



中国科学院大学
University of Chinese Academy of Sciences

学士学位论文

超导体中非点式空间群保护的拓扑不变量研究

作者姓名: 张桓羽

指导教师: 杨义峰 研究员

中国科学院物理研究所

学位类别: 理学学士

专 业: 物理学

学院(系): 中国科学院大学物理科学学院

2021 年 6 月

Investigation on Topological Invariant Protected by
Non-Symmorphic Space Group in Superconductors

A thesis submitted to the
University of Chinese Academy of Sciences
in partial fulfillment of the requirement
for the degree of
Bachelor of Natural Science
in Physics

By
Zhang Huanyu
Supervisor: Professor Yang Yifeng
Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences

School of Physical Sciences

June, 2021

中国科学院大学 学位论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文是本人在导师的指导下独立进行研究工作所取得的成果。尽我所知，除文中已经注明引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的研究成果。对论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确方式标明或致谢。本人完全意识到本声明的法律结果由本人承担。

作者签名：

日期：

中国科学院大学 学位论文授权使用声明

本人完全了解并同意遵守中国科学院大学有关保存和使用学位论文的规定，即中国科学院大学有权保留送交学位论文的副本，允许该论文被查阅，可以按照学术研究公开原则和保护知识产权的原则公布该论文的全部或部分内容，可以采用影印、缩印或其他复制手段保存、汇编本学位论文。

涉密及延迟公开的学位论文在解密或延期后适用本声明。

作者签名：

日期：

导师签名：

日期：

摘要

近年来空间对称性对量子系统拓扑性质的影响受到了广泛关注。基于 K 理论，人们已经预言并分类了一系列二阶点式空间变换保护的新奇拓扑物态，并且指出了可能实现这些拓扑物态的具体材料。最新的理论结果发现二阶非点式空间变换同样能够保护新的拓扑物态，这种拓扑物态的能带具有和 Möbius 环类似的性质，这在点式空间变换的情形中没有出现。最近的研究显示，在一些奇字称配对且属于非点式空间群的超导体中，同样可能实现这种 Möbius 态，并且对应的拓扑不变量的计算能够简化。本论文将用一种统一的方法简化重费米子超导体 URhGe 和 UCoGe 的拓扑不变量的计算，最后的结果只依赖于布里渊区中几个高对称点的正常态占据数信息。

关键词： 非点式空间群，拓扑超导体，Möbius 拓扑态

Abstract

Recently, the influence of space group symmetry on the topological properties of quantum systems has attracted much interest. Based on the K Theory, series of new topological states protected by second-order symmorphic transformations have been predicted and classified. Specific candidate materials are also pointed out. However, the latest theoretical results suggest that second-order non-symmorphic transformations can also protect new topological states. These states support structures like Möbius torus in the energy spectrum, which have not shown up in symmorphic situations. Recent investigation suggests that such Möbius topological states can appear in superconductors and the calculation of corresponding topological invariants in superconductors with specific non-symmorphic space group and odd-parity pairing can be simplified. In this thesis, we shall use a unified method to simplify the calculation of topological invariants in heavy fermion superconductor URhGe and UCoGe. Results show that they only depend on the occupied number of normal states at several points with high-symmetry in Brillouin Zone.

Keywords: Non-Symmorphic Space Group, Topological Superconductors, Möbius Topological States

目 录

第1章 引言	1
1.1 研究背景与意义	1
1.2 文章结构	4
第2章 背景介绍	5
2.1 超导体的 BCS 理论	5
2.1.1 BCS 哈密顿量	5
2.1.2 平均场方法与 BdG 哈密顿量	6
2.1.3 Bogoliubov 变换与超导体的激发能谱	7
2.1.4 平均场方法在一般超导体中的形式	8
2.1.5 超导配对对称性	8
2.1.6 粒子-空穴对称性	9
2.2 量子系统中的拓扑	9
2.2.1 整数量子霍尔效应与 TKNN 不变量	9
2.2.2 绝热演化与 Berry 相位	10
2.3 拓扑绝缘体	11
2.3.1 量子自旋霍尔效应与 Kane-Mele 的 Z_2 拓扑不变量	11
2.3.2 拓扑绝缘体及其强、弱 Z_2 拓扑数	12
2.3.3 体边对应 (Bulk-Edge Correspondence)	12
2.4 拓扑超导体	13
2.4.1 一般超导体的拓扑不变量	13
2.4.2 时间反演不变超导体的拓扑不变量	15
2.4.3 Majorana 零能模	15
2.4.4 有节点的拓扑超导体	15
2.5 拓扑材料分类进展	16
第3章 空间对称性对拓扑不变量计算的简化	17
3.1 空间反演对称拓扑绝缘体	17
3.2 奇宇称配对超导体	18
3.2.1 奇宇称配对条件对拓扑不变量计算的化简	18
3.2.2 拓扑不变量与费米面	19
3.2.3 时间反演不变超导体的情况	19

第 4 章 非点式对称性保护的拓扑态	21
4.1 非点式对称变换	21
4.1.1 二维全局 Z_2 变换	21
4.1.2 三维滑移 (Glide) 变换	22
4.1.3 Z_2 变换与滑移变换的关系	23
4.2 二维时间反演对称性破缺的拓扑超导体	23
4.2.1 对称性的形式	23
4.2.2 拓扑不变量	24
4.3 二维时间反演不变的拓扑超导体	25
4.3.1 对称性的形式	25
4.3.2 G-偶性的拓扑不变量	26
4.3.3 G-奇性的拓扑不变量	26
4.4 Möbius 边界态	27
第 5 章 UCoGe 和 URhGe 中的 Möbius 拓扑态	31
5.1 UCoGe 和 URhGe 的基本信息	31
5.1.1 UCoGe 和 URhGe 的空间群—— $Pnma$	31
5.1.2 UCoGe 和 URhGe 的相图	32
5.1.3 UCoGe 和 URhGe 的超导配对对称性	33
5.2 在 UCoGe 和 URhGe 中研究 Möbius 拓扑态	33
5.2.1 URhGe 中的拓扑不变量	34
5.2.2 UCoGe 中的 G-偶性拓扑不变量	34
5.2.3 UCoGe 中的 G-奇性拓扑不变量	35
5.3 超导奇宇称配对对拓扑不变量计算的简化	35
5.3.1 URhGe 中 G-偶性情形	37
5.3.2 URhGe 中 G-奇性情形	38
5.3.3 UCoGe 中 G-偶性情形	38
5.3.4 UCoGe 中 G-奇性情形	38
5.4 空间群对拓扑不变量的简化	39
5.4.1 URhGe 中 G-偶性的情形	40
5.4.2 URhGe 中 G-奇性的情形	42
5.4.3 UCoGe 中的情形	42
5.4.4 阶段性总结	46
5.5 费米面与拓扑性质	46
第 6 章 总结与展望	49

附录 A 奇宇称配对超导体拓扑不变量的详细推导	51
附录 B 式 (5.49)、(5.40) 中用到的关系证明	55
参考文献	57
致谢	61

图形列表

2.1 参与相互作用的电子对数量示意图。	6
2.2 整数量子霍尔效应和量子自旋霍尔效应边界态示意图。	11
2.3 Wilson 回路示意图 (Sato, 2010)。	13
4.1 二维全局 Z_2 变换示意图。	22
4.2 三维滑移变换示意图 (Shiozaki 等, 2016)。	23
4.3 二维时间反演破缺 G-偶性超导体 $v_+^B = v_-^B = 1$ 时的能谱示意图。	28
4.4 二维时间反演不变 G-奇性超导体 $\theta = 2$ 时的能谱示意图。	29
4.5 二维时间反演不变 G-奇性超导体 $\theta = 1$ 能谱示意图。	30
5.1 UCoGe 的 T - P 相图 (Manago 等, 2019)。	32
5.2 URhGe 的 T - P 相图 (Aoki 等, 2019)。	33
5.3 第一性原理方法计算的 URhGe 和 UCoGe 的费米面 (Fujimori 等, 2016)。	47
5.4 UCoGe 的 S_2 相的能带 (Samsel-Czekała 等, 2009)。	47

表格列表

5.1 群 W 作用对应的四个一维表示。	40
5.2 $W(0, \pi, 0)$ 两个二维不可约表示与 W 一维表示的相容关系。	41
5.3 $W(0, -\pi, \pi)$ 两个二维不可约表示与 W 一维表示的相容关系。	42
5.4 $W(\pi, \pi, \pi)$ 两个二维不可约表示与 W 一维表示的相容关系。	43
5.5 $W(\pi, \pi, 0)$ 两个二维不可约表示与 W 一维表示的相容关系。	43
5.6 $\overline{W}(\pi, 0, \pi)$ 两个二维不可约表示与 W 一维表示的相容关系。	44
5.7 $\overline{W}(\pi, \pi, \pi)$ 两个二维不可约表示与 W 一维表示的相容关系。	45
5.8 $\overline{W}(\pi, \pi, 0)$ 两个二维不可约表示与 W 一维表示的相容关系。	45
5.9 化简至仅依赖于 k -空间位置正常态占据数的拓扑不变量公式。	46

符号列表

缩写

Symbol	Description
TKNN	Thouless-Kohmoto-Nightingale-Nijs
AZ	Altland-Zirnbauer
TRI	Time Reversal Invariance
TRB	Time Reversal Breaking
SSG	Symmorphic Space Group
NSG	Non-Symmorphic Space Group
TCI	Topological Crystalline Insulator
TCS	Topological Crystalline Superconductor
TNCS	Topological Non-Symmorphic Crystalline Superconductivity
PHS	Particle-Hole Symmetry
IQHE	Integer Quantum Hall Effect
QSHE	Quantum Spin Hall Effect

第1章 引言

1.1 研究背景与意义

超导体性质的理论研究是现代凝聚态物理学中的一类重要的课题。

一方面，自 1986 年 Bednorz 和 Muller 首次发现了转变温度超过 30K 的超导体以来 (Bednorz 等, 1986)，人们加快了探索高温超导体领域的步伐。在这个过程中，人们发现了一系列实验特性显著不同于早期常规 BCS 超导体的特殊超导体，称为非常规超导体 (Sigrist, 2005)，其中包括铜氧化物高温超导体和重费米子超导体等代表类型。相关的实验结果让人们意识到，传统 Landau 的 Fermi 液体理论已经完全无法描述它们的超导正常态，它们的超导配对机制也和 BCS 超导体有着显著不同 (李正中, 2002)。非常规超导体的理论研究必须进入强关联电子态的全新领域，并对奇异的配对机制做出解释。

另一方面，1980 年 Von Klitzing 在实验中观测到了整数量子霍尔效应 (Klitzing 等, 1980)，并由几位物理学家随后在 1982 年提出了 TKNN 拓扑不变量 (或 Chern 数) 来描述它，这被认为是拓扑性质首次被引入量子系统 (Thouless 等, 1982)。人们后来又在 2005 年发现了二维电子系统的量子自旋霍尔效应 (Kane 等, 2005)，这是一种带有时间反演不变性 (Time Reversal Invariant, TRI) 的系统，由 Z_2 拓扑不变量描述，之后又把它推广到三维空间，形成了拓扑绝缘体的概念 (Fu 等, 2007b)。这项成果也引领了拓扑绝缘体领域研究的热潮，人们发展并完善了许多形式理论和数值计算方法，也意识到了量子系统拓扑性质的变化并不能利用 Landau 关于相变的对称性自发破缺理论来描述，而是一个全新的领域 (Bernevig 等, 2013)。之后人们开始在理论上研究空间维数、不同的对称性 (比如时间反演对称性) 对拓扑绝缘体的影响，并得到对应的拓扑不变量。早期的分类理论主要针对具有完全打开的能隙的拓扑绝缘体，于是人们自然而然地试图将这一分类理论应用到别的带有完全打开能隙的系统。超导体作为一类典型的能隙完全打开的量子系统 (虽然有许多非常规超导体存在能隙闭合的节点) 便成为了一个成功的应用对象，并且由于其自身的特性而展示出了区别于拓扑绝缘体的全新拓扑性质 (Qi 等, 2011)。现在，人们已经可以在同一框架 (Altland-Zirnbauer 分类) 下分类研究拓扑超导体和拓扑绝缘体，相关结果已经被总结并形成了所谓拓扑

周期表 (Topological Periodic Table) (Chiu 等, 2016)。

由此可见, 超导体的理论前沿已经超出了传统凝聚态理论的两大基石——Landau 的 Fermi 液体理论以及 Landau 的对称性自发破缺相变理论——能研究的范围 (Wen, 2004)。与强关联电子态和拓扑性质相关的理论研究对领域的突破有着重要的基础性作用。

除此之外, 拓扑超导体本身还具有相当的应用前景。拓扑非平凡的材料常常在边界处出现奇异的零能激发态(以下简称边界态), 这一现象常被称为体边对应 (Bulk-Edge Correspondence), 而拓扑超导体由于本身的粒子-空穴对称性 (Particle-Hole Symmetry, PHS), 其边界态准粒子具有自共轭性质而被称为 Majorana 零能模 (Majorana Zero Mode), 被认为是在凝聚态系统中对应高能物理中 Majorana 费米子的实现。理论上将它的出现作为拓扑超导的重要特征以外, 实验上也将它的实现作为一项重要目标 (梁奇峰 等, 2020)。Majorana 零能模遵循 Non-Abelian 统计, 后者的性质在拓扑量子计算领域中十分重要 (何映萍 等, 2020; Sato 等, 2016)。

本文关注空间群对一类重费米子超导体拓扑性质的影响。其实在早期拓扑超导体和拓扑绝缘体的分类研究中并没有特别关注系统的空间对称性。2011 年华人科学家傅亮发现拓扑绝缘体的晶格对称性使得在高对称平面上能够表现出拓扑非平凡态, 并可以由新的拓扑不变量来描述 (Fu, 2011)。人们从此开始了对受空间群保护的拓扑态的研究, 并形成了“拓扑晶格绝缘体 (Topological Crystalline Insulator, TCI)”、“拓扑晶格超导体 (Topological Crystalline Superconductor, TCS)”等概念。正如在正文中将会看到的, 空间对称性对拓扑超导体的影响体现在两方面: 首先是晶格的空间群对称性, 它有时可以保护新类型的拓扑态, 并产生全新的拓扑不变量来描述它; 另一方面是超导的配对对称性, 例如空间反演对称性以及各向异性的 s -波、 p -波、 d -波对称性等, 空间反演对称性(尤其是奇宇称情形)有时能够大幅简化有关拓扑不变量的解析计算, 以至于只通过观察正常态费米面即可判断其是否具有非平凡的拓扑性质 (Fu 等, 2010; Sato, 2010, 2009)。超导配对的各向异性本身对拓扑超导体的实现有重要的影响, 例如二维 p -波超导体是理论上最为简单的一种拓扑超导体 (Bernevig 等, 2013)。所以, 具体的拓扑超导体常常需要在具有非常规配对机制的材料中寻找, 而重费米子超导体由于多种竞争序并存, 在序的边界处容易由量子临界涨落引起非常规配对机制 (李宇等, 2021; 杨义峰 等, 2015), 从而可能为实现拓扑超导提供平台。

空间对称性对量子系统拓扑性质的影响还是一个相当年轻并正在快速发展的领域。2014年出现了基于K理论的在二阶点式空间群(Symmorphic Space Group, SSG)变换操作(例如 π -旋转和镜面反射等)下具有不变性的拓扑绝缘体和拓扑超导体的分类工作(Shiozaki等,2014),一个基本的想法便是将其推广到二阶非点式空间群(Non-Symmorphic Space Group, NSG)变换操作(例如滑移、二阶螺旋轴等)下的情况。2015年,人们在理论上发现二阶非点式空间群变换能够在拓扑绝缘体系统上保护一类新奇的拓扑边界态——Mobius边界态,并给出其相关的拓扑不变量(Shiozaki等,2015; Fang等,2015)。2016年,同样基于K理论的分类工作成功将二阶非点式空间群变换纳入其中,给出了两种Mobius态在二维时间反演不变拓扑超导体上实现的可能:一种对应奇变换,由 Z_4 拓扑不变量描述,另一种对应偶变换,由 Z_2 拓扑不变量描述(Shiozaki等,2016)。2017年,Youichi Yanase等人的工作提出重费米子超导体UPt₃在理论上可能实现滑移-偶变换(Glide-Even)保护的Mobius态,可能是一种拓扑非点式晶格超导体(Topological Non-Symmorphic Crystalline Superconductor, TNCS)(Yanase等,2017)。随后在2019年,Akido Daido等人提出重费米子超导体UCoGe在高压下的 S_2 相中,在特定超导配对对称性下可能实现滑移-奇变换(Glide-Odd)保护的Mobius态,从而实现 Z_4 拓扑超导态(Daido等,2019)。更重要的是,该工作借助了UCoGe的空间群对称性和配对对称性,大幅简化了一部分拓扑不变量的计算工作,使得通过直接观察正常态的费米面(由第一性原理给出)就可以得到大量关于拓扑性质的信息,对数值计算的需求大大减少。

UPt₃的工作基于具备时间反演不变性的A相,而UCoGe的工作基于其高压 S_2 相,在该相中,铁磁序被抑制,系统同样具备时间反演不变性(Manago等,2019)。虽然一个系统是否具备时间反演不变性将在很大程度上影响其可能的拓扑性质,但理论上时间反演不变性破缺(Time Reversal Breaking, TRB)的超导系统同样能实现Mobius态(Shiozaki等,2016)。

时间反演破缺的重费米子超导体URhGe具有和UCoGe完全一样的非点式空间对称性(Aoki等,2019),因此也有形成滑移变换保护的Mobius态的可能。本文将总结利用有关空间对称性对拓扑性质影响的研究结果,用统一的方法来简化URhGe和UCoGe拓扑不变量的计算。

1.2 文章结构

文章正文分成六个章节。第一章引言介绍本文的研究背景和内容，并指出行文结构。

第二章将简要介绍本文需要的超导和拓扑材料背景知识，本身也可以作为一个简短综述。首先将介绍超导体的 BCS 理论并引入后文中使用的平均场形式和粒子-空穴对称性。然后介绍量子系统中的拓扑现象，大致按照发展的顺序逐步引入概念和数学表达，最后简要介绍近十年拓扑晶格材料分类的研究进展。

第三章承接第二章最后拓扑晶格材料的介绍，对拓扑绝缘体和拓扑超导体分别给出一个利用空间反演对称性和超导奇宇称配对来简化拓扑不变量计算的例子。

第四章将介绍非点式空间群保护的 Möbius 拓扑态。首先会给出各种非点式变换的数学表达，然后借助这些数学表达引入 Möbius 态的拓扑不变量，最后对 Möbius 态的特性做简要介绍。

第五章将在 UCoGe 和 URhGe 中研究 Möbius 拓扑态，其中将利用各种对称性和群论方法来简化 UCoGe 和 URhGe 中拓扑不变量的计算，并得到一系列只依赖于超导体正常态占据数的拓扑不变量表达式，最后对这些简化后的表达式做一些讨论。第六章中会对全文做一个简要的总结和展望。

第 2 章 背景介绍

2.1 超导体的 BCS 理论

超导体的 BCS 理论由 Bardeen、Cooper 和 Schrieffer 提出 (Bardeen 等, 1957), 它指出常规超导体中电子通过电声相互作用交换虚声子而产生有效的吸引相互作用, 这个有效的吸引相互作用将两个符合一定条件的电子配对在一起形成 Cooper 对, Cooper 对因具有激发能隙而难以被散射形成电阻, 因此超导体具有零电阻的特征。

下面将简要介绍 BCS 理论的形式, 虽然它只适用于电-声机制的常规超导体, 但是其描述的特征以及形式一定程度上可以推广到一般的超导体中, 这个形式在拓扑超导体理论中将作为基础。

2.1.1 BCS 哈密顿量

Bloch 表象下电子间相互作用一般的二次量子化形式为:

$$\hat{H}_{ex} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} V_{\mathbf{q}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \sigma_1, \sigma_2} \hat{c}_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}_2, \sigma_2} \hat{c}_{\mathbf{k}_1, \sigma_1}, \quad (2.1)$$

其中 σ_1, σ_2 是自旋指标。每一项都描述了总晶格动量为 $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ 的相互作用过程。式中 $V_{\mathbf{q}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \sigma_1, \sigma_2}$ 是由于电-声相互作用引起的电子间有效吸引势系数。电子间有效作用的能量交换以声子为媒介, 和 $\hbar\omega_D$ 同一数量级 (ω_D 是系统的 Debye 频率), 远小于金属的费米能, 因此可以认为 $\hbar\omega_D$ 厚度的壳层中才有明显的有效相互作用。在上述条件下可以近似在费米面附近取有效吸引势为常数 $-V$ (表示吸引), 其余部分为 0。

因为参与作用的电子对数量多、作用强的情况起主要影响, 可以进一步限制取相互作用总动量为 0 且自旋方向相反的电子对: 总动量为 0 的电子对占参与的比例更高 (如图 2.1 所示, 其中蓝色表示费米面附近是能参与相互作用的电子, 红色区域是参与相互作用且总动量为 $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ 的电子), 而自旋相反的电子对在空间中更为接近, 相互作用更强。在这一步近似下, 参与配对的电子动量相同时自旋也相反, 可以将产生、湮灭算符的下标合一标记: $(\mathbf{k}, \uparrow) \rightarrow \mathbf{k}; (-\mathbf{k}, \downarrow) \rightarrow -\mathbf{k}$ 。

于是可以得到 BCS 哈密顿量:

$$\hat{H}_{BCS} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{ex} - \mu N = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} (\hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}} + \hat{c}_{-\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}}) - V \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}'}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}}, \quad (2.2)$$

加入 $-\mu N$ 项是因为式 (2.1) 导致超导体系统并没有一个确定的粒子数。上式的化简中已经考虑到了时间反演不变性对能谱的影响。

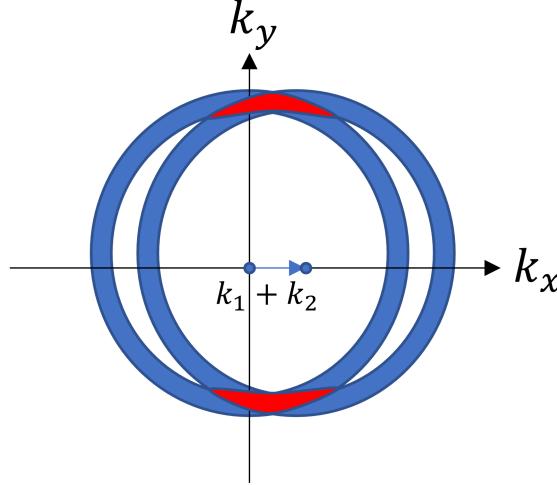


图 2.1 参与相互作用的电子对数量示意图。蓝色部分表示费米面附近壳层中的电子，红色部分表示总动量为 $k_1 + k_2$ 的电子对，一般红色占的体积远比蓝色要少。

Figure 2.1 A schematic diagram of electrons paticipating in the interaction. The blue part represents electrons near the Fermi Surface, the red part represents electron pair with momentum $k_1 + k_2$. Generally the volume of the red part is much smaller than that of the blue part.

2.1.2 平均场方法与 BdG 哈密顿量

Cooper 对的凝聚将使得 Fermi 液体的基态坍缩，因此无法直接套用因果 Green 函数的 Feynman 图技术通过微扰展开来研究超导态的性质。平均场方法是一种寻找新基态的有效手段，在该方法下认为相互作用项中的 $\hat{c}_{-\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}}$ 可以用其对基态的平均值替换掉，相当于认为：

$$\delta \equiv \hat{c}_{-\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}} - \langle \text{BCS} | \hat{c}_{-\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}} | \text{BCS} \rangle \rightarrow 0, \quad (2.3)$$

利用这个近似将式 (2.2) 中的相互作用项近似到保留一阶小量：

$$\begin{aligned} -V \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}'} &\approx -V \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}}^\dagger \langle \text{BCS} | \hat{c}_{-\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}'} | \text{BCS} \rangle - V \langle \text{BCS} | \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}}^\dagger | \text{BCS} \rangle \hat{c}_{-\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}'} \\ &+ V \langle \text{BCS} | \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}}^\dagger | \text{BCS} \rangle \langle \text{BCS} | \hat{c}_{-\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}'} | \text{BCS} \rangle, \end{aligned} \quad (2.4)$$

上式相互作用项的系数 $-V\langle \text{BCS} | \hat{c}_{-\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}} | \text{BCS} \rangle$ 被称为对势 $\Delta(\mathbf{k})$ (Pair Potential)，它一般是复数：

$$\Delta(\mathbf{k}) \equiv -V\langle \text{BCS} | \hat{c}_{-\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}} | \text{BCS} \rangle, \quad (2.5)$$

$$\Delta^*(\mathbf{k}) = -V\langle \text{BCS} | \hat{c}_{-\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger | \text{BCS} \rangle, \quad (2.6)$$

但在 BCS 理论中不考虑与别的超导体的接触时可以取为实数，在 Ginzburg-Landau 理论中它被确认等价于超导态的序参量 (李正中, 2002)，因此后文中将统一称为超导序参量。

平均场近似后的哈密顿量常被称为 BdG 哈密顿量 (Bogoliubov de Gennes Hamiltonian)：

$$\hat{H}_{\text{BdG}} \equiv \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta^*(\mathbf{k}) \hat{c}_{-\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}} + \Delta(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}}^\dagger \right) + \sum_{\mathbf{k}} \frac{|\Delta(\mathbf{k})|^2}{V}. \quad (2.7)$$

现在的相互作用项被约化成了产生、湮灭算符的二次型，这样就可以利用 Bogoliubov 变换对角化。为了更直观地表示，引入 Nambu 旋量 $\Psi_{\mathbf{k}}$ ，将式 (2.7) 改写成矩阵形式：

$$\hat{H}_{\text{BdG}} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \begin{pmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}} & \Delta(\mathbf{k}) \\ \Delta^*(\mathbf{k}) & -\epsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \Psi_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \left(\epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{|\Delta(\mathbf{k})|^2}{V} \right), \quad (2.8)$$

$$\Psi_{\mathbf{k}} = (\hat{c}_{\mathbf{k}}, \hat{c}_{-\mathbf{k}}^\dagger)^T, \quad (2.9)$$

有时也将式 (2.8) 中的矩阵称为 BdG 哈密顿量，记为 $H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})$ 。Nambu 旋量两个分量对应的线性空间在后文称为 Nambu 空间。

2.1.3 Bogoliubov 变换与超导体的激发能谱

对 BdG 哈密顿量矩阵进行一个酉变换可以将其正交对角化，其本征矢意味着电子产生、湮灭算符线性组合得到新准粒子的产生、湮灭算符，这个过程就是 Bogoliubov 变换，其本征值就是新准粒子的激发能。简单起见，超导序参量取为实数，此时：

$$\begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k}} \\ \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta_{\mathbf{k}} & \sin \theta_{\mathbf{k}} \\ -\sin \theta_{\mathbf{k}} & \cos \theta_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k}} \\ \hat{c}_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

在这种变化下新的产生、湮灭算符 $\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger$ 仍然满足费米子反对易关系，因此可以用来描述新准粒子。进一步可以选用以下的 $\theta_{\mathbf{k}}$ ：

$$\sin(2\theta_{\mathbf{k}}) = -\frac{\Delta(\mathbf{k})}{E_{\mathbf{k}}}, \quad \cos(2\theta_{\mathbf{k}}) = \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}, \quad (2.11)$$

这样就能使哈密顿量对角化，并得到对应准粒子激发的能谱：

$$\hat{H}_{\text{BdG}} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k}} \left(\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} + \frac{|\Delta(\mathbf{k})|^2}{V} \right), \quad (2.12)$$

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{|\Delta(\mathbf{k})|^2 + \varepsilon_{\mathbf{k}}^2}, \quad (2.13)$$

可见除了常数项外，BdG 哈密顿量在新的准粒子产生、湮灭算符的表示下被化简成了谐振子的形式。其中式 (2.13) 就是 BCS 超导体的激发谱，在 k -空间中它总有一个最小值 $|\Delta(\mathbf{k})|$ 因此超导序参量也常被称为能隙函数。在 BCS 理论中它是一个常数 (因为近似认为相互作用常数为常数)，因此 BCS 超导体是一个有能隙的系统，就像能带绝缘体一样。

2.1.4 平均场方法在一般超导体中的形式

对一般的超导体来说，平均场方法在一定程度上仍然适用，从 BCS 超导体中得到的形式主要区别在于：相互作用势一般随 \mathbf{k} 变化，导致超导序参量一般在 k -空间中不是常数；由于配对机制的不同，包含自旋在内的多个自由度 (如轨道、子晶格等) 的电子都能参与配对。因此超导序参量 $\Delta(\mathbf{k})$ 和 Nambu 旋量 $\Psi_{\mathbf{k}}$ 的分量将带有这些自由度指标而分别形成直乘空间的矩阵和列向量。Nambu 空间下 BdG 哈密顿量的一般形式为：

$$H_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \varepsilon(\mathbf{k}) & \Delta(\mathbf{k}) \\ \Delta^\dagger(\mathbf{k}) & -\varepsilon^T(-\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

由于电子遵从 Fermi 统计，超导序参量还有额外的限制： $\Delta^T(\mathbf{k}) = -\Delta(-\mathbf{k})$ 。之前一直都将超导序参量表达成显含 \mathbf{k} 的形式，故激发谱公式 (2.13) 仍成立。

2.1.5 超导配对对称性

超导体的配对是有空间对称性的，这个对称性依靠超导序参量定义 $\Delta(\mathbf{k})$ 。由于涉及两个电子配对，Cooper 对中只有自旋单态和自旋三重态 (以及它们的叠加态)，这两种情况下将超导序参量 $\Delta(\mathbf{k})$ 中的自旋分量剥离，剩余关于 \mathbf{k} 的部分按照球谐函数 $Y_l^m(\hat{\mathbf{k}})$ 展开，对应不同的球谐函数分量对应称为 l -波超导。这种对称性分类由于强自旋轨道耦合在重费米子超导体系统中并不严格，需要改用空间群变换下的行为来分类 (Sigrist, 2005)。在拓扑超导体系统中最关注的是在空间反演 I 下的行为，超导序参量满足 $I\Delta(\mathbf{k})I^T = \pm\Delta(-\mathbf{k})$ 的超导体分别被称为偶宇

称、奇宇称配对超导体。由于电子对自旋三重态(自旋单态)的空间波函数具有奇(偶)宇称，也常将奇(偶)宇称配对称为自旋三重态(自旋单态)配对，但在多自由度的情况下前者更严格。

2.1.6 粒子-空穴对称性

超导体实际的准粒子激发是电子、空穴的混合激发，这一性质导致超导体天生具有粒子-空穴对称性，对超导体的能带结构和拓扑性质都有重要的影响。粒子-空穴对称性在数学上的表达为：

$$CH_{\text{BdG}}(\mathbf{k})C^{-1} = -H_{\text{BdG}}(-\mathbf{k}), \quad C = K \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.15)$$

C 表示粒子-空穴变换，作用在 Nambu 空间上， K 是复共轭算符。粒子-空穴对称性使得可以通过正能量本征态来构造负能量本征态：

$$|u_{-n}(-\mathbf{k})\rangle = C|u_n(\mathbf{k})\rangle, \quad (2.16)$$

其中 n 是能带指标，约定正 n 表示能量高于费米能，反之表示能量低于费米能。

2.2 量子系统中的拓扑

拓扑原本是一个数学概念，粗略地说，如果两个形状可以连续地捏成彼此的样子(比如茶杯和甜甜圈)而过程中不产生奇异点，它们被认为属于同一个拓扑等价类。量子系统中的拓扑同样强调连续的演化：当一个量子系统的态可以通过绝热演化到另一个不同的态而不产生奇点时(比如能隙闭合)，它们被认为属于同一拓扑等价类。在多体系统中，平凡的一类态为各个原子态的简单组合，以此为参照，如果系统不能通过绝热演化达到这种平凡的态，就称系统处于拓扑非平凡态([Hasan 等, 2010](#))。正如数学中有对应的拓扑不变量来标记不同的拓扑等价类，量子系统中的拓扑态也有对应的拓扑不变量来描写。

2.2.1 整数量子霍尔效应与 TKNN 不变量

人们最早确认的拓扑非平凡态是 1980 年的整数量子霍尔效应([Klitzing 等, 1980](#))，该二维系统位于强磁场中，边界态具有量子化的电导率。1982 年 Thouless 等四位物理学家提出了 TKNN 不变量来描述整数量子霍尔效应(Integer Quantum Hall Effect) 中的量子化电导率，TKNN 不变量和拓扑学中的 Chern 数有紧密的联

系 (Thouless 等, 1982)。也正因此, 整数量子霍尔效应被认为是拓扑性质第一次被引入量子系统当中。整数量子霍尔效应本身不假定系统有任何额外的对称性, 却能支持非平凡的拓扑态, 但这并不意味着任何一个系统都能有非平凡的拓扑性质, 一维和三维的系统中就没有整数量子霍尔效应, 这和数学中 Chern 数不能在奇数维空间定义有关。

2.2.2 绝热演化与 Berry 相位

量子系统的拓扑性质和系统的绝热演化有关。绝热演化的理论描述涉及随参数演化的绝热定理, 以及几何相位(或 Berry 相位)。由于量子系统中拓扑不变量几乎都和 k -空间下的 Berry 相位有关, 下面简要介绍 Berry 相位有关的结果。

对含参哈密顿量 $H(\mathbf{k})$ (多体系统中常取参数为准动量 \mathbf{k})及其 Bloch 本征态 $|u_n(\mathbf{k})\rangle$, 约定正 n 表示能量高于费米能, 负 n 表示能量低于费米能。可以定义第 n 能带的 Berry 联络 $\mathbf{A}^n(\mathbf{k})$ (Berry Connection):

$$H(\mathbf{k})|u_n(\mathbf{k})\rangle = E_n(\mathbf{k})|u_n(\mathbf{k})\rangle, \quad (2.17)$$

$$\mathbf{A}^n(\mathbf{k}) \equiv i\langle u_n(\mathbf{k}) | \nabla | u_n(\mathbf{k}) \rangle, \quad (2.18)$$

其中需要注意 ∇ 并非力学量算符, 和其他含参算符同时运算时要注意对易关系。

Bloch 本征态的定义精确到一个局域 U(1) 相因子, 可以做一个 U(1) 规范变换:

$$|u_n(\mathbf{k})\rangle \rightarrow e^{i\phi_n(\mathbf{k})}|u_n(\mathbf{k})\rangle, \quad (2.19)$$

因此 Berry 联络 $\mathbf{A}^n(\mathbf{k})$ 并非 U(1) 规范不变的:

$$\mathbf{A}^n(\mathbf{k}) \rightarrow \mathbf{A}^n(\mathbf{k}) - \nabla\phi_n(\mathbf{k}), \quad (2.20)$$

但借助 Berry 联络可以定义两个规范不变的量: 一个是 Berry 曲率 F_{ij}^n (Berry Curvature), 另一个是 Berry 相位 γ^n (Berry Phase)

$$F_{ij}^n \equiv \partial_{k_i} A_j^n(k) - \partial_{k_j} A_i^n(k), \quad (2.21)$$

$$\gamma^n \equiv \oint_C \mathbf{A}^n(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k}. \quad (2.22)$$

当系统选择了恰当的回路 C 或具有特殊的对称性时, Berry 相位将会量子化。一般来说大部分凝聚态系统中的拓扑不变量都涉及 Berry 联络或 Berry 曲率

在 k -空间中的积分, 例如先前提到的 Chern 数(或 TKNN 不变量), 它的定义为:

$$Ch \equiv \frac{1}{2\pi} \sum_{n<0} \iint dk_x dk_y F_{xy}^n. \quad (2.23)$$

2.3 拓扑绝缘体

拓扑绝缘体是最早受到广泛关注并形成较为成熟理论的一类拓扑量子系统, 介绍它之前需要首先介绍量子自旋霍尔效应及其拓扑不变量。

2.3.1 量子自旋霍尔效应与 Kane-Mele 的 Z_2 拓扑不变量

量子自旋霍尔效应 (Quantum Spin Hall Effect) 是一种在系统边界处因量子效应产生奇异自旋运输的现象 (Kane 等, 2005), 它和整数量子霍尔效应都在边界处展现了奇特运输性质, 如图 2.2 所示。

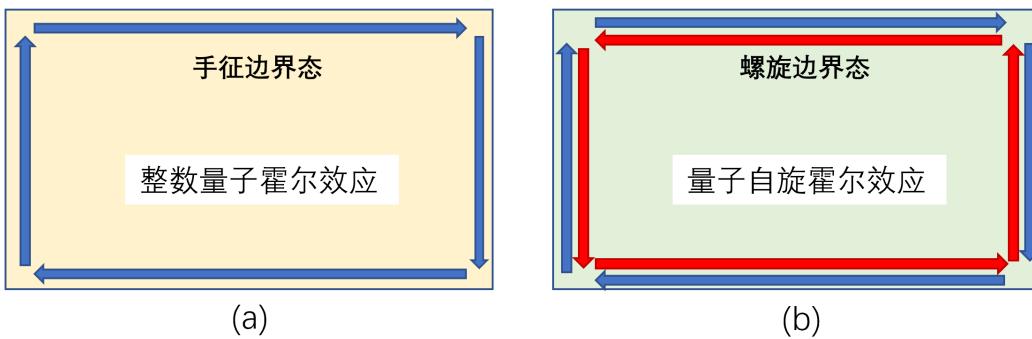


图 2.2 (a) 整数量子霍尔效应示意图。在边界处有电子单向前进的手征边界态, (b) 量子自旋霍尔效应边界态示意图, 在边界处有电子双向前进但自旋朝向相同的螺旋边界态。

Figure 2.2 Schematic diagrams for (a) Integer Quantum Hall Effect, in which chiral edge states allowing electrons moving in one-direction exist. (b) Quantum Spin Hall Effect, in which helical edge states allowing electrons with the same spin orientation moving in different directions exist.

两者在对称性上显著不同: 量子自旋霍尔效应不需要外加强磁场从而系统保有了时间反演不变性, 这一性质使得对其定义的 Chern 数只能得到平庸的结果:

$$TF(\mathbf{k}) = -F(-\mathbf{k}) \Rightarrow \int F(\mathbf{k}) = 0, \quad (2.24)$$

Kane 和 Mele 指出需要一个 Z_2 拓扑不变量来描述量子自旋霍尔效应, 随后傅亮等人巧妙地利用了“自旋泵”(Spin Pump)重构了 Z_2 拓扑不变量的物理图像并给出了更多的解析结果 (Fu 等, 2006; Kane 等, 2005)。

Kane 和 Mele 的 Z_2 不变量有多种定义方式, 以下选取一种在后文中有借鉴意义的方式引入。由于系统有时间反演不变性, 所以每一个本征态都至少二重简并 (Kramers 简并), 因此可以形式上将本征态划分为两组, 由 Kramers 指标 I, II 标记:

$$|u_n^{\text{II}}(\mathbf{k})\rangle \equiv T|u_n^{\text{I}}(\mathbf{k})\rangle, \quad (2.25)$$

其中 $T = is_y \mathbf{K}$ 是时间反演变换, 对两个分支可以分别定义 Berry 联络、Berry 曲率等, 从而可以分别定义 Chern 数:

$$Ch^{\text{I/II}} \equiv \frac{1}{2\pi} \sum_{n<0} \iint dk_x dk_y F_{xy}^{n,\text{I/II}}, \quad (2.26)$$

由于时间反演不变时系统总的 Chern 数为 0: $Ch = Ch^{\text{I}} + Ch^{\text{II}} = 0$, 因此可以选取 $Ch^{\text{I/II}}$ 的宇称作为 Z_2 拓扑不变量:

$$\nu_{\text{KM}} \equiv Ch^{\text{I/II}} \pmod{2}. \quad (2.27)$$

2.3.2 拓扑绝缘体及其强、弱 Z_2 拓扑数

拓扑绝缘体起初在 2005 年自旋量子霍尔效应发现之后作为其拓展到三维空间的产物提出, 它整体仍然保持时间反演不变性 (Fu 等, 2007b)。其拓扑性质由 4 个并非互相独立的 Z_2 拓扑不变量描述, 其中三个 Z_2 拓扑数由几个 k -空间中时间反演不变平面的 Kane-Mele 的 Z_2 拓扑数定义, 称为弱拓扑数, 对应的系统就像多个二维系统垂直叠了起来, 因此容易受系统中杂质的影响, 比较脆弱; 剩下的一个 Z_2 拓扑数对应的拓扑非平凡态无法由二维系统的拓扑非平凡态构造, 可以认为是由空间维数提升过程中演生的。强拓扑数平凡而弱拓扑数非平凡时称为弱拓扑绝缘体, 对应的系统就像多个二维系统垂直叠了起来, 因此容易受三维系统中杂质影响而比较脆弱; 强拓扑数非平凡时则称为强拓扑绝缘体, 它能够较好地抵抗杂质的影响。这种强、弱拓扑数和空间维数的关系并局限在拓扑绝缘体, 而是更为一般的性质, 可以由 K 理论进行解释, 一般来说低维空间的强拓扑数会作为高维空间的弱拓扑数出现, 这使得在高维空间中也能进行低维拓扑性质的研究 (Shiozaki 等, 2017), 就像在第四章将要看到的那样。

2.3.3 体边对应 (Bulk-Edge Correspondence)

目前这些拓扑不变量都利用了周期性边界条件并在整个 Brillouin 区积分, 对应腔体 (Bulk) 的拓扑性质。实验室中的真实系统都是开边界的, 整数量子霍尔

效应和量子自旋霍尔效应都在开边界附近出现了和腔体不同的输运性质。许多具有非平凡拓扑性质的量子系统中常出现这种体边对应的现象：若对腔体计算的拓扑不变量非平凡，改为开边界条件后边界会出现局域的零能隙激发态。这个现象使得实验上可以通过寻找这种奇特的表面态来判断系统的拓扑性质，理论上对它的计算也是相当重要的，常常作为除了拓扑不变量以外非平凡拓扑性质的又一验证。体边对应现象理论上也可以由 K 理论进行解释 (Shiozaki 等, 2017)。

2.4 拓扑超导体

能带绝缘体都具有完全打开的能隙，因此早期对拓扑绝缘体的研究使得人们试图将相关理论推广到别的有能隙系统。超导体作为典型的有能隙系统就成为了应用对象。人们发现许多概念在超导体中同样适用，并且粒子-空穴对称性使拓扑超导体能够展示出更加丰富的性质 (Qi 等, 2011)。

2.4.1 一般超导体的拓扑不变量

如 2.1.6 中所述，超导体本身就有粒子-空穴对称性，这一性质使得超导体在不附加额外的对称性下在一维、二维空间都能定义拓扑不变量。二维拓扑超导体的拓扑不变量仍然是 Chern 数。一维空间中其拓扑不变量由一个新的 Z_2 拓扑不变量 v_{1D} 表达，它可以借助 Wilson 回路积分定义。Wilson 回路在这里由 k -空间中连接两个 TRI 点的 TRI 直线确定 (注意 Brillouin 区的周期性)，如图 2.3 所示。

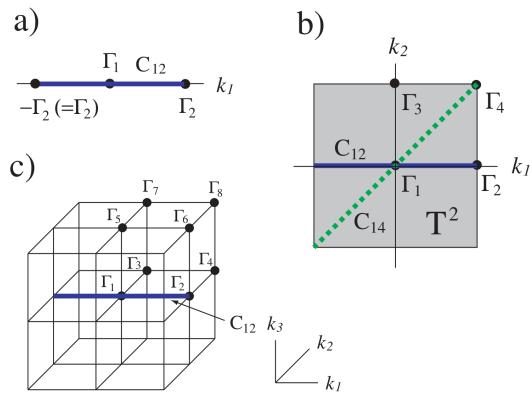


图 2.3 Wilson 回路示意图 (Sato, 2010)，图中用蓝色直线标记了几个典型的 Wilson 回路。

Figure 2.3 Schematic diagrams of Wilson Loop. Several typical Wilson Loops are highlighted in blue for example.

首先对超导体的本征态 $|u_n(\mathbf{k})\rangle$ ，定义三个 k -空间上由正能态、负能态的 Berry

联络相加所得的规范场和它们两个的和：

$$\mathbf{A}^>(\mathbf{k}) \equiv i \sum_{n>0} \langle u_n(\mathbf{k}) | \nabla | u_n(\mathbf{k}) \rangle, \quad (2.28)$$

$$\mathbf{A}^<(\mathbf{k}) \equiv i \sum_{n<0} \langle u_n(\mathbf{k}) | \nabla | u_n(\mathbf{k}) \rangle, \quad (2.29)$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{k}) \equiv \mathbf{A}^>(\mathbf{k}) + \mathbf{A}^<(\mathbf{k}), \quad (2.30)$$

一维情况下 Wilson 回路只有一条，就是从 $-\pi$ 到 π ，以此可以定义一维拓扑超导体的拓扑不变量 (Sato 等, 2017)：

$$\nu_{1d} \equiv \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} A^<(k) dk \pmod{2}, \quad (2.31)$$

要证明它是量子化的需要利用 $\mathbf{A}(\mathbf{k})$ 可以被表达为全微分的形式这一性质：

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{k}) &= i \sum_n \langle u_n(\mathbf{k}) | \nabla | u_n(\mathbf{k}) \rangle = i \text{tr} \left(\sum_n | u_n(\mathbf{k}) \rangle \nabla \langle u_n(\mathbf{k}) | \right), \\ &= i \nabla (\ln \det \langle u_m(\mathbf{k}) | u_n(\mathbf{k}) \rangle) = -\nabla \theta(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (2.32)$$

上式最后一个等式中 $\theta(\mathbf{k})$ 表示 $\det \langle u_m(\mathbf{k}) | u_n(\mathbf{k}) \rangle$ 的幅角，第三个等式的证明见附录 A。另外，由于正、负能本征态通过式 (2.16) 联系，两个规范场不是独立的，而是有关系：

$$\mathbf{A}^>(\mathbf{k}) = \mathbf{A}^<(-\mathbf{k}), \quad (2.33)$$

因此实际上：

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} A^<(k) dk = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} A(k) dk = \frac{1}{2\pi} [\theta(-\pi) - \theta(\pi)], \quad (2.34)$$

由于 $\det \langle u_m(\mathbf{k}) | u_n(\mathbf{k}) \rangle$ 具有 2π 周期，其幅角满足 $\theta(-\pi) - \theta(\pi) = 2\pi N$ ，可见 ν_{1d} 确实是一个量子化的 Z_2 拓扑不变量。

在高维空间中有很多个 Wilson 回路 C ，用类似的方法都可以定义一系列量子化的回路积分 $\nu[C]$ ：

$$W[C] = \frac{1}{2\pi} \oint_C d\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}^<(\mathbf{k}), \quad (2.35)$$

$$(-1)^{\nu[C]} = e^{2\pi i W[C]} = \pm 1, \quad (2.36)$$

有时 $\nu[C]$ 可以帮助获得一部分高维空间超导体拓扑不变量的信息，或者辅助定义空间群对称性保护的拓扑不变量，正如在第四章中要看到的那样。

2.4.2 时间反演不变超导体的拓扑不变量

二维时间反演不变拓扑超导体的拓扑不变量仍为 Kane 和 Mele 的 Z_2 不变量。一维情形可以用区分 Kramers 对的方法(就像在 2.3.1 中那样)来定义新的 Z_2 拓扑不变量:

$$v_{1d}^T \equiv \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} A^{I,<}(k) dk. \quad (2.37)$$

三维空间的拓扑超导体借助粒子-空穴对称性可以定义缠绕数(Winding Number)作为拓扑不变量, 这是一个整数(Schnyder 等, 2008), 说明三维拓扑超导体拥有比拓扑绝缘体有更丰富的拓扑性质。

2.4.3 Majorana 零能模

拓扑超导体也同样存在体边对应现象: 超导体边界处的 Andreev 边界态在一些拓扑非平凡的情况下, 能隙可能会严格闭合。实际上拓扑超导体受到关注的一个重要原因便是它的零能隙 Andreev 边界态和 Majorana 费米子的关系。由于超导体的元激发是电子和空穴的混合集体激发, 在一些配对情况下它能满足电荷自共轭条件(也叫 Majorana 条件)。此外拓扑超导体的零能隙 Andreev 边界态常常具有 k -空间上的线性色散关系, 它对应的元激发满足无质量的 Dirac 方程。因此这种零能隙 Andreev 边界态的元激发被期望是 Majorana 费米子在凝聚态系统中的实现, 对应称之为 Majorana 零能模。在理论研究上常常将它的出现作为论证出现拓扑超导态的一个重要特征, 实验上也将它的实现作为一个重要的目标(梁奇峰 等, 2020)。

凝聚态系统中电子的电荷共轭恰好是空穴, 两者由电子的产生和湮灭算符 c^\dagger, c 表示, Majorana 零能模的电荷共轭就是它自己, 所以 Majorana 零能模实际上是遵循 Non-Abelian 统计的任意子, 这一性质使它在量子计算上有这广泛的应用前景(何映萍 等, 2020), 例如两个分离的 Majorana 零能模可以用于形成非局域的量子比特(Sato 等, 2016)。由于超导体的磁通涡旋也可以视为广义的边界, 这些地方同样可能出现局域的 Majorana 零能模, 这将方便在实验上对量子比特的操纵。

2.4.4 有节点的拓扑超导体

虽然本文并不涉及带有节点的拓扑超导体, 但相关的研究使得人们对量子系统中的拓扑性质有了更深的认识。起初人们主要研究能隙完全打开的超导系

统，这样可以将原先已有的概念形式直接迁移到超导体来。但是在许多高温氧化物超导体、重费米子超导体等非常规系统中能带是有节点或节线的，能否在这种系统中研究拓扑性质就成为了一个新的问题。一方面人们研究节点的存在对已知拓扑性质的影响；另一方面，人们发现节点、节线本身可以在其附近定义局域的拓扑不变量 (Sato 等, 2017)。事实上一类有节点的拓扑超导体因其和 Weyl 半金属的节点性质类似而受到了大量关注，称为 Weyl 超导体 (Meng 等, 2012)。

2.5 拓扑材料分类进展

正如在前面几节所见的那样，一个量子系统的对称性以及所处的空间维数对其可能的拓扑性质有巨大的影响，因此人们发展或引用了一系列抽象的数学理论来试图将所有的拓扑非平凡态分类。目前，基于系统是否具有时间反演不变性、粒子空穴对称性以及其他对称性特征，已经将拓扑绝缘体和拓扑超导体纳入了一个统一的分类框架——Altland-Zirnbauer 分类(后文简称 A-Z 分类)来进行研究，并且对各个类给出了不同空间维度下的拓扑不变量，并形成所谓的拓扑周期表 (Topological Periodic Table) (Chiu 等, 2016)。在这个框架中，拓扑绝缘体可以用来泛指不具有粒子-空穴对称性的系统，其中时间反演破缺的被分为 A 类，具有时间反演不变性的被分为 AII 类；拓扑超导体可以用来泛指具有粒子-空穴对称性的系统，其中时间反演破缺的被分为 D 类，具有时间反演不变性的被分为 DII 类。本文之后都将使用这种泛指。

AZ 分类框架主要涉及系统的内禀对称性，并没有涉及空间对称性。2011 年傅亮等人提出了拓扑晶格绝缘体的概念后，人们开始关注空间对称性对拓扑性质的影响 (Fu, 2011)。在对拓扑晶格绝缘体和拓扑晶格超导体的研究中，人们发现空间对称性有时能够帮助简化拓扑不变量的计算，有时也可以保护新的拓扑态。本文就将利用空间对称性来化简由空间对称性保护的拓扑不变量的计算，在下一章中将介绍两个将会在后文用到的简化计算的例子。

拓扑材料分类的研究中，K 理论起到了重要的作用，它将量子系统中各种影响拓扑的因素(对称性、空间维数等)高度抽象化，除了能给出各种强、弱拓扑数的分解外，还能够描述体边对应、缺陷拓扑态等现象。通过在原先的基础上加入空间对称性的限制，拓扑晶格材料也可以由 K 理论描述，相关的分类结果能够将空间变换与拓扑不变量联系起来 (Shiozaki 等, 2014, 2017)。

第3章 空间对称性对拓扑不变量计算的简化

本章将介绍两个空间对称性简化拓扑不变量计算的例子，第一个是拓扑绝缘体的 Fu-Kane 公式，另一个是奇宇称配对超导体拓扑不变量计算的简化。由于奇宇称配对超导体相关结论的细节需要在后文中使用，因此展示了每个步骤的主要结果而将详细的证明过程置于附录 A 中。

3.1 空间反演对称拓扑绝缘体

本节中拓扑绝缘体泛指 AZ 分类中的 AII 类系统。如 2.3.2 和 2.3.1 所述，拓扑绝缘体系统由一系列 Z_2 拓扑不变量描述。空间反演不变性的数学描述为：

$$IH(\mathbf{k})I^{-1} = H(-\mathbf{k}), \quad (3.1)$$

因此，在 k -空间 TRI 点处， H 和空间反演变换 I 对易，在该处可以选取能量本征态使其同时具有空间宇称 π_n ，由于时间反演变换 T 和空间反演变换 I 对易，TRI 点处 Kramers 对的空间宇称一致。

2007 年，傅亮和 Kane 指出：对二维和三维空间下具有空间反演对称性的拓扑绝缘体，他们的强 Z_2 拓扑数可以简单地由 k -空间中各个 TRI 点处奇宇称态的占据数决定 (Fu 等, 2007a)：

$$\nu = \prod_{i,n} \pi_n^I(\mathbf{k}_i), \quad (3.2)$$

式中 i 标记空间中不同的 TRI 点， n 是能带标记。 $\pi_n^I(\mathbf{k}_i)$ 表示同一 Kramers 对中本征态的空间宇称只计算一次。上式也常被称为 Fu-Kane 公式，它大大方便了 Z_2 拓扑不变量的计算，因为不论是对 Berry 联络积分，还是按照 Kane 和 Mele 原始的定义 (Kane 等, 2005)，直接计算 Z_2 拓扑不变量都比较困难。

2007 年的 Fu-Kane 公式本身没有应用于“一维拓扑绝缘体”，因为一维绝缘体一般是拓扑平凡的。但随着人们对拓扑晶格材料认识的加深，后来人们发现空间反演不变性本身能够在一维绝缘体上保护非平凡的拓扑性质，而且利用 Wilson 回路，“一维的 Fu-Kane 公式”在形式上仍然成立 (Alexandradinata 等, 2014)。

3.2 奇宇称配对超导体

本节将化简奇宇称配对的超导体拓扑不变量的计算，它可以像 Fu-Kane 公式一样将拓扑不变量化简至仅依赖 k -空间中几个 TRI 点处的正常态空间宇称（可参见前文图 2.3），进一步可以化简到只需要正常态的费米面信息就可以判断系统的拓扑性质，这一点在第四章 URhGe 和 UCoGe 拓扑性质的研究中有巨大的作用。事实上在奇宇称配对超导体中寻找拓扑超导的候选材料已经被认为是一个重要的思路 (Fu 等, 2010)。

3.2.1 奇宇称配对条件对拓扑不变量计算的化简

在超导体具有奇宇称配对时，Wilson 回路积分可以进一步简化。这是由于此时哈密顿量在空间反演变换 I 和 $U(1)$ 规范变换的联合变换 I_{BdG} 下不变：

$$I_{\text{BdG}}^\dagger H_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) I_{\text{BdG}} = H_{\text{BdG}}(-\mathbf{k}), \quad I_{\text{BdG}} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I^* \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

此时在 k -空间的 TRI 点 \mathbf{k}_i 处 $H(\mathbf{k}_i)$ 和 I_{BdG} 变换对易。从而在 \mathbf{k}_i 处可以得到它们的共同本征态 $|u_n(\mathbf{k}_i)\rangle$ 满足： $I_{\text{BdG}}|u_n(\mathbf{k}_i)\rangle = \pi_n(\mathbf{k}_i)|u_n(\mathbf{k}_i)\rangle$ 。

通过引入辅助矩阵：

$$V_{mn}(\mathbf{k}) = \langle u_m(\mathbf{k}) | I_{\text{BdG}} C | u_n(\mathbf{k}) \rangle, \quad (3.4)$$

$$W_{mn}(\mathbf{k}) = \langle u_m(-\mathbf{k}) | C | u_n(\mathbf{k}) \rangle, \quad (3.5)$$

可以将 Wilson 回路积分化简：

$$v[C_{ij}] = \frac{1}{\pi i} \ln \left(\frac{\sqrt{\det V(\mathbf{k}_i)}}{\sqrt{\det V(\mathbf{k}_j)}} \right), \quad (3.6)$$

$$\det V(\Gamma_i) = \prod_n \pi_n(\Gamma_i) \det W, \quad (3.7)$$

由于粒子-空穴对称性的存在，同一 TRI 点处能量相反的两个本征态有相同的 π 本征值，所以式 (3.7) 可以开平方。然后对负能态求积：

$$\sqrt{\det V(\mathbf{k}_i)} = \prod_{n<0} \pi_n(\mathbf{k}_i) \sqrt{\det W}, \quad (3.8)$$

最后得到：

$$(-1)^{v[C_{ij}]} = \prod_{n<0} \pi_n(\mathbf{k}_i) \pi_n(\mathbf{k}_j). \quad (3.9)$$

3.2.2 拓扑不变量与费米面

在弱配对假设下，式(3.9)最后的结果能够直接和费米面联系起来。弱配对假设是指式(2.14)中TRI点处的超导序参量 $\Delta(\mathbf{k}_i)$ 显著小于对角项 $\varepsilon(\mathbf{k}_i)$ 。因此可以认为即使超导序参量 $\Delta(\mathbf{k}) \rightarrow 0$ 也不会导致能隙关闭，由绝热定理可知这并不会改变体系的拓扑性质。此时可以近似TRI点处的哈密顿量呈对角形式：

$$H(\mathbf{k}_i) \approx \text{diag}(\varepsilon(\mathbf{k}_i), -\varepsilon^T(\mathbf{k}_i)), \quad (3.10)$$

对单独的 $\varepsilon(\mathbf{k}_i)$ 可以定义其具有本征值 $\varepsilon_\alpha(\mathbf{k}_i)$ 的本征矢 $|\varphi_\alpha(\mathbf{k}_i)\rangle$ ，这其实就是超导正常态的能带。另外由于在TRI点处 $\varepsilon(\mathbf{k}_i)$ 和空间反演变换I对易，这些本征矢可以同时具有空间反射宇称 $\zeta_\alpha(\mathbf{k}_i)$ 。

这样，本征态 $|u_n(\mathbf{k})\rangle$ 可以表达为：

$$|u_n(\mathbf{k})\rangle = (|\varphi_\alpha(\mathbf{k}_i)\rangle, 0)^T \quad (\varepsilon_\alpha < 0), \quad (3.11)$$

$$|u_n(\mathbf{k})\rangle = (0, |\varphi_\alpha^*(\mathbf{k}_i)\rangle)^T = C (|\varphi_\alpha(\mathbf{k}_i)\rangle, 0)^T \quad (\varepsilon_\alpha > 0), \quad (3.12)$$

第二式已经利用了式(2.16)的结果。按照之前的约定，它们同时也是 Π 的本征态，所以：

$$\prod_{n<0} \pi_n(\mathbf{k}_i) = \prod_\alpha \zeta_\alpha(\mathbf{k}_i) \prod_\alpha \text{sgn}\varepsilon_\alpha(\mathbf{k}_i), \quad (3.13)$$

由于 $\prod_\alpha \zeta_\alpha(\mathbf{k}_i)$ 事实上只由 $\det P$ 决定而后者和 k -空间的点无关，所以前者事实上也和 k -空间的点无关： $\prod_\alpha \zeta_\alpha(\mathbf{k}_i) = \prod_\alpha \zeta_\alpha(\mathbf{k}_j)$ 。将所得结果代回式(3.9)，得到：

$$(-1)^{\nu[C_{ij}]} = \prod_\alpha \text{sgn}\varepsilon_\alpha(\mathbf{k}_i) \text{sgn}\varepsilon_\alpha(\mathbf{k}_j), \quad (3.14)$$

左边是由Wilson回路定义的拓扑不变量，右边却是超导正常态下的能谱信息，也就是费米面的信息，式(3.14)给出了一个通过费米面判断拓扑不变量是否平凡的简单方法。

3.2.3 时间反演不变超导体的情况

在系统具有时间反演不变性的情况下思路仍和2.3.1中定义Kane-Mele的 Z_2 拓扑不变量一样，可以将本征态分为两组Kramers对，每一分支都给出对应的规范场及其Wilson回路积分，由此可以得到适用于时间反演不变系统的拓扑

不变量。对 Kramers 分支定义规范场，并做 Wilson 回路积分：

$$\mathbf{A}^{\text{I},<}(\mathbf{k}) = i \sum_{n<0} \langle u_n^{\text{I}}(\mathbf{k}) | \nabla | u_n^{\text{I}}(\mathbf{k}) \rangle, \quad (3.15)$$

$$W^{\text{I}}[C_{ij}] = \frac{1}{2\pi} \oint_{C_{ij}} d\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}^{\text{I},<}(\mathbf{k}), \quad (3.16)$$

实际上 $W^{\text{I}}[C_{ij}] = W^{\text{II}}[C_{ij}]$ ，两个 Kramers 对会给出一样的结果，且两者相加得到之前平凡的 $W[C_{ij}]$ ，所以可以定义新的拓扑不变量：

$$(-1)^{\tilde{v}[C_{ij}]} = e^{2\pi i W^{\text{I}}[C_{ij}]}, \quad (3.17)$$

可以改写形式上的 Kramers 指标为能带指标，能带指标的奇偶性分别对应两个 Kramers 对，平行的讨论可以得到：

$$(-1)^{\tilde{v}[C_{ij}]} = \prod_{n<0} \pi_{2n}(\mathbf{k}_i) \pi_{2n}(\mathbf{k}_j), \quad (3.18)$$

$$\prod_{n<0} \pi_{2n}(\mathbf{k}_i) = \prod_{\alpha} \zeta_{2\alpha}(\mathbf{k}_i) \prod_{\alpha} \text{sgn}\epsilon_{2\alpha}(\mathbf{k}_i), \quad (3.19)$$

$$(-1)^{\tilde{v}[C_{ij}]} = \prod_{\alpha} \text{sgn}\epsilon_{2\alpha}(\mathbf{k}_i) \text{sgn}\epsilon_{2\alpha}(\mathbf{k}_j), \quad (3.20)$$

相当于认为每一组双重简并的 Kramers 对只被记了一次。

第4章 非点式对称性保护的拓扑态

根据 \mathbf{K} 理论的结果，非点式对称性 (Non-Symmorphic Symmetry) 可以使拓扑绝缘体和拓扑超导体系统产生新的拓扑态和拓扑不变量。

一般而言 Z_2 拓扑不变量描述的系统往往在具备时间反演对称性或粒子-空穴对称性的条件下实现，也就是说需要系统在一类反酉变化下保持不变。但是现在这些非点式对称性本身也能在不具备这些反酉对称性的情况下保护由一类 Z_2 拓扑不变量描述的全新的拓扑非平凡态；如果系统额外具备时间反演不变性，还将可能出现全新的 Z_4 拓扑不变量描述的拓扑非平凡态，这个 Z_4 拓扑不变量模二之后便是一般情形下的 Z_2 拓扑不变量 (Shiozaki 等, 2016)。

这一类由非点式对称性保护的全新拓扑非平凡态有共同的奇特特性，其边界态的激发谱在 k -空间中展示出一种类似 Möbius 环的性质，这种性质还使得一定条件下激发谱可以从腔体 (bulk) 的激发谱剥离出来，这是由非点式对称性本身决定的。因此称这一类拓扑非平凡边界态为 Möbius 边界态。

下面将以二维拓扑超导体为例详细介绍这类拓扑性质，首先简要介绍要用到的非点式对称变换。

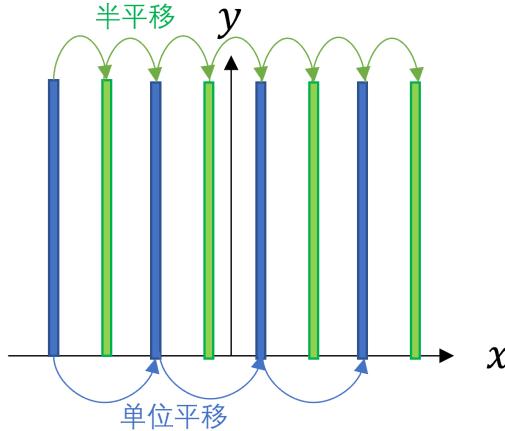
4.1 非点式对称变换

4.1.1 二维全局 Z_2 变换

二维空间下全局 Z_2 变换的特征是变换后 k -空间的坐标没有一个变号 (后文中将称为 Z_2 变换)。如图 4.1 所示：其中相邻近的绿色、蓝色条纹代表一个晶格单位内部的两个子晶格结构，选择全局 Z_2 变换将系统沿着 x 方向平移半个晶格单位，使得蓝色条纹到达绿色条纹的位置，再将系统全体蓝色、绿色条纹位置互换，此时系统将回到原来的状态。 k -空间中它的作用是将 $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ 映射到 $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ 。

将此变换在目标空间的作用以 $G(k_x)$ 表示，目标空间为自旋空间和子晶格空间的直乘：

$$G(k_x) = i s_z \otimes \begin{pmatrix} 0 & e^{-ik_x} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.1)$$

图 4.1 二维全局 Z_2 变换示意图。**Figure 4.1 Schematic diagram for global Z_2 transformation in 2D space.**

其中 s_z 是作用在自旋空间的 Pauli 矩阵, k -空间的 e^{-ik_x} 因子对应实空间中 x 方向的半平移。若系统的自旋不需要考虑:

$$G(k_x) = \begin{pmatrix} 0 & e^{-ik_x} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

4.1.2 三维滑移 (Glide) 变换

三维滑移变换是一个半平移叠加一个镜面变换, 它将会改变 k -空间中的至少一个坐标的符号, 这一点决定了滑移变换至少在三维空间中才能存在 (后文中将略去空间维数直接称为滑移变换)。如图 4.2 所示: 其中相邻的蓝色、粉色带有不同自旋组态的平面表示一个晶格单位内部的两个子晶格结构, 选择滑移变换将系统沿着 x 方向平移半个晶格单位, 使得蓝色平面到达粉色平面的位置, 此时再将系统对 xz 平面做镜面变换, 镜面变换在自旋组态上的作用使得粉色蓝色两组的自旋组态彼此交换, 从而系统重新回到原来的状态。 k -空间中它的作用是将 $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ 映射到 $\mathbf{k} = (k_x, k_y, -k_z)$

将此变换在目标空间的作用以 $G(k_x)$ 表示, 目标空间为自旋空间和子晶格空间的直积:

$$G(k_x) = i s_z \otimes \begin{pmatrix} 0 & e^{-ik_x} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.3)$$

其中 s_z 是作用在自旋空间的 Pauli 矩阵, 它的存在来自镜面变换中绕在 z 轴的 π 旋转。 k -空间的 e^{-ik_x} 因子仍然对应实空间中 x 方向的半平移。若系统的自旋不

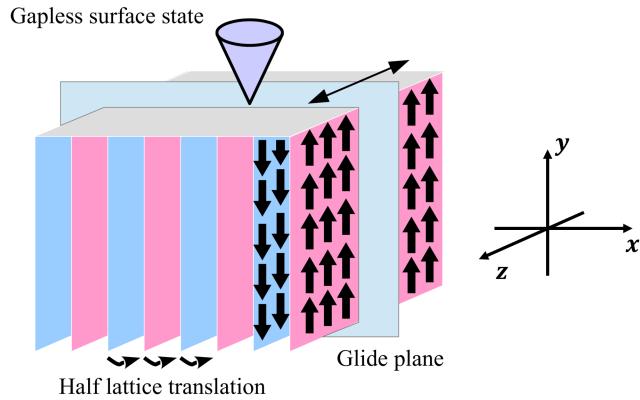


图 4.2 三维滑移变换示意图 (Shiozaki 等, 2016)。

Figure 4.2 Schematic diagram of glide transformation in 3D space.

需要考虑:

$$G(k_x) = \begin{pmatrix} 0 & e^{-ik_x} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

4.1.3 Z_2 变换与滑移变换的关系

由式(4.1)和式(4.3)可知, 滑移变换和全局 Z_2 变换在自旋空间和子晶格空间上的作用式是一样的, 区别在于 k -空间中的作用不一样。观察式(4.3)可知, $k_y = 0$ 与 $k_y = \pi$ 表示的三维 k -空间中平面在滑移变换下保持不变, 称为滑移不变平面(注意 k -空间中的周期性)。滑移变换在这个滑移不变平面上的限制效果和全局 Z_2 变换是等价的。

4.2 二维时间反演对称性破缺的拓扑超导体

由 K 理论知此类系统属于 A-Z 分类中的 D 类, 在非点式全局 Z_2 变换下, 系统的拓扑性质由不变量 $Z \oplus Z_2$ 描述 (Shiozaki 等, 2016)。

4.2.1 对称性的形式

系统的 BdG 哈密顿量为:

$$H_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \varepsilon(\mathbf{k}) & \Delta(\mathbf{k}) \\ \Delta^*(-\mathbf{k}) & -\varepsilon^T(-\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

正常态具有 Z_2 变换不变性的数学形式为:

$$G(k_x)\varepsilon(\mathbf{k})G(k_x)^{-1} = \varepsilon(\mathbf{k}), \quad (4.6)$$

由于时间反演对称性破缺情形下常常不需要考虑自旋的影响, 所以 Z_2 变换 $G(k_x)$ 可以取式 (4.2) 的形式。

若要求超导态也具有该不变性, 超导序参量 $\Delta(\mathbf{k})$ 需要满足:

$$G(k_x)\Delta(\mathbf{k})G(-k_x)^T = \pm\Delta(\mathbf{k}), \quad (4.7)$$

其中 + 对应 G-偶性, - 对应 G-奇性 (以后将两者统称为 G-宇称)。将以上两式组合起来, 得到 Z_2 变换不变性在 Nambu 空间下的表达式为:

$$G_{\text{BdG}}^{(\pm)}(k_x) = \begin{pmatrix} G(k_x) & 0 \\ 0 & \pm G(-k_x)^* \end{pmatrix}, \quad (4.8)$$

从而在 Nambu 空间下 Z_2 变换不变的超导体 BdG 哈密顿量满足:

$$G_{\text{BdG}}^{(\pm)}(k_x)H_{\text{BdG}}(\mathbf{k})G_{\text{BdG}}^{(\pm)}(k_x)^{-1} = H_{\text{BdG}}(\mathbf{k}). \quad (4.9)$$

4.2.2 拓扑不变量

$Z \oplus Z_2$ 中的 Z 正是 (2.2.2) 中提到的 Chern 数, 而 Z_2 则是 Z_2 变换不变性直接对应的拓扑不变量, 它们共同成为了 Z_2 不变的二维时间反演破缺超导体的强拓扑数, 引入过程如下:

由于 $G_{\text{BdG}}^{(\pm)}(k_x)$ 与哈密顿量 H_{BdG} 对易, 可以取 H_{BdG} 和 $G_{\text{BdG}}^{(\pm)}(k_x)$ 的共同本征态 $|u_n^\pm(k_x, k_y)\rangle$, $G_{\text{BdG}}(k_x)$ 中的成分 $G(k_x)$ 的本征值为 $\pm e^{-ik_x/2}$ (后文中称为 G-本征值), u 的上标 \pm 表示对应 G-本征值的符号而非超导序参量的 G-宇称。

一个基本的想法便是希望上述区分的各支中至少能有几支分别保持粒子空穴对称性, 也就是说 $|u\rangle$ 和 $C|u\rangle$ 都是 G_{BdG}^\pm 相同本征值的本征态, 从而可以在对应的区域直接定义超导体的拓扑不变量 v_\pm^B 。

这需要考察粒子-空穴变换 C 和 $G_{\text{BdG}}^{(\pm)}(k_x)$ 的对易关系, 直接计算可得:

$$G_{\text{BdG}}^{(\pm)}(k_x)C = \begin{pmatrix} 0 & G(k_x) \\ \pm G(-k_x)^* & 0 \end{pmatrix} K, \quad (4.10)$$

$$CG_{\text{BdG}}^{(\pm)}(k_x) = \begin{pmatrix} 0 & \pm G(-k_x) \\ G(k_x)^* & 0 \end{pmatrix} K = \pm G_{\text{BdG}}^{(\pm)}(-k_x)C. \quad (4.11)$$

G-奇性时, 在 $k_x = 0, \pi$ 直线上 C 和 $G_{\text{BdG}}^{(-)}(k_x)$ 反对易:

$$G_{\text{BdG}}^{(-)}C|u\rangle = -CG_{\text{BdG}}^{(-)}|u\rangle = -C(\pm a)|u\rangle = \mp a^*C|u\rangle, \quad (4.12)$$

所以 G-本征值 a 应为虚数, 这要求 $k_x = \pi$, 此时 $G^\pm(k_x = \pi)$ 的本征值为 $\pm i$ 。于是在 $k_x = \pi$ 上可以像 3.2 中对 G-本征值的两个分支分别定义一维超导体 Z_2 拓扑不变量 (Sato, 2010):

$$v_\pm^B = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \text{tr} A_\pm(k_x = \pi, k_y) dk_y \pmod{2}, \quad (4.13)$$

$$\text{tr} A_\pm(k_x = \pi, k_y) = i \sum_{n<0} \langle u_n^\pm(k_x = \pi, k_y) | \partial_{k_y} | u_n^\pm(k_x = \pi, k_y) \rangle, \quad (4.14)$$

其中 $\text{tr} A_\pm(k_x = \pi, k_y)$ 表示两个 G-本征值分支的 Berry 联络对所有负能态的求和。

G-偶性时, 在 $k_x = 0, \pi$ 直线上 C 和 $G_{\text{BdG}}^{(-)}(k_x)$ 反对易, 由相同的论证知 G-本征值应为实数, 这要求 $k_x = 0$, 此时 $G(k_x = 0)$ 的本征值为 ± 1 可, 以对 G-特征值的两个分支分别定义一维超导体 Z_2 拓扑不变量:

$$v_\pm^B = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \text{tr} A_\pm(k_x = 0, k_y) dk_y \pmod{2}, \quad (4.15)$$

$$\text{tr} A_\pm(k_x = 0, k_y) = i \sum_{n<0} \langle u_n^\pm(k_x = 0, k_y) | \partial_{k_y} | u_n^\pm(k_x = 0, k_y) \rangle, \quad (4.16)$$

其中 $\text{tr} A_\pm(k_x = 0, \pi, k_y)$ 表示两个 G-本征值分支的 Berry 联络对负能态的求和。

v_+^B 和 v_-^B 并不是独立的, 事实上它们和 Chern 数满足关系 (Shiozaki 等, 2016):

$$v_+^B + v_-^B = Ch \pmod{2}, \quad (4.17)$$

这也说明了系统的拓扑性质实际上由不变量 $Z \oplus Z_2$ 描述.

4.3 二维时间反演不变的拓扑超导体

由 K 理论知此类系统属于 A-Z 分类中的 DIII 类, 在非点式全局 Z_2 变换 G 下, 系统的拓扑性质依赖 G-宇称, G-奇性由不变量 Z_4 描述, 而 G-偶性由不变量 $Z_2 \oplus Z_2$ 描述 (Yanase 等, 2017)。

4.3.1 对称性的形式

系统的对称性形式和 4.2.1 中一样, 除了在时间反演不变的情况下应考虑自旋, Z_2 变换的作用应采用式 (4.1), 此时由于多出的 is_z 因子, $G(k_x)$ 的本征值将变为 $\pm ie^{ik_x/2}$ 。除此外, 系统还额外增加了时间反演不变性:

$$TH_{\text{BdG}}(\mathbf{k})T^{-1} = H_{\text{BdG}}(-\mathbf{k}), \quad (4.18)$$

$$T = is_y K, \quad (4.19)$$

Z_2 变换和时间反演变换还有关系: $TG_{\text{BdG}}^{(\pm)}(k_x) = G_{\text{BdG}}^{(\pm)}(-k_x)T$ 。

4.3.2 G-偶性的拓扑不变量

和时间反演不变性破缺的情形相同, G-偶性意味着超导序参量满足:

$$G(k_x)\Delta(\mathbf{k})G(-k_x)^T = +\Delta(\mathbf{k}), \quad (4.20)$$

此时 Z_2 变换在 Nambu 空间下的表示为:

$$G_{\text{BdG}}^{(+)}(k_x) = \begin{pmatrix} G(k_x) & 0 \\ 0 & G(-k_x)^* \end{pmatrix}, \quad (4.21)$$

直接的计算可得:

$$TG_{\text{BdG}}^{(+)}(k_x) = G_{\text{BdG}}^{(+)}(-k_x)T, \quad (4.22)$$

$$CG_{\text{BdG}}^{(+)}(k_x) = G_{\text{BdG}}^{(+)}(-k_x)C. \quad (4.23)$$

类似 4.2.2 中讨论可知, 在 $k_x = \pi$ 上可以定义带有粒子-空穴对称性的 H_{BdG} 和 $G_{\text{BdG}}^{(+)}$ 的共同本征态 $|u_n^{\pm}(k_x = \pi, k_y)\rangle$ 。又由于 $k_x = \pi$ 上 T 和 $G_{\text{BdG}}^{(+)}$ 对易, 所以 G-本征值的两个分支本身也是时间反演不变的。这样可以按照 3.2 中的方式进一步区分两组 Kramer 对, 从而对两个 G-本征值分支可以分别定义一维时间反演不变超导体拓扑不变量 (Sato, 2010; Qi 等, 2010):

$$v_{\pm}^I = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \text{tr} A_{\pm}^I(k_x = \pi, k_y) dk_y \pmod{2}, \quad (4.24)$$

$$\text{tr} A_{\pm}^I(k_x = \pi, k_y) = i \sum_{n<0} \langle u_n^{\pm,I}(k_x = \pi, k_y) | \partial_{k_y} | u_n^{\pm,I}(k_x = \pi, k_y) \rangle, \quad (4.25)$$

$\text{tr} A_{\pm}^I(k_x = \pi, k_y)$ 表示两个 G-本征值分支中对应 Kramer 对 I 分支的 Berry 联络对负能态的求和。

4.3.3 G-奇性的拓扑不变量

G-奇性的情况和之前所有的情况都不太一样, 它对应的拓扑不变量是 Z_4 (Shiozaki 等, 2016), 这是一种因非点式对称性而演生 (Emerge) 的现象。目前针对点式对称性得到的理论分类结果都没有得到这种 Z_4 拓扑不变量 (Chiu 等, 2016; Shiozaki 等, 2014)。

先进行对称性分析, 和前文一样, G-奇性意味着超导序参量满足:

$$G(k_x)\Delta(\mathbf{k})G(-k_x)^T = -\Delta(\mathbf{k}), \quad (4.26)$$

此时 Z_2 变换在 Nambu 空间下的表示为:

$$G_{\text{BdG}}^{(-)}(k_x) = \begin{pmatrix} G(k_x) & 0 \\ 0 & -G(-k_x)^* \end{pmatrix}, \quad (4.27)$$

直接的计算表明:

$$TG_{\text{BdG}}^{(-)}(k_x) = G_{\text{BdG}}^{(-)}(-k_x)T, \quad (4.28)$$

$$CG_{\text{BdG}}^{(-)}(k_x) = G_{\text{BdG}}^{(-)}(-k_x)C. \quad (4.29)$$

类似 4.2.2 中讨论可知, 在 $k_x = 0$ 上可以定义带有粒子-空穴对称性的 H_{BdG} 和 $G_{\text{BdG}}^{(-)}$ 的共同本征态 $|u_n^\pm(k_x = \pi, k_y)\rangle$, 但是两个 G-本征值分支将不再保有时间反演不变性, 因为此时 G-本征值是纯虚数, 会被时间反演算符作用改变符号。虽然可以定义一维超导体的拓扑不变量:

$$\nu_\pm = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \text{tr} A_\pm(k_x = 0, k_y) dk_y \pmod{2}, \quad (4.30)$$

但这只是一个 Z_2 不变量。K 理论告诉我们, 事实上 Z_4 不变量的定义需要直线 $k_x = \pi$ 上的信息, 虽然直线 $k_x = \pi$ 上也可以定义 H_{BdG} 和 $G_{\text{BdG}}^{(-)}$ 的共同本征态并且由于 G-本征值是实数而保有时间反演不变性, 但它失去了粒子-空穴对称性, 这并不是一件平凡的事情。 Z_4 不变量 θ 的公式由 Shiozaki 等人给出:

$$\theta = \frac{2}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \text{tr} A_+^I(k_x = \pi, k_y) dk_y - \frac{1}{\pi} \int_0^\pi dk_x \int_{-\pi}^{\pi} dk_y \text{tr} F_+(k_x, k_y) \pmod{4}, \quad (4.31)$$

式 (4.31) 中的 $(\text{mod } 4)$ 源自式 (4.31) 中第一项 Berry 联络 A_+^I 的 U(1) 相位自由度 (Shiozaki 等, 2016), $\text{tr} A_+^I(k_x = \pi, k_y)$ 类似于式 (4.25) 定义, $\text{tr} F_+(k_x, k_y)$ 表示二维 k 平面 G-本征值正号分支的 Berry 曲率对负能态的求和:

$$\text{tr} F_+(k_x, k_y) = i \sum_{n<0} \left(\partial_{k_x} \langle u_n^+(k_x, k_y) | \partial_{k_y} | u_n^+(k_x, k_y) \rangle - \partial_{k_y} \langle u_n^+(k_x, k_y) | \partial_{k_x} | u_n^+(k_x, k_y) \rangle \right). \quad (4.32)$$

4.4 Möbius 边界态

除了上述的四种二维情况, 三维空间中滑移变换不变性也可以在拓扑绝缘体的表面保护类似的拓扑非平凡态 (Shiozaki 等, 2015, 2016)。

这些由非点式变换对称性保护的拓扑非平凡态有奇特的性质, 由 Z_2 变换和滑移变换的作用式 (4.1) 和 (4.3) 可知其关于 k_x 是 2π 周期的, 在之前的分析中

我们将它们按照 G-本征值的符号划分成了 \pm 两类，但是注意到本征值 $\pm e^{ik_x/2}$ 或 $\pm ie^{ik_x/2}$ 在 k_x 变换 2π 后并不会变回原样，而是 \pm 两分支互换，只有 k_x 平移 4π 后才回到原来的分支。这种周期的不一致使得按照 G-本征值划分的拓扑非平凡态展示出类似 Möbius 环的性质，故称 Möbius 态。

点式变换保护的边界态没有这种性质，因为点式变换中不可能出现非整数晶格单位的平移，从而类似 e^{-ik_x} 的项不会出现在目标空间的作用式中。

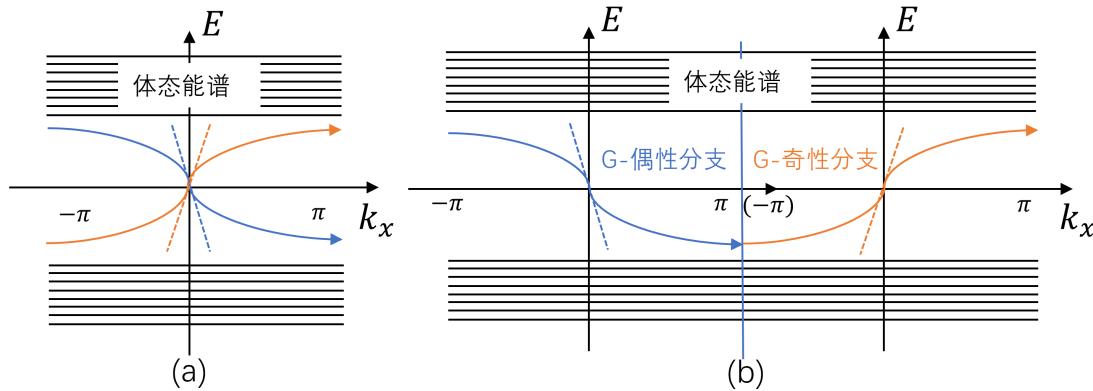


图 4.3 二维时间反演破缺 G-偶性超导体 $v_+ = v_- = 1$ 时的能谱示意图。蓝色、橙色曲线表示不同 G-本征值分支的手征 Majorana 模。(a) 由两支属于不同的 G-本征值分支的手征 Majorana 模形成的一组螺旋 Majorana 模。(b) 将 2π 周期的能谱展开, 此时 G-偶性分支经过 2π 后自然演变入 G-奇性分支, 需要经过 4π 才能回到原处。

Figure 4.3 Schematic diagrams for the spectrum of 2D TRB glide-even topological superconductor with $v_+ = v_- = 1$. Blue and orange curves mean chiral Majorana modes belonging to different G-eigenvalue branches respectively. (a) Two chiral Majorana modes of different G-eigenvalue branches form a helical Majorana mode, (b) Extending spectrum into 4π periodicity, the G-even chiral Majorana mode evolves into G-odd chiral Majorana mode naturally after changing k_x with 2π .

以 $v_+^B = v_-^B = 1$, (此时 $Ch = 0$) 的二维时间反演破缺 G-偶性超导体为例, v_+^B 和 v_-^B 均非平凡意味着两支 G-本征值分支均呈现非平凡的 Majorana 零能模。图 4.3 展示了可能的 k_x 方向能谱图 (按照式 4.1 中的方向选择, 边界态在 y -开边界呈现): 其中蓝色、橙色能谱线对应的是两支 G-本征值分支的手征 Majorana 零能模 (Chiral Majorana Mode), 两端密集的黑色能谱线是体态能谱, 它们远比图示的要密集。左图呈现出由两个 G-本征值分支对应的手征 Majorana 模形成的螺旋 Majorana 零能模 (Helical Majorana Mode), 注意这一螺旋边界态并不需要时间反演不变性的保护。另外将左图拆开成为右图的两部分可以更清楚地展示两条分支

随 k_x 的演变关系, 这种光滑地演变是由能谱本身的 2π 周期性与两个 G-分支在 $k_x = \pi$ 处互为彼此的粒子-空穴对称变换保证的: $|u_n^+(k_x = \pi)\rangle = e^{i\phi}|u_n^-(k_x = \pi)\rangle$ 。

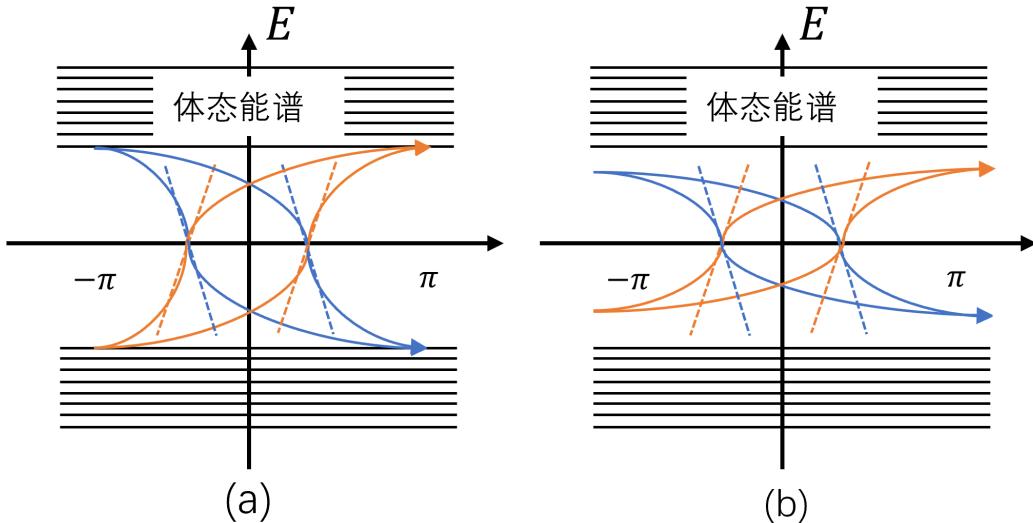


图 4.4 二维时间反演不变 G-奇性超导体 $\theta = 2$ 时的能谱示意图, 蓝、橙两种曲线表示不同的 G-本征值分支。(a) 此时两组螺旋 Majorana 模的能谱合入了体态能谱, (b) 此时两组螺旋 Majorana 模的能谱从体态能谱剥离。

Figure 4.4 Schematic diagrams for the spectrum of 2D TRI glide-odd topological superconductor with $\theta = 2$, where blue and orange curves belong to different G-eigenvalue branches. (a) The spectrum of helical Majorana modes are mixed with the bulk spectrum. (b) The spectrum of helical Majorana modes is isolated from the bulk spectrum.

在由 Z_4 拓扑不变量 θ 描述的二维时间反演不变 G-奇性超导体的情况下, θ 的取值代表有 θ 个螺旋 Majorana 模。

图 4.4 展示了两组 $\theta = 2$ 时的两个螺旋 Majorana 模的能谱图, 可见两个 G-本征值分支同样出现了 Möbius 环的行为, 即每个分支的能谱本身不具有 2π 周期性, 而是 4π 周期性, 平移 2π 后进入另一分支的谱线。图 4.4 中给出的两种能谱区别在于边界态能谱是否融入体态能谱, 这在带有时间反演不变性的系统下并不是一件平凡的事, 在 4.3.3 内分析到由于在直线 $k_x = \pi$ 上系统具有时间反演不变性, 所有能量本征态在 $k_x = \pi$ 上至少双重简并。在有两组螺旋 Majorana 模的情况下, 它们将在 $k_x = \pi$ 处简并, 除此外并没有其余限制条件, 所以具体的简并能完全可以脱离体态能谱。同样的, 对二维时间反演破缺的超导体一般也没有多余的限制, 所以 Majorana 模的能谱也可以脱离体态能谱。

但若系统只有一组螺旋 Majorana 模 ($\theta = 1, 3$), 它们在 $k_x = \pi$ 处将不得不与

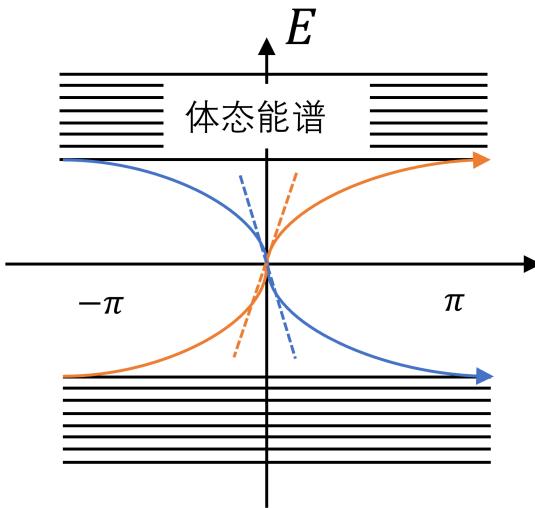


图 4.5 二维时间反演不变 G-奇性超导体 $\theta = 1$ 能谱示意图。Kramers 简并要求螺旋 Majorana 模能谱不能从体态能谱剥离。

Figure 4.5 Schematic diagrams for the spectrum of 2D TRI glide-odd topological superconductor with $\theta = 1$, the spectrum of Majorana mode can not be isolated from the bulk spectrum because of the Kramers degeneracy.

体态能谱简并，从而融入其中，图 4.5 展示了 $\theta = 1$ 时螺旋 Majorana 模的能谱图，它不能脱离体态能谱。

目前，能够同时存在两组螺旋边界态这本身就是 Z_4 不变量对应的拓扑性质特有的现象，在二维、三维空间中 Z_4 不变量（作为强拓扑数）只在同时具有时间反演不变性和非点式对称性的系统中存在，所以边界态能谱能够从体态能谱中脱离是 Möbius 边界态在这类系统中的一个重要特征。

生成以上典型能谱的模型哈密顿量以及有关的数值结果已出现在 (Shiozaki 等, 2015; Yanase 等, 2017; Fang 等, 2015; Shiozaki 等, 2016) 中，另外直接数值积分计算 Z_4 和 Z_2 拓扑不变量的方法也出现在 (Yoshida 等, 2019) 中。

第5章 UCoGe 和 URhGe 中的 Möbius 拓扑态

本章将讨论在 UCoGe 具有时间反演不变性的 S_2 相中研究 Z_4 拓扑不变量的理论方法，其中超导奇宇称配对以及系统空间群对称性对计算的简化起到很大帮助。这种简化方法并不局限于时间反演不变系统，本文还将该分析方法应用于时间反演破缺的 URhGe 并简化了计算拓扑不变量的公式。最后将对两者可能的拓扑性质进行分析。

5.1 UCoGe 和 URhGe 的基本信息

UCoGe、URhGe 是两种重费米子超导体，本节将分别介绍它们的空间群、相图以及超导配对特性。

5.1.1 UCoGe 和 URhGe 的空间群—— $Pnma$

(Aoki 等, 2019) 中指出 UCoGe 和 URhGe 晶格均具有空间群 $Pnma$ 的对称性，这个空间群对应正交晶系，可以取对应的晶格基矢为 $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ 。 $Pnma$ 空间群含有含有两个不同方向的滑移变换： a -滑移 G_a 、 n -滑移 G_n ，三个二阶螺旋轴变换 (Screw)： S_x, S_y, S_z ，一个 y 方向镜面变换 M_y ，恒等变换 E 和空间反演变换 I 。

实空间中 G_a, G_n 可以统一表示为： $G = \{M_c|\hat{c}/2 + \mathbf{a}/2\}$ ，其中带有帽子的 \hat{c} 是点阵的基矢，常与惯用晶格的坐标轴同向，而粗体的 \mathbf{a} 也要求是基矢量，须和 \hat{c} 垂直，但不必与惯用晶格同向，这取决于具体的情况。 M_c 表示垂直于 c 方向平面的镜面反射变换。另外可以再引入同样与 \hat{c} 垂直的 \mathbf{b} ，使得 $\{\mathbf{a}, \mathbf{b}, \hat{c}\}$ 成为一组新的完备晶格基矢，其中 \mathbf{a}, \mathbf{b} 并不需要互相垂直，晶格常数信息已经包含其中。

这组新的晶格基矢下的倒格矢系数将同样形成一个等效的立方布里渊区： $-\pi \leq k_a, k_b, k_c \leq \pi$ ，接下来的计算都将在这个等效立方布里渊区中进行（这样做是可行的，因为拓扑不变量并不涉及参数空间坐标轴的垂直与否），这有利于 G_a 和 G_n 放在一起讨论：

例如按照上述一般形式， $Pnma$ 空间群下两个滑移变换可以表达为：

$$G_a = \{M_z|\hat{z}/2 + \hat{x}/2\}, \quad (5.1)$$

$$G_n = \{M_x|\hat{x}/2 + (\hat{z}/2 + \hat{y}/2)\}, \quad (5.2)$$

若采用 G_n 对应的基矢 $\{\mathbf{a}, \mathbf{b}, \hat{\mathbf{c}}\} = \{\hat{\mathbf{z}} + \hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{z}}, \hat{\mathbf{x}}\}$, 这组基对应的倒格矢 $\{\mathbf{k}_a, \mathbf{k}_b, \mathbf{k}_c\} = \{\mathbf{k}_y, \mathbf{k}_z - \mathbf{k}_y, \mathbf{k}_x\}$, 从而得到布里渊区的变换:

$$\mathbf{k} = k_x \mathbf{k}_x + k_y \mathbf{k}_y + k_z \mathbf{k}_z = k_a \mathbf{k}_a + k_b \mathbf{k}_b + k_c \mathbf{k}_c, \quad (5.3)$$

$$k_a = k_y + k_z, \quad k_b = k_z, \quad k_c = k_x. \quad (5.4)$$

$Pnma$ 空间群除了上述两个滑移变换以及平移外的六个群元在实空间的表示如下:

$$E = \{E|0\}, \quad (5.5)$$

$$I = \{I|0\}, \quad (5.6)$$

$$M_y = \{M_y|\hat{\mathbf{y}}/2\}, \quad (5.7)$$

$$S_x = \{C_{2x}|\hat{\mathbf{x}}/2 + \hat{\mathbf{y}}/2 + \hat{\mathbf{z}}/2\}, \quad (5.8)$$

$$S_y = \{C_{2y}|\hat{\mathbf{y}}/2\}, \quad (5.9)$$

$$S_z = \{C_{2z}|\hat{\mathbf{x}}/2 + \hat{\mathbf{z}}/2\}. \quad (5.10)$$

直接计算可以得到一个重要关系, 它将帮助化简奇宇称配对的拓扑不变量:

$$\begin{aligned} GI &= \{M_c I|\hat{\mathbf{c}}/2 + \mathbf{a}/2\} = \{E|\hat{\mathbf{c}} + \mathbf{a}\} \{IM_c| - \hat{\mathbf{c}}/2 - \mathbf{a}/2\} \\ &= \{E|\hat{\mathbf{c}} + \mathbf{a}\} IG = IG\{E| - \hat{\mathbf{c}} + \mathbf{a}\}. \end{aligned} \quad (5.11)$$

5.1.2 UCoGe 和 URhGe 的相图

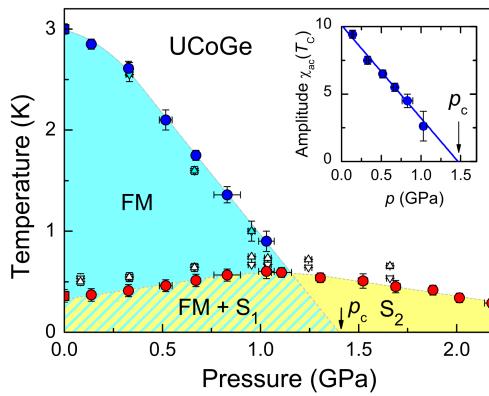


图 5.1 UCoGe 的 T - P 相图 (Manago 等, 2019)。

Figure 5.1 The T - P phase diagram of UCoGe.

图 5.1 给出了 UCoGe 的 T - P 相图: 系统在低压强下具有铁磁序, 低温下进入超导态, 但注意到系统在高压低温下存在一个 S_2 相, 系统处于铁磁序被抑制

的超导态中，这意味着 S_2 相下 UCoGe 具有时间反演不变性，在该平台上有望实现受非点式对称性保护的 Z_4 或 Z_2 拓扑态。

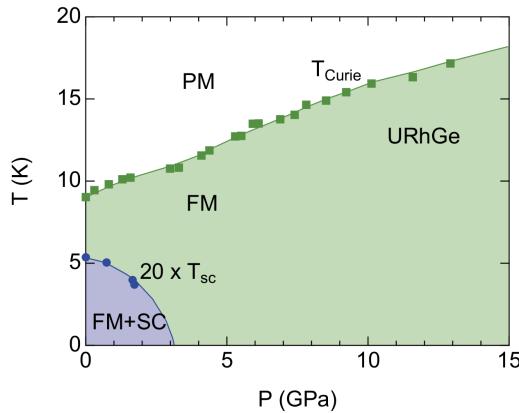


图 5.2 URhGe 的 T - P 相图 (Aoki 等, 2019)。

Figure 5.2 The T - P phase diagram of UCoGe.

图 5.2 给出了 UCoGe 随温度、压强变化的相图：和 UCoGe 不同之处在于超导态存在的区域完全被铁磁序存在的区域包裹，所以无论压强如何，URhGe 的超导态都与铁磁序共存，低温下它将是一个时间反演破缺的超导体，可能实现非点式对称性保护的 Z_2 拓扑态。

5.1.3 UCoGe 和 URhGe 的超导配对对称性

URhGe 和 UCoGe 的超导态都具有铁磁序或与铁磁序光滑过渡，加上实验中观测到的上临界磁场远远超出了 Pauli 极限范围，意味着它们的超导配对十分可能具有奇宇称，其中实验还支持 URhGe 的超导序参量具有 p -波对称性 (Huy 等, 2008; Hardy 等, 2005)。这种配对特性使得我们可以利用 3.2 中的方法简化对应拓扑数的计算。

5.2 在 UCoGe 和 URhGe 中研究 Möbius 拓扑态

虽然实际上 UCoGe 和 URhGe 都是三维空间中的晶体，但由 4.1.3 可知，在三维 k -空格的滑移不变平面上滑移变换和二维 Z2 变换的效果是一样的，所以可以在 k -空间滑移不变平面上研究对应的二维 Möbius 态。K 理论给出了更为抽象的观点来解释这件事：一个拓扑量子系统由一系列拓扑不变量描述，它们可以被分解为一系列强、弱拓扑数，高维系统通过维数约化或体-边对应 (Bulk-Boundary Correspondence) 可以分解出低维系统的拓扑不变量作为其弱拓扑数。因此受非

点式变换保护的 Z_2 、 Z_4 不变量作为二维系统的强拓扑数，在三维系统中将作为弱拓扑数出现，仍有在高维空间中研究的可能 (Yanase 等, 2017; Shiozaki 等, 2017)。

另外 $Pnma$ 空间群中的滑移变换与 4.1.2 中描绘的略有不同： G_n, G_a 中的平移项出现了垂直于镜面反射变换 M_c 的分量 $\hat{c}/2$ 。但这不影响在目标空间中的作用式 (4.3)，因为分量 $\hat{c}/2$ 本身并不在子晶格空间产生影响，而 $a/2$ 涉及两个子晶格分量的对易以及相对相位变化，如图 4.2 所示。

在 5.1.1 的符号下 G 在目标空间中作用的表达式为：

$$G = is_y \otimes \begin{pmatrix} 0 & e^{-ik_a} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.12)$$

若不考虑自旋则有：

$$G = \begin{pmatrix} 0 & e^{-ik_a} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.13)$$

5.2.1 URhGe 中的拓扑不变量

由之前分析可知 $Pnma$ 对称性系统中有两个滑移不变平面： $k_c = 0$ 和 $k_c = \pi$ ，其上可以定义 H_{BdG} 和 G_{BdG} 的共同本征态 $|u_n^\pm(k_a, k_b, k_c^*)\rangle$ ：

$$G_{\text{BdG}}|u_n^\pm(k_c = 0, \pi)\rangle = \pm e^{-ik_a/2}|u_n^\pm(k_c^*)\rangle, \quad (5.14)$$

上式中的 k_c^* 表示 $k_c = \pi$ 或 $k_c = 0$ 都可以，下面也将使用这个约定。

对 URhGe 来说，两个滑移不变平面均可以定义 Z_2 拓扑不变量，其中 k_a 的取值依靠超导序参量的 G-宇称，对 G-偶性情况来说：

$$\nu_\pm^{\text{B}}(k_c^*) = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \text{tr} A_\pm(0, k_b, k_c^*) dk_b, \quad (5.15)$$

相同地，对 G-奇性来说：

$$\nu_\pm^{\text{B}}(k_c^*) = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \text{tr} A_\pm(\pi, k_b, k_c^*) dk_b. \quad (5.16)$$

5.2.2 UCoGe 中的 G-偶性拓扑不变量

对 UCoGe 同样可以在滑移不变平面上定义式 (5.14) 一样的共同本征态：

$$G_{\text{BdG}}|u_n^\pm(k_c^*)\rangle = \pm i e^{-ik_a/2}|u_n^\pm(k_c^*)\rangle. \quad (5.17)$$

由于 S_2 相中时间反演不变性的存在，其可以在两个滑移不变平面上的 $k_a = \pi$ 直线上定义拓扑不变量，就像在 4.3.2 中那样：

$$\nu_{\pm}^S(k_c^*) = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \text{tr} A_{\pm}^I(\pi, k_b, k_c^*) dk_b. \quad (5.18)$$

5.2.3 UCoGe 中的 G-奇性拓扑不变量

Z_4 拓扑不变量由于带有 Berry 曲率的面积分而稍复杂些，但是在 $k_c = \pi$ 平面上利用空间群性质式 (5.11) 可以将该项消去：

$$\begin{aligned} G_{\text{BdG}}(k_a) (TI_{\text{BdG}}|u_n^{\pm}(k_c^*)\rangle) &= \{E|\hat{c} + \alpha\} I_{\text{BdG}} G_{\text{BdG}}(-k_a) T |u_n^{\pm}(k_c^*)\rangle \\ &= \{E|\hat{c} + \alpha\} I_{\text{BdG}} T G_{\text{BdG}}(k_a) |u_n^{\pm}(k_c^*)\rangle \\ &= (e^{-ik_a - ik_c}) TI_{\text{BdG}} (\pm ie^{-ik_a/2}) |u_n^{\pm}(k_c^*)\rangle \\ &= (e^{-ik_a - ik_c}) (\mp ie^{+ik_a/2}) (TI_{\text{BdG}}|u_n^{\pm}(k_c^*)\rangle). \end{aligned} \quad (5.19)$$

式中 BdG 下标特指空间变换在 Nambu 空间上的作用。由最后的结果可知，在平面 $k_c = 0$ 上， TI 联合变换将交换两支 G-本征值分支，而平面 $k_c = \pi$ 上，两支 G-本征值分支在 TI 联合变换下不变，这一性质使得该 G-本征值分支的 Berry 曲率为 0，因为：

$$TF(\mathbf{k}) = -F(-\mathbf{k}), IF(\mathbf{k}) = F(-\mathbf{k}) \Rightarrow TIF(\mathbf{k}) = -F(\mathbf{k}) = F(\mathbf{k}) \Rightarrow F(\mathbf{k}) = 0, \quad (5.20)$$

从而 θ 被映射到两倍的“一维时间反演不变拓扑绝缘体”的拓扑不变量（一维时间反演不变的情况下没有非平凡的强拓扑数 (Chiu 等, 2016)）：

$$\theta(\pi) = \frac{2}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \text{tr} A_{+}^I(\pi, k_b, \pi) dk_b. \quad (5.21)$$

5.3 超导奇宇称配对拓扑不变量计算的简化

UCoGe 和 URhGe 的奇宇称配对性质给它们的拓扑不变量计算的简化带来可能，就像 3.2 中那样，一些拓扑不变量将被简化至只需要 k -空间中 TRI 点处正常态占据数的信息即可判断，但首先需要变换 I 和 G 在 TRI 点具有对易关系，这样对每个 G-本征值分支才能够同时具有空间宇称，利用式 (5.11)：

$$\begin{aligned} G_{\text{BdG}} I_{\text{BdG}} |u_n^{\pm}(k_a, k_b, k_c^*)\rangle &= I_{\text{BdG}} G_{\text{BdG}} \{E|\hat{c} - \alpha\} |u_n^{\pm}(k_a, k_b, k_c^*)\rangle \\ &= e^{-ik_c + ik_a} I_{\text{BdG}} G_{\text{BdG}} |u_n^{\pm}(k_a, k_b, k_c^*)\rangle, \end{aligned} \quad (5.22)$$

所以满足 $e^{ik_a - ik_c} = 1$ 的 TRI 点: $k_a = k_c = \pi$ 或者 $k_a = k_c = 0$ 能够使得 I 和 G 在状态空间的作用对易, 在这些点处的本征态可以同时具有 G-本征值和空间宇称, 记为 $\pi_n(k_a, k_b, k_c^*)$ (由于上式的系数中不出现 k_b , 实际上这在过这些点的 k_b 方向直线上都成立), 若系统具有时间反演不变性, 利用式 (5.19) 可以在 TRI 点处再进一步分出 Kramers 对: $|u_n^{\pm, I}(k_a, k_b, k_c^*)\rangle, |u_n^{\pm, II}(k_a, k_b, k_c^*)\rangle$ 。对符合条件的四个 TRI 点利用式 (3.9) 和 (3.18) :

URhGe 的 G-偶性配对下,

$$(-1)^{v_{\pm}^B(0)} = \prod_{n<0} \pi_{n,\pm}(0, \pi, 0) \pi_{n,\pm}(0, 0, 0). \quad (5.23)$$

URhGe 的 G-奇性配对下,

$$(-1)^{v_{\pm}^B(\pi)} = \prod_{n<0} \pi_{n,\pm}(\pi, \pi, \pi) \pi_{n,\pm}(\pi, 0, \pi). \quad (5.24)$$

UCoGe 的 G-偶性配对情形下,

$$(-1)^{v_{\pm}^I(\pi)} = \prod_{n<0} \pi_{2n,\pm}(\pi, \pi, \pi) \pi_{2n,\pm}(\pi, 0, \pi). \quad (5.25)$$

其中下标 $2n$ 表示已经将 Kramers 简并考虑其中。

UCoGe 的 G-奇性配对的情况下拓扑不变量映射到“一维时间反演不变的拓扑绝缘体”, 由于在 (π, k_b, π) 上 I 和 G 对易, 每个 G-分支都是空间反演不变的, 形式上仍然可以使用一维情况下的 Fu-Kane 公式 (Alexandradinata 等, 2014):

$$(-1)^{\theta(\pi)/2} = \prod_{n<0} \pi_{2n,+}(\pi, \pi, \pi) \pi_{2n,+}(\pi, 0, \pi). \quad (5.26)$$

现在各情况可以一起使用 3.2 中弱配对假设的方式处理, 在 TRI 点处取消滑移变换 $G(\mathbf{k}_{\text{TRI}})$, 超导正常态哈密顿量 $\epsilon(\mathbf{k}_{\text{TRI}})$, 空间反演变换 I 的共同本征态 $|\varphi_{\alpha,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle$, 这些 $|\varphi_{\alpha}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle$ 在弱配对假设下能够与 Nambu 空间中的负能态 $|u_{n<0}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle$ 联系起来。一种是 $\epsilon_{\alpha}^0 < 0$, 对应 Nambu 空间 $(|\varphi_{\alpha}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle, 0)^T$, 表示诞生一个负能态; 另一种是 $\epsilon_{\alpha}^0 > 0$, 对应 Nambu 空间 $C(|\varphi_{\alpha}^*(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle, 0)^T$ 。

上式暂时忽略了 G-本征值指标 \pm , 因为粒子-空穴变换 C 可能会改变 G-本

征值的符号:

$$\begin{aligned} G_{\text{BdG}} C \begin{pmatrix} |\varphi_\alpha(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle \\ 0 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} G & 0 \\ 0 & \pm G^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} K \begin{pmatrix} |\varphi_\alpha(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} G & 0 \\ 0 & \pm G^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ |\varphi_\alpha^*(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle \end{pmatrix} = \pm G_{\text{Eigen}}^* C \begin{pmatrix} |\varphi_\alpha(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.27)$$

5.3.1 URhGe 中 G-偶性情形

将上一节中取的共同本征态 $|\varphi_{\alpha,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle$ 列出:

$$\varepsilon(\mathbf{k}_{\text{TRI}})|\varphi_{\alpha,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle = \varepsilon_{\alpha,\pm}^0(\mathbf{k}_{\text{TRI}})|\varphi_{\alpha,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle, \quad (5.28)$$

$$G(\mathbf{k}_{\text{TRI}})|\varphi_{\alpha,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle = \pm e^{-k_a/2}|\varphi_{\alpha,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle, \quad (5.29)$$

$$I|\varphi_{\alpha,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle = \zeta_{\alpha,\pm}^0(\mathbf{k}_{\text{TRI}})|\varphi_{\alpha,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle. \quad (5.30)$$

URhGe 中 G-偶性情形下 $k_a = 0$ 此时 G-本征值是实数, 故不会被粒子-空穴变换 C 对换 G-本征值分支, 因此:

$$|u_{n,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle = (|\varphi_{\alpha,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle, 0)^T \quad (\varepsilon_{\alpha,\pm}^0(\mathbf{k}_{\text{TRI}}) > 0), \quad (5.31)$$

$$|u_{n,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle = C (|\varphi_{\alpha,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle, 0)^T \quad (\varepsilon_{\alpha,\pm}^0(\mathbf{k}_{\text{TRI}}) < 0). \quad (5.32)$$

利用式(3.13)的讨论方法, 对拓扑不变量起贡献的只有 $|u_{n<0}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle$ 中奇宇称的个数, 由于 I 和 C 反对易 (超导奇宇称配对), 这对应正常态本征态中负能奇宇称和正能偶宇称的情况, 所以:

$$(-1)^{\nu_\pm^B(0)} = (-1)^{N_{\pm,o}^<(0,\pi,0)}(-1)^{N_{\pm,e}^>(0,\pi,0)}(-1)^{N_{\pm,o}^<(0,0,0)}(-1)^{N_{\pm,e}^>(0,0,0)}, \quad (5.33)$$

式中 N 表示粒子数, 下标 \pm 表示 G-本征值分支, o/e 表示正常态的宇称, 上标 $<$ 和 $>$ 表示正常态负能态和正常态正能态 (费米面内外), 有一个指标不出现就意味着对两种情况的求和。此处先不证明地使用一个关系—— N 的上标 $<$ 和 $>$ 可以对换而不影响结果 (证明见附录 B):

$$(-1)^{\nu_\pm^B(0)} = (-1)^{N_{\pm}^<(0,\pi,0)}(-1)^{N_{\pm}^<(0,0,0)} = (-1)^{N_{\pm}^<(0,\pi,0) \pm N_{\pm}^<(0,0,0)}, \quad (5.34)$$

利用上式最后一个等号还可以将拓扑不变量改写:

$$\nu_\pm^B(0) = N_{\pm}^<(0,\pi,0) \pm N_{\pm}^<(0,0,0) \pmod{2}, \quad (5.35)$$

$$\nu_\pm^B(0) = \int_{(0,0,0)}^{(0,\pi,0)} \nabla N_{\pm}^<(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k} \pmod{2}, \quad (5.36)$$

第二行表示该拓扑不变量可以由对应的分支从在 k -空间中沿着 $(0, 0, 0)$ 到 $(0, \pi, 0)$ 的曲线穿越费米面的次数决定。

5.3.2 URhGe 中 G-奇性情形

此时 $k_a = \pi$, 因此 G-本征值是虚数, 需要将式 (5.29) 改为:

$$G(\mathbf{k}_{\text{TRI}})|\varphi_{\alpha,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle = \pm i|\varphi_{\alpha,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle, \quad (5.37)$$

由于复共轭与 G-奇性带来的负号相抵, 这时粒子-空穴变换 C 仍不对换 G-本征值分支, 所以:

$$|u_{n,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle = (|\varphi_{\alpha,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle, 0)^T \quad (\varepsilon_{\alpha,\pm}^0(\mathbf{k}_{\text{TRI}}) > 0), \quad (5.38)$$

$$|u_{n,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle = C(|\varphi_{\alpha,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle, 0)^T \quad (\varepsilon_{\alpha,\pm}^0(\mathbf{k}_{\text{TRI}}) < 0), \quad (5.39)$$

可以得到和 G-偶性中类似的结论:

$$(-1)^{v_{\pm}^B(\pi)} = (-1)^{N_{\pm}^<(\pi, \pi, \pi)}(-1)^{N_{\pm}^<(\pi, 0, \pi)} = (-1)^{N_{\pm}^<(\pi, \pi, \pi) - N_{\pm}^<(\pi, 0, \pi)}, \quad (5.40)$$

$$v_{\pm}^B(\pi) = N_{\pm}^<(\pi, \pi, \pi) \pm N_{\pm}^<(\pi, 0, \pi) \pmod{2}, \quad (5.41)$$

$$v_{\pm}^B(\pi) = \int_{(\pi, 0, \pi)}^{(\pi, \pi, \pi)} \nabla N_{\pm}^<(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k} \pmod{2}. \quad (5.42)$$

5.3.3 UCoGe 中 G-偶性情形

UCoGe 的 G-偶性时 $k_a = \pi$, G-本征值为实数, 此时粒子-空穴变换 C 不会对换 G-本征值分支, 结果的形式类似 URhGe, 不过由于 UCoGe 中存在时间反演不变性, 需要以 Kramers 对计数, 所以要将表达式中的粒子数除以二:

$$(-1)^{v_{\pm}^I(\pi)} = (-1)^{N_{\pm}^<(\pi, \pi, \pi)/2}(-1)^{N_{\pm}^<(\pi, 0, \pi)/2}, \quad (5.43)$$

$$v_{\pm}^I(\pi) = N_{\pm}^<(\pi, \pi, \pi)/2 \pm N_{\pm}^<(\pi, 0, \pi)/2 \pmod{2}, \quad (5.44)$$

$$v_{\pm}^I(\pi) = \int_{(\pi, 0, \pi)}^{(\pi, \pi, \pi)} \nabla N_{\pm}^<(\mathbf{k})/2 \cdot d\mathbf{k} \pmod{2}. \quad (5.45)$$

5.3.4 UCoGe 中 G-奇性情形

注意到此时 $k_a = \pi$, 由于是 G-奇性配对, 此时粒子空穴变换 C 将对换 G-本征值分支, 所以:

$$|u_{n,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle = (|\varphi_{\alpha,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle, 0)^T \quad (\varepsilon_{\alpha,\pm}^0(\mathbf{k}_{\text{TRI}}) > 0), \quad (5.46)$$

$$|u_{n,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle = C(|\varphi_{\alpha,\mp}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle, 0)^T \quad (\varepsilon_{\alpha,\mp}^0(\mathbf{k}_{\text{TRI}}) < 0). \quad (5.47)$$

考虑到 Kramers 简并，最后的结果为：

$$(-1)^{\theta(\pi)/2} = (-1)^{N_{+,o}^<(\pi,\pi,\pi)/2} (-1)^{N_{-,e}^>(\pi,\pi,\pi)/2} (-1)^{N_{+,o}^<(\pi,0,\pi)/2} (-1)^{N_{-,e}^>(\pi,0,\pi)/2}. \quad (5.48)$$

类似地，将 N 的上标 $</>$ 可以对换后可得（附录 B）：

$$\theta(\pi) = N_{+,o}^<(\pi,\pi,\pi) + N_{-,e}^<(\pi,\pi,\pi) + N_{+,o}^<(\pi,0,\pi) + N_{-,e}^<(\pi,0,\pi) \pmod{4}. \quad (5.49)$$

5.4 空间群对拓扑不变量的简化

现在已经通过超导配对的奇宇称性质将几个拓扑不变量从 k -空间中对相互作用本征态 $|u(\mathbf{k})\rangle$ 的积分规归化到了 k -空间中几个高对称点处正常态 $|\varphi(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle$ 的占据数或费米面的信息。从 k -空间中的线元素归结到点元素实际上是一个对称性提高的过程，因此有望依靠空间群 $Pnma$ 进一步简化其中几个拓扑不变量。

在物理上， k -空间某处的准粒子概率分布可以由 k -空间上波函数 $\varphi(\mathbf{k})$ 或态矢量 $|\varphi(\mathbf{k})\rangle$ 来描写，它们可以按照空间群的不可约表示进行分类。对一处具体的 k -空间点 \mathbf{k}_0 来说，该处的本征态可以按照该处波矢群 $W(\mathbf{k}_0)$ 的不可约表示进行分类。在空间群 $Pnma$ 下，所有 TRI 点的波矢群都是 $Pnma$ 本身，通过群元的直接运算可知， $Pnma$ 可以通过选择 $\{I, G_a, M_y\}$ 或者 $\{I, G_n, M_y\}$ 组合上平移群来生成整个空间群。

由于在 5.3 中已经将 $|\varphi_{\alpha,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle$ 定义为 $G(\mathbf{k}_{\text{TRI}})$ 、 I 的共同本征态，两个变换操作在 $|\varphi(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle$ 上的作用可以对易（式 (5.22)），由此可知 5.3 中定义的运算对应 $Pnma$ 中由 E, I, G 和平移操作生成的子群 W 在 Hilbert 空间 $\{|\varphi_{\alpha,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle\}$ 上的群作用。考虑到平移操作的 Bloch 定理，不同的 G-本征值和宇称实际上对应了四个不同的一维表示，如表 5.1 所示。其中括号内表示 G-本征值为复数的情形（URhGe 的 G-奇性情况），每个表示的下标代表对应的 G-本征值符号和宇称，在群元上标记了' 来代表作用在 Hilbert 空间上以区别于直接的空间群乘法， $|\varphi_{\alpha,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle$ 就是四个一维表示的标准基。

由于群 W 正是波矢群 $W(\mathbf{k}_{\text{TRI}}) = Pnma$ 的子群，且生成元只相差 M_y ，可以将波矢群的不可约表示与表 5.1 中的四个一维表示联系起来，考察他们的相容性关系。因为 $Pnma$ 最高只有二维不可约表示，而且群 W 中非平移变换之间均对易，所以 $Pnma$ 的一维不可约表示意味着 M_y 不能将群 W 的不同一维表示联系起来，因而得不到进一步基于对称性的结果；而 $Pnma$ 的二维不可约表示能够

表 5.1 群 W 作用对应的四个一维表示。Table 5.1 Four 1D representations of group W .

表示	$R_{+,e}$	$R_{+,o}$	$R_{-,e}$	$R_{-,o}$
E'	1	1	1	1
I'	1	-1	1	-1
G'	$1(i)$	$1(i)$	$-1(-i)$	$-1(-i)$
$I'G'$	$1(i)$	$-1(-i)$	$-1(-i)$	$1(i)$

将群 W 的不同一维表示联系起来，相容的两个不可约标准基将因简并而被同时占据，这一点可以给出新的信息。

接下来的讨论将从一般性的 (k_a, k_b, k_c) 形式回到具体的 (k_x, k_y, k_z) 形式，以便对具体的滑移变换 G_n, G_a 分析：对 G_a 来说， $(k_x, k_y, k_z) = (k_a, k_b, k_c)$ ；对 G_n 来说， $(k_x, k_y, k_z) = (k_c, k_a - k_b, k_b)$ 。因此， (k_a, k_b, k_c) 形式和 (k_x, k_y, k_z) 形式下的 TRI 点是等价的。另外，还将用 $|\varphi_{o/e,\pm}\rangle$ 来代替 $|\varphi_{\alpha,\pm}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle$ ，其中下标 o/e 表示空间反演宇称。

5.4.1 URhGe 中 G-偶性的情形

此时需要重点考虑的 TRI 点的 (k_a, k_b, k_c) 坐标为：

$$(0, 0, 0) \rightarrow (0, 0, 0)_a \rightarrow (0, 0, 0)_n, \quad (5.50)$$

$$(0, \pi, 0) \rightarrow (0, \pi, 0)_a \rightarrow (0, -\pi, \pi)_n, \quad (5.51)$$

下标表示对应的波矢群生成元中取 G_a 还是 G_n ，接下来需要利用以下空间群对易关系：

$$\mathbf{M}_y I = \{E|\hat{y}\} IM_y, \quad (5.52)$$

$$\mathbf{M}_y G_a = G_a \mathbf{M}_y, \quad (5.53)$$

$$\mathbf{M}_y G_n = \{E|-\hat{y}\} G_n. \quad (5.54)$$

对 $W((0, 0, 0))$ 进行分析，在 $|\varphi_{o/e,\pm}\rangle$ 上的作用给出 $[M_y, I] = [M_y, G_a] = [M_y, G_n] = 0$ 。（每个平移变换 $\{E|\hat{y}\}$ 都提供一个 e^{ik_y} 的因子，此处为 $k_y = 0$ ，故因子为 1）这表明 M_y 不会改变本征态的 G_a -本征值， G_n -本征值和宇称，不能得到二维不可约表示，此时空间群对称性没有给出新结果。

对 $W((0, \pi, 0))$ 进行分析，在 $|\varphi_{o/e, \pm}\rangle$ 上的作用给出 $\{M_y, I\} = [M_y, G_a] = 0$ ，因此 M_y 将改变本征态的宇称，这意味着 $W((0, \pi, 0))$ 存在两个二维不可约表示 ($Pnma$ 没有高于 2 维的不可约表示)，使得以 $(|\varphi_{e,+}\rangle, |\varphi_{o,+}\rangle)^T$ 为基时：

$$G_a = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad M_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.55)$$

以 $(|\varphi_{e,-}\rangle, |\varphi_{o,-}\rangle)^T$ 为基时：

$$G_a = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad M_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.56)$$

之前得到的一维表示与这两个 $Pnma$ 的二维表示相容关系列于表 5.2，所以不论选取的态矢量属于波矢群的哪一个表示，群 W 的 $(0, \pi, 0)$ 处 $R_{+,e}(R_{-,e})$ 和 $R_{+,o}(R_{-,o})$ 两个表示总是一起出现，由此可得：

$$N_{+,e}^<(0, \pi, 0) = N_{+,o}^<(0, \pi, 0), \quad (5.57)$$

$$N_{-,e}^<(0, \pi, 0) = N_{-,o}^<(0, \pi, 0). \quad (5.58)$$

表 5.2 $W(0, \pi, 0)$ 两个二维不可约表示与 W 一维表示的相容关系。

Table 5.2 The compatible relationships between two 2D irreducible representations of $W(0, \pi, 0)$ and 1D representations of W .

波矢群表示	R_1		R_2	
群 W 表示	$R_{+,e}$	$R_{+,o}$	$R_{-,e}$	$R_{-,o}$
I	1	-1	1	-1
G	1	1	-1	-1

$W(0, -\pi, \pi)$ 在 $|\varphi_{o/e, \pm}\rangle$ 上的作用可以得到： $\{M_y, I\} = \{M_y, G_n\} = 0$ ， M_y 同时改变了 G -本征值和宇称，于是得到了新的二维不可约表示的相容性关系，这个相容性关系给出：

$$N_{+,e}^<(0, -\pi, \pi) = N_{-,o}^<(0, -\pi, \pi), \quad (5.59)$$

$$N_{+,o}^<(0, -\pi, \pi) = N_{-,e}^<(0, -\pi, \pi). \quad (5.60)$$

综上，属于 G_n 的拓扑不变量 $v_{\pm,n}^B(0)$ (式 (5.35)) 没有得到新的信息。而由于 $N_{\pm}^<(0, \pi, 0) = 2N_{\pm,e}^<(0, \pi, 0)$ ，属于 G_a 的拓扑不变量第一项为平庸的，因此：

$$v_{\pm,a}^B(0) = N_{\pm}^<(0, 0, 0) \pmod{2}. \quad (5.61)$$

表 5.3 $W(0, -\pi, \pi)$ 两个二维不可约表示与 W 一维表示的相容关系。**Table 5.3 The compatible relationships between two 2D irreducible representations of $W(0, -\pi, \pi)$ and 1D representations of W .**

波矢群表示	R_1	R_2		
群 W 表示	$R_{+,e}$	$R_{-,o}$	$R_{+,o}$	$R_{-,e}$
I	1	-1	-1	-1
G	1	-1	1	-1

5.4.2 URhGe 中 G-奇性的情形

此时需要重点考虑的 TRI 点的 (k_a, k_b, k_c) 坐标为:

$$(\pi, 0, \pi) \rightarrow (\pi, 0, \pi)_a \rightarrow (\pi, \pi, 0)_n, \quad (5.62)$$

$$(\pi, \pi, \pi) \rightarrow (\pi, \pi, \pi)_a \rightarrow (\pi, 0, \pi)_n. \quad (5.63)$$

按照之前的思路, k_y 坐标为 0 的点将无法给出新的内容, 而 $W(\pi, \pi, \pi)$ 作用在 $|\varphi_{o/e, \pm}\rangle$ 上可以得到: $\{M_y, I\} = [M_y, G_a] = 0$, 这对应表 5.4 中显示的相容性关系; 而 $W(\pi, \pi, 0)$ 作用在 $|\varphi_{o/e, \pm}\rangle$ 上可以得到: $\{M_y, I\} = \{M_y, G_y\} = 0$, 对应表 5.5 显示的相容性关系, 这些相容性关系给出:

$$N_{+,e}^<(\pi, \pi, \pi) = N_{+,o}^<(\pi, \pi, \pi), \quad (5.64)$$

$$N_{-,e}^<(\pi, \pi, \pi) = N_{-,o}^<(\pi, \pi, \pi), \quad (5.65)$$

$$N_{+,e}^<(\pi, \pi, 0) = N_{-,o}^<(\pi, \pi, 0), \quad (5.66)$$

$$N_{+,o}^<(\pi, \pi, 0) = N_{-,e}^<(\pi, \pi, 0). \quad (5.67)$$

总结以上结果可知: 属于 G_n 的拓扑不变量 $v_{\pm,n}^B(0)$ (式 (5.40)) 没有得到新的信息。而由于 $N_{\pm}^<(\pi, \pi, \pi) = 2N_{\pm,e}^<(\pi, \pi, \pi)$, 属于 G_a 的拓扑不变量第一项为平庸的, 因此:

$$v_{\pm,a}^B(0) = N_{\pm}^<(\pi, 0, \pi) \pmod{2}. \quad (5.68)$$

5.4.3 UCoGe 中的情形

UCoGe 和 URhGe 的区别主要在于 UCoGe 需要明显地考虑自旋的效果, 因此应考虑对应的双群 \overline{W} , 和群 W 的区别在于其中加入了新元素 \overline{E} , 且点群部分

表 5.4 $W(\pi, \pi, \pi)$ 两个二维不可约表示与 W 一维表示的相容关系。

Table 5.4 The compatible relationships between two 2D irreducible representations of $W(\pi, \pi, \pi)$ and 1D representations of W .

波矢群表示	R_1		R_2	
群 W 表示	$R_{+,e}$	$R_{-,o}$	$R_{+,o}$	$R_{-,e}$
I	1	-1	-1	-1
G	i	$-i$	i	$-i$

表 5.5 $W(\pi, \pi, 0)$ 两个二维不可约表示与 W 一维表示的相容关系。

Table 5.5 The compatible relationships between two 2D irreducible representations of $W(\pi, \pi, 0)$ and 1D representations of W .

波矢群表示	R_1		R_2	
群 W 表示	$R_{+,e}$	$R_{+,o}$	$R_{-,e}$	$R_{-,o}$
I	1	-1	1	-1
G	i	i	$-i$	$-i$

含有空间旋转的变换性质将改变，这使得 M_y 表示矩阵与其他变换表示矩阵的对易关系可能出现变化。由于 $Pnma$ 的点群全是二阶变换， \bar{E} 可以形式上记为-1，另外 $Pnma$ 的对应的双空间群仍然只有最高二维不可约表示。

变化了的关系如下：

$$M_y^2 = -1, \quad (5.69)$$

$$M_y I = \{E| \hat{y}\} IM_y, \quad (5.70)$$

$$M_y G_a = -G_a M_y, \quad (5.71)$$

$$M_y G_n = -\{E| -\hat{y}\} G_n. \quad (5.72)$$

UCoGe 的两个 G-宇称情形需要考虑的 TRI 点的坐标一致：

$$(\pi, 0, \pi) \rightarrow (\pi, 0, \pi)_a \rightarrow (\pi, \pi, 0)_n, \quad (5.73)$$

$$(\pi, \pi, \pi) \rightarrow (\pi, \pi, \pi)_a \rightarrow (\pi, 0, \pi)_n. \quad (5.74)$$

$\overline{W}(\pi, 0, \pi)$ 在 $|\varphi_{o/e, \pm}\rangle$ 上的作用给出： $[M_y, I] = \{M_y, G_a\} = \{M_y, G_n\} = 0$ ，

这使得以 $(|\varphi_{e,+}\rangle, |\varphi_{o,+}\rangle)^T$ 为基时：

$$G_{a/n} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad M_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.75)$$

以 $(|\varphi_{e,-}\rangle, |\varphi_{o,-}\rangle)^T$ 为基时：

$$G_{a/n} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad M_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.76)$$

其中需要注意式 (5.69) 给 M_y 的表示矩阵带来的变化，对应的相容性关系如表 5.6 所示，由此可得：

$$N_{+,e}^<(\pi, 0, \pi) = N_{-,e}^<(\pi, 0, \pi), \quad (5.77)$$

$$N_{+,o}^<(\pi, 0, \pi) = N_{-,o}^<(\pi, 0, \pi), \quad (5.78)$$

再考虑到由于时间反演不变性导致的 Kramers 简并，这里的每一个占据数都是偶数，从而：

$$N_e(\pi, 0, \pi) \in 4\mathbb{Z}, \quad N_o(\pi, 0, \pi) \in 4\mathbb{Z}, \quad (5.79)$$

$$2N_+(\pi, 0, \pi) = 2N_-(\pi, 0, \pi) = N(\pi, 0, \pi) \in 4\mathbb{Z}. \quad (5.80)$$

表 5.6 $\overline{W}(\pi, 0, \pi)$ 两个二维不可约表示与 W 一维表示的相容关系。

Table 5.6 The compatible relationships between two 2D irreducible representations of $\overline{W}(\pi, 0, \pi)$ and 1D representations of W .

波矢群表示	R_1		R_2	
群 W 表示	$R_{+,e}$	$R_{-,e}$	$R_{+,o}$	$R_{-,o}$
I	1	1	-1	-1
$G_{a/n}$	1	-1	1	-1

$\overline{W}(\pi, \pi, \pi)$ 在 $|\varphi_{o/e,\pm}\rangle$ 上的作用给出： $\{M_y, I\} = \{M_y, G_a\} = 0$ ，相容性关系如表 5.7 所示，可得：

$$N_{+,e}^<(\pi, \pi, \pi) = N_{-,o}^<(\pi, \pi, \pi), \quad (5.81)$$

$$N_{+,o}^<(\pi, \pi, \pi) = N_{-,e}^<(\pi, \pi, \pi), \quad (5.82)$$

利用 Kramers 简并进一步还可以得到：

$$2N_+^<(\pi, \pi, \pi) = 2N_-^<(\pi, \pi, \pi) = N_-(\pi, \pi, \pi) \in 4\mathbb{Z}. \quad (5.83)$$

表 5.7 $\overline{W}(\pi, \pi, \pi)$ 两个二维不可约表示与 W 一维表示的相容关系。

Table 5.7 The compatible relationships between two 2D irreducible representations of $\overline{W}(\pi, \pi, \pi)$ and 1D representations of W .

波矢群表示	R_1	R_2
群 W 表示	$R_{+,e}$ $R_{-,o}$	$R_{+,o}$ $R_{-,e}$
I	1 -1	-1 -1
G_a	1 -1	1 -1

$\overline{W}(\pi, \pi, 0)$ 在 $|\varphi_{o/e,\pm}\rangle$ 上的作用给出： $\{M_y, I\} = [M_y, G_n] = 0$ ，相容性关系如表 5.8 所示，可得：

$$N_{+,e}^<(\pi, \pi, 0) = N_{+,o}^<(\pi, \pi, 0), \quad (5.84)$$

$$N_{-,e}^<(\pi, \pi, 0) = N_{-,o}^<(\pi, \pi, 0), \quad (5.85)$$

考虑到 Kramers 简并，可以进一步得到：

$$N_e^<(\pi, \pi, 0) = N_o^<(\pi, \pi, 0) \in 2\mathbb{Z}, \quad (5.86)$$

$$2N_e^<(\pi, \pi, 0) = 2N_o^<(\pi, \pi, 0) = N^<(\pi, \pi, 0) \in 4\mathbb{Z}. \quad (5.87)$$

表 5.8 $\overline{W}(\pi, \pi, 0)$ 两个二维不可约表示与 W 一维表示的相容关系。

Table 5.8 The compatible relationships between two 2D irreducible representations of $\overline{W}(\pi, \pi, 0)$ and 1D representations of W .

波矢群表示	R_1	R_2
群 W 表示	$R_{+,e}$ $R_{+,o}$	$R_{-,o}$ $R_{-,e}$
I	1 -1	-1 1
G_n	1 1	-1 -1

属于 G_a 的 Z_4 拓扑不变量 $\theta_a(\pi)$ 表达式 (5.49) 中前两项相等 (式 (5.82))，且每一项都 Kramers 二重简并，因此可以被整体消去，再利用式 (5.80) 可得到：

$$\theta_a(\pi) = N^<(\pi, 0, \pi) / 2 \pmod{4}. \quad (5.88)$$

属于 G_n 的 Z_4 拓扑不变量 $\theta_a(\pi)$ 的表达式 (5.49) 中前两项的和由式(5.80)知等于 $N^<(\pi, 0, \pi)/2$, 后两项的和由式 (5.87) 知等于 $N^<(\pi, \pi, 0)/2$ 因此:

$$\theta_a(\pi) = N^<(\pi, 0, \pi)/2 + N^<(\pi, \pi, 0)/2 \pmod{4}. \quad (5.89)$$

属于 G_a 的 Z_2 拓扑不变量 $v_{\pm,a}(\pi)$ 表达式 (5.44) 中, 由式 (5.83) 和 (5.80) 可化简得到:

$$v_{\pm,a}^I(\pi) = N^<(\pi, 0, \pi)/4 - N^<(\pi, \pi, \pi)/4 \pmod{2}. \quad (5.90)$$

属于 G_n 的 Z_2 拓扑不变量 $v_{\pm,a}(\pi)$ 表达式 (5.44) 中, 由式 (5.80) 可化简得到:

$$v_{\pm,n}^I(\pi) = N^<(\pi, 0, \pi)/4 + N^<(\pi, \pi, \pi)/2 \pmod{2}. \quad (5.91)$$

5.4.4 阶段性总结

现在已经完成了将 UCoGe、URhGe 中几个特殊点拓扑不变量利用空间群 $Pnma$ 的对称性进一步研究, 除了少数两个并没有获得进一步的信息外, 别的或多或少的都得到了简化, 它们都将只依赖于 k -空间某点处不同 G-本征值分支的正常态占据数, 若采用在滑移不变平面上将滑移变换与哈密顿量同时对角化的数值方法来计算腔体能带, 能带信息将能够直接应用于判断系统的拓扑性质, 而不必再按照定义式对各个能带的 Berry 联络和 Berry 曲率求数值积分。将所得结果列于表 5.9 中, 这也是本文的主要结果:

表 5.9 化简至仅依赖于 k -空间位置正常态占据数的拓扑不变量公式。

Table 5.9 Simplified Topological invariants depending on the occupied number of normal states in k -space.

拓扑不变量	G_a	G_n
$v_{\pm}^B(0)$	$N_{\pm}^<(0, 0, 0) \pmod{2}$	$N_{\pm}^<(0, 0, 0) - N_{\pm}^<(0, -\pi, \pi) \pmod{2}$
$v_{\pm}^B(\pi)$	$N_{\pm}^<(\pi, 0, \pi) \pmod{2}$	$N_{\pm}^<(\pi, 0, \pi) - N_{\pm}^<(\pi, \pi, 0) \pmod{2}$
$v_{\pm}^I(\pi)$	$N^<(\pi, 0, \pi)/4 - N^<(\pi, \pi, \pi)/4 \pmod{2}$	$N^<(\pi, 0, \pi)/4 + N^<(\pi, \pi, 0)/2 \pmod{2}$
$\theta(\pi)$	$N^<(\pi, 0, \pi)/2 \pmod{4}$	$N^<(\pi, 0, \pi)/2 + N^<(\pi, \pi, 0)/2 \pmod{4}$

由于模运算的存在, 拓扑不变量中两项的加减实际上是等价的。

5.5 费米面与拓扑性质

观察化简得到的公式可以发现, 对 UCoGe 而言, 需要鉴别 G-本征值分支的情况相当少, 这意味着某些情形可以直接利用已有的通过第一性原理计算得到

的费米面或能带信息来判断拓扑性质。图 5.3 是由第一性原理计算得到的 UCoGe 和 URhGe 的费米面。由图可见，靠近 (π, π, π) 和 $(\pi, \pi, 0)$ 处的费米面出现了细微的分裂 (71(e) 和 72(e))，这意味着该两点附近自旋轨道耦合并不是很强。UCoGe 的 S_2 相本身不展示铁磁序，因此该两点附近自旋近似有 SU(2) 对称性，又由于滑移变换的作用和自旋耦合在一起 (式 (4.3))，所以在该两点附近两个 G-本征值分支的占据数近似相等 (Daido 等, 2019)。但由于 URhGe 本身有铁磁序，自旋在空间中具有固定朝向，上述论证无法对 URhGe 起效。

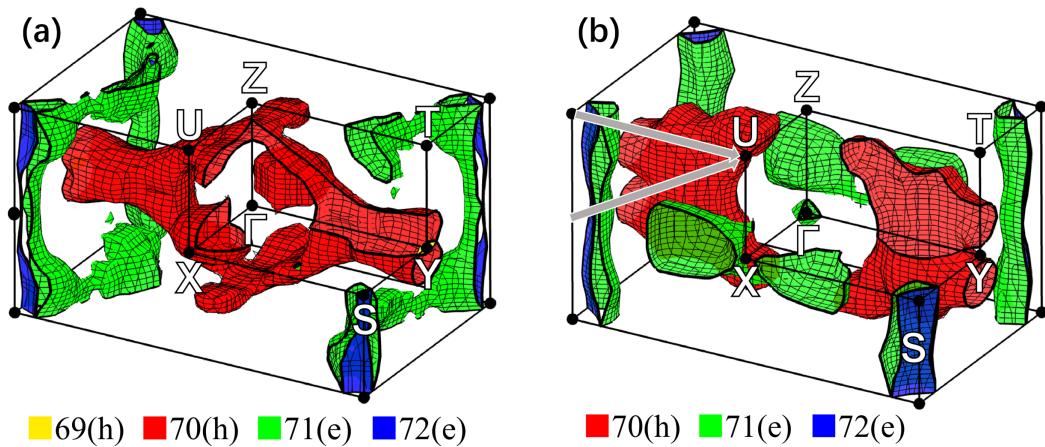


图 5.3 第一性原理方法计算的 (a) URhGe 的费米面, (b) UCoGe 的费米面 (Fujimori 等, 2016)。(b) 中两条灰色箭头表示从 (π, π, π) 和 $(\pi, \pi, 0)$ 到 $(\pi, 0, \pi)$ 的路线。

Figure 5.3 Fermi surface calculated with *ab initio* method of (a) URhGe, (b) UCoGe. Two grey arrows show the route starting from (π, π, π) and $(\pi, \pi, 0)$ ending at $(\pi, 0, \pi)$.

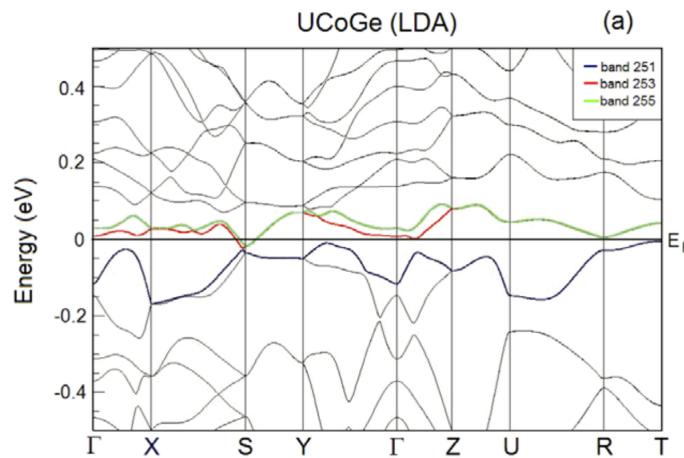


图 5.4 UCoGe 的 S_2 相的能带 (Samsel-Czekała 等, 2009)。

Figure 5.4 Spectrum of UCoGe in S_2 phase.

通过改写 UCoGe 的拓扑不变量可以将其与费米面的拓扑联系起来，在上述关于两点的自旋 $SU(2)$ 对称性假设下 $v_{\pm,a}^I(\pi)$, $v_{\pm,n}^I(\pi)$ 可以分别视为从 (π, π, π) 和 $(\pi, \pi, 0)$ 出发直到 $(\pi, 0, \pi)$ 是穿过费米面次数的一半（注意考虑 Kramers 简并），由于这两条路线都将穿越费米面 71(e) 和 72(e) 各一次，此时 Z_2 拓扑不变量将是非平庸的。 $\theta_n(\pi)$ 此时是 $v_{\pm,n}^I(\pi)$ 的两倍， Z_4 拓扑不变量也是非平庸的。不论此时 UCoGe 具有何种 G-宇称超导配对，都将展示非平凡的 Möbius 拓扑态。

而对 $\theta_a(\pi)$ 来说，它可以直接从计算的能带得出，如图 5.4 所示， $(\pi, 0, \pi)$ 对应着图中 U 点，由于 Kramers 简并，在该处费米能下方共有 252 个能级，因此 $\theta_a(\pi) = 252/2 \pmod{4} = 2$ ，仍是非平凡的。

第6章 总结与展望

本论文首先回顾了超导体的 BCS 理论及其推广到一般配对情形下的平均场形式，又介绍了量子系统中具有拓扑性质的拓扑绝缘体和拓扑超导体，并以 Fu-Kane 公式和奇宇称配对的超导体为例展示了系统对称性在拓扑性质中的重要作用，为后文的理论推导做了准备。然后介绍了由非点式空间群保护的 Möbius 拓扑态的公式和性质，以及这一类拓扑态在铁磁重费米子超导体 URhGe、UCoGe 中的实现。本文利用了多种对称性和群论方法来化简 Möbius 拓扑态的拓扑不变量，能够将其化简至仅依赖于正常态的一些能带信息。这些化简的结果降低了在 UCoGe 和 URhGe 中计算 Möbius 态拓扑不变量的难度。对 UCoGe 来说情况较为简单，可以由已知的费米面信息或能带计算信息直接判断，结果预示其很可能实现奇异的 Z_4 Möbius 拓扑态。

本方向还有许多进一步的工作可以进行：

对 URhGe 来说，本论文化简得到的拓扑不变量以及现有的数值信息还无法判断其是否能够实现 Möbius 拓扑态。因为对 URhGe 来说滑移变换的信息十分重要。进一步可以尝试将滑移变换与哈密顿量同时严格对角化的数值方法，或者通过紧束缚模型哈密顿量直接进行表面态激发能谱的计算。另外在理论推导中或多或少的加入了类似超导弱耦合、无能隙节点等假设，这些假设本身对拓扑态的实现的影响还需要实验、理论方面进一步探索。

对非点式空间群保护的拓扑性质来说，通过文中的推导可以发现，相关拓扑不变量的化简相当依赖空间群本身的结构。由于对具体的空间群或材料进行的算例不是很多，一方面很难判断其中的结论是巧合还是普适性质，另一方面对任意非点式空间群也还不清楚是否有一般性的处理方法。

对量子系统新奇拓扑物态的探索与分类还有很长的路要走，奇异的拓扑性质也常常需要非常规的超导配对来配合实现，相信这方面的研究能够推动现代超导理论的进一步发展。

附录 A 奇宇称配对超导体拓扑不变量的详细推导

首先证明 V 和 W 是酉矩阵：

$$\begin{aligned} \sum_b (V^\dagger)_{ab} V_{bc} &= \sum_a \langle u_a | I_{\text{BdG}}^\dagger C^\dagger | u_b \rangle \langle u_b | I_{\text{BdG}} C | u_c \rangle \\ &= \langle u_a | C^\dagger I_{\text{BdG}}^\dagger I_{\text{BdG}} C | u_c \rangle \\ &= \langle u_a | u_c \rangle = \delta_{ac}, \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

$$\begin{aligned} \sum_b V_{ab} (V^\dagger)_{bc} &= \sum_b \langle u_a | I_{\text{BdG}} C | u_b \rangle \langle u_b | I_{\text{BdG}}^\dagger C^\dagger | u_c \rangle \\ &= \langle u_a | I_{\text{BdG}} C I_{\text{BdG}}^\dagger C^\dagger | u_c \rangle \\ &= \langle u_c | u_a \rangle = \delta_{ac}, \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

$$\begin{aligned} \sum_b (W^\dagger)_{ab} W_{bc} &= \sum_b \langle u_a(\mathbf{k}) | C^\dagger | u_b(-\mathbf{k}) \rangle \langle u_b(-\mathbf{k}) | C | u_c(\mathbf{k}) \rangle \\ &= \langle u_a(\mathbf{k}) | C^\dagger C | u_c(\mathbf{k}) \rangle \\ &= \langle u_a(\mathbf{k}) | u_c(\mathbf{k}) \rangle = \delta_{ac}, \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned} \sum_b W_{ab} (W^\dagger)_{bc} &= \sum_b \langle u_a(-\mathbf{k}) | C | u_b(\mathbf{k}) \rangle \langle u_b(\mathbf{k}) | C | u_c(-\mathbf{k}) \rangle \\ &= \sum_b \langle u_a(-\mathbf{k}) | C C^\dagger | u_c(-\mathbf{k}) \rangle \\ &= \langle u_a(-\mathbf{k}) | u_c(-\mathbf{k}) \rangle = \delta_{ac}. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

然后证明数学恒等式： $\text{tr}(V^\dagger \partial_x V) = \partial_x \ln \det V$ 。利用行列式按行或列展开公式： $\det V = \sum_j V_{ij} \tilde{V}_{ij}$ ，其中 \tilde{V}_{ij} 表示矩阵 V 的 i 行 j 列元素对应的代数余子式。可得：

$$\frac{\partial \det V}{\partial V_{ij}} = \tilde{V}_{ij} = \det V (V^{-1})_{ji}, \quad (\text{A.5})$$

因此，

$$\partial_x \ln \det V = \sum_{ij} \frac{\partial \ln \det V}{\partial V_{ij}} \frac{\partial V_{ij}}{\partial x} = \sum_{ij} (V^{-1})_{ji} \frac{\partial V_{ij}}{\partial x}, \quad (\text{A.6})$$

由于 V 是酉矩阵： $V^{-1} = V^\dagger$ ，所以式 (A.6) 右端就是 $\text{tr}(V^\dagger \partial_x V)$ 。

接下来证明 $\text{tr}(V^\dagger \nabla V) = 2i\mathbf{A}(\mathbf{k})$ 。利用式(2.16)将粒子-空穴变換作用于态矢量上可得：

$$\begin{aligned}
\text{tr}(V^\dagger \nabla V) &= \sum_{n,m} \langle u_{-n}(-\mathbf{k}) | C | u_m(\mathbf{k}) \rangle \nabla (\langle u_m(\mathbf{k}) | C | u_{-n}(-\mathbf{k}) \rangle) \\
&= \sum_{n,m} \langle u_{-n}(-) | I_{\text{BdG}}^\dagger | u_m(\mathbf{k}) \rangle \nabla (\langle u_m(\mathbf{k}) |) I_{\text{BdG}} | u_{-n}(-\mathbf{k}) \rangle \\
&\quad + \sum_{n,m} \langle u_{-n}(-\mathbf{k}) | I_{\text{BdG}} | u_m(\mathbf{k}) \rangle \langle u_m(\mathbf{k}) | I_{\text{BdG}} \nabla (| u_{-n}(-\mathbf{k}) \rangle) \\
&= \sum_m (\nabla \langle u_m(\mathbf{k}) |) | u_m(\mathbf{k}) \rangle + \sum_n \langle u_{-n}(-\mathbf{k}) | \nabla | u_{-n}(-\mathbf{k}) \rangle \\
&= \sum_m (\nabla \langle u_m(\mathbf{k}) | u_m(\mathbf{k}) \rangle - \langle u_m(\mathbf{k}) | \nabla | u_m(\mathbf{k}) \rangle) \\
&\quad - \sum_n \langle u_{-n}(-\mathbf{k}) | \partial_{-\mathbf{k}} | u_{-n}(-\mathbf{k}) \rangle \\
&= - \sum_m \langle u_m(\mathbf{k}) | \nabla | u_m(\mathbf{k}) \rangle - \sum_n \langle u_{-n}(-\mathbf{k}) | \partial_{-\mathbf{k}} | u_{-n}(-\mathbf{k}) \rangle \\
&= i (\mathbf{A}^>(\mathbf{k}) + \mathbf{A}^<(\mathbf{k}) + \mathbf{A}^>(-\mathbf{k}) + \mathbf{A}^<(-\mathbf{k})) \\
&= 2i (\mathbf{A}^>(\mathbf{k}) + \mathbf{A}^<(\mathbf{k})) = 2i\mathbf{A}(\mathbf{k}).
\end{aligned} \tag{A.7}$$

利用以上结果可以证明式(3.6)：

$$\begin{aligned}
v[C_{ij}] &= \frac{1}{\pi} \int_{\mathbf{k}_i}^{\mathbf{k}_j} d\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}^<(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathbf{k}_i}^{\mathbf{k}_j} d\mathbf{k} \cdot \text{tr}(V^\dagger \nabla V) \\
&= \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathbf{k}_i}^{\mathbf{k}_j} d\mathbf{k} \nabla \ln \det V = \frac{1}{2\pi i} \ln \left(\frac{\det V(\mathbf{k}_i)}{\det V(\mathbf{k}_j)} \right) \\
&= \frac{1}{\pi i} \ln \left(\frac{\sqrt{\det V(\mathbf{k}_i)}}{\sqrt{\det V(\mathbf{k}_j)}} \right),
\end{aligned} \tag{A.8}$$

在指数上进一步可得：

$$(-1)^{v[C_{ij}]} = \frac{\sqrt{\det V(\mathbf{k}_i)}}{\sqrt{\det V(\mathbf{k}_j)}}. \tag{A.9}$$

接下来证明 $\det V(\mathbf{k})$ 在 TRI 点处的关系： $\det V(\mathbf{k}_i) = \prod_n \pi_n(\mathbf{k}_i) \det W(\mathbf{k}_i)$ ，其中 π_n 是本征态在 TRI 点处的空间宇称： $I_{\text{BdG}} | u_n(\mathbf{k}_i) \rangle = \pi_n(\mathbf{k}_i) | u_n(\mathbf{k}_i) \rangle$ 。

$$V_{mn}(\mathbf{k}_i) = \langle u_m(\mathbf{k}_i) | I_{\text{BdG}} C | u_n(\mathbf{k}_i) \rangle = \pi_m(\mathbf{k}_i) \langle u_m(\mathbf{k}_i) | C | u_n(\mathbf{k}_i) \rangle = \pi_m(\mathbf{k}_i) W_{mn}(\mathbf{k}_i), \tag{A.10}$$

其中式(A.10)已经利用了 TRI 点的性质： $\mathbf{k}_i = -\mathbf{k}_i$ ，因此：

$$\det V(\mathbf{k}_i) = \prod_n \pi_n(\mathbf{k}_i) \det W(\mathbf{k}_i). \tag{A.11}$$

然后证明: $\det W$ 在 k -空间是常数:

$$\begin{aligned}
 \text{tr}(W \nabla W) &= \sum_{n,m} (\langle u_n(\mathbf{k}) | C | u_m(-\mathbf{k}) \rangle \nabla [\langle u_m(-\mathbf{k}) | C | u_n(\mathbf{k}) \rangle]) \\
 &= \sum_{n,m} \langle u_n(\mathbf{k}) | C | u_m(-\mathbf{k}) \rangle \nabla (\langle u_m(-\mathbf{k}) |) C | u_n(\mathbf{k}) \rangle \\
 &\quad + \sum_{n,m} \langle u_n(\mathbf{k}) | C | u_m(-\mathbf{k}) \rangle \langle u_m(-\mathbf{k}) | C \nabla (| u_n(\mathbf{k}) \rangle) \\
 &= \sum_m \nabla (\langle u_m(-\mathbf{k}) |) | u_m(-\mathbf{k}) \rangle + \sum_n \langle u_n(\mathbf{k}) | \nabla | u_n(\mathbf{k}) \rangle \\
 &= \sum_m (\nabla (\langle u_m(-\mathbf{k}) | u_m(-\mathbf{k}) \rangle) - \langle u_m(-\mathbf{k}) | \nabla | u_m(-\mathbf{k}) \rangle) \\
 &\quad + \sum_n \langle u_n(\mathbf{k}) | \nabla | u_n(\mathbf{k}) \rangle \\
 &= \sum_m \langle u_m(-\mathbf{k}) | \partial_{-\mathbf{k}} | u_m(-\mathbf{k}) \rangle + \sum_n \langle u_{-n}(-\mathbf{k}) | C \nabla C | u_{-n}(-\mathbf{k}) \rangle \\
 &= -iA^+(-\mathbf{k}) - iA^-(-\mathbf{k}) - \sum_n \langle u_{-n}(-\mathbf{k}) | \partial_{-\mathbf{k}} | u_{-n}(-\mathbf{k}) \rangle \\
 &= -iA^+(-\mathbf{k}) - iA^-(-\mathbf{k}) + iA^+(-\mathbf{k}) + iA^-(-\mathbf{k}) = 0,
 \end{aligned} \tag{A.12}$$

因此:

$$\nabla \ln \det W = \text{tr}(W \nabla W) = 0, \tag{A.13}$$

所以 $\det W$ 是一个在 k -空间处处相等的常数, 利用 $\pi_n(\Gamma_{i,j}) = \pm 1$, 式 (A.9) 可以进一步化简:

$$(-1)^{\nu[C_{ij}]} = \sqrt{\frac{\det V(\mathbf{k}_i)}{\det V(\mathbf{k}_j)}} = \sqrt{\frac{\prod_n \pi_n(\mathbf{k}_i) \det W}{\prod_n \pi_n(\mathbf{k}_j) \det W}} = \sqrt{\prod_n \pi_n(\mathbf{k}_i) \pi_n(\mathbf{k}_j)}. \tag{A.14}$$

利用粒子空穴变换 C 与 I_{BdG} 的反对易关系:

$$CI_{\text{BdG}}C = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} K \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} K = \begin{pmatrix} -I & 0 \\ 0 & I^* \end{pmatrix} = -I_{\text{BdG}}, \tag{A.15}$$

可以得到在 TRI 点处正能态和负能态之间空间宇称的关系:

$$\begin{aligned}
 I_{\text{BdG}} |u_{-n}(\mathbf{k}_i)\rangle &= I_{\text{BdG}} C |u_n(-\mathbf{k}_i)\rangle = -CI_{\text{BdG}} |u_n(\mathbf{k}_i)\rangle \\
 &= -\pi_n(\mathbf{k}_i) C |u_n(\mathbf{k}_i)\rangle = -\pi_n(\mathbf{k}_i) |u_{-n}(\mathbf{k}_i)\rangle,
 \end{aligned} \tag{A.16}$$

所以 $\pi_n(\mathbf{k}_i) = -\pi_{-n}(\mathbf{k}_i)$, 这说明正、负能本征态的 Π 宇称并非独立, 式 (A.14) 中可以将连乘积限制在负能本征态开平方, 并得到最后的结果:

$$(-1)^{\nu[C_{ij}]} = \prod_{n<0} \pi_n(\mathbf{k}_i) \pi_n(\mathbf{k}_j). \tag{A.17}$$

附录 B 式 (5.49)、(5.40) 中用到的关系证明

本附录利用群论关系证明以下性质： k_a 和 k_c 坐标相同， k_b 坐标分别为 0 和 π 的两个 k -空间 TRI 点 $\mathbf{k}_{\text{TRI}}^1$ 和 $\mathbf{k}_{\text{TRI}}^2$ 处对应的 $N_{\pm,o/e}(\mathbf{k}_{\text{TRI}}) = N_{\pm,o/e}^<(\mathbf{k}_{\text{TRI}}) + N_{\pm,o/e}^>(\mathbf{k}_{\text{TRI}})$ 都相等。

对应的本征矢 $|u_{\pm,o/e}(\mathbf{k}_{\text{TRI}})\rangle$ 是表 5.1 中所列群 W 不可约表示的不可约标准基，因此群 W 该 TRI 点处一般的表示可以由四个不可约表示展开，不同的 TRI 点对应表示 $R(\mathbf{k}_{\text{TRI}}^1)$ 和 $R(\mathbf{k}_{\text{TRI}}^2)$ 。要证明所需性质，可以证明 $R(\mathbf{k}_{\text{TRI}}^1)$ 和 $R(\mathbf{k}_{\text{TRI}}^2)$ 等价，或者证明其中的各个元素特征标相等。

群 W 中只有 $\{E|\mathbf{a}\}$ 生成的平移操作，而两 TRI 点 k_a 坐标一致，所以平移变换的特征标相等。由于恒等变换 E 和空间反演变换 I 的表示都和 k 坐标无关，所以它们特征标也相等。注意到变换 G 和 GI 在 Hilbert 空间的作用式中和 k_b 无关，所以 G 、 GI 的特征标也相等。综上可知：

$$N_{\pm,o/e}(\mathbf{k}_{\text{TRI}}^1) = N_{\pm,o/e}(\mathbf{k}_{\text{TRI}}^2). \quad (\text{B.1})$$

由此性质，涉及 k_a 和 k_c 坐标相同， k_b 坐标分别为 0 和 π 的两个 k -空间 TRI 点占据数的加减时，可以整体加减 $N_{\pm,o/e}(\mathbf{k}_{\text{TRI}}^1) + N_{\pm,o/e}(\mathbf{k}_{\text{TRI}}^2)$ ，减去的式子在时间反演不变或时间反演破缺的情况下分别属于 $4\mathbb{Z}$ 和 $2\mathbb{Z}$ ，其中的差异会被拓扑不变量的模运算消去。这样做等效于将拓扑不变量公式中的带上标 $>$ 项换成带上标 $<$ 的项。

参考文献

- 何映萍, 洪健松, 刘雄军. 马约拉纳零能模的非阿贝尔统计及其在拓扑量子计算的应用 [J]. 物理学报, 2020, 69: 110302.
- 李宇, 盛玉韬, 杨义峰. 重费米子超导理论和材料研究进展 [J]. 物理学报, 2021, 70: 017402.
- 李正中. 固体理论 [M]. 高等教育出版社, 2002.
- 杨义峰, 李宇. 重费米子超导与竞争序 [J]. 物理学报, 2015, 64: 217401.
- 梁奇锋, 王志, 胡晓. 拓扑超导 Majorana 束缚态的探索 [J]. 物理学报, 2020, 69: 117102.
- Alexandradinata A, Dai X, Bernevig B A. Wilson-Loop Characterization of Inversion-Symmetric Topological Insulators [J]. Phys. Rev. B, 2014, 89: 155114.
- Aoki D, Ishida K, Flouquet J. Review of U-based Ferromagnetic Superconductors: Comparison between UGe₂, URhGe, and UCoGe [J]. Journal of the Physical Society of Japan, 2019, 88(2): 022001.
- Bardeen J, Cooper L N, Schrieffer J R. Theory of superconductivity [J]. Phys. Rev., 1957, 108: 1175.
- Bednorz J G, Müller K A. Possible high T_c superconductivity in the Ba-,La-,Cu-O system [J]. Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, 1986, 64: 189.
- Bernevig B A, Hughes T L. Topological Insulators and Topological Superconductors [M]. Princeton university press, 2013.
- Chiu C K, Teo J C Y, Schnyder A P, et al. Classification of Topological Quantum Matter with Symmetries [J]. Rev. Mod. Phys., 2016, 88: 035005.
- Daido A, Yoshida T, Yanase Y. Z_4 Topological Superconductivity in UCoGe [J]. Phys. Rev. Lett., 2019, 122: 227001.
- Fang C, Fu L. New Classes of Three-Dimensional Topological Crystalline Insulators: Nonsymmorphic and Magnetic [J]. Phys. Rev. B, 2015, 91: 161105.
- Fu L. Topological Crystalline Insulators [J]. Phys. Rev. Lett., 2011, 106: 106802.
- Fu L, Berg E. Odd-Parity Topological Superconductors: Theory and Application to Cu_xBi₂Se₃ [J]. Phys. Rev. Lett., 2010, 105: 097001.
- Fu L, Kane C L. Time Reversal Polarization and a Z_2 Adiabatic Spin Pump [J]. Phys. Rev. B, 2006, 74: 195312.
- Fu L, Kane C L. Topological Insulators with Inversion Symmetry [J]. Phys. Rev. B, 2007, 76: 045302.
- Fu L, Kane C L, Mele E J. Topological Insulators in Three Dimensions [J]. Phys. Rev. Lett., 2007, 98: 106803.

- Fujimori S i, Takeda Y, Okane T, et al. Electronic Structures of Uranium Compounds Studied by Soft X-ray Photoelectron Spectroscopy [J]. Journal of the Physical Society of Japan, 2016, 85: 062001.
- Hardy F, Huxley A D. *p*-Wave Superconductivity in the Ferromagnetic Superconductor URhGe [J]. Phys. Rev. Lett., 2005, 94: 247006.
- Hasan M Z, Kane C L. Colloquium: Topological Insulators [J]. Rev. Mod. Phys., 2010, 82: 3045.
- Huy N T, de Nijs D E, Huang Y K, et al. Unusual Upper Critical Field of the Ferromagnetic Superconductor UCoGe [J]. Phys. Rev. Lett., 2008, 100: 077002.
- Kane C L, Mele E J. Z_2 Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect [J]. Phys. Rev. Lett., 2005, 95: 146802.
- Klitzing K v, Dorda G, Pepper M. New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance [J]. Phys. Rev. Lett., 1980, 45: 494.
- Manago M, Kitagawa S, Ishida K, et al. Enhancement of Superconductivity by Pressure-Induced Critical Ferromagnetic Fluctuations in UCoGe [J]. Phys. Rev. B, 2019, 99: 020506.
- Meng T, Balents L. Weyl Superconductors [J]. Phys. Rev. B, 2012, 86: 054504.
- Qi X L, Zhang S C. Topological Insulators and Superconductors [J]. Rev. Mod. Phys., 2011, 83: 1057.
- Qi X L, Hughes T L, Zhang S C. Topological Invariants for the Fermi Surface of a Time-Reversal-Invariant Superconductor [J]. Phys. Rev. B, 2010, 81: 134508.
- Samsel-Czekała M, Elgazzar S, Oppeneer P M, et al. The electronic structure of UCoGe by ab initio calculations and XPS experiment [J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2009, 22: 015503.
- Sato M. Topological Properties of Spin-Triplet Superconductors and Fermi Surface Topology in the Normal State [J]. Phys. Rev. B, 2009, 79: 214526.
- Sato M. Topological Odd-Parity Superconductors [J]. Phys. Rev. B, 2010, 81: 220504.
- Sato M, Ando Y. Topological Superconductors: A Review [J]. Reports on Progress in Physics, 2017, 80: 076501.
- Sato M, Fujimoto S. Majorana Fermions and Topology in Superconductors [J]. Journal of the Physical Society of Japan, 2016, 85: 072001.
- Schnyder A P, Ryu S, Furusaki A, et al. Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions [J]. Phys. Rev. B, 2008, 78: 195125.
- Shiozaki K, Sato M. Topology of Crystalline Insulators and Superconductors [J]. Phys. Rev. B, 2014, 90: 165114.
- Shiozaki K, Sato M, Gomi K. Z_2 Topology in Nonsymmorphic Crystalline Insulators: Möbius Twist in Surface States [J]. Phys. Rev. B, 2015, 91: 155120.

- Shiozaki K, Sato M, Gomi K. Topology of Nonsymmorphic Crystalline Insulators and Superconductors [J]. Phys. Rev. B, 2016, 93: 195413.
- Shiozaki K, Sato M, Gomi K. Topological Crystalline Materials: General Formulation, Module Structure, and Wallpaper Groups [J]. Phys. Rev. B, 2017, 95: 235425.
- Sigrist M. Introduction to Unconventional Superconductivity [J]. AIP Conference Proceedings, 2005, 789: 165.
- Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P, et al. Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential [J]. Phys. Rev. Lett., 1982, 49: 405.
- Wen X G. Quantum Field theory of Many-Body Systems: From the Origin of Sound to an Origin of Light and Electrons [M]. Oxford University Press on Demand, 2004.
- Yanase Y, Shiozaki K. Möbius Topological Superconductivity in UPt_3 [J]. Phys. Rev. B, 2017, 95: 224514.
- Yoshida T, Daido A, Kawakami N, et al. Efficient method to compute Z_4 indices with glide symmetry and applications to the Möbius materials CeNiSn and UCoGe [J]. Phys. Rev. B, 2019, 99: 235105.

致 谢

光阴似箭、日月如梭，这篇论文的完稿也意味着我的四年大学的本科生活即将结束。完成这篇论文的同时，我也学到了许多拓扑材料、非常规超导的知识，最重要的是学习了如何从零入手一个完全陌生茫然还没有课本的题目。在这最后，我想向这四年里所有帮助过我的人一一表达我的感谢。

首先感谢我的导师杨义峰研究员。最早杨老师主讲了我大一的热学课，杨老师讲授演生现象的内容我仍历历在目。后来 2019 年参加了杨老师组里的暑期学校，在那里见识了许多凝聚态理论的前沿，于是在大三进一步学习后，我决定往超导理论方向发展。

其次要感谢带领我一步步完成毕业论文全程的盛玉韬师兄，这篇论文能够顺利完成离不开他中间小题目的精巧安排。论文题目中一个相当重要的中间过程就要用到师兄在大四上半学期科研实践安排的小题目。杨老师说师兄临近毕业也很忙，但我有问题想找师兄讨论的时候总能在一天内安排出时间。同时也要感谢组里秦琼师姐，龙卓青、胡丹青、程渊昊师兄在安排讨论、修改论文时提供的帮助。感谢徐远骐师兄在 2019 年暑期学校中小题目的指导。胡丹青和董建军两位师兄也是我 2018 年春季热学课的助教，我作为本科生到杨老师组里离不开董师兄的帮助。祝各位师兄师姐前程似锦！

感谢一起在组里的同校同学康泽瑜和王俊彬，我们几个到杨老师组里以后一直在生活、学习上互帮互助，这两位同学都会留组继续深造，祝两位同学早日成为组里独当一面的大佬。感谢四年来自互相帮助日常互相串门的曲行舟、徐泽鲲、严启宇、黄吉鸿、黄子旗等同学，给我的大学生活带来了不少欢乐，祝各位在研究生院一切顺利。感谢余泽恺同学，虽然和他的话没有上面几位同学这么多，但是每次和他的交谈都能使我在学习心态和未来目标上有许多收获，我和他在这所大学里走过的路竟十分的相像，祝他在苏黎世联邦理工学院发展顺利。感谢卢玖澍同学，在我紧张焦虑或碰到问题的时候帮助了我许多次，祝他能够实现自己的想法，在慕尼黑工业大学发展顺利。

最后感谢我的父母、阿姨等家人一直以来在精神、物质上支持我。希望你们放心，对于追求卓越，我不会停下脚步。

