

# ИДЕНТИФИКАЦИЯ ДВУМЕРНЫХ АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРОВ КЛАССА $Z_2$

Ф. Бег, П. Пужоль, Р. Рамазашвили\*

*Laboratoire de Physique Théorique, IRSAMC, Université de Toulouse, CNRS, UPS, France*

Поступила в редакцию 27 марта 2017 г.

(Перевод с английского)

## IDENTIFYING TWO-DIMENSIONAL $Z_2$ ANTIFERROMAGNETIC TOPOLOGICAL INSULATORS

F. Bègue, P. Pujol, R. Ramazashvili

Обсуждается вопрос о возможности возникновения двумерного топологического изолятора в соизмеримом неелевском антиферромагнетике, где неелевская намагниченность нарушает симметрию как по отношению к элементарной трансляции, так и по отношению к обращению времени — но сохраняет симметрию по отношению к произведению этих двух операций. В противоположность топологическим изоляторам класса  $Z_2$ , исчерпывающая классификация антиферромагнитных топологических фаз с помощью топологических инвариантов до сих пор отсутствует. Мы изучаем простую модель антиферромагнитного топологического изолятора и приводим ее фазовую диаграмму, пользуясь недавним критерием для центросимметричных систем [13]. Далее мы адаптируем к задаче два метода, изначально предложенных для парамагнитных систем, и демонстрируем появление топологических фаз. Предложенные методы допускают приложение далеко за пределами приведенных в работе примеров и допускают простое обобщение, что мы и иллюстрируем двумя примерами систем без центра инверсии, где простые критерии топологически нетривиальных фаз до сих пор отсутствуют. Для некоторых случаев мы также явно демонстрируем существование краевых состояний в антиферромагнитном топологическом изоляторе.

DOI: 10.7868/S0044451018010108

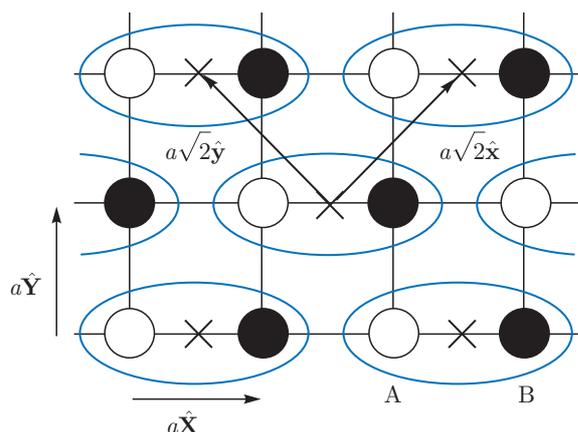
### 1. ВВЕДЕНИЕ

Топологически нетривиальные состояния вещества стали предметом значительных теоретических и экспериментальных усилий (см. подробные обзоры [1, 2] и ранние работы [3–6]). Такой интерес продиктован замечательной устойчивостью топологических фаз и их физических свойств по отношению к возмущениям.

Топологические изоляторы (ТИ) представляют простой пример таких фаз в невзаимодействующих системах. С точки зрения зонной теории это обычные зонные изоляторы со щелью в спектре. Однако, помимо щели, зоны могут иметь нетривиальную топологию в пространстве импульсов, проявляющую

себя, помимо прочего, наличием поверхностных состояний, устойчивых по отношению к умеренным объемным и поверхностным возмущениям. Эта топология может быть охарактеризована целым числом, относящимся к заполненным объемным зонам. Изоляторы с нечетным значением этого числа имеют топологически защищенные бесщелевые поверхностные состояния внутри объемной щели и называются «топологическими». При четном значении этого числа поверхностные состояния не защищены; такие изоляторы называются «топологически тривиальными». Переход между четным и нечетным значениями требует закрытия объемной щели и фазового перехода; в противном случае, непрерывное изменение гамильтониана оставляет это число неизменным. Поэтому оно называется топологическим инвариантом типа  $Z_2$  («чет-нечет»).

\* E-mail: revaz@irsamc.ups-tlse.fr



**Рис. 1.** (В цвете онлайн) Квадратная решетка, на которой определен гамильтониан. В отсутствие антиферромагнитной намагниченности элементарными векторами решетки Браве являются  $a\hat{X}$  и  $a\hat{Y}$ . В присутствии антиферромагнитной намагниченности димеризованная решетка определена элементарными векторами  $a\sqrt{2}\hat{x}$  и  $a\sqrt{2}\hat{y}$ . В этом случае элементарная ячейка (обозначенная синим цветом) состоит из двух узлов, A и B (соответственно белые и черные кружки). Центр элементарной ячейки (обозначенный  $r$  в тексте) представлен крестиком

Симметрия облегчает описание; поэтому неудивительно, что в пионерских работах по топологическим изоляторам изучались высокосимметричные системы, в особенности симметричные как по отношению к обращению времени  $\theta$ , так и по отношению к инверсии  $\mathcal{P}$ . Одновременное присутствие этих двух симметрий гарантирует двойное вырождение блоховских состояний на каждом импульсе в зоне Бриллюэна. Среди двумерных систем одним из наиболее известных примеров подобного рода является так называемая модель Берневига – Хьюза – Жанга (БХЖ) [7], которую мы кратко обсудим в настоящей статье. Объемные блоховские состояния могут быть вырождены и в системах с более деликатными симметриями. Удобным примером является коллинеарный неелевский антиферромагнетик, схематично изображенный на рис. 1; в нем симметрия  $\theta$  по отношению к обращению времени явно нарушена магнитным порядком. Черные и белые круги на рисунке изображают подрешетки неелевского антиферромагнетика на квадратной решетке и соответствуют противоположному направлению локальной намагниченности. Как обращение времени  $\theta$ , так и трансляция  $T$  на элементарный период  $a$  обращают направление локальной намагниченности (т. е. меняют местами черные и белые круги на рис. 1), и поэтому ни одна из этих операций не является симмет-

рией системы. Тем не менее, произведение  $\theta T$  остается симметрией и в сочетании с инверсией  $\mathcal{P}$  обеспечивает двойное вырождение блоховских состояний с произвольным импульсом в зоне Бриллюэна — точно так же, как в парамагнитном изоляторе такое вырождение возникает благодаря сочетанию  $\theta$  и  $\mathcal{P}$ .

Имея в виду это сходство, можно поинтересоваться, способно ли топологически нетривиальное состояние возникнуть в антиферромагнетике — и, если да, то может ли оно иметь свойства, отличающие его от парамагнитных родственников. Несколько пионерских работ уже ставили этот вопрос. В частности, в работе [8] поставлен вопрос о том, может ли антиферромагнитный изолятор быть топологически нетривиальным и можно ли охарактеризовать его топологическим инвариантом. Авторы заключили, что в отличие от немагнитных изоляторов, присутствие краевых состояний в антиферромагнетике чувствительно к тому, симметрична ли поверхность к той же комбинации трансляции и обращения времени, что и объем. Этот результат был получен для трехмерных веществ и подтвержден для специально выбранной поверхности. С тех пор изучение трехмерных антиферромагнитных топологических изоляторов стало предметом широких исследований [9–13].

В последующей публикации [13] изучен класс систем, где помимо симметрии по отношению к обращению времени имеется и центр инверсии. Авторы утверждают, что антиферромагнитный изолятор с такими свойствами может быть охарактеризован топологическим инвариантом класса  $Z_2$ , который, как и в парамагнетике, выражается через произведение четностей собственных состояний в особых точках зоны Бриллюэна. Однако в антиферромагнетике этот набор особых точек состоял бы лишь из половины точек, соответствующих парамагнитному случаю.

Упомянутые выше системы можно рассматривать как частный пример так называемых кристаллических топологических изоляторов, изучавшихся в трех измерениях [10–12, 14–17], а также на двумерной гексагональной решетке [18]. Ключевой составляющей этих работ являлась симметрия по отношению к обращению времени, дополненная некоторой кристаллической симметрией.

В настоящей работе мы изучаем точную форму упомянутого инварианта класса  $Z_2$  в антиферромагнитном изоляторе для определенного обобщения модели БХЖ [7] в двух измерениях. В разд. 2 мы кратко обзораем модель БХЖ и ее симметрии. Далее мы обобщаем эту модель, включая в нее

антиферромагнитную намагниченность, перечисляем ее симметрии и задаемся вопросом о том, может ли топология этой модели быть охарактеризована так же, как в парамагнитной модели БХЖ. В разд. 3 мы обзреваем некоторые методы, используемые при изучении топологических изоляторов: топологический инвариант Фу–Кейна [19], метод параллельного переноса [20], метод зарядовых центров Ванье [21, 22] и, наконец, явную запись краевых состояний. Мы демонстрируем, что эти методы неприменимы к антиферромагнетикам дословно, и показываем, как следует их адаптировать. Рассматриваемая нами модель имеет центр инверсии, поэтому мы сравниваем наши результаты с топологическим инвариантом класса  $Z_2$  в форме Фанга и находим полное согласие. При этом наша адаптация метода зарядовых центров Ванье действует даже тогда, когда основанный на четности критерий уже неприменим. Чтобы проиллюстрировать это, в разд. 4 мы рассматриваем два примера возмущений изначального гамильтониана, нарушающих симметрию по отношению к инверсии, и метод успешно идентифицирует топологические фазы. И, наконец, разд. 5 содержит заключительные замечания и обсуждение перспектив.

## 2. МОДЕЛЬ БХЖ И ЕЕ АНТИФЕРРОМАГНИТНОЕ РАСШИРЕНИЕ

Берневиг, Хьюз и Жанг предложили модель для описания топологических изолирующих фаз в квантовых ямах HgTe/CdTe [7]. В этой части мы представляем предложенный ими гамильтониан. Мы увидим, как он меняется в присутствии антиферромагнетизма, и рассмотрим вопрос о том, как магнитный порядок влияет на топологические свойства.

### 2.1. Модель БХЖ

Мы рассмотрим квадратную решетку, заданную векторами  $\mathbf{R} = pa\hat{\mathbf{X}} + qa\hat{\mathbf{Y}}$ , где  $p, q \in \mathbb{Z}$  (см. рис. 1). Элементарная ячейка, обозначенная вектором  $\mathbf{R}$ , содержит четыре одноэлектронных состояния  $|\mathbf{R}, n\rangle$ : две орбитали  $s$ -типа,  $|\uparrow, s\rangle$  и  $|\downarrow, s\rangle$ , и две орбитали  $p$ -типа,  $|\uparrow, p_x + ip_y\rangle$  и  $|\downarrow, p_x - ip_y\rangle$ .

Мы используем индекс  $\nu$  для обозначения  $s$ -состояния ( $\nu = +$ ) или  $p$ -состояния ( $\nu = -$ ) и  $\sigma$  для обозначения спина. В этом базисе гамильтониан БХЖ может быть записан как

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{BHZ} = & \sum_{\mathbf{R}, \sigma, \nu} (\mu + \nu \Delta \mu) c_{\sigma, \nu}^{\dagger}(\mathbf{R}) c_{\sigma, \nu}(\mathbf{R}) + \\ & + \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle, \sigma, \nu} (t + \nu \Delta t) (c_{\sigma, \nu}^{\dagger}(\mathbf{R}) c_{\sigma, \nu}(\mathbf{R}') + \text{H.c.}) + \\ & + \sum_{\mathbf{R}, \sigma, \nu} -i \alpha \sigma (c_{\sigma, \nu}^{\dagger}(\mathbf{R} + a\hat{\mathbf{X}}) c_{\sigma, -\nu}(\mathbf{R}) - \text{H.c.}) + \\ & + \sum_{\mathbf{R}, \sigma, \nu} \alpha \nu (c_{\sigma, \nu}^{\dagger}(\mathbf{R} + a\hat{\mathbf{Y}}) c_{\sigma, -\nu}(\mathbf{R}) + \text{H.c.}). \quad (1) \end{aligned}$$

Первый член ( $\mu_{\pm} = \mu \pm \Delta \mu$ ) происходит от разности энергий орбиталей  $s$ - и  $p$ -симметрии. Второй член соответствует перескоку между ближайшими соседями одной и той же орбитали, с разными амплитудами  $t_{\pm} = t \pm \Delta t$ . Остальные два члена могут быть истолкованы по-разному: в оригинальной модели БХЖ [2, 7] они происходят от зонной структуры HgTe, диктующей связь между  $s$ - и  $p$ -орбиталями. При переходе к обратному пространству в уравнении (3) мы упомянем и другую интерпретацию. Заметьте, что гамильтониан инвариантен как по отношению к обращению времени, так и по отношению к инверсии, как это будет подробнее обсуждаться ниже.

Гамильтониан является невзаимодействующим, и его основное состояние строится путем заполнения одноэлектронных состояний вплоть до энергии Ферми. При половинном заполнении объемный спектр имеет щель. Тем не менее, в зависимости от параметров гамильтониана, система может быть тривиальным или топологическим изолятором — в том смысле, в котором это описано во Введении, как мы покажем ниже. Таким образом, тривиальная фаза имеет место при  $|\Delta \mu| > 4|\Delta t|$ : на границе такой системы возникает четное число пар краевых состояний. Напротив, при  $|\Delta \mu| < 4|\Delta t|$  система оказывается в топологической фазе и имеет нечетное число пар состояний на поверхности, поэтому в топологической фазе гарантировано существование по крайней мере одной пары киральных краевых состояний. Переход от топологического к тривиальному состоянию подразумевает закрытие зонной щели (в данном случае, это происходит при  $|\Delta \mu| = 4|\Delta t|$ ) и является квантовым фазовым переходом. Отсюда термин «топологически защищенные краевые состояния». Топология каждой фазы может быть характеризована четностью числа пар краевых состояний, которая, как мы увидим ниже, связана с топологическим инвариантом класса  $Z_2$ .

Трансляционная инвариантность кристаллической решетки позволяет определить гамильтониан Блоха

$$H_{BHZ}(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \mathcal{H}_{BHZ} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \quad (2)$$

и получить

$$H_{BHZ}(\mathbf{k}) = \mu + 2t \cos(ak_X) + 2t \cos(ak_Y) + (\Delta\mu + 2\Delta t \cos(ak_X) + 2\Delta t \cos(ak_Y))\tau^z - 2\alpha \sin(ak_X)s^z\tau^x + 2\alpha \sin(ak_Y)\tau^y, \quad (3)$$

где  $s^b$  и  $\tau^c$  с « $b$ » и « $c$ », обозначающими « $x$ », « $y$ » и « $z$ », являются матрицами Паули, действующими соответственно в спиновом и орбитальном пространствах. Единичный оператор в обоих пространствах опущен для краткости: например, последний член в уравнении (3) в спиновом пространстве действует как единичный оператор.

При фиксированном  $s^z$   $\alpha$ -член в уравнении (3) имеет по отношению к  $\tau$ -матрицам структуру спин-орбитального взаимодействия типа Рашба–Дрессельхаус. Каждая ветвь спектра имеет вырожденного партнера с противоположным  $s^z$ . Заметим, что величина  $\alpha$  не появляется в неравенствах, определяющих приведенную выше топологическую фазовую диаграмму.

Гамильтониан БХЖ инвариантен по отношению к обращению времени  $\Theta = is^y K$ , где  $K$  — комплексное сопряжение. Оператор  $\Theta$  антиунитарен, и  $\Theta^2 = -1$ .

Пользуясь аргументами теоремы Крамерса, можно показать, что собственные состояния гамильтониана БХЖ появляются крамерсовскими парами (см. общее доказательство в Приложении В), и состояние с импульсом  $\mathbf{k}$  связано с его вырожденным партнером с импульсом  $-\mathbf{k}$ . Это имеет важное последствие для множества особых точек  $\Gamma_i = (\Gamma^x, \Gamma^y)$  в зоне Бриллюэна, называемых «импульс, инвариантный по отношению к обращению времени» (ИИОВ)<sup>1)</sup>. Эти особые точки удовлетворяют уравнению  $-\Gamma_i = \Gamma_i + \mathbf{G}$ , где  $\mathbf{G}$  — вектор обратной решетки, и  $\Gamma^x, \Gamma^y$  принимают значения 0 или  $\pi/a$ . Поскольку  $\Gamma_i$  эквивалентен  $-\Gamma_i$ , состояния с ИИОВ двукратно вырождены; это важное свойство, которым мы воспользуемся ниже.

Гамильтониан также инвариантен по отношению к инверсии  $\mathcal{P} = \sum_{\mathbf{R}} \tau_z |-\mathbf{R}\rangle\langle\mathbf{R}|$  (где  $\tau_z$  происходит от того, что  $s$ -орбиталь инвариантна при инверсии, в то время как  $p$ -орбиталь приобретает знак «минус»). Заметим, что  $\mathcal{P}H(\mathbf{k})\mathcal{P}^{-1} = H(-\mathbf{k})$ , и  $\mathcal{P}^2 = 1$ .

Сочетая  $\Theta$  и  $\mathcal{P}$ , можно показать, что каждое блоховское собственное состояние имеет вырожденного партнера с тем же импульсом.

## 2.2. Обобщение на неелевскую намагниченность

Желая изучить влияние антиферромагнетизма на топологические изоляторы, мы вводим неелевскую намагниченность, следуя работам [13, 24–27], с помощью члена

$$\sum_{\mathbf{R}, \sigma, \nu} (-1)^{\mathbf{R}} \sigma m c_{\sigma, \nu}^{\dagger}(\mathbf{R}) c_{\sigma, \nu}(\mathbf{R}), \quad (4)$$

где  $m$  — произведение антиферромагнитной намагниченности и константы связи, определяющей ее взаимодействие с электронным спином. Уравнение (4) вводит антиферромагнитное упорядочение феноменологически, вне зависимости от формы взаимодействия, порождающего магнетизм. В то же время, это уравнение полностью пренебрегает как тепловыми, так и квантовыми флуктуациями магнитного порядка. Это может быть оправдано для упорядоченного магнитного момента, сравнимого с магнетонном Бора при температурах, низких по сравнению с температурой Нееля.

Неелевская намагниченность в уравнении (4) удваивает элементарную ячейку парамагнитного состояния и обедняет его трансляционную симметрию. Новая решетка Браве теперь определяется векторами

$$\mathbf{r} = pa\sqrt{2}\hat{\mathbf{x}} + qa\sqrt{2}\hat{\mathbf{y}}, \quad p, q \in \mathbb{Z},$$

где

$$\hat{\mathbf{x}} = (\hat{\mathbf{X}} + \hat{\mathbf{Y}})/\sqrt{2} \quad \text{и} \quad \hat{\mathbf{y}} = (-\hat{\mathbf{X}} + \hat{\mathbf{Y}})/\sqrt{2}.$$

Новая решетка Браве содержит два узла на элементарную ячейку, А и В, расположенные соответственно в

$$\mathbf{R}_A = \mathbf{r} - \frac{a}{2}\hat{\mathbf{X}} \quad \text{и} \quad \mathbf{R}_B = \mathbf{r} + \frac{a}{2}\hat{\mathbf{X}}$$

(см. рис. 1). Далее мы полагаем  $a = 1/\sqrt{2}$ . Элементарная ячейка с вектором решетки  $\mathbf{r}$  теперь содержит восемь состояний,  $|\mathbf{r}, n\rangle$ .

Мы определяем блоховский гамильтониан с неелевской намагниченностью согласно

$$H(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathcal{H} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (5)$$

Заметим различие между уравнениями (2) и (5). Здесь, в противоположность выбору Гуо и др. [27], реальные расположения узлов,  $\mathbf{R}_A$  и  $\mathbf{R}_B$ , заменены положением  $\mathbf{r}$  центра элементарной ячейки, которой принадлежат эти узлы. Такое определение блоховского гамильтониана гарантирует выполнение свойства  $H(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = H(\mathbf{k})$  для любого вектора обратной решетки  $\mathbf{G}$  [28], это свойство окажется полезным

<sup>1)</sup> Time Reversal Invariant Momenta (TRIM).

ниже, когда нам потребуется определить величины, непрерывные на торе зоны Бриллюэна. Получаем

$$\begin{aligned}
 H(\mathbf{k}) = & \mu + \Delta\mu\tau^z + ms^z\sigma^z + \\
 & + (2C_-^2 + 2C_-C_+)(t\sigma^x + \Delta t\tau^z\sigma^x) + \\
 & + (2C_-S_- + 2C_+S_-)(t\sigma^y + \Delta t\tau^z\sigma^y) - \\
 & - 2\alpha S_-(C_-s^z\tau^x\sigma^x + S_-s^z\tau^x\sigma^y) + \\
 & + 2\alpha S_+(C_- \tau^y\sigma^x + S_- \tau^y\sigma^y), \quad (6)
 \end{aligned}$$

где

$$C_{\pm} \equiv \cos[(k_x \pm k_y)/2], \quad S_{\pm} \equiv \sin[(k_x \pm k_y)/2],$$

в то время как  $\sigma$ ,  $s$  и  $\tau$  — матрицы Паули, действующие на подрешетках (А и В), и соответственно в спиновом и орбитальном пространствах.

Можно заметить, что этот гамильтониан сохраняет  $z$ -компоненту спина, что отчасти проистекает от совпадения спин-орбитальной оси с осью неелевской намагниченности.

Как обращение времени, так и элементарная трансляция обращают локальную намагниченность, и поэтому ни одна из этих операций не является симметрией антиферромагнитного состояния. Но их произведение  $\Theta_{AF} = T\Theta$  (где  $T$  — трансляция на вектор  $a\hat{\mathbf{X}}$ ) остается симметрией.

Оператор  $\Theta_{AF}$  также является антиунитарным, но его квадрат не равен  $-1$  для произвольного импульса в зоне Бриллюэна. Разумеется, поскольку обращение времени коммутирует с любым чисто пространственным преобразованием, оно коммутирует и с любой трансляцией, и поэтому  $\Theta_{AF}^2 = -T^2$ . Можно заметить, что  $T^2$  является симметрией антиферромагнитного состояния и действует на собственное состояние  $|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$  согласно

$$T^2|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle = e^{-i2a\mathbf{k}\cdot\mathbf{X}}|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle.$$

В результате в некоторых точках зоны Бриллюэна

$$k_X = \frac{\pi}{2a} \bmod \pi/a$$

оператор  $\Theta_{AF}^2$  равен единице, что препятствует определению крамеровских пар (см. рис. 2).

Тем не менее система по-прежнему инвариантна по отношению к инверсии, представленной оператором  $\mathcal{P}_{AF}$ , выражение для которого дано в Приложении В.

Благодаря обеим симметриям можно показать, что по-прежнему можно разделить состояния на крамеровские пары, связывающие состояние с импульсом  $\mathbf{k}$  с состоянием с импульсом  $-\mathbf{k}$  (см. Приложение В). Это понадобится нам в следующем разделе при вычислении инварианта  $Z_2$  в антиферромагнитном состоянии. Более того, можно показать, что

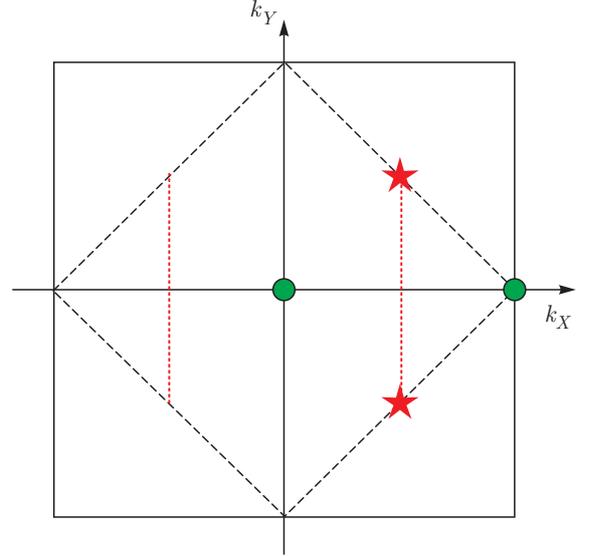


Рис. 2. (В цвете онлайн) Большой квадрат (сплошная линия) изображает парамагнитную зону Бриллюэна. Он сокращается до антиферромагнитной зоны Бриллюэна (квадрат с черной штрихованной границей) в присутствии неелевской намагниченности. Красные штрихованные линии отвечают тем точкам антиферромагнитной зоны Бриллюэна, где  $\Theta_{AF}^2 = 1$ . У них нет горизонтального аналога, так как избранный  $\Theta_{AF}$  включает трансляцию лишь вдоль оси  $x$ . Две красные звезды обозначают две А-ИИОВ, где  $\Theta_{AF}^2 = 1$ , в то время как зеленые кружки отвечают В-ИИОВ, где  $\Theta_{AF}^2 = -1$

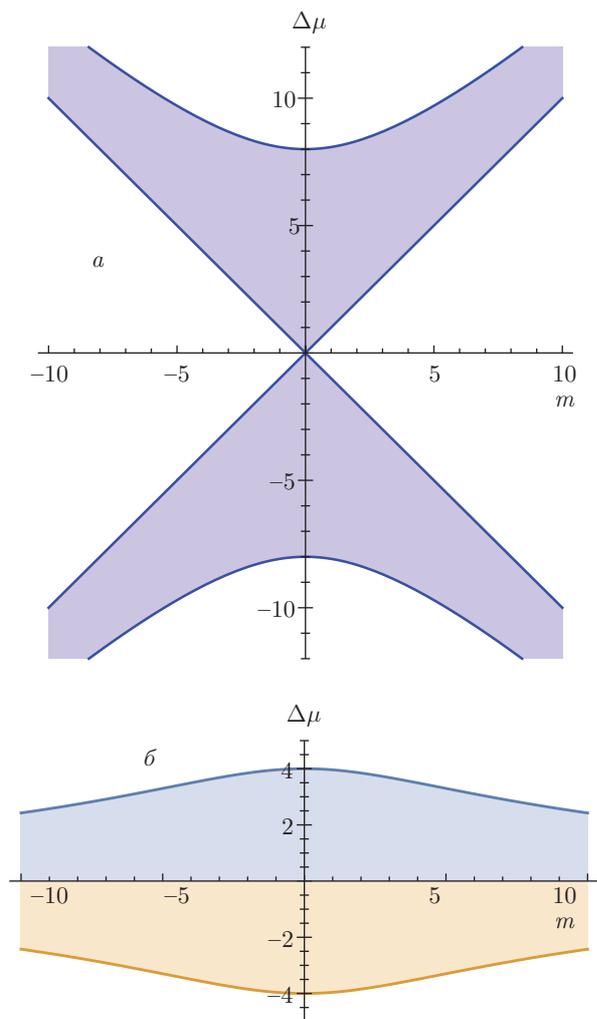
комбинированная симметрия  $\mathcal{P}_{AF}\Theta_{AF}$  антиунитарна, и ее квадрат равен  $-1$ . Таким образом, каждое собственное блоховское состояние имеет ортогонального вырожденного партнера с тем же импульсом, и объемные зоны двукратно вырождены [25, 26].

Как и ранее, при половинном заполнении система имеет щель в спектре, и возникают два вопроса:

- Выживает ли топологическая фаза при конечном значении неелевской намагниченности?
- Начиная с тривиальной фазы при  $m = 0$ , можно ли прийти к топологической фазе, включив неелевскую намагниченность?

В работе [13] предложено выражение для инварианта  $Z_2$  в двумерном неелевском антиферромагнетике, симметричном по отношению к  $\Theta_{AF}$  и  $\mathcal{P}_{AF}$ . Мы обсудим этот критерий более подробно в следующем разделе (см. уравнение (17)).

Применительно к нашему случаю, критерий из работ [13], выраженный уравнением (17), подразумевает положительный ответ на оба вопроса. И в



**Рис. 3.** (В цвете онлайн) Фазовая диаграмма модели БХЖ в уравнении (3) в присутствии неелевской намагниченности, для  $t_+ = 3$  и  $t_- = 1$ . *а*) Фазовая диаграмма при половинном заполнении. Синяя область соответствует топологической фазе. Вертикальная линия  $m = 0$  соответствует фазовой диаграмме гамильтониана БХЖ. Можно заметить, что топологическая фаза при  $m = 0$  выживает вплоть до конечного порогового значения  $m$  и становится тривиальной для других значений. Более того, из тривиальной фазы при  $m = 0$  система может быть выведена включением неелевской намагниченности. *б*) Наложение фазовых диаграмм при заполнениях  $1/4$  и  $3/4$ . Синяя область соответствует топологической фазе при заполнении  $1/4$ , в то время как желтая область соответствует топологической фазе при заполнении  $3/4$

самом деле, при  $\alpha = 2$ ,  $t_+ = 3$  и  $t_- = 1$  мы получаем фазовую диаграмму на рис. 3, где окрашенная область соответствует тем значениям  $m$  и  $\Delta\mu$ , где изолятор является топологическим (все численные результаты, представленные в настоящей ста-

тье, предполагают эти значения параметров  $t_+$  и  $t_-$ ). Фазовая диаграмма показывает, что, начиная с топологической фазы при  $m = 0$ , с увеличением  $m$  система остается нетривиальной до  $m = \Delta\mu$ . С другой стороны, если начать в тривиальной фазе с  $m = 0$ , то существует интервал  $m$ , в котором система становится топологически нетривиальной, что соответствует областям, где

$$|m| < |\Delta\mu|, \quad 2|\Delta\mu| < \sqrt{m^2 + 16t_+^2} + \sqrt{m^2 + 16t_-^2}.$$

Мы подтвердили это с помощью метода, изложенного в следующем разделе, для нескольких наборов параметров. Результаты были в совершенном согласии с предсказанием [13]. Можно заметить различие между результатами, полученными здесь в пределе  $m = 0$ , и результатами разд. 2.1. Это проистекает из изменения номенклатуры, связанного со «сложной» зоной Бриллюэна в антиферромагнитном случае. Тем не менее эти изменения не влияют на наши заключения, так как расхождения возникают тогда, когда система не является изолятором.

Благодаря неелевской намагниченности, теперь мы работаем с восьмизонной моделью. И вновь симметрия позволяет разделить их на четыре двукратно вырожденные зоны, не имеющие точек соприкосновения в зоне Бриллюэна, за исключением точки топологического перехода. Заметим, что теперь цель может открыться и при заполнении  $1/4$  и  $3/4$ , что не имеет аналога в модели БХЖ. Было бы интересно увидеть, могут ли топологические фазы возникнуть при таких заполнениях. Используя выражение (17) [13], мы получили фазовую диаграмму на рис. 3, которая вновь оказывается в совершенном согласии с нашими численными результатами.

### 3. МЕТОДЫ ХАРАКТЕРИЗАЦИИ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРОВ

В этом разделе мы обсудим некоторые технические средства характеристики топологических изоляторов, инвариантных по отношению к обращению времени, используя в качестве иллюстрации гамильтониан БХЖ с неелевской намагниченностью и без нее.

Первый метод, принадлежащий Фу и Кейну [29], дает выражение для инварианта  $Z_2$ , которое может быть вычислено аналитически, если известны непрерывно-определенные объемные блоховские функции. Второй метод является адаптацией подхода Фу–Кейна к случаям, где блоховские состояния могут быть вычислены лишь численно, и изуча-

ет или изменение фазы блоховских функций в зоне Бриллюэна [20], или траектории так называемых зарядовых центров Ванье [21, 22]. Наконец, третий метод состоит в явном построении краевых состояний, поскольку их число позволяет различить тривиальную и топологическую фазы.

### 3.1. Вычисление топологического инварианта Фу – Кейна

Сначала мы представим основные шаги вывода топологического инварианта  $Z_2$  Фу – Кейна, а затем — изменения, необходимые в присутствии неевлевской намагниченности. Технические детали приведены в Приложениях А и С.

Поскольку гамильтониан БХЖ трансляционно инвариантен, его собственные состояния могут быть записаны как

$$|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|u_{n,\mathbf{k}}\rangle \quad (7)$$

с  $n$  от 1 до 4 для БХЖ, где  $|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$  — собственные векторы блоховского гамильтониана в уравнении (3). Мы выбираем  $|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$ , непрерывные в зоне Бриллюэна.

Как было сказано выше, гамильтониан БХЖ инвариантен по отношению к обращению времени, и поэтому его собственные состояния являются в форме крамерсовских пар. Таким образом, мы можем разделить собственные состояния ( $|\Psi_{\mathbf{k},\alpha}^I\rangle, |\Psi_{\mathbf{k},\alpha}^{II}\rangle$ ),  $\mathbf{k} \in BZ, \alpha = 1, 2$ ) таким образом, что

$$\begin{aligned} |\Psi_{\alpha,-\mathbf{k}}^I\rangle &= -e^{i\chi_{\mathbf{k},\alpha}}\Theta|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^{II}\rangle, \\ |\Psi_{\alpha,-\mathbf{k}}^{II}\rangle &= e^{i\chi_{-\mathbf{k},\alpha}}\Theta|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle. \end{aligned} \quad (8)$$

Значение топологического инварианта будет зависеть от того, как фаза  $\chi$  меняется в зоне Бриллюэна.

Топологический инвариант определяется посредством поляризации обращения времени<sup>2)</sup>  $P_{k_y}^\Theta$ , введенного Фу и Кейном [29] в терминах координаты центра масс вдоль направления  $\hat{\mathbf{x}}$ , или гибридных функций Ванье, вычисленных при фиксированном  $k_y$ . Мы определяем и вычисляем  $P_{k_y}^\Theta$  в Приложении А. Топологический инвариант  $Z_2$  может быть определен согласно

$$\Delta = \sum_{\Gamma_y \in \{0, \pi/a\}} P_{\Gamma_y}^\Theta \bmod 2. \quad (9)$$

Как объясняется в работе [29], эта величина является топологическим инвариантом, не зависящим от калибровки блоховских состояний.

<sup>2)</sup> Time reversal polarization.

Топологический инвариант может быть переписан через «матрицу шивки»<sup>3)</sup>

$$w(\mathbf{k})_{mn} = \langle \Psi_{m,-\mathbf{k}} | \Theta | \Psi_{n,\mathbf{k}} \rangle, \quad (10)$$

вычисленную в четырех ИИОВ согласно

$$(-1)^\Delta = \prod_i \frac{\sqrt{\det[w(\Gamma_i)]}}{Pf[w(\Gamma_i)]}, \quad (11)$$

где индекс  $i$  нумерует различные ИИОВ. Несмотря на то что приведенное выше выражение кажется зависящим лишь от состояний в ИИОВ, оно должно вычисляться в калибровке, в которой состояния определены непрерывно на торе зоны Бриллюэна.

Для системы, инвариантной по отношению к обращению времени (что справедливо для гамильтониана БХЖ), оказывается, что уравнение (11) допускает форму [19]

$$(-1)^\Delta = \prod_{i=1}^4 \prod_{\alpha=1}^N \xi_\alpha(\Gamma_i), \quad (12)$$

где  $\xi_\alpha(\Gamma_i) = \pm 1$  — собственные значения четности заполненных собственных состояний  $|\Psi_{\alpha,\Gamma_i}^I\rangle$ .

В противоположность уравнению (11), выражение в правой части уравнения (12) имеет то преимущество, что оно опирается лишь на знание состояний в ИИОВ. Действительно,  $\prod_{\alpha=1}^N \xi_\alpha(\Gamma_i)$  калибровочно инвариантно, и можно вычислить  $\xi_\alpha(\Gamma_i)$  отдельно для разных ИИОВ, не настаивая на том, чтобы состояния были определены непрерывно в зоне Бриллюэна. Тем не менее такое выражение может быть получено лишь для систем с центром инверсии.

В антиферромагнитном случае мы удвоили число зон в гамильтониане Блоха и поэтому индекс  $n$ , определенный в уравнении (7) и принимавший значения от 1 до 4, теперь меняется от 1 до 8. Как отмечалось выше, из-за нарушения симметрии по отношению к обращению времени крамерсовское вырождение больше не гарантировано во всей зоне Бриллюэна. Действительно, в зоне Бриллюэна есть линия  $k_x - k_y = \pm\pi$  состояний, для которых  $\Theta_{AF}^2 = 1$ , и, строго говоря, теорема Крамерса больше не выполняется. Однако, благодаря симметрии по отношению к инверсии, мы можем получить вырождение, требующееся для написания аналога уравнения (8):

$$\begin{aligned} |\Psi_{\alpha,-\mathbf{k}}^I\rangle &= -e^{i\chi_{\mathbf{k},\alpha}} e^{i\Phi_{\mathbf{k},\alpha}/2} \Theta_{AF} |\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^{II}\rangle, \\ |\Psi_{\alpha,-\mathbf{k}}^{II}\rangle &= e^{i\chi_{-\mathbf{k},\alpha}} e^{-i\Phi_{-\mathbf{k},\alpha}/2} \Theta_{AF} |\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle \end{aligned} \quad (13)$$

<sup>3)</sup> Sewing matrix.

для  $\alpha = 1, \dots, 4$ , где  $\Phi_{\mathbf{k},\alpha}$  определяется как

$$\Theta_{AF}^2 = - \sum_{\mathbf{k}} e^{i\Phi_{\mathbf{k},\alpha}} |\mathbf{k}, \alpha\rangle \langle \mathbf{k}, \alpha|. \quad (14)$$

Как и выше, мы получили топологический инвариант посредством поляризации по отношению к обращению времени согласно уравнению (9). Тем не менее в антиферромагнетике это выражение не может быть сведено к простой форме, как в уравнении (11): действительно, матрица шивки

$$\tilde{w}_{k_b}(k_a)_{mn} = \langle \Psi_{m,-\mathbf{k}} | \Theta_{AF} | \Psi_{n,\mathbf{k}} \rangle \quad (15)$$

больше не антисимметрична во всех ИИОВ. В действительности, в тех ИИОВ, где  $\Theta_{AF}^2 = 1$  и которые мы называем А-ИИОВ на рис. 2, пфаффian в уравнении (11) не может даже быть определен.

Тем не менее топологический инвариант  $\Delta$  в уравнении (9) может быть записан в форме, которая, будучи менее элегантно, остается справедливой в случае антиферромагнитного порядка, для непрерывной калибровки и при условии удобного выбора осей  $\mathbf{a} = \hat{\mathbf{x}}$  и  $\mathbf{b} = \hat{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{y}}$ , как описано в Приложении С:

$$\Delta = \sum_{\Gamma_b \in \{0, \pi\}} \left[ \frac{1}{2\pi i} \int_0^\pi dk_a \nabla_{k_a} \ln \det[\tilde{w}_{\Gamma_b}(k_a)] + \frac{1}{\pi} \sum_{\alpha} (\chi_{\alpha,0,\Gamma_b} + \chi_{\alpha,\pi,\Gamma_b}) \right] \text{mod } 2. \quad (16)$$

Это выражение имеет то преимущество, что зависит лишь от  $\chi$ , а также то, что его можно вычислить, имея непрерывное множество блоховских состояний. Оно лежит в основе численного расчета следующей главы. В работе [13] предложено выражение для топологического инварианта, схожее с уравнением (12):

$$(-1)^\Delta = \prod_{\Gamma_i \in B-TRIM} \prod_{\alpha=1}^N \xi_\alpha(\Gamma_i), \quad (17)$$

где В-ИИОВ — те, где  $\Theta_{AF}^2 = -1$ . Уравнение (17) не следует непосредственно из определения (9) в терминах поляризации обращения времени, но эквивалентно нашему результату (16), если нет инверсии зон единственной А-ИИОВ (что справедливо в рассматриваемом случае). Действительно, в таком случае вклад А-ИИОВ в уравнении может быть сокращен (16), и остается лишь  $\Gamma_b = 0$ . Затем преобразование, подобное выполненному в [19], позволяет получить выражение в уравнении (17).

### 3.2. Метод фазы перезамыкания

В этом разделе мы опишем иной метод, предложенный Солуяновым и Вандербильдтом [20] для вычисления топологического инварианта  $\Delta$ , оказывающийся эффективным для численной идентификации топологических фаз в антиферромагнетике.

Для топологического изолятора, симметрично по отношению к обращению времени, последний подход включает ограничение, полагающее относительную фазу  $\chi$  равной нулю. Уравнение (8) таким образом заменяется на

$$\begin{aligned} |\tilde{\Psi}_{\alpha,-\mathbf{k}}^I\rangle &= -\Theta |\tilde{\Psi}_{\alpha,\mathbf{k}}^II\rangle, \\ |\tilde{\Psi}_{\alpha,-\mathbf{k}}^II\rangle &= \Theta |\tilde{\Psi}_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle. \end{aligned} \quad (18)$$

Теперь мы должны проверить, что в этой калибровке все еще возможно определить собственные состояния непрерывно на всем торе зоны Бриллюэна: невозможность это сделать подразумевает ненулевое значение топологического инварианта.

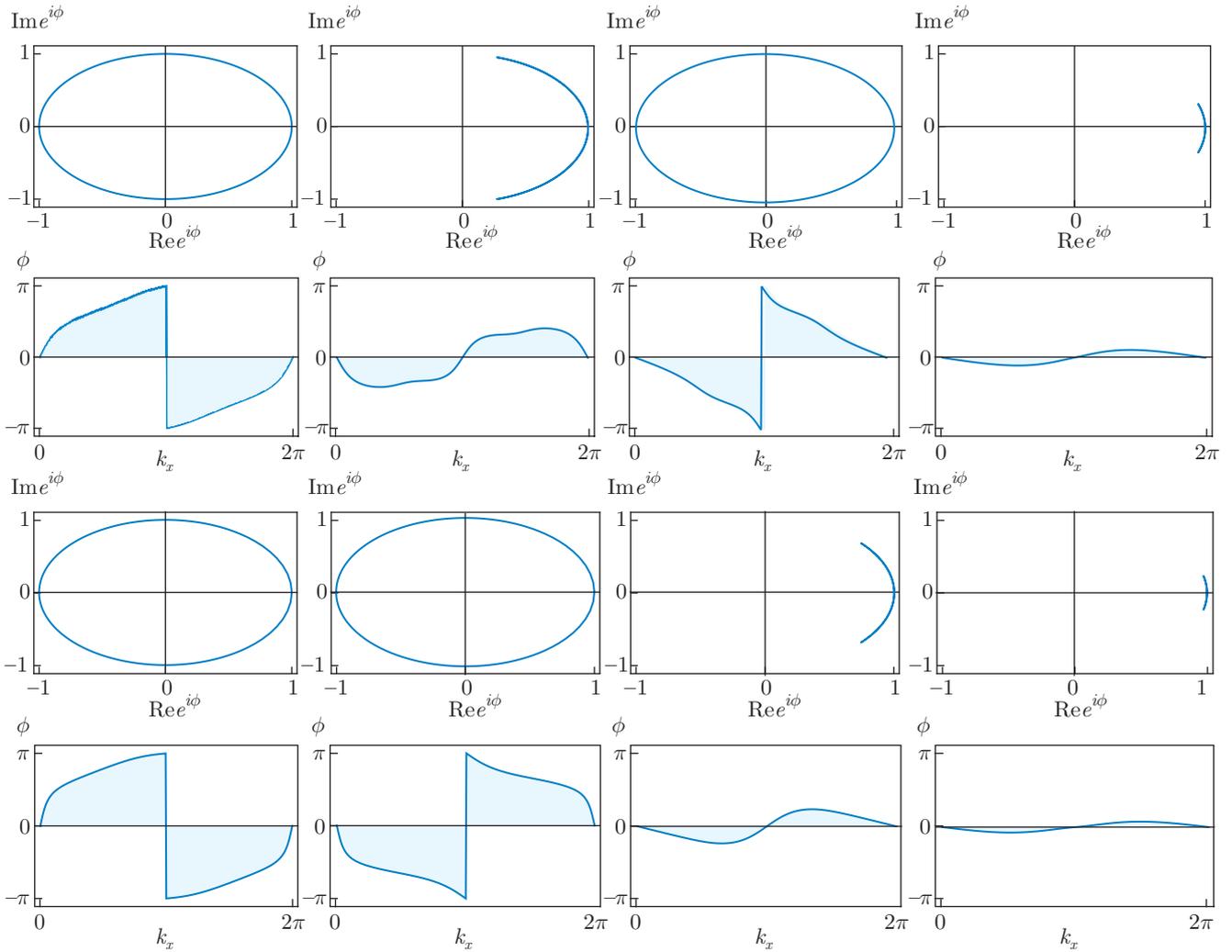
Эквивалентность этих двух подходов, описанных уравнениями (8) и (18), можно продемонстрировать при помощи сингулярного калибровочного преобразования сродни тому, что обычно используется в случае точечного флюксоида.

И вновь, уравнение (18) может быть адаптировано к антиферромагнитному случаю согласно

$$\begin{aligned} |\tilde{\Psi}_{\alpha,-\mathbf{k}}^I\rangle &= -e^{i\Phi_{\mathbf{k}}/2} \Theta_{AF} |\tilde{\Psi}_{\alpha,\mathbf{k}}^II\rangle, \\ |\tilde{\Psi}_{\alpha,-\mathbf{k}}^II\rangle &= e^{-i\Phi_{-\mathbf{k}}/2} \Theta_{AF} |\tilde{\Psi}_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle. \end{aligned} \quad (19)$$

Мы используем этот результат, чтобы найти топологический инвариант численно, адаптируя метод, предложенный в работе [20] для топологических изоляторов, инвариантных по отношению к обращению времени. Идея следующая: выше мы видели, что нетривиальное значение топологического инварианта  $Z_2$  может рассматриваться как невозможность определить собственные состояния непрерывно на всем торе зоны Бриллюэна — в калибровке, инвариантной по отношению к  $\Theta_{AF}$ . Проблема в том, что численная диагонализация гамильтониана в каждой точке  $\mathbf{k}$ , как правило, приводит к разрывному множеству собственных состояний.

Действительно, при каждом значении импульса численная диагонализация дает собственные состояния, определенные с точностью до произвольной фазы  $\phi$ , которая, вообще говоря, не является гладкой при переходе от одного значения импульса к соседнему и проявляет себя как нефизический множитель  $e^{i\phi}$  в скалярном произведении  $\langle u(\mathbf{k}) | u(\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k}) \rangle$  двух собственных состояний, отвечающих соседним



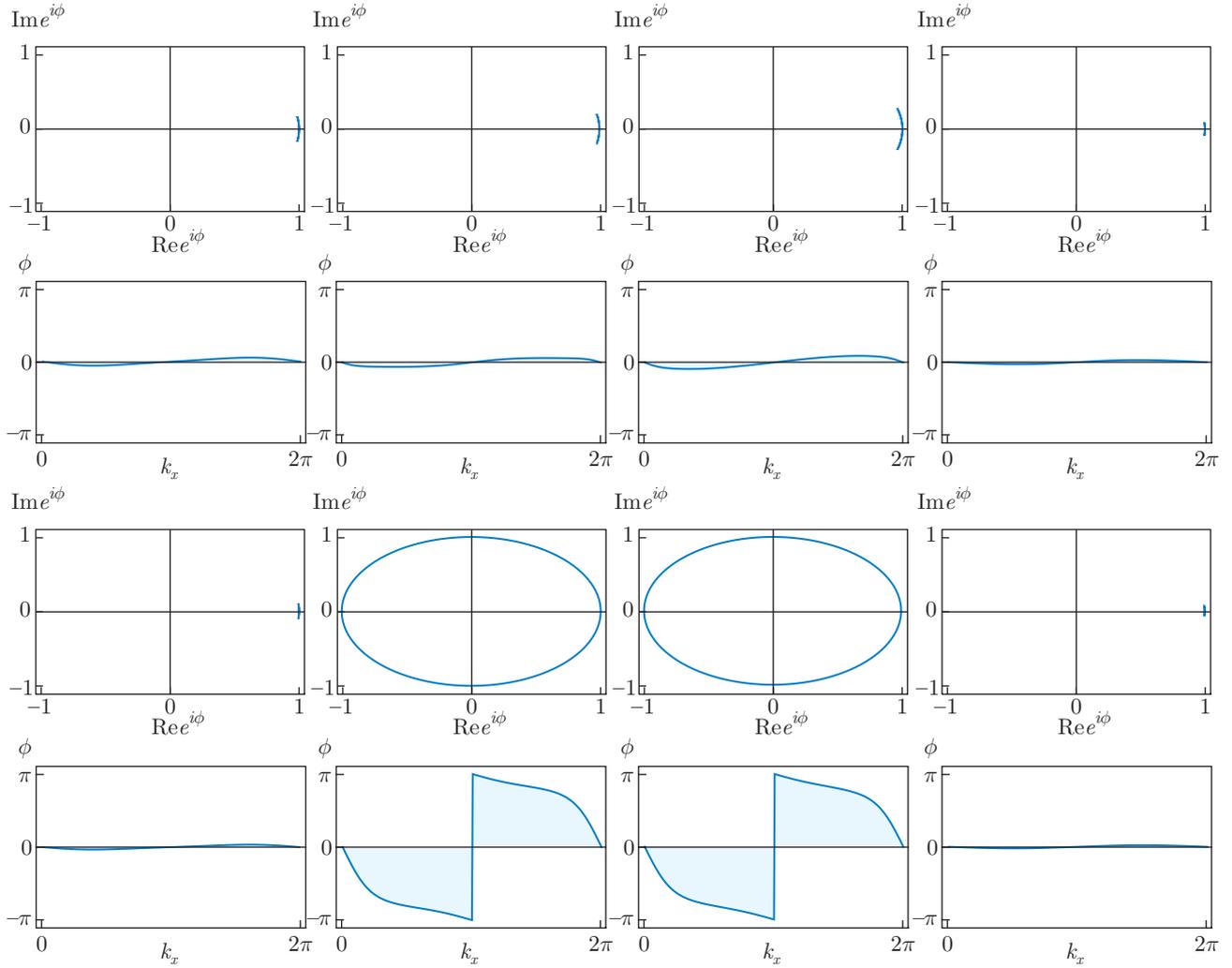
**Рис. 4.** (В цвете онлайн) Результаты метода фазы перезамыкания, изложенные в разд. 3.2, для  $\Delta\mu = 3$ . Для первых двух кривых  $m = 2$ , для последних двух  $m = 5$ . Каждый столбец соответствует изучению пары вырожденных зон. Слева направо мы переходим от зон с низкой к зонам с более высокой энергией. В первой и третьей строках мы изображаем  $e^{i\phi}$  в уравнении (20) в комплексной плоскости как параметрическую функцию  $k_x$ . Во второй и четвертой строках сам аргумент  $\phi$  изображен как функция  $k_x$ . Эти графики и уравнение (21) позволяют вычислить топологический инвариант  $Z_2$ . В обоих случаях система является тривиальным изолятором при заполнении  $3/4$  и топологическим изолятором при заполнении  $1/4$ , в полном согласии с рис. 3б. При половинном заполнении система является топологическим изолятором при  $m = 2$  и тривиальным при  $m = 5$ , в совершенном согласии с рис. 3а

импульсам. Проблема усложняется еще более в случае вырожденных зон, где фазовый множитель  $e^{i\phi}$  может возникать также и из-за поворота базиса вырожденных состояний. Поэтому нам нужно переопределить собственные состояния с тем, чтобы получить непрерывную калибровку. На практике, для каждой пары вырожденных зон мы используем параллельный перенос для получения собственных состояний на цилиндрической зоне Бриллюэна с краями  $k_y = \pi$  и  $k_y = -\pi$ , удовлетворяющих уравне-

нию (19). В такой калибровке возможный разрыв, возникающий благодаря топологически нетривиальной природе состояния, выносится на края цилиндра (подробности можно найти в работе [20]). Чтобы изучить этот разрыв, мы вычисляем фазу перезамыкания для пары зон, обозначенных  $\alpha$ :

$$e^{i\phi_\alpha(k_x)} = \langle \tilde{\Psi}_{\alpha, k_x, k_y = -\pi}^I | \tilde{\Psi}_{\alpha, k_x, k_y = \pi}^I \rangle. \quad (20)$$

«Число оборотов»  $\Delta_\alpha$  этой фазы дает величину топологического инварианта данной пары зон;  $\Delta_\alpha = 0$



**Рис. 5.** (В цвете онлайн) То же, что и на рис. 4, но для  $\Delta\mu = 9$ , с  $m = 2$  для первых двух строк и  $m = 5$  для двух последних. Каждый столбец отвечает изучению пары вырожденных зон. В обоих случаях система является тривиальным изолятором при заполнениях  $1/4$  и  $3/4$ , в согласии с рис. 3б. При половинном заполнении система пребывает в тривиальной фазе при  $m = 2$  и в топологической фазе при  $m = 5$ , в согласии с рис. 3а

означает, что можно найти калибровку, симметричную по отношению к обращению времени, в которой состояния будут определены непрерывно на всем торе зоны Бриллюэна. Напротив,  $\Delta_\alpha = 1$  подразумевает топологически нетривиальную фазу.

Для фиксированного заполнения топологический инвариант дается

$$\Delta = \sum_{\alpha \in FB} \Delta_\alpha \text{ mod } 2, \quad (21)$$

где  $FB$  означает заполненные зоны (filled bands).

Мы применили этот метод к гамильтониану БХЖ в присутствии неелевской намагниченности. Рисунки 4 и 5 представляют результаты для четы-

рех наборов параметров. Для каждого набора мы изучили четыре пары вырожденных зон и построили график четырех фаз перезамыкания  $e^{i\phi_\alpha(k_x)}$ . Из этих графиков можно легко извлечь значения  $\Delta_\alpha$  и сделать выводы о топологической или тривиальной природе системы при заполнении  $1/4$ ,  $1/2$  и  $3/4$ . Все наши результаты, будь то приведенные здесь или нет, находятся в полном согласии с фазовой диаграммой на рис. 3.

### 3.3. Зарядовые центры Ванье

Метод фаз перезамыкания допускает вариацию, в центре внимания которой оказывается «гибрид-

ный» объект, определенный в реальном пространстве вдоль одной координаты, и в обратном пространстве вдоль другой: так называемый зарядовый центр Ванье (ЗЦВ) [21–23]. Мы определяем ЗЦВ как центр  $\bar{x}$  собственного состояния Ванье вдоль оси  $\hat{x}$  как функцию импульса  $k_y$ . Изменение  $\bar{x}$  как функции  $k_y$  характеризует топологию состояния и приводит к тому же инварианту  $\Delta$ , что и метод фаз перезамыкания. Тем не менее технические детали различны, и мы представим их ниже.

Как объяснено в Приложении А, можно определить гибридные функции Ванье согласно

$$\begin{aligned} |X, s, \alpha, k_y\rangle &= \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \exp\{-ik_x(X - \mathbf{X})\} |u_{\alpha, k_x, k_y}^s\rangle. \end{aligned} \quad (22)$$

После этого ЗЦВ определяются как математическое ожидание

$$\bar{x}_{k_y, \alpha}^s = \langle 0, s, \alpha, k_y | \mathbf{x} | 0, s, \alpha, k_y \rangle.$$

Сочетание обращения времени и инверсии требует, чтобы  $\bar{x}_{k_y, \alpha}^I + \bar{x}_{k_y, \alpha}^{II} \in N$ , что, в свою очередь, означает, что зарядовый центр пары крамерсовских состояний-партнеров лежит в центре элементарной ячейки. Тем не менее центр одной зоны может «плыть» с изменением  $k_y$ , и это изменение может характеризовать топологию системы. Чтобы продемонстрировать это, нам нужно изменить определение топологического инварианта в уравнении (9) согласно

$$\Delta = P_{k_y=0}^I - P_{k_y=2\pi}^I \pmod{2}. \quad (23)$$

Выше эти два определения были эквивалентны благодаря выбору калибровки согласно уравнению (13) и специальному выбору базовых осей в Приложении С, вследствие чего

$$P_k^I = P_{-k}^{II} + N_I, \quad N_I \in \mathbb{N}, \quad (24)$$

$$P_{k+G}^I = P_k^I + N_G, \quad N_G \in \mathbb{N}. \quad (25)$$

Для удобства мы здесь воспользуемся  $\hat{x}$  и  $\hat{y}$  как базисными векторами, поэтому уравнение (24) больше не выполняется. При таком условии уравнение (23) определяет топологический инвариант лучше, чем уравнение (9), поскольку оно непосредственно связано с числом Черна той зоны, что соответствует одному из крамерсовских партнеров. Уравнение (23) преобразуется в

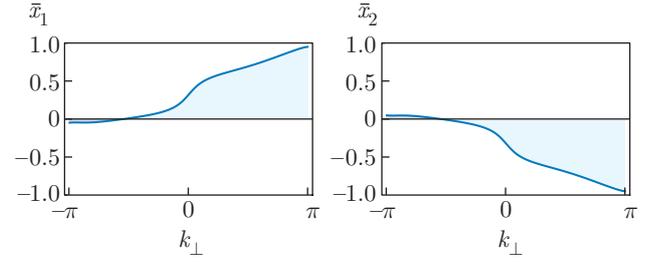


Рис. 6. (В цвете онлайн) Эволюция ЗЦВ согласно определению в разд. 3.3, для первой пары крамерсовских зон для данного набора параметров, как функция  $k_y = k_{\perp}$ . В зависимости от выбора зоны мы находим  $\Delta = \pm 1$ , что соответствует топологической фазе на рис. 3

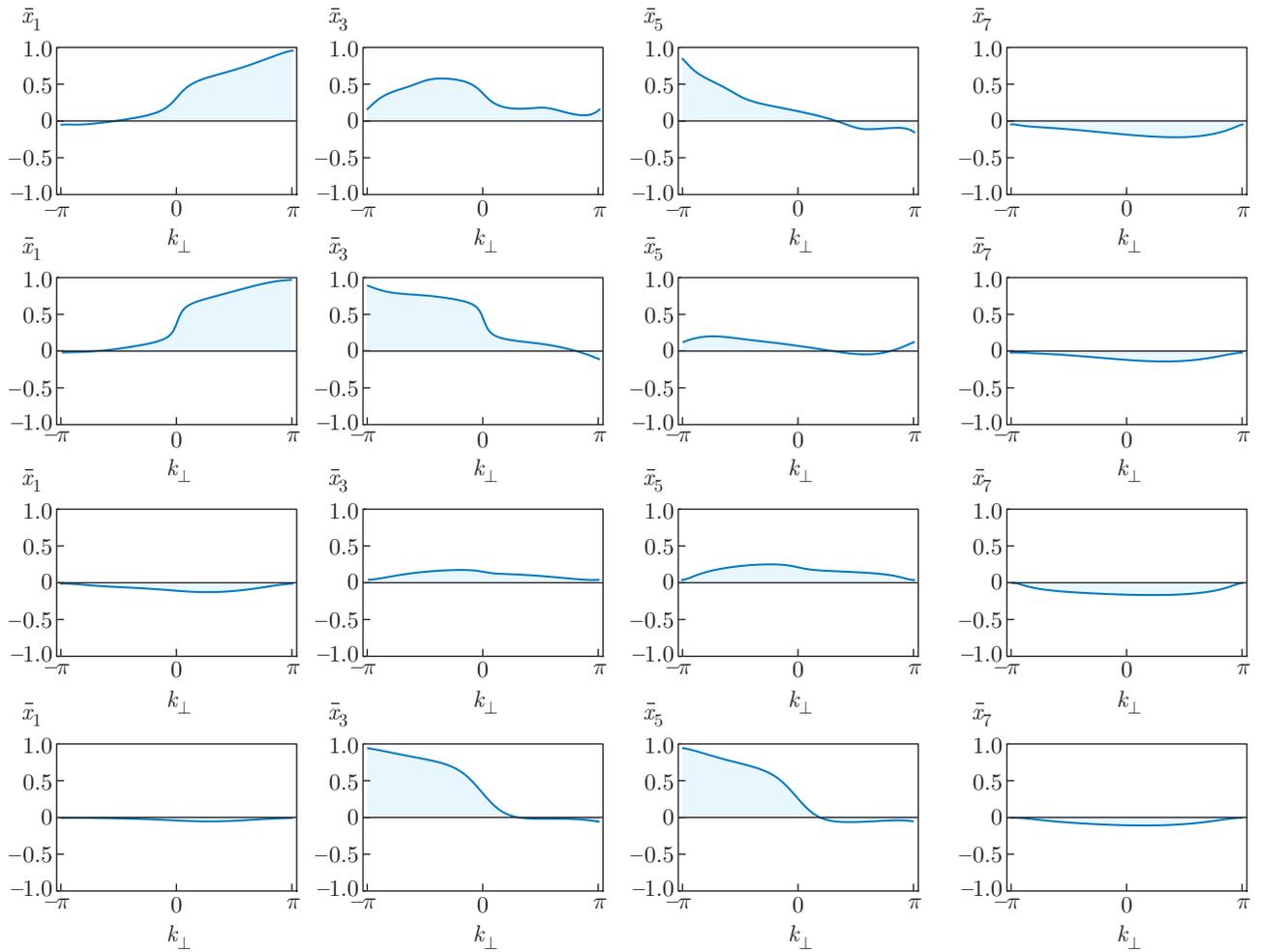
$$\begin{aligned} \Delta &= \sum_{\alpha \in FB} (\bar{x}_{k_y=0, \alpha}^I - \bar{x}_{k_y=2\pi, \alpha}^I) \pmod{2} = \\ &= \sum_{\alpha \in FB} (\bar{x}_{k_y=-\pi, \alpha}^I - \bar{x}_{k_y=\pi, \alpha}^I) \pmod{2}. \end{aligned} \quad (26)$$

Используя метод фаз перезамыкания предыдущего раздела, мы определяем функцию  $|u_{\alpha, k_x, k_y}^s\rangle$  как гладкую на дискретизированной зоне Бриллюэна. Обратим внимание, что это подразумевает цилиндрическую калибровку, чьи свойства мы обсудили непосредственно над уравнением (20). Поскольку  $\bar{x}_{k_y, \alpha}^s$  связан с фазой Берри, мы находим

$$\begin{aligned} \bar{x}_{k_y, \alpha}^s &= i \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \langle u_{\alpha, k_x, k_y}^s | \nabla_{k_x} | u_{\alpha, k_x, k_y}^s \rangle = \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^N \text{Im} \langle u_{\alpha, j+1, k_y}^s | u_{\alpha, j, k_y}^s \rangle, \end{aligned} \quad (27)$$

где интеграл в первом равенстве дискретизируется и во втором равенстве переписывается в виде суммы. Мы видим, что, будучи вычислен для другого партнера в крамерсовской паре, топологический инвариант меняет знак (см. рис. 6). Однако, поскольку  $\Delta$  определяется по модулю два, этот знак не имеет физического значения и можно выбрать любой из двух крамерсовских партнеров. Мы также видим, что уравнения (21) и (26) включают матричные элементы, диагональные по индексу зоны, и определяют одну и ту же величину. Уравнение (16) (которое мы не решаем численно в данной работе) и его связь с уравнениями (21) и (26) обсуждаются в Приложениях А и С.

Положение ЗЦВ одного из двух крамерсовских партнеров в каждой паре зон изображено как функция  $k_y = k_{\perp}$  на рис. 7 для того же набора параметров, что и в предыдущем разделе. Результаты снова



**Рис. 7.** (В цвете онлайн) Эволюция ЗЦВ (зарядовых центров Ванье), определенных в разд. 3.3, как функция  $k_{\perp}$ . Различные столбцы соответствуют представителям первой, второй, третьей и четвертой пар зон, в указанном порядке. Различные строки отвечают  $\Delta\mu = 3$  (первая и вторая строки) и  $\Delta\mu = 9$  (третья и четвертая строки), с  $m = 2$  (первая и третья строки) и  $m = 5$  (вторая и четвертая строки). Читатель может наблюдать полное соответствие с рис. 3

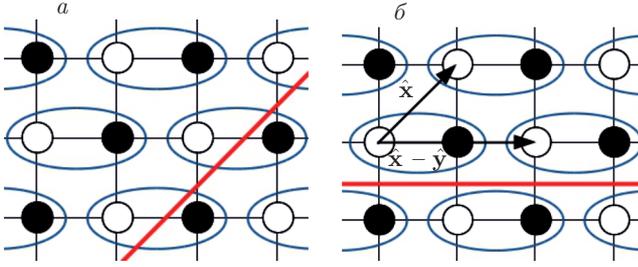
пребывают в полном согласии с ожидаемой фазовой диаграммой на рис. 3.

### 3.4. Явная конструкция краевых состояний

Определяющим свойством топологических изоляторов класса  $Z_2$  является существование топологически защищенных краевых состояний. В системах, инвариантных по отношению к обращению времени, ненулевое значение определенного выше топологического инварианта соответствует системам с нечетным числом крамерсовски-вырожденных пар краевых состояний. Здесь мы иллюстрируем это соответствие между объемом и границей в антиферромагнитном случае путем явной конструкции краевых состояний, адаптируя метод, использованный

для гамильтониана БХЖ в работах [2, 30]. Это подтверждает важность поляризации по отношению к обращению времени в уравнении (17) также и в настоящем случае.

Мы рассматриваем систему, определенную на полуплоскости и, таким образом, имеющую один край. Выбор ориентации разреза будет не произвольным — но таким, чтобы сохранить симметрии объема, как показано на рис. 8. Точнее, «хороший» край содержит чередующиеся узлы А и В и симметричен по отношению к  $\Theta_{AF} = T\Theta$ . Напротив, мы не будем рассматривать здесь края с одними лишь узлами типа А (или В), поскольку такие края упорядочены ферромагнитно и явно нарушают объемную симметрию  $\Theta_{AF}$ . Следовательно, в качестве элементарных векторов решетки мы выберем  $\hat{x}$  и  $\hat{x} - \hat{y}$  и



**Рис. 8.** (В цвете онлайн) Примеры разрезов (обозначенных красной линией) димеризованной квадратной решетки. *а)* Пример края, не сохраняющего объемные симметрии (нарушена симметрия  $\Theta_{AF}$ ). *б)* Край, рассмотренный в настоящей статье, сохраняющий симметрии объема. В данном случае,  $k_{x-y}$  (обозначенный  $k_{\parallel}$ ) остается хорошим квантовым числом

выберем разрез вдоль  $\hat{x} - \hat{y}$  при  $x = 0$ , где кристалл занимает полуплоскость  $x > 0$ . Это нарушает трансляционную инвариантность вдоль  $\hat{x}$  и сохраняет ее вдоль  $\hat{x} - \hat{y}$ . Следовательно,  $k_{x-y}$  (обозначенный как  $k_{\parallel}$ ) остается квантовым числом, а  $k_x$  не остается.

Перескок в направлении  $\hat{x}$  подразумевает трансляцию на постоянную решетки  $b$ , т.е. экспоненту  $\exp[b\partial_x]$  оператора градиента. В объемном блоховском гамильтониане такой перескок порождает экспоненты  $e^{\pm ibk_x}$ . Поэтому поверхностные состояния можно описать, заменив  $k_x$  в объемном блоховском гамильтониане на  $-i\partial_x$  при фиксированном значении  $k_{\parallel}$ , и ища решения, затухающие экспоненциально по  $x$ . В нашем случае гамильтониан не смешивает спин вверх со спином вниз, что позволяет рассматривать лишь  $H_{k_{\parallel}}^{\uparrow}(-i\partial_x)$ , действующий в ограниченном гильбертовом пространстве состояний со спином вверх (затем краевые состояния со спином вниз могут быть получены действием оператора  $\Theta_{AF}$ ). Теперь будем искать решения

$$H_{k_{\parallel}}^{\uparrow}(-i\partial_x)\Psi_{k_{\parallel}}(x) = E\Psi_{k_{\parallel}}(x) \quad (28)$$

со значением  $E$  в щели объемного спектра. Поскольку мы ищем состояния, экспоненциально локализованные вблизи края, используем анзац

$$\Psi_{k_{\parallel}}(x) = e^{\lambda x}\Phi_{k_{\parallel}},$$

где  $\Phi$  не зависит от  $x$  в уравнении (28). Сокращая экспоненты, получим уравнение на собственные значения

$$H_{k_{\parallel}}^{\uparrow}(-i\lambda)\Phi_{k_{\parallel}} = E\Phi_{k_{\parallel}}, \quad (29)$$

которое мы должны будем решить одновременно по отношению к  $\lambda$  и  $\Phi_{k_{\parallel}}$ . Более того, мы удержим лишь решения с  $\text{Re}(\lambda) < 0$ , поскольку хотим получить

нормируемые поверхностные состояния. Для данных величин  $E$  и  $k_{\parallel}$ , мы получаем несколько пар нормируемых решений  $(\lambda^i, \Phi_{k_{\parallel}}^i)$  (вообще говоря,  $i = 1, \dots, 4$ ). Далее мы можем построить краевые состояния в форме

$$\Psi_{edge}(x) = \sum_i C_i e^{\lambda^i x} \Phi_{k_{\parallel}}^i. \quad (30)$$

Поскольку образец занимает полупространство  $x > 0$ , волновая функция должна стремиться к нулю при отрицательных  $x$ . В качестве иллюстрации наложим на  $\Psi_{edge}$  граничное условие  $\Psi_{edge}(0) = 0$ . Это возможно, лишь если  $\Phi_{k_{\parallel}}^i$  линейно зависимы, что подразумевает условие существования краевых состояний. Ввиду избранных граничных условий наше вычисление служит иллюстративным целям и не является доказательством. Другой важный комментарий относительно вычисления краевых состояний состоит в том, что мы могли бы прийти в точности к тем же самым результатам, работая с дискретной моделью. В этом случае частная производная по  $x$  становится дискретной. Определяя операторы рождения и уничтожения, являющиеся преобразованием Фурье лишь в направлении вдоль границы, получим гамильтониан вида

$$H = \sum_{j,k} c_{j,k}^{\dagger} \mathcal{M} c_{j,k} + c_{j,k}^{\dagger} \mathcal{T} c_{j+1,k} + c_{j+1,k}^{\dagger} \mathcal{T}^{\dagger} c_{j,k}, \quad (31)$$

где  $j$  является дискретным индексом узла в реальном пространстве,  $k$  — индекс Фурье, а  $\mathcal{M}$  и  $\mathcal{T}$  — матрицы, действующие в спиновом, орбитальном и подрешеточном пространствах. Используя анзац

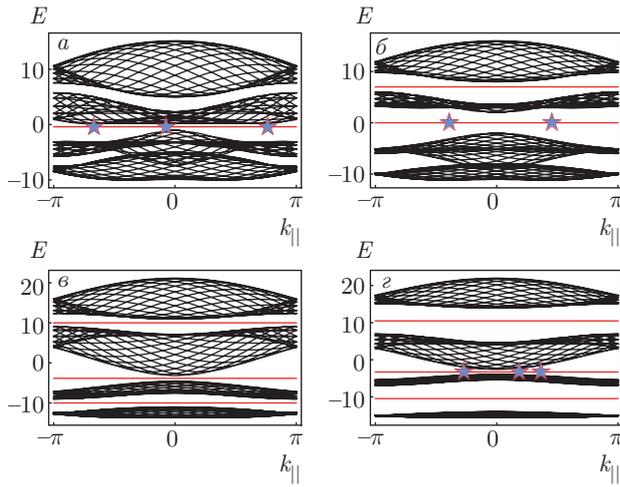
$$\Psi(j, k) = e^{\lambda j} \phi(k), \quad (32)$$

для данной энергии  $E$  и для различных значений  $k$  мы ищем пару  $(\lambda, \phi)$ , являющуюся решением уравнения

$$(e^{-\lambda} \mathcal{T}(k) + e^{\lambda} \mathcal{T}(k)^{\dagger} + \mathcal{M}(k) - E)\phi = 0. \quad (33)$$

Остальная часть процедуры — такая же, как и прежде, — и состоит в поиске нормируемых решений, удовлетворяющих граничным условиям.

В действительности, для значения энергии внутри щели мы получаем четыре решения уравнения (29) и, поскольку мы работаем в пространстве со спином вверх,  $\Phi^i$  имеет четыре компоненты. Таким образом, чтобы проанализировать линейную зависимость полученных решений  $\Phi^i$ , мы вычисляем детерминант матрицы, образованной четырьмя векторами, как функцию  $k_{\parallel}$ . Далее мы находим нули этой функции. Число нулей в интервале между  $-\pi$  и  $\pi$



**Рис. 9.** (В цвете онлайн) Проекция дисперсионных соотношений на  $k_{\parallel}$  изображена черным для нескольких значений параметров. Красные линии соответствуют энергии, при которой мы искали краевые состояния с помощью метода, описанного в разд. 3.4. Синие звездочки соответствуют найденным краевым состояниям со спином вверх. Четное число краевых состояний со спином вверх на данной кривой означает, что при данном заполнении система пребывает в тривиальной фазе, в то время как нечетное число краевых состояний отвечает топологическому изолятору:  $a - \Delta\mu = 3, m = 2$ ;  $б - \Delta\mu = 3, m = 5$ ;  $в - \Delta\mu = 9, m = 2$ ;  $г - \Delta\mu = 9, m = 2$ . Результаты находятся в полном согласии с фазовой диаграммой на рис.  $a$  и  $б$ , некоторые значения заполнения не могли быть изучены по причине полуметаллического характера спектра. В результате топологическая природа первой пары зон на рис.  $a$  и  $б$  могла быть подтверждена с помощью настоящего метода

соответствует числу краевых состояний со спином вверх.

Это число может меняться в зависимости от значений параметров. Тем не менее, если щель присутствует во всей зоне Бриллюэна, то четность этого числа непосредственно связана с величиной топологического инварианта, вычисленного в предыдущем разделе:  $\Delta = 0$  соответствует четному числу краевых состояний со спином вверх, в то время как при  $\Delta = 1$  это число нечетно. Это справедливо для щели при половинном заполнении, что соответствует щели в модели БХЖ, но также для промежуточных заполнений  $1/4$  и  $3/4$ , как мы увидим для некоторых наборов параметров на рис. 9.

Читатель может заметить, что все методы настоящей главы были применены в глубине каждой фазы, будь она топологической или тривиальной: такой выбор позволяет точно и надежно при-

менить наши численные методы. Разумеется, по мере приближения к квантовому фазовому переходу между двумя фазами щель сокращается, матричные элементы начинают смешивать различные зоны, и представляющие для нас интерес величины изменяются все менее и менее гладко. Это — проявление приближающегося квантового фазового перехода, чье численное описание не является нашей целью.

Для некоторых значений параметров при заполнении  $1/4$  и  $3/4$  зонная структура не соответствует изолятору и не имеет запрещенной зоны, как можно наблюдать на рис.  $9a, б$ : при таких заполнениях система является полуметаллом (оптическим изолятором). По этой причине приведенная конструкция краевых состояний не может быть применена непосредственно: этот метод явно опирается на то, что искомые краевые состояния имеют энергию, при которой объемные состояния отсутствуют. Тем не менее с настоящим гамильтонианом нам не удалось получить полностью изолирующее и одновременно топологически нетривиальное поведение при заполнениях  $1/4$  и  $3/4$ .

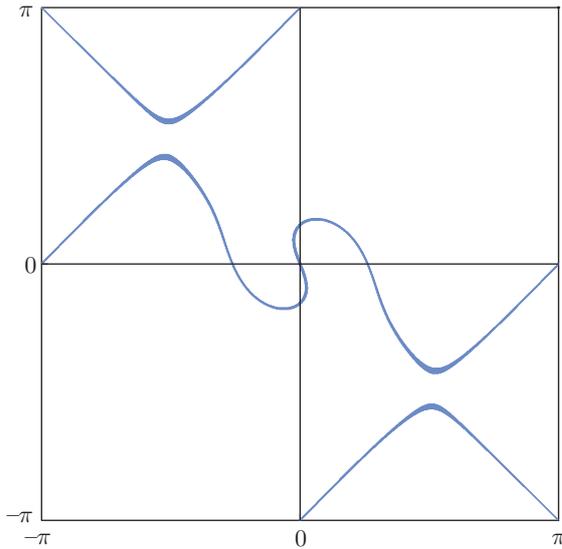
#### 4. ПРИЛОЖЕНИЕ К СИСТЕМАМ БЕЗ ЦЕНТРА ИНВЕРСИИ

До сих пор мы рассматривали случаи, когда численные методы, подобные вычислению фазы Берри или траектории зарядового центра Ванье, можно было сопоставить с произведением собственных значений четности в ИИОВ, элегантно заключающим в себе информацию о топологии зон. Теперь нам хотелось бы показать, что два первых метода позволяют изучить топологию зон, даже если инверсия больше не является симметрией и, таким образом, четность больше не является квантовым числом. В таком случае, инвариант  $Z_2$  больше не может быть связан с произведением собственных значений четности в ИИОВ.

С этой целью мы рассмотрим два различных возмущения (6), явно нарушающие симметрию гамильтониана по отношению к инверсии. Первый пример включает возмущение, сохраняющее  $z$ -компоненту спина, как и изначальный гамильтониан. Второй пример не только нарушает симметрию по отношению к инверсии, но и не сохраняет  $z$ -компоненту спина.

Первый пример включает возмущение

$$H_P(\delta_1, \delta_2) = \delta_1 \tau^x + 2\delta_2 (\sin k_x + \sin k_y) \sigma^z, \quad (34)$$

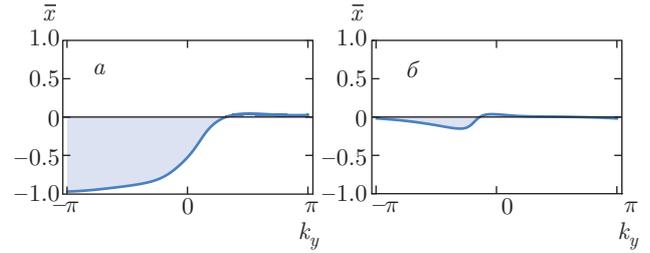


**Рис. 10.** (В цвете онлайн) Многообразие вырождения в зоне Бриллюэна для третьей и четвертой зон при включенном возмущении (34). Параметры здесь принимают значения  $\delta_1 = 1.5$  и  $\delta_2 = 0.5$

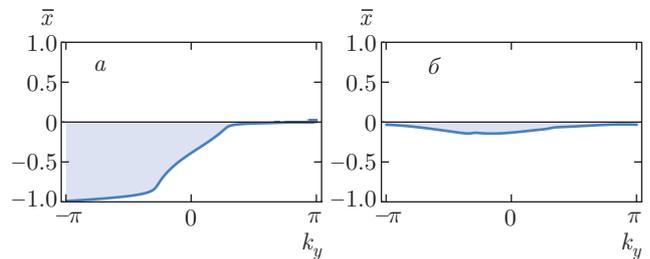
где, как и выше, матрицы  $\tau$  действуют в орбитальном пространстве и матрицы  $\sigma$  действуют в пространстве подрешеток. Первый член соответствует гибридизации между  $p$ - и  $s$ -орбиталями одного и того же узла, в то время как второй член описывает перескоки между подрешетками. Каждый из двух нарушает симметрию по отношению к инверсии и, качественно, имеет тот же эффект, что и рассмотренная здесь комбинация. Мы рассматриваем комбинацию этих двух членов с целью проиллюстрировать общий случай, где симметрия по отношению к инверсии потеряна, но  $\Theta_{AF}$  остается симметрией.

Член (34) снимает двойное вырождение, ранее защищенное во всей зоне Бриллюэна комбинацией  $\Theta_{AF}$  и  $\mathcal{P}_{AF}$ . В то время как  $\Theta_{AF}$  все еще защищает вырождение в ИИОВ, есть две линии импульсов, на которых собственные состояния двукратно вырождены. Эти две линии обязательно проходят через ИИОВ. Рисунок 10 показывает линии вырождения третьей и четвертой зон, т. е. верхних двух зон при половинном заполнении.

Мы сосредоточимся на половинном заполнении и изучим щель между (заполненными) зонами 3 и 4 (пустыми) зонами 5 и 6. Для простоты мы зафиксируем все параметры невозмущенного гамильтониана, а также  $\delta_2$ . Далее будем менять  $\delta_1$ , чтобы вызвать переход между топологической и топологически тривиальной фазами. Выбирая те же  $t_+$  и  $t_-$ , что и выше, а также  $\alpha = 1$ ,  $\Delta\mu = 9$ ,  $m = 5$  и  $\delta_2 = 0.5$ ,



**Рис. 11.** (В цвете онлайн) Анализ ЗЦВ, собранный на двух парах заполненных зон для первого возмущения, нарушающего симметрию по отношению к инверсии. Значения  $t_+$  и  $t_-$  выбраны как и ранее,  $\alpha = 1$ ,  $\Delta\mu = 9$ ,  $m = 5$  и  $\delta_2 = 0.5$ . Переход достигается вариацией  $\delta_1$ , и критическая точка оказывается при значении  $\delta_1^* \approx 2.3$ . Левая сторона отвечает  $\delta_1 = 1.5$ , правая —  $\delta_1 = 3$



**Рис. 12.** (В цвете онлайн) Анализ ЗЦВ, собранный на двух парах заполненных зон для второго возмущения, нарушающего симметрию по отношению к инверсии. Значения  $t_+$  и  $t_-$  выбраны как выше,  $\alpha = 1$ ,  $\Delta\mu = 9$  и  $m = 5$ . Переход получен путем вариации  $\delta_3$ , и критическая точка оказывается при значении  $\delta_3^* \approx 1.25$ . Левая часть отвечает  $\delta_3 = 1$ , правая —  $\delta_3 = 1.5$

мы видим, что щель закрывается при  $\delta_1^* \approx 2.3$ . Для простоты мы покажем здесь лишь результаты, полученные при изучении зарядовых центров Ванье, но, разумеется, изучение фаз перезамыкания дает тот же ответ. Результаты изображены на рис. 11 по обе стороны перехода. Они ясно показывают, что для  $\delta_1 < \delta_1^*$  система топологически нетривиальна, но становится тривиальным изолятором при  $\delta_1 > \delta_1^*$ .

Второй пример нарушения симметрии по отношению к инверсии есть

$$H_P(\delta_3) = \delta_3 s^y \tau^y. \tag{35}$$

Заметим, что, как и указано выше, это возмущение также нарушает сохранение  $z$ -компоненты спина. Кроме того, в этом случае многообразие вырождения сжимается до одних лишь ИИОВ.

Результат для метода ЗЦВ приведен на рис. 12, но метод фаз перезамыкания и здесь дает те же ре-

зультаты. Здесь тоже фазовый переход может быть обнаружен путем вариации константы  $\delta_3$ .

Разумеется, можно рассмотреть и более широкий спектр возмущений, нарушающих симметрию по отношению к инверсии. В то время как для систем с истинной симметрией по отношению к инверсии времени существует топологический инвариант (11), предложенный Фу и Кейном, для систем с антиферромагнитным порядком мы не имеем простого средства, позволяющего предсказать топологические фазы. Тем не менее развитие методов фаз перезамыкания и ЗЦВ, представленных в этой статье, должно позволить исчерпывающе идентифицировать топологические фазы численно.

### 5. ВЫВОДЫ, ОБСУЖДЕНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ

В предыдущих разделах мы представили две версии метода изучения топологии антиферромагнитного изолятора. Обе были основаны на конструкции параллельного транспорта блоховских собственных состояний, первая имеет дело с топологическими свойствами расслоений, сконструированных из блоховских состояний в зоне Бриллюэна, в то время как вторая отслеживает зарядовые центры гибридных функций Ванье. Этих два метода были развиты путем адаптации технических средств, оказавшихся полезными для диагностики парамагнитных топологических изоляторов класса  $Z_2$ . Таким образом, мы представили полную картину и фазовую диаграмму задачи, впервые рассмотренной в работе [27]. Развитые нами методы приложимы к произвольным системам с антиунитарной симметрией, обращающей импульс.

Для centrosymmetric систем задача определение простого критерия нетривиальности топологии была рассмотрена в [13]. В этой работе было предложено рассматривать собственные значения четности лишь в ИИОВ В-типа, исключая из рассмотрения их аналоги А-типа. В нашем случае, используя развитые выше методы, мы показали, что этот метод действительно правильно описывает топологические фазы. В то же время, чтобы этот критерий был действителен, необходимо, чтобы в ИИОВ А-типа инверсии зон не было. Далее, можно показать, что и в более общей модели инверсия зон имеет место в обоих ИИОВ А-типа, коль скоро присутствует симметрия, связывающая эти две точки. В настоящем случае симметрия гамильтониана по отношению к пространственному вращению на

$\pi/2$  гарантирует, что два ИИОВ А-типа ведут себя идентично. Пока это так, критерий из работы [13] действительно описывает топологические фазы. Но если два ИИОВ А-типа не связаны операцией симметрии, то мы не видим обстоятельств, которые запитили бы справедливость критерия [13].

В последнем случае, мы ожидаем, что два развитых выше метода окажутся полезными для обнаружения топологических фаз. Чтобы дополнительно это проиллюстрировать, мы изучили два обобщения модели на системы без центра инверсии, в которых нам не известны никакие простые выражения для топологического инварианта, который идентифицировал бы топологические фазы. Несмотря на это, развитые выше методы позволили нам точно найти переход между тривиальной и топологической фазами.

Нам приятно поблагодарить за многочисленные дискуссии А. А. Солуянова, чьи замечания способствовали значительному улучшению настоящей работы.

### ПРИЛОЖЕНИЕ А

#### Принадлежащее Фу и Кейну вычисление топологического инварианта $Z_2$ в случае симметрии по отношению к обращению времени

В этом Приложении мы приводим детали принадлежащего Фу и Кейну вычисления топологического инварианта класса  $Z_2$  в случае симметрии по отношению к обращению времени.

В качестве элементарных векторов решетки мы здесь выберем  $X$  и  $Y$ . Мы определим векторы обратной решетки обычным образом, но с  $k_X$  и  $k_Y$  будем обращаться асимметрично и определим гибридную функцию Блоха  $|u_{\alpha, k_X, k_Y}^s\rangle$  как

$$|\Psi_{\alpha, \mathbf{k}}^s\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_X}} e^{ik_X \hat{\mathbf{X}}} |u_{\alpha, k_X, k_Y}^s\rangle, \quad (36)$$

где  $\hat{\mathbf{X}}$  есть позиция оператора в направлении  $\mathbf{X}$  и  $|\Psi_{\alpha, \mathbf{k}}^s\rangle$  определен в уравнении (8). В том же духе мы определим гибридные функции Ванье согласно

$$\begin{aligned} |X, s, \alpha, k_Y\rangle &= \\ &= \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_X e^{-ik_X(X-\hat{\mathbf{X}})} |u_{\alpha, k_X, k_Y}^s\rangle \end{aligned} \quad (37)$$

(точно так же мы определяем  $|u_{n,k_X,k_Y}\rangle$  и  $|X,n,k_Y\rangle$ , исходя из  $|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$ , использованных в уравнении (7)).

Следуя Фу и Кейну [29], мы определяем частичную поляризацию  $P_{k_Y}^s$  для данного значения  $k_Y$  как

$$P_{k_Y}^s = \sum_{\alpha} \langle 0, s, \alpha, k_Y | \mathbf{X} | 0, s, \alpha, k_Y \rangle \quad (38)$$

для  $s = \text{I}$  или  $s = \text{II}$ .

Полная поляризация тогда равна

$$P_{k_Y}^{\rho} = P_{k_Y}^{\text{I}} + P_{k_Y}^{\text{II}}, \quad (39)$$

в то время как поляризация по отношению к обращению времени определена как

$$P_{k_Y}^{\Theta} = P_{k_Y}^{\text{I}} - P_{k_Y}^{\text{II}}. \quad (40)$$

Можно показать, что

$$P_{k_Y}^s = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_X A_{k_Y}^s(k_X) \quad (41)$$

с

$$A_{k_Y}^s(k_X) = i \sum_{\alpha} \langle u_{\alpha,k_X,k_Y}^s | \nabla_{k_X} | u_{\alpha,k_X,k_Y}^s \rangle. \quad (42)$$

После вычисления, описанного в работе [29], для калибровки, непрерывной на торе зоны Бриллюэна, получаем

$$P_{\Gamma^Y}^{\Theta} = \frac{a}{2\pi i} \left[ \int_0^{\pi/a} dk_X \nabla_{k_X} \ln \det[w(k_X, \Gamma^Y)] - 2 \ln \left( \frac{Pf[w(\pi/a, \Gamma^Y)]}{Pf[w(0, \Gamma^Y)]} \right) \right] \quad (43)$$

для  $\Gamma^Y \in \{0, \pi/a\}$ .

Используя это выражение, мы можем перейти от определения в (9) к уравнению (11) прямолинейным образом.

## ПРИЛОЖЕНИЕ В

### Крамерсовское вырождение в антиферромагнитном случае

В настоящем Приложении мы покажем, что в присутствии неелевской намагниченности, и следовательно с нарушенной симметрией по отношению к обращению времени, симметрия по отношению к инверсии защищает крамерсовское вырождение (см. также работы [25, 26]). Это важно для определения собственных состояний в уравнении (13).

Рассматриваемая система имеет две важные симметрии. Первая связана с оператором

$$\begin{aligned} \Theta_{AF} &= \sum_{\mathbf{k}} \Theta_{AF}(\mathbf{k}) |-\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| K = \\ &= \sum_{\mathbf{k}} i \exp\left(i \frac{k_x - k_y}{2}\right) \times \\ &\times s^y \otimes (C_- \sigma^x - S_- \sigma^y) |-\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| K, \quad (44) \end{aligned}$$

который является антиунитарным и

$$\Theta_{AF}^2 = -e^{i\Phi_{\mathbf{k}}} = -e^{-i2a\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{X}}}. \quad (45)$$

Вторая симметрия связана с оператором

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{AF} &= \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{P}_{AF}(\mathbf{k}) |-\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| = \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \exp\left(i \frac{k_x - k_y}{2}\right) \times \\ &\times \tau^z \otimes (C_- Id + iS_- \sigma^z) |-\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}|, \quad (46) \end{aligned}$$

он антиунитарен, и его квадрат равен 1.

Аргументы, связанные с теоремой Крамерса, таковы: пусть  $A$  — антиунитарный оператор, коммутирующий с гамильтонианом системы, и чей квадрат равен  $A^2 = e^{i\theta}$  с  $\theta \neq 0 \pmod{2\pi}$ . Далее, пусть  $|\Psi\rangle$  — собственное состояние  $H$ . Тогда  $A|\Psi\rangle$  также является собственным состоянием  $H$  с тем же собственным значением и

$$\langle \Psi | A | \Psi \rangle = 0. \quad (47)$$

Тот факт, что  $A|\Psi\rangle$  также является собственным состоянием  $H$ , в случае коммутации  $A$  и  $H$  следует непосредственно. Ортогональность (47) может быть продемонстрирована следующими уравнениями:

$$\begin{aligned} \langle \Psi | A | \Psi \rangle &= \langle A \Psi | A A \Psi \rangle^* = e^{-i\theta} \langle A \Psi | \Psi \rangle^* = \\ &= e^{-i\theta} \langle \Psi | A \Psi \rangle, \quad (48) \end{aligned}$$

где первое уравнение следует из того факта, что оператор  $A$  антиунитарен, и второе — из значения  $A^2$ . Следовательно, если  $\theta \neq 0 \pmod{2\pi}$ , то  $\langle \Psi | A | \Psi \rangle = 0$ .

В рассматриваемом случае этот результат применим к оператору  $\Theta_{AF}$  в В-ИИОВ, а также к оператору  $\Theta_{AF} \mathcal{P}_{AF}$ , который антиунитарен, коммутирует с гамильтонианом и чей квадрат равен  $-1$  во всей зоне Бриллюэна.

В таком случае состояния  $|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$  и  $\Theta_{AF} \mathcal{P}_{AF} |\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$  вырождены, ортогональны и имеют один и тот же импульс  $\mathbf{k}$ . Таким образом, все зоны двукратно вырождены. Более того, состояния  $\Theta_{AF} |\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$  и  $\mathcal{P}_{AF} |\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$  также вырождены и ортогональны, но имеют импульс  $-\mathbf{k}$ .

Таким образом, всюду в зоне Бриллюэна мы имеем крамерсовские пары состояний, которые можем разделить на  $|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle$  и  $|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^{II}\rangle$ . Далее, проблема состоит в том, чтобы найти непрерывное определение  $|\Psi^{I/II}\rangle$  в зоне Бриллюэна, которое удовлетворяло бы уравнению (13). Это делается в два этапа.

Первый шаг состоит в том, чтобы найти состояния  $|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle$ , определенные непрерывно в зоне Бриллюэна, которые удовлетворяли бы

$$\mathcal{P}_{AF}|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle = e^{i\phi(\mathbf{k})}|\Psi_{\alpha,-\mathbf{k}}^I\rangle. \quad (49)$$

Тогда нам следует лишь сконструировать

$$|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^{II}\rangle = \Theta_{AF}\mathcal{P}_{AF}|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle.$$

Непрерывность состояний  $|\Psi^{II}\rangle$  есть прямое следствие непрерывности  $|\Psi^I\rangle$ , и уравнение (13) есть следствие уравнения (49).

Чтобы должным образом определить состояние  $|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle$ , сначала выберем для него непрерывное определение для  $k_y = 0$  и  $k_x \in [0, \pi]$  так, чтобы  $\mathcal{P}_{AF}|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle$  было пропорционально  $|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle$  для  $\mathbf{k} = (0, 0)$  и  $(\pi, 0)$ . Далее, мы конструируем состояние при  $k_y = 0$  и  $k_x \in ]-\pi, 0[$  согласно  $|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle = \mathcal{P}_{AF}|\Psi_{\alpha,-\mathbf{k}}^I\rangle$ . Это определение может быть разрывным при  $k_x = 0$  и  $k_x = \pi$ , но мы имеем

$$\begin{aligned} \lim_{k_x \rightarrow 0^+} |\Psi_{\alpha,-k_x, k_y=0}^I\rangle &= \lim_{k_x \rightarrow 0^+} \mathcal{P}_{AF}|\Psi_{\alpha, k_x, k_y=0}^I\rangle = \\ &= \mathcal{P}_{AF}|\Psi_{\alpha, k_x=0, k_y=0}^I\rangle = e^{i\phi(0)}|\Psi_{\alpha, k_x=0, k_y=0}^I\rangle, \end{aligned} \quad (50)$$

и аналогичная фаза появляется при  $k_x = \pi$ . Чтобы избавиться от этой фазы, мы умножаем все состояния при  $k_y = 0$  и  $k_x \in ]-\pi, 0[$  на постоянный фазовый множитель  $e^{-i\phi(k_x)}$ , такой, что  $\lim_{k_x \rightarrow 0^-} e^{i\phi(k_x)} = e^{i\phi(0)}$  и  $\lim_{k_x \rightarrow -\pi} e^{i\phi(k_x)} = e^{i\phi(\pi)}$ . Мы получаем определение  $|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^I\rangle$ , непрерывное вдоль окружности  $k_y = 0$  и удовлетворяющее уравнению (49). Это множество состояний теперь может быть непрерывно продолжено на всю верхнюю половину зоны Бриллюэна ( $k_y \in ]0, \pi[$ ) так, как это было описано в работе [20]. Состояния в нижней половине зоны Бриллюэна конструируются путем применения оператора  $\mathcal{P}_{AF}$ . Повторим: мы можем столкнуться с разрывом при пересечении линии  $k_y = 0$ , но непрерывность восстанавливается умножением всех состояний с  $k_y < 0$  на фазовый множитель  $e^{-i\phi(k_x)}$ .

Как мы уже отмечали ранее, теперь можно воспользоваться оператором  $\Theta_{AF}\mathcal{P}_{AF}$ , чтобы сконструировать состояния  $|\Psi_{\alpha,\mathbf{k}}^{II}\rangle$  и получить определение, непрерывное в цилиндрической зоне Бриллюэна с краями  $k_y = \pi$  и  $k_y = -\pi$ , удовлетворяющее уравнению (13).

## ПРИЛОЖЕНИЕ С

### Вычисление инварианта $Z_2$ в антиферромагнитном случае

В настоящем Приложении мы определим гибридные блоховские состояния и гибридные функции Ванье как в Приложении А, вновь с целью вычислить поляризацию по отношению к обращению времени, но в случае нарушенной симметрии по отношению к обращению времени. В Приложении А мы показали, как получить выражение для топологического инварианта  $Z_2$  через детерминант и пфаффиан матрицы шивки в четырех ИИОВ (11). Для определения пфаффиана нужно, чтобы матрица шивки была антисимметрична в четырех ИИОВ. Однако в присутствии неелевской намагниченности матрица шивки, определенная с помощью  $\Theta_{AF}$ , симметрична в А-ИИОВ (ИИОВ, где  $\Theta_{AF}^2 = 1$ ). Именно поэтому в антиферромагнитном случае мы получаем выражение (16) для инварианта  $Z_2$  не только через матрицу шивки, но также через фазы  $\chi$ .

Как и в случае симметрии по отношению к обращению времени, мы рассмотрим два вектора решетки:  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$ . Мы осуществляем преобразование Ванье вдоль  $\mathbf{a}$ , сохраняя плоские волны вдоль  $\mathbf{b}$ . Теперь мы хотели бы вычислить  $P_{\Gamma_b}^{\Theta_{AF}} = P_{\Gamma_b}^I - P_{\Gamma_b}^{II}$ .

Сначала сосредоточимся на  $P_{\Gamma_b}^I$ . Уравнение (41) для  $s = I$  может быть переписано как

$$P_{\Gamma_b}^I = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi dk_a [A_{\Gamma_b}^I(k_a) + A_{\Gamma_b}^I(-k_a)]. \quad (51)$$

Более того, используя уравнения (13) и (42), а также антиунитарность  $\Theta_{AF}$ , можно показать, что

$$\begin{aligned} A_{-k_b}^I(-k_a) &= A_{k_b}^{II}(k_a) + \\ &+ \sum_{\alpha} \nabla_{k_a} \left( \chi_{\alpha, k_a, k_b} + \frac{1}{2} \Phi_{k_a, k_b} \right) + \\ &+ i \sum_{\alpha} \langle u_{\alpha, k_a, k_b}^{II} | (\nabla_{k_a} \hat{\Theta}_{AF}(\mathbf{k})) \hat{\Theta}_{AF}(\mathbf{k})^\dagger | u_{\alpha, k_a, k_b}^{II} \rangle. \end{aligned} \quad (52)$$

Ввиду присутствия производных  $\Theta_{AF}$  и  $\Phi$ , это выражение может показаться не слишком полезным. Но как  $\Theta_{AF}$ , так и  $\Phi$  зависят лишь от  $k_x - k_y$ . Поэтому, если мы выберем  $k_a = k_x$  и  $k_b = k_x - k_y$ , то член с производными исчезает, и мы получим

$$A_{-k_b}^I(-k_a) = A_{k_b}^{II}(k_a) + \sum_{\alpha} \nabla_{k_a} \chi_{\alpha, k_a, k_b}. \quad (53)$$

Таким образом,

$$P_{\Gamma_b}^I = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi dk_a (A_{-\Gamma_b}^I(k_a) + A_{\Gamma_b}^{II}(k_a)) + \frac{1}{2\pi} \sum_\alpha (\chi_{\alpha,\pi,-\Gamma_b} - \chi_{\alpha,0,-\Gamma_b}). \quad (54)$$

В конце концов, используя  $P_{\Gamma_b}^{\Theta AF} = 2P_{\Gamma_b}^I - P_{\Gamma_b}^\rho$  и следуя Фу и Кейну [29], это можно переписать в непрерывной калибровке как

$$P_{\Gamma_b}^{\Theta AF} = \frac{1}{2\pi i} \int_0^\pi dk_a \nabla_{k_a} \ln \det[\tilde{w}_{\Gamma_b}(k_a)] + \frac{1}{\pi} \sum_\alpha (\chi_{\alpha,0,\Gamma_b} + \chi_{\alpha,\pi,\Gamma_b}), \quad (55)$$

где  $\tilde{w}$  есть матрица шивки, определенная как

$$\tilde{w}_{k_b}(k_a)_{mn} = \langle \Psi_{m,-\mathbf{k}} | \Theta_{AF} | \Psi_{n,\mathbf{k}} \rangle. \quad (56)$$

## ЛИТЕРАТУРА

1. M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
2. X.-L. Qi and S.-C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
3. C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 226801 (2005).
4. C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146802 (2005).
5. C. Xu and J. E. Moore, *Phys. Rev. B* **73**, 045322 (2006).
6. C. Wu, B. A. Bernevig, and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 106401 (2006).
7. B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, *Science* **314**, 1757 (2006).
8. R. S. K. Mong, A. M. Essin, and J. E. Moore, *Phys. Rev. B* **81**, 245209 (2010).
9. C.-X. Liu, arXiv e-prints 1304.6455 (2013).
10. R.-X. Zhang and C.-X. Liu, *Phys. Rev. B* **91**, 115317 (2015).
11. C.-X. Liu, R.-X. Zhang, and B. K. VanLeeuwen, *Phys. Rev. B* **90**, 085304 (2014).
12. C. Fang and L. Fu, *Phys. Rev. B* **91**, 161105 (2015).
13. C. Fang, M. J. Gilbert, and B. A. Bernevig, *Phys. Rev. B* **88**, 085406 (2013).
14. L. Fu, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 106802 (2011).
15. M. Kargarian and G. A. Fiete, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 156403 (2013).
16. J. Liu, W. Duan, and L. Fu, *Phys. Rev. B* **88**, 241303 (2013).
17. M. Serbyn and L. Fu, *Phys. Rev. B* **90**, 035402 (2014).
18. P. Jadaun, D. Xiao, Q. Niu, and S. K. Banerjee, *Phys. Rev. B* **88**, 085110 (2013).
19. L. Fu and C. L. Kane, *Phys. Rev. B* **76**, 045302 (2007).
20. A. A. Soluyanov and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **85**, 115415 (2012).
21. R. D. King-Smith and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **47**, 1651 (1993).
22. R. Yu et al., *Phys. Rev. B* **84**, 075119 (2011).
23. A. A. Soluyanov and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **83**, 235401 (2011).
24. Н. И. Куликов, В. В. Тугушев, *УФН* **144**, 643 (1984).
25. R. Ramazashvili, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 137202 (2008).
26. R. Ramazashvili, *Phys. Rev. B* **79**, 184432 (2009).
27. H. Guo, S. Feng and S.-Q. Shen, *Phys. Rev. B* **83**, 045114 (2011).
28. M. Fruchart, D. Carpentier, and K. Gawedzki, *Europhys. Lett.* **106**, 60002 (2014).
29. L. Fu and C. L. Kane, *Phys. Rev. B* **74**, 195312 (2006).
30. M. Konig et al., *J. Phys. Soc. Jpn* **77**, 031007 (2008).