

山西大学
SHANXI UNIVERSITY

2026 届 硕 士 学 位 论 文

# 扭转双层蜂巢光晶格中超冷原子的能带结构及其性质研究


作者姓名　　张纯瑶

指导教师　　韩　伟　教 授

学科专业　　光　学

研究方向　　超冷原子物理

培养单位　　物理电子工程学院


学习年限　　2023 年 9 月至 2026 年 6 月

二〇二六年六月

山西大学

2026 届硕士学位论文

# 扭转双层蜂巢光晶格中超冷原子的能带结构及其性质研究

**作者姓名**　　张纯瑶

**指导教师**　　韩　伟　教 授

**学科专业**　　光　学

**研究方向**　　超冷原子物理

**培养单位**　　物理电子工程学院

**学习年限**　　2023 年 9 月至 2026 年 6 月

二〇二六年六月

**Thesis for Master' s degree, Shanxi University, 2026**

# Band Structures and Properties of Ultracold Atoms in Twisted Bilayer Honeycomb Optical Lattices


| | |
|---|---|
| Student Name | Chun-yao Zhang |
| Supervisor | Prof. Wei Han |
| Major | Optics |
| Specialty | Ultracold Atom Physics |
| Department | College of Physics and Electronic Engineering |
| Research Duration | 2023.09-2026.06 |


June, 2026

# 摘　要

超冷原子扭转双层光晶格的实验实现为研究莫尔量子材料和平带物理提供了新的理想实验体系。研究表明，在扭转双层蜂巢光晶格的 s 轨道能带狄拉克点附近中有平带的形成，可以用来模拟魔角石墨烯中的相关量子现象，但是对于高轨道能带中平带的演化规律以及拓扑性质，目前依旧缺乏系统性的研究。

本文利用平面波展开法对扭转双层蜂巢光学晶格进行了理论建模和相应的能带计算，同时发展了约化平面波展开法，构造了相对简化的模型，在保证计算精度的前提下极大地节约了时间成本和算力。

研究发现，在合适的层间耦合下，平带不仅出现在 s 轨道狄拉克点附近，在高轨道的其他简并点、能带顶和能带底位置也都可以形成，并且在深晶格的情况下，会出现能带漂移现象。而不同位置的平带形成也有不同的演化规律和新奇的现象。

进一步的拓扑性质研究表明，不同位置的平带具有不同的拓扑响应。s 轨道平带拥有非零的 Wilson Loop 环绕数，表现出非平庸拓扑性质；高轨道能带底、能带顶以及抛物型简并点处形成的平带则主要表现为拓扑平庸；高轨道狄拉克点附近的平带介于上述两种情况之间，体现出一定程度的几何相位响应。

本文结果表明，扭转双层蜂巢光晶格在高轨道处拥有丰富平带以及特殊拓扑几何性质，相关结果进一步拓展了人们对超冷原子莫尔体系中高轨道物理的认识，对于理解平带形成机制、能带拓扑性质以及莫尔体系中的量子行为具有重要意义。

**关键词：**超冷原子气体；光晶格；平带；扭转双层光晶格；威尔逊环

# ABSTRACT

The experimental realization of twisted-bilayer optical lattices with ultracold atoms has provided a new ideal platform for studying moiré quantum materials and flat-band physics. Previous studies have shown that flat bands can emerge near the Dirac points of the sss-orbital bands in twisted-bilayer honeycomb optical lattices, which can be used to simulate correlated quantum phenomena in magic-angle graphene. However, the evolution behavior and topological properties of flat bands in higher-orbital bands still lack systematic investigation.

In this work, the plane-wave expansion method is employed to theoretically model twisted-bilayer honeycomb optical lattices and calculate their band structures. Meanwhile, a reduced plane-wave expansion method is further developed to construct a relatively simplified model, which greatly reduces the computational cost and time consumption while maintaining high numerical accuracy.

The results show that, under suitable interlayer coupling strengths, flat bands can emerge not only near the Dirac points of the sss-orbital bands, but also around other degeneracy points, band tops, and band bottoms in higher-orbital bands. In addition, band-drifting phenomena are observed in the deep-lattice regime. Different types of flat bands also exhibit distinct evolution behaviors and novel physical features.

Further investigation of the topological properties demonstrates that flat bands formed at different positions possess different topological responses. The flat bands in the sss-orbital bands exhibit nonzero Wilson-loop winding numbers, indicating nontrivial topological properties. In contrast, the flat bands formed near the band tops, band bottoms, and parabolic degeneracy points of higher-orbital bands are mainly topologically trivial. The flat bands near the higher-orbital Dirac points lie between these two cases and exhibit a certain degree of geometric-phase response.

These results demonstrate that twisted-bilayer honeycomb optical lattices host abundant flat bands and unique topological geometric properties in higher-orbital bands. The present work further extends the understanding of higher-orbital physics in ultracold-atom moiré systems and provides valuable insights into the formation mechanisms of flat bands, the evolution of band topology, and the quantum behaviors

in moiré systems. In particular, the rich flat-band phenomena and diverse topological responses found in higher-orbital bands reveal that twisted optical lattices possess more complex physical characteristics beyond the conventional low-orbital regime. Owing to the high controllability and tunability of ultracold-atom systems, the results presented in this work may also provide theoretical support for future experimental studies on strongly correlated physics, topological quantum states, and quantum simulation based on twisted optical lattices.

**Key words:** ultracold atomic gas; optical lattice; flat band; twisted bilayer optical lattices; Wilson Loop

# 目　录


摘　要 ..... I

ABSTRACT ..... II

1 绪论 ..... 1

1.1 魔角石墨烯与扭转电子学 ..... 1

1.2 超冷原子扭转光晶格 ..... 3

1.3 本课题研究的目的和意义 ..... 6

2 理论基础和数值计算方法 ..... 8

2.1 光晶格势产生的原理 ..... 8

2.1.1 六角光学晶格势的构造 ..... 10

2.1.2 蜂巢光学晶格势的构造 ..... 12

2.2 单层蜂巢光晶格哈密顿量的构造与求解 ..... 13

2.2.1 有效哈密顿量 ..... 13

2.2.2 平面波展开法 ..... 14

2.3 超冷原子体系中的扭转光晶格实验实现方案 ..... 17

2.4 扭转双层蜂巢光晶格哈密顿量的构造与求解 ..... 19

2.4.1 有效哈密顿量 ..... 19

2.4.2 扭转双层蜂巢光晶格能带的平面波展开法 ..... 19

2.4.3 约化平面波展开法 ..... 23

2.4.4 基于 COMSOL 的有限元计算方法 ..... 25

2.5 Wlison Loop 与拓扑不变量的计算 ..... 26

2.5.1 Wilson Loop 的理论定义 ..... 26

2.5.2 Wilson Loop 相位缠绕与拓扑不变量 ..... 28

2.6 本章小结 ..... 29

3 扭转双层蜂巢光晶格中的高轨道平带 ..... 30

3.1 高轨道平带的形成与层间耦合调控 ..... 30

3.1.1 莫尔超晶格与能带折叠 ..... 30

3.1.2 层间耦合对平带形成的影响 ..... 31

3.1.3 高轨道能带中的平带形成规律与演化特征 ..... 33
3.2 高轨道平带的拓扑性质 ..... 38
3.3 本章小结 ..... 40
4 总结与展望 ..... 41
参考文献 ..... 43
攻读学位期间取得的研究成果 ..... 51
致　谢 ..... 52
个人简况及联系方式 ..... 54
承　诺　书 ..... 55
学位论文使用授权声明 ..... 56

# Contents

**Chinese Abstract** ..... I

**Abstract** ..... II

**Chapter 1 Introduction** ..... 1

1.1 Magic-Angle Graphene and Twistronics ..... 1

1.2 Ultracold Atoms in Twisted Optical Lattices ..... 3

1.3 Purpose and Significance of This Work ..... 6

**Chapter 2 Theoretical Framework and Numerical Methods** ..... 8

2.1 Principles of Optical Lattice Potentials ..... 8

2.1.1 Construction of Hexagonal Optical Lattice Potentials ..... 10

2.1.2 Construction of Honeycomb Optical Lattice Potentials ..... 12

2.2 Hamiltonian Construction and Solution for a Single-Layer Honeycomb Optical Lattice ..... 13

2.2.1 Effective Hamiltonian ..... 13

2.2.2 Plane-Wave Expansion Method ..... 14

2.3 Experimental Realization of Twisted Optical Lattices in Ultracold Atomic Systems ..... 17

2.4 Hamiltonian Construction and Solution for Twisted Bilayer Honeycomb Optical Lattices ..... 19

2.4.1 Effective Hamiltonian ..... 19

2.4.2 Plane-Wave Expansion for Band Structures of Twisted Bilayer Honeycomb Optical Lattices ..... 19

2.4.3 Reduced Plane-Wave Expansion Method ..... 23

2.4.4 Finite-Element Method Based on COMSOL ..... 25

2.5 Wilson Loop and Calculation of Topological Invariants ..... 26

2.5.1 Theoretical Definition of Wilson Loop ..... 26

2.5.2 Wilson Loop Phase Winding and Topological Invariants ..... 28

2.6 Chapter Summary ..... 29

**Chapter 3 High-Orbital Flat Bands in Twisted Bilayer Honeycomb Optical Lattices** ..... 30
3.1 Formation of High-Orbital Flat Bands and Interlayer Coupling Control ..... 30
3.1.1 Moiré Superlattice and Band Folding ..... 30
3.1.2 Effects of Interlayer Coupling on Flat Band Formation ..... 31
3.1.3 Formation Mechanisms and Evolution of Flat Bands in Higher Orbitals ... 33
3.2 Topological Properties of High-Orbital Flat Bands ..... 38
3.3 Chapter Summary ..... 40
**Chapter 4 Conclusion and Prospect** ..... 41
**Reference** ..... 43
**Research achievements** ..... 51
**Acknowledgment** ..... 52
**Personal profiles** ..... 54
**Letter of commitment** ..... 55
**Authorization statement** ..... 56

# 1 绪论

在超冷原子体系中[1]，研究者通过激光冷却与蒸发冷却技术可将原子气体的温度降低至绝对零度，从而在这一极低温区间中显著抑制原子的热运动，得以充分体现其量子统计性质与相干行为，进一步形成可观测的宏观量子态，凭借这样的突出特性，超冷原子体系已成为研究量子多体物理的重要实验平台。超冷原子具有高度可调控性，我们可以在实验中对其相互作用、外场势形以及维度结构精确控制，这是在传统的凝聚态体系中难以实现的，因而我们可以在超冷原子体系中很好地模拟复杂凝聚态问题，例如能带结构、拓扑性质[2]及关联效应[3-7]等，近年来，基于光学晶格[8]与人工规范场的超冷原子实验不仅成为了一种新的研究途径[9]，同时推动了量子模拟与量子调控的发展，超冷原子物理也成为连接原子物理、量子光学与凝聚态物理的重要交叉领域。

## 1.1 魔角石墨烯与扭转电子学

基于上述背景，研究者们开始关注在高度可控的人工量子体系中，是否可以通过量子模拟重现凝聚态体系中出现的丰富能带与关联效应，最近，以扭转双层石墨烯 (twisted bilayer graphene, TBG) 作为代表的扭转二维量子材料，为这一问题提供了新的视角。当两层二维材料发生微小扭转时，体系中会形成长周期的莫尔超晶格，在特定扭转角（即“魔角”）附近，体系的能带变得非常平坦，形成近似平带，表现出新奇的强关联量子效应，2011 年，Bistritzer 与 MacDonald 在其一项具有开创性的工作中[10]系统分析了扭转双层石墨烯体系，并且指出莫尔周期性将会导致能带重构并形成莫尔布洛赫能带，通过研究他们进一步发现，双层之间扭转角变小，层间耦合逐渐增强，导致狄拉克费米速度重整化，并在“魔角”处消失，同时与之对应的能带显著展平，态密度也增强。这样的理论预测也在实验中得到了证明，2018 年，麻省理工学院 Jarillo-Herrero 课题组的曹原和他的同事首次在实验上实现了扭转双层石墨烯体系[11]，并在体系处于半填充的状态下观测到关联绝缘态，表现出类似 Mott 绝缘体的特征；在此基础上，他们进一步发现在体系轻微偏离该关联绝缘态时[12]，能够观察到可调控的超导现象，其相图与铜氧化物超导体有类似的表现。上述扭转双层石墨烯中平带物理与强关联效应在理论和实验上的重大进展与开创性贡献使得

Jarillo-Herrero、MacDonald 和 Bistritzer 三人于 2020 年共同获得沃尔夫物理学奖，也被认为是该发展领域的重要里程碑。

莫尔超晶格材料在量子模拟[13,14]和量子精密测量等领域都表现出潜在的应用价值。例如：扭转带来的莫尔周期结构会导致能带折叠效应，使系统对外部参数（磁场、相互作用等）的敏感性急剧增强，因而扭转体系可以天然地应用于微弱磁场[15]、原子散射长度等的高精度测量。随着莫尔量子物理研究的迅速发展和研究的不断深入，诞生了一个全新的研究领域：扭转电子学[10-12]。

随着莫尔体系中平带与强关联效应的出现，拓扑量子态相关研究也逐渐受到广泛关注。研究表明，莫尔超晶格体系中不仅可能产生量子霍尔效应、量子自旋霍尔效应等非平庸拓扑态[16-21]，还能够支持具有单向边缘输运特性的拓扑边缘模式[22]，这进一步丰富了扭转体系中的新奇量子物理现象。随着工作的进一步展开，扭转电子学所关注的对象不再局限于石墨烯，而逐渐扩大至更多种类的二维材料[23] 。如在过渡金属硫族化物、黑磷等材料中[25,26] ，加入层间的旋转角度也可以得到莫尔超晶格并且有丰富电子行为和光谱特性；除此之外，还有一些有面内各向异性的二维材料，由于它们晶格对称性较低，在不同晶向上存在不同的物理性质，在其形成扭转结构后，整个系统可能有更复杂的能带重排以及新奇的量子效应发生，这也大大拓宽扭转电子学的研究领域。

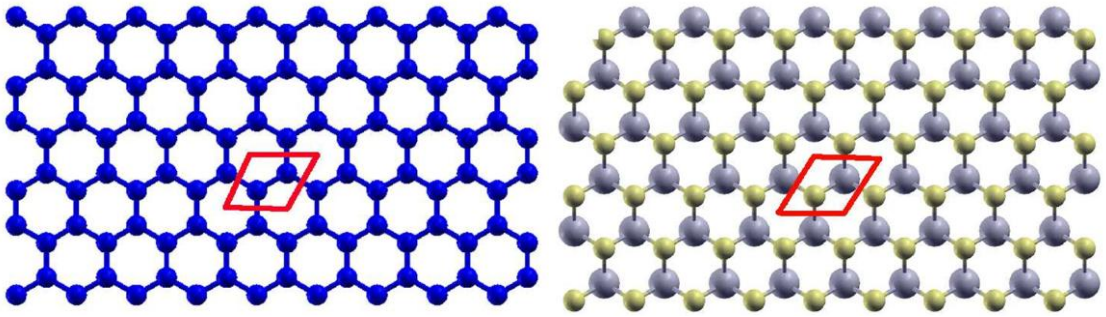


图 1-1 石墨烯与过渡金属硫化物晶格结构示意图

Fig. 1-1 Schematic of lattice structures of graphene and transition metal dichalcogenides

图片来源：文献[25]。

然而，石墨烯等常见的扭转电子学材料在研究莫尔量子物理方面存在一定的局限性[27-29]。一方面，决定石墨烯等材料性质的是电子，属于费米子，难以研究玻色子在莫尔超晶格中的性质。另外，石墨烯等扭转电子学材料一般仅限于六角晶格结构。这就激发人们试图在新的量子系统中实现莫尔超晶格[13]。

## 1.2 超冷原子扭转光晶格

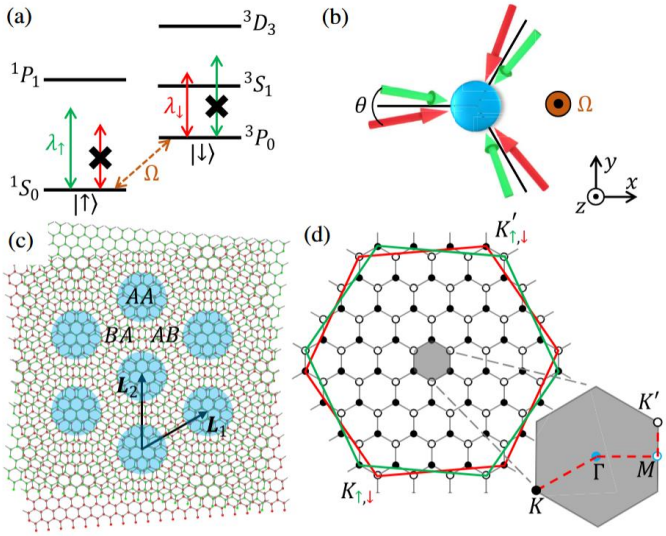



图 1-2 自旋扭转光晶格的实现方案示意图

Fig. 1-2 Scheme for spin-twisted optical lattices

注：(a)(b) 分别为自旋依赖光晶格的能级结构与激光配置；(c)(d) 为对应的莫尔结构及布里渊区。当 $\theta$=9.43° (m=3,n=4) 时，AA 区域形成三角晶格，AB/BA 区域位于其中心。

图片来源：文献[33]。

基于以上目的，近年来有研究者开始尝试将扭转结构的概念引入到光学体系[30-31]以及超冷原子体系[33-39]中。上海交通大学叶芳伟等在光折变晶体中叠加了两组具有相对扭转角度的光学晶格，成功产生了光子莫尔超晶格，为相关现象的直观观测提供了平台。

相较于石墨烯系统，超冷原子系统具有天然优势，最首要的一点是在石墨烯中决定其性质的电子是带电粒子，是自旋为半整数的费米子，而超冷原子是电中性的，可以是费米子也可以是玻色子，这一点极大地拓展了莫尔量子物理的研究范围。2019 年，González-Tudela 和 Cirac 等国外研究者提出，可以利用超冷原子在自旋依赖光学晶格中的运动来模拟扭转双层体系，通过调控不同内部态对应晶格之间的相对扭转与耦合，实现对莫尔物理和能带结构的研究。2021 年，张传伟等人在此基础上类比扭转双层石墨烯体系中的莫尔超晶格[39]，在超冷原子体系扭转同一二维光学晶格中两种自旋（或赝自旋）原子的光学势，从而构造“自旋扭转光学晶格”，值得指出的是，他们并没有真实构造两个物理层，而是借助原子的内态自由度，使不同的自旋态分别对应两个相互扭转的光晶格，来实现一种等效的双层结构，进一步可以在体系

中引入莫尔周期结构。并且，他们在方案中提出，通过外加微波或 Raman 耦合，可以实现不同自旋态之间的跃迁，这一过程等效于双层体系中的层间耦合。

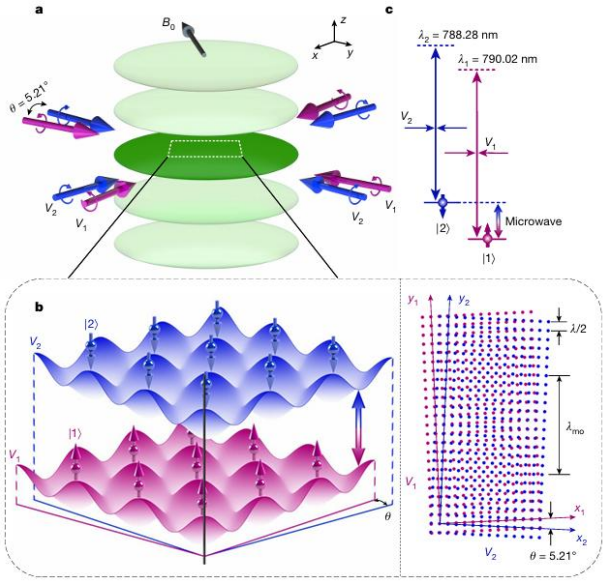



图 1-3 自旋依赖性光晶格中原子的扭转双层系统

Fig. 1-3 Twisted bilayer system of atoms in a spin-dependent optical lattice

图片来源：文献[36]。

随后，在实验上也取得了突破性进展，2023 年，山西大学张靖课题组克服了基于超冷原子实现扭转双层莫尔超晶格面临一系列技术挑战，通过原子自旋依赖光晶格技术[40-45]，将超冷 $^{87}$Rb 原子制备在两个相互扭转的方形光晶格中作为扭转双层晶格系统的量子模拟器[46-48]，该体系中的原子始终驻留在空间中的单层平面，层间耦合通过微波耦合两个原子自旋态模拟实现[49]，这种方法使得扭转角、耦合强度等参数均可以在实验中连续调节，避免了材料体系中的结构限制。同时，他们在该扭转双层实验系统中观察到莫尔超流态和复杂的超流—莫特绝缘相变行为。

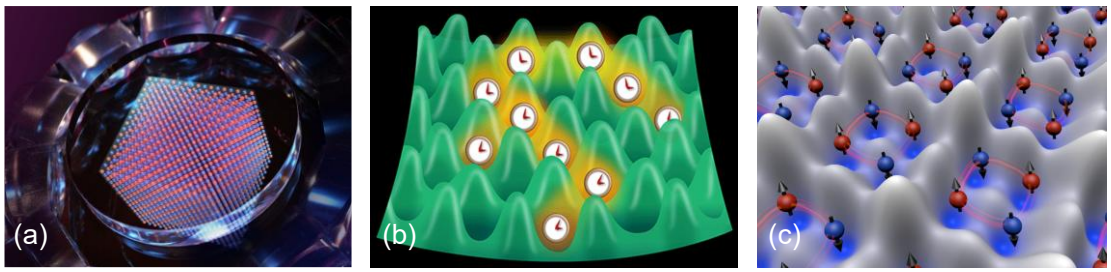



图 1-4 超冷原子光晶格在量子模拟、量子精密测量和量子计算等方面的重要应用

Fig. 1-4 Important applications of ultracold-atom optical lattices in quantum simulation, quantum precision measurement, and quantum computing

图片来源：摘自 Nature 官网。

超冷原子扭转双层光晶格[50-54]的实验实现了将扭转电子学研究从电子推广到中性原子水平，其在量子模拟、量子精密测量和量子计算[55-56]等方面具有重要的应用，例如，利用超冷原子光晶格可以实现 150 亿年误差不到 1 秒的光晶格原子钟[57,58]。用超冷原子体系研究莫尔量子物理还存在一条显著优势，基于超冷原子体系更好的可操控性，通过调整激光排列方式、晶格深度或者原子自身的自旋状态等方式可以得到不同类型的人工晶格，如蜂巢光晶格、Kagome 光晶格、六角光晶格以及 Lieb 光晶格[35-40]等，这就突破了传统扭转电子学所受晶格结构的限制。除此之外，研究者们可以利用激光、磁场等手段对系统进行多自由度联合调控。例如可以通过拉曼耦合技术实现人造规范场，利用光晶格技术调控原子所感受到的外势，利用 Feshbach 共振技术调控原子间的相互作用。通常在真实的空间中，三维材料的扭转是难以想象的，而在 2024 年，王策、高超等人在理论上预言了在超冷原子体系中可以实现这样一种三维莫尔晶格结构[59]，他们提出把超冷原子的自旋看做一个虚拟空间维度，再利用自旋依赖光晶格技术有望实现三维扭转的莫尔超晶格。

而在量子模拟与凝聚态物理的交叉领域，扭转双层石墨烯中的平坦电子能带本就因其独特的拓扑特性、极低的电子速度以及增强的态密度而备受研究者的关注。2018 年，哈佛大学 Po、Vishwanath 与 Senthil 等人研究指出[60]，魔角转角双层石墨烯中的莫尔平带存在 Wannier obstruction 等非平庸拓扑性质，表明该体系中的平带无法通过普通局域 Wannier 轨道进行描述。2020 年，上海科技大学刘建鹏与香港科技大学戴希等人综述了转角石墨烯中的电子结构、拓扑性质以及轨道磁性，他们发现转角多层石墨烯体系中普遍存在具有非平庸拓扑性质的平带，这些拓扑平带通常具有非零的谷陈数, 并且在一定近似下可以由一个普适的规律描述[3]。因而在超冷原子体系中实现平带的相关研究是十分有价值的。2025 年，山西大学隋文杰等人针对超冷原子体系双层扭转蜂巢光晶格中平带的形成及其拓扑性质展开了研究[61]，结果表明，在弱层间耦合区域，临界耦合强度下可形成拓扑非平庸的平带结构；而在强层间耦合区域则会出现拓扑平庸的平带结构。随着层间耦合强度的增强，拓扑非平庸平带逐渐失去平坦特性，而拓扑平庸平带会逐渐变得更加平坦。当扭曲角较大时，通过调节层间耦合强度还可形成狄拉克点附近的拓扑平带结构，这突破了传统扭曲双层石墨烯中扭曲角的物理限制。这项研究不仅深化了对莫尔带物理原理的认识，更为光学、声学及凝聚态物理等领域的莫尔带应用提供了普适性指导方案。近期，Floquet 工程与扭转光晶格的结合也受到关注，2026 年，华东师范大学研究人员利用 Floquet 周期驱动研究了扭转双层光晶格中的莫尔准晶形成机制[61]，发现通过调控驱动频率

与驱动强度，可以在超冷玻色气体中形成具有高旋转对称性的莫尔准晶结构，并实现类似扭转双层石墨烯中的十二重对称莫尔准晶图样。

综上所述，基于光晶格的超冷原子体系，有望在一定程度上突破传统扭转电子学在晶格结构、量子统计性质以及参数调控方面的限制[36,59-63]，为更加全面地研究扭转量子体系中的新奇物理现象提供新的途径，同时也为探索强关联量子态、拓扑量子态以及人工量子材料设计提供一个较为重要的平台[64]。

## 1.3 本课题研究的目的和意义

在先前提到的理论工作中，研究者在适当的转角以及层间耦合条件下，在 s 轨道能带的狄拉克点附近可以出现较为平坦的能带，并且这些平带通常具有非平庸的拓扑性质。这说明超冷原子光晶格体系可以在一定程度上模拟魔角石墨烯中的平带物理，能够为研究强关联效应以及拓扑量子态提供一个可调控性较强的量子模拟平台。

值得注意的是，在光晶格体系中，通过调节每个晶格格点上费米原子的占据情况，还可以将原子填充到更高轨道的能带中。因此，一个比较自然的问题就出现了：在这些高轨道中，是否同样可以形成平带？如果可以形成，那么其形成机制是否与 s 轨道情况相似，还是存在不同规律？另外，在拓扑性质等方面，这些高轨道平带与 s 轨道平带之间又会表现出怎样的差别？

为了解决这些问题，本文对超冷原子在扭转蜂巢光晶格中所具有的高轨道能带性质进行分析。研究发现，除了在 s 轨道狄拉克点与能带底部存在平带以外[29,42]，在高轨道上也可能出现平带，而且这些平带可以出现在能带简并点或者能带顶、能带底等不同地方。此外，不同位置上平带对于层间耦合强度的要求是有很大区别的。比如那些位于能带简并点附近的平带一般需要一定的层间耦合强度才能形成，在这个范围内的层间耦合强度下能带最平坦，但是当层间耦合强度更大时却不再平坦；而另一些位于能带顶或者能带底位置上的平带则是随着层间耦合强度增强而更加平缓，在形成平带后也会一直保持平坦。进一步地，我们注意到，这些高轨道平带有别于 s 轨道狄拉克点附近的平带。对于 s 轨道而言，其平带一般对应非零 Wilson Loop 的缠绕数，即拓扑非平凡态；而对高轨道平带来说，则是 Wilson Loop 一般为零或是仅有微小的变化，意味着它们的几何相位相关的效应受到一定的限制。另外，在计算中也发现由于层间耦合作用的变化导致平带漂移的现象。尤其是当晶格较深时，平带随着耦合作用的不同会从原来的连续能带区转移到能隙内，说明高轨道平带更易于

被控制。

本文工作表明，在超冷原子扭转光晶格系统内，存在更多种类平带并且参数可调范围较大。而从高轨道处展开研究能够丰富超冷原子体系的能带结构，相较于 s 轨道高轨道也具有更复杂的空间结构和简并特性，因而体系在这样的相互作用下也更容易产生新奇量子态，这为后续开展有关平带下强相关现象和拓扑量子相变等研究奠定良好基础与启示。接下来，正文部分第二章将主要呈现理论模型的构建与数值计算，第三章为扭转双层蜂巢光晶格中平带的形成与拓扑分析几个方面的主要内容，第四章为对主要工作内容的梳理以及在此基础上可以继续开拓的研究方向。

需要说明的是，本文中所讨论的 s 带、p 带以及更高轨道能带，并非来源于真实原子轨道，而是来源于光晶格局域 Wannier 态与原子轨道之间的类比。在蜂巢光晶格的每个格点附近，周期势场可近似看作局域谐振子势，其本征态具有类似 s、p、d 等不同角动量对称性。其中，s 轨道对应最低能带，p 轨道对应第一激发能带，而更高轨道则对应更高能带结构，因此通常采用类似原子轨道的命名方式对不同能带进行区分。

# 2 理论基础和数值计算方法

## 2.1 光晶格势产生的原理

我们通常认为[39]光学晶格是由多束激光之间发生相互干涉形成的，进一步可以构成一种具有周期性的势场结构，也就能够看作是在空间上呈周期调制的光学偶极势，那么在超冷原子体系之中，它可以被用来构造人工晶格。以往的传统磁阱一般只能对部分原子自旋态（例如弱场寻优态）进行有效束缚，而光学偶极阱则可以在一定程度上克服这一限制，从而实现对多种不同原子内部态的俘获，这一点在实验中是比较有优势的。

考虑到光与原子之间的相互作用，当原子处在远失谐的光场条件下时，将其主要可以理解为 AC Stark 位移，成因是原子在外电场作用下会产生诱导偶极矩，并与外加电场之间发生相互作用。正是由于存在这样的相互作用，原子才会感受到一个有效的偶极势，并且该势的大小通常与光场的强度成正比关系，即可以写为（在一定近似下）与光强成比例的形式：

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2}\alpha(\omega_L)|E(\mathbf{r})|^2 \tag{2.1}$$

其中$|E(\mathbf{r})|$为光场的电场振幅，$|E(\mathbf{r})|^2$表示光场强度，$\alpha(\omega_L)$为原子的极化率，$\omega_L$表示激光角频率，通常将激光角频率与原子跃迁的共振频率之差称为失谐。一般情况下，通过将激光频率调离原子共振频率，以抑制自发辐射，使得该势近似为保守势。由于原子极化率方向与失谐方向有关，根据失谐方向的不同，该势可以表现为吸引型或排斥型。

最简单的情形是一维光学晶格，它通常由两束反向传播的激光形成驻波光场，其光强在空间中呈现周期性调制，从而形成一维周期势场，其典型形式为：

$$V(x) = V_0 \sin^2(k_L x) \tag{2.2}$$

该形式来源于驻波光场的干涉强度分布，其中$k_L = 2\pi/\lambda_L$，$V_0$为晶格深度，通常以反冲能$E_r = \frac{\hbar^2 k_L^2}{2m}$为单位。

如果想构造更高维度的光学晶格，可以通过在不同方向上叠加多组激光干涉结构。例如，在实验上可以操控两组相互正交的驻波，使其在空间中形成二维周期排列的管状势阱阵列，进一步可以实现准一维体系，这其中的原子将在两个方向上都受到强束缚，仅能沿剩余的另一个方向运动，如图 2-1(a)。而操控三组相互正交的驻波则

可以进一步构造出三维光学晶格，其结构类似于简单立方晶体，每一个晶格势阱可近似视为局域的谐振子势，如图 2-1(b)。

而在二维平面内操控多束具有特定传播方向的激光，可以产生具有二维周期结构的光学晶格势，如方形晶格、六角晶格以及蜂巢晶格等，同时改变这些激光束的角度、强度和相位，就可以改变晶格形状以及势阱宽度，进而达到精确地调整系统参数的目的。

其中，六角光学晶格可以由三束具有相同频率和强度的激光在平面内相互干涉形成。当三束激光的偏振方向均垂直于晶格平面时，干涉光场产生具有三角对称性的周期势场。若改变激光的偏振结构，使其偏振方向位于晶格平面内，则不同光束之间的干涉项会发生改变，从而使光学势的空间分布发生变化，并形成具有蜂巢结构的蜂巢光学晶格。因此，在许多实验方案中，六角晶格和蜂巢晶格之间的主要区别来源于激光偏振方向的不同。由于蜂巢晶格具有与石墨烯相同的几何对称性，其能带结构中会出现狄拉克点等重要特征，因此在超冷原子体系中被广泛用于模拟狄拉克物理和拓扑能带结构。

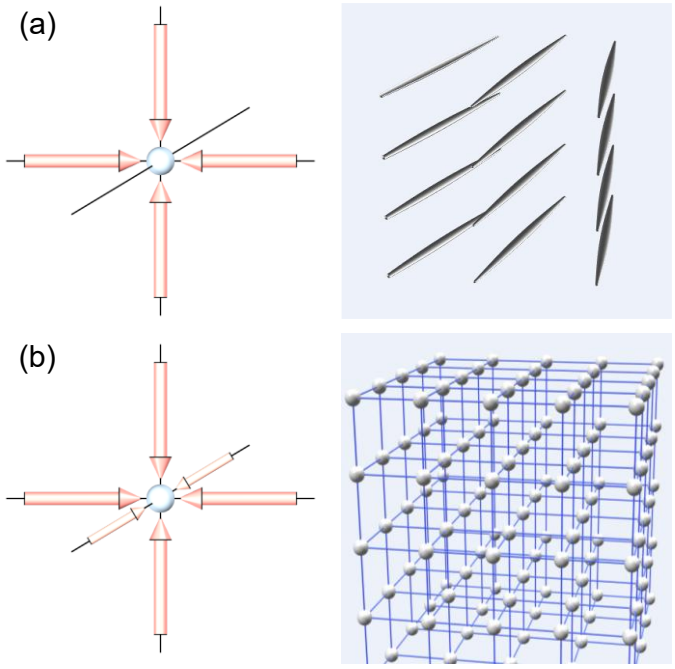



图 2-1 二维与三维光学晶格势的形成与结构示意图

Fig. 2-1 Formation and structure of two- and three-dimensional optical lattice potentials

注：光学晶格势可以通过叠加两束或三束相互正交的驻波光场形成。(a)在二维光学晶格中，原子被限制在一组强束缚的一维势阱“管道”阵列中。(b)在三维情况下，光学晶格可近似为一个三维简单立方排列，在每个晶格位点处对应一个强束缚的谐振子势阱。

当多束相干激光在空间中叠加时，不同光束之间会发生相互干涉而使光强分布发生周期性变化，在实空间中形成具有周期性的光学晶格势。因此，该势函数与光强分布有同样的空间周期性，在理论上可以用晶格平移对称性来表示，即：

$$V(\mathbf{r}+\mathbf{R})=V(\mathbf{r}) \tag{2.3}$$

其中$\mathbf{R}$为晶格平移矢量。由于势函数在空间中具有周期性，原子在该势场中的单粒子哈密顿量：

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(\mathbf{r}) \tag{2.4}$$

同样具有晶格平移对称性。因此，根据 Bloch 定理，体系的单粒子本征态可以写为$\psi_{n\mathbf{q}}(\mathbf{r})=e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{q}}(\mathbf{r})$, 其中$u_{n\mathbf{q}}(\mathbf{r})$具有与晶格势相同的周期性，$n$表示能带指标，$\mathbf{q}$为准动量。这样的结果告诉我们，在周期势场中粒子的能谱将形成能带结构。

### 2.1.1 六角光学晶格势的构造

考虑三束具有相同频率和强度的激光在二维平面内相互干涉。设三束激光的传播方向位于同一平面内，并且其波矢之间两两夹角为$2\pi/3$。这种对称的干涉结构在偏振方向不同的情况下能够形成不同类型的二维光学晶格，例如六角光学晶格或蜂巢光学晶格。在适当选取坐标系后，可以将三束激光的波矢表示为：

$$k_1=k(0,1),k_2=k\left(\frac{\sqrt{3}}{2},-\frac{1}{2}\right),k_3=k\left(-\frac{\sqrt{3}}{2},-\frac{1}{2}\right) \tag{2.5}$$

其中$k$为激光波矢的模长。设每束激光的电场振幅为$E_0$，则三束激光对应的平面波电场可以如下表示：

$$\begin{aligned}E_1&=E_0e^{iky}\\E_2&=E_0e^{ik\frac{\sqrt{3}}{2}x-ik\frac{1}{2}y}\\E_3&=E_0e^{-ik\frac{\sqrt{3}}{2}x-ik\frac{1}{2}y}\end{aligned} \tag{2.6}$$

其中$E_i(\mathbf{r})$表示第 i 束激光在空间位置 $\mathbf{r}$ 处的电场分布。三束激光在空间中叠加形成总电场：

$$E(\mathbf{r})=E_1(\mathbf{r})+E_2(\mathbf{r})+E_3(\mathbf{r}) \tag{2.7}$$

而原子在远失谐光场中的有效势能来源于 AC Stark 位移，其大小与光场强度成正比。因此，需要首先计算干涉光场的空间光强分布。由式 (2.1) 可知光强由电场的模平方给出，即：

$$|E(\mathbf{r})|^2=E^*(\mathbf{r})E(\mathbf{r}) \tag{2.8}$$

由此可见，三束激光干涉形成的光强分布直接决定了光学晶格势的空间结构。下面对光强分布$|E(\mathbf{r})|^2$进行展开计算。在远失谐条件下，原子的动态极化率变化较为缓慢，可近似视为常数，在后续推导中我们只需计算光强分布$|E(\mathbf{r})|^2$，并将常数项吸收到势深参数$V_0$中。

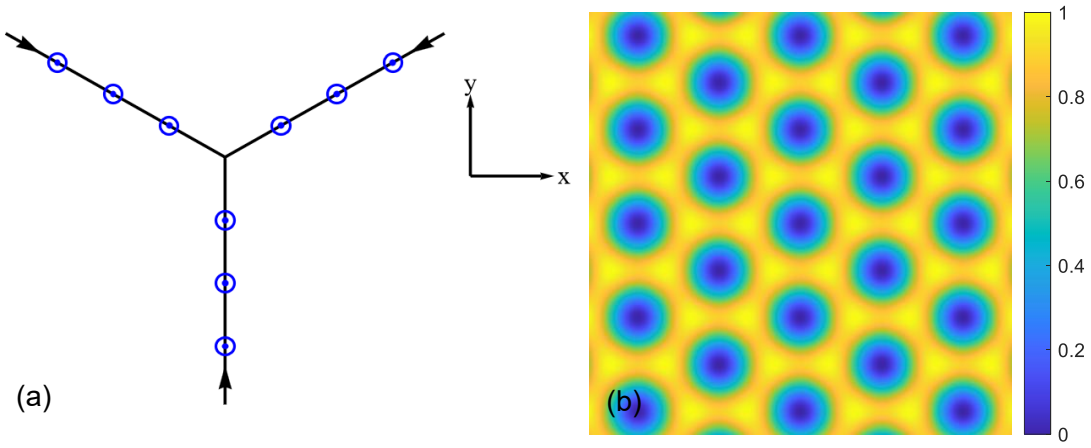



图 2-2 三束激光干涉形成的六角晶格势能空间分布

Fig. 2-2 Spatial distribution of the hexagonal optical lattice potential formed by three interfering laser beams

注：(a)三束激光在平面内以 120° 夹角入射并相互干涉，蓝色圆点表示各光束的偏振方向，均沿 z 方向。(b)蓝色表示势能低点，即囚禁原子处；黄色表示势垒。

关于六角光学晶格的构造，三束激光的偏振方向均取为垂直于晶格平面，偏振方向垂直于晶格平面的情形，即沿 z 方向，如图 2-2 (a) 所示，此时总电场可表示为：

$$E(r)=\left(E_0e^{iky}+E_0e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}kx-i\frac{1}{2}ky}+E_0e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}kx-i\frac{1}{2}ky}\right)\mathbf{e}_z \tag{2.9}$$

那么光场强度由电场模平方给出，并且利用欧拉公式$e^{i\theta}=\cos\theta+i\sin\theta$对指数项进行展开，可以得到电场强度表达式。经过整理后，将干涉项化为余弦形式：

$$\begin{aligned}|E(\mathbf{r})|^2&=E^*(\mathbf{r})E(\mathbf{r})\\&=E_0^2+E_0^2e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}kx-i\frac{3}{2}ky}+E_0^2e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}kx-i\frac{3}{2}ky}+E_0^2e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}kx+i\frac{3}{2}ky}+E_0^2+\\&\quad E_0^2e^{-i\frac{2\sqrt{3}}{2}kx}+E_0^2e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}kx+i\frac{3}{2}ky}+E_0^2e^{i\frac{2\sqrt{3}}{2}kx}+E_0^2\\&=3E_0^2+2E_0^2\left[\cos\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}kx+\frac{3}{2}ky\right)+\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}kx+\frac{3}{2}ky\right)+\cos\left(\sqrt{3}kx\right)\right]\end{aligned} \tag{2.10}$$

忽略与空间坐标无关的常数项，并将系数吸收到势深参数中，即可得到六角光学晶格势：

$$V(x,y) = -V_0\left[\cos k\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}x + \frac{3}{2}y\right) + \cos k\left(\frac{\sqrt{3}}{2}x + \frac{3}{2}y\right) + \cos k\left(\sqrt{3}x\right)\right] \tag{2.11}$$

其空间分布如图 2-2 (b)。

### 2.1.2 蜂巢光学晶格势的构造

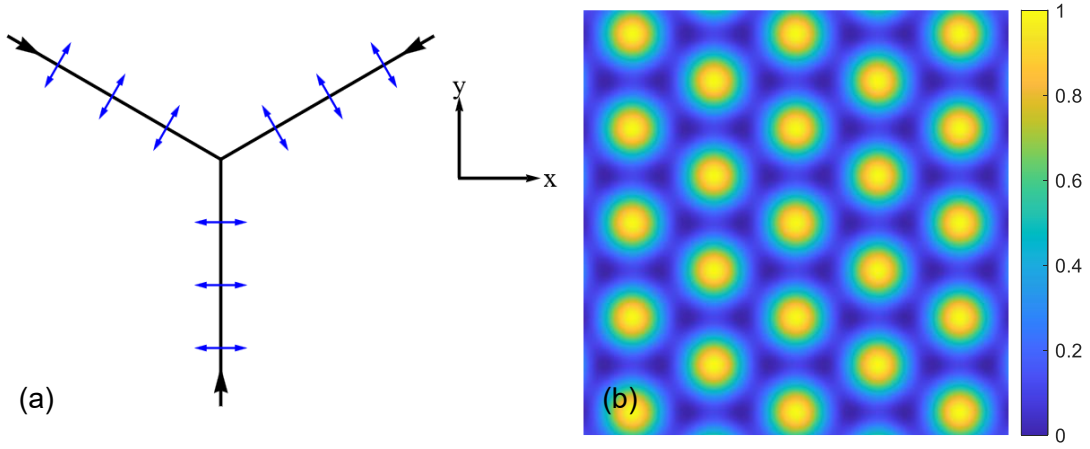



图 2-3 三束激光干涉形成的蜂巢晶格势能空间分布

Fig. 2-3 Spatial distribution of a hexagonal optical lattice potential formed by three interfering laser beams

注：(a)三束激光在平面内以 120° 夹角入射并相互干涉，蓝色箭头表示各光束的偏振方向，平行于纸面且垂直于激光传播方向。(b)蓝色表示势能低点，即囚禁原子处；黄色表示势垒。

关于蜂巢光学晶格的构造，三束激光的传播方向不发生变化，但偏振方向取为平行于晶格平面，并满足与各自传播方向垂直，如图 2-3 (a)。因而在适当选取坐标系后，可取：

$$\widehat{n_1} = \widehat{e_x};\ \widehat{n_2} = -\frac{1}{2}\widehat{e_x} - \frac{\sqrt{3}}{2}\widehat{e_y};\ \widehat{n_3} = -\frac{1}{2}\widehat{e_x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\widehat{e_y} \tag{2.12}$$

在此情况下，总电场需写成包含偏振方向的矢量叠加形式，即：

$$E = E_0 e^{iky}\cdot\widehat{n_1} + E_0 e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}kx - i\frac{1}{2}ky}\cdot\widehat{n_2} + E_0 e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}kx - i\frac{1}{2}ky}\cdot\widehat{n_3} \tag{2.13}$$

同样利用欧拉公式给出电场强度：

$$|E(\mathbf{r})|^2 = E^*(\mathbf{r})E(\mathbf{r})$$

$$= 3E_0^2 - \frac{1}{2}E_0^2 e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}kx - i\frac{3}{2}ky} - \frac{1}{2}E_0^2 e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}kx - i\frac{3}{2}ky} - \frac{1}{2}E_0^2 e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}kx + i\frac{3}{2}ky} -$$

$$\frac{1}{2}E_0^2 e^{-i\frac{2\sqrt{3}}{2}kx} - \frac{1}{2}E_0^2 e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}kx + i\frac{3}{2}ky} - \frac{1}{2}E_0^2 e^{i\frac{2\sqrt{3}}{2}kx}$$

$$= 3E_0^2 - E_0^2\left[\cos\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}kx + \frac{3}{2}ky\right) + \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}kx + \frac{3}{2}ky\right) + \cos\left(\sqrt{3}kx\right)\right] \tag{2.14}$$

同理可得蜂巢光学晶格势：

$$V(x,y) = V_0\left[\cos\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}kx + \frac{3}{2}ky\right) + \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}kx + \frac{3}{2}ky\right) + \cos\left(\sqrt{3}kx\right)\right] \tag{2.15}$$

其空间分布如图 2-3 (b)。

为便于后文进一步研究蜂巢光学晶格的结构及其能带性质，将该势函数改写为倒格矢的统一形式：

$$V(\mathbf{r}) = V_0\sum_{i=1}^{3}\cos(\mathbf{G}_i\cdot\mathbf{r}) \tag{2.16}$$

其中$\mathbf{G}_i$为三条模长相同、夹角为 120° 的倒格矢，$V_0$表示晶格深度。在本文中，我们选取倒格矢为：

$$\mathbf{G}_1 = \sqrt{3}k_0(1,0);\ \mathbf{G}_2 = \sqrt{3}k_0\left(\frac{1}{2},-\frac{\sqrt{3}}{2}\right);\ \mathbf{G}_3 = \sqrt{3}k_0\left(\frac{1}{2},\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \tag{2.17}$$

基于此，在光学晶格中原子的单粒子动力学可以用相应的哈密顿量来表征，后面的章节中将会进一步利用此处的单层蜂巢光学晶格，引入自旋依赖的光学势，从而构建等效的双层扭转模型。

## 2.2 单层蜂巢光晶格哈密顿量的构造与求解

### 2.2.1 有效哈密顿量

在光学晶格中，超冷原子在远失谐激光场作用下可视为在一周期势中运动的单粒子体系。忽略原子间相互作用时，其动力学行为可由单粒子薛定谔方程描述[10]，对应的哈密顿量可写为动能项与外加光学晶格势之和，如式 (2.4)，将蜂巢光学晶格势的具体形式代入后，单粒子薛定谔方程可写为：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V_0\sum_{i=1}^{3}\cos(\mathbf{G}_i\cdot\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \tag{2.18}$$

其实这个方程也为之后计算能带结构与并且分析拓扑性质提供了基础，考虑到该体系具有一定的平移对称性，我们可以借助 Bloch 定理对其本征态做进一步展开，并利用平面波展开法将实空间中的微分方程转化为动量空间下的矩阵本征值问题，具体的数值实现方法将在下一节详细说明。

### 2.2.2 平面波展开法

在上述单粒子哈密顿量的基础上，本文采用平面波展开法对体系能带结构进行数值求解。该方法充分利用光学晶格势的空间周期性，将实空间中的微分方程转化为动量空间中的矩阵本征值问题，具有清晰的物理图像和良好的数值稳定性。由于体系具有平移对称性，根据 Bloch 定理，其本征态可以写为：

$$\psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \tag{2.19}$$

其中$\mathbf{q}$为准动量，$u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$为具有晶格周期性的函数。进一步地，周期函数$u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$可以在倒格矢基底下展开为离散平面波的线性叠加形式，即：

$$u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} a_{\mathbf{q}}(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \tag{2.20}$$

其中$\mathbf{G}$为倒格矢，$a_{\mathbf{q}}(\mathbf{G})$为对应的展开系数。由此，Bloch 态可表示为:

$$\psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} a_{\mathbf{q}}(\mathbf{G}) e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}} \tag{2.21}$$

将上述展开形式代入单粒子薛定谔方程：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + V_0\{\cos(\mathbf{G}_1\cdot\mathbf{r}) + \cos(\mathbf{G}_2\cdot\mathbf{r}) + \cos(\mathbf{G}_3\cdot\mathbf{r})\}\right] \sum_{\mathbf{G}} a_{\mathbf{q}}(\mathbf{G}) e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}$$

$$= E_q \sum_{\mathbf{G}} a_{\mathbf{q}}(\mathbf{G}) e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}} \tag{2.22}$$

处理导数项并将$\cos(\mathbf{G}_i\cdot\mathbf{r})$写成 $e$ 指数形式：

$$\sum_p \frac{\hbar^2}{2M}\left|\mathbf{q}+\mathbf{G}_p\right|^2 a_q(p)\, e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{G}_p)\cdot\mathbf{r}} + \frac{V_0}{2}\sum_p a_q(p)\, e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{G}_p+\mathbf{G}_1)\cdot\mathbf{r}} +$$

$$\frac{V_0}{2}\sum_p a_q(p)\, e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{G}_p-\mathbf{G}_1)\cdot\mathbf{r}} + \frac{V_0}{2}\sum_p a_q(p)\, e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{G}_p+\mathbf{G}_2)\cdot\mathbf{r}} + \frac{V_0}{2}\sum_p a_q(p)\, e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{G}_p-\mathbf{G}_2)\cdot\mathbf{r}} +$$

$$\frac{V_0}{2}\sum_p a_q(p)\, e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{G}_p+\mathbf{G}_1+\mathbf{G}_2)\cdot\mathbf{r}} + \frac{V_0}{2}\sum_p a_q(p)\, e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{G}_p-\mathbf{G}_1-\mathbf{G}_2)\cdot\mathbf{r}}$$

$$= E_q \sum_p a_q(p)\, e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{G}_p)\cdot\mathbf{r}} \tag{2.23}$$

左乘$e^{-i(\mathbf{q}+\mathbf{G}_{p'})\cdot\mathbf{r}}$并对全空间积分：

$$\sum_p \frac{\hbar^2}{2M}\left|\mathbf{q}+\mathbf{G}_p\right|^2 a_q(p)\,\delta_{p',p} + \frac{V_0}{2}\sum_p a_q(p)[\delta_{p',p+\Delta m}+\delta_{p',p-\Delta m}+\delta_{p',p+\Delta n}+\delta_{p',p-\Delta n}$$

$$+\delta_{p',p+\Delta m+\Delta n}+\delta_{p',p-\Delta m-\Delta n}]$$

$$= E_q \sum_p a_q(p)\,\delta_{p',p} \tag{2.24}$$

其中：

$$\begin{aligned} p &= (m,n), \\ p \pm \Delta m &= (m \pm 1,\ n), \\ p \pm \Delta n &= (m,\ n \pm 1), \\ p \pm \Delta m \pm \Delta n &= (m \pm 1,\ n \pm 1) \end{aligned} \tag{2.25}$$

直接删除$\sum_p a_q(p)$得哈密顿矩阵元：

$$H_{p\prime p} = \frac{\hbar^2}{2M}\left|\mathbf{q}+\mathbf{G}_p\right|^2\delta_{p\prime,p} + \frac{V_0}{2}[\delta_{p\prime,\,p+\Delta m} + \delta_{p\prime,\,p-\Delta m} + \delta_{p\prime,\,p+\Delta n} + \delta_{p\prime,\,p-\Delta n} + \delta_{p\prime,\,p+\Delta m+\Delta n} + \delta_{p\prime,\,p-\Delta m-\Delta n}] \tag{2.26}$$

其中$p=(m,n)$表示倒格矢的双整数标记。将抽象指标$p$显式写成$(m,n)$形式后，哈密顿量矩阵元可以改写为：

$$H_{p'p} = \frac{\hbar^2}{2M}\left|\mathbf{q}+\mathbf{G}_p\right|^2\delta_{m',m}\,\delta_{n',n} + \frac{V_0}{2}[\delta_{m',m+1}\delta_{n',n} + \delta_{m',m-1}\delta_{n',n} + \delta_{m',m}\delta_{n',n+1} + \delta_{m',m}\delta_{n',n-1} + \delta_{m\prime,m+1}\delta_{n\prime,n+1} + \delta_{m\prime,m-1}\delta_{n\prime,n-1}] \tag{2.27}$$

根据前述 Kronecker δ 函数所给出的选择规则，哈密顿量矩阵元仅在满足特定整数指标关系时非零。因此，上式可等价地改写为如下分段形式：

$$H_{p\prime p} = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2M}\left|\mathbf{q}+\mathbf{G}_p\right|^2, & p'=p, \\ \frac{V_0}{2}, & \begin{cases} |m'-m|=1, n'=n, \\ |n'-n|=1, m'=m, \\ m'-m=1, n'-n=1, \\ m'-m=-1, n'-n=-1 \end{cases} \\ 0, & \text{其他情况} \end{cases} \tag{2.28}$$

为了简化表达，同时便于后续的数值计算，我们对哈密顿量进行无量纲化处理。选取光子反冲动量$\hbar k_0$作为动量单位，对应的反冲能量$E_r=(\hbar^2k_0^2)/(2M)$作为能量单位，于是有：

$$\mathbf{q} = \tilde{\mathbf{q}}\,k_0;\ \ \mathbf{G}_p = \tilde{\mathbf{G}}_p\,k_0;\ \ V_0 = \tilde{V}_0\,E_r \tag{2.29}$$

在这一尺度下，动能项可以写成$E_r\left|\tilde{\mathbf{q}}+\tilde{\mathbf{G}}_p\right|^2$。整体除以$E_r$后，哈密顿量被化为无量纲形式，后续在程序中实现时只需处理纯数值量，从而避免频繁携带物理常数。最终得到：

$$\tilde{H}_{p\prime p} = \begin{cases} \left|\tilde{\mathbf{q}}+\tilde{\mathbf{G}}_p\right|^2, & p'=p, \\ \frac{\tilde{V}_0}{2}, & \begin{cases} |m'-m|=1, n'=n, \\ |n'-n|=1, m'=m, \\ m'-m=1, n'-n=1, \\ m'-m=-1, n'-n=-1 \end{cases} \\ 0, & \text{其他情况} \end{cases} \tag{2.30}$$

上述矩阵元清晰地反映了体系哈密顿量的物理结构：对角项对应于原子的动能贡献，其形式为$\left|\tilde{\mathbf{q}}+\tilde{\mathbf{G}}_p\right|^2$；而非对角部分是由光学晶格势导致的离散动量耦合，在有限几个满足一定相邻条件倒格矢上出现。所以，哈密顿量矩阵在这个基础上具有很强的稀疏性，这也使得它可以进行有限维截断后用数值方法求取其本征值以及相应的本征态。

在完成哈密顿量的动量空间表示之后，我们用 Matlab 对体系进行数值对角化计算。具体而言，在倒格矢展开中引入有限截断参数 $N$，选取满足给定范围内的整数对$p=(m,n)$作为动量空间基底，从而将原本无限维的哈密顿量转化为有限维矩阵问题。随着 $N$ 的增大，能带结果逐渐收敛，本文所采用的截断范围已经能够保证在所考察的能量区间内结果稳定，不再随 $N$ 的增加发生明显变化。

那么单层的层内势能项按照前述最近邻耦合规则构造。当动量指标满足：

$$|m'-m|=1,n'-n,|n'-n|=1,m'=m \tag{2.31}$$

以及

$$m'-m=\pm1,n'-n=\pm1 \tag{2.32}$$

时，对应矩阵元取$V_0/2$，其余为零。因此，最终得到的势能矩阵呈现出明显的稀疏结构。在每一个给定的准动量$\mathbf{q}$处，总哈密顿量由势能矩阵与动能对角项$\left|\mathbf{q}+\mathbf{G}_p\right|^2$叠加构成，随后对该矩阵进行数值对角化，得到能谱$E_n(\mathbf{q})$。

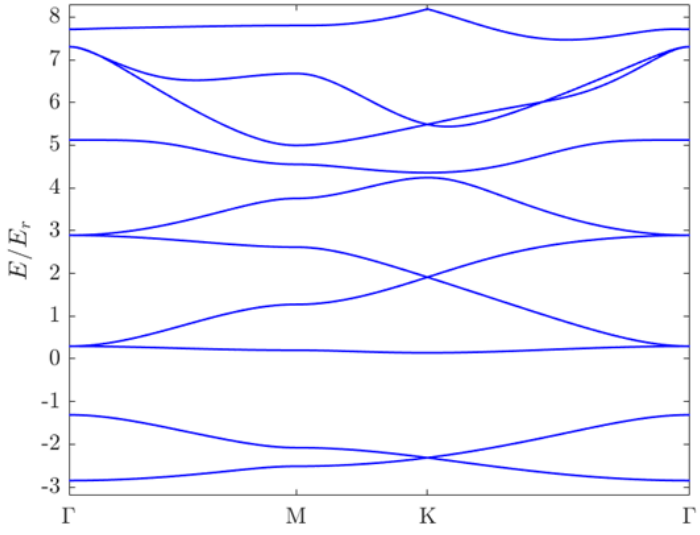



图 2-4 二维蜂窝光学晶格能带结构

Fig. 2-4 Band structure of a two-dimensional honeycomb optical lattice

为了展示体系的能带结构，我们选择晶格深度$V_0=4E_r$，并沿布里渊区的高对称路径$\Gamma\to M\to K\to\Gamma$对$\mathbf{q}$进行逐点扫描。对于路径上的每一个动量点，通过对体

系哈密顿量进行对角化得到其能谱，并将各动量点的本征值按路径顺序连接，从而得到完整的能带结构，计算得到的该体系前十条能带结构如图 2-4 所示。可以看到，在所选参数条件下体系呈现出明显的能带分裂结构，各能带在布里渊区高对称点附近表现出不同的色散行为。在$K$点附近，两条能带相互接近并发生交叉，形成类似狄拉克点的能带结构，体现了蜂巢晶格对称性对能谱结构的影响。

## 2.3 超冷原子体系中的扭转光晶格实验实现方案

在上一小节中，已经对单层蜂巢光晶格的有效哈密顿量进行了研究与求解，在此基础上，若能进一步在两个单层蜂巢光晶格之间引入扭转角，那么在这个新的体系中，会形成具有长周期结构的莫尔超晶格，极有可能产生平带以及新的拓扑能带结构。因此，如何实现基于超冷原子光晶格体系模拟扭转双层莫尔超晶格结构，成为研究扭转莫尔物理的重要问题[65]。然而，由于光的衍射极限，无法直接生成空间分离的双层光晶格，构建扭转双层莫尔超晶格面临一系列技术挑战。

2023 年，山西大学张靖课题组采取了一种以原子内部自旋态为合成维度的方案，通过原子自旋依赖光晶格技术，在超冷玻色原子系统中实现了扭转双层方形光晶格，该体系中原子始终驻留在单层空间中，其中，不同自旋态分别对应两层具有相对转角的蜂巢光晶格，层间耦合通过微波耦合两个原子自旋态模拟实现。

实现自旋依赖光晶格的重要物理基础是 AC stark 效应[66]。在交变电磁场作用下，原子与光场相互作用，导致能级移动，这种移动是由于光场的交变电场与原子的电偶极矩相互作用，导致原子的能量本征值发生改变，这就是 AC stark 效应，即交流斯塔克效应[67]。该效应与原子自旋、偏振、磁场相关，因而可借助光诱导产生的 AC Stark 效应来操控不同自旋态的原子[68]。

对于碱金属基态原子而言，AC stark 效应产生的频移可表示为极化率的标量、矢量和张量三项[69]：

$$\Delta U(F,m_F;\omega)=-\alpha^{(0)}(F;\omega)\left|E^{(+)}\right|^2-\alpha^{(1)}(F;\omega)(\xi\widehat{e_k}\cdot\widehat{e_B})\left(iE^{(-)}\times E^{(+)}\right)_z\frac{m_F}{F}$$
$$-\alpha^{(2)}(F;\omega)\frac{3\left|E_z^{(+)}\right|^2-\left|E^{(+)}\right|^2}{2}\frac{3m_F^2-F(F+1)}{F(2F-1)} \tag{2.33}$$

公式包含标量项、矢量项、张量项三项，更高阶的光频移通常可忽略掉。$\alpha^{(0)}(F;\omega)$、$\alpha^{(1)}(F;\omega)$、$\alpha^{(2)}(F;\omega)$分别称为标量极化率、矢量极化率和张量极化率。其中$E_0$为光场强度，$F$ 为总的原子角动量，$\omega$为激光频率，$\widehat{e_k}$和$\widehat{e_B}$分别为沿光波矢和磁场量化轴

的单位矢量，$m_F$为磁量子数，$\phi$为光场线偏振分量与单位矢量$\widehat{e_B}$的夹角。$\xi$代表激光偏振方向，激光为左旋圆偏光时$\xi$=1，激光为右旋圆偏光时$\xi$=-1，激光为线偏光时$\xi$=0。

在一定的光强下，标量光频移主要依赖于光束的频率。矢量光频移依赖于光束的频率、光束的偏振、光束与磁场强度的夹角、原子的磁量子数和总角动量。张量光频移与光束的频率、光束与磁场的夹角、磁量子数和总角动量有关。对于基态的碱金属原子[70]，电子的总角动量 $J$=1/2，此时$\alpha^{(2)}(F;\omega)\approx 0$。我们的实验正是对应这种情形，因此只需要考虑标量光频移和矢量光频移两项。

在特定波长下，标量极化率$\alpha^{(0)}(F;\omega)$与矢量极化率$\alpha^{(1)}(F;\omega)$的频率依赖关系会使得标量光频移与矢量光频移相互抵消，从而原子总的光频移为零。该波长被称为幻零波长（magic-zero wavelength），亦称 tune-out 波长。该概念最早由 J. H. Thywissen 和 L. J. LeBlanc 提出[57]。研究者提出了两种在混合原子体系中通过光晶格调控原子的方案：一种是通过近共振的驻波光场实现对原子的强束缚方案（tune-in 方案）；另一种是选择波长处于碱金属原子 D2 和 D1 跃迁线之间的激光光束，由此实现对特定种类原子的束缚（tune-out 方案），这也是我们实验上幻零波长光晶格的实验方案。实验上幻零波长处在碱金属原子的 D1 线和 D2 线之间，此时各阶极化率有如下公式：

$$\alpha^{(0)}(F;\omega)\approx-\frac{\pi c^2\Gamma_{D2}}{2\omega_0^3}\left(\frac{1}{\delta_{D1}}+\frac{2}{\delta_{D2}}\right) \tag{2.34}$$

$$\alpha^{(1)}(F;\omega)\approx-\frac{\pi c^2\Gamma_{D2}}{2\omega_0^3}\left(\frac{1}{\delta_{D2}}-\frac{1}{\delta_{D1}}\right)g_F F \tag{2.35}$$

$$\alpha^{(2)}(F;\omega)\approx 0 \tag{2.36}$$

上式中的$\Gamma_{D2}$是 D2 线的激发态衰减速率，$\delta_{D1}=\omega-\omega_{D1}$和$\delta_{D2}=\omega-\omega_{D2}$分别为激光频率相对于 D1 线和 D2 线共振频率（$\omega_{D1}$和$\omega_{D2}$）的失谐。$\omega_0=(\omega_{D1}+2\omega_{D2})/3$为有效频率[57]。公式中的朗德 $g$ 因子表达式为：

$$g_F=\left[\frac{F(F+1)+J(J+1)-I(I+1)}{2F(F+1)}\right]g_J \tag{2.37}$$

$$g_J=1+\frac{J(J+1)+S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)} \tag{2.38}$$

其中 $J$ 代表原子中电子的总角动量，$S$ 代表电子自旋角动量，$L$ 是电子轨道角动量，$I$ 是原子的核自旋角动量。根据上面的公式就可以计算出在不同基态超精细能级塞曼子能级上的 $^{39}$K 原子和 $^{87}$Rb 原子的幻零波长。

在实际实验中，我们使用两束平行的圆偏振光，合成光场在传播方向上具有处处相同的圆偏振，但光强在实空间中周期性变化。此时晶格势能包含标量项和矢量项两部分。在幻零波长下，晶格势能完全消失。通过改变激光光束的光强与波长，可以灵

活调节不同塞曼子能级的原子感受到的晶格势能，非常适宜构造自旋依赖的光晶格。对于不同塞曼子能级的原子组成的混合超冷原子气体，可以用每个子能级的幻零波长独立调节该子能级感受到的晶格深度，同时完全不干扰另一子能级。实验上利用这种特征构造了双层扭转光晶格[36,71-77]。

## 2.4 扭转双层蜂巢光晶格哈密顿量的构造与求解

### 2.4.1 有效哈密顿量

在前一节中，我们介绍了超冷原子体系中扭转光晶格的实验实现方案。为了进一步研究该体系中的能带结构与平带性质，下面将在此基础上建立扭转双层蜂巢光晶格的理论模型[78-81]，并对其哈密顿量进行求解。

我们考虑将分别处于两个赝自旋态的超冷原子分别束缚在两个相对扭转的蜂巢光晶格中，并利用微波耦合将两个自旋态耦合起来。在准二维条件下，体系的单粒子哈密顿量可表示为：

$$\widehat{H} = \begin{pmatrix} \widehat{H}_1 & \widehat{H}_{inter} \\ \widehat{H}_{inter}^{\dagger} & \widehat{H}_2 \end{pmatrix} \tag{2.39}$$

其中$H_1$和$H_2$分别表示两个相对旋转角度为$\pm\theta/2$的蜂巢光学晶格中的单粒子哈密顿量：

$$\begin{aligned} \widehat{H}_1 &= -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V_0\sum_{i=1}^{3}\cos\left[\left(\mathbf{G}_i S\left(\frac{\theta}{2}\right)\right)\cdot\mathbf{r}\right] \\ \widehat{H}_2 &= -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V_0\sum_{i=1}^{3}\cos\left[\left(\mathbf{G}_i S\left(-\frac{\theta}{2}\right)\right)\cdot\mathbf{r}\right] \end{aligned} \tag{2.40}$$

即扭转后的层内哈密顿量，后文将其称为层内耦合；其中$S(\theta)$为旋转矩阵，

$$S(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \tag{2.41}$$

旋转之后的倒格矢分别为：

$$\begin{aligned} &\mathbf{G}_{11} = \mathbf{G}_1 S\left(\frac{\theta}{2}\right);\ \mathbf{G}_{21} = \mathbf{G}_2 S\left(\frac{\theta}{2}\right);\ \mathbf{G}_{31} = \mathbf{G}_3 S\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ &\mathbf{G}_{12} = \mathbf{G}_1 S\left(-\frac{\theta}{2}\right);\ \mathbf{G}_{22} = \mathbf{G}_2 S\left(-\frac{\theta}{2}\right);\ \mathbf{G}_{32} = \mathbf{G}_3 S\left(-\frac{\theta}{2}\right) \end{aligned} \tag{2.42}$$

$\widehat{H}_{inter}$描述不同层（即不同自旋态）之间的耦合项，在实验上通过微波耦合两个原子自旋态模拟实现，因此也称为层间耦合项，通常取$\hbar\Omega_R$，其中$\Omega_R$是 Rabi 频率。

### 2.4.2 扭转双层蜂巢光晶格能带的平面波展开法

我们类比单层蜂巢光晶格哈密顿量的求解，同样用平面波展开法对双层蜂巢光晶格进行求解。依旧先将系统的 Bloch 态展开为离散平面波基的线性叠加，体系本征态可写为：

$$\psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})=\begin{pmatrix}\psi_{\mathbf{q}}^{\uparrow}(\mathbf{r})\\ \psi_{\mathbf{q}}^{\downarrow}(\mathbf{r})\end{pmatrix}=\sum_p\begin{pmatrix}a_{\mathbf{q}}^{\uparrow}(p)\\ a_{\mathbf{q}}^{\downarrow}(p)\end{pmatrix}e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{G}_p)\cdot\mathbf{r}} \tag{2.43}$$

将其代入薛定谔方程：

$$\left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2M}+\begin{pmatrix}V_1(\mathbf{r}) & \hbar\Omega_R\\ \hbar\Omega_R & V_2(\mathbf{r})\end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix}\psi_q^{\uparrow}(\mathbf{r})\\ \psi_q^{\downarrow}(\mathbf{r})\end{pmatrix}=E_q\begin{pmatrix}\psi_q^{\uparrow}(\mathbf{r})\\ \psi_q^{\downarrow}(\mathbf{r})\end{pmatrix} \tag{2.44}$$

展开得到：

$$\begin{aligned}&\sum_p\begin{pmatrix}a_q^{\uparrow}(p)\\ a_q^{\downarrow}(p)\end{pmatrix}\frac{\hbar^2|\mathbf{q}+\mathbf{G}_p|^2}{2M}e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{G}_p)\cdot\mathbf{r}}+\sum_p\begin{pmatrix}0 & \hbar\Omega_R\\ \hbar\Omega_R & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_q^{\uparrow}(p)\\ a_q^{\downarrow}(p)\end{pmatrix}e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{G}_p)\cdot\mathbf{r}}+\\ &\sum_p\sum_{p_1,p_2}\frac{V_0}{2}\begin{pmatrix}e^{i\mathbf{G}_{p_1}^{(1)}\cdot\mathbf{r}} & 0\\ 0 & e^{i\mathbf{G}_{p_2}^{(1)}\cdot\mathbf{r}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_q^{\uparrow}(p)\\ a_q^{\downarrow}(p)\end{pmatrix}e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{G}_p)\cdot\mathbf{r}}\\ &=E_q\sum_p\begin{pmatrix}a_q^{\uparrow}(p)\\ a_q^{\downarrow}(p)\end{pmatrix}e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{G}_p)\cdot\mathbf{r}}\end{aligned} \tag{2.45}$$

其中$\mathbf{G}_i\in\{\mathbf{G}_{11},\mathbf{G}_{21},\mathbf{G}_{31}\},\mathbf{G}_i{}'\in\{\mathbf{G}_{12},\mathbf{G}_{22},\mathbf{G}_{32}\}$, 左乘$e^{-i(q+G_{p\prime})\cdot\mathbf{r}}$并对全空间积分：

$$\begin{aligned}&\sum_p\begin{pmatrix}a_q^{\uparrow}(p)\\ a_q^{\downarrow}(p)\end{pmatrix}\frac{\hbar^2|\mathbf{q}+\mathbf{G}_p|^2}{2M}\delta_{p\prime,p}+\sum_p\begin{pmatrix}0 & \hbar\Omega_R\\ \hbar\Omega_R & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_q^{\uparrow}(p)\\ a_q^{\downarrow}(p)\end{pmatrix}\delta_{p\prime,p}+\\ &\sum_p\sum_{p_1,p_2}\frac{V_0}{2}\begin{pmatrix}\delta_{p\prime,p+p_1} & 0\\ 0 & \delta_{p\prime,p+p_2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_q^{\uparrow}(p)\\ a_q^{\downarrow}(p)\end{pmatrix}\\ &=E_q\sum_p\begin{pmatrix}a_q^{\uparrow}(p)\\ a_q^{\downarrow}(p)\end{pmatrix}\delta_{p\prime,p}\end{aligned} \tag{2.46}$$

直接删除$\sum_p\begin{pmatrix}a_q^{\uparrow}(p)\\ a_q^{\downarrow}(p)\end{pmatrix}$得哈密顿矩阵元：

$$H_{p\prime p}(\mathbf{q})=\left[\frac{\hbar^2|\mathbf{q}+\mathbf{G}_p|^2}{2M}+\begin{pmatrix}0 & \hbar\Omega_R\\ \hbar\Omega_R & 0\end{pmatrix}\right]\delta_{p\prime,p}+\frac{V_0}{2}\sum_{p_1,p_2}\begin{pmatrix}\delta_{p\prime,p+p_1} & 0\\ 0 & \delta_{p\prime,p+p_2}\end{pmatrix} \tag{2.47}$$

我们将其无量纲化，设$q=\tilde{q}k_0$（$\hbar k_0$为光子反冲动量），$\mathbf{G}_p=\tilde{\mathbf{G}}_pk_0$，$V_0=\tilde{V}_0E_r$，（$E_r=(\hbar^2k_0^2)/(2M)$为光子反冲能量），并且做一些在双层体系中需要特别处理的部分。

与单层体系不同，双层体系在每个准动量$\mathbf{q}$处均具有层自由度的矩阵结构。由于两层晶格分别绕原点旋转$\pm\theta/2$，旋转操作作用于倒格矢空间，使得各层的倒格矢基底发生相对旋转。因此，哈密顿量在动量空间中可表示为关于层指标的 2×2 块矩阵形式，其各块矩阵元分别在对应旋转后的倒格矢基底下定义。

为保证旋转后两层倒格矢仍构成离散晶格结构，需要满足公度条件，即旋转后的某一倒格矢可以表示为原倒格矢的整数线性组合。由几何匹配条件可得旋转角与整数参数$(m,n)$的关系：

$$\cos\frac{\theta}{2}=\frac{m+\frac{n}{2}}{\sqrt{m^2+n^2+mn}},\ \sin\frac{\theta}{2}=\frac{\frac{\sqrt{3}}{2}n}{\sqrt{m^2+n^2+mn}} \tag{2.48}$$

在该公度条件下，为使倒格矢能够以整数形式表示，本文在倒空间中重新选取基底：

$$\boldsymbol{e}_1=(e_x,0),\ \boldsymbol{e}_2=(-\frac{1}{2}e_x,\frac{\sqrt{3}}{2}e_y) \tag{2.49}$$

在新的倒格矢基底下，满足公度条件的六个主耦合倒格矢为：

$$\begin{aligned}
&\widetilde{\mathbf{G}}_{11}=\widetilde{\mathbf{G}}_{m,-n}=(m,-n)h,\\
&\widetilde{\mathbf{G}}_{21}=\widetilde{\mathbf{G}}_{n,m+n}=(n,m+n)h,\\
&\widetilde{\mathbf{G}}_{31}=\widetilde{\mathbf{G}}_{-m-n,-m}=(-m-n,-m)h,\\
&\widetilde{\mathbf{G}}_{12}=\widetilde{\mathbf{G}}_{m+n,n}=(m+n,n)h,\\
&\widetilde{\mathbf{G}}_{22}=\widetilde{\mathbf{G}}_{-n,m}=(-n,m)h,\\
&\widetilde{\mathbf{G}}_{32}=\widetilde{\mathbf{G}}_{-m,-m-n}=(-m,-m-n)h
\end{aligned} \tag{2.50}$$

可统一表示为：

$$\widetilde{\mathbf{G}}_p=(i,j)h \tag{2.51}$$

其中$i,j\in Z$, 并且

$$h=\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{m^2+n^2+mn}} \tag{2.52}$$

该表示保证旋转后的倒格矢仍构成离散晶格结构，从而哈密顿量矩阵在动量空间中保持有限个倒格矢之间的耦合关系，并呈现明显的稀疏结构。随着公度参数$(m,n)$的增大，倒格基矢的模长减小，根据实空间与倒空间的对偶关系，这对应于实空间中莫尔原胞尺度的增大。因此得到层内势能耦合结构，两层对应的动量耦合项分别为：

$$\begin{aligned}
H_{01}=&\frac{V_0}{2}[\delta_{p\prime,p+(m,-n)}+\delta_{p\prime,p-(m,-n)}+\delta_{p\prime,p+(n,m+n)}+\delta_{p\prime,p-(n,m+n)}\\
&+\delta_{p\prime,p+(m+n,m)}+\delta_{p\prime,p-(m+n,m)}]\\
H_{02}=&\frac{V_0}{2}[\delta_{p\prime,p+(m+n,n)}+\delta_{p\prime,p-(m+n,n)}+\delta_{p\prime,p+(-n,m)}+\delta_{p\prime,p-(-n,m)}\\
&+\delta_{p\prime,p+(m,m+n)}+\delta_{p\prime,p-(m,m+n)}]
\end{aligned} \tag{2.53}$$

这里取$c=(m^2+n^2+mn)/3$，详细解释见下一章。整理得到在每个准动量$\mathbf{q}$处，哈密顿量矩阵元为：

$$\widetilde{H}_{p\prime p}=|\widetilde{\mathbf{q}}+\widetilde{\mathbf{G}}_p|^2\,\delta_{p\prime,p}+c\begin{pmatrix}0 & \widetilde{\Omega}_R\\ \widetilde{\Omega}_R & 0\end{pmatrix}\delta_{p\prime,p}+c\frac{\widetilde{V}_0}{2}\sum_{p_1,p_2}\begin{pmatrix}\delta_{p\prime,p+p_1} & 0\\ 0 & \delta_{p\prime,p+p_2}\end{pmatrix} \quad (2.54)$$

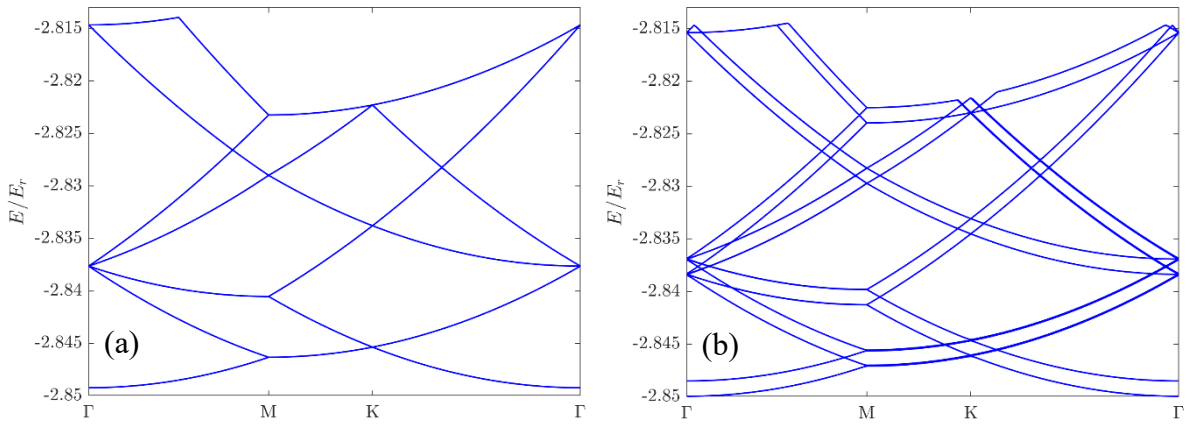



图 2-5 双层蜂巢光学晶格能带结构

Fig. 2-5 Band structure of a bilayer hexagonal optical lattice

注：(a)层间耦合强度为 0 (b)层间耦合强度为 $0.001E_r$

因此，在满足公度条件的情况下，扭转双层光学晶格体系在动量空间中可表示为有限维的层自由度块矩阵哈密顿量，其矩阵元由动能项、层间拉曼耦合项以及旋转后的层内倒格矢耦合项共同构成。由于倒格矢空间本质上是无限维的，在实际数值计算中必须对倒格矢模长进行截断，即仅保留满足$|\mathbf{G}_p|\le\mathbf{G}_{max}$的有限个基矢，从而将哈密顿量表示为有限维矩阵进行数值对角化。由于动能项随$|\mathbf{G}_p|^2$增大迅速增长，因此高动量分量对应的能量显著高于低能区间，其对低能能带结构的影响逐渐减小。基于这一物理特性，倒格矢截断在数值计算中具有良好的收敛性。

在完成上述截断与矩阵构造之后，对莫尔布里渊区内选定的高对称路径$\Gamma\to M\to K\to\Gamma$逐点计算哈密顿量并进行数值对角化，将各动量点处得到的本征能量依次连接，最终得到扭转双层光学晶格体系沿莫尔高对称路径的能带结构。如图 2-5 显示的是扭转角度大约为 $4.4085°(m=22,n=1)$情况下，耦合强度分别为 0 和$0.001E_r$的所得能带图的前二十条，我们发现当层间耦合$\Omega_R=0$时，两层蜂巢光晶格之间不存在隧穿过程，体系等价于两层相互独立的单层光晶格，其能带结构为两层能带的简单叠加。当略微增大耦合强度时，图 2-5(b) 给出了层间耦合强度为$\Omega_R=0.001E_r$时的能带结构。可以看到，此时原本重合的能带开始出现轻微分裂，但从整体上看，其

能带结构与无耦合情形相比仍保持基本一致。在此基础上，可以进一步研究随着层间耦合强度逐渐增大时体系能带结构的演化行为。清晰反映了层间耦合与扭转参数对能谱重构的影响，为后续分析能隙演化与平带形成等物理性质提供了基础。

在实验上，光学晶格中的能带结构通常可以通过多种方法进行探测。例如，利用能带映射技术，可以测量原子的动量分布与能带占据情况；通过周期性调制光晶格频率，可以利用晶格调制谱测量不同能带之间的能量差；此外，还可以利用 Bloch 振荡等动力学方法研究体系的能量色散关系及其拓扑几何性质。这些实验技术的发展也为未来进一步观测扭转双层光晶格中的高轨道平带及其拓扑性质提供了可能。

### 2.4.3 约化平面波展开法

从之前建立的完整双层动量空间模型之中，我们可以看到，当倒格矢的截断半径逐渐增大时，对应的哈密顿矩阵维度会出现比较快速的增长。虽然从理论上来说，通过增加截断范围可以系统性地提高能带计算的精度，但是在小扭转角或者周期势较强的情况下，矩阵的规模通常会达到数万维甚至更高，这样一来计算所需时间就明显增加。当光晶格深度较浅时，周期势对原子波函数的调制较弱，不同动量态之间的耦合主要集中在低阶衍射通道，而高阶衍射对应的高动量态由于具有较大的动能，其耦合强度迅速减小，因此在数值计算中通常可以忽略高阶衍射项，那么为了节省算力，我们通过约化平面波展开法，构造一个相对简化的模型。

具体的简化思路其实是严格围绕我们主要关心的布里渊区中的特定高对称点来进行约化，在原本的平面波展开法之中，我们构造了一个较为完整的超胞倒空间基底来构造哈密顿量，以便保证能带结构在较大的能量范围中有良好的收敛性，而实际上，如果我们主要关心特定高对称点附近的能带，完全可以有针对性地选取高对称点附近的超胞并进行有限阶数的衍射，核心思想是：在给定参考动量点（例如莫尔第一布里渊区的$K$点）附近，低能能带主要由动能相近的少数平面波分量通过层内周期势耦合与层间耦合混合形成；而动能差异较大的高动量分量由于能量失配显著，其对该局域低能谱的影响迅速减弱。因此，相较于上一节中按照$\left|\mathbf{G}_p\right| \leq \mathbf{G}_{max}$进行的几何截断，这里直接围绕参考点在动量空间选取一组满足动能接近条件的平面波基底，从而构造一个围绕目标能区的“能量壳层”子空间。本文中围绕特定高对称点位置动量为零和不为零两种情况展开讨论。

如果想要研究第一布里渊区中$\Gamma$点附近的能带，$\Gamma$点处的动量为零，完全可以在动量空间中以$\Gamma$点为参考动量点，基于选取的扭转角确定的原胞倒格矢方向，接着构

造一组有限阶的动量衍射点集合，同时根据需要精确求解的能带的范围，可以通过控制衍射阶数的大小来确定$\Gamma$点附近需要保留的动量态，也就可以获得$\Gamma$点附近的一组有限基底，由于附近的动量态在动能上是相互接近的，并且通过周期势诱导的动量散射过程实现有效耦合，因而我们实现了精确求解该点附近的能带结构。

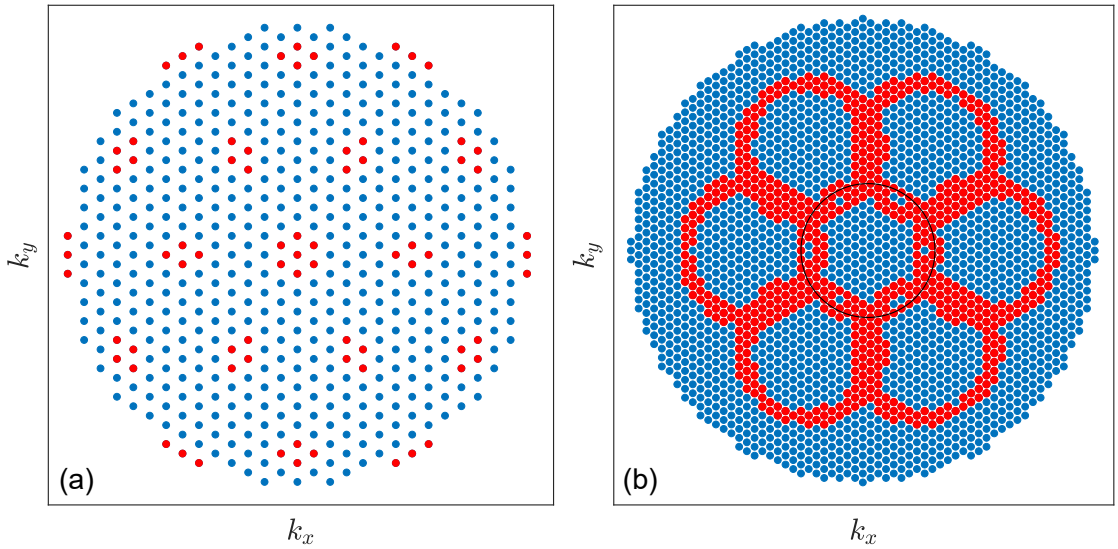



图 2-6 (a) $\Gamma$点附近动量基底约化方法的对比示意图；(b) $K$点附近动量基底约化方法的对比示意图

Fig. 2-6 Comparison of the reduced momentum-basis method near (a) the $\Gamma$ point and (b) the $K$ point.

注：(a) 蓝色点表示未约化方法中采用的完整动量格点，红色点表示约化后选取的动量态；(b) 蓝色点表示未约化方法的完整动量格点，红色点表示约化后选取的动量态，黑色圆圈表示与 $K$ 点等动能壳层的位置

另外一种特殊点位置动量不为零的情况，我们以第一布里渊区中的$K$点为例，与动量为零处不同，与其动量相同的态应当是分布在以$K$点到原点的距离为半径、以原点为圆心的等动能圆环上（在图中用黑色圆环表示），我们首先在圆环的周围保留适当范围的莫尔超胞格点，并对其做一定阶数的动量衍射，如果想要调整能带的精度，可以通过调整莫尔超胞格点的范围和衍射的阶数来实现。同样，在更高的布里渊区处有更多的动量不为零的特殊点，可以采用相同的方法对其周围的能带进行精确求解。

由于约化模型仅关注特定能区，如图 2-6 可以看到，我们用约化方法在保证能带精度的前提下得到的衍射点比一般的平面波展开法要少很多，其矩阵维度远小于完整截断模型，从而显著地降低了计算复杂度和计算的成本，在追求精确高效地计算方面是十分可行的。图 2-7 展示了从一阶至三阶衍射得到的能带结构（蓝色虚线表示）与一般的平面波展开法（红色实线表示）得到的能带结构的对比结果，可以看到，

狄拉克点附近的能带首先与一般方法得到的能带重合，而随着阶数的增加，能带趋于完全一致，计算是足够精确的。

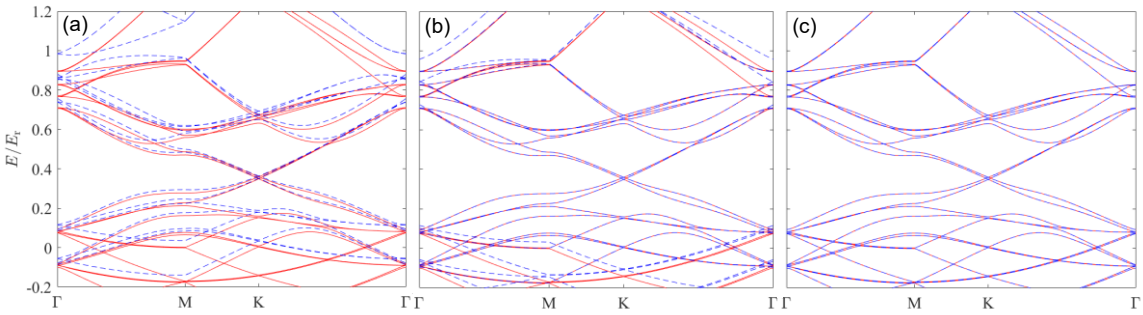



图 2-7 (a) 一阶衍射能带结构对比图；(b) 二阶衍射能带结构对比图；(c) 三阶衍射能带结构对比图；

Figure 2-7 (a) Comparison of band structures obtained using first-order diffraction;(b) Comparison of band structures obtained using second-order diffraction;(c) Comparison of band structures obtained using third-order diffraction.

### 2.4.4 基于 COMSOL 的有限元计算方法

为了验证上述平面波展开法得到的能带结果的可靠性，并进一步考察有限基底截断可能带来的影响，本文同时采用有限元方法对体系进行数值求解。与动量空间平面波展开方法不同，有限元方法在实空间中对波函数进行离散化处理，不依赖于倒格矢基底的显式截断，因此可以从另一种数值角度对理论结果进行独立验证[61]。

在数值计算部分中，我们采用 COMSOL Multiphysics 软件，对光学晶格体系中的单粒子哈密顿量进行求解。在该软件中，主要是基于有限元方法 (Finite Element Method, FEM) 来完成计算。其基本做法是，在实空间中先构建一个离散网格，然后将波函数在每一个小区域内用分片多项式进行近似表示，这样就可以把原本连续形式的偏微分本征方程，转化成为一个有限维的矩阵本征值问题，从而可以直接求出能量本征值以及对应的本征波函数。

从计算特点来看，这种方法在保持空间局域精度方面表现比较好，同时对于一些较为复杂的几何边界条件以及周期性条件，也可以比较自然地进行处理。因此，对于像光学晶格这种具有周期势结构的体系，该方法在能带计算中是比较适用的一种数值手段。

具体来说，我们在 COMSOL Multiphysics 中构建了与理论模型相对应的二维周期性光学晶格势$V(\mathbf{r})$，并选取其中一个原胞作为计算区域。在这个原胞的边界位置，

我们施加了 Bloch 类型的周期性边界条件，使得波函数需要满足相应的平移关系：

$$\psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}}\psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \tag{2.55}$$

其中$\mathbf{R}$为晶格的平移矢量,$\mathbf{q}$为准动量。该条件保证了解的平移对称性符合布洛赫定理，从而可以在单个原胞内重构无限周期体系的能带结构。

在给定准动量$\mathbf{q}$的情况下，通过求解对应的本征值问题即可获得体系在该动量点处的能量本征值$E_n(\mathbf{q})$。通过沿布里渊区高对称路径连续扫描准动量$\mathbf{q}$，逐点计算本征能量，并将各动量点处的本征值依次连接，即可重构完整的能带色散关系。

相比于平面波展开方法，有限元方法在计算时不需对动量空间中的基底进行显式截断，在数值上主要是由于实空间网格的离散程度以及求解过程所设定数值容差造成的。所以在实际计算中可以不断减小实空间网格尺寸，然后比较所得能带差别，以此来判断计算是否已达到收敛，这是最简单有效的方法。

在本文所选取的参数范围之内，利用有限元方法得到的能带结构，与平面波展开方法计算的结果基本相同，在低能量区的能带位置、能隙大小上两者都十分吻合。这表明，在平面波方法中的基底截断对我们的研究区域已基本收敛，同时也在一定程度上验证了理论模型与数值实现之间是相互一致的。

通过对这两种数值方法的进行比较和验证，可以认为本文所得到的能带结构以及其随参数变化的演化趋势具有较好的数值可靠性。从而也给后续对平带产生机理和平带能隙调控行为的研究奠定一个较为坚实的基础。

## 2.5 Wlison Loop 与拓扑不变量的计算

得到体系能带以后，为了研究该体系的拓扑性质，还需要使用拓扑不变量来描述这种性质[82-85]。而在二维周期性系统中，Chern 数就是一种能够表征能带拓扑性质的重要参数。但是由于 Berry 曲率求和过于依赖网格大小，在实际计算过程中容易出现问题，所以这里用 Wilson Loop 方法[16-19]来判断是否存在拓扑相。

### 2.5.1 Wilson Loop 的理论定义

而在周期性系统中，能带的拓扑性可以通过动量空间中波函数所具有的几何结构来描述。相对于直接求取 Berry 曲率之后在布里渊区内进行积分的做法，Wilson Loop 是一个数值上更加稳健以及规范不变的方法[20-22]。

用 $n$ 表示能带指标，设哈密顿量$H(\mathbf{k})$的本征态为$|u_{n,\boldsymbol{k}}\rangle$。若考虑一组被占用能

带或目标能带子空间，可将其在动量点$\mathbf{k}$处的本征态写成矩阵形式：

$$U_{\boldsymbol{k}} = \left(|u_{1,\boldsymbol{k}}\rangle, \cdots, |u_{N,\boldsymbol{k}}\rangle\right) \tag{2.56}$$

其中 $N$ 为所选子空间的能带数。

在二维布里渊区中，将动量表示为$\mathbf{k} = k_1\mathbf{b}_1 + k_2\mathbf{b}_2$。固定$\mathbf{b}_2$，沿$\mathbf{b}_1$方向构造闭合路径，则 Wilson Loop 定义为：

$$W = \mathcal{P}\exp\left[i\oint A(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k}\right] \tag{2.57}$$

其中$A(\mathbf{k})$为动量空间中的 Berry 连接算符，$\mathcal{P}$表示路径有序积。该算符描述了波函数在动量空间闭合路径上的几何平行输运。

在实际数值计算中，我们将该闭合路径离散为一系列按顺序排列的点：

$$k_0 \to k_1 \to \cdots \to k_L \tag{2.58}$$

其中$k_L$与$k_0$分别位于布里渊区的周期边界，在倒空间中对应等价动量点。对于由 $N$ 条能带构成的子空间，其对应的非阿贝尔 Wilson Loop 矩阵可表示为：

$$W(C_{\mathrm{i}}) \approx \prod_{l=0}^{L-1}\left[<u_p(\mathbf{k}_l)|u_q(\mathbf{k}_{l+1})>\right]_{N\times N} \tag{2.59}$$

其中$u_p(\mathbf{k}_l)$表示动量空间中$\mathbf{k}_l$处第$p$条能带布洛赫波函数的周期部分，$p, q = 1,2,\ldots,N$。为表述方便，记相邻两个动量点之间的重叠矩阵元为：

$$M_{pq}(k_1, k_2) = <u_{p,k_1} \mid u_{q,k_2}> \tag{2.60}$$

因此，符号$[\ldots]_{N\times N}$表示由矩阵元$M_{pq}(\boldsymbol{k}_l, \boldsymbol{k}_{l+1})$构成的$N \times N$矩阵，该矩阵描述了相邻动量点$\mathbf{k}_l$与$\mathbf{k}_{l+1}$之间不同能带布洛赫态之间的投影关系。通过沿闭合路径依$C_{\mathrm{i}}$次计算这些矩阵并进行矩阵乘积，可以得到对应子空间的 Wilson Loop 矩阵$W(C_{\mathrm{i}})$。进一步对该 Wilson Loop 矩阵进行对角化处理，即可得到其本征值及相应的本征相位，这些本征相位构成 Wilson Loop 本征谱。Wilson Loop 本征谱随动量参数的演化能够反映能带子空间的几何性质和拓扑特征，因此常被用来刻画平带体系中的拓扑结构。

可以看到，当$N = 1$时，Wilson Loop 矩阵退化为一个复数，此时 Wilson Loop 可写为相邻动量点布洛赫波函数内积的乘积，其物理意义对应于沿闭合路径积累的单带几何相位（ Berry 相位）。在这种情况下，体系只涉及单条能带的演化，Wilson loop 的计算可以直接通过相邻动量点处波函数的内积来完成；然而，当体系中存在多条能带且这些能带之间存在耦合、近简并甚至能带交叉时，单带波函数的规范往往难以在整个动量路径上保持连续，从而使得单带 Berry 相位的计算出现规范依赖或数值不稳定的问题。为了解决这一问题，需要将相关的多条能带视为一个整体的能带子空间，并采用矩阵形式的 Wilson Loop，即非阿贝尔 (non-Abelian) Wilson Loop 描

述该子空间在动量空间中的几何演化。在这种处理方式下，Wilson Loop 由不同能带布洛赫态之间的内积构成矩阵，其本征相位能够反映整个能带子空间的几何性质与拓扑结构，从而保证计算结果具有良好的规范不变性与数值稳定性。因此，在研究多带体系的拓扑性质时，非阿贝尔 Wilson Loop 方法被广泛应用。

为更直观地理解上述重叠矩阵的结构，考虑仅包含两条能带的情形：

$$M(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2)=\begin{pmatrix}M_{11} & M_{12}\\ M_{21} & M_{22}\end{pmatrix} \tag{2.61}$$

设在动量点$\mathbf{k}_1$和$\mathbf{k}_2$处两条能带的本征态分别为：

$$\begin{aligned}|u_{1,\mathbf{k}_1}\rangle=\begin{pmatrix}a_1\\ b_1\end{pmatrix},|u_{2,\mathbf{k}_1}\rangle=\begin{pmatrix}c_1\\ d_1\end{pmatrix}\\ |u_{1,\mathbf{k}_2}\rangle=\begin{pmatrix}a_2\\ b_2\end{pmatrix},|u_{2,\mathbf{k}_2}\rangle=\begin{pmatrix}c_2\\ d_2\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{2.62}$$

其中$a_i,b_i,c_i,d_i$为相应本征态在所选二维正交基底下的复数分量。则相邻两点之间的重叠矩阵为：

$$M(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2)=\begin{pmatrix}\mathrm{a}_1^*a_2+\mathrm{b}_1^*b_2 & \mathrm{a}_1^*c_2+\mathrm{b}_1^*d_2\\ c_1^*a_2+d_1^*b_2 & c_1^*c_2+d_1^*d_2\end{pmatrix} \tag{2.63}$$

可以看到，矩阵的对角元描述了同一能带在相邻动量点之间的投影，而非对角元反映了不同能带之间的投影与混合，即不同能带之间的耦合效应。沿着给定路径对这些重叠矩阵按照动量点的顺序依次相乘，即可得到 Wilson Loop 矩阵。进一步对该矩阵进行对角化，可以得到其本征值$\lambda_\alpha$。由于 Wilson Loop 矩阵为幺正矩阵，其本征值的模长为 1，因此可以写成：

$$\lambda_\alpha=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_\alpha} \tag{2.64}$$

其中$\theta_\alpha$为 Wilson Loop 相位，$\alpha=1,2,\ldots,\mathrm{N}$。因此 Wilson Loop 本征谱包含 $N$条相位曲线，每一条曲线对应于该子空间中的一个 Wilson Loop 本征态。当控制参数（例如固定方向动量）在整个布里渊区变化时，若这些相位发生整数次$2\pi$的绕行，则体系具有非零拓扑不变量。

因此，Wilson Loop 将拓扑不变量的计算转化为对 Wilson Loop 相位演化的分析，不仅在数值上更加稳定，而且在存在多带耦合或交叉的情况下依然保持严格的规范不变性。在下一小节中，我们将进一步讨论 Wilson loop 相位的缠绕结构及其与拓扑不变量之间的对应关系。

### 2.5.2 Wilson Loop 相位缠绕与拓扑不变量

在上一小节中，我们推导得到了 Wilson Loop 的本征相位$\theta_\alpha$。接下来我们对这些相位在布里渊区中的演化行为进行分析，从而得到体系的拓扑性质。

在二维周期体系中，通常沿布里渊区中的某一动量方向（例如$k_1$方向）计算 Wilson Loop[55–60]，并将所得相位视为另一动量分量（例如$k_2$）的函数，即$\theta_\alpha(k_2)$。当$k_2$在整个布里渊区范围内连续变化时，Wilson Loop 相位会形成一组随动量参数演化的相位谱。

对于由 $N$ 条能带构成的子空间，Wilson Loop 矩阵具有 $N$ 个本征值，因此 Wilson Loop 本征谱包含 N 条相位曲线，每一条曲线对应于该子空间中的一个 Wilson Loop 本征态。在这种情况下，体系的拓扑性质不再由单条曲线决定，而是由整个相位谱的整体演化结构所刻画。

若某些 Wilson Loop 相位曲线在布里渊区内发生整数次$2\pi$的连续缠绕，则表明对应能带子空间具有非平庸的拓扑性质，其缠绕次数反映了体系的拓扑不变量。在二维体系中，这种 Wilson Loop 相位的缠绕结构与体系的 Chern 数之间存在直接对应关系。因此，通过分析 Wilson Loop 相位随动量参数的演化行为，可以直观地判断体系能带的拓扑性质。

在后续的计算中，我们将通过绘制 Wilson Loop 相位谱并分析其缠绕结构，以确定不同平带的拓扑特征。

## 2.6 本章小结

本章主要介绍了单层蜂巢光晶格及双层蜂巢光晶格在实验上的实现方案以及理论上能带的计算方法。在实验中为了构造双层体系，我们采用了自旋依赖光晶格技术；在理论上，目前为止，我们有平面波展开法，约化平面波展开法，基于 COMSOL 的有限元计算方法这三种方法，其中，约化平面波展开法相较于另外两种可以在保证计算精度的基础上显著减少计算矩阵的维度，大幅提高计算的效率。除此之外，本章也对用于表征体系拓扑性质的 Wilson Loop 方法进行了介绍。为下一章中研究高轨道平带的形成及平带的拓扑性质奠定了基础。

# 3 扭转双层蜂巢光晶格中的高轨道平带

## 3.1 高轨道平带的形成与层间耦合调控

已有的一些前期工作指出，在扭转双层蜂巢光晶格体系中，当考虑 s 轨道时，在狄拉克点附近，在某些特定的层间耦合强度条件下，可以形成具有拓扑性质的平带，并且对应的 Wilson Loop 会表现出非零的绕行特征[61]。不过，如果把原子填充到更高轨道中，体系是否还可以形成类似的平带，其形成过程是否仍然依赖某一个临界耦合强度，以及在拓扑性质方面是否与 s 轨道情形保持一致，这些问题目前还没能被完全弄清楚，需要进一步进行比较系统的研究[55-59]。

基于第二章中已经建立的理论模型，在本章中，我们将主要对高轨道能带在层间耦合作用下的演化行为进行分析，希望能对上述问题给出一定程度的解释和证明。

### 3.1.1 莫尔超晶格与能带折叠

单层蜂巢光晶格的布里渊区及其能带结构分别如图 1(a) 和 1(b) 所示。当两层蜂巢光晶格之间存在相对扭转角$\theta$时，体系在满足公度条件的情况下将形成具有蜂巢对称性的莫尔超晶格结构。该公度角[41]需满足关系：

$$\tan\frac{\theta}{2}=\frac{\sqrt{3}n}{2m+n},m,n\in\mathbb{Z} \tag{3.1}$$

在该条件下，体系形成周期性莫尔超晶格，其实空间周期相对于原单层晶格放大了$\sqrt{c}$倍。其中参数$c$取决于整数对$(m,n)$，具体为：

$$c=\begin{cases}\frac{m^2+mn+n^2}{3}, & 当\ \frac{m-n}{3}\in\mathbb{Z}\\ m^2+mn+n^2, & 当\ \frac{m-n}{3}\notin\mathbb{Z}\end{cases} \tag{3.2}$$

由于莫尔超胞在实空间中线性尺度放大了$\sqrt{c}$倍，对应的倒空间布里渊区面积缩小为原来的$1/c$，其线性尺度缩小为$1/\sqrt{c}$。因此，莫尔超晶格的布里渊区相比单层蜂巢晶格布里渊区缩小了$\sqrt{c}$倍，如图 1(c) 所示。

在层间耦合强度为零的极限下，双层体系等价于两套彼此独立的单层体系。此时，莫尔超晶格能带可视为单层蜂巢光晶格能带在缩小后的布里渊区中的折叠结果。具体而言，原单层布里渊区中的动量点$\mathbf{k}$可表示为

$$\mathbf{k}=\mathbf{q}+\mathbf{G}^M \tag{3.3}$$

其中$\mathbf{q}$位于莫尔布里渊区内，$\mathbf{G}^M$为莫尔倒格矢。由于不同的$\mathbf{k}$在莫尔布里渊区中对应同一$\mathbf{q}$，单层的一条能带将在新布里渊区中被折叠为 $c$ 条能带；考虑双层体系的两套独立自由度，总计形成 $2c$ 条能带，如图 1(d) 所示。需要强调的是，能带折叠本身仅源于周期性结构的改变，并不引入新的物理相互作用。因此，该折叠谱可作为后续分析层间耦合效应与能带重构的参考基准。

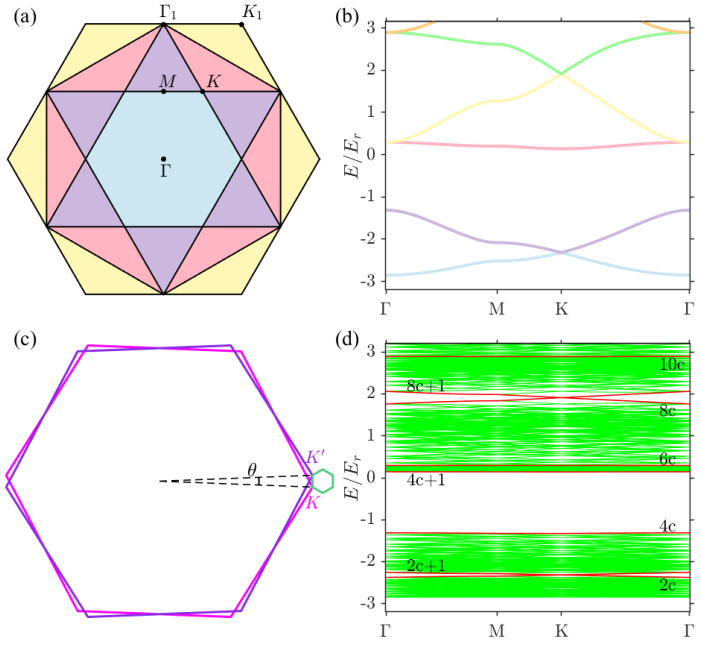



图 3-1 (a) 单层蜂巢光晶格的布里渊区；(b) 单层蜂巢光晶格的能带结构；(c) 扭转双层蜂巢光晶格的布里渊区；(d)扭转双层蜂巢光晶格的能带结构。

Fig. 3-1 (a) Brillouin zone of a monolayer honeycomb optical lattice; (b) band structure of a monolayer honeycomb optical lattice; (c) Brillouin zone of a twisted bilayer honeycomb optical lattice; (d) band structure of a twisted bilayer honeycomb optical lattice.

注：光晶格深度为$V_0 = 4E_\mathrm{r}$，扭转角度为$\theta = 2arctan\left(\frac{\sqrt{3}n}{2m+n}\right), m = 22, n = 1$。

### 3.1.2 层间耦合对平带形成的影响

层间耦合在扭转双层光晶格的能带重构过程中起着决定性作用。图 3-2 给出了在固定光晶格深度$V_0 = 4E_\mathrm{r}$下，能带宽度随层间耦合强度变化的结果。在层间耦合强度为零时，体系等价于两套彼此独立的单层体系，其能带均具有明显色散，如图 3-2(a) 所示。此时所有能带均不平坦，原子具有有限群速度。

已有研究表明，在适当的层间耦合条件下，单层蜂巢光晶格 s 带在狄拉克点附近以及 s 带能带底附近可以被有效压平，分别对应拓扑非平庸和平庸的平带结构。

在此基础上，我们进一步发现，平带的形成并不限于上述两个特殊动量点。在合适的层间耦合强度下，能带的其他简并点、能带底以及能带顶附近同样可以实现显著压平，如图 3-2(b)-(e) 所示。

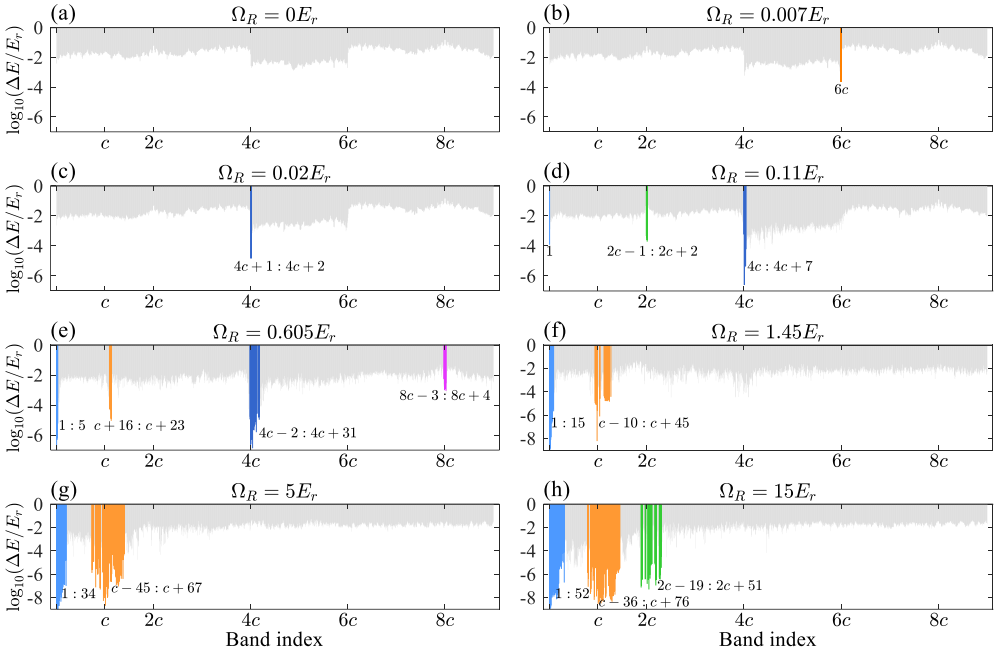



图 3-2 扭转双层蜂巢光晶格的能带宽度随层间耦合强度的变化

Fig. 3-2 Variation of the band width of a twisted bilayer honeycomb optical lattice with interlayer coupling strength

注：灰色表示所有能带的带宽，彩色突出标注了特定位置（包括能带简并点、能带底和能带顶）附近的能带在层间耦合作用下被压平并形成平带。光晶格深度为$V_0 = 4E_r$，扭转角度为$\theta = 2\arctan\left(\frac{\sqrt{3}n}{2m+n}\right), m = 22, n = 1$。

在强层间耦合区域，随着耦合强度的持续增大，体系能带依次在能带指标为 1、$c$、$2c$ 等位置附近被逐步压平，从而形成一系列平带结构，如图 3-2(e)-(h) 所示。这种规律性表明，莫尔超胞参数 $c$ 在能带重构过程中起到了决定性的结构性作用。

进一步进行分析可以发现，对于在不同类型的能带来说，平带的形成规律其实是存在很大差别的。对于像 $2c$、$6c$、$8c$ 等位置的能带，对应在单层光晶格之中，我们发现它们分别对应其中的前几个能带的简并点，在这些位置上，体系通常存在一个特定的临界层间耦合强度，当耦合从零开始逐渐增大接近这一临界值时，能带会被明显压平，形成平带结构；但是，如果层间耦合继续增大，平带消失，能带又会重新出现色散行为，这一点可以从图 3-3 中红色、紫色以及浅蓝色曲线中看出。

与之相比，在能带底部或者能带顶部的位置，例如能带指标为 1、$4c$、$4c$+1 等，对应单层光晶格中 s 带底、s 带顶以及 p 带底的情形，其行为会有所不同。在这些

情况下，当层间耦合从零逐渐增加时，能带宽度会持续减小，并逐渐趋向平坦；而在进入较强耦合区域之后，这种平带特征仍然可以保持下来，如图 3-3 中蓝色、绿色以及橙色曲线所示。

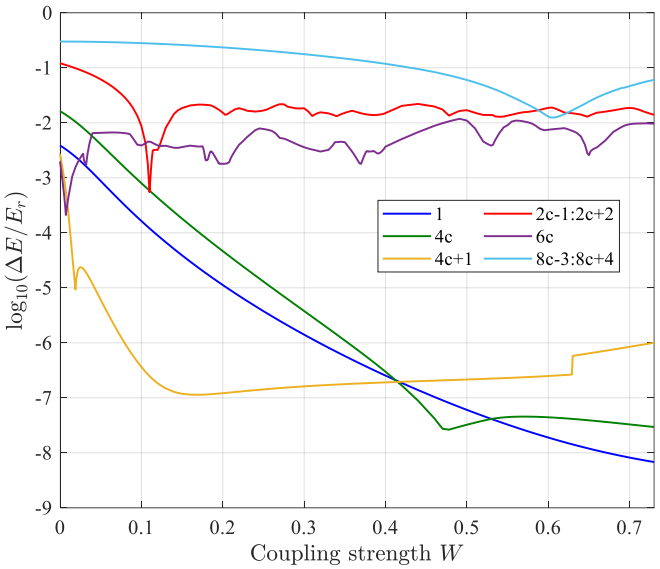



图 3-3 能带简并点附近、能带底和能带顶的带宽随层间耦合强度的变化

Fig. 3-3 Band width near band degeneracy points, band bottoms, and band tops as a function of interlayer coupling strength

注：光晶格深度为$V_0 = 4E_\mathrm{r}$，扭转角度为$\theta = 2arctan\left(\frac{\sqrt{3}n}{2m+n}\right), m = 22, n = 1$

这些结果说明，关于不同的动量结构背景，能带对于层间耦合的响应机制是有着本质区别的，这也为后续进一步讨论平带的拓扑性质提供了一个比较重要的基础。

### 3.1.3 高轨道能带中的平带形成规律与演化特征

在进一步讨论更高轨道能带中的平带形成规律之前，我们首先关注 s 带狄拉克点附近的情形。图 3-4 给出了在固定光晶格深度$V_0 = 4E_\mathrm{r}$和扭转角度：

$$\theta = 2\arctan\left(\frac{\sqrt{3}n}{2m+n}\right) \tag{3.4}$$

$(m = 22, n = 1)$条件下，能带结构随层间耦合强度变化的结果。计算结果表明，只有在特定的临界层间耦合强度$\Omega_R = 0.11E_\mathrm{r}$时体系才能形成平带结构。若层间耦合强度偏离该临界值，无论增大还是减小，能带都会重新获得色散，从而使平带被破坏。特别地，在该临界耦合强度下，能带指标为 $2c-1$、$2c$、$2c+1$ 和 $2c+2$ 的四条能带同时被显著压平，形成四重简并的平带结构，如图 3-4(a)-(c) 所示。

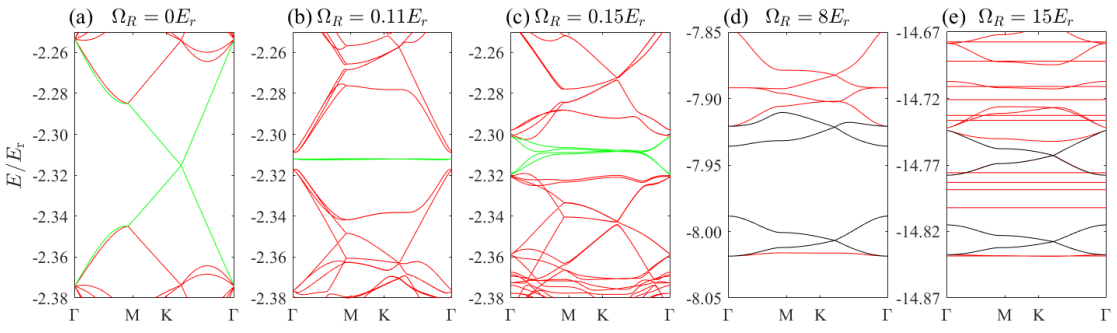



图 3-4 s 带狄拉克点附近的能带随层间耦合强度的变化

Fig. 3-4 Band structure near the Dirac point of the s band as a function of interlayer coupling strength

注：(a)-(c) 弱层间耦合区域平带的形成过程；(d)-(e) 强层间耦合区域涌现的受到莫尔超晶格对称性保护的新狄拉克点。光晶格深度为$V_0 = 4E_\mathrm{r}$，扭转角度为$\theta = 2\arctan\left(\frac{\sqrt{3}n}{2m+n}\right), m = 22, n = 1$；图 (a)-(c) 中，绿线突出显示了能带指标从 2$c$-1 到 2$c$+2 的四条能带；图(d)和图(e)中，黑线突出显示了新形成的狄拉克点能带结构。

这种在 s 带狄拉克点附近形成平带的情况，也类似于扭转双层石墨烯中在相同位置出现平带所表现出的特征，两者具有相似性。因此可以说这对于用超冷原子系统来模拟扭转石墨烯中的平带物理奠定了很好的基础以及提供了很好的借鉴意义。进一步的分析还可以发现，虽然层间耦合会破坏原来单层蜂巢光晶格中已有的狄拉克点结构，但是当进入较强层间耦合区域之后，体系中又会重新出现新的狄拉克点，如图 3-4(d)-(e) 所展示的那样。这些新出现的狄拉克点，可以理解为来源于莫尔超晶格本身的对称性，并且受到这种对称性的保护，因此在拓扑性质上表现出一定的稳定性。此外，如果在此基础上进一步考虑将两个莫尔超晶格再次进行扭转堆叠，那么体系中可能会出现更加丰富的平带结构，同时也伴随着更为丰富的拓扑性质。而这个方面目前还缺乏相关工作的报道，但无疑它给用超冷原子系统来探究更为复杂的莫尔结构下的平带物理开创了一条新思路。

在对 s 轨道狄拉克点附近的平带形成机制进行了讨论之后，可以进一步去考察，在能带顶、能带底以及高轨道简并点附近，平带是如何随层间耦合发生演化的。这里我们首先关注的是 s 带能带顶部，以及其相邻更高能带底部区域，在层间耦合作用下的能带变化情况。图 3-5(a)-(e) 展示了在$V_0 = 4E_\mathrm{r}$条件下，能带结构随着层间耦合强度变化时的结果。

从图中可以看出，当层间耦合强度接近$\Omega_R = 0.11E_\mathrm{r}$时，能带指标为 4$c$ 的能带会被明显压平，从而形成一个较为稳定的平带。与 s 轨道狄拉克点附近的情况有所不同的是，这里的平带在层间耦合进一步增强之后，并不会被破坏，而是一直保持比较平坦的特征。同时，这一平带与相邻能带之间的能隙，可以通过调节层间耦合强度

来实现连续调控。随着耦合强度继续增大，在能带顶部区域还会逐渐出现由多条平带组成的结构，类似一个“平带簇”，其能级分布看起来接近离散的形式。

需要进一步说明的是，在层间耦合为零时，由于双层蜂巢光晶格本身的对称性，体系中的能带通常是具有二重简并的。当引入层间耦合之后，这种简并性会被打破，因此在弱耦合区域内，能带一般不再保持二重简并。不过，在较强耦合的区域中，由于莫尔超晶格新的对称性约束，有一部分能带又会重新表现出简并特性。具体计算结果显示，除了第 $4c$ 条能带保持非简并之外，其余新出现的平带大多呈现出双重简并。需要指出的是，在层间耦合为零时，由于双层蜂巢光晶格的对称性，体系能带普遍具有二重简并。层间耦合的引入打破了这一简并性，因此弱耦合区域的能带不再保持二重简并。然而在强耦合区间，部分能带在莫尔超晶格新的对称性约束下重新恢复简并特性。具体而言计算结果表明，除第 $4c$ 条能带保持非简并外，其余新形成的平带均呈现双重简并特征。

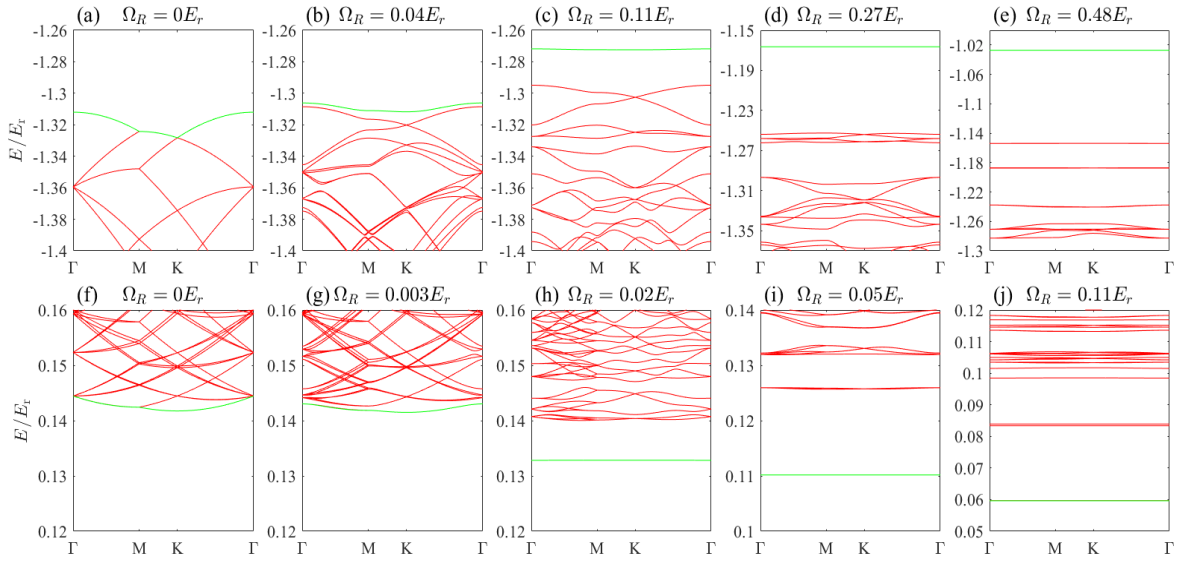



图 3-5 高轨道能带底和能带顶附近的能带随层间耦合强度的变化

Fig. 3-5 Band structure near the bottoms and tops of higher-orbital bands as a function of interlayer coupling strength

注：其中 (a)-(e) 对应能带指标为 $4c$（绿线）附近的能带结构，(f)-(j) 对应能带指标为 $4c$+1（绿线）附近的能带结构。

而这些简并或非简并平带组成的“平带簇”，类似于原子能级具有离散能谱特点，有利于进一步考虑多轨道间相互作用问题，在超冷原子系统中，通过调控相互作用强度与占据方式，由单带强关联过渡到多轨道强关联，进而观察到轨道局部化、轨道序

甚至更多种对称性被破坏的新奇现象。

在更高轨道能带底部，平带形成规律与能带顶部情形相似。随着层间耦合强度的增加，能带逐渐压平，并可通过耦合调节带隙大小，在强耦合区域同样形成由多条平带构成的簇结构，如图 3-5(f)-(j) 所示。

进一步考虑高轨道能带简并点附近的平带形成机制。回顾单层蜂巢光晶格的能带结构，除前文讨论的 s 轨道狄拉克点外，在第三与第四条能带之间还存在一个呈抛物形色散的简并点，如图 3-1(b) 所示。与线性色散的狄拉克点不同，该简并点的能带色散呈抛物形结构，且该处单层能带本身较为平坦，因此在较弱层间耦合作用下即可被压平。例如在$V_0 = 4E_\mathrm{r}$、$m = 22$、$n = 1$条件下，当$\Omega_\mathrm{R} = 0.007E_\mathrm{r}$时，能带指标为 $6c$ 的能带已接近平坦状态。然而，与 s 带狄拉克点处形成的孤立平带不同，此处形成的平带在浅光晶格条件下与其他能带之间不存在明显带隙，并且在耦合继续增强后重新获得色散，如图 3-6(a)-(e) 所示。

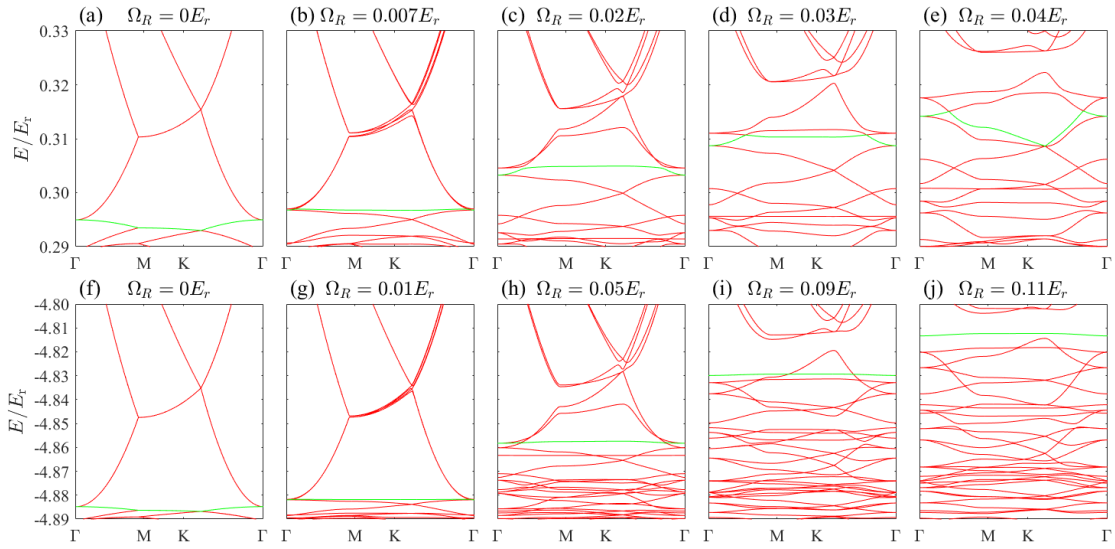



图 3-6 具有抛物型色散的高轨道能带简并点附近 (6c) 能带随层间耦合强度的变化

Fig. 3-6 Band structure near the higher-orbital band degeneracy point (6c) with parabolic dispersion as a function of interlayer coupling strength

注：(a)-(e) 对应光晶格深度为$V_0 = 4E_r$的能带结构，(f)-(j) 对应光晶格深度为$V_0 = 10\mathrm{E_r}$的能带结构。扭转角度固定为$\theta = 2\arctan\left(\frac{\sqrt{3}n}{2m+n}\right), m = 22, n = 1$。图中，绿线突出显示了能带指标为 $6c$ 的能带。

当光晶格深度增大至$V_0 = 10E_\mathrm{r}$时，该体系能带分布又呈现出另外一种情况，通过改变耦合强度，我们发现只要平带形成，其结构就不会再被逐渐增强的层间耦合破坏，而是发生能带漂移现象：平带首先在能带的内部发生移动现象，随后逐渐进入带

隙区域，最终形成孤立平带，如图 3-6(f)-(j) 所示。也就是说深光晶格不仅增强了平带的稳定性，并且改变了其随着耦合变化而演化的普遍规律。

在更高轨道的第四能带和第五能带之间，还存在另外一个具有线性色散关系的狄拉克简并点，如图 3-1(b) 和图 3-1(d) 所示。该简并点同样来源于蜂巢晶格能带结构中的对称性保护，是高轨道能带中的一个重要特征。通过进一步研究其在层间耦合作用下的演化行为可以发现，该狄拉克点附近的能带演化规律与 s 轨道狄拉克点的情形在整体上具有相似的趋势：当层间耦合强度从零逐渐增大时，原本具有线性色散的能带逐渐被压平；当层间耦合强度增加到某一临界值附近时，能带达到最为平坦的状态，并在该能量区域形成平带结构。

而与 s 轨道狄拉克点作比较，该高轨道狄拉克点附近形成平带所需的层间耦合强度与 s 轨道处相比大很多，这样的不同也意味着，高轨道能带之间的耦合结构及其能带色散极大地影响着平带的形成。具体而言，当我们固定光晶格深度$V_0 = 4E_\mathrm{r}$的条件下，产生平带所需的层间耦合强度约为$\Omega_R = 0.605E_\mathrm{r}$, 如图 3-7 所示。

此外，不同于此前 s 轨道狄拉克点由于层间耦合而产生四重简并平带的况，在此高轨道狄拉克点附近，能带指标分别为 8$c$−3、8$c$−2、8$c$−1、8$c$、8$c$+1、8$c$+2、8$c$+3 和 8$c$+4 的八条能带（记为 8$c$−3:8$c$+4）会同时被压平，即形成了八重简并平带。这表明在高轨道区域中，层间耦合可以对更多能带产生影响，并更大程度上简并平带。

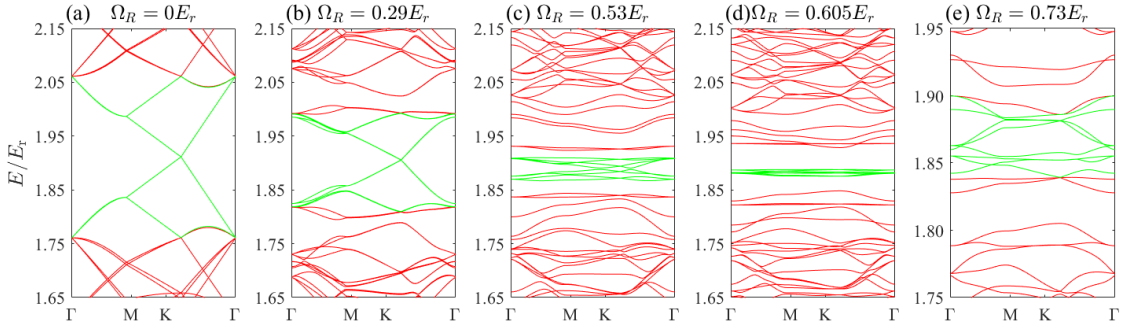



图 3-7 高轨道狄拉克点附近 (8c) 能带随层间耦合强度的变化

Fig. 3-7 Band structure near the higher-orbital Dirac point (8c) as a function of interlayer coupling

注：光晶格深度为$V_0 = 4E_\mathrm{r}$，扭转角度为$\theta = 2\arctan\left(\frac{\sqrt{3}n}{2m+n}\right), m = 22, n = 1$。图中，绿线突出显示了能带指标从 8$c$-3 到 8$c$+4 的八条能带。

进一步研究分析能够发现，在这八条能带完全压平之前，此狄拉克点附近存在的另外四条能带（对应能带指标为 8$c$−5、8$c$−4、8$c$+5 和 8$c$+6）会在较弱的层间耦合作用下较早的发生明显的压平情况，进而产生两个较平坦的能带，如图 3-7(c) 所示，

这也表明在高轨道区域中，能带对于层间耦合的响应是具有明显的层次区分的，不同能带对耦合强度的敏感性不同，从而导致平带逐步形成的过程。

综上所述，不同轨道以及不同类型的简并点对于层间耦合有不同的反应。线性色散的狄拉克点表现出明显的临界耦合现象，而抛物形简并点更易被压平，与线性色散的狄拉克点相比，该抛物型简并点附近的单层能带本身已经较为平坦，因此在较弱的层间耦合作用下即可被压平。但是在这个位置所得到的平带与其他能带之间并没有明显的带隙，而且随着层间耦合增加，平带又会重新获得色散而消失；同时能量最低点更有利于在较强的层间耦合作用下形成稳定的平带簇，这说明了莫尔超晶格可以多层次地影响能带结构，同时也为进一步研究高轨道平带中的拓扑以及强相关性打下了基础。

## 3.2 高轨道平带的拓扑性质

本小节我们将研究这些平带所具有的拓扑性质，在上一章中已经提到过，能带子空间的拓扑性质可以由 Wilson Loop 本征态相位变化给出，接下来我们将这种方法用于本模型中的能带。

如图 3-8(a) 所示，在布里渊区内沿某一定向（例如沿$\mathbf{b_1}$方向）选择一个闭合路径$C_{\mathrm{i}}$，并将该路径离散为一系列按顺序排列的动量点$\mathbf{k}_0 \to \mathbf{k}_1 \to \ldots \to \mathbf{k}_L$, 其中$\mathbf{k}_L$和$\mathbf{k}_0$是布里渊区的两个边界上的点，在倒空间中是等价动量。

对于具有 $N$ 条能带的子空间，通过求出相邻动量点处布洛赫态之间的重叠矩阵并沿路径依次进行连乘即可得到相应的 Wilson Loop 矩阵。对该矩阵进行对角化即可得到 Wilson Loop 本征相位谱，它随动量参数的变化而变化可以表征能带子空间的拓扑结构。

先前有研究指出，在 s 带狄拉克点附近由层间耦合诱导形成的平带具有非平庸拓扑性质，它们的 Wilson Loop 相位呈现从 0 到$\pi$的连续缠绕，如图 3-8(b) 所示。可以与之进行对比研究的是，我们发现高轨道能带中的平带表现出明显不同的拓扑响应。特别地，在能带底 (4*c*)、能带顶 (4*c*+1) 以及具有抛物型色散的高轨道能带简并点 (6*c*) 处形成的平带，其 Wilson Loop 相位分布均为接近零，并不发生缠绕，表明这些平带在所选子空间内可视为拓扑平庸，其几何相位效应被极大程度上抑制，如图 3-8(c) 所示。

另一方面，在高轨道的狄拉克点（8*c* 位置）附近形成的平带，其几何结构会显

得更加复杂一些。从 Wilson Loop 的相位上来看并没有像 s 带狄拉克点平带那样，出现比较清晰的从$0 \to \pi$的缠绕行为，但它在数值上也并不是严格等于零，而是在零附近存在比较大的波动，这说明此平带对应的子空间并不像 s 带狄拉克平带那样具有强烈的拓扑缠绕性，但是它也有一定的几何相位响应，甚至可能具有非阿贝尔几何性质，如图 3-8(d) 中所展示的结果。

由以上可知，不同来源的平带在 Wilson Loop 谱中呈现出明显不同的拓扑特征：s 轨道狄拉克点平带表现出典型的拓扑非平庸缠绕，而高轨道能带底、能带顶以及抛物型简并点处形成的平带则主要表现为拓扑平庸；高轨道狄拉克点附近的平带介于上述两种情况之间，体现出一定程度的几何相位响应。这些结果表明，莫尔超晶格中的平带不仅在能带结构上呈现多样性，其拓扑性质也根据能带来源和简并结构的不同而表现出显著差异。

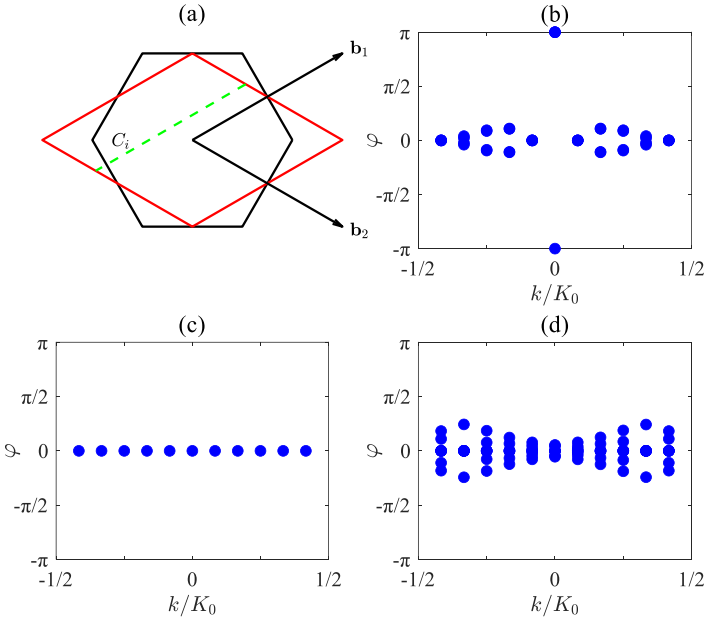



图 3-8 扭转双层蜂巢光晶格中三类平带的 Wilson loop 相位

Fig. 3-8 Wilson-loop phases of three types of flat bands in a twisted bilayer honeycomb optical lattice

注：(a) 莫尔超晶格布里渊区（黑色六边形）和 Wilson loop 相位计算区域（红色菱形）示意图。虚线$C_i$表示用于计算 Wilson loop 相位的某一闭合路径。(b)、(c)、(d) 分别表示 s 轨道狄拉克点 ($2c$-1:$2c$+1)、能带底 ($4c$) 或能带顶 ($4c$+1) 或抛物型色散的高轨道能带简并点 ($6c$)、高轨道狄拉克点 ($8c$-3:$8c$+4) 处的 Wilson loop 相位在布里渊区的变化。横坐标 $k$ 表示沿布里渊区某一方向的动量位置（该方向的周期为$K_0$），纵坐标$\varphi$表示 Wilson loop 相位。

以上这些工作在一定程度上说明，在扭转双层光晶格体系中，平带在多个高对称

点附近的区域都有可能出现，其对应的拓扑性质也极大的受到平带来源以及相应的能带简并形式影响。进一步而言，这也说明在莫尔超晶格体系中不同类型的平带之间拓扑性质是有很大区别的。因此，上述发现对于以后深入研究轨道占据较多的高轨道平带中所可能存在的拓扑效应及其与粒子之间相互作用形成的强相关量子态提供了良好基础。

## 3.3 本章小结

本章基于第二章的理论计算基础，进一步研究了高轨道平带的形成与层间耦合调控对其的影响，研究结果表明，随着耦合不断增强，不同位置的能带被相继有效压平。高轨道中不同位置的平带形成与演化各不相同，在能带简并点的 $2c$，$6c$，$8c$ 处，平带的形成需要一个明显的临界耦合强度，当耦合强度接近临界耦合时，能带变得十分平坦，如果耦合强度继续增大，能带会重新获得色散；与之相反的能带顶部、底部的 1，$4c$，$4c$+1 位置，这里的平带在层间耦合进一步增强之后，并不会被破坏，而是一直保持比较平坦的特征。同时，我们也计算了不同位置平带的拓扑性质，有三种典型的情况，低轨道 Dirac 点位置平带处存在明显的拓扑非平庸现象，高轨道 Dirac 点位置处存在一定的拓扑响应，其他特殊位置平带表现为拓扑平庸，之后我们将继续进一步研究高轨道 Dirac 点位置附近的平带拓扑性质。

# 4 总结与展望

近年来，扭转二维量子材料因为其莫尔超晶格所引入的平带结构，以及由此产生的一系列强关联物理现象，逐渐受到较多关注。特别是在所谓魔角石墨烯体系中，层与层之间的相对转角可以明显改变体系的能带分布，使电子的动能被有效压缩，从而使粒子之间相互作用效应得到增强，并进一步产生例如关联绝缘态、非常规超导态以及拓扑量子相等多种新奇物理现象。与传统固体材料相比，超冷原子光晶格体系具有较高的可调控性，在晶格结构、相互作用强度以及统计性质等方面都可以进行比较精确的调节，因此被认为是研究莫尔物理以及扭转量子体系的一个较理想的量子模拟平台。在这样的背景之下，本文选择扭转双层蜂巢光晶格作为主要研究对象，重点对该体系中高轨道能带的平带结构及其相关性质进行了分析，并从理论角度探讨不同参数条件下平带形成的物理机制以及其拓扑几何特征。主要工作与结论如下：

（1）文章构建了双层扭转蜂巢晶格的理论模型，并且用平面波展开法对能带进行了精确求解。

从理论模型出发，在二维光学晶格势一般构造之后，本文给出了三角及六角光晶格势的具体形式及其所对应晶格结构，在此基础上，在上下两层蜂巢光晶格之间加入一定相对旋转角度得到扭转双层蜂巢光晶格模型并给出其对应的单粒子哈密顿量，运用布洛赫定理将其转换到动量空间下得到便于计算能带的矩阵形式，之后用平面波展开法求出系统的能带并对其主要能带特性进行分析。

（2）在此基础上，本文进一步探讨扭转双层蜂巢光晶格中高轨道能带平带结构和平带形成规律。

研究表明，平带不仅可以在 s 轨道狄拉克点附近出现，在其它能带简并点及能带底、能带顶处也可存在。在能带简并点处，平带出现一般伴随有一个临界层间耦合强度，在此临界值附近能带展宽最显著，在能带底或者能带顶处，平带出现并不具有明显的临界性，而是在不断增加层间耦合时，能带逐渐变得越来越平坦。在较深光晶格区域内，对于拥有抛物型色散关系高轨道能带，在其简并点附近形成的平带可能会随着层间耦合强度变化发生一种类似于“平带漂移”现象。另外，在较强的层间耦合作用下，s 轨道能带顶部或更高轨道能带底部可能会出现多个平带组成的“平带簇”，加入超冷原子之间相互作用后，就可以获得多轨道强关联模型。而在强耦合区域内，也会出现由于莫尔超晶格对称性导致的新狄拉克点。

（3）同时利用 Wilson Loop 方法计算能带几何相位及拓扑性质，为进一步探讨高轨道平带相关问题奠定良好基础。

在上述工作的基础上，本文还可以从拓扑结构、强关联效应以及实验实现等方面进一步展开研究。

（1）更复杂的拓扑结构。进一步的研究显示，高轨道平带和平带出现在 s 轨道狄拉克点附近形成的平带在拓扑性质上和几何相位响应方面存在着很大差异，目前正在研究的工作表明，通过 Wilson Loop 分析，该双层扭转蜂巢光晶格在不同能带区域呈现出分层的拓扑结构。在 2*c* 附近，Wilson Loop 谱表现出明显绕行，对应脆拓扑特征；在 4*c* 附近，Wilson Loop 谱转变为量子化局域分布，表明 Wannier 心被锁定于非原子 Wyckoff 位置，对应阻碍原子极限相；而在更高能的 8*c* 附近，出现不连续跃变的异常结构。进一步的研究对我们理解扭转双层蜂巢光晶格内各种不同类型的可调谐平带和平带提供了有益指导。

（2）强关联量子态。需要注意的是，虽然这里主要讨论的是单粒子能带结构及其相关拓扑几何性质，但是在平带系统中，粒子间的相互作用起着非常重要的作用。因为平带可以使粒子具有很小的动能，进而使得相互作用占主导地位，所以未来的工作就可以在该基础上研究由相互作用导致的强关联量子态[86-92]，比如分数量子霍尔态、拓扑超流体等新的量子物态；另外也可以通过改变晶格深度、层间耦合强度以及扭转角等方式来研究不同种类平带之间的耦合以及这对系统的拓扑性所造成的影响[93-97]，从而得到更多的能带以及相应的相变信息。

（3）高轨道平带的实验实现。另一方面，由于近年来超冷原子实验技术取得巨大进步，使得制作扭转光晶格成为可能。比如可以利用自旋选择性光晶格或人为引入额外维度的方法得到有相对转角的两层光晶格并用微波或拉曼耦合实现它们之间的有效耦合。将来如果有相应的实验工作，就可以检验文中提出的高轨道平带以及它所具有的拓扑性质，并且还可以在此基础上寻找新的强关联量子相。

总体上说，双层扭转蜂巢光晶格为研究莫尔平坦带提供了一个具有良好可调性的量子模拟器，也为我们探究强关联量子现象及拓扑量子相提供了新途径，在未来的工作中，我们相信它将在量子模拟、拓扑物态以及强关联物理等方面发挥更大作用。

# 参考文献

[1] BLOCH I, DALIBARD J, ZWERGER W. Many-body physics with ultracold gases[J]. Reviews of Modern Physics, 2008, 80(3): 885-964.

[2] COOPER N R, DALIBARD J, SPIELMAN I B. Topological bands for ultracold atoms[J]. Reviews of Modern Physics, 2019, 91(1): 015005.

[3] LIU J P, DAI X, SCHOOL OF PHYSICAL SCIENCE AND TECHNOLOGY, SHANGHAI TECH UNIVERSITY, SHANGHAI 201210, CHINA, et al. Topological properties and orbital magnetism in twisted graphene systems[J]. Acta Physica Sinica, 2020, 69(14): 147301.

[4] ABBAS G, LI Y, WANG H, et al. Recent Advances in Twisted Structures of Flatland Materials and Crafting Moiré Superlattices[J]. Advanced Functional Materials, 2020, 30(36): 2000878.

[5] ANDREI E Y, MACDONALD A H. Graphene bilayers with a twist[J]. Nature Materials, 2020, 19(12): 1265-1275.

[6] LI X F, SUN R X, WANG S Y, et al. Recent Advances in Moiré Superlattice Structures of Twisted Bilayer and Multilayer Graphene[J]. Chinese Physics Letters, 2022, 39(3): 037301.

[7] TIAN Z Y, LI S Y, ZHOU H T, et al. Moiré physics in two-dimensional materials: Novel quantum phases and electronic properties[J]. Chinese Physics B, 2025, 34(2): 027301.

[8] LEWENSTEIN M, SANPERA A, AHUFINGER V, et al. Ultracold atomic gases in optical lattices: mimicking condensed matter physics and beyond[J]. Advances in Physics, 2007, 56(2): 243-379.

[9] GROSS C, BLOCH I. Quantum simulations with ultracold atoms in optical lattices[J]. Science, 2017, 357(6355): 995-1001.

[10] BISTRITZER R, MACDONALD A H. Moiré bands in twisted double-layer graphene[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2011, 108(30): 12233-12237.

[11] CAO Y, FATEMI V, DEMIR A, et al. Correlated insulator behaviour at half-filling in magic-angle graphene superlattices[J]. Nature, 2018, 556(7699): 80-84.

[12] CAO Y, FATEMI V, FANG S, et al. Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices[J]. Nature, 2018, 556(7699): 43-50.

[13] KENNES D M, CLAASSEN M, XIAN L, et al. Moiré heterostructures as a condensed-matter quantum simulator[J]. Nature Physics, 2021, 17(2): 155-163.

[14] MA C, YUAN S, CHEUNG P, et al. Intelligent infrared sensing enabled by tunable moiré quantum geometry[J]. Nature, 2022, 604(7905): 266-272.

[15] BOHRDT A, HOMEIER L, REINMOSER C, et al. Exploration of doped quantum magnets with ultracold atoms[J]. Annals of Physics, 2021, 435: 168651.

[16] WANG H X, GUO G Y, JIANG J H. Band topology in classical waves: Wilson-loop approach to topological numbers and fragile topology[J]. New Journal of Physics, 2019, 21: 093029.

[17] THOULESS D J, KOHMOTO M, NIGHTINGALE M P, et al. Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential[J]. Physical Review Letters, 1982, 49: 405-408.

[18] BERNEVIG B A, HUGHES T L, ZHANG S C. Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells[J]. Science, 2006, 314(5806): 1757-1761.

[19] KONIG M, WIEDMANN S, BRUNE C, et al. Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells[J]. Science, 2007, 318(5851): 766-770.

[20] FU L, KANE C L, MELE E J. Topological insulators in three dimensions[J]. Physical Review Letters, 2007, 98: 106803.

[21] FU L, KANE C L. Superconducting proximity effect and Majorana fermions at the surface of a topological insulator[J]. Physical Review Letters, 2008, 100: 096407.

[22] AO X, LIN Z, CHAN C T. One-way edge mode in a magneto-optical honeycomb photonic crystal[J]. Physical Review B, 2009, 80: 033105.

[23] HENNIGHAUSEN Z, KAR S. Twistronics: a turning point in 2D quantum materials[J]. Electronic Structure, 2021, 3(1): 014004.

[24] GAO W, LAWRENCE M, YANG B, et al. Topological photonic phase in chiral hyperbolic metamaterials[J]. Nature Communications, 2015, 6: 1-7.

[25] JIANG J W. Graphene versus $MoS_2$: A short review[J]. Frontiers of Physics, 2015, 10(3): 287-302.

[26] DINDORKAR S S, KURADE A S, SHAIKH A H. Magical moiré patterns in twisted bilayer graphene: A review on recent advances in graphene twistronics[J]. Chemical Physics Impact, 2023, 7: 100325.

[27] TRAN K, MOODY G, WU F, et al. Evidence for moiré excitons in van der Waals heterostructures[J]. Nature, 2019, 567(7746): 71-75.

[28] ZHANG C, CHUU C P, REN X, et al. Interlayer couplings, Moiré patterns, and 2D electronic superlattices in $MoS_2$ /$WSe_2$ hetero-bilayers[J]. Science Advances, 2017, 3(1): e1601459.

[29] HUNT B, SANCHEZ-YAMAGISHI J D, YOUNG A F, et al. Massive Dirac Fermions and Hofstadter Butterfly in a van der Waals Heterostructure[J]. Science, 2013, 340(6139): 1427-1430.

[30] LI S, WEI K, LIU Q, et al. Twistronics and moiré excitonic physics in van der Waals heterostructures[J]. Frontiers of Physics, 2024, 19(4): 42501.

[31] KIM H, KIM C, JUNG Y, et al. In-plane anisotropic two-dimensional materials for twistronics[J]. Nature Reviews Physics, 2024, 6: 85-103.

[32] KARIYADO T. Flat band in twisted bilayer Bravais lattices[J]. Physical Review B, 2019, 99: 035131.

[33] HUANG C, YE F, CHEN X, et al. Localization-delocalization wavepacket transition in Pythagorean aperiodic potentials[J]. Scientific Reports, 2016, 6(1): 32546.

[34] WANG P, ZHENG Y, CHEN X, et al. Localization and delocalization of light in photonic moiré lattices[J]. Nature, 2020, 577(7788): 42-46.

[35] MAO X R, SHAO Z K, LUAN H Y, et al. Magic-angle lasers in nanostructured moiré superlattice[J]. Nature Nanotechnology, 2021, 16(10): 1099-1105.

[36] MENG Z, WANG L, HAN W, et al. Atomic Bose–Einstein condensate in twisted-bilayer optical lattices[J]. Nature, 2023, 615(7951): 231-236.

[37] GONZÁLEZ-TUDELA A, CIRAC J I. Cold atoms in twisted-bilayer optical potentials[J]. Physical Review A, 2019, 100(5): 053604.

[38] SALAMON T, CELI A, CHHAJLANY R W, et al. Simulating Twistronics without a Twist[J]. Physical Review Letters, 2020, 125(3): 030504.

[39] LUO X W, ZHANG C. Spin-Twisted Optical Lattices: Tunable Flat Bands and Larkin-Ovchinnikov Superfluids[J]. Physical Review Letters, 2021, 126(10): 103201.

[40] ZENG J H, ZHU Q, HE L. Interaction-induced moiré systems in twisted bilayer optical lattices[J]. Physical Review A, 2025, 111(6): 063317.

[41] WAN X T, GAO C, SHI Z Y. Fractal Spectrum in Twisted Bilayer Optical Lattice[J]. Physical Review Letters, 2026, 136(3): 033401.

[42] PAUL G C, RECHER P, SANTOS L. Interacting Bose gases in twisted-bilayer optical lattices[J]. Physical Review A, 2026, 113(1): 013324.

[43] MANDEL O, GREINER M, WIDERA A, et al. Coherent Transport of Neutral Atoms in Spin-Dependent Optical Lattice Potentials[J]. Physical Review Letters, 2003, 91(1): 010407.

[44] SOLTAN-PANAHI P, STRUCK J, HAUKE P, et al. Multi-component quantum gases in spin-dependent hexagonal lattices[J]. Nature Physics, 2011, 7(5): 434-440.

[45] KE Y, HUANG J, ZHUANG M, et al. Compact gravimeter with an ensemble of ultracold atoms in spin-dependent optical lattices[J]. Physical Review A, 2018, 98(5): 053826.

[46] YANG B, DAI H N, SUN H, et al. Spin-dependent optical superlattice[J]. Physical Review A, 2017, 96(1): 011602.

[47] MCKAY D, DEMARCO B. Thermometry with spin-dependent lattices[J]. New Journal of Physics, 2010, 12(5): 055013.

[48] CAO M T, HAN L, QI Y R, et al. Calculation of the Spin-Dependent Optical Lattice in Rubidium Bose-Einstein Condensation[J]. Chinese Physics Letters, 2012, 29(3): 034201.

[49] WEN K, MENG Z, WANG L, et al. Experimental study of tune-out wavelengths for spin-dependent optical lattice in $^{87}$Rb Bose–Einstein condensation[J]. Journal of the Optical Society of America B, 2021, 38(11): 3269.

[50] SCHNORRBERGER U, THOMPSON J D, TROTZKY S, et al. Electromagnetically Induced Transparency and Light Storage in an Atomic Mott Insulator[J]. Physical Review Letters, 2009, 103(3): 033003.

[51] AIDELSBURGER M, ATALA M, LOHSE M, et al. Realization of the Hofstadter Hamiltonian with Ultracold Atoms in Optical Lattices[J]. Physical Review Letters, 2013, 111(18): 185301.

[52] DUAN L M, DEMLER E, LUKIN M D. Controlling Spin Exchange Interactions of

Ultracold Atoms in Optical Lattices[J]. Physical Review Letters, 2003, 91(9): 090402.

[53] JAKSCH D, BRUDER C, CIRAC J I, et al. Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices[J]. Physical Review Letters, 1998, 81(15): 3108-3111.

[54] OSTROVSKAYA E A, KIVSHAR Y S. Localization of Two-Component Bose-Einstein Condensates in Optical Lattices[J]. Physical Review Letters, 2004, 92(18): 180405.

[55] YE Q, QIN X, LI Y, et al. Band-gap structure and chiral discrete solitons in optical lattices with artificial gauge fields[J]. Annals of Physics, 2018, 388: 173-185.

[56] GRUSDT F, LI T, BLOCH I, et al. Tunable spin-orbit coupling for ultracold atoms in two-dimensional optical lattices[J]. Physical Review A, 2017, 95(6): 063617.

[57] LEBLANC L J, THYWISSEN J H. Species-specific optical lattices[J]. Physical Review A, 2007, 75(5): 053612.

[58] SHAO H J, WANG Y X, ZHU D Z, et al. Antiferromagnetic phase transition in a 3D fermionic Hubbard model[J]. Nature, 2024, 632(8024): 267-272.

[59] DAI H N, YANG B, REINGRUBER A, et al. Four-body ring-exchange interactions and anyonic statistics within a minimal toric-code Hamiltonian[J]. Nature Physics, 2017, 13(12): 1195-1200.

[60] PO H C, ZOU L, VISHWANATH A, et al. Origin of Mott insulating behavior and superconductivity in twisted bilayer graphene[J]. Phys. Rev. X, 2018, 8: 031089.

[61] SUI W, HAN W, HAN Z V, et al. Topologically nontrivial and trivial flat bands via weak and strong interlayer coupling in twisted bilayer honeycomb optical lattices for ultracold atoms[J]. Physical Review A, 2025, 111(6): 063306.

[62] FAN Z Z, WANG J, LI Y, et al. Floquet-engineered moiré quasicrystal patterns of ultracold Bose gases in twisted bilayer optical lattices[J]. Phys. Lett. A, 2026, 585: 131646.

[63] PEDROZO-PEÑAFIEL E, COLOMBO S, SHU C, et al. Entanglement on an optical atomic-clock transition[J]. Nature, 2020, 588(7838): 414-418.

[64] XU L, CHEN S L, YANG X Y, et al. Ground state of Rydberg-dressed Bose gas confined in periodic moiré lattices[J]. Acta Physica Sinica, 2023, 72(10): 100307.

[65] TÖRMÄ P, PEOTTA S, BERNEVIG B A. Superconductivity, superfluidity and quantum geometry in twisted multilayer systems[J]. Nature Reviews Physics, 2022, 4: 528–542.

[66] DELONE N B, VLADIMIR P K. AC Stark shift of atomic energy levels[J]. Physics Uspekhi, 1999, 42(7): 669.

[67] 齐盼丽. $^{87}$Rb 原子基态超精细能级 Ac-Stark 频移张量分量研究[D]. 武汉：华中师范大学, 2018.

[68] Park C Y, Noh H, Lee C M, et al. Measurement of the Zeeman-like ac Stark shift[J]. Physical Review A, 2001, 63(3): 032512.

[69] Kai W, Meng Z, Wang L, et al. Experimental study of spin-dependent optical lattice and tune-out wavelength for 87Rb Bose-Einstein condensate[J]. Journal of the Optical Society of America B, 2021, 38(11): 3269-3276.

[70] BECHER J H, BAIER S, AIKAWA K, et al. Anisotropic polarizability of erbium atoms [J]. Physical Review A, 2018, 97(1): 012509.

[71] TU P, ZHAO X, XI B, et al. Gap solitons in Bose-Einstein condensate under moiré optical lattice[J]. Acta Physica Sinica, 2026, 75(3): 0.

[72] WINDPASSINGER P, SENGSTOCK K. Engineering novel optical lattices[J]. Reports on Progress in Physics, 2013, 76(8): 086401.

[73] BROWN C D, CHANG S W, SCHWARZ M N, et al. Direct geometric probe of singularities in band structure[J]. Science, 2022, 377(6612): 1319-1322.

[74] STRUCK J, ÖLSCHLÄGER C, LE TARGAT R, et al. Quantum Simulation of Frustrated Classical Magnetism in Triangular Optical Lattices[J]. Science, 2011, 333(6045): 996-999.

[75] SEBBY-STRABLEY J, ANDERLINI M, JESSEN P S, et al. Lattice of double wells for manipulating pairs of cold atoms[J]. Physical Review A, 2006, 73(3): 033605.

[76] JO G B, GUZMAN J, THOMAS C K, et al. Ultracold Atoms in a Tunable Optical Kagome Lattice[J]. Physical Review Letters, 2012, 108(4): 045305.

[77] TAIE S, OZAWA H, ICHINOSE T, et al. Coherent driving and freezing of bosonic matter wave in an optical Lieb lattice[J]. Science Advances, 2015, 1(10): e1500854.

[78] WANG C, GAO C, ZHANG J, et al. Three-Dimensional Moiré Crystal in Ultracold Atomic Gases[J]. Physical Review Letters, 2024, 133(16): 163401.

[79] DEAN C R, WANG L, MAHER P, et al. Hofstadter’s butterfly and the fractal quantum Hall effect in moiré superlattices[J]. Nature, 2013, 497(7451): 598-602.

[80] GONZÁLEZ-TUDELA A. Synthetic twisted bilayers made using atoms and light[J].

Science Bulletin, 2023, 68(6): 557-558.

[81] LOPES DOS SANTOS J M B, PERES N M R, CASTRO NETO A H. Graphene Bilayer with a Twist: Electronic Structure[J]. Physical Review Letters, 2007, 99(25): 256802.

[82] SONG Z, WANG Z, SHI W, et al. All Magic Angles in Twisted Bilayer Graphene are Topological[J]. Physical Review Letters, 2019, 123(3): 036401.

[83] SONG Z D, LIAN B, REGNAULT N, et al. Twisted bilayer graphene. II. Stable symmetry anomaly[J]. Physical Review B, 2021, 103(20): 205412.

[84] LI M R, HE A L, YAO H. Magic-angle twisted bilayer systems with quadratic band touching: Exactly flat bands with high Chern number[J]. Physical Review Research, 2022, 4(4): 043151.

[85] WILSON K G. Confinement of quarks[J]. Physical Review D, 1974, 10(8): 2445-2459.

[86] KOGUT J B. An introduction to lattice gauge theory and spin systems[J]. Reviews of Modern Physics, 1979, 51(4): 659-713.

[87] LIN J X, ZHANG Y H, MORISSETTE E, et al. Spin-orbit – driven ferromagnetism at half moiré filling in magic-angle twisted bilayer graphene[J]. Science, 2022, 375: 437-441.

[88] SHARPE A L, FOX E J, BARNARD A W, et al. Emergent ferromagnetism near three-quarters filling in twisted bilayer graphene[J]. Science, 2019, 365: 605-608.

[89] ISOBE H, YUAN N F Q, FU L. Unconventional superconductivity and density waves in twisted bilayer graphene[J]. Physical Review X, 2018, 8: 041041.

[90] LIAN B, WANG Z, BERNEVIG B A. Twisted bilayer graphene: A phonon-driven superconductor[J]. Physical Review Letters, 2019, 122: 257002.

[91] WU L H, HU X. Scheme for achieving a topological photonic crystal by using dielectric material[J]. Physical Review Letters, 2015, 114: 223901.

[92] SILVEIRINHA M G. Z2 topological index for continuous photonic materials[J]. Physical Review B, 2015, 92: 125153,

[93] WU L H, HU X. Scheme for achieving a topological photonic crystal by using dielectric material[J]. Physical Review Letters, 2015, 114: 223901.

[94] JACKIW R, REBBI C. Solitons with fermion number 1/2[J]. Physical Review D, 1976, 13: 3398-3409.

[95] ZAK J. Berry's phase for energy bands in solids[J]. Physical Review Letters, 1989, 62:

2747-2750.

[96] BENALCAZAR W A, LI T, HUGHES T L. Quantization of fractional corner charge in Cn-symmetric higher-order topological crystalline insulators[J]. Physical Review B, 2019, 99: 245151.

[97] BENALCAZAR W A, LI T, HUGHES T L. Quantization of fractional corner charge in Cn-symmetric higher-order topological crystalline insulators[J]. Physical Review B, 2019, 99: 245151.

# 攻读学位期间取得的研究成果

[1]张纯瑶，龚琳善，郭慧，孟增明，韩伟，超冷原子扭转蜂巢光晶格中的高轨道平带[J]. 物理学报, 2026, 75(11): 110302.

[2]孙浩然，张纯瑶，韩伟，张素英，光学超晶格中里德堡阻塞驱动的自发对称性破缺与结构相变[J]. 量子光学学报（已录用）

# 致　谢

三年时光倏忽而过，还是到了提笔回顾与感恩的这一页。回望入学时的懵懂，研究生三年带给我的是更加开阔的思维和视野，也让我在科研与人生的道路上，逐渐学会了如何选择、如何坚持。

首先感谢山西大学光电研究所为我提供良好的科研平台与学术环境。三年来，我在这里不断提升科研能力，凭借着所里提供的丰富学术资源不断地开阔自己的视野。

衷心感谢山西大学张靖教授。张靖老师治学严谨而不事张扬，于学术上始终保持求真务实的态度，于生活中也自律朴素、淡泊谦和。与老师接触的过程中，我愈发体会到，一名真正的学者不仅在于学识之深，更在于人格之正。老师身上所体现出的那份对学术的坚守、对名利的淡然以及对自我的严格要求，始终令我敬佩，也在无形之中影响着我对科研与人生的理解。谨以此表达我由衷的敬意与感谢。

特别感谢我的指导老师韩伟教授，他为人严谨谦逊，真诚宽厚，对学术始终保持着严谨认真的态度，是我十分敬佩的学者。不论是入学之初对科研方向的困惑还是课题研究过程中遇到的难题，老师都始终站在我身后，给予我耐心细致的帮助，春风化雨的教导，为我撑起一把沉静而坚定的伞。从课题的诞生到论文撰写完成，老师始终手把手地指引我前行，从理论建模到数值计算都倾注了大量心血，在此表示衷心感谢。而在科研之外，当我在成长道路上感到迷茫、在未来选择中陷入困惑时，老师始终以长辈般的关怀给予我鼓励，以极大的包容和耐心给予我帮助，为我减轻了许多压力与顾虑，是我人生道路上的良师益友。“经师易遇，人师难求”，祝愿老师岁岁安康，桃李芬芳。非常感谢我们课题组的老师：黄良辉老师、孟增明老师、王鹏军老师、叶祝雄老师、陈良超老师、于旭东老师、靳元彬老师，在科研道路上为我提供了无私的帮助。

感谢我的师兄师姐龚琳善、隋文杰、张紫瑞在科研上对我的帮助，总是为我答疑解惑，倾囊相授；感谢我的同门：刘澍、王亚洲、杨雅婧、陈卫、冯嘉煜、赵非凡，一路走来，我们互相鼓励，共同进步；感谢实验室其他师兄师姐：顾正宇、李云达、刘方德、闫江伟、高晨力、张越、王泽奎、单标、赵宇航、周暄胜、边国旗、贾甜、丁培波、杨雯馨、余浩坤、王永腾，无论是学习还是生活上，都给予我许多关心和帮助；感谢为我带来欢乐的师弟师妹们：冯佳、韩明康、梁新浩、袁铭清、姚新江、申嘉辉、郑烨；特别感谢王彦师姐在未入学时对我的帮助和照顾。

一直以来我遇到许多包容我的朋友、舍友，生活上亦或是学习中，他们都给了我极大的耐心和陪伴，每当我烦恼困惑之际，总能用一次次倾听为我缓解焦虑、抚平疲惫。

最后，深深感谢我的父母和家人。是你们始终如一的支持与陪伴，让我能够安心求学、坚定前行。多年来，你们默默承担、无私付出，在我失意时给予包容与鼓励，在我收获时与我一同欣喜。这份爱与牵挂，始终是我不断前行的力量。

在这里，我祝愿所有 2026 届毕业的校友径行直遂、青云万里！

# 个人简况及联系方式

个人简况：

张纯瑶，女，2001 年 8 月 3 日生，籍贯：山西省运城市

2019.09—2023.06 太原师范学院物理系 物理学 本科

2023.09—2026.06 光量子技术与器件全国重点实验室

山西大学光电研究所 光学专业 硕士

联系方式：

电话：13643449141

电子邮箱：zhangchunyao803@163.com

# 承 诺 书

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是在导师指导下独立完成的，学位论文的知识产权属于山西大学。如果今后以其他单位名义发表与在读期间学位论文相关的内容，将承担法律责任。除文中已经注明引用的文献资料外，本学位论文不包括任何其他个人或集体已经发表或撰写过的成果。

作者签名：

2016年5月27日

# 学位论文使用授权声明

本人完全了解山西大学有关保留、使用学位论文的规定，即：学校有权保留并向国家有关机关或机构送交论文的复印件和电子文档，允许论文被查阅和借阅，可以采用影印、缩印或扫描等手段保存、汇编学位论文。同意山西大学可以用不同方式在不同媒体上发表、传播论文的全部或部分内容。

保密的学位论文在解密后遵守此协议。

作者签名：张红强

导师签名：

2016年5月27日