

拓扑电子态与拓扑电子材料

方忠

中国科学院，物理研究所

一、拓扑电子态研究：(新的量子物态)

给物理学发展带来了深远的影响

二、拓扑电子材料发现：

计算预测起到了关键作用。

三、拓扑物态研究的大门刚刚打开：

未来要建立完整的“拓扑物理学”。

凝聚态物理：量子 + 对称性 + 相位

一、拓扑电子态：“物态”

凝聚态物理：More Is Different
Broken symmetry and the nature of the hierarchical structure of science.
P. W. Anderson

量子多体

如何描述“相”：物质的某种状态 - - 物态

如何描述“相变”：物质状态的改变 (随: P, T, V等)

“物态调控”：物质与外场相互作用，实现丰富的功能

例如：
水蒸气 → 水 → 冰
非磁性态 → 磁性态

水的“相图”

一、拓扑电子态：“对称性”

1), 对称性: → 守恒量

例如: 时间平移 → 能量守恒
空间平移 → 动量守恒,
空间旋转 → 角动量守恒

2), 对称性分类: 丰富多彩

例如: 分立与连续, 时间反演, Parity, Gauge, etc.

3), 对称性破缺: → 物质状态改变

(1) 直接对称性破缺: Hamiltonian对称性破缺
(2) 自发对称性破缺: H没有破缺, 但是波函数对称性破缺

朗道对称性破缺理论: (20世纪30年代开始, 主导凝聚态物理的认识)

1. “物态”可以用“局域序参量”和相关“对称性”描述

例如: 铁磁态的磁化强度 $M(r)$

2. “物态变化”(相变)伴随着“对称性破缺”

例如: $M(r)$ 的出现破坏了旋转对称性

反铁磁 铁磁 自发破缺

一、拓扑电子态：拓扑态的早期发现

◆ 拓扑元激发与KT相变 (1972) : 获2016诺奖

Vortices 拓扑数 $\oint_C \nabla\phi \cdot d\mathbf{l} = 2\pi n$ KT相变: vortices + anti vortices

◆ 量子霍尔效应 (1980) : 获1985诺奖

2DEG

不能用对称性描写: (1) 不同的电导台阶对应不同的电子态
(2) 不同电子态间的转变没有对称性破缺

结论: 这是一种全新的拓扑态, 需要用拓扑不变量描述

一、拓扑电子态：“拓扑”起源

鼻祖: 欧拉(L. Euler), 1736年, 柯尼斯堡七桥问题

欧拉数: $\chi = V - E + F = 2$

拓扑 (Topology): 该词最早由利斯廷 (Liston) 于1847年引入。在其论文中“...定性的几何学, 区别于被以定量关系对待的一般几何学”。

特点: “定量”与“定性”的区别, 连续变换下的不变性
忽略细节, 而考虑整体的等价性

一、拓扑电子态：拓扑不变量

几何拓扑: 流形

Gauss-Bonnet-Chern: $\frac{1}{2\pi} \int_S K dA = 2(1-g)$
K: 高斯曲率
g: genus of surface

sphere $g=0$ torus $g=1$ two-holed torus $g=2$

微分拓扑: 流形 + 函数, 纤维丛, 与物理场直接相关

毛球定理: 不能抚平球上的毛, 而没有翘起的毛

拓扑不变量: 是确定的、是可计算的。

一、拓扑电子态：场的“拓扑”

点电荷: $Q_e = e$ $\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho_e$

高斯公式: $\oint_S \mathbf{E} \cdot d\mathbf{S} = 4\pi Q_e$

Maxwell方程无磁单极: $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ 但不排斥磁单极的存在

Dirac磁单极: Q_m $\nabla \cdot \mathbf{B} = 4\pi\rho_m$

$\oint_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = 4\pi Q_m$

为何电荷e是量化的? 答案: 只需要有一个磁单极

$4\pi Q_m = \oint_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = \text{磁通} = n \frac{hc}{e}$ $4\pi e Q_m = nhc$

Q_e or Q_m : Topological Charge $n = \text{整数}$

一、拓扑电子态：特点

拓扑量子态: 具有拓扑性质的量子态。对细节不敏感。
(可以在任意的参数空间, 例如: 实空间, K-空间)

- “0”与“1”严格区分, 无微扰过程, 不怕干扰、噪声
- 非局域 (Non-Local) 在边界上会有特殊量子态

信息高速公路: 极低电阻、极低能耗

普通态: 鱼目混杂, 杂乱无章; 遇到杂质, 会被散射

拓扑态: 各行其道, 永不混杂; 遇到杂质, 自动绕行

一、拓扑电子态：颠覆了对“物态”的认识

局域有序态: 对称性破缺导致有序态 (朗道对称性破缺理论)

- 物态可以用局域序参量描写 如: 铁磁态的磁化强度 $\mathbf{M}(\mathbf{r})$
- 相变伴随着对称性破缺 如: $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ 的出现破坏了旋转对称性

整体有序态: 拓扑量子态 (量子物理与几何的完美结合)

- 具有拓扑性质的“量子态”
- 不能用局域序参量描写, 而要用全局拓扑不变量描写
- 相变过程并不伴随对称性破缺

拓扑电子态:

- 对细节 (微扰) 不敏感
- 边界上一般有受到保护的特别边界态, 可被观测。
- 可用于新型电子器件、拓扑量子计算等。

然而: (1) 发现的拓扑电子态非常少 (2) 1980-2000, 近20年的沉寂

一、拓扑电子态：动量空间的拓扑电子态

21世纪: 动量空间拓扑电子态的发现, 推动了拓扑能带理论的出现, 带动整个拓扑电子态研究进入了大发展期。

参数空间: (动量K-空间), 能带 E_k , 布洛赫波函数 $\psi_k = e^{ikr} u_k$

Berry Connection: “矢量势” $\bar{A}_n(\mathbf{k}) = i \langle u_n | \nabla_{\mathbf{k}} | u_n \rangle$

Berry Curvature: “磁场” $\bar{\Omega}_n(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \bar{A}_n(\mathbf{k})$

拓扑不变量: $\oint_S \bar{\Omega}_n(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{S} = 2\pi Z$

两个重要进展:

- 2003年, 发现动量空间的磁单极
- 2005年, 发现时间反演下的拓扑不变量 Z_2

一、拓扑电子态：三维动量空间中的“磁单极”

能带交叉点 \Rightarrow Weyl不可约表示 (2x2) $\Rightarrow H(\mathbf{k}) = \pm \hat{k} \cdot \vec{\sigma} = \begin{bmatrix} k_z & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & -k_z \end{bmatrix}$ $E(k)=0$, 三个变量, 三个参数, 一般两解

动量空间磁单极: 外尔节点

Magnetic Monopoles: $\bar{\Omega}(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \bar{A}(\mathbf{k}) = \pm \frac{\mathbf{k}}{2k^3}$ $\nabla \cdot \bar{\Omega} = 0$

$\frac{1}{2\pi} \oint_S \bar{\Omega}(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{S}(\mathbf{k}) = Q$ “磁荷”

方忠, 等, Science (2003).

$\Omega(\mathbf{k})$ “磁场”可被观测

电子运动方程

Equation of motion: $\dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} - \frac{\mathbf{k} \times \Omega(\mathbf{k})}{\hbar}$ $\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e\mathbf{E}(\mathbf{r}) - e\mathbf{r} \times \mathbf{B}(\mathbf{r})$ $\mathbf{x}_i = i \frac{\partial}{\partial k_i} - \bar{A}_i(\mathbf{k})$, $[\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j] = -i\Omega_{ij}(\mathbf{k})$

例如: 反常霍尔效应

一、拓扑电子态：磁单极的存在 \Leftarrow 多种拓扑不变量

二维“陈”绝缘体: “陈数” Z $\int_{\text{BZ}} \Omega(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{S} = 2\pi Z$

二维 Z_2 拓扑绝缘体: (可推广到三维 Z_2)

时间反演对称性 Invariant: $Z_2 = Z \bmod 2$

Ref: (1) Hasan & Kane, RMP (2010); (2) Qi & Zhang, RMP (2011).

量子自旋霍尔效应

三维拓扑Weyl金属

$\frac{1}{2\pi} \oint_S \bar{\Omega}(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{S}(\mathbf{k}) = C_F$ $C_F=0$, 一般金属 $C_F \neq 0$, 拓扑金属

Volovik, JETP (2003); X. Wan, et al., PRL (2011); Z. J. Wang, et al., PRB (2012)

三维拓扑Dirac金属: $\times + \times$ K空间重合的Weyl Nodes “左手” + “右手”

一、拓扑电子态：拓扑能带理论—电子态分类

动量空间拓扑态：打开了全新的窗口，产生了拓扑能带理论

能带理论：绝缘体、金属、半导体

拓扑能带理论：拓扑绝缘体、拓扑金属

绝缘体：可分类

正常绝缘体

金属：可分类吗？

正常金属

拓扑绝缘体

存在无隙的边缘态

拓扑金属

问题：是否存在“拓扑金属”？如何定义、分类？

二、拓扑电子材料：

- 系列拓扑电子材料的发现推动了领域迅速发展。
- 若干重要拓扑电子材料的发现都是由理论计算首先预言，而后被实验证实。

◆ 计算可靠吗？ (1) 能带计算可完整刻画“Berry Phase” (2) 拓扑态有鲁棒性，计算误差往往是小量

◆ 计算难点：如何计算获得拓扑不变量？

(1) 早期方法：直接计算表面（边界）态

(2) 新方法：Wilson Loop方法，可普遍计算各种拓扑不变量

余睿，等，PRB 84, 075119 (2011).

$$\theta = \oint_{l_k} \vec{A} \cdot d\vec{l}$$

$\theta_1 \theta_2 \theta_3 \dots \theta_N$

对路径画图：Bi₂Se₃

二、拓扑电子材料：Plots for Z and Z₂ Invariant

$\theta_n(k_x) = \oint_{C_y} \vec{A}_n \cdot d\vec{k}_y$

$\theta(k_x)$

$Z=1$

$Z=0$

$Z_2=1$

$Z_2=0$

Reference line in gap.

Results for Bi₂Se₃

$\theta(l_k) = \oint_{l_k} \vec{A} \cdot d\vec{l}_k$

Fermi Surface

Chem number

$Z=1$

二、拓扑电子材料：二维Z₂拓扑绝缘体

HgTe/CdTe 量子阱中的量子自旋霍尔效应

理论：B. A. Bernevig, T. L. Hughes, S.-C. Zhang, Science 314, 1757 (2006)

实验：M. Konig et al., Science 318, 766 (2007)

能带反转实现TI

Gap opening due to SOC

Real materials for TI?

“twisted band”

二、拓扑电子材料：三维Z₂拓扑绝缘体

Bi₂Se₃, Bi₂Te₃, Sb₂Te₃ 家族

理论：张海军，等，Nature Phys. (2009).

实验：Y. Xia, et al., Nature Phys. (2009); Y. L. Chen, et al., Science (2009).

优点：(1) 稳定、简单；(2) 表面态只有单个Dirac Cone；(3) 能隙大(0.3eV)

Nature Physics, 5, 378(2009): “(认为拓扑绝缘体几乎不可能在常规条件下获得的) 传统观点被发表于本期的两篇文章颠覆”

Nature, 464, 194(2010), “The Birth of Topological Insulators”:

“对拓扑绝缘体的探索以最近Bi₂Se₃和Bi₂Te₃拓扑绝缘体的发现而达到顶峰”

PL 105, 266806 (2010): “它们现在被认为是拓扑绝缘体的参考体系”。

二、拓扑电子材料：二维“陈”绝缘体

首次实现量子反常霍尔效应：Cr-doped Bi₂Se₃ & Bi₂Te₃薄膜

理论：余睿，等，Science. (2010).

实验：常翠祖等，Science (2013); Y. Tokura组，Nature Physics 10, 731 (2014)

难点：(1) 掺杂又不引入载流子？（同价态磁性元素取代）

(2) 绝缘体中实现铁磁？（Van-Vleck机制，不同于稀磁半导体）

(3) 实现非零“陈”数？（厚度调控，4-5层最佳）

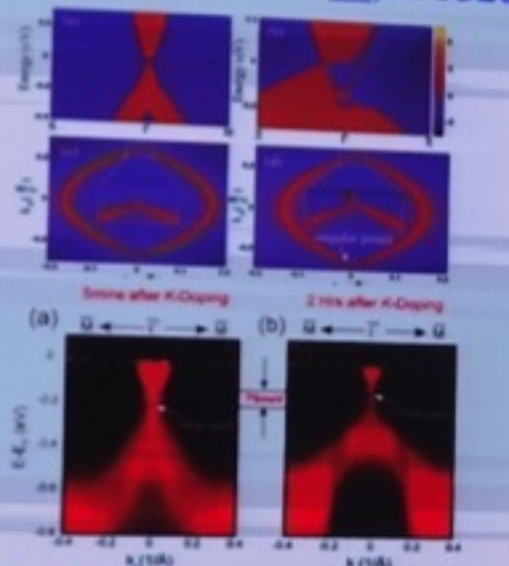
SCIENCE, 340, 153 (2013), “The Complete Quantum Hall Trio”:

“理论预言磁性掺杂的Bi₂Se₃拓扑绝缘体被制成薄膜时应具有量子反常霍尔效应——这就是Chang等成功实现的方案”。

二、拓扑电子材料：三维拓扑Dirac半金属

Na₃Bi

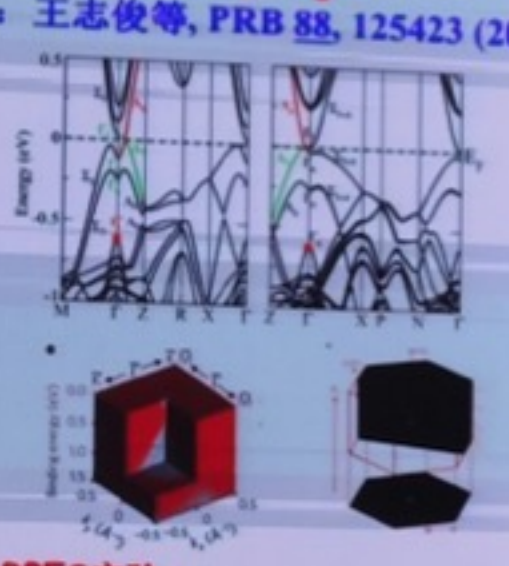
理论：王志俊等, PRB 85, 195320 (2012)



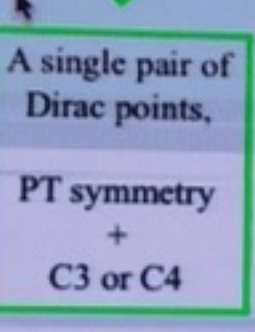
ARPES实验：
Z. K. Liu, Science (2014).
S. Y. Xu, Science (2014).

Cd₃As₂

理论：王志俊等, PRB 88, 125423 (2013)



ARPES实验：
Z. K. Liu, Nature Mater. (2014).
M. Neupane, Nature Comm. (2014).
S. Borisenko, PRL (2014).



A single pair of Dirac points,
PT symmetry + C3 or C4

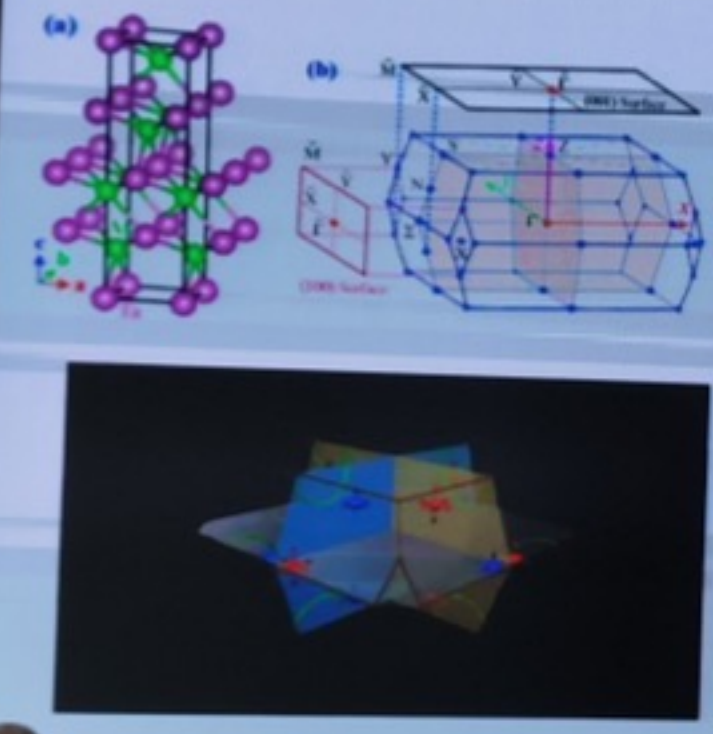
N. P. Ong, et.al. PRL (2017): “狄拉克半金属的第一个例子”。

C. K. Kane et.al. Nature news (2014): “打开了研究它们特性的门”

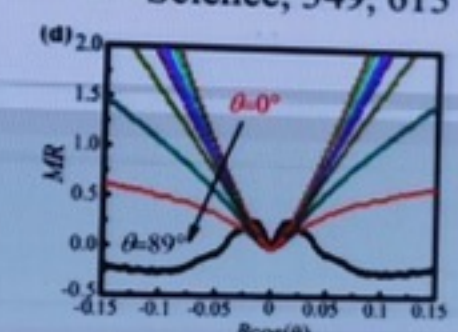
二、拓扑电子材料：拓扑外尔半金属

Family: TaAs, TaP, NbAs, NbP ($I4_1md$, 109, $C4v$)

理论：翁红明等, PRX 5, 011029 (2015);
实验：Z. Hasan组, Nature Comm. 6, 7373 (2015); H. Ding组, PRX 5, 031013(2015)



Fermi Arcs: PRX, 5, 031013 (2015)
Science, 349, 613 (2015).



Negative MR: PRX, 5, 031013 (2015)
Science, 349, 613 (2015).

Theory
无空间反演对称

二、拓扑电子材料：“拓扑材料词典”和“拓扑材料数据库”

◆ 建立了“拓扑材料词典”：从“晶体群表示”到“拓扑不变量”

k point	irreducible representations
Γ	$2E_g + 4E_g + 4E_g$
L	$E_g + 2E_g + 2E_g$
W	$2E_g + 3E_g$
X	$2E_g + 2E_g + E_g$

无自旋轨道耦合词典：
PRX 8, 021069 (2018)

有自旋轨道耦合词典：
Nat. Commun. 9, 1530 (2018), (共110页)

◆ 建立了“拓扑电子材料数据库”：从“材料”到“拓扑性质”

- ◆ 全自动搜索非磁性拓扑电子材料，搜索了3.9万种材料，找到了超过8000种拓扑材料，建立了拓扑材料数据库。（三篇独立文章同期发表）
- ◆ Nature专文报道了该工作并受到业内专家的高度评价。

物理所：Nature 566, 475 (2019)
南京大学：Nature 566, 480 (2019)
普林斯顿：Nature 566, 486 (2019)

"I am shocked by the number." - Reyes Calvo
"You can put in a compound name and, with one click, get whether there is topology or not. For me, this is wonderful." - Chandru Shekhar
"It's up to experimentalists to uncover new exciting physical phenomena." - Oleg Vasyev

三、拓扑物态大门刚刚打开：

拓扑的概念被扩展到众多的凝聚态体系：

- ◆ 拓扑声子态：声子Hall效应.....
- ◆ 拓扑光子态：拓扑光子晶体，“无损光纤”.....
- ◆ 拓扑冷原子态：.....
- ◆ 拓扑激发态：floquet state (time dependent).....
- ◆ 拓扑自旋态：Spin Seeback effect, Skyrmion.....
- ◆ 拓扑轨道态：宏观轨道磁矩.....
- ◆ 拓扑电子态：拓扑绝缘体，拓扑金属，拓扑超导.....
- ◆ 强关联+拓扑：强关联拓扑绝缘体，强关联拓扑金属
分数拓扑绝缘体，分数量子反常Hall效应
.....

三、拓扑物态大门刚刚打开：未来研究

基础研究：需要建立完整的“拓扑物理学”

- ◆ 拓扑量子场论： $\mathcal{L}_{MCS} = -\frac{1}{4e^2} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \frac{\kappa}{2} \epsilon^{\mu\nu\rho} A_\mu \partial_\nu A_\rho$
Yang-Mills Chern-Simons
- ◆ 强关联多体系统：拓扑长程纠缠，拓扑序，.....

应用研究：需要充分利用其特有的“拓扑物性”

- ◆ 具有鲁棒性，对细节（微扰）不敏感（拓扑量子计算）
- ◆ 具有体—边对应性，有受保护的边界态（低功耗芯片）
- ◆ 具有手征选择性（拓扑催化剂）
- ◆ 可以实现比标准模型更多的低能激发（新型元激发）
- ◆

三、拓扑物态大门刚刚打开：应用举例

- ◆ 拓扑+超导：Majorana费米子， $\gamma = \gamma^\dagger$ ？拓扑量子计算
在铁基超导中看到马约拉纳零模
- ◆ 单向“拓扑无损光纤”：不怕杂质散射
- ◆ 高选择性“拓扑光腔”：用于半导体激光器

Nature Nanotechnology 15, 1012 (2020)