物理学报 Acta Physica Sinica
Chinese Physical Society
Institute of Physics, CAS

铁基超导中拓扑量子态研究进展

郝宁　胡江平

Research progress of topological quantum states in iron-based superconductor

Hao Ning　Hu Jiang-Ping

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica, **67**, 207101 (2018)　DOI: 10.7498/aps.67.20181455
在线阅读 View online: http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20181455
当期内容 View table of contents: http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I20

您可能感兴趣的其他文章
Articles you may be interested in

$Bi_xBa_{1-x}TiO_3$ 电子及能带结构的第一性原理研究
First principle study of electron and band structure of $Bi_xBa_{1-x}TiO_3$
物理学报.2018, 67(11): 117101　http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20172644

空位缺陷对 β-$AgVO_3$ 电子结构和光吸收性能的影响
Electronic structure and optical absorption properties of β-$AgVO_3$ with vacancy defects
物理学报.2017, 66(15): 157101　http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.157101

γ 石墨炔衍生物结构稳定性和电子结构的第一性原理研究
First-principle study of structure stability and electronic structures of γ graphyne derivatives
物理学报.2017, 66(10): 107102　http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.107102

Ga 空位对 GaN:Gd 体系磁性影响的第一性原理研究
Effect of Ga vacancy on the magnetism in GaN:Gd: First-principles calculation
物理学报.2016, 65(12): 127102　http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.127102

强激光照射对 6H-SiC 晶体电子特性的影响
Effect of intense laser irradiation on the electronic properties of 6H-SiC
物理学报.2016, 65(10): 107101　http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.107101

专题: 铁基高温超导体发现十周年

编者按 新型超导体的发现常常为物理研究带来科学突破的机遇. 2008 年发现的新一类高温超导体家族——铁基高温超导体, 由于其独特的物理性质和在应用方面的潜在优势, 激发了世界范围的研究热潮, 是过去十年凝聚态物理研究的热点之一.

自铁基高温超导发现以来, 中国科学家一直走在铁基高温超导研究的最前沿, 不断取得重要成果, 在国内外学术界产生了重大的影响. 不仅发现并合成了多种新型超导材料, 而且发展并利用各种实验测量手段对铁基高温超导进行了全方位的研究, 极大加深了对高温超导机理的理解, 推动了实验技术和高温超导应用领域的发展.

在铁基高温超导体发现十周年之际, 本刊特组织专题, 邀约国内相关学者对铁基高温超导体新材料、物理性质与机理以及应用等方面的发展现状和创新研究进行了介绍. 我们希望, 通过对十年来铁基高温超导体研究进展的总结, 可以进一步加速新超导体材料的探索和物理机理的理解, 并促进铁基高温超导体的应用.

(客座编辑: 中国科学技术大学 陈仙辉; 中国科学院物理研究所 周兴江, 胡江平)

铁基超导中拓扑量子态研究进展*

郝宁[1)†] 胡江平[2)3)‡]

1) (中国科学院强磁场科学中心, 极端条件凝聚态物理安徽省重点实验室, 合肥 230031)

2) (中国科学院物理研究所, 北京凝聚态物理国家研究中心, 北京 100190)

3) (中国科学院大学, 卡弗里理论科学研究所, 北京 100190)

(2018 年 7 月 30 日收到; 2018 年 8 月 21 日收到修改稿)

铁基超导体和拓扑量子材料是近年来凝聚态物理两个重要的前沿研究方向. 铁基超导体中是否能衍生出非平庸的拓扑现象是一个非常有意义的问题. 本文从晶体对称性、布里渊区高对称点附近的有效模型以及自旋轨道耦合相互作用三个方面具体分析了铁基超导的电子结构的基本特点. 在此基础上, 重点阐述铁基超导的正常态、临近超导的长程有序态以及超导态中非平庸的拓扑量子态是如何衍生的; 具体介绍了相关的理论模型以及结果, 回顾了相关的实验进展, 展望了该领域的发展前景.

关键词: 铁基超导体, 拓扑相变, 拓扑量子态

PACS: 71.20.–b, 71.10.–w, 74.70.Xa, 74.20.–z **DOI:** 10.7498/aps.67.20181455

1 引 言

2008 年, 日本科学家首次合成出超导转变温度达到 26 K 的 $LaO_{1-x}F_xFeAs$ 铁基超导材料[1], 这一突破性发现标志着铁基超导材料研究的开端. 从新材料合成的角度回顾十年来铁基超导研究的历程, 主要分为三个阶段: 1) 以 $LaO_{1-x}F_xFeAs$ 为代表的铁砷超导系, 主要特点是布里渊区 Γ 点和 M 点分别存在空穴型和电子型的费米面, 这一特征是早期基于费米面嵌套的超导理论的基础; 2) 2010 年中国科学院物理研究所的陈小龙研究组[2] 首次合成了超导转变温度为 30 K 的 $K_xFe_2Se_2$ 铁硒超导材料, 与铁砷超导相比, 其主要特点是布里渊区 Γ 点处的空穴型费米面消失了, 只在 M 点存在电子型的费米面, 这一新的材料体系对早期的铁基超导

* 国家重点研究发展计划 (批准号: 2015CB921300, 2017YFA0303100, 2017YFA0303201)、国家自然科学基金 (批准号: 11674331, 11334012)、中国科学院百人计划基金和中国科学院先导项目 (批准号: XDB07000000) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: haon@hmfl.ac.cn

‡ 通信作者. E-mail: jphu@iphy.ac.cn

© 2018 中国物理学会 Chinese Physical Society

理论提出了巨大挑战, 导致了完全不同的铁基超导理论; 3) 2012年清华大学薛其坤教授研究组[3]首次通过分子束外延法在$SrTiO_3$衬底上生长出单层的FeSe薄膜, 实验得到了超导转变温度高达65 K的超导态, 这是实验上首次制备出的界面高温超导体系. 以上述三种材料体系为代表, 经过十多年的发展, 铁基超导材料家族变得十分庞大. 如此丰富的材料类别, 为探索各种新的衍生量子物态提供了可能性.

传统的高温超导研究的基本问题主要包括两个方面: 一是如何理解高温超导机理; 二是如何理解不同的有序态(电荷序、磁有序、轨道序和超导序等)或量子涨落的共存与竞争关系. 对于铁基超导研究也是如此, 但是与单轨道的铜基高温超导相比, 铁基超导材料属于多轨道的复杂电子体系, 其丰富的自由度为在铁基超导材料中研究新问题提供了基础.

自2005年量子自旋霍尔效应和拓扑绝缘体首次在理论上预测并实验实现以来[4−10], 拓扑量子材料迅速成为凝聚态物理研究的焦点, 其中拓扑能带论描述的电子材料由于其真实材料体系的丰富性和相关理论的完备性而成为拓扑量子材料的研究重点. 因此, 一个自然而然的新问题是, 在铁基超导材料中是否可以实现高温超导和拓扑的交叉和关联? 以此新问题为目标, 本综述主要回顾近几年来铁基超导材料中各种关于衍生拓扑量子态的理论设计和相关实验进展, 分别讨论在铁基超导的正常相、对称性破缺的有序相以及超导相中, 拓扑如何衍生并与之耦合, 从而形成一些奇异的拓扑量子物态. 通过系统总结和归纳, 希望可以拓展铁基超导新的研究方向.

2 铁基超导体的电子结构

2.1 晶格和对称性

所有铁基超导体都具有核心的X-Fe-X三层子结构, 其中X代表As, P, S, Se, Te原子, 大部分重要的物理现象都与这个子结构密切相关. X-Fe-X的三层子结构如图1(a)所示, 其中Fe四方格子被上下的X原子层夹在中间, 并且上层的X原子沿着Fe格子的对角线方向排布, 下层的X原子沿着Fe格子的反对角线方向排布. X原子这种上下交错的排布使得原胞中包含两个不等价的Fe原子[11].

这个X-Fe-X三层子结构的对称性由非点式的$P4/nmm$空间群来决定, 这意味着在X-Fe-X三层子结构中不存在一个原点使得每一个对称操作都可以分解成一个点群操作和一个整数格矢的平移操作. $P4/nmm$空间群的对称性操作元可以按以下方式构造, 取任意Fe原子为原点(0, 0, 0), 其中

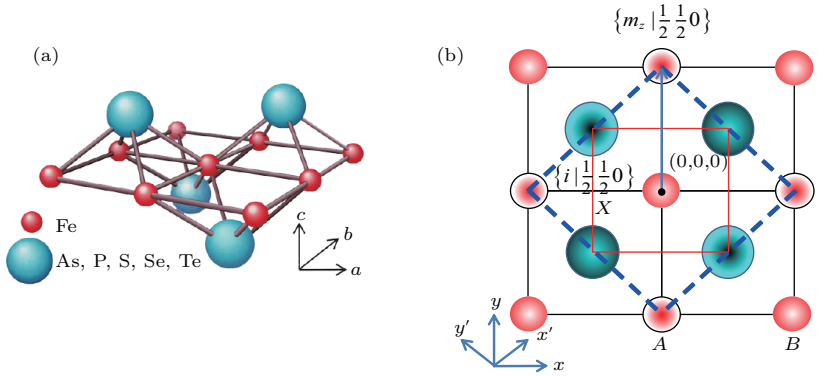

图1 (a) 铁基超导X-Fe-X三层子结构; (b) X-Fe-X三层子结构的俯视图, 红色实线代表一个铁的原胞, 蓝色虚线代表两个铁的原胞, A和B代表两个铁的子格, AB中点是空间反演中心, 镜面滑移对称操作$\left\{m_z\middle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right\}$和空间反演滑移操作$\left\{i\middle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right\}$以铁原子为原点定义, 分数平移$\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right)$在两个铁的原胞坐标$(x', y', z')$中定义

Fig. 1. (a) The lattice structures of FeSe; (b) the top view of Fig.(a). The one-Fe unit cell is enclosed by red/solid lines and the two-Fe unit cell is enclosed by the blue/dashed lines, with the two-Fe sublattice labeled with A and B. The inverse center is labeled by the small cross at the midpoint of the A-B link. The glide-plane mirror reflection symmetry $\left\{m_z\middle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right\}$ and the glide-plane inversion symmetry $\left\{i\middle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right\}$ are defined after the origin is fixed on Fe site. Note that the fractional translation $\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right)$ is defined under the two-Fe unit coordinate vector (x', y', z').

的八个对称性操作元包括单位操作 E, 两个关于 z 轴的 90° 旋转, 接着做空间反演组成的 $2S_4$, 三个关于 x, y, z 轴的 180° 旋转 $c_2(x)$, $c_2(y)$, $c_2(z)$ 以及两个镜面反射 $2\sigma_d$, 这八个对称性操作元形成一个点群 D_{2d}. 此外, 上述八个对称操作元乘以一个滑移反演操作 $\left\{i\middle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right\}$ 可以得到另外八个对称操作元, 其中 i 表示关于原点 (0, 0, 0) 的空间反演操作, $\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right)$ 表示定义在两个 Fe 原胞坐标系 (x', y', z') 中的分数平移操作. 滑移反演操作 $\left\{i\middle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right\}$ 等价于关于最近邻 Fe 与 Fe 中点的空间反演操作, 如图 1 (b) 中的 "X" 点所示. $P4/nmm$ 空间群中的最后一个操作是定义在坐标系 (x', y', z') 中的整数周期的平移对称操作 T. 因此, $P4/nmm$ 空间群可以表示成如下形式:

$$P4/nmm = D_{2d} \otimes \left\{E, \left\{i\middle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right\}\right\} \otimes T. \quad (1)$$

那么单粒子的电子态的对称性完全由 $P4/nmm$ 空间群来决定. 由于整数平移对称操作 T 的作用, 这些单粒子的电子态可以表示成布洛赫态的形式. 进一步, 这些布洛赫态的对称性由商群 $(P4/nmm)/T$ 来决定. 但是, 分数平移 $\left\{i\middle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right\}$ 的作用导致商群 $(P4/nmm)/T$ 不是封闭的, 因此, 它不是一个点群. 在这种情况下用点群的不可约表示来对布洛赫态进行分类似乎是不合适的. 幸运的是, 商群 $(P4/nmm)/T$ 中的对称性操作元是有限的, 那么确定布洛赫态在商群 $(P4/nmm)/T$ 的群元素操作下是如何变化的就变得可能并且有意义. 特别地, 在布里渊区某些高对称点, 分数平移操作的效果可以被消除掉, 那么商群 $(P4/nmm)/T$ 就同构于一个点群 D_{4h}, 该点群等于 D_{2d} 和 C_{4v} 的直和. 在这种情况下, 布洛赫态可以用点群 D_{4h} 的不可约表示来表征. 布里渊区中其他具有较低对称性的点或线处的布洛赫态可以由这些点或线所具有的对称性形成的小群来表征, 更多的细节可以参考文献 [12].

下面主要阐述某些关键的对称操作对铁基超导布洛赫电子态的约束关系以及铁基超导体中一个 Fe 的原胞图景和两个 Fe 的原胞图景的关系. 特别地, 在理解铁基超导的许多问题时, 采用一个 Fe 的原胞图景通常是非常有用的. 在 $P4/nmm$ 空间群中一个非常关键的对称操作元是滑移镜面反射对称操作 $\left\{m_z\middle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right\}$, 这个对称操作元直接包含了 X 原子的交错排列对 Fe 四方格子的影响, 应该隐含了电子态在一个 Fe 和两个 Fe 原胞之间变换的某些关联. 为了更清楚地揭示这种关联, 考虑一个定义在两个 Fe 原胞图景下的布洛赫电子态,

$$\psi_{k',\alpha\eta}(r') = \frac{1}{N}\sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}k'\cdot r'_{n\eta}}\phi_\alpha(r' - r'_{n\eta}), \quad (2)$$

其中 $r'_{n\eta} = R'_n + r'_\eta$, R'_n 表示正格矢, r'_η 表示 Fe 或者 X 原子的坐标, η 表示 A 和 B 两个子格, ϕ_α 代表 Fe 的 3d 轨道基函数或者 X 原子 p 轨道的基函数. 布洛赫哈密顿量由如下公式定义:

$$H(k')_{\alpha\eta,\beta\eta} = \int \mathrm{d}^d r' \psi^*_{k',\alpha\eta}(r')\hat{H}\psi_{k',\alpha\eta}(r'), \quad (3)$$

其中 $\hat{H}$ 表示单粒子的哈密顿量. 能量的本征态用能带的指标 j 来标记, 并有如下定义:

$$\phi_{nj,k'}(r') = \sum_{\alpha=1}^{n_{\mathrm{tot}}} u_{nj,k'}(\alpha)\psi_{k',\alpha\eta}(r'), \quad (4)$$

$$\sum_{\alpha=1,\eta'}^{n_{\mathrm{tot}}} H(k')_{\alpha\eta,\beta\eta'}u_{\eta' j,k'}(\beta) = \varepsilon_{nj,k'}u_{nj,k'}(\alpha). \quad (5)$$

给定能带指标 j, 布洛赫波函数 $u_{nj,k'}(\alpha)$ 可以用狄拉克括号简记为 $|\alpha\eta, k'\rangle$. 根据镜面滑移对称操作 $\left\{m_z\middle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right\}$ 的宇称, 布洛赫态可以被分为两组, 并可以重组为如下赝布洛赫态的形式:

$$|\alpha, k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\alpha A, k'\rangle + (-1)^{\frac{p+1}{2}}|\alpha B, k'\rangle], \quad (6a)$$

$$|\alpha, k+Q\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\alpha A, k'\rangle - (-1)^{\frac{p+1}{2}}|\alpha B, k'\rangle], \quad (6b)$$

其中 $p = \langle\alpha|m_z|\alpha\rangle$, k 是定义在一个 Fe 原胞对应的布里渊区内的动量. $Q = (\pi, \pi, 0)$ 对应于折叠的波矢量. 可以发现, 赝的布洛赫态 $|\alpha, k\rangle$ 具有镜面滑移对称操作 $\left\{m_z\middle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right\}$ 的奇宇称, 赝的布洛赫态 $|\alpha, k+Q\rangle$ 具有镜面滑移对称操作 $\left\{m_z\middle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right\}$ 的偶宇称. (6) 式表明, 由于 X 原子的分布构型导致的二元子格的自由度可以被消除, 代价是布里渊区要发生折叠. (6) 式清楚地表明了一个 Fe 和两个 Fe 的图景间的映射关系, 并且只要镜面滑移操作 $\left\{m_z\middle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right\}$ 对称性不被破坏, 这种映射关系就是严格成立的.

另外一个关键的对称操作是空间反演对称操作 $\hat{I} = \left\{i\middle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right\}$, 通过空间反演对称操作的宇称来标记拓扑态的性质通常是非常有效的.

在具有时间反演对称性的体系, 布里渊区某些高对称点的空间反演对称操作的宇称反转通常表明系统可能发生了拓扑转变. 对于(6)式定义的赝布洛赫态, 可以发现$\hat{I}|\alpha,k\rangle = \pm|\alpha,k\rangle$和$\hat{I}|\alpha,k+Q\rangle = \mp|\alpha,k+Q\rangle$, 其中"+"对应于$\alpha = xz,yz,x,y$, "−"对应于$\alpha = xy,x^2-y^2,z^2,z$, 这意味着具有相同镜面滑移对称操作宇称的布洛赫态可以具有相反的空间反演对称操作宇称. 对于相同的布洛赫态, 其在两种对称操作下宇称的不一致性保证了铁基超导中发生拓扑相变的可能.

上述的讨论并没有涉及具体的电子结构. 实际上, 第一性原理计算和相应的紧束缚模型可以给出明确的电子结构[13,14], 这些电子结构的特点完全由上述的对称性来决定, 在下面的讨论中, 针对具体的问题会做详细的分析. 在结束本节的讨论前, 再讨论一些可能导致对称性破缺的效应. 实际上, 镜面滑移对称操作$\left\{m_z\middle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right\}$的对称性通常是不守恒的, 在大多数铁基超导体中都被很弱的效应所破缺掉, 从而导致某些类似$|\alpha,k+Q\rangle\langle\alpha',k|+\text{H.c.}$的效应存在. 在这种意义上, 铁基超导体的正常态属于一种弱的电荷密度波态. 例如, 这种弱的耦合效应可以来自于c方向的层间耦合. 层间耦合包括两部分: 第一部分描述具有相同镜面滑移对称操作宇称的两个赝布洛赫态间的耦合, 这种耦合$f(k_x,k_y)\cos k_z$不破坏镜面滑移对称性[15]; 第二部分描述具有相反的镜面滑移对称操作宇称的两个赝布洛赫态间的耦合, 这种耦合$g(k_x,k_y)\sin k_z$会破坏镜面滑移对称性[15]. 需要特别指出的是, 耦合$g(k_x,k_y)\sin k_z$应当非常弱, 因为这种耦合项来自于长程的跃迁过程. 但是, 耦合$g(k_x,k_y)\sin k_z$在布里渊区的某些点会非常关键, 当它的强度与这些点非常小的能隙可以比拟时, 类似于Bi_2Se_3, 铁基超导体中可以产生出三维的拓扑绝缘体相[16].

2.2 高对称性点处$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$有效哈密顿量

铁基超导中的许多问题只和费米能附近非常窄的能量区间的电子结构有紧密关系, 因此在布里渊区高对称点处费米能级附近关于能带的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$展开是一种描述电子结构非常有效的近似. 图2给出了典型的铁基超导的能带结构. 这里讨论两种不同的途径来构造$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$有效模型: 第一种途径是利用布里渊区高对称点处的布洛赫本征态作为基来构造$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$有效模型[12], 在此基函数下, $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$有效哈密顿量中的项是关于动量$\boldsymbol{k}$的幂次展开, 并且具有布洛赫本征态的不可约表示函数的形式; 第二种途径是利用布里渊区高对称点处具有特定轨道的万尼尔波函数作为基来构造$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$有效模型.

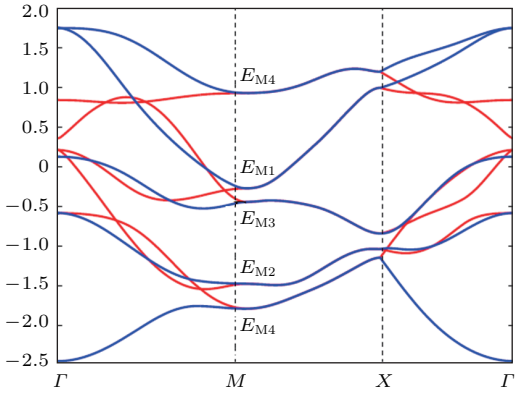

图2 紧束缚模型近似下典型的铁基超导的能带图

Fig. 2. Band structures of a typical iron-based superconductor.

在精确的布洛赫基下, 对于布里渊区的Γ和M点, $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$有效哈密顿量可以表示为如下形式[12]:

$$\boldsymbol{H}_0 = \sum_{k,\sigma=\uparrow,\downarrow}\boldsymbol{\psi}^{\dagger}_{\sigma}(k)\begin{bmatrix}\boldsymbol{h}^{+}_{M}(k) & 0 & 0\\ 0 & \boldsymbol{h}^{-}_{M}(k) & 0\\ 0 & 0 & \boldsymbol{h}_{\Gamma}(k)\end{bmatrix}\times\boldsymbol{\psi}_{\sigma}(k), \tag{7}$$

其中六分量的旋量具有如下形式:

$$\boldsymbol{\psi}_{\sigma}(k) = \begin{pmatrix}\psi_{X,\sigma}(k)\\ \psi_{Y,\sigma}(k)\\ \boldsymbol{\psi}_{\Gamma,\sigma}(k)\end{pmatrix}. \tag{8}$$

对于每一个自旋投影, ψ_X的上分量按群表示E^X_{M1}的形式变换, ψ_X的下分量按群表示E^X_{M3}的形式变换, ψ_Y的上分量按群表示E^Y_{M1}的形式变换, ψ_Y的下分量按群表示E^Y_{M3}的形式变换. 类似地, 对于每一个自旋投影, ψ_Γ的上下两个分量按轴矢量$E_{\rm g}$的形式变换. 因此, 方程(7)的对角元可以表示成如下形式:

$$\boldsymbol{h}^{\pm}_{M}(k) = \begin{pmatrix}\varepsilon_1+\dfrac{k^2}{2m_1}\pm a_1k_1k_2 & -\mathrm{i}v_{\pm}(k)\\ \mathrm{i}v_{\pm}(k) & \varepsilon_3+\dfrac{k^2}{2m_3}\pm a_3k_1k_2\end{pmatrix}, \tag{9}$$

$$\boldsymbol{h}_{\Gamma}(k)=\begin{pmatrix}\varepsilon_{\Gamma}+\dfrac{k^2}{2m_{\Gamma}}+bk_1k_2 & c(k_1^2-k_2^2)\\ c(k_1^2-k_2^2) & \varepsilon_{\Gamma}+\dfrac{k^2}{2m_3}-bk_1k_2\end{pmatrix}, \tag{10}$$

$$v_{\pm}(k)=v(\pm k_1+k_2)+p_1(\pm k_1^3+k_2^3)+p_2k_1k_2(k_1\pm k_2), \tag{11}$$

$$k^2=k_1^2+k_2^2,\quad k_1=\frac{1}{\sqrt{2}}(k_x+k_y),\quad k_2=\frac{1}{\sqrt{2}}(-k_x+k_y). \tag{12}$$

(9)—(12)式可以用来拟合铁基超导体的布里渊区Γ和M点附近的能带结构[12]. 对于拓扑能带论而言, 用万尼尔函数作为基来构造有效的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$哈密顿量通常来说是非常有效的. 第一性原理计算可以确定高对称点Γ和M附近能带的轨道权重. 对于铁基超导体, 计算表明, 在高对称点Γ和M附近三个$\mathrm{t_{2g}}$轨道具有最大的权重; 在Γ点费米能附近, 其中两条能带具有两维的E_{g}不可约表示, 一条能带具有一维的$B_{1\mathrm{g}}$不可约表示. 万尼尔函数$|xz,k\rangle$和$|yz,k\rangle$给出E_{g}表示的基函数, $|xy,k+Q\rangle$给出了$B_{1\mathrm{g}}$表示的基函数. 因此, Γ点附近的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$有效哈密顿量具有如下的形式:

$$\boldsymbol{H}_{\Gamma}=\sum_{k,\sigma=\uparrow\downarrow}\boldsymbol{\psi}^{\dagger}_{\Gamma,\sigma}(k)\boldsymbol{h}_{\Gamma}(k)\boldsymbol{\psi}_{\Gamma,\sigma}(k), \tag{13}$$

$$\boldsymbol{h}_{\Gamma}(k)=\begin{bmatrix}f_x^{\Gamma}(k) & t_4^{\Gamma}k_xk_y & 0\\ t_4^{\Gamma}k_xk_y & f_y^{\Gamma}(k) & 0\\ 0 & 0 & \varepsilon_3^{\Gamma}+t_3^{\Gamma}k^2\end{bmatrix}, \tag{14}$$

$$f_x^{\Gamma}(k)=\varepsilon_1^{\Gamma}+t_1^{\Gamma}k_{x/y}^2+t_2^{\Gamma}k_{y/x}^2, \tag{15}$$

$$\boldsymbol{\psi}_{\Gamma,\sigma}(k)=\begin{pmatrix}\langle xz,k,\sigma|\\ \langle yz,k,\sigma|\\ \langle xy,k+Q,\sigma|\end{pmatrix}. \tag{16}$$

如图2所示, 在布里渊区M点(也就是$(\pi,0)$点), 所有的能带都是两重简并(不考虑自旋自由度), 其中在费米能附近的两个简并点分别是E_{M3}和E_{M1}, E_{M3}对应的万尼尔基是$(|xy,k\rangle, |xy+Q,k\rangle)$, E_{M1}对应的万尼尔基是$(|yz,k\rangle, |xz,k+Q\rangle)$. 根据镜面反演对称性的宇称, M点附近的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$有效哈密顿量具有下列形式:

$$H_M=\sum_{k,\sigma=\uparrow\downarrow}\boldsymbol{\psi}^{\dagger}_{M,\sigma}(k)\begin{bmatrix}\boldsymbol{h}_M^{\mathrm{oo}} & 0\\ 0 & h_M^{\mathrm{ee}}\end{bmatrix}\boldsymbol{\psi}_{M,\sigma}(k), \tag{17}$$

$$h_M^{oo/ee}=\begin{bmatrix}\varepsilon_1^{\mathrm{o/e}}+t_1^{\mathrm{o/e}}k_x^2+t_2^{o/e}k_y^2 & -it_4^{\mathrm{o/e}}k_{y/x}\\ \mathrm{i}t_4^{\mathrm{o/e}}k_{y/x} & \varepsilon_3^{o/e}+t_3^{\mathrm{o/e}}k^2\end{bmatrix}, \tag{18}$$

$$\boldsymbol{\psi}_{M,\sigma}(k)=\begin{bmatrix}\langle yz,k,\sigma|\\ \langle xy,k,\sigma|\\ \langle xz,k+Q,\sigma|\\ \langle xy,k+Q,\sigma|\end{bmatrix}. \tag{19}$$

取合适的拟合参数, (7)—(12)式和(13)—(19)式可以给出类似的描述布里渊区Γ和M点附近的能带结构[12].

2.3 自旋轨道耦合

一般而言, 对铁基超导体的自旋轨道耦合效应是可以忽略的. 但是, 铁基超导体中存在一些具体的材料体系, 在布里渊区的某些点处, 能带有一些非常小的能隙, 大小从几个毫电子伏特到几十个毫电子伏特[17,18], 自旋轨道耦合可以克服这些小的能隙进而导致系统发生拓扑相变.

在铁基超导中唯象的自旋轨道耦合可以表示成原子极限下的形式[17]:

$$H_{\mathrm{so}}=\sum_{i,\alpha=x,y,z}\lambda_{\mathrm{so}}\boldsymbol{L}_i^{\alpha}\cdot\boldsymbol{s}_i^{\alpha}, \tag{20}$$

其中λ_{so}表示铁原子3d轨道的自旋轨道耦合的强度. X原子p轨道的效果可以被重整到λ_{so}. Fe原子裸的自旋轨道耦合强度大约在80 meV[18]附近或50 meV附近[17]. 这个强度的自旋轨道耦合可以引起布里渊区M点附近大概50—100 meV的裸的能量劈裂. $\boldsymbol{s}^{\alpha}$代表三个泡利矩阵, $(\boldsymbol{L}^x,\boldsymbol{L}^y,\boldsymbol{L}^z)$代表三个角动量矩阵, 在基$[\mathrm{d}_{xz},\mathrm{d}_{yz},\mathrm{d}_{x^2-y^2},\mathrm{d}_{xy},\mathrm{d}_{z^2}]$下, 三个角动量矩阵具有如下形式:

$$\boldsymbol{L}^x=\begin{bmatrix}0 & 0 & 0 & \mathrm{i} & 0\\ 0 & 0 & -\mathrm{i} & 0 & \mathrm{i}\sqrt{3}\\ 0 & \mathrm{i} & 0 & 0 & 0\\ -\mathrm{i} & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & \mathrm{i}\sqrt{3} & 0 & 0 & 0\end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{L}^y=\begin{bmatrix}0 & 0 & \mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i}\sqrt{3}\\ 0 & 0 & 0 & \mathrm{i} & 0\\ -\mathrm{i} & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -\mathrm{i} & 0 & 0 & 0\\ \sqrt{3}\mathrm{i} & 0 & 0 & 0 & 0\end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{L}^z=\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}&0&0&0\\ \mathrm{i}&0&0&0&0\\ 0&0&0&-2\mathrm{i}&0\\ 0&0&2\mathrm{i}&0&0\\ 0&0&0&0&0\end{bmatrix}. \tag{21}$$

(20)式表明自旋轨道耦合分为自旋守恒的项$\lambda_{\mathrm{so}}\boldsymbol{L}^z\boldsymbol{s}^z$和自旋翻转的项$\lambda_{\mathrm{so}}(\boldsymbol{L}^x\boldsymbol{s}^x+\boldsymbol{L}^y\boldsymbol{s}^y)$. (21)式表明自旋守恒的项耦合了两个具有相同镜面滑移对称操作宇称的轨道, 自旋翻转的项耦合了两个具有相反镜面滑移对称操作宇称的轨道.

自旋轨道耦合通常在驱动拓扑相变的过程中扮演非常重要的角色[19,20], 下面看自旋轨道耦合如何影响布里渊区高对称点附近的能带结构. 以最简单的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$有效哈密顿量为例, 并且只考虑三个$\mathrm{t_{2g}}$轨道. 对于(13)式中的$\Gamma$点附近的有效哈密顿量, 考虑自旋自由度, 那么自旋守恒的项$\lambda_{\mathrm{so}}\boldsymbol{L}^z\boldsymbol{s}^z$导致$|xz,k,\sigma\rangle$和$|yz,k,\sigma\rangle$的耦合, 自旋翻转的项$\lambda_{\mathrm{so}}(\boldsymbol{L}^x\boldsymbol{s}^x+\boldsymbol{L}^y\boldsymbol{s}^y)$导致$|xz,k,\sigma\rangle$, $|yz,k,\sigma\rangle$和$|xy,k,-\sigma\rangle$的耦合. 在$\mathrm{t_{2g}}(\mathrm{d}_{xz},\mathrm{d}_{yz},\mathrm{d}_{xy})$子空间中, 三个有效的轨道角动量矩阵$(\tilde{\boldsymbol{L}}^x,\tilde{\boldsymbol{L}}^y,\tilde{\boldsymbol{L}}^z)$具有如下的形式:

$$\tilde{\boldsymbol{L}}^x=\begin{bmatrix}0&0&\mathrm{i}\\ 0&0&0\\ -\mathrm{i}&0&0\end{bmatrix},\quad \tilde{\boldsymbol{L}}^y=\begin{bmatrix}0&0&0\\ 0&0&\mathrm{i}\\ 0&-\mathrm{i}&0\end{bmatrix},$$
$$\tilde{\boldsymbol{L}}^z=\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}&0\\ \mathrm{i}&0&0\\ 0&0&0\end{bmatrix}. \tag{22}$$

在Γ点附近新的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$有效哈密顿量可以表示成如下形式:

$$H_\Gamma=\sum_{k,\sigma\sigma'}\boldsymbol{\psi}^\dagger_{\Gamma,\sigma}(k)\Big[h_\Gamma(k)s^0_{\sigma\sigma'}+\sum_{\alpha=x,y,z}\lambda_{\mathrm{so}}(\tilde{\boldsymbol{L}}^x\cdot s^\alpha)_{\sigma\sigma'}\Big]\boldsymbol{\psi}_{\Gamma,\sigma'}(k), \tag{23}$$

(23)式中包含了三个轨道角动量矩阵, 因此Γ点的费米能附近的三个能带是相互耦合在一起的.

对于(17)式描述的M点附近的有效哈密顿量, 从(17)式—(19)式和(22)式可以看出, 当考虑自旋自由度以及自旋轨道耦合时, 由于自旋反转项$\lambda_{\mathrm{so}}(\boldsymbol{L}^x\boldsymbol{s}^x+\boldsymbol{L}^y\boldsymbol{s}^y)$会引起$|yz,k,\sigma\rangle$与$|xy,k+Q,-\sigma\rangle$的耦合以及$|xy,k,\sigma\rangle$与$|xz,k+Q,-\sigma\rangle$的耦合. 因此, 计入自旋轨道耦合中自旋翻转项对$M$点附近$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$有效哈密顿量的贡献可以表示成

$$\Delta H_M=\sum_{k,\sigma,\sigma'}\boldsymbol{\psi}^\dagger_{M,\sigma}(k)\begin{bmatrix}0&\boldsymbol{h}^{\mathrm{so}}_{M,\sigma\sigma'}\\ \boldsymbol{h}^{so\dagger}_{M,\sigma\sigma'}&0\end{bmatrix}\times\boldsymbol{\psi}_{M,\sigma'}(k), \tag{24}$$

其中

$$\boldsymbol{h}^{\mathrm{so}}_{M,\sigma\sigma'}=\lambda_{\mathrm{so}}\left[\begin{pmatrix}0&0\\ -\mathrm{i}&0\end{pmatrix}s^x_{\sigma\sigma'}+\begin{pmatrix}0&\mathrm{i}\\ 0&0\end{pmatrix}s^y_{\sigma\sigma'}\right]. \tag{25}$$

值得注意的是, 在上述M点附近$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$有效哈密顿量中, 自旋守恒的项$\lambda_{\mathrm{so}}\boldsymbol{L}^z\boldsymbol{s}^z$并没有贡献. 实际上, 自旋守恒项的贡献可以通过下面的考虑来导出, 前述构造M点附近哈密顿量时, 忽略了E_{M2}的贡献, 因为E_{M2}态距离费米能很远, 如图2所示. E_{M2}态包含万尼尔态$|xz,k,\sigma\rangle$和$|yz,k+Q,\sigma\rangle$. 自旋守恒项$\lambda_{\mathrm{so}}\boldsymbol{L}^z\boldsymbol{s}^z$耦合来自于$E_{M1}$的$|yz,k,\sigma\rangle$和$E_{M2}$的$|xz,k,\sigma\rangle$以及$E_{M1}$的$|xz,k+Q,\sigma\rangle$和$E_{M2}$的$|yz,k+Q,\sigma\rangle$. 由于$E_{M1}$和$E_{M2}$对应的能量劈裂很大, 因此自旋守恒项$\lambda_{\mathrm{so}}\boldsymbol{L}^z\boldsymbol{s}^z$对$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$有效哈密顿量的修正可以近似地表示为

$$\Delta\tilde{H}_M=\sum_{k,\sigma=\uparrow\downarrow}\boldsymbol{\psi}^\dagger_{M,\sigma}(k)\begin{bmatrix}\boldsymbol{h}^{\mathrm{oo}}_{M,\mathrm{so}}&0\\ 0&\boldsymbol{h}^{\mathrm{ee}}_{M,\mathrm{so}}\end{bmatrix}\times\boldsymbol{\psi}_{M,\sigma}(k), \tag{26}$$

其中

$$h^{\mathrm{oo/ee}}_{M,\mathrm{so}}=t_5\begin{bmatrix}\lambda^2_{\mathrm{so}}&\pm\lambda_{\mathrm{so}}k_{x/y}\\ \pm\lambda_{\mathrm{so}}k_{x/y}&k^2_{x/y}\end{bmatrix}. \tag{27}$$

因此, 计入自旋轨道耦合的影响, 在M点附近的$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$有效哈密顿量具有如下形式:

$$H^{\mathrm{tot}}_M=H_M+\Delta H_M+\Delta\tilde{H}_M. \tag{28}$$

值得注意的是, 哈密顿量$H_M+\Delta\tilde{H}_M$和BHZ模型具有类似的形式. 调节参数$t_5\lambda^2_{\mathrm{so}}$可以导致能带反转进而引起拓扑相变. 通常而言, ΔH_M和$\Delta\tilde{H}_M$的效应比较弱, 对铁基超导体的能带结构影响不大. 但是对于某些具体的材料或者界面体系, 比如单层FeSe/$\mathrm{SrTiO_3}$, $\Delta\tilde{H}_M$可以强烈地调制M点附近的能带结构并有可能引起拓扑相变[21].

3 铁基超导体正常态的拓扑

在上面一节的论述中, 重点讨论了铁基超导的对称性和电子结构的特点, 现在转向本综述的

核心内容: 铁基超导中的拓扑量子态. 首先讨论铁基超导体正常态的拓扑. 拓扑绝缘体Bi_2Se_3是关于能带拓扑的一个范例, 图3 (a)给出了在原子极限下各种相互作用导致的Bi_2Se_3能带演化的典型图像[16], 在第IV 步, 自旋轨道耦合驱动了能带反转. 图3 (a)是描述拓扑绝缘体发生拓扑相变的标准图像, 类似地, 铁基超导体的拓扑相变也应该有类似的图像. 图3 (b)和图3 (c)给出了在原子极限下铁基超导的3d能带在杂化、晶体场、自旋轨道耦合或者其他效应的作用下, Γ点和M点的能带演化图像. 具体来看, 用符号$\mathrm{d}_{\mathrm{o/e},\alpha}$来表示具有关于镜面滑移对称操作的奇/偶宇称的$\alpha$轨道. $|\mathrm{d}_{\mathrm{o/e}}, m_l, m_j\rangle$表示磁量子数$m_l$和$m_j$标记的具有关于镜面滑移对称操作的奇/偶宇称的d轨道. 考虑图3 (b)和图3 (c)中绿线标记的长方形区域, 轨道$\mathrm{d}_{\mathrm{o/e},\alpha}$和$|\mathrm{d}_{\mathrm{o/e}}, m_l, m_j\rangle$当$\alpha = xz, yz$和$m_l = \pm 1$时的空间反演对称操作的宇称与轨道$\mathrm{d}_{\mathrm{o/e},\alpha}$当$\alpha = xy$时的空间反演对称操作的宇称是相反的. 因此, 图3 (b)和图3 (c) 所示的空间反演对称操作下的宇称反转和图3 (a)中拓扑绝缘体的图像是一致的. 这种类比表明, 在铁基超导体的某些化合物中, 一定存在拓扑相变. 下面几个小节将分别讨论对应于图3 (b)和图3 (c)中拓扑相变图像的几个具体例子.

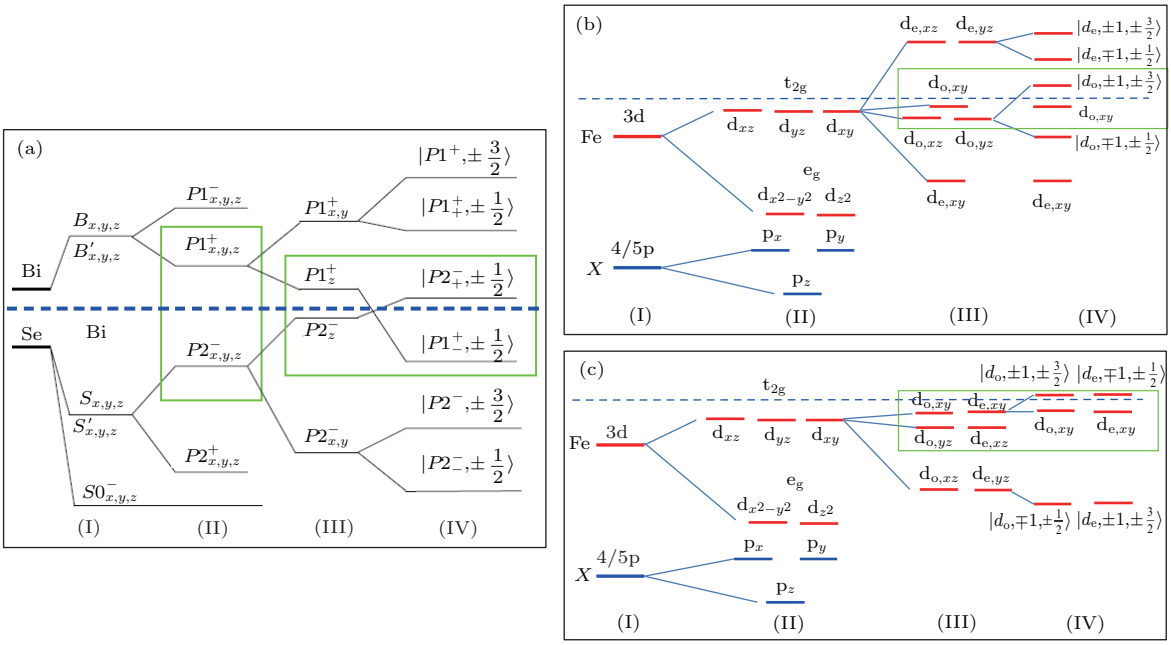

图3 (a) 原子极限下, Bi和Se的轨道在如下四种效应下的演化[16], (I) Bi和Se轨道的杂化, (II) 由于时间反演对称性形成的成键态和反键态, (III) 晶体场劈裂, (IV) 自旋轨道耦合效应的影响; (b), (c) 铁基超导在高对称点Γ(图(b))和M(图(c))点的能带演化图像, 其中, (I) Fe的3d轨道和X原子的4p或者5p轨道的杂化; (II) 晶体场劈裂; (III) 根据镜面滑移对称操作的宇称分类, Fe的3d轨道电子态分别形成成键态和反键态; (IV) 自旋轨道耦合或者其他效应的影响

Fig. 3. (a) In the atomic limit, the evolution of the bands from Bi and Se under the influences of the following four effects[16], (I) the hybridization of Bi orbitals and Se orbitals, (II) the formation of the bonding and antibonding states due to the inversion symmetry, (III) the crystal field splitting, (IV) the influence of the spin-orbit coupling; (b) and (c) are the similar processes in iron-based superconductors at high-symmetry Γ point (Fig. (b)) and M point (Fig. (c)). In both (b) and (c), (I) the hybridization of iron 3d orbitals and X 4p or 5p orbitals, (II) the crystal field splitting, (III) the formation of the bonding and antibonding states, which are classified with the parities of glide-plane symmetry, (IV) the influence of the spin-orbit coupling or other effects.

3.1 单层FeSe/SrTiO$_3$

本节讨论布里渊区M点附近的拓扑相变. 根据上面的讨论, M点附近存在一个非常小的能隙, 是讨论拓扑相变的一个非常重要的前提条件. 引人注目的单层FeSe/SrTiO$_3$就是这样一个体系[3], 由于它具有超高的超导转变温度, 引起了人们广泛的兴趣和关注[22−28]. 图4 (a)和图4 (b)给出了角分辨光电子谱(angle-resolved photoemission spectroscopy, ARPES)得到的能带结构[23,25]. 为了模拟实验观测到的能带结构, 采用一个紧束缚近似的哈密顿量来描述从体材料到单层材料能带结构的

演化. 图4 (c)—图4 (e) 中的能谱来自于紧束缚近似的哈密顿量计算的结果[29]. 与体材料相比, 单层FeSe/$SrTiO_3$只有在M点的电子型费米面, 而Γ点的费米面沉到费米能以下消失了. ARPES实验表明, 单层FeSe/$SrTiO_3$的能带结构不能通过体材料能带结构的刚性位移得到, 因为与体材料相比, 布里渊区M点费米能以下会出现一个非常小的能隙. 图4 (c)—图4 (e) 给出了电子结构从FeSe体材料到单层FeSe/$SrTiO_3$的转变. 从对称性的角度来看, 图4 (c) 中两个红色的奇宇称的能带No.2和No.3 属于A_2和B_2不可约表示, 这就是它们交叉不打开能隙的原因. 但是, 两条蓝色的偶宇称的能带No.1和No.4属于相同的B_1不可约表示, 若它们交叉, 则必会打开能隙. 注意到在M点附近, 这两条能带主要具有d_{xz}和d_{xy}轨道权重. 此外, 能带的对称性不依赖于轨道间的耦合, 因为这种耦合在高对称的M点处为零. 因此, 可以调整d_{xz}和d_{xy}的相对轨道能使这两个能带在M点交叉进而打开能隙. 通过比较图4 (c) 与图4 (e), 可以清楚地发现图4 (e) 中的能带对应于图3 (c) 中的第III步, 可以进一步地追问, M点的这个小能隙是否可以被自旋轨道耦合克服进而实现第IV步? 实际上, 如果M点的这个由$SrTiO_3$衬底的应力调制的小能隙可以与自旋轨道耦合强度相比拟, 那么可以预期在某些参数区间内单层FeSe/$SrTiO_3$可以发生拓扑转变进而进入到图3 (c) 所示的第IV步, 这一物理图像类似于量子自旋霍尔效应.

上述讨论说明单层FeSe/$SrTiO_3$中的拓扑相变包含两个重要的物理过程: 首先在高对称点M附近需要存在包含一个小能隙的特定电子结构, 并且这个拓扑平庸的小能隙来源于外界的调制, 例如衬底的应力; 其次, 自旋轨道耦合强度和这个小能隙可以比拟, 进而可以克服这个小能隙引起能带反转. 单层FeSe/$SrTiO_3$的拓扑非平庸态可以用Z_2拓扑数来标记. 在两个Fe原胞图景中, 有两套能带,

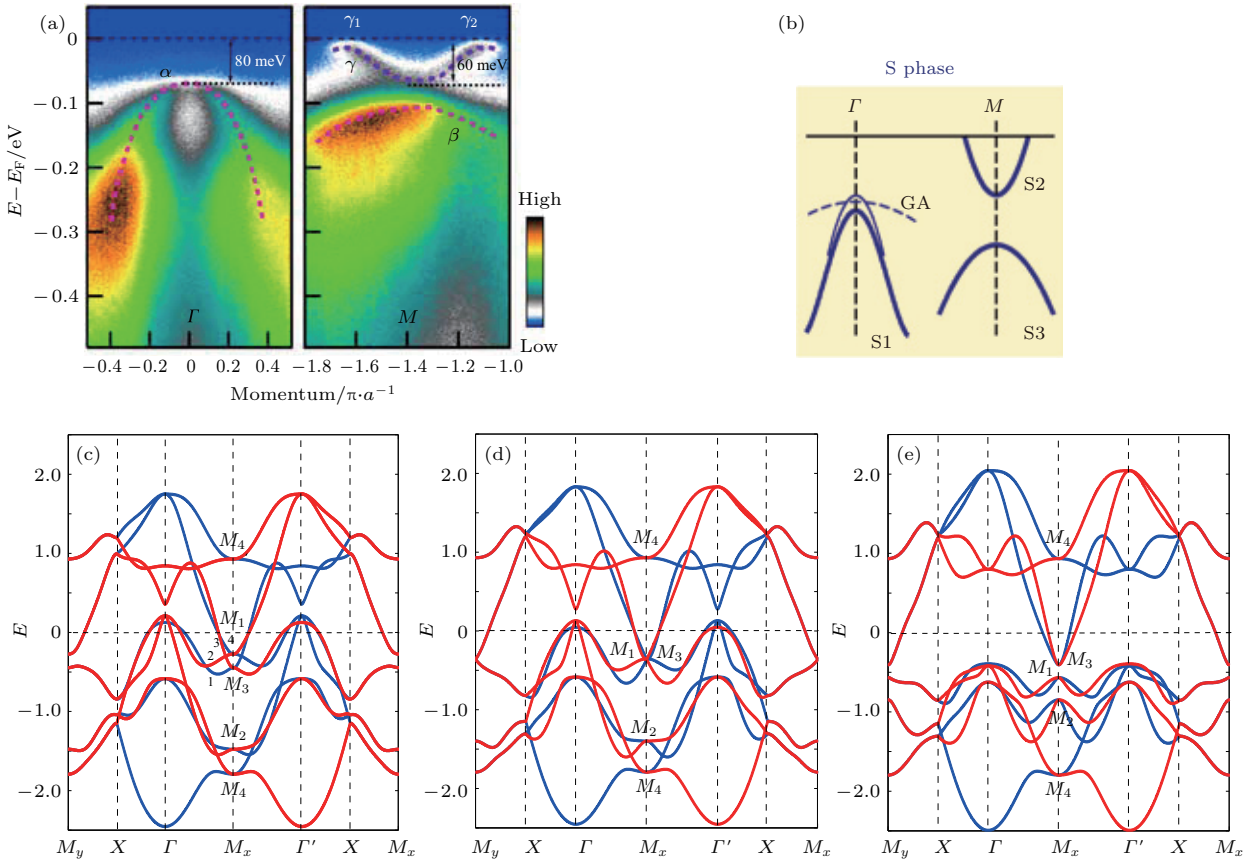

图4 (a) 角分辨光电子谱测得的能带[25]; (b) Γ点和M点附近的能带结构示意图[23]; (c)—(e) 对应不同的参数, 紧束缚模型得到的能带结构, 红色和蓝色代表镜面滑移对称操作的奇和偶宇称[29]

Fig. 4. (a) Band structures which are resolved by ARPES[25]; (b) the schematic drawing about the bands near Γ and M points[23]; (c)–(e) band structures obtained from tigh-binding Hamiltonian with different hopping parameters. The red and blue colors label the bands with odd and even parities[29].

分别由镜面滑移对称操作的奇和偶宇称来标记, 如图 4 (c)—图 4 (e) 中红色和蓝色的能带所示. 对于每一套给定宇称的能带, 可以定义一个 Z_2 拓扑不变量, 这个 Z_2 拓扑不变量可以通过图 5 (a) 中四个高对称点处的空间反演对称操作 $\left\{i\middle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right\}$ 的宇称来计算. 也就是

$$(-1)^{v^q}=\prod_{i=1}^{4}\delta_i^q, \tag{29}$$

其中 δ_i^q 表示空间反演对称操作 $\left\{i\middle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right\}$ 在 i 点的宇称, q 取 o 或 e 表示关于镜面滑移对称操作 $\left\{m_z\middle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right\}$ 的奇或偶宇称. 简单计算可以发现 q 取 o 或 e 时 $v^q=1$, 这表明体系具有偶数个 Z_2 拓扑不变量. 相应地, 体系存在偶数个边界态, 如图 5 (b) 所示. 同时, 可以构造一个最小有效模型来描述单层 $FeSe/SrTiO_3$ 中的拓扑相变, 其形式类似于 (28) 式中的 $H_M+\Delta\tilde{H}_M$. 但是, 仔细分析会发现 (28) 式中的 ΔH_M 项会破坏镜面滑移对称性 $\left\{m_z\middle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right\}$, 并导致两组边界态的耦合进而打开一个小的能隙. 这里的拓扑相变实际上属于弱的拓扑相, 类似于弱的拓扑绝缘体 [30].

下面讨论如何从弱拓扑相到强拓扑相转变. 如前所述, 在单层 $FeSe/SrTiO_3$ 中由于衬底的作用, 体系存在两种破坏镜面滑移对称性 $\left\{m_z\middle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right\}$ 的效应, 第一种是来自于自旋轨道耦合的 ΔH_M, 第二种是来自于衬底的耦合, 可以表示成

$$H_{\rm s}=\sum_{m,\sigma}\sum_{\tilde{k}=k,k+Q}\xi_{\rm s}(\tilde{k})d^{\dagger}_{m,\sigma}(\tilde{k})d_{m,\sigma}(\tilde{k}+Q), \tag{30}$$

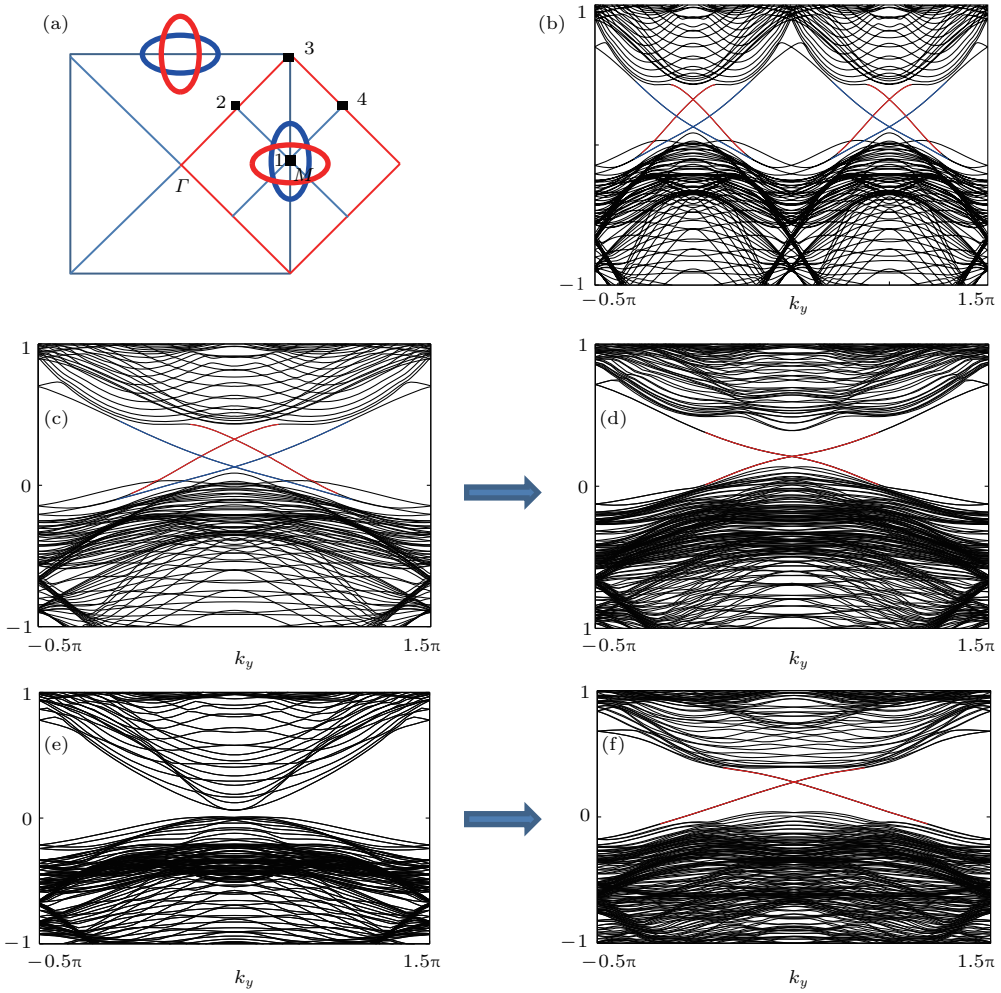

图 5 (a) 两个铁原胞中高对称点 1—4; (b) 弱拓扑相的边界谱 [21]; (c), (d) 弱拓扑相到强拓扑相转变 [21]; (e), (f) 拓扑平庸相到强拓扑相转变 [21]

Fig. 5. (a) The high-symmetry points 1–4 in two-iron unit cell picture; (b) the edge spectrum in weak topological phase [21]; (c), (d) the transition from weak to strong topological phase [21]; (e), (f) the transition from trivial to strong topological phase [21].

其中在最低阶近似下 $\xi_{\rm s}(\tilde{k})$ 取常数 $\xi_{\rm s}$. 当考虑 $H_{\rm s}$ 时, 情况就会非常不同, 相较于破坏拓扑相, $H_{\rm s}$ 会使拓扑相更稳定进而驱动系统进入一个强的拓扑相. 实际上, M 点附近的有效能带结构可以用一个有质量的狄拉克方程来描写, 下面考虑这个狄拉克方程, 当 $\lambda_{\rm so}>0$ 时, 狄拉克质量 $m(k)$ 被修正为 $m(k)\pm\xi_{\rm s}$, 其中 $m(k)=\alpha(m-k^2)$. $H_{\rm s}$ 的作用是在不同的 M 点改变狄拉克质量. 对于两个不同的 M 点, 这种改变 $m(k)\pm\xi_{\rm s}$ 具有相反的趋势. 因此, 对于 $\alpha>0$, 如果满足 $m+\xi_{\rm s}>0$, 那么 $H_{\rm s}$ 可以引起一个 M 点的能带反转, 同时另外一个 M 点的能带不会反转, 因为 $m-\xi_{\rm s}<0$, 这种情况对应于一个强的拓扑相变[31]. 强的拓扑相对于任何不破坏时间反演对称性的微扰都是稳定的, 包括自旋轨道耦合的反转项 ΔH_M, 图 5 (c)—图 5 (f) 的数值结果给出了很清楚的证明.

3.2 单层 $\mathbf{FeTe_{1-\mathit{x}}Se_{\mathit{x}}}$

本小节介绍单层 $\rm FeTe_{1-\mathit{x}}Se_{\mathit{x}}$ 薄膜, 这个体系在布里渊区 Γ 点会发生拓扑转变. 在讨论拓扑非平庸态前, 先来讨论拓扑平庸态. 单层 FeTe 的晶格常数是 $a=3.925$ Å[32−34], 其包含和不包含自旋轨道耦合时的能带结构如图 6 (a) 所示.

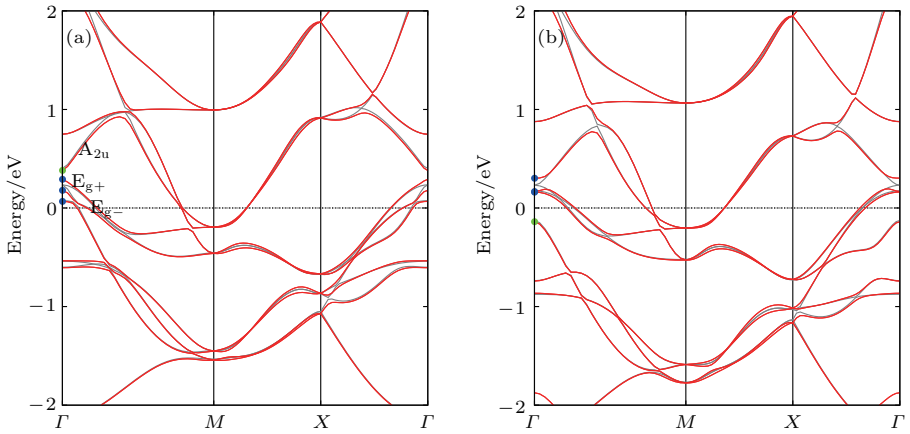

图 6 单层 FeTe 的能带结构[35] (a) 晶格常数 $a=3.925$ Å; (b) 晶格常数 $a=3.805$ Å; 灰色和红色能带分别表示不考虑和考虑自旋轨道耦合的情形; 蓝色和绿色的点标记相应的能带具有空间反演对称操作的偶和奇宇称

Fig. 6. Band structures of monolayer FeTe[35]: (a) $a=3.925$ Å; (b) $a=3.805$ Å. The red solid lines represent the band with spin-orbit coupling and the gray lines represent the band without spin-orbit coupling. The inversion-symmetry parities of the eigenstates at near the Fermi level are shown: blue circles for even parities and green circles for odd parities.

自旋轨道耦合的效果主要包括两方面: 1) Γ 点两重简并的 $E_{\rm g}$ 能带劈裂成两个 E_{g+} 和 E_{g-} 能带; 2) 沿着 Γ-M 方向的狄拉克锥结构有能隙打开. 第二个效应会导致布里渊区每一个 k 点都有一个小的能隙, 这是定义一个拓扑不变量的充分条件. 在不考虑自旋轨道耦合时, 图 6 (a) 给出了 Γ 点费米能附近的能带关于空间反演对称性 $\left\{i\middle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right\}$ 的宇称. 根据前述的讨论, 可以发现 $\rm A_{2u}$ 态主要由大权重的 $|xy,k\rangle$ 态和小权重的 $|z,k+Q\rangle$ 态组成, 两个 $(\rm E_{g+},E_{g-})$ 态主要由大权重的 $(|xz,k\rangle,|yz,k\rangle)$ 态和小权重的 $(|x,k\rangle,|y,k\rangle)$ 态组成. 存在自旋轨道耦合时, 两个 $(\rm E_{g+},E_{g-})$ 态在 Γ 点劈裂成两个独立的态. 通过计算这个时间反演不变点的空间反演对称性的宇称的乘积, 可以发现图 6 (a) 中的能带结构是拓扑平庸的. 与前述的图 3 (b) 中的拓扑相变的图像相比较, 可以发现图 6 (a) 对应第 III 步. $\rm A_{2u}$ 和 $\rm E_{g+}$ 态在 Γ 点具有相反的宇称, 并且被一个大概 90 meV 的能隙分开. 如果这个能隙可以被调制关闭然后再打开, 那么这两个态的反转会驱动体系进入一个由 Z_2 拓扑不变量标记的非平庸的拓扑态. 第一性原理计算表明这种能带反转可以在单层 FeTe 中发生, 因为它具有较小的晶格常数, $a=3.805$ Å. 相应的能带结构如图 6 (b) 所示, 其中 $\rm A_{2u}$ 和 $\rm E_{g+}$ 态在 Γ 点确实发生了反转. 进一步的计算表明这种能带反转是由 Te 到 Fe 面的高度和晶格常数大小来调制的[35]. 如果定义 $\Delta_{\rm s}$ 和 Δ_n 分别为

考虑和不考虑自旋轨道耦合时 A_{2u} 和 E_{g+} 态的能量差, 那么 Te 原子的高度 d, A_{2u} 和 E_{g+} 态随着晶格常数的变化规律如图 7 (a) 所示. 随着晶格常数的减小, Te 原子高度增加, 那么 A_{2u} 态的能量下移, E_{g+} 态能量上移, 导致 Δ_s 和 Δ_n 减小. 第一性原理计算表明拓扑相变发生在 $a = 3.905$ Å, 对应 Te 的高度是 $d = 1.535$ Å [36,37]. 当 $a < 3.905$ Å 时, 体系是拓扑非平庸的, 当 3.886 Å $< a <$ 3.905 Å 时, Δ_s 是负的, Δ_n 是正的, 表明能带反转完全由自旋轨道耦合驱动. 当 $a < 3.886$ Å 时, Δ_n 是负的, 即使没有自旋轨道耦合, 能带也发生了反转, 如图 6 (b) 所示. 单层 FeTe 的拓扑边界态如图 7 (b) 所示.

Te 的高度也可以通过掺杂 Se 形成 $FeTe_{1-x}Se_x$ 调制, 相应地, 拓扑相变可以通过改变 Se 的掺杂浓度来调制. 为了估计临界掺杂浓度, 可以参照实验测量的数据. 在 FeSe 和 $FeTe_{0.5}Se_{0.5}$ 中, Se 的高度分别是 1.46 和 1.589 Å. 假设 Se 的高度随着 Se 浓度的变化是线性变化的 [38], 那么在拓扑转变点处 Se 的临界浓度对应 $x = 0.7$. 因此, 通过掺杂来调节 Se 的浓度提供了一个非常好的控制 $FeTe_{1-x}Se_x$ 拓扑相变的外部手段.

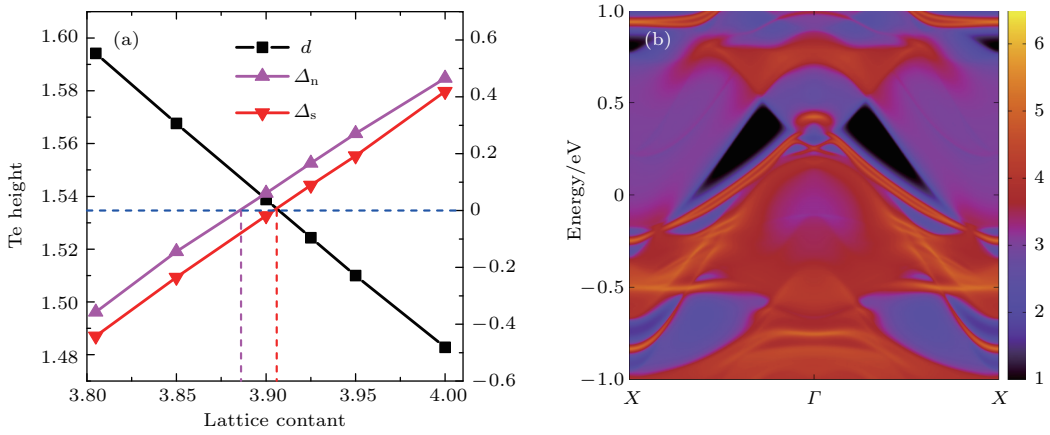

图 7 (a) Te 的高度 d 和 Δ_s, Δ_n 随着面内晶格常数的变化 [35]; (b) 对应于晶格常数 $a = 3.805$ Å, 取 [100] 边界时单层 FeTe 的谱函数 [35]

Fig. 7. (a) The Te height d and the gaps Δ_s and Δ_n as functions of in-plane lattice constant [35]; (b) the spectrum function of the monolayer FeTe with $a = 3.805$ Å with [100] edges [35].

3.3 $FeTe_{1-x}Se_x$ 单晶

以上两节讨论了单层 $FeSe/SrTiO_3$ 和单层 $FeTe_{1-x}Se_x$, 它们分别在布里渊区 M 点和 Γ 点发生能带反转进而导致体系发生拓扑相变, 这两个体系都是两维的. 下面来讨论 $FeTe_{1-x}Se_x$ 单晶中的三维拓扑相变 [39].

在不考虑自旋轨道耦合时, FeSe 和 $FeTe_{0.5}Se_{0.5}$ 单晶的电子结构如图 8 (a) 和图 8 (b) 所示 [39], 对于 FeSe 的电子结构, 在 Γ 附近用 Γ_5^+ 来标记两重简并的态 $|xz, k\rangle$ 和 $|yz, k\rangle$, 用 Γ_4^+ 来标记一个非简并的态 $|xy, k + Q\rangle$, Γ 点附近的导带和价带被一个大约 600 meV 的能隙分开. 由红色圆圈标记的能带用 Γ_2^- 标记, 主要包括 $|xy, k\rangle$ 和 $|z, k + Q\rangle$. 图 8 (b) 给出了 $FeTe_{0.5}Se_{0.5}$ 单晶的电子结构, 与 FeSe 单晶的电子结构相比, 主要有两点不同: 1) Γ_2^- 态的能量被强烈拉低, 导致在 Γ 点几乎触碰到价带顶部, 并且 Γ 点的能隙几乎闭合; 2) 沿着 Γ-Z 方向, Γ_2^- 能带的色散被强烈增强, 在 Z 点发生能带反转, 进而导致体系可能发生拓扑相变. 在 FeSe 单晶和 $FeTe_{0.5}Se_{0.5}$ 单晶中 Γ_2^- 能带的这种强烈反差与 3.2 节中单层 $FeTe_{1-x}Se_x$ 类似, 都是 Se 和 Te 的浓度差异导致晶格常数变化 [40,41].

当考虑自旋轨道耦合时, $FeTe_{0.5}Se_{0.5}$ 的能带结构就会打开一个直接的能隙. 假设一个弯曲的化学势 (如图 8 (c) 和图 8 (d) 中的红色虚线) 位于第 10 和第 11 个能带之间, 可以定义一个非平庸的 Z_2 拓扑不变量来描述这种拓扑相变. 具体来讲, 双重简并的 Γ_5^+ 态劈裂成两个 Γ_6^+ 和 Γ_7^+ 态, Γ_2^- 态变为 Γ_6^-. 沿着 Γ-Z 方向, 两个 Λ_6 带耦合并打开一个大约 10 meV 的能隙, 若定义一个弯曲的费米能穿过这个小的能隙, 那么可以计算出 Z_2 不变量等于 1. 这表明 $FeTe_{0.5}Se_{0.5}$ 处在一个三维的拓扑相并且支持非平庸的拓扑表面态 [39].

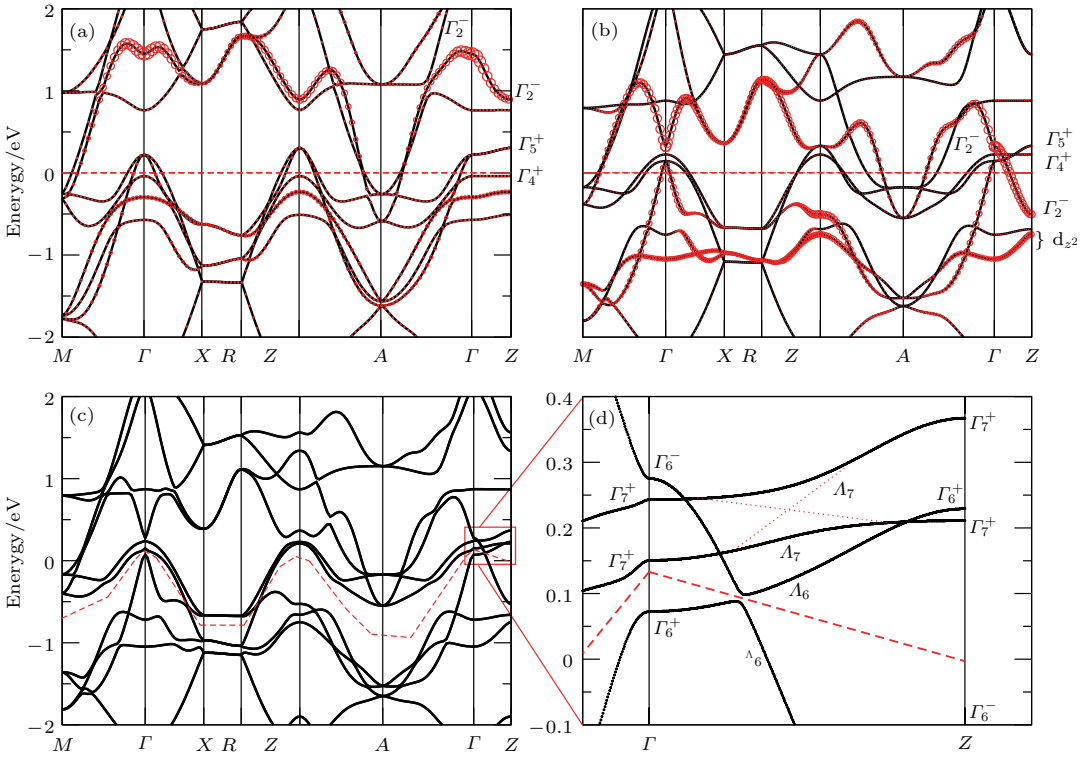

图 8 (a) 不考虑自旋轨道耦合时 FeSe 的能带结构 [39]; (b) 不考虑自旋轨道耦合时 $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ 的能带结构 [39]; (c) 考虑自旋轨道耦合时 $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ 的能带结构 [39]; (d) 图 (c) 中红色方框区域的放大图 [39]

Fig. 8. (a) Band structures of FeSe without spin-orbit couplings [39]; (b) band structures of $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ without spin-orbit couplings [39]; (c) band structures of $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ with spin-orbit couplings [39]; (d) zoom-in view of the solid red box area in (c) [39].

参照图 3 (c) 中拓扑相变的图像, $FeTe_{0.5}Se_{0.5}$ 单晶中的拓扑相变和单层 $FeTe_{1-x}Se_x$ 会有些不同. 在单层 $FeTe_{1-x}Se_x$ 中自旋轨道耦合在驱动拓扑相变时并不起首要的作用, 但是在驱动 $FeTe_{0.5}Se_{0.5}$ 单晶中的拓扑相变时是不可或缺的. 原因在于沿着 Γ-Z 方向能带 Γ_6^+ 和 Γ_6^- 交叉形成的能隙其实来自于一种传递效应, 通过自旋轨道耦合把 Γ_4^+ 和 Γ_5^+ 的耦合传递到 Γ_6^+ 和 Γ_6^- 能带的耦合, 换句话说, 这个有效的能隙来自于自旋轨道耦合和层间耦合导致的二阶微扰过程. 这种传递效应可以通过紧束缚哈密顿量的模拟清楚地反映出来. 其中 Γ_2^- 中 $|z, k+Q\rangle$ 的权重可以被重整到 $|xy, k\rangle$. 如前所述, 层间耦合可以分为两部分, 宇称守恒的部分和宇称混合的部分. 图 9 (a) 给出了不考虑自旋轨道耦合和层间宇称混合项的能带结构. 第一性原理计算的 Γ_2^- 态对应于图 9 (b) 中的能带 4. 若不考虑层间宇称混合项, 自旋轨道耦合并不会打开能带 4 和能带 1, 2 间的能隙. 只有当层间宇称混合项和自旋轨道耦合同时考虑时, 才会得到类似第一性原理计算的结果. 进一步的分析表明, 最关键的层间宇称混合项是 d_{xz} 和 d_{yz} 轨道间的耦合, 也就是 $-4it^c_{xz,yz}(\cos k_x + \cos k_y)\sin k_z$ [42]. 这个层间宇称混合项的效应可以被重整为一个有效的自旋轨道耦合,

$$\tilde{\boldsymbol{H}}_{\rm soc} = \begin{bmatrix} 0 & \tilde{\boldsymbol{h}}_{\rm soc} \\ \tilde{\boldsymbol{h}}^{\dagger}_{\rm soc} & 0 \end{bmatrix}, \tag{31}$$

$$\tilde{\boldsymbol{h}}_{\rm soc} \propto \lambda_{\rm so}[\boldsymbol{H}_{\rm c}^{\dagger}\boldsymbol{L}^- + \boldsymbol{L}^-\boldsymbol{H}_{\rm c}], \tag{32}$$

其中 $\lambda_{\rm so}$ 是自旋轨道耦合的强度, L^- 是 d 轨道的轨道角动量矩阵, $\boldsymbol{H}_{\rm c}$ 是层间宇称混合项. 沿着 Γ-Z 方向, $(k_x, k_y) = (0, 0)$, 可以得到

$$\tilde{\boldsymbol{h}}_{\rm soc} = {\rm i}t^c_{xz,yz}\lambda_{\rm so}\sin k_z \begin{bmatrix} 0 & 0 & -{\rm i} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & -{\rm i} & 0 \\ -{\rm i} & -1 & 0 & 0 & -\sqrt{3} \\ 1 & -{\rm i} & 0 & 0 & \sqrt{3}{\rm i} \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & \sqrt{3}{\rm i} & 0 \end{bmatrix}, \tag{33}$$

类似于三维的拓扑绝缘体, 这里的 $\sin k_z$ 项起到了关键的作用.

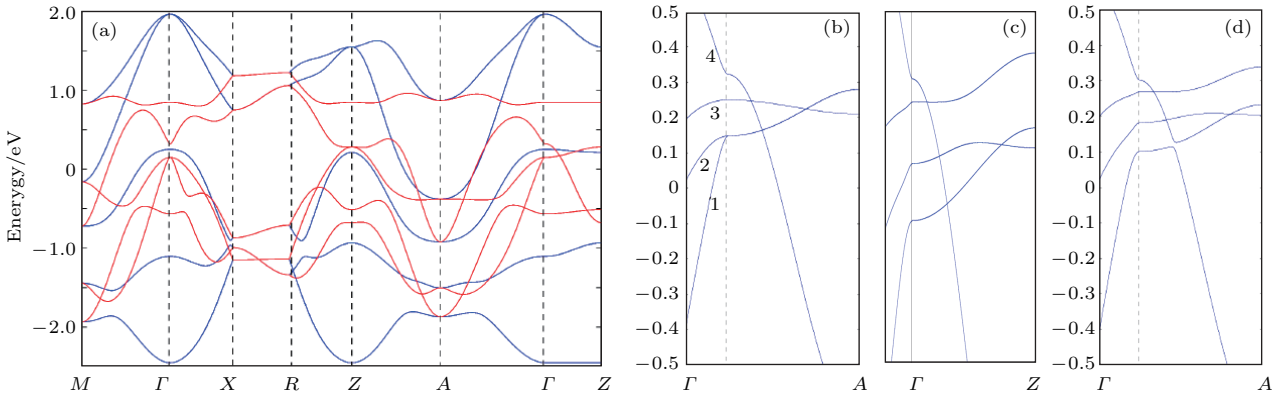

图 9 (a) 紧束缚近似哈密顿量得到的能带结构, 红和蓝色标记特定的宇称; (b)—(d) 沿着 Γ-Z 方向的能带结构, 其中 (b) 层间宇称混合项和自旋轨道耦合为零, (c) 层间宇称混合项为零, 自旋轨道耦合不为零, (d) 层间宇称混合项和自旋轨道耦合都不为零

Fig. 9. (a) Band structures from the tight-binding Hamiltonian. The red and blue colors indicate the bands with specific parities; (b)–(d) band structures along the Γ-Z line with nonzero interlayer parity-mixing hopping and zero spin-orbit coupling in (b), with zero interlayer parity-mixing hopping and nonzero spin-orbit coupling in (c), and with nonzero interlayer parity-mixing hopping and nonzero spin-orbit coupling in (d).

3.4 As层夹层的 $CaFe_2As_2$

$Ca_{1-x}La_xFeAs_2$ 具有链状的As层和As-Fe-As层沿着 c 方向交错排列的结构[43−45], 如图10 (a)所示. As-Fe-As层作为铁基超导的核心子结构对高温超导电性的产生起着非常重要的作用. 与其他铁基超导相比, 链状的As插层使得 $Ca_{1-x}La_xFeAs_2$ 具有非常独特的性质[46]. 图10 (b)给出了 $Ca_{1-x}La_xFeAs_2$ 的费米面结构, 其中, 绿色的费米面来自于As-Fe-As的贡献, 红色的费米面来自于链状的As层的 p_z 轨道以及Ca的d轨道的贡献. 橙色的费米面来自于链状的As层的 p_x 和 p_y 轨道的贡献. 值得指出的是, 只有在布里渊区的两条边界上才有橙色的费米面, 这表明由于链状As 插层的存在, 体系四重旋转对称性被破坏了. 仔细分析可以看出在CaAs中的As原子形成了一个锯齿型的链, 对应于棋盘格子中心As原子沿着 x 方向偏离的中心位置, 如图10 (c) 所示. 这种偏移破坏了Fe格子的 S_4 对称性. 在动量空间, 这种对称性的降低导致了 $k_x = \pi$ 平面的能带退简并[43].

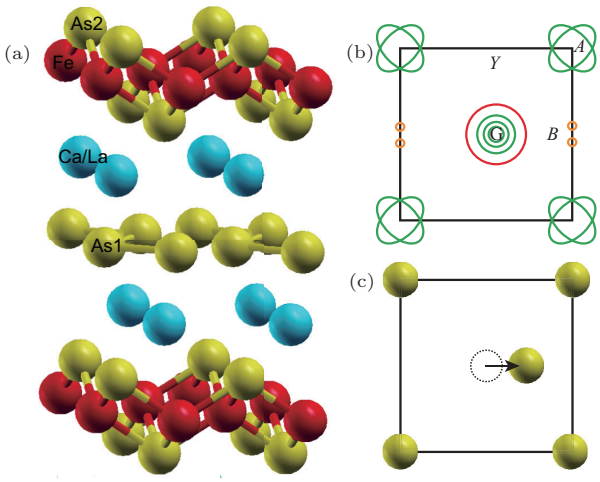

图 10 (a) $Ca_{1-x}La_xFeAs_2$ 晶体结构示意图[43]; (b) 相应的费米面[43]; (c) As链的构型[43]

Fig. 10. (a) Schematic view of the crystal structure of $Ca_{1-x}La_xFeAs_2$ [43]; (b) the relevant Fermi surface[43]; (c) the configuration of As chain[43].

如图10所示, $Ca_{1-x}La_xFeAs_2$ 费米面可以分为三个弱耦合的部分, 包括Fe-As层的d轨道形成的能带, As 链的 p_x 和 p_y 轨道形成的能带以及As链的 p_z 轨道形成的能带. 值得注意的是, 在不考虑自旋轨道耦合时, As链的 p_x 和 p_y 轨道形成的能带在费米面附近会形成一个狄拉克锥的结构. 当考虑自旋轨道耦合时, 这个狄拉克锥会打开一个小的能隙, 如图11 (b) 和图11 (c) 所示. 其中, As链的 p_x 和 p_y 轨道形成的能带及其狄拉克锥的结果可以用一个有效的哈密顿量来描述,

$$H = H_{\rm TB} + H_{\rm so} + H_{\rm p}, \tag{34}$$

其中 $H_{\rm TB}$ 表示紧束缚近似的哈密顿量, 主要描述两个子格的 p_x 和 p_y 轨道形成的能带结构. $H_{\rm so}$ 描述 p_x 和 p_y 轨道的有效自旋轨道耦合. $H_{\rm p}$ 描述由于晶格对称性破缺导致的交错的子格势. 它们具体的形式见参考文献[43]. 通过选取合适的参数, (34) 式给出的能带结构如图11 (a) 和图11 (d) 所示. 能带

的拓扑性质可以通过计算占据态的万尼尔中心来判断[47], 计算结果如图 12 (a) 和图 12 (b) 所示, 可以看出万尼尔中心发生了交错并且体系存在边界态. 图 12 (e) 给出了关于自旋轨道耦合强度 λ 和交错势 $\lambda_{\rm v}$ 的相图, 可以看出当 $\lambda_{\rm v} > \lambda/2$ 时体系是能带绝缘体, 当 $\lambda_{\rm v} < \lambda/2$ 时, 体系是量子自旋霍尔态. 此外, 对于三维情况, 计算表明 $Ca_{1-x}La_xFeAs_2$ 处于弱的三维拓扑绝缘体态, 其拓扑不变量 $Z_2 = 0$; (001)[7]. 处于拓扑态时边界态的图像如图 12 (c) 和图 12 (d) 所示.

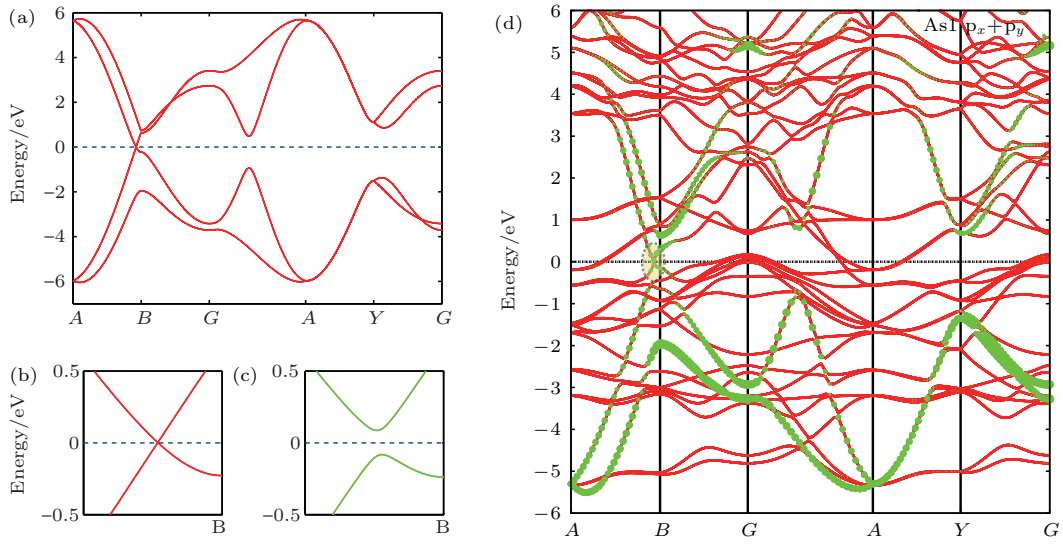

图 11 (a) 紧束缚模型给出的 As 链的能带结构[43]; (b) 和 (c) 分别为不考虑和考虑自旋轨道耦合时费米面附近的能带结构[43]; (d) 第一性原理计算的能带结构[43]

Fig. 11. (a) The band structures of As chain from tight-binding model[43]; (b), (c) the band structures around the Fermi energy without and with spin-orbit coupling, respectively[43]; (d) the band structures from first-principle calculations[43].

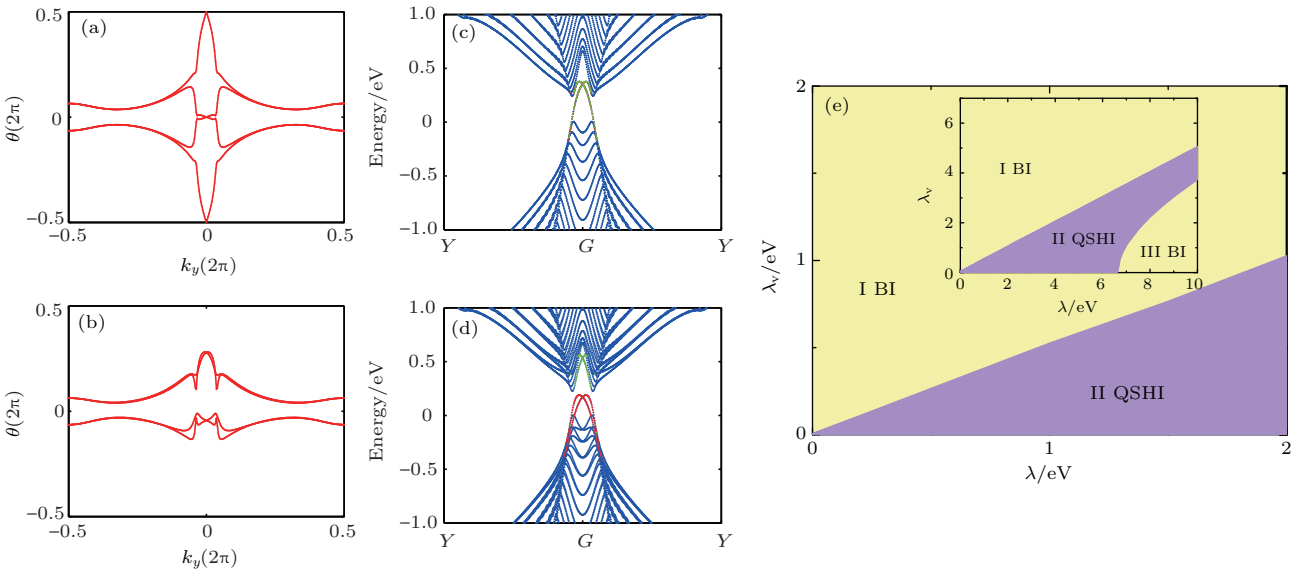

图 12 拓扑相 (a) 和非拓扑相 (b) 时紧束缚模型计算的万尼尔中心的演化[43]; (c), (d) 紧束缚模型给出的边界态[43]; (e) 能带绝缘体和量子自旋霍尔态关于自旋轨道耦合强度 λ 和交错势 $\lambda_{\rm v}$ 的相图[43]

Fig. 12. (a), (b) The evolution of Wannier function centers in topological and trivial phases with tight-binding model[43]; (c), (d) the relevant edge states from tight-binding model[43]; (e) the phase diagram of band insulator and quantum spin Hall state about the spin-orbit coupling λ and staggered potential $\lambda_{\rm v}$[43].

3.5 相关实验

对于铁基超导体, 自旋轨道耦合在驱动其拓扑相变过程中起到非常重要的作用. 但是在真实的铁基超导体中, 自旋轨道耦合的强度到底有多大呢? 对于这个问题ARPES实验可以给出一个很好的答案[48]. 实验策略就是测量高对称点附近的能带劈裂, 得到具体的数值, 然后通过调节紧束缚模型的参数来精确拟合测量的能带结构, 那么自旋轨道耦合的强度可以通过比较实验测量和理论计算的结果得到.

图13给出了不同铁基超导材料中自旋轨道耦合的实验测量和理论计算的结果. 实验测量结果表明铁基超导中真实的自旋轨道耦合的强度大概在5—80 meV. 因此, 在铁基超导中, 自旋轨道耦合的强度具有相当大的能量尺度, 在讨论拓扑性质时是不能忽略的.

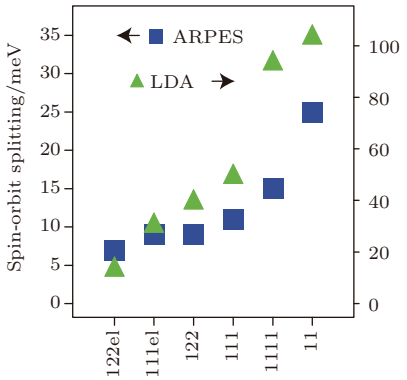

图13 ARPES测量和理论计算得到的不同铁基超导材料的自旋轨道耦合强度的数值比较[48]

Fig. 13. Comparison of the values of spin-orbit couplings obtained from ARPES and theoretical values[48].

扫描隧道显微镜/谱(scanning tunneling microscopy/spectroscopy, STM/S)是一种实空间的测量手段, 可以测量位置依赖的电子态密度. 因此, 可以通过STM/S来测量边界态. 近来, 在不同衬底, 例如Bi_2Te_3, 单晶Bi上的双层Bi结构中[49−51], STM/S被用来测量该体系中的一维拓扑边界态, 实验表明在双层Bi的台阶处确实存在边界态. 由于Bi单晶衬底上生长的双层Bi和$SrTiO_3$衬底上生长的单层FeSe具有类似的结构, STM/S也可以用来测量单层$FeSe/SrTiO_3$中的边界态.

图14给出了STS实验关于单层$FeSe/SrTiO_3$的测量结果[52]. 实验测量在两个不同的边界进行, 分别是铁磁边界和反铁磁边界. 需要说明的是, 该实验认为单层$FeSe/SrTiO_3$中的拓扑相变是由于存在棋盘反铁磁序和自旋轨道耦合导致的, 这种机制和前述关于单层$FeSe/SrTiO_3$中拓扑的解释是不同的. 我们后续会讨论这一点. 这里先回顾文献[52]关于实验测量结果的描述和解释, 一个最主要的特征是对于铁磁边界在−0.1 eV时以及对于反铁磁边界在−0.05 eV时, 实验观测到谱的强度会明显增强. 此外, 图14(a)—图14(d)给出了关于铁磁边界的二维STS图谱, 表明实空间的边界态的宽度大概在1 nm. 边界处的超导能隙也可以被确定, 虽然靠近边界时它的值会很快减小. 以上的实验现象表明单层$FeSe/SrTiO_3$中存在边界态.

实验的策略是通过比较STS测量的$\mathrm{d}I/\mathrm{d}V$谱所得到的能隙(包括带隙和超导能隙)与ARPES测量的能隙相比较, 来确定体能隙, 进而区分出边界态的贡献. 最主要的实验测量结果如图14(i)所示, 可以发现, 在扣除体的背景贡献后存在一些来自于边界态的额外贡献, 但是, 这一特征还不足以证明边界态的非平庸特征, 因为能隙中平庸的边界态也会有类似的$\mathrm{d}I/\mathrm{d}V$的行为, 非局域的输运是确定边界态拓扑性质的有效手段, 这需要巧妙的微纳器件设计与测量[53,54]. 文献[52]指出棋盘反铁磁序的存在是打开M点能隙的关键. 而在我们的工作中, M点能隙的打开是由于衬底的应力效应[21]. 此外, 在单层$FeSe/SrTiO_3$中, 棋盘反铁磁序和超导的共存也是非常难理解的, 因为反铁磁序的能隙大概是50 meV, 应该比较容易探测, 但在反铁磁转变温度以上, 这个能隙应该会消失. 因此, 我们建议对单层$FeSe/SrTiO_3$中边界态的拓扑性质进行进一步实验检测, 例如自旋分辨的STM或者非局域的输运测量.

在单层$FeTe_{1-x}Se_x$薄膜中, 拓扑相变的出现是由于Te浓度的增加. 因此, 通过改变Te的浓度可以检验$FeTe_{1-x}Se_x$薄膜的能带演化, 进而来判断其中可能的拓扑相变. 因此, 对于单层生长在$SrTiO_3$衬底上的$FeTe_{1-x}Se_x$薄膜, ARPES实验是有效的测量手段[55]. 图15给出了Γ点附近能带随着Te浓度的演化, 图15(a)中的曲线标识能带色散关系, 表明两个具有$\mathrm{d}_{xz}/\mathrm{d}_{yz}$轨道特征的空穴型能带[56,57]. 对于里面那个靠近费米能的能带, 从FeSe到FeTe, 能带带顶会向上移动, 而有效质量沿着相反的方向变化. 如图15(a)所示, 未占据

的能带可以通过费米-狄拉克函数辨识. 当Se 的含量小于60%时, 可以清楚地观测到一个向下移动的电子型能带, 这个电子型能带具有p_z轨道和d_{xy}轨道杂化的特征. 并且, 这个电子型的能带和空穴型能带会互相靠近, 最后在Se浓度大约为33%时相互接触导致能隙闭合, 图15 (b) 中的等能线和和图15 (c) 动量分布曲线进一步证明了这一点. 此外, 电子型和空穴型能带可以通过简单的公式$E = C_0 + C_1|k| + C_1|k|^2$来拟合. 通过比较图15 (d)—图15 (f) 可以发现, 当增加Te的浓度时, 能带色散关系的线性趋势表明了电子型能带和空穴型能带相互靠近导致能隙闭合的趋势. ARPES实验从能隙演化的角度给出了单层$FeTe_{1-x}Se_x$薄膜中拓扑相变的证据[55].

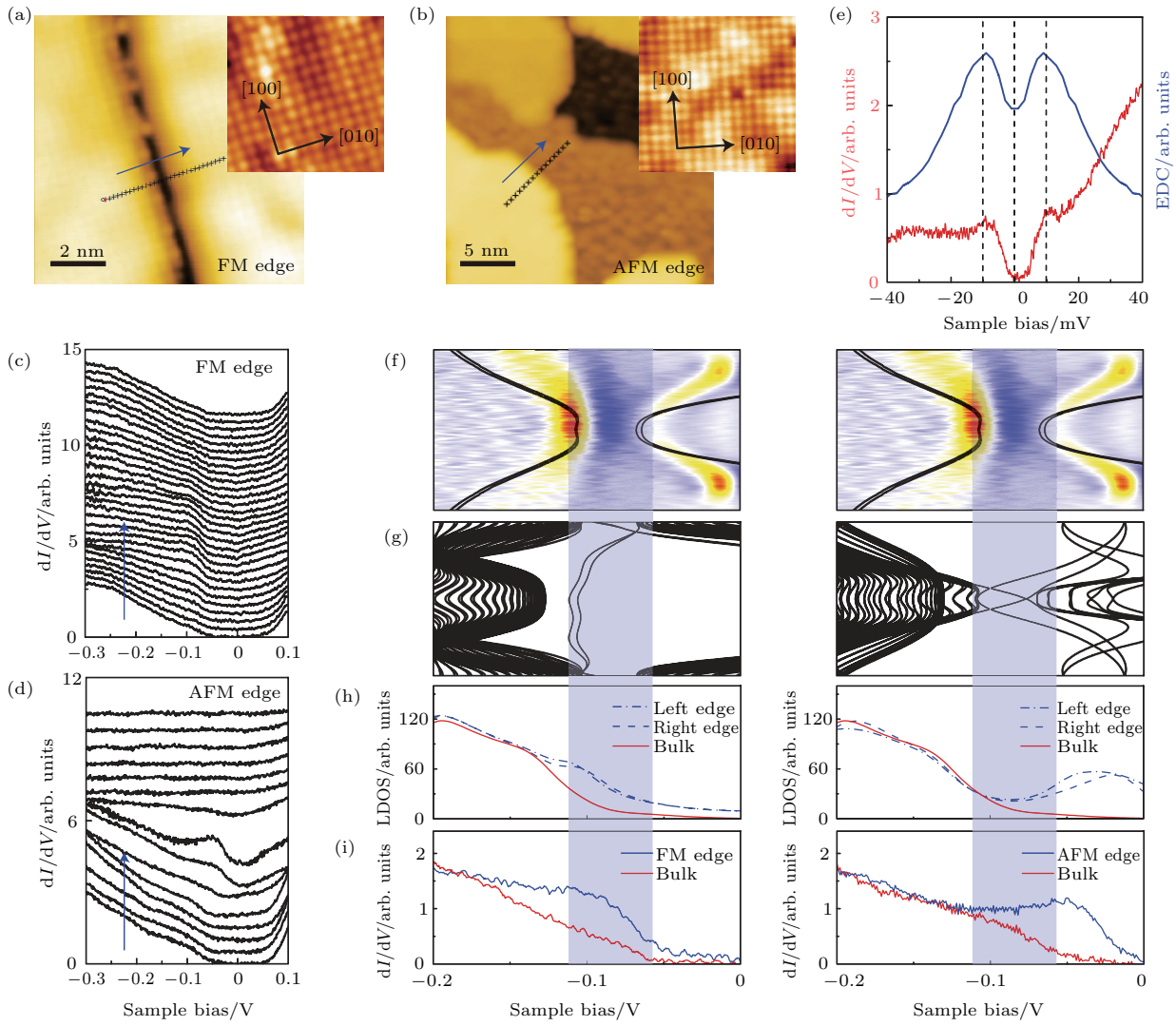

图14 理论计算与STS谱测量的拓扑边界态的比较[52] (a), (b) 铁磁和反铁磁边界STM的测量形貌; (c), (d) 分别沿着(a)与(b)中铁磁与反铁磁边界的STS测量的dI/dV谱; (e) STS和ARPES测量的超导能隙比较; (f) M点附近理论计算和ARPES测量的能带比较; (g) 理论计算的分别沿着铁磁和反铁磁边界的一维带结构; (h) 理论计算的边界和体的局域态密度; (i) 从图(c)和(d)数据提取出的关于边界和体的沿铁磁和反铁磁边界的STS谱

Fig. 14. Topological edge state comparison between theory and STS spectra[52]: (a), (b) STM topography of the ferromagnetic and antiferromagnetic edge; (c), (d) STS line scanning at the marked positions along the blue arrow direction of the ferromagnetic and antiferromagnetic edge; (e) superconducting gap comparison between STS and ARPES; (f) theoretical and ARPES band structures around the M point; (g) theoretical 1D band structures with ferromagnetic and antiferromagnetic edge, respectively; (h) theoretical local density of states for edge and bulk states; (i) STS spectra of edge and bulk states extracted from (c) and (d) for ferromagnetic and antiferromagnetic edge respectively.

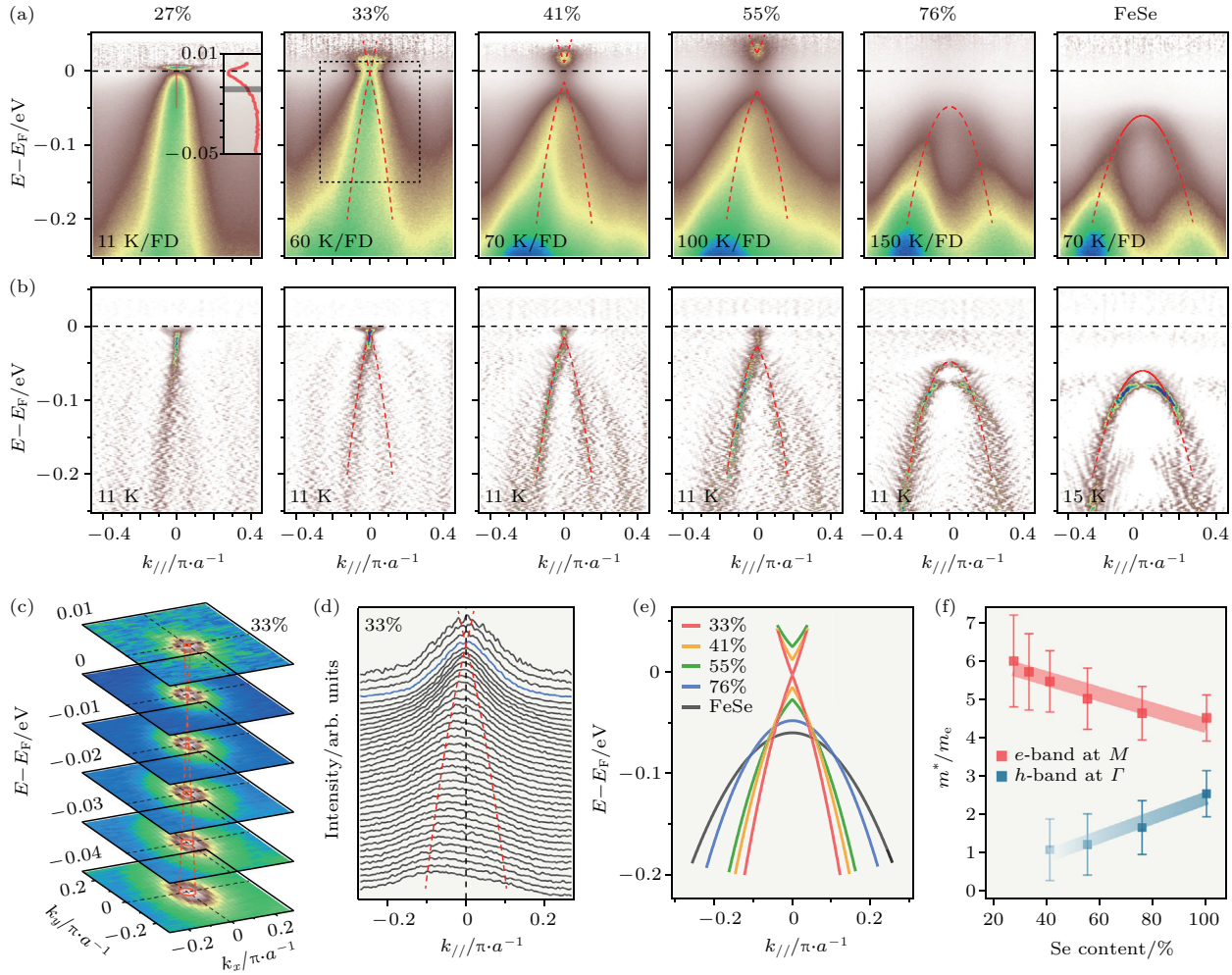

图 15 单层 $FeTe_{1-x}Se_x/SrTiO_3$ 的 ARPES 测量结果 [55] (a) 对于不同的 Se 浓度, Γ 点附近 ARPES 测得的谱的强度的分布; (b) 对应于 (a) 的曲率, 红色的曲线通过公式 $E = C_0 + C_1|k| + C_1|k|^2$ 拟合的结果; (c) Se 浓度为 33% 时, 在不同能量处等能线的分布; (d) 对应于 (a) 中黑色方框内的能量分布曲线; (e) 不同 Se 浓度 Γ 点附近能带色散的比较; (f) Se 浓度相关的有效质量

Fig. 15. The ARPES measurements about monolayer $FeTe_{1-x}Se_x/SrTiO_3$ [55]: (a) Evolution of the intensity plot divided by the Fermi-Dirac distribution function near $\Gamma$for monolayer $FeTe_{1-x}Se_x/SrTiO_3$; (b) curvature intensity plots along the same cut as in (a); (c) intensity plot of the constant energy contours at different binding energies for the Se-33% sample; (d) energy distribution curve plot corresponding to the spectrum in the black square in (a); (e) comparison of the band dispersions at Γ for each sample; (f) Se concentration dependence of the effective mass.

在单层 $FeTe_{1-x}Se_x$ 薄膜和 $FeTe_{1-x}Se_x$ 单晶中, 拓扑相变是由增加 Te 原子的浓度导致的, 类似于单层 $FeTe_{1-x}Se_x$ 薄膜, ARPES 实验也可以用来探测 $FeTe_{1-x}Se_x$ 单晶中的拓扑相变. 能带计算表明, 在 FeSe 单晶中 Γ_2^- 能带被推到远离费米能的高能量区域, 而在 $FeTe_{0.5}Se_{0.5}$ 单晶中, Γ_2^- 能带会向低能区域弯曲成为电子型能带. 为了证明这个电子型能带的存在, 可以通过原位掺杂钾原子来提高化学势使电子型能带被占据进而可以被 ARPES 观测到. 图 16 给出了蒸钾原子前后的 ARPES 测量结果, 结果显示在蒸钾原子后空穴型的能带会进一步向下移动, 同时探测到一个新的电子型的能带. 上述 ARPES 实验探测到的这个新的电子型能带和理论预测的结果一致, 给出了该体系中拓扑相变的一个间接的证据 [39].

近来高分辨和自旋分辨的 ARPES [59,60] 被用来研究 $FeTe_{0.5}Se_{0.5}$ 单晶中的拓扑相变, 得到了关于拓扑表面态的细节. 图 17 给出了测量的结果, 在 Γ 点附近, 分别用 p 极化和 s 极化的光子来做测量, 由于不同轨道特定的散射矩阵, 对于 p 极化的光子, 表面态和体态 (p_z 和 d_{xz}) 都是可以测量的, 而对于 s 极化的光子, 只有体价带 (d_{xz}) 是可以测量

的. 图 17 (b) 清楚地表明 p 极化的光子给出一个狄拉克型的线性能带, 图 17 (c) 表明 s 极化的光子给出了一个抛物型的二次能带. 在低温下 (2.4 K) 谱函数的展宽被抑制, 能带的分辨率更高. 仔细对比可以发现, 体系确实存在一个表面的狄拉克型能带和抛物型的二次型体能带. 此外, 自旋分辨的 ARPES 可以用来测量狄拉克型的线性能带和抛物型的二次型能带的自旋极化, 测量结果如图 17 (f) 所示, 可以看出狄拉克型能带具有螺旋型的自旋结构, 表明狄拉克型的能带确实来自于拓扑表面态.

对于 $Ca_{1-x}La_xFeAs_2$, ARPES 可以通过测量理论上预测的布里渊区边界处的狄拉克锥结构来间接验证该体系的拓扑性质 [61]. 如图 18 所示, 实验上的策略是通过直接测量 X-Γ-X 方向和 X-Y 方向的能谱, 经过对比, 发现体系在 X 点附近确实存在狄拉克锥结构.

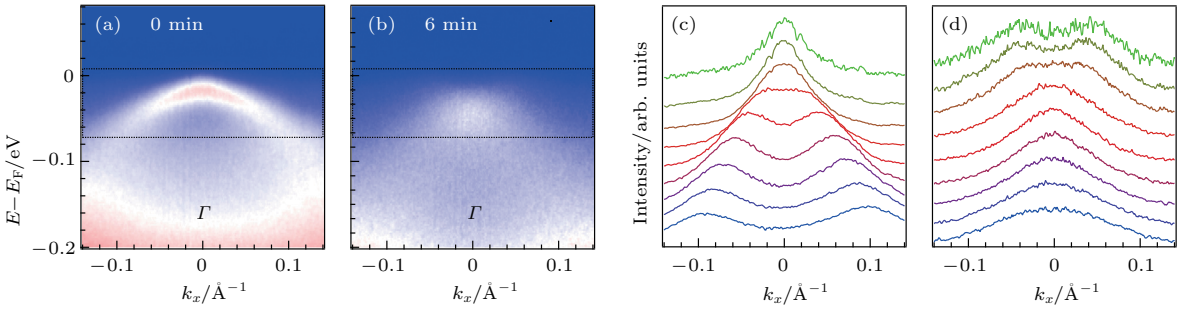

图 16 (a), (b) 分别为蒸钾原子前后的 ARPES 谱 [39]; (c), (d) 为相应的能量分布曲线 [39]

Fig. 16. (a), (b) ARPES spectra before and after K surface doping [39]; (c), (d) the relevant energy distribution curve [39].

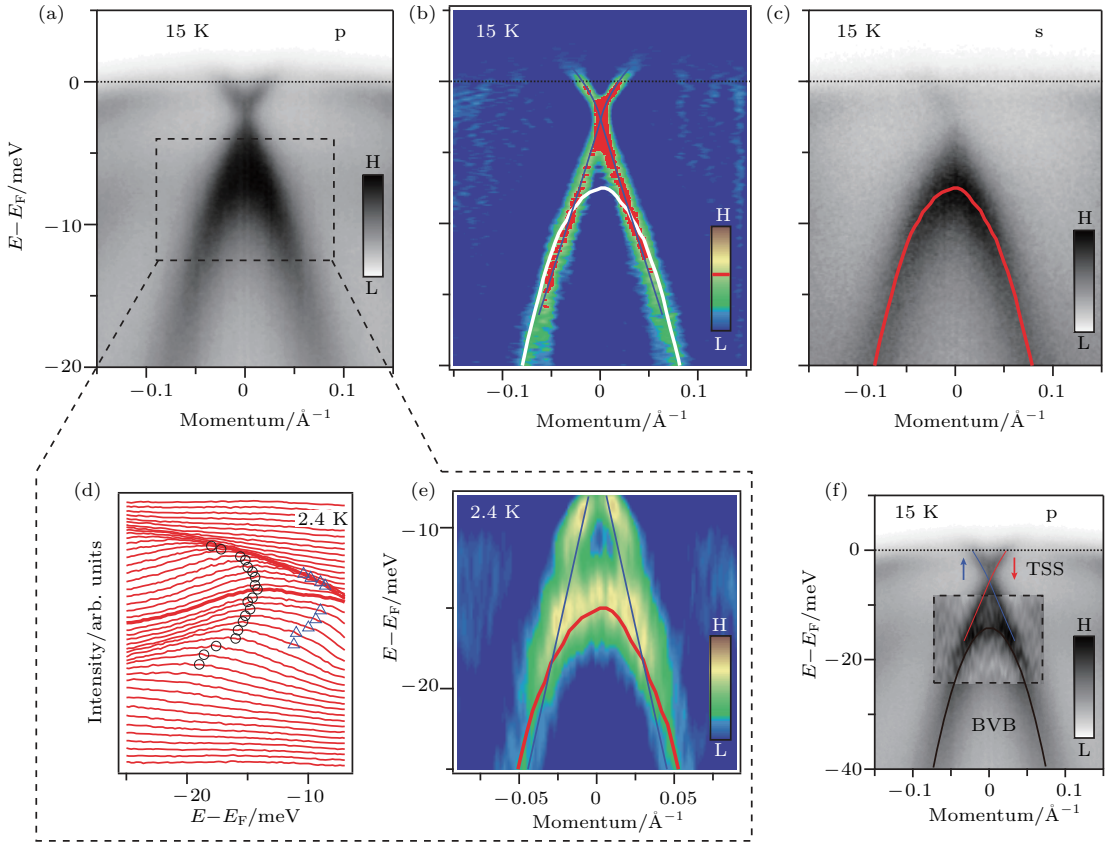

图 17 狄拉克锥形表面能带 [58] (a) p 极化光下 Γ 附近的能带; (b) 对应于 (a) 的动量分布曲线; (c) s 极化光下 Γ 附近能带; (d), (e) 对应于 (a) 的放大图; (f) 整体能带结构的总结

Fig. 17. Dirac-cone type surface band [58]: (a) Band structures around Γ point with p-polarized light; (b) momentum distribution curve of (a); (c) band structures around Γ point with s-polarized light; (d), (e) the zoom-in plot of (a); (f) summary of the overall band structures.

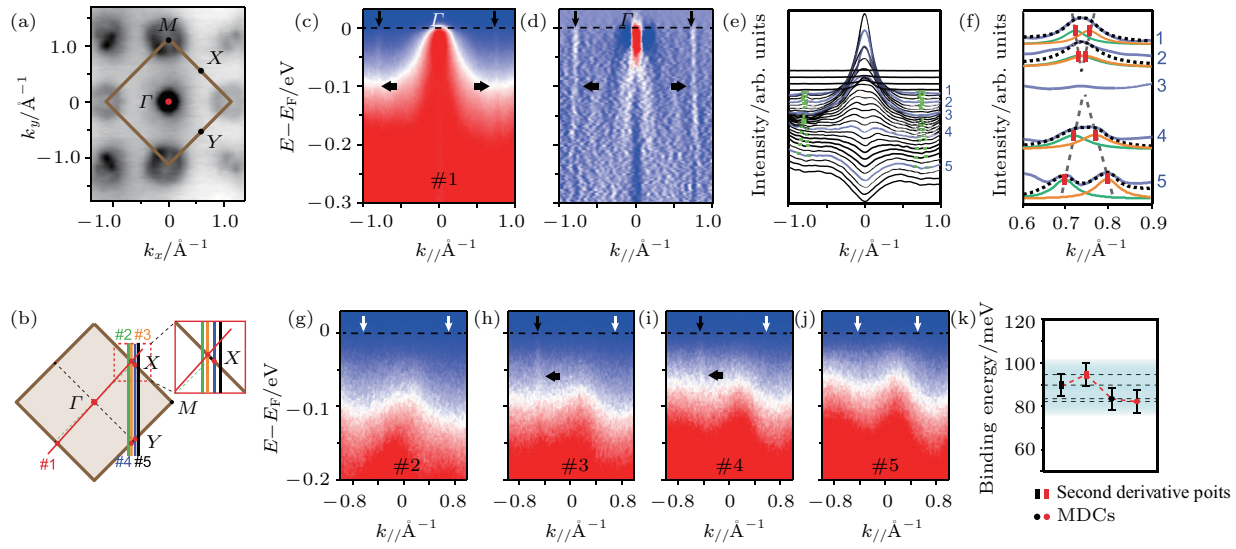

图 18 $Ca_{1-x}La_xFeAs_2$ 的 ARPES 测量结果 [61] (a) $Ca_{1-x}La_xFeAs_2$ 在能量区间 [−10 meV, 10 meV] 内的光电发射强度图; (b) 相应的布里渊区; (c)—(e) 沿着 #1 号线的光电发射强度图和相应的动量分布曲线; (f) 对于 #1—5 号线的动量分布曲线的洛伦兹峰的拟合; (g)—(j) 沿着 #2—5 号线的光电发射强度图; (k) 狄拉克点的位置

Fig. 18. ARPES measurement of $Ca_{1-x}La_xFeAs_2$ [61]: (a) Photoemission integrated intensity map within energy [−10 meV, 10 meV] for $Ca_{1-x}La_xFeAs_2$; (b) the relevant Brillouin zone; (c)–(e) the photoemission intensity plots and the corresponding momentum distribution curves along cut #1; (f) Lorentzian peaks fitting to a few representative momentum distribution curves along cuts (1–5); (g)–(j) photoemission intensity plots along cuts #2–5; (k) energy location of the Dirac point.

4 铁基超导体临近超导的长程有序态的拓扑

第 3 节讨论了几种铁基超导体系, 它们的拓扑性质是由一些外部的调制来驱动的, 包括衬底, 元素替换和插层. 这些外部调制的引入可以在布里渊区某些高对称点处对能带产生比较大的影响. 值得注意的是, 这些外部调制不会破坏体系的对称性, 比如, 讨论的所有态都处于顺磁态. 但是, 在铁基超导体中, 除了超导态, 还存在一些对称性破缺的态, 例如相列相和反铁磁态 [62−66]. 这些对称性破缺的序可以非常强烈地改变铁基超导的电子结构, 并为在铁基超导中产生拓扑态提供新的元素. 本节主要讨论由对称性破缺的序在铁基超导中导致的拓扑态.

4.1 相列序

相列序破坏转动对称性但是保持平移对称性, 是铁基超导中一种非常重要的对称性破缺的序. 铁基超导中相列相是来自于自旋还是轨道相关的机制一直是悬而未决的问题 [67−71]. 理解铁基超导相列相的性质有助于理解超导态的性质, 实验上也发现铁基超导相列相的电子结构具有非常有趣的特点. 在 FeSe 单晶和 FeSe 薄膜中, Γ 点的 d_{xz} 和 d_{yz} 能带的劈裂是温度不相关的, 但是 M 点能带的劈裂和相列相有非常紧密的关系, 并且劈裂大小可以达到 80 meV. Γ 点的能带劈裂可以归结于自旋轨道耦合 [72,73], M 点的能带劈裂可以归结于相列相 [74,75]. 对于厚度大于一个原胞的 FeSe 薄膜, 在 M 点可以观察到狄拉克锥型的色散关系 [76,77], 并且 M 点的费米面具有四叶螺旋桨的形状.

下面先详细回顾一下 FeSe 的相列相中, ARPES 观测到的电子结构的一些特征. M 点的能带劈裂比 Γ 点要复杂很多, 由于 M 点的能带劈裂是由相列相导致的, 本文主要关注 M 点的能带特点. 如图 19 (a) 所示, 实验观测到 M 点附近两个由 $H1$ 和 $H2$ 标记的空穴型能带, 一个处于更低能量处的电子型能带与 $H1$ 能带的底部相交, 一个浅层的电子型能带与 $H2$ 能带的顶部相交. 在低温时, 实验观测到费米能稍往上处存在一个电子型能带, 它的带底和 $H2$ 能带的带顶简并. 总结这些实验观测到的现象可以发现, FeSe 在相列相时, M 点的能带具有两个空穴型能带和三个电子型能带, 此外, 能量最低的那个电子型能带和 $H2$ 能带相交在费米面附近形成狄拉克锥的结构. 随着温度升高, $E2$ 能带和 $H1$ 能带的能隙会减小, 当能隙为零时可以看到线性的色散关系 [24].

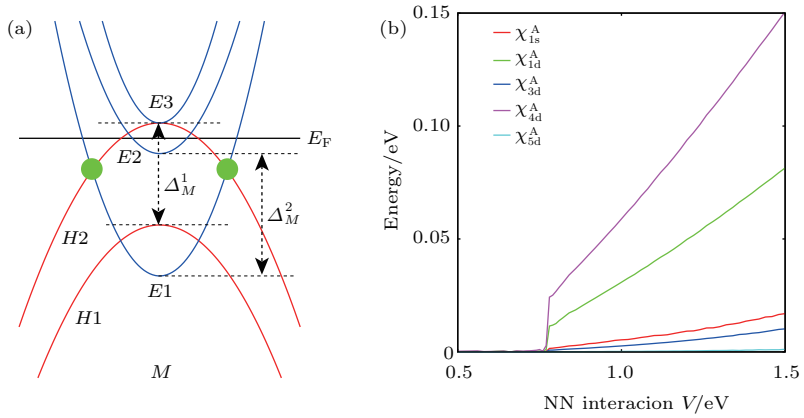

图 19 (a) 相列相 FeSe 在 M 点附近的能带结构 [78]; (b) 对称性破缺的序参量关于最近邻库仑相互作用 V 的函数 [78]

Fig. 19. (a) Band structures around M point in nematic phase of FeSe [78]; (b) symmetry-breaking order parameters as a function of the nearest neighbor Coulomb interaction V [78].

FeSe 中的相列序可以通过最近邻的库仑相互作用产生 [79,80], 在这个假设下, 相应的理论结果可以比较好地解释实验. 最近邻的相互作用可以表示为 [78]

$$H_V = V\sum_{\langle i,j\rangle} :n_i n_j :, \tag{35}$$

其中正规序的符号表示依赖于总电子密度 $n_i = \sum_\alpha n_{i\alpha}$ 的哈特利项被忽略. H_V 中包括对称性守恒的项和对称性破缺的项. 考虑对称性破缺的项, 在平均场近似下, H_V 可以近似为

$$\begin{aligned} H_V^B = 2\sum_{k,\sigma}[&\chi_{1s}^A\alpha_k(c_{k,1\sigma}^\dagger c_{k,1\sigma} - c_{k,2\sigma}^\dagger c_{k,2\sigma}) \\ &+ \chi_{1d}^A\beta_k(c_{k,1\sigma}^\dagger c_{k,1\sigma} + c_{k,2\sigma}^\dagger c_{k,2\sigma}) \\ &+ \chi_{3d}^A\beta_k c_{k,3\sigma}^\dagger c_{k,3\sigma} + \chi_{4d}^A\beta_k c_{k,4\sigma}^\dagger c_{k,4\sigma} \\ &+ \chi_{5d}^A\beta_k c_{k,5\sigma}^\dagger c_{k,5\sigma} + (\chi_{13p}^A\eta_k^y c_{k,1\sigma}^\dagger c_{(k+Q),3\sigma} \\ &+ \chi_{13p}^A\eta_k^x c_{k,2\sigma}^\dagger c_{(k+Q),3\sigma}) \\ &+ (\chi_{14p}^A\eta_k^x c_{k,1\sigma}^\dagger c_{(k+Q),4\sigma} \\ &- \chi_{14p}^A\eta_k^y c_{k,2\sigma}^\dagger c_{(k+Q),4\sigma}) \\ &+ (\chi_{15p}^A\eta_k^y c_{k,1\sigma}^\dagger c_{(k+Q),5\sigma} \\ &- \chi_{15p}^A\eta_k^x c_{k,2\sigma}^\dagger c_{(k+Q),5\sigma}) \\ &+ \chi_{35s}^A\beta_k(c_{k,3\sigma}^\dagger c_{k,5\sigma} + c_{k,5\sigma}^\dagger c_{k,3\sigma})], \end{aligned} \tag{36}$$

其中 $\alpha_k = \cos k_x + \cos k_y$, $\beta_k = \cos k_x - \cos k_y$, $\eta_k^{x/y} = \mathrm{i}\sin k_{x/y}$. H_V^B 可以自洽求解, 结果如图 19 (b) 所示. 可以发现, 三个 t_{2g} 轨道的轨道内的 d 波相列序是最强的, 其在 Γ 点没有效果但在 M 点最强, 并且对于 k 和 $k+Q$ 两部分能带具有相反的符号. 如图 20 所示, d 波型相列序可以在 M 点产生特殊能带结构. 作为对比, 图 20 (a) 给出了不考虑相列序时 Γ-M 方向的能带. 考虑一个孪晶型相列相, 其中两个相列相的畴分别用两个相反的相列序的序参量来描述. 假设畴 1 具有负的相列序序参量, 那么 "$k+Q$" d_{xz} 电子能带会下移, "$k+Q$" d_{xy} 空穴能带会上移, 这种移动会使这两个能带在 M 点互相靠近 (图 20 (b)). 同时两个 "k" 的能带会互相远离. 但是, 在畴 2 表现出相反的行为, 即 "$k+Q$" 的能带互相远离, "k" 的能带互相靠近. 当 χ_{1d}^A 和 χ_{4d}^A 分别取 11 和 18 meV 时, 包含两个畴的电子结构如图 20 (b) 所示, 和 ARPES 的结果 (图 19 (a)) 是一致的. 此外, 当相列序减弱时, $E2$ 和 $H1$ 能带会互相接触形成线性的色散关系, 也和实验测量结果一致. 相应的费米面如图 20 (c) 所示, 可以发现 M_x 点附近四叶螺旋桨形的费米面, 它们的形成来自于狄拉克锥的能带, 其中, 中心的小空穴型费米面来自于 d_{xy} 轨道, 这些结果和实验结果都是相符合的. 此外, 在 M 点附近沿着 k_y 方向穿过狄拉克点的能带结构如图 20 (d) 所示, 与实验结果也是一致的, 这证明上述关于相列相的讨论是正确的.

在正常态, "k" 和 "$k+Q$" 的能带在 M 点是简并的, 并具有相反的宇称. 在相列相, 相列序只会破坏 C_4 转动对称性, 不会破坏空间反演对称性, 因此相应的宇称在存在相列序时也是一个好的量子数. 增强相列序时, "$k+Q$" 具有相反宇称的 d_{xz} 和 d_{xy} 能带会互相靠近并交错进而在 M 点重新打开一个能隙, 这是典型的类似于拓扑绝缘体中的能带反转过程. 当不考虑自旋轨道耦合时, 由于相列序

会把狄拉克锥推到费米能附近, FeSe 会处于一个狄拉克半金属态. 当考虑自旋轨道耦合时, M 点的狄拉克锥会变得有质量, 这时体系进入拓扑相, 因此相列序可以作为驱动体系发生拓扑相变的参量. 图 21 给出的拓扑边界态的图像证明体系处于拓扑相. 如果相列序引起的劈裂大于正常态 M 点附近的 $\mathrm{d}_{xz}/\mathrm{d}_{yz}$ 和 d_{xy} 能带的能隙, 那么体系就是拓扑的. 实验上, 这个劈裂大概有 80 meV, 远大于正常态 M 点 40 meV 的能隙. 因此, FeSe 的相列相是拓扑非平庸的.

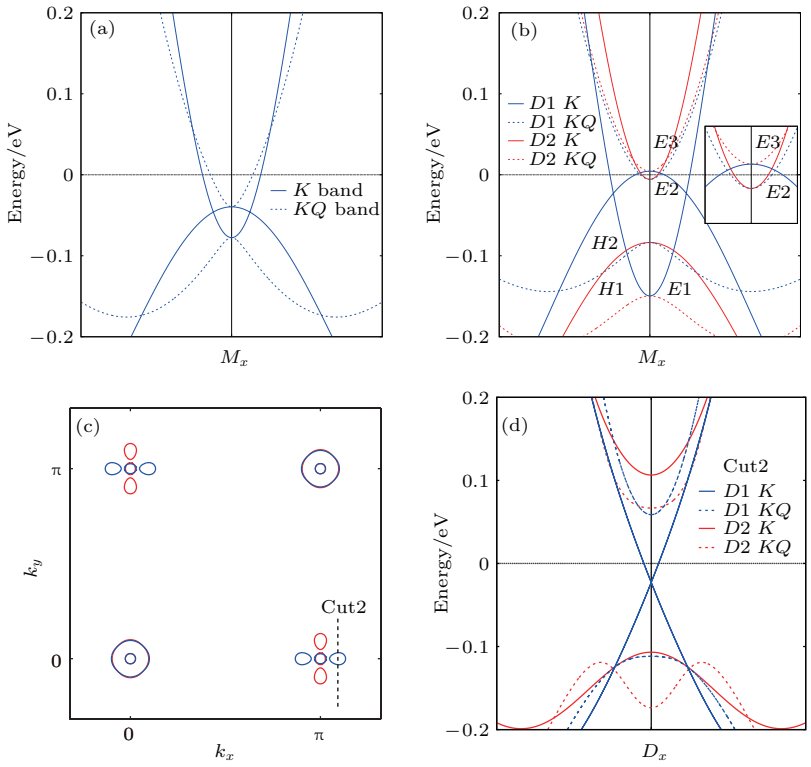

图 20 FeSe 相列相的能带和费米面 [78] (a) 不考虑相列相时, M 点附近的能带; (b) 相列相序参数 $\chi^{\mathrm{A}}_{1\mathrm{d}}$ 和 $\chi^{\mathrm{A}}_{4\mathrm{d}}$ 分别取 11 和 18 meV 时, M 点附近的能带, 蓝色和红色表明能带来自于两个不同的畴; (c) 相应的相列相的费米面; (d) 沿着图 (c) 中的线 2 穿过狄拉克点的能带

Fig. 20. Band structures and Fermi surface in nematic phase of FeSe [78]: (a) Band structures without nematic order; (b) band structures in nematic phase with $\chi^{\mathrm{A}}_{1\mathrm{d}} = 11$ meV, $\chi^{\mathrm{A}}_{4d} = 18$ meV, the blue and red lines represent the bands of domain 1 and domian 2, respectively; (c) the relevant Fermi surface in nematic phase; (d) band structures across the Dirac point along the cut2 in (c).

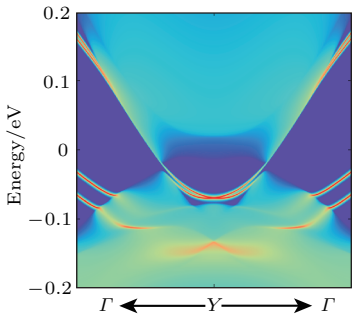

图 21 相列相 FeSe 的 [100] 边界的谱函数, 其中相列相序参数 $\chi^{\mathrm{A}}_{1\mathrm{d}}$ 和 $\chi^{\mathrm{A}}_{4\mathrm{d}}$ 分别取 11 meV 和 18 meV, 自旋轨道耦合强度取 40 meV [78]

Fig. 21. The spectra function of FeSe with nematic order on the [100] edge with $\chi^{\mathrm{A}}_{1\mathrm{d}} = 11$ emV, $\chi^{\mathrm{A}}_{4\mathrm{d}} = 18$ meV and spin-orbit coupling strength 40 meV [78].

4.2 反铁磁序

4.1 节讨论了 FeSe 相列相中的拓扑, 这种拓扑相变主要分成两步. 首先, 相列序在费米能附近产生狄拉克锥结构, 同时反生能带反转, 其次, 自旋轨道耦合会使狄拉克锥获得质量进而打开能隙. 这两种效应导致 M 点发生拓扑相变. 同样地, 在铁基超导中, 波矢量为 $(\pi, 0)$ 的条带状反铁磁序也会导致能带形成一个狄拉克锥结构 [81,82]. 本小节中讨论另一种反铁磁序, 也就是具有波矢量 $(\pi, \pi/2)$ 的反铁磁序导致的拓扑相变. 相较于在铁基超导体中广泛存在的波矢量 $(\pi, 0)$ 的反铁磁序, 波矢量 $(\pi, \pi/2)$ 的反铁磁序比较少见 [68], 中子散射实验在具

有245结构的铁硒化合物中探测到该反铁磁序[83]. 以11结构的FeS为例, 第一性原理计算表明加压可以改变反铁磁的基态, 当压力超过3.5 GPa时, 反铁磁基态就会从波矢量(π, 0)反铁磁序转变为波矢量(π, π/2)的反铁磁序. 这里讨论波矢量(π, π/2)的反铁磁序, 其会诱导出一种拓扑晶体反铁磁态[84].

在平均场近似下, 波矢量(π, π/2)的反铁磁序的序参量可以近似表示为$\Delta \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta(\alpha)}$, 其中$\Delta = \mathrm{diag}(m_{xy}, m_{x^2-y^2}, m_{xz}, m_{yz}, m_{z^2})$, $\theta(\alpha) = [n/2 - (-1)^{\alpha}]\pi, \alpha$表示镜面滑移对称操作$\left\{m_z\middle|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right\}$的宇称. 图22给出了从顺磁相到(π, π/2)的反铁磁相的能带演化. 从图22(a)所示的顺磁相的能带出发, 波矢量(π, π/2)会把M点的电子型能带和Γ点的空穴型能带联系起来, 引起它们之间互相的折叠, 这在图22(b1)所示的折叠布里渊区的能带结构中可以看出. 这里存在两组参数$\{\Delta\varepsilon_j\}$和$\{m_j\}$, 分别表示在位的轨道能修正和轨道依赖的(π, π/2)反铁磁序的序参量. 如图22(b2)所示, 当考虑$\{\Delta\varepsilon_j\}$修正时, 在费米面附近存在三支能带. 如图22(b3)所示, 当考虑除了m_{xy}外其他所有的$\{m_j\}$时, 这三个能带被强烈重整, 沿着Γ-M方向电子型能带和空穴型能带的交错会打开能隙, 而沿着Γ-X方向, 则不会有能隙打开. 如图22(b3)所示, 当m_{xy}从零逐渐增大时, 这三个能带会沿着图中箭头所示的方向上下移动, 最终形成一个节线半金属. 值得注意的是, 图22(c)中的能带对应于只取自旋轨道耦合的自旋反转项$(\boldsymbol{L}^x\boldsymbol{s}_x + \boldsymbol{L}^y\boldsymbol{s}_y)$, 图22(d)中的能带对应只取自旋轨道耦合的自旋守恒项$\boldsymbol{L}^z\boldsymbol{s}_z$. 通过对比可以发现, $\boldsymbol{L}^z\boldsymbol{s}_z$项可以使狄拉克锥打开能隙, 这说明(π, π/2)的反铁磁相的能带有没有能隙与其自旋/磁矩的磁化方向有关. 图23(a1)—图23(a3)总结了(π, π/2)的反铁磁相

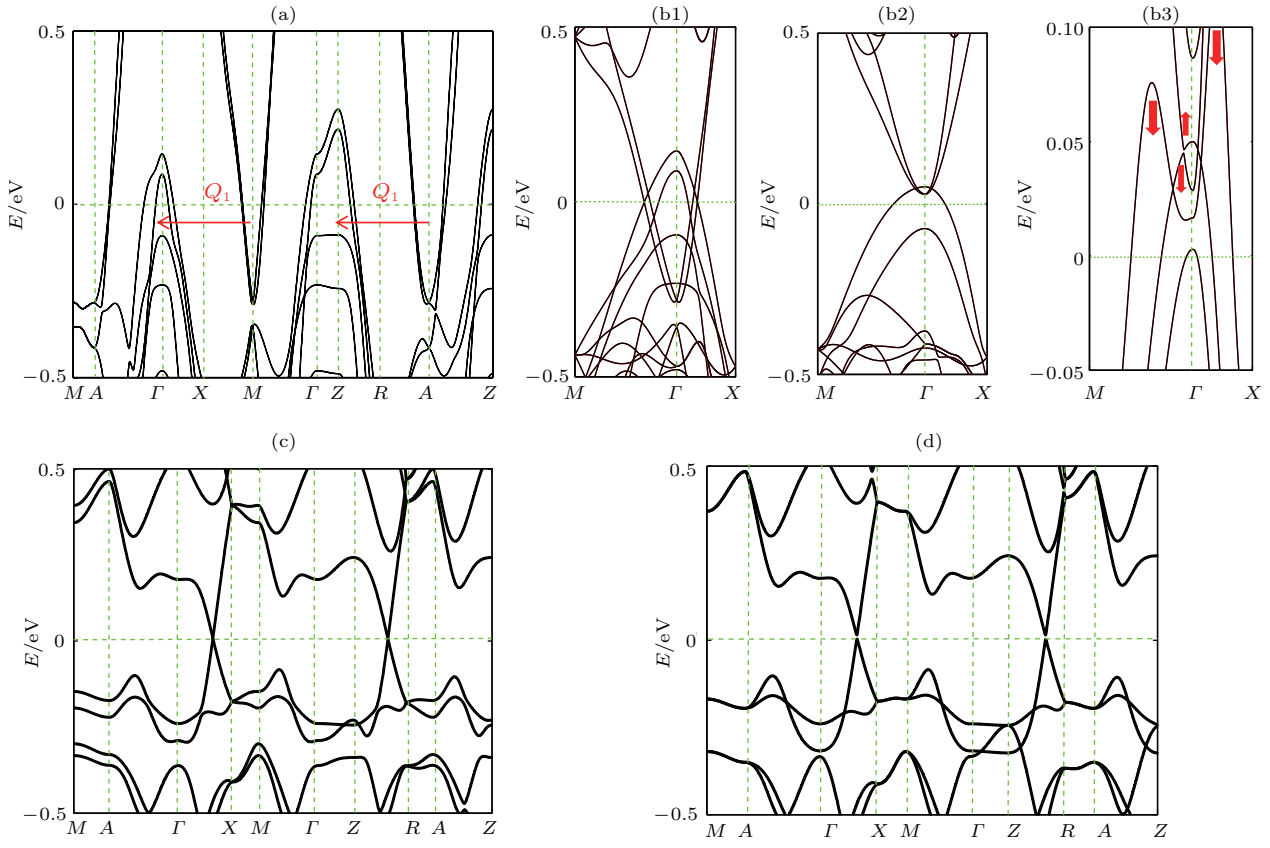

图22 FeS能带随反铁磁序参量的变化[84] (a)考虑自旋轨道耦合时顺磁相的能带结构; (b1)—(b3), (c), (d)考虑自旋轨道耦合并且磁化方向沿着[001]方向时, 能带从顺磁相到波矢量(π, π/2)的反铁磁序的演化

Fig. 22. The evolution of the band of FeS about antiferromagnetic order[84]: (a) Band structures of the paramagnetic state with spin-orbit coupling; (b1)–(b3), (c), (d) bands evolution from the paramagnetic state to the (π, π/2) antiferromagnetic state along the M-Γ-X lines from the mean-field Hamiltonian for the (π, π/2) antiferromagnetic state with the [001]-direction magnetization and spin-orbit coupling.

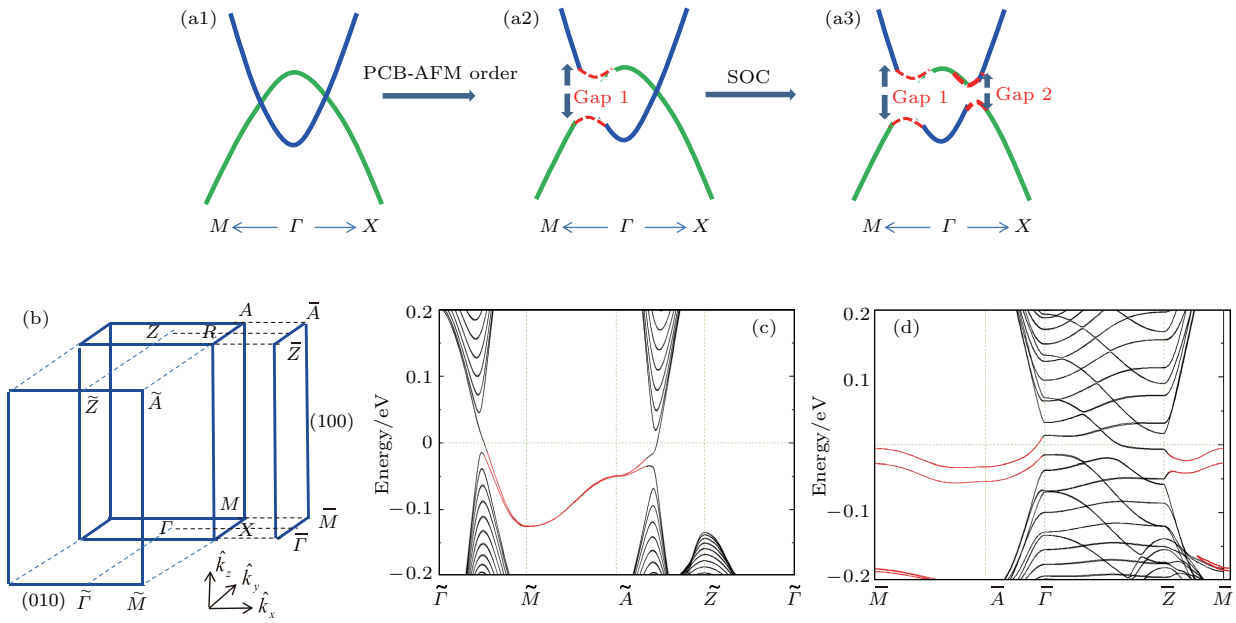

图 23 (a1)—(a3) 在有效的两带模型下, (π, π/2) 反铁磁序和自旋轨道耦合调制的拓扑相变的示意图; (b) 表面布里渊区; (c), (d) (010) 和 (100) 的表面态. 图来自于文献 [84]

Fig. 23. (a1)–(a3) Under the two effective bands picture, the schematic diagrams show the topological phase transition induced by the (π, π/2) antiferromagnetic order and spin-orbit coupling; (b) surface Brillouin zone; (c), (d) the surface states about (010) and (100) surface. The figure is from Ref. [84].

能带的主要特点. 四个 Fe 的 d 轨道可以分成两组有效的能带. 在考虑到波矢量 (π, π/2) 引起的能带折叠后, 会发现在折叠后的布里渊区内, 能带反转的条件是自然满足的. 当考虑 (π, π/2) 的反铁磁序参量后, 能带会沿着 Γ-M 方向打开能隙, 而沿着 Γ-X 方向则不会有能隙打开. 最后, 当磁矩方向沿着 [001] 方向时, Γ-X 方向会进一步打开能隙进而得到一个有能隙的态, 实际上, 这个有能隙的态对应于拓扑态, 它的表面态和晶面的取向是有关的. 图 23 (c) 和图 23 (d) 给出了不同晶面的表面态, 可以清楚地发现 (010) 表面和 (100) 表面具有完全不同的表面态, 前者是拓扑的, 后者是平庸的. 原因是反铁磁序的存在会修正时间反演对称性, 导致时间反演对称性只在某些晶面才满足反幺正的条件.

5 铁基超导体超导态的拓扑

马约拉纳费米子由于具有奇异的性质, 近来在实验和理论上都受到了极大的关注. 实验上已构造了很多的体系来实现马约拉纳费米子, 包括半导体纳米线和常规超导的复合体系、半导体和超导异质节、拓扑绝缘体和超导体的复合体系以及 Al-InAs 纳米线拓扑超导体 [85−88]. 在这些设计中, 都采用常规超导体而不是高温超导体, 原因在于高温超导体的相干长度太小, 界面耦合的公度性差 [89,90]. 铁基和铜基高温超导具有高超导转变温度, 大的临界磁场, 因此, 若铁基超导体中可以实现拓扑超导那么就可以在更高的温度鲁棒地研究马约拉纳费米子相关的物理. 本节将讨论几种关于铁基超导体中拓扑超导的理论和实验设计.

5.1 奇宇称配对导致的拓扑超导

在第 4 节中, 回顾了几种铁基超导体系中的拓扑态, 包括单层 $FeSe/SrTiO_3$, $FeTe_{1-x}Se_x$ 单层或者薄膜以及 $FeTe_{1-x}Se_x$ 单晶等. 当温度降到超导转变温度以下, 以上的体系都会进入超导态. 那么是否可以在这些体系中实现本征的拓扑超导呢?

时间反演不变的本征拓扑超导需要满足两个判据 [91]: 1) 超导具有奇宇称的配对并具有完全的超导能隙; 2) 围绕时间反演不变动量的费米面必须是奇数个. 对于铁基超导, 其能带结构可以分为两个近乎独立的部分, 计为 $\{k\}$ 和 $\{k+Q\}$. 在每一部分内, 都会有奇宇称和偶宇称的超导对 $(k, -k)$ 以及 $(k+Q, -k-Q)$. 此外, 在两部分之间, 也可以有奇宇称和偶宇称的超导对 $(k, -k+Q)$. 但是后者不会给出完全超导能隙的超导态, 因此我们只考虑前者. 把上述关于本征拓扑超导的判据应

用到单层 FeSe/$SrTiO_3$ 上, 为了简单起见, 忽略自旋轨道耦合和镜面滑移对称的破坏效应. 考虑到空间、自旋和轨道三种自由度, 那么超导的能隙函数可以参数化为 $\Delta(k) = f(k)s_m\lambda_m$, 其中 $f(k)$ 是能隙函数的空间部分, 具有相应空间群的不可约表示的基函数的形式; s_m 表示自旋空间的泡利矩阵; λ_m 表示三个 t_{2g} 轨道空间的盖尔曼矩阵. 考虑以下两种情况: 1) $f(k)$ 是常数; 2) $f(k)$ 是 k 相关的函数. 对于 $(k,-k)$ 的配对, 可以通过 D_{4h} 点群的不可约表示得到所有的配对可能性, 结果见表 1 和表 2. 我们只关注具有完全超导能隙和奇宇称的超导配对. 对于 $E_u^{(1)}$ 和 $E_u^{(2)}$ 都支持本征的拓扑超导态, $E_u^{(1)}$ 对应于时间反演对称性破缺的不同轨道间的自旋三重态的配对, $E_u^{(2)}$ 对应于时间反演对称性不变的不同轨道间的三重态的配对. 对 $E_u^{(3)}$ 和 $A_{1u}^{(1)}$ 也支持本征的拓扑超导态, $E_u^{(3)}$ 是双重简并的时间反演对称性破缺的同一轨道内的自旋三重态, $A_{1u}^{(1)}$ 是时间反演对称性守恒的同一轨道内的自旋三重态. 进一步分析表明, 当有效的不同轨道间吸引相互作用大于轨道内的吸引相互作用时, $E_u^{(2)}$ 是可能的, 并且会与 $A_{1g}^{(1)}$ 竞争, 但是自旋三重态的配对和铁基超导中广泛接受的配对不相符, 因此通过自旋三重态在铁基超导中实现本征拓扑超导似乎是不可行 [29].

表 1 动量不相关的超导配对的不可约 (IR) 表示 [29]

Table 1. Irreducible reperestation (IR) of superconducting pair in momentum-independent channels [29].

$(k,-k):\Delta(k)$	$c_2(z)$	$c_2(x)$	σ_d	$\left\{m_z\middle\vert\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right\}$	IR
	$-\mathrm{i}s_z\eta_1$	$-\mathrm{i}s_x\eta_2$	$\frac{-\mathrm{i}(s_x-s_y)\eta_3}{\sqrt{2}}$	$s_0\eta_4$	
$s_0\lambda_0$	1	1	1	1	$A_{1g}^{(1)}$
$s_0\lambda_8$	1	1	1	1	A_{1g}
$s_0\lambda_1$	1	−1	1	1	B_{2g}
$s_0(\lambda_4,\lambda_6)$	(−1, −1)	(1, −1)	$s_0(\lambda_6,\lambda_4)$	(−1, −1)	E_u
$\mathrm{i}s_z\lambda_2$	1	1	1	1	A_{1g}
$s_z(\lambda_5,\lambda_7)$	(−1, −1)	(−1, 1)	$-s_z(\lambda_7,\lambda_5)$	(−1, −1)	$E_u^{(1)}$
$\mathrm{i}(s_x,s_y)\lambda_2$	(−1, −1)	(−1, 1)	$\mathrm{i}(s_y,s_x)\lambda_2$	(1, 1)	E_g
$\mathrm{i}(s_x\lambda_5,s_y\lambda_7)$	(1, 1)	(1, 1)	$-\mathrm{i}(s_y\lambda_7,s_x\lambda_5)$	(−1, −1)	$E_u^{(2)}$
$\mathrm{i}(s_y\lambda_5,s_x\lambda_7)$	(1, 1)	(−1, −1)	$-\mathrm{i}(s_x\lambda_7,s_y\lambda_5)$	(−1, −1)	$E_u^{(2')}$

表 2 动量相关的超导配对的不可约表示 [29]

Table 2. Irreducible reperestation of superconducting pair in momentum-dependent channels [29].

$(k,-k):\Delta(k)$	IR
$f_{1/4}(k)s_0\lambda_{0/8}, f_5(k)s_0\lambda_1, f_3(k_x)s_0\lambda_5+f_3(k_y)s_0\lambda_7$	$A_{1g}^{(2)}$
$f_2(k)s_0\lambda_{0/8}, f_3(k_x)s_0\lambda_5-f_3(k_y)s_0\lambda_7$	$B_{1g}^{(1)}$
$f_2(k)s_0\lambda_1, f_3(k_y)s_0\lambda_5-f_3(k_x)s_0\lambda_7$	A_{2g}
$f_5(k)s_0\lambda_{0/8}, f_{1/4}(k)s_0\lambda_1, f_3(k_y)s_0\lambda_5+f_3(k_x)s_0\lambda_7$	B_{2g}
$\mathrm{i}f_{1/4}(k)s_z\lambda_2, \mathrm{i}^{1/0/0}[f_3(k_x)s_{z/x/y}\lambda_4+\mathrm{i}f_3(k_y)s_{z/y/x}\lambda_6]$	A_{1g}
$\mathrm{i}f_2(k)s_z\lambda_2, \mathrm{i}^{1/0/0}[f_3(k_x)s_{z/x/y}\lambda_4-\mathrm{i}f_3(k_y)s_{z/y/x}\lambda_6]$	B_{1g}
$\mathrm{i}^{1/0/0}[f_3(k_y)s_{z/x/y}\lambda_4-f_3(k_x)s_{z/y/x}\lambda_6]$	A_{2g}
$\mathrm{i}f_5(k)s_z\lambda_2, \mathrm{i}^{1/0/0}[f_3(k_y)s_{z/x/y}\lambda_4+f_3(k_x)s_{z/y/x}\lambda_6]$	B_{2g}
$\mathrm{i}f_{1/2/4/5}(k)(s_x,s_y)\lambda_2$	E_g
$f_3(k_x)s_{x/y}\lambda_0 \pm f_3(k_y)s_{y/x}\lambda_0$	$A_{1u}^{(1)}$
$f_3(k_x), f_3(k_y)]s_z\lambda_0$	$E_u^{(3)}$

5.2 原生拓扑超导

自旋单重态的限制使得铁基超导体很难处于本征的拓扑超导态, 但是在铁基超导体中, 存在其他途径可以实现拓扑超导态. 下面讨论几个可能的设计.

图 24 给出了一个分别由空穴掺杂和电子掺杂的单层 FeSe/$SrTiO_3$ 构成的 p-n 结、空穴掺杂的部分提供拓扑的边界态, 电子掺杂的部分提供超导态, 两部分的边界在外加磁场或者铁磁绝缘体的作用下可以形成一维的拓扑超导态. 在这种设计中, 拓扑和超导复合在同一种材料中, 因此可以通过改变掺杂或者用不同的衬底来调制这种复合进而实现拓扑超导. 通常的耦合体系中, 超导和拓扑边界态来自于不同的材料, 它们的界面失配会导致体系不可预知的复杂性, 单层 FeSe/$SrTiO_3$ 的这种设

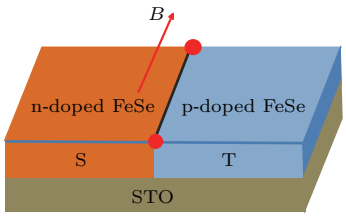

图 24 通过 p 型和 n 型掺杂的 $FeSe/SrTiO_3$ 来实现拓扑超导的示意图 其中 S 表示超导态, T 表示拓扑态, 在外加磁场下, 它们的边界可以产生一维的拓扑超导态

Fig. 24. Schematic picture of the proposed setup for the realization of topological superconductivity. p-type and n-type doping of FeSe/ STO could lead to an topological (T) state and a superconducting (S) state, respectively. The boundary could generate a 1D topological superconductor under external magnetic field.

计则不会受此干扰, 在 $BaBiO_3$ 中也存在类似的设计 [92].

上面的设计可以推广到 $CaFeAs_2$ 中. 如前所述, 这个材料可以粗略分为两个独立的部分, 也就是 Fe-As 层和 Ca-As 层 [43]. 其中 Ca-As 层中存在量子自旋霍尔效应, 同时 Fe-As 层中存在转变温度高达 40 K 的超导. 因此, 在超导转变温度以下, CaAs 层中的边界态自然而然成为一维的拓扑超导态. 量子自旋霍尔态和超导态的交错堆垛提供了一种实现拓扑超导和探索马约拉纳费米子的可能途径.

下面讨论两个可能的设计. 一个是可以束缚马约拉纳零模的构型, 如图 25 (a) 所示, 在铁磁绝缘体的近邻效应下, 边界 II 会变成一个正常的绝缘体, 那么边界 II 的两端会束缚马约拉纳零模, 在这种情况下, 实验可以探测到一个量子化的零偏压电导峰 $2e^2/h$ [93,94]. 一个更有意思的情况是考虑 [100] 表面, 在这种情况下, 每一层 CaAs 都会有边界态. 因此, 它们形成弱耦合的准一维拓扑超导体. 通过引入绝缘的磁性薄膜, 如图 25 (b) 所示, 可以生成沿着 c 方向的马约拉纳链. 马约拉纳零模对电导没有贡献, 但是可以贡献热导和比热. 在低温下, 马约拉纳零模链的热导正比于温度 T [95]. 由于 $CaFeAs_2$ 是一种完全超导能隙的超导体, 因此低温条件下, 材料体系热导关于温度的线性关系是马约拉纳零模存在的一个很强的证据.

在单层 $FeSe/SrTiO_3$ 中, 拓扑相变发生在 M 点. 带隙在费米能以下, 不采用前述的 p-n 结的设计, 很难同时达到拓扑边界态和超导态共存. 但是在单层 $FeTe_{1-x}Se_x/SrTiO_3$ 中拓扑边界态和超导态的共存是很自然的. 原因是拓扑相变发生在 Γ 点并给出拓扑的边界态, 而 M 点存在电子型的能带穿过费米能进而给出体超导态. 更重要的是, 电子型能带的位置和超导转变温度对于 Te 原子浓度是不敏感的, 在超导转变温度以下 M 点附近电子型费米面处超导的库珀对可以被散射到 Γ 点处拓扑相变导致的边界态. 这个过程类似于动量空间的近邻效应, 与通常的实空间的近邻效应导致的拓扑超导的构想有本质的区别, 具体的图像如图 26 所示. 在单层 $FeTe_{1-x}Se_x/SrTiO_3$ 中当 $0 < x < 0.3$ 时, 会出现原生的拓扑超导态 [55].

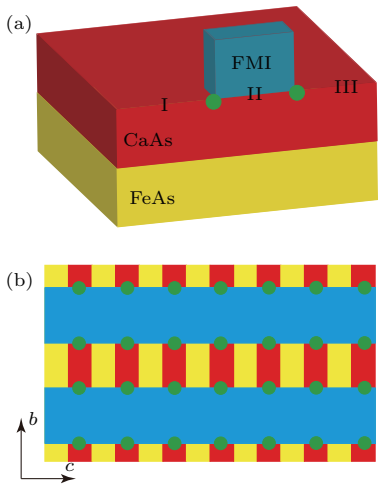

图 25 实现马约拉纳费米子的两种设想示意图 [43] (a) 实现两个马约拉纳零模; (b) 实现马约拉纳链

Fig. 25. Schematic picture of the proposed setup for the realization of Majorana fermions: (a) Two Majorana modes; (b) a Majorana chain realization.

对于 $FeTe_{1-x}Se_x$ 单晶, 拓扑相变发生在沿着 Γ-Z 的方向, (001) 表面具有无能隙的表面态, 如图 27 所示. 同样地, 在 M-A 方向存在电子型的费米面, 因此在超导转变温度以下, 电子型的费米面上的库珀对可以被散射到 (001) 面上的表面态 (图 27), 从而导致拓扑超导 [58,96]. 对于 $FeTe_{1-x}Se_x$ 单晶中的 (001) 表面态, 可以形成两维的拓扑超导态, 文献 [96] 首次给出了详细的讨论, 具体的有效理论和有效模型参见文献. 需要特别指出的是, 图 28 给出了由于 Te 和 Se 原子浓度差异导致的化学势的调制以及体超导能隙的变化对表面态形成拓扑超导态的影响 [96], 该相图对相关实验的设计非常有意义.

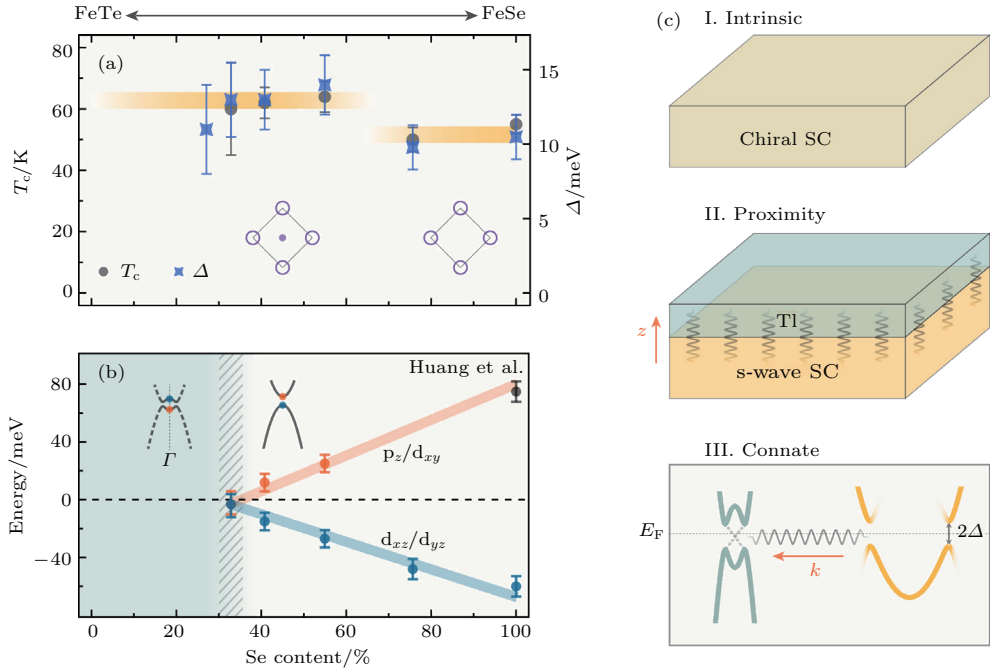

图 26 (a) 单层 FeSe 到 FeTe 超导转变温度和费米面的变化相图 [55]; (b) Γ 点附近能带的演化表明 Se 浓度的降低会导致能带反转的趋势 [55]; (c) 几种实现拓扑超导的示意图 [55]

Fig. 26. (a) The phase diagram about superconducting transition temperature and Fermi surface topology from monolayer FeSe to FeTe [55]; (b) evolution of the band positions at Γ, showing a trend towards band inversion upon decreasing the Se concentration [55]; (c) schematic plots of different types of method to realize topological superconductor [55].

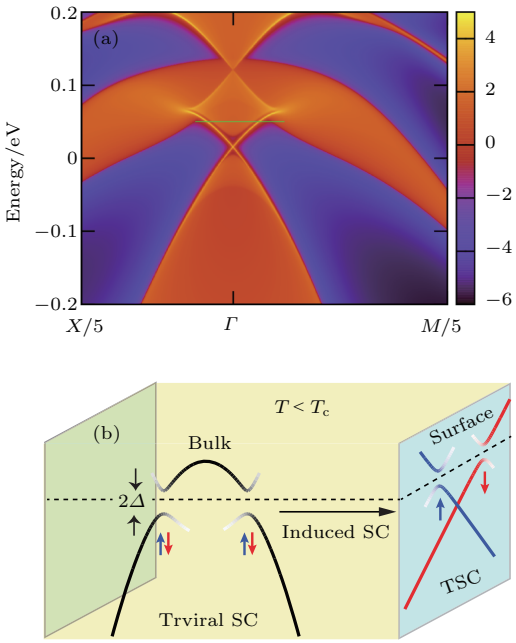

图 27 (a) $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ 晶体中 (001) 表面态 [58]; (b) 超导转变温度以下, 体能带会打开一个 s 波的超导能隙, 导致表面态进入超导态 [58]

Fig. 27. (a) Topological nontrivial (001) surface states for $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ [58]; (b) when the temperature decreases to below superconducting transition temperature, the bulk bands open s-wave SC gaps, which induce the surface states to be superconducting [58].

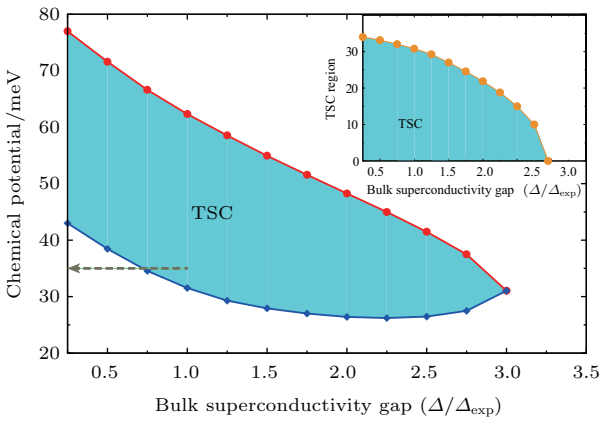

图 28 化学势和体超导能隙变化对拓扑超导态的影响. 插图表明拓扑超导态的区域 (红色边界减去蓝色边界) 相较于体超导能隙的变化

Fig. 28. Topological superconducting state as a function as chemical potential and bulk superconducting gap. The inset shows an evolution of the topological superconducting state region (red line minus blue line) with respect to the bulk pairing gap.

5.3 相关实验

上面的讨论中, 回顾了几个理论上的设计. 更有意义的是, 最近实验上已经观测到拓扑超导和马约拉纳费米子存在的证据, 下面来讨论这些实

验进展. 通过分子束外延生长的方法, 在衬底SrTiO$_3$上生长FeTe$_{1-x}$Se$_x$, 这种方法的好处是可以精确控制Se 的浓度, 因此可以通过ARPES来测量不同Se浓度下能带的演化. 在第3节中回顾了ARPES观测到Γ点的能带反转, 表明了该体系存在拓扑边界态. 图29给出了M点的电子型费米面的超导能隙随着Se浓度的变化, 可以发现超导能隙对Se浓度的变化是不敏感的. 因此可以近似认为M点的电子型费米面给出超导, Γ点的能带反转给出拓扑边界态, 它们之间通过超导的量子关联联系起来共同达到超导态. 当然, 这个ARPES实验的测量给出了间接的证据, 直接证据还需要测量拓扑的超导安德烈夫边界态和马约拉纳零模[55].

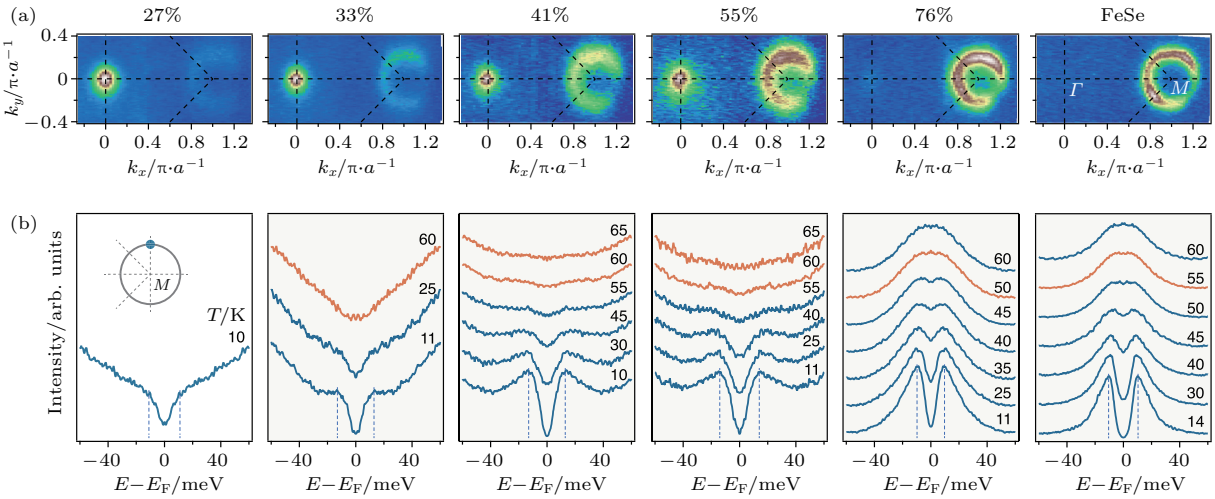

图29 (a) 不同Se浓度下ARPES测得的单层FeTe$_{1-x}$Se$_x$/SrTiO$_3$的费米面[55]; (b) ARPES测得的相应的超导能隙随温度的变化[55]

Fig. 29. (a) ARPES Fermi surface maps of a series of FeTe$_{1-x}$Se$_x$ monolayersgrown on STO, with the nominal concentration of Se indicated above ach panel[55]; (b) temperature evolution of the superconducting gap[55].

对于FeTe$_{1-x}$Se$_x$单晶, ARPES实验已经证实了拓扑边界态, 更重要的问题是在超导转变温度以下, 是否可以直接观测到拓扑表面电子凝聚成库珀对然后打开超导能隙. 图30清楚地表明了拓扑表面态的超导特性. 表面能带的超导能隙大小为1.8 meV, 小于电子能带的2.5 meV以及空穴能带的4.2 meV[58], 这个结果与表面态的超导来自于有效的近邻效应是一致的, 并且表明诱导的超导主要来自于库珀对在带间的散射, 与单层FeTe$_{1-x}$Se$_x$/SrTiO$_3$中的机制相同.

拓扑超导体中的拓扑缺陷可以束缚马约拉纳零模, 这是拓扑超导的一个非常重要的性质. 实验结果强烈地支持铁基超导体中单层的FeTe$_{1-x}$Se$_x$/SrTiO$_3$和FeTe$_{1-x}$Se$_x$单晶是拓扑超导体. 第一个疑似马约拉纳零模的实验是在FeTe$_{1-x}$Se$_x$ 单晶中, 发现FeTe$_{1-x}$Se$_x$单晶表面单个Fe原子磁性杂质可以束缚一个很稳定的零模[97]. STM/S的测量结果如图31所示, 可以发现零模的性质和马约拉纳零模非常类似. 进一步的测量表明零模对外加磁场是不敏感的, 并且实验排除了经典的磁或非磁杂质引起的束缚态、超导d波配对导致的束缚态以及近藤效应等[98−101]. 各种测量都表明这个零模和马约拉纳零模性质非常一致, 暗示了可能与体系的拓扑有关.

在FeTe$_{1-x}$Se$_x$单晶中, 拓扑超导表面态符合标准的二维拓扑超导的特征. 那么类似于二维拓扑超导, 在FeTe$_{1-x}$Se$_x$单晶中, 磁通涡旋中心应该可以束缚马约拉纳零模. 为了验证这一点, STM 实验测量了存在磁通涡旋点阵的FeTe$_{1-x}$Se$_x$单晶的dI/dV曲线[102], 实验结果如图32所示. 图32 (b)—图32 (e)清楚地表明在涡旋中心dI/dV存在一个零能的尖峰, 这个尖峰的空间构型是指数衰减的, 所有的测量结果都支持FeTe$_{1-x}$Se$_x$单晶的磁通涡旋中心会束缚一个马约拉纳零模. 到目前为止, 该实验是最接近于证明FeTe$_{1-x}$Se$_x$单晶中存在拓扑超导和马约拉纳零模的实验.

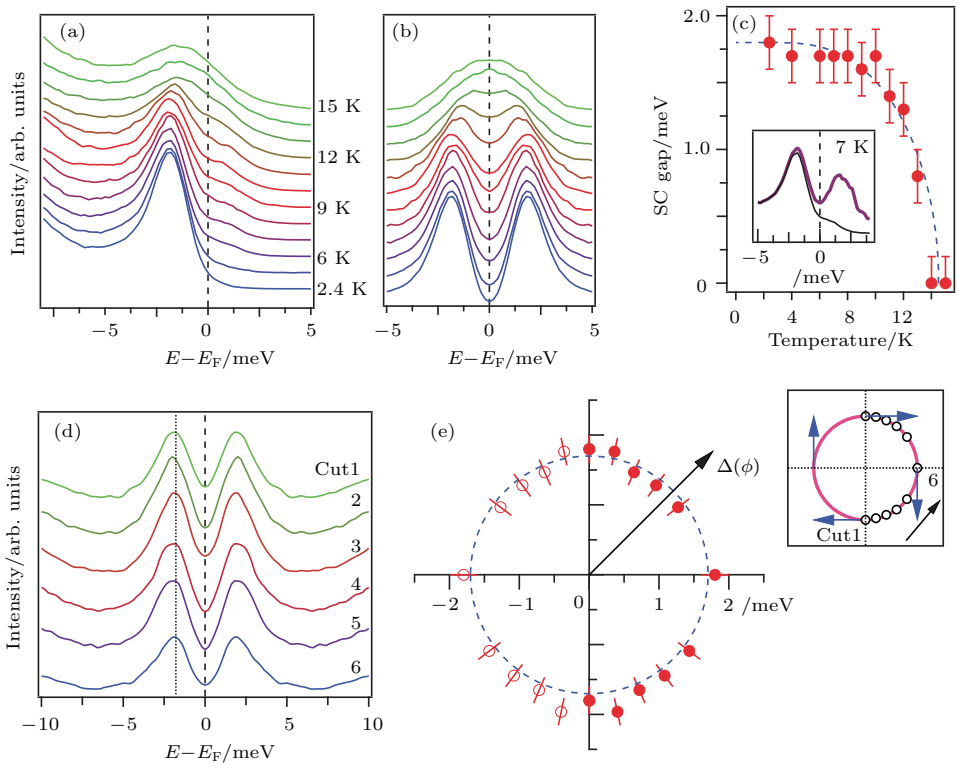

图 30 表面能带的 s-波超导能隙的 ARPRS 测量结果 [58]

Fig. 30. s-wave SC gap of the surface band [58].

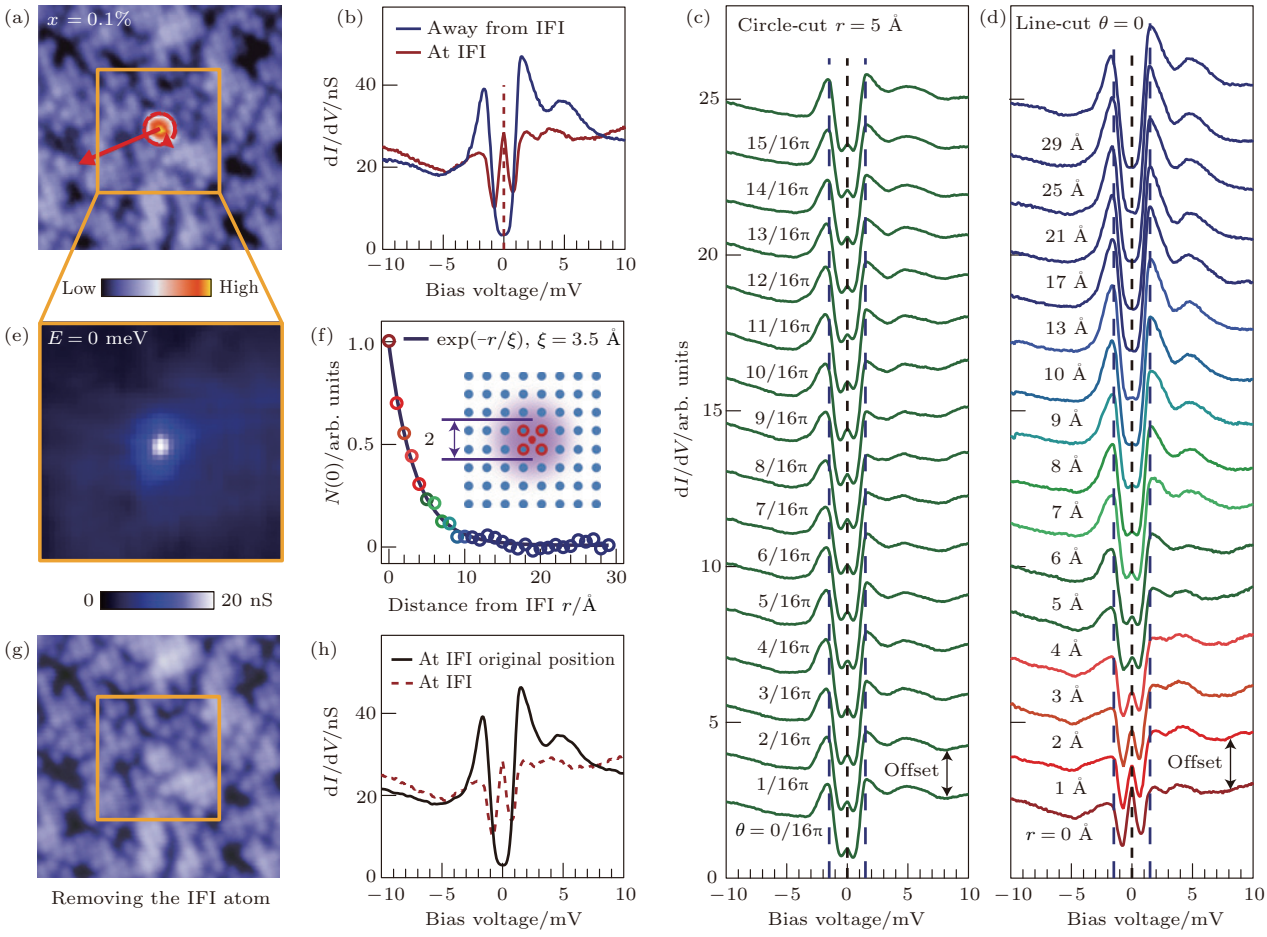

图 31 $FeTe_{1-x}Se_x$ 单晶中, STM/S 实验关于其表面的单个 Fe 原子磁性杂质束缚态的实验结果 [97]

Fig. 31. STM/S measurement results about the bound state of single Fe impurity at the surface of $FeTe_{1-x}Se_x$ [97].

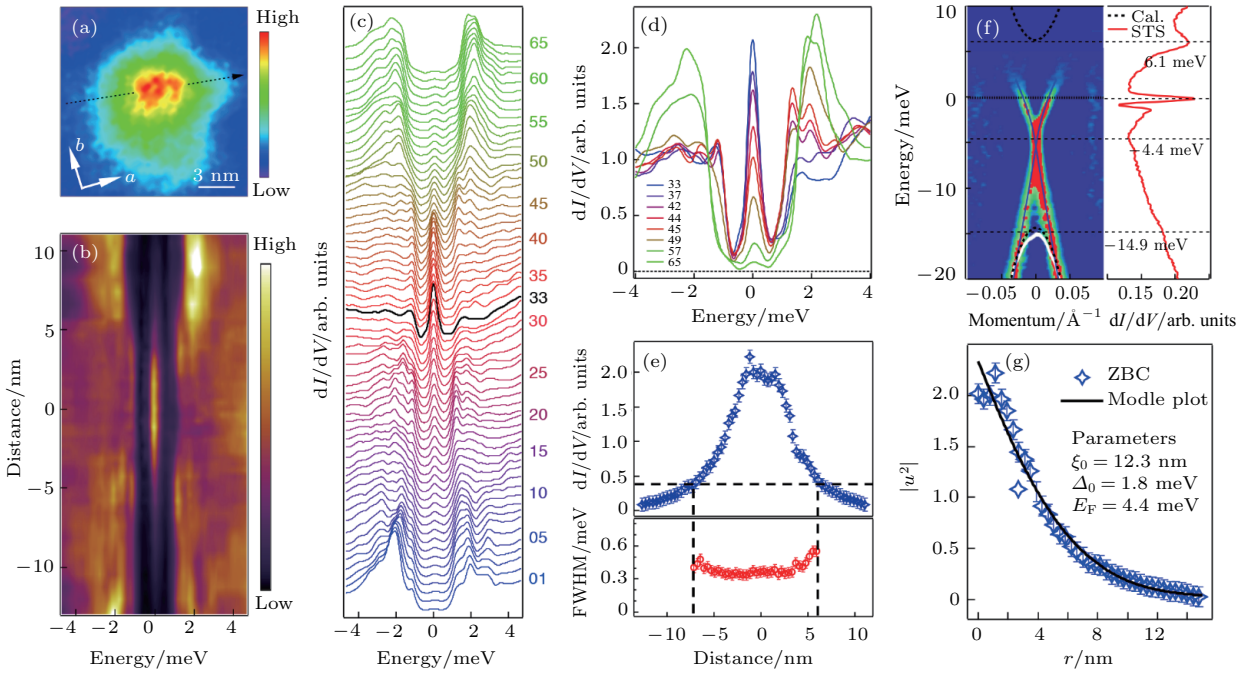

图 32 $FeTe_{1-x}Se_x$ 单晶中, STM/S 实验关于其表面的单个磁通涡旋束缚态的实验结果 [102]

Fig. 32. STM/S measurement results about the bound state of single vortex in $FeTe_{1-x}Se_x$ [102].

6 展 望

对于铁基超导材料中的拓扑量子态, 理论上已经进行了比较深入的研究, 但是相关的实验研究才刚刚开始. 对于铁基超导的正常态, 借助于拓扑能带论, 对正常态衍生出的拓扑现象研究和理解得已经比较透彻, 关于正常态拓扑的理论和实验也是比较自洽的. 但是, 对于对称性破缺的有序相和超导态, 认识还很初级, 主要表现为实验观测到一些理论难以完全理解的现象. 这里举两个例子: 首先, 在 Fe(Te,Se) 表面, 单个 Fe 杂质可以束缚一个稳定的类马约拉纳的费米子, 这是很难理解的现象, 即使在通常的拓扑超导体中也不存在这样的现象; 其次, 同样在 Fe (Te, Se) 单晶中, 实验测得大概 10% 的磁通涡旋会束缚一个稳定的零能马约拉纳模, 这也与通常的拓扑超导中任意磁通涡旋都可以束缚马约拉纳零模不一致 [89,102]. 因此, 对于铁基超导中的对称性破缺态和超导态中的拓扑量子现象的认识非常初级, 值得继续研究和探索.

参考文献

[1] Kamihara Y, Watanabe T, Hirano M, Hosono H 2008 *J. Am. Chem. Soc.* **130** 3296

[2] Guo J, Jin S, Wang G, Wang S, Zhu K, Zhou T, He M, Chen X 2010 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **82** 180520

[3] Wang Q Y, Li Z, Zhang W H, Zhang Z C, Zhang J S, Li W, Ding H, Ou Y B, Deng P, Chang K 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 037402

[4] Kane C L, Mele E J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 226801

[5] Kane C L, Mele E J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 146802

[6] Bernevig B A, Hughes T L, Zhang S C 2006 *Science* **314** 1757

[7] Fu L, Kane C L, Mele E J 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 106803

[8] König M, Wiedmann S, Brüne C, Roth A, Buhmann H, Molenkamp L W, Qi X L, Zhang S C 2007 *Science* **318** 766

[9] Zhang H, Liu C X, Qi X L, Dai X, Fang Z, Zhang S C 2009 *Nat. Phys.* **5** 438

[10] Chen Y, Analytis J G, Chu J H, Liu Z, Mo S K, Qi X L, Zhang H, Lu D, Dai X, Fang Z 2009 *Science* **325** 178

[11] Lee P A, Wen X G 2008 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **78** 144517

[12] Cvetkovic V, Vafek O 2013 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **88** 134510

[13] Lebègue S 2007 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **75** 035110

[14] Kuroki K, Onari S, Arita R, Usui H, Tanaka Y, Kontani H, Aoki H 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 087004

[15] Hao N, Hu J 2014 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **89** 045144

[16] Liu C X, Qi X L, Zhang H, Dai X, Fang Z, Zhang S C 2010 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **82** 045122

[17] Kreisel A, Wang Y, Maier T A, Hirschfeld P J, Scalapino D J 2013 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **88** 094522

[18] Tiago M L, Zhou Y, Alemany M M G, Saad Y, Chelikowsky J R 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 147201

[19] Qi X L, Zhang S C 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 1057

[20] Hasan M Z, Kane C L 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 3045

[21] Hao N, Hu J 2014 *Phys. Rev. X* **4** 031053

[22] Ge J F, Liu Z L, Liu C, Gao C L, Qian D, Xue Q K, Liu Y, Jia J F 2015 *Nat. Mater.* **14** 285

[23] He S, He J, Zhang W, Zhao L, Liu D, Liu X, Mou D, Ou Y B, Wang Q Y, Li Z 2013 *Nat. Mater.* **12** 605

[24] Tan S, Zhang Y, Xia M, Ye Z, Chen F, Xie X, Peng R, Xu D, Fan Q, Xu H 2013 *Nat. Mater.* **12** 634

[25] Liu D, Zhang W, Mou D, He J, Ou Y B, Wang Q Y, Li Z, Wang L, Zhao L, He S 2012 *Nat. Commun.* **3** 931

[26] Lee J, Schmitt F, Moore R, Johnston S, Cui Y T, Li W, Yi M, Liu Z, Hashimoto M, Zhang Y 2014 *Nature* **515** 245

[27] Miyata Y, Nakayama K, Sugawara K, Sato T, Takahashi T 2015 *Nat. Mater.* **14** 775

[28] Peng R, Xu H, Tan S, Cao H, Xia M, Shen X, Huang Z, Wen C, Song Q, Zhang T 2014 *Nat. Commun.* **5** 5044

[29] Hao N, Shen S Q 2015 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **92** 165104

[30] Fu L, Kane C L 2007 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **76** 045302

[31] Lu H Z, Shan W Y, Yao W, Niu Q, Shen S Q 2010 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **81** 115407

[32] Liu K, Lu Z Y, Xiang T 2012 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **85** 235123

[33] Timur B, Marvin L C 2013 *J. Phys.: Condens. Matter* **25** 105506

[34] Zheng F, Wang Z, Kang W, Zhang P 2013 *Sci. Rep.* **3** 2213

[35] Wu X, Qin S, Liang Y, Fan H, Hu J 2016 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **93** 115129

[36] Margadonna S, Takabayashi Y, McDonald M T, Kasperkiewicz K, Mizuguchi Y, Takano Y, Fitch A N, Suard E, Prassides K 2008 *Chem. Commun.* **43** 5607

[37] Lehman M C, Llobet A, Horigane K, Louca D 2010 *J. Phys. Conf. Ser.* **251** 012009

[38] Imai Y, Sawada Y, Nabeshima F, Maeda A 2015 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **112** 1937

[39] Wang Z, Zhang P, Xu G, Zeng L K, Miao H, Xu X, Qian T, Weng H, Richard P, Fedorov A V, Ding H, Dai X, Fang Z 2015 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **92** 115119

[40] Li S, de la Cruz C, Huang Q, Chen Y, Lynn J W, Hu J, Huang Y L, Hsu F C, Yeh K W, Wu M K, Dai P 2009 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **79** 054503

[41] Phelan D, Millican J N, Thomas E L, Leão J B, Qiu Y, Paul R 2009 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **79** 014519

[42] Eschrig H, Koepernik K 2009 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **80** 104503

[43] Wu X, Qin S, Liang Y, Le C, Fan H, Hu J 2015 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **91** 081111

[44] Yakita H, Ogino H, Okada T, Yamamoto A, Kishio K, Tohei T, Ikuhara Y, Gotoh Y, Fujihisa H, Kataoka K, Eisaki H, Shimoyama J I 2014 *J. Am. Chem. Soc.* **136** 846

[45] Katayama N, Kudo K, Onari S, Mizukami T, Sugawara K, Sugiyama Y, Kitahama Y, Iba K, Fujimura K, Nishimoto N, Nohara M, Sawa H 2013 *J. Phys. Soc. Jpn.* **82** 123702

[46] Wu X, Le C, Liang Y, Qin S, Fan H, Hu J 2014 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **89** 205102

[47] Yu R, Qi X L, Bernevig A, Fang Z, Dai X 2011 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **84** 075119

[48] Borisenko S V, Evtushinsky D, Liu Z H, Morozov I, Kappenberger R, Wurmehl S, Büchner B, Yaresko A, Kim T, Hoesch M 2016 *Nat. Phys.* **12** 311

[49] Yang F, Miao L, Wang Z F, Yao M Y, Zhu F, Song Y R, Wang M X, Xu J P, Fedorov A V, Sun Z, Zhang G B, Liu C, Liu F, Qian D, Gao C L, Jia J F 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 016801

[50] Kim S H, Jin K H, Park J, Kim J S, Jhi S H, Kim T H, Yeom H W 2014 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **89** 155436

[51] Drozdov I K, Alexandradinata A, Jeon S, Nadj-Perge S, Ji H, Cava R J, Andrei Bernevig B, Yazdani A 2014 *Nat. Phys.* **10** 664

[52] Wang Z 2016 *Nat. Mater.* **15** 968

[53] Roth A, Brüne C, Buhmann H, Molenkamp L W, Maciejko J, Qi X L, Zhang S C 2009 *Science* **325** 294

[54] Brüne C, Liu C, Novik E, Hankiewicz E, Buhmann H, Chen Y, Qi X, Shen Z, Zhang S, Molenkamp L 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 126803

[55] Shi X, Han Z Q, Richard P, Wu X X, Peng X L, Qian T, Wang S C, Hu J P, Sun Y J, Ding H 2017 *Sci. Bull.* **62** 503

[56] Liu Z H, Richard P, Xu N, Xu G, Li Y, Fang X C, Jia L L, Chen G F, Wang D M, He J B, Qian T, Hu J P, Ding H, Wang S C 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 037003

[57] Huang D, Song C L, Webb T A, Fang S, Chang C Z, Moodera J S, Kaxiras E, Hoffman J E 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 017002

[58] Zhang P, Yaji K, Hashimoto T, Ota Y, Kondo T, Okazaki K, Wang Z, Wen J, Gu G, Ding H 2018 *Science* **360** 182

[59] Okazaki K, Ota Y, Kotani Y, Malaeb W, Ishida Y, Shimojima T, Kiss T, Watanabe S, Chen C T, Kihou K 2012 *Science* **337** 1314

[60] Yaji K, Harasawa A, Kuroda K, Toyohisa S, Nakayama M, Ishida Y, Fukushima A, Watanabe S, Chen C, Komori F 2016 *Rev. Sci. Instrum.* **87** 053111

[61] Liu Z T, Xing X Z, Li M Y, Zhou W, Sun Y, Fan C C, Yang H F, Liu J S, Yao Q, Li W, Shi Z X, Shen D W, Wang Z 2016 *Appl. Phys. Lett.* **109** 042602

[62] Fang C, Yao H, Tsai W F, Hu J, Kivelson S A 2008 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **77** 224509

[63] Xu C, Müller M, Sachdev S 2008 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **78** 020501

[64] Chu J, Kuo H 2012 *Science* **337** 710

[65] Fernandes R M, Chubukov A V, Schmalian J 2014 *Nat. Phys.* **10** 97

[66] Hu J, Xu B, Liu W, Hao N N, Wang Y 2012 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **85** 144403

[67] Chubukov A V, Fernandes R M, Schmalian J 2015 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **91** 201105

[68] Glasbrenner J, Mazin I, Jeschke H O, Hirschfeld P, Fernandes R, Valentí R 2015 *Nat. Phys.* **11** 953

[69] Wang F, Kivelson S A, Lee D H 2015 *Nat. Phys.* **11** 959

[70] Yu R, Si Q 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 116401
[71] Wang Q, Shen Y, Pan B, Hao Y, Ma M, Zhou F, Steffens P, Schmalzl K, Forrest T, Abdel-Hafiez M 2016 *Nat. Mater.* **15** 159
[72] Zhang P, Qian T, Richard P, Wang X, Miao H, Lv B, Fu B, Wolf T, Meingast C, Wu X 2015 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **91** 214503
[73] Zhang Y, Yi M, Liu Z, Li W, Lee J arXiv: 150301556 [cond-mat.supr-con]
[74] Mukherjee S, Kreisel A, Hirschfeld P, Andersen B M 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 026402
[75] Watson M, Kim T, Haghighirad A, Davies N, McCollam A, Narayanan A, Blake S, Chen Y, Ghannadzadeh S, Schofield A 2015 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **91** 155106
[76] Tan S, Fang Y, Xie D, Feng W, Wen C, Song Q, Chen Q, Zhang W, Zhang Y, Luo L 2016 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **93** 104513
[77] Li W, Zhang Y, Lee J, Ding H, Yi M, Li Z, Deng P, Chang K, Mo S K, Hashimoto M 2015 arXiv:150901892 [cond-mat.supr-con]
[78] Wu X, Liang Y, Fan H, Hu J 2016 arXiv:160302055 [cond-mat.supr-con]
[79] Hu J, Yuan J 2016 *Front. Phys.* **11** 117404
[80] Jiang K, Hu J, Ding H, Wang Z 2016 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **93** 115138
[81] Hao N N, Wang Y P, Hu J P 2013 *EPL* **104** 57007
[82] Ran Y, Wang F, Zhai H, Vishwanath A, Lee D H 2009 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **79** 014505
[83] Park J, Friemel G, Li Y, Kim J H, Tsurkan V, Deisenhofer J, von Nidda H-A K, Loidl A, Ivanov A, Keimer B 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 177005
[84] Hao N, Zheng F, Zhang P, Shen S Q 2017 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **96** 165102
[85] Mourik V, Zuo K, Frolov S M, Plissard S, Bakkers E P, Kouwenhoven L P 2012 *Science* **336** 1003
[86] Nadj-Perge S, Drozdov I K, Li J, Chen H, Jeon S, Seo J, MacDonald A H, Bernevig B A, Yazdani A 2014 *Science* **346** 602
[87] Albrecht S M, Higginbotham A, Madsen M, Kuemmeth F, Jespersen T S, Nygård J, Krogstrup P, Marcus C 2016 *Nature* **531** 206
[88] Xu S Y, Alidoust N, Belopolski I, Richardella A, Liu C, Neupane M, Bian G, Huang S H, Sankar R, Fang C 2014 *Nat. Phys.* **10** 943
[89] Sun H H, Zhang K W, Hu L H, Li C, Wang G Y, Ma H Y, Xu Z A, Gao C L, Guan D D, Li Y Y, Liu C, Qian D, Zhou Y, Fu L, Li S C, Zhang F C, Jia J F 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 257003
[90] Fu L, Kane C L 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 096407
[91] Fu L, Berg E 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 097001
[92] Yan B, Jansen M, Felser C 2013 *Nat. Phys.* **9** 709
[93] Alicea J 2012 *Rep. Prog. Phys.* **75** 076501
[94] Law K T, Lee P A, Ng T K 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 237001
[95] Neupert T, Onoda S, Furusaki A 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 206404
[96] Xu G, Lian B, Tang P, Qi X L, Zhang S C 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 047001
[97] Yin J, Wu Z, Wang J, Ye Z, Gong J, Hou X, Shan L, Li A, Liang X, Wu X 2015 *Nat. Phys.* **11** 543
[98] Balatsky A, Vekhter I, Zhu J X 2006 *Rev. Mod. Phys.* **78** 373
[99] Pan S, Hudson E, Lang K, Eisaki H, Uchida S, Davis J 2000 *Nature* **403** 746
[100] Hudson E, Lang K, Madhavan V, Pan S, Eisaki H, Uchida S, Davis J 2001 *Nature* **411** 920
[101] Tsai W F, Zhang Y Y, Fang C, Hu J 2009 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **80** 064513
[102] Wang D, Kong L, Fan P, Chen H, Zhu S, Liu W, Cao L, Sun Y, Du S, Schneeloch J, Zhong R, Gu G, Fu L, Ding H, Gao H J 2018 *Science* eaao1797

SPECIAL TOPIC — Tenth anniversary of the discovery of iron-based high temperature superconductors

Research progress of topological quantum states in iron-based superconductor*

Hao Ning[1)†] Hu Jiang-Ping[2)3)‡]

1) (*Anhui Province Key Laboratory of Condensed Matter Physics at Extreme Conditions, High Magnetic Field Laboratory, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China*)

2) (*Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

3) (*Kavli Institute of Theoretical Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

(Received 30 July 2018; revised manuscript received 21 August 2018)

Abstract

Iron-based superconductors and topological quantum states have been two important research frontiers in condensed matter physics in recent years. It is a very significant question whether the nontrivial topological phenomena can occur in iron-based superconductors. In this paper, the basic characteristics of the electronic structure of iron-based superconducting are analyzed from three aspects: crystal symmetry, effective model near the high symmetry points in Brillouin zone, and spin-orbit coupling interaction. On this basis, this paper focuses on how the nontrivial topological quantum states occur in the normal state, the states with long-range order near superconducting state and the superconducting state. Furthermore, the relevant theoretical models and results are introduced in detail, the related experimental progress is reviewed, and the development in this field is prospected.

Keywords: iron-based superconductor, topological phase transition, topological quantum state

PACS: 71.20.–b, 71.10.–w, 74.70.Xa, 74.20.–z **DOI:** 10.7498/aps.67.20181455

* Project supported by the National Key Research and Development Plan of China (Grant Nos. 2015CB921300, 2017YFA0303100, 2017YFA0303201), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11674331, 11334012), the '100 Talents Project' of Chinese Academy of Sciences, and the Strategic Priority Research Program of Chinese Academy of Sciences (Grant No. XDB07000000).

† Corresponding author. E-mail: haon@hmfl.ac.cn

‡ Corresponding author. E-mail: jphu@iphy.ac.cn