

從量子霍爾效應到拓樸光子學與拓樸聲子學

From Quantum Hall Effect to Topological Photonics/Acoustics

蔡雅雯、吳杰倫、樂丕綱

Ya-Wen Tsai, Jie-Luen Wu, Pi-Gang Luan

從 30 年前提出的光子晶體 (photonic crystals) 與光子能隙材料 (photonic band gap materials)，到過去十多年很熱門的超穎材料 (metamaterials)，再到近幾年正在快速發展的拓樸光子學 (topological photonics)，都是光子學與電磁波研究受凝態物理概念啟發而引出的新研究領域。本文對拓樸絕緣體與拓樸光子學的概念做一簡介，並探討未來拓樸材料 (topological materials) 研究可探索的方向。

Photonic crystals, photonic band gap materials, metamaterials and topological photonics, all of these research areas concerning electromagnetic waves are inspired by some important concepts in condensed matter physics. In this article, we introduce the concepts in topological insulator and topological photonics, and discuss the possible future of the topological materials research.

一、前言

去年 (2016 年) 的諾貝爾物理獎頒發給了三位來自英國的美國理論物理學家 David J. Thouless，F. Duncan M. Haldane，和 J. Michael Kosterlitz，以表彰他們利用拓樸學 (Topology) 概念解決凝態物理 (condensed matter physics) 與統計力學 (statistical mechanics) 問題的貢獻。他們率先研究的拓樸相變 (topological phase transition) 與拓樸相位 (topological phase) 概念開啟了凝態物理與量子力學的新研究方向—拓樸絕緣體 (topological insulator)，讓拓樸材料 (topological materials) 在將來有機會應用在自旋

電子學 (spintronics) 與超導體 (superconductor)，甚至是量子電腦 (quantum computer) 的研發上。

拓樸材料的物理特性—主要是關於電流與自旋流 (spin current) 的分布與傳導方向—在材料參數的連續變化下具有穩定不變的韌性 (robustness)，只會在參數變化幅度過大時發生跳躍性的改變。在穩定不變的參數區間裡，拓樸不變量 (topological invariant) 可以被定義出來，而參數變化所對應的系統哈密頓量 (Hamiltonian) 的變化可以被形象化地比喻成是在不改變拓樸的條件下改變物體的幾何形狀。具體而言，二維的拓樸絕緣體在材料內部是電流的絕緣體，但在材料

的邊緣卻會有沿特定方向環繞—順時或逆時針轉 (clockwise or counterclockwise) 一旦不受障礙物與缺陷 (defects)、錯位 (dislocations) 影響的電流或自旋流。這樣的單向傳播 (one-way propagating) 狀態 (mode) 或模態 (mode) 被稱為手徵邊緣態/模 (chiral edge state/mode) 與螺旋邊緣態 (helical edge state/mode)。最早發現的拓樸相是在強大外加磁場下二維電子氣 (2-dimensional electron gas) 所表現出的整數量子霍爾效應 (integer quantum Hall effect)。然後在 1988 年，Haldane 發現，對石墨烯加上週期磁場 (平均為 0)，依然可以出現具有手徵邊緣態，且陳數 (Chern number) 不為 0 的拓樸相，現在稱為陳絕緣體 (Chern insulators)。2005 年，Kane 與 Mele 進一步推廣 Haldane 的模型，認真考慮了被 Haldane 忽略的電子自旋，並將外加的週期磁場換成石墨烯原子本身提供的自旋軌道交互作用 (spin-orbital interaction)，於是發現了被稱為量子自旋霍爾效應 (quantum spin Hall effect) 且具有螺旋邊緣態的拓樸相。

早在 2008 年，Haldane 與 S. Raghu 就已成功將上述拓樸不變量與手徵邊緣態的相關理論與物理現象「移植」到對應的光學與電磁系統中。在電子的系統中，可以藉著先找出具有時間反轉對稱性 (time reversal symmetry) 的系統能帶中的狄拉克點 (Dirac point)，再破壞系統的時空反轉對稱性而將此點打開，形成一個小能隙，那麼就會生出一條代表單向傳播的曲線貫穿這個能隙，而此曲線就是手徵邊緣態的色散曲線 (dispersion relation)。在光子系統中，基本作法也是一樣，也可以藉著使用破壞時空反轉對稱的材料而實現光子晶體的光子手徵邊緣態。由此引發的後續研究就發展出了現在所謂的拓樸光子學。

本文後續各節將先針對拓樸絕緣體的概念發展脈絡做一個簡介，再介紹近年關於拓樸光子學與拓樸聲子學的研究以及未來值得進一步探索的方向。

二、整數量子霍爾效應 (integer quantum Hall effect)、貝里相 (Berry phase)，與陳數 (Chern number)

傳統的霍爾效應 (Hall effect, HE)⁽¹⁾ 描述的是電子 (electron) 或電洞 (hole) 在互相垂直的電場與磁場同時作用下，因為羅倫茲力 (Lorentz force) 而導致電荷往導電材料的邊緣移動並累積的現象。由於正負電荷所受的磁力方向相反，因此，因電荷累積所造成的橫向 (同時垂直於電場與磁場的方向) 電場的方向也會相反。藉著量測這個橫向電場對應的電位差或霍爾電導 (Hall conductivity)，即可判定材料中的電荷載子 (carriers) 是電子還是電洞。

上世紀 80 年代，Klaus von Klitzing 在高磁場作用下的二維電子氣體 (2-dimensional electron gas, 2DEG) 系統發現了整數量子霍爾效應 (integer quantum Hall effect, IQHE)，因此獲得了 1985 年的諾貝爾物理學獎。隨後在遷移率更高的二維電子氣系統中，分數量子霍爾效應 (fractional quantum Hall effect, FQHE) 也被崔琦 (Daniel Tsui)、Horst Störmer 和 A. C. Gossard 發現，前兩者還與理論物理學家 Robert Laughlin 分享了 1998 年度的諾貝爾物理學獎^(2, 3)。這兩種效應被合稱為量子霍爾效應 (quantum Hall effect, QHE)。不過，若不特別提醒，通常也直接將整數量子霍爾效應簡稱為量子霍爾效應。

QHE 有別於傳統 HE 的兩個主要特點是霍爾電導的量子化 (quantization)，以及此現象對於材料中來自於雜質或無序 (disorder) 的免疫性。IQHE 中的霍爾電導量子化為基本單位 e^2/h 的整數倍，而 FQHE 的霍爾電導量子化為基本單位的分數或有理數倍。這些特性必須借助於量子力學才能獲得滿意解釋，這就是它們為何被稱作「量子」霍爾效應的原因。對於 IQHE，只需要解單電子 Schrodinger 方程，分析藍道能級 (Landau level) 的能級簡併度 (degeneracy) 與波函數單值性 (single-valuedness) 導致的磁通量子化 (flux quantization) 的關係，就足以解釋霍爾電導的整數量子化。此外，藍道能級間的能隙，似乎也可以解釋 IQHE 對於雜質與無序的免疫性。對於 FQHE，單電子行為不足以解釋，而必須考慮電子間的交互作用才行。相關的研究後來還發展出了像是任意子 (anyon) 與分數統計 (fractional statistics) 等觀念^(2,3)。

在 IQHE 現象中，外加的強磁場事實上讓 2DEG 二維材料的內部成為了絕緣體 (insulator)，而導電的電流分布在材料的邊緣。這個在邊緣傳播而不受雜質影響的波模態 (wave mode) 具有單向傳播 (one way propagation) 的特性，被稱為手徵邊緣態 (chiral edge state)。事實上，早在 1982 年 (IQHE 發現兩年後)，D. J. Thouless (2016 的諾貝爾獎得主之一)、M. Kohmoto、M. P. Nightingale 與 M. den Nijs 就提出了解釋 IQHE 的完整理論。他們根據 Kubo 公式分析 IQHE，發現每一個對應於特定整數台階的霍爾電導是一個拓樸不變量 (topological invariant)⁽⁴⁾。由於這個系統的拓樸特性，雜質或無序的微擾並不會連續改變系統的拓樸，因此邊緣態是拓樸保護的態 (topologically protected states)，對不大的干擾是免疫的。只有在拓樸被改變的時候，系統才會進入具有另一個拓樸特徵數字的態 (霍爾電導的另一個台階) (參考圖 1)。

進一步分析這個現在被稱作 TKNN 不變量 (TKNN invariant) 的整數 n ，就會發現它不折不扣就是規範場 (gauge fields) 與纖維叢 (fiber bundle) 術語中所謂的陳數 (Chern number)⁽⁵⁾。這一層認識把我們帶到了麥可·貝里 (M.V. Berry) 對於量子態的幾何相位 (geometrical phase) 的研究⁽⁶⁾，以及後來發展出的拓樸能帶論⁽⁷⁻⁹⁾。像這類內部是絕緣體，周圍是導體，且傳導電流被拓樸保護的奇異物質相 (phase)，就是所謂的拓樸絕緣體 (topological insulator)。IQHE 是第一個被人們找到的拓樸絕緣相 (topological insulator phase)。注意，此處的「相」指的是像「固相、液相、汽相」這樣的「物相」，而不是指相位。

Berry 是在研究量子系統的漸變演化時發現

了所謂的 Berry 相 (Berry phase)，並發現這個相位可以在數學上表示為一個與等效的「磁通量」 (magnetic flux) 成正比的量，而這個提供磁通的「磁場」被稱為 Berry 曲率 (Berry curvature)。現在我們把 Berry 相位的出現原因簡單解釋如下：

考慮一個時變量子系統 (time dependent quantum system)，其哈密頓量 $\hat{H}(\mathbf{R}(t))$ 是透過一組參數 (形式上寫成向量) $\mathbf{R}(t) = [R_1(t), R_2(t), \dots, R_N(t)]$ 隨時間改變。我們的興趣集中於這個量子系統處於非常緩慢改變參數 $\mathbf{R}(t)$ 的條件之下的演化行為。假定參數向量 $\mathbf{R}(t)$ 在參數空間裡繞了一圈，而在時間 T 時回到了初始的參數向量值，即 $\mathbf{R}(T) = \mathbf{R}(0)$ 。假定系統的初始狀態 $|\psi(0)\rangle = |n(\mathbf{R}(0))\rangle$ 是 $\hat{H}(\mathbf{R}(0))$ 的一個本徵態，那麼就有以下的問題：在經歷過這整個演化過程後，最終狀態 $|\psi(T)\rangle$ 會等於 $|n(\mathbf{R}(0))\rangle = |n(\mathbf{R}(T))\rangle = |\psi(0)\rangle$ (回復到初始狀態) 嗎？乍看之下答案似乎是肯定的，然而，只要記住 $\hat{H}(\mathbf{R}(t))$ 的瞬時本徵態 $|n(\mathbf{R}(t))\rangle$ 並不滿足時變性薛丁格方程 (time-dependent Schrodinger equation)，就會發現答案是否定的。

Berry 經過仔細的分析後發現，任意時刻 t 的量子態 $|\psi(t)\rangle$ 是由下式給出：

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(\frac{-i}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'\right) \exp(i\gamma_n) |n(\mathbf{R}(t))\rangle \quad (1)$$

其中 $\exp\left(\frac{-i}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'\right)$ 很容易理解，它是來自於演化本身的動力學相位因子 (dynamical phase factor)，即使在 $\hat{H}(\mathbf{R}(t))$ 不隨時間改變時也會存在。另外這個額外的相位就是 Berry 相位。

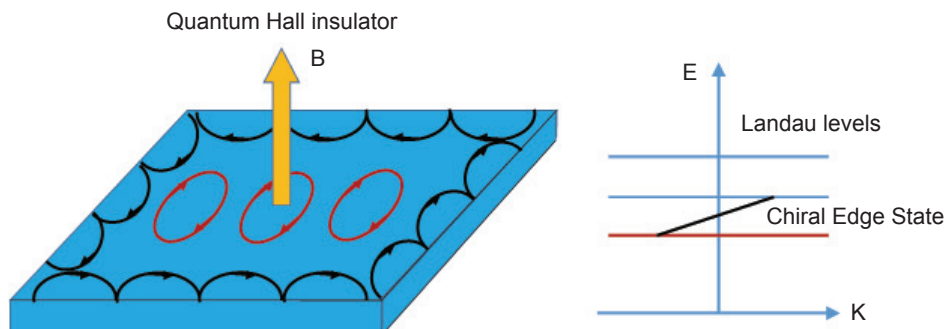


圖 1. QHE 示意圖。右邊為能帶示意圖。黑色線為手徵邊緣態的色散關係。

$$\gamma_n = i \int_0^t \langle n(\mathbf{R}(t')) | \frac{d}{dt'} | n(\mathbf{R}(t')) \rangle dt' \quad (2)$$

為了更清楚表達 $\gamma_n = \gamma_n(\mathbf{T})$ ($\mathbf{R}(t)$ 在參數空間裡繞了一整圈的 Berry 相位) 的幾何意義，可引入梯度算符 (gradient operator) $\nabla_{\mathbf{R}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}$ 並定義 Berry 向量勢 (Berry vector potential) 或 Berry 聯絡 (Berry connection)：

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = i \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | n(\mathbf{R}) \rangle \quad (3)$$

如此則有

$$\gamma_n = \int_C d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \quad (4)$$

此處 C 代表的就是 \mathbf{R} 在參數空間裡所繞的封閉路徑。

若是上述的參數空間恰好是 3 維，則利用 Stokes 定理，就可以將 (4) 中的線積分轉換為面積分：

$$\gamma_n = \oint_S d\mathbf{a} \cdot \mathbf{V}_n \quad (5)$$

其中

$$\mathbf{V}_n = \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_n \quad (6)$$

可類比為一個磁場，稱作 Berry 場 (Berry field)。在一個一般維度的參數空間中，上述等效磁場被一個反對稱的張量

$$F_{\mu\nu} = \frac{\partial A_\nu}{\partial R^\mu} - \frac{\partial A_\mu}{\partial R^\nu} \quad (7)$$

所取代，它被稱作 Berry 曲率 (Berry curvature)。

在固態物理的能帶理論中，Bloch 電子 (Bloch electron) 的量子態可以用布洛赫波向量 (Bloch wave vector) 參數化，亦即波向量扮演量子數 (quantum number) 的角色。考慮到 Bloch 波向量可以被侷限在布里淵區 (Brillouin zone, BZ) 內這個事實，可知一個 2 維的 BZ 在拓樸上等價於輪胎面 (torus)，差一個倒晶格向量 \mathbf{G} 的點被視為同

一點，即即 $\mathbf{k} \equiv \mathbf{k} + \mathbf{G}$ 。當我們連續變動 \mathbf{k} ，讓它從 BZ 邊緣的一點掃到相對應等價的另一點時，就是在參數空間中繞了一圈，因此前述關於巡迴量子態之 Berry 相的相關知識可以直接搬過來用。不過，最有趣的是，由於輪胎面是一個緊緻曲面 (compact surface)，對應於同一個 \mathbf{k} 點的量子態相位必須是單值的 (single valued)，由此就可以推論得知對整個 BZ 做 Berry 曲率的積分所得的 Berry 總通量具有拓樸意義，它正比於前面所說的 Chern 數。在這個意義下，幾何相位就變成了拓樸不變量 (topological invariant)。

值得一提的是，Bloch 本徵態 (Bloch eigenstates) 的 Berry 相位並不是一般意義下的波函數相位，而是一種「 \mathbf{k} 空間相位」。事實上，量子態 (quantum state) 是 Hilbert 空間 (Hilbert space) 裡的一個抽象的向量，具有有限或無限的維度。原則是計算這個態隨 \mathbf{k} 變動的演化，再求出演化後的量子態在初始量子態上的投影，以求出 Berry 相。前面提到根據量子態的演化可以定義 Berry 聯絡與 Berry 曲率，而 Berry 曲率的數學結構跟一般的磁場一樣。我們知道電荷在真實的磁場中運動會受到羅倫茲磁力的作用而導致運動軌跡的偏折。與此類似，若構造一個 Bloch 電子的波包，它的中心運動軌跡也會受到這種「 \mathbf{k} 空間磁力」的影響。也就是說，決定能帶電子 (band electron) 之傳播行為的半古典運動方程 (semi-classical equations of motion) 不是只由能帶結構所決定，它還受到來自 Bloch 本徵態相位的影響⁽⁹⁾。

在上述能帶理論中，人們發現 Berry 曲率的行為會受到一些對稱性的影響。例如當此能帶電子系統具有空間反射對稱性 (inversion symmetry) 或宇稱 (parity) 的時候 (以後簡稱 I 或 P)，Berry 曲率對波向量 \mathbf{k} 是對稱的，即即 $F(-\mathbf{k}) = F(\mathbf{k})$ ；而當系統具有時間反演對稱性 (time reversal symmetry) 的時候 (以後簡稱 T)，Berry 曲率是反對稱的，即 $F(-\mathbf{k}) = -F(\mathbf{k})$ 。由此得知，若系統同時具有 I 與 T 對稱，Berry 曲率就是 0。如果只具有 T 對稱，一般而言雖然 Berry 曲率並不是處處為 0，但由於積分時正負相抵，該能帶的陳數必為 0。這個考慮暗示要得到非平庸 (non-trivial) 的拓樸能帶，必須破壞 T

對稱⁽¹⁰⁾。這樣藉著破壞 T 對稱而得到的拓樸絕緣體，現在被稱為陳絕緣體 (Chern insulator)。IQHE 就是的第一個被發現的陳絕緣體，它是藉著外加強磁場破壞 T，以達成非平庸的拓樸。

三、石墨烯，Haldane 模型與拓樸絕緣體

Haldane 在 1988 年提出了一個有趣的模型，說明了不須借助於外加磁場與藍道能級，只要破壞 T，就可以造出陳絕緣體，以及伴隨著它，被拓樸保護的手徵邊緣態⁽¹¹⁾。Haldane 提出的模型是一個改造過的石墨烯 (graphene)⁽¹²⁾ 緊束縛模型 (tight binding models)⁽¹³⁾。石墨烯是一個具有蜂窩狀 (honeycomb) 原子排列的單層碳原子二維結構。在緊束縛模型裡，人們將蜂窩晶格上的原子分為 A，B 兩類，彼此相鄰。電子可以自由地在相鄰的兩個原子間跳躍，卻不會一次跨越兩步去跳到同類原子上 (參考圖 2)。

對這個簡單的模型做能帶計算，會發現這個二能帶模型 (two-band model) 的哈密頓算符 (Hamiltonian operator) 在傅立葉轉換後具有磁場中的電子自旋 (electron spin) 的哈密頓算符的形式：

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (8)$$

此處的 $\boldsymbol{\sigma} = [\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z]$ 代表三個 Pauli 矩陣，而 $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ 向量的三個分量是

$$\begin{aligned} d_x(\mathbf{k}) &= t \left(1 + 2 \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{\sqrt{3} k_y a}{2} \right) \\ d_y(\mathbf{k}) &= 2t \cos \frac{k_x a}{2} \sin \frac{\sqrt{3} k_y a}{2} \\ d_z(\mathbf{k}) &= 0 \end{aligned} \quad (9)$$

此處 a 是晶格常數 (lattice constant)。

由於 $d_z(\mathbf{k}) = 0$ ，這個 $\hat{H}(\mathbf{k})$ 所給出的能帶具有「有正就有負」的正負對稱性，即以下的手徵對稱性 (chiral symmetry)：

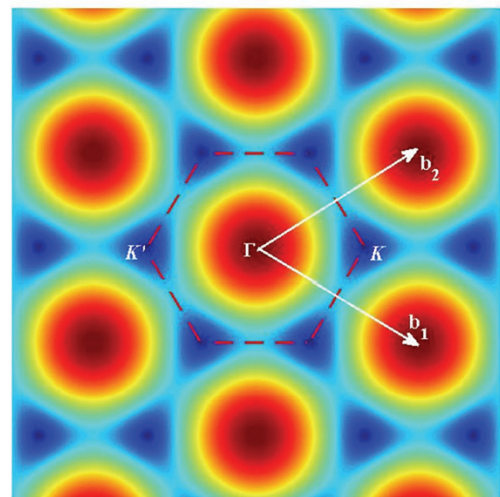
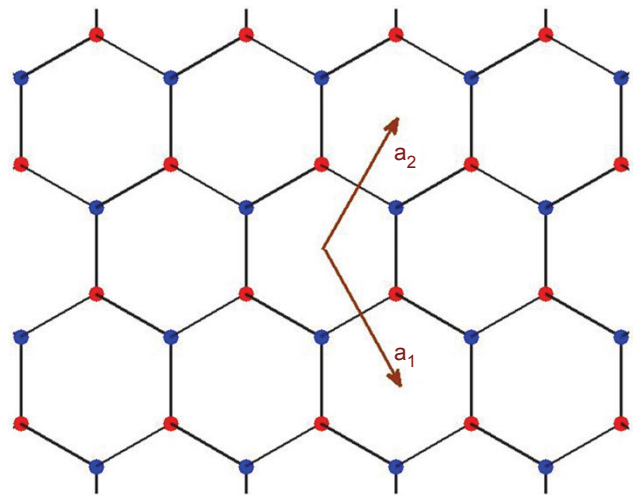


圖 2. 石墨烯晶格。上圖為兩類原子與晶格基底向量。下圖為布理淵區、倒晶格基底向量，以及能帶俯視圖。

$$\begin{aligned} E_{\pm}(\mathbf{k}) &= \pm |\mathbf{d}(\mathbf{k})| \\ &= \pm t \sqrt{1 + 4 \cos^2 \frac{k_x a}{2} + 4 \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{\sqrt{3} k_y a}{2}} \end{aligned} \quad (10)$$

很容易驗證，當電子的 Bloch 波向量 \mathbf{k} 座落於對稱點 $\mathbf{K} = \left(\frac{4\pi}{3a}, 0 \right)$ 與 $\mathbf{K}' = \left(-\frac{4\pi}{3a}, 0 \right) = -\mathbf{K}$ 時，會有 $\mathbf{d}(\mathbf{K}) = \mathbf{d}(\mathbf{K}') = 0$ ，對應於能隙的封閉點。這樣成對的對稱點在 BZ 邊界一共有三對，每一對在時間反轉對稱變換下互相映射為對方 (參考圖 3)。在後面的討論中，我們將這樣的一個能隙封閉的對稱點

稱為一個谷 (Valley)。此外，前面出現的 Pauli 矩陣事實上並不是代表真正的自旋，而是來自前述石墨烯蜂窩晶格分為 A、B 兩類原子的兩個自由度。事實上，在石墨烯緊束縛模型中的 A、B 兩原子並無本質區別，將其分為兩類原子純粹是人為的選擇，因此這種假的「自旋」自由度被稱為假自旋 (pseudospin)。在後面的討論中，我們還會進一步引入谷自旋 (Valley pseudospin) 的 z 分量，寫成 τ_z ，形式上也與 Pauli 矩陣一樣，但代表的是 \mathbf{K} 與 \mathbf{K}' 這兩個 \mathbf{k} -空間中的參考狀態。若在 \mathbf{K} 與 \mathbf{K}' 附近將 $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ 做泰勒展開 (Taylor expansion)，並將相對於它們的波向量微小偏移量記為 \mathbf{p} ，就會發現這兩個谷附近的哈密頓量可以被寫成

$$\hat{H}_{\pm}(\mathbf{p}) = v(\pm p_x \sigma_x + p_y \sigma_y) \quad (11)$$

其中 $v = -\sqrt{3}ta/2$ 。這兩個具有 Dirac 方程形式的哈密頓量給出兩個光錐 (light cone) 形式的能帶，被稱作 Dirac 錐 (Dirac cone)，描述無自旋 (spinless) 的零質量 Dirac 費米子 (massless Dirac fermion) (參考圖 3 右圖)。

Dirac 錐的成因是晶格對稱性所造成的能級簡併 (degeneracy)。事實上，這兩個哈密頓量是等價的，它們可以藉著 σ_y 相互轉換為彼此，即 $\sigma_y \hat{H}_{\pm}(\mathbf{p}) \sigma_y = H_{\mp}(\mathbf{p})$ 。若是在 (11) 式的哈密頓量中加入一項交錯質量項 (mass term) $m\sigma_z$ ，就會將 Dirac 錐的簡併分開，生出能隙，而錐點附近的能譜被修正成

$$E_{\pm}(\mathbf{p}) = \pm \sqrt{v^2 p^2 + m^2} \quad (12)$$

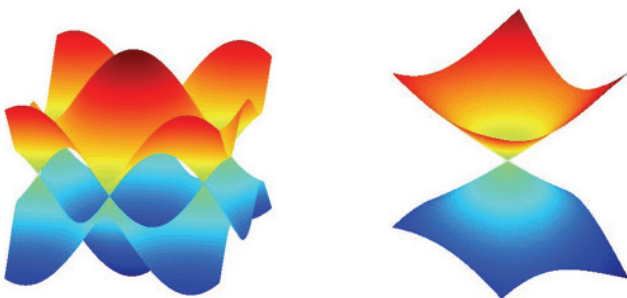


圖 3. 石墨烯能帶。左圖可看出 BZ 周圍的六個簡併點。右圖為 K 或 K' 點附近的 Dirac 錐。

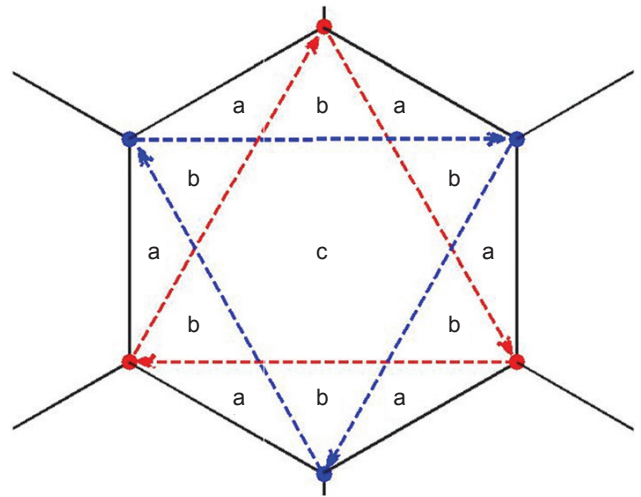


圖 4. Haldane 模型。紅色與藍色的箭頭記錄次近鄰跳躍項的正 (或負) 相位標準方。

不過，這樣打開的能隙是平庸的 (trivial)，並不會出現手徵邊緣態。

Haldane 發現，只要破壞 T 對稱性，即使在一個晶胞中的平均磁場為 0，仍可以在適當條件下實現非平庸的拓樸能帶與手徵邊緣態⁽¹⁴⁾。為了破壞 T 對稱，Haldane model 在原有的石墨烯緊束縛模型的哈密頓量中引入不對稱的次近鄰跳躍項 (next nearest neighbor (NNN) hopping terms)：

$$\hat{H}_{\text{Haldane}} = \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} t e^{i\nu_{ij}\phi} c_i^\dagger c_j + h.c. \quad (13)$$

其中 $\nu_{ij} = -\nu_{ji}$, $|\nu_{ij}| = 1$, 正負號依據逆時針或順時針旋繞晶格中心而決定 (參考圖 4)。按照 Haldane 所設定的磁場分布，在一個晶格中的 a 區域與 b 區域具有適當比例且相反符號的磁通，使得一個晶胞內的總磁通為 0。磁通對電子躍遷振幅的影響表現為與跳躍方向有關的相位因子 $e^{\pm i\phi}$ ，正反跳躍互為複共軛 (complex conjugate)。除此之外，Haldane 還設定 A、B 原子具有在地的位能 (on-site potential energy) $\pm M$ (就是前面提到的質量項)，藉以破壞 I 對稱 (目的將在隨後揭露)。將 B 原子指向三個 A 原子的向量記為 $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3$ ，且其兩兩之差記為 $\alpha_1 = \mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_3$, $\alpha_2 = \mathbf{R}_3 - \mathbf{R}_1$, $\alpha_3 = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2$ ，則修改後的哈密頓量在傅立葉轉換後為

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) + \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (14)$$

其中 $d_x(\mathbf{k}) \pm id_y(\mathbf{k}) = t \sum_{i=1}^3 e^{\pm i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i}$ 與原來的石墨烯緊束縛模型相同。新的兩項是

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{k}) &= 2t' \cos \varphi \sum_{i=1}^3 \cos(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\alpha}_i) \\ d_z(\mathbf{k}) &= M - 2t' \sin \varphi \sum_{i=1}^3 \cos(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\alpha}_i) \end{aligned} \quad (15)$$

它們就是決定系統非平庸特性的關鍵。

在谷點 \mathbf{K} 與 \mathbf{K}' 對 (14) 作泰勒展開，並引入谷自旋，就得到

$$\hat{H}(\mathbf{p}) = v(\tau_z p_x \sigma_x + p_y \sigma_y) + (M - 3\sqrt{3}t' \sin \varphi \tau_z) \sigma_z \quad (16)$$

其中 $3\sqrt{3}t' \sin \varphi \tau_z \sigma_z$ 是可以藉磁場強度調控的項。當 $|t' \sin \varphi| \ll M$ 時，質量項在 Dirac 點 \mathbf{K} 和 \mathbf{K}' 上都是正的，而在 Dirac 點的能隙是 $2M$ 。如果我們緩慢增加 $t' \sin \varphi$ ，那麼 \mathbf{K}' 處的質量 $M + 3\sqrt{3}t' \sin \varphi$ 將變得更大並且保持正，但是 \mathbf{K} 處的質量 $M - 3\sqrt{3}t' \sin \varphi$ 將變得更小。當 $M = 3\sqrt{3}t' \sin \varphi$ 時，能隙將在 \mathbf{K} 處閉合。如果我們進一步增加 $t' \sin \varphi$ ，關掉的能隙將會再次打開。這個能隙關掉再打開的過程對應於一個拓樸相變 (topological phase transition)，而系統的陳數在能隙開關的前後發生了變化。

Haldane 模型雖然可以在「平均不加磁場」的情況下透過破壞 T 與 I 對稱提供拓樸非平庸的能帶，但要符合那樣奇怪的磁場分布其實比直接加一個常數磁場還要困難。2005–2006 年，幾乎同時，有兩組人提出不須外加磁場，也不須破壞 T 對稱，只要藉助於自旋軌道交互作用 (spin-orbit interaction, SOI)⁽¹⁵⁾ 的機制即可實現一種新的拓樸邊緣態：量子自旋霍爾效應 (quantum spin-Hall effect, QSHE)⁽¹⁶⁻¹⁹⁾。根據電磁場的 Lorentz 轉換，考慮一個在電場 \mathbf{E} 中以速度 \mathbf{v} 運動的粒子，若我們將參考坐標轉換到與這個粒子一起運動的參考系，就會出現一個正比於 $\mathbf{E} \times \mathbf{v}$ 的磁場，而若此粒子具有自旋 \mathbf{s} ，就會被此磁場作用。若電場來自於

原子的庫倫勢 (Coulomb potential)，那麼電場就會是徑向的，而這個磁場就可以寫成 $f(r)\mathbf{L}$ 的形式，對應於此，就有一項形式為 $f(r)\mathbf{L} \cdot \mathbf{s}$ 的微擾項出現在哈密頓量中，這就是 SOI。

與 QHE 不同的是，QSHE 不需要外加磁場，且其邊緣態流動的不是電流或電子流，而是自旋流 (spin current)。事實上，在 QSHE 的邊緣態中，自旋向上 (spin up) 與自旋向下 (spin down) 的電子彼此沒有偶合 (coupling)，而是在 SOI 作用下分別往不同方向繞圈，因此兩種繞法構成的淨電流是 0，但自旋流則可以加成。這種特殊的傳播型態為自旋電子學 (spintronics) 的研究提供了新的可能性。這種電子自旋與電子動量以特定方式「綁在一起」的現象被稱為自旋-動量鎖定 (spin-momentum locking)，而這種特殊的邊緣態被稱為螺旋邊緣態 (helical edge state) (參考圖 5)。

Kane 與 Mele^(17, 18) 以及 Bernevig, Hughes 與 Zhang (張首晟) (簡稱 BHZ) 所提出的 QSHE 模型⁽¹⁹⁾ 其實略有不同。此處以 Kane-Mele (KM) 模型說明此效應。KM 是將 Haldane 模型中的奇特磁場分布換成了石墨烯內部原子的內稟 (intrinsic) SOI。簡單解釋如下：電子在近鄰原子間的跳躍由於是徑向的，因此對應於 $\mathbf{E} \times \mathbf{v}$ 的磁場是 0，但在次近鄰跳躍中， $\mathbf{E} \times \mathbf{v}$ 不是 0，因此就有了 SOI 去影響電子跳躍項的相位，就像外加磁場去影響電子跳躍項的相位一樣。所不同的，是這個因運動而生的等效磁場不是作用在電荷上，而是作用在自旋上，因此上下自旋會感受到相反的磁場，導致螺旋態邊緣態的出現。在數學描述上，KM 模型所給出的 SOI 項哈密頓量

$$\hat{H}_{\text{SOI}} = it' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \sum_{\alpha,\beta} v_{ij} \hat{c}_{i\alpha}^\dagger S_{\alpha\beta}^z c_{j\beta} \quad (17)$$

就像是做了兩份 Haldane 模型，且選擇 $\varphi = \frac{\pi}{2}$ ，其中 $S^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ 是代表自旋的 Pauli 矩陣。在傅立葉轉換後，可以很容易驗證它是 T 對稱的。

前面說過 QHE 的手徵邊緣態是受拓樸 (即陳數) 不變所保護的，因此不會被無序所影響。那麼 QSHE 的螺旋邊緣態也受拓樸保護嗎？實際計算會發現兩種繞法相反的自旋電子可以個別計算出不為

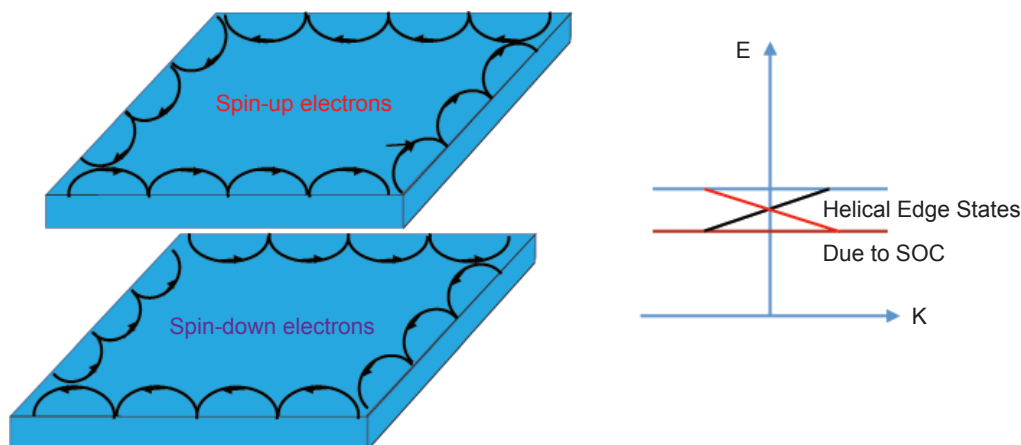


圖 5. QSHE 示意圖，QSHE 就像雙層的 QHE，兩種自旋走不同方向。右邊為能帶示意圖。黑色線為對應兩種自旋的螺旋邊緣態的色散關係。

0 的陳數，但其總和等於 0。不過，這兩種陳數的差卻能給出不為 0 的值，對應於新的拓樸不變量。這個不變量也保護了螺旋邊緣態的穩定性。事實上，QSHE 效應在不破壞 T 對稱之下能夠成立的關鍵是所謂的 Kramers 定理 (Kramers' theorem)⁽²⁰⁾。此定理說明了在保持 T 對稱的情況下，量子態至少是二重簡併的。在 QSHE 的 KM 與 BHZ 模型之後，人們進一步發現不破壞時間反轉對稱的拓樸絕緣體只有兩類，可以分別用 0 與 1 代表，而它們的拓樸不變量就被稱為 Z2 不變量^(7, 8, 19)。此外，研究者又進一步把二維拓樸絕緣體的概念推廣到了三維，提出了三維拓樸絕緣體⁽²¹⁻²³⁾。

前面的討論一直聚焦在二維系統，事實上最早把布里淵區 BZ 想像成一個緊緻空間 (compact space) 的是 J. Zak^(24, 25)。就是這位 Zak 先生率先把 Berry 相的概念應用在一維電子能帶理論中，提出了能帶 Berry 相的概念，而這個最早由 Zak 提出的一維系統拓樸相現在被稱為 Zak 相 (Zak phase)，它在近年獲得了更進一步的發展，被應用於研究一維光子晶體的拓樸相變與介面態問題^(26, 27)。

四、拓樸光子學

就像光子晶體 (photonic crystals) 研究的初期概念是將電子能帶概念移植到電磁波系統，在 2008 年的兩篇論文中，Haldane 與 Raghu^(28, 29) 又進一

步把拓樸絕緣體的主要概念帶入光子晶體與超材料 (metamaterials)^(30, 31) 的研究中，開啟了拓樸光子學 (topological photonics) 研究的新時代。跟之前的研究類似，這個思維的轉換也催生了拓樸聲學 (topological acoustics) 或是拓樸聲子學 (topological phononics)，甚至是拓樸力學 (topological mechanics)⁽³²⁾。

Haldane 與 Raghu 提出的光子拓樸絕緣體 (photonic topological insulator)，是利用外加磁場破壞具有磁光耦合 (magneto-optic coupling) 特性的介電質 (dielectrics) 光子晶體的 T 對稱，以實現光子版的陳絕緣體^(33, 34)。比石墨烯研究困難的，是要先在不加磁場的光子晶體能帶中找到能帶簡併的 Dirac 點 (Dirac point)，即 Dirac 錐的頂點，然後加上磁場去破壞 T 對稱以生出一個微小的能隙。在此能隙被打開的同時，也會有一條手徵邊緣態的色散曲線 (dispersion relation) 連接能隙上下兩個不同陳數的能帶 (見圖 1)。

在這兩篇概念性的論文提出後，大量討論破壞 T 對稱如何生出手徵邊緣態的光子晶體與聲子晶體研究論文開始湧現。2008 年，麻省理工學院 Joannopoulos 的研究組在在實驗上首次觀測到 TM 偏振光的手徵邊緣光子態⁽³⁴⁾。他們是利用旋磁材料 (gyromagnetic material) 圓柱加外加磁場來破壞 T 對稱性以生出手徵邊緣態。在外加磁場 0.20 T，頻率為 4.5 GHz 左右時，手徵邊緣態的前向和逆向傳

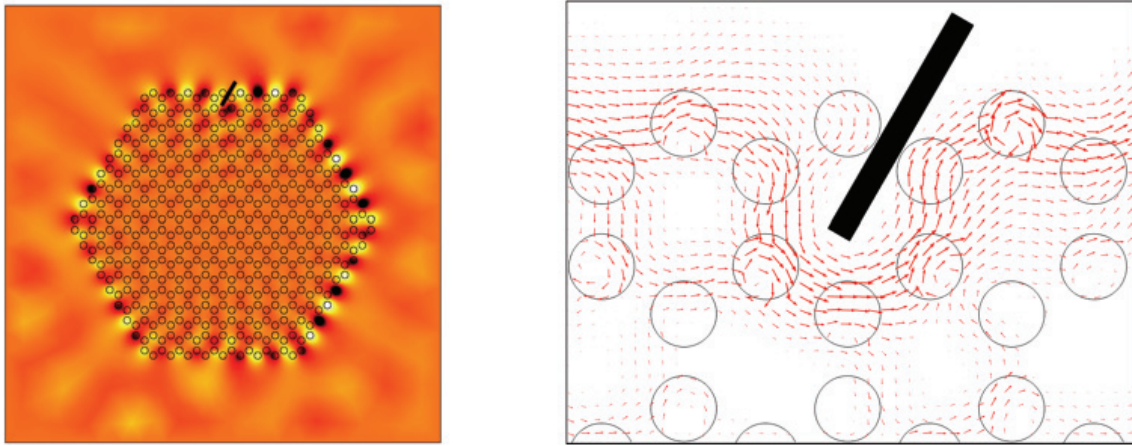


圖 6. 一個典型的光子手徵邊緣態。左圖是場圖，右圖是繞過障礙物的光子能流⁽³⁵⁾。

播 (forward/backward propagation) 的振幅值比差異大於 50 dB，得知此邊緣態表現出符合理論預期的對缺陷免疫以及可繞過障礙物做單向傳播的性質。由於磁響應的頻率不在高頻區，以旋磁材料介質實現光的陳絕緣體，一般僅適用於微波波段。若使用旋電材料 (gyroelectric material)，則操作頻率可延伸到紅外波段，但仍難以應用在紅外至可見光頻段 (參考圖 6)。

回想一下 Haldane 模型，可知破壞 T 對稱的直接物理意義是讓傳遞波逆時針與順時針旋繞一周具有不同的相位。因此，只要找到有效的手段控制波的旋繞相位，就可以滿足破壞 T 對稱的要求⁽³⁶⁾。

2013 年，以色列的研究者 Alexander Szameit 等人提出以空間上的第三維度 (z 方向) 上的螺旋形調制 (helical modulation) 來產生等效磁場，從而在實驗上實現光的 Floquet 拓樸絕緣體⁽³⁷⁾。實驗表明，波長 633 nm 的光可以繞光子晶體結構的邊界作無逆散射的傳播 (沿 z 方向單向螺旋上升)，具有一定的缺陷免疫能力。

馬里蘭大學的研究人員在 2011 年與 2013 年分別提出理論設計與實驗，利用基於近鄰格點上的兩個共振耦合環的方向耦合，在方形晶格共振環陣列結構實現了單向傳播的手徵邊緣模態^(38, 39)。在此結構中，順 (逆) 時針傳播模式經過一個單位晶胞 (unit cell) 會產生符號相反的等效磁場。這兩種模式的光可類比於電子的自旋繞邊界單向傳播。實驗上證實此設計可在通訊波段 (1539 nm) 實現邊

緣模態單向傳播以及無背向散射繞過缺陷。這種基於共振的耦合結構可完全對應於網格模型下的 Floquet 拓樸絕緣體⁽⁴⁰⁾。在此兩類模型中，兩種光的假自旋 (pseudospin) 是完全不耦合的，所以這種拓樸態的缺陷免疫特性僅限於自旋不反轉的情況。

在電子的 QSHE 系統中，有一對自旋與動量鎖定並且受 T 對稱保護的螺旋邊緣態。然而光子 (玻色子，自旋為 1) 與電子 (費米子，自旋 1/2) 在時間反轉下有本質區別，二者的時間反轉算符滿足的關係式 (玻色子 $T_b^2 = 1$ ，費米子 $T_f^2 = -1$) 並不相同，而後者 ($T_f^2 = -1$) 就是 Kramers 定理成立的關鍵。所以，要實現類似 QSHE 的光子拓樸絕緣體，必須為光子建構一對假自旋 (pseudo-spin) 以對應成對的電子自旋，也就是要構造具有 $T_p^2 = -1$ 數學形式的假時間反演算符 (pseudo-time reversal symmetry operator)。很容易想像，對應於電子自旋的光子波函數自由度，最自然的就是光子偏振 (photon polarization)。許多的研究的確是在光子偏振的操控上作文章。

德州大學奧斯汀分校的 Gennady Shvets 等人於 2013 年在理論上提出了一種利用雙各向異性介質 (Bianisotropic material) 電磁場之間的特殊對偶性耦合 ($E_z \leftrightarrow H_z$) 來實現一對 TE+TM/TE-TM 偏振態 (45° 線偏光) 的二維 QSHE 態⁽⁴¹⁾。不過，這個設計所要求的雙各向異性太過完美，實驗上不太可能實現。

南京大學的研究人員於 2016 年在理論上提出

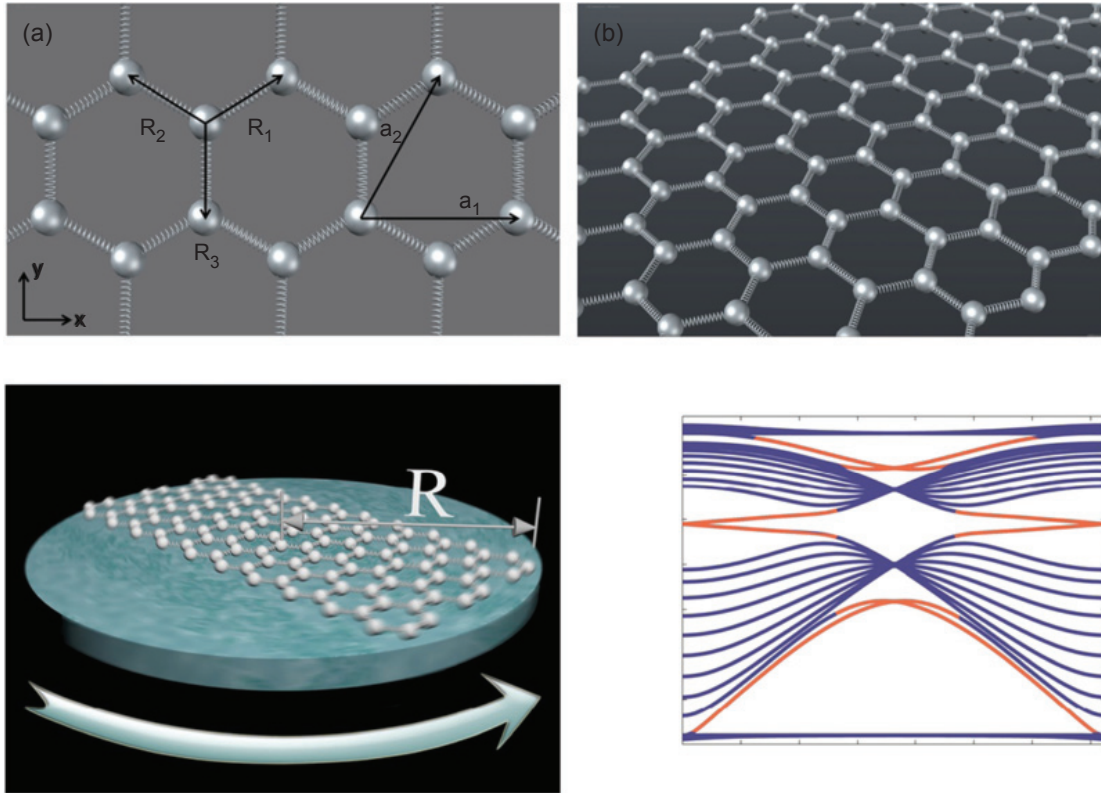


圖 7. 轉盤振子系統。柯氏力扮演羅倫茲力的角色，振動波就會在適當條件下出現手徵邊緣態。右下圖的紅色曲線是邊緣態的色散曲線。

了一種利用壓電/壓磁超晶格構成的破壞 T 對稱的光拓樸絕緣體。他們利用的是 LCP/RCP 為假自旋對。他們指出，在此結構中，光拓樸模態不是像電子系統中那樣受 T 對稱性保護，取而代之的是前面介紹過，滿足 $T_p^2 = -1$ 的一種人為構造的假時間反演對稱性 (pseudo-time reversal symmetry) 在保護著邊界模態⁽⁴²⁾。

五、拓樸彈性／聲學與拓樸力學

在聲學或力學振動系統中要實現 QHE 態，採用的會不同於電磁系統的方法，但多數還是基於破壞 T 對稱的方法。此處僅以 2014 年本人訪問 Birmingham 大學物理系期間，與該系張霜 (Shuang Zhang) 教授的研究組合作的文章為例⁽⁴³⁾，以說明實現 T 破壞以及生出手徵邊緣態的方法。我們考慮的系統是一個二維蜂窩晶格的力學振動系統，質量球為格點，被彈簧 (鍵) 所連接。我們是利用旋

轉座標系內的柯氏力來代替電子系統的羅倫茲磁力，達成破壞 T 對稱的目的。我們設定這個振動的系統是置於一個旋轉的圓盤上 (不考慮摩擦力)，隨轉盤一起轉動。當這個蜂窩狀網格上的球集體振動的時候，除了有來自於本身彈簧的回復力之外，球還受到離心力以及柯氏力的作用。我們假定轉盤轉速不是太大，如此就可以忽略離心力的影響。在這樣的假設之下，柯氏力就會扮演羅倫茲力的角色，轉盤振子振動波就會在適當條件下出現手徵邊緣態 (參考圖 7)。

除了使用整體結構的旋轉坐標之外，另外一種比較常被考慮的方式是對週期晶格內的每一個晶胞內的介質做旋轉，例如參考文獻 44。此外，也可以像電磁系統一樣建構假自旋與假時間反演算符，以做到數學上的對應⁽⁴⁵⁾。最近幾年，一些傳統上屬於結構力學的問題被發現也可以借助拓樸觀念做進一步的深入研究。藉助來自於超對稱量子力學 (supersymmetric quantum mechanics) 研究

的數學方法，結構力學問題可以與量子力學問題做對應，發現一些零能模 (zero modes)，以解決結構是否穩定的問題。這類研究現在被稱為拓樸力學 (topological mechanics)，相關文獻可以進一步參考 (46)。

六、未來展望與討論

在拓樸光／聲系統中，拓樸保護的邊緣態色散曲線落在打開 Dirac 錐所生成的能隙 (帶隙) 之中。事實上，通常藉破壞 T 對稱或是模態的等效 SOI 打開的帶隙都很微小。依據過去對光子晶體與聲子晶體的研究經驗，越小的帶隙意味著邊緣態局限於材料邊緣的效果越差，亦即聲／光子晶體材料的「內部」不能太小，以免材料兩邊界的邊緣態彼此耦合而穿透了材料，破壞了「絕緣體」效應也失去拓樸保護的對無序免疫的特性。此外，目前提出的某些模型比較理想化，例如完美的雙各向異性、無能量的吸收與損耗。為了更進一步探究應用的可能性，將來應該需要對不那麼完美的系統的狀態做一些探討，例如吸收效應的影響。

與陳數或是 Z2 不變量相關的 Berry 聯絡與 Berry 曲率在 k 空間的意義已經清楚了，也能由它們導出座標空間內的效應，但它們有沒有座標空間內的對應物？這方面目前似乎並沒有很明確的物理可說。此外，單向傳播的拓樸保護機制是否存在，需要做陳數或是 Z2 不變量的計算。當無法定義或計算上述拓樸量時，是否仍有能夠穩定傳播的單向模態？值得進一步探討。最後，目前的論文多以概念性的展示物理現象為主。如果手徵邊緣態或是螺旋邊緣態真的有應用價值，未來應該可以用它們來設計一些光／聲元件。無論如何，拓樸觀念滲透至各個波動相關的研究領域後，展現出了令人驚嘆的發展可能性，值得引起更大的關注。

參考文獻

1. C. Kittel, "Introduction to Solid State Physics", Wiley, 8th Ed. (2004).
2. E. Fradkin, "Field Theories of Condensed Matter Physics", Cambridge University Press, 2 Ed. (2013).
3. K. Huang, "Statistical Mechanics", Wiley, 2nd Ed. (1987)
4. D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, *Phys. Rev. Lett.*, **49**, 405 (1982).
5. B. Andrei Bernevig, "Topological Insulators and Topological Superconductors", Princeton University Press (2013).
6. M. V. Berry, "Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes", *Proceedings of the Royal Society A*, 392 (1802): 45–57 (1984).
7. M. Franz (Editor), L. Molenkamp (Editor), "Topological Insulators", Volume 6 (Contemporary Concepts of Condensed Matter Science) Elsevier; 1st Ed. (2013).
8. M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.*, **82**, 3045 (2010).
9. D. Xiao, M.-C. Chang, and Q. Niu, *Rev. Mod. Phys.*, **82**, 1959 (2010).
10. J. J. Sakurai, "Modern Quantum Mechanics", Addison Wesley, Revised Ed. (1993).
11. F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 2015(1988).
12. Graphene, <https://en.wikipedia.org/wiki/Graphene>
13. Tight binding, https://en.wikipedia.org/wiki/Tight_binding
14. D. Haldane, Haldane model and Berry curvature introduction, YouTube Video: <https://www.youtube.com/watch?v=7nVO4uMm-do>
15. Spin-orbit interaction, https://en.wikipedia.org/wiki/Spin%E2%80%93orbit_interaction
16. Quantum spin Hall effect, https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_spin_Hall_effect
17. C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.*, **95**, 226801 (2005).
18. C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.*, **95**, 246802 (2005).
19. B. Andrei Bernevig, Taylor L. Hughes, S.-C. Zhang, *Science*, **314**, 1757 (2006).
20. Kramers theorem, https://en.wikipedia.org/wiki/Kramers_theorem
21. J. E. Moore and L. Balents, *Phys. Rev. B*, **75**, 121306(R) (2007).
22. L. Fu, C. L. Kane, and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 106803 (2007).
23. R. Roy, *Phys. Rev. B*, **79**, 195322 (2009).
24. Zak, J. Berry's phase for energy bands in solids. *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2747–2750 (1989).
25. M. Atala, M. Aidelsburger, Julio T. Barreiro, D. Abanin, T. Kitagawa,, E. Demler, I. Bloch, *Nature Physics*, **9**, 795 (2013).
26. M. Xiao, Z. Q. Zhang, and C. T. Chan, *PHYSICAL REVIEW X*, **4**, 021017 (2014).
27. Q. Wang, M. Xiao, H. Liu, S. Zhu, and C. T. Chan, *Phys. Rev. B*, **93**, 041415(R) (2016).
28. F. D. M. Haldane & S. Raghu, *Phys. Rev. Lett.*, **100**, 013904 (2008).
29. S. Raghu & F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. A*, **78**, 033834 (2008).
30. J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn & R. D. Meade; Photonic Crystals: Molding the Flow of Light, 2nd ed., Princeton Univ. Press (2008).
31. 樂丕綱, 陳啟昌, 光子晶體: 從蝴蝶翅膀到奈米光子學 (2nd Ed.), 五南 (第二版) (2010)
32. Z. Wang, Y. D. Chong, J. D. Joannopoulos & M. Soljačić, *Phys.*

Rev. Lett., **100**, 013905 (2008).

33. Topology on top, *Nature Physics*, **12**, 615 (2016)

34. Z. Wang, Y. D. Chong, J. D. Joannopoulos & M. Soljačić, *Nature*, **461**, 772–775 (2009).

35. X. Ao, Z. Lin, and C. T. Chan, *Phys. Rev. B*, **80**, 033105 (2009).

36. K. Fang, Z. Yu, & Shanhui Fan, *Nature Photonics*, **6**, 782 (2012)

37. M. C. Rechtsman, J. M. Zeuner, Y. Plotnik, Y. Lumer, D. Podolsky, F. Dreisow, S. Nolte, M. Segev, A. Szameit, *Nature*, **496**, 196 (2013)

38. M. Hafezi, E. A. Demler, M. D. Lukin, & J. M. Taylor, *Nature Physics*, **7**, 907 (2011).

39. M. Hafezi, S. Mittal, J. Fan, A. Migdall, J. M. Taylor, *Nature Photonics*, **7**, 1001 (2013).

40. M. Pasek and Y. D. Chong, *Phys. Rev. B*, **89**, 075113 (2014).

41. Alexander B. Khanikaev, S. Hossein Mousavi, W.-K. Tse, M. Kargarian, A. H. MacDonald, G. Shvets, *Nature Mater.*, **12**, 233 (2013).

42. C. He, X.-C. Sun, X.-P. Liua, M.-H. Lu, Y. Chen, L. Feng, and Y.-F. Chen, *PNAS*, **113**, 4924 (2016).

43. Y.-T. Wang, P.-G. Luan, S. Zhang, *New J. Phys.*, **17**, 073031 (2015).

44. Z. Yang, F. G., X. Shi, X. Lin, Z.n Gao, Y. Chong, and B. Zhang, *Phys. Rev. Lett.*, **114**, 114301 (2015).

45. J. Mei, Z.-G. Chen, Y. Wu, Pseudo-time-reversal symmetry and topological edge states in two-dimensional acoustic crystals, *Scientific Reports*, DOI: 10.1038/srep32752 (2016).

46. Sebastian D. Huber, *Nature Physics*, **12**, 621 (2016).



蔡雅雯小姐現為中央大學光電所碩士班學生。

Ya-Wen Tsai is currently a master student in the Department of Optics and Photonics, National Central University.



吳杰倫先生現為中央大學光電所博士班學生。

Jie-Luen Wu is currently a Ph.D. student in the Department of Optics and Photonics, National Central University.



樂丕綱先生為清華大學物理博士，現任國立中央大學光電所副教授。

Pi-Gang Luan received his Ph.D. in the Department of Physics, National Tsing Hua University. He is currently an associate professor in the Department of Optics and Photonics, National Central University.