

# 拓扑转变作为贝里曲率渗流的过程

金韩弼<sup>1</sup>, 余泰完<sup>1</sup> 和申 Sang-Jin<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> 汉阳大学物理系, 首尔 04763, 大韩民国

\* sangjin.sin@gmail.com

## 摘要

我们首先研究了 Berry 曲率符号在二维拓扑材料欧拉特征中的重要性, 该材料具有两个能带。然后我们报道了一种拓扑转变的特征, 即 Berry 曲率符号的渗流现象。Berry 曲率  $F$  在 Dirac 点处有峰值, 这使我们可以根据  $F$  的符号将布里渊区划分为两个区域: 一个与峰值具有相同符号的区域和另一个具有相反符号的区域。我们观察到当 Chern 数非零时, 符号相反的区域是局域化的, 而在平凡拓扑的情况下, 符号相反的区域主要是非局域化的。因此, 在从非平凡到平凡的拓扑相变过程中, 符号相反的区域将发生渗流现象。我们在包括 Haldane 模型、扩展 Haldane 模型和 QWZ 模型在内的几个模型中验证了这一点。我们的观察结果可能作为拓扑相变的一种新颖特征。

## 目录

1 介绍	2
2 量子度量和拓扑不变量	2
3 贝里曲率的渗流现象	4
3.1 Berry 曲率的渗流现象	4
3.2 贝里曲率的行为	5
3.3 渗流率	6
4 应用	7
4.1 七物张模型	7
4.2 霍尔丹模型	8
4.3 扩展的哈罗德模型	11
5 讨论	13

arxiv:2407.21098v2 中译本

## 1 介绍

在拓扑材料的研究中，理论和实验方面都取得了很大进展，深刻影响了我们对电子性质和相变的理解。由量子霍尔效应 [?] 引发，展示了拓扑概念阐明复杂量子行为的能力，研究已经扩展到诸如拓扑绝缘体 [?, ?] 和拓扑超导体 [?, ?] 等领域。这些研究已经在拓扑不变量如陈数、布里渊区 (BZ) 上的贝里曲率积分等基础上建立了理论框架。

最近，量子几何在拓扑学的研究中发挥了关键作用 [?]. 量子几何基本描述了电子波函数的几何和拓扑性质如何影响物质在量子水平上的行为 [?, ?, ?]. 这个领域探讨了各种现象，从量子度量对超导状态的影响到电子带拓扑在设计新型材料中的更广泛意义 [?, ?, ?, ?]. 具体来说，量子几何在揭示诸如超导性和超流性等物理性质的几何贡献方面发挥了关键作用，特别是在研究平坦带和类似系统中超流权重的研究中尤为明显 [?, ?].

尽管量子度量在理论和实验上都具有重要性，但对局部空间属性（如贝里曲率的渗流）如何影响拓扑相特征的理解仍然难以捉摸。作为量子度量张量的虚部，贝里曲率的空间分布的重要性必须强调 [?, ?]. 这引发了这样一个问题：是否存在一种基于模式识别的方法来判断拓扑序的存在？先前的研究表明，仅通过贝里曲率主峰的符号无法确定拓扑的平凡性或非平凡性。在这里，我们提出了一种方法，即通过对贝里曲率峰值相对的异号区域 (OSR) 进行考虑，可以在不直接计算陈数的情况下识别系统是否为拓扑平凡或非平凡。我们的研究旨在通过关注贝里曲率的空间动力学及其对材料拓扑性质的影响来弥补这一空白。通过对各种拓扑模型中贝里曲率的局域化和去局域化行为进行阐明，我们希望提供一种更为精确地区分平凡与非平凡拓扑相的方法。

本文探讨了 Berry 曲率渗流现象及其对各种模型的拓扑相的影响，包括 Qi-Wu-Zhang (QWZ) 模型、Haldane 模型和扩展 Haldane 模型。我们特别关注 Berry 曲率与 Chern 数之间的局域化和非局域化特性，这有助于区分平凡和非平凡的拓扑相。

## 2 量子度量和拓扑不变量

在本节中，我们将描述量子度量与 Berry 曲率的关系。对于具有非简并特征值系统的标准正交特征向量  $|\mathbf{n}\rangle$ ，量子几何张量 (QGT) 为

$$Q_{ij}^{(n)} = \langle \partial_i \mathbf{n} | \partial_j \mathbf{n} \rangle - \langle \partial_i \mathbf{n} | \mathbf{n} \rangle \langle \mathbf{n} | \partial_j \mathbf{n} \rangle. \quad (1)$$

QGT 的实部作为量子度量 (QM)，而 QGT 的虚部则是 Berry 曲率：

$$g_{ij}^{(n)} = \text{Re} Q_{ij}^{(n)}, \quad F_{ij}^{(n)} = -2 \text{Im} Q_{ij}^{(n)}.$$

如果我们考虑二维中的两个能带系统，Berry 曲率可以表示为  $F_{xy}$ 。一般的两带布洛赫哈密顿量为

$$H = h_0(\mathbf{k}) I_2 + \mathbf{h}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2)$$

其中  $I_2$  是  $2 \times 2$  单位矩阵， $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ 、

$$\mathbf{h} = (h_1(\mathbf{k}), h_2(\mathbf{k}), h_3(\mathbf{k})), \quad \boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3),$$

和  $\sigma_i$  为泡利矩阵。利用  $\hat{\mathbf{h}} = \mathbf{h}/|\mathbf{h}|$ , Berry 曲率可以表示为 [?]

$$F_{xy} = \frac{1}{2|\mathbf{h}|^3} \left[ \left( \mathbf{h} \cdot \left( \partial_{k_x} \mathbf{h} \times \partial_{k_y} \mathbf{h} \right) \right) \right] = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{h}} \cdot \left( \partial_{k_x} \hat{\mathbf{h}} \times \partial_{k_y} \hat{\mathbf{h}} \right). \quad (3)$$

在此公式中,  $\partial_{k_x} \hat{\mathbf{h}} \times \partial_{k_y} \hat{\mathbf{h}}$  项描述了 Bloch 球体表面上的方向。Berry 曲率具有正负值, 表明其方向定义不明确; 沿  $F_{xy} = 0$  线发生定向反转。为了看到量子度量与 Berry 曲率的关系, 我们计算了量子度量。量子度量可以简化为以下形式:

$$g_{ij} = \frac{1}{4} \partial_{k_i} \hat{\mathbf{h}} \cdot \partial_{k_j} \hat{\mathbf{h}}. \quad (4)$$

借助方程 (4), 量子度量的行列式可以写成

$$\det(g) = \frac{1}{16} \left[ \left( \hat{\mathbf{h}} \cdot \left( \partial_{k_x} \hat{\mathbf{h}} \times \partial_{k_y} \hat{\mathbf{h}} \right) \right) \right]^2. \quad (5)$$

由此以及方程 (3),

$$\det(g) = \frac{1}{4} F_{xy}^2, \quad (6)$$

对于二维两带系统。陈数

$$C = \frac{1}{2\pi} \oint_{BZ} F_{xy} dk_x dk_y, \quad (7)$$

是一个整数, 可以通过直接验证确认。欧拉特征数,  $\chi$ , 是一种拓扑不变量, 可以通过欧拉类积分 [?,?] 定义。

在这里, 我们采用略有不同的路径, 使用克罗内克指数 [?]. 令  $S$  是一个  $n$  维闭黎曼流形, 在其上定义了一组满足  $V^i(x)V^i(x) = 1$  的函数  $n+1$   $V^i(x)$ 。利用这组函数, 我们可以考虑将  $S$  连续映射到单位  $n$  球面上。定义行列式  $D$  为  $V$  类如下:

$$D = \begin{vmatrix} V^1 & \dots & V^{n+1} \\ \partial_{x^1} V^1 & \dots & \partial_{x^1} V^{n+1} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \partial_{x^n} V^1 & \dots & \partial_{x^n} V^{n+1} \end{vmatrix}. \quad (8)$$

然后, 我们可以证明

$$D^2 = \det G, \quad G_{\alpha\beta} = \partial_{x^\alpha} V \cdot \partial_{x^\beta} V, \quad (9)$$

并定义偶数维的欧拉特征为

$$\chi = \frac{2}{\text{vol}(S_n)} \int \pm \sqrt{D^2} d^n x, \quad (10)$$

其中  $\text{vol}(S_n)$  是  $n$  维球体的面积, 并选择符号以允许覆盖 [?] 的重叠。在我们的研究中, 我们仅考虑动量空间上的 Bloch 球体的两个维度, 由  $\hat{\mathbf{h}}$  表示。在二维情况下, 我们可以表达  $D = 2\mathcal{F}_{xy}$  和  $G_{ij} = 4g_{ij}$ 。通过使用方程 (4) 和方程 (6), 具体地我们可以将  $D^2$  简化为

$$D^2 = \det G = 16 \det g = 4\mathcal{F}_{xy}^2. \quad (11)$$

从公式 (11), 欧拉特征数可以表示如下:

$$\chi = \frac{2}{\pi} \int_S \pm \sqrt{\det g} dk_x dk_y = \frac{1}{\pi} \int_S \mathcal{F}_{xy} dk_x dk_y. \quad (12)$$

因此， $\chi$  可以简单地表示为：

$$\chi = 2C. \quad (13)$$

需要注意的重要一点是，在第一布里渊区（BZ）到 Bloch 球映射中的重叠区域的存在导致了定向反转。具体来说，由于从动量空间到量子态流形的映射的拉回在 BZ 上产生了诱导定向，表示为

$$\mathfrak{h} : BZ \rightarrow \text{Bloch sphere},$$

它在曲面理论中扮演着高斯映射的角色。结果表明，Berry 曲率的符号决定了这种定向 [?]。因此，由于沿线  $F_{xy} = 0$  处 BZ 内的定向反转，必须仔细考虑定向符号——这是许多先前研究中常常忽视的一个方面。因此，Berry 曲率的符号作为观察与拓扑相关的量的重要指标。

### 3 贝里曲率的渗流现象

在上一节中，我们观察到贝里曲率的符号是拓扑可观测工作机制中的关键手段。本节探讨了贝里曲率渗透的关键现象及其在确定拓扑相方面的重要作用。这次讨论的一个基本方面是如何理解贝里曲率符号的局域化和去局域化对拓朴性质的影响。在二维布里渊区中，沿  $k_x$  和  $k_y$  方向存在周期性，因此我们可以将贝里曲率映射到环面上。最初，我们将特定区域具有某种符号的贝里曲率的“局域化”定义为该区域在从其中任意一点开始的任何轨迹上是不连续的，从而防止返回起点。在环面上，“局域化”意味着在某些带有特定符号的区域内存在可收缩的回路。例如，图 3 提供了这种具有簇集的局域化。相反，“去局域化”指的是区域的连续性，允许轨迹返回其起点。当我们映射贝里曲率的具体符号区域时，在环面上存在不可收缩的回路。

#### 3.1 Berry 曲率的渗流现象

贝里曲率倾向于在特定位置形成峰值，这些位置是能带接近交叉或接触的地方。为了看出这一点，请注意，在 2 带系统中，与+带相关的贝里曲率可以表示为

$$F_{xy}(\mathbf{k}) = i \frac{1}{(\epsilon_+ - \epsilon_-)^2} [\langle \mathbf{n}_+ | \partial_{k_x} H | \mathbf{n}_- \rangle \langle \mathbf{n}_- | \partial_{k_y} H | \mathbf{n}_+ \rangle - \langle \mathbf{n}_+ | \partial_{k_y} H | \mathbf{n}_- \rangle \langle \mathbf{n}_- | \partial_{k_x} H | \mathbf{n}_+ \rangle], \quad (14)$$

$$= - \frac{2 \text{Im} \left( \langle \mathbf{n}_+ | \partial_{k_x} H | \mathbf{n}_- \rangle \langle \mathbf{n}_- | \partial_{k_y} H | \mathbf{n}_+ \rangle \right)}{(\epsilon_+ - \epsilon_-)^2}, \quad (15)$$

其中  $\epsilon_{\pm}$  是特征值和  $|\mathbf{n}_{\pm}\rangle$  是每一带的特征向量。当能带接触点处的本征值出现简并时， $(\epsilon_+ - \epsilon_-)^2$  的值接近于零，使得在接近接触点处贝里曲率的峰值变得尖锐。现在让我们集中讨论  $F_{xy}$  的符号问题。 $F_{xy}$  的符号翻转会明显改变贝里曲率峰符号区域（PSR）及其相反符号区域（OSR）的分布情况。我们用主导峰的符号定义了 PSR；在拓朴相变中，带接触点处的峰值从图 1 可

以看出, PSR 用红色表示, 而 OSR 用蓝色表示。当陈数非平凡时, OSR 是局域化的, 类似于岛屿, 而 PSR 主要是非局域化的。相反, 在陈数平凡的情况下, OSR 广泛地分布, 类似河流。这种模式表明拓扑相变伴随着 OSR 的渗流现象。我们一致验证了这一有趣的现象在各种模型中的适用性, 证实了它在描述拓扑相变中的普遍适用性。此外, 如第 2 节所述, 在 QGT 框架内, 贝里曲率的分布可以等同于度量张量的分布, 进一步阐明这些拓扑现象的几何基础。

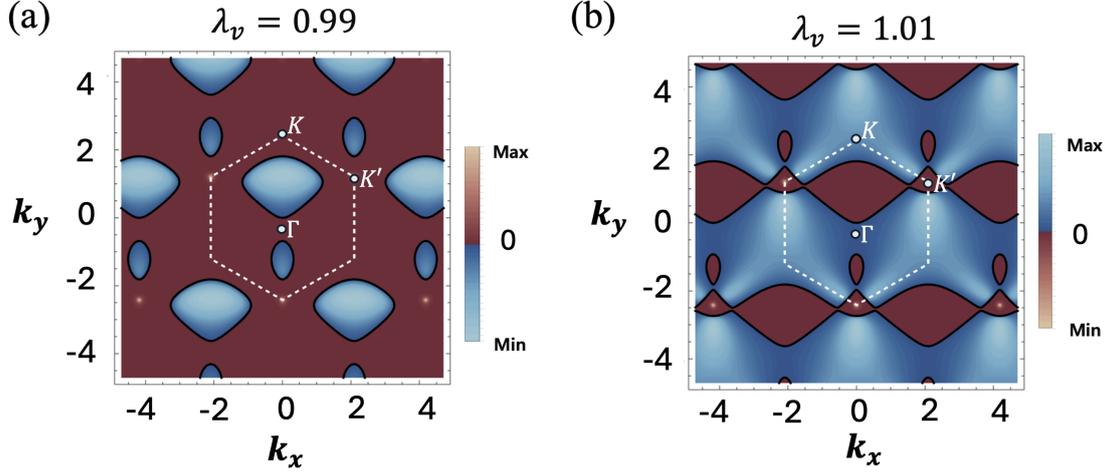


图 1: Haldane 模型的 Berry 曲率。红色区域表示 PSR, 蓝色区域描述 OSR。虚线代表 BZ。在图 (a) 中, 陈数是非平凡的, 因此 OSR 是局域化的。相反, 在图 (b) 中, 当陈数是平凡的时候, OSR 是去局域化的。

### 3.2 贝里曲率的行为

在本节中, 我们解释了这些观察结果的原因, 重点在于贝里曲率分布的变化如何直接与陈数的变化相关联。影响贝里曲率分布变化的主要因素是带反转。当轨道的能量水平 (通常是不同奇偶性的) 在布里渊区的特定高对称点通过一个过程中交换位置时, 带反转就发生了, 在这个过程中, 能隙先是变窄, 然后闭合, 再重新打开。带隙重新打开后, 靠近闭合点的下价带和上导带轨道相对于其平凡相 [?] 发生了反转。在能带接触点附近, 存在一个明显的区域, 其中不同能带的本征矢量混合 (见图 2)。这样的能带混合区始终存在于能带接触点周围。因此, 在靠近能带接触点的地方, 贝里曲率主要由其他能带的本征矢量构成, 这与其他区域不同, 后者中的贝里曲率由原始能带的本征矢量组成。这意味着在峰值附近存在一个本征矢量跳跃。这种本征矢量配置现象对于理解拓扑相变下贝里曲率分布的本质至关重要: 由于本征矢量的混合, 在能带接触点附近, 贝里曲率的符号发生了变化。简而言之, 能带反转修改了贝里曲率的局域化特性。此外, 根据方程 15, 当存在足够的带隙时, OSR 内的贝里曲率值显著低于峰值处的值。因此, OSR 分布对于定量补偿峰值的价值至关重要, 直接决定了陈数是平凡还是非平凡。具体而言, 当陈数为非平凡时, OSR 局部化, 导致对峰值值的最小补偿, 从而确保陈数保持非零。相反, 当陈数为平凡时, OSR 的平坦性要求其在布里渊区中广泛分布以充分补偿峰值, 从而导致其去局域化。总体而言, 贝里曲率分布的分析作为拓扑特征的关键指标, 决定了拓扑相是平凡还是非平凡。

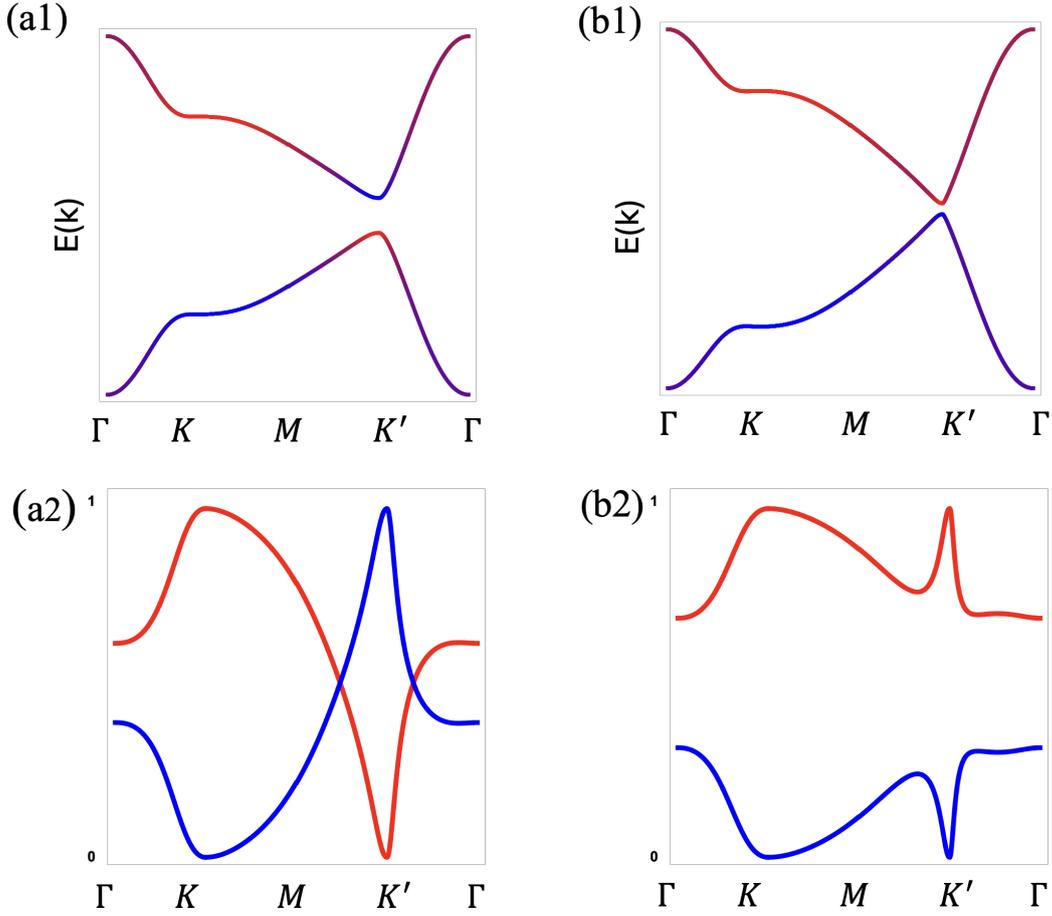


图 2: (a1), (b1): Haldane 模型的带结构图示, 分别对应拓扑相为非平庸和平凡的情况。颜色代表了本征向量  $|\psi\rangle = (\alpha, \beta)^T$  的分量大小, 其中  $|\psi\rangle = (1, 0)^T$  显示为红色,  $|\psi\rangle = (0, 1)^T$  显示为蓝色。在 (a1) 中可以观察到由于在拓扑非平庸相中靠近  $K'$  点的带反转导致的颜色变化, 在 (b1) 中则没有这种表现。(a2) 和 (b2) 展示了本征向量的第一分量大小 (分别对应于 (a1) 和 (b1) 中的  $|\alpha|$ )。红色表示上层能带, 蓝色描述下层能带。

### 3.3 渗流率

渗流理论, 统计力学中的一个关键概念, 研究随机介质中连接簇的行为。通过分析形成和扩散到系统 [?] 的簇的概率和几何结构, 它提供了对相变的洞见。渗流是指在相变期间, 局部簇扩展并合并的现象。在这种情况下, OSR 去局域化可以通过将 OSR 视为渗流理论中的簇来量化。我们定义  $S_i$  为个体  $i$ -th OSR 集群的大小, 考虑到周期性如图 3 所示。然后, Berry 曲率的渗流率可以写成如下形式,

$$P = \frac{S_{max}}{N}, \quad (16)$$

其中  $N$  是 BZ 的大小,  $S_{max}$  是最大集群的大小。当 Chern 数非平凡时, OSR 保持局域化, 形成几个小簇群, 导致渗流率低于 0.5。相反, 当 Chern 数平凡时, OSR 脱离局域化进入一个连接的簇群, 导致渗流率达到超过 0.5 的高水平。有趣的是, 当 Chern 数平凡时, OSR 的脱离局域化总是主要发生在 BZ 内。如果有窄带 OSR 的脱离局域化, 并且 PSR 主要局域化, 则应存

在非零 Chern 数。但是重要的事情是这种情况从未发生过：如果 OSR 发生脱离局部化，OSR 占据了 BZ 的主导地位，因此该系统的 Chern 数总是为零。

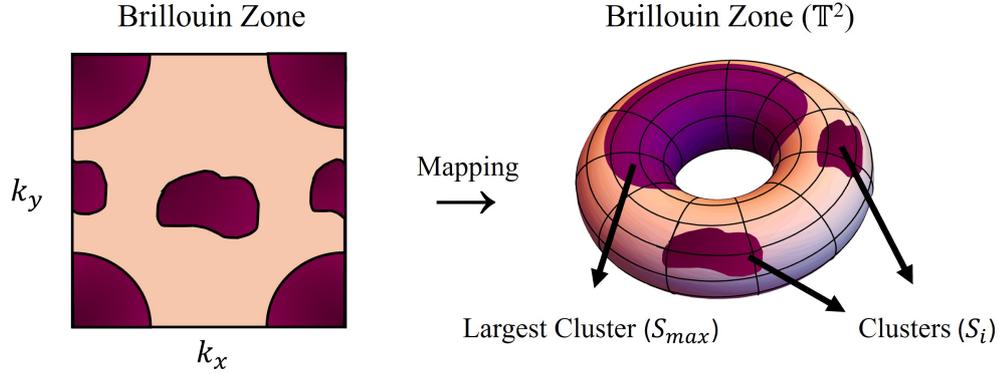


图 3: 渗流率示意图。将贝里曲率映射到环面上。紫色区域是 OSR，其他区域表示 PSR。

## 4 应用

我们现在演示当拓扑相为平凡或非平凡时，Berry 曲率的渗流现象如何在三个不同的 2D 模型中出现。这些模型的拓扑不变量由 Chern 类定义。通过这些模型，我们提供了 Berry 曲率的等高线图；红色区域始终表示 PSR，而蓝色区域表示 OSR。

### 4.1 七物张模型

Qi-Wu-Zhang (QWZ) 模型是一个二维晶格模型，描述了量子反常霍尔效应，作为理解凝聚态物理学中拓扑相的基本框架 [?,?]. QWZ 模型的布洛赫哈密顿量由下式给出：

$$h_{\text{QWZ}} = A \sin k_x \sigma_1 + A \sin k_y \sigma_2 + (\cos k_x + \cos k_y + \Delta) \sigma_3. \quad (17)$$

我们可以直接使用上述哈密顿量计算 Berry 相位，如方程 (3) 所示。在 QWZ 模型中，陈数依赖于  $A$  与  $\Delta$  的比值如下。

$$\begin{cases} C = 1 & \text{for } 0 < \frac{\Delta}{A} < 2 \\ C = -1 & \text{for } -2 < \frac{\Delta}{A} < 0 \\ C = 0 & \text{for } \frac{\Delta}{A} > 2 \text{ or } \frac{\Delta}{A} < -2 \end{cases}$$

在图 4 中，虚线代表 BZ。红色表示 PSR，而蓝色表示 OSR。当陈数非平凡时，PSR 主要表现为离域化，而 OSR 则像岛屿一样局域化。 $\Delta = 0$  也是从 -1 到 1 的拓扑相变点。然而，由于两边的陈数都是非平凡的，因此 OSR 的局域性保持不变。相反，在平凡陈数的情况下，OSR 表现为离域化。此外，我们使用公式 (Eq16) 计算渗流率。在图 5 中，红线表示  $P = 0.5$ ，蓝线是 QWZ 模型中 OSR 的渗流率。当陈数为零时，渗流率高于 0.5，这意味着 OSR 主要在 BZ 内表现为离域化。另一种情况下，当陈数非零时，渗流率低于 0.5。因此，观察 Berry 曲率每个带符号区域的分布作为确定拓扑相是平凡还是非平凡的拓扑特征。

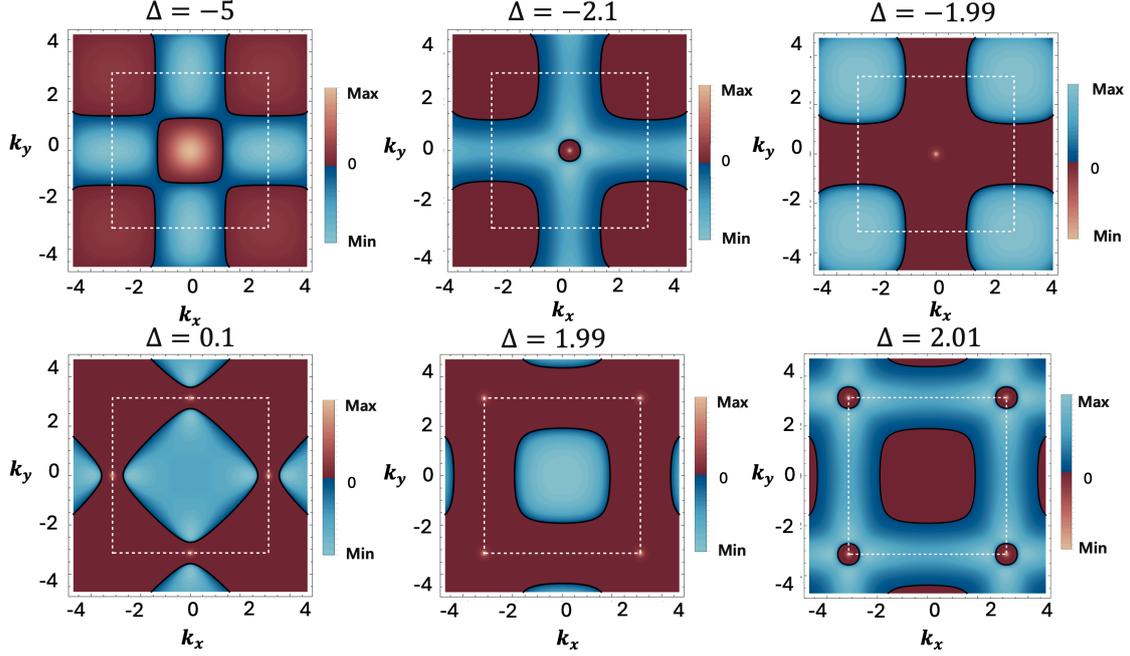


图 4: QWZ 模型的 Berry 曲率当  $A=1$  时: 红色区域是 PSR, 蓝色区域是 OSR。虚线表示 QWZ 模型的等效 BZ。当  $\Delta < -2$  或  $\Delta > 2$  时, 陈数平凡, 因此蓝色区域是离域化的。在其他情况下, 当  $-2 < \Delta < 2$  时, 蓝色区域是局域化的而红色区域发生离域化。

## 4.2 霍尔丹模型

我们还验证了 Haldane 模型 [?] 中的 Berry 曲率的渗流性质。Haldane 模型的紧束缚哈密顿量由以下给出

$$H_H = t_1 \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger c_j + t_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} e^{-i v_{ij} \phi} c_i^\dagger c_j + \lambda_v \sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_i, \quad (18)$$

其中  $\langle ij \rangle$  表示最近邻 (NN) 跃迁的总和, 而  $\langle\langle ij \rangle\rangle$  则表示次近邻 (NNN) 相互作用的总和。  $t_1$  是决定 NN 跃迁的跃迁常数。第二个项的引入考虑了次近邻 (NNN) 跃迁, 受内部磁通量  $\phi$  和跃迁参数  $t_2$  的影响。此外, 与该术语相关的相位因子取决于次近邻跃迁的方向:

$$v_{ij} = \text{sgn}(\hat{d}_i \times \hat{d}_j)_z = \pm 1, \quad (i, j) \in \{1, 2\}$$

其中  $\hat{d}_{1,2}$  是沿着次近邻跃迁方向的向量。最后一项是原位能量, 它依赖于子晶格: 对于每个站点分别为  $\epsilon_i = 1$  和  $\epsilon_i = -1$ 。在这里, 我们定义一个原始晶格矢量为

$$\vec{d}_1 = \frac{\sqrt{3}}{2} a (\sqrt{3}, 1), \quad \vec{d}_2 = \frac{\sqrt{3}}{2} a (-\sqrt{3}, 1), \quad (19)$$

其中  $a$  是晶格间距。使用泡利矩阵, 我们可以按如下方式表达布洛赫哈密顿量:

$$\begin{aligned} h_H(\mathbf{k}) = & 2t_2 \cos(\phi) (2 \cos(\tilde{k}_x) \cos(\tilde{k}_y) + \cos(2\tilde{k}_y)) I_2 \\ & - t (1 + 2 \cos(\tilde{k}_x) \cos(\tilde{k}_y)) \sigma_1 - 2t \sin(\tilde{k}_x) \cos(\tilde{k}_y) \sigma_2 \\ & + (\lambda_v + 2t_2 \sin(\phi) (2 \cos(\tilde{k}_x) \sin(\tilde{k}_y) - \sin(2\tilde{k}_y))) \sigma_3. \end{aligned} \quad (20)$$

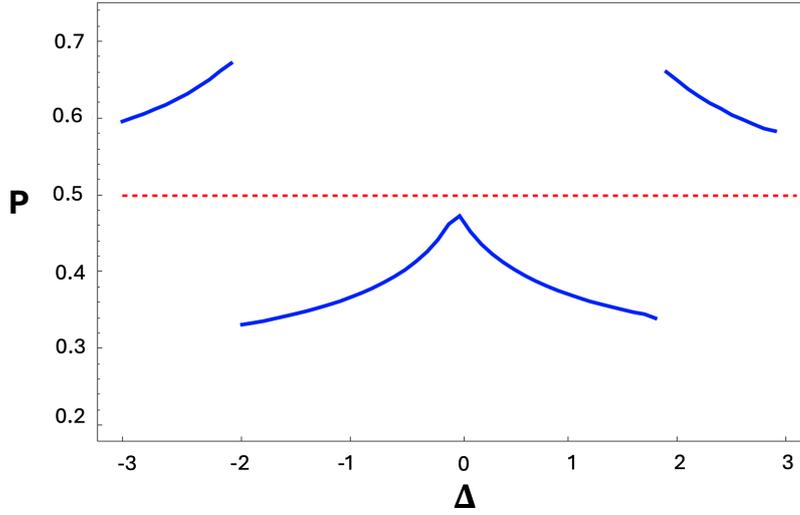


图 5: 渗透率的 OSR 在 QWZ 模型中。红线表示  $P = 0.5$ 。当  $\Delta < -2$  或  $\Delta > 2$  时，陈数是平凡的，因此渗透率高于 0.5。在其他情况下，当  $-2 < \Delta < 2$  时，当陈数是非平凡的，渗透率低于 0.5。

其中  $\tilde{k}_x = 3ak_x/2, \tilde{k}_y = \sqrt{3}ak_y/2$ 。

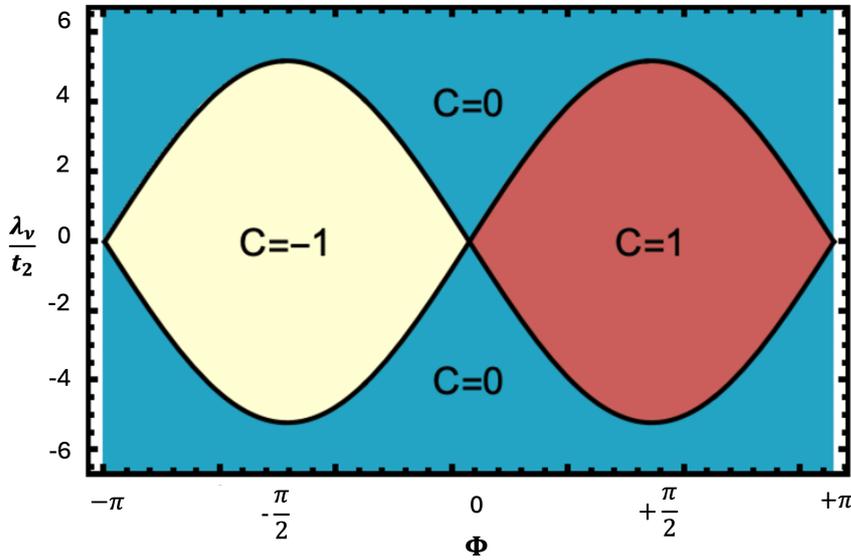


图 6: 霍尔丹模型的相图

利用方程 (7)，Haldane 模型的陈数由三个独立参数的比例决定： $t_2, \phi$ ，和  $\lambda_v$ 。这些依赖关系的具体表示在相图中进行了说明，见图 6。在图 7 中，虚线代表布里渊区。我们固定  $\phi = \pi/2$ ，同时改变  $\lambda_v$  与  $t_2$  的比例，并研究 PSR 和 OSR 的非局域化特性。类似于 QWZ 模型中的观察结果，在图 7 中，红色区域代表 PSR，而蓝色区域是 OSR。如图 7 所示，在非平凡相中当  $\lambda_v < 1$  时，PSR 的非局域化变得广泛，类似于河流，而 OSR 则是局域化的。相反，在平凡相中，当陈数为零且  $\lambda_v > 1$  时，OSR 变得非局域化，并发生拓扑转变，这代表了 OSR 的渗

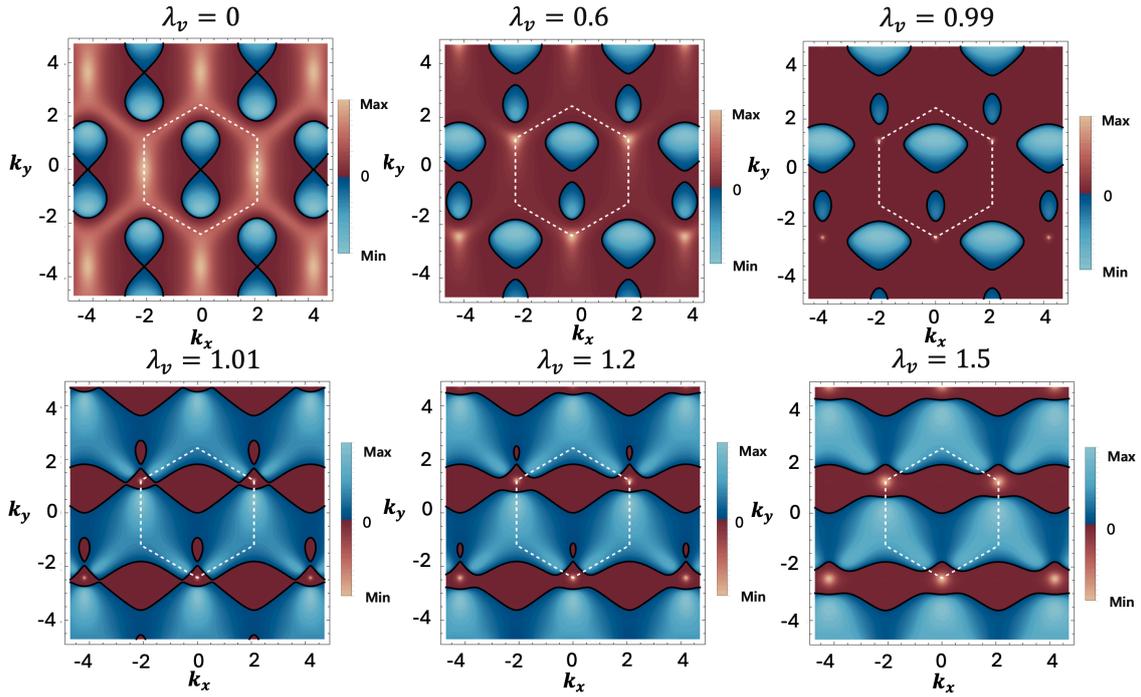


图 7: Haldane 模型的 Berry 曲率, 其中  $t_2 = 1/3\sqrt{3}$  和  $\phi = \pi/2$ : 虚线表示等效的 BZ。类似于之前的图形, 红色区域是峰值带符号区域, 蓝色区域是相反符号的区域。当  $\lambda_\nu < 1$  时, 拓扑相是非平凡的, 因此红区会发生渗流, 并伴有蓝区的局域化。另一方面, 如果拓扑相是平凡的, 则蓝区会去局域化。

流现象。此外, 渗透率如图 8 所示。当  $-1 < \lambda_\nu < 1$  时, OSR 局限在特定区域, 因此渗透率低于 0.5。另一方面, 当  $-1 > \lambda_\nu$  or  $1 < \lambda_\nu$  时, OSR 在 BZ 中的去局域化占据主导地位, 所以渗透率高于 0.5。因此, OSR 的渗透伴随着拓扑相变。

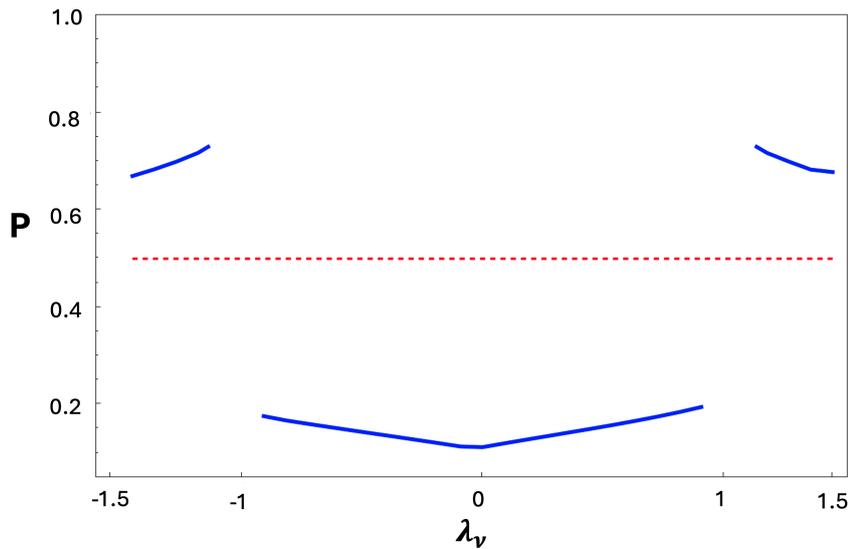


图 8: 渗透率的 OSR 在 Haldane 模型中。红线表示  $P = 0.5$ 。当  $-1 > \lambda_\nu$  或  $\lambda > 1$  时, 陈数是平凡的, 渗透率高于 0.5, 这意味着去局域化主要发生在 BZ 中。另一方面, 陈数是非平凡的, 渗透率低于 0.5。

### 4.3 扩展的哈罗德模型

扩展的哈罗德模型除了哈罗德模型 [?] 外, 还包括次近邻跳跃。扩展的 Haldane 模型的紧束缚哈密顿量由以下给出

$$H_{\text{EH}} = t_1 \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger c_j + t_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} e^{-i\nu_{ij}\phi} c_i^\dagger c_j + t_3 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} c_i^\dagger c_j + \lambda_\nu \sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_i. \quad (21)$$

除了 Haldane 模型外,  $\langle\langle ij \rangle\rangle$  表示对 N3 邻近跳跃的求和, 而  $t_3$  是在傅里叶变换下, 紧束缚哈密顿量可以写成布洛赫哈密顿量,

$$\begin{aligned} h_0 &= 2t_2 \cos(\phi) [\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_1) + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_2) \\ &\quad + \cos(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{d}_1 - \mathbf{d}_2))], \\ h_1 &= t_1 [\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_1) + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_2)] \\ &\quad + t_3 [\cos(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{d}_1 + \mathbf{d}_2)) + 2\cos(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{d}_1 - \mathbf{d}_2))], \\ h_3 &= \lambda_\nu + M_H, \end{aligned} \quad (22)$$

其中,  $M_H$  是 Haldane 质量  $M_H = 2t_2 \sin(\phi) [\sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_2) - \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_1) + \sin(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{d}_1 - \mathbf{d}_2))]$  和  $\mathbf{d}_1 = a/2(\sqrt{3}, 3)$ ,  $\mathbf{d}_2 = a/2(-\sqrt{3}, 3)$  就像在 Haldane 模型中一样。从图 9 中, 我们可以看到扩展的 Haldane 模型的陈数相图。

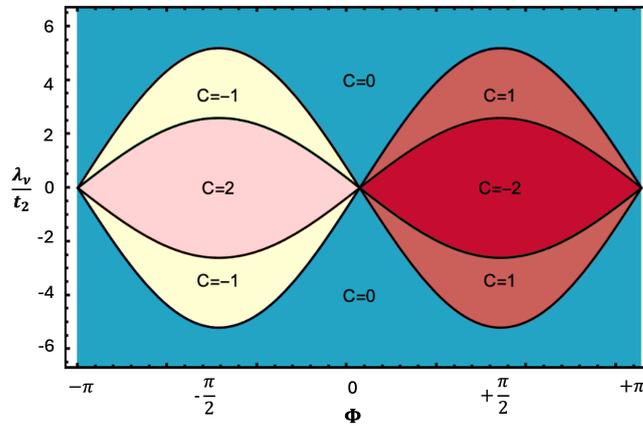


图 9: 扩展哈罗德模型的相图  
当  $t_1 = 1, t_3 = 0.35$ 。

类似于 Haldane 模型, 我们固定了  $\phi = -\pi/2$  并连续改变比值  $\lambda_\nu/t_2$ 。当陈数平凡时, 即当该比值的大小超过大约 5.2 时, 观察到 PSR 的去局域化。而 OSR 在特定区域中是局域化的。拓扑相变发生在从  $C = -1$  到  $C = 2$ , 其中  $\lambda_\nu/t_2 = 2.8$ 。类似于 QWZ 模型, 在非平凡相之间, OSR 内的去局域化趋势不会改变。相反, 当陈数为非平凡 ( $-5.2 < \lambda_\nu/t_2 < 5.2$ ) 时, OSR 表现出去局域化。

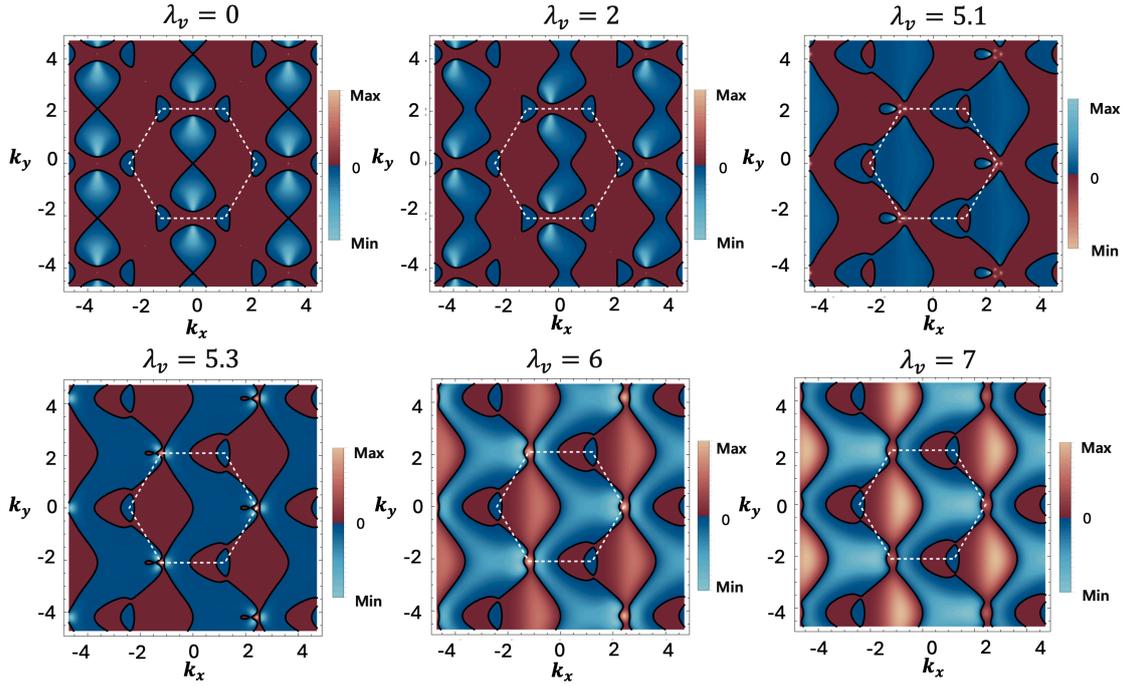


图 10: 扩展 Haldane 模型的 Berry 曲率当  $t_1 = 1, t_2 = 1, t_3 = 0.35, \phi = -\pi/2$ : 虚线表示扩展 Haldane 模型的 BZ。红色区域是峰值符号区域, 蓝色区域是相反符号的区域。当  $\lambda_v < 5.2$  时, 拓扑相是非平凡的, 因此红色区域发生局域化消失而蓝色区域则去局域化。另一方面, 当拓扑相为平凡时, 局域化消失发生在蓝色区域内, 就像河流一样。随着拓扑跃迁的发生, 蓝色区域的渗流现象出现。

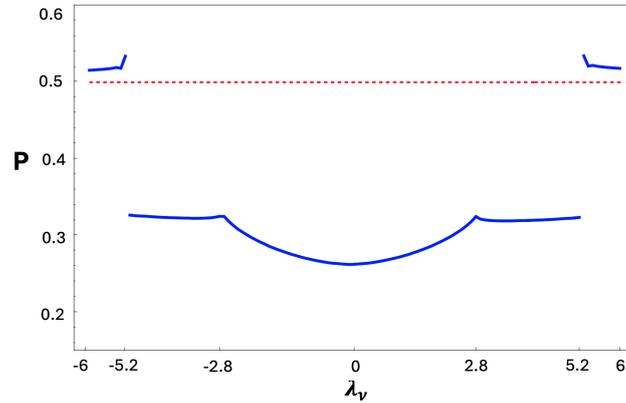


图 11: 渗透率的 OSR 在扩展的 Haldane 模型中。当  $-5.2 > \lambda_v$  or  $5.2 < \lambda_v$ , 陈数是平凡的, 渗透率高于 0.5, 这意味着去局域化主要发生在布里渊区。另一方面, 陈数是非平凡的, 渗透率低于 0.5。

基于结果, 我们使用公式 (16) 计算渗流率。在图 5 中, 红线表示  $P = 0.5$ , 而蓝线表示 QWZ 模型中 OSR 的渗流率。当  $C = 0$  时, 渗流率超过 0.5, 表明 BZ 中的 OSR 主要呈非局域化。相反, 当  $C$  非零时, 渗流率低于 0.5。因此, 在 OSR 和 PSR 中 Berry 曲率的分布作为决定拓扑相是否平凡或非平凡的拓扑特征。

## 5 讨论

在本研究中，我们展示了 Berry 曲率的渗流行为可以发挥关键作用来确定材料的拓扑相。通过从拓扑转变的角度分析 Berry 曲率分布，我们建立了明确且实用的准则以区分 Chern 数是否平凡或非平凡。这种方法通过 QWZ 模型、Haldane 模型和扩展 Haldane 模型在广泛参数范围内的全面分析得到了验证。本研究的关键见解是引入相对符号分析，定义了峰值符号区域 (PSR) 和反符号区域 (OSR)。这种途径揭示了与拓扑相变紧密相关的 Berry 曲率的全局模式。我们观察到当拓扑平凡时，BZ 中 OSR 的非局域化现象。相比之下，在非平凡拓扑中，PSR 是非局域化的而 OSR 是局域化的。平凡和非平凡拓扑相之间的转变由 PSR 和 OSR 渗流特征的清晰变化所标记。这一观察为预测和理解材料的拓扑性质提供了框架。此外，通过我们的方法捕捉到的 Berry 曲率分布的整体行为支持未来的实验验证。直接测量 Berry 曲率的努力，如涉及冷原子和光子晶格 [?,?] 的研究展示了表征拓扑性质的潜力。这些测量为开发具有定制电子特性的材料提供了数据，并深化了我们对量子 and 拓扑物理的理解。观察 Berry 曲率的渗流行为可能使在实验装置中更精确地确定 Chern 数并促进拓扑相的特征化。我们的发现代表观测结果而非正式证明的陈述。此外，本研究侧重于单个能带对及 BZ 内单个非简并主导 Berry 峰的情形。未来的工作可以将这些发现扩展到多带系统，并在不同实验条件下检查渗流行为的稳健性。我们希望相对符号分析能够推进拓扑相的研究。本研究强调了即使在整合到 BZ 之前，Berry 曲率的重要性。