

# 威尔逊多边形与零维系统拓扑

Gen Yin,<sup>1,\*</sup> Rameswar Bhattacharjee,<sup>2</sup> and Miklos Kertesz<sup>2,†</sup>

<sup>1</sup>*Department of Physics, Georgetown University, Washington, D.C. 20057, USA*

<sup>2</sup>*Department of Chemistry, Georgetown University, Washington, D.C. 20057, USA*

我们证明零维 (0-D) 系统可以承载类似于高维度宏观拓扑材料的非平凡拓扑。与具有平移对称性的宏观周期系统不同, 分子、团簇和量子点等零维材料可以表现出离散旋转对称性。因此, 本征态可以被分成离散带和类似布洛赫波函数的形式。由于对称性是离散的, Berry 相位和拓扑指标必须由离散 Wilson 多边形定义。在这里, 我们展示了两个代表性的 0-D 分子 [m]-环状联苯和 [m]-异硫杂萘中的非平凡  $Z_2$  阶, 在修改重复单元之间的耦合时会发生拓扑转变。类似于高维度的宏观拓扑系统, 局部边界态在由拓扑不同的片段组成的复合纳米环中出现。这为零维系统的非平凡拓扑相提供了可能性。

拓扑带理论是过去几十年凝聚态物理学中的一个重要中心主题。它导致了具有令人信服的基本和应用性质的拓扑材料被发现。这些发现包括陈绝缘体 [1]、拓扑绝缘体 [2–4]、拓扑超导体 [5–8] 和外尔及狄拉克半金属 [9, 10]。在具有不同拓扑指数的材料界面之间, 会出现较低维度的边界态, 其存在和稳健性由拓扑保护。这些边界状态已被确认为许多重要量子化现象的起源, 如量子霍尔效应 [11]、量子反常霍尔效应 [1, 12–15] 和量子自旋霍尔效应 [16–19]。类似的理论已经被应用于不同周期系统中的其他准粒子激发, 从而产生了拓声子 [20]、拓光子 [21] 和拓磁振子 [22]。最近, 由于合成手段的高度发展提供了大量的结构和化学自由度, 有机一维 (1-D) 拓扑系统 [23] 受到了广泛关注。特别地, 在一系列乙炔连接的寡聚乙炔  $\pi$ -共轭聚合物吸附在金表面时, 当改变乙炔尺寸 [24, 25] 时, 已经实验识别出一种  $Z_2$  拓扑转变。类似的拓扑转变已经在各种  $\pi$ -共轭聚合物中作为外部应变 [26] 的函数被证明。

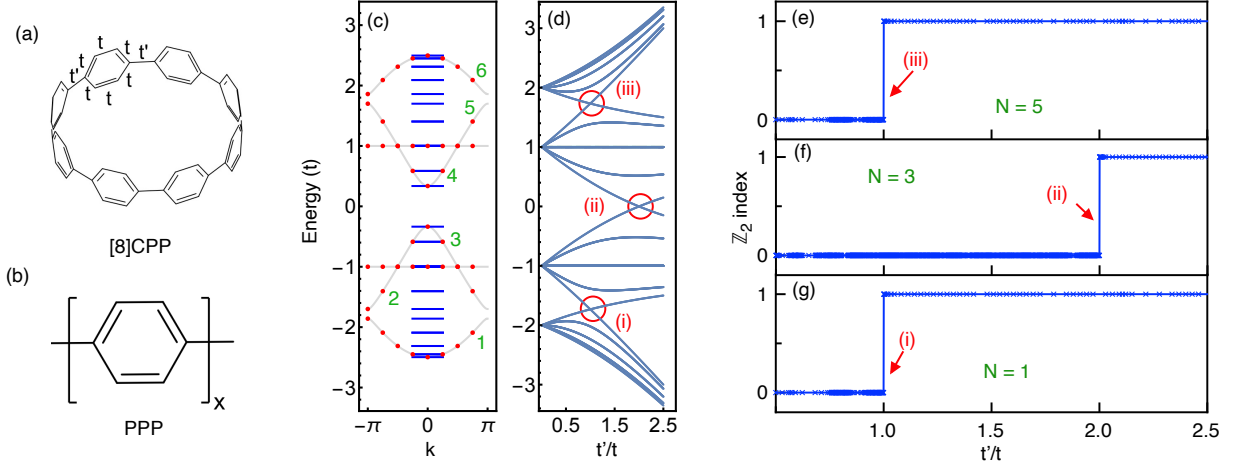
上述拓扑分类主要基于周期材料的能带理论, 因为它们具有平移对称性。这些系统通常是宏观且周期性的, 因此在倒空间中的晶格动量  $\hbar\mathbf{k}$  是连续的。Berry (或 Zak) 相位、Berry 连接和 Berry 曲率则被定义为  $\mathbf{k}$  [27, 28] 的连续函数。具体来说, Berry 连接可以被视为一个规范场, 沿着闭合 Wilson 回路对其进行积分将给出一个规范不变的 Berry 相位 [29]。在某些情况下, 连续的威尔逊环可以被离散化, 这对于极化 [30] 的数值计算、费米面霍尔电导率 [31, 32]、光学响应 [33] 和拓

扑指标 [34] 非常重要。这些由离散威尔逊链形成的环也被称为威尔逊多边形 [35]。虽然已经建立了很好的基础, 但威尔逊多边形方法通常被认为是一种近似处理宏观拓扑材料在 1D、2D 或 3D 中的连续谱的方法。在这里, 我们展示了威尔逊多边形定义了零维 (0-D) 系统的拓扑指标 [36]。数值结果自然是精确和稳健的, 而不是连续极限的近似值。

具体而言, 我们在两个 0-D 分子中展示了拓扑序: [m] 环并苯 [37] ([m]CPP) 和 [m]-异噻喃 ([m]ITN)。由于这些分子是圆形的, 因此它们也被称为“纳米环”。我们使用了仅包含最近邻跃迁积分项的修改版休克尔模型来研究这两个分子。由于两个系统都具有时间反演对称性和较小的自旋轨道耦合, 我们只考虑了一种类型的自旋, 因此所有轨道都是自旋简并的。这类似于 1-D 聚乙炔 [38] 的苏-施里弗-希格模型。首先, 我们使用简化的 [m]CPP 模型来展示这一概念, 如图 1(a) 所示。该分子由  $m$  个对位连接的苯基组成, 类似于聚对苯 ylene (PPP), 即聚合半导体类似物, 如图 1(b) 所示。在这里,  $t$  描述了每个重复单元内的碳-碳 (CC) 跃迁, 而  $t'$  表示相邻单元之间的耦合 [见图 1(a)]。由于分子是环状的, 它具有  $C_m$  旋转对称性, 分子轨道 (MOs) 由沿纳米环传播的驻波解给出。与一个重复单元相关的局部波函数仅在整体相位上与其他相关联的不同。此阶段由离散旋转的特征值给出:  $e^{ik} = 1$ , 其中  $k = \frac{2\pi l}{m}$ , 以及  $l = 0, 1, 2, \dots, m-1$ 。在极限  $m \rightarrow \infty$  下, 离散的  $k$  点变得连续, 并且旋转对称性恢复为一维晶格中的平移对称性。在此极限下, 布洛赫定理得以恢复, 而 0-D[m]CPP 分子变为宏观的一维聚对苯乙炔 (PPP)。因此, 我们可以精确地将 MOs 映射到 PPP 带中, 如图 1(c) 所示。

\* gen.yin@georgetown.edu

† kertesz@georgetown.edu



**Fig 1.  $\mathbb{Z}_2$  在 [m]CPP 中的转换。** (a) [8]CPP 的原子结构。这里,  $t$  是每个苯环内的 C-C 跃迁幅度, 而  $t'$  标记相邻单元之间的跃迁幅度。 (b) 当  $n \rightarrow \infty$  时, [n]CPP 情况下的 PPP 聚合物的晶胞。 (c) [8]CPP 中的 MO 映射到 PPP 的连续带中。短水平蓝色线条表示 MO 的离散能级, 而它们在连续带中对应的位置由红色实点标记。灰色实线说明了 1-D 聚合物 PPP 的连续带。 (d) 调节  $t'$  时 [8]CPP 的能级演化。捕捉到了三个交叉。 (e-f) 随着  $t'$  变化的  $\mathbb{Z}_{2,N}$  索引的量子跃迁, 对应于在 (d) 中显示的两个交叉。

Hückel 模型中的单一参数  $t'/t$  显著调制了 MO 能量, 如图 1(d) 所示。对于 PPP 或 [m]CPPs 的现实模型,  $t'/t < 1$  受到限制, 因为连接苯环的碳-碳键较长, 对应的整体结构严格为“芳香性”, 意味着  $\pi$  电子在苯环上更加局域化, 在环间键 [39] 上的分布较少。在这里我们在一个不现实的范围内调节  $t'/t$  以演示这一概念, 更现实的系统将在后面介绍。当调节  $0 \leq t'/t \leq 2.5$  时, 模型捕获了三个 MO 的交叉点, 这些交叉点在图 1(d) 中标记为 (i)-(iii)。交叉点 (i) 和 (iii) 位于  $t'/t = 1$  处, 可以映射到图 1(c) 中所示的两个能带交叉点  $k = -\pi$  处。交叉 (ii) 在  $t'/t = 2$  被捕获, 这对应于第 3 和第 4 带之间的间隙, 并且总是出现在  $k = 0$  [图 1(c)]。考虑到每个碳原子向  $\pi$  系统贡献一个电子, 交叉 (ii) 对应于最高占据分子轨道 (HOMO) 与最低未占据分子轨道 (LUMO) 之间的间隙。

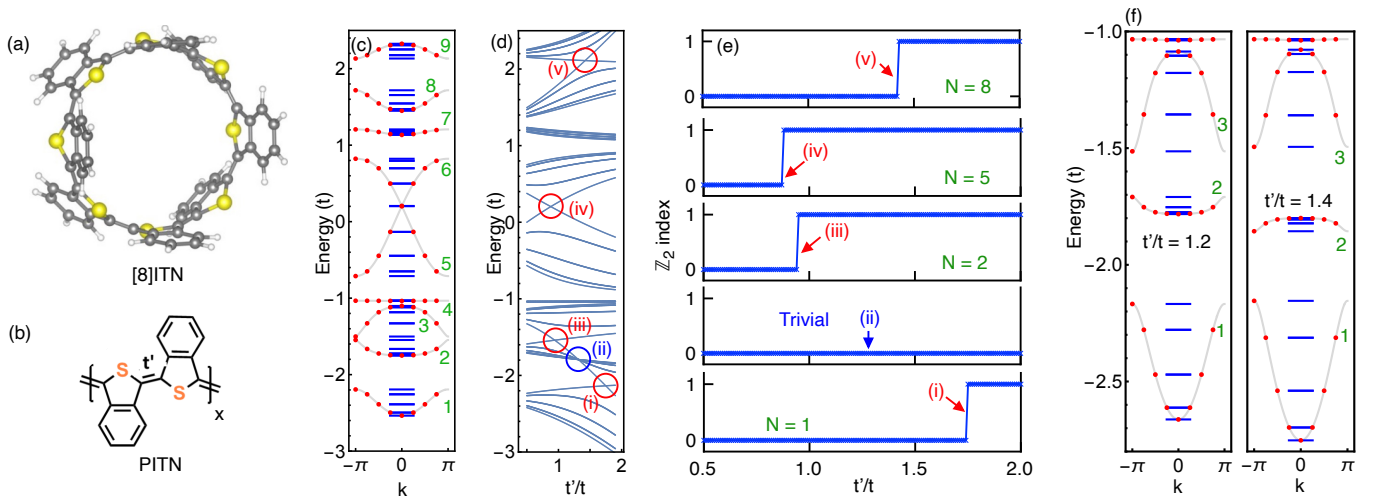
这些能级的交叉确实对应于  $\mathbb{Z}_2$  拓扑转变。由于纳米环的有限尺寸, 流形自然离散化, 贝里相位只能定义在威尔逊多边形上:  $\gamma_n = -\text{Im} \ln \left( \prod_{l=1}^m \langle k_l, n | k_{l+1}, n \rangle \right)$ , 其中  $k_{m+1} = k_1$ , 这里  $|k_l, n\rangle$  表示沿第  $n$  带采样的第  $l$  个离散 MO 的周期部分。Berry 相直到第  $N$  个带的总和提供了相应的

指标:  $\mathbb{Z}_{2,N} = \sum_{n=1}^N \frac{\gamma_n}{\pi} \pmod{2}$ 。这等价于

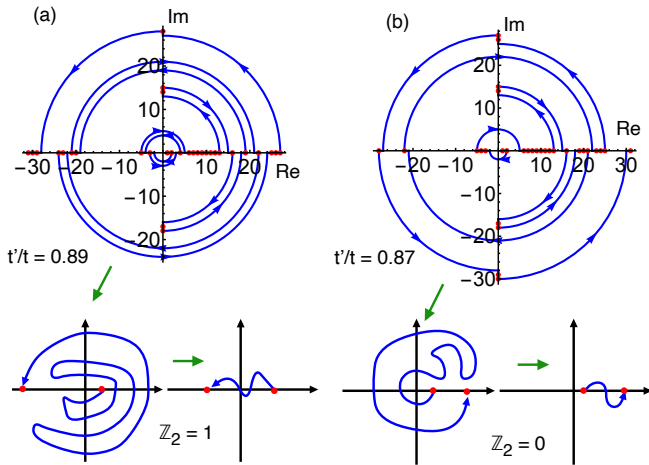
$$\mathbb{Z}_{2,N} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \ln \left( \prod_{n=1}^N \prod_{l \in \text{band } n}^m \langle k_l, n | k_{l+1}, n \rangle \right), \quad (1)$$

其中指标  $l$  遍历第  $n$  个带, 自然对数定义在分支  $(-\pi, \pi]$  上。 $\mathbb{Z}_2$  指数作为  $t'/t$  的函数如图所示。1(e-g)。这里, 在计算公式 1 后总是取模 2。尖锐的步骤分别在  $t'/t = 1$  和  $t'/t = 2$  处被数值捕获, 正好与图 1(d) 中所示的 MO 的能级交叉相吻合。非平凡的  $\mathbb{Z}_2$  序在 0-D[m]CPP 中受到以站点为中心的反演对称性的保护。这在  $m$  是偶数时得到保证, 在这种情况下, 总是可以将一个重复单元  $j$  映射到其对应的单元  $-j$ 。 $\mathbb{Z}_2$  指数也可以由  $k = 0$  和  $k = -\pi$  处的反演本征值决定, 这类似于在一维拓扑晶体绝缘体 [40]。然而, 当  $m$  为奇数时,  $k = -\pi$  处的能隙不能由离散的 MOs 采样。尽管如此, 威尔逊多边形仍然可以以规范不变的方式捕获拓扑序, 提供一个明确定义的  $\mathbb{Z}_2$  指数。此形式主义可直接应用于具有  $C_m$  旋转对称性的任意 0-D 纳米环。

尽管拓扑跃迁必须与某些能级的交叉相吻合, 但仅仅存在分子轨道的交叉并不一定意味着拓扑跃迁。这一点可以从 [m]-iso-噻喃苯的光谱中看出, 该光谱由  $m$  个 iso-thia-naphthene (ITN) 单元组成, 每个单元包含一个杂环中的硫原子。在  $m \rightarrow \infty$  的极限下, 纳米环变成 PITN, 这是一种已知的具有接近 1 eV [41] 的小



**Fig 2.  $Z_2$  在 [m]ITN 中的转换。** (a) [8]ITN 结构的示例图，其中重复单元在结构优化后采取了交替结构。(b) 当  $m \rightarrow \infty$  时，与 [m]ITN 情况对应的 PITN 聚合物的晶胞。(c) 将 [8]ITN 中的 MOs 映射到类似于图 1 所示的 PITN 连续带中。这里  $\frac{t'}{t} = 0.88$ ，对应于 HOMO 和 LUMO 在  $\Gamma$  处的交叉。(d) 在调节  $t'$  时，[8]ITN 能级的变化情况。捕获了五个交叉点 (i-v)。(e) 作为  $t'$  函数的  $Z_{2,N}$  指数，对应于 (d) 中显示的五个交叉点。(ii) 中的转变是平凡的，而所有其他转变在拓扑上是非平凡的。(f) 对于情况 (ii)，对平凡过渡的解释。左侧和右侧面板显示了交集前 (左) 和交集后 (右) 的不同带曲率。

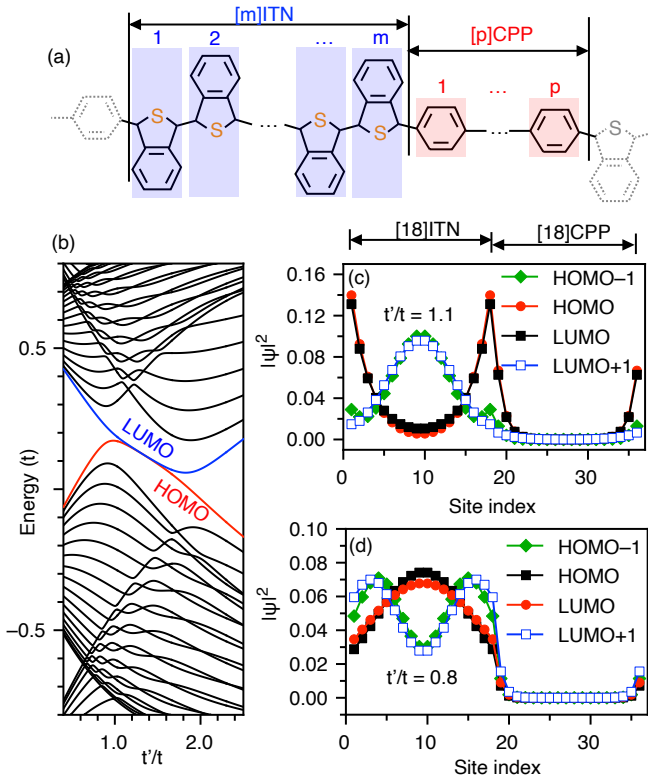


**Fig 3. 离散 Berry 相的几何意义及  $Z_2$  指数。** 实心红点展示了在计算 [6]ITN 的指标  $Z_{2,N=5}$  时累积的 Berry 相位。每个点的大小被归一化为当遍历前五个带中的  $6 \times 5 = 30$  个 MOs 时的 MO 指标。带有箭头的蓝色弧线表示 Berry 相位累积的顺序。(a) 拓扑非平凡情况下的  $Z_{2,N=5} = 1$  对应于净 Berry 相位为  $\pi$ 。平滑规范变换可以将路径变形为必须包含原点的一条线段。(b) 总 Berry 相位为 0 的平凡情形，因此该路径可以变形为一条不包括原点的线段。

带隙的聚合物，如图 2 所示。相应的紧束缚模型有额外两个参数：硫原子的局域能量和 S-C 耦合。两者分别根据传统参数化选择了  $\epsilon_S = 0.69t$  和  $t_{C-S} = 1.11t$ ，分

别是 [42]。每个硫原子在此杂化中贡献了两个  $\pi$ -电子。单位之间的耦合保持为  $t'$ ，而  $t'/t$  仍然是所呈现模型的唯一参数。如图 2(c) 所示，离散谱 [8]ITN 可以精确映射到 PITN 的连续谱。这些量子化的 MO 在跳跃元素  $t'$  调制时也经历了多次交叉，在图 2(d) 中用 (i)-(v) 标记。在这五个交叉中，只有 (i), (iii), (iv) 和 (v) 对应于  $Z_2$  拓扑转变，如图 2(e) 所示。这四个转变可以分别映射到 PITN 带隙之间的成对 (1, 2), (2, 3), (5, 6) 和 (8, 9)。(ii) 处的交叉是独特的，不对应任何拓扑转变。此交叉映射到 PITN 的第二带，当增加  $t'/t$  时，它从凸形变为凹形，如图 2(f) 所示。尽管 MO 确实发生了交叉，但在连续极限下没有能带闭合。这给出了 MO 的平凡交叉，这与图 2(e) 中 Case (ii) 对应的  $Z_2$  指数行为一致。然而，这种平凡的交叉发生在被占据的 MO 深处，因为我们系统中有十个  $\pi$  电子。HOMO-LUMO 交叉始终在拓扑上是非平凡的，如 Case (iv) 所示。

0-D 纳米环在 Wilson 多边形上定义的拓扑指标不仅是精确的，而且在数值上也是稳健的。这一点可以通过检查沿 Wilson 多边形边缘循环时累积的 Berry 相位来观察到。在图 3 中，我们说明了方程 1 中括号内复数乘积的累积总相位。对于  $Z_{2,N=5}$  和 [6]ITN 的情况，这涉及  $5 \times 6 = 30$  步骤。极角展示了相应的瞬时相位，而幅度表示步骤的指标。实际上，瞬时 Berry 相位的



**Fig 4.** 0 维复合拓扑纳米环中的拓扑边界态。(a)[ $m$ ]ITN-[ $p$ ]CPP 的结构。虚线表示由于周期边界条件导致的重复单元。(b) 修改单一参数  $t'/t$  时, [18]ITN-[18]CPP 在 HOMO-LUMO 间隙附近的光谱。(c) 当两个片段在拓扑上不同时, 在重复单元上解析的电子密度。(d) 类似于 (c), 但当两个片段在拓扑上等价时的电子密度。

具体路径不是唯一的, 并且由所选择的规范决定, 通常是由数值求解器任意指定的。如图 3(a-b) 的上部面板所示, 相位累积的具体路径通常是突然变化并且不可微分的。然而, 确实可以选择一个连续的规范并将路径平滑地变形为拓扑等价的连续曲线。这种转换可以简化相位累积的路径, 就像我们在拉紧一根绳子。当  $\mathcal{Z}_2 = 0$ , 初始和终末的 Berry 相位保持相等 (在我们的情况下, 为零), 因此路径可以转换成一条不包括原点的直线, 如图 3(b) 的下部所示。另一方面, 当  $\mathcal{Z}_2 = 1$ , 终末的 Berry 相位是  $-\pi$ , 而初始相位是 0。连接这两个点的最短路径因此必须包含原点, 如图 3(a) 所示。尽管平滑规范的选择提供了良好的概念理解, 但由于方程 1 的规范不变性, 在数值计算中它们并不是必需的。

纳米环的  $\mathcal{Z}_2$  指数可以被视为当两个拓扑不同的  $\pi$ -键系统形成复合 0-D 纳米环时, 间隙边界态的标志。这类似于更高维度中拓扑材料的体边对应关系。边界

状态可以在 [ $m$ ]ITN-[ $p$ ]CPP 中展示, 其结构如图 4 (a) 所示, 其中完整的纳米环包含  $m$  个 ITN 重复单元和  $p$  个 CPP 单元。这样的复合纳米环也可以通过前述的 Hückel 模型进行建模, 其中参数  $t'$  表示相邻重复单元之间的跃迁。图 4(b) 中的实线展示了在不同值的  $t'/t$  下 MOs 的能量。由于如图 2(e) 所示的  $\mathcal{Z}_{2,N=5}$  跃迁, 当  $t'/t > \sim 0.85$  时, [8]ITN 分子从拓扑上看是非平凡的。另一方面, 当  $t'/t < 2$  时, 如图 1(f) 所示, [8]CPP 分子在拓扑上是平凡的。事实上, 这些过渡条件对于任意的  $m$  和  $p$  值保持不变, 因为在  $k = 0$  处总是会采样 HOMO-LUMO 间隙。例如, [18]ITN-[18]CPP 的两个片段在  $0.85 \leq t'/t \leq 2$  时必须是拓扑上不同的。这表现为 HOMO 和 LUMO 的合并, 如图 4(b) 所示。当这种情况发生时, 重复单元沿电子密度在界面处急剧峰值, 如图 4(c) 所示。尽管有尖锐的峰值, 两个接口可以因为纳米环的小尺寸而耦合, 在光谱中打开一个有限的间隙。这解释了 HOMO 和 LUMO 在接近  $t'/t \approx 0.85$  和  $\approx 2.0$  时的分裂, 如图 4(b) 所示。

当两个段的拓扑指标相同时, HOMO 和 LUMO 类似于图 4(d) 所示的盒子中粒子基态。值得注意的是, 在这种情况下, LUMO+1 和 HOMO-1 状态像正常激发驻波一样表现。然而, 当系统变得拓扑非平凡时, HOMO-1 和 LUMO+1 变为典型基态的轮廓, 而 HOMO 和 LUMO 在图 4(c) 所示的界面处急剧尖峰。这表明拓扑跃迁确实是整个谱系的一个突然变化。

我们提出了光学和输运实验来检测这些 0-D 纳米环中离域  $\pi$  电子系统的拓扑转变。如上文所示的三个示例, 与拓扑转变对应的能量尺度可以被特定结构精细地调节。在 [8]CPP 的情况下, 从第一带过渡到  $\mathcal{Z}_2$  和另一个过渡到第六带都在  $t'/t = 1$  处发生, 这非常接近实际中的键强度表示。然而, 相应的 MOs 远低于 HOMO (或高于 LUMO), 因此难以通过光学测量检测到它们。尽管在  $t'/t = 2$  处的  $\mathcal{Z}_2$  转变确实跨越了 HOMO 和 LUMO, 但关键耦合  $t'$  太强, 因此实验上很难实现。与 [8]CPP 不同,  $\mathcal{Z}_2$  跃迁 (iv) 在 [8]ITN 中发生在  $t'/t \sim 0.85$  处, 这不仅位于 HOMO 和 LUMO 之间, 而且更接近实际值。同样, 在复合纳米环 [ $m$ ]ITN-[ $p$ ]CPP 中, 当  $t'/t \sim 1$  时, 合并的 HOMO-LUMO 间隙也出现。在这两种情况下, 跃迁可能在通过断裂结点 [43, 44] 中的机械拉伸诱导变形 [39] 时发生。光学光谱或弹道输运可能捕获由于这些场景中  $\mathcal{Z}_2$

跃迁而导致的 MOs 中的突然变化。事实上, 通过改变相邻重复单元之间的长程排斥力, 可以精细调节相似有机  $\pi$  电子系统中相邻重复单元间的键合强度。这可以通过结构工程 [45] 实现, 对应于合成化学前沿提供的巨大自由度。

数据可用性声明: 支持本文发现的数据是公开可用的 [46]。

致谢: 本文基于美国国家科学基金会资助的工作,

项目编号为 ECCS-2151809 (GY) 和 DMR-2440337 (GY)。本研究使用了匹兹堡超级计算中心的 Bridges-2 系统, 通过高级网络基础设施协调生态系统服务与支持 (ACCESS) 计划提供的分配 PHY230018 获得访问权限, 该计划得到了美国国家科学基金会拨款 #2138259、#2138286、#2138307、#2137603 和 #2138296 的支持。本材料部分基于美国能源部科学办公室, 基础能源科学研究下的奖励编号 DE-SC-0019017 (MK) 的工作。

- 
- [1] F. D. M. Haldane, Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly", *Physical Review Letters* **61**, 2015 (1988).
  - [2] L. Fu, C. L. Kane, and E. J. Mele, Topological Insulators in Three Dimensions, *Physical Review Letters* **98**, 106803 (2007).
  - [3] R. Roy, Topological phases and the quantum spin Hall effect in three dimensions, *Physical Review B* **79**, 195322 (2009).
  - [4] J. E. Moore and L. Balents, Topological invariants of time-reversal-invariant band structures, *Physical Review B* **75**, 121306 (2007).
  - [5] A. Kitaev, Periodic table for topological insulators and superconductors, *AIP Conference Proceedings* **1134**, 22 (2009).
  - [6] A. Y. Kitaev, Unpaired Majorana fermions in quantum wires, *Physics-Uspekhi* **44**, 131 (2001).
  - [7] X.-L. Qi, T. L. Hughes, S. Raghu, and S.-C. Zhang, Time-Reversal-Invariant Topological Superconductors and Superfluids in Two and Three Dimensions, *Physical Review Letters* **102**, 187001 (2009).
  - [8] X.-L. Qi and S.-C. Zhang, Topological insulators and superconductors, *Reviews of Modern Physics* **83**, 1057 (2011).
  - [9] S.-Y. Xu, I. Belopolski, N. Alidoust, M. Neupane, G. Bian, C. Zhang, R. Sankar, G. Chang, Z. Yuan, C.-C. Lee, S.-M. Huang, H. Zheng, J. Ma, D. S. Sanchez, B. Wang, A. Bansil, F. Chou, P. P. Shibayev, H. Lin, S. Jia, and M. Z. Hasan, Discovery of a Weyl fermion semimetal and topological Fermi arcs, *Science* **349**, 613 (2015).
  - [10] N. Armitage, E. Mele, and A. Vishwanath, Weyl and Dirac semimetals in three-dimensional solids, *Reviews of Modern Physics* **90**, 015001 (2018).
  - [11] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential, *Physical Review Letters* **49**, 405 (1982).
  - [12] R. Yu, W. Zhang, H.-J. Zhang, S.-C. Zhang, X. Dai, and Z. Fang, Quantized Anomalous Hall Effect in Magnetic Topological Insulators, *Science* **329**, 61 (2010).
  - [13] C.-Z. Chang, J. Zhang, X. Feng, J. Shen, Z. Zhang, M. Guo, K. Li, Y. Ou, P. Wei, L.-L. Wang, Z.-Q. Ji, Y. Feng, S. Ji, X. Chen, J. Jia, X. Dai, Z. Fang, S.-C. Zhang, K. He, Y. Wang, L. Lu, X.-C. Ma, and Q.-K. Xue, Experimental Observation of the Quantum Anomalous Hall Effect in a Magnetic Topological Insulator, *Science* **340**, 167 (2013).
  - [14] X. Kou, L. Pan, J. Wang, Y. Fan, E. S. Choi, W.-L. Lee, T. Nie, K. Murata, Q. Shao, and S.-C. Zhang, Metal-to-insulator switching in quantum anomalous Hall states, *Nature communications* **6**, 8474 (2015).
  - [15] E. J. Fox, I. T. Rosen, Y. Yang, G. R. Jones, R. E. Elmquist, X. Kou, L. Pan, K. L. Wang, and D. Goldhaber-Gordon, Part-per-million quantization and current-induced breakdown of the quantum anomalous Hall effect, *Physical Review B* **98**, 075145 (2018).
  - [16] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells, *Science* **314**, 1757 (2006).
  - [17] S. Murakami, N. Nagaosa, and S.-C. Zhang, Spin-Hall Insulator, *Physical Review Letters* **93**, 156804 (2004).
  - [18] C. L. Kane and E. J. Mele,  $Z_2$  Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect, *Physical Review Letters* **95**, 146802 (2005).
  - [19] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang,

- Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells, *Science* **318**, 766 (2007).
- [20] C. L. Kane and T. C. Lubensky, Topological boundary modes in isostatic lattices, *Nature Physics* **10**, 39 (2014).
- [21] Z. Wang, Y. Chong, J. D. Joannopoulos, and M. Soljai, Observation of unidirectional backscattering-immune topological electromagnetic states, *Nature* **461**, 772 (2009).
- [22] R. Shindou, R. Matsumoto, S. Murakami, and J.-i. Ohe, Topological chiral magnonic edge mode in a magnonic crystal, *Physical Review B* **87**, 174427 (2013).
- [23] A. M. Pendás, J. Contreras-García, F. Pinilla, J. D. Mella, C. Cardenas, and F. Muñoz, A chemical theory of topological insulators, *Chemical Communications* **55**, 12281 (2019).
- [24] B. Cirera, A. Sánchez-Grande, B. de la Torre, J. Santos, S. Edalatmanesh, E. Rodríguez-Sánchez, K. Lauwaet, B. Mallada, R. Zboil, R. Miranda, O. Gröning, P. Jelínek, N. Martín, and D. Ecija, Tailoring topological order and -conjugation to engineer quasi-metallic polymers, *Nature Nanotechnology* **15**, 437 (2020).
- [25] H. González-Herrero, J. I. Mendieta-Moreno, S. Edalatmanesh, J. Santos, N. Martín, D. Ecija, B. de la Torre, and P. Jelinek, Atomic Scale Control and Visualization of Topological Quantum Phase Transition in -Conjugated Polymers Driven by Their Length, *Advanced Materials* **33**, 2104495 (2021).
- [26] R. Bhattacharjee and M. Kertesz, Topological Transition in Aromatic and Quinonoid -Conjugated Polymers Induced by Static Strain, *Journal of the American Chemical Society* **146**, 26497 (2024).
- [27] J. Zak, Berry's phase for energy bands in solids, *Physical Review Letters* **62**, 2747 (1989).
- [28] M. Berry, Quantal phase factors accompanying adiabatic changes, *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* **392** (1984).
- [29] K. G. Wilson, Confinement of quarks, *Physical Review D* **10**, 2445 (1974).
- [30] R. D. King-Smith and D. Vanderbilt, Theory of polarization of crystalline solids, *Physical Review B* **47**, 1651 (1993).
- [31] X. Wang, D. Vanderbilt, J. R. Yates, and I. Souza, Fermi-surface calculation of the anomalous Hall conductivity, *Physical Review B* **76**, 195109 (2007).
- [32] J.-X. Yu, J. Zang, R. K. Lake, Y. Zhang, and G. Yin, Discrete quantum geometry and intrinsic spin Hall effect, *Physical Review B* **104**, 184408 (2021).
- [33] H. Wang, X. Tang, H. Xu, J. Li, and X. Qian, Generalized Wilson loop method for nonlinear light-matter interaction, *npj Quantum Materials* **7**, 1 (2022).
- [34] T. Fukui, Y. Hatsugai, and H. Suzuki, Chern Numbers in Discretized Brillouin Zone: Efficient Method of Computing (Spin) Hall Conductances, *Journal of the Physical Society of Japan* **74**, 1674 (2005).
- [35] I. O. Cherednikov, T. Mertens, and F. F. Van Der Veken, Loop space and evolution of the light-like wilson polygons, *International Journal of Modern Physics: Conference Series* **20**, 109 (2012).
- [36] R. Bhattacharjee, J. D. Tovar, and M. Kertesz, Quinonoid radial -conjugation, *Chemical Science* (2025).
- [37] E. R. Darzi and R. Jasti, The dynamic, size-dependent properties of [5] – [12]cycloparaphenylenes, *Chemical Society Reviews* **44**, 6401 (2015).
- [38] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, Solitons in Polyacetylene, *Physical Review Letters* **42**, 1698 (1979).
- [39] M. Kertesz, C. H. Choi, and S. Yang, Conjugated Polymers and Aromaticity, *Chemical Reviews* **105**, 3448 (2005).
- [40] L. Fu, Topological Crystalline Insulators, *Physical Review Letters* **106**, 106802 (2011).
- [41] J. L. Brédas, A. J. Heeger, and F. Wudl, Towards organic polymers with very small intrinsic band gaps. I. Electronic structure of polyisothianaphthene and derivatives, *The Journal of Chemical Physics* **85**, 4673 (1986).
- [42] Y. Carissan, D. Hagebaum-Reignier, N. Goudard, and S. Humbel, Hückel-Lewis Projection Method: A “Weights Watcher” for Mesomeric Structures, *The Journal of Physical Chemistry A* **112**, 13256 (2008).
- [43] M. A. Reed, C. Zhou, C. J. Muller, T. P. Burgin, and J. M. Tour, Conductance of a Molecular Junction, *Science* **278**, 252 (1997).
- [44] B. Xu and N. J. Tao, Measurement of Single-Molecule Resistance by Repeated Formation of Molecular Junctions, *Science* **301**, 1221 (2003).
- [45] M. Hermann, D. Wassy, and B. Esser, Conjugated Nanohoops Incorporating Donor, Acceptor, Hetero- or Polycyclic Aromatics, *Angewandte Chemie International Edition* **60**, 15743 (2021).
- [46] G. Yin, Wilson polygons and the topology of zero-dimensional systems (2025). DOI: 10.5281/zenodo.15313638.