# Berry接続

塩崎　謙

May 15, 2024

**Abstract**

Berry接続の導出と注意事項についてまとめる．

## 1　バンド構造とベクトル束

電子の運動を記述するSchrödinger方程式は，多体効果が無視できるか，あるいは密度汎関数理論の枠組みにおいて，３次元ユークリッド空間$\mathbb{R}^3$における１粒子のハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + V(\hat{\boldsymbol{r}}) \tag{1}$$

によって記述される．簡単のため，ここでは電子のスピン自由度を無視する．ポテンシャル項$V(\boldsymbol{r})$は固体結晶の有する繰り返し構造に対応する，格子の並進対称性を満たす．格子ベクトルを$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3 \in \mathbb{R}^3$とし，格子の並進ベクトルから成る群を

$$\Pi = \left\{ n_1\boldsymbol{a}_1 + n_2\boldsymbol{a}_2 + n_3\boldsymbol{a}_3 | (n_1, n_2, n_3) \in \mathbb{Z}^3 \right\} \tag{2}$$

と書こう．関数$V(\boldsymbol{r})$は並進$\boldsymbol{a} \in \Pi$に対して$V(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}) = V(\boldsymbol{r})$を満たす．Hilbert空間に作用する格子の並進演算子は，無限小並進の生成子である運動量演算子$\hat{\boldsymbol{p}}$を用いて，$\boldsymbol{a} \in \Pi$に対して$\hat{T}_{\boldsymbol{a}} = e^{-i\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{a}}$と与えられる．１粒子基底を$\{|\boldsymbol{r}\rangle\}_{\boldsymbol{r}\in\mathbb{R}^3}$と書く．正準交換関係$[\hat{r}_\mu, \hat{p}_\nu] = i\delta_{\mu\nu}, \mu, \nu \in \{x, y, z\}$に注意すると，

$$\hat{T}_{\boldsymbol{a}}\hat{\boldsymbol{r}}(\hat{T}_{\boldsymbol{a}})^{-1} = \hat{\boldsymbol{r}} - \boldsymbol{a}, \tag{3}$$

$$\hat{T}_{\boldsymbol{a}} |\boldsymbol{r}\rangle = |\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}\rangle\,, \tag{4}$$

が成立する．固体結晶に特徴的な格子の並進対称性は

$$[\hat{T}_{\boldsymbol{a}}, \hat{H}] = 0, \quad \boldsymbol{a} \in \Pi, \tag{5}$$

と表現される．よってハミルトニアン$\hat{H}$は並進演算子$\hat{T}_{\boldsymbol{a}}$と同時対角化可能である．格子の並進群$\Pi$は$\mathbb{Z}^3$と同型な可換群であり，その既約表現は**Brillouin zone（BZ）トーラス**と呼ばれる３次元トーラス$X_\Pi \cong T^3$上の点$\boldsymbol{k} \in X_\Pi$によってラベルされる．ここで，BZトーラス$X_\Pi$は

$$\boldsymbol{a}_i \cdot \mathbf{G}_j = 2\pi\delta_{ij}, \quad i, j \in \{1, 2, 3\}, \tag{6}$$

を満たす逆格子ベクトル$\mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2, \mathbf{G}_3$によって張られる平行六面体であり，指標は$\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{a}) = e^{-i\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{k}}$として与えられる．$\boldsymbol{k}$という表記は$\mathbb{R}^3$のベクトルであるが，

$$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k} + \mathbf{G}, \quad \mathbf{G} = m_1\mathbf{G}_1 + m_2\mathbf{G}_2 + m_3\mathbf{G}_3, \quad (m_1, m_2, m_3) \in \mathbb{Z}^3, \tag{7}$$

として逆格子ベクトルによる並進と同一視することにより３次元トーラス上の点とみなしている．以下，$\boldsymbol{k}$と書くとBZトーラス上の点を指すものとする．

Bloch運動量$\boldsymbol{k}$におけるセクターにおいて，ハミルトニアン$\hat{H}$の固有値は離散的である．これを見るために，Bloch運動量$\boldsymbol{k}$のセクターにおける基底を形式的に$\boldsymbol{k}$セクターへの射影

$$\hat{P}_{\boldsymbol{k}} = \sum_{\boldsymbol{a}\in\Pi} \chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{a})^* \hat{T}_{\boldsymbol{a}} \tag{8}$$

を用いて

$$|\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}\rangle := \hat{P}_{\boldsymbol{k}} |\boldsymbol{r}\rangle = \sum_{\boldsymbol{a}\in\Pi} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}} |\boldsymbol{r}-\boldsymbol{a}\rangle \tag{9}$$

と定義しよう．$\hat{T}_{\boldsymbol{a}} |\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}\rangle = e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}} |\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}\rangle$に注意．関係式

$$|\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}\rangle = |\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}\rangle e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}}, \quad \boldsymbol{a}\in\Pi, \tag{10}$$

が成立するため，状態$|\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}\rangle$における$\boldsymbol{r}$の独立な自由度は，実空間を格子の並進対称性で割って得られる**単位胞（unit cell）**

$$\mathbb{R}^3/\Pi = \left\{\boldsymbol{r} = \sum_{i=1}^{3} t_i \boldsymbol{a}_i \in \mathbb{R}^3 | 0 \le t_1, t_2, t_3 \le 1\right\} \tag{11}$$

における波動関数の関数依存性のみである．これは有限の箱における量子力学の問題と等価であり，離散固有値が得られる．

　したがって，BZトーラス$X_\Pi$によってラベルされた，離散個のエネルギー固有値と固有状態の族$E_{n,\boldsymbol{k}}, |\psi_{n,\boldsymbol{k}}\rangle, \boldsymbol{k}\in X_\Pi$,が得られる．定義方程式を書くと以下のようになる．

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\boldsymbol{a}} |\psi_{n,\boldsymbol{k}}\rangle &= e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}} |\psi_{n,\boldsymbol{k}}\rangle, \\ \hat{H} |\psi_{n,\boldsymbol{k}}\rangle &= E_{n,\boldsymbol{k}} |\psi_{n,\boldsymbol{k}}\rangle. \end{aligned} \tag{12}$$

ここで，$n = 1, 2, \ldots,$は$n$番目の固有値を表す．

　固有値方程式(12)の線形性より，固有状態$|\psi_{n,\boldsymbol{k}}\rangle$には$U(1)$位相の不定性が存在する．つまり，$|\psi_{n,\boldsymbol{k}}\rangle$が解であれば任意の$U(1)$値関数$e^{i\chi_{n,\boldsymbol{k}}}$に対して，$|\psi_{n,\boldsymbol{k}}\rangle e^{i\chi_{n,\boldsymbol{k}}}$も解である．

## 2　セル周期状態

Bloch状態$|\psi_{n,\boldsymbol{k}}\rangle$を平面場“$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$”とそれ以外に分ける．平面波“$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$”における波数$\boldsymbol{k}$は逆格子ベクトルの並進$\boldsymbol{k}\mapsto\boldsymbol{k}+\mathbf{G}$による同一視がなされないため，混乱を避けるために異なる記号を導入しよう．無限小並進の生成子である運動量演算子$\hat{\boldsymbol{p}}$の固有状態である運動量を正体で$\mathbf{k}$と書く．$\mathbf{k}$はBZトーラスではなく，$\mathbb{R}^3$の元であり，逆格子ベクトルのシフトに対して異なる運動量である

$$\mathbf{k} \neq \mathbf{k}+\mathbf{G}. \tag{13}$$

BZトーラス$X_\Pi$から運動量空間$\mathbb{R}^3$へのリフトをひとつ取り，同一の記号で$\boldsymbol{k}\mapsto\mathbf{k}$と書く．暗にリフトをひとつ選んでいるが，混乱が生じない限りリフト依存性は顕に書かないことにする．リフトの取り替えは$\mathbf{k}\mapsto\mathbf{k}+\mathbf{G}$で与えられる．平面波“$e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{r}}$”なる表記にも注意する．この表示は暗に$\boldsymbol{r}$で指定される座標系をひとつ導入し，その座標系において原点を中心とする平面波を意味する．無限に拡がった結晶においてはカノニカルな座標系の取り方は存在しない．そこで$\boldsymbol{r}$で指定される座標系をひとつ固定し，Bloch状態を，$\boldsymbol{r}_0$を中心とする平面波$e^{i\mathbf{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)}$成分とそれ以外に分ける：

$$|\psi_{n,\boldsymbol{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)} |u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}}\rangle. \tag{14}$$

ここで，

$$|u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}}\rangle := e^{-i\mathbf{k}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)} |\psi_{n,\boldsymbol{k}}\rangle \tag{15}$$

によって定義される状態をセル周期状態と呼び，その座標基底による表示

$$u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}}(\boldsymbol{r}) = \left\langle \boldsymbol{r} \,\middle|\, u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}} \right\rangle \tag{16}$$

をセル周期関数と呼ぶ．関係式$\hat{T}_{-\boldsymbol{a}} |u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}}\rangle = |u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}}\rangle$，つまり，

$$u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}) = u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}), \quad \boldsymbol{a}\in\Pi, \tag{17}$$

が成立することに注意．関係式$\hat{T}_{\boldsymbol{a}} |u^{\boldsymbol{r}}_{n,\mathbf{k}}\rangle = |u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}}\rangle$は，セル周期状態がBloch運動量ゼロを持つ状態であることを意味する．特に，Bloch状態とは異なり，セル周期状態は異なる運動量$\mathbf{k}$における内積が非ゼロであり得ることに注意．つまり，一般に，$\left\langle u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}} \middle| u^{\boldsymbol{r}'_0}_{n,\mathbf{k}'} \right\rangle \neq 0$である．

Bloch状態$|\psi_{n,\boldsymbol{k}}\rangle$は逆格子ベクトルの並進$\boldsymbol{k} \mapsto \boldsymbol{k} + \mathbf{G}$に対して同一の物理的状態，つまりU(1)位相を除いて同一状態を与えた．セル周期状態は演算子$e^{-i\mathbf{k}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)}$に由来する演算子が残り，

$$|u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}+\mathbf{G}}\rangle \propto e^{-i\mathbf{G}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)} |u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}}\rangle \tag{18}$$

が成立する．つまり，逆格子ベクトルの並進に対して$|u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}}\rangle$と$|u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}+\mathbf{G}}\rangle$は**異なる**物理的状態を与える．

セル周期状態の参照点$\boldsymbol{r}_0$依存性について調べる．参照点の取り替え$\boldsymbol{r}_0 \to \boldsymbol{r}'_0$は，同一の物理的状態を与える．つまり，U(1)位相を除いて一致する：

$$|u^{\boldsymbol{r}'_0}_{n,\mathbf{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot(\boldsymbol{r}'_0-\boldsymbol{r}_0)} |u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}}\rangle \propto |u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}}\rangle . \tag{19}$$

一方で，以下に述べる，ある標準的な接続については，$\boldsymbol{r}_0$依存性が残る．

# 3 Berry接続

各種トポロジカル不変量を議論する上で，接続を導入しておくと便利である．一般論として，複素ベクトル束に導入される接続は一意ではないが，バンド理論においては，Bloch状態$|\psi_{n,\boldsymbol{k}}\rangle$のなす複素ベクトル束に対して**Berry接続**と呼ばれる標準的な接続の入れ方の族が存在する [1]．ここでは，Berry接続を位置演算子$\hat{\boldsymbol{r}}$の期待値の評価する際に自然に導入されるという見方で導入しよう．

## 3.1 波束を用いた導出

$n$番目の固有状態$|\psi_{n,\boldsymbol{k}}\rangle$は$\boldsymbol{k}_0$を中心としたある可縮な領域$O_{\boldsymbol{k}_0} \subset X_\Pi$において縮退が存在せずかつ$O_{\boldsymbol{k}_0}$において滑らかに定義されているものとし，$c(\boldsymbol{k})$を$O_{\boldsymbol{k}_0}$に台を持ち$\boldsymbol{k}_0$にガウス的なピークを持つ複素数値関数とする [2]．状態

$$|\Psi[c]\rangle = \int_{O_{\boldsymbol{k}_0}} d\boldsymbol{k} c(\boldsymbol{k}) |\psi_{n,\boldsymbol{k}}\rangle \tag{20}$$

を$c(\boldsymbol{k})$によって定義された波束とする [3]．波束の波動関数$\Psi[c](\boldsymbol{r}) = \langle \boldsymbol{r} \mid \Psi[c]\rangle$は実空間のある点でピークを持ち，それ以外では波数成分が打ち消し合い減衰する．特に，位置演算子の期待値がwell-definedである．そこで，期待値

$$\langle\Psi[c]|\hat{\boldsymbol{r}}|\Psi[c]\rangle = \int_{O_{\boldsymbol{k}_0}} d\boldsymbol{k} \int_{O_{\boldsymbol{k}_0}} d\boldsymbol{k}' c(\boldsymbol{k})^* c(\boldsymbol{k}') \langle\psi_{n,\boldsymbol{k}}|\hat{\boldsymbol{r}}|\psi_{n,\boldsymbol{k}'}\rangle \tag{21}$$

を評価しよう．

期待値$\langle\psi_{n,\boldsymbol{k}}|\hat{\boldsymbol{r}}|\psi_{n,\boldsymbol{k}'}\rangle$は，無限に拡がった波動関数$|\psi_{n,\boldsymbol{k}}\rangle$による位置演算子の期待値であるので不定であるが，可縮領域にのみ台を持つ関数$c(\boldsymbol{k})$と合わせると以下のように計算できる．いま，Bloch状態$|\psi_{n,\boldsymbol{k}}\rangle$はある可縮な領域$O_{\boldsymbol{k}_0}$上においてのみ定義されているため，対応するセル周期状態は逆格子ベクトルのシフトに対して条件

$$|u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}+\mathbf{G}}\rangle = e^{-i\mathbf{G}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)} |u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}}\rangle \tag{22}$$

を満たすように取ることができる．まず，セル周期状態を用いて，

$$\langle\psi_{n,\boldsymbol{k}}|\hat{\boldsymbol{r}}|\psi_{n,\boldsymbol{k}'}\rangle = \left\langle u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}} \middle| e^{-i\mathbf{k}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)} \hat{\boldsymbol{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)} \middle| u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}'} \right\rangle \tag{23}$$

と書き換える．演算子部分は

$$e^{-i\mathbf{k}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)} \hat{\boldsymbol{r}} e^{i\mathbf{k}'\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)} = \boldsymbol{r}_0 + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)} (-i\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{k}'}) e^{i\mathbf{k}'\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)} + e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)} i\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{k}'} \tag{24}$$

[1] 一意ではなく族であることを指摘している文献としては，[1]を挙げる．

[2] 例えば，$c(\boldsymbol{k}) \sim e^{-b(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)^2} e^{i\alpha(\boldsymbol{k})}$など．

[3] 切断$c(\boldsymbol{k})$に対する共変微分を自然な方法で定義することが目的である．

と書き換えられる．ここで，運動量空間における微分$\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}}$については，リフトの取り方に依存しないため単に$\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}}$と書いた．すると，

$$\langle \psi_{n,\boldsymbol{k}}|\hat{\boldsymbol{r}}|\psi_{n,\boldsymbol{k}'}\rangle = \boldsymbol{r}_0\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') - i\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}'}\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') + i\left\langle u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}} \middle| e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)} \middle| \frac{\partial u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}'}}{\partial \boldsymbol{k}'}\right\rangle \tag{25}$$

を得る．$\langle \psi_{n,\boldsymbol{k}}|\psi_{n,\boldsymbol{k}'}\rangle = \delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')$を用いた．第３項については，座標表示で評価し，セル周期関数の周期性を用いて，

$$\left\langle u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}} \middle| e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)} \middle| \frac{\partial u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}'}}{\partial \boldsymbol{k}'}\right\rangle = \sum_{\boldsymbol{a}\in\Pi}\int_{\mathbb{R}^3/\Pi} d\boldsymbol{r}\, u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}}(\boldsymbol{r})^* e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}-\boldsymbol{r}_0)}\frac{\partial u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}'}(\boldsymbol{r})}{\partial \boldsymbol{k}'} \tag{26}$$

と書かれる．ここで格子の並進の和を先に実行すると，

$$\sum_{\boldsymbol{a}\in\Pi} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\boldsymbol{a}} = \sum_{\mathbf{G}}\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{G}) \tag{27}$$

より，

$$\begin{aligned}
\left\langle u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}} \middle| e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\hat{\boldsymbol{r}}} \middle| \frac{\partial u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}'}}{\partial \boldsymbol{k}'}\right\rangle &= \sum_{\mathbf{G}}\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{G})\int_{\mathbb{R}^3/\Pi} d\boldsymbol{r}\, u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}}(\boldsymbol{r})^* e^{i\mathbf{G}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)}\frac{\partial u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\boldsymbol{r})}{\partial \boldsymbol{k}} \\
&= \sum_{\mathbf{G}}\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{G})\left\langle u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}} \middle| e^{i\mathbf{G}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)} \middle| \frac{\partial u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}+\mathbf{G}}}{\partial \boldsymbol{k}}\right\rangle_{\text{cell}} \qquad (28) \\
&= \sum_{\mathbf{G}}\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{G})\left\langle u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}} \middle| \frac{\partial u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}}}{\partial \boldsymbol{k}}\right\rangle_{\text{cell}} \qquad (29) \\
& \qquad (30)
\end{aligned}$$

を得る．ここで，セル周期関数に対して，

$$\left\langle u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}} \middle| \frac{\partial u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}}\right\rangle_{\text{cell}} := \int_{\mathbb{R}^3/\Pi} d\boldsymbol{r}\, u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}}(\boldsymbol{r})^* \frac{\partial u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}}(\boldsymbol{r})}{\partial \mathbf{k}} \tag{31}$$

と定義した．周期性(17)より，積分値は単位胞の選び方に積分値は依存しないことに注意．さて，内積(31)であるが，リフト$\boldsymbol{k}\mapsto\mathbf{k}$には依存しない．実際，リフトの取り替え$\mathbf{k}\mapsto\mathbf{k}+\mathbf{G}$に対して，(22)のゲージ固定条件のもとで

$$\left\langle u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}+\mathbf{G}} \middle| \frac{\partial u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}+\mathbf{G}}}{\partial \mathbf{k}}\right\rangle_{\text{cell}} = \left\langle u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}} \middle| \frac{\partial u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}}\right\rangle_{\text{cell}} \tag{32}$$

が成立する．Berry接続を

$$\boldsymbol{A}^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\boldsymbol{k}} := i\left\langle u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}} \middle| \frac{\partial u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}}}{\partial \boldsymbol{k}}\right\rangle_{\text{cell}} \tag{33}$$

によって定義する．リフト非依存性のため，左辺の引数は$\boldsymbol{k}$と書いて良い．結局，波束の位置期待値は，逆格子ベクトルの無限和は$\mathbf{G}=\mathbf{0}$のみが寄与することに注意して，

$$\langle\Psi[c]\,|\,\hat{\boldsymbol{r}}\,|\,\Psi[c]\rangle = \boldsymbol{r}_0 + \int_{O_{\boldsymbol{k}_0}} d\boldsymbol{k}\, c(\boldsymbol{k})^*\left[i\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{k}} + \boldsymbol{A}^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\boldsymbol{k}}\right]c(\boldsymbol{k}) \tag{34}$$

と計算される．

### 3.2 Berry接続の大域的構造

Berry接続$\boldsymbol{A}^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\boldsymbol{k}}$はパッチ変換に対する望みの変換性を満たすことがわかる．簡単のため，固有状態$|\psi_{n,\boldsymbol{k}}\rangle$はBZトーラス全域において縮退がなく他のバンドから孤立していると仮定する．BZトーラスを覆うパッチ$\{O_i\}_i$を導入し，パッチ$O_i$上の固有状態を$|\psi^{(i)}_{n,\boldsymbol{k}}\rangle$，セル周期状態を$|u^{\boldsymbol{r}_0,(i)}_{n,\mathbf{k}}\rangle = e^{-i\mathbf{k}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)}\,|\psi^{(i)}_{n,\boldsymbol{k}}\rangle$とし，逆格子ベクトルのシフトに対してゲージ固定条件(22)を課し，Berry接続を$\boldsymbol{A}^{\boldsymbol{r}_0,(i)}_{n,\boldsymbol{k}} = \left\langle u^{\boldsymbol{r}_0,(i)}_{n,\mathbf{k}} \middle| \frac{\partial u^{\boldsymbol{r}_0,(i)}_{n,\mathbf{k}}}{\partial \boldsymbol{k}} \right\rangle_{\mathrm{cell}}$とする．重なり部分$O_i\cap O_j$においてはU(1)に値を取る変換関数$e^{i\chi^{(ij)}_{n,\boldsymbol{k}}}$によって

$$|\psi^{(i)}_{n,\boldsymbol{k}}\rangle = |\psi^{(j)}_{n,\boldsymbol{k}}\rangle\, e^{i\chi^{(ij)}_{n,\boldsymbol{k}}}, \quad \boldsymbol{k}\in O_i\cap O_j, \tag{35}$$

として貼り合っている．セル周期状態についても，

$$|u^{\boldsymbol{r}_0,(i)}_{n,\mathbf{k}}\rangle = e^{-i\mathbf{k}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)}\,|\psi^{(i)}_{n,\boldsymbol{k}}\rangle = e^{-i\mathbf{k}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)}\,|\psi^{(j)}_{n,\boldsymbol{k}}\rangle\, e^{i\chi^{(ij)}_{n,\boldsymbol{k}}} = |u^{\boldsymbol{r}_0,(j)}_{n,\mathbf{k}}\rangle\, e^{i\chi^{(ij)}_{n,\boldsymbol{k}}} \tag{36}$$

を得る．すると，Berry接続の変換性として，

$$\boldsymbol{A}^{\boldsymbol{r}_0,(i)}_{n,\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{A}^{\boldsymbol{r}_0,(j)}_{n,\boldsymbol{k}} - \partial_{\boldsymbol{k}}\chi^{(ij)}_{n,\boldsymbol{k}}, \quad \boldsymbol{k}\in O_i\cap O_j, \tag{37}$$

を得る．

Berry接続の定義式における$\boldsymbol{r}_0$の取り替えは異なる接続の導入に対応する．これを見るために，ゲージ不変量であるホロノミーを計算しよう．$\boldsymbol{r}_0$の取り替え(19)に対して，あるパッチ$O_i$におけるBerry接続は

$$\boldsymbol{A}^{\boldsymbol{r}'_0,(i)}_{n,\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{A}^{\boldsymbol{r}_0,(i)}_{n,\boldsymbol{k}} - (\boldsymbol{r}'_0-\boldsymbol{r}_0) \tag{38}$$

と変化する．逆格子ベクトル$\mathbf{G}_i$に対してBZトーラス$X_\Pi$内の閉経路$C_{\boldsymbol{k}_0,\mathbf{G}_i} = \{\boldsymbol{k}_0 + s\mathbf{G}_i \in X_\Pi | s\in[0,1]\}$を考える．経路$C_{\boldsymbol{k}_0,\mathbf{G}_i}$に沿ったホロノミー$e^{i\gamma^{\boldsymbol{r}_0}(C_{\boldsymbol{k}_0,\mathbf{G}_i})}$はパッチ上のBerry接続と貼り合わせ条件だけから決まる．具体的には，区間$[0,1]$を$0=s_0<s_1<\cdots<s_N=1$と分割し，各区間$[s_q,s_{q+1}]$はパッチ$O_q$に含まれるとする．$O_N=O_0$に注意．ホロノミーは以下で与えられる．

$$e^{i\gamma^{\boldsymbol{r}_0}(C_{\boldsymbol{k}_0,\mathbf{G}_i})} = \prod_{q=0}^{N-1}\left[e^{i\int_{s_q}^{s_{q+1}} d\boldsymbol{k}(s)\cdot \boldsymbol{A}^{\mathrm{r}_0}_{n,\boldsymbol{k}(s)}} \times e^{i\chi^{(q,q+1)}_{n,\boldsymbol{k}(s_{q+1})}}\right]. \tag{39}$$

すると，参照点$\boldsymbol{r}_0$の取り替えは

$$e^{i\gamma^{\boldsymbol{r}'_0}(C_{\boldsymbol{k}_0,\mathbf{G}_i})} = e^{i\gamma^{\boldsymbol{r}_0}(C_{\boldsymbol{k}_0,\mathbf{G}_i})} \times e^{-i\mathbf{G}_i\cdot(\boldsymbol{r}'_0-\boldsymbol{r}_0)} \tag{40}$$

なる変換を導く．この表式から，Berry接続のゲージ非等価な$\boldsymbol{r}_0$依存性は単位胞内に値を取る$\boldsymbol{r}_0$の取り替え$\boldsymbol{r}'_0-\boldsymbol{r}_0\in\mathbb{R}^3/\Pi$に限られることがわかる．実際，$\boldsymbol{r}'_0=\boldsymbol{r}_0+\boldsymbol{a}, \boldsymbol{a}\in\Pi$はゲージ変換$e^{i\alpha_{\boldsymbol{k}}} = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}} : X_\Pi \to \mathrm{U}(1)$が存在して，パッチに依らず

$$\boldsymbol{A}^{\boldsymbol{r}_0+\boldsymbol{a},(i)}_{n,\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{A}^{\boldsymbol{r}_0,(i)}_{n,\boldsymbol{k}} - \partial_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}}, \quad \boldsymbol{k}\in X_\Pi, \tag{41}$$

が成立する．

### 3.3 ホロノミーの離散公式

Berry接続の微小積分は

$$e^{i\int_{\boldsymbol{k}}^{\boldsymbol{k}+\delta\boldsymbol{k}} d\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{A}^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\boldsymbol{k}}} \cong \left\langle u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\boldsymbol{k}+\delta\boldsymbol{k}} \middle| u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\boldsymbol{k}}\right\rangle \tag{42}$$

と近似できる．よってホロノミーは

$$e^{i\gamma^{\boldsymbol{r}_0}(C_{\boldsymbol{k}_0,\mathbf{G}_i})} = \lim_{\mathcal{N}\to\infty}\prod_{p=0}^{\mathcal{N}-1}\left\langle u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}_0+\frac{p+1}{\mathcal{N}}\mathbf{G}_i} \middle| u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}_0+\frac{p}{\mathcal{N}}\mathbf{G}_i}\right\rangle \tag{43}$$

と離散点における内積の積として書くことができる．ゲージ不変性は，

$$e^{i\gamma^{\boldsymbol{r}_0}(C_{\boldsymbol{k}_0,\mathbf{G}_i})} = \lim_{\mathcal{N}\to\infty}\left[\left\langle u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}_0}\,\middle|\, e^{i\mathbf{G}_i\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)}\,\middle|\, u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}_0+\mathbf{G}_i-\frac{1}{\mathcal{N}}\mathbf{G}_i}\right\rangle \prod_{p=0}^{\mathcal{N}-2}\left\langle u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}_0+\frac{p+1}{\mathcal{N}}\mathbf{G}_i}\,\middle|\, u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}_0+\frac{p}{\mathcal{N}}\mathbf{G}_i}\right\rangle\right] \tag{44}$$

と表示すると明らか．また，内積$\left\langle u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}'}\,\middle|\, u^{\boldsymbol{r}_0}_{n,\mathbf{k}}\right\rangle$が参照点$\boldsymbol{r}_0$に依存しないことから，ホロノミーの$\boldsymbol{r}_0$依存性は演算子$e^{i\mathbf{G}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{r}_0)}$のc数部分のみから生じることが分かり，(40)を再現する．

# References


[1] Daniel S. Freed, Gregory W. Moore, *Twisted equivariant matter*, arXiv:1208.5055.