2017 / 2 / 22 (수) 「PRB 89, 155402(2014) 참고」

Sahin

energy band 에서 time-reversal symmetry 와 inversion symmetry 에 의해 two-fold degenerate 되어 있는 상태에 대한 Berry connection.

같은 에너지레벨에 two-fold degeneracy 를 가질때 다른 index 사이의 Berry connection 을 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$A_{n\alpha\, n\beta} = i \left\langle u_{n\beta} \middle| \frac{\partial}{\partial \tilde{k}} u_{n\alpha} \right\rangle$$

(time-reversal symmetry 와 inversion symmetry) 에 의해 $u_{n\alpha}(\vec{r})$ 와 그 파트너 사이에는 다음과 같은 condition 이 가능하다.

$$u_{n\,-\alpha}(\vec{r}) = i\sigma^y u^*_{n\alpha}(-\vec{r}).$$

이제 $A_{n\alpha\, n\beta}$ 를 full matrix 형태로 적어보면

$$A_{n\alpha\, n\beta} = i \int d\vec{r} \sum_{\tau\tau'\tau''} \left(i[\sigma^y]_{\tau\tau'} u^*_{n\,-\beta}(-\vec{r},\tau') \right)^* \left(\frac{\partial}{\partial \tilde{k}} i[\sigma^y]_{\tau\tau''} u^*_{n\,-\alpha}(-\vec{r},\tau'') \right)$$

여기서 $\sum_{\tau} [\sigma^{y*}]_{\tau,\tau'} [\sigma^y]_{\tau\tau''} = \sum_{\tau} [\sigma^y]_{\tau,\tau'} [\sigma^y]_{\tau\tau''} = \delta_{\tau',\tau''}$ 이므로

$$A_{n\alpha\, n\beta} = i \int d\vec{r} \sum_{\tau'} u_{n\,-\beta}(-\vec{r},\tau') \left(\frac{\partial}{\partial \tilde{k}} u^*_{n\,-\alpha}(-\vec{r},\tau') \right)$$

$-\vec{r} \to \vec{r}$ 로 하고 부분적분을 하면

$$A_{n\alpha\, n\beta} = -i \int d\vec{r} \sum_{\tau'} u^*_{n\,-\alpha}(\vec{r},\tau') \frac{\partial}{\partial \tilde{k}} u_{n\,-\beta}(\vec{r},\tau')$$

$$= -A_{n\,-\beta\, n\,-\alpha} \quad // \text{ 끝.}$$