

Kekulé 蜂窝晶格中拓扑角态与边界态的光电导响应特征 *

袁焕予¹⁾ 阮鸿宇²⁾ 张师铜²⁾ 段文晔^{1)3)†}

1) (华东理工大学物理学院, 上海 200237)

2) (华东理工大学信息科学与工程学院, 上海 200237)

3) (南京大学, 固体微结构物理国家重点实验室, 南京 210093)

本文通过研究六边形有限尺寸的 Kekulé 晶格纳米盘, 发现了二维高阶拓扑绝缘体的拓扑角态和边界态在光电导中的特征响应。通过数值计算, 研究了不同边长六边形纳米盘的能带结构和光电导。确认了满足边长条件 $L = 4a_0 + 3na_0$ (其中 a_0 为每条键的长度, $n = 0, 1, 2, \dots$) 的六边形 Kekulé 晶格纳米盘属于二维高阶拓扑绝缘体。由于体能隙中存在拓扑角态和边界态, 其光电导在低频区出现了额外的共振峰。而对于拓扑平庸绝缘体而言, 光电导在该频段消失。研究发现这些额外光电导共振峰归因于二维高阶拓扑绝缘体的能带结构和光学选择定则。此外, 只要化学势位于体能隙内, 这些独特的光电导特征就可以被观察到, 并且对无序引起的散射展宽具有一定鲁棒性。本文的研究从动力学角度扩展了对二维高阶拓扑绝缘体中拓扑角态和边界态的理解。同时, 光电导的额外共振峰为光学探测二维高阶拓扑绝缘体的角态和边界态提供了一条有前景的途径。

关键词: 拓扑角态和边界态, 光电导, Kekulé 蜂窝晶格, 二维高阶拓扑绝缘体

PACS: 73.20.At, 73.22.-f, 78.20.-e

† 通信作者. E-mail: duanwy@pku.edu.cn

第一作者. E-mail: HuanyuYuan@mail.ecust.edu.cn

* 国家自然科学基金面上项目 (批准号: 12574191)、国家自然科学基金青年科学基金 (批准号: 12004111)、南京大学固体微结构物理国家重点实验室开放课题 (批准号: M37018) 和大学生创新创业训练计划项目 (批准号: S202410251185) 资助的课题。

1 引言

在过去的二十年里, 常规 (一阶) 拓扑绝缘体 (topological insulators) 一直是凝聚态物理中的热门研究领域之一 [1,2]。对于常规拓扑绝缘体, 比其体态低一维的边界处存在受拓扑保护的无能隙激发态。近年来, 人们的研究兴趣进一步扩展至高阶拓扑绝缘体 (higher-order topological insulators) [3-14]。不同于常规拓扑绝缘体, 对于 n 阶 (高阶) 拓扑绝缘体, 其 m 维体内 (bulk) 具有局域于 $(m-n)$ 维边界的无能隙态。例如, 三维二阶拓扑绝缘体在体系特定的棱上呈现出一维无能隙边界态 [4-6]。通过扫描隧穿谱学 [15-17]、角分辨紫外光电子谱学 [18] 以及约瑟夫森干涉测量 [15,19] 可以对这些高阶拓扑绝缘体特有的拓扑棱态进行探测。此外, 在由高阶拓扑绝缘体与普通金属构成的法布里-珀罗干涉仪中, 电子电导的阿哈罗诺夫-玻姆振荡表明, 这些拓扑棱态具有可观测且具有鲁棒性的磁输运特征 [20,21]。

二维高阶拓扑绝缘体是高阶拓扑绝缘体的另一类典型实例, 其特征是能隙内存在零维角态 [10-13,22-25]。在空间中, 这些角态局域于几何角上; 由于与边界态及体态之间存在能隙, 在能谱中这些角态表现为孤立态。与常规拓扑绝缘体中的无能隙边界态不同, 这些角态更类似于局域束缚态, 且与外部导电通路中的传输通道耦合较弱, 因此难以自然形成具有鲁棒性的输运通道 [11,26,27]。这就导致从输运的角度探测与利用这些角态较为困难。为此, 已有大量工作致力于探测与操纵二维高阶拓扑绝缘体中的角态 [11,13,26-31,31-37]。已有理论提出可通过局域外场对这些角态的能量进行独立且直观的调控 [29,37], 或者可通过三层陈绝缘体的层间耦合实现二维混合阶拓扑绝缘体, 使角态与手性边界态在同一体能隙内共存 [11]。在二维高阶拓扑绝缘体中, 角态的位置可以通过自旋轨道势 [28]、交变磁体 [30]、转角双层陈绝缘体中的层间耦合 [11,12,32], 或通过长程跃迁和不同几何形状 [31] 等手段加以调控。此外, 菱形二维高阶拓扑绝缘体 (包括具有和不具有多空腔结构的系统) 的双端口输运特性呈现出角态相关的共振隧穿现象 [26,27]。

光电导能够提供难以通过直流输运测量的电荷动力学相关的重要信息 [38]。这些信息有助于确定体系的本征能带结构 [39-43], 从而促进有针对性的设计与优化光电器件。近年来, 光电导为研究拓扑材料中的边界态提供了重要的信息 [44-49]。尤其是理论预言通过圆偏光伏效应可以测量三维高阶拓扑绝缘体中棱态的态间贝里曲率 [44]。然而, 目前尚不清楚在二维高阶拓扑绝缘体中是否存在与角态和边界态相关的光电导特征响应。因此, 我们会自然地提出一个问题: 在这些彼此孤立的角态、边界态与体态之间能否发生光学跃迁。

目前, 已有多种候选结构被提出用于实现二维高阶拓扑绝缘体, 例如 Kekulé 晶格 [25,50-52]、呼吸 Kagome 晶格 [23]、准晶格 [53] 以及非厄米系统 [54,55]。在实验方面, 这些晶格结构已在多种人工系统中得

到证实 [7,56], 包括声子晶体的弹性波 [57] 和声波 [58-60] 系统、光子晶体 [61,62] 以及电路系统 [63]。Kekulé 晶格是二维高阶拓扑绝缘体的典型模型之一。目前, 已有多种实验合成的材料 (如石墨炔和石墨烯嵌锂) 在晶格结构上与 Kekulé 晶格等价 [25,50,64-67]。

基于此, 本文以 Kekulé 晶格为例展开研究, 揭示了二维高阶拓扑绝缘体中拓扑角态与边界态的光电导特征。数值计算了不同边长的六边形纳米盘 (如图1所示) 的能带结构、波函数分布以及光电导。计算结果表明, 在一定的参数比与尺寸条件下, 六边形 Kekulé 纳米盘处于二维高阶拓扑相, 与文献 [25,36] 一致。与拓扑平庸绝缘体相比, 二维高阶拓扑相在体能隙内存在角态与边界态, 其光电导在低能区域呈现额外的共振峰, 而拓扑平庸绝缘体在低能区的光电导则为零。进一步分析发现, 二维高阶拓扑绝缘体独特能带结构及其对应的光学选择定则共同导致了这些额外的光电导共振峰。只要化学势在体能隙内, 拓扑非平庸相与平庸相的光电导表现出显著差异, 这些额外的共振峰可作为二维高阶拓扑绝缘体中拓扑角态与边界态的有效判据。

本文的第 2 节将引入 Kekulé 晶格的紧束缚哈密顿量和计算光电导的 Kubo 公式。第 3 节将展示能带结构、波函数分布以及光电导的数值计算结果, 并分析其主要特征及其对应的光学选择定则。最后, 对本文进行总结并对结果做进一步的分析讨论。

2 模型与公式

考虑最近邻 (NN) 近似, 单层 Kekulé 晶格的紧束缚哈密顿量为 [36,68]:

$$H = -t_1 \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j - t_2 \sum_{\langle i',j' \rangle} c_{i'}^\dagger c_{j'}, \quad (1)$$

其中 t_1 和 t_2 分别描述了如图1所示的橙色和蓝色键的 NN 跃迁能。数值求解薛定谔方程 $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ 可以得到能带结构和本征波函数。

然后, 利用如下所示的 Kubo 公式 [69] 计算光电导

$$\sigma_{xx}(\omega) = -\frac{i\hbar}{S} \sum_{lm} \frac{[f_F(E_l) - f_F(E_m)] \langle \Psi_l | j_x | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | j_x | \Psi_l \rangle}{(E_l - E_m)(\hbar\omega + E_l - E_m + i\Gamma)}, \quad (2)$$

其中, S 表示面积, $f_F(E_l) = 1/[e^{(E_l - \mu)/k_B T} + 1]$ 为费米-狄拉克分布函数, T 为温度, μ 为化学势, 控制费米能级位置, 从而决定不同本征态之间跃迁的占据条件; Γ 表示杂质散射率, 表征无序导致的能级展宽

与有限寿命效应（为简化起见，假设 Γ 为常数）；电流算符为 $j_x = \frac{ie}{\hbar}[H, x]$ 。我们将在下一节中展示数值结果并进行详细分析，其中重点讨论拓扑角态与边界态对光电导的贡献。

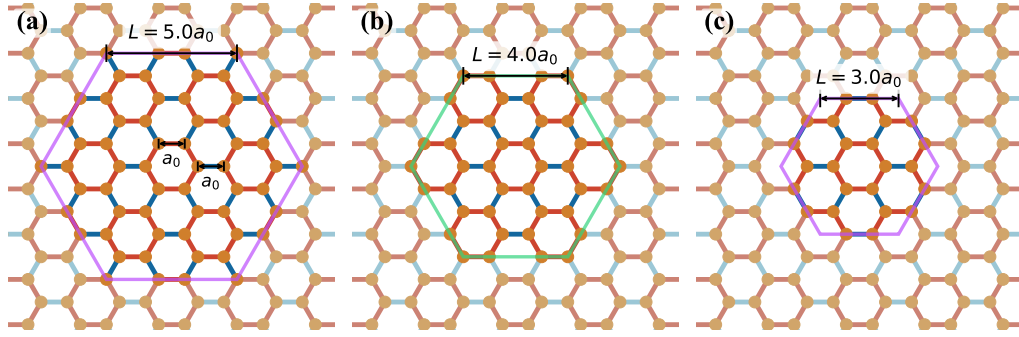


图 1 O-Kekulé 晶格的示意图，其中橙色点表示格点。红色和蓝色实线分别对应跃迁能为 t_1 和 t_2 的键。在图中它们的几何长度相同 (a_0)，且不影响计算结果。紫色六边形（图 (a) 和 (c)）和绿色六边形（图 (b)）表示不同尺寸的纳米盘。需要注意的是，仅当纳米盘按照图 (b) 中绿色六边形所标示的方式选取时，才会出现角态，此时对应的边长满足 $L = 4a_0 + 3na_0$

Fig. 1. The schematic of the O-Kekulé lattice, where orange dots represent lattices. The red and blue solid lines correspond to bonds with t_1 and t_2 energies, respectively; their geometric lengths are taken to be identical (a_0) for schematic illustration and do not affect the calculations. The purple (panels (a) and (c)) and green (panel (b)) hexagons represent different types of nanodisks with different sizes. Note that corner states appear only if the nanodisk is cut according to the pattern marked by the green hexagon in

panel (b), corresponding to $L = 4a_0 + 3na_0$.

3 数值结果

本节研究并分析了能带结构、角态和边界态波函数的空间分布和光电导的结果。Kekulé 晶格的示意图如图1所示，其中红色与蓝色实线分别表示不同的键强，对应最近邻跃迁能 t_1 与 t_2 。已有研究表明，当 $|t_2/t_1| > 1$ 时，有限尺寸的六边形 Kekulé 纳米盘可实现二维高阶拓扑相 [25,36,50,64–66]，在后续计算中，我们选取 $t_2/t_1 = 2$ 并使用 $t_1 = \tilde{t}\text{eV}$ 作为能量单位。关于 t_2/t_1 取值合理性的分析详见附录 A。

在有限尺寸体系中，角态的出现不仅取决于跃迁参数比值，还与边界终止方式密切相关 [25,36]。图1中紫色与绿色六边形表示不同尺寸对应的纳米盘边界类型。设每条键长为 a_0 ，则拓扑非平庸六边形 Kekulé 纳米盘的几何条件可总结为 $L = 4a_0 + 3na_0$ (其中 $n = 0, 1, 2, \dots$)，如图1(b) 中绿色六边形所示。相反，

图1(a) 和 (c) 中紫色边界对应的纳米盘为拓扑平庸相。这一几何条件为后续区分拓扑非平庸与平庸结构提供了一个简洁的判据。

3.1 能带结构与波函数

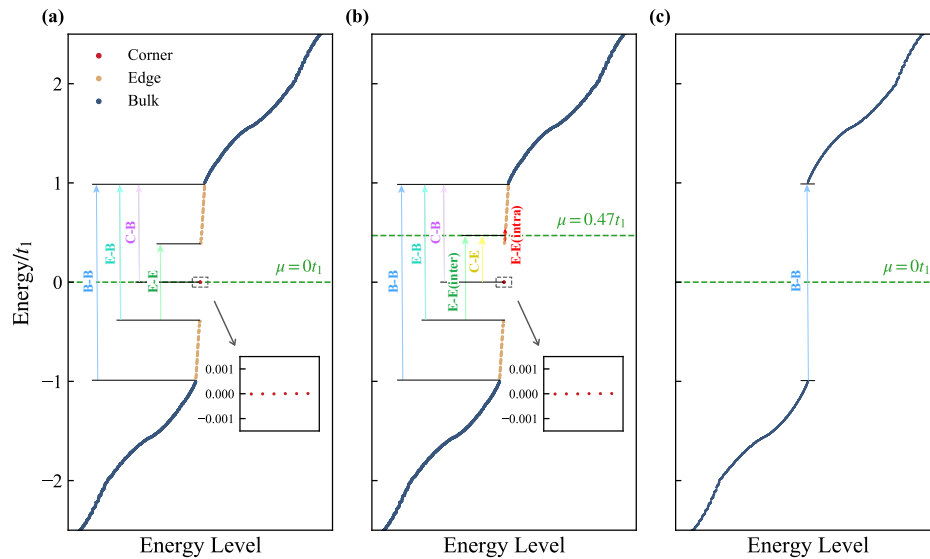


图 2 六边形 Kekulé 纳米盘的能带结构和化学势 (a) $L = 49a_0$, 化学势 $\mu = 0t_1$; (b) $L = 49a_0$, 化学势 $\mu = 0.47t_1$; (c) $L = 48a_0$, 化学势 $\mu = 0t_1$ 。红色、黄色和蓝色点分别表示角态、边界态和体态。角态与体态 (C-B)、角态与边界态 (C-E)、边界态与边界态 (E-E)、边界态与体态 (E-B) 以及体态与体态 (B-B) 之间的跃迁, 已使用不同颜色的箭头标明

Fig. 2. The band structures of hexagonal-shaped Kekulé nanodisks with (a) $L = 49a_0$, $\mu = 0t_1$; (b) $L = 49a_0$, $\mu = 0.47t_1$; (c) $L = 48a_0$, $\mu = 0t_1$, respectively. The red, yellow, and blue dots represent corner, edge, and bulk states, respectively. The optical transitions between corner and bulk states (C-B), corner and edge states (C-E), edge and edge states (E-E), edge and bulk states (E-B), as well as bulk and bulk states (B-B) are indicated by arrows of different colors.

为研究拓扑性质对能带与光电导的影响, 有必要构造两个尽可能相似、仅在拓扑性质上不同的体系作为对照。为此, 选取边长分别为 $L = 49a_0$ 和 $L = 48a_0$ 的六边形 Kekulé 纳米盘进行比较。两者尺寸接近, 整体能级分布与体能隙宽度差异较小, 但前者满足上述几何条件, 而后者不满足, 从而分别对应拓扑非平庸与平庸结构。边长为 $L = 49a_0$ 和 $L = 48a_0$ 的六边形 Kekulé 纳米盘的能带结构分别如图2(a),(c) 所示。当纳米盘边长 $L = 49a_0$ 时, 即满足关系 $L = 4a_0 + 3na_0$ (其中 $n = 15$), 如图2(a) 中的红点所示, 体能

隙中存在零能态。图2(a)中的插图即为零能态六重简并态的放大图。需要注意的是，有限尺寸效应可能会导致简并态发生劈裂，本文选择的纳米盘的尺寸 L 足够大，从而保证了这些零能态的简并性。作为对比，如图2(c)所示，当纳米盘边长 $L = 48a_0$ 时为拓扑平庸绝缘体，即其体态存在能隙，但能隙间没有零能态。

图2(a)中所示的零能态和边界态的波函数空间分布 $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ 如图3所示。图3(a)中，零能态的波函数在六个角处具有良好的局域性，因此可以确认为角态。对于能量区间 $(0.0, 1.0)t_1$ 内的态（如图2(a)中的黄色点所示），其波函数空间分布沿纳米盘的边缘，表明其为边界态。结合上述特征，对于在 $t_2/t_1 = 2$ 且边长满足 $L = 4a_0 + 3na_0$ 的六边形 Kekulé 纳米盘，其能带中的本征态可依据其空间分布清晰划分出角态、边界态与体态。后文将基于上述讨论，分别计算角态、边界态与体态之间的跃迁对光电导的具体贡献。

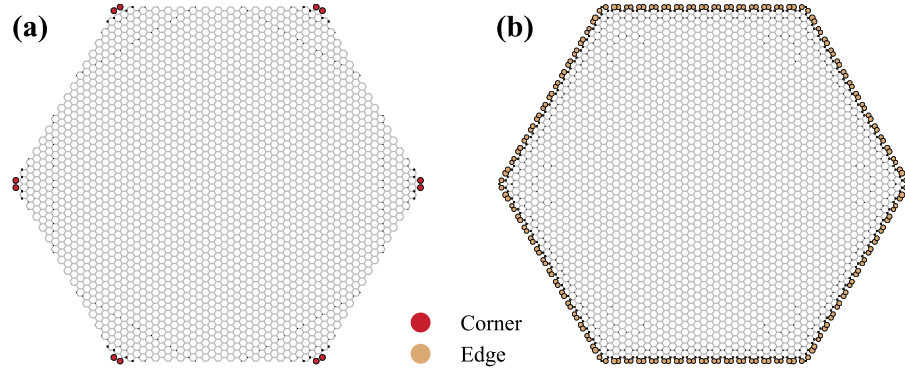


图 3 波函数空间分布 $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ (a) 对应图2(a)中红点的角态，即零能态，其波函数局域于六角处；(b) 对应图2(b)中黄色点的边界态，其波函数分布在纳米盘边缘。在两个子图中，点的大小表示波函数在各个格点处的幅值大小

Fig. 3. The wave-function spatial distributions $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ for (a) corner states corresponding to red dots in Fig. 2(a), which are the zero-energy states and well localized at corners, and (b) edge states corresponding to yellow dots in Fig. 2(b), which are distributed at the edge. In both panels, the size of the dots represents the magnitude of the wave function at each site.

3.2 光电导

在本小节中，通过探究分析光电导的计算结果，研究发现光电导由角态、边界态和体态的能带结构以及光学选择定则共同决定，尤其是拓扑角态和边界态在其中起着关键作用。接下来，我们将对数值结果进行系统阐述和分析。

当 $\mu = 0t_1$ 时，光电导实部 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 随频率的变化如图 4 所示。如图4(a)中红色点线所示，当

$\hbar\omega < 2.006t_1$ 时, 拓扑平庸绝缘体 (即 $L = 48a_0$) 的光电导为零。这是因为在该情况下, 如图2(c) 所示, 体能隙内不存在拓扑角态或边界态, 因此在这一频率范围内光学跃迁被禁止。当频率增加至 $\hbar\omega > 2.006t_1$ 时, 体态与体态间的跃迁导致光电导开始呈现出一系列共振峰, 且这些峰的幅度逐渐增大。二维高阶拓扑绝缘体 ($L = 49a_0$) 的光电导如图4(a) 中品红色虚线所示, 光学共振峰起始频率移至体能隙内 $\hbar\omega = 0.396t_1$ 。随着频率 ω 的增加, 光电导呈现出一系列共振峰, 峰的幅度逐渐增大且整体高于 $L = 48a_0$ 的结果。

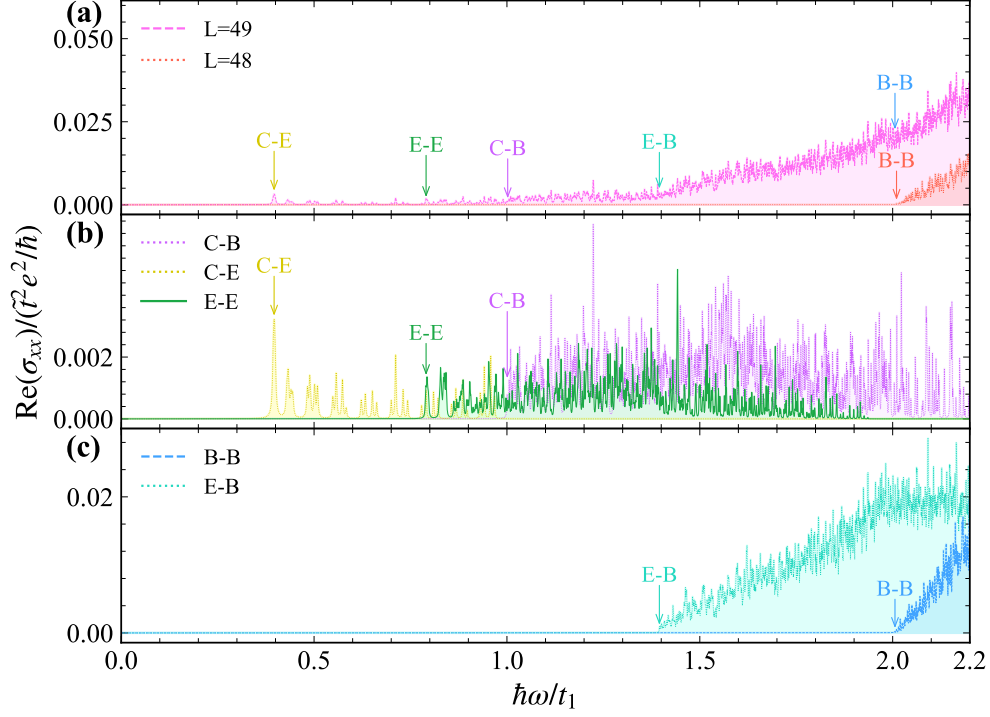


图4 $\mu = 0t_1$ 时光电导实部 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 随频率的变化。(a) $L = 48a_0$ 和 $L = 49a_0$ 时的 $\text{Re}(\sigma_{xx})$; (b) $L = 49a_0$ 时, 分别考虑 C-B、C-E、E-E 之间的跃迁时的 $\text{Re}(\sigma_{xx})$; (c) $L = 49a_0$ 时, 分别考虑 B-B、E-B 之间的跃迁时的 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 。不同跃迁时共振峰的起始位置用不同颜色的箭头标注, 其中箭头颜色和图2(a) 中标注跃迁的箭头颜色分别对应。参数取值: $k_B T = 0.01t_1$ 和 $\Gamma = 0.001t_1$

Fig. 4. Real part of the optical conductivity, $\text{Re}(\sigma_{xx})$, as a function of frequency at $\mu = 0t_1$. (a) $\text{Re}(\sigma_{xx})$ for $L = 48a_0$ and $L = 49a_0$. (b) For $L = 49a_0$, contributions from C-B, C-E, and E-E transitions. (c) For $L = 49a_0$, contributions from B-B and E-B transitions. The resonant peaks of C-B, C-E, E-E, B-B and E-B transitions are marked by arrows at the onset frequency with different colors. These color codes are the same as those of the arrows in Fig. 2(a). The other parameters are $k_B T = 0.01t_1$ and $\Gamma = 0.001t_1$.

为阐明二维高阶拓扑绝缘体体能隙内共振峰的物理起源, 对光电导进行了详细计算, 结果如图4(b)、

(c) 所示 (相关描述分析见附录 B)。我们发现边长 $L = 49a_0$ 的纳米盘的 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 中存在五种不同类型的跃迁：角态与边界态 (C-E)、角态与体态 (C-B)、边界态与边界态 (E-E)、边界态与体态 (E-B)、体态与体态 (B-B)。分析发现，这些不同种类的跃迁共振峰的起始与截止频率与图2(a) 所示的能带结构中各类能隙宽度 (跃迁阈值) 之间存在一一对应关系 (见表1)，同时图4中不同跃迁时共振峰的起始位置已使用不同颜色的箭头标注，其中箭头颜色和图2(a) 中标注跃迁的箭头颜色分别对应。

表 1 $\mu = 0t_1$ 时，光学跃迁类型、跃迁阈值 (即对应能隙宽度) 以及光电导起始频率的总结

Table 1. Summary of optical transitions, transition thresholds (i.e., corresponding band gaps), and onset frequencies of the optical conductivity for different transitions at $\mu = 0t_1$.

跃迁类型	跃迁阈值	起始频率 ($\hbar\omega$)
C-E	$0.394 t_1$	$0.396 t_1$
E-E	$0.789 t_1$	$0.791 t_1$
C-B	$1.003 t_1$	$1.001 t_1$
E-B	$1.398 t_1$	$1.395 t_1$
B-B	$2.008 t_1$	$2.006 t_1$

进一步地，这一对应关系揭示了二维高阶拓扑绝缘体中额外光学共振峰的来源。即由于在该体系中，除体态外，还在体能隙内额外存在拓扑角态与边界态。正是这两类额外的局域态，使得体系允许 C-E、C-B、E-E 以及 E-B 的跃迁过程。当光频率与这些态之间的能量差相匹配时，只要公式 (2) 中定义的电流算符矩阵元不为零，体能隙内会产生新的共振峰。因此，二维高阶拓扑绝缘体光电导的低频共振峰源于体能隙中的拓扑角态和边界态，这些低频共振峰可以作为识别二维高阶拓扑绝缘体 ($L = 49a_0$ 的纳米盘) 和拓扑平庸绝缘体 ($L = 48a_0$ 的纳米盘) 重要特征。这是本文的关键结果之一。

作为实验调控的关键参数，化学势 μ 的取值直接决定了体系中可参与跃迁的占据态分布。根据 Kubo 公式 (式2)，光电导响应通过费米分布函数 $f_F(E)$ 依赖于化学势 μ ，后者进而调控跃迁权重。因此，化学势 μ 的取值对所得结论的适用范围具有重要影响。图5展示了不同化学势 μ 下 $L = 49a_0$ 与 $L = 48a_0$ 纳米盘光电导实部 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 的频率依赖关系，下文将结合具体的跃迁过程对其物理机制进行详细讨论。

当 μ 位于角态与边界态之间的能隙内 ($|\mu| < 0.394t_1$) 时，如图5中红色点线与橙色划线所示，拓扑平庸绝缘体 ($L = 48a_0$) 和二维高阶拓扑绝缘体 ($L = 49a_0$) 的 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 的共振峰位置与 $\mu = 0t_1$ 时基本一致。由于此时 μ 仍位于角态与边界态之间的能隙中，原有的跃迁通道未受到影响，跃迁对应的最小与最大能量差保持不变，从而光电导共振峰的起始频率与终止频率均未发生改变 (详见附录 B 中图9)。因此，无

论是二维高阶拓扑绝缘体还是拓扑平庸绝缘体，其光电导在低频区的结构特征未发生改变，前文关于两者差异的物理结论在该一化学势 μ 的变化区间 ($|\mu| < 0.394t_1$) 内依然成立。

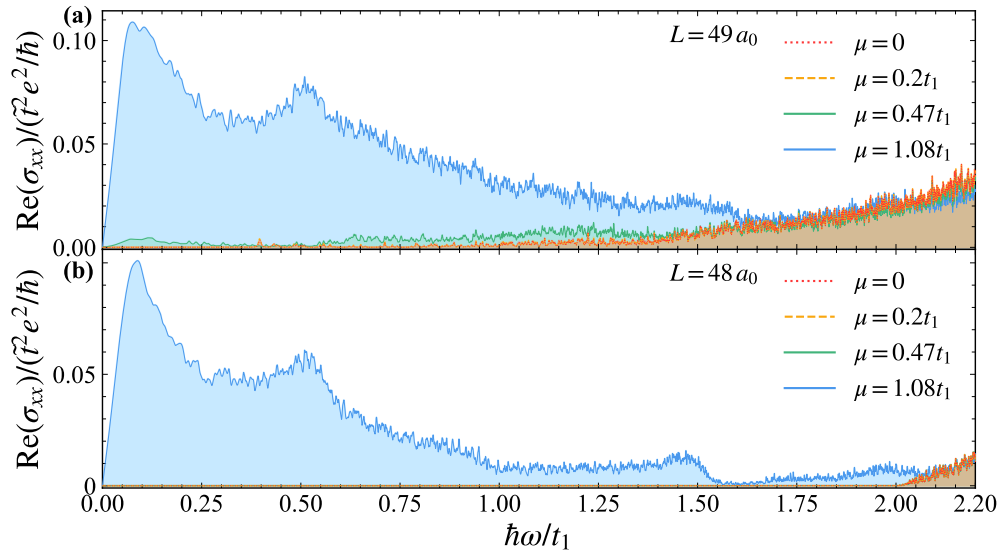


图5 $\mu = 0t_1, 0.2t_1, 0.47t_1$ 和 $1.08t_1$ 时光电导实部 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 随频率的变化关系 (a) $L = 49a_0$; (b) $L = 48a_0$ 。参数取值: $\Gamma = 0.001t_1$ 和 $k_B T = 0.01t_1$

Fig. 5. Real part of the optical conductivity, $\text{Re}(\sigma_{xx})$, as a function of frequency at $\mu = 0t_1, 0.2t_1, 0.47t_1$, and $1.08t_1$ for (a) $L = 49a_0$ and (b) $L = 48a_0$. The other parameters are $\Gamma = 0.001t_1$ and $k_B T = 0.01t_1$.

随着化学势进一步增加，当其穿过边界态但仍未进入体态时 ($0.394t_1 < |\mu| < 1.003t_1$)，虽然拓扑平庸绝缘体 ($L = 48a_0$) 对化学势在这一区间内的变化仍然不敏感，但二维高阶拓扑绝缘体 ($L = 49a_0$) $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 中由角态与边界态贡献的特征信号发生显著变化，如图6(a) 所示。此时 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 在低频区域自 $\hbar\omega \approx 0t_1$ 开始出现响应。如图2(b) 所示，当 μ 穿过边界态能区后，边界态部分导带被占据，从而发生边界态导带内的低能跃迁。由于边界态导带内能级分布准连续，因此如图6(b) 所示 E-E (带内) 跃迁光电导响应从 $\hbar\omega \approx 0t_1$ 开始出现。随着频率增加，当达到 E-E 带内跃迁所允许的最大能量差后，E-E 带内跃迁通道关闭。继续提高频率后，E-E 带间跃迁才重新满足跃迁能量差条件。由此如图6(b) 所示在 $0.609t_1 < \hbar\omega < 0.865t_1$ 区间内形成明显的无响应窗口。与此同时，由于 μ 的抬升改变了能级的占据分布，部分跃迁通道受到泡利阻塞。如图6(b)、(c) 所示，C-E 和 E-E (带间) 跃迁的起始频率均向高频方向移动，E-B 跃迁的起始频率向低频方向移动。这佐证了 μ 的变化重构了跃迁的统计权重与允许区间。由于此时 μ 仍位于体能隙内，体态未发生部分占据，因此 C-B 和 B-B 跃迁通道保持不变，其起始频率基本稳定。为便于比较，不同跃迁通道的能量区间随 μ 的变化关系总结于表 2。可以看出，图 6(b)、(c) 中各响应峰

的起始位置与相应跃迁阈值经 μ 修正后的估算结果呈现明显的一一对应关系。需要指出的是，由于有限展宽效应，该对应关系为近似意义下的匹配，而非严格等量关系。上述分析也解释了在 μ 仍处于体能隙内时拓扑平庸绝缘体 ($L = 48a_0$) 对 μ 变化不敏感的原因。由于拓扑平庸绝缘体 ($L = 48a_0$) 的光电导来源于 B-B 跃迁，而 μ 未进入体态时不会改变体态的占据结构，因此 B-B 跃迁的起始频率及整体光电导随频率变化的特征均保持稳定。根据上述讨论，如图6(a) 所示，在 $0.394t_1 < |\mu| < 1.003t_1$ 区间内，尽管二维高阶拓扑绝缘体 ($L = 49a_0$) 的跃迁通道因 μ 穿过边界态而发生重构，其低频区域仍存在由拓扑角态与边界态共同贡献的额外光电导响应；而拓扑平庸绝缘体 ($L = 48a_0$) 由于仅存在 B-B 跃迁，低频区域仍无响应峰。在该 μ 区间内，光电导仍可作为区分两种拓扑相的有效判据。

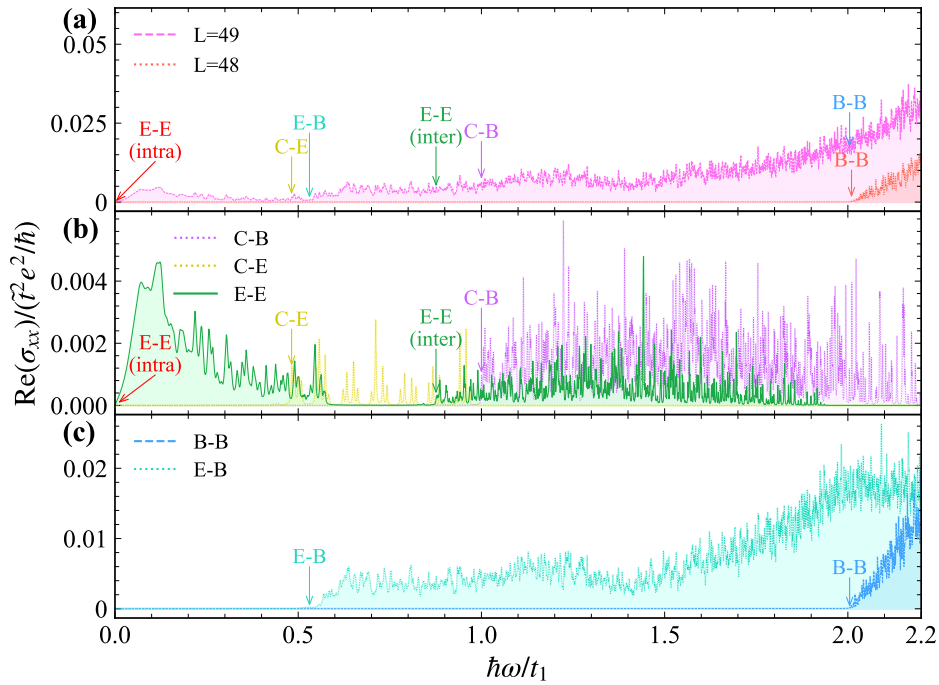


图 6 $\mu = 0.47t_1$ 时光电导实部 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 随频率的变化。(a) $L = 48a_0$ 和 $L = 49a_0$ 时的 $\text{Re}(\sigma_{xx})$; (b) $L = 49a_0$ 时，分别考虑 C-B、C-E、E-E 之间的跃迁时的 $\text{Re}(\sigma_{xx})$; (c) $L = 49a_0$ 时，分别考虑 B-B、E-B 之间的跃迁时的 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 。参数取值： $\mu = 0.47t_1$ ， $k_B T = 0.01t_1$ 和 $\Gamma = 0.001t_1$

Fig. 6. Real part of the optical conductivity, $\text{Re}(\sigma_{xx})$, as a function of frequency at $\mu = 0.47t_1$. (a)

$\text{Re}(\sigma_{xx})$ for $L = 48a_0$ and $L = 49a_0$. (b) For $L = 49a_0$, contributions from C-B, C-E, and E-E transitions. (c) For $L = 49a_0$, contributions from B-B and E-B transitions. The other parameters are

$$k_B T = 0.01t_1 \text{ and } \Gamma = 0.001t_1.$$

当化学势 μ 进一步增大并进入体态，即满足 $|\mu| > 1.003t_1$ 时，如图5中蓝色实线所示，二维高阶拓扑

表 2 $\mu = 0.47t_1$ 时不同跃迁类型的近似跃迁阈值

Table 2. Approximate transition thresholds for different transitions at $\mu = 0.47t_1$.

跃迁类型	近似跃迁阈值
C-E	$\approx \mu = 0.47t_1$
E-E (带内)	$\approx 0t_1$
E-E (带间)	$\frac{0.789t_1}{2} + \mu = 0.865t_1$
C-B	$1.003t_1$
E-B	$\frac{2.008t_1}{2} - \mu = 0.534t_1$
B-B	$2.008t_1$

绝缘体 ($L = 49a_0$) 与拓扑平庸绝缘体 ($L = 48a_0$) 在低频区域原有的特征差异基本消失。当 μ 进入体态后, 体态部分能级被占据, 从而开启了 B-B 导带内的跃迁通道。由于体态导带内存在准连续能级分布, 允许的能量差可趋近于零, 因此光电导响应从 $\hbar\omega \approx 0t_1$ 处开始出现。该低频响应同时出现在 $L = 49a_0$ 与 $L = 48a_0$ 两种体系中, 使得原本由角态或边界态主导的低频特征被 B-B 带内跃迁所覆盖。另一方面, 由于 μ 已高于边界态能级上限, 边界态基本被完全占据, C-E 与 E-E 跃迁通道因泡利阻塞而被抑制 (详见附录 B 图10)。因此, 当 μ 进入体态后 (即 $|\mu| > 1.003t_1$), B-B 带内跃迁成为主导机制, 二维高阶拓扑绝缘体与拓扑平庸绝缘体在低频区域的光电导结构不再具有显著差异。在该化学势 μ 区间内, 基于低频光电导特征区分两类体系的判据不再适用。

综上所述, 只需化学势 μ 位于体能隙内 ($|\mu| < 1.003t_1$), 二维高阶拓扑绝缘体 ($L = 49a_0$) 与拓扑平庸绝缘体 ($L = 48a_0$) 在低频区域的光电导实部 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 就可以表现出清晰的结构差异, 不同 μ 值下光电导的特征变化已总结于图5。因此基于低频光电导特征定性区分两类拓扑相的结论在较宽的化学势 μ 区间内都成立, 这为在实验上通过观测光电导来确定拓扑角态和边界态的特征信号的可行性提供了理论基础。

最后, 考虑到杂质散射率 Γ 在实际样品中对应电子有限寿命及能级展宽, 可表征无序强度, 我们进一步考察不同 Γ 取值对拓扑角态和边界态的光电导特征的影响, 以分析结果对无序的鲁棒性。边长为 $L = 49a_0$ 与 $L = 48a_0$ 的纳米盘在 $\Gamma = 0.0005t_1, 0.001t_1, 0.005t_1, 0.03t_1$ 取值下的光电导实部 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 如图 7所示。随着 Γ 的增大, 光电导在定性结构上均基本保持不变, 仅表现为共振峰幅度被抑制并逐渐变得平滑。在 $\Gamma = 0.005t_1$ 时, 共振峰仍然清晰可辨。参考实验测量的石墨烯中的最近邻跃迁能 $t_1 = 2.6\text{eV}$ [67,70] 时, 对应于杂质散射率 $\Gamma = 13\text{meV}$ 。因此, 光电导中拓扑角态和边界态的特征对无序具有良好的鲁棒性。

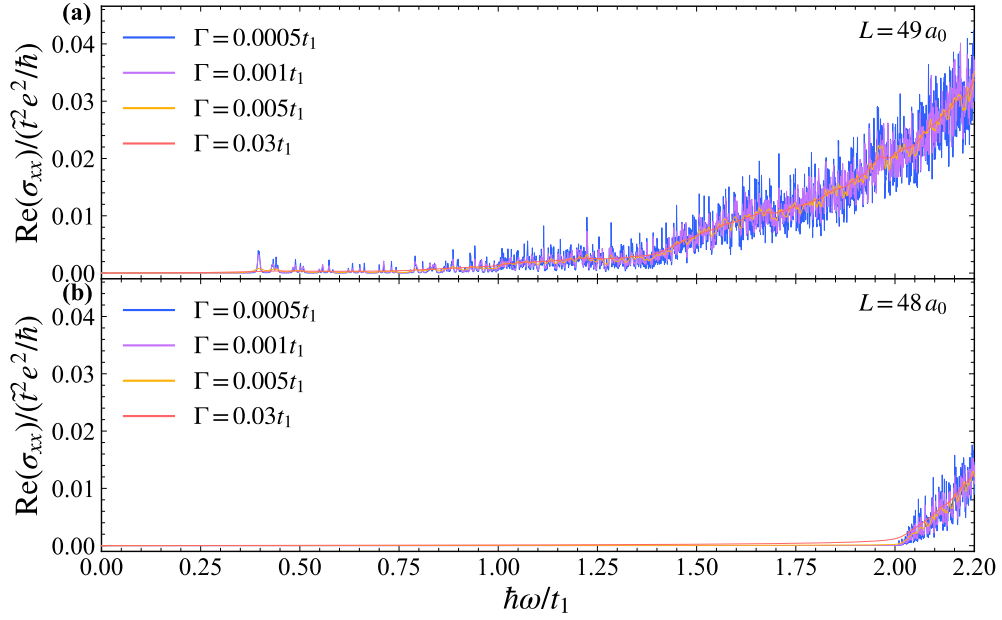


图 7 $\Gamma = 0.0005t_1$ 、 $0.001t_1$ 、 $0.005t_1$ 和 $0.03t_1$ 时光电导实部 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 随频率的变化关系。(a) $L = 49a_0$;
(b) $L = 48a_0$ 。参数取值: $\mu = 0t_1$, $k_B T = 0.01t_1$

Fig. 7. The real part of optical conductivity $\text{Re}(\sigma_{xx})$ as a function of frequency for $\Gamma = 0.0005t_1$, $0.001t_1$, $0.005t_1$, and $0.03t_1$, respectively. (a) $L = 49a_0$; (b) $L = 48a_0$. The other parameters are $\mu = 0t_1$ and $k_B T = 0.01t_1$.

4 总结与讨论

综上所述，基于紧束缚哈密顿量，本文探究了单层六边形 Kekulé 晶格纳米盘的能带结构、波函数和光电导。如图1所示，六边形纳米盘存在三种不同的构型。能带结构（见图2）和波函数（见图3）的结果表明，只有当边长满足 $L = 4a_0 + 3na_0$ （其中 $n = 0, 1, 2, \dots$ ）时（如图1中绿色边框所示），纳米盘才表现出拓扑角态和边界态。因此这类纳米盘属于二维高阶拓扑绝缘体，并展现出一系列独特的性质。而在其他情况下，这些纳米盘为拓扑平庸绝缘体。

随后，利用 Kubo 公式计算 $L = 48a_0$ 和 $49a_0$ 纳米盘的光电导如图4所示。对于 $L = 49a_0$ 的二维高阶拓扑绝缘体，由于拓扑角态和边界态的存在，在体能隙内 ($\hbar\omega < 2t_1$) 出现了额外的共振峰；而对于 $L = 48a_0$ 的拓扑平庸绝缘体，其光电导在该范围内为零。进一步分析表明，在拓扑平庸绝缘体中仅存在 B-B 跃迁；而在二维高阶拓扑绝缘体中，如图2和图4所示，还存在额外的 C-E、C-B、E-E 和 E-B 跃迁。

这些跃迁贡献了体能隙内的额外共振峰，并已在表1中对其对应关系进行了总结。体能隙内这些额外的光电导共振峰是二维高阶拓扑绝缘体的显著特征，使得通过光电导测量并区分具有拓扑角态和边界态的二维高阶拓扑绝缘体与拓扑平庸绝缘体成为可能。此外，如图5所示，只要化学势位于体态能隙内，这些光电导的特征即可被观测到，并且上述结论对无序具有良好的鲁棒性。

最后，将无量纲参数转换为实际能量尺度，为实验观测提供理论基础。参考实验测量的石墨烯中的最近邻跃迁能 $t_1 \approx 2.6\text{eV}$ [67,70]，C-E 光学跃迁的特征起始频率约为 $0.396t_1 \sim 2.4 \times 10^{14}\text{Hz}$ ，位于近红外波段。体系的边界态能隙宽度约为 $0.789t_1 \approx 2.05\text{eV}$ ，体能隙宽度约为 $2.008t_1 \approx 5.22\text{eV}$ 。已有的菱形二维高阶拓扑绝缘体（包括具有和不具有多空腔结构的系统）的双端口输运特性研究中呈现出角态相关的共振隧穿现象的能量最大在 10^{-2} 最近邻跃迁能的量级 [26,27]。作为对比，化学势 μ 只需控制在体能隙范围内，二维高阶拓扑绝缘体角态和边界态的光电导特征即可被观测到，这个化学势调节范围是较为宽松的，实验上更易实现。在杂质散射率 $\Gamma = 0.005t_1 \approx 13\text{meV}$ 时，共振峰仍保持可分辨结构。计算中 $k_B T$ 取值为 $0.01t_1 \approx 26\text{meV}$ ，对应 $T \approx 302\text{K}$ ，说明上述结果在室温下成立。希望本文的研究结果能够提供一种通过光学手段探测二维高阶拓扑绝缘体中角态和边界态动力学性质的方法，并为未来关于高阶拓扑绝缘体的研究提供有价值的参考。

致谢

我们感谢薛阳老师在讨论中提供的有益帮助。感谢国家自然科学基金（NSFC，批准号：12574191、12004111）、南京大学固体微结构物理国家重点实验室开放课题（批准号：M37018）以及大学生创新创业训练计划项目（批准号：S202410251185）的资助支持。

附录 A t_2/t_1 取值对能谱的影响

对于 $L = 49a_0$ （即 $n = 15$ ），我们进一步计算了零能附近的能谱随 t_2/t_1 变化的关系。如图8所示，在 $t_2/t_1 > 1$ 且比例尚未显著增大时，能谱中出现角态。但此时角态并未保持严格简并，这种非简并来源于有限尺寸效应。随着 t_2/t_1 的进一步增大，角态逐渐趋于简并，并且能谱中出现明显的能隙，表明系统进入了一个稳定的高阶拓扑相。 $t_2/t_1 = 2$ 在图8中的位置已使用竖直绿色实线标明。为确保体系处于稳定的拓扑非平庸区，同时使得角态简并，本文选取 $t_2/t_1 = 2$ 作为代表性参数。

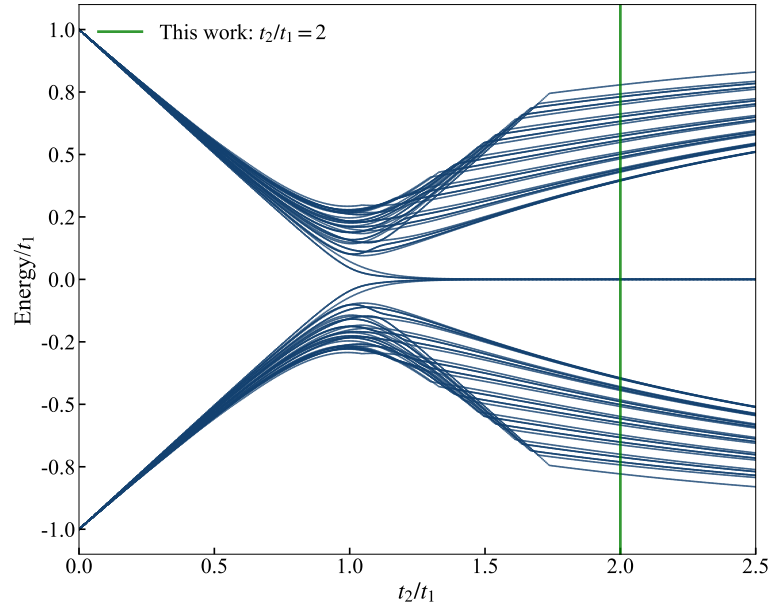


图 8 $L = 49a_0$ 的 Kekulé 六边形纳米盘中，零能附近能谱随 t_2/t_1 的变化关系。图中绘制了最接近零能的 80 个本征值。绿色竖直实线标示 $t_2/t_1 = 2$ 的位置，即为本文选取的代表性参数

Fig. 8. Energy spectrum near zero energy as a function of t_2/t_1 for a Kekulé hexagonal nanodisk with $L = 49a_0$. The 80 eigenvalues closest to zero energy are plotted. The vertical green solid line marks $t_2/t_1 = 2$, which is the representative parameter adopted in this work.

附录 B 光电导的一些补充

对 $\mu = 0t_1$ 时，边长 $L = 49a_0$ 的纳米盘在体能隙内的共振峰进行详细分析，数值结果已展示于图4(b)和 (c) 中。这些共振峰来源于其本征能带结构和光学选择定则。如图2所示，研究发现 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 中存在五种不同类型的跃迁：角态与边界态 (C-E)、角态与体态 (C-B)、边界态与边界态 (E-E)、边界态与体态 (E-B)、体态与体态 (B-B)。其中，C-E 跃迁在图2(a) 中以黄色竖直箭头标示，其对应的光电导如图4(b) 中的黄色虚线所示。 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 的第一个响应峰（如图4(a) 中品红色虚线所示）正是由 C-E 跃迁引起的，其位置对应于图2(a) 中角态与边界态之间的能隙。由 C-E 跃迁产生的光电导在图4(b) 中于 $\hbar\omega = 0.968t_1$ 附近消失，该频率对应于图2(a) 中边界态的上边界。在 $0.791t_1 < \hbar\omega < 1.936t_1$ 范围内，E-E 跃迁如图2(a) 中绿色竖直箭头所示，其对应的光电导由图4(b) 中的绿色实线给出。随着频率进一步升高，出现 C-B 跃迁，其在图2(a) 中以紫色竖直箭头标示，对应的光电导如图4(b) 中的紫色虚线所示。E-B 跃迁从 $\hbar\omega = 1.395t_1$ 开始出现，如图2(a) 中青色竖直箭头所示，其对应的光电导如图4(c) 中的青色虚线所示。最后，B-B 跃迁在

图2(a) 中以蓝色垂直箭头标示，其对应的光电导如图4(c) 中的蓝色虚线所示，其起始能量为 $\hbar\omega = 2.006t_1$ 。包含上述所有跃迁贡献的总响应 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 如图4(a) 中品红色虚线所示，各类跃迁的起始频率也分别以对应颜色箭头标出。综上，主要的光学跃迁及其对应的能隙和光电导的起始频率汇总于表1中。由表中可得各起始频率与相应的能隙之间具有良好的一致性。由于角态、边界态与体态之间的差异（如图2(a) 所示），会出现大量的 E-B 和 B-B 跃迁。如图4(c) 所示，这些共振峰的幅度强于由 C-E、C-B 和 E-E 跃迁引起的共振峰（见图4(b)）。因此，在高频区域，主要由于 E-B 跃迁的贡献，二维高阶拓扑绝缘体的 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 的幅度超过了拓扑平庸绝缘体的 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 。

$\mu = 0.2t_1$ 时光电导实部 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 随频率的变化如图9所示。

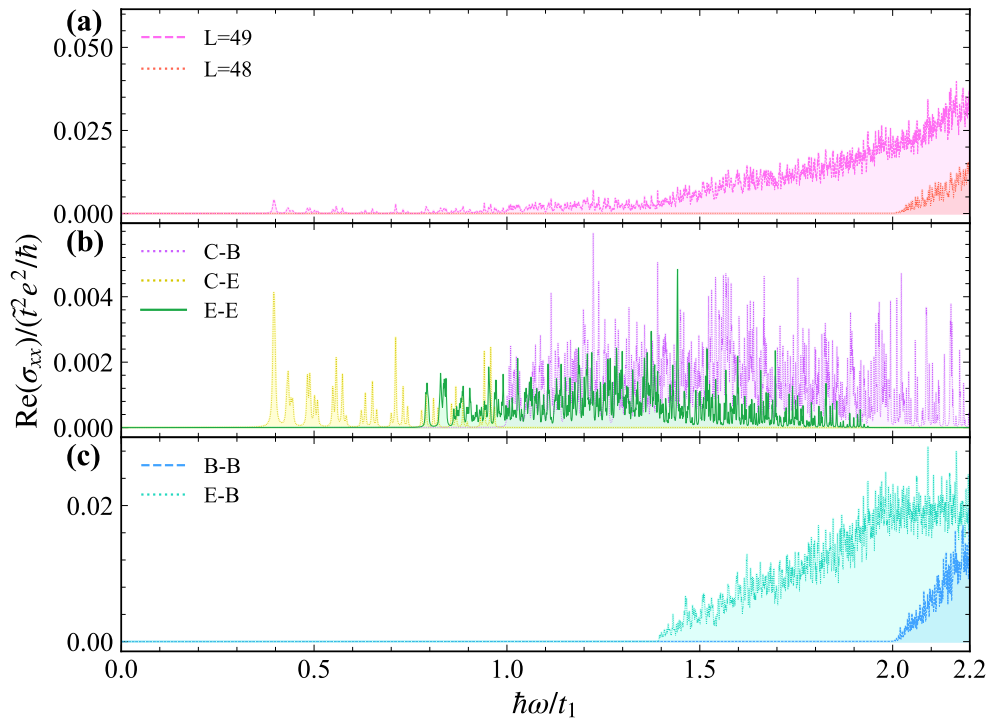


图 9 $\mu = 0.2t_1$ 时光电导实部 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 随频率的变化。(a) $L = 48a_0$ 和 $L = 49a_0$ 时的 $\text{Re}(\sigma_{xx})$; (b) $L = 49a_0$ 时，分别考虑 C-B、C-E、E-E 之间的跃迁时的 $\text{Re}(\sigma_{xx})$; (c) $L = 49a_0$ 时，分别考虑 B-B、E-B 之间的跃迁时的 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 。参数取值： $\mu = 0.2t_1$ ， $k_B T = 0.01t_1$ 和 $\Gamma = 0.001t_1$

Fig. 9. Real part of the optical conductivity, $\text{Re}(\sigma_{xx})$, as a function of frequency at $\mu = 0.2t_1$. (a)

$\text{Re}(\sigma_{xx})$ for $L = 48a_0$ and $L = 49a_0$. (b) For $L = 49a_0$, contributions from C-B, C-E, and E-E transitions. (c) For $L = 49a_0$, contributions from B-B and E-B transitions. The other parameters are $k_B T = 0.01t_1$ and $\Gamma = 0.001t_1$.

$\mu = 1.08t_1$ 时光电导实部 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 随频率的变化如图10所示。

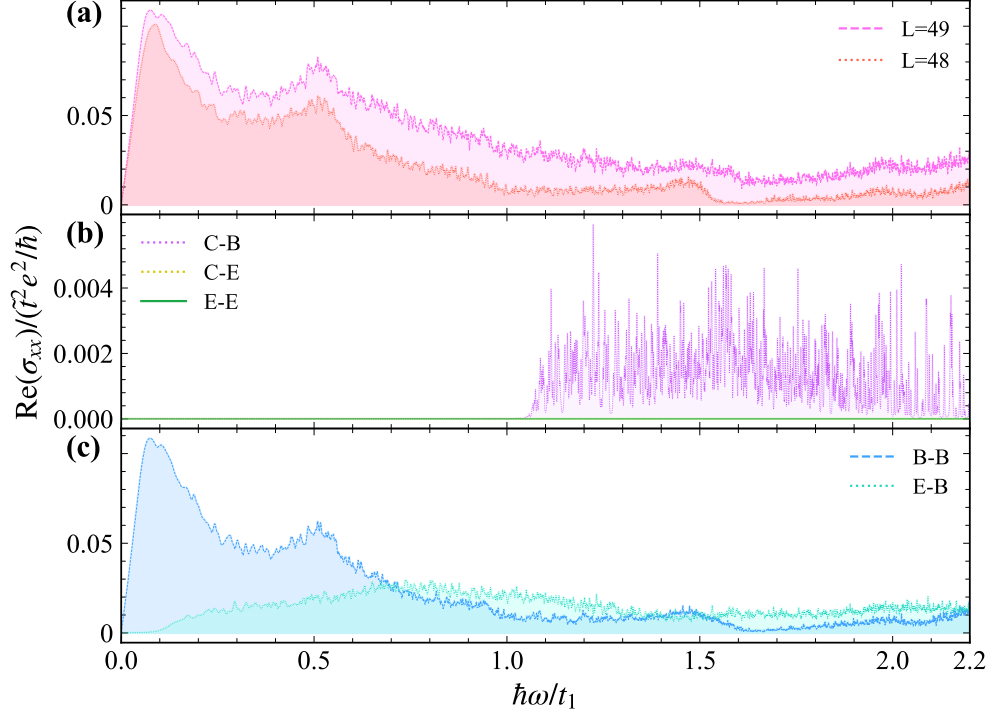


图 10 $\mu = 1.08t_1$ 时光电导实部 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 随频率的变化。(a) $L = 48a_0$ 和 $L = 49a_0$ 时的 $\text{Re}(\sigma_{xx})$; (b) $L = 49a_0$ 时, 分别考虑 C-B、C-E、E-E 之间的跃迁时的 $\text{Re}(\sigma_{xx})$; (c) $L = 49a_0$ 时, 分别考虑 B-B、E-B 之间的跃迁时的 $\text{Re}(\sigma_{xx})$ 。参数取值: $\mu = 1.08t_1$, $k_B T = 0.01t_1$ 和 $\Gamma = 0.001t_1$

Fig. 10. Real part of the optical conductivity, $\text{Re}(\sigma_{xx})$, as a function of frequency at $\mu = 1.08t_1$. (a) $\text{Re}(\sigma_{xx})$ for $L = 48a_0$ and $L = 49a_0$. (b) For $L = 49a_0$, contributions from C-B, C-E, and E-E transitions. (c) For $L = 49a_0$, contributions from B-B and E-B transitions. The other parameters are $k_B T = 0.01t_1$ and $\Gamma = 0.001t_1$.

参考文献

- [1] Hasan M Z, Kane C L 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 3045
- [2] Qi X L, Zhang S C 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 1057
- [3] Benalcazar W A, Bernevig B A, Hughes T L 2017 *Science* **357** 61

- [4] Schindler F, Cook A M, Vergniory M G, Wang Z, Parkin S S P, Bernevig B A, Neupert T 2018 *Science Advances* **4** eaat0346
- [5] Song Z, Fang Z, Fang C 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 246402
- [6] Langbehn J, Peng Y, Trifunovic L, von Oppen F, Brouwer P W 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 246401
- [7] Yang Y B, Wang J H, Li K, Xu Y 2024 *Journal of Physics: Condensed Matter* **36** 283002
- [8] Jia W, Tian Y, Yang H, Kong X, Huang Z H, Gong W J, An J H 2025 *Phys. Rev. B* **112** L241103
- [9] Peng M, Wei Q, He A L, Huang Z, Deng W, Liu Z, Chen G 2025 *Phys. Rev. B* **112** 245411
- [10] Bark C B, Kim H, Pak S, Min H G, Ahn S, Kim Y, Park M J 2025 *npj 2D Materials and Applications* **9** 57
- [11] Liu L, Miao C M, Sun Q F 2026 *Phys. Rev. B* **113** L201401
- [12] Zhang Y L, Liu L, Sun Q F, Liu J J, Zhang Y T 2026 *Phys. Rev. B* **113** 125427
- [13] Zhu R 2024 *Physics Letters A* **525** 129840
- [14] Subhadarshini M, Pal A, Saha A 2026 *Phys. Rev. B* **113** 195421
- [15] Schindler F, Wang Z, Vergniory M G, Cook A M, Murani A, Sengupta S, Kasumov A Y, Deblock R, Jeon S, Drozdov I, Bouchiat H, Guéron S, Yazdani A, Bernevig B A, Neupert T 2018 *Nature Physics* **14** 918
- [16] Shumiya N, Hossain M S, Yin J X, Wang Z, Litskevich M, Yoon C, Li Y, Yang Y, Jiang Y X, Cheng G, Lin Y C, Zhang Q, Cheng Z J, Cochran T A, Multer D, Yang X P, Casas B, Chang T R, Neupert T, Yuan Z, Jia S, Lin H, Yao N, Balicas L, Zhang F, Yao Y, Hasan M Z 2022 *Nature Materials* **21** 1111
- [17] Aggarwal L, Zhu P, Hughes T L, Madhavan V 2021 *Nature Communications* **12** 4420
- [18] Noguchi R, Kobayashi M, Jiang Z, Kuroda K, Takahashi T, Xu Z, Lee D, Hirayama M, Ochi M, Shirasawa T, Zhang P, Lin C, Bareille C, Sakuragi S, Tanaka H, Kunisada S, Kurokawa K, Yaji K,

- Harasawa A, Kandyba V, Giampietri A, Barinov A, Kim T K, Cacho C, Hashimoto M, Lu D, Shin S, Arita R, Lai K, Sasagawa T, Kondo T 2021 *Nature Materials* **20** 473
- [19] Choi Y B, Xie Y, Chen C Z, Park J, Song S B, Yoon J, Kim B J, Taniguchi T, Watanabe K, Kim J, Fong K C, Ali M N, Law K T, Lee G H 2020 *Nature Materials* **19** 974
- [20] Luo K, Geng H, Sheng L, Chen W, Xing D Y 2021 *Phys. Rev. B* **104** 085427
- [21] Li C A, Zhang S B, Li J, Trauzettel B 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 026803
- [22] Ezawa M 2018 *Phys. Rev. B* **97** 155305
- [23] Ezawa M 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 026801
- [24] Park M J, Kim Y, Cho G Y, Lee S 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 216803
- [25] Sheng X L, Chen C, Liu H, Chen Z, Yu Z M, Zhao Y X, Yang S A 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 256402
- [26] Wang K T, Ren Y, Xu F, Wei Y, Wang J 2021 *Science China Physics, Mechanics & Astronomy* **64** 257811
- [27] Wang K T, Xu F, Wang B, Yu Y, Wei Y 2022 *Frontiers of Physics* **17** 43501
- [28] Chen R, Zhou B, Xu D H 2024 *Phys. Rev. B* **110** L121301
- [29] Han Y, Cui C, Li X P, Zhang T T, Zhang Z, Yu Z M, Yao Y 2024 *Phys. Rev. Lett.* **133** 176602
- [30] Li Y X, Liu Y, Liu C C 2024 *Phys. Rev. B* **109** L201109
- [31] Qin F, Chen R 2025 *Phys. Rev. B* **112** 125405
- [32] Miao C M, Wan Y H, Zhang Y T, Sun Q F 2025 *Phys. Rev. B* **111** 165418
- [33] Liu L, An J, Ren Y, Zhang Y T, Qiao Z, Niu Q 2024 *Phys. Rev. B* **110** 115427
- [34] Liu L, An J, Ren Y, Zhang Y T, Qiao Z, Niu Q 2025 *Phys. Rev. B* **111** 045403
- [35] Mandal S, Wang Z, Banerjee R, Teo H T, Wei M, Zhou P, Xi X, Gao Z, Liu G G, Zhang B 2025 *Phys. Rev. Lett.* **135** 016903

- [36] Li X, Zhong J, Peng Y, Oudich M, Kim J, Gao F, Jing Y, Liu F 2025 *Journal of Physics: Condensed Matter* **38** 015303
- [37] Zhou Y, Wu R 2023 *Phys. Rev. B* **107** 035412
- [38] Calderón M J, Camjayi A, Datta A, Bascones E 2025 *Phys. Rev. B* **112** L041126
- [39] Bai W Q, Yang J T, Yang C H, Chen Y Y 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 137803. (in Chinese) [柏文庆, 杨江涛, 杨翠红, 陈云云 2024 物理学报 **73** 137803]
- [40] Cai X X, Luo G Y, Li Z Q, He Y 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 187301. (in Chinese) [蔡潇潇, 罗国语, 李志强, 贺言 2021 物理学报 **70** 187301]
- [41] Ullah K, Ren J T, Han B, Lü H F 2025 *Physics Letters A* **544** 130478
- [42] Mohammadi Y 2026 *Phys. Rev. B* **113** 165406
- [43] Budić J, Nasrallah S, Santos-Cottin D, Le Mardelé F, Pulkkinen A, Minár J, Sačer P, Gudac B, Barišić N, Homes C C, Akrap A, Novak M 2026 *Phys. Rev. B* **113** 125102
- [44] Liu Z, Qiao Z, Gao Y, Niu Q 2024 *Phys. Rev. Res.* **6** L012005
- [45] Duan W, Lu X, Liu J F 2023 *Phys. Rev. B* **108** 195436
- [46] Shi L k, Song J C W 2017 *Phys. Rev. B* **96** 081410
- [47] Ullah A, Sabeeh K 2014 *Journal of Physics: Condensed Matter* **26** 505303
- [48] Witczak-Krempa W, Maciejko J 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 100402
- [49] Li Z, Carbotte J P 2013 *Phys. Rev. B* **88** 045414
- [50] Mu H, Liu B, Hu T, Wang Z 2022 *Nano Letters* **22** 1122
- [51] Lee E, Furusaki A, Yang B J 2020 *Phys. Rev. B* **101** 241109
- [52] Jiang Y C, Kariyado T, Hu X 2024 *Journal of the Physical Society of Japan* **93** 033703
- [53] Chen R, Chen C Z, Gao J H, Zhou B, Xu D H 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 036803

- [54] Tanaka Y, Nakamura D, Okugawa R, Kawabata K 2025 *Phys. Rev. B* **112** 245302
- [55] Shi A, Bao L, Peng P, Ning J, Wang Z, Liu J 2025 *Phys. Rev. B* **111** 094109
- [56] Xie B, Wang H X, Zhang X, Zhan P, Jiang J H, Lu M, Chen Y 2021 *Nature Reviews Physics* **3** 520
- [57] Fan H, Xia B, Tong L, Zheng S, Yu D 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 204301
- [58] Xue H, Yang Y, Gao F, Chong Y, Zhang B 2019 *Nature Materials* **18** 108
- [59] Ni X, Weiner M, Alù A, Khanikaev A B 2019 *Nature Materials* **18** 113
- [60] Hu J R, Kong P, Bi R G, Deng K, Zhao H P 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 054301. (in Chinese) [胡军容, 孔鹏, 毕仁贵, 邓科, 赵鹤平 2022 物理学报 **71** 054301]
- [61] Kim M, Jacob Z, Rho J 2020 *Light: Science & Applications* **9** 130
- [62] Noh J, Benalcazar W A, Huang S, Collins M J, Chen K P, Hughes T L, Rechtsman M C 2018 *Nature Photonics* **12** 408
- [63] Lv B, Chen R, Li R, Guan C, Zhou B, Dong G, Zhao C, Li Y, Wang Y, Tao H, Shi J, Xu D H 2021 *Communications Physics* **4** 108
- [64] Qian S, Liu C C, Yao Y 2021 *Phys. Rev. B* **104** 245427
- [65] Liu F, Deng H Y, Wakabayashi K 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 086804
- [66] Bao C, Zhang H, Zhang T, Wu X, Luo L, Zhou S, Li Q, Hou Y, Yao W, Liu L, Yu P, Li J, Duan W, Yao H, Wang Y, Zhou S 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 206804
- [67] Qiu X, Zhu T, Fan Z, Wang K, Mu Y, Yang B, Wu D, Zhang H, Wang C, Wang H, Zhang Y 2026 *The Journal of Physical Chemistry Letters* **17** 2785. PMID: 41770234
- [68] Gamayun O V, Ostroukh V P, Gnezdilov N V, Adagideli , Beenakker C W J 2018 *New Journal of Physics* **20** 023016
- [69] Mahan G D 2000 *Many-Particle Physics*. 3rd edn. (New York: Springer)
- [70] Chung H C, Chang C P, Lin C Y, Lin M F 2016 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18** 7573

Optical conductivity signature of topological corner and edge states in Kekulé honeycomb lattice*

YUAN Huanyu ¹⁾ RUAN Hongyu²⁾ ZHANG Shitong²⁾ DUAN Wenye
¹⁾³⁾†

1) (*School of Physics, East China University of Science and Technology, Shanghai, 200237, China*)

2) (*School of Information Science and Engineering, East China University of Science and Technology, Shanghai, 200237, China*)

3) (*Laboratory of Solid State Microstructures, Nanjing University, Nanjing 210093, China*)

Abstract

Over the past decades, the investigation of conventional first-order topological insulators (TIs) has attracted much attention in condensed matter physics. In contrast to conventional TIs with gapless edge states, two-dimensional higher-order topological insulators (2D HOTIs) host zero-dimensional in-gap corner states, which are spatially localized at geometric corners and energetically separated from both edge and bulk bands. Due to their localized nature and weak coupling to propagating states in external leads, these corner states do not naturally form robust transport channels, making their detection via direct current measurements challenging. Optical conductivity provides valuable information on charge

* Project supported by the General Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12574191), the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12004111), Project (Grant No. M37018) supported by Laboratory of Solid State Microstructures, and the Undergraduate Training Program on Innovation and Entrepreneurship (Grant No. S202410251185).

† Corresponding author. E-mail: duanwy@pku.edu.cn

The First Author. E-mail: HuanyuYuan@mail.ecust.edu.cn

dynamics and intrinsic band structures that is often difficult to access through transport measurements. It is therefore natural to ask whether optical transitions among isolated corner states, edge states, and bulk states can generate distinct optical conductivity signatures.

In this work, we take finite-size hexagonal nanodisks of the Kekulé lattice as a concrete example and identify optical conductivity signatures of topological corner and edge states in 2D HOTIs. We numerically investigate the band structures and optical conductivities of hexagonal nanodisks with different side lengths. Specifically, for the side length $L = 4a_0 + 3na_0$, where a_0 is the length of each bond and $n = 0, 1, 2, \dots$, the hexagonal nanodisks of the Kekulé lattice are confirmed to be 2D HOTIs. In this case, additional corner and edge states appear within the band gap of the bulk states. Since optical transitions involving corner states, edge states, and bulk states provide extra transition channels in the bulk gap, they give rise to the characteristic low-frequency optical conductivity response. As a consequence, the optical conductivity exhibits additional resonant peaks in the low-frequency region, where the optical conductivity vanishes for trivial insulators. These additional resonant peaks are absent in trivial insulating nanodisks because there are no corresponding in-gap corner or edge states to participate in the optical transition processes. Moreover, these distinctive features of optical conductivity can be observed as long as the chemical potential is located in the bulk gap, and they are robust against disorder-induced scattering broadening. Our findings extend the theoretical understanding of the dynamical aspects of topological corner and edge states in 2D HOTIs. The additional resonant peaks in optical conductivity provide a promising route toward the optical detection of corner and edge states in 2D HOTIs.

Keywords: Topological corner and edge states, optical conductivity, Kekulé honeycomb lattice, two-dimensional higher-order topological insulators