

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PADOVA

Dipartimento di Fisica e Astronomia “Galileo Galilei”

Corso di Laurea in Fisica

Tesi di Laurea

UN ORDINE TOPOLOGICO  $Z_2$  IN ISOLANTI  
INVARIANTI PER INVERSIONE TEMPORALE

Relatore

Prof. Pieralberto Marchetti

Laureando

Tommaso Masiero

Anno Accademico 2022/2023

## Abstract

Nella tesi si discutono isolanti topologici invarianti per inversione temporale. In alcuni di questi materiali, l'imposizione di tale vincolo di simmetria impedisce l'esistenza di autovettori della Hamiltoniana di Bloch definiti globalmente sulla banda. Questo fenomeno dà luogo alla comparsa di un ordine topologico  $Z_2$  caratterizzato fisicamente, in due dimensioni, dalla presenza sul bordo di tali materiali di modi gapless chirali, che producono un effetto Hall quantistico di spin.

# Indice

<b>Introduzione</b>	<b>4</b>
<b>1 Il fibrato di Bloch</b>	<b>5</b>
<b>2 Simmetria time-reversal</b>	<b>7</b>
2.1 Operatore di inversione temporale . . . . .	7
2.2 Simmetria per inversione temporale nelle bande di Bloch . . . . .	8
2.3 Le coppie di Kramer . . . . .	8
<b>3 Invarianti topologici <math>\mathbb{Z}_2</math></b>	<b>10</b>
3.1 Polarizzazione di carica e numero di Chern . . . . .	10
3.2 Polarizzazione time-reversal per bande con degenerazione di Kramer . . . . .	12
3.3 FKM come un'ostruzione al teorema di Stokes . . . . .	16
3.4 Invarianti $\mathbb{Z}_2$ con simmetria per inversione . . . . .	18
<b>4 Interpretazione geometrica degli invarianti <math>\mathbb{Z}_2</math></b>	<b>21</b>
4.1 Zona di Brillouin effettiva, vertici e bordi . . . . .	22
4.2 Costruzione di un Bloch frame simmetrico nel caso d=2 . . . . .	24
4.3 Costruzione di un Bloch frame simmetrico nel caso d=3 . . . . .	27
<b>5 Struttura a bande caratterizzata dagli invarianti <math>\mathbb{Z}_2</math> e stati di bordo</b>	<b>29</b>
<b>Conclusioni</b>	<b>34</b>

# Introduzione

Un isolante topologico è un cristallo in cui le bande di valenza hanno delle proprietà topologiche non usuali, contraddistinte da una quantità che non dipende dalla struttura del sistema, e questa quantità è detta caratterizzare un ordine topologico. Questo dona al materiale delle caratteristiche uniche, infatti la conseguenza di un ordine topologico non banale è la presenza di stati conduttivi topologicamente protetti sui bordi, legati all'effetto Hall quantistico. Gli isolanti topologici possono essere divisi in due categorie: gli isolanti di Chern che sono legati all'effetto Hall quantistico anomalo e gli isolanti  $\mathbb{Z}_2$ , legati all'effetto Hall quantistico di spin (QSHE).

Qui ci concentreremo sugli isolanti  $\mathbb{Z}_2$ , scoperti da Kane e Mele nel 2005 [7], in cui l'ordine topologico caratterizza le bande elettroniche vincolate alla simmetria per inversione temporale (time-reversal). Nel 2007, il gruppo di L. Molenkamp è riuscito per la prima volta a realizzare sperimentalmente uno stato con il QSHE utilizzando dei cristalli di HgTe. Lo stesso anno, l'ordine topologico di Kane-Mele è stato esteso anche a sistemi tridimensionali [4], a differenza di quanto accade per gli isolanti di Chern che esistono solo in due dimensioni.

In generale, esistono diverse formulazioni per gli invarianti  $\mathbb{Z}_2$ . La prima espressione trovata da Kane e Mele è l'invariante Pfaffiano, successivamente Fu e Kane introdussero l'invariante della matrice di sewing [3], per poi estenderlo in tre dimensioni. L'invariante di ostruzione è stato formulato da Roy e da Fu e Kane [2] dando importanza alla somiglianza con il numero di Chern, ed un simile approccio è stato utilizzato da Moore e Balents per comprendere la topologia  $\mathbb{Z}_2$  in tre dimensioni.

In questa tesi ricaveremo gli indici topologici  $\mathbb{Z}_2$  per sistemi bidimensionali e tridimensionali trovati da L. Fu, C. L. Kane e J. Mele, e ne daremo delle interpretazioni geometriche. Questi indici, infatti, possono essere visti come un'ostruzione alla definizione di autostati di Bloch continui su tutta la zona di Brillouin o, più in generale, alla definizione di un Bloch frame simmetrico, continuo e globale [12].

# Il fibrato di Bloch

In seguito faremo più volte riferimento al cosiddetto fibrato di Bloch, cioè un fibrato vettoriale definito nella prima zona di Brillouin e con fibre gli spazi di Hilbert  $\mathcal{H}_k$ , ove  $k$  denota il quasi-momento <sup>1</sup> nella zona di Brillouin, perciò, prima di procedere, diamo un po' di definizioni.

**Definizione 1.** *Un fibrato differenziabile è costituito dai seguenti elementi:*

- (i) *Una varietà differenziabile  $E$  chiamata spazio totale.*
- (ii) *Una varietà differenziabile  $M$  chiamata base.*
- (iii) *Una varietà differenziabile  $F$  chiamata fibra.*
- (iv) *Una suriezione  $\pi : E \rightarrow M$  detta proiezione.*
- (v) *Un gruppo di Lie  $G$  che agisce su  $F$ .*
- (vi) *Un ricoprimento aperto  $\{U_i\}$  di  $M$  con un insieme di diffeomorfismi  $\{\Phi_i : U_i \times F \rightarrow \pi^{-1}(U_i)\}$  tali che  $\pi\Phi_i(p, f) = p \forall p \in U_i, f \in F$ . La mappa  $\Phi_i$  è detta trivializzazione locale poichè  $\Phi_i^{-1}$  mappa  $\pi^{-1}(U_i)$  sul prodotto  $U_i \times F$ .*
- (vii) *Se scriviamo  $\Phi_i(p, f) = \Phi_{i,p}(f)$ , la mappa  $\Phi_{i,p} : F \rightarrow F_p$  è un diffeomorfismo  $\forall p \in U_i$ . Inoltre chiediamo che  $\forall i, j$  tali che  $U_i \cap U_j \neq \emptyset$ , la mappa  $t_{ij}(p) = \Phi_{i,p}^{-1}\Phi_{j,p} : F \rightarrow F$  sia un elemento di  $G$ . Allora,  $\Phi_i$  e  $\Phi_j$  sono collegati da una mappa liscia  $t_{ij} : U_i \cap U_j \rightarrow G$  tale che:*

$$\Phi_j(p, f) = \Phi_i(p, t_{ij}(p)f).$$

*Le mappe  $\{t_{ij}\}$  sono chiamate funzioni di transizione.*

Un fibrato vettoriale  $E \rightarrow M$  è semplicemente un fibrato la cui fibra  $F$  è uno spazio vettoriale. Tale fibrato si dice banale se la fibra  $F$  è diffeomorfa a  $\mathbb{C}^n$ ,  $F \cong \mathbb{C}^n$ , ed in tal caso si dice che il fibrato vettoriale è di rango  $n$  [9].

Consideriamo un cristallo  $d$ -dimensionale, gli atomi si disporranno in un reticolo cristallino che può essere descritto dalla riproduzione nello spazio di un elemento di volume rappresentativo, detto cella unitaria. La periodicità del reticolo fa sì che l'Hamiltoniana  $H$  del sistema sia a sua volta periodica e questo si riflette sulla natura dei suoi autostati  $|\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$ ,  $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^d$ . <sup>2</sup> La zona di Brillouin ha la topologia di un toro  $d$ -dimensionale  $\mathbb{T}^d$  che chiamiamo toro di Brillouin (*BT*).

Se consideriamo una Hamiltoniana periodica  $H$ , le bande sono caratterizzate dalle funzioni d'onda di Bloch  $|\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$ , dove  $|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$  sono autostati dell'Hamiltoniana di Bloch associata ad  $H$ :

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

<sup>1</sup>Talvolta verrà semplicemente detto momento.

<sup>2</sup>Gli  $|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$  sono autostati di Bloch indicizzati da un momento  $\mathbf{k}$  ristretto alla prima zona di Brillouin (*BZ*).

Per ogni  $\mathbf{k} \in BT$ , l'Hamiltoniana di Bloch  $H(\mathbf{k})$  è un operatore hermitiano che agisce sullo spazio di Hilbert  $\mathcal{H}_k \cong \mathbb{C}^{2n}$  associato a  $\mathbf{k}$  (dove  $2n$  sono i gradi di libertà degli elettroni in una cella unitaria). L'insieme di questi spazi  $\mathcal{H}_k$  forma un fibrato vettoriale, detto fibrato di Bloch, sullo spazio di base  $\mathbb{T}^d$  che sotto opportune condizioni risulta essere banale, ovvero  $\bigcup_{\mathbf{k} \in BZ} \{\mathbf{k}\} \times \mathcal{H}_k \cong \mathbb{T}^d \times \mathbb{C}^{2n}$ . In un isolante ci sono due sottofibrati ben definiti: il fibrato della banda di valenza ed il fibrato della banda di conduzione. In un isolante topologico questi sottofibrati possiedono delle topologie non banali pur essendo, il fibrato totale, banale.

# Simmetria time-reversal

## 2.1 Operatore di inversione temporale

Una simmetria discreta importante per i sistemi fisici è l'inversione temporale (detta anche time-reversal), ovvero una trasformazione che inverte la freccia del tempo:

$$T : t \mapsto -t.$$

Quantità come la posizione spaziale, l'energia o il campo elettrico sono pari per inversione temporale; mentre quantità come l'impulso, il momento angolare o il campo magnetico sono dispari per inversione temporale. A questa trasformazione assoceremo un operatore antiunitario  $\Theta$ , che agisce su uno spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$ , e diremo che essa è una simmetria (dinamica) del sistema se commuta con l'Hamiltoniana  $H$ :

$$[H, \Theta] = 0.$$

Questo significa che, se  $|\psi\rangle$  è un autostato di  $H$ , allora lo è anche  $\Theta|\psi\rangle$ ; in particolare per particelle con spin intero questi due autostati coincidono:  $\Theta|\psi\rangle = |\psi\rangle$ .

In generale, l'operatore di inversione temporale si può scrivere come la combinazione di due operatori:

$$\Theta = UK,$$

dove  $U$  è un operatore unitario e  $K$  è l'operatore di coniugazione complessa tale che  $K\alpha = \alpha^*$ ,  $\forall \alpha \in \mathbb{C}^m$ . Abbiamo quindi che:

$$\Theta^2 = UKUK = UU^* = U(U^T)^{-1} = \Phi,$$

dove  $\Phi$  sarà una matrice diagonale di fase. Allora vale che <sup>1</sup>:

$$U = \Phi U^T, \quad U^T = U\Phi,$$

e quindi

$$U = \Phi U^T = \Phi U\Phi.$$

Questo è possibile solo se  $\Phi = \pm \mathbb{1}$  e quindi se  $\Theta^2 = \pm \mathbb{1}$ .

Lo spin è un momento angolare intrinseco della particella perciò dovrà essere dispari per inversione temporale:

$$\Theta \mathbf{S} \Theta^{-1} = -\mathbf{S}.$$

Per convenzione, si sceglie di rappresentare l'operatore di inversione temporale come una rotazione di un angolo  $\pi$  attorno all'asse  $y$  nello spazio dello spin:

$$\Theta = e^{-i\pi S_y} K,$$

---

<sup>1</sup>Sfruttando il fatto che la trasposta di una matrice diagonale è la matrice stessa ( $\Phi^T = \Phi$ ), abbiamo che:  $U^T = (\Phi U^T)^T = U\Phi^T = U\Phi$ .

e quindi

$$\Theta^2 = e^{-i\pi S_y} K e^{-i\pi S_y} K = e^{-i2\pi S_y}.$$

Da questo risultato deduciamo che per particelle con spin intero:  $\Phi = \mathbb{1}$ ; mentre per particelle con spin semintero:  $\Phi = -\mathbb{1}$ .

## 2.2 Simmetria per inversione temporale nelle bande di Bloch

Consideriamo la struttura a bande in un cristallo 2-dimensionale e, essendo gli elettroni dei fermioni con spin  $s = 1/2$ , concentriamoci sul caso specifico di particelle con spin semintero. Sia  $H(\mathbf{k})$ , con  $\mathbf{k} \in BT$ , l'Hamiltoniana di Bloch del sistema definita sul toro di Brillouin allora, se il sistema è invariante per inversione temporale ( $[H, \Theta] = 0$ ),  $H(\mathbf{k})$  trasforma come segue:

$$\Theta H(\mathbf{k}) \Theta^{-1} = H(-\mathbf{k}).$$

Questo significa che un'operazione di inversione temporale manda una fibra a  $\mathbf{k}$  in una fibra a  $-\mathbf{k}$  e quindi, una volta definita la mappa

$$\begin{aligned} \theta : \mathbb{T}^2 &\rightarrow \mathbb{T}^2 \\ \mathbf{k} &\mapsto \theta\mathbf{k} = -\mathbf{k} \end{aligned}$$

che mette in relazione i momenti, l'operatore  $\Theta$  può essere visto come un'estensione di questa mappa su tutto il fibrato:

$$\begin{aligned} \mathbb{T}^2 \times \mathbb{C}^{2n} &\rightarrow \mathbb{T}^2 \times \mathbb{C}^{2n} \\ (\mathbf{k}, \psi) &\mapsto (\theta\mathbf{k}, \Theta\psi) = (-\mathbf{k}, \Theta\psi) \end{aligned}$$

Notiamo allora che, se descriviamo un sistema time-reversal invariante considerando tutta la zona di Brillouin, c'è ridondanza. Questa ridondanza può essere eliminata considerando una zona di Brillouin effettiva (*EBZ*), che è semplicemente una metà del toro di Brillouin definita prendendo un solo autostato a scelta in una delle due fibre. E' immediato osservare che *EBZ* ha la topologia di un cilindro.

## 2.3 Le coppie di Kramer

In sistemi invarianti per inversione temporale, la proprietà  $\Theta^2 = -\mathbb{1}$  fa sì che lo spettro in energia di un sistema con spin totale semintero sia affetto da degenerazione. Questa degenerazione è dovuta al fatto che l'Hamiltoniana  $H$  commuta con l'operatore time-reversal  $\Theta$  e quindi i due operatori hanno degli autostati comuni che, grazie alla proprietà:  $\Theta^2 = -\mathbb{1}$ , sono ortogonali tra loro. Questo risultato è contenuto nel teorema di Kramer.

**Teorema** (di Kramer). *Sia  $H$  un operatore hamiltoniano che agisce su uno spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$ , associato ad un sistema con spin semintero ed invariante sotto inversione temporale. Sia  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  un autovettore di  $H$  con autovalore  $E$ , allora  $\Theta|\psi\rangle$  è anch'esso un autovettore di  $H$  con autovalore  $E$ .*

*In particolare  $|\psi\rangle$  e  $\Theta|\psi\rangle$  sono ortogonali:*

$$\langle \psi | \Theta\psi \rangle = \langle \Theta\psi | \psi \rangle = 0.$$

*Dimostrazione.* Dato un autostato  $|\psi\rangle$  di  $H$  tale che  $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ , è immediato verificare che  $\Theta|\psi\rangle$  è autostato di  $H$  con autovalore  $E$ , infatti il fatto che  $[H, \Theta] = 0$  implica che  $H\Theta = \Theta H$  e quindi:

$$H\Theta|\psi\rangle = \Theta H|\psi\rangle = \Theta E|\psi\rangle = E\Theta|\psi\rangle,$$



sfruttando, nell'ultimo passaggio, il fatto che  $E$  è reale.

Sappiamo poi che  $\Theta^2 = -\mathbb{1}$  perchè lo spin è semintero e che  $\langle \Theta\Phi | \Theta\psi \rangle = \langle \psi | \Phi \rangle \quad \forall |\psi\rangle, |\Phi\rangle \in \mathcal{H}$  per definizione di operatore antiunitario, quindi:

$$-\langle \psi | \Theta\psi \rangle = \langle \Theta^2\psi | \Theta\psi \rangle = \langle \psi | \Theta\psi \rangle$$

e questo è possibile  $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$  se e solo se  $\langle \psi | \Theta\psi \rangle = 0$ .

□

Grazie a questo teorema sappiamo che l'immagine attraverso  $\Theta$  di un autostato dell'Hamiltoniana di Bloch  $H(\mathbf{k})$  è autostato dell'Hamiltoniana di Bloch  $H(-\mathbf{k})$  con la stessa energia.<sup>2</sup> La coppia  $(|\psi\rangle, \Theta|\psi\rangle)$  formata da questi due autostati che appartengono a fibre diverse,  $\mathcal{H}_k$  e  $\mathcal{H}_{-k}$ , è detta coppia di Kramer.

Alla luce dell'azione dell'operatore di inversione temporale sul fibrato di Bloch, alcuni punti del toro di Brillouin risultano di particolare interesse: stiamo parlando dei cosiddetti momenti time-reversal invarianti.

**Definizione 2.** *Un momento time-reversal invariante (TRIM) è un punto nel toro di Brillouin  $\Gamma \in BT$  tale che  $\Theta\Gamma = \Gamma$ . In particolare, vale che  $\Gamma = -\Gamma + \mathbf{G}$ , dove  $\mathbf{G}$  è un vettore del reticolo reciproco.*

In corrispondenza di un TRIM, i due autostati della coppia di Kramer vivono nella stessa fibra. Poiché essi sono ortogonali ed elementi dello stesso autospazio, lo spettro dell'energia è necessariamente degenerare in questi punti.

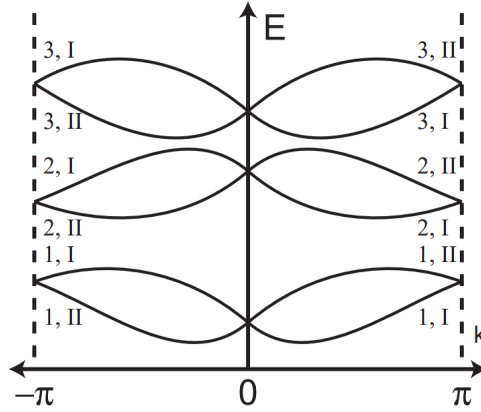


Figura 2.1: Rappresentazione schematica di una struttura a bande per un sistema 1-dimensionale time-reversal simmetrico con interazioni spin orbita.

<sup>2</sup> $H(-\mathbf{k})\Theta|\psi\rangle = \Theta H(\mathbf{k})\Theta^{-1}\Theta|\psi\rangle = \Theta H(\mathbf{k})|\psi\rangle = E\Theta|\psi\rangle$

# Invarianti topologici $\mathbb{Z}_2$

Consideriamo una Hamiltoniana continua che dipende esplicitamente ed in modo periodico dal tempo:

$$(i) \quad H(t + T) = H(t) \quad \forall t,$$

$$(ii) \quad H(-t) = \Theta H(t) \Theta^{-1}.$$

Negli isolanti in cui c'è una rottura della simmetria time-reversal, la polarizzazione di carica assume un ruolo fondamentale nella caratterizzazione delle proprietà elettriche del materiale, in quanto essa può determinare la presenza di cariche di superficie. In questa sezione introdurremo il concetto di polarizzazione time-reversal sulla falsa riga della polarizzazione di carica, ed in particolare considereremo il ruolo della degenerazione di Kramer in sistemi time-reversal invarianti.

## 3.1 Polarizzazione di carica e numero di Chern

Per un sistema reticolare 1-dimensionale formato da  $N_c = L$  celle, con parametro di cella unitario  $a = 1$  e con  $2N$  bande occupate, gli autostati di  $H$  si possono scrivere in funzione degli autostati di Bloch:

$$|\psi_{n,k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} |u_{n,k}\rangle.$$

Definiamo la funzione di Wannier <sup>1</sup> nella banda  $n$  ed associata al vettore  $R$  del reticolo reciproco

$$|R, n\rangle = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{-ik(R-r)} |u_{n,k}\rangle.$$

Osserviamo però che, così definite, le funzioni di Wannier non sono autostati dell'Hamiltoniana e in più dipendono dalla scelta della gauge che, oltre a introdurre un fattore di fase, può mescolare gli stati attraverso una trasformazione  $U(2N)$  della forma:

$$|u_{n,k}\rangle \rightarrow \sum_{m=1}^{2N} U_{nm}(k) |u_{m,k}\rangle, \quad (3.1)$$

ma nonostante ciò l'autofunzione totale del sistema, che si può scrivere utilizzando il determinante di Slater degli stati occupati, risulta invariante per trasformazioni di gauge.

La polarizzazione è data dalla somma su tutte le bande del centro di carica degli stati di Wannier:

$$P_\rho = \sum_n \langle 0, n | r | 0, n \rangle,$$

---

<sup>1</sup>Le funzioni di Wannier sono definite tramite una trasformazione unitaria delle funzioni di Bloch, quindi costituiscono una rappresentazione alternativa del sistema quantistico

che esplicitamente si può scrivere <sup>2</sup>

$$\begin{aligned}
P_\rho &= \sum_n \langle 0, n | r | 0, n \rangle \\
&= \sum_n \int dr dk_1 dk_2 \langle 0, n | k_1 \rangle \langle k_1 | r \rangle \langle r | k_2 \rangle \langle k_2 | 0, n \rangle \\
&= \sum_n \frac{1}{4\pi^2} \int dr dk_1 dk_2 e^{i(k_2 - k_1)r} u_{n,k_1}^* i \nabla_{k_2} u_{n,k_2} \\
&= \sum_n \frac{1}{2\pi} \int dk_1 dk_2 \delta(k_2 - k_1) u_{n,k_1}^* i \nabla_{k_2} u_{n,k_2} \\
&= \sum_n \frac{i}{2\pi} \int_{BZ} dk \langle u_{n,k} | \nabla_k | u_{n,k} \rangle.
\end{aligned}$$

A questo punto possiamo riconoscere la connessione di Berry

$$\mathcal{A}(k) = i \sum_n \langle u_{n,k} | \nabla_k | u_{n,k} \rangle$$

e scrivere quindi la polarizzazione di carica in termini dell'integrale di  $\mathcal{A}(k)$  sulla zona di Brillouin:

$$P_\rho = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk \mathcal{A}(k). \quad (3.2)$$

La continuità delle autofunzioni sul reticolo reciproco implica che  $|\psi_{n,-\pi}\rangle = |\psi_{n,\pi}\rangle$ , allora l'integrale può essere considerato su una curva chiusa  $\gamma : BZ \rightarrow \mathbb{S}^1$  tale che  $\gamma(k) = k \quad \forall k \in (-\pi, \pi)$  e  $\gamma(\pi) = \gamma(-\pi) = \pi$ :

$$P_\rho = \frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma} dk \mathcal{A}(k),$$

perché  $\mathcal{A}(-\pi) = \mathcal{A}(\pi)$ .

La polarizzazione di carica non è una quantità gauge invariante infatti, per una trasformazione di gauge  $|u_{n,k}\rangle \rightarrow e^{i\phi} |u_{n,k}\rangle$  in cui la fase  $\phi$  avanza di  $2\pi m$  con un giro su  $\gamma$ , essa avanza di una quantità  $m$  ( $P_\rho \rightarrow P_\rho + m$ ) ma, nonostante ciò, la variazione di  $P_\rho$  indotta da una deformazione continua dell'Hamiltoniana è ben definita.

Consideriamo un'Hamiltoniana che dipende in modo diretto anche dalla variabile temporale  $t$  allora, se assumiamo che gli autostati di Bloch  $|u_{n,k}(t)\rangle$  siano continui sia nella zona di Brillouin che per ogni  $t \in [t_1, t_2]$ , possiamo scrivere:

$$P_\rho(t_2) - P_\rho(t_1) = \frac{1}{2\pi} \left[ \oint_{\gamma_2} dk \mathcal{A}(t, k) - \oint_{\gamma_1} dk \mathcal{A}(t, k) \right],$$

dove  $\gamma_j$  è la curva chiusa a  $t = t_j$  fissato. Se definiamo la curvatura di Berry

$$\mathcal{F}(t, k) = i \sum_n \langle \nabla_t u_{n,k}(t) | \nabla_k u_{n,k}(t) \rangle$$

ed utilizziamo il teorema di Stokes, possiamo riscrivere questa quantità in termini di un integrale sulla superficie  $\tau_{12}$  con bordo le curve  $\gamma_1$  e  $\gamma_2$ :

$$P_\rho(t_2) - P_\rho(t_1) = \frac{1}{2\pi} \int_{\tau_{12}} dt dk \mathcal{F}(t, k).$$

---

<sup>2</sup>Sfruttando le completezze:  $\int dx |x\rangle \langle x| = \mathbb{1}$  e  $\int dk |k\rangle \langle k| = \mathbb{1}$ .

La periodicità dell'Hamiltoniana, ovvero il fatto che  $H(t+T) = H(t)$ , fa sì che  $P_\rho(T) - P_\rho(0)$  possa essere scritto in termini di un integrale su un toro  $\mathbb{T}^2$ :

$$C = P_\rho(T) - P_\rho(0) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{T}^2} dt dk \mathcal{F}(t, k).$$

In questo modo siamo riusciti a trovare una quantità  $C$  che rappresenta una proprietà topologica del sistema, ovvero la possibilità di definire degli autostati di Bloch continui su tutto il toro di Brillouin e, al tempo stesso, gauge invariante. Abbiamo trovato quindi l'invariante topologico, detto numero di Chern, che caratterizza i cosiddetti isolanti di Chern. Questa quantità è un numero intero che per un sistema invariante per inversione temporale è necessariamente nullo perché  $\mathcal{F}(-t, -k) = -\mathcal{F}(t, k)$  e quindi l'integrale su tutta la zona di Brillouin va a zero.<sup>3</sup>

### 3.2 Polarizzazione time-reversal per bande con degenerazione di Kramer

Un sistema time-reversal invariante con spin totale  $s = 1/2$  può essere studiato considerando solo la zona di Brillouin effettiva  $EBZ$  e, per il teorema di Kramer, la struttura a bande è affetta da degenerazione. Questa degenerazione viene eliminata dall'interazione spin orbita su tutti i punti del toro di Brillouin, esclusi i TRIM  $k = 0, \pi$ . Il teorema di Kramer garantisce inoltre che i due stati di Wannier, ognuno definito per un autostato della coppia di Kramer, hanno lo stesso centro e questo ci suggerisce l'idea di definire due polarizzazioni parziali e confrontarle tra loro. Per semplicità, assumiamo che non ci sia degenerazione oltre a quella imposta dalla simmetria di inversione temporale e consideriamo il caso unidimensionale. I  $2N$  autostati possono essere divisi in  $N$  coppie di Kramer:

$$(1) |u_{\alpha, -k}^I\rangle = e^{i\chi_{k, \alpha}} \Theta |u_{\alpha, k}^{II}\rangle;$$

$$(2) |u_{\alpha, -k}^{II}\rangle = -e^{i\chi_{-k, \alpha}} \Theta |u_{\alpha, k}^I\rangle;$$

dove  $\alpha = 1, \dots, N$ ; e l'operatore time-reversal  $\Theta$  trasforma, a meno di un fattore di fase  $\chi_k$ , gli autostati con momento  $k$  delle bande I negli autostati con momento  $-k$  delle bande II e viceversa.<sup>4</sup> Definiamo, in analogia con quanto fatto per la polarizzazione di carica, la polarizzazione parziale:

$$P^s = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk \mathcal{A}^s(k),$$

<sup>3</sup>Senza perdita di generalità, consideriamo il caso 2-dimensionale. Sia  $A$  una connessione di Berry, che in generale è definita come la 1-forma:  $A = \mathcal{A}_i(k_1, k_2) dk^i$  con coefficienti  $\mathcal{A}_i = i \sum_n \langle u_{n, \mathbf{k}} | \partial_i | u_{n, \mathbf{k}} \rangle$ . La curvatura di Berry è definita come il differenziale esterno della connessione di Berry:

$$F = \mathcal{F}(k_1, k_2)_{ij} dk^i \wedge dk^j$$

$$= \partial_i \mathcal{A}_j dk^i \wedge dk^j,$$

quindi i suoi coefficienti  $\mathcal{F}_{ij}(\mathbf{k}) = i \sum_n \langle \partial_i u_{n, \mathbf{k}} | \partial_j u_{n, \mathbf{k}} \rangle$  sono antisimmetrici. Allora si ha che:

$$\mathcal{F}_{ij}(-\mathbf{k}) = i \int d^2 \mathbf{r} \partial_i u_{n, -\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \partial_j u_{n, -\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

e se imponiamo l'invarianza time-reversal dal fatto che  $u_{n, -\mathbf{k}} = \Theta u_{n, \mathbf{k}} = u_{n, \mathbf{k}}^*$  è immediato verificare che  $\mathcal{F}_{ij}(-\mathbf{k}) = \mathcal{F}_{ji}(\mathbf{k}) = -\mathcal{F}_{ij}(\mathbf{k})$ .

<sup>4</sup>Una volta definito l'autostato  $|u_{\alpha, -k}^I\rangle = e^{i\chi_{\alpha, k}} \Theta |u_{\alpha, k}^{II}\rangle$ , dall'immagine di  $\Theta$  otteniamo la seconda relazione (2):

$$\Theta |u_{\alpha, -k}^I\rangle = \Theta e^{i\chi_{\alpha, k}} \Theta |u_{\alpha, k}^{II}\rangle = e^{-i\chi_{\alpha, k}} \Theta^2 |u_{\alpha, k}^{II}\rangle = -e^{-i\chi_{\alpha, k}} |u_{\alpha, k}^{II}\rangle$$

ricordando che  $\Theta^2 = -\mathbb{1}$  per sistemi con spin semintero.

dove

$$\mathcal{A}^s(k) = i \sum_{\alpha=1}^N \langle u_{\alpha,k}^s | \nabla_k | u_{\alpha,k}^s \rangle,$$

e con  $s = I$  oppure  $II$ .

Mostriamo ora che la polarizzazione parziale è invariante sotto una trasformazione  $U(2N)$  del tipo:

$$|u_{\alpha,k}^s\rangle \rightarrow \sum_{\beta} U_{\alpha\beta}(k) |u_{\beta,k}^s\rangle.$$

Prima di tutto, separiamo l'integrale sulla zona di Brillouin in due integrali su metà di essa:

$$P^I = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi dk [\mathcal{A}^I(k) + \mathcal{A}^I(-k)],$$

ed osserviamo che

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^I(-k) &= -i \sum_{\alpha} \langle u_{\alpha,-k}^I | \nabla_k | u_{\alpha,-k}^I \rangle \\ &= -i \sum_{\alpha} \langle \Theta u_{\alpha,k}^{II} | \nabla_k | \Theta u_{\alpha,k}^{II} \rangle + \sum_{\alpha} \nabla_k \chi_{k,\alpha} \langle \Theta u_{\alpha,k}^{II} | \Theta u_{\alpha,k}^{II} \rangle \\ &= i \sum_{\alpha} \langle u_{\alpha,k}^{II} | \nabla_k | u_{\alpha,k}^{II} \rangle + \sum_{\alpha} \nabla_k \chi_{k,\alpha} \\ &= \mathcal{A}^{II}(k) + \sum_{\alpha} \nabla_k \chi_{k,\alpha}, \end{aligned}$$

utilizzando il fatto che  $\langle \Theta u_{\alpha,k}^{II} | \Theta u_{\alpha,k}^{II} \rangle = 1$ <sup>5</sup> e  $\langle \Theta u_{\alpha,k}^{II} | \nabla_k | \Theta u_{\alpha,k}^{II} \rangle = -\langle u_{\alpha,k}^{II} | \nabla_k | u_{\alpha,k}^{II} \rangle$ <sup>6</sup>.

Quindi, sostituendo:

$$\begin{aligned} P^I &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi dk [\mathcal{A}^I(k) + \mathcal{A}^{II}(k) + \sum_{\alpha} \nabla_k \chi_{k,\alpha}] \\ &= \frac{1}{2\pi} \left[ \int_0^\pi dk \mathcal{A}(k) + \sum_{\alpha} (\chi_{\pi,\alpha} - \chi_{0,\alpha}) \right], \end{aligned}$$

compare la connessione di Berry totale  $\mathcal{A}(k) = \mathcal{A}^I(k) + \mathcal{A}^{II}(k)$ .

Introduciamo una matrice  $U(2N)$ , detta matrice di sewing:

$$w_{mn}(k) = \langle u_{m,-k} | \Theta | u_{n,k} \rangle,$$

che per un sistema time-reversal invariante è una matrice  $2N \times 2N$ , a blocchi e tale che:

1.  $w_{mn}^{(I,II)}(k) = \langle u_{m,-k}^I | \Theta | u_{n,k}^{II} \rangle = \delta_{mn} e^{-i\chi_{k,n}}$ ;
2.  $w_{mn}^{(I,II)}(k) = -w_{mn}^{(II,I)}(-k)$ ;
3.  $w_{mn}^{(I,I)}(k) = w_{mn}^{(II,II)}(k) = 0 \quad \forall m, n = 1, \dots, N$ .

<sup>5</sup>  $\langle \Theta u_{\alpha,k}^{II} | \Theta u_{\alpha,k}^{II} \rangle = \langle \Theta u_{\alpha,k}^{II} | e^{-i\chi_{k,\alpha}} e^{i\chi_{k,\alpha}} | \Theta u_{\alpha,k}^{II} \rangle = \langle u_{\alpha,-k}^I | u_{\alpha,-k}^I \rangle = 1$ .

<sup>6</sup> Scrivendo  $\Theta = UK$  come la combinazione dell'operatore di coniugazione complessa e un operatore unitario  $U$  si ha:

$$\begin{aligned} \langle \Theta u_{\alpha,k}^{II} | \nabla_k | \Theta u_{\alpha,k}^{II} \rangle &= (U_{mn} (u_{\alpha,k}^{II*})_n)^* \nabla_k U_{mj} (u_{\alpha,k}^{II*})_j = (U^\dagger)_{nm} U_{mj} (u_{\alpha,k}^{II})_n \nabla_k (u_{\alpha,k}^{II*})_j = (u_{\alpha,k}^{II})_n \nabla_k (u_{\alpha,k}^{II*})_n \\ &= -(u_{\alpha,k}^{II*})_n \nabla_k (u_{\alpha,k}^{II})_n = -\langle u_{\alpha,k}^{II} | \nabla_k | u_{\alpha,k}^{II} \rangle. \end{aligned}$$

Per esempio, nel caso in cui  $N = 2$ ,  $w$  è una matrice  $4 \times 4$ :

$$w^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & -e^{-i\chi_{-k,1}} & 0 & 0 \\ e^{-i\chi_{k,1}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -e^{-i\chi_{-k,2}} \\ 0 & 0 & e^{-i\chi_{k,2}} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

L'ipotesi di continuità degli autostati di Bloch sul reticolo reciproco implica che  $w_{mn}(\tilde{k}) = -w_{nm}(\tilde{k})$ , quindi  $w(\tilde{k})$  è una matrice antisimmetrica per  $\tilde{k} = 0, \pi$ .

Il determinante della matrice di sewing (3.3), nel caso  $N=2$ , risulta essere:  $\text{Det}[w^{(2)}(\tilde{k})] = e^{-2i(\chi_{\tilde{k},1} + \chi_{\tilde{k},2})}$ , quindi possiamo scrivere:

$$\frac{\text{Pf}[w^{(2)}(\pi)]}{\text{Pf}[w^{(2)}(0)]} := \sqrt{\frac{\text{Det}[w^{(2)}(\pi)]}{\text{Det}[w^{(2)}(0)]}} = e^{-i \sum_{\alpha=1}^2 (\chi_{\pi,\alpha} - \chi_{0,\alpha})}$$

introducendo l'operatore Pfaffiano, cioè la radice quadrata del determinante di una matrice antisimmetrica.

Estendendo questa scrittura al caso generale, possiamo riscrivere il secondo termine che compare nel calcolo della polarizzazione parziale in termini dello Pfaffiano di  $w$ :

$$P^I = \frac{1}{2\pi} \left[ \int_0^\pi dk \mathcal{A}(k) + i \log \left( \frac{\text{Pf}[w(\pi)]}{\text{Pf}[w(0)]} \right) \right]. \quad (3.4)$$

Per  $P^{II}$  si ottiene una cosa simile:

$$P^{II} = \frac{1}{2\pi} \left[ \int_0^\pi dk \mathcal{A}(k) + i \log \left( \frac{\text{Pf}[w(-\pi)]}{\text{Pf}[w(0)]} \right) \right]$$

e, se sommiamo la polarizzazione parziale delle bande I e II, otteniamo la polarizzazione di carica totale:

$$P_\rho = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^\pi dk \mathcal{A}(k) = P^I + P^{II}.$$

Definiamo allora la polarizzazione time-reversal come la differenza tra le due polarizzazioni parziali:

$$\begin{aligned} P_\theta &= P^I - P^{II} \\ &= 2P^I - P_\rho \\ &= \frac{1}{2\pi} \left[ 2 \int_0^\pi dk \mathcal{A}(k) + 2i \log \left( \frac{\text{Pf}[w(\pi)]}{\text{Pf}[w(0)]} \right) - \int_{-\pi}^\pi dk \mathcal{A}(k) \right] \\ &= \frac{1}{2\pi} \left[ \int_0^\pi dk \mathcal{A}(k) - \int_{-\pi}^0 dk \mathcal{A}(k) + 2i \log \left( \frac{\text{Pf}[w(\pi)]}{\text{Pf}[w(0)]} \right) \right]. \end{aligned}$$

Così scritta, la polarizzazione time-reversal dipende dall'integrale della differenza tra le connessioni di Berry calcolate in  $k$  e in  $-k$  perciò, con l'obiettivo di ottenere un'espressione più compatta per  $P_\theta$ , cerchiamo una relazione tra  $\mathcal{A}(k)$  e  $\mathcal{A}(-k)$ . Iniziamo definendo una nuova matrice  $a^{\alpha\beta}(k) = i \langle u_{\alpha,k} | \nabla_k | u_{\beta,k} \rangle$  che ci permette di scrivere la connessione di Berry in un modo alternativo:

$$\mathcal{A}(k) = i \sum_{\alpha} \langle u_{\alpha,k} | \nabla_k | u_{\alpha,k} \rangle = \text{Tr}[i \langle u_{\alpha,k} | \nabla_k | u_{\alpha,k} \rangle] = \text{Tr}[a].$$

Sfruttando la relazione  $|u_{\alpha,-k}\rangle = \sum_{\beta} w_{\alpha\beta}^*(k) |u_{\beta,k}\rangle$ <sup>7</sup>, possiamo scrivere la matrice  $a^{\alpha\beta}(-k)$  in termini di  $a^{\alpha\beta}(k)$  e della matrice di sewing<sup>8</sup>:

$$\begin{aligned}
a_i^{\alpha\beta}(-k) &= -i \langle u_{\alpha,-k} | \partial_{k_i} | u_{\beta,-k} \rangle \\
&= -i [w_{\alpha\lambda}^* \Theta u_{\lambda,k}]_m^* [\partial_i (w_{\beta\gamma}^* \Theta u_{\gamma,k})]_m \\
&= -i [w_{\alpha\lambda} U_{\nu m}^\dagger(u_{\lambda,k})_\nu] [\partial_i (w_{\beta\gamma}^* U_{m\sigma}(u_{\gamma,k})_\sigma + w_{\beta\gamma}^* U_{m\sigma} \partial_i (u_{\gamma,k})_\sigma)] \\
&= -i [w_{\alpha\lambda} \partial_i w_{\beta\gamma}^* U_{\nu m}^\dagger(u_{\lambda,k})_\nu U_{m\sigma}(u_{\gamma,k})_\sigma + w_{\alpha\lambda} w_{\beta\gamma}^* U_{\nu m}^\dagger(u_{\lambda,k})_\nu U_{m\sigma} \partial_i (u_{\gamma,k})_\sigma] \\
&= -i [w_{\alpha\lambda} \partial_i w_{\beta\gamma}^* \delta_{\lambda\gamma} + w_{\alpha\lambda} w_{\beta\gamma}^* (\langle u_{\lambda,k} | \partial_i | u_{\gamma,k} \rangle)^*] \\
&= w_{\alpha\lambda} (a_i^{\lambda\gamma}(k))^* w_{\beta\gamma}^* - i w_{\alpha\gamma} \partial_i w_{\beta\gamma}^*,
\end{aligned}$$

quindi

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}(-k) &= \text{Tr}[a(-k)] \\
&= \text{Tr}[w w^\dagger a^*(k)] - i \text{Tr}[w \nabla_k w^\dagger] \\
&= \text{Tr}[a(k)] + i \text{Tr}[w^\dagger \nabla_k w] = \mathcal{A}(k) + i \text{Tr}[w^\dagger \nabla_k w].
\end{aligned}$$

Allora possiamo scrivere la polarizzazione in termini della sola matrice di sewing  $w$ :

$$\begin{aligned}
P_\theta &= \frac{1}{2\pi i} \left[ \int_0^\pi dk \text{Tr}[w^\dagger \nabla_k w] - 2 \log \left( \frac{\text{Pf}[w(\pi)]}{\text{Pf}[w(0)]} \right) \right] \\
&= \frac{1}{2\pi i} \left[ \int_0^\pi dk \nabla_k \log \text{Det}[w(k)] - 2 \log \left( \frac{\text{Pf}[w(\pi)]}{\text{Pf}[w(0)]} \right) \right],
\end{aligned}$$

dove l'ultimo passaggio è suggerito dal fatto che  $\text{Tr}[w^\dagger \nabla_k w]$  fornisce il fattore di fase  $U(1)$  di  $w$ . Dal momento che  $\text{Det}[w] = \text{Pf}[w]^2$ , per l'ambiguità del logaritmo, questa quantità può assumere un valore intero modulo 2 che è determinato dal fatto che  $\text{Pf}[w]$  abbia o meno lo stesso segno di  $\text{Det}[w]$  in  $k = 0, \pi$ . Per valutare in modo più diretto i valori che può assumere la polarizzazione si può scrivere

$$(-1)^{P_\theta} = \frac{\sqrt{\text{Det}[w(0)]}}{\text{Pf}[w](0)} \frac{\sqrt{\text{Det}[w(\pi)]}}{\text{Pf}[w(\pi)]}, \quad (3.5)$$

ed osservare che  $P_\theta \in \mathbb{Z}_2$ , quindi la polarizzazione può essere 0 o 1.

Se consideriamo un sistema che dipende dal tempo con periodo  $T$ , la differenza di  $P_\theta(t)$  tra  $t = 0$  e  $t = T/2$

$$\Delta = P_\theta(T/2) - P_\theta(0)$$

definisce un invariante topologico  $\mathbb{Z}_2$ . Dall'equazione (3.5) possiamo scrivere

$$(-1)^\Delta = \prod_{i=1}^4 \frac{\sqrt{\text{Det}[w(\Gamma_i)]}}{\text{Pf}[w(\Gamma_i)]}, \quad (3.6)$$

---

7

$$\begin{aligned}
\left( \sum_{\beta} \right) w_{\alpha\beta}^* \Theta(u_{\beta,k})_\mu &= [(u_{\alpha,-k})_m U_{nm}(u_{\beta,k})_n]^* U_{\mu\nu}(u_{\beta,k})_\nu \\
&= (u_{\alpha,-k})_m U_{mn}^\dagger(u_{\beta,k})_n U_{\mu\nu}(u_{\beta,k})_\nu \\
&= (u_{\alpha,-k})_m \delta_{m\mu} = (u_{\alpha,-k})_\mu. \quad c.v.d.
\end{aligned}$$

<sup>8</sup>Gli indici ripetuti sottointendono una sommatoria.

dove  $\Gamma_i$  sono i TRIM che caratterizzano il toro  $\mathbb{T}^2 = \mathbb{S}_t^1 \times \mathbb{S}_k^1$  su cui le autofunzioni sono definite in modo continuo. Questo è l'invariante topologico  $\mathbb{Z}_2$  introdotto da Fu, Kane e Mele (spesso per questo motivo ci si riferisce ad esso con la sigla FKM) per un sistema time-reversal invariante, la cui interpretazione geometrica è stata a lungo studiata. Di seguito infatti, è riportata prima una diversa formulazione che mette in evidenza il fatto che questo invariante può essere interpretato come un'ostruzione nella definizione continua delle coppie di Kramer su tutto il toro di Brillouin, e successivamente una sua interpretazione puramente geometrica. La definizione di  $\Delta$  richiede di valutare lo Pfaffiano della matrice di sewing solo in pochi punti nel toro di Brillouin: i TRIM; questo può essere comodo per il calcolo, ma può avere come conseguenza la perdita di informazioni circa la sua interpretazione.

### 3.3 FKM come un'ostruzione al teorema di Stokes

Sappiamo che un valore non nullo del numero di Chern corrisponde ad una situazione in cui non è possibile definire le autofunzioni di Bloch in modo continuo su tutto il toro di Brillouin  $\mathbb{T}^d$ . Prima di tutto, per capire come questo è legato alla validità del teorema di Stokes, definiamo:

$$C = \int_{BT} d^2\mathbf{k} \mathcal{F} \quad ; \quad C' = \int_{\partial(BT)} d\mathbf{k} \cdot \mathcal{A}.$$

Supponiamo che  $\mathcal{A}(\mathbf{k})$  sia continua su tutto il toro di Brillouin, allora la 2-forma  $F = \mathcal{F}_{ij} dk^i \wedge dk^j$ , con  $\mathcal{F}_{ij}(\mathbf{k}) = i \sum_n \langle \partial_i u_{n,\mathbf{k}} | \partial_j u_{n,\mathbf{k}} \rangle$ , è esatta perché:

$$F = dA = \partial_i \mathcal{A}_j dk^i \wedge dk^j.$$

Quindi per il teorema di Stokes vale che  $C = C'$  ( $=0$  perché il toro di Brillouin non ha bordo:  $\partial(BT) = 0$ ). Se invece  $\mathcal{A}(\mathbf{k})$  non può essere definita in modo continuo su tutto il toro di Brillouin, la 2-forma  $F$  non è esatta e quindi il teorema di Stokes non è più valido:  $C \neq C'$ .

In tal caso quindi, è necessario trovare un ricoprimento  $\{U_i\}_{i \in I} \subset \mathbb{T}^d$  su cui è possibile definire delle autofunzioni  $\psi_i$  e  $\psi_j$  continue rispettivamente su  $U_i$  e  $U_j$ , e collegate da una mappa di transizione

$$t_{ij} : \psi_i \rightarrow t_{ij} \psi_i = \psi_j$$

che rappresenta una trasformazione di gauge. Definiamo una gauge liscia data dai seguenti vincoli time-reversal:

$$(i) |u_{\alpha,-k}^I(-t)\rangle = \Theta |u_{\alpha,k}^{II}(t)\rangle;$$

$$(ii) |u_{\alpha,-k}^{II}(-t)\rangle = -\Theta |u_{\alpha,k}^I(t)\rangle;$$

che corrispondono alle trasformazioni viste nella sezione precedente nel caso  $\chi_k = 0$ . Questo significa che  $\text{Det}[w(k, t)] = 1 = \text{Pf}[w(k, t)] \quad \forall k, t$  e quindi vale sempre  $\Delta = 0$ . In questa sezione mostriamo che un valore non nullo dell'invariante  $\mathbb{Z}_2$  rappresenta un ostacolo per la definizione di una gauge liscia di questo tipo.

Supponiamo di avere degli autostati  $\{|u_{\alpha,k}^s(t)\rangle_A |u_{\alpha,k}^s(t)\rangle_B\}$  continui rispettivamente su  $U_A, U_B \subset EBZ$  e tali che:

$$|u_{\alpha,k}^s(t)\rangle_A = t_{\alpha,\beta,s}^{AB} |u_{\beta,k}^s(t)\rangle_B.$$



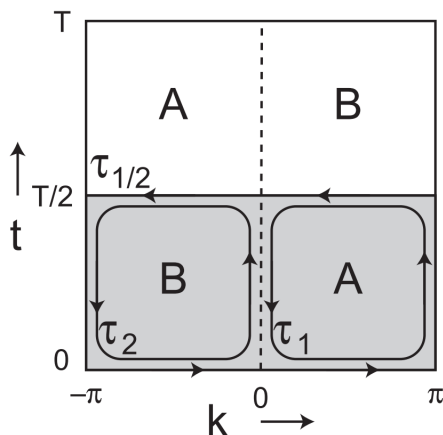


Figura 3.1: Immagine del toro nello spazio dei parametri  $(k, t)$  diviso in due aperti  $U_A$  e  $U_B$ .

In analogia con quanto fatto precedentemente, un giro lungo la curva chiusa  $\partial\tau_1$  (si veda Fig.3.1) genera un fattore di fase  $U(1)$ :<sup>9</sup>

$$D = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\partial\tau_1} dl \cdot \text{Tr}[t^{AB\dagger} \nabla t^{AB}].$$

Possiamo riscrivere  $D$  come la differenza delle connessioni di Berry definite in  $U_A$  e  $U_B$ :

$$\begin{aligned} D &= \frac{1}{2\pi} \oint_{\partial\tau_1} dl \cdot (\mathcal{A}^B - \mathcal{A}^A) \\ &= \frac{1}{2\pi} \left[ - \int_{\tau_2} dt dk \mathcal{F}^B + \oint_{\partial\tau_{1/2}} dl \cdot \mathcal{A}^B - \int_{\tau_1} dt dk \mathcal{F}^A \right] \\ &= \frac{1}{2\pi} \left[ \oint_{\partial\tau_{1/2}} dl \cdot \mathcal{A}^B - \int_{\tau_{1/2}} dt dk \mathcal{F} \right], \end{aligned}$$

dove nel secondo passaggio abbiamo usato il teorema di Stokes per scrivere gli integrali della curvatura di Berry sulle superfici  $\tau_1$  e  $\tau_2$ . Si può facilmente verificare che, per una trasformazione di gauge  $|u_{\alpha, k}\rangle_B \rightarrow e^{-i\phi(k)} |u_{\alpha, k}\rangle_B$ , l'integrale della connessione di Berry lungo la curva  $\partial\tau_{1/2}$  trasforma nel seguente modo:

$$\oint_{\partial\tau_{1/2}} dl \cdot \mathcal{A}^B(k) \rightarrow \oint_{\partial\tau_{1/2}} dl \cdot \mathcal{A}^B(k) + 2 \oint_{\partial\tau_{1/2}} dl \cdot \nabla \phi(k).$$

Quindi, se consideriamo la fase  $D$  modulo 2, otteniamo una quantità gauge invariante e possiamo dimenticarci dell'indice  $B$ :

$$D = \frac{1}{2\pi} \left[ \oint_{\partial\tau_{1/2}} dl \cdot \mathcal{A} - \int_{\tau_{1/2}} dt dk \mathcal{F} \right] \text{mod} 2.$$

Come il numero di Chern rappresenta un'ostruzione del teorema di Stokes su tutto il toro di Brillouin similmente, per sistemi con simmetria time-reversal, l'invariante  $\mathbb{Z}_2$  può essere visto

<sup>9</sup>La matrice di transizione  $t^{AB}$  svolge lo stesso ruolo della matrice di sewing nella sezione precedente, quindi se in quel caso l'integrale della traccia di  $w^\dagger \nabla_k w$  forniva il fattore di fase nel passare da  $k$  a  $-k$ , allo stesso modo qui l'integrale di  $\text{Tr}[t^{AB\dagger} \nabla t^{AB}]$  dà il fattore di fase nel passare da  $U_A$  a  $U_B$ .

come un'ostruzione al teorema di Stokes su EBZ ovvero su metà toro di Brillouin. Questa interpretazione è facile da vedere perché, usando la definizione della polarizzazione time-reversal  $P_\theta = 2P^I - P_\rho$  e le equazioni (3.2) e (3.4), possiamo identificare la fase D con l'invariante  $\mathbb{Z}_2$  precedentemente trovato  $\Delta = P_\theta(T/2) - P_\theta(0)$ :

$$\begin{aligned}\Delta &= 2[P^I(T/2) - P^I(0)] - [P_\rho(T/2) - P_\rho(0)] \quad \text{mod}2 \\ &= \frac{1}{2\pi} \oint_{\partial\tau_{1/2}} dl\mathcal{A} - \frac{1}{2\pi} \int_{\tau_{1/2}} dt dk \mathcal{F} \quad \text{mod}2 = D.\end{aligned}$$

### 3.4 Invarianti $\mathbb{Z}_2$ con simmetria per inversione

L'equazione (3.6) può essere scritta in modo più compatto:

$$(-1)^\Delta = \prod_i \delta_i, \quad (3.7)$$

definendo gli indici

$$\delta_i := \frac{\sqrt{\text{Det}[w(\Gamma_i)]}}{\text{Pf}[w(\Gamma_i)]} = \pm 1.$$

In due dimensioni ci sono quattro diversi momenti time-reversal invarianti (TRIM) ed un singolo invariante  $\mathbb{Z}_2$ :

$$(-1)^\Delta = \prod_{i=1}^4 \delta_i,$$

mentre in tre dimensioni ci sono ben otto TRIM diversi che generano quattro invarianti topologici  $\mathbb{Z}_2$  indipendenti. Uno di questi,  $\Delta_0$ , è determinato dal prodotto su tutti gli otto TRIM:

$$(-1)^{\Delta_0} = \prod_{i=1}^8 \delta_i,$$

mentre gli altri tre invarianti sono determinati dal prodotto su quattro TRIM contenuti nello stesso piano:

$$(-1)^{\Delta_k} = \prod_{n_k=1; n_j \neq k=0,1} \delta_{i=(n_1 n_2 n_3)}.$$

Consideriamo un sistema con spin totale semintero e con due diverse simmetrie: time reversal ed inversione spaziale. L'operatore che rappresenta l'inversione spaziale è detto operatore di parità e può essere definito a partire dalla sua azione su una qualsiasi funzione d'onda:  $\mathcal{P}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r})$ . Chiedere che il sistema sia invariante per inversione temporale e spaziale, equivale a chiedere che i due operatori  $\Theta$  e  $\mathcal{P}$  commutino con l'Hamiltoniana  $H$ :

- $[H, \Theta] = 0 \rightarrow H(-\mathbf{k}) = \Theta H(\mathbf{k}) \Theta^{-1}$ ;
- $[H, \mathcal{P}] = 0 \rightarrow H(-\mathbf{k}) = \mathcal{P} H(\mathbf{k}) \mathcal{P}^{-1}$ .

Questa duplice simmetria fa sì che la curvatura di Berry debba essere necessariamente nulla perché i due operatori agiscono diversamente su  $\mathcal{F}$ :

- $\mathcal{F}(\mathbf{k}) \xrightarrow{\Theta} \mathcal{F}(-\mathbf{k}) = -\mathcal{F}(\mathbf{k})$ ,
- $\mathcal{F}(\mathbf{k}) \xrightarrow{\mathcal{P}} \mathcal{F}(-\mathbf{k}) = \mathcal{F}(\mathbf{k})$ .

La curvatura di Berry  $\mathcal{F}(\mathbf{k})$  può essere valutata calcolando il rotore, rispetto al momento  $\mathbf{k}$ , della connessione di Berry:

$$\mathcal{F}(\mathbf{k}) = -\nabla_{\mathbf{k}} \times \mathcal{A}(\mathbf{k}).$$

Questo significa che, affinché  $\mathcal{F}$  sia nulla, possiamo scegliere una gauge tale che  $\mathcal{A}(\mathbf{k}) = 0 \quad \forall \mathbf{k}$ , e con tale scelta troveremo che è possibile calcolare facilmente gli invarianti topologici  $\mathbb{Z}_2$ .

Consideriamo la matrice  $2N \times 2N$ , unitaria<sup>10</sup> ed antisimmetrica<sup>11</sup>

$$v_{mn}(\mathbf{k}) = \langle u_{m,\mathbf{k}} | \mathcal{P} \Theta | u_{n,\mathbf{k}} \rangle.$$

Alternativamente, si può definire la matrice  $v$  in un modo più diretto:  $|u_{m,k}\rangle = v_{mn}^* \mathcal{P} \Theta |u_{n,k}\rangle$ ; e sfruttando questa relazione è facile verificare che

$$\mathcal{A}(\mathbf{k}) = -\frac{i}{2} \text{Tr}[v(\mathbf{k})^\dagger \nabla_{\mathbf{k}} v(\mathbf{k})].$$

Quindi, siccome  $\text{Tr}[v(\mathbf{k})^\dagger \nabla_{\mathbf{k}} v(\mathbf{k})] = \text{Tr}[\nabla_{\mathbf{k}} \log v(\mathbf{k})] = 2 \nabla_{\mathbf{k}} \log \text{Pf}[v(\mathbf{k})]$ , si ha che:

$$\mathcal{A}(\mathbf{k}) = -i \nabla_{\mathbf{k}} \log \text{Pf}[v(\mathbf{k})].$$

Questo significa che, affinché  $\mathcal{A}(\mathbf{k}) = 0$ , possiamo scegliere una fase per  $|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$  tale che  $\text{Pf}[v(\mathbf{k})] = 1$ . Una trasformazione di gauge che agisce sugli stati di una sola banda occupata del tipo

$$\begin{cases} e^{i\theta_{\mathbf{k}}} |u_{n,\mathbf{k}}\rangle & \text{per } n=1 \\ |u_{n,\mathbf{k}}\rangle & \text{per } n \neq 1 \end{cases}$$

trasforma  $\text{Pf}[v(\mathbf{k})] \rightarrow \text{Pf}[v(\mathbf{k})]e^{-i\theta_{\mathbf{k}}}$  quindi, con un'opportuna scelta della gauge, riusciamo a rendere lo Pfaffiano di  $v(\mathbf{k})$  unitario  $\forall \mathbf{k}$ .

Per determinare gli indici  $\delta_i$  rimane da calcolare  $\text{Pf}[w(\Gamma_i)]$ , e per farlo notiamo che possiamo scrivere

$$w_{mn}(\Gamma_i) = \langle \psi_{m,\Gamma_i} | \mathcal{P}(\mathcal{P}\Theta) | \psi_{n,\Gamma_i} \rangle$$

perché  $\mathcal{P}^2 = \mathbb{1}$  e per l'antilinearità di  $\Theta$ . Dal momento che  $[H, \mathcal{P}] = 0$ , un autostato  $|\psi_{n,\Gamma_i}\rangle$  di  $H$  è anche autostato di  $\mathcal{P}$  con autovalore  $\xi_n(\Gamma_i) = \pm 1$ , allora:

$$w_{mn}(\Gamma_i) = \xi_n(\Gamma_i) v_{nm}(\Gamma_i).$$

Questo significa che il determinante della matrice di sewing può essere calcolato conoscendo  $\text{Det}[v(\Gamma_i)]$  e gli autovalori dell'operatore di parità per gli autostati  $|\psi_{n,\Gamma_i}\rangle$ , infatti:

$$\text{Det}[w(\Gamma_i)] = \text{Det}[v(\Gamma_i)] \prod_{n=1}^{2N} \xi_n(\Gamma_i).$$

---

<sup>10</sup>

$$\begin{aligned} (v^\dagger)_{mn} v_{\mu m} &= (u_{m,k}^*)_\nu U_{\nu i}^\dagger \mathcal{P}_{ij} (u_{n,k}^*)_j (u_{\mu,k})_\lambda \mathcal{P}_{\lambda \sigma} U_{\sigma \rho} (u_{m,k})_\rho \\ &= \mathcal{P}_{ij} (u_{n,k}^*)_j (u_{\mu,k})_\lambda \mathcal{P}_{\lambda i} \quad \text{perché } (u_{m,k}^*)_\nu (u_{m,k})_\rho = \delta_{\nu \rho} \text{ e } U_{\nu i}^\dagger U_{\sigma \nu} = \delta_{i\sigma} \\ &= \delta_{j\lambda} (u_{n,k}^*)_j (u_{\mu,k})_\lambda = (u_{n,k}^*)_j (u_{\mu,k})_j = \delta_{n\mu}. \end{aligned}$$

Allo stesso modo si può mostrare che  $vv^\dagger = \mathbb{1}$  e quindi  $v$  è una matrice unitaria.

<sup>11</sup>  $(v^*)_{nm}(\mathbf{k}) = \langle u_{m,\mathbf{k}} | \Theta^\dagger \mathcal{P}^\dagger | u_{n,\mathbf{k}} \rangle = -\langle u_{m,\mathbf{k}} | \Theta \mathcal{P} | u_{n,\mathbf{k}} \rangle$  perchè  $\mathcal{P}^\dagger = \mathcal{P}, \Theta^\dagger = -\Theta$  e  $[\mathcal{P}, \Theta] = 0$ .

L'operatore di parità e quello di inversione temporale commutano, quindi i due autostati che compongono la coppia di Kramer  $|\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$  e  $\Theta|\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$  sono a loro volta autostati di  $\mathcal{P}$ , con lo stesso autovalore <sup>12</sup>. Allora ogni autovalore comparirà due volte all'interno della produttoria:

$$\text{Pf}[w(\Gamma_i)]^2 = \text{Det}[w(\Gamma_i)] = \text{Pf}[v(\Gamma_i)]^2 \prod_{n=1}^{2N} \xi_n(\Gamma_i) = \left( \text{Pf}[v(\Gamma_i)] \prod_{n=1}^N \xi_n(\Gamma_i) \right)^2$$

e prendendo la radice quadrata <sup>13</sup>

$$\text{Pf}[w(\Gamma_i)] = \text{Pf}[v(\Gamma_i)] \prod_{n=1}^N \xi_n(\Gamma_i).$$

Quindi, nella particolare gauge in cui  $\mathcal{A}(\mathbf{k}) = 0$ , possiamo scrivere

$$\delta_i = \prod_{n=1}^N \xi_n(\Gamma_i). \quad (3.8)$$

Questo importante risultato ci fornisce un metodo semplice per determinare gli invarianti  $\mathbb{Z}_2$  che caratterizzano un isolante topologico con simmetria time-reversal e di parità, senza dover indagare le proprietà globali delle bande energetiche.

---

<sup>12</sup> $\mathcal{P}\Theta|\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle = \Theta\mathcal{P}|\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle = \xi_n(\mathbf{k})\Theta|\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$ .

<sup>13</sup>C'è un'apparente ambiguità nella scelta del segno, infatti avremmo potuto scrivere che  $\text{Pf}[w] = -\prod_{n=1}^N \xi_n$ . In tal caso però, avremmo concluso che  $\text{Pf}[w] = -1$  se  $\prod_{n=1}^N \xi_n = 1$ , ovvero che un isolante topologico ( $\text{Pf}[w] = -1$ ) è in realtà l'isolante banale. Questa è chiaramente un'affermazione non corretta quindi il segno positivo è la scelta giusta.

# Interpretazione geometrica degli invarianti $\mathbb{Z}_2$

Consideriamo un sistema con simmetria time-reversal e con spin semintero. In questa sezione ci concentreremo sulla famiglia di proiettori, costruiti a partire dagli autostati di Bloch  $|u_{n,k}\rangle$ , in rappresentazione di Bloch-Floquet:

$$P_k = \sum_{n \in I_{occ}} |u_{n,k}\rangle \langle u_{n,k}|, \quad k \in \mathbb{R}^d,$$

dove  $I_{occ}$  è l'insieme degli indici delle bande occupate.

Dato uno spazio di Hilbert separabile  $\mathcal{H}$ ,  $U(\mathcal{H})$  è il gruppo degli operatori unitari su  $\mathcal{H}$ . Inoltre il reticolo reciproco associato al reticolo di Bravais è denotato con:

$$\Lambda = \text{Span}_{\mathbb{Z}}\{e_1, \dots, e_d\} \simeq \mathbb{Z}^d \subset \mathbb{R}^d.$$

In particolare, lavoreremo con una famiglia di proiettori  $\{P_k\}_{k \in \mathbb{R}^d}$  che soddisfa l'assunzione 1.

**Assunzione 1.** *La famiglia  $\{P_k\}_{k \in \mathbb{R}^d}$  gode delle seguenti proprietà:*

1. *differenziabilità: la mappa  $k \mapsto P_k$  è  $C^\infty$ ;*
2.  *$\tau$  - covarianza: la mappa  $k \mapsto P_k$  è covariante rispetto ad una rappresentazione unitaria  $\tau : \Lambda \rightarrow U(\mathcal{H})$ , che rappresenta una traslazione nello spazio dei momenti di un vettore  $\lambda$ , ovvero  $P_{k+\lambda} = \tau(\lambda)P_k\tau(\lambda)^{-1} \quad \forall k \in \mathbb{R}^d, \lambda \in \Lambda$ ;*
3. *simmetria time-reversal: la mappa  $k \mapsto P_k$  è simmetrica per inversione temporale, in altre parole vale che  $\Theta^2 = -\mathbb{1}$ ,  $P_{-k} = \Theta P_k \Theta^{-1}$ ;*
4.  *$\Theta \tau(\lambda) = \tau(\lambda)^{-1} \Theta \quad \forall \lambda \in \Lambda$ .*

**Definizione 3** (Bloch frame). *Sia  $\{P_k\}_{k \in \mathbb{R}^d}$  una famiglia di proiettori che soddisfa l'assunzione 1. Un Bloch frame  $\Phi(k)$ ,  $k \in \Omega \subset \mathbb{R}^d$ , associato alla famiglia di proiettori  $\{P_k\}_{k \in \mathbb{R}^d}$  è una collezione di mappe  $\phi_a : \Omega \rightarrow \mathcal{H}$  con  $a=1, \dots, m$  tale che,  $\forall k \in \Omega$ , l'insieme  $\Phi(k) := \{\phi_1(k), \dots, \phi_m(k)\}$  è una base ortonormale per  $\text{Ran}P_k$ <sup>2</sup>.*

Un Bloch frame si dice:

- (1) *continuo se le funzioni  $\phi_a(k)$  sono continue per ogni  $a=1, \dots, m$ ;*

---

1

$$\begin{aligned} P_{k+\lambda} &= \tau(\lambda)P_k\tau(\lambda)^{-1} \\ &= \sum_n \tau(\lambda) |u_{n,k}\rangle \langle u_{n,k}| \tau(\lambda)^\dagger = \sum_n |u_{n,k+\lambda}\rangle \langle u_{n,k+\lambda}|. \end{aligned}$$

<sup>2</sup> $\text{Ran}P_k$  è lo spazio vettoriale generato dagli stati di Bloch  $|u_{n,k}\rangle$  associati a  $k$ . In altre parole, rappresenta lo spazio occupato dagli stati di Bloch associati al momento  $k$  all'interno dello spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$ .

- (2) liscio se le funzioni  $\phi_a(k)$  sono  $C^\infty$  per ogni  $a=1, \dots, m$ ;
- (3)  $\tau$ -equivariante se  $\phi_a(k + \lambda) = \tau(\lambda)\phi_a(k)$  per ogni  $k \in \Omega$ ,  $\lambda \in \Lambda$ ,  $a=1, \dots, m$ ;
- (4) time-reversal invariante se

$$\phi_b(-k) = \sum_{a=1}^m \Theta \phi_a \epsilon_{ab},$$

per ogni  $k \in \Omega$ ,  $b=1, \dots, m$ , e per qualche matrice unitaria ed antisimmetrica<sup>3</sup>  $\epsilon = (\epsilon_{ab})_{1 \leq a, b \leq m} \in \mathcal{U}(\mathbb{C}^m)$ . Inoltre un Bloch frame  $\tau$ -equivariante e time-reversal invariante si dice *simmetrico* e se  $\Omega = \mathbb{R}^d$  si dice che il frame è *globale*.

È importante notare che, dato un Bloch frame  $m$ -dim  $\Phi = \{\phi_1, \dots, \phi_m\}$ , possiamo ottenere un nuovo frame in  $\text{Fr}(m, \mathcal{H})$  (spazio degli  $m$ -frame su  $\mathcal{H}$ ) applicando una matrice unitaria  $M \in \mathcal{U}(\mathbb{C}^m)$ :

$$(M\Phi)_b := \sum_{a=1}^m \phi_a M_{ab}.$$

Inoltre, è possibile estendere l'azione dell'operatore unitario  $\tau(\lambda) \in U(\mathcal{H})$  e dell'operatore time-reversal  $\Theta : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  su tutto il  $m$ -frame:  $(\tau_\lambda \Phi)_a := \tau(\lambda)\phi_a$  e  $(\Theta \Phi)_a := \Theta \phi_a$ , per ogni  $\Phi = \{\phi_1, \dots, \phi_m\} \in \text{Fr}(m, \mathcal{H})$ ;  $a=1, \dots, m$ .

L'operatore unitario  $\tau_\lambda$  è una simmetria per il gruppo unitario  $\mathcal{U}(\mathbb{C}^m)$  infatti, data una qualsiasi matrice unitaria  $M \in \mathcal{U}(\mathbb{C}^m)$ , esso agisce su  $M\Phi$  nel seguente modo:

$$\tau_\lambda(M\Phi) = M(\tau_\lambda \Phi).$$

L'operatore di inversione temporale invece, essendo antiunitario, agisce su  $M\Phi$  nel seguente modo:

$$\Theta(M\Phi) = M^*(\Theta \Phi).$$

Data una famiglia di proiettori  $\{P_k\}_{k \in \mathbb{R}^d}$ , possiamo costruire il fibrato di Bloch<sup>4</sup>  $\mathcal{P} \rightarrow \mathbb{T}^d$  con base il toro di Brillouin  $\mathbb{T}^d = \mathbb{R}^d/\Lambda$  e le cui fibre sono degli elementi di  $\text{Ran}P_k$ . Se  $d \leq 3$  e  $\{P_k\}_{k \in \mathbb{R}^d}$  è time-reversal simmetrica, si può dimostrare che il fibrato di Bloch è banale oppure, equivalentemente, che esiste un Bloch frame simmetrico. In particolare, la banalità del fibrato deriva dal fatto che per sistemi invarianti per inversione temporale il numero di Chern, che rappresenta le proprietà topologiche del fibrato, deve essere necessariamente nullo, non essendo time-reversal invariante.

## 4.1 Zona di Brillouin effettiva, vertici e bordi

Consideriamo la zona di Brillouin

$$BZ = \left\{ k = \sum_{j=1}^d c_j e_j \in \mathbb{R}^d : -\frac{1}{2} \leq c_j \leq \frac{1}{2} \right\},$$

<sup>3</sup>La presenza della matrice antisimmetrica è motivata dal fatto che i vettori  $\Theta \phi(k)$  e  $\phi(k)$  devono essere ortogonali per ogni  $k$  perché  $\Theta^2 = -\mathbb{1}$ . Infatti, se definiamo l'azione di  $\Theta$  su  $\phi_a(k)$  come  $\Theta \phi_a(k) = \phi_a(-k)$ , abbiamo necessariamente che  $\Theta \phi_a(0) = \phi_a(0) = 0$  e questo non è compatibile con il fatto che i vettori  $\{\phi_a(k)\}_{a=1, \dots, m}$  formano una base per  $\text{Ran}P_k$  per ogni  $k$ .

<sup>4</sup> $\mathcal{P} = \bigcup_{k \in BZ} P_k$ .

per quanto già detto possiamo lavorare con una zona di Brillouin effettiva

$$EBZ_i = \left\{ k \in \mathbb{R}^d : k_i \geq 0 \right\}, \quad \text{per } i = 1, \dots, d.$$

Con questo nuovo formalismo, i TRIM sono dei punti  $\Gamma \in BZ$  su cui la mappa  $t_\lambda \theta$  agisce come l'identità, ovvero sono dei punti  $\Gamma$  tali che:

$$t_\lambda \theta(\Gamma) = \Gamma,$$

dove le mappe  $t_\lambda : k \mapsto k + \lambda$  e  $\theta : k \mapsto -k$  sono l'estensione degli operatori  $\tau(\lambda)$  e  $\Theta$  sullo spazio dei quasimomenti  $k$ .

Cercheremo di capire sotto quali condizioni esiste un Bloch frame simmetrico, continuo e globale su tutta la zona di Brillouin BZ, per  $d = 1, 2, 3$ , nel caso di sistemi fermionici <sup>5</sup> (vale quindi  $\Theta^2 = -\mathbb{1}$ ). Come fatto in precedenza, possiamo ridurre il problema dell'esistenza di tale Bloch frame alla sola EBZ, avendo l'accortezza di imporre le opportune condizioni sui bordi orientati  $E_i$  (si veda Fig. 4.1) che collegano due TRIM consecutivi  $\Gamma_i$  e  $\Gamma_{i+1}$ .

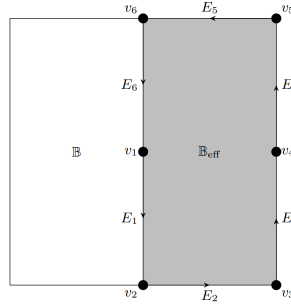


Figura 4.1: Zona di Brillouin effettiva (in grigio), nel caso  $d = 2$ , dove i vertici  $v_i$  coincidono con i TRIM  $\Gamma_i$ .

**Proposizione 1.** Sia  $\{P_k\}_{k \in \mathbb{R}^2}$ , per  $d=2$ , una famiglia di proiettori che soddisfa l'assunzione 1, e supponiamo che esista un Bloch frame simmetrico continuo e globale  $\Phi$  per questa famiglia di proiettori. Allora  $\Phi$  è tale che  $\Phi(\Gamma) = \tau(\lambda)\Theta\epsilon\Phi(\Gamma)$ , per  $\Gamma \in \{\Gamma_1, \dots, \Gamma_6\}$  (1), e soddisfa le condizioni di bordo (2):

- (i)  $\Phi(\theta(k)) = \Theta\epsilon\Phi(k)$  per  $k \in E_1 \cup E_6$ ,
- (ii)  $\Phi(t_{e_2}(k)) = \tau_{e_2}\Phi(k)$  per  $k \in E_2$ ,
- (iii)  $\Phi(\theta t_{-e_1}(k)) = \tau_{e_1}\Theta\epsilon\Phi(k)$  per  $k \in E_3 \cup E_4$ ,
- (iv)  $\Phi(t_{-e_2}(k)) = \tau_{-e_2}\Phi(k)$  per  $k \in E_5$ .

Viceversa, sia  $\Phi_{eff} = \{\Phi(k)\}_{k \in EBZ}$  un Bloch frame continuo per  $\{P_k\}_{k \in \mathbb{R}^2}$ , definito sulla zona di Brillouin effettiva EBZ e che soddisfa la condizione (1) e le condizioni di bordo (2). Allora esiste un Bloch frame simmetrico, continuo e globale  $\Phi$  la cui restrizione ad EBZ coincide con  $\Phi_{eff}$ ,  $\Phi|_{EBZ} = \Phi_{eff}$ .

*Dimostrazione.* ( $\Rightarrow$ ) Dato un Bloch frame simmetrico, continuo e globale  $\Phi$ , le proprietà (3) e (4) della definizione di Bloch frame possono essere riscritte come segue:

<sup>5</sup>Nel caso di sistemi bosonici, data una famiglia di proiettori  $\{P_k\}_{k \in \mathbb{R}^d}$ ,  $d \leq 3$ , che soddisfa l'assunzione 1, esiste sempre un Bloch frame simmetrico, liscio e globale per  $\{P_k\}_{k \in \mathbb{R}^d}$  [11].

$$(3') \quad \Phi(k + \lambda) = \tau_\lambda \Phi(k) \quad \forall k \in \mathbb{R}^2;$$

$$(4') \quad \Phi(-k) = \Theta \epsilon \Phi(k) \quad \forall k \in \mathbb{R}^2.$$

Si vede quindi che la condizione (1) e le condizioni di bordo (2) della proposizione discendono direttamente da queste proprietà.

( $\Leftarrow$ ) Sia  $\Phi_{eff}$ ,  $k \in EBZ$ , un Bloch frame continuo che soddisfa le condizioni (1) e (2) della proposizione. Possiamo estendere la definizione di  $\Phi_{eff}$  su tutta la zona di Brillouin:

$$\Phi_B(k) := \begin{cases} \Phi_{eff}(k) & \text{se } k \in EBZ \\ \Theta \epsilon \Phi_{eff}(\theta(k)) & \text{se } k \in BZ \setminus EBZ \end{cases}$$

e poi estendere  $\Phi_B$  su tutto  $\mathbb{R}^2$ , ponendo  $\Phi(k) := \tau_\lambda \Phi_B(k')$  se  $k = k' + \lambda$  con  $k' \in BZ$ ,  $\lambda \in \Lambda$ . Questo è chiaramente un Bloch frame simmetrico continuo grazie alle condizioni (1) e alle condizioni di bordo (2) soddisfatte da  $\Phi_{eff}$ .  $\square$

Ora abbiamo tutti gli elementi per dimostrare il seguente teorema.

**Teorema 1** ( $d=1$ ). *Sia  $\{P_k\}_{k \in \mathbb{R}}$  una famiglia di proiettori che soddisfa l'assunzione 1 per  $d = 1$ . Allora esiste un Bloch frame simmetrico continuo e globale per  $\{P_k\}_{k \in \mathbb{R}}$ , ed in tal caso può essere costruito esplicitamente.*

*Dimostrazione.* Considerando l'esempio precedente, la curva  $E_1 \cup E_6$  può essere interpretata come una zona di Brillouin 1-dimensionale, ed in tal caso le condizioni di bordo sono semplicemente le proprietà (3) e (4) della definizione di Bloch frame simmetrico. Allora, utilizzando la  $\tau$ -equivarianza, un qualsiasi frame simmetrico <sup>6</sup> può essere esteso in modo continuo su tutto  $\mathbb{R}$ , come abbiamo fatto nella dimostrazione della proposizione 1.

Quindi, nel caso unidimensionale, possiamo sempre costruirci un Bloch frame simmetrico continuo e globale per una famiglia di proiettori  $\{P_k\}_{k \in \mathbb{R}}$  che soddisfa l'assunzione 1.  $\square$

## 4.2 Costruzione di un Bloch frame simmetrico nel caso $d=2$

Per capire se è possibile trovare un Bloch frame simmetrico, continuo e globale anche nel caso  $d = 2$ , possiamo considerare un Bloch frame continuo  $\Psi$  definito su tutta EBZ e provare a modificarlo, cercando di ottenere un nuovo Bloch frame che soddisfi le condizioni (1) e (2) della proposizione 1, attraverso l'applicazione di una matrice unitaria  $U(k)$ :

$$\Phi(k) = U(k)\Psi(k), \quad U(k) \in \mathcal{U}(\mathbb{C}^m).$$

In questo modo, sempre per la proposizione 1, siamo sicuri di poter trovare un Bloch frame simmetrico, continuo e globale. Ci basterà quindi studiare la mappa  $k \mapsto U(k)$ .

La definizione di un Bloch frame simmetrico  $\Phi(k)$  è data su  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ , tuttavia, possiamo facilmente restringere questa definizione ai soli bordi  $E_i$  della zona di Brillouin effettiva EBZ. Chiameremo  $\hat{\Phi}(k)$  il Bloch frame simmetrico definito su  $\partial(EBZ)$  che soddisfa le condizioni di bordo (2) della proposizione 1. Per vedere se è possibile il contrario, ovvero se è possibile estendere il frame  $\hat{\Phi}(k)$  in un Bloch frame simmetrico continuo su tutto EBZ, introduciamo la mappa continua e unitaria  $\hat{U} : \partial(EBZ) \rightarrow \mathcal{U}(\mathbb{C}^m)$  che mappa un qualsiasi frame  $\Psi(k)$  in  $\hat{\Phi}(k)$ :

$$\hat{\Phi}(k) = \hat{U}(k)\Psi(k) \quad k \in \partial(EBZ),$$

---

<sup>6</sup>Si può dimostrare che è sempre possibile definire un Bloch frame simmetrico sulla zona di Brillouin 1-dimensionale [10].



e cerchiamo di trovare un'estensione continua  $U : EBZ \rightarrow \mathcal{U}(\mathbb{C}^m)$  di  $\hat{U}$  su tutto EBZ. Da un punto di vista topologico,  $\partial(EBZ)$  è omeomorfo ad un cerchio  $\mathbb{S}^1$ . Sappiamo però che, se  $X$  è uno spazio topologico, allora la mappa continua  $f : \mathbb{S}^1 \rightarrow X$  è un elemento del gruppo di omotopia  $\pi_1(X)$ . Inoltre,  $f$  può essere estesa ad una mappa continua  $F : D^2 \rightarrow X$ , dove  $D^2$  è il disco con bordo  $\mathbb{S}^1$ , se e solo se  $[f] \in \pi_1(X)$  è l'elemento triviale <sup>7</sup>. Nel nostro caso  $X = \mathcal{U}(\mathbb{C}^m)$  e sappiamo anche che  $\pi_1(\mathcal{U}(\mathbb{C}^m)) \simeq \pi_1(U(1))$ , ovvero che i gruppi  $\pi_1(\mathcal{U}(\mathbb{C}^m))$  e  $\pi_1(U(1))$  sono collegati dall'isomorfismo

$$\begin{aligned} \text{Det} : \mathcal{U}(\mathbb{C}^m) &\rightarrow U(1) \\ U(k) &\mapsto \text{Det}[U(k)]. \end{aligned}$$

Inoltre, si può dimostrare che il grado topologico così definito:

$$\begin{aligned} \text{deg} : \pi_1(U(1)) &\rightarrow \mathbb{Z} \\ [\varphi : \mathbb{S}^1 \rightarrow U(1)] &\mapsto \frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathbb{S}^1} dz \partial_z \log \varphi(z) \end{aligned}$$

costituisce un isomorfismo tra i gruppi  $\pi_1(U(1))$  e  $\mathbb{Z}$ . Concludiamo quindi che una mappa continua  $f : \partial(EBZ) \rightarrow \mathcal{U}(\mathbb{C}^m)$  può essere estesa ad una mappa  $F : EBZ \rightarrow \mathcal{U}(\mathbb{C}^m)$  se  $\text{deg}([\text{Det}f]) \in \mathbb{Z}$  è nullo. In questo caso quindi, se vogliamo estendere  $\hat{U}$ , dobbiamo assicurarci che  $\text{deg}([\text{Det}\hat{U}]) = 0$ . Tuttavia, invece di verificare se  $\text{deg}([\text{Det}\hat{U}])$  è nullo, è sufficiente trovare una mappa a valori in  $\mathcal{U}(\mathbb{C}^m)$  che soddisfi determinate condizioni. Più precisamente, vale la seguente proposizione.

**Proposizione 2.** *Sia  $\hat{\Phi}$  un Bloch frame definito su  $\partial(EBZ)$  che soddisfa le condizioni (1) e (2) della proposizione 1, e tale che  $\hat{\Phi}(k) = \hat{U}(k)\Psi(k)$ . Se esiste una mappa continua  $X : \partial(EBZ) \rightarrow \mathcal{U}(\mathbb{C}^m)$  tale che:*

$$(i) \text{ deg}([\text{Det}X]) = -\text{deg}([\text{Det}\hat{U}]),$$

(ii) *il frame  $X\hat{\Phi}$  soddisfa le condizioni (1) e le condizioni di bordo (2).*

*Allora esiste un Bloch frame simmetrico continuo e globale  $\Phi$  che è l'estensione di  $X\hat{\Phi}$  su tutto  $\mathbb{R}^2$ . Viceversa, se  $\Phi$  è un Bloch frame simmetrico continuo e globale, allora la sua restrizione a  $\partial(EBZ)$  differisce da  $\hat{\Phi}$  attraverso l'azione di una matrice unitaria data da una mappa  $X$  che soddisfa le condizioni (i) e (ii).*

La proposizione 2 riduce la questione dell'esistenza di un Bloch frame simmetrico, continuo e globale all'esistenza di una mappa continua  $X : \partial(EBZ) \rightarrow \mathcal{U}(\mathbb{C}^m)$  che soddisfa le condizioni (i) e (ii). Imponendo che  $X\hat{\Phi}$  soddisfi le condizioni di bordo, si ha che devono valere le seguenti uguaglianze <sup>8</sup>:

1.  $\epsilon X(0, -k_y) = X^*(0, k_y)\epsilon$  per  $k_y \in [-1/2, 1/2]$ ,
2.  $\epsilon X(1/2, -k_y) = X^*(1/2, k_y)\epsilon$  per  $k_y \in [-1/2, 1/2]$ ,
3.  $X(k_x, -1/2) = X(k_x, 1/2)$  per  $k_x \in [0, 1/2]$ .

Imponendo invece  $X(\Gamma)\hat{\Phi} = \tau_\lambda \Theta(X(\Gamma)\epsilon\hat{\Phi})$ , otteniamo che:

$$X(\Gamma)^T \epsilon X(\Gamma) = \epsilon$$

<sup>7</sup>Questa condizione deriva direttamente dalla definizione di  $\pi_1(X)$  come spazio quoziente  $X/\sim$ .

<sup>8</sup>Considerando la zona effettiva di Brillouin  $EBZ_1 := \{(k_x, k_y) \in \mathbb{R}^2 : 0 \leq k_x \leq 1/2; -1/2 \leq k_y \leq 1/2\}$ .

e quindi, assumendo che  $\epsilon$  sia la matrice simplettica standard <sup>9</sup>, la matrice  $X(\Gamma)$  è un elemento del gruppo simplettico  $\text{Sp}(2n, \mathbb{C})$  e perciò  $\text{Det}X(\Gamma) = 1$  <sup>10</sup>.

**Proposizione 3.** *Sia  $X : \partial(EBZ) \rightarrow \mathcal{U}(\mathbb{C}^m)$  una mappa che soddisfa la condizione (ii) della proposizione 2, ovvero tale che  $X\hat{\Phi}$  soddisfa la condizione (1) e le condizioni di bordo (2). Allora il grado topologico del determinante di  $X$  è un numero pari:*

$$\text{deg}([\text{Det}X]) \in 2\mathbb{Z}.$$

*Dimostrazione.* Chiamiamo  $\xi : \partial(EBZ) \rightarrow U(1)$  la mappa tale che  $\xi(k) = \text{Det}X(k)$ . Possiamo dividere l'integrale sul bordo  $\partial(EBZ)$  nella sommatoria degli integrali sui singoli percorsi orientati  $E_i$ :

$$\text{deg}([\xi]) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\partial(EBZ)} dz \partial_z \log \text{Det}X(z) = \sum_{i=1}^6 \frac{1}{2\pi i} \int_{E_i} dz \partial_z \log \text{Det}X(z).$$

Dal fatto che  $\text{Det}X(\Gamma) = 1$  per ogni TRIM  $\Gamma$  deduciamo che le mappe  $\xi_i := \text{Det}X|_{E_i} : E_i \rightarrow U(1)$  sono periodiche, quindi possiamo mettere in corrispondenza gli estremi di  $E_i$ :

$$\text{deg}([\xi]) = \sum_{i=1}^6 \frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathbb{S}_i^1} dz \partial_z \log \text{Det}X(z) = \sum_{i=1}^6 \text{deg}([\xi_i]).$$

Gli integrali su  $E_2$  ed  $E_5$  si compensano perché  $X(k_x, -1/2) = X(k_x, 1/2)$ , mentre le uguaglianze 1 e 2 possono essere riassunte nella seguente equazione:

$$X^*(k_*, k_y) = \epsilon X(k_*, -k_y) \epsilon^{-1},$$

per  $k_* \in \{0, 1/2\}$ . Allora, chiamando  $z = -k_y$  le coordinate su  $\mathbb{S}_1^1$  e  $\mathbb{S}_6^1$ , possiamo scrivere che:

$$\text{Det}X^*(k_*, k_y) = \text{Det}X(k_*, -k_y) \quad \Rightarrow \quad \xi_6(z) = \xi_1^*(-z) \text{ per } k_* = 0$$

e quindi <sup>11</sup>

$$\begin{aligned} \text{deg}([\xi_6]) &= -\text{deg}([\xi_1^*]) \\ &= \text{deg}([\xi_1]). \end{aligned}$$

Allo stesso modo, ponendo  $k_* = 1/2$ , abbiamo che  $\text{deg}([\xi_4]) = \text{deg}([\xi_3])$  e quindi  $\text{deg}([\xi])$  sarà un numero pari:

$$\text{deg}([\xi]) = 2(\text{deg}([\xi_1]) + \text{deg}([\xi_3])) \in 2\mathbb{Z}.$$

□

<sup>9</sup>Possiamo assumere, senza perdita di generalità, che  $\epsilon$  sia la matrice simplettica standard.[5]

<sup>10</sup> $\text{Det}[\epsilon] = \text{Det}[X^T \epsilon X] = (\text{Det}[X])^2 \text{Det}[\epsilon]$

$\Rightarrow \text{Det}[X] = \pm 1$

Utilizzando invece lo Pfaffiano si ha che il determinante deve essere necessariamente positivo:

$$\text{Pf}[\epsilon] = \text{Pf}[X^T \epsilon X] = \text{Det}[X] \text{Pf}[\epsilon].$$

<sup>11</sup> Se  $\varphi : \mathbb{S}^1 \rightarrow U(1) \Rightarrow \text{deg}([\varphi^*]) = -\text{deg}([\varphi])$ .

A questa proposizione segue il teorema 2 che suggerisce una classificazione  $\mathbb{Z}_2$  per le famiglie di proiettori nel caso  $d=2$ .

**Teorema 2.** ( $d=2$ ) Sia  $\{P_k\}_{k \in \mathbb{R}^2}$  una famiglia di proiettori ortogonali che soddisfa l'assunzione 1, e sia  $\hat{U} : \partial(EBZ) \rightarrow \mathcal{U}(\mathbb{C}^m)$  una mappa continua tale che  $\hat{\Phi}(k) = \hat{U}(k)\Psi(k)$ . Allora esiste un Bloch frame simmetrico continuo e globale  $\Phi$  per  $\{P_k\}_{k \in \mathbb{R}^2}$  se e solo se

$$\deg([\text{Det}\hat{U}]) = 0 \pmod{2}.$$

L'indice

$$\delta(P) := \deg([\text{Det}\hat{U}]) \pmod{2} \quad (4.1)$$

è l'invariante topologico  $\mathbb{Z}_2$  che rappresenta un'ostruzione per l'esistenza di un Bloch frame simmetrico, continuo e globale associato alla famiglia di proiettori  $\{P_k\}_{k \in \mathbb{R}^2}$ .

L'indice  $\delta$  è definito come l'ordine topologico di  $[\text{Det}\hat{U}]$ , perciò sembrerebbe dipendere dalla scelta del frame  $\Psi$  da cui siamo partiti per trovare il Bloch frame simmetrico  $\hat{\Phi}$  su  $\partial(EBZ)$ .

Si può dimostrare tuttavia, che il valore di  $\delta(P)$  non dipende da tale scelta e che non dipende nemmeno dalla scelta della base  $\{e_1, e_2\}$  per il reticolo reciproco  $\Lambda$ .

Concludiamo questa parte enunciando, senza dimostrazione [12], il seguente teorema che mette in relazione l'indice  $\delta(P)$  con l'indice trovato da Fu-Kane:  $\Delta = P_\theta(T/2) - P_\theta(0) \pmod{2}$ .

**Teorema 3.** Sia  $\{P_k\}_{k \in \mathbb{R}^2}$  una famiglia di proiettori che soddisfa l'assunzione 1,  $\delta(P) := \deg([\text{Det}\hat{U}]) \in \mathbb{Z}_2$  l'indice topologico che rappresenta un'ostruzione nella costruzione di un Bloch frame simmetrico continuo e globale e sia  $\Delta \in \mathbb{Z}_2$  l'indice di Fu-Kane. Allora i due indici topologici sono equivalenti:

$$\delta = \Delta \in \mathbb{Z}_2.$$

### 4.3 Costruzione di un Bloch frame simmetrico nel caso $d=3$

In questa parte ci limiteremo a dare un'idea del procedimento necessario per definire un Bloch frame simmetrico, continuo e globale nel caso di un isolante 3-dimensionale.

Sia

$$BZ^{(3)} := \left\{ k = \sum_{j=1}^3 c_j e_j : -1/2 \leq c_j \leq 1/2; j = 1, 2, 3 \right\}$$

la zona di Brillouin nel caso tridimensionale, dove  $\{e_1, e_2, e_3\}$  è una base del reticolo reciproco e quindi  $\Lambda = \text{Span}_{\mathbb{Z}}\{e_1, e_2, e_3\}$ . Per sistemi time-reversal invarianti, possiamo definire un Bloch frame simmetrico sulla zona di Brillouin effettiva

$$EBZ^{(3)} := \{k = (k_1, k_2, k_3) \in BZ^{(3)} : k_1 \geq 0\}$$

e, se soddisfa le condizioni (1) e le condizioni di bordo (2) imposte dalla periodicità del reticolo, possiamo estenderlo su tutto  $\mathbb{R}^3$  applicando delle traslazioni  $\tau$ . Supponiamo, come fatto nel caso  $d=2$ , di avere un qualsiasi Bloch frame  $\Psi(k)$ ,  $k \in EBZ^{(3)}$  definito sulla zona di Brillouin effettiva, e chiamiamo  $U(\cdot) : k \mapsto U(k) \in \mathcal{U}(\mathbb{C}^m)$  la mappa la cui immagine  $U(k)$  è una matrice unitaria che trasforma il frame  $\Psi(k)$  nel Bloch frame simmetrico  $\Phi(k)$ :

$$\Phi(k) = U(k)\Psi(k), \text{ per } k \in EBZ^{(3)} \setminus \partial(EBZ^{(3)}).$$

La mappa  $U(k)$  definita sulla parte interna della zona di Brillouin effettiva può essere facilmente estesa ai bordi 1-dim,  $\partial_1(EBZ^{(3)})$ . Adesso, però, dobbiamo estendere la definizione di  $U(k)$  anche a  $\partial_2(EBZ^{(3)})$  che è composto da sei facce:

$$\begin{aligned} F_{1,0} &:= \{(k_1, k_2, k_3) \in \partial(EBZ^{(3)}) : k_1 = 0\}, \\ F_{1,+} &:= \{(k_1, k_2, k_3) \in \partial(EBZ^{(3)}) : k_1 = 1/2\}, \\ F_{i,\pm} &:= \{(k_1, k_2, k_3) \in \partial(EBZ^{(3)}) : k_i = \pm 1/2\}, \quad i = 2, 3. \end{aligned}$$

Consideriamo prima il caso  $i=2,3$ . Con lo stesso procedimento fatto precedentemente per il sistema bidimensionale si arriva alla conclusione che, per estendere  $U(\cdot)$  dai bordi alle facce  $F_{i,\pm}$ , è necessario che gli indici associati  $\delta_{i,\pm}$  siano nulli. Questi quattro indici, però, non sono indipendenti tra loro perché  $\delta_{i,+} = \delta_{i,-}$  per  $i=2,3$ , dunque per ora abbiamo solo due invarianti  $\mathbb{Z}_2$  indipendenti:  $\delta_{2,+}$  e  $\delta_{3,+}$ . Per quanto riguarda il caso  $i=1$  invece, si ha che gli indici  $\delta_{1,0}$  e  $\delta_{1,+}$  devono essere nulli affinché sia possibile estendere il Bloch frame rispettivamente sulle facce  $F_{1,0}$  e  $F_{1,+}$ . In generale quindi, questi quattro invarianti  $\mathbb{Z}_2$  rappresentano un ostacolo all'estensione di un Bloch frame simmetrico dai bordi  $\partial_1(EBZ^{(3)})$  alle facce  $\partial_2(EBZ^{(3)})$ .

Supponiamo ora di essere nella situazione in cui  $\delta_{1,0} = \delta_{1,+} = \delta_{2,+} = \delta_{3,+} = 0$ , ovvero di essere in grado di trovare una mappa  $\hat{U} : \partial(EBZ) \rightarrow \mathcal{U}(\mathbb{C}^m)$  tale che

$$\hat{\Phi}(k) = \hat{U}(k)\Psi(k)$$

è un Bloch frame simmetrico. Allora, per trovare un Bloch frame simmetrico e continuo definito su tutta la zona di Brillouin effettiva, è sufficiente estendere questa mappa  $\hat{U}$  ad una mappa  $U : EBZ^{(3)} \rightarrow \mathcal{U}(\mathbb{C}^m)$ . Nel nostro caso, osservando che  $\partial(EBZ^{(3)}) \simeq \mathbb{S}^2$  e che il gruppo di omotopia  $\pi_2(\mathcal{U}(\mathbb{C}^m)) = 0$ , concludiamo che in tre dimensioni è possibile estendere in modo continuo una mappa dal bordo  $\partial(EBZ^{(3)})$  a tutta  $EBZ^{(3)}$  e quindi, sfruttando la proposizione 1, su tutto  $\mathbb{R}^3$ .

Il teorema seguente racchiude tutto quello che abbiamo detto finora per il caso tridimensionale.

**Teorema 4.** ( $d=3$ ) Sia  $\{P_k\}_{k \in \mathbb{R}^3}$  una famiglia di proiettori che soddisfa l'assunzione 1. Allora esiste un Bloch frame simmetrico, continuo e globale per  $\{P_k\}_{k \in \mathbb{R}^3}$  se e solo se

$$\delta_{1,0}(P) = \delta_{1,+}(P) = \delta_{2,+}(P) = \delta_{3,+}(P) = 0,$$

dove  $\delta_{1,0}(P)$ ,  $\delta_{1,+}(P)$ ,  $\delta_{2,+}(P)$ ,  $\delta_{3,+}(P) \in \mathbb{Z}_2$  sono definiti come:

$$\delta_*(P) := \delta(P|_{F_*}), \quad F_* \in \{F_{1,0}, F_{1,+}, F_{2,+}, F_{3,+}\}.$$

Inoltre, in tal caso questo Bloch frame può essere costruito esplicitamente.

# Struttura a bande caratterizzata dagli invarianti $\mathbb{Z}_2$ e stati di bordo

Nel 2007, L. Molenkamp et al. [8] sono riusciti a realizzare uno stato QSHE utilizzando dei cristalli di HgTe. Il tellururo di mercurio è un semiconduttore, ed è stato dimostrato sperimentalmente che il pozzo quantico di questo materiale si comporta come un isolante topologico  $\mathbb{Z}_2$ . Dunque, mentre l'interno è un isolante, sui bordi si possono osservare delle correnti anche in assenza di un campo magnetico esterno (diversamente da quanto accade negli isolanti di Chern in cui è necessario un campo magnetico per osservare bordi metallici). La conduttanza di Hall risulta non nulla a causa della presenza di stati di bordo gapless chirali che sono in grado di accettare e donare elettroni. La presenza di tali stati induce la non banalità dell'isolante topologico.

Analizziamo, per semplicità, un materiale isolante bidimensionale attraversato da un campo magnetico perpendicolare ad esso. Se consideriamo condizioni al contorno periodiche nella direzione  $x$  e posizioniamo i bordi nella direzione  $z$ , possiamo avvolgere il campione lungo  $\hat{x}$  ed ottenere, così, un cilindro con circonferenza pari al parametro di cella  $a_x$ . In questo modo, lungo il cilindro, il momento  $k_x$  è un buon numero quantico. All'interno di questo cilindro inseriamo un flusso  $\Phi$ , parallelo a  $\hat{z}$ , che serve a controllare il momento  $k_x$ <sup>1</sup> ed applichiamo una differenza di potenziale tra le due estremità. Sulla superficie si svilupperà una corrente descritta dall'operatore

$$\mathcal{J}_x(k_x) = \frac{\partial H}{\partial k_x} = \frac{a_x}{2\pi} \frac{\partial H}{\partial \Phi}.$$

Calcolando il valore medio di tale operatore e discretizzando otteniamo<sup>2</sup>:

$$I_x = \frac{\Delta E}{\Delta \Phi},$$

dove  $\Delta E$  è la variazione di energia dovuta all'inserimento del flusso  $\Phi$  nel cilindro.

Il campo elettrico prodotto dalla differenza di potenziale tra le due estremità, fa aumentare l'energia delle bande e quindi alcune di esse potranno intersecare il livello di Fermi. Se consideriamo un singolo quanto di flusso ( $\Delta \Phi = 1$ ), il momento  $k_x$  di tutti gli stati occupati aumenta di una quantità  $2\pi/a_x$ . Questo significa che ogni singola banda che interseca il livello di Fermi, ha un momento occupato ad energia  $E > E_F$  in prossimità di una faccia e un momento non occupato ad energia  $E < E_F$  sulla faccia opposta del cilindro. Tra le due facce, però, è applicata una differenza di potenziale  $V_z$ ; quindi, l'energia  $\Delta E$  deve corrispondere all'energia necessaria

---

<sup>1</sup>Il flusso  $\Phi$  fa cambiare il momento  $k_x$  all'interno dell'Hamiltoniana:

$$k_x \rightarrow k_x + \frac{2\pi}{a_x} \Phi.$$

<sup>2</sup>A meno del fattore moltiplicativo  $a_x/2\pi$ .

per far passare da una faccia all'altra gli  $n$  elettroni (se le bande che intersecano il livello di Fermi sono  $n$ ):

$$\Delta E = neV_z.$$

Siccome stiamo considerando  $\Delta\Phi = 1$ , si ha che  $ne = I_x/V_z$  e dunque la conduttanza di Hall sarà non nulla:

$$\sigma_{xz} := \frac{I_x}{V_z} = n,$$

in unità di  $e^2/h$ .

Questo è l'argomento di Laughlin che mostra la profonda connessione tra la conduttanza di Hall e l'esistenza di stati di bordo in isolanti di Chern. Allo stesso modo, si può collegare l'effetto Hall quantistico di spin con la presenza di stati di bordo, o di superficie, in isolanti topologici  $\mathbb{Z}_2$ . L'invariante topologico  $\mathbb{Z}_2$ , che caratterizza la struttura a bande di un sistema bidimensionale, può essere costruito immaginando un cilindro con assi paralleli ad un vettore  $\mathbf{G}$  del reticolo reciproco e con circonferenza pari al parametro di cella. Questo cilindro, in due dimensioni, è attraversato da un campo magnetico il cui flusso  $\Phi = 0, \pi\hbar/e$  corrisponde rispettivamente ai TRIM di superficie  $k_x = \Lambda_1$  e  $k_x = \Lambda_2$ . In tre dimensioni invece, il cilindro è difficile da visualizzare, tuttavia, si può pensare ad un toro con una superficie interna ed una esterna perché topologicamente equivalente. In quest'ultimo caso avremo quattro TRIM di superficie, anziché due, e quindi avremo due flussi  $\Phi_1 \sim k_x$  e  $\Phi_2 \sim k_y$ .

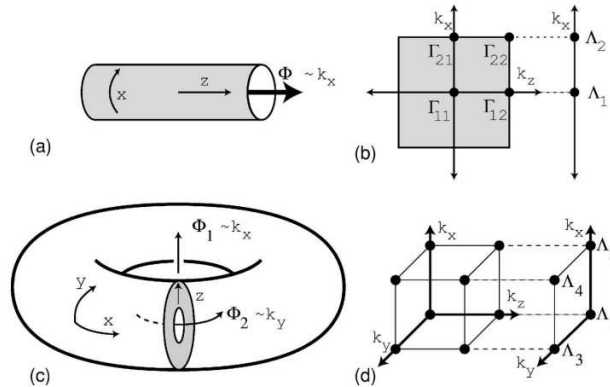


Figura 5.1: (a) Cilindro 2-dim attraversato da un flusso  $\Phi$  che, quando il cilindro ha la circonferenza pari al parametro di cella della zona di Brillouin, gioca il ruolo di  $k_x$  (b) I flussi  $\Phi = 0$  e  $\Phi = \pi\hbar/e$  corrispondono rispettivamente ai TRIM di bordo  $\Lambda_1$  e  $\Lambda_2$ . (c) In tre dimensioni il cilindro può essere visualizzato con il "Corbino donut", dove i due flussi  $\Phi_1$  e  $\Phi_2$  controllano i momenti  $k_x$  e  $k_y$ . (d) I quattro flussi  $\Phi_1, \Phi_2 = 0, \pi\hbar/e$  corrispondono ai quattro TRIM di superficie  $\Lambda_a$ .

Gli invarianti sono legati alla polarizzazione time-reversal, che segnala la presenza di una degenerazione di Kramer sulla superficie corrispondente quando il flusso cambia da 0 a  $\pi\hbar/e$ , e possono essere rappresentati in termini delle quantità

$$\delta_i = \frac{\sqrt{\text{Det}[w(\Gamma_i)]}}{\text{Pf}[w(\Gamma_i)]} = \pm 1.$$

La polarizzazione associata al TRIM di superficie  $\Lambda_a$ ,

$$\pi_a = \delta_{a1}\delta_{a2},$$

non è una quantità invariante, infatti una trasformazione di gauge del tipo (3.1) trasforma:

- $\text{Det}[w(\mathbf{k})] \rightarrow \text{Det}[w(\mathbf{k})]e^{-i(\theta_{\mathbf{k}}+\theta_{-\mathbf{k}})}$ ;
- $\text{Pf}[w(\Gamma_i)] \rightarrow \text{Pf}[w(\Gamma_i)]e^{-i\theta_{\Gamma_i}}$ .

Se scegliamo  $\theta_{\mathbf{k}} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}$ , dove  $\mathbf{R}$  è un vettore del reticolo reciproco, è chiaro che il determinante della matrice di sewing non cambia, mentre dal fatto che  $\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2\pi$  segue che  $\text{Pf}[w(\Gamma_{a1})]\text{Pf}[w(\Gamma_{a2})]$ , e quindi  $\pi_a$ , cambia segno perché  $\Gamma_{a2} - \Gamma_{a1} = \mathbf{G}/2$ . Dal momento che questa trasformazione di gauge cambia il segno di  $\pi_a$  per ogni  $a$ , il prodotto  $\pi_a\pi_b$  rimane invariato. In generale quindi, il prodotto tra quattro  $\delta_i$ , associati ai TRIM  $\Gamma_i$  che si trovano nello stesso piano, è gauge invariante e definisce un invariante topologico.

Sappiamo che per un sistema con spin semintero vale  $\Theta^2 = -\mathbb{1}$  ed una conseguenza di ciò è che, per il teorema di Kramer, tutti i sistemi con simmetria time-reversal hanno autostati dell'Hamiltoniana degeneri.

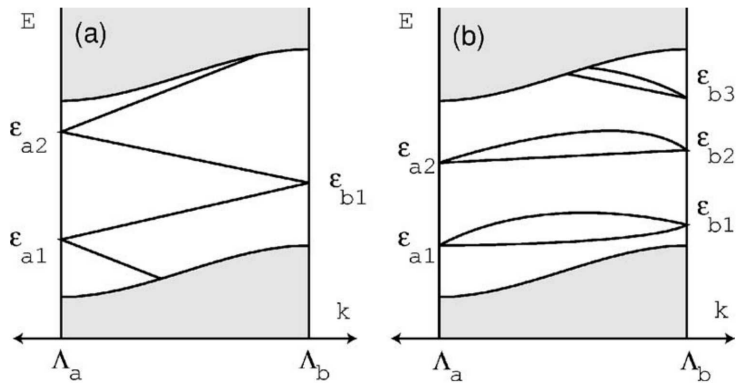


Figura 5.2: Dispersione elettronica tra due punti TRIM di bordo con degenerazione di Kramer. In (a) il numero stati di bordo che intersecano l'energia di Fermi  $E_F$  è dispari, mentre in (b) è pari. Un numero dispari di intersezioni corrisponde a degli stati di bordo conduttivi che sono topologicamente protetti.

In Fig. 5.2 è rappresentato lo spettro energetico di un isolante  $\Theta$  invariante bidimensionale, in funzione della sola componente  $x$  del momento  $\mathbf{k} = (k_x, k_z)$  e contenente degli stati di bordo all'interno del gap tra banda di valenza e banda di conduzione (la presenza di questi stati dipende dalla forma dell'Hamiltoniana). In particolare sono rappresentati solo gli stati in un'estremità del cilindro. Il teorema di Kramer fa sì che questi stati abbiano una doppia degenerazione ( $\text{deg}=2$ ) in corrispondenza dei TRIM di superficie  $\Lambda_a = 0$  e  $\Lambda_b = \pi/a$  contenuti nella zona di Brillouin effettiva, mentre nel resto dei punti l'interazione spin orbita splitta i livelli energetici eliminando la degenerazione. In Fig. 5.2(a) le coppie di Kramer si scambiano gli stati passando da  $\Lambda_a$  a  $\Lambda_b$  (o viceversa), mentre in Fig. 5.2(b) no.

Questi due casi sono distinti dall'invariante  $\mathbb{Z}_2$ , che caratterizza il valore della polarizzazione del cilindro quando il flusso cambia dal valore corrispondente a  $\Lambda_a$  ( $\Phi_a$ ), al valore corrispondente a  $\Lambda_b$  ( $\Phi_b$ ). Supponiamo che, per un flusso  $\Phi = \Phi_a$ , lo stato fondamentale non sia affetto da degenerazione e che tutti gli stati ad energia superiore, fino al doppietto  $\epsilon_{a1}$  compreso, siano occupati. Se facciamo variare adiabaticamente il flusso da  $\Phi = \Phi_a$  a  $\Phi = \Phi_b$ , per la figura 5.2(a) un elettrone andrà ad occupare lo stato  $\epsilon_{b1}$  mentre l'altro elettrone andrà verso lo stato fondamentale, che diventa dunque degenere. Per la figura 5.2(b) invece, lo stato fondamentale rimane privo di degenerazione ed entrambi gli elettroni vanno ad occupare lo stato degenere  $\epsilon_{b1}$ . In base al valore dell'invariante  $\pi_a\pi_b = -1(+1)$ , lo spettro di superficie sarà simile a Fig. 5.2(a) (5.2b).

Questi due diversi scenari possono essere distinti l'uno dall'altro osservando che, se  $\pi_a\pi_b = -1(+1)$ , il livello di Fermi sarà attraversato un numero dispari (pari) di volte dagli stati di bordo.

Quindi un numero di intersezioni dispari corrisponde a stati di bordo, se presenti, topologicamente protetti, mentre un numero pari di intersezioni corrisponde al caso in cui eventuali stati di bordo presenti all'interno del gap possono essere eliminati mediante trasformazioni continue dei parametri dell'Hamiltoniana, senza cambiarne dunque la topologia associata.

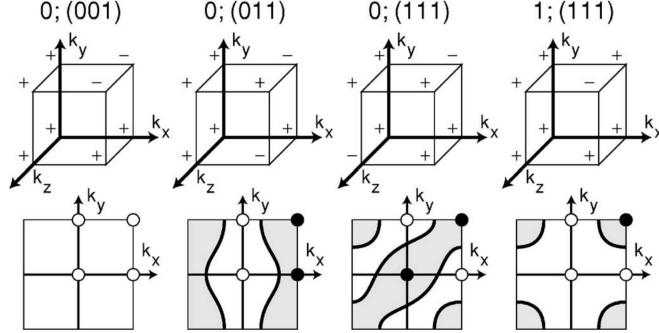


Figura 5.3: Immagine raffigurante quattro diverse fasi indicizzate da  $\Delta_0; (\Delta_1\Delta_2\Delta_3)$ . (a) mostra i coefficienti  $\delta_i$  per i TRIM  $\Gamma_i$  ai vertici del cubo. (b) mostra la superficie 001 per ogni fase. I TRIM di superficie  $\Lambda_a$  sono rappresentati con dei cerchi pieni (vuoti) se  $\pi_a = \delta_{a_1}\delta_{a_2} = -1(+1)$ . Le linee nere rappresentano gli archi di Fermi che delimitano la zona di Fermi (in grigio).

In tre dimensioni ci sono 8 diversi TRIM, che in Fig. 5.3 sono rappresentati dai vertici del cubo, quindi complessivamente sono possibili 16 diverse configurazioni di  $\delta_i$ . Queste configurazioni possono essere distinte tra loro, non da 1 come nel caso di isolanti 2-dim, ma da ben quattro invarianti topologici  $\mathbb{Z}_2$ :  $\Delta_0; (\Delta_1\Delta_2\Delta_3)$ ; che sono definiti come

$$(-1)^{\Delta_0} = \prod_{i=1}^8 \delta_i,$$

$$(-1)^{\Delta_k} = \prod_{n_k=1; n_j \neq k=0,1} \delta_{i=(n_1 n_2 n_3)}.$$

Generalizzando l'argomento di Laughlin in tre dimensioni, possiamo considerare un sistema con due direzioni periodiche:  $\hat{x}$  e  $\hat{y}$ ; e questo può essere visualizzato come un "Corbino donut", ovvero come un toro con una superficie interna ed una superficie esterna. In questo modo, possiamo classificare la degenerazione di Kramer presente sulle superfici in funzione del valore dei due flussi che attraversano il toro.

Una superficie,  $\Sigma$ , ortogonale ad un vettore del reticolo reciproco  $\mathbf{G}$  possiede quattro TRIM di superficie  $\Lambda_a$ , che sono la proiezione su  $\Sigma$  delle coppie  $\Gamma_{a_1}$  e  $\Gamma_{a_2}$  tali che  $\Gamma_{a_2} - \Gamma_{a_1} = \mathbf{G}/2$ . Questi punti  $\Lambda_a$  sono detti punti di Dirac e, come mostrato in Fig. 5.3, il valore di  $\pi_a = \delta_{a_1}\delta_{a_2}$  determina come sono connessi tra loro. Per due diversi TRIM di superficie  $\Lambda_a$  e  $\Lambda_b$ , se  $\pi_a\pi_b = -1(+1)$ , la struttura a bande della superficie sarà come quella rappresentata in Fig. 5.2(a) (5.2b) e gli stati di superficie incontreranno un numero dispari (pari) di volte il livello di Fermi. Nella parte inferiore di Fig. 5.3 è mostrata la superficie (001) in cui i vertici, che rappresentano i quattro punti di Dirac  $\Lambda_a$ , sono rappresentati con dei cerchi pieni se  $\pi_a = \delta_{a_1}\delta_{a_2} = -1$  e con dei cerchi vuoti se  $\pi_a = \delta_{a_1}\delta_{a_2} = +1$ . Inoltre, in figura sono evidenziati gli archi di Fermi che contengono la zona di Fermi dividendo la superficie di Brillouin in due regioni.

In base al valore di  $\Delta_0$  si possono distinguere due diverse classi di fasi. Per  $\Delta_0 = 0$  ogni faccia ha 0 o 2 punti di Dirac all'interno della zona di Fermi, ed in quest'ultimo caso le fasi possono



essere interpretate come degli stati QSH <sup>3</sup> che si estendono lungo la direzione  $\mathbf{G}_\Delta = \sum_i \Delta_i \mathbf{e}_i$  ( $\mathbf{e}_i$  sono i vettori di base del reticolo reciproco). La presenza o l'assenza di stati di superficie nelle fasi  $\Delta_0 = 0$  è una questione delicata. Per la fase 0;(001) in Fig 5.3, la faccia 100 ha due punti di Dirac, mentre la faccia 001 ne ha 0; quindi a causa di questa sensibilità traslazionale gli stati di superficie saranno localizzati all'interno della zona di Brillouin. Per questo motivo le fasi caratterizzate da  $\Delta_0 = 0$  sono dette isolanti topologici "deboli". Le fasi caratterizzate da  $\Delta_0 = 1$  invece, sono più robuste perché la zona di Fermi contiene 1 o 3 punti di Dirac su ogni faccia, e per questo motivo ci riferiamo ad esse con il termine: isolanti topologici "forti".

---

<sup>3</sup>Stati Hall quantistici di spin.

# Conclusioni

Dopo aver introdotto brevemente il numero di Chern [1], abbiamo discusso l'ordine topologico in isolanti con Hamiltoniana time-reversal simmetrica e spin semintero. In particolare, abbiamo definito la polarizzazione time-reversal [2] sulla falsa riga di quanto fatto per la polarizzazione di carica, e poi trovato un indice topologico  $\mathbb{Z}_2$  invariante per trasformazioni di gauge: l'invariante della matrice di sewing introdotto inizialmente da Fu e Kane. Nel caso di sistemi simmetrici anche per inversione spaziale, abbiamo trovato un modo per calcolare questo indice a partire dai soli autovalori di parità degli autostati di Bloch.

L'invariante FKM può essere interpretato come un'ostruzione al teorema di Stokes a causa dell'impossibilità di definire degli autostati di Bloch continui su tutta la zona di Brillouin. Da un punto di vista geometrico invece, l'invariante FKM può essere interpretato come un'ostruzione all'esistenza di un Bloch frame simmetrico, continuo e globale. Si può dimostrare che, per  $d \leq 3$ , la banalità del fibrato di Bloch è determinata da un numero di Chern  $C=0$  e, visto che  $C$  deve essere necessariamente nullo per sistemi time-reversal simmetrici, per isolanti topologici  $\mathbb{Z}_2$  il fibrato di Bloch è banale [10]. Infine, abbiamo visto che un ordine topologico  $\mathbb{Z}_2$  non nullo corrisponde al caso in cui eventuali stati di bordo o di superficie sono topologicamente protetti, ed in tal caso si osserveranno dei fenomeni conduttivi sulla superficie del materiale [6].

# Bibliografia

- [1] B. A. Bernevig. *Topological Insulators and Topological Superconductors*. Princeton University Press, 2013.
- [2] L. Fu and C. L. Kane. Time reversal polarization and a  $Z_2$  adiabatic spin pump. *Phys. Rev. B* *74*, 195312, 2006.
- [3] L. Fu and C. L. Kane. Topological insulators with inversion symmetry. *Phys. Rev. B* *76*, 045302, 2007.
- [4] L. Fu, C. L. Kane, and E. J. Mele. Topological insulators in three dimensions. *Phys. Rev. Lett.* *98*, 106803, 2007.
- [5] L.-K. Hua. On the theory of automorphic functions of a matrix variable – geometrical basis. *Am. J. Math.* *66*, 1944.
- [6] C. L. Kane. Topological band theory and the  $Z_2$  invariant. *Marcel Franz, Laurens Molenkamp, Contemporary Concepts of Condensed Matter Science, Elsevier*, 2013.
- [7] C. L. Kane and E. J. Mele.  $Z_2$  topological order and the quantum spin Hall effect. *Phys. Rev. Lett.* *95*, 2005.
- [8] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang. Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells. *Science* *318* 766–770., 2007.
- [9] M. Nakahara. *Geometry, Topology and Physics*. IoP, 2003.
- [10] G. Panati. Triviality of Bloch and Bloch-Dirac bundles. *Ann. H. Poincaré* *8* 995–1011, 2007.
- [11] G. Panati, D. Fiorenza, and D. Monaco. Construction of real-valued localized composite Wannier functions for insulators. *Ann. Henri Poincaré*, *17*, 2016.
- [12] G. Panati, D. Fiorenza, and D. Monaco.  $Z_2$  invariants of topological insulators as geometric obstructions. *Commun. Math. Phys.* *343*, 1115-1157, 2016.