

博士学位论文

拓扑物质中的量子霍尔效应研究

**RESEARCH ON QUANTUM HALL
EFFECTS IN TOPOLOGICAL MATTER**

孙海鹏

哈尔滨工业大学

2021 年 5 月

国内图书分类号: O469
国际图书分类号: 535

学校代码: 10213
密级: 公开

理学博士学位论文

拓扑物质中的量子霍尔效应研究

博士研究生: 孙海鹏

导师: 卢海舟教授

申请学位: 理学博士

学科: 物理学

所在单位: 南方科技大学

答辩日期: 2021 年 5 月

授予学位单位: 哈尔滨工业大学

Classified Index: O431.2

U.D.C: 535

Dissertation for the Doctoral Degree in Science

RESEARCH ON QUANTUM HALL EFFECTS IN TOPOLOGICAL MATTER

Candidate:	Sun Haipeng
Supervisor:	Professor Lu Haizhou
Academic Degree Applied for:	Doctor of Science
Specialty:	Physics
Affiliation:	Southern University of Science and Technology
Date of Defence:	May, 2021
Degree-Conferring-Institution:	Harbin Institute of Technology

摘 要

量子霍尔效应最早是在强磁场下的二维电子气中观测到的，其量子霍尔电导可以表示为 ne^2/h ，其中 n 为整数。这一结果开创了直接测量基本常数的新方法。随着研究的深入，人们发现量子霍尔电导中的整数 n 可以表示为在布里渊区中所有占据态贝里曲率的积分，揭开了拓扑物质研究的序幕。拓扑物质是具有奇特拓扑性质的物态，其拓扑属性可以用拓扑不变量来刻画。由于拓扑物质其拓扑性质不受器件构型的影响，具有极大的应用前景，因此人们在不断寻找新的拓扑物质，研究其具有的独特拓扑性质。在量子反常霍尔效应发现以后，由于其无耗散边界态在制造低能耗电子器件方面具有巨大潜力，如何在拓扑物质中实现量子反常霍尔效应成为重要的研究方向。最近，有报道称 MnBi_2Te_4 为本征反铁磁拓扑绝缘体，理论计算显示其表面态具有 88 meV 的能隙，并在其薄膜中观测到量子反常霍尔效应。然而最新的角分辨光电子能谱显示，其表面态有可能是无能隙的，这与之前的理论相差甚远。因此研究哪些因素会影响 MnBi_2Te_4 表面态的拓扑性质，以及如何进行量子反常霍尔效应调控不仅具有重要的理论价值，也有巨大的应用价值。此外，二维电子气在强磁场中会形成朗道能级，而朗道能级在样品边缘会发生形变与费米能相交，形成一维拓扑边缘态。拓扑边缘态以无损耗的方式运动，能够产生 e^2/h 整数倍的量子霍尔电导。然而在三维电子气中，沿磁场方向的维度阻止了霍尔电导的量子化。因此，研究三维拓扑材料中，要形成三维量子霍尔效应需要哪些条件，不仅在理解奇异拓扑物态方面有重要的理论价值，在物态调控方面也具有应用价值。综上所述，本文将研究如何在三维拓扑半金属中实现三维量子霍尔效应，以及研究影响 MnBi_2Te_4 表面态拓扑性质的因素和如何调控 MnBi_2Te_4 薄膜中的量子反常霍尔效应。主要的研究成果如下：

我们研究了拓扑半金属在外加磁场中的三维量子霍尔效应。我们展示了在拓扑半金属中费米弧表面态通过外尔点可以产生独特的三维量子霍尔效应。由于存在拓扑约束，单个表面的费米弧是开放的，无法产生量子霍尔效应。在外尔点通过“虫洞”隧穿，上下两个表面的费米弧可以完成费米闭合回路产生量子霍尔效应。费米弧的边界态表现出特有的三维分布，可以看作 $(d-2)$ 维边界态的又一例证。此外，当费米面逐渐变化切过外尔点时，薄膜霍尔电导率由 $1/B$ 依赖关系演变为量子化的平台。这一现象可以通过调节拓扑半金属平板的栅极

电压来实现。

我们还研究了最近新发现的本征反铁磁拓扑绝缘体 MnBi_2Te_4 表面态的拓扑性质。之前的理论预言 MnBi_2Te_4 中表面态会打开很大的能隙。然而最新的角分辨光电子能谱测量显示表面态的能隙不总是能观测到。为了解决这一理论预测与实验结果的分歧，我们从三维体哈密顿量出发，并考虑体磁化的空间分布，解析推导了半无穷结构单个表面的二维表面态有效模型。我们的计算结果显示，角分辨光电子能谱实验观测到的很小的表面态能隙可能是层内铁磁序变得更小和更局域造成的。此外，我们还计算了表面态的空间分布与穿透深度，计算表明表面态主要局域在样品表面的前两层七原层内。从我们的解析结果也可明确体参数对表面态的影响。同时，我们还推导了 MnBi_2Te_4 薄膜的表面态有效模型，展示了随厚度增加，有限尺寸效应减小。在样品较厚时，体磁化越局域，其有效磁化越小。我们还展示了陈数随奇偶层数变化在 -1 与 0 之间振荡。

此外，我们研究了电场对本征反铁磁拓扑绝缘体 MnBi_2Te_4 薄膜中量子反常霍尔效应的调控。对于奇数层 MnBi_2Te_4 薄膜来说，如果电场诱导的势能 V 足够大，其霍尔电导会由原来的 e^2/h 变为 0，即陈数由 1 变为 0。也就是说，随着 V 的增大，发生了由拓扑非平庸态到拓扑平庸态的量子相变。此外，由于偶数层 MnBi_2Te_4 薄膜具有 PT（空间反演-时间反演）对称性，能带的贝里曲率为零。但是，当在垂直于表面方向加电场时，会破坏系统的 PT 对称性，此时能带会破除简并，产生劈裂，能带的贝里曲率不再为零。因此，对于偶数层薄膜，当费米面切到能带时，外加电场会使偶数层薄膜的反常霍尔电导由 0 变为有限大小。但与奇数层不同的是，当费米能落在能隙中时，其霍尔电导依然为 0，不随 V 的改变而改变，即不会产生拓扑相变。

关键词：拓扑绝缘体；磁性拓扑绝缘体；拓扑半金属；量子霍尔效应；量子反常霍尔效应

Abstract

The quantum Hall effect was first observed in the two-dimensional electron gas under a strong magnetic field. The quantum Hall conductance can be expressed as ne^2/h , where n is an integer. This result creates a new method of directly measuring fundamental constants. With the deepening of the research, it was discovered that the integer n in quantum Hall conductance can be expressed as integrals of the Berry curvature of all occupied states in the Brillouin zone, which opened the prelude to the study of topological matter. Topological matter is a state of matter with exotic topological properties, and its topological properties can be described by topological invariants. Because the topological properties of topological matter are not affected by the geometry of the devices and have great application prospects, researchers are constantly searching for new topological matter and studying their unique topological properties. After the discovery of the quantum anomalous Hall effect, because its non-dissipative boundary state has great potential in manufacturing low-energy electronic devices, how to realize the quantum anomalous Hall effect in topological materials has become an important research direction. Recently, it has been reported that MnBi_2Te_4 is an intrinsic antiferromagnetic topological insulator. Theoretical calculations show that its surface states have an energy gap of size 88 meV, and the quantum anomalous Hall effect has been observed in its thin film. However, the latest results of angle-resolved photoemission spectroscopy shows that the surface states may be gapless, which is far from the previous theory. Therefore, studying which factors will affect the topological properties of the surface states of MnBi_2Te_4 and how to adjust the quantum anomalous Hall effect has not only important theoretical value, but also huge application value. In addition, the two-dimensional electron gas will form Landau levels in a strong magnetic field, and the Landau levels will deform and intersect the Fermi energy at the edge of the sample, forming the one-dimensional topological edge states. The topological edge states move in a dissipationless manner and can generate quantum Hall conductance of integer multiples of e^2/h . However, in the three-dimensional electron gas, the dimension along the direction of the magnetic field prevents the quantization of Hall conductance. Therefore, in the study of three-dimensional topological materials, what conditions are needed to form a three-dimensional quantum Hall effect, not only

have important value in understanding the unique topological state of matter, but also have application value in the aspect of control of quantum states. In summary, this dissertation will study how to realize the three-dimensional quantum Hall effect in three-dimensional topological semimetals, and the factors that affect the topological properties of MnBi_2Te_4 and how to control quantum anomalous Hall effect in MnBi_2Te_4 thin films. The main research results are as follows:

We have studied the three-dimensional quantum Hall effect of topological semimetals in an external magnetic field. We show that the surface states of Fermi arcs in topological semimetals can produce a unique three-dimensional quantum Hall effect through the Weyl nodes. Due to the topological constraint, the Fermi arc on a single surface is open and cannot support the quantum Hall effect. The Fermi arcs on the upper and lower surfaces can complete the closed Fermi loop through the "wormhole" tunneling via Weyl nodes to produce the quantum Hall effect. The boundary states of the Fermi arc exhibit a unique three-dimensional distribution, which can be regarded as another example of the $(d-2)$ -dimensional boundary states. In addition, when the Fermi surface gradually changes and cuts through the Weyl node, the Hall conductivity of the film evolves from the $1/B$ dependence to a quantized platform. This phenomenon can be achieved by adjusting the gate voltage of the topological semimetal flake.

We have also studied the topological properties of the surface states of the newly discovered intrinsic antiferromagnetic topological insulator MnBi_2Te_4 . Previously, it was predicted that the surface states of MnBi_2Te_4 would open a large energy gap. However, the latest angle-resolved photoemission spectroscopy measurements show that the energy gap of the surface states is not always observable. In order to resolve this discrepancy between the theoretical prediction and experimental results, starting from the three-dimensional bulk Hamiltonian and considering the spatial distribution of bulk magnetization, we analytically deduce the two-dimensional effective model for the surface states of a single surface for a semi-infinite geometry. Our calculated results show that the small surface gap observed in the angle-resolved photoemission spectroscopy experiments may be caused by a much smaller and more localized intralayer ferromagnetic order. In addition, we also calculate the spatial distribution and penetration depth of the surface states, which shows that the surface states are mainly localized in the first two septuple layers of the sample surface. From our analytical results, the influence of bulk parameters on surface states can be clarified. At the same time, we also deduce the effective model of the surface state for

the MnBi_2Te_4 thin films, which shows that the finite size effect decreases as the thickness increases. When the sample is thicker, the more localized the bulk magnetization is, the smaller the effective magnetization will be. We also show that the Chern number oscillates between -1 and 0 as the number of odd and even layers changes.

In addition, we have studied the influence of the external electric field on the quantum anomalous Hall effect in the intrinsic antiferromagnetic topological insulator MnBi_2Te_4 thin films. For the odd-layer MnBi_2Te_4 thin film, if the potential energy V induced by the electric field is large enough, the Hall conductance will change from the original e^2/h to 0, that is, the Chern number will change from 1 to 0. In other words, with the increase of V , a topological quantum phase transition from a topologically non-trivial state to a topologically trivial state occurs. In addition, because the even-layer MnBi_2Te_4 thin films has the PT (spatial inversion and time-reversal combined) symmetry, the Berry curvature of the energy band is zero. However, when an electric field is applied in the direction perpendicular to the surface, the PT symmetry of the system will be destroyed. At this time, the energy band will lift the degeneracy and split, and the Berry curvature of the energy band will no longer be zero. Therefore, for even-layer thin films, when the Fermi energy cuts to the energy band, the applied electric field will cause the anomalous Hall conductance of the even-layer thin films to change from zero to a finite value. Unlike the odd-layer thin films, when the Fermi energy falls in the surface gap, its Hall conductance is still 0, which does not change with the change of V , that is, no topological phase transition occurs.

Keywords: topological insulators, magnetic topological insulators, topological semimetals, quantum Hall effect, quantum anomalous Hall effect

目 录

摘 要	I
Abstract	III
 第 1 章 绪论	 1
1.1 研究背景.....	1
1.2 拓扑半金属与拓扑绝缘体模型	3
1.2.1 拓扑外尔半金属	3
1.2.2 拓扑狄拉克半金属.....	4
1.2.3 拓扑节线半金属	5
1.2.4 拓扑绝缘体	5
1.3 拓扑半金属与拓扑绝缘体在磁场中的输运性质	6
1.3.1 外尔与狄拉克半金属中的量子振荡.....	6
1.3.2 节线半金属中的量子振荡	7
1.3.3 拓扑绝缘体中的负磁阻	8
1.4 拓扑材料与量子霍尔效应研究现状.....	9
1.5 本论文的主要研究内容及各章安排.....	12
 第 2 章 拓扑物态中的量子霍尔效应	 14
2.1 二维有质量狄拉克粒子中的量子霍尔效应	14
2.2 拓扑绝缘体薄膜中的量子霍尔效应.....	24
2.3 本章小结.....	34
 第 3 章 拓扑半金属中的三维量子霍尔效应	 36
3.1 引言	36
3.2 拓扑外尔半金属	37
3.2.1 最小模型	37
3.2.2 一个表面的开放费米弧	37
3.2.3 通过“虫洞”隧穿的费米弧闭合回路.....	40
3.2.4 霍尔响应	40
3.2.5 费米弧的边界态	43
3.3 拓扑狄拉克半金属.....	43

3.3.1 量子霍尔电导计算	44
3.4 本章小结	45
第 4 章 本征反铁磁拓扑绝缘体中的表面态	48
4.1 引言	48
4.2 半无穷结构表面态有效模型	48
4.2.1 表面态能隙	55
4.2.2 可能的实验证据	55
4.2.3 体参数对表面态能隙的影响	57
4.3 本征反铁磁拓扑绝缘体薄膜的有效模型	57
4.4 本章小结	63
第 5 章 磁性拓扑绝缘体中量子反常霍尔效应调控	64
5.1 引言	64
5.2 电场调控量子反常霍尔效应	65
5.2.1 模型	65
5.2.2 量子相变与量子反常霍尔效应调控	66
5.3 电场调控本征反常霍尔效应	69
5.4 本章小结	70
结 论	72
参考文献	75
附录 A 缩写表	92
攻读博士学位期间发表的论文及其他成果	93
哈尔滨工业大学与南方科技大学联合培养研究生学位论文原创性声明和使用权限	94
致 谢	95
个人简历	96

Contents

Abstract (In Chinese)	I
Abstract (In English)	III
Chapter 1 Introduction	1
1.1 Research background	1
1.2 Models for topological semimetals and insulators	3
1.2.1 Topological Weyl semimetal	3
1.2.2 Topological Dirac semimetal	4
1.2.3 Topological nodal-line semimetal	5
1.2.4 Topological insulator	5
1.3 Transport property of topological semimetals and insulators under mag- netic field	6
1.3.1 Quantum oscillation in Weyl and Dirac semimetals	6
1.3.2 Quantum oscillation in nodal-line semimetals	7
1.3.3 Negative magnetoresistance in topological insulators	8
1.4 Research status of topological materials and quantum Hall effects	9
1.5 The main content of this thesis and the arrangement of each chapter	12
Chapter 2 Quantum Hall effect in topological states of matter	14
2.1 Quantum Hall effect in 2D massive Dirac fermions	14
2.2 Quantum Hall effect in topological insulator thin films	24
2.3 Summary	34
Chapter 3 3D quantum Hall effect in topological semimetals	36
3.1 Introduction	36
3.2 Topological Weyl semimetals	37
3.2.1 Minimal model	37
3.2.2 Open Fermi arc at one surface	37
3.2.3 Fermi arc loop via “wormhole” tunneling	40
3.2.4 The Hall response	40
3.2.5 The edge states of the Fermi arcs	43

3.3 Topological Dirac semimetals	43
3.3.1 The calculation of the Hall conductivity	44
3.4 Summary	45
Chapter 4 Surface states of intrinsic antiferromagnetic topological insulators	48
4.1 Introduction	48
4.2 Magnetically doped topological insulators thin films	48
4.2.1 Energy gap of the surface states	55
4.2.2 Possible experimental evidence	55
4.2.3 Influences of the bulk on the surface gap	57
4.3 Effective model for intrinsic antiferromagnetic topological insulator thin films	57
4.4 Summary	63
Chapter 5 Tuning quantum anomalous Hall effect in magnetic topological	
 insulators	64
5.1 Introduction	64
5.2 Electric field induced quantum phase transition	65
5.2.1 Model	65
5.2.2 Quantum phase transition and tuning quantum anomalous Hall effect	66
5.3 Electric field tuned intrinsic anomalous Hall effect	69
5.4 Summary	70
Conclusions	72
References	75
Chapter A Abbreviations	92
Papers published in the period of Ph.D. education	93
Statement of copyright and Letter of authorization	94
Acknowledgements	95
Resume	96

第1章 绪论

1.1 研究背景

霍尔效应是由 Edwin Herbert Hall 在 1879 发现的。当将通电导体放置在与电流方向垂直的磁场中时，运动的电荷受到洛伦兹力而偏向一侧，垂直于电流与磁场方向形成电压降（如图 1-1（a）所示），此电压降称为霍尔电压，此效应称为霍尔效应。而量子霍尔效应（Quantum Hall effect, QHE）最早由 Klaus von Klitzing 在 1980 年发现。Klaus von Klitzing 与合作者在测量二维电子气（2D electron gas, 2DEG）的霍尔电压时发现，测到的霍尔电阻是固定值，且不受器件构型（geometry of the device）的影响。其霍尔电导可以表示成 e^2/h 的整数倍^[1]，即是量子化的，其中 e 为电子电荷， h 为普朗克常量。这一结果开创了直接测量基本常数的新方法。在 2019 年的国际计量日（5 月 20 日），基于自然常数的一套新的且被广泛接受的国际单位制定义生效，其中千克的定义将基于 e^2/h 中的普朗克常量^[2]。除此之外，通过对 QHE 的更深入研究，Thouless、Kohmoto、Nightingale 与 Nijs 在 1982 年提出二维导体在磁场中的霍尔电导可以表示成 ne^2/h ^[3]，其中 n 为整数，其表达式为

$$n = \sum_m \frac{i}{2\pi} \int_{BZ} d^2k \nabla_k \times \langle u_m | \nabla_k | u_m \rangle \quad (1-1)$$

这就是著名的 TKNN 不变量，也称为陈数（Chern number）。其中，求和是对所有处于占据态的电子子带，积分是在整个布里渊区进行的， $\nabla_k \times \langle u_m | i \nabla_k | u_m \rangle$ 为贝里曲率（Berry curvature）^[4]。陈数的大小表示边界态的个数，这里的边界态是无能耗的。图 1-1（b）展示了陈数为 2 的 QHE。

目前，广义的 QHE 不再仅仅局限于在强磁场中观测到的量子化的霍尔效应（the quantized Hall effect）。对于实验上观测到的其它量子化的霍尔效应（quantized Hall effect），包括量子自旋霍尔效应（quantum spin Hall effect, QSHE），量子反常霍尔效应（quantum anomalous Hall effect, QAHE）等等也统称为 QHE^[5]。

1988 年，Haldane 提出了没有朗道能级（Landau level, LL）形成的 QHE 理论^[6]。在“二维石墨”模型中，当时间反演对称性（time-reversal symmetry, TRS）被破坏，会打开能隙，就像拓扑绝缘体（topological insulator, TI）的表面态由于掺杂磁性杂质破坏 TRS 而打开能隙一样，此时会产生陈数为 ± 1 的整数 QHE 态。

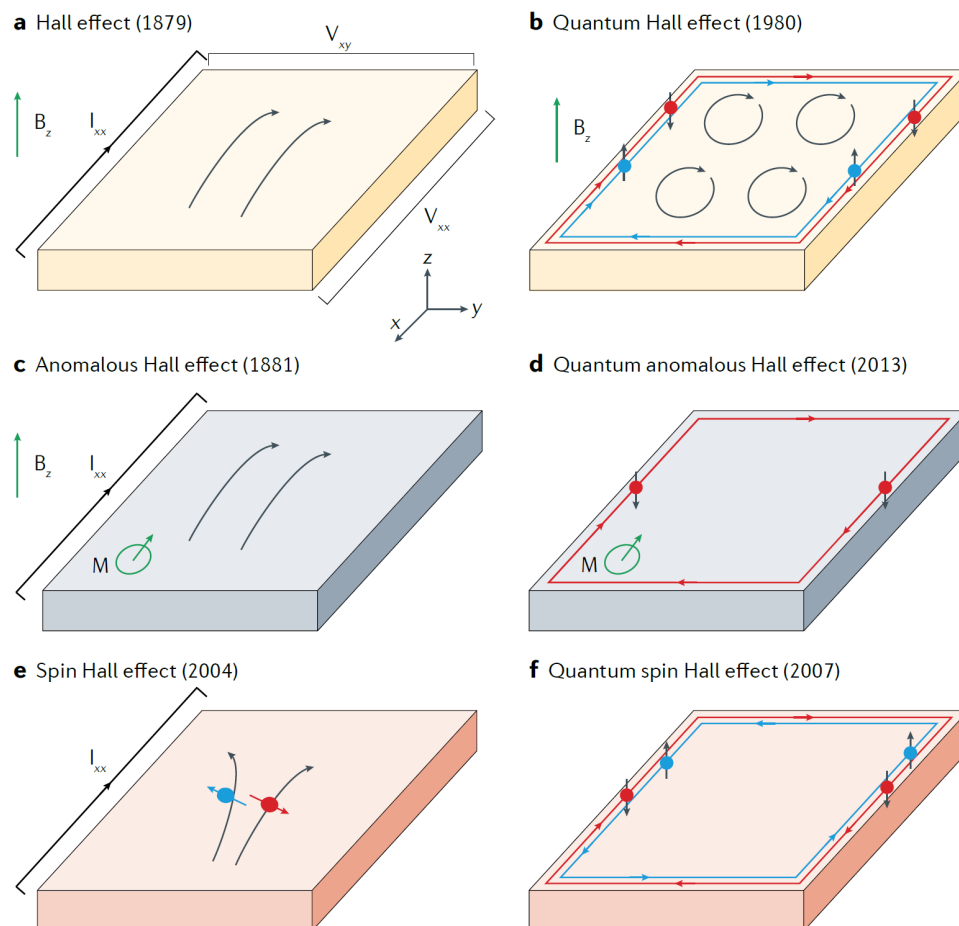


图 1-1 经典与量子霍尔效应。摘自于文献 [5]。

Fig. 1-1 Classical and quantum Hall effects. Adapted from Ref. [5].

然而在 Haldane 模型中并未考虑自旋轨道相互作用。在 2005 年, Kane 和 Mele 提出在石墨烯中, 自旋轨道耦合会将具有 TRS 的系统从二维半金属变为量子自旋绝缘体^[7]。此时体态是绝缘的, 而边界态是无能隙的。由于存在自旋轨道锁定, 两条自旋极化方向相反的边界态在边界上沿相反的方向运动 (如图 1-1 (f) 所示), 被称为螺旋边界态 (helical edge states)。虽然没有净电流, 但是当外加电场时, 会有净自旋流, 产生 QSHE。随后在 2006 年, Bernevig、Hughes 和 Zhang 提出在 HgTe 量子阱中也可以实现 QSHE^[8]。在 2007 年, Molenkamp 实验组在 HgTe 量子阱中首次观测到 QSHE^[9,10]。当在 QSHE 绝缘体中掺杂磁性杂质, 破坏其 TRS 时, 原本两条具有 TRS 的边界态只剩其中一条 (如图 1-1 (d) 所示), 同时其原本无能隙的表面态会打开能隙。由于边界态是具有手性的, 背向杂质散射是被禁止的。将费米能调到能隙中时, 便会产生 QAHE。在 2013 年, 薛其坤实验组在铬掺杂的 $(\text{Bi,Sb})_2\text{Te}_3$ 磁性拓扑绝缘体 (magnetic topological insulator, MTI) 材料中首次观测到了 QAHE^[11]。

综上所述, 可以说, QHE 打开了拓扑物态 (topological states of matter) 这一

新世界的大门。目前，一般所说的拓扑材料是指能够用拓扑不变量来刻画其物态的材料，包括 TI 和拓扑半金属（topological semimetal, TSM）等等。其中 TSM 又可分为拓扑外尔半金属（Weyl Semimetal, WSM）、拓扑狄拉克半金属（Dirac semimetal, DSM）和拓扑节线半金属（nodal-line semimetal, NLSM）等等。当然，材料划分的界限也不是那么严格，总会有些重叠，比如有些单层的二维过渡金属硫化物材料是 TI^[12,13]，而较厚的时候却是 WSM^[14]。

1.2 拓扑半金属与拓扑绝缘体模型

1.2.1 拓扑外尔半金属

WSM 是三维拓扑物态^[15-23]，其体态的导带跟价带在离散的外尔点相接触，如图 1-2（b）所示。其中外尔点总是成对出现，每对外尔点具有相反的手性。外尔点的手性可以通过在包裹住外尔点的费米面上对贝里曲率积分得到，这一积分结果就是外尔点的拓扑荷（topological charge），又被称作“monopole charge”。图 1-2（a）显示了一对外尔点的不同贝里曲率指向，一个是向里汇聚，一个是向外发散，表明这一对外尔点的拓扑荷符号相反。同时图 1-2（a）还展示了费米弧表面态连接了两个不同手性的外尔点。外尔点的存在已经在 WSM TaAs 族^[24-31]中被证实。此外，WSM 也可以由半霍伊斯勒化合物（half-Heusler compounds）施加磁场诱导产生^[32-34]。

下面简要介绍外尔半金属哈密顿量的由来^[35]。在 1929 年，外尔发现，当狄拉克方程质量项为零时，可以分解为两个外尔方程，此时两个手性相反的外尔点的哈密顿量为 $H_{\pm} = \pm v \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ ，手性可以表示为 $h = \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} / p$ ，并具有两个本征值， ± 1 。因此，单个外尔点的哈密顿量可以表示成 $H_{\pm} = \hbar v \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ 。在 1981 年，Nielsen 和 Ninomiya 证明一个 no-go 理论^[36]：对于三维晶格，其哈密顿量具有平移不变性，且其傅里叶变换为平滑函数，则左手性外尔态与右手性外尔态具有相同的数量。也就是说，三维晶格中外尔点是成对出现的，每对外尔点彼此手性相反。因此外尔半金属的最小模型为 two-node model。

WSM 可由下面具有两个外尔点的哈密顿量来描述^[35,37,38]

$$H = A(k_x \sigma_x + k_y \sigma_y) + M(k_w^2 - \mathbf{k}^2) \sigma_z \quad (1-2)$$

其中， $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 为泡利矩阵， $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ 为波矢， A 、 M 和 k_w 为模型参数。哈密顿量的本征能量为 $E_{\pm}^{\mathbf{k}} = \pm [M^2(k_w^2 - \mathbf{k}^2)^2 + A^2(k_x^2 + k_y^2)]^{1/2}$ ，其中 $+$ 表示导带的， $-$ 表示价带的。两个外尔点在 $(0, 0, \pm k_w)$ ，且此模型已经被验证具有所有 WSM

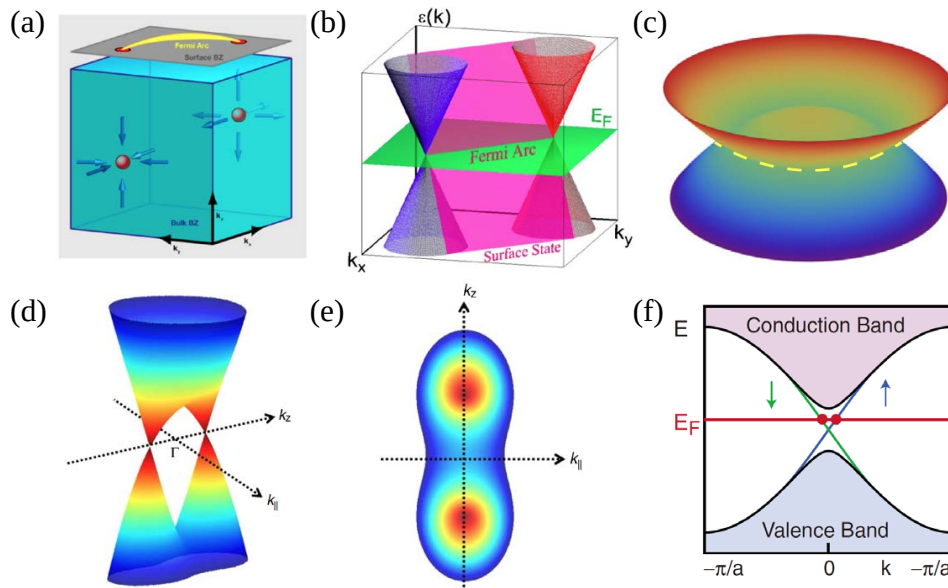


图 1-2 拓扑材料动量空间色散关系示意图。(a) 外尔点分布与表面费米弧。(b) 外尔半金属能谱与费米弧表面态。(c) 动量空间中节线半金属能谱示意图。(d) 狄拉克半金属能谱。(e) 狄拉克半金属能谱俯视图。(f) 拓扑绝缘体能谱。摘自于文献 [39–42]。

Fig.1-2 The schematic diagrams of the dispersion relations for topological materials in the momentum space. (a) Distribution of the Weyl point and the surface Fermi arc. (b) The energy spectrum of the Weyl semimetal and the Fermi arc surface states. (c) Energy spectrum of the nodal-line semimetal in the momentum space. (d) Energy spectrum of the Dirac semimetal. (e) Top view of the energy spectrum for the Dirac semimetal. (f) Energy spectrum of the topological insulator. Adapted from Ref. [39–42].

的性质^[38]，包括费米弧表面态^[43]。此模型的拓扑性质来自于 σ_z 项^[44]。上面的模型引入两个平庸的 D 参数项可改写为^[35,37,38]

$$H = D_1 k_y^2 + D_2 (k_x^2 + k_z^2) + A(k_x \sigma_x + k_y \sigma_y) + M(k_w^2 - k^2) \sigma_z \quad (1-3)$$

1.2.2 拓扑狄拉克半金属

DSM 也属于三维拓扑物态^[45–47]，可以把 WSM 及其做时间反演对称后两部分合起来看作是 DSM。狄拉克点的存在已经在 DSM Na_3Bi ^[22,48,49] 和 Cd_3As_2 ^[41,46,50–55] 中被证实。表面的费米弧表面态连接两个外尔点构成费米回路，图 1-2 (d) 显示了狄拉克半金属的三维能谱示意图，可以看到体态的导带跟价带在狄拉克点接触。图 1-2 (e) 为其俯视图。与外尔半金属不同的是，在狄拉克半金属表面会有两段费米弧连接两个狄拉克点。当导带价带能隙闭合时，由狄拉克方程可得无质量的狄拉克粒子的有效哈密顿量为 $H = v\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\alpha} = vk_x \alpha_x + vk_y \alpha_y + vk_z \alpha_z$ ，其中 $\mathbf{k}$ 为波矢， α_i ($i = x, y, z$) 为狄拉克矩阵。由于 α_i 在时间反演操作下变号，因此哈密顿量具有时间反演不变性。狄拉克点是四重简并的。可以通过么正变换，将哈密顿量形式变为块对角化的。

拓扑狄拉克半金属可以用以下块对角化的哈密顿量来研究^[22,46,56]

$$H = \varepsilon_0(\mathbf{k}) + \begin{bmatrix} M(\mathbf{k}) & Ak_+ & 0 & 0 \\ Ak_- & -M(\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M(\mathbf{k}) & -Ak_- \\ 0 & 0 & -Ak_+ & -M(\mathbf{k}) \end{bmatrix} + \frac{\mu_B}{2}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) \otimes \begin{bmatrix} g_s & 0 \\ 0 & g_p \end{bmatrix} \quad (1-4)$$

其中, g_s 为 s 带的朗德 g 因子, g_p 为 p 带的朗德 g 因子^[56], $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$, $\varepsilon_0(\mathbf{k}) = C_0 + C_1 k_z^2 + C_2(k_x^2 + k_y^2)$, $M(\mathbf{k}) = M_0 + M_1 k_z^2 + M_2(k_x^2 + k_y^2)$ 。 x, y, z 轴分别定义为沿晶体生长的 $[100]$, $[010]$ 和 $[001]$ 方向。

1.2.3 拓扑节线半金属

NLSM^[57-60] 具有鼓膜表面态, 其导带与价带相交部分为闭合的圆环^[61-64], 如图 1-2 (c) 所示。最近, 一种新的表面态称为移动带 (floating band) 在 NLSM 中被发现^[65]。此外, 当对称性被破坏后, NLSM 可能会演变为 DSM、TI 或表面陈绝缘体^[66]。根据理论计算, 预测很多材料中都有 NLSM, 例如 HgCr_2Se_4 ^[18]、石墨烯网络^[67]、 $\text{Cu}_3(\text{Pd/Zn})\text{N}$ ^[68,69]、 SrIrO_3 ^[70,71]、 TiTaSe_2 ^[72]、 Ca_3P_2 ^[73,74]、 CaTe ^[75]、压缩黑磷^[76]、 $\text{CaAg}(\text{P/As})$ ^[77]、 CaP_3 族^[78]、单层 PdS ^[79]、Zintl 化合物^[80]、 BaMX_3 ($M=\text{V, Nb and Ta, X=S, Se}$)^[81]、稀土一元酸^[82]、碱土化合物^[83-85] 以及其它碳基材料^[61,86] 和金属金红石氧化物 XO_2 , ($X=\text{Ir, Os, Rd}$)^[87]。目前, 被角分辨光电子能谱 (angle-resolved photoemission spectroscopy, ARPES) 证实为 NLSM 的材料有 ZrSiS ^[88-90]、 PbTaSe_2 ^[91,92]、 InBi ^[93] 和 PtSn_4 ^[94] 等。

NLSM 的哈密顿量可以表示为^[72,91]

$$H = \left\{ \left[\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)/2m - u \right] \tau_3 + \lambda k_z \tau_1 \right\} \otimes \sigma_0 \quad (1-5)$$

其中, $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ 为波矢, τ 与 σ 为泡利矩阵。 λ 、 m 和 u 为模型参数^[72,91]。哈密顿量的本征能量为 $E_{\pm} = \pm \sqrt{[\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)/2m - u]^2 + \lambda^2 k_z^2}$ 。当 u 为正值时, 两个带在能量为零时相交, 形式为 $k_x^2 + k_y^2 = 2mu/\hbar^2$, 其描述的就是节环 (nodal ring)。节环的半径为 $\sqrt{2mu}/\hbar$ 。当 $E_F < u$ 时, 由色散关系可以看到费米面为环面。当 $E_F > u$, 费米面演变为鼓膜结构。公式 (1-5) 的模型是具有镜面反射对称性的^[72,91]。节线也可以由其它对称性保护^[59,69,95], 比如双重螺旋旋转 (screw rotation)^[70,71], 四重旋转以及空间反演对称性^[59] 等等。

1.2.4 拓扑绝缘体

拓扑绝缘体的体态是绝缘的, 边界态是导电的, 如图 1-2 (f) 所示。其中

对于无能隙的两条边界态，绿色能带代表自旋下的边界态，蓝色能带代表自旋上的边界态。由于两条自旋极化方向相反的边界态运动方向相反，因此会形成螺旋边界态，产生自旋霍尔效应。

由于拓扑性质由在 Γ 点处的物理决定，因此我们可以利用体系的低能有效模型来研究其拓扑物理性质。在 Γ 点附近的能带反转来自于 Bi 原子的 $|P_{1z}^+\rangle$ 和 Te 原子的 $|P_{2z}^-\rangle$ ^[96]。由四个 low-lying 态 $|P_{1z}^+, \uparrow(\downarrow)\rangle$ 和 $|P_{2z}^-, \uparrow(\downarrow)\rangle$ 出发（其中上角标 $+, -$ 表示相应态的 parity），三维 TI 可以由 $k \cdot p$ 哈密顿量描述，形式如下^[35,96,97]

$$H_0 = C_{\mathbf{k}} + \begin{pmatrix} M_{\mathbf{k}} & 0 & iV_n k_z & -iV_{\perp} k_{-} \\ 0 & M_{\mathbf{k}} & iV_{\perp} k_{+} & iV_n k_z \\ -iV_n k_z & -iV_{\perp} k_{-} & -M_{\mathbf{k}} & 0 \\ iV_{\perp} k_{+} & -iV_n k_z & 0 & -M_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad (1-6)$$

其中， $M_{\mathbf{k}} = M_0 + M_{\perp}(k_x^2 + k_y^2) + M_z k_z^2$ ， $C_{\mathbf{k}} = C_0 + C_{\perp}(k_x^2 + k_y^2) + C_z k_z^2$ 。 C_i 、 M_i 和 V_i 为模型参数。当 $M_0 M_{\perp} < 0$ 且 $M_0 M_z < 0$ 时，模型描述的是三维强 TI^[35]。在 Γ 点附近有四条能带 $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ ，两条导带和两条价带。此模型可以给出拓扑表面态的正确描述^[44,98,99] 以及解释 TI 中的负磁阻^[100-104]。

在有外加磁场时，塞曼哈密顿量形式为

$$H_Z = \frac{\mu_B}{2} \begin{pmatrix} g_z^v B_z & g_p^v B_{-} & 0 & 0 \\ g_p^v B_{+} & -g_z^v B_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & g_z^c B_z & g_p^c B_{-} \\ 0 & 0 & g_p^c B_{+} & -g_z^c B_z \end{pmatrix} \quad (1-7)$$

其中， $g_{v/c,z/p}$ 为 $x-y$ 平面沿 z 方向价带/导带的朗德 g 因子， μ_B 为玻尔磁子。

1.3 拓扑半金属与拓扑绝缘体在磁场中的输运性质

1.3.1 外尔与狄拉克半金属中的量子振荡

对于 WSM，当沿 z 方向外加磁场时，能谱会演化为一系列的一维 LL^[38,43]，产生 Shubnikov-de Haas 电阻振荡。电阻率的振荡可以由 Lifshitz-Kosevich 公式来描述^[105]

$$\rho \sim \cos[2\pi(F/B + \phi)] \quad (1-8)$$

其中， ϕ 为相移， F 为振荡频率， B 为磁场强度。 F 与 ϕ 中包含材料费米面的重要细节信息。

每一频率组分的相移可以表示如下：

$$\phi = -1/2 + \phi_B/2\pi + \phi_{3D} \quad (1-9)$$

其中， $\phi_{3D} = \mp 1/8$ 为修正，仅在三维情况出。 ϕ_B 为贝里相位^[4,106]。费米面沿磁场方向的曲率决定了 ϕ_{3D} 的符号^[107,108]。当费米面垂直于磁场方向横截面最大时，对于电子相移 $\phi_{3D} = -1/8$ ，对于空穴相移 $\phi_{3D} = 1/8$ 。当费米面垂直于磁场方向横截面最小时，对于电子相移 $\phi_{3D} = 1/8$ ，对于空穴相移 $\phi_{3D} = -1/8$ 。对于球形费米面，仅存在最小横截面，因此，对于电子相移 $\phi_{3D} = 1/8$ ，对于空穴相移 $\phi_{3D} = -1/8$ 。对于抛物线能带，其不具有贝里相位，因此相移在二维与三维分别为 $\pm 1/2$ 和 $\pm 5/8$ 。然而对于线性色散能带（比如外尔和 DSM）具有额外的贝里相位 π ^[106]，因此相移在二维与三维时分别为 0 ^[109] 和 $\pm 1/8$ ^[110]。在 Lifshitz 转变点附近，量子震荡的相移可以超过 $\pm 1/8$ 或 $\pm 5/8$ ，并且在很大的范围 $\pm 7/8$ 与 $\pm 9/8$ 内移动。然而，这些值在实验中可能会被误认为是 $\pm 1/8$ 。对于 DSM，全部的相移会取离散值 $\pm 1/8$ 或 $\pm 5/8$ 。此外，拓扑能带反转会造成新的拍频产生。

1.3.2 节线半金属中的量子振荡

对于外磁场中的 NLSM，其量子振荡频率 F 与相移 ϕ 可以通过由公式 (1-5) 描述的费米面来分析。由昂萨格关系（Onsager relation），可知 $F = (\hbar/2\pi e)A$ ，其中 A 为费米面垂直于磁场方向最大相交区域的面积。当节线平面与磁场方向垂直时，在 $k_z = 0$ 平面相交区域有两个极值。结合昂萨格关系，可得对于外面的圆环高频为 $F_\alpha = m(u + E_F)/\hbar e$ ，对于里面的圆环低频为 $F_\alpha = m(u + E_F)/\hbar e$ 。这两个频率会产生拍频^[111]。

NLSM 中的相移更复杂一些。首先，无论磁场方向是在面内方向还是面外方向，圆环费米面都具有最大相交区域与最小相交区域。其次，沿平行于节线方向的圆环其贝里相位为 0 ，而沿包裹住节线的圆环方向其贝里相位为 π 。因此，磁场方向不同，量子振荡产生的相移不同。当节线平面垂直于磁场时，有两个相交区域记为 α 和 β 。沿相交区域 α 和 β 的闭环，其贝里相位为 0 ，因此相移取值为 $5/8$ 或 $-5/8$ 。对于电子载流子，最大相交区域的相移为 $\phi_{3D} = -1/8$ 和 $\phi = -1/2 + 0 - 1/8 = -5/8$ 。最小相交区域的相移为 $\phi_{3D} = 1/8$ 和 $\phi = -1/2 + 0 + 1/8 = -3/8$ 。相移 $\phi = -1/2 + 0 + 1/8 = -3/8$ 与相移 $5/8$ 是等价的，因为振荡具有 2π 的周期性。

当保护节线的对称性被破坏时，有限大小的能隙 Δ 会将导带与价带分开。贝里相位变为

$$\phi_B = \pm\pi \left(1 - \frac{\Delta}{2E_F}\right) \quad (1-10)$$

1.3.3 拓扑绝缘体中的负磁阻

最近发现 TSM 中会有手征反常 (chiral anomaly) 现象, 也就是手性电流不守恒。一般认为手征反常会引起负磁阻。然而在 TI 中, 动量空间里手征反常并不能很好的定义, 依然能观测到负磁阻。这使得人们对引起负磁阻的原因产生困惑。利用具有贝里曲率与轨道磁矩的半经典玻尔兹曼理论可以解释 TI 中的负磁阻现象。

贝里曲率与轨道磁矩会产生反常速度, 因此可能导致负磁阻。在实验中, 负磁阻存在于 $T = 100 \text{ K}$ [103], 因此可以忽略量子干涉机制。此外, 由于 TlBi_2Te_3 和 Bi_2Se_3 中迁移率较低 [112], 当磁场达到 6 特斯拉时, LL 还没有很好的形成。在半经典的机制中, 电子输运可以由运动方程来描述 [113]

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} - \dot{\mathbf{k}} \times \mathbf{\Omega}_{\mathbf{k}}, \quad \dot{\mathbf{k}} = -\frac{e}{\hbar} (\mathbf{E} + \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}) \quad (1-11)$$

其中, 位置 $\mathbf{r}$ 与波矢 $\mathbf{k}$ 同时出现。 $\dot{\mathbf{r}}$ 与 $\dot{\mathbf{k}}$ 为它们的时间导数。 $-e$ 为电子电荷, $\mathbf{E}$ 与 $\mathbf{B}$ 分别为外加电场与磁场。 $\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$, $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ 为能带色散, $\mathbf{m}$ 为半经典的布洛赫波包自转引起的轨道磁矩, $\mathbf{\Omega}_{\mathbf{k}}$ 为贝里曲率 [4]。在线性响应极限下 ($\mathbf{E} = 0$), 公式 (1-11) 满足有效速度形式如下

$$\dot{\mathbf{r}} = [\tilde{\mathbf{v}}_{\mathbf{k}} + (e/\hbar) \mathbf{B} (\tilde{\mathbf{v}}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{\Omega}_{\mathbf{k}})] / D_{\mathbf{k}} \quad (1-12)$$

其中, $D_{\mathbf{k}}^{-1}$ 为态密度的修正为

$$\tilde{\mathbf{v}}_{\mathbf{k}} = \mathbf{v}_{\mathbf{k}} - \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} (\mathbf{m}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{B}), \quad D_{\mathbf{k}} = 1 + \frac{e}{\hbar} \mathbf{B} \cdot \mathbf{\Omega}_{\mathbf{k}} \quad (1-13)$$

由于有贝里曲率, 速度产生正比于 $\mathbf{B}$ 的反常项。此处需要注意电导是流-流关联 (current-current correlation), 因此反常速度出现将会产生额外的电导, 随磁场增大, 也就是负磁阻。也有报道称 TSM 中的负磁阻是与贝里曲率相关的 [114, 115]。之前也提到过 [115], 贝里曲率 [113] 会产生随磁场增大的电导修正

$$\delta\sigma(B) \propto \frac{B^2}{k_F^2} \propto \frac{B^2}{n^{2/3}} \quad (1-14)$$

其中, k_F 为费米波矢, 载流子密度 n 是正比于 k_F^3 。这是除了手征反常之外另外一种负磁阻的解释。计算表明, 在 TI 中, 这一机制产生的负磁阻与实验中的大小差不多 [100]。

相对磁阻定义为 $\text{MR}_{\mu}(B_{\mu}) = [1/\sigma^{\mu\mu}(B_{\mu}) - 1/\sigma^{\mu\mu}(0)]/[1/\sigma^{\mu\mu}(0)]$ 。在半经典玻

尔兹曼理论中, 纵向电导 $\sigma^{\mu\mu}$ 来自于费米能切过的所有带的贡献, 对于第 n 条带^[116]

$$\sigma^{\mu\mu} = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{e^2\tau}{D_{\mathbf{k}}} \left(\tilde{v}_{\mathbf{k}}^{\mu} + \frac{e}{\hbar} B^{\mu} \tilde{v}_{\mathbf{k}}^{\nu} \Omega_{\mathbf{k}}^{\nu} \right)^2 \left(-\frac{\partial \tilde{f}_0}{\partial \varepsilon} \right) \quad (1-15)$$

其中为了简洁略去了指标 n 。 $D_{\mathbf{k}}$ 与 $\tilde{v}_{\mathbf{k}}^{\mu}$ 在公式 (1-13) 中已给出。 $\tilde{f}_0$ 为平衡态下费米分布。 输运时间 τ 在半经典极限下被当作常数^[117]。 对于哈密顿量为 H 的第 n 条带来说, 贝里曲率矢量的 ξ 部分表示为 $\Omega_{n\mathbf{k}}^{\xi} = \Omega_{n\mathbf{k}}^{\mu\nu} \varepsilon_{\mu\nu\xi}$, 其中 ξ 、 μ 和 ν 代表 x 、 y 和 z , $\varepsilon_{\mu\nu\xi}$ 为 Levi-Civita 反对称张量, 且

$$\Omega_{n\mathbf{k}}^{\mu\nu} = -2 \sum_{n' \neq n} \frac{\text{Im} \langle n | \partial H / \partial k_{\mu} | n' \rangle \langle n' | \partial H / \partial k_{\nu} | n \rangle}{(\varepsilon_n - \varepsilon_n')^2} \quad (1-16)$$

其中 $H = H_0 + H_Z$ 。 轨道磁矩 $\mathbf{m}$ 形式为

$$m_{n\mathbf{k}}^{\mu\nu} = -\frac{e}{\hbar} \sum_{n' \neq n} \frac{\text{Im} \langle n | \partial H / \partial k_{\mu} | n' \rangle \langle n' | \partial H / \partial k_{\nu} | n \rangle}{\varepsilon_n - \varepsilon_n'} \quad (1-17)$$

塞曼能会导致 Ω 和 $\mathbf{m}$ 的有限分布^[100]。

1.4 拓扑材料与量子霍尔效应研究现状

2DEG 在强磁场中会形成 LL, 而 LL 在样品边缘会发生形变与费米能相交, 形成一维拓扑边缘态。 拓扑边缘态以无损耗的方式运动, 能够产生 e^2/h 整数倍的量子霍尔电导。 然而在三维电子气中, 沿磁场方向的维度阻止了霍尔电导的量子化。 因此, 研究三维拓扑材料中, 要形成三维 QHE 需要哪些条件, 不仅在理解奇异的拓扑物态有重要价值, 在物态调控方面也具有应用价值。

对于磁性拓扑材料, 在 TI 中掺入磁性杂质, 会破坏体系的 TRS, 此时 TI 的表面态会打开能隙^[118]。 表面态打开能隙是实现 QAHE 的必要条件^[11,118]。 然而磁性杂质掺杂不可避免的会引入不均匀性和无序, 使得可以探测到 QAHE 的温度一般比较低 (小于 2K)^[119,120]。 理论上可以通过磁性延展方法^[121,122] 或使用本征 MTI (磁性是晶体中固有的, 而非人为掺杂引入)^[123-126] 来提高 QAHE 的工作温度。 QAHE 绝缘体可用于低能耗量子器件的研制。 最近, 有报道预言 MnBi_2Te_4 为本征 MTI^[127-129], 如图 1-3 (a) 所示, 并且已经被实验验证^[127,130-136]。 其表面态打开很大的能隙^[127], 如图 1-3 (b) 和图 1-4 (a) 所示, 且在温度为 1.4 K 时, 5 层 MnBi_2Te_4 薄膜中观测到 QAHE^[137], 如图 1-3 (c) 所示。 然而, 最近的 ARPES 实验结果显示 MnBi_2Te_4 晶体的表面态能隙很小甚至可能是无能隙的, 如图 1-4 (b-f) 所示^[131,133-136], 与之前的计算结果大相径庭^[127-133,138-142]。 因此研究哪些因

素会影响 MnBi_2Te_4 表面态的拓扑性质，解决新的实验结果与之前理论的差异，具有重要的理论价值和潜在的应用价值。

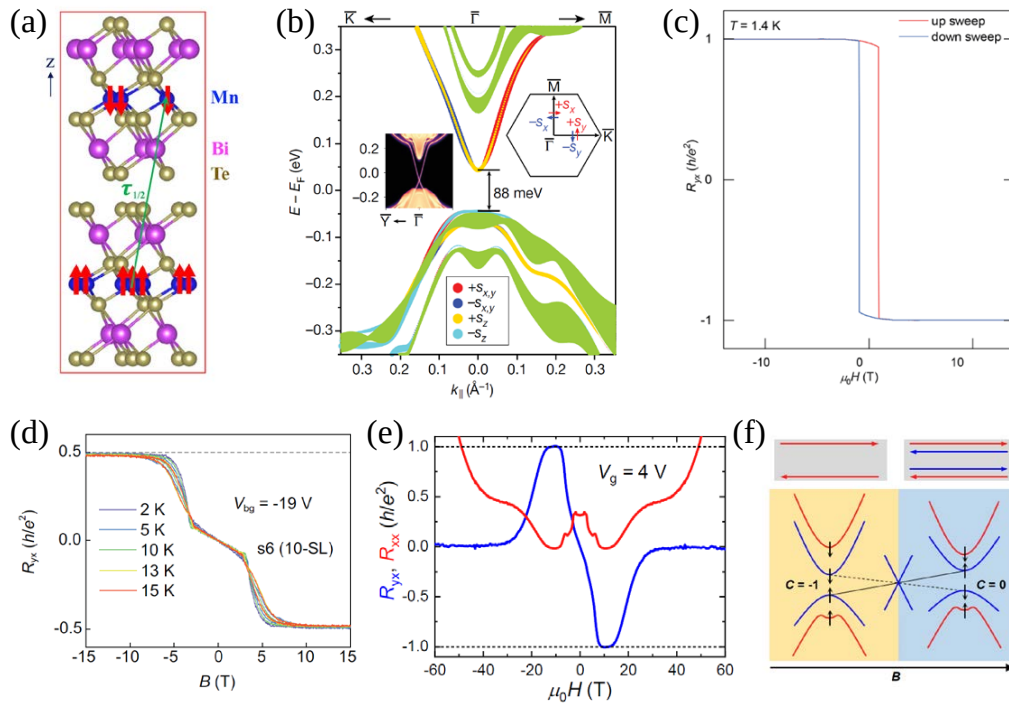


图 1-3 (a) 双层 MnBi_2Te_4 结构。(b) MnBi_2Te_4 的能谱。(c) 在温度为 1.4K 时，5 层 MnBi_2Te_4 薄膜中观测到 QAHE。(d) 对于 10 层 MnBi_2Te_4 薄膜，霍尔电阻随磁场的变化。(e) 在 7 层 MnBi_2Te_4 薄膜中，霍尔电阻（蓝色）与纵向电阻（红色）随磁场的变化。(f) 随磁场增大发生拓扑相变。摘自于文献 [127,128,137,143,144]。

Fig. 1-3 (a) The structure of bilayer MnBi_2Te_4 . (b) The calculated energy spectrum of MnBi_2Te_4 . (c) QAHE observed in a five-layer MnBi_2Te_4 thin film at 1.4 K. (d) The Hall resistance as a function of magnetic field for ten septuple layer MnBi_2Te_4 thin film. (e) The Hall resistance (blue) and longitudinal resistance (red) as a function of magnetic field for seven septuple layer MnBi_2Te_4 thin film. (f) The topological phase transition as the strength of the magnetic field increases. Adapted from Ref. [127,128,137,143,144].

此外，在外加磁场中观测到了无朗道能形成的高陈数 QHE 以及本征陈绝缘态与塞曼效应引起的陈绝缘态共存的螺旋陈绝缘相，如图 1-3 (d-f) 所示^[143,144]。量子物态调控是实现量子器件的重要基础，除了通过外加磁场进行物态调控外，外加电场也可以进行量子物态调控。因此研究在外加电场下 MnBi_2Te_4 的量子物态具有重要的应用价值。

在磁性拓扑材料的研究中，对磁性 TSM 的研究也有很多。目前发现的磁性 TSM 包括 $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ ^[145]、 Co_2MnAl ^[146] 以及 EuB_6 ^[40] 等，理论预测其中会有 QAHE^[40]。目前实验上观测到多种费米弧^[147]、很大的反常霍尔效应^[145,146,148]、反常能斯特效应^[149] 以及电子关联产生的平带^[150]。

另外，考虑到相互作用的影响，对于半金属，会产生金属-绝缘体相变。最

近, 在 ZrTe_5 块材中观测到了有电荷密度波参与的三维量子霍尔效应^[151]。磁场会诱导产生到电荷密度波相的二阶相变过程, 并且序参量是由电子-声子相互作用主导, 而不是电子-电子相互作用主导^[152]。

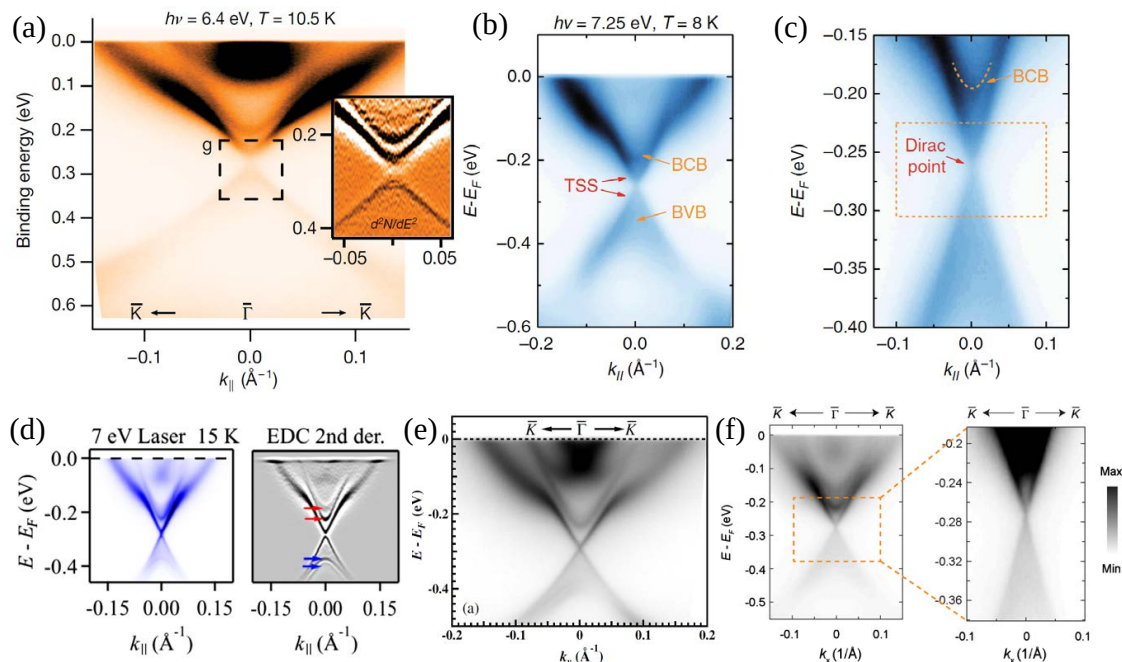


图 1-4 块材 MnBi_2Te_4 表面态能隙的 ARPES 结果。表面态能隙 (a) 大约 70 meV, (b-c) 小于 25 meV, (d) 小于 13.5 meV, (e) 小于 3 meV, (f) 小于 2.5 meV。摘自文献 [127,131,133-135]。
Fig. 1-4 ARPES results of the surface gap for bulk MnBi_2Te_4 . The surface gap is (a) about 70 meV, (b-c) less than 25 meV, (d) less than 13.5 meV, (e) less than 3 meV, (f) and less than 2.5 meV. Adapted from Ref. [127,131,133-135].

考虑相互作用与拓扑性质的彼此影响, 转角电子学 (twistronics) 作为一个新的方向发展也很迅速。尤其是在双层转角石墨烯实验^[153,154] 出来以后, 越来越多的相关工作涌现, 包括转角石墨烯中的超导性^[155-157]、铁磁性^[158-161], 还有莫里超晶格^[162-164] 以及转角双层 MTI^[165] 等等。值得一提的是, 最近在双层石墨烯中观测到了 QAHE^[166]。

除了整数量子霍尔效应以外, 在拓扑材料中, 分数量子霍尔效应的研究也在不断发展。双层石墨烯是研究分数量子霍尔效应的主要材料^[167-175]。最近有理论提出, 在外尔半金属中也可以实现分数量子霍尔效应^[176,177]。对于转角石墨烯, 目前理论预测的 fractional Chern insulator states 也已经在实验上观测到^[178-180]。因此, 在拓扑材料中寻找分数量子霍尔效应有着光明的前景。

除了上面提到的拓扑材料, 目前研究较多的拓扑材料还有拓扑手性晶体^[181], 包括 CoSi , RhSi , RhGe , CoGe ^[182,183] 和 AlPt ^[184] 等。其具有长费米弧^[184-188], 高陈数^[189] 以及量子化的旋光电流效应^[183,190] 等特点。

综上所述，目前的拓扑材料种类繁多，各种效应也不胜枚举。本文将主要研究如何在三维 TSM 中实现三维 QHE，以及影响 MnBi_2Te_4 表面态拓扑性质的因素和如何调控 MnBi_2Te_4 薄膜中 QAHE。

1.5 本论文的主要研究内容及各章安排

本论文将主要研究 TSM 中的三维 QHE，本征 MTI MnBi_2Te_4 表面态的拓扑性质及其在外加电场中的输运性质。具体研究内容如下：

(1) 我们知道 2DEG 在强磁场中会形成 LL。LL 在样品边缘会发生形变与费米能相交，形成一维拓扑边缘态。拓扑边缘态以无损耗的方式在运动，产生 e^2/h 整数倍的霍尔电导，定义为 QHE。QHE 可以给出区分不同电子气的输运特性，比如石墨烯中二维无质量狄拉克费米子的半整数霍尔电导和拓扑表面态。作为对比，在三维电子气中，沿磁场方向的维度阻止了霍尔电导的量子化。那么，对于三维 TSM，在外加磁场下除了体态会有量子振荡以外，其表面态与体态一起能否产生三维 QHE 呢？针对这一问题，我们将研究在三维 TSM 中，形成三维 QHE 所需要的条件。

(2) 有报道预测 MnBi_2Te_4 为本征 MTI 并且已经被实验验证。然而，最近的实验结果显示 MnBi_2Te_4 晶体的表面态可能是无能隙的，与之前的计算结果和实验观测相去甚远。为了探究其表面态能隙变小的原因，就需要得到块材单个表面的表面态有效模型，然后可以直观的看到哪些参数对表面态的能隙大小有影响。因此，我们将考虑体磁化的空间分布，从三维体哈密顿量出发，来推导其单个表面的表面态有效模型，研究表面态能隙变小的原因，看有哪些因素会导致实验观测结果的差异。

(3) 对于本征 MTI MnBi_2Te_4 ，其奇数层薄膜（因为有净磁化）是陈绝缘体，而偶数层薄膜（因为净磁化为 0）是轴子绝缘体。虽然可以通过第一性原理计算薄膜的能带结构及其拓扑数，然而第一性原理计算只能计算较薄（几层厚度）的薄膜，更高层数的薄膜计算量会非常大。因此我们考虑构造薄膜有效模型来描述这一体系。通过体边对应原理，得到薄膜表面态的有效模型，然后再通过有效模型研究本征 MTI 的拓扑性质。此外，目前 ARPES 探测到的薄膜表面态能隙比第一性原理计算的要小，在得到薄膜表面态有效模型以后，也可以研究哪些因素会导致其表面态能隙变小。

(4) 由于偶数层 MnBi_2Te_4 薄膜具有空间反演对称性（spatial inversion symmetry, P）与时间反演对称性（time-reversal symmetry, T）结合的 PT 对称性，其

总的贝里曲率为零。但是,当在垂直于表面方向加电场时,会破坏系统的 PT 对称性,此时能带会破除简并,产生劈裂,每个能带的贝里曲率不再为零。当费米面切到能带时,非零的贝里曲率会贡献反常霍尔电导。但是其反常霍尔电导的大小目前还没有实验结果。因此我们可以从理论模型出发,计算外加电场对偶数层薄膜的反常霍尔效应调控。此外,奇数层 $MnBi_2Te_4$ 薄膜为量子反常霍尔效应绝缘体,其在外加电场下的输运特性还并不太清楚。如果外加电场能够调控 QAHE,那就可以用来实现拓扑场效应管,其中“开”的状态为霍尔平台为 1 时,有无耗散的导电通道,“关”的状态为外加电场变为普通绝缘体时,没有导电通道。因此研究外加电场对 $MnBi_2Te_4$ 薄膜输运特性的调控具有潜在的应用价值。

基于以上的研究内容,本论文主要内容如下:

在第 2 章中介绍了如何利用朗道能级理论与久保公式来计算外加磁场中的量子霍尔电导,推导了有质量的狄拉克粒子在外磁场下的量子霍尔电导以及 TI 在上下表面加电压时表面态在外磁场下的量子霍尔电导。

在第 3 章中分析了在 WSM 中要实现三维 QHE 所需要的条件。展示了上下表面的开放费米弧与外尔点结合可以实现完整的费米闭合回路的图像。同时还分析了上下表面费米弧与外尔点附近波函数的分布以及费米能在远离外尔点与切过外尔点时的霍尔电导。最后展示了在 DSM 中也可以产生 QHE。

在第 4 章中分析了 ARPES 实验观测到的很小的表面态能隙的原因以及体参数的变化对表面态分布的影响。讨论了体磁化的大小和局域性对单个表面的表面态能隙的影响。研究了本征 MTI 上下两个表面有耦合时的表面态拓扑性质。展示了偶数层薄膜由于存在 PT 对称性,其能谱是二重简并的。同时还讨论了有限尺寸效应、有效磁化与表面态能隙随薄膜厚度的变化。研究了在薄膜中体磁化的局域性对有效磁化与表面态能隙的影响。最后还讨论了体系的陈数对厚度的依赖关系。

在第 5 章中研究了外加电场对本征 MTI 的物态调控。推导了外加电场下奇数层薄膜与偶数层薄膜的二带有效模型。讨论了奇数层薄膜在外加电场作用下的拓扑量子相变。分析了外加电场对偶数层薄膜对称性的影响,以及当费米能切过能带时,外加电场对其本征反常霍尔效应的调控。同时还给出了奇数层薄膜与偶数层薄膜的反常霍尔电导随外加电场诱导的势能 V 与费米能变化的相图。

第 2 章 拓扑物态中的量子霍尔效应

为了研究拓扑物质在磁场中的 QHE 行为, 需要利用朗道能级理论以及久保公式来计算其量子霍尔电导。本章将以有质量的狄拉克粒子的二带模型以及拓扑绝缘体表面态的四带模型为例子, 展示如何计算外加磁场下的量子霍尔电导。

2.1 二维有质量狄拉克粒子中的量子霍尔效应

二维有质量狄拉克粒子的模型为

$$\mathcal{H} = \gamma(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + h_z \sigma_z = \begin{bmatrix} h_z & i\gamma k_- \\ -i\gamma k_+ & -h_z \end{bmatrix} \quad (2-1)$$

其中, $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$ 。此模型来自于狄拉克方程。其中第一项为无质量的狄拉克粒子模型, 第二项为质量项, 使得能带在 Γ 点打开能隙, 能隙的大小正比于 h_z 的绝对值。

沿垂直于 $x-y$ 面的 z 方向加磁场, 同时选取朗道规范 $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$, 可以验证

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = (\partial_y A_z - \partial_z A_y)\hat{x} + (\partial_z A_x - \partial_x A_z)\hat{y} + (\partial_x A_y - \partial_y A_x)\hat{z} = B\hat{z} \quad (2-2)$$

利用皮尔斯代换 (Peierls substitution) $\vec{k} \rightarrow \vec{k} - \frac{q}{\hbar} \vec{A}$ (其中 q 为电荷电量, $\hbar$ 是约化普朗克常数), 即 $(k_x, k_y) \rightarrow (k_x - \frac{eB}{\hbar}y, -i\partial_y)$, 这里 $e = |e|$ 仅代表电子电荷的绝对值。定义磁长度为

$$\ell_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} \quad (2-3)$$

以及升降算符定义为

$$a = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{y-y_0}{\ell_B} + \ell_B \partial_y\right), a^\dagger = -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{y-y_0}{\ell_B} - \ell_B \partial_y\right) \quad (2-4)$$

其中 $y_0 = \ell_B^2 k_x$ 。由升降算符的定义可得

$$-\frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) = \frac{y-y_0}{\ell_B}, -\frac{1}{\sqrt{2}}(a - a^\dagger) = \ell_B \partial_y \quad (2-5)$$

将动量表示成升降算符的形式为

$$k_+ = \frac{\sqrt{2}}{\ell_B} a^\dagger, k_- = \frac{\sqrt{2}}{\ell_B} a \quad (2-6)$$

在皮尔斯代换后，磁场下的哈密顿量的形式变为

$$H = \begin{bmatrix} h_z & i\eta a \\ -i\eta a^\dagger & -h_z \end{bmatrix} \quad (2-7)$$

其中 $\eta = \gamma \frac{\sqrt{2}}{\ell_B}$ 。假设其本征波函数的形式为

$$\phi_n = \begin{bmatrix} C_{n1} |n-1\rangle \\ C_{n2} |n\rangle \end{bmatrix}, n \geq 1 \quad (2-8)$$

当 $n > 0$ 时，将其带入本征方程

$$H\psi_n = E_n\psi_n \quad (2-9)$$

我们得到

$$h_z C_{n1} |n-1\rangle + i\eta\sqrt{n} C_{n2} |n-1\rangle = E_n C_{n1} |n-1\rangle \quad (2-10)$$

$$-i\eta\sqrt{n} C_{n1} |n\rangle - h_z C_{n2} |n\rangle = E_n C_{n2} |n\rangle \quad (2-11)$$

由于 n 的任意性，需要满足

$$(h_z - E_n)C_{n1} + i\eta\sqrt{n}C_{n2} = 0 \quad (2-12)$$

$$-i\eta\sqrt{n}C_{n1} - (h_z + E_n)C_{n2} = 0 \quad (2-13)$$

即

$$\begin{bmatrix} h_z & i\eta\sqrt{n} \\ -i\eta\sqrt{n} & -h_z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{n1} \\ C_{n2} \end{bmatrix} = E_n \begin{bmatrix} C_{n1} \\ C_{n2} \end{bmatrix} \quad (2-14)$$

通过解久期方程，我们可以得到本征能量 $E_n^\pm = \pm\sqrt{h_z^2 + \eta^2 n} = \pm\sqrt{h_z^2 + 2\gamma^2 n/\ell_B^2}$ ，相应的本征波函数为 $|n, \alpha\rangle$ ，其中 $\alpha = \pm$ 。将本征能量代入本征方程中，

$$E_n^+ \begin{bmatrix} \cos\theta_n & i\sin\theta_n \\ -i\sin\theta_n & -\cos\theta_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{n1} \\ C_{n2} \end{bmatrix} = E_n \begin{bmatrix} C_{n1} \\ C_{n2} \end{bmatrix} \quad (2-15)$$

其中，我们定义了

$$\cos\theta_n = \frac{h_z}{\sqrt{h_z^2 + \eta^2 n}}, \sin\theta_n = \frac{\eta\sqrt{n}}{\sqrt{h_z^2 + \eta^2 n}} \quad (2-16)$$

对于 $E_n = E_n^+$ 且 $E_n^+ \neq 0$,

$$\begin{bmatrix} \cos\theta_n & i\sin\theta_n \\ -i\sin\theta_n & -\cos\theta_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{n1} \\ C_{n2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{n1} \\ C_{n2} \end{bmatrix} \quad (2-17)$$

同时利用归一化关系 $|C_{n1}|^2 + |C_{n2}|^2 = 1$, 可得 $C_{n1} = \cos\frac{\theta_n}{2}$, $C_{n2} = \sin\frac{\theta_n}{2}$, 因此本征函数的形式为

$$|n, +\rangle = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta_n}{2}|n-1\rangle \\ \sin\frac{\theta_n}{2}|n\rangle \end{bmatrix} \quad (2-18)$$

对于 $E_n = E_n^-$ 且 $E_n^- \neq 0$,

$$\begin{bmatrix} \cos\theta_n & i\sin\theta_n \\ -i\sin\theta_n & -\cos\theta_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{n1} \\ C_{n2} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} C_{n1} \\ C_{n2} \end{bmatrix} \quad (2-19)$$

同样利用归一化关系 $|C_{n1}|^2 + |C_{n2}|^2 = 1$, 我们得到 $C_{n1} = \sin\frac{\theta_n}{2}$, $C_{n2} = -\cos\frac{\theta_n}{2}$, 其中 C_{n2} 中的负号来自于正交关系。因此本征波函数为

$$|n, -\rangle = \begin{bmatrix} \sin\frac{\theta_n}{2}|n-1\rangle \\ -\cos\frac{\theta_n}{2}|n\rangle \end{bmatrix} \quad (2-20)$$

对于 $n = 0$, 本征波函数的形式为

$$\phi_0 = \begin{bmatrix} 0 \\ C_{01}|0\rangle \end{bmatrix}, n = 0 \quad (2-21)$$

代入本征方程中, 我们得到

$$-h_z C_{01} |0\rangle = E_0 C_{01} |0\rangle \quad (2-22)$$

如果 $C_{01} \neq 0$, 可得

$$E_0 = -h_z \quad (2-23)$$

其对应的本征波函数为 $|0, \pm\rangle$ 。

当 $h_z < 0$ 时, $E_{0+} = \sqrt{h_z^2}$,

$$|0, +\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ \sin\frac{\theta_0}{2}|0\rangle \end{bmatrix} \quad (2-24)$$

当 $h_z > 0$ 时, $E_{0-} = -\sqrt{h_z^2}$,

$$|0, -\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ -\cos\frac{\theta_0}{2}|0\rangle \end{bmatrix} \quad (2-25)$$

其中我们定义了

$$\sin\frac{\theta_0}{2} = \theta(-h_z), \cos\frac{\theta_0}{2} = \theta(h_z) \quad (2-26)$$

这里 $\theta(x)$ 为阶跃函数, 定义为

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & \text{其它} \end{cases} \quad (2-27)$$

计算霍尔电导时需要用到速度算符 $\hat{v}_x$ 和 $\hat{v}_y$, 其定义如下

$$\hat{v}_x = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial k_x} = \frac{1}{\hbar} \begin{bmatrix} 0 & i\gamma \\ -i\gamma & 0 \end{bmatrix}, \hat{v}_y = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial k_y} = \frac{1}{\hbar} \begin{bmatrix} 0 & \gamma \\ \gamma & 0 \end{bmatrix} \quad (2-28)$$

计算霍尔电导的久保公式如下

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2 \hbar}{2\pi \ell_B^2} \sum_{n, \alpha \neq m, \beta} \text{Im} [\langle n, \alpha | \hat{v}_x | m, \beta \rangle \langle m, \beta | \hat{v}_y | n, \alpha \rangle] \frac{n_F(E_n^\alpha - \mu) - n_F(E_m^\beta - \mu)}{(E_n^\alpha - E_m^\beta)^2} \quad (2-29)$$

将上式展开以方便计算

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} = \frac{e^2 \hbar}{2\pi \ell_B^2} \sum_{n \neq m} & \left\{ \text{Im} [\langle n, + | \hat{v}_x | m, + \rangle \langle m, + | \hat{v}_y | n, + \rangle] \frac{n_F(E_n^+ - \mu) - n_F(E_m^+ - \mu)}{(E_n^+ - E_m^+)^2} \right. \\ & + \text{Im} [\langle n, + | \hat{v}_x | m, - \rangle \langle m, - | \hat{v}_y | n, + \rangle] \frac{n_F(E_n^+ - \mu) - n_F(E_m^- - \mu)}{(E_n^+ - E_m^-)^2} \\ & + \text{Im} [\langle n, - | \hat{v}_x | m, - \rangle \langle m, - | \hat{v}_y | n, - \rangle] \frac{n_F(E_n^- - \mu) - n_F(E_m^- - \mu)}{(E_n^- - E_m^-)^2} \\ & \left. + \text{Im} [\langle n, - | \hat{v}_x | m, + \rangle \langle m, + | \hat{v}_y | n, - \rangle] \frac{n_F(E_n^- - \mu) - n_F(E_m^+ - \mu)}{(E_n^- - E_m^+)^2} \right\} \quad (2-30) \end{aligned}$$

其中,

$$\langle n, + | \hat{v}_x | m, + \rangle = \frac{i\gamma}{\hbar} \left(\cos\frac{\theta_n}{2} \sin\frac{\theta_m}{2} \delta_{n-1, m} - \sin\frac{\theta_n}{2} \cos\frac{\theta_m}{2} \delta_{n, m-1} \right) \quad (2-31)$$

$$\langle n, + | \hat{v}_x | m, - \rangle = \frac{i\gamma}{\hbar} \left(-\cos\frac{\theta_n}{2} \cos\frac{\theta_m}{2} \delta_{n-1, m} - \sin\frac{\theta_n}{2} \sin\frac{\theta_m}{2} \delta_{n, m-1} \right) \quad (2-32)$$

$$\langle n, - | \hat{v}_x | m, - \rangle = \frac{i\gamma}{\hbar} \left(-\sin\frac{\theta_n}{2} \cos\frac{\theta_m}{2} \delta_{n-1, m} + \cos\frac{\theta_n}{2} \sin\frac{\theta_m}{2} \delta_{n, m-1} \right) \quad (2-33)$$

$$\langle n, - | \hat{v}_x | m, + \rangle = \frac{i\gamma}{\hbar} \left(\sin \frac{\theta_n}{2} \sin \frac{\theta_m}{2} \delta_{n-1, m} + \cos \frac{\theta_n}{2} \cos \frac{\theta_m}{2} \delta_{n, m-1} \right) \quad (2-34)$$

$$\langle n, + | \hat{v}_y | m, + \rangle = \frac{\gamma}{\hbar} \left(\cos \frac{\theta_n}{2} \sin \frac{\theta_m}{2} \delta_{n-1, m} + \sin \frac{\theta_n}{2} \cos \frac{\theta_m}{2} \delta_{n, m-1} \right) \quad (2-35)$$

$$\langle n, + | \hat{v}_y | m, - \rangle = \frac{\gamma}{\hbar} \left(-\cos \frac{\theta_n}{2} \cos \frac{\theta_m}{2} \delta_{n-1, m} + \sin \frac{\theta_n}{2} \sin \frac{\theta_m}{2} \delta_{n, m-1} \right) \quad (2-36)$$

$$\langle n, - | \hat{v}_y | m, - \rangle = \frac{\gamma}{\hbar} \left(-\sin \frac{\theta_n}{2} \cos \frac{\theta_m}{2} \delta_{n-1, m} - \cos \frac{\theta_n}{2} \sin \frac{\theta_m}{2} \delta_{n, m-1} \right) \quad (2-37)$$

$$\langle n, - | \hat{v}_x | m, + \rangle = \frac{\gamma}{\hbar} \left(\sin \frac{\theta_n}{2} \sin \frac{\theta_m}{2} \delta_{n-1, m} - \cos \frac{\theta_n}{2} \cos \frac{\theta_m}{2} \delta_{n, m-1} \right) \quad (2-38)$$

$$\begin{aligned} & \langle n, + | \hat{v}_x | m, + \rangle \langle m, + | \hat{v}_y | n, + \rangle \\ &= \frac{i\gamma^2}{\hbar^2} \left(\cos^2 \frac{\theta_n}{2} \sin^2 \frac{\theta_m}{2} \delta_{n-1, m} - \sin^2 \frac{\theta_n}{2} \cos^2 \frac{\theta_m}{2} \delta_{n, m-1} \right) \end{aligned} \quad (2-39)$$

$$\begin{aligned} & \langle n, + | \hat{v}_x | m, - \rangle \langle m, - | \hat{v}_y | n, + \rangle \\ &= \frac{i\gamma^2}{\hbar^2} \left(\cos^2 \frac{\theta_n}{2} \cos^2 \frac{\theta_m}{2} \delta_{n-1, m} - \sin^2 \frac{\theta_n}{2} \sin^2 \frac{\theta_m}{2} \delta_{n, m-1} \right) \end{aligned} \quad (2-40)$$

$$\begin{aligned} & \langle n, - | \hat{v}_x | m, - \rangle \langle m, - | \hat{v}_y | n, - \rangle \\ &= \frac{i\gamma^2}{\hbar^2} \left(\sin^2 \frac{\theta_n}{2} \cos^2 \frac{\theta_m}{2} \delta_{n-1, m} - \cos^2 \frac{\theta_n}{2} \sin^2 \frac{\theta_m}{2} \delta_{n, m-1} \right) \end{aligned} \quad (2-41)$$

$$\begin{aligned} & \langle n, - | \hat{v}_x | m, + \rangle \langle m, + | \hat{v}_y | n, - \rangle \\ &= \frac{i\gamma^2}{\hbar^2} \left(\sin^2 \frac{\theta_n}{2} \sin^2 \frac{\theta_m}{2} \delta_{n-1, m} - \cos^2 \frac{\theta_n}{2} \cos^2 \frac{\theta_m}{2} \delta_{n, m-1} \right) \end{aligned} \quad (2-42)$$

下面将根据 n 与 m 的取值来分情况计算霍尔电导。

当 $n \geq 1$, $m \geq 1$, 且 $n = m + 1$ 时,

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} &= \frac{1}{2} \frac{e^2}{h} \eta^2 \sum_{m \geq 1} \left\{ \cos^2 \frac{\theta_{m+1}}{2} \sin^2 \frac{\theta_m}{2} \frac{n_F(E_{m+1}^+ - \mu) - n_F(E_m^+ - \mu)}{(E_{m+1}^+ - E_m^+)^2} \right. \\ &\quad + \cos^2 \frac{\theta_{m+1}}{2} \cos^2 \frac{\theta_m}{2} \frac{n_F(E_{m+1}^+ - \mu) - n_F(E_m^- - \mu)}{(E_{m+1}^+ - E_m^-)^2} \\ &\quad \left. + \sin^2 \frac{\theta_{m+1}}{2} \cos^2 \frac{\theta_m}{2} \frac{n_F(E_{m+1}^- - \mu) - n_F(E_m^- - \mu)}{(E_{m+1}^- - E_m^-)^2} \right\} \end{aligned}$$

$$+ \sin^2 \frac{\theta_{m+1}}{2} \sin^2 \frac{\theta_m}{2} \frac{n_F(E_{m+1}^- - \mu) - n_F(E_m^+ - \mu)}{(E_{m+1}^- - E_m^+)^2} \Big\} \quad (2-43)$$

其中 $\eta = \gamma \frac{\sqrt{2}}{\ell_B}$ 。

当 $n \geq 1$, $m \geq 1$, 且 $n = m - 1$ 时,

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} = & -\frac{1}{2} \frac{e^2}{h} \eta^2 \sum_{n \geq 1} \left\{ \sin^2 \frac{\theta_n}{2} \cos^2 \frac{\theta_{n+1}}{2} \frac{n_F(E_n^+ - \mu) - n_F(E_{n+1}^+ - \mu)}{(E_n^+ - E_{n+1}^+)^2} \right. \\ & + \sin^2 \frac{\theta_n}{2} \sin^2 \frac{\theta_{n+1}}{2} \frac{n_F(E_n^+ - \mu) - n_F(E_{n+1}^- - \mu)}{(E_n^+ - E_{n+1}^-)^2} \\ & + \cos^2 \frac{\theta_n}{2} \sin^2 \frac{\theta_{n+1}}{2} \frac{n_F(E_n^- - \mu) - n_F(E_{n+1}^- - \mu)}{(E_n^- - E_{n+1}^-)^2} \\ & \left. + \cos^2 \frac{\theta_n}{2} \cos^2 \frac{\theta_{n+1}}{2} \frac{n_F(E_n^- - \mu) - n_F(E_{n+1}^+ - \mu)}{(E_n^- - E_{n+1}^+)^2} \right\} \end{aligned} \quad (2-44)$$

因此, 当 $n \geq 1$ 且 $m \geq 1$ 时, 总的霍尔电导为

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} = & \frac{e^2}{4h} \eta^2 \sum_{n \geq 1} \sum_{\alpha, \alpha' = \pm} \left(\frac{h_z}{E_{n+1}^\alpha} - \frac{h_z}{E_n^{\alpha'}} \right) \frac{n_F(E_{n+1}^\alpha - \mu) - n_F(E_n^{\alpha'} - \mu)}{(E_{n+1}^\alpha - E_n^{\alpha'})^2} \\ & + \frac{e^2}{4h} \eta^2 \sum_{n \geq 1} \sum_{\alpha, \alpha' = \pm} \left(1 - \frac{h_z^2}{E_{n+1}^\alpha E_n^{\alpha'}} \right) \frac{n_F(E_{n+1}^\alpha - \mu) - n_F(E_n^{\alpha'} - \mu)}{(E_{n+1}^\alpha - E_n^{\alpha'})^2} \end{aligned} \quad (2-45)$$

其中, 公式 (2-45) 第一项可以化简为

$$\begin{aligned} & \frac{e^2}{4h} \eta^2 \sum_{n \geq 1} \sum_{\alpha, \alpha' = \pm} \left(\frac{h_z}{E_{n+1}^\alpha} - \frac{h_z}{E_n^{\alpha'}} \right) \frac{n_F(E_{n+1}^\alpha - \mu) - n_F(E_n^{\alpha'} - \mu)}{(E_{n+1}^\alpha - E_n^{\alpha'})^2} \\ & = \frac{e^2}{4h} \sum_{n \geq 1} \sum_{\alpha = \pm} \left\{ E_0 \frac{2n_F(E_{n+1}^\alpha - \mu) - n_F(E_n^\alpha - \mu) + n_F(E_n^\alpha + \mu)}{E_{n+1}^\alpha} \right. \\ & \quad \left. - E_0 \frac{n_F(E_n^\alpha - \mu) + n_F(E_n^\alpha + \mu)}{E_n^\alpha} \right\} \end{aligned} \quad (2-46)$$

当 $\mu = 0$ 时, 仅能量为 E_n^- 的态是被占据的, 因此上式变为

$$\begin{aligned} & \frac{e^2}{4h} \eta^2 \sum_{n \geq 1} \sum_{\alpha, \alpha' = \pm} \left(\frac{h_z}{E_{n+1}^\alpha} - \frac{h_z}{E_n^{\alpha'}} \right) \frac{n_F(E_{n+1}^\alpha) - n_F(E_n^{\alpha'})}{(E_{n+1}^\alpha - E_n^{\alpha'})^2} \\ & = \frac{1}{2} \frac{e^2}{h} \sum_{n \geq 1} E_0 \left[\frac{n_F(E_{n+1}^-)}{E_{n+1}^-} - \frac{n_F(E_n^-)}{E_n^-} \right] \end{aligned} \quad (2-47)$$

公式 (2-45) 第二项可以化简为

$$\begin{aligned} & \frac{e^2}{4h} \eta^2 \sum_{n \geq 1} \sum_{\alpha, \alpha' = \pm} \left(1 - \frac{h_z^2}{E_{n+1}^\alpha E_n^{\alpha'}} \right) \frac{n_F(E_{n+1}^\alpha - \mu) - n_F(E_n^{\alpha'} - \mu)}{(E_{n+1}^\alpha - E_n^{\alpha'})^2} \\ & = \frac{e^2}{8h} \sum_{n \geq 1} \sum_{\alpha = \pm} \frac{(2n+1)}{E_{n+1}^\alpha E_n^\alpha} \left\{ (E_{n+1}^\alpha + E_n^\alpha)^2 [n_F(E_{n+1}^\alpha - \mu) - n_F(E_n^\alpha - \mu)] \right. \end{aligned}$$

$$-(E_{n+1}^\alpha - E_n^\alpha)^2 \{n_F(E_{n+1}^\alpha - \mu) - [1 - n_F(E_n^\alpha + \mu)]\} \} \quad (2-48)$$

当 $\mu = 0$ 时, 仅能量为 E_n^- 的态是被占据的, 因此上式变为

$$\begin{aligned} & \frac{e^2}{4h} \eta^2 \sum_{n \geq 1} \sum_{\alpha, \alpha' = \pm} \left(1 - \frac{h_z^2}{E_{n+1}^\alpha E_n^{\alpha'}} \right) \frac{n_F(E_{n+1}^\alpha) - n_F(E_n^{\alpha'})}{(E_{n+1}^\alpha - E_n^{\alpha'})^2} \\ &= \frac{1}{2} \frac{e^2}{h} \sum_{n \geq 1} (2n+1) [n_F(E_{n+1}^-) - n_F(E_n^-)] \end{aligned} \quad (2-49)$$

其中, 化简过程中我们用到了 $n_F(E) = 1 - n_F(-E)$, $n_F(-E) = 1 - n_F(E)$ 以及 $\eta^2 = E_{n+1, \alpha}^2 - E_{n, \alpha'}^2$ 。

综上所述, 当 $n \geq 1$ 且 $m \geq 1$ 时, 霍尔电导为

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} = & \frac{e^2}{4h} \sum_{n \geq 1} \sum_{\alpha = \pm} E_0 \left[\frac{2n_F(E_{n+1}^\alpha - \mu) - n_F(E_n^\alpha - \mu) + n_F(E_n^\alpha + \mu)}{E_{n+1}^\alpha} \right. \\ & \left. - \frac{n_F(E_n^\alpha - \mu) + n_F(E_n^\alpha + \mu)}{E_n^\alpha} \right] \\ & + \frac{e^2}{8h} \eta^4 \sum_{n \geq 1} \sum_{\alpha = \pm} \frac{(2n+1)}{E_{n+1}^\alpha E_n^\alpha} \left\{ \frac{n_F(E_{n+1}^\alpha - \mu) - n_F(E_n^\alpha - \mu)}{(E_{n+1}^\alpha - E_n^\alpha)^2} \right. \\ & \left. - \frac{n_F(E_{n+1}^\alpha - \mu) - [1 - n_F(E_n^\alpha + \mu)]}{(E_{n+1}^\alpha + E_n^\alpha)^2} \right\} \end{aligned} \quad (2-50)$$

当 $\mu = 0$ 时, $n \geq 1$ 且 $m \geq 1$ 的霍尔电导为

$$\sigma_{xy} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{h} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ E_0 \left[\frac{n_F(E_{n+1}^-)}{E_{n+1}^-} - \frac{n_F(E_n^-)}{E_n^-} \right] + (2n+1) [n_F(E_{n+1}^-) - n_F(E_n^-)] \right\} \quad (2-51)$$

在温度 $T = 0$ 时,

$$n_F(E_n^\alpha + \mu) = \begin{cases} 1 & -E_n^\alpha > \mu \\ 0 & -E_n^\alpha < \mu \end{cases} \quad (2-52)$$

因此, 当 $\mu = 0, T = 0$ 时, $n \geq 1$ 且 $m \geq 1$ 的霍尔电导为

$$\sigma_{xy} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{h} \frac{E_0}{E_1^+} \quad (2-53)$$

其中 $E_n^\pm = \pm \sqrt{h_z^2 + \eta^2 n}$ 。

对于 $n = 0$ 或 $m = 0$ 的情况。当 $n = 1$ 且 $m = 0$ 时, 霍尔电导为

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2 \hbar}{2\pi \ell_B^2} \sum_{\alpha, \beta = \pm} \text{Im} [\langle l, \alpha | \hat{v}_x | 0, \beta \rangle \langle 0, \beta | \hat{v}_y | l, \alpha \rangle] \frac{n_F(E_l^\alpha - \mu) - n_F(E_0^\beta - \mu)}{(E_l^\alpha - E_0^\beta)^2} \quad (2-54)$$

其中,

$$\langle 1, + | \hat{v}_x | 0, + \rangle = \frac{i\gamma}{\hbar} \left(\cos \frac{\theta_1}{2} \sin \frac{\theta_0}{2} \right) \quad (2-55)$$

$$\langle 1, + | \hat{v}_x | 0, - \rangle = \frac{i\gamma}{\hbar} \left(-\cos \frac{\theta_1}{2} \cos \frac{\theta_0}{2} \right) \quad (2-56)$$

$$\langle 1, - | \hat{v}_x | 0, - \rangle = \frac{i\gamma}{\hbar} \left(-\sin \frac{\theta_1}{2} \cos \frac{\theta_0}{2} \right) \quad (2-57)$$

$$\langle 1, - | \hat{v}_x | 0, + \rangle = \frac{i\gamma}{\hbar} \left(\sin \frac{\theta_1}{2} \sin \frac{\theta_0}{2} \right) \quad (2-58)$$

$$\langle 1, + | \hat{v}_y | 0, + \rangle = \frac{\gamma}{\hbar} \left(\cos \frac{\theta_1}{2} \sin \frac{\theta_0}{2} \right) \quad (2-59)$$

$$\langle 1, + | \hat{v}_y | 0, - \rangle = \frac{\gamma}{\hbar} \left(-\cos \frac{\theta_1}{2} \cos \frac{\theta_0}{2} \right) \quad (2-60)$$

$$\langle 1, - | \hat{v}_y | 0, - \rangle = \frac{\gamma}{\hbar} \left(-\sin \frac{\theta_1}{2} \cos \frac{\theta_0}{2} \right) \quad (2-61)$$

$$\langle 1, - | \hat{v}_y | 0, + \rangle = \frac{\gamma}{\hbar} \left(\sin \frac{\theta_1}{2} \sin \frac{\theta_0}{2} \right) \quad (2-62)$$

$$\langle 1, + | \hat{v}_x | 0, + \rangle \langle 0, + | \hat{v}_y | 1, + \rangle = \frac{i\gamma^2}{\hbar^2} \left(\cos^2 \frac{\theta_1}{2} \sin^2 \frac{\theta_0}{2} \right) \quad (2-63)$$

$$\langle 1, + | \hat{v}_x | 0, - \rangle \langle 0, - | \hat{v}_y | 1, + \rangle = \frac{i\gamma^2}{\hbar^2} \left(\cos^2 \frac{\theta_1}{2} \cos^2 \frac{\theta_0}{2} \right) \quad (2-64)$$

$$\langle 1, - | \hat{v}_x | 0, - \rangle \langle 0, - | \hat{v}_y | 1, - \rangle = \frac{i\gamma^2}{\hbar^2} \left(\sin^2 \frac{\theta_1}{2} \cos^2 \frac{\theta_0}{2} \right) \quad (2-65)$$

$$\langle 1, - | \hat{v}_x | 0, + \rangle \langle 0, + | \hat{v}_y | 1, - \rangle = \frac{i\gamma^2}{\hbar^2} \left(\sin^2 \frac{\theta_1}{2} \sin^2 \frac{\theta_0}{2} \right) \quad (2-66)$$

如果 $h_z > 0$, 当 $n = 0$ 时, 本征能量 $E_0 = E_0^- = -h_z$, 此时霍尔电导为

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} = \frac{1}{4} \frac{e^2}{h} \left\{ [n_F(E_1^+ - \mu) + n_F(E_1^- - \mu) - 2n_F(E_0 - \mu)] \right. \\ \left. + \frac{E_0}{E_1^+} [n_F(E_1^+ - \mu) - n_F(E_1^- - \mu)] \right\} \end{aligned} \quad (2-67)$$

如果 $h_z < 0$, 当 $n = 0$ 时, 本征能量 $E_0 = E_0^+ = -h_z$, 此时霍尔电导为

$$\sigma_{xy} = \frac{1}{4} \frac{e^2}{h} \left\{ \left[n_F(E_1^+ - \mu) + n_F(E_1^- - \mu) - 2n_F(E_0 - \mu) \right] + \frac{E_0}{E_1^+} \left[n_F(E_1^+ - \mu) - n_F(E_1^- - \mu) \right] \right\} \quad (2-68)$$

其结果与 $h_z > 0$ 时一样。

当 $n = 0$ 且 $m = 1$ 时，霍尔电导为

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2 \hbar}{2\pi \ell_B^2} \sum_{\alpha, \beta=\pm} \text{Im}[\langle 0, \alpha | \hat{v}_x | 1, \beta \rangle \langle 1, \beta | \hat{v}_y | 0, \alpha \rangle] \frac{n_F(E_0^\alpha - \mu) - n_F(E_1^\beta - \mu)}{(E_0^\alpha - E_1^\beta)^2} \quad (2-69)$$

利用下面的结果

$$\langle 0, + | \hat{v}_x | 1, + \rangle \langle 1, + | \hat{v}_y | 0, + \rangle = \frac{i\gamma^2}{\hbar^2} \left(-\sin^2 \frac{\theta_0}{2} \cos^2 \frac{\theta_1}{2} \right) \quad (2-70)$$

$$\langle 0, + | \hat{v}_x | 1, - \rangle \langle 1, - | \hat{v}_y | 0, + \rangle = \frac{i\gamma^2}{\hbar^2} \left(-\sin^2 \frac{\theta_0}{2} \sin^2 \frac{\theta_1}{2} \right) \quad (2-71)$$

$$\langle 0, - | \hat{v}_x | 1, - \rangle \langle 1, - | \hat{v}_y | 0, - \rangle = \frac{i\gamma^2}{\hbar^2} \left(-\cos^2 \frac{\theta_0}{2} \sin^2 \frac{\theta_1}{2} \right) \quad (2-72)$$

$$\langle 0, - | \hat{v}_x | 1, + \rangle \langle 1, + | \hat{v}_y | 0, - \rangle = \frac{i\gamma^2}{\hbar^2} \left(-\cos^2 \frac{\theta_0}{2} \cos^2 \frac{\theta_1}{2} \right) \quad (2-73)$$

$$\langle 0, + | \hat{v}_x | 1, + \rangle = \frac{i\gamma}{\hbar} \left(-\sin \frac{\theta_0}{2} \cos \frac{\theta_1}{2} \right) \quad (2-74)$$

$$\langle 0, + | \hat{v}_x | 1, - \rangle = \frac{i\gamma}{\hbar} \left(-\sin \frac{\theta_0}{2} \sin \frac{\theta_1}{2} \right) \quad (2-75)$$

$$\langle 0, - | \hat{v}_x | 1, - \rangle = \frac{i\gamma}{\hbar} \left(\cos \frac{\theta_0}{2} \sin \frac{\theta_1}{2} \right) \quad (2-76)$$

$$\langle 0, - | \hat{v}_x | 1, + \rangle = \frac{i\gamma}{\hbar} \left(\cos \frac{\theta_0}{2} \cos \frac{\theta_1}{2} \right) \quad (2-77)$$

$$\langle 0, + | \hat{v}_y | 1, + \rangle = \frac{\gamma}{\hbar} \left(\sin \frac{\theta_0}{2} \cos \frac{\theta_1}{2} \right) \quad (2-78)$$

$$\langle 0, + | \hat{v}_y | 1, - \rangle = \frac{\gamma}{\hbar} \left(\sin \frac{\theta_0}{2} \sin \frac{\theta_1}{2} \right) \quad (2-79)$$

$$\langle 0, - | \hat{v}_y | 1, - \rangle = \frac{\gamma}{\hbar} \left(-\cos \frac{\theta_0}{2} \sin \frac{\theta_1}{2} \right) \quad (2-80)$$

$$\langle 0, - | \hat{v}_y | 1, + \rangle = \frac{\gamma}{\hbar} \left(-\cos \frac{\theta_0}{2} \cos \frac{\theta_1}{2} \right) \quad (2-81)$$

我们可以得到, 如果 $h_z > 0$, 当 $n = 0$ 时, 本征能量 $E_0 = E_0^- = -h_z$, 霍尔电导为

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} = & \frac{1}{4} \frac{e^2}{h} \left\{ \left[n_F(E_1^+ - \mu) + n_F(E_1^- - \mu) - 2n_F(E_0 - \mu) \right] \right. \\ & \left. + \frac{E_0}{E_1^+} \left[n_F(E_1^+ - \mu) - n_F(E_1^- - \mu) \right] \right\} \end{aligned} \quad (2-82)$$

如果 $h_z < 0$, 当 $n = 0$, 本征能量 $E_0 = E_0^+ = -h_z$, 霍尔电导为

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} = & \frac{1}{4} \frac{e^2}{h} \left\{ \left[n_F(E_1^+ - \mu) + n_F(E_1^- - \mu) - 2n_F(E_0 - \mu) \right] \right. \\ & \left. + \frac{E_0}{E_1^+} \left[n_F(E_1^+ - \mu) - n_F(E_1^- - \mu) \right] \right\} \end{aligned} \quad (2-83)$$

其结果与 $h_z > 0$ 时一样。

综上所述, 当 $n = 0$ 或 $m = 0$, 霍尔电导为

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} = & \frac{1}{2} \frac{e^2}{h} \left\{ \left[n_F(E_1^+ - \mu) + n_F(E_1^- - \mu) - 2n_F(E_0 - \mu) \right] \right. \\ & \left. + \frac{E_0}{E_1^+} \left[n_F(E_1^+ - \mu) - n_F(E_1^- - \mu) \right] \right\} \end{aligned} \quad (2-84)$$

而当 $n = 0$ 或 $m = 0$ 且 $\mu = 0$ 时, 霍尔电导为

$$\sigma_{xy} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{h} \left\{ \left[1 - 2n_F(E_0) \right] - \frac{E_0}{E_1^+} \right\} \quad (2-85)$$

最终, 我们得到总的霍尔电导为

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} = & \frac{1}{2} \frac{e^2}{h} \left\{ \left[n_F(E_1^+ - \mu) + n_F(E_1^- - \mu) - 2n_F(E_0 - \mu) \right] \right. \\ & \left. + \frac{E_0}{E_1^+} \left[n_F(E_1^+ - \mu) - n_F(E_1^- - \mu) \right] \right\} \\ & + \frac{e^2}{4h} \sum_{n \geq 1} \sum_{\alpha = \pm} E_0 \left[\frac{2n_F(E_{n+1}^\alpha - \mu) - n_F(E_n^\alpha - \mu) + n_F(E_n^\alpha + \mu)}{E_{n+1}^\alpha} \right. \\ & \left. - \frac{n_F(E_n^\alpha - \mu) + n_F(E_n^\alpha + \mu)}{E_n^\alpha} \right] \\ & + \frac{e^2}{8h} \eta^4 \sum_{n \geq 1} \sum_{\alpha = \pm} \left[\frac{(2n+1) n_F(E_{n+1}^\alpha - \mu) - n_F(E_n^\alpha - \mu)}{E_{n+1}^\alpha E_n^\alpha (E_{n+1}^\alpha - E_n^\alpha)^2} \right. \\ & \left. - \frac{n_F(E_{n+1}^\alpha - \mu) - [1 - n_F(E_n^\alpha + \mu)]}{(E_{n+1}^\alpha + E_n^\alpha)^2} \right] \end{aligned} \quad (2-86)$$

当 $\mu = 0$ 时, 总的电导率为

$$\sigma_{xy} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{h} \left\{ [1 - 2n_F(E_0)] - \frac{E_0}{E_1^+} \right\} + \frac{1}{2} \frac{e^2}{h} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ E_0 \left[\frac{n_F(E_{n+1}^-)}{E_{n+1}^-} - \frac{n_F(E_n^-)}{E_n^-} \right] + (2n+1)[n_F(E_{n+1}^-) - n_F(E_n^-)] \right\} \quad (2-87)$$

当 $\mu = 0$ 且温度 $T = 0$ 时, 如果 $h_z > 0$, 霍尔电导为

$$\sigma_{xy} = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{h} \quad (2-88)$$

当 $\mu = 0$ 且温度 $T = 0$ 时, 如果 $h_z < 0$, 霍尔电导为

$$\sigma_{xy} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{h} \quad (2-89)$$

2.2 拓扑绝缘体薄膜中的量子霍尔效应

本小节我们研究上下表面加栅压的拓扑绝缘体薄膜的量子霍尔效应。在第一章中我们介绍了三维强拓扑绝缘体的低能有效模型, 将其投影到表面态在 Γ 点附近基矢构成的希尔伯特空间, 我们可以得到三维强拓扑绝缘体的二维表面态有效模型^[44,191]

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \frac{\Delta}{2} - bk^2 & i\gamma k_- & V & 0 \\ -i\gamma k_+ & -\frac{\Delta}{2} + bk^2 & 0 & V \\ V & 0 & -\frac{\Delta}{2} + bk^2 & i\gamma k_- \\ 0 & V & -i\gamma k_+ & \frac{\Delta}{2} - bk^2 \end{bmatrix} \quad (2-90)$$

其中, $k^2 = k_x^2 + k_y^2$, $\gamma = v\hbar$, V 表示由于上下表面加电压引起的结构反演不对称性 (structure inversion asymmetry), Δ 和 b 为薄膜厚度的函数。对于比较厚的样品, $\Delta \rightarrow 0$ 且 $b \rightarrow 0$ 。

沿垂直于 $x-y$ 平面的 z 方向加磁场, 同时选取朗道规范 $A = (-By, 0, 0)$, 定义磁长度为

$$\ell_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} \quad (2-91)$$

利用皮尔斯代换 $\vec{k} \rightarrow \vec{k} - \frac{q}{\hbar} \vec{A}$, 我们有 $(k_x, k_y) \rightarrow (k_x - \frac{eB}{\hbar}y, -i\partial_y)$, 可知

$$k_x^2 + k_y^2 \rightarrow \frac{1}{\ell_B^2} \left[\left(\frac{y - y_0}{\ell_B} \right)^2 - \ell_B^2 \partial_y^2 \right] \quad (2-92)$$

其中 $y_0 = \ell_B^2 k_x$ 。定义升降算符为

$$a = -\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{y - y_0}{\ell_B} + \ell_B \partial_y \right) \quad (2-93)$$

$$a^\dagger = -\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{y - y_0}{\ell_B} - \ell_B \partial_y \right) \quad (2-94)$$

由公式 (2-93) 与公式 (2-94) 可得

$$-\frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) = \frac{y - y_0}{\ell_B} \quad (2-95)$$

$$-\frac{1}{\sqrt{2}}(a - a^\dagger) = \ell_B \partial_y \quad (2-96)$$

将动量部分用升降算符代换后可得

$$k_x^2 + k_y^2 \rightarrow \left(k_x - \frac{eB}{\hbar} y \right)^2 + (-i \partial_y)^2 = \frac{2}{\ell_B^2} \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (2-97)$$

$$k_+ = \left(k_x - \frac{y}{\ell_B^2} \right) + i(-i \partial_y) = \frac{\sqrt{2}}{\ell_B} a^\dagger \quad (2-98)$$

$$k_- = \left(k_x - \frac{y}{\ell_B^2} \right) - i(-i \partial_y) = \frac{\sqrt{2}}{\ell_B} a \quad (2-99)$$

化简过程中用到了 $[a, a^\dagger] = aa^\dagger - a^\dagger a = 1$ 。

因此，加磁场后的哈密顿量表示成升降算符的形式为

$$\mathcal{H}_a = \begin{bmatrix} \mathcal{M}_a & i\eta a & V & 0 \\ -i\eta a^\dagger - \mathcal{M}_a & 0 & V & \\ V & 0 & -\mathcal{M}_a & i\eta a \\ 0 & V & -i\eta a^\dagger & \mathcal{M}_a \end{bmatrix} \quad (2-100)$$

其中， $\eta = \gamma \frac{\sqrt{2}}{\ell_B}$, $\mathcal{M}_a = \frac{\hbar}{2} - \omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})$, $\omega = b \frac{2}{\ell_B^2}$ 。

我们假设本征波函数的形式为

$$\psi_n(x, y) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} e^{ik_x x} \phi_n(y), \quad n \geq 1 \quad (2-101)$$

$$\psi_0(x, y) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} e^{ik_x x} \phi_0(y), \quad n = 0 \quad (2-102)$$

其中，

$$\phi_n(y) = \begin{bmatrix} C_{n1}|n-1\rangle \\ C_{n2}|n\rangle \\ C_{n3}|n-1\rangle \\ C_{n4}|n\rangle \end{bmatrix}, \quad n \geq 1 \quad (2-103)$$

$$\phi_0(y) = \begin{bmatrix} 0 \\ C_{01}|0\rangle \\ 0 \\ C_{02}|0\rangle \end{bmatrix}, n = 0 \quad (2-104)$$

其中, $|n\rangle = (1/\sqrt{n!2^n\ell_B}\sqrt{\pi}\exp[-(y-y_0)^2/(2\ell_B^2)]\mathcal{H}_n[(y-y_0)/\ell_B])$, $\mathcal{H}_n$ 为厄米多项式, C_{ni} 为复参数。

当 $n \geq 1$ 时, 将本征函数的形式代入本征方程中

$$H_a\psi_n(x, y) = E_n\psi_n(x, y) \quad (2-105)$$

通过解久期方程

$$\det \begin{bmatrix} \mathcal{M}_n + \frac{\omega}{2} - E_n & i\eta\sqrt{n} & V & 0 \\ -i\eta\sqrt{n} & -\mathcal{M}_n + \frac{\omega}{2} - E_n & 0 & V \\ V & 0 & -\mathcal{M}_n - \frac{\omega}{2} - E_n & i\eta\sqrt{n} \\ 0 & V & -i\eta\sqrt{n} & \mathcal{M}_n - \frac{\omega}{2} - E_n \end{bmatrix} = 0 \quad (2-106)$$

我们可以得到本征能量为

$$E_{n1} = -\sqrt{(\mathcal{M}_n^2 + \eta^2 n) + V^2 + \omega^2/4} - \sqrt{\omega^2(\mathcal{M}_n^2 + \eta^2 n) + 4\eta^2 n V^2} \quad (2-107)$$

$$E_{n2} = \sqrt{(\mathcal{M}_n^2 + \eta^2 n) + V^2 + \omega^2/4} - \sqrt{\omega^2(\mathcal{M}_n^2 + \eta^2 n) + 4\eta^2 n V^2} \quad (2-108)$$

$$E_{n3} = -\sqrt{(\mathcal{M}_n^2 + \eta^2 n) + V^2 + \omega^2/4} + \sqrt{\omega^2(\mathcal{M}_n^2 + \eta^2 n) + 4\eta^2 n V^2} \quad (2-109)$$

$$E_{n4} = \sqrt{(\mathcal{M}_n^2 + \eta^2 n) + V^2 + \omega^2/4} + \sqrt{\omega^2(\mathcal{M}_n^2 + \eta^2 n) + 4\eta^2 n V^2} \quad (2-110)$$

因此, $n \geq 1$ 时, LL 的本征能量为

$$E_{n,s}^{\pm} = \pm\sqrt{(\epsilon_n + s\mathcal{P}_n)^2 + V^2\cos^2\Theta_n} \quad (2-111)$$

其中, $\epsilon_n = \sqrt{\mathcal{M}_n^2 + \eta^2 n}$, $\mathcal{P}_n = \sqrt{V^2\sin^2\Theta_n + \omega^2/4}$, $\sin\Theta_n = \eta\sqrt{n}/\epsilon_n$, $\cos\Theta_n = \mathcal{M}_n/\epsilon_n$, $\mathcal{M}_n = \frac{\omega}{2} - n\omega$, $s = \pm 1$ 。

当 $n = 0$ 时, 本征方程为

$$\mathcal{H}_a\psi_0(x, y) = E_0\psi_0(x, y) \quad (2-112)$$

通过解久期方程

$$\det \begin{bmatrix} -\frac{\Delta}{2} + \frac{\omega}{2} - E_0 & V \\ V & \frac{\Delta}{2} - \frac{\omega}{2} - E_0 \end{bmatrix} = 0 \quad (2-113)$$

我们可以得到 $n = 0$ 时, LL 的本征能量为

$$E_0^\pm = \pm \sqrt{\left(\frac{\Delta}{2} - \frac{\omega}{2}\right)^2 + V^2} \quad (2-114)$$

下面我们来看如何得到 $n = 0$ 时, LL 的本征波函数。当 $n = 0$ 时, 其本征波函数的形式为

$$\psi_0(x, y) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} e^{ik_x x} \phi_0(y) \quad (2-115)$$

其中,

$$\phi_0(y) = \begin{bmatrix} 0 \\ C_{01}|0\rangle \\ 0 \\ C_{02}|0\rangle \end{bmatrix} \quad (2-116)$$

我们的目标是得到系数 C_{01} 与 C_{02} 的表达式。将本征函数代入本征方程中, 可得

$$\begin{bmatrix} -\frac{\Delta}{2} + \frac{\omega}{2} & V \\ V & \frac{\Delta}{2} - \frac{\omega}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{01} \\ C_{02} \end{bmatrix} = E_0 \begin{bmatrix} C_{01} \\ C_{02} \end{bmatrix} \quad (2-117)$$

上式可以表示为

$$E_0^+ \begin{bmatrix} \cos\Gamma & \sin\Gamma \\ \sin\Gamma & -\cos\Gamma \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{01} \\ C_{02} \end{bmatrix} = E_0 \begin{bmatrix} C_{01} \\ C_{02} \end{bmatrix} \quad (2-118)$$

其中, $E_0^+ = \sqrt{\left(\frac{\Delta}{2} - \frac{\omega}{2}\right)^2 + V^2}$, $\cos\Gamma = \frac{\omega - \Delta}{2E_0^+}$, $\sin\Gamma = \frac{V}{2E_0^+}$ 。

对于 $E_0 > 0$,

$$\begin{bmatrix} \cos\Gamma & \sin\Gamma \\ \sin\Gamma & -\cos\Gamma \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{01} \\ C_{02} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{01} \\ C_{02} \end{bmatrix} \quad (2-119)$$

结合归一化关系 $|C_{01}|^2 + |C_{02}|^2 = 1$, 可得

$$|+\rangle = \begin{bmatrix} \cos(\Gamma/2) \\ \sin(\Gamma/2) \end{bmatrix} \quad (2-120)$$

对于 $E_0 < 0$,

$$E_0^+ \begin{bmatrix} \cos\Gamma & \sin\Gamma \\ \sin\Gamma & -\cos\Gamma \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{01} \\ C_{02} \end{bmatrix} = -E_0^+ \begin{bmatrix} C_{01} \\ C_{02} \end{bmatrix} \quad (2-121)$$

$$C_{01} \cos\Gamma + C_{02} \sin\Gamma = -C_{01} \quad (2-122)$$

$$C_{01} \sin\Gamma - C_{02} \cos\Gamma = -C_{02} \quad (2-123)$$

结合归一化关系 $|C_{01}|^2 + |C_{02}|^2 = 1$, 可得

$$|-\rangle = \begin{bmatrix} \sin(\Gamma/2) \\ -\cos(\Gamma/2) \end{bmatrix} \quad (2-124)$$

因此, $n = 0$ 时的本征波函数为

$$\psi_0(x, y) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} e^{ik_x x} |0, \pm\rangle \quad (2-125)$$

其中,

$$|0, +\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ \cos(\Gamma/2)|0\rangle \\ 0 \\ \sin(\Gamma/2)|0\rangle \end{bmatrix}, |0, -\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ \sin(\Gamma/2)|0\rangle \\ 0 \\ -\cos(\Gamma/2)|0\rangle \end{bmatrix} \quad (2-126)$$

对于 $n > 0$ 时的本征波函数, 可以通过么正变换将哈密顿量对角化来得到。

下面我们利用久保公式来计算霍尔电导, 其表达式为

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} &= \frac{e^2 \hbar}{2\pi \ell_B^2} \sum_{n, \alpha, s \neq m, \beta, t} \text{Im} [\langle n\alpha s | \hat{v}_x | m\beta t \rangle \langle m\beta t | \hat{v}_y | n\alpha s \rangle] \\ &\times \frac{n_F(E_{n,s}^\alpha - \mu) - n_F(E_{m,t}^\beta - \mu)}{(E_{n,s}^\alpha - E_{m,t}^\beta)^2} \end{aligned} \quad (2-127)$$

其中, $|n\alpha s\rangle$ 为 LL 能量 $E_{n,s}^\alpha$ 的本征态, $n_F(E) = 1/[1 + \exp(E/k_B T)]$ 为费米分布函数, k_B 为玻尔兹曼常量。 $\hat{v}_x$ 和 $\hat{v}_y$ 为速度算符, 其形式分别为

$$\hat{v}_x = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial k_x} = \frac{1}{\hbar} \begin{bmatrix} -2bk_x & i\gamma & 0 & 0 \\ -i\gamma & 2bk_x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2bk_x & i\gamma \\ 0 & 0 & -i\gamma & -2bk_x \end{bmatrix} \quad (2-128)$$

$$\hat{v}_y = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial k_y} = \frac{1}{\hbar} \begin{bmatrix} -2bk_y & \gamma & 0 & 0 \\ \gamma & 2bk_y & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2bk_y & \gamma \\ 0 & 0 & \gamma & -2bk_y \end{bmatrix} \quad (2-129)$$

利用皮尔斯代换

$$k_x \rightarrow k_x - \frac{eB}{\hbar} y = \frac{A_+}{\sqrt{2}\ell_B} \quad (2-130)$$

$$k_y \rightarrow -i\partial_y = \frac{iA_-}{\sqrt{2}\ell_B} \quad (2-131)$$

将速度算符中的动量用升降算符来表示为

$$\hat{v}_x = -\frac{\ell_B}{\sqrt{2}\hbar} \begin{bmatrix} \omega A_+ & -i\eta & 0 & 0 \\ i\eta & -\omega A_+ & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\omega A_+ & -i\eta \\ 0 & 0 & i\eta & \omega A_+ \end{bmatrix} \quad (2-132)$$

$$\hat{v}_y = -\frac{i\ell_B}{\sqrt{2}\hbar} \begin{bmatrix} \omega A_- & i\eta & 0 & 0 \\ i\eta & -\omega A_- & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\omega A_- & i\eta \\ 0 & 0 & i\eta & \omega A_- \end{bmatrix} \quad (2-133)$$

其中, $A_{\pm} = a \pm a^{\dagger}$, $y_0 = \ell_B^2 k_x$, $\eta = \gamma \frac{\sqrt{2}}{\ell_B}$, $\omega = b \frac{2}{\ell_B^2}$ 。

LL 的本征波函数在 $n = 0$ 和 $n \geq 1$ 的形式分别为

$$|0, \alpha\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ C_{01}^{\alpha} |0\rangle \\ 0 \\ C_{02}^{\alpha} |0\rangle \end{bmatrix}, n = 0 \quad (2-134)$$

$$|n\alpha s\rangle = \begin{bmatrix} C_{n1}^{\alpha s} |n-1\rangle \\ C_{n2}^{\alpha s} |n\rangle \\ C_{n3}^{\alpha s} |n-1\rangle \\ C_{n4}^{\alpha s} |n\rangle \end{bmatrix}, n \geq 1 \quad (2-135)$$

下面将展示把速度算符与本征波函数代入久保公式中来算霍尔电导的过程。

当 $n \geq 1, m \geq 1$ 时,

$$\begin{aligned}
 \langle n\alpha s|\hat{v}_x|m\beta t\rangle &= \left(-\frac{\ell_B}{\sqrt{2}\hbar}\right) \begin{bmatrix} \langle n-1|C_{n1}^{\alpha s*} \\ \langle n|C_{n2}^{\alpha s*} \\ \langle n-1|C_{n3}^{\alpha s*} \\ \langle n|C_{n4}^{\alpha s*} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \omega A_+ C_{m1}^{\beta t}|m-1\rangle - i\eta C_{m2}^{\beta t}|m\rangle \\ i\eta C_{m1}^{\beta t}|m-1\rangle - \omega A_+ C_{m2}^{\beta t}|m\rangle \\ -\omega A_+ C_{m3}^{\beta t}|m-1\rangle - i\eta C_{m4}^{\beta t}|m\rangle \\ i\eta C_{m3}^{\beta t}|m-1\rangle + \omega A_+ C_{m4}^{\beta t}|m\rangle \end{bmatrix} \\
 &= \left(-\frac{\ell_B}{\sqrt{2}\hbar}\right) \left\{ \left[\omega C_{n1}^{\alpha s*} C_{m1}^{\beta t} \left(\sqrt{m-1}\delta_{n-1,m-2} + \sqrt{m}\delta_{n-1,m} \right) - i\eta C_{n1}^{\alpha s*} C_{m2}^{\beta t} \delta_{n-1,m} \right] \right. \\
 &\quad + \left[i\eta C_{n2}^{\alpha s*} C_{m1}^{\beta t} \delta_{n,m-1} - \omega C_{n2}^{\alpha s*} C_{m2}^{\beta t} \left(\sqrt{m}\delta_{n,m-1} + \sqrt{m+1}\delta_{n,m+1} \right) \right] \\
 &\quad + \left[-\omega C_{n3}^{\alpha s*} C_{m3}^{\beta t} \left(\sqrt{m-1}\delta_{n-1,m-2} + \sqrt{m}\delta_{n-1,m} \right) - i\eta C_{n3}^{\alpha s*} C_{m4}^{\beta t} \delta_{n-1,m} \right] \\
 &\quad \left. + \left[i\eta C_{n4}^{\alpha s*} C_{m3}^{\beta t} \delta_{n,m-1} + \omega C_{n4}^{\alpha s*} C_{m4}^{\beta t} \left(\sqrt{m}\delta_{n,m-1} + \sqrt{m+1}\delta_{n,m+1} \right) \right] \right\} \quad (2-136)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle m\beta t|\hat{v}_y|n\alpha s\rangle &= \left(-\frac{i\ell_B}{\sqrt{2}\hbar}\right) \begin{bmatrix} \langle m-1|C_{m1}^{\beta t*} \\ \langle m|C_{m2}^{\beta t*} \\ \langle m-1|C_{m3}^{\beta t*} \\ \langle m|C_{m4}^{\beta t*} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \omega A_- C_{n1}^{\alpha s}|n-1\rangle + i\eta C_{n2}^{\alpha s}|n\rangle \\ i\eta C_{n1}^{\alpha s}|n-1\rangle - \omega A_- C_{n2}^{\alpha s}|n\rangle \\ -\omega A_- C_{n3}^{\alpha s}|n-1\rangle + i\eta C_{n4}^{\alpha s}|n\rangle \\ i\eta C_{n3}^{\alpha s}|n-1\rangle + \omega A_- C_{n4}^{\alpha s}|n\rangle \end{bmatrix} \\
 &= \left(-\frac{i\ell_B}{\sqrt{2}\hbar}\right) \left\{ \left[\omega C_{m1}^{\beta t*} C_{n1}^{\alpha s} \left(\sqrt{n-1}\delta_{m-1,n-2} - \sqrt{n}\delta_{m-1,n} \right) + i\eta C_{m1}^{\beta t*} C_{n2}^{\alpha s} \delta_{m-1,n} \right] \right. \\
 &\quad + \left[i\eta C_{m2}^{\beta t*} C_{n1}^{\alpha s} \delta_{m,n-1} - \omega C_{m2}^{\beta t*} C_{n2}^{\alpha s} \left(\sqrt{n}\delta_{m,n-1} - \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} \right) \right] \\
 &\quad + \left[-\omega C_{m3}^{\beta t*} C_{n3}^{\alpha s} \left(\sqrt{n-1}\delta_{m-1,n-2} - \sqrt{n}\delta_{m-1,n} \right) + i\eta C_{m3}^{\beta t*} C_{n4}^{\alpha s} \delta_{m-1,n} \right] \\
 &\quad \left. + \left[i\eta C_{m4}^{\beta t*} C_{n3}^{\alpha s} \delta_{m,n-1} + \omega C_{m4}^{\beta t*} C_{n4}^{\alpha s} \left(\sqrt{n}\delta_{m,n-1} - \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} \right) \right] \right\} \quad (2-137)
 \end{aligned}$$

当 $n \geq 1, m \geq 1$ 且 $m = n + 1$ 时,

$$\begin{aligned}
 \langle n\alpha s|\hat{v}_x|m\beta t\rangle &= -\frac{\ell_B}{\sqrt{2}\hbar} \left\{ i\eta \left(C_{n2}^{\alpha s*} C_{m1}^{\beta t} + C_{n4}^{\alpha s*} C_{m3}^{\beta t} \right) \right. \\
 &\quad \left. + \omega \left(C_{n1}^{\alpha s*} C_{m1}^{\beta t} \sqrt{n} - C_{n3}^{\alpha s*} C_{m3}^{\beta t} \sqrt{n} - C_{n2}^{\alpha s*} C_{m2}^{\beta t} \sqrt{m} + C_{n4}^{\alpha s*} C_{m4}^{\beta t} \sqrt{m} \right) \right\} \quad (2-138)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle m\beta t|\hat{v}_y|n\alpha s\rangle &= -i\frac{\ell_B}{\sqrt{2}\hbar} \left\{ i\eta \left(C_{m1}^{\beta t*} C_{n2}^{\alpha s} + C_{m3}^{\beta t*} C_{n4}^{\alpha s} \right) \right. \\
 &\quad \left. - \omega \left(C_{m1}^{\beta t*} C_{n1}^{\alpha s} \sqrt{n} - C_{m3}^{\beta t*} C_{n3}^{\alpha s} \sqrt{n} - C_{m2}^{\beta t*} C_{n2}^{\alpha s} \sqrt{m} + C_{m4}^{\beta t*} C_{n4}^{\alpha s} \sqrt{m} \right) \right\} \quad (2-139)
 \end{aligned}$$

此时霍尔电导为

$$\begin{aligned}
\sigma_{xy} &= \frac{e^2 \hbar}{2\pi \ell_B^2} \sum_{n, \alpha, s \neq m, \beta, t} \text{Im}[\langle n\alpha s | \hat{v}_x | m\beta t \rangle \langle m\beta t | \hat{v}_y | n\alpha s \rangle] \frac{n_F(E_{n,s}^\alpha - \mu) - n_F(E_{m,t}^\beta - \mu)}{(E_{n,s}^\alpha - E_{m,t}^\beta)^2} \\
&= -\frac{e^2}{2h} \sum_{n \geq 1} \sum_{\alpha, \beta, s, t} (\eta^2 |C_1|^2 + \omega^2 |C_2|^2) \frac{n_F(E_{n,s}^\alpha - \mu) - n_F(E_{n+1,t}^\beta - \mu)}{(E_{n,s}^\alpha - E_{n+1,t}^\beta)^2} \quad (2-140)
\end{aligned}$$

其中, C_1 和 C_2 定义如下

$$C_1 = C_{n2}^{\alpha s*} C_{m1}^{\beta t} + C_{n4}^{\alpha s*} C_{m3}^{\beta t} \quad (2-141)$$

$$C_2 = C_{n1}^{\alpha s*} C_{m1}^{\beta t} \sqrt{n} - C_{n3}^{\alpha s*} C_{m3}^{\beta t} \sqrt{n} - C_{n2}^{\alpha s*} C_{m2}^{\beta t} \sqrt{m} + C_{n4}^{\alpha s*} C_{m4}^{\beta t} \sqrt{m} \quad (2-142)$$

当 $n \geq 1, m \geq 1$ 且 $n = m + 1$ 时,

$$\begin{aligned}
\langle n\alpha s | \hat{v}_x | m\beta t \rangle &= -\frac{\ell_B}{\sqrt{2}\hbar} \left\{ -i\eta \left(C_{n1}^{\alpha s*} C_{m2}^{\beta t} + C_{n3}^{\alpha s*} C_{m4}^{\beta t} \right) \right. \\
&\quad \left. + \omega \left(C_{n1}^{\alpha s*} C_{m1}^{\beta t} \sqrt{m} - C_{n3}^{\alpha s*} C_{m3}^{\beta t} \sqrt{m} - C_{n2}^{\alpha s*} C_{m2}^{\beta t} \sqrt{n} + C_{n4}^{\alpha s*} C_{m4}^{\beta t} \sqrt{n} \right) \right\} \quad (2-143)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle m\beta t | \hat{v}_y | n\alpha s \rangle &= -i\frac{\ell_B}{\sqrt{2}\hbar} \left\{ i\eta \left(C_{m2}^{\beta t*} C_{n1}^{\alpha s} + C_{m4}^{\beta t*} C_{n3}^{\alpha s} \right) \right. \\
&\quad \left. + \omega \left(C_{m1}^{\beta t*} C_{n1}^{\alpha s} \sqrt{m} - C_{m3}^{\beta t*} C_{n3}^{\alpha s} \sqrt{m} - C_{m2}^{\beta t*} C_{n2}^{\alpha s} \sqrt{n} + C_{m4}^{\beta t*} C_{n4}^{\alpha s} \sqrt{n} \right) \right\} \quad (2-144)
\end{aligned}$$

此时霍尔电导为

$$\begin{aligned}
\sigma_{xy} &= \frac{e^2 \hbar}{2\pi \ell_B^2} \sum_{n, \alpha, s \neq m, \beta, t} \text{Im}[\langle n\alpha s | \hat{v}_x | m\beta t \rangle \langle m\beta t | \hat{v}_y | n\alpha s \rangle] \frac{n_F(E_{n,s}^\alpha - \mu) - n_F(E_{m,t}^\beta - \mu)}{(E_{n,s}^\alpha - E_{m,t}^\beta)^2} \\
&= \frac{e^2}{2h} \sum_{n \geq 1} \sum_{\alpha, \beta, s, t} (\eta^2 |C_3|^2 + \omega^2 |C_4|^2) \frac{n_F(E_{m+1,s}^\alpha - \mu) - n_F(E_{m,t}^\beta - \mu)}{(E_{m+1,s}^\alpha - E_{m,t}^\beta)^2} \quad (2-145)
\end{aligned}$$

其中, C_3 和 C_4 定义如下

$$C_3 = C_{m2}^{\beta t*} C_{n1}^{\alpha s} + C_{m4}^{\beta t*} C_{n3}^{\alpha s}, \quad (2-146)$$

$$C_4 = C_{m1}^{\beta t*} C_{n1}^{\alpha s} \sqrt{m} - C_{m3}^{\beta t*} C_{n3}^{\alpha s} \sqrt{m} - C_{m2}^{\beta t*} C_{n2}^{\alpha s} \sqrt{n} + C_{m4}^{\beta t*} C_{n4}^{\alpha s} \sqrt{n} \quad (2-147)$$

注意到如果公式 (2-145) 交换 m 和 n , $[n_F(E_{m+1,s}^\alpha - \mu) - n_F(E_{m,t}^\beta - \mu)]$ 项会多出来一个负号, 其结果与 $m = n + 1$ 时的结果一样。

因此, 当 $n \geq 1$ 且 $m \geq 1$ 时,

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h} \sum_{n \geq 1} \sum_{\alpha, \beta, s, t} |f + g|^2 \frac{n_F(E_{n,s}^\alpha - \mu) - n_F(E_{n+1,t}^\beta - \mu)}{(E_{n,s}^\alpha - E_{n+1,t}^\beta)^2} \quad (2-148)$$

其中 $f = \omega C_2, g = i\eta C_1$ 。

当 $n = 0, m > 0$ 时,

$$\langle 0\alpha|\hat{v}_x|m\beta t\rangle = \left(-\frac{\ell_B}{\sqrt{2}\hbar}\right) \begin{bmatrix} 0 \\ \langle 0|C_{01}^{\alpha*} \\ 0 \\ \langle 0|C_{02}^{\alpha*} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \omega A_+ C_{m1}^{\beta t} |m-1\rangle - i\eta C_{m2}^{\beta t} |m\rangle \\ i\eta C_{m1}^{\beta t} |m-1\rangle - \omega A_+ C_{m2}^{\beta t} |m\rangle \\ -\omega A_+ C_{m3}^{\beta t} |m-1\rangle - i\eta C_{m4}^{\beta t} |m\rangle \\ i\eta C_{m3}^{\beta t} |m-1\rangle + \omega A_+ C_{m4}^{\beta t} |m\rangle \end{bmatrix} \quad (2-149)$$

$$= \left(-\frac{\ell_B}{\sqrt{2}\hbar}\right) \left\{ \left[i\eta C_{01}^{\alpha*} C_{m1}^{\beta t} \delta_{0,m-1} - \omega C_{01}^{\alpha*} C_{m2}^{\beta t} \left(\sqrt{m} \delta_{0,m-1} + \sqrt{m+1} \delta_{0,m+1} \right) \right] \right. \\ \left. + \left[i\eta C_{02}^{\alpha*} C_{m3}^{\beta t} \delta_{0,m-1} + \omega C_{02}^{\alpha*} C_{m4}^{\beta t} \left(\sqrt{m} \delta_{0,m-1} + \sqrt{m+1} \delta_{0,m+1} \right) \right] \right\} \quad (2-150)$$

$$\langle m\beta t|\hat{v}_y|0\alpha\rangle = \left(-\frac{i\ell_B}{\sqrt{2}\hbar}\right) \begin{bmatrix} \langle m-1|C_{m1}^{\beta t*} \\ \langle m|C_{m2}^{\beta t*} \\ \langle m-1|C_{m3}^{\beta t*} \\ \langle m|C_{m4}^{\beta t*} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} i\eta C_{01}^{\alpha} |0\rangle \\ -\omega A_- C_{01}^{\alpha} |0\rangle \\ i\eta C_{02}^{\alpha} |0\rangle \\ \omega A_- C_{02}^{\alpha} |0\rangle \end{bmatrix} \quad (2-151)$$

$$= \left(-\frac{i\ell_B}{\sqrt{2}\hbar}\right) \left[i\eta C_{m1}^{\beta t*} C_{01}^{\alpha} \delta_{m-1,0} + \omega C_{m2}^{\beta t*} C_{01}^{\alpha} \delta_{m,1} \right. \\ \left. + i\eta C_{m3}^{\beta t*} C_{02}^{\alpha} \delta_{m-1,0} - \omega C_{m4}^{\beta t*} C_{02}^{\alpha} \delta_{m,1} \right] \quad (2-152)$$

当 $n = 0, m = 1$ 时,

$$\langle 0\alpha|\hat{v}_x|1\beta t\rangle = \left(-\frac{\ell_B}{\sqrt{2}\hbar}\right) \left[i\eta \left(C_{01}^{\alpha*} C_{11}^{\beta t} + C_{02}^{\alpha*} C_{13}^{\beta t} \right) + \omega \left(C_{02}^{\alpha*} C_{14}^{\beta t} - C_{01}^{\alpha*} C_{12}^{\beta t} \right) \right] \quad (2-153)$$

$$\langle 1\beta t|\hat{v}_y|0\alpha\rangle = \left(-\frac{i\ell_B}{\sqrt{2}\hbar}\right) \left[i\eta \left(C_{11}^{\beta t*} C_{01}^{\alpha} + C_{13}^{\beta t*} C_{02}^{\alpha} \right) - \omega \left(C_{14}^{\beta t*} C_{02}^{\alpha} - C_{12}^{\beta t*} C_{01}^{\alpha} \right) \right] \quad (2-154)$$

因此, 此时的霍尔电导为

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2\hbar}{2\pi\ell_B^2} \sum_{\alpha\beta t} \text{Im}[\langle 0\alpha|\hat{v}_x|1\beta t\rangle \langle 1\beta t|\hat{v}_y|0\alpha\rangle] \frac{n_F(E_0^\alpha - \mu) - n_F(E_{1,t}^\beta - \mu)}{(E_0^\alpha - E_{1,t}^\beta)^2} \quad (2-155)$$

$$= -\frac{e^2}{2h} \sum_{\alpha\beta t} |\xi|^2 \frac{n_F(E_0^\alpha - \mu) - n_F(E_{1,t}^\beta - \mu)}{(E_0^\alpha - E_{1,t}^\beta)^2} \quad (2-156)$$

其中, $\xi = \omega C'_2 + i\eta C'_1$, $C'_1 = C_{01}^{\alpha*} C_{11}^{\beta t} + C_{02}^{\alpha*} C_{13}^{\beta t}$, $C'_2 = C_{02}^{\alpha*} C_{14}^{\beta t} - C_{01}^{\alpha*} C_{12}^{\beta t}$ 。

当 $m = 0, n > 0$ 时,

$$\langle n\alpha s|\hat{v}_x|0\beta\rangle = \left(-\frac{\ell_B}{\sqrt{2}\hbar}\right) \begin{bmatrix} \langle n-1|C_{n1}^{\alpha s*} \\ \langle n|C_{n2}^{\alpha s*} \\ \langle n-1|C_{n3}^{\alpha s*} \\ \langle n|C_{n4}^{\alpha s*} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} -i\eta C_{01}^{\beta} |0\rangle \\ -\omega A_+ C_{01}^{\beta} |0\rangle \\ -i\eta C_{02}^{\beta} |0\rangle \\ \omega A_+ C_{02}^{\beta} |0\rangle \end{bmatrix} \quad (2-157)$$

$$= \left(-\frac{\ell_B}{\sqrt{2}\hbar}\right) \left[-i\eta \left(C_{n1}^{\alpha s*} C_{01}^{\beta} \delta_{n-1,0} + C_{n3}^{\alpha s*} C_{02}^{\beta} \delta_{n-1,0} \right) - \omega \left(C_{n2}^{\alpha s*} C_{01}^{\beta} \delta_{n,1} - C_{n4}^{\alpha s*} C_{02}^{\beta} \delta_{n,1} \right) \right] \quad (2-158)$$

$$\langle 0\beta | \hat{v}_y | n\alpha s \rangle = \left(-\frac{i\ell_B}{\sqrt{2}\hbar}\right) \begin{bmatrix} 0 \\ \langle 0 | C_{01}^{\beta*} \\ 0 \\ \langle 0 | C_{02}^{\beta*} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \omega A_- C_{n1}^{\alpha s} |n-1\rangle + i\eta C_{n2}^{\alpha s} |n\rangle \\ i\eta C_{n1}^{\alpha s} |n-1\rangle - \omega A_- C_{n2}^{\alpha s} |n\rangle \\ -\omega A_- C_{n3}^{\alpha s} |n-1\rangle + i\eta C_{n4}^{\alpha s} |n\rangle \\ i\eta C_{n3}^{\alpha s} |n-1\rangle + \omega A_- C_{n4}^{\alpha s} |n\rangle \end{bmatrix} \quad (2-159)$$

$$= \left(-\frac{i\ell_B}{\sqrt{2}\hbar}\right) \left\{ i\eta C_{n1}^{\alpha s} C_{01}^{\beta*} \delta_{0,n-1} - \omega C_{n2}^{\alpha s} C_{01}^{\beta*} \left(\sqrt{n} \delta_{0,n-1} - \sqrt{n+1} \delta_{0,n+1} \right) + i\eta C_{n3}^{\alpha s} C_{02}^{\beta*} \delta_{0,n-1} + \omega C_{n4}^{\alpha s} C_{02}^{\beta*} \left(\sqrt{n} \delta_{0,n-1} - \sqrt{n+1} \delta_{0,n+1} \right) \right\} \quad (2-160)$$

当 $m = 0, n = 1$ 时,

$$\langle 1\alpha s | \hat{v}_x | 0\beta \rangle = \left(-\frac{\ell_B}{\sqrt{2}\hbar}\right) \left[-i\eta \left(C_{11}^{\alpha s*} C_{01}^{\beta} + C_{13}^{\alpha s*} C_{02}^{\beta} \right) - \omega \left(C_{12}^{\alpha s*} C_{01}^{\beta} - C_{14}^{\alpha s*} C_{02}^{\beta} \right) \right] \quad (2-161)$$

$$\langle 0\beta | \hat{v}_y | 1\alpha s \rangle = \left(-\frac{i\ell_B}{\sqrt{2}\hbar}\right) \left[i\eta \left(C_{11}^{\alpha s} C_{01}^{\beta*} + C_{13}^{\alpha s} C_{02}^{\beta*} \right) + \omega \left(C_{14}^{\alpha s} C_{02}^{\beta*} - C_{12}^{\alpha s} C_{01}^{\beta*} \right) \right] \quad (2-162)$$

此时霍尔电导为

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2 \hbar}{2\pi \ell_B^2} \sum_{\alpha\beta s} \text{Im} \langle 1\alpha s | \hat{v}_x | 0\beta \rangle \langle 0\beta | \hat{v}_y | 1\alpha s \rangle \frac{n_F(E_{1,s}^{\alpha} - \mu) - n_F(E_0^{\beta} - \mu)}{(E_{1,s}^{\alpha} - E_0^{\beta})^2} \quad (2-163)$$

$$= \frac{e^2}{2h} \sum_{\alpha\beta s} |\xi'|^2 \frac{n_F(E_{1,s}^{\alpha} - \mu) - n_F(E_0^{\beta} - \mu)}{(E_{1,s}^{\alpha} - E_0^{\beta})^2} \quad (2-164)$$

其中, $\xi' = \omega C'_4 + i\eta C'_3$, $C'_3 = C_{11}^{\alpha s} C_{01}^{\beta*} + C_{13}^{\alpha s} C_{02}^{\beta*}$, $C'_4 = C_{14}^{\alpha s} C_{02}^{\beta*} - C_{12}^{\alpha s} C_{01}^{\beta*}$ 。

注意到上面的结果如果交换 n 和 m 的位置, $[n_F(E_{1,s}^{\alpha} - \mu) - n_F(E_0^{\beta} - \mu)]$ 项会产生负号, 其结果与 $n = 0, m = 1$ 时的结果一样。

因此, 当 $n = 0, m > 0$ 或 $m = 0, n > 0$ 时, 霍尔电导为

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h} \sum_{\alpha\beta t} |\xi|^2 \frac{n_F(E_0^{\alpha} - \mu) - n_F(E_{1,t}^{\beta} - \mu)}{(E_0^{\alpha} - E_{1,t}^{\beta})^2} \quad (2-165)$$

其中, $\xi = \omega C'_2 + i\eta C'_1$, $C'_1 = C_{01}^{\alpha*} C_{11}^{\beta t} + C_{02}^{\alpha*} C_{13}^{\beta t}$, $C'_2 = C_{02}^{\alpha*} C_{14}^{\beta t} - C_{01}^{\alpha*} C_{12}^{\beta t}$ 。

综上所述, 考虑到 n 与 m 所有可能的取值, 总的霍尔电导为

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h} \left\{ \sum_{\alpha\beta t} |\xi|^2 \frac{n_F(E_0^{\alpha} - \mu) - n_F(E_{1,t}^{\beta} - \mu)}{(E_0^{\alpha} - E_{1,t}^{\beta})^2} \right.$$

$$+ \sum_{n \geq 1} \sum_{\alpha, \beta, s, t} |f + g|^2 \frac{n_F(E_{n,s}^\alpha - \mu) - n_F(E_{n+1,t}^\beta - \mu)}{(E_{n,s}^\alpha - E_{n+1,t}^\beta)^2} \} \quad (2-166)$$

其中, $\xi = \omega C'_2 + i\eta C'_1$, $f = \omega C_2$, $g = i\eta C_1$, 且

$$C'_1 = C_{01}^{\alpha*} C_{11}^{\beta t} + C_{02}^{\alpha*} C_{13}^{\beta t} \quad (2-167)$$

$$C'_2 = C_{02}^{\alpha*} C_{14}^{\beta t} - C_{01}^{\alpha*} C_{12}^{\beta t} \quad (2-168)$$

$$C_1 = C_{n2}^{\alpha s*} C_{m1}^{\beta t} + C_{n4}^{\alpha s*} C_{m3}^{\beta t} \quad (2-169)$$

$$C_2 = C_{n1}^{\alpha s*} C_{m1}^{\beta t} \sqrt{n} - C_{n3}^{\alpha s*} C_{m3}^{\beta t} \sqrt{n} - C_{n2}^{\alpha s*} C_{m2}^{\beta t} \sqrt{m} + C_{n4}^{\alpha s*} C_{m4}^{\beta t} \sqrt{m} \quad (2-170)$$

2.3 本章小结

我们推导了外加磁场中有质量的狄拉克费米子的量子霍尔电导, 其表达式为

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} = & \frac{1}{2} \frac{e^2}{h} \left\{ [n_F(E_1^+ - \mu) + n_F(E_1^- - \mu) - 2n_F(E_0 - \mu)] \right. \\ & + \frac{E_0}{E_1^+} [n_F(E_1^+ - \mu) - n_F(E_1^- - \mu)] \left. \right\} \\ & + \frac{e^2}{4h} \sum_{n \geq 1} \sum_{\alpha = \pm} E_0 \left[\frac{2n_F(E_{n+1}^\alpha - \mu) - n_F(E_n^\alpha - \mu) + n_F(E_n^\alpha + \mu)}{E_{n+1}^\alpha} \right. \\ & - \left. \frac{n_F(E_n^\alpha - \mu) + n_F(E_n^\alpha + \mu)}{E_n^\alpha} \right] \\ & + \frac{e^2}{8h} \eta^4 \sum_{n \geq 1} \sum_{\alpha = \pm} \left[\frac{(2n+1) n_F(E_{n+1}^\alpha - \mu) - n_F(E_n^\alpha - \mu)}{E_{n+1}^\alpha E_n^\alpha} \frac{1}{(E_{n+1}^\alpha - E_n^\alpha)^2} \right. \\ & - \left. \frac{n_F(E_{n+1}^\alpha - \mu) - [1 - n_F(E_n^\alpha + \mu)]}{(E_{n+1}^\alpha + E_n^\alpha)^2} \right] \end{aligned} \quad (2-171)$$

当 $\mu = 0$ 且温度 $T = 0$ 时, 如果 $h_z > 0$, 霍尔电导为

$$\sigma_{xy} = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{h} \quad (2-172)$$

当 $\mu = 0$ 且温度 $T = 0$ 时, 如果 $h_z < 0$, 霍尔电导为

$$\sigma_{xy} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{h} \quad (2-173)$$

也就是说, 在零温 $\mu = 0$ 时, 其霍尔电导是半整数的。

对于 TI 薄膜, 加磁场后其量子霍尔电导为

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h} \left\{ \sum_{\alpha \beta t} |\xi|^2 \frac{n_F(E_0^\alpha - \mu) - n_F(E_{l,t}^\beta - \mu)}{(E_0^\alpha - E_{l,t}^\beta)^2} \right\}$$

$$+ \sum_{n \geq 1} \sum_{\alpha, \beta, s, t} |f + g|^2 \frac{n_F(E_{n,s}^\alpha - \mu) - n_F(E_{n+1,t}^\beta - \mu)}{(E_{n,s}^\alpha - E_{n+1,t}^\beta)^2} \} \quad (2-174)$$

其中, $\xi = \omega C'_2 + i\eta C'_1$, $f = \omega C_2$, $g = i\eta C_1$, 且

$$C'_1 = C_{01}^{\alpha*} C_{11}^{\beta t} + C_{02}^{\alpha*} C_{13}^{\beta t} \quad (2-175)$$

$$C'_2 = C_{02}^{\alpha*} C_{14}^{\beta t} - C_{01}^{\alpha*} C_{12}^{\beta t} \quad (2-176)$$

$$C_1 = C_{n2}^{\alpha s*} C_{m1}^{\beta t} + C_{n4}^{\alpha s*} C_{m3}^{\beta t} \quad (2-177)$$

$$C_2 = C_{n1}^{\alpha s*} C_{m1}^{\beta t} \sqrt{n} - C_{n3}^{\alpha s*} C_{m3}^{\beta t} \sqrt{n} - C_{n2}^{\alpha s*} C_{m2}^{\beta t} \sqrt{m} + C_{n4}^{\alpha s*} C_{m4}^{\beta t} \sqrt{m} \quad (2-178)$$

本章主要内容为拓扑物质在磁场中的量子霍尔电导计算, 主要以解析推导为主。之所以详尽的写出推导过程, 是由于目前的文献和书籍中, 相应的解析推导内容有限。通过推导二维有质量狄拉克粒子与拓扑绝缘体薄膜在外加磁场下的量子霍尔电导, 读者可以掌握量子霍尔电导计算的理论基础, 便于更好的理解第三章中拓扑半金属在磁场下的三维量子霍尔效应以及相关文献中的内容。

第3章 拓扑半金属中的三维量子霍尔效应

3.1 引言

QHE 的发现揭开了拓扑物态研究的序幕^[1]。2DEG 在强磁场中会形成 LL。LL 在样品边缘会发生形变切过费米能，形成一维拓扑边缘态^[3]。电子边缘态以无损耗的方式在运动，产生 e^2/h 整数倍的霍尔电导，定义为 QHE。QHE 可以给出区分不同电子气的输运特性，比如石墨烯中二维无质量狄拉克费米子的半整数霍尔电导和拓扑表面态^[1,109,192–194]。作为对比，在三维电子气中，沿磁场方向的维度阻止了霍尔电导的量子化。因此，QHE 通常是在二维系统中观测到。

本章我们将展示在特殊的三维体系中，QHE 是可以实现的，具体来讲，在 TSM 体系中，利用费米弧来实现。TSM 为三维拓扑物态^[15–23,45–47]，其能带在离散的外尔点相接触，如图 3-1 (a) 所示。对于外尔点间的动量（这里指 k_z ）其相当于二维 TI，会产生局域在表面的平行于外尔点相连方向的拓扑表面态（图 3-1 (c) 中上下表面）。这些受拓扑保护的表面态在费米面形成费米弧（如图 3-1 (a) 和 3-1 (b) 中红色曲线所示）。费米弧已经被 ARPES 探测到^[22,24–27,41,46,48,49,51–53,195,196]并且会诱导出新奇的量子振荡^[197,198]。拓扑物态通常伴随着特有的输运特性，这使得费米弧的输运研究成为一个吸引人的题目^[199–203]。

要通过费米弧产生 QHE 有几个需要解决的问题。首先，拓扑性要求费米弧表面态仅在两个外尔点之间一个区域存在^[43]，如图 3-1 (b) 所示。在一个表面，费米弧不能形成 LL 与 QHE 需要的闭合的费米回路。我们发现在 TSM 平板（如图 3-1 (c) 所示）中费米弧会与相反表面的费米弧形成需要的完整闭合费米回路（如图 3-1 (d) 所示）。电子可以通过外尔点隧穿到相反表面费米弧上（如图 3-1 (e)–3-1 (g)）。其次，仅由费米弧产生的 QHE 需要将费米能调到外尔点以减少体载流子的干扰^[204]。最后，我们发现外尔费米子能带的各向异性是费米弧形成 2DEG 的必要条件。QHE 的这些性质可以支持费米弧的输运特性。与新奇的量子振荡相比，^[197,198]，费米弧的 QHE 是对费米弧主导的电子输运的补充。

WSM TaAs 族^[24–31]与 DSM Cd_3As_2 和 Na_3Bi 具有 QHE 需要的极高的迁移率^[205–209]。低载流子密度^[50,54,55]与栅压调节^[55]也已经实现。我们预期费米弧的 QHE 在 TaAs 族、 $[110]$ 或 $[1\bar{1}0]$ Cd_3As_2 和 $[100]$ 或 $[010]$ Na_3Bi 中实现。

3.2 拓扑外尔半金属

3.2.1 最小模型

我们将用一个最小模型来展示费米弧的 QHE 中的物理图像。为了保留其中的拓扑性质，我们需要从三维 WSM 模型出发导出二维费米弧的有效模型^[35,37,38]

$$H = D_1 k_y^2 + D_2 (k_x^2 + k_z^2) + A(k_x \sigma_x + k_y \sigma_y) + M(k_w^2 - k^2) \sigma_z \quad (3-1)$$

其中, $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 为泡利矩阵, $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ 为波矢, D_1 、 D_2 、 A 、 M 与 k_w 为模型参数。我们假设 $|M| > |D_1|$ 。模型的能谱为 $E_{\pm}^{\mathbf{k}} = D_1 k_y^2 + D_2 (k_x^2 + k_z^2) \pm [M^2 (k_w^2 - \mathbf{k}^2)^2 + A^2 (k_x^2 + k_z^2)]^{1/2}$, 其中 $\pm$ 分别表示导带和价带。模型在 $(0, 0, \pm k_w)$ 具有两个外尔点, 能量为 $E_w = D_2 k_w^2$ (如图3-1 (a) 所示), 且具有 TSM 的所有性质^[115]。与 $\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ 模型相比, 此模型可以解析的得到费米弧表面态^[43]。

3.2.2 一个表面的开放费米弧

首先, 我们展示 WSM 的单个表面上的费米弧无法产生 QHE。对于很厚的拓扑半金属平板, 其厚度为 L , 我们假设在 y 方向开边界。我们主要研究 $y = L/2$ 的表面。此时 k_x 和 k_z 依然是好量子数, 但 k_y 不再是好量子数, 需要替换为 $k_y = -i\partial_y$ 。在两个开放的边界上, 波函数满足

$$\Psi_{k_x, k_z}(x, y = -L/2, z) = \Psi_{k_x, k_z}(x, y = L/2, z) = 0 \quad (3-2)$$

在 $y = L/2$ 表面, 定义 $y' = y - L/2$ 。因此, 边界条件变为

$$\Psi_{k_x, k_z}(x, y' = -L \rightarrow -\infty, z) = \Psi_{k_x, k_z}(x, y' = 0, z) = 0 \quad (3-3)$$

因为 $\partial_y = \partial_{y'}$, 我们假设试解波函数为

$$\Phi_{\lambda} = e^{ik_x x + ik_z z} e^{\lambda y'} \psi \quad (3-4)$$

将试解波函数代入本征方程 $H(k_x, -i\partial_{y'}, k_z)\Phi_{\lambda} = E\Phi_{\lambda}$, 我们得到 λ 的四个解, 记为 $\beta\lambda_{\alpha}$, 其中 $\alpha = 1, 2$ 且 $\beta = \pm 1$ 。因此, y 方向的通解为其线性叠加

$$\Psi_{k_x, k_z}(\mathbf{r}) = e^{ik_x x + ik_z z} \sum_{\beta=\pm} \sum_{\alpha=1,2} C_{\alpha\beta} \psi_{\alpha\beta} e^{\beta\lambda_{\alpha} y'} \quad (3-5)$$

其中, $C_{\alpha\beta}$ 由边界条件确定,

$$\psi_{\alpha\beta} = \begin{bmatrix} A(k_x - \beta\lambda_{\alpha}) \\ E - M(\bar{k}^2 + \lambda_{\alpha}^2) - (D_2 q^2 - D_1 \lambda_{\alpha}^2) \end{bmatrix} \quad (3-6)$$

或

$$\psi_{\alpha\beta} = \begin{bmatrix} E + M(\bar{k}^2 + \lambda_\alpha^2) - (D_2 q^2 - D_1 \lambda_\alpha^2) \\ A(k_x + \beta \lambda_\alpha) \end{bmatrix} \quad (3-7)$$

边界条件为

$$\Psi_{k_x, k_z}(x, y' = -\infty, z) = \Psi_{k_x, k_z}(x, y' = 0, z) = 0 \quad (3-8)$$

对于 $\Psi_{k_x, k_z}(x, y' = -\infty, z) = 0$, Ψ 仅包含有 $\beta = +1$ 与 $\text{Re}(\lambda_\alpha) > 0$ ($\beta = -1$ 与 $\text{Re}(\lambda_\alpha) < 0$) 的项, 因此 $C_{1-} = C_{2-} = 0$ ($C_{1+} = C_{2+} = 0$)。考虑另外一个边界条件 $\Psi_{k_x, k_z}(x, y' = 0, z) = 0$, 对于非零的 $C_{\alpha+}$, 需满足久期方程 $\det \begin{vmatrix} \psi_{1+} & \psi_{2+} \end{vmatrix} = 0$ 。当 $k_x = k_z = 0$ 时, 由久期方程可得 $E_0 = D_1 k_w^2$, 且 λ 的解为

$$\lambda_\alpha = \frac{1}{\sqrt{M^2 - D_1^2}} \left[A/2 + (-1)^\alpha \sqrt{(A/2)^2 + (D_1^2 - M^2)k_w^2} \right] \quad (3-9)$$

波函数为

$$\Psi_{0,0}(\mathbf{r}) = C \begin{pmatrix} \text{sgn}(M + D_1) \\ \sqrt{\frac{M-D_1}{M+D_1}} \end{pmatrix} (e^{\lambda_1 y'} - e^{\lambda_2 y'}) \quad (3-10)$$

其中 $M^2 > D_1^2$ 。由归一化条件 $\langle \Psi_{0,0}(\mathbf{r}) | \Psi_{0,0}(\mathbf{r}) \rangle = 1$ 可得

$$\int d^3 \mathbf{r} |C|^2 |e^{\lambda_1 y'} - e^{\lambda_2 y'}|^2 = \frac{M + D_1}{2M} \quad (3-11)$$

费米弧的有效哈密顿量为

$$\begin{aligned} H_{\text{arc}} &= \langle \Psi_{0,0}(\mathbf{r}) | H(k_x, -i\partial_{y'}, k_z) | \Psi_{0,0}(\mathbf{r}) \rangle \\ &= v k_x + D_1 k_w^2 + (D_2 - D_1)(k_x^2 + k_z^2) \end{aligned} \quad (3-12)$$

其中 $v \equiv A(M^2 - D_1^2)/M$ 。

如果没有各向异性的 D_1, D_2 项, 费米弧仅仅具有关于 k_x 线性色散关系, 这会导致 LL 不能很好的定义。因此, 各向异性的 D_1, D_2 项是必须的。此外, 不同于通常的 2DEG 的, 费米弧的电子气由于其拓扑属性被限制在特定的动量空间^[43]。对于这一模型, 在 $y = L/2$ 表面的费米弧被限定的区域满足如下的约束关系

$$k_x^2 + k_z^2 + 2ak_x < k_w^2 \quad (3-13)$$

其中 $a \equiv AD_1/2M\sqrt{M^2 - D_1^2}$ 。这意味着在 $y = L/2$ 表面的费米弧的波矢仅在一个半径为 $\sqrt{k_w^2 + a^2}$, 中心为 $(k_x = -a, k_z = 0)$ 的圆环内是允许的。 H_{arc} 的费米圆环在

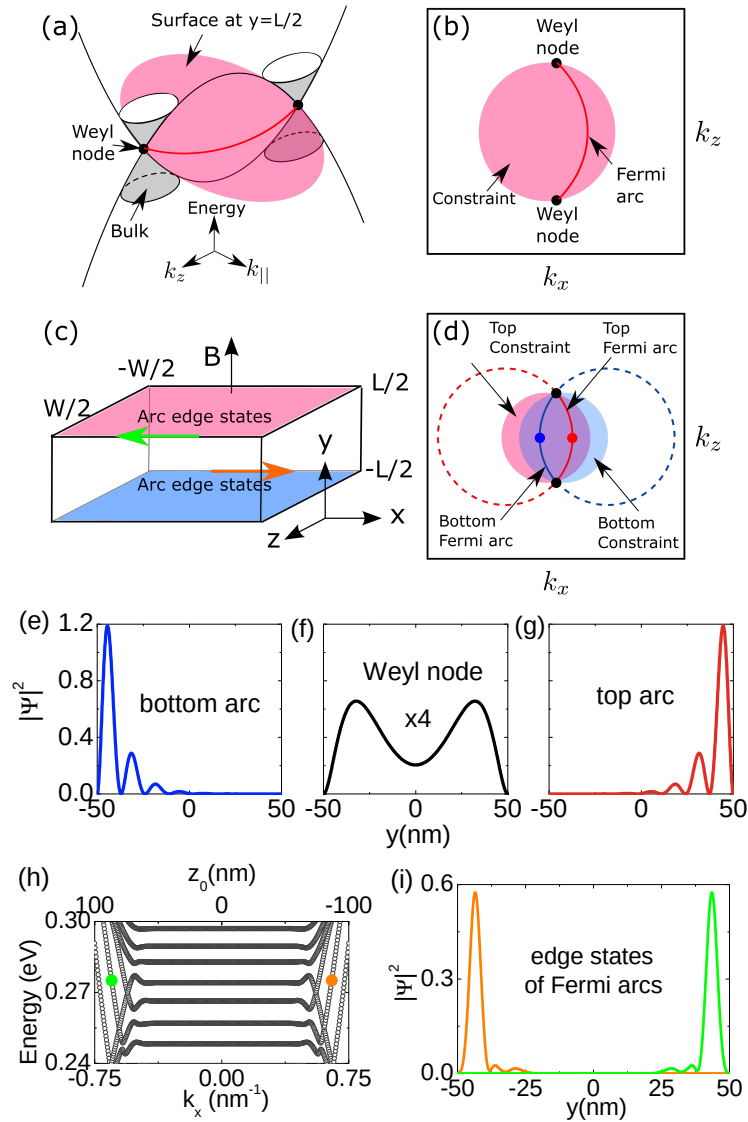


图 3-1 (a) 在外尔半金属中费米弧 (在 $y = L/2$) 与体态的能谱。 $k_{||}$ 分别代表体的动量 (k_x, k_y) 与费米弧的动量 k_x 。(b) 在 $k_z - k_x$ 平面内, $y = L/2$ 表面的费米弧以及费米能切过外尔点 $E_F = E_w$ 。红色阴影部分为费米弧能存在的“约束”区域。(c) 厚度为 L , 宽度为 W 的拓扑半金属平板。(d) 费米能 $E_F = E_w$ 切过外尔点处的费米弧 (实线) 与平板在 $y = L/2$ (红色) 和 $-L/2$ (蓝色) 表面的约束区域 (阴影)。(e)-(g) 波函数在 $k_z = 0$ 沿 y 轴的分布, (d) 中的蓝色 (下表面费米弧, $k_x < 0$), 黑色 (外尔点), 红色 (上表面费米弧, $k_x > 0$) 点。(h) $B = 5$ T 时费米弧的朗道能级与导旋中心 z_0 的依赖关系。(i) 在 (h) 中标记为绿色与橘色的点其费米弧边界态的波函数沿 y 轴的分布。 $L = 100$ nm, $W = 200$ nm。

Fig. 3-1 (a) The energy dispersions for the Fermi arc (at $y = L/2$) and bulk states in a topological Weyl semimetal. $k_{||}$ stands for (k_x, k_y) for the bulk and k_x for the arc, respectively. (b) The Fermi arc at $y = L/2$ and $E_F = E_w$ on the $k_z - k_x$ plane. The shadow defines the “constraint” region where the Fermi arcs can exist. (c) A slab of topological semimetal of thickness L and width W . (d) The Fermi arcs at $E_F = E_w$ (solid) and constraints (shadow) at the $y = L/2$ (red) and $-L/2$ (blue) surfaces of the slab. [(e)-(g)] The wave function distributions at $k_z = 0$ along the y axis, at the blue (bottom arc, $k_x < 0$), black (Weyl nodes), and red (top arc, $k_x > 0$) dots in (d). (h) Landau levels of the Fermi arcs at $B = 5$ T vs. the guiding center z_0 . (i) The wave function distributions along the y axis for the edge states of the Fermi arcs marked by the green and orange dots in (h). $L = 100$ nm, $W = 200$ nm.

给定的费米能仅可以与约束条件 (公式 (3-13)) 区域部分的相交, 形成一个“开放的”费米面, 如图 3-1(a) 和图 3-1(b) 中红色实曲线所示。因为费米面是开放的, 电子在垂直的磁场中无法完成完整的回旋运动。因此, 在单个的表面费米弧的 2DEG 不能形成 QHE 需要的很好定义的 LL。

3.2.3 通过“虫洞”隧穿的费米弧闭合回路

相比之下, WSM 平板在上下表面的两段费米弧, 在外尔点的帮助下, 可以形成闭合的费米环路来产生 QHE。对于一个厚度为 L 的 WSM 平板, 我们考虑上下表面分别位于 $y = \pm L/2$ (如图 3-1 (c) 所示)。与公式 (3-12) 和公式 (3-13) 类似, 在 $y = -L/2$ 表面的有效模型与约束条件分别为 $H'_{\text{arc}} = D_1 k_w^2 - v k_x + (D_2 - D_1)(k_x^2 + k_z^2)$ 和 $k_x^2 + k_z^2 - 2ak_x < k_w^2$ 。图 3-1 (d) 展示了在 $E_F = E_w$ 时的费米弧和在上下两个表面的约束区域。在上下表面的费米弧表面态沿 k_x 轴运动, 不同平面内的运动方向相反。两段开放的费米弧 (图 3-1 (d) 中红色与蓝色曲线) 会在重合的约束区域内形成费米环路。因此, 此费米环路内的所有态是允许存在的 (满足拓扑性质的)。利用基矢 $\varphi_n(y) = \sqrt{2/L} \sin[n\pi(y/L + 1/2)]$, 我们数值的计算了此平板的能谱。图 3-2 (a) 证实了以上形成费米环路的图像。费米环路的能带记为 “I” (arc I)。还有另外一条带 (记作 “II”) 出现在 $k_x = \pm 0.1 \text{ nm}^{-1}$, 但是淹没在体能谱的价带中。此外, 电子在从费米弧上运动到外尔点时, 费米环路的波函数会从一个表面 (如图 3-1(e) 和图 3-1(g) 所示) 向 y 方向延伸扩展 (如图 3-1 (f) 所示)。因此, 外尔点表现的像“虫洞”一样, 连接了上下表面, 使得电子可以完成整个回旋运动。根据不确定性关系, 由于外尔点在能量和动量空间是奇点, 虫洞隧穿在时间和空间上是无穷大的。而在实际材料中, 隧穿距离是受限于平均自由程。在高迁移率的 TSM 中其大小大于等于 $100 \text{ nm}^{[28-31, 205-209]}$, 甚至可以到 $1 \mu\text{m}^{[198]}$ 。所以计算过程中材料的厚度选为了 100 nm 。由在上下表面的两段费米弧通过外尔点形成的闭合回路可以支持产生三维 QHE。在 TI 中不同的情况的虫洞效应已经被讨论过^[210]。

3.2.4 霍尔响应

下面我们证明 WSM 平板的弧 I 可以支持产生 QHE。霍尔电导可以由久保公式来计算

$$\sigma_H = \frac{e^2 \hbar}{i V_{\text{eff}}} \sum_{\delta, \delta' \neq \delta} \frac{\langle \Psi_\delta | v_x | \Psi_{\delta'} \rangle \langle \Psi_{\delta'} | v_z | \Psi_\delta \rangle [f(E_{\delta'}) - f(E_\delta)]}{(E_\delta - E_{\delta'})(E_\delta - E_{\delta'} + i\Gamma)} \quad (3-14)$$

其中 $|\Psi_\delta\rangle$ 为在开放边界 $y = \pm L/2$ 且在 y 方向加磁场的情况下, 能量为 E_δ 时

H 的本征态。 v_x 和 v_z 为速度算符, $f(x)$ 为费米分布函数, V_{eff} 为平板的体积或费米弧在上下表面围成的面积。 σ_H 在二维以 e^2/h 为单位, 而在三维以 e^2/h 比上长度为单位。平板的薄膜霍尔电导率可以定义为 $\sigma_H^s = \sigma_H L$ 。我们利用基矢 $|\phi_v(z)\rangle \otimes |\varphi_n(y)\rangle$ 来确定平板在 y 方向磁场中的本征能量, 其中 ϕ_v 为简谐振子的本征函数。图3-2(b)显示了TSM平板在费米面远离外尔点时的薄膜霍尔电导率。 σ_H^s 符合常见的 $1/B$ 依赖关系。最近的实验显示, 在 100 nm 厚拓扑半金属器件中, 栅压可以调节载流子从 n 型到 p 型^[55]。当费米能量向外尔点移动时, 斜率变得更小, 表明载流子密度在降低。同时, σ_H^s 中量子化的平台开始出现。当费米能仅仅切过弧 I 时 (如图3-2(c)所示), σ_H^s 展现出很好的以 e^2/h 为单位的量子化平台, 说明产生了来自于费米弧的 QHE。这里已经在久保公式中通过能带展宽的形式来考虑无序的影响。这一处理能够给出在二维石墨烯中无质量狄拉克粒子的量子化^[211]。由于与拓扑不变量陈数是相关的^[3], 在研究 QHE 的时候理论上是可以不考虑无序的, 就像在 TI 中的一样^[212-215]。为了检验图3-2(c)中的数值结果, 通过将弧 I 看作各向异性抛物线能带 $H_{\text{arcI}} \approx D_1 k_w^2 + \hbar^2 k_x^2 / 2m_x + \hbar^2 k_z^2 / 2m_z$, 我们解析的计算了弧 I 的量子霍尔电导, 其中 m_x 和 m_z 为有效质量。定义 $k'_x = k_x \sqrt{m_z/m_x}$, 费米弧的哈密顿量变为

$$H_{\text{arcI}} \approx D_1 k_w^2 + \frac{\hbar^2}{2m_z} (k_x'^2 + k_z^2) \quad (3-15)$$

常见的各向同性 2DEG。外加垂直于费米弧平面的磁场, 即沿 y 方向 $\mathbf{B} = (0, B, 0)$, 选取朗道规范, 矢势为 $\mathbf{A} = (Bz, 0, 0)$, 哈密顿量变为

$$H_{\text{arcI}} = D_1 k_w^2 + \frac{\hbar^2}{2m_z} \left[\left(k'_x - \frac{tz}{\ell_B'^2} \right)^2 - \partial_z^2 \right] \quad (3-16)$$

其中 $\ell_B' = \sqrt{\hbar/|eB'|}$, $B' = \sqrt{m_z/m_x}B$, $t = \text{sgn}(eB)$ 。此哈密顿量具有磁场下各向同性 2DEG 的形式。LL 为

$$E_v^{\text{arcI}} = D_1 k_w^2 + \text{sgn}(m_z) \hbar \omega_{\text{arcI}} \left(\nu + \frac{1}{2} \right), \quad \nu = 0, 1, 2, \dots \quad (3-17)$$

其中 $\omega_{\text{arcI}} = |eB'|/|m_z| = |eB|/\sqrt{m_x m_z}$ 。每条 LL 的简并度为 $N_B = 1/(2\pi\ell_B'^2)$ 。此外, $\text{sgn}(m_z) = \text{sgn}(R) = \text{sgn}(D_2 - D_1)$ 。

需要指出的是, 这里考虑“干净极限 (clean limit)”, 不是说在量子霍尔效应中无序没有作用。“干净极限”是指无序很弱, 不会影响平台的宽度。在强磁场下形成 LL, 无序会使 LL 展宽。因此, 费米能可以落在 LL 之间的能隙中。由局域态分隔的延展态仅存在于 LL 附近。由于局域态对输运没有贡献, 当费米能在迁移率能隙中时, 霍尔电导不会变化。一般 2DEG 的霍尔电导为 $\sigma_H = ne^2/h$,

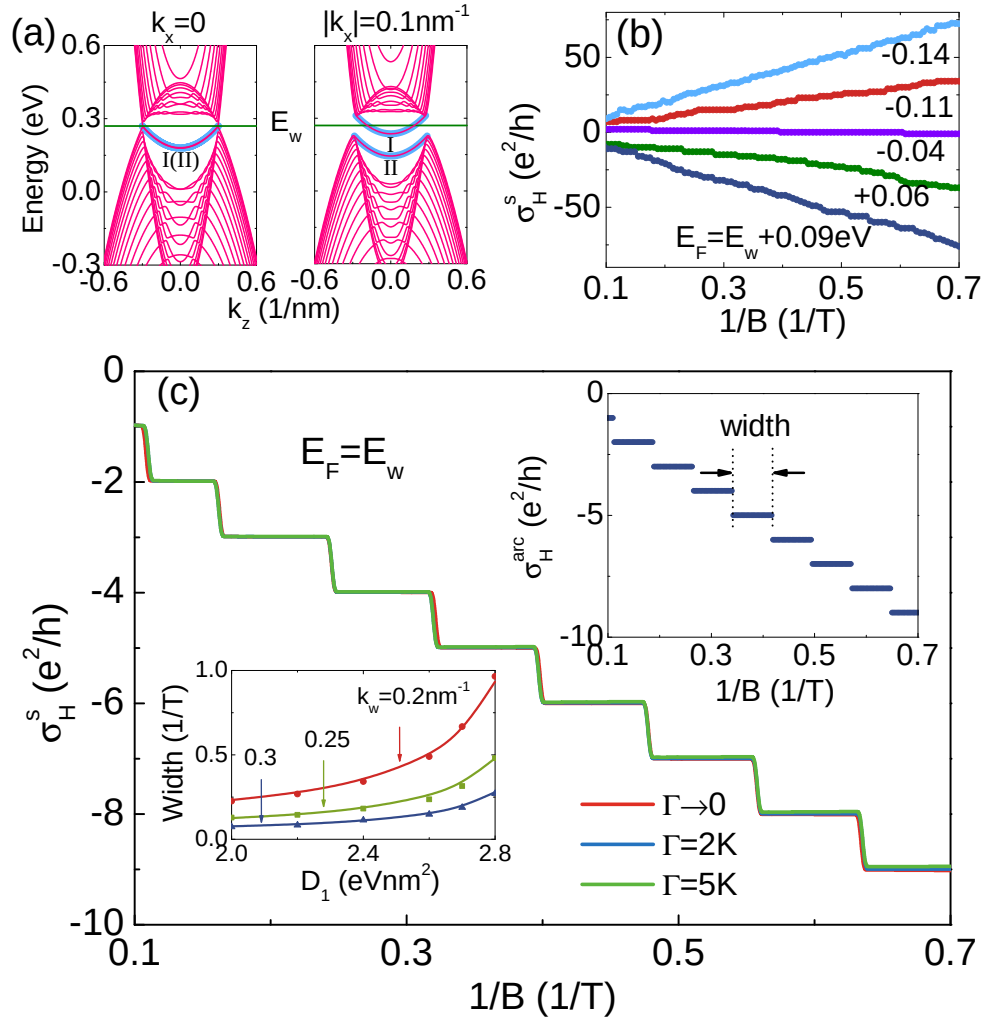


图 3-2 (a) 拓扑半金属平板中，在 $k_x = 0$ (左) 与 $k_x = \pm 0.1 \text{ nm}^{-1}$ (右) 数值计算的体态与费米弧的能谱 (粉色)。蓝色曲线为费米弧能带利用 H_{arc} 与 H'_{arc} 画出的。(b) $\Gamma \rightarrow 0$ 时，费米能切过体态的薄膜霍尔电导率。 Γ 为无序引起的能带展宽。(c) 在 $E_F = E_w$ 费米能穿过弧 I 的薄膜霍尔电导率 σ_H^s 。右侧插图显示了公式 (3-20) 的霍尔电导 σ_H 解析结果。与来自费米弧不同，体态的贡献会随平板厚度改变。左侧的插图显示了在干净极限下霍尔平台宽度对于不同 k_w 随 D_1 的变化。点与线分别为数值与解析结果。计算中的参数为 $M=5 \text{ eVnm}^2$, $A=0.5 \text{ eVnm}$, $D_2=3 \text{ eVnm}^2$, $D_1=2 \text{ eVnm}^2$, $k_w=0.3 \text{ nm}^{-1}$, $L=100 \text{ nm}$ 。

Fig. 3-2 (a) In a topological semimetal slab, the numerically calculated energy spectrum (pink) for the bulk states and Fermi arcs at $k_x = 0$ (left) and $k_x = \pm 0.1 \text{ nm}^{-1}$ (right). The blue curves are the Fermi arc bands plotted using H_{arc} and H'_{arc} . (b) The sheet Hall conductivity when the Fermi energy E_F crosses the bulk states for $\Gamma \rightarrow 0$. Γ is the disorder-induced level broadening. (c) The sheet Hall conductivity σ_H^s at $E_F = E_w$, where the Fermi energy crosses only arc I. The right inset shows the analytic Hall conductance σ_H in Eq. (3-20). Unlike that from the Fermi arcs, the contribution from the bulk states may change with the slab thickness. The left inset shows the width of the Hall plateaus in the clean limit as a function of D_1 for different k_w . The dots and lines are the numerical and analytic results, respectively. The parameters are $M=5 \text{ eVnm}^2$, $A=0.5 \text{ eVnm}$, and $D_2=3 \text{ eVnm}^2$, $D_1=2 \text{ eVnm}^2$, $k_w=0.3 \text{ nm}^{-1}$, and $L=100 \text{ nm}$.

其中 n 为费米面以下 LL 的个数。尽管大多数电子处于局域态，霍尔电导表现的像全部是 LL 的贡献^[7]，这也证实当假设每一条 LL 被完全占据时久保公式是有效的。

因为每一条 LL 的简并度为 N_B ，费米面以下 LL 的个数 n 表示为

$$n = \left\lfloor \frac{N + \frac{1}{2}N_B}{N_B} \right\rfloor \quad (3-18)$$

其中， $\lfloor \dots \rfloor$ 表示向下取整， N 为费米面以下载流子密度。此公式表明对于固定的费米能， σ_H 表现出平台具有 $1/B$ 依赖关系。 N 可以在零温下计算得到

$$N = \sum_{k_x, k_z} f(E_{\text{arc}_I}) = \frac{1}{(2\pi)^2} S_I \quad (3-19)$$

其中 S_I 为弧 I 在动量空间具有的面积。

在不考虑无序时 ($\Gamma \rightarrow 0$)，我们发现弧 I 的量子霍尔电导为^[7]

$$\sigma_H^{\text{arc}} = \frac{e^2}{h} \text{sgn}(R) \text{sgn}(eB) \left\lfloor \frac{S_I/(2\pi)^2}{eB/h} + \frac{1}{2} \right\rfloor \quad (3-20)$$

其中， $R = D_2 - D_1$ ，弧 I 在动量空间的面积为

$$S_I = 2k_w^2(1 + v^2/4R^2k_w^2) \arctan(2|R|k_w/|v|) - |v|k_w/|R| \quad (3-21)$$

R 和 eB 的符号由载流子类型和电荷类型决定，磁场方向决定霍尔电导的符号。图 3-2 (c) 表明解析的结果与数值的结果在霍尔电导和平台宽度上符合的很好。

3.2.5 费米弧的边界态

图3-1(h) 和图 3-1(i) 展示了费米弧边界态具有独特的三维空间分布。图3-1 (h) 为 y 方向加磁场时 LL 的能谱。在 $z_0 = \pm 100$ nm 附近，LL 形变产生边界态。图3-1(h) 中绿色点和图3-1(i) 中绿色曲线展示了表面态在 $z_0 = 100$ nm 时主要分布在 $y = 50$ nm 的上表面，而在 $z_0 = -100$ nm 附近主要分布在下表面（橘色的点与曲线）。这一独特的费米弧表面态三维分布可以由面内输运结合扫描隧道显微镜来探测。与 TI 不同的是^[193,194]，费米弧 QHE 需要上下两个表面共同完成。需要指出的是 100 nm 平板是三维物体。因此，在外尔点 $E_F = E_w$ 的 QHE 对费米能的依赖可以作为费米弧的输运特性。以上费米弧的 QHE 图像可以用在 WSM 中^[24-31,204]。

3.3 拓扑狄拉克半金属

由于 TRS 的存在，DSM（例如 Cd_3As_2 和 Na_3Bi ）的一个表面具有 QHE 需要

的一个完整的费米回路。同一表面的费米弧回路并不是很坚固 (robust), 可能会产生形变^[216]。因此, 与两个表面的费米弧回路相比会表现出不同的特性 (比如平台的位置与宽度差异)。DSM 的费米弧霍尔效应与能谱可以通过下面的哈密顿量来计算^[22,46,56]

$$H = \varepsilon_0(\mathbf{k}) + \begin{bmatrix} M(\mathbf{k}) & Ak_+ & 0 & 0 \\ Ak_- & -M(\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M(\mathbf{k}) & -Ak_- \\ 0 & 0 & -Ak_+ & -M(\mathbf{k}) \end{bmatrix} + \frac{\mu_B}{2}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) \otimes \begin{bmatrix} g_s & 0 \\ 0 & g_p \end{bmatrix} \quad (3-22)$$

其中 g_s 和 g_p 分别为 s 和 p 带的 g 因子^[56], $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$, $\varepsilon_0(\mathbf{k}) = C_0 + C_1 k_z^2 + C_2(k_x^2 + k_y^2)$, $M(\mathbf{k}) = M_0 + M_1 k_z^2 + M_2(k_x^2 + k_y^2)$ 。哈密顿量中的 x 、 y 和 z 轴分别沿结晶的方向 [100]、[010] 和 [001] 定义。Cd₃As₂ 样品通常解离和生长的方向为 [112] 或 [110] 方向。因此, 为了方便我们定义新的 y' 轴, 如图3-3(a) 所示。对于 [112] 方向的平板, 代入参数^[217] 可以得到费米弧能带很接近体能带的子带 (如图3-3(c) 所示), 这表明 QHE 可能会有四重简并。对于 [110] 方向的平板, QHE 可能仅来自于费米弧的贡献 (如图3-3(d) 所示)。图3-3(e) 展示了对于 [110] 方向的 Cd₃As₂ 平板, 由于 g 因子很大, 其奇数平台要比偶数平台宽。在转动磁场方向时此特性依然稳定。沿 [010] 方向解离的 Na₃Bi 样品^[49] 也具有费米弧的 QHE (如图 3-3(f) 和 3-3(g) 所示)。公式 (3-22) 中的 C 和 M 项保证了 (010) 表面上有二维的费米弧。Cd₃As₂ 计算中用到的参数为 $C_0 = -0.0145$ eV, $C_1 = 10.59$ eVÅ², $C_2 = 11.5$ eVÅ², $M_0 = 0.0205$ eV, $M_1 = -18.77$ eVÅ², $M_2 = -13.5$ eVÅ², $A = 0.889$ eVÅ^[217], $g_s = 18.6$, $g_p = 2$ ^[56]。Na₃Bi 计算中用到的参数为 $C_0 = -0.06382$ eV, $C_1 = 8.7536$ eVÅ², $C_2 = -8.4008$ eVÅ², $M_0 = 0.08686$ eV, $M_1 = -10.6424$ eVÅ², $M_2 = -10.361$ eVÅ², $A = 2.4598$ eVÅ^[217], $g_s = 20$, $g_p = 20$ ^[209]。

3.3.1 量子霍尔电导计算

在 x' - y' 平面施加均匀磁场 $\mathbf{B} = (B_x, B_y, 0) = B(\sin \xi, \cos \xi, 0)$ 。我们选取朗道规范 $\mathbf{A} = (B_y z', -B_x z', 0)$ 。磁场在 [100]、[010] 和 [001] 轴的分量可以由下式得到

$$\begin{bmatrix} B_{[100]} \\ B_{[010]} \\ B_{[001]} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \alpha - \cos \theta \sin \alpha & \sin \theta \sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \theta \cos \alpha - \sin \theta \cos \alpha \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_x \\ B_y \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3-23)$$

因此, 塞曼能项的形式为

$$H_{\text{Zeeman}} = \frac{\mu_B}{2} (\sigma_x B_{[100]} + \sigma_y B_{[010]} + \sigma_z B_{[001]}) \otimes \begin{bmatrix} g_s & 0 \\ 0 & g_p \end{bmatrix} \quad (3-24)$$

$$= \begin{bmatrix} \Delta_{11} & 0 & \Delta_{13} & 0 \\ 0 & \Delta_{22} & 0 & \Delta_{24} \\ \Delta_{13}^* & 0 & \Delta_{11} & 0 \\ 0 & \Delta_{24}^* & 0 & \Delta_{22} \end{bmatrix} \quad (3-25)$$

其中,

$$\Delta_{11} = \sin \theta \Delta_{sy} \quad (3-26)$$

$$\Delta_{22} = \sin \theta \Delta_{py} \quad (3-27)$$

$$\Delta_{13} = e^{-i\alpha} (\Delta_{sx} - i \cos \theta \Delta_{sy}) \quad (3-28)$$

$$\Delta_{24} = e^{-i\alpha} (\Delta_{px} - i \cos \theta \Delta_{py}) \quad (3-29)$$

且 $\Delta_{s/px} = g_{s/p} \mu_B B_x / 2$, $\Delta_{s/py} = g_{s/p} \mu_B B_y / 2$ 。有外加磁场时, 波矢需要用皮尔斯代换 $\mathbf{k}' = (k'_x, -i\partial_{y'}, k'_z) \rightarrow (k'_x - \frac{t_y z'}{\ell_y^2}, -i\partial_{y'} + \frac{t_x z'}{\ell_x^2}, -i\partial_{z'})$, 其中 $\ell_x = \sqrt{\hbar/|eB_x|}$, $\ell_y = \sqrt{\hbar/|eB_y|}$, $t_x = \text{sgn}(eB_x)$, $t_y = \text{sgn}(eB_y)$ 。定义升降算符 $a = \frac{\ell_y}{\sqrt{2}} \left[k'_x - \frac{t_y z'}{\ell_y^2} - t_y i(-i\partial_{z'}) \right]$, $a^\dagger = \frac{\ell_y}{\sqrt{2}} \left[k'_x - \frac{t_y z'}{\ell_y^2} + t_y i(-i\partial_{z'}) \right]$, 基矢为 $|s, \nu, \varphi_n\rangle = |\chi_s\rangle \otimes |\nu\rangle \otimes |\varphi_n\rangle$, 其中, $|\nu\rangle$ 为简谐振子本征波函数, 导旋中心为 $z_0 = t_y k'_x \ell_y^2$ 。将在磁场中的哈密顿量表示为升降算符的形式后, 通过解本征方程得到本征能量与本征波函数。

我们定义

$$\bar{v}_x^{\delta\delta'} \delta_{k''_x, k'_x} = \hbar \frac{\ell_y}{\sqrt{2}} \langle \Psi_\delta | v_x | \Psi_{\delta'} \rangle \quad (3-30)$$

$$\bar{v}_z^{\delta'\delta} \delta_{k''_x, k'_x} = \hbar \frac{\ell_y}{it_y \sqrt{2}} \langle \Psi_{\delta'} | v_z | \Psi_\delta \rangle \quad (3-31)$$

此外, 我们知道 $\bar{v}_x^{\delta'\delta} = (\bar{v}_x^{\delta\delta'})^*$, $\bar{v}_z^{\delta\delta'} = -(\bar{v}_z^{\delta'\delta})^*$ 。因此, 将本征能量与本征波函数代入久保公式可得零温时霍尔电导为

$$\sigma_H = \frac{e^2}{h} \frac{8\pi t_y}{V \ell_y^2} \sum_{k'_x} \sum_{\substack{E_\delta < E_F \\ E_{\delta'} > E_F}} \frac{\text{Re}(\bar{v}_x^{\delta\delta'} \bar{v}_z^{\delta'\delta})}{(E_\delta - E_{\delta'})^2 + \Gamma^2} \quad (3-32)$$

图 3-3 中的霍尔电导可由上式计算得到。

3.4 本章小结

QHE 通常是在二维系统观察到。我们展示了在 TSM 中费米弧可以产生独

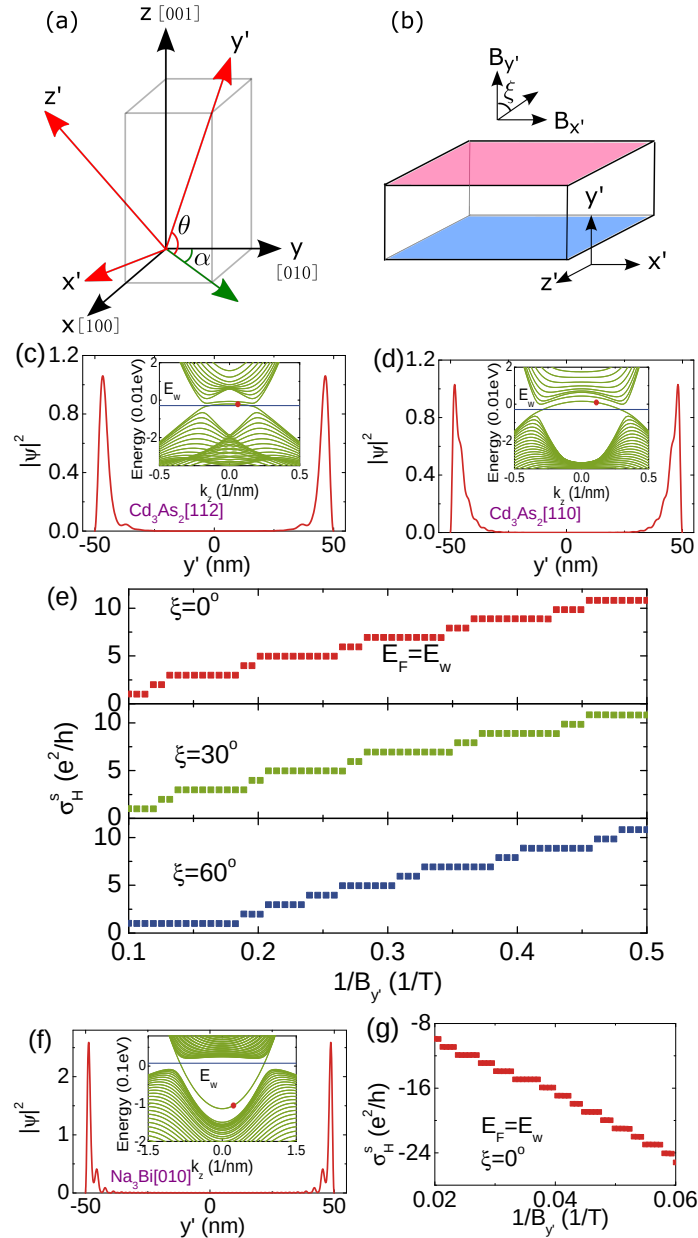


图 3-3 中 (a) 公式 (3-22) 中 DSM 的结晶方向与坐标系。沿 [112] 和 [110] 方向生长的平板分别对应 $(\alpha, \theta) = (-\pi/4, \tan^{-1} \sqrt{2})$ 和 $(-\pi/4, 0)$ 。(b) y' 为平板生长方向。霍尔电导定义于 $x' - z'$ 平面内。磁场可以通过改变角度 ξ 从 y' 方向转到 x' 方向。[(c),(d), (f)] 100 nm 厚的平板, 在 $k_x = 0.01 \text{ nm}^{-1}$ 的能谱与红色标记点的态的波函数沿 y' 方向分布。(e) Cd_3As_2 [110] 平板在不同 ξ 角度时, 在狄拉克点 $E_w = C_0 - C_1 M_0/M_1$ 的薄膜霍尔电导率。(g) 与 (e) 相同, 但是是 [010] Na_3Bi 平板的计算结果。在 (e) 和 (g) 中 $\Gamma=1\text{K}$ 。

Fig.3-3 (a) The crystallographic directions and coordinates system in the model of Dirac semimetal Eq. (3-22). Slabs grown along the [112] and [110] directions corresponds to $(\alpha, \theta) = (-\pi/4, \tan^{-1} \sqrt{2})$ and $(-\pi/4, 0)$, respectively. (b) y' is the slab growth direction. The Hall conductance is defined in the $x' - z'$ plane. The magnetic field can be rotated from the y' to the x' direction by the angle ξ . [(c),(d), (f)] For a slab of 100 nm, the energy spectrum at $k_x = 0.01 \text{ nm}^{-1}$ and the wave function distribution along the y' direction for the states marked by the red points. (e) The sheet Hall conductivity at the Dirac node $E_w = C_0 - C_1 M_0/M_1$ for the Cd_3As_2 [110] slab at different ξ . (g) The same as (e) but for the [010] Na_3Bi slab. $\Gamma=1\text{K}$ in panels (e) and (g).

特的三维 QHE。由于存在拓扑约束，单个表面的费米弧是开放的，无法产生 QHE。在外尔点通过“虫洞”隧穿，上下两个表面的费米弧可以完成费米闭合回路产生 QHE。费米弧的边界态表现出特有的三维分布，可以看作 $(d-2)$ 维边界态的又一例证。这与 TI 来自于一个表面的表面态 QHE 有本质的不同。当费米面逐渐变化扫到外尔点时，薄膜霍尔电导率由 $1/B$ 依赖关系演变为量子化的平台。这一现象可以通过调节 TSM（例如 TaAs 族, Cd_3As_2 或者 Na_3Bi ）平板的栅极电压来实现。此工作不仅对寻找费米弧的输运特性有指导意义，对于探索其它拓扑物态中的新奇电子气也会有所启发。

第4章 本征反铁磁拓扑绝缘体中的表面态

4.1 引言

TI 的体态是绝缘的，但是其表面态却是导电的^[35,42,218,219]。在 TI 中掺入磁性杂质，会破坏体系的 TRS，此时 TI 的表面态会打开能隙^[118?]。表面态打开能隙是实现 QAHE 的必要条件^[11,118]。QAHE 是由无耗散的边界态产生的，可用于制造无耗散电子元器件，具有广泛的潜在应用价值。然而磁性杂质掺杂不可避免的会引入不均匀性和无序，使得可以探测到 QAHE 的温度一般比较低（小于 2K）^[119,120]。理论上可以通过磁性延展方法^[121,122]或使用本征磁性绝缘体（磁性是晶体中固有的，而非人为掺杂引入）^[123-126]来提高 QAHE 的工作温度。最近中科院物理所报道了磁性延展方面的实验探索^[220]，结果并不是太理想。在本征磁性绝缘体方面，有报道预言 MnBi_2Te_4 为本征磁性绝缘体^[127-129]，并且已经被实验验证^[127,130-136]。目前，在 MnBi_2Te_4 薄膜中观测到 QAHE、轴子绝缘体到陈绝缘体相变和无朗道能形成的高陈数 QHE^[137,143,221]。在强磁场时，观察到了本征陈绝缘态 (connate Chern insulator state) 与塞曼效应引起的 (Zeeman-effect-induced) 陈绝缘态共存的螺旋陈绝缘相 (helical Chern insulator phase)^[144]。然而，最近的实验结果显示 MnBi_2Te_4 晶体的表面态可能是无能隙的^[134-136]，与之前的计算结果和实验观测大相径庭^[127-133,138-142]。

为了理解为什么实验观测到表面态能隙的大小差异如此悬殊，我们用解析方法推导出了表面态的有效模型（因为解析模型可以明确的表示出晶体块材的表面态分布）。需要特别指出的是，在推导过程中我们考虑了体磁化的空间分布。随后我们会看到表面态能隙的大小实际上是依赖于层间铁磁序大小和作用范围。我们也总结了目前实验观测到的表面态能隙大小对应的层间铁磁序大小（见表 4-1）。此外，我们还计算了表面态的空间分布以及穿透深度，结果表明表面态主要存在于块材的最上面两层七原层当中。此计算结果与第一性原理计算的结果一致^[222]。最后，我们还推导了 MnBi_2Te_4 薄膜的有效模型，展示了陈数随层厚的振荡行为，此计算结果也与第一性原理计算的结果一致^[138]。

4.2 半无穷结构表面态有效模型

半无穷晶体的电子结构可以由包含格林函数的第一性原理计算直接得到。

表 4-1 基于密度泛函理论和 ARPES 得到的 MnBi_2Te_4 的表面态能隙与由于实验结果估算的层内铁磁序大小，其中用到公式 (4-45)，且 n 取 1 作为例子。

Table 4-1 The gaps of the surface states of the AFM MnBi_2Te_4 based on density functional theory (DFT) and angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES) and the estimated amplitude of the intralayer ferromagnetic order m_0 from the experiments, where Eq. (4-45) has been used and $n = 1$ has been taken as an example.

Reference	Method	Surface gap (meV)	m_0 (meV)
Otrokov <i>et al.</i> ^[127]	DFT	88	
Otrokov <i>et al.</i> ^[127]	ARPES	70	218
Lee <i>et al.</i> ^[142]	ARPES	85	265
Zeugner <i>et al.</i> ^[141]	ARPES	100	311
Chen <i>et al.</i> ^[131]	ARPES	< 25	< 78
Hao <i>et al.</i> ^[134]	ARPES	< 3	< 9
Li <i>et al.</i> ^[133]	ARPES	< 13.5	< 42
Chen <i>et al.</i> ^[135]	ARPES	< 2.5	< 8
Swatek <i>et al.</i> ^[136]	ARPES	< 2	< 6
Shikin <i>et al.</i> ^[222]	ARPES	15 – 67	47 – 209

此外，其表面态还可以由 $k \cdot p$ 方法来定性（甚至定量）得到。这里我们采用 $k \cdot p$ 方法，从 MnBi_2Te_4 的反铁磁三维体态哈密顿量^[128] 出发，推导出半无穷结构的表面态有效模型。此方法的有效性在预测 TI 薄膜中 QSHE^[44,98,99] 和 TSM 中三维 QHE^[223,224] 时得到验证。 MnBi_2Te_4 的七原层结构如图 4-1 所示。由于其拓扑性质由在 Γ 点处的物理决定，因此我们可以利用体系的低能有效模型来研究其拓扑物理性质。在 Γ 点附近的能带反转来自于 Bi 原子的 $|P_{1z}^+\rangle$ 和 Te 原子的 $|P_{2z}^-\rangle$ ^[128]。由四个 low-lying 态 $|P_{1z}^+, \uparrow(\downarrow)\rangle$ 和 $|P_{2z}^-, \uparrow(\downarrow)\rangle$ 出发（其中上角标 $+, -$ 表示相应态的 parity），可以写出 MnBi_2Te_4 的反铁磁三维哈密顿量为

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \epsilon_0(\mathbf{k}) + \begin{bmatrix} M(\mathbf{k}) & A_1 k_z & 0 & A_2 k_- \\ A_1 k_z & -M(\mathbf{k}) & A_2 k_- & 0 \\ 0 & A_2 k_+ & M(\mathbf{k}) & -A_1 k_z \\ A_2 k_+ & 0 & -A_1 k_z & -M(\mathbf{k}) \end{bmatrix} + H_X \quad (4-1)$$

其中， $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$ ， $\epsilon_0(\mathbf{k}) = C_0 + D_1 k_z^2 + D_2(k_x^2 + k_y^2)$ ， $M(\mathbf{k}) = M_0 - B_1 k_z^2 - B_2(k_x^2 + k_y^2)$ 。 C_0 、 D_i 、 M_0 、 B_i 和 A_i 为模型参数，且 $i = 1, 2$ 。此哈密顿量的基矢为 $\{|P_{1z}^+, \uparrow\rangle, |P_{2z}^-, \uparrow\rangle, |P_{1z}^+, \downarrow\rangle, |P_{2z}^-, \downarrow\rangle\}$ 。

一般会把交换场 H_X 当作常量 m_0 来处理。为了研究实际体系，与之前的工作^[44,98] 不同的是，在反铁磁 MnBi_2Te_4 中我们考虑交换场的空间分布。为了便于计算，我们考虑交换场的空间分布为正弦函数的形式。交换场 H_X 表示为

$$H_X = -m_0 \sin^n\left(\frac{\pi}{d}z\right) \sigma_z \otimes \tau_0 \quad (4-2)$$

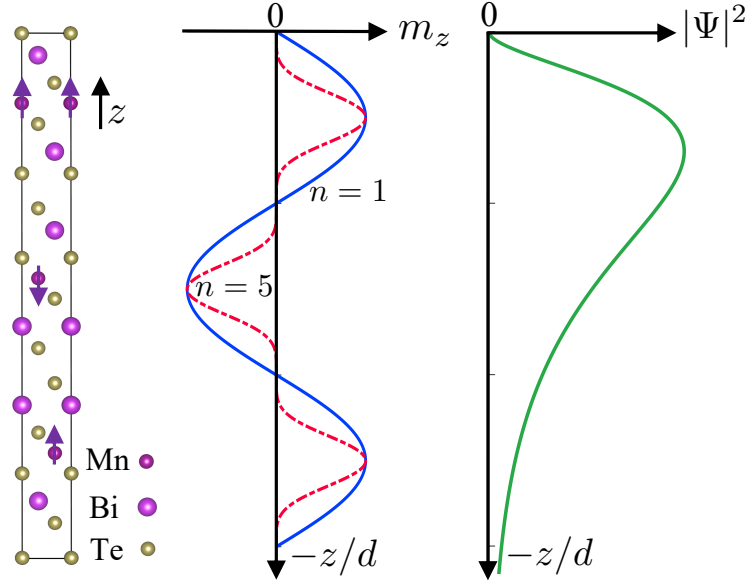


图 4-1 (左) MnBi_2Te_4 七原层结构。紫色箭头表示 Mn 原子层内铁磁序的方向。(中) 假设的体磁序分布 $m_z \sim \sin^n(\pi z/d)$ 。 n 取奇数, 用来控制层内铁磁序的作用范围, 是计算中唯一的可调参数。 d 为一个七原层的厚度。(右) 表面态的包络函数 Ψ 的分布。

Fig. 4-1 (Left) Septuple layers of MnBi_2Te_4 . The purple arrows denote the direction of the ferromagnetic order in the Mn atomic layer. (Middle) The assumed profile of the bulk magnetization $m_z \sim \sin^n(\pi z/d)$. n is an odd integer that controls the acting range of the intralayer ferromagnetic order and is the only tuning parameter in the calculation. d is the thickness of a septuple layer. (Right) The distribution of the envelope function Ψ of the surface states.

其中, m_0 为层内铁磁序的幅值, d 为一个七原层的厚度, σ_z 为泡利矩阵 z 分量代表自旋自由度, τ_0 为 2×2 单位矩阵代表轨道自由度, 以及对于不同的 n 取值, 沿 z 方向的磁化能 $m_z = -m_0 \sin^n(\pi z/d)$ 的表示如图 4-1 所示。 n 用来模拟层间铁磁序的局域化, 其中 n 取奇数。 n 越大表示层间铁磁序越局域。根据中子散射对磁化探测的结果^[225], 我们主要研究磁化方向垂直于样品表面的情况。

现在我们考虑一个在 $z = 0$ 处的表面, 如图 4-1 左图所示, 推导表面态的有效模型。

对于半无穷结构, 在 $z \leq 0$ 且取开放边界条件时, k_x 和 k_y 依然是好量子数, 然而 k_z 不再是好量子数, 需要用算符 $-i\partial_z$ 来代替, 此时哈密顿量写作

$$\mathcal{H}(k, \partial_z) = \epsilon_0(k, \partial_z) + \begin{bmatrix} M(k, \partial_z) & -iA_1\partial_z & 0 & A_2k_- \\ -iA_1\partial_z & -M(k, \partial_z) & A_2k_- & 0 \\ 0 & A_2k_+ & M(k, \partial_z) & iA_1\partial_z \\ A_2k_+ & 0 & iA_1\partial_z & -M(k, \partial_z) \end{bmatrix} \quad (4-3)$$

其中, $k^2 = k_x^2 + k_y^2$, $\epsilon_0(k, \partial_z) = C - D_1\partial_z^2 + D_2k^2$, $M(k, \partial_z) = M + B_1\partial_z^2 - B_2k^2$ 。

将哈密顿量分解为如下形式

$$\mathcal{H}(k, \partial_z) = \mathcal{H}_0(\partial_z) + \Delta\mathcal{H}(k) \quad (4-4)$$

其中

$$\mathcal{H}_0(\partial_z) = \begin{bmatrix} l_+ - D_- \partial_z^2 & -iA_1 \partial_z & 0 & 0 \\ -iA_1 \partial_z & l_- - D_+ \partial_z^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & l_+ - D_- \partial_z^2 & iA_1 \partial_z \\ 0 & 0 & iA_1 \partial_z & l_- - D_+ \partial_z^2 \end{bmatrix} \quad (4-5)$$

$$\Delta\mathcal{H}(k) = \begin{bmatrix} -B_- k^2 & 0 & 0 & A_2 k_- \\ 0 & B_+ k^2 & A_2 k_- & 0 \\ 0 & A_2 k_+ & -B_- k^2 & 0 \\ A_2 k_+ & 0 & 0 & B_+ k^2 \end{bmatrix} \quad (4-6)$$

且 $l_{\pm} = C \pm M$, $D_{\pm} = D_1 \pm B_1$, $B_{\pm} = B_2 \pm D_2$ 。取试探波函数 Ψ_{λ} 为如下形式

$$\Psi_{\lambda} = e^{ik_x x} e^{ik_y y} \psi e^{\lambda z} \quad (4-7)$$

其中 $\psi = [a, b, c, d]^T$ 。

在 Γ 点 ($k_x = k_y = 0$)，将试探波函数代入本征方程中

$$\mathcal{H}(k, \partial_z) \Psi_{\lambda} = E \Psi_{\lambda} \quad (4-8)$$

为了得到非平庸的解，需要满足久期方程

$$\det[H(\lambda) - E] = 0 \quad (4-9)$$

其中

$$H(\lambda) = \begin{bmatrix} h(-A_1) & 0 \\ 0 & h(A_1) \end{bmatrix}, h(A_1) = \begin{bmatrix} l_+ - D_- \lambda^2 & iA_1 \lambda \\ iA_1 \lambda & l_- - D_+ \lambda^2 \end{bmatrix} \quad (4-10)$$

通过解久期方程，我们可以得到四个 λ 的解，记作 $\beta\lambda_{\alpha}$ ，且 $\alpha = 1, 2, \beta = \pm 1$ 。 λ 的解的具体形式如下

$$\lambda_{\alpha}(E) = \left[\frac{-F + (-1)^{\alpha-1} \sqrt{R}}{2D_+ D_-} \right]^{1/2}, \lambda_{\alpha}^2(E) = \frac{-F + (-1)^{\alpha-1} \sqrt{R}}{2D_+ D_-} \quad (4-11)$$

其中， $F = A_1^2 + D_+(E - l_+) + D_-(E - l_-)$, $R = F^2 - 4D_+ D_- [(E - l_+)(E - l_-)]$ 。

把 $\lambda_{\alpha}(E)$ 代入本征方程

$$h(-A_1) \psi_{\uparrow} = E \psi_{\uparrow} \quad (4-12)$$

其中 $\psi_{\uparrow} = [a, b]^T$ 。

我们得到方程组

$$(l_+ - D_- \lambda^2 - E)a - iA_1 \lambda b = 0 \quad (4-13)$$

$$-iA_1 \lambda a + (L_- - D_+ \lambda^2 - E)b = 0 \quad (4-14)$$

从中可以得到如下关系

$$\frac{a}{b} = \frac{iA_1 \lambda}{l_+ - D_- \lambda^2 - E} \quad (4-15)$$

本征矢量可能具有如下形式

$$\psi_{\uparrow} = \begin{bmatrix} iA_1 \lambda \\ l_+ - D_- \lambda^2 - E \end{bmatrix} \quad (4-16)$$

因此, $h(-A_1)$ 的本征矢量的一般形式为

$$\psi_{\alpha\beta} = \begin{bmatrix} iA_1 \beta \lambda_{\alpha} \\ l_+ - D_- \lambda_{\alpha}^2 - E \end{bmatrix} \quad (4-17)$$

通解可以表示成这些本征矢量的线性组合

$$\Psi(E, z) = \sum_{\alpha=1,2} \sum_{\beta=\pm} C_{\alpha\beta} \psi_{\alpha\beta} e^{\beta \lambda_{\alpha} z} \quad (4-18)$$

其中, 叠加系数 $C_{\alpha\beta}$ 需要通过边界条件来确定。

在 $z = -\infty$ 时, 边界条件为 $\Psi(E, z = -\infty) = 0$, 即

$$\Psi(E, -\infty) = C_1 \psi_{1,+} e^{\lambda_1 z} + C_2 \psi_{1,-} e^{-\lambda_1 z} + C_3 \psi_{2,+} e^{\lambda_2 z} + C_4 \psi_{2,-} e^{-\lambda_2 z} = 0 \quad (4-19)$$

此条件要求 $C_1 = C_3 = 0$ 或 $C_2 = C_4 = 0$ 。当 $C_2 = C_4 = 0$, 通解的形式为

$$\Psi(E, z) = C_1 \psi_{1,+} e^{\lambda_1 z} + C_3 \psi_{2,+} e^{\lambda_2 z} \quad (4-20)$$

在 $z = 0$ 处, 开放边界条件要求 $\Psi(E, z = 0) = 0$, 即

$$\Psi(E, 0) = C_1 \begin{bmatrix} iA_1 \lambda_1 \\ l_+ - D_- \lambda_1^2 - E \end{bmatrix} + C_3 \begin{bmatrix} iA_1 \lambda_2 \\ l_+ - D_- \lambda_2^2 - E \end{bmatrix} = 0 \quad (4-21)$$

我们可以得到如下方程组

$$iA_1 \lambda_1 C_1 + iA_1 \lambda_2 C_3 = 0 \quad (4-22)$$

$$(l_+ - D_- \lambda_1^2 - E)C_1 + (l_+ - D_- \lambda_2^2 - E)C_3 = 0 \quad (4-23)$$

化简可得

$$\frac{C_3}{C_1} = -\frac{\lambda_1}{\lambda_2} = -\frac{l_+ - D_- \lambda_1^2 - E}{l_+ - D_- \lambda_2^2 - E} \quad (4-24)$$

将方程组重新写成矩阵相乘的形式

$$h(\lambda_1, \lambda_2) \begin{bmatrix} C_1 \\ C_3 \end{bmatrix} = 0 \quad (4-25)$$

其中

$$h(\lambda_1, \lambda_2) = \begin{bmatrix} iA_1 \lambda_1 & iA_1 \lambda_2 \\ l_+ - D_- \lambda_1^2 - E & l_+ - D_- \lambda_2^2 - E \end{bmatrix} \quad (4-26)$$

要想得到非平庸的解，需要满足久期方程 $\det[h(\lambda_1, \lambda_2)] = 0$, 即

$$iA_1 \lambda_1 (l_+ - D_- \lambda_2^2 - E) = iA_1 \lambda_2 (l_+ - D_- \lambda_1^2 - E) \quad (4-27)$$

当 $\lambda_1 \neq \lambda_2$ 时，我们得到

$$\lambda_1 \lambda_2 = \left[\frac{-F + \sqrt{R}}{2D_+ D_-} \right]^{1/2} \left[\frac{-F - \sqrt{R}}{2D_+ D_-} \right]^{1/2} = \frac{1}{2} \left[\frac{F^2 - R}{D_+^2 D_-^2} \right]^{1/2} = -\frac{l_+ - E}{D_-} \quad (4-28)$$

因此，我们得到等式

$$\sqrt{F^2 - R} = 2D_+(E - l_+) \quad (4-29)$$

将 F 和 R 的具体形式代入，我们得到

$$\sqrt{4D_+ D_- [(E - l_+)(E - l_-)]} = 2D_+(E - l_+) \quad (4-30)$$

因为 $l_{\pm} = C \pm M$ 且 $D_{\pm} = D_1 \pm B_1$ ，代入上式我们可以得到本征能量

$$E = C + \frac{D_1}{B_1} M \quad (4-31)$$

下面我们将本征能量代入本征方程来得到本征波函数。

由公式 (4-24) 可知

$$\lambda_2 = -\lambda_1 \frac{C_1}{C_3} \quad (4-32)$$

$$l_+ - D_- \lambda_2^2 - E = -(l_+ - D_- \lambda_1^2 - E) \frac{C_1}{C_3} \quad (4-33)$$

将上面两个等式代入通解中可得

$$\Psi^\uparrow(E, z) = \varphi(A_1) = C \begin{bmatrix} iA_1 \\ -D_- \lambda_+ \end{bmatrix} (e^{\lambda_1 z} - e^{\lambda_2 z}) \quad (4-34)$$

其中, $\lambda_+ = \lambda_1 + \lambda_2$, C 为归一化因子, 由下式确定

$$1/|C|^2 = (A_1^2 + D_-^2 |\lambda_+|^2) \int_{-\infty}^0 dz \{ |e^{\lambda_1 z} - e^{\lambda_2 z}|^2 \} \quad (4-35)$$

对于块矩阵 $h(A_1)$, 其本征能量为

$$E = C + \frac{D_1}{B_1} M, \quad (4-36)$$

其通解为

$$\Psi^\downarrow(E, z) = \varphi(-A_1) = C \begin{bmatrix} -iA_1 \\ -D_- \lambda_+ \end{bmatrix} (e^{\lambda_1 z} - e^{\lambda_2 z}) \quad (4-37)$$

因此, 表面态的基矢为 $\{\Phi_1, \Phi_2\}$

$$\Phi_1 = \begin{bmatrix} \varphi(A_1) \\ 0 \end{bmatrix}, \Phi_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ \varphi(-A_1) \end{bmatrix} \quad (4-38)$$

将哈密顿量 $\mathcal{H}(k)$ 投影到基矢 $\{\Phi_1, \Phi_2\}$, 我们得到表面态的有效哈密顿量

$$H_{\text{eff}} = \langle \Phi_1 \Phi_2 | \mathcal{H}(k) | \Phi_1 \Phi_2 \rangle = E + \Delta H_{\text{eff}} \quad (4-39)$$

其中

$$\Delta H_{\text{eff}} = \langle \Phi_1 \Phi_2 | \Delta \mathcal{H}(k) | \Phi_1 \Phi_2 \rangle = -Dk^2 + \begin{bmatrix} 0 & i\gamma k_- \\ -i\gamma k_+ & 0 \end{bmatrix} \quad (4-40)$$

参数 D 与 γ 的具体形式如下

$$D = \frac{A_1^2 B_- - B_+ D_-^2 |\lambda_+|^2}{A_1^2 + D_-^2 |\lambda_+|^2}, \gamma = \frac{A_1 A_2 D_- (\lambda_+ + \lambda_+^*)}{A_1^2 + D_-^2 |\lambda_+|^2} \quad (4-41)$$

体系交换场的形式为

$$H_X = -m_0 \sin^n\left(\frac{\pi}{d}z\right) \sigma_z \otimes \tau_0 \quad (4-42)$$

这里 d 为单个七原层的厚度, n 为正奇数.

通过投影可以得到交换场的有效哈密顿量, 其形式为

$$H_X^{\text{eff}} = \langle \Phi_1 \Phi_2 | H_X | \Phi_1 \Phi_2 \rangle = m\sigma_z \quad (4-43)$$

其中 m 的形式如下

$$m = m'_0 \int_{-\infty}^0 dz |e^{\lambda_1 z} - e^{\lambda_2 z}|^2 \sin^n\left(\frac{\pi}{d}z\right) \quad (4-44)$$

参数 m'_0 的形式为 $m'_0 = -m_0(A_1^2 + D_-^2|\lambda_+|^2)|C|^2$, C 为归一化系数。

对于任意正奇数 n , 有效磁化 m 的具体形式为

$$m = m'_0 n! \pi^n d \left\{ \frac{2}{\prod_{j=1}^{\frac{n+1}{2}} \{d^2 \lambda_p^2 + [(2j-1)\pi]^2\}} - \sum_{i=1}^2 \frac{1}{\prod_{j=1}^{\frac{n+1}{2}} \{4d^2 \lambda_i^2 + [(2j-1)\pi]^2\}} \right\} \quad (4-45)$$

其中 $\lambda_p = \lambda_1 + \lambda_2$ 。

最终, 我们得到半无穷结构的表面态有效模型为

$$H_{\text{surface}} = H_{\text{eff}} + H_X^{\text{eff}} = E - Dk^2 + \begin{bmatrix} m & i\gamma k_- \\ -i\gamma k_+ & -m \end{bmatrix} \quad (4-46)$$

4.2.1 表面态能隙

表面态有效模型的两个能带为 $E_{\text{surface}}^{\pm} = E_0 - Dk^2 \pm \sqrt{m^2 + \gamma^2 k^2}$ 。可以看到表面态在 Γ 点打开一个大小为 $2|m|$ 的能隙。利用公式 (4-45), 我们可以计算在逐渐增大奇数 $n \in \{1, 3, 5, \dots\}$ 时有效磁化 m 的大小, 并画出 m 随不同模型参数变化的曲线, 如图 4-2(a)–4-2(d) 所示。计算中用到的参数值来自于 *ab initio* 计算^[128], 其中 $C_0 = -0.0048$ eV, $D_1 = 2.7232$ eVÅ², $D_2 = 17.0000$ eVÅ², $A_1 = 2.7023$ eVÅ, $A_2 = 3.1964$ eVÅ, $M_0 = -0.1165$ eV, $B_1 = -11.9048$ eVÅ², $B_2 = -9.4048$ eVÅ², $m_0 = 0.26$ eV。图 4-2(a) 展示了当层间铁磁序变小或者变得更局域 (n 取更大的值) 时有效磁化会减小。

从这个意义上来说, 我们的计算表明实验上观测到的很小的表面态能隙可能是更小的和更局域的层内铁磁序造成的。值得一提的是, Shikin 及其合作者指出, 表面的结构变化会使得表面态向材料内部移动也会造成有效磁化减小^[222,226]。

4.2.2 可能的实验证据

目前有些实验结果可能会支持我们的结论, 即实际材料中更小的和更局域的层内铁磁序造成了表面态能隙变小。层内铁磁序变小已经在实验中得到证实。因为实验上测得在 MnBi_2Te_4 薄膜中 Mn 原子的磁化大小为约 $1.14 \mu_B$ ^[130], 在 MnBi_2Te_4 块材中 Mn 原子的磁化大小为约 $3.8 \mu_B$ ^[134], 这比理论上的值 $4.6 \mu_B$ ^[127,138] 或 $5 \mu_B$ ^[129,130] 要小很多。此外, 共振光电发射谱测量显示 Mn 3d 态在

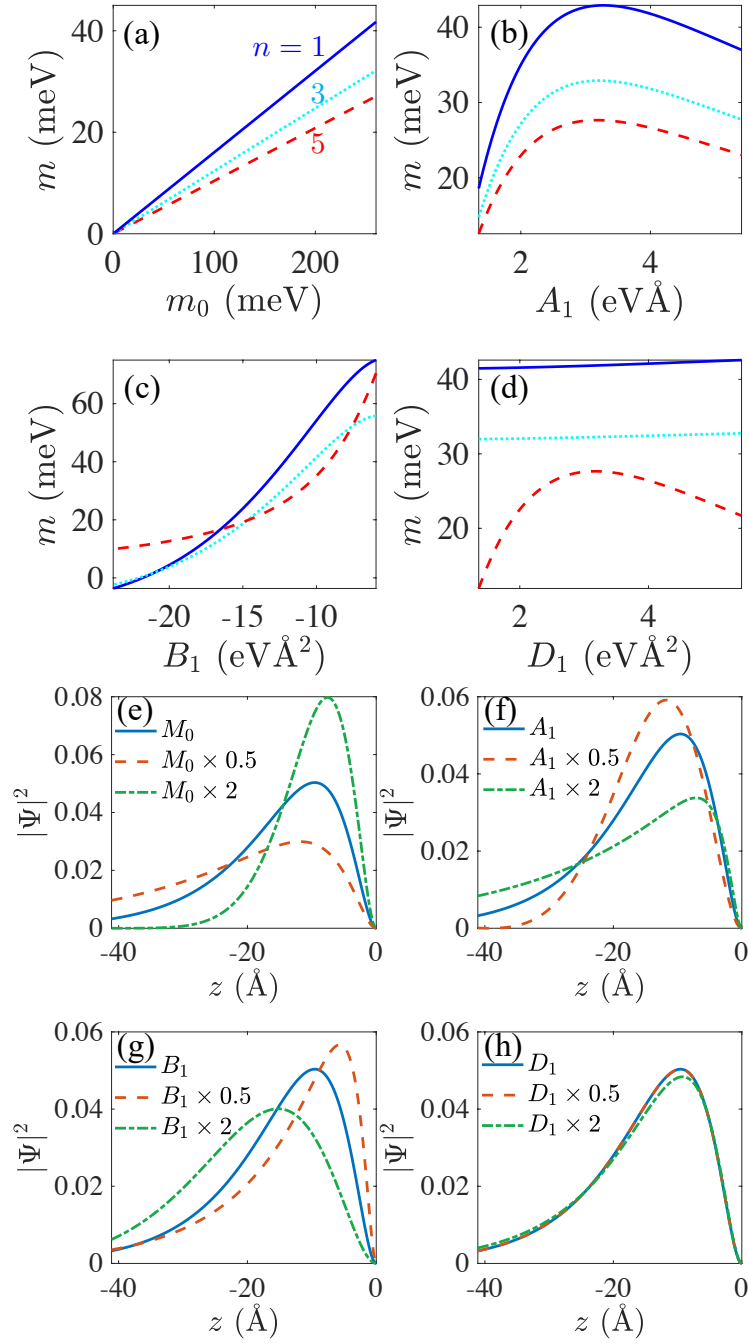


图 4-2 (a) 对于图 4-1 中不同的体空间磁化 m_z 分布，有效磁化 m 与层内铁磁序振幅 m_0 间的关系。[(b)–(d)] 参数 A_1, B_1 和 D_1 分别变化对有效磁化 m 的影响。蓝色实线，青色点线以及红色虚线分别代表 $n = 1, 3$ 和 5 。[(e)–(h)] 参数 M_0, A_1, B_1 和 D_1 分别变化对表面态分布的影响。

Fig.4-2 (a) The relation between the effective magnetic moment m and the amplitude of the intralayer ferromagnetic order m_0 for different m_z profiles in Fig. 4-1. [(b)–(d)] The influence of the variation of the parameters A_1, B_1 , and D_1 on the effective magnetic moment m , respectively. The blue solid, cyan dotted, and red dashed lines represent $n = 1, 3$, and 5 , respectively. [(e)–(h)] The influence of the variation of the parameters M_0, A_1, B_1 , and D_1 on the distribution of the surface states, respectively.

费米面以下能量小于 0.6 eV 范围内的态密度及其小，几乎可以忽略不计^[132,133]。这与 Mn 掺杂的 Sb_2Te_3 ^[227] 很相似，意味着 MnBi_2Te_4 中 Mn 3d 态本质上是局域的^[132,133]。

4.2.3 体参数对表面态能隙的影响

我们还计算了表面态的空间分布 $|\Psi(z)|^2$ 以及表面态的穿透深度 ξ ，其中计算过程中用到的参数来自于 *ab initio* 计算^[128]。如图 4-2(e)–4-2(h) 所示，表面态很好的局域在表面，并且已经被实验探测到^[228,229]。更重要的是，我们发现表面态的穿透深度 ξ 大概为 16.2 Å。这比一个七原层的厚度（大约 13.7 Å）要大，说明表面态已经扩展到表面的第二个七原层。需要说明的是，虽然我们是通过包络函数来估算穿透深度的大小，但是得到的结果与 *ab initio* 计算的结果^[222,230] 是一致的。

4.3 本征反铁磁拓扑绝缘体薄膜的有效模型

以上我们讨论了半无穷结构的单个表面的表面态能隙。现在，我们来讨论具有上下表面的薄膜的表面态能隙。首先，我们推导 MnBi_2Te_4 薄膜的 $k \cdot p$ 模型。与单个表面的有效模型推导类似，为了得到薄膜的有效模型，我们先得到在 Γ 点 ($k_x = 0, k_y = 0$) 表面态的基矢。

由边界条件 $\psi_{\uparrow}(z = \pm L/2) = 0$ ，可以得到关于本征能量的两个超越方程

$$\frac{(-D_+\lambda_1^2 + L_- - E)\lambda_2}{(-D_+\lambda_2^2 + L_- - E)\lambda_1} = \frac{\tanh(\lambda_1 L/2)}{\tanh(\lambda_2 L/2)} \quad (4-47)$$

$$\frac{(-D_+\lambda_1^2 + L_- - E)\lambda_2}{(-D_+\lambda_2^2 + L_- - E)\lambda_1} = \frac{\tanh(\lambda_2 L/2)}{\tanh(\lambda_1 L/2)} \quad (4-48)$$

通过解超越方程，我们得到在 Γ 点的本征能量，记为 $E_{\pm}$ ，其具体形式如下

$$E_+ = \frac{(-D_+\lambda_1^2 + L_-)\lambda_2 \tanh(\lambda_1 L/2) - (-D_+\lambda_2^2 + L_-)\lambda_1 \tanh(\lambda_2 L/2)}{\lambda_2 \tanh(\lambda_1 L/2) - \lambda_1 \tanh(\lambda_2 L/2)} \quad (4-49)$$

$$E_- = \frac{(-D_+\lambda_1^2 + L_-)\lambda_2 \tanh(\lambda_2 L/2) - (-D_+\lambda_2^2 + L_-)\lambda_1 \tanh(\lambda_1 L/2)}{\lambda_2 \tanh(\lambda_2 L/2) - \lambda_1 \tanh(\lambda_1 L/2)} \quad (4-50)$$

可以看到，在 Γ 点打开一个有限大小的能隙 $\Delta = E_+ - E_-$ 。同时， λ_1 和 λ_2 可以通过将得到的本征能量 E_+ 或 E_- 代入公式 (4-11) 得到。

对于本征能量 $E = E_+$ ，其通解的形式为

$$\psi_+^\uparrow = C_+ \begin{bmatrix} -D_+ f_+^+(z) \eta^+ \\ iA_1 f_+^+(z) \end{bmatrix} \quad (4-51)$$

其中，我们定义了

$$f_+^+(z) = f_c^+(z) = \frac{\cosh(\lambda_1 z)}{\cosh(\lambda_1 \frac{L}{2})} - \frac{\cosh(\lambda_2 z)}{\cosh(\lambda_2 \frac{L}{2})} \Big|_{E=E_+} \quad (4-52)$$

$$f_-^+(z) = f_s^+(z) = \frac{\sinh(\lambda_1 z)}{\sinh(\lambda_1 \frac{L}{2})} - \frac{\sinh(\lambda_2 z)}{\sinh(\lambda_2 \frac{L}{2})} \Big|_{E=E_+} \quad (4-53)$$

$$\eta^+ = \frac{(\lambda_2^2 - \lambda_1^2)}{\lambda_2 \coth(\lambda_2 \frac{L}{2}) - \lambda_1 \coth(\lambda_1 \frac{L}{2})} \Big|_{E=E_+} \quad (4-54)$$

$$1/|C_+|^2 = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dz [D_+^2 |f_-^+(z) \eta^+|^2 + A_1^2 |f_+^+(z)|^2] \Big|_{E=E_+} \quad (4-55)$$

因此，本征能量 $E = E_+$ 的本征波函数的形式为

$$\varphi(A_1) = \psi_+^\uparrow = C_+ \begin{bmatrix} -D_+ f_+^+(z) \eta^+ \\ iA_1 f_+^+(z) \end{bmatrix} \quad (4-56)$$

$$\varphi(-A_1) = \psi_+^\downarrow = C_+ \begin{bmatrix} -D_+ f_-^+(z) \eta^+ \\ -iA_1 f_+^+(z) \end{bmatrix} \quad (4-57)$$

对于本征能量 $E = E_-$ ，其通解的形式为

$$\psi_-^\uparrow = C_- \begin{bmatrix} -D_+ f_+^-(z) \eta^- \\ iA_1 f_-^-(z) \end{bmatrix} \quad (4-58)$$

其中，我们定义了

$$f_+^-(z) = f_c^-(z) = \frac{\cosh(\lambda_1 z)}{\cosh(\lambda_1 \frac{L}{2})} - \frac{\cosh(\lambda_2 z)}{\cosh(\lambda_2 \frac{L}{2})} \Big|_{E=E_-} \quad (4-59)$$

$$f_-^-(z) = f_s^-(z) = \frac{\sinh(\lambda_1 z)}{\sinh(\lambda_1 \frac{L}{2})} - \frac{\sinh(\lambda_2 z)}{\sinh(\lambda_2 \frac{L}{2})} \Big|_{E=E_-} \quad (4-60)$$

$$\eta^- = \frac{(\lambda_2^2 - \lambda_1^2)}{\lambda_2 \tanh(\lambda_2 \frac{L}{2}) - \lambda_1 \tanh(\lambda_1 \frac{L}{2})} \Big|_{E=E_-} \quad (4-61)$$

$$1/|C_-|^2 = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dz [D_+^2 |f_+^-(z)\eta^-|^2 + A_1^2 |f_-^-(z)|^2] \Big|_{E=E_-} \quad (4-62)$$

因此, 本征能量 $E = E_-$ 的本征波函数的形式为

$$\chi(A_1) = \psi_-^\uparrow = C_- \begin{bmatrix} -D_+ f_+^-(z)\eta^- \\ iA_1 f_-^-(z) \end{bmatrix} \quad (4-63)$$

$$\chi(-A_1) = \psi_-^\downarrow = C_- \begin{bmatrix} -D_+ f_+^-(z)\eta^- \\ -iA_1 f_-^-(z) \end{bmatrix} \quad (4-64)$$

综上所述, 表面态的基矢 $\{\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3, \Phi_4\}$ 具体形式为

$$\Phi_1 = \begin{bmatrix} \varphi(A_1) \\ 0 \end{bmatrix}, \Phi_2 = \begin{bmatrix} \chi(A_1) \\ 0 \end{bmatrix}, \Phi_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ \varphi(-A_1) \end{bmatrix}, \Phi_4 = \begin{bmatrix} 0 \\ \chi(-A_1) \end{bmatrix} \quad (4-65)$$

将哈密顿量投影到基矢 $\{\Phi_1, \Phi_4, \Phi_2, \Phi_3\}$ 所构成的希尔伯特空间, 得到其有效哈密顿量为

$$H_{\text{eff}}^{\text{non}} = E_0 - Dk^2 + \begin{bmatrix} h_+(k) & 0 \\ 0 & h_-(k) \end{bmatrix} \quad (4-66)$$

其中, $E_0 = (E_+ + E_-)/2$, $\Delta = E_+ - E_-$, $b = (\tilde{B}_1 - \tilde{B}_2)/2$, $D = (\tilde{B}_1 + \tilde{B}_2)/2 - D_2$,

$$h_+(k) = \begin{bmatrix} \frac{\Delta}{2} - bk^2 & i\gamma k_- \\ -i\gamma k_+ & -\frac{\Delta}{2} + bk^2 \end{bmatrix}, h_-(k) = \begin{bmatrix} -\frac{\Delta}{2} + bk^2 & i\gamma k_- \\ -i\gamma k_+ & \frac{\Delta}{2} - bk^2 \end{bmatrix} \quad (4-67)$$

$$\tilde{B}_1 = B_2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dz \langle \varphi(A_1) | \sigma_z | \varphi(A_1) \rangle, \quad (4-68)$$

$$\tilde{B}_2 = B_2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dz \langle \chi(A_1) | \sigma_z | \chi(A_1) \rangle \quad (4-69)$$

$$\gamma = -iA_2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dz \langle \varphi(A_1) | \sigma_x | \chi(-A_1) \rangle \quad (4-70)$$

下面我们考虑薄膜的磁化部分, 由于 MnBi_2Te_4 的磁化为反铁磁, 因此需要区分奇数层与偶数层, 因奇数层与偶数层的净磁化不同。我们固定最上层的七原层的磁化方向为垂直于面内向上, 将最上层表面的边界设为 $z = 0$, 最下层表面的边界设为 $z = -L$, 其中 L 为样品的厚度, 那么交换场可以写作 $-\sin^n(\pi z/d)$ 。对于偶数层的 MnBi_2Te_4 薄膜, 其交换场的形式为

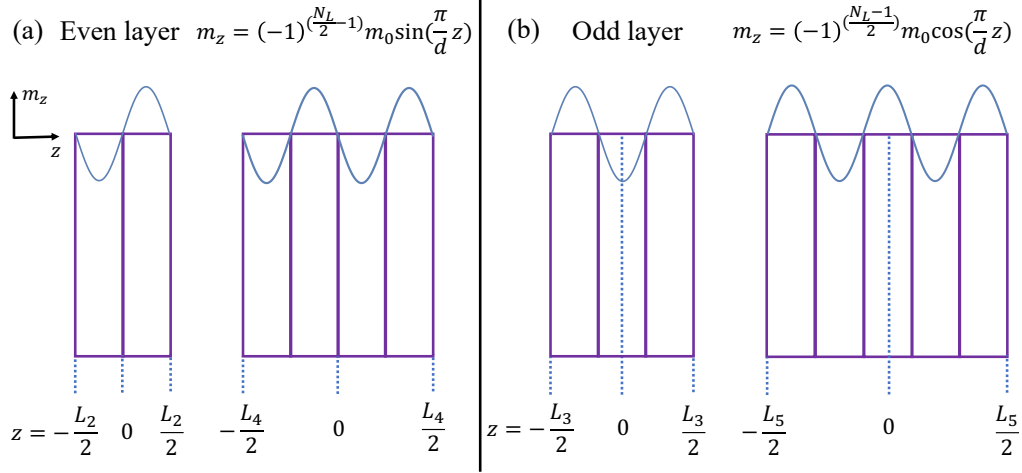


图 4-3 本征反铁磁拓扑绝缘体偶数层 (a) 与奇数层 (b) 的体磁化空间分布。
Fig.4-3 The profile of the bulk magnetization for (a) even septuple layers and (b) odd septuple layers of the intrinsic antiferromagnetic topological insulator, respectively.

$$H_X = (-1)^{\frac{N_L}{2}-1} m_0 \begin{bmatrix} \sin(\frac{\pi}{d} z) \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sin(\frac{\pi}{d} z) \sigma_0 \end{bmatrix} \quad (4-71)$$

如图 4-3(a) 所示。其中 d 为七原层的厚度。将交换场投影到表面态基矢，我们得到偶数层的有效磁化形式为

$$H_{\text{eff}}^{X_{\text{even}}} = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dz [\Phi_1, \Phi_4, \Phi_2, \Phi_3]^\dagger H_X [\Phi_1, \Phi_4, \Phi_2, \Phi_3] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & m_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -m_2^* \\ m_2^* & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -m_2 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4-72)$$

其中

$$m_2 = (-1)^{\frac{N_L}{2}-1} m_0 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dz \langle \varphi(A_1) | \sin^n(\frac{\pi}{d} z) \sigma_0 | \chi(A_1) \rangle \quad (4-73)$$

对于奇数层的 MnBi_2Te_4 薄膜，其交换场的形式为

$$H_X = (-1)^{\frac{N_L-1}{2}} m_0 \begin{bmatrix} \cos(\frac{\pi}{d} z) \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\cos(\frac{\pi}{d} z) \sigma_0 \end{bmatrix} \quad (4-74)$$

如图 4-3(b) 所示。将交换场投影到表面态基矢，得到奇数层的有效磁化形式为

$$H_{\text{eff}}^{X_{\text{odd}}} = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dz [\Phi_1, \Phi_4, \Phi_2, \Phi_3]^\dagger H_X [\Phi_1, \Phi_4, \Phi_2, \Phi_3] = \begin{bmatrix} m_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -m_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -m_1 \end{bmatrix} \quad (4-75)$$

其中

$$m_1 = (-1)^{\frac{N_L-1}{2}} m_0 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dz \langle \varphi(A_1) | \cos^n\left(\frac{\pi}{d}z\right) \sigma_0 | \varphi(A_1) \rangle \quad (4-76)$$

$$m_3 = (-1)^{\frac{N_L-1}{2}} m_0 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dz \langle \chi(A_1) | \cos^n\left(\frac{\pi}{d}z\right) \sigma_0 | \chi(A_1) \rangle \quad (4-77)$$

最终, 我们得到薄膜的表面态有效模型为

$$H_{\text{film}} = E_0 - Dk^2 + \begin{bmatrix} h(k) + m_1 & i\gamma k_- & m_2 & 0 \\ -i\gamma k_+ & -h(k) - m_3 & 0 & -m_2 \\ m_2 & 0 & -h(k) + m_3 & i\gamma k_- \\ 0 & -m_2 & -i\gamma k_+ & h(k) - m_1 \end{bmatrix} \quad (4-78)$$

其中, $E_0 = (E_+ + E_-)/2$, E_+ 和 E_- 为在 Γ 点的本征能量。 $h(k) = \Delta/2 - bk^2$, $k^2 = k_x^2 + k_y^2$ 。 $\Delta = E_+ - E_-$ 为有限尺寸效应造成的能隙。 m_i 为有效磁化, 其中 $i = 1, 2, 3$ 。

对于偶数层 MnBi_2Te_4 薄膜, 其表面态的本征能量为 $E_{\text{even}} = E_0 - Dk^2 \pm \sqrt{(\Delta/2 - bk^2)^2 + \gamma^2 k^2 + m_2^2}$ 。由于体系具有 $P_2\Theta$ 对称性^[129], 其本征能量是二重简并的, 如图 4-4(a) 所示。在 Γ 点, 表面态能隙为 $2\sqrt{(\Delta/2)^2 + m_2^2}$, 能隙会随着薄膜厚度的增大而减小。因为有限尺寸效应造成的能隙 Δ [如图 4-4(e) 所示] 和有效磁化 m_2 [如图 4-4(d) 所示] 均会随薄膜厚度的增大而减小。层数 N_L 较大时, 表面态能隙与有效磁化 m_2 最终都趋于饱和, 如图 4-4(c) 和 3(d) 所示。

对于奇数层 MnBi_2Te_4 薄膜, 其表面态的本征能量为 $E_{\text{odd}} = E_0 - Dk^2 + s(m_1 - m_3)/2 \pm \sqrt{[\Delta/2 - bk^2 + s(m_1 + m_3)/2]^2 + \gamma^2 k^2}$, 其中 $s = \pm 1$ 。其能谱如图 4-4(b) 所示并未出现简并, 因为体系的 Θ 和 $P_2\Theta$ 对称性均已被破坏^[129]。在 Γ 点, 表面态的能隙为 $2\sqrt{[\Delta/2 + (m_1 + m_3)/2]^2}$ 。当 $n = 1$ 和 $n = 5$ 时, 表面态能隙开始会随层数 N_L 的增加而增大, 最终在层数 N_L 较大时趋于饱和。有效磁化 m_3 会随层数 N_L 的增加而增大, 最终趋于饱和, 如图 4-4(c)-(d) 所示。

此外, 由于有效磁化 m_1 和 m_3 的差异, 导致两个导带在 Γ 点的能量差 $\Delta_{E_{1-2}}$ 与两个价带在 Γ 点的能量差 $\Delta_{E_{3-4}}$ 在层数 $N_L < 11$ 的时候并不相同, 如图 4-4(d) 和 4-4(f) 所示。对于单层 MnBi_2Te_4 薄膜以及所有的偶数层薄膜, 陈数为 0。对于 $N_L \geq 3$ 的奇数层薄膜, 陈数为 -1, 如图 4-4(g) 所示。图 4-4(g) 中展示的陈数的振荡行为与本征反铁磁 TI 的自身性质一致^[128,129,138]。需要指出的是, 为了与 *ab initio* 的计算结果^[128,129,138] 保持一致, 层内铁磁序的大小 m_0 取值为 0.26 eV。

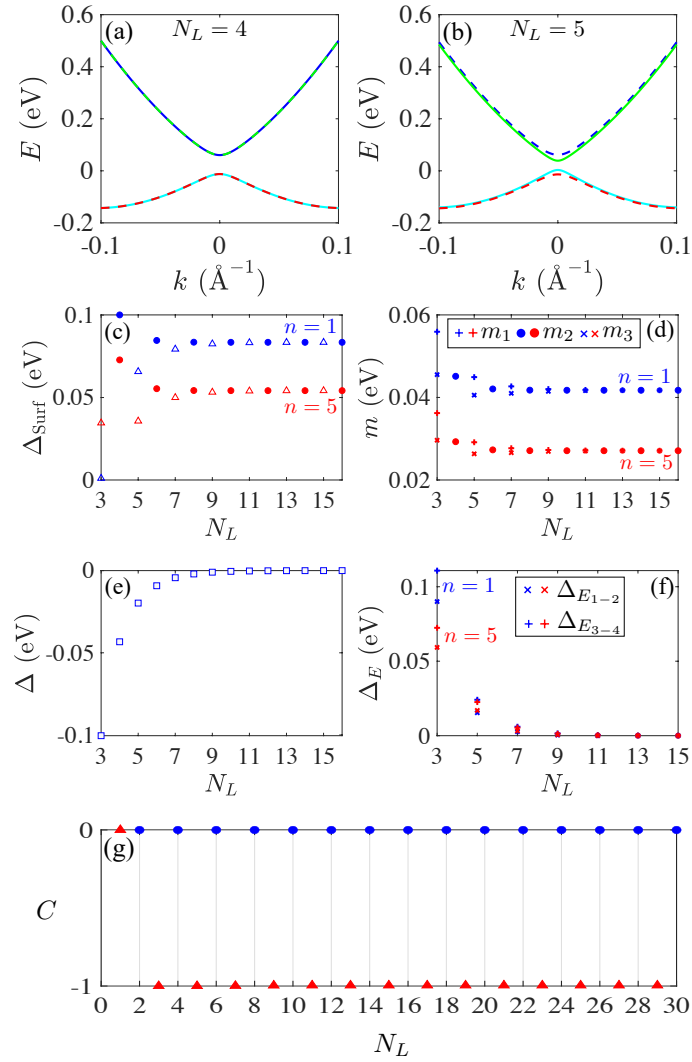


图 4-4 偶数层 (a) $N_L = 4$ 和奇数层 (b) $N_L = 5$ 对应的能带色散图。(c) 对于图 4-1 中不同的磁化分布 m_z ，表面态能隙 Δ_{surf} 与薄膜包含的七原层层数 N_L 的关系。蓝色实圆圈与空心三角表示 n 取 1 的情况，红色实圆圈与空心三角表示 n 取 5 的情况。(d) 对于图 4-1 中不同的磁化分布 m_z ，有效磁化 $m_{1,2,3}$ 随层数 N_L 的变化。蓝色加号，交叉号以及实心圆圈表示 n 取 1 的情况，红色加号，交叉号，实心圆圈表示 n 取 5 的情况。(e) 有限尺寸效应引起的能隙 Δ 随层数 N_L 的变化。(f) 两个导带在 Γ 点的能量差 $\Delta_{E_{1-2}}$ 和两个价带在 Γ 点的能量差 $\Delta_{E_{3-4}}$ 随层数 N_L 的变化。(g) 陈数 C 随层数 N_L 的变化。对于偶数层，陈数为 0。对于奇数层 $N_L \geq 3$ ，陈数是 -1。计算中用到的参数与图 4-2 中一样。

Fig.4-4 The energy dispersion of even and odd septuple layers for (a) $N_L = 4$ and (b) $N_L = 5$. (c) The relation between the surface gap Δ_{surf} and the number of septuple layers N_L for different m_z profiles in Fig. 4-1. The blue solid circles and empty triangles represent $n = 1$ and red solid circles and empty triangles represent $n = 5$, respectively. (d) The effective magnetic moments $m_{1,2,3}$ as functions of N_L for different m_z profiles in Fig. 4-1. The blue plus signs, crosses, and solid circles represent $n = 1$ and red plus signs, crosses, and solid circles represent $n = 5$, respectively. (e) The finite-size gap Δ versus N_L . (f) The energy difference of the upper two bands $\Delta_{E_{1-2}}$ and the energy difference of the lower two bands $\Delta_{E_{3-4}}$ versus N_L . (g) The Chern number C versus N_L . For even N_L , the Chern number is zero. For odd $N_L \geq 3$, the Chern number is -1. The parameters are the same as in Fig. 4-2.

4.4 本章小结

最近新发现的本征 MTI MnBi_2Te_4 具有垂直于表面的反铁磁序，之前的理论预言其表面态会打开很大的能隙。然而最新的 ARPES 测量显示表面态的能隙不总是能观测到。为了解决这一理论与实验结果的分歧，我们从三维体哈密顿量出发，并考虑体磁化的空间分布，解析推导了半无穷结构单个表面的二维表面态有效模型。我们的计算结果显示，ARPES 实验观测到的很小的表面态能隙可能是层内铁磁序变得更小和更局域造成的。此外，我们还计算了表面态的空间分布与穿透深度，计算表明表面态主要局域在样品表面的前两层七原层内。从我们的解析结果也可明确体参数对表面态的影响。同时，我们还推导了 MnBi_2Te_4 薄膜的表面态有效模型，展示了陈数随奇偶层数变化振荡的行为。此工作对于正在探索的本征反铁磁 TI MnBi_xTe_y 族的性质研究有所裨益。

第5章 磁性拓扑绝缘体中量子反常霍尔效应调控

5.1 引言

QAHE 是由无耗散的边界态产生的, 可用于制造无耗散电子元器件, 具有广泛的潜在应用价值。然而磁性杂质掺杂不可避免的会引入不均匀性和无序, 使得可以探测到 QAHE 的温度一般比较低 (小于 2K)^[119,120]。理论上可以通过磁性延展方法^[121,122] 或使用本征磁性绝缘体 (磁性是晶体中固有的, 而非人为掺杂引入)^[123-126] 来提高 QAHE 的工作温度。最近, 有报道预言 MnBi_2Te_4 为本征磁性绝缘体^[127-129], 并且已经被实验验证^[127,130-136]。 MnBi_2Te_4 薄膜中, 在温度为 1.4 K 时, 已经观测到 QAHE^[137], 而 MnBi_2Te_4 的 Neel 温度为 24 K 左右^[127,137], 因此其 QAHE 的工作温度还有提升的空间。而在 $\text{MnBi}_2\text{Te}_4/\text{Bi}_2\text{Te}_4$ 超晶格结构中, 在样品冷却到 7 K 左右时霍尔电导开始接近量子化^[231], 远远高于磁掺杂 TI 所能达到的最高温度 2 K^[119]。当 QAHE 绝缘体与超导体接触时, 会产生马约拉纳费米子 (Majorana fermion)^[232]。马约拉纳费米子可用于超导量子计算, 是实现超导量子计算的一个重要途径。此外, 由于 MnBi_2Te_4 本身的反铁磁结构, 其奇数层薄膜具有 QAHE, 而偶数层薄膜具有轴子绝缘体态 (axion insulator state)。在由零逐渐增大外磁场时, 实验上观测到轴子绝缘体到陈绝缘体的量子相变^[221]。同时, 有报道称在较强磁场下观测到还没有形成 LL 的高陈数 QHE^[143]。更有意思的是, 在强磁场时, 观察到了本征陈绝缘态 (connate Chern insulator state) 与塞曼效应引起的 (Zeeman-effect-induced) 陈绝缘态共存的螺旋陈绝缘相 (helical Chern insulator phase)^[144]。除了外加磁场进行物态调控以外, 也可以通过外加电场来调控其物态。由于偶数层 MnBi_2Te_4 薄膜具有空间反演-时间反演对称性 (PT 对称性), 其总的贝里曲率为零。但是, 当在垂直于表面方向加电场时, 会破坏系统的时间空间反演对称性, 此时能带会破除简并, 产生劈裂, 每个能带的贝里曲率不再为零。当费米面切到能带时, 非零的贝里曲率会产生反常霍尔效应。有报道称, 加电场后, 对于双层 MnBi_2Te_4 , 在远离 Γ 点处, 随外加电场增大会发生量子相变^[233]。本章我们将通过建立模型来证明, 对于奇数层 MnBi_2Te_4 薄膜, 在 Γ 点附近, 随外加电场增大, 会发生量子相变, 可以用来实现对 QAHE 的调控。而对于偶数层薄膜, 在 Γ 点则不会发生量子相变。同时, 外加电场还可以调控贝里曲率分布, 进而调控本征反常霍尔效应。

5.2 电场调控量子反常霍尔效应

5.2.1 模型

电场是通过上下表面加栅压产生的。这里我们假设上下栅压产生的电场为反对称势 (antisymmetric potential) $V_a(z) = -V_a(-z)$ 。将其投影到上一章得到的表面态基矢 $\{\Phi_1, \Phi_4, \Phi_2, \Phi_3\}$, 即

$$H_{\text{eff}}^{\text{SIA}} = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dz [\Phi_1, \Phi_4, \Phi_2, \Phi_3]^\dagger V_a(z) [\Phi_1, \Phi_4, \Phi_2, \Phi_3] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & V & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V \\ V & 0 & 0 & 0 \\ 0 & V & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (5-1)$$

其中, L 为薄膜厚度, 且

$$V = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dz \langle \varphi(A_1) | V_a(z) | \chi(A_1) \rangle \quad (5-2)$$

对于奇数层 MnBi_2Te_4 薄膜, 在样品上下表面加电压后, 由式 (4-66)、式 (4-75) 和式 (5-1) 可得其有效哈密顿量为

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{odd}} &= H_{\text{eff}}^{\text{non}} + H_{\text{eff}}^{\text{Xodd}} + H_{\text{eff}}^{\text{SIA}} \\ &= E_0 - Dk^2 + \begin{bmatrix} h(k) + m_1 & i\gamma k_- & V & 0 \\ -i\gamma k_+ & -h(k) - m_3 & 0 & V \\ V & 0 & -h(k) + m_3 & i\gamma k_- \\ 0 & V & -i\gamma k_+ & h(k) - m_1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (5-3)$$

其中, $h(k) = \frac{\Delta}{2} - Bk^2$, $k^2 = k_x^2 + k_y^2$, $\gamma = v\hbar$, V 表示由于上下表面加电压引起的结构反演不对称性 (structure inversion asymmetry), Δ 和 b 为薄膜厚度的函数。对于比较厚的样品, $\Delta \rightarrow 0$ 且 $b \rightarrow 0$ 。 m_1 和 m_3 为奇数层薄膜的有效磁化。

对于偶数层 MnBi_2Te_4 薄膜, 在样品上下表面加电压后, 由式 (4-66)、式 (4-72) 和式 (5-1) 可得其有效哈密顿量为

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{even}} &= H_{\text{eff}}^{\text{non}} + H_{\text{eff}}^{\text{Xeven}} + H_{\text{eff}}^{\text{SIA}} \\ &= E_0 - Dk^2 + \begin{bmatrix} h(k) & i\gamma k_- & V + m_2 & 0 \\ -i\gamma k_+ & -h(k) & 0 & V - m_2 \\ V + m_2 & 0 & -h(k) & i\gamma k_- \\ 0 & V - m_2 & -i\gamma k_+ & h(k) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (5-4)$$

其中, m_2 为偶数层薄膜的有效磁化。

为了便于讨论,我们忽略能谱的平移 E_0 以及粒子空穴不对称性 (Dk^2 项),并假设有效磁化 $m_1 = m_3$ 。此时,奇数层薄膜的有效哈密顿量为

$$H_{\text{odd}} = \begin{bmatrix} h(k) + m_1 & i\gamma k_- & V & 0 \\ -i\gamma k_+ & -h(k) - m_1 & 0 & V \\ V & 0 & -h(k) + m_1 & i\gamma k_- \\ 0 & V & -i\gamma k_+ & h(k) - m_1 \end{bmatrix} \quad (5-5)$$

其能谱如图 5-1(a) 所示,与偶数层的能谱相比,其能带并没有简并。偶数层薄膜的有效哈密顿量为

$$H_{\text{even}} = \begin{bmatrix} h(k) & i\gamma k_- & V + m_2 & 0 \\ -i\gamma k_+ & -h(k) & 0 & V - m_2 \\ V + m_2 & 0 & -h(k) & i\gamma k_- \\ 0 & V - m_2 & -i\gamma k_+ & h(k) \end{bmatrix} \quad (5-6)$$

其能谱如图 5-1(b) 所示,相比于奇数层,由于偶数层具有时间空间反演对称性,其能带是二重简并的。

5.2.2 量子相变与量子反常霍尔效应调控

对于四带模型,加电场后其相变主要是由中间的导带与价带能带反转导致的,因此我们需要把四带模型简化为二带模型,来讨论其中的相变过程。由于奇数层与偶数层对称性不同,其有效模型有区别,所以我们分别讨论。对于奇数层的有效模型,我们通过么正变换将其块对角化为

$$H_{\text{odia}} = \begin{pmatrix} \Gamma + \Lambda & ik_- \gamma \cos(\theta) & 0 & 0 \\ -ik_+ \gamma \cos(\theta) & -\Gamma - \Lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Lambda - \Gamma & -ik_+ \gamma \cos(\theta) \\ 0 & 0 & ik_- \gamma \cos(\theta) & \Gamma - \Lambda \end{pmatrix} \quad (5-7)$$

其中, $h(k) = \frac{\Lambda}{2} - Bk^2$, $\Gamma = \sqrt{m_1^2 + (\gamma k \sin(\theta))^2}$, $\Lambda = \sqrt{h(k)^2 + V^2}$, $\cos(\theta) = h(k)/\Lambda$, $\sin(\theta) = V/\Lambda$ 。

其非平庸拓扑能带来自于下面的块矩阵,将其改写为 $d \cdot \sigma$ 的形式

$$H_{\text{od}} = d_x \sigma_x + d_y \sigma_y + d_z \sigma_z = (\gamma k_y \cos \theta) \sigma_x + (\gamma k_x \cos \theta) \sigma_y + (\Lambda - \Gamma) \sigma_z \quad (5-8)$$

其中, $d_x = \gamma k_y \cos \theta$, $d_y = \gamma k_x \cos \theta$, $d_z = \Lambda - \Gamma$ 。

对于二带模型,计算霍尔电导的久保公式表达式为

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{2\hbar} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{f_{k,c} - f_{k,v}}{d^3} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \frac{\partial d_\alpha}{\partial k_x} \frac{\partial d_\beta}{\partial k_y} d_\gamma \quad (5-9)$$

其中, d 为 (d_x, d_y, d_z) 的模, $f_{k,c/v} = 1/\exp\{[\varepsilon_{c/v}(k) - \mu]/(k_B T) + 1\}$ 为导带 (c) 和价带 (v) 的费米分布函数, μ 为化学势, k_B 为玻尔兹曼常数, T 表示温度。

将公式 (5-8) 代入到公式 (5-9) 中, 当费米面在导带与价带的能隙中时, 得到其霍尔电导为

$$\sigma_{xy}(V \neq 0) = \frac{e^2}{2h} \left\{ 1 - \operatorname{sgn} \left[\left(\frac{\Delta}{2} \right)^2 + V^2 - m_1^2 \right] \right\} \quad (5-10)$$

其中, $\operatorname{sgn}(x)$ 为符号函数。对于奇数层薄膜来说, 如果 V 增加的足够大, 其霍尔电导会由原来的 e^2/h 变为 0, 即陈数由 1 变为 0。也就是说, 随着 V 的增大, 发生了由拓扑非平庸态到拓扑平庸的态的量子相变。由图 (5-1)(c) 和图 (5-1)(e) 可以看到, 当 V 的大小由 0.005eV 增大到 0.06eV 时, 上面两条导带以及下面两条价带的间的能隙 (两个导带或者两个价带在 Γ 点处的能量差) 会逐渐增大, 最终导致中间的导带与价带发生能带反转。能带反转之后导带与价带的贝里曲率符号发生反转。

对于奇数层薄膜 $N_L = 3$ 与 $N_L = 5$, 霍尔电导随费米能 E_F 与电场诱导势能 V 变化的相图如图 5-3(a) 与 5-3(b) 所示。当费米能 $E_F = 0$ 时, 由于有限尺寸效应 Δ 与有效磁化 m_1 不同, 导致三层与五层薄膜发生量子相变时 V 的大小不同。五层薄膜发生量子相变相比三层薄膜需要的外加电场更大。

对于偶数层薄膜的有效模型, 我们通过么正变换将其对角化为

$$H_{\text{edia}} = \begin{pmatrix} -h(k) \Lambda + V & 0 & 0 \\ \Lambda + V & h(k) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -h(k) V - \Lambda \\ 0 & 0 & V - \Lambda & h(k) \end{pmatrix} \quad (5-11)$$

其中, $h(k) = \frac{\Lambda}{2} - Bk^2$, $\Lambda = \sqrt{\gamma^2 k^2 + m_2^2}$ 。

四带模型中间的导带与价带来自于下面的块对角化矩阵, 将其改写为 $d \cdot \sigma$ 的形式

$$H_{ed} = -h(k)\sigma_z + (V - \Lambda)\sigma_x \quad (5-12)$$

将上式代入公式 (5-9), 可得当费米能在导带与价带的能隙中时, 偶数层的霍尔电导始终为零, 即陈数为零。与奇数层不同的是, 这一结果不依赖于 V 的大小。因此, 偶数层并不会随电场诱导势能 V 的增大而发生量子相变。如图 5-3(c)

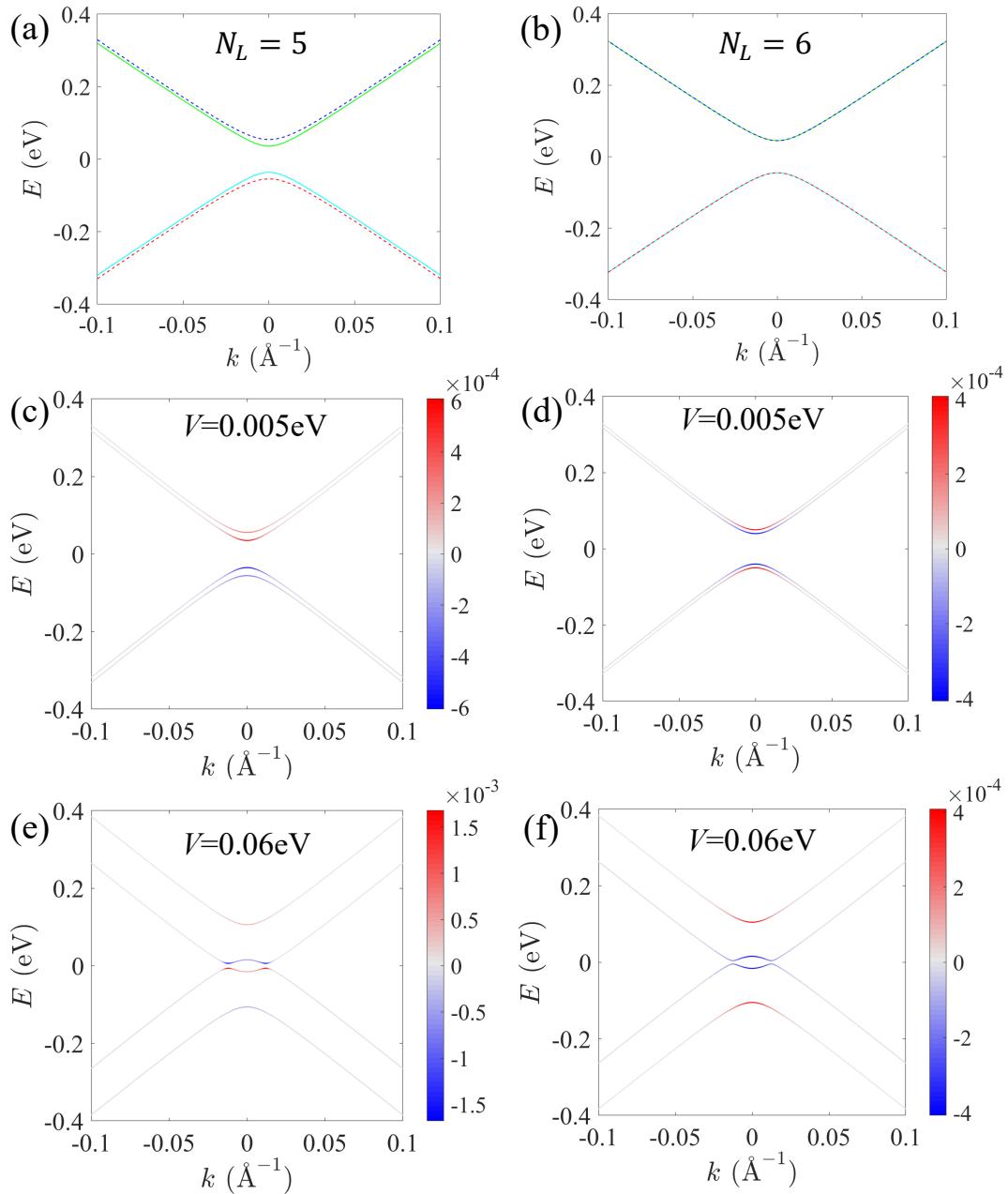


图 5-1 (a) 奇数层 $N_L = 5$ 与 (b) 偶数层 $N_L = 6$ 对应的能带色散图。(c)-(d) 当 $V = 0.005 \text{ eV}$ 时, 奇数层 $N_L = 5$ 与偶数层 $N_L = 6$ 的能带色散 (灰色曲线), 其中红蓝色代表贝里曲率的权重。(e)-(f) 当 $V = 0.06 \text{ eV}$ 时, 奇数层 $N_L = 5$ 与偶数层 $N_L = 6$ 的能带色散 (灰色曲线), 其中红蓝色代表贝里曲率的权重。

Fig.5-1 (a)-(b) The energy dispersion of odd and even septuple layers for (a) $N_L = 5$ and (b) $N_L = 6$, the color red and blue represent the weight of the Berry curvature. (c)-(d) The energy dispersion (gray curve) of odd septuple layer $N_L = 5$ and even septuple layer $N_L = 6$ and the weight of the Berry curvature for $V = 0.005 \text{ eV}$, respectively. (e)-(f) The energy dispersion (gray curve) of odd septuple layer $N_L = 5$ and even septuple layer $N_L = 6$ and the weight of the Berry curvature for $V = 0.06 \text{ eV}$, respectively.

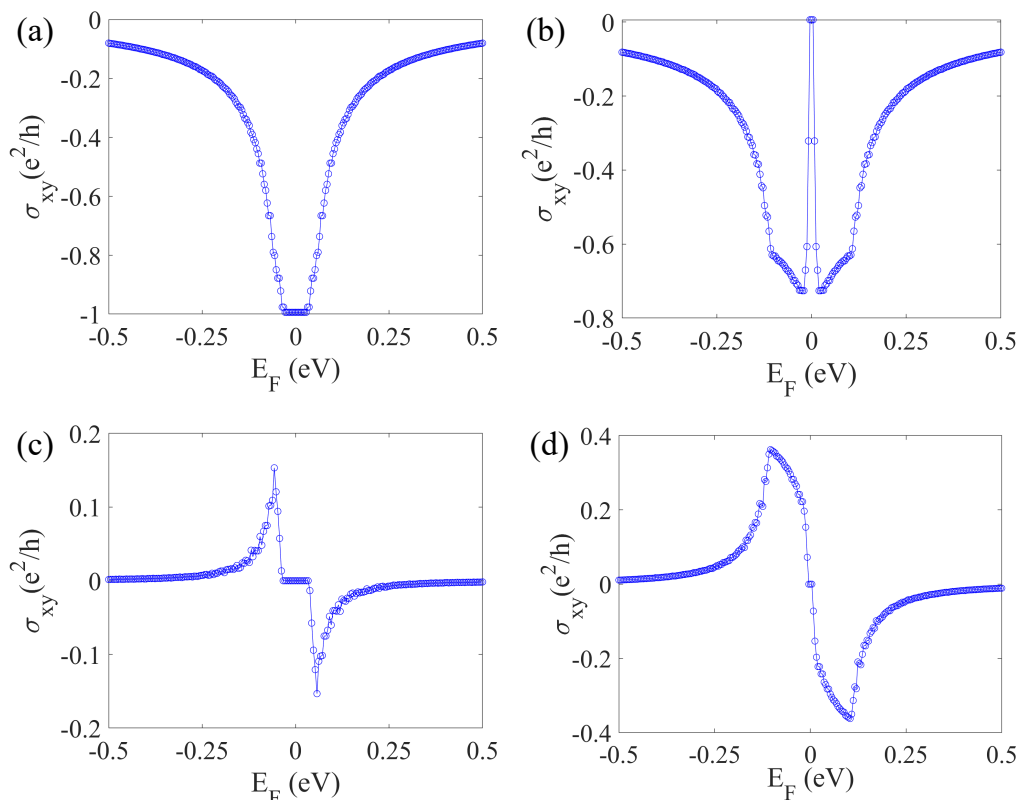


图 5-2 霍尔电导随费米能 E_F 的变化。(a) 奇数层 $N_L = 5$, $V = 0.01\text{eV}$ 。(b) 奇数层 $N_L = 5$, $V = 0.06\text{eV}$ 。(c) 偶数层 $N_L = 6$, $V = 0.01\text{eV}$ 。(d) 偶数层 $N_L = 6$, $V = 0.06\text{eV}$ 。

Fig. 5-2 The Hall conductance as a function of the Fermi energy E_F . (a) For odd septuple layer $N_L = 5$ and $V = 0.01\text{eV}$. (b) For odd septuple layer $N_L = 5$ and $V = 0.06\text{eV}$. (c) For even septuple layer $N_L = 6$ and $V = 0.01\text{eV}$. (d) For even septuple layer $N_L = 6$ and $V = 0.06\text{eV}$.

与 5-3(d) 所示, 当 $E_F = 0$ 时, 偶数层 $N_L = 4$ 与 $N_L = 6$ 的霍尔电导始终为零, 不受电场诱导的势能 V 的影响。对于偶数层, 外加电场破坏了系统的时间空间反演对称性, 破除能带简并, 如图 5-1(b) 所示。其劈裂后的能带贝里曲率大小相同符号相反, 因此, 当费米面在导带与价带的能隙中时依然为零。

5.3 电场调控本征反常霍尔效应

对于反常霍尔效应, 其本征反常霍尔效应由贝里曲率来决定。当有外加电场时, 电场会调控贝里曲率的分布, 进而调控本征反常霍尔效应。

如图 5-2(a) 与图 5-2(b) 所示, 对于奇数层 ($N_L = 5$) 薄膜, 当电场诱导的势能 $V = 0.01\text{eV}$, 且费米能在导带与价带的能隙中时, 其霍尔电导为量子化的平台。当电场诱导的势能 $V = 0.06\text{eV}$, 且费米能在导带与价带的能隙中时, 其霍尔电导平台为 0。可以通过图 5-3(b) 的相图来确定合适的电场诱导势能 V 的值, 来控制霍尔电导平台的值。此效应可以用来实现拓扑场效应管, 其中“开”的状态为霍尔平台为 1 时, 具有无耗散的导电通道, “关”的状态为外加电场将陈

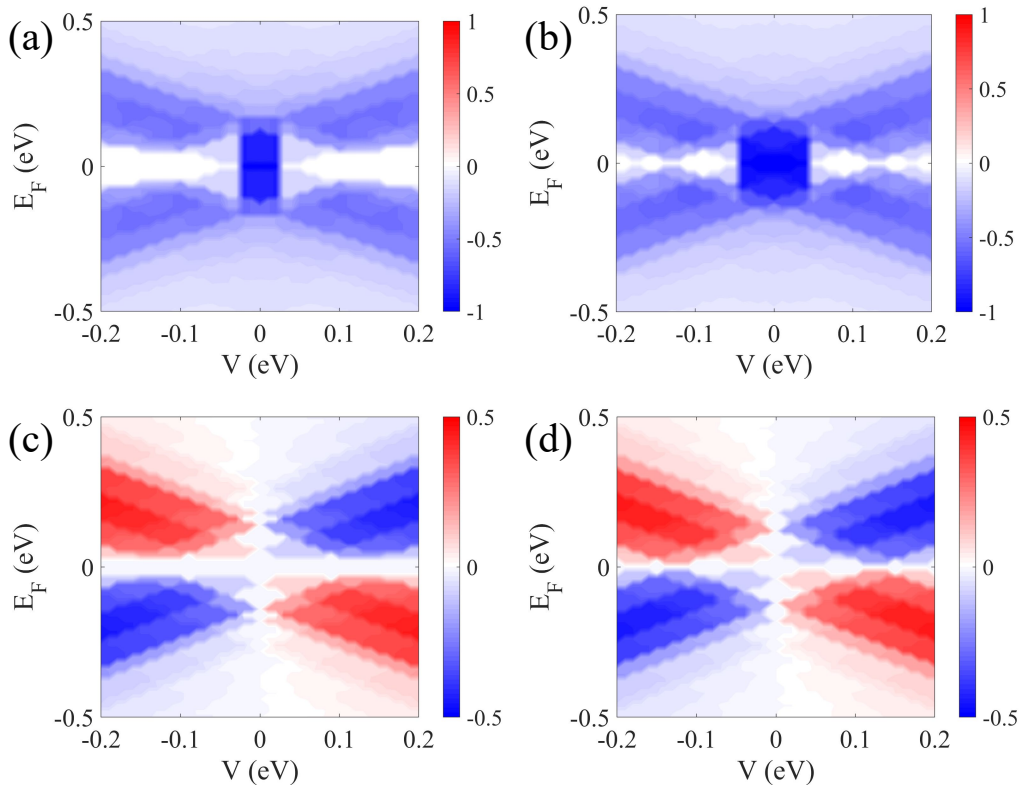


图 5-3 霍尔电导随费米能 E_F 与电场诱导势能 V 变化的相图，其中电导单位为 e^2/h 。(a) 奇数层 $N_L = 3$ 。(b) 奇数层 $N_L = 5$ 。(c) 偶数层 $N_L = 4$ 。(d) 偶数层 $N_L = 6$ 。

Fig.5-3 The phase diagram of the Hall conductance as functions of the Fermi energy E_F and electrical field induced potential V in the units of e^2/h 。(a) For odd septuple layers $N_L = 3$ 。(b) For odd septuple layers $N_L = 5$ 。(c) For even septuple layers $N_L = 4$ 。(d) For even septuple layers $N_L = 6$ 。

绝缘体转变为普通绝缘体时，没有导电通道^[234]。此外，QAHE 随费米能与外加电场的变化可以用来设计反铁磁存储器件^[233]。

如图 5-2(c) 与图 5-2(d) 所示，对于偶数层 ($N_L = 6$) 薄膜，当电场诱导的势能 $V = 0.01\text{eV}$ ，且费米能在导带与价带的能隙中时，其霍尔电导为 0 平台。当电场诱导的势能 $V = 0.06\text{eV}$ 时，霍尔电导 0 平台的宽度会减小。当费米能切过导带时，其霍尔电导值是有限大小的，而不是在 $V = 0$ 时，由于时间空间反演对称性导致霍尔电导一直为零。此外，当费米能切过导带时，随着 V 增大，其有限大小的霍尔电导值的最大值会逐渐增大，如图 5-3(c) 和图 5-3(d) 所示。

5.4 本章小结

最近新发现的本征反铁磁 $\text{TiMnBi}_2\text{Te}_4$ ，是实现高温 QAHE 的候选材料。在外加磁场时，实验上观测到轴子绝缘体到陈绝缘体的量子相变，没有形成 LL 的高陈数 QHE 以及螺旋陈绝缘相等。除了外加磁场进行物态调控以外，还可以通过外加电场来调控其物态。对于奇数层 MnBi_2Te_4 薄膜来说，如果电场诱导的

势能 V 增加的足够大，其霍尔电导会由原来的 e^2/h 变为 0，即陈数由 1 变为 0。也就是说，随着 V 的增大，发生了由拓扑非平庸态到拓扑平庸的态的量子相变。此效应可以用来实现拓扑场效应管，其中“开”的状态为霍尔平台为 1 时，具有无耗散的导电通道，“关”的状态为外加电场将陈绝缘体转变为普通绝缘体时，没有导电通道。此外，由于偶数层 MnBi_2Te_4 薄膜具有 PT 对称性，其总的贝里曲率为零。但是，当在垂直于表面方向加电场时，会破坏系统的 PT 对称性，此时能带会破除简并，产生劈裂，每个能带的贝里曲率不再为零。当费米面切到能带时，外加电场会使偶数层薄膜的反常霍尔电导由 0 变为有限大小。但与奇数层不同的是，当费米能落在能隙中时，其霍尔电导依然为 0，不随 V 的改变而改变，即不会产生拓扑相变。

结 论

本文通过解析推导与数值计算相结合的方式,利用拓扑材料具有的体边对应原理,通过投影的方法得到其拓扑表面态的有效模型。有了有效模型以后,一方面我们可以研究其表面态的拓扑性质,另一方面我们可以通过外加磁场或者电场来研究其拓扑物态的输运性质。研究内容主要包括:三维 TSM 表面态在外磁场下的输运行为,本征反铁磁 TI 表面态的拓扑性质以及本征 MTI 在外加电场下的输运行为。主要研究结果总结如下:

(1) 研究了 TSM 中的三维 QHE。在 WSM 中,费米弧表面态通过外尔点可以产生独特的三维 QHE。由于存在拓扑约束,单个表面的费米弧是开放的,无法产生 QHE。在外尔点通过“虫洞”隧穿,上下两个表面的费米弧可以完成费米闭合回路产生 QHE。费米弧的边界态表现出特有的三维分布,可以看作 ($d-2$) 维边界态的又一例证。当费米面逐渐变化扫到外尔点时,薄膜霍尔电导率由 $1/B$ 依赖关系演变为量子化的平台。这一现象可以通过调节 TSM (例如 TaAs 族, Cd_3As_2 或者 Na_3Bi) 平板的栅极电压来实现。

(2) 研究了本征反铁磁 TI 单个表面的表面态的拓扑性质。从三维体哈密顿量出发,并考虑体磁化的空间分布,解析推导了半无穷结构单个表面的二维表面态有效模型。计算结果显示,ARPES 实验观测到的很小的表面态能隙可能是层内铁磁序变得更小和更局域造成的。此外,我们还计算了表面态的空间分布与穿透深度,计算表明表面态主要局域在样品表面的前两层七原层内。从我们的解析结果也可明确体参数对表面态分布的影响,进而影响表面态的有效磁化,而表面态能隙又与有效磁化成正比,因此表面态能隙会随体参数变化。

(3) 研究了当本征反铁磁 TI 上下两个表面有耦合时的表面态的拓扑性质。推导了其薄膜的表面态有效模型。同时展示了对于奇数层薄膜,其能谱是无简并的,而对于偶数层薄膜,由于存在 PT 对称性,其能谱是二重简并的。薄膜的有限尺寸效应会随着薄膜厚度的增加而减小。此外,还展示了如果层内铁磁序更局域,其有效磁化会随局域性增大而减小。以及当薄膜厚度足够大时,其表面态能隙与有效磁化的大小均趋于饱和,不再随厚度变化。最后展示了陈数随奇偶层数变化振荡的行为。

(4) 研究了本征反铁磁 TI 在外加电场中的输运性质。对于奇数层 MnBi_2Te_4 薄膜来说,如果电场诱导的势能 V 增加的足够大,其霍尔电导会由原来的 e^2/h

变为 0，即陈数由 1 变为 0。此外，由于偶数层 MnBi_2Te_4 薄膜具有 PT 对称性，其总的贝里曲率为零。但是，当在垂直于表面方向加电场时，会破坏系统的 PT 对称性，此时能带会破除简并，产生劈裂，每个能带的贝里曲率不再为零。当费米面切到能带时，外加电场会使偶数层薄膜的反常霍尔电导由 0 变为有限大小。但与奇数层不同的是，当费米能落在能隙中时，其霍尔电导依然为 0，不随 V 的改变而改变，即不会产生拓扑相变。

本文的主要创新点总结如下：

(1) 提出了可以实现三维 QHE 的特殊三维 WSM 体系。一般而言，强磁场下的 QHE 通常是在二维系统观察到。我们展示了在拓扑半金属中费米弧可以产生独特的三维 QHE。与拓扑绝缘体来自于一个表面的表面态 QHE 不同的是，由于存在拓扑约束，单个表面的费米弧是开放的，无法产生 QHE，需要借助外尔点将上下两个表面的费米弧连接起来，可以完成费米闭合回路，从而产生三维 QHE。

(2) 提出了本征反铁磁 TI 单个表面的表面态有效模型，以及定量的探讨了层内体磁化的大小和局域性对表面态能隙的影响。此模型可以用来解释最新的 ARPES 实验结果。此外，计算得到的表面态穿透深度与第一性原理计算结果一致，此结果能够解释扫描隧道显微镜探测表面态的部分结果。从我们的解析结果也可明确体参数对表面态能隙的影响。

(3) 提出了本征反铁磁 TI 薄膜的有效模型。此模型不仅可以用来解释 ARPES 实验结果，还可以用来研究本征反铁磁 TI 表面态的拓扑性质。计算得到的陈数随厚度的变化表明奇数层薄膜为陈绝缘体，偶数层薄膜为轴子绝缘体，结果与第一性原理计算一致，证明了此模型的有效性。

(4) 提出了通过外加电场来调控本征反铁磁 TI 中的 QAHE 理论。对于奇数层薄膜，随着电场诱导的势能 V 的增大，会发生由拓扑非平庸态到拓扑平庸态的量子相变。对于偶数层薄膜，外加电场会破坏 PT 对称性，当费米能切过能带时，其本征反常霍尔电导会由无电场时的 0 变为有限大小。并给出了奇数层薄膜与偶数层薄膜的霍尔电导随外加电场诱导的势能 V 与费米能变化的相图。

拓扑材料的拓扑性质及其在外场下的输运行为是极为丰富的。本文主要研究了 TSM 表面态在外磁场中的输运和本征 MTI 的拓扑性质及其在外加电场的输运行为。除此之外，还有很多方面可以继续开展工作，比如：

(1) 本征 MTI 在外磁场中的输运行为。这是目前本征 MTI 的一个比较重要的方向，相关实验结果很多，但是单独的理论工作还相对较少。主要原因在于外加磁场后，磁场首先需要将反铁磁序变为铁磁序。而铁磁序时，目前还没有

相关薄膜材料的有效模型。因此，我们首先需要通过三维的铁磁哈密顿量得到铁磁序下的薄膜有效模型，然后就可以着手研究其在外磁场下的输运特性。

(2) 本征 MTI 与超导体形成异质结时的超导性质。这也是实验的一个方向。MTI 与超导体接触由于近邻效应会产生马约拉纳费米子，而马约拉纳费米子通过编织技术可以用来做超导量子计算。有些实验组在做相关的实验，因此可以做一些相关的具体理论研究，或许可以推进实验进程，更快的在此体系中观测到马约拉纳费米子。

参考文献

- [1] von Klitzing K, Dorda G, Pepper M. New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance[J]. Phys. Rev. Lett., 1980, 45(6): 494-497.
- [2] von Klitzing K. Essay: Quantum Hall Effect and the New International System of Units[J]. Phys. Rev. Lett., 2019, 122(20): 200001.
- [3] Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P, et al. Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential[J]. Phys. Rev. Lett., 1982, 49(6): 405-408.
- [4] Xiao D, Chang M C, Niu Q. Berry Phase Effects on Electronic Properties[J]. Rev. Mod. Phys., 2010, 82(3): 1959-2007.
- [5] von Klitzing K, Chakraborty T, Kim P, et al. 40 Years of the Quantum Hall Effect[J]. Nat. Rev. Phys., 2020, 2(8): 397-401.
- [6] Haldane F D M. Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly"[J]. Phys. Rev. Lett., 1988, 61(18): 2015-2018.
- [7] Kane C L, Mele E J. Quantum Spin Hall Effect in Graphene[J]. Phys. Rev. Lett., 2005, 95(22): 226801.
- [8] Bernevig B A, Hughes T L, Zhang S C. Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells[J]. Science, 2006, 314(5806): 1757-1761.
- [9] König M, Wiedmann S, Brüne C, et al. Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells[J]. Science, 2007, 318(5851): 766-770.
- [10] König M, Buhmann H, W. Molenkamp L, et al. The Quantum Spin Hall Effect: Theory and Experiment[J]. J. Phys. Soc. Jpn., 2008, 77(3): 031007.
- [11] Chang C Z, Zhang J, Feng X, et al. Experimental Observation of the Quantum Anomalous Hall Effect in a Magnetic Topological Insulator[J]. Science, 2013, 340(6129): 167-170.
- [12] Qian X, Liu J, Fu L, et al. Quantum Spin Hall Effect in Two-Dimensional Transition Metal Dichalcogenides[J]. Science, 2014, 346(6215): 1344-1347.
- [13] Wu S, Fatemi V, Gibson Q D, et al. Observation of the Quantum Spin Hall Effect up to 100 Kelvin in a Monolayer Crystal[J]. Science, 2018, 359(6371): 76-79.

- [14] Li P, Wen Y, He X, et al. Evidence for Topological Type-II Weyl Semimetal WTe₂[J]. Nat. Commun., 2017, 8(1): 2150.
- [15] Wan X, Turner A M, Vishwanath A, et al. Topological Semimetal and Fermi-Arc Surface States in the Electronic Structure of Pyrochlore Iridates[J]. Phys. Rev. B, 2011, 83(20): 205101.
- [16] Yang K Y, Lu Y M, Ran Y. Quantum Hall Effects in a Weyl Semimetal: Possible Application in Pyrochlore Iridates[J]. Phys. Rev. B, 2011, 84(7): 075129.
- [17] Burkov A A, Balents L. Weyl Semimetal in a Topological Insulator Multilayer[J]. Phys. Rev. Lett., 2011, 107(12): 127205.
- [18] Xu G, Weng H, Wang Z, et al. Chern Semimetal and the Quantized Anomalous Hall Effect in HgCr₂Se₄[J]. Phys. Rev. Lett., 2011, 107(18): 186806.
- [19] Delplace P, Li J, Carpentier D. Topological Weyl Semi-Metal from a Lattice Model[J]. EPL, 2012, 97(6): 67004.
- [20] Jiang J H. Tunable Topological Weyl Semimetal from Simple-Cubic Lattices with Staggered Fluxes[J]. Phys. Rev. A, 2012, 85(3): 033640.
- [21] Young S M, Zaheer S, Teo J C Y, et al. Dirac Semimetal in Three Dimensions[J]. Phys. Rev. Lett., 2012, 108(14): 140405.
- [22] Wang Z, Sun Y, Chen X Q, et al. Dirac Semimetal and Topological Phase Transitions in A₃Bi (A=Na, K, Rb)[J]. Phys. Rev. B, 2012, 85(19): 195320.
- [23] Liu J, Vanderbilt D. Weyl Semimetals from Noncentrosymmetric Topological Insulators[J]. Phys. Rev. B, 2014, 90(15): 155316.
- [24] Weng H, Fang C, Fang Z, et al. Weyl Semimetal Phase in Noncentrosymmetric Transition-Metal Monophosphides[J]. Phys. Rev. X, 2015, 5(1): 011029.
- [25] Huang S M, Xu S Y, Belopolski I, et al. A Weyl Fermion Semimetal with Surface Fermi Arcs in the Transition Metal Monopnictide TaAs Class[J]. Nat. Commun., 2015, 6(1): 7373.
- [26] Lv B Q, Weng H M, Fu B B, et al. Experimental Discovery of Weyl Semimetal TaAs[J]. Phys. Rev. X, 2015, 5(3): 031013.
- [27] Xu S Y, Belopolski I, Alidoust N, et al. Discovery of a Weyl Fermion Semimetal and Topological Fermi Arcs[J]. Science, 2015, 349(6248): 613-617.
- [28] Huang X, Zhao L, Long Y, et al. Observation of the Chiral-Anomaly-Induced Negative Magnetoresistance in 3D Weyl Semimetal TaAs[J]. Phys. Rev. X, 2015, 5(3): 031023.

- [29] Yang L X, Liu Z K, Sun Y, et al. Weyl Semimetal Phase in the Non-Centrosymmetric Compound TaAs[J]. Nat. Phys., 2015, 11(9): 728-732.
- [30] Shekhar C, Nayak A K, Sun Y, et al. Extremely Large Magnetoresistance and Ultrahigh Mobility in the Topological Weyl Semimetal Candidate NbP[J]. Nat. Phys., 2015, 11(8): 645-649.
- [31] Zhang C L, Xu S Y, Belopolski I, et al. Signatures of the Adler–Bell–Jackiw Chiral Anomaly in a Weyl Fermion Semimetal[J]. Nat. Commun., 2016, 7(1): 10735.
- [32] Hirschberger M, Kushwaha S, Wang Z, et al. The Chiral Anomaly and Thermopower of Weyl Fermions in the Half-Heusler GdPtBi[J]. Nat. Mater., 2016, 15(11): 1161-1165.
- [33] Felser C, Yan B. Magnetically Induced[J]. Nat. Mater., 2016, 15(11): 1149-1150.
- [34] Shekhar C, Kumar N, Grinenko V, et al. Anomalous Hall Effect in Weyl Semimetal Half-Heusler Compounds RPtBi (R = Gd and Nd)[J]. PNAS, 2018, 115(37): 9140-9144.
- [35] Shen S Q. Topological Insulators: Dirac Equation in Condensed Matter[M]. Second. [S.l.]: Springer Singapore, 2017.
- [36] Nielsen H B, Ninomiya M. The Adler-Bell-Jackiw Anomaly and Weyl Fermions in a Crystal[J]. Physics Letters B, 1983, 130(6): 389-396.
- [37] Okugawa R, Murakami S. Dispersion of Fermi Arcs in Weyl Semimetals and Their Evolutions to Dirac Cones[J]. Phys. Rev. B, 2014, 89(23): 235315.
- [38] Lu H Z, Zhang S B, Shen S Q. High-Field Magnetoconductivity of Topological Semimetals with Short-Range Potential[J]. Phys. Rev. B, 2015, 92(4): 045203.
- [39] Armitage N P, Mele E J, Vishwanath A. Weyl and Dirac Semimetals in Three-Dimensional Solids[J]. Rev. Mod. Phys., 2018, 90(1): 015001.
- [40] Nie S, Sun Y, Prinz F B, et al. Magnetic Semimetals and Quantized Anomalous Hall Effect in EuB6[J]. Phys. Rev. Lett., 2020, 124(7): 76403.
- [41] Neupane M, Xu S Y, Sankar R, et al. Observation of a Three-Dimensional Topological Dirac Semimetal Phase in High-Mobility Cd3As2[J]. Nat. Commun., 2014, 5(1): 3786.
- [42] Hasan M Z, Kane C L. Colloquium: Topological Insulators[J]. Rev. Mod. Phys., 2010, 82(4): 3045-3067.
- [43] Zhang S B, Lu H Z, Shen S Q. Linear Magnetoconductivity in an Intrinsic Topological Weyl Semimetal[J]. New J. Phys., 2016, 18(5): 053039.

- [44] Lu H Z, Shan W Y, Yao W, et al. Massive Dirac Fermions and Spin Physics in an Ultrathin Film of Topological Insulator[J]. Phys. Rev. B, 2010, 81(11): 115407.
- [45] Singh B, Sharma A, Lin H, et al. Topological Electronic Structure and Weyl Semimetal in the TlBiSe₂ Class of Semiconductors[J]. Phys. Rev. B, 2012, 86(11): 115208.
- [46] Wang Z, Weng H, Wu Q, et al. Three-Dimensional Dirac Semimetal and Quantum Transport in Cd₃As₂[J]. Phys. Rev. B, 2013, 88(12): 125427.
- [47] Bulmash D, Liu C X, Qi X L. Prediction of a Weyl Semimetal in Hg_{1-x}-yCd_xMnyTe[J]. Phys. Rev. B, 2014, 89(8): 081106.
- [48] Liu Z K, Zhou B, Zhang Y, et al. Discovery of a Three-Dimensional Topological Dirac Semimetal, Na₃Bi[J]. Science, 2014, 343(6173): 864-867.
- [49] Xu S Y, Liu C, Kushwaha S K, et al. Observation of Fermi Arc Surface States in a Topological Metal[J]. Science, 2015, 347(6219): 294-298.
- [50] Li H, He H, Lu H Z, et al. Negative Magnetoresistance in Dirac Semimetal Cd₃As₂[J]. Nat. Commun., 2016, 7(1): 10301.
- [51] Liu Z K, Jiang J, Zhou B, et al. A Stable Three-Dimensional Topological Dirac Semimetal Cd₃As₂[J]. Nat. Mater., 2014, 13(7): 677-681.
- [52] Borisenko S, Gibson Q, Evtushinsky D, et al. Experimental Realization of a Three-Dimensional Dirac Semimetal[J]. Phys. Rev. Lett., 2014, 113(2): 027603.
- [53] Yi H, Wang Z, Chen C, et al. Evidence of Topological Surface State in Three-Dimensional Dirac Semimetal Cd₃As₂[J]. Sci. Rep., 2014, 4(1): 6106.
- [54] Zhang C, Zhang E, Wang W, et al. Room-Temperature Chiral Charge Pumping in Dirac Semimetals[J]. Nat. Commun., 2017, 8(1): 13741.
- [55] Li C Z, Wang L X, Liu H, et al. Giant Negative Magnetoresistance Induced by the Chiral Anomaly in Individual Cd₃As₂ Nanowires[J]. Nat. Commun., 2015, 6(1): 10137.
- [56] Jeon S, Zhou B B, Gyenis A, et al. Landau Quantization and Quasiparticle Interference in the Three-Dimensional Dirac Semimetal Cd₃As₂[J]. Nat. Mater., 2014, 13(9): 851-856.
- [57] Burkov A A, Hook M D, Balents L. Topological Nodal Semimetals[J]. Phys. Rev. B, 2011, 84(23): 235126.

- [58] Chiu C K, Schnyder A P. Classification of Reflection-Symmetry-Protected Topological Semimetals and Nodal Superconductors[J]. Phys. Rev. B, 2014, 90(20): 205136.
- [59] Fang C, Weng H, Dai X, et al. Topological Nodal Line Semimetals[J]. Chinese Phys. B, 2016, 25(11): 117106.
- [60] Yang B J, Bojesen T A, Morimoto T, et al. Topological Semimetals Protected by Off-Centered Symmetries in Nonsymmorphic Crystals[J]. Phys. Rev. B, 2017, 95(7): 075135.
- [61] Chen Y, Xie Y, Yang S A, et al. Nanostructured Carbon Allotropes with Weyl-like Loops and Points[J]. Nano Lett., 2015, 15(10): 6974-6978.
- [62] Bzdušek T, Wu Q, Rüegg A, et al. Nodal-Chain Metals[J]. Nature, 2016, 538(7623): 75-78.
- [63] Feng X, Yue C, Song Z, et al. Topological Dirac Nodal-Net Fermions in AlB₂-Type TiB₂ and ZrB₂[J]. Phys. Rev. Materials, 2018, 2(1): 014202.
- [64] Yi C J, Lv B Q, Wu Q S, et al. Observation of a Nodal Chain with Dirac Surface States in TiB₂[J]. Phys. Rev. B, 2018, 97(20): 201107.
- [65] Zhu Z, Chang T R, Huang C Y, et al. Quasiparticle Interference and Nonsymmorphic Effect on a Floating Band Surface State of ZrSiSe[J]. Nat. Commun., 2018, 9(1): 4153.
- [66] Chen W, Lado J L. Interaction-Driven Surface Chern Insulator in Nodal Line Semimetals[J]. Phys. Rev. Lett., 2019, 122(1): 016803.
- [67] Weng H, Liang Y, Xu Q, et al. Topological Node-Line Semimetal in Three-Dimensional Graphene Networks[J]. Phys. Rev. B, 2015, 92(4): 045108.
- [68] Yu R, Weng H, Fang Z, et al. Topological Node-Line Semimetal and Dirac Semimetal State in Antiperovskite Cu₃PdN[J]. Phys. Rev. Lett., 2015, 115(3): 036807.
- [69] Kim Y, Wieder B J, Kane C L, et al. Dirac Line Nodes in Inversion-Symmetric Crystals[J]. Phys. Rev. Lett., 2015, 115(3): 036806.
- [70] Fang C, Chen Y, Kee H Y, et al. Topological Nodal Line Semimetals with and without Spin-Orbital Coupling[J]. Phys. Rev. B, 2015, 92(8): 081201.
- [71] Chen Y, Lu Y M, Kee H Y. Topological Crystalline Metal in Orthorhombic Perovskite Iridates[J]. Nat. Commun., 2015, 6(1): 6593.

- [72] Bian G, Chang T R, Zheng H, et al. Drumhead Surface States and Topological Nodal-Line Fermions in TiTaSe_2 [J]. *Phys. Rev. B*, 2016, 93(12): 121113.
- [73] Xie L S, Schoop L M, Seibel E M, et al. A New Form of CaP_2 with a Ring of Dirac Nodes[J]. *APL Materials*, 2015, 3(8): 083602.
- [74] Chan Y H, Chiu C K, Chou M Y, et al. CaP_2 and Other Topological Semimetals with Line Nodes and Drumhead Surface States[J]. *Phys. Rev. B*, 2016, 93(20): 205132.
- [75] Du Y, Tang F, Wang D, et al. CaTe : A New Topological Node-Line and Dirac Semimetal[J]. *npj Quantum Materials*, 2017, 2(1): 1-4.
- [76] Zhao J, Yu R, Weng H, et al. Topological Node-Line Semimetal in Compressed Black Phosphorus[J]. *Phys. Rev. B*, 2016, 94(19): 195104.
- [77] Yamakage A, Yamakawa Y, Tanaka Y, et al. Line-Node Dirac Semimetal and Topological Insulating Phase in Noncentrosymmetric Pnictides CaAgX ($X = \text{P, As}$)[J]. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 2015, 85(1): 013708.
- [78] Xu Q, Yu R, Fang Z, et al. Topological Nodal Line Semimetals in the CaP_3 Family of Materials[J]. *Phys. Rev. B*, 2017, 95(4): 045136.
- [79] Jin Y J, Wang R, Zhao J Z, et al. The Prediction of a Family Group of Two-Dimensional Node-Line Semimetals[J]. *Nanoscale*, 2017, 9(35): 13112-13118.
- [80] Zhu Z, Li M, Li J. Topological Semimetal to Insulator Quantum Phase Transition in the Zintl Compounds Ba_2X ($X = \text{Si, Ge}$)[J]. *Phys. Rev. B*, 2016, 94(15): 155121.
- [81] Liang Q F, Zhou J, Yu R, et al. Node-Surface and Node-Line Fermions from Nonsymmorphic Lattice Symmetries[J]. *Phys. Rev. B*, 2016, 93(8): 085427.
- [82] Zeng M, Fang C, Chang G, et al. Topological Semimetals and Topological Insulators in Rare Earth Monopnictides[J]. *arXiv:1504.03492*, 2015.
- [83] Hirayama M, Okugawa R, Miyake T, et al. Topological Dirac Nodal Lines and Surface Charges in Fcc Alkaline Earth Metals[J]. *Nat. Commun.*, 2017, 8(1): 14022.
- [84] Huang H, Liu J, Vanderbilt D, et al. Topological Nodal-Line Semimetals in Alkaline-Earth Stannides, Germanides, and Silicides[J]. *Phys. Rev. B*, 2016, 93(20): 201114.
- [85] Li R, Ma H, Cheng X, et al. Dirac Node Lines in Pure Alkali Earth Metals[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2016, 117(9): 096401.
- [86] Wang J T, Weng H, Nie S, et al. Body-Centered Orthorhombic C16 : A Novel Topological Node-Line Semimetal[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2016, 116(19): 195501.

- [87] Sun Y, Zhang Y, Liu C X, et al. Dirac Nodal Lines and Induced Spin Hall Effect in Metallic Rutile Oxides[J]. Phys. Rev. B, 2017, 95(23): 235104.
- [88] Schoop L M, Ali M N, Straßer C, et al. Dirac Cone Protected by Non-Symmorphic Symmetry and Three-Dimensional Dirac Line Node in ZrSiS[J]. Nat. Commun., 2016, 7(1): 11696.
- [89] Neupane M, Belopolski I, Hosen M M, et al. Observation of Topological Nodal Fermion Semimetal Phase in ZrSiS[J]. Phys. Rev. B, 2016, 93(20): 201104.
- [90] Chen C, Xu X, Jiang J, et al. Dirac Line Nodes and Effect of Spin-Orbit Coupling in the Nonsymmorphic Critical Semimetals MSiS (M = Hf, Zr)[J]. Phys. Rev. B, 2017, 95(12): 125126.
- [91] Bian G, Chang T R, Sankar R, et al. Topological Nodal-Line Fermions in Spin-Orbit Metal PbTaSe₂[J]. Nat. Commun., 2016, 7(1): 10556.
- [92] Chang T R, Chen P J, Bian G, et al. Topological Dirac Surface States and Superconducting Pairing Correlations in PbTaSe₂[J]. Phys. Rev. B, 2016, 93(24): 245130.
- [93] Ekahana S A, Wu S C, Jiang J, et al. Observation of Nodal Line in Non-Symmorphic Topological Semimetal InBi[J]. New J. Phys., 2017, 19(6): 065007.
- [94] Wu Y, Wang L L, Mun E, et al. Dirac Node Arcs in PtSn₄[J]. Nat. Phys., 2016, 12(7): 667-671.
- [95] Alexandradinata A, Glazman L. Semiclassical Theory of Landau Levels and Magnetic Breakdown in Topological Metals[J]. Phys. Rev. B, 2018, 97(14): 144422.
- [96] Zhang H, Liu C X, Qi X L, et al. Topological Insulators in Bi₂Se₃, Bi₂Te₃ and Sb₂Te₃ with a Single Dirac Cone on the Surface[J]. Nat. Phys., 2009, 5(6): 438-442.
- [97] Nechaev I A, Krasovskii E E. Relativistic $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Hamiltonians for Centrosymmetric Topological Insulators from Ab Initio Wave Functions[J]. Phys. Rev. B, 2016, 94(20): 201410.
- [98] Shan W Y, Lu H Z, Shen S Q. Effective Continuous Model for Surface States and Thin Films of Three-Dimensional Topological Insulators[J]. New J. Phys., 2010, 12(4): 043048.
- [99] Zhang Y, He K, Chang C Z, et al. Crossover of the Three-Dimensional Topological Insulator Bi₂Se₃ to the Two-Dimensional Limit[J]. Nat. Phys., 2010, 6(8): 584-588.
- [100] Dai X, Du Z Z, Lu H Z. Negative Magnetoresistance without Chiral Anomaly in Topological Insulators[J]. Phys. Rev. Lett., 2017, 119(16): 166601.

- [101] Wang J, Li H, Chang C, et al. Anomalous Anisotropic Magnetoresistance in Topological Insulator Films[J]. Nano Res., 2012, 5(10): 739-746.
- [102] He H T, Liu H C, Li B K, et al. Disorder-Induced Linear Magnetoresistance in (221) Topological Insulator Bi₂Se₃ Films[J]. Appl. Phys. Lett., 2013, 103(3): 031606.
- [103] Wiedmann S, Jost A, Fauqué B, et al. Anisotropic and Strong Negative Magnetoresistance in the Three-Dimensional Topological Insulator Bi₂Se₃[J]. Phys. Rev. B, 2016, 94(8): 081302.
- [104] Wang L X, Yan Y, Zhang L, et al. Zeeman Effect on Surface Electron Transport in Topological Insulator Bi₂Se₃ Nanoribbons[J]. Nanoscale, 2015, 7(40): 16687-16694.
- [105] Shoenberg D. Magnetic Oscillations in Metals[M]. [S.l.]: Cambridge University Press, 2009.
- [106] Mikitik G P, Sharlai Y V. Manifestation of Berry's Phase in Metal Physics[J]. Phys. Rev. Lett., 1999, 82(10): 2147-2150.
- [107] Coleridge P T, Templeton I M. High Precision de Haas-van Alphen Measurements in the Noble Metals[J]. J. Phys. F: Met. Phys., 1972, 2(4): 643-656.
- [108] Luk'yanchuk I A, Kopelevich Y. Phase Analysis of Quantum Oscillations in Graphite[J]. Phys. Rev. Lett., 2004, 93(16): 166402.
- [109] Zhang Y, Tan Y W, Stormer H L, et al. Experimental Observation of the Quantum Hall Effect and Berry's Phase in Graphene[J]. Nature, 2005, 438(7065): 201-204.
- [110] Murakawa H, Bahramy M S, Tokunaga M, et al. Detection of Berry's Phase in a Bulk Rashba Semiconductor[J]. Science, 2013, 342(6165): 1490-1493.
- [111] Phillips M, Aji V. Tunable Line Node Semimetals[J]. Phys. Rev. B, 2014, 90(11): 115111.
- [112] Culcer D. Transport in Three-Dimensional Topological Insulators: Theory and Experiment[J]. Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 2012, 44(5): 860-884.
- [113] Sundaram G, Niu Q. Wave-Packet Dynamics in Slowly Perturbed Crystals: Gradient Corrections and Berry-Phase Effects[J]. Phys. Rev. B, 1999, 59(23): 14915-14925.
- [114] Son D T, Spivak B Z. Chiral Anomaly and Classical Negative Magnetoresistance of Weyl Metals[J]. Phys. Rev. B, 2013, 88(10): 104412.
- [115] Lu H Z, Shen S Q. Quantum Transport in Topological Semimetals under Magnetic Fields[J]. Front. Phys., 2017, 12(3): 127201.

- [116] Yip S K. Kinetic Equation and Magneto-Conductance for Weyl Metal in the Clean Limit[J]. arXiv:1508.01010, 2015.
- [117] Burkov A A. Chiral Anomaly and Diffusive Magnetotransport in Weyl Metals[J]. Phys. Rev. Lett., 2014, 113(24): 247203.
- [118] Yu R, Zhang W, Zhang H J, et al. Quantized Anomalous Hall Effect in Magnetic Topological Insulators[J]. Science, 2010, 329(5987): 61-64.
- [119] Mogi M, Yoshimi R, Tsukazaki A, et al. Magnetic Modulation Doping in Topological Insulators toward Higher-Temperature Quantum Anomalous Hall Effect[J]. Appl. Phys. Lett., 2015, 107(18): 182401.
- [120] Tokura Y, Yasuda K, Tsukazaki A. Magnetic Topological Insulators[J]. Nat. Rev. Phys., 2019, 1(2): 126-143.
- [121] Otrokov M M, Menshchikova T V, Rusinov I P, et al. Magnetic Extension as an Efficient Method for Realizing the Quantum Anomalous Hall State in Topological Insulators[J]. JETP Lett., 2017, 105(5): 297-302.
- [122] Otrokov M M, Menshchikova T V, Vergniory M G, et al. Highly-Ordered Wide Bandgap Materials for Quantized Anomalous Hall and Magnetoelectric Effects[J]. 2D Mater., 2017, 4(2): 025082.
- [123] Mong R S K, Essin A M, Moore J E. Antiferromagnetic Topological Insulators[J]. Phys. Rev. B, 2010, 81(24): 245209.
- [124] Chowdhury S, Garrity K F, Tavazza F. Prediction of Weyl Semimetal and Antiferromagnetic Topological Insulator Phases in Bi₂MnSe₄[J]. npj Computational Materials, 2019, 5(1): 1-7.
- [125] Mong R S K, Moore J E. Magnetic and Topological Order United in a Crystal[J]. Nature, 2019, 576(7787): 390-392.
- [126] Rienks E D L, Wimmer S, Sánchez Barriga J, et al. Large Magnetic Gap at the Dirac Point in Bi₂Te₃/MnBi₂Te₄ Heterostructures[J]. Nature, 2019, 576(7787): 423-428.
- [127] Otrokov M M, Klimovskikh I I, Bentmann H, et al. Prediction and Observation of an Antiferromagnetic Topological Insulator[J]. Nature, 2019, 576(7787): 416-422.
- [128] Zhang D, Shi M, Zhu T, et al. Topological Axion States in the Magnetic Insulator MnBi₂Te₄ with the Quantized Magnetoelectric Effect[J]. Phys. Rev. Lett., 2019, 122(20): 206401.

- [129] Li J, Li Y, Du S, et al. Intrinsic Magnetic Topological Insulators in van Der Waals Layered MnBi₂Te₄-Family Materials[J]. *Sci. Adv.*, 2019, 5(6): eaaw5685.
- [130] Gong Y, Guo J, Li J, et al. Experimental Realization of an Intrinsic Magnetic Topological Insulator[J]. *Chinese Phys. Lett.*, 2019, 36(7): 076801.
- [131] Chen B, Fei F, Zhang D, et al. Intrinsic Magnetic Topological Insulator Phases in the Sb Doped MnBi₂Te₄ Bulks and Thin Flakes[J]. *Nat. Commun.*, 2019, 10(1): 4469.
- [132] Vidal R C, Bentmann H, Peixoto T R F, et al. Surface States and Rashba-Type Spin Polarization in Antiferromagnetic MnBi₂Te₄(0001)[J]. *Phys. Rev. B*, 2019, 100(12): 121104.
- [133] Li H, Gao S Y, Duan S F, et al. Dirac Surface States in Intrinsic Magnetic Topological Insulators EuSn₂As₂ and MnBi₂nTe_{3n+1}[J]. *Phys. Rev. X*, 2019, 9(4): 041039.
- [134] Hao Y J, Liu P, Feng Y, et al. Gapless Surface Dirac Cone in Antiferromagnetic Topological Insulator MnBi₂Te₄[J]. *Phys. Rev. X*, 2019, 9(4): 041038.
- [135] Chen Y J, Xu L X, Li J H, et al. Topological Electronic Structure and Its Temperature Evolution in Antiferromagnetic Topological Insulator MnBi₂Te₄[J]. *Phys. Rev. X*, 2019, 9(4): 041040.
- [136] Swatek P, Wu Y, Wang L L, et al. Gapless Dirac Surface States in the Antiferromagnetic Topological Insulator MnBi₂Te₄[J]. *Phys. Rev. B*, 2020, 101(16): 161109.
- [137] Deng Y, Yu Y, Shi M Z, et al. Quantum Anomalous Hall Effect in Intrinsic Magnetic Topological Insulator MnBi₂Te₄[J]. *Science*, 2020, 367(6480): 895-900.
- [138] Otrokov M M, Rusinov I P, Blanco Rey M, et al. Unique Thickness-Dependent Properties of the van Der Waals Interlayer Antiferromagnet MnBi₂Te₄ Films[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2019, 122(10): 107202.
- [139] Li J, Wang C, Zhang Z, et al. Magnetically Controllable Topological Quantum Phase Transitions in the Antiferromagnetic Topological Insulator MnBi₂Te₄[J]. *Phys. Rev. B*, 2019, 100(12): 121103.
- [140] Wu J, Liu F, Sasase M, et al. Natural van Der Waals Heterostructural Single Crystals with Both Magnetic and Topological Properties[J]. *Sci. Adv.*, 2019, 5(11): eaax9989.

- [141] Zeugner A, Nietschke F, Wolter A U B, et al. Chemical Aspects of the Candidate Antiferromagnetic Topological Insulator MnBi₂Te₄[J]. Chem. Mater., 2019, 31(8): 2795-2806.
- [142] Lee S H, Zhu Y, Wang Y, et al. Spin Scattering and Noncollinear Spin Structure-Induced Intrinsic Anomalous Hall Effect in Antiferromagnetic Topological Insulator MnBi₂Te₄[J]. Phys. Rev. Research, 2019, 1(1): 012011.
- [143] Ge J, Liu Y, Li J, et al. High-Chern-Number and High-Temperature Quantum Hall Effect without Landau Levels[J]. Natl. Sci. Rev., 2020, 7(8): 1280-1287.
- [144] Liu C, Wang Y, Yang M, et al. Helical Chern Insulator Phase with Broken Time-Reversal Symmetry in MnBi₂Te₄[J]. arXiv, 2020.
- [145] Liu E, Sun Y, Kumar N, et al. Giant Anomalous Hall Effect in a Ferromagnetic Kagome-Lattice Semimetal[J]. Nat. Phys., 2018, 14(11): 1125-1131.
- [146] Li P, Koo J, Ning W, et al. Giant Room Temperature Anomalous Hall Effect and Tunable Topology in a Ferromagnetic Topological Semimetal Co₂MnAl[J]. Nat. Commun., 2020, 11(1): 3476.
- [147] Morali N, Batabyal R, Nag P K, et al. Fermi-Arc Diversity on Surface Terminations of the Magnetic Weyl Semimetal Co₃Sn₂S₂[J]. Science, 2019, 365(6459): 1286-1291.
- [148] Wang Q, Xu Y, Lou R, et al. Large Intrinsic Anomalous Hall Effect in Half-Metallic Ferromagnet Co₃Sn₂S₂ with Magnetic Weyl Fermions[J]. Nat. Commun., 2018, 9(1): 3681.
- [149] Guin S N, Vir P, Zhang Y, et al. Zero-Field Nernst Effect in a Ferromagnetic Kagome-Lattice Weyl-Semimetal Co₃Sn₂S₂[J]. Adv. Mater., 2019, 31(25): 1806622.
- [150] Xu Y, Zhao J, Yi C, et al. Electronic Correlations and Flattened Band in Magnetic Weyl Semimetal Candidate Co₃Sn₂S₂[J]. Nat. Commun., 2020, 11(1): 3985.
- [151] Tang F, Ren Y, Wang P, et al. Three-Dimensional Quantum Hall Effect and Metal-Insulator Transition in ZrTe₅[J]. Nature, 2019, 569(7757): 537-541.
- [152] Qin F, Li S, Du Z Z, et al. Theory for the Charge-Density-Wave Mechanism of 3D Quantum Hall Effect[J]. Phys. Rev. Lett., 2020, 125(20): 206601.
- [153] Cao Y, Fatemi V, Fang S, et al. Unconventional Superconductivity in Magic-Angle Graphene Superlattices[J]. Nature, 2018, 556(7699): 43-50.

- [154] Cao Y, Fatemi V, Demir A, et al. Correlated Insulator Behaviour at Half-Filling in Magic-Angle Graphene Superlattices[J]. *Nature*, 2018, 556(7699): 80-84.
- [155] Yankowitz M, Chen S, Polshyn H, et al. Tuning Superconductivity in Twisted Bilayer Graphene[J]. *Science*, 2019, 363(6431): 1059-1064.
- [156] Lian B, Wang Z, Bernevig B A. Twisted Bilayer Graphene: A Phonon-Driven Superconductor[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2019, 122(25): 257002.
- [157] Hao Z, Zimmerman A M, Ledwith P, et al. Electric Field Tunable Superconductivity in Alternating Twist Magic-Angle Trilayer Graphene[J]. *Science*, 2021.
- [158] Sharpe A L, Fox E J, Barnard A W, et al. Emergent Ferromagnetism near Three-Quarters Filling in Twisted Bilayer Graphene[J]. *Science*, 2019, 365(6453): 605-608.
- [159] Chen G, Sharpe A L, Fox E J, et al. Tunable Correlated Chern Insulator and Ferromagnetism in a Moiré Superlattice[J]. *Nature*, 2020, 579(7797): 56-61.
- [160] Bultinck N, Chatterjee S, Zaletel M P. Mechanism for Anomalous Hall Ferromagnetism in Twisted Bilayer Graphene[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2020, 124(16): 166601.
- [161] Saito Y, Ge J, Rademaker L, et al. Hofstadter Subband Ferromagnetism and Symmetry-Broken Chern Insulators in Twisted Bilayer Graphene[J]. *Nat. Phys.*, 2021: 1-4.
- [162] Xu Y, Liu S, Rhodes D A, et al. Correlated Insulating States at Fractional Fillings of Moiré Superlattices[J]. *Nature*, 2020, 587(7833): 214-218.
- [163] Xu Y, Horn C, Zhu J, et al. Creation of Moiré Bands in a Monolayer Semiconductor by Spatially Periodic Dielectric Screening[J]. *Nat. Mater.*, 2021: 1-5.
- [164] Wu Q, Liu J, Guan Y, et al. Landau Levels as a Probe for Band Topology in Graphene Moiré Superlattices[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2021, 126(5): 056401.
- [165] Lian B, Liu Z, Zhang Y, et al. Flat Chern Band from Twisted Bilayer MnBi₂Te₄[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2020, 124(12): 126402.
- [166] Serlin M, Tschirhart C L, Polshyn H, et al. Intrinsic Quantized Anomalous Hall Effect in a Moiré Heterostructure[J]. *Science*, 2020, 367(6480): 900-903.
- [167] Shibata N, Nomura K. Fractional Quantum Hall Effects in Graphene and Its Bilayer[J]. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 2009, 78(10): 104708.
- [168] Apalkov V M, Chakraborty T. Controllable Driven Phase Transitions in Fractional Quantum Hall States in Bilayer Graphene[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2010, 105(3): 036801.

- [169] Ki D K, Fal'ko V I, Abanin D A, et al. Observation of Even Denominator Fractional Quantum Hall Effect in Suspended Bilayer Graphene[J]. Nano Lett., 2014, 14(4): 2135-2139.
- [170] Kou A, Feldman B E, Levin A J, et al. Electron-Hole Asymmetric Integer and Fractional Quantum Hall Effect in Bilayer Graphene[J]. Science, 2014, 345(6192): 55-57.
- [171] Maher P, Wang L, Gao Y, et al. Tunable Fractional Quantum Hall Phases in Bilayer Graphene[J]. Science, 2014, 345(6192): 61-64.
- [172] Shi Y, Lee Y, Che S, et al. Energy Gaps and Layer Polarization of Integer and Fractional Quantum Hall States in Bilayer Graphene[J]. Phys. Rev. Lett., 2016, 116(5): 056601.
- [173] Diankov G, Liang C T, Amet F, et al. Robust Fractional Quantum Hall Effect in the $N=2$ Landau Level in Bilayer Graphene[J]. Nat. Commun., 2016, 7(1): 13908.
- [174] Li J I A, Tan C, Chen S, et al. Even-Denominator Fractional Quantum Hall States in Bilayer Graphene[J]. Science, 2017, 358(6363): 648-652.
- [175] Sanchez Yamagishi J D, Luo J Y, Young A F, et al. Helical Edge States and Fractional Quantum Hall Effect in a Graphene Electron-Hole Bilayer[J]. Nat. Nanotechnol., 2017, 12(2): 118-122.
- [176] Wang C, Gioia L, Burkov A A. Fractional Quantum Hall Effect in Weyl Semimetals[J]. Phys. Rev. Lett., 2020, 124(9): 096603.
- [177] Thakurathi M, Burkov A A. Theory of the Fractional Quantum Hall Effect in Weyl Semimetals[J]. Phys. Rev. B, 2020, 101(23): 235168.
- [178] Ledwith P J, Tarnopolsky G, Khalaf E, et al. Fractional Chern Insulator States in Twisted Bilayer Graphene: An Analytical Approach[J]. Phys. Rev. Research, 2020, 2(2): 023237.
- [179] Liu Z, Abouelkomsan A, Bergholtz E J. Gate-Tunable Fractional Chern Insulators in Twisted Double Bilayer Graphene[J]. Phys. Rev. Lett., 2021, 126(2): 026801.
- [180] Wilhelm P, Lang T C, Läuchli A M. Interplay of Fractional Chern Insulator and Charge Density Wave Phases in Twisted Bilayer Graphene[J]. Phys. Rev. B, 2021, 103(12): 125406.
- [181] Chang G, Wieder B J, Schindler F, et al. Topological Quantum Properties of Chiral Crystals[J]. Nat. Mater., 2018, 17(11): 978-985.

- [182] Tang P, Zhou Q, Zhang S C. Multiple Types of Topological Fermions in Transition Metal Silicides[J]. Phys. Rev. Lett., 2017, 119(20): 206402.
- [183] Chang G, Xu S Y, Wieder B J, et al. Unconventional Chiral Fermions and Large Topological Fermi Arcs in RhSi[J]. Phys. Rev. Lett., 2017, 119(20): 206401.
- [184] Schröter N B M, Pei D, Vergniory M G, et al. Chiral Topological Semimetal with Multifold Band Crossings and Long Fermi Arcs[J]. Nat. Phys., 2019, 15(8): 759-765.
- [185] Sanchez D S, Belopolski I, Cochran T A, et al. Topological Chiral Crystals with Helicoid-Arc Quantum States[J]. Nature, 2019, 567(7749): 500-505.
- [186] Takane D, Wang Z, Souma S, et al. Observation of Chiral Fermions with a Large Topological Charge and Associated Fermi-Arc Surface States in CoSi[J]. Phys. Rev. Lett., 2019, 122(7): 076402.
- [187] Rao Z, Li H, Zhang T, et al. Observation of Unconventional Chiral Fermions with Long Fermi Arcs in CoSi[J]. Nature, 2019, 567(7749): 496-499.
- [188] Yao M, Manna K, Yang Q, et al. Observation of Giant Spin-Split Fermi-Arc with Maximal Chern Number in the Chiral Topological Semimetal PtGa[J]. Nat. Commun., 2020, 11(1): 2033.
- [189] Schröter N B M, Stolz S, Manna K, et al. Observation and Control of Maximal Chern Numbers in a Chiral Topological Semimetal[J]. Science, 2020, 369(6500): 179-183.
- [190] de Juan F, Grushin A G, Morimoto T, et al. Quantized Circular Photogalvanic Effect in Weyl Semimetals[J]. Nat. Commun., 2017, 8(1): 15995.
- [191] Lu H Z, Zhao A, Shen S Q. Quantum Transport in Magnetic Topological Insulator Thin Films[J]. Phys. Rev. Lett., 2013, 111(14): 146802.
- [192] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, et al. Two-Dimensional Gas of Massless Dirac Fermions in Graphene[J]. Nature, 2005, 438(7065): 197-200.
- [193] Xu Y, Miotkowski I, Liu C, et al. Observation of Topological Surface State Quantum Hall Effect in an Intrinsic Three-Dimensional Topological Insulator[J]. Nat. Phys., 2014, 10(12): 956-963.
- [194] Yoshimi R, Yasuda K, Tsukazaki A, et al. Quantum Hall States Stabilized in Semi-Magnetic Bilayers of Topological Insulators[J]. Nat. Commun., 2015, 6(1): 8530.
- [195] Brahlek M, Bansal N, Koirala N, et al. Topological-Metal to Band-Insulator Transition in $(\text{Bi}_{1-x}\text{In}_x)_2\text{Se}_3$ Thin Films[J]. Phys. Rev. Lett., 2012, 109(18): 186403.

- [196] Wu L, Brahlek M, Valdés Aguilar R, et al. A Sudden Collapse in the Transport Lifetime across the Topological Phase Transition in $(\text{Bi}_{1-x}\text{In}_x)_2\text{Se}_3$ [J]. Nat. Phys., 2013, 9(7): 410-414.
- [197] Potter A C, Kimchi I, Vishwanath A. Quantum Oscillations from Surface Fermi Arcs in Weyl and Dirac Semimetals[J]. Nat. Commun., 2014, 5(1): 5161.
- [198] Moll P J W, Nair N L, Helm T, et al. Transport Evidence for Fermi-Arc-Mediated Chirality Transfer in the Dirac Semimetal Cd_3As_2 [J]. Nature, 2016, 535(7611): 266-270.
- [199] Hosur P. Friedel Oscillations Due to Fermi Arcs in Weyl Semimetals[J]. Phys. Rev. B, 2012, 86(19): 195102.
- [200] Baum Y, Berg E, Parameswaran S A, et al. Current at a Distance and Resonant Transparency in Weyl Semimetals[J]. Phys. Rev. X, 2015, 5(4): 041046.
- [201] Gorbar E V, Miransky V A, Shovkovy I A, et al. Origin of Dissipative Fermi Arc Transport in Weyl Semimetals[J]. Phys. Rev. B, 2016, 93(23): 235127.
- [202] Ominato Y, Koshino M. Magnetotransport in Weyl Semimetals in the Quantum Limit: Role of Topological Surface States[J]. Phys. Rev. B, 2016, 93(24): 245304.
- [203] McCormick T M, Watzman S J, Heremans J P, et al. Fermi Arc Mediated Entropy Transport in Topological Semimetals[J]. Phys. Rev. B, 2018, 97(19): 195152.
- [204] Ruan J, Jian S K, Yao H, et al. Symmetry-Protected Ideal Weyl Semimetal in HgTe-Class Materials[J]. Nat. Commun., 2016, 7(1): 11136.
- [205] He L P, Hong X C, Dong J K, et al. Quantum Transport Evidence for the Three-Dimensional Dirac Semimetal Phase in Cd_3As_2 [J]. Phys. Rev. Lett., 2014, 113(24): 246402.
- [206] Liang T, Gibson Q, Ali M N, et al. Ultrahigh Mobility and Giant Magnetoresistance in the Dirac Semimetal Cd_3As_2 [J]. Nat. Mater., 2015, 14(3): 280-284.
- [207] Zhao Y, Liu H, Zhang C, et al. Anisotropic Fermi Surface and Quantum Limit Transport in High Mobility Three-Dimensional Dirac Semimetal Cd_3As_2 [J]. Phys. Rev. X, 2015, 5(3): 031037.
- [208] Narayanan A, Watson M D, Blake S F, et al. Linear Magnetoresistance Caused by Mobility Fluctuations in N-Doped Cd_3As_2 [J]. Phys. Rev. Lett., 2015, 114(11): 117201.
- [209] Xiong J, Kushwaha S K, Liang T, et al. Evidence for the Chiral Anomaly in the Dirac Semimetal Na_3Bi [J]. Science, 2015, 350(6259): 413-416.

- [210] Rosenberg G, Guo H M, Franz M. Wormhole Effect in a Strong Topological Insulator[J]. Phys. Rev. B, 2010, 82(4): 041104.
- [211] Gusynin V P, Sharapov S G. Unconventional Integer Quantum Hall Effect in Graphene[J]. Phys. Rev. Lett., 2005, 95(14): 146801.
- [212] Zyuzin A A, Burkov A A. Thin Topological Insulator Film in a Perpendicular Magnetic Field[J]. Phys. Rev. B, 2011, 83(19): 195413.
- [213] Zhang S B, Zhang Y Y, Shen S Q. Robustness of Quantum Spin Hall Effect in an External Magnetic Field[J]. Phys. Rev. B, 2014, 90(11): 115305.
- [214] Zhang S B, Lu H Z, Shen S Q. Edge States and Integer Quantum Hall Effect in Topological Insulator Thin Films[J]. Sci. Rep., 2015, 5(1): 13277.
- [215] Pertsova A, Canali C M, MacDonald A H. Quantum Hall Edge States in Topological Insulator Nanoribbons[J]. Phys. Rev. B, 2016, 94(12): 121409.
- [216] Kargarian M, Randeria M, Lu Y M. Are the Surface Fermi Arcs in Dirac Semimetals Topologically Protected?[J]. PNAS, 2016, 113(31): 8648-8652.
- [217] Cano J, Bradlyn B, Wang Z, et al. Chiral Anomaly Factory: Creating Weyl Fermions with a Magnetic Field[J]. Phys. Rev. B, 2017, 95(16): 161306.
- [218] Moore J E. The Birth of Topological Insulators[J]. Nature, 2010, 464(7286): 194-198.
- [219] Qi X L, Zhang S C. Topological Insulators and Superconductors[J]. Rev. Mod. Phys., 2011, 83(4): 1057-1110.
- [220] Liu N, Niu X, Liu Y, et al. Anomalous Hall Effect in a Magnetically Extended Topological Insulator Heterostructure[J]. Phys. Rev. Materials, 2020, 4(9): 094204.
- [221] Liu C, Wang Y, Li H, et al. Robust Axion Insulator and Chern Insulator Phases in a Two-Dimensional Antiferromagnetic Topological Insulator[J]. Nat. Mater., 2020, 19(5): 522-527.
- [222] Shikin A M, Estyunin D A, Klimovskikh I I, et al. Nature of the Dirac Gap Modulation and Surface Magnetic Interaction in Axion Antiferromagnetic Topological Insulator MnBi₂Te₄[J]. Sci. Rep., 2020, 10(1): 13226.
- [223] Wang C M, Sun H P, Lu H Z, et al. 3D Quantum Hall Effect of Fermi Arcs in Topological Semimetals[J]. Phys. Rev. Lett., 2017, 119(13): 136806.
- [224] Zhang C, Zhang Y, Yuan X, et al. Quantum Hall Effect Based on Weyl Orbits in Cd₃As₂[J]. Nature, 2019, 565(7739): 331-336.

- [225] Yan J Q, Zhang Q, Heitmann T, et al. Crystal Growth and Magnetic Structure of MnBi₂Te₄[J]. Phys. Rev. Materials, 2019, 3(6): 064202.
- [226] Ereameev S V, Vergniory M G, Menshchikova T V, et al. The Effect of van Der Waal's Gap Expansions on the Surface Electronic Structure of Layered Topological Insulators[J]. New J. Phys., 2012, 14(11): 113030.
- [227] Islam M F, Canali C M, Pertsova A, et al. Systematics of Electronic and Magnetic Properties in the Transition Metal Doped Sb₂Te₃ Quantum Anomalous Hall Platform[J]. Phys. Rev. B, 2018, 97(15): 155429.
- [228] Yuan Y, Wang X, Li H, et al. Electronic States and Magnetic Response of MnBi₂Te₄ by Scanning Tunneling Microscopy and Spectroscopy[J]. Nano Lett., 2020, 20(5): 3271-3277.
- [229] Liang Z, Luo A, Shi M, et al. Mapping Dirac Fermions in the Intrinsic Antiferromagnetic Topological Insulators (MnBi₂Te₄)(Bi₂Te₃)_n (N=0,1)[J]. Phys. Rev. B, 2020, 102(16): 161115.
- [230] Zhang W, Yu R, Zhang H J, et al. First-Principles Studies of the Three-Dimensional Strong Topological Insulators Bi₂Te₃, Bi₂Se₃ and Sb₂Te₃[J]. New J. Phys., 2010, 12(6): 065013.
- [231] Deng H, Chen Z, Wołos A, et al. High-Temperature Quantum Anomalous Hall Regime in a MnBi₂Te₄/Bi₂Te₃ Superlattice[J]. Nat. Phys., 2021, 17(1): 36-42.
- [232] He Q L, Pan L, Stern A L, et al. Chiral Majorana Fermion Modes in a Quantum Anomalous Hall Insulator–Superconductor Structure[J]. Science, 2017, 357(6348): 294-299.
- [233] Du S, Tang P, Li J, et al. Berry Curvature Engineering by Gating Two-Dimensional Antiferromagnets[J]. Phys. Rev. Research, 2020, 2(2): 022025.
- [234] Collins J L, Tadich A, Wu W, et al. Electric-Field-Tuned Topological Phase Transition in Ultrathin Na₃Bi[J]. Nature, 2018, 564(7736): 390-394.

附录 A 缩写表

表 A-1 缩写表

缩写	英文全称	中文对应	页码
2DEG	2D electron gas	二维电子气	1
ARPES	angle-resolved photoemission spectroscopy	角分辨光电子能谱	4
DSM	Dirac semimetal	狄拉克半金属	3
LL	Landau level	朗道能级	1
MTI	magnetic topological insulator	磁性拓扑绝缘体	2
NLSM	nodal-line semimetal	节线半金属	3
QAHE	quantum anomalous Hall effect	量子反常霍尔效应	1
QHE	quantum Hall effect	量子霍尔效应	1
QSHE	quantum spin Hall effect	量子自旋霍尔效应	1
TI	topological insulator	拓扑绝缘体	1
TRS	time-reversal symmetry	时间反演对称性	1
TSM	topological semimetal	拓扑半金属	3
WSM	Weyl semimetal	外尔半金属	3

攻读博士学位期间发表的论文及其他成果

（一）发表的相关论文

- [1] **Sun H P**, Wang C M, Zhang S B, Chen R, Zhao Y, Liu C, Liu Q, Chen C, Lu H Z, Xie X C. Analytical solution for the surface states of the antiferromagnetic topological insulator MnBi₂Te₄. Phys. Rev. B. 2020, 102(24): 241406(R). (SCI 收录, WOS 号: 000598244400003, IF=3.575, 对应学位论文第四章)
- [2] **Sun H P**, Lu H Z. Quantum transport in topological semimetals under magnetic fields (II). Frontiers of Physics. 2019, 14(3): 1-24. (SCI 收录, WOS 号: 000465246800001, IF=2.502, 对应学位论文第一章 1.2 节和 1.3 节)
- [3] Wang C M, **Sun H P**, Lu H Z, Xie X C. 3D quantum Hall effect of Fermi arcs in topological semimetals. Phys. Rev. Lett. 2017, 119(13): 136806. (SCI 收录, WOS 号: 000411996200014, IF=8.385, 对应学位论文第三章)
- [4] Hu Y J, Chan Y T, Lai K T, Ho K O, Guo X, **Sun H P**, Yip K Y, Ng D H, Lu H Z, Goh S K. Angular dependence of the upper critical field in the high-pressure 1 T' phase of MoTe₂. Phys. Rev. Materials. 2019, 3(3):034201. (SCI 收录, WOS 号: 000462971700004, IF=3.337)
- [5] Chen R, Li S, **Sun H P**, Lu H Z, Xie X C. Using nonlocal surface transport to identify the axion insulator. Phys. Rev. B. 2021, 103(24): L241409. (SCI 收录, IF=3.575)
- [6] Du Z Z, Wang C M, **Sun H P**, Lu H Z, Xie X C. Quantum theory of the nonlinear Hall effect. arXiv preprint arXiv:2004.09742. 2020.

（二）参加的国内外会议

- [1] Presentation entitled: Analytical solution for the surface states of antiferromagnetic topological insulator MnBi₂Te₄, Session J52.15, APS March Meeting 2021.
- [2] Poster presentation entitled: 3D quantum Hall effect, Gordon Research Conference on Topological and Correlated Matter, Hongkong, 2019.

致 谢

几年的时光倏忽而逝。这几年经历了很多事，只想对自己说，既然选择了远方，便只顾风雨兼程。希望再次看到这句话时，还能记得写下这句话时的深意，算是对自己的劝勉吧。

这里首先必须感谢我的博士导师卢海舟教授这几年来对我的关心和指导。依稀记得几年前在二科初次见面的场景，就是这特别的缘分使我留了下来。这几年我看到了卢老师在收获荣誉的背后默默地付出与耕耘。对待学生，卢老师一直是认真负责。即便是教了多年的量子力学，每次上课之前依然会花时间认真备课，希望能讲的比之前更好，让学生更容易理解和接受。对待学术，卢老师向来是一丝不苟，紧跟学术前沿。专注于量子输运的同时，也在努力开拓新的课题。更为难得的是，即使得到一些肯定与赞誉，卢老师依然勤恳谦卑，虚怀若谷。这些都是值得我学习一生的，能成为卢老师的学生，是我的幸运。

其次，还要感谢博士联培申请期间刘树田教授和周可雅教授给予的帮助。感谢读博期间我的合作者谢心澄教授，王春明教授，陈朝宇教授，刘奇航教授，刘畅教授，赵悦教授，张松波博士，杜宗正博士，陈锐博士和李帅的帮助和支持。

最后，感谢我的家人和朋友一直以来的支持与鼓励，你们在这白茫茫大地中最美的风景。

