

# workflow

核心课题：

Disorder-Filtered Quantum Geometry: Universal Crossover from Hidden Berry Curvature to Quantum Metric in  $\mathcal{PT}$ -Symmetric Antiferromagnets

(无序过滤的量子几何： $\mathcal{PT}$  对称反铁磁体中从隐藏贝里曲率到量子度规的普适交叉)

**基本逻辑：**利用 NEGF 全量子输运方法，证明在  $MnBi_2Te_4$  中，**隐藏贝里曲率 (Hidden BCD)** 对**磁性无序**极其敏感（会被迅速杀灭），而**量子度规 (QMD)** 具有拓扑鲁棒性。这解释了为什么实验看到的是 QMD，并调和了 Nature (2023) 与 arXiv (2025) 的矛盾。

## 第一阶段：模型构建与基准测试 (Model Construction)

**目标：**在 Python 中复现  $MnBi_2Te_4$  的 6 层板 (6SL) 电子结构。

### 1. 原理与公式

基于你上传的 Supplementary Information (SI)， $MnBi_2Te_4$  的有效哈密顿量是基于  $|P1\{z\}^{+}, \uparrow\rangle, |P2\{z\}^{-}, \uparrow\rangle, |P1\{z\}^{+}, \downarrow\rangle, |P2\{z\}^{-}, \downarrow\rangle$  的四带模型 1。

紧束缚模型 (Tight-Binding) 离散化规则：

将 SI 中的  $k$  空间公式 (S7) 2 转换为实空间格点跳跃：

- **On-site (对角项):**  $\epsilon_0 = C_0 - 2t_0 z - 4t_0^2$ 。
- **Z方向层间跳跃 (\$t\_z\$):** 仅保留  $z$  方向的 Hopping (6层)。
- **XY平面内跳跃 (\$t\_{xy}\$):**
  - **\$k^2\$ 项 (Mass):**  $t \cos(k) \rightarrow \frac{t}{2} (\lvert i \rangle \langle j \rvert + h.c.)$
  - **\$k\$ 项 (SOC):**  $t \sin(k) \rightarrow \frac{-it}{2} (\lvert i \rangle \langle j \rvert - h.c.)$

### 2. 伪代码 (Python/Pyqula 风格)

Python

```
import numpy as np
from pyqula import geometry, hamiltonians
```

```

# 1. 定义参数 (直接来自 SI 第 30 页 Eq. S9) [cite: 1988-1995]
C0, C1, C2 = -0.0048, 2.7232, 0.0
M0, M1, M2 = -0.1165, 11.9048, 9.4048
A1, A2 = 4.0535, 3.1964
az = 13.64 # 层间距
a = 4.334 # 面内晶格常数

# 2. 构建层状几何 (6SL)
# 创建一个 Width x Length x 6 的长方体格点系统
def build_MBT_system(L=100, W=40):
    g = geometry.cubic_lattice(L, W, 6) # 6层厚度
    return g

# 3. 构建哈密顿量矩阵
def model_Hamiltonian(k=None):
    # 这里的矩阵 H 是 4x4 的, 基于 Eq. S7 # 需要将 Eq. S8 的 t0, t1... 参数代入
    # 注意: 这里需要手动写一个函数, 将 Gamma 矩阵转化为 4x4 数组
    # 并在每一层的对角块中加入磁性项 +/- m_z [cite: 2001]
    pass

# 4. 添加 AFM 磁序 [cite: 2001, 2006]
def add_AFMs_order(h):
    m_val = 0.030 # 30 meV [cite: 2006]
    for i in range(h.geometry.Natoms):
        layer_index = get_z_layer(i)
        # 奇数层 +m, 偶数层 -m
        sign = 1 if layer_index % 2 == 0 else -1
        h.add_zeeman(i, [0, 0, sign * m_val])

```

**动作：**画出能带图，确认在  $\Gamma$  点有能隙 (Massive Dirac Cone)。

## 第二阶段：非平衡格林函数 (NEGF) 计算引擎

**目标：**实现二阶非线性霍尔电流的计算。

### 1. 数值计算原理 (Finite Difference NEGF)

直接推导二阶 NEGF 公式极其复杂。最稳健的数值方法是有限差分法。

二阶响应定义为  $J_y \propto E_x^2$ 。

我们在  $x$  方向施加微小偏压  $V$ ，计算  $y$  方向的电流  $J_y$ 。

$$J_y^{(2)} \approx \frac{J_y(+V) - J_y(-V)}{2V}$$

(利用  $J(V) = G^{(1)}V + G^{(2)}V^2 + \dots$ ，偶数项即为二阶项)。

### 2. 伪代码

Python

```

# NEGF 计算核心函数
def calculate_current_NEGF(hamiltonian, bias_V, energy=0.0):

```

```

# 1. 构建左右电极的自能 Sigma_L, Sigma_R
# 2. 在中心区哈密顿量加上偏压 V (电势沿 x 线性降落)
H_device = H0 + Potential(x) * bias_V

# 3. 计算格林函数
# G^R = inv(E - H_device - Sigma_L - Sigma_R)

# 4. 计算透射系数或电流密度
# 这里我们需要横向电流 J_y。
# J_y = Tr[ v_y * G^< ]
# G^< = G^R * Sigma^< * G^A (Keldysh 方程)

return J_y_total

# 二阶响应提取器
def get_nonlinear_signal(h, V_bias=0.01):
    J_plus = calculate_current_NEGF(h, V_bias)
    J_minus = calculate_current_NEGF(h, -V_bias)

    J_2nd = (J_plus + J_minus) / 2.0 # 提取偶次项 (二阶)
    return J_2nd

```

## 第三阶段：核心实验——无序扫描 (The "PRL" Step)

**目标：**这是论文的核心创新点。分别引入标量无序和磁性无序，观察  $J^{(2)}$  的衰减行为。

### 1. 两种无序的定义

- 标量无序 (Scalar Disorder): 模拟杂质 doping。

$$H \rightarrow H + \sum_i V_{rand} c_i^\dagger c_i, \quad V_{rand} \in [-W, W]$$

- 磁性无序 (Magnetic Disorder): 模拟反位缺陷或热涨落。

$$H_{mag} \rightarrow \sum_i (\vec{M}_i + \delta \vec{m}_i) \cdot \vec{\sigma}, \quad \text{quad } \delta \vec{m} \text{ is random direction}$$

### 2. 分离 BCD 和 QMD (栅压奇偶法)

利用 Nature 和 arXiv 论文中提到的对称性：

- 施加垂直栅压电场  $E_z$  (在哈密顿量中加入  $z$  方向电势差)。
- **BCD:** 是  $E_z$  的奇函数。
- **QMD:** 是  $E_z$  的偶函数。

### 3. 伪代码 (数据生产流水线)

## Python

```
disorder_strengths = [0.01, 0.05, 0.1, 0.2, 0.5] # W 值
Ez_field = 0.05 # 固定一个栅压

results = []

for W in disorder_strengths:
    J_total_list = []

    # 无序平均循环 (Averaging)
    for sample in range(100): # 跑100个样本取平均

        # 1. 产生无序哈密顿量 (标量 或 磁性)
        h_dirty = add_disorder(h_clean, W, type='scalar')

        # 2. 施加 +Ez
        h_pos = add_gate_field(h_dirty, +Ez_field)
        J2_pos = get_nonlinear_signal(h_pos)

        # 3. 施加 -Ez
        h_neg = add_gate_field(h_dirty, -Ez_field)
        J2_neg = get_nonlinear_signal(h_neg)

        # 4. 分离 BCD 和 QMD
        J_BCD = (J2_pos - J2_neg) / 2
        J_QMD = (J2_pos + J2_neg) / 2

        J_total_list.append([J_BCD, J_QMD])

    # 取平均并保存
    avg_signals = np.mean(J_total_list, axis=0)
    results.append(avg_signals)

# 最终得到: J_BCD(W) 和 J_QMD(W) 的曲线
```

---

## 第四阶段：论文结果图表规划 (Paper Figures)

这是你写论文时直接要放进去的图：

- **图 1 (Model & Method):**

- (a)  $6\text{SL MnBi}_2\text{Te}_4$  的晶格结构示意图。
- (b) 计算出的能带结构 (复现 PDF Fig. 2 的特征)。
- (c)  $J_y^{(2)}$  随  $E_z$  变化的“蝴蝶曲线”，展示奇偶分离的物理基础。

- **图 2 (The Discovery - Scalar Disorder):**

- 纵轴： $\log(\sigma^{(2)})$ ，横轴： $\log(W)$  (标量无序强度)。
- 两条线：红色 (BCD) 和 蓝色 (QMD)。

- 预期结果：两者都下降，但在强无序下可能趋于一致或 QMD 稍强。
- 图 3 (The Smoking Gun - Magnetic Disorder):
  - 纵轴： $\log(\sigma^2)$ ，横轴： $\log(W_{\text{mag}})$  (磁性无序强度)。
  - 预期结果 (PRL Point): BCD 信号呈指数级极速衰减 (Crash)，因为 Hidden BCD 依赖于完美的层间磁矩抵消被  $E_z$  微扰。一旦磁结构乱了，Hidden BCD 瞬间消失。
  - QMD 信号：衰减缓慢 (Robust)。
  - 结论：在真实且“脏”的磁性样品中，BCD 被过滤掉了，所以实验只看到了 QMD！
- 图 4 (Size Effect - Optional):
  - 改变器件长度  $L$ ，看信号变化。验证 arXiv 关于“非局域输运”的猜想 (NEGF 天然包含有限尺寸效应)。

---

## 总结：你的核心 Story

"之前的争议在于 Nature 说只有 QMD，arXiv 说有 Hidden BCD。我们的全量子 NEGF 计算表明：在一个完美的理论晶体中，Hidden BCD 确实很强（支持 arXiv）。但是，一旦引入实验中不可避免的磁性无序，Hidden BCD 极其脆弱，会被迅速抑制，而 QMD 依然存活（支持 Nature 的实验观测）。因此，无序是量子几何的过滤器。"