MBT

1. 研究提案：MnBi_2Te_4 纳米带中非线性霍尔效应的 NEGF-CPA 模拟

(一份内部研究计划与理论推导)

1.1 项目目标与科学问题

• **核心问题:** 在 $\mathcal{PT}$ 对称的反铁磁拓扑绝缘体 $MnBi_2Te_4$ (MBT) 中，实验观测到的非线性霍尔效应 (NLHE) 主要由量子度规偶极矩 (QMD) 还是隐式贝里曲率偶极矩 (hBCD) 贡献？现有的BTE理论 [1, 2, 3] 无法区分这一点，也无法处理有限尺寸器件中的边缘态和无序效应 [4, 5, 6, 7]。
• **研究目标:** 利用全量子的非平衡格林函数 (NEGF) 结合相干势近似 (CPA)，在真实的有限尺寸（纳米带）器件模型上，从理论上揭示 hBCD 和 QMD 对 NLHE 的独特贡献，并提出清晰的实验区分方案。
• **关键假设 (待验证):**
  1. hBCD 贡献的 NLHE 是一种边缘主导的效应（我们称之为非线性层霍尔效应，NLHE-L）[8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16]。
  2. hBCD 和 QMD 对不同类型的无序（标量 vs. 磁性）具有截然不同的鲁棒性 [17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24]。
  3. BTE 理论 [1, 2] 预测的“隐式”层霍尔流 [25, 12, 26] 可以在非局域（H-bar）结构中被探测到 [27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37]。

1.2 理论框架与模型

1. 紧束缚 (TB) 哈密顿量
我们将采用文献 [38] 中为 $MnBi_2Te_4$ 薄膜开发的 $k \cdot p$ 模型的紧束缚版本。该模型已被证明能准确复现其拓扑和磁性。
• 基矢: 对于每个五元层 (QL)，我们使用4个 p_z 派生的轨道 [38]：
$\Psi = (|P1_{z}^{+},\uparrow\rangle, |P2_{z}^{-},\uparrow\rangle, |P1_{z}^{+},\downarrow\rangle, |P2_{z}^{-},\downarrow\rangle)$
• Γ 矩阵: 哈密顿量由 4×4 的 Γ 矩阵构建 [38]：
$\Gamma_0 = s_0 \tau_0$, $\Gamma_1 = s_x \tau_x$, $\Gamma_2 = s_y \tau_x$,

$\Gamma_3 = s_z \tau_x$, $\Gamma_4 = s_0 \tau_y$, $\Gamma_5 = s_0 \tau_z$（其中 s_i 和 τ_i 分别是自旋和轨道空间的泡利矩阵）
- **哈密顿量 (非磁性):** h_{TB} 的具体形式（包括面内 $k_{x,y}$ 和层间 k_z 依赖）由 [38] (Eq. S7-S9) 给出，使用以下参数 [38]：
  - $C_0 = -0.0048$ eV, $C_1 = 2.7232$ eVÅ^2, $C_2 = 0$ eVÅ^2
  - $M_0 = -0.1165$ eV, $M_1 = 11.9048$ eVÅ^2, $M_2 = 9.4048$ eVÅ^2
  - $A_1 = 4.0535$ eVÅ, $A_2 = 3.1964$ eVÅ
  - 晶格常数: $a = 4.334$ Å, $a_z = 13.64$ Å
- 反铁磁 (AFM) 项: A型反铁磁序通过层间交错的交换场引入 (以 $N=6$ 层为例) [38]：
$h_{AFM} = \text{diag}(+m_z \cdot s_z \tau_0, -m_z \cdot s_z \tau_0, \dots, -m_z \cdot s_z \tau_0)$
其中 $m_z = 0.030$ eV，该项破坏 P 和 T 对称性，但保留了 $\mathcal{PT}$ 联合对称性 [38]。

2. 二阶响应的 NEGF 理论

标准 NEGF 关注的是线性响应（电流 $J^{(1)}$）。我们需要将其推广到二阶非线性响应 $J^{(2)}$。我们将采用基于 Keldysh 形式的微扰展开。
- **系统设置:** 中心器件区 (C) 连接到左 (L) 右 (R) 两个电极。系统受到交流偏压 $V(t) = V_0 \cos(\omega t)$ 驱动。
- Keldysh 绘景: 所有格林函数 (GF) 和自能 (Σ) 都是 Keldysh 矩阵：
$\hat{G} = \begin{pmatrix} G^R & G^K \\ 0 & G^A \end{pmatrix}, \hat{\Sigma} = \begin{pmatrix} \Sigma^R & \Sigma^K \\ 0 & \Sigma^A \end{pmatrix}$
其中 G^K (Keldysh GF) 包含粒子分布信息， $G^{R/A}$ (推迟/超前 GF) 包含谱信息。
- **Dyson 方程:** $\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \hat{\Sigma}_{pert} \hat{G}$。
- **微扰项:** 驱动偏压 $V(t)$ 作为微扰项 $\hat{\Sigma}_{pert}(t)$ 进入哈密顿量。我们将此微扰展开到二阶 V^2。
- 二阶电流 (DC 极限): 我们关注的是直流（$2\omega \to 0$）非线性响应，即电场 E_x 的二阶响应。通过对 Keldysh GF 的微扰展开并应用 Langreth 定则，二阶非线性流 $J^{(2)}$ 的一般形式（示意性地）涉及三个格林函数的乘积（或两个GF和一个能量导数）：
$J^{(2)} \propto \int dE \text{Tr}$
(注意：实际公式更复杂，涉及 G 对 E 的导数，以及 $G^R, G^A, G^<$ 的特定组合，例如 $G^R \Sigma^< G^A$。)

3. 无序模型 (NEGF-CPA)

为模拟无序效应，我们将 NEGF 与相干势近似 (CPA) 相结合。CPA 用一个自洽的、能量依赖的有效自能 $\Sigma_{CPA}(E)$ 来替代无序的系综平均。
- **有效哈密顿量:** $H_{eff} = H_{TB} + \Sigma_{CPA}(E)$

• 自洽方程 (单点): Σ_{CPA} 通过 T 矩阵的系综平均值为零的条件自洽求解：
$\langle T_i \rangle = \langle (V_i - \Sigma_{CPA}) \cdot^{-1} \rangle = 0$
其中 $G_{loc} = (E - H_{eff})^{-1}_{ii}$ 是有效媒介中的局域格林函数。
• **两种无序类型:**
1. **标量无序 (Scalar Disorder):** 模拟非磁性杂质。$V_i = W_s \cdot \mathbf{I}$，其中 W_s 是从某个分布（例如 $$）中抽取的随机在位势，$\mathbf{I}$ 是 $4N \times 4N$ 的单位阵。此 Σ_{CPA} 是对角矩阵，保持 $\mathcal{PT}$ 对称性。
2. **磁性无序 (Magnetic Disorder):** 模拟 Mn 替位缺陷 [18, 39, 40, 14, 41]。$V_i = \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{s}$，其中 $\mathbf{m}_i$ 是随机方向和幅度的局域磁矩（例如 $m_z s_z$）。这是一个*矩阵* CPA，Σ_{CPA} 具有非对角的自旋结构，它将*破坏* $\mathcal{PT}$ 对称性 [42, 43, 44, 45]。
• **非平衡 CPA (NECPA):** 对于非平衡态（有限偏压），自能 Σ 变为 Keldysh 矩阵 $\hat{\Sigma}$。我们需要求解 $\Sigma^R, \Sigma^A, \Sigma^<$ 的自洽方程。

1.3 数值模拟计划 (使用 PyQULA [46, 47] 或类似工具)

任务 1: H-bar 几何中的非局域 NLHE (模拟图1)
• **目的:** 验证 hBCD 机制是否确实导致可测量的非局域信号 [27, 28, 29, 13, 30, 31, 14, 32, 33, 34, 35, 36, 37]，这是 arXiv [1, 2] 理论的核心预测。
• **几何:** 构建一个 H 型的 TB 模型。电极 1-2 施加驱动电流 $I_x(\omega)$，电极 3-4 作为*非局域电压探针*（开路）。
• **方法:** (NEGF 电压探针)
1. 施加 $I_x(\omega)$ (通过电极 1-2 的小偏压 $V_{12}(\omega)$)。
2. 将电极 3-4 建模为自洽的电压探针，其自能 $\Sigma_{3,4}$ 满足流入探针的净电流（在 2ω 频率）为零，即 $J_{3}^{(2\omega)} = 0$ 和 $J_{4}^{(2\omega)} = 0$ [48]。
3. 求解自洽的探针化学势 $\mu_3^{(2\omega)}$ 和 $\mu_4^{(2\omega)}$。
4. 计算非局域霍尔电压 $V_y^{(2\omega)} = (\mu_3^{(2\omega)} - \mu_4^{(2\omega)}) / e$。
• **预期结果 (占位符):** 在 E_F 处于体能隙时，当 $I_x(\omega)$ 施加时，在 V_y 处测量到显著的 2ω 信号。
任务 2: 局域二阶电流密度图 (模拟图2)
• **目的:** 揭示非线性信号的*空间来源*：体 (Bulk) vs. 边缘 (Edge) [49, 48, 50, 51, 52, 53]。
• **方法:** (NEGF 局域电流)

1. 使用两端器件（非 H-bar）施加 $E_x(\omega)$。
2. 计算连接任意两个相邻格点 i, j 之间的二阶非线性键电流 $J_{i \to j}^{(2\omega)}$。
3. 键电流 $J_{i \to j}$ 可由 Keldysh GF $G^<$ 和哈密顿量 H_{ij} 计算得到：$J_{i \to j}(t) \propto \text{Im} [H_{ij} G^<_{ji}(t, t)]$
4. 通过对 $V(\omega)$ 的微扰展开，提取 $J_{i \to j}$ 的 2ω 分量 (或 V^2 的直流分量) [54, 55]。
5. 绘制 $J_y^{(2\omega)}(\mathbf{r})$ 的实空间分布图。

- **预期结果 (占位符):** 当 E_F 在体能隙中时，非线性横向电流 $J_y^{(2\omega)}$ [**占位符：在纳米带中心（体）几乎为零，但强劲地局域在纳米带的两个（拓扑）边缘，且符号相反**][48, 27, 56, 50, 57, 58]。

任务 3: 无序效应的差异化指纹 (模拟图3)

- **目的:** 验证 hBCD 和 QMD 对称性保护假设。
- **方法:** (NEGF-CPA)

1. 计算洁净 (clean) 器件的 $R_{xy}^{(2\omega)}$ (作为基准)。
2. 引入*标量无序* W_{scalar}，使用 NEGF-CPA 计算 $R_{xy}^{(2\omega)}(W_{scalar})$。
3. 引入*磁性无序* W_{mag}，使用 NEGF-CPA 计算 $R_{xy}^{(2\omega)}(W_{mag})$。
4. 绘制 $R_{xy}^{(2\omega)}$ (归一化) vs. W 的曲线。

- **预期结果 (占位符):**
  - **hBCD 信号 (来自图2的边缘电流):**)，但随 W_{mag} 迅速衰减（$\mathcal{PT}$ 对称性被破坏）**][42, 43, 44, 45]。
  - **QMD 信号 (若 E_F 在导带/价带中):**[62, 63, 64, 17, 65, 66, 67, 68, 69, 70]。

任务 4: hBCD 和 QMD 的定量分离 (模拟图4)

- **目的:** 提供一种实验上分离两种贡献的方案。
- **方法:**

1. 计算总 $R_{xy}^{(2\omega)}$ 随 E_F 的变化曲线，作为 W_{mag} 的函数（例如 $W_{mag}=0, W_1, W_2$）。
2. $\chi_{total}(E_F) = \chi_{hBCD}(E_F) + \chi_{QMD}(E_F)$。
3. 根据任务3，χ_{hBCD} 贡献被 W_{mag} 迅速抑制。
4. χ_{QMD} 贡献则对 W_{mag} 不敏感。

- **预期结果 (占位符):**
  - 洁净样品 ($W_{mag}=0$) 的 $R_{xy}^{(2\omega)}(E_F)$。
  - 强磁性无序样品 ($W_{mag}=W_2$) 的 $R_{xy}^{(2\omega)}(E_F)$ [**占位符：信号大幅下降，但残留一个平滑的、对无序不敏感的背景信号**]。
  - **结论:** 这个残留的信号平台即是纯 χ_{QMD} 贡献。因此，$\chi_{hBCD} = \chi(W_{mag}=0) - \chi(W_{mag}=W_2)$ [71, 1, 2, 3, 72]。