XI. BB-СООТВЕТСТВИЕ

В этой главе строится BB(bulk-boundary)-соответствие между топологическими инвариантами твердого тела и его границы. Формулировка основного результата приводится в параграфе 1. В частном случае моделей из периодического унитарного класса удается построить BB-соответствия явным образом, следуя [17]. Это делается в параграфах 2 и 3.

1. BB-отображение

Короткая точная последовательность из предыдущего параграфа порождает длинную точную последовательность гомоморфизмов KR-групп

$$\ldots \longrightarrow KR_{s-r+2}(A_0^W) \xrightarrow{i^*} KR_{s-r+2}(\widehat{A}^W) \xrightarrow{\rho^*} KR_{s-r+2}(A^W) \longrightarrow$$
$$\xrightarrow{\partial} KR_{s-r+1}(A_0^W) \xrightarrow{i^*} KR_{s-r+1}(\widehat{A}^W) \xrightarrow{\rho^*} KR_{s-r+1}(A^W) \longrightarrow \ldots .$$

Граничное отображение $\partial : KR_{s-r+2}(A^W) \longrightarrow KR_{s-r+1}(A_0^W)$ называется *BB-отображением*.

Теорема 1 ([1]). *Фиксируем W-совместимую комплексную структуру $(J_{ref}, \phi) \in \mathcal{J}_{r,s}(A^W)$ индекса симметрии (r, s). Тогда для любой W-совместимой комплексной структуры $(J, \phi) \in \mathcal{J}_{r,s}(A^W)$ индекса симметрии (r, s) имеет место равенство*

$$\partial[(J, \phi)] = [(J, \phi)]_0.$$

Иначе говоря, BB-отображение переводит класс $[(J, \phi)]$, отвечающий классу (J, ϕ) твердого тела, в граничный класс $[(J, \phi)]_0$.

Доказательство этой теоремы можно найти в статье [1].

2. BB-соответствие в унитарном классе

Рассмотрим системы из *унитарного класса*, которые выделяются условием, что их эволюция во времени задается унитарным преобразованием. Тем самым, гамильтоновы операторы, порождающие эту эволюцию, являются самосопряженными. Трансляционно-инвариантные гамильтонианы из унитарного класса можно записать в виде

$$H : \ell^2(\mathbb{Z}^d) \otimes \mathbb{C}^N \longrightarrow \ell^2(\mathbb{Z}^d) \otimes \mathbb{C}^N,$$

где

$$H = \sum_{y \in \mathbb{Z}^d} S^y \otimes W_y.$$

Оператор S^y, задающийся трансляцией на вектор y в пространстве $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$, равен $S^y(x) = x + y$, а $N \times N$-матрицы W_y, называемые *туннельными* или *матрицами подскока*, удовлетворяют единственному соотношению

$$W_y^* = W_{-y},$$

гарантирующему самосопряженность H. Будем предполагать, что суммирование в рассматриваемых формулах ограничивается конечным множеством значений $\mathcal{R} \subset \mathbb{Z}^d$ (условие локальности). В этом случае также говорят, что гамильтониан H имеет конечный диапазон подскоков.

Блоховский гамильтониан H_k является оператором, действующим в $\mathbb{C}^N$ по формуле

$$H_k = \sum_{y \in \mathcal{R}} e^{iy \cdot k} W_y.$$

Нетривиальные топологические фазы могут существовать только в четных размерностях и в каждой такой размерности имеется счетное число топологических фаз. Они различаются с помощью топологического инварианта, наазываемого *высшим четным числом Черна*, который определяется формулой

$$\mathrm{Ch}_d(P_F) = \frac{(2\pi i)^{d/2}}{(d/2)!} \sum_{\rho \in S_d} (-1)^{\operatorname{sgn}\rho} \int_{\mathbb{T}^d} \mathrm{tr} \left(P_F(k) \prod_{j=1}^{d} \frac{\partial P_F(k)}{\partial k_{\rho_j}} \right) \frac{dk}{(2\pi)^d},$$

где $P_F(k) = \chi(H_k \leq E_F)$ – спектральный проектор на множество уровней энергии ниже энергии Ферми E_F, называемый *проектором Ферми*.

Граница тела задается ограничением рассматриваемой системы на полупространство $\mathbb{Z}^{d-1} \times \mathbb{N}$ с наложением условия Дирихле при $x_d = 0$. Получаемый при этом полупространственный гамильтониан $\widehat{H}$ будет действовать в гильбертовом пространстве $\ell^2(\mathbb{Z}^{d-1} \times \mathbb{N}) \otimes \mathbb{C}^N$.

Характерной чертой топологических диэлектриков из рассматриваемого класса является наличие энергетических зон, связывающих уровни энергии, лежащие выше и ниже энергии Ферми. При $d > 2$ на таких граничных зонах могут появляться сингулярности, называемые *точками Дирака*. Вблизи от этих точек, обозначаемых через $k^D \in \mathbb{T}^{d-1}$, спектр и состояние системы описываются *оператором Дирака* вида

$$\sum_{j=1}^{d-1} \nu_j (k_j - k_j^D) \widehat{\gamma}_j,$$

где $\widehat{\gamma} = (\widehat{\gamma}_1, \ldots, \widehat{\gamma}_{d-1})$ являются образующими неприводимого представления комплексной алгебры Клиффорда $\mathbb{C}l_{d-1}$, а $\nu = (\nu_1, \ldots, \nu_{d-1})$ – набор ненулевых вещественных чисел ν_j, называемых наклонами уровней энергии.

Киральностью точки Дирака называется величина

$$\nu_D = \prod_{j=1}^{d-1} \operatorname{sgn} \nu_j \in \{-1, 1\}.$$

Эта величина инвариантна относительно непрерывных деформаций, оставляющих точки Дирака отделенными друг от друга.

ВВ-принцип для унитарного класса утверждает, что

$$\mathrm{Ch}_d(P_F) = \sigma \sum \nu_D, \tag{1}$$

где $\sigma = \pm 1$, а суммирование ведется по всем точкам Дирака. Иначе говоря, при деформации системы сингулярности Дирака могут перемещаться, но при этом сумма киральностей остается постоянной и равной (с точностью до знака) топологическому инварианту тела. Множитель σ есть знак, который зависит от выбора неприводимого $(d-1)$-мерного представления алгебры Клиффорда (напомним, что в случае четного d имеются два неэквиваленных $(d-1)$-мерных неприводимых представления этой алгебры).

3. ВВ-соответствие для периодической модели

Рассмотрим в качестве примера *периодическую модель* из унитарного класса, для которой удается явно вычислить введенные выше инварианты тела и границы (см. [17]). Обозначим через e_j базисные векторы на $\mathbb{Z}^d$ и через S_j отвечающие им операторы сдвига на $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$.

Гильбертово пространство рассматриваемой модели совпадает с $\mathbb{C}^N \otimes \ell^2(\mathbb{Z}^d)$, где $N = 2^{d/2}$. Трансляционно-инвариантный гамильтониан, действующий в этом пространстве, имеет вид

$$H = \frac{1}{2i} \sum_{j=1}^{d} \gamma_j \otimes (S_j - S_j^*) + \gamma_0 \otimes (m + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{d} (S_j + S_j^*)), \tag{2}$$

где $\gamma_1, \ldots, \gamma_d$ задают неприводимое представление комплексной алгебры Клиффорда $\mathbb{C}l_d$ в $\mathbb{C}^N$, $\gamma_0 = (-1)^{d/2} \gamma_1 \cdot \ldots \cdot \gamma_d$, m – целое число. Предполагается, что энергия Ферми $E_F = 0$.

Блоховский гамильтониан периодической модели имеет вид

$$H_k = \sum_{j=1}^{d} \gamma_j \sin(k_j) + \gamma_0 (m + \sum_{j=1}^{d} \cos(k_j)).$$

Поскольку оператор H_k^2 пропорционален тождественному, у H_k имеется только два собственных значения, равных

$$E_k^{\pm} = \pm\sqrt{\sum_{j=1}^{d}\sin^2(k_j) + (m + \sum_{j=1}^{d}\cos(k_j))^2}. \tag{3}$$

Отсюда следует, что в рассматриваемой модели имеются два $(d/2)$-кратных энергетических уровня, расположенных симметрично относительно $E_F = 0$. При всех m, кроме $m = 0, \pm 2, \dots, \pm d$, наша система будет обладать энергетической щелью на уровне энергии Ферми. В точках $m = 0, \pm 2, \dots, \pm d$ щель закрывается и происходит топологический фазовый переход.

Критические значения m_c и точки Дирака k^D можно найти из формулы (3), накладывая условия закрытия щели, имеющие вид

$$\sum_{j=1}^{d}\sin^2(k_j) = 0 \quad \text{и} \quad m + \sum_{j=1}^{d}\cos(k_j) = 0.$$

Из этих условий вытекает, что точки Дирака имеют вид $k^D = (\delta_1, \dots, \delta_d)$, где δ_j равны 0 или π. Приведем таблицу критических значений и отвечающих им точек Дирака:

$$\begin{cases} m_c^0 = -d, & k^D = (0, 0, \dots, 0) \\ m_c^1 = -d + 2, & k^D = (\pi, 0, \dots, 0) \quad \text{плюс } \binom{d}{1} \text{ перестановок} \\ m_c^2 = -d + 4, & k^D = (\pi, \pi, 0, \dots, 0) \quad \text{плюс } \binom{d}{2} \text{ перестановок} \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots & \\ m_c^{d-1} = d - 2, & k^D = (\pi, \dots, \pi, 0) \quad \text{плюс } \binom{d}{d-1} \text{ перестановок} \\ m_c^d = d, & k^D = (]pi, \dots, \pi) \end{cases}$$

Можно также вычислить скачки числа Черна в точках Дирака. В окрестности этих точек, т.е. при $m = m_c + \varepsilon$, блоховский гамильтониан допускает асимптотическое представление вида

$$H_k = \sum_{j=1}^{d}\alpha_j^D(k_j - k_j^D)\gamma_j + \varepsilon\gamma_0 + O(k^2)$$

где $\alpha_j^D = +1$ или -1, если $k_j^D = 0$ или π соответственно. Сделаем замену переменной $\alpha_j^D(k_j - k_j^D) \mapsto \xi_j$, так что

$$H_k = \sum_{j=1}^{d}\xi_j\gamma_j + \varepsilon\gamma_0 + O(k^2).$$

Вклад точек Дирака в полный класс Черна равен

$$\sigma \sum_{D} \prod_{j=1}^{d} \alpha_j^D.$$

Можно показать, что при $m \notin [-d, d]$ число Черна равно нулю, а при $m \in (-d+2n, -d+2n+2)$, $n = 0, \dots, d-1$, оно равно

$$\mathrm{Ch}_d(P_F) = \sigma \sum_{j=0}^{n} (-1)^j \binom{d}{j} = \sigma(-1)^n \binom{d-1}{n}. \tag{4}$$

Рассмотрим теперь граничный инвариант. Обозначим гамильтониан, задаваемый сужением H на гильбертово пространство $\mathbb{C}^N \otimes \ell^2(\mathbb{Z}^{d-1} \times \mathbb{N})$ с условием Дирихле при $x_d = 0$, через $\widehat{H}$. В этом случае блоховский гамильтониан имеет вид

$$\widehat{H}_k = \sum_{j=1}^{d-1} \sin(k_j)\gamma_j \otimes 1 + \frac{1}{2i}\gamma_d \otimes (\widehat{S} - \widehat{S}^*) + \gamma_0 \otimes (m + \sum_{j=1}^{d-1} \cos(k_j) + \frac{1}{2}(\widehat{S} + \widehat{S}^*)),$$

где $\widehat{S}$ – односторонний сдвиг на пространстве $\ell^2(\mathbb{N})$. Оператор $\widehat{H}_k$ действует на гильбертовом пространстве $\mathbb{C}^N \otimes \ell^2(\mathbb{N})$.

Решения уравнения Шредингера $\widehat{H}_k \psi_k = \widehat{E}_k \psi_k$ для $\widehat{E}_k$ внутри энергетической щели будем искать в виде

$$\psi_k(x) = \xi_k \otimes (\lambda_k)^x,$$

где $|\lambda_k| < 1$, $\xi_k \in \mathbb{C}^N$. Из уравнений Шредингера при $x_d > 0$ и условия Дирихле при $x_d = 0$ получаем два независимых уравнения, из которых выводятся необходимые условия разрешимости

$$(i\gamma_d + \gamma_0)\xi_k = 0 \quad \text{и} \quad \lambda_k = -(m + \sum_{j=1}^{d-1} \cos(k_j)).$$

Отсюда следут, что ξ_k является общим собственным вектором для двух коммутирующих матриц

$$-i\gamma_0\gamma_d\xi_k = -(-i)^{d/2+1}\gamma_1 \cdot \ldots \cdot \gamma_{d-1}\xi_k = \xi_k \tag{5}$$

и

$$\left[\sum_{j=1}^{d-1} \sin(k_j)\gamma_j\right] \xi_k = \widehat{E}_k \xi_k.$$

При $d = 2$ условие (5) эквивалентно соотношению $\gamma_1 \xi_k = \xi_k$, т.е. ξ_k – единственный собственный вектор матрицы γ_1, отвечающий положительному собственному значению, обозначаемому далее через ξ_+ и не зависящему от k. Уравнение Шредингера $\widehat{H}_k \psi_k = \widehat{E}_k \psi_k$ допускает при этом единственное решение внутри щели

$$\widehat{E}_k = \sin\, k,\ \psi_k = \frac{(\lambda_k)^x}{\sqrt{2(1-\lambda_k^2)}} \otimes \xi_+,\ \lambda_k = -(m+\cos\, k).$$

В этом случае в граничной зоне нет сингулярных точек и $\widehat{E} \sim \pm k$ вблизи $E = 0$. Киральность граничной зоны ν^D определяется условием $|\lambda_k| < 1$, эквивалентным условию

$$\cos\, k \in [-m-1, -m+1] \cap [-1, 1]. \tag{6}$$

Если $|m| > 2$, условие (6) не выполняется, поэтому граничных состояний нет. Если $m \in (-2, 0)$, то $k = 0$ удовлетворяет условию (6), а $k = \pi$ нет. Тем самым, наклон граничной зоны, равный $\cos\, k$, при пересечении уровня $E = 0$ положителен, также как киральность ν^D. При $m \in (0, 2)$ $k = \pi$ удовлетворяет условию (6), а $k = 0$ – нет. В этом случае наклон граничной зоны при пересечении уровня $E = 0$ и киральность отрицательны. Это согласуется с формулой (4) для числа Черна, что доказывает справедливость BB-соответствия в двумерном случае.

При $d > 2$ заметим, что матрица $-i\gamma_0\gamma_d$ в левой части равенства (5) является эрмитовой и коммутирует со всеми $\gamma_1, \ldots, \gamma_{d-1}$. Поэтому матрицы $\gamma_1, \ldots, \gamma_{d-1}$ задают неприводимое представление комплексной алгебры Клиффорда $\mathbb{C}l_{d-1}$. Обозначим через $\mathcal{L}$ линейное подпространство, порождаемое векторами ξ_k, удовлетворяющими условию (5), и рассмотрим линейные операторы $\widehat{\gamma}_j = \gamma_j 1_{\mathcal{L}}$ при $j = 1, \ldots, d-1$. Эти матрицы удовлетворяют соотношениям Клиффорда: $\widehat{\gamma}_i\widehat{\gamma}_j + \widehat{\gamma}_j\widehat{\gamma}_i = 2\delta_{ij}$, $i, j = 1, \ldots, d-1$, и условию $\widehat{\gamma}_1 \cdot \ldots \cdot \widehat{\gamma}_{d-1} = i^{(d-2)/2} 1_{\mathcal{L}}$.

При этом выполняются следующие свой1ства.

(1) ξ_k являются собственными векторами гамильтониана $\widehat{H}_k$, т.е.

$$\left[\sum_{j=1}^{d-1} \sin(k_j)\widehat{\gamma}_j\right] \xi_k = \widehat{E}_k \xi_k;$$

(2) собственные значения внутри щели задаются формулами

$$\widehat{E}_k^{\pm} = \pm\sqrt{\sum_{j=1}^{d-1} \sin^2(k_j)};$$

(3) собственные состояния. отвечающие $\widehat{E}_k^{\pm}$, задаются формулами

$$\psi_k(x) = \xi_k \otimes \frac{(\lambda_k)^x}{\sqrt{2(1-\lambda_k^2}},\ \text{где}\ \lambda_k = -(m + \sum_{j=1}^{d-1} \cos(k_j));$$

(4) граничные зоны, вообще говоря, определены не над всей зоной Бриллюэна, а только над областью $|\lambda_k| < 1$;

(5) координаты точек Дирака удовлетворяют условиям $k_j^D \in \{0, \pi\}$, $j = 1, \ldots, d-1$, а редуцированный гамильтониан в окрестности точки Дирака ведет себя асимптотически как оператор вида

$$\sum_{j=1}^{d-1} \alpha_j^D (k_j - k_j^D) \widehat{\gamma}_j,$$

где $\alpha_j^D = \pm 1$;

(6) точки Дирака находятся из условия

$$|\lambda_{k^D}| < 1 \Leftrightarrow \sum_{j=1}^{d-1} \cos(k_j^D) \in [-1-m, 1-m] \cap [-d+1, d-1].$$

Покажем теперь, что BB-соответствие имеет место для рассматриваемой модели. Если $m \in (-d+2n, -d+2n+2)$, $n = 0, \ldots, d-1$, то имеется единственная комбинация (по модулю перестановок) из $d-1$ чисел, равных ± 1, отвечающих $\cos(k_j^D)$ из последнего уравнения, при которой их сумма принадлежит интервалу $(-1-m, 1-m)$. Действительно, поскольку $(-1-m, 1-m) \subset (d-2n-1, d-2n+1)$, то n из этих чисел должны быть равны -1 и $(d-1-n)$ из них должны быть равны $+1$. Нужно учесть также, что имеется $\binom{d-1}{n}$ перестановок этих знаков, отвечающих различнын местоположениям точек Дирака. Далее, в точности n из координат k_j^D точек Дирака равны π, а остальные – нулю. Следовательно, киральности всех точек Дирака совпадают и равны $(-1)^n$. Тем самым, граничный инвариант равен

$$\sum \nu_D = (-1)^n \binom{d-1}{n}, \ m \in (-d+2n, -d+2n+2).$$

Следовательно, умножая это выражение на знак σ, получим, что указанный инвариант совпадает с числом Черна из формулы (4).

Список литературы

[1] A.Alldridge, C.Max, M.R.Zirnbauer, Bulk-boundary correspondence for disordered free-fermion topological phases, Comm. Math. Phys., **377**(2020), 1761-1821.

[2] N.W.Ashcroft, N.D.Mermin, *Solid State Physics*, Saunders, New York, 1976 [Русский перевод: Н.Ашкрофт, Н.Мермин, Физика твердого тела, М.: Мир, 1979]

[3] M.F.Atiyah, *K-theory*, Benjamin, New York, 1967 [Русский перевод: М.Атья, Лекции по K-теории, М.: Мир, 1967]

[4] S.Baaj, P.Julg, Théorie bivariante de Kasparov et opérateurs non bornés dans les C*-modules Hilbertiens, C. R. Acad. Sci., Ser. I, Math, **296(21)**(1983), 875–878.

[5] J.Bellissard, A. van Elst, H.Schulz-Baldes, The noncommutative geometry of the quantum Hall effect, J. Math. Phys. **35**(1994), 5373–5451.

[6] F.A.Berezin, M.A.Shubin, *The Schrödinger Equation*, Kluwer, Boston, 1991.

[7] C.Bourne, J.Kellendonk, A.Rennie, The K-theoretic bulk-edge correspondence for topological insulators, Ann. Inst. Poincare, **18**(2017), 1833–1866.

[8] J.M.Gracia-Bondia, J.C.Varilly, H.Figueroa, *Elements of Noncommutative Geometry*, Birkhäuser, Boston–Basel–Berlin, 2001.

[9] C.L.Kane, E.J.Mele, Quantum spin Hall effect in graphene, Phys. Rev. Lett. **95**(2005), 95:226801.

[10] C.L.Kane, E.J.Mele, $\mathbb{Z}_2$ topological order and the quantum spin Hall effect, Phys. Rev. Lett. **95**(2005), 95:146802.

[11] Г.Г.Каспаров, Операторный K-функтор и расширения C*-алгебр, Изв. АН СССР, Серия матем., **44**(1980), 571-636.

[12] R.Kennedy, M.R.Zirnbauer, Bott periodicity for Z2 symmetric ground states of gapped free-fermion systems. Commun. Math. Phys. **342**(2016), 909–963.

[13] A.Kitaev, Periodic table for topological insulators and superconductors, Adv. Theor. Phys., AIP Conf. Proc. **1134**(2009), 22-30.

[14] B.Laughlin, Quantized Hall conductance in two dimensions, Phes Rev. **B23**(1981), 5232.

[15] H.Lawson, M.-L.Michelsohn, *Spin Geometry*, Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1989.

[16] Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский, *Статистическая физика, часть 2*, Наука, Москва, 1978.

[17] E.Prodan, H.Schulz-Baldes, *Bulk and Boundary Invariants for Complex Topological Insulators*, Mathematical Physics Studies. Springer, 2016.

[18] J.Roe, Paschke duality for real and graded C?-algebras, Oxford Quat. J. Math., **55(3)**(2004), 325–331.

[19] L.B.Schweitzer, A short proof that Mn(A) is local if A is local and Fr?echet, Int. J. Math., **03(04)**(1992),581–589.

[20] D.J.Thouless, M.Kohmoto, M.P.Nightingale, M. den Nijs, Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential, Phys. Rev. Lett. **49**(1982), 405-408.

[21] A.Van Daele, K-theory for graded Banach algebras. I. Quat. J. Math. Oxford, Ser.(2), **39**(1988), 185–199.

[22] A.Van Daele, K-theory for graded Banach algebras. II. Pacific J. Math., **134**(1988), 377-392.