不规则堆叠多层 Haldane 模型的拓扑不变量

Xi Wu*

中国长沙 *410082*，湖南大学物理与电子学院

arXiv:2302.00307v1 [cond-mat.mes-hall] 1 Feb 2023

摘要

我们研究了具有不规则堆垛类型的多层 Haldane 模型，并考虑最近邻层间跃迁。我们证明，无论堆垛类型如何，拓扑不变量的值都等于层数乘以单层 Haldane 模型的拓扑不变量值；层间跃迁不会导致能隙闭合和相变。

PACS 编号：

*电子地址：wuxi5949@gmail.com, wuxi5949@hnu.edu.cn

目录

I. 引言 2**II. 多层石墨烯与多层 Haldane 模型** 3**III. 一一对应关系及其证明** 7**IV. 存在相变的模型示例** 13**V. 讨论** 16**致谢** 17**参考文献** 17

I. 引言

过去二十年来，人们对多层石墨烯进行了大量研究，并针对不同的堆垛类型对其能带结构进行了深入分析。自然界中，稳定的石墨具有伯纳尔型，对应 ABAB... 堆垛；菱方型，对应 ABCABC... 堆垛；以及乱层型，对应混合了前两种堆垛的不规则堆叠[1–4]。众所周知，堆垛类型会影响能带结构，并带来不同的现象，例如量子输运[3, 5, 6], 和光学吸收[4, 7]。

另一方面，Haldane 模型同样构建于六角晶格中，其晶格结构与石墨烯相同。Haldane 模型[8] 可能是最早提出的陈绝缘体范例之一，它表明电子哈密顿量的拓扑结构能够定义新的物质相。只要带隙保持开放，反常霍尔电导率就不会因任何微扰而改变[9]。因此，可以用类似的方式对 Haldane 模型进行堆垛，构建多层 Haldane 模型。由此自然引出一些问题：多层 Haldane 模型是否在某些方面类似于多层石墨烯？堆垛类型和层间跃迁参数如何影响多层 Haldane 模型的性质，例如反常霍尔电导率?

对于 ABC堆垛：解析结果表明[10] 当仅考虑最近邻

跃迁时，霍尔电导率与层数乘以单层 Haldane 模型中的霍尔电导率成正比，而层间跃迁参数不会导致能带闭合。其他堆垛类型，例如伯纳尔堆垛甚至乱层堆垛，情况又如何呢?

此外，如何构造具有较大陈数的器件，在过去十年一直是一个有趣的课题。一种方法表明，在单层 Haldane 模型中考虑远邻跃迁可以产生更大的陈数[11] ，并由此得到优美的解析结果。另一种方法是考虑多层模型，但通常采用数值方法[12, 13]。因此，人们不禁怀疑，解析方法能否切实用于确定多层模型中的陈数。

本文将 [10], 中的方法加以推广，提出了研究多层 Haldane 模型拓扑数的解析方法。在仅考虑最近邻层间跃迁的情况下，我们发现，多层石墨烯的谱和本征波函数与多层 Haldane 模型的谱和本征波函数之间存在一一对应关系。利用这一对应关系，我们证明了 ABC堆垛的性质对上述所有堆垛类型均成立，而且各层间跃迁参数的取值也无关紧要。

本文的组织结构如下：在第（II）节中，我们回顾多层石墨烯的构造，并以类似的方式提出多层 Haldane 模型；在第（III）节中，我们展示对应关系并给出证明；在第（IV）节中，我们给出一些违反证明中部分条件的例子，从而导致能隙闭合和相变；在第（V）节讨论中，我们探讨层间跃迁参数趋于无穷大时的能隙闭合、我们的结果的应用以及可能的未来研究方向。

II. 多层石墨烯与多层 Haldane 模型

在第（IIA）节中，为了定义我们的多层 Haldane 模型，我们回顾多层石墨烯的堆垛类型；在第（II B）节中，我们定义具有不规则堆叠的多层哈尔丹模型，并展示一个用于证明的重要反对易关系。

A. 多层石墨烯概述

这里我们主要遵循 [3, 5]中的讨论。石墨烯是由碳原子排列成蜂窝结构构成的二维体系。该结构可分解为两个子晶格，分别称为 α 和 β。单层石墨烯在费米能级附近具有线性的能量-动量（色散关系），导带与价带在两个费米点 K 和 K' 处相接，其有效哈密顿量为

$$H_1^G = \begin{bmatrix} 0 & v(p_1 - ip_2) \\ v(p_1 + ip_2) & 0 \end{bmatrix}, \tag{1}$$

其中， v 为费米速度， p_1 p_2 为动量。

考虑多层情形，由于蜂窝晶格的 C_3 对称性，后续各层有三种不同的位置，分别标记为 A 型、B 型和 C 型。若仅考虑相邻层之间的耦合，则多层石墨烯的有效哈密顿量可写为

$$\mathcal{H}_n^G = \begin{bmatrix} H_1^G & \mathfrak{t}_{12}^T & & & \\ \mathfrak{t}_{12} & H_1^G & \mathfrak{t}_{23}^T & & \\ & \mathfrak{t}_{23} & H_1^G & \mathfrak{t}_{34}^T & \\ & & & \cdots & \\ & & & \mathfrak{t}_{n-1,n} & H_1^G \end{bmatrix}_{2n\times 2n}. \tag{2}$$

$\mathfrak{t}_{i-1,\ i}$ 是层 $i-1$ 与层 i之间的耦合矩阵，用于定义堆垛类型。

堆垛模式包括 AA……、ABAB……、ABCABC……，以及 ABAB……与 ABCABC…… 混合形成的不规则模式。最简单的情形是 AA 堆垛，其定义为

$$\mathfrak{t}_{i-1,i} = t \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{3}$$

一层中的 α/β 子晶格与下一层中同类型的子晶格重叠，使其能量不稳定。其能谱为

$$E_r^{\pm} = \pm v|\mathbf{p}| + 2t\cos\left(\frac{r\pi}{n+1}\right), r = 1, ..., n\,. \tag{4}$$

能量上最有利的是 ABAB... 堆垛。其定义为

$$\mathfrak{t}_{2i-1,2i} = t \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathfrak{t}_{2i,2i+1} = t \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \tag{5}$$

能谱为

$$E_r^{\pm} = \pm\sqrt{v^2|\mathbf{p}|^2 + t^2\cos^2(\frac{r\pi}{n+1})} + t\cos\left(\frac{r\pi}{n+1}\right), r = 1, ..., n\,. \tag{6}$$

另一个常见的例子是 ABC 堆垛，其

$$\mathfrak{t}_{i-1,i} = t\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \tag{7}$$

The 精确能谱尚未求解，而有效哈密顿量为

$$H_n^{eff} = -\frac{1}{t^{n-1}}\begin{pmatrix} 0 & v^n(p_1 - ip_2)^n \\ v^n(p_1 + ip_2)^n & 0 \end{pmatrix}. \tag{8}$$

其色散关系为

$$E_n^{\pm} = \pm\frac{v^n p^n}{t^{n-1}}\,. \tag{9}$$

对于不规则堆叠的 n 层石墨烯，我们应用手征分解：(i) 找出最长的 ABC 堆垛链及其层，例如 J_1 ，并将其划分出来；(ii) 重复步骤 (i)，直至所有层都处理完毕。于是我们得到 $J_1 + J_2 + ...J_D = n$。整个多层石墨烯的有效哈密顿量为

$$\mathcal{H}_n^{eff} \approx H_{J_1} \oplus H_{J_2} \oplus ...H_{J_D}\,, \tag{10}$$

其中每个 H_{J_i} 都具有式 (8) 的形式。

B. 多层哈尔丹模型

在本小节中，我们讨论与上一小节所考虑的多层石墨烯模型相对应的各种多层哈尔丹模型。单层 Haldane 模型的哈密顿量为

$$H_1^H = h_1\sigma_1 + h_2\sigma_2 + h_3\sigma_3\,, \tag{11}$$

为简洁起见，这里忽略与单位矩阵成正比的项。在原始 Haldane模型中，可通过令 cos $\phi = 0$ 为零将其消去。而 n层哈代模型的哈密顿量为

哈密顿量

$$\mathbb{H}_n^H = \begin{bmatrix} H_1^H & \mathfrak{t}_{12}^T & & & \\ \mathfrak{t}_{12} & H_1^H & \mathfrak{t}_{23}^T & & \\ & \mathfrak{t}_{23} & H_1^H & \mathfrak{t}_{34}^T & \\ & & & \cdots & \\ & & & \mathfrak{t}_{n-1,n} & H_1^H \end{bmatrix}_{2n\times 2n} = \sum_i h_i \mathbb{1}_n \otimes \sigma_i + T$$

$$= h_3 \mathbb{1}_n \otimes \sigma_3 + \mathbb{H}_n^G \,, \tag{12}$$

其中

$$\mathfrak{t}_{i,i+1} = \begin{bmatrix} 0 & t_{i,i+1} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \text{ or } \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ t_{i,i+1} & 0 \end{bmatrix} = t_{i,i+1}(\sigma_1 \pm i\sigma_2) \tag{13}$$

是层间跃迁矩阵。 $\mathbb{H}_n^G$ 具有与.....相同的矩阵结构，并且在 **K** 点处与 $\mathcal{H}_n^G$ 相同。在本文接下来的部分中，我们将把 $\mathbb{H}_n^G$ 称为多层石墨烯，而非 $\mathcal{H}_n^G$ 。

显然， $h_3\mathbb{1}_n \otimes \sigma_3$ 与 $h_1\mathbb{1}_n \otimes \sigma_1$ 和 $h_2\mathbb{1}_n \otimes \sigma_2$ 反对易。下面来证明 $\{T, h_3\mathbb{1}_n \otimes \sigma_3\} = 0$：

$$\{\mathfrak{t}_{i,i+1}, \sigma_3\} = 0 \Leftrightarrow \mathfrak{t}_{i,i+1}\sigma_3 = -\sigma_3\mathfrak{t}_{i,i+1} \tag{14}$$

thus

$$\mathbb{1}_n \otimes \sigma_3 \; T = -T \; \mathbb{1}_n \otimes \sigma_3 \tag{15}$$

因此

$$\{T, h_3\mathbb{1}_n \otimes \sigma_3\} = 0 \,. \tag{16}$$

由此可得

$$\{h_3\mathbb{1}_n \otimes \sigma_3, \mathbb{H}_n^G\} = 0 \,, \tag{17}$$

正是由于这一反对易关系，$\mathbb{H}_n^G$ 与 $\mathbb{H}_n^H$之间存在一一对应关系。

III. 一一对应关系及其证明 F

本节将证明，对于我们考虑的所有堆垛类型（AA 堆垛除外；我们将在第 (IV A) 节讨论 AA 堆垛），反常霍尔电导所对应的拓扑不变量与层数成正比，比例系数为单层 Haldane 模型的拓扑不变量。基本思路与 [10], 中相同：先求出层间跃迁为零时的拓扑数，然后证明对于任意有限的层间跃迁值，能隙都不会闭合。本节分为四个小节：第 III A 节计算交错跃迁关闭时多层 Haldane 模型的拓扑不变量；第 (III B) 节证明多层石墨烯与多层 Haldane 模型之间存在一一对应关系，这表明多层 Haldane 模型的能隙闭合只能发生在多层石墨烯能隙闭合点，而不会发生在布里渊区的其他位置；第 (III C) 节研究多层石墨烯的能隙闭合条件，并发现层间跃迁不会改变该条件；第 (III D) 节总结前面各小节的要点，说明多层 Haldane 模型的能隙受到单层 Haldane 模型能隙的保护，并结合第 (III A) 节的结果完成证明。

A. 层间跃迁为零的极限

本小节的结果并非新结果，但为使证明完整，我们在此列出。负责异常量子霍尔效应电导的拓扑不变量 [14–17] 定义如下

$$\mathcal{N}[\mathbb{G}] = \frac{1}{3!}\int \frac{d^3p}{(2\pi)^2}\,\epsilon^{ijk}\,\mathrm{Tr}\left(\mathbb{G}\partial_i\mathbb{G}^{-1}\mathbb{G}\partial_j\mathbb{G}^{-1}\mathbb{G}\partial_k\mathbb{G}^{-1}\right). \tag{18}$$

在这些表达式中， $\mathbb{G}$ 是电子的二点格林函数。本节考虑层间跃迁为零的极限，即 $t_\perp = 0$。$\mathbb{G}$ 表示为

$$\mathbb{G}^{-1} = i\omega - \mathbb{H}_n^H|_{t_\perp=0} = \begin{bmatrix} Q_1 & & & \\ & Q_2 & & \\ & & \cdots & \\ & & & Q_n \end{bmatrix}_{2n\times 2n}. \tag{19}$$

其中， $Q_i = i\omega - H_1^i$ 和 i 是层的标签。矩阵 $\mathbb{G}^{-1}$ 变为Q_i 的直和。如果矩阵 $\mathbb{G}$ 是另外两个矩阵 G_1 和 G_2的直和，那么拓扑

不变量，或 $\mathbb{G}$ 的绕数，将是 G_1的拓扑不变量与 G_2的拓扑不变量之和。也就是说，如果 $\mathbb{G} = \begin{bmatrix} G_1 & 0 \\ 0 & G_2 \end{bmatrix}$，那么 $N[\mathbb{G}] = N[G_1] + N[G_2]$ [18]。因为：

$$\begin{aligned} \mathcal{N}[\mathbb{G}] &= \frac{1}{3!}\int \frac{d^3p}{(2\pi)^2}\,\epsilon^{ijk}\,\mathrm{Tr}\big(\mathbb{G}\partial_i\mathbb{G}^{-1}\mathbb{G}\partial_j\mathbb{G}^{-1}\mathbb{G}\partial_k\mathbb{G}^{-1}\big) \\ &= \frac{1}{3!}\int \frac{d^3p}{(2\pi)^2}\,\epsilon^{ijk}\,\mathrm{Tr}\big(G_1\partial_i G_1^{-1}G_1\partial_j G_1^{-1}G_1\partial_k G_1^{-1} + G_2\partial_i G_2^{-1}G_2\partial_j G_2^{-1}G_2\partial_k G_2^{-1}\big) \\ &= \mathcal{N}[G_1] + \mathcal{N}[G_2]\,. \end{aligned} \tag{20}$$

因此，

$$\mathcal{N}[\mathbb{G}_n] = \sum_i \mathcal{N}[G_i]\,. \tag{21}$$

可以看出，如果没有层间跃迁，n层哈代模型的拓扑不变量将等于各层拓扑不变量之和。如果开启层间跃迁且能隙不闭合，这一结论也可以推广；我们将在下一小节中说明这一点。

B. 一一对应

本小节将证明一个引理，说明多层石墨烯与多层 Haldane 模型的能谱和本征函数之间存在一一对应关系。

我们从考虑满足以下条件的矩阵开始

$$H_H = H_G + H_3\,, \tag{22}$$

满足

$$\{H_G, H_3\} = 0, \tag{23}$$

and

$$H_3^2 = h_3^2\,\mathbb{1}\,, \tag{24}$$

其中 h_3 是某个数。这些条件正是多层石墨烯和多层 Haldane 模型的哈密顿量所满足的条件，详见第（IIB）节。

引理如下：对于每个本征方程

$$(H_G - E_i^G)\psi_i^G = 0\,, \tag{25}$$

存在一个本征方程

$$(H_H - E_i^H)\psi_i^H = 0\,, \tag{26}$$

满足

$$(E_i^H)^2 = h_3^2 + (E_i^G)^2\,, \tag{27}$$

反之亦然。

证明：由式（25）可得

$$\Big(H_G^2 - (E_i^G)^2\Big)\psi_i^G = 0\,. \tag{28}$$

式（22）、（23）和（24）给出

$$H_H^2 = H_G^2 + h_3^2\ \mathbb{1}\,. \tag{29}$$

将式（29）代入式（28），可得

$$\Big(H_H^2 - h_3^2 - (E_i^G)^2\Big)\psi_i^G = 0\,. \tag{30}$$

式（30）有两个解

$$\Big(H_H \mp \sqrt{h_3^2 + (E_i^G)^2}\Big)\psi_i^{H\pm} = 0\,., \tag{31}$$

with

$$\psi_i^{H\pm} = \Big(H_H \pm \sqrt{h_3^2 + (E_i^G)^2}\Big)\psi_i^G\,. \tag{32}$$

定义

$$E_i^H \ := \ \mathrm{sgn}(E_i^G)\sqrt{h_3^2 + (E_i^G)^2} \tag{33}$$

$$\psi_i^H \ := \ \Big(H_H + \mathrm{sgn}(E_i^G)\sqrt{h_3^2 + (E_i^G)^2}\Big)\psi_i^G\,, \tag{34}$$

我们得到式（26）和（27）。 E_i^H的符号选取使得在 $h_3 \to 0$ 极限下，式（25）和（26）变得相同，这意味着

$$E_i^H(h_3 \to 0) \to E_i^G\,, \tag{35}$$

并且还有 $\psi_i^H \neq 0$。上述过程可以反过来进行：从式（26）出发，我们可以推导出式（25）和（27），因此引理得证。

备注：式（24）确保了这种对应关系是一一对应的；若没有这一条件，两个谱之间仍存在类似于公式（33）和（34）的对应关系，但并非一一对应，其中 h_3^2 被 H_3^2 的特征值替代。

C. 多层石墨烯的能隙闭合条件

公式（33）表明，多层 Haldane 模型的能隙闭合条件，即对于某个 i，$E_i^H = 0$ 满足 $h_3 = E_i^G = 0$。在本小节中，我们将求多层石墨烯 $E_i^G = 0$ 的能隙闭合条件。多层石墨烯的久期行列式为

$$\det\left(\mathbb{H}_n^G - E^G \mathbb{1}_n\right) = \det\left(h_1 \mathbb{1}_n \otimes \sigma_1 + h_2 \mathbb{1}_n \otimes \sigma_2 + T - E^G \mathbb{1}\right) \tag{36}$$

并且当处于半填充时，能隙闭合

$$\det\left(\mathbb{H}_n^G - E^G \mathbb{1}_n\right)\Big|_{E^G=0} = \det\left(\mathbb{H}_n^G\right) = 0\,. \tag{37}$$

满足式（37）的 h_1 和 h_2 的取值决定了能隙闭合点。尽管堆垛类型和 $t_{i.i+1}$ 的取值通常决定多层石墨烯的能量本征值，而且求出能谱非常困难，甚至可能不可能，但式（37）是可解的。

接下来我们证明

$$\det\left(\mathbb{H}_n^G\right) = (-h_1^2 - h_2^2)^n \tag{38}$$

对于式（13）中的 $\mathfrak{t}_{i,i+1}$ 以及 $t_{i.i+1}, i = 1, ..., n-1$ 的任意取值。当对所有 $i = 1, ..., n-1$ 都有 $t_{i.i+1} = 0$ 时，很容易看出

$$\det\left(\mathbb{H}_n^G\right) = (-h_1^2 - h_2^2)^n\,, \tag{39}$$

我们只需证明，涉及 $t_{i.i+1}$ 的项不会对行列式产生贡献。我们使用数学归纳法。从这里开始，我们将$t_{i,\ i+1}$ 的记号由$\mathfrak{t}_{i,\ i+1}$ 改为

$\begin{bmatrix} 0 & u_i \\ v_i & 0 \end{bmatrix}$，以方便书写。对于 $n=2$，我们有

$$\det\left(\mathbb{H}_2^G\right) = \begin{vmatrix} 0 & h_1-ih_2 & & v \\ h_1+ih_2 & 0 & u & \\ & u & 0 & h_1-ih_2 \\ v & & h_1+ih_2 & 0 \end{vmatrix} = (-h_1^2-h_2^2)^2\,, \tag{40}$$

对于 $u=0$ 或 $v=0$均成立。假设 $n=k$

$$\det\left(\mathbb{H}_k^G\right) = (-h_1^2-h_2^2)^k\,, \tag{41}$$

我们计算 $\det\left(\mathbb{H}_{k+1}^G\right)$。其表达式如下:

$$\begin{aligned} &\det\left(\mathbb{H}_{k+1}^G\right) \\ &= \begin{vmatrix} 0 & h_1-ih_2 & 0 & v_1 & 0 & 0 & \mathbf{0} \\ h_1+ih_2 & 0 & u_1 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{0} \\ 0 & u_1 & 0 & h_1-ih_2 & 0 & v_2 & \mathbf{0} \\ v_1 & 0 & h_1+ih_2 & 0 & u_2 & 0 & \mathbf{0} \\ 0 & 0 & 0 & u_2 & 0 & h_1-ih_2 & \ldots \\ 0 & 0 & v_2 & 0 & h_1+ih_2 & 0 & \ldots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \ldots & \ldots & \ldots \end{vmatrix}. \end{aligned} \tag{42}$$

我们分别考虑 $u_1=0$ 和 $v_1=0$。只有当 $u_1=0$ 或 $v_1=0$ 的余子式非零时，它们才会对行列式有贡献。若 $u_1=0$，我们可以证明这两个 v_1的余子式均为零:

$$A_{4,1} = -\begin{vmatrix} h_1+ih_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{0} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & v_2 & \mathbf{0} \\ v_1 & 0 & h_1+ih_2 & u_2 & 0 & \mathbf{0} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_1-ih_2 & \ldots \\ 0 & 0 & v_2 & h_1+ih_2 & 0 & \ldots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \ldots & \ldots & \ldots \end{vmatrix} = 0 \tag{43}$$

因为第二列为零，同理，$A_{1,\,4}$ 也为零，因为它的第二行为零。

如果 $v_1 = 0$，两个 u_1 的余子式为零：

$$A_{2,3} = -\begin{vmatrix} 0 & h_1 - ih_2 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{0} \\ 0 & u_1 & h_1 - ih_2 & 0 & v_2 & \mathbf{0} \\ 0 & 0 & 0 & u_2 & 0 & \mathbf{0} \\ 0 & 0 & u_2 & 0 & h_1 - ih_2 & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & h_1 + ih_2 & 0 & \ldots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \ldots & \ldots & \ldots \end{vmatrix} . \tag{44}$$

因为第一列为零，同理，$A_{3,\ 2}$ 也为零，因为其第一行为零。因此，u_1 和 v_1均没有贡献。由此，

$$\det\left(\mathbb{H}^G_{k+1}\right) = (-h_1^2 - h_2^2)\det\left(\mathbb{H}^G_k\right) = (-h_1^2 - h_2^2)^{k+1} . \tag{45}$$

因此，能隙闭合条件仍然 $h_1 = h_2 = 0$ 不受层间跃迁的影响。备注：这一结果可以推广，即每一层中的 h_1 和 h_2 可以不同h_1^i 和 h_2^i，于是我们有 $\det\left(\mathbb{H}^G_n\right) = \prod_{i=1}^{n}(-(h_1^i)^2 - (h_2^i)^2)$，而能隙闭合条件为其中一个 i的 $h_1^i = h_2^i = 0$ 。

D. 最后的证明

我们总结前面各小节的结论：根据第（II B）节，多层 Haldane 模型的哈密顿量由 $h_3\mathbb{1}_n \otimes \sigma_3$ 和多层石墨烯的哈密顿量组成，二者彼此反对易；根据第（III B）节，这使它们的谱之间存在一一对应关系，见公式（33）。至于 AA 堆垛，我们在第（III C）节证明，多层石墨烯的带隙闭合，即$E_i^G = 0$，仅当 $h_1 = h_2 = 0$时才会发生，但此时 $h_3 \neq 0$ ，这是单层 Haldane 模型的能隙所要求的：

$$h_1^2 + h_2^2 + h_3^2 > 0 . \tag{46}$$

因此，除非在极限 $t_{i,i+1} \to \infty$ 下，否则 $h_3 = 0$ 和 $E_i^G = 0$ 不可能同时成立。所以，即使对于非规则堆垛类型，引入最近邻层间跃迁也不会改变多层 Haldane 模型的拓扑不变量。第 III A 节表明，当层间跃迁为零时，多层 Haldane 模型的拓扑不变量等于各单层 Haldane

模型拓扑不变量之和。至此，证明完成。从某种意义上说，我们的证明甚至不限于 Haldane 模型，因为我们不需要 h_1 h_2 和 h_3 的详细信息。

备注：这一结论可以推广到如下情形：对于标签为 i、 h_1^i 和 h_2^i 的每一层，其标签不必与其他层相同。关键在于， h_3^i必须相同，才能与 T 矩阵反对易。由于每一层都是绝缘体，$(h_1^i)^2 + (h_2^i)^2 + h_3^2 > 0$。因此，开启任何层间跃迁都不会发生相变。于是，整个层状系统的拓扑不变量等于各层拓扑不变量之和。

IV. E 确实会发生相变的模型示例 S

为说明上一节结果的非平凡性，我们考虑两个确实会发生相变、且违反前文某项要求的例子。为简单起见，我们只考虑双层模型。这些模型分别是：AA 堆垛，此时式（17）不成立；以及 $\alpha\beta$&$\beta\alpha$ 堆垛，此时 $h_3 = 0$ 和 $E_i^G = 0$ 可以同时满足。

A. AA 堆垛

AA 堆垛模型定义如下：

$$H_{AA}^2 = \begin{bmatrix} h_3 & h_1 - ih_2 & t & \\ h_1 + ih_2 & -h_3 & & t \\ t & & h_3 & h_1 - ih_2 \\ & t & h_1 + ih_2 & -h_3 \end{bmatrix} =: \sum_{i=1}^{3} h_i \mathbb{1} \otimes \sigma_i + t\sigma_1 \otimes \mathbb{1}\,. \tag{47}$$

H_{AA}^2 通过变换 $S = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbb{1} - i\sigma_2) \otimes \mathbb{1}$实现块对角化：—

$$SH_{AA}^2 S^{-1} = \begin{bmatrix} h_3 + t & h_1 - ih_2 & & \\ h_1 + ih_2 & -h_3 + t & & \\ & & h_3 - t & h_1 - ih_2 \\ & & h_1 + ih_2 & -h_3 - t \end{bmatrix} \tag{48}$$

因此，能谱为

$$E_{AA} = \pm t \pm \sqrt{\sum_i h_i^2} =: \pm t \pm h\,. \tag{49}$$

能带闭合点为

$$|t| = h_{min}, h_{max} \tag{50}$$

如果我们将 t 的值从零调至无穷大，双层模型将从拓扑绝缘体/普通绝缘体（取决于单层模型）转变为金属，然后再转变为普通绝缘体。

B. $\alpha\beta\&\beta\alpha$**堆垛**

我们将 $\alpha\beta\&\beta\alpha$ 堆垛定义如下：存在两种层间跃迁，分别是从 α 亚格自由度到 β 亚格自由度，以及从 β 亚格自由度到 α 亚格自由度。连续模型在 [19, 20]中提出。哈密顿量如下

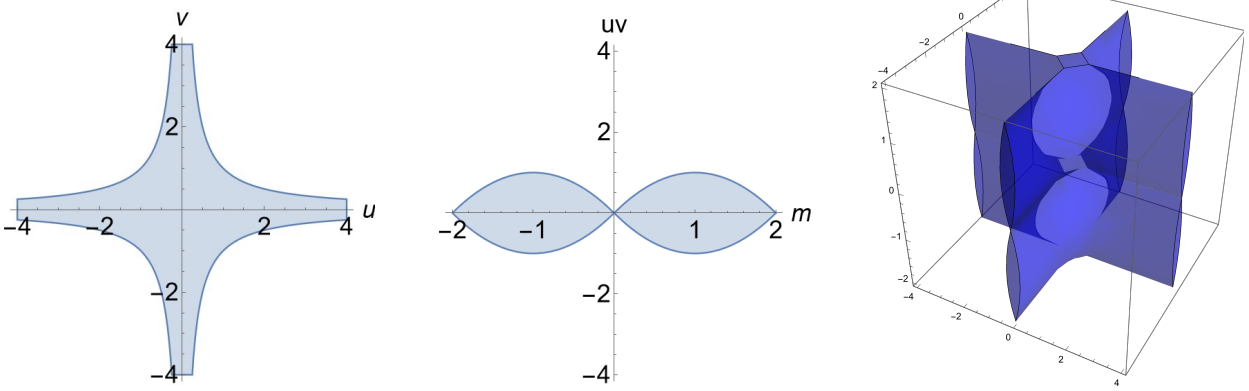
$$\begin{aligned} H^2_{\alpha\beta\&\beta\alpha} &= \begin{bmatrix} h_3 & h_1 - ih_2 & & v \\ h_1 + ih_2 & -h_3 & u & \\ & u & h_3 & h_1 - ih_2 \\ v & & h_1 + ih_2 & -h_3 \end{bmatrix} \\ &= \sum_{i=1}^{3} h_i \mathbb{1} \otimes \sigma_i + \frac{u+v}{2}\sigma_1 \otimes \sigma_1 + \frac{u-v}{2}\sigma_2 \otimes \sigma_2 \\ &=: \sum_{i=1}^{3} h_i \mathbb{1} \otimes \sigma_i + t_1\sigma_1 \otimes \sigma_1 + t_2\sigma_2 \otimes \sigma_2\,. \end{aligned} \tag{51}$$

当 $u = 0$ 或 $v = 0$时，该哈密顿量退化为方程（12）中模型的双层情形。尽管方程（12）中的模型能隙不会闭合，但对于一般的 u 和 v，正如我们将看到的，能隙确实会闭合。该哈密顿量的能谱满足

$$E^2_{\alpha\beta\&\beta\alpha} = h_3^2 + h_1^2 + h_2^2 + t_1^2 + t_2^2 \pm 2\sqrt{h_1^2 t_1^2 + h_2^2 t_2^2 + t_1^2 t_2^2}\,,. \tag{52}$$

现在我们定义如下函数

$$f \;:=\; (h_1^2 + h_2^2 + t_1^2 + t_2^2)^2 - 4(h_1^2 t_1^2 + h_2^2 t_2^2 + t_1^2 t_2^2)\,, \tag{53}$$



(a) $m=1$，而 x、y 轴分别为 u 和 v

(b) x、y 轴分别为 uv 和 m

(c) 选取 x、y、z 轴分别为 u、v 和 m

图 1： $H^2_{\alpha\beta\&\beta\alpha}$ 的相图。如果单层哈密顿量是拓扑非平庸的，则彩色区域也是拓扑非平庸的。

那么，能隙闭合条件可以重新表述为

$$\begin{cases} f=0 \\ h_3=0\,. \end{cases} \tag{54}$$

f 可简化为

$$f=(h_1^2-h_2^2-t_1^2+t_2^2)^2+4h_1^2h_2^2\,. \tag{55}$$

因此，能隙闭合条件变为

$$\begin{cases} t_1^2-t_2^2=h_1^2-h_2^2 \text{ or } uv=h_1^2-h_2^2 \\ h_1h_2=0 \\ h_3=0\,. \end{cases} \tag{56}$$

对于方程（12）的双层模型，由于 $uv=0$，三个方程无法同时满足。因此，$uv=0$ 情形是拓扑非平庸的，前提是单层模型具有拓扑性质。当将 $|uv|$ 从零增至无穷大时，体系会从拓扑非平庸相发生相变，转变为拓扑平庸相：从方程（56）可以看出，随着 $|uv|$ 增大，总会有一些 $|uv|$ 的取值（例如 $|uv|_0$ ）使能隙闭合；经过所有能隙闭合点后，由于体系与 $u\to\pm\infty$ 且 $v\to\pm\infty$ 的情形平滑相连，相就变为拓扑平庸相。

接下来，为简化讨论并研究相变，我们考虑方程（51）中每一层的 Wilson费米子[21]，而不采用 Haldane模型。Qi、Wu和Zhang 也曾提出，可在二维顺磁半导体[22]中将其实现为自旋霍尔效应。Wilson费米子的哈密顿量为

$$H_W = (m + \cos p_1 + \cos p_2)\sigma_3 + \sin p_1 \sigma_1 + \sin p_2 \sigma_2 \,, \tag{57}$$

由方程（56）可得能隙闭合条件为

$$\text{If } uv > 0 \begin{cases} uv = \sin^2 p_1 \\ \sin p_2 = 0 \\ m \pm 1 + \cos p_1 = 0 \,. \end{cases} \Rightarrow uv = 1 - (1 \pm m)^2 \,, \tag{58}$$

$$\text{If } uv < 0 \begin{cases} uv = -\sin^2 p_2 \\ \sin p_1 = 0 \\ m \pm 1 + \cos p_2 = 0 \,. \end{cases} \Rightarrow -uv = 1 - (1 \pm m)^2 \,, \tag{59}$$

其中，$+$ or- 的取值应满足 $(1 \pm m)^2 \leq 1$。方程（58）和（58）可以合并为一个条件

$$(uv)^2 = (1 - (1 \pm m)^2)^2 \,. \tag{60}$$

V. 讨论

尽管我们证明，对于任意有限的层间跃迁值，能隙都不会闭合$t_{i,\ i+1}$，但随着$t_{i,\ i+1}$的值增大，能隙确实会越来越小，并在$t_{i,\ i+1} = \infty$处闭合。原因在于，当$t_{i,\ i+1} = \infty$时，有一个 E^G 对所有 h_1 和 h_2 的取值都趋于零，因此多层 Haldane 模型的能隙闭合点完全由 $h_3 = 0$决定。在 [10] 中，我们对双层模型证明了这一点。现在我们将证明，这一点对 n 层模型也成立，至少当所有$t_{i,\ i+1}$ 都具有相同的值 t_{bot}时是如此。当我们增大t_{bot} 的值，使得 $t_{bot} >> \sqrt{h_1^2 + h_2^2}$时，[3]中 K 点附近的低能有效理论便可在整个布里渊区内作出良好近似。于是我们有

$$\mathcal{H}_n^G \approx H_{J_1} \oplus H_{J_2} \oplus ... H_{J_D} \,, \tag{61}$$

其中

$$H_{J_i} = -\frac{1}{t_\perp^{J_i - 1}} \begin{pmatrix} 0 & (h_1 - ih_2)^{J_i} \\ (h_1 + ih_2)^{J_i} & 0 \end{pmatrix} \tag{62}$$

其中 J_i 是与手征分解对应的整数，且 $J_1 + J_2 + ...J_D = n$。能量本征值

$$E_{J_i} = \pm \frac{\sqrt{h_1^2 + h_2^2}^{J_i}}{t_\perp^{J_i - 1}} \to 0 \text{ as } t_\perp \to 0 \tag{63}$$

对于 $J_i \geq 2$。但由于手性分解机制，不可能所有 $J_i = 1$ 。因此，如果 t_{bot} 变得过大，尽管不可能转变为另一种拓扑/平庸绝缘体相，但材料实际上会变成半导体。

从证明中我们可以看出，即使存在不规则堆叠，多层 Haldane 模型也可以用作构建大陈数器件的方法，因为其相已得到理解。此外，根据第 III D 节，当改变各层中的 h_1^i 和 h_2^i 时，系统的行为是可预测的，因此我们不仅可以通过增减层数来改变陈数，也可以通过调整各层来改变陈数。一种实现方式是考虑层内远邻跃迁：如[11], 所示，层内远邻跃迁也能产生大陈数，因此结合这两种方法可以得到更多结构。

在他的论文中，我们发现了多层石墨烯与多层 Haldane 模型之间的一一对应关系；多层 Haldane 模型可能还有更多有趣的现象等待发现。我们只考虑了层间最近邻跃迁。如多层石墨烯中所示[23], ，层间远邻跃迁可以在能带结构中引发三角翘曲。如果允许层间远邻跃迁，了解多层 Haldane 模型会发生什么将很有意思。也许这种一一对应关系会发生变化，甚至被破坏。我们将此留作未来的研究方向。

致谢

X. Wu 感谢与 C.X.Zhang 进行的有价值讨论。

[1] F. Guinea、A. H. Castro Neto 和 N. M. R. Peres，《物理评论 B》**73**，245426（2006），网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.245426。

[2] M.I. Katsnelson，《今日材料》**10**，20（2007），ISSN1369-7021，网址：http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1369702106717886。

[3] H. Min 和 A. H. MacDonald，《物理评论 B》**77**，155416（2008），网址：https://link.aps. org/doi/10.1103/PhysRevB.77.155416。[4] M. Koshino 和 E. McCann，《物理评论 B》**87**，045420（2013），网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.045420。[5]H. Min 和 A. H. MacDonald，《理论物理进展补编》**176**，227（2008），ISSN 0375-9687，https://academic.oup.com/ptps/article-pdf/doi/10.1143/PTPS.176.227/5322668/176-227.pdf，网址：https://doi.org/10.1143/PTPS.176.227。[6]W. Bao、L. Jing、J. Velasco、Y. Lee、G. Liu、D. Tran、B. Standley、M. Aykol、S. B. Cronin、D. Smirnov 等，《自然物理》**7**，948（2011），网址：https://doi.org/10.1038/ nphys2103。[7] K. F. Mak、J. Shan 和 T. F. Heinz，物理评论快报**104**，176404（2010），网址：https: //link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.104.176404。[8] F. D. M. Haldane，物理评论快报**61**，2015（1988），网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.61.2015。[9] X.-L. Qi 和 S.-C. Zhang，现代物理评论**83**，1057（2011），网址：https://link.aps.org/ doi/10.1103/RevModPhys.83.1057。[10]X. Wu、C. Zhang 和 M. Zubkov，固态通信**353**，114863（2022），ISSN 0038-1098，网址：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/ S0038109822001922。[11] D. Sticlet 和 F. Pi´echon，《物理评论 B》**87**，115402（2013），网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.115402。[12] C. C. Titus Neupert、Luiz Santos 和 C. Mudry，物理评论快报**106** （2011）。[13] M. Trescher 和 E. J. Bergholtz，《物理评论B》**86** （2012）。[14] K. Ishikawa 和 T. Matsuyama，核物理B**280**，523（1987），ISSN 0550-3213，网址：http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/055032138790160X。[15] M. F. L. Golterman、K. Jansen 和 D. B. Kaplan，物理快报**B301**，219（1993），hep- lat/9209003。[16] G. E. Volovik，《氦液滴中的宇宙》《氦液滴中的宇宙》（牛津大学出版社，2009），网址：https://doi.org/10.1093%2Facprof%3Aoso%2F9780199564842.001.0001。[17]M. Zubkov，物理学年鉴**373**，298（2016），ISSN 0003-4916，网址：https://www.

sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491616301130.[18] M. Nakahara，几何、拓扑与物理 （CRC出版社，2003）。[19] F. Zhang、A. H. MacDonald 和 E. J. Mele，《美国国家科学院院刊》**110**，10546（2013），
https://www.pnas.org/doi/pdf/10.1073/pnas.1308853110，网址：https: //www.pnas.org/doi/abs/10.1073/pnas.1308853110。[20]K. Hashimoto 和 T. Kimura，《理论与实验物理进展》**2016** （2016），ISSN 2050-3911，013B04，
https://academic.oup.com/ptep/article- pdf/2016/1/013B04/9620604/ptv181.pdf，网址：https://doi.org/10.1093/ptep/ptv181。[21] K. G. Wilson，载于亚核物理新现象 （施普林格美国公司，1977），第 69–142 页。[22] X.-L. Qi、Y.-S. Wu 和 S.-C. Zhang，《物理评论 B》**74**，085308（2006），网址：https://link. aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.085308。[23] M. Koshino 和 E. McCann，《物理评论 B》**80**，165409（2009），网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.165409。