

# $Z_2$ 拓扑不变量与拓扑绝缘体<sup>\*</sup>

余睿 方忠 戴希<sup>†</sup>

(中国科学院物理研究所 北京 100190)

**摘要** 文章回顾了两种  $Z_2$  拓扑数的计算方法,并详细介绍了一种用非阿贝尔贝里联络表示绝缘体  $Z_2$  不变量的计算方法.这种方法可以确定出一般能带绝缘体的拓扑性质,而不需要限定波函数的规范.利用这种新方法,文章作者计算了二维石墨烯(graphene)系统的  $Z_2$  拓扑数,得到了和以前研究相一致的结论.

**关键词** 非阿贝尔贝里联络, 拓扑绝缘体,  $Z_2$  拓扑数

## $Z_2$ topological invariant and topological insulators

YU Rui FANG Zhong DAI Xi<sup>†</sup>

(Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

**Abstract** We briefly review some of the equivalent ways of determining the  $Z_2$  invariant in 2D insulators. We introduce a new expression for this invariant in band insulators using non-Abelian Berry's connection. The new expression can be used to determine the topological nature of a general band insulator in a way that does not require any gauge fixing. By this means, we have recalculated the  $Z_2$  topological index for 2D graphene systems, and have obtained results consistent with previous studies.

**Keywords** non-Abelian Berry's connection, topological insulator,  $Z_2$  topological invariant

### 1 引言

在上世纪 80 年代以前,人们对物质状态进行分类的主要依据是体系的对称性.朗道相变理论强调了对称性的重要性,指出凝聚态物质中对称性的破缺对应着相变的发生.对称性由序参量描述,对称性破缺意味着序参量不为零的有序相的出现.但是在发现整数量子霍尔效应(IQHE)后,人们发现这个系统从平庸态变化到整数量子霍尔态并没有对称性的变化,不存在局域序参量,对该物质态的描述需要引入拓扑不变量的概念<sup>[1-3]</sup>.具有不同的拓扑有序态的系统必须由不同的拓扑不变量来进行描述.这个概念极大地提升了人们对凝聚态物质中量子现象的认识,在凝聚态物理发展历史中具有里程碑式的重要意义.

#### 1.1 整数量子霍尔系统

1980 年,冯·克利青在由半导体反型层所构成

的二维电子气中测量了强磁场下霍尔电阻随二维电子气中电子浓度变化的关系,发现在浓度变化的过程中,霍尔电导在一定浓度范围内保持不变,即出现霍尔电导的平台,这些平台对应的数值为  $\sigma_{xy} = ne^2/h$ , 这里  $n$  为整数.这种效应称之为整数量子霍尔效应<sup>[4]</sup>.其物理机制为:当系统的外加磁场足够强和温度足够低时,材料体内的所有电子都被局域化到了分立的朗道能级上,形成一个完全绝缘的体态.但是材料的边界上会形成一些没有“背散射”的导电通道(也就是不受杂质散射影响的理想导体),从而导致量子霍尔效应的出现.随后人们发现这个整数  $n$  与系统占据态在布里渊区中的拓扑性质有关<sup>[1,2]</sup>:

$$n = \frac{1}{2\pi} \int d^2k F, \quad (1)$$

其中  $F = \nabla \times A$  是贝里曲率,  $A = i \sum_{m=1}^M \langle u_m(k) | \nabla_k |$

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号: 131212503413; 10821403)、国家重点基础研究发展计划(批准号: 2007CB925000)资助项目  
2011-06-22 收到

<sup>†</sup> 通讯联系人. Email: daix@aphy. iphy. ac. cn

$u_m(k)$ 是贝里联络,  $M$ 是占据态的数目. 在数学上整数  $n$  被称为第一陈数. 整数量子霍尔系统的拓扑不变量就由第一陈数来表征. 从此拓扑学进入了凝聚态物理学的研究领域.

### 1.2 拓扑绝缘体和 $Z_2$ 拓扑不变量

当系统存在时间反演对称性时, 系统不存在霍尔电流, 霍尔电导为零, 因此不论系统是否具有其他的拓扑性质, 第一陈数都等于零, 这样就不能用第一陈数来对具有时间反演对称性的系统进行拓扑分类. 2005年, Kane和Mele提出了用  $Z_2$  拓扑数来表征时间反演不变系统拓扑性质的方法<sup>[5]</sup>. 按照他们提出的方法, 所有时间反演不变的二维绝缘体系统可以用  $Z_2$  数分成两类: 一类是普通绝缘体, 对应  $Z_2=0$ ; 另一类是拓扑绝缘体, 对应  $Z_2=1$ . 图1给出了这种分类直观的解釋<sup>[6]</sup>. 这个概念还可以推广到时间反演不变的三维系统<sup>[7-9]</sup>, 这时需要用4个  $Z_2$  拓扑数(1个强拓扑数, 3个弱拓扑数)来描述系统的拓扑性质<sup>[7, 10-13]</sup>. 按照这种分类方法, 三维时间反演不变绝缘体系统可以分为平庸的普通绝缘体、弱拓扑绝缘体和强拓扑绝缘体三类. 其中强拓扑绝缘体由于在所有方向的表面上都有狄拉克色散形式的表面态, 在理论和实验上都引起了广泛关注<sup>[14-25]</sup>. 确定一个具有时间反演对称性的绝缘体系统是否具有非平庸的拓扑性质, 最直接的方法是计算系统的  $Z_2$  拓扑数. 因此本文的主要目的是介绍几种  $Z_2$  拓扑数的计算方法.

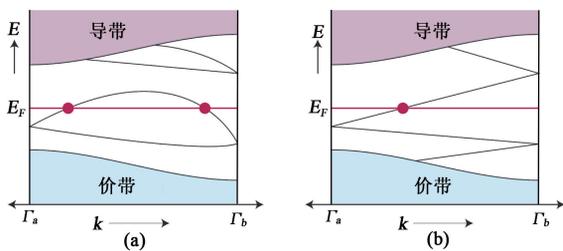


图1 (a)普通绝缘体和(b)拓扑绝缘体能带中贯穿能隙的边界态(表面态)<sup>[6]</sup>.  $\Gamma_a$ 和  $\Gamma_b$ 是时间反演不变点, 这些点上的能级是2重简并的. 图(a)中费米面和边界态相交次数是偶数次, 在外在扰动下, 边界态可以被拉进体态中. 因此这种形式的边界态在拓扑上是不稳定的. 图(b)中费米面和边界态相交奇数次, 外在的扰动只要不使得系统能隙发生闭合, 能隙中始终存在边界态, 并且费米面和边界态相交奇数次. 这种形式的边界态是稳定的, 受拓扑保护)

## 2 $Z_2$ 拓扑不变量的计算

我们考虑的系统具有时间反演对称性, 因此布

里渊区可以分成  $B^+$  和  $B^-$  2个部分(见图3). 这2个部分的波函数可以通过时间反演算符  $\hat{\theta} = i\sigma_y \hat{C}$  联系起来(这里  $\sigma_y$  是泡利矩阵,  $\hat{C}$  是复共轭算符). 因此在后面的讨论中, 我们只需要将讨论的范围限制在半个布里渊区  $B^+$  中. 下面我们将介绍几种等价的  $Z_2$  拓扑数的计算方法.

### 2.1 通过 Pfaffian 方法计算 $Z_2$ 拓扑数

在文献[25]中, Kane和Mele引入了一个矩阵  $m_{ij} = \langle u_i(k) | \hat{\theta} | u_j(k) \rangle$ , 这里  $| u_j(k) \rangle = e^{-ibr} | \Psi_j(k) \rangle$  是布洛赫波的周期部分,  $\hat{\theta}$  是时间反演算符,  $i, j = 1, 2, \dots, N$ ,  $N$  是电子占据的能带数. 容易证明  $m(k)$  满足  $m^T(k) = -m(k)$ , 是反对称矩阵. 对反对称矩阵, 我们可以计算它的 Pfaffian 并定义方程  $P(k)$ :

$$P(k) = pf[\langle u_i(k) | \hat{\theta} | u_j(k) \rangle] \quad (2)$$

如果  $P(k)$  在布里渊区中的零点是离散的, 那么系统的  $Z_2$  拓扑数就是半个布里渊区  $B^+$  中零点个数的奇偶性. 如果  $P(k)$  在布里渊区中的零点是连续的, 那么系统的  $Z_2$  拓扑数是沿着半个布里渊区的边界上  $P(k)$  符号改变次数一半的奇偶性<sup>[25]</sup>. 这两种情况可以统一地写成下面的式子:

$$Z_2 = \frac{1}{2i\pi} \oint_{\partial B^+} dk \cdot \nabla_k \log [P(k + i\delta)] \text{ mod } 2 \quad (3)$$

这里积分路径  $\partial B^+$  沿着半个布里渊区  $B^+$  的边界, 引入  $\delta$  可以避免积分发散. 图2给出了不同参数下石墨烯体系中  $P(k)$  零点分别为离散和连续情况的图例<sup>[5]</sup>.

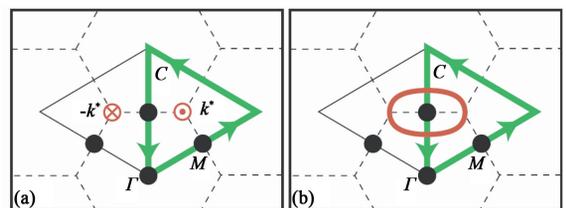


图2  $P(k)$ 的零点分布<sup>[5]</sup>(a)零点为离散的情形;(b)零点为连续的情形(其中  $\Gamma, M$  是布里渊区中的时间反演不变点, 绿色曲线  $C$  是绕着半个布里渊区边界的环路. 图(a)中的  $k^*$ ,  $-k^*$  分别为2个离散零点, 图(b)中红色曲线为连续零点所在的位置(见《物理》网刊彩图, 下同))

2006年, L. Fu和C. L. Kane提出了用时间反演极化定义  $Z_2$  拓扑数的方法. 他们证明了  $Z_2$  拓扑数的数值等于系统在自旋泵送周期过程中, 自旋反演极化在泵送起始点和中点上的差值. 他们给出了如下的方法来计算  $Z_2$  不变量<sup>[10]</sup>, 对占据态定义矩阵:

$$\omega_{ij}(k) = \langle u_i(k) | \hat{\theta} | u_j(-k) \rangle \quad (4)$$

在布里渊区中的时间反演不变点上, 矩阵满足

$\omega^T(\Gamma_a) = -\omega(\Gamma_a)$ . 时间反演不变点  $\Gamma_a$  是布里渊区中满足关系  $-k = k + G$  的点, 这里  $G$  为倒空间基矢.  $\omega(\Gamma_a)$  也是一个反对称矩阵, 对反对称矩阵, 它的行列式等于它的 Pfaffian 的平方, 于是我们可以定义一个数  $\delta_a = \frac{pf[\omega(\Gamma_a)]}{\sqrt{\det[\omega(\Gamma_a)]}}$ ,  $\delta_a$  的取值只能是  $\pm 1$ , 然后通过下式我们可以计算出系统的  $Z_2$  拓扑数:

$$(-1)^{Z_2} = \prod_{a=1}^4 \frac{pf[\omega(\Gamma_a)]}{\sqrt{\det[\omega(\Gamma_a)]}}. \quad (5)$$

需要注意的是, (5) 式在形式上好像只和布里渊区中的 4 个时间反演不变点处的占据态波函数有关, 但是在数值计算中, 对每个时间反演不变点上满足克拉默斯(Kramers)简并的能态, 其排列顺序的改变都会造成矩阵 Pfaffian 符号的改变. 因此要使 (5) 式有意义, 必须使波函数在半个布里渊区中连续, 使得这 4 个时间反演不变点的波函数在这个连续规范下相互关联起来, 这样才能得到确定的  $Z_2$  拓扑数. 这个波函数连续的要求给数值计算带来了不少困难, 但是当系统具有空间反演对称性的时候,  $Z_2$  拓扑数的计算会得到很大简化. 这时只需要计算布里渊区中时间反演不变点处占据态波函数宇称的乘积<sup>[10]</sup>:

$$\delta_a = \prod_{m=1}^M \xi_{2m}(\Gamma_a), \quad (6)$$

这里占据态的数目为  $2M$ ,  $\xi_i$  是  $\Gamma_a$  点第  $i$  个波函数的宇称.  $\Gamma_a$  点的波函数具有 Kramers 二重简并, 有相同的宇称, 所以求积中只取 Kramers 简并态中一个波函数的宇称. 系统的  $Z_2$  拓扑数由下式确定:

$$(-1)^{Z_2} = \prod_{a=1}^4 \delta_a. \quad (7)$$

### 2.2 通过贝里联络和贝里曲率计算 $Z_2$ 拓扑数

$Z_2$  拓扑数也可以按照类似计算陈数的方法, 通过布里渊区中的贝里联络和贝里曲率进行计算<sup>[12, 26, 27]</sup>. 不过现在由于系统存在时间反演对称性, 这里的积分只需要限制在半个布里渊区中(见图 3). L. Fu 和 Kane 给出了计算  $Z_2$  拓扑数的如下表达式<sup>[28]</sup>:

$$Z_2 = \frac{1}{2\pi} \left[ \oint_{\partial B^+} d\mathbf{l} \cdot \mathbf{A}(k) - \int_{B^+} d^2k F(k) \right] \text{mod} 2, \quad (8)$$

其中  $F = \nabla \times \mathbf{A}$  是贝里曲率,  $\mathbf{A} = i \sum_{m=1}^M \langle u_m(k) | \nabla_k | u_m(k) \rangle$  是贝里联络,  $M$  是占据态的数目,  $B^+ = [-\pi, \pi] \otimes [-\pi, 0]$ . 如果波函数在  $B^+$  上光滑连续, 那么根据斯托克斯公式, (8) 式等于 0. 因此要使得 (8) 式的计算结果有意义, 需要给波函数加上如下

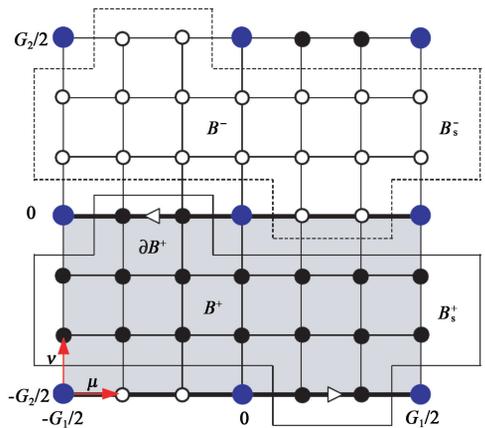


图 3 对二维系统的布里渊区进行格点化(由于系统具有时间反演对称性, 可以把布里渊区(BZ)分成图中所示的  $B^+$  (深色部分) 和  $B^-$  (浅色部分) 两个部分.  $B^+$  和  $B^-$  中的波函数互为时间反演态. 蓝色圆点是时间反演不变点)

规范限制条件:

$$|u_i(-k)\rangle = \hat{\theta} |u_i(k)\rangle. \quad (9)$$

对具有非平庸拓扑性质的系统, 不可能找到在  $B^+$  上光滑且同时满足限制条件(9)式这样的波函数. 因此,  $Z_2 = 1$  表明系统存在一个拓扑阻塞.

为了便于数值计算, 可以在布里渊区中取均匀的离散格点, 这样 (8) 式中的贝里联络和贝里曲率可以写成如下形式:

$$F(k_l) = \text{Im} \log [U_\mu(k_l) U_\nu(k_l + \mu) U_\mu^{-1}(k_l + \nu) U_\nu^{-1}(k_l)], \quad (10)$$

$$A_\mu(k_l) = \text{Im} \log U_\mu(k_l), \quad (11)$$

其中  $U_\mu(k_l) = \det \| \langle u_m(k_l) | u_n(k_l + \mu) \rangle \|$ ,  $\mu, \nu$  表示离散布里渊区中倒格矢  $G_1, G_2$  方向上相邻格点间的距离矢量, 式中  $\log$  的值限制在  $[-\pi, \pi]$ . 这样在离散布里渊区上的每个方格中可以定义一个整数场:

$$n(k_l) = \frac{1}{2\pi} \{ [\Delta_\nu A_\mu(k_l) - \Delta_\mu A_\nu(k_l)] - F(k_l) \}. \quad (12)$$

$Z_2$  拓扑数由半个布里渊区  $B^+$  上这些整数场之和得到:

$$Z_2 = \sum_{k_l \in B^+} n(k_l) \text{mod} 2. \quad (13)$$

对波函数取不同的规范, 整数场  $n(k_l)$  的分布会有所改变, 但是在半个布里渊区中,  $n(k_l)$  之和的奇偶性与波函数的规范无关.

### 2.3 通过非阿贝尔贝里联络表示 $Z_2$ 不变量的计算方法

下面我们介绍一种用非阿贝尔贝里联络表示

$Z_2$  拓扑数的计算方法<sup>[29]</sup>. 这个方法只需要用到满足平移不变性的体材料波函数的信息, 而且不需要限制布里渊区中的波函数满足光滑连续的规范, 从而可以极大地简化计算. 这个方法对满足和不满足空间反演对称性的系统都适用. 计算结果也非常直观, 很容易判断出系统的拓扑性质. 同时, 这种新方法还把  $Z_2$  拓扑数跟非阿贝尔贝里联络联系在一起, 提供了一种直观地观测和理解  $Z_2$  拓扑数的崭新视角, 具有深刻的物理意义.

这种方法的主要思想是, 计算等效一维系统的瓦尼尔函数心的演化. 我们将看到, 系统的瓦尼尔函数心的演化方式确定了系统的拓扑性质. 下面我们先给出这个方法的数学表达式和证明, 然后基于这种方法, 在数值上计算了一般绝缘体系统的  $Z_2$  拓扑数.

### 2.3.1 等效一维系统的瓦尼尔函数心

三维系统的拓扑性质可以通过降低维度变成 2 个二维系统来计算. 举例来说, 我们在由  $k_x, k_y, k_z$  张成的三维倒空间中, 取  $k_z = 0$  和  $k_z = \pi$ , 得到 2 个由  $k_x$  和  $k_y$  张成的二维平面. 然后从这 2 个等效的二维系统的拓扑性质就可以得到三维系统的拓扑性质. 因此, 在后面的公式推导中, 对三维系统我们默认  $k_z$  等于 0 和  $\pi$ , 并省略不写. 对由  $k_x, k_y$  构成的二维系统, 我们把其中一个维度的分量(本节以  $k_y$  为例)当成一个可以绝热变化的参数, 这样我们进一步把系统降低了维度, 变成了一个由参数  $k_y$  控制的等效一维系统. 下面我们先给出这个等效一维系统占据态瓦尼尔函数心的计算方法. 下一节再给出通过瓦尼尔函数心的演化方式来判断二维系统拓扑性质的方法.

我们先定义布洛赫(Bloch)基矢:

$$|k\alpha\tau\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_{\text{cell}}}} \sum_j e^{ik \cdot (R_j + \tau)} |j\alpha\tau\rangle, \quad (14)$$

其中  $j$  标记实空间中原胞的位置,  $\tau$  是原胞内不等价原子的位置,  $\alpha$  是轨道和自旋指标.  $|k\alpha\tau\rangle$  是布洛赫基函数,  $|j\alpha\tau\rangle$  是实空间局域轨道基函数. 具有平移不变性系统的能量本征态可以用 (14) 式的 Bloch 基矢展开,  $c_{n\alpha\tau}$  是展开系数:

$$\begin{aligned} |\Psi_{nk}(r)\rangle &= \sum_{\alpha\tau} c_{n\alpha\tau} |k\alpha\tau\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N_{\text{cell}}}} \sum_{j\alpha\tau} c_{n\alpha\tau} e^{ik \cdot (R_j + \tau)} |j\alpha\tau\rangle. \end{aligned} \quad (15)$$

我们定义算符

$$\hat{X} = \sum_{j\alpha\tau} e^{-i\delta k_x \cdot (R_j + \tau)} |j\alpha\tau\rangle \langle j\alpha\tau|, \quad (16)$$

其中  $\delta k_x = 2\pi/N_x a_x$ ,  $N_x$  是实空间中  $x$  方向原胞的数目,  $a_x$  是晶格常数. 可以看到这个算符的相位有实空间位置的物理意义.

系统的拓扑性质由占据态的电子决定, 因此我们定义投影算符:

$$\hat{P}_{k_y} = \sum_{m \in o} \sum_{k_x} |\Psi_{mk_x k_y}\rangle \langle \Psi_{mk_x k_y}|, \quad (17)$$

把系统投影到  $k_y$  固定的占据态中. 上式中  $o$  表示对  $2N$  个占据态求和. 把投影算符作用到 (16) 式上, 我们得到了固定  $k_y$  的描述占据态的等效一维系统的位置算符:

$$\begin{aligned} \hat{X}_P(k_y) &= \hat{P}_{k_y} \hat{X} \hat{P}_{k_y} \\ &= \sum_{mn \in o} \sum_{\alpha, k_x, k'_x} c_{n\alpha}^*(k_x) c_{m\alpha}(k'_x) \delta(k_x + \delta k_x - k'_x) |\Psi_{nk_x k_y}\rangle \langle \Psi_{mk'_x k_y}|. \end{aligned} \quad (18)$$

为了方便, 上式中我们把指标  $\tau$  吸收到了  $\alpha$  中. 这个算符可以写成更直观的矩阵形式:

$$\hat{X}_P(k_y) = \begin{bmatrix} 0 & F_{0,1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & F_{1,2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & F_{2,3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & F_{N_x-2, N_x-1} \\ F_{N_x-1, 0} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (19)$$

其中

$$\begin{aligned} F_{i,i+1}^{nm} &= \sum_{\alpha} c_{n\alpha}^*(k_{x,i}, k_y) c_{m\alpha}(k_{x,i+1}, k_y) \\ &= \langle n, k_{x,i}, k_y | m, k_{x,i+1}, k_y \rangle. \end{aligned} \quad (20)$$

是  $U(2N)$  非阿贝尔贝里联络(non-Abelian Berry's connection),  $k_{x,i} = 2\pi i/N_x a_x$  是  $k_x$  方向上的离散点.  $|m, k_{x,i+1}, k_y\rangle$  是本征态布洛赫函数的周期部分.

我们把  $F_{i,i+1}$  首尾相接的连乘起来, 定义如下的一个  $W(k_y)$  矩阵:

$$W(k_y) = F_{0,1} F_{1,2} F_{2,3} \cdots F_{N_x-2, N_x-1} F_{N_x-1, 0}. \quad (21)$$

$W(k_y)$  是在  $k_y$  固定时, 由  $k_x$  的取值构成一个闭合环路的  $U(2N)$  威耳逊环路(Wilson loop) (见图 4). 容易证明, 矩阵  $W(k_y)$  的本征值和行列式是与环路上各个  $k_x$  点的波函数的具体规范无关的. 这个性质给数值计算带来了很大便利.  $W(k_y)$  矩阵有  $2N$  个本征值:

$$\lambda_m(k_y) = |\lambda_m| e^{i\phi_m(k_y)}, \quad m = 1, \dots, 2N. \quad (22)$$

后面我们将看到  $|\lambda_m| = 1$ , 本征值的相位  $\phi_m(k_y)$  是等效一维系统占据态的瓦尼尔函数心<sup>[30]</sup>. 绝热地变化  $k_y$  的值, 可以得到这个一维系统瓦尼尔函数心的演化曲线. 在下一节中, 我们将详细讨论  $\phi_m(k_y)$  演化曲线与系统拓扑性质的联系.

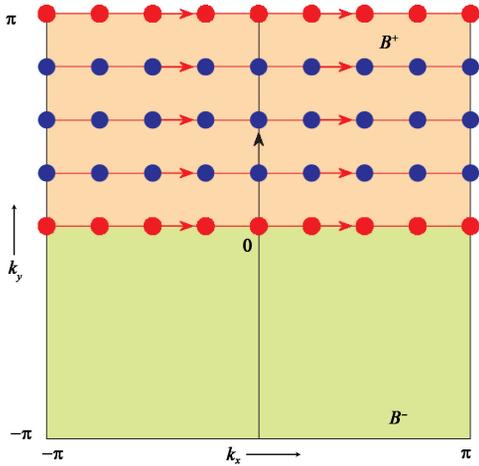


图4 布里渊区被分成  $B^+$  和  $B^-$  两个区域. 在  $B^+$  中, 先把  $k_y$  固定, 让  $k_y$  沿着红色箭头方向形成一个一维的闭合环路(因为布里渊区具有周期性,  $k_y = -\pi$  和  $k_y = \pi$  处的状态是相同的), 按照 (21) 式, 可以定义一个  $U(2N)$  威耳逊环路矩阵. 这个矩阵本征值的相位即为该等效一维系统占据态的瓦尼尔函数心. 然后让  $k_y$  沿着黑色箭头从 0 变化到  $\pi$ , 可以得到系统瓦尼尔函数心的演化图像. 布里渊区中红色点线 ( $k_y = 0$  和  $k_y = \pi$ ) 是满足时间反演对称性的 2 个一维系统, 可以证明这 2 个等效一维系统的瓦尼尔函数心是 2 重简并的

2.3.2  $Z_2$  拓扑不变量

上一节通过  $U(2N)$  威耳逊环路给出了计算等效一维系统瓦尼尔函数心  $\phi_m(k_y)$  的数学表达式, 这一节中我们将给出  $\phi_m(k_y)$  与  $Z_2$  拓扑不变量的联系.

因为系统存在时间反演对称性, 积分限制在  $B^+$  中, 并且对布里渊区中的波函数作如下规范限制:

$$|n, -k\rangle = \hat{\theta} |n, k\rangle \quad (n = 1, 2, 3 \dots 2N) \quad (23)$$

式中  $2N$  为系统占据态的数目. 因为系统处于非平庸拓扑相时会存在拓扑阻塞, 使得不可能在整个布里渊区上找到连续的、且满足上面限制条件的波函数, 所以我们把布里渊区分成两部分:  $B^-$  和  $B^+$ , 并假设波函数在  $B^-$  和  $B^+$  内部都连续, 不连续性只发生在  $B^-$  和  $B^+$  的交界线上, 即图 4 中所示的  $k_y = 0$  和  $k_y = \pi$  两条线. 我们先把贝里联络沿着  $k_x$  方向积分, 定义一个  $U(1)$  威耳逊环路:

$$\Phi(k_y) = \oint_{-\pi}^{\pi} dk_x A_x(k_x, k_y) \quad (24)$$

这样 (8) 式可以表示为

$$Z_2 = \frac{1}{2\pi} \left[ \int_0^{\pi} dk_y \partial_{k_y} \Phi(k_y) - (\Phi(\pi) - \Phi(0)) \right] \text{ mod } 2 \quad (25)$$

下面我们给出 (21) 式定义的  $W(k_y)$  矩阵和  $\Phi(k_y)$  的联系. 在 (20) 式中, 当  $\delta k_x \ll 2\pi$  时,

$$\begin{aligned} F_{i,i+1}^{nm} &= \langle n, k_{x,i}, k_y | m, k_{x,i+1}, k_y \rangle \\ &= \delta_{mn} + \langle n, k_{x,i}, k_y | m, k_{x,i+1}, k_y \rangle \\ &\quad - \langle n, k_{x,i}, k_y | m, k_{x,i}, k_y \rangle \\ &= \delta_{mn} - ia_x^{nm}(k_{x,i}, k_y) \delta k_x \\ &\approx e^{-ia_x^{nm}(k_{x,i}, k_y) \delta k_x} \end{aligned} \quad (26)$$

其中  $a_x^{nm}(k_{x,i}, k_y) =$

$$i \frac{\langle n, k_{x,i}, k_y | m, k_{x,i+1}, k_y \rangle - \langle n, k_{x,i}, k_y | m, k_{x,i}, k_y \rangle}{\delta k_x}$$

是贝里联络矩阵的离散偏分形式. 这样, (21) 式中的  $W(k_y)$  可以改写成

$$\begin{aligned} W(k_y) &= \prod_{i=0}^{N_x-1} F_{i,i+1}(k_y) = \prod_{i=0}^{N_x-1} e^{-ia_x(k_{x,i}, k_y) \delta k_x} \\ &= P e^{\int_{-\pi}^{\pi} -ia_x(k_x, k_y) dk_x} \end{aligned} \quad (27)$$

上式是连续模型下的  $U(2N)$  威耳逊环路.

将 (24) 式和 (27) 式代入到大家熟知的等式  $\det[e^{Q}] = e^{\text{Tr}[Q]}$  ( $Q$  为矩阵) 中, 得到

$$\det[W(k_y)] = e^{-i\Phi(k_y)} \quad (28)$$

$W(k_y)$  的本征值为  $e^{-i\phi_n(k_y)}$ , 所以有

$$\Phi(k_y) = - \sum_{n=1}^{2N} \phi_n(k_y) \text{ mod } 2\pi \quad (29)$$

把 (29) 式代入 (25) 式, 得到

$$Z_2 = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=1}^{2N} \left[ \int_0^{\pi} dk_y \partial_{k_y} \phi_n(k_y) - (\phi_n(\pi) - \phi_n(0)) \right] \text{ mod } 2 \quad (30)$$

上式给出了等效一维系统瓦尼尔函数心  $\phi_n(k_y)$  与系统  $Z_2$  拓扑数的联系.

相位  $\phi_n(k_y)$  有  $2\pi$  的不确定性, 因此  $\sum_{n=1}^{2N} \phi_n(k_y)$  有  $4N\pi$  的不确定性, 这使得 (30) 式右边求和中  $2N$  的不确定性, 但是这不改变  $Z_2$  的奇偶性, 因此 (30) 式定义的  $Z_2$  拓扑数是良好的, 即与相位的不确定性无关. 为了方便, 我们限定  $\phi_n(k_y = 0)$  和  $\phi_n(k_y = \pi)$  的取值在  $[0, 2\pi]$  区间, 这样得到

$$\int_0^{\pi} dk_y \partial_{k_y} \phi_n(k_y) = \phi_n(\pi) - \phi_n(0) + 2\pi M_n \quad (31)$$

$M_n$  即为  $\phi_n(k_y)$  的缠绕数. 把 (31) 式代入 (30) 式, 可得到本节最重要的公式:

$$Z_2 = \sum_{n=1}^{2N} M_n \text{ mod } 2, \quad (32)$$

即系统的  $Z_2$  拓扑数等于等效的一维系统瓦尼尔函数心缠绕数之和模 2. 我们还可以证明这种方法和 (5) 式方法的等价性<sup>[29]</sup>.

为了方便理解,在图 5 中,我们给出了占据态为 2,  $M_1=0, M_2$  分别等于 0, 1, 2, 3 的一个例子.  $\phi_n$  ( $k_y=0$ ) 离开  $k_y=0$  的两重简并点后会劈开,到  $k_y=\pi$  处再汇合. 由于  $\phi_n(k_y)$  具有  $2\pi$  的周期性,在图 5 (a), (c), (e), (g) 中给出了它的几种演化方式. 为了方便说明问题,在图 5 (b), (d), (f), (h) 中,我们把  $\phi=0$  和  $\phi=2\pi$  这两条线粘合到一起,这样在  $k_y$  和  $\phi$  空间中构成了一个圆柱体. 随着  $k_y$  的变化,  $\phi_n$  的演化曲线在圆柱体上缠绕,缠绕的圈数即为缠绕数. 在图 5 (a) 中,  $\phi_{1,2}$  的缠绕数都为 0, 按照 (32) 式计算得到  $Z_2=0$ . 在图 5 (c) 中,  $\phi_1$  的缠绕数为 0,  $\phi_2$  的缠绕数为 1, 对应到图 5 (d) 中, 可以看到  $\phi_{1,2}$  缠绕圆柱面正好一圈, 得到  $Z_2=1$ . 同样可以看出图 5 (f) 中缠绕数为 2. 但在图 5 (f) 中,  $P$  点处的简并属于偶然简并, 不受时间反演对称性的保护, 在外在扰动下, 简并点会打开 (如图 5 (f) 中绿色线所示). 这样在拓扑结构上图 5 (f) 就和图 5 (a) 等价了, 因此  $Z_2=0$ . 同样的道理, 图 5 (h) 的拓扑性质和图 5 (d) 是一样的, 系统的拓扑数  $Z_2=1$ . 对更多占据态的系统, 可以通过计算  $\phi_n$  穿过  $\phi=2\pi$  (或者其他任何一条方便的参考线) 的次数来确定系统的  $Z_2$  拓扑数. 具体的例子见下一节对真实材料系统的计算.

### 2.3.3 数值结果

本节我们把上面提出的方法用于真实材料的计算中. 现以二维 graphene 系统为例, 通过系统的瓦尼尔函数心的演化曲线来判断它们的拓扑性质.

Graphene 具有二维的六角格子结构, 它由 2 套子格 (A 子格和 B 子格) 组合而成. Kane 和 Mele 提出了一个满足时间反演对称性、包含自旋轨道耦合相互作用项的有效模型<sup>[6]</sup>:

$$H = t \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j + i\lambda_{so} \sum_{\langle i,j \rangle} v_{ij} c_i^\dagger s_z c_j + i\lambda_R \sum_{\langle i,j \rangle} v_{ij} c_i^\dagger (s \times \hat{d}_{ij})_z c_j + \lambda_v \sum_i \xi_i c_i^\dagger c_i, \quad (33)$$

其中自旋指标吸收到了升降算符中. 第 1 项  $t$  是最近邻跃迁项. 第 2 项  $\lambda_{so}$  是次近邻间的自旋轨道耦合相互作用项. 第 3 项是破坏  $z$  方向反演对称性的 Rashba 项. 第 4 项描述 2 套子格的在位能, 这一项破坏平面内的反演对称性. 在  $k$  空间中, 哈密顿量

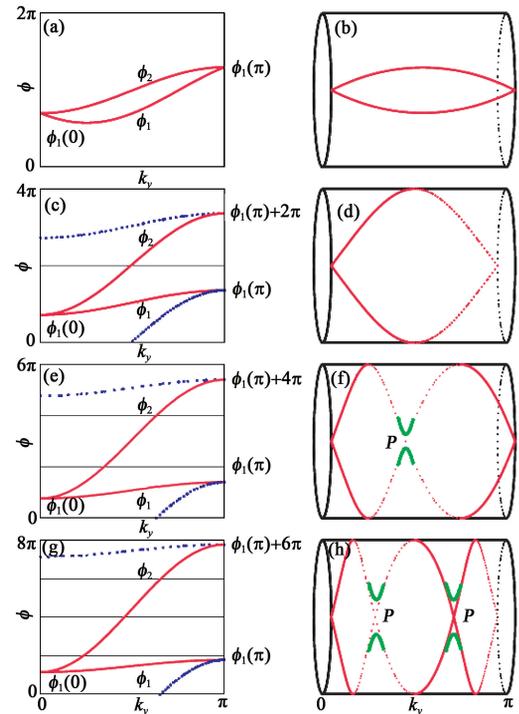


图 5 一个占据态为 2 的假想系统的例子. 图 (a), (c), (e), (g) 给出了占据态的瓦尼尔函数心的几种演化方式. 因为相位  $\phi$  有  $2\pi$  的周期性, 为了方便讨论问题, 我们把  $\phi$  方向上等于 0 和  $2\pi$  的线粘连起来构成一个圆柱, 这样很容易看出瓦尼尔函数心在圆柱上的缠绕数分别为 (b) 0, (d) 1, (f) 2, (h) 3. 在  $k_y=0$  和  $k_y=\pi$  处, 由于时间反演对称性,  $\phi_n(k_y)$  是双重简并的. 但在 (f) 和 (h) 中的偶然简并点  $P$  不受时间反演对称性保护, 在外扰下简并被破坏, 使得它们的拓扑性质分别和 (b) 和 (d) 相同

可以写成

$$H(k) = \sum_{\alpha=1}^5 d_\alpha(k) \Gamma_\alpha + \sum_{\alpha<\beta=1}^5 d_{\alpha\beta}(k) \Gamma_{\alpha\beta}, \quad (34)$$

其中  $\Gamma_{1,2,3,4,5} = (I \otimes \sigma_x, I \otimes \sigma_z, s_x \otimes \sigma_y, s_y \otimes \sigma_y, s_z \otimes \sigma_y)$ ,  $\sigma, s$  分别是描述子格空间和自旋空间的泡利矩阵,  $\Gamma_{\alpha\beta} = \frac{[\Gamma_\alpha, \Gamma_\beta]}{2i}$ ,  $d_\alpha$  和  $d_{\alpha\beta}$  的形式见表 1.

表 1 (34) 式中非零系数的具体形式 (其中  $x=k_x a/2, y=\sqrt{3} k_x a/2$ )

$d_1$	$t(1+2\cos x \cos y)$	$d_{12}$	$-2t \cos x \sin y$
$d_2$	$\lambda_v$	$d_{15}$	$2\lambda_{so}(\sin 2x - 2\sin x \cos y)$
$d_3$	$\lambda_R(1 - \cos x \cos y)$	$d_{23}$	$-\lambda_R \cos x \sin y$
$d_4$	$-\sqrt{3} \lambda_R \sin x \sin y$	$d_{24}$	$\sqrt{2} \lambda_R \sin x \cos y$

文献[6]给出了 graphene 的相图: 不同的  $\lambda_R, \lambda_{so}, \lambda_v$  参数值, 可以使系统处于普通绝缘体相 (insulating phase) 或者量子自旋霍尔相 (quantum spin hall phase) (见图 6).

这里我们取普通绝缘体相的一组参数值为:

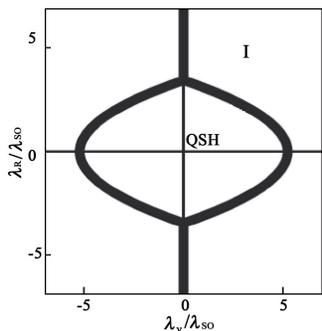


图6 石墨烯(graphene)在不同参数下的相图<sup>[5]</sup>(曲线内部是量子自旋霍尔态(QSH),曲线外部是普通绝缘体相(I))

$\lambda_R = 0.05t, \lambda_{SO} = 0.06t, \lambda_V = 0.4t$ . 这里选  $t$  作为能量单位;取量子自旋霍尔态的一组参数值为: $\lambda_R = 0.05t, \lambda_{SO} = 0.06t, \lambda_V = 0.1t$ . 我们用这个模型计算两种物相下系统的瓦尼尔函数心的演化曲线,得到的结果如图7所示. 图7(a)是取量子自旋霍尔相参数值的情形,图7(b)是取普通绝缘体相参数值的情形. 图中红色虚线是选取的参考线. 在图7(a)中,瓦尼尔函数心和参考线相交一次,按照2.3.2节给出的判断方法,这个系统的  $Z_2$  拓扑数等于1. 在图7(b)中,瓦尼尔函数心和参考线相交零次,也可以向上移动参考线,使相交次数为2次,但得到的  $Z_2$  拓扑数仍然等于0. 这样我们通过计算瓦尼尔函数心演化曲线得到的  $Z_2$  拓扑数,跟以前通过其他方法计算得到的结果完全一致.

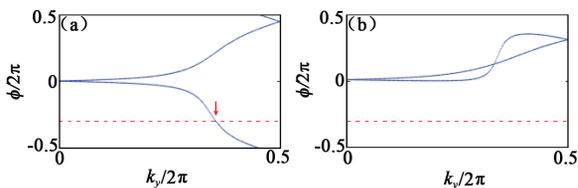


图7 石墨烯(graphene)系统的瓦尼尔函数心演化曲线 (a)瓦尼尔函数心演化曲线(蓝色实线)和参考线(红色虚线)相交一次,可以判断出系统处于量子自旋霍尔态;(b)瓦尼尔函数心演化曲线和参考线相交零次,可以判断出系统处于普通绝缘体态

### 3 结束语

本文我们回顾了几种满足时间反演不变性的绝缘体系统的  $Z_2$  拓扑数的计算方法,并给出了一种通过  $U(2N)$ 非阿贝尔贝里联络表示  $Z_2$  拓扑数的计算方法. 这种方法的优势在于计算过程中不需要限定波函数的规范,可以很方便地嵌入到数值计算的程序中. 基于这个方法,我们以石墨烯(graphene)系统为例,计算了系统瓦尼尔函数心演化的图像,非常

直观地判断出了系统的拓扑性质,得到了和前面研究相同的结论.

### 参考文献

[1] Nakahara M. *Geometry, Topology and Physics*. Bristol: Adam Hilger, 1990

[2] Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 1982, 49(6):405

[3] Wen X G. *Advances in Physics*, 1995, 44(5):405

[4] Klitzing K V, Dorda G, Pepper M. *Phys. Rev. Lett.*, 1980, 45(6):494

[5] Kane C L, Mele E J. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, 95(14):146802

[6] Kane C L. *Nat. Phys.*, 2008, 4(5):348

[7] Fu L, Kane C L, Mele E J. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, 98(10):106803

[8] Roy R. *Phys. Rev. B*, 2009, 79(19):195322

[9] Moore J E, Balents L. *Phys. Rev. B*, 2007, 75(12):121306

[10] Fu L, Kane C L. *Phys. Rev. B*, 2007, 76(4):045302

[11] Teo J C Y, Fu L, Kane C L. *Phys. Rev. B*, 2008, 78(4):045426

[12] Fukui T, Hatsugai Y. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 2007, 76:053702

[13] Ran Y, Zhang Y, Vishwanath A. *Nat. Phys.*, 2009, 5:298

[14] Zhang H J, Liu C X, Qi X L *et al.* *Nat. Phys.*, 2009, 5(6):438

[15] Chen Y L, Analytis J G, Chu J H *et al.* *Science*, 2009, 325(5937):178

[16] Hsieh D, Qian D, Wray L *et al.* *Nature*, 2008, 452(7190):970

[17] Xia Y, Qian D, Hsieh D *et al.* *Nat. Phys.*, 2009, 5(6):398

[18] Analytis J G, Chu J H, Chen Y *et al.* *Phys. Rev. B*, 2010, 81(20):205407

[19] Hsieh D, Xia Y, Qian D *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2009, 103(14):146401

[20] Park S R, Jung W S, Kim C *et al.* *Phys. Rev. B*, 2010, 81(4):041405

[21] Shen S Q. Quantum hall effect of the surface states in topological insulator. arXiv:0909.4125, September 2009

[22] Yan B, Liu C X, Zhang H J *et al.* 2010, 90(3):37002

[23] Lin H, Andrew W L, Xia Y *et al.* *Nat. Mater.*, 2010, 9(7):546

[24] Shan W Y, Lu H Z, Shen S Q. *New J. Phys.*, 2010, 12(4):043048

[25] Kane C L, Mele E J. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, 95(22):226801

[26] Fukui T, Hatsugai Y, Suzuki H. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 2005, 74:1674

[27] Xiao D, Yao Y, Feng W *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2010, 105(9):096404

[28] Fu L, Kane C L. *Phys. Rev. B*, 2006, 74(19):195312

[29] Yu R, Qi X L, Bernevig A *et al.* An equivalent expression of  $Z_2$  topological invariant for band insulators using non-Abelian Berry's connection. arXiv:1101.2011v1

[30] Marzari N, Vanderbilt D. *Phys. Rev. B*, 1997, 56(20):12847