

メモ：Wannier状態とスペクトル流

Ken Shiozaki

October 28, 2024

絶縁体において、占有、非占有の両方について指数関数的に局在するWannier状態が構成できれば、あらゆる実空間境界において（高次絶縁体を含む）スペクトル流は存在しないことの説明のメモ。（[1]のII-A節に書かれていることと等価。）

$H_{\mathbf{k}}$ を単位胞当たりの自由度が N のハミルトニアンとする。つまり、 $H_{\mathbf{k}}$ は $N \times N$ 行列。単位胞内の自由度を $|\mathbf{x}\alpha\rangle$ と書く。ハミルトニアンは

$$H = \sum_{\alpha\beta, \mathbf{x}\mathbf{x}'} h_{\alpha,\beta}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') |\mathbf{x}\alpha\rangle \langle \mathbf{x}'\beta|. \quad (0.1)$$

$h_{\alpha\beta}(\mathbf{x})$ は指数関数的に減衰すると仮定する。スペクトルギャップを仮定する。占有状態と非占有状態の両方について、指数関数的に局在し、かつ対称性を保つWannier状態 $w_{n\mathbf{R}}$ が構成できたと仮定する。ここで、「対称性を保つ」とは、対称性変換によってWannier状態 $w_{n\mathbf{R}}$ があるサイト \mathbf{R}' におけるWannier状態 $w_{n'\mathbf{R}'}$ の線形結合となることを指す。ハミルトニアン $H_{\mathbf{k}}$ が定義された自由度はWannier基底で展開できるため、ハミルトニアン $H_{\mathbf{k}}$ はWannier基底を用いた短距離ホッピング模型となる。

$$H = \sum_{nn', \mathbf{R}\mathbf{R}'} t_{nn'}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') |\mathbf{R}n\rangle \langle \mathbf{R}'n'|. \quad (0.2)$$

ここで、 $t_{nn'}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ は指数関数的に減衰する。（指数関数的に減衰するWannierが存在しない場合は、 $t_{nn'}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ が長距離ホッピングとなる。）

さて、 H をギャップと対称性を保ち平坦化する。平坦化したハミルトニアンを H' と書く。 H' はWannier基底で“原子絶縁体”となる。

$$H' = \sum_{n\mathbf{R}} \epsilon_{n\mathbf{R}} |\mathbf{R}n\rangle \langle \mathbf{R}n|. \quad (0.3)$$

平坦化

$$H_t = (1-t)H + tH', \quad t \in [0, 1], \quad (0.4)$$

によりスペクトル流の存在/非存在は保たれることに注意。境界条件としてWannier基底 $|\mathbf{R}n\rangle$ に対してOBCを考える：

$$\phi_n(\mathbf{R}) = 0, \quad R_x > 0. \quad (0.5)$$

すると、スペクトルは厳密に $\epsilon_{n\mathbf{R}}$ で与えられる。あるいは自由度が $R_x > 0$ にも存在する場合はゼロ状態となる。（0.5）はもとの基底 $|\mathbf{x}\alpha\rangle$ においても何らかの境界条件ではあり、スペクトル流の有無は境界条件に依存しないと仮定すると、占有、非占有状態の指数関数的Wannier状態の存在からスペクトル流の非存在が証明される。

注意：一般論として、境界条件を境界近傍のハミルトニアン H_{bdy} で与えることもできる。もとの基底のOBCを H_{bdy} 、Wannier基底のOBC (0.5)を $H_{\text{W,bdy}}$ と書くと、境界条件の連続変化

$$(1-s)H_{\text{W,bdy}} + sH_{\text{bdy}} \quad (0.6)$$

によってスペクトル流が出現するかどうかという問題となるが、ギャップが保たれている限りスペクトル流は連続変形に関する不変量であるから、スペクトル流の有無は変化しない。

メモ：

- 現実のハミルトニアンは無限の非占有状態を持つ。この場合の扱いはどうする？

References

- [1] Alexander Altland, Piet W. Brouwer, Johannes Dieplinger, Matthew S. Foster, Mateo Moreno-Gonzalez, and Luka Trifunovic, *Fragility of Surface States in Non-Wigner-Dyson Topological Insulators*, Phys. Rev. X 14, 011057 – Published 27 March 2024