

拓扑绝缘体及其研究进展*

叶飞¹ 苏刚^{2,†}

(1 中国科学院研究生院材料科学与光电技术学院 北京 100049)

(2 中国科学院研究生院物理科学学院 北京 100049)

摘要 拓扑绝缘体是当前凝聚态物理领域中的一个热点问题. 这类材料的典型特征是体内元激发存在能隙, 但在边界上具有受拓扑保护的无能隙边缘激发. 从广义上讲, 拓扑绝缘体可以分两大类: 一类是破坏时间反演的量子霍尔体系, 另一类是新近发现的时间反演不变的拓扑绝缘体. 这些新材料的奇特物理性质和潜在的应用前景, 使其倍受人们关注. 文章对这种新奇物态的物理性质和研究进展做了简要的介绍.

关键词 拓扑绝缘体, 量子霍尔效应, 量子自旋霍尔效应, 拓扑分类

Topological insulators

YE Fei¹ SU Gang^{2,†}

(1 College of Materials Science and Optoelectronic Technology, Graduated University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

(2 College of Physical Sciences, Graduated University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract A new kind of insulator has been proposed recently, which is fully gapped in the bulk but has a metallic edge or surface states that are protected topologically. These electronic materials are dubbed as topological insulators (TIs). Generally speaking, TIs can be divided into two classes. One is the quantum Hall system which was found in the 1980s to show breaking of time reversal symmetry (TRS), and another is the newly discovered type which does not demonstrate TRS breaking and has attracted much attention recently. This article presents a brief review of recent advances in the development of TIs.

Keywords topological insulator, quantum Hall effect, quantum spin Hall effect, topological classification

1 引言

自然界的材料根据其电学输运性质, 可分为导体、半导体和绝缘体. 一般的导体中存在着费米面 (如图 1(a) 所示), 在其附近, 电荷元激发只需要消耗无穷小的能量. 因此当加上任意小的电场时, 系统就会有电流响应, 但这种电荷输运会受到杂质散射和声子散射等因素的影响. 一般来说, 随材料维数的降低, 电荷输运的通道就会变少, 从而导电性能也会变差.

半导体和绝缘体的费米面存在于禁带之中 (如图 1(b) 所示), 我们这里把它们归为一类. 在此类材料中, 任何电荷元激发都需要克服一个有限大小的能隙. 因此在足够低的温度下, 系统对弱电场不会有电流响应. 对于能带绝缘体而言¹⁾, 能隙大小是价带顶和导带底之间的禁带宽度. 作为最简单的能带绝

* 国家自然科学基金 (批准号: 10904081) 资助项目
2010-05-10 收到

† 通讯联系人. Email: gsu@gucas.ac.cn

1) 其他类型的绝缘态, 如莫特态、玻璃态以及安德森局域化态等, 本文将不涉及

缘体,我们考虑紧束缚近似下的惰性原子晶体模型.在原子极限下,所有电子都被紧紧束缚在原子周围不能移动,系统的能带是扁平的.由于惰性气体原子是满壳层的,所以价带被完全填满.如果我们调整原子之间的电荷跃迁几率幅(如通过加压改变原子的间距),则系统的能带会变宽,从而禁带宽度会相应地变小.虽然能隙发生了变化,但这并未导致系统的状态发生本质变化.加压前后的绝缘体态在能带结构上是拓扑等价的.这种等价性可以用来对绝缘体进行拓扑分类,前述的原子晶体模型只是其中拓扑平庸的一种.在不闭合系统能隙的前提下,不同拓扑等价类之间无法连续转化.这种分类并非仅在数学上有意义,事实上拓扑非平庸的绝缘体与普通绝缘体有本质的区别,它们虽然在体材料内部都具有电荷激发能隙,但是能带的拓扑结构完全不同.拓扑绝缘体在边界上存在着受到拓扑保护的稳定的低维金属态,这些无能隙的边缘激发处在禁带之中,并且连接价带顶和导带底(如图 1(c)和(d)).从这个意义上讲,拓扑绝缘体是介于普通绝缘体和低维金属之间的一种新物态.接下来我们简要介绍能带绝缘体的拓扑分类,以及拓扑绝缘体的有关物理性质.

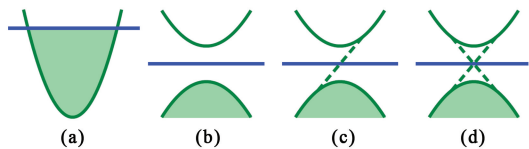


图 1 导体和绝缘体的能带示意图.其中(a)为导体,(b)为普通绝缘体,(c)为量子霍尔绝缘体,(d)为时间反演不变的拓扑绝缘体.图中黑色实线代表费米面,虚线代表边缘态,对于绝缘体来说,费米面处在禁带之中.当样品有边界时,禁带之间存在着受到拓扑保护的边缘态(如(c)和(d)),这些边缘态连接体系的价带顶和导带底

2 整数量子霍尔系统

整数量子霍尔效应是上世纪 80 年代初发现的一种宏观量子态.人们在研究强磁场中的二维电子气时,发现它的横向霍尔电导在外磁场改变时会在 e^2/h 的整数倍处出现平台,并且精度达到 10^{-8} [1].我们知道二维自由电子气在磁场中会形成分立的朗道能级.在足够低的温度下,当费米面位于两个朗道能级之间时,体系应该表现出绝缘体性质.进一步的研究表明,虽然系统内部的电荷激发的确存在能隙,但在系统边界存在着无能隙的激发,正是这些激发导致了量子化的霍尔电导.这些边缘态朝着一个方向运动,不存在背向散射通道(见图 2(a)),因此形

成了完美的一维金属[2, 3].

整数量子霍尔系统的这些特性完全符合人们对“拓扑绝缘体”的定义,尽管那时人们尚未明确提出该概念.实际上,在上世纪 80 年代以前,人们对物态的分类是基于朗道的对称性自发破缺理论,但是之后随着对量子霍尔效应的深入了解,材料的拓扑性质作为物态分类的新标准开始扮演日益重要的角色[4].下面我们先看体材料能带中的拓扑结构.根据布洛赫定理,周期性系统的波函数 $|u_n(k)\rangle$ 满足定态薛定谔方程:

$$H(k)|u_n(k)\rangle = E_n(k)|u_n(k)\rangle, \quad (1)$$

其中 n 是能带指标, k 是晶格动量.假设费米面以下的 N 个能带被完全填满.通过 $|u_n(k)\rangle$,我们可以在布里渊区上定义一个矢量场(规范势) $A = i \sum_{n=1}^N \langle u_n(k) | \nabla_k | u_n(k) \rangle$,与之相对应,还可定义一个场强 $F = \nabla_k \times A$.应该指出,在选取波函数时存在一个 $U(1)$ 的规范自由度,即 $e^{i\theta(k)}|u_n(k)\rangle$ 也满足同样的薛定谔方程(1).因此,当对 $|u_n(k)\rangle$ 做规范变换时, $|u_n(k)\rangle \rightarrow e^{i\theta_n(k)}|u_n(k)\rangle$,规范场会发生变化, $A(k) \rightarrow A(k) - \nabla_k \sum_{n=1}^N \theta_n(k)$,但场强 F 不变.在动量空间中定义的 A 和 F ,和实空间中电磁场的性质完全类似.在传统的电磁理论中,如果存在磁单极子的话,通过闭合曲面的磁通量是量子化的[5].由于体系的布里渊区是二维的闭合环面,因此通过该环面的“磁通”总数是整数,记为 n_w ,满足

$$\frac{1}{2\pi} \int d^2k F(k) = n_w. \quad (2)$$

换个角度来说,根据斯托克斯定理 $n_w = \frac{1}{2\pi} \oint A \cdot dl$,其中积分回路选取在布里渊区边界上.由于波函数在布里渊区边界上满足周期性条件,因此 n_w 必须是整数,我们称之为第一类陈数,它是能带结构上的一个拓扑不变量.在能隙不闭合的前提下,我们可以连续改变哈密顿量 $H(k)$,但 n_w 不会改变.更为重要的是, n_w 不仅仅是个数学上的量.1982 年, Thouless 等人(TKN²)在一篇奠基性的文章[6]中,利用久保公式计算了二维周期性晶格系统的霍尔电导 σ_H ,发现它等于 $n_w e^2/h$.这不仅揭示了整数霍尔电导的拓扑来源,而且也开启了拓扑学在凝聚态物理中应用的大门.

上面对能带拓扑结构的描述需要利用周期性边界条件.当系统存在边界时,比如将一个拓扑绝缘体 ($n_w \neq 0$) 和一个普通绝缘体 ($n_w = 0$,真空可以看成是一种普通绝缘体)接在一起,这样在边界处, n_w 的数值会发生变化,因此能隙在界面处必须闭

合,否则 n_w 作为一个拓扑不变量不会发生变化. 此时,处于禁带中的费米面附近存在着无能隙的激发,它们对应的单粒子态分布在系统的边界上(见图 2(a)). 从这个意义上来说,整数量子霍尔绝缘体是介于二维普通绝缘体和一维金属之间的一种新量子物态. 它向人们展示了能带绝缘体可以通过表征能带拓扑结构的陈数 n_w 进行分类.

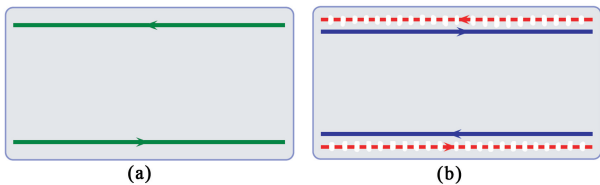


图 2 拓扑绝缘体的边缘态示意图:(a) 破坏时间反演的整数量子霍尔系统;(b) 时间反演不变的自旋霍尔绝缘体,其中的灰色实线和灰色虚线是一时间反演共轭对

在整数量子霍尔效应中,我们需要一个外加的磁场,它会破坏系统的平移对称性,并导致出现分立的朗道能级. 1988 年, Haldane^[7] 提出了一个六角晶格上的紧束缚模型. 他在每一个六角原胞的中心引入适当的磁偶极子, 这样虽然破坏了时间反演对称性,但不会出现朗道能级,而且晶格的平移对称性得到保持. 我们仍然可以使用原来六角晶格的布里渊区,该模型可以写成

$$H^{(h)}(k) = \mathbf{h}(k) \cdot \mathbf{s} \quad (3)$$

上式中 \mathbf{s} 是 2×2 的泡利矩阵,它对应着蜂窝结构的两套子格, $\mathbf{h}(k)$ 是个非零三维矢量. 根据久保公式,我们可以算出这个体系的霍尔电导 $\sigma_H = ne^2/h$. 定义单位矢量 $\hat{h} \equiv \mathbf{h}/|\mathbf{h}|$ 后,整数 n 可写为

$$n = \frac{1}{4\pi} \int d^2k (\partial_{k_x} \hat{h} \times \partial_{k_y} \hat{h}) \cdot \hat{h} \quad (4)$$

注意到矢量函数 $\mathbf{h}(k)$ 对应着从布里渊区的轮胎面到 S^2 球面的一个映射,所以整数 n (公式(4)) 其实对应着这个映射的绕数^[8]. Haldane 模型的关键之处在于,矢量函数 \mathbf{h} 的 Z 分量在布里渊区中的 K 和 K^* 点符号相反. 在这种情况下, $n = \pm 1$, 即系统存在量子化的霍尔电导. 当系统有边界时, Haldane 模型的能谱如图 1(c) 所示,而图 2(a) 是它的边缘态示意图.

3 二维自旋霍尔绝缘体

上面提到的整数量子霍尔系统,无论是 Haldane 模型还是传统的整数量子霍尔系统,它们的共同特点都是时间反演对称性被破坏,这是在样品边界上出现无耗散手征激发的必要条件,同样也是系

统的能带结构可以用非零陈数 n_w 刻划的必要条件. 1983 年,人们证明 TKN² 的第一类陈数 n_w 可以被用来对定义在复数域上的任意维的哈密顿量进行拓扑分类^[9]. 但是当系统具有时间反演不变性时, $n_w = 0$, 也就是说,不存在霍尔电导,这一点可以通过分析霍尔电导表达式 $j_x = \sigma_H E_y$ 的对称性得到证明. 因此对于具有时间反演对称性的系统,就无法继续使用第一类陈数进行分类了.

时间反演算符 Θ 是个反么正算符,它可以写成 $\Theta = \exp(i\pi \hat{J}_y) \kappa$, κ 是复共轭算符, \hat{J}_y 是角动量算符的 y 分量. 对于整数自旋的玻色子, $\Theta^2 = 1$. 但是对于半奇数自旋的费米子, $\Theta^2 = -1$, 这将会导致 Kramers 简并,因此费米子哈密顿量的本征态都是成对出现的,使得我们在选取系统本征态时有一个 $SU(2)$ 的规范自由度. Dyson 在 1962 年已经注意到,时间反演不变系统的哈密顿量的矩阵元可以在四元数域上取值^[10]. 1988 年, Avron 等人尝试对定义在四元数域上的哈密顿量进行拓扑分类^[11], 并指出需要使用第二类陈数来代替第一类陈数,以便刻划时间反演不变系统的拓扑性质. 该文使用了一个简单的在电四极场作用下的自旋 $3/2$ 模型,对这种分类进行了说明. 2001 年,张首晟和胡江平把量子霍尔效应从二维推广到四维^[12], 相应地,原来的 $U(1)$ 规范场也被 $SU(2)$ 规范场代替. 在这种情况下,整个系统实际上是时间反演不变的. 在这样的系统中,施加一个纵向的电场会导致横向无耗散的 $SU(2)$ 自旋流出现. 随后, Murakami 等人在此基础上又研究了三维材料由自旋轨道耦合导致的无耗散自旋流^[13].

2005 年, Kane 和 Mele 通过研究石墨上的自旋轨道耦合效应,指出在单层石墨中会出现量子化的自旋霍尔效应,该预言是基于假设系统总自旋 S^z 是个好量子数^[14]. 在此假设下,他们所构造的模型可以写成两部分:

$$H(k) = \begin{pmatrix} H_{\uparrow}^h(k) & 0 \\ 0 & H_{\downarrow}^h(k) \end{pmatrix} \quad (5)$$

其中 $H_{\uparrow, \downarrow}^h(k)$ 是自旋向上(向下)电子的 Haldane 模型. 关于石墨中自旋轨道耦合模型的详细推导可参阅文献 [15]. 该系统是时间反演不变的,即 $\Theta H(k) \Theta^{-1} = H(-k)$. 自旋向上和自旋向下的电子分别贡献一个单位、符号相反的霍尔电导,即 $\sigma_{H\uparrow}^e = \frac{e^2}{h}$ 和 $\sigma_{H\downarrow}^e = -\frac{e^2}{h}$, 所以系统总的霍尔电导 $\sigma_{H\text{总}}^e = 0$; 但 $\sigma_{H\uparrow}^s = \frac{1}{2}(\sigma_{H\uparrow}^e - \sigma_{H\downarrow}^e) = \frac{e^2}{h}$ 会导致系统存在量子化的自旋霍尔效应. 此时在系统的边界上存在两种互为时间反演的

边缘激发,它们的自旋和速度相反,并构成一维无质量的狄拉克粒子(见图 1(d) 和图 2(b)). 如果我们假设系统的边界在 x 方向,同时在 y 方向满足周期性条件,狄拉克简并点只能出现在 $k_y=0$ 或 $k_y=\pi$ 处,因为在这两个波矢处系统是时间反演不变的.

这一对无质量的边缘激发的重要特征是,狄拉克简并点受到时间反演对称性保护,在其附近非磁杂质散射不会打开能隙. 这个结论可作如下说明^[16],假设 Ψ 是一个边缘态,时间反演对称性要求 $\Theta\Psi$ 是另外一个边缘态. 我们考虑任意一个非磁杂质在这对时间反演共轭对之间的散射矩阵元,考虑到非磁杂质散射满足 $\Theta V = V\Theta$, 而 $(\Theta\Psi, V\Psi) = -(\Theta V\Psi, \Psi)$, 所以 $(\Theta\Psi, V\Psi) = 0$, 即在时间反演共轭态之间不存在非磁杂质导致的散射.

由于在实际材料中存在着破坏 S^z 守恒的项,如 Rashba 自旋轨道耦合项,所以 S^z 不再是好量子数,因此不能实现量子化自旋霍尔效应. 但是 Kane 和 Mele 注意到,只要这些散射项不破坏时间反演,作为边缘态出现的无质量的狄拉克粒子就能保留下来^[17],只是这些态上的自旋和动量会耦合在一起,这样的边缘态被称为“helical liquid”^[18]. 他们由此提出了二维量子霍尔绝缘体的 Z_2 分类,该分类可以简单理解为边界上时间反演共轭对数目的奇偶性. 我们前面已经证明,当在边界上只存在一对时间反演共轭对时,非磁杂质不会导致共轭对之间的耦合,所以这个无能隙的边缘金属态是受到时间反演对称性保护的. 但是如果在边界上存在两支时间反演共轭对的话,背向散射就会在这两对之间发生,从而导致狄拉克点的简并被移除,一维的边缘金属态也被破坏了. 因此奇数对狄拉克粒子和偶数对狄拉克粒子在物理性质上有本质不同.

要实现时间反演不变的拓扑绝缘体,必须利用自旋轨道耦合来打开电荷激发能隙. 由于石墨中的本征自旋轨道耦合太弱,大约只有 10^{-3} meV ^[15], 实验上很难被观测到. 要获得较强的自旋轨道耦合效应,人们应该在重原子材料中寻找拓扑绝缘体. 2006 年, Bernevig, Hughes 和张首晟指出由自旋轨道耦合导致的能带反转是实现量子自旋霍尔效应的一般机制,可以在半导体材料 HgTe 和 CdTe 形成的量子阱中来实现^[19]. 在一般的半导体材料中,导带电子是 s 轨道贡献的,价带则是由 p 轨道形成的, CdTe 就是这样一种常规的半导体材料. 但在 HgTe 中,由于自旋轨道耦合非常强,引起 s-p 轨道之间的能带反转. 这种能带翻转会导致材料能带上出现

非平庸的拓扑结构,从而实现二维的量子自旋霍尔效应. 在 CdTe-HgTe-CdTe 量子阱中,可以通过调节中间层 HgTe 的宽度,来实现正常能带结构到反转能带结构之间的转变. 遵循这种能带翻转的思想,刘朝星等人通过理论计算表明,在 InAs/GaSb 结构中也有可能观测到自旋霍尔效应^[20].

2007 年,德国的一个实验小组制备了 CdTe-HgTe-CdTe 三明治型量子阱,其中中间层的宽度是 d . 通过测量样品的纵向电导,发现中间层 HgTe 存在一个临界宽度 d_c . 当 $d < d_c$ 时,材料的电导几乎是 0, 这表明,作为常规半导体的 CdTe 在起主要作用. 但当 $d > d_c$ 时,材料的电导是 $2 \times \frac{e^2}{h}$, 并且其数值大小与样品的宽度无关. 我们知道,时间反演不变的自旋霍尔系统的边缘态存在两个通道,人们因此相信此时中间层能带反转材料 HgTe 起主要作用,导致体系处于自旋霍尔绝缘体态. 这也是人们首次在实验上观测到了时间反演不变的体系表现出非平庸的拓扑性质. 在这种量子阱中,杂质散射起着令人意想不到的作用. 最近的理论研究表明,它们会导致一种被称为拓扑安德森绝缘体的态出现^[21, 22], 这种拓扑非平庸的态甚至不需要量子阱中的能带翻转.

4 三维拓扑绝缘体

2006 年,时间反演不变的拓扑绝缘体由 3 个小组从二维推广到三维体系^[23-25]. 从另外的角度来看,三维拓扑绝缘体也可以通过对四维推广的量子霍尔模型^[12]降维来得到^[26].

对于三维绝缘体来说,其表面是个二维体系,在布里渊区中存在 4 个时间反演对称的点. 当体系存在表面态时,在这些特殊的点上,会出现 Kramers 简并,从而可能形成二维的狄拉克能谱. 同二维自旋霍尔绝缘体类似,三维的拓扑绝缘体也可以通过 Z_2 的拓扑不变量来分类,即表面布里渊区中狄拉克点数目的奇偶性决定了绝缘体的拓扑类别. Fu 和 Kane 从单粒子波函数的角度,利用体材料在布里渊区的波函数性质,定义了一个拓扑不变量来刻划拓扑绝缘体的拓扑分类^[27]. 他们引入了一个矩阵 $\omega_{mn}(k) \equiv \langle u_m(k) | \Theta | u_n(-k) \rangle$. 当考虑三维体系时,在动量空间一共有 8 个时间反演不变的点,记为 $\Lambda_\alpha (\alpha=1, \dots, 8)$, 在这些点上, k 和 $-k$ 可以通过一个倒格矢联系起来,如图 3(a) 所示. 容易证明, $\omega_{mn}^T(\Lambda_\alpha) = -\omega_{mn}(\Lambda_\alpha)$, 这是一个完全反对称的矩阵,

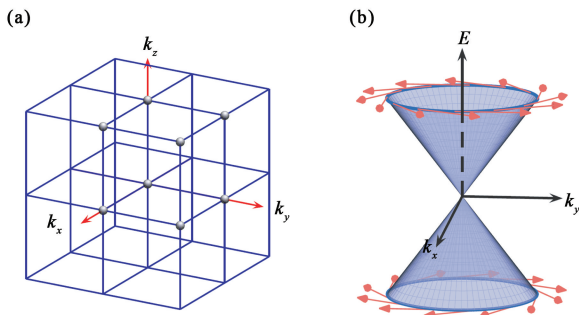


图3 (a) 三立方晶格的布里渊区示意图,图中圆点代表时间反演不变的动量;(b) 三维拓扑绝缘体边缘态狄拉克谱的示意图,其中灰色箭头代表自旋的指向

它的行列式等于它的 Pfaffian 的平方. 于是可以定义整数 $\delta_a = pf[\omega(\Lambda_a)]/\sqrt{\det[\omega(\Lambda_a)]}$, 该整数只能等于 ± 1 . 然后, 通过下式定义特征参数 ν_0 :

$$(-1)^{\nu_0} = \prod_{a=1}^8 \delta_a \quad (6)$$

值得注意的是, 在目前情况下, 我们必须要求波函数 $|u_n(k)\rangle$ 在布里渊区连续, 否则, δ_a 的符号可以任意选取, 其定义将失去意义. 另外我们还可以针对不同的表面, 去计算另外 3 个特征系数 $\nu_{1,2,3}$, 它们的计算涉及到表面布里渊区中 4 个时间反演不变点. 当参数 $\nu_0 = 1$ 时, 体系被称为“强拓扑绝缘体”; 当 $\nu_0 = 0$ 而 $\nu_{1,2,3}$ 不为零时, 即是“弱拓扑绝缘体”, 此时材料是否会展现狄拉克型能谱的表面态, 取决于表面的指向. Fu 和 Kane 更进一步指出, 当材料具有反射对称性时, 在这些时间反演不变的点上, 系统的波函数还具有确定的宇称 $\xi_m(\Lambda_a) = \pm 1$, 并且 $\delta_a = \prod_{m=1}^{2N} \xi_m(\Lambda_a)$, 其中 $2N$ 是费米面下能带的数目. 这个特点有助于人们寻找到合适的拓扑绝缘体. Fu 和 Kane 通过该方法预言了 $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ 和 $\alpha\text{-Sn}$ 是拓扑绝缘体.

2008 年, Hsieh 等人通过角分辨光电子谱观测到了 $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ 材料表面的狄拉克型能谱, 这是实验上首次对三维拓扑绝缘体的报道^[28]. 但这种材料是一种合金, 其结构和表面的性质极其复杂. 2009 年, 方忠和张首晟等人合作报道了他们对 Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 以及其他一些材料的能带计算结果, 表明前面两种材料都是强拓扑绝缘体, 并给出了其表面的单个狄拉克能谱的低能有效模型^[29]. 与此同时, 美国 Princeton 的研究小组也独立地报道了他们对 Bi_2Te_3 和 Bi_2Se_3 的角分辨光电子谱的实验结果, 确定了这两种材料都是表面只有一支狄拉克能谱的强拓扑绝缘体^[30]. 令人惊奇的是, Bi_2Se_3 的禁带宽度达到了 0.3eV, 远高于室温. 另外, Bi_2Se_3 与 $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ 不同, 它是晶体, 可以获得纯度很高的样品,

具有进一步的潜在应用价值. 目前, 薛其坤等人通过分子束外延的方法, 生长出了高质量的 Bi_2Se_3 和 Bi_2Te_3 薄膜^[31, 32], 并通过角分辨光电子谱的实验验证了表面狄拉克谱的存在. 吕力等人也报道了他们在 SrTiO_3 衬底上生长 Bi_2Se_3 薄膜^[33], 并对其载流子浓度进行大幅度调控的工作. 除了上述这些材料之外, 最近的能带计算还预言了一类具有新型结构的拓扑绝缘体材料 TlBiQ_2 和 TlSbQ_2 ^[34] (这里 Q 可以是 Te, Se 和 S).

三维拓扑绝缘体的表面态可以用纯粹的自旋轨道耦合模型来描写, 其低能有效理论可以写成^[29]

$$H_{\text{surface}} = -i \hbar v_F (\sigma \times \nabla)_z \quad (7)$$

这里 v_F 是体系的费米速度, σ 是泡利矩阵. 可以看到电子的自旋和其轨道运动完全耦合在一起. 对于每一个 k 态, 其自旋的指向如图 3(b) 所示. 当电子态绕狄拉克点转一圈后, 电子的自旋转过了 2π 角度, 引起了一个 π 的贝里位相. 从另外一个角度来看, 时间反演对称性保证了 k 到 $-k$ 的背向散射不会发生, 这使得强拓扑绝缘体表面金属态非常稳定, 不会被非磁杂质散射而导致局域化^[35]. 从这个意义上说, 三维拓扑绝缘体和二维拓扑绝缘体的性质是非常相似的. 此外, 由于磁性杂质可能会破坏时间反演对称性, 从而在狄拉克点打开能隙, 并进而破坏表面态的金属性, 因此拓扑绝缘体中的磁性杂质效应非常重要. 对磁性杂质的进一步研究表明, 拓扑绝缘体表面金属态的独特性质, 会在磁性杂质的近藤效应以及 RKKY 相互作用上都有明显反映^[36-38].

值得一提的是, 目前狄拉克型能谱在很多体系中都会出现, 特别是石墨体系^[39]. 拓扑绝缘体表面的狄拉克能谱和石墨有本质不同, 原因在于 Fermion doubling 定理. 实际上, 上世纪 80 年代初, 人们就证明了在普通格点模型中, 狄拉克粒子一定是成对出现的^[40]. 在二维石墨中的狄拉克点就是成对出现的, 但是三维拓扑绝缘体的二维表面态可以避免这个问题, 因为成对出现的两支狄拉克能谱由于拓扑的原因被推到了材料的两个不同的表面上, 从而相互被完全隔开, 因此这些表面态中可以只有一个狄拉克点. 但在超薄的拓扑绝缘体薄膜中, 因为两个表面靠得比较近, 它们之间会发生耦合并打开能隙, 从而导致狄拉克点的简并被移除^[41].

5 拓扑绝缘体有效场论

我们知道, 二维量子霍尔效应可以通过陈-赛门斯有效场论进行描述^[42], 时间反演不变的拓扑绝缘体也可以用有效拓扑场论来描述. 祁晓亮, Huges

和张首晟在 2008 年给出了 2+1 维和 3+1 维拓扑绝缘体的有效拓扑场理论^[26], 这些有效场理论可以通过降维从 4+1 维的拓扑绝缘体得到. 原则上, 当我们积分掉哈密顿量中的费米子自由度以后, 就会得到绝缘体中电磁场的有效作用量: $S_0 = \frac{1}{8\pi} \int d^3x dt (\epsilon \mathbf{E}^2 - \frac{1}{\mu} \mathbf{B}^2)$, 这里的 ϵ 和 μ 是材料中的介电常数和磁导率. 但是在三维拓扑绝缘体中还会出现下面的磁电耦合项:

$$S_\theta = \frac{\theta\alpha}{4\pi^2} \int d^3x dt \mathbf{E} \cdot \mathbf{B} \quad (8)$$

其中精细结构常数 $\alpha = e^2/hc$. S_θ 是一个拓扑项, 它只依赖于物理空间拓扑结构. 这种拓扑项最早出现在粒子物理领域中^[43]. 在凝聚态材料中, 该项的出现会导致材料出现奇特的磁电耦合效应^[26, 44, 45]. S_θ 中的系数 θ 可以用来对拓扑绝缘体进行分类^[26, 44]. 由于电场项 E 在时间反演时不变, 而磁场项 B 在时间反演时会变号, 所以一般来说, S_θ 是破坏时间反演的. 但在 $\theta=0$ 和 π 时, S_θ 并不破坏系统的时间反演对称性, 这为我们提供了时间反演不变的拓扑绝缘体的另外一种 Z_2 分类方式. 很明显, $\theta=0$ 对应着普通绝缘体, 而 $\theta=\pi$ 对应着拓扑绝缘体. 这种分类方式要比上一节中提到的利用材料布里渊区内单粒子波函数的信息来分类更加清晰.

6 结论和展望

拓扑绝缘体本质上是一种单粒子态, 可以用能带理论进行描述. 令人惊奇的是, 单粒子能带理论经过几十年的发展, 至今依然具有值得深入研究的内容. 这些内容都和量子力学的本质问题——位相密切相关. 这里的位相可以是阿贝尔的(整数霍尔效应), 也可以是非阿贝尔的(时间反演不变的拓扑绝缘体), 它们直接导致体系拓扑性质上的不同. 人们期待着通过研究其输运性质, 能够在实验上直接观测到拓扑绝缘体的表面金属态, 并探索其可能的实际应用前景. 除了拓扑绝缘体, 现在人们也关注着超导体中的拓扑分类. 类似地, 拓扑非平庸的超导体在边界上也存在着无能隙的实费米子激发. 关于拓扑绝缘体和超导体的分类, 可以参阅文献^[46]和^[47]. 这些从理论上提出的非平庸拓扑相, 还有待实验的证实.

参考文献

[1] Klitzing K V, Dorda G, Pepper M. Phys. Rev. Lett., 1980, 45:494
 [2] Halperin B I. Phys. Rev. B, 1982, 25:2185

[3] Wen X G. Phys. Rev. B, 1990, 41:12838
 [4] Wen X G. Advances in Physics, 1995, 44:405
 [5] Wu T T, Yang C N. Phys. Rev. D, 1975, 12:3845
 [6] Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P *et al.* Phys. Rev. Lett., 1982, 49:405
 [7] Haldane F D M. Phys. Rev. Lett., 1988, 61: 2015
 [8] Hsiang W Y, Lee D H. Phys. Rev. A, 2001, 64: 052101
 [9] Avron J E, Seiler R, Simon B. Phys. Rev. Lett., 1983, 51: 51
 [10] Dyson F J. J. of Math. Phys., 1962, 3:140
 [11] Avron J E, Sadun L, Segert J *et al.* Phys. Rev. Lett., 1988, 61: 329
 [12] Zhang S C, Hu J P. Science, 2001, 294:823
 [13] Murakami S, Nagaosa N, Zhang S C. Science, 2003, 301: 1348
 [14] Kane C L, Mele E J. Phys. Rev. Lett., 2005, 5:226801
 [15] Yao Y, Ye F, Qi X L *et al.* Phys. Rev. B, 2007, 75: 041401
 [16] Xu C, Moore J E. Phys. Rev. B, 2006, 73:045322
 [17] Kane C L, Mele E J. Phys. Rev. Lett., 2005, 95:146802
 [18] Wu C, Bernevig B A, Zhang S C. Phys. Rev. Lett., 2006, 96:106401
 [19] Bernevig B A, Hughes T L, Zhang S C. Science, 2006, 314:1757
 [20] Liu C, Hughes T L, Qi X L *et al.* Phys. Rev. Lett., 2008, 100:236601
 [21] Li J, Chu R L, Jain J K *et al.* Phys. Rev. Lett., 2009, 102: 136806
 [22] Jiang H, Wang L, Sun Q F *et al.* 2009. arXiv: 0905.4550v1
 [23] Roy R. 2006. arXiv: cond-mat/0607531
 [24] Fu L, Kane C L, Mele E J. Phys. Rev. Lett., 2007, 98: 106803
 [25] Moore J E, Balents L. Phys. Rev. B, 2007, 75:121306
 [26] Qi X L, Hughes T L, Zhang S C. Phys. Rev. B, 2008, 78: 195424
 [27] Fu L, Kane C L. Phys. Rev. B, 2007, 76:045302
 [28] Hsieh D, Qian D, Wray L *et al.* Nature, 2008, 452:970
 [29] Zhang H, Liu C X, Qi X L *et al.* Nat. Phys., 2009, 5:438
 [30] Xia Y, Qian D, Hsieh D *et al.* Nat. Phys., 2009, 5:398
 [31] Zhang T, Cheng P, Chen X *et al.* Phys. Rev. Lett., 2009, 103:266803
 [32] Zhang Y, He K, Chang C Z *et al.* 2009. arXiv:0911.3706v2
 [33] Chen J, Qin H J, Yang F *et al.* 2010. arXiv: 1003.1534v2
 [34] Yan B, Liu C X, Zhang H J *et al.* 2010. arXiv: 1003.0074v1
 [35] Nomura K, Koshino M, Ryu S. Phys. Rev. Lett., 2007, 99:146806
 [36] Liu Q, Liu C X, Xu C *et al.* Phys. Rev. Lett., 2009, 102: 156603
 [37] Gao J, Chen W, Xie X C *et al.* Phys. Rev. B, 2009, 80: 241302
 [38] Ye F, Ding G H, Zhai H *et al.* 2009. arXiv: 1002.0111, to be published
 [39] Castro Neto A H, Guinea F, Peres N M R *et al.* Rev. Mod. Phys., 2009, 81:109
 [40] Nielsen H B, Ninomiya M. Phys. Lett., 1981, B105:219
 [41] Lu H Z, Shan W Y, Yao W *et al.* 2010. arXiv: 0908.3120v2
 [42] Zhang S C, Hansson T H, Kivelson S. Phys. Rev. Lett., 1989, 62:82
 [43] Wilczek F. Phys. Rev. Lett., 1987, 58:1799
 [44] Qi X L, Li R, Zang J *et al.* Science, 2009, 23: 1184
 [45] Essin A M, Moore J E, Vanderbilt D. Phys. Rev. Lett., 2009, 102: 146805
 [46] Schnyder A P, Ryu S, Furusaki A *et al.* Phys. Rev. B, 2008, 78:195125
 [47] Kitaev A. 2009. arXiv: 0901.2686v2