# クラスDハミルトニアンの諸性質

塩崎　謙

January 13, 2024

**Abstract**

## 1　準備

このノートの目的は，ギャップのある2次元のハミルトニアン$H(\boldsymbol{k})^\dagger = H(\boldsymbol{k}), \boldsymbol{k} = (k_x, k_y)$が各点でクラスDの対称性

$$U_C H(\boldsymbol{k})^T U_C^\dagger = -H(\boldsymbol{k}), \quad U_C^T = U_C, \tag{1}$$

を満たすとき，Chern数$ch_1 \in 2\mathbb{Z}$証明することである．波数を変化させないから，この対称性は$C_2C$つまり，$C_2$回転とPHSを組み合わせた対称性である．一般には上記の$U_C$は$\boldsymbol{k}$依存するが，簡単のため，$U_C$は$\boldsymbol{k}$依存しないものとする． $H(\boldsymbol{k})$は$2n \times 2n$行列とする．

ハミルトニアンは平坦化，つまり，固有値は$\pm 1$に断熱変形されているものとする．

$U_C$は複素対称行列であるので，$U$をユニタリ行列として，$U_C = UU^T$と書くことができる，この$U$で基底変換すると，ハミルトニアンの対称性は

$$H(\boldsymbol{k})^T = -H(\boldsymbol{k}) \tag{2}$$

である． $A(\boldsymbol{k}) = iH(\boldsymbol{k})$を導入すると，$A(\boldsymbol{k})$は実反対称行列である．

$$A(\boldsymbol{k})^* = A(\boldsymbol{k}), \quad A(\boldsymbol{k})^T = -A(\boldsymbol{k}). \tag{3}$$

行列$A(\boldsymbol{k})$は直交行列$Q(\boldsymbol{k})$を用いて以下のように書かれる．

$$A(\boldsymbol{k}) = Q(\boldsymbol{k}) i\tau_y Q(\boldsymbol{k})^T, \quad Q(\boldsymbol{k}) \in \mathrm{O}(2n). \tag{4}$$

$Q(\boldsymbol{k})$はゲージ不定性がある．

$$Q(\boldsymbol{k}) \mapsto Q(\boldsymbol{k})V(\boldsymbol{k}). \tag{5}$$

ここで，$V(\boldsymbol{k}) \in \mathrm{O}(2n)$であり，

$$[i\tau_y, V(\boldsymbol{k})] = 0 \tag{6}$$

を満たす．解くと，

$$V(\boldsymbol{k}) = \begin{pmatrix} a(\boldsymbol{k}) & b(\boldsymbol{k}) \\ -b(\boldsymbol{k}) & a(\boldsymbol{k}) \end{pmatrix}, \quad a(\boldsymbol{k}), b(\boldsymbol{k}) \in \mathrm{Mat}_{n\times n}(\mathbb{R}), \tag{7}$$

$$a(\boldsymbol{k})a(\boldsymbol{k})^T + b(\boldsymbol{k})b(\boldsymbol{k})^T = 1_n, \quad a(\boldsymbol{k})b(\boldsymbol{k})^T - b(\boldsymbol{k})a(\boldsymbol{k})^T = 0, \tag{8}$$

である．

$$U(\boldsymbol{k}) = a(\boldsymbol{k}) + ib(\boldsymbol{k}) \tag{9}$$

とすると，$U(\boldsymbol{k})U(\boldsymbol{k})^\dagger = 1_n$と等価である．逆に，与えられた$\mathrm{U}(n)$行列$U$から$a = \mathrm{Re}\, U = (U + U^*)/2, b = \mathrm{Im}\, U = (U - U^*)/(2i)$とすると，上の性質を満たす．よって，ゲージ自由度は$\mathrm{U}(n)$群である．埋め込み$\mathrm{U}(n) \to \mathrm{O}(2n)$を明示すると，

$$\mathrm{U}(n) \ni U \mapsto \begin{pmatrix} \mathrm{Re}\, U & \mathrm{Im}\, U \\ -\mathrm{Im}\, U & \mathrm{Re}\, U \end{pmatrix} \in \mathrm{SO}(2n). \tag{10}$$

$V(\boldsymbol{k}) \in \mathrm{SO}(2n)$に注意．

## 2　ゲージ自由度とChern数

$U_C = 1$とする．

$$A(\boldsymbol{k}) = Q(\boldsymbol{k}) i\tau_y Q(\boldsymbol{k})^T \tag{11}$$

とする．ハミルトニアンは

$$H(\boldsymbol{k}) = -iA(\boldsymbol{k}) = Q(\boldsymbol{k})\tau_y Q(\boldsymbol{k})^T \tag{12}$$

であり，占有状態は局所的に

$$\mathcal{U}_-(\boldsymbol{k}) = Q(\boldsymbol{k})\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \tag{13}$$

で与えられる．すると$U(1)$接続は

$$\mathcal{A} = \mathrm{tr}\,[\mathcal{U}_-^\dagger d\mathcal{U}_-] = \frac{1}{2}\mathrm{tr}\,[(1-\tau_y)Q^T dQ] = \frac{1}{2}\mathrm{tr}\,[Q^T dQ] - \frac{1}{2}\mathrm{tr}\,[\tau_y Q^T dQ] \tag{14}$$

$$= \frac{1}{2} d\log\det Q - \frac{1}{2}\mathrm{tr}\,[\tau_y Q^T dQ] = -\frac{1}{2}\mathrm{tr}\,[\tau_y Q^T dQ]. \tag{15}$$

ゲージ変換$Q \mapsto QV$に対して，

$$\mathcal{A} \mapsto \mathcal{A} - \frac{1}{2}\mathrm{tr}\,[\tau_y V^T dV]. \tag{16}$$

$$V = \begin{pmatrix} \mathrm{Re}\, U & \mathrm{Im}\, U \\ -\mathrm{Im}\, U & \mathrm{Re}\, U \end{pmatrix}, U \in \mathrm{U}(n) \tag{17}$$

を代入すると，

$$-\frac{1}{2}\mathrm{tr}\,[\tau_y V^T dV] = -i\mathrm{tr}\,[(\mathrm{Re}\, U)^T d\mathrm{Im}\, U - (\mathrm{Im}\, U)^T d\mathrm{Re}\, U] = -d\log\det U. \tag{18}$$

すると，球面$S^2$上のChern数は，赤道のゲージ変換を$U(\phi) \in \mathrm{U}(n)$として，

$$ch_1 = \frac{1}{2\pi i}\oint d\log\det U \tag{19}$$

となる．

## 3　$ch_1 \in 2\mathbb{Z}$の証明

$ch_1 \in 2\mathbb{Z}$であることが以下のように証明される．

　ホモトピー完全列より，$n \geq 2$のとき，

$$0 \to \pi_2[O(2n)/U(n)] \xrightarrow{2} \pi_1[U(n)] \xrightarrow{\mathrm{mod}\ 2} \pi_1[O(2n)] \to 0. \tag{20}$$

であるので，

$$\mathrm{U}(n) \ni U \mapsto V = \begin{pmatrix} \mathrm{Re}\, U & \mathrm{Im}\, U \\ -\mathrm{Im}\, U & \mathrm{Re}\, U \end{pmatrix} \in O(2n) \tag{21}$$

で決まるループが自明な基本群に属することを示せば良いが，

$$V'(\phi,\theta) := Q_S(\pi-\theta,\phi)^T Q_N(\theta,\phi), \quad \theta \in [0, \frac{\pi}{2}], \tag{22}$$

とすると$V(\phi)$は1点$V'(0,\phi)=Q_S(\pi,\phi)^T Q_N(0,\phi)$にホモトピック．[1]

次に，トーラスの場合を考える．$\pi_0[O(2n)]=\mathbb{Z}_2$であり，$\det Q\in\pm 1$で特徴づけられるが，ギャップレス点の不在は$\det Q$が$T^2$全体で一定であることを意味する．よって，$T^2$上の任意のループ$C$に対して，$Q(\phi)\in O(n),\phi\in C$が定まる．$k_x$方向に$k_x\in S^1$全体で連続なゲージを取る．$k_y$方向は区間$k_y\in[0,2\pi]$において連続なゲージを取ることができる．すると，変換関数

$$V(k_x)=Q(k_x,0)^T Q(k_x,2\pi),\quad k_x\in S^1, \tag{23}$$

が定まる．すると，$\pi_1[O(2n)]$の元として，$[V]=-[Q(k_y=0)]+[Q(k_y=2\pi)]$であるが[2]，$Q(k_x,k_y)$がホモトピー同値$Q(k_y=0)\sim Q(k_y=2\pi)$を与えるので，$[V]=0$．よって，$V(k_x)$はnull homotopicである．

# 4 模型

Dirac模型を考える．$\gamma^*=\gamma,\gamma^T=-\gamma$を満たす互いに反可換な行列は，$2\times 2$だと$i\tau_y$のひとつ，$4\times 4$だと$i\sigma_y,i\sigma_x\tau_y,i\sigma_z\tau_y$の3つある．よって$S^2$上のDirac模型の行列次元は$4\times 4$が最小．

模型は

$$H(\boldsymbol{n})=\boldsymbol{n}\cdot(\sigma_x\tau_y,\sigma_y,\sigma_z\tau_y)=e^{-i\phi\sigma_z\tau_y/2}e^{-i\theta\sigma_y/2}\sigma_z\tau_y e^{i\theta\sigma_y/2}e^{i\phi\sigma_z\tau_y/2}. \tag{24}$$

このとき，

$$A(\boldsymbol{n})=iH(\boldsymbol{n})=e^{-i\phi\sigma_z\tau_y/2}e^{-i\theta\sigma_y/2}\sigma_z\tau_y e^{i\theta\sigma_y/2}e^{i\phi\sigma_z\tau_y/2} \tag{25}$$

$$=e^{-i\phi\sigma_z\tau_y/2}e^{-i\theta\sigma_y/2}(\tau_0\oplus\tau_z)(1\otimes i\tau_y)(\tau_0\oplus\tau_z)e^{i\theta\sigma_y/2}e^{i\phi\sigma_z\tau_y/2}. \tag{26}$$

よって，

$$Q(\boldsymbol{n})\sim e^{-i\phi\sigma_z\tau_y/2}e^{-i\theta\sigma_y/2}(\tau_0\oplus\tau_z) \tag{27}$$

である．この表示は$\theta=0,\pi$で連続的にはない．$U(2)$ゲージ変換を用いて，北半球と南半球でそれぞれ連続な$Q_N(\boldsymbol{n}),Q_S(\boldsymbol{n})$は

$$Q_N(\boldsymbol{n})=e^{-i\phi\sigma_z\tau_y/2}e^{-i\theta\sigma_y/2}(\tau_0\oplus\tau_z)e^{i\phi\tau_y/2}=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2} & -e^{-i\phi\tau_y}\sin\frac{\theta}{2}\tau_z\\ e^{i\phi\tau_y}\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2}\tau_z\end{pmatrix}_\sigma, \tag{28}$$

$$Q_S(\boldsymbol{n})=e^{-i\phi\sigma_z\tau_y/2}e^{-i\theta\sigma_y/2}(\tau_0\oplus\tau_z)e^{-i\phi\tau_y/2}=\begin{pmatrix}e^{-i\phi\tau_y}\cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2}\tau_z\\ \sin\frac{\theta}{2} & e^{i\phi\tau_y}\cos\frac{\theta}{2}\tau_z\end{pmatrix}_\sigma. \tag{29}$$

赤道における変換関数は

$$V_{NS}(\phi)=Q_S(\theta=\frac{\pi}{2},\phi)^T Q_N(\theta=\frac{\pi}{2},\phi)=e^{i\phi\tau_y}=\begin{pmatrix}\cos\phi & \sin\phi\\ -\sin\phi & \cos\phi\end{pmatrix}_\sigma. \tag{30}$$

よって，$U(2)$行列は

$$U(\phi)=e^{i\phi}1_2 \tag{31}$$

であり，巻き付き数は2である．

接続も計算しておく．

$$Q_N^T\partial_\phi Q_N=i\sigma_0\tau_y\sin^2\frac{\theta}{2}-i\sigma_y\tau_x e^{i\phi\tau_y}\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}. \tag{32}$$

すると，$\tau$空間だけトレースを取ると，

$$\mathrm{tr}_\tau[\frac{1-\tau_y}{2}Q_N^T\partial_\phi Q_N]=-i\sigma_0\sin^2\frac{\theta}{2}. \tag{33}$$

[1] この証明方法は窪田さんに教えていただきました．

[2] これは安定ホモトピー群の範囲内でのみ証明可能？ $Q_1Q_2\oplus 1_{2n}\sim Q_1\oplus Q_2$であるが．．

より，$U(1)$の接続は

$$\mathcal{A}_{N,\phi} = -2i\sin^2\frac{\theta}{2}. \tag{34}$$

すると，Berry位相は

$$\gamma(\theta) = \arg e^{\oint \mathcal{A}_N} = -4\pi\sin^2\frac{\theta}{2} \tag{35}$$

となり，Berry位相の巻き付きは偶数である．
　さて，$\gamma(\theta)/2$がwell-definedにできるか？

## 5 Berry位相

$H(\phi) = Q(\phi)\tau_y Q(\phi)^T$を1点にホモトピックなハミルトニアンとする．ホモトピーを$Q(\phi, t\in[0,1])$をする． $D^2$上の曲率を

$$\mathcal{F} = d\mathcal{A}, \quad \mathcal{A} = \mathrm{tr}\,[\frac{1-\tau_y}{2}Q^T dQ] \tag{36}$$

とする． Berry位相を

$$e^{i\gamma} = e^{\frac{1}{2}\int_{D^2} d\mathcal{A}} \in U(1) \tag{37}$$

と定義すると，ホモトピーの取り方に依存しないためwell-defined.
　これを離散点のハミルトニアンのデータから計算したい．
　... 保留.

## 6 分解$U_C = UU^T$について

各点で（高木）分解$U_C = UU^T$は実行できるが，パラメータ族$U_C(\boldsymbol{k})$がパラメータ空間全体で分解できるかどうかは，一般には障害が存在する．
　$U_C \in U(n)$を対称行列$U_C^T = U_C$とする．分解$U_C = UU^T$は，変換

$$U \mapsto UO, \quad O \in O(n) \tag{38}$$

に対して不変である．同値類を

$$[U] \in U(n)/O(n) \tag{39}$$

と書く．切断

$$U(n)/O(n) \to U(n), \quad [U] \mapsto U \tag{40}$$

を大域的に取ることができるのは，$U_C \mapsto [U]$で定まる$O(n)$束が自明である場合のみである．
　大域的な$U(\boldsymbol{k})$が存在しない場合がある．実際，

$$\pi_1[U(n)] = \mathbb{Z} \to \pi_1[U(n)/O(n)] = \mathbb{Z} \tag{41}$$

は2倍写像であるので，$\pi_1[U(n)/O(n)] = \mathbb{Z}$の奇数元に対応する$U_C(\boldsymbol{k})$は連続な分解$U(\boldsymbol{k})$を持たない．最も簡単な例は$S^1$上の$1\times 1$行列

$$U_C(k\in S^1) = e^{ik} \tag{42}$$

である．$k \in S^1$の各点で

$$U_C(k) = e^{ik/2}e^{ik/2} \tag{43}$$

という分解は可能であるが，$S^1$全体で連続な$U(k)$は存在しない．

$U_C(k)=e^{ik}$の場合のハミルトニアンに対する制限について考えよう．

$$U_C(k)H(k)^*U_C(k)^\dagger=-H(k) \tag{44}$$

は

$$H(k)^*=-H(k) \tag{45}$$

であるが，今は$1\times 1$模型であるので，全ての点$k\in S^1$で$H(k)=0$が示される． $U_C(k)=1$でも同じ結果である．この点は実空間描像で理解できる．反ユニタリな対称性$U_C(\boldsymbol{k})$は波数を変化させないため，空間反転と（局所的な）PHSの組み合わせである． $1\times 1$模型の場合は反転中心が$x=0,1/2$の2通り存在し，それぞれ$U_C=1,e^{ik}$に対応する．反転中心においてPHS型の対称性が存在するため，ハミルトニアンは0に固定される．

一方で，ギャップのあるハミルトニアン$H(\boldsymbol{k})$に興味がある場合は，「$U_C(\boldsymbol{k})$は占有状態と非占有状態を入れ替える」という制限があるため，$O(n)$束$U_C(\boldsymbol{k})\to[U(\boldsymbol{k})]$は自明束である，と予想される．例として，空間1次元で，実空間上の局在軌道に対して$U_C(k)$を定義する場合を考えると，反転中心が0であれば

$$U_C(k)=\begin{pmatrix} & 1\\ 1 & \end{pmatrix}. \tag{46}$$

一方で反転中心が$x=1/2$であれば

$$U_C(k)=e^{-ik}\begin{pmatrix} & 1\\ 1 & \end{pmatrix} \tag{47}$$

である．後者は一見大域的な$U(k)$が存在しないように思われるが， $U_C(k)$の巻き付き数は2であるので，大域的な$U(k)$が存在する．実際，

$$U(k)=\begin{pmatrix}1 & \\ & e^{-ik}\end{pmatrix}e^{\frac{\pi}{4}i\tau_x}e^{-\frac{\pi}{4}i} \tag{48}$$

とすれば良い．

予想：

- $U_C(\boldsymbol{k})\mapsto[U(\boldsymbol{k})]$が定める$O(n)$束が非自明であれば， $U_C(\boldsymbol{k})H(\boldsymbol{k})^*U_C(\boldsymbol{k})^\dagger=-H(\boldsymbol{k})$なる対称性を持つハミルトニアン$H(\boldsymbol{k})$はフルギャップであり得ない．

## 7　計算メモ：実空間AHSS

雑な議論だが実空間AHSSを用いると$ch_1 \in 2\mathbb{Z}$が示される．第2微分$d^2_{2,-2}:\mathbb{Z}\to\mathbb{Z}_2$は2セルのクラスAのDiracハミルトニアン

$$H = \begin{pmatrix} & -i\Delta e^{i\theta(x,y)}(\partial_x - i\partial_y) \\ -i\Delta e^{-i\theta(x,y)}(\partial_x + i\partial_y) & \end{pmatrix} + m\sigma_z \tag{49}$$

が$(C_2C)^2 = 1$の場合にゼロ状態を強制されるかどうかを調べれば良い．例えば$C_2C = \sigma_x$とすると位相$e^{i\theta(x,y)}$に課される対称性は

$$e^{i\theta(-x,-y)} = -e^{i\theta(x,y)} \tag{50}$$

であるから，$\pi$-vortexが強制されるため$d^2_{2,-2}$が非自明となり，$ch_1 \in 2\mathbb{Z}-1$は実現しない．