А.Г.СЕРГЕЕВ

ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ИНВАРИАНТЫ ДИЭЛЕКТРИКОВ

КАЗАНЬ – 2025

При подготовке этого доклада автор пользовался финансовой поддержкой Российского Научного Фонда (грант № 21-11-00196).

I. ВВЕДЕНИЕ

Роль топологии в теории твердого тела впервые проявилась при исследовании квантового эффекта Холла. Вскоре после его открытия фон Клитцингом в 1980 году появились статьи Лафлина и Таулесса с соавторами, в которых было предложено топологическое объяснение этого эффекта.

Следующий важный шаг был сделан Кейном и Милом, которые предложили конструкцию топологического $\mathbb{Z}_2$-инварианта для диэлектриков, инвариантных относительно обращения времени, и показали, что этот инвариант является нетривиальным для спинового диэлектрика Холла. С этого момента началось интенсивное развитие теории топологических диэлектриков.

Топологические диэлектрики, являющиеся основным предметом этого доклада, характеризуются наличием широкой энергетической щели, устойчивой относительно малых деформаций, что мотивирует использование топологических методов для их изучения. Будут предложены два метода исследования топологии этих твердых тел и построения их топологических инвариантов.

Первый, который можно назвать методом спектрального уплощения, позволяет ввести классифицирующее пространство для гамильтонианов топологических диэлектриков, которое совпадает с грассмановым многообразием. Второй метод, основанный на использовании связности Берри, позволяет построить топологический инвариант, называемый инвариантом Черна, для двумерных диэлектриков.

В этом докладе мы представим оба метода на простых примерах и рассмотрим их обобщения на более сложные случаи.

II. ТЕОРИЯ бЛОХА

Классическая теория Блоха описывает свойства твердых тел, обладающих кристаллической решеткой, называемой решеткой Бравэ. С математической точки зрения это дискретная абелева группа Γ в пространстве $\mathbb{R}^d$ с $d = 2, 3$, изоморфная $\mathbb{Z}^d$ и действующая на $\mathbb{R}^d$ трансляциями T_γ, порождаемыми векторами $\gamma \in \Gamma$.

Поведение свободных электронов в твердом теле определяется одночастичным уравнением Шредингера

$$H\psi := (-\Delta + V)\psi = E\psi$$

с периодическим потенциалом V, инвариантным относительно действия Γ.

Обозначим через Γ' двойственную решетку в импульсном пространстве $(\mathrm{R}^d)'$, определяемую следующим образом:

$$\Gamma' = \{k \in (\mathbb{R}^d)' : k \cdot \gamma \in 2\pi\mathbb{Z} \quad \text{для всех } \gamma \in \Gamma\}.$$

Фундаментальная область (единичная клетка) решетки Γ' называется зоной Бриллюэна Br_d, которую можно отождествить с d-мерным тором.

Функции, инвариантные относительно Γ, можно рассматривать как функции на торе $\mathbb{T}^d = \mathbb{R}^d/\Gamma$. Обозначим через $\mathcal{H}_0$ гильбертово пространство

$$\mathcal{H}_0 = L^2(\mathbb{T}^d) = L^2(\mathbb{R}^d/\Gamma)$$

относительно меры на $\mathbb{R}^d/\Gamma$, индуцированной мерой Лебега dx на $\mathbb{R}^d$. Экспонента $e_k = e^{ik\cdot x}$ принадлежит $\mathcal{H}_0$, если $k \in \Gamma'$. Более того, такие функции образуют ортономированный базис в $\mathcal{H}_0$.

Гладкие функции вида

$$\psi(x) = e^{ik\cdot x}\varphi(x)$$

называются блоховскими. Здесь, вектор k, назывемый квазиинпульсом, принадлежит зоне Бриллюэна Br_d, а C^∞-гладкая функция φ инвариантна относительно Γ, поэтому ее можно рассматривать как функцию из $C^\infty(\mathbb{R}^d/\Gamma)$. Векторное пространство блоховских функций с квазиимпульсом k обозначается через L_k.

Оператор Шредингера действует на блоховские функции по формуле
$$H\left(e^{ik\cdot x}\varphi(x)\right) = e^{ik\cdot x}H_k\varphi(x).$$

Оператор H_k, называемый блоховским гамильтонианом, имеет вид
$$H_k\varphi = (\frac{1}{i}\nabla + k)^2\varphi + V\varphi$$

и отображает пространство $C^\infty(\mathbb{R}^d/\Gamma)$ в себя. В частности, из приведенной выше формулы следует, что исходный оператор Шредингера $H = H_0$ отображает пространство блоховских функций с квазиимпульсом k в себя.

Если мы обозначим через I_k оператор умножения на $e^{ik\cdot x}$, то сможем переписать приведенную выше формулу в выиде

$$I_k^{-1} \circ H \circ I_k = H_k.$$

Иными словами,

$$H|_{L_k} = I_k \circ H_k|_{L_0} \circ I_k^{-1}.$$

поэтому исследование оператора $H|_{L_k}$ сводится к исследованию оператора $H_k|_{L_0}$.

Обозначим через $H(k)$ замыкание оператора $H_k|_{L_0}$ в пространстве $\mathcal{H}_0$. Область определения оператора $H(k)$ совпадает с подпространгством

$$D(H(k)) = \{\varphi : \varphi(x) = \sum_{\gamma' \in \Gamma'} c_{\gamma'} e^{i(\gamma' \cdot x)},$$

$$\text{удовлетворяющих условию } \sum_{\gamma' \in \Gamma'} (1 + |\gamma'|^2)|c_{\gamma'}|^2 < \infty\}.$$

Оператор $H(k)$ имеет дискретный спектр, а его собственные функции $\varphi_m(k)$ являются решениями уравнения

$$H(k)\varphi_m(k) = E_m(k)\varphi_m(k).$$

Заметим, что функции $\varphi_m(k)$ являются функциями от x, зависящими от двух параметров — дискретного параметра $m \in \mathbb{N}$ и непрерывного параметра $k \in \mathrm{Br}_d$. Для любого фиксированного k они образуют полную ортогональгую систему в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}_0$.

Блоховсие функции

$$\psi_m(k) = e^{ik\cdot x}\varphi_m(k)$$

являются собственными функциями исходного оператора Шредингера H.

Обозначим через $\mathcal{H}_k$ пополнение пространства L_k по норме, определяемой изоморфизмом $I_k : L_0 \to L_k$, продолжающимся до изометрии $I_k : \mathcal{H}_0 \to \mathcal{H}_k$. Рассмотрим векторное расслоение $\pi : \mathfrak{H} \to \mathrm{Br}_d$, называемое блоховским, со слоем $\mathcal{H}_k$ над точкой $k \in \mathrm{Br}_d$, и обозначим через $\mathcal{H} = L^2(\mathfrak{H})$ гильбертово пространство квадратично интегрируемых сечений $\mathfrak{H}$ со скалярным произведением

$$(s_1, s_2) = \int_{\mathrm{Br}_d} (s_1(k), s_2(k))dk,$$

где $(s_1(k), s_2(k))$ – скплярное произведение в $\mathcal{H}_k$.

III. ПРИБЛИЖЕНИЕ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

Рассмотрим теперь физическую интерпретацию этой математической картины. Основное состояние системы (состояние с наименьшей энергией) имеет следующую структуру. Заполненные одноэлектронные уровни с энергиями, не превосходящими величины E_F, называемой энергией Ферми, называются уровнями валентности. Выше E_F лежат пустые (не заполненные) энергетические уровни, называемые уровнями проводимости. Интервал энергий между высшим заполненным уровнем и низшим пустым уровнем называется энергетической щелью или запрещенной зоной. Твердые тела с широкой энергетической щелью называются диэлектриками.

В приближении сильной связи, принятом в большинстве физических работ по теории твердого тела, считается, что гильбертово пространство состояний системы есть $\ell^2(\Gamma) \otimes V$, где V – гильбертово пространство, а Γ – решетка Бравэ.

Будем называть блоховским состоянием отображение

$$k \in \mathrm{Br}_d \longmapsto u(k) \in V$$

или его проективную версию $k \in \mathrm{Br}_d \longmapsto [u(k)] \in \mathbb{P}V$.

Предполагается, что рассматриваемые гамильтонианы, действующие в пространстве состояний $\ell^2(\Gamma) \otimes V$, являются самосопряженными операторами с пространственной симметрией, т.е. инвариантны относительно трансляций на векторы решетки Бравэ Γ. В то время как гильбертово пространство V отвечает за внутренние симметрии (такие как спин).

В твердых телах при низких температурах активные степени свободы концентрируются вблизи от энергии Ферми. Другими словами, для описания таких систем можно ограничиться низко-энергетическим сектором гильбертова пространства V, порождаемого состояниями, близкими к энергии Ферми. В приближении сильной связи считается просто, что пространство V конечномерно.

Тем самым, мы будем предполагать, что имеется конечное число N активных одноэлектронных уровней, отвечающих собственным значениям $E_m(k)$. Семейство энергетических уровней, отвечающих собственным значениям $E_m(k)$ с фиксированным m, называется энергетической зоной.

IV. СПЕКТРАЛЬНОЕ УПЛОЩЕНИЕ И КЛАССИФИЦИРУЮЩИЙ ГРАССМАНИАН

В представленной нами блоховской картине остается непонятным, где же в ней скрывается топология. Для того, чтобы ответить на этот вопрос, рассмотрим блоховский гамильтониан $H_0(k)$, описывающий диэлектрик с энергетической щелью на уровне энергии Ферми E_F, которую мы полагаем равной нулю. Запишем этот гамильтониан в ыиде

$$U_0^\dagger(k)H_0(k)U_0(k) = \mathrm{diag}(E_1(k), \dots, E_p(k), E_{p+1}(k), \dots, E_N(k))$$

где мы предполагаем, что первые p уровней $E_1, \dots, E_p$ заняты, а $N - p$ уровней $E_{p+1}, \dots, E_N$ свободны и $E_1 \leq \dots \leq E_p < E_{p+1} \leq \dots \leq E_N$. Унитарная матрица $U_0(k) = (u_1(k), \dots, u_N(k)) \in \mathrm{U}(N)$ составлена из столбцов, являющихся блоховскими собственными векторами.

Рассмотрим адиабатическую деформацию этого гамильтониана, т.е. его непрерывную деформацию в классе рассматриваемых гамильтонианов, не затрагивающую энергетическую щель, которая переводит H_0 в гамильтониан $H_1 \equiv \operatorname{sgn} H_0$, имеющий только два собственных значения, равных ± 1. Такой гамильтониан H_1, называемый спектральным уплощением гамильтониана H_0, нетрудно построить, пользуясь спектральным представлением оператора H_0.

Адиабатическая деформация задает непрерывное отображение $U_1 : \mathrm{Br}_d \to \mathrm{U}(N)$, такое что

$$U_1^*(k) H_1(k) U_1(k) = \operatorname{diag}\left(-1_{p\times p}, +1_{(N-p)\times(N-p)}\right). \qquad (1)$$

Заметим, что матрица $U_1(k)$ в этом уравнении определена только с точностью до преобразований вида

$$U_1(k) \longmapsto U_1(k) \mathrm{diag}\left(U_{p\times p}, U_{(N-p)\times(N-p)}\right).$$

Следовательно, матрица $U_1(k)$, задающая решение уравнения (1), порождает непрерывное отображение из зоны Бриллюэна $\mathrm{Br}_d = \mathbb{T}^d$ в грассманиан

$$\mathrm{Gr}_{p,N} = \mathrm{U}(N)/(\mathrm{U}(p) \times \mathrm{U}(N-p)).$$

Иными словами, построенное представление означает, что грассманово многообразие $\mathrm{Gr}_{p,N}$ играет роль классифицирующего пространства для рассматриваемых гамильтонианов.

Построенное представление сводит задачу о топологических инвариантах диэлектриков к описанию топологии пространства $[T^d, \mathrm{Gr}_{p,N}]$ классов гомотопической эквивалентности непрерывных отображений из тора T^d в грассманово многообразие $\mathrm{Gr}_{p,N}$.

Общая задача об описании гомотопических классов непрерывных отображений торов в топологические пространства изучалась Фоксом. Из его результатов следует, что гомотопические классы $[\mathbb{T}^d, X]$ непрерывных отображений из тора $\mathbb{T}^d$ в топологическое пространство X классифицируются гомоморфизмами

$$\Omega_I^r : \pi_r(X) \to [\mathbb{T}^d, X], r \leq d,$$

параметризуемыми подмножествами $I = \{i_1 < \ldots < i_{r-1}\}$ в множестве индексов $\{1, \ldots, d\}$. Отсюда следует, что гомотопические классы $[\mathbb{T}^d, X]$ параметризуются наборами из d элементов группы $\pi_1(X)$, $\frac{d(d-1)}{2}$ элементов из группы $\pi_2(X), \ldots,$ $\binom{d}{j}$ элементов из группы $\pi_j(X)$ и так далее.

Применяя этот результат к пространству $X = \mathrm{Gr}_{p,N}$, получим при $d = 1$, что $[\mathbb{T}^1, \mathrm{Gr}_{p,N}] = \pi_1(\mathrm{Gr}_{p,N}) = 0$, при $d = 2$ гомотопические классы $\mathbb{T}^2 \to \mathrm{Gr}_{p,n}$ характеризуются единственным инвариантом, поскольку $\pi_2(\mathrm{Gr}_{p,N}) = \mathbb{Z}$, и при $d = 3$ классы $[\mathbb{T}^3, \mathrm{Gr}_{p,N}]$ классицируются тремя элементами из группы $\pi_2(\mathrm{Gr}_{p,N}) = \mathbb{Z}$, поскольку $\pi_1(\mathrm{Gr}_{p,N}) = \pi_3(\mathrm{Gr}_{p,N}) = 0$.

Нетривиальные классы в размерностях $d = 2, 3$ описываются следующим образом. Пространство $[\mathbb{T}^d, \mathrm{Gr}_{p,N}]$ можно отождествить с классами гомотопической эквивалентности векторных расслоений над $\mathbb{T}^d$. В размерности $d = 2$ имеется нетривиальное расслоение над $\mathbb{T}^2$, являющееся аналогом расслоения Хопфа над $\mathbb{S}^2$. В размерности $d = 3$ имеются три расслоения над $\mathbb{T}^3$, являющихся поднятиями расслоения Хопфа над $\mathbb{T}^2$ на $\mathbb{T}^3$ относительно трех различных проекций $\mathbb{T}^3 = \mathbb{S}^1 \times \mathbb{S}^1 \times \mathbb{S}^1 \mapsto \mathbb{T}^2 = \mathbb{S}^1 \times \mathbb{S}^1$.

V. ИНВАРИАНТ ЧЕРНА ДВУМЕРНОГО ДИЭЛЕКТРИКА

Рассмотрим диэлектрик размерности $d = 2$. Пусть $V \to \mathbb{P}V$ есть главное U(1)-расслоение. Обозначим через $u : \mathrm{Br}_2 \ni k \longmapsto u(k) \in V$ блоховское состояние, а через $[u] : \mathrm{Br}_2 \ni k \longmapsto [u(k)] \in \mathbb{P}V$ его проективную версию. Пусть P есть ортогональный проектор на пространстве V, задаваемый формулой $P = I - (u, \cdot)(\cdot, u)$, $u \in V$, образ которого совпадает с ортогональным дополнением к вектору u в пространстве V.

Естественная связность на расслоении $V \to \mathbb{P}V$, называемая связностью Берри, задается 1-формой $A = udu$ с компонентами $A_i = (u, \partial_i u)$. Ее кривизна $\Omega = dA$ есть 2-форма с компонентами

$$\Omega_{ij} = (P(\partial_i u), \partial_j u) - c.c.,$$

где "c.c." обозначает комплексно сопряженный член.

Тогда число Черна C диэлектрика определяется как интеграл от Ω по зоне Бриллюэна

$$C = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathrm{Br}_2} \Omega.$$

Для иллюстрации этого определения рассмотрим более детально случай двухзонных диэлектриков. Классифицирующее пространство для таких диэлектриков совпадает с римановой сферой

$$\mathrm{Gr}_{1,2} = \mathrm{U}(2)/(\mathrm{U}(1) \times \mathrm{U}(1)) = \mathbb{CP}^1 = S^2.$$

Ассоциированный блоховский гамильтониан имеет вид

$$H(k) = d_x(k)\sigma_x + d_y(k)\sigma_y + d_z(k)\sigma_z + d_o(k)1,$$

где $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ – матрицы Паули, а единичный вектор $d = d(k) = (d_x(k), d_y(k), d_z(k)) \in S^2$ параметризует точку $\mathbb{CP}^1 = S^2$.

Этот гапильтониан можно записать в виде

$$H = U\mathrm{diag}(E_1, E_2)U^\dagger,$$

где $U = (u_1, u_2)$ есть матрица, составленная из блоховских собственных векторов с собственными значениями $E_1 < E_2$.

Число Черна расслоения $V \to \mathbb{P}V$ задается в этом случае формулой

$$C = \frac{1}{4\pi}\int_{\mathrm{Br}_2} d(k)d_{k_x}d(k) \wedge d_{k_y}d(k).$$

VI. ДАЛЬНЕЙШИЕ ОБОБЩЕНИЯ

Первое обобщение связано с т.н. многозонным случаем. Обозначим через U матрицу, столбцы которой задают ортогональную систему векторов, образующих ортогональный базис гильбертова пространства V_-, порождаемого заполненными зонами. Обозначим через $P = I - UU^\dagger$ ортогональный проектор на подпространство, ортогональное пространству V_-.

Выберем теперь ортогональный базис пространства V, образованный столбцами матрицы $\widetilde{U} \in \mathrm{U}(N)$, в котором первые p столбцов отвечают заполненным зонам, а другие $N - p$ столбцов отвечают пустым зонам. Классифицирующее пространство для таких конфигураций отождествляется с грассманианом

$$\mathrm{Gr}_{p,N} = \mathrm{U}(N)/(\mathrm{U}(p) \times \mathrm{U}(N-p)).$$

Рассмотрим главное $\mathrm{U}(p)$-расслоение

$$\mathrm{U}(N)/\mathrm{U}(N-p) \longrightarrow \mathrm{Gr}_{p,N},$$

в котором вертикальное подпространство состоит из матриц с компонентами $(u_n, \partial_i u_m)$, где u_n, u_m отвечают заполненным состояниям. Связность на этом расслоении имеет компоненты

$$A_i^{mn} = (u_n, \partial_i u_m)$$

или $A_i = U^\dagger \partial_i U$. Эта связность принимает значения в алгебре Ли косоэрмитовых $(p \times p)$-матриц.

След $\mathrm{Tr}(\Omega)$ кривизны $\Omega = dA$ есть 2-форма с компонентами

$$\mathrm{Tr}(\Omega_{ij}) = \sum_l (P\partial_i u_l, \partial_j u_l) - c.c.,$$

где суммирование ведется по заполненным зонам u_l.

Число Черна C задается интегралом от $\mathrm{Tr}(\Omega)$ по зоне Бриллюэна

$$C = \frac{1}{4\pi}\int_{\mathrm{Br}_2} \mathrm{Tr}(\Omega).$$

В случае гамильтонианов с m энергетическими щелями роль классифицирующего пространства играют флаговые многообразия

$$F_{p_1,\ldots,p_m,N} = \mathrm{U}(N)/(\mathrm{U}(p_1)\times\ldots\times\mathrm{U}(p_m)\times\mathrm{U}(N-p_1-\ldots-p_m))$$

с $m+1$ зонными подпространствами размерностей $p_1,\ldots,p_m$ и $N-p_1-\ldots-p_m$.

Другое обобщение связано с т.н. квантовой геометрией, хотя термин "плюккерова геометрия" кажется нам более подходящим.

В предыдущих параграфах грассманианы $\mathrm{Gr}_{p,N}$ играли роль классифицирующих пространств для рассматриваемых диэлектриков. Грассманово многообразие $\mathrm{Gr}_{p,N}$ можно вложить с помощью плюккерова вложения в проективное пространство, являющееся проективизацией p-й внешней степени пространства V. Образ $\mathrm{Gr}_{p,N}$ будет при этом совпадать с пересечением квадрик в указанном проективном пространстве.

Плюккерово вложение $i : \mathrm{Gr}_{p,N} \to \mathbb{P}(\Lambda^p(V)$ задается отображением

$$i : \mathrm{span}\{u_1, \dots, u_p\} \longmapsto [u_1 \wedge \dots \wedge u_p],$$

где $\{u_1, \dots, u_p\}$ есть базис p-мерного подпространства $W \in \mathrm{Gr}_{p,N}$, а $[u_1 \wedge \dots \wedge u_p]$ – класс проективной эквивалентности $u_1 \wedge \dots \wedge u_p \in \Lambda^p(V)$.

Идея предлагаемой физиками квантовой геометрии состоит в том, чтобы переформулировать свойства топологических диэлектриков на языке плюккеровой геометрии грассмановых многообразий. Эта задача выглядит интересной и с точки зрения математики.