



山西大學  
Shanxi University

2017 届硕士学位论文

# 二维自旋轨道耦合下拓扑半金属的量子模拟

作者姓名	刘聪明
指导教师	张云波 教授 徐志浩 副教授
学科专业	理论物理
研究方向	冷原子中的量子理论
培养单位	理论物理研究所
学习年限	2014 年 9 月至 2017 年 6 月

二〇一七年六月



山西大学

2017 届硕士学位论文

# 二维自旋轨道耦合下拓扑半金属的量子模拟

作者姓名	刘聪明
指导教师	张云波 教授 徐志浩 副教授
学科专业	理论物理
研究方向	冷原子中的量子理论
培养单位	理论物理研究所
学习年限	2014 年 9 月至 2017 年 6 月

二〇一七年六月

**Thesis for Master's degree, Shanxi University, 2016**

Quantum simulation of topological semi-metallic under two  
dimensional spin orbit coupling

Student Name	Cong-ming Liu
Supervisor	Prof. Yun-bo Zhang Ass. Prof. Zhi-hao Xu
Major	Theoretical Physics
Specialty	Quantum theory on Cold atoms
Department	Institute of Theoretical Physics
Research Duration	2014.09-2017.06

June, 2017

中文摘要.....	I
ABSTRACT.....	III
第一章 绪论.....	1
1.1 超冷原子系统.....	1
1.1.1 玻色—爱因斯坦凝聚.....	1
1.1.2 光晶格.....	1
1.1.3 自旋轨道耦合.....	3
1.2 拓扑半金属.....	4
1.2.1 狄拉克半金属和外尔半金属.....	5
1.2.2 狄拉克方程和外尔方程.....	6
1.3 本文内容.....	9
第二章 二维自旋轨道耦合效应的有关推导.....	11
2.1 从经典物理出发得出自旋轨道耦合的来源.....	11
2.2 二维自旋轨道耦合在电子系统的本征值和本征态.....	14
2.3 二维自旋轨道耦合的二次量子化.....	16
第三章 拓扑相在冷原子光晶格中的模拟.....	21
3.1 狄拉克费米子在冷原子光晶格中的模拟和实现.....	21
3.1.1 理论模型和能谱.....	21
3.1.2 密度分布.....	24
3.2 外尔半金属在冷原子光晶格中的模拟.....	25
3.2.1 理论模型和能谱.....	25
3.2.2 拓扑不变量和边缘态.....	28
3.3 二维正方晶格中的自旋轨道耦合效应.....	30
3.3.1 理论模型和能谱.....	31
3.3.2 自旋轨道耦合的相对强度对系统色散关系的影响.....	32
3.3.3 自旋轨道耦合的相对强度对系统边缘态的影响.....	33
3.3.4 能带接触点的拓扑不变量.....	36
第四章 总结与展望.....	39
参考文献.....	41
攻读学位期间取得的研究成果及参与科研的项目.....	46

致 谢.....	47
个人简况及联系方式.....	48
承 诺 书.....	49
学位论文使用授权声明.....	50

## Contents

<b>Chinese Abstract</b> .....	I
<b>ABSTRACT</b> .....	III
<b>Chaprer 1 Introduction</b> .....	1
1.1 Ultracold atomic systems.....	1
1.1.1 Bose-Einstein condensation.....	1
1.1.2 Optical lattice.....	1
1.1.3 Spin-orbit coupling.....	3
1.2 Topological semi-metal.....	4
1.2.1 Dirac semi-metal and Weyl semi-metal.....	5
1.2.2 Dirac equation and Weyl equation.....	6
1.3 Content.....	9
<b>Chapter 2 The derivation of two dimensional spin orbit coupling effect</b> .....	11
2.1 The origin of spin orbit coupling is derived from classical physics.....	11
2.2 Eigenvalues and eigenstates of two dimensional spin orbit coupling in electronic systems.....	14
2.3 Two quantization of two dimensional spin orbit coupling.....	16
<b>Chapter 3 Simulation of topological phase in cold atomic optical lattices</b> .....	21
3.1 Simulation and detection of Dirac fermions in cold atomic optical lattices.....	21
3.1.1 Theoretical model and energy spectrum.....	21
3.1.2 Density distribution.....	24
3.2 Simulation of Weyl semimetal in cold atomic optical lattices.....	25
3.2.1 Theoretical model and energy spectrum.....	25
3.2.2 Topological invariants and edge states.....	28
3.3 Simulation of Weyl semimetal in cold atomic optical lattices.....	31
3.3.1 Theoretical model and energy spectrum.....	31
3.3.2 The influence of the relative strength of spin orbit coupling on the dispersion relation.....	32
3.3.3 The influence of the relative strength of spin orbit coupling on the Edge	

states.....	33
3.3.4 Topological invariants of contact points.....	36
<b>Chapter 4 Summary and Outlook.....</b>	<b>39</b>
<b>References.....</b>	<b>41</b>
<b>Research Achievements.....</b>	<b>46</b>
<b>Acknowledgment.....</b>	<b>47</b>
<b>Personal Profiles.....</b>	<b>48</b>
<b>Letter of Commitment.....</b>	<b>49</b>
<b>Authorization Statement.....</b>	<b>50</b>



## 中文摘要

拓扑物质态是一大类具有拓扑属性的，新奇的量子物质态，其不能像传统的物质态那样用对称破缺等理论描述，其拓扑特性可以用拓扑不变量来描述。自上世纪80年代量子霍尔效应被发现后，其相关的理论知识和实验探究得到了广泛的关注和研究。尤其在2016年，诺贝尔物理学奖授予了提出凝聚态物质中拓扑相变和拓扑相的三位物理学家，从而使拓扑物理学赢得了更多人的研究热情。其包括的拓扑绝缘体，拓扑半金属，拓扑超流、超导等很多拓扑物质态都取得了一定的进展。

在冷原子方面，冷原子物理学是原子物理学的一个非常重要的分支。冷原子由于其温度低，运动速度慢，而且原子间的碰撞远小于热原子，因此其具有更稳定的能级结构和更好的操控性。将冷原子囚禁于由激光相互干涉而形成的周期性网状势阱中，即可实现类似于晶体结构的光晶格。光晶格作为一个纯净的、易操控的实验平台，已经成为一个模拟和研究物质态系统的最便利的工具之一。其广泛应用于磁学、动力学及量子学等学科，同时在众多领域内都有着重要的应用价值。而对于拓扑物质态，我们也可以用光晶格进行有效的模拟和探究，相比于真实材料，其简易的可控性和操作性为实验的实现提供了便利。

本文主要在冷原子光晶格中，模拟和研究拓扑半金属和其它拓扑物质态的性质。由冷原子光晶格构成的研究系统，在紧束缚近似下，从系统的哈密顿量出发，通过对角化、傅里叶变换，研究和分析系统在动量空间的能谱，并计算其拓扑不变量，从而确定系统所对应的物质相。运用降维法，研究其边缘态的性质，从而验证所对应物质相的属性。另外，文章通过改变二维自旋轨道耦合的强度，计算了不同强度对系统色散关系和边缘态的影响。不同强度的自旋轨道耦合并不会打开系统的能隙，说明系统一直处于半金属，而边缘态的存在和得到的拓扑不变量说明系统具有拓扑非平庸的特性。

**关键词：**自旋轨道耦合；拓扑半金属；拓扑不变量；边缘态



**ABSTRACT**

Topological state is a new kind of quantum state, which has topological properties. It can not be described by the theory of symmetry breaking, but it can be described by topological invariants. Since the quantum Hall effect was discovered in 1980s, the relevant theories and experiments have been widely concerned and studied. In particular, the Nobel prize in physics was awarded to the three physicists in 2016, who proposed topological phase transitions and topological phases in condensed matter. Thus, one pays much more attentions to topological physics. Some progresses have been made in topological states, such as topological insulators, topological semimetals, topological superconductors and so on.

Cold atom is an important branch of atomic physics. Due to three features of cold atoms: the slow speed, low temperature, and the lower collision probability than hot atoms, it has a more stable energy level structure and better controllability. When the cold atoms are trapped in the periodic network trap formed by the mutual interference of the laser, the optical lattice which is similar to the crystal structure can be realized. As a pure and controllable experimental platform, optical lattice has gradually become one of the most convenient tools to simulate physical systems. It is widely used in many subjects, such as magnetism, dynamics and quantum theory, and has important applications in many fields. For the topological state, it can be effectively simulated and explored by optical lattices. Compared to the real material, the simple controllability and operability of the optical lattice provides convenience for the realization of the experiment.

In this paper, we study the properties of topological semi-metallic and other topological phases in optical lattices. By the tight binding approximation, the Fourier transform and the diagonalization, we study energy spectrum of system in momentum space, and calculate the topological invariants to determine the corresponding phases. By means of the dimension

reduction method, we study the properties of the edge states and verify the properties of the corresponding phases. In addition, the effects of different strengths on the energy spectrum and edge states are analyzed by changing the strength of the two dimensional spin orbit coupling. The different strengths of spin orbit coupling do not open the energy gap of the system, which shows that the system preserves the semi-metallic properties, and the existence of the edge states and the topological invariants show that the system has nontrivial topological characteristics.

**Key words:** Spin orbit coupling ; Topological semimetal; Topological invariant; Edge state

## 第一章 绪论

### 1.1 超冷原子系统

冷原子物理是原子物理学的一个重要分支，到目前为止已经有几十年的发展历史。随着研究的不断深入和激光制冷<sup>[1-2]</sup>等技术的发展，冷原子物理已成为物理学的一个重要研究领域。光晶格是冷原子物理的一个重要研究对象，是实验上模拟和研究多体系统的重要手段，其广泛应用于磁学、动力学及量子物理等领域，同时在原子钟、精确测量等方面都有着重要的应用价值。

#### 1.1.1 玻色—爱因斯坦凝聚

冷原子物理是研究在极低温度的条件下，原子样品的制备以及在此条件下原子的性质，结构和应用的学科。在量子物理学中，量子物理不同于经典物理的本质是粒子具有波粒二象性。当粒子间的平均间隔与粒子的德布罗意波波长在同一量级时，物质将表现出显著的量子特征。爱因斯坦曾经预言，在极低温条件下，当原子间的距离与原子的德布罗意波波长可比拟时，理想玻色气体会凝聚在能量最低的基态上，即发生玻色—爱因斯坦凝聚(BEC)<sup>[3]</sup>。玻色—爱因斯坦凝聚态与寻常微观量子现象相比，是一种截然不同的宏观量子态。在实验上，我们发现玻色—爱因斯坦凝聚态可以通过降低温度<sup>[1]</sup>和提高粒子数密度<sup>[2]</sup>的方法来实现。历史上首次制备出原子气体的玻色—爱因斯坦凝聚体<sup>[4]</sup>是由美国物理学家于1995年实现。而目前蒸发冷却技术，激光冷却技术和绝热压缩技术等是实现玻色—爱因斯坦凝聚，有效获取冷原子样品的常用方法。

#### 1.1.2 光晶格

光晶格可以说就是利用激光囚禁冷原子而形成的一种光学晶体。具体方法是冷原子囚禁于对射的两束具有相同波长的激光所形成的周期性网状势阱中，即实现冷原子的光学囚禁，从而形成冷原子在空间结构上的周期性排列，即称之为“光晶格”。在固体物理学中，固体模型中原子之间的距离一般是几埃，电子间的相互作用比较强，从而使固体模型的结构通常是复杂多变，并且难以求解的，这为研究者研究其结构和性质带来了极大的困难。但令人欣喜的是，光晶格系统中原子与原子间的相互作用由于原子之间的距离通常是微米级，因此原子之间的影响很微弱，而

且光晶格中冷原子的性质与固体模型中电子的性质非常相似，因此冷原子光晶格可以用来模拟和研究固体物理学中复杂的晶体模型。

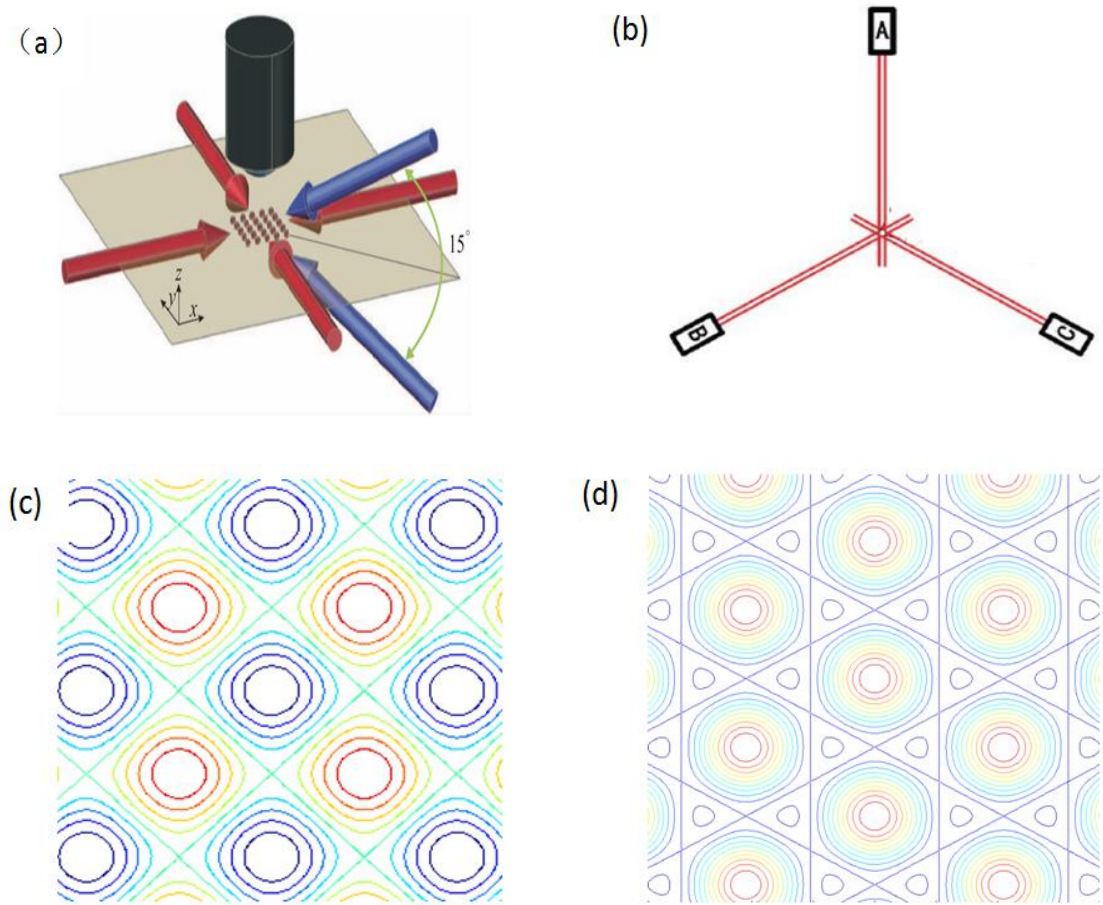


图 1.1 生成光晶格的实验装置图和实验上生成的二维光晶格

(a) 生成二维正方光晶格的实验装置图<sup>[15]</sup>；(b) 生成二维六角光晶格的实验装置图<sup>[12]</sup>；(c) 实验上生成的二维正方光晶格；(d) 实验上生成的二维六角光晶格。

我们可以通过高品质、高精度的激光束在实验室中产生所需要的无缺陷、无瑕疵的光晶格。另外，通过调节激光的强度、频率以及偏振度等，可以对光晶格的势深、周期等参量进行准确有效的操控。同时拥有如此之多的优势，且没有什么缺陷，作为一个纯净、易操作的实验平台，使光晶格成为模拟与研究物质态的最便利工具。同时，光晶格在其它领域，如原子钟<sup>[5]</sup>、量子态的操纵<sup>[6]</sup>、相干态性质<sup>[7]</sup>的研究和量子计算<sup>[8]</sup>等都有着极其重要的应用价值。

常见的二维光晶格有正方光晶格和六角光晶格。正方光晶格是一种较容易实现的光晶格，如图 1 (a)，在  $x-y$  平面内，利用两对互相垂直、相对传播的激光，生成二维驻波来囚禁原子，通过两束在垂直平面成  $15^\circ$  夹角的激光可以产生一个较深

的势阱<sup>[9]</sup>。这个势阱使得原子在  $z$  方向不发生跃迁，而只能在  $x$ - $y$  平面内跃迁。这就是我们获得的二维正方光晶格。六角晶格，也叫蜂巢晶格，常见的石墨烯就是这种结构。2004 年，物理学家在实验室中成功制备出单层石墨烯<sup>[10]</sup>，其特殊的二维六角晶格结构得到了人们广泛的关注。而近年来研究非常热的拓扑绝缘体<sup>[11-12]</sup>以及发现的量子自旋液体<sup>[13]</sup>，更是使得六角光晶格成为实验与理论追捧的对象。我们可以通过以下的方法实现六角光晶格，如图 1 (b) 所示，用三束光强稳定的，相同相位的激光 A、B 和 C 在  $x$ - $y$  平面内成  $120^\circ$  汇聚，进而在激光的相干区域内形成六角光晶格。同理，用额外的激光产生一个较深的势阱<sup>[9]</sup>，用这个深势阱来囚禁原子。图中的 1 (c) 和 1 (d) 分别是激光干涉形成的光强等势面图像分布，其中的 1 (c) 对应正方光晶格，1 (d) 对应六角光晶格，处于其中的冷原子与光场相互作用，最终在势场最小的地方达到稳定，形成稳定的光晶格。

### 1.1.3 自旋轨道耦合

电子同时具有电荷和自旋(即磁矩)的内禀自由度。原子中电子运动经过原子核的电场时，会产生电磁作用。电子的自旋与这电磁作用相耦合，形成了自旋轨道耦合<sup>[14]</sup>作用。对在真空中慢速运动的电子来说，其运动的轨迹我们能清楚的测量到。而在晶体中，由于电子围绕着原子核的轨道运动，速度极快，因而展现出相对论效应。在电子的运动过程中，电子的自旋和轨道运动会耦合在一起，因此，通过电场控制电子的轨道运动，可以间接地操控电子的自旋。

自旋轨道耦合<sup>[14]</sup>是量子物理学中基本的物理效应。很多物理现象与其有关，如量子自旋霍尔效应<sup>[15]</sup>，拓扑量子计算<sup>[16]</sup>等，它在多种物理现象中扮演了核心角色。这些现象导致产生了自旋电子学<sup>[17]</sup>、拓扑绝缘体<sup>[11-12]</sup>、拓扑超导体<sup>[18]</sup>等当前凝聚态物理中最重要的前沿研究领域。

在冷原子领域，我们最关心的是原子气体的动量和自旋等，但是由于其整体是中性的，因此并不存在天然的自旋轨道耦合效应。2009 年，NIST 的研究小组通过拉曼光和原子内部的能级耦合作用，在冷原子气体中实现了规范场<sup>[19]</sup>，后来他们又实现了玻色原子气体的一维自旋轨道耦合<sup>[20]</sup>。2012 年，山西大学<sup>[21]</sup>和 MIT 的研究小组<sup>[22]</sup>，分别实现了费米冷原子气体的一维自旋轨道耦合。最近由中国科学技术大学和北京大学联合团队以及山西大学的张靖组分别提出并实验实现超冷原子二维自旋轨道耦合的人工合成<sup>[23-24]</sup>。具有自旋轨道耦合的冷原子气体，由于其具有很好的操作性可控性，为模拟其他物理体系提供了有效平台，如模拟拓扑绝缘体，人们预言在拓扑绝

缘体体系下会出现马约拉纳费米子，这是实现拓扑量子计算的重要资源。冷原子体系中自旋轨道耦合的实现为研究新奇量子物态奠定了良好的基础，它将对冷原子物理和凝聚态物理产生重大影响。

实验实现自旋轨道耦合有多种方案，但目前主要的方案是通过以下方法来实现：由于原子内部的不同能级，而不同的能级对应不同的自旋，所以用传播方向相反的一对拉曼光，来耦合原子的不同能级。当原子从一个自旋状态跃迁到另一个自旋状态时，它会吸收其中一束拉曼光的光子，而释放另一束拉曼光的光子。由于两个光子的动量是相反的，因此，原子就获得了两倍的光子动量。这样，原子质心的运动，就与原子内部的自旋耦合起来了。这就是实验实现自旋轨道耦合原子气体的原理。

## 1.2 拓扑半金属

近年来，凝聚态物理中发生了一场激动人心的革命，那就是发现了一些新的物质态。人们认为这些物质态不能够用朗道的对称破缺理论来解释。在过去的二三十年里，弄清它们的结构一直是非常激动人心的工作，人们研究发现只能从拓扑性质上对这些物质态加以描述和区分，从而把拓扑这个近代数学中一个重要的概念引入了凝聚态物理中。简单地说，拓扑学主要研究拓扑空间在拓扑的连续变换下其不变的性质以及其对应的不变量。在拓扑学中，对于两个拓扑流形，如果可以通过弯曲、延展等连续操作把其中一个变为另一个，则认为两者是同胚的，即在拓扑学中两者是等价的。2016年，诺贝尔物理学奖授予了提出凝聚态物质中拓扑相变和拓扑相的三位物理学家，从而使拓扑物理学赢得了更多人的研究热情。

自上世纪80年代整数量子霍尔效应和分数量子霍尔效应被发现后，人们逐渐认识到，如果材料中的电子结构具有独特的拓扑性质，则其在宏观尺度上将表现出新奇的量子效应。这为我们打开了一扇通往研究新奇物态世界的大门，而这个新物态就是拓扑量子态。2005年前后，拓扑绝缘体<sup>[11-12]</sup>的发现，吸引了大批研究者的目光，大大拓宽了拓扑量子物态的研究范围。从拓扑绝缘体的理论出发，研究者预言了多种结构迥异于拓扑绝缘体的拓扑量子态。如拓扑半金属<sup>[25]</sup>，其是不同于拓扑绝缘体的一类全新拓扑量子态，和普通金属相比，拓扑半金属有局域于系统边界的边缘态，而在动量空间其能带发生接触，这些能带接触点构成了晶格动量空间的磁单极子<sup>[26]</sup>。根据磁单极子在晶格动量空间的分布，拓扑半金属可以分为狄拉克（Dirac）半金属<sup>[27-29]</sup>、外尔（Weyl）半金属<sup>[30-31]</sup>等。

拓扑半金属是近几年来研究非常热的一拓扑态，这方面的理论和实验也有重大



的发现。其独特的能带结构，表面态性质和特别的输运性质是人们关注的焦点，但拓扑金属材料距离真正可以应用仍有很长的距离。在研究拓扑金属的新奇物理现象以及新的物理机制上，人们期望在设计新型高性能器件领域得到一些有特色的应用，如新型的无能耗电池、功能更加强大的微型芯片和超级量子计算机等。因此，是否能够发明和实现这些性能独特、功能强大的器件，其关键就在于能否获得高质量、可调控和廉价的拓扑金属材料。一旦这种材料可以大范围的获得，并且运用到生活和科技中，其独特的物理性质将对形成新型技术发挥至关重要的作用。

### 1.2.1 狄拉克半金属和外尔半金属

狄拉克 (Dirac) 半金属作为一种拓扑非平庸的物质态，由于在动量空间其能带间有接触，而接触的点就是狄拉克点，且在点附近能带表现出线性色散关系。若接触点的能量又恰好在费米能级附近，那么这类晶体中电子的低能运动就可以用狄拉克方程<sup>[32]</sup>来描写，相应的材料就被称为是狄拉克半金属。有趣的是，通过研究发现，三维狄拉克半金属作为一种拓扑物质态和量子材料，其正好处于多种物态的相变临界点。理论上通过调制和改变狄拉克半金属的某些参数，可以使其转变为拓扑绝缘体、普通绝缘体、外尔半金属乃至拓扑超导体等。目前人们已经发现多个狄拉克材料体系，如：石墨烯<sup>[33]</sup>、高温铜氧化物 d 波超导<sup>[27]</sup>、单层氮化硼<sup>[34]</sup>、拓扑绝缘体<sup>[11-12]</sup>等。这些都成为凝聚态物理研究领域内重要的研究对象。

外尔 (Weyl) 半金属是最近几年发现的一种新的体内无能隙的拓扑非平庸态，体内价带和导带的交点叫做外尔点。若交点的位置又恰好在能量为零的地方，即费米能级附近，那么能带交点附近的低能运动就可以用外尔方程<sup>[35]</sup>来描述，也就是说在这类晶体中出现了具有某种手性<sup>[36]</sup>的外尔费米子，那么对应的材料就被称作是外尔半金属。外尔费米子的质量为零，初始，人们认为中微子是外尔费米子，直到确定中微子是有质量的。外尔半金属有区别于其它拓扑物质态的拓扑性质：首先，外尔点是成对出现的，它们受拓扑保护且稳定，小的微扰只能改变外尔点的位置，不能消除它们，除非两个手性相反的外尔点相遇才能成对消失<sup>[31]</sup>。其次，外尔半金属有着受拓扑保护的表面态。通常费米面总是闭合的，但是对于外尔半金属，它的表面态在费米面形成一个费米弧 (Fermi arc)<sup>[30, 37]</sup>，这个弧的两个端点连接着手性相反的外尔点在外尔半金属表面的投影点。最后，外尔半金属的反常霍尔效应<sup>[38]</sup>与外尔点的位置有关，和能带的细节无关。

### 1.2.2 狄拉克方程和外尔方程

狄拉克从爱因斯坦的质能方程出发来推导狄拉克方程<sup>[32]</sup>。质能方程为

$$E = mc^2 \quad (1.1)$$

$c$  是光速， $m$  是非静态质量，

$$m = \frac{m_0}{\left(1 - v^2/c^2\right)^{1/2}} \quad (1.2)$$

$m_0$  是静态质量， $v$  是粒子运动的速度，再由动量公式

$$p = mv \quad (1.3)$$

可以得到粒子的相对论能量动量关系

$$E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4 \quad (1.4)$$

将能量和动量作算符的变换，即

$$\hat{E} \rightarrow ih \frac{\partial}{\partial t} \quad \hat{p} \rightarrow -ih \nabla \quad (1.5)$$

将 (1.4) 式的能量和动量做算符的变换后，再乘以波函数，可以得到克莱因-戈登方程

$$\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = (\hbar^2 \nabla^2 c^2 - m_0^2 c^4) \psi \quad (1.6)$$

将 (1.6) 式进行化解，引入泡利矩阵，就可以得到狄拉克方程

$$ih \frac{\partial}{\partial t} \psi = (-ihc \alpha_i \partial_i + \beta m_0 c^2) \psi \quad (1.7)$$

这里  $\alpha_i$ ， $\beta$  是  $4 \times 4$  的矩阵，其形式为

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

$\sigma_i$  是泡利算符， $i=1,2,3$ 。 $\sigma_0$  是单位算符， $\alpha_i$ ， $\beta$  满足的关系有

$$\begin{aligned} \alpha_i^2 &= \beta^2 = 1 \\ \{\alpha_i, \alpha_j\} &= \delta_{ij} \\ \{\alpha_i, \beta\} &= 0 \end{aligned} \quad (1.9)$$

由于  $\alpha_i$ ,  $\beta$  是  $4 \times 4$  的矩阵, 其对应的波函数  $\psi$  是四分量的, 其可表达为  $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$ ,

定义手性算符

$$P_L = \frac{1}{2}(1 - \gamma^5) \quad P_R = \frac{1}{2}(1 + \gamma^5) \quad (1.10)$$

这里  $\gamma^5 = \begin{pmatrix} -\sigma_0 & 0 \\ 0 & \sigma_0 \end{pmatrix}$  是外尔表象下的矩阵。手性算符具有投影算符的特性:

$$\begin{aligned} P_L^2 &= \frac{1}{4}(1 - \gamma^5)^2 = \frac{1}{2}(1 - \gamma^5) = P_L \\ P_R^2 &= \frac{1}{4}(1 + \gamma^5)^2 = \frac{1}{2}(1 + \gamma^5) = P_R \end{aligned} \quad (1.11)$$

$$P_L + P_R = 1$$

将投影算符作用到波函数  $\psi$ , 可以得到

$$P_L \psi = \psi_L \quad P_R \psi = \psi_R \quad (1.12)$$

可以发现  $\psi = \begin{pmatrix} \psi_L \\ \psi_R \end{pmatrix}$ , 因此  $\psi_L, \psi_R$  是二分量的。在狄拉克方程中, 若质量为 0, 即  $m_0 = 0$

时, (1.7) 式可以推导得到外尔方程<sup>[35]</sup>

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{R,L} = \pm c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \psi_{R,L} \quad (1.13)$$

(1.13) 式中的  $\pm$  分别对应左手性和右手性的外尔方程, 其分别对应陈数为 +1 和 -1 的外尔点。在动量空间, 具有左、右手性的外尔方程, 忽略其速度, 哈密动量的表达式为

$$H(\mathbf{k}) = \pm \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \pm (k_x \sigma_x + k_y \sigma_y + k_z \sigma_z) \quad (1.14)$$

现在我们计算  $H(\mathbf{k}) = \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  对应的陈数, 其哈密顿量可写作

$$H(\mathbf{k}) = k_x \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + k_y \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + k_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} k_z & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & -k_z \end{pmatrix} \quad (1.15)$$

将直角坐标转到球面坐标， $k_x = k \sin \theta \cos \phi$ ， $k_y = k \sin \theta \sin \phi$ ， $k_z = k \cos \theta$ ，其中  $k = |\mathbf{k}|$ ，则

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} k \cos \theta & k \sin \theta \cos \phi - ik \sin \theta \sin \phi \\ k \sin \theta \cos \phi + ik \sin \theta \sin \phi & -k \cos \theta \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} k \cos \theta & k \sin \theta e^{-i\phi} \\ k \sin \theta e^{i\phi} & -k \cos \theta \end{pmatrix} \quad (1.16)$$

哈密顿量对应的久期方程为

$$\begin{vmatrix} k \cos \theta - E & k \sin \theta e^{-i\phi} \\ k \sin \theta e^{i\phi} & -k \cos \theta - E \end{vmatrix} = 0 \quad (1.17)$$

解久期方程得到系统的本征值为

$$E = \pm k \quad (1.18)$$

我们解本征值为  $-k$  对应的本征矢  $\psi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ ，哈密顿量为

$$\begin{pmatrix} k \cos \theta & k \sin \theta e^{-i\phi} \\ k \sin \theta e^{i\phi} & -k \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = -k \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (1.19)$$

可以解得本征矢为

$$\psi = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (1.20)$$

梯度算符在球坐标中定义为

$$\nabla_{\mathbf{k}} = \frac{\partial}{\partial k} \mathbf{e}_k + \frac{1}{k} \frac{\partial}{\partial \theta} \mathbf{e}_\theta + \frac{1}{k \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \mathbf{e}_\phi \quad (1.21)$$

可以计算系统的贝里联络为

$$A(\mathbf{k}) = \langle \psi | i \nabla_{\mathbf{k}} | \psi \rangle = \left\langle \psi \left| i \left( \frac{\partial}{\partial k}, \frac{1}{k} \frac{\partial}{\partial \theta}, \frac{1}{k \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \right| \psi \right\rangle = (A_k, A_\theta, A_\phi) = \left( 0, 0, \frac{\tan \frac{\theta}{2}}{2k} \right) \quad (1.22)$$

系统的贝里曲率为

$$\begin{aligned}
 F(\mathbf{k}) &= \nabla_{\mathbf{k}} \times A(\mathbf{k}) \\
 &= \frac{1}{k^2 \sin \theta} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_k & q\mathbf{e}_\theta & k \sin \theta \mathbf{e}_\phi \\ \frac{\partial}{\partial k} & \frac{\partial}{\partial \theta} & \frac{\partial}{\partial \phi} \\ A_k & kA_\theta & k \sin \theta A_\phi \end{pmatrix} \\
 &= \frac{1}{k \sin \theta} \left[ \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta A_\phi) - \frac{\partial}{\partial \phi} A_\theta \right] \mathbf{e}_k + \frac{1}{k} \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} A_k - \frac{\partial}{\partial k} (kA_\phi) \right] \mathbf{e}_\theta + \frac{1}{k} \left[ \frac{\partial}{\partial k} (kA_\theta) - \frac{\partial}{\partial \theta} A_k \right] \mathbf{e}_\phi \\
 &= \begin{pmatrix} \frac{\tan \frac{\theta}{2}}{2k} \cot \theta + \frac{1}{k} \frac{\partial \left( \frac{\tan \frac{\theta}{2}}{2k} \right)}{\partial \theta} \\ \frac{\tan \frac{\theta}{2}}{2k} \cot \theta + \frac{1}{4k^2} \left( \sec^2 \frac{\theta}{2} \right) \\ \frac{1}{2k^2} \end{pmatrix} \mathbf{e}_k - \begin{pmatrix} \frac{\tan \frac{\theta}{2}}{k} + \frac{\partial \left( \frac{\tan \frac{\theta}{2}}{2k} \right)}{\partial k} \\ \frac{\tan \frac{\theta}{2}}{2k^2} - \frac{\tan \frac{\theta}{2}}{2k^2} \end{pmatrix} \mathbf{e}_\theta \\
 &= \frac{1}{2k^2} \mathbf{e}_k \\
 F(\mathbf{k}) &= \nabla_{\mathbf{k}} \times A(\mathbf{k}) = (F_k, F_\theta, F_\phi) = \left( \frac{1}{2k^2}, 0, 0 \right) \tag{1.23}
 \end{aligned}$$

外尔点对应的陈数为

$$C = \frac{1}{2\pi} \int_S F dS = \frac{1}{2\pi} k^2 \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi F_k = \frac{1}{2\pi} k^2 \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \left( \frac{1}{2k^2} \right) = 1 \tag{1.24}$$

同理，可以计算外尔点  $H(\mathbf{k}) = -\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  对应的陈数为

$$C = \frac{1}{2\pi} \int_S F dS = -1 \tag{1.25}$$

### 1.3 本文内容

本文主要探究在冷原子光晶格组成的系统中模拟拓扑物质态。通过研究系统在动量空间的能谱，计算拓扑物质态的拓扑不变量和分析开边界条件下出现的边缘态等一些特性，从而确定系统是拓扑平庸还是拓扑非平庸的，并在此基础上计算和研究了二维自旋轨道耦合的相对强度对此系统能带的色散关系和边缘态的影响。文章

整体结构如下：

第一章：简要介绍了冷原子，光晶格，自旋轨道耦合和拓扑半金属的概念，特性，实验成果和发展的历程。叙述和推导了与本文相关的一些重要公式；

第二章：从经典出发，描述了自旋轨道耦合的由来，并计算了各向异性自旋轨道耦合的本征值和本征态，最后对其进行二次量子化，从而得到晶格模型下自旋轨道耦合的表达式。

第三章：主要分三部分，第一部分为狄拉克费米子在冷原子光晶格中的模拟和实现。由系统能谱的分析和低能有效哈密顿的计算，说明通过改变系统的参数，可实现有质量和无质量狄拉克费米子的相互转换，由系统的密度分布可以判断理论的正确性。第二部分为外尔半金属在冷原子光晶格中的模拟和实现。通过系统能谱的分析，对应拓扑不变量的计算，以及出现的边缘态和费米弧，说明此冷原子光晶格系统可以模拟外尔半金属的特征。第三部分提出在二维正方光晶格中引入各向异性的自旋轨道耦合，接着通过改变自旋轨道耦合的相对强度，研究自旋轨道耦合的相对强度对系统相变点的色散关系和边缘态的影响。由系统不存在能隙，说明系统一直处于半金属相，而由一直存在的边缘态和计算得到的拓扑不变量，说明系统具有非平庸的拓扑性质。

第四章：对前文结果和结论进行总结，以及对未来冷原子光晶格模拟量子物质态的展望。

## 第二章 二维自旋轨道耦合效应的有关推导

众所周知，自旋和电荷是电子的两个内禀自由度，而自旋是一种奇特的量子性质。传统的电学器件正是利用了电子带有电荷的属性而加以运用，但是到目前为止，对电子自旋的实际应用还不是很成熟，鉴于电子自旋的量子化和运输中的低能耗特征，利用电子的自旋实现更高性能的电子元件是未来实现新一代高科技产品的关键步骤。实验上可以用电场操控电子的电荷以及其轨道运动，利用磁场使电子的自旋发生劈裂，从而操控电子的磁矩以及有关自旋状态，但是，在实际材料中加入均匀的磁场是很难实现的，因此由磁场操控电子自旋在现实中并不是理想的方法。然而，自旋轨道耦合<sup>[14]</sup>是电子的自旋和轨道运动耦合在一起，两者的运动不再是相互独立的，因此可以通过电场控制电子的轨道运动而间接的控制电子的自旋。自旋轨道耦合是自旋电子学中一个很重要的相互作用，起因就是电子绕原子核运动，电子的自旋磁矩与产生的磁场有了相互作用。其在自旋电子学<sup>[17]</sup>以及凝聚态物理中扮演了极其重要的角色，在半导体场效应管，自旋霍尔效应<sup>[15]</sup>以及其它拓扑材料<sup>[11-12, 18]</sup>中，已有很好的体现。

本章中，我们首先从经典理论出发，描述了二维自旋轨道耦合的来源<sup>[39]</sup>，接着推导了各向异性自旋轨道耦合<sup>[40]</sup>的本征值和本征态，最后对各向异性的自旋轨道耦合进行二次量子化，从而获得晶格模型下自旋轨道耦合的表达式。

### 2.1 从经典物理出发得出自旋轨道耦合的来源

自旋轨道耦合作用是描述原子内部电子绕原子核运动而产生的作用。关于自旋轨道耦合的来源，我们可以用这样一个不是很严谨但简单明了，非常直观的经典物理图像来说明：如图 2.1 (a)，电子  $-e$  绕静止的原子核运动，速度为  $\mathbf{v}$ ，由库仑定律可知，原子核在运动的电子处产生一电场  $\mathbf{E}$ 。由于运动是相对的，现在假设电子不动，原子核以  $-\mathbf{v}$  的速度绕电子运动，也就是电场以  $-\mathbf{v}$  的速度绕电子运动，从而在电子处产生一磁场  $\mathbf{B}$ ，磁场  $\mathbf{B}$  对电子的自旋有力矩的作用，这个作用就是自旋轨道耦合作用。电子在绕原子核运动时，由于速度快，因此表现出相对论效应。在相对论的情况下，电子的自旋和轨道耦合起来，两者不再是相互独立的运动。

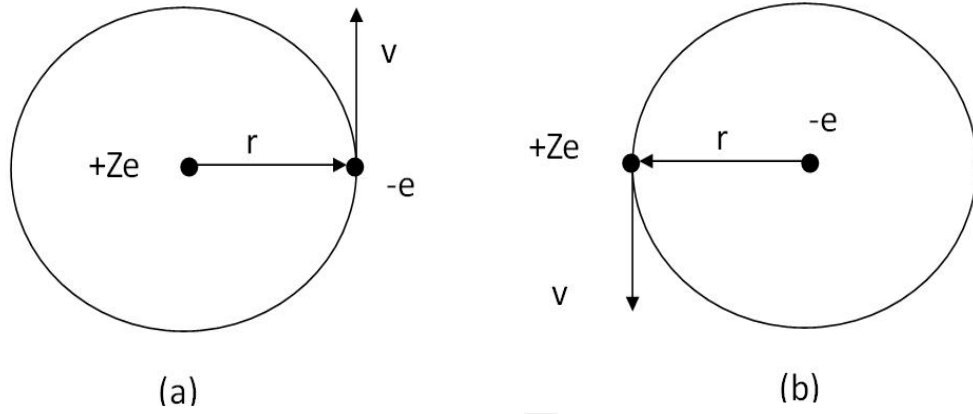


图 2.1 两种不同坐标系下电子运动的示意图。来自参考文献[39]

(a) 原子核坐标系；(b) 电子坐标系。

在电子参考系中，如果把原子核的运动看作一有效电流  $I$ ，由毕奥—萨伐尔定律可以计算产生的磁场为

$$B = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{2\pi I}{r} \quad (2.1)$$

$r$  为电子与原子核的距离， $\mu_0$  是真空磁导率，有效电流  $I$  的大小为

$$I = \frac{Zev}{2\pi r} \quad (2.2)$$

由关系式  $\mu_0 \epsilon_0 = \frac{1}{c^2}$ ，(2.1) 式磁场可以写作

$$B = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zev}{c^2 r^2} \quad (2.3)$$

$\epsilon_0$  为真空中的介电常量， $c$  为光速。为了确定磁场的方向，磁场的矢量形式可以写作

$$\mathbf{B} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{c^2 r^2} \left( \frac{\mathbf{r}}{r} \times \mathbf{v} \right) \quad (2.4)$$

利用角动量  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$  和动量  $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ ，磁场可以写作

$$\mathbf{B} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{mc^2 r^3} \mathbf{L} \quad (2.5)$$

自由电子在考虑自旋的情况下，其哈密顿量可以表示<sup>[41]</sup>为

$$H = \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})^2}{2m} \quad (2.6)$$



在没有磁场时,  $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})^2 = \mathbf{p}^2$ , 当电子处于磁场中时, 由磁场  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ ,  $\mathbf{A}$  为电磁矢势, 上式哈密顿量可以写作

$$H = \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}/c))^2}{2m} \quad (2.7)$$

由关系式  $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B})$ , (2.7) 式可以写作

$$H = \frac{(\mathbf{p} + e\mathbf{A}/c)^2}{2m} + \frac{i}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot [(\mathbf{p} + e\mathbf{A}/c) \times (\mathbf{p} + e\mathbf{A}/c)] \quad (2.8)$$

(2.8) 式中第一项即为电子轨道磁矩和外磁场的相互作用, 而第二项可以写作

$$\begin{aligned} \frac{i}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot [(\mathbf{p} + e\mathbf{A}/c) \times (\mathbf{p} + e\mathbf{A}/c)] &= \frac{ie}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot [(\mathbf{p} \times \mathbf{A}) + (\mathbf{A} \times \mathbf{p})] \\ &= \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \\ &= -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B} \end{aligned} \quad (2.9)$$

$\boldsymbol{\mu}_s$  是与自旋  $\mathbf{s}$  相应的磁矩, 即电子的自旋磁矩, 由原子物理可知, 电子的自旋磁矩表达式为

$$\boldsymbol{\mu}_s = -\frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} = -\mu_B \boldsymbol{\sigma} = -\frac{e}{mc} \mathbf{s} = -\frac{g\mu_B}{\hbar} \mathbf{s} \quad (2.10)$$

$\mathbf{s} = \hbar\boldsymbol{\sigma}/2$  是自旋角动量,  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$  为玻尔磁子,  $g$  称为劈裂因子, 将式 (2.5) 和 (2.10)

带入到式 (2.9) 中, 即可得到自旋轨道耦合的相互作用量,

$$\begin{aligned} U = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B} &= -\left(-\frac{g\mu_B}{\hbar} \mathbf{s}\right) \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{mc^2 r^3} \mathbf{L} \\ &= -\left(-\frac{e}{m} \mathbf{s}\right) \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{mc^2 r^3} \mathbf{L} \\ &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{m^2 c^2 r^3} (\mathbf{L} \cdot \mathbf{s}) \\ &= \frac{1}{m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(-\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}\right) (\mathbf{L} \cdot \mathbf{s}) \\ &= \frac{1}{m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} (\mathbf{L} \cdot \mathbf{s}) \end{aligned} \quad (2.11)$$

上述的计算过程中, 是在考虑电子静止的框架下进行的, 即为忽略非惯性系的影响, 获得的自旋轨道耦合的一般表达式。如果考虑到非惯性系的影响, 则要产生托马斯

(Thomas) 进动, 对应的上述自旋轨道耦合需要乘以一个  $\frac{1}{2}$  的因子, 所以

$$U = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} (\mathbf{L} \cdot \mathbf{s}) = \xi(r) \mathbf{L} \cdot \mathbf{s} \quad (2.12)$$

(2.12) 式就是自旋轨道耦合的通用表达式。

## 2.2 二维自旋轨道耦合在电子系统的本征值和本征态

在研究中根据材料的受力性质和材料结构的对称性, 可将自旋轨道耦合分为 Rashba 型<sup>[42]</sup>和 Dressalhaus 型<sup>[43]</sup>, 两者的形式分别为

$$H_R = R(k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) \quad (2.13)$$

$$H_D = D(k_y \sigma_x + k_x \sigma_y) \quad (2.14)$$

上述  $R$  和  $D$  是 Rashba 型和 Dressalhaus 型自旋轨道耦合的强度。我们可以用一个统一的式子来表示这两个形式, 即二维各向异性的自旋轨道耦合<sup>[40]</sup>, 其表达式为

$$H_{so} = k_{so1} k_x \sigma_y + k_{so2} k_y \sigma_x \quad (2.15)$$

这里  $k_{so1}$ 、 $k_{so2}$  分别为  $x$ 、 $y$  方向自旋轨道耦合的强度。 $k_{so1} = -k_{so2}$  时, 自旋轨道耦合的类型为 Rashba 型; 当  $k_{so1} = k_{so2}$  时, 自旋轨道耦合的类型为 Dressalhaus 型。 $k_{so1}$  或  $k_{so2}$  其中一个为 0 时, 二维的自旋轨道耦合变为一维的自旋轨道耦合。在二维自旋轨道耦合的电子系统中, 单电子的哈密顿量具有如下的形式:

$$H = H_0 + H_{so} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + k_{so1} k_x \sigma_y + k_{so2} k_y \sigma_x \quad (2.16)$$

其中  $m$  是电子的质量,  $k$  是波矢, 大小为  $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ 。把上式写成矩阵的形式:

$$H = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & k_{so2} k_y - ik_{so1} k_x \\ k_{so2} k_y + ik_{so1} k_x & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

这里令  $u(k) = k_{so2} k_y - ik_{so1} k_x$ , 且求此矩阵的本征值, 对应的久期方程为

$$\begin{vmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E & u(k) \\ u^*(k) & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \end{vmatrix} = 0 \quad (2.18)$$

解此久期方程，得到能量本征值为

$$E_{\pm} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm \sqrt{k_{so1}^2 k_x^2 + k_{so2}^2 k_y^2} \quad (2.19)$$

上式中正负号为能带的指标，反映了能带由于发生自旋劈裂，而分为两支能带。如图 2.2。

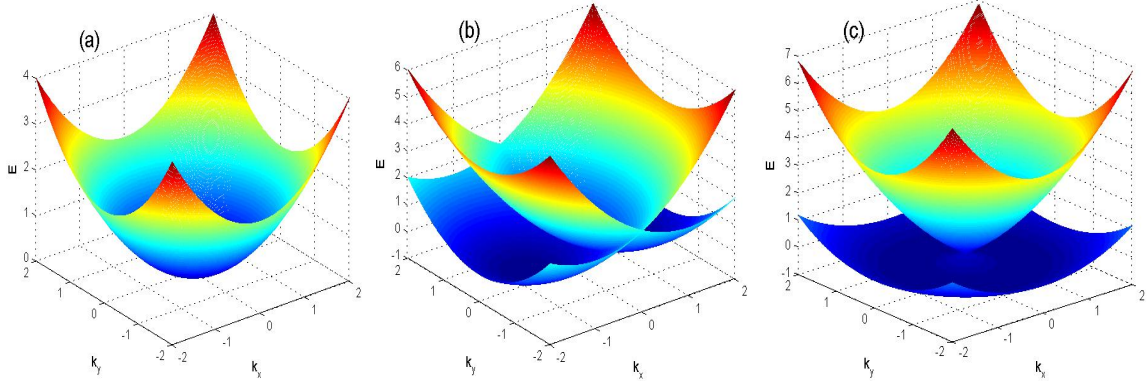


图 2.2 不同强度的自旋轨道耦合的能带图

(a)  $k_{so1} = 0, k_{so2} = 0$ ，没有自旋轨道耦合，为单能带；(b)  $k_{so1} = 1, k_{so2} = 0$ ，存在一个维度的自旋轨道耦合，单能带发生劈裂；(c)  $k_{so1} = 1, k_{so2} = 1$ ，存在二维的自旋轨道耦合，单能带发生劈裂。

接着求解系统对应的本征波函数，设其波函数为  $\psi = \eta_k \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ，其中  $\eta_k = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$  是自旋部分，空间部分为

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.20)$$

将波函数带入到 (2.17) 式中，可以得到

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} & u(k) \\ u^*(k) & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = E_{\pm} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.21)$$

可以解得

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm \frac{u^*(k)}{\sqrt{u^*(k)u(k)}} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm \frac{k_{so2}k_y + ik_{so1}k_x}{\sqrt{k_{so1}^2k_x^2 + k_{so2}^2k_y^2}} \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm \frac{k_{so2}k_y + ik_{so1}k_x}{\sqrt{k_{so1}^2k_x^2 + k_{so2}^2k_y^2}} \end{pmatrix} e^{ik \cdot r} \quad (2.23)$$

### 2.3 二维自旋轨道耦合的二次量子化

接下来我们对连续模型下各向异性的自旋轨道耦合进行二次量子化，紧束缚近似下，得到晶格模型下各向异性自旋轨道耦合的形式。连续模型下各向异性的自旋轨道耦合<sup>[41]</sup>的哈密顿量为(2.15)式。在二次量子化表象，(2.15)式的哈密顿量二次量子化的形式为

$$H_{SO} = \int d\mathbf{r} \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) H_{so} \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) \quad (2.24)$$

对于自旋为 $\frac{1}{2}$ 的费米子系统，这里 $\hat{\psi}_\sigma^\dagger$ ( $\hat{\psi}_\sigma$ )为产生(湮灭)的场算符， $\mathbf{r} = (x, y)$ ，自旋 $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ ， $\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) = (\hat{\psi}_\uparrow(\mathbf{r}), \hat{\psi}_\downarrow(\mathbf{r}))^T$ ， $\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$ 满足反对易关系 $[\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}')]_{\pm} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ 。场算符 $\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$ 可以表达为

$$\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{i}, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger \langle w_{\mathbf{i}}, \sigma | \quad (2.25)$$

$$\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{i}, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{i}, \sigma} | w_{\mathbf{i}}, \sigma \rangle \quad (2.26)$$

上述 $\hat{a}_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger$ ( $\hat{a}_{\mathbf{i}, \sigma}$ )为粒子的产生(湮灭)算符， $w_{\mathbf{i}}$ 为 $\mathbf{i}$ 格点的瓦尼尔函数，则

$$\begin{aligned} H_{SO} &= \int d\mathbf{r} \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) H_{so} \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}, \sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} \hat{a}_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger \langle w_{\mathbf{i}}, \sigma | k_{so1}k_x \sigma_y + k_{so2}k_y \sigma_x | w_{\mathbf{j}}, \sigma' \rangle \hat{a}_{\mathbf{j}, \sigma'} \end{aligned} \quad (2.27)$$

分别对上述方程中坐标部分和自旋部分进行计算，

$$\begin{aligned} & k_{so1} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}, \sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} \hat{a}_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger \langle w_{\mathbf{i}}, \sigma | k_x \sigma_y | w_{\mathbf{j}}, \sigma' \rangle \hat{a}_{\mathbf{j}, \sigma'} + k_{so2} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}, \sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} \hat{a}_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger \langle w_{\mathbf{i}}, \sigma | k_y \sigma_x | w_{\mathbf{j}}, \sigma' \rangle \hat{a}_{\mathbf{j}, \sigma'} \\ &= k_{so1} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}, \sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} \langle w_{\mathbf{i}} | k_x | w_{\mathbf{j}} \rangle \langle \sigma | \sigma_y | \sigma' \rangle \hat{a}_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{j}, \sigma'} + k_{so2} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}, \sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} \langle w_{\mathbf{i}} | k_y | w_{\mathbf{j}} \rangle \langle \sigma | \sigma_x | \sigma' \rangle \hat{a}_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{j}, \sigma'} \\ &= k_{so1} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} \int d\mathbf{r} \langle w_{\mathbf{i}} | k_x | w_{\mathbf{j}} \rangle \langle \uparrow | \sigma_y | \downarrow \rangle \hat{a}_{\mathbf{i}, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{j}, \downarrow} + k_{so1} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} \int d\mathbf{r} \langle w_{\mathbf{i}} | k_x | w_{\mathbf{j}} \rangle \langle \downarrow | \sigma_y | \uparrow \rangle \hat{a}_{\mathbf{i}, \downarrow}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{j}, \uparrow} \\ &+ k_{so2} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} \int d\mathbf{r} \langle w_{\mathbf{i}} | k_y | w_{\mathbf{j}} \rangle \langle \uparrow | \sigma_x | \downarrow \rangle \hat{a}_{\mathbf{i}, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{j}, \downarrow} + k_{so2} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} \int d\mathbf{r} \langle w_{\mathbf{i}} | k_y | w_{\mathbf{j}} \rangle \langle \downarrow | \sigma_x | \uparrow \rangle \hat{a}_{\mathbf{i}, \downarrow}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{j}, \uparrow} \end{aligned}$$

将  $k$  写作算符的形式,  $k = -i\hbar\nabla$ , 这里令  $\hbar = 1$ ,  $\langle\uparrow| = (1\ 0)$ ,  $\langle\downarrow| = (0\ 1)$ , 上述

$$\begin{aligned}
&= k_{s_{01}} \sum_{i,j} \int d\mathbf{r} \langle w_i | -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} | w_j \rangle (1\ 0) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \hat{a}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{j,\downarrow} \\
&+ k_{s_{01}} \sum_{i,j} \int d\mathbf{r} \langle w_i | -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} | w_j \rangle (0\ 1) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \hat{a}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{j,\uparrow}, \\
&+ k_{s_{02}} \sum_{i,j} \int d\mathbf{r} \langle w_i | -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} | w_j \rangle (1\ 0) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \hat{a}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{j,\downarrow} \\
&+ k_{s_{02}} \sum_{i,j} \int d\mathbf{r} \langle w_i | -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} | w_j \rangle (0\ 1) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \hat{a}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{j,\uparrow} \\
&= -k_{s_{01}} \sum_{i,j} \int d\mathbf{r} \langle w_i | \hbar \frac{\partial}{\partial x} | w_j \rangle (\hat{a}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{j,\downarrow} - \hat{a}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{j,\uparrow}) - ik_{s_{02}} \sum_{i,j} \int d\mathbf{r} \langle w_i | \hbar \frac{\partial}{\partial y} | w_j \rangle (\hat{a}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{j,\downarrow} + \hat{a}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{j,\uparrow})
\end{aligned} \tag{2.28}$$

接下来我们将瓦尼尔函数近似的写作高斯函数的形式, 即  $w_i(\mathbf{r}) \approx \phi_i(\mathbf{r})$ , 高斯函数的表达式为

$$\phi_i(\mathbf{r}) = \psi_{i_x} \psi_{i_y} \tag{2.29}$$

$$\psi_{i_x} = A e^{-\frac{1}{2}[k_0(x-x_i)]^2} \tag{2.30}$$

$$\psi_{i_y} = A e^{-\frac{1}{2}[k_0(y-y_i)]^2} \tag{2.31}$$

由于系统为二维的正方晶格, 所以  $x$ 、 $y$  方向波函数的归一化系数  $A$  是相同的,  $k_0$  是激光的波矢, 那么紧束缚近似下, 只考虑最近邻跃迁, 对每个格点  $\mathbf{i}$ , 我们有

$$k_{s_{01}} \int d\mathbf{r} \langle w_i | \hbar \frac{\partial}{\partial x} | w_j \rangle = k_{s_{01}} \hbar \int d\mathbf{r} \phi_i^*(\mathbf{r}) \left( \frac{\partial}{\partial x} \right) \phi_j(\mathbf{r}) = k_{s_{01}} \hbar \int d\mathbf{r} \psi_{i_x}^* \psi_{i_y}^* \left( \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_{i_x+a} \psi_{i_y} \tag{2.32}$$

其中  $a$  表示晶格的长度, 将式 (2.30) 和 (2.31) 代入上式 (2.32) 中, 利用  $y$  方向瓦尼尔函数的归一性,

$$\int dy \psi_{i_y}^* \psi_{i_y} = 1 \tag{2.33}$$

得到

$$A = \frac{k_0}{\sqrt{\pi}} \quad (2.34)$$

所以 (2.32) 式可以写作

$$\begin{aligned} k_{so1} \hbar \int dx \psi_{i_x}^* \left( \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_{i_x+a} &= k_{so1} \hbar \int A e^{-\frac{1}{2}[k_0 x]^2} \left( \frac{\partial}{\partial x} \right) A e^{-\frac{1}{2}[k_0(x+a)]^2} dx \\ &= k_{so1} \hbar A^2 \int e^{-\frac{1}{2}[k_0 x]^2} e^{-\frac{1}{2}[k_0(x+a)]^2} [-k_0(x+a)] k_0 dx \\ &= -k_0^2 k_{so1} \hbar A^2 \int e^{-(k_0 x)^2 - k_0^2 a x - \frac{1}{2}(k_0 a)^2} (x+a) dx \\ &= -k_0^2 k_{so1} \hbar A^2 \int e^{-k_0^2 \left(x + \frac{1}{2}a\right)^2 - \frac{1}{4}(k_0 a)^2} (x+a) dx \\ &= -k_0^2 k_{so1} \hbar A^2 e^{\frac{1}{4}(k_0 a)^2} \int (x+a) e^{-k_0^2 \left(x + \frac{1}{2}a\right)^2} dx \end{aligned} \quad (2.35)$$

接下来我们对上式的积分部分进行计算，

$$\begin{aligned} A^2 \int (x+a) e^{-k_0^2 \left(x + \frac{1}{2}a\right)^2} dx &= A^2 \int \left(x + \frac{1}{2}a\right) e^{-k_0^2 \left(x + \frac{1}{2}a\right)^2} dx + \frac{1}{2} a A^2 \int e^{-k_0^2 \left(x + \frac{1}{2}a\right)^2} dx \\ &= A^2 \int \left(x + \frac{1}{2}a\right) e^{-k_0^2 \left(x + \frac{1}{2}a\right)^2} d\left(x + \frac{1}{2}a\right) + \frac{1}{2} a A^2 \int e^{-k_0^2 \left(x + \frac{1}{2}a\right)^2} d\left(x + \frac{1}{2}a\right) \\ &= A^2 \sqrt{\frac{\pi}{k_0^2}} = \frac{a}{2} \end{aligned} \quad (2.36)$$

把 (2.35) 和 (2.36) 带入到式 (2.32)，得到

$$k_{so1} \int dx \langle w_i | \frac{\partial}{\partial x} | w_i \rangle = -\frac{a}{2} k_0^2 k_{so1} \hbar e^{-\frac{1}{4}(k_0 a)^2} \quad (2.37)$$

则

$$\begin{aligned} &-k_{so1} \sum_{i,j} \int dx \langle w_i | \hbar \frac{\partial}{\partial x} | w_j \rangle (\hat{a}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{j,\downarrow} - \hat{a}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{j,\uparrow}) \\ &= -\frac{a}{2} k_0^2 k_{so1} \hbar e^{-\frac{1}{4}(k_0 a)^2} \sum_i (\hat{a}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{i+x,\downarrow} - \hat{a}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{i+x,\uparrow} + h.c.) \\ &= -\alpha \sum_i (\hat{a}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{i+x,\downarrow} - \hat{a}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{i+x,\uparrow} + h.c.) \end{aligned} \quad (2.38)$$

这里  $\alpha = \frac{a}{2} k_0^2 k_{so1} \hbar e^{-\frac{1}{4}(k_0 a)^2}$ ，同理可以计算得到

$$\begin{aligned} & -ik_{so2} \sum_{i,j} \int dy \langle w_i | \frac{\partial}{\partial y} | w_j \rangle (\hat{a}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{i,\downarrow} + \hat{a}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{i,\uparrow}) \\ & = -i\beta \sum_i (\hat{a}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{i+y,\downarrow} + \hat{a}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{i+y,\uparrow} + h.c.) \end{aligned} \quad (2.39)$$

这里  $\beta = \frac{a}{2} k_0^2 k_{so2} \hbar e^{-\frac{1}{4}(k_0 a)^2}$ ，所以自旋轨道耦合的二次量子化的形式<sup>[41]</sup>为

$$H_{so} = -\alpha \sum_i (\hat{a}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{i+x,\downarrow} - \hat{a}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{i+x,\uparrow} + h.c.) - i\beta \sum_i (\hat{a}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{i+y,\downarrow} + \hat{a}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{i+y,\uparrow} + h.c.) \quad (2.40)$$

这里把  $\alpha$ 、 $\beta$  分别当作晶格模型下  $x$ 、 $y$  方向自旋轨道耦合的强度。 $\alpha = -\beta$  时，自旋轨道耦合的类型为 Rashba 型；当  $\alpha = \beta$  时，自旋轨道耦合的类型为 Dresselhaus 型。 $\alpha$  或  $\beta$  其中一个为 0 时，二维的自旋轨道耦合变为一维的自旋轨道耦合。





## 第三章 拓扑相在冷原子光晶格中的模拟

冷原子中的光晶格系统为模拟各种量子物质态提供了一个可靠实用的平台。通过控制光晶格中的超冷原子和设计这个原子系统的构型，可以模拟和研究凝聚态物理前沿的一些重要课题，特别是，实验上实现了人工规范场<sup>[19]</sup>，从而把冷原子光晶格这种研究手段推到模拟和探测物质状态属性的前沿。如测量在一维光晶格中拓扑非平凡布洛赫带的扎克（Zak）相<sup>[44]</sup>；实现和探测二维陈绝缘体和霍夫施塔特（Hofstadter）能带<sup>[45-46]</sup>；通过堆叠二维陈绝缘体或霍夫施塔特绝缘体，提出了模拟和实现三维的外尔半金属的方法<sup>[47-48]</sup>。自旋轨道耦合（SOC）在冷原子中的实现，为探索奇异的物理相，以及深入地研究其对系统各种物理性质的影响开辟了一条新的途径。实验上运用玻色<sup>[20]</sup>和费米<sup>[21-22]</sup>冷原子气体都已成功实现了一维的自旋轨道耦合，可以用其研究系统的磁化，自旋动力学<sup>[17]</sup>，模拟和实现一维拓扑绝缘体等。而实现高维度的自旋轨道耦合充满了挑战，最近由中国科学技术大学和北京大学联合团队以及山西大学的张靖组分别提出并实验实现超冷原子二维自旋轨道耦合的人工合成<sup>[23-24]</sup>，其为研究和探索新奇量子物态带来了新的曙光，它将对冷原子和凝聚态物理产生重大影响。

本章中，我们将在冷原子光晶格中构造物理模型，来模拟和研究拓扑半金属，由系统的能谱，低能激发，边缘态和拓扑不变量来说明系统的拓扑性质，从而说明光晶格对拓扑物质态有效模拟的重要意义。

### 3.1 狄拉克费米子在冷原子光晶格中的模拟和实现

首节用冷原子的六角光晶格来模拟和研究相对论的狄拉克费米子<sup>[49]</sup>（此系统没有自旋轨道耦合），通过参数的变化，实现有质量狄拉克费米子和无质量狄拉克费米子的相互转换，并由密度分布图说明理论的正确性。

#### 3.1.1 理论模型和能谱

将单分量的费米原子气体（如<sup>6</sup>L<sub>i</sub>，<sup>40</sup>K等），放入六角晶格中，六角晶格由两种子晶格组成，分别由A和B表示，如图3.1（a）所示。六角光晶格系统中，在紧束缚近似下，我们只考虑最近邻跃迁，其哈密顿量的表达式为

$$\hat{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} (\hat{a}_i^\dagger \hat{b}_j + h.c.) \quad (3.1)$$

这里 $\langle i,j \rangle$ 表示最近邻格点 $i$ 和 $j$ 的位置， $\hat{a}_i^\dagger$  ( $\hat{a}_i$ ) 和  $\hat{b}_j^\dagger$  ( $\hat{b}_j$ ) 算符分别对应子晶格A和B的产生（湮灭）算符。对于子晶格A，利用晶格的周期性，其可以表示为  $\mathbf{A} = m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2$ ，其中

$m_1$  和  $m_2$  是整数,  $\mathbf{a}_1 = (\sqrt{3}a/2, -a/2)$  和  $\mathbf{a}_2 = (0, a)$  是原包的基矢,  $a$  是晶格的长度。子晶格A和子晶格B连接的矢量为  $\mathbf{b}_s$ , 则子晶格B可以表示为  $\mathbf{B} = \mathbf{A} + \mathbf{b}_s$ , 矢量  $\mathbf{b}_s$  有3个, 分别为

$$\mathbf{b}_1 = (a/2\sqrt{3}, a/2), \mathbf{b}_2 = (a/2\sqrt{3}, -a/2), \mathbf{b}_3 = (-a/\sqrt{3}, 0) \quad (3.2)$$

如图3.1 (a) 所示。由基矢和倒格矢的关系  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{c}_j = 2\pi\delta_{ij}$ , 可确定倒格矢为

$$\mathbf{c}_1 = (4\pi/\sqrt{3}a, 0), \mathbf{c}_2 = (2\pi/\sqrt{3}a, 2\pi/a) \quad (3.3)$$

继而可以确定六角晶格的第一布里渊区的面积为

$$S_0 = 8\pi^2/\sqrt{3}a^2 \quad (3.4)$$

$t_{ij}$  表示子晶格A和B之间的跃迁强度, 由于A到B (或B到A) 存在三个方向, 所以用  $t_1, t_2, t_3$  表示三个方向的跃迁强度, 这里设  $t_1 = t_2 = t, t_3 = \lambda t$ ,  $\lambda$  表示一个各向异性参数, 且  $\lambda > 0$ 。在以下的讨论中, 我们通过改变各向异性参数  $\lambda$  值, 来研究系统有哪些特性的改变。

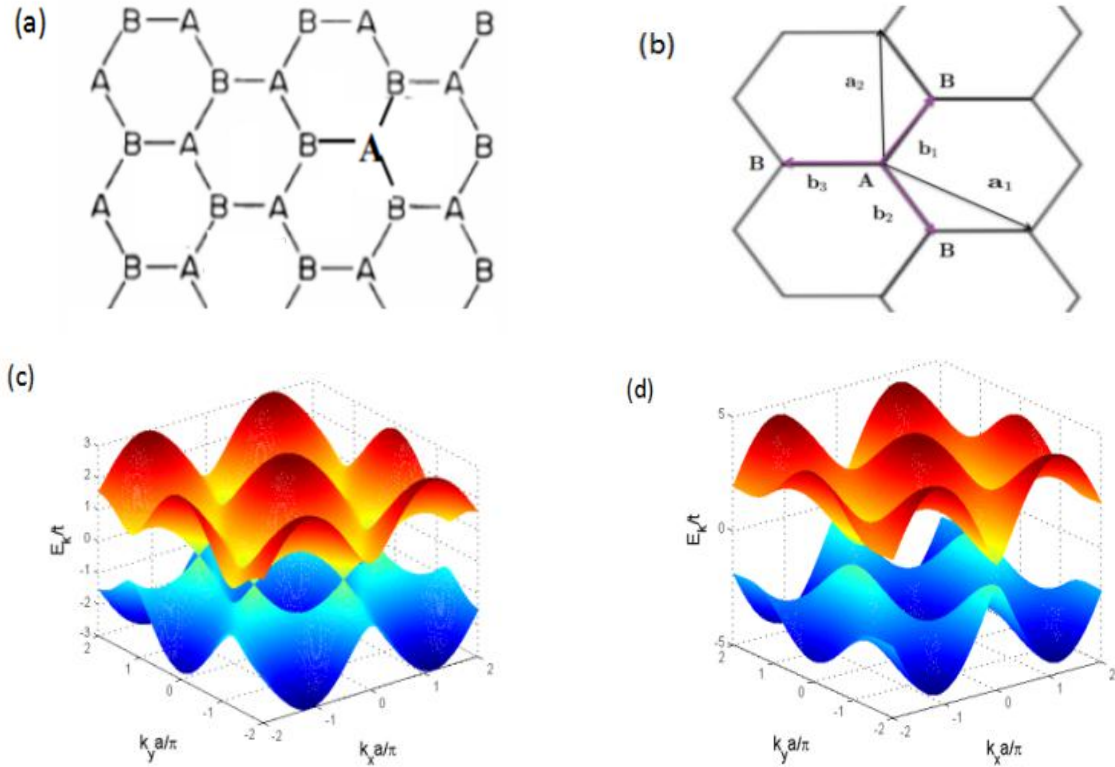


图 3.1 六角光晶格的示意图和不同参数下的能带图

(a) 六角光晶格由A和B两种子晶格组成的示意图<sup>[49]</sup>; (b) 基矢在六角光晶格表示的示意图; (c)  $\lambda = 1$  的能带图, 此时上下能带发生接触; (d)  $\lambda = 2.5$  的能带图, 上下能带分离, 存在能隙。图(c)和(d)模拟文献[49]。

在周期边界条件下, 我们将哈密顿量转换到动量空间, 这里用到了傅里叶变换公式

$$\hat{a}_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_i) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger, \quad \hat{b}_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{B}_j) \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \quad (3.5)$$

这里  $N$  表示子晶格 A(B) 的格点数目。则 (3.1) 式可以写作

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left[ \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_i) \exp(-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{B}_j) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} + \exp(i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{B}_j) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_i) \right] \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \left[ -\sum_{s=1}^3 t_s \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_s) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} - \sum_{s=1}^3 t_s \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_s) \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \right] \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \left[ \phi(\mathbf{k}) \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} + h.c. \right] \end{aligned} \quad (3.6)$$

这里  $\phi(\mathbf{k}) = -\sum_{s=1}^3 t_s \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_s)$ ，并且用到了  $\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{i}} \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{i}]$  和  $\mathbf{B}_j = \mathbf{A}_i + \mathbf{b}_s$ ，

(3.6) 式可以写作矩阵的形式

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger & \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} H_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \hat{a}_{\mathbf{k}} \\ \hat{b}_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

$H_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} 0 & \phi^*(\mathbf{k}) \\ \phi(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix}$ ，其本征值为  $E_{\mathbf{k}} = \pm |\phi(\mathbf{k})|$ ，具体表达式为

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{k}} &= \pm \sqrt{\left[ -\sum_{s=1}^3 t_s \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_s) \right] \left[ -\sum_{s=1}^3 t_s \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_s) \right]} \\ &= \pm \sqrt{\left[ t_1 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_1) + t_2 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_2) + t_3 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_3) \right] \left[ t_1 \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_1) + t_2 \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_2) + t_3 \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_3) \right]} \\ &= \pm t \sqrt{1 + \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2)] + \lambda \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_3)] + \exp[-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2)] + 1} \\ &\quad \sqrt{1 + \lambda \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)] + \lambda \exp[-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_3)] + \lambda \exp[-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)] + \lambda^2} \\ &= \pm t \sqrt{2 + \lambda^2 + 2 \cos(k_y a) + 4\lambda \cos(\sqrt{3} k_x a / 2) \cos(k_y a / 2)} \end{aligned} \quad (3.8)$$

通过改变各向异性参数  $\lambda$  值，可以发现不同  $\lambda$  值对应不同的能谱，如图 3.1 (c) 和 3.1 (d)。当  $0 < \lambda < 2$ ，两个能带在能量为 0 处有接触，在接触点周围出现狄拉克锥型结构，当  $\lambda = 1$  时，出现如石墨烯材料的标准锥形结构。当  $\lambda$  离开 1 时，且  $0 < \lambda < 2$ ，狄拉克锥形结构会在  $x$  或  $y$  方向挤在一起，但此时上下能带一直接触。当  $\lambda > 2$  时，上下两能带不再接触，打开一能隙，能隙的大小为  $\Delta = t(\lambda - 2)$ ，且这里  $\Delta$  对应的是有质量的狄拉克费米子。从这里可以看出， $\lambda = 2$  是系统发生相变的相变点， $\lambda$  从小于 2 到大于 2 对应系统从能带接触到能隙打开，即系统从半金属相转变为绝缘相。

在  $0 < \lambda < 2$ ，我们研究能带接触点  $(k_x^0, k_y^0)$  附近的低能激发，在能带接触点附近  $(k_x, k_y) = (k_x^0 + q_x, k_y^0 + q_y)$  做  $q_x$  和  $q_y$  的二阶泰勒展开， $q_x$  和  $q_y$  为接触点附近的动量，可以得到系统的低能色散关系为

$$E_{\mathbf{q}} = \pm \sqrt{\Delta^2 + v_x^2 q_x^2 + v_y^2 q_y^2} \quad (3.9)$$

在  $q_x, q_y \leq 1/2a$  时，色散关系  $E_{\mathbf{q}}$  是很好的近似表达。这里  $\Delta$  即表示狄拉克费米子的质量， $v_x$  和  $v_y$  表示其在  $x$  和  $y$  方向的有效费米速度。其中

$$0 < \lambda < 2, \Delta = 0, v_x = \sqrt{3}\lambda ta/2, v_y = ta\sqrt{1 - \lambda^2/4} \quad (3.10)$$

$$\lambda > 2, \Delta = t(\lambda - 2), v_x = ta\sqrt{3\lambda/2}, v_y = ta\sqrt{\lambda/2 - 1} \quad (3.11)$$

对于狄拉克点附近的低能激发，其准粒子满足狄拉克方程  $i\hbar\partial_t\Psi = H_D\Psi$ ， $H_D$  的表达式为

$$H_D = \alpha_0\Delta + v_x\alpha_x p_x + v_y\alpha_y p_y \quad (3.12)$$

$\alpha_\mu$  ( $\mu = 0, x, y$ ) 是满足反对易关系的矩阵，对于这里的  $2+1$  维系统，可以把它们当作泡利矩阵  $\sigma_z, \sigma_x, \sigma_y$  <sup>[34]</sup>。由以上的讨论说明，在冷原子六角晶格中，通过改变各向异性参数  $\lambda$ ，可以实现有质量和无质量狄拉克费米子的相互转换，即系统可以实现半金属相与绝缘相的相互转换。

### 3.1.2 密度分布

实验上可以通过测量原子密度分布来确定是否存在相对论的有质量和无质量的狄拉克费米子，以及通过改变各向异性参数  $\lambda$  值，实现有质量和无质量狄拉克费米子之间的相互转化。囚禁原子的密度分布的测量可以通过飞行时间成像 (time-of-flight) 以及光吸收 (light absorption) 技术来实现。假设光晶格的冷原子处在一个简谐势阱中，若这个简谐势阱的势能变化的非常缓慢，则系统可以用局域密度近似来处理。局域的化学势被定义为  $\mu = \mu_0 - V(\mathbf{r})$ ， $\mu_0$  是简谐势阱中心的化学势， $V(\mathbf{r}) = m\omega^2 r^2/2$  是球形简谐势阱的势能，费米子满足狄拉克-费米分布规律

$$f(k_x, k_y, \mu) = 1/\{\exp[(E_{\mathbf{k}} - \mu)/T] + 1\} \quad (3.13)$$

所以，原子的密度分布在温度为  $T$  时可以写作

$$n(\mu) = \frac{1}{S_0} \int f(k_x, k_y, \mu) dk_x dk_y \quad (3.14)$$

$S_0 = 8\pi^2/\sqrt{3}a^2$  是引用公式 (3.4)。在绝对温度  $T$  接近 0 时，我们画出了有质量和无质

量准粒子的密度分布，如图3.2，这里无质量的准粒子对应 (a)，此时  $\lambda=1$ ；有质量的准粒子对应图 (b)， $\lambda=2.5$ 。如图 (a) 所示，动量空间的能谱中，不存在能隙，随着局域化学势的增大，密度分布单调增大；而图 (b) 中，局域化学势在0的附近，密度分布没有一直增大，而是有一平台 (plateau) 的分布，化学势的大小为  $\mu=1$ ，从这里说明化学势此时处于能隙中，对应有质量的狄拉克费米子。原子的密度分布中平台的分布是有无能隙的标志，而且出现的平台分布越长，说明能隙的宽度越大。

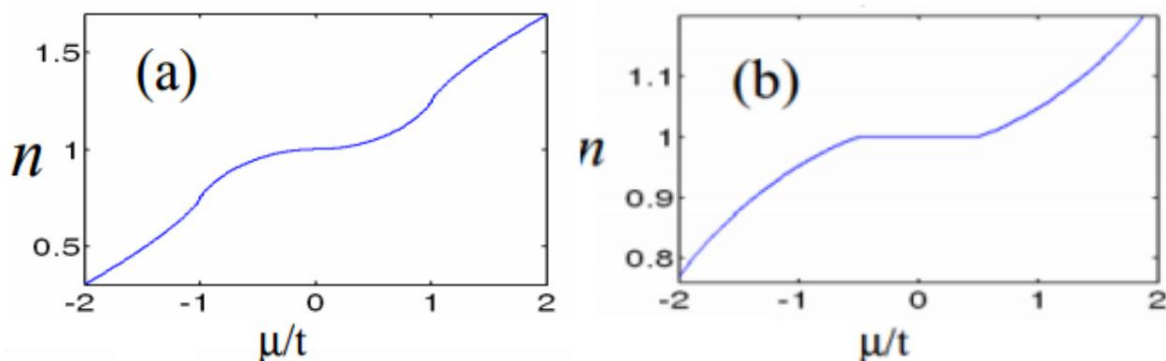


图 3.2 系统的密度分布图<sup>[49]</sup>

(a)  $\lambda=1$  时的密度分布，对应无质量的狄拉克费米子；(b)  $\lambda=2.5$  时的密度分布，对应有质量的狄拉克费米子。

## 3.2 外尔半金属在冷原子光晶格中的模拟

这节，我们在二维的正方晶格中，引入一个额外的周期参数，从而构成一个三维系统来模拟外尔半金属<sup>[50]</sup>，通过观察能带的接触点（外尔点）的产生、移动和湮灭，计算系统对应的拓扑不变量，分析系统的边缘态和费米弧，从而说明了系统模拟外尔半金属的正确性。说明此系统是模拟外尔半金属的一个很好的平台。

### 3.2.1 理论模型和能谱

将自旋为1/2的，无相互作用的费米子气体囚禁在2维的正方晶格中，正方晶格处于x-z平面。由这个冷原子系统构成的紧束缚哈密顿量为

$$\hat{H} = \hat{H}_L + \hat{H}_{SOC} + \hat{H}_p \quad (3.15)$$

哈密顿量  $\hat{H}$  中包括跃迁项  $\hat{H}_L$ ，沿x方向的自旋轨道耦合项  $\hat{H}_{SOC}$ ，和额外的耦合势能项  $\hat{H}_p$ ，其中跃迁项  $\hat{H}_L$  只考虑最近邻的跃迁，自旋轨道耦合项  $\hat{H}_{SOC}$  在实验上可以通过拉曼光耦合自旋上下两个态<sup>[51]</sup>来实现，耦合势能项  $\hat{H}_p$  包括塞曼 (Zeeman) 项和拉曼 (Raman) 项。它们的表达式分别为

$$\hat{H}_L = -\sum_{\mathbf{i}, \sigma} t_{\eta, \sigma} (\hat{a}_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{i}+\eta, \sigma} + h.c.) \quad (3.16)$$

$$\hat{H}_{SOC} = -t_s \sum_{\mathbf{i}} (\hat{a}_{\mathbf{i}, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{i}+x, \downarrow} - \hat{a}_{\mathbf{i}, \downarrow}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{i}+x, \uparrow} + h.c.) \quad (3.17)$$

$$\hat{H}_P = \Gamma_z \sum_{\mathbf{i}} (\hat{a}_{\mathbf{i}, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{i}, \uparrow} - \hat{a}_{\mathbf{i}, \downarrow}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{i}, \downarrow}) + \Gamma_x \sum_{\mathbf{i}} (\hat{a}_{\mathbf{i}, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{i}, \downarrow} + \hat{a}_{\mathbf{i}, \downarrow}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{i}, \uparrow}) \quad (3.18)$$

这里  $\hat{a}_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger$  ( $\hat{a}_{\mathbf{i}, \sigma}$ ) 为产生 (湮灭) 算符, 格点位置  $\mathbf{i} = (i_x, i_z)$ , 自旋  $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ ,  $\eta = \{x, z\}$ 。 $t_\sigma$  为跃迁强度, 实验上通过拉曼激光诱导佩尔斯相 (Peierls phase) <sup>[51]</sup>, 可以将二维方格子系统的跃迁强度调节为

$$t_{x, \uparrow} = -t_{x, \downarrow} = t_0, \quad t_{z, \uparrow} = -t_{z, \downarrow} = t_0 \quad (3.19)$$

自旋轨道耦合项  $\hat{H}_{SOC}$  在实验上可通过 Rashba 型和 Dresselhaus 型自旋轨道耦合等权相加得到, 塞曼项由  $z$  方向的磁场产生, 拉曼项由拉曼激光诱导产生, 这两项在实验上可以独立调节。其对应的参数为

$$\Gamma_z = m_z - 2t_0 \cos \theta, \quad \Gamma_x = 2t_s \sin \theta \quad (3.20)$$

这里  $m_z$  和  $\theta$  都是参数,  $\theta$  的取值范围为  $[-\pi, \pi]$ 。利用周期边界条件和傅里叶变换

$\hat{a}_{\mathbf{i}, \sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{i}) \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}$ , 可将系统的哈密顿量从实空间转换到动量空间, 得到

$$H(\mathbf{k}) = \vec{d}(\mathbf{k}) \cdot \vec{\sigma} \quad (3.21)$$

这里  $\mathbf{k} = (k_x, k_z)$ ,  $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  是泡利矩阵,  $\vec{d}(\mathbf{k}) = (d_x, d_y, d_z)$  是布洛赫矢量, 其中,  $d_x = 2t_s \sin \theta$ ,  $d_y = 2t_s \sin k_x$ ,  $d_z = m_z - (2t_0 \cos k_z + 2t_0 \cos k_x + 2t_0 \cos \theta)$ 。系统的能量本征值为

$$E_{\pm}(\mathbf{k}, \theta) = \pm |\vec{d}(\mathbf{k}, \theta)| \quad (3.22)$$

这里将周期参数  $\theta$  看作动量  $k_y$ , 从而 2 维的动量空间变为一个 3 维的参数空间。此时, 若两能带发生接触时, 系统对应的相即为外尔半金属相; 而当两能带没发生接触, 即存在能隙时, 系统对应的相为绝缘体相。系统的两能带发生接触, 需满足以下的条件:

$$d_x = 2t_s \sin \theta = 0, \quad d_y = 2t_s \sin k_x = 0 \quad (3.23)$$

$$d_z = m_z - (2t_0 \cos k_z + 2t_0 \cos k_x + 2t_0 \cos \theta) = 0 \quad (3.24)$$

我们现在讨论外尔半金属相。为了不失一般性, 令参数  $t_0 > 0$ ,  $t_s > 0$  和  $m_z \geq 0$ 。对于条件 (3.23), 要求  $k_x = \{0, \pi\}$  和  $\theta = \{0, \pi\}$ 。那么 (3.23) 和 (3.24) 变为



$$m_z - 2t_0 \cos k_z = 0, \text{ 对于 } (k_x, \theta) = (0, \pi) \text{ 和 } (\pi, 0) \quad (3.25)$$

$$m_z - 2t_0 \cos k_z - 4t_0 = 0, \text{ 对于 } (k_x, \theta) = (0, 0) \quad (3.26)$$

$$m_z - 2t_0 \cos k_z + 4t_0 = 0, \text{ 对于 } (k_x, \theta) = (\pi, \pi) \quad (3.27)$$

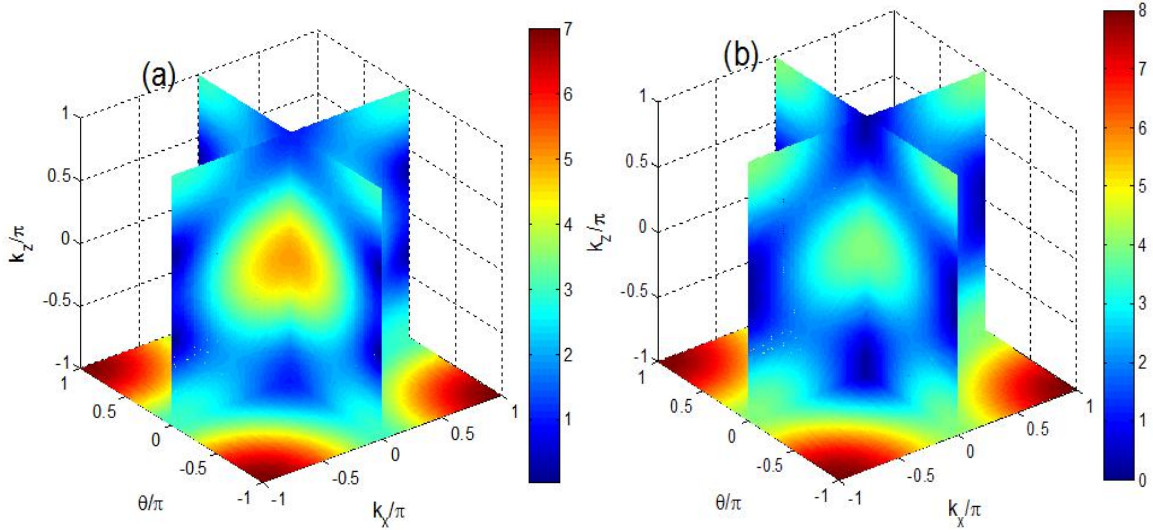
在  $k_z \in [-\pi, \pi]$ , 上述三个方程若成立, 则有成对的能带简并点出现, 这里的能带简并点就是外尔点。对于方程 (3.25), 在  $0 \leq m_z \leq 2t_0$ , 有两对外尔点出现, 位置为

$$W_{1,\pm} = \left( 0, \pi, \pm \arccos \frac{m_z}{2t_0} \right) \text{ 和 } W_{2,\pm} = \left( \pi, 0, \pm \arccos \frac{m_z}{2t_0} \right) \quad (3.28)$$

对于方程 (3.26), 在  $2t_0 \leq m_z \leq 6t_0$ , 有一对外尔点出现, 位置为

$$W_{\pm} = \left( 0, 0, \pm \arccos \frac{m_z - 4t_0}{2t_0} \right) \quad (3.29)$$

由于  $t_0 > 0$ , 对于方程 (3.27), 没有满足条件的外尔点出现。对于 3 维的能量本征值关于参数  $m_z$  的能带图, 可以画出能量本征值  $E_{\pm}$  关于参数  $m_z$  的能带图。如图 3.3 所示, 其它参数设为:  $t_0 = t_{\pm} = 1$ 。其中能带图的 x 轴、y 轴、z 轴分别对应动量的三个方向, 而用不同的颜色表示能量本征值的大小, 其中的颜色条就表示  $E_{+}$  的能量。外尔点处在  $E_{+} = 0$  的位置, 对应的最蓝的部分, 而最红的部分对应的是最大的能量。



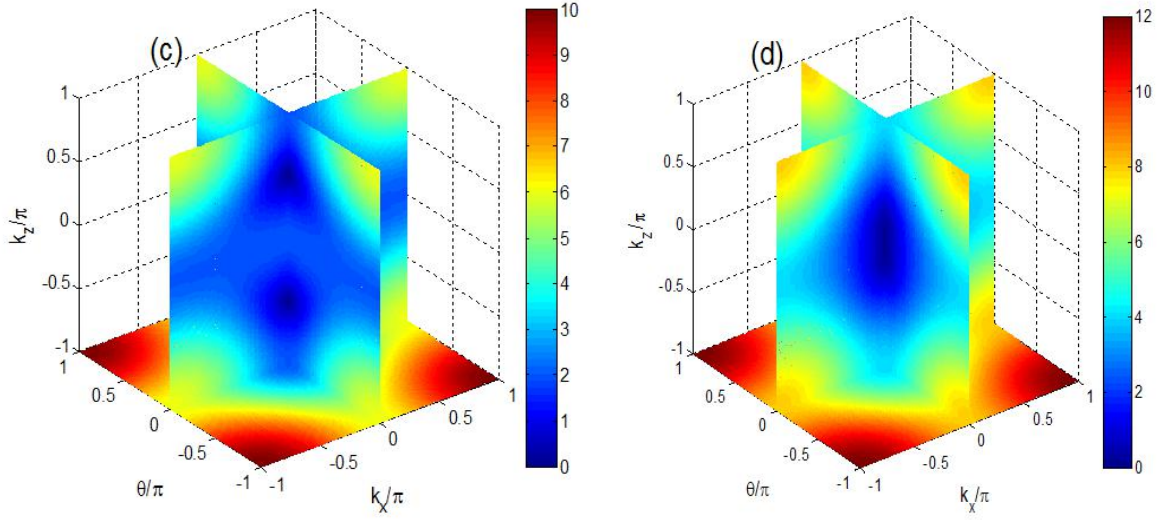


图 3.3 系统的能量本征值  $E_+$  关于参数  $m_z$  的能带图。图例模拟文献[50]。

(a)  $m_z = 1$ ; (b)  $m_z = 2$ ; (c)  $m_z = 4$ ; (d)  $m_z = 6$ 。其中能量为零（最蓝的部分）对应的是外尔点。

我们选取一对外尔点  $W_{\pm} = (k_x, \theta, k_z) = (0, 0, \pm\pi/2)$  为例，在其附近做展开，得到其低能有效哈密顿量为

$$H_{\pm W} = v_x q_x \sigma_y + v_y q_y \sigma_x \pm v_z q_z \sigma_z \quad (3.30)$$

其中， $v_x = 2t_s$ ， $v_y = 2t_s$ ， $v_z = 2t_0$  是各方向的有效费米速度， $\mathbf{q} = (q_x, q_y, q_z) = \mathbf{k} - W_{\pm}$  是外尔点附近外尔费米子的动量。对应的外尔费米子满足的各向异性的外尔哈密顿量为

$$H(\mathbf{q}) = \sum_{i,j} q_i v_{ij} \sigma_j \quad (3.31)$$

其中，

$$v_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 2t_s & 0 \\ 2t_s & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 2t_0 \end{pmatrix}$$

从而确定两个外尔点对应的手性为  $\kappa_{\pm} = \text{sign}(\det[v_{ij}]) = \pm 1$ ，这里手性等同于拓扑荷。

### 3.2.2 拓扑不变量和边缘态

为了研究系统的拓扑特性，我们采用降维方法 (Dimensional reduction method)，将系统哈密顿量中的  $k_z$  当作有效参数，从而二维系统变为一维的紧束缚链系统



$H(k_x, \theta, k_z) \rightarrow H_{k_z}(k_x, \theta)$ 。而把周期参数  $\theta$  仍当作动量  $k_y$ ，那么系统仍是二维系统，此时

$$H_{k_z}(k_x, \theta) = 2t_s \sin \theta \sigma_x + 2t_s \sin k_x \sigma_y + (M_z - 2t_0 \cos k_x - 2t_0 \cos \theta) \sigma_z \quad (3.32)$$

这里  $M_z = m_z - 2t_0 \cos k_z$ ， $H_{k_z}(k_x, \theta)$  描述的系统可以当作二维的绝缘体。通过计算拓扑不变量来研究此时的二维系统，计算得到的陈数<sup>[52]</sup>为

$$\begin{aligned} C_{k_z} &= \frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \hat{d} \cdot \left( \partial_{k_x} \hat{d} \times \partial_{\theta} \hat{d} \right) \\ &= \begin{cases} -\text{sign}(M_z), & 0 < |M_z| < 4t_0 \\ 0, & |M_z| > 4t_0 \end{cases} \end{aligned} \quad (3.33)$$

这里  $\hat{d} \equiv \vec{d}/|\vec{d}|$ 。在参数  $0 < M_z < 4t_0$ ，可以计算得到系统对应的陈数为  $C_{k_z} = -1$ ，此时系统模拟的二维绝缘体为拓扑非平庸的陈绝缘体。在其它区域陈数为  $C_{k_z} = 0$ ，对应的二维绝缘体即拓扑平庸的普通绝缘体。这里只考虑  $t_0 > 0$  的情况。接着我们研究系统的边缘态，我们选取系统在  $x$  方向为开边界条件， $H_{k_z}(k_x, \theta)$  对应的哈密顿量为

$$\begin{aligned} \hat{H}_c &= -\sum_{i_x} t_0 \left( \hat{a}_{i_x+x, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{i_x, \uparrow} - \hat{a}_{i_x+x, \downarrow}^\dagger \hat{a}_{i_x, \downarrow} \right) + h.c. - \sum_{i_x} t_s \left( \hat{a}_{i_x, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{i_x+x, \downarrow} - \hat{a}_{i_x, \downarrow}^\dagger \hat{a}_{i_x-x, \uparrow} \right) + h.c. \\ &+ \sum_{i_x} (M_z - 2t_0 \cos \theta) \left( \hat{a}_{i_x, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{i_x, \uparrow} - \hat{a}_{i_x, \downarrow}^\dagger \hat{a}_{i_x, \downarrow} \right) + \sum_{i_x} 2t_s \sin \theta \left( \hat{a}_{i_x, \downarrow}^\dagger \hat{a}_{i_x, \uparrow} + \hat{a}_{i_x, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{i_x, \downarrow} \right) \end{aligned} \quad (3.34)$$

选取系统在  $x$  方向的格点长度为  $L_x = 40$ ， $m_z = 4t_0$ ，通过改变参数  $k_z$  来观察边缘态能谱的变化，从而确定系统的属性，如图 3.4 所示。图 (a) 中， $k_z = 0$ ，系统的体能带存在能隙，在能隙中存在着连接上下体能带的边缘态。我们选取  $\theta = \pm 0.2\pi$  时边缘态的密度分布，可以发现它们局域于系统的两个边界，表明系统是拓扑非平庸的绝缘体。此时系统对应的陈数为  $-1$ 。逐渐增大  $k_z$  的值，能隙会逐渐减小，在  $k_z = 0.5\pi$ ，能隙关闭，此时边缘态演化到体态中，如图 (b)。继续增大  $k_z$  的值，能隙会再次打开，但此时系统中不存在连接上下体能带的边缘态，如图 (c)，此时系统对应的是拓扑平庸的绝缘体，陈数为  $0$ 。从这里可以看出，通过改变参数  $k_z$ ，可以使冷原子系统模拟拓扑非平庸绝缘体到拓扑平庸绝缘体的相互转变。

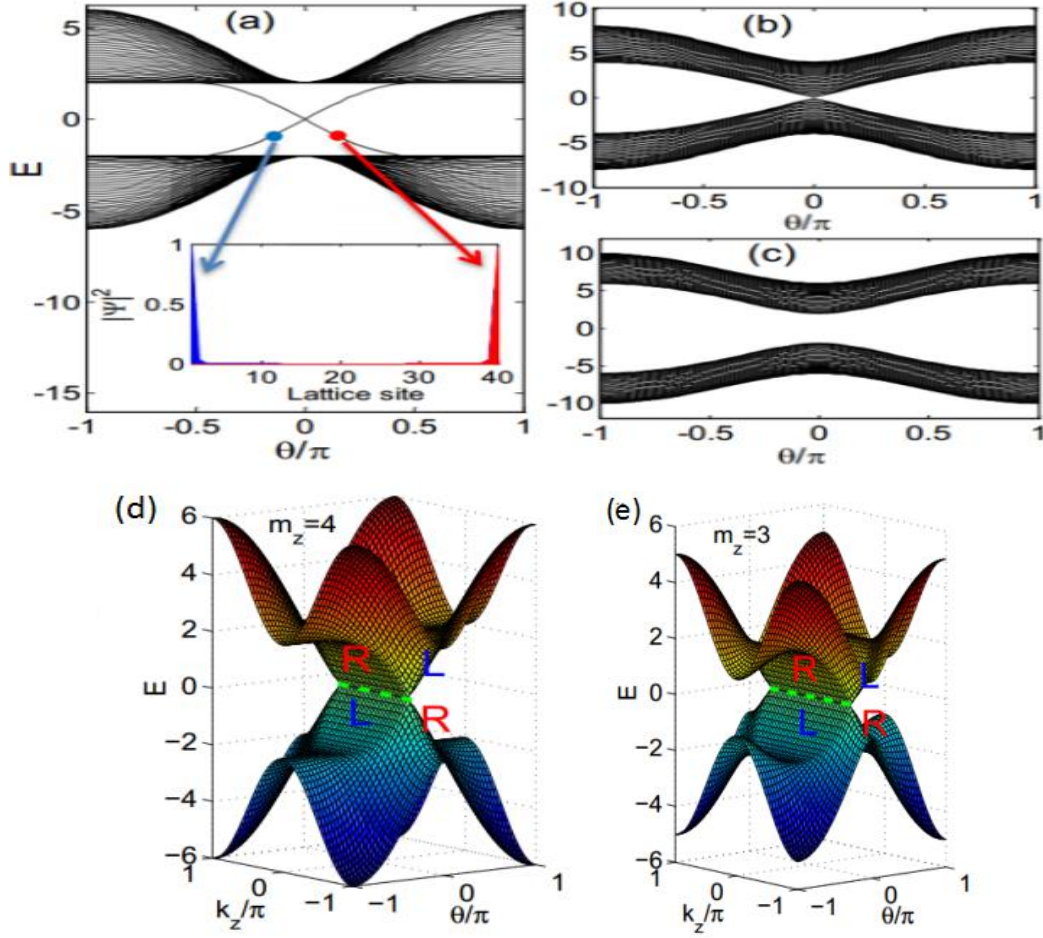


图 3.4 系统的边缘态能谱和模拟外尔半金属出现的费米弧。图例引自文献[50]。  
 (a)  $m_z = 4t_0$ ,  $k_z = 0$ ; (b)  $m_z = 4t_0$ ,  $k_z = 0.5\pi$ ; (c)  $m_z = 4t_0$ ,  $k_z = \pi$ ; (d)  $m_z = 4t_0$  和 (e)  $m_z = 3t_0$  时, 模拟外尔半金属出现的费米弧, 其中绿色的虚线就是费米弧, 而图中的 R 和 L 表示局域于左、右边界的边缘态模式。

外尔半金属很重要的性质是其拥有受拓扑保护的表面态-费米弧<sup>[30,37]</sup>, 费米弧的一部分与外尔半金属的上表面连接在一起, 另一部分与外尔半金属的下表面连接在一起。在上下表面, 费米弧连接着体内具有手性相反的外尔点在表面的投影。而在这里, 我们选取  $\theta$  和  $k_z$  为参数画出它的能谱图, 如图 3.4 (d) 与 (e), 外尔点被能量为零的边缘态, 即直的费米线连接着 (绿色的虚线), 这些直的费米线就可以看作费米弧。其中图 3.4 (d)  $m_z = 4t_0$ , 外尔点的位置为  $(\theta, k_z) = (0, \pm\pi/2)$ , 图 3.4 (e)  $m_z = 3$ , 外尔点的位置为  $(\theta, k_z) = (0, \pm 2\pi/3)$ , 图 (d) 和图 (e) 中的 L 和 R 分别对应着局域于左边界的边缘态模式和右边界的边缘态模式。

### 3.3 二维正方晶格中的自旋轨道耦合效应

基于自旋轨道耦合对凝聚态物理的重要性, 本节在二维的正方光晶格中, 引入了二

维自旋轨道耦合，研究二维自旋轨道耦合的相对强度对二维正方光晶格系统的影响。文中令二维自旋轨道耦合一个维度的耦合强度与系统跃迁强度相当，即选择  $x$  方向的自旋轨道耦合强度  $\alpha$  与系统的跃迁强度  $t_0$  相等，通过改变  $y$  方向自旋轨道耦合强度  $\beta$ ，研究相对强度  $\beta/\alpha$  对色散关系和边缘态的影响。并在最后计算了能带接触点的拓扑不变量。

### 3.3.1 理论模型和能谱

考虑无相互作用的具有自旋轨道耦合的费米气体被捕陷在二维的正方晶格中，紧束缚近似下（只考虑最近邻跃迁），其哈密顿量的表达式为

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{soc} \quad (3.35)$$

其中， $\hat{H}_0$  表示自旋守恒的跃迁项，其表达式为

$$\hat{H}_0 = -\sum_{\mathbf{i}, \sigma} t_{\eta, \sigma} (\hat{a}_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{i}+\boldsymbol{\eta}, \sigma} + h.c.) \quad (3.36)$$

这里  $\hat{a}_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger$  ( $\hat{a}_{\mathbf{i}, \sigma}$ ) 为产生（湮灭）算符，格点位置  $\mathbf{i} = (i_x, i_y)$ ，自旋  $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ ， $\boldsymbol{\eta} = \{x, y\}$ 。系统的跃迁强度见 (3.19) 式，即

$$t_{x, \uparrow} = -t_{x, \downarrow} = t_0, \quad t_{y, \uparrow} = -t_{y, \downarrow} = t_0 \quad (3.37)$$

$\hat{H}_{soc}$  的形式即 (2.40) 式，整个系统中我们设  $t_0$  为能量单位。

为了研究系统的性质，我们首先计算其能谱，在周期边界条件下，利用傅里叶变换可将哈密顿量转化到动量空间，可以得到

$$H(\mathbf{k}) = \vec{d}(\mathbf{k}) \cdot \vec{\sigma} \quad (3.38)$$

其中，

$$d_x = 2\beta \sin k_y, \quad d_y = 2\alpha \sin k_x, \quad d_z = -2t_0 (\cos k_x + \cos k_y) \quad (3.39)$$

该模型满足粒子空穴对称性，即有  $\sigma_x H^*(\mathbf{k}) \sigma_x = -H(-\mathbf{k})$ 。且在  $\alpha$  或  $\beta$  等于 0 时具有手征对称性，其中  $\alpha = 0$ ，有  $\sigma_y H(\mathbf{k}) \sigma_y = -H(\mathbf{k})$ ； $\beta = 0$  时，有  $\sigma_x H(\mathbf{k}) \sigma_x = -H(\mathbf{k})$ ；当  $\alpha$  和  $\beta$  不等于 0 时，手征对称性被破坏。对角化此系统哈密顿量得到其能量本征值为

$$E_{\pm} = \pm |\vec{d}| = \pm \sqrt{4\beta^2 \sin^2 k_y + 4\alpha^2 \sin^2 k_x + 4t_0^2 (\cos k_x + \cos k_y)^2} \quad (3.40)$$

我们知道，能带发生接触与打开，是系统发生相变的相变点。这里能带的间隙为  $\Delta = 2|\vec{d}|$ ，而能带闭合的条件是  $|\vec{d}| = 0$ 。从而得到两能带在第一布里渊区中有两个接触点，分别为  $(k_x^0, k_y^0) = (0, \pi)$  和  $(k_x^0, k_y^0) = (\pi, 0)$ 。如图 3.5(a), (b), (c)，计算了在  $\beta/\alpha = 0, 0.2, 1$  时系统在

第一布里渊区的能谱。可以观察到系统具有上下两个能带，而在 $(0, \pi)$ 和 $(\pi, 0)$ 处上下能带发生接触。通过变化 $\beta/\alpha$ 的比值，发现两能带一直在 $(k_x^0, k_y^0) = (0, \pi)$ 和 $(k_x^0, k_y^0) = (\pi, 0)$ 处有接触。由此可知，系统具有半金属特性，且能带接触点位置不随自旋轨道耦合强度的变化而改变。

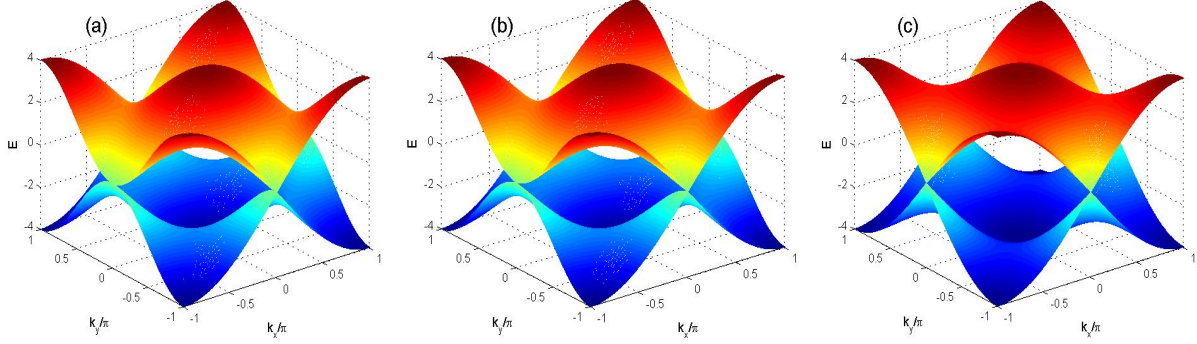


图 3.5 系统在  $\beta/\alpha = 0, 0.2, 1$  时，对应的能谱图

(a)  $\beta/\alpha = 0$ ; (b)  $\beta/\alpha = 0.2$ ; (c)  $\beta/\alpha = 1$ 。

### 3.3.2 自旋轨道耦合的相对强度对系统色散关系的影响

半金属具有许多新颖的特性，如独特的输运性质<sup>[53]</sup>，磁性<sup>[54]</sup>等，而这些新颖的特性均来源于能带接触点附近的特殊结构。为了了解系统接触点的性质，我们研究自旋轨道耦合的相对强度对接触点的影响。我们将动量空间的哈密顿量在能带的任意接触点附近 $(k_x, k_y) = (k_x^0 - q_x, k_y^0 - q_y)$ 作二阶泰勒展开，其中 $q_x, q_y$ 为动量的分量，它们都是接触点附近的小量，我们以能带接触点 $(k_x^0, k_y^0) = (0, \pi)$ 为例作展开，得到低能有效哈密顿量为

$$H(q_x, q_y) = 2\alpha q_x \sigma_y - 2\beta q_y \sigma_x + t_0 q_x^2 \sigma_z - t_0 q_y^2 \sigma_z \quad (3.41)$$

我们研究不同 $\beta/\alpha$ 比值情况下在接触点附近色散关系的特性。如图3.6(a)所示，为能量在 $k_x = 0$ 平面的分布，此时 $\alpha = t_0$ ， $\beta$ 分别为 $0, 0.2\alpha, 0.4\alpha$ 和 $\alpha$ 时，系统的低能有效色散关系。对于不同 $\beta$ ，可以发现，在 $\beta = 0$ 或 $\beta$ 极小的情况下，能量在 $q_y$ 方向，能带在 $q_y/\pi = 0$ 点处呈非线性色散关系的特征，当 $\beta$ 达到有限大数值时，将呈现线性的色散关系；而图3.6(b)为 $\alpha = t_0$ ，能量在 $k_y = \pi$ 平面的分布。其低能色散关系并不随着 $\beta$ 的变化而变化，且一直保持线性的特性。由低能的有效哈密顿量(3.41)式也可确定，当 $\beta = 0$ 或 $\beta$ 极小时，在 $k_x = 0$ 平面呈主导的为第四项，即二次的非线性项，当随着 $\beta$ 的增大，线性项逐渐增强，从而掩盖非线性项，此时色散关系呈现线性；当能量在 $k_y = \pi$ 平面时，由于 $q_x$ 为小量，即 $\alpha q_x \gg t_0 q_x^2$ ，所以此时色散关系保持线性特性。

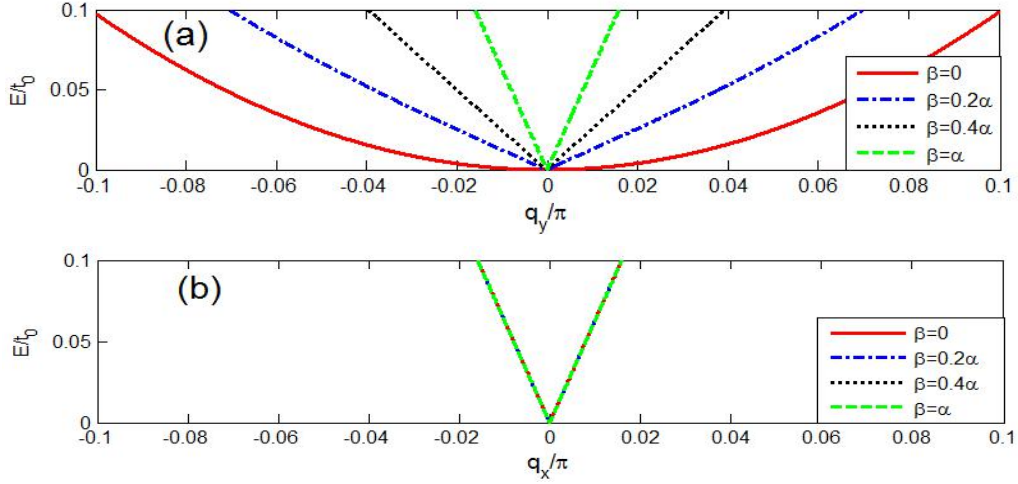


图 3.6 体系的色散关系。

(a)和(b)表示 $\alpha = t_0$ ,  $\beta = 0, 0.2\alpha, 0.4\alpha$ 和 $\alpha$ 时, 在能带接触点 $(k_x^0, k_y^0) = (0, \pi)$ 附近, 能量分别在 $q_y$ 和 $q_x$ 方向, 能带所呈现的色散关系。

由图 3.6 和公式 (3.41) 分析, 得出改变自旋轨道耦合的相对强度并不会使系统的能隙打开, 但是会影响系统能带的色散关系。在相对强度很小时, 色散关系呈非线性特征; 而当其变大时, 色散关系变为线性。

### 3.3.3 自旋轨道耦合的相对强度对系统边缘态的影响

接着我们研究自旋轨道耦合的相对强度对相变点的边缘态的影响。我们还是选取系统在 $x$ 方向为开边界条件,  $y$ 方向为周期边界条件, 即有傅里叶变换

$$\begin{aligned}\hat{a}_{i,\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_{k_y} e^{ik_y i_y} \hat{a}_{i,\sigma}(k_y) \\ \hat{a}_{i+x,\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_{k_y} e^{ik_y i_y} \hat{a}_{i_x+a,\sigma}(k_y) \\ \hat{a}_{i+y,\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_{k_y} e^{ik_y(i_y+a)} \hat{a}_{i,\sigma}(k_y)\end{aligned}\quad (3.42)$$

这里 $L_y$ 是 $y$ 方向的格点长度,  $a$ 是正方晶格的单位长度。将 (3.42) 式代入到 (3.36) 式,

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= -\sum_{i,\sigma} t_{\eta,\sigma} (\hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{a}_{i+\eta,\sigma} + h.c.) \\ &= -t_0 \sum_i (\hat{a}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{i+x,\uparrow} - \hat{a}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{i+x,\downarrow} + \hat{a}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{i+y,\uparrow} - \hat{a}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{i+y,\downarrow} + h.c.)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= -t_0 \frac{1}{L_y} \sum_{i_x, i_y} \sum_{k_y, k_y'} \left[ \begin{aligned} &\exp(-ik_y i_y) \exp(ik_y' i_y) \hat{a}_{i_x, \uparrow}^\dagger(k_y) \hat{a}_{i_x+a, \uparrow}(k_y') \\ &-\exp(-ik_y i_y) \exp(ik_y' i_y) \hat{a}_{i_x, \downarrow}^\dagger(k_y) \hat{a}_{i_x+a, \downarrow}(k_y') \end{aligned} \right] \\
 &-t_0 \frac{1}{L_y} \sum_{i_x, i_y} \sum_{k_y, k_y'} \left[ \begin{aligned} &\exp(-ik_y i_y) \exp[ik_y'(i_y+a)] \hat{a}_{i_x, \uparrow}^\dagger(k_y) \hat{a}_{i_x, \uparrow}(k_y') \\ &-\exp(-ik_y i_y) \exp[ik_y'(i_y+a)] \hat{a}_{i_x, \downarrow}^\dagger(k_y) \hat{a}_{i_x, \downarrow}(k_y') \end{aligned} \right] + h.c. \quad (3.43)
 \end{aligned}$$

由  $\delta$  函数

$$\frac{1}{L_y} \sum_{i_y} \exp[-i(k_y - k_y') i_y] = \delta_{k_y, k_y'} \quad (3.44)$$

(3.43) 式可以化作

$$\begin{aligned}
 &= -t_0 \sum_{i_x} \sum_{k_y, k_y'} \left[ \delta_{k_y, k_y'} \hat{a}_{i_x, \uparrow}^\dagger(k_y) \hat{a}_{i_x+a, \uparrow}(k_y') - \delta_{k_y, k_y'} \hat{a}_{i_x, \downarrow}^\dagger(k_y) \hat{a}_{i_x+a, \downarrow}(k_y') \right] \\
 &-t_0 \sum_{i_x} \sum_{k_y, k_y'} \left[ \delta_{k_y, k_y'} \exp(ik_y' a) \hat{a}_{i_x, \uparrow}^\dagger(k_y) \hat{a}_{i_x, \uparrow}(k_y') - \delta_{k_y, k_y'} \exp(ik_y' a) \hat{a}_{i_x, \downarrow}^\dagger(k_y) \hat{a}_{i_x, \downarrow}(k_y') \right] + h.c. \\
 &= -t_0 \sum_{i_x} \sum_{k_y} \left[ \begin{aligned} &\hat{a}_{i_x, \uparrow}^\dagger(k_y) \hat{a}_{i_x+a, \uparrow}(k_y) - \hat{a}_{i_x, \downarrow}^\dagger(k_y) \hat{a}_{i_x+a, \downarrow}(k_y) \\ &+ \exp(ik_y a) \hat{a}_{i_x, \uparrow}^\dagger(k_y) \hat{a}_{i_x, \uparrow}(k_y) - \exp(ik_y a) \hat{a}_{i_x, \downarrow}^\dagger(k_y) \hat{a}_{i_x, \downarrow}(k_y) \end{aligned} \right] + h.c. \quad (3.45)
 \end{aligned}$$

将 (3.45) 式的求和号改为积分号，并有

$$\hat{a}_{i_x, \sigma}(k_y) \equiv \hat{a}_{i_x, \sigma} \quad (3.46)$$

则

$$\begin{aligned}
 &= \int \frac{L_y}{2\pi} dk_y \left\{ -t_0 \sum_{i_x} \left[ \hat{a}_{i_x, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{i_x+a, \uparrow} - \hat{a}_{i_x, \downarrow}^\dagger \hat{a}_{i_x+a, \downarrow} + \exp(ik_y a) \hat{a}_{i_x, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{i_x, \uparrow} - \exp(ik_y a) \hat{a}_{i_x, \downarrow}^\dagger \hat{a}_{i_x, \downarrow} \right] + h.c. \right\} \\
 &= k \int \frac{L_y}{2\pi} dk_y \left\{ -t_0 \sum_{i_x} \left[ \hat{a}_{i_x, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{i_x+a, \uparrow} - \hat{a}_{i_x, \downarrow}^\dagger \hat{a}_{i_x+a, \downarrow} + h.c. \right] - 2t_0 \cos(k_y a) \sum_{i_x} \left[ \hat{a}_{i_x, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{i_x, \uparrow} - \hat{a}_{i_x, \downarrow}^\dagger \hat{a}_{i_x, \downarrow} \right] \right\}
 \end{aligned}$$

所以

$$\hat{H}_0^c = -t_0 \sum_{i_x} \left( \hat{a}_{i_x, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{i_x+1, \uparrow} - \hat{a}_{i_x, \downarrow}^\dagger \hat{a}_{i_x+1, \downarrow} + h.c. \right) - 2t_0 \cos k_y \sum_{i_x} \left( \hat{a}_{i_x, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{i_x, \uparrow} - \hat{a}_{i_x, \downarrow}^\dagger \hat{a}_{i_x, \downarrow} \right) \quad (3.47)$$

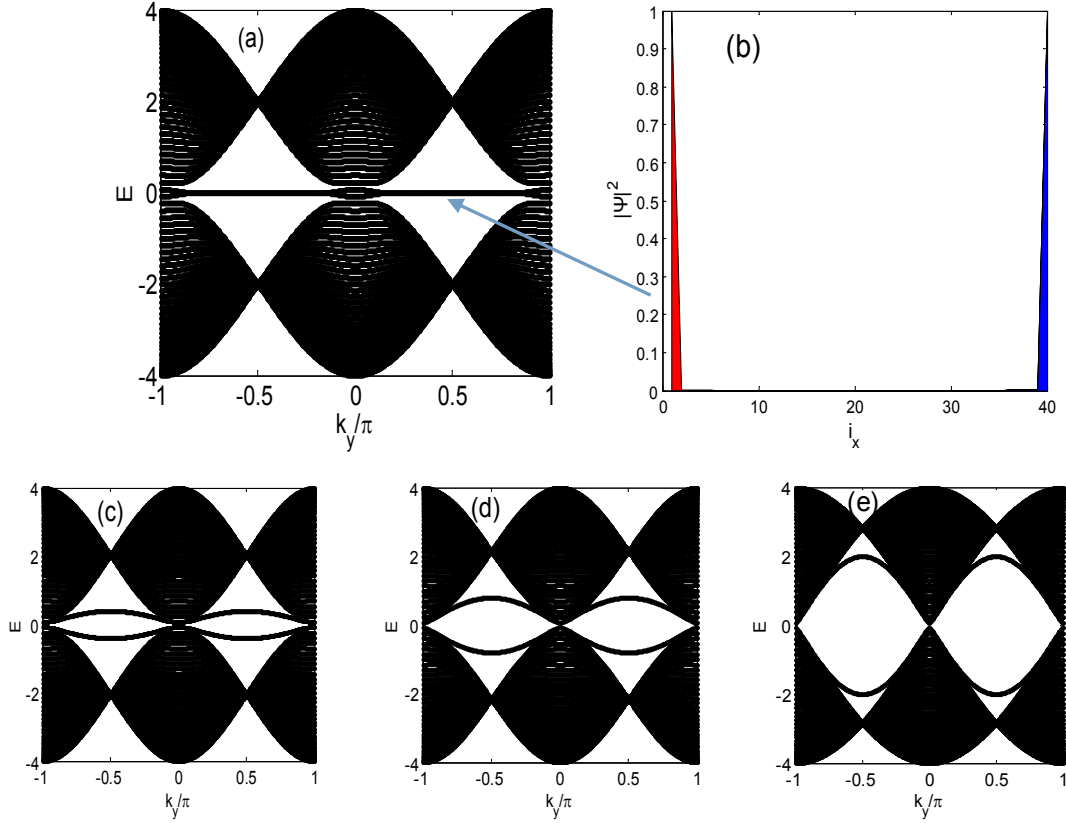
这里  $a=1$ ，同理可以计算得到

$$\hat{H}_{so}^c = -\alpha \sum_{i_x} \left( \hat{a}_{i_x, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{i_x+1, \downarrow} - \hat{a}_{i_x, \downarrow}^\dagger \hat{a}_{i_x+1, \uparrow} + h.c. \right) + 2\beta \sin k_y \sum_{i_x} \left( \hat{a}_{i_x, \downarrow}^\dagger \hat{a}_{i_x, \uparrow} + \hat{a}_{i_x, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{i_x, \downarrow} \right) \quad (3.48)$$

此时系统的哈密顿量为



$$\begin{aligned} \hat{H}^c = & -t_0 \sum_{i_x} \left( \hat{a}_{i_x, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{i_x+1, \uparrow} - \hat{a}_{i_x, \downarrow}^\dagger \hat{a}_{i_x+1, \downarrow} + h.c. \right) - 2t_0 \cos k_y \sum_{i_x} \left( \hat{a}_{i_x, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{i_x, \uparrow} - \hat{a}_{i_x, \downarrow}^\dagger \hat{a}_{i_x, \downarrow} \right) \\ & - \alpha \sum_{i_x} \left( \hat{a}_{i_x, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{i_x+1, \downarrow} - \hat{a}_{i_x, \downarrow}^\dagger \hat{a}_{i_x+1, \uparrow} + h.c. \right) + 2\beta \sin k_y \sum_{i_x} \left( \hat{a}_{i_x, \downarrow}^\dagger \hat{a}_{i_x, \uparrow} + \hat{a}_{i_x, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{i_x, \downarrow} \right) \end{aligned} \quad (3.49)$$



3.7  $\alpha=t_0$ ，随着  $\beta$  值的变化，系统边缘态相应的变化。

图 3.7 展示了  $\alpha=t_0$ ，随着  $\beta$  值的变化，系统边缘态相应的变化。(a)  $\beta=0$ ；(c)  $\beta=0.2\alpha$ ；(d)  $\beta=0.4\alpha$ ；(e)  $\beta=\alpha$ ；(b) 对应的是 (a) 中  $k_y = \pi/2$  处简并的零模边缘态沿着  $x$  方向的密度分布，其中格点数目为  $N_x = 40$ 。

我们令  $\alpha=t_0$ ， $\beta$  取  $0, 0.2\alpha, 0.4\alpha$  和  $\alpha$  时，系统的能谱图如 3.7 所示。我们发现，在 3.7 (a) 中， $\beta=0$ ，系统有 2 重简并的零模边缘态，这是系统具有手征对称性的体现。3.7 (b) 为图 3.7 (a) 中  $k_y = 0.5\pi$  时零模的密度分布情况。可以看到，对应于零模，粒子分别局域在左右边界。而在离开  $\beta=0$  点处，系统的手征对称性被破坏，简并的零模边缘态也发生破坏，两支边缘态逐渐分离，随着  $\beta$  值逐渐增大，边缘态逐渐向体态方向靠近，但在  $k_y = 0.5\pi$  处，边缘态始终稳定存在，不会随  $\beta$  增大演化成体态，如图 3.7 的 (c), (d) 和 (e) 所示。

通过改变  $\beta/\alpha$  的比值，由图 3.7 可以发现，系统在  $\beta=0$  时，具有简并的边缘态，且满足手征对称性；在  $\beta \neq 0$  时，边缘态的简并性遭到破坏，同时系统不再满足手征对

称性；但不管  $\beta$  取何值，边缘态始终存在，边缘态的存在，表明系统具有非平庸的拓扑性质。

### 3.3.4 能带接触点的拓扑不变量

对于系统是否为拓扑相，可以通过计算系统的拓扑不变量来确定。当系统能带打开时，我们可以计算占满的布洛赫带的拓扑不变量，来描述布洛赫带的整体拓扑性质，如拓扑绝缘体。但对于能隙关闭，出现了能带简并点的系统，我们需要在动量空间或动量和相变参数组成的参数空间里，选取围绕能带简并点的封闭路径或曲面作为拓扑不变量的积分区域，得到一数值，继而确定系统的拓扑性质<sup>[55-56]</sup>。本系统哈密顿量在动量空间的具体形式为

$$H(\mathbf{k}) = 2\beta \sin k_y \sigma_x + 2\alpha \sin k_x \sigma_y - 2t_0 (\cos k_x + \cos k_y) \sigma_z \quad (3.50)$$

将其做一阶的泰勒展开，得到

$$\begin{aligned} H(k_x, k_y) &= H(k_x^0 + q_x, k_y^0 + q_y) \\ &= 2q_x (\alpha \cos k_x \sigma_y + t_0 \sin k_x \sigma_z) + 2q_y (\beta \cos k_y \sigma_x + t_0 \sin k_y \sigma_z) \end{aligned} \quad (3.51)$$

对于接触点  $(k_x^0, k_y^0) = (0, \pi)$ ，上式哈密顿量变为

$$H(q_x, q_y) = 2\alpha q_x \sigma_y - 2\beta q_y \sigma_x \quad (3.52)$$

将其展开，并转化到平面极坐标下，

$$\begin{aligned} H(q_x, q_y) &= 2 \begin{pmatrix} 0 & \beta q_y + i\alpha q_x \\ \beta q_y - i\alpha q_x & 0 \end{pmatrix} \\ &= 2q \begin{pmatrix} 0 & \beta \cos \theta + i\alpha \sin \theta \\ \beta \cos \theta - i\alpha \sin \theta & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.53)$$

可以计算得到本征值为

$$E_{\pm} = \pm 2q \sqrt{\beta^2 \cos^2 \theta + \alpha^2 \sin^2 \theta} \quad (3.54)$$

对于本征值为负的，本征态设为  $\psi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ ，则

$$2q \begin{pmatrix} 0 & \beta \cos \theta + i\alpha \sin \theta \\ \beta \cos \theta - i\alpha \sin \theta & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = -2q \sqrt{\beta^2 \cos^2 \theta + \alpha^2 \sin^2 \theta} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

解得



$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{-\beta \cos \theta + i\alpha \sin \theta}{\sqrt{\beta^2 \cos^2 \theta + \alpha^2 \sin^2 \theta}} \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

这里定义接触点的贝里相位为  $\gamma = \int_{-\pi}^{\pi} \langle \psi | i\partial_{\theta} | \psi \rangle d\theta$

$$\partial_{\theta} | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \partial_{\theta} \frac{-\beta \cos \theta + i\alpha \sin \theta}{\sqrt{\beta^2 \cos^2 \theta + \alpha^2 \sin^2 \theta}} \end{pmatrix} \quad (3.56)$$

$$\partial_{\theta} \frac{-\beta \cos \theta + i\alpha \sin \theta}{\sqrt{\beta^2 \cos^2 \theta + \alpha^2 \sin^2 \theta}} = \frac{\alpha\beta (i\beta \cos \theta + \alpha \sin \theta)}{(\beta^2 \cos^2 \theta + \alpha^2 \sin^2 \theta)^{3/2}}$$

$$i\partial_{\theta} \frac{-\beta \cos \theta + i\alpha \sin \theta}{\sqrt{\beta^2 \cos^2 \theta + \alpha^2 \sin^2 \theta}} = \frac{\alpha\beta (-\beta \cos \theta + i\alpha \sin \theta)}{(\beta^2 \cos^2 \theta + \alpha^2 \sin^2 \theta)^{3/2}}$$

则

$$\begin{aligned} \langle \psi | i\partial_{\theta} | \psi \rangle &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \frac{-\beta \cos \theta - i\alpha \sin \theta}{\sqrt{\beta^2 \cos^2 \theta + \alpha^2 \sin^2 \theta}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\alpha\beta (-\beta \cos \theta + i\alpha \sin \theta)}{(\beta^2 \cos^2 \theta + \alpha^2 \sin^2 \theta)^{3/2}} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \frac{\alpha\beta}{\beta^2 \cos^2 \theta + \alpha^2 \sin^2 \theta} \end{aligned} \quad (3.57)$$

$$\begin{aligned} \gamma &= \int_{-\pi}^{\pi} \langle \psi | i\partial_{\theta} | \psi \rangle d\theta \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\alpha\beta}{\beta^2 \cos^2 \theta + \alpha^2 \sin^2 \theta} d\theta \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{-\alpha \sin \theta d(\beta \cos \theta) + \beta \cos \theta d(\alpha \sin \theta)}{\beta^2 \cos^2 \theta + \alpha^2 \sin^2 \theta} \end{aligned} \quad (3.58)$$

令  $h_x = \beta \cos \theta$ ， $h_y = \alpha \sin \theta$ ，则上式可以写作

$$\frac{1}{2} \oint \frac{h_x dh_y - h_y dh_x}{h_x^2 + h_y^2} \quad (3.59)$$

(3.59) 式就是 Winding Number 的定义<sup>[56]</sup>，由于不显含参量  $\theta$ ，所以把积分上下限去掉，改写为环路积分，设

$$\frac{h_x}{\sqrt{h_x^2 + h_y^2}} \equiv \cos \varphi \quad \frac{h_y}{\sqrt{h_x^2 + h_y^2}} \equiv \sin \varphi \quad (3.60)$$

(3.59) 式变为

$$\frac{1}{2} \oint \cos \varphi d \sin \varphi - \sin \varphi d \cos \varphi = \frac{1}{2} \oint d \varphi \quad (3.61)$$

上式环路积分，当顺时针积分时，即可得到贝里相位  $\gamma = \pi$ ；当逆时针积分时，即可得到贝里相位  $\gamma = -\pi$ 。同理，按上述计算方法可以计算得到接触点  $(k_x^0, k_y^0) = (\pi, 0)$  的贝里相位。

## 第四章 总结与展望

光晶格相比于固体物质，有很好的可控性和操作性，因此为我们提供了一个研究和模拟物质态的一个良好平台。实验实现的超冷原子二维自旋轨道耦合的人工合成，给人们研究和发现新奇的物质态带来了新的曙光。本文就是基于自旋轨道耦合的条件下，在冷原子光晶格中模拟拓扑半金属和研究其一些性质。

文章首先讲了在六角光晶格中模拟狄拉克费米子，通过能谱的分析和狄拉克点处的低能激发的有关计算，发现随着参数的改变，可以实现有质量和无质量的狄拉克费米子的相互转换，再由密度分布的计算可确定，密度分布图像中有平台（plateau）的对应的是有质量的狄拉克费米子，而没有平台，密度分布随着化学势的增大而连续增大的对应着无质量的狄拉克费米子。

其次讲了在二维的正方光晶格中，引入一参数变量，构成一个三维的参数空间，去模拟和探究外尔半金属。通过观察能带的接触点（外尔点）的产生、移动和湮灭，计算得到的量子化拓扑不变量，以及出现的边缘态和费米弧，从而印证了系统模拟外尔半金属的正确性。

最后我们提出在二维的正方光晶格中，引入二维自旋轨道耦合，从能谱的计算和图例分析，得出改变相对强度并不会使系统的能隙打开，即不会改变系统半金属的性质，但是会影响系统能带的色散关系。在相对强度很小时，色散关系呈非线性的特征；而当其变大时，色散关系变为线性。在开边界条件下，系统存在稳定的边缘态，因此系统具有非平庸的拓扑性质。文章在最后定义了能带接触点的拓扑不变量—贝里相位，并计算得到了量子化的值。

拓扑半金属及其他一些拓扑态，虽然现在得到了广泛的关注，但很多研究手段还不是很成熟，有些拓扑态的性质和研究方法还有待发现，如高维度的拓扑半金属有哪些奇异的现象，拓扑不变量有什么更简便的计算方法，以及怎样能获得廉价的拓扑半金属材料，这些都需要科学工作者研究克服，期望未来这方面的问题得到解决，推动科学技术向前发展。



## 参考文献

- [1] T. W. Hänsch and A. L. Schawlow. Cooling of gases by laser radiation. *Optics Communication*, 1975, 13(1), 68.
- [2] 王义道. 原子的激光冷却与陷俘. 北京: 北京大学出版, 2007.
- [3] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J.J. Tollett, and R. G. Hulet. Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions. *Phys. Rev. Lett*, 1995, 75, 1687-1690.
- [4] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman and E. A. Cornell. Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor. *Science*, 1995, 269, 198.
- [5] S. Bize, P. Laurent, M. Abgrall, H. Marion, I. Maksimovic, L. Cacciapuoti, C. Vian, et al. Cold atom clocks and applications. *At. Mol. Opt. Phys*, 2005, 38, S449–S468.
- [6] Line Hjortshøj Pedersen, Niels Martin Møller and Klaus Mølmer. Fidelity of quantum operations. *Phys. Lett. A*, 2007, 367, 47-51.
- [7] M. R. Andrews, C. G. Townsend, H.-J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn and W. Ketterle. Observation of Interference Between Two Bose Condensates. *Science*, 1997, 275, 637.
- [8] Xia-Ji Liu and P. D. Drummond. Manipulating Majorana fermions in one-dimensional spin-orbit-coupled atomic Fermi gases. *Phys. Rev. A*, 2012, 86, 035602.
- [9] Nathan Gemelke, Xi-bo Zhang, Chen-Lung Hung and Cheng Chin. In situ observation of incompressible Mott-insulating domains in ultracold atomic gases. *Nature*, 2009, 460, 995.
- [10] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, 2004, 306, 666.
- [11] C. L. Kane and E. J. Mele. Quantum Spin Hall Effect in Graphene. *Phys. Rev. Lett*, 2005, 95, 226801.
- [12] Xiao-Liang Qi, Shou-Cheng Zhang. Topological insulators and superconductors. *Rev. Mod. Phys*, 2011, 83, 1057.
- [13] Z. Y. Meng, T. C. Lang, S. Wessel, F. F. Assaad and A. Muramatsu. Quantum spin

- liquid emerging in two-dimensional correlated Dirac fermions. *Nature*, 2010, 464, 847.
- [14] M. Blume and R. E. Watson. Theory of spin-orbit coupling in atoms. I. Derivation of the spin-orbit coupling constant. *Mathematical and Physical Sciences*, 1962, 270, 127-143.
- [15] Xiao-Liang Qi, Yong-Shi Wu and Shou-Cheng Zhang. Topological quantization of the spin Hall effect in two-dimensional paramagnetic semiconductors. *Phys. Rev. B*, 2006, 74, 085308.
- [16] Xia-Ji Liu and P. D. Drummond. Manipulating Majorana fermions in one dimensional spin-orbit coupled atomic Fermi. *Phys. Rev. A*, 2012, 86(3), 035602.
- [17] L. Berger. Emission of spin waves by a magnetic multilayer traversed by a current. *Phys. Rev. B*, 1996, 54, 9353.
- [18] R. Roy. Z<sub>2</sub> classification of quantum spin Hall systems: An approach using time reversal invariance. *Phys. Rev. B*, 2009, 79, 195321.
- [19] Xiong-Jun Liu, Mario F. Borunda, Xin Liu, and Jairo Sinova. Effect of Induced Spin-Orbit Coupling for Atoms via Laser Fields. *Phys. Rev. Lett*, 2009, 102, 046402.
- [20] Y. J. Lin, K. Jimenez Garcia and I. B. Spielman. Spin-orbit-coupled Bose–Einstein condensates. *Nature*, 2001, 471, 83-86.
- [21] Peng-jun Wang, Zeng-Qiang Yu, Zheng-kun Fu, Jiao Miao, Liang-hui Huang, Shi-jie Chai, Hui Zhai, and Jing Zhang. Spin-Orbit Coupled Degenerate Fermi Gases. *Phys. Rev. Lett*, 2012, 109, 095301.
- [22] Lawrence W. Cheuk, Ariel T. Sommer, Zoran Hadzibabic, Tarik Yefsah, Waseem S. Bakr, and Martin W. Zwierlein. Spin-Injection Spectroscopy of a Spin-Orbit Coupled Fermi Gas. *Phys. Rev. Lett*, 2012, 109, 095302.
- [23] Zhan Wu, Long Zhang, Wei Sun, Xiao-Tian Xu, Bao-Zong Wang, Si-Cong Ji, You-jin Deng, Shuai Chen, Xiong-Jun Liu, Jian-Wei Pan. Realization of two dimensional spin-orbit coupling for Bose-Einstein condensates. *Science*, 2016, 354, 6308.
- [24] Liang-hui Huang, Zeng-ming Meng, Peng-jun Wang, Peng Peng, Shao-Liang Zhang, Liang-chao Chen, Dong-hao Li, Qi Zhou and Jing Zhang. Experimental realization of two-dimensional synthetic spin–orbit coupling in ultracold Fermi gases. *Nature physics*, 2016, 12, 540-544.

- [25] Hong-ming Weng, Xi Dai, and Zhong Fang. Exploration and prediction of topological electronic materials based on first-principles calculations. *MRS Bulletin*, 2014, 39, 849.
- [26] M. V. Berry. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 1984, 392, 45-57.
- [27] T.O. Wehling, A.M. Black-Schaffer, and A.V. Balatsky. Dirac materials. *Advances in Physics*, 2014, 63, 1-76.
- [28] S. M. Young, S. Zaheer, J. C. Y. Teo, C. L. Kane, E. J. Mele, and A. M. Rappe. Dirac Semimetal in Three Dimensions. *Phys. Rev. Lett*, 2012, 108, 140405.
- [29] Zhi-jun Wang, Yan Sun, Xing-Qiu Chen, Cesare Franchini, Gang Xu, Hong-ming Weng, Xi Dai, and Zhong Fang. Dirac semimetal and topological phase transitions in  $A3Bi$  ( $A = Na, K, Rb$ ). *Phys. Rev. B*, 2012, 85, 195320.
- [30] Xian-gang Wan, Ari M. Turner, Ashvin Vishwanath, and Sergey Y. Savrasov. Topological semimetal and Fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates. *Phys. Rev. B*, 2011, 83, 205101.
- [31] Ari M. Turner, Ashvin Vishwanath. Beyond Band Insulators: Topology of Semi-metal and Interacting Phases. arXiv: 1301. 0330, 2013.
- [32] P. A. M. Dirac. The Quantum Theory of the Electron. *Proc. Roy. Soc. Lond. A*, 1928, 117, 610.
- [33] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys*, 2009, 81, 109.
- [34] Gordon W. Semenoff. Condensed-Matter Simulation of a Three-Dimensional Anomaly. *Phys. Rev. Lett*, 1984, 53, 2449.
- [35] Hermann Weyl. Electron and gravitation. *Phys*, 1929, 56, 330-352.
- [36] Di Xiao, Ming-Che Chang, Qian Niu. Berry phase effects on electronic properties. *Rev. Mod. Phys*, 2010, 82, 1959.
- [37] Kai-Yu Yang, Yuan-Ming Lu, and Ying Ran. Quantum Hall effects in a Weyl semimetal: Possible application in pyrochlore iridates. *Phys. Rev. B*, 2011, 84, 075129.
- [38] Masaru Onoda and Naoto Nagaosa. Quantized Anomalous Hall Effect in Two Dimensional Ferromagnets: Quantum Hall Effect in Metals. *Phys. Rev. Lett*, 2003, 90, 206601.

- [39] 杨军, 戴斌飞, 李霞. 自旋轨道耦合效应及其应用研究. *大学物理*, 2011, 8, 9-12.
- [40] Zi Cai, Xiang-fa Zhou, and Cong-jun Wu. Magnetic phases of bosons with synthetic spin-orbit coupling in optical lattices. *Phys. Rev. A*, 2012, 85, 061605.
- [41] 曾谨言. *量子力学 (卷 I)*. 北京, 科学出版社, 2000, 403-404.
- [42] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba. Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers. *J. Phys. C*, 1984, 17, 6039–6045.
- [43] G. Dresselhaus. Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures. *Phys. Rev.*, 1955, 100, 580–586.
- [44] M. Atala, M. Aidelsburger, J. T. Barreiro, D. Abanin, T. Kitagawa, E. Demler, and I. Bloch. Direct Measurement of the Zak Phase in Topological Bloch Bands. *Nat. Phys.*, 2013, 9, 795.
- [45] G. Jotzu, M. Messer, R. Desbuquois, M. Lebrat, T. Uehlinger, D. Greif, and T. Esslinger. Experimental realisation of the topological Haldane model with ultracold fermions, *Nature*, 2014, 515, 237.
- [46] M. Aidelsburger, M. Lohse, C. Schweizer, M. Atala, J. T. Barreiro, N. R. Cooper, I. Bloch, and N. Goldman, Measuring the Chern number of Hofstadter bands with ultracold bosonic atoms. *Nat. Phys.*, 2015, 11, 162.
- [47] Tena Dubček, Colin J. Kennedy, Ling Lu, Wolfgang Ketterle, Marin Soljačić, and Hrvoje Buljan. Weyl Points in Three-Dimensional Optical Lattices: Synthetic Magnetic Monopoles in Momentum Space. *Phys. Rev. Lett.*, 2015, 114, 225301.
- [48] Wen-yu He, Shi-zhong Zhang, and K. Law. The Realization and Detection of Weyl Semimetals in Cold Atomic Systems. *arXiv:1501.02348*, 2016.
- [49] Shi-liang Zhu, Bai-geng Wang, and L. M. Duan. Simulation and Detection of Dirac Fermions with Cold Atoms in an Optical Lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, 98, 260402.
- [50] Dan-wei Zhang, Shi-liang Zhu, and Z. D. Wang. Simulating and exploring Weyl semimetal physics with cold atoms in a two-dimensional optical lattice. *Phys. Rev. A*, 2015, 92, 013632.
- [51] Jean Dalibard, Fabrice Gerbier, Gediminas Juzeliunas and Patrik Ohberg. Artificial gauge potentials for neutral atoms. *Rev. Mod. Phys.*, 2011, 83, 1523.
- [52] Shun-qing Shen. *Topological Insulators Dirac Equation in Condensed Matters*. Springer Series in Solid-State Sciences. 2012, 1-174.



- [53] B. Huard, J. A. Sulpizio, N. Stander, K. Todd, B. Yang and D. G. Gordon. Transport Measurements Across a Tunable Potential Barrier in Graphene. *Phys. Rev. Lett*, 2007, 98, 236803.
- [54] J. H. Park, E. Vescovo, H. J. Kim, C. Kwon, C. Ramesh and T. Venkatesan. Direct evidence for a half-metallic ferromagnet. *Nature*, 1998, 392, 794-796.
- [55] Lin-hu Li and Shu Chen. Characterization of topological phase transitions via topological properties of transition points. *Phys. Rev. B*, 2015, 92, 085118.
- [56] Lin-hu Li and Shu Chen. Winding numbers of phase transition points for one dimensional topological systems. 2015, *EPL*, 112, 10004.

## 攻读学位期间取得的研究成果及参与科研的项目

刘聪明, 徐志浩, 张云波, 二维正方晶格中的自旋轨道耦合效应, 山西大学学报(自然科学版), 2018, 02, 017.

## 致 谢

时光荏苒, 岁月如梭, 三年硕士研究生生活即将结束, 在这论文即将完成之际, 回首这三年的科研生活, 心潮难平, 感慨颇多, 但无论如何, 这些亲身经历, 将是我人生中弥足珍贵的记忆和宝贵的人生财富。在此, 要特别感谢求学过程给予我无限支持和帮助的老师、朋友和亲人们。

首先, 我要感谢我的导师张云波老师, 因为他是一位科研上严谨认真, 一丝不苟, 工作上兢兢业业, 不辞劳苦的老师。不管是冰天雪地的数九寒天, 还是烈日炎炎的三伏夏天, 张老师都会准时出现在小组讨论会上; 而在教学上, 张老师对每个细节的严格要求, 以及每个知识点循循善诱的教导, 使我认识到, 探索科学需要的严谨态度, 求知道路上需要的艰辛努力。张老师, 用他那广博的学识、严谨的治学态度、崇高的敬业精神、高尚的人格魅力将给我指明人生的前进方向。

其次, 我要感谢在学习上给了我很大支持和帮助的徐志浩老师, 还有中科院的李林虎老师, 他们给予的许多具体指导, 使我思路顿开, 如沐春风; 感谢小组的王利老师, 郭丽平老师, 以及小组的师哥, 师姐, 学弟, 学妹们给予我学习和生活上的关怀和帮助; 感谢我们这个小组, 使我能在像家一样的温馨环境中学习和成长。

感谢每天朝夕相处、热情助人的自习室同事们; 如兄弟般可亲的、默契如家人的舍友们; 以及远在家乡却一直惦念、默默守护我的父母亲和姐姐!

还要感谢理论所的聂一行老师、李卫东老师、李录老师、李志坚老师、张素英老师、阎维贤老师、姜晓庶老师, 班主任刘玉萍老师等, 还有山大的校领导, 是他们传授了我专业知识, 提供了我安静的学习环境, 在这里, 我表示诚挚的谢意。

最后, 感谢自己, 感谢自己能在繁琐和枯燥的研究生生活中, 耐得住寂寞和孤独, 坚守一颗探索科研任务的心, 并能以一种饱满的、积极乐观的、严谨治学的心态和不乏斗志的生活态度, 去面对一切。感谢自己能一路走来。

此致, 致所有给予我关心、帮助、指导以及建议和批评的人们, 谢谢你们!

感谢参加阅读和答辩的各位评审专家与教授。

## 个人简历及联系方式

姓名：刘聪明

性别：男

籍贯：山西省朔州市

学习经历：2014年9月至2017年6月在山西大学理论物理研究所攻读硕士学位

联系方式：15735172741

电子邮箱：1397605557@qq.com.

## 承 诺 书

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是在导师指导下独立完成的，学位论文的知识产权属于山西大学。如果今后以其他单位名义发表与在读期间学位论文相关的内容，将承担法律责任。除文中已经注明引用的文献资料外，本学位论文不包括任何其他个人或集体已经发表或撰写过的成果。

作者签名：

20 年 月 日

## 学位论文使用授权声明

本人完全了解山西大学有关保留、使用学位论文的规定，即：学校有权保留并向国家有关机关或机构送交论文的复印件和电子文档，允许论文被查阅和借阅，可以采用影印、缩印或扫描等手段保存、汇编学位论文。同意山西大学可以用不同方式在不同媒体上发表、传播论文的全部或部分内容。

保密的学位论文在解密后遵守此协议。

作者签名：

导师签名：

20 年 月 日