反転対称性とWannier状態について

塩崎　謙

January 5, 2024

1　例 1

１次元系において，単位胞中心に局在した２つの局在軌道であって，両方とも反転の固有値が正である状況を考える．図１ (a)を見よ．

$$\hat{I}\,|w_{1,R}\rangle = |w_{1,-R}\rangle\,, \quad \hat{I}\,|w_{2,R}\rangle = |w_{2,-R}\rangle\,. \tag{1}$$

対応するBloch状態を

$$|\phi_{j,k}\rangle = \sum_R |w_{j,R}\rangle\, e^{ikR}, \quad j = 1, 2, \tag{2}$$

とし，

$$\Phi_k = (|\phi_{1,k}\rangle\,, |\phi_{2,k}\rangle) \tag{3}$$

と書くと，反転対称性はΦ_kに対して

$$\hat{I}\Phi_k = \Phi_{-k} I_k, \quad I_k = 1_2, \tag{4}$$

と作用する．

　反転対称性を考慮しなければ，２つの局在軌道を混成させ，$x = a, -a$に局在させることが可能である．具体的には，ユニタリ変換

$$\Phi'_k = (\phi'_{1,k}, \phi'_{2,k}) = \Phi_k U_k = \Phi_k \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} e^{ik} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{-ik} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \tag{5}$$

と再定義すると，$\phi'_{1,k}, \phi'_{2,k}$から構成されるWannier

$$|w'_{j,R}\rangle = \sum_k |\phi'_{j,k}\rangle\, e^{-ikR}, \quad j = 1, 2, \tag{6}$$

の中心位置，つまりBerry位相

$$r'_j = \langle w'_{j,R=0}|\hat{r}|w'_{j,R=0}\rangle \tag{7}$$

は

$$r'_1 = \sin^2\frac{\theta}{2}, \quad r'_2 = -\sin^2\frac{\theta}{2} \tag{8}$$

と変化する．実際，Wannier状態の変化は，

$$|w'_{1,R}\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\,|w_{1,R}\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\,|w_{2,R+1}\rangle\,, \tag{9}$$

$$|w'_{2,R}\rangle = -\sin\frac{\theta}{2}\,|w_{1,R-1}\rangle + \cos\frac{\theta}{2}\,|w_{2,R}\rangle\,, \tag{10}$$

となり，$\hat{r}\,|w_{j,R}\rangle = R\,|w_{j,R}\rangle$に注意すると，上の計算を再現する．

Φ'_kにおける反転対称性の表現行列は

$$\hat{I}\Phi_k = \hat{I}\Phi_k U_k = \Phi_{-k} I_k U_k = \Phi'_{-k} U^\dagger_{-k} I_k U_k \tag{11}$$

より，

$$I'_k = U^\dagger_{-k} I_k U_k = \begin{pmatrix} \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + e^{-2ik}\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) & i\sin(k)\sin(\theta) \\ i\sin(k)\sin(\theta) & \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + e^{2ik}\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \tag{12}$$

と与えられる．

$$W'_R = \left(|w'_{1,R}\rangle\,, |w'_{2,R}\rangle\right) \tag{13}$$

と書く． Wannier状態に対する反転対称性の作用は

$$\hat{I}W'_R = \sum_{R'} W'_{R'} \sum_k I'_k e^{ik(R-R')} \tag{14}$$

より，

$$I'_{R-R'} = \sum_k I'_k e^{ik(R-R')} \tag{15}$$

で与えられる．計算すると，

$$I'_{R-R'} = \begin{cases} \begin{pmatrix} \cos^2\frac{\theta}{2} & \\ & \cos^2\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} & (R-R'=0) \\ \begin{pmatrix} & \pm\frac{1}{2}\sin\theta \\ \pm\frac{1}{2}\sin\theta & \end{pmatrix} & (R-R'=\pm1) \\ \begin{pmatrix} \sin^2\frac{\theta}{2} & \\ & 0 \end{pmatrix} & (R-R'=2) \\ \begin{pmatrix} 0 & \\ & \sin^2\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} & (R-R'=-2) \\ O & (\text{else}) \end{cases} \tag{16}$$

となり，あるサイトRにおける単一のWannier状態で閉じないことが分かる．閉じる場合は，(5)のゲージ変換に限るのであれば，$\theta = 0$，つまり初期のWannier状態$|w_{1,R}\rangle\,, |w_{2,R}\rangle$のみに限ることも確かめられる．

- では(5)以外のゲージ変換であって，

  $$r'_1 = -r'_2 = a \neq 0 \tag{17}$$

  かつ，反転対称性がWannier状態１つか２つで閉じる，つまり， $I'_{R-R'}$の成分の絶対値が１であるものが存在するか？

2　例２

単位胞中心に局在した２つの局在軌道であって，前節とは異なり，反転の固有値がそれぞれ正と負である状況を考える．図１ (b)を見よ．

$$\hat{I}\,|w_{1,R}\rangle = |w_{1,-R}\rangle\,, \quad \hat{I}\,|w_{2,R}\rangle = -\,|w_{2,-R}\rangle\,. \tag{18}$$

対応して，

$$I_k = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix} \tag{19}$$

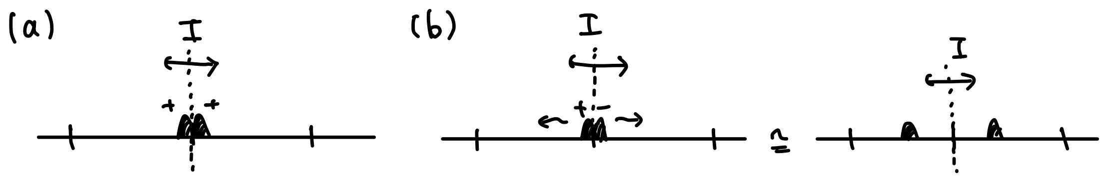

Figure 1

である．

$|w_{1,R}\rangle, |w_{2,R}\rangle$内における反転対称性の行列は$I \sim \begin{pmatrix} & 1 \\ 1 & \end{pmatrix}$とユニタリ同値であり，このような基底においてはWannier状態の局在位置を$x = a, -a$に反転対称性を保ったまま連続変形できるため，Φ_kのゲージを上手く取って，$r_1 = -r_2 = a$かつ$I_k = \begin{pmatrix} & 1 \\ 1 & \end{pmatrix}$とできると期待できる．

条件を書き出すと，ゲージ変換

$$U_k = \begin{pmatrix} u_k & -v_k^* \\ v_k & u_k^* \end{pmatrix} \tag{20}$$

が

$$I'_k = U_{-k}^\dagger I_k U_k = \begin{pmatrix} & 1 \\ 1 & \end{pmatrix} \tag{21}$$

を満たし，かつ， Berry位相

$$r'_1 = \frac{i}{2\pi} \oint_0^{2\pi} dk (u_k^* \partial u_k + v_k^* \partial v_k) \tag{22}$$

が非ゼロ．

一般解の導出は別にして，非自明解が存在することを示す．

$$U_k = \begin{pmatrix} \frac{\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)(i\cos(k) + \sin(k))}{\sqrt{2}} & \frac{\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + e^{ik} i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)}{\sqrt{2}} \\ \frac{\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - ie^{-ik}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)}{\sqrt{2}} & \frac{ie^{ik}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) - \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \tag{23}$$

とすると，条件を満たし，Berry位相は

$$r'_1 = \sin^2 \frac{\theta}{2} \tag{24}$$

となる．

- 一般論として，原子絶縁体の断熱変形が存在する場合，対応するゲージ変換$U_{\boldsymbol{k}}$が存在するか？
- Wannier状態が“空間群対称性を満たす原子絶縁体”となる条件は，空間群対称性演算子$U_g(\boldsymbol{k})$から構成されるWannier状態間の遷移行列

$$U_g(\boldsymbol{R} - \boldsymbol{R}') = \int_{T^3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} U_g(\boldsymbol{k}) e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}-\boldsymbol{R}')} \tag{25}$$

  の行列要素が，ある原子絶縁体から誘導される空間群の表現と一致する場合，と定義すれば良いか？もっと“まし”な定義はないか？