

专题: 兰州大学物理学科 80 周年

无序半狄拉克费米子的对称性和输运性质*

安津可¹⁾ 韩志松¹⁾ 李伟豪¹⁾ 刘浩杰¹⁾ 王云华^{1)2)†}

1) (兰州大学物理科学与技术学院, 兰州 730000)

2) (兰州理论物理中心, 量子理论及应用基础教育部重点实验室, 甘肃省理论物理重点实验室,
甘肃省量子物理基础学科研究中心, 兰州 730000)

(2026 年 5 月 22 日收到; 2026 年 6 月 21 日收到修改稿)

在真实的材料体系, 杂质和缺陷等无序不可避免地对准粒子产生复杂的散射过程, 这使得量子输运计算面临困难. 自洽玻恩近似将无序对电子的散射自洽地计入自能和顶角修正, 已成为处理杂质散射下电子输运的量子场论方法. 然而以往基于自洽玻恩近似的输运研究大多建立在各向同性假设基础上, 对各向异性体系缺乏系统而明确的对称性分析方法. 本文发展了一套基于离散内禀对称性和动量联合赝自旋空间反射对称性的自洽玻恩近似输运理论框架, 将复杂的输运计算约化为少数几个标量代数方程, 从本质上简化了自洽矩阵方程的求解, 也加深了对赝自旋空间和各向异性体系量子输运的理解. 基于此理论框架, 本文系统研究了无序散射下半狄拉克体系的能谱重整化和新奇量子输运性质. 自洽计算结果表明: 1) 自能的实部和虚部都保持了能谱的粒子空穴对称性特征, 无序的增强会导致系统从 Lifshitz 相变临界点的半狄拉克金属相转变到双节点半金属相; 2) 在线性色散方向, 零能附近的纵向电导率具有一个接近 $4e^2/\pi h$ 的最小值, 且无序的增强没有使其消失, 这反映了狄拉克费米子的克莱因隧穿量子本质, 然而在抛物线色散方向零能附近的纵向电导率始终为零; 3) 在偏离零能的能量范围, 纵向电导率呈现出显著的各向异性, 体系的霍尔电导率随能量的变化呈现出奇函数特性, 相对于费米海的贡献, 费米面对霍尔电导起主导作用, 无序的增强对纵向和霍尔电导率都起到明显的抑制作用.

关键词: 半狄拉克费米子, 自洽玻恩近似, 对称性, 弱场霍尔效应**DOI:** 10.7498/aps.75.20260737**CSTR:** 32037.14.aps.75.20260737

1 引言

半狄拉克费米子是凝聚态物理中一类新奇的准粒子, 早在 2001 年 $^3\text{He-A}$ 超流的研究^[1]中就提出了其色散数学形式, 2008 年 Montambaux 等^[2]提出在单轴应变蜂窝晶格中存在该类型准粒子. 基于紧束缚模型的计算表明: 当最近邻跃迁强度比值达到临界值, 两个狄拉克点在动量空间融合, 体系发生拓扑 Lifshitz 相变^[3,4], 此时产生低能半狄拉克

费米子^[5,6]. 其独特的能谱结构兼具线性与二次色散特征, 沿某一方向表现为无质量的狄拉克费米子, 沿另一正交方向表现为有质量的薛定谔费米子行为. 这种高度的各向异性赋予了半狄拉克体系一系列新奇的物理性质, 比如正比 $\sqrt{E}$ 的反常态密度幂律和正比于 $B^{2/3}$ 的非传统朗道能级标度^[2,7]等. 除了应变石墨烯以外, 已经在 TiO_2/VO_2 异质结构^[8]和压力下的有机导体 $\alpha\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{I}_3$ ^[9]等体系中被理论计算预言, 并在冷原子光晶格^[10]、黑磷薄膜^[11]以及节线半金属 ZrSiS ^[12]等实验表征中观测到. 在

* 国家自然科学基金 (批准号: 12247101)、中央高校基本科研业务费 (批准号: lzujbky-2025-jdxx07)、甘肃省自然科学基金 (批准号: 22JR5RA389, 25JRRA799) 和 111 计划 (批准号: B20063) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: wangyunhua@lzu.edu.cn

此基础上, 针对半狄拉克费米子的研究取得了有丰富物理内涵的研究进展, 如无序^[13]或者圆偏振光^[14]诱导的半狄拉克体系的拓扑相变、周期性驱动场对该系统电子结构和输运性质的动态调控^[15]以及库仑相互作用增强半狄拉克费米子的稳定性^[16]. 近期更有研究表明, 利用半狄拉克材料固有的各向异性, 使得边缘态自然形成空间分离的一维通道, 从而在传统 *s* 波超导体邻近时, 无需依赖涡旋或复杂纳米结构即可产生拓扑超导和角马约拉纳零模^[17]. 这些研究丰富了新型准粒子的类型, 揭示了半狄拉克费米子的本征量子性质, 为新奇拓扑物态的实现提供了新的物质系统.

量子输运是探测准粒子性质、揭示体系基态和激发态特征的重要物理手段^[18]. 研究半狄拉克费米子的输运性质, 可为各向异性电子系统的输运提供理论框架^[19–21], 也有利于发现可能存在的新型量子输运现象, 还为基于半狄拉克费米子量子器件的设计和实验提供参考^[11,22,23]. 然而, 真实的材料体系不可避免地存在杂质和缺陷^[24], 它们破坏了晶格的平移对称性, 使电子经历复杂的散射过程, 对量子输运的理论研究造成了一定的困难. 自洽玻恩近似是一种处理杂质散射下电子输运的量子场论方法^[25], 它自洽地计入杂质对电子自能和顶角修正的影响, 在解决狄拉克费米子^[26–29]、高自旋外尔费米子^[30,31]及 Rashba 型自旋轨道耦合电子^[32–34]受短程或长程杂质散射的输运问题时呈现出优势. 然而以往基于自洽玻恩近似的输运研究大多建立在各向同性假设的基础上, 对各向异性体系缺乏系统而明确的对称性分析方法. 半狄拉克费米子系统作为典型的各向异性体系, 不同于仅具有一个自能赝自旋分量的各向同性体系, 半狄拉克费米子自能张量的赝自旋独立分量明显增多, 而且电流顶角具有方向依赖性, 其动量积分必须对所有维进行完整的网格积分, 不能进行简单的各向同性假设. 另一方面的实际困难在于, 不考虑对称性约束时需要对比自能张量、单电流顶角和双电流顶角的所有分量都进行复杂的自洽迭代计算.

针对上述问题, 本文发展了一套基于离散内禀对称性 (particle-hole symmetry, PHS; time-reversal symmetry, TRS; chiral symmetry, CS)^[35]和动量联合赝自旋空间反射对称性的自洽玻恩近似输运理论框架, 给出了半狄拉克体系中自能和电流顶角等物理量在赝自旋空间的最简形式. 这一框

架不仅从本质上简化了自洽矩阵方程的求解, 使复杂的输运计算约化为少数几个标量代数方程, 还加深了我们对赝自旋空间和各向异性体系量子输运的理解. 基于此理论框架, 揭示了无序散射下半狄拉克体系的能谱重整化和新奇量子输运性质. 自洽计算结果表明自能的实部和虚部都保持了 PHS 特征, 无序的增强会导致系统从 Lifshitz 相变临界点的半狄拉克金属相转变到双节点半金属相. 在线性色散方向, 零能附近的纵向电导率具有一个接近 $4e^2/\pi h$ 的最小值, 且无序的增强没有使其消失, 这反映了狄拉克费米子的克莱因隧穿量子本质. 然而在抛物线色散方向零能附近的纵向电导率始终为零. 在偏离零能的能量范围, 纵向电导率呈现出显著的各向异性, 且随着无序的增强都会明显被抑制. 体系的霍尔电导率随能量的变化呈现出奇函数特性, 相对于费米海的霍尔电导贡献, 费米面的霍尔电导起主导作用. 无序强度的增大对两种霍尔电导率起到明显的抑制作用.

本文首先在第 2 节构建了二维半狄拉克系统在高斯型白噪声杂质散射下的有效哈密顿量; 在第 3 节中对自洽玻恩近似理论的量子场论框架进行了全面而细致的回顾; 第 4 节基于内禀对称性和晶格空间对称性推导自洽玻恩近似下自能和顶角修正的约束条件, 为后续开展输运理论的计算和研究提供新思路; 在第 5 节, 结合第 3 节的响应函数公式和第 4 节的对称性约束, 计算了短程杂质散射下的自能、纵向输运电导率和弱场下的横向霍尔电导率, 并对计算结果展开了分析与讨论; 最后在第 6 节进行总结.

2 半狄拉克费米子的有效哈密顿量

考虑沿波矢 k_x 方向具有线性色散且沿 k_y 方向具有抛物色散的半狄拉克费米子, 在短程高斯关联的白噪声无序势 $U(\mathbf{r})$ 作用下, 具有如下低能有效哈密顿量形式:

$$H(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = H_0(\mathbf{k}) + U(\mathbf{r})\sigma_0 \\ = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}\sigma_x + \hbar v_F k_x \sigma_y + \sigma_0 \sum_j u_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \quad (1)$$

其中 v_F 为 k_x 方向的费米速度, m 为 k_y 方向的有效质量, σ_x 和 σ_y 是描述晶格赝自旋自由度的泡利矩阵, σ_0 是赝自旋空间的单位矩阵. 在无序势

时, 方程 (1) 描述的自由半狄拉克费米子 $H_0(\mathbf{k})$ 具有能谱

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}\right)^2 + (\hbar v_F k_x)^2}. \quad (2)$$

方程 (2) 中能谱的各向异性对半狄拉克系统的独特输运性质具有重要影响. 其中 $U(\mathbf{r}) = \sum_j u_{\text{imp}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) = \sum_j u_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$, 这里 $\mathbf{r}_j$ 表示第 j 个杂质的位置. 本文采用短程高斯关联的白噪声势, 即 δ 函数型散射体 $u_{\text{imp}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) = u_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$, 其中 u_0 是局域随机交替的吸引-排斥无序势. 杂质势的关联函数仅保留二阶矩 $\langle U(\mathbf{r}_1)U(\mathbf{r}_2) \rangle = n_i u_0^2 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$, 傅里叶变换到动量空间中为常数 $\langle U_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} \rangle = n_i u_0^2$, 这里 $n_i = N_{\text{imp}}/V$ 为杂质浓度, 其中 N_{imp} 为系统中杂质的总数目, V 为系统体积. 后续各节中将采用自洽玻恩近似对方程 (1) 进行系统性的输运分析.

3 输运的自洽玻恩近似理论

一般而言, 自洽玻恩近似是弱无序杂质散射的有效方法. 在对杂质散射进行微扰展开时, 仅包含非交叉的阶梯费曼图项, 忽略杂质线交叉项. 这种弱无序条件要求 $k_F l \gg 1$, 其中 l 为平均自由程, k_F 为费米波矢, 即 $l \gg \lambda_F$ (λ_F 为费米波长). 这意味着准粒子在两次散射之间会传播过多个自身波长的距离. 或等价地表示成 $E_F \tau \gg 1$ [27], 其中 $\hbar = 1$, 即 $1/\tau \sim |\text{Im}\Sigma| \ll E_F$, 即自能虚部绝对值 $|\text{Im}\Sigma(E)|$ (散射率) 远小于费米能, 这表明准粒子寿命足够长, 能谱展宽不淹没能带结构.

3.1 纵向电导率

自洽玻恩近似对杂质分布采取构型平均, 利用自能自洽重整化电子的能谱与输运. 针对方程 (1) 中半狄拉克费米子的两能带系统, 其格林函数可由图 1(b) 所示的戴森方程导出, 具有如下 2×2 的矩阵形式:

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, E) = \frac{1}{E - H_0(\mathbf{k}) - \Sigma(\mathbf{k}, E)}, \quad (3)$$

其中自能 $\Sigma(\mathbf{k}, E)$ 也为一个 2×2 的矩阵, 它的表达式为

$$\Sigma(\mathbf{k}, E) = n_i \int \frac{d^2 \mathbf{k}'}{(2\pi)^2} u_{\text{imp}}^2(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathcal{G}(\mathbf{k}', E), \quad (4)$$

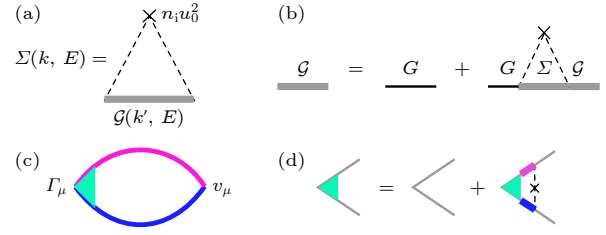


图 1 自洽玻恩近似下的费曼图 (a) 自能, (b) 满足戴森方程的格林函数, (c) 阶梯近似下的纵向电导率和 (d) 顶角修正的 Bethe-Salpeter 方程的费曼图. 其中品红色线代表推迟格林函数 G^R , 蓝色线代表超前格林函数 G^A

Fig. 1. Feynman diagram within the self-consistent Born approximation: (a) Self-energy, (b) Green's function obeying the Dyson equation, (c) Longitudinal conductivity in the ladder approximation, and (d) Bethe-Salpeter equation for the vertex correction. Here magenta and blue lines represent G^R and G^A , respectively.

对应图 1(a) 中费曼图所表示的自能. 在短程杂质散射下有 $u_{\text{imp}}^2(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = u_0^2$, 因此自能不具有动量依赖性, 故在之后的讨论中将自能简记为 $\Sigma(E)$.

由 Kubo 公式 [36], 纵向电导率的表达式可写为

$$\sigma_{\mu\mu}(E) = \sigma_{\mu\mu}^{\text{RA}}(E) - \sigma_{\mu\mu}^{\text{RR}}(E), \quad (\mu = x, y), \quad (5)$$

其中

$$\sigma_{\mu\mu}^{\text{RA}}(E) = \frac{e^2}{hL^2} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \times \text{Tr}[v_\mu \mathcal{G}^R(\mathbf{k}, E) \Gamma_\mu^{\text{RA}} \mathcal{G}^A(\mathbf{k}, E)], \quad (6)$$

$$\sigma_{\mu\mu}^{\text{RR}}(E) = \frac{e^2}{hL^2} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \times \text{Tr}[v_\mu \mathcal{G}^R(\mathbf{k}, E) \Gamma_\mu^{\text{RR}} \mathcal{G}^R(\mathbf{k}, E)], \quad (7)$$

式中的积分和求迹遍历了所有动量和赝自旋, L 是二维系统单个方向的尺寸, L^2 是体系的面积, R 和 A 各代表格林函数的推迟和超前, μ 方向的裸速度被定义为 $v_\mu = \partial H_0(\mathbf{k}) / \partial k_\mu$, 即 $v_x = \tilde{v} \sigma_y$ 和 $v_y = 2\tilde{u} k_y \sigma_x$, 其中 $\tilde{u} = \hbar^2 / (2m)$, $\tilde{v} = \hbar v_F$. 电导率 $\sigma_{\mu\mu}^{\text{RA}}$ 对应费曼图如图 1(c) 所示. Γ_μ 表示被杂质散射修正后的 μ 方向电流顶角, 满足 Bethe-Salpeter 方程:

$$\Gamma_\mu(\mathbf{k}, E', E) = v_\mu + n_i u_0^2 \int \frac{d^2 \mathbf{k}'}{(2\pi)^2} \mathcal{G}(\mathbf{k}', E') \times \Gamma_\mu(\mathbf{k}', E', E) \mathcal{G}(\mathbf{k}, E), \quad (8)$$

E, E' 分别均表示能量的解析延拓形式, 对应因果性.

(6) 式对应于弛豫时间近似下的准粒子扩散输

运^[19,27,37], 反映了有限准粒子寿命及其在外场下的漂移和杂质散射的弛豫过程, 弱散射极限下与玻尔兹曼输运理论一致. (7) 式由同构型的格林函数乘积构成, 为纯量子修正贡献^[27,38,39], 主要源于无序自能展宽引起的带间或带内散射量子干涉.

3.2 弱场霍尔电导率

引入垂直于二维平面的磁场 $\mathbf{B}$, 可选取矢势为位置的线性函数, 例如朗道规范下的矢势 $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = (-By, 0, 0)$, 在弱场极限下将矢势视为微扰, 那么在无穷大体系中, 对磁场作级数展开会导致发散. Fukuyama 及其合作者^[40,41] 假设磁场具有沿 y 方向的三角函数形式 $\mathbf{B}(\mathbf{r}) = B \cos(qy) \hat{e}_z$, 则矢量势可以取 $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = (-B \sin(qy)/q, 0, 0)$, 其中 $q = |\mathbf{q}|$ 为磁场的波矢的大小, 从而有效地规避了发散问题^[29,32,42-46]. 在长波极限, 即 $q \rightarrow 0$ 下, 霍尔电导率被拆分为以下两项^[47]:

$$\sigma_{xy}(E) = \sigma_{xy}^{\text{surf}}(E) + \sigma_{xy}^{\text{sea}}(E), \quad (9)$$

其中两项具体为

$$\sigma_{xy}^{\text{surf}}(E) = -\frac{2e^2}{l_B^2 L^2 \hbar} \Phi_{xy}(E), \quad (10)$$

$$\sigma_{xy}^{\text{sea}}(E) = -\frac{4e^2}{l_B^2 L^2 \hbar} \int_{-\infty}^E \Xi_{xy}(E') dE', \quad (11)$$

分别描述了费米面电子和费米海电子对霍尔电导率的贡献^[37,48], 其中 $l_B = \sqrt{\hbar/(eB)}$ 为磁长度. 函数 $\Phi_{xy}(E)$ 和 $\Xi_{xy}(E)$ 是由电流顶角和传播子组成的函数, 对霍尔电导率产生直接贡献, 详见附录公式 (A1) 和 (A2).

方程 (10) 中霍尔电导率的费米面贡献由图 2(a) 中的费曼图表示, 方程 (11) 中霍尔电导率的费米海贡献由图 3(a) 中的费曼图表示, 其中引入的双顶角满足和单顶角类似的 Bethe-Salpeter 型自洽方程

$$\begin{aligned} & \Gamma_{\mu\nu}(\mathbf{k}, E, E', E'') \\ &= \Gamma_{\mu}(\mathbf{k}, E, E') \mathcal{G}(\mathbf{k}, E') \Gamma_{\nu}(\mathbf{k}, E', E'') \\ &+ n_i u_0^2 \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^2} \mathcal{G}(\mathbf{k}', E) \Gamma_{\mu\nu}(\mathbf{k}', E, \\ &E', E'') \mathcal{G}(\mathbf{k}', E''), \end{aligned} \quad (12)$$

由图 2(e) 的费曼图表示.

4 对称性分析

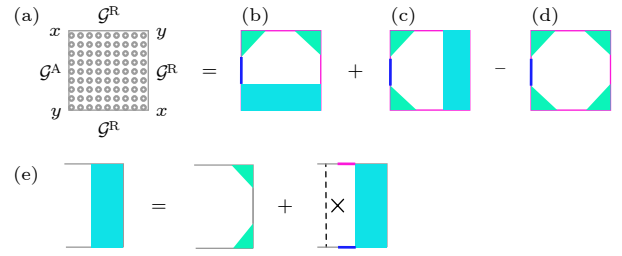


图 2 (a) 霍尔电导率的费米面贡献 $\sigma_{xy}^{\text{surf}}$ 的费曼图. 为了保持阶梯形杂质作用线不产生交叉, 考虑两个单电流顶角和两个双电流顶角, 从而拆分为 (b)–(d) 三幅图, 其中 (d) 为 (b) 和 (c) 相对于 (a) 产生的重复项. (e) 双顶角 Bethe-Salpeter 方程对应的费曼图

Fig. 2. (a) Feynman diagrams for the Fermi surface contribution to the conductivity $\sigma_{xy}^{\text{surf}}$. To avoid crossing of the impurity scattering lines in the ladder diagrams, two single-current vertices and two double-current vertices are introduced. Then it is decomposed into three panels (b)–(d), where (d) represents the duplicate term arising from (b) and (c) relative to (a). (e) Feynman diagrams for double-vertex Bethe-Salpeter equation.

一般而言, 如果不考虑系统的对称性, 自能的自洽迭代求解需要求解自能矩阵的每一个矩阵元素, 这会导致格林函数和输运性质的求解变得复杂. 决定一个物理系统自能的数学形式的根本因素应该是系统的对称性, 而对于一个由赝自旋自由度描述的物理系统, 首要的出发点是决定其哈密顿量的拓扑分类的离散内禀对称性和晶格系统的空间对称性^[35].

4.1 粒子-空穴对称性 (PHS)

粒子-空穴对称性在不同物理系统中具有本质区别: 其一, 内禀于超导体的平均场描述, 是定义在 Bogoliubov 准粒子激发空间中的严格对称性; 其二, 常见于拓扑半金属或拓扑绝缘体的低能有效模型, 实质上是单粒子能谱在特定填充条件下所呈现的一种涌现对称性, 其根源往往与手征对称性或晶体对称性相关. 这一区分直接决定了裸哈密顿量和杂质势的数学表述形式.

在超导体中, 系统由 Bogoliubov-de Gennes (BdG) 哈密顿量描述, 内禀地蕴含严格的 PHS, 通常由反么正算符 $\hat{C} = \tau_x \mathcal{K}$ 实现, 满足 $\hat{C} H_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) \hat{C}^{-1} = -H_{\text{BdG}}(-\mathbf{k})$ ^[49], 其中 $\mathcal{K}$ 为复共轭算符, τ_x 和 τ_z 为作用于 Nambu(粒子-空穴) 空间的泡利矩阵. 相比之下, 在粒子数守恒的晶格系统中, 如大多数拓扑半金属, 情况有本质区别. 其完整电子哈密顿量通

常不具备严格的 PHS, 但当化学势 μ 位于狄拉克点或能带交叉点时, 低能有效模型可呈现出能谱对称性 $E(\mathbf{k}) = -E(-\mathbf{k})$. 若形式化地定义 $\hat{Q} = \hat{N} - N/2$ [35], 则 $\langle \hat{Q} \rangle = 0$ 对应“半填充”条件, 此时类 PHS 变换仅将一个能量为 E 的导带电子本征态映射到能量为 $-E$ 的价带电子本征态. 因此, 这类系统中的所谓“PHS”更准确的称谓应是“能谱的粒子-空穴对称性”.

上述差异直接决定了杂质散射势的数学表述: 在 BdG 体系中, 它必须在 Nambu 空间中保持严格 PHS, 取 $U(\mathbf{r})\tau_z$ 的形式 [50]; 而在粒子数守恒的晶格有效模型中, 它以常规形式作用于子晶格电子的赝自旋空间, 为 $U(\mathbf{r})\sigma_0$ [32]. 对于本文所研究的半狄拉克系统, 定义与能谱 PHS 对应的反么正变换算符 $\hat{C} = \sigma_z \mathcal{K}$. 在该变换下, 裸哈密顿量满足

$$\hat{C}H_0(\mathbf{k})\hat{C}^{-1} = -H_0(-\mathbf{k}), \quad \hat{C}i\hat{C}^{-1} = -i, \quad (13)$$

其中 $\hat{C}^2 = +\mathbb{1}$, 对应不考虑电子自旋的赝自旋模型情形. 然而, 杂质势将破缺这一能谱对称性:

$$\hat{C}U(\mathbf{r})\hat{C}^{-1} = U(\mathbf{r}) = -U(\mathbf{r}). \quad (14)$$

因此, 虽然引入短程高斯关联的白噪声无序但是总哈密顿量仍然满足能谱 PHS:

$$\hat{C}H(\mathbf{k}, \mathbf{r})\hat{C}^{-1} = -H(-\mathbf{k}, \mathbf{r}). \quad (15)$$

综上, PHS 能作为无序半狄拉克系统哈密顿量形式的对称性约束. 而在 BdG 体系中, 杂质散射势取 $U(\mathbf{r})\tau_z$ 时, $\hat{C}(U(\mathbf{r})\tau_z)\hat{C}^{-1} = -U(\mathbf{r})\tau_z$, 即杂质势也不破坏该体系的粒子-空穴对称性.

4.2 时间反演对称性 (TRS)

本文研究的体系为粒子数守恒的子晶格赝自旋 $-\frac{1}{2}$ 模型, 不考虑电子自旋自由度. 定义反么正的时间反演算符 $\hat{T} = \mathcal{K}$ [51], 其中 $\mathcal{K}$ 为复共轭算符. 在该变换下, 裸哈密顿量满足

$$\hat{T}H_0(\mathbf{k})\hat{T}^{-1} = H_0(-\mathbf{k}), \quad \hat{T}i\hat{T}^{-1} = -i, \quad (16)$$

即满足时间反演对称性的严格定义: 动量反转 $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ 、时间反演操作后哈密顿量形式不变. 上述选取在数学上自洽且具有明确的物理意义. $\hat{T} = \mathcal{K}$ 作用于任意波函数两次给出

$$\hat{T}^2\psi_j = \mathcal{K}(\mathcal{K}\psi_j) = \mathcal{K}(\psi_j^*) = \psi_j, \quad (17)$$

即 $\hat{T}^2 = +\mathbb{1}$, 对应玻色子或仅由子晶格张成的赝自旋系统, 此类系统的时间反演对称性不导致

Kramers 简并. 与之对比, 真实自旋 $-1/2$ 电子的时间反演算符须取 $\hat{T} = i\sigma_y \mathcal{K}$, 以满足 $\hat{T}^2 = -\mathbb{1}$ 和 Kramers 定理 [35]. 半狄拉克系统的两带赝自旋 $-\frac{1}{2}$ 模型描述晶格中两个子格自由度, 其裸哈密顿量满足 TRS. 体系中的无序体现为 $U(\mathbf{r})\sigma_0$, 易证

$$\hat{T}U(\mathbf{r})\hat{T}^{-1} = U(\mathbf{r}), \quad (18)$$

表明非磁性杂质散射势不破坏无杂质系统原有的 TRS. 因此, 总哈密顿量保持 TRS:

$$\hat{T}H(\mathbf{k}, \mathbf{r})\hat{T}^{-1} = H(-\mathbf{k}, \mathbf{r}). \quad (19)$$

对于粒子数不守恒的 BdG 系统, 在 Nambu 旋量空间中杂质势取 $U(\mathbf{r})\tau_z$, 与 PHS 分析一致. 可以验证, 实数标量势同样不破坏超导系统的 TRS. TRS 被破缺的典型情形包括引入磁性杂质或外磁场, 此时势函数成为复数矩阵, 与时间反演操作不再对易. 综上, 无论无杂质系统粒子数是否守恒, 非磁性实数标量无序势均不破坏 TRS. 因此, TRS 可以作为短程散射无序半狄拉克系统哈密顿量形式的对称性约束.

4.3 手征对称性 (CS)

$\hat{T}$ 与 $\hat{C}$ 的结合给出第三种内禀对称性——手征对称性 [35]. 赝自旋半狄拉克系统的手征变换算符为

$$\hat{S} = \hat{T} \cdot \hat{C} = \sigma_z, \quad (20)$$

其物理意义在于, 即使 $\hat{T}$ 和 $\hat{C}$ 各自破缺, 二者的乘积 $\hat{S}$ 仍可能保持. 在本文研究的无序系统中, 如 (14) 式所示, 杂质势具有 PHS, 系统自然也具备 CS. 实际上, 手征对称性是拓扑半金属低能有效模型的根本对称性.

综合上述离散内禀对称性的讨论以及参考表 1 给出的十重对称性分类, 清洁半狄拉克系统属于手征正交类 (BDI 类). 引入无序后, 系统仍然是 BDI 类.

4.4 动量-赝自旋空间镜面反射对称性

方程 (1) 中的 $H(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ 在自洽玻恩近似的杂质分布构型平均下具有关于 x 轴的镜面反射 $\mathcal{M}_x: (k_x, k_y) \rightarrow (k_x, -k_y)$ 和作用在子格空间上为恒等变换 σ_0 , 以及关于 y 轴的镜面反射 $\mathcal{M}_y: (k_x, k_y) \rightarrow (-k_x, k_y)$ 与伴随子格空间的交换 σ_x . 因此自由半狄拉克费米子具有 $\hat{R}_1 = \mathcal{M}_x \cdot \sigma_0$ 和 $\hat{R}_2 = \mathcal{M}_y \cdot \sigma_x$

表 1 十重对称性分类表^[35,49,52], 给出了以上述三类内禀对称性为基础衍生出的十个对称类及其拓扑不变量的周期表
Table 1. The “ten-fold way” symmetry classification table^[35,49,52], showing the ten symmetry classes derived from the three intrinsic symmetries and their periodic table of topological invariants.

Class	$\mathcal{T}$	$\mathcal{C}$	$\mathcal{S}$	0	1	2	3	4	5	6	7
A	0	0	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0
AIII	0	0	1	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$
AI	+	0	0	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$
BDI	+	+	1	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$
D	0	+	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$2\mathbb{Z}$	0
DIII	−	+	1	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$2\mathbb{Z}$
AII	−	0	0	$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0
CII	−	−	1	0	$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0
C	0	−	0	0	0	$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0
CI	+	−	1	0	0	0	$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$

两种复合变换下的对称性, 它们构成了系统的一个对称性群, 即

$$\hat{\mathcal{R}}_i H(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \hat{\mathcal{R}}_i^{-1} = H(\mathbf{k}, \mathbf{r}), \quad (i = 1, 2) \quad (21)$$

因此, 将空间对称性和赝自旋复合起来的对称性思想^[53]能很好地描述它们的拓扑物态.

4.5 对称性约束下的物理量

上节确定的联合反射对称性 $\hat{\mathcal{R}}_2 = \mathcal{M}_y \cdot \boldsymbol{\sigma}_x$ 和三种离散内禀对称性, 为自能和电流顶角的形式施加了极强的约束, 将它们的矩阵形式的自洽方程约化为少数几个标量方程. 首先考虑自能, 在赝自旋空间自能可写为

$$\boldsymbol{\Sigma}(E) = \Sigma_0 \boldsymbol{\sigma}_0 + \Sigma_x \boldsymbol{\sigma}_x + \Sigma_y \boldsymbol{\sigma}_y + \Sigma_z \boldsymbol{\sigma}_z. \quad (22)$$

时间反演对称性要求 $\boldsymbol{\Sigma}(E)$ 为实矩阵, 而 $\hat{\mathcal{R}}_2$ 对称性 $\hat{\mathcal{R}}_2 \boldsymbol{\Sigma} \hat{\mathcal{R}}_2^{-1} = \boldsymbol{\Sigma}$ 迫使 $\Sigma_y = \Sigma_z = 0$. 因此, 无序系统的自能仅包含两个独立分量:

$$\boldsymbol{\Sigma}(E) = \Sigma_0(E) \boldsymbol{\sigma}_0 + \Sigma_x(E) \boldsymbol{\sigma}_x. \quad (23)$$

相应地, 自能的自洽方程 (4) 简化为以下两个标量积分方程:

$$\Sigma_0 = n_i u_0^2 \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{Y(E)}{D(\mathbf{k}, E)}, \quad (24)$$

$$\Sigma_x = n_i u_0^2 \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{\tilde{u} k_y^2 + \Sigma_x}{D(\mathbf{k}, E)}, \quad (25)$$

其中, $Y(E) = E - \Sigma_0(E)$, $D(\mathbf{k}, E) = Y^2 - (\tilde{u} k_y^2 + \Sigma_x)^2 - \tilde{v}^2 k_x^2$. 方程 (3) 中的格林函数具有形式

$$G(\mathbf{k}, E) = \frac{1}{D} [Y \boldsymbol{\sigma}_0 + (\tilde{u} k_y^2 + \Sigma_x) \boldsymbol{\sigma}_x + \tilde{v} k_x \boldsymbol{\sigma}_y]. \quad (26)$$

对电流顶角, $\hat{\mathcal{R}}_2$ 和 $\hat{\mathcal{T}}$ 同样严格限制其结构.

x 方向的裸速度 $v_x = \tilde{v} \boldsymbol{\sigma}_y$ 在 $\hat{\mathcal{R}}_2$ 下为奇, 故重整化顶角 Γ_x 也必为奇, 且与 v_x 有相同的矩阵结构. 结合 TRS, 可知

$$\Gamma_x(\mathbf{k}, E', E) = \lambda_x(E', E) \tilde{v} \boldsymbol{\sigma}_y, \quad (27)$$

其中标量因子 λ_x 满足由方程 (8) 退化而来的代数方程

$$\lambda_x = 1 + \lambda_x n_i u_0^2 \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{1}{2} \times \text{Tr}[G(\mathbf{k}, E') \boldsymbol{\sigma}_y G(\mathbf{k}, E) \boldsymbol{\sigma}_y]. \quad (28)$$

相反地, y 方向的裸速度 $v_y = 2\tilde{u} k_y \boldsymbol{\sigma}_x$ 在 $\hat{\mathcal{R}}_2$ 下为偶函数, 而在 $\mathcal{M}_x$ 联合反射下表现为 k_y 的奇函数. 由于重整化自能与格林函数均为 k_y 的偶函数, 动量积分后杂质散射对 Γ_y 的修正恰好为零, 即

$$\Gamma_y(\mathbf{k}, E', E) = v_y(\mathbf{k}). \quad (29)$$

这一结果意味着在抛物线色散方向上, 电流顶角无需任何重整化.

对图 3 中费米海项的密度顶角 Γ_0 , 对称性分析表明它是赝自旋空间的标量, 即 $\Gamma_0 = \lambda_0(E', E) \boldsymbol{\sigma}_0$, 其修正因子 λ_0 由类似 (28) 式的标量方程给出:

$$\lambda_0 = 1 + \lambda_0 n_i u_0^2 \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{1}{2} \times \text{Tr}[G(\mathbf{k}, E') \boldsymbol{\sigma}_0 G(\mathbf{k}, E) \boldsymbol{\sigma}_0]. \quad (30)$$

上述约束将顶角修正的 Bethe-Salpeter 方程从矩阵积分方程约化为单变量代数方程, 使纵向电导率及弱场霍尔电导率的计算仅包含少数标量自洽迭代, 为数值求解提供了根本性的简化.

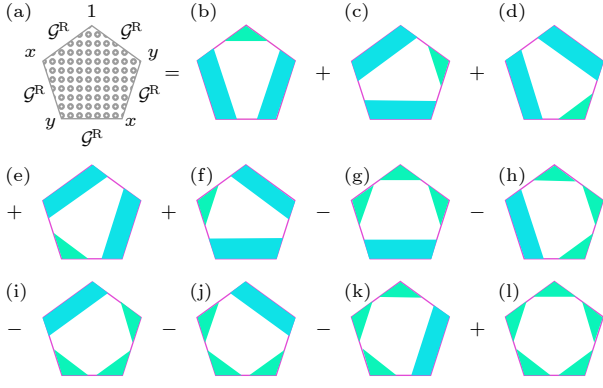


图3 霍尔电导率的费米海贡献 σ_{xy}^{sea} 对应的费曼图表示 (a) 总贡献, 即一个密度顶角、四个单电流顶角、两个电流-密度顶角和三个双电流顶角; 图 (g)–(l) 来自于图 (b)–(f) 相对于 (a) 的重复项或补全项

Fig. 3. Feynman diagram representation of the Fermi sea Hall conductivity σ_{xy}^{sea} : (a) The total contribution, which includes one density vertex, four single-current vertices, two current-density vertices, and three double-current vertices. Panels (g)–(l) are the duplicate terms or the compensation terms arising from panels (b)–(f) relative to panel (a).

5 数值计算结果及分析

5.1 数值方法

由于半狄拉克体系的各向异性, 对该体系动量积分不具备像狄拉克费米子体系那样成熟的数值和解析方法 [27–29, 42, 54, 55], 故本文采用更直接的均匀长方形网格动量差分. 定义截断能 ε_c , 对 k_x 和 k_y 方向的动量截断可以分别表示为

$$k_c^x = \frac{\varepsilon_c}{\tilde{v}}, \quad k_c^y = \sqrt{\frac{\varepsilon_c}{\tilde{u}}}, \quad (31)$$

则对一个动量函数 $F(\mathbf{k})$ 的积分可以被离散化求和的过程代替

$$\int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} F(\mathbf{k}) \rightarrow \sum_{k_x(i)=-k_c^x}^{k_c^x} \sum_{k_y(j)=-k_c^y}^{k_c^y} \times \frac{\Delta k_x \Delta k_y}{(2\pi)^2} F(k_x(i), k_y(j)), \quad (32)$$

其中 $k_x(i)$ 和 $k_y(j)$ 分别表示动量网格 x 和 y 方向上的第 i 和 j 个格点上的动量值. 由均匀差分, $\Delta k_\mu = k_\mu(2) - k_\mu(1)$. 在动量积分的基础上进行自洽迭代可以数值求解得到第3节中的物理量. 简单起见, 实际计算时用 $W = n_i u_0^2$ 表示无序的强度, 选取截断能 $\varepsilon_c = 0.5$.

5.2 无磁场下的纵向输运

由自能在对称性约束下的表达式 (23), 自洽玻

恩近似后导带满足方程

$$E_c(\mathbf{k}) = \text{Re}\Sigma_0[E_c] + \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + \text{Re}\Sigma_x[E_c]\right)^2 + \hbar^2 v_F^2 k_x^2}, \quad (33)$$

价带满足方程

$$E_v(\mathbf{k}) = \text{Re}\Sigma_0[E_v] - \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + \text{Re}\Sigma_x[E_v]\right)^2 + \hbar^2 v_F^2 k_x^2}. \quad (34)$$

另一方面根据自能的对称性分析结果 (23), 及其满足的迭代方程 (24) 和 (25), 数值计算得到的自能分量的实部与虚部随费米能的变化如图4所示.

数值计算结果表明 $\text{Im}\Sigma_0(E)$ 和 $\text{Re}\Sigma_x(E)$ 为偶函数, $\text{Re}\Sigma_0(E)$ 和 $\text{Im}\Sigma_x(E)$ 为奇函数, 正如图4中自能随费米能变化的函数关系所示, 即

$$\begin{aligned} \text{Re}\Sigma_{0,c} &= -\text{Re}\Sigma_{0,v}, & \text{Im}\Sigma_{0,c} &= \text{Im}\Sigma_{0,v}, \\ \text{Re}\Sigma_{x,c} &= \text{Re}\Sigma_{x,v}, & \text{Im}\Sigma_{x,c} &= -\text{Re}\Sigma_{x,v}, \end{aligned} \quad (35)$$

这完全满足 Kramers-Kronig 关系的因果性要求 [56]. 自能实部对色散关系具有修正作用, 而自能虚部表征自由粒子在相互作用下获得的有限寿命, 即 $|\text{Im}\Sigma| \propto \tau^{-1}$, 其中 τ 是弛豫时间. 在杂质系统中, 总的自能则反映杂质散射下粒子的能谱重整化、弛豫和退相干过程.

由方程 (33)–(35) 知, 有 $E_v(\mathbf{k}) = -E_c(-\mathbf{k})$, 即自能的实部不破缺能谱 PHS. 如图4(a)所示, $\text{Re}\Sigma_0$ 在费米能为0处的值恒为0, 表示其不对半狄拉克点处的能隙产生影响, 故不影响体系的拓扑结构, 然而 $\text{Re}\Sigma_0$ 的奇函数性质对导带和价带产生互为相反的改变, 那么 $\text{Re}\Sigma_0$ 将不破缺体系的 PHS. 图4(c)显示 $\text{Re}\Sigma_x$ 在费米能为0时具有非零贡献, 意味着短程杂质散射对原来的半狄拉克能谱的拓扑结构产生了修正. 由方程 (33) 和方程 (34) 知, 原来的半狄拉克点打开一个能隙 $2\text{Re}\Sigma_x(0)$. 图5绘制了不同 $\text{Re}\Sigma_x$ 下的能谱示意图, 其中假定 $\text{Re}\Sigma_x$ 与 $\mathbf{k}$ 无关. 可以看到, 无序强度 W 的增大使得原来在半狄拉克点处的单节点逐渐分离为两个以 $(\pm\sqrt{2m|\text{Re}\Sigma_x(0)|/\hbar^2}, 0)$ 为坐标的节点. 最终自能分量的实部 $\text{Re}\Sigma_0$ 和 $\text{Re}\Sigma_x$ 仍没有破坏系统的能谱 PHS.

如图4(b)和图4(d)所示, $\text{Im}\Sigma_0$ 和 $\text{Im}\Sigma_x$ 随着无序强度 W 的增强而单调增加, 这表明杂质散射

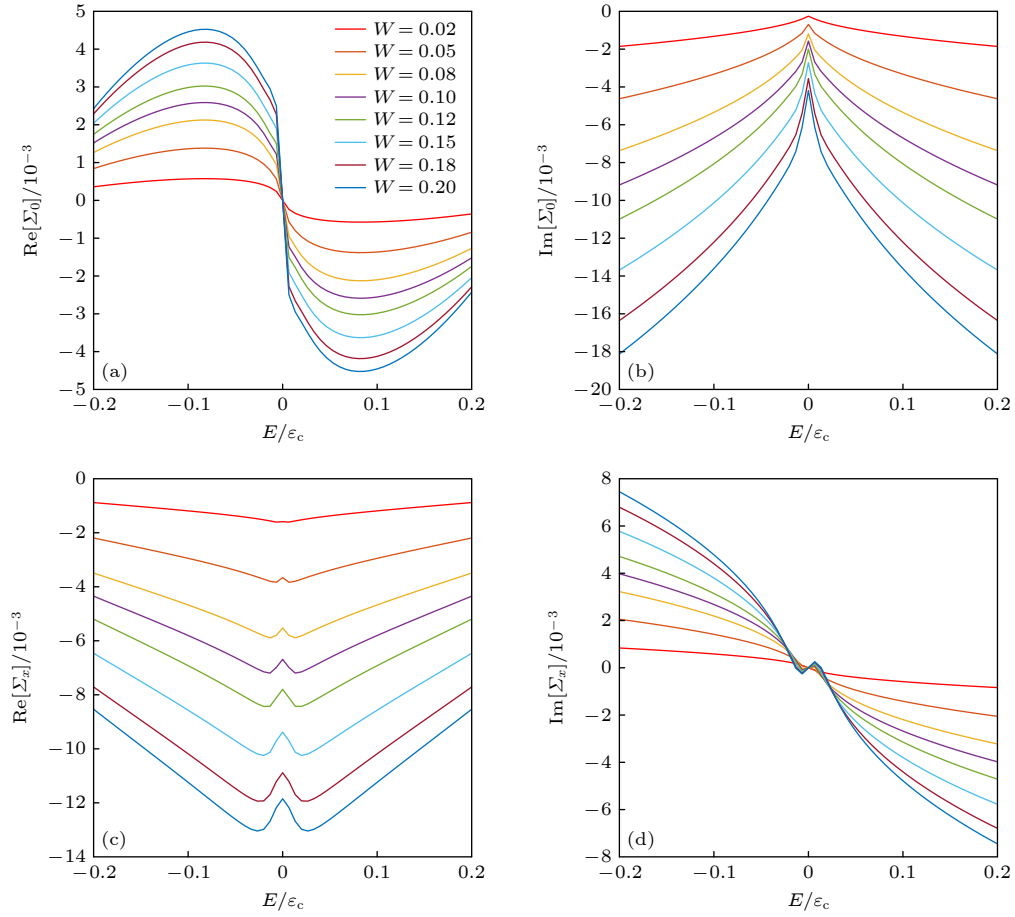


图 4 自能分量 Σ_0 和 Σ_x 的实部与虚部随费米能的变化 (a) Σ_0 的实部; (b) Σ_0 的虚部; (c) Σ_x 的实部; (d) Σ_x 的虚部
 Fig. 4. Real and imaginary parts of the self-energy components Σ_0 and Σ_x as functions of the Fermi energy: (a) Real part of Σ_0 ; (b) imaginary part of Σ_0 ; (c) real part of Σ_x ; (d) imaginary part of Σ_x .

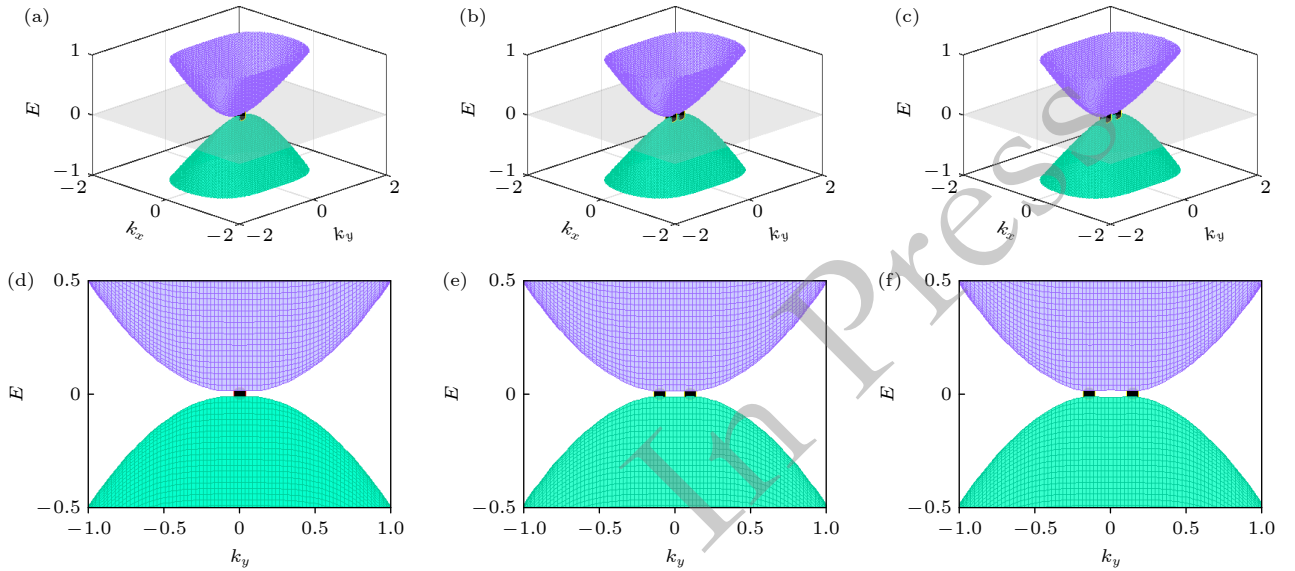


图 5 不同 $\text{Re}\Sigma_x(0)$ 重整的半狄拉克能带示意图 (a) $\text{Re}\Sigma_x(0) = 0$; (b) $\text{Re}\Sigma_x(0) = -0.005$; (c) $\text{Re}\Sigma_x(0) = -0.01$.
 (d)–(f) 分别为 (a)–(c) 对应的沿 k_x 轴方向正视图
 Fig. 5. Renormalized semi-Dirac bands with different $\text{Re}\Sigma_x(0)$: (a) $\text{Re}\Sigma_x(0) = 0$; (b) $\text{Re}\Sigma_x(0) = -0.005$; (c) $\text{Re}\Sigma_x(0) = -0.01$.
 (d)–(f) Corresponding bands with views from k_x axis with respect to (a)–(c), respectively.

的增强会直接缩短粒子运输的弛豫时间, 从而准粒子的寿命逐渐缩短, 由海森伯不确定关系, 准粒子能谱的不确定度同时增大. 虽然准粒子和准空穴的寿命都被改变, 但由于 $\text{Im}\Sigma_0$ 的偶函数性 (图 4(b)) 和 $\text{Im}\Sigma_x$ 的奇函数性 (图 4(d)), 准粒子和准空穴的能谱展宽具有一样的重整, 因此系统仍然保持 PHS.

下面首先讨论零能半狄拉克点的输运性质, 图 6(d) 给出了半狄拉克点纵向电导率 $\sigma_{xx}(0)$ 随无序强度 W 的变化. 在弱无序下 (约 $W < 0.1$), $\sigma_{xx}(0)$ 接近图 6(c) 中的干净极限值, 在 $4e^2/\pi h$ 附近, 随 W 的增大仅缓慢下降; 进入中等无序区后下降加速; 而当 $W > 1$, 曲线显著放缓并逐渐趋向一个与无序近乎无关的饱和值, 约为 $0.2e^2/h$, 在整个计算范围内未趋于零. 这一饱和行为源于相对性狄拉克费米子的克莱因隧穿的量子本征性质 [57].

在过去的这些年, 狄拉克点的最小电导率已经被深入研究, 包括散射无关的最小电导率 $4e^2/\pi h$ [58–61]、量子临界产生的最小电导率 $4e^2/h$ [62,63]、短程无序相关的最小电导率 [64–68] 以及最新的长程无序依赖的最小电导率 [27]. 然而沿抛物线色散方向的纵向电导率 $\sigma_{yy}(0)$ 始终是 0 (图 6(c)). 然后讨论整个能量范围的纵向输运性质. 图 6(a) 给出了不同无序强度下纵向电导率 σ_{xx} 随能量的变化函数, 可以看到 σ_{xx} 具有能量的偶函数性, 随着无序强度 W 的增大, 纵向电导率在非零的能量区域被压缩, 然而零能附近的纵向电导率变化很小, 仍处在 $4e^2/\pi h$ 附近. 图 6(b) 给出了不同无序强度下纵向电导率 σ_{yy} 随能量的变化函数, 首先零能附近的纵向电导率始终为零, 说明零能的薛定谔费米子不具备狄拉克费米子的克莱因隧穿本质, 在非零的能量区域,

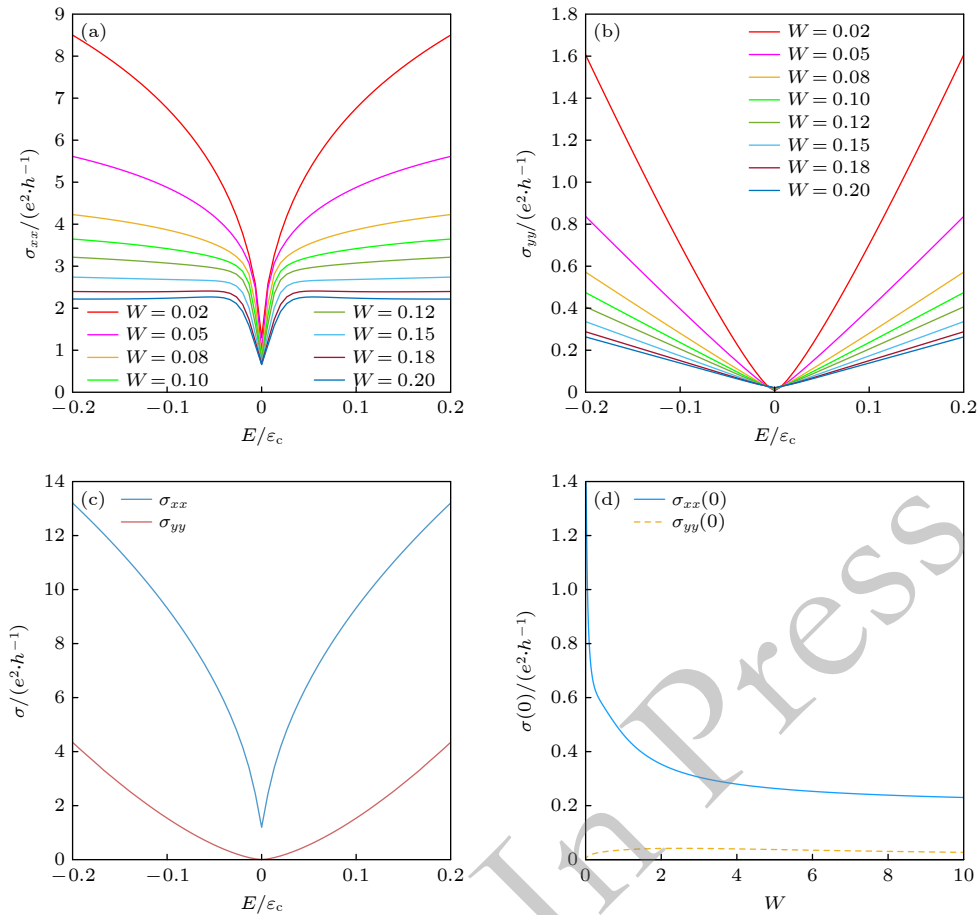


图 6 自洽玻恩近似下半狄拉克费米子的纵向电导率 (a) 不同无序强度下线性色散方向的纵向电导率; (b) 不同无序强度下抛物线色散方向的纵向电导率; (c) 清洁极限下的纵向电导率; (d) 最小电导率随杂质散射强度变化

Fig. 6. Longitudinal conductivity of semi-Dirac fermions within the self-consistent Born approximation: (a) Longitudinal conductivity along the linear dispersion direction under different disorder strengths; (b) longitudinal conductivity along the parabolic dispersion direction under different disorder strengths; (c) longitudinal conductivity in the clean limit; (d) minimal conductivity as a function of the impurity scattering strength.

σ_{yy} 呈现出随能量近线性的变化关系, 随着无序强度 W 的增大, 纵向电导率 σ_{yy} 在非零的能量区域也被极大地压缩。

5.3 弱场霍尔效应

图 7 给出了弱场霍尔电导率的自洽玻恩近似的数值计算结果. 可以看到随着费米能从负能区向正能区变化, 霍尔电导率呈现出奇函数特性, 这是 PHS 约束的结果, 而且在两个区域的分界面发生符号反转, 表明栅压扫描经过狄拉克点时, 载流子类型从空穴型变为电子型, 这符合弱场霍尔电导率的基本性质 [26,29,69]. 随着无序强度的增大, 霍尔电导率的绝对值减小, 这是杂质散射对电子输运抑制的结果, 这个性质符合纵向电导率和横向电导率在杂质散射输运下的一般规律。

图 8(a) 给出了费米面附近传导电子在弱磁场下的输运行为, 即半经典图像中电导率的主要来源, 符合玻尔兹曼输运理论的框架. 并且由于费米面附近空穴和电子的简并性, 费米面电子贡献的霍尔电导率随栅压的变化具有中心对称性, 反映了 PHS. 图 8(b) 给出了费米海电子在弱磁场下的输运行为, 我可以看到费米海电子主要贡献在零能附近, 它们对霍尔电导率的贡献小于费米面电子的贡献, 且满足系统 PHS 的约束. 随着无序强度的增大, 两种霍尔电导率的绝对值都减小。

6 总 结

本文系统研究了短程无序散射下半狄拉克费

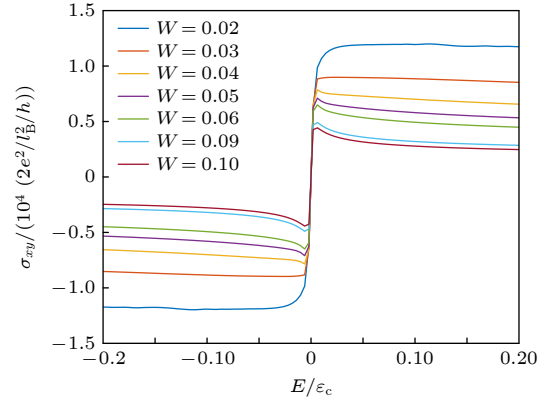


图 7 不同无序强度 W 下的弱场霍尔电导率 σ_{xy} 随费米能的变化

Fig. 7. Weak-field Hall conductivity σ_{xy} as a function of the Fermi energy under different disorder strengths W .

米子的对称性约束和量子输运性质. 通过建立自洽玻恩近似下的格林函数和电导率形式, 并结合 Kubo 公式, 给出了完整的对称性约束输运理论框架. 基于对称性分析, 发现无序体系的半狄拉克费米子具有三种内禀对称性和动量-赝自旋复合空间对称性. 在二维情况下, 它们属于 Altland-Zirnbauer(AZ) 分类里面的 BDI 平庸类. 这些对称性约束将自能和顶角的自洽方程限制为简单的标量方程, 特别是抛物线色散方向的电流顶角甚至没有重整化. 在对称性约束的输运理论框架下, 系统研究了无序产生的自能对半狄拉克费米子能谱和寿命的重整化性质, 计算结果表明自能的实部和虚部都保持了 PHS 特征, 无序的增强会导致系统从 Lifshitz 相变临界点的半狄拉克金属相转变到双节

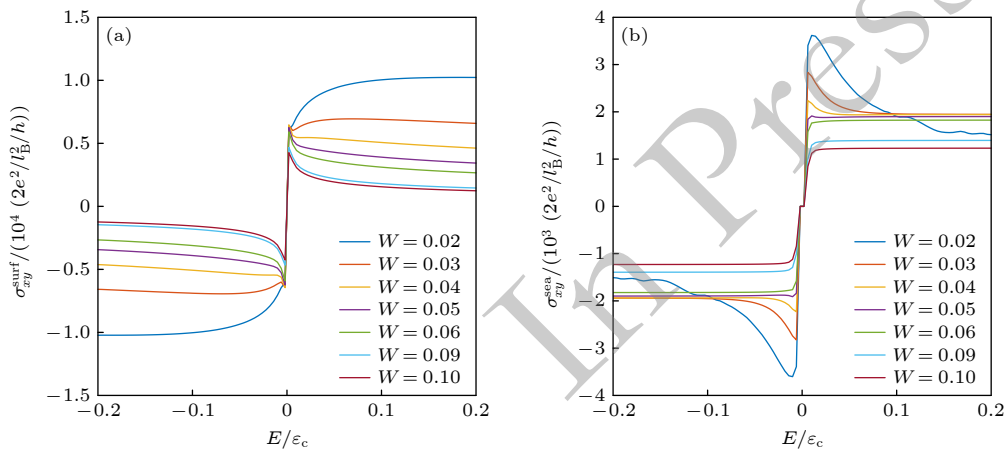


图 8 弱场霍尔电导率 σ_{xy} 随能量的变化函数 (a) 费米面电子的贡献; (b) 费米海电子的贡献

Fig. 8. Weak-field Hall conductivity as functions of energy: (a) Contribution from the Fermi surface electrons; (b) contribution from the Fermi sea electrons.

点半金属相. 在线性色散方向, 零能附近的纵向电导率具有一个接近 $4e^2/\pi h$ 的最小值, 且无序的增强没有使其消失, 然而在抛物线色散方向零能附近的纵向电导率始终为零. 在偏离零能的能量范围, 纵向电导率呈现出显著的各向异性, 且随着无序的增强都会明显被抑制. 体系的霍尔电导率随能量的变化呈现出奇函数特性, 这体现了系统的能谱 PHS. 针对霍尔电导率的数值计算结果表明费米海的霍尔电导贡献主要集中在零能附近, 相对于费米

海的霍尔电导贡献, 费米面的霍尔电导起主导作用. 随着无序强度的增大, 两种霍尔电导率的大小都减小.

附录A 弱场霍尔电导率的具体表达式

与图 3(a)—(d) 和图 4(a)—(l) 对应, 霍尔电导率函数 Φ_{xy} 和 Ξ_{xy} 的具体形式分别如以下公式所示:

$$\begin{aligned} \Phi_{xy}(E) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \text{ImTr} [& \mathcal{G}(-)\Gamma_x(-+)\mathcal{G}(+)\Gamma_y(++)\mathcal{G}(+)\Gamma_{xy}(++-) \\ & + \mathcal{G}(-)\Gamma_x(-+)\mathcal{G}(+)\Gamma_{yx}(+++)\mathcal{G}(+)\Gamma_y(+ -) \\ & - \mathcal{G}(-)\Gamma_x(-+)\mathcal{G}(+)\Gamma_y(++)\mathcal{G}(+)\Gamma_x(++)\mathcal{G}(+)\Gamma_y(+ -)], \end{aligned} \quad (\text{A1})$$

$$\begin{aligned} \Xi_{xy}(E) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \text{ImTr} [& \mathcal{G}(+)\Gamma_0(++)\mathcal{G}(+)\Gamma_{yx}(+++)\mathcal{G}(+)\Gamma_{yx}(+++) \\ & + \Gamma_{x0}(+++)\mathcal{G}(+)\Gamma_y(++)\mathcal{G}(+)\Gamma_{xy}(+++)\mathcal{G}(+) \\ & + \mathcal{G}(+)\Gamma_{0y}(+++)\mathcal{G}(+)\Gamma_x(++)\mathcal{G}(+)\Gamma_{yx}(+++) \\ & + \Gamma_{x0}(+++)\mathcal{G}(+)\Gamma_{yx}(+++)\mathcal{G}(+)\Gamma_y(++)\mathcal{G}(+) \\ & + \Gamma_x(++)\mathcal{G}(+)\Gamma_{0y}(+++)\mathcal{G}(+)\Gamma_{xy}(+++)\mathcal{G}(+) \\ & - \Gamma_x(++)\mathcal{G}(+)\Gamma_0(++)\mathcal{G}(+)\Gamma_y(++)\mathcal{G}(+)\Gamma_{xy}(+++)\mathcal{G}(+) \\ & - \Gamma_x(++)\mathcal{G}(+)\Gamma_0(++)\mathcal{G}(+)\Gamma_{yx}(+++)\mathcal{G}(+)\Gamma_y(++)\mathcal{G}(+) \\ & - \Gamma_x(++)\mathcal{G}(+)\Gamma_{0y}(+++)\mathcal{G}(+)\Gamma_x(++)\mathcal{G}(+)\Gamma_y(++)\mathcal{G}(+) \\ & - \Gamma_{x0}(+++)\mathcal{G}(+)\Gamma_y(++)\mathcal{G}(+)\Gamma_x(++)\mathcal{G}(+)\Gamma_y(++)\mathcal{G}(+) \\ & - \mathcal{G}(+)\Gamma_0(++)\mathcal{G}(+)\Gamma_y(++)\mathcal{G}(+)\Gamma_x(++)\mathcal{G}(+)\Gamma_{yx}(+++) \\ & + \Gamma_x(++)\mathcal{G}(+)\Gamma_0(++)\mathcal{G}(+)\Gamma_y(++)\mathcal{G}(+)\Gamma_x(++)\mathcal{G}(+)\Gamma_y(++)\mathcal{G}(+)], \end{aligned} \quad (\text{A2})$$

其中“+,-”分别代表能量在复平面的解析延拓的方向, 即 $E + i0, E - i0$, 与推迟超前指标是分别严格对应的. 在 (A2) 式中, 顶角函数下标“0”代表密度顶角.

附录B 从 Kubo 公式到费米面和费米海电导率

费米面项

从线性响应理论出发, 电导率张量可由 Kubo 公式的电流电流关联函数表示为零温零频极限下推迟和超前格林函数的乘积形式, 详见文献 [70,71]. 经标准推导, Streda 将电导率张量分解为两项 [72]:

$$\tilde{\sigma}_{ij} = \tilde{\sigma}_{ij}^I + \tilde{\sigma}_{ij}^{II}, \quad (\text{B1})$$

其中

$$\tilde{\sigma}_{ij}^I = \frac{e^2 \hbar}{4\pi V} \text{Tr} \langle v_i (G^R - G^A) v_j G^A - v_i G^R v_j (G^R - G^A) \rangle_c |_{\varepsilon = \varepsilon_F}, \quad (\text{B2})$$

$$\tilde{\sigma}_{ij}^{II} = -\frac{e^2}{4i\pi V} \text{Tr} \langle (G^R - G^A) (r_i v_j - r_j v_i) \rangle_c |_{\varepsilon = \varepsilon_F}. \quad (\text{B3})$$

将 (B2) 进一步分解 [37]:

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{ij}^I &= \sigma_{ij}^{\text{surf}} + \sigma_{ij}^{\text{ol}}, \\ \sigma_{ij}^{\text{surf}} &= \frac{e^2 \hbar}{4\pi V} \text{Tr} \langle v_i (G^R - G^A) v_j (G^R - G^A) \rangle_c |_{\varepsilon_F}, \\ \sigma_{ij}^{\text{ol}} &= \frac{e^2 \hbar}{4\pi V} \text{Tr} \langle v_i G^R v_j G^A - v_i G^A v_j G^R \rangle_c |_{\varepsilon_F}. \end{aligned} \quad (\text{B4})$$

其中 V 为系统体积 (三维体系) 或面积 (二维体系), $\sigma_{ij}^{\text{surf}}$ 关于指标 (i, j) 交换对称, 描述费米面附近电子的扩散输运, 可退化为半经典的玻尔兹曼电导率 [48]; σ_{ij}^{ol} 关于指标交换反对称, 亦被称为交叠项.

费米海项

在 (B3) 中保留位置算符的非对易性, 通过恒等式 $\partial_\varepsilon G^{R/A} = -(G^{R/A})^2$ 及对易关系 $v_k = -\frac{i}{\hbar} [G^{-1}, r_k]$, 可将 $\tilde{\sigma}_{ij}^{II}$ 分解为

$$\tilde{\sigma}_{ij}^{II} = \sigma_{ij}^{\text{sea}} - \sigma_{ij}^{\text{ol}}, \quad (\text{B5})$$

其中费米海项 σ_{ij}^{sea} 经代数化简后为 [37,48]

$$\sigma_{ij}^{\text{sea}} = \frac{e^2}{2\pi\hbar V} \int d\varepsilon f(\varepsilon) \text{Tr}[(G^{\text{R}} - G^{\text{A}})[r_i, r_j]]_{\text{c}}, \quad (\text{B6})$$

其中 $f(\varepsilon) = 1/[\exp((\varepsilon - \mu)/k_{\text{B}}T) + 1]$ 为 Fermi-Dirac 分布函数, 在零温极限下退化为阶跃函数 $f(\varepsilon) = \Theta(\varepsilon_{\text{F}} - \varepsilon)$. 此时交叠项 σ_{ij}^{ol} 被精确抵消. 利用 $G^{\text{R}} - G^{\text{A}} = -2\pi i \delta(\varepsilon - H)$ 并在布洛赫基矢 $\{|n\mathbf{k}\rangle\}$ 下求迹, 结合 $i\hbar\langle n\mathbf{k}|v_k|m\mathbf{k}\rangle = (\varepsilon_{n\mathbf{k}} - \varepsilon_{m\mathbf{k}})\langle n\mathbf{k}|r_k|m\mathbf{k}\rangle$, 得到

$$\sigma_{ij}^{\text{sea}} = -ie^2\hbar \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \sum_n f_{n\mathbf{k}} \sum_{m \neq n} \frac{\langle n\mathbf{k}|v_i|m\mathbf{k}\rangle \langle m\mathbf{k}|v_j|n\mathbf{k}\rangle - (i \leftrightarrow j)}{(\varepsilon_{n\mathbf{k}} - \varepsilon_{m\mathbf{k}})^2}. \quad (\text{B7})$$

定义能带 n 的贝里曲率

$$\Omega_{n,ij}(\mathbf{k}) = i \sum_{m \neq n} \frac{\langle n\mathbf{k}|\partial_i H|m\mathbf{k}\rangle \langle m\mathbf{k}|\partial_j H|n\mathbf{k}\rangle - (i \leftrightarrow j)}{(\varepsilon_{n\mathbf{k}} - \varepsilon_{m\mathbf{k}})^2}, \quad (\text{B8})$$

其中 $\partial_i H = \partial H/\partial k_i = \hbar v_i$. 将 (B7) 式与 (B8) 式对比, 费米海项最终写为占据态贝里曲率的积分

$$\sigma_{ij}^{\text{sea}} = -\frac{e^2}{\hbar} \int_{\text{BZ}} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \sum_n f_{n\mathbf{k}} \Omega_{n,ij}(\mathbf{k}). \quad (\text{B9})$$

此即内禀反常霍尔电导率的普适表达式. 由 (B8) 的式反对称性可知, 当 $i = j$ 时 $\sigma_{ii}^{\text{sea}} = 0$, 即费米海项对纵向电导率无贡献.

综上, 零温零频极限下电导率张量最终分解为

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^{\text{surf}} + \sigma_{ij}^{\text{sea}}, \quad (\text{B10})$$

其中 $\sigma_{ij}^{\text{surf}}$ 为费米面的扩散输运贡献, σ_{ij}^{sea} 为费米海的内禀几何贡献, 由占据态贝里曲率积分给出.

参考文献

- [1] Volovik G E 2001 *JETP Lett.* **73** 162
- [2] Dietl P, Piéchon F, Montambaux G 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 236405
- [3] Volovik G E 2017 *Low Temp. Phys.* **43** 47
- [4] Zeljkovic I, Okada Y, Huang C Y, Sankar R, Walkup D, Zhou W, Serbyn M, Chou F, Tsai W F, Lin H, Bansil A, Fu L, Hasan M, Madhavan V 2014 *Nat. Phys.* **10** 572
- [5] Montambaux G, Piéchon F, Fuchs J N, Goerbig M O 2009 *Phys. Rev. B* **80** 153412
- [6] Montambaux G, Piéchon F, Fuchs J N, Goerbig M O 2009 *Eur. Phys. J. B* **72** 509
- [7] Banerjee S, Singh R R P, Pardo V, Pickett W E 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 016402
- [8] Pardo V, Pickett W E 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 166803
- [9] Goerbig M O, Fuchs J N, Montambaux G, Piéchon F 2008 *Phys. Rev. B* **78** 045415
- [10] Tarruell L, Greif D, Uehlinger T, Jotzu G, Esslinger T 2012 *Nature* **483** 302
- [11] Makino T, Katagiri Y, Ohata C, Nomura K, Haruyama J 2017 *RSC Adv.* **7** 23427
- [12] Shao Y, Moon S, Rudenko A N, Wang J, Herzog-Arbeitman J, Ozerov M, Graf D, Sun Z, Queiroz R, Lee S H, Zhu Y, Mao Z, Katsnelson M I, Bernevig B A, Smirnov D, Millis A J, Basov D N 2024 *Phys. Rev. X* **14** 041057
- [13] Sriluckshmy P V, Saha K, Moessner R 2018 *Phys. Rev. B* **97** 024204
- [14] Saha K 2016 *Phys. Rev. B* **94** 081103
- [15] Islam S F, Saha A 2018 *Phys. Rev. B* **98** 235424
- [16] Elsayed M M, Uchoa B, Kotov V N 2025 *Phys. Rev. B* **111** 165127
- [17] Olmos M G, Baba Y, Molina R A, Amado M 2026 ArXiv: 2604.22553[cond-mat.mes-hall]
- [18] Wang H W, Fu B, Shen S Q 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 177303 (in Chinese) [王焕文, 付博, 沈顺清 2023 物理学报 **72** 177303]
- [19] Adroguer P, Carpentier D, Montambaux G, Orignac E 2016 *Phys. Rev. B* **93** 125113
- [20] Ning Z, Fu B, Shi Q, Wang X 2020 *Chin. Phys. Lett.* **37** 117201
- [21] Ning Z, Fu B, Shi Q, Wang X 2020 *Phys. Rev. B* **102** 134207
- [22] Yang Z, Lv Z, Liu D, Ma D, Ma W, Liu Z 2026 *Nano Lett.* **26** 5282
- [23] Li M, Mei R, Yan D, Ma Z, Cao F, Xu Y, Xu C, Luo J 2024 *Phys. Rev. B* **109** 125432
- [24] Lee P A, Ramakrishnan T V 1985 *Rev. Mod. Phys.* **57** 287
- [25] Bruus H, Flensberg K 2004 *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction* (Oxford: Oxford University Press)
- [26] Shon N, Ando T 1998 *J. Phys. Soc. Jpn.* **67** 2421
- [27] Chen W, Shen Y, Fu B, Shi Q, Zhu W 2023 *Phys. Rev. B* **108** 174205
- [28] Noro M, Koshino M, Ando T 2010 *J. Phys. Soc. Jpn.* **79** 094713
- [29] Fukuzawa T, Koshino M, Ando T 2009 *J. Phys. Soc. Jpn.* **78** 094714
- [30] Kikuchi R, Yamakage A 2023 *Phys. Rev. B* **108** 085204
- [31] Kikuchi R, Yamakage A 2025 *Phys. Rev. B* **111** 125201
- [32] Suzuura H, Ando T 2016 *Phys. Rev. B* **94** 035302
- [33] Hutchinson J, Maciejko J 2018 *Phys. Rev. B* **98** 195305
- [34] Ando T, Suzuura H 2017 *J. Phys. Soc. Jpn.* **86** 014701
- [35] Chiu C K, Teo J C Y, Schnyder A P, Ryu S 2016 *Rev. Mod. Phys.* **88** 035005
- [36] Kubo R 1957 *J. Phys. Soc. Jpn.* **12** 570
- [37] Bonbien V, Manchon A 2020 *Phys. Rev. B* **102** 085113
- [38] Nomura K, MacDonald A H 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 076602
- [39] Adam S, Brouwer P W, Das Sarma S 2009 *Phys. Rev. B* **79** 201404
- [40] Fukuyama H, Ebisawa H, Wada Y 1969 *Prog. Theor. Phys.* **42** 494
- [41] Fukuyama H 1969 *Prog. Theor. Phys.* **42** 1284
- [42] Noro M, Ando T 2016 *J. Phys. Soc. Jpn.* **85** 014708
- [43] Könye V, Ogata M 2025 *Phys. Rev. B* **112** 125409
- [44] Niwa H, Obata M, Kotani T, Oda T 2026 *Phys. Rev. B* **113** 155114
- [45] Morpurgo G, Berthod C, Giamarchi T 2025 *Phys. Rev. Res.* **7** 033038
- [46] Nagashima R, Ogata M, Tsuji N 2026 *Phys. Rev. Res.* **8** L012041
- [47] Ando T, Suzuura H 2017 *J. Phys. Soc. Jpn.* **86** 014709
- [48] Fujimoto J, Kohno H 2014 *Phys. Rev. B* **90** 214418
- [49] Kumar R R, Sarkar S 2020 *Ph. Transit.* **93** 287
- [50] de Gennes P G 1966 *Superconductivity of Metals and Alloys* (New York: W. A. Benjamin, Inc.). Reprinted by Westview Press, 1999
- [51] Chen W, Lu H Z, Zilberberg O 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 196603
- [52] Ludwig A W W 2015 *Phys. Scr.* **2016** 014001

- [53] Fang C, Gilbert M J, Bernevig B A 2012 *Phys. Rev. B* **86** 115112
- [54] Ando T 2014 *Physica E* **58** 6
- [55] Zheng Y, Ando T 2002 *Phys. Rev. B* **65** 245420
- [56] de L Kronig R 1926 *J. Opt. Soc. Am.* **12** 547
- [57] Katsnelson M I, Novoselov K S, Geim A K 2006 *Nat. Phys.* **2** 620
- [58] Peres N M R, Guinea F, Castro Neto A H 2006 *Phys. Rev. B* **73** 125411
- [59] Ostrovsky P M, Gornyi I V, Mirlin A D 2006 *Phys. Rev. B* **74** 235443
- [60] Katsnelson M I 2006 *Eur. Phys. J. B* **51** 157
- [61] Tworzydło J, Trauzettel B, Titov M, Rycerz A, Beenakker C W J 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 246802
- [62] Ostrovsky P M, Gornyi I V, Mirlin A D 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 256801
- [63] Bardarson J H, Tworzydło J, Brouwer P W, Beenakker C W J 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 106801
- [64] Adam S, Hwang E H, Galitski V M, Das Sarma S 2007 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **104** 18392
- [65] Kłos J W, Zozoulenko I V 2010 *Phys. Rev. B* **82** 081414
- [66] Radchenko T M, Shylau A A, Zozoulenko I V 2012 *Phys. Rev. B* **86** 035418
- [67] Suzuura H, Ando T 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 266603
- [68] Yan X Z, Ting C S 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 126801
- [69] Nakamura M, Hirasawa L 2008 *Phys. Rev. B* **77** 045429
- [70] Crépieux A, Bruno P 2001 *Phys. Rev. B* **64** 014416
- [71] Bastin A, Lewiner C, Betheder-matibet O, Nozieres P 1971 *J. Phys. Chem. Solids* **32** 1811
- [72] Streda P 1982 *J. Phys. C* **15** L717

SPECIAL TOPIC—The 80th Anniversary of Physics at Lanzhou University

Symmetry and transport properties of disordered semi-Dirac fermions^{*}

AN Jinke¹⁾ HAN Zhisong¹⁾ LI Weihao¹⁾ LIU Haojie¹⁾ WANG Yunhua^{1)2)†}¹⁾ (School of Physical Science and Technology, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China)²⁾ (Gansu Provincial Research Center for Basic Disciplines of Quantum Physics, Key Laboratory of Theoretical Physics of Gansu Province, Key Laboratory of Quantum Theory and Applications of MoE, Lanzhou Center for Theoretical Physics, Lanzhou 730000, China)

(Received 22 May 2026; revised manuscript received 21 June 2026)

Abstract

Disorders such as impurities or defects inevitably induce complex scatterings in realistic material systems. As a result, we need transport theories dealing with these disorder scatterings to compute electronic transports. The self-consistent Born approximation (SCBA) is an effective field-theoretical approach for weak disorders by incorporating scatterings into both self-energy and vertex corrections self-consistently. However, previous SCBA theory relies on isotropic assumptions and lacks a systematic symmetry analysis for anisotropic systems. Here we develop a symmetry-constrained SCBA (SCSCBA) framework for disordered semi-Dirac fermion systems by combining joint space symmetries consisting of both momentum and pseudospin space with intrinsic discrete symmetries including particle-hole symmetry (PHS), time-reversal symmetry (TRS) and chiral symmetry (CS). Through symmetry constraints we reduce self-energy, single current-vertex and double current-vertex tensors into a few scalar algebraic equations, thereby greatly simplifying self-consistent calculations on transport properties. Applying SCSCBA, we systematically investigate the self-energy, band renormalization, vertex corrections, longitudinal conductivity, and Hall conductivity of disordered semi-Dirac fermion systems. We find that, (i) both the real and imaginary parts of the self-energy preserve the PHS, and the increased disorder strength drives the initial semi-Dirac metallic phase into two-node semimetals through the Lifshitz transition; (ii) For longitudinal conductivity, along the linear-dispersion direction there exists a robust minimum close to $4e^2/\pi h$ near zero energy reflecting the underlying Klein-tunneling nature of Dirac fermions, whereas the conductivity along the quadratic-dispersion direction vanishes at zero energy, manifesting a remarkable anisotropy; (iii) The weak-field Hall conductivity exhibits an odd function feature with energy, and the Fermi-surface contribution plays the dominant role in the Hall response, compared with the Fermi-sea contribution; (iv) Away from zero energy, both longitudinal and Hall conductivities are significantly suppressed by disorders. The suggested SCSCBA perspective can also be extended into other anisotropic systems.

Keywords: semi-Dirac fermions, self-consistent Born approximation, symmetry, weak-field Hall effect**DOI:** [10.7498/aps.75.20260737](https://doi.org/10.7498/aps.75.20260737)**CSTR:** [32037.14.aps.75.20260737](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20260737)

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12247101), the Fundamental Research Fund for the Central Universities, China (Grant No. lzujbky-2025-jdxx07), the Natural Science Foundation of Gansu Province, China (Grant No. 22JR5RA389, 25JRRA799), and the 111 Center, China (Grant No. B20063).

[†] Corresponding author. E-mail: wangyunhua@lzu.edu.cn