PT対称性とトポロジカル不変量（書きかけ）

塩崎　謙

December 14, 2022

Abstract

$(PT)^2=1$なるPT対称性は，既約表現以外のトポロジカル不変量，変換関数としてのトポロジカル不変量とBerry位相の関係，自由度の局在位置とトポロジカル不変量の関係，脆いトポロジカル絶縁体，バンドの直和に対して和として振る舞わないトポロジカル不変量の例，など，結晶対称性によって保護されたトポロジカル絶縁体における技術的な話題を多く含む．文献としては[1]の付録を挙げる．

1　PT対称性

BZで周期的な基底を用いる．dを空間次元とする．PT対称性は以下．

$$V_{\boldsymbol{k}} H_{\boldsymbol{k}}^* V_{\boldsymbol{k}} = H_{\boldsymbol{k}}, \quad V_{\boldsymbol{k}} V_{\boldsymbol{k}}^* = 1. \tag{1}$$

ハミルトニアン$H_{\boldsymbol{k}}$の占有状態として得られうるベクトル束の分類が知りたい．ユニタリ行列$V_{\boldsymbol{k}}$は自由度の局在位置によって決まる．ハミルトニアン$H_{\boldsymbol{k}}$, PT対称性$U_{\boldsymbol{k}}$は共にBZで大域的に定義されている．例えば，単位胞内の反転対称点$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{n}/2, \boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^d$に自由度が存在する場合は，$1\times 1$行列

$$V_{\boldsymbol{k}} = z e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{n}} \tag{2}$$

である．zはU(1)位相．反転対称な対$\boldsymbol{x},-\boldsymbol{x}$（単位胞中心位置からのズレベクトル）が自由度が存在する場合は，2×2行列

$$V_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} & z \\ z^* & \end{pmatrix}. \tag{3}$$

一般には，$V_{\boldsymbol{k}}$は複素対称$V_{\boldsymbol{k}}^T=V_{\boldsymbol{k}}$であるので，一般論より，基底$Q_{\boldsymbol{k}}=(|u_{\boldsymbol{k}}^1\rangle,\dots,|u_{\boldsymbol{k}}^N\rangle)$を用いて，

$$V_{\boldsymbol{k}} Q_{\boldsymbol{k}}^* = Q_{\boldsymbol{k}} \begin{pmatrix} e^{i\theta_{\boldsymbol{k}}^1} & & \\ & \ddots & \\ & & e^{i\theta_{\boldsymbol{k}}^N} \end{pmatrix} \tag{4}$$

とおくことができる．

- $Q_{\boldsymbol{k}}$は大域的に取ることができる？

$H_{\boldsymbol{k}}$を$N\times N$行列とする．BZのgood cover $\{U_i\}$を一つとる．パッチU_i上において，ハミルトニアン$H_{\boldsymbol{k}}$の占有状態の基底の集合$\Phi_{\boldsymbol{k}}^i$は，PT対称なゲージ

$$V_{\boldsymbol{k}} (\Phi_{\boldsymbol{k}}^i)^* = \Phi_{\boldsymbol{k}}^i \tag{5}$$

を満たすように取ることができる．PT対称性の行列$V_{\boldsymbol{k}}$は大域的に定義されていることに注意．nを占有状態の数とする．$\Phi_{\boldsymbol{k}}^i$は擬ユニタリ$N\times n$行列$(\Phi_{\boldsymbol{k}}^i)^\dagger\Phi_{\boldsymbol{k}}^i=1_n$である．パッチの重なり部分$U_{ij}=U_i\cap U_j$において変換関数

$$t_{\boldsymbol{k}}^{ij} = (\Phi_{\boldsymbol{k}}^i)^\dagger \Phi_{\boldsymbol{k}}^j, \quad \boldsymbol{k}\in U_{ij}, \tag{6}$$

が定義される． $t_{\boldsymbol{k}}^{ij}$は実対称行列である．実際，

$$(\Phi_{\boldsymbol{k}}^i)^* = V_{\boldsymbol{k}}^\dagger \Phi_{\boldsymbol{k}}^i \tag{7}$$

に注意すると，

$$(t_{\boldsymbol{k}}^{ij})^* = (\Phi_{\boldsymbol{k}}^i)^\dagger V_{\boldsymbol{k}} V_{\boldsymbol{k}}^\dagger \Phi_{\boldsymbol{k}}^j = (\Phi_{\boldsymbol{k}}^i)^\dagger \Phi_{\boldsymbol{k}}^j = t_{\boldsymbol{k}}^{ij} \tag{8}$$

より． $O(n)$に値を取る変換関数$t_{\boldsymbol{k}}^{ij}$のホモトピー同値類の分類が，PT対称な絶縁体の分類を与える．

トポロジカル不変量は，定義から，$t_{\boldsymbol{k}}^{ij}$の分類によって与えられる．しかし，滑らかな基底$\Phi_{\boldsymbol{k}}^i$の構成，PT対称ゲージなど，数値計算上望ましくない性質を課すため，条件を緩めた，より数値計算が容易な表式に書き換えることがある．

2　1次元系

まずは1次元系を考える．パッチはひとつ$[0, 2\pi]$を取ってよく， PT対称なゲージを満たすものとする．

$$V_k \Phi_k^* = \Phi_k. \tag{9}$$

$k = 0 = 2\pi$における変換関数

$$t = \Phi_0^\dagger \Phi_{2\pi} \in O(n) \tag{10}$$

は，$\mathbb{Z}_2$値

$$\det t \in \pm 1 \tag{11}$$

によって分類され，$\det t$がトポロジカル不変量である．実際，PT対称なゲージ変換

$$\Phi_k \mapsto \Phi_k W_k, \quad W_k \in O(n) \tag{12}$$

（W_kは$[0, 2\pi]$上で連続であり，$W_{2\pi} \neq W_0$で良い）に対して

$$t \mapsto W_0^T t W_{2\pi} \tag{13}$$

であるが，$\det W_k$は一定であるから$\det t$はゲージ不変.

トポロジカル不変量tの，PT対称ゲージ条件を消した表式を考える． PTゲージを課さない一般のゲージ変換

$$\Phi_k \mapsto \Phi_k W_k, \quad W_k \in U(n), \tag{14}$$

に対して，

$$\det t \mapsto \det W_0^\dagger \det t \det W_{2\pi} \tag{15}$$

であるから，$\det t$はゲージ変換で値を変える．ゲージ不変にするためには，Berry位相項を加える．以下の$U(1)$値はゲージ不変量.

$$e^{i\gamma} = \det(\Phi_0^\dagger \Phi_{2\pi}) e^{-\int_0^{2\pi} \operatorname{tr} \Phi_k^\dagger d\Phi_k} \in U(1). \tag{16}$$

この量がtと一致するかどうかを考える． Φ_kは$[0, 2\pi]$上で一意的に定義されているから， $\int_0^{2\pi} \operatorname{tr} \Phi_k^\dagger d\Phi_k$に$2\pi i\mathbb{Z}$の不定性は存在しないことに注意する． PT対称ゲージ

$$\Phi_k^* = V_k^* \Phi_k \tag{17}$$

を課すと [1]，$(\mathrm{tr}\,\Phi^\dagger d\Phi)^* = -\mathrm{tr}\,\Phi^\dagger d\Phi$に注意して，

$$-\int_0^{2\pi} \mathrm{tr}\,\Phi_k^\dagger d\Phi_k = \int_0^{2\pi} \mathrm{tr}\,(\Phi_k^\dagger d\Phi_k)^* \tag{18}$$

$$= \int_0^{2\pi} \mathrm{tr}\,\Phi_k^\dagger V_k^T d(V_k^* \Phi_k) \tag{19}$$

$$= \int_0^{2\pi} \mathrm{tr}\,\Phi_k^\dagger d\Phi_k + \int_0^{2\pi} \mathrm{tr}\,\Phi_k^\dagger (V_k^T dV_k^*)\Phi_k. \tag{20}$$

よって，

$$-\int_0^{2\pi} \mathrm{tr}\,\Phi_k^\dagger d\Phi_k = \frac{1}{2}\int_0^{2\pi} \mathrm{tr}\,\Phi_k^\dagger (V_k^T dV_k^*)\Phi_k \tag{21}$$

となる．右辺はゲージ不変量であることに注意する． PT対称ゲージを課すと

$$e^{i\gamma} = \det(\Phi_0^\dagger \Phi_{2\pi}) e^{\frac{1}{2}\int_0^{2\pi} \mathrm{tr}\,\Phi_k^\dagger (V_k^T dV_k^*)\Phi_k} = \det t \times e^{\frac{1}{2}\int_0^{2\pi} \mathrm{tr}\,\Phi_k^\dagger (V_k^T dV_k^*)\Phi_k} \tag{22}$$

であるから， PT対称ゲージ条件を課さない$\mathbb{Z}_2$不変量の表式

$$\boxed{\det t = e^{i\gamma} e^{-i\beta}, \quad e^{i\beta} := e^{\frac{1}{2}\int_0^{2\pi} \mathrm{tr}\,\Phi_k^\dagger (V_k^T dV_k^*)\Phi_k}} \tag{23}$$

を得る． ここで，第一因子$e^{i\gamma}$はBerry位相でありゲージ不変． また第２因子$e^{i\beta}$もゲージ変換$\Phi_k \mapsto \Phi_k W_k$に対して変化しないため，ゲージ不変．

- $e^{i\gamma}, e^{i\beta}$は個別に$\mathbb{Z}_2$値？あるいは組み合わせのみが$\mathbb{Z}_2$値？

2.1 例

- $V_k = 1$，$\Phi_k \sim (1)$とすると，

$$e^{i\gamma} = 1, \quad e^{i\beta} = 1 \tag{24}$$

  より，

$$\det t = 1. \tag{25}$$

- $V_k = e^{ik}$，$\Phi_k \sim (1)$とすると，

$$e^{i\gamma} = 1, \quad e^{i\beta} = -1 \tag{26}$$

  より，

$$\det t = -1. \tag{27}$$

- $V_k = 1_2$，$\Phi_k \sim (\cos\frac{k}{2}, \sin\frac{k}{2})^T$とすると，

$$e^{i\gamma} = -1, \quad e^{i\beta} = 1 \tag{28}$$

  より，

$$\det t = -1. \tag{29}$$

- $V_k = e^{ik} 1_2$，$\Phi_k \sim (\cos\frac{k}{2}, \sin\frac{k}{2})^T$とすると，

$$e^{i\gamma} = -1, \quad e^{i\beta} = -1 \tag{30}$$

  より，

$$\det t = 1. \tag{31}$$

など． 占有状態から構成したWanner状態の局在位置と一致することに注意.

[1] $\Phi_k^* = V_k^\dagger \Phi_k$よりもこちらの方が性質が良さそうだ.

2.2　BZで非周期的な基底

実空間から波数空間へのフーリエ変換を

$$|k,a\rangle' = \sum_R |R+x_a\rangle\, e^{ik(R+x_a)} \tag{32}$$

と，自由度の単位胞中心位置Rからのズレx_aを加えた，基底を考える．

$$|k,a\rangle' = |k+2\pi,b\rangle'\, U_{ba}(2\pi), \quad U_{ba}(k) = \delta_{ba} e^{-ikx_b}, \tag{33}$$

であるため，ハミルトニアンは以下の境界条件を満たす．

$$U(2\pi)H(k)U(2\pi)^\dagger = H(k+2\pi). \tag{34}$$

BZにおいて周期的なハミルトニアンH_kとの関係は

$$H_k = U(k)^\dagger H(k) U(k) \tag{35}$$

である．占有状態，PT対称性の行列についてもそれぞれ

$$\Phi_k = U(k)^\dagger \Phi(k), \tag{36}$$

$$V_k = U(k)^\dagger V(k) U(k)^* \tag{37}$$

の関係にある．

　$\mathbb{Z}_2$不変量の表式をBZで非周期的な場合に書き換える． Berry位相は

$$\begin{aligned}
e^{i\gamma} &= \det(\Phi_0^\dagger \Phi_{2\pi}) \exp\left[-\int_0^{2\pi} \mathrm{tr}\, \Phi_k^\dagger d\Phi_k\right] && (38)\\
&= \det[\Phi(0)^\dagger U(0) U(2\pi)^\dagger \Phi(2\pi)] \exp\left[-\int_0^{2\pi} \mathrm{tr}\, \Phi(k)^\dagger U(k) d\{U(k)^\dagger \Phi(k)\}\right] && (39)\\
&= \det[\Phi(0)^\dagger U(2\pi)^\dagger \Phi(2\pi)] \exp\left[-\int_0^{2\pi} \mathrm{tr}\, \Phi(k)^\dagger d\Phi(k)\right] \exp\left[-\int_0^{2\pi} \mathrm{tr}\, \Phi(k)^\dagger U(k) dU(k)^\dagger \Phi(k)\right] && (40)
\end{aligned}$$

となり，非周期的な基底におけるBerry位相

$$e^{i\gamma_{\mathrm{NP}}} = \det[\Phi(0)^\dagger U(2\pi)^\dagger \Phi(2\pi)] \exp\left[-\int_0^{2\pi} \mathrm{tr}\, \Phi(k)^\dagger d\Phi(k)\right] \tag{41}$$

と，補正項

$$e^{-i\delta} := \exp\left[-\int_0^{2\pi} \mathrm{tr}\, \Phi(k)^\dagger U(k) dU(k)^\dagger \Phi(k)\right] \tag{42}$$

の積となる． $e^{i\beta}$については，

$$\begin{aligned}
e^{i\beta} &= \exp\left[\frac{1}{2}\int_0^{2\pi} \mathrm{tr}\, \Phi_k^\dagger (V_k^T dV_k^*) \Phi_k\right] && (43)\\
&= \exp\left[\frac{1}{2}\int_0^{2\pi} \mathrm{tr}\, \Phi(k)^\dagger U(k) (U(k)^\dagger V(k) U(k)^*)^T d(U(k)^\dagger V(k) U(k)^*)^* U(k)^\dagger \Phi(k)\right] && (44)\\
&= \exp\left[\frac{1}{2}\int_0^{2\pi} \mathrm{tr}\, \Phi(k)^\dagger \{V(k)^T U(k)^* dU(k)^T V(k)^* + V(k)^T dV(k)^* + dU(k) U(k)^\dagger\} \Phi(k)\right] && (45)\\
& && (46)
\end{aligned}$$

であるが，$\Phi(k)$はPT対称性を満たすため，

$$V(k)\Phi(k)^* = \Phi(k) w(k) \tag{47}$$

なるユニタリ行列$w(k)$が存在するから，第 1 項は

$$\exp\left[\frac{1}{2}\int_0^{2\pi}\operatorname{tr} w(k)^T\Phi(k)^T U(k)^* dU(k)^T\Phi(k)^* w(k)^*\right] \tag{48}$$

$$= \exp\left[\frac{1}{2}\int_0^{2\pi}\operatorname{tr}\Phi(k)^T U(k)^* dU(k)^T\Phi(k)^*\right] \tag{49}$$

$$= \exp\left[\frac{1}{2}\int_0^{2\pi}\operatorname{tr}\Phi(k)^\dagger dU(k)U(k)^\dagger\Phi(k)\right] \tag{50}$$

より，

$$e^{i\beta} = \exp\left[\frac{1}{2}\int_0^{2\pi}\operatorname{tr}\Phi(k)^\dagger\{V(k)^T dV(k)^* + 2dU(k)U(k)^\dagger\}\Phi(k)\right] \tag{51}$$

$$= \exp\left[\frac{1}{2}\int_0^{2\pi}\operatorname{tr}\Phi(k)^\dagger\{V(k)^T dV(k)^* - 2U(k)dU(k)^\dagger\}\Phi(k)\right] \tag{52}$$

$$= \exp\left[\frac{1}{2}\int_0^{2\pi}\operatorname{tr}\Phi(k)^\dagger V(k)^T dV(k)^*\Phi(k)\right] e^{-i\delta}. \tag{53}$$

よって，

$$e^{i\beta}e^{i\delta} = \exp\left[\frac{1}{2}\int_0^{2\pi}\operatorname{tr}\Phi(k)^\dagger V(k)^T dV(k)^*\Phi(k)\right] \tag{54}$$

となる．よって，非周期的基底における$\mathbb{Z}_2$不変量の表式

$$\det t = e^{i\gamma_{\mathrm{NP}}}e^{-i\beta_{\mathrm{NP}}}, \quad e^{i\beta_{\mathrm{NP}}} = \exp\left[\frac{1}{2}\int_0^{2\pi}\operatorname{tr}\Phi(k)^\dagger V(k)^T dV(k)^*\Phi(k)\right] \tag{55}$$

を得る．周期的基底における$\mathbb{Z}_2$不変量の表式と完全に等しいことに注意． $e^{i\beta_{\mathrm{NP}}}$は実はPT対称性の定義と占有状態の数だけできまり，占有状態の詳細に依存しない：非周期基底においては，PT変換の実空間作用を$PT: x\mapsto -x+2a_{\mathrm{PT}}$としたとき（$a_{\mathrm{PT}}$が反転中心），$k$依存しないユニタリ行列$D$を用いて

$$V(k) := e^{-ik2a_{\mathrm{PT}}}D \tag{56}$$

である．よって，占有状態の数（単位胞辺りの電子の数）をνとすると，

$$e^{i\beta_{\mathrm{NP}}} = e^{2\pi i\nu a_{\mathrm{PT}}} \tag{57}$$

である．結局，以下が示された．

$$\det t = e^{i\gamma}e^{-i\beta} = e^{i\gamma_{NP}}e^{-i\delta} = e^{i\gamma_{NP}}e^{-2\pi i\nu a_{\mathrm{PT}}}. \tag{58}$$

さらに，非周期的基底におけるBerry位相$e^{i\gamma_{NP}}$はWanner状態の局在位置（の和）

$$\frac{\gamma_{NP}}{2\pi} = \sum_{n=1}^{\nu}\langle W_{nR}\,|\,\hat{r}-R\,|\,W_{nR}\rangle = \langle\hat{r}\rangle \in \mathbb{R}/\mathbb{Z} \tag{59}$$

だったことを思い出すと，

$$\det t = e^{2\pi i(\langle\hat{r}\rangle - \nu a_{\mathrm{PT}})} \tag{60}$$

である．特に，1バンド$\nu=1$の場合は，

$$\det t = e^{2\pi i(\langle\hat{r}\rangle - a_{\mathrm{PT}})} \tag{61}$$

であり，$\mathbb{Z}_2$不変量$\det t$は占有状態の反転中心からのズレ，という物理的意味がある．

2.3　単位胞中心の選び方に対する依存性

$\mathbb{Z}_2$不変量は単位胞の中心位置の選び方に依存しない．この点は，単位胞中心の選び方は連続的な変化であることから自明であるが，不変量の表式からも確認できる．単位胞中心の選び方の変化

$$R \mapsto R + \delta R \tag{62}$$

に対して，占有状態の局在位置の変化は

$$\langle \hat{r} \rangle \mapsto \langle \hat{r} \rangle + \nu \delta R. \tag{63}$$

一方で，反転中心a_{PT}の変化は

$$a_{\mathrm{PT}} \mapsto a_{\mathrm{PT}} + \delta R \tag{64}$$

であるから，寄与がキャンセルし，$\mathbb{Z}_2$不変量$\det t$は不変である．

2.4　反転中心の選び方に対する依存性

一方で，$\mathbb{Z}_2$不変量は反転中心の選び方に依存する．反転中心の選び方は任意性がある．（点群から空間群への切断のゲージ変換の自由度．）つまり，任意の整数$n \in \mathbb{Z}$に対して，

$$\{PT|n + 2a_{\mathrm{PT}}\} = \{1|n\}\{PT|2a_{\mathrm{PT}}\} : x \mapsto -x + 2a_{\mathrm{PT}} + n \tag{65}$$

を空間反転として選んで良い．この変換で反転中心は

$$a_{\mathrm{PT}} \mapsto a_{\mathrm{PT}} + \frac{n}{2} \tag{66}$$

と変化する．表式

$$\det t = e^{2\pi i(\langle \hat{r} \rangle - \nu a_{\mathrm{PT}})} \tag{67}$$

において，局在位置の期待値$\langle \hat{r} \rangle$はPT変換とは無関係に定義されているから，反転中心a_{PT}の選び方に依存しない．よって，

$$\det t = e^{2\pi i(\langle \hat{r} \rangle - \nu a_{\mathrm{PT}})} \mapsto e^{2\pi i(\langle \hat{r} \rangle - \nu(a_{\mathrm{PT}} + \frac{n}{2}))} = \det t \times e^{-\pi i \nu n} \tag{68}$$

と変化する．したがって，占有状態のバンド数νが偶数である場合に，$\mathbb{Z}_2$不変量$\det t$は反転中心の選び方に依存しない．

3　2次元

- 2次のSWクラス，バンドの直和．
- fragile topology.

References

[1] Junyeong Ahn, Dongwook Kim, Youngkuk Kim, Bohm-Jung Yang, *Band Topology and Linking Structure of Nodal Line Semimetals with Z2 Monopole Charges*, arXiv:1803.11416 .