科学通报 2016 年 第 61 卷 第 36 期: 3907 ~ 3916
专题: 解读“2016年度诺贝尔自然科学奖”
《中国科学》杂志社
SCIENCE CHINA PRESS

拓扑相和拓扑相变: 浅谈固体中的拓扑物态

翁红明[①②]

① 中国科学院物理研究所, 北京凝聚态物理国家实验室, 北京 100190;
② 量子物质科学协同创新中心, 北京 100190
E-mail: hmweng@iphy.ac.cn

2016年10月4日, 斯德哥尔摩瑞典皇家科学院宣布, 2016年诺贝尔物理学奖授予三位美国科学家: 戴维·索利斯(David J. Thouless)、邓肯·霍尔丹(F. Duncan M. Haldane)和迈克尔·科斯特利茨(J. Michael Kosterlitz), 以表彰他们“在理论上发现了物质的拓扑相变和拓扑相”(http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2016/). 那么什么是拓扑相变和拓扑相? 它们的重要意义是什么? 当前凝聚态物理领域内的研究热点拓扑绝缘体和拓扑半金属与它们有什么关系? 借助于今年诺贝尔物理学奖的解读, 我们做一个简要的阐述.

1 凝聚态与相变

凝聚态物质是指由大量相互作用的微小粒子聚集在一起形成的整体. 通常这些微小粒子是指带正电的原子核和带负电的电子, 也可以是分子、甚至宏观尺度颗粒等. 这些凝聚体有固体、液体和气体等不同形态, 即不同的物态或“相”. 相变, 就是物质在所处环境连续变化的时候突然“变脸”的过程, 通常伴随着某些物性的急剧变化. 比如水随着温度变化而在固、液、气三相之间转变, 不同相的水具有明显不同的性质. 气态水中水分子在空间杂乱无章地分布, 向任意方向观察都是等价的, 但随着温度降低, 这些相互作用的水分子会在某个温度点突然采取某种有序的排列方式, 变成液态水或固态冰, 破坏了原来空间任意方向分布的等价性, 即发生了空间排列对称性的降低或破缺. 20世纪30年代, 前苏联物理学家朗道、金兹堡等提出“对称性破缺”理论来解释凝聚态体系里的物态和相变. 除了这种三态之间的相变外, 物质从金属变成超导或绝缘体, 从铁磁变成顺磁等也都可以用相应物理量的对称性破缺来描述和解释. 因此人们曾认为“对称性破缺”理论已经非常完美, 以后凝聚态物理的研究仅仅是修修补补了. 凝聚态物理的主要研究内涵是发现并刻画新物态, 研究相关相变过程、现象和规律. 从这个意义上讲, 发现一个全新的物态是非常重要和令人兴奋的事情.

2 拓扑相和拓扑相变

拓扑学是数学上的一个分支, 主要研究几何图形在连续形变(拉伸或扭曲而不撕裂或黏合)下保持不变的整体属性. 譬如一个面团的外表面, 在任意揉搓等连续形变下, 所包裹的孔洞数目是整数0; 如果撕破它并重新粘连, 做成面包圈, 表面包裹的孔洞数是整数1. 它们包裹的孔洞数在连续形变下不改变, 可以用来刻画和区分这两种不同封闭曲面的拓扑性质, 称为拓扑不变量. 一个显著的特点是, 要了解一个几何图形的拓扑特性, 仅仅研究其中的一小块区域是不行的, 需要对整体进行全局研究. 从一大块冰中掰出一小块来, 仍然可知它是固态的, 但从面包圈上挖出一小块来是不可能知道母体的拓扑性质的. 闭合曲面的撕裂和黏合使拓扑数发生变化, 但没有发生对称性的破缺, 这是拓扑相变的特征. 如果凝聚态体系中存在可以借用这样的数学概念来描述的物态, 那就可称为拓扑物态或拓扑相, 不同拓扑相之间的转变就是拓扑相变. 这是观察和理解物质世界的全新视角, 完全不同于以往的对称性破缺理论. 这种思想和观念上的突破是人类在探索自然界、提高自身认知能力过程中的关键转折点, 会对人类社会产生巨大的、不可估量的推动作用.



翁红明 中国科学院物理研究所研究员, 南京大学物理学系博士, 计算凝聚态物理专业. 曾先后在日本东北大学金属研究所、产业技术综合研究所、北陆先端大等机构学习工作, 2010年被引进回国. 从事凝聚态物质中新奇量子现象的计算研究, 包括拓扑量子物态, 固体磁学、光学性质等. 曾获JSPS博士后奖学金, 国家自然科学基金委员会优秀青年科学基金, “科技盛典——2015年十大科技创新团队奖”等.

3 KT相变或BKT相变

1971年左右[1,2], 迈克尔·科斯特利茨和戴维·索利斯在研究二维超流/超导体时, 发现二维体系中存在一个有趣的相变, 这跟当时普遍认为的有限温度下二维或一维体系

© 2016《中国科学》杂志社

中不可能发生相变相违背, 因为热扰动会破坏其中物理量的长程有序排列而始终处于无序状态. 他们研究的是二维超流/超导中的涡旋运动. 这里的涡旋跟我们日常生活中见到的浴缸或水槽中放水时看到的涡旋是类似的: 放水之前的水面是静止, 所有点的速度都一样; 拔开塞子后水向中心的出水口方向流动, 同时在地球自转的影响下形成涡旋. 涡旋中心外的任意一点都绕着中心的孔洞做闭合的圆周运动, 当它回到起点后其速度的方向也正好变化了360°的整数倍, 对应绕涡旋中心的缠绕数, 这是描述涡旋的拓扑不变量. 图1中箭头表示的是二维超流/超导中波函数的相位或二维磁体中的磁矩指向, 也表示水面一点的速度方向. 图1(a)表示均匀有序分布; 而图1(b)是一对涡旋和反涡旋, 它们具有大小相等符号相反的缠绕数, 可以分别看作是二维平面内的"正"、"负"电荷. 每个涡旋都是拓扑稳定的, 一旦产生了, 微小扰动只能移动它而不能消除它, 但可以通过把正反涡旋重叠到一起、像正负电荷一样相互抵消, 因此涡旋可以看作是图1(a)里产生的拓扑型缺陷. 科斯特利茨和索利斯发现在一定温度以下, 这些涡旋和反涡旋会束缚成对并形成准长程序; 在该温度以上, 正负涡旋都是自由的, 呈无序分布. 这就是KT相变, 以两人英文姓氏首字母命名. 前苏联科学家Vadim Berezinskii也完全独立进行了相似的研究工作[3,4], 因此也称为BKT相变. KT相变的研究给了人们一个启发, 那就是在凝聚态体系中可以存在与拓扑学相对应的物态或激发, 且具有新的运动机理和物理现象.

4 整数量子霍尔效应和TKNN数

霍尔效应是1879年由美国物理学家艾德文·霍尔(E. H. Hall)发现的. 他注意到非磁性二维导电薄膜中沿x方向流动的电流会在垂直于薄膜(z方向)的磁场作用下发生y方向偏转, 在y方向的边界上产生电荷积累, 导致所谓的霍尔电压, 即霍尔效应(图2(a)). 这是凝聚态领域内非常重要的实验现象, 它提供了操控导体中载流子的一个重要方式, 要知道人们现在熟知的电子要等到18年后的1897年才被发现[5]. 近100年后的1980年, 德国物理学家冯·克利钦[6]在研究极低温、强磁场中二维电子气的霍尔效应时发现, 磁场强度增加到一定程度, 霍尔电导率呈整数倍台阶状变化, 而不再是连续变化, 这就是整数量子霍尔效应(图2(b)和(c)). 强磁场使得二维电子气进入到一个新的量子态: 体内电子做迴旋运动而处于局域绝缘态, 但在边界, 电子只能沿着边界向一个方向运动, 是手征的导电态. 1982年戴维·索利斯和合作者(M. Kohmoto, M. P. Nightingale和M. den Nijs)[7]发现整数量子霍尔效应态实际上是一个全新的拓扑量子态, 可以用占据态电子能带的波函数在二维晶格动量空间中分布的拓扑特性来标识, 对应的拓扑不变量就是TKNN数, 以这篇开拓性工作的四位作者姓氏的首字母命名. TKNN数跟陈省身先生在微分几何中提出的陈省身示性类相关, 也被称为陈数. 量子化的霍尔电导来自于边界附近发生的拓扑相变, 即TKNN数从体内的非零值变化到真空中的零. 索利斯等人还指出体内电子态的TKNN数等于边界上导电态的数目, 就是实验测量的霍尔电导量子数[7,8]. 索利斯等人开创性地将数学中的拓扑概念应用到固体晶格动量空间中波函数的拓扑性质研究, 在物理思想上取得了突破, 是数学与实验相结合的典范之一.

冯·克利钦因为整数量子霍尔效应的实验发现而获得1985年的诺贝尔物理学奖. 整数量子霍尔效应具有非常

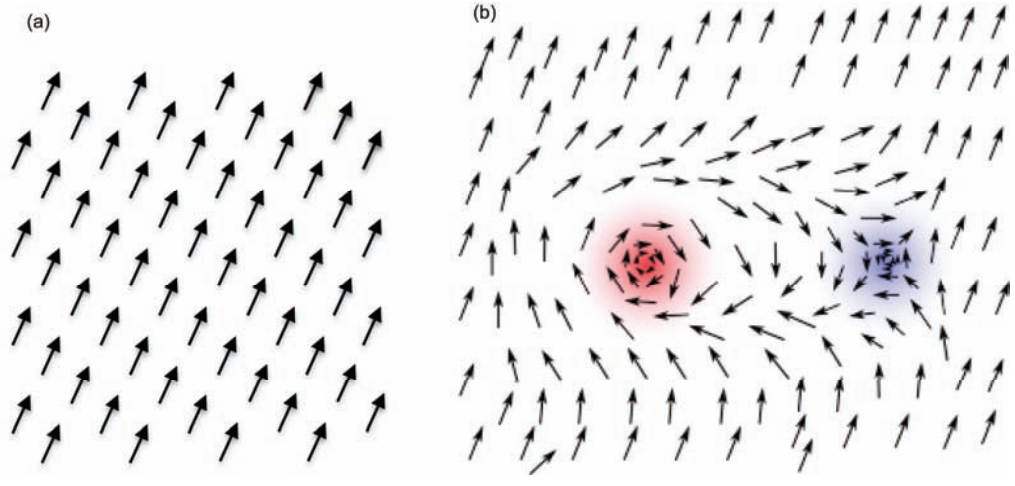


图 1 (网络版彩色)箭头表示二维超流/超导中波函数的相位或磁性薄膜中磁矩的指向. (a) 有序排列; (b) 一对涡旋和反涡旋(图片来自网络http://abeekman.nl/wordpress/)

Figure 1 (Color online) The arrow indicates the phase of wavefunction in two-dimensional (2D) super-fluid/-conductor or the magnetic moment direction in magnetic film. (a) Ordered state; (b) one pair of vortex and anti-vortex (taken from http://abeekman.nl/wordpress/)

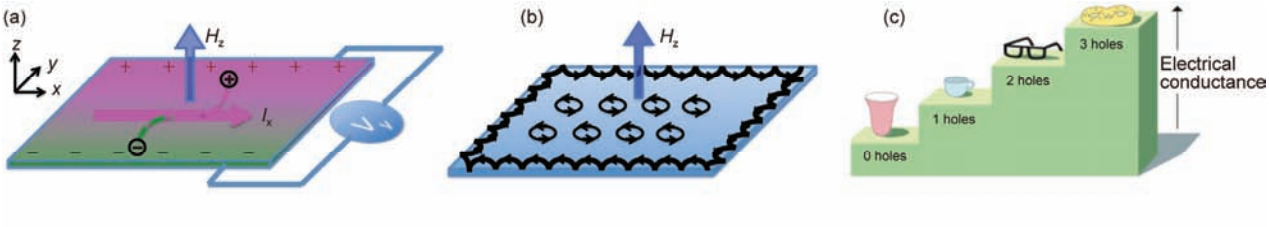


图 2 (网络版彩色)(a) 霍尔效应: 处于z方向磁场中沿x方向流动的电流I, 在y方向发生偏转, 产生y方向电压V_y; (b) 整数量子霍尔效应: 二维电子气在强磁场H作用下做回旋运动, 体内绝缘但边界处有磁场驱动的手性电流; (c) 台阶状跃迁变化的霍尔电导, 其量子数对应常见物体表面包裹的孔洞数目(图片取自诺贝尔奖网站)

Figure 2 (Color online) (a) Hall effect: The current flowing in x direction shifts in y direction when magnetic field in z direction is applied, which causes nonzero voltage along y direction; (b) integer Quantum Hall effect: Cyclotron motion of two-dimensional electron gas within strong magnetic field H, which leads to insulating state in bulk but chiral edge current at edges; (c) Hall conductivity changes in step and each step in topology has been schematically explained with object containing different hole number (taken from website of Nobel Prize)

精确的量子电导, 已经成为确定许多物理常数的重要依据和手段, 但强磁场、极低温的实现条件使得整数量子霍尔效应的实验研究和器件应用都非常困难. 如果能够去掉这些苛刻的条件, 在普通的固体材料中实现整数量子霍尔效应, 那将会是非常有意义的事情. 这种无需外磁场的整数量子霍尔效应就是量子化反常霍尔效应, 实现它最为关键的一步是今年诺贝尔奖获得者之一邓肯·霍尔丹迈出的[9].

5 Haldane相与Haldane模型

诺贝尔奖委员会认为邓肯·霍尔丹获奖的工作是在1982年左右发现一维整数量子自旋链中存在一个拓扑相. 这是拓扑概念在凝聚态中的又一体现, 现被称为Haldane相. 但邓肯·霍尔丹在1988年还做了一个重要的工作, 对当今拓扑电子物态的研究产生了巨大的影响. 他首次提出无需外磁场实现整数量子霍尔效应的晶格模型, 为在固态物质中调控电子能带结构以实现拓扑相和拓扑相变指明了方向, 为拓扑绝缘体和拓扑半金属的诞生奠定了理论基础. 这个理论模型被称为Haldane模型[9]. 在进一步介绍该模型之前, 我们先介绍其他相关知识, 作为深入理解固态电子结构的拓扑相和拓扑相变的基础.

6 固体能带理论的进一步拓展: 能带拓扑理论

众所周知, 晶体是组分原子在空间的周期有序排列形成的. 按照量子力学原理, 组分原子中带负电的电子在周期有序原子核正电荷点阵中以几率波(Bloch波函数)的形式存在, 在正点电荷背景中形成一定的空间分布, 使得整体呈电中性的固体稳定存在. 电子的质量远小于原子核, 量子效应显著, 决定了晶体材料的许多物性, 譬如导电性, 磁性, 光学性质等. 研究电子在晶格中的分布和响应是理解并调控物性的基础, 也是凝聚态物理的主要任务.

固体能带理论提供了求解电子在周期性势场中分布的方法. 由于电子在实空间的周期性势场中运动, 通常采用傅里叶变换在晶格倒空间进行研究. 图3(a)是二维蜂巢晶格及其倒格矢. 倒格矢构成的空间就是晶格动量空间, 也叫布里渊区. 孤立原子中的电子能级在周期性固体中由于相互作用而变成连续的带状分布, 构成电子能带结构, 如图3(b)和(c)所示. 它反映的是电子的能量与其晶格动量之间的关系. 由于泡利不相容原理, 电子依据能量最低原理从低到高依次填充这些能带. 如果所有的电子正好填充满了整数条能带, 而满带的电子不能够导电, 那么这就形成绝缘体或半导体; 如果还有未填满的能带, 形成部分占据, 这些电子可以导电, 那就形成金属. 对于绝缘体或半导体, 占据和非占据的能带之间被有限大小的能量隔开, 形成能隙, 这是电子对外界扰动响应需要克服的最低能量; 而对于金属, 由于占据态和非占据态没有能隙隔开, 存在最高占据的能量等能面, 即费米面, 因而金属对外界微扰响应积极. 由此可见, 固体能带理论成功解释了物质的导电性, 并依据电子能带结构将其划分为绝缘体和金属两大类, 取得了极大的成功, 但是近十年来拓扑物态的研究极大地拓展了传统的固体能带理论, 逐步建立起了能带拓扑理论, 这也是拓扑理论在晶格动量空间的体现, 这一切可以从Berry相位说起.

7 Berry相位

显然, 对于绝缘体和金属的物态分类仅仅利用了能带信息, 即电子能量在倒空间的分布情况, 并没有利用到每个电子能级所对应的波函数所包含的信息. 实际上, 电子波函数在倒空间的拓扑结构导致了人们对绝缘体的进一步的分类, 体现了量子力学原理更深层次的物理意义. 1984年, 英国物理学家Berry[10]发表了一篇重要的文章, 揭示了一个普遍的量子力学原理, 即一个量子系统, 经过一个周期性的绝热演化回到初始状态, 其量子本征态与演化之前相比, 会多出一个相位因子, 而且该相位因子只与闭合绝热演化路径的几何特性相关, 与在该路径上具体的演化方式无关, 因此被称为量子几何相位因子, 也被称为Berry相位. 一个与之对应的经典例子是在球面上做平行

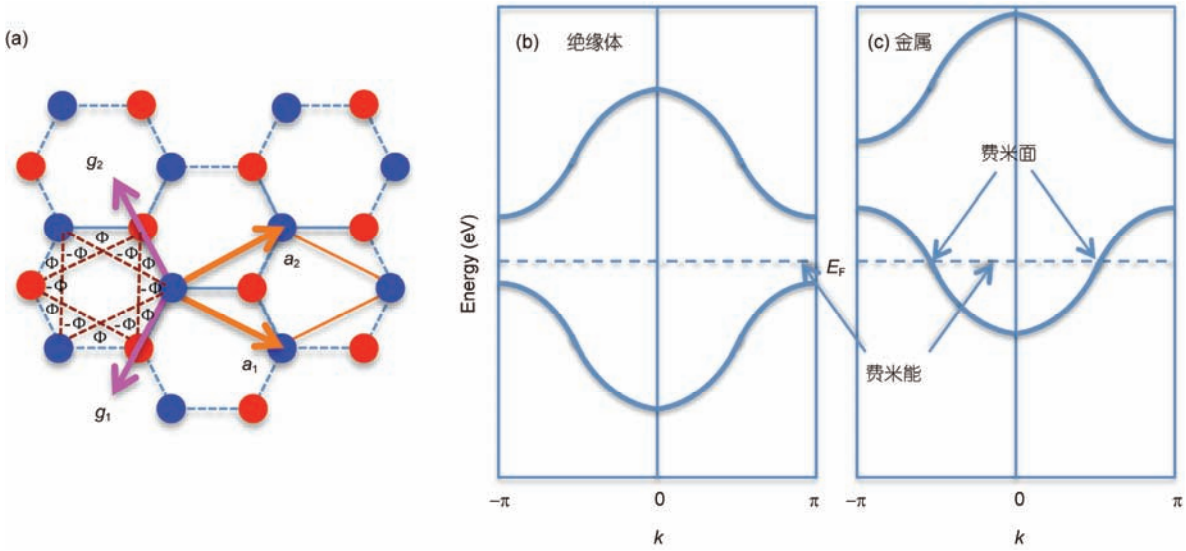


图 3 (网络版彩色) (a) 二维蜂巢晶格, a_1, a_2是晶格矢量, g_1, g_2是对应的倒格矢, 交错的反向磁通为Φ; (b), (c) 分别是绝缘体和金属的能带示意图. 金属有部分占据的能带, 存在最高占据电子能量的等能面, 即费米面

Figure 3 (Color online) (a) 2D honeycomb lattice. a_1 and a_2 are lattice vectors and g_1 and g_2 are corresponding reciprocal lattice vectors. The staggered magnetic flux is labeled as Φ with plus and minus sign. (b) and (c) are the band structure for insulator and metal, respectively. Metal has partial occupied bands with highest occupied energy contour, i.e. Fermi surface

移动的切矢量(图4). 该矢量在球面上做一圈平行移动回到出发点, 跟出发时相比发生了偏转, 这个偏转角度就是平行移动所经过的封闭路径所围的球面在球心处所张的立体角, 与移动的路径、快慢、方式等具体细节无关, 是一个曲面几何(即非欧几何, 跟平面几何, 也就是欧几里得几何对应)问题. 如果上述运动发生在平面上, 就不存在这样的角度差. 量子系统在某些弯曲的参数空间内做周期性绝热演化时, 其量子态也会有类似的现象: 球面相当于系统哈密顿的参数空间, 球心相当于该哈密顿所决定的能级简并点, 平行移动相当于绝热演化, 切矢量相当于量子本征

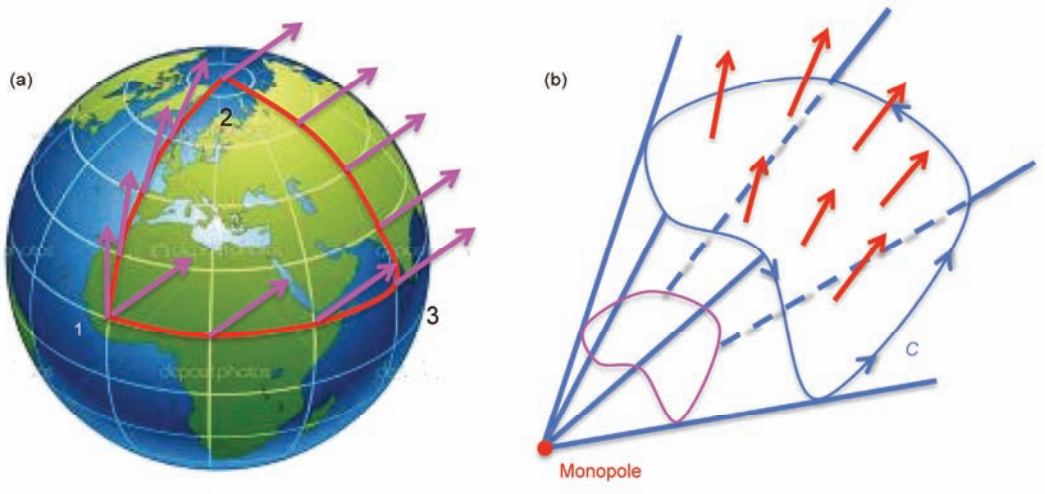


图 4 (网络版彩色)(a) 切矢量在球面上做平行移动, 从 1 到 2 到 3 再回到 1, 与出发时相比旋转了α角, 该角度与平行移动的路径包围的球面在球心所张的立体角成正比; (b) 量子系统的哈密顿在参数空间(譬如晶格动量空间)的绝热演化路径在能级交叉点或参数空间的磁单极点所张的立体角与本征态获得的Berry相位成正比

Figure 4 (Color online) (a) The parallel transport of a tangent vector along a loop 1-2-3-1 on the surface of a sphere will acquire a rotation by angle α; (b) Berry phase acquired by the adiabatic loop evolution is proportional to the solid angle spanned by the loop at the degenerate nodal point, i.e. the monopole, of the Hamiltonian in the parameter space, e. g. crystal momentum space

态. 数学上, 这样的参数空间被称为底流形, 定义在其上的电子波函数被称之为纤维. 对于绝缘体, 占据态的波函数定义在全部布里渊区, 因而可以遍历整个底流形并和底流形构成纤维丛. 陈省生先生对纤维丛的拓扑分类做了开创性、系统性的研究工作. 前述整数量子霍尔效应态里, 体内的占据态电子波函数在二维倒空间上构成纤维丛, TKNN数就是它的拓扑分类数.

波函数的相位一般情况下很难直接观测, 但其相互干涉形成的几率幅比较容易观测、且被广泛应用. 譬如"杨氏双缝干涉"实验中可以观测到光波干涉产生的明暗条纹, Aharonov-Bohm效应(AB效应)实验[11](图5)中电流强弱随磁通的变化等. AB效应的本质是线圈中两路运动的电子获得跟磁通量相关的相位差, 形成干涉导致电流强弱变化. 该相位差与线圈的具体形状无关、只跟通过线圈的磁通量相关. 上面提到的能级简并点可以看作是系统哈密顿在参数空间中产生的磁单极子点, 它产生的磁场强度就是所谓的Berry曲率$\boldsymbol{\Omega}$, 对应的矢势就是所谓的Berry联络$\boldsymbol{A}$, 因此$\boldsymbol{\Omega}$是$\boldsymbol{A}$的旋度即$\boldsymbol{\Omega}=\nabla\times\boldsymbol{A}$. 对Berry联络沿着闭合的绝热演化路径积分, 就得到Berry相位; 或者等价的, 穿过绝热演化路径所包围的曲面的Berry曲率通量, 也正比于Berry相位(图4). 显然, 磁单极子点或能级简并点在参数空间的位置、磁荷极性和数量都是由系统的哈密顿所决定的.

以色列物理学家Zak[12]首先认识到在固体的晶格动量空间, 电子的能带波函数同样会带有Berry相位. 如图6所示是二维晶格的倒空间, 具有x, y方向周期性, 其等价于一维周期性排列的圆柱面或轮胎面. 绝缘体的占据态在晶格动量空间的演化是绝热的, 经过一个晶格周期后, 波函数的Berry相可以相差2π的整数倍. 跟上面图4的情形相比, 最大的不同点在于这里的绝热演化路径是整个封闭的轮胎面, 没有边界. 那么如何来计算Berry相位呢? 虽然没有边界, 但是通过轮胎面的Berry曲率通量还是可以计算的, Berry相位的这个物理意义还是成立的. 考虑系统哈密顿的能级简并点, 也就是磁单极子点, 分别在轮胎面的里面和外面两种情形, 如图6所示. 这两种情形在几何拓扑上是不一样的, 磁单极子点需要穿过轮胎面, 才可以实现这两种几何拓扑的转变. 由高斯定理可知, 当这样的封闭曲面内没有磁单极子时, 穿过它的磁通为零; 反之, 穿过它的净磁通量正比于它包裹的净磁荷数, 因此可以用它来区分这两种不同的拓扑结构. 只要磁单极子数目不变, 且一直保持在轮胎面内, 不管它的具体位置如何变, 穿过轮胎面的总磁通是不变的, 体系的拓扑性质就不变. 而当磁单极子正好落在轮胎面上时, 表明系统实际的演化路径上有能级的交叉, 对应这两个能带之间能隙发生闭合, 变成半金属态, 是拓扑相变临界点的特征[13].

了解量子几何相位理论之后, 我们再回头去看TKNN数的意义, 就可以发现它其实是占据态的Berry曲率在整个晶格动量空间上的磁通量子数, 也就是上述轮胎面包裹的净磁荷数. 由此可见, Berry相位理论是理解电子拓扑物

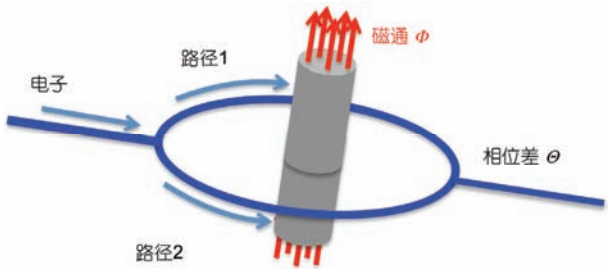


图 5 (网络版彩色)AB效应示意图. 电子入射到线圈后分为两条路径传输, 经过路径 1 和路径 2 的电子波函数相差相位Θ, 且仅与穿过线圈的磁通Φ有关

Figure 5 (Color online) Schematic plot of AB effect. The electron wave-functions along path 1 and path 2 are different by phase difference Θ, which is only determined by the flux Φ passing through the circle

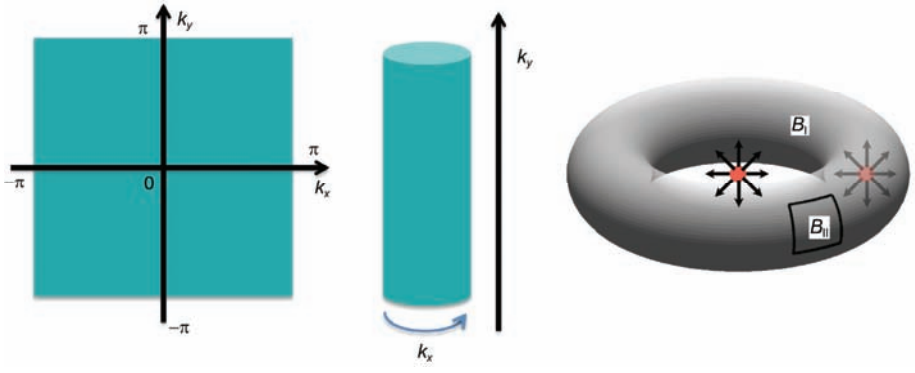


图 6 (网络版彩色)二维晶格动量空间, 由于周期性条件, 拓扑上跟一维周期性排列的圆柱面或轮胎面等价. 晶格动量空间的磁单极子跟轮胎面的相对位置拓扑结构

Figure 6 (Color online) Crystal momentum space of 2D system. Due to periodicity, it is topologically equivalent to the periodically aligned cylinder surface or the torus. The relative position between crystal momentum space and monopole determines the topology of the insulating state

态的重要基础. 今年Berry没能获得诺贝尔奖还是非常遗憾的. 2000年, Berry与Geim一起因为研究“磁悬浮中的青蛙”而获得“搞笑诺贝尔奖”(https://en.wikipedia.org/wiki/Michael_Berry_(physicist)). 戏剧的是, 2010年Geim因为实验发现石墨烯而获得真正的诺贝尔物理学奖(http://www.Nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2010/), 我们期待Berry也能获得真正的诺贝尔奖.

8 拓扑绝缘体

Haldane模型是建立在二维石墨烯晶格上的, 如图3所示, 邓肯·霍尔丹假设可以施加跟晶格周期、对称性都一致的反向交错垂直磁场, 使得a, b区域的磁通Φ大小相等方向相反. 类似于AB效应, 次近邻跃迁(在石墨烯晶格中, 次近邻跃迁相当于完成一个晶格周期运动)的电子会因跃迁方向相反而获得相反的相位. 外加磁场相当于Berry曲率, 对Berry相位进行调节, 从而可以实现不同TKNN数的拓扑物态. 但此后近30年间这个晶格模型一直没有能在材料中实现, 直到2005年才有了进一步的突破. 这个突破开启了近10年来拓扑物态研究的新高潮. 2005年前后, 美国物理学家Kane等人[14,15]和Bernevig等人[16]分别认识到原子内禀的自旋轨道耦合效应能够充当Haldane模型中假想的反向交错磁场角色. 自旋轨道耦合不破坏时间反演对称性, 假如电子自旋向上和向下可以用来区分时间反演对称的占据态波函数, 那该系统可以看作是两套互为时间反演对称的Haldane模型的叠加: 体内保持绝缘态, 但边界上有互为时间反演的导电边缘态(图7), 使得自旋反向的电子具有相反的速度, 导致量子化自旋疏运, 这被称为量子自旋霍尔效应. 时间反演对称的自旋向上和向下占据态波函数成对出现, 各自陈数大小相等、符号相反, 称为自旋陈数, 但所有占据态自旋陈数总和为零, 因而陈数不能作为描述该物态的拓扑数. 其实在更一般的情况下, 由于自旋轨道耦合作用, 波函数不能严格区分为自旋向上或向下, 进一步研究发现原先自旋陈数绝对值的奇偶性给出了不同的拓扑物态. 因此二维时间反演对称体系可以有0(偶)和1(奇)两种不同的拓扑物态, 可以用数学上的Z_2数作为拓扑不变量来标识. Z_2=1的绝缘体被称为拓扑绝缘体, 另一种就是普通绝缘体.

这个理论上的突破使得人们首次意识到时间反演对称可以导致新的拓扑物态, 从而引发了寻找和实现更多拓扑物态的研究热情. Kane等人[15]最初提出的石墨烯, 由于碳原子质量轻、自旋轨道耦合作用小, 打开的体能隙极其微小, 量子自旋霍尔效应在现有的低温条件下几乎不能观测. 2006年Bernevig等人[17]理论预言可以通过HgTe/CdTe量子阱来实现这个效应. 很快在2007年他们跟德国实验小组合作[18], 实验观测到量子自旋霍尔效应中的霍尔电导平台.

不同于整数量子霍尔效应, 拓扑绝缘体态可以推广到三维系统[19~21]. $Bi_{1-x}Sb_x$合金[19,22]是第一个理论预言并得到实验证实的三维拓扑绝缘体, 但它的表面态很复杂, 不利于进一步研究. 2009年中国科学院物理研究所的方忠、戴希研究小组与斯坦福大学的张守晟研究组[23]一起, 通过理论计算预言Bi_2Se_3, Bi_2Te_3和Sb_2Te_3等是大能隙三维拓扑绝缘体, 且只有一个狄拉克锥形表面态. 该理论预言很快获得实验证实. 这类材料此后成为广泛实验研究的理想对象, 大量拓扑物性得到了深入研究, 掀起了拓扑绝缘体研究的热潮. 而Haldane梦想的无外磁场整数量子霍尔效应, 也就是量子化反常霍尔效应, 也在这场研究浪潮中得到了最终实现. 首先, 2003年Fang等人[24]揭示铁磁金属中反常霍尔效应的内禀贡献来源于倒空间的磁单极子. 接着, 2010年方忠、戴希研究小组与张守晟小组[25]合作, 提出Cr或Fe掺杂的Bi_2Se_3, Bi_2Te_3和Sb_2Te_3等薄膜可以实现量子化反常霍尔效应. 然后, 他们跟中国科学院物理研究所的马旭村、何珂小组、吕力小组以及清华大学的薛其坤小组、王亚愚小组等合作[26], 在2013年首次观测到了量子化反常霍尔效应, 直接验证了理论预言. 还不止于此, 对称性保护的拓扑物态[27]的概念从时间反演对称性推广到了晶体空间群对称性, 并向超导, 光子、声子晶体, 冷原子等体系延伸, 各种各样的非平庸拓扑绝缘态及其材料实现不断涌现, 譬如拓扑超导体[28]、拓扑晶体绝缘体[29,30]、沙漏绝缘体[31,32]、拓扑光子[33]、声子晶体[34]等.

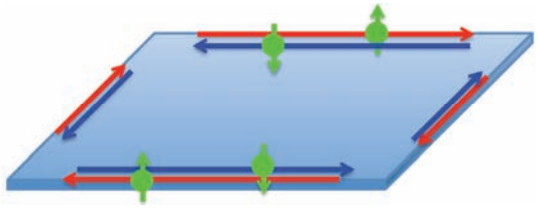


图 7 (网络版彩色)二维Z_2拓扑绝缘体表现出的量子自旋霍尔效应

Figure 7 (Color online) 2D Z_2 topological insulator has quantum spin Hall effect

9 拓扑半金属

随着对拓扑绝缘体的深入研究, 我们已经认识到可以把绝缘态根据不同的拓扑不变量进行分类. 但人们自然而然会问另一个问题, 对于金属, 是不是也有拓扑非平庸的态? 如何定义它的拓扑性质? 有哪些拓扑分类, 有没有新奇的物性? 我们在前期研究的基础上, 成功地把固体中电子能带拓扑分类的概念从绝缘体推广到了金属[35]. 三维金属的费米面是封闭或周期连通的, 类似于二维绝缘体轮胎面样的晶格动量空间. 根据费米面中包裹的磁单极子的磁荷和分布, 可以把拓扑金属分成狄拉克半金属[36~39]、外尔半金属[40~47]、节线半金属[48~51]和多重点半金属[52~55]等(图8).

实验上首先实现的是狄拉克半金属, 它可以看作是

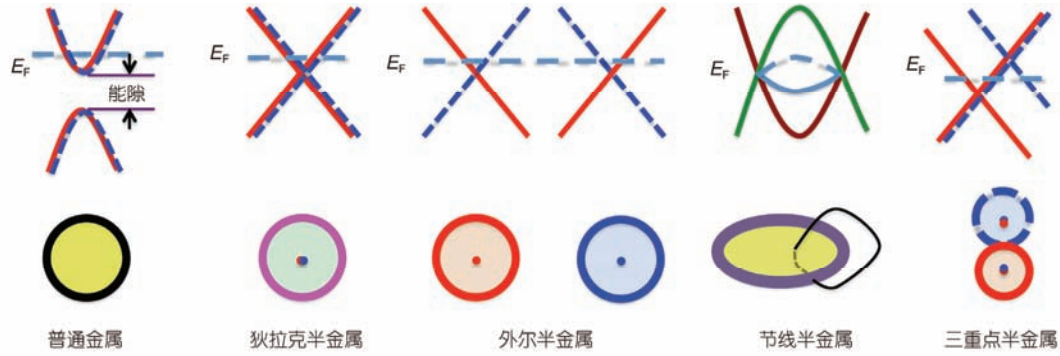


图 8 (网络版彩色)从左向右分别是普通金属、狄拉克半金属、外尔半金属、节线半金属和三重点半金属的能带和磁单极子点在费米面中的分布情况

Figure 8 (Color online) From the left to right, the band structure, distribution of monopole around Fermi surface for the normal metal, Dirac semimetal, Weyl semimetal, node-line semimetal and multiple-degenerate-node-point semimetal are shown, respectively

手性相反的外尔点(磁荷相反的磁单极子点)重叠在一起. 2012和2013年, 中国科学院物理研究所的方忠、戴希、翁红明研究组理论预言Na_3Bi[36]和Cd_3As_2[37]是狄拉克半金属, 四重简并的狄拉克点受到晶格对称性的保护. 他们与实验研究组合作, 在2014年证实了这两个理论预言, 是世界上首次发现狄拉克半金属[38,39]. 随后, 众多的实验和理论工作迅速开展起来, 形成了当前凝聚态领域的一个研究热点.

2011年, 南京大学的万贤纲研究组及其合作者[40]首先在磁性烧绿石结构的铱氧化物中提出可能存在外尔半金属态, 并指出其表面上存在特征性的开放费米弧. 中国科学院物理研究所方忠、戴希、翁红明研究组在同一年预言铁磁性的$HgCr_2Se_4$也是外尔半金属, 其薄膜可实现量子反常霍尔效应[41]. 但这些磁性体系由于材料本身和实验手段的局限, 一直没有得到实验证实. 直到2015年, 翁红明、方忠、戴希等人[42]预言非磁性非中心对称的TaAs家族材料是外尔半金属, 并得到许多实验验证, 例如观测到了TaAs的表面费米弧[43~45]、体内狄拉克锥形能带和外尔点(磁单极子点)[46]、由“手性异常”导致的负磁阻现象[47]等. TaAs家族材料成为首个实验实现的外尔半金属材料.

节线半金属[48,49]是狄拉克半金属或外尔半金属的特殊情形, 能带交叉点不再是晶格动量空间离散的点, 而是连续分布, 形成孤立的封闭线圈或周期性连接的线, 或环环相扣的线圈链[51]. 节线半金属的实现条件比前两者更为苛刻, 已经有许多理论工作提出各种候选材料[49], 其中最可能的是碱土金属单质, 譬如中国科学院金属材料研究所陈星秋组提出的金属铍[50]等.

多重点半金属[52~55]不同于狄拉克半金属中的四重和外尔半金属中的两重简并点. 它可以是三重、六重、八重等, 使得描述简并点附近低能激发的矩阵方程不再是4×4或2×2的, 可能会导致全新粒子的准粒子激发.

10 总结

当前, 拓扑相及其相变研究如火如荼, 相关进展也是日新月异. 现在回头来看, 是戴维·索利斯(David J.Thouless)、邓肯·霍尔丹(F. Duncan M. Haldane)和迈克尔·科斯特利茨(J. Michael Kosterlitz)二十世纪七八十年代的系列开创性工作开启了这种全新的奇异拓扑物质世界, 极大地提高了人类认识世界的广度和深度, 获得诺贝尔物理学奖是实至名归.

参考文献

1 Kosterlitz J M, Thouless D J. Long range order and metastability in two dimensional solids and superfluids (application of dislocation theory). J Phys C: Solid State Phys, 1973, 5: 124–126

2 Kosterlitz J M, Thouless D J. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. J Phys C: Solid State Phys, 1973, 6: 1181–1203

3 Berezinskii V L. Destruction of long-range order in one-dimensional and two-dimensional systems having a continuous symmetry group I. Classical systems. Sov Phys JETP, 1971, 32: 493–500

4 Berezinskii V L. Destruction of long-range order in one-dimensional and two-dimensional systems having a continuous symmetry group II. Quantum systems. Sov Phys JETP, 1971, 34: 610–616

5 Weng H M, Yu R, Hu X, et al. Quantum anomalous Hall effect and related topological electronic states. Adv Phys, 2015, 64: 227–282

6 Klitzing K V, Dorda G, Pepper M. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance. Phys Rev Lett, 1980, 45: 494–497
7 Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P, et al. Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential. Phys Rev Lett, 1982, 49: 405
8 Niu Q, Thouless D J, Wu Y S. Quantized Hall conductance as a topological invariant. Phys Rev B, 1985, 31: 3372
9 Haldane F D M. Model for a quantum Hall effect without landau levels: Condensed-matter realization of the parity anomaly. Phys Rev Lett, 1988, 61: 2015
10 Berry M V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. Proc Roy Soc Lond A, 1984, 392: 45–57
11 Aharonov Y, Bohm D. Significance of electromagnetic potentials in quantum theory. Phys Rev, 1959, 115: 485
12 Zak J. Berry's phase for energy bands in solids. Phys Rev Lett, 1989, 62: 2747
13 Murakami S. Gap closing and universal phase diagrams in topological insulators. Phys E, 2011, 43: 748
14 Kane C L, Mele E J. Z_2 topological order and the quantum spin Hall effect. Phys Rev Lett, 2005, 95: 146802
15 Kane C L, Mele E J. Quantumspin Hall effect in graphene. Phys Rev Lett, 2005, 95: 226801
16 Bernevig B A, Zhang S C. Quantum spin Hall effect. Phys Rev Lett, 2006, 96: 106802
17 Bernevig B A, Hughes T L, Zhang S C. Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells. Science, 2006, 314: 1757
18 König M, Wiedmann S, Brüne C, et al. Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells. Science, 2007, 318: 766
19 Fu L, Kane C, Mele E. Topological insulators in three dimensions. Phys Rev Lett, 2007, 98: 106803
20 Moore J E, Balents L. Topological invariants of time-reversal-invariant band structures. Phys Rev B: Condens Matter, 2007, 75: 121306
21 Roy R. Topological phases and the quantum spin Hall effect in three dimensions. Phys Rev B: Condens Matter, 2009, 79: 195322
22 Hsieh D, Qian D, Wray L, et al. A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase. Nature, 2008, 452: 970
23 Zhang H, Liu C X, Qi X L, et al. Topological insulators in Bi_2Se_3, Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 with a single Dirac cone on the surface. Nat Phys, 2009, 5: 438
24 Fang Z, Nagaosa N, Takahashi K S, et al. The anomalous Hall effect and magnetic monopoles in momentum space. Science, 2003, 302: 92–95.
25 Yu R, Zhang W, Zhang H J, et al. Quantized anomalous Hall effect in magnetic topological insulators. Science, 2010, 329: 61–64
26 Chang C Z, Zhang J S, Feng X, et al. Experimental observation of the quantum anomalous Hall effect in a magnetic topological insulator. Science, 2013, 340: 167–170
27 Chen X, Gu Z C, Liu Z X, et al. Symmetry protected topological orders and the group cohomology of their symmetry group. Phys Rev B, 2013, 87: 155114
28 Qi X L, Zhang S C. Topological insulators and superconductors. Rev Mod Phys, 2011, 83: 1057
29 Fu L. Topological crystalline insulators. Phys Rev Lett, 2011, 106: 106802
30 Hsieh T H, Lin H, Liu J, et al. Topological crystalline insulators in the SnTe material class. Nat Commun, 2012, 3: 982
31 Alexandradinata A, Cava R J, Bernevig B A. Hourglass fermions. Nature, 2016, 532: 189–194
32 Ma J Z, Yi C J, Lv B Q, et al. Experimental discovery of the first nonsymmorphic topological insulator KHgSb. arXiv: 1605:06824
33 Lu L, Joannopoulos J D, Soljacic M. Topological photonics. Nat Photonics, 2014, 8: 821
34 Prodan E, Prodan C. Topological phonon modes and their role in dynamic instability of microtubules. Phys Rev Lett, 2009, 103: 248101
35 Weng H, Dai X, Fang Z. Topological semimetals predicted from first-principles calculations. J Phys: Condens Matter, 2016, 28: 303001
36 Wang Z, Sun Y, Chen X Q, et al. Dirac semimetal and topological phase transitions in A_3Bi (A=Na, K, Rb). Phys Rev B, 2012, 85: 195320
37 Wang Z, Wu Q, Dai X, et al. Three dimensional Dirac semimetal and quantum transport in Cd_3As_2. Phys Rev B, 2013, 88: 125427
38 Liu Z K, Zhou B, Zhang Y, et al. Discovery of a three-dimensional topological Dirac semimetal, Na_3Bi. Science, 2014, 343: 864
39 Liu Z K, Jiang J, Zhou B, et al. A stable three-dimensional topological Dirac semimetal Cd_3As_2. Nat Mater, 2014, 13: 677
40 Wan X G, Turner A M, Vishwanath A, et al. Topological semimetal and Fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates. Phys Rev B, 2011, 83: 205101
41 Xu G, Wang Z, Dai X, et al. Chern semimetal and quantized anomalous Hall effect in $HgCr_2Se_4$. Phys Rev Lett, 2011, 107: 186806
42 Weng H, Fang C, Fang Z, et al. Weyl semimetal phase in noncentrosymmetric transition-metal monophosphides. Phys Rev X, 2015, 5: 011029
43 Lv B Q, Fu B B, Wang X P, et al. Experimental discovery of Weyl semimetal TaAs. Phys Rev X, 2015, 5: 031013
44 Huang S M, Xu S Y, Belopolski I, et al. A Weyl Fermion semimetal with surface Fermi arcs in the transition metal monopnictide TaAs class. Nat Commun, 2014, 6: 7373

45 Xu S Y, Belopolski I, Alidoust N, et al. Discovery of a Weyl fermion semimetal and topological Fermi arcs. Science, 2015, 349: 613
46 Lv B Q, Xu N, Ma J Z, et al. Observation of Weyl nodes in TaAs. Nature Phys, 2015, 11: 724–727
47 Huang X, Zhao L, Long Y, et al. Observation of the chiral-anomaly-induced negative magnetoresistance in 3D Weyl semimetal TaAs. Phys Rev X, 2015, 5: 031023
48 Burkov A A, Hook M D, Balents L. Topological nodal semimetals. Phys Rev B, 2011, 84: 235126
49 Fang C, Weng H, Dai X, et al. Topological nodal line Semimetal. Chin Phys B, 2016, 25: 117106
50 Li R, Ma H, Cheng X, et al. Dirac node lines in pure alkali earth metals. Phys Rev Lett, 2016, 117: 096401
51 Bzdusek T, Ruegg A, Sigrist M, et al. Nodal-chain metals. Nature, 2016, 538: 75
52 Bradlyn B, Cano J, Vergniory M G, et al. Beyond Dirac and Weyl fermions: Unconventional quasiparticles in conventional crystals. Science, 2016, 353: 558
53 Weng H, Fang C, Fang Z, et al. Topological semimetals with triply degenerate nodal points in θ-phase tantalum nitride. Phys Rev B, 2016, 93: 241202(R)
54 Zhu Z, Winkler G W, Wu Q S, et al. Triple point topological metals. Phys Rev X, 2016, 6: 031003
55 Weng H M, Fang C, Fang Z, et al. Coexistence of Weyl fermion and massless triply degenerate nodal points. Phys Rev B, 2016, 94: 165201

Topological phase and topological phase transition: A brief introduction to topological states of matter in solids

WENG HongMing[1,2]

[1] *Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics and Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;*
[2] *Collaborative Innovation Center of Quantum Matter, Beijing 100190, China*

The Nobel Prize in physics of year 2016 has been awarded to David J. Thouless, F. Duncan M. Haldane and J. Michael Kosterlitz for their theoretical discoveries of topological phase transitions and topological phase of matter. This paper starts with a brief introduction to their groundbreaking works made in 1970s–1980s, including the KT phase transition due to topological defects, vortex and antivortex pairs, in two-dimensional superfluid or superconductor, the TKNN number identifying the integer quantum Hall state, as well as the Haldane model to realize quantum Hall effect without external magnetic field in crystal lattice. Their insightful findings have revealed a new quantum state of matter, which cannot be described by local order parameter within Landau symmetry-breaking theory but by some global topological invariant of electronic states. In topology, a branch of mathematics, topological invariant describes the preserved properties of an object under continuous deformations. The combination of topology with the state of matter is a breakthrough in condensed matter physics. The band topology theory based on Berry phase is introduced in order to understand the origin of topology of the electronic states in solids. But only in last ten years, their pioneering works have been rediscovered and greatly extended. Around 2005, the time-reversal symmetry protected topological state identified by Z_2 number has been discovered theoretically and soon it is realized in material called as Z_2 topological insulator. Quickly, the concept of symmetry protected topological states has been generalized from time-reversal symmetry to all the space group symmetries, from electronic states to those in photonic crystal, phonon spectrum and cold atoms, and even from the insulators to metals. The first experimentally realized topological metal is Dirac semimetal, a three-dimensional version of graphene, with massless Dirac equation describing the low energy excitation around Fermi level. The discovery of Weyl semimetal in TaAs family has stimulated lots of studies on the chiral Weyl fermions, which have not been found in vacuum but observed as quasiparticles in Weyl semimetals. More topological semimetals, such as node-line semimetal and multiple-degenerate nodal point semimetal, have been also proposed. The distinguished property of topological states of matter is its stability in both bulk and boundary states against the perturbation preserving the protecting symmetry. This is expected for potential applications in electronic devices. Therefore, three Laureates of Nobel Prize in physics of 2016 revealed the secrets of exotic matter and opened the door to topological states.

topological insulator, topological semimetal, topological quantum state, topological phase transition, Berry phase

doi: 10.1360/N972016-01297