



中国科学院大学
University of Chinese Academy of Sciences

学士学位论文

六角近藤晶格系统中的拓扑相

作者姓名: 康泽瑜

指导教师: 杨义峰 研究员

中国科学院物理研究所

学位类别: 理学学士

专业: 物理学

学院(系): 中国科学院大学物理科学学院

2021年6月

Topological Phases on a Honeycomb Kondo Lattice

A thesis submitted to the
University of Chinese Academy of Sciences
in partial fulfillment of the requirement
for the degree of
Bachelor of Natural Science
in Physics
By
Kang Zeyu
Supervisor: Professor Yang Yifeng

**University of Chinese Academy of Sciences, School of Physical
Sciences**

June, 2021

中国科学院大学 学位论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文是本人在导师的指导下独立进行研究工作所取得的成果。尽我所知，除文中已经注明引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的研究成果。对论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确方式标明或致谢。本人完全意识到本声明的法律结果由本人承担。

作者签名：

日 期：

中国科学院大学 学位论文授权使用声明

本人完全了解并同意遵守中国科学院大学有关保存和使用学位论文的规定，即中国科学院大学有权保留送交学位论文的副本，允许该论文被查阅，可以按照学术研究公开原则和保护知识产权的原则公布该论文的全部或部分内容，可以采用影印、缩印或其他复制手段保存、汇编本学位论文。

涉密及延迟公开的学位论文在解密或延期后适用本声明。

作者签名：

日 期：

导师签名：

日 期：

摘要

重费米子材料中的拓扑相以及拓扑相变是近年来渐受关注的研究方向之一。本文通过在 Haldane 模型中添加周期性排列的局域磁矩，来考虑非对称势和 Kondo 耦合效应对系统拓扑性质的影响。计算结果表明，半填充情形下非零的 Kondo 耦合效应将产生一种特殊的拓扑绝缘体相。通过考察这种新拓扑相的形成，我们发现了局域电子能带对巡游电子能带的特殊依赖关系，以及 Kondo 耦合效应对巡游电子能带内部结构的削弱甚至破坏作用。

关键词：Kondo 晶格，Haldane 模型，拓扑绝缘体，陈数

Abstract

Topological phases and phase transitions in heavy fermion systems continue to attract intensive interest in modern condensed matter physics. We investigate the influence of asymmetric potential and Kondo effect on the topological properties of the Haldane model coupling with periodically arranged local moments. The results suggest that in the half-filled case, non-zero Kondo coupling can lead to a new topological insulator phase. By investigating the formation condition of this new topological phase, we find a special dependence of the local electron energy band on the itinerant electron energy band, and the Kondo coupling effect may weaken the internal structure of the itinerant electron energy band.

Keywords: Kondo Lattice, Haldane Model, Topological Insulator, Chern Number

目 录

第 1 章 引言	1
第 2 章 背景介绍	3
2.1 重费米子化合物	3
2.1.1 Kondo 模型与 Kondo 效应	3
2.1.2 重费米子化合物的发现	4
2.1.3 重费米子化合物的一般性质	4
2.1.4 重费米子化合物的基本模型	5
2.2 拓扑绝缘态	6
2.2.1 整数量子霍尔效应态	6
2.2.2 Haldane 模型	7
第 3 章 理论推导	9
3.1 模型哈密顿量	9
3.1.1 Haldane 模型哈密顿量	9
3.1.2 Haldane-Kondo 晶格模型哈密顿量	10
3.2 平均场方法	12
3.2.1 平均场近似与自治方程	12
3.2.2 傅里叶变换与哈密顿量的核	13
3.2.3 Bogoliubov 正则变换与算符均值	14
3.3 具有 zigzag 型边界的条带系统的哈密顿量	15
第 4 章 数值结果与讨论	17
4.1 Haldane 模型的前置讨论	17
4.2 零温情形	18
4.2.1 非对称参数 m 对体系的影响	18
4.2.2 Kondo 耦合系数 J_K 对体系的影响	20
4.2.3 零温相图	21
4.3 有限温情形	22
4.3.1 温度 T 对体系的影响	22
4.3.2 有限温相图	23
第 5 章 总结与展望	25
附录 A 时间反演对称性对陈数的影响	27

附录 B 具有 zigzag 型边界的条带系统的哈密顿量	29
参考文献	31
致谢	33

图形列表

2.1 Haldane 模型能谱图。	8
3.1 六角晶格的原胞与跃迁矢量。	9
3.2 Haldane 模型中次近邻跃迁附加相位示意图。	10
3.3 具有 zigzag 型边界的六角晶格。	16
4.1 Haldane 模型能带陈数 C_- 、 C_+ 随非对称参数 m 变化图。	17
4.2 $V = 0$ 时的 Haldane-Kondo 晶格模型能谱图。	18
4.3 两能带陈数 C_1 、 C_2 及平均场参数 V 随非对称参数 m 变化图。	19
4.4 Haldane-Kondo 晶格模型具有不同拓扑性质时的能谱图。	20
4.5 两能带陈数 C_1 、 C_2 及平均场参数 V 随 Kondo 耦合系数 J_K 变化图。	20
4.6 Haldane-Kondo 晶格模型零温相图。	21
4.7 两能带陈数 C_1 、 C_2 及平均场参数 V 随温度 T 变化图。	22
4.8 Haldane-Kondo 晶格模型的有限温相图。	23

第 1 章 引言

同时包含巡游电子和局域磁矩的系统是现代凝聚态物理的一个重要研究对象。当系统内的巡游电子与局域磁矩间有 Kondo 耦合时, 低温下其有效质量往往比自由电子大 2 到 3 个数量级, 因此这类系统也被称为重费米子系统。由 Kondo 模型推广得来的 Kondo 晶格模型是研究重费米子系统的基础模型之一, 该模型被认为能描述 Kondo 屏蔽与 RKKY 相互作用间的竞争效应, 这也是理解重费米子材料中各类量子态的关键 (Gegenwart *et al.*, 2008)。低温时反铁磁型的 Kondo 耦合将使局域磁矩被自旋相反的巡游电子包围形成 Kondo 屏蔽, 进而产生无磁性的 Kondo 单态。Ruderman、Kittel、Kasuya 及 Yosida 等人指出, 局域磁矩间可通过巡游电子介导产生间接交换作用 (RKKY 相互作用), 它倾向于在系统中形成稳定磁序。而近藤晶格系统在半填充极限下可能表现为顺磁的近藤绝缘体相 (Tsunetsugu *et al.*, 1997; Riseborough, 2000), 且该相可能有非平凡的拓扑性质。

拓扑材料是近年来最受关注且发展最快的研究领域之一。整数量子霍尔效应是研究者们发现的第一个非平凡拓扑相 (Von Klitzing *et al.*, 1980), 即拓扑陈绝缘体, 其能带结构的拓扑特性由被称作 TKNN 不变量 (Thouless *et al.*, 1982) 的拓扑指标衡量。陈绝缘体的内部仍表现为有能隙的绝缘体, 但在其边界上却存在无能隙的金属性激发态 (Halperin, 1982)。Haldane 于 1988 年提出了一种二维六角晶格模型 (Haldane, 1988), 它虽然要求与整数量子霍尔效应完全不同的势场条件, 却具有相同的基于能带拓扑性质的现象。陈绝缘体的共性之一是必须破坏系统的时间反演不变性, 而自旋轨道相互作用则可使我们在不破坏时间反演不变性的情况下得到另一类拓扑绝缘体, 也就是 Z_2 拓扑绝缘体 (Kane *et al.*, 2005)。描述这类 Z_2 拓扑绝缘体的最简单的模型 (Kane-Mele 模型) 可以视作两个 Haldane 模型的耦合。此外, 研究者们在过去 30 年的研究中还发现了许多其他类型的拓扑相, 诸如三维拓扑绝缘体 (Fu *et al.*, 2007; Moore *et al.*, 2007; Roy, 2009)、拓扑超导体等 (Schnyder *et al.*, 2008)。

关于拓扑绝缘体的理论研究仍主要集中在非强关联模型内, 相互作用在其中只扮演配角。斯其苗等人 (Feng *et al.*, 2013) 于 2013 年首先在 Kane-Mele 模型中引入了周期性排列的局域磁矩, 并利用平均场方法考虑了系统的拓扑性质及

强关联效应。本文受其启发，将考虑另一种有强关联效应的拓扑模型：与周期性排列的局域磁矩有 Kondo 耦合的 Haldane 模型，通过对相图和陈数的计算讨论各相的拓扑性质，并研究系统内拓扑特性和重费米子特性间的相互影响。

第 2 章 背景介绍

2.1 重费米子化合物

当系统中电子间相互作用相对较弱时，可用一个等效的势场来描述每个电子所受其它电子的库仑排斥作用，这通常被称作单电子近似。基于单电子近似的传统能带论已经能够对普通金属、绝缘体及半导体的一般性质给出一个令人满意的理论解释。但当系统内包含过渡金属元素或镧系/锕系元素时，因这些元素原子具有未满的 d 或 f 电子壳层，系统内电子间往往具有较强的库仑相互作用，致使单电子近似失效 (Yang, 2016)。这意味着系统内电子间的相互影响变得显著，即成为所谓的“强关联电子”系统。这将使得材料在低温下表现出许多新奇的行为，重费米子便是其中之一。

2.1.1 Kondo 模型与 Kondo 效应

上世纪三十年代，研究者们在 10 K 以下的稀磁合金中发现了电阻率随温度降低而反常上升的现象 (De Haas *et al.*, 1934)。这一现象在当时与超导的零电阻现象并列，成为固体物理研究中的两大难题。直到超导问题被解决数年后，才由 Schrieffer 等人通过实验确定电阻率的低温反常增大与金属中磁性杂质对巡游电子的散射有关 (Sarachik *et al.*, 1964)。同年，日本物理学家 Kondo 通过分析磁性杂质对巡游电子的自旋翻转散射作用，对该现象给出了理论上的解释 (Kondo, 1964)。

Kondo 模型中存在一个特征温度，即 Kondo 温度 T_K 。当 $T \gg T_K$ 时，磁性杂质表现出独立磁离子的特性，满足居里-外斯定律；当 $T \ll T_K$ 时，反铁磁型相互作用将使巡游电子在磁性杂质周围形成自旋相反的屏蔽云，使单个磁性杂质表现为无磁性的近藤单态。这说明在温度由 T_K 以下逐渐上升到高于 T_K 的过程中，系统内发生了巡游电子与局域磁矩由强耦合到脱耦合的转变。Kondo 问题在强关联电子系统的研究历史上占据了极其重要的地位，Kondo 模型及其推广也成为了研究重费米子物理相关问题的基础模型之一。

2.1.2 重费米子化合物的发现

1975 年，美国贝尔实验室的 Andres 等人发现稀土金属化合物 CeAl_3 在接近零温时的电子比热系数比常规金属高出三个数量级 (Andres *et al.*, 1975)。而后一系列对于稀土金属或锕系元素化合物的实验表明，这一行为是该类化合物的共性。由于比热系数正比于有效质量：

$$\frac{\gamma(\text{观测})}{\gamma_0} = \frac{m^*}{m}, \quad (2.1)$$

其中 γ_0 是自由电子比热系数，故该共性也可表述为：低温下该类材料电子有效质量超出普通金属中电子 2 到 3 个数量级。因此，研究者们称这些化合物为重费米子化合物。普遍认为，是未满的 d 或 f 电子壳层中的局域电子与巡游电子间的 Kondo 耦合使得巡游电子有效质量显著增大。该耦合将在系统内打开一个小的杂化能隙，当费米能级处于该能隙内时，材料呈现出绝缘体或半导体行为，故这类材料又被称为 Kondo 绝缘体或 Kondo 半导体；而更多情况下费米能级会位于导带或价带，系统表现为金属行为 (Wu *et al.*, 2019)。

在传统基于电声耦合的 BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer) 超导中，外磁场和内部磁性杂质对超导都有很强的破坏，进而学界形成了超导与磁性相互排斥的论断。1979 年，Steglich 等人在重费米子材料 CeCu_2Si_2 中发现超导行为，且其中 Ce 在高温下表现为磁性离子，这一发现超出了 BCS 理论的框架范围 (Steglich *et al.*, 1979)。随着在 UBe_{13} (Ott *et al.*, 1983) 和 UPt_3 (Stewart *et al.*, 1984) 等重费米子材料中陆续发现超导现象，这种非常规的超导材料开始备受关注，对它们以及铜氧化物高温超导和铁基超导的研究极大的推动了对于超导的理论和实验研究。

2.1.3 重费米子化合物的一般性质

重费米子材料中存在许多具有未满 d 或 f 壳层电子的磁性原子，而在金属环境中 f 壳层电子间的主要磁性相互作用是 RKKY 相互作用 (Tsunetsugu *et al.*, 1997)，即通过巡游电子传递的局域自旋间接交换耦合作用。RKKY 相互作用与 Kondo 效应之间存在竞争关系。Doniach 首先指出，两种相互作用的强度对 Kondo 耦合参数 J 有不同的依赖行为，而体系将在两者的竞争下产生丰富的基态性质 (Doniach, 1977)。

正是由于体系中存在多种相互作用，重费米子材料成为研究强关联电子系

统的重要体系。同时，重费米子化合物中各种相互作用的能量尺度较低，可以通过诸如外磁场、压力、化学掺杂等非温度参数调控其基态使其发生量子相变，是研究量子相变和发现新型量子态的重要对象 (Wu *et al.*, 2019)。

2.1.4 重费米子化合物的基本模型

模型哈密顿量的计算是重费米子物理研究的基本方法之一。这种方法试图使用比真实材料简单的，带数个可调参数的模型哈密顿量来描述真实系统的某一个或几个特征。因为仅在个别情况下模型哈密顿量的计算才存在解析解，一般进行数值求解是更实际的选择。同时，研究者们也发展出了一系列用于简化计算的近似方法，本文所使用的平均场近似自洽求解便是较为常见的一种。

Kondo 模型与 Anderson 模型是研究含单磁性杂质 Kondo 问题的基本模型。而著名的 Schrieffer-Wolff 变换 (Schrieffer *et al.*, 1966) 可通过正则变换消去 Anderson 模型中的高能价态涨落，进而导出 Kondo 模型。因此，Kondo 模型可以看作是 Anderson 模型的低温有效模型，两者描述的低温物理是一致的。由于包含价态涨落的物理，Anderson 模型通常来说具有比 Kondo 模型更广泛的适用范围。

由于重费米子化合物中含有周期性排列的磁性原子，因此将 Anderson 模型和 Kondo 模型中的相互作用项推广至晶格形式便能反映其中的物理，进而得到描述重费米子化合物的两个基本模型：周期性 Anderson 模型 和 Kondo 晶格模型 (Doniach, 1977)。

周期性 Anderson 模型哈密顿量为：

$$H = - \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \epsilon_f \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + V \sum_{i\sigma} (f_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + c_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow}^f n_{i\downarrow}^f, \quad (2.2)$$

其中第一项为用格点间跃迁表示的巡游电子动能项，第二项 ϵ_f 为 f 电子的局域能级，第三项表示巡游电子与局域 f 电子的杂化能，第四项为 f 电子间的局域库仑排斥势。

Kondo 晶格模型哈密顿量为：

$$H = - \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i, \quad (2.3)$$

其中第一项仍为巡游电子动能项，第二项为 Kondo 耦合项， \mathbf{S}_i 和 \mathbf{s}_i 分别表示局域自旋与巡游电子自旋。本文将在二维六角晶格中考虑 Kondo 晶格模型，并主要关注系统内拓扑特性和重费米子特性间的相互影响。

2.2 拓扑绝缘态

绝缘体是最基本的物相之一。固体能带论是上世纪量子力学最伟大也最成功的理论之一，它为我们提供了一种描述固体中电子微观运动结构的理论范式。在该范式中，绝缘体指已满的价带和未满的导带被能隙隔开的固体。事实上，在狄拉克的相对论性量子力学的框架中，由于在真空中激发出一对正负电子的最小能量为有限值，真空也可被视作具有一个能隙的绝缘体。

相的发现和分类一直是凝聚态物理研究的重要方向。通常来说，我们总是在朗道的对称性自发破缺的理论框架下讨论相。而拓扑能带论的出现为物相的分类提供了一个新的角度，即拓扑等价类的角度 (Wen, 1995)。比如我们可以通过调节哈密顿量连续地增大半导体中的能隙，使之成为绝缘体。在不闭合能隙的前提下，可通过连续调节哈密顿量而相互转换的绝缘体被归入同一个拓扑等价类中。传统绝缘体都与真空拓扑等价，因此它们也被称作拓扑平凡的绝缘体。而陈绝缘体则是一种新奇的拓扑非平凡绝缘体。

2.2.1 整数量子霍尔效应态

最简单的拓扑绝缘体相是 Klitzing 等人于 1980 年发现的整数量子霍尔效应态 (Von Klitzing *et al.*, 1980)。它出现于强磁场下的二维材料中。对于晶格势较弱的材料，在外加强磁场下系统能带表现为以分立朗道能级 $\epsilon_m = \hbar\omega_c(m + 1/2)$ 为中心的窄带，其中 ω_c 为磁场中电子运动的圆频率。当费米面位于某个朗道能级内时，系统表现为导体；而当费米面位于某两个朗道能级之间的带隙中时，系统表现为绝缘体。然而当研究者们在系统中加入一个横向电场时，却观察到了量子化的霍尔电导：

$$\sigma_H = \frac{Ce^2}{2\pi\hbar}, \quad (2.4)$$

其中 C 对整数的偏差不超过 10^{-9} (Von Klitzing, 2005)。

整数量子霍尔效应态也是研究者们发现的首个非平凡的拓扑绝缘体。相较于拓扑平凡的绝缘体，其内部虽然也具有“满价带-能隙-空导带”的结构，但在边界上却存在零能激发的边界态。

拓扑不等价的系统间的区别源于其能带的拓扑结构。我们可以定义一些被称作拓扑指标的物理量来描述该结构特点，它们一般取离散值。拓扑等价的系统具有相同的一组拓扑指标。具体到整数量子霍尔效应态和普通绝缘体，它们

可以通过陈数这一指标区分，陈数又被称作 TKNN 不变量 (Thouless *et al.*, 1982)。整数量子霍尔效应态电导中的整数 C 便是已填充的朗道能级上的陈数和。

定义陈数前需要用到如下两个物理量：

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_n(\mathbf{k}) &\equiv i\langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle, \\ \mathcal{F}_n(\mathbf{k}) &\equiv \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathcal{A}_n(\mathbf{k}).\end{aligned}\tag{2.5}$$

它们分别被称作 Berry 联络和 Berry 曲率 (Berry, 1984)，其中 n 为能带指标， \mathbf{k} 为晶格动量， $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ 为布洛赫波函数的振幅部分。从形式上看，Berry 联络类似于电磁场中的矢势 $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ ，Berry 曲率则类似于电磁感应强度 $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ ，且经过简单推导也可证明 Berry 曲率是倒空间中的规范场。

能带 n 上的陈数被定义为 Berry 曲率在第一布里渊区内的积分，由于倒空间具有倒格矢平移周期性，故可视为是在闭合曲面上的积分，即：

$$C_n \equiv \frac{1}{2\pi} \iint_{1\text{BZ}} d\sigma \cdot \mathcal{F}_n(\mathbf{k}).\tag{2.6}$$

由于 Berry 曲率是量子力学意义下的规范场，而陈数 C_n 是其在第一布里渊区内的通量，那么陈数的取值便不依赖于具体规范的选取，这与它是可观测量这一事实保持一致。

2.2.2 Haldane 模型

整数量子霍尔效应态虽然是最早被发现的拓扑绝缘体态，但它要求强磁场与弱晶格势，此时朗道能级很大程度上替代了系统原本的能带。那么在材料本身能带结构中能否找到非平凡的拓扑呢？Haldane 于 1988 年基于石墨烯晶格提出的一种模型给出了肯定的答案 (Haldane, 1988)。

石墨烯中最特殊的一点是，在其布里渊区的两个不等价角隅 \mathbf{K} 和 \mathbf{K}' 处存在狄拉克电子，即具有线性色散关系的电子 (DiVincenzo *et al.*, 1984)。狄拉克电子的线性色散关系意味着它拥有零有效质量，运动方式便类似于光子。石墨烯哈密顿量是一个 2×2 的厄米矩阵，通过选取 $\{I, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$ 为 2 阶厄米矩阵群的一组基，可将哈密顿量在布洛赫表象下参数化为：

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \mathbf{h}(\mathbf{k}) \cdot (I, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z),\tag{2.7}$$

其中 I 为二阶单位阵， σ_i 为泡利矩阵， $\mathbf{h}(\mathbf{k}) = (h_0(\mathbf{k}), h_x(\mathbf{k}), h_y(\mathbf{k}), h_z(\mathbf{k}))$ 为哈密顿量参数。在仅考虑最近邻跃迁与次近邻跃迁时，系统具有时空反演不变性，哈

密顿量参数中 $h_0(\mathbf{k}) = h_z(\mathbf{k}) = 0$ 。此时上下能带在角隅 \mathbf{K} 和 \mathbf{K}' 点自然闭合形成狄拉克电子，系统表现为导体（如图 2.1(a)）。

陈数的一个重要特性是：在具有时间反演不变性的系统中陈数必然为零（见附录 A）。故为了打开能隙使其成为绝缘体并得到非零陈数，Haldane 设想在系统引入较弱的磁场，同时要求其具有晶格周期性且在空间上平均为零（Haldane, 1988）。此时在系统中 \mathbf{K} 和 \mathbf{K}' 点打开了宽度为 $|2h_z(\mathbf{K})|$ 的能隙，且计算表明能带具有非零的陈数，能隙中出现零能激发的边界态（如图 2.1(b)）。

由于拓扑绝缘体与真空属于不同的拓扑等价类，所以不能连续地由系统内部过渡到外部，在两者的交界处必须出现非绝缘体型的边界态隔开两者（Hasan et al., 2010）。故零能激发的边界态是系统内部具有非平凡拓扑结构的重要标志。

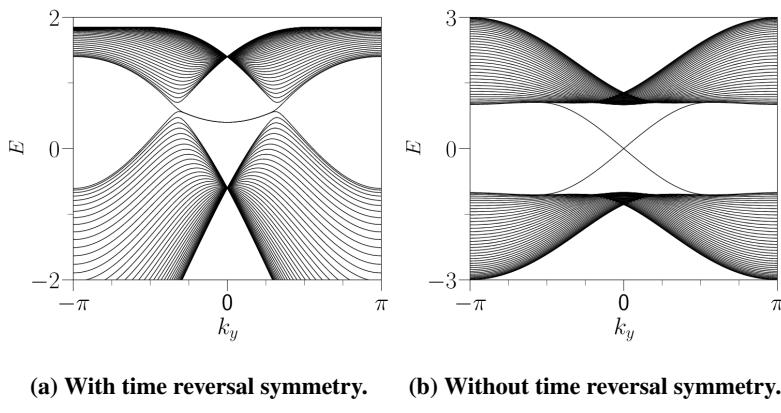


图 2.1 Haldane 模型能谱图。

Figure 2.1 Energy spectra of the Haldane model.

第3章 理论推导

3.1 模型哈密顿量

3.1.1 Haldane 模型哈密顿量

六角晶格中的紧束缚模型哈密顿量为：

$$H = -t_1 \sum_{i,\delta,\alpha} \left(c_{i,a,\alpha}^\dagger c_{i+\delta,b,\alpha} + \text{H.c.} \right) \\ - t_2 \sum_{i,\delta',\alpha} \left(c_{i,a,\alpha}^\dagger c_{i+\delta',a,\alpha} + c_{i,b,\alpha}^\dagger c_{i-\delta',b,\alpha} + \text{H.c.} \right), \quad (3.1)$$

其中指标 a 、 b 用于标记一个原胞内的两个不等价原子（如图 3.1）。 t_1 、 t_2 为最近邻跃迁强度与次近邻跃迁强度，均为实数。 δ 、 δ' 为以任意 a 原子为起点的最近邻跃迁矢量与次近邻跃迁矢量。

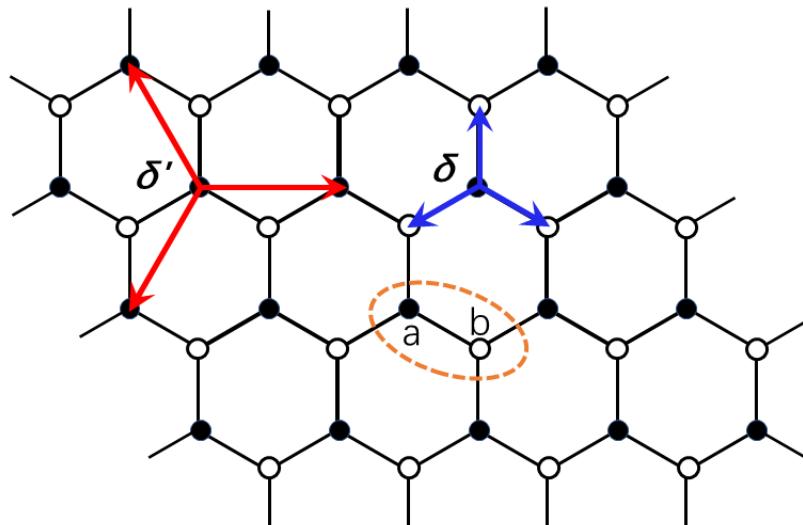


图 3.1 六角晶格的原胞与跃迁矢量。

Figure 3.1 The unit cell and hopping vectors of the honeycomb lattice.

Haldane 在系统中引入具有晶格周期性且关于空间平均值为零的磁场。由于 Aharonov-Bohm 效应，电子跃迁会产生附加相位变化，这将使得跃迁强度变为复数：

$$t_{x_1 x_2} = |t_{x_1 x_2}| \exp \left(i \frac{e}{\hbar} \int_l d\mathbf{x} \cdot \mathbf{A} \right), \quad (3.2)$$

且 $t_{x_1 x_2} = t_{x_2 x_1}^*$ 。其中 \mathbf{A} 为电磁场矢势， \mathbf{l} 为由 x_1 点到 x_2 点的一条路径。由于 \mathbf{A} 的值与规范的选取有关，所以两点间跃迁产生的相位也依赖于规范的选择，并不本质。只有电子沿一闭合回路跃迁后产生的附加相位 $\frac{e}{\hbar} \oint d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A}$ 才具有可观测效应。为简单起见，我们假定次近邻跃迁产生如图 3.2 所示的附加相位，且反向跃迁会产生相反的相位。系统哈密顿量变为：

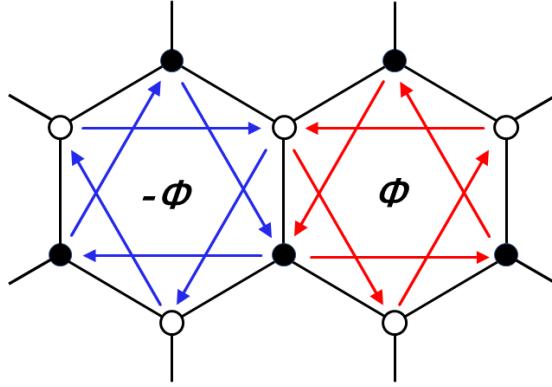


图 3.2 Haldane 模型中次近邻跃迁附加相位示意图。

Figure 3.2 The schematic drawing for the extra phase of the next nearest hopping in the Haldane model.

$$H = -t_1 \sum_{i,\delta,\alpha} \left(c_{i,a,\alpha}^\dagger c_{i+\delta,b,\alpha} + \text{H.c.} \right) \\ - t_2 \sum_{i,\delta',\alpha} \left(e^{i\phi} c_{i,a,\alpha}^\dagger c_{i+\delta',a,\alpha} + e^{-i\phi} c_{i,b,\alpha}^\dagger c_{i-\delta',b,\alpha} + \text{H.c.} \right). \quad (3.3)$$

3.1.2 Haldane-Kondo 晶格模型哈密顿量

在前文中已经分别介绍了 Kondo 晶格模型和 Haldane 模型，现在考虑将其组合起来得到 Haldane-Kondo 晶格模型，其哈密顿量为：

$$H = H_c + H_p + H_K, \quad (3.4)$$

其中 H_c 为巡游电子动能项， H_p 为描述同一原胞内两原子位置不等价程度的非对称势， H_K 为局域自旋与巡游电子自旋间的近藤交换相互作用项。对于巡游电子自旋和局域自旋均为 $1/2$ 的情形（取 $\hbar = k_B = 1$ ），各项具体为：

(1) 巡游电子动能项 H_e :

$$H_e = -t_1 \sum_{i,\delta,\alpha} \left(c_{i,a,\alpha}^\dagger c_{i+\delta,b,\alpha} + \text{H.c.} \right) - \mu \sum_{i,\alpha} \sum_{A=a,b} c_{i,A,\alpha}^\dagger c_{i,A,\alpha} \\ - t_2 \sum_{i,\delta',\alpha} \left(e^{i\phi} c_{i,a,\alpha}^\dagger c_{i+\delta',a,\alpha} + e^{-i\phi} c_{i,b,\alpha}^\dagger c_{i-\delta',b,\alpha} + \text{H.c.} \right), \quad (3.5)$$

其中 i 为格点位置, 指标 A 可取 a 或 b , 用于标记一个原胞内的两个不等价原子 (如图 3.1), t_1 、 t_2 为最近邻跃迁强度与次近邻跃迁强度, 均为实数。 δ 、 δ' 为以任意 a 原子为起点的最近邻跃迁矢量与次近邻跃迁矢量, $c_{i,A,\alpha}^\dagger$ 与 $c_{i,A,\alpha}$ 为 i 格点上 A 原子位置处自旋为 α 的巡游电子的产生和湮灭算符, μ 为巡游电子化学势。这里的巡游电子动能项由 Haldane 哈密顿量和化学势项组成, 其中化学势项用于调节系统内巡游电子总数。

(2) 非对称势项 H_P :

$$H_P = m \sum_{i,\alpha} \left(c_{i,a,\alpha}^\dagger c_{i,a,\alpha} - c_{i,b,\alpha}^\dagger c_{i,b,\alpha} \right), \quad (3.6)$$

其中 m 为非对称参数。Haldane 模型中引入的外磁场具有与六角晶格完全相同的对称性, 故在同一格点的 a 、 b 位置处磁场强度相同, 此时系统具有空间反演不变性。但在第二章的讨论中可得出, 空间反演不变性的存在与否对于非平凡拓扑的出现并无直接关系。故可在外加磁场中只保持六角晶格的平移对称性而舍弃系统原本的空间反演不变性, 表现在哈密顿量中即为非对称势项。通过调节 m 的大小可以考量非对称程度对系统的影响。

(3) Kondo 交换相互作用项 H_K :

$$H_K = J_K \sum_{i,A} \mathbf{S}_{i,A} \cdot \mathbf{s}_{i,A}, \quad (3.7)$$

其中 J_K 局域自旋和巡游电子自旋间的 Kondo 耦合系数。 $\mathbf{S}_{i,A}$ 为格点 i 上的局域自旋算符, $\mathbf{s}_{i,A}$ 为格点 i 上的巡游电子自旋算符。

自旋为 $1/2$ 的情形下, 巡游电子自旋算符和局域自旋算符的赝费米子表示分别为:

$$\mathbf{s}_{i,A} = \sum_{\alpha\beta} c_{i,A,\alpha}^\dagger \frac{\sigma_{\alpha\beta}}{2} c_{i,A,\beta}, \quad (3.8)$$

$$\mathbf{S}_{i,A} = \sum_{\alpha\beta} f_{i,A,\alpha}^\dagger \frac{\sigma_{\alpha\beta}}{2} f_{i,A,\beta},$$

其中 $f_{i,A,\alpha}^\dagger$ 与 $f_{i,A,\alpha}$ 为 i 格点上 A 原子位置处自旋为 α 的赝费米子的产生和湮灭算符， $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 为泡利矩阵矢量，且具有如下完备性关系：

$$\sigma_{\alpha\beta} \cdot \sigma_{\gamma\delta} = 2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}. \quad (3.9)$$

在赝费米子表示下，我们需要引入单占据条件作为约束以保证希尔伯特空间是物理的，此时 H_K 变为：

$$H_K = J_K \sum_{i,A} S_{i,A} \cdot s_{i,A} + \sum_{i,A,\alpha} \lambda_{i,A} \left(f_{i,A,\alpha}^\dagger f_{i,A,\alpha} - 1 \right). \quad (3.10)$$

考虑到系统具有平移对称性，可以近似认为 $\lambda_{i,A}$ 在所有格点上相同，简记为 λ_A 。

将式 (3.8) 代入 Kondo 交换相互作用项 H_K 中，并使用式 (3.9) 的完备性关系和赝费米子单占据条件可得：

$$\begin{aligned} H_K = N J_K & - \frac{J_K}{4} \sum_{i,A,\alpha} c_{i,A,\alpha}^\dagger c_{i,A,\alpha} - \frac{J_K}{2} \sum_{i,A} \left(\sum_{\alpha} f_{i,A,\alpha}^\dagger c_{i,A,\alpha} \right) \left(\sum_{\beta} c_{i,A,\beta}^\dagger f_{i,A,\beta} \right) \\ & + \sum_A \lambda_A \sum_{i,\alpha} f_{i,A,\alpha}^\dagger f_{i,A,\alpha} - N(\lambda_a + \lambda_b), \end{aligned} \quad (3.11)$$

其中 N 为系统内格点数。结果中第一项为常数，第二项可归入化学式项中，在这里一并略去只保留后三项。在后面章节的讨论中，我们也称局域自旋的赝费米子表示中的赝费米子为局域电子。

3.2 平均场方法

3.2.1 平均场近似与自治方程

在平均场方法处理中，我们要略去系统内的高阶涨落，可对 H_K 项应用算符乘积的如下关系：

$$AB \approx A\langle B \rangle + \langle A \rangle B - \langle A \rangle \langle B \rangle, \quad (3.12)$$

得：

$$\begin{aligned} H_K \approx & \frac{J_K}{2} \sum_{i,A,\alpha} \left(V_{i,A} f_{i,A,\alpha}^\dagger c_{i,A,\alpha} + \text{H.c.} \right) + \frac{J_K}{2} \sum_{i,A} |V_{i,A}|^2 \\ & + \sum_A \lambda_A \sum_{i,\alpha} f_{i,A,\alpha}^\dagger f_{i,A,\alpha} - N(\lambda_a + \lambda_b), \end{aligned} \quad (3.13)$$

其中：

$$V_{i,A} = \sum_{\alpha} \left\langle f_{i,A,\alpha} c_{i,A,\alpha}^\dagger \right\rangle, \quad V_{i,A}^* = \sum_{\alpha} \left\langle c_{i,A,\alpha} f_{i,A,\alpha}^\dagger \right\rangle. \quad (3.14)$$

考虑到系统具有平移对称性，可以近似认为 $V_{i,A}$ 在所有格点上相同，简记为 V_A 。 V_A 被称作平均场参数，可以理解为同格点 A 位置处局域电子与巡游电子的 Kondo 耦合程度，也能用来描述局域电子能级与巡游电子能带的杂化程度。由于产生湮灭算符具有相位转动的自由度，为简单起见可设在恰当选取相位后 V_A 为实数。

在平均场近似后，模型哈密顿量转变为产生湮灭算符的二阶齐次式。但应注意，模型中还存在两对未定的平均场参量 V_A 与 λ_A ，它们的取值应当通过自由能 $F(V_A, \lambda_A)$ 的变分极值条件自治决定。由热力学基本内容可知系统的配分函数和自由能分别为：

$$\begin{aligned} Z(V_A, \lambda_A) &= \text{Tr} [e^{-\beta H(V_A, \lambda_A)}], \\ F(V_A, \lambda_A) &= -\frac{1}{\beta} \ln Z(V_A, \lambda_A). \end{aligned} \quad (3.15)$$

则自由能对 V_A 与 λ_A 的极值条件可表示为：

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial F(V_A, \lambda_A)}{\partial V_A} = -\frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z(V_A, \lambda_A)}{\partial V_A} \\ &= \text{Tr} \left[\frac{\partial H(V_A, \lambda_A)}{\partial V_A} e^{-\beta H} \right] / \text{Tr} [e^{-\beta H}] = \left\langle \frac{\partial H(V_A, \lambda_A)}{\partial V_A} \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.16)$$

由此可得自治方程为：

$$\begin{cases} 0 = \frac{1}{N} \sum_{i,\alpha} \Re \left\langle f_{i,A,\alpha} c_{i,A,\alpha}^\dagger \right\rangle - V_A, \\ 0 = \frac{1}{N} \sum_{i,\alpha} \left\langle f_{i,A,\alpha}^\dagger f_{i,A,\alpha} \right\rangle - 1. \end{cases} \quad (3.17)$$

另外，系统的化学势 μ 由巡游电子总数确定：

$$n_c = \frac{1}{N} \sum_{i,A,\alpha} \left\langle c_{i,A,\alpha}^\dagger c_{i,A,\alpha} \right\rangle, \quad (3.18)$$

其中 n_c 为每格点平均巡游电子数，系统能带半填充对应 n_c 取 2 (每个原胞有 a 、 b 两个原子)。

3.2.2 傅里叶变换与哈密顿量的核

为进一步化简，现通过如下关系对哈密顿量中各项进行格点傅里叶变换：

$$\begin{cases} c_{i,a,\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in 1\text{BZ}} c_{\mathbf{k},a,\alpha} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i}, \\ c_{i,b,\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in 1\text{BZ}} c_{\mathbf{k},b,\alpha} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i + \mathbf{e}_1)}, \end{cases} \quad (3.19)$$

其中 ϵ_1 是同一原胞内由 a 位置指向 b 位置的矢量。布洛赫表象下哈密顿量中各部分为：

$$\begin{aligned} H_c + H_p &= \sum_{\mathbf{k}, A, \alpha} \epsilon_{\mathbf{k}A} c_{\mathbf{k}, A, \alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}, A, \alpha} - t_1 \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left(\gamma_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, a, \alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}, b, \alpha} + \text{H.c.} \right), \\ H_K &= \sum_{\mathbf{k}, A, \alpha} \left[\lambda_A f_{\mathbf{k}, A, \alpha}^\dagger f_{\mathbf{k}, A, \alpha} + \frac{J_K V_A}{2} \left(f_{\mathbf{k}, A, \alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}, A, \alpha} + \text{H.c.} \right) \right] + N\epsilon_0, \end{aligned} \quad (3.20)$$

其中 $\epsilon_0 = \frac{J_K}{2}(V_a^2 + V_b^2) - \lambda_a - \lambda_b$ 。 $\gamma_{\mathbf{k}} = \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}\cdot\delta}$ 是最近邻位点的结构因子， $\epsilon_{\mathbf{k}A}$ 是巡游电子色散关系，具体为：

$$\begin{cases} \epsilon_{\mathbf{k}a} = m - \mu - 2t_2 \sum_{\delta'} \cos(\mathbf{k} \cdot \delta' + \phi), \\ \epsilon_{\mathbf{k}b} = -m - \mu - 2t_2 \sum_{\delta'} \cos(\mathbf{k} \cdot \delta' - \phi). \end{cases} \quad (3.21)$$

此时哈密顿量中只存在产生湮灭算符的二阶项，故可表示为：

$$H = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \Psi_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger \mathcal{H}_{\mathbf{k}\alpha} \Psi_{\mathbf{k}\alpha} + N\epsilon_0, \quad (3.22)$$

其中 $\Psi_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger = (c_{\mathbf{k}, a, \alpha}^\dagger, c_{\mathbf{k}, b, \alpha}^\dagger, f_{\mathbf{k}, a, \alpha}^\dagger, f_{\mathbf{k}, b, \alpha}^\dagger)$ 为产生算符矢量， $\mathcal{H}_{\mathbf{k}\alpha}$ 常被称作哈密顿量的核，为 4×4 厄米矩阵：

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}\alpha} = \begin{pmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}a} & -t_1 \gamma_{\mathbf{k}} & \frac{J_K V_a}{2} & 0 \\ -t_1 \gamma_{\mathbf{k}}^* & \epsilon_{\mathbf{k}b} & 0 & \frac{J_K V_b}{2} \\ \frac{J_K V_a}{2} & 0 & \lambda_a & 0 \\ 0 & \frac{J_K V_b}{2} & 0 & \lambda_b \end{pmatrix}. \quad (3.23)$$

3.2.3 Bogoliubov 正则变换与算符均值

哈密顿量的核已经包含了系统几乎所有的信息，可从中得到系统能带和准粒子激发。

对于厄米矩阵 $\mathcal{H}_{\mathbf{k}\alpha}$ ，总可找到幺正矩阵 $\mathcal{U}_{\mathbf{k}\alpha}$ 将其对角化：

$$\mathcal{U}_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger \mathcal{H}_{\mathbf{k}\alpha} \mathcal{U}_{\mathbf{k}\alpha} = \text{Diag}(\epsilon_{i, \mathbf{k}\alpha}), \quad (3.24)$$

其中 $\epsilon_{i, \mathbf{k}\alpha}$ 为 $\mathcal{H}_{\mathbf{k}\alpha}$ 的本征值，对应系统的四个能带解，其具体形式较为复杂，宜采用数值方法求解。

由此对产生算符矢量 $\Psi_{k\alpha}^\dagger$ 进行变换，得到一组新的算符：

$$\Phi_{k\alpha}^\dagger = \Psi_{k\alpha}^\dagger \mathcal{U}_{k\alpha} = (\phi_{1,k,\alpha}^\dagger, \phi_{2,k,\alpha}^\dagger, \phi_{3,k,\alpha}^\dagger, \phi_{4,k,\alpha}^\dagger). \quad (3.25)$$

且易验证这组算符满足费米子正则对易关系。它们实际上是系统内准粒子激发的产生算符。

从数学角度来看，对哈密顿量核以及产生湮灭算符矢量进行的幺正变换，其实是在布洛赫表象下的希尔伯特空间中选取了一组新的基底。在新基底下系统哈密顿量为：

$$H = \sum_{i,k\alpha} \epsilon_{i,k\alpha} \phi_{i,k\alpha}^\dagger \phi_{i,k\alpha} + N \epsilon_0, \quad (3.26)$$

其中只包含四种费米子的粒子数算符，不存在它们间的耦合项及高阶项。这意味着系统内只有四种无相互作用的费米子，即为一个自由费米气体系统。对于自由费米气体系统，粒子数应满足费米分布：

$$\langle \phi_{i,k\alpha}^\dagger \phi_{j,k\alpha} \rangle = \frac{\delta_{ij}}{e^{\beta \epsilon_{i,k\alpha}} + 1}. \quad (3.27)$$

由于系统内原本的产生湮灭算符与新的准粒子产生湮灭算符间存在线性变换关系，易证明原产生湮灭算符的均值可表示为：

$$\langle \psi_{i,k\alpha}^\dagger \psi_{j,k\alpha} \rangle = \sum_m \frac{(\mathcal{U}_{k\alpha}^*)_{im} (\mathcal{U}_{k\alpha})_{jm}}{e^{\beta \epsilon_{m,k\alpha}} + 1}, \quad (3.28)$$

其中 $\psi_{i,k\alpha}$ 与 $\psi_{j,k\alpha}$ 为原湮灭算符矢量 $\Psi_{k\alpha}$ 的第 i, j 分量。

上述讨论为系统能量本征值和算符均值的数值求解提供了一个较好的方法，这种方法对哈密顿量核的具体表达式没有依赖。本文的第四章将使用该方法数值求解 (3.17) 及 (3.18) 式的自治方程组，进而对平均场近似后系统的性质进行分析。

3.3 具有 zigzag 型边界的条带系统的哈密顿量

边界态是能带具有非平凡拓扑结构的重要标志。在实际计算中，我们通过周期性边界条件来模拟哈密顿量对应的无限大系统，但无限大系统不具有边界。因此由式 (3.22) 所得的能谱图中只有内部态，而无边界态。

为了得到具有边界态的能谱图以直观判断系统是否拓扑平凡，我们必须考虑在 x 方向上有限，在 y 方向上无限的条带状系统 (图 3.3(a))。

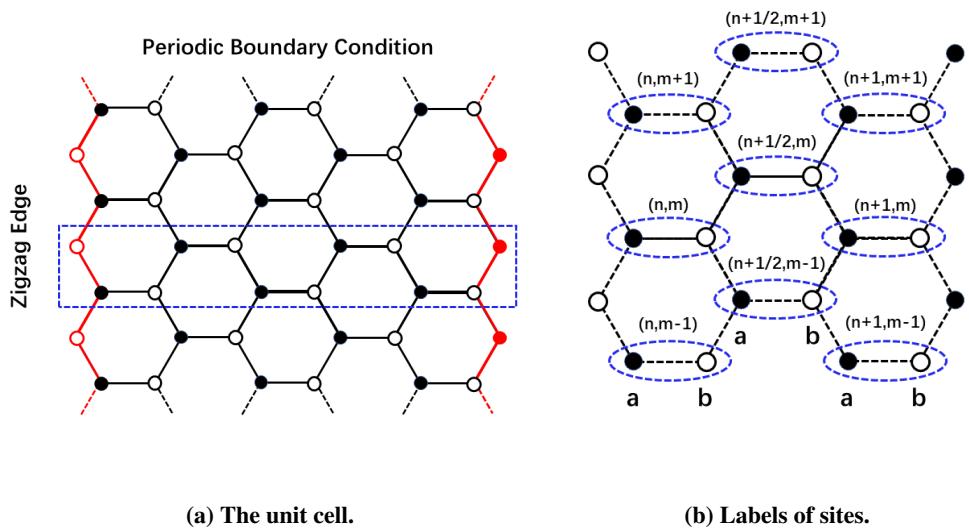


图 3.3 具有 zigzag 型边界的六角晶格。

Figure 3.3 The honeycomb lattices with zigzag edges.

在 y 方向上应用周期性边界条件，此时系统实际上是一维链状晶格，原胞如图 3.3(a) 所示，各位点的标记如图 3.3(b) 所示。通过依次考虑原胞内各位点上电子的相互作用及原胞间电子的相互作用，即可得到系统哈密顿量。略去自旋指标的最近邻跃迁项为：

$$H_N = -t_1 \sum_{i,k_y} \left(2c_{i-1/2,k_y,a}^\dagger c_{i,k_y,b} \cos \frac{k_y}{2} + 2c_{i,k_y,a}^\dagger c_{i+1/2,k_y,b} \cos \frac{k_y}{2} + c_{i,k_y,a}^\dagger c_{i,k_y,b} + \text{H.c.} \right) \\ - t_1 \sum_{k_y} \sum_{i=1}^{L_y-1} \left(c_{i+1/2,k_y,a}^\dagger c_{i+1/2,k_y,b} + \text{H.c.} \right). \quad (3.29)$$

因哈密顿量各项过于繁琐，将其具体形式收录于附录 B 中以节省正文篇幅。

第 4 章 数值结果与讨论

第二章的公式推导部分已经给出了 Haldane-Kondo 晶格模型的自治方程并介绍了数值计算算符均值的方法，这一章将讨论自治方程数值解所给出的系统性质。通过比较平均场参数 V_A 和各能带陈数 C_i 是否为零，我们可以判断系统是否存在近藤耦合以及各能带是否具有非平凡拓扑，进而得到系统的相图。

本章将仅讨论能带为半填充 ($n_c = 2$) 的情形，且取 $t_1 = 1$, $t_2 = 0.2$, $\phi = \frac{\pi}{2}$ 并以 t_1 为能量的单位。我们系统的分析了非对称参数 m 、近藤耦合系数 J_K 以及温度 T 对系统的影响。在计算中我们发现， V_a 与 V_b 间的相对差值 ($|V_a - V_b|/V_a$ 或 $|V_a - V_b|/V_b$) 始终很小，因此在下文的讨论中忽略 V_a 与 V_b 的差异并直接以 V 代指。

4.1 Haldane 模型的前置讨论

由近似后的平均场哈密顿量可知，平均场参数 V 为零时巡游电子将回归纯粹的 Haldane 模型。因此在正式进入平均场方法的数值结果的分析前，先对具有非对称势的 Haldane 模型性质进行简单讨论是很有帮助的。

在预设 $t_1 = 1$, $t_2 = 0.2$, $\phi = \frac{\pi}{2}$ 的情况下，Haldane 模型中的非对称势参数 m 是唯一的可调参数，且该参数的取值直接影响能带的拓扑性质。从两能带陈数 C_- 、 C_+ 随非对称参数 m 的变化曲线(图 4.1)可以看出系统约在 $m = 1$ 附近出现拓扑相变。

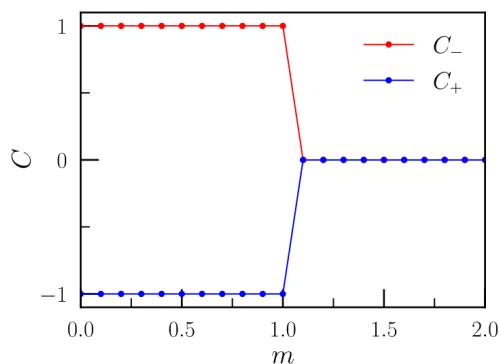


图 4.1 Haldane 模型能带陈数 C_- 、 C_+ 随非对称参数 m 变化图。

Figure 4.1 The m dependence of Chern number C_- 、 C_+ in the Haldane model.

如图 4.2(a), $m < 1$ 时巡游电子系统表现为具有边界态的拓扑绝缘体 (topological insulator, TI); 如图 4.2(b), 当 $m > 1$ 时则表现为平凡绝缘体 (normal insulator, NI)。

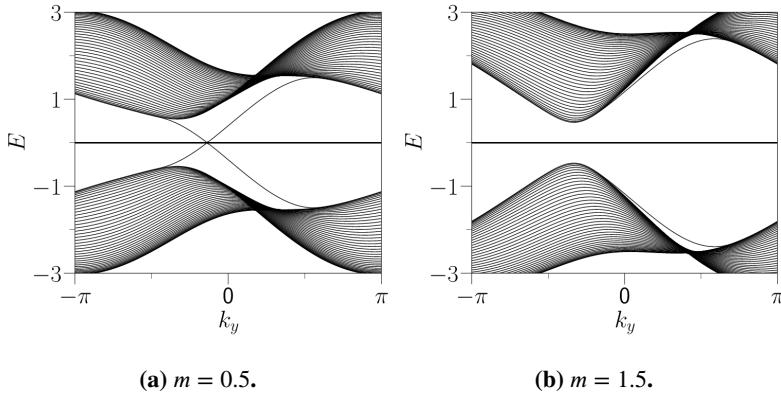


图 4.2 $V = 0$ 时的 Haldane-Kondo 晶格模型能谱图。图中 $E = 0$ 处的平直线为脱耦合后的局域电子能级。

Figure 4.2 The energy spectra for $V = 0$. The straight line at $E = 0$ is the level of local electronics.

4.2 零温情形

由于零温时的费米狄拉克分布函数中含有阶跃函数，数值求解时会产生诸多问题，故在本文中选取 10^{-3} (单位为 t_1/k_B) 作为近似零温。在后续结果中可以看到，相对于系统的诸多特征温度， 10^{-3} 已经是可以忽略的高阶小量。

4.2.1 非对称参数 m 对体系的影响

能带 $1/2$ 填充 ($n_c = 2$) 的情形下，能量由低到高排列的第 1、2 能带将恰好被填满，其陈数分别记为 C_1 、 C_2 。由于第 1、2 能带解除杂化后分别对应巡游电子能带与局域电子能级，故本文中将杂化后的 1、2 能带分别称为巡游电子能带和局域电子能带。

我们首先考虑在 $J_K = 1.6$ 和 2.5 时， C_1 、 C_2 及平均场参数 V 随非对称参数 m 的变化曲线 (如图 4.3)。可以看出随着非对称参数 m 的增大，平均场参数 V 与两能带陈数经历了从非零到零的变化。这意味着原胞中两位点的非对称性会抑制巡游电子与局域电子间的 Kondo 耦合效应，且在非对称参数 m 足够大时直接破坏 Kondo 耦合及系统内的非平凡拓扑结构，使系统由 Kondo 绝缘体转变为普

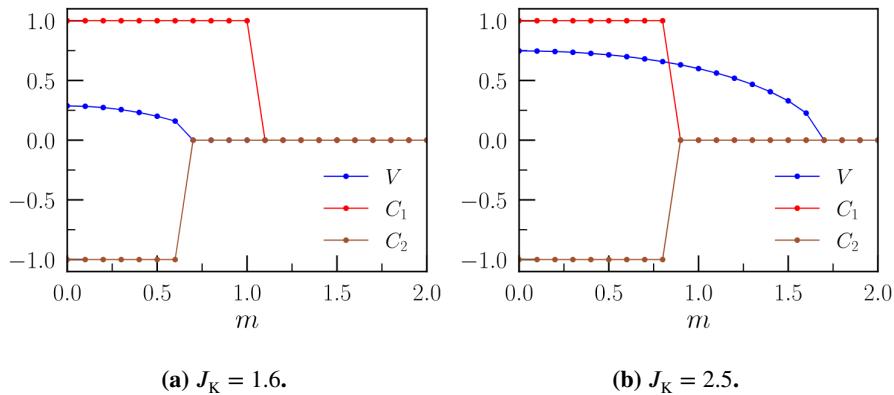


图 4.3 两能带陈数 C_1 、 C_2 及平均场参数 V 随非对称参数 m 变化图。

Figure 4.3 The m dependence of V and Chern number of band 1 and 2.

通绝缘体，或由拓扑绝缘体转变为平凡绝缘体。由此我们可以定义两个新物理量 m_K 、 m_T ，分别表示零温下平均场参数 V 和局域电子能带陈数 C_2 由非零变为零时的 m 的值。它们实际上近似为系统零温时的量子相变点。

其次由陈数曲线可知，通过与具有非平凡拓扑的巡游电子能带发生杂化，局域电子能带也可具有非平凡拓扑结构。而由于杂化前的局域电子能级不存在任何内部结构，且在图中杂化形成局域电子能带后，两能带陈数总是同时非零或归零，故可初步推测：杂化后局域电子能带的拓扑特性完全源于巡游电子能带。

从图 4.3 中两图的对比来看, 对于不同的 J_K , m_K 与 m_T 可以相同也可以不同。在图 4.3(a) 中 $m_K = m_T$, 且巡游电子能带在解除杂化后仍能保持其陈数非零, 说明杂化的解除是此图中局域电子能带失去非平凡拓扑的直接原因; 而在图 4.3(b) 中 $m_K > m_T$, 且两能带陈数同时归零, 说明此图中局域电子能带之所以失去非平凡拓扑, 是因为过强的非对称性破坏了巡游电子能带的拓扑结构, 进而引起局域电子能带同步失去拓扑。然而此处拓扑相变参数 m_T 相比于无杂化情形(如图 4.1) 明显减小, 说明杂化后的能带的拓扑结构更易被非对称势破坏。

图 4.4 分别为不同拓扑性质下系统的能谱图。左侧能谱图对应图 4.3(b) 中陈数不为零的区域，此时 1、2 能带具有非平凡的拓扑结构，两者之间可见跨能隙连接的边界态。但与图 4.2(a) 中拓扑绝缘体相不同的是，此时边界态分别出现在 1、2 能带和 3、4 能带间，而不是出现在半填充下作为价带的能带 2 与作为导带的能带 3 之间。这说明虽然各能带均有非平凡拓扑结构，但整体而言系统是与真空等价的平凡绝缘体，因此价带与导带间未出现边界态将其与真空隔开。

为与在 SmB₆ 中发现的拓扑 Kondo 绝缘体态 (topological Kondo insulator,

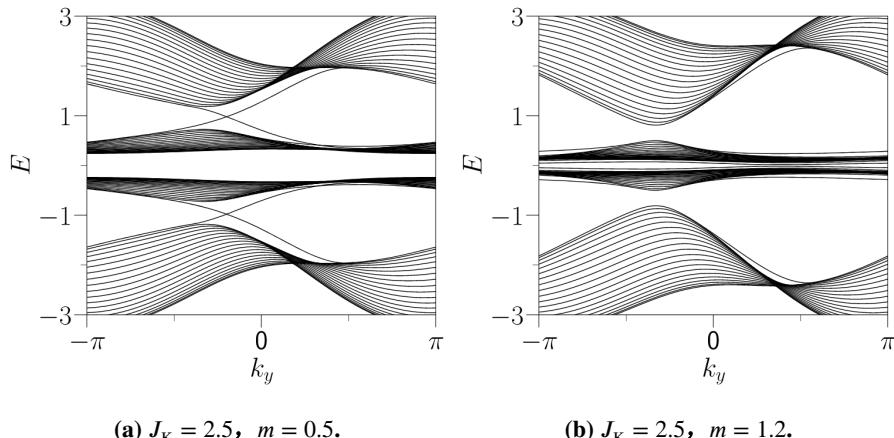


图 4.4 Haldane-Kondo 晶格模型具有不同拓扑性质时的能谱图。

Figure 4.4 The energy spectra of Haldane-Kondo lattice model with different topological properties.

TKI) ([Dzero et al., 2010](#); [Lu et al., 2013](#)) 加以区分, 我们称图 4.4(a) 中的相为具有非平凡拓扑结构的 Kondo 绝缘体态 (Kondo insulator with nontrivial topological structure, KIT), 而图 4.4(b) 中则为拓扑平凡的 Kondo 绝缘体 (Kondo insulator, KI)。

4.2.2 Kondo 耦合系数 J_K 对体系的影响

这部分我们主要讨论 J_K 对系统拓扑性质的影响。

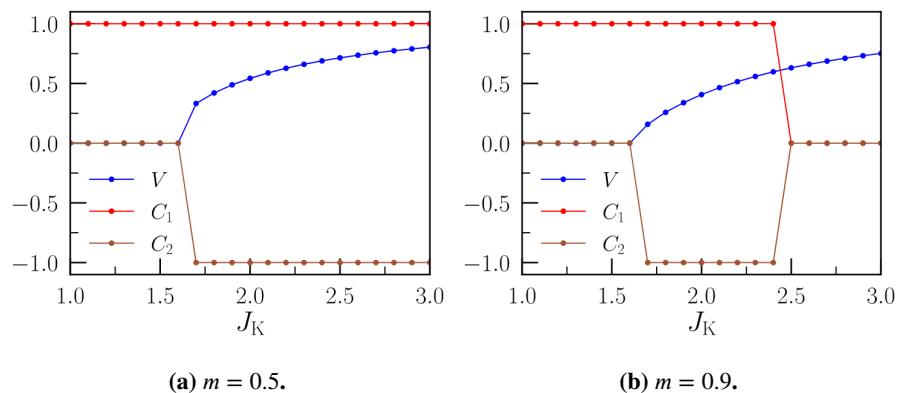


图 4.5 两能带陈数 C_1 、 C_2 及平均场参数 V 随 Kondo 耦合系数 J_K 变化图。

Figure 4.5 The J_K dependence of V and Chern number of band 1 and 2.

从图 4.5 中陈数曲线可以看到，在两能带间存在杂化即平均场参数 V 不为零的区域内，它们总是具有相同的拓扑特性；当杂化解除即平均场参数 V 归零后，巡游电子能带仍能保持非零陈数而局域电子能带失去非平凡拓扑。这进一步表明杂化后局域电子能带的拓扑特性完全源于巡游电子能带。因此，系统中不可

能出现巡游电子能带陈数 C_1 为零而局域电子能带陈数 C_2 非零的情形。

值得注意的是，图 4.5(b) 中出现了平均场参数 V 随着 Kondo 耦合系数 J_K 增加而增加，但两能带陈数却在 $J_K > 2.5$ 后归零的情况。说明过强的 Kondo 耦合也会破坏两能带的拓扑特性。可能的原因是：局域能级通过与巡游电子能带的杂化获得了能带结构与拓扑特性，但相应的巡游电子能带拓扑结构的稳定性也被削弱了。当这种削弱超过某个临界值时，巡游电子能带便失去了原有的拓扑特性，进而使得局域电子能带陈数也同步归零。

对比两图来看，相同 Kondo 耦合系数 J_K 处 a 图中平均场参数 V 要略大于 b 图，这与图 4.3 中所示相一致。但图 4.5(a) 中 $J_K > 2.5$ 的区域系统内虽然有着相比于图 b 更强的 Kondo 耦合，巡游电子能带的拓扑特性却没有被破坏。这是因为非对称势是影响能带拓扑性质的主要因素，图 4.5(b) 中相较于图 a 更强的非对称势减弱了巡游电子能带拓扑结构的稳定性，变得更易因与局域电子能级杂化而被破坏。

4.2.3 零温相图

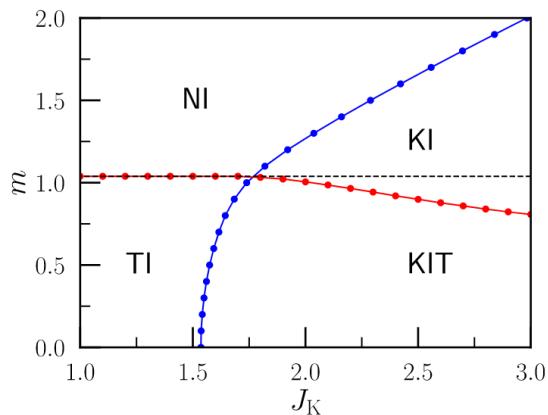


图 4.6 Haldane-Kondo 晶格模型零温相图。图中黑色虚线为 Haldane 模型拓扑相变参考线。

Figure 4.6 The phase diagram of Haldane-Kondo lattice model with $T = 0$. As a comparison, the dashed line is the topological phase transition line of Haldane model without local moment.

前文的分析中已可看出，零温下系统在不同参数下具有多种相。通过在不同参数下重复前文的计算，我们得到 Haldane-Kondo 晶格模型的零温相图（图 4.6）。图中的蓝色曲线为 $m_K - J_K$ 线，从左向右越过该线时平均场参数 V 由零

开始增大，系统内出现 Kondo 屏蔽。红色曲线为 $m_T\text{-}J_K$ 线，从下向上越过该线时系统内发生拓扑相变。从两条曲线的走向可以看出，非对称参数 m 的取值是影响系统拓扑性质的主要因素，而 Kondo 耦合系数 J_K 的取值则是影响系统强关联性质的主要因素。

其次可以看到， $m_T\text{-}J_K$ 线在向右越过 $m_K\text{-}J_K$ 线后向下弯曲，说明杂化后巡游电子能带拓扑结构的稳定性相较于杂化前有所下降。同时因为非对称势对系统内的 Kondo 耦合有抑制作用，故随着非对称参数 m 的增加 $m_K\text{-}J_K$ 线逐渐向上弯曲。

在图中当 Kondo 耦合系数 $J_K > 1.5$ 时系统内才可能存在 Kondo 耦合，而此时最近邻跃迁系数 t_1 取值仅为 1。这是因为巡游电子与局域电子是通过散射的方式实现耦合的，然而绝缘体相中价带内不存在空穴，所以单一散射事件后该巡游电子的末态只可能在能隙之上的导带中，相当于实现了跨越能隙的激发，因此系统需要相当强的 Kondo 相互作用能才能由普通绝缘体转变为 Kondo 绝缘体。

4.3 有限温情形

4.3.1 温度 T 对体系的影响

首先考虑系统内能带陈数 C_1 、 C_2 及平均场参数 V 随温度升高的变化曲线，如图 4.7。两图中平均场参数 V 随着温度的升高都经历了逐渐降低至零的过程，

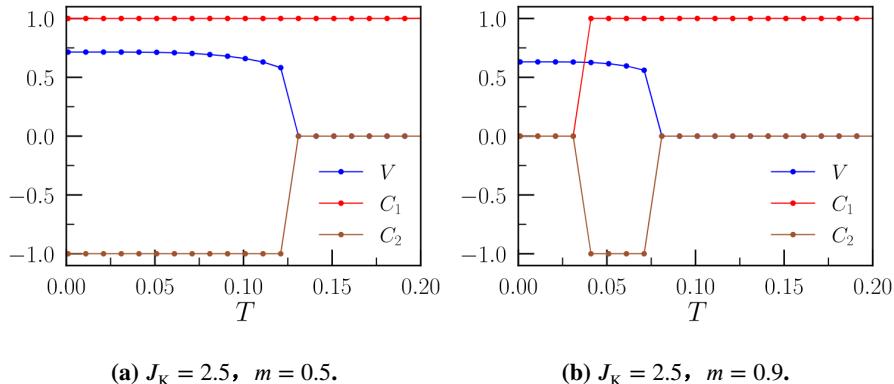


图 4.7 两能带陈数 C_1 、 C_2 及平均场参数 V 随温度 T 变化图。

Figure 4.7 The T dependence of V and Chern number of band 1 and 2.

系统由具有非平凡拓扑结构的 Kondo 绝缘体相转变为拓扑绝缘体相，其相变温度便可被视为 Kondo 温度 T_K 。

同时注意到图4.7(b)中，该参数下零温时系统因过度杂化而拓扑平凡，但当Kondo耦合强度随着温度升高而逐渐减弱时，系统又恢复其非平凡拓扑结构。这与图4.5(b)中具有非平凡拓扑结构的Kondo绝缘体相在较弱杂化下可稳定存在相一致。将图4.7(b)中存在Kondo耦合时系统发生拓扑相变的特殊温度记为 T_T ，以在下一节有限温相图部分具体讨论。

4.3.2 有限温相图

绘制出Kondo温度 T_K 及拓扑相变温度 T_T 随Kondo耦合系数 J_K 和非对称参数 m 变化的曲线图(图4.8)，即为系统的有限温相图。两图中曲线 T_K 下方的

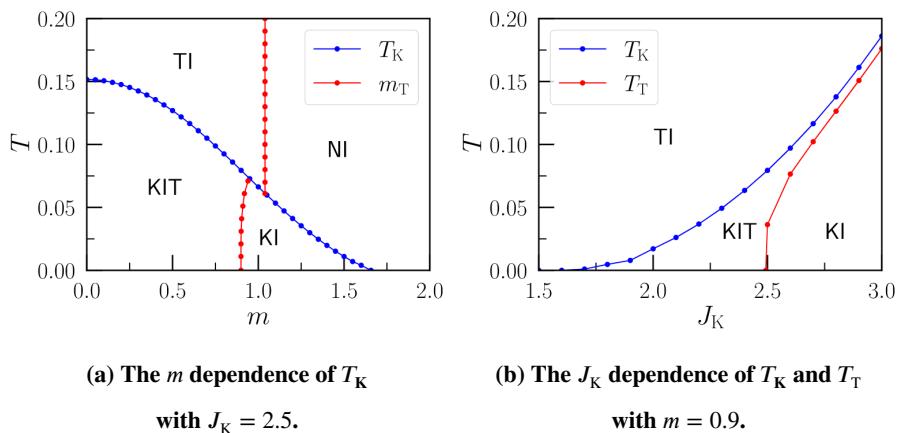


图4.8 Haldane-Kondo晶格模型的有限温相图。

Figure 4.8 The phase diagram of Haldane-Kondo lattice model with $T > 0$.

区域平均场参量 $V \neq 0$ ，系统为Kondo绝缘体。图4.8(a)中 m_T 线左侧及图4.8(b)中 T_T 上方的区域内，系统中存在能带陈数非零，为非平凡拓扑相。只有图a中位于 m_T 线右侧及 T_K 线上方的区域中，所有能带陈数 C_i 与平均场参数 V 均为零，处于完全平庸的绝缘体相。

第 5 章 总结与展望

Haldane-Kondo 晶格模型的平均场理论虽然简单，但其结果却包含了丰富的物理图景。通过数值求解不同参数下的自治方程并计算各能带陈数，我们发现非对称势不仅可以破坏能带的非平凡拓扑结构，而且能够抑制系统内的 Kondo 耦合效应，使得零温相图中 Kondo 绝缘体与普通绝缘体的相分界线会随着 非对称参数 m 的增大而向右弯曲。同时，通过与具有非平凡拓扑的巡游电子能带杂化，局域电子能带也可具有非零陈数，且杂化后两者拓扑性质总保持一致。但与局域电子能级杂化会削弱巡游电子能带本身拓扑结构的稳定性，使其相较于杂化前更易被非对称势破坏，因此拓扑相与非拓扑相的分界线会随着 Kondo 耦合系数的增大而向下弯曲。通过讨论温度 T 对系统的影响，我们发现在零温时因过度杂化而失去的能带拓扑结构会在升温后因 Kondo 耦合减弱而恢复其非平凡拓扑结构。而随着温度的进一步升高，局域电子与巡游电子间的 Kondo 耦合效应将逐步减弱至消失，系统也将恢复为纯粹的 Haldane 模型。

然而，本文的研究也引出了更多的问题，比如：将系统涨落考虑在内后所得结论还能否成立？本文基于 Haldane-Kondo 晶格模型所得结果对于其他类似模型是否成立？对于其他拓扑指标所对应的拓扑结构是否成立？本文所用近似方法无法处理磁序，那么将磁性考虑在内时又将产生什么影响？高温下为金属相的系统在低温下是否具有类似行为？我们将针对这些问题开展后续的研究，以期能对杂化过程中能带拓扑结构的变化有更全面的认识，或对其机理有更深入的理解。

附录 A 时间反演对称性对陈数的影响

以下讨论仅针对有能隙系统。

时间反演算符 \mathcal{T} 是反幺正算符。在其作用下，常数 C 将变换为 C^* ，晶格动量 \mathbf{k} 将变换为 $-\mathbf{k}$ 。对于布洛赫波函数的振幅部分，我们可以得到如下变换结果：

$$\mathcal{T}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,-\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}). \quad (\text{A.1})$$

对于 Berry 联络则有：

$$\begin{aligned} \mathcal{T}\mathcal{A}_n(\mathbf{k}) &= \langle \mathcal{T}u_{n\mathbf{k}} | i\nabla_{\mathbf{k}} | \mathcal{T}u_{n\mathbf{k}} \rangle = i \int d\mathbf{r} u_{n,-\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{k}} u_{n,-\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \\ &= -i \int d\mathbf{r} \nabla_{\mathbf{k}} u_{n,-\mathbf{k}}(\mathbf{r}) u_{n,-\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) = i \int d\mathbf{r} u_{n,-\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \nabla_{-\mathbf{k}} u_{n,-\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ &= \mathcal{A}_n(-\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Berry 曲率和 Chern 数在时间反演变换下依次变为：

$$\begin{aligned} \mathcal{T}\mathcal{F}_n(\mathbf{k}) &= \nabla_{\mathbf{k}} \times [\mathcal{T}\mathcal{A}_n(\mathbf{k})] = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathcal{A}_n(-\mathbf{k}) = -\nabla_{-\mathbf{k}} \times \mathcal{A}_n(-\mathbf{k}) \\ &= -\mathcal{F}_n(-\mathbf{k}), \\ \mathcal{T}C_n &= \frac{1}{2\pi} \oint_{1\text{BZ}} d\boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathcal{T}\mathcal{F}_n(\mathbf{k})] = -\frac{1}{2\pi} \oint_{1\text{BZ}} d\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathcal{F}_n(-\mathbf{k}) \\ &= -C_n. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

因此，如果系统在时间反演下保持不变，就有：

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_n(-\mathbf{k}) &= \mathcal{A}_n(\mathbf{k}) + \nabla_{\mathbf{k}} \chi(\mathbf{k}), \\ \mathcal{F}_n(-\mathbf{k}) &= -\mathcal{F}_n(\mathbf{k}), \\ C_n &= -C_n. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

由此得出结论，对于时间反演不变的系统，其任意能带的陈数必然为零。陈数不为零的系统一定是破坏了时间反演不变性的系统。

附录 B 具有 zigzag 型边界的条带系统的哈密顿量

假定系统在 y 方向上为无限长, 在 x 方向上具有有限长度 L_x 。那么我们在 y 方向上可取周期性边界条件。依照如图 3.3 中对各格点的标记方式, 我们可将哈密顿量中各项罗列如下, 其中除约束条件项外均省略自旋指标。

(1) 最近邻跃迁项:

$$H_N = -t_1 \sum_{i,k_y} \left(2c_{i-1/2,k_y,a}^\dagger c_{i,k_y,b} \cos \frac{k_y}{2} + 2c_{i,k_y,a}^\dagger c_{i+1/2,k_y,b} \cos \frac{k_y}{2} + c_{i,k_y,a}^\dagger c_{i,k_y,b} + \text{H.c.} \right) \\ - t_1 \sum_{k_y} \sum_{i=1}^{L_y-1} \left(c_{i+1/2,k_y,a}^\dagger c_{i+1/2,k_y,b} + \text{H.c.} \right). \quad (\text{B.1})$$

(2) 次近邻跃迁项为:

$$H_{NNN} = -2t_2 \sum_{k_y} \sum_{i=1}^{L_y-1} \left[c_{i,k_y,a}^\dagger c_{i+1/2,k_y,a} \cos \left(\frac{k_y}{2} + \phi \right) + c_{i+1,k_y,b}^\dagger c_{i+1/2,k_y,b} \cos \left(\frac{k_y}{2} - \phi \right) + \text{H.c.} \right] \\ - 2t_2 \sum_{i,k_y} \left[c_{i,k_y,a}^\dagger c_{i-1/2,k_y,a} \cos \left(\frac{k_y}{2} + \phi \right) + c_{i,k_y,b}^\dagger c_{i+1/2,k_y,b} \cos \left(\frac{k_y}{2} - \phi \right) + \text{H.c.} \right] \\ - 2t_2 \sum_{k_y} \sum_{i=1}^{2L_y+1} \left[c_{i/2,k_y,a}^\dagger c_{i/2,k_y,a} \cos(k_y - \phi) + c_{i/2,k_y,b}^\dagger c_{i/2,k_y,b} \cos(k_y + \phi) \right]. \quad (\text{B.2})$$

(3) 非对称势项为:

$$H_P = m \sum_{k_y} \sum_{i=1}^{2L_y+1} \left(c_{i/2,k_y,a}^\dagger c_{i/2,k_y,a} - c_{i/2,k_y,b}^\dagger c_{i/2,k_y,b} \right). \quad (\text{B.3})$$

(4) 近藤相互作用项为:

$$H_K \approx -\frac{J_K}{2} \sum_{A,k_y} \sum_{i=1}^{2L_y+1} V_{i/2,A} \left(c_{i/2,k_y,A}^\dagger f_{i/2,k_y,A} + \text{H.c.} \right) \\ + \frac{J_K L_y}{2} \sum_i \left(V_{i-1/2,a}^2 + V_{i+1/2,b}^2 + V_{i,a}^2 + V_{i,b}^2 \right). \quad (\text{B.4})$$

(5) 约束条件对应的拉格朗日乘子项为:

$$H_\lambda = \sum_{A,k_y} \sum_{i=1}^{2L_y+1} \lambda_{i/2,a} \left(\sum_\alpha f_{i/2,k_y,A,\alpha}^\dagger f_{i/2,k_y,A,\alpha} - 1 \right). \quad (\text{B.5})$$

参考文献

- Andres K, Graebner J, Ott H. *4f*-virtual-bound-state formation in CeAl₃ at low temperatures [J]. Physical Review Letters, 1975, 35: 1779.
- Berry M V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes [J]. Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences, 1984, 392: 45.
- De Haas W, De Boer J, Van den Berg G. The electrical resistance of gold, copper and lead at low temperatures [J]. Physica, 1934, 1: 1115.
- DiVincenzo D, Mele E. Self-consistent effective-mass theory for intralayer screening in graphite intercalation compounds [J]. Physical Review B, 1984, 29: 1685.
- Doniach S. The Kondo lattice and weak antiferromagnetism [J]. Physica B+C, 1977, 91: 231.
- Dzero M, Sun K, Galitski V, *et al.* Topological Kondo insulators [J]. Physical Review Letters, 2010, 104: 106408.
- Feng X Y, Dai J, Chung C H, *et al.* Competing topological and Kondo insulator phases on a honeycomb lattice [J]. Physical Review Letters, 2013, 111: 016402.
- Fu L, Kane C L, Mele E J. Topological insulators in three dimensions [J]. Physical Review Letters, 2007, 98: 106803.
- Gegenwart P, Si Q, Steglich F. Quantum criticality in heavy-fermion metals [J]. Nature Physics, 2008, 4: 186.
- 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: 2015.
- Halperin B I. Quantized Hall conductance, current-carrying edge states, and the existence of extended states in a two-dimensional disordered potential [J]. Physical Review B, 1982, 25: 2185.
- Hasan M Z, Kane C L. Colloquium: topological insulators [J]. Reviews of Modern Physics, 2010, 82: 3045.
- Kane C L, Mele E J. Quantum spin Hall effect in graphene [J]. Physical Review Letters, 2005, 95: 226801.
- Kondo J. Resistance minimum in dilute magnetic alloys [J]. Progress of Theoretical Physics, 1964, 32: 37.
- Lu F, Zhao J, Weng H, *et al.* Correlated topological insulators with mixed valence [J]. Physical Review Letters, 2013, 110: 096401.
- Moore J E, Balents L. Topological invariants of time-reversal-invariant band structures [J]. Physical Review B, 2007, 75: 121306.

- Ott H, Rudigier H, Fisk Z, *et al.* UBe₁₃: an unconventional actinide superconductor [J]. Physical Review Letters, 1983, 50: 1595.
- Riseborough P S. Heavy fermion semiconductors [J]. Advances in Physics, 2000, 49: 257.
- Roy R. Topological phases and the quantum spin Hall effect in three dimensions [J]. Physical Review B, 2009, 79: 195322.
- Sarachik M, Corenzwit E, Longinotti L. Resistivity of Mo-Nb and Mo-Re alloys containing 1% Fe [J]. Physical Review, 1964, 135: A1041.
- Schnyder A P, Ryu S, Furusaki A, *et al.* Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions [J]. Physical Review B, 2008, 78: 195125.
- Schrieffer J R, Wolff P A. Relation between the Anderson and Kondo hamiltonians [J]. Physical Review, 1966, 149: 491.
- Steglich F, Aarts J, Bredl C, *et al.* Superconductivity in the presence of strong pauli paramagnetism: CeCu₂Si₂ [J]. Physical Review Letters, 1979, 43: 1892.
- Stewart G, Fisk Z, Willis J, *et al.* Possibility of coexistence of bulk superconductivity and spin fluctuations in UPt₃ [M]//Ten Years of Superconductivity: 1980–1990. Springer, 1984: 85.
- 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: 405.
- Tsunetsugu H, Sigrist M, Ueda K. The ground-state phase diagram of the one-dimensional Kondo lattice model [J]. Reviews of Modern Physics, 1997, 69: 809.
- Von Klitzing K. Developments in the quantum Hall effect [J]. Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 2005, 363: 2203.
- Von Klitzing K, 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: 494.
- Wen X G. Topological orders and edge excitations in fractional quantum Hall states [J]. Advances in Physics, 1995, 44: 405.
- Wu X, Bin S, Yong-Jun Z, *et al.* Heavy fermion materials and physics [J]. Acta Physica Sinica, 2019, 68: 177101.
- Yang Y F. Two-fluid model for heavy electron physics [J]. Reports on Progress in Physics, 2016, 79: 074501.

致 谢

首先，我想感谢父母对我生活上的支持和精神上的鼓励。其次，要感谢我的导师杨义峰研究员及组内的师兄师姐们，给我提供了学业上的指引，并让我逐渐感受到什么是真正的科研。在此还要特别感谢龙卓青师兄，多亏龙师兄的全程指导和监督，毕设才能顺利完成。最后，要感谢张一鸣、曲行舟和魏子轩等同学四年来的一路同行，虽然未来难免分道扬镳，但大学时光永远是珍贵的回忆。

