

密级 \_\_\_\_\_



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

## 博士学位论文

重费米子材料和磁性拓扑绝缘体薄膜的量子输运研究

作者姓名 \_\_\_\_\_ 张树峰

指导教师 \_\_\_\_\_ 杨义峰 研究员

\_\_\_\_\_ 中国科学院物理研究所

学位类别 \_\_\_\_\_ 理学博士

学科专业 \_\_\_\_\_ 理论物理

研究所 \_\_\_\_\_ 中国科学院物理研究所

2016 年 5 月



Quantum transport of heavy fermion  
materials and magnetic topological  
insulator films

By

**Shu-feng Zhang**

A Dissertation Submitted to  
University of Chinese Academy of Sciences  
In partial fulfillment of the requirement  
For the degree of  
Doctor of Science

Institute of Physics  
Chinese Academy of Sciences

May, 2015



## 摘 要

量子输运是研究材料性质的重要手段。近些年来随着实验技术的进步，量子输运在凝聚态系统的研究中发挥了重要作用。本论文主要通过非平衡格林函数方法研究重费米子材料和磁性拓扑绝缘体薄膜的量子输运性质。

(1) 我们研究了正常态重费米子材料的电输运性质。我们采用了大U极限近似下的周期性Anderson模型。着重研究了Fano和空间路径干涉效应、探针和样品的耦合强度及其与能带特征，如杂化能隙和范霍夫奇异点，之间的竞争与合作。我们发现在探针和样品接触界面较大的情形，空间干涉效应会压制杂化能隙附近的电导谱。这是由于空间干涉导致电子到样品中布洛赫态的跃迁是动量依赖的。我们认为这对应于点接触测量的情形，因为点接触区域的面积通常是较大的。考虑到重费米子材料中  $f$  电子的能带会被重整化到费密面附近，这一压制效应导致点接触测量会丢失  $f$  电子的部分信息。Fano干涉源于电子到巡游导带和经由局域的  $f$  电子能带再进入导带之间的干涉效应。我们发现这会导致电导谱中出现极小值，进而增加电导谱的非对称特征。此外，我们发现在探针和样品局域耦合的情形，增强耦合强度会导致在杂化能隙内出现电导峰。这是源于局域束缚态的出现。

(2) 我们研究了磁场和门电压对处在量子反常霍尔 (QAH) 相的磁性拓扑绝缘体薄膜的影响。我们计算了体系相应于门电压和费密能的相图。我们发现门电压会破坏QAH相，并在其取值极大时形成平庸的相。QAH的电阻平台不会被磁场破坏，并且在强磁场下演化到量子霍尔效应的相。适当强度的磁场在某些参数下会导致一个类似量子自旋霍尔效应的相。在标准的六端口霍尔测量中，我们发现磁场会导致一些霍尔电阻和纵向电阻的取值均为分数的平台。

**关键词：** 量子输运，非平衡格林函数，重费米子材料，扫描隧道谱，点接触谱，量子反常霍尔效应



## Abstract

Quantum transport measurement is important and effective in revealing properties of materials. And recently, it acts an essential role in studying the condensed matter system with the process of experimental technique. In this paper, we mainly focus on the quantum transport behavior of heavy fermion material and magnetic topological insulator films by nonequilibrium Green function theory.

(1) We have studied the electric transport of heavy fermion materials in the normal state. The model used here is the periodic Anderson model in the large- $U$  mean field limit. We consider the effect of both Fano and spatial path interferences, coupling strength between probe and sample, and their interplay with band features such as, hybridization gap and Van Hove singularity. We find that spatial interference will suppress the conductance besides the hybridization gap if the contact interface is large. This is due to a weighted average in the first Brillouin zone. And it may correspond to the point contact measurement since point contact possesses a large contact region. Considering that local  $f$  electron band mainly distribute itself near Fermi level due to renormalization effect, this suppression effect will make point contact miss some information of  $f$  electron. Besides we find that Fano interference due to transport into  $f$  band and conduction band will lead to minimum which enhances the asymmetry of the conductance spectrum. Increasing the coupling strength will cause an in-gap conductance peak in the local hopping case and it's due to the bound state located in the contact region.

(2) We have studied the effect of magnetic field and gate voltages on the magnetic topological insulator film which is in the quantum anomalous Hall (QAH) phase. We give the phase diagram in the plane of gate voltage and Fermi energy. We find that gate voltage will break the QAH phase and lead to a trivial phase if it is large enough. The QAH resistance plateau will survive magnetic field and evolve into the quantum Hall phase. Moderate magnetic field will result

in a phase similar to quantum spin Hall phase in certain parameters. And in the standard Hall bar magnetic field will lead to exotic Hall and longitudinal resistance plateaus with fractional value.

**Keywords:** quantum transport, nonequilibrium Green's function, heavy fermion material, scanning tunneling spectroscopy, point contact spectroscopy, quantum anomalous Hall effect

# 目 录

摘要 .....	i
Abstract .....	iii
目录 .....	v
<b>第一章 绪论 .....</b>	<b>1</b>
1.1 重费米子材料 .....	1
1.2 点接触谱和扫描隧道谱 .....	3
1.2.1 点接触谱及其在重费米子研究中的应用 .....	3
1.2.2 扫描隧道谱及其在重费米子研究中的应用 .....	5
1.3 量子反常霍尔效应 .....	7
1.4 论文的主要内容 .....	11
<b>第二章 非平衡格林函数方法介绍 .....</b>	<b>13</b>
2.1 非平衡格林函数的定义 .....	13
2.2 格林函数的计算 .....	15
2.2.1 常用的表达式 .....	15
2.2.2 迭代法生长中心区的格林函数 .....	18
2.3 电流公式 .....	19
2.3.1 一般表达式 .....	20
2.3.2 多端口Landauer-Büttiker公式 .....	22
2.3.3 “导线-导线”结构 .....	23
2.3.4 “金属-超导”结构 .....	24
2.4 例子: Fano效应 .....	25

<b>第三章 重费米子材料的量子输运研究</b>	<b>27</b>
3.1 引言	27
3.2 模型哈密顿量	29
3.3 数值结果	31
3.3.1 Fano干涉	31
3.3.2 空间干涉效应	33
3.3.3 动量空间的加权平均	33
3.3.4 无穷大界面情形	36
3.3.5 能带展宽的影响	39
3.3.6 强耦合效应	41
3.4 小结	43
<b>第四章 磁性拓扑绝缘体输运性质</b>	<b>45</b>
4.1 引言	45
4.2 系统的哈密顿量和相图	47
4.2.1 三维低能有效哈密顿量	47
4.2.2 拓扑绝缘体薄膜的哈密顿量	49
4.2.3 相图	52
4.3 磁场效应：朗道能级谱	54
4.4 输运分析	60
4.4.1 哈密顿量和数值方法	60
4.4.2 无磁场情形	62
4.4.3 磁场的影响	63
4.5 小结	68
<b>第五章 总结</b>	<b>69</b>
<b>附录 A 实空间格林函数的计算</b>	<b>71</b>
A.1 一维链的表面格林函数	71
A.2 准一维链的表面格林函数	71

---

A.3 三维半无限表面的格林函数 .....	72
A.4 三维半无限无相互作用周期性Anderson晶格 .....	73
参考文献 .....	75
简历 .....	91
发表文章目录 .....	93
致谢 .....	95
学位论文原创性声明和使用授权说明 .....	97



## 表 格



## 插 图

1.1	Ce <sub>x</sub> La <sub>1-x</sub> Cu <sub>6</sub> 电阻率。图片取自 [17] .....	2
1.2	杂化图像。图片取自 [3]。 .....	3
1.3	杂化能隙的形成示意图。(a, c) 动量沿着(0,1) 方向, (b, d) (1,1) 方向。图片取自 [35]。 .....	6
1.4	六种霍尔效应示意图。(a) 霍尔效应; (b) 反常霍尔效应; (c) 自旋霍尔效应; (d) 量子霍尔效应; (e) 量子反常霍尔效应; (f) 量子自旋霍尔效应。图片取自 [48]。 .....	8
1.5	(A) 没有反转的能带结构随着引入交换场和自旋轨道耦合的演化。(B) 反转的能带结构随着引入交换场和自旋轨道耦合的演化。图片取自 [55] .....	10
2.1	闭路格林函数的定义。图中回路上四个时间的先后顺序为: $\tau, \tau_1, \tau_2, \tau'$ 。在闭路格林函数定义中时序在前的算符在编时算符作用后排在右边。 .....	13
2.2	两端口装置示意图。 .....	19
2.3	霍尔装置示意图。 .....	22
2.4	Fano效应示意图。(a) 电导谱, (b) 谱函数。参数: $t = 25$ , $\epsilon_d = 0$ , $V = 5$ , $t_c = 0.01t$ , $t_d = qt_c$ , $\Gamma_f = 0.2$ 。 .....	26
3.1	实验装置示意图。(a) $n_L \times n_L \rightarrow n_L \times n_L$ 位形, $n_L = 2$ ; (b) $1 \rightarrow 2 \times 2$ 位形。 .....	28
3.2	遂穿到重费米子样品的电导谱, 调节 $q$ 以揭示Fano效应。(a) $1 \rightarrow 1$ 位形, (b) $16 \times 16 \rightarrow 16 \times 16$ 位形。参数: $t = 25$ , $\mu = -20$ , $\epsilon_f = 0.01$ , $\mathcal{V} = 5$ , $t_c = 0.001t$ , $t_L = t$ , $\Gamma = 0.01$ 。偏压以杂化能隙为单位, 电导单位 $\frac{2e^2}{h} n_R^2 \frac{4\pi t_c^2}{t_L t}$ 。 .....	32

- 3.3 不同位形下遂穿到重费米子样品的电导谱。(a)  $q = 0$  , (b)  $q = 0.2$ 。参数:  $t = 25$ ,  $\mu = -20$ ,  $\epsilon_f = 0.01$ ,  $\mathcal{V} = 5$ ,  $t_c = 0.001t$ ,  $t_L = t$ ,  $\Gamma = 0.01$ 。电导单位  $\frac{2e^2}{h} n_R^2 \frac{4\pi t_c^2}{t_L t}$ 。 ..... 34
- 3.4 (a)  $2 \times 2$  导线的能带。共4条能带, 其中两条简并子带穿过费密面。(b) 第二条子带入射的电子透射到样品动量空间沿着第一布里渊区对角线上的跃迁系数,  $|t_{2k}| \propto |\sin(\frac{k_x + k_y}{2})|$ 。 ..... 35
- 3.5 (a)  $n_L = 1, 16, \infty$  时的电导谱。参数  $t = 25$ ,  $\mu = -20$ ,  $\epsilon_f = 0.01$ ,  $\mathcal{V} = 5$ ,  $t_c = 0.001t$ ,  $t_L = t$ ,  $\Gamma = 0.01$ 。电导单位  $\frac{2e^2}{h} n_L^2 \frac{4\pi t_c^2}{t_L t}$ 。无相互作用导带晶格(b)和c-f 杂化晶格(c) 沿着  $(1, 1)$  方向的动量约束的示意图。阴影区域对输运没有贡献。 .... 37
- 3.6  $q = \infty$  时不同位形  $n_L = 1, 2, 16, \infty$  的电导谱比较。参数:  $t = 25$ ,  $\mu = -20$ ,  $\epsilon_f = 0.01$ ,  $\mathcal{V} = 5$ ,  $t_c = 0$ ,  $t_L = t$ ,  $\Gamma = 0.01$ ,  $t_f = 0.001t$ 。电导单位  $\frac{2e^2}{h} n_L^2 \frac{4\pi t_f^2}{t_L t}$ 。 ..... 39
- 3.7 电导谱随着  $\Gamma$  的改变。考虑不同的位形  $1 \rightarrow 1$  (a,c,e),  $16 \times 16 \rightarrow 16 \times 16$  (b,d,f), Fano 因子取  $q = 0, 0.2, \infty$ 。参数:  $t = 25$ ,  $\mu = -20$ ,  $\epsilon_f = 0.01$ ,  $\mathcal{V} = 5$ ,  $t_L = t$ 。(a-d)电导单位  $\frac{2e^2}{h} n_L^2 \frac{4\pi t_c^2}{t_L t}$ ,  $t_c = 0.001t$ 。(e,f) 电导单位  $\frac{2e^2}{h} n_L^2 \frac{4\pi t_f^2}{t_L t}$ ,  $t_f = 0.001t$ ,  $t_c = 0$ 。 ..... 40
- 3.8  $1 \rightarrow 1$  位形 (a) 和  $16 \times 16 \rightarrow 16 \times 16$  位形 (b) 的电导谱, Fano 因子设为  $q = 0.2$ 。参数:  $t = 25$ ,  $\mu = -20$ ,  $\epsilon_f = 0.01$ ,  $\mathcal{V} = 5$ ,  $t_L = t$ ,  $\Gamma = 0.01$ 。电导单位:  $\frac{2e^2}{h} n_L^2 \frac{4\pi t_c^2}{t_L t}$ 。 ..... 41
- 3.9 强耦合情形电导谱随着  $t_c$  和  $\Gamma$  的演化。参数:  $t = 25$ ,  $\mu = -20$ ,  $\epsilon_f = 0.01$ ,  $\mathcal{V} = 5$ ,  $t_L = t$ ,  $\Gamma = 0.01$ 。电导单位:  $\frac{2e^2}{h} n_L^2 \frac{4\pi}{t_L t}$ 。 ..... 42
- 3.10 强耦合情形电导谱随着  $n_L$  的演化。参数:  $t = 25$ ,  $\mu = -20$ ,  $\epsilon_f = 0.01$ ,  $\mathcal{V} = 5$ ,  $t_L = t$ ,  $\Gamma = 0.01$ 。电导单位:  $\frac{2e^2}{h} n_L^2 \frac{4\pi}{t_L t}$ 。 ..... 43
- 4.1  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  能级劈裂示意图。图片源自 [123]。 ..... 48

- 4.2 (a1) 和 (b1) 是体系相应于空间反演非对称势  $\delta V$  和费米能  $E_f$  的相图。区域I-VI是拓扑非平庸体系。区域I (IV) 是QAH (QPH) 相, 费密能级在能隙中。区域II, V (III, VI) 是n(p)-掺杂的能带反转区域。区域VII是正常绝缘体区域, 费密能级在能隙中。区域VIII和IX是普通的金属相。(a2) 和 (b2) 是久保霍尔电导公式计算的作为费米能函数的霍尔电导曲线。(a3) 和 (b3) 是二维系统在动量空间某个方向的色散曲线。(a4) 和 (b4) 是宽度为480nm的纳米带的色散曲线。(a1) - (a4)  $m_0/B < 0$ , (b1) - (b4)  $m_0/B > 0$ 。 ..... 53
- 4.3 朗道能级谱。(a/b1-4) 不同  $\delta V$  对应的朗道能级随磁场的演化。(a/b5) 磁场取值  $B_z = 3T$  时, 朗道能级随着  $\delta V$  的演化。两条亮绿色的曲线是朗道能级的零模式  $E_{0\pm}$ 。磁场较小时模式  $E_{0-}$  位于  $E_{0+}$  之下。红色的整数给出了所属区域由久保公式算出的霍尔电导。(a1-5)  $m_0/B < 0$ , (b1-5)  $m_0/B > 0$ 。 ..... 55
- 4.4 霍尔电阻  $R_H$  和纵向电阻  $R_L$  作为费密能级  $E_f$  的函数, 考虑不同的空间反演非对称势  $\delta V$  的影响。(a1) 和 (a2)  $m_0/B < 0$ , (b1) 和 (b2)  $m_0/B > 0$ 。中心区和端口的宽度均取为  $480nm$ 。 ..... 58
- 4.5 (a1、a2, b1, b2) 霍尔电阻和纵向电阻随着费米能  $E_f$  的变化。磁场固定为  $B_z = 0, 0.1T, 0.6T, 1T, 3T, 6T$ 。(c) 一维纳米带的能带曲线, 磁场取为  $B_z = 0, 0.1T, 0.6T, 1T$ 。(d) 边态波函数在实空间的分布, 其中的插图是图 (c) 的局部放大。  $m_0/B < 0$ ,  $\delta V = 0$ 。 ..... 59
- 4.6 霍尔电阻和纵向电阻随着费米能  $E_f$  的变化。磁场取为  $B_z = 0, 0.1T, 0.6T, 1T, 3T, 6T$ 。  $m_0/B < 0$ ,  $\delta V = 10meV$ 。 ..... 60
- 4.7 一维纳米带的能带曲线。磁场取为  $B_z = 0, 0.1T, 0.6T, 1T, 3T, 6T$ 。  $m_0/B < 0$ ,  $\delta V = 10meV$ 。 ..... 61
- 4.8 霍尔电阻和纵向电阻随着费米能  $E_f$  的变化。磁场取为  $B_z = 0, 0.1T, 0.5T, 1T, 3T, 6T$ 。  $\delta V = 40meV$ ,  $m_0/B < 0$ 。 ..... 62
- 4.9 一维纳米带的能带曲线。磁场取为  $B_z = 0, 0.1T, 0.5T, 1T, 3T, 6T$ 。  $\delta V = 40meV$ ,  $m_0/B < 0$ 。 ..... 63

- 4.10 霍尔电阻和纵向电阻随着费米能  $E_f$  的变化。磁场取为  $B_z = 0, 0.1T, 0.6T, 1T, 3T, 6T$ 。  $m_0/B > 0, \delta V = 0$ 。 ..... 64
- 4.11 一维纳米带的能带曲线。磁场取为  $B_z = 0, 0.1T, 0.6T, 1T, 3T, 6T$ 。  $m_0/B > 0, \delta V = 0$ 。 ..... 65
- 4.12 霍尔电阻和纵向电阻随着费米能  $E_f$  的变化。磁场取为  $B_z = 0, 0.1T, 0.6T, 1T, 3T, 6T$ 。  $m_0/B > 0, \delta V = 10meV$ 。 ..... 66
- 4.13 一维纳米带的能带曲线。磁场取为  $B_z = 0, 0.1T, 0.6T, 1T, 3T, 6T$ 。  $m_0/B > 0, \delta V = 10meV$ 。 ..... 67
- 4.14 磁场  $B_z = 3T$  时关于费米能  $E_f$  和空间反演非对称势  $\delta V$  的相图。(a)  $m_0/B < 0$ , (b)  $m_0/B > 0$ 。图中的整数标记了所属区域的霍尔电导, 并且所属区域纵向电导为零。亮绿色区域的纵向电导是非零的平台。 ..... 68

# 第一章 绪论

量子输运是研究材料性质的重要手段，在凝聚态体系的研究中有着广泛的应用。本论文将着重于分析重费米子材料和拓扑非平庸材料的量子输运行为。在本章我们将对研究背景给出一个简明的概述，包括：重费米子材料简介、点接触谱和扫描隧道谱简介及其在重费米子材料中的应用、量子反常霍尔效应介绍。

## 1.1 重费米子材料

重费米子材料具有极大的低温比热系数，一般是普通金属材料比热系数 $10^2\sim 10^3$  倍的量级。按照费米液体理论，低温比热系数正比于能带电子的有效质量，因此这类材料中具有重电子，故称为重费米子材料 [1-3]。一般而言，这类材料是含有  $f$  电子（稀土或镧系元素）的体系，此外还有极少量的  $d$  电子材料，如  $\text{LiV}_2\text{O}_4$  [4] 以及  $\text{CaCu}_3\text{Ir}_4\text{O}_{12}$  [5] 等。重费米子材料的能标比较小，一般在  $\text{meV}$ （几十 $K$ ）的量级，因此易于被外加因素——压力、磁场、化学掺杂等调控。在低温下具有复杂的相图，可以形成近藤绝缘体、磁有序、价态涨落、量子临界点、非费米液体和非常规超导，以及电多级矩序、密度波序、拓扑序、隐藏序等奇异的相，自发现以来就是理论和实验研究的热点 [1-3,6-10]。

重费米子材料属于多带的强关联电子体系。多带是指存在巡游的导带和局域的  $f$  电子能带。其中  $f$  电子周期性地排布成晶格，其波函数分布比较局域，关联效应较强。相邻格点上  $f$  电子之间的距离较大，波函数之间交叠很弱。 $f$  电子的能级是部分填充的，携带局域磁矩。导带是巡游的且关联较弱，导带电子波函数与  $f$  电子之间存在交叠，即存在杂化效应。高温下局域磁矩与导带电子没有杂化，系统处在顺磁状态。随着温度降低，局域磁矩与导带电子的杂化逐步增强。此时局域磁矩和导带电子之间存在近藤耦合效应，其强度由近藤温标  $T_K$  刻画；局域磁矩之间通过导带电子的传递可以形成RKKY相互作用，其强度由RKKY温标  $T_{RKKY}$  刻画。近藤耦合和RKKY相互作用是重费米子材料中常见的物理机制，二者竞争共存。RKKY作用占主导则产生磁有序基态，近藤效应占主导则产生重费米液体态。当这两个能标接近时，其竞争将导致一些

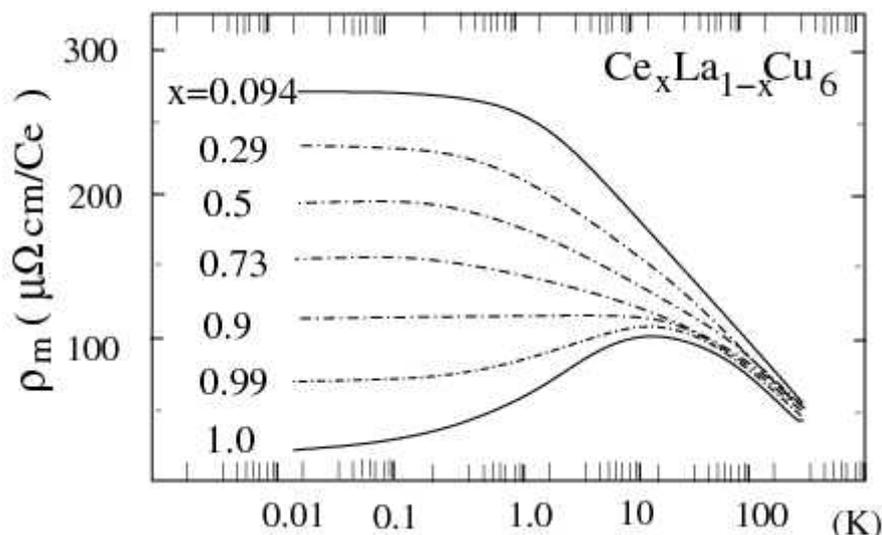


图 1.1:  $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Cu}_6$  电阻率。图片取自 [17]

奇异的现象，如：超导、量子临界点等 [11]。

近藤耦合效应是在研究稀磁金属电阻率反常时提出的，早于重费米子材料的发现 [12–15]。对于普通金属，电阻率随着温度降低而逐渐减小，零温下到达非磁性杂质或缺陷导致的剩余电阻率。其低温下的行为满足费米液体性质。但是对于稀磁金属，在足够低的温度下电阻率反常增大，呈现  $-\log(T)$  的行为，并在温度极小时，电阻率逐渐饱和，见示意图 1.1 中  $x = 0.094$  的曲线。电阻的反常增大源于导带电子被磁性杂质散射。趋于饱和则是由于低温下磁矩和导带电子的杂化增强，且耦合是反铁磁类型的，因而磁矩逐渐被导带电子屏蔽，形成非磁的单态。单态（近藤共振态）的形成会增大费密面上的态密度。在相互作用量子点的量子输运研究中，这体现为贡献了额外的输运通道，形成近藤电导峰 [15]。屏蔽效应出现的温标定义为近藤温度  $T_K$ 。需要指出的是单杂质近藤问题的近藤温标与重费米子晶格的近藤温标是不同的。重费米子材料中，磁矩形成的周期性晶格，每个格点都存在近藤耦合效应，体系可以出现相干效应 [16]。对于重费米子金属，低温下电阻率逐渐由随温度增大变为随温度以  $T^2$  降低，见图 1.1 中  $x = 1$  的曲线。这是因为在低温下出现相干效应，形成了重电子的能带，且为费米液体。对于重费米子半导体（近藤绝缘体），相干效应的出现则导致形成绝缘体能隙，随温度降低电阻率以指数形式增大 [3]。

对于近藤绝缘体和重费米子金属，可以从能带的图像来理解。 $f$  电子是内

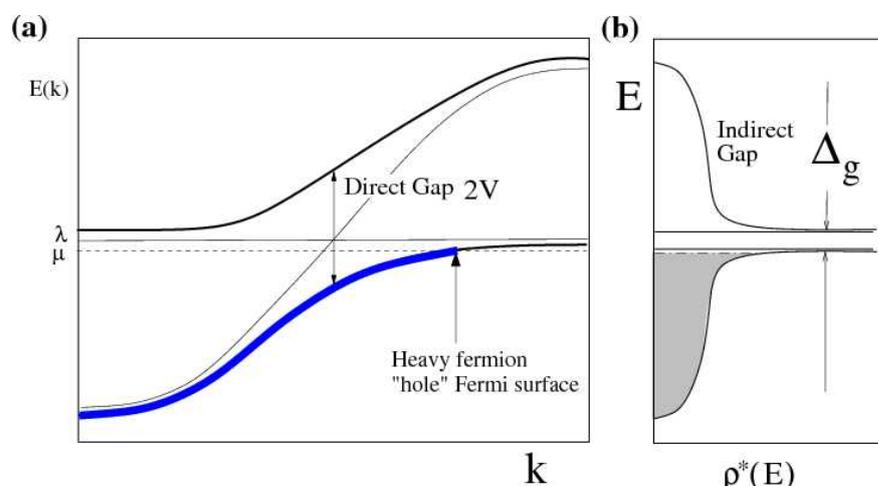


图 1.2: 杂化图像。图片取自 [3]。

层电子，低温下  $f$  电子的能带深埋在费米面以下。强关联效应以及和导带的杂化会使得  $f$  电子能带被重整化到费密面附近，与导带的杂化会打开杂化能隙，能隙两侧形成重电子带，见图 1.2。如果费米能位于间接带隙内则形成近藤绝缘体，如果费米能在间接带隙外或者没有间接带隙则形成重费米子金属。

## 1.2 点接触谱和扫描隧道谱

### 1.2.1 点接触谱及其在重费米子研究中的应用

点接触是指金属之间、金属与超导以及超导与超导之间形成的的一种直接的接触。Sharvin 在1965年意识到弹道运输的重要性，开始用金属接触做输运测量 [18]。Yanson 在1974年进行金属点接触实验时发现，可以进行能量分辨的测量，并且把电流-电压曲线的非线性特征与金属中的电声耦合联系起来。这标识着点接触谱学的开始 [19]。经过多年的发展，点接触已经成为研究材料输运性质的常用手段。其突出的优势是易于制备、经济，并且能够在加压环境下使用。点接触的详细介绍参见综述文章 [20-22]。

按照接触区域尺寸  $d$  和电子平均自由程  $l$  的大小，可以把点接触分为三类：弹道区 (ballistic regime)、扩散区 (diffusive regime) 和热学区 (thermal regime)。弹道区， $l_{el}, l_{in} \gg d$ ；扩散区， $l_{el} \ll d \ll \sqrt{l_{in}l_{el}}$ ；热学区， $l_{el}, l_{in} \ll d$ 。其中  $l_{el}$ ,  $l_{in}$  分别是电子弹性散射和非弹性散射的平均自由程。只有当点接触处在弹道区时，才能进行能量分辨的测量。点接触的制备工

艺比较简单，这也使得对探针与样品的接触区域不能进行精细的调控，即不能精确调控接触区域的数量、面积、接触方式以及探针和样品的耦合强度。实验上往往根据测量的结果对接触区域进行估计。实验结果的可重复性是判断点接触质量的重要依据。对于普通金属之间的点接触谱，可以根据大量实验总结出的规律判断点接触的好坏以及实验数据是否可用 [20]。

Wexler公式给出了电阻与点接触参数的关系，可以用于估计点接触区域的尺寸。公式如下 [21]，

$$R = \frac{4\rho l}{3\pi d^2} + \frac{\rho}{2d}\Gamma(l/d), \quad (1.1)$$

其中  $\rho$  是电阻率， $d$  是点接触尺寸， $l$  是电子平均自由程， $\Gamma$  是一个缓慢变化的函数，宗量是  $l/d$ 。对于纯净的重费米子材料，电子的平均自由程较大。近年来的实验往往可以得到处于弹道区的点接触。例如，点接触对  $\text{URu}_2\text{Si}_2$  进行的测量，文中估计  $d \approx 25\text{nm}$  [23]。但是考虑到点接触是由上百个小的接触组成的，对于每一个小的点接触可以近似估计为  $d \approx 25\text{nm}/100 = 0.25\text{nm}$ 。考虑到平均自由程  $l \approx 10\text{nm}$ ，因此有  $d \ll l$ ，从而测量处在弹道区。对于  $\text{CeCoIn}_5$  的点接触测量，文中估计  $d \approx 20 - 50\text{nm}$ ，而  $\text{CeCoIn}_5$  可以长出非常纯净的晶体，低温下  $l$  可以达到若干微米的量级，因此也有  $d \ll l$ ，从而测量处在弹道区 [24]。

遂穿结是电导谱测量的另一常用手段，遂穿谱也是能量分辨的。它的特征是电极和样品之间有一绝缘层，具有类似“金属-绝缘层-金属”的结构，工作原理是量子力学中的遂穿原理。这与点接触的直接接触是不同的。遂穿谱中准粒子散射会修正电流，结果是电流增加。原因是散射过程相当于打开了额外的遂穿通道。这一点与点接触是相反的 [20]。

点接触谱在研究重费米子材料的正常态、磁性序和超导电性方面有着广泛的应用 [20–22]。近年来重费米子材料点接触谱研究的一个重要进展是发现了Fano效应 [24, 25]。Fano效应是指若系统中存在两条输运通道，一条是电子直接透射到连续的能带，另一条是电子跃迁到离散的孤立能级再跃迁到连续能带，两条输运路径之间会发生干涉效应 [26]。若电导谱原本是对称的，Fano效应会在电导谱中导致极小和极大值的出现，从而导致电导的非对称特征。重电子是一种复合准粒子，由导带电子和  $f$  带电子杂化形成。进行电导测量时，电子存在进入导带和  $f$  带两种通道的跃迁。这两条路径可以产生Fano干

涉效应 [25]。CeCoIn<sub>5</sub> [24, 27], URu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> [28], CeAl<sub>3</sub> [29] 等材料的点接触电导谱需要引入Fano干涉来拟合。其中URu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>的数据中同时存在杂化能隙的特征和Fano干涉的特征。但是在CeCoIn<sub>5</sub>和CeAl<sub>3</sub>的点接触电导谱中却不存在杂化能隙的特征。考虑到URu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>中隐藏序问题的复杂性, 对于点接触谱能不能测量到杂化能隙是值得商榷的。

在超导能隙区域, 点接触谱能够测量到Andreev反射电导谱。不同的超导配对对称性以及解理面的晶面取向对Andreev反射有较大影响, 点接触谱可以据此对配对对称性作出判定。对CeCoIn<sub>5</sub> [24]和PuCoGa<sub>5</sub> [30]的测量证实了Andreev束缚态的存在, 给出了支持  $d_{x^2-y^2}$  的证据。点接触谱的一个重要的应用是确定材料的温标, 比如相干温标  $T^*$  等。点接触谱可以用于比较不同相之间的关系。对URu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>在常压下隐藏序相和高压下大磁矩相的研究表明, 两个相的点接触电导谱具有相似的特征, 这说明两者具有相似的结构特征, 因此关于隐藏序的理论应该能够同时解释高压下的磁性序 [23]。点接触谱也可以用于拓扑近藤绝缘体的研究 [31]。对于SmB<sub>6</sub>的研究发现在特征温度4K及以下, 点接触谱没有明显的改变, 这说明了体态的性质没有改变。从而电阻率在4K以下出现饱和不是体态的贡献而是源于表面态。这有利地支持了SmB<sub>6</sub>是拓扑近藤绝缘体。

### 1.2.2 扫描隧道谱及其在重费米子研究中的应用

扫描隧道显微镜 (STM) 通过局域的电导测量可以给出样品表面形貌和电子结构等信息 [32]。STM可以在真空、大气以及溶液中, 常温和极低温, 零磁场和强磁场环境下进行测量, 但是高压下的STM测量还没有实现。STM是一种精密的测量手段, 可以实现实空间原子级分辨率的测量, 能量分辨率可以达到  $meV$  的量级。对样品表面比较敏感, 对样品解理的要求比较高。重构或者无序的样品表面会对电导谱产生极大的影响。但是STM可以首先测量得到样品表面的空间形貌并分辨出不同的解理面, 然后选择高质量的表面进行测量。这是很多表面敏感的测量手段所不能实现的。

傅里叶变换STM (FT-STM) 是近些年发展起来的测量手段 [33, 34]。FT-STM 在实空间中不同位置测量得到电导谱, 然后通过傅里叶变换得到动量空间的电子结构信息。FT-STM 是少有的几种能够得到动量空间信息的实验手段。ARPES 只能测量占据态的信息, FT-STM则可以给出激发态的信息。

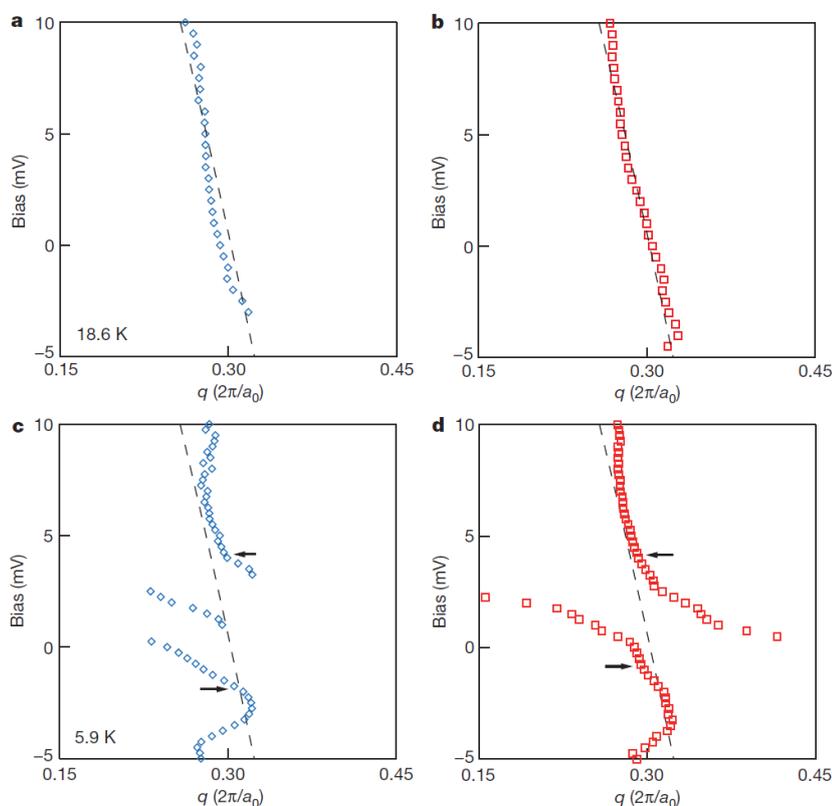


图 1.3: 杂化能隙的形成示意图。(a, c) 动量沿着(0,1) 方向, (b, d) (1,1) 方向。图片取自 [35]。

FT-STM的基本原理是样品表面存在的缺陷或者杂质会导致准粒子在不同的动量之间散射, 在实空间这表现为准粒子干涉效应。散射势的不同会导致准粒子干涉(QPI)图样的不同。QPI中强度较强的波矢对应了能带中等能面上态密度较大动量间的散射波矢。ARPES是对电子结构的直接测量, 而FT-STM的结果则需要拟合, 从中提取电子结构的信息。对于多带系统, 不做任何假设直接提取电子结构是很困难的。我们需要结合第一性计算或者ARPES、量子相干振荡等的结果来拟合QPI 的结果。

重费米子材料的能量尺度比较低, 因此对STM的能量分辨率提出了较高的要求。近年来随着实验技术的进步, 特别是FT-STM分辨率的提高, STM在重费米子研究中得到了广泛的应用。对于揭示重电子形成机制、超导配对对称性以及拓扑近藤绝缘体等方面发挥了重大作用 [36]。

巡游的导带和局域的  $f$  带之间的杂化是理解重费米子物理的基本图像，但是一直没有得到实验的直接证实。康奈尔大学的Davis组通用FT-STM对URu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>的杂化过程进行了研究 [35]，在实验上第一次直接观测到了动量空间杂化能隙的形成，见图 1.3。他们的实验结果揭示了随着温度降低导带和  $f$  带的杂化增强，杂化能隙打开并形成重电子能带的过程。对URu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>隐藏序的理论提出了限制，具有重要意义。随后普林斯顿大学的Yazdani组在URu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> [37]和正常态CeCoIn<sub>5</sub> [36] 中也观测到了杂化能隙的形成过程。重费米子物理的杂化图像得到了完全的证实。对CeCoIn<sub>5</sub>的研究发现了在超导转变温度之上存在能隙，这一点与铜基超导类似。探究两者之间的关系也是一个有意思的课题 [38]。随后上述两个研究组对CeCoIn<sub>5</sub>进行了更低温度下的测量，分别通过拟合准粒子散射谱和观测缺陷态引起的电子结构的响应，证实了CeCoIn<sub>5</sub>的超导配对对称性是  $d_{x^2-y^2}$  [38, 39]。他们的测量第一次给出了超导能隙在动量空间的结构。

此外，扫描隧道谱的另一个重要特征是观测到Fano干涉效应 [35–41]。但是这里的Fano干涉与传统的单杂质Fano效应不同，杂化能隙特征和Fano干涉的特征在电导谱中共存，需要更加细致地分析。

### 1.3 量子反常霍尔效应

霍尔效应家族包括：霍尔效应 (HE)，量子霍尔效应 (QHE)，反常霍尔效应 (AHE)，量子反常霍尔效应 (QAHE)，自旋霍尔效应 (SHE)，量子自旋霍尔效应 (QSHE)，示意图见图 1.4。截至目前，这六种效应都已经在实验上实现。

霍尔效应是指外加磁场导致在垂直于电流和和磁场方向出现偏压的现象 [42]。实验发现霍尔电阻正比于磁场，反比于载流子浓度。霍尔效应是测量载流子浓度和极性的有效手段。其物理机制是运动电荷受到磁场的洛伦兹力。霍尔效应是霍尔1879年在普通金属材料中最早发现。后来霍尔以及其他研究者发现，铁磁材料的霍尔效应不同于非磁性材料，是为反常霍尔效应 [43]。此时霍尔电阻不再线性依赖于磁场，而是在弱磁场时迅速增大，在强磁场时接近饱和，对磁场的依赖较弱。对于很多材料，其霍尔电阻率  $\rho_{xy}$ 、外加磁场  $H_z$  和所测材料的磁矩  $M_z$  满足如下关系，

$$\rho_{xy} = R_0 H_z + R_s M_z, \quad (1.2)$$

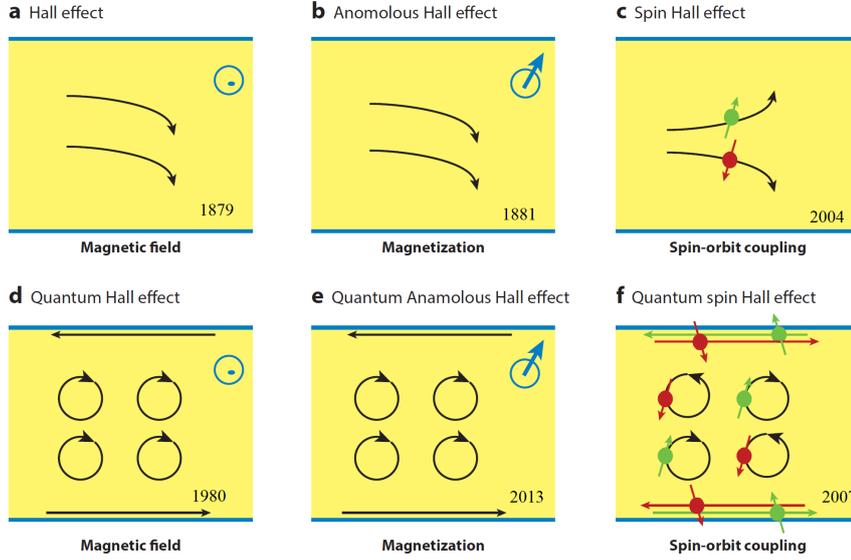


图 1.4: 六种霍尔效应示意图。(a) 霍尔效应; (b) 反常霍尔效应; (c) 自旋霍尔效应; (d) 量子霍尔效应; (e) 量子反常霍尔效应; (f) 量子自旋霍尔效应。图片取自 [48]。

其中第二项对应于材料自身磁化的贡献。如果选择样品薄膜表面垂直于铁磁材料的易磁化轴，样品会发生自发磁化，这样即使不外加磁场也可以观测到霍尔电阻。直观地讲，磁性序产生附加的磁场，破坏了霍尔电阻率对外加磁场的线性依赖。但是磁矩产生的磁场不足以贡献如此大的霍尔电阻。对AHE机制的解释长期存在争论。历史上主要的解释有三种，分为内禀机制和外禀机制两类。外禀机制包括：螺旋散射 [44] (skew scattering) 和边跳 (side jump) 机制 [45]。外禀机制主要考虑晶格缺陷以及杂质的散射。Smit等人提出的螺旋散射机制认为，由于存在自旋轨道耦合和铁磁极化，入射电子被磁性杂质非对称地散射，从而导致横向的电荷移动。边跳机制则指出极化的电子被存在自旋轨道耦合效应的杂质散射时存在额外的横向跳跃。

内禀机制认为霍尔电流源于电子所具有的垂直于磁场的反常的速度项 [46]。Berry位相的研究表明这一反常速度源于能带具有非零的Berry曲率 [47]。处在能带  $n$  动量  $k$  的电子在电场  $\mathbf{E}$  下的速度项为，

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{\partial \epsilon_n(\mathbf{k})}{\hbar \partial \mathbf{k}} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \times \Omega_n(\mathbf{k}), \quad (1.3)$$

其中第二项是反常的速度项， $\Omega_n(\mathbf{k})$  是Berry曲率。这样外加电场导致的电流表达式可以简单写为，

$$\mathbf{J} = -e \sum_n \int \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2} \left[ \frac{\partial \epsilon_n(\mathbf{k})}{\hbar \partial \mathbf{k}} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \times \Omega_n(\mathbf{k}) \right] f(\epsilon_n(\mathbf{k})). \quad (1.4)$$

其对应的霍尔电导是

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{\hbar} \sum_n \int \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2} \Omega_{k_x, k_y}^{(n)} f(\epsilon_n(\mathbf{k})). \quad (1.5)$$

低温下的霍尔电导对应于Berry曲率在布里渊区被占据态的求和。导体的导带是部分填充的，这时的霍尔电导对应于Berry曲率在布里渊区的部分求和。因此即使对于一条平庸的能带（陈数为零），AHE也可以存在，但这时的霍尔电导不是量子化的。对于部分布里渊区的求和可以转化为费米面上的Berry位相，这与费米液体理论中输运性质由费密面决定是不相悖的 [47]。

在上个世纪由于理论和实验的限制，对于AHE的定量研究一直无法进行。在本世纪初，由于从理论上弄清楚了内禀机制中电子反常速度的拓扑本质，再加上计算能力的提高，才使得定量研究成为可能。通过第一性计算可以直接确定内禀机制的霍尔电导，对很多材料的研究表明，内禀机制占据主导作用 [49, 50]。考虑到真实的材料中必然存在缺陷、杂质以及声子等元激发，外在机制的贡献也要根据实验条件做具体的分析。

1980年，对二维电子气在强磁场下的研究表明，对于低温强磁场下纯净的样品，霍尔电导与外磁场的依赖关系不是线性的，而是呈现为电阻平台，取值为  $\frac{e^2}{h}$ （单位量子电导）的整数倍。纵向电阻则会减小到零，仅在相邻平台，霍尔电导跃变处存在。这称为整数量子霍尔效应（IQHE） [51, 52]。从经典的图像来看，这是因为样品内部的电子形成朗道能级，做局域化运动，体态是绝缘的。边界处的电子则由于边界破坏了朗道能级，可以沿着边界做手征性的运动，边界态是导电的。在动量空间，边界态是有色散的，且存在于朗道能级之间的能隙中。整数霍尔效应不能用朗道的相变理论描述，而是需要引入拓扑不变量的概念。电导平台的数值对应于TKNN数 [53]，描述了被占据的边态的数目。由于其拓扑属性，整数量子霍尔效应在强无序下也可以存在。而且其边态的输运不存在“背散射”，因而是无耗散的。对Berry位相的研究表明，TKNN数与如下定义的“陈数”（Chern number）是一致的 [47]，

$$C_n = \int \frac{dk_x dk_y}{2\pi} \Omega_{k_x, k_y}^{(n)}. \quad (1.6)$$

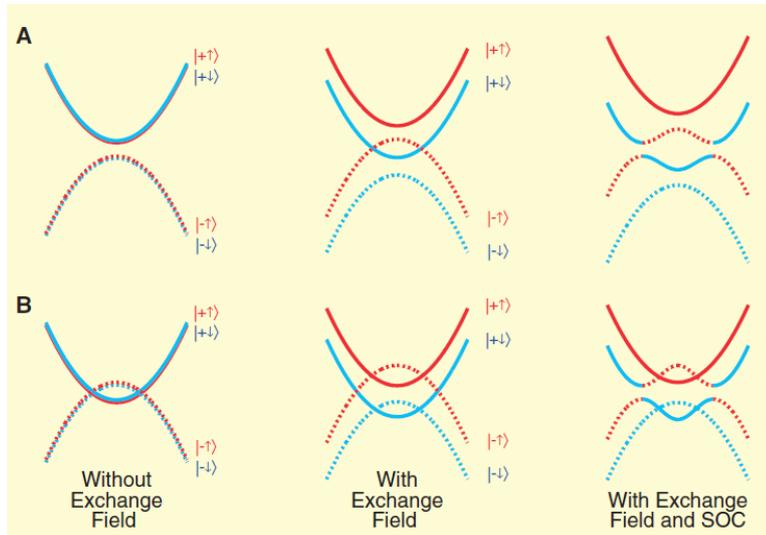


图 1.5: (A) 没有反转的能带结构随着引入交换场和自旋轨道耦合的演化。(B) 反转的能带结构随着引入交换场和自旋轨道耦合的演化。图片取自 [55]

IQHE的机制与AHE的内禀机制是一致的。对于低温时的绝缘体或半导体而言，化学势在带隙中，能带是满占据的。按照霍尔电导的表达式 (1.5)，所对应的求和遍及第一布里渊区，霍尔电导正比于陈数。对于普通的绝缘体陈数为零，不存在霍尔电导。对于磁场下的二维电子气，积分遍及“磁布里渊区”，对应于非零的陈数。

IQHE的研究，使人们思考是否可以在无外加磁场时实现量子化霍尔电导，这一现象被称为量子反常霍尔效应 (QAHE)。Haldane在1988年最早提出了一个理论模型，在六角复式晶格中通过引入相反的磁通量实现整体的磁场为零 [54]。这一研究表明了实现体能带拓扑非平庸的可行性。AHE内禀机制的研究使人们意识到存在自旋轨道耦合的磁性系统有可能实现QAHE。在祁晓亮等提出的两带模型中，磁场的效应则通过自旋轨道耦合实现，时间反演对称性通过引入塞曼项破缺 [56, 57]。

QAHE材料需要满足这几个条件：铁磁薄膜材料，体态绝缘且拓扑非平庸。同时满足这几个条件是不容易的。近年来拓扑绝缘体的研究提供了可行的方案。拓扑绝缘体是指体态绝缘的但是在界面上有能导电的边界态的一类材料 [58, 59]。量子反常霍尔效应和量子自旋霍尔效应分别是破坏时间反演和保持时间反演的二维拓扑绝缘体。时间反演对称性导致QSHE中存在简并的边界态，

导致霍尔电导为零。如果可以通过引入磁性序，破坏部分边界态，则能够实现量子反常霍尔效应。理论上提出了在 HgTe 中磁性掺杂的模型 [57]，但是未能形成磁性序。三维拓扑绝缘体在表面上存在二维的表面态，且表面态有狄拉克锥结构。理论上建议指出，可以通过让表面态近邻铁磁绝缘体在表面态狄拉克锥中打开能隙 [60]。

三维拓扑绝缘体的表面上存在自由的表面态，将其做成薄膜后，上下表面的表面态会发生耦合，打开能隙。可以形成二维的量子自旋霍尔效应绝缘体或普通绝缘体 [61–63]。通过磁性掺杂可以实现磁性的拓扑绝缘体薄膜。第一性计算预测在  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ， $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  和  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  薄膜中掺杂 Cr、Fe 等可以实现 QAHE [55]。理论计算表明，掺杂的作用是产生磁性的交换场。如图 1.5 所示，在未引入交换场和自旋轨道耦合之前，如果系统的能带是非反转的，足够大的交换场会产生一对反转能带。对于已经反转的情况 (QSHE)，足够大的交换场则破坏其中的一对反转结构并加强另一对的反转。总之，不论初始能带是否反转，交换场的存在使得只存在一对反带结构。再引入自旋轨道耦合，会打开能隙，形成 QAHE 材料。在 2013 年，清华的研究组首先在  $\text{Cr}_{0.15}(\text{Bi}_{0.1}\text{Sb}_{0.9})_{1.85}\text{Te}_3$  中观测到 QAHE [64]，并被其他研究组的观测证实 [65–71]。

## 1.4 论文的主要内容

在第二章中，我们介绍了利用非平衡格林函数研究量子输运的方法。具体包括：非平衡格林函数的定义，推迟格林函数的计算，格林函数形式的电流表达式。并且以 Fano 效应为例具体说明。

在第三章中，我们研究了重费米子材料的量子输运性质。我们计算了大 U 极限平均场近似下周期性 Anderson 模型与普通的金属探针耦合时的电导谱。希望以此简化模型来模拟扫描隧道谱和点接触谱，分析两种输运测量手段中不同的微观过程。我们考虑了不同的耦合位形和不同的耦合强度的影响。发现 Fano 干涉导致电导极小值，增强电导谱的非对称性。空间干涉效应导致对布里渊区的加权平均，压制杂化能隙两侧的电导。这一压制效应可能会在点接触测量中体现出来，导致点接触对  $f$  电子的测量不够敏感。

在第四章中，我们研究了处在量子反常霍尔效应相的拓扑绝缘体薄膜的输运性质。我们在薄膜两侧均加上门电压。这样门电压可以调节体系的费密能级，并引入破坏空间反演的势能项。我们研究了门电压和磁场对量子反常霍尔

效应的影响。我们通过线性响应理论的久保公式计算了霍尔电导，并直接计算准一维纳米带的色散关系，据此给出了零磁场时系统关于费米能级和上下表面门电压差的相图。发现门电压可以破坏量子反常霍尔效应相。我们计算了磁场导致的朗道能级谱。发现在某些参数下适中的磁场可以导致类似量子自旋霍尔效应的相。磁场下的霍尔测量发现了一些新的电阻平台，纵向电阻和霍尔电阻取值均为分数。

第五章是对论文的总结。

## 第二章 非平衡格林函数方法介绍

非平衡格林函数理论在低维系统量子输运研究中被广泛应用。在这一章中，我们简要介绍非平衡格林函数和以其研究量子输运现象的理论框架，包括：非平衡格林函数的定义、“推迟”格林函数的计算方法以及普遍的电流表达式的推导。最后通过一个Fano效应的例子来做具体说明。

### 2.1 非平衡格林函数的定义

闭路格林函数定义为 [72]，

$$G_{ij}(\tau, \tau') = -i \langle \mathcal{T}_c [c_i(\tau) c_j^\dagger(\tau')] \rangle, \quad (2.1)$$

其中  $\langle \dots \rangle$  是指力学量的量子统计平均， $c_i(\tau)$  湮灭一个  $\tau$  时刻状态为  $i$  的电子。 $\mathcal{T}_c$  是回路编时算符，其定义如下，

$$\mathcal{T}_c [c_i(\tau) c_j^\dagger(\tau')] = \theta_c(\tau - \tau') c_i(\tau) c_j^\dagger(\tau') - \theta_c(\tau' - \tau) c_j^\dagger(\tau') c_i(\tau). \quad (2.2)$$

这里我们用  $\tau$  和  $\tau'$  表示回路上的时间， $\theta_c$  是回路上的阶跃函数，其对应的时间顺序如图 2.1 所示。对于费米子算符，规定两个算符因为编时算符的作用而交换时，添加一个负号。注意到  $\tau$  和  $\tau'$  均可能

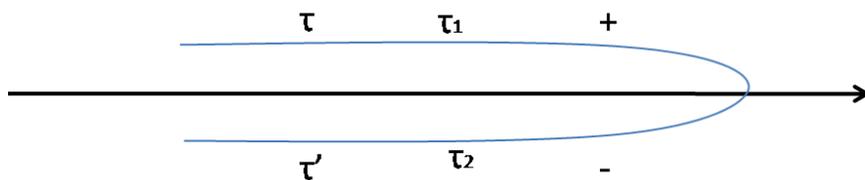


图 2.1: 闭路格林函数的定义。图中回路上四个时间的先后顺序为： $\tau, \tau_1, \tau_2, \tau'$ 。在闭路格林函数定义中时序在前的算符在编时算符作用后排在右边。

出现在回路的  $\pm$  分支上，可以定义四种格林函数

$$\begin{aligned}
G_{ij}^{++}(t, t') &= -i\langle \mathcal{T}[c_i(t)c_j^\dagger(t')] \rangle, \\
G_{ij}^{-+}(t, t') &= G_{ij}^>(t, t') = -i\langle c_i(t)c_j^\dagger(t') \rangle, \\
G_{ij}^{+-}(t, t') &= G_{ij}^<(t, t') = i\langle c_j^\dagger(t')c_i(t) \rangle, \\
G_{ij}^{--}(t, t') &= -i\langle \tilde{\mathcal{T}}[c_i(t)c_j^\dagger(t')] \rangle,
\end{aligned} \tag{2.3}$$

其中  $\mathcal{T}$  是编时算符， $\tilde{\mathcal{T}}$  是反编时算符。这里的时间  $t$  和  $t'$  已经是实轴上的时间。 $G^{++}$  被称为编时格林函数或因果格林函数， $G^>$  ( $G^<$ ) 是“大于” (“小于”) 格林函数。 $G^{--}$  是反编时格林函数，其编时效果与  $G^{++}$  恰好相反。此外，“推迟”和“超前”格林函数定义如下，

$$\begin{aligned}
G_{ij}^r(t, t') &= -i\theta(t-t')\langle \{c_i(t), c_j^\dagger(t')\} \rangle, \\
G_{ij}^a(t, t') &= i\theta(t'-t)\langle \{c_i(t), c_j^\dagger(t')\} \rangle,
\end{aligned} \tag{2.4}$$

其中  $\theta(t-t')$  是普通的阶跃函数。这里定义的多个格林函数各有其特点。 $G^{++}$  可以通过Wick定理做细致的微扰展开。 $G^r$  的解析性质比较好，在上半平面没有极点，因此其实部和虚部可以通过希尔伯特变换 (KK关系) 相联系。 $G^r$  的极点对应体系的元激发。线性响应理论的响应函数具有“推迟”格林函数的形式。 $G^<$  则直接与物理量相关，例如：电子占据数、电流等。

这六个非平衡格林函数中只有两个是独立的。各个格林函数关系如下，

$$\begin{aligned}
G^a &= (G^r)^\dagger, \quad G_{ij}^a(t, t') = [G_{ji}^r(t', t)]^*, \\
G^r - G^a &= G^> - G^<, \\
G^{++} + G^{--} &= G^> + G^<, \\
G^{++} - G^< &= G^r.
\end{aligned} \tag{2.5}$$

在实际应用中我们往往计算  $G^r$  和  $G^<$ ，其中  $G^<$  的求解有时是非常困难的。对于平衡态格林函数，由于存在涨落耗散定理，“小于”格林函数可以由推迟格林函数表示，

$$G^<(\omega) = -f(\omega)(G^r(\omega) - G^a(\omega)). \tag{2.6}$$

这样在平衡态只存在一个独立的格林函数。

回路积分的计算不够方便，我们可以用实轴上的积分来代替，这一过程称为解析延拓。其中常见的是某个格林函数写成其他格林函数卷积的形式，

$$C(\tau, \tau') = \int_c d\tau_1 A(\tau, \tau_1) B(\tau_1, \tau'), \quad (2.7)$$

其中  $\int_c$  代表回路积分。解析延拓后写为，

$$\begin{aligned} C^r(t, t') &= \int dt_1 A^r(t, t_1) B^r(t_1, t'), \\ C^a(t, t') &= \int dt_1 A^a(t, t_1) B^a(t_1, t'), \\ C^<(t, t') &= \int dt_1 (A^r(t, t_1) B^<(t_1, t') + A^<(t, t_1) B^a(t_1, t')), \\ C^>(t, t') &= \int dt_1 (A^r(t, t_1) B^>(t_1, t') + A^>(t, t_1) B^a(t_1, t')), \end{aligned} \quad (2.8)$$

这里的积分已经是实轴上的积分 [72]。

## 2.2 格林函数的计算

在这一部分我们介绍计算无相互作用系统格林函数的方法。

### 2.2.1 常用的表达式

#### 孤立的无相互作用平衡态系统

系统的哈密顿量在离散的二次量子化表象给出，

$$H = \sum_j \epsilon_j c_j^\dagger c_j + \sum_{i \neq j} t_{ij} c_i^\dagger c_j, \quad (2.9)$$

其中第一项是在位能项，第二项是动能项。需要指出的是，所有的两算符哈密顿量都可以写成这种形式。

按照格林函数的微扰理论，我们可以把哈密顿量分为易于求解的部分  $H_0$  和作为微扰的部分  $H_I$ 。微扰展开可以得到Dyson方程如下，

$$G = g + g \Sigma G, \quad (2.10)$$

其中  $g$  是  $H_0$  对应的格林函数， $G$  是全格林函数。 $\Sigma$  是不可约自能，以下简称自能。

对于无相互作用系统，可以把哈密顿量中  $\sum_{i \neq j} t_{ij} c_i^\dagger c_j$  项选为微扰项，然后用Wick定理做微扰展开。这样可以得到自能为  $\Sigma_{ij}(\tau_1, \tau_2) = t_{ij} \delta(\tau_1 - \tau_2)$  [75]，解析沿拓到实轴上可得，

$$\begin{aligned}\Sigma_{ij}^r(t_1, t_2) &= t_{ij} \delta(t_1 - t_2), \\ \Sigma_{ij}^<(t_1, t_2) &= 0.\end{aligned}\quad (2.11)$$

傅里叶变换到频率空间

$$\begin{aligned}\Sigma_{ij}^r(\omega) &= t_{ij}, \\ \Sigma_{ij}^<(\omega) &= 0.\end{aligned}\quad (2.12)$$

这样系统的“推迟”格林函数可以得到

$$G^r(\omega) = \frac{1}{\omega - H + i0^+}, \quad (2.13)$$

其中  $H$  是离散表象中矩阵形式的哈密顿量。

### 耦合系统的格林函数

两个系统 (A, B) 耦合的哈密顿量在离散表象可以写为如下的矩阵形式，

$$H = \begin{pmatrix} H_{AA} & V_{AB} \\ H_{BB} & V_{BA} \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

其中  $V_{AB}$  是耦合矩阵。

耦合前后的自由格林函数可以分别记为

$$g = \begin{pmatrix} g_{AA} & \\ & g_{BB} \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} G_{AA} & G_{AB} \\ G_{BA} & G_{BB} \end{pmatrix}, \quad (2.15)$$

并引入自能定义式  $\Sigma_A = V_{BA} g_{AA} V_{AB}$ ，带宽函数的定义式  $\Gamma_L = i(\Sigma_A^r - \Sigma_A^a)$ 。

子系统 A 处在平衡态，满足涨落耗散定理

$$\begin{aligned}g_{AA}^< &= -f_A(g_{AA}^r - g_{AA}^a), \\ \Sigma_A^< &= -f_A(\Sigma_A^r - \Sigma_A^a),\end{aligned}\quad (2.16)$$

其中  $f_A$  是系统 A 的费米分布。

系统的Dyson方程为,

$$\begin{pmatrix} G_{AA} & G_{AB} \\ G_{BA} & G_{BB} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_{AA} & \\ & g_{BB} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} g_{AA} & \\ & g_{BB} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} & V_{AB} \\ V_{BA} & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{AA} & G_{AB} \\ G_{BA} & G_{BB} \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} G_{AA} & G_{AB} \\ G_{BA} & G_{BB} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_{AA} & \\ & g_{BB} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} G_{AA} & G_{AB} \\ G_{BA} & G_{BB} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} & V_{AB} \\ V_{BA} & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_{AA} & \\ & g_{BB} \end{pmatrix}.$$

变形可得

$$\begin{aligned} G_{BB} &= g_{BB} + g_{BB}\Sigma_A G_{BB}, \\ G_{BA} &= G_{BB}V_{BA}g_{AA}, \\ G_{AB} &= g_{AA}V_{AB}G_{BB}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

利用解析开拓, 可以得到,

Dyson方程:

$$G_{BB}^{r/a} = g_{BB}^{r/a} + g_{BB}^{r/a}\Sigma_A^{r/a}G_{BB}^{r/a}. \quad (2.18)$$

Keldysh方程:

$$G_{BB}^< = G_{BB}^r g_{BB}^{r-1} g_{BB}^< g_{BB}^{a-1} G_{BB}^a + G_{BB}^r \Sigma_A^< G_{BB}^a. \quad (2.19)$$

上述两个方程经常用于计算大系统格林函数的某些分量。相比于公式(2.13)中直接矩阵求逆解出格林函数的全部分量, 通过子系统耦合直接计算格林函数特定分量的方法, 计算量小, 计算时间短。应用于导线中心区系统, Dyson方程表明导线对于中心区推迟格林函数的修正是贡献了一个自能项。

### “小于”格林函数的一个表达式

Dyson方程(2.18)可以变形为,

$$\begin{aligned} G_{BB}^{r/a-1} &= g_{BB}^{r/a-1} - \Sigma_A^{r/a}, \\ G_{BB}^r - G_{BB}^a &= -G_{BB}^r (g_{BB}^{r-1} - g_{BB}^{a-1}) G_{BB}^a + G_{BB}^r (\Sigma_A^r - \Sigma_A^a) G_{BB}^a. \end{aligned} \quad (2.20)$$

代入子系统B的涨落耗散定理  $g_{BB}^< = -f_B(g_{BB}^r - g_{BB}^a)$  得到,

$$-f_B(G_{BB}^r - G_{BB}^a) = G_{BB}^r g_{BB}^{r-1} g_{BB}^< g_{BB}^{a-1} G_{BB}^a - f_B G_{BB}^r (\Sigma_A^r - \Sigma_A^a) G_{BB}^a. \quad (2.21)$$

再代入Keldysh方程，我们可以得到“小于”格林函数的如下形式，

$$G_{BB}^< = -f_B(G_{BB}^r - G_{BB}^a) + G_{BB}^r \Sigma_A^< G_{BB}^a + f_B G_{BB}^r (\Sigma_A^r - \Sigma_A^a) G_{BB}^a. \quad (2.22)$$

代入子系统  $A$  的涨落耗散定理  $\Sigma_A^< = -f_A(\Sigma_A^r - \Sigma_A^a)$ ，并定义如下的带宽函数  $\Gamma_A = i(\Sigma_A^r - \Sigma_A^a)$ ，我们得到如下形式的“小于”格林函数，

$$G_{BB}^< = -f_B(G_{BB}^r - G_{BB}^a) + i(f_A - f_B)G_{BB}^r \Gamma_A G_{BB}^a. \quad (2.23)$$

总结一下，可能用到的格林函数表达式罗列如下，

$$\begin{aligned} G_{BB}^r &= 1/(g_{BB}^{r-1} - \Sigma_A^r), \\ G_{BB}^< &= -f_B(G_{BB}^r - G_{BB}^a) - i(f_B - f_A)G_{BB}^r \Gamma_A G_{BB}^a, \\ G_{BA}^r &= G_{BB}^r V_{BA} g_{AA}^r, \\ G_{AB}^r &= g_{AA}^r V_{AB} G_{BB}^r, \\ G_{BA}^< &= G_{BB}^r V_{BA} g_{AA}^< + G_{BB}^< V_{BA} g_{AA}^a, \\ G_{AB}^< &= g_{AA}^r V_{AB} G_{BB}^< + g_{AA}^< V_{AB} G_{BB}^a. \end{aligned} \quad (2.24)$$

### 2.2.2 迭代法生长中心区的格林函数

我们以两端口“中心区-导线”结构为例（示意图见图 2.2），给出迭代法计算格林函数具体步骤。迭代法计算格林函数的基本原理是两个子系统耦合的格林函数公式 (2.18)。对于两端口的情形，透穿系数的求解只需要计算连接中心区两端的格林函数  $G_{1N}^r$ 。

左右端口均为准一维半无穷长的导线，其对中心区的贡献是局域的自我修正，因此我们只需要计算其表面格林函数。导线的表面格林函数已经有成熟的计算方法，在文献 [76-78] 中有详尽的描述，在附录 A 中有特殊情形的讨论，这里不在赘述。

为了说明的方便，我们对导线和中心区做了一些标记。左右导线的表面格林函数分别记为  $g_L^r$  和  $g_R^r$ 。对于中心区，沿着电流方向人为的分为若干层 (1, 2, …, n, …, N)，其中第  $n$  层的哈密顿量是  $H_{nn}$ ，其与左右的耦合分别记为  $H_{n,n-1}$  和  $H_{n,n+1}$ ，并满足  $H_{n,n+1} = H_{n,n+1}^\dagger$ 。孤立的第  $n$  层的格林函数记为  $g_n^{(0,r)} = 1/(\omega - H_{nn} + i0^+)$ ，其中格林函数上角标 0 说明不存在与左右层的耦合。这里需要指出中心区可以不具有平移不变性，比如存在无序的情况。

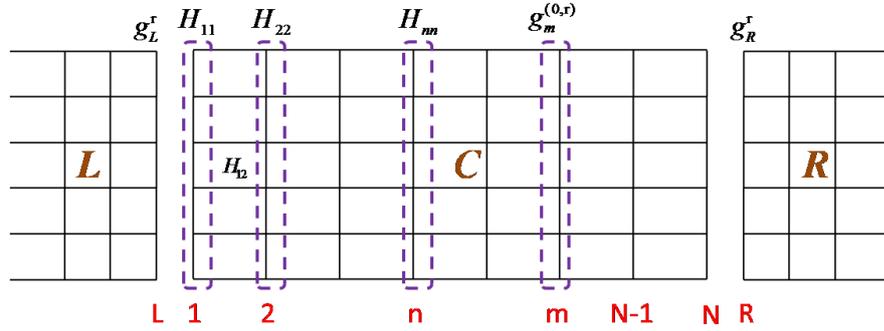


图 2.2: 两端口装置示意图。

获得  $G_{1N}^r$  的方法:

(1) 计算左右两端导线的实空间表面格林函数  $g_L^r$  和  $g_R^r$ , 获得两端口贡献的自能  $\Sigma_L^r = H_{1L}g_L^r H_{L1}$ ,  $\Sigma_R^r = H_{NR}g_R^r H_{RN}$ 。

(2) 在左端导线上生长中心区的第一层格点,  $g_{11}^{(1,r)} = 1/(\omega - H_{11} - \Sigma_L^r)$ 。其中格林函数上角标 1, 表示已经生长了一层中心区格点。

...

(3) 生长第  $n+1$  层格点。这时第  $n$  层已经生长完成, 有格林函数  $G_{n,n}^{(n,r)}$  和  $G_{1,n}^{(n,r)}$ 。

$$G_{n+1,n+1}^{(n+1,r)} = g_{n+1}^{(0,r)} + g_{n+1}^{(0,r)} H_{n+1,n} G_{n,n}^{(n,r)} H_{n,n+1} G_{n+1,n+1}^{(n+1,r)}, \quad (2.25)$$

$$G_{1,n+1}^{(n+1,r)} = G_{1,n}^{(n,r)} H_{n,n+1} G_{n+1,n+1}^{(n+1,r)}, \quad (2.26)$$

...

第  $N$  层生长后, 中心区生长结束。这时有格林函数  $G_{1N}^{(N,r)}$ ,  $G_{NN}^{(N,r)}$ 。

(4) 耦合右导线,

$$G_{NN}^r = 1/[(G_{NN}^{(N,r)})^{-1} - \Sigma_R^r], \quad (2.27)$$

$$G_{1N}^r = G_{1N}^{(N,r)} + G_{1N}^{(N,r)} \Sigma_R^r G_{NN}^r. \quad (2.28)$$

至此已经得到  $G_{1N}^r$ , 计算结束。

## 2.3 电流公式

在这一部分, 我们在非平衡格林函数框架下推导电流的一般表达式 [72-74]。

### 2.3.1 一般表达式

实验中的输运测量系统一般由导线和样品组成。一般而言，理论模型可以分为导线（端口）和中心区两部分，这里称为“导线-中心区”结构。例如，霍尔测量中样品作为中心区连接六根测量导线，见图 2.3。但是对于扫描隧道谱、点接触谱等测量手段，绝大部分电阻分布在测量端口，因此只有这一个端口比较重要。这时可以把待测样品视为一个端口，从模型的角度来看是一根金属导线和一个特殊端口的直接耦合，这里称为“导线-导线”结构。但是如果可以把耦合区域视为中心区，这种导线直接连接的结构也可以视为中心区连接多个端口结构的特例。

“导线-中心区”结构的哈密顿量可以写为，

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{\alpha} H_{\alpha} + H_S + H_t, \\
 H_{\alpha} &= - \sum_{\alpha\sigma\langle i\neq j\rangle} t_{\alpha ij} c_{\alpha\sigma i}^{\dagger} c_{\alpha\sigma j} - \mu_{\alpha} \sum_{\langle\sigma i\rangle} c_{\alpha\sigma i}^{\dagger} c_{\alpha\sigma i}, \\
 H_S &= H_S(d_{\sigma}, d_{\sigma}^{\dagger}), \\
 H_t &= \sum_{\alpha\sigma\langle ij\rangle} V_{\alpha ij} c_{\alpha\sigma i}^{\dagger} d_{j\sigma} + V_{\alpha ji} d_{j\sigma}^{\dagger} c_{\alpha\sigma i}.
 \end{aligned} \tag{2.29}$$

其中  $c_{\alpha\sigma i}^{\dagger}$  在  $\alpha$  端口  $i$  格点处产生一个自旋  $\sigma$  的电子。中心区哈密顿量  $H_S(d_{\sigma}, d_{\sigma}^{\dagger})$  的形式取决于具体的样品，一般来说可能比较复杂。对于量子反常霍尔效应体系，会包含自旋轨道耦合效应项和磁性的塞曼项。对于量子点以及重费米子材料则会包含相互作用项。在这里我们把导线取成了最简单的无相互作用晶格，对于中心区则不给出具体形式。这样我们推导出的电流表达式与中心区具体形式无关。

流出导线  $L$  的电流可以通过其中粒子占据数的微分得到，

$$\begin{aligned}
 I_L &= -e \langle \partial_t N_L \rangle = \frac{ie}{\hbar} \langle [N_L, H] \rangle, \\
 &= \frac{ie}{\hbar} \langle c_L^{\dagger} H_{LS} d_S - d_S^{\dagger} H_{SL} c_L \rangle.
 \end{aligned} \tag{2.30}$$

其中  $c_L = (\dots, c_{Li\sigma}, \dots)^T$  ( $d_S = (\dots, d_{i\sigma}, \dots)^T$ ) 是导线  $L$ （中心区）中算符组成的列矢， $H_{LS}$  是导线  $L$  与中心区耦合系数组成的矩阵。

定义“小于”格林函数  $G_{SL}^{<}(t) = i \langle c_L^{\dagger}(0) d_S(t) \rangle$ ，这样电流表达式可以写

为,

$$\begin{aligned} I_L &= \frac{e}{\hbar} \text{Tr}[H_{LS}G_{SL}^<(t=0) - H_{SL}G_{LS}^<(t=0)], \\ &= \frac{e}{\hbar} \text{Tr} \int d\omega [H_{LS}G_{SL}^<(\omega) - H_{SL}G_{LS}^<(\omega)]. \end{aligned} \quad (2.31)$$

“小于”格林函数  $G_{SL}^<$  同时有中心区和导线的指标。下面我们通过Dyson方程去掉导线指标。根据Dyson方程和Langreth解析延拓公式 [72],

$$\begin{aligned} G_{SL}^< &= G_{SS}^r H_{SL} g_{LL}^< + G_{SS}^< H_{SL} g_{LL}^a, \\ G_{LS}^< &= g_{LL}^r H_{LS} G_{SS}^< + g_{LL}^< H_{LS} G_{SS}^a. \end{aligned} \quad (2.32)$$

其中  $g_{LL}$  对应于导线  $L$  与中心区耦合前的表面格林函数。代入电流表达式, 可以得到,

$$I_L = \frac{e}{\hbar} \text{Tr} \int d\omega [\Sigma_L^< (G_{SS}^r - G_{SS}^a) - G_{SS}^< (\Sigma_L^r - \Sigma_L^a)]. \quad (2.33)$$

现在在全格林函数中只有中心区的指标。其中我们定义了导线  $L$  贡献的自能项,

$$\Sigma_L^{r,a,<} \equiv H_{SL} g_{LL}^{r,a,<} H_{LS}. \quad (2.34)$$

由于自能中出现的格林函数是耦合前的格林函数, 故可以应用涨落耗散定理,

$$\begin{aligned} \Sigma_L^< &= -f_L (\Sigma_L^r - \Sigma_L^a), \\ \Gamma_L &= i(\Sigma_L^r - \Sigma_L^a), \end{aligned} \quad (2.35)$$

其中  $f_L = f(\omega - eV_L)$  是导线  $L$  中的费米分布函数。这样电流的表达式写为如下形式,

$$I_L = \frac{e}{\hbar} \text{Tr} \int d\omega [i f_L \Gamma_L (G_{SS}^r - G_{SS}^a) + i \Gamma_L G_{SS}^<]. \quad (2.36)$$

由于在推导过程中只假设了导线是无相互作用的, 没有用到中心区哈密顿量的具体形式, 上式对中心区存在相互作用情形也适用, 是一般形式的电流公式。

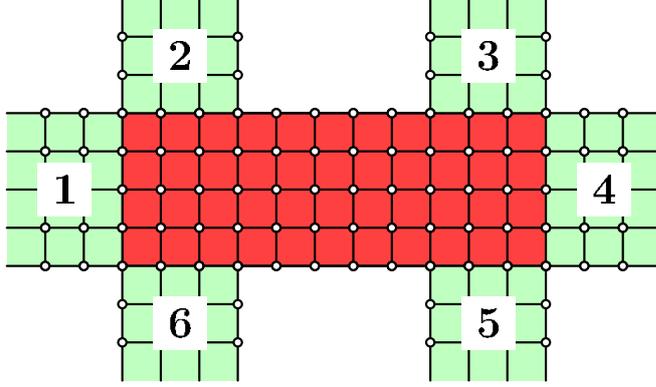


图 2.3: 霍尔装置示意图。

### 2.3.2 多端口Landauer-Büttiker公式

如果中心区没有相互作用，电流表达式 (2.36) 可以进一步化简。这时中心区“小于”格林函数有简单的形式，

$$G_{SS}^< = G_{SS}^r \Sigma^< G_{SS}^a = G_{SS}^r \left( \sum_{\alpha} \Sigma_{\alpha}^< \right) G_{SS}^a, \quad (2.37)$$

其中  $\Sigma_{\alpha}^<$  是端口  $\alpha$  贡献的“小于”自能，满足涨落耗散定理  $\Sigma_{\alpha}^< = -f_{\alpha}(\Sigma_{\alpha}^r - \Sigma_{\alpha}^a) = if_{\alpha}\Gamma_{\alpha}$ 。

另一方面根据中心区格林函数满足的Dyson方程，

$$G_{SS}^{r/a-1} = g_{SS}^{r/a-1} - \sum_{\alpha} \Sigma_{\alpha}^{r/a}, \quad (2.38)$$

可以得到

$$G_{SS}^r - G_{SS}^a = -i \sum_{\alpha} G_{SS}^r \Gamma_{\alpha} G_{SS}^a. \quad (2.39)$$

把式 (2.37, 2.39) 代入式 (2.36)，可推出，

$$I_L = \frac{e}{h} \text{Tr} \int d\omega \sum_{\alpha} (f_L - f_{\alpha}) \Gamma_L G_{SS}^r \Gamma_{\alpha} G_{SS}^a. \quad (2.40)$$

通常我们定义  $T_{L\alpha} = \text{Tr}[\Gamma_L G_{SS}^r \Gamma_{\alpha} G_{SS}^a]$ ，当  $\alpha \neq L$  时， $T_{L\alpha}$  是端口  $\alpha$  到端口  $L$  的透射系数。对于两端口系统，我们有  $T_{LR} = T_{RL}$ 。但是对于多端口系统，一般不存在  $T_{L\alpha} = T_{\alpha L}$ 。

在零温下,  $f_\alpha(\omega) = \theta(\mu_\alpha - \omega)$ , 零偏压附近的电流公式可化简为,

$$I_L = \frac{e^2}{h} \sum_{\alpha} T_{L\alpha} (V_L - V_\alpha). \quad (2.41)$$

对于六端口霍尔测量体系, 两个端口是电流端, 四个端口是电压端 (电流为零)。电流表达式 (2.41) 可以写成矩阵的形式,

$$\begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \\ I_4 \\ I_5 \\ I_6 \end{pmatrix} = \frac{e^2}{h} \begin{pmatrix} \tilde{T}_1 - T_{11} & -T_{12} & -T_{13} & -T_{14} & -T_{15} & -T_{16} \\ -T_{21} & \tilde{T}_2 - T_{22} & -T_{23} & -T_{24} & -T_{25} & -T_{26} \\ -T_{31} & -T_{32} & \tilde{T}_3 - T_{33} & -T_{34} & -T_{35} & -T_{36} \\ -T_{41} & -T_{42} & -T_{43} & \tilde{T}_4 - T_{44} & -T_{45} & -T_{46} \\ -T_{51} & -T_{52} & -T_{53} & -T_{54} & \tilde{T}_5 - T_{55} & -T_{56} \\ -T_{61} & -T_{62} & -T_{63} & -T_{64} & -T_{65} & \tilde{T}_6 - T_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \\ V_4 \\ V_5 \\ V_6 \end{pmatrix}. \quad (2.42)$$

其中定义了  $\tilde{T}_i = \sum_{j=1}^6 T_{ij}$ 。  $I_1 = -I_4 = I$ ,  $I_2 = I_3 = I_5 = I_6 = 0$ ,  $V_1$  和  $V_2$  是外加的偏压, 是已知量。由于电流守恒  $\sum_i I_i = 0$ , 这六个方程只有五个是独立的, 恰好可以解出  $(I, V_2, V_3, V_5, V_6)$ 。

### 2.3.3 “导线-导线”结构

对于无相互作用的“导线-导线”结构, 我们可以推出另一形式的电流表达式。在此结构下“小于”格林函数可以写为如下形式,

$$G_{SS}^< = -f_S(G_{SS}^r - G_{SS}^a) - i(f_S - f_L)G_{SS}^r\Gamma_L G_{SS}^a. \quad (2.43)$$

代入电流的一般表达式 (2.36) 可以得到电流表达式,

$$I = \frac{e}{h} \int d\omega (f_L - f_S) \text{Tr}[i\Gamma_L(G_{SS}^r(\omega) - G_{SS}^a(\omega)) - \Gamma_L G_{SS}^r(\omega)\Gamma_L G_{SS}^a(\omega)], \quad (2.44)$$

微分电导,

$$G(\omega) = \frac{e^2}{h} \text{Tr}[i\Gamma_L(G_{SS}^r(\omega) - G_{SS}^a(\omega)) - \Gamma_L G_{SS}^r(\omega)\Gamma_L G_{SS}^a(\omega)]. \quad (2.45)$$

通过Fisher-Lee关系 [79, 80], 可以证明这一形式的电流和电导表达式与著名的Landauer公式 [81]是一致的。

### 2.3.4 “金属-超导” 结构

在这一小节我们给出“金属-超导”异质结的电流表达式。这一模型可以用来理解超导材料的扫描隧道谱和点接触电导谱。

在Nambu表象处理超导问题可以有简化的并且与正常态情形类似的数学形式，在超导研究中被广泛采用。在Nambu表象中，上自旋电子算符保持不变  $\tilde{c}_{k\uparrow} = c_{k\uparrow}$  ( $\tilde{c}_{i\uparrow} = c_{i\uparrow}$ )，下自旋粒子算符则定义为  $\tilde{c}_{k\downarrow} = c_{-k\downarrow}^\dagger$  ( $\tilde{c}_{i\downarrow} = c_{i\downarrow}^\dagger$ )。即上自旋粒子仍是电子，下自旋粒子则是空穴。南部表象格林函数的定义式如下，

$$G^r(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \langle\langle \tilde{c}_{k\uparrow} | \tilde{c}_{k\uparrow}^\dagger \rangle\rangle^r & \langle\langle \tilde{c}_{k\uparrow} | \tilde{c}_{k\downarrow}^\dagger \rangle\rangle^r \\ \langle\langle \tilde{c}_{k\downarrow} | \tilde{c}_{k\uparrow}^\dagger \rangle\rangle^r & \langle\langle \tilde{c}_{k\downarrow} | \tilde{c}_{k\downarrow}^\dagger \rangle\rangle^r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle\langle c_{k\uparrow} | c_{k\uparrow}^\dagger \rangle\rangle^r & \langle\langle c_{k\uparrow} | c_{-k\downarrow} \rangle\rangle^r \\ \langle\langle c_{-k\downarrow}^\dagger | c_{k\uparrow}^\dagger \rangle\rangle^r & \langle\langle c_{-k\downarrow}^\dagger | c_{-k\downarrow} \rangle\rangle^r \end{pmatrix}. \quad (2.46)$$

这样电流的表达式仍然可以通过导线中粒子占据数的微分给出，

$$I_\sigma = -e\partial_t \sum_\sigma \langle \tilde{c}_{L\sigma}^\dagger \tilde{c}_{L\sigma} \rangle \sigma, \quad (2.47)$$

其中  $\sigma = \pm$  分别对应于上下自旋。因为下自旋粒子是空穴，所以电流表达式中有  $\sigma$  项。与推导公式 (2.36) 过程相似，可以得到，

$$I_\sigma = \sigma \frac{e}{h} \text{Tr} \int d\omega [i\Gamma_{L\sigma} G_{S\sigma S\sigma}^< + i f_{L\sigma} \Gamma_{L\sigma} (G_{S\sigma S\sigma}^r - G_{S\sigma S\sigma}^a)]. \quad (2.48)$$

其中  $f_{L\sigma} = f(\omega - \sigma eV_L)$  是导线  $L$  中的费米分布，并定义了自旋依赖的自能和带宽函数，

$$\Sigma_{L\sigma}^< = V_{S\sigma L\sigma} g_{L\sigma}^< V_{L\sigma S\sigma}, \quad (2.49)$$

$$\Gamma_{L\sigma} = i(\Sigma_{L\sigma}^r - \Sigma_{L\sigma}^a). \quad (2.50)$$

“小于”格林函数有如下表达式，

$$G_{S\sigma S\sigma}^< = -f_S (G_{S\sigma S\sigma}^r - G_{S\sigma S\sigma}^a) + i \sum_{\bar{\sigma}} G_{S\sigma S\bar{\sigma}}^r (f_{L\bar{\sigma}} - f_S) \Gamma_{L\bar{\sigma}} G_{S\bar{\sigma} S\sigma}^a. \quad (2.51)$$

代入电流表达式 (2.48)，可以推出，

$$\begin{aligned} I_\sigma = \sigma \frac{e}{h} \text{Tr} \int d\omega & [i(f_{L\sigma} - f_S) \Gamma_{L\sigma} (G_{\sigma\sigma}^r - G_{\sigma\sigma}^a) \\ & - (f_{L\sigma} - f_S) \Gamma_{L\sigma} G_{\sigma\sigma}^r \Gamma_{L\sigma} G_{\sigma\sigma}^a \\ & - (f_{L\bar{\sigma}} - f_S) \Gamma_{L\sigma} G_{\sigma\bar{\sigma}}^r \Gamma_{L\bar{\sigma}} G_{\bar{\sigma}\sigma}^a], \end{aligned} \quad (2.52)$$

其中第三项中有自旋反转的项，对应于Andreev反射。

我们考虑上下自旋平权的系统， $I_\uparrow = I_\downarrow$ ，并且电流表达式中Andreev反射贡献的电流也会对应相等，即

$$\frac{e}{h} Tr \int d\omega [-(f_{L\downarrow} - f_S)] \Gamma_{L\uparrow} G_{\uparrow\downarrow}^r \Gamma_{L\downarrow} G_{\downarrow\uparrow}^a = \frac{e}{h} Tr \int d\omega [(f_{L\uparrow} - f_S)] \Gamma_{L\downarrow} G_{\downarrow\uparrow}^r \Gamma_{L\uparrow} G_{\uparrow\downarrow}^a.$$

这样电流的表达式可以变为，

$$I_\sigma = \sigma \frac{e}{h} Tr \int d\omega i (f_{L\sigma} - f_S) [\Gamma_{L\sigma} (G_{\sigma\sigma}^r - G_{\sigma\sigma}^a) - \Gamma_{L\sigma} G_{\sigma\sigma}^r \Gamma_{L\sigma} G_{\sigma\sigma}^a + \Gamma_{L\bar{\sigma}} G_{\bar{\sigma}\sigma}^r \Gamma_{L\sigma} G_{\sigma\bar{\sigma}}^a]. \quad (2.53)$$

微分电导，

$$G = \frac{2e^2}{h} Tr [i \Gamma_{L\uparrow} (G_{\uparrow\uparrow}^r - G_{\uparrow\uparrow}^a) - \Gamma_{L\uparrow} G_{\uparrow\uparrow}^r \Gamma_{L\uparrow} G_{\uparrow\uparrow}^a + \Gamma_{L\downarrow} G_{\downarrow\downarrow}^r \Gamma_{L\downarrow} G_{\downarrow\downarrow}^a]. \quad (2.54)$$

通过Fisher-Lee关系 [79, 80]，可以证明这一形式的电流和电导表达式与著名的BTK公式 [82]是一致的。

## 2.4 例子：Fano效应

考虑金属表面吸附一个孤立原子的情形。当STM探针靠近该吸附原子时，电子可以直接透射到金属中的连续能级，也可以先跃迁到孤立原子的离散能级再跃迁到金属的连续能级。这是一个典型的Fano问题 [26]，两条路径之间存在干涉效应。下面我们计算其电导谱。

考虑如下哈密顿量，

$$\begin{aligned} H = & \epsilon_d d^\dagger d - t \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger c_j + V (d^\dagger c_0 + c_0^\dagger d), \\ & - t \sum_{\langle i \rangle} (a_i^\dagger a_{i-1} + h.c.), \\ & + t_c (c_0^\dagger a_0 + a_0^\dagger c_0) + t_d (d^\dagger a_0 + a_0^\dagger d). \end{aligned} \quad (2.55)$$

其中  $d^\dagger$  在孤立原子能级上产生一个电子， $c_j$  在样品中湮灭一个  $j$  格点处的电子。 $V$  描述了吸附原子与样品的耦合强度。上式中第二行是STM探针的哈密顿量，我们的讨论并不依赖其具体形式。第三行是探针与样品以及吸附在样品上的原子之间的耦合。这里我们考虑自旋简并的系统，自旋指标没有写出。

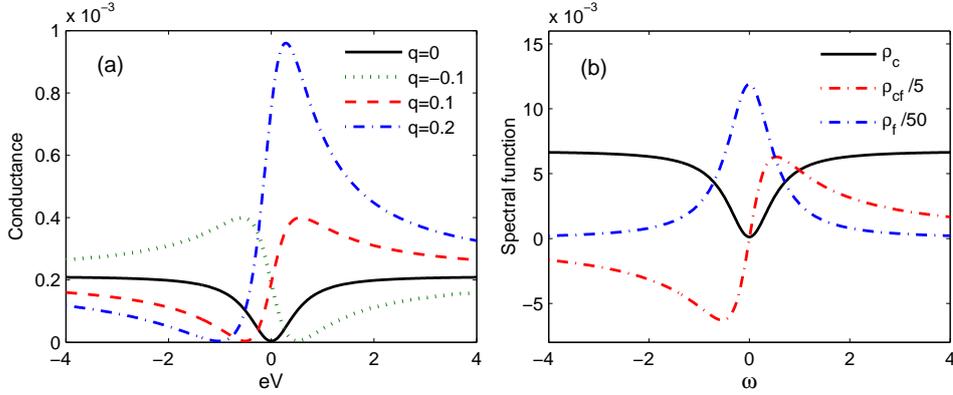


图 2.4: Fano效应示意图。(a) 电导谱, (b) 谱函数。参数:  $t = 25$ ,  $\epsilon_d = 0$ ,  $V = 5$ ,  $t_c = 0.01t$ ,  $t_d = qt_c$ ,  $\Gamma_f = 0.2$ 。

我们把样品取为三维半无穷大的单带立方晶格, 只考虑最近邻跃迁。把吸附在表面的原子和样品视为处在平衡态的系统。这样我们可以用公式 (2.45) 计算电导谱。样品表面格林函数的计算方法我们在附录 A 给出。对于 STM 测量, 真空势垒的存在导致探针与样品耦合极弱。此时只有电导公式中的第一项起作用, 电导可以直接写为谱函数相加的形式。

此时的电导谱如图 2.4(a)所示。其中Fano因子  $q = t_d/t_c$  描述了到离散能级和连续能级跃迁的相对强度。在  $q = 0$  时, 电导谱与导带谱函数  $\rho_c$  (图 2.4(b)) 一致, 且是对称的。在  $q$  取有限值时, 电导谱是非对称的, 存在一个电导的极小值。这是因为入射电子从针尖尖端跃迁到离散能级再进入样品与直接跃迁进入样品之间存在干涉效应。该干涉效应体现在  $\rho_{cf}$  的非对称上。由于这里的能带是电子空穴对称的, 所以电导谱的非对称性全部来自于Fano干涉效应。

## 第三章 重费米子材料的量子输运研究

利用扫描隧道谱和点接触谱技术研究重费米子在近些年取得了重要进展。这两种技术揭示了重电子的复合粒子本质。但是这两种测量电导谱技术微观物理过程的相同及不同之处的详尽解释至今仍然欠缺。在这一章我们通过Keldysh非平衡格林函数方法研究了探针到正常态周期性Anderson晶格的电子输运过程。入射电子透射到导带和  $f$  带两条输运通道之间的干涉效应可以导致Fano线型，这一效应在之前的文献中已经被广泛讨论。此外，不同的空间输运路径之间存在空间干涉效应。我们细致地研究了这两种干涉效应研究及其与能带结构——杂化能隙、范霍夫奇异点等共同作用的特征。我们发现空间干涉效应导致电子跃迁到布洛赫态的加权平均，在某些特殊的界面位形下会压制某些能带特征。值得指出的是，在界面比较大的情况下对  $f$  电子的探测被压制。这可能导致点接触谱测量中丢失了部分  $f$  电子的信息。

### 3.1 引言

重电子材料中存在丰富的演生现象，这对于强关联电子体系的研究具有重要意义 [1-3]。这一领域研究的一个重要进展是提出重费米子材料扫描隧道谱 (STS) 和点接触谱 (PCS) 中存在Fano干涉效应 [25, 83-94]。Fano线型在很多重费米子材料中被观测到，比如：CeCoIn<sub>5</sub> [24, 27, 36, 39, 40]，URu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> [28, 35, 37]，YbRh<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> [41]，YbAl<sub>3</sub> [29] 以及被预测为拓扑近藤绝缘体的SmB<sub>6</sub> [31, 95-97]。这些工作证实重电子准粒子微观上源于导带电子和  $f$  带电子的杂化。这一方面的研究尽管取得了这些重要的进展，但是对实验数据的详尽分析仍然十分困难。这部分归咎于重费米子材料复杂的能带结构和强关联特征。但更为迫切的原因是我们缺乏对于这些实验技术微观物理过程的全面认识。扫描隧道谱和点接触谱对同一种材料的测量会产生非常不同的电导谱，使得对于物理过程的理解变得困难。比如说，扫描隧道谱可以观测到杂化能隙，但PCS在正常态的CeCoIn<sub>5</sub>等材料中却没有观测到杂化能隙 [24]。在URu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>中，PCS观测到的杂化能隙被认为与这一材料特有的隐藏序有关 [28]。与扫描隧道谱不同，对于PCS能否给出电子能带结构的信息一直存在争议 [98-100]。

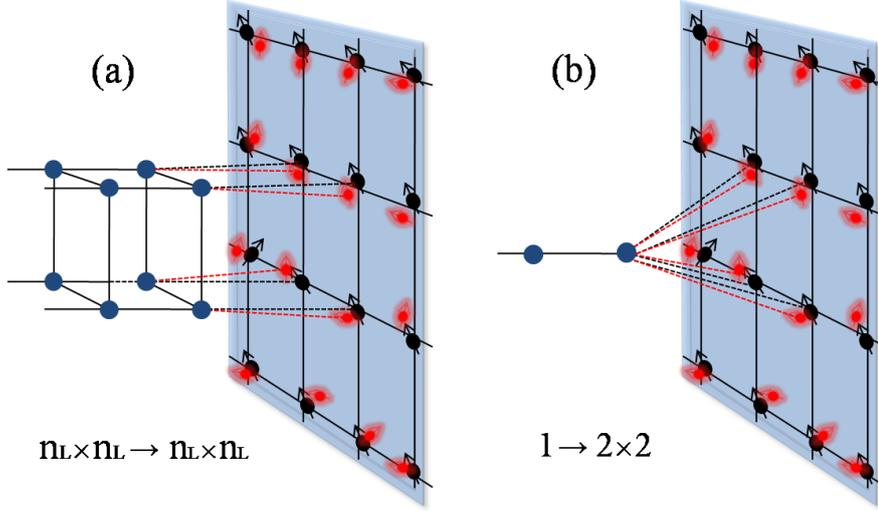


图 3.1: 实验装置示意图。(a)  $n_L \times n_L \rightarrow n_L \times n_L$  位形,  $n_L = 2$ ; (b)  $1 \rightarrow 2 \times 2$  位形。

在我们的工作中, 我们用一个简化的模型模拟扫描隧道谱和PCS, 以此揭示这两种实验手段的微观物理过程。模型的装置示意图见图 3.1。重费米子样品用周期性Anderson晶格模拟, 并且样品和金属探针都被离散化 [101]。这一模型忽略了真实的重费米子材料的很多性质, 因此可能并不能与真实的实验情形对应。但是这一模型仍然能够使我们抓住系统的某些主要特征——重费米子材料的杂化能隙以及输运过程中的干涉效应。此外, 通过调节探针和样品之间界面的大小, 我们实现了模拟点到点输运到有限尺寸点接触的输运的演化。这可以粗略地模拟扫描隧道谱和PCS的相似及不同之处。

实际上我们的模型不仅能够揭示杂化能隙等能带特征以及大家熟知的Fano效应, 还能够揭示界面上多条输运通道贡献的空间干涉效应。我们发现界面上空间路径干涉会极大的影响电导谱。例如在  $1 \rightarrow 1$  位形时出现的杂化能隙会在增大界面时被压制, 可能导致杂化能隙和典型的Fano效应导致的电导极小的混淆, 因为两者均表现为一个较宽的电导极小。二维正方晶格所特有的范霍夫奇异点在  $1 \rightarrow 2 \times 2$  位形下会被完全的压制。 $1 \rightarrow 1$  与  $1 \rightarrow 2 \times 2$  位形的差别或许可以解释 $URu_2Si_2$ 的扫描隧道谱中发现针尖在U原子上方和在原胞的中心位置上方电导谱的差异 [37]。此外我们发现在某些界面位形下, 空间干涉效应也可以导致非对称的电导谱。这可以理解为动量空间的加权平均的效果, 这

一效应使得PCS不能很好的给出态密度。我们认为这是扫描隧道谱和PCS这两种实验手段的主要区别。另一方面这也表明PCS能够测量一些动量空间加权平均无法抵消的费米面的变化 [99]。

### 3.2 模型哈密顿量

装置示意图见图 3.1。系统包括重费米子晶格和金属探针两部分。两者之间可以有不同的耦合位形，图 3.1中给出的是  $2 \times 2 \rightarrow 2 \times 2$  和  $1 \rightarrow 2 \times 2$  的耦合位形。我们可以调节耦合界面的尺寸来控制输运的通道数目，以此来模拟从STM探针到点接触探针的变化。这一简化模型可能并不足以描述真实的点接触实验。但是正如我们将要给出的，这一模型可以描述两种测量技术中最基本的物理过程，有助于理解二者的异同。

系统的哈密顿量由三部分给出，

$$\hat{H} = \hat{H}_L + \hat{H}_S + \hat{H}_t, \quad (3.1)$$

其中  $\hat{H}_L$ ,  $\hat{H}_S$  和  $\hat{H}_t$  分别描述探针、重费米子晶格以及二者之间的耦合。探针被近似为一个截面尺寸为  $n_L \times n_L$  的准一维半无限晶格，其哈密顿量为，

$$\hat{H}_L = -t_L \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{a}_{j\sigma}, \quad (3.2)$$

其中算符  $\hat{a}_{i\sigma}^\dagger$  ( $\hat{a}_{i\sigma}$ ) 产生（湮灭）一个格点  $i$  上的自旋为  $\sigma$  的电子。探针和重费米子晶格的耦合哈密顿量形式如下，

$$\hat{H}_t = \sum_{\langle li \rangle s \sigma} (t_s \hat{a}_{l\sigma}^\dagger \hat{c}_{is\sigma} + h.c.). \quad (3.3)$$

其中  $\hat{c}_{is\sigma}$  湮灭一个重费米子晶格中格点  $i$  处自旋  $\sigma$  轨道为  $s$  的电子。

哈密顿量在实空间给出，并且我们近似只取接触区域最近邻格点的跃迁。真实界面的耦合形式可能远比这里考虑的复杂，并依赖于接触的几何位形。比如说，对于STM，探针的针尖非常的尖锐以至于只有一个原子。其对应的跃迁位形可以为  $1 \rightarrow 1$  的形式。另一方面，如果探针位于一个四方晶格原胞中心的上方，则电子跃迁到最近邻四个格点的几率相等，可以对应于  $1 \rightarrow 2 \times 2$  的位形。对于PCS情形，界面上有可能存在数以百计的小的接触端口，而每个小的端口覆盖一块晶格区域 [20–22]，可以用  $n_L \times n_L \rightarrow n_L \times n_L$  位形描述。为了简

化起见，我们忽略接触区域几何位形的细节，并假设到相同轨道的跃迁系数为常数。

重费米子系统通常用周期性Anderson模型来描述。由于强关联效应，这一模型目前无法得到严格解。为了简化起见，我们采用大U极限下的隶波色子平均场近似 [102]，这一近似没有考虑准粒子的自能修正。重费米子系统的哈密顿量可以写为，

$$\hat{H}_S = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \hat{\varphi}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \check{H}_S(\mathbf{k}) \hat{\varphi}_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (3.4)$$

其中  $\hat{\varphi}_{\mathbf{k}\sigma} = (\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{f}_{\mathbf{k}\sigma})^T$ ， $\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}$  和  $\hat{f}_{\mathbf{k}\sigma}$  分别湮灭动量  $\mathbf{k}$  自旋  $\sigma$  的导带和  $f$  带电子。离散表象的哈密顿量矩阵为，

$$\check{H}_s(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}} & \mathcal{V} \\ \mathcal{V} & \epsilon_f \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

其中导带的色散关系由  $\epsilon_{\mathbf{k}} = -\mu - 2t(\cos k_x + \cos k_y)$  给出。 $\mathcal{V}$  描述了导带和位于  $\epsilon_f$  处的  $f$  带之间的杂化。杂化后形成了两条准粒子能带，

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left[ (\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_f) \pm \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_f)^2 + 4\mathcal{V}^2} \right]. \quad (3.6)$$

在导带带宽远大于杂化的极限下，间接带隙可以近似表示为  $\Delta_h \approx \frac{2\mathcal{V}^2}{D}$ ，其中  $D = 4t$  是导带半宽。在这个工作中  $D$  是最大的能量量级，并有  $D \gg \mathcal{V}$ 。对于二维正方晶格，导带中存在对应于动量空间中  $\mathbf{k} = (0, \pm\pi)$  和  $(\pm\pi, 0)$  的范霍夫奇异点。该奇异点也会在杂化后的能带中出现，其位置由  $E_{\pm}^{VH} = \frac{1}{2} [(-\mu + \epsilon_f) \pm \sqrt{(\mu + \epsilon_f)^2 + 4\mathcal{V}^2}]$  给出。杂化能隙和范霍夫奇异点是能带的主要特征，并且决定了电导谱的主要特征。

在平均场近似下，样品晶格在动量空间的自由格林函数可以简单的给出，

$$\check{g}_{SS}^r(\mathbf{k}, \omega) = \langle \langle \hat{\varphi}_{\mathbf{k}\sigma} | \hat{\varphi}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle \rangle_{\omega}^r = [\omega - \check{H}_S(\mathbf{k}) + i0^+]^{-1}. \quad (3.7)$$

实空间的格林函数可以通过傅里叶变换得到。

由于存在到探针的耦合，样品平行于表面的平移不变性被破坏，因此直接在实空间计算耦合探针所产生的自能  $\check{\Sigma}_L^r$  和样品晶格的格林函数  $\check{G}_{SS}^{r,a}(\omega)$  更为简单。

### 3.3 数值结果

现在我们详尽的讨论对应于不同位形和不同的模型参数下的电导谱。电导谱的计算公式见表达式 (2.45)。根据样品晶格与探针耦合系数大小分为弱耦合 ( $t_{f,c} \ll t$ ) 和强耦合 ( $t_{f,c} \sim t$ ) 两种情形。这个工作中我们主要讨论了以下几种跃迁位形:  $1 \rightarrow 1$ ,  $1 \rightarrow 2 \times 2$  以及  $n_L \times n_L \rightarrow n_L \times n_L$  ( $n_L = 2, 4, 8, 16$ )。为了研究Fano效应, 我们可以调节透射到导带的跃迁系数  $t_c$  与到  $f$  带跃迁系数  $t_f$  的比例系数  $q = t_f/t_c$ 。

在后面的分析中, 我们首先研究弱耦合情形下电导谱随着  $q$  的演化规律, 然后简单分析强耦合情形。由于存在两种不同的干涉效应, 到导带与到  $f$  带的Fano干涉和不同空间路径的干涉, 我们的结果揭示了这两种干涉之间的竞争。我们进一步指出空间路径干涉等效于动量空间里的加权平均。这两种干涉效应与能带特征的竞争与共存一起决定了电导谱。

#### 3.3.1 Fano干涉

我们首先讨论  $1 \rightarrow 1$  位形的电导谱。此时电子有跃迁到导带和  $f$  带的两条输运通道, 两者会出现Fano干涉效应。图 3.2(a) 计算了随着Fano因子  $q = t_f/t_c$  变化的电导谱。Fano因子  $q$  决定了相消干涉导致的电导极小值的位置。对于  $q = 0$ , 探针只与导带耦合, 电导谱与杂化后的导带谱函数一致。导带的主要特征——范霍夫奇点和杂化能隙等能够清晰看到。然而随着增大  $q$ , 电导谱的整体形状会有一个复杂的变化。杂化能隙的右侧随着  $q$  增大而增强并且变得尖锐。这是因为跃迁到  $f$  带的权重增大, 而且  $f$  带主要分布在杂化能隙两侧并呈现峰值。杂化能隙左侧的演化则极为不同。在  $q < 0.04$  时, 电导逐渐被压制。继续增大  $q$  电导逐渐增大。同时范霍夫奇异点逐渐被压制, 并在  $q = 0.2$  时被完全压制。杂化能隙左侧的非单调变化以及范霍夫奇异点的压制源于Fano相消干涉的极小值位置随着  $q$  增大而向左侧移动。

为了更好的理解, 我们忽略掉电导公式中的高阶项, 此时电导表达式可以写为,

$$G(eV) = \frac{2e^2}{h} (2\pi)^2 t_c^2 \text{Tr} [\check{\rho}_L(0) (\check{\rho}_c + 2q\check{\rho}_{cf} + q^2\check{\rho}_f)_{eV}], \quad (3.8)$$

其中  $\check{\rho}_L(0) = -\text{Im}\check{g}_{LL}^r(\omega = 0)/\pi$  是实空间探针表面格林函数对应的的谱函数,  $\check{\rho}_c = -\text{Im}\check{g}_{cc}^r(eV)/\pi$ ,  $\check{\rho}_{cf} = -\text{Im}\check{g}_{cf}^r(eV)/\pi$  和  $\check{\rho}_f = -\text{Im}\check{g}_{ff}^r(eV)/\pi$  是样品晶格的

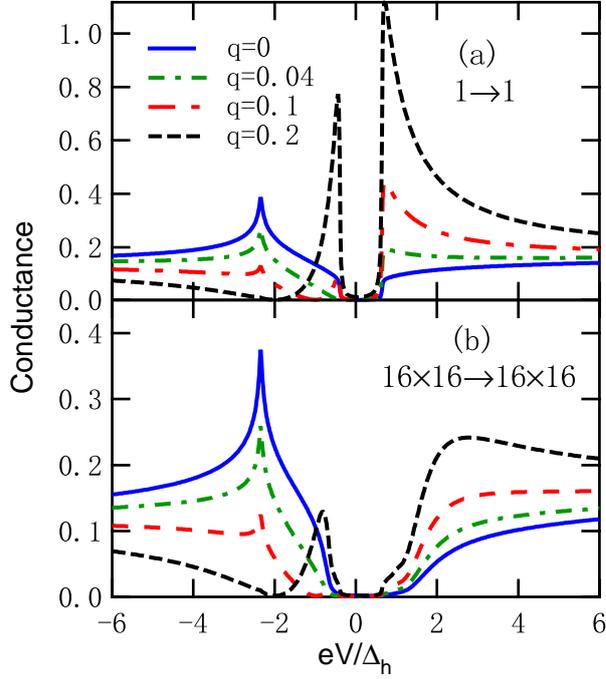


图 3.2: 遂穿到重费米子样品的电导谱, 调节  $q$  以揭示Fano效应。(a)  $1 \rightarrow 1$  位形, (b)  $16 \times 16 \rightarrow 16 \times 16$  位形。参数:  $t = 25$ ,  $\mu = -20$ ,  $\epsilon_f = 0.01$ ,  $\mathcal{V} = 5$ ,  $t_c = 0.001t$ ,  $t_L = t$ ,  $\Gamma = 0.01$ 。偏压以杂化能隙为单位, 电导单位  $\frac{2e^2}{h} n_R^2 \frac{4\pi t_c^2}{t_L t}$ 。

实空间格林函数对应的谱函数。求迹遍及界面上的所有格点。对于一般的跃迁位形, 以上公式中的谱函数均为矩阵形式。对于  $1 \rightarrow 1$  位形, 界面上只有一个格点, 所以以上公式中的谱函数均为正实数, 并且代表了相应的态密度。对于  $q = 0$ , 可以看出微分电导与导带的谱函数  $\rho_c(eV)$  成简单正比关系。对于取有限值的  $q$ , 到  $f$  带的跃迁贡献  $\rho_f$  项, 两种输运通道之间的干涉贡献  $\rho_{cf}$  项。

在平均场近似下, 电导表达式可以进一步简化为,

$$G(eV) = \frac{2e^2}{h} (2\pi)^2 t_c^2 \text{Tr} [\check{\rho}_L(0) \check{\rho}_c(eV)] \mathcal{F}(eV), \quad (3.9)$$

其中  $\mathcal{F}(eV) = \left(1 + q \frac{\mathcal{V}}{eV - \epsilon_f}\right)^2$  描述了Fano线型, 另一项  $\text{Tr} [\check{\rho}_L(0) \check{\rho}_c(eV)]$  则描述了能带特征, 主要包括杂化能隙和范霍夫奇异点。我们可以看出Fano干涉对电导谱进行了一个简单的整体调制。Fano极小值的位置由  $eV = \epsilon_f - q\mathcal{V}$  给出, 随

着  $q$  增大而逐渐左移，并在  $q = 0.04$  和  $q = 0.2$  时分别与杂化能隙左侧和范霍夫奇异点重合。这与图 3.2(a) 计算结果一致。

Fano 效应及其与杂化能隙和范霍夫奇异点的竞争共存行为在多对多跃迁位形也有体现。图 3.2(b) 是  $16 \times 16 \rightarrow 16 \times 16$  位形的计算结果。以上电导公式 (3.9) 依然适用，但是要注意谱函数是矩阵形式。谱函数矩阵的非对角项对应空间路径干涉，其效应是使得杂化能隙两旁的电导被进一步压制。在这种情形下，Fano 效应与能带特征呈现有趣的竞争现象。这一点在先前的研究中没有报道，可能导致对实验数据的错误理解。比如说在图 3.2(b) 中  $q = 0.2$  的情形，Fano 电导极小和杂化能隙之间出现一个电导峰，容易与带隙内的束缚态混淆。

### 3.3.2 空间干涉效应

我们现在讨论不同的耦合位形，从而详尽的讨论空间干涉效应。图 3.3(a, b) 分别给出了  $q = 0$  和  $0.2$  时四种位形 ( $1 \rightarrow 1$ ,  $1 \rightarrow 2 \times 2$ ,  $2 \times 2 \rightarrow 2 \times 2$ , 和  $16 \times 16 \rightarrow 16 \times 16$ ) 下的电导谱。 $q = 0$  情形，只存在电子跃迁到导带的通道。在  $n_L \times n_L \rightarrow n_L \times n_L$  位形下增大  $n_L$  范霍夫奇异点没有定性的改变。杂化能隙两旁的电导却逐渐被压制，导致杂化能隙变为一个很宽的谷。电导谱的这一结构在分析点接触谱的实验数据时可能与 Fano 效应导致的电导极小值混淆。在 STM 测量中有可能出现  $1 \rightarrow 2 \times 2$  的位形，此时的电导谱有极大的不同。电导中的范霍夫奇异点被压制。杂化能隙的右侧电导增强，这与增大  $q$  会增加  $f$  带贡献的结果一致。杂化能隙左侧电导则被压制，与  $n_L \times n_L \rightarrow n_L \times n_L$  位形的结果一致。

图 3.3(b) 计算了  $q = 0.2$  时的结果。范霍夫奇异点的位置与 Fano 极小的位置重合，导致范霍夫电导峰消失。另一方面，与  $q = 0$  相比，对于  $n_L \times n_L \rightarrow n_L \times n_L$  位形杂化能隙两侧的电导似乎增强了。对于  $1 \rightarrow 2 \times 2$  位形，杂化能隙右侧的电导被极大增强，而左侧电导则被空间干涉压制。

### 3.3.3 动量空间的加权平均

为了更好的理解空间干涉效应，我们在对角化希尔伯特空间考虑电子的输运行为。这里的对角化空间是指孤立导线的对角化空间和样品的动量空间。通过对角化  $\check{\rho}_L$  和  $\check{\rho}_c$ ，我们可以重写电导公式 (3.9)。

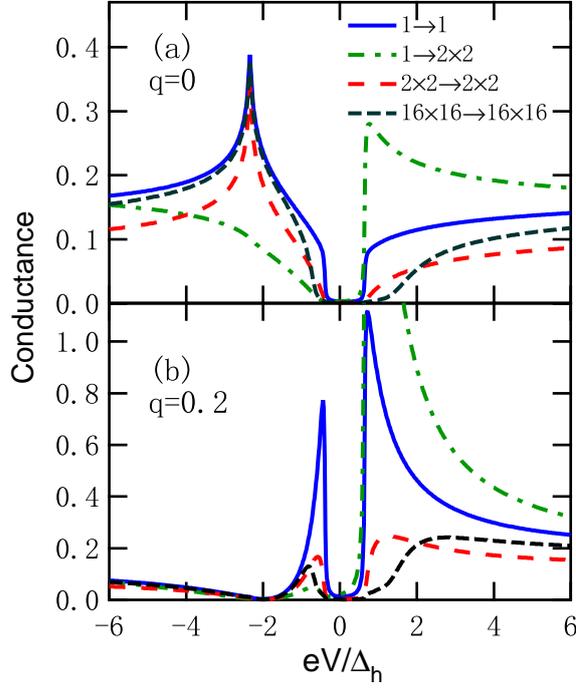


图 3.3: 不同位形下隧穿到重费米子样品的电导谱。(a)  $q = 0$ , (b)  $q = 0.2$ 。参数:  $t = 25$ ,  $\mu = -20$ ,  $\epsilon_f = 0.01$ ,  $\mathcal{V} = 5$ ,  $t_c = 0.001t$ ,  $t_L = t$ ,  $\Gamma = 0.01$ 。电导单位  $\frac{2e^2}{h} n_R^2 \frac{4\pi t_c^2}{t_L t}$ 。

对样品晶格的对角化是通过傅里叶变换完成的,

$$\check{\rho}_c(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \frac{1}{N_k} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \rho_{c\mathbf{k}}, \quad (3.10)$$

其中  $\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j$  标记了界面上的两个格点,  $N_k$  是第一布里渊区的波矢数目,  $\rho_{c\mathbf{k}}$  是导带电子动量  $\mathbf{k}$  能量  $eV$  的谱函数。

对于导线, 由于没有平移不变性, 平行于平面的动量不再是好量子数。在每个原胞内有  $n_L \times n_L$  个格点, 因此导线有  $n_L \times n_L$  条能级, 这些能级是正交的, 相应的希尔伯特空间是对角化的。我们通过对角化孤立原胞的哈密顿量以及原胞之间耦合的哈密顿量可以变换到这一表象。不同的子带之间是正交的, 因此每条子带可以视为一条孤立的一维链, 这样左端口可以视为多个孤立的端口。对于  $n_L = 1$  的情形, 只有一条能带, 已经是对角表象。对于  $n_L = 2$  的情

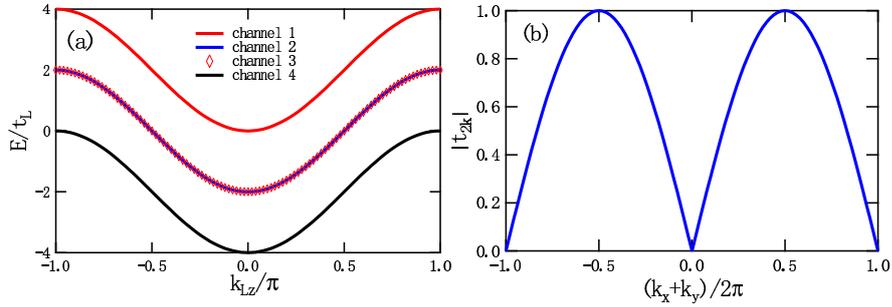


图 3.4: (a)  $2 \times 2$  导线的能带。共4条能带，其中两条简并子带穿过费密面。(b) 第二条子带入射的电子透射到样品动量空间沿着第一布里渊区对角线上的跃迁系数， $|t_{2\mathbf{k}}| \propto |\sin(\frac{k_x+k_y}{2})|$ 。

形，存在四条能带，见图 3.4。其中中间的两条简并能带与费密面相交并有非零的群速度，对输运有贡献。对于  $n_L = 4$  的情形，存在十六条能带。与费密面相交的能级较多，情况比较复杂。

导线表面的谱函数  $\check{\rho}_L$  可以通过如下么正变换对角化，

$$\check{\rho}_L(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i) = \sum_{m=1}^{n_L^2} P_{jm}^\dagger \rho_{Lm} P_{mi}, \quad (3.11)$$

其中下标  $m$  标记了导线中的第  $m$  条子带， $\rho_{Lm}$  是第  $m$  条子带在导线表面费密面处的局域态密度。 $P_{mi}$  是所用的么正变换矩阵。导线  $L$  中第  $m$  条子带中电子入射到样品动量  $\mathbf{k}$  的透穿系数可以写为，

$$\tilde{t}_{m\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j, \mathbf{R}_j} P_{mj} t_{j, \mathbf{R}_j} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j}, \quad (3.12)$$

变换之后的电导公式可以直接给出如下，

$$G(\omega) = \frac{2e^2}{h} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} [i\tilde{\Gamma}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^L (G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^r(\omega) - G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^a(\omega)) - \tilde{\Gamma}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^L G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^r(\omega) \tilde{\Gamma}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^L G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^a(\omega)]. \quad (3.13)$$

其中  $\tilde{\Gamma}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^L = \tilde{t}_{\mathbf{k}m} i(\tilde{g}_{Lm}^r - \tilde{g}_{Lm}^a) \tilde{t}_{m\mathbf{k}'}$ 。可以看出上式与实空间的表达式 (2.45) 在形式上是一致的，区别在于矩阵求迹的指标不同。

在弱耦合情形，舍去高阶项，电导表达式可以写为如下形式，

$$G(eV) = \frac{8\pi^2 e^2}{h} t_c^2 \sum_{\mathbf{k}, m=1}^{n_L^2} |\mathcal{A}_{m\mathbf{k}}|^2 \rho_{Lm}(0) \rho_{c\mathbf{k}}(eV) \mathcal{F}(eV). \quad (3.14)$$

其中

$$\mathcal{A}_{m\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N_k}} \sum_{\mathbf{r}_i} P_{mi} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}, \quad (3.15)$$

描述了透穿系数对动量的依赖关系。从数学上来讲，界面上多条透穿路径导致的干涉效应完全包含在  $\mathcal{A}_{m\mathbf{k}}$  中。对于  $1 \rightarrow 1$  的位形，由于只有一条路径， $\mathcal{A}_{m\mathbf{k}} = 1$ ，对动量没有依赖性。这时测到的电导是电子态密度和Fano因子的乘积。对于  $2 \times 2 \rightarrow 2 \times 2$  的情形， $|\mathcal{A}_{m\mathbf{k}}| \propto |\sin(\frac{k_x \pm k_y}{2})|$ 。在  $k_x \pm k_y = 0, \pm 2\pi$  处，透穿系数  $\mathcal{A}_{m\mathbf{k}} = 0$ 。对于我们这里考虑的模型，对应于杂化能隙下边缘的  $\mathbf{k} = (\pm\pi, \pm\pi)$  和对应于上边缘的  $\mathbf{k} = (0, 0)$  满足  $\mathcal{A}_{m\mathbf{k}} = 0$ 。这意味着电导谱中的杂化能隙会被压制。对于  $1 \rightarrow 2 \times 2$  位形， $|\mathcal{A}_{m\mathbf{k}}| \propto |\cos(k_x/2)\cos(k_y/2)|$ ，在满足  $k_x = \pm\pi$  或者  $k_y = \pm\pi$  的点取值为零，这导致电导谱杂化能隙下边缘被压制。在  $\mathbf{k} = (0, 0)$  跃迁系数取极大值，这导致了电导谱杂化能隙上边缘的增强。电导谱中的范霍夫奇异点源于能带在  $\mathbf{k} = (0, \pm\pi)$  和  $(\pm\pi, 0)$  处的梯度为零，在  $1 \rightarrow 2 \times 2$  位形下，透穿到这些点的几率为零，导致电导谱中范霍夫奇异点消失。

### 3.3.4 无穷大界面情形

考虑  $n_L \rightarrow \infty$  的极限可以充分揭示路径干涉效应，在某种程度上说这种位形更接近点接触谱的大端口的情况 [99]。在这一极限位形下，界面内具有平移不变性，这导致  $\check{\rho}_L(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \rho_L(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ 。平行于界面的动量是好量子数，因此实空间谱函数可以通过傅里叶变换对角化，

$$\check{\rho}_L(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i) = \frac{1}{N_k} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)} \rho_{L\mathbf{k}}. \quad (3.16)$$

与公式 (3.11) 比较，可以对应出  $P_{\mathbf{k}i} = N_k^{-1/2} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}$ 。这直接导致，

$$\mathcal{A}_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} = \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}. \quad (3.17)$$

这意味着导线中进入样品的电子平行于界面的动量守恒，这与平行于界面的动量是好量子数一致。动量守恒再加上能量守恒，对于入射电子的入射通道有极大的限制并导致布里渊区的加权平均。我们认为  $1 \rightarrow 1$  位形与

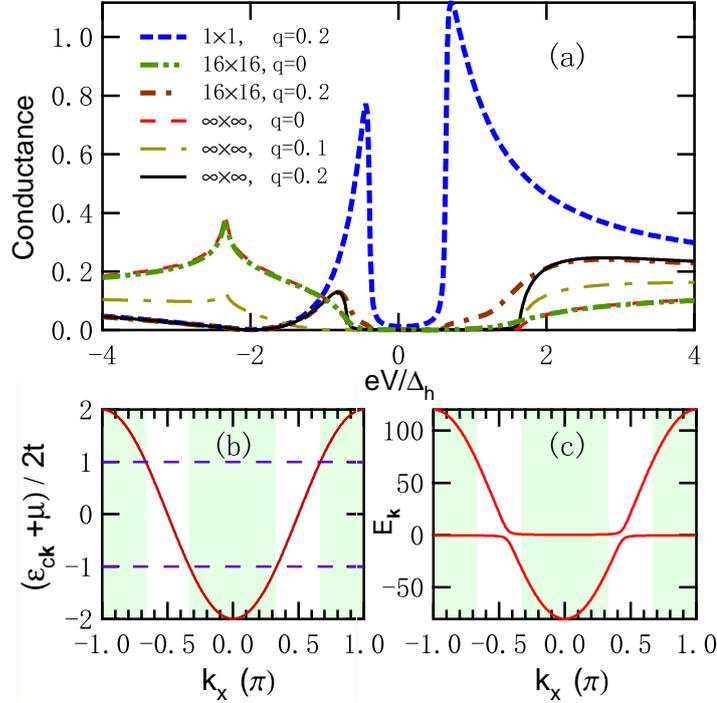


图 3.5: (a)  $n_L = 1, 16, \infty$  时的电导谱。参数  $t = 25$ ,  $\mu = -20$ ,  $\epsilon_f = 0.01$ ,  $\mathcal{V} = 5$ ,  $t_c = 0.001t$ ,  $t_L = t$ ,  $\Gamma = 0.01$ 。电导单位  $\frac{2e^2}{h} n_L^2 \frac{4\pi t_c^2}{t_L t}$ 。无相互作用导带晶格(b)和c-f 杂化晶格(c) 沿着 (1,1) 方向的动量约束的示意图。阴影区域对输运没有贡献。

$n_L \times n_L \rightarrow n_L \times n_L$  位形在布里渊区加权平均的区别是 STS 与点接触谱的一个重要区别。代入公式 (3.17) 后电导公式 (3.14) 变形为,

$$G(eV) = \frac{8\pi^2 e^2}{h} t_c^2 \sum_{\mathbf{k}} \rho_{L\mathbf{k}}(0) \rho_{c\mathbf{k}}(eV) \mathcal{F}(eV). \quad (3.18)$$

设想导线是二维无穷大的,  $\rho_{L\mathbf{k}}$  和  $\rho_{c\mathbf{k}}$  均为  $\delta$  函数。因此只有满足  $E_{\pm}(\mathbf{k}) - \epsilon_{L\mathbf{k}} = eV$  的动量才对电导有贡献。但是对于真实的三维体系情形略有不同。入射电子垂直于界面方向的动量  $\mathbf{k}_z$  不是好量子数, 入射过程会导致到不同  $\mathbf{k}_z$  的散射。因此对于  $\mathbf{k}_z$  的求和修正界面上的态密度, 使之不再是  $\delta$  函数的形式。这样公式 (3.18) 所要求的限制条件得到了极大的减弱, 对电导谱将会产生相应的修正。

为了说明这一点，我们在图 3.5(a)中比较了  $n_L=1, 16, \infty$  的电导谱。与  $n_L=1$  和 16 时的电导谱相比， $n_L = \infty$  时的电导谱在一个极大的电压范围内取零值。这一电压区间包含了杂化能隙的区域并且不随着  $q$  改变。这一压制效应与三维半无限探针的表面态密度  $\rho_{L\mathbf{k}}(\omega)$  的形式有密切关系。 $\rho_{L\mathbf{k}}(\omega)$  的表达式可以如下给出，

$$\rho_{L\mathbf{k}}(\omega) = \frac{1}{\pi t_L} \sqrt{1 - (\omega - \epsilon_{L\mathbf{k}})^2 / 4t_L^2}, \quad (3.19)$$

其中  $\epsilon_{L\mathbf{k}} = -2t_L(\cos \mathbf{k}_x + \cos \mathbf{k}_y)$ 。对于  $\omega = 0$ ，可以由其推出一个导线中电子对界面内动量的依赖关系，费密面上只有满足  $|\cos k_x + \cos k_y| \leq 1$  的电子才对输运有贡献。由于遂穿过程中电子界面内动量守恒，样品晶格中的电子也受到这一限制。假设样品晶格是自由的导带  $\epsilon_{c\mathbf{k}}$ ，如图 3.5(b)所示，带边满足  $|(\epsilon_{c\mathbf{k}} + \mu)/2t| \propto |\cos \mathbf{k}_x + \cos \mathbf{k}_y| > 1$ ，因此电导谱中的带边特征会被压制。对于周期性Anderson晶格，导带与一条色散极弱的  $f$  带耦合形成杂化能级。输运过程对动量的限制也会反映到对  $f$  带电子的压制，由于  $f$  电子在杂化能隙附近权重极大，因此电导谱中的杂化能隙特征会被压制。对于这个工作中所考虑的简单模型， $n_L$  极大时的电导公式可以推出如下，

$$\lim_{n_L \rightarrow \infty} \frac{G(eV)}{n_L^2} = \frac{2e^2}{h} \frac{4\pi t_c^2}{t_L t} \rho_c(eV) \sqrt{t^2 - h(eV)^2} \mathcal{F}(eV), \quad (3.20)$$

其中  $h(eV) = [eV - \mathcal{V}^2 / (eV - \epsilon_f) + \mu] / 2$ 。可以看出对于满足  $|h(eV)| \geq t$  的区域，电导被压制。压制区域的宽度约为  $4\mathcal{V}^2 / D \approx 2\Delta_h$ ，恰好是杂化能隙的两倍，并且覆盖了杂化能隙的区域。我们进一步指出，这一压制效应在有限的  $n_L$  时已经显现出来。正如在图 3.5(a)所示，在  $n_L = 16$  时杂化能隙的带边已经被极大的压制。

能量和动量守恒导致的对于探测  $f$  电子的限制在Fano因子  $q = \infty$  时，可以得到更好的体现。此时我们令导线中的入射电子到导带的透射为零，即只存在到  $f$  带的透射。电导谱的数值结果如图 3.6 所示。可以看出，杂化能隙随着  $n_L$  的增大而逐渐变宽，这印证了比较大的端口（大  $n_L$ ）对于  $f$  电子的探测不够敏感。

上面所讨论的约束条件并不仅仅局限于我们这里所讨论的简化模型。一般来讲，导线费密面上入射电子的平行于界面的动量受到三维费密面在  $(k_x, k_y)$  界面上投影的限制。垂直于界面的色散给出了  $\epsilon_{L\mathbf{k}}$  所允许的范围  $|\epsilon_{L\mathbf{k}}| \leq W_z$ 。在这个工作所考虑的简化模型中  $W_z \approx 2t_L |\cos k_z| = 2t_L$ 。对  $\epsilon_{L\mathbf{k}}$  的约束限制了

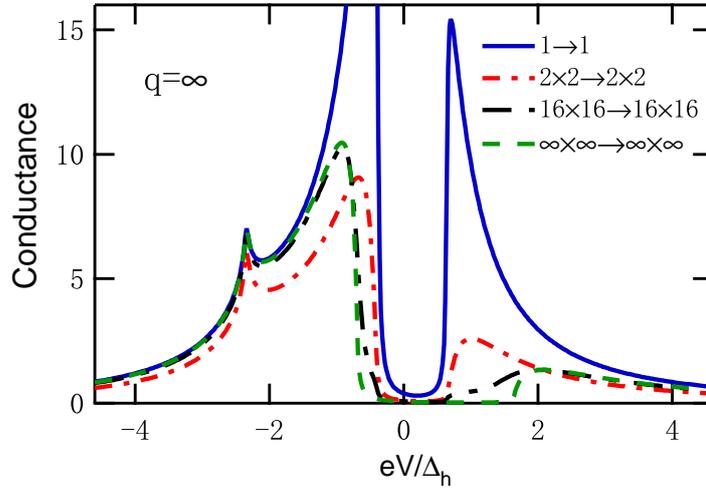


图 3.6:  $q = \infty$  时不同位形  $n_L = 1, 2, 16, \infty$  的电导谱比较。参数:  $t = 25$ ,  $\mu = -20$ ,  $\epsilon_f = 0.01$ ,  $\mathcal{V} = 5$ ,  $t_c = 0$ ,  $t_L = t$ ,  $\Gamma = 0.01$ ,  $t_f = 0.001t$ 。电导单位  $\frac{2e^2}{h} n_L^2 \frac{4\pi t_f^2}{t_L t}$ 。

平行于界面动量的可能的取值。考虑到透射过程中能量和平行于界面动量的守恒，电子只能透射到样品中某些动量。而在  $1 \rightarrow 1$  位形，入射电子可以等几率的透射到不同的动量。对动量的选择性导致布里渊区中某些区域的信息不能够被探测到。对于重费米子样品，由于  $f$  电子能级的色散较弱， $f$  能带在一个小的能量区间内遍历布里渊区。强关联效应导致  $f$  能带被重整化到且主要分布在杂化能隙附近。动量空间的选择性跃迁会使得相当一部分  $f$  能带无法被入射电子占据。如图 3.5(c)所示，入射电子无法透射到阴影区域。导致电导谱中的杂化能隙被压制，从而呈现出一个更大的能隙特征。这是我们这个工作的一个普遍性的结论。我们认为点接触谱在测量  $f$  电子特征时存在不足，因此在分析点接触的实验数据时需要格外的注意。

### 3.3.5 能带展宽的影响

在上面的讨论中，我们没有考虑强关联效应。从计算的角度来讲，计入强关联效应导致单粒子格林函数难以严格求解。通过在格林函数中添加有限的虚部，可以部分的考虑强关联效应。这种做法相当于假设了一个准粒子的有限寿命  $\tau \sim \Gamma^{-1}$ 。下面我们讨论准粒子有限寿命对电导谱的影响。

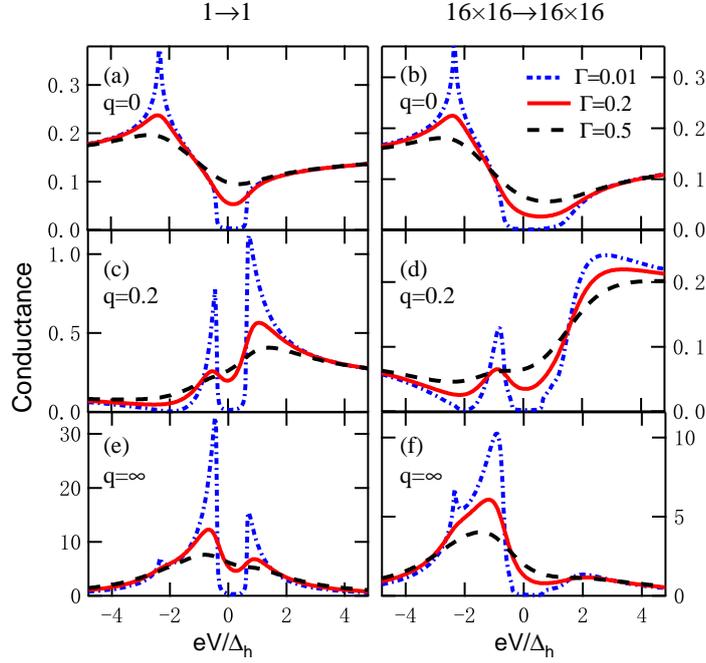


图 3.7: 电导谱随着  $\Gamma$  的改变。考虑不同的位形  $1 \rightarrow 1$  (a,c,e),  $16 \times 16 \rightarrow 16 \times 16$  (b,d,f), Fano 因子取  $q = 0, 0.2, \infty$ 。参数:  $t = 25$ ,  $\mu = -20$ ,  $\epsilon_f = 0.01$ ,  $\mathcal{V} = 5$ ,  $t_L = t$ 。(a-d)电导单位  $\frac{2e^2}{h} n_L^2 \frac{4\pi t_c^2}{t_L t}$ ,  $t_c = 0.001t$ 。(e,f) 电导单位  $\frac{2e^2}{h} n_L^2 \frac{4\pi t_f^2}{t_L t}$ ,  $t_f = 0.001t$ ,  $t_c = 0$ 。

图 3.7 计算了  $q = 0, 0.2, \infty$ ,  $n_L = 1, 16$  时能带展宽  $\Gamma$  取不同值的电导谱。可以看出有限的展宽  $\Gamma$  的作用是使电导谱变平滑。 $q = 0$  时,  $\Gamma$  的增大使得杂化能隙变为一个宽阔的电导极小值。范霍夫奇异点不再非常的尖锐, 其存在使得电导谱呈现出类似  $q \neq 0$  时 Fano 效应的非对称特征。应注意区分二者形成的不同原因。 $q = 0.2$  时, 杂化能隙左侧的电导峰在  $\Gamma$  增大到 0.2 仍然存在, 继续增大  $\Gamma$  到 0.5 时, 该电导峰被压制。比较  $n_L = 1, 16$  时的结果, 较大  $n_L$  对应电导谱的右侧电导峰更为扩展。而且两者出现在不同的偏压处, 大  $n_L$  由于干涉效应的影响, 右侧的电导峰更加偏离杂化能隙。Fano 因子  $q = \infty$  时的电导谱结果更为明显。在  $\Gamma = 0.2$  时,  $1 \rightarrow 1$  位形的电导谱仍然有明显的杂化能隙, 但是  $16 \times 16 \rightarrow 16 \times 16$  位形的杂化能隙已经几乎消失。对于更大的  $\Gamma$ ,  $q = \infty$  时的电导谱与  $q = 0$  时的结果类似, 在理解时注意区分。 $q = 0$  时的非对称谱

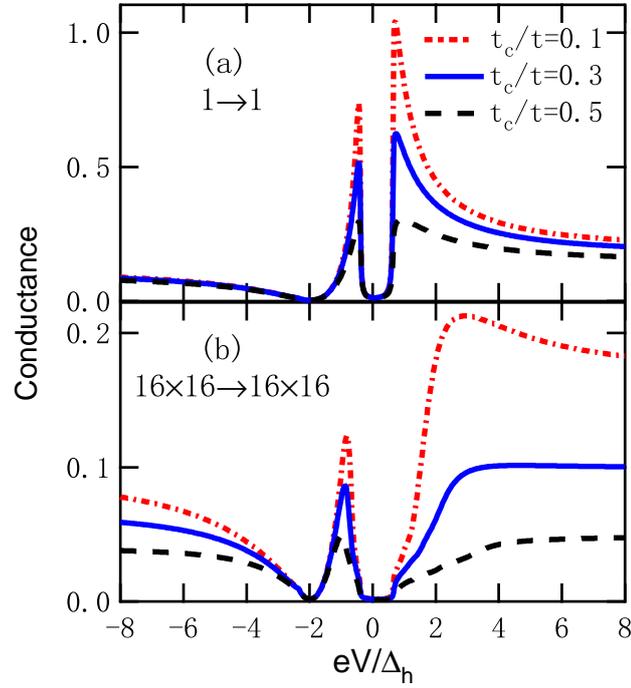


图 3.8:  $1 \rightarrow 1$  位形 (a) 和  $16 \times 16 \rightarrow 16 \times 16$  位形 (b) 的电导谱, Fano 因子设为  $q = 0.2$ 。参数:  $t = 25$ ,  $\mu = -20$ ,  $\epsilon_f = 0.01$ ,  $\mathcal{V} = 5$ ,  $t_L = t$ ,  $\Gamma = 0.01$ 。电导单位:  $\frac{2e^2}{h} n_L^2 \frac{4\pi t_c^2}{t_L t}$ 。

线源于范霍夫奇异点, 而  $q = \infty$  时则源于  $f$  能带谱函数。在大部分重费米子材料中, 实验结果表明存在一个较大的  $\Gamma$ 。在扫描隧道谱中由于不存在干涉效应, 杂化能隙被压制需要的  $\Gamma$  相比点接触谱要大。这与杂化能隙在点接触谱中被压制却在扫描隧道谱中出现是一致的 [24, 36]。在  $\text{URu}_2\text{Si}_2$  中, “隐藏序” 的出现可能会使得  $\Gamma$  减小, 这可以说明为什么在  $\text{URu}_2\text{Si}_2$  点接触谱中可以观测到杂化能隙 [28, 35, 37]。

### 3.3.6 强耦合效应

这一部分我们讨论探针和样品的跃迁系数对电导谱的影响。

图 3.8 中是在 Fano 因子  $q = 0.2$  时调节  $t_c/t$  的电导谱。可以看到电导谱没有定性的改变。随着  $t_c/t$  的增大, 电导谱的非对称性减弱。这一效应源于电流公

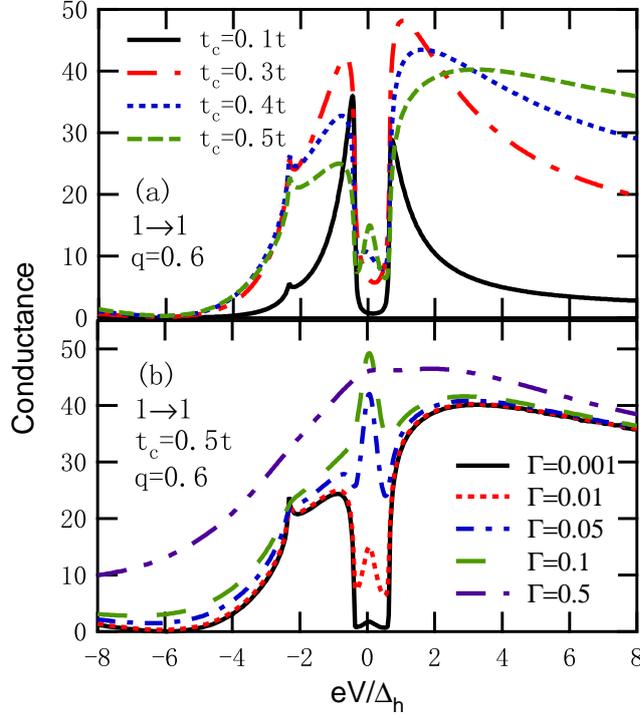


图 3.9: 强耦合情形电导谱随着  $t_c$  和  $\Gamma$  的演化。参数:  $t = 25$ ,  $\mu = -20$ ,  $\epsilon_f = 0.01$ ,  $\mathcal{V} = 5$ ,  $t_L = t$ ,  $\Gamma = 0.01$ 。电导单位:  $\frac{2e^2}{h} n_L^2 \frac{4\pi}{t_L t}$ 。

式 (2.45) 的第二项提供的非平衡负反馈效应对运输的部分压制。

如图 3.9(a)所示, 进一步的增大跃迁系数  $t_f$  可以在杂化能隙内导致一个小的电导峰。该电导峰对应的跃迁系数是  $t_f/V = 1.5$ , 此时探针与近邻的  $f$  电子有极强的耦合。我们因此认为这一电导峰源于探针所导致的杂质态。从数学的角度讲, 这一效应源于电导表达式 (2.45) 的第二项。对于  $1 \rightarrow 1$  的跃迁位形, 电导表达式的第一项只与局域谱函数或者说局域格林函数的虚部有关。但是, 局域格林函数的实部在公式 (2.45) 的第二项出现。在探针和样品的耦合较大时, 第二项对电流也有贡献。特别是在杂化能隙边缘, 由于格林函数虚部存在跃变, 其实部在此发散。这导致电导表达式中第二项贡献极大, 杂化能隙边缘电导的压制相对较大, 从而在杂化能隙中出现电导峰。图 3.9(b)展示了  $\Gamma$  对带隙内电导峰的影响, 可以看到随着  $\Gamma$  的增大电导峰逐步变强, 但在  $\Gamma$  极大时会被淹没。图 3.10则考虑了其它跃迁位形的情况。可以看到随着  $n_L$  的增大, 带

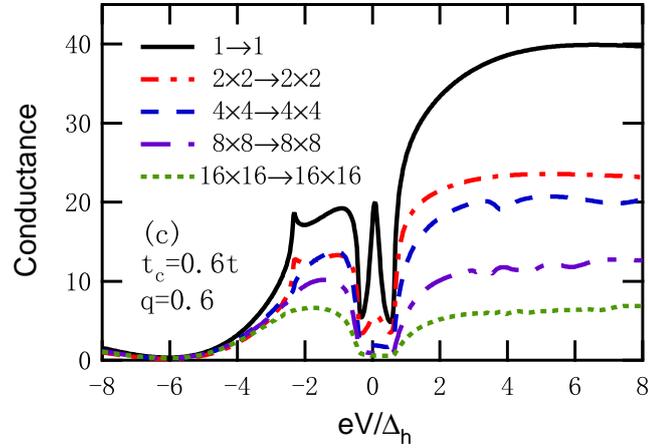


图 3.10: 强耦合情形电导谱随着  $n_L$  的演化。参数:  $t = 25$ ,  $\mu = -20$ ,  $\epsilon_f = 0.01$ ,  $\mathcal{V} = 5$ ,  $t_L = t$ ,  $\Gamma = 0.01$ 。电导单位:  $\frac{2e^2}{h} n_L^2 \frac{4\pi}{t_L t}$ 。

隙内电导峰被逐步压制。这与电导峰是由局域束缚态引起的是一致的。

我们注意到扫描隧道谱测量对应的  $t_c$  或  $t_f$  是极小的。在点接触中测量中,  $t_c$  或  $t_f$  可能也不具有如此大的取值。但是耦合极强的情况可以在一些特殊的装置中实现, 比如说电极与样品存在极强自组织的测量系统。

### 3.4 小结

在这一章中我们系统地研究了周期性Anderson模型电导谱随着Fano因子  $q$  和探针样品耦合位形的变化规律。 $n_L$  较小和较大时的结果分别可以反映一些扫描隧道谱和点接触谱的实验结果。当然真实的情况可能是比较复杂的。对于点接触谱的情形, 探针和样品之间的接触区域可能包含数百个小的接触界面(小端口), 不同的小端口有不同的接触位形和耦合强度。所以点接触谱的结果应该理解为不同的小端口的统计平均。我们的研究表明空间路径干涉效应依赖于具体的位形。然而对于较大的  $n_L$ , 计算结果没有定性的变化。因此我们认为这里的计算模拟了电子输运的基本物理过程, 包括: 由于存在  $f$  带和导带杂化导致的Fano干涉效应和由于端口的有限尺寸导致的空间路径干涉效应。由于我们采用了平均场处理, 故不能包含强关联效应导致若干有趣的物理, 比如量子临界现象等。但是在这个工作中我们期望描述电子输运的基本物理机制, 对

强关联效应的一个完整处理超出了这个工作的范围。此外我们观察到的干涉效应与能带特征（范霍夫奇异点和杂化能隙等）的竞争合作提供了一些可能的电导谱行为，在理解实验数据时需要给予格外的关注。

## 第四章 磁性拓扑绝缘体输运性质

在这一章我们主要研究磁场和破坏空间反演的门电压对磁性拓扑绝缘体输运性质的影响。我们研究了磁性拓扑绝缘体薄膜的相图，计算了朗道能级谱，并用Landauer-Büttiker理论模拟了其输运行为。我们发现量子反常霍尔效应在磁场下一直存在并逐渐演化到朗道能级对应的边态。朗道能级的两条零模可以共存，形成一个类似于量子自旋霍尔效应的非平庸相。但是这个相是磁场导致的，而量子自旋霍尔效应会被磁场破坏。在六端口霍尔测量中，可以发现一些分数化的纵向和霍尔电阻平台，这些分数化的平台源于反转的能带和朗道能级导致的边态。

### 4.1 引言

量子霍尔效应 (QHE) [51] 是普通霍尔效应的量子化版本 [42]。在其边界上有手征的边界态，这些边界态源于磁场导致的朗道能级，并且是无耗散的。当不存在磁场和朗道能级时，在某些材料中也可能存在霍尔电导，这称为量子反常霍尔效应 (QAHE) [54, 55]。QAHE 可以视为反常霍尔效应的量子化版本 [43, 103]。在 QAHE 的边界也存在边界态，这一边界态源于非平庸的体能带结构。如果体系受时间反演对称性保护，非平庸的电子能带结构会在样品边界上产生一对相向传输的边界态，称为量子自旋霍尔效应 (QSHE) [104–106]。QSHE 可以视为自旋霍尔效应的量子化版本 [107–109]。相向传播的边界态使得霍尔电阻为零，但是纵向电阻将会是量子化的  $h/2e^2$ 。QSHE 在理论预测之后很快被实验证实 [110, 111]。尽管 QAHE 的理论预测远早于 QSHE [54]，但是 QAHE 则直到最近才被证实 [64]。

在文献 [64] 中，QAHE 在磁性拓扑绝缘体中被观测到。拓扑绝缘体是材料的一种拓扑相，不能用朗道的对称破缺理论描述。其特点是体态是绝缘的，但是边界上存在无耗散的边界态（二维拓扑绝缘体）或表面态（三维拓扑绝缘体） [58, 59]。对于自由的表面态，其对应的低能激发是无质量的狄拉克费米子。但是对于足够薄的样品，上下界面之间将会有隧穿效应，上下表面的表面态会发生耦合，会在狄拉克点打开能隙，从而低能激发变成有质量的狄拉克费

米子 [61]。通过对拓扑绝缘体薄膜进行磁性掺杂，可以引入磁性交换场，并形成铁磁序。如果铁磁序的指向垂直于界面，并且交换场的强度大于表面态能隙，则会导致存在一对反转的能带结构 [55]。通过在磁性拓扑绝缘体薄膜的上下表面施加门电压，可以调控样品的化学势，当化学势位于带隙中时，可以观测到QAHE。上下表面的电压差一般是不一致的，这样门电压的存在可以导致系统存在空间反演非对称（SIA）势能项。在文献 [64]中，也进行了磁场下的测量，但是观测结果表明只有QAH对应的电导平台被观测到。QHE的平台则由于样品迁移率较低而无法观测到。因此QAHE和QHE如何竞争共存还没有被研究。SIA项的效应也需要充分的研究。

现有的工作主要是集中在二维拓扑绝缘体薄膜材料的朗道能级谱的研究 [110, 112–115]。在垂直磁场下，狄拉克费米子不论是否存在质量都会形成朗道能级 [116]。孤立的表面态对应于无质量情形 [114]，动量依赖的表面间隧穿项则对应于质量项，其强度取决于样品的厚度 [112]。实验上在测量朗道能级谱方面已经有一些进展。无质量激发的朗道能级在  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  [117–119]、 $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  [120]、 $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  [121]和  $\text{HgTe}$  [122]中测量到。然而，动量依赖的表面间隧穿项，SIA项，交换场项对朗道能级谱的影响仍然没有充分的研究。实际上即使只有一个门电压的情况，SIA项一般也是存在的，对SIA项的分析是必要的。我们的研究表明动量依赖的隧穿会使得朗道能级谱的两条零模线性依赖于磁场，并且交叉形成类似于QSHE的相。

对于QAHE和QHE竞争合作在输运行为上的体现的理论研究比较缺乏。尽管朗道能级谱可以用于分析输运性质，但是直接的输运模拟对于完整的理解输运行为仍然是必要的。原因是只有在有限尺寸的样品中边界态才会出现，此时基于能带反转结构的边态和基于朗道能级的边态才能共存并相互影响。

在这一章我们研究磁场中磁性拓扑绝缘体薄膜的输运性质，并考虑空间反演对称性破缺下的电势的影响。我们计算了朗道能级谱并模拟了输运性质。我们发现，两条零模具有相同的自旋极化，由于二者的陈数是相反的，故存在一个类似于QSHE的相。破坏空间反演对称性会导致这一拓扑非平庸的相消失。对于有限尺寸的纳米带，体能带拓扑非平庸导致的边态将会和磁场导致的朗道能级对应的边态共存，并形成新的能带结构。其效应是，在六端口霍尔测量中，我们可以观测到一些纵向电阻和霍尔电阻均为分数的平台。参与耦合的磁致边态对应于反转能带时的耦合要强于对应于平庸能带的情况。此外我们发现

把朗道能级按照所对应的能带进行分类有助于数据的理解。

本章的剩余部分如下安排：第二部分介绍用到的哈密顿量和对应的相图，第三部分计算朗道能级谱，第四部分模拟了六端口装置的电输运，最后是本章的小结。

## 4.2 系统的哈密顿量和相图

### 4.2.1 三维低能有效哈密顿量

三维拓扑绝缘体  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  保持时间反演对称性和空间反演对称性，其对应的拓扑不变量是  $Z_2$  指数且有  $\nu_0 = 1$ ，因而是强拓扑绝缘体材料。其表面态结构比较简单，只有一个  $\Gamma$  点附近的狄拉克锥。并且是晶体材料，不需要额外的掺杂来引入非平庸的拓扑性质。体能隙相对较大，约为  $0.3\text{eV}$ 。考虑到这些优势， $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  一经提出 [123] 和证实 [124]，便在实验和理论研究中得到了广泛运用 [58, 59]。

在拓扑绝缘体的理论研究中经常用到低能有效哈密顿量。对于表面态的研究则需要表面态对应的低能有效模型。对称性分析是获得低能有效模型的常用方法。文献 [123] 通过对  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  能带和对称性的分析来获得  $\Gamma$  点附近的低能有效模型。

能带计算的结果表明， $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  费密面附近的能级主要是来自于  $p$  轨道。 $s$  轨道能级较低，主要分布在内层被占据轨道。因此能级分析可以只考虑  $p$  轨道出发。原胞中有两个 Bi ( $6s^26p^3$ ) 原子和三个 Se ( $4s^24p^4$ ) 原子，共有 28 个外层电子，14 条被占据能带。由于  $s$  轨道被占据，因此靠近费密面的  $p$  轨道有 9 条被占据。图 4.1 是  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的能级劈裂示意图。计入成键作用和晶体场劈裂后，费密面之下的能级是源于 Se 的奇宇称  $p_z$  成分的轨道  $P2_z^-$ ，费密面之上能级是源于 Bi 的偶宇称  $p_z$  成分的轨道  $P1_z^+$ 。计入自旋轨道耦合后， $\Gamma$  点附近  $P1_z^+$  能量降低显著。在自旋轨道耦合超过某临界值时， $P1_z^+$  低于  $P2_z^-$ ，宇称相反的两能级发生反转。由于其它高对称点未发生能级反转。根据同时满足空间反演对称性和时间反演对称性系统  $Z_2$  指数计算的简易方法，可得  $\nu_0 = 1$ ，说明  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  是强拓扑绝缘体。

$\text{Bi}_2\text{Se}_3$  费米面附近的能级是  $\{P1_{z\uparrow}^+, P1_{z\downarrow}^+, P2_{z\uparrow}^-, P2_{z\downarrow}^-\}$ ，其中  $\pm$  表示宇称。通过对称性分析的方法可以去掉模型哈密顿量中对称性不允许的矩阵元，极大的简化分析的难度。 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  对称群的生成元是空间反演不变性  $I$ ，时间

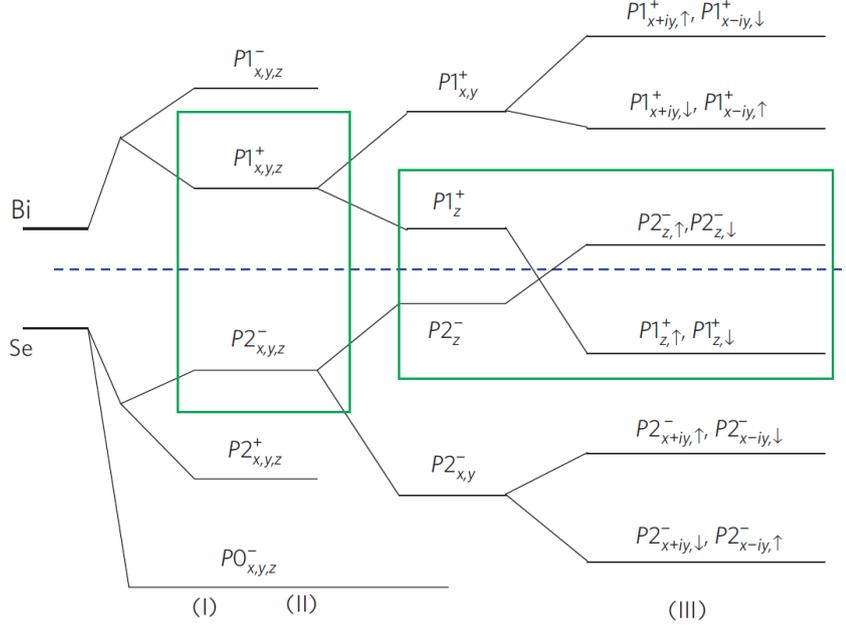


图 4.1:  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  能级劈裂示意图。图片源自 [123]。

反演不变性  $T$  和三重旋转不变性  $C_3$ 。下面我们推导  $\Gamma$  点附近满足  $\{I, T, C_3\}$  不变性的低能有效模型。哈密顿量写为  $\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^\dagger H(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}}$ 。哈密顿量在操作  $R$  下不变，则  $\hat{H} = \hat{R}^\dagger \hat{H} \hat{R} = \hat{R}^\dagger \psi_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{R} \hat{R}^\dagger H(\mathbf{k}) \hat{R} \hat{R}^\dagger \psi_{\mathbf{k}} \hat{R}$ 。其中  $\hat{R}$  是  $Q$  数。令  $\hat{R}^\dagger \psi_{\mathbf{k}} \hat{R} = R \psi_{R\mathbf{k}}$ ， $R$  是  $C$  数。我们有  $\sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^\dagger H(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{R\mathbf{k}}^\dagger R^\dagger H(\mathbf{k}) R \psi_{R\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^\dagger R^\dagger H(R\mathbf{k}) R \psi_{\mathbf{k}}$ 。从而我们有  $H(R\mathbf{k}) = R^\dagger H(\mathbf{k}) R$ 。  $\psi(\mathbf{k}) = (a_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}}, c_{\mathbf{k}}, d_{\mathbf{k}})^T$ ，基底的排列顺序为  $\{P1_{z\uparrow}^+, P1_{z\downarrow}^+, P2_{z\uparrow}^-, P2_{z\downarrow}^-\}$ 。在这一基底上，对称群的生成元矩阵写为，

$$C_3 = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\pi}{3}\sigma_z} & \\ & e^{i\frac{\pi}{3}\sigma_z} \end{pmatrix}, I = \begin{pmatrix} E & \\ & -E \end{pmatrix}, T = \begin{pmatrix} i\sigma_y K & \\ & i\sigma_y K \end{pmatrix}. \quad (4.1)$$

我们把前两个指标记为  $A$ （偶宇称），后两个指标记为  $B$ （奇宇称），空间反演不变性要求，

$$\begin{pmatrix} H_{AA}(-\mathbf{k}) & -H_{AB}(-\mathbf{k}) \\ -H_{BA}(-\mathbf{k}) & H_{BB}(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{AA}(\mathbf{k}) & H_{AB}(\mathbf{k}) \\ H_{BA}(\mathbf{k}) & H_{BB}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

可以看到，空间反演不变性保证了不同宇称的能带之间的杂化是动量的奇函数。再计入时间反演对称和三重旋转不变，可以得到考虑到动量最低阶的低能

有效哈密顿量的形式,

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_0(\mathbf{k}) + M(\mathbf{k}) & 0 & A_1 k_z & A_2^* k_- \\ 0 & \epsilon_0(\mathbf{k}) + M(\mathbf{k}) & A_2 k_+ & -A_1^* k_z \\ A_1^* k_z & A_2^* k_- & \epsilon_0(\mathbf{k}) - M(\mathbf{k}) & 0 \\ A_2 k_+ & -A_1 k_z & 0 & \epsilon_0(\mathbf{k}) - M(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

其中  $\epsilon_0(\mathbf{k}) = C + D_1 k_z^2 + D_2(k_x^2 + k_y^2)$ ,  $M(\mathbf{k}) = M - B_1 k_z^2 - B_2(k_x^2 + k_y^2)$ 。而且我们注意到其旋转对称群扩大为沿着  $z$  轴的任意转动。哈密顿量里的参数可以通过拟合能带数据得到。

#### 4.2.2 拓扑绝缘体薄膜的哈密顿量

拓扑绝缘体薄膜的哈密顿量可以通过其三维哈密顿量在合适的边界条件下推导得到 [61], 也可以通过对称性分析并拟合参数来得到。这里我们直接给出其形式。

##### 拓扑绝缘体薄层哈密顿量

对于一个拓扑绝缘体薄层, 上下层分别存在表面态, 且表面态之间存在耦合, 其哈密顿量可以写为如下形式 [55,61],

$$H = \hbar v_F (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) \tau_z + m_k \tau_x. \quad (4.4)$$

对应的基底取为  $(|t \uparrow\rangle, |t \downarrow\rangle, |b \uparrow\rangle, |b \downarrow\rangle)^T$ , 其中  $t$  ( $b$ ) 标记了上 (下) 表面态,  $\uparrow, \downarrow$  标记了上下自旋。泡利矩阵  $\sigma_{x,y,z}$  作用在自旋空间,  $\tau_{x,y,z}$  混合上下表面的表面态。哈密顿量中的第一项描述了自由的表面态, 其中  $v_F$  给出了表面态的费米速度。哈密顿量中的第二项  $m_k = m_0 + B\mathbf{k}^2$  描述了上下表面态之间的

耦合。对基底做幺正变换,  $P_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$ , 我们得到新的基底

$(\frac{|t \uparrow\rangle + |b \uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, \frac{|t \downarrow\rangle - |b \downarrow\rangle}{\sqrt{2}}, \frac{|t \downarrow\rangle + |b \downarrow\rangle}{\sqrt{2}}, \frac{|t \uparrow\rangle - |b \uparrow\rangle}{\sqrt{2}})^T$ 。哈密顿量可以对角化为,

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} m_k & i v_F k_- & & \\ -i v_F k_+ & -m_k & & \\ & & m_k & -i v_F k_- \\ & & i v_F k_+ & -m_k \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

其中两个对角块通过时间反演对称性联系。HgTe的低能有效哈密顿量（BHZ模型）也可以写成类似的对角形式，这是因为二者满足相同的对称性群。

哈密顿量中的上对角块是一个常见的两带模型，对应的哈密顿量矩阵可以用泡利矩阵写为， $H = \mathbf{d} \cdot \sigma$ 。其陈数可以通过下式计算 [47]，

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h} \frac{1}{4\pi} \int dk_x dk_y \frac{\mathbf{d} \cdot (\partial_{k_x} \mathbf{d} \times \partial_{k_y} \mathbf{d})}{d^3}, \quad (4.6)$$

其中  $d = \sqrt{\mathbf{d} \cdot \mathbf{d}}$ ， $\mathbf{d} = (-v_F k_y, v_F k_x, m_k)^T$ 。直接积分可以得到，

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h} \frac{\text{sign}(m_0/v_F) - \text{sign}(B/v_F)}{2} = \begin{cases} 0, & \text{if } m_0 B > 0 \\ -1, & \text{if } m_0 > 0, B < 0 \\ 1, & \text{if } m_0 < 0, B > 0 \end{cases} \quad (4.7)$$

表面间的隧穿会打开一个宽度  $2m_0$  的能隙。如果  $m_0/B < 0$ ，处在拓扑非平庸的态。由于两个哈密顿量对角块的陈数相反，可知系统处在QSHE相。如果  $m_0/B > 0$  则处于普通绝缘体的相。 $m_0/B$  的取值决定于样品薄膜的厚度 [125, 126]。

### 磁性拓扑绝缘体薄层

哈密顿量可以写为，

$$H = \hbar v_F (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) \tau_z + m_k \tau_x + M \sigma_z. \quad (4.8)$$

最后一项是沿着  $z$  方向的交换场项，描述了磁性掺杂导致的铁磁序。从形式上来看，其与塞曼项是一致的。变换到基底  $(\frac{|t\rangle+|b\rangle}{\sqrt{2}}, \frac{|t\rangle-|b\rangle}{\sqrt{2}}, \frac{|t\rangle+|b\rangle}{\sqrt{2}}, \frac{|t\rangle-|b\rangle}{\sqrt{2}})^T$ ，则哈密顿量可以写为，

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} m_k + M & i\hbar v_F k_- & & \\ -i\hbar v_F k_+ & -m_k - M & & \\ & & m_k - M & -i\hbar v_F k_- \\ & & i\hbar v_F k_+ & -m_k + M \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

可以看到哈密顿量是块对角的，并且在形式上与式 (4.5) 是一致的。可以看出，足够大的交换场 ( $|M| > |m_0|$ ) 可以显著的调制能带结构。其结果是不论初始态 ( $M = 0$ ) 是量子自旋霍尔效应 ( $m_0/B < 0$ ) 还是平庸绝缘体

( $m_0/B > 0$ ) 足够大的交换场都会导致只存在一对反转的能带结构。

### 考虑SIA项的磁性拓扑绝缘体薄层

计入薄膜上下表面门电压导致的空间反演非对称 (SIA) 势能, 哈密顿量可以写为,

$$H = H_{sf} + M\sigma_z + \frac{\delta V}{2}\tau_z + \bar{V}. \quad (4.10)$$

其中  $\delta V = V_t - V_b$  是上下表面门电压的差值,  $\bar{V} = \frac{V_t + V_b}{2}$  是门电压的平均值,  $V_{t/b}$  是上下表面的门电压。在后面的计算中, 我们取  $\bar{V} = 0$ 。哈密顿量写成矩阵形式如下,

$$H = \begin{pmatrix} M + V_t & i\hbar v_F k_- & m_k & 0 \\ -i\hbar v_F k_+ & -M + V_t & 0 & m_k \\ m_k & 0 & M + V_b & -i\hbar v_F k_- \\ 0 & m_k & i\hbar v_F k_+ & -M + V_b \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

我们注意到计入上下表面的门电压项后, 哈密顿矩阵不能块对角化。

我们可以通过一个幺正变换  $P = \text{diag}(e^{i\varphi_1}, e^{i\varphi_2}, e^{i\varphi_3}, e^{i\varphi_4})$  来调节波函数的位相。相应的哈密顿量在幺正变换后变形为,

$$P\tilde{H}P^\dagger = \begin{pmatrix} M + V_t & i\hbar v_F k_- e^{i(\varphi_1 - \varphi_2)} & m_k e^{i(\varphi_1 - \varphi_3)} & 0 \\ -i\hbar v_F k_+ e^{-i(\varphi_1 - \varphi_2)} & -M + V_t & 0 & m_k e^{i(\varphi_2 - \varphi_4)} \\ m_k e^{-i(\varphi_1 - \varphi_3)} & 0 & M + V_b & -i\hbar v_F k_- e^{i(\varphi_3 - \varphi_4)} \\ 0 & m_k e^{-i(\varphi_2 - \varphi_4)} & i\hbar v_F k_+ e^{-i(\varphi_3 - \varphi_4)} & -M + V_b \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

如果我们要求上自旋和下自旋电子表面间的跃迁有相同的位相, 即  $m_k e^{i(\varphi_1 - \varphi_3)} = m_k e^{i(\varphi_2 - \varphi_4)}$ , 则  $e^{i(\varphi_1 - \varphi_3)} = e^{i(\varphi_2 - \varphi_4)}$ 、 $e^{i(\varphi_1 - \varphi_2)} = e^{i(\varphi_3 - \varphi_4)}$ 。哈密顿量变为,

$$P\tilde{H}P^\dagger = \begin{pmatrix} M + V_t & i\hbar v_F k_- e^{i\delta\varphi_1} & m_k e^{i\delta\varphi_2} & 0 \\ -i\hbar v_F k_+ e^{-i\delta\varphi_1} & -M + V_t & 0 & m_k e^{i\delta\varphi_2} \\ m_k e^{-i\delta\varphi_2} & 0 & M + V_b & -i\hbar v_F k_- e^{i\delta\varphi_1} \\ 0 & m_k e^{-i\delta\varphi_2} & i\hbar v_F k_+ e^{-i\delta\varphi_1} & -M + V_b \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

可以看出通过改变波函数相位可以调节哈密顿量中非对角项的相位。但是考虑到力学量的矩阵元也要做相应的改变，这里的变换不会改变物理量的取值。这里的位相变换对应于轨道空间的旋转。通过选择不同的相位，我们发现  $H(-\delta V, m_k, v_F, M)$ 、 $H(\delta V, -m_k, v_F, M)$ 、 $H(\delta V, m_k, -v_F, M)$ 、 $-H(\delta V, m_k, v_F, -M)$  与  $H(\delta V, m_k, v_F, M)$  之间只相差一个么正变换。因此在下面的讨论中我们取SIA项为正值， $\delta V > 0$ ，能隙项  $m_0 > 0$ ，交换场  $M < 0$ 。哈密顿量中的参数取为： $v_F = 4.53 \times 10^5 \text{ms}^{-1}$ 、 $m_0 = 5 \text{meV}$ 、 $B = \pm 800 \text{meV} \cdot \text{nm}^2$  [127]。我们讨论了  $m_0/B < 0$  和  $m_0/B > 0$  两种情形。对于  $M = 0$  且系统处在QSH相的情形，已经有详尽的研究 [58, 59, 110, 128, 129]。因此我们主要关注  $|M| > m_0$  的情形，并取  $M = -15 \text{meV}$ 。此时当体系有空间反演对称性时，不论  $m_0/B < 0$  还是  $m_0/B > 0$  体系均处于QAH相。

### 4.2.3 相图

哈密顿量 (4.11) 对应的色散关系可以通过久期方程直接解出，

$$\epsilon = \pm \sqrt{\hbar^2 v_F^2 k^2 + m_k^2 + M^2 + \delta V^2/4 \pm 2\sqrt{m_k^2 M^2 + M^2 \delta V^2/4 + \hbar^2 v_F^2 k^2 \delta V^2/4}}. \quad (4.14)$$

色散关系中有两重根号，这说明哈密顿量不能被分块对角化。一个哈密顿量矩阵能否被分块对角化取决于系统的对称群，这里可以看到破坏空间反演对称性后该系统不能分块对角化。自由的表面态是狄拉克锥式的电子结构。上下表面之间的耦合项  $m_k$ ，交换场  $M$ ，以及SIA项  $\delta V$  均可以打开能隙。体系共有四条能带，交换场和SIA项均会导致能级劈裂，导致简并被打破。图 4.2(a3)和图 4.2(b3)是能带的示意图。对于  $m_0/B < 0$  和  $\delta V = 0$  的情形，电子型和空穴型能带的两个分支会有交叉。有限取值  $\delta V$  的出现会打开这个交叉。在后面的讨论中，我们会讨论这个交叉对应的有意思的现象。

按照公式 (4.14)，随着调节  $\delta V$ ，体系的能带会关闭然后重新打开。对于  $m_0/B < 0$ ，能隙会出现两次关闭的过程： $|\delta V|/2 = \sqrt{M^2 - m_0^2}$  时在  $\Gamma$  点，以及  $|\delta V|/2 = \sqrt{M^2 + \hbar^2 v_F^2 |m_0/B|}$  时在  $|\mathbf{k}| = \sqrt{-m_0/B}$  点，见图 4.2(a1)。但是对于  $m_0/B > 0$  情形，能隙只在  $|\delta V|/2 = \sqrt{M^2 - m_0^2}$  时关闭和打开一次。图 4.2(a1)和4.2(b1)是系统关于空间反演非对称项  $\delta V$  和费米能  $E_f$  的相图。 $m_0/B < 0$  时，图 4.2(a1)共有九个区域； $m_0/B > 0$  时，图 4.2(b1)共有六个区

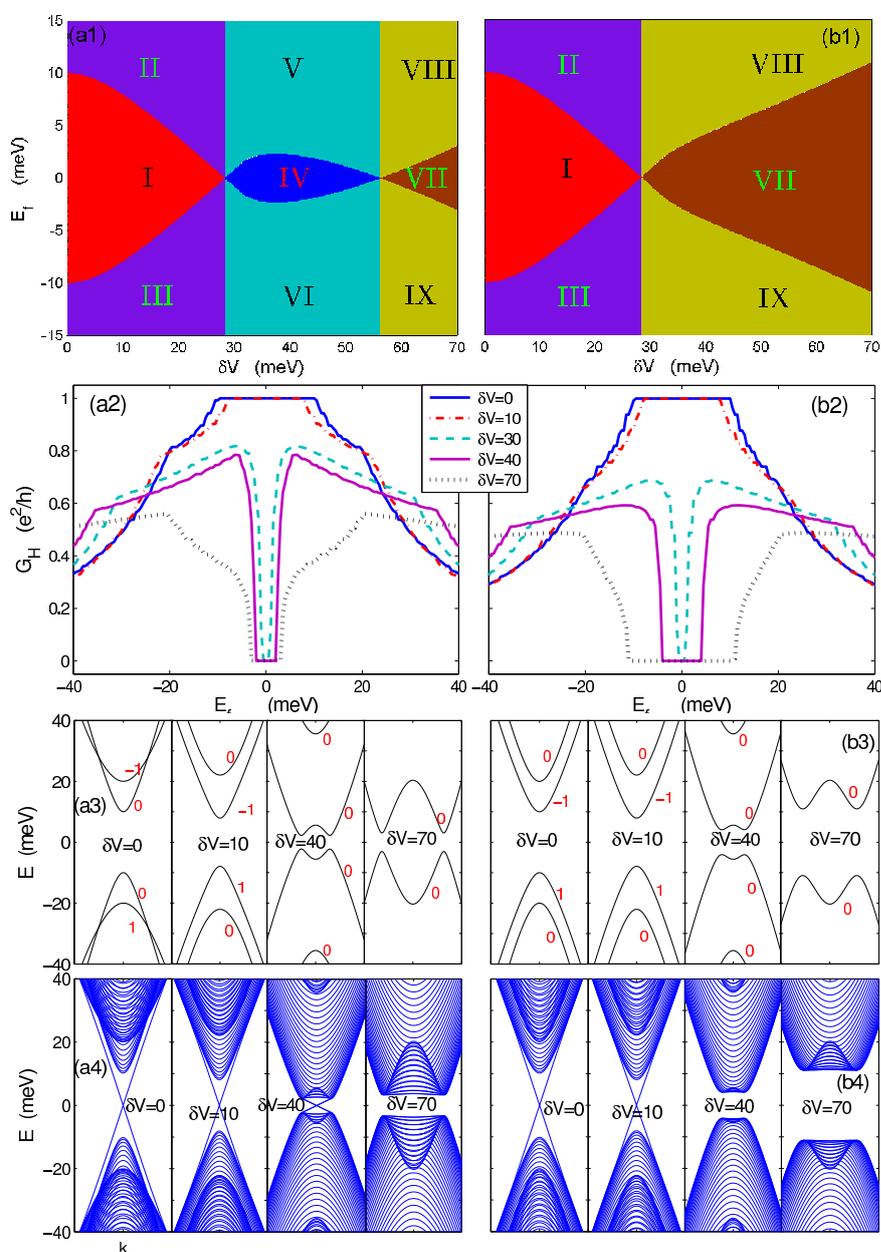


图 4.2: (a1) 和 (b1) 是体系相应于空间反演非对称势  $\delta V$  和费米能  $E_f$  的相图。区域I-VI是拓扑非平庸体系。区域I (IV) 是QAH (QPH) 相, 费密能级在能隙中。区域II, V (III, VI) 是n(p)-掺杂的能带反转区域。区域VII是正常绝缘体区域, 费密能级在能隙中。区域VIII和IX是普通的金属相。(a2) 和 (b2) 是久保霍尔电导公式计算的作为费米能函数的霍尔电导曲线。(a3) 和 (b3) 是二维系统在动量空间某个方向的色散曲线。(a4) 和 (b4) 是宽度为480nm的纳米带的色散曲线。(a1) - (a4)  $m_0/B < 0$ , (b1) - (b4)  $m_0/B > 0$ 。

域。为了确定各个区域的拓扑性质，我们计算了系统的陈数。陈数等于零温时的系统的霍尔电导，可以通过久保公式计算得到 [53, 130]，

$$G_H = \frac{2e^2}{\hbar} \int_{BZ} \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2} \sum_{\epsilon_l < E_f < \epsilon_n} \text{Im} \frac{\langle l | \frac{\partial H}{\partial k_x} | n \rangle \langle n | \frac{\partial H}{\partial k_y} | l \rangle}{(\epsilon_l - \epsilon_n)^2}, \quad (4.15)$$

其中  $BZ$  代表第一布里渊区， $\epsilon_{l/n}$  和  $|l/n\rangle$  分别是相应的本征能量和本征态。图 4.2(a2) (4.2(b2)) 的结果表明图 4.2(a1) (4.2(b1)) 中 I-III 的区域是拓扑非平庸的。区域 IV 的霍尔电导为零。为了揭示其拓扑特征，我们计算了  $y$  方向有开边界的纳米带的色散曲线，见图 4.2(a4) 和图 4.2(b4)。计算结果表明 IV-VI 和 VII-IX 分别处在能带反转和拓扑平庸的区域。其中区域 IV 是量子赝自旋霍尔 (QPH) 效应的相 [61, 126]。总之，对于  $m_0/B < 0$  情形，增大  $\delta V$ ，体系经历了 QAH-QPH-平庸绝缘体的相变；对于  $m_0/B > 0$ ，则是 QAH-平庸绝缘体的相变，没有 QPH 的相。

图 4.2(a3) 和图 4.2(b3) 中的整数标记了对应能带的陈数。通过图 4.2(a4)、4.2(b4) 和陈数，当  $\delta V = 0$  时，我们可以看到内层（外层）的两条能带在  $m_0/B < 0$  时是拓扑平庸（非平庸）的，在  $m_0/B > 0$  时则恰好相反。但是有限  $\delta V$  的出现，使得内层两条能带变为非平庸，外层两条能带变为平庸。当  $\delta V$  足够大时（对于  $m_0/B > 0$ ， $\delta V/2 > \sqrt{M^2 - m_0^2}$ ，对于  $m_0/B < 0$ ， $\delta V/2 > \sqrt{M^2 + \hbar^2 v_F^2 |m_0/B|}$ ），系统处在拓扑平庸的相，四条能带均是平庸的。

### 4.3 磁场效应：朗道能级谱

在这一部分，我们研究拓扑绝缘体薄膜的朗道能级谱 (LLs)。LLs 可以用于解释霍尔效应、磁光效应以及 de Haas 震荡等。

磁场的效应主要有两种：轨道效应和塞曼效应。其中塞曼效应是磁场对自旋的作用，形式上与我们所用模型中交换场项是一致的，但是在强度上则相对极小。因此在我们的有效模型中，磁场导致的塞曼效应可以忽略。磁场的轨道效应可以用 Peierls 替换  $\mathbf{k} \rightarrow \pi = \mathbf{k} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}$  来包含到哈密顿量中。其中矢势  $\mathbf{A} = (B_z y, 0, 0)$ ，磁场沿着  $z$  轴方向  $(0, 0, -B_z)$ ， $e = |e|$  是电子电荷的数值大小。我们用类似求解简谐振子的产生湮灭算符解法来求解朗道能级谱。我们定义产生湮灭算符如下： $\hat{a} = l_c \pi_+ / \sqrt{2}$ ， $\hat{a}^\dagger = l_c \pi_- / \sqrt{2}$  [131]，其中

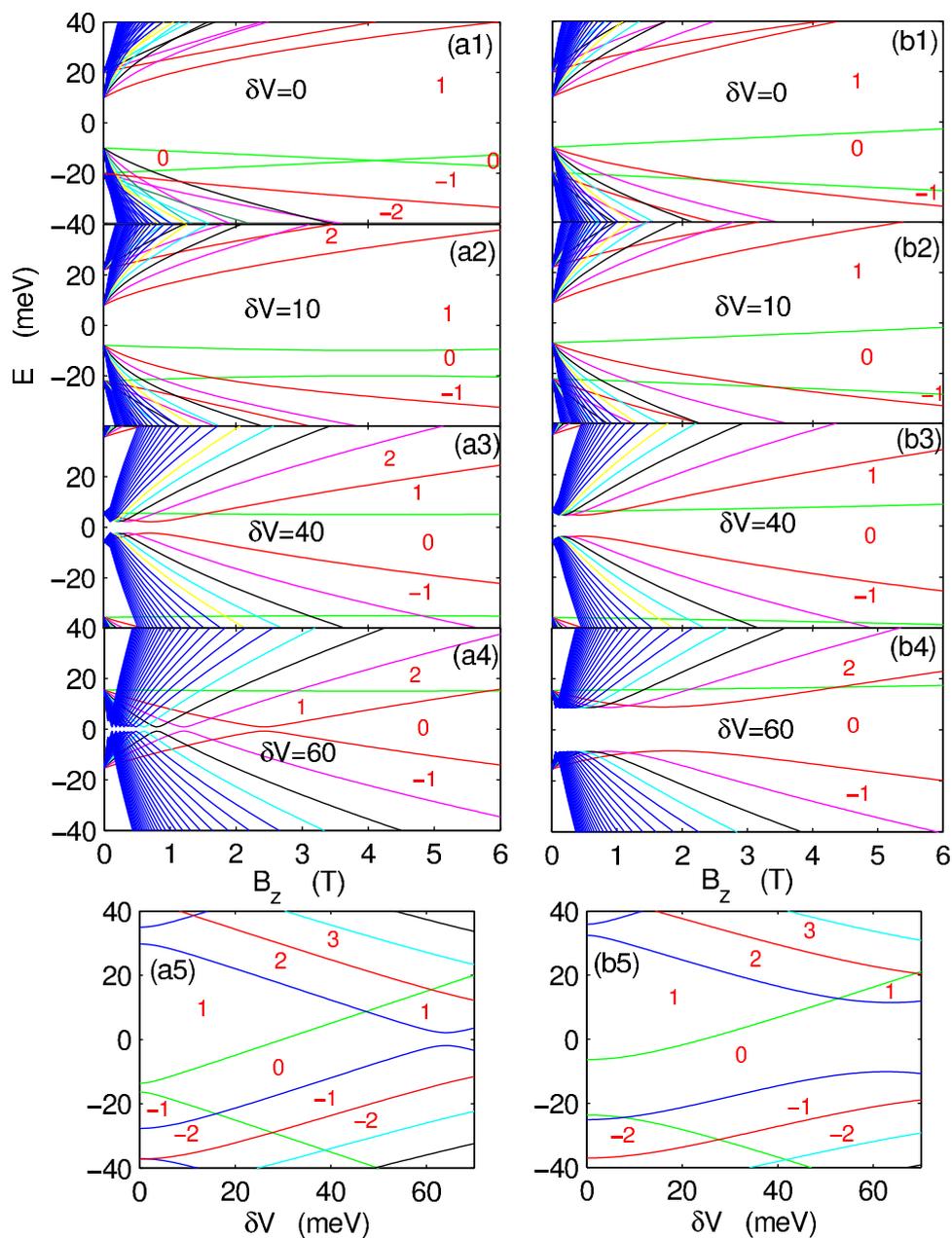


图 4.3: 朗道能级谱。(a/b1-4) 不同  $\delta V$  对应的朗道能级随磁场的演化。(a/b5) 磁场取值  $B_z = 3T$  时, 朗道能级随着  $\delta V$  的演化。两条亮绿色的曲线是朗道能级的零模式  $E_{0\pm}$ 。磁场较小时模式  $E_{0-}$  位于  $E_{0+}$  之下。红色的整数给出了所属区域由久保公式算出的霍尔电导。(a1-5)  $m_0/B < 0$ , (b1-5)  $m_0/B > 0$ 。

$l_c = \sqrt{\frac{\hbar}{eB_z}}$ ,  $\pi_{\pm} = \pi_x \pm i\pi_y$ , 其具体形式可以明确写出为:  $\pi_x = k_x + \frac{e}{\hbar}B_z y$ ,  $\pi_y = k_y$ ,  $\pi_+ = k_x + \frac{e}{\hbar}B_z y + ik_y$ ,  $\pi_- = k_x + \frac{e}{\hbar}B_z y - ik_y$ 。系统在  $y$  方向平移不变性被破坏,  $x$  方向平移不变性保持。  $k_x$  是好量子数, 取为  $c$  数, 而  $k_y$  则不是好量子数。产生湮灭算符作用到试探波函数  $\phi_N$  上满足:  $\hat{a}\phi_N = \sqrt{N}\phi_{N-1}$ ,  $\hat{a}^\dagger\phi_N = \sqrt{N+1}\phi_{N+1}$ 。哈密顿量可以写为,

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} M + \delta V/2 & i\omega_1 a^\dagger & m_N - \alpha/2 & 0 \\ -i\omega_1 a & -M + \delta V/2 & 0 & m_N - \alpha/2 \\ m_N - \alpha/2 & 0 & M - \delta V/2 & -i\omega_1 a^\dagger \\ 0 & m_N - \alpha/2 & i\omega_1 a & -M - \delta V/2 \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

其中  $m_N = m_0 - \alpha\hat{a}^\dagger\hat{a}$ ,  $\omega_1 = v_F\sqrt{2eB_z\hbar}$ ,  $\alpha = -\frac{2eB_z B}{\hbar}$ 。把试探波函数取为  $\psi_N = (f_1^N\phi_N, f_2^N\phi_{N-1}, f_3^N\phi_N, f_4^N\phi_{N-1})^T$ , 哈密顿量可以变形如下形式,

$$\tilde{H}' = \begin{pmatrix} M + \delta V/2 & i\omega_N & \tilde{m}_N - \alpha/2 & 0 \\ -i\omega_N & -M + \delta V/2 & 0 & \tilde{m}_N + \alpha/2 \\ \tilde{m}_N - \alpha/2 & 0 & M - \delta V/2 & -i\omega_N \\ 0 & \tilde{m}_N + \alpha/2 & i\omega_N & -M - \delta V/2 \end{pmatrix}. \quad (4.17)$$

其中  $\tilde{m}_N = m_0 - \alpha N$ ,  $\omega_N = v_F\sqrt{2e\hbar B_z N}$ 。哈密顿量写成如此形式后, 其本征值可通过久期方程获得, 此即朗道能级谱。

朗道能级的零模式可以解出为:  $E_{0\pm} = M \pm \sqrt{(m_0 - \alpha/2)^2 + (\delta V/2)^2}$ , 其波函数可以写为  $\psi_0 = (f_1^0\phi_0, 0, f_3^0\phi_0, 0)^T$ 。当不存在SIA项时, 两支零模式为:  $E_{0\pm} = M \pm (m_0 + \frac{eBB_z}{\hbar})$ , 线性依赖于磁场。然而朗道能级谱的一般表达式极其冗长, 不在这里给出。这里我们只给出类电子和类空穴的非零模式对称情形的表达式。

情形I:  $B = 0$ , 只有最低阶面间隧穿,

$$E_N^2 = \omega_N^2 + \left(\frac{\delta V}{2}\right)^2 + M^2 + m_0^2 \pm 2\sqrt{\omega_N^2\left(\frac{\delta V}{2}\right)^2 + \left(\frac{\delta V}{2}\right)^2 M^2 + M^2 m_0^2}. \quad (4.18)$$

情形II:  $M = 0$ , 未掺杂的拓扑绝缘体薄膜,

$$E_N^2 = \omega_N^2 + \left(\frac{\delta V}{2}\right)^2 + \left(\frac{\alpha}{2}\right)^2 + \tilde{m}_N^2 \pm 2\sqrt{\omega_N^2\left(\frac{\delta V}{2}\right)^2 + \left(\frac{\delta V}{2}\right)^2\left(\frac{\alpha}{2}\right)^2 + \left(\frac{\alpha}{2}\right)^2\tilde{m}_N^2}. \quad (4.19)$$

如果去掉一些额外的项，面间隧穿  $m_k$ ，交换场  $M$ ，以及SIA势  $\delta V$ ，线性色散的狄拉克电子的朗道能级谱可以约化为  $E_N = \text{sign}(N)v_F\sqrt{2eB_z\hbar|N|}$ ，其中  $N = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ，这一结果已被广泛研究 [116, 132–134]。但是这些项的存在使得朗道能级对于  $N$  和  $B_z$  的依赖更加复杂。交换场的存在会破坏电子型和空穴型朗道能级的对称性。在考虑到磁场和SIA项后朗道能级谱会呈现出复杂的相图，见图 4.3。

考虑磁场极小的情形， $B_z \approx 0$ ，朗道能级谱汇聚在  $E_N \approx \pm(M \pm \sqrt{m_0^2 + \delta V^2/4})$ ，其中两支零模式则分别出现在  $E_{0\pm} \approx M \pm \sqrt{m_0^2 + \delta V^2/4}$ 。因此朗道能级谱可以分为四组，分别对应于四条能带。例如，汇聚在  $M - \sqrt{m_0^2 + \delta V^2/4}$  处的朗道能级谱对应于能量最低的能带。图 4.3 中的标记为红色的整数是通过有磁场条件下的久保霍尔电导公式计算得到的，对应于所属区域的霍尔电导。从这些霍尔电导的数值可以推断出每条朗道能级的陈数。可以看出两条零模式的陈数相反。当  $E_{0-}$  对应于平庸的能带时，它是空穴型的朗道能级，陈数  $C = -1$ ，与源于同一能带的其它朗道能级相同，见图 4.3(a2-a4, b1-b4)。但是当  $E_{0-}$  对应于拓扑非平庸的能带时，它是电子型的朗道能级，对应的陈数是  $C = 1$ ，与源于同一能带的其它朗道能级不同，见图 4.3(a1)。

在图 4.3(a1)， $E_{0-}$  的陈数  $C = 1$ 。当  $B_z < B_c = -\frac{\hbar m_0}{eB} \approx 4.1T$ ， $E_{0-}$  位于  $E_{0+}$  之下并且与若干非零模式的朗道能级相交。在  $B_z \approx 4.1T$ ，两条零模式交叉（图 4.3(a1) 的亮绿色曲线）。对于有限大的尺寸的样品， $E_{0-}$  对应的边态是逆时针运动的。但是与  $E_{0-}$  相交的朗道能级对应的边态是顺时针运动的。因此在恰当的区域中，会同时出现顺时针和逆时针运动的边态。

在图 4.3(a1)中，朗道能级的两条零模式交叉，贡献两个陈数为零区域。这与处在量子自旋霍尔效应态的HgTe/CdTe 量子阱在磁场下导致的朗道能级是类似的 [110, 128]。由于这两条零模式，陈数相反，因此在  $B_z < B_c$  会形成类似的量子自旋霍尔效应。不同的是，这里的两条朗道能级都是自旋向上极化的。磁场大于  $B_c$ ，陈数为零的区域将会是普通的绝缘体能隙区域。按照广为接受的观点，量子自旋霍尔效应受时间反演对称性保护。磁场会破坏时间反演对称性，从而破坏量子自旋霍尔效应。但是这里我们发现恰当大小的磁场作用在量子反常霍尔效应相可以导致一个类似量子自旋霍尔效应的相。但是过大的磁场会破坏这一量子自旋霍尔效应相。此外，由于  $E_{0+} - E_{0-} = 2\sqrt{(m_0 - \alpha/2)^2 + (\delta V/2)^2}$ ，SIA项会破坏两条零模式的交叉，见

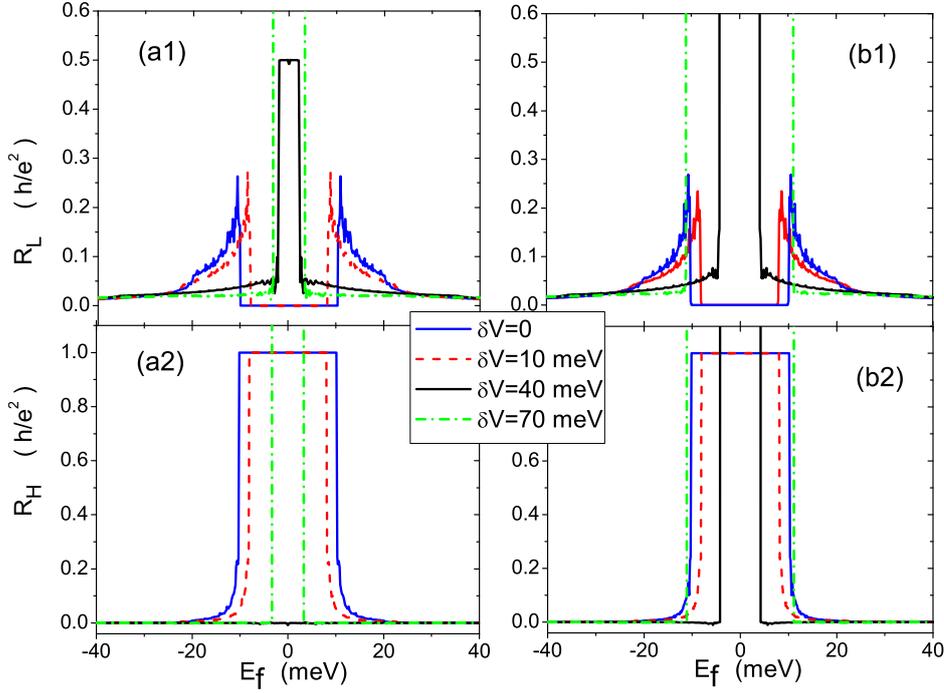


图 4.4: 霍尔电阻  $R_H$  和纵向电阻  $R_L$  作为费密能级  $E_f$  的函数, 考虑不同的空间反演非对称势  $\delta V$  的影响。(a1) 和 (a2)  $m_0/B < 0$ , (b1) 和 (b2)  $m_0/B > 0$ 。中心区和端口的宽度均取为  $480nm$ 。

图 4.3(a1)和 4.3(a2)。这导致陈数为零的区域是普通绝缘体能隙区, 尽管在没有磁场时对于较小的  $\delta V$ , 体系仍然处在量子反常霍尔相。原因在于SIA项的出现使得内层和外层能带的拓扑性质发生突变。改变交换场项不会产生额外的影响。对于  $m_0/B > 0$ , 两条零模式将不会产生交叉, 不会产生类似量子自旋霍尔效应的相。总之类似QSH的相只在保持空间反演对称性并且  $m_0/B < 0$  时存在, 而与交换场无关。

图 4.3(a1), 4.3(a2), 4.3(b1), 4.3(b2)是磁场作用在QAH相的朗道能级谱。我们发现只存在一个陈数  $C = 1$  的区域。并且在磁场极小时, 该区域存在于  $M + \sqrt{m_0^2 + \delta V^2/4} < E_f < -M - \sqrt{m_0^2 + \delta V^2/4}$ , 恰好是QAH的体能隙区域。因此  $C = 1$  的区域可以视为QAHE。换句话说, 对于QAHE相, 在增加磁场过程中霍尔电导保持不变, 并逐渐演化为第一朗道能级的区域, 这与实验观测结果是一致的 [64]。增大  $\delta V$ , 内层对应于  $\pm(M + \sqrt{m_0^2 + \delta V^2/4})$  的两组朗道能级将会分别向上向下相向移动, 当  $\delta V/2 = \sqrt{M^2 - m_0^2}$  时, 二者在  $B_z = 0$  的

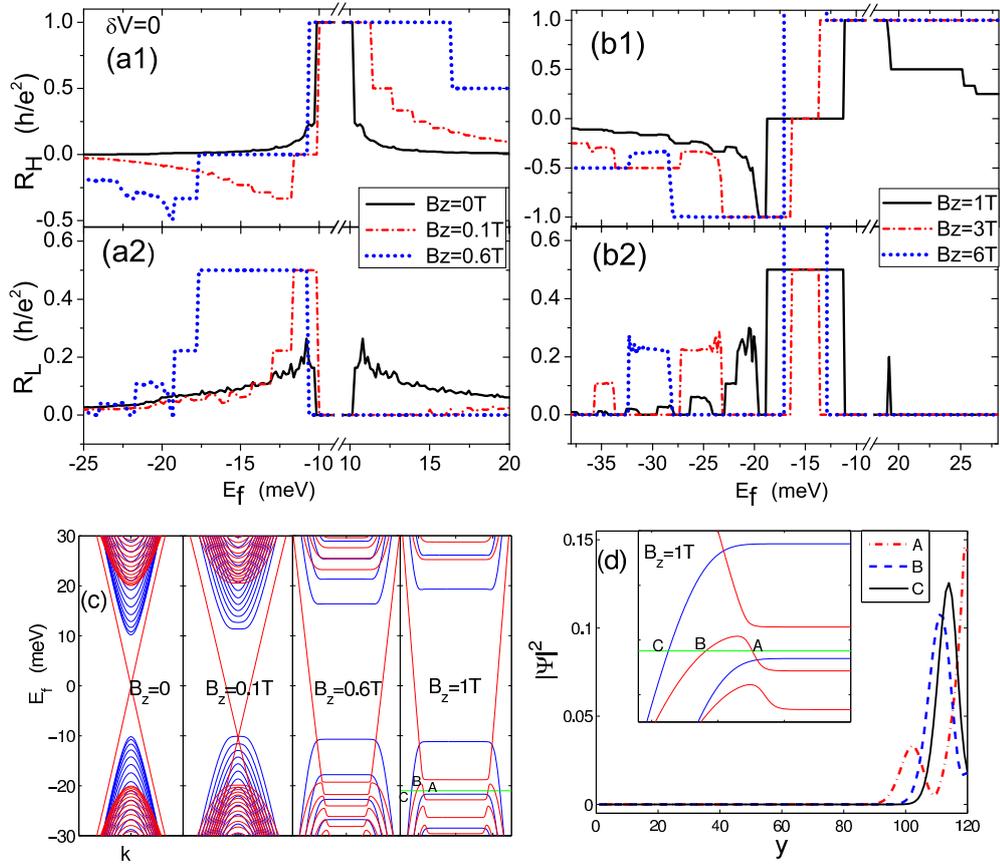


图 4.5: (a1、a2, b1, b2) 霍尔电阻和纵向电阻随着费米能  $E_f$  的变化。磁场固定为  $B_z = 0, 0.1T, 0.6T, 1T, 3T, 6T$ 。(c) 一维纳米带的能带曲线, 磁场取为  $B_z = 0, 0.1T, 0.6T, 1T$ 。(d) 边态波函数在实空间的分布, 其中的插图是图 (c) 的局部放大。  $m_0/B < 0$ ,  $\delta V = 0$ 。

汇聚点相交。继续增大  $\delta V$ , 两组朗道能级会交换陈数, 形成普通的绝缘体能隙。继续增大  $\delta V$ , 对于  $m_0/B > 0$ , 普通绝缘体能隙单调增大, 图 4.3(b3)和 4.3(b4); 对于  $m_0/B < 0$  能隙会在  $\delta V/2 = \sqrt{M^2 - m_0 \hbar^2 v_F^2 / B}$  时重新关闭和再打开, 图 4.3(a3)和 4.3(a4)。

为了进一步揭示空间反演非对称势能项  $\delta V$  的影响, 我们在图 4.3(a5)和 4.3(b5)中计算了  $B_z = 3T$  时朗道能级谱随  $\delta V$  变化的规律。正如我们所预期的,  $\delta V$  较小时陈数  $C = 1$  的区域对应于量子反常霍尔效应。较大的SIA项则会破坏量子反常霍尔相。

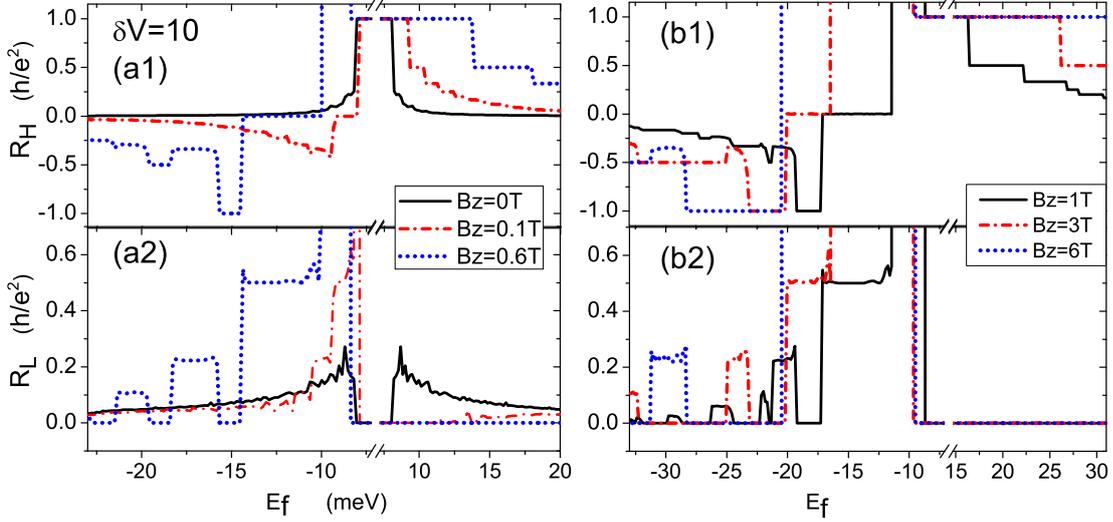


图 4.6: 霍尔电阻和纵向电阻随着费米能  $E_f$  的变化。磁场取为  $B_z = 0, 0.1T, 0.6T, 1T, 3T, 6T$ 。  $m_0/B < 0$ ,  $\delta V = 10meV$ 。

## 4.4 输运分析

在这一部分，我们研究一个标准形式的六端口霍尔装置的输运性质，装置示意图见图 2.3。我们用Landauer-Büttiker理论在零温下进行了计算。一方面这里的数值结果可以验证前面关于相图和朗道能级的分析。另一方面，有限尺寸效应会导致在非平庸的体能隙中出现边态。当存在外磁场时，基于能带反转结构的边态和基于朗道能级的边态将会共存并且互相耦合。这将导致奇异的输运行为。

### 4.4.1 哈密顿量和数值方法

我们首先在正方晶格上把哈密顿量(4.10)离散化，其形式如下给出，

$$\begin{aligned}
 H_d &= \sum_{\mathbf{x}} [\psi_{\mathbf{x}}^\dagger T_0 \psi_{\mathbf{x}} + (\psi_{\mathbf{x}}^\dagger T_x \psi_{\mathbf{x}+\delta\hat{x}} + \psi_{\mathbf{x}}^\dagger T_y \psi_{\mathbf{x}+\delta\hat{y}} + h.c.)], \\
 T_0 &= M\sigma_z + \tilde{m}_0\tau_x + \frac{\delta V}{2}\tau_z, \\
 T_x &= (it_a\sigma_y\tau_z - B_a\tau_x)e^{i\phi_{\mathbf{x},\mathbf{x}+\delta\hat{x}}}, \\
 T_y &= (-it_a\sigma_x\tau_z - B_a\tau_x)e^{i\phi_{\mathbf{x},\mathbf{x}+\delta\hat{y}}}, \tag{4.20}
 \end{aligned}$$

其中  $\mathbf{x}$  是格点位置的标记， $\delta\hat{x}$  ( $\delta\hat{y}$ ) 是沿着  $x$  ( $y$ ) 方向的晶格常数。  $\psi_{\mathbf{x}} =$

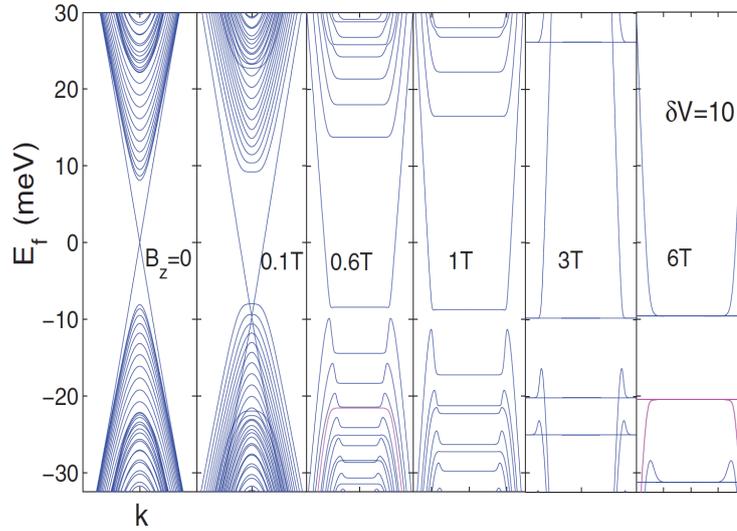


图 4.7: 一维纳米带的能带曲线。磁场取为  $B_z = 0, 0.1T, 0.6T, 1T, 3T, 6T$ 。  
 $m_0/B < 0$ ,  $\delta V = 10meV$ 。

$(a_x, b_x, c_x, d_x)^T$  代表在格点  $\mathbf{x}$  处湮灭  $|t \uparrow\rangle, |t \downarrow\rangle, |b \uparrow\rangle, |b \downarrow\rangle$  态上的电子。  $T_0$  代表在位能项,  $T_{x/y}$  代表  $x/y$  方向上的动能项。磁场的效应通过在动能项中增加相位因子  $\phi_{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2} = \int_{\mathbf{x}_1}^{\mathbf{x}_2} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} / \phi_0$  实现, 其中  $\mathbf{A} = (B_z y, 0, 0)$  是磁矢势, 其所对应的是在  $z$  方向值为  $-B_z$  的磁场。哈密顿量(4.20)中的其它参数取为:  $t_a = \frac{\hbar v_F}{2a}$ ,  $B_a = B/a^2$ ,  $\tilde{m}_0 = m_0 + 4B_a$ , 其中  $a = 4nm$  是  $x/y$  方向上的晶格常数。中心区和六个端口的宽度均取为 480nm。

按照Landauer-Büttiker的理论框架, 流出端口  $i$  的电流可以写为 [135–137],

$$I_i = \frac{e^2}{h} \sum_j T_{ij}(E_f)(V_i - V_j). \quad (4.21)$$

其中  $V_i$  是端口  $i$  的偏压,  $T_{ij}(E_f) = \text{Tr}[\Gamma^i G^r \Gamma^j G^a]$  是费密面上的电子从端口  $j$  透射进入端口  $i$  的透射系数。  $G^r = [G^a]^\dagger = 1/(E_f - \tilde{H} - \sum_{i=1}^6 \Sigma_i^r)$  是中心区的推迟格林函数,  $\tilde{H}$  是中心区的哈密顿量。  $\Sigma_i^r = [\Sigma_i^a]^\dagger$  是端口  $i$  贡献的推迟自能, 可以直接数值计算得到 [76]。带宽函数  $\Gamma_i$  通过自能定义为  $\Gamma_i = i(\Sigma_i^r - \Sigma_i^a)$ 。我们在样品上施加一个偏压  $V = V_1 - V_4$ , 并取端口 2, 3, 5, 6 为电压端, 即电流为零。电压  $V_2$ 、 $V_3$ 、 $V_5$  和  $V_6$  以及流过装置的电流  $I = I_1 = -I_4$  均可以通过方程 (4.21) 直接解出。此时, 霍尔电阻和纵向电阻可以得到为  $R_H \equiv \frac{V_6 - V_2}{I}$ ,  $R_L \equiv \frac{V_2 - V_3}{I}$ 。

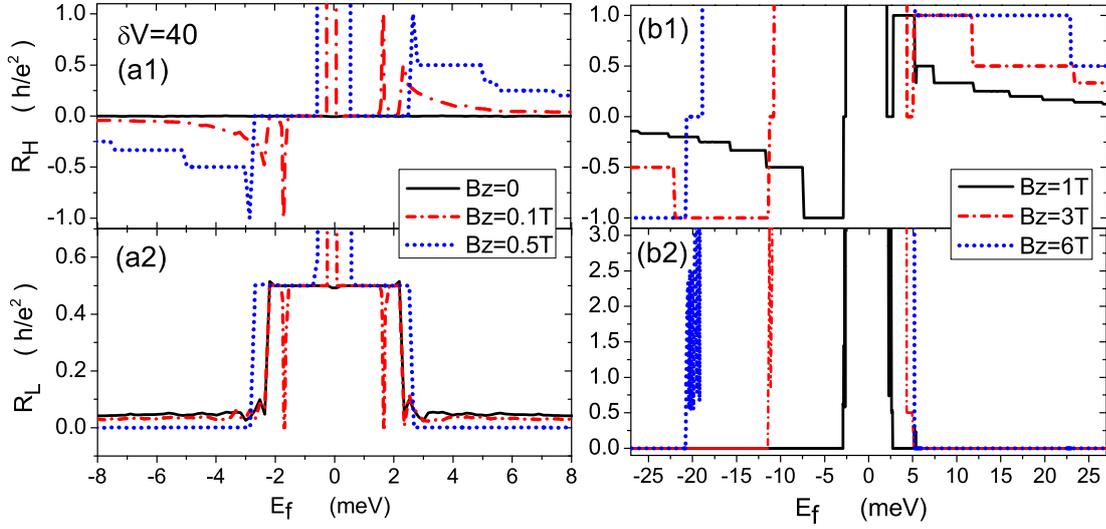


图 4.8: 霍尔电阻和纵向电阻随着费米能  $E_f$  的变化。磁场取为  $B_z = 0, 0.1T, 0.5T, 1T, 3T, 6T$ 。  $\delta V = 40meV$ ,  $m_0/B < 0$ 。

#### 4.4.2 无磁场情形

无磁场时的霍尔电阻和纵向电阻的计算结果在图 4.4 给出，这里的结果与通过朗道能级的分析是一致的。图 4.4(a1) 和 4.4(a2) 对应于  $m_0/B < 0$  的情形。当  $\delta V < 2\sqrt{M^2 - m_0^2} \approx 28meV$  时，霍尔电阻呈现一个霍尔平台，其值为  $h/e^2$ ，且对应的纵向电阻为零。这对应于 QAH 相，并且已经在实验中观测到 [64]。当  $28meV < \delta V < \sqrt{M^2 - m_0\hbar^2v_F^2}/|B| \approx 56meV$  时，霍尔电阻接近于零，但是纵向电阻则是一个值为  $h/2e^2$  的平台，这对应于 QPH 相，见图 4.2(a1) 区域 IV。继续增大  $\delta V$ ，在某些区域的电阻变为无穷大，这对应于相图中的平庸绝缘体相，图 4.2(a1) 和 4.2(b1) 区域 VIII-IX。另一方面，对于  $m_0/B > 0$  的情形，增大  $\delta V$  系统直接从 QAH 相进入平庸绝缘体相，QPH 相则没有出现。因此没有观测到纵向电阻的平台，只是在  $\delta V < 2\sqrt{M^2 - m_0^2}$ （图 4.4(b1) 和 4.4(b2)）的区域观测到了霍尔电阻平台。 $R_H$  和  $R_L$  是关于  $E_f = 0$  对称的。原因在于系统的哈密顿量 (4.10) 在空间反演和电子-空穴变换下不变，因此能带是关于  $E_f = 0$  对称的，见图 4.2(a4) 和 4.2(b4)。但是磁场的引入，会破坏电子空穴对称性，因而能带不再对称，电阻曲线也将不再对称。

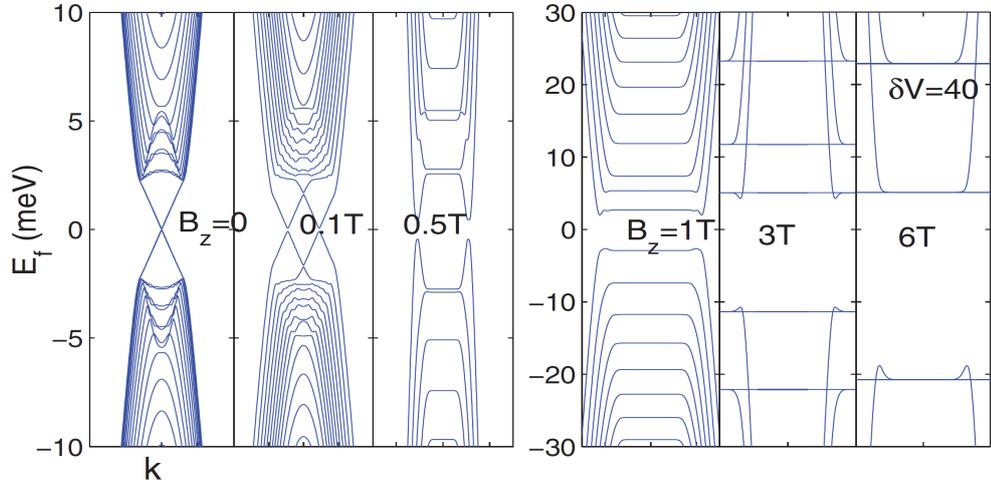


图 4.9: 一维纳米带的能带曲线。磁场取为  $B_z = 0, 0.1T, 0.5T, 1T, 3T, 6T$ 。  
 $\delta V = 40meV, m_0/B < 0$ 。

#### 4.4.3 磁场的影响

接下来我们研究磁场的效应。我们首先考虑  $m_0/B < 0$  时  $\delta V = 0$  的情形。霍尔和纵向电阻的计算结果见图 4.5(a,b)。对应于正费米能级，我们观测到若干整数量子霍尔效应类型的霍尔平台，其对应的纵向电阻是零、霍尔电阻整数取值。这些霍尔平台与久保公式算的结果是一致的，并且可以用朗道能级谱进行定量的解释。对于负的费米能级的区域，在弱磁场下没有观测到整数量子霍尔效应的电阻特征，见图 4.5(a)。然而我们发现存在一些奇异的电阻特征：纵向电阻呈现非零的平台。在强磁场下，在负费米能的区域，整数量子霍尔效应和非零的纵向电阻平台的特征都能被观测到 4.5(b)。这些奇异的平台  $(R_L, R_H) = (\frac{1}{2}h/e^2, 0)$ 、 $(\frac{2}{9}h/e^2, -\frac{1}{3}h/e^2)$ 、 $(\frac{3}{28}h/e^2, -\frac{2}{7}h/e^2)$ ...，可以定量的描述为，

$$R_L = \frac{n_a n_c}{n_a^3 + n_c^3} \frac{h}{e^2}, \quad R_H = \frac{n_a^2 - n_c^2}{n_a^3 + n_c^3} \frac{h}{e^2}, \quad (4.22)$$

其中  $(n_a, n_c) = (1, 1), (1, 2), (1, 3)$ ...。对应于  $(\frac{1}{2}h/e^2, 0)$  的平台是 QSH 类型的平台，其它则可以称为分数化平台。其中  $n_c$  和  $n_a$  分别代表顺时针和逆时针传播的边态数目。假设只有边态对输运有贡献，并且边态不会发生耦合，公式(4.22)可以通过Landauer-Büttiker公式直接导出。这一推导过程与 QSH 的推导过程是一致的 [128]。因此可以推断这些分数化的平台源于同时存在顺时针

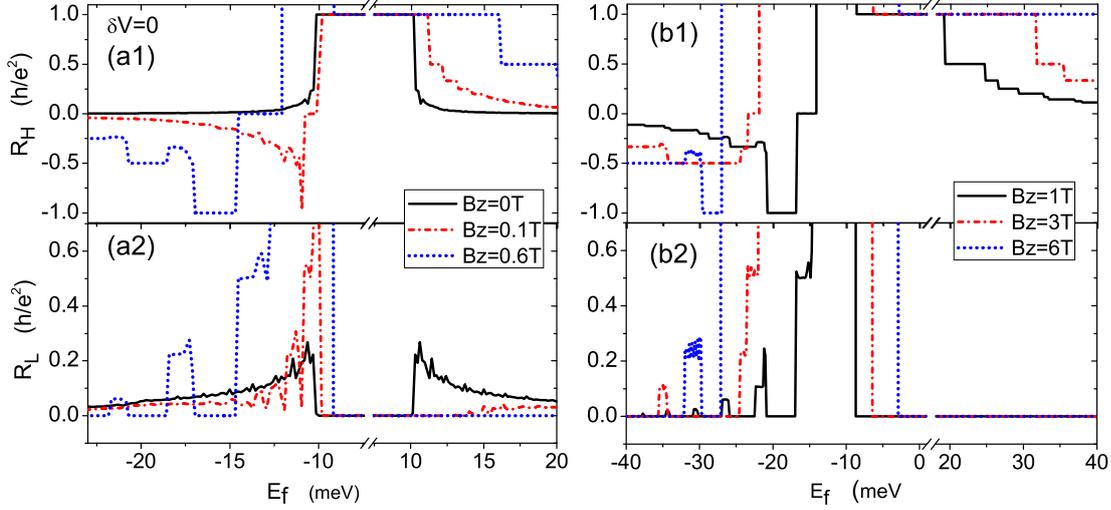


图 4.10: 霍尔电阻和纵向电阻随着费米能  $E_f$  的变化。磁场取为  $B_z = 0, 0.1T, 0.6T, 1T, 3T, 6T$ 。  $m_0/B > 0$ ,  $\delta V = 0$ 。

和逆时针传播的边态。

为了进一步验证这一观点，我们直接计算了不同磁场下的色散曲线，见图 4.5(c)。由于  $\delta V = 0$ ，哈密顿量可以解耦成反带结构（4.5(c)中的红线）和平庸结构（4.5(c)中的蓝线）两部分。增大磁场会导致狄拉克点向下移动，进入平庸的能带。基于朗道能级的边态和基于反带结构的边态将会在样品的同侧相向传播，这导致了非零的纵向电阻出现。这里的分析与基于朗道能级的分析是一致的4.3(a1)。

按照图 4.3(a1)的结果，第一个分数霍尔平台在磁场小于  $0.7T$  时出现。在该临界值处，正陈数的零模  $E_{0-}$  与负陈数的  $N = 1$  的朗道能级交叉。但是，图 4.5(b)的结果表明这些奇异的电阻平台在磁场超过临界值后也存在，只是平台不够完美。在图 4.3(a1)中表明的分数平台区域要求  $-20\text{meV} < E_f < -10\text{meV}$ ，但是数值结果表明在  $E_f < -20\text{meV}$  仍然能够观测到这一平台。原因在于足够大的磁场可以使得狄拉克点进入非平庸的能带，此时存在两种边态，二者耦合可以形成奇异的能带结构，见图 4.5(c)。可以看到边态和朗道能级连接处形成隆起的结构。根据图 4.3(a1)，  $E_f = -21\text{meV}$  和  $B_z = 1T$  区域的陈数是  $-1$ ，应该只存在一个空穴型的边态。然而奇异能带结构的隆起位置对应了一对相向传播的边态（A和B）。图 4.5(d)给出了A、B、C对应的波函数的空间分布，可以看到他们确实是边态。顺时针和逆时针边态的数目是  $(n_a, n_c) = (1, 2)$ ，对应

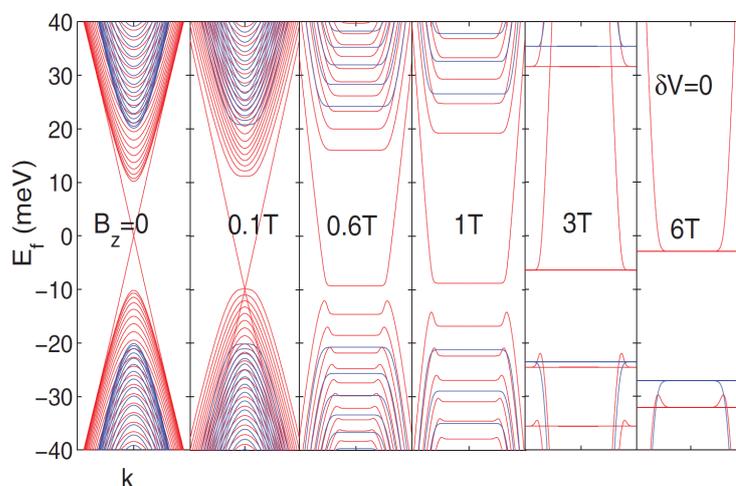


图 4.11: 一维纳米带的能带曲线。磁场取为  $B_z = 0, 0.1T, 0.6T, 1T, 3T, 6T$ 。  
 $m_0/B > 0, \delta V = 0$ 。

的电阻是  $(R_L, R_H) = (\frac{2}{9}h/e^2, -\frac{1}{3}h/e^2)$ ，恰好对应于第一对分数化电阻平台。

QSH类型的霍尔平台  $(R_L, R_H) = (\frac{1}{2}h/e^2, 0)$  与我们通过朗道能级的计算预测的类似QSH的相（见4.3(a1)陈数为零的区域）是一致的。但是与QSH效应不同，这里相向传播的边态是由破坏时间反演对称性的磁场导致的。详细的计算表明，平台的宽度在磁场  $B_z = 0.7T$  时取最大值，继续增大磁场则逐渐减弱。当磁场大于  $B_c = -\frac{\hbar m_0}{eB} \approx 4.1T$  时该平台消失。

接下来我们讨论存在SIA势  $\delta V$ ，但仍然处在QAH相的情形。我们取  $m_0/B < 0, \delta V = 10meV$ 。图 4.6和4.7给出了纵向电阻、霍尔电阻和能带曲线。可以看出能带曲线中内层能带是拓扑非平庸的，而外层能带是平庸的。适当大小的磁场可以使得狄拉克点移动到非平庸的能带中，从而形成前面讨论过的奇异能带结构，在朗道能级和边态的连接处出现隆起的结构。此外磁场还会导致绝缘体能隙。在能隙区域电阻将会趋于无穷大。在能隙区域的右侧，我们观测到QAH和其它的整数量子霍尔效应的平台。在能隙左侧，同时存在整数量子霍尔效应和分数化的奇异电阻平台。通过图4.7中的能带曲线与图 4.3(a2)中朗道能级的对比，我们发现对应于非平庸的能带分支的空穴类型能带可以形成明显的隆起结构，但是对应于平庸分支的能带则不能形成此结构。这说明反转能带导致的边态与平庸能带的耦合要弱于与非平庸能带的耦合。继续增大磁场，除了  $E_{0-}$ （图4.7中粉线）之外的空穴类型的朗道能级将会向下

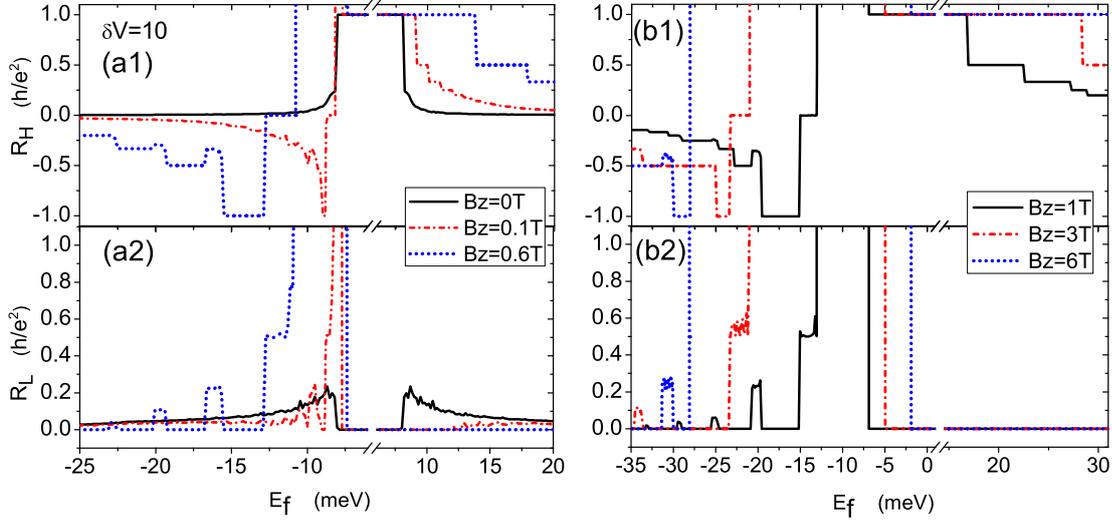


图 4.12: 霍尔电阻和纵向电阻随着费米能  $E_f$  的变化。磁场取为  $B_z = 0, 0.1T, 0.6T, 1T, 3T, 6T$ 。  $m_0/B > 0$ ,  $\delta V = 10meV$ 。

移动。当磁场小于  $B_c = 4.1T$  时,  $E_{0-}$  随磁场增大向上移动, 见图 4.3(a2)。对于足够大的磁场,  $E_{0-}$  将会成为第一个空穴类型的朗道能级。由于其没有隆起的能带结构, 这导致QSH类型的电阻平台消失。但是第一对分数化平台一直存在, 因为第二条空穴型朗道能级对应于非平庸的能带结构, 见图 4.3(a2)。

接下来, 我们讨论磁场对QPH相的影响。我们取  $m_0/B < 0$ ,  $\delta V = 40meV$ 。图 4.8给出了纵向和霍尔电阻, 图 4.9给出了能带曲线。我们发现磁场会使得两个狄拉克点分别向上和向下移动, 这样简并会被打破。我们发现电子型能带和空穴型能带均会形成奇异的能带结构, 这与之前讨论的只有空穴型能带形成奇异能带结构是不同的。但是与处在QAH不同的是, 磁场不能把基于能带反转的边态移入体能带内部, 见图 4.9。因此只有最内层的两条朗道能级边态可以与反转能带结构导致的边态耦合, 从而形成带有“隆起”特征的奇异能带。这导致了弱磁场下形成QSH类型的平台, 纵向电阻  $h/2e^2$ , 霍尔电阻为零。增大磁场导致能带的隆起特征逐渐减弱, QSH类型的电阻特征逐渐消失。在强磁场下, 系统进入整数量子霍尔效应区域, 霍尔电阻值为  $h/ne^2$  ( $n = \pm 1, \pm 2, \dots$ )的平台在正负费米能处均出现。

最后我们考虑  $m_0/B > 0$  的情形。我们只考虑磁场对QAH相的影响, 因为在平庸的相磁场会导致整数量子霍尔效应, 这一点已经是很清楚的。在图

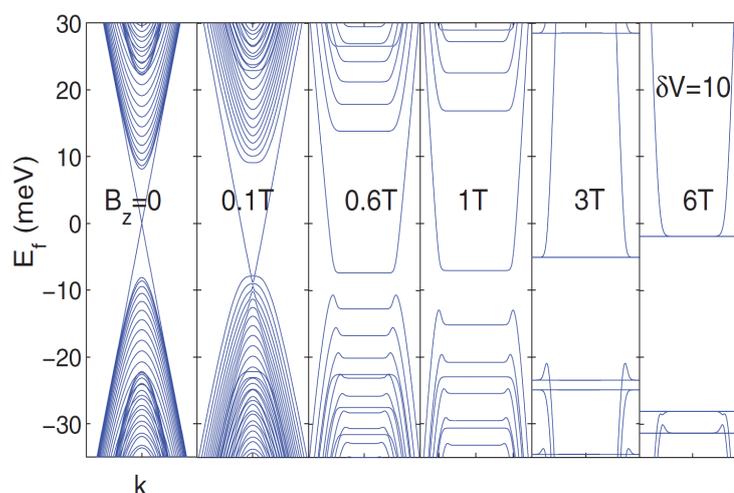


图 4.13: 一维纳米带的能带曲线。磁场取为  $B_z = 0, 0.1T, 0.6T, 1T, 3T, 6T$ 。  
 $m_0/B > 0, \delta V = 10meV$ 。

4.10和 4.12中我们给出了  $\delta V = 0$  和  $\delta V = 10meV$  时的电阻曲线。奇异的能带结构和电阻平台均会出现。我们可以利用能带曲线（见图 4.11、4.13）和朗道能级谱（图 4.3(b1-2)）并通过与  $m_0/B < 0$  情形相似的方法进行分析。我们发现这些奇异的平台在  $\delta V = 0$  是连续出现的，图 4.10(b)。但是在  $\delta V \neq 0$  时则是被量子霍尔效应形式的平台隔断，图 4.12。我们注意到在  $m_0/B < 0$  的情形奇异平台也是被量子霍尔效应平台隔断的。与  $m_0/B < 0$  情形不同的是，即使是  $\delta V = 0$  时的平台也不是很完美，这是因为不论  $\delta V$  是否为零内层（外层）能带是非平庸（平庸）的。

为了进一步揭示SIA相的影响，我们我们讨论了  $B_z = 3T$  时的相图，见图 4.14。图中的数字表明了所属区域对应的霍尔电导 ( $G_H = \frac{R_H}{R_H^2 + R_L^2}$ ) 的大小，并且该区域的纵向电导为零 ( $G_L = \frac{R_L}{R_H^2 + R_L^2}$ )。这些区域与朗道能级的结果（图 4.3(a5, b5)）是一致的。亮绿色区域对应于奇异能带结构形成的区域，在这些区域纵向电导不为零。可以看到他们占据了原来属于QH的区域，并且使得绝缘体能隙变窄。比较图 (a)、(b) 可以发现， $m_0/B > 0$  对应的亮绿色区域明显的小于  $m_0/B < 0$  的情形。对于足够大的  $\delta V$ ，亮绿色区域将会消失，因为此时系统处在拓扑平庸的相。

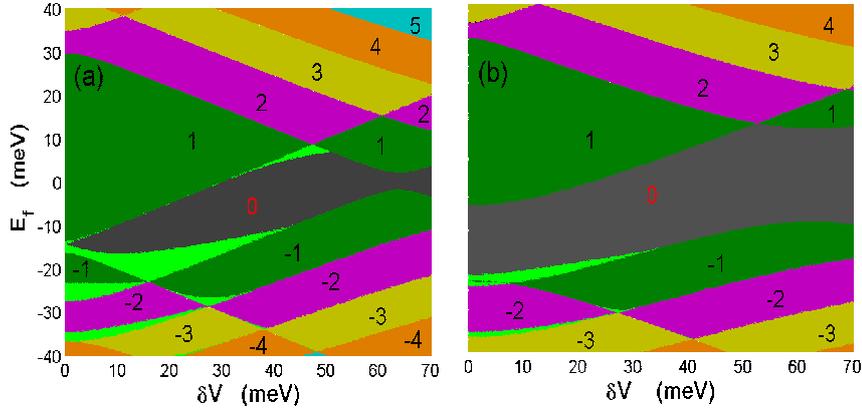


图 4.14: 磁场  $B_z = 3T$  时关于费米能  $E_f$  和空间反演非对称势  $\delta V$  的相图。(a)  $m_0/B < 0$ , (b)  $m_0/B > 0$ 。图中的整数标记了所属区域的霍尔电导, 并且所属区域纵向电导为零。亮绿色区域的纵向电导是非零的平台。

#### 4.5 小结

在这一章我们研究了磁场和空间反演非对称项对磁性拓扑绝缘体薄膜的影响。我们给出了零磁场情形系统相应于空间反演非对称项和费米能的相图。我们发现破坏反演对称性会破坏量子反常霍尔效应, 此外我们发现了在某些参数下可以导致量子赝自旋霍尔效应的相。我们计算了系统的朗道能级, 并计算了输运行为。我们发现量子反常霍尔效应的输运特征在磁场下保持不变, 并逐渐过渡到整数量子霍尔效应的图像。磁场可以导致一个类似量子自旋霍尔效应的相, 这不同于磁场破坏量子自旋霍尔效应。在标准的霍尔装置中, 我们发现了一些纵向电阻和霍尔电阻均为分数的平台。这些奇异的电阻特征是由于系统中同时存在相向传播的边态。

## 第五章 总结

本论文主要是通过非平衡格林函数理论研究了重费米子材料和磁性拓扑绝缘体体系的量子输运性质。

第一章介绍了相关的研究背景。包括: 重费米子材料的简单介绍、近藤耦合和RKKY机制、杂化图像, 点接触谱和扫描隧道谱的简单介绍及其在重费米子研究中的应用, 拓扑绝缘体和量子反常霍尔效应的介绍。

第二章介绍了研究量子输运问题的常用方法——非平衡格林函数理论。我们首先介绍了非平衡格林函数的定义以及无相互作用体系格林函数的计算方法, 然后推导了格林函数形式的普遍的正常态电流表达式。在此基础上, 我们给出了多端口Landauer-Büttiker公式, 正常态“金属-金属”结和“金属-超导”结的电流表达式。最后我们用一个Fano干涉效应的例子给出了如何应用非平衡格林函数求解电输运性质。

在第三章, 我们用一个简化模型模拟了重费米子材料点接触谱和扫描隧道谱的量子输运行为。我们通过改变探针和端口的接触区域的耦合位形来模拟两种端口, 探讨了Fano干涉、空间路径干涉以及探针和样品的耦合强度对电子输运的影响。我们发现在接触区域较大情形, 空间路径干涉效应会导致电子到样品中不同的布洛赫态的透射是动量依赖的。电导谱对应于第一布里渊区的加权平均, 从而会偏离态密度。更为重要的是杂化能隙两侧的电导会被压制。因为点接触测量的接触区域较大, 上述压制效应会在点接触电导谱中有所体现。考虑到  $f$  电子被重整化到杂化能隙附近, 我们认为点接触测量丢失了一些  $f$  电子的信息。而扫描隧道谱的测量则对应于整个布里渊区等权重求和。我们研究了Fano干涉导致的电导极小值特征及其与样品的能带结构的竞争和共存在电导谱中的体现。此外我们发现在探针和样品耦合较强的情形, 如果接触区域较小, 会在杂化能隙中形成电导峰。我们给出的计算电输运的公式是比较普遍的, 由于采用了格林函数的表达形式, 可以方便的应用到其它类似体系的量子输运研究中。

在第四章, 我们研究了处在量子反常霍尔效应的磁性拓扑绝缘体薄膜的量子输运性质。主要讨论了门电压和磁场对量子反常霍尔效应的影响。其中门电压施加在样品的上下两个表面, 在实际应用中这更容易对系统进行调控。门电

压能够调控样品的费密能级，其上下表面的电压差则提供了空间反演非对称势能项。首先在无磁场情形，我们研究了门电压对量子反常霍尔效应的影响，并给出了相图。发现空间反演非对称势能项可以破坏量子反常霍尔效应，并在该项极强时导致拓扑平庸的相。在适当的参数下也可以诱导类似量子自旋霍尔效应的相。我们计算了磁场导致的朗道能级谱，发现在某些参数区间磁场也可以诱导类似量子自旋霍尔效应的相。在霍尔装置输运测量中我们发现了一些奇异的电阻平台，其纵向电阻和霍尔电阻的取值均为分数。这源于样品中同时存在相向传播的边态。

## 附录 A 实空间格林函数的计算

### A.1 一维链的表面格林函数

我们考虑一个最简单的一维链，原胞内只有一条轨道，哈密顿量中只有在位能和最近邻跃迁项。

实空间哈密顿量如下，

$$H = \epsilon_0 \sum_i c_i^\dagger c_i - t \sum_i (c_i^\dagger c_{i+1} + h.c.). \quad (\text{A.1})$$

其表面格林函数可以通过Dyson方程计算，

$$G_{00}^r = g_{00}^r + g_{00}^r t g_{11}^r t G_{00}^r = g_{00}^r + g_{00}^r t G_{00}^r t G_{00}^r. \quad (\text{A.2})$$

其中  $g_{00}^r = \frac{1}{\omega - \epsilon_0 + i0^+} = \frac{1}{\tilde{\omega} + i0^+}$  是孤立格点的格林函数， $g_{11}^r = G_{00}^r$  是未耦合最外层格点时的表面格林函数。直接解方程可以得到，

$$G_{00}^r = \frac{1 \pm \sqrt{1 - 4t^2 (g_{00}^r)^2}}{2t^2 g_{00}^r}. \quad (\text{A.3})$$

上式描述了多个解，除了这里要求的“推迟”格林函数，“超前”函数也可以由上式给出，因为“超前”格林函数也满足公式 (A.2)。由于“推迟”格林函数虚部为负值，并考虑到解析函数所满足的希尔伯特变换 (KK 关系) 导致  $\lim_{\omega \rightarrow \infty} \text{Re} G^r(\omega) \propto \frac{1}{\omega}$ ，其具体形式可以写为，

$$G_{00}^r = \frac{\tilde{\omega} - \sqrt{\tilde{\omega}^2 - 4t^2}}{2t^2} \theta(|\tilde{\omega}| < 2|t|) + \frac{\tilde{\omega} - \text{sign}(\tilde{\omega}) \sqrt{\tilde{\omega}^2 - 4t^2}}{2t^2} \theta(|\tilde{\omega}| > 2|t|), \quad (\text{A.4})$$

其中  $\tilde{\omega} = \omega - \epsilon_0$ 。

### A.2 准一维链的表面格林函数

对于准一维的链，矩阵形式的哈密顿量可以写为，

$$H = \begin{pmatrix} H_{00} & H_{01} & & & \\ H_{10} & H_{11} & H_{12} & & \\ & H_{21} & H_{22} & H_{23} & \\ & & H_{32} & H_{33} & \end{pmatrix}, \quad (\text{A.5})$$

并满足周期性条件  $H_{ii} = H_{00}$ ,  $H_{i,i+1} = H_{01}$ 。

如果  $H_{00}$  和  $H_{01}$  对易, 那么二者可以同时对角化。取矩阵  $P$  满足  $P^\dagger H_{00} P = \Lambda$ ,  $P^\dagger H_{01} P = \mathcal{T}$ ,  $\Lambda, \mathcal{T}$  是对角矩阵。则么正变换为,

$$U = \begin{pmatrix} P & & & \\ & P & & \\ & & P & \\ & & & P \end{pmatrix}, \quad U^\dagger H U = \begin{pmatrix} \Lambda & \mathcal{T} & & \\ \mathcal{T}^\dagger & \Lambda & \mathcal{T} & \\ & \mathcal{T}^\dagger & \Lambda & \mathcal{T} \\ & & \mathcal{T}^\dagger & \Lambda \end{pmatrix}$$

由于  $\Lambda, \mathcal{T}$  是对角矩阵, 所以变换后的哈密顿量描述了  $N$  条孤立的一维链。变换后的格林函数  $\tilde{g}^r$  和原格林函数  $g^r$  通过么正变换联系,

$$g^r = U \tilde{g}^r U^\dagger, \quad (\text{A.6})$$

表面格林函数满足  $g_{0,0}^r = P \tilde{g}_{0,0}^r P^\dagger$ 。

变换后的格林函数  $\tilde{g}^r$  可以用附录A.1中的方法获得, 然后通过么正变换得到要求的表面格林函数

### A.3 三维半无限表面的格林函数

考虑最简单的三维半无限立方晶格。原胞内只有一条轨道, 只考虑最近邻跃迁。实空间的哈密顿量形式如下,

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger c_j = -t \sum_{zxy} (c_{z,x\pm 1,y}^\dagger c_{zxy} + c_{z,x,y\pm 1}^\dagger c_{zxy} + c_{z\pm 1,xy}^\dagger c_{zxy}). \quad (\text{A.7})$$

平行于平面的动量是好量子数, 对算符做傅里叶变换,

$$c_{z,x,y} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} c_{z,k_x,k_y} e^{i(k_x x + k_y y)}. \quad (\text{A.8})$$

得到新表象中的哈密顿量,

$$H = \sum_{z\mathbf{k}\tilde{\mathbf{k}}} [\epsilon_{k_x,k_y} c_{z,k_x,k_y}^\dagger c_{z,k_x,k_y} - t c_{z\pm 1,k_x,k_y}^\dagger c_{z,k_x,k_y}], \quad (\text{A.9})$$

其中  $\epsilon_{k_x,k_y} = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$ 。在新表象中的表面格林函数可以写为,

$$g_{\mathbf{k}}^r = \frac{(\omega - \epsilon_k) - \sqrt{(\omega - \epsilon_k)^2 - 4t^2}}{2t^2} \Theta(|\omega - \epsilon_k| < 2|t|) \\ + (\omega - \epsilon_k) \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{4t^2}{(\omega - \epsilon_k)^2}}}{2t^2} \Theta(|\omega - \epsilon_k| > 2|t|). \quad (\text{A.10})$$

实空间表面格林函数通过傅里叶变换得到,

$$g^r(x_1, y_1; x_2, y_2) = \frac{1}{N_k} \sum_{k_x, k_y} g_{\mathbf{k}}^r e^{i(k_x(x_1-x_2)+k_y(y_1-y_2))}. \quad (\text{A.11})$$

#### A.4 三维半无限无相互作用周期性Anderson晶格

这一部分考虑无相互作用的周期性Anderson模型, 这里只考虑最近邻跃迁的立方晶格, 计算三维半无穷表面的实空间格林函数。

实空间哈密顿量由下式给出,

$$H = -t_c \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - \mu \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \epsilon_f \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \mathcal{V} \sum_{i\sigma} (f_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + c_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}), \quad (\text{A.12})$$

其中  $c_{i\sigma}$  ( $f_{i\sigma}$ ) 在格点  $i$  处湮灭一个自旋  $\sigma$  的导带 ( $f$  带) 电子。  $\mathcal{V}$  则描述了导带和  $f$  带的杂化。平行于表面有平移不变性,  $(k_x, k_y)$  仍然是好量子数, 可以做傅里叶变换,

$$\begin{aligned} c_{xyz} &= \frac{1}{\sqrt{N_k}} \sum_{k_x, k_y} e^{i(k_x x + k_y y)} c_{k_x, k_y, z}, \\ c_{xyz}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N_k}} \sum_{k_x, k_y} e^{-i(k_x x + k_y y)} c_{k_x, k_y, z}^\dagger, \\ f_{xyz} &= \frac{1}{\sqrt{N_k}} \sum_{k_x, k_y} e^{i(k_x x + k_y y)} f_{k_x, k_y, z}, \\ f_{xyz}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N_k}} \sum_{k_x, k_y} e^{-i(k_x x + k_y y)} f_{k_x, k_y, z}^\dagger. \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

变换后的哈密顿量变为,

$$\begin{aligned} H &= \sum_{z, k_x, k_y} [\epsilon(k_x, k_y) c_{k_x, k_y, z}^\dagger c_{k_x, k_y, z} - t c_{k_x, k_y, z \pm \delta_z}^\dagger c_{k_x, k_y, z} \\ &\quad + \epsilon_f f_{k_x, k_y, z}^\dagger f_{k_x, k_y, z} + \mathcal{V} (f_{k_x, k_y, z}^\dagger c_{k_x, k_y, z} + h.c.)] \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

其中  $\epsilon(k_x, k_y) = -\mu - 2t_c(\cos k_x + \cos k_y)$ 。

对于一组确定的  $(k_x, k_y)$ , 哈密顿量是一条准一维链。下面给出该准一维链的表面格林函数  $G^r(k_x, k_y)$ 。最外层格点和内层格点耦合, 其满足的Dyson方程如下,

$$G^r(k_x, k_y) = g^r(k_x, k_y) + g^r(k_x, k_y) \mathcal{T} G^r(k_x, k_y) \mathcal{T} G^r(k_x, k_y), \quad (\text{A.15})$$

其中  $\mathcal{T} = \text{diag}(-t, 0)$  描述两个格点之间的耦合。 $g^r(k_x, k_y)$  是孤立格点的格林函数，满足

$$g^r(k_x, k_y) = \frac{1}{\omega - \begin{pmatrix} \epsilon(k_x, k_y) & \mathcal{V} \\ \mathcal{V} & \epsilon_f \end{pmatrix} + i0^+}, \quad (\text{A.16})$$

其中导带格林函数分量是，

$$g_{cc}^r(\omega) = \frac{1}{(\omega - \frac{\mathcal{V}^2}{\omega - \epsilon_f}) - \epsilon_c(k_x, k_y) + i0^+}. \quad (\text{A.17})$$

由公式 (A.15) 可以导出导带格林函数分量满足的Dyson方程，

$$G_{cc}^r = g_{cc}^r + g_{cc}^r(-t)G_{cc}^r(-t)G_{cc}^r. \quad (\text{A.18})$$

由上式可以直接解出  $G_{cc}^r$ ，

$$G_{cc}^r = \frac{1 \pm \sqrt{1 - 4t^2(g_{cc}^r)^2}}{2t^2 g_{cc}^r}, \quad (\text{A.19})$$

其具体形式可以写出，

$$G_{cc}^r(k_x, k_y) = \frac{\tilde{\omega} - \sqrt{\tilde{\omega}^2 - 4t^2}}{2t^2} \theta(|\tilde{\omega}| < 2|t|) + \frac{\tilde{\omega} - \text{sign}(\tilde{\omega})\sqrt{\tilde{\omega}^2 - 4t^2}}{2t^2} \theta(|\tilde{\omega}| > 2|t|), \quad (\text{A.20})$$

其中  $\tilde{\omega} = (\omega - \frac{\mathcal{V}^2}{\omega - \epsilon_f}) - \epsilon_c(k_x, k_y)$ 。

实空间的格林函数由傅里叶变换得到，

$$G_{cc}^r(x_1, y_1; x_2, y_2) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2} e^{i(k_x(x_1-x_2)+k_y(y_1-y_2))} G_{cc}^r(k_x, k_y). \quad (\text{A.21})$$

格林函数的  $f$  带和杂化分量可以由最外层孤立的  $f$  能级和和准一维链的其它部分耦合的Dyson方程给出，

$$\begin{aligned} G_{cf}^r &= G_{cc}^r \mathcal{V} g_{0f}^r, \\ G_{ff}^r &= g_{0f}^r + g_{0f}^r \mathcal{V} G_{cc}^r \mathcal{V} g_{0f}^r, \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

其中  $g_{0f}^r = 1/(\omega - \epsilon_f + i0^+)$  是孤立的  $f$  能级的格林函数。

## 参考文献

- [1] G. R. Stewart, *Heavy-fermion systems*, Rev. Mod. Phys. **56**, 755 (1984).
- [2] L. Degiorgi, *The electrodynamic response of heavy-electron compounds*, Rev. Mod. Phys. **71**, 687 (1999).
- [3] P. Coleman, *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials*, edited by H. Kronmuller and S. Parkin, Vol. 1 (John Wiley & Sons, New York, 2007).
- [4] S. Kondo, D. C. Johnston, C. A. Swenson, F. Borsa, A. V. Mahajan, L. L. Miller, T. Gu, A. I. Goldman, M. B. Maple, D. A. Gajewski, E. J. Freeman, N. R. Dilley, R. P. Dickey, J. Merrin, K. Kojima, G. M. Luke, Y. J. Uemura, O. Chmaissem, and J. D. Jorgensen, *LiV<sub>2</sub>O<sub>4</sub>: a heavy fermion transition metal oxide*, Phys. Rev. Lett. **78** 3729 (1997).
- [5] J. G. Cheng, J. S. Zhou, Y. F. Yang, H. D. Zhou, K. Matsubayashi, Y. Uwatoko, A. MacDonald, and J. B. Goodenough, *Possible Kondo physics near a metal-insulator crossover in the A-site ordered perovskite CaCu<sub>3</sub>Ir<sub>4</sub>O<sub>12</sub>*, Phys. Rev. Lett. **111**, 176403 (2013).
- [6] G. R. Stewart, *Non-Fermi-liquid behavior in d- and f-electron metals*, Rev. Mod. Phys. **73**, 797 (2001).
- [7] C. Pfleiderer, *Superconducting phases of f-electron compounds*, Rev. Mod. Phys. **81**, 1551 (2009).
- [8] J. A. Mydosh and P. M. Oppeneer, *Colloquium: Hidden order, superconductivity, and magnetism: The unsolved case of URu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>* Rev. Mod. Phys. **83**, 1301 (2011).
- [9] 杨义峰, 李宇, 重费米子超导与竞争序, 物理学报 **65**, 217401 (2015).

- [10] 杨义峰, 谢能, 李宇, 重费米子二流体理论, 物理学进展 **35**, 191 (2015).
- [11] S. Doniach, *The Kondo lattice and weak antiferromagnetism*, Physica B, **91**, 231 (1977).
- [12] J. Kondo, *Resistance minimum in dilute magnetic alloys*, Prog. Theoret. Phys. **32**, 37 (1964).
- [13] 李正中, 固体理论, 科学出版社, (2002).
- [14] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions*, Cambridge university press, (1993).
- [15] L. Kouwenhoven and C. Marcus, *Revival of the Kondo effect*, Phys. World **11**, 35 (1998).
- [16] Y.-F. Yang, Z. Fisk, H. O. Lee, J. D. Thompson, and D. Pines, *Scaling the Kondo lattice*, Nature (London) **454**, 611 (2008).
- [17] Y. Onuki, T. Komatsubara. *Heavy fermion state in CeCu6*. J. Magn. Magn. Mater. **63-64**, 281 (1987).
- [18] Y. V. Sharvin, *A possible method for studying Fermi surfaces*, Sov. Phys. - JETP **21**, 655(1965).
- [19] I. K. Yanson, *Nonlinear effects in the electric conductivity of point junctions and electron-phonon interaction in normal metals*, Sov. Phys. — JETP **39**, 506 - 13 (1974).
- [20] Yu. G. Naidyuk and I. K. Yanson, *Point Contact Spectroscopy* (Springer, New York, 2005).
- [21] W. K. Park and L. H. Greene, *Andreev reflection and order parameter symmetry in heavy-fermion superconductors: the case of CeCoIn<sub>5</sub>*, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 103203 (2009).
- [22] D. Daghero and R. S. Gonnelli, *Probing multiband superconductivity by point-contact spectroscopy*, Supercond. Sci. Technol. **23**, 043001 (2010).

- 
- [23] X. Lu, F. Ronning, P. H. Tobash, K. Gofryk, E. D. Bauer, and J. D. Thompson, *Pressure-tuned point-contact spectroscopy of URu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> from hidden order to antiferromagnetic states: Similarity of the Fermi surface gapping*, Phys. Rev. B **85**, 020402 (2012).
- [24] W. K. Park, J. L. Sarrao, J. D. Thompson, and L. H. Greene, *Andreev reflection in heavy-Fermion superconductors and order parameter symmetry in CeCoIn<sub>5</sub>*, Phys. Rev. Lett. **100**, 177001 (2008).
- [25] Y.-F. Yang, *Fano effect in the point contact spectroscopy of heavy-electron materials*, Phys. Rev. B **79**, 241107 (2009).
- [26] A. E. Miroschnichenko, S. Flach, and Y. S. Kivshar, *Fano resonances in nanoscale structures*, Rev. Mod. Phys. **82**, 2257 (2010).
- [27] W. K. Park, E. D. Bauer, J. L. Sarrao, J. D. Thompson, and L. H. Greene, *On the origin of the conductance asymmetry in CeMIn<sub>5</sub> (M=Co, Rh, Ir)*, J. Phys. Conf. Ser. **150**, 052207 (2009).
- [28] W. K. Park, P. H. Tobash, F. Ronning, E. D. Bauer, J. L. Sarrao, J. D. Thompson, and L. H. Greene, *Observation of the hybridization gap and Fano resonance in the Kondo lattice URu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>*, Phys. Rev. Lett. **108**, 246403 (2012).
- [29] W. K. Park, S. M. Narasimwodeyar, M. Dwyer, P. C. Canfield, and L. H. Greene, *Hybridization and slow coherence crossover in the intermediate valence compound YbAl<sub>3</sub> via quasiparticle scattering spectroscopy*, arXiv:1411.7073 (unpublished).
- [30] D. Daghero, M. Tortello, G.A. Ummarino, J.-C. Griveau, E. Colineau, R. Eloirdi, A.B. Shick, J. Kolorenc, A.I. Lichtenstein, and R. Caciuffo, *Strong-coupling d-wave superconductivity in PuCoGa<sub>5</sub> probed by point-contact spectroscopy*, Nat. Commun. **3**, 786 (2012).

- [31] X. H. Zhang, N. P. Butch, P. Syers, S. Ziemak, R. L. Greene, and J. Paglione, *Hybridization, inter-ion correlation, and surface states in the Kondo insulator  $SmB_6$* , Phys. Rev. X **3**, 011011 (2013).
- [32] C. J. Chen, *Introduction to Scanning Tunneling Microscopy*, Oxford University Press, (2008).
- [33] L. Petersen, P. T. Sprunger, P. Hofmann, E. Lagsgaard, B. G. Briner, M. Doering, H.-P. Rust, A. M. Bradshaw, F. Besenbacher, and E. W. Plummer, *Direct imaging of the two-dimensional Fermi contour: Fourier-transform STM*, Phys. Rev. B **57**, R6858 (1998).
- [34] L. Petersen, P. Hofmann, E. W. Plummer, and F. Besenbacher, *Fourier transform - STM: determining the surface Fermi contour*, J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom. **109**, 97 (2000).
- [35] A. R. Schmidt, M. H. Hamidian, P. Wahl, F. Meier, A. V. Balatsky, J. D. Garrett, T. J. Williams, G. M. Luke, and J. C. Davis, *Imaging the Fano lattice to ‘hidden order’ transition in  $URu_2Si_2$* , Nature (London) **465**, 570 (2010).
- [36] P. Aynajian, E. H. da Silva Neto, A. Gyenis, R. E. Baumbach, J. D. Thompson, Z. Fisk, E. D. Bauer, and A. Yazdani, *Visualizing heavy fermions emerging in a quantum critical Kondo lattice*, Nature (London) **486**, 201 (2012).
- [37] P. Aynajian, E. H. da Silva Neto, C. V. Parker, Y. Huang, A. Pasupathy, J. Mydosh, and A. Yazdani, *Visualizing the formation of the Kondo lattice and the hidden order in  $URu_2Si_2$* , Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **107**, 10383 (2010).
- [38] B. B. Zhou, S. Misra, E. H. da Silva Neto, P. Aynajian, R. E. Baumbach, J. D. Thompson, E. D. Bauer, and A. Yazdani, *Visualizing nodal heavy fermion superconductivity in  $CeCoIn_5$* , Nat. Phys. **9**, 474 (2013).

- [39] M. P. Allan, F. Masee, D. K. Morra, J. V. Dyke, A. W. Rost, A. P. Mackenzie, C. Petrovic, and J. C. Davis, *Imaging Cooper pairing of heavy fermions in CeCoIn<sub>5</sub>*, Nat. Phys. **9**, 468 (2013).
- [40] P. Aynajian, E. H. da Silva Neto, B. B. Zhou, S. Misra, R. E. Baumbach, Z. Fisk, J. Mydosh, J. D. Thompson, E. D. Bauer, and A. Yazdani, *Visualizing heavy fermion formation and their unconventional superconductivity in f-electron materials* J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 061008 (2014).
- [41] S. Ernst, S. Kirchner, C. Krellner, C. Geibel, G. Zwicknagl, F. Steglich, and S. Wirth, *Emerging local Kondo screening and spatial coherence in the heavy-fermion metal YbRh<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>*, Nature (London) **474**, 362 (2011).
- [42] E. H. Hall, *On a new action of the magnet on electric currents*, Am. J. Math. **2**, 287 (1879).
- [43] E. H. Hall, *On the “Rotational Coefficient” in nickel and cobalt*, Philos. Mag. **12**, 157 (1881).
- [44] J. Smit, *The spontaneous hall effect in ferromagnetics I*, Physica. **21**, 877 (1955).
- [45] L. Berger, *Side-jump mechanism for the Hall effect of ferromagnets*, Phys. Rev. B **2**, 4559 (1970).
- [46] R. Karplus and J. M. Luttinger, *Hall effect in ferromagnetics*, Phys. Rev. **95**, 1154 (1954).
- [47] D. Xiao, M. C. Chang, and Q. Niu, *Berry phase effects on electronic properties*, Rev. Mod. Phys. **82**, 1959 (2010).
- [48] C. X. Liu, S. C. Zhang and X. L. Qi, *The quantum anomalous Hall effect: theory and experiment*, Ann. Rev. Condens. Matter Phys. **7**, 301 (2016).
- [49] Z. Fang, N. Nagaosa, K. S. Tahakashi, A. Asamitsu, R. Mathieu, T. Ogasawara, H. Yamada, M. Kawasaki, Y. Tokura, K. Terakura, *The anoma-*

- lous Hall effect and magnetic monopoles in momentum space*, Science **302**, 92 (2003).
- [50] Y. G. Yao, L. Kleinman, A. H. MacDonald, Jairo Sinova, T. Jungwirth, D. S. Wang, E. G. Wang, and Q. Niu, *First principles calculation of anomalous Hall conductivity in ferromagnetic bcc Fe*, Phys. Rev. Lett **92**, 037204 (2004).
- [51] K. v. Klizing, G. Dorda, and M. Pepper, *New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance*, Phys. Rev. Lett **45**, 494 (1980).
- [52] 翁红明, 戴希, 方忠, *磁性拓扑绝缘体与量子反常霍尔效应*, 物理学进展, **34** (1) : 1-9 (2014).
- [53] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, *Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential*, Phys. Rev. Lett. **49**, 405 (1982).
- [54] F. D. M. Haldane, *Model for a quantum hall effect without Landau levels: condensed-matter realization of the "parity anomaly"*, Phys. Rev. Lett. **61**, 2015 (1988).
- [55] R. Yu, W. Zhang, H. J. Zhang, S. C. Zhang, X. Dai, and Z. Fang, *Quantized anomalous Hall effect in magnetic topological insulators*, Science **329**, 61 (2010).
- [56] X. L. Qi, Y. S. Wu, and S. C. Zhang, *Topological quantization of the spin Hall effect in two-dimensional paramagnetic semiconductors*, Phys. Rev. B **74**, 085308 (2006).
- [57] C. X. Liu, X. L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S. C. Zhang, *Quantum anomalous Hall effect in  $Hg_{1-y}Mn_yTe$  quantum wells*, Phys. Rev. Lett. **101**, 146802 (2008).
- [58] M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Colloquium : topological insulators*, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010).

- [59] X.L. Qi, S.C. Zhang, *Topological insulators and superconductors*, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011).
- [60] X. L. Qi, T. Hughes, and S. C. Zhang, *Topological field theory of time-reversal invariant insulators*, Phys. Rev. B **78**, 195424 (2008).
- [61] W.Y. Shan, H.Z. Lu, and S.Q. Shen, *Effective continuous model for surface states and thin films of three-dimensional topological insulators*, New J. Phys. **12**, 043048 (2010).
- [62] H.Z. Lu, W.Y. Shan, W. Yao, Q. Niu, and S.Q. Shen, *Massive Dirac fermions and spin physics in an ultrathin film of topological insulator*, Phys. Rev. B **81**, 115407 (2010).
- [63] H.C. Li, L. Sheng, D.N. Sheng, and D.Y. Xing, *Chern number of thin films of the topological insulator  $Bi_2Se_3$* , Phys. Rev. B **82**, 165104 (2010).
- [64] C.Z. Chang, J.S. Zhang, X. Feng, J. Shen, Z.C. Zhang, M.H. Guo, K. Li, Y.B. Ou, P. Wei, L.L. Wang, Z.Q. Ji, Y. Feng, S.H. Ji, X. Chen, J.F. Jia, X. Dai, Z. Fang, S.C. Zhang, K. He, Y.Y. Wang, L. Lu, X.C. Ma, and Q.K. Xue, *Experimental observation of the quantum anomalous Hall effect in a magnetic topological insulator*, Science **340**, 167 (2013).
- [65] C. Z. Chang, W. W. Zhao, D. Y. Kim, H. J. Zhang, B. A. Assaf, D. Heiman, S. C. Zhang, C. X. Liu, M. H. W. Chan and J. S. Moodera, *High-precision realization of robust quantum anomalous Hall state in a hard ferromagnetic topological insulator* Nat. Mater. **14**, 473 (2015).
- [66] J. Checkelsky, R. Yoshimi, A. Tsukazaki, K. Takahashi, Y. Kozuka, J. Falson, M. Kawasaki and Y. Tokura, *Trajectory of the anomalous Hall effect towards the quantized state in a ferromagnetic topological insulator*, Nat. Phys. **10**, 731 (2014).
- [67] X. Kou, S. T. Guo, Y. Fan, L. Pan, M. Lang, Y. Jiang, Q. M. Shao, T. X. Nie, K. Murata, J. S. Tang, Y. Wang, L. He, T. K Lee, W. L. Lee, and K. L. Wang, *Scale-invariant quantum anomalous Hall effect in magnetic*

- topological insulators beyond the two-dimensional limit*, Phys. Rev. Lett. **113**, 137201 (2014).
- [68] A. Bestwick, E. Fox, X. Kou, L. Pan, K. L. Wang and D. Goldhaber-Gordon, *Precise quantization of the anomalous Hall effect near zero magnetic field*, Phys. Rev. Lett. **114**, 187201 (2015).
- [69] X. Kou, L. Pan, J. Wang, Y. Fan, E. S. Choi, W. L. Lee, T. X. Nie, K. Murata, Q. M. Shao, S. C. Zhang, K. L. Wang, *Metal-to-insulator switching in quantum anomalous Hall states*, Nat. Commun. **6** 8474 (2015).
- [70] Y. Feng, X. Feng, E. Ou, J. Wang, C. Liu, L. G. Zhang, D. Y. Zhao, G. Y. Jiang, S. C. Zhang, K. He, X. C. Ma, Q. K. Xue, and Y. Y. Wang, *Observation of the zero Hall plateau in a quantum anomalous Hall insulator*, Phys. Rev. Lett. **115**, 126801 (2015).
- [71] A. Kandala, A. Richardella, S. Kempinger, C. Liu and N. Samarth, *Giant anisotropic magnetoresistance in a quantum anomalous Hall insulator*, Nat. Commun. **6**, 7434 (2015).
- [72] H. Haug and A.-P. Jauho, *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors* (Springer, Berlin Heidelberg, 2008).
- [73] Y. Meir and N. S. Wingreen, *Landauer formula for the current through an interacting electron region*, Phys. Rev. Lett. **68**, 2512 (1992).
- [74] A.-P. Jauho, N. S. Wingreen and Y. Meir, *Time dependent transport in interacting and noninteracting resonant-tunneling systems*, Phys. Rev. B **50**, 5528 (1994).
- [75] 参考孙庆丰老师讲义，非平衡格林函数简介。
- [76] D. H. Lee and J. D. Joannopoulos, *Simple scheme for surface-band calculations. II. the Green's function*, Phys. Rev. B **23**, 4997 (1981).

- [77] M. P. L. Sancho, J. M. L. Sancho, and J. Rubio, *Quick iterative scheme for the calculation of transfer matrices: application to Mo (100)*, J. Phys. F **14**, 1205 (1984).
- [78] M. P. L. Sancho, J. M. L. Sancho, and J. Rubio, *Highly convergent schemes for the calculation of bulk and surface Green functions*, J. Phys. F **15**, 851 (1985).
- [79] D. S. Fisher and P. A. Lee, *Relation between conductivity and transmission matrix*, Phys. Rev. B **23**, 6851 (1981).
- [80] T. Gramspacher and M. Büttiker, *Nanosopic tunneling contacts on mesoscopic multiprobe conductors*, Phys. Rev. B **56**, 13026 (1997).
- [81] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1995).
- [82] G. E. Blonder, M. Tinkham, and T. M. Klapwijk, *Transition from metallic to tunneling regimes in superconducting microconstrictions: Excess current, charge imbalance, and supercurrent conversion*, Phys. Rev. B **25**, 4515 (1982).
- [83] M. Maltseva, M. Dzero, and P. Coleman, *Electron cotunneling into a Kondo lattice*, Phys. Rev. Lett. **103**, 206402 (2009).
- [84] M. Fogelström, W. K. Park, L. H. Greene, G. Goll, and M. J. Graf, *Point-contact spectroscopy in heavy-fermion superconductors*, Phys. Rev. B **82**, 014527 (2010).
- [85] M. Fogelström and M. J. Graf, *Tunneling limit of heavy-fermion point contacts*, J. Phys. Conf. Ser. **273**, 012073 (2011).
- [86] M. Fogelström, M. J. Graf, V. A. Sidorov, X. Lu, E. D. Bauer, and J. D. Thompson, *Two-channel point-contact tunneling theory of superconductors*, Phys. Rev. B **90**, 104512 (2014).

- [87] P. Wölfle, Y. Dubi, and A. V. Balatsky, *Tunneling into clean heavy fermion compounds: origin of the Fano line shape*, Phys. Rev. Lett. **105**, 246401 (2010).
- [88] J. Figgins and D. K. Morr, *Differential conductance and quantum interference in Kondo systems*, Phys. Rev. Lett. **104**, 187202 (2010).
- [89] J. Figgins and D. K. Morr, *Defects in heavy-fermion materials: unveiling strong correlations in real space*, Phys. Rev. Lett. **107**, 066401 (2011).
- [90] Y. Dubi and A. V. Balatsky, *Hybridization wave as the ‘‘hidden order’’ in URu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>*, Phys. Rev. Lett. **106**, 086401 (2011).
- [91] J. X. Zhu, J. P. Julien, Y. Dubi, and A. V. Balatsky, *Local electronic structure and Fano interference in tunneling into a Kondo hole system*, Phys. Rev. Lett. **108**, 186401 (2012).
- [92] T. Yuan, J. Figgins, and D. K. Morr, *Hidden order transition in URu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>: Evidence for the emergence of a coherent Anderson lattice from scanning tunneling spectroscopy*, Phys. Rev. B **86**, 035129 (2012).
- [93] F. P. Toldin, J. Figgins, S. Kirchner, and D. K. Morr, *Disorder and quasi-particle interference in heavy-fermion materials*, Phys. Rev. B **88**, 081101 (2013).
- [94] M. Dzero, *Tunneling in heavy-fermion junctions*, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 061010 (2014).
- [95] M. M. Yee, Y. He, A. Soumyanarayanan, D.-J. Kim, Z. Fisk, and J. E. Hoffman, *Imaging the Kondo insulating gap on SmB<sub>6</sub>*, arXiv:1308.1085 (unpublished).
- [96] W. Ruan, C. Ye, M. H. Guo, F. Chen, X. H. Chen, G. M. Zhang, and Y. Y. Wang, *Emergence of a coherent in-gap state in the SmB<sub>6</sub> Kondo insulator revealed by scanning tunneling spectroscopy*, Phys. Rev. Lett. **112**, 136401 (2014).

- [97] S. Rößler, T.-H. Jang, D.-J. Kim, L. H. Tjeng, Z. Fisk, F. Steglich, and S. Wirth, *Hybridization gap and Fano resonance in  $\text{SmB}_6$* , Proc. Natl. Acad. Sci. **111**, 4798 (2014).
- [98] W. A. Harrison, *Tunneling from an independent-particle point of view*, Phys. Rev. **123**, 85 (1961).
- [99] W. C. Lee, W. K. Park, H. Z. Arham, L. H. Greene, and P. W. Phillips, *Theory of point contact spectroscopy in correlated materials*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **112**, 651 (2014).
- [100] W. C. Lee and L. H. Greene, *Point contact spectroscopy as a probe of correlated electron states*, arXiv:1512.02660 (unpublished).
- [101] C. Berthod and T. Giamarchi, *Tunneling conductance and local density of states in tight-binding junctions*, Phys. Rev. B **84**, 155414 (2011).
- [102] N. E. Bickers, *Review of techniques in the large- $N$  expansion for dilute magnetic alloys*, Rev. Mod. Phys. **59**, 845 (1987).
- [103] N. Nagaosa, J. Sinova, S. Onoda, A.H. MacDonald, and N.P. Ong, *Anomalous Hall effect*, Rev. Mod. Phys. **82** 1539 (2010).
- [104] C.L. Kane, E.J. Mele,  *$Z_2$  Topological order and the quantum spin Hall effect*, Phys. Rev. Lett. **95**, 146802 (2005).
- [105] B.A. Bernevig and S.C. Zhang, *Quantum spin Hall effect*, Phys. Rev. Lett. **96**, 106802 (2006).
- [106] B.A. Bernevig, T.L. Hughes and S.C. Zhang, *Quantum spin Hall effect and topological phase transition in  $\text{HgTe}$  quantum wells*, Science **314**, 1757 (2006).
- [107] M.I. Dyakonov and V.I. Perel, *Possibility of orienting electron spins with current*, Sov. Phys. JETP Lett. **13**, 467 (1971).
- [108] J. E. Hirsch, *Spin hall effect*, Phys. Rev. Lett. **83**, 1834 (1999).

- [109] Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, D. D. Awschalom, *Observation of the spin Hall effect in semiconductors*, Science **306**, 1910 (2004).
- [110] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L.W. Molenkamp, X.L Qi, and S.C. Zhang, *Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells*, Science **318**, 766 (2007).
- [111] H. Jiang, S. Cheng, Q.-F. Sun, and X. C. Xie, *Topological insulator: a new quantized spin Hall resistance robust to dephasing*, Phys. Rev. Lett. **103**, 036803 (2009).
- [112] A. A. Zyuzin and A. A. Burkov, *Thin topological insulator film in a perpendicular magnetic field*, Phys. Rev. B **83** 195413 (2011).
- [113] H. C. Li, L. Sheng, and D. Y. Xing, *Quantum Hall effect in thin films of three-dimensional topological insulators*, Phys. Rev. B **84**, 035310 (2011).
- [114] C. X. Liu, X. L. Qi, H. J. Zhang, X. Dai, Z. Fang, and S. C. Zhang, *Model Hamiltonian for topological insulators*, Phys. Rev. B **82**, 045122 (2010).
- [115] M. Tahir, K. Sabeeh, and U. Schwingenschlögl, *Quantum magnetotransport properties of ultrathin topological insulator films*, J. Appl. Phys. **113**, 043720 (2013).
- [116] A. I. Akheizer and V. B. Berestetsky, *Quantum Electrodynamics* (Interscience, New York, 1965).
- [117] P. Cheng, C.l. Song, T. Zhang, Y. Y. Zhang, Y. L. Wang, J. F. Jia, J. Wang, Y. Y. Wang, B. F. Zhu, X. Chen, X. C. Ma, K. He, L. L. Wang, X. Dai, Z. Fang, X. C. Xie, X. L. Qi, C. X. Liu, S. C. Zhang, and Q. K. Xue, *Landau quantization of topological surface states in Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>*, Phys. Rev. Lett **105**, 076801 (2010).
- [118] T. Hanaguri, K. Igarashi, M. Kawamura, H. Takagi, and T. Sasagawa, *Momentum-resolved Landau-level spectroscopy of Dirac surface state in Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>*, Phys. Rev. B **82**, 081305 (2010).

- [119] B. Sacepe, J. B. Oostinga, J. Li, A. Ubaldini, N. J. G. Couto, E. Giannini, and A. F. Morpurgo, *Gate-tuned normal and superconducting transport at the surface of a topological insulator*, Nature Commun. **2**, 575 (2011).
- [120] Y. P. Jiang, Y. L. Wang, M. Chen, Z. Li, C. L. Song, K. He, L. L. Wang, X. Chen, X. C. Ma, and Q. K. Xue, *Landau quantization and the thickness limit of topological insulator thin films of  $Sb_2Te_3$* , Phys. Rev. Lett **108**, 016401 (2012).
- [121] Y. Okada, W. W. Zhou, C. Dhital, D. Walkup, Y. Ran, Z. Wang, S. D. Wilson, and V. Madhavan, *Visualizing Landau levels of Dirac electrons in a one-dimensional potential*, Phys. Rev. Lett **109**, 166407 (2012).
- [122] C. Brüne, C. X. Liu, E. G. Novik, E. M. Hankiewicz, H. Buhmann, Y. L. Chen, X. L. Qi, Z. X. Shen, S. C. Zhang, and L. W. Molenkamp, *Quantum Hall effect from the topological surface states of strained bulk  $HgTe$* , Phys. Rev. Lett **106**, 126803 (2011).
- [123] H. J. Zhang, C. X. Liu, X. L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S. C. Zhang, *Topological insulators in  $Bi_2Se_3$ ,  $Bi_2Te_3$  and  $Sb_2Te_3$  with a single Dirac cone on the surface*, Nat. Phys. **5**, 438 (2009).
- [124] Y. Xia, D. Qian, D. Hsieh, L. Wray, A. Pal, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava and M. Z. Hasan, *Observation of a large-gap topological-insulator class with a single Dirac cone on the surface*, Nat. Phys. **5**, 398 (2009).
- [125] C. X. Liu, H. J. Zhang, B. H. Yan, X. L. Qi, T. Frauenheim, X. Dai, Z. Fang, and S. C. Zhang, *Oscillatory crossover from two-dimensional to three-dimensional topological insulators*, Phys. Rev. B **81**, 041307 (2010).
- [126] H. C. Li, L. Sheng, and D. Y. Xing, *Quantum phase transitions in ultra-thin films of three-dimensional topological insulators in the presence of an electrostatic potential and a Zeeman field*, Phys. Rev. B **85**, 045118 (2012).

- [127] Y. Zhang, K. He, C.-Z. Chang, C.-L. Song, L.-L. Wang, X. Chen, J.-F. Jia, Z. Fang, X. Dai, W.-Y. Shan, S.-Q. Shen, Q. Niu, X.-L. Qi, S.-C. Zhang, X.-C. Ma, and Q.-K. Xue, *Crossover of the three-dimensional topological insulator Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> to the two-dimensional limit*, Nat. Phys. **6**, 584 (2010).
- [128] J. C. Chen, J. Wang, and Q. F. Sun, *Effect of magnetic field on electron transport in HgTe/CdTe quantum wells: Numerical analysis*, Phys. Rev. B **85**, 125401 (2012).
- [129] H. Jiang, L. Wang, Q.-F. Sun, and X. C. Xie, *Numerical study of the topological Anderson insulator in HgTe/CdTe quantum wells*, Phys. Rev. B **80**, 165316 (2009).
- [130] M. Kohmoto, *Topological invariant and the quantization of the Hall conductance*, Ann. Phys. (NY) **160**, 343 (1985).
- [131] S. Q. Shen, M. Ma, X. C. Xie, and F. C. Zhang, *Resonant spin Hall conductance in two-dimensional electron systems with a Rashba interaction in a perpendicular magnetic field*, Phys. Rev. Lett **92**, 256603 (2004).
- [132] V. P. Gusynin and S. G. Sharapov, *Unconventional integer quantum Hall effect in graphene*, Phys. Rev. Lett **95**, 146801 (2005).
- [133] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, *Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene*, Nature (London) **438**, 197 (2005).
- [134] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, *Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene*, Nature (London) **438**, 201 (2005).
- [135] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* ( Cambridge University Press, Cambridge, England, 1995 ).

- 
- [136] W. Long, Q.-F. Sun, and J. Wang, *Disorder-induced enhancement of transport through graphene p-n junctions*, Phys. Rev. Lett. **101**, 166806 (2008).
- [137] Q.-F. Sun and X. C. Xie, *CT-invariant quantum spin Hall effect in ferromagnetic graphene*, Phys. Rev. Lett. **104**, 066805 (2010).



# 简 历

## 基本情况

张树峰，男，山东省泰安市人，1989年10月出生，未婚，中国科学院物理研究所在读博士研究生。

## 教育状况

2007年9月至2011年6月，山东大学物理系，本科，专业：物理学。

2011年9月至2016年6月，中国科学院物理研究所，硕博连读研究生，专业：理论物理。

## 工作经历

无。

## 研究兴趣

重费米子材料的量子输运，低维介观系统的量子输运。

## 联系方式

E-mail: zhangsf@iphy.ac.cn



## 发表文章目录

- [1] **Shu-feng Zhang**, Wei Zhu and Qing-feng Sun, *Josephson junction on one edge of a two dimensional topological insulator affected by magnetic impurity*. J. Phys.: Condens. Matter **25**. 295301 (2013).
- [2] **Shu-feng Zhang** and Wei Zhu, *The limit spin current in a time-dependent Rashba spin - orbit coupling system*. J. Phys.: Condens. Matter **25**. 075302 (2013).
- [3] **Shu-feng Zhang**, Hua Jiang, X. C. Xie, and Qing-feng Sun, *Effect of magnetic field on a magnetic topological insulator film with structural inversion asymmetry*. Phys. Rev. B **89**, 155419 (2014).
- [4] **Shu-feng Zhang**, Yu Liu, Hai-Feng Song, and Yi-feng Yang, *Fano and spatial interferences in the electron transport of heavy fermion materials*. arXiv:1602.07782 (submitted to PRB).
- [5] Tie-feng Fang, **Shu-feng Zhang**, Chun-Jiang Niu, and Qing-feng Sun, *Bipolaronic blockade effect in quantum dots with negative charging energy*. Europhys. Lett. **105**. 47006 (2014).
- [6] Wei-Jiang Gong, **Shu-feng Zhang**, Zhi-Chao Li, Guangyu Yi, and Yi-Song Zheng, *Detection of a Majorana fermion zero mode by a T-shaped quantum-dot structure*. Phys. Rev. B **89**, 245413 (2014).
- [7] Z. Gao, W. J. Gong, **Shu-feng Zhang**, G. Y. Yi and Y. S. Zheng, *Tunable fractional Josephson effect in the topological superconducting junction with embedded quantum dots*. Europhys. Lett. **109**. 40010 (2015).



## 致 谢

我首先要感谢我的导师杨义峰研究员。感谢杨老师在我工作上的指导和生活中的帮助。杨老师具有深刻的物理直觉，对复杂的物理问题往往能够提出简明的物理图像。杨老师对重费子和强关联领域有深刻的理解和广泛的涉猎。杨老师对科学研究的热爱与执着以及对科研工作极其严谨的要求给我留下了深刻的印象。

感谢孙庆丰教授对我工作和生活上的帮助。孙老师不厌其烦地讲解使我获益匪浅，并帮我掌握了非平衡格林函数的方法。孙老师乐观向上的生活态度给我留下了深刻印象。感谢谢老师在组会上所提的问题，使我能够对工作有更深刻的认识。感谢江华师兄和刘瑜师兄对我的帮助，两位师兄的帮助帮我扫清了很多障碍。感谢公卫江教授对我生活和工作上的帮助，和公老师的讨论使我获益良多。

感谢同组的兄弟姐妹们在读研期间的陪伴和帮助。他们是：付召明博士、谢能、魏兰英、林赫羽、李宇、刘敏、徐远骥、胡丹青、杜光乐、俞楠；郭爱敏博士、房铁峰博士、刘海文、陈江钗、邹永连、张胜男、裴威、陈垂针、鲍志强、朱伟、齐俊杰、王孜博、潘廷瑞、吕鹏。

最后，感谢父母在我读博期间默默的支持！



# 学位论文原创性声明和使用授权说明

## 原创性声明

本人郑重声明：所提交的学位论文，是本人在导师指导下，独立进行研究工作所取得的成果。本论文所参考的其他个人或集体已经发表或撰写的成果、数据和观点等，均已在文中明确注明出处。除此之外，尽我所知，本论文不包含任何他人享有著作权的内容。对本论文研究成果做出贡献的个人和集体，本人已在文中作了明确的说明并表示谢意。

本人愿意承担由此声明而产生的一切法律责任。

学位论文作者签名：

日期： 年 月 日

## 关于学位论文使用授权的声明

本人声明：本人在毕业后发表、使用与本论文直接相关的学术论文或成果时，本人的第一署名单位仍然为中国科学院物理研究所（以下简称为物理所）；本人同意物理所保留并向国家有关部门或机构提交本学位论文的纸质版和电子版，允许论文被查阅和借阅；本人授权物理所将本学位论文的全部或部分内容编入有关数据库进行检索，并可以采用复印、缩印或其它手段保存和汇编本学位论文。

学位论文作者签名：

日期： 年 月 日

导师签名：

日期： 年 月 日