メモ：Chern-Simons項の単位胞中心依存性について

Ken Shiozaki

May 13, 2026

Berry接続

１粒子ハミルトニアン$\hat{H}$のエネルギー固有状態であるBloch状態

$$\hat{H}\left|\phi_n(\boldsymbol{k})\right\rangle = E_n(\boldsymbol{k})\left|\phi_n(\boldsymbol{k})\right\rangle \tag{1}$$

に対して，セル周期状態は，系の原点$\boldsymbol{r}_0$をひとつ固定して

$$\left|u_n^{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{k})\right\rangle = e^{-i\boldsymbol{k}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)}\left|\phi_n(\boldsymbol{k})\right\rangle \tag{2}$$

と定義される．セル周期状態は逆格子ベクトルの並進に対して不変ではない：

$$\left|u_n^{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})\right\rangle = e^{-i\boldsymbol{G}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)}\left|u_n^{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{k})\right\rangle. \tag{3}$$

また，原点$\boldsymbol{r}_0$に陽に依存することに注意．格子ベクトル$\boldsymbol{R}$に対して$\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{R}\equiv 0 \bmod 2\pi$であるから，セル周期状態の$\boldsymbol{r}_0$依存性は，単位胞内の位置ベクトルだけの不定性がある．一方で，Berry接続

$$\boldsymbol{A}_{mn}^{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{k}) = i\left\langle u_m^{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{k})\middle|\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{k}}u_n^{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{k})\right\rangle \tag{4}$$

は逆格子ベクトルの並進に対して不変である：

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{A}_{mn}^{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}) &= i\left\langle u_m^{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})\middle|\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{k}}u_n^{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})\right\rangle &(5)\\
&= i\left\langle u_m^{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{k})\middle|e^{i\boldsymbol{G}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{k}}e^{-i\boldsymbol{G}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)}\middle|u_n^{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{k})\right\rangle &(6)\\
&= i\left\langle u_m^{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{k})\middle|\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{k}}u_n^{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{k})\right\rangle = \boldsymbol{A}_{mn}^{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{k}). &(7)
\end{aligned}$$

しかし，単位胞中心位置依存性は残る．単位胞中心位置が$\boldsymbol{r}_0+\delta\boldsymbol{r}_0$において定義されたBerry接続との差は

$$\boldsymbol{A}_{mn}^{\boldsymbol{r}_0+\delta\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{k}) = \boldsymbol{A}_{mn}^{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{k}) - \delta\boldsymbol{r}_0\delta_{mn} \tag{8}$$

と与えられる [1]．

注意として，$\boldsymbol{k}$依存するBlochハミルトニアンを

$$H(\boldsymbol{k}) = e^{-i\boldsymbol{k}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)}\hat{H}e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)} \tag{9}$$

と定義すると，$H(\boldsymbol{k})$は$\boldsymbol{r}_0$には依存しないことに注意せよ．セル周期状態$\left|u_n^{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{k})\right\rangle$はBlochハミルトニアン$H(\boldsymbol{k})$のエネルギー固有状態である：

$$H(\boldsymbol{k})\left|u_n^{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{k})\right\rangle = E_n(\boldsymbol{k})\left|u_n^{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{k})\right\rangle. \tag{10}$$

単位胞中心位置$\boldsymbol{r}_0$はBlochハミルトニアンが定義される平面波基底の従う平坦接続を定める．

[1] Berry接続は，単位胞中心位置からのズレを表した．

Chern-Simons項

磁気電気分極のCS項由来の寄与は，Chern数がゼロであれば，BZ全体で連続な占有状態のセル周期状態$|u_n^{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{k})\rangle$が存在し，Berry接続

$$\mathcal{A}_{mn}^{\boldsymbol{r}_0} = \langle u_m^{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{k}) \,|\, du_n^{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{k})\rangle \tag{11}$$

を用いて，

$$\alpha_{\mathrm{CS}} = \frac{e^2}{h}\frac{1}{8\pi^2}\int_{BZ} \mathrm{tr}\,[\mathcal{A}^{\boldsymbol{r}_0} d\mathcal{A}^{\boldsymbol{r}_0} + \frac{2}{3}(\mathcal{A}^{\boldsymbol{r}_0})^3] \tag{12}$$

で与えられる．ここで，dはk空間の外微分である． Chern数が非ゼロの場合においても，数学的にはCS項は定義される． BZトーラスT^3上の接続$\mathcal{A}$を，$\partial X = T^3$なる４次元空間X上に拡張し，

$$\mathrm{CS}_3 := \frac{1}{8\pi^2}\int_X \mathrm{tr}\,[\mathcal{F}^2] \mod 1, \tag{13}$$

と定義する．そのようなXは以下のように与えられる： Chern数のベクトル$\boldsymbol{C} = (C_{yz}, C_{zx}, C_{xy})$が$\boldsymbol{C} = (0, 0, C_{xy})$なる座標系を選ぶと，Berry接続$\mathcal{A}$は$z$成分がゼロの接続$\mathcal{A}'$に滑らかに変形できる． $X = T^2 \times D^2$として，２次元円板D^2の半径をrとすると，$r = 0$を$\mathcal{A}'$, $r = 1$を$\mathcal{A}$に対応させる [2]．

計算例として，xy面内のバンド数１のChern数CのChern絶縁体をz方向の位置$z \in \mathbb{Z} + z_0$に積層した模型を考える． Berry接続は，単位胞の中心位置に依存して，

$$\mathcal{A}^{z_0} = \mathcal{A}_x dk_x + \mathcal{A}_y dk_y - iz_0 dk_z \tag{14}$$

と与えられる． $T^2 \times D^2$への拡張を

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_x dk_x + \mathcal{A}_y dk_y - irz_0 dk_z \tag{15}$$

と定めると，曲率は

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_{xy} dk_x dk_y - iz_0 dr dk_z \tag{16}$$

となり，CS項は

$$\begin{aligned}
\mathrm{CS}_3 &= \frac{1}{8\pi^2}\int_{T^2\times D^2} \mathrm{tr}\,[\mathcal{F}^2] &(17)\\
&= \frac{1}{8\pi^2}\int_{T^2\times D^2} 2\mathcal{F}_{xy}(-iz_0 dr dk_z) dk_x dk_y &(18)\\
&= \frac{1}{4\pi^2}\int_{T^2} \mathcal{F}_{xy} dk_x dk_y \int_0^1 (-iz_0) dr \int_0^{2\pi} dk_z &(19)\\
&= C z_0. &(20)
\end{aligned}$$

このように，CS項はChern数が非ゼロであれば，Chern数のベクトルと平行な成分の単位胞中心位置z_0に依存する．

注意として，物理的な磁気電気分極への寄与が，数学的なCS項と同一であるかどうかは別問題である． [1]で調べられている可能性がある．

References

[1] Xin Lu, Renwen Jiang, Zhongqing Guo, Jianpeng Liu, *Orbital magnetoelectric coupling of three dimensional Chern insulators*, arXiv:2408.16103.

[2] 同じことだが，占有状態への射影$P(\boldsymbol{k})$はk_z依存しない射影$P'(k_x, k_y)$に滑らかに変形できる．