指数関数的なWannier状態に対する障害について

塩崎　謙

December 31, 2023

Abstract

指数関数的なWannier状態が存在するための条件はChern数がゼロであるとされているが，再検討する．

強束縛近似模型におけるハミルトニアンを考える．単位胞中心を$\boldsymbol{R}$とし，自由度の局在位置を$\boldsymbol{x}_\alpha$と書き，内部自由度をiと書く．ハミルトニアンを$H_{\boldsymbol{k}}$とする． $H_{\boldsymbol{k}}$は周期性

$$V_{\boldsymbol{G}} H_{\boldsymbol{k}} V_{\boldsymbol{G}}^\dagger = H_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}}, \quad [V_{\boldsymbol{G}}]_{\alpha i,\beta j} = e^{i\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{x}_\alpha}\delta_{\alpha\beta}\delta_{ij} \tag{1}$$

を満たす． $\boldsymbol{G}$は逆格子ベクトル． $H_{\boldsymbol{k}}$のエネルギー負の状態を並べた行列を

$$\Phi_{\boldsymbol{k}} = (u_{1,\boldsymbol{k}}, \dots, u_{n,\boldsymbol{k}}) \tag{2}$$

とする．問題設定は，

- 波数空間全体で連続であり，周期性$V_{\boldsymbol{G}}\Phi_{\boldsymbol{k}} = \Phi_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}}$を満たす$\Phi_{\boldsymbol{k}}$はいつ存在するか？

$V_{\boldsymbol{G}}$依存性については消すことができる． $\boldsymbol{k}$依存するユニタリ変換

$$[V_{\boldsymbol{k}}]_{\alpha i,\beta j} = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}_\alpha}\delta_{\alpha\beta}\delta_{ij} \tag{3}$$

を導入し，

$$\tilde{H}_{\boldsymbol{k}} = V_{\boldsymbol{k}}^\dagger H_{\boldsymbol{k}} V_{\boldsymbol{k}} \tag{4}$$

とすると，$V_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}} = V_{\boldsymbol{k}} V_{\boldsymbol{G}}$に注意して

$$\tilde{H}_{\boldsymbol{k}} = \tilde{H}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}} \tag{5}$$

が得られる．

以下，$H_{\boldsymbol{k}}$は周期的$H_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}} = H_{\boldsymbol{k}}$とする．

1 $d = 2$

まずは 1 バンドの場合を考える． S^1方向に障害はない．よって，占有状態u_{k_x,k_y}は$k_x \in S^1, k_y \in [0, 2\pi]$上で連続と仮定して良い．

$$e^{i\theta_{k_x}} = u_{k_x,2\pi}^\dagger u_{k_x,0} \in U(1) \tag{6}$$

として，マップ$S^1 \to U(1)$が定まる． θ_{k_x}の巻き付き数（Chern数）は連続な$u_{\boldsymbol{k}}$を与える障害となるため，θ_{k_x}の巻き付きはゼロとする．このとき，ゲージ変換

$$e^{\chi_{\boldsymbol{k}}} : S^1 \times [0, 2\pi] \to U(1) \tag{7}$$

であり，

$$\tilde{u}_{\boldsymbol{k}} = u_{\boldsymbol{k}} e^{i\chi_{\boldsymbol{k}}} \tag{8}$$

がT^2全体で連続であるようなものが存在する．なぜなら，ゲージ変換で

$$\theta_{k_x} \mapsto \theta_{k_x} - \chi_{k_x,2\pi} + \chi_{k_x,0} \tag{9}$$

であるが，

$$e^{i\chi_{k_x,2\pi}} = e^{i\theta_{k_x}}, \quad e^{i\chi_{k_x,0}} = 1 \tag{10}$$

として，$k_y \in [0,2\pi]$はホモトピー$e^{i\chi_{k_x,2\pi}} \sim 1$で繋げば良い．

次に一般のnバンドの場合を考える．同様にして，

$$U_{k_x} = \Phi^\dagger_{k_x,2\pi}\Phi_{k_x,0} \in U(n) \tag{11}$$

が定まる．ゲージ変換

$$V_{\boldsymbol{k}} : S^1 \times [0,2\pi] \to U(n) \tag{12}$$

により，

$$U_{k_x} \mapsto V^\dagger_{k_x,2\pi} U_{k_x} V_{k_x,0} \tag{13}$$

と変化する．

$$V_{k_x,2\pi} = U_{k_x}, \quad V_{k_x,0} = 1 \tag{14}$$

と置く．ホモトピー

$$U_{k_x} \sim 1 \tag{15}$$

がいつ存在するかを調べれば良い． $\pi_1[U(n)] = \mathbb{Z}$より，巻き付き数（Chern数）がゼロであればホモトピーが存在する．

2 $d = 3$

空間３次元，nバンド系を考える．全ての方向のChern数はゼロとする． $\Phi_{\boldsymbol{k}}$は$S^1 \times S^1 \times [0,2\pi]$で連続と仮定して良い．

$$U_{k_x,k_y} = \Phi^\dagger_{k_x,k_y,2\pi}\Phi_{k_x,k_y,0} \in U(n) \tag{16}$$

が定まる．前節の議論より，ホモトピー

$$U_{k_x,k_y} \sim 1 \tag{17}$$

が存在する条件を調べれば良い．事実として，

$$[T^2, U(n)] = \mathbb{Z} \times \mathbb{Z} \tag{18}$$

であり，それぞれk_xk_z, k_yk_z面内のChern数で特徴づけられるから，Chern数がゼロであればU_{k_x,k_y}はヌルホモトピック．

コメントとして，U_{k_x,k_y}はWilson loopに等しい．よって，Chern数が存在しない場合は，全ての固有値を1にするホモトピーが存在することは直感的に理解できる．