

# 博士学位论文

磁场与磁性调控的拓扑材料输运性质研究

**TRANSPORT PROPERTIES OF  
TOPOLOGICAL MATERIALS TUNED BY  
MAGNETIC FIELD AND MAGNETISM**

李帅

**哈尔滨工业大学**

2023 年 4 月

国内图书分类号：O469

国际图书分类号：538.9

学校代码：10213

密级：公开

## 博士学位论文

# 磁场与磁性调控的拓扑材料输运性质研究

博士研究生：李帅

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：2023 年 4 月

授予学位单位：哈尔滨工业大学

Classified Index: O469  
U.D.C: 538.9

Dissertation for the Doctoral Degree

# **TRANSPORT PROPERTIES OF TOPOLOGICAL MATERIALS TUNED BY MAGNETIC FIELD AND MAGNETISM**

<b>Candidate:</b>	Shuai Li
<b>Supervisor:</b>	Prof. Hai-Zhou Lu
<b>Academic Degree Applied for:</b>	Doctor of Science
<b>Speciality:</b>	Physics
<b>Affiliation:</b>	Southern University of Science and Technology
<b>Date of Defence:</b>	April, 2023
<b>Degree-Conferring-Institution:</b>	Harbin Institute of Technology

## 摘要

拓扑物理是本世纪以来凝聚态物理学研究中取得的最大的进展之一。拓扑概念的引入使得人们对物相的分类和认知提升了一个新的台阶。从拓扑概念中衍生出来的第一个拓扑材料即为拓扑绝缘体，它也是拓扑材料中最具代表性的一个。拓扑绝缘体内部的能带结构与外界拓扑不同，因此拓扑相变发生在其界面处，这使其在界面拥有了稳定的界面态。这种拓扑保护的界面态是拓扑材料最广为人知的特性。在拓扑绝缘体发现之后，狄拉克半金属、外尔半金属、节线半金属等拓扑材料被陆续提出并一一实验实现。近年来，研究者开始研究磁性拓扑材料和高阶拓扑材料，并在光学、声学、电路等经典系统中自主设计和制造拓扑系统。因其与传统材料拓扑不同的能带结构，拓扑材料往往展现出各种新奇的物理性质。这使它们成为了研究新一类输运现象的绝佳平台。本论文将具体从以下几个方面研究拓扑材料中的输运特性。

从量子理论出发，我们研究了多个低能有效模型中各个方向的磁电阻，并考虑了不同杂质势能的影响。通过对磁电阻的解析推导和计算，我们得到了两个重要的结果：第一，在拥有单个狄拉克锥型能带结构的材料中量子极限下的纵向磁电阻反比于磁场强度且不受杂质散射的影响；第二，量子极限下的线性磁电阻并非拥有线性能谱的系统所独有，其同样存在于拥有二次方型能谱的系统中。此外，计算表明长程高斯势能型杂质可以同时带来线性的纵向和横向磁电阻，而屏蔽库伦势能型杂质只能导致线性的横向磁电阻。以上这些结果给出了准一维朗道能带系统中杂质散射的机制和物理意义，并解释了实验上观测到的线性纵向磁电阻。本文中对磁电阻的研究给拓扑半金属的输运性质带来了新的见解，并推动了线性磁电阻方向的研究进展。

我们发展了磁场中电荷密度波的理论框架，并通过计算发现在  $\text{ZrTe}_5$  中电子和声子之间的相互作用是形成电荷密度波的关键，而费米波矢固定的公度电荷密度波支持了  $\text{ZrTe}_5$  中的量子霍尔平台。这种电荷密度波机制的三维量子霍尔效应的独特之处在于磁场强度同时调控了系统在沿磁场方向发生的序参数相变和在垂直于磁场方向的平面内发生的拓扑相变。本文中的理论分析和计算结果解释了实验在  $\text{ZrTe}_5$  中观测到的三维量子霍尔效应，有助于将无耗散输运早日投入到实际应用中。

我们提出了通过非局域化测量来区分轴子绝缘体和普通绝缘体的方法，并对比研究了理想轴子绝缘体和反铁磁拓扑绝缘体  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  的非局域化电阻值。数值计算表明  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  中存在着未量子化的非局域化输运现象，并且其非局域化电阻

对费米能量变化、杂质和电极厚度的影响有一定的抵抗力。此外，本论文还发现了奇数层和偶数层的  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  器件可以通过不同测量方式下得到的非局域化电阻值加以区分。这些结果为实验上测量  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  的非局域化输运以及寻找轴子绝缘体提供了切实可行的方案。

**关键词：**磁电阻；拓扑绝缘体；拓扑半金属；三维量子霍尔效应

## Abstract

Topological physics is one of the greatest advancements made in the study of condensed matter physics since this century. The introduction of topology concepts has taken the classification and understanding of matter to a new level. The first topological material derived from the concept of topology is the topological insulator, which is also the most representative one among topological materials. The bulk energy band structure of topological insulators is topologically different from that of the outside; therefore, the topological transition happens at the interface, giving the topological insulator stable interface states. The topologically protected interface states are the most known feature of the topological materials. After the discovery of topological insulators, many other topological materials have been proposed and experimentally realized, including Dirac semimetals, Weyl semimetals, nodal-line semimetals, and so on. In recent years, researchers have started to investigate magnetic topological materials and higher-order topological materials, and design and manufacture topological systems in classical systems such as optical systems, acoustic systems, and electric circuits. Because their energy band structures are topologically different from those of traditional materials, topological materials often exhibit various novel physical properties. This makes them the ideal platform for investigating a new class of transport phenomena. This dissertation will study the transport properties of topological materials from the following aspects.

Starting from the quantum theory, we have studied the magnetoresistance in various directions in several low-energy effective models, and the effect of different types of impurities has been considered. By the analytical derivation and calculations of the magnetoresistance, we have obtained two important results: first, the longitudinal magnetoresistance in the quantum limit is inversely proportional to the magnetic field strength, independent of impurity scattering, in materials with a single Dirac cone dispersion; second, linear magnetoresistance in the quantum limit is not exclusive to systems with linear energy dispersion, but can also occur in systems with quadratic energy dispersion. In addition, calculations show that the long-range Gaussian-type impurity can induce both linear longitudinal and transverse magnetoresistance, but the screened-Coulomb-type impurity can only induce linear transverse magnetoresistance. The above results reveal the scattering mechanisms and the corresponding physical meaning in the quasi-one-dimensional systems with Landau bands, and explain the linear longitudinal magnetoresistance observed in experiments. The investigation of magnetoresistance in this dissertation brings new insights into the transport properties of topological semimetals and advances research progress in the field of linear magnetoresistance.

We have developed the theory of the charge density wave under the magnetic field. Calculations show that the electron-phonon interactions in  $\text{ZrTe}_5$  are responsible for the form of the charge density wave, and the three-dimensional quantum Hall effect of  $\text{ZrTe}_5$  is supported by a fixed-Fermi-wavevector commensurate charge density wave. The three-dimensional quantum Hall effect supported by the charge density wave is special in that the magnetic field strength simultaneously governs the order parameter phase transition of the system along the magnetic field direction and the topological phase transition perpendicular to the magnetic field direction. Theoretical analysis and calculations in this dissertation can explain the three-dimensional quantum Hall effect observed in  $\text{ZrTe}_5$  and help to further promote the dissipationless transport into practical applications.

We have proposed using the nonlocal measurement to distinguish the axion insulators and normal insulators, and comparatively investigated the nonlocal resistance in the ideal axion insulator and the antiferromagnetic  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ . Numerical calculations show that there exists non-quantized nonlocal transport in  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ , which is robust against Fermi energy change, impurities, and electrode thickness. Additionally, this dissertation discovers that  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  devices of even-number-layer and odd-number-layer can be distinguished based on the nonlocal resistance measured in different ways. The above results provide a practical approach to measuring the nonlocal transport of  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  in experiments and search for axion insulators.

**Keywords:** magnetoresistance, topological insulator, topological semimetal, three-dimensional quantum Hall effect

# 目 录

摘 要.....	I
Abstract .....	III
第 1 章 绪论.....	1
1.1 课题背景及研究目的和意义 .....	1
1.2 拓扑系统的理论探索以及实验实现 .....	5
1.2.1 拓扑材料的特性以及测量方法.....	5
1.2.2 拓扑绝缘体.....	6
1.2.3 拓扑半金属.....	11
1.2.4 磁性拓扑材料.....	14
1.2.5 高阶拓扑材料.....	15
1.2.6 人工制造的拓扑系统.....	16
1.3 拓扑材料中独特的输运性质 .....	17
1.3.1 材料输运性质的研究方法.....	18
1.3.2 量子化的输运现象.....	19
1.3.3 量子自旋霍尔效应和量子反常霍尔效应.....	21
1.3.4 拓扑材料体态贡献的独特输运现象.....	25
1.4 拓扑材料输运性质研究的现存问题 .....	27
1.5 本论文主要研究内容 .....	28
第 2 章 无质量狄拉克粒子的本征磁电阻特性.....	30
2.1 引言 .....	30
2.2 低能有效模型和朗道能带 .....	30
2.3 磁电阻的计算 .....	34
2.3.1 朗道能带的格林函数和自能.....	36
2.3.2 磁电导率的久保公式计算.....	38
2.4 量子振荡区域的磁电阻 .....	40
2.4.1 纵向磁电阻.....	41
2.4.2 横向磁电阻.....	44
2.4.3 电阻量子振荡的频率和相位.....	47
2.5 量子极限区域的磁电阻 .....	51
2.6 本章小结 .....	55
第 3 章 拓扑半金属中的线性磁电阻.....	56



3.1 引言 .....	56
3.2 理论研究中的杂质处理 .....	57
3.2.1 杂质平均理论 .....	57
3.2.2 杂质模型 .....	59
3.3 低能有效模型和朗道能带 .....	60
3.4 散射时间和输运时间 .....	62
3.4.1 最低朗道能带的输运时间 .....	62
3.4.2 朗道 $n = 1$ 的能带的散射时间 .....	64
3.5 量子极限下的线性磁电阻 .....	65
3.5.1 纵向磁电导 .....	66
3.5.2 横向磁电导和霍尔电导 .....	69
3.5.3 磁电阻对磁场强度的依赖关系 .....	73
3.6 本章小结 .....	75
<b>第 4 章 电荷密度波导致的三维量子霍尔效应 .....</b>	<b>76</b>
4.1 引言 .....	76
4.2 三维量子霍尔效应的机制 .....	77
4.3 $\text{ZrTe}_5$ 的低能有效模型 .....	78
4.4 最低朗道能带的电荷密度波 .....	79
4.4.1 电子-声子相互作用 .....	79
4.4.2 电子-电子相互作用 .....	82
4.5 $\text{ZrTe}_5$ 中的电荷密度波和三维量子霍尔效应 .....	83
4.6 本章小结 .....	86
<b>第 5 章 反铁磁拓扑绝缘体 <math>\text{MnBi}_2\text{Te}_4</math> 的输运特性 .....</b>	<b>87</b>
5.1 引言 .....	87
5.2 模型和数值计算方法 .....	88
5.2.1 单个 $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ 七重层的哈密顿量 .....	88
5.2.2 反铁磁格点模型和 $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ 能带结构 .....	88
5.2.3 多端口器件中电阻的计算方法 .....	91
5.3 轴子绝缘体在非局域化测量中的理论电阻值 .....	92
5.4 $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ 六端口器件中的电阻 .....	93
5.5 本章小结 .....	96
结论 .....	98
参考文献 .....	100

攻读博士学位期间发表的论文.....	114
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.....	115
致 谢.....	116
个人简历.....	118

# Contents

<b>Abstract (In Chinese)</b> .....	I
<b>Abstract (In English)</b> .....	III
<b>Chapter 1 Introduction</b> .....	1
1.1 Background, purpose, and significance of the research .....	1
1.2 Theoretical exploration and experimental realization of topological systems .	5
1.2.1 Properties and measurement method of topological materials .....	5
1.2.2 Topological insulators .....	6
1.2.3 Topological semimetals.....	11
1.2.4 Magnetic topological materials .....	14
1.2.5 Higher-order topological materials .....	15
1.2.6 Artificial topological systems.....	16
1.3 Unique transport properties in topological materials .....	17
1.3.1 Research methods of material transport properties.....	18
1.3.2 Quantized transport .....	19
1.3.3 Quantum spin Hall effect and quantum anomalous Hall effect .....	21
1.3.4 Unique transport phenomena contributed by bulk states of topological materials .....	25
1.4 Existing problems in the study of transport properties of topological materials .....	27
1.5 Main research content of this dissertation .....	28
<b>Chapter 2 Intrinsic magnetoresistance of massless Dirac particle</b> .....	30
2.1 Introduction .....	30
2.2 Low-energy effective model and Landau bands.....	30
2.3 Calculation of magnetoconductance.....	34
2.3.1 Green function and self-energy for Landau bands.....	36
2.3.2 Kubo formula for magnetoconductivity.....	38
2.4 Magnetoconductance in the quantum oscillation regime .....	40
2.4.1 Logitudinal magnetoconductance .....	41
2.4.2 Transverse magnetoconductance.....	44
2.4.3 Oscillation frequency and phase of the resistance .....	47
2.5 Magnetoresistance in the quantum limit.....	51
2.6 Summary.....	55
<b>Chapter 3 Linear magnetoresistance in topological semimetals</b> .....	56
3.1 Introduction .....	56

3.2 Impurity handling in theoretical studies .....	57
3.2.1 Impurity average theory .....	57
3.2.2 Impurity models .....	59
3.3 Low-energy effective model and Landau bands.....	60
3.4 Scattering time and transport time.....	62
3.4.1 Transport time of the lowest Landau band.....	62
3.4.2 Scattering time of bands with index $n=1$ .....	64
3.5 Linear magnetoresistance in the quantum limit.....	65
3.5.1 Logitudinal magnetoconductance .....	66
3.5.2 Transverse and Hall magnetoconductance .....	69
3.5.3 Dependence of magnetoresistance on magnetic field strength .....	73
3.6 Summary.....	75
<b>Chapter 4 Charge density wave induced three-dimensional quantum Hall effect .....</b>	<b>76</b>
4.1 Introduction .....	76
4.2 Mechanism of three-dimensional quantum Hall effect .....	77
4.3 Low-energy effective model of $\text{ZrTe}_5$ .....	78
4.4 Charge density wave in the lowest landau band.....	79
4.4.1 Electron-phonon interaction.....	79
4.4.2 Electron-electron interaction.....	82
4.5 Charge density wave and three-dimensional quantum Hall effect in $\text{ZrTe}_5$ ...	83
4.6 Summary.....	86
<b>Chapter 5 Transport properties of AFM topological insulator <math>\text{MnBi}_2\text{Te}_4</math> .....</b>	<b>87</b>
5.1 Introduction .....	87
5.2 Models and numerical calculation methods .....	88
5.2.1 Hamiltonian of single $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ septuple layer .....	88
5.2.2 AFM lattice model and band structure of $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ .....	88
5.2.3 Calculation method for resistance of the multi-terminal device .....	91
5.3 Nonlocal resistance of the ideal axion insulator .....	92
5.4 Resistance of $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ six-terminal device .....	93
5.5 Summary.....	96
<b>Conclusions.....</b>	<b>98</b>
<b>References .....</b>	<b>100</b>
<b>Publication in the period of Ph.D. education.....</b>	<b>114</b>
<b>Statement of copyright and Letter of authorization .....</b>	<b>115</b>
<b>Acknowledgements.....</b>	<b>116</b>
<b>Resume .....</b>	<b>118</b>



# 第 1 章 绪论

本论文研究的课题为拓扑材料中的输运特性。本章将首先在 1.1 节中介绍凝聚态物理中拓扑的概念以及其意义和应用；在 1.2 节中详细介绍不同种类的拓扑系统以及在理论方面和实验方面对其电子能带结构的探索；之后在 1.3 节中介绍在拓扑材料中存在的独特输运现象；在 1.4 节中综述目前拓扑材料输运性质的研究最新进展以及现存问题；最后在 1.5 节中给出本论文的研究内容。

## 1.1 课题背景及研究目的和意义

对物质状态的分类一直以来是人类科学认知中重要的一环。从固态、液态和气态三种简单的物相到现代物理中的铁磁相、反铁磁相，超导相等，物相的分类在不断地发展。随之，固体物理（solid-state physics）领域的物理学家在二十世纪六十年代开始将他们所研究的领域称作凝聚态物理（condensed-matter physics）<sup>[1]</sup>。他们所研究的对象不仅有固体，还包含了液体，等离子体，以及其他一些非固态体系，而物相的分类方法以及新物相的探索一直是凝聚态物理中最为重要的研究主题。

对系统不同相的对称性分析可以很好地描述相变。例如，从固态到液态再到气态，平移对称性不断地变高了；从铁磁相到非磁性相，旋转对称性变高了。基于对称性变化而发展出的朗道相变理论<sup>[2]</sup>为近代凝聚态物理中物相分类的普适方法<sup>[3,4]</sup>。然而，对于 1980 年实验上发现的量子霍尔效应<sup>[5]</sup>，对称性分析的方法却不再适用。

量子霍尔效应是量子化的一个宏观体现。在二维电子气系统中，于垂直二维平面的方向施加磁场，纵向流动的电子（或空穴）会因洛伦兹力发生偏转，从而产生横向的电压，即霍尔电压（Hall voltage）。霍尔电阻为霍尔电压和纵向电流的比值。随着磁场强度的不断增强，原本正比于磁场强度的霍尔电阻会变化为一个霍尔平台（Hall plateau），于此同时纵向电阻会降为零，如图 1-1 所示。即在一段磁场强度范围内，霍尔电阻的值不再跟随磁场强度发生变化，而是一个固定的常数。这个电阻常数的值为  $h/(ne^2)$ ，其中  $e$  为电子的电荷量， $h$  为普朗克常数， $n$  为整数。量子霍尔效应体现的是系统内量子化的导电通道（这里的整数  $n$  即为导电通道的个数），它只能整数个地变化。当系统内只有一个导电通道时，霍尔电阻为  $h/e^2 \approx 25.8 \text{ k}\Omega$ 。导电通道的个数随着磁场强度的增大而不断减少，霍尔电阻从而有了一个个量子化的值。量子霍尔效应并不依赖于实验材料和装置的细节，因此在实验中测量到的量子化电阻是十分精确的。早在 1987 年便有实验<sup>[6]</sup>报道在不同样品之间测得的量子化霍尔电阻误差仅为  $5 \times 10^{-9}$ 。此外，量子化的霍尔电阻是与物理常数  $e$  和  $h$

直接相连的,这使它变得更加重要。在 von Klitzing 发现了量子霍尔效应五年之后,他便被授予了诺贝尔物理学奖。对于量子霍尔效应,以往对称性分析的方法却无法描述系统的相变。因为在增大磁场强度的过程中,系统的对称性没有发生任何变化,但量子化的霍尔电阻以及不同的霍尔平台却表明系统在强磁场下有着不同的物相。在对量子霍尔效应的理论研究中<sup>[7,8]</sup>,一种新的分类方法,即拓扑分类,被引入到了凝聚态物理学中。

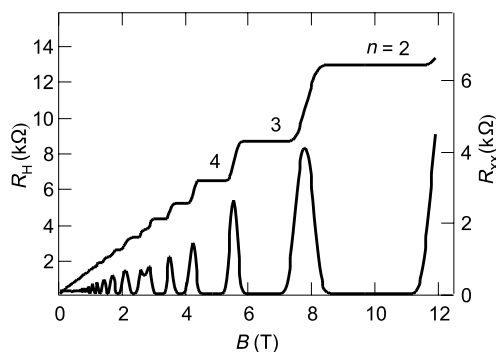


图 1-1 量子霍尔效应<sup>[9]</sup>。在温度为 0.3 K 时, GaAs/AlGaAs 异质结中测量得到的霍尔电阻 $R_H$ 和纵向电阻 $R_{xx}$ , 其中 $B$ 为磁场强度。

Fig. 1-1 The quantum Hall effect<sup>[9]</sup>. Experiment measurement of the Hall resistance  $R_H$  and longitudinal resistance  $R_{xx}$  of GaAs/AlGaAs heterostructure at a temperature of 0.3 K ( $B$  is the magnetic field strength).

拓扑概念的引入开启了凝聚态物理研究的新篇章。拓扑不变量 (topological invariance) 原本是数学中的概念,它是用来区分不同几何对象的。两个几何物体拓扑相同即表明可以从其中一个物体通过连续地形变得到另一个物体,如图 1-2 所示。拓扑概念中最为著名的一个例子为:咖啡杯和甜甜圈是拓扑相同的(它们都有一个孔洞),但它们和橘子是拓扑不同的。在凝聚态物理学中,拓扑被用来分类不同的物相。因为现代物理研究中关注的通常是系统的能量,因此物相的拓扑分类往往和能带理论紧密相连。系统中的电子(或准粒子)是从能量最低的态开始填充(对费米子而言,泡利不相容原理要求每一个态只能由一个费米子占据),当填满后能量最高的态和下一处可以被占据的态之间有较大能量差时,这个能量差即为系统的能隙大小。和数学中连续形变类似,拓扑相同的物相可以通过在不关闭能隙(即能隙大小没有变为零)的情况下连续变化能隙的大小联系起来<sup>[4]</sup>。量子霍尔效应中处于不同霍尔平台时的系统是拓扑不同的。随着磁场强度的增大,电阻从一个霍尔平台变化到另一个平台时,系统的能隙经历一次闭合又打开的过程。系统的拓扑不变量即为霍尔电阻 $h/(ne^2)$ 中的整数 $n$ 。在量子霍尔效应中实现的拓扑态是需要外加磁场的。

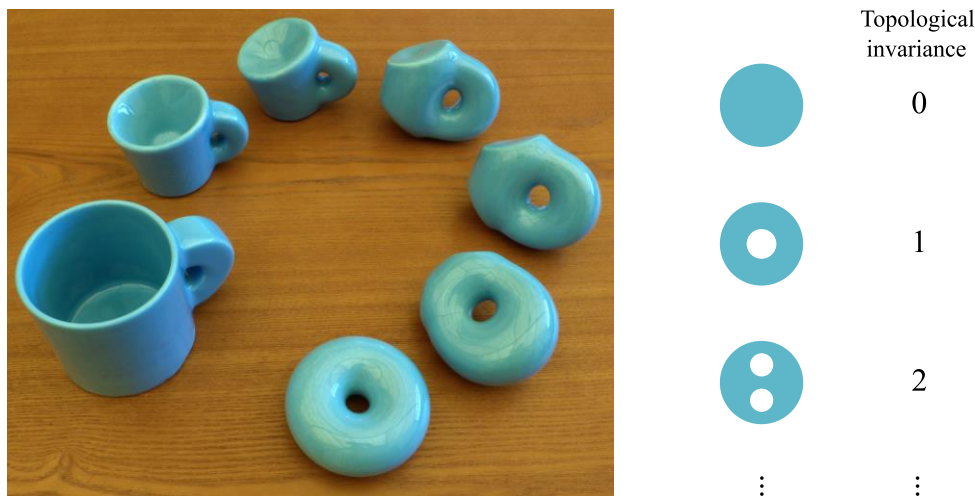


图 1-2 数学中的拓扑概念。拓扑等价的咖啡杯和甜甜圈可以通过连续地变形相互转变，拓扑不变量即对应着孔洞的个数。左图由 Keenan Crane 和 Henry Segerman 创作[CC-BY-SA-3.0]。

Fig. 1-2 The concept of topology in math. The mug and donut are topologically equal and can be related by a continuous deformation, and the topological invariant is the number of holes. The left picture is created by Keenan Crane and Henry Segerman / [CC-BY-SA-3.0].

在凝聚态物理中有了拓扑的概念后，理论物理学家很快预测了一种无需外加磁场即存在于材料中的拓扑态<sup>[10,11]</sup>。这种新的拓扑物态随后在实验中也观测到了<sup>[12]</sup>。拥有这种新奇拓扑态的材料便是拓扑绝缘体。从能带理论出发，绝缘体是拥有较大能隙的一类材料，因为其能隙下方的态被完全填充，没有可以自由移动的载流子所以无法导电。拓扑绝缘体的材料内部能带也有较大的能隙，但它与普通绝缘体是拓扑不同的，两者无法通过在不关闭能隙的情况下连续变化能隙大小而相互转变。从拓扑绝缘体转变为普通绝缘体的过程中能隙一定会先关闭再打开。这种拓扑相变和量子霍尔效应中从一个霍尔平台变化到另一个霍尔平台时能隙的变化情况是一致的。在拓扑绝缘体材料内部与材料外界环境接触的界面存在着能隙为零的界面态。因此，拓扑绝缘体的材料内部绝缘但材料表面（二维体系即为边界）导电，这是拓扑绝缘体的独特性质（将在下一小节详细介绍）。普通绝缘体和拓扑绝缘体的区别可以从图 1-3 中不同能带结构的示意图体现出来。拓扑绝缘体的发现仅仅是拓扑概念引入凝聚态物理研究中的开端。用拓扑分类的方法区分出有别于普通材料（拓扑不变量为零）的材料通常被统称为拓扑材料（拓扑不变量非零）。除拓扑绝缘体之外，近年来更多的拓扑材料陆续被理论预测和实验实现，包括陈绝缘体、外尔半金属、狄拉克半金属、节线半金属、高价拓扑绝缘体、磁性拓扑绝缘体等<sup>[13–17]</sup>。而拓扑分类的概念也进入了各个学科<sup>[18–22]</sup>。在 2016 年，诺贝尔物理学奖颁发给了在物理学中引入拓扑概念做出卓越贡献的三位理论物理学家，David J. Thoules, F. Duncan M. Haldane 和 J. Michael Kosterlitz。



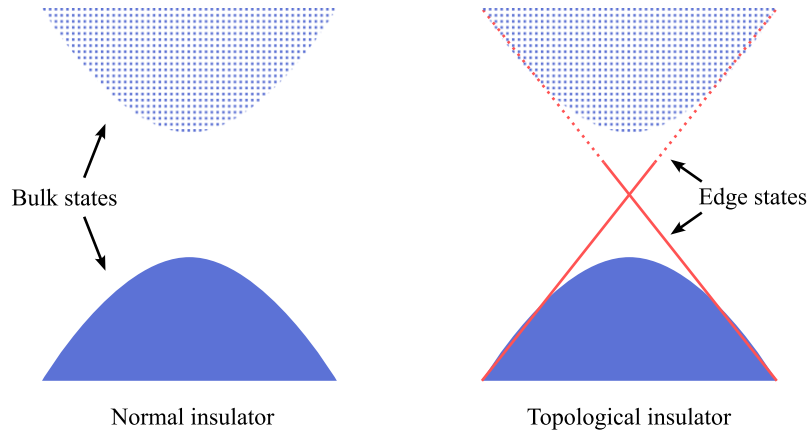


图 1-3 普通绝缘体和拓扑绝缘体的能带结构示意图。两者均为二维系统，其中一个方向上为周期性边界条件，另一个方向上取有限大小。蓝色区域为体能带，红线为边界态；实线和实体填充代表占据态，虚线和非实体填充代表未被占据的态。

Fig. 1-3 Sketch of the band structures of normal insulator and topological insulator. Both are two-dimensional systems, where periodic boundary condition is taken in one direction and finite size is taken in another direction. Blue area denotes the bulk bands, and red lines represent the edge states. Solid lines and solid fills represent the occupied states, and dashed lines and non-solid fills represent the unoccupied states.

拓扑系统的研究不仅对凝聚态理论的发展意义重大，而且在应用前景方面有更加实际的意义。在拓扑系统中独有的特性通常被称作其拓扑性质。量子化阻值和无耗散输运为众多拓扑性质中的典型代表。在量子霍尔效应中对应霍尔平台范围内的磁场强度区间内，纵向电阻阻值为零以及霍尔电阻量子化便是无耗散输运的体现。为零的纵向电阻表明纵向的电压降为零，而量子化的霍尔电阻是测量电极和样品间的接触电阻。由于量子化霍尔电阻可以与物理常量直接对应以及其可重复的超高精度，它已经成为电阻阻值的计量标准<sup>[9]</sup>并帮助实现了新的一套基于物理常量的国际单位体系<sup>[23]</sup>。另一方面，将无耗散输运应用到电子元器件中可以解决因电阻焦耳热而产生的器件发热问题，从而帮助突破电子元器件现有的性能瓶颈。拓扑系统良好的应用前景也源于其较好的鲁棒性（robustness），即高稳定性和强抗干扰能力。这是因为对于一个拓扑系统，微小的局部细节变化不会影响整体系统的拓扑性质。例如，在材料制备的过程中，即使制备出的样品大小形状不同，或一些样品较为纯净而另一些样品中含有少量的杂质，对于同样的拓扑材料，这些样品都是拓扑等价的，有着完全相同的拓扑性质。这种强抗干扰能力对于量子信息领域的研究应用十分理想，拓扑量子计算便是其中的代表。对拓扑系统的研究无疑能够帮助早日实现超越传统计算机的量子计算机。

## 1.2 拓扑系统的理论探索以及实验实现

上一节的内容引入了凝聚态物理中的拓扑概念，本节将首先在 1.2.1 小节中简要介绍拓扑相变以及在实验中确定材料拓扑性质的方法；在 1.2.2 小节中介绍  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  系列拓扑绝缘体的实验和理论研究，并对材料中的拓扑相变做具体介绍；之后将介绍目前已经实现的各种拓扑材料和系统，其中包括 1.2.3 小节中的拓扑半金属、1.2.4 小节中的磁性拓扑材料、1.2.5 小节中的高阶拓扑材料和 1.2.6 小节中的人工制造的拓扑系统。在这一节中主要以拓扑材料的能谱特征为重点，拓扑材料的输运性质将于下一节中介绍。

### 1.2.1 拓扑材料的特性以及测量方法

拓扑界面态是拓扑材料的一个显著标志，它是由处于拓扑相变点处的零能隙态导致的。以拓扑绝缘体为例，如图 1-4 所示，通过调节参数将普通绝缘体变为拓扑绝缘体的过程中，能隙会在相变点处变为零之后再变大。在理论研究中，可以调节模型参数来研究拓扑相变。在实验中控制材料的性质并不容易，但上述控制相变的参数可以是空间坐标，因此在连续的空间中，拓扑绝缘体和普通绝缘体两者的界面处即为存在着零能隙态的相变点。将真空当作一个能隙极大的绝缘体后，拓扑绝缘体的内部到外部空间即为拓扑不同的，因此拓扑绝缘体的界面会存在能隙为零的态。这便是拓扑绝缘体内部绝缘而界面导电的原因。只要拓扑绝缘体的内部拓扑性（拓扑不变量非零）没有发生变化，它与非拓扑（拓扑不变量为零）的外界接触的界面处一定会存在能隙为零的界面态。通常把这种界面态称作拓扑保护的界面态，或非平庸（non-trivial）的界面态。而相应的平庸（trivial）界面态一般有着有限大小的能隙，并且会随参数变化而变化。

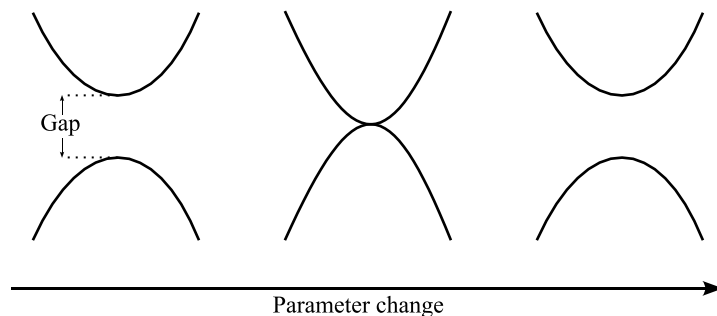


图 1-4 拓扑相变中能隙（Gap）变化的示意图。在拓扑相变中，相变点处的能隙必然为零。

Fig. 1-4 Schematic diagram of the energy gap change during the topological phase transition. In the topological phase transition, the energy gap at the transition point must be zero.

由于拓扑保护的界面态存在于所有内部电子能带结构非平庸（拓扑不变量非零）的拓扑材料中，对界面态输运性质的测量以及对内部和界面电子能带结构的直接测量为探索拓扑材料的主要方法。三维系统与外界的界面为面，而二维系统与外界的界面为边。因此二维拓扑系统拥有拓扑保护的一维边界态。得益于二维系统中成熟的实验技术，薄膜状的拓扑材料一般会被制成多端口器件（multi-terminal device），然后通过施加激发电流（excitation current）测量电压的方法探索其边界态性质。此外，还可以使用扫描隧道显微镜（scanning tunneling microscopy）或扫描微波阻抗显微镜（scanning microwave impedance microscopy）直接测量薄膜状材料局部区域的导电情况。对于三维拓扑材料，相比于测量输运性质探索其二维的表面态，使用角分辨光电子能谱仪器（angle-resolved photoemission spectroscopy）直接测量其内部和表面电子能带结构更为便捷<sup>[24]</sup>。

### 1.2.2 拓扑绝缘体

拓扑绝缘体已经在前文中多次提到，它是拓扑材料中的典型代表。在实验上，拓扑绝缘体是于 2007 年在 HgTe/CdTe 量子阱中首次实现的<sup>[12]</sup>。作为二维拓扑绝缘体，其拓扑保护的边界态拥有着独特的输运现象，即量子自旋霍尔效应。在实验中可以通过测得量子化的电阻来确定其拓扑性质<sup>[12,25]</sup>。这种二维拓扑绝缘体的边界态输运现象在 InAs/GaSb 量子阱也同样被观测到了<sup>[26,27]</sup>。量子自旋霍尔效应将于下一节详细介绍，本小节内容主要讨论拓扑绝缘体的电子能带结构。

近期，在 Bi<sub>4</sub>Br<sub>4</sub> 的实验中<sup>[28]</sup>，研究者在室温的条件下用扫描隧道显微镜直接观测到了位于边缘处导通的拓扑边界态，如图 1-5 所示。Bi<sub>4</sub>Br<sub>4</sub> 的晶体结构较为独特，它是由 Bi 原子和 Br 原子的链条先形成二维的面再堆垛成三维的体。因此在实验中能够相对容易的得到其二维边界。图 1-5 (a)为 Bi<sub>4</sub>Br<sub>4</sub> 样品中由扫描透射电子显微镜（scanning transmission electron microscopy）观测到的台阶形状地貌图。其中台阶两侧的 A、B 两个表面之间只相差一个 Bi<sub>4</sub>Br<sub>4</sub> 单层。图 1-5 (b)为扫描隧道显微镜所得到的微分电导数据的空间分布图，蓝色为不导电状态，黄色为导电状态。可以看到，在 Bi<sub>4</sub>Br<sub>4</sub> 单层的边缘处存在局域的导电态。图 1-5 (c)为微分电导随偏压大小的变化曲线，其中红色和蓝色曲线分别对应着在图 1-5 (a)中红点和蓝色矩形处的测量数据，即边缘处和内部。可以看到，在 Bi<sub>4</sub>Br<sub>4</sub> 的内部有着较大能量范围的绝缘态（即较大的能隙）；而在边缘处任何能量处都有导电态，即存在无能隙的边界态。图 1-5 (d)为微分电导随空间变化的曲线，即为图 1-5 (a)中灰色箭头所标识的 6 nm 的区域内。可以看到，导电态（即边界态）是随远离边缘的距离指数衰减的。

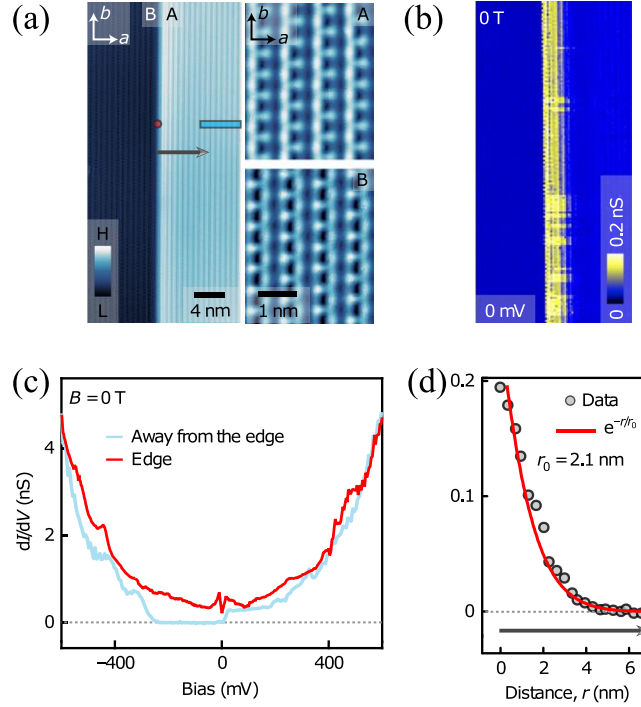


图 1-5 在  $\text{Bi}_4\text{Br}_4$  中观察到的拓扑边界态<sup>[28]</sup>。(a)在  $\text{Bi}_4\text{Br}_4$  样品中观测到的单层台阶形状地貌图；(b)微分电导数据的空间分布图；(c)不同位置的微分电导随偏压的变化曲线；(d)微分电导随远离边缘距离的变化曲线。

Fig. 1-5 Topological edge states observed in  $\text{Bi}_4\text{Br}_4$ <sup>[28]</sup>. (a) Topographic image of a single-step-shaped region in the  $\text{Bi}_4\text{Br}_4$  sample. (b) The spatial distribution of the differential conductance. (c) Differential conductances of different regions as functions of the bias. (d) Differential conductance as a function of the distance from the edge.

三维拓扑绝缘体是在 2008 年首次于实验中实现的<sup>[29–31]</sup>， $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  系列材料（包括  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ， $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ， $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  等）为其中的代表<sup>[3,4]</sup>。在拓扑绝缘体的材料制备中，需要费米能量位于体态的能隙之中。不同于二维材料，三维材料无法用调偏压的方式来改变其费米能量，调节费米能量的位置通常是通过掺杂来实现的。图 1-6 为实验中测得 $(\text{Bi}_{1-\delta}\text{Sn}_\delta)_2\text{Te}_3$  在不同掺杂浓度  $\delta$  时的角分辨光电子能谱<sup>[30]</sup>。其中图 1-6 (a)为无掺杂时纯净  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  的能谱，图(b)、(c)、(d)分别对应掺杂浓度  $\delta$  为 0.27%、0.67%和 0.9%时的能谱。图 1-6 的子图中第一行为测量所得的费米面，第二行即所测到的能谱，第三行为第二行的原始数据(注意其纵轴方向与第二行相反)。图中 SSB、BCB、BVB、 $E_F$  的标识分别为表面态能带 (surface state band)、体态导带 (bulk conduction band)、体态价带 (bulk valence band)、费米能量 (Fermi energy)。从图中的能谱可以清晰地看到在体态能隙中呈线性色散的表面态能带。此外，当掺杂浓度  $\delta$  达到 0.67%时费米能量是位于体态的能隙中且切过表面态能带的，即此时材料为表面导电而内部绝缘的拓扑绝缘体。

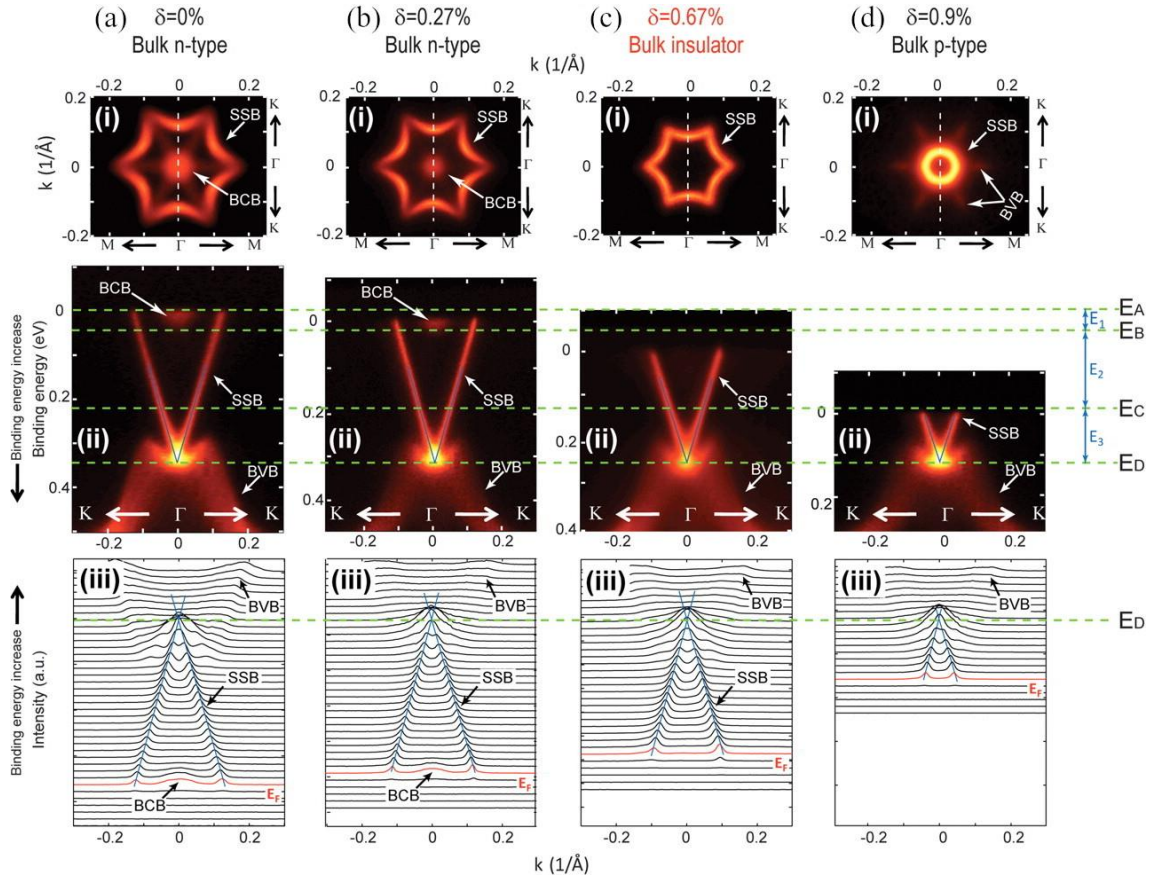


图 1-6  $(\text{Bi}_{1-\delta}\text{Sn}_\delta)_2\text{Te}_3$  在不同掺杂浓度  $\delta$  时的角分辨光电子能谱<sup>[30]</sup>。其中(a)、(b)、(c)、(d)分别对应掺杂浓度  $\delta$  为 0%、0.27%、0.67%和 0.9%时。子图的第一行(i)为测得的费米面；第二行(ii)为能谱；第三行(iii)为第二行能谱图的原始数据。

Fig. 1-6 The angle-resolved photoemission spectroscopy of  $(\text{Bi}_{1-\delta}\text{Sn}_\delta)_2\text{Te}_3$  with different doping concentration  $\delta$ . The doping concentrations  $\delta$  of (a), (b), (c), and (d) are 0%, 0.27%, 0.67%, and 0.9%, respectively. The first row (i), second row (ii), and third row (iii) of the subfigures are the Fermi surface, energy dispersion, and origin data of energy dispersion.

基于第一性原理的能带计算对拓扑绝缘体的发现起了重要作用<sup>[10,32–35]</sup>。在实际材料中，拓扑绝缘体内部能带与普通绝缘体的拓扑不同来源于由自旋轨道耦合（spin-orbit coupling）作用带来的内部能带顺序的反转（band inversion）。因此，往往在拥有较强自旋轨道耦合作用的材料中寻找拓扑绝缘体。自旋轨道耦合作用的强度即为前文中介绍的从普通绝缘体到拓扑绝缘体拓扑相变的参数。图 1-7 为基于第一性原理计算所得的  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  体态电子能带图<sup>[33]</sup>。可以看到没有考虑自旋轨道耦合作用时，能隙最小处位于  $\Gamma$  点，当考虑自旋轨道耦合作用再次进行能带计算后， $\Gamma$  点处的带隙反而变大了（其他位置的带隙均减小了）。这表明在  $\Gamma$  点处的能带顺序反转了，即：当自旋轨道耦合作用的强度从零开始逐渐增加时， $\Gamma$  点处的带隙先是减小至零再逐渐变大。



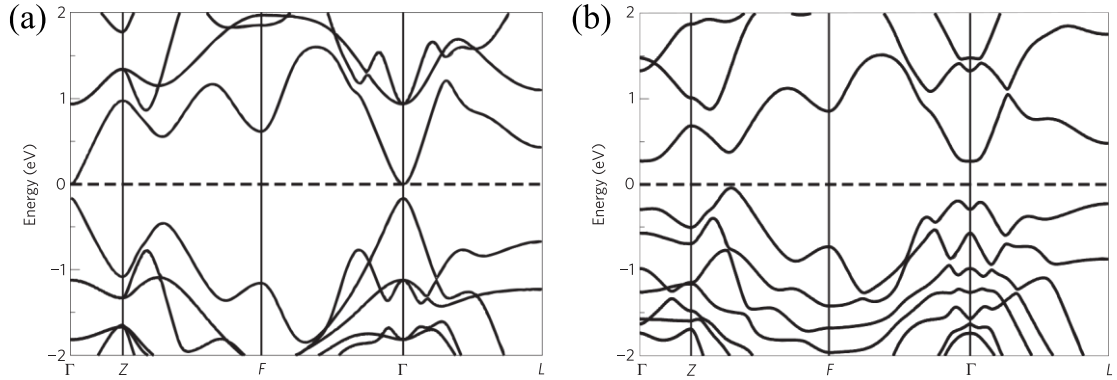


图 1-7 基于第一性原理计算的  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  体态电子能带图<sup>[33]</sup>。其中(a)和(b)分别为未考虑自旋轨道耦合作用和考虑之后的结果。

Fig. 1-7 Bulk band structure of  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  found by first-principles calculation<sup>[33]</sup>. (a) and (b) are the results with and without the effect of spin-orbit coupling.

能带顺序反转为前文所说的拓扑相变在实际材料中存在的根本原因。对于普通的绝缘体，它拓扑等价于原子绝缘体<sup>[32]</sup>。电子态从低能量到高能量的填充顺序即为 s、p、d、f 轨道（能带）。而自旋轨道耦合作用会导致能带劈裂，从而改变其能量的高低。较强的自旋轨道耦合作用会使能带原本的顺序反转。图 1-8 描述了  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  体态能带  $\Gamma$  点处能带顺序反转的过程<sup>[33]</sup>。在图 1-8 (a)中，(I)、(II)、(III) 三个过程分别为化学结合（chemical bonding）、晶体场劈裂（crystal-field splitting）和自旋轨道耦合作用造成的 Bi 原子和 Se 原子的能级分裂，其中自旋轨道耦合作用产生的能级劈裂导致了  $\Gamma$  点处能带顺序的反转。图 1-8 (b)为基于第一性原理计算所得  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  体态在费米能量上下的两条能带随着自旋轨道耦合作用的逐步增强而在  $\Gamma$  点处能量的变化。可以看到自旋轨道耦合作用导致了两条能带在  $\Gamma$  点处能量高低的顺序发生了反转。由于拓扑绝缘体的体态能带存在反序的能带而普通绝缘体体态能带为正序，因此从拓扑绝缘体变化到普通绝缘体时必然伴随着从反序能带变为正序能带的过程，这即为上文中描述的拓扑相变在真实材料中的具体体现。由强自旋轨道耦合作用导致的体态能带顺序反转为理论计算中寻找拓扑绝缘体的依据之一。

除了体态能带顺序反转，理论计算中还有两种方法来确定材料的拓扑性质。第一种方法为直接计算系统的拓扑不变量。二维拓扑绝缘体是由一个  $Z_2$  不变量描述的；而三维拓扑绝缘体需要由四个拓扑不变量描述<sup>[36]</sup>。当系统拥有空间反演对称性（inversion symmetry）时，拓扑不变量的计算可以简化为被占据的布洛赫态波函数奇偶性（parity）的乘积<sup>[32]</sup>。另一种确定材料拓扑性质的方法为直接计算其表面态能谱。在第一性原理计算中，通常通过迭代的方法计算出一个半无穷系统的表面格林函数<sup>[33]</sup>，此格林函数的虚部即为系统的能谱。

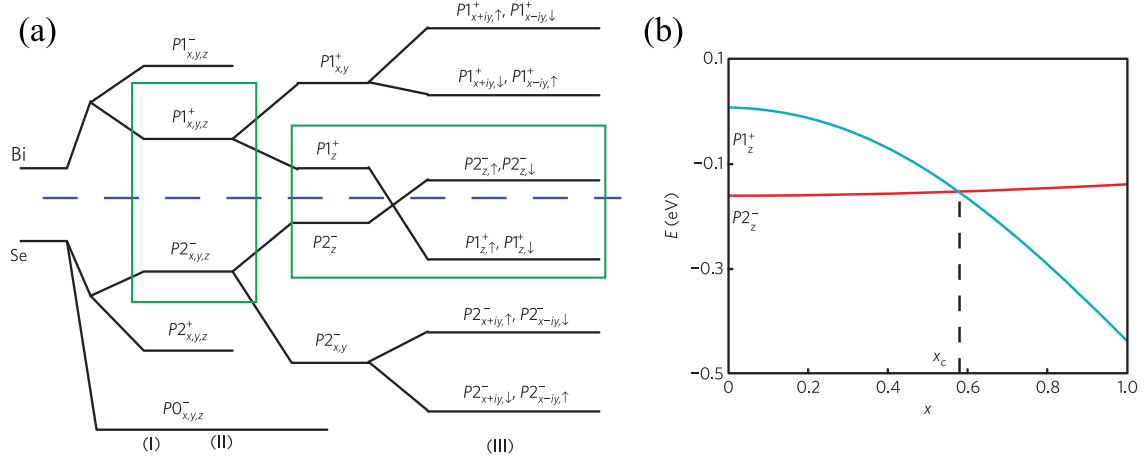


图 1-8 在  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  中体态能带  $\Gamma$  点处能带顺序反转的过程<sup>[33]</sup>。(a)在能带  $\Gamma$  点处从能级劈裂到顺序反转的示意图。(b)由第一性原理计算所得能带在  $\Gamma$  点处随自旋轨道耦合作用强度逐渐增强而产生的顺序反转。

Fig. 1-8 The process of bulk band inversion at  $\Gamma$  point in  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ <sup>[33]</sup>. (a) Schematic diagram of the band splitting and inversion at  $\Gamma$  point. (b) The band inversion at  $\Gamma$  point with increasing the strength of spin-orbit coupling, found by first-principles calculation.

低能有效模型对拓扑材料的深入细致研究十分关键。低能有效模型往往是解析计算的出发点，它也使一些更为复杂的数值计算得以实施。在这些拓扑材料的低能模型中，BHZ 模型尤为重要。BHZ 模型描述的是一个二维拓扑绝缘体的体态，它是由 B. Andrei Bernevig, Taylor L. Hughes 和 Shou-Cheng Zhang 在  $\text{HgTe}$  量子阱的研究中提出的<sup>[10]</sup>。基于第一性原理计算和对称性分析，由  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  方法可得到 BHZ 低能有效哈密顿量为

$$\begin{aligned}
 H^{BHZ}(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} H(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & H^*(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \\
 H(\mathbf{k}) &= \epsilon(\mathbf{k}) + d_i(\mathbf{k})\sigma_i \\
 \epsilon(\mathbf{k}) &= C - D(k_x^2 + k_y^2) \\
 d_1 + id_2 &= A(k_x + ik_y) \\
 d_3 &= M - B(k_x^2 + k_y^2)
 \end{aligned} \tag{1-1}$$

其中  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  为动量， $\sigma_i$  为泡利矩阵， $i$  可取  $x$ 、 $y$  或  $z$ （上述表达式中需要进行重复指标求和）。 $A$ 、 $B$ 、 $C$ 、 $D$ 、 $M$  为模型参数，它们的取值由具体的系统决定。当  $M$  和  $B$  取相同符号时，即  $MB > 0$  时，这个哈密顿量描述的为二维拓扑绝缘体的体态。此时可以直接计算出非平庸的拓扑不变量<sup>[32]</sup>，或者通过考虑有限大小的尺寸得到其无能隙的边界态<sup>[4]</sup>。当  $MB < 0$  时，此哈密顿量描述的是一个普通的二维绝缘体。因此在这个低能有效模型中，可以通过固定  $B$  的取值调节  $M$  来研究拓扑相变。

### 1.2.3 拓扑半金属

拓扑半金属是在拓扑绝缘体之后提出的一种新材料。半金属即为在费米能量附近有着很小态密度的一类材料。拓扑半金属的导带和价带在费米能量附近有一个或多个接触点（crossing point），且在接触点附近能量范围内的能谱通常有着线性的色散。根据能带中接触点类型的不同，拓扑半金属主要分为狄拉克半金属，外尔半金属，节线半金属这三种<sup>[14,37,38]</sup>，它们通常位于两种拓扑不同的系统之间的拓扑相变过程中。不同于拓扑绝缘体，拓扑半金属的体态是没有能隙的，但很多拓扑半金属也有着独特的界面态。

最简单的狄拉克半金属的导带和价带在费米能量附近只有一个接触点，即狄拉克点（Dirac point），且在狄拉克点附近的能谱有着线性色散的特征。狄拉克半金属的线性能谱相当于石墨烯能谱的三维推广，在数学形式上，它可以直接由无质量的狄拉克方程所描述<sup>[39]</sup>。狄拉克方程是量子力学和相对论的一个结合，狄拉克哈密顿量为

$$H = c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\alpha} + mc^2\beta \quad (1-2)$$

其中 $c$ 为光速， $m$ 和 $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ 分别为粒子的质量和动量， $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$ 和 $\beta$ 为狄拉克矩阵。它的能谱为

$$E_{\pm} = \pm\sqrt{m^2c^4 + |\mathbf{p}|^2c^2} \quad (1-3)$$

其中 $E_+$ 和 $E_-$ 均为双重简并的。可以看到：当质量项 $m$ 取为零时， $E_+$ 和 $E_-$ 于零能处交于一点，且均为 $|\mathbf{p}|$ 的线性项。在零能处的交点，即为狄拉克点，它有着四个能量简并的态。当 $m = 0$ 时，狄拉克哈密顿量所描述的正是狄拉克半金属在费米能量附近的能谱，这也是狄拉克半金属名称的由来。狄拉克半金属费米能量附近的准粒子通常会被称作无质量的狄拉克费米子，它是属于材料系统中的独特准粒子，并带来了一些新奇的输运现象。

在实际材料中， $\text{Na}_3\text{Bi}$  和  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  为狄拉克半金属的代表<sup>[14,38,40-42]</sup>。它们在费米能量附近均有一对狄拉克点。这种成对出现的狄拉克点是由能带顺序反转和晶体对称性保护共同造成的<sup>[37]</sup>。图 1-9 为实验测得  $\text{Na}_3\text{Bi}$  的角分辨光电子能谱<sup>[41]</sup>，可以清楚地看到其体态的狄拉克点以及线性的能谱。线性的能谱在许多物理性质上有其独特的特征。除了直接使用角分辨光电子能谱仪进行测量外，也可以通过测量光电导的方法间接地判断狄拉克半金属中线性的能谱。这是因为其三维线性的能谱对应的光电导与光子频率是线性相关的<sup>[43,44]</sup>。在实验材料制备方面，由于  $\text{Na}_3\text{Bi}$  的化学稳定性较差，因此对狄拉克半金属的研究在各种  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  样品上开展的更多一些<sup>[45]</sup>。



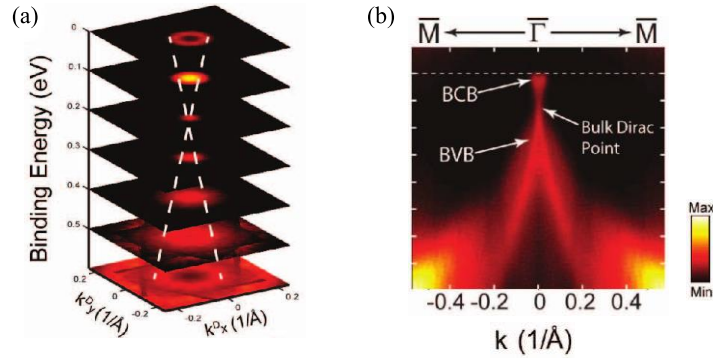


图 1-9  $\text{Na}_3\text{Bi}$  的角分辨光电子能谱<sup>[41]</sup>。(a)相同能量时角分辨光电子能谱强度随动量变化关系的堆叠图；(b)角分辨光电子能谱强度与能量和动量的依赖关系。

Fig. 1-9 The angle-resolved photoemission spectroscopy of  $\text{Na}_3\text{Bi}$ <sup>[41]</sup>. (a) A stack of plots of the constant-energy contour of spectroscopy intensity. (b) Intensity of the angle-resolved photoemission spectroscopy as a function of energy and momentum.

狄拉克半金属是由时间反演和空间反演对称性共同保护的，当两者其中任意一个对称性被破坏时，狄拉克半金属将转变为外尔半金属。外尔半金属在费米能量附近同样有着线性的色散，不同的是：在外尔半金属中，导带和价带的交点，即外尔点，必须成对出现，且在每个外尔点的位置存在着两个能量简并的态。打破时间反演对称性但拥有空间反演对称性的外尔半金属最少有一对外尔点，而打破空间反演对称性但拥有时间反演对称性的外尔半金属最少有两对外尔点<sup>[37]</sup>。在外尔点附近的准粒子是被外尔方程所描述的，因此两个成对的外尔点有着相反的手性（chirality）。相比于狄拉克点，外尔点更稳定一些，系统的参数变化通常只会对外尔点在动量空间的位置造成变化。连续的变化参数只能使两个手性相反的外尔点先相遇（即变为狄拉克半金属）再打开能隙。外尔半金属的体态虽然没有能隙，但它也有着独特的表面态<sup>[46]</sup>，通常被称为费米弧（Fermi arc）。常规材料的费米面（即费米能量处的态在动量空间的分布）都是闭合的。二维电子气的费米面即为一个闭合的圆环。但在外尔半金属的表面，费米能量处的态在二维动量空间呈半圆形分布，即未闭合的圆弧。圆弧的两个端点对应着体态中两个手性相反的外尔点。

虽然在很早之前便有了外尔费米子的理论预测，但在高能粒子物理的实验中尚未发现外尔费米子的确切证据，而外尔半金属的发现使得物理学家可以在材料系统中研究被外尔方程所描述的准粒子。 $\text{TaAs}$  为实际材料中外尔半金属的代表<sup>[47-49]</sup>。它是属于打破空间反演对称性类型的外尔半金属，一共拥有 12 对外尔点。图 1-10 为角分辨光电子能谱在  $\text{TaAs}$  样品中观测到的费米弧以及相应的理论计算结果<sup>[47]</sup>。可以看到，测量数据与理论计算结果较为一致。虽然在费米能量处还有一些其他平庸能带引入的闭合费米环，但费米弧还是清晰可见的。

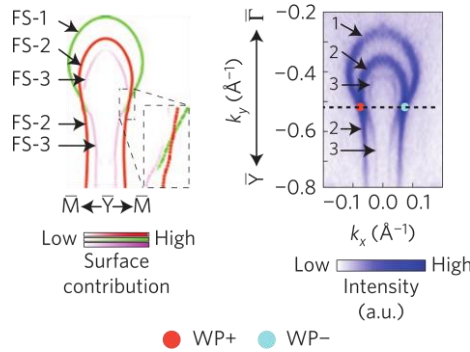


图 1-10 在 TaAs 中的费米弧<sup>[47]</sup>。左图为理论计算结果，右图为角分辨光电子能谱强度对动量的依赖关系。其中左图中 FS-1 所指的绿色弧线和右图中数字 1 所指的弧线为费米弧；红色和蓝绿色的点代表着两个手性相反的外尔点。

Fig. 1-10 Fermi arc in TaAs. Left figure shows the theoretical calculation results, and the right figure is the intensity of the angle-resolved photoemission spectroscopy as a function of momentum. The green curve pointed by FS-1 in the left figure and the arc pointed by number 1 in the right figure are Fermi arcs; red and cyan points represent the Weyl points with opposite chirality.

随着研究的不断深入，更多新型的拓扑半金属不断被发现。一些外尔半金属会由于价带和导带的倾斜导致费米能量不仅切过外尔点而且切过导带和价带<sup>[50]</sup>，这类外尔半金属被称为第二类外尔半金属（**type-II Weyl semimetals**）。在一些研究中会更为细致的将费米能量刚好切过价带和导带时的情况划分为第三类外尔半金属<sup>[51,52]</sup>。导带和价带倾斜效应并不会影响费米弧的性质。此外，这种根据能带倾斜的分类方法也同样适用于狄拉克半金属。在普通外尔半金属中，每个外尔点都有 $+1$ 或 $-1$ 的拓扑荷（**topological charge**），有些地方也将其称作单极荷（**monopole charge**）。拓扑荷可以通过求出动量空间的贝利曲率后再做包围单个外尔点的球面积分得到。在一些材料中，价带和导带的交点处的拓扑荷可以达到 $\pm 2$ 或 $\pm 3$ ，它们分别被称作双重外尔半金属（**double Weyl semimetal**）<sup>[53]</sup>和三重外尔半金属（**triple double Weyl semimetal**）<sup>[54]</sup>。双重外尔半金属和三重外尔半金属的能谱在费米能量附近不再是线性色散，它们分别呈动量平方和三次方。值得注意的是费米弧的个数和拓扑荷的大小一致。因此在这类材料中，多重外尔点连接着多个费米弧。除了在费米能量附近导带和价带接触于一点之外，一些拓扑材料的导带和价带会在一条闭合环线的接触<sup>[55]</sup>，它们被成为节线半金属（**nodal-line semimetals**）。这些动量空间中的节线可以相互嵌套形成链状<sup>[56,57]</sup>，这使它们拥有更为复杂的拓扑结构。节线半金属和外尔半金属类似，它的表面态在动量空间位于节线之内<sup>[58]</sup>。在此概念上做进一步扩展，导带和价带有一个接触面的材料被称为节面半金属（**nodal-surface semimetals**）<sup>[59]</sup>。

### 1.2.4 磁性拓扑材料

尽管二维拓扑绝缘体有着拓扑保护的边界态，但是实现无磁场下的量子霍尔效应仍然需要在材料内部引入磁性。此外，材料内部磁序对材料拓扑性质的影响也十分值得探究。通常有两种方法可以将磁性引入到非磁的拓扑材料中。第一种方法是通过与磁性绝缘体的接触由近邻效应（proximity effect）将拓扑材料的表面磁化<sup>[60,61]</sup>。第二种方法是通过磁性杂质掺杂将磁性引入到拓扑材料中<sup>[62-64]</sup>，这些磁性杂质会通过 RKKY（Ruderman–Kittel–Kasuya–Yosida）相互作用或 Van Vleck 相互作用形成长程的磁序。但近邻效应不仅需要找到合适的磁性绝缘体而且它只能在相互接触的表面引入较为微弱的磁性<sup>[65]</sup>。而磁性掺杂的方法不仅需要选择适合特定拓扑材料的磁性杂质，而且需要精细调控掺杂浓度使得杂质引入磁性的同时不改变材料的拓扑性质<sup>[65,66]</sup>。因此，理想的磁性拓扑材料应自带磁性结构，即本征磁性拓扑材料（intrinsic magnetic topological materials）。

$\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  是第一个实验实现的本征反铁磁拓扑绝缘体。虽然早在 2013 年  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  就已经在实验中成功合成<sup>[69]</sup>，但它的拓扑性质和磁性直到 2019 年才得到理论计算预测<sup>[68,70,71]</sup>和实验确认<sup>[72,73]</sup>。 $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  中的磁性由 Mn 原子贡献，能带反转来源于 Bi 和 Te 原子。它拥有着层状结构，每一层有面外方向的磁性，而层间是由反铁磁结构耦合在一起的。当低于它的尼尔温度（约 24.5 K）时， $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  为反铁磁结构的拓扑绝缘体。在高于尼尔温度时，磁性将变为无序结构。如图 1-11 (a) 所示<sup>[67]</sup>，尼尔温度可以通过测量磁化率随温度的变化曲线得到。材料处于不同的磁性结构时磁化率随温度的变化不同，因此磁化率曲线在尼尔温度处是不连续的。 $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  顶层和底层的电子态都会因为上下表面层外方向的磁性而打开能隙，而它侧面的电子态仍会保持无能隙结构，如图 1-11 (b) 所示。图(c)和(d)分别为基于第一性原理计算得到的  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  上下表面和侧表面的能带结构图<sup>[68]</sup>。在实验方面，对于有能隙的表面电子能带结构的角分辨光电子能谱测量结果目前仍存在一些争议<sup>[67,74-78]</sup>，这可能和样品表面附近的杂质有关。但角分辨光电子能谱的测量已经确认了  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  表面磁性的存在<sup>[76,77,79]</sup>。

基于第一性原理的计算预测了许多本征磁性拓扑半金属<sup>[80,81]</sup>，例如反铁磁狄拉克材料  $\text{CuMnAs}$  和  $\text{CuMnP}$ ，它们的时间反演对称性会因磁性的存在而被打破，但它们拥有时间空间反演结合对称性<sup>[82]</sup>。在实验方面，拥有 kagome 晶体结构的铁磁外尔半金属  $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$  得到大量研究<sup>[83-87]</sup>。此外在实验中得到确认的本征磁性拓扑半金属还有铁磁结构的  $\text{Co}_2\text{MnGa}$ 、 $\text{Co}_2\text{MnAl}$  等<sup>[88-90]</sup>，反铁磁结构的  $\text{CdPtBi}$ 、 $\text{FeSn}$  等<sup>[91,92]</sup>。

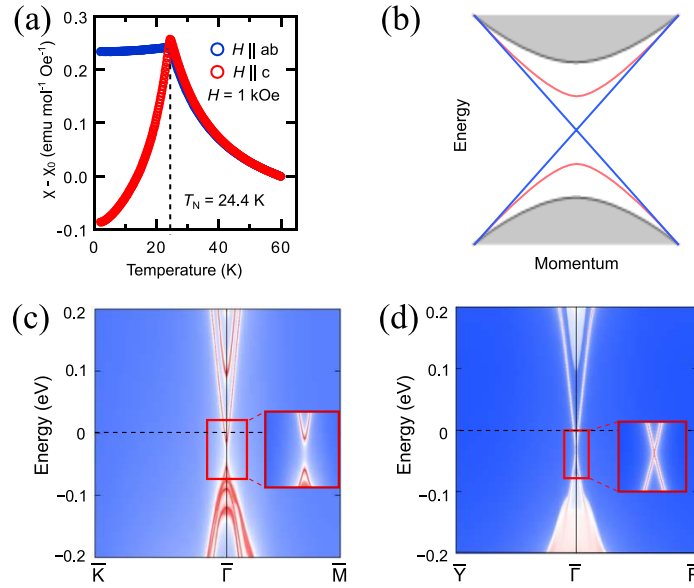


图 1-11 本征反铁磁拓扑绝缘体  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  的磁化率和电子能谱结构。(a)实验中测得的磁化率数据<sup>[67]</sup>。其中 $H$ 为磁场， $ab$ 为层内平面， $c$ 为垂直层内平面的方向。(b)  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  的电子能带结构示意图。其中蓝线和红线分别为侧表面和上下表面能带。(c)和(d)分别为基于第一性原理计算得到的上下表面和侧表面的能谱<sup>[68]</sup>。

Fig. 1-11 Magnetic susceptibility and energy spectrum of the intrinsic antiferromagnetic topological insulator  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ . (a) The magnetic susceptibility data found in the experiment<sup>[67]</sup>.  $H$  is the magnetic field,  $ab$  is the plane of layers, and  $c$  is the out-of-plane direction. (b) Sketch of the electronic band structure of  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ . The red and blue lines are energy bands of side and top/bottom surfaces, respectively. (c) and (d) are the energy spectrums of side and top/bottom surfaces found in first-principles calculations, respectively.

### 1.2.5 高阶拓扑材料

前面内容中的三维拓扑材料均有着二维的表面态，而三维的高阶拓扑材料拥有更低维度的界面态<sup>[93,94]</sup>。例如，三维的二阶拓扑绝缘体(second-order topological insulator)不仅体态有能隙，它的表面态也有一定大小的能隙，而它的棱边态(hinge states)是无能隙的。即在这类材料中只有棱边导电，其他区域均绝缘。而三维的三阶拓扑绝缘体的体态、表面态和棱边态均有能隙，且在能隙中存在着棱角态(corner states)。同样，在二维二阶拓扑绝缘体中，边界态不再是无能隙的，能隙中也存在着棱角态。即一个 $m$ 维 $n$ 阶的拓扑绝缘体对应着 $(m-n)$ 维的拓扑界面态。相应的，在阶的拓扑半金属中也存在着更低维度的费米“弧”<sup>[95,96]</sup>。

高阶拓扑材料的界面态和前文介绍的普通拓扑材料的界面态有着同样的形成原因，它们都可以用拓扑相变来解释。以三维二阶拓扑绝缘体为例，它的棱边两侧的表面态虽然都有能隙，但两个表面态是拓扑不同的，因此在两个表面的边界会存

在无能隙的棱边态。高阶拓扑材料形成的根本因为材料不同位置处不同的晶体对称性。

虽然 SnTe、BiBr、BiTe 等<sup>[94,97]</sup>许多材料都被理论预测拥有高阶拓扑性质，但在真实材料中还未观测到十分确凿的实验证据。近期，理论计算预测 Bi<sub>4</sub>Br<sub>4</sub> 为高阶拓扑绝缘体<sup>[98]</sup>，并且在实验上已经观测到了其导电的边界态（即前文中的图 1-5）<sup>[28]</sup>，但是对材料棱边或棱角处的直接测量仍有一定难度。而另一方面，高阶拓扑系统可以在一些光学、声学、电路系统中更为便捷地实现<sup>[17]</sup>。

### 1.2.6 人工制造的拓扑系统

在拓扑物理研究的初期，真实材料为实验研究的主要平台。因此寻找拓扑材料、调节材料性质、制备测量样品十分重要。相应的，理论计算中也要考虑材料的具体性质。例如在前文中介绍费米弧的探测时，费米弧附近还存在一些平庸的能带（图 1-10）。随着研究的不断深入，人工制造的拓扑系统也成为了拓扑物理的研究平台之一。不同于真实材料，人工制造的系统是从头人为设计的，因此它可以让研究更加集中在拓扑性质上。例如，作为在六角晶格上的第一个拓扑模型，Haldane 模型<sup>[99]</sup>因其复数的次近邻跃迁系数而难以在材料系统中实现，但它却可以在冷原子系统中得以实现<sup>[100]</sup>。此外，在前文中介绍的高阶拓扑物理虽然在材料系统中难以得到确凿的实验证据，但在人工制造的系统中能够轻易实现<sup>[17]</sup>。常见的人工制造拓扑系统有电路系统<sup>[101-103]</sup>、声学超材料<sup>[19,104,105]</sup>、光学系统<sup>[22]</sup>等。不同于实际材料的电子体系，这些系统都是属于经典系统，它们能够实现拓扑物理的根本原因在于：拓扑能带结构是波在周期性介质中的性质，而与波是经典物理中的波还是量子物理中的波无关<sup>[106]</sup>。人工拓扑系统的优点主要为其可以直接依据紧束缚模型设计，因此人工拓扑系统可以更好地实现许多理论构造，且其实验数据和理论计算吻合较好。此外人工系统也可以模拟高于三维的系统以探索高维物理<sup>[107]</sup>。在实验测量方面，由于这些人工系统均为经典系统，它们没有态的占据填充概念（即不存在费米能量），因此可以通过控制能量大小来探测任意位置能带的性质。下面将以光子晶体中的三维陈绝缘体为例对人工拓扑材料的研究进行简要介绍。

光子晶体中的三维陈绝缘体是从外尔半金属中延伸出的概念<sup>[108,109]</sup>。当一对外尔点随参数调节移动到布里渊区边界后，它们打开能隙后即相变为三维陈绝缘体。不同于布里渊区中其他位置相遇的一对外尔点打开能隙，在布里渊区边界相遇打开的能隙为拓扑的且费米弧依然存在并延伸到了整个布里渊区。将 Haldane 模型扩展至三维后便可以通过调节跃迁系数得到三维陈绝缘体<sup>[110]</sup>。在理论计算中，可以通过计算随某方向动量变化的陈数来确定拓扑性。和电子系统不同，光子晶体的尺



寸较大, 图 1-12 为实验中实现三维陈绝缘体所用的系统<sup>[110]</sup>。它的每个原胞为一个金属铜片中固定了一个棒形旋磁材料(钇铁石榴石铁氧体), 通过铜片形状的构造可以设计系统的对称性, 而旋磁材料使得可以用磁场来调节系统的性质。实验中通过在系统中插入两个微波偶极天线(分别作为源和探针)然后测量体传输(bulk transmission)来确定体态性质。而表面态通过近场扫描探测(near-field scanning probe)的方法来探测。图 1-12 (c)为实验中测得的表面态。当磁场为零时, 系统为普通绝缘体且没有表面态。增大磁场强度后, 系统会转变为外尔半金属。两个手性相反的外尔点会随磁场强度的增大而逐渐移向布里渊区边界, 并最终消失且打开体能隙转变为三维陈绝缘体。值得注意的是: 这里的磁场是通过旋磁材料来调节系统性质, 并不会像在电子体系中一样产生塞曼效应或朗道能级。此外, 在两个拥有不同方向陈数的三维陈绝缘体的界面上会发生表面态之间的耦合, 从而形成 Hopf 链(Hopf link)表面态<sup>[108–110]</sup>。

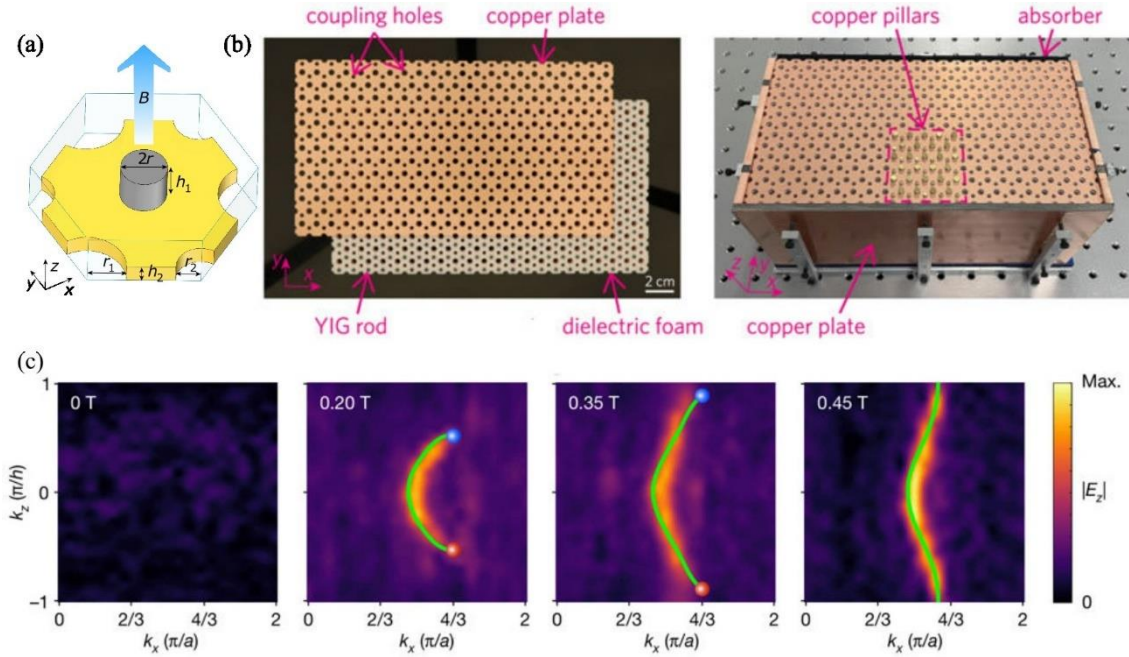


图 1-12 光子晶体中的三维陈绝缘体<sup>[110]</sup>。(a)光子晶体中的一个原胞示意图。(b)在实验中使用的光子晶体实物图。(c)光子晶体在不同磁场强度下的表面态。其中红色和蓝色小球对应着两个手性相反的外尔点的位置。

Fig. 1-12 Three-dimensional Chern insulator in the photonic crystal<sup>[110]</sup>. (a) sketch of a unit cell of the photonic crystal. (b) Photo of the photonic crystal used in the experiment. (c) Surface states of the photonic crystal under different magnetic field strengths. The red and blue balls represent the positions of two Weyl points with opposite chirality.

### 1.3 拓扑材料中独特的输运性质

在上一节中介绍的各种拓扑材料通常都会因其独特的电子能带结构而展现出与众不同的输运特性。这些输运特性既是实验中确定材料拓扑性的方法，又是拓扑材料的应用前景之一。它们一般可以分为表面态带来的量子化输运和体态带来的非量子化输运。在本节中，1.3.1 小节将首先对材料中输运性质的理论和实验研究方法做概括性介绍；1.3.2 小节将引入量子化输运现象的深层物理机制；1.3.3 小节和 1.3.4 小节将分别介绍拓扑材料中表面态和体态带来的独特输运现象，包括量子自旋霍尔效应、量子反常霍尔效应、外尔半金属中的反常霍尔效应、电阻的量子振荡和非线性霍尔效应。

#### 1.3.1 材料输运性质的研究方法

得益于二维系统中成熟的加工制作工艺，在材料输运性质的实验研究中，二维材料在成功制备之后通常会被制成霍尔器件形状（Hall bar）以进行横向和纵向电阻的测量。非局域化测量（non-local measurement）对边界态的探测非常重要，因此一些实验样品会被制成 H 形（H-bar）或在霍尔器件的基础上增加更多测量端口。非局域化测量是指在器件局部施加偏压而在远离施加偏压的区域测量电压。由于边界态是环绕着整个二维样品边界的，因此在边界的任何区域都能测量到边界态的输运。与之相反，体态通常贡献局部的输运，所以用非局域化的测量方法可以将边界态和体态的输运区分出来。除此之外，还可以将电极直接接到二维材料的中间区域，直接测量没有边界态贡献的输运<sup>[111]</sup>。

通过输运测量探测材料性质往往需要看电阻随参数的变化曲线。例如，对于磁性材料，可以从电阻随温度变化的曲线得到其居里温度或尼尔温度。除了温度，实验中可采用的参数还有载流子浓度、外加磁场强度、外加电场强度、外加磁场的方向等。其中测量电阻随磁场强度变化的方式最为常见。通常将随磁场强度变化的电阻叫做磁电阻（magnetoresistance）。对于系统的载流子浓度，在二维系统中可以通过门电压（gate voltage）来控制，但在三维系统中很难调控。

在理论研究中，电阻是无法直接计算的，需要先计算电导再通过换算得到电阻（具体的换算方法见第二章节）。本文中理论计算的出发点为

$$I = \sigma E \quad (1-4)$$

即线性响应理论（linear response theory）。上式的含义为：施加外电场后，产生的响应电流  $I$  和系统内电场  $E$  有着线性关系<sup>[112]</sup>，它们的比例系数为电导率  $\sigma$ 。此外，以上公式为系统为一维时的简单情况，在实际的三维情况中（尤其外加磁场时），三个空间方向上的电流以及电场通常会写为三行一列的矩阵，而相应的电导率为三

行三列的矩阵。电导率的常见计算方法有两种<sup>[112]</sup>，第一种是玻尔兹曼方程（Boltzmann transport equation）的方法，它是一种基于经典或半经典理论的方法。另一种是从量子理论出发的久保公式（Kubo formula）。本文中所研究的磁电导率是在有效模型的基础上，结合格林函数（Green function）的方法通过久保公式计算得到的。磁场中系统的格林函数以及相应久保公式的推导将在第二章的 2.3 节详细给出，此外计算磁电导率时杂质处理的方法将在第三章的 3.2 节详细介绍。除了计算电导率，在输运性质的理论研究中还可以计算器件电极之间的透射率，然后再用 Landauer-Büttiker 公式直接得出相应电导。透射率一般需要用数值计算求解散射问题得到，具体有递归格林函数（recursive Green function）的方法和波函数的方法<sup>[113,114]</sup>。和计算整体材料的电导率相比，用 Landauer-Büttiker 公式得到的电导可以考虑在实验测量中器件的形状和电极的个数对测量结果的影响。本文中研究的非局域化电阻便使用了这种数值计算电导的方法。Büttiker 公式计算多端口器件电导的方法将在 1.3.3 小节中介绍，具体系统中透射率的数值计算方法以及相应的计算软件包将在第五章的 5.2.3 小节中介绍。

### 1.3.2 量子化的输运现象

虽然拓扑材料因其边界态所贡献的量子化输运现象而闻名，但量子化的输运现象并不是拓扑材料所独有的。量子化输运现象的根本原因是一维系统中整数个的弹道输运电导通道<sup>[113]</sup>。弹道输运是指：当系统的尺寸小于粒子的平均自由程、德布罗意波长和相位相干长度时<sup>[113]</sup>，粒子穿过整个系统的过程中将不会发生散射（也就是无耗散输运），即测量中不会有电压降。在实际测量中，弹道输运的范围内没有电压降，也就是没有电阻，但测量用的电极和弹道输运的系统的接触处会出现接触电阻（contact resistance）。接触电阻是因为输运通道的个数从弹道输运的系统中到电极中突然增多而产生的<sup>[115]</sup>。每个一维的输运通道贡献的接触电阻大小为  $h/e^2$ ，也就是通常所说的量子电阻。量子电阻可以从电流的微观公式中推导得出，

$$I = nev \quad (1-5)$$

这里  $I$  为电流， $n$  和  $v$  分别是电子的个数和速度， $e$  为电子所带电荷。在图 1-13 (a) 所示的一维系统中，当系统两端电压分别为  $V_R$  和  $V_L$  时，系统左侧的电子来自左边电极，电子能量为  $u_L$ ；系统右侧电子来自右边电极，电子能量为  $u_R$ 。当电压差为  $V_R - V_L = V$  时，有  $u_R - u_L = eV$ 。而电子的速度为  $v = \partial E / (\hbar \partial k)$ ，其中  $E$  为能量， $k$  为动量， $\hbar$  为普朗克常数。图 1-13 (b) 为此一维系统的能带示意图，其中实线和虚线分别代表占据和为占据的态。因此，电流为



$$\begin{aligned}
 I &= e \int_{k_L}^{k_R} \frac{dk}{2\pi} \left( \frac{\partial E}{\hbar \partial k} \right) \\
 &= \frac{e}{h} \int_{u_L}^{u_R} dE \\
 &= \frac{e^2}{h} V
 \end{aligned} \tag{1-6}$$

从上式即可得大小为 $h/e^2$ 的接触电阻。这里可以看到，输运通道的个数其实与系统内费米能量切过的能带个数是一致的。此外，在维度高于 1 的系统中将不再有以上情况，转而会出现量子化的非线性接触电阻<sup>[116]</sup>。

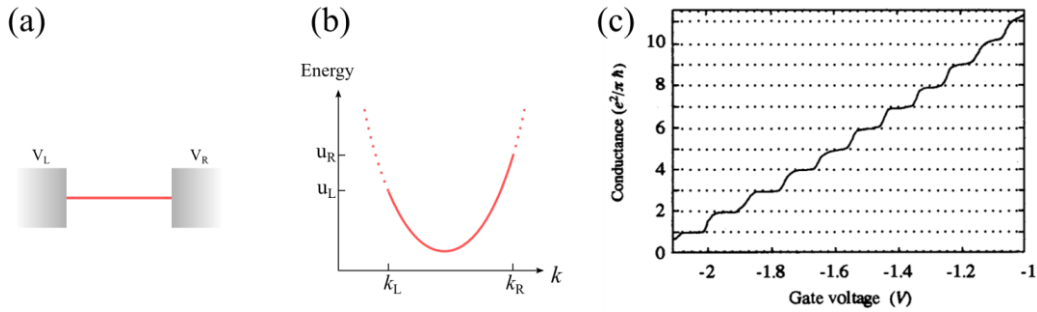


图 1-13 量子化的电导。(a)、(b)分别为一维系统的装置示意图和能带示意图。(c)为实验中通过施加顶端电压限制二维电子气宽度测量到的量子化电导<sup>[113,117]</sup>。

Fig. 1-13 Quantized conductance. (a) and (b) are sketches of the device and band structure of a one-dimensional system (c) The quantized conductance measured experimentally by applying a top voltage to constrain the width of the two-dimensional electron gas<sup>[113,117]</sup>.

在实验中，可以通过在二维电子气上施加电压的方式限制其可导通的宽度并不断缩减其输运通道的个数，进而观测到了量子化电导。图 1-13 (c)即为实验在电子气中观测到的量子化电导（即为电阻的倒数）<sup>[117,113]</sup>。此外，对于弹道输运的接触电阻，实验中通过光盘形状的器件确认了接触电阻出现在输运通道个数变化的位置<sup>[115]</sup>。分别在光盘内环和外边盘周接电极，当光盘形器件处于弹道输运时，由于输运通道的数目和光盘半径相关，接触电阻不仅会集中在电极接触处也会分布在光盘形器件中。

然而，对于非拓扑的材料，量子化的输运几乎都会受到其他因素的影响。材料中的杂质，器件的制备工艺等都会导致量子化的电阻不够精确。例如，在上述二维电子气中量子化输运的实验中，图 1-13 (c)中的数据是在减去一定大小的背景电导之后得到的。因此，拥有拓扑保护的一维边界态或棱边态的拓扑材料是观测量子化输运的最佳平台。目前，精确的量子化电阻也仅仅在量子霍尔效应或量子反常霍尔效应中能够观测到。

### 1.3.3 量子自旋霍尔效应和量子反常霍尔效应

在量子霍尔效应中，外加强磁场是实现材料拓扑相变以及量子化运输的必要条件。为了使量子化运输能够投入到更广泛的实际应用中，无需磁场的量子化运输研究变得十分必要。F. D. M. Haldane 最早在 1988 年提出的模型虽然可以得到零磁场的量子化电导的结果<sup>[99]</sup>，但在实际材料中却无法实现。在 2005 年，C. L. Kane 和 E. J. Mele 提出了由于自旋轨道耦合作用在石墨烯中存在量子自旋霍尔效应<sup>[11]</sup>。拥有量子自旋霍尔效应的材料即为二维的拓扑绝缘体，有些地方也会叫做量子自旋霍尔绝缘体（quantum spin Hall insulator）<sup>[4,3]</sup>。二维拓扑绝缘体的内部绝缘但在边界上有两条方向相反的导电通道，如图 1-14 (a)所示。提供两条方向相反通道的两个边界态的自旋方向也是相反的，因此这两条通道传输的总电荷为零但会产生一个纯自旋流。石墨烯中的碳原子为轻元素，其自旋轨道耦合作用比较弱，因此实验中一直未在石墨烯中观测到量子自旋霍尔效应。在 2006 年和 2007 年，二维拓扑绝缘体 HgTe 量子阱先后被理论计算预测和实验制备<sup>[10,12]</sup>，量子自旋霍尔效应也由其边界态的电阻特性得到了确认。将二维拓扑绝缘体边界上两条方向相反的导电通道除去一条便可以实现无需磁场的量子化霍尔电阻，即量子反常霍尔效应，见图 1-14 (b)。在 2010 年和 2013 年，我们国内的两个课题组分别理论预测<sup>[118]</sup>和实验实现<sup>[62]</sup>了在磁性掺杂拓扑绝缘体中的量子反常霍尔效应。

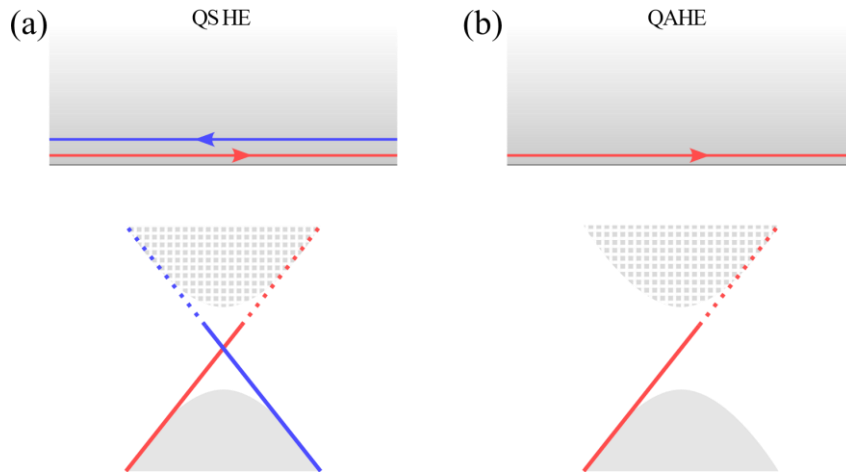


图 1-14 量子自旋霍尔效应（QSHE）和量子反常霍尔效应（QAHE）的示意图。(a)和(b)分别为量子自旋霍尔效应和量子反常霍尔效应在一个边界上的运输通道（上图）以及相应能带示意图（下图）。其中能带示意图中的实线和实体填充代表费米能量下方被占据的态。

Fig. 1-14 Schematic diagrams of the quantum spin Hall effect (QSHE) and the quantum anomalous Hall effect (QAHE). (a) and (b) are sketches of the transport channels at one edge (upper panel) and the corresponding band structures (lower panel) for the QSHE and the QAHE, respectively. The solid lines and solid fills represent the occupied states below the Fermi energy.

在实验测量中边界态导致的电阻特性可以用 Büttiker 公式来理解。对于一个多端口器件，根据电荷守恒可以得到：每个端口的电流流入量和流出量相等，即

$$I_p = \sum_q^N G_{pq}(V_p - V_q) \quad (1-7)$$

其中 $N$ 为器件端口的总数， $p$ 和 $q$ 为端口的编号。 $V_p$ 和 $I_p$ 分别为 $p$ 端口的电压和外界流入此端口的电流， $G_{pq}(V_p - V_q)$ 为从 $p$ 端口流入到 $q$ 端口的电流，即 $G_{pq}$ 为从 $p$ 端口到 $q$ 端口的电导。在边界态的弹道输运中，每个 $G_{pq}$ 都是已知的（即导电通道数目倍数的量子化电导）。当从 $p$ 端口到 $q$ 端口有 $n$ 个弹道输运的导电通道时，有 $G_{pq} = ne^2/h$ 。在实验测量中，除了用于施加激发电流的两个端口外（其流入电流分别为 $I_{input}$ 和 $-I_{input}$ ），其他端口的外界流入电流均为零。因此对于一个 $N$ 端口器件，有 $(N - 1)$ 个独立方程，其中所有的电流 $I_p$ 和电导 $G_{pq}$ 均为已知量。将器件的一个端口的电压设为零点电压后，可以计算出其他各端口电压的值，即方程组中 $(N - 1)$ 个未知数的值。

常用的霍尔器件有六个端口，如图 1-15 所示。在实验中测量的纵向电阻即为

$$R_{14,23} = \frac{V_3 - V_2}{I_{input}} \quad (1-8)$$

其中 $R_{14,23}$ 代表在1和4端口通电流，测量2和3端口电压。对于量子自旋霍尔效应，器件的边界上有两条方向相反的弹道输运通道（图 1-15 中的红线和蓝线）。由 Büttiker 公式可以得到电压差 $V_3 - V_2 = hI_{input}/(2e^2)$ 。因此，在量子自旋霍尔效应中可以测到纵向电阻 $R_{14,23} = h/(2e^2)$ 。

横向电阻为

$$R_{14,26} = \frac{V_6 - V_2}{I_{input}} \quad (1-9)$$

计算可得 $V_6 = V_2$ ，即其横向电阻（霍尔电阻）为零。

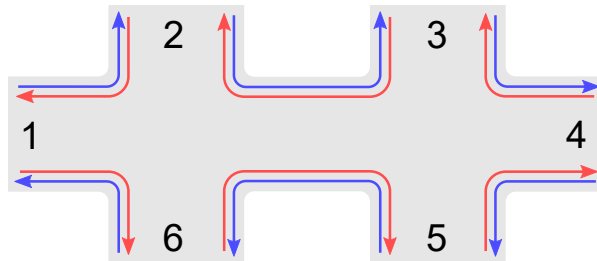


图 1-15 霍尔器件中量子自旋霍尔效应的弹道输运通道示意图。

Fig. 1-15 Schematic diagram of the ballistic transport channels of the quantum spin Hall effect in a Hall bar device.

在二维拓扑绝缘体 HgTe 量子阱和 InAs/GaSb 量子阱中, 这种由量子自旋霍尔效应边界态导致的电阻特性均在实验中被观测到了<sup>[12,26,27,25]</sup>。图 1-16 (a) 为 HgTe 量子阱中测量到的量子化电阻值<sup>[25]</sup>, 其中电阻  $R_{14,23}$  与以上 Büttiker 公式的计算结果是一致的。除了常规的霍尔器件外, 实验上还对  $\pi$  形 InAs/GaSb 量子阱器件进行了测量, 如图 1-16 (b) 所示<sup>[27]</sup>。图 1-16 (a) 中的  $R_{14,14}$  以及 (b) 中  $\pi$  形器件的测量结果也与相应 Büttiker 公式计算结果是一致的。

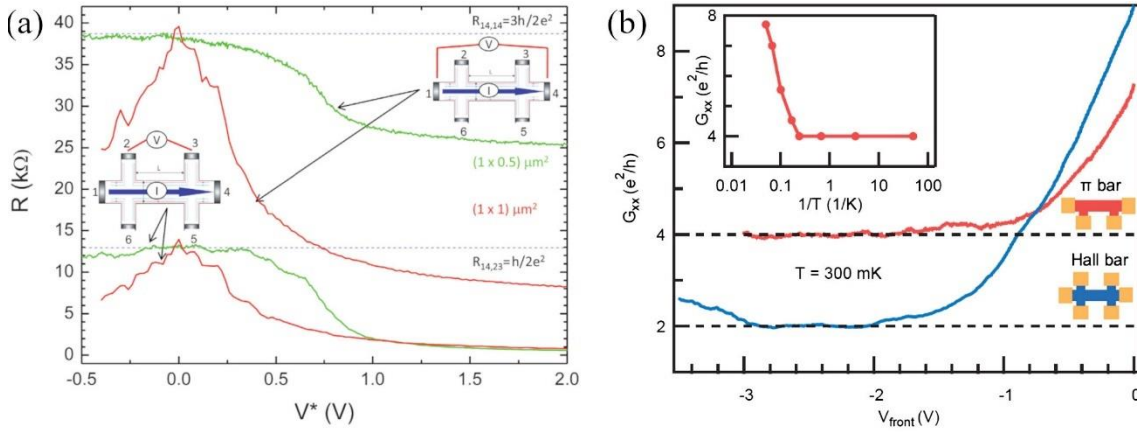


图 1-16 二维拓扑绝缘体中量子自旋霍尔效应带来的量子化输运现象。(a) HgTe 量子阱中电阻随门电压变化的曲线<sup>[25]</sup>。绿线和红线分别代表不同尺寸器件中的测量结果。(b) InAs/GaSb 量子阱电导随门电压变化的曲线<sup>[27]</sup>。其中插图为电导随温度的变化曲线。红线和蓝线分别为  $\pi$  形器件和霍尔器件中的测量结果。

Fig. 1-16 Quantized transport from the quantum spin Hall effect in the two-dimensional topological insulators. (a) Resistances as functions of the gate voltage in HgTe quantum well. Green and red lines represent the measurements from devices of different sizes. (b) Conductance as functions of the gate voltage in InAs/GaSb quantum well. Inset shows the temperature dependent conductance. Red and blue lines represent the measurements from a  $\pi$  bar and a Hall bar, respectively.

在拥有量子自旋霍尔效应的材料中引入磁性可以得到量子反常霍尔效应。量子自旋霍尔效应中两条方向相反的通道是被时间反演对称性所保护的。这一点在 BHZ 模型(1-1)式中体现在矩阵对角元上的  $H(\mathbf{k})$  和  $H^*(-\mathbf{k})$ 。磁性带来的塞曼项 (Zeeman term) 可以打破时间反演对称性, 系统的哈密顿量将从(1-1)式变为

$$H^{BHZ}(\mathbf{k}) + H^{Zeeman} = \begin{pmatrix} H(\mathbf{k}) + m\sigma_z & 0 \\ 0 & H^*(-\mathbf{k}) - m\sigma_z \end{pmatrix} \quad (1-10)$$

其中  $m$  为磁性引入的面外方向交换场 (exchange field) 强度。塞曼项的引入相当于重整了(1-1)式中  $M$  的值: 它相当于把原本的  $M$  在  $H(\mathbf{k})$  中变为  $(M + m)$ , 而在  $H^*(-\mathbf{k})$  中变为了  $(M - m)$ 。当  $m$  足够强时会导致  $H(\mathbf{k})$  和  $H^*(-\mathbf{k})$  中的一个描述能带顺序反转的情况, 而另一个为能带顺序未反转的情况, 如图 1-17 所示<sup>[118]</sup>。当边界上只有

一条弹道输运通道时，由上述 Büttiker 公式即可得到纵向电阻  $R_{14,23} = 0$ ，横向电阻（霍尔电阻）  $R_{14,26} = h/e^2$ 。

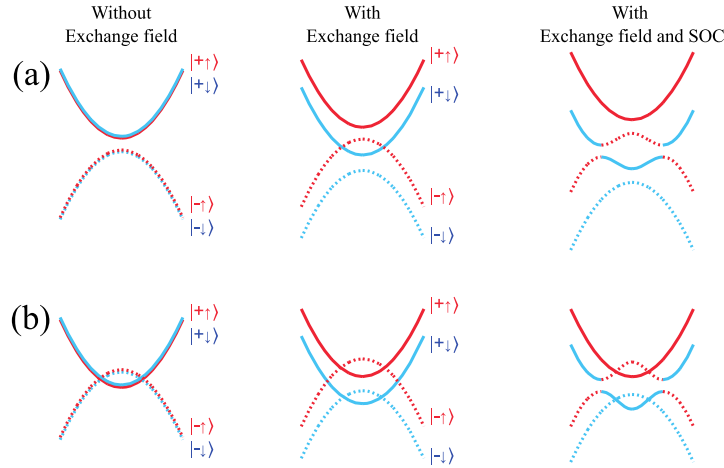


图 1-17 交换场和自旋轨道耦合作用（SOC）对能带的影响<sup>[118]</sup>。(a)没有交换场和自旋轨道耦合作用时能带已经打开能隙的情况。(b)没有交换场和自旋轨道耦合作用时能带无能隙的情况。

Fig. 1-17 The effect of exchange field and spin-orbit coupling (SOC) on energy bands. (a) A finite energy gap is present when there is no exchange field or SOC. (b) No energy gap is present when there is no exchange field or SOC.

量子反常霍尔效应是在磁性拓扑绝缘体  $\text{Cr}_{0.15}(\text{Bi}_{0.1}\text{Sb}_{0.9})_{1.85}\text{Te}_3$  薄膜中首次实现的，其量子化的霍尔电阻如图 1-18 (a)所示<sup>[62]</sup>。在实验中需要精细调控 Bi 原子和 Sb 原子的比例以及 Cr 原子的浓度来调整费米能量的位置和材料的磁性。从图 1-18 (a)中可以看到：在温度为 30 mK 下，将门电压调至 -1.5V 时，霍尔电阻达到量子化，同时纵向电阻接近于零 ( $0.098h/e^2$ )。目前，实验上已经在许多材料中实现了量子反常霍尔效应，其中除了 Cr 或 V 掺杂的  $(\text{Bi,Sb})_2\text{Te}_3$  体系外<sup>[64,119,120]</sup>，还有  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  薄膜<sup>[121]</sup>、转角双层石墨烯（twisted bilayer graphene）<sup>[122]</sup>、 $\text{MoTe}_2/\text{WSe}_2$  摩尔双层异质结（moiré heterobilayers）<sup>[123]</sup>。当前实现量子反常霍尔效应的最高温度约为 2 K，在实验中是通过将有 Cr 掺杂和没有 Cr 掺杂的  $(\text{Bi,Sb})_2\text{Te}_3$  交替叠成五层的设备实现的<sup>[124]</sup>，图 1-18 (b)为在其中测量到的霍尔电阻和纵向电阻。从图中可以看到在磁场强度为零时，霍尔电阻接近量子化的值，同时纵向电阻大约为  $0.2h/e^2$ 。当温度更低时，量子化的阻值会更加精确而且纵向电阻也会趋于零<sup>[124]</sup>。

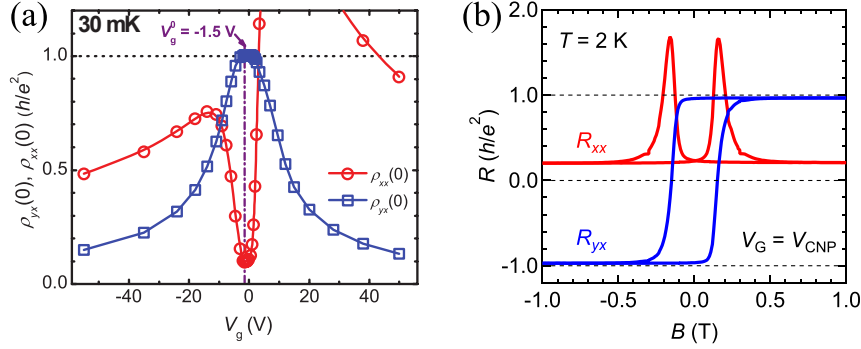


图 1-18 在实验中观测到的量子霍尔效应。(a)  $\text{Cr}_{0.15}(\text{Bi}_{0.1}\text{Sb}_{0.9})_{1.85}\text{Te}_3$  薄膜中的纵向电阻和霍尔电阻随门电压变化的曲线<sup>[62]</sup>。(b) 有 Cr 掺杂和没有 Cr 掺杂的  $(\text{Bi,Sb})_2\text{Te}_3$  交替形成的五层装置中的纵向电阻和霍尔电阻随磁场强度变化的曲线<sup>[124]</sup>。

Fig. 1-18 The quantum anomalous Hall effect observed in experiments. (a) Longitudinal and Hall resistance as functions of the gate voltage in  $\text{Cr}_{0.15}(\text{Bi}_{0.1}\text{Sb}_{0.9})_{1.85}\text{Te}_3$  thin film<sup>[62]</sup>. (b) The magnetic-field dependent longitudinal and Hall resistance in a penta-layer device formed alternately of Cr-doped and Cr-free  $(\text{Bi,Sb})_2\text{Te}_3$  films<sup>[124]</sup>.

### 1.3.4 拓扑材料体态贡献的独特输运现象

在拓扑半金属中，输运性质主要由被费米能量穿过的体态能带贡献的。这些体态的线性能带结构以及动量空间分布的贝利曲率使得它们与普通材料的输运性质有所区别<sup>[125,126]</sup>。

打破时间反演对称性的外尔半金属中均存在反常霍尔效应<sup>[127]</sup>，并且它的反常霍尔电阻的大小与动量空间外尔点之间的距离紧密相连。对于只有一对外尔点情况，取定两个外尔点沿线方向上每一个动量的值（以  $k_z$  为例），则  $k_x$  和  $k_y$  描述了一个二维系统，整个系统即相当于许多二维系统的合集。当  $k_z$  的值位于两个外尔点之间时，计算可以得到对应的二维系统有一个整数的霍尔电导  $e^2/h$ ，而取  $k_z$  位于两个外尔点之外时，对应二维系统的霍尔电导为零。因此，整个系统拥有反常霍尔电导率

$$\sigma_{xy} = \int \sigma_{xy}(k_z) \frac{dk_z}{2\pi} = \frac{e^2}{h} k_d \quad (1-11)$$

可见其正比于两个外尔点之间的距离  $k_d$ 。

外尔半金属中的另一个独特输运特征为其手性反常（chiral anomaly）效应带来的负磁电阻<sup>[128–130]</sup>。手性反常是指两个手性相反的外尔点附近的准粒子总数目是守恒的，但对于某一个手性的准粒子，其数目不再守恒。而负磁电阻便是其表现之一，它是电阻随着磁场强度增大而减小的一种现象。目前，研究发现了多种可以在材料中导致负磁电阻的机制<sup>[131]</sup>。对于手性反常导致的负磁电阻，其特点为磁电阻的大



小取决于磁场 $\mathbf{B}$ 和电场 $\mathbf{E}$ 之间的夹角。当电场和磁场方向平行时，在此方向上负磁电阻有最大值；当电场和磁场方向垂直时，负磁电阻消失。玻尔兹曼方程计算结果表明<sup>[129,132]</sup>：在外尔半金属中，纵向磁电导正比于 $\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}$ ；在磁场较小时，纵向磁电导正比于磁场强度的平方，而在系统进入量子极限时，其正比于磁场强度。实验上，这种手性反常导致的负磁电阻已经在许多材料中被观测到了<sup>[133–135]</sup>，例如图 1-19 (a) 为实验在 ZrTe<sub>5</sub> 中测量到的负磁电阻<sup>[134]</sup>。

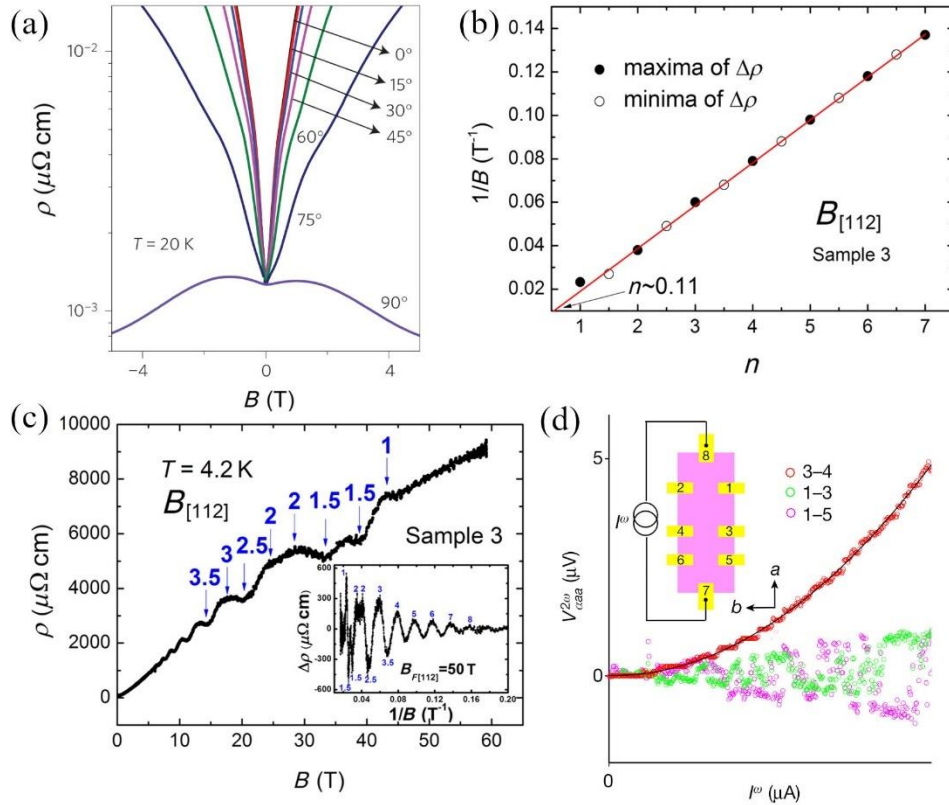


图 1-19 拓扑材料中体态的独特输运现象。(a)在 ZrTe<sub>5</sub> 中测量到的负磁电阻<sup>[134]</sup>。图中的不同曲线为在磁场和激发电流的不同角度下的磁电阻。(b)在 Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub> 中测量到的非平庸 SdH 振荡相位<sup>[138]</sup>。图中纵坐标为磁场强度的倒数，横坐标为磁电阻的振荡指标。(c)在 Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub> 中测量到的线性磁阻<sup>[138]</sup>。(d)在 WTe<sub>2</sub> 中测量到的非线性霍尔效应<sup>[141]</sup>。图中红色圆圈（绿色和紫色圆圈）为非线性霍尔（纵向）电压和激发电流的关系。

Fig. 1-19 Unique transport phenomena contributed by the bulk states of topological materials. (a) Negative magnetoresistance measured in ZrTe<sub>5</sub><sup>[134]</sup>. Different curves denote magnetoresistance with different angles between magnetic field and excitation current. (b) Non-trivial SdH oscillation phase measured in Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub><sup>[138]</sup>. The ordinate in the figure is the reciprocal of the magnetic field strength, and the abscissa is the oscillation index of the magnetoresistance. (c) Linear magnetoresistance measured in Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub><sup>[138]</sup>. (d) Nonlinear Hall effect measured in WTe<sub>2</sub><sup>[141]</sup>. Red circle (green and purple) denotes the nonlinear Hall (longitudinal) voltage as a function of the excitation current.

拓扑材料的线性能带结构给它带来了一些不同于传统二次方型能带结构的特征,例如非平庸的 SdH 振荡 (Shubnikov–de Haas oscillation) 相位<sup>[136,37,126]</sup>和线性磁电阻<sup>[137]</sup>。SdH 振荡是电阻随磁场强度大小  $B$  的振荡。当磁场强度不断增大时,费米能量将不断穿过朗道能带进而导致系统的物理性质不断变化,其中系统热力学性质的振荡被称为 dHvA 振荡 (de Haas–van Alphen oscillation), 输运性质的振荡为 SdH 振荡。对于线性能带结构和二次方型能带结构,这些振荡曲线的相位是不同的,因此测量 SdH 振荡相位也是判断一个材料拓扑性质的依据之一。如图 1-19 (b) 为实验在  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  中测量到的非平庸振荡相位<sup>[138]</sup>。在传统材料中,磁电阻会随磁场强度大小呈平方型增长,但在一些拓扑材料中,实验测量发现其磁电阻随着磁场强度增大呈线性增长。图 1-19 (c) 为实验在  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  中测到的线性磁电阻<sup>[138]</sup>。因此,线性磁电阻也常作为探测到拓扑材料的信号之一。

除了以上线性的输运现象,非线性霍尔效应也是材料拓扑性质的体现之一<sup>[139,140]</sup>。这里的非线性霍尔效应指的是由纵向激发电流产生二阶横向电压的现象。在实验中,一般通过在纵向施加一个较小频率的电流,然后测量横向的二倍频率的电压<sup>[141]</sup>。图 1-19 (d) 为实验在  $\text{WTe}_2$  中测量到的非线性霍尔效应<sup>[141]</sup>。材料中的贝利曲率偶极矩可以贡献本征的非线性霍尔输运<sup>[142]</sup>,而有限大小的贝利曲率偶极矩通常会出现现在打开能隙的倾斜狄拉克锥型能谱中<sup>[143]</sup>。

## 1.4 拓扑材料输运性质研究的现存问题

前面两节的内容回顾了当前拓扑材料中的研究现状,可以看到目前已经发现了种类繁多的拓扑材料和许多新奇的输运现象。输运性质的研究一方面是为了探索拓扑材料的电子能带结构,另一方面是为了推动拓扑材料早日投入到实际应用之中。本节将归纳出当前研究中存在的几个突出问题。

首先,对拓扑材料磁电阻的研究是探究其体态性质的最佳方法之一,目前在此方面的实验测量数据众多,但在理论方面缺乏对磁电阻系统性的对比研究。虽然在拓扑材料中的负磁电阻<sup>[129,132]</sup>、线性磁电阻<sup>[137]</sup>、非平庸的磁电阻振荡相位<sup>[144,145]</sup>均有相应的理论解释,但是这些理论都相互独立。例如当前理论中负磁电阻是出现在纵向磁电阻中的,而线性磁电阻是出现在横向磁电阻中的,两者是否会同时出现在同一个系统中还尚未被探究。此外,当前实验中关于量子机制下线性磁电阻的理论解释均基于 Abrikosov 提出的量子磁电阻理论<sup>[137]</sup>。在此理论框架下,横向的线性磁电阻对应的纵向磁电阻对磁场强度的依赖关系还不清楚。同时确定一个系统中的各方向磁电阻特征有助于在实验中与理论对照时得到更为精准和确凿的实验证据。整体来说,目前在量子理论框架下,各种类型的能带结构和杂质势能对磁电



阻的影响仍需要一个系统性的研究。

量子化输运在投入实际应用中存在几个阻碍。首先,大多数量子化的输运都需要外加强磁场以及在低温中实现。经过近年来研究者的不懈努力,实验上已经在数个体系中实现了量子反常霍尔效应<sup>[62,64,119–123]</sup>。但是,由于磁性掺杂带来的能隙较小,实验上仍然需要极低的温度来实现无磁场的量子化输运。这个难题需要由未来新的实验技术或新的本征磁性拓扑材料来突破。另一个影响量子化输运的阻碍为:目前量子化输运中的无耗散输运通道个数都很少。实验上量子反常霍尔效应中的输运通道目前只能达到个位数<sup>[146,147]</sup>。而在另一方面,实验上在  $\text{ZrTe}_5$  中实现的三维量子霍尔效应有望解决这一难题<sup>[148]</sup>。在这类三维量子霍尔效应中无耗散的输运通道可以达到上万个。然而目前在理论方面仅仅知道电荷密度波或自旋密度波能够带了三维量子霍尔效应,但还没有磁场中电荷密度波的具体理论。实验中  $\text{ZrTe}_5$  的三维量子霍尔效应的具体机制和细节还需要具体的理论解释,且寻找更多拥有三维量子霍尔效应的材料也需要理论的帮助。

半整数的霍尔电导虽然早已出现在各种理论计算中,但实验上相应的确凿证据很少。理论上首先是在三维铁磁拓扑绝缘体的棱边上发现了半整数的量子化输运<sup>[149]</sup>,随后又提出了上下两个表面的半整数的霍尔电导相互抵消的轴子绝缘体(axion insulator)<sup>[150]</sup>。实验上由于材料侧表面态的影响以及器件制备技术的限制一直没有直接观测到半整数的霍尔电导<sup>[151]</sup>。目前,反铁磁拓扑绝缘体  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  的实现为探索半整数的霍尔电导提供了更好的平台。但开展实验测量的具体方案以及  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  输运性质的理论研究还很缺乏。

## 1.5 本论文主要研究内容

针对上一节中提出的问题,本论文系统地研究了拓扑半金属中的磁电阻,探索了磁场中电荷密度波引入的三维量子霍尔效应,设计了  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  的非局域化输运测量方案并计算了相应的非局域化电阻。以下为具体的研究内容和各章的安排。

第二章从无质量的狄拉克哈密顿量出发,首先研究了其在磁场中形成的朗道能带,接着推导了形成朗道能带的系统中的格林函数,并与一般系统中格林函数的推导做了比较研究,在此基础上使用久保公式分析推导了纵向、横向和霍尔电导率,并研究了在杂质趋于零的理想情况下纵向磁电阻量子振荡的频率和相位。第二章的最后部分研究了量子极限下费米能量和载流子浓度的关系以及杂质对纵向磁电阻的影响。

第三章首先给出了朗道能带系统中杂质的处理方法,之后分别从单个外尔节点模型和两节点模型出发,对最低朗道能带和朗道指标为 1 的能带中的散射时间

和输运时间进行了推导。第三章的计算分别考虑了  $\delta$  势能型杂质、高斯势能型杂质、屏蔽库伦势能型杂质，并给出了不同类型杂质在系统中占主导时，相应量子极限下纵向和横向磁电阻对磁场的依赖关系。

第四章首先介绍了在三维材料中量子霍尔效应出现的物理机制，之后从  $\text{ZrTe}_5$  的低能有效模型出发，在磁场中的最低朗道能级上考虑了电子-声子相互作用和电子-电子相互作用引入的电荷密度波，并用平均场近似的方法数值计算了相应序参量的大小，之后分析了  $\text{ZrTe}_5$  中电荷密度波的性质以及电流的非欧姆特性。第四章的最后讨论了电荷密度波可能引起的其他尚未实验实现的量子化输运现象。

第五章从  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  的单个七重层有效哈密顿量出发，首先在空间中构建了反铁磁结构  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  的格点模型，之后设计了多端口中非局域化输运的测量方案，并用 Landauer-Büttiker 公式计算了六端口  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  器件中的非局域化电阻，最后考虑了费米能量、杂质、测量电极厚度对非局域化电阻的影响。此外，第五章还计算了六端口轴子绝缘体中的理论非局域化电阻，并于  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  的计算结果进行了对比。

## 第 2 章 无质量狄拉克粒子的本征磁电阻特性

### 2.1 引言

正如第一章中 1.2.3 小节所述,许多拓扑半金属在费米能量附近有线性的能带特征,并且附近的态可以被无质量狄拉克方程所描述。由于材料的许多物理性质都和其费米能量附近的能带结构直接关联,拓扑半金属在许多方面都会表现出与拥有二次方型能带结构的传统材料截然不同的特征。无质量狄拉克哈密顿量结构简单且能抓住狄拉克半金属以及外尔半金属中关键的线性能带特征,此外,一些材料(例如  $\text{Ag}_2\text{Se}$  和  $\text{ZrTe}_5$ ) 在费米面附近的能带结构确实为一个单狄拉克锥的形状<sup>[137,152–154]</sup>,即和无质量狄拉克哈密顿量描述的情况完全一致。因此无质量狄拉克哈密顿量为许多拓扑材料的理论研究出发点。

在拓扑材料的磁电阻方面,研究重点大多集中在由手性反常带来的负磁电阻效应<sup>[42,129,131,132,134]</sup>以及特殊能带结构导致的线性磁电阻上<sup>[137,155–158]</sup>。在许多理论研究工作中<sup>[129,132,157,158]</sup>,玻尔兹曼方程的方法被用来计算拓扑半金属的磁电阻。虽然通过加入贝利曲率修正的速度项后玻尔兹曼方程的方法能解释许多输运现象,但其本质为半经典的方法,并非像久保公式一样直接从量子理论出发。对于无磁场系统,通过久保公式研究电导率的理论框架已被很多教科书详细阐述<sup>[112,159]</sup>。对于磁场中的无穷多朗道能带系统,虽然有许多研究工作仍通过久保公式研究其磁电导率,但相应的理论框架一直未被详细梳理。其中的关键近似也一直未被指明。另一方面,虽然杂质效应在磁电阻研究中得到了广泛的关注,但对于朗道能带这种准一维系统,久保公式的顶点修正对纵向磁电阻的重要性一直未得到重视。

本章将从无质量狄拉克哈密顿量出发,首先在 2.2 节求解磁场中的朗道能带和本征态,之后介绍由磁场强度划分的三个区间并给出无质量狄拉克粒子进入量子极限的临界磁场强度。2.3 节将先介绍各个方向的磁电阻以及其与磁电导的关系,之后系统地给出久保公式求解朗道能带系统中磁电导的理论框架,包括相应的格林函数、自能、流流关联函数等。2.4 节将计算无质量狄拉克粒子由其能带结构而带来的纵向和横向本征磁电阻,并对其振荡频率和相位进行研究。2.5 节将研究量子极限下杂质对纵向磁电阻的影响以及顶点修正的作用。最后,2.6 节将对本章内容总结并讨论。

### 2.2 低能有效模型和朗道能带

对于质量为零的狄拉克粒子,第一章中的(1-2)式将解耦为两块  $2 \times 2$  矩阵,且

均有锥型能谱。而在材料体系中，材料的性质往往取决于费米能量附近的态。通过第一性原理计算可以得到材料整体的能带，进一步仅取费米能量附近的能带时，可以得到一个低能有效模型。在狄拉克半金属中，低能有效哈密顿量为

$$H^{total} = \begin{pmatrix} H(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & -H(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (2-1)$$

其中

$$H(\mathbf{k}) = \hbar v_F \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2-2)$$

这里 $\hbar$ 为约化普朗克常数， $v_F$ 为费米速度， $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ 为波矢， $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 为泡利矩阵。哈密顿量中的泡利矩阵带来的自由度对应着两个不同的能带。可以看到，低能有效模型(2-1)式与零质量狄拉克哈密顿量中的 $2 \times 2$ 矩阵块有着相同的数学形式，但和原本的狄拉克方程相比，三维材料中的费米速度比光速小 $10^2$ 到 $10^3$ 个量级。

由于在(2-1)式中，对角上的两个矩阵块是完全解耦的，研究时往往仅取其中一个进行计算。通过求解定态薛定谔方程可以得到(2-2)式的能谱和相应的本征态。无质量狄拉克粒子能谱的最大特征为：它是动量的线性函数，

$$E_{\pm}(k) = \pm \hbar v_F k \quad (2-3)$$

其中 $\pm$ 分别为两个不同能带的指标，而 $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$ 。

由于这里所研究的哈密顿量是各项同性的，因此在各方向上施加磁场是等价的。取磁场 $\mathbf{B}$ 的方向为 $\hat{z}$ ，在朗道规范下，有矢势 $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$ 。通过佩尔斯替换<sup>[160]</sup> (Peierls replacement) 可以得到磁场中系统的哈密顿量变为 $H(\mathbf{k} + e\mathbf{A}/\hbar)$ ，即在(2-2)式中的波矢 $k_x$ 将变为 $(k_x - eBy/\hbar)$ ，其中 $e = 1.6 \times 10^{-19}$  C 为电子所带的电荷量。变换后的哈密顿量会因 $y$ 的引入打破 $\hat{y}$ 方向的平移对称性，进而导致 $k_y$ 变为微分算符。通过观察变换后的哈密顿量可以发现其数学形式和一维谐振子相似，因此可以通过定义相似的产生湮灭算符来解析求解系统的本征能量和本征态。定义产生湮灭算符 $a^\dagger$ 和 $a$ 分别为

$$\begin{aligned} a^\dagger &= \frac{l_B}{\sqrt{2}} \left( k_x - \frac{eBy}{\hbar} + \partial_y \right) \\ a &= \frac{l_B}{\sqrt{2}} \left( k_x - \frac{eBy}{\hbar} - \partial_y \right) \end{aligned} \quad (2-4)$$

其中 $l_B = \sqrt{\hbar/(eB)}$ 。之后，相应的定态薛定谔方程可以写为

$$\hbar v_F \begin{pmatrix} k_z & \sqrt{2}a/l_B \\ \sqrt{2}a^\dagger/l_B & -k_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1|n-1\rangle \\ c_2|n\rangle \end{pmatrix} |k_x, k_z\rangle = E \begin{pmatrix} c_1|n-1\rangle \\ c_2|n\rangle \end{pmatrix} |k_x, k_z\rangle \quad (2-5)$$

这里 $E$ 为需要求解的本征能量，本征态的形式是根据哈密顿量中产生湮灭算符的位置写出的。此外，本征态的表示混合使用了矩阵形式和狄拉克符号，一个本征态是

由狄拉克符号 $|n\rangle$ 和 $|k_x, k_z\rangle$ 与矩阵形式中的矢量（其中 $c_1$ 和 $c_2$ 为系数）共同确定的。在表达式中使用狄拉克符号可以使解析推导更为便捷，仅在需要本征态的具体形式时选择合适的表象将其写出即可。将产生湮灭算符作用到本征态上，约去等式两边的公因子，(2-5)式可以化为

$$\hbar v_F \begin{pmatrix} k_z & \sqrt{2n}/l_B \\ \sqrt{2n}/l_B & -k_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad (2-6)$$

求解久期方程（secular equation）便可得到本征能量以及系数 $c_1$ 和 $c_2$ 的值。系统的本征能量为

$$E_{k_z, n\pm} = \pm \hbar v_F \sqrt{k_z^2 + \frac{2n}{l_B^2}} \quad (2-7)$$

对应的本征态为

$$\begin{aligned} |k_x, k_z, n+\rangle &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_{k_z, n}}{2} |n-1\rangle \\ \sin \frac{\theta_{k_z, n}}{2} |n\rangle \end{pmatrix} |k_x, k_z\rangle \\ |k_x, k_z, n-\rangle &= \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta_{k_z, n}}{2} |n-1\rangle \\ \cos \frac{\theta_{k_z, n}}{2} |n\rangle \end{pmatrix} |k_x, k_z\rangle \end{aligned} \quad (2-8)$$

其中 $\cos \theta_{k_z, n} = k_z / \sqrt{k_z^2 + 2n/l_B^2}$ 。在表达式中使用 $\theta_{k_z, n}$ 的形式是为了方便对两能带模型进行更一般性的研究。

不同于普通的单能带模型，(2-7)式和(2-8)式对应的是朗道指标 $n \geq 1$ 的情况。因本征态的独特形式， $n = 0$ 的情况需要单独处理，此时，(2-5)式应为

$$\hbar v_F \begin{pmatrix} k_z & \sqrt{2}a/l_B \\ \sqrt{2}a^\dagger/l_B & -k_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ c_0|0\rangle \end{pmatrix} |k_x, k_z\rangle = E \begin{pmatrix} 0 \\ c_0|0\rangle \end{pmatrix} |k_x, k_z\rangle \quad (2-9)$$

参数 $c_0$ 为等号两边的公约数，因此可以约去。将哈密顿量作用到本征态后，仅能得到一个方程，即

$$-\hbar v_F k_z |0\rangle = E |0\rangle \quad (2-10)$$

因此，当 $n = 0$ 时，系统的本征能量为

$$E_{k_z, 0} = -\hbar v_F k_z \quad (2-11)$$

相应本征态为

$$|k_x, k_z, 0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ |0\rangle \end{pmatrix} |k_x, k_z\rangle \quad (2-12)$$

从以上本征态的表达式可以看到：磁场中系统的量子数为动量 $k_x$ 和 $k_z$ 以及能带指标（ $n \pm$ 或 $0$ ）。由于本征能量对量子数 $k_x$ 没有依赖关系，计算 $k_x$ 的数目即可得

到每个本征能量都是  $N_L = eB/h$  重简并的。

根据(2-7)式和(2-11)式可以画出系统本征能量随波矢  $k_z$  变化的能带图，如图 2-1 所示。随着磁场强度的不断增强，从(2-7)式可以得出：能带将逐渐远离零能点，且能带之间的距离将不断增大。此外，简并度  $N_L$  也是与磁场强度呈正比的，因此，当系统中的粒子数目固定时，整体的填充能量位置（即费米能量）将会随磁场强度增强而下降，如图 2-1 中(a)、(b)、(c)所示。对于由(2-7)式形式的一维能带，可以求得每条能带贡献的态密度  $N_{n\pm}(E)$  为

$$N_{n\pm}(E) = \frac{1}{V} \sum_{k_x, k_y, k_z} \delta(E - E_{k_z, n\pm})$$

$$= \frac{N_L}{\pi} \frac{E}{\hbar v_F \sqrt{E^2 - (\hbar v_F)^2 \frac{2n}{l_B^2}}} \Theta \left( E \mp \hbar v_F \sqrt{\frac{2n}{l_B^2}} \right) \quad (2-13)$$

这里  $V$  为系统的体积， $\Theta(x)$  为阶跃函数。可以看到，在能量  $E$  位于每个  $E_{k_z, n+}$  能带底端或  $E_{k_z, n-}$  能带顶端时，态密度将会发散。因此，费米能量切过每条能带时对应的态密度将剧烈变化。在磁场强度较小时，因为朗道能带十分密集，即图 2-1 (a) 所示情况，系统和未加磁场时的情况并无太大区别，通常把这个范围的磁场区间称作半经典区间（semiclassical regime）。当磁场强度较大时，朗道能带之间距离足够大，即图 2-1 (b) 所示情况，系统的物理性质会随磁场强度的变化产生振荡，因此这个区间被称为量子振荡区间（quantum oscillation regime）。当磁场十分大时，仅最低朗道能带被占据，系统的物理性质将停止随磁场强度振荡，这个区间通常被称为量子极限区间（quantum limit regime），即图 2-1 (c) 所示情况。从量子振荡区间进入量子极限区间的临界磁场强度为  $B_c$ 。当系统处于  $B_c$  时，费米能量刚好切过  $E_{k_z, 1+}$  能带底端（如果为空穴型载流子，则为  $E_{k_z, 1-}$  能带顶端），即

$$\min(E_{k_z, 1+}) = E_{k_F, 0} \quad (2-14)$$

对于哈密顿量(2-2)式，从(2-11)式出发可以得到量子极限下费米波矢  $k_F$  和载流子浓度  $n_0$  的关系为  $k_F = 2\pi n_0 / N_L$ 。因此，可以求得临界磁场强度为

$$B_c = \frac{\hbar}{e} (2\sqrt{2}\pi^2 n_0)^{2/3} \quad (2-15)$$

但考虑整个哈密顿量(2-1)式时，有  $k_F = \pi n_0 / N_L$ ，则需要移除上式中括号内的 2。鉴于此表达式对模型参数没有任何依赖性，因此它可以在实验中用于确定载流子浓度或临界磁场强度。

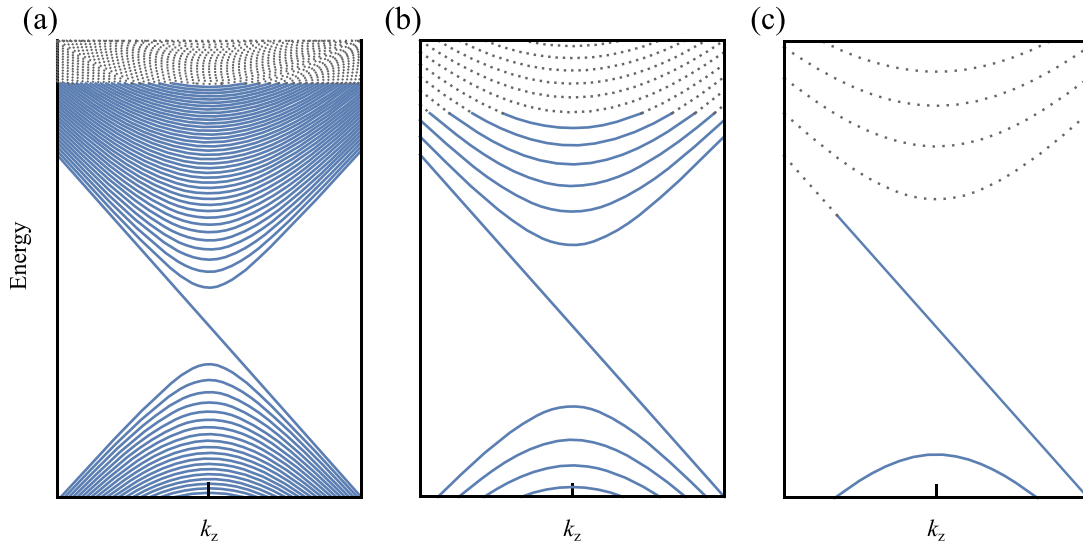


图 2-1 无质量狄拉克粒子在不同磁场强度下的能谱。(a)磁场强度较弱时，朗道能带之间距离较近。(b)磁场强度较大时，朗道能带之间的距离变大。(c)磁场强度十分大时，只有最低朗道能带被占据。图中蓝色实线代表被占据的态，灰色虚线代表未被占据的态。

Fig. 2-1 The energy dispersion of massless Dirac particles under different magnetic strengths. (a) The spacing of adjoining Landau bands is very small under the weak magnetic field strength. (b) The spacing of adjoining Landau bands becomes larger when the magnetic field is strong. (c) Only the lowest Landau band is occupied when the magnetic field strength is extremely strong. Blue solid lines represent the occupied states, and gray dashed lines represent the unoccupied states.

## 2.3 磁电阻的计算

对于一个三维系统，固定磁场的方向后，根据施加激发电流的方向和测量电压的方向不同（见图 2-2），可以将磁电阻分为三类。在竖直方向施加磁场的情况下，当激发电流与测量电压的方向均与磁场方向平行时，所测得的电阻通常被称为纵向磁电阻，如图 2-2 (a)所示；当激发电流方向与磁场方向垂直时，平行于激发电流的方向测量电压所得到的电阻通常被称作横向磁电阻，如图 2-2 (b)所示；当激发电流方向和测量电压方向相互垂直且位于垂直磁场方向的平面内时，所测得的电阻为霍尔电阻，如图 2-2 (c)所示。这里的横向和纵向电阻与二维系统中的定义不同，在二维系统中垂直二维平面施加磁场的情况下测得的纵向电阻和霍尔电阻和上述三维情况中横向电阻和霍尔电阻较类似。

由于磁场的引入，空间中各个方向的电阻将变得复杂，因此一般将电阻写为矩阵形式，以便在分析计算中能全面地描述系统电阻特性。当磁场沿 $z$ 方向时，在笛卡尔坐标系下，电阻率可以写为

$$\rho \equiv \begin{pmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} & 0 \\ \rho_{yx} & \rho_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{zz} \end{pmatrix} \quad (2-16)$$

这里矩阵元 $\rho_{\alpha\beta}$ 代表在 $\alpha$ 方向施加激发电流而在 $\beta$ 方向测量电压时的电阻率。因此 $\rho_{zz}$ 即为前文所说的纵向磁电阻率； $\rho_{xx}$ 和 $\rho_{yy}$ 即为横向磁电阻率。由于磁场沿 $\vec{z}$ 方向，霍尔电压即在 $\vec{x}$ - $\vec{y}$ 平面内分布，仅有霍尔电阻率 $\rho_{xy}$ 和 $\rho_{yx}$ 不为零。

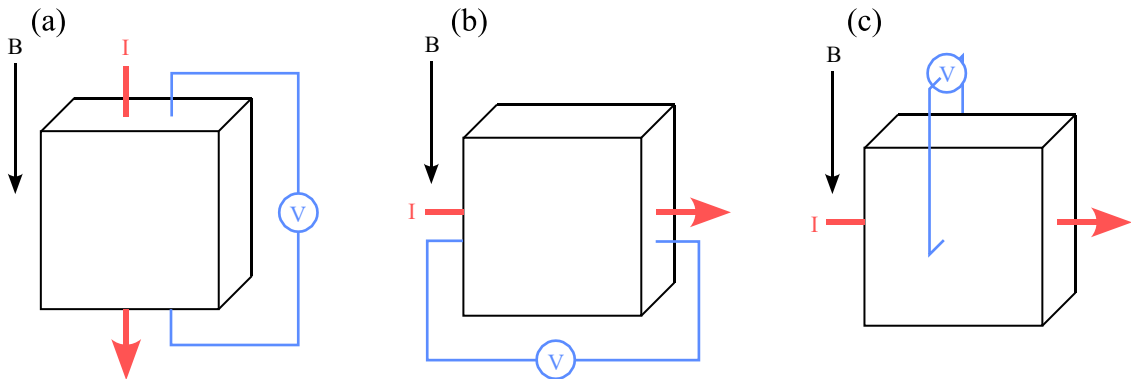


图 2-2 磁场中三种不同的电阻测量示意图。(a)纵向磁电阻；(b)横向磁电阻；(c)霍尔电阻。

Fig. 2-2 Schematic diagrams of the measurements for three different kinds of resistance in the magnetic field. (a) Longitudinal magnetoresistance. (b) Transverse magnetoresistance. (c) Hall resistance.

将电阻率写为三维的方矩阵后，相应的电导率也应为三维的方矩阵，而电流和电场应为三行一列的矩阵（分别对应空间中的三个方向）。它们之间的关系仍遵循第一章的(1-4)式，只是相应的乘法和除法运算变为了矩阵的乘法和求逆。因此电导率与电阻率之间的关系为

$$\sigma = \rho^{-1} \quad (2-17)$$

将(2-16)式中的矩阵求逆可以得到：纵向磁电阻率和磁电导率相互为倒数，即 $\sigma_{zz} = 1/\rho_{zz}$ ；横向磁电阻率和磁电导率的关系为

$$\sigma_{xx} = \frac{\rho_{yy}}{\rho_{xx}\rho_{yy} - \rho_{xy}\rho_{yx}} \quad (2-18)$$

对于一个在 $\vec{x}$ - $\vec{y}$ 平面内各项同性的系统， $\rho_{xx} = \rho_{yy}$ 且 $\rho_{xy} = -\rho_{yx}$ ，因此上式可以简化为

$$\sigma_{xx} = \frac{\rho_{xx}}{\rho_{xx}^2 + \rho_{xy}^2} \quad (2-19)$$

相应的霍尔电导率为

$$\sigma_{xy} = \frac{\rho_{yx}}{\rho_{xx}^2 + \rho_{xy}^2} \quad (2-20)$$



### 2.3.1 朗道能带的格林函数和自能

系统的格林函数是久保公式计算电导率的基础，而杂质对电导的影响一般通过格林函数的自能来考虑。和计算普通体系的格林函数不同，磁场中的三维材料通常被当作拥有无穷多一维能带的系统来对待。例如(2-7)式中朗道指标 $n$ 是可以取到无穷大的。因此在求解朗道能带的格林函数以及自能的过程中需要一些近似处理。

对于任意系统，其哈密顿量的一般形式可以写作

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (2-21)$$

其中 $\hat{H}_0$ 和 $\hat{V}$ 分别为未考虑杂质的哈密顿量算符和杂质势能算符。对于未考虑杂质时的系统，有

$$\hat{H}_0|u\rangle = E_u|u\rangle \quad (2-22)$$

其中 $E_u$ 和 $|u\rangle$ 分别表示系统的本征能量和本征态，对于无质量狄拉克粒子即为(2-7)式、(2-11)式以及(2-8)和(2-12)式。根据松原格林函数（Matsubara Green function）的定义<sup>[112,159]</sup>，格林函数算符的一般形式可以做以下转换

$$\begin{aligned} \hat{G}(i\omega_m) &= (i\omega_m - \hat{H})^{-1} \\ &= \{[\hat{G}_0(i\omega_m)]^{-1} - \hat{V}\}^{-1} \\ &= \{1 - \hat{G}_0(i\omega_m)\hat{V}\}^{-1}\hat{G}_0(i\omega_m) \end{aligned} \quad (2-23)$$

这里 $i\omega_m/\hbar$ 即为松原格林函数中的虚数频率（imaginary frequency）。 $\hat{G}_0(i\omega_m)$ 为未考虑杂质时系统的格林函数算符，它可以写为 $E_u$ 和 $|u\rangle$ 的表达式，

$$\begin{aligned} \hat{G}_0(i\omega_m) &= (i\omega_m - \hat{H}_0)^{-1} \\ &= (i\omega_m - \hat{H}_0)^{-1} \sum_u |u\rangle\langle u| \\ &= \sum_u \frac{|u\rangle\langle u|}{i\omega_m - E_u} \end{aligned} \quad (2-24)$$

其中上式的第二个行插入了 $\sum_u |u\rangle\langle u| = 1$ 。

将(2-23)式以杂质势能做泰勒展开可以得到

$$\begin{aligned} \hat{G}(i\omega_m) &= \hat{G}_0(i\omega_m) + \hat{G}_0(i\omega_m)\hat{V}\hat{G}_0(i\omega_m) + \hat{G}_0(i\omega_m)\hat{V}\hat{G}_0(i\omega_m)\hat{V}\hat{G}_0(i\omega_m) \\ &\quad + \hat{G}_0(i\omega_m)\hat{V}\hat{G}_0(i\omega_m)\hat{V}\hat{G}_0(i\omega_m)\hat{V}\hat{G}_0(i\omega_m) + \dots \end{aligned} \quad (2-25)$$

由于 $\hat{G}(i\omega_m)$ 为考虑杂质后系统的格林函数，因此将 $\hat{G}(i\omega_m)$ 以原本的本征态 $|u\rangle$ 为基用矩阵表示，其非对角矩阵元 $\langle u|\hat{G}(i\omega_m)|u'\rangle$ 将在一般情况下不为零。系统的量子数 $u$ 一般分为动量 $\mathbf{k}$ 和能带指标 $b$ ，对于 $\langle \mathbf{k}, b|\hat{G}(i\omega_m)|\mathbf{k}', b'\rangle$ ，在进行杂质平均（impurity average）后，将变为 $\langle \mathbf{k}, b|\hat{G}(i\omega_m)|\mathbf{k}, b'\rangle$ ，即格林函数在在动量 $\mathbf{k}$ 的空间将恢复为对角形式，而在能带指标空间为非对角形式。对于无磁场的多能带体系，系统的哈密

顿量一般写为动量的函数和能带指标的矩阵的混合形式，在对杂质做近似处理后可以将(2-25)式重新写回(2-23)式的形式。系统的格林函数可直接依据(2-23)式的求逆计算，其能带空间的矩阵形式自然的包含了相应的非对角项。但磁场中的系统情况比较特殊，因为其朗道能带的数目是无穷多的，无法用矩阵表示和求逆。因此通常在这里需要进一步近似处理。仅考虑格林函数在能带指标空间中的对角项，对于本征态 $u$ ，其格林函数可以写为

$$\begin{aligned}
 G_u(i\omega_m) &= \langle u | \hat{G}(i\omega_m) | u \rangle \\
 &= \langle u | \hat{G}_0(i\omega_m) | u \rangle + \langle u | \hat{G}_0(i\omega_m) \hat{V} \hat{G}_0(i\omega_m) | u \rangle \\
 &\quad + \langle u | \hat{G}_0(i\omega_m) \hat{V} \hat{G}_0(i\omega_m) \hat{V} \hat{G}_0(i\omega_m) | u \rangle + \dots
 \end{aligned} \tag{2-26}$$

上式等号右边的第一项为无杂质影响时的格林函数，第二项为

$$\begin{aligned}
 \langle u | \hat{G}_0(i\omega_m) \hat{V} \hat{G}_0(i\omega_m) | u \rangle &= \sum_{u', u''} \langle u | \hat{G}_0(i\omega_m) | u' \rangle \langle u' | \hat{V} | u'' \rangle \langle u'' | \hat{G}_0(i\omega_m) | u \rangle \\
 &= \frac{1}{i\omega_m - E_u} \langle u | \hat{V} | u \rangle \frac{1}{i\omega_m - E_u}
 \end{aligned} \tag{2-27}$$

同样，通过插入 $\sum_u |u\rangle\langle u|$ 的方法，第三项可以写为

$$\begin{aligned}
 &\langle u | \hat{G}_0(i\omega_m) \hat{V} \hat{G}_0(i\omega_m) \hat{V} \hat{G}_0(i\omega_m) | u \rangle \\
 &= \frac{1}{i\omega_m - E_u} \langle u | \hat{V} \hat{G}_0(i\omega_m) \hat{V} | u \rangle \frac{1}{i\omega_m - E_u} \\
 &= \frac{1}{i\omega_m - E_u} \sum_{u'} \langle u | \hat{V} | u' \rangle \frac{1}{i\omega_m - E_{u'}} \langle u' | \hat{V} | u \rangle \frac{1}{i\omega_m - E_u}
 \end{aligned} \tag{2-28}$$

将上式中杂质的影响提取出来，可以得到杂质带来的自能

$$\Sigma_u(i\omega_m) = \sum_{u'} \frac{|\langle u' | \hat{V} | u \rangle|^2}{i\omega_m - E_{u'}} \tag{2-29}$$

使用戴森方程（Dyson equation）<sup>[112,159]</sup>，可以得到态 $u$ 的格林函数近似为

$$G_u(i\omega_m) \approx \frac{1}{i\omega_m - E_u - \Sigma_u(i\omega_m)} \tag{2-30}$$

戴森方程是将自能（即提取出来的杂质作用）通过迭代的方法加入到了格林函数中。将(2-30)式等式右边展开后与(2-26)式等式右边对比可知近似后的格林函数与未做近似时相比仅包含了部分的项。在做杂质平均处理后会发现这种近似在杂质浓度和强度都比较小时十分有效。将(2-30)式和(2-24)式对比可得，考虑杂质效应后系统的格林函数算符为

$$\hat{G}(i\omega_m) = \sum_u \frac{|u\rangle\langle u|}{i\omega_m - E_u - \Sigma_u(i\omega_m)} \tag{2-31}$$

从以上推导可以发现：计算朗道能带的格林函数时，一共有两处近似。其中一

处为处理杂质时的常规近似，另一处为拥有朗道能带的系统所特有的。(2-26)式意味着从 $u$ 态出发后最终又回到了 $u$ 态，即假设了杂质不会导致不同朗道能带之间态的散射。结合(2-29)式和(2-30)式会发现此处杂质近似处理的影响为：给每个朗道能带带来了有限大小的带宽（band broadening）但没有带来能带间的相互作用。

在计算系统的响应函数时，通常需要使用推迟格林函数（retarded Green function），它可以通过对松原格林函数进行解析延拓得到。实际操作时，只需将松原格林函数中的虚数能量 $i\omega_m$ 替换为 $\omega + i0^+$ 即可得到推迟格林函数（这里 $0^+$ 为大于0的无穷小量）<sup>[112]</sup>。此外，超前格林函数（advanced Green function）与推迟格林函数互为厄密共轭（Hermitian conjugate），它可以通过对推迟格林函数求厄密共轭或者对松原格林函数进行解析延拓（ $i\omega_m \rightarrow \omega - i0^+$ ）得到。

### 2.3.2 磁电导率的久保公式计算

对于磁场中的系统，将其当作无穷多个一维能带体系处理后，其电导率的计算和普通系统本质上讲并无差异。本小节以下内容将通过推迟流流关联函数（retarded current-current correlation function）分别推导出拥有朗道能带系统中的纵向电导率和横向电导率。

电导率和推迟流流关联函数 $\Pi_{\alpha\beta}^R(\Omega)$ 的关系为

$$\text{Re}[\sigma_{\alpha\beta}] = -\lim_{\Omega \rightarrow 0} \frac{\hbar}{\Omega} \text{Im}[\Pi_{\alpha\beta}^R(\Omega)] \quad (2-32)$$

根据单圈费曼图（如图 2-3 所示）<sup>[112]</sup>，可以直接写出虚频流流关联函数的表达式为

$$\Pi_{\alpha\beta}(i\Omega) = \frac{e^2 k_B T}{V} \sum_m \text{Tr}[v_\alpha \hat{G}(i\omega_m) v_\beta \hat{G}(i\omega_m + i\Omega)] \quad (2-33)$$

其中 $i\Omega/\hbar$ 为虚数频率， $e$ 为电子所带电荷量， $k_B$ 为玻尔兹曼常数， $T$ 为温度， $V$ 为系统的体积， $v_\alpha$ 为 $\alpha$ 方向的速度算符。

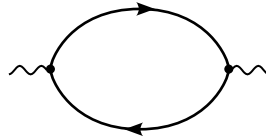


图 2-3 流流关联函数的单圈图。带有箭头的线段代表粒子的格林函数，黑色实心圆为速度算符，两侧的波浪线代表格林函数能量的增加和减小量。

Fig. 2-3 One loop diagram of the current-current correlation function. The arrowed lines represent Green functions of particles. Black solid circles denote velocity operators. Wiggly lines at two sides represent the incoming and outgoing energy of the Green function.

将上一小节得到的格林函数的表达式(2-31)式代入上式后可得

$$\Pi_{\alpha\beta}(i\Omega) = \frac{e^2 k_B T}{V} \sum_m \sum_{u,u'} \frac{\text{Tr}[v_\alpha|u\rangle\langle u|v_\beta|u'\rangle\langle u'|]}{[i\omega_m - E_u - \Sigma_u(i\omega_m)][i\omega_m + i\Omega - E_{u'} - \Sigma_{u'}(i\omega_m)]} \quad (2-34)$$

这里在关联函数中的求迹运算是为了对矩阵表示的自由度求和。利用求迹的循环性质（即循环置换矩阵的乘积并不改变乘积的迹），可得

$$\text{Tr}[v_\alpha|u\rangle\langle u|v_\beta|u'\rangle\langle u'|] = \langle u'|v_\alpha|u\rangle\langle u|v_\beta|u'\rangle \quad (2-35)$$

为了进一步将虚频求和，需要做如下替换

$$\frac{1}{i\omega_m - E_u - \Sigma_u(i\omega_m)} = \int \frac{A_u(\omega_1)}{i\omega_m - \omega_1} d\omega_1 \quad (2-36)$$

这里 $A_u(\omega_1)$ 为谱函数（spectral function），它与格林函数的关系为

$$A_u(\omega_1) = \frac{i}{2\pi} [G_u^R(\omega_1) - G_u^A(\omega_1)] \quad (2-37)$$

其中 $G_u^R(\omega_1)$ 和 $G_u^A(\omega_1)$ 分别为推迟格林函数和超前格林函数。在进行谱函数替换之后，将(2-34)式中的虚频求和提出计算为

$$k_B T \sum_m \frac{1}{(i\omega_m - \omega_1)(i\omega_m + i\Omega - \omega_2)} = \frac{n_F(\omega_1) - n_F(\omega_2)}{\omega_1 - \omega_2 + i\Omega} \quad (2-38)$$

其中费米-狄拉克分布函数 $n_F(\omega_1)$ 的表达式为

$$n_F(\omega_1) = \frac{1}{e^{(\omega_1 - E_F)/k_B T} + 1} \quad (2-39)$$

将(2-34)式中的虚频求和后，做解析延拓 $i\Omega \rightarrow \Omega + i0^+$ 即可得到推迟流流关联函数。

为了得到电导率，需要取推迟流流关联函数的虚部。对于 $\alpha = \beta$ 的情况，即前文中的纵向或横向电导率，有

$$\langle u'|v_\alpha|u\rangle\langle u|v_\alpha|u'\rangle = |\langle u'|v_\alpha|u\rangle|^2 \quad (2-40)$$

因此

$$\begin{aligned} \text{Im}[\Pi_{\alpha\alpha}^R(\Omega)] &= \frac{e^2}{V} \sum_{u,u'} \int \int \left\{ \text{Im} \left[ \frac{1}{\omega_1 - \omega_2 + \Omega + i0^+} \right] \right. \\ &\quad \times [n_F(\omega_1) - n_F(\omega_2)] A_u(\omega_1) A_{u'}(\omega_2) |\langle u'|v_\alpha|u\rangle|^2 \Big\} d\omega_1 d\omega_2 \\ &= \frac{e^2}{V} \sum_{u,u'} \int \int \{ [-\pi \delta(\omega_1 - \omega_2 + \Omega)] \\ &\quad \times [n_F(\omega_1) - n_F(\omega_2)] A_u(\omega_1) A_{u'}(\omega_2) |\langle u'|v_\alpha|u\rangle|^2 \} d\omega_1 d\omega_2 \\ &= -\frac{\pi e^2}{V} \sum_{u,u'} \int \{ [n_F(\omega_1) - n_F(\omega_1 + \Omega)] \\ &\quad \times A_u(\omega_1) A_{u'}(\omega_1 + \Omega) |\langle u'|v_\alpha|u\rangle|^2 \} d\omega_1 \end{aligned} \quad (2-41)$$

这里在取虚部时使用了 Sokhotski-Plemelj 定理，即

$$\frac{1}{x \pm i0^+} = \mathcal{P}\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi\delta(x) \quad (2-42)$$

其中 $\mathcal{P}$ 表示柯西主值， $\delta(x)$ 为狄拉克 $\delta$ 函数（Dirac  $\delta$  function）。当 $\Omega$ 趋于零时，有

$$\lim_{\Omega \rightarrow 0} \frac{[n_F(\omega_1) - n_F(\omega_1 + \Omega)]}{\Omega} = -\frac{dn_F(\omega_1)}{d\omega_1} \quad (2-43)$$

在零温近似下，

$$\lim_{T \rightarrow 0} \left[ -\frac{dn_F(\omega_1)}{d\omega_1} \right] = \delta(\omega_1 - E_F) \quad (2-44)$$

因此可得

$$\text{Re}[\sigma_{\alpha\alpha}] = \frac{\pi\hbar e^2}{V} \sum_{u,u'} A_u(E_F) A_{u'}(E_F) |\langle u' | v_\alpha | u \rangle|^2 \quad (2-45)$$

这个公式十分重要，它是计算纵向和横向磁电导率的出发点。

对于霍尔电导率，即 $\alpha \neq \beta$ 的情况，不考虑杂质效应时，虚频流流关联函数(2-34)式中不再有自能 $\Sigma_u(i\omega_m)$ ，因此可以直接使用(2-38)式进行虚频求和，

$$\Pi_{\alpha\beta}(i\Omega) = \frac{e^2}{V} \sum_{u,u'} \frac{n_F(E_u) - n_F(E_{u'})}{E_u - E_{u'} + i\Omega} \langle u' | v_\alpha | u \rangle \langle u | v_\beta | u' \rangle \quad (2-46)$$

做解析延拓（ $i\Omega \rightarrow \Omega + i0^+$ ）后，需要取推迟流流关联函数的虚部。在具体计算中会发现 $\langle u' | v_\alpha | u \rangle \langle u | v_\beta | u' \rangle$ 只有虚部，因此

$$\text{Im}[\Pi_{\alpha\beta}^R(\Omega)] = \frac{e^2}{V} \sum_{u,u'} \frac{n_F(E_u) - n_F(E_{u'})}{E_u - E_{u'} + \Omega} \text{Im} \langle u' | v_\alpha | u \rangle \langle u | v_\beta | u' \rangle \quad (2-47)$$

通过使用洛必达法则可以得到<sup>[39]</sup>

$$\lim_{\Omega \rightarrow 0} \frac{(E_u - E_{u'} + \Omega)^{-1}}{\Omega} = -\frac{1}{(E_u - E_{u'})^2} \quad (2-48)$$

即有本征霍尔电导率

$$\text{Re}[\sigma_{\alpha\beta}] = \frac{\hbar e^2}{V} \sum_{u,u'} \frac{n_F(E_u) - n_F(E_{u'})}{(E_u - E_{u'})^2} \text{Im} \langle u' | v_\alpha | u \rangle \langle u | v_\beta | u' \rangle \quad (2-49)$$

上式的求和中不包括 $E_u = E_{u'}$ 的情况。

## 2.4 量子振荡区域的磁电阻

上一节的内容阐明了磁电阻的分类以及计算方法，本节将对无质量狄拉克粒子的纵向和横向磁电阻进行具体计算。重点集中在无质量狄拉克粒子的本征磁电导率以及其在量子振荡区间的特性。

### 2.4.1 纵向磁电阻

对于 $z$ 方向磁场中的系统, (2-45)式中的量子数 $u$ 即为 $k_x, k_z$ 以及能带指标( $n \pm$ 或 $0$ )。磁场中无质量狄拉克粒子在 $z$ 方向的速度算符为

$$\begin{aligned} v_z &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H(\mathbf{k} + e\mathbf{A}/\hbar)}{\partial k_z} \\ &= v_F \sigma_z \end{aligned} \quad (2-50)$$

结合速度算符以及本征态(2-8)式和(2-12)式可以得到

$$\begin{aligned} |\langle k_x, k_z, 0 | v_z | k'_x, k'_z, 0 \rangle|^2 &= v_F^2 \delta_{k_x, k'_x} \delta_{k_z, k'_z} \\ |\langle k_x, k_z, 0 | v_z | k'_x, k'_z, n \pm \rangle|^2 &= 0 \end{aligned} \quad (2-51)$$

以及

$$\begin{aligned} |\langle k_x, k_z, n + | v_z | k'_x, k'_z, n' - \rangle|^2 &= v_F^2 (\sin \theta_{k_z, n})^2 \delta_{n, n'} \delta_{k_x, k'_x} \delta_{k_z, k'_z} \\ |\langle k_x, k_z, n + | v_z | k'_x, k'_z, n' + \rangle|^2 &= v_F^2 (\cos \theta_{k_z, n})^2 \delta_{n, n'} \delta_{k_x, k'_x} \delta_{k_z, k'_z} \\ |\langle k_x, k_z, n - | v_z | k'_x, k'_z, n' - \rangle|^2 &= v_F^2 (\cos \theta_{k_z, n})^2 \delta_{n, n'} \delta_{k_x, k'_x} \delta_{k_z, k'_z} \end{aligned} \quad (2-52)$$

这里的 $\delta_{k_x, k'_x}$ 为克罗内克 $\delta$ 函数(Kronecker  $\delta$  function)。无质量狄拉克粒子的纵向磁电阻率即为

$$\begin{aligned} \text{Re}[\sigma_{zz}] &= \frac{\pi \hbar e^2 v_F^2}{V} \sum_{k_x, k_z} \left\{ [A_{k_z, 0}(E_F)]^2 \right. \\ &\quad + \sum_n \left[ (\cos \theta_{k_z, n})^2 A_{k_z, n+}(E_F) A_{k_z, n+}(E_F) \right. \\ &\quad + (\cos \theta_{k_z, n})^2 A_{k_z, n-}(E_F) A_{k_z, n-}(E_F) \\ &\quad \left. \left. + 2(\sin \theta_{k_z, n})^2 A_{k_z, n+}(E_F) A_{k_z, n-}(E_F) \right] \right\} \end{aligned} \quad (2-53)$$

根据上一节中格林函数和谱函数的定义, 可以得到上式中谱函数的表达式为

$$A_{k_z, b}(E_F) = -\frac{1}{\pi} \frac{\text{Im}[\Sigma_{k_z, b}^R]}{(E_F - E_{k_z, b} - \text{Re}[\Sigma_{k_z, b}^R])^2 + (\text{Im}[\Sigma_{k_z, b}^R])^2} \quad (2-54)$$

其中 $b$ 代表能带指标( $n \pm$ 或 $0$ )。对于自能的实部 $\text{Re}[\Sigma_{k_z, b}^R]$ , 通常认为其作用相当于改变了费米能量 $E_F$ 的大小, 因此在计算中通常被忽略不计。而自能的虚部 $\text{Im}[\Sigma_{k_z, b}^R]$ 作用为给洛伦兹分布(也叫柯西-洛伦兹分布)函数型的谱函数在动量和能量空间带来了一定大小的分布宽度, 体现在能带图上即为有限大小的带宽。如果将谱函数中自能的虚部近似为常数 $-\Gamma$ (注意自能的虚部总是负值, 因此下文中的 $\Gamma$ 表示其绝对值的大小), 能带图中的各条能带将拥有大小相同的带宽。图 2-4 中(a)、(b)、(c)分别为 $\Gamma$ 取 2.5 meV、5 meV 和 10 meV 时, 由谱函数表达式得到的能带图。可以看到, 随着 $\Gamma$ 取值变大, 谱函数的洛伦兹分布宽度不断变大, 能带趋向弥散到整个动

量-能量空间。而当 $\Gamma$ 趋于零时，谱函数将变为洛伦兹型的 $\delta$ 函数，此时由谱函数得到的能带图将与通过能谱表达式(2-7)式和(2-11)式所直接画出的能带图一致，即没有杂质、没有其他相互作用时理想系统的能带。由在谱函数中可以考虑杂质以及相互作用，因此由谱函数得到的能带图是可以和实验中角分辨光电子能谱仪（见第一章）所测量的能带图直接对应的。

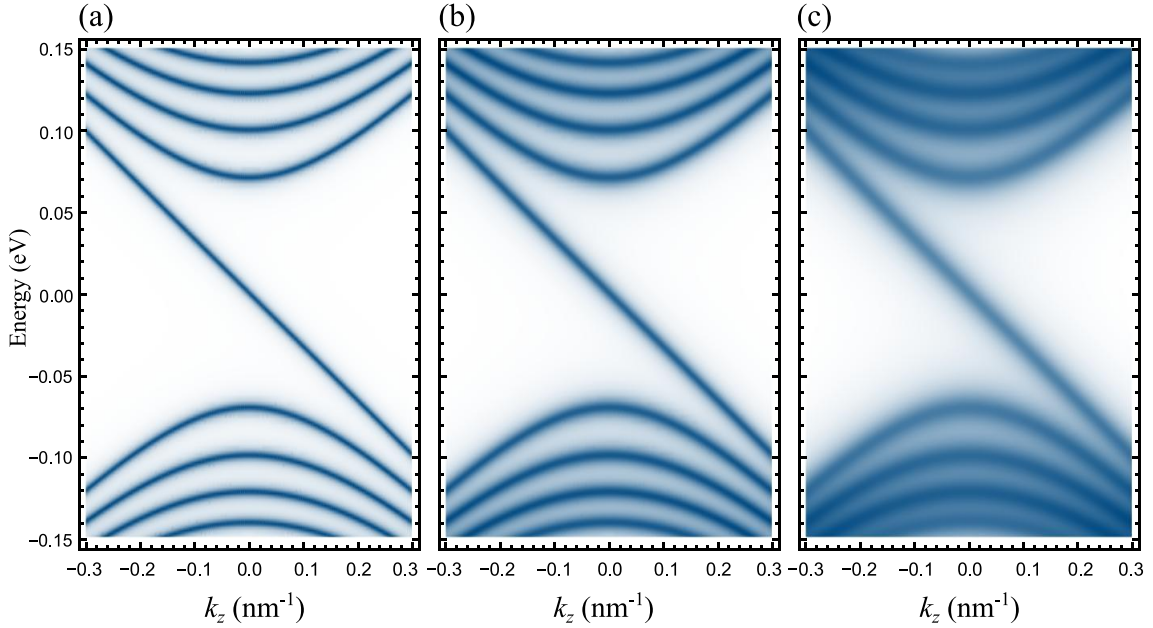


图 2-4 由谱函数得到的能带图。(a)、(b)、(c)分别为自能虚部大小 $\Gamma$ 取 2.5 meV、5 meV 和 10 meV 时的图像。费米速度 $v_F$ 取为  $5 \times 10^5 \text{ m/s}$ 。

Fig. 2-4 Band structure found from the spectral function. (a), (b), and (c) are band structures when the imaginary part of the self-energy  $\Gamma$  takes 2.5 meV, 5 meV, and 10 meV, respectively. The Fermi velocity  $v_F$  is taken as  $5 \times 10^5 \text{ m/s}$ .

在磁电阻率的表达式(2-53)式中，对量子数 $k_x$ 和 $k_z$ 的求和可以转化为

$$\frac{1}{V} \sum_{k_x, k_z} = N_L \int \frac{dk_z}{2\pi} \quad (2-55)$$

其中 $k_z$ 的求和变为了积分，而剩余部分为

$$\begin{aligned} \frac{1}{L_x L_y} \sum_{k_x} &= \frac{1}{L_y} \int_0^{eBL_y/\hbar} \frac{dk_x}{2\pi} \\ &= N_L \end{aligned} \quad (2-56)$$

至此，将谱函数代入(2-53)式后，对 $k_z$ 积分并对 $n$ 求和即可得到纵向磁电导率。取自能的虚部为常数并固定费米能量后，数值计算可得纵向磁电导率如图 2-5 (a) 所示。无质量狄拉克粒子的总电导率由图 2-5 (a)中的黑色实线所表示，蓝色虚线和

红色虚线分别对应(2-53)式中第一项和第二项的贡献。可见纵向磁电导中的振荡完全由费米能量切过 $E_{k_z, n+}$ 能带而产生，而 $E_{k_z, 0}$ 能带对磁电导率的贡献和磁场强度 $B$ 呈正比。随着磁场强度增强，费米能量切过的能带越来越少，最终系统进入量子极限区域：电导率停止振荡且只剩下 $E_{k_z, 0}$ 能带的贡献。此外，所有的 $E_{k_z, n-}$ 能带全部位于所取费米能量下方，即被完全填充，相应的谱函数在费米能量处的取值趋近于零。因此(2-53)式中包含 $E_{k_z, n-}$ 的后两项对纵向磁电导的贡献可以忽略不计（如图中的棕色和黄色虚线所示）。

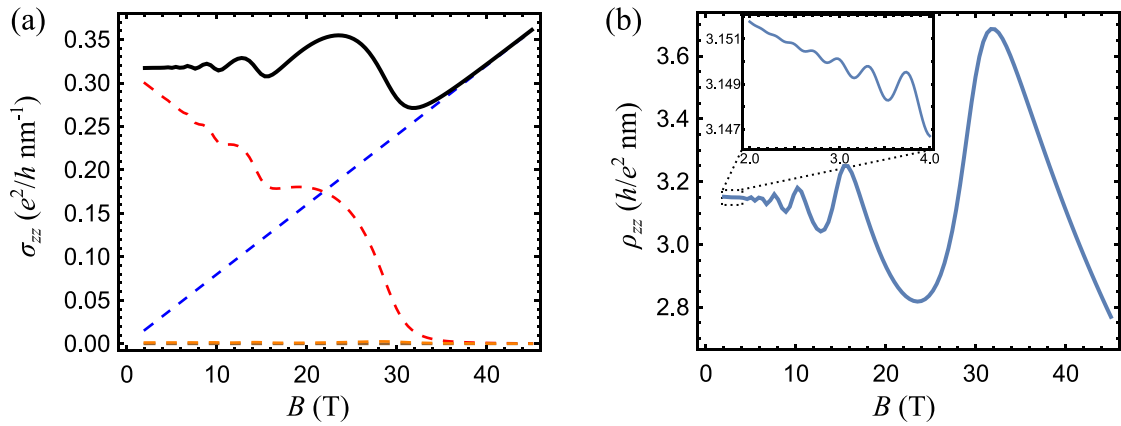


图 2-5 无质量狄拉克粒子的纵向磁电导率和磁电阻率。(a)纵向磁电导率。黑色实线为总电导率，不同颜色的虚线分别代表来自(2-53)式中各项的贡献。(b)磁电阻率。插图为磁电阻率在磁场强度为 2 T 到 4 T 区间的放大图。在数值计算中，费米速度 $v_F$ 取值为  $5 \times 10^5$  m/s，费米波矢 $k_F$ 取值为  $0.3 \text{ nm}^{-1}$ （即对应费米能量为  $0.099 \text{ eV}$ ），自能虚部大小 $\Gamma$ 取为  $5 \text{ meV}$ 。

Fig. 2-5 Longitudinal magnetoconductivity and magnetoresistance of the massless Dirac particle. (a) Longitudinal magnetoconductivity. The solid black line represents the total conductivity, and dash lines of different colors denote contributions from different terms in equation (2-53). (b) Longitudinal magnetoresistance. The inset is a magnified view when the magnetic-field strength is in the range of 2 T to 4 T. In the numerical calculation, the Fermi velocity  $v_F$  is taken as  $5 \times 10^5$  m/s; the Fermi wavevector  $k_F$  is taken as  $0.3 \text{ nm}^{-1}$  (the corresponding Fermi energy is  $0.099 \text{ eV}$ ); the imaginary part of the self-energy  $\Gamma$  is taken as  $5 \text{ meV}$ .

纵向磁电阻率可以通过关系式 $\rho_{zz} = 1/\sigma_{zz}$ 得到，如图 2-5 (b)所示。从(2-45)式到(2-53)式的推导过程中是没有任何近似的，因此(2-53)式对于上一节中所描述的三个磁场区间均成立。从图 2-5 (b)中可以看到，当磁场强度较小时，纵向磁电阻率随磁场强度增大而减小，即无质量狄拉克粒子拥有本征的负磁电阻效应。随磁场强度的增大，尤其是当费米能量切过能量最低的几个 $E_{k_z, n+}$ 能带时，纵向磁电阻率将会在较大的磁场强度范围内振荡变化。



## 2.4.2 横向磁电阻

由于系统的哈密顿量 $H(\mathbf{k} + e\mathbf{A}/\hbar)$ 在垂直于磁场方向的平面内各向同性，因此有横向磁电阻率 $\rho_{xx} = \rho_{yy}$ ，且

$$\rho_{xx} = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \quad (2-57)$$

接下来将分别计算无质量狄拉克粒子的横向磁电导率和霍尔电导率，之后再由上式给出相应的横向磁电阻率。

同样从(2-45)式出发，磁场中无质量狄拉克粒子在 $\hat{x}$ 方向的速度算符为

$$\begin{aligned} v_x &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H(\mathbf{k} + e\mathbf{A}/\hbar)}{\partial \left(k_x - \frac{eBy}{\hbar}\right)} \\ &= v_F \sigma_x \end{aligned} \quad (2-58)$$

同之前纵向磁电导率计算过程相似，结合本征态(2-8)式和(2-12)式可以得到

$$\begin{aligned} |\langle k_x, k_z, 0 | v_x | k'_x, k'_z, 0 \rangle|^2 &= 0 \\ |\langle k_x, k_z, 0 | v_x | k'_x, k'_z, n+ \rangle|^2 &= v_F^2 \left( \cos \frac{\theta_{k_z, n}}{2} \right)^2 \delta_{0, n-1} \delta_{k_x, k'_x} \delta_{k_z, k'_z} \\ |\langle k_x, k_z, 0 | v_x | k'_x, k'_z, n- \rangle|^2 &= v_F^2 \left( \sin \frac{\theta_{k_z, n}}{2} \right)^2 \delta_{0, n-1} \delta_{k_x, k'_x} \delta_{k_z, k'_z} \end{aligned} \quad (2-59)$$

以及

$$\begin{aligned} &|\langle k_x, k_z, n+ | v_x | k'_x, k'_z, n'+ \rangle|^2 \\ &= v_F^2 \delta_{k_x, k'_x} \delta_{k_z, k'_z} \left[ \left( \cos \frac{\theta_{k_z, n}}{2} \sin \frac{\theta_{k_z, n'}}{2} \right)^2 \delta_{n-1, n'} \right. \\ &\quad \left. + \left( \sin \frac{\theta_{k_z, n}}{2} \cos \frac{\theta_{k_z, n'}}{2} \right)^2 \delta_{n, n'-1} \right] \end{aligned} \quad (2-60)$$

这里并未将 $|\langle k_x, k_z, n- | v_x | k'_x, k'_z, n'- \rangle|^2$ 以及 $|\langle k_x, k_z, n- | v_x | k'_x, k'_z, n'+ \rangle|^2$ 等全部列出，因为在推导这些式子过程中仅涉及到矩阵乘法等基础运算，且在(2-60)式中 $\cos \frac{\theta_{k_z, n}}{2}$ 和 $\sin \frac{\theta_{k_z, n}}{2}$ 均来自 $\langle k_x, k_z, n+ |$ ，而 $\cos \frac{\theta_{k_z, n'}}{2}$ 和 $\sin \frac{\theta_{k_z, n'}}{2}$ 均来自 $|k'_x, k'_z, n'+ \rangle$ ；观察(2-8)式会发现其余各项可以通过替换(2-60)式中对应的 $\cos$ 函数和 $\sin$ 函数写出。与纵向磁电导率的情况不同，由于计算过程中克罗内克 $\delta$ 函数的缘故，(2-53)式中每一项中都有相同的朗道能带指标，而在这里克罗内克 $\delta$ 函数要求横向磁电导率中每一项中的两个朗道能带指标差值为1。

将(2-59)式和(2-60)式代入到(2-45)式化简后即可得到无质量狄拉克粒子的横向磁电阻率表达式为

$$\begin{aligned}
 \text{Re}[\sigma_{xx}] = & \frac{2\pi\hbar e^2 v_F^2}{V} \sum_{k_x, k_z} \left\{ \left( \cos \frac{\theta_{k_z,1}}{2} \right)^2 A_{k_z,1+}(E_F) A_{k_z,0}(E_F) \right. \\
 & + \left( \sin \frac{\theta_{k_z,1}}{2} \right)^2 A_{k_z,1-}(E_F) A_{k_z,0}(E_F) \\
 & + \sum_{n \geq 2} \left[ \left( \cos \frac{\theta_{k_z,n}}{2} \sin \frac{\theta_{k_z,n-1}}{2} \right)^2 A_{k_z,n+}(E_F) A_{k_z,(n-1)+}(E_F) \right. \\
 & + \left( \sin \frac{\theta_{k_z,n}}{2} \cos \frac{\theta_{k_z,n-1}}{2} \right)^2 A_{k_z,n-}(E_F) A_{k_z,(n-1)-}(E_F) \\
 & + \left( \cos \frac{\theta_{k_z,n}}{2} \cos \frac{\theta_{k_z,n-1}}{2} \right)^2 A_{k_z,n+}(E_F) A_{k_z,(n-1)-}(E_F) \\
 & \left. + \left( \sin \frac{\theta_{k_z,n}}{2} \sin \frac{\theta_{k_z,n-1}}{2} \right)^2 A_{k_z,n-}(E_F) A_{k_z,(n-1)+}(E_F) \right] \quad (2-61)
 \end{aligned}$$

对于霍尔电阻,  $\hat{y}$  方向的速度算符为

$$\begin{aligned}
 v_y &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H(\mathbf{k} + e\mathbf{A}/\hbar)}{\partial k_y} \\
 &= v_F \sigma_y \quad (2-62)
 \end{aligned}$$

计算可得

$$\begin{aligned}
 & \text{Im} \langle k_x, k_z, n + | v_x | k'_x, k'_z, n' + \rangle \langle k'_x, k'_z, n' + | v_y | k_x, k_z, n + \rangle \\
 &= v_F^2 \delta_{k_x, k'_x} \delta_{k_z, k'_z} \left[ \left( \cos \frac{\theta_{k_z,n}}{2} \sin \frac{\theta_{k_z,n'}}{2} \right)^2 \delta_{n-1, n'} \right. \\
 & \quad \left. - \left( \sin \frac{\theta_{k_z,n}}{2} \cos \frac{\theta_{k_z,n'}}{2} \right)^2 \delta_{n, n'-1} \right] \quad (2-63)
 \end{aligned}$$

上式与(2-60)式相比仅第二项的符号不同(来源于 $\sigma_x$ 和 $\sigma_y$ 两个矩阵右上角矩阵元的符号差)。通过观察可以发现:将上式中  $\cos$  函数和  $\sin$  函数互换即可得到  $\text{Im} \langle k_x, k_z, n - | v_x | k'_x, k'_z, n' - \rangle \langle k'_x, k'_z, n' - | v_y | k_x, k_z, n - \rangle$ , 同样通过替换  $\cos$  函数和  $\sin$  函数的方法可以得到其他项。其中而将  $|k_x, k_z, n - \rangle$  替换  $|k_x, k_z, 0 \rangle$  时, 替换规则为

$$\begin{aligned}
 \cos \frac{\theta_{k_z,n}}{2} &\rightarrow 0 \\
 \sin \frac{\theta_{k_z,n}}{2} &\rightarrow 1 \quad (2-64)
 \end{aligned}$$

通过对(2-63)式替换可以得到另外 8 项表达式, 即(2-49)式中对能带指标  $n +$ 、 $n -$ 、 $0$  的求和一共 9 项, 将其全部代入(2-49)式后即可得到霍尔电导率的表达式。经过化简后整理后可以写为

$$\begin{aligned}
 \text{Re}[\sigma_{xy}] = & \frac{2\hbar e^2 v_F^2}{V} \sum_{k_x, k_z} \left\{ \left( \cos \frac{\theta_{k_z,1}}{2} \right)^2 \frac{n_F(E_{k_z,1+}) - n_F(E_{k_z,0})}{(E_{k_z,1+} - E_{k_z,0})^2} \right. \\
 & + \left( \sin \frac{\theta_{k_z,1}}{2} \right)^2 \frac{n_F(E_{k_z,1-}) - n_F(E_{k_z,0})}{(E_{k_z,1-} - E_{k_z,0})^2} \\
 & + \sum_{n \geq 2} \left[ \left( \cos \frac{\theta_{k_z,n}}{2} \sin \frac{\theta_{k_z,n-1}}{2} \right)^2 \frac{n_F(E_{k_z,n+}) - n_F(E_{k_z,(n-1)+})}{(E_{k_z,n+} - E_{k_z,(n-1)+})^2} \right. \\
 & + \left( \sin \frac{\theta_{k_z,n}}{2} \cos \frac{\theta_{k_z,n-1}}{2} \right)^2 \frac{n_F(E_{k_z,n-}) - n_F(E_{k_z,(n-1)-})}{(E_{k_z,n-} - E_{k_z,(n-1)-})^2} \\
 & + \left( \cos \frac{\theta_{k_z,n}}{2} \cos \frac{\theta_{k_z,n-1}}{2} \right)^2 \frac{n_F(E_{k_z,n+}) - n_F(E_{k_z,(n-1)-})}{(E_{k_z,n+} - E_{k_z,(n-1)-})^2} \\
 & \left. + \left( \sin \frac{\theta_{k_z,n}}{2} \sin \frac{\theta_{k_z,n-1}}{2} \right)^2 \frac{n_F(E_{k_z,n-}) - n_F(E_{k_z,(n-1)+})}{(E_{k_z,n-} - E_{k_z,(n-1)+})^2} \right\} \quad (2-65)
 \end{aligned}$$

与(2-61)式对比可以发现霍尔电导率的表达式和纵向电导率表达式十分相似，它们中的每一项相互对应，主要不同为(2-61)式中出现的是两个谱函数的乘积，而(2-65)式中出现的为分布函数和本征能量表达式。

通过对 $k_z$ 进行数值积分，(2-61)式和(2-65)式的计算结果以及通过(2-57)式得到的横向磁电阻率如图 2-6 所示。由图 2-6 (a)可见横向磁电导率主要来自于(2-61)式中第一项和第三项的贡献（分别为图中的蓝色和红色虚线），而其余各项的贡献可以忽略不计（图中的棕色、黄色、紫红色和青色虚线）。可见横向磁电导率和纵向磁电导率都是主要由费米能量附近的态贡献。但横向磁电导率随磁场强度的增强而迅速下降。图 2-6 (b)中的霍尔电导率虽然也主要由表达式(2-65)式中的第一项和第三项的贡献（分别为图中的蓝色和红色虚线），但(2-65)式中的第五项和第六项的大小也不能忽略（分别为图中的紫红色和黄色虚线），且第六项的符号与其他各项相反。总的来说，霍尔电导率大小的绝对值也会随磁场强度的增强而降低。由于在计算中取了零温近似，即分布函数变为阶梯函数形式，因此图 2-6 (b)中的曲线变化十分尖锐。图 2-6 (c)为无质量狄拉克粒子的横向磁电阻率，和纵向磁电阻率不同，它随磁场强度的增大而增大。此外，在图 2-6 (c)的数值计算中，原本曲线的尖锐变化被通过取霍尔电导率中的分布函数的 $k_B T = 1 \text{ meV}$  抹平了（和零温近似相比并未造成其他任何变化）。

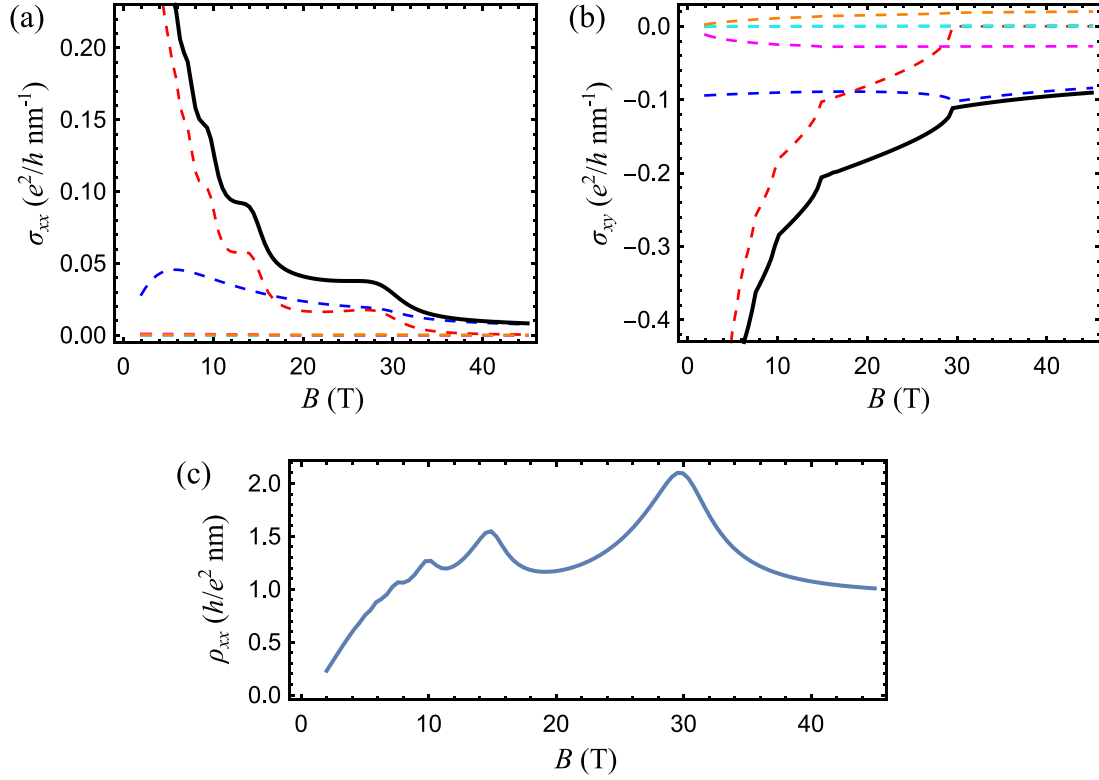


图 2-6 无质量狄拉克粒子的横向磁电导率、霍尔电导率以及横向磁电阻率。(a)和(b)分别为横向磁电导率和霍尔电导率。黑色实线为总电导率，不同颜色的虚线为电导率表达式中各项的贡献。(c)横向磁电阻率。在数值计算中使用的参数与图 2-5 中一致。

Fig. 2-6 Transverse magnetoconductivity, Hall conductivity, and transverse magnetoresistivity of the massless Dirac particle. (a) and (b) are transverse magnetoconductivity and Hall conductivity, respectively. The solid black lines represent the total conductivity, and the dash lines of different colors denote contributions from different terms in the conductivity expressions. (c) Transverse magnetoresistivity. The parameters used in the numerical calculations are the same as those in Fig. 2-5.

### 2.4.3 电阻量子振荡的频率和相位

SdH 振荡是电阻随磁场强度倒数的周期性振荡现象，它的振荡行为可以被 Lifshitz-Kosevich 公式描述<sup>[161]</sup>，即

$$\cos \left[ 2\pi \left( \frac{F}{B} + \varphi \right) \right] \quad (2-66)$$

其中  $F$  为振荡频率， $\varphi = \pm(\gamma + \delta)$  为振荡相位，+ 和 - 分别对应着空穴型和电子型载流子。对于二维系统， $\delta$  为零；对于三维系统， $\delta = 1/8$ 。而  $\gamma$  的值为

$$\gamma = \frac{1}{2} - \frac{\phi_B}{2\pi} \quad (2-67)$$

其中  $\phi_B$  为粒子运动一周后获得的贝利相位。表 2-1 列出了根据 Lifshitz-Kosevich 公

式得到的各种系统中的振荡相位。注意， $\varphi = 3/8$ 和 $-5/8$ 是等价的，因为它们之间相差了一个周期，即

$$\frac{3}{8} \cdot 2\pi = -\frac{5}{8} \cdot 2\pi + 2\pi \quad (2-68)$$

对于磁电阻的 SdH 振荡频率，它可以由 Onsager 关系给出<sup>[161]</sup>，即

$$F = \frac{\hbar}{2\pi e} A \quad (2-69)$$

此处的 $A$ 为与施加磁场方向垂直的最大费米面面积（这里的费米面指的是未加磁场时的）。

表 2-1 由 Lifshitz-Kosevich 公式得到的不同系统中的电阻振荡相位  
Table 2-1 Phase shift of different systems found by Lifshitz-Kosevich formula

	零贝利相位	$\pi$ 贝利相位
二维系统	$\pm \frac{1}{2}$	0
三维系统	$\pm \frac{5}{8}$	$\pm \frac{1}{8}$

在实验测量中，磁电阻的振荡频率和相位是通过提取出数据中振荡峰值的磁场强度后，通过线性拟合得到的。整个过程共分为三步：首先第一步需要提取出振荡周期的大概值，它可以直接用两个相邻振荡峰值对应的磁场强度倒数 $B^{-1}$ 相减得到；第二步，对每一个振荡峰分配一个整数的振荡指标 $n$ ，它可以通过峰对应的 $B^{-1}$ 除以振荡周期的大概值得到；第三步，对提取出所有振荡峰值对应的 $B^{-1}$ 以及其被分配的振荡指标 $n$ 做线性拟合。根据(2-66)式的振荡特征可得线性拟合公式为

$$y = a + kx \quad (2-70)$$

其中 $x$ 即为振荡指标 $n$ ，而 $y$ 为磁场强度的倒数 $B^{-1}$ 。因此 $k$ 为振荡周期，而(2-66)式中的频率 $F$ 和相位 $\varphi$ 分别为 $1/k$ 和 $-a/k$ 。

上述的振荡指标 $n$ 和朗道能带指标是相似的，但由于相位 $\varphi$ 的存在，它们的值并不一定一一对应。如果将整数 $n$ 分配给振荡谷值，和分配给峰值相比，线性拟合后得到的相位有 $\pi$ 的偏移。此外，在数值计算中， $n$ 是可以通过在相应磁场强度时费米能量所切过的能带底端的相应朗道指标来给出的。

这里用上一小节得到的纵向磁电阻来研究 SdH 振荡。纵向磁电阻率随磁场强度倒数变化的曲线如图 2-7 (a)所示，其中图中的红色圆点标记为振荡峰值位置。图 2-7 (b)为振荡指标 $n$ 与磁场强度倒数的线性拟合，拟合直线的斜率即为振荡周期，它与横轴的截距即为振荡相位。拟合直线的表达式为

$$y = -0.00220 + 0.03383x \quad (2-71)$$

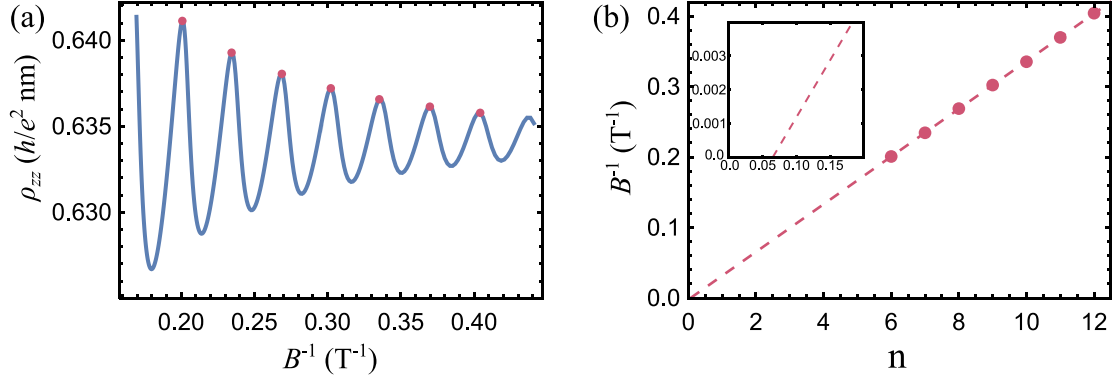


图 2-7 纵向磁电阻的量子振荡。(a)纵向磁电阻率随磁场强度倒数的振荡。红色圆点为振荡峰值。(b)振荡峰值处磁场强度的线性拟合。其中红色圆点与(a)中红色圆点一一对应，虚线为线性拟合直线。插图坐标原点附近的放大图。数值计算中，自能虚部大小 $\Gamma$ 取为 1 meV，其余参数与图 2-5 中一致。

Fig. 2-7 Quantum oscillation of the longitudinal magnetoresistance. (a) Oscillation of the longitudinal magnetoresistivity as a function of the inverse of magnetic field strength. The red dots denote peaks of the oscillation. (b) Linear fitting of the peak-position magnetic field strength of the oscillation. The red dots are in one-to-one correspondence with the red dots in (a), and the dashed line is the linear fitting. The inset is a magnified view near the zero point of the axis. In the numerical calculation, the imaginary part of the self-energy  $\Gamma$  is taken as 1 meV, and other parameters are the same as those in Fig. 2-5.

结合(2-3)式与(2-69)式，通过 Onsager 关系可以得到，在无质量狄拉克系统中的振荡频率为

$$F = \frac{E_F^2}{2e\hbar v_F^2} \quad (2-72)$$

将计算中所用的参数 ( $E_F = 0.099 \text{ eV}$ ,  $\hbar v_F = 0.330 \text{ eV nm}$ ) 代入即可得  $1/F \approx 0.03377 \text{ T}$ ，这与线性拟合结果(2-71)式一致。

对于磁电阻量子振荡的相位，自能虚部大小 $\Gamma$ 会对线性拟合提取出的值造成一定的影响。图 2-8 (a)为取不同 $\Gamma$ 时振荡峰值的线性拟合直线与横轴的截距图。可以看到，当 $\Gamma$ 趋近于零时，振荡相位（即图中直线与横轴的截距）趋近于零，即对于无质量狄拉克粒子，其本征的振荡相位为零。自能虚部大小对提取出相位的影响可以由图 2-8 (b)和(c)解释。当 $\Gamma$ 十分小时，磁电阻振荡剧烈且振荡峰尖锐，即图 2-8 (b)所示情况。但 $\Gamma$ 变大时，量子振荡幅度变小且振荡峰变平滑，如图 2-8 (c)。在图 2-8 (c)中磁电阻率的峰值位置相比图 2-8 (b)向磁场强度倒数 $1/B$ 减小方向偏移，因此当 $\Gamma$ 从 0.5 meV 增大到 3 meV 时，在图 2-8 (a)中的体现即为拟合直线向下平移，截距变大（相位变大）。然而这种振荡峰的偏移对线性拟合提取出的振荡周期几乎毫无影响：图 2-8 (a)中五条直线相互平行（五条直线的斜率最小为 0.03374，最大

为 0.03391)。此外, 当 $\Gamma$ 增大时, 由于振荡幅度变小, 相比之下非振荡部分的磁电阻对磁电阻的总值影响变大, 可以看到图 2-8 (c)中磁电阻率曲线相比图 2-8 (b)中的曲线有随 $1/B$ 增大而上升的趋势。当 $\Gamma$ 进一步增大时, 磁电阻率的振荡会衰弱到无法提取其频率和相位。

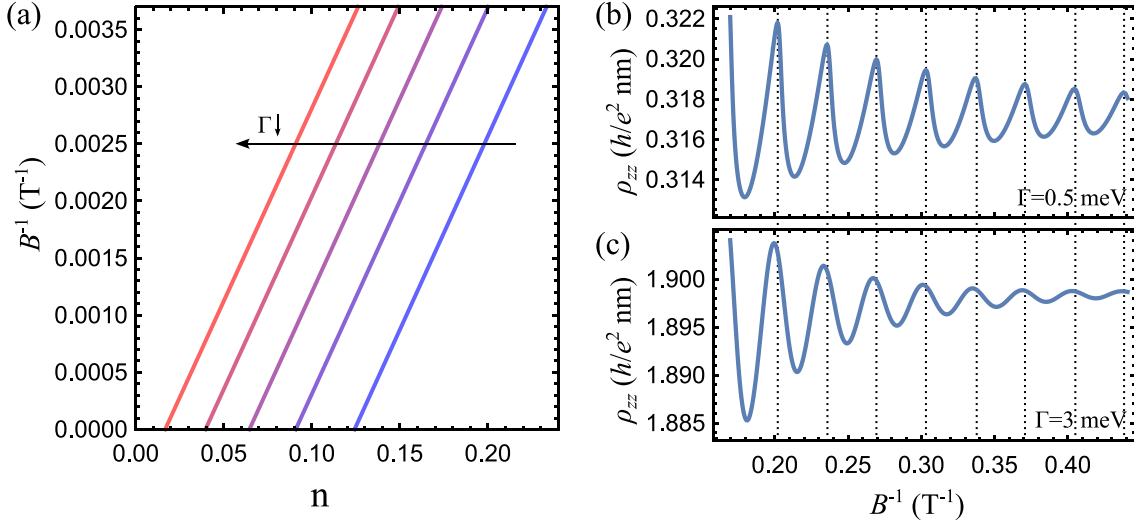


图 2-8 自能虚部的大小 $\Gamma$ 对线性拟合提取出的磁电阻振荡相位的影响。(a)不同 $\Gamma$ 时线性拟合得到的直线与横轴的截距图。从蓝线到红线的 $\Gamma$ 取值分别为 3 meV、1 meV、0.7 meV、0.5 meV。(b)和(c)分别为 $\Gamma$ 取 0.5 meV 和 3 meV 时纵向磁电阻率随磁场强度倒数的振荡曲线。在数值计算中, 除了 $\Gamma$ 的值外, 其余参数均与图 2-5 中一致。

Fig. 2-8 The effect of the self-energy's imaginary part magnitude  $\Gamma$  on the magnetoresistance-oscillation phase extracted by linear fitting. (a) The intercept plot of the horizontal axis and the linear fitting lines obtained at different  $\Gamma$ . The values of  $\Gamma$  from the blue line to the red line are 3 meV, 1 meV, 0.7 meV, and 0.5 meV, respectively. (b) and (c) are the oscillation curves of the longitudinal magnetoresistivity as a function of the inverse of magnetic field strength when  $\Gamma$  is taken as 0.5 meV and 3 meV, respectively. In the numerical calculation, except for values of  $\Gamma$ , other parameters are the same as those in Fig. 2-5.

通过这里对于量子振荡的研究可以发现在实验中很难得到振荡相位的精确值。首先, 计算表明系统的能带展宽可以给相位带来高达 $\pi/4$ 的改变(这个值并不会更大, 因为更大的能带展宽会使振荡消失)。能带展宽以及非振荡部分的磁电阻会对振荡峰形状带来微弱的改变, 虽然这对振荡频率几乎没有影响, 但足以改变相位的大小。在实验中使用的不同测量样品的能带展宽大小是不同的。此外, 在实验测量中需要先将振荡部分的磁电阻提取出来再提取其振荡相位, 这个过程中也会有一定的误差产生。因此, 从实际应用角度讲, 相位为零或 $\pi$ 是可以区分的, 但很难得到精准的相位值。

## 2.5 量子极限区域的磁电阻

在前面的计算中，费米能量 $E_F$ 被取为了固定值，而在输运性质的实验测量中，三维系统的费米能量一般是随磁场变化的，固定不变的为系统内的载流子浓度 $n_0$ 。费米能量和载流子浓度的关系为

$$n_0 = \frac{1}{V} \sum_u n_F(E_u) \quad (2-73)$$

其中 $n_F(E)$ 为前文中出现过的费米-狄拉克分布函数。对于无质量狄拉克粒子，其载流子浓度 $n_0$ 为电子占据态和空穴占据态的浓度差值。当载流子类型为电子型时，其载流子浓度的表达式即为

$$n_0 = \frac{1}{V} \sum_{k_x, k_z} \left[ n_F(E_{k_z, 0}) \Theta(E_{k_z, 0}) + \sum_n n_F(E_{k_z, n+}) \right] \quad (2-74)$$

其中 $\Theta(E)$ 为阶跃函数。图 2-9 为载流子浓度为  $4.56 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ （对应无磁场时系统费米能量为  $0.099 \text{ eV}$ ）时费米能量随磁场的变化图像。进入量子极限的临界磁场强度由(2-15)式计算可得 $B_c \approx 35.87 \text{ T}$ 。由图 2-9 可见在半经典区间和量子振荡区间费米能量的变化幅度十分小，但在量子极限区间费米能量随磁场强度增强而迅速下降。因此，在计算半经典区间和量子振荡区间的磁电阻时取固定大小的费米能量是合理的。但计算量子极限区间的磁电阻时，必须考虑费米能量的变化。

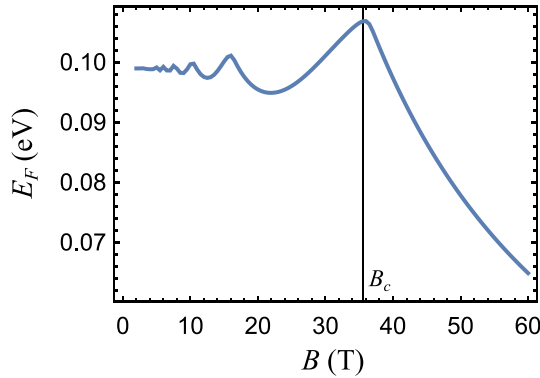


图 2-9 固定载流子浓度时费米能量随磁场变化图像。图中黑色竖线为系统进入量子极限时的临界磁场强度 $B_c$ 的分界线。数值计算中 $k_B T$ 取为  $1 \text{ meV}$ （在这里，有限大小的温度仅会平滑尖锐的振荡峰，不会造成包括数值大小在内的任何其他变化）。

Fig. 2-9 Fermi energy as a function of the magnetic field strength when the carrier concentration is fixed. The black vertical line in the figure is the dividing line of the critical magnetic field  $B_c$  when the system enters the quantum limit.  $k_B T$  is taken as  $1 \text{ meV}$  in the numerical calculation (The finite temperature only smooths out the sharp oscillation peaks here without causing any other changes, inducing the magnitude).



根据上一节的计算，可以得到量子极限区间的纵向磁电导率表达式可以近似为

$$\text{Re}[\sigma_{zz}] \approx \frac{\pi \hbar e^2 v_F^2}{V} \sum_{k_x, k_z} [A_{k_z,0}(E_F)]^2 \quad (2-75)$$

取谱函数平方的主导项  $G_{k_z,0}^R G_{k_z,0}^A / (2\pi^2)$ ，并做以下近似

$$\frac{G_{k_z,0}^R G_{k_z,0}^A}{(2\pi^2)} \approx \frac{\tau_{k_z,0}(E_F)}{\pi \hbar} \delta(E_F - E_{k_z,0}) \quad (2-76)$$

其中  $\tau_{k_z,0}(E_F)$  为位于费米能量处的态  $|k_x, k_z, 0\rangle$  的散射时间 (scattering time)，其定义为

$$\frac{\hbar}{2\tau_{k_z,0}(E_F)} = -\text{Im}[\Sigma_{k_z,0}^R] \quad (2-77)$$

当自能虚部取常数  $-\Gamma$  时，式(2-75)的结果即为

$$\begin{aligned} \text{Re}[\sigma_{zz}] &= \frac{e^2}{h} \cdot N_L v_F \tau_{k_F,0}(E_F) \\ &= \frac{e^2}{h} \cdot \frac{\hbar}{2\Gamma} N_L v_F \end{aligned} \quad (2-78)$$

这是一个十分重要的结果。首先，它表明在量子极限下，无质量狄拉克粒子的纵向电导率（以及纵向磁电阻）是和费米能量或载流子浓度无关的。这种特性来源于无质量狄拉克粒子最低朗道能带  $E_{k_z,0}$  线性依赖于动量  $k_z$ ，进而导致了在不同能量处的速度  $\partial E_{k_z,0} / (\hbar \partial k_z)$  均为常数  $v_F$ ，因此最低朗道能带贡献的纵向电导对费米能量没有任何依赖关系。

在材料的电阻研究中，对杂质的处理十分关键。在(2-78)式的推导中，可以看到纵向磁电导率是正比于散射时间  $\tau_{k_F,0}(E_F)$  的。而散射时间（或说自能虚部）的主要贡献往往来自于系统内的杂质。在久保公式计算电导的理论框架中，可以用费曼图的方法来考虑杂质的影响<sup>[112]</sup>。在 2.3 节的流流关联函数费曼图（图 2-3）中，两个格林函数（带箭头的线段）的自能虚部如果取常数并使其趋于零，得到的电导率即为系统本征的贡献。做杂质平均处理后，会得到流流关联函数的一系列费曼图。这些费曼图可以分为两大类：第一类为杂质平均的效果分别独立在流流关联函数中的两个格林函数上，如图 2-10 (a) 所示；第二类为有存在于两个格林函数之间杂质平均效果的费曼图；其中第二类费曼图中还包括两个格林函数之间的杂质平均效果是相互独立的或是相互关联的两种，如图 2-10 (b) 和 (c) 所示。在考虑杂质影响的理论计算中，如果仅考虑第一类费曼图，则计算杂质效应的自能后求出相应的散射时间  $\tau_{k_F,0}(E_F)$ ，并用其替换掉(2-78)式中的  $\hbar/2\Gamma$  即可。杂质的不同势能类型将会导致量子极限下磁电阻对磁场强度的依赖关系不同。但是在计算杂质对电导的影

响时，需要检查在第一类费曼图的基础上继续考虑第二类费曼图对结果影响的大小。将第二类费曼图中所有的非关联的杂质效应图全部考虑到电导计算中的技术被称为顶点修正<sup>[112]</sup> (vertex correction)，它是通过迭代的方法将此类费曼图全部进行了求和，对应的费曼图如图 2-10 (d)所示。

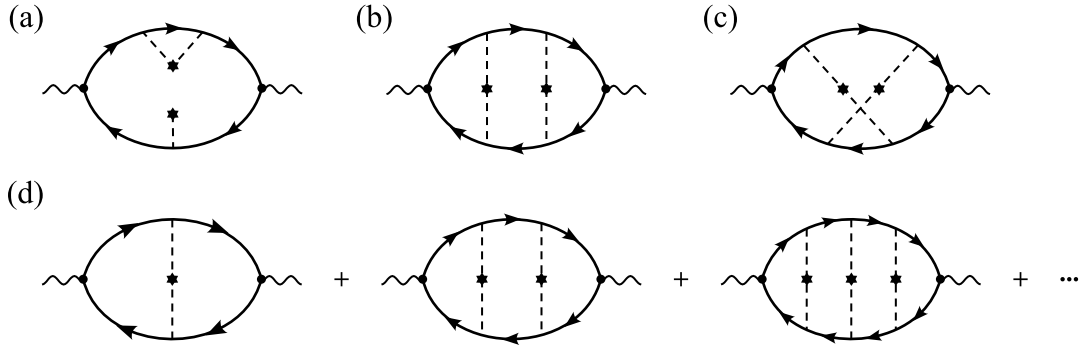


图 2-10 考虑杂质效应后流流关联函数的费曼图。(a)上半部分和下半部分的格林函数的杂质平均效应相互独立。(b)杂质平均效应在上半部分和下半部分的格林函数之间，但杂质平均效应之间相互独立。(c)杂质平均效应在上半部分和下半部分的格林函数之间，且杂质平均效应之间相互关联。(d)顶点修正所对应的费曼图。

Fig. 2-10 Feynman diagrams of the current-current correlation function with disorder effect. (a) The impurity average effects of the upper-part Green functions and of the lower-part Green functions are independent of each other. (b) The impurity average effects are between the upper-part Green functions and the lower-part Green functions, but they are independent of each other. (c) The impurity average effects are between the upper-part Green functions and the lower-part Green functions, and they are correlated. (d) The Feynman diagrams of the vertex correction.

对于纵向磁电导，可以用更为便捷的方法来计算顶点修正：包含顶点修正的久保公式得到的结果相当于在上述计算中将散射时间 $\tau_{k_F,0}(E_F)$ 替换为输运时间 (transport time)  $\tau'_{k_F,0}(E_F)$ 。其计算方法是在计算散射时间的过程中，给各个方向散射对输运性质的影响分配了不同的权重，即

$$\frac{\hbar}{2\tau'_{k_F,0}(E_F)} = \pi \sum_{k'_x, k'_z} \left(1 - \frac{v_{k'_z,0}}{v_{k_z,0}}\right) \delta(E_F - E_{k'_z,0}) |\langle k'_x, k'_z, 0 | \hat{V} | k_x, k_F, 0 \rangle|^2 \quad (2-79)$$

上式是通过联立(2-29)式和(2-77)式后，在求和中添加了权重因子 $(1 - v_{k'_z,0}/v_{k_z,0})$ 。其中 $v_{k_z,0} = \partial E_{k_z,0}/(\hbar \partial k_z)$ ，即为在最低朗道能带上 $k_z$ 态的速度。由于输运时间和电导是呈正比的，权重因子表达式的物理意义为：当发生杂质散射的初始态和末态具有相同速度时，权重因子为零，即此散射不对输运造成影响；而初始态和末态速度方向相反时，权重因子大于1，即此散射对输运影响较大。

对于无质量狄拉克粒子的最低朗道能带，在费米面处的态 $k_z$ 均相同，散射只能

发生在不同 $k_x$ 标记的能量简并态中，这些态拥有相同的速度（均为 $v_F$ ），如图 2-11 (a)所示。因此，在(2-29)式求和中的所有 $k_z'$ 态的权重因子均为零。这完全不依赖于杂质势能 $\hat{V}$ 的具体形式。最终的结果是：在无质量狄拉克粒子中，即使系统中的自能项为杂质主导，量子极限下的纵向磁电导率仍被(2-78)式所描述，即不依赖于杂质势能且正比于磁场强度；对应的磁电阻即为随磁场强度增大而减小（和磁场强度呈反比）。

这个结果在考虑完整的无质量狄拉克哈密顿量(2-1)式时仍然成立。这是因为：虽然磁场中(2-1)式在量子极限下有 $\pm k_z$ 两个态，但它们之间没有耦合，因此两者之间的态无法相互跃迁，如图 2-11 (b)所示。而对于有质量项的狄拉克粒子，质量项会将(2-1)式中的两个对角矩阵块耦合在一起，进而两个朗道指标为 0 的能带便会相互耦合打开能隙，此时量子极限下 $\pm k_z$ 两个态之间的散射便可以发生，如图 2-11 (c)所示。因此对于有质量的狄拉克粒子，(2-78)式便不再成立，磁电阻对磁场强度的依赖关系将由杂质势能 $\hat{V}$ 的具体形式决定。此外，对于未进入量子极限的无质量狄拉克粒子，被费米能量切过的、指标大于 0 的朗道能带中的散射行为和图 2-11 (c)中描述的情况一致，因此也会依赖于杂质势能的具体形式。

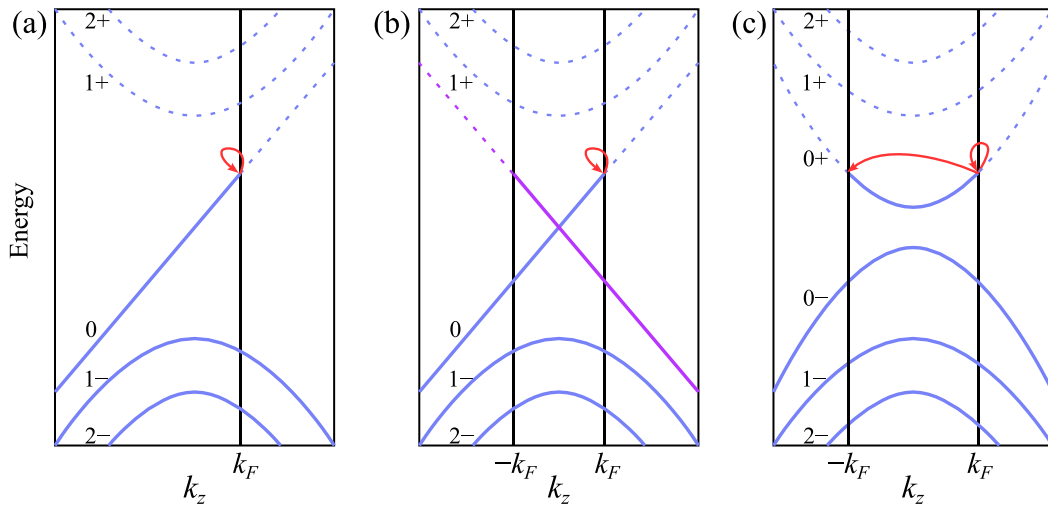


图 2-11 量子极限下的 $k_F$ 态散射示意图。(a)由哈密顿量(2-2)式所描述系统中的情况。(b)由哈密顿量(2-1)式所描述的无质量狄拉克系统中的情况。其中蓝色和紫色两条直线分别表示两条没有耦合的最低朗道能带。(c)有质量项的狄拉克哈密顿量的情况。红色带箭头线条代表从初始态到末态的散射。

Fig. 2-11 Schematic diagrams of the scattering of state  $k_F$  under the quantum limit. (a) Situation in the system described by Hamiltonian (2-2). (b) Situation in the massless Dirac system described by Hamiltonian (2-1). The blue and purple straight lines represent the two lowest Landau bands without coupling. (c) Situation of the massive Dirac Hamiltonian. The arrowed red lines denote the scattering from the initial state to the final state.

## 2.6 本章小结

本章研究了无质量狄拉克系统中的本征磁电阻。主要内容可以分为两部分：首先，系统地给出了久保公式计算磁电阻的方法，指出了其中的关键近似过程；第二，计算了本征磁电阻的特性，研究了量子振荡的频率和相位，以及量子极限下杂质作用对纵向磁电阻的影响。得出的重要结论有两个：（1）对于无质量狄拉克粒子，其本征量子振荡的相位为零，能带展宽会带来一定大小的相位。（2）在量子极限下，无质量狄拉克粒子的纵向磁电阻将反比于磁场强度，这个结果不依赖于具体的杂质势能，且不随费米能量或载流子浓度变化。

对于量子极限下的纵向磁电阻，虽然其推导过程比较简单，但其重要性需要用顶点修正来揭示。其不被杂质散射所影响的纵向输运性质来源于量子极限下哈密顿量(2-2)式中的 $k_z$ 量子数只有一个取值，这和量子反常霍尔效应中的边界态输运是类似的。而对于无质量狄拉克系统，(2-1)式，在量子极限下，其 $\pm k_z$ 两个态是没有耦合的，这和量子自旋霍尔效应中的边界态输运是类似的。但和量子反常/自旋霍尔效应不同的是最低朗道能带是 $N_L$ 重简并的，杂质散射存在于不同的 $k_x$ 之间。简并度 $N_L$ 是量子极限下的纵向磁电阻反比于磁场强度的来源。在本章的计算中，量子极限下的纵向磁电阻耗散的来源于 $\Gamma$ ，它是粒子间的相互作用以及其他因素引入的有限大小的自能虚部。在实际材料中，狄拉克哈密顿量中任何有限大小的质量项都会破坏上述不被杂质散射所影响的纵向输运性质。因此，这种独特的输运性质可能很难在材料系统中观察到，但其有望在人工制造的系统实现并进一步研究（见第一章 1.2.6 小节）。

## 第 3 章 拓扑半金属中的线性磁电阻

### 3.1 引言

磁电阻通常被用来揭示新型材料的非平庸性质，其中线性磁电阻现象尤其知名。对于普通材料，其磁电阻会随磁场强度增大呈平方型增长；但在一些拓扑材料中，磁电阻随磁场强度呈线性增长。在实验测量中，线性磁电阻现象是首先于银硫族化物中发现的<sup>[152]</sup>，并在当时引发了广泛的研究关注<sup>[137,162]</sup>。目前，众多实验研究陆续在各种材料中被发现了线性磁电阻特性，包括狄拉克和外尔半金属<sup>[163-166]</sup>、节线半金属<sup>[167,168]</sup>、石墨烯<sup>[169]</sup>、超导材料<sup>[170-173]</sup>以及磁性拓扑绝缘体<sup>[174,175]</sup>。

对于线性磁电阻的起源，目前有多中不同的理论解释。其中 Abrikosov 的量子磁电阻理论是其中的一个著名代表<sup>[137]</sup>。量子磁电阻理论是从无质量外尔粒子模型出发，在量子极限下得到了由屏蔽库伦势能型杂质导致的线性磁电阻。因此在许多实验测量中，线性磁电阻被当作无能隙锥型能带结构的信号。在后续的理论研究中<sup>[176-179]</sup>，Abrikosov 的计算虽然得到了进一步的证实以及推广，但并没有新的量子线性磁电阻机制被发现。另一个对线性磁电阻的著名解释为 Parish 和 Littlewood 所提出的随机电阻器网络模型<sup>[162,180]</sup> (resistor network model)。通过数值模拟磁场中电阻器网络的电阻，Parish 和 Littlewood 发现系统内部的高度非均匀性将会导致磁电阻中有来自霍尔效应的贡献。由于霍尔电导与磁场强度呈反比，结合上一章(2-57)式可见，磁电阻中的霍尔效应的贡献将会导致线性的磁电阻。值得注意的是系统内部的非均匀性通常是由杂质造成的，且这种电阻器网络模型是一种基于经典理论的解释，因此其对材料的能带结构等具体性质没有任何依赖。在后续的研究工作中，电阻器网络模型被从二维推广至三维<sup>[181,182]</sup>；其与有效介质模型 (effective medium theory) 的等价性得到了证明<sup>[183,184]</sup>；此外，研究发现载流子浓度的非均匀性是此模型中线性磁电阻产生的关键因素<sup>[185]</sup>。除了上述两种解释外，还有在电子载流子和空穴载流子数目相当的系统 (compensated systems) 中线性磁阻来源的经典理论解释<sup>[155,156]</sup>，以及由杂质作用产生线性磁阻的半经典理论解释<sup>[157,158]</sup>。

以上关于线性磁电阻来源的理论解释均集中在线性的横向磁电阻，并没有讨论对应纵向磁电阻的情况。在实验测量中，一些材料不仅存在线性的横向磁电阻，而且还有线性的纵向磁电阻<sup>[135,167,186,187]</sup>。这些线性的纵向磁电阻目前并没有得到相应的理论解释。另一方面，电子能带结构以及杂质势能对磁电阻的磁场强度依赖关系尚未被探索。

本章将系统地研究三维材料中电子能带结构和杂质势能对纵向以及横向磁电阻的影响。3.2 节将首先介绍在理论研究中杂质处理的方法，并引入几种常用的杂

质模型。3.3 节将给出外尔和狄拉克半金属的低能模型，并在 3.4 节中计算相应的杂质自能以及散射时间。3.5 节将先计算在量子极限下各个系统的磁电导率，之后将分析相应磁电阻对磁场的依赖关系同时给出线性磁电阻出现的条件。最后，3.6 节将对本章内容做总结并加以讨论。

## 3.2 理论研究中的杂质处理

杂质往往对材料系统的输运性质起关键影响。本节将首先推导杂质处理中至关重要一步，即可观测量的杂质平均，之后将介绍在理论研究中常用的三种杂质模型。

### 3.2.1 杂质平均理论

杂质平均是一种系综平均（ensemble average），经过杂质平均处理后，系统中的众多杂质将不会对其空间平移不变性造成影响。以单粒子的格林函数  $\hat{G}_0(i\omega_m)$  为例，在引入单个杂质后（即相当于在系统中加入了以某点为中心的势能），包含杂质作用的格林函数  $\hat{G}(i\omega_m)$  可以由原格林函数  $\hat{G}_0(i\omega_m)$  和杂质势能  $\hat{V}$  通过迭代的方法精确求出（其具体值取决于引入杂质的具体位置和势能）。如果无杂质时的系统拥有  $\mathbf{k}$  空间的平移不变性，引入一个杂质后的系统将不再拥有此平移不变性。在  $\mathbf{k}$  空间的矩阵表示下，单粒子的格林函数从原本可以用对角矩阵写出的  $\hat{G}_0(i\omega_m)$  变为了只能写为非对角矩阵的  $\hat{G}(i\omega_m)$ 。对于一个拥有  $N$  个杂质的系统，任何物理可观测量的值均依赖于这  $N$  个杂质的具体分布位置，即可观测量为杂质分布情况的函数。而杂质平均是系综平均的一种，它是将对应所有杂质可能分布情况的观测量全部求出并做平均<sup>[159]</sup>。因此，杂质平均处理后的物理量对杂质位置没有依赖关系，杂质平均处理后的系统将保持其原有的  $\mathbf{k}$  空间平移不变性。

杂质平均处理的通用数学表达式比较简单，其中没有任何近似过程。系统中杂质势能的通用表达式为

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}) &= \sum_i^N U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \\ &= \sum_i^N \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)} u(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (3-1)$$

其中  $N$  为杂质数目， $\mathbf{R}_i$  为第  $i$  个杂质在空间中的中心位置。 $U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$  即为单个杂质势能的函数，其物理意义为：在空间位置  $\mathbf{r}$  处第  $i$  个杂质势能的大小。上式第二行的函数  $u(\mathbf{q})$  为  $U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$  的傅里叶变换。因此，在系统的哈密顿量(2-21)式中， $V(\mathbf{r})$  的含义即为：在空间  $\mathbf{r}$  处所有杂质带来的势能大小。对于一个物理观测量  $O$ ，它是系

统中所有杂质位置 ( $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3, \dots, \mathbf{R}_N$ ) 的函数, 其杂质平均即为

$$\langle O \rangle_{imp} = \left( \frac{1}{V} \right)^N \int \int \int \dots \int O d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 d\mathbf{R}_3 \dots d\mathbf{R}_N \quad (3-2)$$

其中  $V$  为系统的体积。在上式中, 由于坐标可以连续取值因此使用了积分形式,  $1/V$  即为对一个坐标积分的空间平均。可以看到, 杂质平均本身并不包含任何近似过程, 它完全是单纯的系综平均。

在上一章 2.3 节的推导中, 需要进行杂质平均的量为格林函数和流流关联函数。经过杂质平均处理后, 可以从格林函数(谱函数)得到杂质对材料能带的影响; 可以从流流关联函数得到杂质对输运性质的影响。从上一章格林函数和流流关联函数的表达式可以看到, 以  $\hat{V}$  做展开后的每一项均为不同数目  $\hat{V}$  和格林函数乘积的形式。而杂质的位置 ( $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3, \dots, \mathbf{R}_N$ ) 信息仅包含在  $\hat{V}$  中。因此, 无论是格林函数还是流流关联函数, 杂质平均最终都作用在每一项中所有  $\hat{V}$  的乘积上。在推导计算中, 可以先将  $\hat{V}$  的乘积提取出做杂质平均后再放回去。以格林函数为例, 2.3 节的(2-26)式中, 首先需要将杂质势能算符  $\hat{V}$  在实空间基下写出其表达式, 通过插入两个  $\int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| = 1$ , 可以得到在第二项中,

$$\begin{aligned} \langle u | \hat{V} | u \rangle &= \int \int \langle u | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \hat{V} | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | u \rangle d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \\ &= \int \langle u | \mathbf{r} \rangle V(\mathbf{r}) \langle \mathbf{r} | u \rangle d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (3-3)$$

其中

$$\langle \mathbf{r} | \hat{V} | \mathbf{r}' \rangle = V(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3-4)$$

这是一个只包含一个  $V(\mathbf{r})$  的项, 杂质平均即为

$$\begin{aligned} \langle V(\mathbf{r}) \rangle_{imp} &= \left( \frac{1}{V} \right)^N \int \int \dots \int \sum_i^N U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 \dots d\mathbf{R}_N \\ &= \sum_i^N \frac{1}{V} \int U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) d\mathbf{R}_i \end{aligned} \quad (3-5)$$

上式中对求和中的每一项进行积分时, 对于第  $i$  个杂质势能, 其表达式  $U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$  并不包含其他杂质的位置, 因此仅留下对  $\mathbf{R}_i$  的积分, 其他积分和  $(1/V)^{N-1}$  的乘积为 1。将单个杂质势能表达式替换为其傅里叶变化后的形式后, 可以得到

$$\begin{aligned} \langle V(\mathbf{r}) \rangle_{imp} &= \frac{1}{V} \sum_i^N \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} u(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \left[ \int e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i} d\mathbf{R}_i \right] \\ &= \frac{1}{V} \sum_i^N \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} u(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} [(2\pi)^3 \delta(\mathbf{q})] \\ &= \frac{N}{V} u(0) \end{aligned} \quad (3-6)$$

这里  $N/V$  即为杂质的浓度  $n_i$ 。由上式可见杂质平均之后含一个  $V(\mathbf{r})$  的项的结果为常数，将其包含到自能中之后即等价于调节了费米能量的大小，因此此项通常忽略不计。(2-26)式中第三项的杂质势能部分为

$$\begin{aligned}\langle u|\hat{V}|u'\rangle\langle u'|\hat{V}|u\rangle &= \int \int \int \int \langle u|\mathbf{r}\rangle\langle \mathbf{r}|\hat{V}|\mathbf{r}_1\rangle\langle \mathbf{r}_1|u'\rangle\langle u'|\mathbf{r}_2\rangle\langle \mathbf{r}_2|\hat{V}|\mathbf{r}'\rangle\langle \mathbf{r}'|u\rangle d\mathbf{r}d\mathbf{r}_1d\mathbf{r}_2d\mathbf{r}' \\ &= \int \int \langle u|\mathbf{r}_1\rangle V(\mathbf{r}_1)\langle \mathbf{r}_1|u'\rangle\langle u'|\mathbf{r}_2\rangle V(\mathbf{r}_2)\langle \mathbf{r}_2|u\rangle d\mathbf{r}_1d\mathbf{r}_2\end{aligned}\quad (3-7)$$

此项即为本论文所考虑到的自能项中的杂质势能。其杂质平均部分为

$$\begin{aligned}\langle V(\mathbf{r}_1)V(\mathbf{r}_2)\rangle_{imp} &= \left(\frac{1}{V}\right)^N \int \int \dots \int \sum_{i,j}^N U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i)U(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_j) d\mathbf{R}_1d\mathbf{R}_2 \dots d\mathbf{R}_N \\ &= \sum_{i,j}^N \left(\frac{1}{V}\right)^2 \int \int U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i)U(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_j) d\mathbf{R}_i d\mathbf{R}_j\end{aligned}\quad (3-8)$$

上式中包含分别位于  $\mathbf{R}_i$  和  $\mathbf{R}_j$  两处杂质的势能，即  $i \neq j$  的情况，有

$$\sum_{i \neq j}^{N-1} \sum_j^N \left(\frac{1}{V}\right)^2 \int \int U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i)U(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_j) d\mathbf{R}_i d\mathbf{R}_j = \left(1 - \frac{1}{N}\right) \left[\frac{N}{V} u(0)\right]^2 \quad (3-9)$$

其推导过程与(3-6)式相似。在实际材料中，杂质的数目  $N$  通常是和载流子数目的量级相当，因此上式中的  $(1 - 1/N)$  约为 1。对于  $i = j$  的情况，它的物理意义为在  $\mathbf{r}_1$  和  $\mathbf{r}_2$  两个位置发生的散射都源于位于  $\mathbf{R}_i$  处的杂质，因此求和符号里面只剩下对位于  $\mathbf{R}_i$  杂质的平均，即

$$\sum_i^N \frac{1}{V} \int U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i)U(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_i) d\mathbf{R}_i = \frac{N}{V} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} u(\mathbf{q})u(-\mathbf{q})e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)} \quad (3-10)$$

因此， $\langle V(\mathbf{r}_1)V(\mathbf{r}_2)\rangle_{imp}$  的结果即为(3-9)式和(3-10)式之和。通过同样的方式，可以进一步计算  $\langle V(\mathbf{r}_1)V(\mathbf{r}_2)V(\mathbf{r}_3)\rangle_{imp}$  以及包含更多杂质势能  $V(\mathbf{r})$  的项的杂质平均，这里将不继续进行计算，因为在下文中用到的仅为(3-10)式。在上一章的(2-29)式中，格林函数的自能只考虑了包含  $\langle V(\mathbf{r}_1)V(\mathbf{r}_2)\rangle_{imp}$  的项，这是因为在本论文中考虑的杂质强度十分弱，其中  $\langle V(\mathbf{r})\rangle_{imp}$  和  $\langle V(\mathbf{r}_1)V(\mathbf{r}_2)\rangle_{imp}$  分别为杂质强度的一阶项和二阶项，而其中的非常数部分全部包含在(3-10)式中。

### 3.2.2 杂质模型

理论计算中，常用的杂质模型有三种，分别为  $\delta$  势能型 ( $\delta$  potential)、高斯势能型 (Gaussian potential)、屏蔽库伦势能型 (screened Coulomb potential)。 $\delta$  势能是描述势能集中在某一点的杂质，其表达式为

$$U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = u_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (3-11)$$

其中  $u_0$  为势能的强度，是一个常数的能量。这个函数的傅里叶变换即为



$$u(\mathbf{q}) = u_0 \quad (3-12)$$

高斯势能通常用来模拟势能有一定分布范围的杂质，其表达式为

$$U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = u_0 \left( \frac{1}{d\sqrt{2\pi}} \right)^3 e^{-\frac{|\mathbf{r}-\mathbf{R}_i|^2}{2d^2}} \quad (3-13)$$

这里 $d$ 即为势能的衰减长度。上式即描述了杂质势能在位置 $\mathbf{R}_i$ 有最大的强度，随着空间距离远离 $\mathbf{R}_i$ 会呈高斯型衰减。上式相应的傅里叶变换函数为

$$u(\mathbf{q}) = u_0 e^{-\frac{q^2 d^2}{2}} \quad (3-14)$$

这里的 $q$ 为 $\sqrt{q_x^2 + q_y^2 + q_z^2}$ 。另一个常用的有限范围分布的杂质势能为屏蔽库伦势能，它描述的是带电杂质和电子之间的势能，其表达式为

$$U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|} e^{-\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{R}_i|} \quad (3-15)$$

这里 $\epsilon$ 为绝对介电常数 (absolute permittivity),  $\kappa$ 为倒德拜屏蔽半径 (reciprocal Debye screening radius)。屏蔽库伦势能函数的傅里叶变换函数为

$$u(\mathbf{q}) = \frac{e^2}{\epsilon(q^2 + \kappa^2)} \quad (3-16)$$

此外，绝对介电常数可以写为

$$\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r \quad (3-17)$$

其中 $\epsilon_0 \approx 8.854 \times 10^{-12} \text{ C}^2(\text{J m})^{-1}$ 为真空介电常数， $\epsilon_r$ 为相对介电常数。

### 3.3 低能有效模型和朗道能带

本节将介绍单节点 (single-node) 和两节点 (two-node) 两种典型外尔/狄拉克半金属的低能有效哈密顿量以及相应朗道能带，并与三维电子气的朗道能带作对比研究。此外还将讨论不同模型中进入量子极限的临界磁场强度。

单节点和两节点模型都经常在研究狄拉克或外尔半金属中使用。仅取狄拉克半金属低能有效模型(2-1)式对角上的一个块矩阵，其描述的即为无质量外尔粒子，

$$H^L(\mathbf{k}) = \hbar v_F \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (3-18)$$

相应的能谱和朗道能带已经在上一章中详细研究过，这里不再重复。此模型描述的为一个外尔点附近的能带结构，因此通常将其称为单节点模型。另一个常用来描述外尔半金属费米能量附近粒子的低能有效哈密顿量为

$$H^Q(\mathbf{k}) = A(k_x \sigma_x + k_y \sigma_y) + M(k_w^2 - k_x^2 - k_y^2 - k_z^2) \sigma_z \quad (3-19)$$

其中 $A$ 、 $M$ 和 $k_w$ 均为模型参数。这个哈密顿量可以描述在 $\mathbf{k}$ 空间沿 $k_z$ 分布的相距 $k_w$ 的两个外尔点，因此被称为两节点模型。与(3-18)式相比，两节点模型可以在开放边界条件 (open boundary condition) 下求出外尔半金属中的表面态。将(3-19)式与

其时间反演对称的部分结合后，有

$$\begin{pmatrix} H^Q(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & [H^Q(-\mathbf{k})]^* \end{pmatrix} \quad (3-20)$$

其描述的即为狄拉克半金属。

两节点模型的朗道能带同样可以用上一章 2.2 节中描述的方法求解，因此这里便不再重复将直接给出结果。当取磁场  $\mathbf{B}$  的方向为  $\hat{z}$  时，计算可得两节点模型的本征态拥有和(2-8)式以及(2-12)式一样的形式，但在两节点模型中  $\cos \theta_{k_z, n} = M_n / \sqrt{M_n^2 + 2nA^2/l_B^2}$ ，这里  $M_n = M(k_w^2 - k_z^2) - n\omega$ ， $\omega = 2M/l_B^2$ 。相应的朗道能带的表达式为

$$E_{k_z, n\pm}^Q = \frac{\omega}{2} \pm \sqrt{M_n^2 + 2n \frac{A^2}{l_B^2}} \quad (3-21)$$

其中  $n \geq 1$ 。对于  $n = 0$  的情况，有

$$E_{k_z, 0}^Q = \frac{\omega}{2} + M(k_z^2 - k_w^2) \quad (3-22)$$

三维电子气的哈密顿量为

$$H^{EG}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (3-23)$$

这里  $m$  是有效质量， $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$ 。由于它仅有一个简单的  $k$  的二次方型能带，因此其所有的朗道能带（包括  $n = 0$  的情况）均可用下式表示

$$E_{k_z, n}^{EG} = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{ml_B^2} \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (3-24)$$

相应的本征态与上述两能带模型相比也十分简单，即为  $|n\rangle|k_x, k_z\rangle$ 。

系统进入量子极限的临界磁场强度  $B_c$  与载流子浓度  $n_0$  相关。对于单节点模型，此关系为(2-15)式。可以同样用上一章介绍的计算方法，写出在进入量子极限时三维电子气系统中有如下关系

$$\min(E_{k_z, 1}^{EG}) = E_{k_F, 0}^{EG} \quad (3-25)$$

进而可以得到其临界磁场强度  $B_c = \hbar e^{-1} (\sqrt{2}\pi^2 n_0)^{2/3}$ ，即与上一章中无质量狄拉克模型相同。对于两节点模型，由于其能带结构复杂，并不能得到简单的  $B_c$  表达式。

以费米能量位于  $E_{k_z, n+}^Q$  能带为例， $E_{k_z, 1+}^Q$  取最小值时其  $k_z$  的值会随磁场强度变化。当磁场强度较小时，有  $k_w^2 > 2/l_B^2$ ，能带  $E_{k_z, 1+}^Q$  最小值处的  $k_z = \pm \sqrt{k_w^2 - 2/l_B^2}$ 。因此临界磁场强度  $B_c$  和载流子浓度  $n_0$  有如下关系：

$$\sqrt{2 \frac{A^2}{l_c^2 M^2}} = (2\pi^2 l_c^2 n_0)^2 - k_w^2 \quad (3-26)$$

其中  $l_c = \sqrt{\hbar/(eB_c)}$ 。当磁场强度较大时，有  $k_w^2 \leq 2/l_B^2$ ，能带  $E_{k_z,1+}^Q$  最小值处的  $k_z = 0$ 。因此临界磁场强度  $B_c$  和载流子浓度  $n_0$  的关系为

$$\sqrt{\left(k_w^2 - \frac{2}{l_c^2}\right)^2 + 2\frac{A^2}{l_c^2 M^2}} = (2\pi^2 l_c^2 n_0)^2 - k_w^2 \quad (3-27)$$

### 3.4 散射时间和输运时间

杂质作用最终是以散射时间或输运时间的形式进入到磁电阻表达式的。本节将推导  $n = 0$  和  $n = 1$  朗道能带的自能，并计算相应的散射时间的输运时间。

#### 3.4.1 最低朗道能带的输运时间

从上一章(2-78)式的推导中可以发现计算量子极限下的纵向磁电阻只需用到最低朗道能带的输运时间，因此只需计算  $n = 0$  能带的自能即可。通过(2-29)式，可以写出

$$\Sigma_{k_z,0}^R(E_F) = \sum_{k'_x, k'_z, b'} \frac{|\langle k'_x, k'_z, b' | \hat{V} | k_x, k_z, 0 \rangle|^2}{E_F - E_{k'_z, b'} + i0^+} \quad (3-28)$$

由(2-77)式可知散射时间的计算只需要自能的虚部，使用 Sokhotski-Plemelj 定理(2-42)式后会发现：对于上式的虚部，只有  $b' = 0$  的项不为零，因此在下面的计算中仅计算  $b' = 0$  的项。为了将杂质势能  $\hat{V}$  在空间坐标基下写出，通过与(3-7)式类似的方法可以得到

$$\langle k'_x, k'_z, 0 | \hat{V} | k_x, k_z, 0 \rangle = \int \langle k'_x, k'_z, 0 | \mathbf{r} \rangle V(\mathbf{r}) \langle \mathbf{r} | k_x, k_z, 0 \rangle d\mathbf{r} \quad (3-29)$$

其中实空间的波函数为

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | k_x, k_z, 0 \rangle &= \langle x, z | k_x, k_z \rangle \begin{pmatrix} 0 \\ \langle y | 0 \rangle \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{L_x L_z}} e^{i(xk_x + zk_z)} \begin{pmatrix} 0 \\ \phi_0(y, k_x) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3-30)$$

而  $\phi_0(y, k_x)$  可以将下式中  $n$  取 0 得到

$$\phi_n(y, k_x) = \frac{1}{\sqrt{n! 2^n l_B \sqrt{\pi}}} e^{-\frac{1}{2}(\frac{y}{l_B} - k_x l_B)^2} H_n\left(\frac{y}{l_B} - k_x l_B\right) \quad (3-31)$$

这里的  $H_n(x)$  为厄密多项式 (Hermite polynomial)。使用 3.2 节中杂质平均的结果

$$\langle V(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}') \rangle_{imp} \approx n_i \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} u(\mathbf{q}) u(-\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \quad (3-32)$$

可以得到(3-28)式中

$$\begin{aligned}
 |\langle k'_x, k'_z, b' | \hat{V} | k_x, k_z, 0 \rangle|^2 &= n_i \left( \frac{1}{L_x L_y} \right)^2 \int \int \int \frac{d\mathbf{r} d\mathbf{r}' d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \{ u(\mathbf{q}) u(-\mathbf{q}) \\
 &\quad \times e^{i[(k'_x - k_x)x + (k'_z - k_z)z]} e^{i[(k'_x - k_x)x' + (k'_z - k_z)z']} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \\
 &\quad \times \phi_0(y, k_x) \phi_0(y, k'_x) \phi_0(y', k_x) \phi_0(y', k'_x) \} \quad (3-33)
 \end{aligned}$$

上式中, 对  $x$ 、 $x'$ 、 $z$ 、 $z'$  的积分结果均为狄拉克  $\delta$  函数, 而对  $y$  或  $y'$  积分部分的结果可以由下式得到

$$\int dy e^{\pm i q_y y} \phi_0(y, k_x) \phi_0(y, k'_x) = e^{-\frac{1}{4l_B^2}[(k_x - k'_x)^2 + q_y^2] l_B^2 \pm \frac{1}{2} i q_y (k_x + k'_x) l_B^2} \quad (3-34)$$

结合以上结果最终可以得到

$$\text{Im}[\Sigma_{k_z, 0}^R(E_F)] = -\pi n_i \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} u(\mathbf{q}) u(-\mathbf{q}) \delta(E_F - E_{k_z - q_z, 0}) e^{-\frac{1}{2}(q_x^2 + q_y^2) l_B^2} \quad (3-35)$$

这个表达式以及通过(2-77)式进一步得到的散射时间或者更进一步得到的输运时间均为通用表达式。系统的信息包含在上式中的  $E_{k_F - q_z, 0}$  中, 而杂质的信息包含在  $u(\mathbf{q})$  中。

将具体的杂质势能代入后可以得到对应杂质模型的最低朗道能带散射时间。

对于高斯势能, 上式中对  $q_x$  和  $q_y$  积分的部分为

$$\begin{aligned}
 \int \int \frac{dq_x dq_y}{(2\pi)^2} e^{-(q_x^2 + q_y^2) d^2} e^{-\frac{1}{2}(q_x^2 + q_y^2) l_B^2} &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty q_\perp e^{-q_\perp^2 (d^2 + \frac{1}{2} l_B^2)} dq_\perp \\
 &= \frac{1}{2\pi(2d^2 + l_B^2)} \quad (3-36)
 \end{aligned}$$

在上式的计算中, 直角坐标系中的积分被转换到了极坐标系中, 其中  $q_\perp = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$ 。结合(2-77)式和(3-35)式可以得到高斯势能型杂质给最低朗道能带带来的散射时间表达式为

$$\frac{\hbar}{2\tau_{k_F, 0}^G} = \frac{n_i u_0^2}{4\pi l_B^2 (1 + 2d^2/l_B^2)} \int_{-\infty}^\infty \delta(E_F - E_{k_F - q_z, 0}) e^{-q_z^2 d^2} dq_z \quad (3-37)$$

由于在后面的计算中用到的为费米能量处的散射时间, 上式取了  $k_z = k_F$ 。对于  $\delta$  势能型杂质, 其结果可以由上式中  $d$  取 0 给出。将屏蔽库伦势能型  $u(\mathbf{q})$  代入到(3-35)式中, 可以用同样的方法可以得到对  $q_x$  和  $q_y$  部分的积分为

$$\begin{aligned}
 \int \int \frac{dq_x dq_y}{(2\pi)^2} \frac{e^4}{\varepsilon^2 (q^2 + \kappa^2)^2} e^{-\frac{1}{2}(q_x^2 + q_y^2) l_B^2} &= \frac{e^4}{2\pi \varepsilon^2} \int_0^\infty q_\perp \frac{1}{\varepsilon^2 (q_\perp^2 + q_z^2 + \kappa^2)^2} e^{-\frac{1}{2} l_B^2 q_\perp^2} dq_\perp \\
 &= \frac{e^4 l_B^2}{8\pi \varepsilon^2} \mathcal{F}_1 \left[ \frac{l_B^2}{2} (q_z^2 + \kappa^2) \right] \quad (3-38)
 \end{aligned}$$

其中

$$\mathcal{F}_1(x) = \frac{1}{x} + e^x + \text{Ei}(-x) \quad (3-39)$$

$$\text{Ei}(x) = - \int_{-x}^{\infty} \frac{1}{t} e^{-t} dt \quad (3-40)$$

因此，屏蔽库伦势能型杂质给最低朗道能带所带来的散射时间可以由下式得到

$$\frac{\hbar}{2\tau_{k_F,0}^C} = \frac{n_i e^4 l_B^2}{16\pi\epsilon^2} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(E_F - E_{k_F - q_z,0}) \mathcal{F}_1 \left[ \frac{l_B^2}{2} (q_z^2 + \kappa^2) \right] dq_z \quad (3-41)$$

在计算纵向磁电阻时，求解输运时间的表达式可以直接在以上表达式的积分中添加权重因子  $(1 - \frac{v_{k_F - q_z,0}}{v_{k_F,0}})$  得到，其中  $v_{k_F,0} = \left. \frac{\partial E_{k_z,0}}{\hbar \partial k_z} \right|_{k_z=k_F}$ 。

### 3.4.2 朗道 $n = 1$ 的能带的散射时间

计算横向磁电导率时，在电导表达式中出现的为两个朗道指标相差为1的谱函数，这一点可以在上一章(2-59)式和(2-60)式中的克罗内克  $\delta$  函数体现出。因此计算量子极限下的横向磁电阻需要用到  $n = 1$  朗道能带的自能。以  $1 +$  能带为例，根据(2-29)式，可以写出其自能表达式为

$$\Sigma_{k_z,1+}^R(E_F) = \sum_{k'_x, k'_z, b'} \frac{|\langle k'_x, k'_z, b' | \hat{V} | k_x, k_z, 1+ \rangle|^2}{E_F - E_{k'_z, b'} + i0^+} \quad (3-42)$$

与计算  $\text{Im}[\Sigma_{k_z,0}^R(E_F)]$  时相同，对于量子极限下上式的虚部，仅需考虑  $b' = 0$  的项即可。由于上式和(3-28)式的差别仅在于指标为0的本征态被替换为了指标为  $1 +$  的本征态，因此上式和(3-28)式在计算过程上是相似的，在此便不再重复，仅列出计算中不同的地方。  $1 +$  本征态以空间坐标为基矢的表达式为

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | k_x, k_z, 1+ \rangle &= \langle x, z | k_x, k_z \rangle \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_{k_z,1}}{2} \langle y | 0 \rangle \\ \sin \frac{\theta_{k_z,1}}{2} \langle y | 1 \rangle \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{L_x L_z}} e^{i(xk_x + zk_z)} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_{k_z,1}}{2} \phi_0(y, k_x) \\ \sin \frac{\theta_{k_z,1}}{2} \phi_1(y, k_x) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3-43)$$

其中  $\phi_0(y, k_x)$  和  $\phi_1(y, k_x)$  可由(3-31)式得到。对  $y$  和  $y'$  部分的积分可以通过下式得到

$$\begin{aligned} \int dy e^{\pm i q_y y} \phi_1(y, k_x) \phi_0(y, k'_x) &= e^{-\frac{1}{4}[(k_x - k'_x)^2 + q_y^2]} l_B^2 \pm \frac{1}{2} i q_y (k_x + k'_x) l_B^2 \\ &\quad \times \frac{l_B}{\sqrt{2}} (k_x - k'_x \pm i q_y) \end{aligned} \quad (3-44)$$

最终(3-42)式可以化为

$$\text{Im}[\Sigma_{k_z,1+}^R(E_F)] = -\pi n_i \left( \sin \frac{\theta_{k_z,1}}{2} \right)^2 \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} [\delta(E_F - E_{k_z - q_z,0})$$

$$\times u(\mathbf{q})u(-\mathbf{q}) \frac{(q_x^2 + q_y^2)l_B^2}{2} e^{-\frac{1}{2}(q_x^2 + q_y^2)l_B^2} \Big] \quad (3-45)$$

将高斯势能代入后, 可以进一步计算 $q_x$ 和 $q_y$ 部分的积分

$$\begin{aligned} \int \int \frac{dq_x dq_y}{(2\pi)^2} e^{-(q_x^2 + q_y^2)d^2} e^{-\frac{1}{2}(q_x^2 + q_y^2)l_B^2} \frac{(q_x^2 + q_y^2)l_B^2}{2} &= \frac{l_B^2}{4\pi} \int_0^\infty q_\perp^3 e^{-q_\perp^2(d^2 + \frac{1}{2}l_B^2)} dq_\perp \\ &= \frac{l_B^2}{2\pi(2d^2 + l_B^2)^2} \end{aligned} \quad (3-46)$$

最终可以得到高斯势能型杂质给 $1+$ 能带所带来的散射时间为

$$\frac{\hbar}{2\tau_{k_F,1+}^G} = \frac{n_i u_0^2}{4\pi l_B^2 (1 + 2d^2/l_B^2)^2} \left( \sin \frac{\theta_{k_F,1}}{2} \right)^2 \int_{-\infty}^\infty \delta(E_F - E_{k_F - q_z, 0}) e^{-q_z^2 d^2} dq_z \quad (3-47)$$

和 $\hbar/(2\tau_{k_F,1+}^G)$ 相比, 上式中多了乘数 $[\sin(\theta_{k_F,1}/2)]^2/(1 + 2d^2/l_B^2)$ 。对于屏蔽库伦势能,  $q_x$ 和 $q_y$ 部分的积分为

$$\begin{aligned} \int \int \frac{dq_x dq_y}{(2\pi)^2} \frac{e^4}{\varepsilon^2(q^2 + \kappa^2)^2} e^{-\frac{1}{2}(q_x^2 + q_y^2)l_B^2} \frac{(q_x^2 + q_y^2)l_B^2}{2} \\ = \frac{e^4 l_B^2}{4\pi \varepsilon^2} \int_0^\infty q_\perp^3 \frac{1}{\varepsilon^2(q_\perp^2 + q_z^2 + \kappa^2)^2} e^{-\frac{1}{2}l_B^2 q_\perp^2} dq_\perp \\ = \frac{e^4 l_B^2}{8\pi \varepsilon^2} \mathcal{F}_2 \left[ \frac{l_B^2}{2} (q_z^2 + \kappa^2) \right] \end{aligned} \quad (3-48)$$

其中

$$\mathcal{F}_2(x) = -1 - (1+x)e^x \text{Ei}(-x) \quad (3-49)$$

因此, 屏蔽库伦势能型杂质给 $n=1+$ 能带所带来的散射时间可以由下式得到

$$\frac{\hbar}{2\tau_{k_F,1+}^C} = \frac{n_i e^4 l_B^2}{16\pi \varepsilon^2} \left( \sin \frac{\theta_{k_F,1}}{2} \right)^2 \int_{-\infty}^\infty \delta(E_F - E_{k_F - q_z, 0}) \mathcal{F}_2 \left[ \frac{l_B^2}{2} (q_z^2 + \kappa^2) \right] dq_z \quad (3-50)$$

对于 $1-$ 能带的自能和散射时间, 仅需将以上表达式中的 $\sin(\theta_{k_F,1}/2)$ 替换为 $\cos(\theta_{k_F,1}/2)$ 即可, 这点可以由本征态的表达式(2-8)式保证 (因为计算中有平方操作, 所以(2-8)式中的负号不会出现在结果中)。

对于三维电子气模型, 由于其只有一个指标为1的能带, 因此在其最终的散射时间表达式中不会出现 $\sin(\theta_{k_F,1}/2)$ 。

### 3.5 量子极限下的线性磁电阻

上一节给出了输运计算中最为重要的散射时间, 本节将在此基础上推导量子极限下单节点模型和两节点模型以及三维电子气中的纵向、横向和霍尔磁电导率, 并研究相应磁电阻对磁场强度的依赖关系。

### 3.5.1 纵向磁电导

单节点模型在量子极限下的纵向磁电阻已经在上一章 2.5 节中详细讨论，以下内容将集中探讨两节点模型在量子极限下纵向磁电阻。

使用和上一章 2.5 节中类似的方法，可以得到量子极限下纵向磁电导率的通用表达式为

$$\sigma_{zz} = \frac{e^2}{h} N_L \sum_i |v_{k_F,0}^i| \tau_{k_F,0}^i(E_F) \quad (3-51)$$

这里  $i$  代表费米能量处  $k_z$  不同的态。值得注意的是此处得到的(3-51)式为量子极限下纵向磁电导率的通用表达式。如果取其中费米速度为三维电子气的，(3-51)式即变为经典的 Drude 公式<sup>[188]</sup>。对于单节点模型，费米能量处的态仅有一个可取的  $k_z$ ，(3-51)式即简化为(2-78)式。对于两节点模型或三维电子气，费米能量切过的最低朗道能带有  $k_z = \pm k_F$  两个值可取（在本章中  $k_F$  代表正的费米波矢）。由于  $\pm k_F$  态速度的绝对值是相同的，且它们的散射时间或输运时间也是相同的，因此上式可简化为

$$\sigma_{zz}^Q = 2 \frac{e^2}{h} N_L v_{k_F,0} \tau_{k_F,0}(E_F) \quad (3-52)$$

上式和单节点模型中情况不同的是费米速度（ $v_{k_F,0} = \partial E_{k_z,0} / (\hbar \partial k_z) \big|_{k_z=k_F}$ ）是正比于  $k_F$  的。当载流子浓度取固定值时，费米速度将反比于磁场强度  $B$ 。这将进而导致当  $\tau_{k_F,0}(E_F)$  与磁场强度无关时， $\sigma_{zz}^Q$  的值不依赖于磁场强度。

将本正能量表达式(3-21)式和(3-22)式结合上一节中得到的散射时间表达式代入到量子极限下纵向磁电导率的表达式并整理后，可以得到：当系统内的高斯势能型杂质占主导地位时

$$\sigma_{zz}^{Q,G} = \frac{e^2}{h} \frac{(\hbar v_{k_F,0})^2}{n_i u_0^2} \frac{2(1 + 2d^2/l_B^2)}{1 + e^{-4k_F^2 d^2}} \quad (3-53)$$

可以看到纵向磁电导的大小是反比于杂质浓度和强度的。对于  $\delta$  势能型杂质（即取高斯型衰减长度  $d = 0$  时），纵向的磁电导对磁场强度有  $B^{-2}$  的依赖关系。而在高斯势能的情况下， $\sigma_{zz}^{Q,G}$  将额外拥有的包含  $B^{-1}$  的一项。在上式中， $k_F$  较小时有  $e^{-4k_F^2 d^2} \approx 1$ ，因此当高斯势能衰减长度比较大时（ $2d^2 \gg l_B^2$ ），包括  $B^{-1}$  的项将在纵向磁电导中占主导地位。

同样可以得到当系统中屏蔽库伦势能型杂质主导时，纵向磁电导率为

$$\sigma_{zz}^{Q,C} = \frac{e^2}{h} \frac{\varepsilon^2}{n_i e^4 l_B^4} \frac{8(\hbar v_{k_F,0})^2}{\mathcal{F}_1 \left[ \frac{l_B^2}{2} (4k_F^2 + \kappa^2) \right] + \mathcal{F}_1 \left[ \frac{l_B^2}{2} \kappa^2 \right]} \quad (3-54)$$

上式对磁场强度的依赖关系比较复杂，在一般情况下，它是随磁场强度非单调变化

的。上式中 $(v_{k_F,0}/l_B^2)^2$ 中的磁场强度 $B$ 会消去，因此 $\sigma_{zz}^{Q,C}$ 对磁场强度的依赖完全包含在 $\mathcal{F}_1[l_B^2(4k_F^2 + \kappa^2)/2] + \mathcal{F}_1[l_B^2\kappa^2/2]$ 中。对于倒德拜屏蔽半径 $\kappa$ ，它可以通过以下方式计算<sup>[137]</sup>

$$\begin{aligned}\kappa^2 &= \frac{e^2 k_B T}{\varepsilon V} \sum_{m, k_x, k_z} \left( \frac{1}{i\omega_m - E_{k_z,0}} \right)^2 \\ &= \frac{e^2}{\varepsilon} N_L \int \frac{dk_z}{2\pi} \delta(E_F - E_{k_z,0}) \\ &= \frac{e^2}{2\pi\varepsilon} N_L \frac{2}{\hbar v_{k_F,0}}\end{aligned}\quad (3-55)$$

上式计算中用到的虚频求和类似于 2.3 节中的计算，在零温极限下有

$$\lim_{T \rightarrow 0} \left[ k_B T \sum_m \left( \frac{1}{i\omega_m - E_{k_z,0}} \right)^2 \right] = \delta(E_F - E_{k_z,0}) \quad (3-56)$$

因此 $\sigma_{zz}^{Q,C}$ 中的 $\kappa \propto B$ 。对于函数 $\mathcal{F}_1[x]$ ，分析可得：在 $x$ 取值十分小时， $\mathcal{F}_1[x] \approx x^{-1}$ ，而在 $x$ 取值很大时， $\mathcal{F}_1[x] \approx x^{-2}$ 。相应的函数拟合如图 3-1 所示。拥有以上结果后，再对(3-54)式分析可以得到：当 $4l_B^2 k_F^2 \ll l_B^2 \kappa^2$ ，纵向磁电导反比于 $\mathcal{F}_1[l_B^2 \kappa^2/2]$ ，如果 $l_B^2 \kappa^2/2 \ll 1$ ，即有 $\sigma_{zz}^{Q,C}$ 正比于 $B$ ，如果 $l_B^2 \kappa^2/2 \gg 1$ ，即有 $\sigma_{zz}^{Q,C} \propto B^2$ ；当 $4l_B^2 k_F^2 \gg l_B^2 \kappa^2$ 时，仍然存在以上近似结果，这是因为 $\mathcal{F}_1[l_B^2(4k_F^2 + \kappa^2)/2] \propto (2l_B^2 k_F^2)^{-1}$ 而 $\mathcal{F}_1[l_B^2 \kappa^2/2] \propto (l_B^2 \kappa^2/2)^{-1}$ 导致 $\mathcal{F}_1[l_B^2 \kappa^2/2] \gg \mathcal{F}_1[l_B^2(4k_F^2 + \kappa^2)/2]$ 。

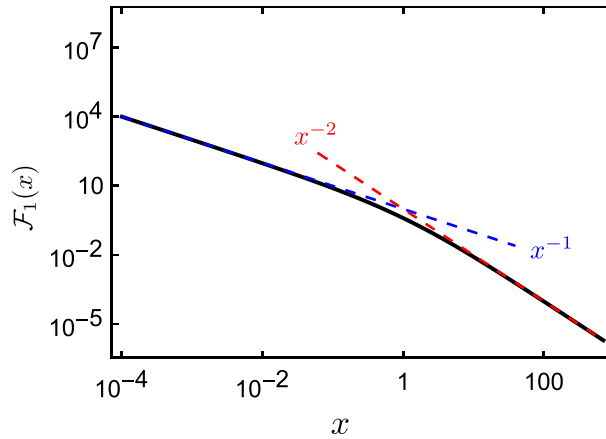


图 3-1 函数 $\mathcal{F}_1[x]$ 的幂函数拟合。

Fig. 3-1 Power function fitting of  $\mathcal{F}_1[x]$ .

三维电子气在量子极限下的纵向电导率表达式同样遵循(3-53)式和(3-54)式。这是因为将三维电子气模型中的 $\hbar^2/(2m)$ 替换为 $M$ 后，它的最低朗道能带和两节点模型的相比仅有一个常数的能量差 $(Mk_w^2)$ ，这个常数差值对最终结果不会产生任



何影响。

此外，当系统中的载流子浓度极低并且磁场强度十分大时，载流子将集中在最低朗道能带的底端，这种情况下需要在以上磁电导率的表达式中引入修正。这是因为在解析推导的过程中使用了  $\delta$  函数近似。在(2-76)式中的推迟格林函数和超前格林函数的乘积以及计算自能虚部时使用 Sokhotski–Plemelj 定理得到的  $\delta$  函数都是洛伦兹分布函数的分布宽度趋于零时的近似。以两节点模型为例，这个近似过程以及对  $\delta$  函数进行积分即为

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\pi} \frac{\eta}{[M(k_z^2 - k_F^2)]^2 + \eta^2} dk_z &\approx \int_{-\infty}^{\infty} \delta[M(k_z^2 - k_F^2)] dk_z \\ &= \frac{1}{M|k_F|} \end{aligned} \quad (3-57)$$

其中  $\eta$  即为洛伦兹分布宽度，在这里它是一个正的趋于零的小量。上式中的近似处理保证了解析推导得以进行，且在通常情况下其结果是准确的。但是在  $k_F \rightarrow 0$  时，上式的结果是发散的，即载流子集中在能带底端时是不适用的。在无近似的情况下，上式的积分为

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\pi} \frac{\eta}{[M(k_z^2 - k_F^2)]^2 + \eta^2} dk_z = \frac{1}{M} \sqrt{\frac{k_F^2 + \sqrt{k_F^4 + \left(\frac{\eta}{M}\right)^2}}{2 \left[k_F^4 + \left(\frac{\eta}{M}\right)^2\right]}} \quad (3-58)$$

可见，当  $k_F^2 \gg \eta/M$  时，上式的结果近似为  $1/(M|k_F|)$ ，即和做  $\delta$  函数近似后积分的结果是一样的。但当  $k_F^2 \ll \eta/M$  时，上式的结果近似为  $\sqrt{1/(2\eta M)}$ 。因此，在  $k_F \rightarrow 0$  时应将做  $\delta$  函数近似后积分的结果  $1/(M|k_F|)$  替换为  $\sqrt{1/(2\eta M)}$ 。因为固定载流子浓度时  $k_F$  的值是反比于磁场强度  $B$  的，这个修正将会对磁电阻对磁场强度的依赖产生影响。出于和以上讨论同样的原因，在求解倒德拜屏蔽半径  $\kappa$  时做  $\delta$  函数近似后的积分结果也有同样的问题，因此也需要在载流子集中在能带底端时做修正。虽然在(3-56)式中数学上并非为洛伦兹分布，但修正结果和以上类似，即将会去除结果中分母上的  $k_F$ 。具体到以上纵向磁电导率的表达式中会发现，在(2-76)式中的近似和自能虚部计算中的近似是相除关系，它们的修正因子会相互抵消掉。因此(3-53)式和(3-54)式在任何载流子浓度和磁场强度下均成立。但(3-54)式中的  $\kappa$  会在载流子浓度极低并且磁场强度十分大时变为正比于  $\sqrt{B}$ ，这会导致  $\sigma_{zz}^{Q,C}$  出现与上述分析不同的结果。

不同于单节点模型，顶点修正对两节点模型的磁电导影响有限。在费米能量处，以  $k_z = k_F$  处的态为例，权重因子  $(1 - v_{k_F - q_z, 0}/v_{k_F, 0})$  中  $q_z$  除了取 0 还可以取  $2k_F$ 。这里  $q_z$  代表着散射初态和末态之间动量  $k_z$  的差值，即  $q_z$  为 0 和  $2k_F$  分别对应着  $k_z = k_F$

处的态散射到  $k_z = k_F$  和  $k_z = -k_F$  的态上。两种散射对应的权重因子分别为 0 和 2。经顶点修正后, (3-53) 式中分母  $(1 + e^{-4k_F^2 d^2})$  将变为  $2e^{-4k_F^2 d^2}$ , 而 (3-54) 式中分母  $\mathcal{F}_1[l_B^2(4k_F^2 + \kappa^2)/2] + \mathcal{F}_1[l_B^2\kappa^2/2]$  将变为  $2\mathcal{F}_1[l_B^2(4k_F^2 + \kappa^2)/2]$ 。因此, 顶点修正不会对高斯势能型杂质主导的磁电导对磁场强度的依赖造成影响。但是顶点修正将使屏蔽库伦势能型杂质主导的磁电导在  $4l_B^2 k_F^2 \gg l_B^2 \kappa^2$  时反比于  $\mathcal{F}_1[l_B^2(4k_F^2 + \kappa^2)/2]$ , 即正比于  $B^{-3}$  或  $B^{-6}$ 。

### 3.5.2 横向磁电导和霍尔电导

对于量子极限下的横向磁电导, 从 (2-45) 式以及 (2-61) 式可得到单节点模型和两节点模型均有

$$\sigma_{xx} \approx \sigma_{xx,1+} + \sigma_{xx,1-} \quad (3-59)$$

其中

$$\sigma_{xx,1\pm} = \hbar e^2 N_L \int_{-\infty}^{\infty} A_{k_z,0}(E_F) A_{k_z,1\pm}(E_F) |\langle k_x, k_z, 0 | v_x | k_x, k_z, 1 \pm \rangle|^2 dk_z \quad (3-60)$$

因为谱函数中洛伦兹分布宽度较小时其可以近似为  $\delta$  函数, 而在量子极限下费米能量并不会直接切过  $E_{k_z,1\pm}$  能带, 因此, 和  $A_{k_z,0}(E_F)$  相比, 上式中  $A_{k_z,1\pm}(E_F)$  会大幅减小横向磁电导率。在这种情况下, 可以做如下近似

$$\begin{aligned} A_{k_z,0}(E_F) &\approx \delta(E_F - E_{k_z,0}) \\ A_{k_z,1\pm}(E_F) &\approx \frac{1}{\pi} \frac{1}{(E_F - E_{k_z,1\pm})^2} \frac{\hbar}{2\tau_{k_F,1+}} \end{aligned} \quad (3-61)$$

杂质对  $\sigma_{xx}$  的影响将完全包含在  $\tau_{k_F,1+}$  中。

对于单节点模型, 有

$$|\langle k_x, k_z, 0 | v_x | k_x, k_z, 1 \pm \rangle|^2 = v_F^2 \left( \cos \frac{\theta_{k_z,1}}{2} \right)^2 \quad (3-62)$$

将其代入到 (3-60) 式后, 可以得到

$$\begin{aligned} \sigma_{xx,1+}^L &= \frac{\hbar e^2 v_F^2}{\pi} N_L \int_{-\infty}^{\infty} \delta(E_F - E_{k_z,0}) \left[ \left( \frac{\cos(\theta_{k_z,1}/2)}{E_F - E_{k_z,1+}} \right)^2 \frac{\hbar}{2\tau_{k_z,1+}} \right] dk_z \\ &= \frac{e^2}{\pi} N_L v_F \left[ \frac{\cos(\theta_{k_F,1}/2)}{E_F - E_{k_F,1+}} \right]^2 \frac{\hbar}{2\tau_{k_F,1+}} \end{aligned} \quad (3-63)$$

结合 (3-47) 式, 可以得到高斯势能型杂质主导时, 对于单节点模型有

$$\sigma_{xx,1+}^{L,Q} = \frac{e^2}{h} \frac{n_i u_0^2}{(2\pi l_B^2)^2} \frac{1}{(1 + 2d^2/l_B^2)^2} f_{1+}^L \quad (3-64)$$

$$f_{1+}^L = \left[ \frac{\cos(\theta_{k_F,1}/2) \sin(\theta_{k_F,1}/2)}{E_F - E_{k_F,1+}} \right]^2 \quad (3-65)$$

$\sigma_{xx,1-}^{L,Q}$  的推导与上述过程类似，其最终表达式与  $\sigma_{xx,1+}^{L,Q}$  的差别仅在  $f_{1+}^L$ 。将  $f_{1+}^L$  中的  $E_{k_F,1+}$  替换为  $E_{k_F,1-}$  即可得到  $\sigma_{xx,1-}^{L,Q}$  中的  $f_{1-}^L$ 。当载流子浓度比较低而磁场强度较大时，有  $2/l_B \gg k_F$ ，可以得到  $f_{1\pm}^L \approx l_B^2/[8(\hbar v_F)^2]$ 。因此

$$\sigma_{xx}^{L,G} \approx \frac{e^2}{h} \frac{n_i u_0^2}{(4\pi\hbar v_F)^2 l_B^2} \frac{1}{(1 + 2d^2/l_B^2)^2} \quad (3-66)$$

从上式可以看出，与纵向磁电导不同的是横向磁电导的大小是正比于杂质浓度和强度的。当高斯势能衰减长度为零时（即  $\delta$  势能型杂质）， $\sigma_{xx}^{L,G}$  正比于  $B$ 。当  $2d^2 \gg l_B^2$  时， $\sigma_{xx}^{L,G}$  变为反比于  $B$ 。对于系统内屏蔽库伦势能型杂质主导的情况，由类似的推导过程可以得到

$$\sigma_{xx}^{L,C} \approx \frac{e^2}{h} \frac{n_i e^4 l_B^2}{(8\pi\hbar v_F)^2 \varepsilon^2} \mathcal{F}_2 \left[ \frac{l_B^2}{2} \kappa^2 \right] \quad (3-67)$$

其中函数  $\mathcal{F}_2[x]$  的性质见图 3-2 的幂函数拟合。而对于单节点模型，经(3-55)式计算可得倒德拜屏蔽半径  $\kappa \propto \sqrt{B}$ ，因此有  $\sigma_{xx}^{L,C} \propto B^{-1}$ 。

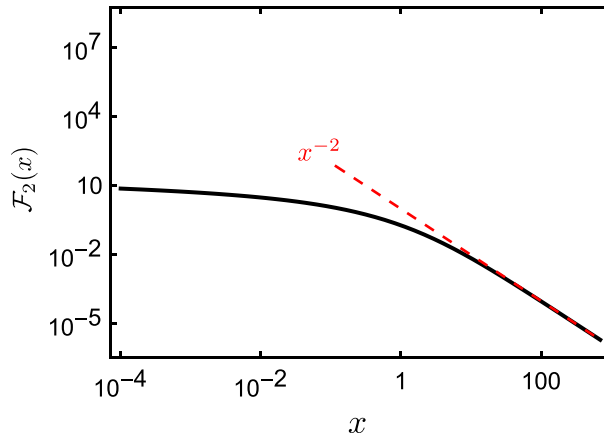


图 3-2 函数  $\mathcal{F}_2[x]$  的幂函数拟合。

Fig. 3-2 Power function fitting of  $\mathcal{F}_2[x]$ .

对于两节点模型，相应的纵向速度算符为

$$v_x = \frac{A}{\hbar} \sigma_x - \frac{2M}{\hbar} \left[ \frac{1}{\sqrt{2}l_B} (a + a^\dagger) \right] \sigma_z \quad (3-68)$$

因此有

$$|\langle k_x, k_z, 0 | v_x | k_x, k_z, 1 \pm \rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left( A \cos \frac{\theta_{k_z,1}}{2} + \frac{\sqrt{2}M}{l_B} \sin \frac{\theta_{k_z,1}}{2} \right)^2 \quad (3-69)$$

将上式代入到(3-60)式并做积分后可以得到

$$\sigma_{xx,1+}^Q = \frac{e^2}{\pi} \frac{2N_L}{|v_{k_F,0}|} \left[ \frac{A \cos(\theta_{k_z,1}/2) + \sqrt{2}M \sin(\theta_{k_z,1}/2)/l_B}{\hbar(E_F - E_{k_F,1+})} \right]^2 \frac{\hbar}{2\tau_{k_z,1+}} \quad (3-70)$$

结合高斯势能型杂质带来的散射时间，上式可化为

$$\sigma_{xx,1+}^{Q,G} = \frac{e^2}{h} \frac{2n_i u_0^2}{(2\pi l_B^2 v_{k_F,0})^2} \frac{(1 + e^{-4k_F^2 d^2})}{(1 + 2d^2/l_B^2)^2} f_{1+}^Q \quad (3-71)$$

其中

$$f_{1+}^Q = \left\{ \frac{A \cos(\theta_{k_z,1}/2) \sin(\theta_{k_z,1}/2) + \sqrt{2}M [\sin(\theta_{k_z,1}/2)]^2 / l_B}{\hbar(E_F - E_{k_F,1+})} \right\}^2 \quad (3-72)$$

和之前单节点模型中的情况相同，这里 $\sigma_{xx,1-}^{Q,G}$ 中的 $f_{1-}^Q$ 仅需将上式的 $E_{k_F,1+}$ 替换为 $E_{k_F,1-}$ 。可以看到两节点模型中的横向磁电导率对模型参数是比较依赖的。这个模型的参数依赖特性在 SdH 振荡的研究中也被报道过<sup>[144]</sup>。在这里，横向磁电导对磁场强度的依赖不会因不同的参数选择而改变。当 $2M^2 \gg A^2 l_B^2$ 时，可以得到 $f_{1+}^Q \approx 0$ 而 $f_{1-}^Q \approx l_B^2/(2\hbar^2)$ 。当 $2M^2 \ll A^2 l_B^2$ 时，有 $f_{1\pm}^Q \approx l_B^2/(8\hbar^2)$ 。同时数值结果也能得出 $f_{1\pm}^Q$ 中的主导项总是反比于磁场强度 $B$ 。因此，当 $\delta$ 势能型杂质占主导地位时（即取高斯型衰减长度 $d = 0$ 时），可以得到两节点模型量子极限下的横向磁电导正比于 $B^3$ 。当衰减长度较长的高斯势能型杂质占主导地位时， $\sigma_{xx}^{Q,G} \propto B$ 。但在载流子全部集中在能带底端的情况下，和纵向磁电导的情况不同，谱函数的近似和自能虚部计算中的近似是相乘关系，它们的修正因子会相互相乘。因此，在带底时以上给出的横向磁电导与磁场强度的依赖关系需要除去 $B^2$ 。对于屏蔽库伦势能型杂质，可以由类似的推导得到

$$\sigma_{xx,1+}^{Q,C} = \frac{e^2}{h} \frac{n_i e^4}{2\varepsilon^2 (2\pi v_{k_F,0})^2} \left\{ \mathcal{F}_2 \left[ \frac{l_B^2}{2} (4k_F^2 + \kappa^2) \right] + \mathcal{F}_2 \left[ \frac{l_B^2}{2} \kappa^2 \right] \right\} f_{1+}^Q \quad (3-73)$$

可以看到 $\sigma_{xx}^{Q,C}$ 对磁场强度的依赖也是非单调的。结合以上对函数 $\mathcal{F}_2[x]$ 以及 $f_{1+}^Q$ 和 $f_{1-}^Q$ 的分析可得：当 $4l_B^2 k_F^2 \ll l_B^2 \kappa^2$ ，横向磁电导正比于 $l_B^2 \mathcal{F}_2[l_B^2 \kappa^2/2]/v_{k_F,0}^2$ ，如果 $l_B^2 \kappa^2/2 \ll 1$ ，即有 $\sigma_{xx}^{Q,C}$ 正比于 $B$ ，如果 $l_B^2 \kappa^2/2 \gg 1$ ，即有 $\sigma_{xx}^{Q,C}$ 反比于 $B$ ；当 $4l_B^2 k_F^2 \gg l_B^2 \kappa^2$ 时，上述结果仍然成立；当载流子全部集中在能带底端时， $\mathcal{F}_2[l_B^2 \kappa^2/2]$ 将不再有磁场依赖关系，此时 $\sigma_{xx}^{Q,C}$ 反比于 $B$ 。

对于三维电子气，在以上推导中需要做如下替换

$$\begin{pmatrix} 0 \\ |0\rangle \end{pmatrix} \rightarrow |0\rangle$$

$$\begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_{k_z, n}}{2} |0\rangle \\ \sin \frac{\theta_{k_z, n}}{2} |1\rangle \end{pmatrix} \rightarrow |1\rangle \quad (3-74)$$

此外其  $v_x = \frac{\hbar}{m} \frac{1}{\sqrt{2}l_B} (a + a^\dagger)$ , 因此有

$$|\langle k_x, k_z, 0 | v_x | k_x, k_z, 1 \rangle|^2 = \frac{1}{2} \left( \frac{\hbar}{ml_B} \right)^2 \quad (3-75)$$

经过类似的推导过程, 能够发现将(3-71)式和(3-73)式中的  $f_{1+}^0$  替换为  $l_B^2/(2\hbar^2)$  即为三维电子气模型在量子极限下的横向磁电导率表达式。

这里并没有对横向磁电导进一步做顶点修正。这是因为: 与纵向磁电导不同, 横向磁电导中的杂质作用出现在  $\tau_{k_F, 1\pm}$  上。它是发生在 0 能带和  $1 \pm$  能带之间的散射, 因此, 即使是对单节点模型也不会出现像上一章 2.5 节中顶点修正对电导大幅修正的情况。此外横向磁电导的顶点修正和纵向的情况不同, 计算方法也不同。

虽然两节点模型的霍尔电导率计算比较复杂, 但计算方法和上一章 2.4.2 小节中的没有差异。结合前面的一些结果以及

$$v_y = \frac{A}{\hbar} \sigma_y - \frac{2M}{\hbar} \left[ -i \frac{1}{\sqrt{2}l_B} (a - a^\dagger) \right] \sigma_z \quad (3-76)$$

代入到(2-49)式整理可得, 当费米能量仅切过最低朗道能带时

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} = & \frac{e^2}{h} \frac{1}{\pi l_B^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \left\{ \left( A \cos \frac{\theta_{k_z, 1}}{2} + \frac{\sqrt{2}M}{l_B} \sin \frac{\theta_{k_z, 1}}{2} \right)^2 \frac{n_F(E_{k_z, 1+}) - n_F(E_{k_z, 0})}{(E_{k_z, 1+} - E_{k_z, 0})^2} \right. \\ & + \left( -A \sin \frac{\theta_{k_z, 1}}{2} + \frac{\sqrt{2}M}{l_B} \cos \frac{\theta_{k_z, 1}}{2} \right)^2 \frac{n_F(E_{k_z, 1-}) - n_F(E_{k_z, 0})}{(E_{k_z, 1-} - E_{k_z, 0})^2} \\ & + \sum_{n \geq 1} \left[ \left( A \cos \frac{\theta_{k_z, n+1}}{2} \cos \frac{\theta_{k_z, n}}{2} + \frac{\sqrt{2}nM}{l_B} \cos \frac{\theta_{k_z, n+1}}{2} \sin \frac{\theta_{k_z, n}}{2} \right. \right. \\ & + \left. \frac{\sqrt{2(n+1)M}}{l_B} \sin \frac{\theta_{k_z, n+1}}{2} \cos \frac{\theta_{k_z, n}}{2} \right)^2 \frac{n_F[E_{k_z, (n+1)+}] - n_F(E_{k_z, n-})}{[E_{k_z, (n+1)+} - E_{k_z, n-}]^2} \\ & + \left( -A \sin \frac{\theta_{k_z, n+1}}{2} \sin \frac{\theta_{k_z, n}}{2} + \frac{\sqrt{2}nM}{l_B} \sin \frac{\theta_{k_z, n+1}}{2} \cos \frac{\theta_{k_z, n}}{2} \right. \\ & + \left. \left. \frac{\sqrt{2(n+1)M}}{l_B} \cos \frac{\theta_{k_z, n+1}}{2} \sin \frac{\theta_{k_z, n}}{2} \right)^2 \frac{n_F[E_{k_z, (n+1)-}] - n_F(E_{k_z, n+})}{[E_{k_z, (n+1)-} - E_{k_z, n+}]^2} \right] \end{aligned} \quad (3-77)$$

通过数值计算  $k_z$  积分可以发现上式中由  $1+$  和  $0$  能带参与的第一项为主导项, 即图 3-3 中的棕色虚线(剩余三项为红、黄、蓝三条虚线)。数值拟合可以发现  $\sigma_{xy} \propto B^{-1}$ 。

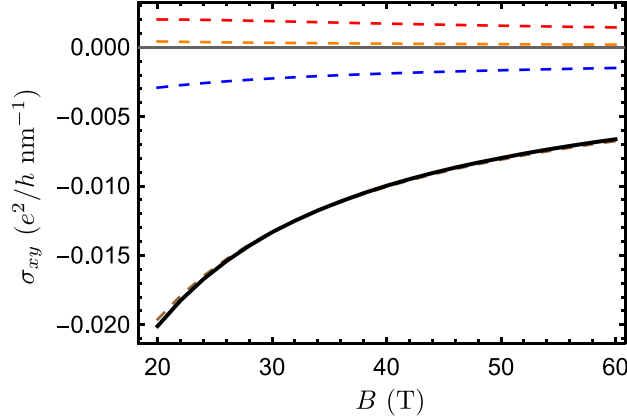


图 3-3 量子极限下两节点模型中的霍尔电导率。其中黑色实线为霍尔电导率的总值，虚线为(3-77)式中各项的贡献。计算中使用的模型参数为： $M = 5 \text{ eV (nm)}^2$ ， $A = 0.5 \text{ eV nm}$ ， $k_w = 0.1 \text{ nm}^{-1}$ 。载流子浓度 $n_0$ 取为  $10^{-4} \text{ nm}^{-3}$ 。

Fig. 3-3 Hall conductivity of the two-node model in the quantum limit. The black solid line denotes the total Hall conductivity, and the dashed lines represent the contributions from each term in Eq. (3-77). The model parameters used in the calculations are  $M = 5 \text{ eV (nm)}^2$ ,  $A = 0.5 \text{ eV nm}$ , and  $k_w = 0.1 \text{ nm}^{-1}$ . The carrier concentration  $n_0$  is taken as  $10^{-4} \text{ nm}^{-3}$ .

对于单节点模型的霍尔电导，可以将(3-77)式中 $A$ 和 $M$ 替换为 $\hbar v_F$ 和0并用其相应的能量本征值进行计算。由于其能量本征值表达式比较简单，因此可以解析地得到在载流子浓度较低时，量子极限下的霍尔电导率为 $-en_0/B$ 。

对于三维电子气的霍尔电导，其只有 $E_{k_z,0}$ 和 $E_{k_z,1}$ 会参与到计算，即

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} &= \frac{\hbar e^2}{V} \sum_{k_z, k_x} \frac{2[n_F(E_{k_z,1}) - n_F(E_{k_z,0})]}{(E_{k_z,1} - E_{k_z,0})^2} \left( \frac{\hbar}{\sqrt{2} m l_B} \right)^2 \\ &= \frac{e^2}{\hbar} l_B^2 \frac{1}{V} \sum_{k_z, k_x} -n_F(E_{k_z,0}) \\ &= -\frac{en_0}{B} \end{aligned} \quad (3-78)$$

### 3.5.3 磁电阻对磁场强度的依赖关系

综合以上对各方向磁电导率的推导和分析可以进一步得出各个系统中磁电阻对磁场强度的依赖关系。首先，上一章节已经给出了量子极限下单节点模型的纵向磁电阻总是反比于磁场强度的。单节点模型的横向以及霍尔磁电导率表达式比较简单，可以直接得出其横向磁电阻对磁场强度的依赖关系。而三维电子气和两节点模型的最低朗道能带均为动量的二次方型，其与两节点模型的磁电阻有相同的磁场强度依赖关系。图 3-4 给出了最具代表性的两节点模型磁电阻率结果。

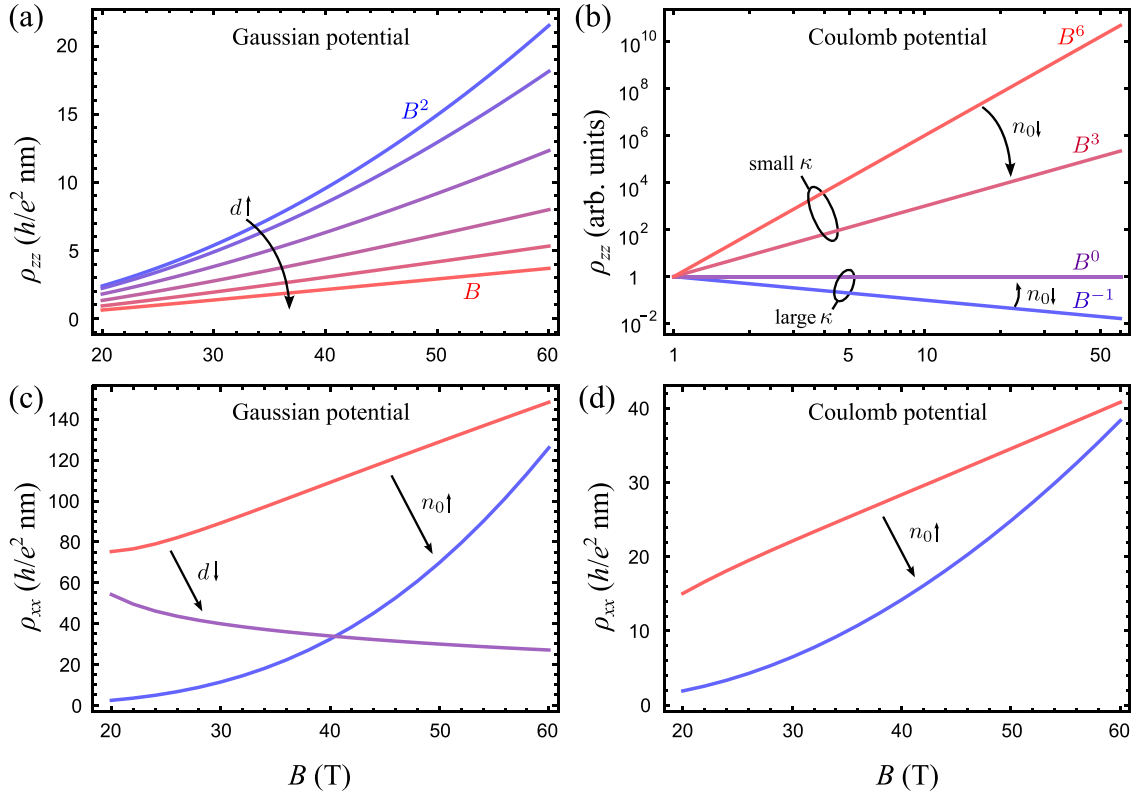


图 3-4 量子极限下两节点模型中磁电阻对磁场强度的依赖关系。(a)高斯势能型杂质主导时，两节点外尔/狄拉克半金属中的纵向磁电阻率随高斯势能衰减长度变化的情况。衰减长度 $d$ 的取值分别为 0、1、2、3、4、5 nm。载流子浓度 $n_0$ 取为  $10^{-4} \text{ nm}^{-3}$ 。(b)屏蔽库伦势能型杂质主导时，不同情况下纵向磁电阻率对磁场强度的依赖关系。(c)和(d)分别为高斯势能型杂质和屏蔽库伦势能型杂质主导时两节点外尔/狄拉克半金属中的横向磁电阻率。其中红线为载流子浓度 $n_0$ 取为  $10^{-5} \text{ nm}^{-3}$  时，蓝线为载流子浓度 $n_0$ 取为  $10^{-4} \text{ nm}^{-3}$  时。(c)图中高斯势能衰减长度 $d$ 的取值分别为 1 nm 和 5 nm。所有图中高斯势能型杂质模型参数 $n_i u_0^2$ 均取为  $1 \text{ eV}^2 \text{ nm}^3$ ，屏蔽库伦势能型杂质浓度 $n_i$ 取为  $0.1n_0$ 。其余模型参数与图 3-3 一致。

Fig. 3-4 Magnetic field dependence of the quantum-limit magnetoresistance. (a) Longitudinal magnetoresistivity of two-node Weyl/Dirac semimetals as functions of the decay length when the Gaussian-type impurities dominate. The decay length  $d$  is taken as 0, 1, 2, 3, 4, and 5 nm, respectively. The carrier concentration  $n_0$  is taken as  $10^{-4} \text{ nm}^{-3}$ . (b) Magnetic field dependence of the longitudinal magnetoresistivity when the screened-Coulomb-type impurities dominate. (c) and (d) are the transverse magnetoresistivity with Gaussian-type impurities dominance, and screened-Coulomb-type impurities dominance, respectively. The carrier concentrations are  $10^{-5}$  and  $10^{-4} \text{ nm}^{-3}$  for red and blue lines, respectively. The decay length in (c) is taken as 1 nm and 5 nm. Gaussian-type impurity parameter  $n_i u_0^2$  is taken as  $1 \text{ eV}^2 \text{ nm}^3$  for all, and concentration  $n_i$  of the screened-Coulomb-type impurities is taken as  $0.1n_0$ . Other parameters are the same as those in Fig. 3-3.

两节点模型的纵向磁电阻对磁场强度的依赖会随系统中杂质的类型变化而变化。如图 3-4(a)所示，当系统中  $\delta$  势能型杂质主导时 ( $d = 0$ )，纵向磁电阻率为磁场强度 $B$ 的二次方型。随着高斯势能衰减长度 $d$ 不断变大，磁电阻率将从 $B$ 的二次方

型变为 $B$ 的线性依赖。当屏蔽库伦势能型杂质占主导时，磁电阻是随磁场强度非单调变化的，但在一些情况下仍能得到简单的依赖关系，如图 3-4 (b)所示。在德拜屏蔽半径十分大时（即 $\kappa$ 十分小），纵向磁电阻将随磁场增强而变大。而在德拜屏蔽半径十分小时（即 $\kappa$ 十分大），纵向磁电阻将随磁场增强而减小。

另一方面，对于本章中所研究的三个系统，当载流子浓度较低时，屏蔽半径较大的库伦势能型杂质或衰减长度较大的高斯势能型杂质均能带来线性的横向磁电阻，如图 3-4 (c)和(d)所示。但是当载流子浓度变大时，两节点模型以及三维电子气中的磁电阻均偏离原本对磁场强度的线性依赖关系。

虽然以上计算和讨论是基于无时间反演对称性的哈密顿量(3-18)式和(3-19)式，但上述结论不仅适用于被这些模型描述的外尔半金属同样也适用于相应的狄拉克半金属。首先对于单节点模型，(3-18)式的时间反演对称部分的磁电阻与(3-18)式相同，因此上述结论同样成立。而对于两节点模型，在量子极限下(3-19)式的时间反演对称部分的最低朗道能带将会完全位于费米能量下方，即仅有(3-19)式的贡献，因此不会对以上结果造成影响。

最后，需要强调的是以上结果为杂质强度较弱的情况下得到的。研究表明强势能杂质能够在能带中引入共振态<sup>[189,190]</sup>，这些共振态会带来一些独特的光电导特征<sup>[191,192]</sup>。强磁场下杂质共振态对磁电阻的影响还有待于探索。

### 3.6 本章小结

本章重点研究了量子极限下外尔和狄拉克半金属中磁电阻对磁场强度的依赖关系。本章的磁电阻的计算完全从量子理论出发，因此能带结构和杂质势能对磁电阻的影响被自然的考虑在内。在以往的研究中，线性磁电阻一直被当作线性能谱的独有特征，通过本章的研究可以看到线性磁电阻同样可以出现在拥有二次方型色散的系统中。此外，通过本章的研究还可以发现：对于高斯势能型杂质主导的系统，横向和纵向磁电阻都可能线性正比于磁场强度，而对于屏蔽库伦势能型杂质主导的系统，只有横向磁电阻会与磁场强度呈线性关系。以上这些发现很好地解释了实验上观测到的一些现象，并给量子极限下的磁电阻带来了新的见解。



## 第 4 章 电荷密度波导致的三维量子霍尔效应

### 4.1 引言

作为凝聚态物理中最为重要的发现之一，量子霍尔效应通常只能出现在强磁场下的二维材料中。对于强磁场中的二维材料，当费米能量位于两个朗道能级之间时，材料内部的态是绝缘的，而边界态对运输的贡献会产生量子霍尔效应。但对于强磁场中的三维材料，费米能量总会切过一维的朗道能带，因此材料的内部为导电态，进而导致量子霍尔效应无法形成。自从量子霍尔效应发现以来，研究者一直在尝试实现三维材料中的量子化运输<sup>[193-196]</sup>。近年来，三维量子霍尔效应的研究取得了相当大的进展，其实现机制可以分为两种。

第一种为通过三维拓扑材料的棱边态来实现三维量子霍尔效应，其中最具有代表性的即为强磁场下外尔半金属中费米弧贡献的量子霍尔效应<sup>[197]</sup>。外尔半金属中一个表面上的费米弧因为其动量的限制条件因此无法在磁场中完成回旋运动（即无法形成朗道能级）。但两个表面上的费米弧可以共同支持一个完整的回旋运动从而产生量子霍尔效应。在实空间中，当施加垂直方向的磁场时，电子将在上表面进行半个回旋运动，之后隧穿到下表面继续完成整个回旋运动。这种费米弧支持的量子霍尔效应的特征为：两个拥有相反运输方向的棱边态会分别出现在两个相对的表面上，如图 4-1 (a)所示，其量子化的电阻和二维系统中量子霍尔效应的相同。这种三维量子霍尔效应可以在  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  材料中实现的。但是狄拉克半金属  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  的一个表面上拥有一对时间反演对称的费米弧的，因此在实验测量中需要使用契型样品<sup>[198]</sup>，即通过在不同位置测量的量子霍尔平台随测量位置厚度的偏移来确认量子霍尔效应来自上下表面费米弧的共同支持。

另一种实现三维量子霍尔效应的方法为：在沿磁场的方向引入周期性势能并在费米能量处打开能隙。和拓扑材料中棱边态实现的三维量子霍尔效应不同，周期性势能打开能隙而导致的三维量子霍尔效应拥有的量子化电阻率为

$$\rho_{xy} = \frac{h}{e^2} \lambda \quad (4-1)$$

其中 $\lambda$ 为磁场方向势能的周期。早在 1987 便已经有理论提出了这种三维量子霍尔效应的存在<sup>[194]</sup>，但直到 2019 年的实验中才在  $\text{ZrTe}_5$  材料中真正观测到这种新奇的物理现象<sup>[148]</sup>。周期性势能打开能隙引入的量子霍尔效应其物理图像类似于许多形成二维量子霍尔效应的二维电子气沿磁场方向的堆叠，如图 4-1 (b)所示，但其量子化的电阻值远远大于实验上通过堆叠二维电子气的方法实现的量子化电阻，在  $\text{ZrTe}_5$  的实验上中三维量子霍尔效应有上万条的量子化通道<sup>[148]</sup>。材料系统中打开费

米能量处能隙的周期性势能一般被认为是电荷密度波（charge density wave）或自旋密度波（spin density wave）引入的，其中 ZrTe<sub>5</sub> 的实验中密度波是在强磁场下出现的。

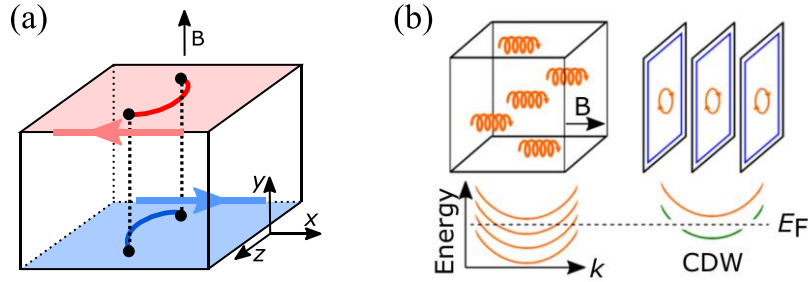


图 4-1 三维量子霍尔效应的两种机制。(a)外尔半金属中上下表面费米弧共同贡献的棱边态导致的三维量子霍尔效应。(b)左图为普通材料中费米能量总会切过朗道能带。右图为电荷密度波（CDW）产生能隙导致的三维量子霍尔效应。

Fig. 4-1 Two mechanisms of the three-dimensional quantum Hall effect. (a) Three-dimensional quantum Hall effect contributed by the hinge states from the Fermi arcs of the top and bottom surfaces of Weyl semimetal. (b) Left figure shows that the Fermi energy always crosses the Landau bands in the normal materials. Right figure shows the three-dimensional quantum Hall effect induced by the charge density wave (CDW) opened gap.

本章将给出由电荷密度波机制导致的三维量子霍尔效应的理论，并解释 ZrTe<sub>5</sub> 的三维量子霍尔效应实验中的一些关键问题。首先，4.2 节将解释为什么沿磁场方向的周期性势能和费米能量处的能隙能够带来三维量子霍尔效应。4.3 节将给出 ZrTe<sub>5</sub> 的低能有效模型以及其朗道能带。4.4 节将推导在量子极限下形成的电荷密度波，并分别讨论电子-声子相互作用和电子-电子相互作用在最低朗道能带引入能隙。4.5 节将结合 ZrTe<sub>5</sub> 中三维量子霍尔效应实验，研究其中电荷密度波的性质以及其导致的非欧姆电流-电压关系。最后 4.6 节将对本章的内容进行总结并讨论。

## 4.2 三维量子霍尔效应的机制

三维量子霍尔效应所必须的条件为沿磁场方向的周期性势能和费米能量处的能隙。这里以三维电子气为例来简单介绍三维霍尔效应的形成。从上一章 3.5.2 小节可知，在量子极限下三维电子气的霍尔电导率为

$$\begin{aligned}\sigma_{xy} &= -\frac{e^2}{\hbar} l_B^2 \frac{1}{V} \sum_{k_z, k_x} n_F(E_{k_z, 0}) \\ &= -\frac{e^2}{\hbar} \int_{-k_F}^{k_F} \frac{dk_z}{(2\pi)^2}\end{aligned}\quad (4-2)$$

可以看到以上结果正比于  $k_F$ ，而在量子极限下  $k_F = \pi n_0 / N_L$ ，即反比于磁场强度  $B$ 。

当引入周期性条件后，系统的能带会折叠到第一布里渊区，因此只需积分第一布里渊区中的 $k_z$ 即可。但是加入周期性条件并不会对霍尔电导造成变化。如果周期性势能同时在费米能量处打开了能隙，则只需将完全填充的能带中的态进行积分即可，此时有

$$\begin{aligned}\sigma_{xy} &= -\frac{e^2}{h} \int_{-\frac{\pi}{\lambda}}^{\frac{\pi}{\lambda}} \frac{dk_z}{(2\pi)^2} \\ &= -\frac{e^2}{h} \frac{1}{\lambda}\end{aligned}\quad (4-3)$$

其中 $\lambda$ 为沿磁场方向势能的周期。由于费米能量位于能隙之中，系统中横向以及纵向磁电导均为零，因此可以得到(4-1)式的量子电阻率。

### 4.3 ZrTe<sub>5</sub> 的低能有效模型

基于第一性原理计算和对称性分析<sup>[153,199,200]</sup>，可以得到 ZrTe<sub>5</sub> 的低能有效哈密顿量为

$$H(\mathbf{k}) = m(\mathbf{k})\tau_z \otimes \sigma_0 + \hbar v_x k_x \tau_x \otimes \sigma_z + \hbar v_y k_y \tau_y \otimes \sigma_0 + \hbar v_z k_z \tau_x \otimes \sigma_x \quad (4-4)$$

其中

$$m(\mathbf{k}) = M_0 + M_1(v_x k_x + v_y k_y) + M_z k_z^2 \quad (4-5)$$

这里的 $M_0$ 、 $M_1$ 、 $M_z$ 、 $v_x$ 、 $v_y$ 、 $v_z$ 均为模型参数。这个哈密顿量即为有质量的狄拉克粒子哈密顿量，质量项即为 $m(\mathbf{k})$ 。ZrTe<sub>5</sub>是一种位于相变点附近的材料，根据具体样品的差异，它在一些实验中被报道为拓扑绝缘体，而在另一些实验中被报道为狄拉克半金属。因此其能带结构十分适合用狄拉克粒子哈密顿量来描述。

使用第二章求解朗道能带的方法可以得到：当取磁场 $\mathbf{B}$ 的方向为 $\hat{z}$ 时，以上哈密顿量的最低朗道能带为

$$E_{k_z,0\pm} = \pm \sqrt{(\hbar v_z k_z)^2 + m_{k_z}^2} \quad (4-6)$$

其中

$$m_{k_z} = M_0 + M_1 v_x v_y / l_B^2 + M_z k_z^2 \quad (4-7)$$

在实验中使用的 ZrTe<sub>5</sub> 样品的费米能量为正，在量子极限下费米能量仅切过 $E_{k_z,0+}$ 能带。为了确定系统进入量子极限时磁场和载流子浓度的关系，能量高于 $E_{k_z,0+}$ 能带且距其最近的能带

$$E_{k_z,1+} \approx \sqrt{(M_0 + 3M_1 v_x v_y / l_B^2)^2 + 2v_x v_y \hbar^2 / l_B^2} \quad (4-8)$$

## 4.4 最低朗道能带的电荷密度波

在 ZrTe<sub>5</sub> 的三维量子霍尔效应实验中, 量子化的电阻平台仅出现在系统进入量子极限之后, 因此电荷密度波是在最低朗道能带形成的。本节将用平均场近似的方法研究位于最低朗道能带的态因电子-声子相互作用或电子-电子相互作用而产生的电荷密度波, 并给出相应能隙的计算方法以及电荷密度空间分布表达式的推导。

### 4.4.1 电子-声子相互作用

声子为晶格中原子震动的集体激发, 其哈密顿量可以写为

$$H_p = \sum_q \hbar\omega_q a_q^\dagger a_q \quad (4-9)$$

这里  $a_q^\dagger$  和  $a_q$  分别为能量为  $\hbar\omega_q$  的声子的产生算符和湮灭算符。系统中电子和声子之间的相互作用即为

$$H_{ep} = \sum_{k_x, k_z, q} A_q c_{k_x+q_x, k_z+q_z}^\dagger c_{k_x, k_z} (a_{-q}^\dagger + a_q) \quad (4-10)$$

其中  $c_{k_x, k_z}^\dagger$ 、 $c_{k_x, k_z}$  为最低朗道能带上指标为  $k_x, k_z$  的电子的产生、湮灭算符。上式中三个相乘的产生湮灭算符的含义为电子吸收或释放一个声子产生的动量变化。上式中<sup>[201]</sup>

$$A_q = -iqV_q \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_q}} \quad (4-11)$$

$M$  为离子的质量,  $V_q$  为电子和离子之间的势能, 其表达式为

$$V_q = -\frac{Ze^2}{\varepsilon(q^2 + \kappa^2)} \quad (4-12)$$

其中  $Ze$  为离子所带电荷量,  $q = \sqrt{q_x^2 + q_y^2 + q_z^2}$ 。因此系统电子部分的哈密顿量为

$$H = H_e + H_{ep} \quad (4-13)$$

其中无相互作用的电子哈密顿量  $H_e$  为

$$H_e = \sum_{k_x, k_z} E_{k_z, 0+} c_{k_x, k_z}^\dagger c_{k_x, k_z} \quad (4-14)$$

这里  $E_{k_z, 0+}$  为单电子能谱, 即最低朗道能带。在电子-声子相互作用哈密顿量  $H_{ep}$  中, 对于最低朗道能带, 费米能量上的态的  $k_z$  仅可取  $\pm k_F$  (为使公式表达清晰, 本章中所有  $k_F$  均表示正值), 因此(4-10)式中的  $q_z$  只能取  $\pm k_F$  的差值。但不同于传统的一维系统中的电荷密度波, 磁场中朗道能带为简并度为  $N_L$  的一维能带, 其中的态除了  $k_z$  指标外还额外拥有量子数  $k_x$ , 因此(4-10)式中的  $q_x$  的取值是不受限制的。这里取

$q_x$ 为零后做平均场近似有

$$H \approx \sum_{k_x, k_z} (E_{k_z, 0+} c_{k_x, k_z}^\dagger c_{k_x, k_z} + |\Delta| e^{i\phi} c_{k_x, k_z+2k_F}^\dagger c_{k_x, k_z} + |\Delta| e^{-i\phi} c_{k_x, k_z-2k_F}^\dagger c_{k_x, k_z}) \quad (4-15)$$

其中

$$|\Delta| e^{i\phi} = \sum_{q_y} A_{(0, q_y, 2k_F)} \left( \langle a_{(0, q_y, -2k_F)}^\dagger \rangle + \langle a_{(0, q_y, 2k_F)} \rangle \right) \quad (4-16)$$

相比一维系统中的电荷密度波，在这里的推导中需要处理额外的量子数 $k_x$ ，但取 $q_x$ 为零后，仍可参照一维系统中的一些处理方法<sup>[201]</sup>。由于费米能量处的态仅可取 $k_z = k_F$ 或 $-k_F$ ，当仅考虑费米能量附近的态时，以上哈密顿量可以写为

$$H = \sum_{k_x, \delta k_z} [E_{\delta k_z, +}^l c_{k_x, \delta k_z, +}^\dagger c_{k_x, \delta k_z, +} + E_{\delta k_z, -}^l c_{k_x, \delta k_z, -}^\dagger c_{k_x, \delta k_z, -} + |\Delta| e^{i\phi} c_{k_x, \delta k_z, +}^\dagger c_{k_x, \delta k_z, -} + |\Delta| e^{-i\phi} c_{k_x, \delta k_z, -}^\dagger c_{k_x, \delta k_z, +}] \quad (4-17)$$

这里产生湮灭算符 $c_{k_x, \delta k_z, \pm}^\dagger$ 、 $c_{k_x, \delta k_z, \pm}$ 中的+和-分别代表在 $k_z = k_F$ 和 $k_z = -k_F$ 附近态的产生和湮灭，而 $\delta k_z$ 为态偏离费米能量处的大小。此外， $E_{\delta k_z, \pm}^l$ 为将费米能量处定零点能量后线性化的能谱，即

$$E_{\delta k_z, \pm}^l = \pm \hbar v_{k_F} \delta k_z \quad (4-18)$$

其中速度 $v_{k_F}$ 为

$$\begin{aligned} v_{k_F} &= \frac{1}{\hbar} \frac{dE_{k_z, 0+}}{dk_z} \bigg|_{k_z=k_F} \\ &= \frac{\hbar v_z k_F + 2M_z k_F m_{k_F}}{\hbar \sqrt{(\hbar v_z k_F)^2 + m_{k_F}^2}} \end{aligned} \quad (4-19)$$

为了对角化(4-17)式，定义算符

$$\gamma_{k_x, \delta k_z, +} = U e^{-i\phi} c_{k_x, \delta k_z, +} - V e^{i\phi} c_{k_x, \delta k_z, -} \quad (4-20)$$

$$\gamma_{k_x, \delta k_z, -} = V e^{-i\phi} c_{k_x, \delta k_z, +} + U e^{i\phi} c_{k_x, \delta k_z, -} \quad (4-21)$$

由归一化条件可得：系数 $U$ 、 $V$ 的限制条件为 $U^2 + V^2 = 1$ 。将(4-17)式以 $\gamma_{k_x, \delta k_z, \pm}^\dagger$ 和 $\gamma_{k_x, \delta k_z, \pm}$ 表示后，取对角化条件即可得到系数

$$U^2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{E_{\delta k_z, +}^l}{\sqrt{(E_{\delta k_z, +}^l)^2 + |\Delta|^2}} \right) \quad (4-22)$$

$$V^2 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{E_{\delta k_z, +}^l}{\sqrt{(E_{\delta k_z, +}^l)^2 + |\Delta|^2}} \right) \quad (4-23)$$

此时，对角化的哈密顿量为

$$H = \sum_{k_x, \delta k_z} E_{\delta k_z} (\gamma_{k_x, \delta k_z, +}^\dagger \gamma_{k_x, \delta k_z, +} + \gamma_{k_x, \delta k_z, -}^\dagger \gamma_{k_x, \delta k_z, -}) \quad (4-24)$$

其中

$$E_{\delta k_z} = \text{sign}(\delta k_z) \sqrt{(\hbar v_{k_F} \delta k_z)^2 + |\Delta|^2} \quad (4-25)$$

因此费米能量附近的能谱为  $E_F + E_{\delta k_z}$ ，即费米能量处有了大小为  $2|\Delta|$  的能隙，如图 4-2 所示。

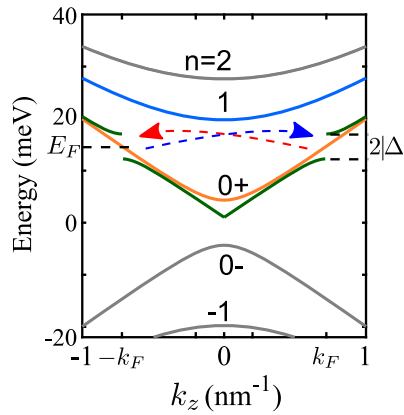


图 4-2 由电荷密度波在费米能量处打开的能隙。其中黄色实线为无相互作用的最低朗道能带，绿色实线为加入相互作用后打开能隙的最低朗道能带。

Fig. 4-2 Band gap in the Fermi energy induced by charge density wave. The yellow solid line indicates the lowest Landau band without interactions, and the green solid line is the gapped lowest Landau band when the interactions are considered.

在以上推导中， $|\Delta|$  为电荷密度波相变的序参量 (order parameter)，它可以通过自洽的数值计算求出。首先，平均场近似处理后系统的总能量为  $|\Delta|$  的函数。系统的基态能量即为通过 (4-24) 式将电子占据态的能量求和，再加上声子的能量 (即平均场近似处理后的 (4-9) 式)。因为在以上推导中对费米能量附近的能谱做了线性化处理，这里计算中仅考虑费米能量附近态的总能量即可 (远离费米能量的态与相变前无差异)。数值计算取基态能量最低时即可得到  $|\Delta|$ 。

基态波函数为

$$|\Psi_0\rangle = \left( \prod_{k_x, \delta k_z < 0} \gamma_{k_x, \delta k_z, +}^\dagger \gamma_{k_x, \delta k_z, -}^\dagger \right) |0\rangle \quad (4-26)$$

因此电子的密度为<sup>[201]</sup>

$$\rho(\mathbf{r}) = \langle \Psi_0 | \psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) | \Psi_0 \rangle \quad (4-27)$$

其中

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{k_x, \delta k_z} \frac{e^{ik_x x - \frac{1}{2}(\frac{y}{l_B} - k_x l_B)^2}}{\sqrt{l_B \sqrt{\pi}}} [e^{i(k_F + \delta k_z)z} c_{k_x, \delta k_z, +}^\dagger + e^{-i(k_F + \delta k_z)z} c_{k_x, \delta k_z, -}^\dagger] \quad (4-28)$$

结合以上三个式子以及之前推导得到的系数 $U$ 、 $V$ 的值，可以得到

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{k_x, \delta k_z} \frac{e^{-\left(\frac{y}{l_B} - k_x l_B\right)^2}}{\sqrt{l_B \sqrt{\pi}}} \left[ 1 + \frac{|\Delta|}{\sqrt{(\hbar v_{k_F} \delta k_z)^2 + |\Delta|^2}} \cos(2k_F z + \phi) \right] \quad (4-29)$$

虽然在以上计算中最低朗道能带的波函数与一维电子气的波函数差异很大，但从上式可以看出电子密度在空间的分布有电荷密度波的典型特征，即一部分电子在空间中均匀分布而另一部分沿 $z$ 方向周期性分布。

#### 4.4.2 电子-电子相互作用

除了电子和声子之间的相互作用可以导致电荷密度波外，电子和电子之间的相互作用也能导致电荷密度波的出现。电子-电子相互作用哈密顿量的一般形式为

$$H_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{k, l, m, n} \langle k | \langle l | \hat{U} | m \rangle | n \rangle c_k^\dagger c_l^\dagger c_n c_m \quad (4-30)$$

其中 $k$ 、 $l$ 、 $m$ 、 $n$ 均为态的指标。 $c_m^\dagger$ 和 $c_m$ 分别为电子的产生和湮灭算符，上式中的 $c_k^\dagger c_l^\dagger c_n c_m$ 即表示 $m$ 和 $n$ 两个态湮灭后产生 $l$ 和 $k$ 两个态。 $\hat{U}$ 为库伦相互作用的算符形式。这里的 $\hat{U}$ 和上一章中的库伦势能不同，之前的库伦势能为一个电子感受到的势能，而这里的库伦相互作用为两个电子之间的势能。因此 $\hat{U}$ 为一个两体算符， $\langle l | \hat{U} | m \rangle$ 为一个单体算符，只有 $\langle k | \langle l | \hat{U} | m \rangle | n \rangle$ 才不再是算符。上式中出现的 $1/2$ 是因为求和包含了全部的态，而全部的相互作用数目为态数目的一半，因此需要乘上因子 $1/2$ 。在空间坐标表象下有

$$\langle k | \langle l | \hat{U} | m \rangle | n \rangle = \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \langle k | \mathbf{r}_1 \rangle \langle l | \mathbf{r}_2 \rangle U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \langle \mathbf{r}_1 | n \rangle \langle \mathbf{r}_2 | m \rangle \quad (4-31)$$

上式中屏蔽库伦势能为

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} e^{-\kappa |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \\ &= \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} u(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \end{aligned} \quad (4-32)$$

其中

$$u(\mathbf{q}) = \frac{e^2}{\epsilon(q^2 + \kappa^2)} \quad (4-33)$$

屏蔽库伦势能的表达式和第三章中出现的并无区别，倒德拜屏蔽半径 $\kappa$ 同样可以通过(3-55)式计算得到。取 $k$ 、 $l$ 、 $m$ 、 $n$ 均为最低朗道能带的量子数时（相应的波函数

即与 3.4 节计算中用到的相同) 可以得到

$$H_{ee} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}_\perp, \mathbf{k}'_\perp, \mathbf{q}} u(\mathbf{q}) e^{-\frac{1}{2}l_B^2[q_x^2+q_y^2-2iq_xq_y+2iq_y(k'_x-k_x)]} c_{\mathbf{k}_\perp+\mathbf{q}_\perp}^\dagger c_{\mathbf{k}'_\perp-\mathbf{q}_\perp}^\dagger c_{\mathbf{k}'_\perp} c_{\mathbf{k}_\perp} \quad (4-34)$$

上式中  $\mathbf{k}_\perp = (k_x, k_z)$ 。和之前的处理一样, 这里同样假设  $q_z = \pm 2k_F$  且  $q_x = 0$  的项最重要, 由平均场近似可以给出

$$H_{ee} \approx \sum_{k_x, k_z} (|\Delta| e^{i\phi} c_{k_x, k_z+2k_F}^\dagger c_{k_x, k_z} + |\Delta| e^{-i\phi} c_{k_x, k_z-2k_F}^\dagger c_{k_x, k_z}) \quad (4-35)$$

其中

$$|\Delta| e^{i\phi} = \sum_{k'_x, k'_z, q_y} \frac{u(0, q_y, -2k_F)}{2V} e^{-\frac{1}{2}l_B^2[q_y^2+2iq_y(k'_x-k_x)]} \left\langle c_{k'_z-2k_F, k'_x}^\dagger c_{k'_z, k'_x} \right\rangle \quad (4-36)$$

与前面电子-声子相互作用导致的电荷密度波相比, 经平均场近似后两者拥有同样形式的相互作用哈密顿量, 但  $|\Delta|$  的产生机制和计算方法不同。因此电子-电子相互作用导致的电荷密度波和电子-声子相互作用导致的电荷密度波形式相同, 即(4-24)式哈密顿量所描述情况。但对于电子-电子相互作用的情况, 计算最低基态能量求  $|\Delta|$  时, 基态能量的表达式无需再考虑声子的部分, 其直接根据(4-24)式的能谱求和所有电子占据态的能量即可。

## 4.5 ZrTe<sub>5</sub> 中的电荷密度波和三维量子霍尔效应

选取合适的模型参数为理论计算解释实验的重要的一步。在实验中使用的 ZrTe<sub>5</sub> 样品的载流子浓度  $n_0$  位于  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  到  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  之间<sup>[148]</sup>。在理论计算中, 取  $n_0$  为  $8.87 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ , 取哈密顿量(4-4)式中的模型参数参数为:  $v_x = 9 \times 10^5 \text{ m/s}$ 、 $v_y = 1.9 \times 10^5 \text{ m/s}$ 、 $v_z = 0.3 \times 10^5 \text{ m/s}$ 、 $M_0 = -4.7 \text{ meV}$ 、 $M_1 v_x v_y = 150 \text{ meV nm}^2$ 、 $M_z = 1.5 \text{ meV nm}^2$ 。通过第二章 2.2 节给出的方法, 由  $\min(E_{k_z, 1+}) = E_{k_F, 0+}$  可以得到系统进入量子极限时的临界磁场强度为 1.3 T, 这与实验中的数据十分接近<sup>[148]</sup>, 因此上述模型参数能够很好地描述实验中使用的 ZrTe<sub>5</sub> 样品。

通过之前两章的研究可知: 在量子极限下, 一般载流子浓度是固定的而费米波矢  $k_F$  的大小是随磁场强度变化的。随磁场变化的费米波矢无法提供不随磁场变化的量子化电阻, 实验中观测到的量子化霍尔平台需要用  $k_F$  固定的公度电荷密度波 (commensurate charge density wave) 来解释。由(4-29)式可知, 电荷密度沿磁场方向的周期为

$$\lambda = \frac{2\pi}{2k_F} = \frac{\pi}{k_F} \quad (4-37)$$

而量子化的磁电阻(4-1)式正比于  $\lambda$ 。在量子极限下,  $k_F$  反比于磁场强度  $B$ , 因此得



到的量子化霍尔电阻将正比于磁场强度 $B$ 。实验中观测到的量子霍尔电阻率和横向磁电阻率如图 4-3 (a)所示<sup>[148]</sup>，图中的霍尔平台意味着 $\lambda$ 并没有随磁场强度发生变化。因此，在电荷密度波存在的磁场强度范围内， $\text{ZrTe}_5$ 样品的费米波矢为固定的而其载流子浓度发生了变化。实验中得到的 $\lambda$ 大约为  $\text{ZrTe}_5$  沿磁场方向晶体层间距离的 8 倍<sup>[148]</sup>，因此电荷密度波为公度的，即其长度周期为系统原本晶体周期的整数倍。图 4-3 (b)为公度电荷密度波在动量空间的周期 $2\pi/\lambda$ 与原周期 $2\pi/a$ 的关系示意图，其实空间的周期如图 4-3 (c)所示。非公度电荷密度波的长度周期为系统原本晶体周期的非整数倍。结合 4.4 节给出的公式数值计算可得由电子-电子相互作用引入的 $|\Delta|$ 远小于电子-声子相互作用引入的 $|\Delta|$ ，如图 4-3 (d)和(e)所示。因此  $\text{ZrTe}_5$  中的电荷密度波很可能是由电子-声子相互作用引入的。图 4-3 (e)和(f)分别为系统的基态能量以及 $|\Delta|$ 随磁场强度的变化，其中紫红色和绿色线段分别为由公度和非公度电荷密度波计算得到的结果（其中实线为系统中可能发生的情况）。可见，在量子霍尔效应发生的磁场强度区间，形成公度电荷密度波时系统拥有更低的基态能量和更大的能隙。

在  $\text{ZrTe}_5$  的实验中并未观测到由非公度电荷密度波支持的三维量子霍尔效应。这里的非公度电荷密度波中是指其 $\lambda$ 正比于磁场强度 $B$ 。当 $\lambda \propto B$ 时，霍尔电阻虽然正比于 $B$ 但它是“量子化”的。这是因为系统的费米能量位于能隙之中，霍尔电阻率由(4-1)式所描述而横向磁电阻为零。这种伴随着零横向磁电阻且正比于 $B$ 的霍尔电阻尚未被实验观测到。

电荷密度波在  $\text{ZrTe}_5$  中存在的另一个证据为非欧姆的电流-电压关系（non-Ohmic current-voltage relation）。对于形成电荷密度波的系统，沿电荷密度波形成方向的电流分为两部分，即

$$I = I_N + I_{CDW} \quad (4-38)$$

其中 $I_N$ 为符合欧姆定律的普通电流，它由没有形成集体激发的电子贡献，如(4-29)式中的第一项以及能带展宽部分的电子。 $I_{CDW}$ 为电子集体激发的贡献，它是非欧姆的。对于集体激发贡献的 $I_{CDW}$ ，只有在沿电荷密度波的方向上施加的电压达到一定强度时才会出现。此外，温度升高将会降低触发有限大小 $I_{CDW}$ 的临界电压的大小。因此在实验中施加激发电流较小且温度较低时， $I_{CDW} = 0$ ，有此时有符合欧姆定律的电流和电压关系，而不断增大激发电流或升高温度时会出现由 $I_{CDW}$ 导致的非欧姆电流-电压关系。

目前实验上仅在  $\text{ZrTe}_5$  中观测到了三维量子霍尔效应，且是在系统位于量子极限下的情况下。在以上理论研究的基础上，这里将进一步探讨尚未在实验中观测到的其他新奇现象。

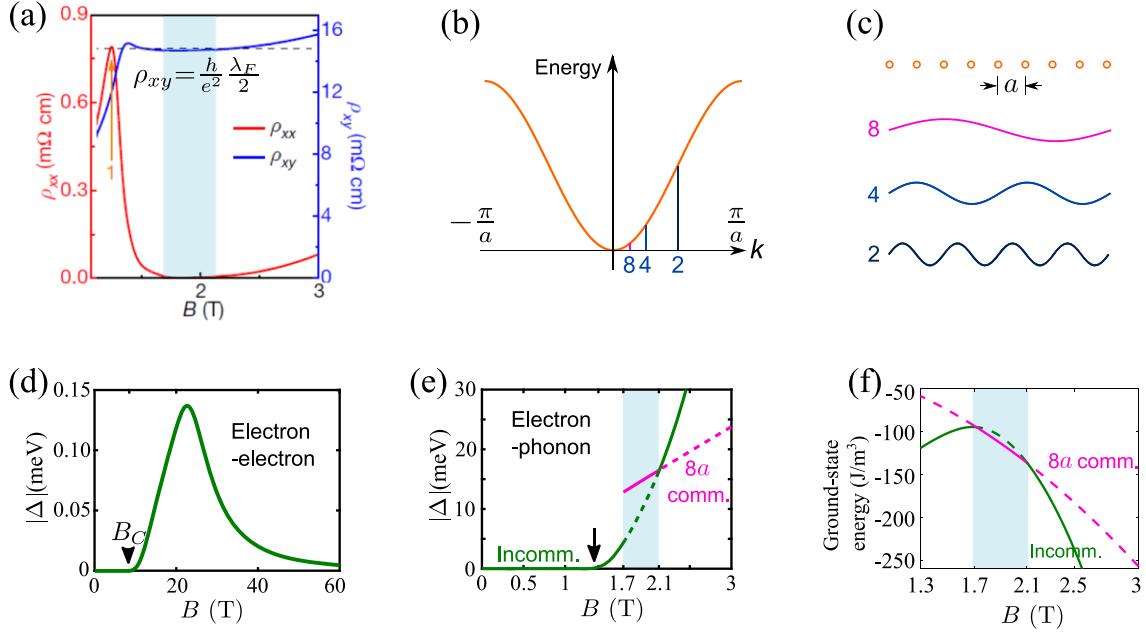


图 4-3 ZrTe<sub>5</sub> 中的三维量子霍尔效应和电荷密度波。(a)实验中测量到的霍尔电阻率和横向磁电阻率<sup>[148]</sup>。(b)公度电荷密度波在动量空间的周期示意图。(c)公度电荷密度波在实空间的周期示意图。(d)系统中电子-电子相互作用导致的序参量大小。(e)电子-声子相互作用导致的公度(comm.)和非公度(incomm.)电荷密度波的序参量随磁场强度的变化。(f)系统中形成公度和非公度电荷密度波时的基态能量随磁场强度的变化。

Fig. 4-3 Three-dimensional quantum Hall effect and charge density wave in ZrTe<sub>5</sub>. (a) Hall resistivity and transverse magnetoresistivity measured in the experiment<sup>[148]</sup>. (b) Schematic diagram of the periodic length of the commensurate charge density wave. in the momentum space. (c) Schematic diagram of the periodic length of the commensurate charge density wave in real space. (d) Magnetic field strength dependent order parameter of charge density wave induced by electron-electron interaction. (e) Magnetic field strength dependent order parameter of the system with commensurate and incommensurate charge density wave induced by electron-phonon interaction. (f) Magnetic field strength dependent ground state energy of the system with commensurate and incommensurate charge density wave.

电荷密度波是系统内部电子自发形成，它与外界引入的周期性势能不完全相同。在系统未进入量子极限的磁场强度范围内，周期性势能无法支持三维量子霍尔效应<sup>[202]</sup>。虽然周期性势能在最低朗道能带的不同能量处都打开了能隙，但高能量处的能隙中存在朗道指标  $n$  大于或等于 1 的能带。同样，周期性势能在  $n$  大于或等于 1 的能带中打开的能隙中也存在  $n$  比较小的能带。因此，系统中只有位于能量最低处的能隙可能存在，即只有在量子极限下可能出现三维量子霍尔效应。而电荷密度波本质上是由相互作用产生的，在未进入量子极限的磁场强度范围内，费米能量处多条能带同时打开能隙也是可能的，即费米能量处每条能带的态都各自形成了电

荷密度波。对于这种情况下对应的量子霍尔现象仍有待探索。

在量子极限下，由电荷密度波支持的三维量子霍尔效应可能会因为不同的机制而出现大小不同的霍尔平台。如果系统在电荷密度波的 $\lambda$ 为晶格周期的整数倍时更趋向于维持固定的费米波矢（即拥有霍尔平台）而 $\lambda$ 为晶格周期的非整数倍时更趋向于维持固定的载流子浓度（即霍尔平台不存在），当 $\lambda$ 从晶格周期的某个整数倍变化到另一个整数倍时不同大小的霍尔平台将会出现。在上述的不同大小霍尔平台之间的过渡磁场强度中即可能存在之前描述的非公度电荷密度波支持的三维量子霍尔效应。另一方面，当分数量子霍尔效应出现时，在量子极限下将会出现不同大小的霍尔平台。不同平台的霍尔电阻率即正比于相应分数与 $\lambda$ 的乘积，而位于不同平台之间的磁场强度范围内，系统的横向磁电阻率不为零。

## 4.6 本章小结

本章研究了出现在量子极限下的电荷密度波，解释了  $\text{ZrTe}_5$  中由电荷密度波导致的三维量子霍尔效应。对于强磁场中的三维材料，能够在费米能量处打开能隙的周期性势能是形成三维量子霍尔效应的关键，而电荷密度波恰巧具备此特征。最低朗道能带虽然仅有一个维度上的色散，但和一维系统不同，它有 $N_L$ 的简并度且波函数是三维的。从本章的推导中可知：在最低朗道能带上可以形成沿磁场方向的电荷密度波。本章的数值计算表明强磁场下  $\text{ZrTe}_5$  中的电荷密度波来源于电子和声子的相互作用，而量子化的霍尔平台由费米波矢固定的非公度电荷密度波支持。本章给出的电荷密度波机制的三维量子霍尔效应理论有一个罕见且重要的特征，即系统在一个方向上的序参量和垂直于此方向的平面上的陈数同时由磁场强度调节。

## 第 5 章 反铁磁拓扑绝缘体 $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ 的输运特性

### 5.1 引言

轴子是在高能物理中提出的一种基础粒子<sup>[203]</sup>，而轴子绝缘体则是其在凝聚态物理中的类比实现。轴子绝缘体由于其独特的拓扑磁电效应（topological magnetoelectric effect）和棱边态而备受关注<sup>[150,204,205]</sup>。和三维拓扑绝缘体的体态类似，轴子绝缘体的体态也是拓扑非平庸的，但它的各个表面态都是有能隙的。单看轴子绝缘体的一个表面，其拥有半整数的霍尔电导。而轴子绝缘体上下表面的棱边态输运方向是相反的，即分别支持 $e^2/(2h)$ 和 $-e^2/(2h)$ 的霍尔电导。因此上下表面贡献的总的霍尔电阻为零。由于普通绝缘体在零磁场下霍尔电阻也为零，所以从实验测量中区分出普通绝缘体和轴子绝缘体是有一定难度的。

$\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  是实验上首次实现的本征反铁磁拓扑绝缘体<sup>[72,73]</sup>，第一性原理计算预言偶数层  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  薄层可能是轴子绝缘体<sup>[68,70,71]</sup>。 $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  有着层状的晶体结构，其中每一层由 Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te 顺序的七个原子层组成，一般将其称作七重层（详见本章中的模型构造部分）。 $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  中的磁性来源于 Mn 原子的贡献<sup>[74,206]</sup>，每一个七重层均拥有垂直于层面方向的磁性。沿垂直层面的方向，七重层通过范德瓦尔斯力结合堆叠形成  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  晶体，且相邻的两个七重层的磁性方向相反。当其所处环境温度低于尼尔温度（Néel temperature）时， $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  的反铁磁结构会使其上下表面均打开能隙，而侧表面态仍为无能隙。当  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  被制成薄层时，量子限制（quantum confinement）作用会使其侧表面打开能隙，因此在  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  薄层中仅存在无能隙的棱边态。表面上棱边态的输运方向取决于表面磁性的方向。对于奇数层  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ ，其上下表面磁性方向相同，因此上下表面的棱边态共同贡献了整数的霍尔电导。而对于偶数层  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ ，其上下表面磁性方向相反，即上下表面的棱边态共同贡献的霍尔电导为零。

本章将使用非局域化测量的方法区分轴子绝缘体和普通绝缘体，并计算  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  中独特的输运特性。5.2 节将首先构造  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  的理论模型并研究其表面态的能谱特征，然后给出在多端口器件中电阻的计算方法。5.3 节将计算六端口器件的轴子绝缘体上表面和下表面的理论电阻值。5.4 节将数值计算六端口  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  的非局域化电阻并将其与 5.3 节中得到的结果进行对比。此外 5.4 节还将进一步探究实验测量中费米能量、杂质以及测量电极厚度对非局域化电阻的影响。5.5 节将总结本章内容并进一步讨论了轴子绝缘体中的半整数电导。

## 5.2 模型和数值计算方法

在前面三个章节中使用的低能有效哈密顿量均为没有磁性的连续模型，但是像 1.3.3 小节中的(1-10)式一样，它们可以通过添加交换场作用项来描述铁磁结构的系统。然而反铁磁结构的系统是无法用连续模型描述的。本节将在 5.2.1 小节先给出铁磁结构  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  七重层的低能有效连续模型，之后在 5.2.2 小节推导出有限厚度的反铁磁结构  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  的格点模型并计算相应的表面能带结构。5.2.3 小节将给出本章中使用的多端口器件以及在此多端口器件中电阻的具体计算方法。

### 5.2.1 单个 $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ 七重层的哈密顿量

对于三维的拓扑绝缘体，其连续低能有效哈密顿量为

$$H(\mathbf{k}) = \epsilon_0(\mathbf{k})I_4 + \begin{pmatrix} M(\mathbf{k}) & v_z k_z & 0 & vk_- \\ v_z k_z & -M(\mathbf{k}) & vk_- & 0 \\ 0 & vk_+ & M(\mathbf{k}) & -v_z k_z \\ vk_+ & 0 & -v_z k_z & -M(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (5-1)$$

其中  $I_4$  为四维的单位矩阵， $k_{\pm} = k_z \pm ik_y$ 。上式中

$$\begin{aligned} \epsilon_0(\mathbf{k}) &= C_0 + C_1 k_z^2 + C_2 (k_x^2 + k_y^2) \\ M(\mathbf{k}) &= M_0 + M_1 k_z^2 + M_2 (k_x^2 + k_y^2) \end{aligned} \quad (5-2)$$

这里  $C_0$ 、 $C_1$ 、 $C_2$ 、 $M_0$ 、 $M_1$ 、 $M_2$ 、 $v$ 、 $v_z$  均为模型参数，其中参数  $C_0$ 、 $C_1$ 、 $C_2$  的作用为打破粒子空穴对称性， $M_0$ 、 $M_1$ 、 $M_2$  的值会影响能带的反转（即决定模型的拓扑性）， $v$  和  $v_z$  影响不同方向能谱的斜率。虽然这个模型能够很好地描述三维系统中的能带反转<sup>[33]</sup>，但其无法直观地标识  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  的反铁磁结构。为了描述  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  中铁磁的七重层，在哈密顿量  $H(\mathbf{k})$  的基础上添加磁性部分的哈密顿量  $H_{ex}$ ，即

$$H_{ex} = \begin{pmatrix} m & 0 & 0 & 0 \\ 0 & m & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -m & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -m \end{pmatrix} \quad (5-3)$$

其中  $m$  为磁性的强度。 $H(\mathbf{k}) + H_{ex}$  即为铁磁拓扑绝缘体模型。

为了便于将上述连续模型转换为紧束缚模型，可以将(5-1)式重写为

$$H(\mathbf{k}) = \epsilon_0(\mathbf{k})I_4 + vk_x \Gamma_1 + vk_y \Gamma_2 + v_z k_z \Gamma_3 + M(\mathbf{k})\Gamma_4 \quad (5-4)$$

其中  $\Gamma_1$ 、 $\Gamma_2$ 、 $\Gamma_3$ 、 $\Gamma_4$  分别为  $\sigma_x \otimes \sigma_x$ 、 $\sigma_y \otimes \sigma_x$ 、 $\sigma_z \otimes \sigma_x$ 、 $I_2 \otimes \sigma_z$ ，这里  $I_2$  为二维的单位矩阵。

### 5.2.2 反铁磁格点模型和 $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ 能带结构

$\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  的层状结构和磁性结构如图 5-1 (a)所示。为了得到有限厚度的反铁

磁结构  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  模型，需要将七重层的哈密顿先写为紧束缚模型的形式，之后将其转换为实空间的格点模型再添加反铁磁项。

在构造紧束缚模型之前，需要先确定实空间的格点结构。为了与  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  晶体对称性接近，这里在平面空间内选取六角型格子，如图 5-1 (b) 所示，而在垂直于平面的方向上格点一一对应。笛卡尔坐标系下，上述格点的基矢为

$$\begin{aligned} \mathbf{a} &= (a, 0, 0) \\ \mathbf{b} &= \left( \frac{1}{2}a, \frac{\sqrt{3}}{2}a, 0 \right) \\ \mathbf{c} &= (0, 0, c) \end{aligned} \quad (5-5)$$

其中  $a$  和  $c$  分别为平面内和垂直方向两个相邻格点之间的距离。

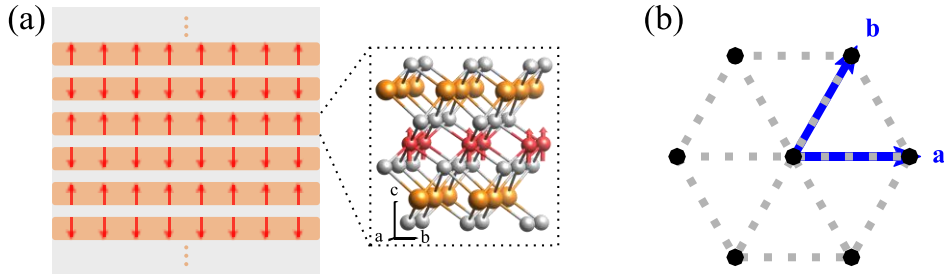


图 5-1  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  的结构和格点模型示意图。(a)  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  晶体的层状结构以及单个七重层示意图。红色箭头代表磁性的方向。红色、黄色、灰色小球分别代表 Mn、Bi、Te 原子。(b) 格点模型平面内部分的示意图。黑色圆点为平面内格点的位置，带箭头的蓝线为格点基矢  $\mathbf{a}$  和  $\mathbf{b}$ 。

Fig. 5-1 Schematic illustrations of the structure and lattice model of  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ . (a) Layered crystal structure of  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ . Red arrows represent the directions of magnetic moments. Red, yellow and gray balls represent Mn, Bi, and Te atoms, respectively. (b) In-plane part of the lattice model. Red dots represent the position of the lattice, and blue arrowed lines denote the lattice vectors  $\mathbf{a}$  and  $\mathbf{b}$ .

根据以上格点结构，可以构造紧束缚模型<sup>[207]</sup>

$$H^t = H_1^t + H_2^t \quad (5-6)$$

其中  $H_1^t$  和  $H_2^t$  分别表示平面内和垂直方向上的部分

$$\begin{aligned} H_1^t &= \left[ \tilde{C} - \frac{4}{3}C_2(\cos k_1 + \cos k_2 + \cos k_3) \right] I_4 + \frac{2v}{3} \left[ \sin k_1 + \frac{1}{2}(\sin k_2 + \sin k_3) \right] \Gamma_1 \\ &\quad + \frac{v}{\sqrt{3}}(\sin k_2 - \sin k_3) \Gamma_2 + \left[ \tilde{M} - \frac{4}{3}C_2(\cos k_1 + \cos k_2 + \cos k_3) \right] \Gamma_4 \end{aligned} \quad (5-7)$$

$$H_2^t = \left( -2C_1 \cos \frac{k_z}{2} \right) I_4 + \left( v_2 \sin \frac{k_z}{2} \right) \Gamma_3 - \left( 2M_1 \cos \frac{k_z}{2} \right) \Gamma_4 \quad (5-8)$$

这里  $\tilde{C} = C_0 + 2C_1 + 4C_2$ ， $\tilde{M} = M_0 + 2M_1 + 4M_2$ ，而  $k_1$ 、 $k_2$ 、 $k_3$  是由平面上基矢的特征定义的，它们与  $k_x$  和  $k_y$  的关系为：

$$k_1 = k_x$$

$$\begin{aligned} k_2 &= \frac{1}{2}(k_x + \sqrt{3}k_y) \\ k_3 &= \frac{1}{2}(k_x - \sqrt{3}k_y) \end{aligned} \quad (5-9)$$

将 $H^t$ 展开到动量的二阶项即可恢复为连续有效模型(5-1)式。

将 $H^t$ 变换到实空间后，可以得到沿 $\mathbf{a}$ 方向的跃迁系数为

$$-\frac{2}{3a^2}C_2I_4 - i\frac{v}{3a}\Gamma_1 - \frac{2}{3a^2}M_2\Gamma_4 \quad (5-10)$$

沿 $\mathbf{b}$ 方向的跃迁系数为

$$-\frac{2}{3a^2}C_2I_4 - i\frac{v}{6a}\Gamma_1 - \frac{2}{3a^2}M_2\Gamma_4 - i\frac{v}{2\sqrt{3}a}\Gamma_2 \quad (5-11)$$

沿 $(\mathbf{a} - \mathbf{b})$ 方向的跃迁系数为

$$-\frac{2}{3a^2}C_2I_4 - i\frac{v}{6a}\Gamma_1 - \frac{2}{3a^2}M_2\Gamma_4 + i\frac{v}{2\sqrt{3}a}\Gamma_2 \quad (5-12)$$

沿 $\mathbf{c}$ 方向的跃迁系数为

$$-\frac{C_1}{c^2}I_4 - i\frac{v_z}{2c}\Gamma_3 - \frac{M_1}{c^2}M_2\Gamma_4 \quad (5-13)$$

而在每个格点的在位势能为

$$\tilde{C}I_4 + \tilde{M}\Gamma_4 \quad (5-14)$$

由于 $H_{ex}$ 与动量 $\mathbf{k}$ 无关，其格点模型的形式仍为(5-3)式，即 $m\sigma_z \otimes I_2$ 。

结合(5-5)式、(5-10)式、(5-11)式、(5-12)式、(5-13)式、(5-14)式，并在每相邻两层的所有格点的在位势能上分别加上 $m\sigma_z \otimes I_2$ 和 $(-m\sigma_z \otimes I_2)$ 即可得到反铁磁结构的  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  格点模型。图 5-2 为由此模型计算得到的系统能谱，其中图(a)和(b)分别对应 $m$ 为 0 和有限大小时的情况。

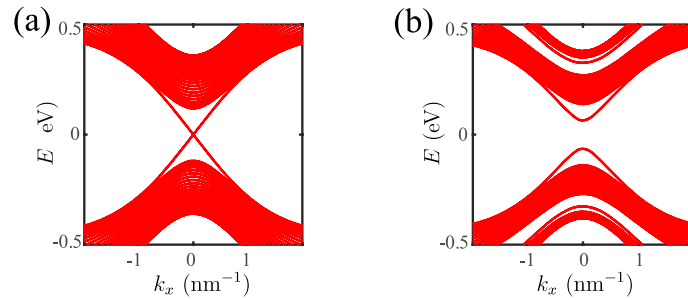


图 5-2 由格点模型计算得到的能谱。(a)和(b)分别为磁性强度 $m$ 取 0 和 0.1 eV 的情况。系统在平面内为周期性边界条件，在垂直方向为 30 层。

Fig. 5-2 Energy dispersion calculated from the lattice model. (a) and (b) are situations when  $m$  is taken as 0 and 0.1 eV, respectively. Periodic boundary condition is taken in the plane, and 30 layers are taken in the vertical direction.

在以上图 5-2 的计算中，所用模型边界条件为在沿  $c$  方向取 30 层，在  $a$  和  $b$  方向取周期性边界条件。模型参数参考了第一性原理计算所得的  $k \cdot p$  模型<sup>[70]</sup>，即  $a = c = 1 \text{ nm}$ 、 $C_0 = C_1 = C_2 = 0$ 、 $M_0 = -0.11650 \text{ eV}$ 、 $M_1 = 0.11908 \text{ eV nm}^2$ 、 $M_2 = 0.09408 \text{ eV nm}^2$ 、 $v = 0.31964 \text{ eV nm}$ 、 $v_z = 0.27023 \text{ eV nm}$ 。从图中可以看到，当  $m$  为 0 时，系统体态的能隙内有无能隙的表面态（即普通拓扑绝缘体的情况），当  $m$  为有限大小时，表面态会打开能隙。

### 5.2.3 多端口器件中电阻的计算方法

根据以上格点模型，可以写出任意形状  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  的哈密顿量矩阵，将其与测量电阻所用电极的哈密顿量结合即可计算整个器件的电阻。测量电阻用的电极为金属材料，因此可以用自由电子气模型描述其特性。根据  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  的晶体生长特性<sup>[206]</sup>，这里使用六棱柱型样品模型，如图 5-3 (a) 所示。图中的灰色六棱柱为  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  样品，红色和蓝色长方体分别表示六个电极接在样品顶端或底端时。图 5-3 (b) 为计算中器件上表面的具体格点模型，其中黑色网格为样品在上表面的格点示意图，红色网格为连接在上表面的六个电极的格点模型示意图。

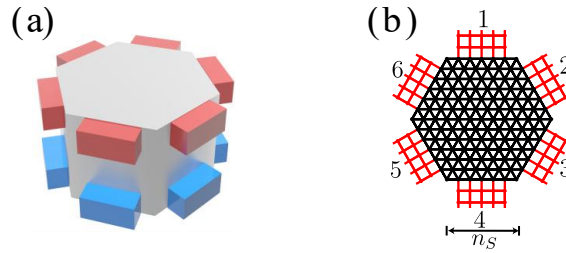


图 5-3 计算中使用器件的示意图。(a) 六棱柱型样品连接电极的示意图。(b) 器件上表面的格点模型示意图。 $n_s$  为六棱柱样品中六边形的边长。

Fig. 5-3 Schematic diagram of the device used in the calculation. (a) Hexagonal shape sample with electrodes attached. (b) Lattice model in the upper surface of the device.  $n_s$  is the side length of the hexagon in the hexagonal sample.

多端口器件中的电阻可以根据 Landauer-Büttiker 理论方法计算<sup>[113]</sup>。其中 Büttiker 公式即为第一章中给出的(1-7)式。对于六端口器件，(1-7)式将给出各端口电压和电流之间关系的 6 个方程，将其写为矩阵形式即为

$$\begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \\ I_4 \\ I_5 \\ I_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i \neq 1} G_{1i} & -G_{12} & -G_{13} & -G_{14} & -G_{15} & -G_{16} \\ -G_{21} & \sum_{i \neq 2} G_{2i} & -G_{23} & -G_{24} & -G_{25} & -G_{26} \\ -G_{31} & -G_{32} & \sum_{i \neq 3} G_{3i} & -G_{34} & -G_{35} & -G_{36} \\ -G_{41} & -G_{42} & -G_{43} & \sum_{i \neq 4} G_{4i} & -G_{45} & -G_{46} \\ -G_{51} & -G_{52} & -G_{53} & -G_{54} & \sum_{i \neq 5} G_{5i} & -G_{56} \\ -G_{61} & -G_{62} & -G_{63} & -G_{64} & -G_{65} & \sum_{i \neq 6} G_{6i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \\ V_4 \\ V_5 \\ V_6 \end{pmatrix} \quad (5-15)$$



这里 $G_{ij}$ 表示从 $i$ 端口到 $j$ 端口的电导，其与透射系数的关系可以从 Landauer 公式得到，即

$$G_{ij} = \frac{e^2}{h} T_{ij} \quad (5-16)$$

其中 $i \neq j$ 。透射系数 $T_{ij}$ 即为电子从 $i$ 端口到 $j$ 端口的隧穿概率。根据整个六端口器件的哈密顿量矩阵，通过数值计算可以得到其波函数，透射系数即为入射部分波函数系数模的平方比上出射部分波函数系数模的平方<sup>[208,114]</sup>。

本文中透射系数是通过 Kwant 软件包计算得到的。Kwant 为编程语言 Python 的一个开源软件包<sup>[114]</sup>，它可以用来数值计算各种系统的输运性质。使用上一小节中构建的模型并结合描述器件几何形状的数学函数，可以使用 Python 和 Kwant 软件包编程并计算出系统各端口的透射系数 $T_{ij}$ 。将 $T_{ij}$ 代入到以上 Landauer 公式和 Büttiker 公式后即可算出各个端口的电压和电流之间的关系，进而得到电极在六个端口上任意连接方式时的电阻。

### 5.3 轴子绝缘体在非局域化测量中的理论电阻值

正如第一章 1.3 节中所介绍，非局域化测量为表征边界态输运性质的最恰当方法，而在多端口器件中可以便捷地开展非局域化测量。本节将首先计算六端口拓扑材料中的非局域化电阻，然后给出轴子绝缘体上表面和下表面理论的非局域化电阻值。

在一个六端口器件中，以其第三个端口为零电压点（对于电压而言，只有两个电压的差值有意义，因此零电压点可以设到任意位置而不影响计算结果），即取 $V_3 = 0$ ，则 Büttiker 公式给出的 6 个方程变为 5 个独立方程，其矩阵形式即为去掉 (5-15) 式中的所有矩阵的第三行以及第三列。在拓扑材料中，当费米能量仅切过边界态时会出现量子化的输运。此时仅相邻端口之间的电导不为零，(5-15) 式即可简化为

$$\begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_4 \\ I_5 \\ I_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_L + n_R & -n_L & 0 & 0 & -n_R \\ -n_R & n_L + n_R & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & n_L + n_R & -n_L & 0 \\ 0 & 0 & -n_R & n_L + n_R & -n_L \\ -n_L & 0 & 0 & -n_R & n_L + n_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_4 \\ V_5 \\ V_6 \end{pmatrix} \quad (5-17)$$

这里的 $n_L$ 和 $n_R$ 分别代表在此器件边界上顺时针方向和逆时针方向的输运通道贡献的电导值。为了测量电阻，需要给此器件施加激发电流。当通过第一个端口和第二个端口施加激发电流时，即有 $I_1 = -I_2 = I$ 。此时器件的其余端口都没有从外界流入的或向外界流出的电流，因此 $I_3 = I_4 = I_5 = I_6 = 0$ 。求解(5-17)式可以得到此器

件中各端口的电压为:

$$\begin{aligned}
 V_1 &= \frac{n_R(n_L^2 + n_R^2)}{n_L^4 + n_R^4 + n_L^2 n_R^2} I \\
 V_2 &= -\frac{n_L^4}{(n_L + n_R)(n_L^4 + n_R^4 + n_L^2 n_R^2)} I \\
 V_3 &= 0 \\
 V_4 &= \frac{n_L^3 n_R}{(n_L + n_R)(n_L^4 + n_R^4 + n_L^2 n_R^2)} I \\
 V_5 &= \frac{n_L^2 n_R}{n_L^4 + n_R^4 + n_L^2 n_R^2} I \\
 V_6 &= \frac{n_L n_R}{n_L^3 + n_R^3} I
 \end{aligned} \tag{5-18}$$

从上式可以进一步推导出任意测量方式下得到的电阻值。例如：在第一个端口和第五个端口接电压表，测量得到的电阻即为

$$\begin{aligned}
 R &= \frac{V_1 - V_5}{I} \\
 &= \frac{n_R^3}{n_L^4 + n_R^4 + n_L^2 n_R^2}
 \end{aligned} \tag{5-19}$$

对于轴子绝缘体，其上表面棱边态和下表面棱边态的输运通道方向相反。即其中一个表面的棱边态有 $n_L = e^2/(2h)$ 和 $n_R = 0$ （只有顺时针方向的输运通道），而另一个表面的棱边态有 $n_L = 0$ 和 $n_R = e^2/(2h)$ （只有逆时针方向的输运通道）。表 5-1 列出了在轴子绝缘体的上表面和下表面分别以图 5-4 (a)、(b)、(c)、(d)中的插图所示方式测量电压时得到的电阻值。可以看到，轴子绝缘体的上表面和下表面棱边态的输运通道方向不同将导致截然不同的电阻值。对于一个有一定厚度的量子反常霍尔绝缘体，其上下表面的棱边态贡献的输运通道方向相同，因此同样的测量方式对于上表面和下表面得到的电阻值相同。

表 5-1 不同测量方式下得到的轴子绝缘体上表面和下表面的电阻值。

Table 5-1 Resistances of the top surface and bottom surface of an axion insulator under different measurement setups.

	测量方式(a)	测量方式(b)	测量方式(c)	测量方式(d)
上表面	$\frac{2h}{e^2}$	$\frac{2h}{e^2}$	0	0
下表面	0	0	$\frac{2h}{e^2}$	0

## 5.4 MnBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub> 六端口器件中的电阻

本节将数值计算 MnBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub> 中的非局域化电阻，并分别考虑材料厚度、费米能量、杂质以及测量电极厚度对电阻的影响。由于偶数层 MnBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub> 的上表面和下表面的磁性相反，因此上表面和下表面棱边态提供的输运通道方向相反，即为轴子绝缘体的情况。奇数层 MnBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub> 的上下表面磁性相同，因此有相同方向的输运通道，即为量子反常霍尔绝缘体的情况。以下内容将对偶数层和奇数层的情况分开计算和讨论。

对于 5.2.2 小节所选取的模型参数，样品模型的偶数层上表面的棱边输运通道为顺时针方向，下表面的输运通道为逆时针方向。而奇数层的上表面和下表面的输运通道均为逆时针方向。将六个端口置于器件的顶层或底层后，数值计算出各个透射系数再带入到(5-15)式和(5-16)式即可求解器件中各端口的电压。图 5-4 (a)、(b)、(c)、(d)为六端口 MnBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub> 器件在不同测量方式下电阻随样品的厚度 $n_z$ 变化的数值计算结果。图中红色线条和红色空心圆分别对应偶数层和奇数层的上表面电阻，蓝色空心圆和蓝色线条分别对应偶数层和奇数层的下表面电阻。各图中的插图电阻的测量方式示意图。可以看到：在同样的测量方式下，顶层六端口和底层六端口的偶数层样品有相同的电阻；但对于顶层六端口和底层六端口的奇数层样品，在(a)、(b)、(c)图中的测量方式下电阻截然不同。随着样品厚度的不断增大，电阻会趋于稳定值。在 100 层以上时，电阻值不再随样品厚度发生变化，此时，各种测量方式下得到的电阻值与表 5-1 中的规律是一致的，但具体大小有偏离。数值计算得到的电阻并没有量子化，这很可能是由 MnBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub> 的侧表面态导致的。此外，图 5-4 (b)中的电阻值比 5-4 (a)小一些，这表明除了棱边态在最邻端口之间提供的电导外，非最邻端口之间也有非零的电导（这点也可以从数值计算得到的各个透射系数中看出）。

当取更大的费米能量时，图 5-4 (a)、(b)、(c)、(d)中的电阻将变为图 5-4 (e)、(f)、(g)、(h)的结果。可以看到，此时电阻值会随层厚震动变化。这是因为量子限制作用使侧表面态的能谱随层厚变化，进而导致层厚发生变化时费米能量切过的表面态不同。此外，图中奇数层和偶数层的电阻振荡相位相差 $\pi$ ，这可能是因为奇数层样品与偶数层样品总是相差奇数数目的层数导致两者能带数目相差为奇数。在图 5-4 (e)到(h)中，对于顶层六端口和底层六端口的偶数层样品，同样的测量方式下有相同的电阻，但顶层六端口和底层六端口的奇数层样品只有在图 5-4 (d)中插图的测量方式下才有相同的电阻。这点与图 5-4 (a)到(d)中一致。

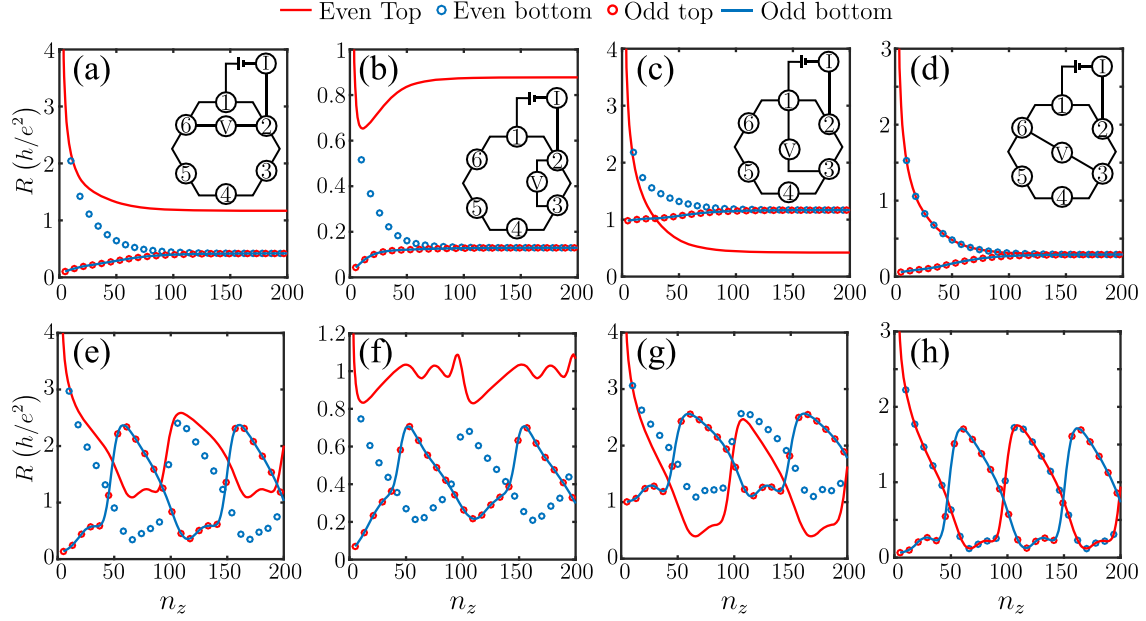


图 5-4  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  中的非局域化电阻。(a)、(b)、(c)、(d)中的插图为不同测量方式的示意图，计算中费米能量取为 1 meV。图(e)至(h)与图(a)至(d)一一对应，但费米能量取为 10 meV。计算中样品平面内的尺寸  $n_s$  为 25。

Fig. 5-4 Nonlocal resistances in  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ . Insets in (a), (b), (c), and (d) are sketches of different measurement setups. Fermi energy in (a)-(d) is taken as 1 meV. (e)-(h) are in one-to-one correspondence with (a)-(d), but the Fermi energy is taken as 10 meV. In-plane dimension  $n_s$  of the sample is taken as 25 in the calculation.

在调节费米能量的基础上，进一步考虑杂质效应和测量电极的厚度得到的结果如图 5-5 所示。安德森杂质（Anderson-type impurity）可以通过给系统中每个格点的在位势能加上杂质部分  $W_i I_4$  实现。这里  $W_i$  为第  $i$  个格点位置的杂质势能，其值为  $-U/2$  到  $U/2$  的范围内的随机大小。 $U$  即表示杂质的强度。图 5-5 (a)、(b)、(c)、(d) 即为电阻随杂质强度的变化关系，这里的四个图仍与图 5-4 (a)到(d)中插图所示的测量方法对应。从图中可以看到非局域化的输运对无序有很强的抵抗力，即使在  $U$  为 0.2 eV 时（大约为系统内部能隙的大小），非局域电阻也和未加杂质前在一个量级。图 5-5 (e)、(f)、(g)、(h) 为考虑杂质的基础上进一步增大测量电极的厚度时电阻的结果。非局域化电阻整体上会随电极厚度变大而下降，但是奇数层器件和偶数层器件仍然可以通过不同测量方式下的电阻特性区分出来。

以上结果表明轴子绝缘体中的半整数霍尔电导值得进一步探索。对于量子反常霍尔效应，其整数的量子化电阻由整数个的边界通道所保证。近邻端口中沿输运方向的透射系数为 1。但对于轴子绝缘体，虽然其半整数霍尔电导可以由久保公式得到，但此半整数霍尔电导的物理图像在 Landauer-Büttiker 的理论框架下尚不清楚。从目前的研究中来看<sup>[149,209,210]</sup>，半整数霍尔电导是通过近邻端口相反方向透射

系数的差值得到的。在这种情况下，轴子绝缘体的非局域化电导将不被表 5-1 所描述，而是图 5-4 (a)到(d)中给出的结果。这种情况下轴子绝缘体的输运机制与量子反常霍尔效应完全不同，它只能通过非局域化测量进行探测，而其半整数电导（透射系数的差值）的稳定性和保护机制更加值得探索。

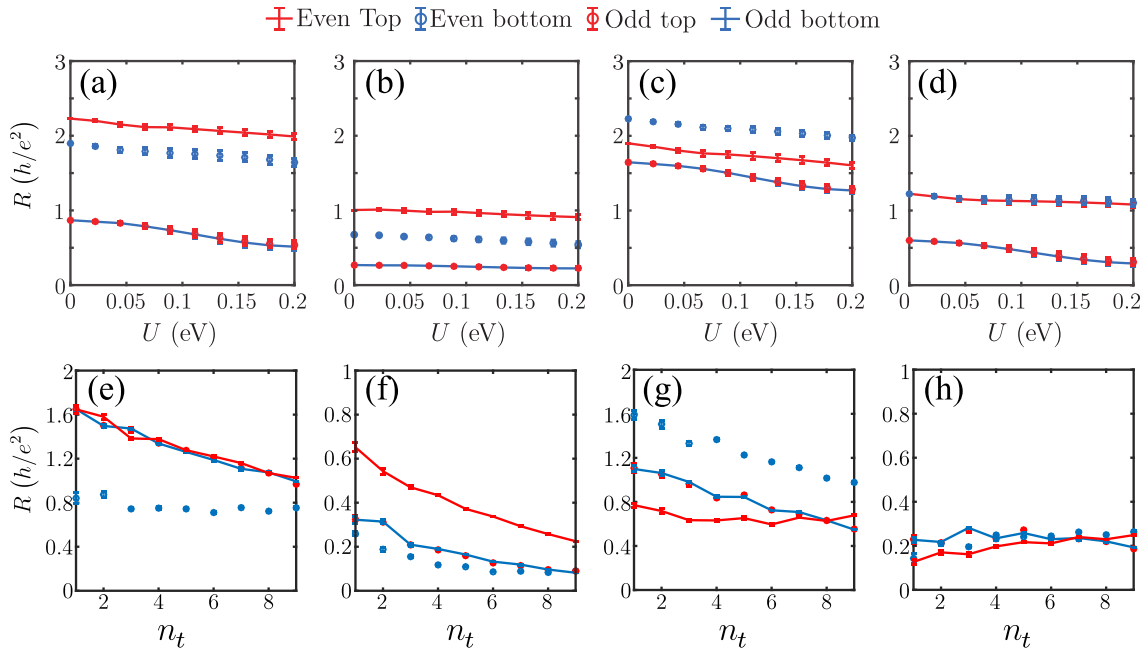


图 5-5 杂质和测量电极厚度对  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  中的非局域化电阻的影响。(a)电阻随杂质强度的变化，其中偶数层和奇数层分别对应 $n_z$ 为 200 和 201 时。(b)在考虑杂质的基础上电阻随电极厚度的变化，其中偶数层和奇数层分别对应 $n_z$ 为 100 和 101 时。计算中 $n_s$ 取为 25，费米能量为 10 meV。误差条显示了 100 次计算计算结果的标准偏差。

Fig. 5-5 Effects of disorder and electrode thickness on the nonlocal resistances of  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ . (a)

Resistance as functions of the disorder strength. The even-layer sample and odd-layer sample correspond to  $n_z = 200$  and  $n_z = 201$ . (b) Resistance as functions of the electrode thickness. The even-layer sample and odd-layer sample correspond to  $n_z = 100$  and  $n_z = 101$ . In the calculations  $n_s$  is taken as 25, and Fermi energy is taken as 10 meV. The error bars show the standard deviation of 100 calculations.

## 5.5 本章小结

本章探讨了轴子绝缘体棱边态半整数电导通道在六端口器件中带来的非局域化电阻，并计算了相应六端口  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  中的非局域化输运性质。计算结果表明  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  中存在非局域化的输运，但其电阻值并未量子化。在不同的测量方式下奇数层和偶数层的  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  有截然不同的非局域化电阻，并且在有限大小的费米能量下考虑杂质以及电极厚度效应仍然可以从这些非局域化电阻区分出不同系统

的不同特性。本章所考虑的测量器件（样品厚度为 150 nm 到 300 nm 之间，电极厚度最高可达 14 nm）是可以在现有实验技术下实现的，因此本章的理论研究为实验探索  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  的输运性质以及实现轴子绝缘体提供了有力的支持。

## 结论

本论文主要研究了狄拉克半金属、外尔半金属和反铁磁拓扑绝缘体中的输运性质。在狄拉克半金属和外尔半金属中，本论文从量子理论出发计算了各方向上的磁电阻，并研究了不同的杂质和能带结构给量子极限下的磁电阻带来的影响。在接近拓扑相变点的材料  $\text{ZrTe}_5$  中，本论文考虑了最低朗道能带上粒子之间的相互作用，研究了磁场中电荷密度波的形成以及其导致的三维量子霍尔效应。在反铁磁拓扑绝缘体  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  中，本论文计算了  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  多端口器件中的非局域化电阻，并对比研究了理想轴子绝缘体中的非局域化电阻。本文主要研究成果如下：

(1) 我们指出了拥有单个狄拉克锥型能谱的三维狄拉克半金属在量子极限下独有的不受杂质散射影响的纵向磁电阻，并推导得到了其解析表达式。此外，我们发现了量子极限下的线性磁电阻并非拥有线性能谱的系统所独有，其同样存在于拥有二次方型能谱的系统中。在狄拉克半金属和外尔半金属中，解析推导和计算表明长程高斯势能型杂质可以同时带来线性的纵向和横向磁电阻，而屏蔽库伦势能型杂质只能导致线性的横向磁电阻。

(2) 我们将传统系统中的电荷密度波理论推广到了磁场下形成的最低朗道能带中，其中磁场强度同时调控了系统在沿磁场方向发生的序参数相变和在垂直于磁场方向的平面内发生的拓扑相变。此外，我们解释了实验在  $\text{ZrTe}_5$  材料中观测到的三维量子霍尔效应的关键特征。数值计算表明在  $\text{ZrTe}_5$  中电子和声子之间的相互作用是形成电荷密度波的关键，而费米波矢固定的公度电荷密度波支持了  $\text{ZrTe}_5$  中的量子霍尔平台。

(3) 我们提出了通过非局域化测量来区分轴子绝缘体和普通绝缘体的方法，并对比研究了轴子绝缘体的理论非局域化电阻值和本征反铁磁拓扑绝缘体  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  的非局域化电阻值。数值计算表明  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  中存在未量子化的非局域化输运现象，而且这些非局域化电阻对费米能量、杂质和电极厚度的影响有一定的抵抗力。

### 本论文的主要创新点：

(1) 通过系统地研究拓扑半金属中量子极限下的磁电阻，我们发现了在拥有单个狄拉克锥型能谱的系统中存在不受杂质散射影响的纵向负磁电阻，并发现了新的线性磁电阻机制，即线性磁电阻可以存在于拥有二次方型能谱的系统中以及纵向磁电阻中。

(2) 我们发展了由电荷密度波导致的三维量子霍尔效应理论，其中磁场强度同时调控了系统在不同方向的两种不同相变。同时，我们解释了实验在  $\text{ZrTe}_5$  中观测

到的三维量子霍尔效应。

(3) 我们针对轴子绝缘体提出了实验上可操作的非局域化测量方案，并给出了理想轴子绝缘体和反铁磁拓扑绝缘体  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  中非局域化电阻的区别。此外，我们揭示了  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  中未量子化的非局域化电阻。

## 工作展望

本论文的研究内容可以分为三大部分：拓扑材料中的磁电阻、电荷密度波导致的三维量子霍尔效应和反铁磁拓扑绝缘体中的非局域化电阻。我们在此三个方面的工作展望如下：

(1) 在磁电阻的计算方面，本论文系统地梳理了相应的理论框架，因此后续工作可以在此基础上研究较强的势能杂质以及朗道能带之间的相互作用对磁电阻的影响。

(2) 在磁场中的电荷密度波方面，相关的研究较少，相应的理论框架仍有许多细节需要进一步完善。同时其他强关联态是否能带来三维量子霍尔效应也值得探讨。

(3) 在非局域化输运方面，本论文已经给出了轴子绝缘体的理论非局域化电阻值以及  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  中计算得到的非局域化电阻值。但在目前实验中制备得到的  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  样品中均存在一小部分  $\text{Mn}$  原子和  $\text{Bi}$  原子位置互换的情况，而位于  $\text{Bi}$  原子位置的  $\text{Mn}$  原子相当于磁性杂质。因此在后续工作中可以考虑磁性杂质对  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  输运性质造成的影响。



## 参考文献

- [1] Martin J D. When Condensed-Matter Physics Became King[J]. Physics Today, 2019, 72(1): 30-37.
- [2] Landau L D, Lifshitz E M. Statistical Physics: Volume 5: Vol. 5[M]. 3rd ed. Elsevier, 2013.
- [3] Hasan M Z, Kane C L. Colloquium: Topological Insulators[J]. Reviews of Modern Physics, 2010, 82(4): 3045-3067.
- [4] Qi X L, Zhang S C. Topological Insulators and Superconductors[J]. Reviews of Modern Physics, 2011, 83(4): 1057-1110.
- [5] Klitzing K v., Dorda G, Pepper M. New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance[J]. Physical Review Letters, 1980, 45(6): 494-497.
- [6] Delahaye F, Dominguez D. Precise Comparisons of Quantized Hall Resistances[J]. IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement, 1987, IM-36(2): 226-229.
- [7] Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P, et al. Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential[J]. Physical Review Letters, 1982, 49(6): 405-408.
- [8] Laughlin R B. Quantized Hall Conductivity in Two Dimensions[J]. Physical Review B, 1981, 23(10): 5632-5633.
- [9] Jeckelmann B, Jeanneret B. The Quantum Hall Effect as an Electrical Resistance Standard[J]. Reports on Progress in Physics, 2001, 64(12): 1603.
- [10] 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.
- [11] Kane C L, Mele E J. Quantum Spin Hall Effect in Graphene[J]. Physical Review Letters, 2005, 95(22): 226801.
- [12] König M, Wiedmann S, Brüne C, et al. Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells[J]. Science, 2007, 318(5851): 766-770.
- [13] He K, Wang Y, Xue Q K. Quantum Anomalous Hall Effect[J]. National Science Review, 2014, 1(1): 38-48.
- [14] Lv B Q, Qian T, Ding H. Experimental Perspective on Three-Dimensional Topological Semimetals[J]. Reviews of Modern Physics, 2021, 93(2): 025002.
- [15] He K, Wang Y, Xue Q K. Topological Materials: Quantum Anomalous Hall System[J]. Annual Review of Condensed Matter Physics, 2018, 9(1): 329-344.
- [16] Tokura Y, Yasuda K, Tsukazaki A. Magnetic Topological Insulators[J]. Nature Reviews Physics, 2019, 1(2): 126-143.
- [17] Xie B, Wang H X, Zhang X, et al. Higher-Order Band Topology[J]. Nature Reviews

- Physics, 2021, 3(7): 520-532.
- [18] Yan B, Zhang S C. Topological Materials[J]. Reports on Progress in Physics, 2012, 75(9): 096501.
- [19] Yang Z, Gao F, Shi X, et al. Topological Acoustics[J]. Physical Review Letters, 2015, 114(11): 114301.
- [20] Huber S D. Topological Mechanics[J]. Nature Physics, 2016, 12(7): 621-623.
- [21] Delplace P, Marston J B, Venaille A. Topological Origin of Equatorial Waves[J]. Science, 2017, 358(6366): 1075-1077.
- [22] Ozawa T, Price H M, Amo A, et al. Topological Photonics[J]. Reviews of Modern Physics, 2019, 91(1): 015006.
- [23] von Klitzing K, Chakraborty T, Kim P, et al. 40 Years of the Quantum Hall Effect[J]. Nature Reviews Physics, 2020, 2(8): 397-401.
- [24] Lv B, Qian T, Ding H. Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy and Its Application to Topological Materials[J]. Nature Reviews Physics, 2019, 1(10): 609-626.
- [25] Roth A, Brüne C, Buhmann H, et al. Nonlocal Transport in the Quantum Spin Hall State[J]. Science, 2009, 325(5938): 294-297.
- [26] Knez I, Du R R, Sullivan G. Evidence for Helical Edge Modes in Inverted InAs/GaSb Quantum Wells[J]. Physical Review Letters, 2011, 107(13): 136603.
- [27] Du L, Knez I, Sullivan G, et al. Robust Helical Edge Transport in Gated InAs/GaSb Bilayers[J]. Physical Review Letters, 2015, 114(9): 096802.
- [28] Shumiya N, Hossain M S, Yin J X, et al. Evidence of a Room-Temperature Quantum Spin Hall Edge State in a Higher-Order Topological Insulator[J]. Nature Materials, 2022, 21(10): 1111-1115.
- [29] Hsieh D, Qian D, Wray L, et al. A Topological Dirac Insulator in a Quantum Spin Hall Phase[J]. Nature, 2008, 452(7190): 970-974.
- [30] Chen Y L, Analytis J G, Chu J H, et al. Experimental Realization of a Three-Dimensional Topological Insulator, Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>[J]. Science, 2009, 325(5937): 178-181.
- [31] Xia Y, Qian D, Hsieh D, et al. Observation of a Large-Gap Topological-Insulator Class with a Single Dirac Cone on the Surface[J]. Nature Physics, 2009, 5(6): 398-402.
- [32] Fu L, Kane C L. Topological Insulators with Inversion Symmetry[J]. Physical Review B, 2007, 76(4): 045302.
- [33] Zhang H, Liu C X, Qi X L, et al. Topological Insulators in Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>, Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> and Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> with a Single Dirac Cone on the Surface[J]. Nature Physics, 2009, 5(6): 438-442.
- [34] Liu C, Hughes T L, Qi X L, et al. Quantum Spin Hall Effect in Inverted Type-II

- Semiconductors[J]. *Physical Review Letters*, 2008, 100(23): 236601.
- [35] Bansil A, Lin H, Das T. Colloquium: Topological Band Theory[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2016, 88(2): 021004.
- [36] Fu L, Kane C L, Mele E J. Topological Insulators in Three Dimensions[J]. *Physical Review Letters*, 2007, 98(10): 106803.
- [37] Armitage N P, Mele E J, Vishwanath A. Weyl and Dirac Semimetals in Three-Dimensional Solids[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2018, 90(1): 015001.
- [38] Weng H, Dai X, Fang Z. Topological Semimetals Predicted from First-Principles Calculations[J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2016, 28(30): 303001.
- [39] Shen S Q. Topological Insulators: Dirac Equation in Condensed Matter[M]. 2nd ed. 2017. Singapore: Springer Singapore: Imprint: Springer, 2017. DOI:10.1007/978-981-10-4606-3.
- [40] Wang Z, Weng H, Wu Q, et al. Three-Dimensional Dirac Semimetal and Quantum Transport in Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub>[J]. *Physical Review B*, 2013, 88(12): 125427.
- [41] Liu Z K, Zhou B, Zhang Y, et al. Discovery of a Three-Dimensional Topological Dirac Semimetal, Na<sub>3</sub>Bi[J]. *Science*, 2014, 343(6173): 864-867.
- [42] Xiong J, Kushwaha S K, Liang T, et al. Evidence for the Chiral Anomaly in the Dirac Semimetal Na<sub>3</sub>Bi[J]. *Science*, 2015, 350(6259): 413-416.
- [43] Tabert C J, Carbotte J P, Nicol E J. Optical and Transport Properties in Three-Dimensional Dirac and Weyl Semimetals[J]. *Physical Review B*, 2016, 93(8): 085426.
- [44] Neubauer D, Carbotte J P, Nateprov A A, et al. Interband Optical Conductivity of the [001]-Oriented Dirac Semimetal Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub>[J]. *Physical Review B*, 2016, 93(12): 121202.
- [45] Crassee I, Sankar R, Lee W L, et al. 3D Dirac Semimetal Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub>: A Review of Material Properties[J]. *Physical Review Materials*, 2018, 2(12): 120302.
- [46] Jia S, Xu S Y, Hasan M Z. Weyl Semimetals, Fermi Arcs and Chiral Anomalies[J]. *Nature Materials*, 2016, 15(11): 1140-1144.
- [47] Yang L X, Liu Z K, Sun Y, et al. Weyl Semimetal Phase in the Non-Centrosymmetric Compound TaAs[J]. *Nature Physics*, 2015, 11(9): 728-732.
- [48] Lv B Q, Weng H M, Fu B B, et al. Experimental Discovery of Weyl Semimetal TaAs[J]. *Physical Review X*, 2015, 5(3): 031013.
- [49] Lv B Q, Muff S, Qian T, et al. Observation of Fermi-Arc Spin Texture in TaAs[J]. *Physical Review Letters*, 2015, 115(21): 217601.
- [50] Soluyanov A A, Gresch D, Wang Z, et al. Type-II Weyl Semimetals[J]. *Nature*, 2015, 527(7579): 495-498.
- [51] Volovik G E. Black Hole and Hawking Radiation by Type-II Weyl Fermions[J].

- JETP Letters, 2016, 104(9): 645-648.
- [52] Huang H, Jin K H, Liu F. Black-Hole Horizon in the Dirac Semimetal  $\text{Zn}_2\text{In}_2\text{S}_5$ [J]. Physical Review B, 2018, 98(12): 121110.
- [53] Fang C, Gilbert M J, Dai X, et al. Multi-Weyl Topological Semimetals Stabilized by Point Group Symmetry[J]. Physical Review Letters, 2012, 108(26): 266802.
- [54] Liu Q, Zunger A. Predicted Realization of Cubic Dirac Fermion in Quasi-One-Dimensional Transition-Metal Monochalcogenides[J]. Physical Review X, 2017, 7(2): 021019.
- [55] Burkov A A, Hook M D, Balents L. Topological Nodal Semimetals[J]. Physical Review B, 2011, 84(23): 235126.
- [56] Yu R, Wu Q, Fang Z, et al. From Nodal Chain Semimetal to Weyl Semimetal in  $\text{HfC}$ [J]. Physical Review Letters, 2017, 119(3): 036401.
- [57] Bzdušek T, Wu Q, Rüegg A, et al. Nodal-Chain Metals[J]. Nature, 2016, 538(7623): 75-78.
- [58] Weng H, Liang Y, Xu Q, et al. Topological Node-Line Semimetal in Three-Dimensional Graphene Networks[J]. Physical Review B, 2015, 92(4): 045108.
- [59] Liang Q F, Zhou J, Yu R, et al. Node-Surface and Node-Line Fermions from Nonsymmorphic Lattice Symmetries[J]. Physical Review B, 2016, 93(8): 085427.
- [60] Katmis F, Lauter V, Nogueira F S, et al. A High-Temperature Ferromagnetic Topological Insulating Phase by Proximity Coupling[J]. Nature, 2016, 533(7604): 513-516.
- [61] Chong S K, Han K B, Nagaoka A, et al. Topological Insulator-Based van Der Waals Heterostructures for Effective Control of Massless and Massive Dirac Fermions[J]. Nano Letters, 2018, 18(12): 8047-8053.
- [62] 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.
- [63] Chen T, Liu W, Zheng F, et al. High-Mobility Sm-Doped  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  Ferromagnetic Topological Insulators and Robust Exchange Coupling[J]. Advanced Materials, 2015, 27(33): 4823-4829.
- [64] Chang C Z, Zhao W, Kim D Y, et al. High-Precision Realization of Robust Quantum Anomalous Hall State in a Hard Ferromagnetic Topological Insulator[J]. Nature Materials, 2015, 14(5): 473-477.
- [65] Wang P, Ge J, Li J, et al. Intrinsic Magnetic Topological Insulators[J]. The Innovation, 2021, 2(2): 100098.
- [66] Chang C Z, Liu C X, MacDonald A H. Colloquium: Quantum Anomalous Hall Effect[J]. Reviews of Modern Physics, 2023, 95(1): 011002.

- [67] Hao Y J, Liu P, Feng Y, et al. Gapless Surface Dirac Cone in Antiferromagnetic Topological Insulator MnBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub>[J]. *Physical Review X*, 2019, 9(4): 041038.
- [68] Li J, Li Y, Du S, et al. Intrinsic Magnetic Topological Insulators in van Der Waals Layered MnBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub>-Family Materials[J]. *Science Advances*, 2019, 5(6): eaaw5685.
- [69] Lee D S, Kim T H, Park C H, et al. Crystal Structure, Properties and Nanostructuring of a New Layered Chalcogenide Semiconductor, Bi<sub>2</sub>MnTe<sub>4</sub>[J]. *CrystEngComm*, 2013, 15(27): 5532-5538.
- [70] Zhang D, Shi M, Zhu T, et al. Topological Axion States in the Magnetic Insulator MnBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub> with the Quantized Magnetoelectric Effect[J]. *Physical Review Letters*, 2019, 122(20): 206401.
- [71] Otrokov M M, Rusinov I P, Blanco-Rey M, et al. Unique Thickness-Dependent Properties of the van Der Waals Interlayer Antiferromagnet MnBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub> Films[J]. *Physical Review Letters*, 2019, 122(10): 107202.
- [72] Gong Y, Guo J, Li J, et al. Experimental Realization of an Intrinsic Magnetic Topological Insulator[J]. *Chinese Physics Letters*, 2019, 36(7): 076801.
- [73] 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.
- [74] Lee S H, Zhu Y, Wang Y, et al. Spin Scattering and Noncollinear Spin Structure-Induced Intrinsic Anomalous Hall Effect in Antiferromagnetic Topological Insulator MnBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub>[J]. *Physical Review Research*, 2019, 1(1): 012011.
- [75] Vidal R C, Bentmann H, Peixoto T R F, et al. Surface States and Rashba-Type Spin Polarization in Antiferromagnetic MnBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub>(0001)[J]. *Physical Review B*, 2019, 100(12): 121104.
- [76] Chen Y J, Xu L X, Li J H, et al. Topological Electronic Structure and Its Temperature Evolution in Antiferromagnetic Topological Insulator MnBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub>[J]. *Physical Review X*, 2019, 9(4): 041040.
- [77] Li H, Gao S Y, Duan S F, et al. Dirac Surface States in Intrinsic Magnetic Topological Insulators EuSn<sub>2</sub>As<sub>2</sub> and MnBi<sub>2n</sub>Te<sub>3n+1</sub>[J]. *Physical Review X*, 2019, 9(4): 041039.
- [78] Garnica M, Otrokov M M, Aguilar P C, et al. Native Point Defects and Their Implications for the Dirac Point Gap at MnBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub>(0001)[J]. *npj Quantum Materials*, 2022, 7(1): 1-9.
- [79] Nevola D, Li H X, Yan J Q, et al. Coexistence of Surface Ferromagnetism and a Gapless Topological State in MnBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub>[J]. *Physical Review Letters*, 2020, 125(11): 117205.
- [80] Ning W, Mao Z. Recent Advancements in the Study of Intrinsic Magnetic Topological Insulators and Magnetic Weyl Semimetals[J]. *APL Materials*, 2020,

- 8(9): 090701.
- [81] Bernevig B A, Felser C, Beidenkopf H. Progress and Prospects in Magnetic Topological Materials[J]. *Nature*, 2022, 603(7899): 41-51.
  - [82] Tang P, Zhou Q, Xu G, et al. Dirac Fermions in an Antiferromagnetic Semimetal[J]. *Nature Physics*, 2016, 12(12): 1100-1104.
  - [83] Liu E, Sun Y, Kumar N, et al. Giant Anomalous Hall Effect in a Ferromagnetic Kagome-Lattice Semimetal[J]. *Nature Physics*, 2018, 14(11): 1125-1131.
  - [84] Wang Q, Xu Y, Lou R, et al. Large Intrinsic Anomalous Hall Effect in Half-Metallic Ferromagnet  $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$  with Magnetic Weyl Fermions[J]. *Nature Communications*, 2018, 9(1): 3681.
  - [85] Liu D F, Liang A J, Liu E K, et al. Magnetic Weyl Semimetal Phase in a Kagomé Crystal[J]. *Science*, 2019, 365(6459): 1282-1285.
  - [86] Morali N, Batabyal R, Nag P K, et al. Fermi-Arc Diversity on Surface Terminations of the Magnetic Weyl Semimetal  $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ [J]. *Science*, 2019, 365(6459): 1286-1291.
  - [87] Guin S N, Vir P, Zhang Y, et al. Zero-Field Nernst Effect in a Ferromagnetic Kagome-Lattice Weyl-Semimetal  $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ [J]. *Advanced Materials*, 2019, 31(25): 1806622.
  - [88] Sakai A, Mizuta Y P, Nugroho A A, et al. Giant Anomalous Nernst Effect and Quantum-Critical Scaling in a Ferromagnetic Semimetal[J]. *Nature Physics*, 2018, 14(11): 1119-1124.
  - [89] Belopolski I, Manna K, Sanchez D S, et al. Discovery of Topological Weyl Fermion Lines and Drumhead Surface States in a Room Temperature Magnet[J]. *Science*, 2019, 365(6459): 1278-1281.
  - [90] Li P, Koo J, Ning W, et al. Giant Room Temperature Anomalous Hall Effect and Tunable Topology in a Ferromagnetic Topological Semimetal  $\text{Co}_2\text{MnAl}$ [J]. *Nature Communications*, 2020, 11(1): 3476.
  - [91] Hirschberger M, Kushwaha S, Wang Z, et al. The Chiral Anomaly and Thermopower of Weyl Fermions in the Half-Heusler  $\text{GdPtBi}$ [J]. *Nature Materials*, 2016, 15(11): 1161-1165.
  - [92] Kang M, Ye L, Fang S, et al. Dirac Fermions and Flat Bands in the Ideal Kagome Metal  $\text{FeSn}$ [J]. *Nature Materials*, 2020, 19(2): 163-169.
  - [93] Benalcazar W A, Bernevig B A, Hughes T L. Quantized Electric Multipole Insulators[J]. *Science*, 2017, 357(6346): 61-66.
  - [94] Schindler F, Cook A M, Vergniory M G, et al. Higher-Order Topological Insulators[J]. *Science Advances*, 2018, 4(6): eaat0346.
  - [95] Wieder B J, Wang Z, Cano J, et al. Strong and Fragile Topological Dirac

- Semimetals with Higher-Order Fermi Arcs[J]. *Nature Communications*, 2020, 11(1): 627.
- [96] Fang Y, Cano J. Classification of Dirac Points with Higher-Order Fermi Arcs[J]. *Physical Review B*, 2021, 104(24): 245101.
- [97] Tang F, Po H C, Vishwanath A, et al. Efficient Topological Materials Discovery Using Symmetry Indicators[J]. *Nature Physics*, 2019, 15(5): 470-476.
- [98] Yoon C, Liu C C, Min H, et al. Quasi-One-Dimensional Higher-Order Topological Insulators[M]. *arXiv*, 2020[2022-12-15]. <http://arxiv.org/abs/2005.14710>. DOI:10.48550/arXiv.2005.14710.
- [99] Haldane F D M. Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the “Parity Anomaly”[J]. *Physical Review Letters*, 1988, 61(18): 2015-2018.
- [100] Jotzu G, Messer M, Desbuquois R, et al. Experimental Realization of the Topological Haldane Model with Ultracold Fermions[J]. *Nature*, 2014, 515(7526): 237-240.
- [101] Imhof S, Berger C, Bayer F, et al. Topoelectrical-Circuit Realization of Topological Corner Modes[J]. *Nature Physics*, 2018, 14(9): 925-929.
- [102] Lee C H, Imhof S, Berger C, et al. Topoelectrical Circuits[J]. *Communications Physics*, 2018, 1(1): 1-9.
- [103] Zhao E. Topological Circuits of Inductors and Capacitors[J]. *Annals of Physics*, 2018, 399: 289-313.
- [104] Chen Y, Yin Y, Lin Z K, et al. Observation of Topological P-Orbital Disclination States in Non-Euclidean Acoustic Metamaterials[J]. *Physical Review Letters*, 2022, 129(15): 154301.
- [105] Xue H, Yang Y, Zhang B. Topological Acoustics[J]. *Nature Reviews Materials*, 2022, 7(12): 974-990.
- [106] Haldane F D M, Raghu S. Possible Realization of Directional Optical Waveguides in Photonic Crystals with Broken Time-Reversal Symmetry[J]. *Physical Review Letters*, 2008, 100(1): 013904.
- [107] Ozawa T, Price H M. Topological Quantum Matter in Synthetic Dimensions[J]. *Nature Reviews Physics*, 2019, 1(5): 349-357.
- [108] Devescovi C, García-Díez M, Robredo I, et al. Cubic 3D Chern Photonic Insulators with Orientable Large Chern Vectors[J]. *Nature Communications*, 2021, 12(1): 7330.
- [109] Devescovi C, García-Díez M, Bradlyn B, et al. Vectorial Bulk-Boundary Correspondence for 3D Photonic Chern Insulators[J]. *Advanced Optical Materials*, 2022, 10(20): 2200475.

- 
- [110] Liu G G, Gao Z, Wang Q, et al. Topological Chern Vectors in Three-Dimensional Photonic Crystals[J]. *Nature*, 2022, 609(7929): 925-930.
- [111] Ovchinnikov D, Huang X, Lin Z, et al. Intertwined Topological and Magnetic Orders in Atomically Thin Chern Insulator  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ [J]. *Nano Letters*, 2021, 21(6): 2544-2550.
- [112] Mahan G D. Many-Particle Physics[M]. 3rd ed. New York: Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2000.
- [113] Datta S. Electronic Transport in Mesoscopic Systems[M]. 1. paperback ed. (with corr.), 8. print. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2009.
- [114] Groth C W, Wimmer M, Akhmerov A R, et al. Kwant: A Software Package for Quantum Transport[J]. *New Journal of Physics*, 2014, 16(6): 063065.
- [115] Kumar C, Birkbeck J, Sulpizio J A, et al. Imaging Hydrodynamic Electrons Flowing without Landauer–Sharvin Resistance[J]. *Nature*, 2022, 609(7926): 276-281.
- [116] Kane C L. Quantized Nonlinear Conductance in Ballistic Metals[J]. *Physical Review Letters*, 2022, 128(7): 076801.
- [117] van Wees B J, van Houten H, Beenakker C W J, et al. Quantized Conductance of Point Contacts in a Two-Dimensional Electron Gas[J]. *Physical Review Letters*, 1988, 60(9): 848-850.
- [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] Kou X, Guo S T, Fan Y, et al. Scale-Invariant Quantum Anomalous Hall Effect in Magnetic Topological Insulators beyond the Two-Dimensional Limit[J]. *Physical Review Letters*, 2014, 113(13): 137201.
- [120] Bestwick A J, Fox E J, Kou X, et al. Precise Quantization of the Anomalous Hall Effect near Zero Magnetic Field[J]. *Physical Review Letters*, 2015, 114(18): 187201.
- [121] Deng Y, Yu Y, Shi M Z, et al. Quantum Anomalous Hall Effect in Intrinsic Magnetic Topological Insulator  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ [J]. *Science*, 2020, 367(6480): 895-900.
- [122] 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.
- [123] Li T, Jiang S, Shen B, et al. Quantum Anomalous Hall Effect from Intertwined Moiré Bands[J]. *Nature*, 2021, 600(7890): 641-646.
- [124] Mogi M, Yoshimi R, Tsukazaki A, et al. Magnetic Modulation Doping in Topological Insulators toward Higher-Temperature Quantum Anomalous Hall Effect[J]. *Applied Physics Letters*, 2015, 107(18): 182401.
- [125] Xiao D, Chang M C, Niu Q. Berry Phase Effects on Electronic Properties[J].



- Reviews of Modern Physics, 2010, 82(3): 1959-2007.
- [126] Hu J, Xu S Y, Ni N, et al. Transport of Topological Semimetals[J]. Annual Review of Materials Research, 2019, 49(1): 207-252.
- [127] Burkov A A. Anomalous Hall Effect in Weyl Metals[J]. Physical Review Letters, 2014, 113(18): 187202.
- [128] 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.
- [129] Son D T, Spivak B Z. Chiral Anomaly and Classical Negative Magnetoresistance of Weyl Metals[J]. Physical Review B, 2013, 88(10): 104412.
- [130] Burkov A A. Chiral Anomaly and Transport in Weyl Metals[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2015, 27(11): 113201.
- [131] Ong N P, Liang S. Experimental Signatures of the Chiral Anomaly in Dirac–Weyl Semimetals[J]. Nature Reviews Physics, 2021, 3(6): 394-404.
- [132] Deng M X, Qi G Y, Ma R, et al. Quantum Oscillations of the Positive Longitudinal Magnetoconductivity: A Fingerprint for Identifying Weyl Semimetals[J]. Physical Review Letters, 2019, 122(3): 036601.
- [133] Zhang C L, Xu S Y, Belopolski I, et al. Signatures of the Adler–Bell–Jackiw Chiral Anomaly in a Weyl Fermion Semimetal[J]. Nature Communications, 2016, 7(1): 10735.
- [134] Li Q, Kharzeev D E, Zhang C, et al. Chiral Magnetic Effect in ZrTe5[J]. Nature Physics, 2016, 12(6): 550-554.
- [135] Wang Y, Liu E, Liu H, et al. Gate-Tunable Negative Longitudinal Magnetoresistance in the Predicted Type-II Weyl Semimetal WTe2[J]. Nature Communications, 2016, 7(1): 13142.
- [136] Wang H, Wang J. Electron Transport in Dirac and Weyl Semimetals[J]. Chinese Physics B, 2018, 27(10): 107402.
- [137] Abrikosov A A. Quantum Magnetoresistance[J]. Physical Review B, 1998, 58(5): 2788-2794.
- [138] Zhao Y, Liu H, Zhang C, et al. Anisotropic Fermi Surface and Quantum Limit Transport in High Mobility Three-Dimensional Dirac Semimetal Cd3As2[J]. Physical Review X, 2015, 5(3): 031037.
- [139] Du Z Z, Lu H Z, Xie X C. Nonlinear Hall Effects[J]. Nature Reviews Physics, 2021, 3(11): 744-752.
- [140] Li S, Wang C M, Du Z Z, et al. 3D Quantum Hall Effects and Nonlinear Hall Effect[J]. npj Quantum Materials, 2021, 6(1): 1-5.
- [141] Ma Q, Xu S Y, Shen H, et al. Observation of the Nonlinear Hall Effect under Time-Reversal-Symmetric Conditions[J]. Nature, 2019, 565(7739): 337-342.

- 
- [142] Sodemann I, Fu L. Quantum Nonlinear Hall Effect Induced by Berry Curvature Dipole in Time-Reversal Invariant Materials[J]. *Physical Review Letters*, 2015, 115(21): 216806.
  - [143] Du Z Z, Wang C M, Lu H Z, et al. Band Signatures for Strong Nonlinear Hall Effect in Bilayer WTe<sub>2</sub>[J]. *Physical Review Letters*, 2018, 121(26): 266601.
  - [144] Wang C M, Lu H Z, Shen S Q. Anomalous Phase Shift of Quantum Oscillations in 3D Topological Semimetals[J]. *Physical Review Letters*, 2016, 117(7): 077201.
  - [145] Li C, Wang C M, Wan B, et al. Rules for Phase Shifts of Quantum Oscillations in Topological Nodal-Line Semimetals[J]. *Physical Review Letters*, 2018, 120(14): 146602.
  - [146] Zhao Y F, Zhang R, Mei R, et al. Tuning the Chern Number in Quantum Anomalous Hall Insulators[J]. *Nature*, 2020, 588(7838): 419-423.
  - [147] Zhao Y F, Zhang R, Zhou L J, et al. Zero Magnetic Field Plateau Phase Transition in Higher Chern Number Quantum Anomalous Hall Insulators[J]. *Physical Review Letters*, 2022, 128(21): 216801.
  - [148] Tang F, Ren Y, Wang P, et al. Three-Dimensional Quantum Hall Effect and Metal–Insulator Transition in ZrTe<sub>5</sub>[J]. *Nature*, 2019, 569(7757): 537-541.
  - [149] Chu R L, Shi J, Shen S Q. Surface Edge State and Half-Quantized Hall Conductance in Topological Insulators[J]. *Physical Review B*, 2011, 84(8): 085312.
  - [150] Nenno D M, Garcia C A C, Gooth J, et al. Axion Physics in Condensed-Matter Systems[J]. *Nature Reviews Physics*, 2020, 2(12): 682-696.
  - [151] Mogi M, Okamura Y, Kawamura M, et al. Experimental Signature of the Parity Anomaly in a Semi-Magnetic Topological Insulator[J]. *Nature Physics*, 2022, 18(4): 390-394.
  - [152] Xu R, Husmann A, Rosenbaum T F, et al. Large Magnetoresistance in Non-Magnetic Silver Chalcogenides[J]. *Nature*, 1997, 390(6655): 57-60.
  - [153] Chen R Y, Chen Z G, Song X Y, et al. Magnetoinfrared Spectroscopy of Landau Levels and Zeeman Splitting of Three-Dimensional Massless Dirac Fermions in ZrTe<sub>5</sub>[J]. *Physical Review Letters*, 2015, 115(17): 176404.
  - [154] Manzoni G, Gragnaniello L, Autès G, et al. Evidence for a Strong Topological Insulator Phase in ZrTe<sub>5</sub>[J]. *Physical Review Letters*, 2016, 117(23): 237601.
  - [155] Alekseev P S, Dmitriev A P, Gornyi I V, et al. Magnetoresistance in Two-Component Systems[J]. *Physical Review Letters*, 2015, 114(15): 156601.
  - [156] Alekseev P S, Dmitriev A P, Gornyi I V, et al. Magnetoresistance of Compensated Semimetals in Confined Geometries[J]. *Physical Review B*, 2017, 95(16): 165410.
  - [157] Song J C W, Refael G, Lee P A. Linear Magnetoresistance in Metals: Guiding Center Diffusion in a Smooth Random Potential[J]. *Physical Review B*, 2015,

- 92(18): 180204.
- [158] Xiao C, Chen H, Gao Y, et al. Linear Magnetoresistance Induced by Intra-Scattering Semiclassics of Bloch Electrons[J]. *Physical Review B*, 2020, 101(20): 201410.
- [159] Bruus H, Flensberg K. *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction*[M]. Oxford ; New York: Oxford University Press, 2004.
- [160] Sakurai J J, Napolitano J. *Modern Quantum Mechanics*[M]. 2nd ed. Boston: Addison-Wesley, 2011.
- [161] Shoenberg D. *Magnetic Oscillations in Metals*[M]. Cambridge [Cambridgeshire] ; New York: Cambridge University Press, 1984.
- [162] Parish M M, Littlewood P B. Non-Saturating Magnetoresistance in Heavily Disordered Semiconductors[J]. *Nature*, 2003, 426(6963): 162-165.
- [163] He L P, Hong X C, Dong J K, et al. Quantum Transport Evidence for the Three-Dimensional Dirac Semimetal Phase in Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub>[J]. *Physical Review Letters*, 2014, 113(24): 246402.
- [164] Narayanan A, Watson M D, Blake S F, et al. Linear Magnetoresistance Caused by Mobility Fluctuations in N-Doped Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub>[J]. *Physical Review Letters*, 2015, 114(11): 117201.
- [165] Xiang Z J, Zhao D, Jin Z, et al. Angular-Dependent Phase Factor of Shubnikov--de Haas Oscillations in the Dirac Semimetal Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub>[J]. *Physical Review Letters*, 2015, 115(22): 226401.
- [166] Takiguchi K, Wakabayashi Y K, Irie H, et al. Quantum Transport Evidence of Weyl Fermions in an Epitaxial Ferromagnetic Oxide[J]. *Nature Communications*, 2020, 11(1): 4969.
- [167] Laha A, Mardanya S, Singh B, et al. Magnetotransport Properties of the Topological Nodal-Line Semimetal CaCdSn[J]. *Physical Review B*, 2020, 102(3): 035164.
- [168] Yang J, Song Z Y, Guo L, et al. Nontrivial Giant Linear Magnetoresistance in Nodal-Line Semimetal ZrGeSe 2D Layers[J]. *Nano Letters*, 2021, 21(23): 10139-10145.
- [169] Wu J, Li Y, Pan D, et al. Effect of Grain Boundaries on Charge Transport in CVD-Grown Bilayer Graphene[J]. *Carbon*, 2019, 147: 434-440.
- [170] Niu Q, Yu W C, Yip K Y, et al. Quasilinear Quantum Magnetoresistance in Pressure-Induced Nonsymmorphic Superconductor Chromium Arsenide[J]. *Nature Communications*, 2017, 8(1): 15358.
- [171] Giraldo-Gallo P, Galvis J A, Stegen Z, et al. Scale-Invariant Magnetoresistance in a Cuprate Superconductor[J]. *Science*, 2018, 361(6401): 479-481.

- 
- [172] Sarkar T, Mandal P R, Poniatowski N R, et al. Correlation between Scale-Invariant Normal-State Resistivity and Superconductivity in an Electron-Doped Cuprate[J]. Science Advances, 2019, 5(5): eaav6753.
  - [173] Maksimovic N, Hayes I M, Nagarajan V, et al. Magnetoresistance Scaling and the Origin of H-Linear Resistivity in  $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ [J]. Physical Review X, 2020, 10(4): 041062.
  - [174] Lei X, Zhou L, Hao Z Y, et al. Surface-Induced Linear Magnetoresistance in the Antiferromagnetic Topological Insulator  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ [J]. Physical Review B, 2020, 102(23): 235431.
  - [175] Campbell D J, Collini J, Sławińska J, et al. Topologically Driven Linear Magnetoresistance in Helimagnetic FeP[J]. npj Quantum Materials, 2021, 6(1): 1-7.
  - [176] Klier J, Gornyi I V, Mirlin A D. Transversal Magnetoresistance in Weyl Semimetals[J]. Physical Review B, 2015, 92(20): 205113.
  - [177] Xiao X, Law K T, Lee P A. Magnetoconductivity in Weyl Semimetals: Effect of Chemical Potential and Temperature[J]. Physical Review B, 2017, 96(16): 165101.
  - [178] Könye V, Ogata M. Magnetoresistance of a Three-Dimensional Dirac Gas[J]. Physical Review B, 2018, 98(19): 195420.
  - [179] Rodionov Ya I, Kugel K I, Aronzon B A, et al. Effect of Disorder on the Transverse Magnetoresistance of Weyl Semimetals[J]. Physical Review B, 2020, 102(20): 205105.
  - [180] Parish M M, Littlewood P B. Classical Magnetotransport of Inhomogeneous Conductors[J]. Physical Review B, 2005, 72(9): 094417.
  - [181] Hu J, Parish M M, Rosenbaum T F. Nonsaturating Magnetoresistance of Inhomogeneous Conductors: Comparison of Experiment and Simulation[J]. Physical Review B, 2007, 75(21): 214203.
  - [182] Xu J, Zhang D, Yang F, et al. A Three-Dimensional Resistor Network Model for the Linear Magnetoresistance of  $\text{Ag}_{2+\delta}\text{Se}$  and  $\text{Ag}_{2+\delta}\text{Te}$  Bulks[J]. Journal of Applied Physics, 2008, 104(11): 113922.
  - [183] Ramakrishnan N, Lai Y T, Lara S, et al. Equivalence of Effective Medium and Random Resistor Network Models for Disorder-Induced Unsaturating Linear Magnetoresistance[J]. Physical Review B, 2017, 96(22): 224203.
  - [184] Chen S S, Yang Y, Yang F. Analytical Formula Describing the Non-Saturating Linear Magnetoresistance in Inhomogeneous Conductors[J]. Chinese Physics B, 2022, 31(8): 087303.
  - [185] Kisslinger F, Ott C, Weber H B. Origin of Nonsaturating Linear Magnetoresistivity[J]. Physical Review B, 2017, 95(2): 024204.

- [186] Chandan, Islam S, Venkataraman V, et al. Observation of Linear Magneto-Resistance with Small Cross-over Field at Room Temperature in Bismuth[J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 2020, 53(42): 425102.
- [187] Zhu W L, Cao Y, Guo P J, et al. Linear Magnetoresistance Induced by Mobility Fluctuations in Iodine-Intercalated Tungsten Ditelluride[J]. Physical Review B, 2022, 105(12): 125116.
- [188] Murzin S S. Electron Transport in the Extreme Quantum Limit in Applied Magnetic Field[J]. Physics-Uspekhi, 2000, 43(4): 349.
- [189] Black-Schaffer A M, Balatsky A V, Fransson J. Filling of Magnetic-Impurity-Induced Gap in Topological Insulators by Potential Scattering[J]. Physical Review B, 2015, 91(20): 201411.
- [190] Xu Y, Chiu J, Miao L, et al. Disorder Enabled Band Structure Engineering of a Topological Insulator Surface[J]. Nature Communications, 2017, 8(1): 14081.
- [191] Li S, Wang C, Zheng S H, et al. Dynamic Conductivity Modified by Impurity Resonant States in Doping Three-Dimensional Dirac Semimetals[J]. Frontiers of Physics, 2017, 13(2): 137303.
- [192] Santos Pires J P, João S M, Ferreira A, et al. Anomalous Transport Signatures in Weyl Semimetals with Point Defects[J]. Physical Review Letters, 2022, 129(19): 196601.
- [193] Störmer H L, Eisenstein J P, Gossard A C, et al. Quantization of the Hall Effect in an Anisotropic Three-Dimensional Electronic System[J]. Physical Review Letters, 1986, 56(1): 85-88.
- [194] Halperin B I. Possible States for a Three-Dimensional Electron Gas in a Strong Magnetic Field[J]. Japanese Journal of Applied Physics, 1987, 26(S3-3): 1913.
- [195] Kohmoto M, Halperin B I, Wu Y S. Quantized Hall Effect in 3D Periodic Systems[J]. Physica B: Condensed Matter, 1993, 184(1): 30-33.
- [196] Bernevig B A, Hughes T L, Raghu S, et al. Theory of the Three-Dimensional Quantum Hall Effect in Graphite[J]. Physical Review Letters, 2007, 99(14): 146804.
- [197] Wang C M, Sun H P, Lu H Z, et al. 3D Quantum Hall Effect of Fermi Arcs in Topological Semimetals[J]. Physical Review Letters, 2017, 119(13): 136806.
- [198] Zhang C, Zhang Y, Yuan X, et al. Quantum Hall Effect Based on Weyl Orbits in Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub>[J]. Nature, 2019, 565(7739): 331-336.
- [199] Jiang Y, Dun Z L, Zhou H D, et al. Landau-Level Spectroscopy of Massive Dirac Fermions in Single-Crystalline ZrTe<sub>5</sub> Thin Flakes[J]. Physical Review B, 2017, 96(4): 041101.
- [200] Zhang J L, Wang C M, Guo C Y, et al. Anomalous Thermoelectric Effects of ZrTe<sub>5</sub>

- in and beyond the Quantum Limit[J]. Physical Review Letters, 2019, 123(19): 196602.
- [201] Grüner G. Density Waves in Solids[M]. First issued in hardback. London: CRC Press, 2019.
- [202] Geng H, Qi G Y, Sheng L, et al. Theoretical Study of the Three-Dimensional Quantum Hall Effect in a Periodic Electron System[J]. Physical Review B, 2021, 104(20): 205305.
- [203] Peccei R D, Quinn H R. CP Conservation in the Presence of Pseudoparticles[J]. Physical Review Letters, 1977, 38(25): 1440-1443.
- [204] Zhao Y, Liu Q. Routes to Realize the Axion-Insulator Phase in  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_n$  Family[J]. Applied Physics Letters, 2021, 119(6): 060502.
- [205] Sekine A, Nomura K. Axion Electrodynamics in Topological Materials[J]. Journal of Applied Physics, 2021, 129(14): 141101.
- [206] Yan J Q, Zhang Q, Heitmann T, et al. Crystal Growth and Magnetic Structure of  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$ [J]. Physical Review Materials, 2019, 3(6): 064202.
- [207] Zhang R X, Wu F, Das Sarma S. Möbius Insulator and Higher-Order Topology in  $\text{MnBi}_{2n}\text{Te}_{3n+1}$ [J]. Physical Review Letters, 2020, 124(13): 136407.
- [208] Griffiths D J. Introduction to Quantum Mechanics[M]. 2. ed., new internat. ed. Harlow: Pearson Education, 2014.
- [209] Chen R, Li S, Sun H P, et al. Using Nonlocal Surface Transport to Identify the Axion Insulator[J]. Physical Review B, 2021, 103(24): L241409.
- [210] Zhou H, Li H, Xu D H, et al. Transport Theory of Half-Quantized Hall Conductance in a Semimagnetic Topological Insulator[J]. Physical Review Letters, 2022, 129(9): 096601.

## 攻读博士学位期间发表的论文

### （一）与本学位论文有关的学术论文

- [1] **Li S**, Liu T, Liu C, et al. Progress on Antiferromagnetic Topological Insulator  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  [J]. National Science Review, 2023, DOI: 10.1093/nsr/nwac296 （SCI 收录, IF =23.178, 对应学位论文第 5 章）
- [2] **Li S**, Wang C M, Du Z Z, et al. 3D Quantum Hall Effects and Nonlinear Hall Effect [J]. npj Quantum Materials, 2021, 6(1): 1-5. （SCI 收录, IF =6.85, 对应学位论文第 4 章）
- [3] **Li S**, Lu H-Z, Xie X C. Impurity and Dispersion Effects on the Linear Magnetoresistance in the Quantum Limit [J]. 2023, Arxiv: 2212.00383. （在审, 对应学位论文第 2 章和第 3 章）
- [4] Chen R, **Li S**, Sun H-P, et al. Using Nonlocal Surface Transport to Identify the Axion Insulator [J]. Physical Review B, 2021, 103(24): L241409. （SCI 收录, IF =3.908, 对应学位论文第 5 章）
- [5] Qin F, **Li S**, Du Z Z, et al. Theory for the Charge-Density-Wave Mechanism of 3D Quantum Hall Effect [J]. Physical Review Letters, 2020, 125(20), 206601. （SCI 收录, IF =9.185, 对应学位论文第 4 章）

# 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

## 学位论文原创性声明

本人郑重声明：此处所提交的学位论文《磁场与磁性调控的拓扑材料输运性质研究》，是本人在导师指导下，在学校攻读学位期间独立进行研究工作所取得的成果，且学位论文中除已标注引用文献的部分外不包含他人完成或已发表的研究成果。对本学位论文的研究工作做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式注明。

作者签名：李帅

日期：2023 年 4 月 23 日

## 学位论文使用权限

学位论文是研究生在学校攻读学位期间完成的成果，知识产权归属南方科技大学。学位论文的使用权限如下：

(1) 学校可以采用影印、缩印或其他复制手段保存研究生上交的学位论文，并向国家图书馆报送学位论文；(2) 学校可以将学位论文部分或全部内容编入有关数据库进行检索和提供相应阅览服务；(3) 研究生毕业后发表与此学位论文研究成果相关的学术论文和其他成果时，应征得导师同意，且第一署名单位为南方科技大学。

保密论文在保密期内遵守有关保密规定，解密后适用于此使用权限规定。

本人知悉学位论文的使用权限，并将遵守有关规定。

作者签名：李帅

日期：2023 年 4 月 23 日

导师签名：李海田

日期：2023 年 4 月 23 日



## 致 谢

首先我要感谢我的导师卢海舟老师。我是从卢老师这里学会了研究物理和撰写科研论文的方法。卢老师在凝聚态物理研究中,十分关注与课题相关的实验方面研究情况。他经常对许多实验测量结果进行分析和研究,并且会考虑理论研究在实验中实现的可能性。卢老师在这方面的影响十分大,我还记得在我刚来到卢老师组里时,卢老师看到我的理论推导都会让我检查推导结果的量纲,并让我结合实验上的具体参数进行计算。卢老师还教授我许多他总结出的撰写论文经验,给我讲解了许多在写作中“为什么这样写”的原因。在学习上,卢老师十分鼓励我打好凝聚态理论知识的基础,并在博士一年级和二年级给与了我足够多的学习时间,这一点我尤为感激。此外,在我学习材料输运方面的内容时,卢老师还将自己的笔记分享给了我,让我从中学到了许多。不仅是学习上、研究上,卢老师在生活上也十分务实。他会关心我们学生的住宿条件和办公环境。在我进行博士论文预答辩前,他和我一起一张张地过了幻灯片演示文稿,卢老师不仅从正确性、严谨性上给出了很多意见,而且对内容的表现方式和细节也提了很多很好的建议。

我要感谢在这段旅程中共处的南科大的师生。首先十分感谢我的物理科目任课老师。许志芳老师、陈伟强老师和刘奇航老师分别教授了我高等统计物理、固体理论和群论。我对凝聚态理论的兴趣便是在课堂上以及和他们的讨论中逐渐产生的,感谢他们无私的分享和认真的教学。物理系办公室的李爱晨老师负责了我博士期间所有和学位相关的工作,李老师帮我解决了许多毕业流程中遇到的问题,感谢李老师的专业和认真尽责。在卢老师的课题组,我和许多师兄师弟一同学习成长的日子十分愉快!我要对他们每一个人表示感谢。尤其是孙海鹏师兄,在我刚来到卢老师课题组时,师兄和赵光琦师弟热心的接纳了我,在师兄毕业后到德国做博士后期间他还时常关心我的学习和科研状况。我搬到新的办公室后,经常和我的师弟们一起讨论问题一起吃饭,在这里我想感谢我的师弟强晓斌、史磊、陈毅远、林浩杰、龚振昊,和你们一起的日子十分愉快!同时我从我们课题组博后师兄那里学到了许多知识,在这里我要对杜宗正博士、覃昉博士、陈锐博士和赵鹏露博士表示郑重地感谢。我也要感谢我们课题组里的研究助理教授王春明老师和刘天宇师兄。我从王老师那里学到了许多关于数值计算和输运理论的知识,感谢王老师能够无私地、耐心地教导我。天宇师兄是我预答辩和正式答辩的秘书,他为了我的答辩工作抽出了宝贵的时间,我对此表示深深的感谢!我们课题组工作的正常进行离不开课题组秘书刘亚磊和田彩娟的支持,我在对她们表示衷心的感谢。在南科大,我最喜欢的地方是学校图书馆,我经常去琳恩图书馆和后来建成的一丹图书馆,现在我正是坐在一

丹图书馆写下这段致谢的。南科大的图书馆提供的不仅是数目繁多的书籍，还给我们提供了一处空间。感谢图书馆的每一位员工和为图书馆发展建设做贡献的每一位人员。此外，我要感谢和我一同从华南师范大学到南科大读书的刘宝杰师兄、傅培浩和李嘉裕。宝杰师兄比我们要先来到这里，在我们到这里后给我们提供了许多帮助。培浩和嘉裕是我在读研究生期间相处最久的两人，和他俩共同学习和相处的日子我会永远珍惜。同时，我想感谢我在华南师范大学的导师王瑞强老师，我是在他细心指导下开始科研的，也是在他的鼓励下攻读博士学位的。

我要感谢哈工大的刘树田老师和王玉晓老师能够参加我的博士论文预答辩。刘老师和王老师在预答辩时给我提出的修改建议十分有益，让我进一步完善了本论文。我要感谢参加我博士论文答辩的各位老师：哈工大的王先杰老师和肖君军老师，南科大物理系的赵悦老师、何洪涛老师、杨兵老师、刘畅老师以及我的导师卢老师。感谢他们为我的论文答辩所花费的时间和精力，以及给我提出了宝贵的修改建议。我十分高兴能在答辩结束后与他们一起留下珍贵的合照。

最后我想感谢我的家人，他们对我的支持是我能够完成学业的基础。尤其感谢我的父亲，他对我格外地关心，时常询问我学业的状况并尽力地帮助我。我在读书期间经常与我的母亲通电话，母亲不仅关心我的学业还关心我的生活情况。此外，父母在经济上对我和我妻子两人的支持是我能够专心读书基础。我读硕士和博士花费了很多年时间，而我的妻子一直陪伴着我，我们共同度过了许多难忘的时光。我的姐姐也一直关心着我，她经常到父母身边才使我能够安心读书。我在深圳的叔叔、婶婶这些年为我提供了许多帮助，我和他们一起度过了许多欢快时光。

## 个人简历

姓 名：李帅

性 别：男

出生年月：1993 年 04 月 23 日

民 族：汉

籍 贯：河南省驻马店市西平县

研究方向：拓扑材料的输运性质

学习经历：

2011 年 9 月——2015 年 6 月，在河南师范大学物理与材料科学学院学习并获得理学学士学位。

2015 年 9 月——2018 年 6 月，在华南师范大学物理与电信工程学院理论物理专业攻读硕士学位并获理学硕士学位。

2018 年 9 月——2023 年 7 月，哈尔滨工业大学和南方科技大学联培生，在南方科技大学理学院物理系攻读博士学位。