

模型研究与计算*

牛 谦^{1,†} 乔振华^{1,††} 任亚飞^{2,†††}

(1 中国科学技术大学物理学院 合肥 230026)

(2 美国特拉华大学物理与天文系 纽瓦克 DE19716)

2025-01-05 收到

† email: niuqian@ustc.edu.cn

†† email: qiao@ustc.edu.cn

††† email: yfren@udel.edu

DOI: 10.7693/wl20250202

CSTR: 32040.14.wl20250202

Model study and numerical calculation

NIU Qian^{1,†} QIAO Zhen-Hua^{1,††} REN Ya-Fei^{2,†††}

(1 School of Physical Sciences, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

(2 Department of Physics and Astronomy, University of Delaware, Newark DE19716, USA)

摘 要 文章系统综述拓扑物态及量子几何效应研究中的关键理论模型与计算方法。Hofstadter 蝴蝶模型揭示了强磁场下电子能谱的分形结构及其与贝里曲率的联系；基于六角晶格的系列理论(石墨烯、Haldane 与 Kane-Mele 模型)预言了量子反常霍尔效应及受丰富的对称性保护的拓扑绝缘态；低能连续模型帮助人们解析地理解拓扑相变与边界态；第一性原理计算结合瓦尼尔插值实现了材料中贝里曲率的定量计算与反常输运性质预测；无序系统模型研究则阐明了拓扑态的鲁棒性、无序诱导的拓扑相变规律及陈数湮灭机制。文章强调模型与计算方法在量子几何理论、拓扑材料设计中的基础地位。

关键词 六角晶格, 连续模型, 第一原理计算, 量子几何, 贝里曲率, 拓扑态, 无序, 局域化

Abstract This paper introduces representative theoretical models and calculation methods that are central to the study of topological phases and quantum geometric effects. Specifically, the Hofstadter butterfly model unravels the fractal electronic spectrum and its intrinsic connection with geometric phases under strong magnetic fields. Honeycomb lattice-based models, including graphene, Haldane, and Kane-Mele models, have demonstrated the existence of quantum anomalous Hall effects and symmetry-protected topological phases. Low-energy continuum models provide a valuable analytical understanding of topological phases, phase transitions, and edge-mode formation. First-principles calculations combined with Wannier function interpolation enable quantitative calculation of Berry curvatures and anomalous transport in real materials. Disorder models elucidate the robustness of topological phases, disorder-induced topological phase transitions, and Chern number annihilation mechanisms. We emphasize the fundamental importance of theoretical models and computational methods in developing the theory of quantum geometry and topological materials.

Keywords honeycomb lattice, continuum model, first-principles calculations, quantum geometry, Berry curvature, topological phases, disorder, localization

* 国家自然科学基金(批准号: 12234017; 12474158; 12488101)资助项目

1 引言

本专栏前文(详见《物理》2024年第1, 4, 7, 10期)介绍了凝聚态物理中量子几何概念及其在研究实践中的各种应用。这个概念诞生于电子拓扑性质的发现,极大地推动了后续四十多年来凝聚态物理的发展。今天,量子几何已经成为贯穿凝聚态理论体系的一个不可或缺的组成部分,开始进入人们日常科学交流的语言当中。为了保持与传统理论衔接和对新发展叙述的连贯性,前文偏重于一般框架性描绘。

本文着重介绍人们在研究过程中主要运用的几类理论模型和更加切合实际的计算方法,以期读者营造一个更具体的氛围。文章围绕五个小节展开讨论,即:蝴蝶能谱、六角晶格、连续模型、第一性原理计算和无序效应。前两节介绍人们最早用到的两种模型,它们孕育了关于布洛赫电子拓扑几何最初的认识。接着介绍几种连续模型,它们被广泛用来描绘拓扑相变和拓扑边界态的行为。最后两节介绍第一性原理计算方法在实际材料拓扑几何性质中的应用,以及无序散射效应对拓扑态的影响。

按照历史脉络,我们首先介绍Hofstadter蝴蝶能谱模型。早期,人们通过它了解了强磁场下能带中布洛赫电子的量子行为,其能谱复杂性扑朔迷离而又充满诱惑。1982年,在对这个模型中量子霍尔效应的研究过程中,索利斯(David J. Thouless)等人发现电子体系的状态具有拓扑性质。后来,在探讨此能谱分裂规律过程中,我们发现支撑这种拓扑的贝里曲率也深刻地影响着布洛赫电子的运动。

蝴蝶能谱的能带中已不是通常意义下的布洛赫态,因为它们的定义用到了磁平移群的概念。为了避开这种复杂性,Haldane于1988年考虑了六角晶格上净磁通为零的非均匀磁场,并在一定参数范围内获得陈数非零的能带。十多年后,Kane—Mele发现具有次近邻跃迁的石墨烯紧束缚模型恰好代表了Haldane模型的两个版本,各自对应一个守恒的自旋状态,并且彼此在时间反演

下对偶。受这些划时代理论工作的启发,也由于石墨烯等二维材料的不断涌现,六角晶格模型成为研究量子几何与拓扑的一个重要理想平台。

除紧束缚模型外,人们在研究中也用到了各种低能连续模型。连续模型源于半导体物理中的有效质量近似,可以在能带某动量点附近用微扰方法得到。这包括拉廷格关于空穴态的四带有效模型,它曾在早期反常霍尔效应和自旋霍尔效应的研究中扮演了重要角色。这也适用于反带情形,在人们寻找和设计拓扑绝缘体的研究中也用到。另外,各种维度上的狄拉克模型也被广泛应用,通过不同方式的变形获得拓扑相,以及用于描述边界或者反畴壁上的低能模式。

为了精确获取实际材料的几何拓扑性质,人们还得依赖于第一性原理计算方法。这包括计算Zak相位来研究绝缘体的电极化,计算填充状态的贝里曲率来获得金属磁体的反常霍尔电导。类似的还有轨道磁化、反常能斯特效应、自旋霍尔效应、磁电耦合以及高阶响应等方面的计算。在寻找和设计拓扑绝缘体和金属的过程中,第一性原理计算方法也发挥了积极作用。传统的材料计算主要涉及本征态的能级,而这类计算都需要用到本征波函数,因此曾经是一个大难题。有了瓦尼尔(Wannier)插值法后,情况大为改观。许多类似计算变得非常便捷并被写成了标准化程序包。

关于拓扑状态的描述大都基于晶体假设,而实际材料总是存在杂质和缺陷。此时,人们往往把目光转向体能隙中的边界态,看它们在无序散射下的电子输运行为。在弱无序情况下,边界态具有相当强的韧性,为“拓扑”这个概念赋予了具体的物理内涵。在强无序作用下这种韧性会消失,其根本原因是体能态的拓扑相变。尽管拓扑不变量不再用布洛赫态定义,仍可通过体态对边界条件的反应来定义贝里曲率在能量轴上的密度。据此,人们可以理解陈绝缘体在转变为安德森绝缘体前,它的陈数到底是如何消失的。

2 蝴蝶能谱

在均匀磁场下,薛定谔方程的矢量势必然是非均匀的,因此晶格平移不再与电子哈密顿量对

易。对平移后的波函数做规范变换，则可使得薛定谔方程恢复原貌，这就是所谓的磁平移操作。Thouless等人当初研究的磁布洛赫态就是由它们定义的^[1]。不同方向的两个磁平移一般彼此并不对易，除非平移矢量张出的面积正好包含整数个磁通量子 h/e 。Thouless等人考虑的是“有理磁场”的情形，即，穿过原胞的磁通是分数个量子(其中 q 是分数的分母)。因此，只要把磁平移局限在 q 倍大的超晶格上，它们就彼此对易，从而可以拥有共同本征态。

师从Wannier的Hofstadter利用数值计算，首次揭示了二维电子的磁布洛赫能带，也就是令人着迷的分形蝴蝶能谱^[2]。随着磁通变大，原来的能带发生剧烈的分裂与聚集；空隙处看上去是大大小小的蝴蝶，呈现出自相似的分形结构。在有理磁通情况下，子能带的个数等于分母。这对于磁通来说是一个极不连续的行为。整体上能谱长什么样子呢？若把磁通按分数展开，那些整数系数会告诉你能谱大致分成相对集中的几段，每一段大致分成几小段，而每一小段又分成多少小小段，等等。在无理磁通情况下，这个过程会一直持续下去。能谱如同实数分析中提到的康托集那样，形成一个测度为零但仍不可数的分形集合。

如果对矢量势取朗道规范，使其一个分量为零、另一个分量沿某个晶轴方向线性增长，原来

的二维薛定谔方程可以简化为一个紧束缚原子链模型，其中的势能随位置做周期(有理磁通)或准周期(无理磁通)变化。Thouless接纳本文第一作者读博的时候，他对这种介于杂乱和有序的准周期系统颇感兴趣，想知道电子的波函数到底怎样在局域和扩展间做出选择。结果表明，本征波函数采取了一种自相似的变化，而整体上以某种幂次的方式随距离衰减^[3]。

真正有价值的科学宝藏还是隐藏在看似相对简单的有理情形里。Thouless等人在计算满能带的霍尔电导时发现：传统的久保公式可表示为磁布洛赫态的一个微分形式在布里渊区的积分。这个微分形式就是后来人们熟知的贝里曲率^[4]，而那个积分所表达的就是叫做“陈数”的拓扑不变量。他们还推导出一个以有理磁通的分子和分母为系数的整变量丢番图方程，来确定总的陈数如何依赖填充能带的个数。Box 1里蝴蝶能谱中的各种颜色表示费米能落在不同能隙时的陈数分布^[5]，展现出一个极其丰富的拓扑相图。

在小磁通的母能带边缘附近，人们还是可以看到一些熟悉的景象。一条条呈辐射状的能谱如同二维自由电子在磁场中的朗道能级，只是电子的质量被晶格重新定义了，而且在能带的顶部取了负值。从能带边缘往里看，朗道能级的间距逐渐变小，这是源于能带里面有效质量变大的缘故。

Box 1 Hofstadter蝴蝶

1976年，Hofstadter研究电子在二维周期晶格中运动并受到垂直磁场影响时，发现了这个复杂但自相似的、漂亮的能谱结构。紧束缚模型的哈密顿量包含相邻格点间的跃迁，磁场会让跃迁矩阵元获得一个与磁矢势 A 有关的相位， $\frac{2\pi}{\Phi_0} \int_{r_i}^{r_j} A \cdot d\mathbf{l}$ ，其中 $\Phi_0 = \frac{h}{e}$ 为磁通量子， h 为普朗克常数， e 为电子电荷， $r_{i,j}$ 为格点的位置。为了分析系统的能谱，需要考虑一个晶格原胞中的磁通 Φ 与磁通量子 Φ_0 的比值(约化磁通) α 。当它为分数时，紧束缚模型的能带会分裂成 q 个子带，其中 q 为分数的分母。将所有的本征能量 E 对 α 绘图，就得到了Hofstadter蝴蝶图案^[5]。如图1所示，可以观察到一系列能隙，呈一种自相似分形结构。这些能隙不仅是能谱上的间隔，更具有拓扑上的意义。

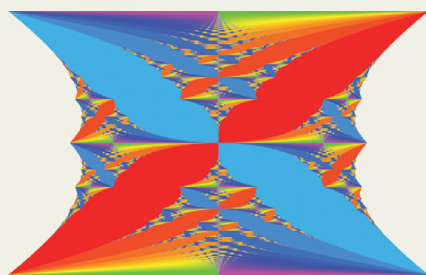


图1 Hofstadter蝴蝶能谱和拓扑相图。横坐标代表费米能，纵坐标代表约化磁通 $\alpha = \Phi/\Phi_0$ 。每个色块代表一个能隙，不同色块的交界代表能谱。色块颜色对应费米面在此能隙时，其左边所有填充的子能带的总陈数。其中，面积最大的红色和蓝色区域的陈数为 ± 1 。在小磁场极限下，相邻颜色陈数差为1

早年，昂萨格认为这种朗道能级就是布洛赫电子在磁场中回旋运动的量子表现，并指出相应等能线在布里渊区围出的面积该怎样量子化^[6]。他的发现在这里得到了良好的印证。至于这些朗道能级辐射线有弯曲和展宽现象，那是由于磁场的非线性效应。这里就不赘述了^[7]。

在非零的有理磁通附近，比如 $1/3$ 磁通的磁带边缘也有辐射状的系列朗道能级出现。这似乎表明电子在额外小磁场作用下也在做回旋运动，但是昂萨格的量子化公式并不能正确给出这些能级的位置。波包分析表明，半经典运动方程需要在两个方面作出修正^[8]：一是电子的群速度要加上一个正比于动量变化率的项，其比例系数就是贝里曲率；二是波包会自转，贡献一个磁矩并引起电子能量的塞曼移动。另外，量子化条件里还得加上一个贝里相位。这样处理后，就可以精确算出蝴蝶能谱里的朗道能级了。

蝴蝶能谱的分裂规律大致按照磁通连分数的展开系数进行。比如磁通为 $22/67$ 时，它可以展成 $1/(3+1/22)$ 的样子。此处的能谱聚集为 3 段(接近 $1/3$ 磁通处的那三个能带)，每段又分为 22 小段。实际上，中间的那段分裂成为 23 小段，与两边的合起来总共 67 小段。结论是：三段能带中的陈数起了重要作用^[9]。按照半经典图像，那些小段对应朗道能级；布里渊区容得下多少个量子化的回旋轨道，就会有多少个朗道能级。计入贝里相位的贡献，就可以推出一个能带的陈数究竟如何影响它分裂的规律。

3 六角晶格

说起六角晶格，大家最熟悉的材料莫过于石墨烯，其中碳原子排列为一层六角蜂窝状结构。最简单的紧束缚模型只考虑一个 p_z 轨道和最近邻跃迁^[10]，其布洛赫能带有上下对称的两支，在布里渊区的角处线性连接。电中性时，下能带填满、上能带空着，费米能级附近的能带呈二维线性狄拉克锥型，并有自旋和能谷两种简并度。在外磁场下，无质量电子表现出极宽的量子霍尔平台以及自旋和谷铁磁对称破缺等等^[11]。

早在发现石墨烯之前，Semenoff 曾考虑过给这种二维石墨的两个子晶格施加位能差来打开能隙，探讨宇称量子反常^[12]。著名的 Haldane 模型也是基于这种六角晶格，只是添加了次近邻耦合作用，并给晶格外加一个非均匀磁场，但保持原胞内净磁通为零^[13](详情见 Box 2)。这样就没有引入磁平移概念的必要，从而避开 Hofstadter 问题的复杂性。他证明，通常意义下的布洛赫能带也可有非零陈数，从而预言了无需外磁场的量子霍尔效应，即量子反常霍尔效应(陈绝缘体)。

Kane 和 Mele 考虑了次近邻跃迁中的内禀自旋—轨道耦合作用，发现石墨烯可以自然地实现两个版本的 Haldane 模型：描述轨道运动的哈密顿量与 Haldane 模型一模一样，只是时间反演破缺的方式取决于自旋的符号。因此，他们得到了量子自旋霍尔效应——两种自旋的电子体系具有大小相同、符号相反的量子霍尔电导^[14]。当存在衬底时，外禀 Rashba 自旋—轨道耦合作用导致自旋不再守恒，自旋霍尔电导也不再量子化。但是，电子体系仍然可以保持一种奇偶型的 Z_2 拓扑状态——保持自旋相反相向运动的边界态的存在，从而拉开了探索拓扑绝缘体的帷幕^[15]。

在时间反演对称的情况下，Semenoff 那种空间反演破缺也可以产生贝里曲率和轨道磁化^[16]。它们在两个能谷处具有相反的符号，表现出谷霍尔和磁化效应。这种现象也发生在过渡金属硫化物等二维半导体中，带间光跃迁还具有依赖于能谷的圆偏振选择性^[17, 18]，而自旋—轨道耦合作用又绑定了能谷和自旋^[19]。因此，这类材料为光电磁的转换提供了一种理想的研究平台。

如果完全不加磁场(包括 Haldane 那种非均匀方式)，是否还能在石墨烯中打破时间反演对称性来实现量子反常霍尔效应呢？一个理论方案是，把石墨烯贴在铁磁体或反铁磁体上，让电子获得一个交换塞曼能和一个 Rashba 自旋—轨道耦合作用^[20]。石墨烯在这两种效应的联合作用下打开体能隙实现非零的陈数(详情见 Box 2)。实验表明，这个方案确实可以导致较大的反常霍尔效应，虽然离严格量子化还有些距离^[21]。后来，本征的二

Box 2 六角晶格模型中的拓扑相

基于六角晶格的 Haldane 模型，如图 2(a)所示，哈密顿量包含近邻和次近邻跃迁项^[13]。为破坏时间反演对称性，在 a、b 相邻区域加上相反的磁通。由于 Peierls 替换，近邻跃迁项具有实数振幅 t ，而 A 子晶格间的次近邻跃迁项则携带一个复数相位 $e^{i\phi}$ (ϕ 对应于 a 区域内的磁通)；B 子晶格间的跃迁则对应相反的磁通和相位。由于晶格总磁通为零，不会产生宏观的磁场，可保证晶格的平移对称性。这种磁通的引入使得系统的能带结构具有拓扑非平庸性，如图 2(b)所示^[91]。能带在布里渊区的角上，即 K 和 K' ，打开一个能隙，携带非零的贝里曲率，对应的陈数非零。从而实现了零磁场下的量子霍尔效应，即量子反常霍尔效应。

在原胞内实现交错磁通是极其困难的。然而，跃迁项复数相位可通过自旋—轨道耦合作用引入。Kane 和 Mele 于 2005 年发现，石墨烯的内禀自旋—轨道耦合作用可在次近邻跃迁项上实现类似于 Haldane 模型的复数相位^[14]。石墨烯具有镜面对称性，使得自旋的面外分量是一个好量子数：自旋向上的电子，在自旋—轨道耦合作用下，次近邻跃迁携带一个非零的相位，能带在布里渊区角上同样具有能隙、携带非零的陈数，有手性边界态；由于时间反演对称性，自旋向下的电子是自旋向上电子的时间反演，具有相反的磁通、相反的陈数和反向运动的边界态。虽然体系总陈数为零，但自旋陈数为整数，且边界态在非磁杂质下不会被散射，显示出拓扑稳定性。此系统被称为量子自旋霍尔效应。当进一步引入外禀 Rashba 自旋—轨道耦合作用，自旋不再是好量子数。但是，Kane—Mele 指出，只要时间反演对称性不被破坏，边界态依然受到拓扑保护，并提出 Z_2 拓扑不变量^[15]，开启了受对称性保护的拓扑态的研究。

当时间反演对称性被破坏，2010 年的一项研究表明，具有外禀 Rashba 自旋—轨道耦合作用的石墨烯可以实现量子反常霍尔效应^[20]，其能带如图 2(d)所示。时间反演对称性被铁磁交换场破坏，因此能带不再双重简并，在自旋上、下能带相交的地方打开了一个体能隙。该能隙下的价带携带一个整数陈数，且 K 和 K' 能谷携带相同陈数，因此总陈数为 ± 2 ，这是不同于 Haldane 模型的地方。

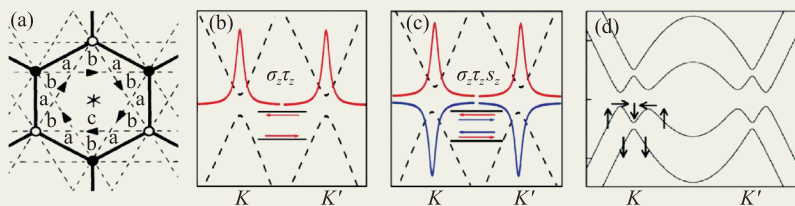


图2 六角晶格中的拓扑相 (a)六角晶格及交错磁通^[13]，图中实心圆圈和空心圆圈代表 AB 两种子晶格，a、b 区域具有相反的磁通；(b)黑色虚线：Haldane 模型的能带，每条能带均非简并；红色实线：价带携带的贝里曲率，对其积分得到非零的陈数，对应于边界态的数目，如红色箭头所示^[91]；(c)黑色虚线：Kane—Mele 模型的能带，每条能带有自旋的双重简并；红(蓝)色实线：自旋向上(下)价带携带的贝里曲率；(d)引入外禀 Rashba 自旋—轨道耦合作用和铁磁交换场的石墨烯体能带^[20]

维反铁磁材料 MnBi_2Te_4 被制备出来，实现了温度较高的量子反常霍尔效应^[22]。

石墨烯堆叠起来也很有意思。层间耦合会让狄拉克锥劈裂重组，在零能处留下紧贴着的一对二次型甚至更高阶能谱。在垂直方向施加电场会打开体能隙^[23]，而在较强的 Rashba 自旋—轨道耦合作用下，还可以转变为 Z_2 拓扑绝缘态^[24]。增大的态密度会在低温下引发自旋或能谷铁磁转变^[25]。最近，人们结合这两种机制，在 WSe_2 衬底上的多层石墨烯中观测到了陈数为 4 和 5 的量子反常霍尔平台^[26]。

让两层石墨烯之间有个扭转，还可以实现高质量的二维莫尔超晶格。Bistritzer 和 MacDonald 预言，在特定转角下零能处的能带会变得相当

平坦^[27]。此时，电子间相互作用就变得非常重要。在实验中的确看到一系列强关联现象，包括超导^[28]、谷极化轨道铁磁^[29]以及量子反常霍尔效应^[30]。

4 连续模型

二能带模型可严格求解，常用来解析计算贝里曲率和陈数。在拓扑相变发生的动量点附近，往往还可以进一步用狄拉克模型描述。Volovik 研究 ^3He 超流拓扑性质的时候，考虑过一种动量空间的斯格明子结构，相当于在狄拉克质量上增加一个二阶动量修正。这个修正使得狄拉克模型紧致化，让单个斯格明子能带携带一个 +1 或 -1 的

陈数^[31]。

三维情形有传统的基于 s - p 原子轨道和电子自旋的八带 Kane 模型^[32]，用来描述一大类半导体的电磁和光学性质。如果只关心导带的低能电磁性质，还可以进一步约化到一个二带模型，类似于真空中带自旋的非相对论自由电子。价带的两支被自旋—轨道耦合作用推到更深的地方，剩下的四支描述轻重空穴；后者具有不同的有效质量，但在零动量点仍然贴在一起。描述轻重空穴的四带拉廷格模型在研究反常霍尔效应和自旋霍尔效应时曾扮演过非常重要的角色^[33, 34]。

四带拉廷格模型也可用来描述 HgTe 等材料在零动量点附近的反带现象。自旋—轨道耦合作用超过了 s - p 轨道能差，把四重能带推到原来的导带之上。同时，轻空穴质量反号，成为新导带；但它仍与重空穴带粘连，让这类材料成为所谓的零

能隙半导体。量子阱中的受限和应变作用可以打开体能隙，使得 HgTe 成为准二维拓扑绝缘体^[35]。

真空中电子的狄拉克模型也有广泛应用。经过其质量项的二阶动量修正，成为模拟各种维度拓扑绝缘体的标准连续模型^[36]（详情见 Box 3）。其二维形式可看作两套 Volovik 斯格明子能带，彼此在时间反演下对偶。该模型可周期拓展到晶格上^[37]，定性地描述准二维 HgTe^[35] 和三维 Bi₂Se₃ 等拓扑绝缘态^[38]。利用本连续模型，还能方便处理边界问题，解析表达无能隙边界态模式^[39, 40]。

狄拉克模型中，如质量随位置改变符号，形成所谓反相畴壁，也会有低维零能隙模式局域其上^[12, 41]。在单层和双层石墨烯体系，这种反相畴壁确实会有一维狄拉克通道出现^[42, 43]。数值模拟显示，只要避开谷间耦合作用，即使在原子级别的转折点处，该通道的电子输运依然畅通无阻^[44]。

Box 3 修正的狄拉克模型

狄拉克于 1928 年提出狄拉克模型，将量子力学与狭义相对论结合起来描述自旋 1/2 的费米子（如电子）的相对论性运动，对物理学的发展影响深远。模型哈密顿量写为： $H(\mathbf{k}) = \sum_i d_i(\mathbf{k}) \Gamma_i$ 。其中， Γ_i 是 4×4 的矩阵，满足反对易关系： $\{\Gamma_i, \Gamma_j\} = 2\delta_{ij}I$ 。 $H(\mathbf{k})^2 = d^2I$ ，其中 d^2 是 d_i 的平方和。相应地， $H(\mathbf{k})$ 的本征值是 $\pm d$ 。对真空中的电子， $d = (cp_x, cp_y, cp_z, mc^2, 0)$ ，其中 c 为光速， m 是电子静态质量， $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ 是电子动量，对应的色散关系为 $E^2 = c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4$ ，与相对论性电子色散关系相同。 Γ 矩阵的形式并不唯一，只要满足上述反对易关系即可。

狄拉克模型可用来描述固体中的低能准粒子（比如准电子），并呈现丰富的拓扑性质。当质量项 $m = 0$ ，狄拉克模型可以描述二维或三维体系中具有双重简并的线性色散关系，比如忽略自旋—轨道耦合作用的石墨烯或者三维狄拉克半金属。当质量项 $m \neq 0$ ，线性色散关系打开了能隙，而且该能隙一般具有非平庸的拓扑特性。比如，Kane—Mele 模型中，电子在 K 或 K' 能谷的有效模型可以用狄拉克模型描述， $H(\mathbf{k}) = vk_x \Gamma_0 + vk_y \Gamma_4 + m \Gamma_3$ 。在动量空间中，自旋向上或向下的能带携带的赝自旋结构组成半斯格明子，对应 $\pm 1/2$ 的陈数。在真实体系中，一条能带携带的陈数必为整数。为了得到整的陈数，一个方法是在另一个能谷中还有一个狄拉克模型描述的低能激发，比如 Kane—Mele 模型；而另外一个方法则是修正质量项，将 m 变为 $m + Bk^2$ ，其中 B 为常数， $k^2 = k_x^2 + k_y^2$ 。此时，如果 m 和 B 具有相同的符号，形成的赝自旋结构具有平庸的拓扑特性^[36]；若二者符号相反，则形成一个斯格明子，对应的陈数为 ± 1 。修正的狄拉克模型可以描述另一类二维拓扑绝缘体，比如 HgTe 异质结。不同于 Kane—Mele 模型，这类拓扑绝缘体的低能模型部分只有一个能谷。通过增加一个 Γ 矩阵引入维度 k_z 后，这个模型可以进一步拓展到描述三维拓扑绝缘体，比如 Bi₂Se₃ 等。

修正的狄拉克模型还蕴含着新的几何或拓扑特性，与第二陈形式、第二陈数、或陈—西蒙斯形式相关。第二陈形式是贝里曲率（又称第一陈形式）在高维参数空间的推广；其在封闭参数空间的积分为第二陈数，是陈数在高维空间中的推广。比如，外尔点附近的哈密顿量可以写为 $H(\mathbf{k}) = k_x s_1 + k_y s_2 + k_z s_3$ ，包围着 $\mathbf{k} = 0$ 的、三维参数空间曲面上的贝里曲率的积分为整数，即陈数；对于修正的狄拉克模型， $H(\mathbf{q}) = q_0 \Gamma_0 + q_1 \Gamma_1 + q_2 \Gamma_2 + q_3 \Gamma_3 + q_4 \Gamma_4$ ，包围着 $\mathbf{q} = 0$ 的、五维参数空间曲面上的第二类陈形式的积分也为整数，即第二陈数。这种陈数在高维拓扑泵浦体系中有重要体现，比如拓扑绝缘体中的磁电耦合^[74]、 K 能谷手性声子在石墨烯中泵浦的轨道磁化^[100]以及泵浦磁化的量子不确定性^[101]等等。

在通道分叉的地方，还会遵循一种奇妙的电流分配规律^[45]。

有一类所谓弱拓扑绝缘体，除了时间反演对称，还需要一些晶格对称来保护其边界态的存在^[46]。这种对称性在某些晶面被打破，其表面态就会打开能隙。如果相邻晶面上对称性打破方式不同，在它们相交的棱上就会出现一维无能隙模式^[47]。这种高阶拓扑棱态在光电测量中也具有拓扑特征^[48]。类似地，二维拓扑绝缘体的某些边界上也可以打开能隙，形成高阶拓扑角态^[49]。

体内能带接触的地方，往往出现无质量外尔—狄拉克型的能谱。这种接触点也是一种磁单极，辐射或吸收一个陈数的贝里曲率通量，因而在一个能带里的数目必须为偶数^[50, 51]。二维情况没有这种约束，一个能带可以有奇数个外尔—狄拉克型接触点，贡献半整数量子化的霍尔电导^[52]。

5 第一性原理计算

Vanderbilt 等人发现，绝缘材料的电极化可表

达成布里渊区的 Zak 相位。这也开创了用第一性原理计算研究电子几何性质的先河^[53]。这些工作也导致了对 Wannier 函数的重新认识：其中心位置由 Zak 相位决定，而最小宽度受能带量子度规和贝里曲率约束。通过对多能带系统的 Wannier 函数做最大局域化求解，发展出一套高效处理波函数问题的插值方法^[54]。Box 4 介绍了计算 Zak 相位和贝里曲率的方法。

贝里曲率的第一性原理计算也极大推动了实际材料中反常霍尔效应的定量研究^[55, 56]。由于自旋—轨道耦合作用相对较弱，其引起的能带交叉点往往又是贝里曲率极大的地方，达到计算所需精度曾是个颇费周折的事情。后来，Wannier 插值方法使这种情况大为改善^[57]。受益于贝里曲率的模型研究和第一性原理计算，人们发现许多关于反常霍尔效应的传统规律不再被遵循，比如，反铁磁材料也有很大的反常霍尔电导^[58]，而铁磁材料的自旋磁化也完全可以躺在霍尔电测量面内^[59]。

本专栏第三篇《半经典响应理论》(详见《物

Box 4 第一性原理计算与电子几何相位

电子波函数在动量空间的几何相位与固体的电极化和反常霍尔效应等现象紧密相关。第一性原理计算方法能够计算波函数和这些物理量，对理解材料性质、预测和优化材料设计十分重要。

比如，电极化跟 Zak 相位相关，正比于贝里联络 $A_k = i \langle u_k | \partial_k u_k \rangle$ 在动量空间中的积分，其中 u_k 是布洛赫波函数的周期部分， k 是电子准动量。由于波函数有规范自由度，数值方法获得的波函数通常不是 k 的连续函数，无法对准动量求导。为了解决这个困难，可以将积分转化为离散波函数的内积^[53]：首先将布里渊区划分为离散的 N 点，标记为 k_i ，其中 i 从 0 变化到 $N-1$ ，然后计算 $\text{Im} \left\{ \ln \prod_{i=0}^{N-1} \langle u_{k_i} | u_{k_{i+1}} \rangle \right\}$ ，要求布里渊区首尾波函数相同，即 $u_{k_N} = u_{k_0}$ 。

贝里曲率是另一个重要的物理量， $\Omega_n = -\text{Im} \langle \nabla_k u_{nk} | \times | \nabla_k u_{nk} \rangle$ ， Im 表示取虚部， n 是能带指标，二维情况下， $\nabla_k = (\partial_{k_x}, \partial_{k_y})$ 。类似于电极化的计算，贝里曲率也可以通过波函数的内积来计算，避免了直接对波函数求导。这需要用 Stokes 定理将面积分转换为线积分， $\int_S \Omega dk_x dk_y = \int_C A_k d\lambda$ ，其中 C 是面 S 的边界，在闭合参数空间 C 上的线积分可以用计算 Zak 相位的方法得到。具体的计算需要将动量空间划分为足够密集的 k 点网格：当网格足够密集，取三个或四个点构成的闭合曲线 C 即可用来计算贝里曲率。另外一种避免对波函数求导的方法是将 Ω_n 转换为速度算符矩阵元的代数运算^[56]：

$$\Omega_n = - \sum_{n' \neq n} \frac{2 \text{Im} \langle u_{nk} | v_x | u_{n'k} \rangle \langle u_{n'k} | v_y | u_{nk} \rangle}{(\omega_{n'} - \omega_n)^2},$$

其中， $v_{x,y}$ 为速度算符， ω_n 为本征能量。通过构造最局域的瓦尼尔函数作为基底，采用瓦尼尔插值的方法可以有效地构造瓦尼尔函数的跃迁矩阵元、速度算符、波函数以及贝里曲率^[57]。

理》2024年第7期)一文曾介绍,无序散射可以产生反常霍尔效应的外禀贡献,包括横移和偏斜散射。针对具体材料也开展过这方面的第一性原理计算,比如,通过假设替代性杂质合金或者高斯型短程无序,与实验结果作对比^[60, 61]。这种高斯型短程无序似乎可以较好地模拟声子作用,也不产生偏斜散射,而其横移和其他外禀贡献可以基本补齐实验结果与内禀贡献的差异。

过去,人们对磁性材料的关注点主要集中在电子自旋,后来发现电子轨道磁化现象也蕴含着丰富的物理。轨道磁化除了单态轨道磁矩的来源,还有贝里曲率对态密度修正而贡献的反常部分^[62–64]。计算表明,不能像传统方法只计及原子内部的轨道运动,还应包括原子间电子的运动。在一类非共线但接近共面的反铁磁材料中,自旋磁矩几乎抵消干净,但轨道磁化贡献了总磁化的主要部分。其中,贝里曲率贡献的反常部分又占了很大份额^[65]。

第一性原理计算也参与到了自旋霍尔效应的研究。在半导体中,低空穴密度下的结果很好地佐证了基于拉廷格模型的计算^[66],但高密度下的行为超出了模型所能预言的范围^[67]。这类计算也延伸到了重金属,强自旋—轨道耦合作用会产生很大的自旋霍尔电导^[68]。在近邻磁化作用下,铂、钯等金属表现出较强的反常霍尔电导,定量上可表达为交换能与自旋霍尔电导在费米能处斜率的乘积^[69]。

在寻找拓扑绝缘体材料过程中,第一性原理计算也发挥了巨大作用。如果晶体具有空间反演对称性,非磁绝缘体的拓扑性质可由布里渊区高对称点处波函数的宇称来确定^[46];否则,还需加和半布里渊区上的贝里曲率及其边界上的贝里相位来得到 Z_2 拓扑数^[70, 71]。后来发明的混合Wannier函数方法让这类计算变得更加直接^[72]。三维情况下, Z_2 拓扑数还可表示为陈—西蒙斯形式在布里渊区的积分,代表一种特殊磁电耦合^[73]。

空间反演对称情况下,在 Z_2 拓扑绝缘体与普通绝缘体或弱拓扑绝缘体的相变临界点,体能隙关闭,这便实现了所谓的狄拉克半金属。这

种状态在旋转等晶体对称操作下保持稳定,正如对 Na_3Bi 等预言的那样^[74]。如果时间或者空间反演对称性破缺,一个狄拉克点会被分裂成两个外尔点^[50]。

6 无序效应

真实材料中总有杂质或缺陷,而有限温度下还会有声子等激发。这些都会引起电子散射。我们曾详细讨论过散射对于反常霍尔效应的各种外禀贡献。下面我们将着重考虑无序效应对拓扑绝缘体的影响。由于体态有能隙,弱无序只能影响到无能隙边界态。在强无序作用下,体态也可以发生根本性变化。

在弱无序下,陈数非零的绝缘体边界态保持宏观尺度的完全导通,反映出为何量子(反常)霍尔效应有如此惊人的精确度。二维拓扑绝缘体的边界态或反相畴壁上的狄拉克模式,由于受Kramers定理的约束,也不会受到非磁弹性散射的影响。但是,实验中总有破坏时间反演对称的各种因素(包括磁性非弹性以及多体散射过程),让一维电子输运通道的平均自由程只能维持在介观尺度^[75]。三维拓扑绝缘体的表面态由于自旋和动量的绑定,非磁性杂质造成的背散射为零,导致了所谓的弱反局域化现象^[76]。

在强无序下,拓扑绝缘态会如何表现呢?人们曾好奇朗道能级所携带的陈数如何随无序增强而最终消失。首先,弱无序会把原来高度简并的朗道能级展宽,其中大部分本征态局域化,而能量中心处态却保持扩展,仍然携带一个陈数。然后,随着无序增强,人们猜测这些扩展态的能量会上浮^[77, 78]。当最低朗道扩展态上浮到费米能以上时,电子体系就转变为安德森绝缘体了。

实际情况并没有这么简单。晶格模型的数值模拟显示,这些朗道扩展态在能量上并没有上浮的趋势,而是高能处有携带相反陈数的扩展态下来与其相遇而湮灭^[79, 80]。这些“反态”最初来源于Hofstadter能谱的中心,对应于零磁场时母能带的鞍点。无散射的时候,那里的子能带携带了许多相反的陈数。在无序情况下,通过引入周期边

条件的两个相位，仍可定义各本征态的陈数。它们的分布随无序强度的变化即描绘出上述朗道扩展态消失的过程。

类似地，本征态对霍尔电导的贡献也可以定义贝里曲率在能量轴上的密度，密度对占据态的积分就是总的反常霍尔电导。通过观察贝里曲率分布的演化，可以研究陈绝缘体的局域化过程^[81]。在一般无序作用下，扩展态的消失遵循相反陈数湮灭的普通路径。但如果散射允许自旋翻转，各能带贝里曲率的分布首先劈为两半，然后其中的一半与另一能带的一半发生交换，最后贝里曲率抵消干净之后才进入安德森绝缘态，详情见Box 5。

在时间反演对称保护下，无序散射对二维拓

扑绝缘体的局域化过程也遵循类似机制。以Kane—Mele模型为例，Rashba自旋—轨道耦合作用和弱无序并不会破坏原先的边界态^[15]。此时，许多体态被无序所束缚，但每个能带里会有一个有限宽的中心区域的本征态保持扩展。随着无序增强，价带和导带的扩展态中心区域相互靠拢，重合后才整体进入完全局域的状态^[82, 83]。

强无序也并不只起着破坏拓扑态的作用。实际材料在费米能附近往往有金属态和平庸边界态出现。无序散射首先把它们局域化，而在一定强度内让更有韧性的拓扑边界态凸显出来^[84]。在这个意义上，无序让拓扑态变得更稳定。通过自能修正，无序散射也可把能带从平庸重整化到非平庸区域，实现所谓的安德森拓扑绝缘体^[85, 86]。

Box 5 陈绝缘体到安德森绝缘体的拓扑相变

拓扑绝缘体转变到平庸绝缘体的过程中，体能隙会关闭，对应于金属态。根据安德森局域化理论，无序会抑制波的传播；局域化标度理论指出，二维电子气在极弱的无序下就会进入安德森绝缘体相。因此，一个自然且基本的问题是：强无序将如何影响陈绝缘体及其拓扑相变？

研究发现，当费米能级位于带隙时，电导在弱无序下保持量子化，随着无序增强电导逐渐变小进入金属态，在更强的无序下最终消失，成为拓扑平庸的安德森绝缘体^[81]。对于可翻转自旋的无序，随着无序强度增加，电导的变化趋势依赖于费米能的位置。具体来说，当费米能处于电中性点时，无序强度超过某个临界值，量子化电导会突然消失；而费米能在其他能量时，电导在更大无序下仍可保持有限大小，且在相变点前后可以保持接近半整数化的电导。这种反常的电子输运现象可归因于价带和导带所携带的贝里曲率的交换。

从拓扑学角度看，量子化的霍尔电导可用拓扑电荷的概念来描述，与自旋织构有关。对于陈数为-1的陈绝缘体，价带和导带携带的拓扑电荷分别为 $Q_v = -1$ 和 $Q_c = 1$ 。其拓扑性质类似于一个斯格明子，如图5(a)所示。在自旋织构中，这表现为自旋在北极向下($Q_v = -1$)或向上($Q_c = 1$)，在南极则相反，而在赤道平面内自旋平行于平面。当施加自旋翻转无序时，由于不同自旋态共存，靠近赤道的电子态会发生强烈散射；而由于缺乏相反自旋电子态，南北极的电子态几乎不受杂质影响。这导致斯格明子分裂成带有 $\pm 1/2$ 拓扑电荷的半斯格明子。随着无序强度增大，这些半斯格明子会发生相互作用和移动：某些半斯格明子彼此吸引，另一些则相互排斥。当无序进一步增强时，导带与价带所携带的相反的半斯格明子互相交换，使得价带所携带的拓扑电荷突然变为零，从而导致电导的消失和安德森局域化的发生。

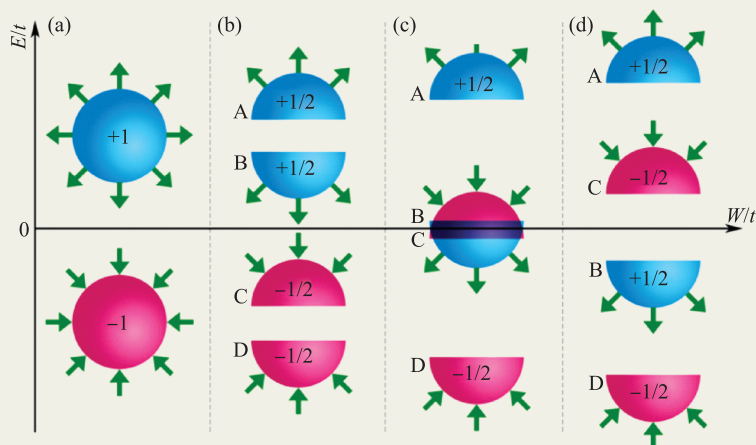


图3 在无序强度逐渐增大时，价带和导带中的自旋织构(即斯格明子和半斯格明子)所携带的拓扑电荷的演化

7 总结与展望

本文介绍了研究布洛赫电子的几何拓扑过程中常用的几种模型,包括 Hofstadter 蝴蝶模型、六角晶格模型和多带连续模型。前两种模型孕育了这个领域最初的理论发现,而后者帮我们解析理解这些理论思想的精华。基于泡利算符和 Γ 矩阵^[34]的二带、四带模型也可以解析延拓到整个布里渊区,为寻找拓扑绝缘体实际材料起到了引导作用。本文也概述了第一性原理计算如何实现理论与实验的对接,以及各种拓扑几何效应如何在无序散射中凸显和消失。

在普通晶体中实现 Hofstadter 蝴蝶能谱需要极强的磁场。直到几十年以后,人们才在石墨烯/氮化硼的莫尔超晶格上进行了细致的实验观察^[87, 88]。有意思的是, Hofstadter 问题也有一个时空晶体对应,其中均匀恒定的电场会让时空的平移对称发生一个规范变形;变形后的时间和空间平移彼此不再对易,除非它们张开的时空面积上穿过整数个电通量子。这也会造成一个分形的弗洛凯—布洛赫能谱和奇特的波函数性质^[89]。

由于石墨烯等二维材料,包括其半导体、磁性、超导等形态的实验发现,六角晶格模型及其各种变形式得到了充分应用^[90]。通过能谷与轨道和自旋耦合,它可以受光、磁场和应变的调控,成为研究各种交叉响应的理想平台。另外,对这类电子体系的研究也启发了其他领域的应用,比如具有六角超结构的光子晶体^[91]和声子晶体^[92]材料也表现出卓越的拓扑几何特性。

各种连续模型在拓扑几何性质的研究中有大量应用,不仅可用来刻画体态的拓扑相变,也可用来描述边界态的行为。连续模型发端于半导体中的有效质量近似,后来发展到多带情形,用以描述某动量点附近的能带结构。在高对称点处,能带往往有简并,具有某种不可约群论表示。动量在不同方向上对高对称点的偏离导致简并解除,其具体形式和大小可以用 $k \cdot p$ 微扰论方法得到,生成各种有效连续模型^[93]。值得注意的是,简并能

带子空间有些整体性质,比如非阿贝尔贝里曲率和磁矩,并不包含在这种有效哈密顿量矩阵内,需要额外考虑子空间与其他能带的耦合^[94]。

实际晶体材料拓扑几何性质的研究往往还需要第一性原理计算。Wannier 内插法让传统的计算程序可以方便地处理波函数的信息,大大简化了贝里相位和贝里曲率等几何量的计算。一般说来,物理量的计算不能仅依靠这种方法生成的紧束缚哈密顿量矩阵,还需知道 Wannier 函数基组间的矩阵元。比如,贝里曲率就有一部分来自位置算符矩阵元的贡献。最大局域化 Wannier 函数,可在一定程度上减少但并不能完全排除这种贡献^[57]。

朗道能级被无序局域化的过程相当复杂,其扩展态的最终消失有赖于朗道能级间的耦合以及与携带相反陈数状态的湮灭。该过程也适用于零磁场下的陈绝缘体,能带里状态的完全局域化只有当贝里曲率被彻底抵消干净才能完成。一般认为,扩展态消失之前只存在于一些分立的能量上,那里聚集了量子化的陈数。但是,这个结论并没有严格证明,而且在多种情况下受到了挑战^[95]。时间反演对称保护下的拓扑绝缘体也有类似的行为。

电子相互作用对于拓扑几何状态的影响也是一个备受关注的问题。本文讨论的布洛赫能带都是已经考虑相互作用的平均场效果。相互作用引起的自发对称破缺,以及由之产生的拓扑相变在很大程度上也可以纳入平均场效应这个范畴。Haldane 曾讨论过费米液体中的反常霍尔效应该利用费米面上的贝里相位来计算,从而避开费米面下不能严格定义的单粒子态^[96]。Volovik 曾引入一个利用单粒子格林函数来计算绝缘体拓扑不变量的公式^[31, 97]。但是,有些强关联体系的拓扑态,比如分数量子霍尔效应和莫特拓扑绝缘体,并不能这么刻画^[98]。因为原来的单粒子概念不能解析延拓过来^[99]。

致谢 感谢沈顺清、姚裕贵、江华和周建辉等在本文撰写过程中给予的宝贵意见和建议。

参考文献

- [1] Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P *et al.* Phys. Rev. Lett., 1982, 49: 405
- [2] Hofstadter D R. Phys. Rev. B, 1976, 14: 2239
- [3] Thouless D J, Niu Q. J. Phys. A: Math. Gen., 1983, 16: 1911
- [4] Berry M V. A. Mathematical and Physical Sciences, 1997, 392: 45
- [5] Avron J E, Osadchy D, Seiler R. Physics Today, 2003, 56: 38
- [6] Onsager L. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 1952, 43: 1006
- [7] Gao Y, Niu Q. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2017, 114: 7295
- [8] Chang M C, Niu Q. Phys. Rev. B, 1996, 53: 7010
- [9] Chang M C, Niu Q. Phys. Rev. Lett., 1995, 75: 1348
- [10] Reich S, Maultzsch J, Thomsen C *et al.* Phys. Rev. B, 2002, 66: 035412
- [11] Zhang Y, Tan Y W, Stormer H L *et al.* Nature, 2005, 438: 201
- [12] Semenoff G W. Phys. Rev. Lett., 1984, 53: 2449
- [13] Haldane F D M. Phys. Rev. Lett., 1988, 61: 2015
- [14] Kane C L, Mele E J. Phys. Rev. Lett., 2005, 95: 226801
- [15] Kane C L, Mele E J. Phys. Rev. Lett., 2005, 95: 146802
- [16] Xiao D, Yao W, Niu Q. Phys. Rev. Lett., 2007, 99: 236809
- [17] Yao W, Xiao D, Niu Q. Phys. Rev. B, 2008, 77: 235406
- [18] Cao T, Wang G, Han W *et al.* Nat. Commun., 2012, 3: 887
- [19] Xiao D, Liu G B, Feng W *et al.* Phys. Rev. Lett., 2012, 108: 196802
- [20] Qiao Z, Yang S A, Feng W *et al.* Phys. Rev. B, 2010, 82: 161414
- [21] Tang C, Cheng B, Aldosary M *et al.* APL Materials, 2017, 6: 026401
- [22] Deng Y, Yu Y, Shi M Z *et al.* Science, 2020, 367: 895
- [23] Castro E V, Novoselov K S, Morozov S V *et al.* Phys. Rev. Lett., 2007, 99: 216802
- [24] Qiao Z, Tse W K, Jiang H *et al.* Phys. Rev. Lett., 2011, 107: 256801
- [25] Zhang F, MacDonald A H. Phys. Rev. Lett., 2012, 108: 186804
- [26] Sha Y, Zheng J, Liu K *et al.* Science, 2024, 384: 414
- [27] Bistrizter R, MacDonald A H. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2011, 108: 12233
- [28] Cao Y, Fatemi V, Fang S *et al.* Nature, 2018, 556: 43
- [29] Lu X, Stepanov P, Yang W *et al.* Nature, 2019, 574: 653
- [30] Nuckolls K P, Oh M, Wong D *et al.* Nature, 2020, 588: 610
- [31] Volovik G E. The Universe in a Helium Droplet. Oxford University Press, 2009
- [32] Kane E O. Chapter 3, The k·p Method. In: Willardson R K, Beer A C ed. Semiconductors and Semimetals, Vol. 1. Elsevier, 1966. pp.75—100
- [33] Jungwirth T, Niu Q, MacDonald A H. Phys. Rev. Lett., 2002, 88: 207208
- [34] Murakami S, Nagaosa N, Zhang S C. Science, 2003, 301: 1348
- [35] Bernevig B A, Hughes T L, Zhang S C. Science, 2006, 314: 1757
- [36] Shen S Q. Topological Insulators: Dirac Equation in Condensed Matter, Vol. 187. Singapore: Springer, 2017
- [37] Qi X L, Wu Y S, Zhang S C. Phys. Rev. B, 2006, 74: 085308
- [38] Zhang H, Liu C X, Qi X L *et al.* Nature Phys, 2009, 5: 438
- [39] Zhou B, Lu H Z, Chu R L *et al.* Phys. Rev. Lett., 2008, 101: 246807
- [40] Lu H Z, Shan W Y, Yao W *et al.* Phys. Rev. B, 2010, 81: 115407
- [41] Fradkin E, Dagotto E, Boyanovsky D. Phys. Rev. Lett., 1986, 57: 2967
- [42] Yao W, Yang S A, Niu Q. Phys. Rev. Lett., 2009, 102: 096801
- [43] Martin I, Blanter Y M, Morpurgo A F. Phys. Rev. Lett., 2008, 100: 036804
- [44] Qiao Z, Jung J, Niu Q *et al.* Nano Lett., 2011, 11: 3453
- [45] Qiao Z, Jung J, Lin C *et al.* Phys. Rev. Lett., 2014, 112: 206601
- [46] Fu L, Kane C L, Mele E J. Phys. Rev. Lett., 2007, 98: 106803
- [47] Schindler F, Cook A M, Vergniory M G *et al.* Science Advances, 2018, 4: eaat0346
- [48] Liu Z, Qiao Z, Gao Y *et al.* Phys. Rev. Res., 2024, 6: L012005
- [49] Ren Y, Qiao Z, Niu Q. Phys. Rev. Lett., 2020, 124: 166804
- [50] Wan X, Turner A M, Vishwanath A *et al.* Phys. Rev. B, 2011, 83: 205101
- [51] Zhou J H, Jiang H, Niu Q *et al.* Chinese Phys. Lett., 2013, 30: 027101
- [52] Fu B, Zou J Y, Hu Z A *et al.* Npj Quantum Mater., 2022, 7: 1
- [53] King-Smith R D, Vanderbilt D. Phys. Rev. B, 1993, 47: 1651
- [54] Marzari N, Mostofi A A, Yates J R *et al.* Rev. Mod. Phys., 2012, 84: 1419
- [55] Fang Z, Nagaosa N, Takahashi K S *et al.* Science, 2003, 302: 92
- [56] Yao Y, Kleinman L, MacDonald A H *et al.* Phys. Rev. Lett., 2004, 92: 037204
- [57] Wang X, Yates J R, Souza I *et al.* Phys. Rev. B, 2006, 74: 195118
- [58] Chen H, Niu Q, MacDonald A H. Phys. Rev. Lett., 2014, 112: 017205
- [59] Ren Y, Zeng J, Deng X *et al.* Phys. Rev. B, 2016, 94: 085411
- [60] Lowitzer S, Ködderitzsch D, Ebert H. Phys. Rev. Lett., 2010, 105: 266604
- [61] Weischenberg J, Freimuth F, Sinova J *et al.* Phys. Rev. Lett., 2011, 107: 106601
- [62] Xiao D, Shi J, Niu Q. Phys. Rev. Lett., 2005, 95: 137204
- [63] Thonhauser T, Ceresoli D, Vanderbilt D *et al.* Phys. Rev. Lett., 2005, 95: 137205
- [64] Shi J, Vignale G, Xiao D *et al.* Phys. Rev. Lett., 2007, 99: 197202
- [65] Chen H, Wang T C, Xiao D *et al.* Phys. Rev. B, 2020, 101: 104418
- [66] Culcer D, Sinova J, Sinitsyn N A *et al.* Phys. Rev. Lett., 2004, 93: 046602
- [67] Guo G Y, Yao Y, Niu Q. Phys. Rev. Lett., 2005, 94: 226601
- [68] Yao Y, Fang Z. Phys. Rev. Lett., 2005, 95: 156601
- [69] Guo G Y, Niu Q, Nagaosa N. Phys. Rev. B, 2014, 89: 214406

- [70] Fu L, Kane C L. Phys. Rev. B, 2006, 74:195312
- [71] Xiao D, Yao Y, Feng W *et al.* Phys. Rev. Lett., 2010, 105: 096404
- [72] Gresch D, Autès G, Yazyev O V *et al.* Phys. Rev. B, 2017, 95: 075146
- [73] Essin A M, Moore J E, Vanderbilt D. Phys. Rev. Lett., 2009, 102: 146805
- [74] Wang Z, Sun Y, Chen X Q *et al.* Phys. Rev. B, 2012, 85:195320
- [75] Wray L A, Xu S Y, Xia Y *et al.* Nature Phys., 2011, 7:32
- [76] Nomura K, Koshino M, Ryu S. Phys. Rev. Lett., 2007, 99: 146806
- [77] Khmel'nitskii D E. JETP Letters, 1983, 38:552
- [78] Laughlin R B. Phys. Rev. Lett., 1984, 52:2304
- [79] Liu D Z, Xie X C, Niu Q. Phys. Rev. Lett., 1996, 76:975
- [80] Sheng D N, Weng Z Y. Phys. Rev. Lett., 1997, 78:318
- [81] Qiao Z, Han Y, Zhang L *et al.* Phys. Rev. Lett., 2016, 117: 056802
- [82] Sheng D N, Weng Z Y, Sheng L *et al.* Phys. Rev. Lett., 2006, 97: 036808
- [83] Onoda M, Avishai Y, Nagaosa N. Phys. Rev. Lett., 2007, 98: 076802
- [84] Jiang H, Qiao Z, Liu H *et al.* Phys. Rev. Lett., 2012, 109:116803
- [85] Li J, Chu R L, Jain J K *et al.* Phys. Rev. Lett., 2009, 102:136806
- [86] Groth C W, Wimmer M, Akhmerov A R *et al.* Phys. Rev. Lett., 2009, 103:196805
- [87] Dean C R, Wang L, Maher P *et al.* Nature, 2013, 497:598
- [88] Hunt B, Sanchez-Yamagishi J D, Young A F *et al.* Science, 2013, 340:1427
- [89] Wang J, He J J, Niu Q. Fractional Stark Ladders and Novel Quantum Dynamics of Space-Time SSH Lattices, <https://arxiv.org/abs/2409.13260v1>
- [90] Ren Y, Qiao Z, Niu Q. Rep. Prog. Phys., 2016, 79:066501
- [91] Ozawa T, Price H M, Amo A *et al.* Rev. Mod. Phys., 2019, 91: 015006
- [92] Zhu W, Deng W, Liu Y *et al.* Rep. Prog. Phys., 2023, 86:106501
- [93] Yu Z M, Zhang Z, Liu G B *et al.* Science Bulletin, 2022, 67:375
- [94] Chang M C, Niu Q. J. Phys.: Condens. Matter, 2008, 20:193202
- [95] Xiong G, Wang S D, Niu Q *et al.* EPL, 2008, 82:47008
- [96] Haldane F D M. Phys. Rev. Lett., 2004, 93:206602
- [97] Volovik G E. JETP Lett., 2010, 91:55
- [98] Zhao J, Mai P, Bradlyn B *et al.* Phys. Rev. Lett., 2023, 131: 106601
- [99] Gavensky L P, Sachdev S, Goldman N. Phys. Rev. Lett., 2023, 131:236601
- [100] Ren Y, Xiao C, Saparov D *et al.* Phys. Rev. Lett., 2021, 127: 186403
- [101] Trifunovic L, Ono S, Watanabe H. Phys. Rev. B, 2019, 100: 054408



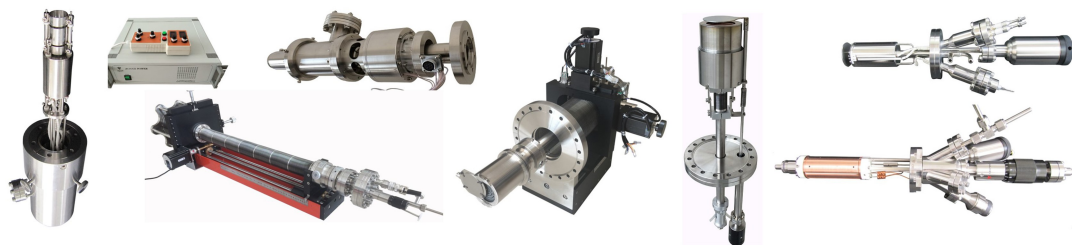
大连齐维科技发展有限公司

地址: 大连高新园区龙头工业园龙天路27号

电话: 0411-8628-6788 传真: 0411-8628-5677

E-mail: info@chi-vac.com HP: <http://www.chi-vac.com>

表面处理和薄膜生长产品: 氩离子枪、RHEED、磁控溅射靶、束源炉、电子轰击蒸发源、样品台。



超高真空腔室和薄膜生长设备: PLD系统、磁控溅射系统、分子束外延系统、热蒸发镀膜装置。

