

对称性投影表示导致的布里渊克莱因瓶

陈至奕¹ 杨声远² 赵宇心^{1,†}

(1 南京大学物理学院 固体微结构物理国家重点实验室 南京 210093)

(2 新加坡科技与设计大学 量子材料理论研究室 新加坡 487372)

2022-05-20收到

† email: zhaoyx@nju.edu.cn

DOI: 10.7693/wl20220607

固体材料中的传统能带理论是基于晶体空间群表示的理论。例如能带理论最基础的概念——布里渊区，是晶体平移群不可约表示的集合形成的空间。作为动量空间的基本单元，布里渊区的一个重要性质是它具有环面(torus)的拓扑类型。这一点对理解固体中的各种物理现象起着关键性的作用。例如，近年来所研究的各种拓扑物态本质上对应着定义在这个环面上的一些奇异结构。

布里渊区中的波矢和平移子群的不可约表示构成了一对一的关系。空间群除以平移子群得到的点群作用在布里渊区上，保持布里渊区的中心也就是 Γ 点不变。因此，在传统能带理论中，空间群在动量空间的作用总是简单的(symmmorphic)，即群的操作不含任何对波矢的平移。即使是实空间中的非简单空间群操作(包括滑移镜面和螺旋轴)，其对应的在动量空间的操作也是简单的。实空间中格矢的分数平移在动量空间中体现为点群元素操作在布洛赫波函数上的相位因子。

近年来，3D打印技术带来了人工晶体(例如声子晶体和光子晶体)的快速发展。相比真实的晶体，人工晶体可以自由设计 Z_2 规范场的分布，即

格点上实数跃迁幅的正负号分布可以任意控制和排布。考虑了规范场分布后，晶体对称性满足投影表示，其代数结构会因此改变，从而超越传统的空间群理论。要理解这个关键点，我们考虑一个具有通量分布 Φ 的晶格， Φ 在某个空间对称性操作 S 下不变。晶格上的通量需要用跃迁的相位 ± 1 来描述，这种选择不是唯一的，即具有格点规范自由度。当选定某个跃迁相位的分布 A 后，一般来说空间对称性操作 S 会改变这一跃迁相位分布，改变后的分布 A' 和之前的 A 对应相同的通量分布 Φ ，因此 A' 和 A 可以被一个规范变换 G 联系起来。相应地，选定的跃迁相位 A 在联合操作 $S = GS$ 下是不变的，也就是哈密顿量 H 和 $S = GS$ 对易：

$$[H, S] = 0, S = GS.$$

由于规范变换 G 的引入，修正后的对称性算符间的代数关系会从之前对称群的乘法关系变为投影表示代数，即

$$S_1 S_2 = S_3 \rightarrow S_1 S_2 = \pm S_3.$$

在 Z_2 规范场下，由于空间对称性代数关系的改变，上述传统空间群理论的基本内容也需要相应的修正。我们发现：在合适的规范场分布下，空间对称性可以在动量空间中表现为带分数倒格矢平移的非简单操作。

一个重要的例子是， Z_2 规范场分布可以导致 x 坐标取逆的镜面对称性 M_x 与 y 方向的平移对称性 L_y 反对易：

$$\{M_x, L_y\} = 0.$$

比如我们考虑图1(a)中的模型^[1]。这里红色代表负跃迁，蓝色代表正跃迁，这种跃迁相位分布下的通量分布亦在图中标出，线的粗细代表跃迁

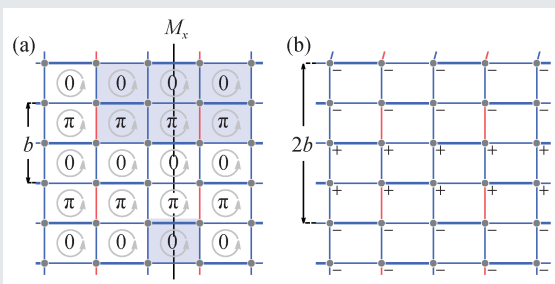


图1 带有 Z_2 通量分布的紧束缚模型^[1] (a)红色代表负跃迁，蓝色代表正跃迁，粗细代表跃迁强度大小；(b)镜面反射后，恢复之前相位分布的规范变换所对应的格点上的符号分布

强度。这个模型显然具有镜面对称性 M_x ，保持了通量分布，但是改变了跃迁相位的分布，因此它的表示会伴随一个规范变换 G (图 1(b))，即镜面对称性的算符会被修正为 $M_x = GM_x$ 。通量分布在 y 方向平移对称性 L_y 的平移长度为 b ，与相位分布的平移长度一致，因此 y 方向平移算符无需规范变换修正，即 $L_y = L_y$ 。现在，我们注意到图 1(b) 中规范变换 G 的符号分布在 y 方向平移 b 会导致正负号交换，因此 G 与 L_y 反对易。这就是规范修正后的镜面对称性算符 M_x 与 y 方向平移算符 L_y 反对易的原因。

反对易关系导致在动量空间 M_x 除了要把 k_x 变为 $-k_x$ ，还要把 k_y 平移半个倒格矢，即变为 $k_y + G_y/2$ 。这是因为反对易关系等价于 $M_x L_y M_x^{-1} = -L_y$ ，而平移算符被表示为 $e^{ik_y b}$ ，由此 $e^{ik_y b}$ 被镜面对称性转换为了 $-e^{ik_y b} = e^{i(k_y + G_y/2)b}$ 。如此，实空间的一个简单镜面对称性在动量空间变为了非简单的滑移镜面对称性。与简单对称性相比，非简单对称性的作用是自由的(free action)，也就是没有不动点。从拓扑分类的角度讲，一个流形上的具有自由作用对称性约束的拓扑分类等价于对称性约化后流形上无对称性约束的拓扑分类。因此布里渊区作为环面可被滑移镜面对称性进一步约化为克莱因瓶(图 2)。

克莱因瓶的一个重要特点是它具有不可定向流形，即它其实只有一个面，没有内外之分。克莱因瓶上最基本的拓扑分类是 Z_2 型的，区别于环面上的 Z 型拓扑分类(二维环面上取值为 Z 的拓扑不变量是陈数)。我们得到克莱因瓶上 Z_2 取值的拓扑不变量为

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \int_{\tau_{1/2}} d^2 k F + \frac{1}{\pi} \gamma(0) \text{ mod } 2,$$

这个公式由两项组成，第一项只在如图 2(a) 所示的一半布里渊区上对贝里(Berry)曲率积分，第二项是以 π 为单位的 $k_y = 0$ 的 k_x 子系统的 Berry 相位。这里要注意的是，因为动量空间滑移镜面对称性的存在， $k_y = 0$ 和 $k_y = \pi$ 的两个 k_x 子系统的 Berry 相位正好相反，因此上述公式等价于半个布里渊区的 Berry 曲率积分减去边界上的 Berry 相位，这就是公式两项的和取值为整数的原因。因为 Berry

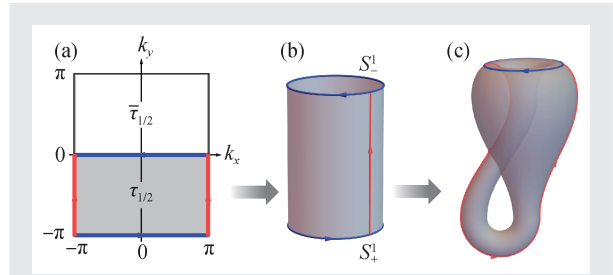


图 2 动量空间的滑移镜面对称性及其约化的克莱因瓶^[1] (a)对称性约化下一半布里渊区的边界条件；(b)施加红色周期边界条件导致的圆柱面；(c)进一步施加蓝色反周期边界条件导致的克莱因瓶

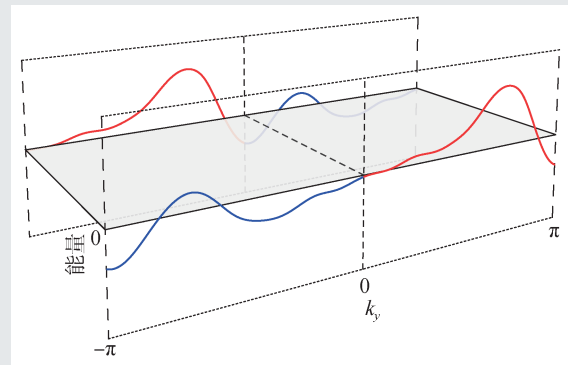


图 3 克莱因瓶拓扑绝缘体在保持镜面对称性的块状几何上的边界态

相位在规范变换下可以被改变 2π 的整数倍，所以只有奇偶性是规范不变的，对应着 Z_2 拓扑不变量。

我们将这种情况下非平庸的拓扑相称为克莱因瓶绝缘体。如图 3 所示，区别于传统的镜面对称性保护的拓扑绝缘体，其保持镜面对称的边界并没有带间边界态，边界态反而出现在不保持镜面对称性的边界上。同时，在保持镜面对称性和 y 方向平移不变性的块状几何上，两条边上的边界态被 L_y 与 M_x 的反对易代数关系联系起来：一条 y 方向边界的边界能带在 k_y 上平移半个倒格矢之后和另外一条边上的边界态能带相同(图 3)。

这个发现是我们最近一系列关于规范场拓展的晶体对称性理论及其对应的能带理论工作中的一个。其他代表性成果简介如下。(1)之前的理论认为，在轨道自旋耦合下，整数自旋和半整数自旋系统因为 PT 对称性分别满足 $(PT)^2 = \pm 1$ ，所以具有完全不同的拓扑分类。文章[2]改变了这一传统观念，提出利用 Z_2 规范场可以交换整数和半整

数自旋系统的代数关系，从而交换它们的拓扑分类。(2)规范场会改变对称性算符之间的代数关系，导致传统能带理论需要被拓展。传统能带理论中的 $k \cdot p$ 方法是用来研究拓扑材料的重要工具，因此文章[3]系统发展了规范场拓展下的 $k \cdot p$ 方法，进一步提出破坏平移不变性可以产生新奇拓扑相的机制，并用于构造具有新奇实数拓扑相的物理模型。(3)之后我们提出了平移对称性投影表示可以导致的新奇拓扑相^[4]，如莫比乌斯拓扑绝缘体和类石墨烯拓扑半金属。此外，关于 Z_2 规范场下对称性投影表示导致的新奇拓扑物态的基本想法和简单模型最近在声学晶体中得到实验验证^[5, 6]，并被美国物理学会 *Physics* 杂志选为 *viewpoint* 介绍^[7]。

对称性与拓扑是推动现代物理学发展的两个核心概念。晶体对称性表示理论与建立在其上的拓扑能带理论充分体现了这两个基本概念的相互交融。我们的工作进一步揭示了规范场的引入会极大地丰富晶体对称性的代数结构，得到超越传

统能带理论的结果，并能够产生更加丰富多彩的拓扑物态。我们提出的布里渊克莱因瓶^[1]以及系列工作^[2-4]给出了一些有趣的例子，从这些例子可以看出规范场拓展的对称性代数打开了一扇通往崭新物理世界的大门，在那里还有更多奇妙的结构和现象需要研究，有更广泛的理论框架等待搭建。

参考文献

- [1] Chen Z Y, Yang S A, Zhao Y X. *Nat. Comm.*, 2022, 13: 2215
- [2] Zhao Y X, Chen C, Sheng X L *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2021, 126: 196402
- [3] Shao L B, Liu Q, Xiao R *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2021, 127: 076401
- [4] Zhao Y X, Huang Y X, Yang S A. *Phys. Rev. B*, 2020, 102: 161117
- [5] Xue H R, Wang Z H, Huang Y X *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2022, 128: 116802;
- [6] Li T Z, Zhang Q C, Li Y T *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2022, 128: 116803
- [7] Deng Y C, Jing Y. *Acoustic Crystals with a Möbius Twist*, <https://physics.aps.org/articles/v15/36>



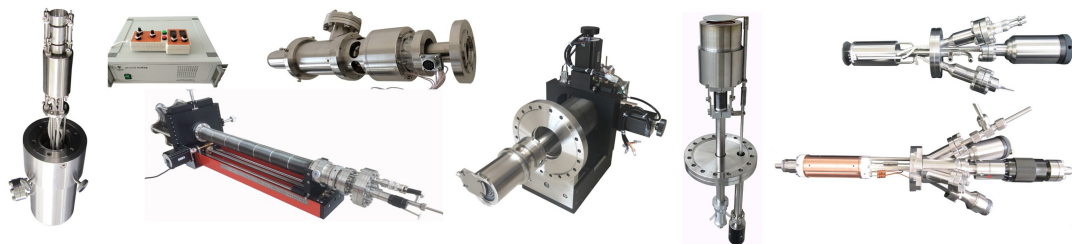
大连齐维科技发展有限公司

地址: 大连高新园区龙头工业园龙天路27号

电话: 0411-8628-6788 传真: 0411-8628-5677

E-mail: info@chi-vac.com HP: <http://www.chi-vac.com>

表面处理和薄膜生长产品: 氩离子枪、RHEED、磁控溅射靶、束源炉、电子轰击蒸发源、样品台。



超高真空腔室和薄膜生长设备: PLD系统、磁控溅射系统、分子束外延系统、热蒸发镀膜装置。

