BlochハミルトニアンとBerry位相に関するノート

塩崎　謙

January 1, 2024

Abstract

波数空間への２通りのフーリエ変換とBerry位相などについてまとめる．

1　２つの基底

実空間から波数空間へのフーリエ変換は２通りの記述がある．流れと記法は，ほぼ[1]に従う．

1.1　実空間基底

実空間位置$\boldsymbol{r}$における複素フェルミオン（単に電子と書く）の生成演算子を

$$c_l^\dagger(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

と書く．lは内部自由度を表す．電子の位置$\boldsymbol{r}$は$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{R} + \Delta\boldsymbol{r}$と分離され，$\boldsymbol{R}$は単位胞の中心座標，$\Delta\boldsymbol{r}$は$\boldsymbol{R}$からの変位ベクトルである．1粒子状態を

$$|\boldsymbol{r}, l\rangle = c_l^\dagger(\boldsymbol{r})\,|\mathrm{vac}\rangle \tag{2}$$

で導入する．Gを空間群とする．要素$g \in G$はSeitz表記で

$$g = \{p_g|\boldsymbol{t}_g\}, \quad g : \boldsymbol{x} \mapsto p_g\boldsymbol{x} + \boldsymbol{t}_g \tag{3}$$

と書かれる．p_gは点群作用を表す直行行列．電子の生成演算子に対して

$$\hat{g}c_l^\dagger(\boldsymbol{r})\hat{g}^{-1} = c_{l'}^\dagger(p_g\boldsymbol{r} + \boldsymbol{t}_g)D_{l'l}^{\mathrm{int}}([g]), \tag{4}$$

$$\hat{g}\,|\boldsymbol{r}, l\rangle = |p_g\boldsymbol{r} + \boldsymbol{t}_g\rangle\, D_{l'l}^{\mathrm{int}}([g]) \tag{5}$$

と作用する．ここで$D_{l'l}^{\mathrm{int}}(g)$は内部自由度の変換性を表すユニタリ行列であり，$g \in G$の点群部分のみに依存する．行列$D_{l'l}^{\mathrm{int}}([g])$は点群の何らかの射影表現である．

$$D^{\mathrm{int}}([g])D^{\mathrm{int}}([h]) = z_{[g],[h]}^{\mathrm{int}}D^{\mathrm{int}}([gh]), \quad z_{[g],[h]}^{\mathrm{int}} \in U(1). \tag{6}$$

1粒子状態$\{|\boldsymbol{r}, l\rangle\}_{\boldsymbol{r},l}$が張るHilbert空間において，２つの位置演算子$\hat{\boldsymbol{r}}, \hat{\boldsymbol{R}}, \Delta\hat{\boldsymbol{r}} = \hat{\boldsymbol{r}} - \hat{\boldsymbol{R}}$を

$$\hat{\boldsymbol{r}}\,|\boldsymbol{r}, l\rangle := \boldsymbol{r}\,|\boldsymbol{r}, l\rangle\,, \tag{7}$$

$$\hat{\boldsymbol{R}}\,|\boldsymbol{R} + \Delta\boldsymbol{r}, l\rangle := \boldsymbol{R}\,|\boldsymbol{R} + \Delta\boldsymbol{r}, l\rangle\,, \tag{8}$$

$$\Delta\hat{\boldsymbol{r}}\,|\boldsymbol{R} + \Delta\boldsymbol{r}, l\rangle := \Delta\boldsymbol{r}\,|\boldsymbol{R} + \Delta\boldsymbol{r}, l\rangle \tag{9}$$

で定義する．ここで，$\hat{\boldsymbol{R}}, \Delta\hat{\boldsymbol{r}}$は位置$\boldsymbol{r}$の電子が属する単位胞$\boldsymbol{R}$の選び方に依存することに注意する．また，格子ベクトル$\boldsymbol{a}$の並進$\{1|\boldsymbol{a}\} \in G$に対して，並進演算子を特に

$$\hat{T}_{\boldsymbol{a}}\,|\boldsymbol{r}, l\rangle = |\boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}, l\rangle \tag{10}$$

と書く．

1.2　波数空間基底１：BZで周期的でない基底

１粒子状態における基底として，

$$|\boldsymbol{k},\Delta\boldsymbol{r},l\rangle := \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{R}}|\boldsymbol{R}+\Delta\boldsymbol{r},l\rangle e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}+\Delta\boldsymbol{r})} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{R}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}}|\boldsymbol{R}+\Delta\boldsymbol{r},l\rangle = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}}|\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0},\Delta\boldsymbol{r},l\rangle \tag{11}$$

を導入する．ここでNは単位胞の数．$\boldsymbol{k}$は並進演算子の固有値である．

$$\hat{T}_{\boldsymbol{a}}|\boldsymbol{k},\Delta\boldsymbol{r},l\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{R}}|\boldsymbol{R}+\boldsymbol{a}+\Delta\boldsymbol{r},l\rangle e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}+\Delta\boldsymbol{r})} \tag{12}$$

$$= |\boldsymbol{k},\Delta\boldsymbol{r},l\rangle e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}}. \tag{13}$$

波数の並進演算子は

$$e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\hat{\boldsymbol{r}}}|\boldsymbol{k},\Delta\boldsymbol{r},l\rangle = |\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}',\Delta\boldsymbol{r},l\rangle \tag{14}$$

で与えられる．特に，$\boldsymbol{G}$を逆格子ベクトルとし，逆格子ベクトルの並進は

$$e^{i\boldsymbol{G}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}}|\boldsymbol{k},\Delta\boldsymbol{r},l\rangle = |\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G},\Delta\boldsymbol{r},l\rangle = |\boldsymbol{k},\Delta\boldsymbol{r},l\rangle e^{i\boldsymbol{G}\cdot\Delta\boldsymbol{r}} \tag{15}$$

となる．対称性作用と同じ形式でこのように，基底$|\boldsymbol{k},\Delta\boldsymbol{r},l\rangle$はBZで周期的ではない．空間群作用は

$$\hat{g}|\boldsymbol{k},\Delta\boldsymbol{r},l\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{R}}|p_g\boldsymbol{R}+p_g\Delta\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t}_g,l'\rangle D^{\mathrm{int}}_{l'l}([g])e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}+\Delta\boldsymbol{r})} \tag{16}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{R}}|\boldsymbol{R}+p_g\Delta\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t}_g,l'\rangle D^{\mathrm{int}}_{l'l}([g])e^{ip_g\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}+p_g\Delta\boldsymbol{r})} \tag{17}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{R}}|\boldsymbol{R}+\Delta\boldsymbol{r}',l'\rangle D^{\mathrm{SL}}_{\Delta\boldsymbol{r}',\Delta\boldsymbol{r}}([g])D^{\mathrm{int}}_{l'l}([g])e^{ip_g\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}+\Delta\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{t}_g)} \tag{18}$$

$$= |p_g\boldsymbol{k},\Delta\boldsymbol{r},l\rangle D^{\mathrm{SL}}_{\Delta\boldsymbol{r}',\Delta\boldsymbol{r}}([g])D^{\mathrm{int}}_{l'l}([g])e^{-ip_g\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_g} \tag{19}$$

となる．ここで$\Delta\boldsymbol{r}$の足を持つ置換行列$D^{\mathrm{SL}}_{\Delta\boldsymbol{r}',\Delta\boldsymbol{r}}([g])$を

$$D^{\mathrm{SL}}_{\Delta\boldsymbol{r}',\Delta\boldsymbol{r}}([g]) = \begin{cases} 1 & (\Delta\boldsymbol{r}' = p_g\Delta\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t}_g \text{ modulo lattice vectors}) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \tag{20}$$

によって導入した．$D^{\mathrm{SL}}([g])$は置換行列なので乗数系は自明

$$D^{\mathrm{SL}}([g])D^{\mathrm{SL}}([h]) = D^{\mathrm{SL}}([gh]) \tag{21}$$

に注意．単位胞内の自由度をまとめて$\alpha=(\Delta\boldsymbol{r},l)$と書き，$D([g]) = D^{\mathrm{SL}}([g])\otimes D^{\mathrm{int}}([g])$を導入する．$D([g]) = D_{\alpha\beta}([g])$は$\boldsymbol{k}$に依存しない．

$$U^g(\boldsymbol{k}) = e^{-ip_g\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_g}D([g]) \tag{22}$$

と書くと

$$\hat{g}|\boldsymbol{k},\alpha\rangle = |p_g\boldsymbol{k},\beta\rangle U^g_{\beta\alpha}(\boldsymbol{k}) \tag{23}$$

と書ける．行列$U^g(\boldsymbol{k})$間の”乗数系”は

$$U^g(p_h\boldsymbol{k})U^h(\boldsymbol{k}) = e^{-ip_gp_h\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_g}D^{\mathrm{SL}}([g])\otimes D^{\mathrm{int}}([g])\times e^{-ip_h\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_h}D^{\mathrm{SL}}([h])\otimes D^{\mathrm{int}}([h]) \tag{24}$$

$$= z^{\mathrm{int}}_{g,h}e^{-ip_{gh}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{t}_g+p_g\boldsymbol{t}_h)}D^{\mathrm{SL}}([gh])\otimes D^{\mathrm{int}}(gh) \tag{25}$$

$$= z^{\mathrm{int}}_{g,h}e^{-ip_{gh}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{t}_g+p_g\boldsymbol{t}_h-\boldsymbol{t}_{gh})}U^{gh}(\boldsymbol{k}) \tag{26}$$

となる．空間群の定義より，$\boldsymbol{t}_g+p_g\boldsymbol{t}_h-\boldsymbol{t}_{gh}$はBravais格子の元である．よって$U(1)$位相$e^{-ip_{gh}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{t}_g+p_g\boldsymbol{t}_h-\boldsymbol{t}_{gh})}$はBZで周期的．逆格子ベクトルの並進も

$$|\boldsymbol{k},\alpha\rangle = |\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G},\beta\rangle V_{\beta\alpha}(\boldsymbol{G}) \tag{27}$$

と書こう．ここで

$$V_{\alpha'\alpha}(\boldsymbol{k}) = V_{\Delta\boldsymbol{r}'l',\Delta\boldsymbol{r},l}(\boldsymbol{k}) := e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\Delta\boldsymbol{r}}\delta_{\alpha'\alpha} = e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\Delta\boldsymbol{r}}\delta_{\Delta\boldsymbol{r}',\Delta\boldsymbol{r}}\delta_{l'l} \tag{28}$$

を導入した．

$$V(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}') = V(\boldsymbol{k})V(\boldsymbol{k}'), \quad V(-\boldsymbol{k}) = V(\boldsymbol{k})^{-1} \tag{29}$$

に注意．後の計算で$V(\boldsymbol{G})$と$D([g])$の関係が必要になるのでここで計算しておこう．

$$\hat{g}\,|\boldsymbol{k},\alpha\rangle = \hat{g}\,|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G},\beta\rangle V_{\beta\alpha}(\boldsymbol{G}) = |p_g(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}),\gamma\rangle U^g_{\gamma\beta}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})V_{\beta\alpha}(\boldsymbol{G}) \tag{30}$$

一方で，

$$\hat{g}\,|\boldsymbol{k},\alpha\rangle = |p_g\boldsymbol{k},\beta\rangle U^g_{\beta\alpha}(\boldsymbol{k}) = |p_g\boldsymbol{k}+p_g\boldsymbol{G},\gamma\rangle V_{\gamma\beta}(p_g\boldsymbol{G})U^g_{\beta\alpha}(\boldsymbol{k}) \tag{31}$$

よって，

$$U^g(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})V(\boldsymbol{G}) = V(p_g\boldsymbol{G})U^g(\boldsymbol{k}). \tag{32}$$

また，$U^g(\boldsymbol{k}) = e^{-ip_g\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_g}D([g])$より

$$e^{-ip_g\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{t}_g}D([g])V(\boldsymbol{G}) = V(p_g\boldsymbol{G})D([g]) \tag{33}$$

にも注意． $p_g\boldsymbol{G}$は逆格子ベクトルだから，関係式は$g\in G$の点群部分のみで決まり，

$$e^{-ip_g\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{t}_{[g]}}D([g])V(\boldsymbol{G}) = V(p_g\boldsymbol{G})D([g]) \tag{34}$$

と書いて良い．

1.3 波数空間基底２：BZで周期的な基底

１粒子状態における基底として，BZで周期的な

$$|\boldsymbol{k},\Delta\boldsymbol{r},l) := \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{R}}|\boldsymbol{R}+\Delta\boldsymbol{r},l\rangle e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{R}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{R}}}|\boldsymbol{R}+\Delta\boldsymbol{r},l\rangle = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{R}}}|\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0},\Delta\boldsymbol{r},l\rangle, \tag{35}$$

$$|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G},\Delta\boldsymbol{r},l) = |\boldsymbol{k},\Delta\boldsymbol{r},l) \tag{36}$$

を導入することもできる．単位胞の中心の選び方に依存することに注意．基底$|\boldsymbol{k},\Delta\boldsymbol{r},l\rangle$との関係は

$$|\boldsymbol{k},\Delta\boldsymbol{r},l) = e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\Delta\hat{\boldsymbol{r}}}\,|\boldsymbol{k},\Delta\boldsymbol{r},l\rangle = |\boldsymbol{k},\Delta\boldsymbol{r},l\rangle\,e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\Delta\boldsymbol{r}}, \tag{37}$$

つまり

$$|\boldsymbol{k},\alpha) = |\boldsymbol{k},\beta\rangle V_{\beta\alpha}(\boldsymbol{k}) \tag{38}$$

である．基底$|\boldsymbol{k},\alpha)$への空間群作用は

$$\hat{g}|\boldsymbol{k},\alpha) = |p_g\boldsymbol{k},\beta)[U^g_{\boldsymbol{k}}]_{\beta\alpha}, \quad U^g_{\boldsymbol{k}} = V(p_g\boldsymbol{k})^{-1}U^g(\boldsymbol{k})V(\boldsymbol{k}) \tag{39}$$

と書ける．ここで$U^g_{\boldsymbol{k}}$の具体形は

$$[U^g_{\boldsymbol{k}}]_{\Delta\boldsymbol{r}'l',\Delta\boldsymbol{r}l} = e^{-ip_g\boldsymbol{k}\cdot(-\Delta\boldsymbol{r}'+\boldsymbol{t}_g+p_g\Delta\boldsymbol{r})}D_{\Delta\boldsymbol{r}'l',\Delta\boldsymbol{r}l}(g) \tag{40}$$

である． $D^{\mathrm{SL}}(g)$の定義より，$[U_{\boldsymbol{k}}^g]_{\Delta\boldsymbol{r}'l',\Delta\boldsymbol{r}l}$がゼロでない足$\Delta\boldsymbol{r}', \Delta\boldsymbol{r}$については

$$\Delta\boldsymbol{r}' + \boldsymbol{t}_g - p_g\Delta\boldsymbol{r} \in \text{格子ベクトル} \tag{41}$$

に注意． $U_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}} = U_{\boldsymbol{k}}$が確認できる．

$U_{\boldsymbol{k}}$の”乗数系”は

$$\begin{aligned} U_{p_h\boldsymbol{k}}^g U_{\boldsymbol{k}}^h &= V(p_g p_h\boldsymbol{k})^{-1} U^g(p_h\boldsymbol{k}) V(p_h\boldsymbol{k}) \times V(p_h\boldsymbol{k})^{-1} U^h(\boldsymbol{k}) V(\boldsymbol{k}) &(42)\\ &= V(p_g p_h\boldsymbol{k})^{-1} U^g(p_h\boldsymbol{k}) U^h(\boldsymbol{k}) V(\boldsymbol{k}) &(43)\\ &= V(p_g p_h\boldsymbol{k})^{-1} \times z_{g,h}^{\mathrm{int}} e^{-ip_{gh}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{t}_g + p_g\boldsymbol{t}_h - \boldsymbol{t}_{gh})} U^{gh}(\boldsymbol{k}) \times V(\boldsymbol{k}) &(44)\\ &= z_{g,h}^{\mathrm{int}} e^{-ip_{gh}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{t}_g + p_g\boldsymbol{t}_h - \boldsymbol{t}_{gh})} U_{\boldsymbol{k}}^{gh} &(45) \end{aligned}$$

となり$U^g(\boldsymbol{k})$と共通である．これは，乗数系は空間群の要素間の関係式

$$\{p_g|\boldsymbol{t}_g\}\{p_h|\boldsymbol{t}_h\} = \{1|\boldsymbol{t}_g + p_g\boldsymbol{t}_h - \boldsymbol{t}_{gh}\}\{p_{gh}|\boldsymbol{t}_{gh}\} \tag{46}$$

のみから決まるからである．

以下ではBZで周期的でない基底$|\boldsymbol{k},\alpha\rangle$における行列要素を$A(\boldsymbol{k})$と書き，BZで周期的な基底$|\boldsymbol{k},\alpha)$における行列要素を$A_{\boldsymbol{k}}$と書くことにする．

- 基底$|\boldsymbol{k},\alpha\rangle$，$|\boldsymbol{k},\alpha)$の選び方は”ゲージ自由度”ではない．自由度の局在位置が異なるので，それぞれ異なる系を記述している．物理量など計算する場合は前者の基底$|\boldsymbol{k},\alpha\rangle$を用いるべきである．

1.4 1粒子ハミルトニアン

フェルミオン・フォック空間における1体のハミルトニアン

$$\hat{H} = \sum_{\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',l,l'} c_l^\dagger(\boldsymbol{r}) H_{ll'}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') c_{l'}(\boldsymbol{r}') \tag{47}$$

を考える． 1粒子状態のみを扱うのであれば1粒子状態$|\boldsymbol{r},l\rangle$で張られるHilbert空間におけるハミルトニアン

$$\hat{H}^{(1)} = \sum_{\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',l,l'} |\boldsymbol{r},l\rangle H_{ll'}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \langle\boldsymbol{r}',l'| \tag{48}$$

を考えれば十分．格子ベクトルの並進対称性

$$H(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a},\boldsymbol{r}'+\boldsymbol{a}) = H(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \tag{49}$$

より

$$H(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = H(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{50}$$

と与えられる．

1粒子状態におけるハミルトニアン$H^{(1)}$は格子ベクトルの並進演算子$\hat{T}_{\boldsymbol{a}}$と同時対角化される．

$$\hat{H}^{(1)}|\psi_\mu(\boldsymbol{k})\rangle = \epsilon_\mu(\boldsymbol{k})|\psi_\mu(\boldsymbol{k})\rangle, \quad \hat{T}_{\boldsymbol{a}}|\psi_\mu(\boldsymbol{k})\rangle = e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}}|\psi_\mu(\boldsymbol{k})\rangle. \tag{51}$$

BZにおける周期性

$$|\psi_\mu(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})\rangle = |\psi_\mu(\boldsymbol{k})\rangle \tag{52}$$

を要請する．[1]

Bloch状態$|\psi_\mu(\boldsymbol{k})\rangle$は基底$|\boldsymbol{k},\alpha\rangle$，あるいは$|\boldsymbol{k},\alpha)$で展開できる．基底$|\boldsymbol{k},\alpha\rangle$に移ると

$$\hat{H}^{(1)} = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\sum_{\boldsymbol{R},\boldsymbol{R}',\Delta\boldsymbol{r},\Delta\boldsymbol{r}',l,l'} |\boldsymbol{k},\Delta\boldsymbol{r},l\rangle\, e^{-i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}+\Delta\boldsymbol{r})} H_{ll'}(\boldsymbol{R}+\Delta\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}'-\Delta\boldsymbol{r}')\,\langle\boldsymbol{k}',\Delta\boldsymbol{r}',l'|\, e^{i\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{R}'+\Delta\boldsymbol{r}')} \tag{53}$$

$$= \sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{R}',\Delta\boldsymbol{r},\Delta\boldsymbol{r}',l,l'} |\boldsymbol{k},\Delta\boldsymbol{r},l\rangle\, H_{ll'}(\boldsymbol{R}-\boldsymbol{R}'+\Delta\boldsymbol{r}-\Delta\boldsymbol{r}')\,\langle\boldsymbol{k},\Delta\boldsymbol{r}',l'|\, e^{-i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}+\Delta\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}'-\Delta\boldsymbol{r}')} \tag{54}$$

$$= \sum_{\boldsymbol{k},\alpha\alpha'} |\boldsymbol{k},\alpha\rangle\, H_{\alpha\alpha'}(\boldsymbol{k})\,\langle\boldsymbol{k},\alpha'| \tag{55}$$

となる．波数$\boldsymbol{k}$毎のセクターに分離する．ただし，

$$H_{\alpha\alpha'}(\boldsymbol{k}) = H_{\Delta\boldsymbol{r}l,\Delta\boldsymbol{r}'l'}(\boldsymbol{k}) := \sum_{\boldsymbol{R}} H_{ll'}(\boldsymbol{R}+\Delta\boldsymbol{r}-\Delta\boldsymbol{r}')e^{-i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}+\Delta\boldsymbol{r}-\Delta\boldsymbol{r}')} \tag{56}$$

と置いた．

$$V(\boldsymbol{G})H(\boldsymbol{k})V(\boldsymbol{G})^\dagger = H(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}) \tag{57}$$

に注意．一方，基底$|\boldsymbol{k},\alpha)$に移ると

$$\hat{H}^{(1)} = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\sum_{\boldsymbol{R},\boldsymbol{R}',\Delta\boldsymbol{r},\Delta\boldsymbol{r}',l,l'} |\boldsymbol{k},\Delta\boldsymbol{r},l)e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} H_{ll'}(\boldsymbol{R}+\Delta\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}'-\Delta\boldsymbol{r}')(\boldsymbol{k}',\Delta\boldsymbol{r}',l'|e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{R}'} \tag{58}$$

$$= \sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\boldsymbol{R}-\boldsymbol{R}',\Delta\boldsymbol{r},\Delta\boldsymbol{r}',l,l'} |\boldsymbol{k},\Delta\boldsymbol{r},l)H_{ll'}(\boldsymbol{R}-\boldsymbol{R}'+\Delta\boldsymbol{r}-\Delta\boldsymbol{r}')(\boldsymbol{k},\Delta\boldsymbol{r}',l'|e^{-i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}+\Delta\boldsymbol{r})} \tag{59}$$

$$= \sum_{\boldsymbol{k},\alpha\alpha'} |\boldsymbol{k},\alpha)[H_{\boldsymbol{k}}]_{\alpha\alpha'}(\boldsymbol{k},\alpha'| \tag{60}$$

となる．ただし，

$$[H_{\boldsymbol{k}}]_{\alpha\alpha'} = [H_{\boldsymbol{k}}]_{\Delta\boldsymbol{r}l,\Delta\boldsymbol{r}'l'} := \sum_{\boldsymbol{R}} H_{ll'}(\boldsymbol{R}+\Delta\boldsymbol{r}-\Delta\boldsymbol{r}')e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} \tag{61}$$

と置いた．周期性

$$H_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}} = H_{\boldsymbol{k}} \tag{62}$$

に注意． $H(\boldsymbol{k})$と$H_{\boldsymbol{k}}$の関係は

$$V(\boldsymbol{k})H_{\boldsymbol{k}}V(\boldsymbol{k})^\dagger = H(\boldsymbol{k}) \tag{63}$$

で与えらえる．行列$H(\boldsymbol{k})$からBloch状態$|\psi_\mu(\boldsymbol{k})\rangle$を得るには$H(\boldsymbol{k})$を対角化する．

$$H(\boldsymbol{k})\boldsymbol{u}_\mu(\boldsymbol{k}) = \epsilon_\mu(\boldsymbol{k})\boldsymbol{u}_\mu(\boldsymbol{k}), \quad |\psi_\mu(\boldsymbol{k})\rangle = \sum_\alpha [\boldsymbol{u}_\mu(\boldsymbol{k})]_\alpha\,|\boldsymbol{k},\alpha\rangle\,. \tag{64}$$

ここで

$$\boldsymbol{u}_\mu(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}) = V(\boldsymbol{G})\boldsymbol{u}_\mu(\boldsymbol{k}), \quad \boldsymbol{u}_\mu(\boldsymbol{k}) = V(\boldsymbol{G})^\dagger\boldsymbol{u}_\mu(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}) \tag{65}$$

[1] 1粒子状態Hilbert空間の次元は単位胞のNと内部自由度の数で固定されているため周期的とするのが自然． $|\psi_\mu(\boldsymbol{k})\rangle$は大域的に取れない場合もあるが，その場合はパッチを導入する．あるいは，ゲージ不変な量だけに興味があるので，そもそもBloch状態のゲージ不定性に興味がない．一般論として，数値計算においては， (1)離散的な$\boldsymbol{k}$に対して計算可能で，かつ(2)Bloch状態のゲージに依存しない定式化をすべきである．

に注意．同様に，周期的な基底で展開すると，

$$H_{\boldsymbol{k}} \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}\mu} = \epsilon_\mu(\boldsymbol{k}) \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}\mu}, \quad |\psi_\mu(\boldsymbol{k})\rangle = \sum_\alpha [\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}\mu}]_\alpha |\boldsymbol{k}, \alpha) \tag{66}$$

である．周期性

$$\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}\mu} = \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}\mu} \tag{67}$$

に注意．両者の関係は

$$\boldsymbol{u}_\mu(\boldsymbol{k}) = V(\boldsymbol{k}) \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}\mu} \tag{68}$$

で与えられる． $H(\boldsymbol{k}), H_{\boldsymbol{k}}$をBlochハミルトニアンと呼ぶ．

異なる波数点におけるBloch状態を比較したいが，波数が異なる２つのBloch状態に対して

$$\langle \psi_\mu(\boldsymbol{k}) | \psi_\nu(\boldsymbol{k}') \rangle = 0, \quad \boldsymbol{k} \neq \boldsymbol{k}' \tag{69}$$

のためBloch状態そのものは比較できない．上で導入したベクトル$\boldsymbol{u}_\mu(\boldsymbol{k}), \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}\mu}$を用いれば意味のある量が定義できる．ブラケット記号を使うために，１粒子状態のHilbert空間における状態$|u_\mu(\boldsymbol{k})\rangle, |u_{\boldsymbol{k}\mu})$を以下のように導入しよう． Bloch状態から平面波成分$\sim e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$を消去した

$$|u_\mu(\boldsymbol{k})\rangle := e^{-i\boldsymbol{k}\hat{\boldsymbol{r}}} |\psi_\mu(\boldsymbol{k})\rangle = \sum_\alpha [\boldsymbol{u}_\mu(\boldsymbol{k})]_\alpha |\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}, \alpha\rangle, \quad |u_\mu(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})\rangle = e^{-i\boldsymbol{G}\cdot\Delta\hat{\boldsymbol{r}}} |u_\mu(\boldsymbol{k})\rangle, \tag{70}$$

$$|u_{\boldsymbol{k}\mu}\rangle := e^{-i\boldsymbol{k}\hat{\boldsymbol{R}}} |\psi_\mu(\boldsymbol{k})\rangle = \sum_\alpha [\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}\mu}]_\alpha |\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}, \alpha) = \sum_\alpha [\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}\mu}]_\alpha |\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}, \alpha\rangle, \quad |u_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}\mu}\rangle = |u_{\boldsymbol{k}\mu}\rangle \tag{71}$$

を定義する． $|\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}, \alpha\rangle = |\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}, \alpha)$を用いた．両者の関係は

$$|u_{\boldsymbol{k}\mu}\rangle = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\Delta\hat{\boldsymbol{r}}} |u_\mu(\boldsymbol{k})\rangle. \tag{72}$$

で与えらえる．状態$|u_\mu(\boldsymbol{k})\rangle, |u_{\boldsymbol{k}\mu}\rangle$の波数はゼロである．それぞれ１粒子ハミルトニアン

$$\hat{H}(\boldsymbol{k}) := e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}} \hat{H}^{(1)} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}}, \tag{73}$$

$$\hat{H}_{\boldsymbol{k}} := e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{R}}} \hat{H}^{(1)} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{R}}} \tag{74}$$

の波数ゼロの固有状態

$$\hat{H}(\boldsymbol{k}) |u_\mu(\boldsymbol{k})\rangle = \epsilon_\mu(\boldsymbol{k}) |u_\mu(\boldsymbol{k})\rangle, \quad \hat{T}_{\boldsymbol{a}} |u_\mu(\boldsymbol{k})\rangle = |u_\mu(\boldsymbol{k})\rangle, \tag{75}$$

$$\hat{H}_{\boldsymbol{k}} |u_{\boldsymbol{k}\mu}\rangle = \epsilon_\mu(\boldsymbol{k}) |u_{\boldsymbol{k}\mu}\rangle, \quad \hat{T}_{\boldsymbol{a}} |u_{\boldsymbol{k}\mu}\rangle = |u_{\boldsymbol{k}\mu}\rangle. \tag{76}$$

とも定義できる．

1.5 Blochハミルトニアンの対称性

空間群対称性がBlochハミルトニアン$H(\boldsymbol{k}), H_{\boldsymbol{k}}$にどのような制限を課すか見る．

$$H_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}) = \langle \boldsymbol{k}, \alpha | \hat{H}^{(1)} | \boldsymbol{k}, \beta \rangle = \langle \boldsymbol{k}, \alpha | \hat{g}^{-1} \hat{H}^{(1)} \hat{g} | \boldsymbol{k}, \beta \rangle \tag{77}$$

$$= [U^g_{\alpha'\alpha}(\boldsymbol{k})]^* \langle p_g\boldsymbol{k}, \alpha' | \hat{H}^{(1)} | p_g\boldsymbol{k}, \beta' \rangle U^g_{\beta'\beta}(\boldsymbol{k}) = [U^g_{\alpha'\alpha}(\boldsymbol{k})]^* H_{\alpha'\beta'}(p_g\boldsymbol{k}) U^g_{\beta'\beta}(\boldsymbol{k}) \tag{78}$$

より

$$U^g(\boldsymbol{k}) H(\boldsymbol{k}) [U^g(\boldsymbol{k})]^\dagger = H(p_g\boldsymbol{k}). \tag{79}$$

$U^g(\boldsymbol{k})=e^{-ip_g\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_g}D([g])$より

$$D([g])H(\boldsymbol{k})D([g])^\dagger=H(p_g\boldsymbol{k}) \tag{80}$$

と書くこともできる.

同様に,

$$[H_{\boldsymbol{k}}]_{\alpha\beta}=(\boldsymbol{k},\alpha|\hat{H}^{(1)}|\boldsymbol{k},\beta)=(\boldsymbol{k},\alpha|\hat{g}^{-1}\hat{H}^{(1)}\hat{g}|\boldsymbol{k},\beta) \tag{81}$$

$$=[U^g_{\boldsymbol{k}}]^*_{\alpha'\alpha}(p_g\boldsymbol{k},\alpha'|\hat{H}^{(1)}|p_g\boldsymbol{k},\beta')[U^g_{\boldsymbol{k}}]_{\beta'\beta}=[U^g_{\boldsymbol{k}}]^*_{\alpha'\alpha}[H_{p_g\boldsymbol{k}}]_{\alpha'\beta'}[U^g_{\boldsymbol{k}}]_{\beta'\beta} \tag{82}$$

より

$$U^g_{\boldsymbol{k}}H_{\boldsymbol{k}}[U^g_{\boldsymbol{k}}]^\dagger=H_{p_g\boldsymbol{k}}. \tag{83}$$

Blochハミルトニアン$H_{\boldsymbol{k}}$は小群$G_{\boldsymbol{k}}=\{g\in G|p_g\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}\text{ for some }\boldsymbol{G}\}$の元と可換である.

$$U^g_{\boldsymbol{k}}H_{\boldsymbol{k}}[U^g_{\boldsymbol{k}}]^\dagger=H_{\boldsymbol{k}},\quad g\in G_{\boldsymbol{k}}. \tag{84}$$

乗数系は(45)より$p_g\boldsymbol{k}\equiv\boldsymbol{k},g\in G_{\boldsymbol{k}}$, $\boldsymbol{t}_g+p_g\boldsymbol{t}_h-\boldsymbol{t}_{gh}\in BL$に注意すると

$$U^g_{\boldsymbol{k}}U^h_{\boldsymbol{k}}=z^{\text{int}}_{g,h}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{t}_g+p_g\boldsymbol{t}_h-\boldsymbol{t}_{gh})}U^{gh}_{\boldsymbol{k}},\quad g,h\in G_{\boldsymbol{k}} \tag{85}$$

で与えられる.

これをBZで周期的でない基底で表現するには, $p_g\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}$として, $U^g_{\boldsymbol{k}}=V(p_g\boldsymbol{k})^{-1}U^g(\boldsymbol{k})V(\boldsymbol{k})=V(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})^{-1}U^g(\boldsymbol{k})V(\boldsymbol{k})$, $H_{\boldsymbol{k}}=V(\boldsymbol{k})^{-1}H(\boldsymbol{k})V(\boldsymbol{k})$より

$$V(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})^{-1}U^g(\boldsymbol{k})H(\boldsymbol{k})[U^g(\boldsymbol{k})]^{-1}V(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})=V(\boldsymbol{k})^{-1}H(\boldsymbol{k})V(\boldsymbol{k}),\quad g\in G_{\boldsymbol{k}}. \tag{86}$$

$V(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})=V(\boldsymbol{G})V(\boldsymbol{k}),V(\boldsymbol{k})^{-1}=V(-\boldsymbol{k})$に注意すると

$$V(\boldsymbol{k}-p_g\boldsymbol{k})U^g(\boldsymbol{k})H(\boldsymbol{k})[V(\boldsymbol{k}-p_g\boldsymbol{k})U^g(\boldsymbol{k})]^{-1}=H(\boldsymbol{k}),\quad g\in G_{\boldsymbol{k}} \tag{87}$$

となる. 行列$V(\boldsymbol{k}-p_g\boldsymbol{k})U^g(\boldsymbol{k})$が従う乗数系は, $U^g(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})V(\boldsymbol{G})=V(p_g\boldsymbol{G})U^g(\boldsymbol{k})$に注意すると$U^g_{\boldsymbol{k}}$と同一の形

$$V(\boldsymbol{k}-p_g\boldsymbol{k})U^g(\boldsymbol{k})V(\boldsymbol{k}-p_h\boldsymbol{k})U^h(\boldsymbol{k})=V(\boldsymbol{k}-p_g\boldsymbol{k})V(p_g(\boldsymbol{k}-p_h\boldsymbol{k}))U^g(\boldsymbol{k}-(\boldsymbol{k}-p_h\boldsymbol{k}))U^h(\boldsymbol{k}) \tag{88}$$

$$=V(\boldsymbol{k}-p_{gh}\boldsymbol{k})U^g(p_h\boldsymbol{k})U^h(\boldsymbol{k}) \tag{89}$$

$$=V(\boldsymbol{k}-p_{gh}\boldsymbol{k})z^{\text{int}}_{g,h}e^{-ip_{gh}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{t}_g+p_g\boldsymbol{t}_h-\boldsymbol{t}_{gh})}U^{gh}(\boldsymbol{k}) \tag{90}$$

$$=z^{\text{int}}_{g,h}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{t}_g+p_g\boldsymbol{t}_h-\boldsymbol{t}_{gh})}V(\boldsymbol{k}-p_{gh}\boldsymbol{k})U^{gh}(\boldsymbol{k}) \tag{91}$$

となる.

2 Berry位相, Wannier軌道, ねじれ演算子

本節では主に

$$|R,\Delta\boldsymbol{r},l\rangle,\quad R=1,\dots,N \tag{92}$$

で張られる1粒子Hilbert空間を考える.

2.1 Berry位相

$|u(k)\rangle, |u_k)$は両者とも波数ゼロの部分Hilbert空間のベクトルだったことを思い出そう．異なるkにおける内積 $\langle u(k_2)|u(k_1)\rangle, (u_{k_1}|u_{k_2})$などは有限の値を持つ．波数を

$$k_j = \frac{2\pi j}{aN}, \quad j = 0, \ldots, N \tag{93}$$

と書く．$k_N = \frac{2\pi}{a} = G$に注意．$|u_k\rangle$で定義されるBerry位相を

$$e^{i\gamma_{\mathrm{P}}} := \prod_{j=0}^{N-1} \langle u_{k_{j+1}}|u_{k_j}\rangle = \prod_{j=0}^{N-1} \boldsymbol{u}_{k_{j+1}}^{\dagger} \boldsymbol{u}_{k_j} \tag{94}$$

と定義する．$|u_k\rangle$の周期性$|u_{k+G}\rangle = |u_k\rangle$に注意すると，$e^{i\gamma}$は$|u_k\rangle$の$U(1)$位相の不定に依存しない，”ゲージ不変”な量である．$\boldsymbol{u}_k$が滑らかに定義されているときは

$$e^{i\gamma_P} = \prod_{j=0}^{N-1} (1 - \frac{2\pi}{L} \boldsymbol{u}_k \partial_k \boldsymbol{u}_k + O(N^{-2})) \tag{95}$$

$$= \prod_{j=0}^{N-1} e^{-\frac{2\pi}{L} \boldsymbol{u}_k \partial_k \boldsymbol{u}_k + O(N^{-2})} \tag{96}$$

$$\underset{N\to\infty}{\longrightarrow} e^{-\oint_0^{2\pi} \boldsymbol{u}_k \partial_k \boldsymbol{u}_k} \tag{97}$$

とBerry接続の積分で書ける．

一方で，状態$|u(k)\rangle$に対するある種のねじれ境界条件

$$|u(k+G)\rangle = e^{-iG\Delta\hat{r}} |u(k)\rangle \tag{98}$$

において，$e^{-iG\Delta\hat{r}}$は波数$k=0$で閉じている．境界条件(98)のもとでゲージ不変なBerry位相

$$e^{i\gamma_{\mathrm{NP}}} := \prod_{j=0}^{N-1} \langle u(k_{j+1})|u(k_j)\rangle = \prod_{j=0}^{N-1} \boldsymbol{u}(k_{j+1})^{\dagger} \boldsymbol{u}(k_j) \tag{99}$$

が定義できる．あるいは，境界条件(98)を課さずにゲージ不変性が顕な量

$$e^{i\gamma_{\mathrm{NP}}} = \langle u(k_0)|e^{iG\Delta\hat{r}}|u(k_N)\rangle \times \prod_{j=0}^{N-1} \langle u(k_{j+1})|u(k_j)\rangle \tag{100}$$

定義しても良い．

２つのBerry位相$e^{i\gamma_{\mathrm{P}}}, e^{i\gamma_{\mathrm{NP}}}$の間に簡単な関係式があるだろうか？

$$|u_k\rangle = e^{ik\Delta\hat{r}} |u(k)\rangle \tag{101}$$

より

$$e^{i\gamma_{\mathrm{P}}} = \prod_{j=0}^{N-1} \langle u(k_{j+1})|e^{-i(k_{j+1}-k_j)\Delta\hat{r}}|u(k_j)\rangle \tag{102}$$

$$= \prod_{j=0}^{N-1} \sum_{\Delta r, l} \boldsymbol{u}_{\Delta r, l}(k_{j+1})^{\dagger} e^{-i(k_{j+1}-k_j)\Delta r} \boldsymbol{u}_{\Delta r, l}(k_j) \tag{103}$$

となる．すると，複数の原子局在位置Δrから成るBloch状態については，簡単な関係式が存在しない可能性がある．単一のΔrから成るBloch状態に対しては$e^{-i(k_{j+1}-k_j)\Delta r}$が分離し，

$$e^{i\gamma_{\mathrm{P}}} = e^{-2\pi i\Delta r} \times e^{i\gamma_{\mathrm{NP}}} \quad (\Delta r\text{が 1 通りの場合}) \tag{104}$$

となる．しかし，一般にはこのような単純な関係は存在しないだろう．（もちろん原理的になんらかの関係はあるはずだが.）

例　格子定数を$a=1$とする． $x=0,1/2$に自由度がある1次元系を考える．ハミルトニアンとして，”SSH模型”

$$\hat{H}^{(1)}=\sum_{x=1}^{N}|x+1/2\rangle\langle x|+h.c. \tag{105}$$

を考える． (周期境界条件$|x+\Delta r+N\rangle=|x+\Delta r\rangle$を課す．) 非周期的な1粒子基底は

$$|k,0\rangle=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{x=1}^{N}|x\rangle e^{ikx},\quad |k,1/2\rangle=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{x=1}^{N}|x+1/2\rangle e^{ik(x+1/2)} \tag{106}$$

と定義される．この基底でハミルトニアンを表示すると，

$$\hat{H}^{(1)}=\sum_k(|k,0\rangle,|k,1/2\rangle)\begin{pmatrix}0 & e^{ik/2}\\ e^{-ik/2} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\langle k,0|\\ \langle k,1/2|\end{pmatrix}. \tag{107}$$

Blochハミルトニアン$H(k)$の占有状態のベクトルは

$$\boldsymbol{u}(k)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -e^{-ik/2}\end{pmatrix} \tag{108}$$

で与えられ，Bloch状態は

$$|\psi(k)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|k,0\rangle-e^{-ik/2}|k,1/2\rangle) \tag{109}$$

となる．周期性$|\psi(k+2\pi)\rangle=|\psi(k)\rangle$に注意．対応して，$|u(k)\rangle$は

$$|u(k)\rangle=e^{-ik\hat{r}}|\psi(k)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|k=0,0\rangle-e^{-ik/2}|k=0,1/2\rangle). \tag{110}$$

で与えらえる．境界条件

$$|u(k+2\pi)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|k=0,0\rangle+e^{-ik/2}|k=0,1/2\rangle)=e^{-2\pi i\Delta\hat{r}}|u(k)\rangle \tag{111}$$

を満たしている． Berry位相$e^{i\gamma_{\mathrm{NP}}}$は

$$e^{i\gamma_{\mathrm{NP}}}=\prod_{j=0}^{N-1}\frac{1+e^{i(k_{j+1}-k_j)/2}}{2}\cong\prod_{j=0}^{N-1}e^{i(k_{j+1}-k_j)/4}=e^{2\pi i/4} \tag{112}$$

で与えらえる．正しくWanner軌道の局在位置を与えることに注目したい．

　次に周期的基底におけるBerry位相を計算しよう．周期的基底は

$$|k,0)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{x=1}^{N}|x\rangle e^{ikx},\quad |k,1/2)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{x=1}^{N}|x+1/2\rangle e^{ikx} \tag{113}$$

と定義される．この基底でハミルトニアンを表示すると，

$$\hat{H}^{(1)}=\sum_k(|k,0),|k,1/2))\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}(k,0|\\ (k,1/2|\end{pmatrix}. \tag{114}$$

Blochハミルトニアン$H(k)$の占有状態のベクトルは

$$\boldsymbol{u}_k=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix} \tag{115}$$

で与えられ，Bloch状態は

$$|\psi(k)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|k,0) - |k,1/2)) \tag{116}$$

となる．周期性$|\psi(k+2\pi)\rangle = |\psi(k)\rangle$に注意．対応して，$|u_k\rangle$は波数ゼロの部分空間における定数ベクトルとなる：

$$|u_k\rangle = e^{-ik\hat{R}}\,|\psi(k)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|k=0,0\rangle - |k=0,1/2\rangle). \tag{117}$$

で与えらえる．よって，Berry位相は自明

$$e^{i\gamma_{\mathrm{P}}} = 1. \tag{118}$$

2.2 Wannier軌道

Bloch状態$|\psi(k)\rangle$, $|\psi(k+G)\rangle = |\psi(k)\rangle$が$k \in \mathbb{R}/(2\pi/a)\mathbb{Z}$に対して滑らかに定義されているとする．具体的には，$|u_{k+2\pi/L} - u_k| = O(N^{-1})$とする． Rを単位胞の位置として，Wannier軌道を

$$|W_R\rangle := \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k e^{-ikR}\,|\psi(k)\rangle \tag{119}$$

と定義する． [2] Bloch状態は$\sim e^{ikr}$の平面波成分を有することを思い出すと， Wannier状態は$r \sim R$に局在する．実際，Wannier軌道を$|R,\alpha\rangle$基底で展開すると

$$|W_R\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k,\alpha} e^{-ikR}[\boldsymbol{u}_k]_\alpha|k,\alpha) \tag{120}$$

$$= \frac{1}{N}\sum_{k,\alpha,R'} e^{-ik(R-R')}[\boldsymbol{u}_k]_\alpha\,|R',\alpha\rangle\,. \tag{121}$$

より$|R',\alpha\rangle$成分は

$$\langle R',\alpha|W_R\rangle = \frac{1}{N}\sum_k e^{-ik(R-R')}[\boldsymbol{u}_k]_\alpha \tag{122}$$

となり，$\boldsymbol{u}_k$がkに関して滑らかならば$R'=R$に局在する．（定量的なことに関しては後で調べる．）

Wannier軌道の単位胞位置演算子$\hat{R}$の期待値を計算しよう． $\hat{R}$は$\mathbb{R}/aN\mathbb{Z}$に値を取ることに注意する．

$$\langle W_R|\hat{R}-R|W_R\rangle \tag{123}$$

$\hat{T}_a\,|W_R\rangle = |W_{R+a}\rangle$に注意すると，$R=0$として良い． $\hat{R}$を処理するために，展開

$$\hat{R} = \frac{L}{2\pi i}(e^{\frac{2\pi i}{L}\hat{R}} - 1) + L\sum_{n\geq 2} a_n(\frac{\hat{R}}{L})^n \tag{124}$$

を用いる． $\hat{R}/L$はS^1に値を取るので第２項の処理が気になるが， Wannier軌道は$R'\sim 0$に局在するので問題ないとして進める．

$$\langle W_0|\hat{R}|W_0\rangle = \langle W_0|\frac{L}{2\pi i}(e^{\frac{2\pi i}{L}\hat{R}} - 1)|W_0\rangle + O(N^{-1}) \tag{125}$$

$$= \frac{a}{2\pi i}\sum_{k,k'}\langle\phi(k)|(e^{\frac{2\pi i}{L}\hat{R}} - 1)|\phi(k')\rangle + O(N^{-1}). \tag{126}$$

[2] メモ．野本さんによると，Wanneir90ではこの定義らしい． Wannier90では，$\boldsymbol{u}_k$の$U(1)$位相も同時に最適化するらしい．

u_kのkに関する周期性と$e^{ik\hat{R}}\left|k=0,\alpha\right\rangle = |k,\alpha), |k+G,\alpha) = |k,\alpha)$に注意すると

$$= \frac{a}{2\pi i}\sum_{k,k'}\left\langle k=0,\alpha\right|[\boldsymbol{u}_k]_\alpha e^{-ik\hat{R}}(e^{\frac{2\pi i}{L}\hat{R}}-1)e^{ik'\hat{R}}[\boldsymbol{u}_{k'}]_\beta\left|k=0,\beta\right\rangle + O(N^{-1}) \tag{127}$$

$$= \frac{a}{2\pi i}\sum_{k}\boldsymbol{u}_k^\dagger(\boldsymbol{u}_{k-\frac{2\pi}{L}}-\boldsymbol{u}_k) + O(N^{-1}) \tag{128}$$

$$= \frac{a}{2\pi i}\sum_{k}\boldsymbol{u}_k^\dagger(-\frac{2\pi}{L}\partial_k\boldsymbol{u}_k + O(N^{-2})) + O(N^{-1}) \tag{129}$$

$$= \frac{a}{2\pi i}\sum_{k}\boldsymbol{u}_k^\dagger(-\frac{2\pi}{L}\partial_k\boldsymbol{u}_k + O(N^{-2})) + O(L^{-1}) \tag{130}$$

$$\xrightarrow[N\to\infty]{} \frac{ia}{2\pi}\oint_0^{2\pi}\boldsymbol{u}_k^\dagger\partial_k\boldsymbol{u}_k \tag{131}$$

$$\tag{132}$$

Berry位相$e^{i\gamma_P}$と比較して

$$\langle W_0|\hat{R}|W_0\rangle = a\times\frac{\gamma_P}{2\pi} \mod a \tag{133}$$

を得る．よって，Berry位相γ_Pは， Wannier軌道の単位胞位置演算子$\hat{R}$の中心位置，という意味がある．

同様に，位置演算子$\hat{r}$のWannier軌道の期待値を計算しよう．

$$\langle W_R|\hat{r}-R|W_R\rangle = \langle W_0|\hat{r}|W_0\rangle\,. \tag{134}$$

展開

$$\hat{r} = \frac{L}{2\pi i}(e^{\frac{2\pi i}{L}\hat{r}}-1) + L\sum_{n\geq 2}a_n(\frac{\hat{r}}{L})^n \tag{135}$$

を用いると$\boldsymbol{u}(k)$で書くことができる．

$$\langle W_0|\hat{r}|W_0\rangle = \langle W_0|\frac{L}{2\pi i}(e^{\frac{2\pi i}{L}\hat{r}}-1)|W_0\rangle + O(N^{-1}) \tag{136}$$

$$= \frac{a}{2\pi i}\sum_{k,k'}\langle\phi(k)|(e^{\frac{2\pi i}{L}\hat{r}}-1)|\phi(k')\rangle + O(N^{-1}) \tag{137}$$

$$= \frac{a}{2\pi i}\sum_{k,k'}\left\langle k=0,\alpha\right|[\boldsymbol{u}_\alpha(k)]_\alpha e^{-ik\hat{r}}(e^{\frac{2\pi i}{L}\hat{r}}-1)e^{ik'\hat{r}}[\boldsymbol{u}(k')]_\beta\left|k=0,\beta\right\rangle + O(N^{-1}). \tag{138}$$

$|\psi(k)\rangle$の$U(1)$位相を滑らかに，つまり$\boldsymbol{u}_k$のそれを滑らかにとったので， $\boldsymbol{u}(k)$は

$$\boldsymbol{u}(k+G) = V(G)^\dagger\boldsymbol{u}(k) \tag{139}$$

を満たす． $N\to\infty$極限を取り

$$\langle W_0|\hat{r}|W_0\rangle = \frac{a}{2\pi i}\sum_k\boldsymbol{u}(k)^\dagger(\boldsymbol{u}(k-\frac{2\pi}{L})-\boldsymbol{u}(k)) + O(N^{-1}) \tag{140}$$

$$\xrightarrow[N\to\infty]{} \frac{ia}{2\pi}\int_0^G\boldsymbol{u}(k)^\dagger\partial_k\boldsymbol{u}(k) \tag{141}$$

を得る． Berry位相$e^{i\gamma_{\mathrm{NP}}}$と比較して

$$\langle W_0|\hat{r}|W_0\rangle = a\times\frac{\gamma_{\mathrm{NP}}}{2\pi} \mod a \tag{142}$$

を得る．よって，Berry位相γ_{NP}は， Wannier軌道の位置演算子$\hat{r}$の期待値，という意味がある．

2.3 ねじれ演算子

Berry位相は，ねじれ演算子

$$\hat{U} = \exp \sum_{R,\Delta r,l} \frac{2\pi i(R+\Delta r)}{L} \hat{n}(R+\Delta r,l) \tag{143}$$

の基底状態期待値と関係がある． $\hat{n}(R+\Delta r,l) = c^\dagger(R+\Delta r,l)c(R+\Delta r,l)$は粒子数演算子である． $\hat{n}(R+\Delta r,l)$の取る値は$0,1$なので， $r \in \mathbb{R}/L\mathbb{Z}$として$\hat{U}$はwell-defined． 1 粒子状態のHilbert空間においては

$$\hat{U} = \sum_{R,\Delta r,l} |R+\Delta,l\rangle \exp \frac{2\pi i(R+\Delta r)}{L} \langle R+\Delta r,l| = e^{\frac{2\pi i}{L}\hat{r}} \tag{144}$$

となる． (135)を見るとわかるようにねじれ演算子の基底状態期待値はBerry位相$e^{i\gamma_{\mathrm{NP}}}$を関係がある．このノートでは詳細を書かない．

2.4 基底の選び方とBerry曲率について

関係式

$$|u_\mu(\boldsymbol{k})\rangle = e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\Delta\hat{r}} |u_{\boldsymbol{k}\mu}\rangle . \tag{145}$$

は占有状態のフレーム内におけるゲージ変換で書けるとは限らないから，Berry曲率は一般には 2 つの基底で一致しない．ここではそのような例をひとつ与えよう．簡単のため，$U(1)$のBerry曲率を考える． Berry接続は

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{k}) = i\langle u(\boldsymbol{k})|\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}} u(\boldsymbol{k})\rangle = i\langle u_{\boldsymbol{k}}| e^{i\boldsymbol{k}\cdot\Delta\hat{r}} \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}(e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\Delta\hat{r}}|u_{\boldsymbol{k}}\rangle) \tag{146}$$

$$= \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}} + \langle u_{\boldsymbol{k}}|\Delta\hat{\boldsymbol{r}}|u_{\boldsymbol{k}}\rangle . \tag{147}$$

するとBerry曲率の違いは

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{k}) = \boldsymbol{F}_{\boldsymbol{k}} + \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}} \times \langle u_{\boldsymbol{k}}|\Delta\hat{\boldsymbol{r}}|u_{\boldsymbol{k}}\rangle \tag{148}$$

となる．ここで，$\langle u_{\boldsymbol{k}}|\Delta\hat{\boldsymbol{r}}|u_{\boldsymbol{k}}\rangle$はゲージ不変であることに注意しよう．第 2 項の閉曲面上における面積分はゼロのためChern数には寄与しないが，局所的には有限値を取りうる．第 2 項が有限に残るのは，波数$\boldsymbol{k}$に依存して局在値$\Delta\boldsymbol{r}$の重みが異なる場合である．

例えば，2×2の模型

$$H_{\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{h}_{\boldsymbol{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \tag{149}$$

に対して， $\sigma_z = 1, \sigma_z = -1$を副格子の自由度と同一視し，単位胞中心位置$\boldsymbol{R}$を副格子間の中心に取り，変位ベクトル$\Delta\boldsymbol{r}$を

$$\langle \boldsymbol{R}, \sigma_z|\Delta\hat{\boldsymbol{r}}|\boldsymbol{R}, \sigma_z'\rangle = \frac{\boldsymbol{b}}{2}\sigma_z \delta_{\sigma_z,\sigma_z'} \tag{150}$$

とする． $\boldsymbol{b}$は$\sigma_z = -1$から$\sigma_z = 1$への自由度の局在位置への変位ベクトル．ハミルトニアン$H_{\boldsymbol{k}}$の占有状態はベクトル$\boldsymbol{h}_{\boldsymbol{k}}$を極座標表示

$$\boldsymbol{h} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta) \tag{151}$$

すると

$$H_{\boldsymbol{k}} = |\boldsymbol{h}_{\boldsymbol{k}}| e^{-i\sigma_z\phi_{\boldsymbol{k}}/2} e^{-i\sigma_y\theta_{\boldsymbol{k}}/2} \sigma_z e^{i\sigma_y\theta_{\boldsymbol{k}}/2} e^{i\sigma_z\phi_{\boldsymbol{k}}/2} \tag{152}$$

より

$$\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \\ \cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} e^{i\phi_{\boldsymbol{k}}} \end{pmatrix} \tag{153}$$

と書ける．するとBerry曲率の差$F(\boldsymbol{k}) - F_{\boldsymbol{k}}$は

$$\boldsymbol{\nabla} \times \langle u_{\boldsymbol{k}}|\Delta\hat{\boldsymbol{r}}|u_{\boldsymbol{k}}\rangle = -\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}} \cos\theta_{\boldsymbol{k}} \times \frac{\boldsymbol{b}}{2} = -\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}\Big(\frac{h_{\boldsymbol{k}z}}{|\boldsymbol{h}_{\boldsymbol{k}}|}\Big) \times \frac{\boldsymbol{b}}{2} \tag{154}$$

となる．つまり，変位ベクトル$\boldsymbol{b}$と垂直な方向に波数空間において比$\frac{h_{\boldsymbol{k}z}}{|\boldsymbol{h}_{\boldsymbol{k}}|}$に変化が存在する場合に差$F(\boldsymbol{k}) - F_{\boldsymbol{k}}$が生じる．

2.5 対称性によるBerry位相の量子化の例

2.5.1 1d，空間反転

$\gamma_{\mathrm{NP}}/2\pi = \langle W_0|\hat{r}/a|W_0\rangle$の右辺は反転対称性が存在する場合は量子化する．よって反転対称性が存在する場合はBerry位相γ_{NP}も量子化することを直接示すことができるはずである．

空間 1 次元系において反転対称性を仮定する．

$$U^I(k)H(k) = H(-k)U^I(k), \quad U^I(-k)U^I(k) = 1. \tag{155}$$

特に，対称点においては次が成立する．

$$[U^I(0), H(0)] = 0, \quad U^I(0)^2 = 1, \tag{156}$$

$$[V(2\pi)U^I(\pi), H(\pi)] = 0, \quad [V(2\pi)U(\pi)]^2 = 1. \tag{157}$$

占有状態を$\boldsymbol{u}_i(k), i = 1, \ldots, M$と書く．対称性より占有状態のフレーム

$$\mathcal{U}(k) := (\boldsymbol{u}_1(k), \ldots, \boldsymbol{u}_M(k)) \tag{158}$$

は

$$U^I(k)\mathcal{U}(k) = \mathcal{U}(-k)W_I(k), \quad W_I(-k)W_I(k) = 1 \tag{159}$$

を満たす．また，逆格子ベクトルの並進より

$$V(G)\mathcal{U}(k) = \mathcal{U}(k+G)W_G(k) \tag{160}$$

も成立する．ここで$W_I(k), W_G(k)$は$M \times M$のユニタリ行列である． $W_I(\pi) \neq W_I(-\pi)$に注意．対称点においては

$$W_I(0)^2 = 1, \quad [W_{G=2\pi}(-\pi)W_I(\pi)]^2 = 1 \tag{161}$$

が成立する．

Berry位相の表式

$$e^{i\gamma_{\mathrm{NP}}} = \det[\mathcal{U}(-\pi)^\dagger V(-2\pi)\mathcal{U}(\pi)] \times \prod_{k=-\pi}^{k=\pi-\Delta k} \det[\mathcal{U}(k+\Delta k)^\dagger \mathcal{U}(k)] \tag{162}$$

において反転対称性より

$$\mathcal{U}(-k)^\dagger \mathcal{U}(-k-\Delta k) = W_I(k)\mathcal{U}(k)^\dagger [U^I(k)]^\dagger U^I(k+\Delta k)\mathcal{U}(k+\Delta k)W_I(k+\Delta k)^\dagger \tag{163}$$

となるが，

$$U^I(k) = e^{ikt_I} D(I), \quad t_I \in \mathbb{R} \tag{164}$$

より

$$\det[\mathcal{U}(-k)^\dagger \mathcal{U}(-k-\Delta k)] = e^{i\Delta k t_I} \det[W_I(k)] \det[\mathcal{U}(k)^\dagger \mathcal{U}(k+\Delta k)] \det[W_I(k+\Delta k)]^{-1} \tag{165}$$

となる．また，逆格子ベクトルの並進より

$$\mathcal{U}(-\pi)^\dagger V(-2\pi) \mathcal{U}(\pi) = W_{G=2\pi}(-\pi)^\dagger. \tag{166}$$

これらから

$$e^{i\gamma_{\mathrm{NP}}} = \det[W_{G=2\pi}(-\pi)]^{-1} \times \left(\prod_{k=0}^{\pi-\Delta k} e^{i\Delta k t_I} |\det[\mathcal{U}(k)^\dagger \mathcal{U}(k+\Delta k)]|^2 \right) \times \det[W_I(0)] \det[W_I(\pi)]^{-1} \tag{167}$$

となる．$U(1)$位相のみ見ると

$$e^{i\gamma_{\mathrm{NP}}} \sim e^{i\pi t_I} \times \frac{\det[W_I(0)]}{\det[W_{G=2\pi}(-\pi) W_I(\pi)]} \in e^{i\pi t_I} \times \{\pm 1\}. \tag{168}$$

となる．ここで$t_I/2$は$\hat{I}$の反転中心を表すことに注意．[3] 結局，Berry位相は反転中心からのズレが量子化し，対称点における±1の反転の固有値の数だけで与えられる．

$$e^{i\gamma_{\mathrm{NP}}}/e^{2\pi i t_I/2} = \frac{\det[\mathcal{U}(0)^\dagger U^I(0) \mathcal{U}(0)]}{\det[\mathcal{U}(\pi)^\dagger V(2\pi) U^I(\pi) \mathcal{U}(\pi)]} \in \{\pm 1\} \tag{169}$$

で与えられる．

2.5.2 2d，4回回転 (under construction)

もうひとつくらい例を見る．波数空間上の経路

$$\ell: \quad (0,0) \to (\pi,0) \to (\pi,\pi) \to (0,\pi) \to (0,0) \tag{170}$$

に関するBerry位相を計算する．ループそのものは可縮なので，２つの基底のどちらを用いても結果は変化しないと期待できる．前節と同じく，ここでは$e^{i\gamma_{\mathrm{NP}}}$を計算する．

4回回転の対称性

$$U^c(\boldsymbol{k}) H(\boldsymbol{k}) U^c(\boldsymbol{k})^\dagger = H(c\boldsymbol{k}), \quad U^c(c^3\boldsymbol{k}) U^c(c^2\boldsymbol{k}) U^c(c\boldsymbol{k}) U^c(\boldsymbol{k}) = 1 \tag{171}$$

を課す．関係式

$$\mathcal{U}(c\boldsymbol{k}) = U^c(\boldsymbol{k}) \mathcal{U}(\boldsymbol{k}) W_c(\boldsymbol{k})^\dagger, \tag{172}$$

$$\mathcal{U}(c^3\boldsymbol{k} + 2\pi\hat{y}) = V(2\pi\hat{y}) U^{c^3}(\boldsymbol{k}) \mathcal{U}(\boldsymbol{k}) W_{c^3}(\boldsymbol{k})^\dagger W_{2\pi\hat{y}}(c^3\boldsymbol{k})^\dagger \tag{173}$$

を用いると，

$$\mathcal{U}(c(\boldsymbol{k}+\Delta\boldsymbol{k}))^\dagger \mathcal{U}(c\boldsymbol{k}) = W_c(\boldsymbol{k}+\Delta\boldsymbol{k}) \mathcal{U}(\boldsymbol{k}+\Delta\boldsymbol{k})^\dagger U^c(\boldsymbol{k}+\Delta\boldsymbol{k})^\dagger U^c(\boldsymbol{k}) \mathcal{U}(\boldsymbol{k}) W_c(\boldsymbol{k})^\dagger \tag{174}$$

$$= e^{ic\Delta\boldsymbol{k}\cdot t_c} W_c(\boldsymbol{k}+\Delta\boldsymbol{k}) \mathcal{U}(\boldsymbol{k}+\Delta\boldsymbol{k})^\dagger \mathcal{U}(\boldsymbol{k}) W_c(\boldsymbol{k})^\dagger, \tag{175}$$

$$\mathcal{U}(c^3(\boldsymbol{k}+\Delta\boldsymbol{k}) + (0,2\pi))^\dagger \mathcal{U}(c^3\boldsymbol{k} + (0,2\pi)) \tag{176}$$

$$= e^{ic^3\Delta\boldsymbol{k}\cdot t_{c^3}} W_{2\pi\hat{y}}(c^3(\boldsymbol{k}+\Delta\boldsymbol{k})) W_{c^3}(\boldsymbol{k}+\Delta\boldsymbol{k}) \mathcal{U}(\boldsymbol{k}+\Delta\boldsymbol{k})^\dagger \mathcal{U}(\boldsymbol{k}) W_{c^3}(\boldsymbol{k})^\dagger W_{2\pi\hat{y}}(c^3\boldsymbol{k})^\dagger. \tag{177}$$

[3] t_Iに制限はない．

より，

$$\prod_{(0,0)\to(0,\pi)} \det[\mathcal{U}(\boldsymbol{k}+\Delta\boldsymbol{k})^\dagger \mathcal{U}(\boldsymbol{k})] = e^{i\pi t_{cy}} \frac{\det W_c(\pi,0)}{\det W_c(0,0)} \prod_{(0,0)\to(\pi,0)} \det[\mathcal{U}(\boldsymbol{k}+\Delta\boldsymbol{k})^\dagger \mathcal{U}(\boldsymbol{k})], \tag{178}$$

$$\prod_{(0,\pi)\to(\pi,\pi)} \det[\mathcal{U}(\boldsymbol{k}+\Delta\boldsymbol{k})^\dagger \mathcal{U}(\boldsymbol{k})] = e^{i\pi t_{c^3x}} \frac{\det[W_{2\pi\hat{y}}(\pi,-\pi)W_{c^3}(\pi,\pi)]}{\det[W_{2\pi\hat{y}}(0,-\pi)W_{c^3}(\pi,0)]} \prod_{(\pi,0)\to(\pi,\pi)} \det[\mathcal{U}(\boldsymbol{k}+\Delta\boldsymbol{k})^\dagger \mathcal{U}(\boldsymbol{k})], \tag{179}$$

これから，

$$e^{i\gamma_{\mathrm{NP}}(\ell)} = e^{-i\pi t_{cy} - i\pi t_{c^3x}} \times \frac{\det[W_c(0,0)]\det[W_{2\pi\hat{y}}(0,-\pi)W_{c^3}(\pi,0)]}{\det[W_c(\pi,0)]\det[W_{2\pi\hat{y}}(\pi,-\pi)W_{c^3}(\pi,\pi)]} \tag{180}$$

を得る．さらに簡略化しよう．

A　空間群

空間群Gの元はSeitz表記

$$g = \{p_g|\boldsymbol{t}_g\} : \boldsymbol{x} \mapsto p_g\boldsymbol{x} + \boldsymbol{t}_g \tag{181}$$

で与えられる．群構造より$\boldsymbol{t}_g$は 1 コサイクル条件

$$\boldsymbol{t}_{gh} = p_g\boldsymbol{t}_h + \boldsymbol{t}_g \tag{182}$$

を満たす．また，原点の$\boldsymbol{a}$だけの並進は等価な空間群の関係

$$g = \{p_g|\boldsymbol{t}_g\} \mapsto \{1|-\boldsymbol{a}\}\{p_g|\boldsymbol{t}_g\}\{1|\boldsymbol{a}\} = \{p_g|\boldsymbol{t}_g + p_g\boldsymbol{a} - \boldsymbol{a}\} \tag{183}$$

を引き起こす．

Πを格子ベクトルの並進群，Pを点群とする．空間群Gは以下の完全列に入る．

$$1 \to \Pi \to G \to P \to 1 \tag{184}$$

ここで

$$\Pi \to G, \quad \boldsymbol{R} \mapsto \{1|\boldsymbol{R}\}, \tag{185}$$

$$G \to P, \quad \{p_g|\boldsymbol{t}_g\} \mapsto p_g. \tag{186}$$

空間群Gは点群Pの並進群Πによる拡大である．一般論から，拡大の分類は2次の群コホモロジー

$$H^2(P,\Pi) \tag{187}$$

で与えられ，一つの拡大は群コサイクル$\boldsymbol{\Delta} \in Z^2(P,\Pi)$によって与えられる．ただし，点群$P$は並進群$\Pi$へ点群として左から自然に作用する．半端な並進$\boldsymbol{t}_g$との関係は以下である．係数群の完全列

$$1 \to \Pi \to \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d/\Pi \to 1 \tag{188}$$

と$H^n(P,\mathbb{R}^d) \cong 0 (n=1,2)$に注意すると

$$H^1(P,\mathbb{R}^d/\Pi) \xrightarrow{\delta} H^2(P,\Pi) \tag{189}$$

は同相射． 1コサイクル$[\boldsymbol{a}_p] \in \mathbb{R}^d/\Pi, p[\boldsymbol{a}_q] - [\boldsymbol{a}_{pq}] + [\boldsymbol{a}_p] = \boldsymbol{0}, p, q \in P$に対して，連結準同型$\delta$は一般論より，リフト$[\boldsymbol{a}_p] \mapsto \boldsymbol{a}_p \in \mathbb{R}^d$とコチェイン複体の微分の合成で与えられる．

$$(\delta[\boldsymbol{a}])_{p,q} = p\boldsymbol{a}_q - \boldsymbol{a}_{pq} + \boldsymbol{a}_p \in \Pi. \tag{190}$$

半端な並進$\boldsymbol{a}_p$は，切断$P \to G$に対応する．

References

[1] Akito Daido, *Novel topological superconductivity and bulk-boundary correspondence*, Ph.D. thesis.