# 線ギャップとエルミート化

塩崎　謙

March 26, 2021

[1]に従って，ハミルトニアン$H(\boldsymbol{k})$に実線ギャップが開いているときに，実線ギャップを閉じずに連続的にエルミート化できること[2]を確認する．以下は[1]のApp. Dのほぼ写しである．

まずは対称性を気にせずに，実線ギャップを有するハミルトニアン$H(\boldsymbol{k})$は平坦化できることを示す．実線ギャップ条件より，$H(\boldsymbol{k})$の固有値$\epsilon_n(\boldsymbol{k})$は$|\mathrm{Re}\,\epsilon_n(\boldsymbol{k})|>0$を満たす．[1] このとき，ハミルトニアンの連続変形

$$H_{\boldsymbol{k}}(\lambda) := (1-\lambda)H(\boldsymbol{k}) + \lambda\left(\oint_{C_+} - \oint_{C_-}\right)\frac{dz}{2\pi i}\frac{1}{z-H(\boldsymbol{k})} \tag{1}$$

を導入する．ここで，$C_+(C_-)$は，$\mathrm{Re}\,\epsilon_n(\boldsymbol{k})>0(<0)$なる固有値を囲む経路．

$$P_\pm(\boldsymbol{k}) = \oint_{C_\pm}\frac{dz}{2\pi i}\frac{1}{z-H_{\boldsymbol{k}}} \tag{2}$$

は$P_\pm(\boldsymbol{k})^2 = P_\pm(\boldsymbol{k})$が成立するため，[2]射影である．$H_\lambda(\boldsymbol{k})$の固有値は

$$(1-\lambda)\epsilon_n(\boldsymbol{k}) + \lambda\mathrm{Re}\,\epsilon_n(\boldsymbol{k}) \tag{4}$$

で与えられるため，$\lambda\in[0,1]$について実線ギャップが保たれることがわかる．

$$H_1(\boldsymbol{k}) = P_+(\boldsymbol{k}) - P_-(\boldsymbol{k}) \tag{5}$$

の固有値は$\pm1$である．換言すると，$H_1(\boldsymbol{k})^2=1$である．続いて，エルミート化する．$H_1(\boldsymbol{k})$を実部と虚部に分解する．

$$H_1(\boldsymbol{k}) = h_1(\boldsymbol{k}) + ih_2(\boldsymbol{k}), \tag{6}$$

$$h_1(\boldsymbol{k}) = \frac{H_1(\boldsymbol{k})+H_1(\boldsymbol{k})^\dagger}{2}, \quad h_2(\boldsymbol{k}) = \frac{H_1(\boldsymbol{k})-H_1(\boldsymbol{k})^\dagger}{2i}. \tag{7}$$

$1 = H_1(\boldsymbol{k})^2 = h_1(\boldsymbol{k})^2 - h_2(\boldsymbol{k})^2 + i\{h_1(\boldsymbol{k}), h_2(\boldsymbol{k})\}$より，

$$h_1(\boldsymbol{k})^2 - h_2(\boldsymbol{k})^2 = 1, \quad \{h_1(\boldsymbol{k}), h_2(\boldsymbol{k})\} = 0 \tag{8}$$

に注意する．連続変形

$$\tilde{H}_\lambda(\boldsymbol{k}) = (1-\lambda)H_1(\boldsymbol{k}) + \lambda h_1(\boldsymbol{k}) = h_1(\boldsymbol{k}) + i(1-\lambda)h_2(\boldsymbol{k}) \tag{9}$$

を導入する．

$$\tilde{H}_\lambda(\boldsymbol{k})^2 = h_1(\boldsymbol{k})^2 - (1-\lambda)^2h_2(\boldsymbol{k})^2 = 1 + (1-(1-\lambda)^2)h_2(\boldsymbol{k})^2 \tag{10}$$

[1] $\lambda$が行列$A$の固有値であるとは，$Au=\lambda u$なる$u\neq0$が存在することと定義される．$\lambda-A$が特異であることと同値．

[2] 例えば，[3]を見よ．レゾルベント方程式

$$(A-w)^{-1} - (A-z)^{-1} = (z-w)(A-z)^{-1}(A-w)^{-1} \tag{3}$$

と積分経路の変形を用いる．

であるが，$h_2(\boldsymbol{k})$のエルミート性より $\tilde{H}_\lambda(\boldsymbol{k})^2 \geq 1$，つまり，$\tilde{H}_\lambda(\boldsymbol{k})$の固有値は実であり，かつ絶対値は0より真に大きい．よって$\lambda \in [0,1]$において$\tilde{H}_\lambda(\boldsymbol{k})$は実線ギャップを保つ． $\tilde{H}_1(\boldsymbol{k})$はエルミートなので，これでエルミート化ができた．（さらに$\tilde{H}_1(\boldsymbol{k})$を平坦化すると，平坦かつエルミートに変形できる．）

次に，上記の変形が対称性と両立するかを考える．考える対称性としては，以下の形のものを考える．

$$U_g(\boldsymbol{k}) \begin{Bmatrix} H(\boldsymbol{k}) \\ H(\boldsymbol{k})^* \\ H(\boldsymbol{k})^T \\ H(\boldsymbol{k})^\dagger \end{Bmatrix} U_g(\boldsymbol{k})^\dagger = c_g H(g\boldsymbol{k}). \tag{11}$$

$c_g \in \{\pm 1\}$である． $U_g(\boldsymbol{k})$はユニタリー行列とする．両辺のエルミート共役を取ると，$H(\boldsymbol{k})^\dagger$も同一の対称性を満たすことがわかる．よって，$\tilde{H}_\lambda(\boldsymbol{k})$は（$H_1(\boldsymbol{k})$が対称性を満たすなら）同一の対称性を満たす． $H_\lambda(\boldsymbol{k})$も同一の対称性を満たすことも示される．まず，転置は積分経路に影響しない． $c_g = -1$の場合は，

$$\left(\oint_{C_+} - \oint_{C_-}\right) \frac{dz}{2\pi i} \frac{1}{z - c_g H(g\boldsymbol{k})} = \left(\oint_{C_+} - \oint_{C_-}\right) \frac{c_g dz}{2\pi i} \frac{1}{c_g z - H(g\boldsymbol{k})} \tag{12}$$

であるが，変数変換$z \mapsto -z$より$C_\pm = -C_\mp$となることに注意すると，

$$= c_g \left(\oint_{C_+} - \oint_{C_-}\right) \frac{dz}{2\pi i} \frac{1}{z - H(g\boldsymbol{k})} \tag{13}$$

を得る．複素共役を含む場合は

$$\left(\oint_{C_+} - \oint_{C_-}\right) \frac{dz}{-2\pi i} \frac{1}{z^* - H(g\boldsymbol{k})} \tag{14}$$

において，変数変換$z \mapsto z^*$より$C_\pm = -C_\pm$となることに注意すると，

$$= \left(\oint_{C_+} - \oint_{C_-}\right) \frac{dz}{2\pi i} \frac{1}{z - H(g\boldsymbol{k})} \tag{15}$$

を得る．

結局，対称性(11)のもとで，実線ギャップを持つハミルトニアンは平坦かつエルミート化できることが示された．

$H(\boldsymbol{k})$が純虚線ギャップを持つ場合は，$H'(\boldsymbol{k}) := iH(\boldsymbol{k})$は実線ギャップを持つので，上記議論により$H'(\boldsymbol{k})$は平坦かつエルミート化できる．（変換$H'(\boldsymbol{k}) = iH(\boldsymbol{k})$に加えて，複素共役を含む対称性については$c_g \mapsto -c_g$と変換されることに注意．）

## References


[1] Yuto Ashida, Zongping Gong, Masahito Ueda, arXiv:2006.01837.

[2] Kohei Kawabata, Ken Shiozaki, Masahito Ueda, Masatoshi Sato, arXiv:1812.09133.

[3] Kato, Tosio. A short introduction to perturbation theory for linear operators. Springer Science & Business Media, 2012.