# Kane=Mele $\mathbb{Z}_2$不変量について

塩崎　謙

December 29, 2023

**Abstract**

KaneとMeleによる$\mathbb{Z}_2$不変量の定義 [1]と，[2]によるそのゲージ不変な表式についてのメモ．

## 1　Kane=Mele $\mathbb{Z}_2$不変量

$k=(k_x,k_y)$と書く．２次元の波数空間$T^2$上のギャップのある$2N\times 2N$ ハミルトニアン$H_k$, $H_k^\dagger=H_k$が，$U_T$を反対称なユニタリ行列として，対称性

$$U_T H_k^* U_T^\dagger = H_{-k}, \quad U_T^\top = -U_T, \tag{1}$$

を満たす状況を考える． $H_k$のエネルギー負の固有状態$u_{j,k}$を並べた行列を$\Phi_k=(u_{1,k},\dots,u_{2n,k})$とする． $\Phi_k$はゲージ不定性

$$\Phi_k \mapsto \Phi_k W_k, \quad W_k \in U(2n), \tag{2}$$

を有するものとする．

任意の$2N\times 2m$行列$\Psi$に対して，行列

$$\Psi^\dagger U_T \Psi^* \tag{3}$$

は反対称行列であるから，Pfaffian

$$\mathrm{Pf}\,[\Psi^\dagger U_T \Psi^*] \in \mathbb{C} \tag{4}$$

が定義できることに注意する．

$H_k$から決まる反対称行列

$$M_k = \Phi_k^\dagger U_T \Phi_k^* \tag{5}$$

のPfaffian

$$P_k = \mathrm{Pf}\,[M_k] \tag{6}$$

を考える． $P_k$のPfaffianはゲージ不変ではなく，

$$P_k \mapsto P_k \det W_k^* \tag{7}$$

と変化する．絶対値$|P_k|$はゲージ不変であることに注意．特に，$|P_k|=0$なる点はゲージに依存せず決まる． [1]においては，$P_k$の渦度の偶奇として$\mathbb{Z}_2$不変量を

$$I = \frac{1}{2\pi i}\oint_{\partial\tau} d\log P_k \mod 2 \tag{8}$$

として導入している．ここで，$\tau$は波数空間の1/2の領域である．図1 (a)を見よ．ゲージ変換から来る$\det W_k^*$の巻き付き数は一般には奇数を取るため，素朴には$I$は mod 1でのみwell-definedであり，$\mathbb{Z}_2$数が定義されていないように思われる．例えば，任意の点$k_0$の周りで$\det W_k^*$の巻き付きが非ゼロであるようなゲージ変換を考えると，渦度$I$に寄与する．同時に，$k=k_0$において$\Phi_k$は不連続となる． $P_k$のゼロ点と渦度を１対１対応させるには，$\Phi_k$が連続（任意の方向からの極限がその点における値に等しい）に与えられていれば良い． $S^1$方向への障害は存在しないため（変換関数は$U(2n)$に値を取る），$\tau$上の連続なゲージが存在する．（さらに，Chern数が存在しないため$T^2$全体で連続な$\Phi_k$を取ることができる．）さらに，$I$がwell-definedであるためには，境界$\partial\tau$上で$|P_k|>0$である必要がある．

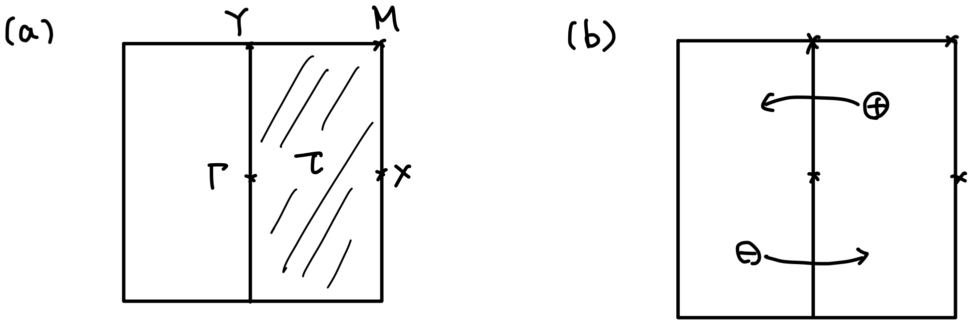


Figure 1

- $\tau$上で$\Phi_k$が連続でかつ$\partial\tau$上で$|P_k| > 0$であるとき，$I$は整数値としてゲージ不変である．

実際，

$$I = \frac{1}{2\pi i}\left[\oint_{-\pi}^{\pi} d_{k_y} \log P_{0,k_y} - \oint_{-\pi}^{\pi} d_{k_y} \log P_{\pi,k_y}\right] \tag{9}$$

であるが，ゲージ変換で

$$I \mapsto I + \frac{1}{2\pi i}\left[\oint_{-\pi}^{\pi} d_{k_y} \log W^*_{0,k_y} - \oint_{-\pi}^{\pi} d_{k_y} \log W_{\pi,k_y}\right] \tag{10}$$

と変化するが，$\Phi_k$の連続性より$k_x = 0, \pi$における$W_{k_x,k_y}$の位相の巻き付き数は等しいため，$I$はゲージ不変．

- $H_k$のギャップを保った連続変化により$\partial\tau$の境界で$|P_k| = 0$となることがあるが，$I$の偶奇は不変に保たれる．

対称性より$\Phi_{-k} = U_T \Phi_k^* V_k$とおくことができる．よって$P_{-k} = P_k^* \det V_k^*$である． $k = k_*$における渦度$i$の$P_k$のゼロ点が存在するとき，$\det V_k^*$の巻き付きが存在すれば$\Phi_k$の連続性に反するから，$\det V_k^*$の巻き付きはゼロであり，$k = -k_*$において渦度$-i$の$P_k$のゼロ点が存在する．時間反転対称点においては$|P_k| = 1$であり，渦は存在しないから，$\tau$内部の渦度の偶奇は保存される．図1 (b)を見よ．

## 2　ゲージ不変な表式

$\mathbb{Z}_2$不変量$I$の表式(8)は$\tau$全体で連続な$\Phi_k$を仮定しているため，計算には適さない． [2]ではゲージ固定不要な表式が紹介されているので，ここでメモする．以下の$\mathbb{C}$値のゲージ不変量を導入する．

$$g(k_y) = \det\left[\prod_{k_x=0}^{\pi-\delta k_x} \Phi_{k_x+\delta k_x k_y} \Phi_{k_x,k_y}\right] \times \frac{\mathrm{Pf}\,[\Phi^\dagger_{0,k_y} U_T \Phi^*_{0,k_y}]}{\mathrm{Pf}\,[\Phi^\dagger_{\pi,k_y} U_T \Phi_{\pi,k_y}]} \in \mathbb{C}. \tag{11}$$

この量はゲージ不変であり，$\partial\tau$において$|P_k| > 0$である限り$g(k_y) \neq 0$であり，位相がwell-defined. “Parallel transport gauge”を取るとWilson線からの寄与が消えるため，

$$g(k_y) = P_{0,k_y}/P_{\pi,k_y} \tag{12}$$

となり，

$$I = \frac{1}{2\pi i}\oint d \log g(k_y) \tag{13}$$

が示される．

# 3 コメント

[1]でもコメントされているが，対称性が存在する場合は$P_k$が実数となり，そのため$P_k = 0$なる領域が閉曲線で出現する場合があり，境界$\partial\tau$において$P_k$のゼロ点が避けられない場合がある． [1]では$I$の定義を

$$I = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\partial\tau} d \log[P_k + i\delta] \tag{14}$$

として， “In this case we find that Eq. (4) also determines the $Z_2$ index (given by 1/2 the number of sign changes along the path $C$), provided we include the convergence factor $\delta$. Note that though the sign of $I$ depends on the sign of $\delta$, $I$ mod 2 does not.” と書かれている． $\mathbb{Z}_2$不変量が$P_k$の符号変化の回数の1/2で与えられる，という点は正しいが，$\delta$が定数である場合は巻き付き数は恒等的にゼロであるため，上の処方により$P_k$が実数である場合にも$I$の表式が拡張されるとの主張は誤りだろう．

一般的な状況においてwell-definedな$\mathbb{Z}_2$不変量の表式は[3]で与えられている．

## References


[1] C.L. Kane, E.J. Mele, “Z2 Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect”, arXiv:cond-mat/0506581.

[2] Heqiu Li, Kai Sun, “Topological insulators and higher-order topological insulators from gauge-invariant 1D lines”, arXiv:2004.05504.

[3] Liang Fu, C.L. Kane, “Time Reversal Polarization and a Z2 Adiabatic Spin Pump”, arXiv:cond-mat/0606336.