

新聞稿

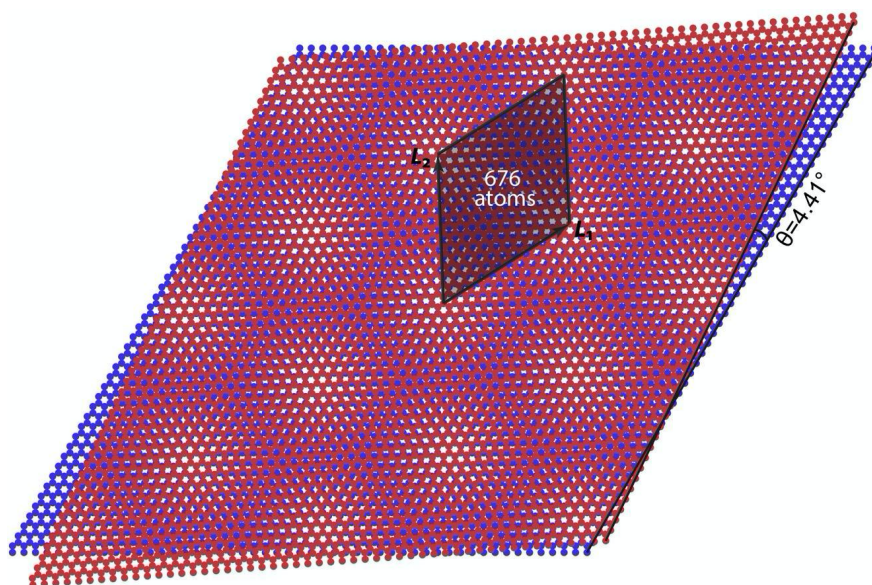
即時發放

港大物理學家解密：

魔轉角雙層石墨烯模型中的「真」拓撲莫特絕緣體

2021 年 9 月 27 日

你能否想像，我們手中的鉛筆（石墨）在發生一定的轉動時會變成超導體？石墨的性質十分有趣，其層狀二維結構就是由碳原子形成的二維六角晶格——石墨烯。當人們將兩層石墨烯交疊並轉動上層的石墨烯時，便會形成如圖一所示的「周期性結構（Periodic Arrangement）」，又稱為「摩爾」（Moiré）圖案。當兩層交疊的轉角為大約 1° 時，即人稱「魔角」，這時奇特的畫面將會出現——石墨烯會變成絕緣體、金屬，甚至是超導體！科學家在 2018 年時發現這神奇的現象，至今仍未能解釋箇中原因。最近，港大物理學家與合作夥伴成功破解魔轉角的秘密，他們在魔轉角雙層石墨烯模型中找出真正的拓撲莫特絕緣體（*bona fide* topological Mott insulator），研究結果剛於學術期刊《自然-通訊》（*Nature Communications*）中發表。



圖一.魔轉角雙層石墨烯中的摩爾圖案。此轉角為 $\theta=4.41^\circ$ ，相應的摩爾原胞內有 676 個碳原子。圖片提供：陳斌斌博士

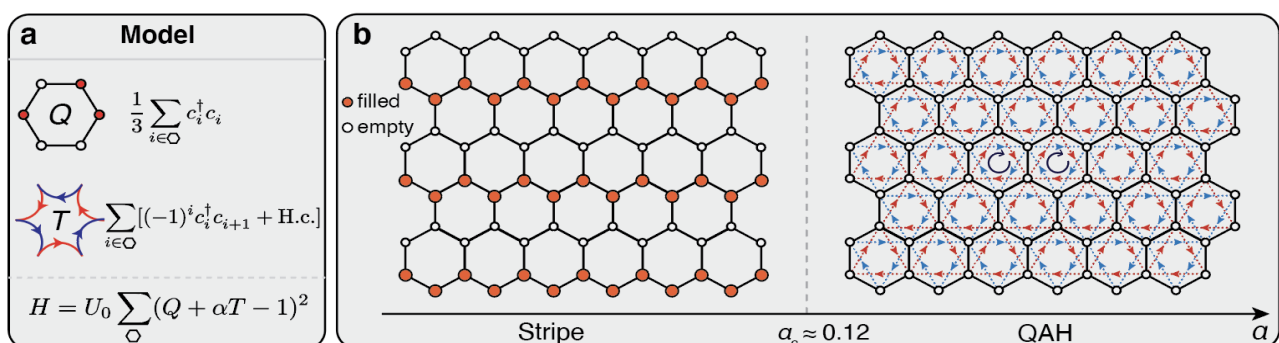
「魔角」現象可說是目前凝聚態物理和量子材料研究的前沿課題，一般需要以理論、實驗、及計算揉合方能破解。現時，我們對魔角雙層石墨烯中的物理現象的初步理解，大體來說就是兩層石墨烯一旦在魔角處形成摩爾圖案，其電子能帶會變成幾乎完全「扁平」。換言之，此時六角晶格中電子

的運行速度相比正常時（例如在單層石墨烯或石墨中的運行速度）顯著降低。在此情況下，電子的行為將由電子之間的相互排斥（庫倫）作用所主導，並導致原本在單層石墨烯或石墨中所不存在的奇異物相（exotic phases），例如絕緣體、金屬和超導體等一一湧現。在低溫下（低於 10K（溫度的計量單位）），當我們調節雙層石墨烯中的電子數目，使得這些「平帶」整數填充，這時系統將形成絕緣物態。而當我們更進一步，使電子數目偏離整數填充（即允許平帶部分填充）時，系統將變成金屬（低電阻）或超導體（零電阻）。

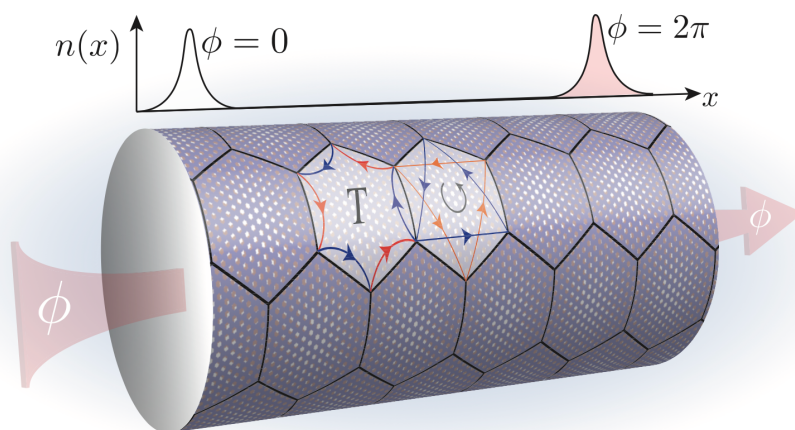
全球物理學家正努力地建立合適的微觀模型去解釋魔角雙層石墨烯中的奇特現象。近日，由中國和美國研究機構組成的團隊就以上研究取得了實質進展，團隊當中包括港大物理學系的陳斌斌博士和孟子楊博士。他們揭示了魔轉角石墨烯模型中整數填充下的基態相圖，並發現了量子反常霍爾效應，和相同情形下的實驗結果一致。

轉角雙層石墨烯模型中的量子反常霍爾效應

我們的研究主要圍繞魔角石墨烯的 $\nu=3$ 整數填充，原因是人們此前在相關實驗發現，在六角氮化硼 (boron nitride) 襯底下，系統中的電子展現出了量子反常霍爾效應 (quantum anomalous Hall, QAH)，即是無需依賴強磁場而由材料本身自發性產生磁場——不加外磁場時得到量子化的霍爾電導 $\sigma_{xy} = e^2/h$ ——它是一種十分有趣的拓撲 (topological) 物態，其中體態 (bulk) 是絕緣的而邊緣態 (edge) 卻能無耗散的導通電流。QAH 態的微觀機制向來是物理學家爭論的焦點，我們通過量子多體計算發現，此效應可於強耦合極限下的轉角雙層石墨烯晶格模型中實現得到。



圖二. 魔轉角雙層石墨烯的六角晶格模型及其相圖。(a) 模型哈密頓量（系統的能量算符，是所有粒子的動能的總和加上與系統相關的粒子的勢能）由兩項組成：「集合」(cluster)電荷項 Q 和符號交替變化的輔助跳遷項 T 。(b) 基態相圖具有兩個不同的絕緣物相： $\alpha < \alpha_c$ 的條紋(stripe)相，和 $\alpha > \alpha_c \approx 0.12$ 的量子反常霍爾(QAH)相。圖片提供：陳斌斌博士



圖三. 通過穿入規範通量進行霍爾電導的計算示意圖。圖片提供：陳斌斌博士

拓撲莫特絕緣體的首例

我們的模型計算中發現的量子反常霍爾態，是由魔角雙層石墨烯系統中庫倫相互作用的獨特性質驅動的。這種純相互作用驅動的拓撲量子物態，在此之前未曾被發現過。我們這一發現不但解答了十年前物理學家提出的拓撲物態設想，其重要性甚至超過了魔角石墨烯體系的本身。此研究發現更得到牛津大學的理論凝聚態物理學家 Nick BULTINCK 博士的高度評價：「Haldane (2015 年諾貝爾物理獎得主)向我們展示了不需要磁場也可以產生拓撲非平庸的量子反常霍爾物態，而這一項研究則發現，即使沒有動能，僅僅通過相互作用也可以產生拓撲莫特絕緣體。」

誠然，我們的工作不局限於轉角石墨烯系統，還提供了全新的僅由相互作用驅動 QAH 的 Mott-Hubbard 視角，繼而解決了長期以來對於拓撲莫特絕緣體(Topological Mott insulator, TMI)的存在性問題的巨大分歧。著名的美籍華裔物理學家、已故的張首晟教授與其研究夥伴在大約十年前提出了拓撲莫特絕緣體的概念；此後，理論物理學家便紛紛探討相互作用模型中的 QAH 物態。在這些研究裏，動能項對 QAH 的出現起了十分關鍵的作用，這些 QAH 因而都無法被稱為 TMI 物態。然而，我們的模型完全摒棄了動能項，並從模型哈密頓量 (Model Hamiltonian) 中僅包含相互作用，發現了其中的 TMI 物態。簡單來說，我們的工作聯繫了凝聚態物理中的兩大領域：拓撲和強關聯。從模型構建和量子多體計算的方向推進，後續的更多工作也可以由此出發進行。

重要影響與後續工作

我們在 $\nu=3$ 填充下進行的模型計算中發現的 QAH 相為魔角石墨烯中出現的同一物相提供了一個合理的解釋。更加精細的建模和量子多體計算，將有望解釋實驗觀測到的超導電性的微觀機制，並在此類二維量子摩爾材料中調控這些新奇現象提供一個更好的理論框架。基於我們的發現，可引伸出更多問題，例如為何在其他填充下沒有拓撲莫特絕緣體？如何恰當地考慮和計算偏離整數填充的模型性質？孟子楊表示：「回答這些問題有助物理學家理解魔轉角石墨烯這一材料，並在此材料和其他二維量子摩爾材料中設計出更加有趣的物態。」孟博士補充道：「我們的專家對於二維量子材料的研究工作，將有利於此研究範疇的進程，同時也是港大科研的策略性方向。」

有關研究團隊



陳斌斌博士（右）是港大物理學系孟子楊博士研究團隊的博士後研究員。他在北京航空航天大學攻讀博士至今，集中在張量網絡（tensor network）方法的發展和對量子多體系統的有效模擬。

孟子楊博士（左）是量子多體系統蒙特卡洛模擬方面的專家，最近在量子材料研究領域取得了重大進展（參見

<https://www.scifac.hku.hk/news/news-KT-Phase-TMGO>）。他曾因利用天河超級計算機進行傑出科學研究，獲得中國國家超算中心授予的「2020 天河之星」獎項（詳見 <https://www.scifac.hku.hk/news/news-2020-Tianhe-Star-Award>）。

其他成員：

李偉博士，來自中國科學院理論物理研究所、北京航空航天大學，是量子多體系統張量網絡模擬方面的專家，曾提出多個高效的熱張量網絡重正化群方法，並將它們應用到了量子磁性材料和關聯電子材料的研究中。

康健博士（蘇州大學）及 Oskar VAFEK 博士（美國佛羅里達州立大學），提出了轉角石墨烯實空間晶格模型，在合作中主要承擔模型的理論分析與平均場計算。

本研究由香港研資局、卓越學科領域計劃二維材料研究：新興技術的基礎」項目和中國自然科學基金委員會資助。團隊同時感謝港大理學院計算研究啟動計劃和 ITS 中心 HPC2021 超級計算機，以及中國國家超算中心天河超級計算機平台提供的技術支持和計算資源。

相關論文連結：<https://www.nature.com/articles/s41467-021-25438-1>

傳媒如有查詢，請聯絡香港大學理學院外務主任杜之樺（電話：3917 4948 ;電郵：caseyto@hku.hk / 助理傳訊總監陳詩迪（電話：3917 5286 ;電郵：cindycst@hku.hk）。

相片下載及說明：<https://www.scifac.hku.hk/press>