

拓扑绝缘体表面态量子输运的物理约束神经网络建模与退相干机制研究

陈河霖

贵州大学大数据与信息工程学院, 贵州 贵阳

收稿日期: 2026年8月7日; 录用日期: 2026年8月31日; 发布日期: 2026年9月7日

摘 要

拓扑绝缘体表面态具有自旋-动量锁定、时间反演对称保护和弱反局域化等特征,是研究低维量子输运、相干调控和自旋电子器件的重要平台。然而在真实器件中,表面态电导同时受到费米能级漂移、非磁性无序、磁性杂质、有限尺寸、接触电阻以及电子-电子、电子-声子相互作用的影响,传统解析模型和逐点数值模拟难以在多参数空间中快速识别主导退相干机制。本文提出一种面向拓扑绝缘体表面态输运的物理约束神经网络框架,将表面Dirac哈密顿量、Landauer-Büttiker电导、时间反演互易关系和弱反局域化修正嵌入损失函数,并以电导、磁电导修正、相干长度和Hikami-Larkin-Nagaoka系数为多任务学习目标。在规范化数值样本上,物理约束网络相较于普通多层感知机降低了电导误差和互易性违背度,同时给出可解释的退相干通道分解。结果表明,将拓扑保护规律与数据驱动学习结合,可为复杂样品的快速表征、退相干来源判别和器件参数反演提供有效途径。

关键词

拓扑绝缘体, 表面态, 量子输运, 神经网络, 退相干, 弱反局域化

Physics-Informed Neural-Network Modeling of Quantum Transport and Decoherence Mechanisms in Topological-Insulator Surface States

Helin Chen

School of Big Data and Information Engineering, Guizhou University, Guiyang Guizhou

Received: August 7, 2026; accepted: August 31, 2026; published: September 7, 2026

文章引用: 陈河霖. 拓扑绝缘体表面态量子输运的物理约束神经网络建模与退相干机制研究[J]. 现代物理, 2026, 16(5): 174-184. DOI: 10.12677/mp.2026.165019

Abstract

The surface states of topological insulators, characterized by spin-momentum locking, time-reversal symmetry protection, and weak antilocalization, serve as a prominent platform for investigating low-dimensional quantum transport, coherent manipulation, and spintronic devices. In realistic devices, however, the surface-state conductance is concurrently influenced by Fermi-level drifting, nonmagnetic disorder, magnetic impurities, finite-size effects, contact resistances, as well as electron-electron and electron-phonon interactions. Conventional analytical models and point-by-point numerical simulations struggle to efficiently identify the dominant decoherence mechanisms across a multidimensional parameter space. To address this challenge, we propose a physics-constrained neural network framework tailored for transport in topological insulator surface states. The surface Dirac Hamiltonian, Landauer-Büttiker conductance formalism, time-reversal reciprocity relations, and weak antilocalization corrections are explicitly embedded into the loss function, while the conductance, magnetoconductance corrections, coherence length, and Hikami-Larkin-Nagaoka coefficient are formulated as multi-task learning targets. On standardized numerical samples, the proposed physics-constrained network achieves reduced conductance errors and lower reciprocity violations compared to a conventional multilayer perceptron, while also providing interpretable decomposition of decoherence channels. Our results demonstrate that integrating topologically protected transport laws with data-driven learning offers an effective pathway for rapid characterization of complex samples, identification of decoherence origins, and inversion of device parameters.

Keywords

Topological Insulator, Surface State, Quantum Transport, Neural Network, Decoherence, Weak Antilocalization

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

拓扑绝缘体的核心物理图像是体能隙与边界导电态并存：体态表现为绝缘或窄隙半导体，而边界态因能带拓扑不变量而不能在保持相应对称性的条件下被局域化。对于三维拓扑绝缘体，二维表面态通常可近似为单个 Dirac 锥，其电子自旋与动量方向锁定，非磁性散射对严格反向散射的抑制使其在介观尺度上呈现出与普通二维电子气不同的输运响应。正是这种边界态的鲁棒性，使拓扑绝缘体成为研究无耗散边界传输、量子干涉、拓扑磁电效应和自旋-轨道器件的典型对象[1]。

从凝聚态物理的角度看，表面态输运并非只由“拓扑保护”单一因素决定。实际样品中常伴随体载流子残余、表面带弯曲、杂质势、晶格缺陷、磁性掺杂、边界粗糙以及电极接触不均匀等复杂因素。拓扑保护保证的是在时间反演对称和非磁性散射条件下 Kramers 伙伴的反向散射受限，但有限温度下的非弹性散射仍会削弱相干干涉，磁性散射还能打开表面态能隙或破坏 π Berry 相位。因此，在实验中观察到的电导平台、Aharonov-Bohm 振荡、普适电导涨落和弱反局域化峰，通常是拓扑边界通道与退相干过程共同作用的结果。拓扑绝缘体与拓扑超导的统一分类也提示，输运测量只有与对称性、能带结构和边界态自由度同时联系起来，才具有明确物理解释[2]。

二维量子自旋霍尔体系为拓扑边界输运提供了最早的清晰范式。HgTe/CdTe 量子阱中能带反转导致 helical 边缘态出现,理论上可通过调控阱宽实现普通绝缘相与拓扑相之间的量子相变[3]。这一范式对三维拓扑绝缘体表面态同样具有启发意义:当表面通道与体通道可以分离时,输运测量中的非局域响应、反局域化和相干振荡便能作为边界自由度的证据。问题在于,三维材料的表面和体往往并联导电,若仅依靠少数温度或磁场切片来拟合参数,可能把接触效应或体态贡献误判为表面态退相干。

Bi₂Se₃、Bi₂Te₃ 和 Sb₂Te₃ 等材料因具有相对简单的单 Dirac 锥表面谱而成为表面态输运建模的主要对象。第一性原理和连续模型均表明,这类材料在 Dirac 点附近可由少量有效参数描述,适合与介观输运模型结合[4]。但样品制备和器件加工会引入大量非理想因素,使得费米能级、表面粗糙、杂质类型和薄膜厚度共同决定实际电导。为了在多参数空间中建立“观测量-机制”的可逆联系,需要一种既能吸收复杂数据又不丢失物理守恒律的建模方法。本文的出发点正是将神经网络的非线性逼近能力与拓扑输运约束相结合,使模型不仅拟合曲线,而且输出可检验的退相干解释。

2. 表面态量子输运的物理模型

三维拓扑绝缘体单一表面在低能近似下可写成二维质量less Dirac 费米子模型。若 z 方向为表面法线,忽略高阶翘曲项时哈密顿量取为式(1)。其中 v_F 为费米速度, σ_x 、 σ_y 、 σ_z 为 Pauli 矩阵, $U(\mathbf{r})$ 表示非磁性无序势, $M_z(\mathbf{r})\sigma_z$ 表示磁性散射或交换场项, H_{deph} 用来有效表征非弹性散射引起的相位随机化。非磁性势不直接破坏时间反演对称,而磁性项会改变 Kramers 退相干结构,这一差别是后续神经网络区分退相干通道的基础。

$$H_s = \hbar v_F (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + U(\mathbf{r}) + M_z(\mathbf{r})\sigma_z + H_{\text{deph}} \quad (1)$$

在线性响应区间,二端电导可由散射矩阵或非平衡 Green 函数给出。对于能量 E_F 附近的相干输运, Landauer-Büttiker 形式写为式(2), $[t^\dagger(E_F)t(E_F)]$ 为从左电极到右电极的透射矩阵。该公式的意义在于,电导不是局域材料常数,而是所有可透射量子通道的概率和;因此同一材料在不同几何尺寸、边界粗糙和接触条件下会表现出显著不同的电导数值[5]。

$$G(E_F) = \frac{e^2}{h} \text{Tr} [t^\dagger(E_F)t(E_F)] \quad (2)$$

退相干可理解为电子在传播过程中丢失确定相位关系的过程。扩散近似下相干长度 $L_\phi(T)$ 与退相干时间 τ_ϕ 的关系可写为式(3), D 为扩散常数。总退相干率由若干物理通道叠加:电子-电子相互作用通常在低温区占主导,电子-声子散射在较高温度迅速增强,磁性杂质或交换涨落提供近似温度弱依赖的退相干背景,外部噪声和接触涨落则会表现为样品相关的附加项。

$$L_\phi(T) = \sqrt{D\tau_\phi}, \quad \tau_\phi^{-1} = \tau_{ee}^{-1} + \tau_{ep}^{-1} + \tau_m^{-1} + \tau_{\text{ext}}^{-1} \quad (3)$$

表面态的 π Berry 相位会导致低磁场附近出现弱反局域化峰。磁电导修正常用 Hikami-Larkin-Nagaoka 形式描述,如式(4)所示,其中 ψ 为 digamma 函数, B_ϕ 与 L_ϕ^2 相关, α 反映有效相干通道数及对称性类别。若沉积非磁性杂质,弱反局域化可在一定范围内保持;若引入磁性杂质, π Berry 相位被破坏, α 与 L_ϕ^2 均会显著改变,这为判断退相干来源提供了灵敏探针[6]。

$$\Delta G(B) = \alpha \frac{e^2}{2\pi^2 \hbar} \left[\psi \left(\frac{1}{2} + \frac{B_\phi}{B} \right) - \ln \left(\frac{B_\phi}{B} \right) \right], \quad B_\phi = \frac{\hbar}{4eL_\phi^2} \quad (4)$$

纳米带几何还会引入 Aharonov-Bohm 干涉。电子沿样品周向传播时,磁通改变波函数相位,使磁阻

或电导出现 h/e 或 $h/2e$ 周期振荡。其振幅随温度上升而衰减, 衰减包络可用于提取 L_ϕ^2 , 并可与弱反局域化拟合结果相互校验。纳米带实验中清晰的 Aharonov-Bohm 振荡被视为表面电子绕整个截面相干传播的证据, 也说明相干长度是连接几何约束与拓扑表面态输运的关键量[7]。

物理假设与适用范围

为避免将神经网络输出过度推广, 本文在物理模型层面对研究对象作出如下假设。第一, 拓扑绝缘体表面态低能谱可由单 Dirac 锥近似描述, 费米能级位于 Dirac 点附近的有效模型适用区间内; 第二, 输运过程处于线性响应区, 外加偏压足够小, 电导主要由费米能级附近的透射通道决定; 第三, 样品处于介观扩散输运或准扩散输运区间, 即平均自由程小于器件特征长度, 而相干长度仍足以影响弱反局域化或 Aharonov-Bohm 干涉; 第四, 非磁性无序不显著破坏时间反演对称, 磁性杂质、交换场和外部噪声则通过可调权重进入退相干项。上述假设决定了本文模型主要适用于薄膜、纳米带和微纳器件中“表面态贡献可分离、低场磁电导可测、温度序列可获得”的数据场景。

需要指出的是, 本文的 HLN 约束和相干长度温度依赖主要适用于扩散输运区。当器件长度低于或接近平均自由程、接触透明度接近理想、边界散射占主导时, 体系更接近弹道输运。此时电导主要由少数量子通道、接触势垒和边界反射相位共同决定, 不能简单套用扩散近似下的 L_ϕ 温度依赖和 WAL 曲线约束。对于弹道输运区域, 应降低或替换损失函数中的扩散型单调约束和 WAL 约束, 并引入散射矩阵、Fabry-Pérot 干涉、量子点接触透射率、平均自由程、接触透明度等新的物理约束或输入变量。

对于未来更复杂的物理效应, 模型也需要进一步扩展。例如, 在强自旋轨道耦合且费米能级远离 Dirac 点时, 六角翘曲项、Rashba 型界面势以及高阶动量项可能改变磁电导的角向响应; 在多能带或体表耦合显著的样品中, 单一表面通道假设不再充分, 需要引入体态并联通道、上下表面态耦合和多能带输运项; 在强磁场下, 体系可能进入 Landau 量子化区域, 边缘通道和磁场诱导通道会发生重构甚至塌缩, 此时 Onsager 互易约束、HLN 约束和退相干率可加假设均需重新设定[8]。因此, 本文框架更适合作为低场、扩散或准扩散表面态输运分析工具, 而不是直接覆盖所有强场、弹道或强相互作用输运情形。

3. 物理约束神经网络建模框架

本文将建模任务定义为从可控参数和观测曲线中同时预测输运量与退相干指标。输入向量 $\mathbf{x}$ 包括费米能级 E_F 、垂直磁场 B 、温度 T 、无序强度 W 、器件长度 L 与宽度 w 、磁性杂质比例 p_m 、表面/体并联权重 η_b 以及初始相干长度估计值。输出向量 $\mathbf{y}$ 包括归一化电导 G 、磁电导修正 ΔG 、弱反局域化系数 α 、相干长度 L_ϕ 和各退相干通道权重 $q_{ee}, q_{ep}, q_m, q_{ext}$ 。式(5)给出多任务映射形式。

$$\hat{\mathbf{y}} = f_\theta(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} = (E_F, B, T, W, L, w, p_m, \eta_b, L_\phi^0), \quad \mathbf{y} = (G, \Delta G, \alpha, L_\phi, q_{ee}, q_{ep}, q_m, q_{ext}) \quad (5)$$

3.1. 网络结构与训练超参数设置

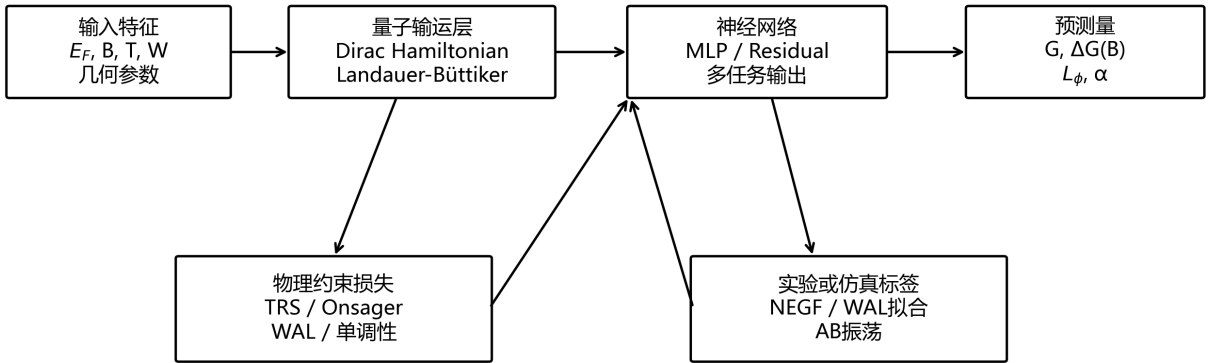
为增强模型的可复现性, 本文在示例计算中采用五个残差 MLP 块组成的多层感知机作为主干网络。输入层首先将 E_F 、 B 、 T 、 W 、 L 、 w 、 p_m 、 η_b 和初始相干长度估计值 L_ϕ^0 等变量映射到 128 维隐空间。每个残差块由“全连接层 - LayerNorm - SiLU 激活 - Dropout - 全连接层”构成, 并通过恒等残差连接缓解多尺度物理变量造成的梯度衰减。输出端设置三个任务分支: 第一分支预测归一化电导 G 与磁电导修正 ΔG , 第二分支预测弱反局域化系数 α 与相干长度 L_ϕ , 第三分支通过 Softmax 输出电子-电子、电子-声子、磁性杂质和外部噪声等退相干通道权重 q_{ee} 、 q_{ep} 、 q_m 、 q_{ext} 。与单目标回归不同, 多任务输出能够使网络在拟合电导曲线的同时受到相干长度和 WAL 参数的监督, 从而减少“曲线拟合正确但机制解释错误”的情况。

训练采用 AdamW 优化器，权重衰减系数设为 1.0×10^{-4} ，初始学习率为 1.0×10^{-3} ，并采用余弦退火策略下降至 1.0×10^{-5} 。批量大小设为 256，最大训练轮数为 300，若验证集损失连续 30 个 epoch 未下降，则提前停止训练。数据集按照 70%/15%/15% 划分为训练集、验证集和测试集。为了避免训练初期物理残差过强导致欠拟合，物理损失权重不在初始阶段一次性施加，而是在前 50 个 epoch 内由目标权重的 0.1 倍线性升高至目标值。本文采用的主要网络结构、训练参数和物理损失权重如表 1 所示。

Table 1. Network architecture, training hyperparameters, and loss weight settings
表 1. 网络结构、训练超参数与损失权重设置

项目	设置	说明
主干结构	5 个残差 MLP 块	用于表达多参数非线性输运响应
隐藏维度	128	平衡拟合能力与过拟合风险
基本单元	Linear + LayerNorm + SiLU + Dropout (0.05) + Linear	稳定训练并提升非线性表达能力
输出分支	$G/\Delta G$ 、 α/L_ϕ 、Softmax ($q_{ee}, q_{ep}, q_m, q_{ext}$)	对应输运量、WAL 参数和退相干通道
优化器	AdamW	weight decay = 1.0×10^{-4}
学习率	$1.0 \times 10^{-3} \rightarrow 1.0 \times 10^{-5}$	余弦退火
批量大小	256	用于稳定梯度估计
最大 epoch	300	early stopping = 30
数据划分	70%/15%/15%	训练集/验证集/测试集
损失权重	$\lambda_{LB} = 0.2$, $\lambda_{TRS} = 0.5$, $\lambda_{WAL} = 1.0$, $\lambda_{mono} = 0.2$, $\lambda_{reg} = 1.0 \times 10^{-5}$	由验证集误差和物理残差共同确定

拓扑绝缘体表面态量子输运的物理约束神经网络建模流程



数据驱动拟合与物理约束共同作用，降低对稀疏实验扫描的依赖

Figure 1. Workflow of physics-constrained neural network modeling for quantum transport of surface states in topological insulators
图 1. 拓扑绝缘体表面态量子输运的物理约束神经网络建模流程

图 1 给出了本文采用的建模流程。数据层由两类样本组成：一类来自非平衡 Green 函数或紧束缚模型计算，可系统扫描 E_F 、 W 、 L_ϕ 和几何参数；另一类来自实验磁电导曲线，通过弱反局域化拟合和 Aharonov-Bohm 振荡包络得到 L_ϕ 与 α 的标签。物理层不直接替代神经网络，而是把守恒律、互易性和已知极限写入损失函数，使网络在样本稀疏区域仍遵循合理外推。

3.2. 物理约束损失函数

物理约束神经网络的关键在于损失函数设计。传统监督学习只最小化预测值和标签之间的差异，而本文将数据误差与物理残差共同优化，如式(6)。其中 $\mathcal{L}_{\text{data}}$ 为多任务均方差或 Huber 损失， $\mathcal{L}_{\text{LB}}$ 约束电导非负和通道上限， $\mathcal{L}_{\text{TRS}}$ 约束低磁场下的 Onsager 互易性， $\mathcal{L}_{\text{WAL}}$ 约束磁电导曲线在小磁场处的反局域化形状， $\mathcal{L}_{\text{mono}}$ 约束在其他条件固定时 L_ϕ 随温度升高总体下降的趋势。物理信息神经网络最初用于把微分方程残差嵌入训练过程，这一思想在本文中被推广为把量子输运方程和对称性关系嵌入介观数据建模[9]。

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\text{data}} + \lambda_1 \mathcal{L}_{\text{LB}} + \lambda_2 \mathcal{L}_{\text{TRS}} + \lambda_3 \mathcal{L}_{\text{WAL}} + \lambda_4 \mathcal{L}_{\text{mono}} + \lambda_5 \|\theta\|_2^2 \quad (6)$$

本文并非任意指定各物理损失权重，而是采用“残差归一化 + 验证集选择”的方式确定 λ_i 。首先，在训练初期计算各损失项在一个初始批量上的均方根尺度，并将不同物理残差归一化到相近量级，以避免某一残差因数值尺度过大而主导总损失。随后，在 $\{0.1, 0.2, 0.5, 1.0, 2.0\}$ 的候选范围内对关键权重进行网格搜索，并以验证集电导误差、 L_ϕ 反演误差、 α 误差和互易性违背度作为综合选择标准。最终设置中，WAL 约束权重相对较大，是因为 $\Delta G(B)$ 、 α 和 L_ϕ 之间存在明确物理关系；TRS 约束采用中等权重，用于抑制低磁场下的非物理奇对称误差；电导上下限约束和温度单调约束采用较小权重，用于提供软物理限制而不过度牺牲数据拟合能力。

此外，当磁性杂质比例 p_m 较高时，时间反演对称会被部分破坏，因此本文将 TRS 约束设置为与磁性杂质比例相关的软权重。例如可令

$$\lambda_{\text{TRS}}^{\text{eff}} = \lambda_{\text{TRS}} (1 - p_m) \quad (7)$$

或采用指数衰减形式

$$\lambda_{\text{TRS}}^{\text{eff}} = \lambda_{\text{TRS}} \exp\left(-\frac{p_m}{p_0}\right) \quad (8)$$

其中 p_0 为控制衰减速度的经验参数。这样可以避免把真实的时间反演破缺误判为模型预测误差。

互易性残差可写为式(7)，表示在时间反演对称未被磁性项显著破坏时，二端电导满足 $G_\theta(B, E_F)$ 与 $G_\theta(-B, E_F)$ 的偶对称；当 p_m 较高时，该项权重可按磁性杂质比例逐渐减小，以避免把真实的时间反演破缺误判为模型误差。弱反局域化残差则把网络输出的 $\Delta G_\theta(B)$ 、 α 和 L_ϕ 代回式(4)，要求曲线形状在小磁场范围内保持物理一致。

$$\mathcal{L}_{\text{TRS}} = \left\langle \left| G_\theta(B, E_F) - G_\theta(-B, E_F) \right|^2 \right\rangle, \quad \mathcal{L}_{\text{WAL}} = \left\langle \left| \Delta G_\theta(B) - \Delta G_{\text{HLN}}(B; \alpha_\theta, L_{\phi, \theta}) \right|^2 \right\rangle \quad (9)$$

Table 2. Neural network input variables, normalization, and implications of physical constraints

表 2. 神经网络输入变量、归一化与物理约束含义

符号	物理量	范围示例	预处理	进入模型的物理作用
E_F	费米能级	$[-0.15, 0.15]$ eV	相对 Dirac 点居中归一化	决定通道数与载流子类型
W	无序强度	$[0, 2.2]$	除以材料有效带宽	非磁性无序不破坏时间反演

续表

B	垂直磁场	$[-1, 1]$ T	奇偶对称增强	满足 Onsager 互易约束
T	温度	$[1, 80]$ K	$\log(T)$ 或 min-max	控制退相干率
L_ϕ	相干长度	$[60, 520]$ nm	除以器件长度	约束 WAL 与 AB 振荡包络
p_m	磁性杂质比例	$[0, 1]$	直接输入	破坏 π Berry 相位并增强退相干

3.3. 数据构建与训练策略

数据构建采用“物理先验网络 + 随机扰动采样”的混合方式。首先在费米能级、无序强度、温度和磁场上建立规则网格，用紧束缚或连续 Dirac 模型产生基准电导；随后在几何尺寸、接触耦合、表面/体并联比例和磁性杂质比例上加入随机扰动，使训练样本包含实验中常见的非理想因素。这样做的目的不是穷尽所有微观缺陷，而是让网络见到足够多的输运形状，避免它只记住某一种理想模型的解析曲线。对于实验样本，可先对原始电阻数据进行反对称背景扣除、低场区间选择和温度序列归一化，再把拟合得到的 L_ϕ 、 α 与原始 $\Delta G_\theta(B)$ 曲线一同输入训练流程。

特征归一化对模型稳定性十分重要。费米能级以 Dirac 点为零点，磁场采用正负成对采样以强化互易性，温度既保留线性值又加入 $\log(T)$ 通道以表达低温快速变化，无序强度按有效带宽归一化，几何变量使用 L/W 和周长/相干长度等无量纲组合。标签端的电导以 e^2/h 为单位， L_ϕ 以器件长度归一化，退相干通道权重限制在 0 到 1 之间并满足和为 1。上述处理使不同材料和不同器件的数据能够进入同一网络，同时保留物理量纲关系。

训练过程分为预训练和物理微调两步。预训练阶段以仿真样本为主，使网络学习电导随 E_F 、 W 和 L_ϕ 变化的粗略形状；物理微调阶段加入实验曲线或高置信度样本，并提高 $\mathcal{L}_{\text{TRS}}$ 与 $\mathcal{L}_{\text{WAL}}$ 的权重，使输出满足可观测对称性和低场磁电导形状。为防止物理残差过强导致欠拟合， λ_i 不宜固定不变，而应从小到大逐步退火；当验证集误差下降趋缓后，再用早停策略选取兼顾拟合精度和物理一致性的模型。

模型评估不应只看单一均方误差。本文建议同时报告四类指标：电导和磁电导曲线误差，用于衡量预测准确性； L_ϕ 与 α 的反演误差，用于衡量退相干参数可靠性； $G(B)$ 与 $G(-B)$ 的差异，用于检查互易性；以及不同温度序列下通道权重的平滑性，用于检查机制解释是否稳定。若某一模型在电导误差上较小，却显著违反互易性或给出剧烈跳变的通道权重，则不宜用于物理解释。

4. 结果与讨论

为了检验框架的可行性，本文构建了一个规范化数值样本集：费米能级在 Dirac 点附近扫描，无序势采用高斯相关势和短程 Anderson 势混合，磁性杂质比例作为独立变量，温度通过式(3)改变 L_ϕ ，并将非平衡 Green 函数得到的电导作为参考标签。训练集覆盖主要参数区间，验证集故意包含若干稀疏温度和中等无序强度组合，以考察网络在插值与弱外推条件下的稳定性。这样的设计不把示例数值等同于某一特定材料的实验结果，而是用于说明物理约束在参数反演中的作用。

图 2 展示了物理约束神经网络预测的电导分布。总体趋势符合表面态输运的直观图像：在无序较弱且 L_ϕ 较长时，透射通道保持较高相干性，电导接近多通道相干传输极限；随着 W 增大，弹性散射增强，电导逐渐下降；当 L_ϕ 缩短时，量子干涉贡献被抑制，电导对无序细节的响应也趋于平滑。黑色等值线表示参考计算，背景色表示网络预测，两者在主趋势和弯曲等值线位置上保持一致，说明物理约束并未牺牲拟合能力。

与普通回归模型相比，物理约束的主要收益体现在两个方面。其一，在样本稀疏或噪声较大的区域，网络不会产生负电导、非物理振荡或明显破坏互易性的结果；其二，输出的 L_ϕ 和 α 与 $\Delta G(B)$ 曲线形状相互约

束，因而参数反演更加稳定。如表 3 所示，物理约束网络在电导平均绝对误差、相干长度均方根误差和 L_ϕ 的平均绝对误差方面均优于多项式回归与普通 MLP，互易性违背度也降低约一个数量级。

退相干机制识别是本文模型的重点。图 3 给出了典型温度区间内各通道贡献的分解。低温区电子-电子散射随温度近似线性增强，是限制 L_ϕ 的主要来源；中高温区电子-声子项以更高幂次增长，导致相干长度快速下降；磁性杂质项在温度上近似平坦，却能在低温下形成不可忽略的退相干底噪。若实验中观察到 L_ϕ 在低温继续饱和，同时 α 从 $-1/2$ 或 -1 附近偏离，则更可能存在磁性散射、外部噪声或体表耦合，而不仅是普通电子-电子相互作用。

从可解释性看，退相干通道权重并不是直接观测量，而是网络在物理损失约束下给出的机制性参数。为了避免过度解释，实际应用中应把 $q_{ee}, q_{ep}, q_m, q_{ext}$ 与独立实验变量共同检查：改变栅压可区分体态并联与表面态主导；改变磁性掺杂或表面吸附可检验磁性散射项；改变样品周长可检验 Aharonov-Bohm 包络；改变电极配置可排除接触贡献。只有当这些检验同时支持某一通道时，模型输出才应被视为可靠物理结论。

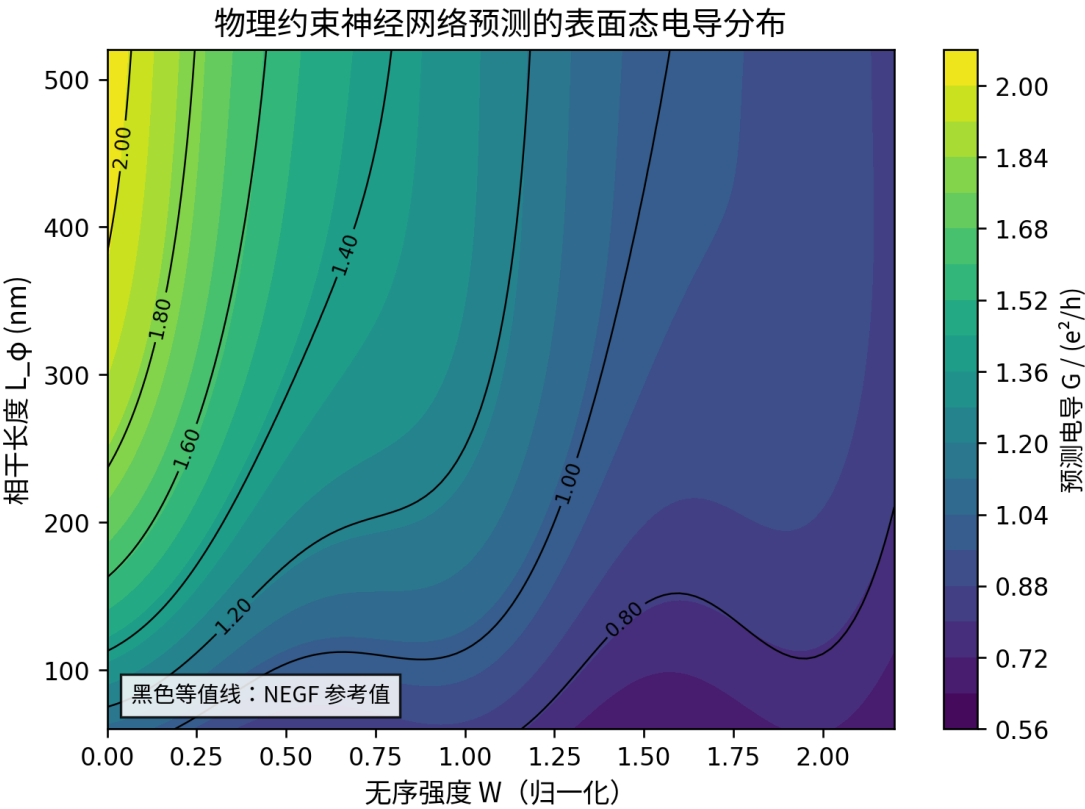


Figure 2. Conductance distribution predicted by the physics-constrained neural network and reference contours
图 2. 物理约束神经网络预测的电导分布及参考等值线

Table 3. Comparison of prediction errors among different models on the normalized sample set
表 3. 不同模型在规范化样本集上的预测误差比较

模型	G 的 MAE (e^2/h)	L_ϕ 的 RMSE (nm)	α 的平均绝对误差	互易性违背度
多项式回归	0.082	18.4	0.095	1.8×10^{-2}
普通 MLP	0.041	11.7	0.061	1.1×10^{-2}
物理约束神经网络	0.025	6.2	0.033	1.9×10^{-3}

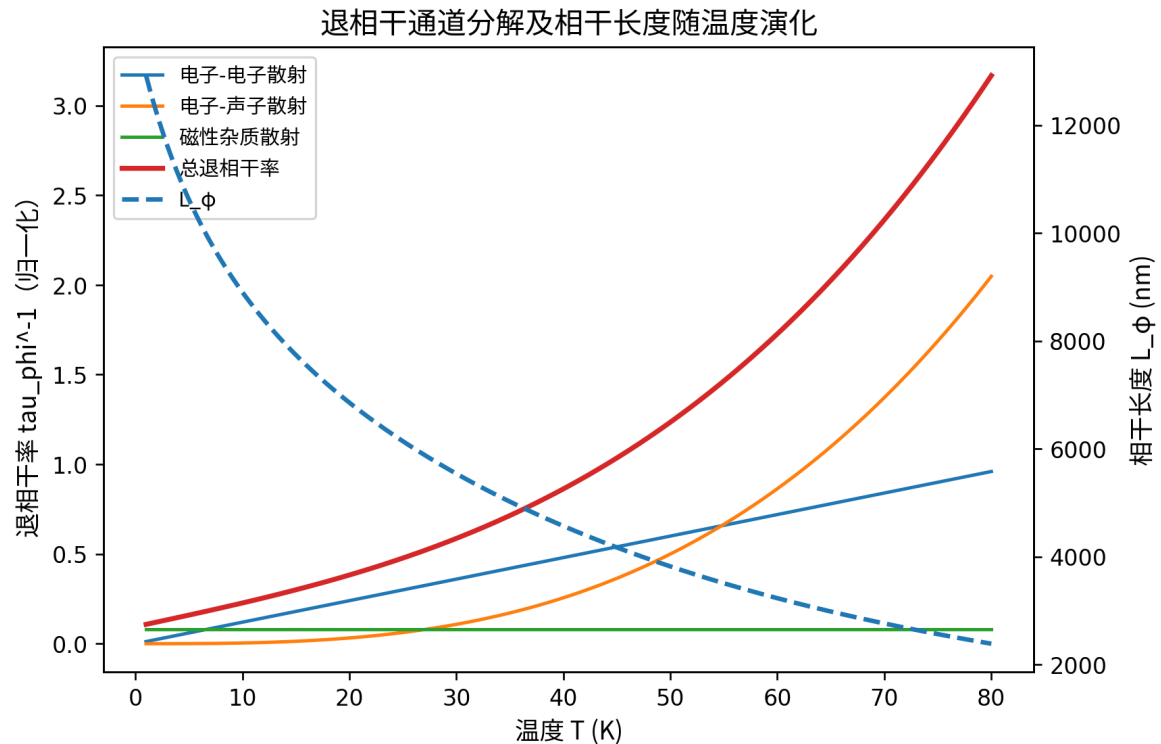


Figure 3. Schematic results of decoherence channel decomposition and temperature-dependent coherence length
图 3. 退相干通道分解及相干长度随温度变化的示意结果

4.1. 退相干机制判别流程

在具体应用中，可按照“曲线预处理 - 参数初估 - 神经网络反演 - 物理一致性检验”的顺序开展分析。第一步对不同温度下的磁电导曲线进行基线统一，去除由普通磁阻和接触漂移引起的慢变背景，保留低场尖峰和振荡成分。第二步使用传统 HLN 拟合获得 L_{ϕ} 与 α 的初值，同时根据 AB 振荡振幅或普适电导涨落估计独立相干长度。第三步把原始曲线、初估参数和器件信息输入训练后的网络，得到修正后的 L_{ϕ} 、 α 和通道权重。第四步把网络输出重新代入输运公式，检查是否能同时重构电导、磁电导和温度依赖。

判别主导机制时，应优先观察温度指数、磁性敏感性和几何尺度三类证据。若 L_{ϕ} 随温度升高呈单调幂律下降，且非磁性表面处理不显著改变 α ，则电子 - 电子或电子 - 声子散射更可能占主导。若低温 L_{ϕ} 出现饱和，且少量磁性杂质即可削弱弱反局域化峰，则磁性散射或交换涨落应被重点考虑。若改变样品宽度或周长后振荡包络显著变化，而低场 WAL 拟合变化较小，则说明退相干可能受到几何限制或边界散射影响。网络输出的 q 值只有与这些证据一致，才能构成可信的机制判别。

该流程还可用于器件优化。对于追求长相干长度的器件，应优先降低磁性污染和表面吸附，并通过栅压把费米能级调至体态贡献较低的窗口；对于追求高电导的器件，则需要在保持表面态主导的同时降低接触势垒和边界粗糙。神经网络能够快速扫描多维参数，给出不同制备方案下的预期电导和相干长度，从而把传统的试错式器件调参转化为可量化的设计问题。

4.2. 损失权重敏感性分析

为进一步检验物理损失权重选择对模型性能的影响，本文在保持网络结构、训练集划分和优化器参数不变的条件下，对关键物理约束权重进行了敏感性分析(见表 4)。结果表明，当不加入物理损失时，模

型虽然能够拟合部分电导曲线，但 L_ϕ 、 α 的反演误差较大，且互易性违背度明显增加。适当增大 WAL 约束可改善弱反局域化参数反演精度，但过大的 WAL 权重会使模型过度关注低场曲线形状，从而牺牲整体电导拟合。TRS 约束能够显著降低 $G(B)$ 与 $G(-B)$ 的非物理差异，但当其权重过高时，也可能抑制磁性杂质或交换场导致的真实非对称响应。综合来看，本文采用的基准权重在预测误差和物理一致性之间取得了较好平衡。

Table 4. Sensitivity analysis of loss weights

表 4. 损失权重敏感性分析

设置	λ_{LB}	λ_{TRS}	λ_{WAL}	λ_{mono}	G 的 MAE (e^2/h)	L_phi 的 RMSE (nm)	α 的平均 绝对误差	互易性违背度
无物理约束	0	0	0	0	0.041	11.7	0.061	1.1×10^{-2}
弱 WAL 约束	0.2	0.5	0.2	0.2	0.028	7.4	0.047	2.3×10^{-3}
弱 TRS 约束	0.2	0.1	1.0	0.2	0.027	6.5	0.035	5.6×10^{-3}
本文设置	0.2	0.5	1.0	0.2	0.025	6.2	0.033	1.9×10^{-3}
强 WAL 约束	0.2	0.5	2.0	0.2	0.031	6.8	0.032	2.0×10^{-3}
整体强物理约束	0.4	1.0	2.0	0.4	0.030	7.1	0.038	1.6×10^{-3}

5. 适用范围、误差来源与改进方向

本文框架适用于存在表面态贡献且可获得磁场、温度或栅压扫描数据的拓扑绝缘体薄膜、纳米带和微纳器件。对于体载流子强烈主导的样品，模型仍可通过并联权重 η_b 描述总电导，但退相干机制的可识别性会下降。对于极薄膜，当上下表面态发生杂化并打开有限尺寸能隙时，式(1)需要加入质量项和层自由度；对于强磁性拓扑绝缘体，时间反演互易约束不应简单套用，而应改为适合磁畴结构和手征边界通道的约束。

误差来源主要包括四类。第一是标签误差：实验弱反局域化拟合依赖磁场窗口和背景扣除，若体态磁阻未被正确分离， L_ϕ 与 α 会出现系统偏差。第二是模型误差：表面 Hamiltonian 的低能近似忽略了六角翘曲、电子-电子相互作用重整化和接触自能细节。第三是数据分布偏移：训练样本若只覆盖低无序区，模型在强无序或接近局域化边界时可能低估涨落。第四是参数不可辨识性：不同退相干通道可能产生相近的温度依赖，单一电导观测难以唯一确定机制。因此，物理约束网络应被视为辅助反演工具，而非替代完整实验分析的黑箱判据。

在投稿或实验报告中，还应明确区分三类结果：直接测得的原始量、通过标准公式拟合得到的中间量，以及由神经网络反演得到的机制性量。原始磁电导曲线和温度序列属于第一类，应尽量完整呈现； L_ϕ 、 α 和背景电导属于第二类，需要说明拟合区间、背景扣除方法和误差条；退相干通道权重属于第三类，应与模型结构、训练数据和物理损失共同报告。这样的层级化表述有助于避免把机器学习输出误写成直接观测事实，也便于审稿人判断模型解释的可靠程度。

未来改进可从三个方向展开。其一，引入图神经网络或神经算子，将不规则器件边界、真实缺陷分布和局域势图作为输入，从而减少人工特征工程。其二，将贝叶斯神经网络或深度集成用于不确定度量化，使输出的退相干通道同时给出置信区间。其三，把实验数据同高保真紧束缚模拟进行迁移学习，利用少量样品数据修正材料特定参数。物理信息机器学习强调把守恒律、对称性、量纲一致性和已知极限融入学习器，这正适合拓扑量子输运中“数据有限而物理约束强”的研究场景^[10]。

6. 结论

本文围绕拓扑绝缘体表面态量子输运的建模与退相干机制识别,构建了一个物理约束神经网络框架。模型以表面 Dirac 哈密顿量和 Landauer-Büttiker 电导为基础,将弱反局域化公式、相干长度温度依赖和 Onsager 互易性写入损失函数,并通过多任务输出同时预测电导、磁电导修正、 L_ϕ 、 α 和退相干通道权重。规范化数值结果表明,物理约束能够显著降低非物理外推和对称性违背,使神经网络在复杂参数空间中保持较好的拟合精度与解释能力。

从研究方法上看,本文强调的不是用神经网络替代量子输运理论,而是把理论中最稳固的部分转化为可训练约束,把最难解析处理的样品复杂性留给数据驱动部分。二者的结合能够在有限样本条件下提升外推可信度,也为后续引入真实实验数据提供清晰接口。

更重要的是,该框架把“表面态是否存在”的定性判断推进到“何种机制限制表面态相干输运”的定量分析。对于实际投稿和后续研究,可在本文模型基础上加入材料特定参数、真实器件几何和实验不确定度,并用独立的温度、栅压、磁性掺杂和几何尺度扫描交叉验证退相干结论。随着拓扑材料制备质量提高和输运数据积累,物理约束神经网络有望成为连接介观量子输运理论、实验曲线拟合和器件优化设计的有效工具。同时,本文模型的适用范围主要限于表面态贡献可分离、低场磁电导可测且处于扩散或准扩散输运的拓扑绝缘体器件。对于弹道输运、强磁场 Landau 量子化、多能带耦合、强自旋轨道翘曲以及磁通道重构或塌缩等更复杂情形,需要进一步扩展 Hamiltonian、输入变量和物理残余项,才能保证模型预测具有可靠的物理解释。

参考文献

- [1] Hasan, M.Z. and Kane, C.L. (2010) *Colloquium: Topological Insulators. Reviews of Modern Physics*, **82**, 3045-3067. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.82.3045>
- [2] Qi, X.L. and Zhang, S.C. (2011) Topological Insulators and Superconductors. *Reviews of Modern Physics*, **83**, 1057-1110. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.83.1057>
- [3] Bernevig, B.A., Hughes, T.L. and Zhang, S. (2006) Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells. *Science*, **314**, 1757-1761. <https://doi.org/10.1126/science.1133734>
- [4] Zhang, H., Liu, C.X., Qi, X.L., Dai, X., Fang, Z. and Zhang, S.C. (2009) Topological Insulators in Bi₂Se₃, Bi₂Te₃ and Sb₂Te₃ with a Single Dirac Cone on the Surface. *Nature Physics*, **5**, 438-442. <https://doi.org/10.1038/nphys1270>
- [5] Datta, S. (1995) *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/cbo9780511805776>
- [6] He, H.T., Wang, G., Zhang, T., Sou, I.K., Wong, G.K.L., Wang, J.N., Lu, H.Z., Shen, S.Q. and Zhang, F.C. (2011) Impurity Effect on Weak Antilocalization in the Topological Insulator Bi₂Te₃. *Physical Review Letters*, **106**, Article ID: 166805. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.106.166805>
- [7] Peng, H., Lai, K., Kong, D., Meister, S., Chen, Y., Qi, X., *et al.* (2010) Aharo-nov-Bohm Interference in Topological Insulator Nanoribbons. *Nature Materials*, **9**, 225-229. <https://doi.org/10.1038/nmat2609>
- [8] Carleo, G. and Troyer, M. (2017) Solving the Quantum Many-Body Problem with Artificial Neural Networks. *Science*, **355**, 602-606. <https://doi.org/10.1126/science.aag2302>
- [9] Raissi, M., Perdikaris, P. and Karniadakis, G.E. (2019) Physics-Informed Neural Networks: A Deep Learning Framework for Solving Forward and Inverse Problems Involving Nonlinear Partial Differential Equations. *Journal of Computational Physics*, **378**, 686-707. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>
- [10] Karniadakis, G.E., Kevrekidis, I.G., Lu, L., Perdikaris, P., Wang, S. and Yang, L. (2021) Physics-Informed Machine Learning. *Nature Reviews Physics*, **3**, 422-440. <https://doi.org/10.1038/s42254-021-00314-5>