

Fermiループ上のBerry位相の格子近似による計算方法について

塩崎 謙

May 25, 2023

2次元の並進対称性のある自由フェルミオン系を考える。ハミルトニアンを $H(\mathbf{k})$, $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ とする。線形応答理論により、フェルミ面がある系におけるHall係数は、エネルギーが負のBerry曲率の積分で与えられる。

$$\sigma_H = \frac{i}{2\pi} \sum_n \int_{E_n(\mathbf{k}) < 0} F_n(\mathbf{k}). \quad (1)$$

n はバンドのラベル。ストークスの定理により、非整数部分はフェルミループにおけるBerry位相として書くことができる [1].

$$\sigma_H = \frac{i}{2\pi} \sum_n \oint_{E_n(\mathbf{k})=0} A_n(\mathbf{k}) \pmod{1}. \quad (2)$$

非整数部分の効率的な計算方法については、例えば[2]を見よ。

絶縁体における量子化されたHall係数の数値計算手法については、[3]が良く知られている。一方でフェルミループが存在する場合も若干の拡張で計算できる。

BZを格子近似する。波数点 \mathbf{k} において、エネルギーが負の状態のフレームを

$$U_{\mathbf{k}} = (u_{1\mathbf{k}}, \dots, u_{m_{\mathbf{k}}\mathbf{k}}) \in \text{Mat}_{m_{\mathbf{k}} \times N}(\mathbb{C}), \quad U_{\mathbf{k}}^\dagger U_{\mathbf{k}} = 1_{m_{\mathbf{k}}}. \quad (3)$$

と書く。ここで、 $E_n(\mathbf{k}) < 0$ なるバンドの数 $m_{\mathbf{k}}$ は波数点 \mathbf{k} に依存することに注意する。BZの三角形012 (四角形でも良い) に対して、以下の行列は、バンドの数 m_0, m_1, m_2 が異なる場合でもwell-defined

$$W_{012} = U_0^\dagger U_2 U_2^\dagger U_1 U_1^\dagger U_0 \in \text{Mat}_{m_0 \times m_0}, \quad \text{rank}(W_{012}) = \min(m_0, m_1, m_2) =: m_{012}. \quad (4)$$

よって、行列 W_{012} の固有値は、以下のようになる。

$$\text{Spec}(W_{012}) = (z_1, \dots, z_{m_{012}}, 0, \dots). \quad (5)$$

一般化されたBerry磁束を以下で定義する。

$$F_{012} = \text{Arg}(z_1 \cdots z_{m_{012}}). \quad (6)$$

注意として、 F_{012} は各波数点 \mathbf{k} における直交射影を $P_{\mathbf{k}} = U_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}}^\dagger$ として、行列 $P_2 P_1 P_0$ の非ゼロの固有値の積の偏角としても計算できる。Hall係数は整数部分も含めて一般化されたBerry磁束の総和で与えられる。

$$\sigma_H = \frac{i}{2\pi} \sum_{\Delta^2} F_{\Delta^2}. \quad (7)$$

上記公式が絶縁体の場合に[3]に一致するのは明らか。さらに、金属の場合は占有バンドのBerry磁束のみが寄与するから、 $\pmod{1}$ でフェルミループ上のBerry位相を与える。

References

- [1] F. D. M. Haldane, *Berry Curvature on the Fermi Surface: Anomalous Hall Effect as a Topological Fermi-Liquid Property*, arXiv:cond-mat/0408417.
- [2] Xinjie Wang, David Vanderbilt, Jonathan R. Yates, Ivo Souza, *Fermi-surface calculation of the anomalous Hall conductivity*, arXiv:0708.0858.
- [3] T Fukui, Y Hatsugai, H Suzuki, *Chern Numbers in Discretized Brillouin Zone: Efficient Method of Computing (Spin) Hall Conductances*, arXiv:cond-mat/0503172.