

Rashba 自旋轨道耦合下 square-octagon 晶格的拓扑相变

杨圆 陈帅 李小兵

Topological phase transitions in square-octagon lattice with Rashba spin-orbit coupling

Yang Yuan Chen Shuai Li Xiao-Bing

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 67, 237101 (2018) DOI: 10.7498/aps.67.20180624

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20180624>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I23>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[新型 4d/5d 基超导体的结构和物性](#)

Crystal structures and physical properties of novel 4d/5d based superconductors

物理学报.2018, 67(12): 127101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20180767>

[外加电场和 Al 组分对纤锌矿 AlGaN/GaN 量子阱中的电子 g 因子的影响](#)

Effects of external electric field and Al content on g factor of wurtzite AlGaN/GaN quantum wells

物理学报.2018, 67(5): 057101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20172213>

[Al_{0.6}Ga_{0.4}N/GaN/Al_{0.3}Ga_{0.7}N/Al_{0.6}Ga_{0.4}N 量子阱中的 Rashba 自旋劈裂](#)

Rashba spin splitting in the Al_{0.6}Ga_{0.4}N/GaN/Al_{0.3}Ga_{0.7}N/Al_{0.6}Ga_{0.4}N quantum well

物理学报.2016, 65(9): 097101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.097101>

[强自旋轨道耦合化合物 Sr_{2-x}La_xIrO₄ 的掺杂和拉曼谱学](#)

Doping and Raman scattering of strong spin-orbit-coupling compound Sr_{2-x}La_xIrO₄

物理学报.2015, 64(20): 207103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.207103>

[HF⁺ 离子在旋轨耦合作用下电子态的特性](#)

The characteristics of excited states for HF⁺ ion under spin-orbit coupling

物理学报.2014, 63(12): 127102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.127102>

Rashba自旋轨道耦合下square-octagon晶格的拓扑相变*

杨圆^{1)2)†} 陈帅¹⁾ 李小兵¹⁾

1) (江苏科技大学张家港校区, 张家港 215600)

2) (南京大学, 固体微结构物理国家重点实验室, 南京 210093)

(2018年4月9日收到; 2018年10月2日收到修改稿)

本文研究了各向同性square-octagon晶格在内禀自旋轨道耦合、Rashba自旋轨道耦合和交换场作用下的拓扑相变, 同时引入陈数和自旋陈数对系统进行拓扑分类. 系统在自旋轨道耦合和交换场的影响下会出现许多拓扑非平庸态, 包括时间反演对称破缺的量子自旋霍尔态和量子反常霍尔态. 特别的是, 在时间反演对称破缺的量子自旋霍尔效应中, 无能隙螺旋边缘态依然能够完好存在. 调节交换场或者填充因子的大小会导致系统发生从时间反演对称破缺的量子自旋霍尔态到自旋过滤的量子反常霍尔态的拓扑相变. 边缘态能谱和自旋谱的性质与陈数和自旋陈数的拓扑刻画完全一致. 这些研究成果为自旋量子操控提供了一个有趣的途径.

关键词: 量子自旋霍尔效应, 自旋轨道耦合, 拓扑相变

PACS: 71.70.Ej, 73.20.At, 73.43.-f

DOI: 10.7498/aps.67.20180624

1 引言

拓扑绝缘体是一种新的量子物质态, 其体电子态是有能隙的绝缘态, 而其边界或表面是无能隙的金属态^[1-5], 这种金属态是由能带结构的拓扑性质决定的, 受到时间反演对称性的保护. 量子自旋霍尔效应, 即二维的拓扑绝缘体, 是通过自旋轨道耦合来实现的, 其拓扑性质可以由 Z_2 不变量^[6,7]或者自旋陈数^[8-10]刻画. 对于时间反演对称的电子系统, Z_2 指标和自旋陈数给出完全等价的描述. 但是在时间反演对称性被破坏的情况下, 将无法定义 Z_2 拓扑不变量, 而自旋陈数的鲁棒性依然保持不变^[8]. 最近, 自旋陈数被用于描述交换场作用下量子自旋霍尔效应的拓扑性质^[11]. 研究结果发现, 在时间反演对称性被破坏后, 量子自旋霍尔态的非平庸拓扑性质仍然存在. 这种时间反演对称破缺的量子

自旋霍尔效应在弱无序情况下, 其边界上的螺旋边缘态结构依然是稳定的. 实验上也在InAs/GaSb量子阱中证实了时间反演对称性破缺的量子自旋霍尔效应的稳定性^[12].

石墨烯的内禀自旋轨道耦合强度非常弱^[13-15], 而破坏镜面对称性的外禀Rashba自旋轨道耦合作用也不利于实现量子自旋霍尔效应^[6]. 但是, 在石墨烯中通过引入Rashba自旋轨道耦合和破坏时间反演对称性的交换场, 可以实现一种无朗道能级的量子霍尔效应, 即量子反常霍尔效应^[16,17]. 量子反常霍尔效应边缘态具有手征的特征. 当Rashba自旋轨道耦合和交换场同时存在时, 人们在kagome晶格^[18], star晶格^[19]和Lieb^[20]晶格中也发现了量子反常霍尔态.

在HgTe/CdTe量子阱中发现量子自旋霍尔效应之后, 一些新的二维拓扑绝缘体也相继被提出, 比如kagome晶格^[21]、修饰的蜂窝状晶格^[22]和单

* 国家自然科学基金(批准号: 11647145)、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: M31024)和江苏省高校自然科学基金研究项目(批准号: 16KJB430012)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yuanyangnju@126.com

层梯异质结构等^[23]. 近年来, square-octagon 晶格凭借其独特的几何结构吸引了一些理论工作者的研究兴趣, 并得到了许多有意义的结果^[24–30]. 例如, Kargarian 和 Fiete^[24] 研究了具有自旋轨道耦合的 square-octagon 晶格中的拓扑相; Bao 等^[26,27] 利用团簇动力学平均场理论和连续时间量子蒙特卡罗算法, 描述了温度和相互作用对 square-octagon 晶格中电子行为的影响. 然而到目前为止, Rashba 自旋轨道耦合作用和交换场对 square-octagon 晶格的拓扑性质的影响还未被研究. 另一方面, 随着实验条件的改善和实验技术的发展, 二维蜂窝状六角晶格^[31] 和 kagome 晶格^[32] 可以通过操纵光晶格中的超冷原子来构建, 因此我们相信 square-octagon 晶格在不久的将来能够在实验中得到实现. 特别是, 实验上发现功能材料 ZnO 具有准 square-octagon 结构^[33]. 因此, 本文将研究各向同性 square-octagon 晶格在内禀自旋轨道耦合、Rashba 自旋轨道耦合和交换场作用下的拓扑相变, 本工作的研究能够加深对 square-octagon 晶格以及准 square-octagon 结构材料的认识.

本文将证明考虑 Rashba 自旋轨道耦合作用和交换场时, 各向同性 square-octagon 晶格也会支持量子自旋霍尔效应的存在, 并且处于不同填充因子时可以实现不同的拓扑相. 利用陈数和自旋陈数确定系统的拓扑性质, 同时为了验证各种拓扑相的存在, 计算了 square-octagon 晶格的边缘态能谱以及自旋性质. 计算结果表明, 在镜面对称性和时间反演对称性都被破坏的情况下, 量子自旋霍尔效应中边缘态的能谱可以是无能隙的, 而其对应的自旋谱存在着谱隙. 进一步调节交换场的大小, 系统会发生从螺旋边缘态到自旋过滤的手征边缘态的拓扑相变, 这为自旋量子调控提供了一种新的思路.

2 模型和方法

2.1 紧束缚模型

本文考虑的晶格结构如图 1(a) 所示. 1, 2, 3, 4 表示一个原胞内的四个不等价原子, 与其对应的第一布里渊区如图 1(b) 所示, 高对称点为 Γ , X 和 M , 紧束缚哈密顿量可以表示为^[1,6,24,30]

$$H = H_0 + H_I + H_R + H_g, \quad (1)$$

其中

$$H_0 = -t_1 \sum_{i,j \in \square, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - t_2 \sum_{\square \rightarrow \square, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}, \quad (2)$$

$$H_I = i\lambda_I \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} c_i^\dagger (\mathbf{e}_{ij} \cdot \boldsymbol{\sigma}) c_j, \quad (3)$$

$$H_R = i\lambda_R \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{d}_{ij}) c_j, \quad (4)$$

$$H_g = g \sum_i c_i^\dagger \sigma_z c_i, \quad (5)$$

这里 $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) 表示格点 i 上费米子的产生 (湮灭) 算符, $\sigma = \uparrow$ 或 \downarrow 表示自旋取向. H_0 中的第一项 t_1 和第二项 t_2 分别代表同一四方形单元上最近邻格点之间的跃迁和最近邻两个四方形单元最近邻格点之间的跃迁. 哈密顿量 H_I 是内禀自旋轨道耦合作用项, λ_I 是耦合强度, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 是泡利矩阵矢量. 单位矢量 $\mathbf{e}_{ij} = (\mathbf{d}_{kj} \times \mathbf{d}_{ik}) / |\mathbf{d}_{kj} \times \mathbf{d}_{ik}|$, \mathbf{d}_{kj} 和 \mathbf{d}_{ik} 是电子从格点 j 跃迁到格点 i 时沿着跃迁方向的次近邻的两个键的方向矢量. 第三项 H_R 表示 Rashba 自旋轨道耦合, 大小用 λ_R 表示. 最后一项 H_g 表示强度为 g 的交换场. 取 $t_1 = t_2 = t$, 以下计算中的能量均以 t 为单位. 为简单起见, 原胞基矢的长度 a 取为 1.

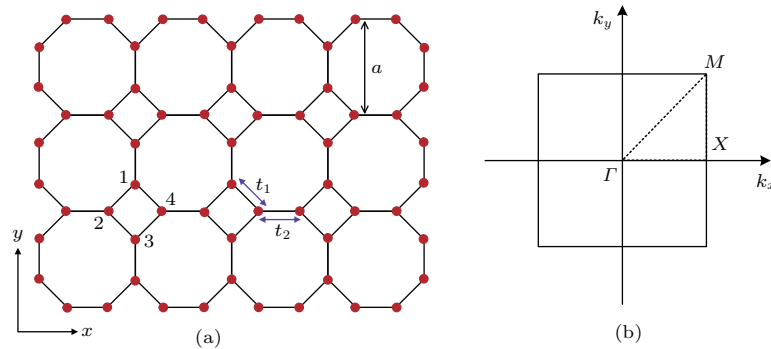


图 1 Square-octagon 晶格 (a) 结构示意图; (b) 第一布里渊区

Fig. 1. Square-octagon lattice: (a) Structure sketch; (b) the first Brillouin zone.

在傅里叶变换下, 选择基矢量

$\Psi_k = (c_{1k\uparrow}, c_{2k\uparrow}, c_{3k\uparrow}, c_{4k\uparrow}, c_{1k\downarrow}, c_{2k\downarrow}, c_{3k\downarrow}, c_{4k\downarrow})^T$,
实空间哈密顿量在动量空间可以写成 $H = \Psi_k^\dagger \mathbf{H}(\mathbf{k}) \Psi_k$. $\mathbf{H}(\mathbf{k})$ 表示为

$$\mathbf{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_k + g\mathbf{I}_{4 \times 4} & \mathbf{R}_k \\ \mathbf{R}_k^\dagger & \mathbf{H}_{-k}^* - g\mathbf{I}_{4 \times 4} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

其中 $\mathbf{I}_{4 \times 4}$ 为 4×4 单位矩阵, \mathbf{H}_k 和 \mathbf{R}_k 的具体形式如下

$$\mathbf{H}_k = \begin{pmatrix} 0 & T_1^* - I_2^* & T_y & T_2 - I_1 \\ T_1 - I_2 & 0 & T_2 + I_1 & T_x^* \\ T_y^* & T_2^* + I_1^* & 0 & T_1 + I_2 \\ T_2^* - I_1^* & T_x & T_1^* + I_2^* & 0 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

$$\mathbf{R}_k = \begin{pmatrix} 0 & (1+i)R_1^* & R_y & (1-i)R_2 \\ (1+i)R_1 & 0 & (1-i)R_2 & iR_x^* \\ R_y^* & (1-i)R_2^* & 0 & (1+i)R_1 \\ (1-i)R_2 & iR_x & (1+i)R_1^* & 0 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

其中

$$T_u = -t_2 t_{2u}, \quad T_1 = -t_1 t_{1x} t_{1y}, \quad T_2 = -t_1 t_{1x} t_{1y}^*,$$

$$I_1 = i\lambda_I (t_{1x} s_y + t_{1y}^* s_x^*), \quad I_2 = i\lambda_I (t_{1x} s_y^* + t_{1y} s_x^*),$$

$$R_u = -i\lambda_R c_2 t_{2u}, \quad R_1 = -i\lambda_R c_1 t_{1x} t_{1y},$$

$$R_2 = i\lambda_R c_1 t_{1x} t_{1y}^*,$$

这里定义参数 $c_2 = \sqrt{2}c_1 = \sqrt{2} - 1$, $t_{ju} = e^{ik_u c_j}$, $s_u = e^{ik_u \frac{\sqrt{2}}{2}}$, 其中 $j = 1, 2$ 和 $u = x, y$.

2.2 自旋陈数和边缘态

随着对拓扑绝缘体的深入研究, 可以根据不同的拓扑不变量对绝缘态进行分类. 本文采用的拓扑不变量是陈数和自旋陈数. 量子霍尔系统的拓扑不变量由陈数来表征, 但对量子自旋霍尔系统, 需要通过 Z_2 拓扑数或者自旋陈数来刻画. 对于时间反演对称的系统, 自旋陈数和 Z_2 指标是完全等价的. 但是在时间反演对称性被破坏后, 不再定义 Z_2 拓扑数, 而自旋陈数不依赖于任何对称性, 因此可以利用自旋陈数的概念, 定义自旋陈数 $C_s = (C_+ - C_-)/2$, 其中 C_\pm 是自旋 $s_z = \pm 1$ 的能带在第一布里渊区的 Berry 相位除以 2π [8-10]. 自旋陈数被两个谱隙所保护, 一个是导带和价带之

间的带隙, 另一个是自旋谱隙. 自旋谱隙指的是自旋投影算符 $P\sigma_z P$ 本征值的谱隙. 只要满足体能隙和自旋谱隙不为零, 都可以定义自旋陈数. 这里陈数 $C = C_+ - C_-$ 的计算可以采用已经发展成熟的数值方法 [34,35]. 另一方面, 研究系统的拓扑相变的另外一个有效的方法是计算边缘态的能谱, 拓扑绝缘体的边缘态也直接跟体能带的拓扑性质有关 [36,37]. 为了研究边缘态的性质, 计算一个二维纳米带的能谱, 其中 y 方向宽度为 50 个原胞, x 方向为无限长, 因此 x 方向的动量 k_x 是好量子数. 对于每一个动量值 k_x , 通过精确对角化系统的哈密顿量 $\mathbf{H}(k_x)$, 可以得到能谱 $E(k_x)$ 和对应的波函数 $|\phi_m(k_x)\rangle$. 边缘态的自旋极化可以通过 $P_{m,k_x}^z(i) = \langle \phi_m(k_x) | c_i^\dagger \sigma_z c_i | \phi_m(k_x) \rangle$ 来描述.

3 数值结果与分析

3.1 时间反演对称破缺的量子自旋霍尔效应

首先, 考虑内禀自旋轨道耦合项 λ_I 对色散关系的影响. 对角化哈密顿量 $\mathbf{H}(\mathbf{k})$ 可以得到 square-octagon 晶格在第一布里渊区中沿着图 1(b) 所示的高对称点的色散关系, 如图 2 所示. 系统中不存在 Rashba 自旋轨道耦合和交换场时, 即 $\lambda_R = g = 0$, 对应的四个能带二重简并. 当 $\lambda_I = 0$ 时, 最上面的三个能带和最下面的三个能带在 Γ 点和 M 点接触 (图 2(a)), 能带中不存在能隙, 说明系统处于金属态. 当 $\lambda_I = 0.1$ 时, 如图 2(b) 所示, 中间的两个能带在布里渊区中的所有点都是彼此分开的, 但它们之间仍然不存在完整的能隙, 即有一个负的能隙, 因此它们的霍尔电导不是量子化的, 系统整体表现为半金属 [38]. 相反, 最上面和最下面的两个能带相互分开, 产生完整的能隙, 表明这时系统处于一种绝缘态. 继续增加 Rashba 自旋轨道耦合至 $\lambda_I = 0.6$ 时, 如图 2(c) 所示, 系统的四个能带独立存在, 彼此分开, 并且有很大的能隙. 接下来同时引入 Rashba 自旋轨道耦合和交换场, 研究 square-octagon 晶格在自旋轨道耦合作用和交换场的影响下可能发生的拓扑相变. 取参数 $\lambda_I = 0.6$, $\lambda_R = 0.05$, $g = 0.1$, 如图 2(d) 所示, 自旋向上与自旋向下的能带完全分开, 系统在 $1/4$, $1/2$ 和 $3/4$ 填充时均处于绝缘态.

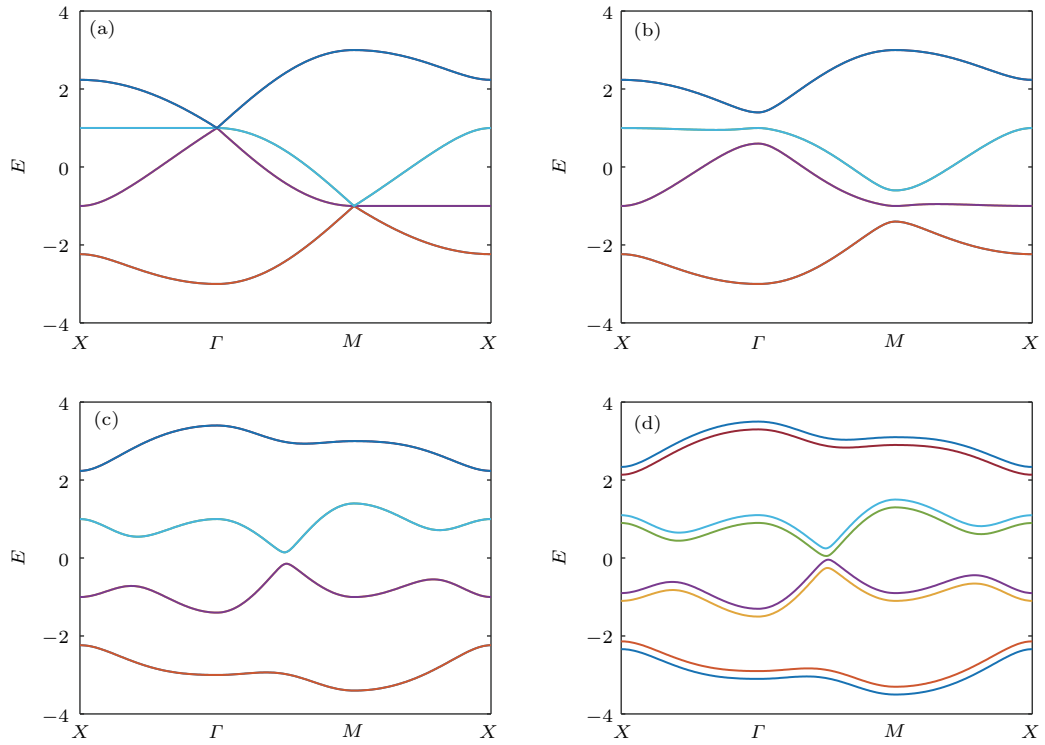


图2 Square-octagon 晶格在第一布里渊区内的色散关系 (a) $\lambda_I = 0$; (b) $\lambda_I = 0.1$; (c) $\lambda_I = 0.6$; (d) $\lambda_I = 0.6, \lambda_R = 0.05, g = 0.1$

Fig. 2. Energy band of square-octagon lattice along the line between high symmetric points in the first Brillouin zone: (a) $\lambda_I = 0$; (b) $\lambda_I = 0.1$; (c) $\lambda_I = 0.6$; (d) $\lambda_I = 0.6, \lambda_R = 0.05, g = 0.1$.

为确定系统是否为拓扑绝缘体, 又计算了 square-octagon 晶格在参数 $\lambda_I = 0.6, \lambda_R = 0.05, g = 0.1$ 下的边缘态模式, 结果如图 3 所示. 系统在 $1/2$ 填充时, 对于给定的费米能级, 很明显有八个不

同的边缘态穿过能隙. 在图 3 (b) 中, 用 A 到 H 从左到右依次标记这八个边缘态. 为了清楚地了解边缘态的模式, 给出了边缘态波函数 $|\phi|^2$ 在纳米带格点的概率分布和边缘态的自旋极化, 如图 4 所示. 发现

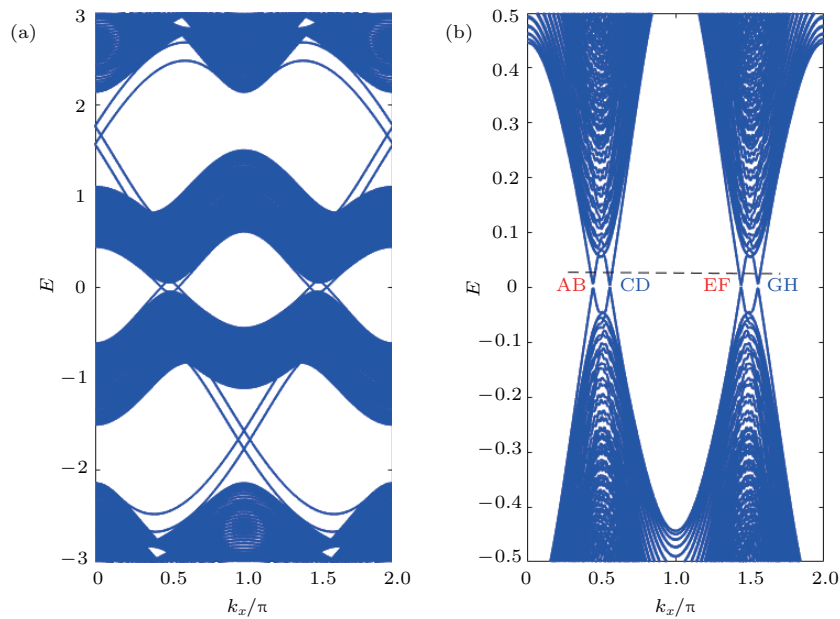


图3 参数 $\lambda_I = 0.6, \lambda_R = 0.05, g = 0.1$ 情况下的 square-octagon 晶格 (a) 边缘态能谱; (b) $1/2$ 填充时的边缘态

Fig. 3. Square-octagon lattice for $\lambda_I = 0.6, \lambda_R = 0.05$, and $g = 0.1$: (a) Energy spectrum; (b) edge states at $1/2$ filling.

边缘态 A, B, E 和 F 局域在纳米带的一个边界上, 而 C, D, G 和 H 局域在另一个边界上. 以边缘态 A 和边缘态 B 为例, 从能带中 A 点和 B 点的斜率(即速度)很容易知道边缘态 A 和边缘态 B 是沿着相反的方向运动的. 边缘态的自旋极化标注在图 4 (a)—图 4 (h) 中, 尽管在考虑 Rashba 自旋轨道耦合作用 λ_R 以及交换场 g 之后, 自旋在 x 和 y 方向的分量不再为零, 但是 z 方向的自旋极化仍然占有很高的比率. 我们发现边缘态 A 自旋向下而边缘态 B 自旋向上. 以同样的道理可以分析边缘态 E 和边缘态 F

的情况. 最后总结出, 在纳米带的一个边界上, 边缘态 A 和 B 以及边缘态 E 和 F 是两对沿着相反方向运动并且自旋极化方向相反的螺旋边缘态, 即 $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = 2$, 这与计算所得的自旋陈数 $C_s = 2$ 相对应, 因此系统处于时间反演对称破缺的量子自旋霍尔相^[11]. 类似地, 系统在 $1/4$ 和 $3/4$ 填充时, 计算得到 $C_s = -1$, 这时在纳米带的每个边界上存在着一对反向传播的具有相反自旋极化的边缘态, 如图 3 (a) 所示, 系统展现同样的量子自旋霍尔效应.

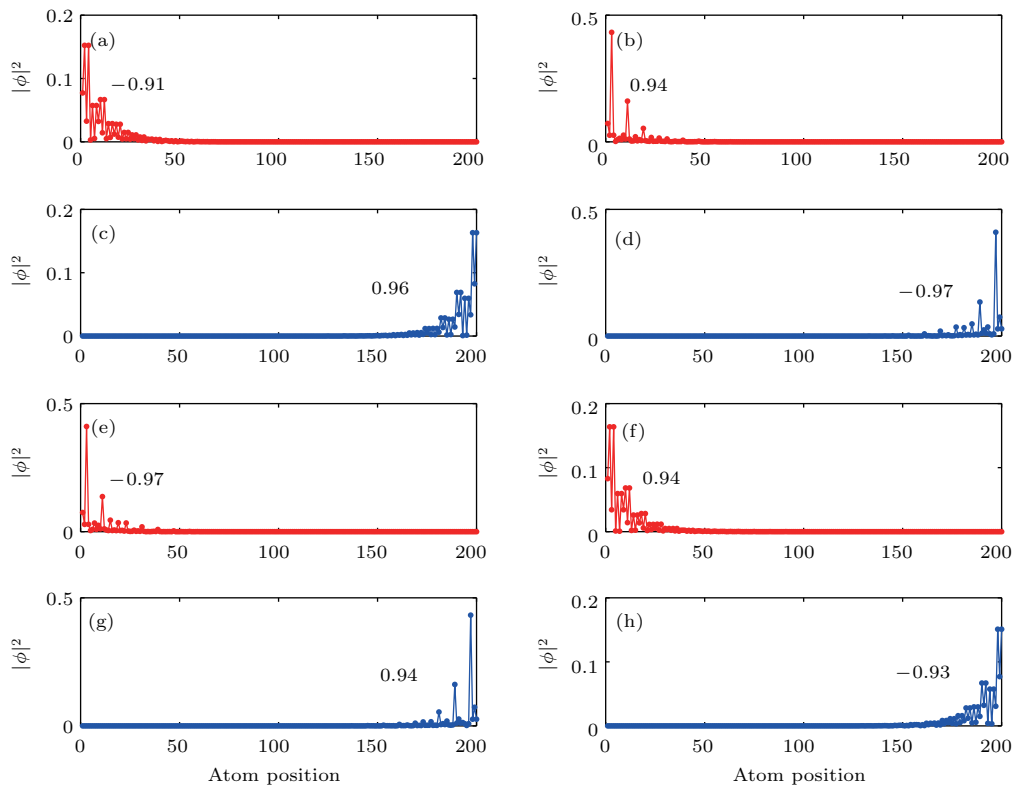


图 4 边缘态波函数 $|\phi|^2$ 在纳米带格点的的概率密度分布和边缘态的自旋极化 (a) 边缘态 A; (b) 边缘态 B; (c) 边缘态 C; (d) 边缘态 D; (e) 边缘态 E; (f) 边缘态 F; (g) 边缘态 G; (h) 边缘态 H

Fig. 4. Probability density of the edge-state wavefunction $|\phi|^2$ of an ribbon and the spin polarizations of the edge states: (a) Edge state A; (b) edge state B; (c) edge state C; (d) edge state D; (e) edge state E; (f) edge state F; (g) edge state G; (h) edge state H.

3.2 自旋过滤的量子反常霍尔效应

增加交换场的大小, 当 $g = 0.8$ 时, 边缘态能带结构如图 5 (a) 所示. 在 $3/8$ 填充时, 能隙中存在六个边缘模式, 分别标记为 A, B, C, D, E 和 F, 其波函数空间分布见图 6. 很容易看出, 边缘模式 A, C 和 E 局域在纳米带的一个边界上, 沿着同一方向运动, 而 B, D 和 F 局域在另一个边界上, 共同沿着另一相反的方向运动, 此时纳米带边界存在手征

的边缘态模式, 因此系统处于量子反常霍尔态, 计算得到陈数 $C = 3$. 特别的是, 边缘态自旋向上的数目不等于自旋向下的数目, 即 $N_{\uparrow} = 1, N_{\downarrow} = 2$, 从而贡献自旋霍尔电导 $\sigma_{SH} = -e/4\pi$, 霍尔电导 $\sigma_H = 3e^2/h$ ^[39,40]. 类似地, 在 $5/8$ 填充时, $N_{\uparrow} = 2, N_{\downarrow} = 1$, 对应 $C = -3$. 同时注意到, 在 $1/8$ 填充的情况下, 纳米带的每个边界上只有一条自旋向下的边缘态, 即 $N_{\uparrow} = 0, N_{\downarrow} = 1$, 计算得到 $C = -1$,

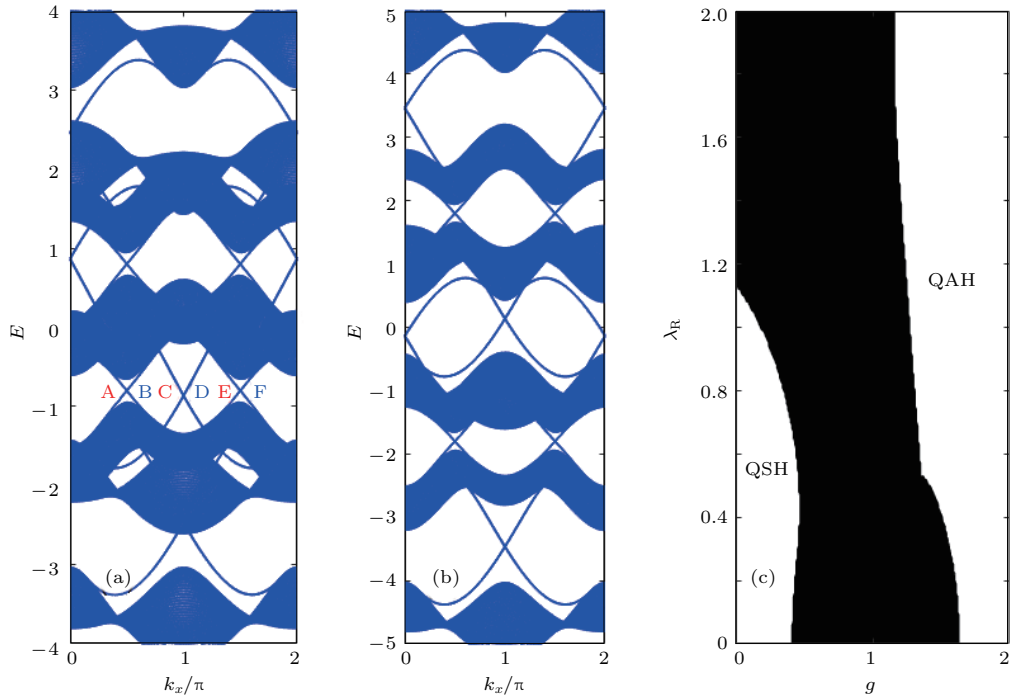


图5 不同交换场下 square-octagon 晶格的边缘态能谱以及 1/4 填充因子下的相图 (a) $\lambda_I = 0.6, \lambda_R = 0.05, g = 0.8$; (b) $\lambda_I = 0.6, \lambda_R = 0.05, g = 1.8$; (c) $\lambda_I = 0.6$, 其中 QSH 表示量子自旋霍尔绝缘体, QAH 表示量子反常霍尔绝缘体, 黑色部分表示金属

Fig. 5. Edge state spectrum with different values of exchange field and phase diagram of the square-octagon lattice at 1/4 filling: (a) $\lambda_I = 0.6, \lambda_R = 0.05, g = 0.8$; (b) $\lambda_I = 0.6, \lambda_R = 0.05, g = 1.8$; (c) $\lambda_I = 0.6$. Here, QSH denotes the quantum spin Hall insulator, QAH denotes the quantum anomalous Hall insulator and the black color denotes a metal phase.

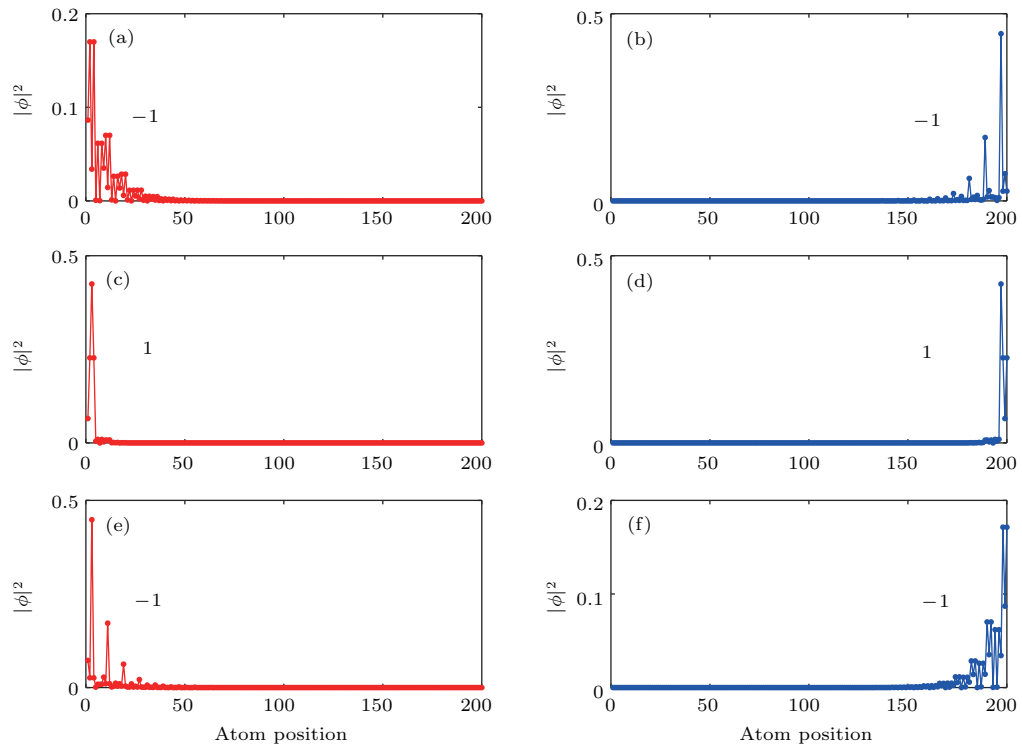


图6 边缘态波函数 $|\phi|^2$ 在纳米带格点的概率密度分布和边缘态的自旋极化 (a) 边缘态 A; (b) 边缘态 B; (c) 边缘态 C; (d) 边缘态 D; (e) 边缘态 E; (f) 边缘态 F

Fig. 6. Probability density of the edge-state wavefunction $|\phi|^2$ of an ribbon and the spin polarizations of the edge states: (a) Edge state A; (b) edge state B; (c) edge state C; (d) edge state D; (e) edge state E; (f) edge state F.

这意味着系统处于自旋过滤的量子反常霍尔态^[39,40]. 相反, 在7/8填充时, 只有一条自旋向上的边缘态存在于边界上, 即 $N_{\uparrow} = 1, N_{\downarrow} = 0$, 对应陈数 $C = 1$, 如图5(a)所示. 继续增大交换场至 $g = 1.8$, 如图5(b)所示, 在1/2填充时, 系统处于时间反演对称破缺的量子自旋霍尔态, 自旋陈数 $C_s = -1$. 系统在1/4填充时, 纳米带的每个边缘上有两条自旋向下的边缘态沿着同一方向传播, 即 $N_{\uparrow} = 0, N_{\downarrow} = 2$, 计算陈数 $C = 2$, 系统处于自旋过滤的量子反常霍尔态. 同样地, 系统在3/4填充时处于 $C = -2$ 的自旋过滤的量子反常霍尔态. 本文还通过直接计算各个参数下的陈数和自旋陈数, 给出了square-octagon晶格处于1/4填充因子下的相图. 图5(c)给出的相图是Rashba自旋轨道耦合作用 λ_R 和交换场 g 的函数. 从相图中可以看到, square-octagon晶格支持量子自旋霍尔绝缘体和量子反常霍尔绝缘体的存在, 并且 $C_s = -1$ 的量子自旋霍尔相到 $C = 2$ 的量子反常霍尔相的转变伴随着体能隙的闭合.

将图3(b)和图5(b)中1/2填充时的量子自旋霍尔态相比较, 可以看出, 在边缘上发生两种情况: 一种情况是边缘态能隙打开, 导致有能隙的边缘态; 另一种情况是在边界上出现无能隙边缘模式. 投影自旋算符的矩阵元是 $\langle \phi_m(k_x) | \sigma_z | \phi_n(k_x) \rangle$, m 和 n 遍历所有被电子占据的态, 通过对该矩阵对角化, 可以得到自旋谱. 对应于图3(b)和图5(b)中给定的参数, 计算获得的自旋谱如图7(a)和图7(b)所示. 在图7(a)中, 当边缘态能谱存在能隙时, 自旋

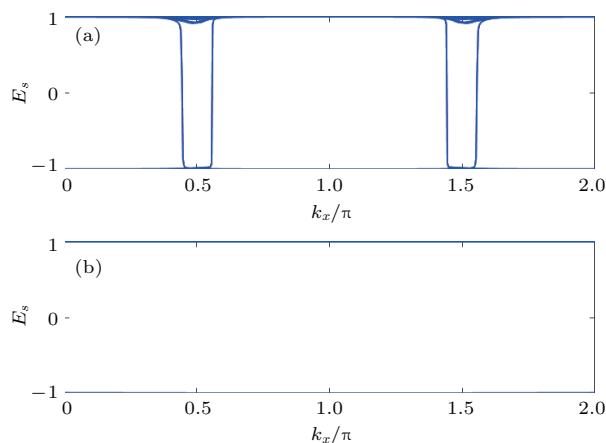


图7 量子自旋霍尔边缘态的自旋谱 (a) 有能隙边缘态; (b) 无能隙边缘态
Fig. 7. Spin spectrum of quantum spin Hall edge state: (a) Gapped edge state; (b) gapless edge state.

谱没有出现能隙. 对于无能隙的边缘态, 自旋谱只有两个值 ± 1 , 存在谱隙, 如图7(b)所示. 因此量子自旋霍尔效应边缘态能谱或自旋谱两者之一必然表现出无谱隙的特征^[41].

4 结 论

基于陈数和自旋陈数, 本文研究了square-octagon晶格在自旋轨道耦合和交换场作用下的拓扑相变. 在自旋轨道耦合和交换场的共同作用下, 系统出现许多不同的拓扑相, 包括自旋陈数 $C_s = -1, 2$ 的时间反演对称破缺的量子自旋霍尔相和陈数 $C = \pm 3, \pm 2, \pm 1$ 的量子反常霍尔相. 有趣的是, 调节交换场的大小或者填充因子, 系统发生了从螺旋量子自旋霍尔边缘态到自旋过滤的手征量子反常霍尔边缘态的相变. 对于量子自旋霍尔系统, 在镜面对称性和时间反演对称性都被破坏的情况下, 其边界上的螺旋边缘态可以是无能隙的, 而对应的自旋谱存在着很大的谱隙. 二维纳米带的边缘态能谱和自旋谱与陈数和自旋陈数的拓扑表征相符合.

量子自旋霍尔效应在不受时间反演对称性保护的情况下, 仍然可以存在无能隙的螺旋边缘态, 这进一步拓宽了量子自旋霍尔效应的理论框架, 为实现稳定的量子自旋霍尔效应提供了一个新方案. 同时, square-octagon晶格具有一定的潜在应用价值, 研究者已经在功能材料ZnO的(10 $\bar{1}$ 0)中发现准square-octagon结构. 另外, 在一定的参数范围内, square-octagon晶格中可以出现具有高平坦率的拓扑平坦能带, 为研究分数量子反常霍尔效应提供了一个新的晶格模型. 就在最近, 人们预言在square-octagon晶格中可以实现单轨道高温 s_{\pm} 超导态^[29]. 此外, 本工作的研究方法可以延伸推广到其他典型的晶格系统^[42,43], 因此进一步探索square-octagon晶格中其他可能的拓扑非平庸态, 例如分数量子反常霍尔态以及其他晶格中可能发生的奇异相变, 将是很有意思的工作. 而且, 由于光晶格冷原子技术的发展, 实验上已经可以利用光晶格模拟Haldane模型^[44], 并且自旋轨道耦合和均匀磁场可以由激光和冷原子间相互作用来调控^[45,46], 为在实验上观测到这些拓扑相变和自旋操控提供了平台.

参考文献

- [1] Kane C L, Mele E J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 226801
- [2] Bernevig B A, Zhang S C 2005 *Phys. Rev. Lett.* **96** 106802
- [3] Hasan M Z, Kane C L 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 3045
- [4] Qi X L, Zhang S C 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 1057
- [5] Ren Y F, Qiao Z H, Niu Q 2016 *Rep. Prog. Phys.* **79** 066501
- [6] Kane C L, Mele E J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 146802
- [7] Moore J E, Balents L 2007 *Phys. Rev. B* **75** 121306
- [8] Prodan E 2009 *Phys. Rev. B* **80** 125327
- [9] Prodan E 2010 *New J. Phys.* **12** 065003
- [10] Sheng D N, Weng Z Y, Sheng L, Haldane F D M 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 036808
- [11] Yang Y Y, Xu Z, Sheng L, Wang B G, Xing D Y, Sheng D N 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 066602
- [12] Du L J, Knez I, Sullivan G, Du R R 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 096802
- [13] Yao Y G, Ye F, Qi X L, Zhang S C, Fang Z 2007 *Phys. Rev. B* **75** 041401
- [14] Min H, Hill J E, Sinitsyn N A, Sahu B R, Kleinman L, MacDonald A H 2006 *Phys. Rev. B* **74** 165310
- [15] Liu C C, Jiang H, Yao Y 2011 *Phys. Rev. B* **84** 195430
- [16] Qiao Z, Yang S A, Feng W, Tse W K, Ding J, Yao Y, Wang J, Niu Q 2010 *Phys. Rev. B* **82** 161414
- [17] Qiao Z, Jiang H, Li X, Yao Y, Niu Q 2012 *Phys. Rev. B* **85** 115439
- [18] Zhang Z Y 2011 *J. Phys. Condens. Matter* **23** 365801
- [19] Chen M S, Wan S L 2012 *J. Phys. Condens. Matter* **24** 325502
- [20] Geng H, Ji Q S, Zhang C X, Wang R 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 127303 (in Chinese) [耿虎, 计青山, 张存喜, 王瑞 2017 物理学报 **66** 127303]
- [21] Guo H M, Franz M 2009 *Phys. Rev. B* **80** 113102
- [22] Rüegg A, Wen J, Fiete G A 2010 *Phys. Rev. B* **81** 205115
- [23] Zhou T, Zhang J, Xue Y, Zhao B, Zhang H, Jiang H, Yang Z 2016 *Phys. Rev. B* **94** 235449
- [24] Kargarian M, Fiete G A 2010 *Phys. Rev. B* **82** 085106
- [25] Liu X P, Chen W C, Wang Y F, Gong C D 2013 *J. Phys. Condens. Matter* **25** 305602
- [26] Bao A, Tao H S, Liu H D, Zhang X Z, Liu W M 2015 *Sci. Rep.* **4** 6918
- [27] Bao A, Zhang X F, Zhang X Z 2015 *Chin. Phys. B* **24** 050310
- [28] Zhang L, Wang F 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 087201
- [29] Kang Y T, Yang F, Yao D X 2017 arXiv: 1801.00220. <https://arxiv.org/abs/1801.00220>
- [30] Yang Y, Yang J, Li X, Zhao Y 2018 *Phys. Lett. A* **382** 723
- [31] Panahi P S, Struck J, Hauke P, Bick A, Plenkers W, Meineke G, Becker C, Windpassinger P, Lewenstein M, Sengstock K 2011 *Nat. Phys.* **7** 434
- [32] Jo G B, Guzman J, Thomas C K, Hosur P, Vishwanath A, StamperKurn D M 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 045305
- [33] He M R, Yu R, Zhu J 2012 *Angew. Chem.* **124** 7864
- [34] Fukui T, Hatsugai Y, Suzuki H 2005 *J. Phys. Soc. Jpn.* **74** 1674
- [35] Taillefumier M, Dugaev V K, Canals B, Lacroix C, Bruno P 2008 *Phys. Rev. B* **78** 155330
- [36] Hatsugai Y 1993 *Phys. Rev. B* **48** 11851
- [37] Hatsugai Y 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 3697
- [38] Sun K, Fradkin E 2008 *Phys. Rev. B* **78** 245122
- [39] Goldman N, Beugeling W, Smith C M 2012 *Europhys. Lett.* **97** 23003
- [40] Beugeling W, Goldman N, Smith C M 2012 *Phys. Rev. Lett.* **86** 075118
- [41] Li H C, Sheng L, Shen R, Shao L B, Wang B G, Sheng D N, Xing D Y 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 266802
- [42] Miao M, Yan Q, van de Walle C, Lou W, Li L, Chang K 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 186803
- [43] Zhang D, Lou W, Miao M, Zhang S, Chang K 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 156402
- [44] Jotzu G, Messer M, Desbuquois R, Lebrat M, Uehlinger T, Greif D, Esslinger T 2014 *Nature* **515** 237
- [45] Lin Y J, Compton R L, Jiménez-García K, Porto J V, Spielman I B 2009 *Nature* **462** 628
- [46] Lin Y J, Jiménez-García K, Spielman I B 2011 *Nature* **471** 83

Topological phase transitions in square-octagon lattice with Rashba spin-orbit coupling*

Yang Yuan^{1)2)†} Chen Shuai¹⁾ Li Xiao-Bing¹⁾

1) (*Zhangjiagang Campus, Jiangsu University of Science and Technology, Zhangjiagang 215600, China*)

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

(Received 9 April 2018; revised manuscript received 2 October 2018)

Abstract

Motivated by the square-octagon lattice which supports topological phases over a wide range of parameters and a number of interesting quantum phase transitions in the phase diagram when considering the intrinsic spin-orbit coupling, we investigate the topological phase transitions in the isotropic square-octagon lattice combining the effects of both spin-orbit couplings and exchange field. The inversion symmetry and time-reversal symmetry are broken when both Rashba spin-orbit coupling and exchange field are present. The Z_2 index is not applicable for quantum spin Hall systems without time-reversal symmetry, but the spin Chern number remains valid even in the absence of time-reversal symmetry. Therefore, we use the Chern number and spin Chern number to describe the topological properties of the system. We explore that a variety of topologically nontrivial states appear with changing the exchange field, including time-reversal-symmetry-broken quantum spin Hall states and quantum anomalous Hall states. The phase transition between these topological phases is accompanied by the closing of band gaps. Interestingly, the quantum spin Hall effect described by nonzero spin Chern number is found to remain intact when the time-reversal symmetry is broken. Furthermore, the variation of the amplitude of the exchange field and filling factor drive interesting topological phase transitions from the time-reversal-symmetry-broken quantum spin Hall phase to spin-filtered quantum anomalous Hall phase. A spin-filtered quantum anomalous Hall phase is characterized by the presence of edge states with only one spin component, which provides an interesting route towards quantum spin manipulation. We also present the band structures, edge state wave functions, and spin polarizations of the different topological phases in the system. It is demonstrated that the energy spectra of edge states are in good agreement with the topological characterization based on the Chern number and spin Chern number. In particular, we observe that gapless edge states can appear in a time-reversal-symmetry-broken quantum spin Hall system, but the corresponding spin spectrum gap remains open on the edges. Recently, an important functional material ZnO with quasi square-octagon lattice has been found experimentally. Consequently, the results found in our work are helpful for understanding the property of square-octagon lattice and studying the real materials with square-octagon structure.

Keywords: quantum spin Hall effect, spin-orbit coupling, topological phase transition

PACS: 71.70.Ej, 73.20.At, 73.43.-f

DOI: 10.7498/aps.67.20180624

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11647145), the National Laboratory of Solid State Microstructures of China (Grant No. M31024), and the Natural Science Foundation of the Jiangsu Higher Education Institutions of China (Grant No. 16KJB430012).

† Corresponding author. E-mail: yuanyangnju@126.com