

# 拓扑反能带理论

柯勇贯<sup>1,2</sup> 李朝红<sup>1,†</sup>

(1 深圳大学物理与光电工程学院 量子精密测量研究所 深圳 518060)

(2 中山大学物理与天文学院 量子工程与精密测量实验室 珠海 519082)

2023-10-09收到

† email: chleecn@szu.edu.cn

DOI: 10.7693/wl20231106

## 1 拓扑能带理论

能带理论是量子力学在固体材料中的一次伟大应用，催生了半导体和半导体激光等发明，促进了第三次工业革命。根据量子力学，我们知道原子中的电子只能处于离散的能级。如果原子之间的距离很远，那么电子被束缚在各自的原子核附近，原子系综存在大量的相互独立的简并能级。然而，如果将原子紧密周期排列，电子可以在不同的原子间运动，耦合简并能级，使得简并能级间发生能级排斥，能量随着晶格动量的变化形成连续的能带。人们根据能带带隙的大小将固体材料分为金属、绝缘体和半导体，能带带隙也决定了半导体激光、发光二极管的发光频率。

然而，量子力学中的另一个重要特征，量子相位，在能带理论发展的很长一段时间内却没有受到太多的关注。转变发生在1980年，克利钦(Von Klitzing)在考虑强磁场中的低温二维电子材料时，发现了霍尔电导随磁场强度的台阶式变化<sup>[1]</sup>。直到索利斯(Thouless)等人利用能带中的电子布洛赫态构造拓扑不变量来解释整数量子霍尔效应<sup>[2]</sup>，人们才意识到拓扑量子相位可决定性地影响电子的传输行为。在此之前，人们主要通过对称性自发破缺来理解物态的变化(即相变)。然而，在整数量子霍尔效应中，体系对称性并没有发生改变，是能带拓扑不变量的改变带来了霍尔电导的变化。这种新的物态被称为拓扑物态，之后迅速成为凝聚态物理的研究热点，使人们在观念上发生了革命性的转变。

随后，人们逐渐完善了拓扑能带理论：拓扑相变一般伴随着能带带隙的闭合；非平庸的体态

拓扑特性会带来拓扑边缘态，可以在一定程度上抵抗缺陷和无序。这是著名的体边对应关系。以Su—Schrieffer—Heeger (SSH)模型为例<sup>[3]</sup>，其描述电子在强键、弱键交错变化的二聚体中的运动。由于体系具有平移不变性，一个原胞包含两个原子，能量随晶格动量的变化形成两条能带。在电场的作用下，当电子在一条能带上绝热演化一个周期，体系会积累一个依赖于布洛赫态的几何相位<sup>[4]</sup>，被称为扎克(Zak)相位。如果原胞内的耦合小于原胞之间的耦合(图1(a))，扫描整个能带积累的扎克相位为 $\pi$ (图1(c))，是拓扑非平庸的；如果原胞内的耦合大于原胞之间的耦合(图1(b))，扫描整个能带积累的扎克相位为零(图1(d))，是拓扑平庸的。原胞内的耦合等于原胞之间的耦合是拓扑相变点，两条能带发生能隙闭合。在开边界条件下，当扎克相位为 $\pi$ 时，存在两个零能模式

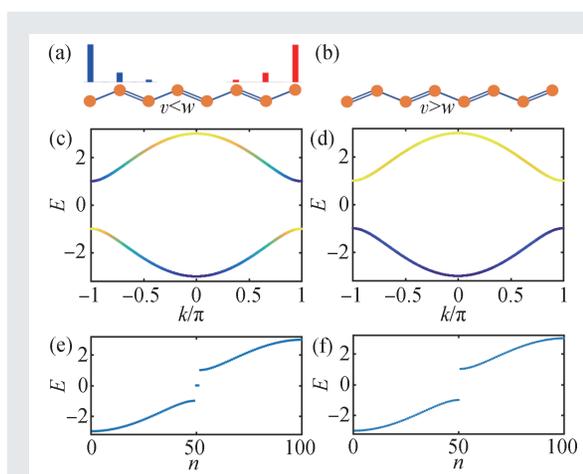


图1 拓扑能带理论。拓扑情况下：(a)原胞内隧穿强度 $v$ 小于原胞间隧穿强度 $w$ ；(c)能带图，颜色的变化代表布洛赫态在奇偶格点的耦合强度的变化；(e)开边界条件下的能谱，中间存在两个零能模式，分别对应插图中局域在左边和右边的边缘态。平庸情况下：(b)原胞内隧穿强度 $v$ 大于原胞间隧穿强度 $w$ ；(d)能带图；(f)开边界条件下的能谱

(图1(e)), 分别对应局域在左边界和右边界的边缘态(图1(a)上的插图); 当扎克相位为零时, 体系不存在边缘态(图1(f))。

后来, 霍尔丹(Haldane)提出一个无需磁场也能出现量子化霍尔电导的模型<sup>[5]</sup>, 指出时间反演对称性破缺才是整数量子霍尔效应的关键。沿着这一思路, 人们根据对称性和维度对无相互作用的电子体系进行拓扑分类, 并利用拓扑能带理论预言了许多新奇的拓扑物态, 比如拓扑绝缘体、自旋量子霍尔效应、量子反常霍尔效应等。拓扑能带理论已经成为一个研究拓扑量子物态的强大工具<sup>[6]</sup>。

## 2 波导量子电动力学

近年来, 人们利用拓扑物态来设计和调控光场, 逐步发展了拓扑光子学这一前沿领域<sup>[7]</sup>。对光子体系而言, 人们可以很容易调控增益、耗散以及光与原子之间的相互作用, 已经实现了拓扑绝缘体激光<sup>[8]</sup>, 其具有更优异的单色性、发光效率和稳定性。为了更好地揭示拓扑特性对光与物质相互作用的影响, 我们需要回归到更加基础的量子电动力学。

波导量子电动力学研究原子—波导体系中光子与原子的相互作用<sup>[9]</sup>。由于光子被限制在波导内传播, 大大增强了光子和原子之间的相互作用。光子波导适合长距离、低损耗的信息传输, 原子(或人工原子)一般由原子、分子、超导比特或者

量子点组成, 可以实现复杂的信息处理和长时间的信息存储。波导量子电动力学体系结合了光子波导和原子各自的优势, 将成为量子信息运输、存储和处理的基本组成单元和关键节点。近年来, 人们已经基于超导比特线路、冷原子与光纤耦合、量子点与波导耦合等平台实现了波导量子电动力学体系。基于波导量子电动力学体系, 研究拓扑特性对光子散射的影响, 有助于实现拓扑保护的光量子器件、量子通信以及量子信息处理。

拓扑波导量子电动力学的早期工作主要是研究拓扑边缘态<sup>[10-12]</sup>。然而, 体态拓扑特性如何影响光子散射仍然不清楚。由于光子可以协助激发子在任意的原子之间实现长程隧穿, 光子散射使得激发子的能量发散并导致能带不连续, 我们无法直接运用拓扑能带理论来理解体态的拓扑性质。这要求我们发展新的理论来分析波导量子电动力学体系中的拓扑特性对光子散射的影响<sup>[13]</sup>。

## 3 拓扑反能带

不失一般性, 我们考虑具有空间反射对称性的波导量子电动力学体系, 如图2(a)所示, 原子的位置空间 $j$ 被周期调制,  $z_j = dj + \delta \cos \theta(-1)^j$ , 其中,  $d$ 为平均原子间距,  $\delta$ 为调制强度,  $\theta$ 为调制相位。这里, 每个原胞包含两个原子。在周期性边界条件下, 该体系具有平移不变性, 晶格动量 $k$ 是一个守恒量。我们可以得到本征能量随晶格动量的变化, 形成的能带如图2(c)所示。其中一个能带在某些特定晶格动量附近发散, 分裂为不连续的上下两支。能带的发散来源于激发子在不同原子之间存在长程耦合。不连续的能带阻碍了我们进一步计算能带的拓扑不变量。

为了解决拓扑能带理论失效的问题, 我们提出了反能带这一新概念: 能量的倒数随晶格动量连续的变化,  $\bar{\omega}_k = (\omega_k - \omega_0)^{-1}$ , 其中 $\omega_0$ 是两能级原子的共振频率。通过变换, 能带中不连续的两个分支精确映射成为一个连续的反能带(图2(d))。由于反能带与能带的本征值之间一一对应, 他们具有相同的布洛赫态 $|\bar{u}_{n,k}\rangle$ , 所以反能带中布洛赫态的整体拓扑相位也能反映原来体系的拓

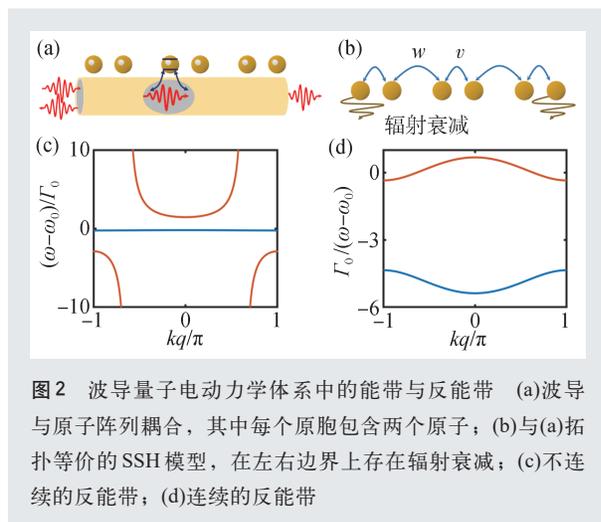


图2 波导量子电动力学体系中的能带与反能带 (a)波导与原子阵列耦合, 其中每个原胞包含两个原子; (b)与(a)拓扑等价的SSH模型, 在左右边界上存在辐射衰减; (c)不连续的反能带; (d)连续的反能带

扑特性。我们可以计算反能带以及反能带的扎克相位,  $\gamma = \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} \langle \bar{u}_{n,k} | \frac{\partial}{\partial k} | \bar{u}_{n,k} \rangle dk$ 。由于体系具有反射对称性, 所以扎克相位要么  $\gamma = 0$ , 要么  $\gamma = \pi$ 。我们发现随着结构参数  $\theta$  和频率参数  $\varphi = \omega d/c \approx \omega_0 d/c$  的改变, 扎克相位在  $\gamma = 0$  和  $\gamma = \pi$  之间发生转变, 如图 3(a) 所示。其中, 黄色区域代表  $\gamma = \pi$ , 白色区域代表  $\gamma = 0$ 。当拓扑相变发生时, 反能带的带隙也会发生闭合。在电子材料中, 拓扑相位大部分由晶格结构决定, 而在我们研究波动量子电动体系时, 可以通过改变入射光子的频率来驱动拓扑相变。

在拓扑能带理论中, 体边对应是一个非常重要的发现。然而, 在开边界条件下, 不管在平庸相还是拓扑相, 在反能带的带隙中, 都不存在孤立的边缘态, 如图 3(c) 所示。为了解释体边对应的破缺, 我们计算有效哈密顿量的逆, 得到一个在左右两端点带耗散衰减项的等效 SSH 模型(图 2(b))。由于左右两端的激发子很容易变成光子逃出原子阵列, 破坏了拓扑边缘态。然而, 如果将拓扑平庸和拓扑非平庸的结构拼接, 在界面处仍可出现拓扑边缘态, 这是因为在界面处并不存在耗散衰减。

虽然左右两端的耗散破坏了拓扑边缘态, 但是耗散也会带来对称的标度不变的局域态(图 3(b)),  $|\psi_{\text{loc}}(j)|^2 \sim (e^{-aj/N} + e^{aj/N})^2$ , 其概率由两端向内部衰减, 衰减率  $(a/N)$  是原胞数的倒数。为了揭示标度不变的局域态在不同反能带的分布, 我们在反能谱中用颜色来表示所有态的反参与率,  $\text{IPR} = \sum_j |\psi_n(j)|^4$ 。反参与率越大, 对应的本征态越局域, 反之越延展。图 3(c) 中黄色对应的本征态是标度不变的局域态。我们发现, 在拓扑平庸相, 标度不变的局域态分布在两个反能带; 而在拓扑相, 标度不变的局域态分布在其中一个反能带。拓扑体系中的耗散衰减一方面破坏了传统的体边

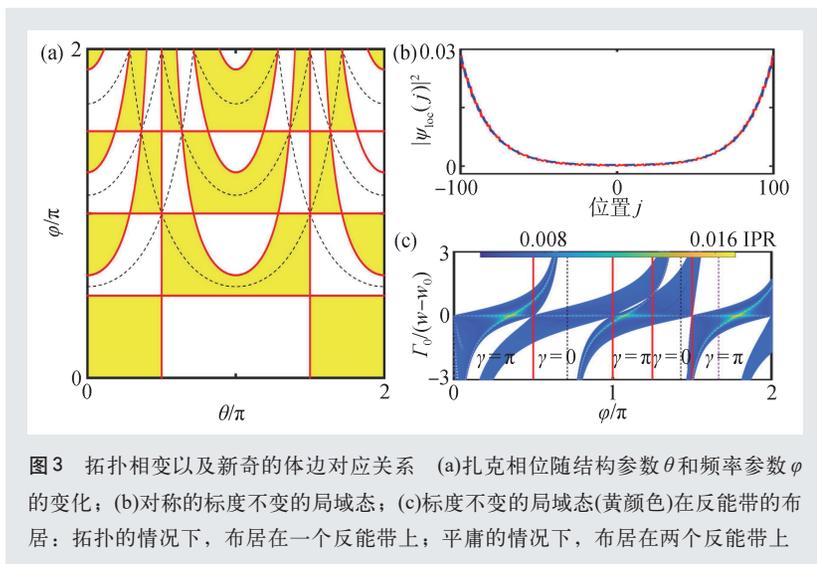


图3 拓扑相变以及新奇的体边对应关系 (a) 扎克相位随结构参数  $\theta$  和频率参数  $\varphi$  的变化; (b) 对称的标度不变的局域态; (c) 标度不变的局域态(黄颜色)在反能带的布居: 拓扑的情况下, 布居在一个反能带上; 平庸的情况下, 布居在两个反能带上

对应关系, 另一方面也会带来新的体边对应关系。

## 4 光子散射

为了理解激发子态的拓扑如何影响光子散射, 我们考虑一个动量为  $\kappa$  的光子入射波导, 通过跟激发子相互作用之后, 要么透射, 要么反射。光子透射和反射会携带激发子拓扑的信息。我们将透射系数  $(t_\kappa)$  和反射系数  $(r_\kappa)$  当成一个二能级量子态的两个分量,  $|\psi_\kappa\rangle = (t_\kappa, r_\kappa)^T$ 。为了得到散射的振幅和相位全部信息, 我们定义散射纹理,  $\mathbf{s}_i = \langle \psi_\kappa | \sigma_i | \psi_\kappa \rangle$ , 其中  $\sigma_i$  是泡利矩阵。如果用  $\kappa$  的变化扫描其中一个反能带, 散射纹理  $\mathbf{s} = (s_x, s_y, s_z)$  的轨迹落在一个平面上。我们可以在该平面上定义轨迹缠绕原点的圈数。这个缠绕数不仅取决于激发子反能带的扎克相位, 还依赖于原胞数目的奇偶性。当原胞数是偶数时, 如果激发子反能带的扎克相位是  $\pi$ , 光子散射的绕数为 1; 如果激发子反能带的扎克相位为 0, 光子散射的绕数为 0。当原胞是偶数时, 上面的情况刚好相反。这一发现揭示了拓扑和光子散射的复杂性。

## 5 总结与展望

拓扑反能带提供了一个理论框架来理解光与原子相互作用中的拓扑量子物态, 特别是无法用

拓扑能带理论理解的现象,如拓扑特性对光子散射的影响。我们可以将这一理论推广到高维的波导量子电动力学体系。由于高维度的体系支持更多的对称性以及更加丰富的拓扑量子物态,研究此类拓扑量子物态将增进我们对光与物质相互作用的理解。

**致谢** 感谢黄嘉璇同学和柳文洁博士的理论支持。

### 参考文献

- [1] Von Klitzing K, Dorda G, Pepper M. *Phys. Rev. Lett.*, 1980, 45: 494
- [2] Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 1982, 49: 405
- [3] Su W P, Schrieffer J R, Heeger A J. *Phys. Rev. Lett.*, 1979, 42: 1698
- [4] Zak J. *Phys. Rev. Lett.*, 1989, 62: 2747
- [5] Haldane F D M. *Phys. Rev. Lett.*, 1988, 61: 2015
- [6] Bansil A, Lin H, Das T. *Rev. Mod. Phys.*, 2016, 88: 021004
- [7] Ozawa T, Price H M, Amo A *et al.* *Rev. Mod. Phys.*, 2019, 91: 015006
- [8] St-Jean P, Goblot V *et al.* *Nat. Photonics*, 2017, 11: 651
- [9] Sheremet A S, Petrov M I, Iorsh I V *et al.* *Rev. Mod. Phys.*, 2022, 95: 015002
- [10] Barik S, Karasahin A *et al.* *Science*, 2018, 359: 666
- [11] Ke Y, Zhong J, Poshakinskiy A V *et al.* *Phys. Rev. Res.*, 2020, 2: 033190
- [12] Poshakinskiy A V, Zhong J, Ke Y *et al.* *npj Quantum Inf.*, 2021, 7: 34
- [13] Ke Y, Huang J, Liu W *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2023, 131: 103604

### 悟理小言

## 学术志业源自个人内心的强烈召唤

美国科学家巴丁(John Bardeen, 1908—1991)是迄今为止唯一获得过两次诺贝尔物理学奖的学者,但世人对他相当陌生。

巴丁的中学和大学成绩并不特别耀眼,他曾申请英国剑桥大学博士班却被拒绝了,但亲近指导过他的师长都看出了他的才华非凡。巴丁不古(搞)怪,不上镜,在人群中默默无闻,他没有一丝世人眼中出格的“天才形象”。

巴丁电机硕士毕业后在海湾石油公司工作,待遇优渥,但三年后他毅然辞职去读物理数学博士学位。博士毕业及做完三年博士后研究后,他获得了明尼苏达大学的教职,年薪只约为在海湾石油公司时的半数。发明晶体管后,巴丁决心转向超导体研究并离开贝尔实验室。他接受伊利诺伊大学的教职,年薪比在贝尔实验室时低得多。



巴丁奋力挥杆

在伊利诺伊州无边无际的玉米田中,每当巴丁奋力挥(高尔夫球)

杆,继而仰望广阔苍穹之时,他或许觉得了解半导体的能隙以及超导体的能隙,足以弥补学术界与工业界间的巨大薪资差异。

1962年,巴丁已经获得了第一个诺贝尔物理学奖(发明晶体管),并发表了后来将得到第二个诺贝尔物理学奖的成果(BCS超导体理论),他却于伦敦举行的“第八届国际低温物理会议”上马失前蹄,在争论超导体—绝缘体—超导体隧道结的电子对/超导电流隧穿行为时,败给了初出茅庐的22岁剑桥大学研究生约瑟夫森(Brian Josephson)。当今,开发高质量和高可靠性的超导体—绝缘体—超导体隧道结(或其他广义的约瑟夫森结)器件,已成为制作超导量子计算机的关键前提。关于巴丁和约瑟夫森两人对超导电流能否隧穿通过一道薄绝缘层之争论的来龙去脉,请参考林志忠《细节与专家——Bardeen马失前蹄?》(物理, 2017, 46(10): 697)一文。

附记:丘成桐获得博士学位之后的第一份工作与之有异曲同工之妙。丘成桐听从导师陈省身的建议,婉谢了其他几所大学的聘任而接受普林斯顿高等研究院的职位,但后者的薪资不及前者的一半。

(台湾阳明交通大学 林志忠 供稿)