

低次元物性班資料

Phys.lab2011 低次元物性班有志

2011 年 5 月 23 日

目次

第 1 章	BCS 理論による超伝導現象の説明	
	森下皓文	3
1.1	BCS 真空とエネルギーギャップ***	3
1.2	Josephson Effect***	4
1.3	Meissner effect, 完全導電性***	5
第 2 章	銅酸化物高温超伝導体におけるジョセフソンプラズマの理論	
	西村拓也	8
2.1	電子の集団振動としてのプラズマ***	8
2.2	量子論からみたプラズモン***	10
2.3	超伝導におけるプラズマ振動***	14
2.4	高温超伝導におけるジョセフソンプラズマ 1***	22
2.5	高温超伝導におけるジョセフソンプラズマ 2***	28
	参考文献	29
第 3 章	2 次元強相関系	
	渡辺伯陽	30
3.1	銅酸化物高温超伝導体***	30
3.2	量子 Hall 効果概論***	36
3.3	トポロジカル秩序 ~ エニオンを例として ~***	41
	参考文献	45
第 4 章	磁気 BZ から見た整数量子ホール効果	
	小澤遼	46
4.1	この Chapter でやりたいこと**	46
4.2	Hall 効果**	46
4.3	一様磁場中の固体物理***	46
4.4	Hall 伝導度の導出***	49
4.5	整数量子 Hall 効果***	52
4.6	最後に***	53
	参考文献	55

第 5 章	トポロジカル絶縁体上の有効作用	
	大森寛太郎	56
5.1	概観**	56
5.2	Berry 位相***	56
5.3	4+1 次元での有効作用***	57
5.4	非可換 Berry 接続 と 第二チャーン数***	60
5.5	3+1dim トポロジカル絶縁体***	60
参考文献		64
第 6 章	トポロジカル絶縁体と dyon	
	中川裕也	65
6.1	はじめに**	65
6.2	電磁場の有効作用から修正された Maxwell 方程式を導く***	65
6.3	dyon の出現***	66
参考文献		69

第 1 章

BCS 理論による超伝導現象の説明

森下皓文

BCS 理論は 1957 年に Bardeen, Cooper, Schrieffer によって提唱された理論で、超伝導現象に関して微視的視点からの説明を与える強力な理論です。ここでは、超伝導の代表的な現象、完全導電性、マイスナー効果、ジョセフソン効果を BCS 理論から説明することを試みます。

1.1 BCS 真空とエネルギーギャップ***

BCS ハミルトニアンを、

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow} \quad (1.1)$$

で定義します。

- 第一項： $\epsilon(\mathbf{k})$ は、フェルミ面から計ったバンド分散です。
- 第二項： $V \leq 0$ とします。これはクーパー対を作る二つの電子の引力相互作用を表します。

このハミルトニアンが BCS 理論の唯一の仮定といってよいでしょう。ここから超伝導の数々の現象が導かれることは驚嘆に値するといえるでしょう。 H_{BCS} を特定できたので、まずやるべきことは、エネルギースペクトルを見つけることです。まずは引力の 4 体相互作用を 2 体相互作用に直すことを考えます。平均からのゆらぎが十分小さいとして無視する平均場近似をつかうと、

$$H_{MF} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \Delta(\mathbf{k}) \left[(c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger + \text{h.c.}) - \langle c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger \rangle \right] \quad (1.2)$$

となります。ただし $\Delta(\mathbf{k})$ はギャップ関数

$$\Delta(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}'} V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \langle c_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger \rangle \quad (1.3)$$

です。次に、自由粒子のハミルトニアンの形に持つていくために、Bogoliubov 変換をしましょう：

$$\alpha_{\mathbf{k}, \uparrow} = u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \uparrow} - v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger \quad (1.4)$$

$$\alpha_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger = u_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}, \downarrow} + v_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger \quad (1.5)$$

$$u_{\mathbf{k}}^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1 \quad (1.6)$$

新しく定義された演算子 α^\dagger, α はフェルミオンの生成・消滅演算子の交換関係を満たし、形式的な粒子とみなすことができます。この粒子のことを Bogolon と呼んでおきます。 H_{MF} に Bogoliubov 変換の式を代入し、相互作用項をゼロにするために、

$$2\epsilon(\mathbf{k})u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}^* - \Delta(\mathbf{k})v_{\mathbf{k}}^{*2} + \Delta(\mathbf{k})^*u_{\mathbf{k}}^2 = 0 \quad (1.7)$$

とおくと、(1.6),(1.7) 式より $u_{\mathbf{k}}$ と $v_{\mathbf{k}}$ が求まり、

$$u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2}\left[1 + \frac{\epsilon(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})}\right] \quad (1.8)$$

$$|v_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2}\left[1 - \frac{\epsilon(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})}\right] \quad (1.9)$$

$$E(\mathbf{k}) = \sqrt{\epsilon^2(\mathbf{k}) + |\Delta^2(\mathbf{k})|} \quad (1.10)$$

となります。対角化されたハミルトニアンは、

$$H = \sum_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})(\alpha_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \alpha_{\mathbf{k},\uparrow} + \alpha_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k},\downarrow}) + E_g \quad (1.11)$$

ただし、定数項を E_g と置きました。以上により、スペクトルは分散関係 $E(\mathbf{k}) = \sqrt{\epsilon(\mathbf{k})^2 + \Delta(\mathbf{k})^2}$ をもつ自由な Bogolon のものであることが分かりました。基底状態 $|\Psi_{BCS}\rangle$ は、 $\alpha_{\mathbf{k},\sigma}|\Psi_{BCS}\rangle = 0$ という条件より、

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger)|0\rangle \quad (1.12)$$

と求まります。

ここまでで得られた結果を解釈してみましょう。エネルギーギャップ関数の存在は、励起状態になるために必要になるエネルギーが自由電子の場合より δ だけ大きいことを示しています。BCS 真空は、系の基底状態が普通の常伝導状態と大きく異なり、クーパー対のコヒーレント状態となっていることを示しています。エネルギーギャップと BCS 真空が BCS 理論の大きな特徴で、数々の現象の本質的原因となっています。

1.2 Josephson Effect***

Josephson Effect とは、図のような接合を作ったとき、絶縁体部分に電流が流れる効果のことです。これを BCS 理論の観点から説明しましょう。この系を考えるために、次のハミルトニアンを考えましょう：

$$H = H_{MF} + H_T \quad (1.13)$$

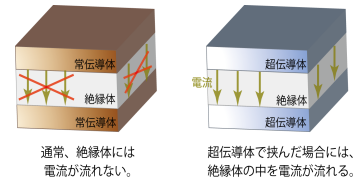
$$H_{MF} = \sum_{\mathbf{k}} E^{(a)}(\mathbf{k})(\alpha_{\mathbf{k},\uparrow}^{(a)\dagger} \alpha_{\mathbf{k},\uparrow}^{(a)} + \alpha_{-\mathbf{k},\downarrow}^{(a)\dagger} \alpha_{-\mathbf{k},\downarrow}^{(a)}) + (b\text{-term}) + E_g \quad (1.14)$$

$$H_T = \sum_{\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma} (T_{\mathbf{p},\mathbf{q}} c_{\mathbf{p},\sigma}^{(a)\dagger} c_{\mathbf{q},\sigma}^{(b)} + \text{h.c.}) \quad (1.15)$$

これは、

- 第一項：2つの超伝導体の BCS ハミルトニアン
- 第二項：2つの超伝導体の間を歩きかう、電子のトンネル効果

となっています。 H_{MF} のスペクトルは分かっているので、 H_T を摂動で扱うことを考えます。更に、温度が十分低いとして、系の状態は H_{MF} の基底状態 $|\Psi^{(0)}\rangle = |\Psi_{BCS}^{(a)}\rangle |\Psi_{BCS}^{(b)}\rangle$ からの摂動として扱えばよいです。電流を求める前



に、エネルギーを求めてみましょう。計算は H_T に Bogoliubov 変換の式を使ってすべての演算子を Bogolon の生成消滅演算子で書き直し、基底状態が Bogolon の真空となっていることを使えば簡単に実行できます。結果、

$$\Delta^{(1)} = \langle \Psi^{(0)} | H_T | \Psi^{(0)} \rangle = 0 \quad (1.16)$$

$$\begin{aligned} \Delta^{(2)} &= \langle \Psi^{(0)} | H_T \frac{1}{E_g - H_{MF}} H_T | \Psi^{(0)} \rangle \\ &= -2 \sum_{\mathbf{k}, l} \frac{|T_{\mathbf{k}, l}|^2}{E_{\mathbf{k}} + E_l} \left[\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon(\mathbf{k})\epsilon(l)}{E(\mathbf{k})E(l)} \right) + \frac{1}{4} \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^{(a)} \Delta_l^{(b)*} + \Delta_{\mathbf{k}}^{(a)*} \Delta_l^{(b)}}{E_{\mathbf{k}} E_l} \right] \end{aligned} \quad (1.17)$$

第一項は $\langle \Psi^{(a)} | c_{\mathbf{p}\uparrow} c_{\mathbf{p}\uparrow}^\dagger | \Psi^{(a)} \rangle$ のような行列要素の寄与で、電子が (a) (b) (a) などと移動することによるエネルギー変化を表します。常伝導状態でもある寄与なので、重要ではありません。第二項は $\langle \Psi^{(a)} | c_{\mathbf{p}\uparrow} c_{-\mathbf{p}\downarrow} | \Psi^{(a)} \rangle$ のような行列要素からの寄与で、クーパーペアが (a) (b) と移動することによるエネルギー変化を表しています。ギャップ関数 Δ に比例することからわかるように、これは超伝導状態特有の寄与で、Josephson effect の原因となります。ギャップ関数が波数 \mathbf{k} によらない特別な場合については、

$$\Delta^{(2)} = -J \cos(\phi_a - \phi_b) \quad (1.18)$$

ただし

$$J = 2 \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} \frac{|T_{\mathbf{p}, \mathbf{q}}|^2}{E_{\mathbf{p}}^{(a)} + E_{\mathbf{q}}^{(b)}} \frac{|\Delta^{(a)}| |\Delta^{(b)}|}{E_{\mathbf{p}}^{(a)} E_{\mathbf{q}}^{(b)}} \quad (1.19)$$

$$\Delta^{(a)} = |\Delta^{(a)}| e^{i\phi_a} \quad (1.20)$$

$$\Delta^{(b)} = |\Delta^{(b)}| e^{i\phi_b} \quad (1.21)$$

と簡単な表式が得られます。この形より、二つの超伝導体の位相がそろったほうが安定化することがみてとれます。それでは電流を求めてみましょう。超伝導体 (a) の電子数を N とおくと、

$$N = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^{(a)\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}^{(a)} \quad (1.22)$$

$$\dot{N} = \frac{i}{\hbar} [H, N] = -\frac{i}{\hbar} \left(\sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \sigma} T_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} c_{\mathbf{p}, \sigma}^{(a)\dagger} c_{\mathbf{q}, \sigma}^{(b)} - \text{h.c.} \right) \quad (1.23)$$

となります。よって、電流は摂動の一次までで、

$$\begin{aligned} I &= (-e) \langle \dot{N} \rangle \\ &= (-e) \langle \Psi | \left(1 + \frac{H_T}{E_g - H_{MF}} \right) \dot{N} \left(1 + \frac{H_T}{E_g - H_{MF}} \right) | \Psi \rangle \\ &= \frac{2eJ}{\hbar} \sin(\phi_a - \phi_b) \end{aligned} \quad (1.24)$$

となって Josephson effect が導出されます。式 (1.18) と式 (1.24) を考えると、位相をそろえて安定化するためにクーパーペアが移動し、電流が流れることがわかります。

1.3 Meissner effect, 完全導電性***

超伝導体に電磁場をかけた時の応答を見ることによって、Meissner effect と完全導電性を導きましょう。例によって電磁場との相互作用項

$$H' = - \int j_\mu A^\mu d^3\mathbf{r} \quad (1.25)$$

は摂動とみなします。また、十分温度が低いとして、基底状態 $|\Psi^{(0)}\rangle = |\Psi_{BCS}\rangle$ からの摂動を考えます。一次の摂動と、そのノルムは、

$$|\Psi^{(1)}\rangle = \sum_{n \neq 0} \frac{\langle n|H'|\Psi^{(0)}\rangle}{E_g - E_n} |n\rangle \quad (1.26)$$

$$|\langle \Psi^{(1)}|\Psi^{(1)}\rangle|^2 = \sum_{n \neq 0} \left| \frac{\langle n|H'|\Psi^{(0)}\rangle}{E_g - E_n} \right|^2 \quad (1.27)$$

となります。分子の行列要素 $|\langle n|H'|\Psi^{(0)}\rangle|$ は磁場が空間的にあまり激しく変化しない場合はゼロに近い値をとります。一方分母はエネルギーギャップの存在により、有限にとどまります。よって、超伝導体では摂動の効果が近似的に無視でき、基底状態は $|\Psi^{(0)}\rangle = |\Psi_{BCS}\rangle$ にとどまったままです。これをとって、超伝導体は摂動に対して”硬い”といわれることがあります。

外部磁場を加えた時の電流は、

$$\langle \mathbf{j} \rangle = \langle -nev \rangle \quad (1.28)$$

$$= -\frac{ne}{m_e} \langle \mathbf{p} + e\mathbf{A} \rangle \quad (1.29)$$

$$= -\frac{ne}{m} \langle \mathbf{p} \rangle - \frac{ne^2}{mc} \mathbf{A} \quad (1.30)$$

です。超伝導体は摂動に対して硬いので、期待値は基底状態についてとればよいです。すると、第一項目は基底状態の自発的電流の表式となり、ゼロになります。よって、

$$\mathbf{j} = -\frac{ne^2}{m} \mathbf{A}(x) \quad (\text{London 方程式}) \quad (1.31)$$

という方程式が得られます。この方程式と Maxwell 方程式を組み合わせることにより、Meissner effect と完全導電性が導かれます。まずは Meissner effect から導きましょう。London 方程式の rot をとって、

$$\mathbf{B} = -\frac{m}{ne^2} \text{rot} \mathbf{j} \quad (1.32)$$

Maxwell 方程式より、

$$\text{rot} \mathbf{B} = \mu \mathbf{j} \quad (1.33)$$

ただし、定常的な Meissner effect を考えるため、変位電流を無視した。さらに rot をとって、

$$\begin{aligned} \text{rot}(\text{rot} \mathbf{B}) &= \text{grad}(\text{div} \mathbf{B}) - \Delta \mathbf{B} \\ &= -\Delta \mathbf{B} \\ &= \mu \text{rot} \mathbf{j} \end{aligned} \quad (1.34)$$

(1.32) 式と (1.34) 式より、

$$\Delta \mathbf{B} = \frac{1}{\lambda_L^2} \mathbf{B} \quad (1.35)$$

$$\lambda_L = \sqrt{\frac{m}{\mu ne^2}} \quad (1.36)$$

となり、磁場は超伝導体の中に λ_L 程度の長さしか侵入できません。Meissner effect が導かれました。ちなみに、 λ_L は Al で 13nm 程度となります。次に、完全導電性、つまり $R = 0$ を導きましょう。London 方程式の両辺を $\frac{\partial}{\partial t}$ して、

$$\frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} = -\frac{ne^2}{m} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (1.37)$$

Maxwell 方程式より、

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (1.38)$$

$$= \frac{m}{ne^2} \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} \quad (1.39)$$

この式は、電場を全くかけなくても電流が流れることを意味していて、完全導電性を表しています。 $\mathbf{j} = \mathbf{j}_0 e^{i\omega t}$ の状況を考えれば、

$$Z = \frac{V}{I} \quad (1.40)$$

$$= \frac{\mathbf{E} \cdot \mathbf{d}}{\mathbf{j} \cdot \mathbf{dS}} \quad (1.41)$$

$$= i \frac{m\omega}{ne^2 S} \quad (1.42)$$

よって、

$$R = \Re(Z) = 0 \quad (1.43)$$

となり、完全導電性の式が導かれました。

第 2 章

銅酸化物高温超伝導体におけるジョセフソンプラズマの理論

西村拓也

2.1 電子の集団振動としてのプラズマ***

まずは古典的なモデルで電子の集団振動としてのプラズマ振動（プラズモン）が現れることを見ます。参考文献は [1],[2] です。

2.1.1 金属の誘電関数とプラズマ振動数

金属中の互いに相互作用しない自由電子からなる系を考えましょう。この系に光の電場 \mathbf{E} を印加した時に金属中の電子がどういう応答を示すかを議論していきます。具体的には分極ベクトル \mathbf{P} を計算することで、次で定義される誘電関数を求めます。

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} =: \epsilon \mathbf{E}$$

ここで一般に印加する電場は周波数依存性を持つので誘電関数 ϵ も周波数依存性を持ちます。^{*1}さてここで電場中の自由電子の運動方程式は

$$m_* \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = -e \mathbf{E}$$

です。 m_* は電子の有効質量、 e は素電荷です。^{*2}電子の変位 \mathbf{x} と電場 \mathbf{E} が $\exp(-i\omega t)$ のような時間依存性を持つと仮定すると運動方程式から簡単に $\mathbf{x} = -(e/m_* \omega^2) \mathbf{E}$ と解けます。単位体積中の電気双極子モーメントから分極ベクトルが次のように与えられます。

$$\mathbf{P} = -N e \mathbf{x} = -\frac{N e^2}{m_* \omega^2} \mathbf{E}$$

ここで N は単位体積中の電子の個数です。よって誘電関数の定義より

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right)$$

^{*1} 以下では長波長極限を考えていくので、波数依存性は持たないものとして扱います。

^{*2} ここでダンピングは無視しました。つまり緩和時間 τ は十分大きいものとしてダンピング項を無視しました。

ここでプラズマ振動数 $\omega_p := \sqrt{\frac{Ne^2}{m_*\epsilon_0}}$ を定義しました。電磁気学によれば反射率 R は複素屈折率 n を用いて

$$R = \left| \frac{n-1}{n+1} \right|^2$$

とかけます。また非磁性体の複素屈折率 n は比誘電率 $\epsilon_r := \epsilon/\epsilon_0 = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$ をもちいて $n = \sqrt{\epsilon_r}$ と表されるので結局

$$R = \left| \frac{\sqrt{\epsilon_r} - 1}{\sqrt{\epsilon_r} + 1} \right|^2$$

となります。反射率が周波数 ω の関数として表されました。誘電率が負のとき、すなわち $\omega < \omega_p$ のとき複素屈折率は純虚数となるので、 $R = 1$ (反射率 100%) となることが分かります。逆に $\omega > \omega_p$ のとき、一部の光は物質中で減衰せずに、透過します。(吸収率は 0 で反射率と透過率の和は 1) 典型的な金属ではプラズマ振動数は紫外領域にあるので、可視光はほとんど反射されることとなります。また原子核の正のイオンが作る背景の影響を考慮すると金属の誘電関数は次のように修正を受けることが期待されますが本質的な変更にはなりません。

$$\epsilon = \epsilon(\infty) \left(1 - \frac{\tilde{\omega}_p^2}{\omega^2} \right)$$

ここで $\tilde{\omega}_p$ はプラズマ振動数における ϵ_0 を $\epsilon(\infty)$ で置き換えたものです。

2.1.2 プラズマ中の電磁波

ここではプラズマ中の電磁波の振る舞いを考えていきます。基礎となるのはマクスウェル方程式:

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{H} &= \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{i} \\ \nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \end{aligned}$$

と現象論的な関係式

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{i} = \sigma \mathbf{E} \quad (\text{オームの法則}) \\ \rho = 0 \\ \mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E} \\ \mathbf{B} = \mu \mathbf{H} \end{array} \right.$$

です。ここで誘電率 ϵ と透磁率 μ を導入しました。一般にこれらは周波数依存性や波数依存性を持ちますが、以下では非磁性の媒質を考えることにして、 μ は真空中の透磁率 μ_0 と等しくとります。マクスウェル方程式から波動方程式

$$\frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} = \frac{1}{\mu_0} \Delta \mathbf{E}$$

が得られますが、ここで $\mathbf{E} \propto \exp(-i\omega t + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$ という解の形を仮定すると次の周波数 ω と波数 \mathbf{k} の関係 (分散関係) が得られます。

$$\omega = \frac{|\mathbf{k}|^2}{\mu_0 \epsilon(\omega, \mathbf{k})}$$

1.1 で求めた自由電子系での誘電関数を代入すると

$$\epsilon(\omega)\omega^2 = \epsilon(\infty)(\omega^2 - \tilde{\omega}_p^2) = \frac{1}{\mu_0}k^2$$

よって $\omega < \tilde{\omega}_p$ のとき $k^2 < 0$ なので k が純虚数になり、電磁波が減衰する解が得られます。これは 1.1 でみたように反射率が 1 となることに対応し、入射電磁プラズマ中で電磁波は減衰し、完全に反射されます。 $\omega > \tilde{\omega}_p$ のとき誘電関数は正の実数値になるので、 k は実数となります。そこで分散関係は

$$\omega^2 = \tilde{\omega}_p^2 + c^2k^2/\epsilon_r$$

真空中の光速と $c = 1/\sqrt{\mu_0\epsilon_0}$ と比誘電率 $\epsilon_r := \epsilon(\infty)/\epsilon_0$ で書き直しました。まとめるとプラズマ中の電磁波は

それ以下の振動数が侵入できないカットオフ振動数 $\tilde{\omega}_p$ を持ち、

分散関係 $\omega = \sqrt{\tilde{\omega}_p^2 + c^2k^2/\epsilon_r}$ を持つ。

といえます。

2.1.3 電子の集団振動とプラズモン

ここでは誘電関数が 0 となる振動数が電子の集団的な縦波モードを決定することをみます。これがプラズモンに他なりません。まず

$$\epsilon(\omega_L) = 0$$

をみたすものとして、縦波プラズマ振動数 ω_L を定義します。特に自由電子系では

$$\epsilon(\omega_L) = \epsilon(\infty) \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega_L^2} \right) = 0$$

より $\omega_L = \omega_p$ が導かれます。このとき誘電関数が 0 となることから $\mathbf{D} = \epsilon_0\mathbf{E} + \mathbf{P} = 0$ となり、 $\mathbf{E} = -\frac{1}{\epsilon_0}\mathbf{P}$ が成り立ちます。よって電子が作る電場 \mathbf{E} は $\mathbf{E} = -\frac{1}{\epsilon_0}\mathbf{P} = -ne\mathbf{u}/\epsilon_0$ となります。そこで単位体積当たりの電子の運動方程式は各電子の変位を \mathbf{u} とすると

$$m_*N\frac{d^2\mathbf{u}}{dt^2} = -Ne\mathbf{E} = -\frac{N^2e^2}{\epsilon_0}\mathbf{u}$$

となり、これは振動数 ω_p の調和振動子の方程式なので、電子の集団振動を記述しています。この伝導電子による、縦波の集団励起をプラズモンといいます。^{*3}

2.2 量子論からみたプラズモン***

$q = (q, q_0)$ とします。基本的に金属中の電子系を考えていきますが、簡単のためフォノンの効果を無視します。

2.2.1 RPA 近似とクーロン相互作用の遮蔽

クーロン相互作用は長距離相互作用であるために、長波長極限で特異性を持ちます。しかし電子の相互作用により、電荷が遮蔽され、有効的なポテンシャルは長波長極限で特異性を持たなくなります。まずはこの効果を乱雑位相近似、RPA(random phase approximation)^{*4}で扱います。すなわち、有効相互作用は次のようなダイアグラムの和で与えら

^{*3} 厳密にはこの集団励起を量子化した準粒子をプラズモンといいます。量子論の文脈での議論は次節で扱います。

^{*4} 元々の RPA はクーロン相互作用を評価する際に、異なる波数を持つ状態間の位相の相関はない(乱雑である)と考え、これらの和は相殺し合い十分無視できるとする近似です。

れるとします。

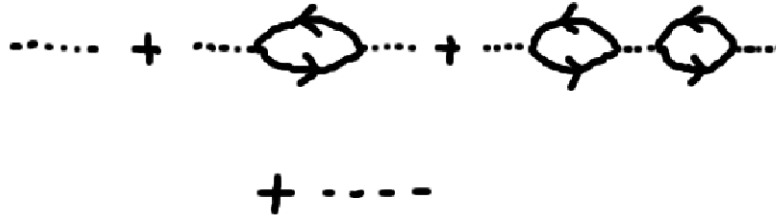


図 2.1 RPA による有効ポテンシャルの評価

これはまさしく、電子による分極 (1 粒子既約なダイアグラムの和) を摂動の最初の項で打ち切ったものに他なりません。さて RPA 近似における有効ポテンシャル $V_{eff}^{RPA}(q)$ を裸のクーロン相互作用 $V(q) := e^2/|q|^2$ を用いて、具体的に評価すると

$$V_{eff}^{RPA}(q) = V(q) - V(q)P^{RPA}(q)V_{eff}^{RPA}(q)$$

ここで $P^{RPA}(q)$ は電子の 1 ループ部分^{*5}で、

$$P^{RPA}(q) = 2 \times i \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} G_0(p+q)G_0(p)$$

2 というファクターは電子のスピンによるものです。また G_0 は自由電子の Green 関数で $G_0(p) = (p_0 - \epsilon_p)^{-1}$, $\epsilon_p = |p|^2/2m$ です。さて上の式を $P^{RPA}(q)$ について解き、次のように誘電関数 $\epsilon(\mathbf{q}, q_0)$ を定義します。

$$V_{eff}^{RPA}(q) = \frac{V(q)}{1 + V(q)P^{RPA}(q)} =: \frac{V(q)}{\epsilon(q)}$$

この評価はリンハードにより与えられていて、

$$\Re\epsilon(q) = 1 + \frac{2e^2mk_F}{\pi|q|^2} \left\{ 1 + \frac{k_F}{2|q|} f\left(\frac{mq_0}{|q|k_F} + \frac{|q|}{2k_F}\right) - \frac{k_F}{2|q|} f\left(\frac{mq_0}{|q|k_F} - \frac{|q|}{2k_F}\right) \right\}$$

$$f(x) = (1 - x^2) \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|$$

$$\Im\epsilon(q) = \begin{cases} 0 & (2m|q_0| > |q|^2 + |q|k_F) \\ 0 & (|q| > 2k_F, 2m|q_0| < |q|^2 - 2qk_f) \\ \frac{2e^2m^2}{|q|^3} \frac{q_0}{|q|} & (|q| < 2k_F, 2m|q_0| < ||q|^2 - |q|k_F|) \\ \frac{e^2mk_F^2}{|q|^3} \left\{ 1 - \left(\frac{mq_0}{|q|k_F} - \frac{|q|}{2k_F} \right)^2 \right\} & ||q|^2 - |q|k_F| < 2m|q_0| < ||q|^2 + |q|k_F| \end{cases}$$

ここで k_F はフェルミ波数です。この関数の主な特徴を述べておきましょう。

(i)

*5 まさしく上で述べた 1 粒子既約な分極部分の最初の項です。

$q_0 = 0$ のとき $\Im\epsilon = 0$ で誘電関数は長波長極限で、トーマス・フェルミの近似の結果を再現する。 :

$$\epsilon(\mathbf{q}, 0) = 1 + \frac{k_s^2}{|\mathbf{q}|^2}$$

$$k_s^2 := \frac{3ne^2}{2\epsilon_0 E_F}$$

(ii)

短波長極限、すなわち $|\mathbf{q}| \rightarrow \infty$ で $\epsilon \rightarrow 1$ であり、運動量の変化が大きい過程では遮蔽は無視できる。

(iii)

$q_0 \neq 0$ の場合、誘電関数に虚部が生じうるのは $|\mathbf{q}|^2 - 2|\mathbf{q}|k_F \leq 2m|\mathbf{q}| \leq |\mathbf{q}|^2 + 2|\mathbf{q}|k_F$ のときだけで、特に振動数が高い極限 $|q_0| \gg |\mathbf{q}|^2 + (2|\mathbf{q}|k_F/2m)$ では自由電子系での結果を再現する。

$$\Re\epsilon(\mathbf{q}, q_0) = 1 - \frac{\omega_p^2}{q_0^2}$$

ここで ω_p はプラズマ振動数。

となります。

2.2.2 電荷密度の揺らぎと真空分極

ここでは前節の RPA 近似による分極関数の評価を全ての分極過程を含む形に拡張し、有効ポテンシャルと誘電関数を定義します。そして誘電関数のゼロ点が、ボゾンの電荷密度揺らぎの集団励起 (プラズモン) を定義することを示します。

fig.2.2 のようなグラフたちの和で定義される量を考えます。これはあらゆる 1 粒子既約な分極過程を含む分極関数です。

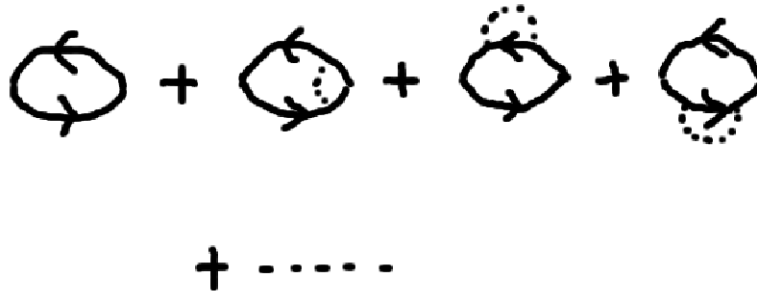


図 2.2 分極関数 $P(q)$ を評価するダイアグラム

よって有効ポテンシャルは $P(q)$ をクーロン相互作用線の間に入れたダイアグラムすべての足し上げで得られて、

$$V_{eff}(q) = \frac{V(q)}{1 + P(q)V(q)} = \frac{V(q)}{\epsilon(q)}$$

さてここで次のような量を定義します。

$$\Pi(q) := -i \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iq_0 t} \langle 0 | T \{ \rho_{-\mathbf{q}}(t) \rho_{\mathbf{q}}(0) \} | 0 \rangle$$

$$\rho_{\mathbf{q}}(t) := \sum_s \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \psi_s^\dagger(\mathbf{r}, t) \psi_s(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{p}, s} c_{\mathbf{p}, s}^\dagger(t) c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, s}(t)$$

$$\frac{V_{eff}(q) - V(q)}{V(q)} = V(q)\Pi(q)$$

であり、 ρ の間に、全ハミルトニアン $\mathcal{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ の固有状態からなる完全系を挿入することで、

$$\frac{1}{\epsilon(q)} - 1 = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{F(\mathbf{q}, \omega)}{q_0 - \omega + iq_0\delta}$$

$$F(\mathbf{q}, \omega) = V(q) \sum_n |\langle n | \rho_{-\mathbf{q}} | 0 \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}), \omega > 0$$

$$F(\mathbf{q}, \omega) = -F(\mathbf{q}, -\omega), \omega < 0$$

ここで $\mathcal{H}|n\rangle = E_n|n\rangle, \omega_{n0} := (E_n - E_0)/\hbar$ 空間反転対称性がある場合、 $F(\mathbf{q}, \omega) = -F(-\mathbf{q}, -\omega)$ が成り立つので、
結局

$$\frac{1}{\epsilon(q)} - 1 = \int_0^{\infty} d\omega F(\mathbf{q}, \omega) \left(\frac{1}{q_0 - \omega + iq_0\delta} - \frac{1}{q_0 + \omega + iq_0\delta} \right)$$

$$= \int_0^{\infty} d\omega F(\mathbf{q}, \omega) \frac{2\omega}{q_0^2 - \omega^2 + i\delta}$$

となります。右辺はまさしく、ボゾンの Green 関数のスペクトル表示そのものであり、左辺から誘電関数のゼロ点がこの Green 関数の極を決定することが分かります。スペクトル関数 $F(\mathbf{q}, \omega)$ が電子系の『電荷密度ゆらぎ演算子』の行列要素を含んでいることから、このボゾンの励起状態は電荷密度ゆらぎを量子化したものといえます。

もうちょっと詳しくこのボゾンの正体を見てみましょう。誘電関数のスペクトル表示の虚部を取ると

$$F(\mathbf{q}, q_0) = \begin{cases} -\frac{1}{\pi} \Im \frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, q_0)} & (q_0 > 0) \\ \frac{1}{\pi} \Im \frac{1}{\epsilon(\mathbf{q}, q_0)} & (q_0 < 0) \end{cases}$$

まとめて

$$F(q) = -\frac{1}{\pi} \frac{\epsilon_2(q) \operatorname{sgn} q_0}{\epsilon_1^2(q) + \epsilon_2^2(q)}$$

ここで誘電関数を RPA で評価したもので置き換えるとすると、運動量 \mathbf{q} を固定した時に、このボゾン励起は $|\mathbf{q}|^2 - 2|\mathbf{q}|k_F \leq 2m|\mathbf{q}| \leq |\mathbf{q}|^2 + 2|\mathbf{q}|k_F$ で連続スペクトルをとります。なぜならこの範囲でのみ誘電関数の虚部が0でない値をとるからです。^{*6}

ではこのボゾンの励起の物理的描像はどうなっているのでしょうか？励起した電子はクーロン相互作用により、その近傍の電子を排斥します。すると周りには正の電荷の雲ができ、これが励起電子の電荷を遮蔽し、さらに雲は励起電子の運動に追従します。このような背景の流動 (バックフロー) を考えることで系の外場に対する矛盾のない応答を得ることができます。

$1/\epsilon - 1$ が特異となりうるのは、 $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 0$ となるところであり、 $\epsilon_1 = 0$ は高周波数極限で考えると

$$q_0^2 = \omega_p^2 = \frac{ne^2}{m\epsilon_0}$$

^{*6} 実はこの条件は始状態でフェルミ面の内側 \mathbf{p} を占めていた電子が、フェルミ面の外側 $\mathbf{p} + \mathbf{q}$ への励起する過程に 1 体 1 に対応させることができます。

のとき、すなわちプラズマ振動数と一致するときであり、これは古典的な結果を再現します。結局ボゾ的な電荷密度揺らぎの励起状態とはプラズモンに他ならなかったわけです。しかし $\epsilon_2 = 0$ という条件から運動量が大きい領域では、1粒子的な連続スペクトルに入り込んでしまい、激しく減衰してしまうために、準粒子描像を保てません。しかし運動量が小さい領域では電子系の電磁場への応答に大きな役割を果たします。

2.3 超伝導におけるプラズマ振動***

この章では自然単位系、つまり $\hbar = c = 1$ の単位系で考えていきます。

2.3.1 電磁場への応答

超伝導体の電磁場との結合を考えるうえでまず、系の応答関数を考えます。電磁場は次のように4元形式で定義します。

$$A_\mu := \begin{cases} A_i & (\mu = i, i = 1, 2, 3) \\ \varphi & (\mu = 0) \end{cases}$$

ここで $x = (\mathbf{r}, t)$ で、以下計量は $\text{diad}(-1, 1, 1, 1)$ ととります。さて電磁場と電子系の結合は次のように与えられます。

$$\begin{aligned} H_p &:= - \int d^3\mathbf{r} j_\mu^p(x) A^\mu(x) \\ &= - \int d^3\mathbf{r} (-\rho_e(x)\varphi(x) + \mathbf{j}^p \cdot \mathbf{A}) \end{aligned}$$

j^p は次で定義される常磁性電流演算子です。

$$j_\mu^p(x) := \begin{cases} j_i^p(x) := -\frac{e}{2mi} \sum_s \{ \psi_s^\dagger(x) \nabla_i \psi_s(x) - \nabla_i \psi_s^\dagger(x) \psi_s(x) \} & (\mu = i = 1, 2, 3) \\ \rho_e(x) := -e \sum_s \psi_s^\dagger(x) \psi_s(x) = -e\rho(x) & (\mu = 0) \end{cases}$$

つまり空間成分は普通の電磁場がない場合の電流密度を与えており、0成分は電荷密度演算子です。 $A \neq 0$ のときのゲージ不変な、つまり物理的な電流密度 j_μ は

$$\begin{aligned} j_\mu &:= j_\mu^p + j_\mu^d \\ j_\mu^d &:= \begin{cases} \frac{e}{m} \rho_e(x) A_i(x) & (\mu = i = 1, 2, 3) \\ 0 & (\mu = 0) \end{cases} \end{aligned}$$

で反磁性項とのカップリングは

$$H_d := -\frac{e}{2m} \int d^3\mathbf{r} \rho_e(x) \sum_i^3 A_i^2(x)$$

で全ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} := H + H'$$

と与えられます。 $H' := H_p + H_d$ は摂動として扱い、以下では相互作用描像で考えていきます。 $t \rightarrow -\infty$ で $A_\mu = 0$ であるとする、基底状態の時間発展は

$$|\Psi(t)\rangle = T \exp \left[-i \int_{-\infty}^t dt' H'(t') \right] |0\rangle =: U(t, -\infty) |0\rangle$$

$|0\rangle$ は非摂動ハミルトニアン H の基底状態で、状態 $|\Psi(t)\rangle$ における電流密度の期待値は

$$J_\mu(x) := \langle \Psi(t) | j_\mu(\mathbf{r}, t) | \Psi(t) \rangle = \langle 0 | U^\dagger(t, -\infty) j_\mu(\mathbf{r}, t) U(t, -\infty) | 0 \rangle$$

でこれを外場についての1次の項までを評価すると

$$J_\mu = - \int d^3\mathbf{r}' dt' K_{\mu\nu}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') A_\nu(\mathbf{r}', t')$$

ここで ν については和を取っていて、(Einstein の規約)

$$K_{\mu\nu} := -i \langle 0 | [j_\mu^p(x), j_\nu^p(x')] | 0 \rangle \theta(t - t') - \frac{e}{m} \langle 0 | \rho_e(x) | 0 \rangle \delta^4(x - x') \delta_{\mu\nu} [1 - \delta_{\nu,0}]$$

系が並進対称性を持つのであれば、 $K_{\mu\nu}$ は二つの時空点の差のみの関数で、特に次のように空間に対して Fourier 展開します。

$$\tilde{K}_{\mu\nu}(\mathbf{q}, t - t') = -i \langle 0 | [\tilde{j}_\mu^p(\mathbf{q}, t), \tilde{j}_\nu^p(-\mathbf{q}, t')] | 0 \rangle \theta(t - t') - \frac{e^2 n}{m} \delta(t - t') \delta_{\mu\nu} [1 - \delta_{\nu,0}]$$

で n は単位体積当たりの電子数です。第一項は常磁性項、第二項は反磁性項を表します。以下では引数で区別することにしてチルダを省略します。常磁性項については特に応答関数

$$R_{\mu\nu}(\mathbf{q}, t) := -i \langle 0 | [j_\mu^p(\mathbf{q}, t), j_\nu^p(-\mathbf{q}, 0)] | 0 \rangle \theta(t)$$

を定義します。これは階段関数により、明白に因果律を守っていますが、場の量子論で自然に扱える対象はむしろ時間順序積で定義された Green 関数です。そこで次のような時間順序積に拡張された応答関数との関係を考えていきます。

$$P_{\mu\nu}(\mathbf{q}, t) := -i \langle 0 | T \{ j_\mu^p(\mathbf{q}, t), j_\nu^p(-\mathbf{q}, 0) \} | 0 \rangle$$

よく知られているようにこれらは時間に関する Fourier 変換を考えて、スペクトル表示をすることで関係づけられます。

$$R_{\mu\nu}(q) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{C_{\mu\nu}(\mathbf{q}, \omega)}{q_0 - \omega + i\delta}$$

$$C(\mathbf{q}, \omega) = \sum_n \langle 0 | j_\mu^p(\mathbf{q}) | n \rangle \langle n | j_\nu(-\mathbf{q}) | 0 \rangle \delta(E_n - E_0 - \omega) - \sum_n \langle 0 | j_\nu^p(-\mathbf{q}) | n \rangle \langle n | j_\mu(\mathbf{q}) | 0 \rangle \delta(E_n - E_0 + \omega)$$

ただし $\mathcal{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ です。同様に $P_{\mu\nu}$ の時間についての Fourier 変換に対して

$$P_{\mu\nu}(q) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{C(\mathbf{q}, \omega)}{q_0 - \omega + i\delta\omega}$$

となり、 $C(\mathbf{q}, \omega)$ が実数の時

$$\Re P_{\mu\nu}(q) = \Re R_{\mu\nu}(q)$$

$$\Im R_{\mu\nu}(q) = \text{sgn}(q_0) \Im P_{\mu\nu}(q)$$

が成り立つので、一方が分かれば他方もわかります。まとめると

弱い電磁場 A_μ に対する系の応答は

$$J_\mu(q) = -K_{\mu\nu}(q) A_\nu(q)$$

$$K_{\mu\nu}(q) = R_{\mu\nu}(q) + \frac{1}{\lambda_L^2} \delta_{\mu\nu} [1 - \delta_{\nu,0}]$$

で与えられる。ここで $\lambda_L^2 := m/ne^2$ で第一項は常磁性項、第二項は反磁性項を表している。

常磁性応答関数 $R_{\mu\nu}$ は常磁性因果関数

$$P_{\mu\nu} := -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle 0|T\{j_{\mu}^p(\mathbf{q}, t)j_{\nu}(-\mathbf{q}, 0)|0\rangle e^{iq_0 t}$$

の実部、虚部から求まる。

さてここで常磁性応答関数が0になるような状況を考えましょう。超伝導体では基底状態は摂動に対して”硬い”とされるので、摂動が小さいとき、 $R_{\mu\nu} = 0$ が期待できます。すると

$$J_i(x) = -\frac{ne^2}{m} A_i(x)$$

となり、ロンドン方程式に帰着します。この方程式が一般のゲージ変換に対して不変でないことは明らかですが、ロンドン理論では A のうち横波だけをあらわに扱っていることになっていて、そのような横波成分を変えないようなゲージ変換に対しては J は不変です。 A の縦波成分は実際は電子系の縦波励起とカップルするので、基底状態はこの摂動に対して硬いわけではなく、常磁性項は厳密には0となりません。実際に A が横波を持たないならば、ゲージ不変性から要請されるように、常磁性項と反磁性項が完全にキャンセルします。 $K_{\mu\nu}$ に対する近似として系の横波励起のみを考慮して計算された結果は、一般に明白なゲージ対称性を失いますが、それでも横波成分への応答は正しい物理的予言を与えます。BCS理論による $K_{\mu\nu}$ に対する評価はまさにこの場合に該当します。縦波集団励起モードなどのバックフローを含めると常磁性項の縦波への応答部分が補正され、ゲージ対称性が回復されます。^{*7} 応答関数を用いたマイスナー効果の議論はゲージ対称性の問題を考えるうえで教育的ですが、ここでは紙面の都合上省かせていただきます。詳しくは参考文献 [4] を参照してください。

2.3.2 ゲージ不変性とワード-高橋恒等式

超伝導現象の本質はよく言われるようにゼロ抵抗ではなく、ゲージ対称性^{*8}の自発的破れです。場の理論では連続的対称性が自発的に破れると、ギャップレスな集団励起モードが存在するという南部・ゴールドストーン定理があり、超伝導の場合この集団励起モードが縦波の電荷密度の揺らぎ、すなわちプラズマ振動に他ならないことは次節で見る予定ですが、前節の最後でちょっと述べたように超伝導において縦波励起を扱うにはゲージ不変な形で定式化する必要があります。

ゲージ不変性は局所的な電荷保存則と等価です。局所的な電荷保存則は4元電流演算子 j^{μ} について $\partial_{\mu} j^{\mu} = 0$ すなわち

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$$

を意味します。これを Fourier 変換で運動量空間に直すと

$$q_{\mu} \tilde{j}^{\mu}(q) = 0 = -q_0 \tilde{\rho}_e + \mathbf{q} \cdot \tilde{\mathbf{j}}$$

で期待値についても同様の式が成り立ちます。系の弱い電磁場への応答は

$$J_{\mu}(q) = -K_{\mu\nu}(q) A_{\nu}(q)$$

^{*7} この縦波集団励起モードが、南部・ゴールドストーンモードに他なりません。

^{*8} U(1) ゲージ対称性

$$K_{\mu\nu}(q) = R_{\mu\nu}(q) + \frac{1}{\lambda_L^2} \delta_{\mu\nu} [1 - \delta_{\nu,0}]$$

で与えられたので結局、局所的な電荷保存則は $K_{\mu\nu}$ に関して、

$$q^\mu K_{\mu\nu}(q) = 0$$

を要請します。同様にゲージ不変性が $K_{\mu\nu}$ に課す条件を調べます。ゲージ変換は

$$\begin{aligned} A_\mu(x) &\rightarrow A_\mu(x) + \partial_\mu \Lambda(x) \\ \tilde{A}_\mu(q) &\rightarrow \tilde{A}_\mu(q) + i q_\mu \tilde{\Lambda}(q) \end{aligned} \text{の}$$

ですからゲージ不変性は

$$K_{\mu\nu}(q) q^\nu = 0$$

を要請します。

$$\begin{aligned} \Re K_{\mu\nu}(q) &= \Re K_{\mu\nu}(-q) \\ \Im K_{\mu\nu}(q) &= -\Im K_{\mu\nu}(-q) \end{aligned}$$

が成り立ち、*9

$$\begin{aligned} q^\mu \Re K_{\mu\nu}(q) &= \Re K_{\nu\mu}(-q) q^\mu \\ q^\mu \Im K_{\mu\nu}(q) &= -\Im K_{\nu\mu}(-q) q^\mu \end{aligned}$$

ですから電荷保存則とゲージ不変性は等価であることが分かりました。ゲージ不変性を保たないような近似では局所的電荷保存則が破綻してしまいます。BCS理論は基底状態がクーパー対のコヒーレント状態であるために、粒子数が確定しておらず、ゲージ不変性が破れるという説明がなされることがありますがこれは不正確です。実際はBCS理論の枠組みでは準粒子励起が正確に扱われておらず、局所的な電荷保存則を破るような過程が存在することに起因します。

実際の電子系では注目する電子の周囲の電子によるバックフローも考慮する必要があります。横波の励起によるバックフローはそれ自身とキャンセルするので、結果的にはバックフローの影響はありません。つまり横波の場に対する応答を考えるうえではこの効果を見ても問題ないです。しかし縦波応答を考える場合はバックフローが縦波ポテンシャルと結合し、そのポテンシャルは長波長極限で裸の準粒子によって生じるポテンシャルと同じ強さで反対の符号をもちます。したがってバックフローとの相互作用を繰り返された準粒子は長波長の縦波ポテンシャル(空間的に緩やかに変化する)と弱くカップルします。結局、バックフローを考慮すると縦波モードが存在することになります。これは電荷密度ゆらぎモードに他なりません。逆に縦波ポテンシャルとカップルするのはこの縦波モードだけなので、縦波モードを考慮することでゲージ不変性を回復できると考えられます。このことはパーディーンによって指摘されました。まとめると

ゲージ不変性と局所電荷保存則は等価である。

ゲージ不変性が破れて見えるのはバックフローによる寄与を見ても無視し、横波応答のみをあらわに扱った結果である。しかしバックフローによる影響(必然的に縦波モードの寄与)を適切に考慮することでゲージ不変性は回復できる。逆に言えば縦波モードを扱うためには、ゲージ不変的な定式化が不可欠である。

*9 $K_{\mu\nu}$ のスペクトル表示よりわかります。

となります。

バックフローと集団励起モードを考慮する方法、つまりゲージ不変性を保つ定式化としてはワード-高橋恒等式を用いた定式化があります。ワード-高橋恒等式は場の理論における対称性と保存則の表れで、Green 関数に対する恒等式です。ワード-高橋恒等式を用いることによって、ゲージ対称性あるいは保存則は自動的に保証されます。以下では南部形式に基づいて議論を進めます。南部形式については [5] や [4] を参照してください。

まず南部形式におけるスピノール場とカレントを含む次のような量を考えます。

$$\Lambda_\mu(x, y, z) := \langle 0|T\{j_\mu(z)\Psi(x)\Psi^\dagger(y)\}|0\rangle$$

を考えます。またバーテックス関数を

$$\Lambda_\mu(x, y, z) =: e \int d^4x' d^4y' G(x, x') \Gamma_\mu(x', y', z) G(y', y)$$

によって定義します。ここで G は

$$G(x, y) := -i \langle 0|T\{\Psi(x), \Psi^\dagger(y)\}|0\rangle$$

でスピノール場の 1 粒子 Green 関数です。ここで系の並進対称性を仮定すると Fourier 変換により、

$$\Gamma_\mu(x, y, z) = \int \frac{d^4p d^4q}{(2\pi)^8} \Gamma_\mu(p+q, p) e^{i\{p(x-y)+q(x-z)\}}$$

さてこの $\Gamma_\mu(p+q, p)$ に関するワード-高橋恒等式は

$$q^\mu \Gamma_\mu(p+q, p) = \tau_3 G^{-1}(p) - G^{-1}(p+q) \tau_3$$

となります。^{*10}さてまずは Γ_μ の物理的な意味を考えてみます。南部形式では

$$j_\mu^p(q) = \begin{cases} \sum_{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p}}^\dagger \left[-\frac{e}{m} (\mathbf{p} + \mathbf{q})_i \mathbf{1} \right] \Psi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} & (\mu = i = 1, 2, 3) \\ \sum_{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p}} [-e\tau_3] \Psi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} & (\mu = 0) \end{cases}$$

と書かれることに注意します。自由なバーテックス関数を

$$\gamma_\mu(p+q, p) := \begin{cases} -\frac{e}{m} (\mathbf{p} + \mathbf{q})_i \mathbf{1} & (\mu = i = 1, 2, 3) \\ -e\tau_3 & (\mu = 0) \end{cases}$$

で定義すると

$$j_\mu^p(q) = -e \sum_{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p}}^\dagger \gamma_\mu(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}) \Psi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}$$

と書かれるので、 Γ_μ に対し、 γ_μ は繰り込まれたバーテックス関数となります。実際に自由な場合については $\epsilon_{\mathbf{p}} = |\mathbf{p}|^2/2m - \mu$ を用いて

$$q^\mu \gamma_\mu(p+q, p) = (\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{p}}) \mathbf{1} - q_0 \tau_3$$

となり、また 1 粒子 Green 関数は

$$G_0^{-1}(p) = p_0 \mathbf{1} - \epsilon_{\mathbf{p}}$$

が成り立つので、確かにワード-高橋恒等式を満たし、自由な場合のバーテックス関数となります。逆に言えば繰り込まれた電子が、繰り込まれたバーテックス $-e\Gamma_\mu$ を通して、電磁場と相互作用するとみなせます。

^{*10} Λ_μ の発散を取り、時間順序積と電荷保存の連続方程式に注意してやるとコンタクトターム (デルタ関数に比例するような項) を除いて 0 になります。求めるものはその両辺を Fourier 変換することで得られます。

さて今から常磁性因果関数 $P_{\mu\nu}$ が G, Γ_μ で表され、さらにワード高橋恒等式がゲージ不変性 $K_{\mu\nu}(q)q^\nu = 0$ を保証することを示します。 $P_{\mu\nu}, \Gamma_\mu$ の定義から

$$P_{\mu\nu}(q) = -ie^2 \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \text{Tr}[\gamma_\mu(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p})G(p+q)\Gamma_\nu(p+q, p)G(p)]$$

が成り立ちます。これをファインマンダイアグラムで表現したものが fig.2.3 です。



図 2.3 分極 $P_{\mu\nu}$ を表すファインマンダイアグラム

この式において 0 成分を無視し、バーテックス関数 Γ_μ を γ_μ によって近似するならば、それはワード-高橋恒等式を満たさず、また BCS 理論の結果を再現することが分かります。つまり、スピノール場の Green 関数には相互作用を考慮した繰り込まれたものを使っているのに対し、バーテックスには自由なものを当てていることが BCS 理論においてワード-高橋恒等式、つまりゲージ不変性を破る原因になっています。では宣言通りワード-高橋恒等式がゲージ不変性を保証することを証明します。

$$\begin{aligned} P_{\mu\nu}(q)q^\nu &= -ie^2 \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \text{Tr}[\gamma_\mu(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p})G(p+q)(q^\nu \Gamma_\nu(p+q, p))G(p)] \\ &= -ie^2 \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \text{Tr}[\gamma_\mu(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}) \\ &\quad \times G(p+q)\{\tau_3 G^{-1}(p) - G^{-1}(p+q)\tau_3\}G(p)] \\ &= ie^2 \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \text{Tr}[\gamma_\mu(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p})\tau_3 G^{-1}(p) - G^{-1}(p+q)\tau_3] \end{aligned}$$

t_3, γ_μ が交換することと、トレースの巡回不変性、 γ_μ の定義から

$$P_{\mu\nu}(q)q^\nu = -\frac{ne^2}{m} q_\mu [1 - \delta_{\mu,0}]$$

ここで n 単位体積当たりの電子密度です。^{*11} 右辺は実数なので $R_{\mu\nu}$ で置き換えることができ、

$$R_{\mu\nu}(q)q^\nu = -\frac{1}{\lambda_L^2} q_\mu [1 - \delta_{\mu,0}]$$

となり、これは反磁性項の符号を反対にしたもので、正確にキャンセルし、 $K_{\mu\nu}$ に関するゲージ不変性が恒等的に満たされます。

2.3.3 バーテックス関数と集団励起モード

前節により、ワード-高橋恒等式がゲージ不変性を保証することが言えたので、この節ではバーテックス関数に関する近似をワード高橋恒等式を満たすように行うことで、BCS 理論を明白にゲージ不変な形に一般化します。 G が摂動展

^{*11} 全電子数を Green 関数で表した表式を用いました。

開においてあるクラスのグラフたちの和で与えられたとしたら、ワード-高橋恒等式をみたすような対応するパーテックス関数 Γ_μ は、そのクラスのグラフたち全てにおいて、各裸の電子線に自由なパーテックス γ_μ を挿入すればよいです。BCS 理論では

$$G^{-1}(p) = p_0 \mathbf{1} - \epsilon_p \tau_3 - \Sigma(p)$$

$$\Sigma(p) = i \int \frac{d^4 p'}{(2\pi)^2} \tau_3 G(p') \tau_3 V(p - p')$$

において自己エネルギー $\Sigma(p)^{*12}$ を相互作用線が重ならないようなグラフの総和で評価することで近似します。つまり BCS 理論をゲージ不変な形に一般化するには、相互作用線が重ならないようなグラフたち (fig.2.4) 全ての可能な部分に γ_μ を挿入すればよく、それは結局、梯子近似することに相当します。

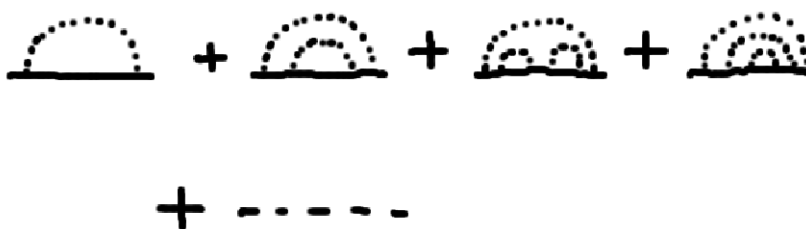


図 2.4 BCS における自己エネルギーの評価を与えるグラフ

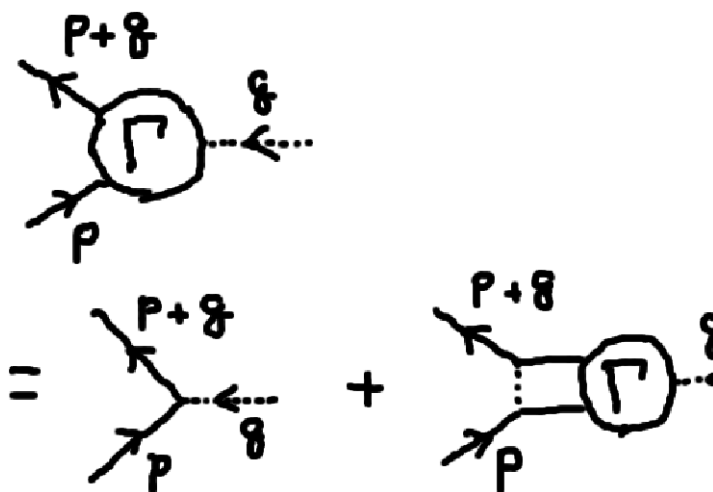


図 2.5 パーテックス関数の満たすべき積分方程式を表すファインマンダイアグラム

したがって

$$\Gamma_\mu(p + q, p) = \gamma_\mu(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}) + i \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \tau_3 G(k + q) \Gamma_\mu(k + q, k) G(k) \tau_3 V(p - k)$$

*12 1 粒子既約な 2 点相関関数のことです。

がバーテックス関数の満たすべき積分方程式 (fig.2.5) です。これがワード-高橋恒等式に整合することは次のようにして確認できます。示すべきは

$$\Gamma_\mu(p+q, p)q^\mu = \tau_3 G^{-1}(k) - G(k+q)^{-1} \tau_3$$

ですが、

$$\Gamma_\mu(p+q, p)q^\mu = \gamma_\mu(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p})q^\mu + i \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \tau_3 G(k+q) (\Gamma_\mu(k+q, k)q^\mu) G(k) \tau_3 V(p-k)$$

の右辺にワード-高橋恒等式を用いると、*13第2項は $\Sigma(p+q)\tau_3 - \tau_3\Sigma(p)$ となることと、自由バーテックス関数について $q^\mu \gamma_\mu(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}) = (\epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{p}})\mathbf{1} - q_0 \tau_3$ を用いると欲しいものが得られます。結局上の積分方程式の解として与えればゲージ不変性は保たれることとなります。さてここで、バーテックス関数に特異性が現れないとすると $q \rightarrow 0$ の極限で、ワード-高橋恒等式の左辺は0になりますが、右辺はギャップの存在のために0ではなくなります。つまり、バーテックス関数が、 $q = 0$ で正則であることはありえません。バーテックスの振る舞いが励起状態のスペクトルを含んでいるとすると、この特異性は低エネルギーにおけるギャップレスな集団励起モードの存在を表している。と考えるのが自然です。実際

$$V(k-p) = \lambda w^*(\mathbf{k})w(\mathbf{p}) \tag{2.1}$$

$$w(\mathbf{k}) = \begin{cases} 1 & (|\epsilon_{\mathbf{k}}| < \omega_c) \\ 0 & (otherwise) \end{cases}$$

を仮定すると

$$\omega(\mathbf{q}) = \frac{v_F}{\sqrt{3}}|\mathbf{q}|$$

というギャップレスな集団励起モードの存在が帰結されます。[4],[6] ここまでバーテックス関数における真空分極過程は無視してきましたが、実際の電子系にはクーロン相互作用が存在し、それが長距離力であるために長波長領域では支配的になるのでこの効果をきちんと考慮する必要があります。必要な補正は

$$-iV_B(q) \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \text{Tr}\{\tau_3 G(k+q) \Gamma_\mu(k+q, k) G(k)\}$$

$$V_B(q) = \frac{e^2}{q^2} + |g_{\mathbf{q}}|^2 D_{0l}(q)$$

を付け加えることです。(fig.2.6)

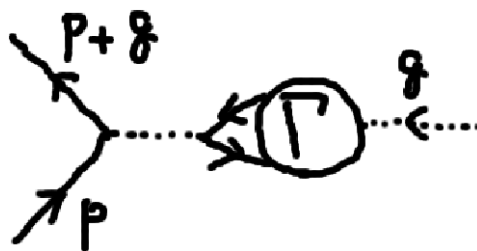


図 2.6 真空分極によるバーテックスの補正を表すファインマンダイアグラム

*13 循環論法のように思えますが、実際積分方程式の解を計算する際は摂動を逐次的に行っていくので n 次までワード-高橋恒等式を満たすならば、 $n+1$ 次の項も自動的に恒等式をみたす。ということを意味しています。

この項は単体と q^μ との内積は 0 となるのでワード-高橋恒等式は満たされます。この補正を考慮すると分散が $|\mathbf{q}| \rightarrow 0$ で 0 になったギャップレスな集団励起モードが有限の振動数が残り、消えないことがアンダーソンにより示されました。[7] このような超伝導系における縦波集団励起モードを彼らの名を冠してアンダーソン・ボゴリューボフモード (AB モード) といいます。結局クーロン相互作用を考慮するとギャップレスだった集団励起モードは、高いエネルギー (典型的には 1eV のオーダー) に押し上げられ、電子系のプラズマ振動になります。(アンダーソン・ヒッグス機構)

2.4 高温超伝導におけるジョセフソンプラズマ 1***

この章の議論は基本的に参考文献 [8],[9] をもとに議論しています。

2.4.1 プラズマモードのエネルギーギャップ

前章までの議論を飛ばした方のために今までの結果から言える大切なことをまとめておきます。一般に外部電磁場への応答を考えるうえで、特に縦波への応答を考慮する際にはゲージ不変な定式化が不可欠です。またこのようなゲージ不変な定式化のもとで超伝導体における縦波集団励起の準粒子描像がボゴリューボフによって最初に導かれ、アンダーソンが一般化された RPA 近似を用いてそれに続きました。そのことからこの集団励起をアンダーソン・ボゴリューボフモード (AB モード) と呼ばれています。まずボゴリューボフが導いたのは長波長極限で分散関係が $\propto |\mathbf{q}|$ となるような音響モードの存在でした。このような分散関係自体は例えばフェルミ液体を音波が伝搬するときのものと同じで、超伝導特有のものではありませんが、特に今の場合はゲージ対称性の自発的破れに伴う南部・ゴールドストーンモードと解釈できます。^{*14} しかしボゴリューボフの議論では電子間のクーロン相互作用による、分極の効果を取り入れていませんでした。アンダーソンが指摘したように超伝導は電氣的に中性の超流動系ではなく、電荷をもったクーロン系ですから長波長極限で支配的となるクーロン相互作用をきちんと考慮する必要があります。すると $|\mathbf{q}| \rightarrow 0$ でも有限の振動数が残り、ギャップが現れます。つまり南部・ゴールドストーンモードとして現れた AB モードが、ゲージ場 (電磁場) の縦波とカップルし、ゲージ場が質量 (ギャップ) を得たというシナリオになっています。^{*15} そのエネルギーギャップはプラズマ振動数を用いて

$$E_g = \hbar\omega_p = \hbar \left(\frac{n_s e^2}{m_* \epsilon} \right)^{\frac{1}{2}}$$

で与えられます。結果として普通の金属に現れるプラズモンと区別がつかなくなります。典型的にはこのギャップの大きさは 1eV のオーダーで、超伝導ギャップのオーダー数 meV に比べて圧倒的に大きいです。このことから AB モードは超伝導準粒子の連続的な励起スペクトルに入り込んでしまい、著しく減衰し観測されません。また観測されたとしてもその励起は普通のプラズモンの励起と区別がつかないので、AB モードと同定するのはできないでしょう。しかし高温超伝導体では 2 次元の CuO_2 面 (ここに超伝導が発現する) と絶縁層が交互に何枚にも積み重なった構造をしており、固有のジョセフソン接合を形成しています。常伝導状態ではシートに垂直な方向 (c 軸という) にはほとんど電子が流れず、有効質量が面内の 3000 倍程度になることが知られています。このことによって、プラズマ振動数が小さくなり、超伝導ギャップ内に収まることで、観測ができるようになります。これがジョセフソンプラズマに他なりません。まとめると

超伝導体における縦波プラズマモードはクーロン相互作用の結果、有限のギャップを持つようになった南部・ゴ

^{*14} 場の量子論の文脈では連続的対称性が自発的に破れるとギャップレスな励起が存在する。という偉大な定理があります。しかし、ゲージ場が存在する系では必ずしも NG モードは観測されるとは限りません。(アンダーソン・ヒッグス機構として知られています。)

^{*15} ゲージ場が AB モードとカップルしているので、ゲージ場が質量を得たと解釈しても問題ありません。

ルドストーンモードと解釈できる。普通の超伝導体ではギャップが大きいため、観測できない。

典型的な高温超伝導体では c 軸方向の有効質量の大きさのために、ギャップが小さくなり観測可能になる。ということになります。

2.4.2 1つのジョセフソン接合でのモデル

高温超伝導体におけるジョセフソンプラズマを詳しく議論する前に、まずは1つの SIS ジョセフソン接合、つまり超伝導層の間に厚さ d 、誘電率 ϵ の絶縁体を介した接合を考えて普通のプラズマ振動とジョセフソンプラズマの違いについて考えてみます。まず注意すべきはジョセフソンプラズマにおいて電荷を運ぶものは電子ではなくクーパー対であるということです。二つの超伝導体の波動関数が絶縁体に染み出して干渉しあうためにクーパー対がこの接合を行き来できます。^{*16} 当時大学院生だったジョセフソンによるとクーパー対がこの接合を介して流れるトンネル電流は

$$I = I_c \sin \Delta\varphi$$

であると予言されました。ここで I_c は接合を介して流れる最大の電流で、 $\Delta\varphi$ は二つの超伝導体の位相差です。ギンツブルク-ランダウ理論によると I_c は次のように表せます。

$$j_{cr} := \frac{2e\hbar n_s}{m_* d^2} = \frac{I_c}{S}$$

ここで S は接合の面積で、 n_s はクーパー対の密度、 m_* は接合に垂直方向の有効質量です。ここでジョセフソンの侵入長を

$$\lambda_J := \sqrt{\frac{\Phi_0}{2\pi\mu_0 d j_{cr}}}$$

で定義します。ここで $\Phi_0 := h/2e$ は磁束量子です。さてジョセフソン接合間の位相差 $\Delta\varphi$ によるこの系のエネルギーは

$$\Delta E(\Delta\varphi) := E_J(1 - \cos \Delta\varphi) = \frac{\Phi_0}{2\pi} I_c (1 - \cos \Delta\varphi)$$

ここで $E_J := I_c \Phi_0 / 2\pi$ はジョセフソンエネルギーとして定義しました。クーパー対は超伝導層を互いに行き来できるので、ジョセフソン接合を一種のコンデンサーとみなすと静電エネルギーが存在します。：

$$\Delta E(n) := \frac{Q^2}{2C} = \frac{(2en)^2}{2C}$$

ここでキャパシタンスは $C = \epsilon S/d$ と与えられます。また $Q = 2en$ は接合を通過したクーパー対の電荷です。よってこの系のハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{Q^2}{2C} + E_J(1 - \cos \Delta\varphi) \\ &\simeq \frac{(2e)^2 n^2}{2C} + \frac{\Phi_0}{2\pi} I_c \cdot \frac{\Delta\varphi^2}{2} \end{aligned}$$

このハミルトニアンは単純な調和振動子のハミルトニアンと等価であることが分かります。なぜなら位相と粒子数は互いに正準共役の関係にあるからです。^{*17} よって調和振動子の固有振動数は結局

^{*16} トンネル効果の一種です。

^{*17} 実際に $[a, a^\dagger] = 1$ をみたす生成消滅演算子を用いて、 $a = \sqrt{n} e^{i\varphi}$, $a^\dagger = e^{-i\varphi} \sqrt{n}$ で粒子数演算子 n と φ を導入するとこれらは正準交換関係を満たすことが分かります。

$$\begin{aligned}\omega_p &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{(2e)^2}{C} \cdot \frac{\Phi_0}{2\pi} I_c} \\ &= \frac{c}{\lambda_J \sqrt{\epsilon_r}}\end{aligned}$$

となります。ここで真空中の光速 c と比誘電率 $\epsilon_r := \epsilon/\epsilon_0$ を導入しました。典型的な高温超伝導体である BSCCO についてはこの振動数はおおよそ 100GHz 程度で、マイクロ波領域に存在します。またエネルギーに換算するとおおよそ 0.43meV でこれは超伝導ギャップ $2\Delta \sim 8\text{meV}$ 以下で、準粒子の減衰は生じないため、ジョセフソンプラズマモードはマイクロ波の時間スケールでは崩壊しません。このような単純なモデルでもジョセフソンプラズマに関する理解がある程度得られたわけですが、このモデルは次の点で簡略化しすぎていることに注意してください。

実際的高温超伝導ではレイヤー間がもっと薄い (\AA オーダー) ので遮蔽効果が不十分で、ジョセフソンの関係式が破綻していること。

何重にも積み重なっているジョセフソン接合を考慮していないこと。

前者は $I = I_c \sin \Delta\varphi$ という関係式が成り立っていないことを意味します。また後者は集団励起としてのプラズマ振動を特徴づけるために必要です。これらはともに次節できちんと定式化します。

2.4.3 固有ジョセフソン接合をなす系におけるジョセフソンプラズマ

いよいよ高温超伝導におけるジョセフソンプラズマの現実的なモデルを考えていきます。 z 軸方向に超伝導層が間隔 D で積層していると、各レイヤー間はジョセフソン効果を通じて結合しているとします。このようなモデルは銅酸化物の高温超伝導体を記述します。 l 番目のレイヤー上 (z 座標が $z_l = lD$) でオーダーパラメータが $\Psi_l(\mathbf{r})$, $\mathbf{r} := (x, y)$ と定義されているとすると、電磁場の存在下で自由エネルギーは

$$E_{couple} = \frac{\hbar^2}{4MD^2} \sum_l \int d\mathbf{r} \left| \Psi_{l+1}(\mathbf{r}) \exp \left[\frac{2ie}{\hbar} \int_{z_l}^{z_{l+1}} dz A_z(\mathbf{r}, z) \right] - \Psi_l(\mathbf{r}) \right|^2$$

で表されることが知られています。ここで M は質量の次元をもつ定数です。オーダーパラメータの絶対値が l によらずに、一定であると近似すると、

$$\Psi_l(\mathbf{r}) = \Delta e^{i\varphi_l(\mathbf{r})}$$

と書けて、上の自由エネルギーは

$$E_{couple} = \frac{\hbar^2 \Delta^2}{2MD^2} \sum_l \int d\mathbf{r} [1 - \cos P_{l+1,l}(\mathbf{r})]$$

とかけます。ただし

$$P_{l+1,l}(\mathbf{r}) := \varphi_{l+1}(\mathbf{r}) - \varphi_l(\mathbf{r}) - \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_{z_l}^{z_{l+1}} dz A_z(\mathbf{r}, z)$$

で $\Phi_0 := h/2e$ は磁束量子です。 z 軸方向の電流密度は

$$j_z(\mathbf{r}, z) = -\frac{\delta E_{couple}}{\delta A_z} = j_c \sum_l [\theta(z - z_l) - \theta(z - z_{l+1})] \sin P_{l+1,l}(\mathbf{r})$$

ここで $\theta(z)$ は階段関数で、 $j_c := \hbar \Delta^2 / (MD^2)$ です。レイヤー内を流れる電流についてはロンドン理論により次の形を仮定します。

$$j_\alpha(\mathbf{r}, z) = D \sum_l \delta(z - z_l) j_l^\alpha(\mathbf{r})$$

$$j_l^\alpha(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\mu\lambda_L^2} \left(A_\alpha(\mathbf{r}, z_l) - \frac{\Phi_0}{2\pi} \partial_\alpha \varphi_l(\mathbf{r}) \right)$$

ここで $\alpha = x, y$ で λ_L はロンドンの侵入長です。これらの電流の表式は ac でも成り立つと仮定します。この仮定は低温で、超伝導ギャップよりも周波数が十分小さければ正当化されます。電磁気のダイナミクスを解くためにさらにロンドン方程式と似た形の方程式を電荷密度にも仮定します。

$$\rho(\mathbf{r}, t) = D \sum_l \delta(z - z_l) \rho_l(\mathbf{r}, t)$$

$$\rho_l(\mathbf{r}, t) = -\frac{\epsilon c}{d^2} \left(A_0(\mathbf{r}, z_l, t) + \frac{\Phi_0}{2\pi c} \partial_t \varphi_l(\mathbf{r}, t) \right)$$

ここで d は遮蔽長 (Debye length)^{*18} で、 $d \ll \lambda_L$ であるとしてます。

マクスウェル方程式 $\nabla \times \mathbf{B} = \mu\epsilon \partial_t \mathbf{E} + \mu \mathbf{j}$ から各成分について

$$\begin{aligned} \partial_y B_z(\mathbf{r}, z, t) - \partial_z B_y(\mathbf{r}, z, t) &= \mu D \sum_l \delta(z - z_l) j_l^x(\mathbf{r}, t) + \epsilon \mu \partial_t E_x(\mathbf{r}, z, t) \\ \partial_z B_x(\mathbf{r}, z, t) - \partial_x B_z(\mathbf{r}, z, t) &= \mu D \sum_l \delta(z - z_l) j_l^y(\mathbf{r}, t) + \epsilon \mu \partial_t E_y(\mathbf{r}, z, t) \\ \partial_x B_y(\mathbf{r}, z, t) - \partial_y B_x(\mathbf{r}, z, t) &= \mu j_c \sum_l [\theta(z - z_l) - \theta(z - z_{l+1})] \sin P_{l+1, l}(\mathbf{r}) \\ &\quad + \epsilon \mu \partial_t E_x(\mathbf{r}, z, t) \end{aligned}$$

であり、最後の式から B_α, E_z の z 依存性が

$$\begin{aligned} B_\alpha(\mathbf{r}, z, t) &= \sum_l [\theta(z - z_l) - \theta(z - z_{l+1})] B_l^\alpha(\mathbf{r}, t) \\ E_z(\mathbf{r}, z, t) &= \sum_l [\theta(z - z_l) - \theta(z - z_{l+1})] E_l^z(\mathbf{r}, t) \end{aligned}$$

の形をしてなければならないことがわかります。これを代入することで B_l^α, E_l^z が満たすべきは

$$\partial_x B_l^y(\mathbf{r}, t) - \partial_y B_l^x(\mathbf{r}, t) = \mu j_c \sin P_{l+1, l}(\mathbf{r}, t) + \epsilon \mu \partial_t E_l^x(\mathbf{r}, t)$$

となります。また上の x, y 成分の式と $\nabla \times \mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{B}$ と j_α から

$$(-\mu\epsilon \partial_t^2 + \Delta) B_z(\mathbf{r}, z, t) = \frac{D}{\lambda_L^2} \sum_l \delta(z - z_l) \left[B_z(\mathbf{r}, z, t) - \frac{\Phi_0}{2\pi} [\partial_x, \partial_y] \varphi_l(\mathbf{r}, t) \right]$$

ここで

$$[\partial_x, \partial_y] \varphi_l(\mathbf{r}, t) := (\partial_x \partial_y - \partial_y \partial_x) \varphi_l(\mathbf{r}, t) = ((\nabla \times \nabla \varphi_l)(\mathbf{r}, t))_z$$

で最後の交換子は位相が特異性をもつ可能性があり、自明に 0 ではないことに注意してください。^{*19}ここでは

$$[\partial_x, \partial_y] \varphi_l(\mathbf{r}, t) = 2\pi \sum_n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{l, n}(t))$$

と仮定します。 $\mathbf{r}_{l, n}(t)$ は l 番目のレイヤーの特異点の位置を表し、 n はそれをラベルする添え字です。よって z 軸方向の磁場 (レイヤーに垂直) は x, y 成分に独立に決められます。

*18 プラズマ中での電場の遮蔽が有効になり距離です。

*19 第 II 種超伝導体に存在する超伝導渦からくる特異性です。

次にゲージ不変な位相差 $P_{l+1,l}$ についての方程式を導きましょう。 $P_{l+1,l}$ の定義を x で微分することで

$$\begin{aligned} \partial_x P_{l+1,l}(\mathbf{r}, t) &= \partial_x \varphi_{l+1}(\mathbf{r}, t) - \partial_x \varphi_l(\mathbf{r}, t) - \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_{z_l}^{z_{l+1}} dz \partial_x A_z(\mathbf{r}, z, t) \\ &= \partial_x \varphi_{l+1}(\mathbf{r}, t) - \partial_x \varphi_l(\mathbf{r}, t) - \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_{z_l}^{z_{l+1}} dz (\partial_x A_z(\mathbf{r}, z, t) - \partial_z A_x(\mathbf{r}, z, t)) \\ &\quad - \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_{z_l}^{z_{l+1}} dz \partial_z A_x(\mathbf{r}, z, t) \\ &= -\frac{2\pi}{\Phi_0} \left[\left(A_x(\mathbf{r}, z_{l+1}, t) - \frac{\Phi_0}{2\pi} \partial_x \varphi_{l+1}(\mathbf{r}, t) \right) - \left(A_x(\mathbf{r}, z_l, t) - \frac{\Phi_0}{2\pi} \partial_x \varphi_l(\mathbf{r}, t) \right) \right] \\ &\quad + \frac{2\pi}{\Phi_0} DB_l^y(\mathbf{r}, t) \end{aligned}$$

そして j_l^x, l_{l+1}^x の定義を思い出すと

$$\frac{\Phi_0}{2\pi} \partial_x P_{l+1,l}(\mathbf{r}, t) = \mu \lambda_L^2 (j_{l+1}^x(\mathbf{r}, t) - j_l^x(\mathbf{r}, t)) + DB_l^y(\mathbf{r}, t)$$

が導かれ、同様にして

$$\frac{\Phi_0}{2\pi} \partial_y P_{l+1,l}(\mathbf{r}, t) = \mu \lambda_L^2 (j_{l+1}^y(\mathbf{r}, t) - j_l^y(\mathbf{r}, t)) - DB_l^x(\mathbf{r}, t)$$

$$\frac{\Phi_0}{2\pi} \partial_t P_{l+1,l}(\mathbf{r}, t) = -\frac{d^2}{\epsilon} (\rho_{l+1}(\mathbf{r}, t) - \rho_l(\mathbf{r}, t)) + DE_l^z(\mathbf{r}, t)$$

最後の式に注目するとこれはジョセフソンの関係式 $\partial_t \theta = V/\Phi_0$ の拡張になっています。 $P_{l+1,l}$ についての3つの方程式をそれぞれもう一度偏微分してやることで

$$\begin{aligned} &[-\mu\epsilon\partial_t^2 + \partial_x^2 + \partial_y^2] P_{l+1,l} \\ &= \frac{2\pi\lambda_L^2\mu}{\Phi_0} ((\partial_x j_{l+1}^x(\mathbf{r}, t) + \partial_y j_{l+1}^y(\mathbf{r}, t)) - (\partial_x j_l^x(\mathbf{r}, t) + \partial_y j_l^y(\mathbf{r}, t))) \\ &= \frac{2\pi D\mu}{\Phi_0} j_c \sin P_{l+1,l}(\mathbf{r}, t) + \frac{2\pi d^2\mu\epsilon}{\Phi_0} (\partial_t \rho_{l+1}(\mathbf{r}, t) - \partial_t \rho_l(\mathbf{r}, t)) \end{aligned}$$

を得ます。ここで電荷保存則 $\partial_t \rho(\mathbf{r}, z, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, z, t) = 0$ より

$$\partial_x j_l^x(\mathbf{r}, t) + \partial_y j_l^y(\mathbf{r}, t) = -\partial_t \rho_l(\mathbf{r}, t) - \frac{j_c}{D} (\sin P_{l+1,l}(\mathbf{r}, t) - \sin P_{l,l-1}(\mathbf{r}, t))$$

が成り立つので結局

$$\begin{aligned} &[-\mu\epsilon\partial_t^2 + \partial_x^2 + \partial_y^2] P_{l+1,l}(\mathbf{r}, t) \\ &= -\frac{2\pi D\mu j_c}{\Phi_0} \left[\frac{\lambda_L^2}{D^2} \sin P_{l+2,l+1}(\mathbf{r}, t) - \left(\frac{2\lambda_L^2}{D^2} + 1 \right) \sin P_{l+1,l}(\mathbf{r}, t) + \frac{\lambda_L^2}{D^2} \sin P_{l,l-1}(\mathbf{r}, t) \right] \\ &\quad - \frac{2\pi\lambda_L^2\mu}{\Phi_0} \left(1 - \frac{d^2}{\lambda_L^2} \right) (\partial_t \rho_{l+1}(\mathbf{r}, t) - \partial_t \rho_l(\mathbf{r}, t)) \end{aligned}$$

というゲージ不変な位相差に対する方程式が得られました。以下、この方程式に対する解を調べていきましょう。

横波の場合

l によらない解を考えます。すなわち $P_{l+1,l}(\mathbf{r}, t) =: P(\mathbf{r}, t)$ このような解が満たすべきは

$$(-\mu\epsilon\partial_t^2 + \partial_x^2 + \partial_y^2)P(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\lambda_c^2} \sin P(\mathbf{r}, t)$$

で、ここで $\lambda_c := \sqrt{\frac{\Phi_0}{2\pi\mu D j_c}}$ でこれは c 軸方向のジョセフソンの侵入長に他なりません。 $P(\mathbf{r}, t)$ が十分小さいとして近似すると

$$\left(-\mu\epsilon\partial_t^2 + \partial_x^2 + \partial_y^2 - \frac{1}{\lambda_c^2}\right) P(\mathbf{r}, t) = 0$$

*20 $P(\mathbf{r}, t) \propto \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega t]$, $\mathbf{k} := (k_x, k_y)$ の平面波解を仮定すると分散関係は

$$\omega(\mathbf{k}) = \frac{c}{\lambda_c \sqrt{\epsilon_r}} \sqrt{1 + \lambda_c^2 |\mathbf{k}|^2}$$

と 4.2 で与えたプラズマ振動数 $\omega_p = \frac{c}{\lambda_c \sqrt{\epsilon_r}}$ をもつ分散関係を再現します。このレイヤー内の位相の揺らぎは横波電磁波とカップルしている横波です。

縦波の場合

得られた方程式を線形化することで z 軸方向に伝搬する平面波解をもつことが分かります。 xy 平面上では一様であるとして。 ($P_{l+1,l}(\mathbf{r}, t) =: P_{l+1,l}(t)$)

$$\begin{aligned} -\mu\epsilon\partial_t^2 P_{l+1,l}(t) = & -\frac{1}{\lambda_c^2} \left[\frac{\lambda_L^2}{D^2} P_{l+2,l+1}(t) - \left(\frac{2\lambda_L^2}{D^2} + 1 \right) P_{l+1,l}(t) + \frac{\lambda_L^2}{D^2} P_{l,l-1}(t) \right] \\ & - \frac{2\pi\lambda_L^2\mu}{\Phi_0} \left(1 - \frac{d^2}{\lambda_L^2} \right) (\partial_t \rho_{l+1}(t) - \partial_t \rho_l(t)) \end{aligned}$$

横波のときと同様に平面波解を仮定します。:

$$\begin{aligned} P_{l+1,l}(t) &= P(k_z) \exp[ik_z l D - i\omega t] \\ \rho_l(t) &= \rho(k_z) \exp[ik_z l D - i\omega t] \end{aligned}$$

これを用いて方程式を書き直すと

$$\left(\mu\epsilon\omega^2 - \frac{1}{\lambda_c^2} ((\lambda_L k_z)^2 + 1) \right) P(k_z) = \frac{2\pi D \lambda_L^2 \mu}{\Phi_0} \left(1 - \frac{d^2}{\lambda_L^2} \right) \omega k_z \rho(k_z)$$

長波長極限を考慮して $k_z D \ll 1$ であるとしてしました。電場 $\mathbf{E} := (0, 0, E_z(z, t))$ に対し、マクスウェル方程式 $\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho/\epsilon$ に注意すると

$$E_l^z(t) - E_{l-1}^z(t) = \frac{D}{\epsilon} \rho_l(t)$$

左辺をさきほど導いた拡張されたジョセフソンの関係式で書き直すと

$$\rho_{l+1}(t) - \left(2 + \frac{D^2}{d^2} \right) \rho_l(t) + \rho_{l-1}(t) = -\frac{\epsilon\Phi_0}{2\pi d^2} [\partial_t P_{l+1,l}(t) - \partial_t P_{l,l-1}(t)]$$

となるので波数空間で $k_z D \ll 1$ のもとでは

$$(d^2 k_z^2 + 1) \rho(k_z) = -\frac{\epsilon\Phi_0}{2\pi D} \omega k_z P(k_z)$$

となります。 $\rho(k_z)$ を消去して $P(k_z)$ のみの式に直すと

$$\left\{ \mu\epsilon\omega^2 \left[1 + \left(1 - \frac{d^2}{\lambda_L^2} \right) \frac{\lambda_L^2 k_z^2}{d^2 k_z^2 + 1} \right] - \frac{1}{\lambda_c^2} ((\lambda_L k_z)^2 + 1) \right\} P(k_z) = 0$$

*20 これは質量が $m := \frac{\hbar}{c\lambda_c}$ のクライン・ゴールドン方程式に他なりません。実際、プラズマ振動の横波と電磁場がカップルした結果、質量を獲得したと解釈できます。

よって縦波プラズマ振動の分散関係は

$$\omega(k_z) = \left[\frac{c^2}{\epsilon_r \lambda_c^2} \frac{(\lambda_L k_z)^2 + 1}{1 + 1 + (1 - d^2/\lambda_l^2) \lambda_L^2 k_z^2 / (d^2 k_z^2 + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \simeq \frac{c}{\sqrt{\epsilon_r} \lambda_c} \sqrt{1 + (dk_z)^2}$$

と求められます。まとめると

$$\omega_T(\mathbf{k}) = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_r} \lambda_c} \sqrt{1 + \lambda_c^2 |\mathbf{k}|^2}$$

$$\omega_L(k_z) = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_r} \lambda_c} \sqrt{1 + (dk_z)^2}$$

となります。関係式としてはほとんど同じですが、 $d/\lambda_c \ll 1$ という仮定から縦波と横波が定性的に異なる振る舞いをします。

2.5 高温超伝導におけるジョセフソンプラズマ 2***

時間と紙面と筆者の能力の関係でジョセフソンプラズマの量子論を扱うまでには至りませんでした。しかし、小山による非常に興味深い定式化 [10] があるので、興味を持たれた方は是非とも参考にしてください。

参考文献

- [1] Charles Kittel, Introduction to Solid State Physics, Wiley; 8th edition(2004)
- [2] Giuseppe Grosso, Giuseppe Pastori Parravicini , Solid State Physics, Academic Press(2000)
- [3] J. Robert Schrieffer, Theory of Superconductivity, Westview Press
- [4] J.R シュリーファー [著]、樺沢宇紀 [訳]、シュリーファー超伝導の理論、丸善プラネット株式会社 (2010)
- [5] Y.Nambu, Phys.Rev. ,**117**, 648(1960).
- [6] N.N.Bogoliubov, Nuovo Cimento, **7**, 6, 794(1958); N.N.Bogoliubov, V.V.Toimoachev, and D.V.Shirkov, A New Method in the Theory of Superconductivity, Consultants Bureau, New York, 1959
- [7] P.W.Anderson, Phys.Rev., **110** 827(1958); **112**,1900(1958)
- [8] I.Kekeya, Josephson Plasma in High Temperature Superconductor $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$, 大阪大学博士論文 (1998)
- [9] M.Tachiki,T.Koyama,S.Takahashi, JOSEPHSON PLASMA IN HIGH TEMPERATURE SUPERCONDUCTIVITY, In: G. Deutscher and A. Revolevschi, Editors, Coherence in High Temperature Superconductors, World Scientific, Singapore (1996)
- [10] T.Koyama, JPSJ, **68**, 9(1999), 3062-3068

第 3 章

2 次元強相関系 渡辺伯陽

この論説では低次元強相関系の代表である高温超伝導現象と量子 Hall 効果を中心に、gauge 場と topology をキーワードにしながら低次元系で重要な Chern-Simons 理論や分数統計、それと深く関連し、topological insulator も関係があると考えられている topological order について各々軽く触れてみたいと思います。書く順序が執筆者の気まぐれである事と時間の制約上、本来書く予定であった複合粒子描像の話省略したなど、やや一貫していない個所が存在するかもしれませんが、今回読むのに参考にした文献を挙げておきましたので、興味を持った方は読んでください。

また他の班員のいずれの解説とも関連する個所があると思いますので、そこについてはそれぞれ参照してください。

3.1 銅酸化物高温超伝導体***

銅酸化物高温超伝導、とりわけ最初に発見された $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ と似た $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ を念頭に置きながら高温超伝導に関する母体の話と、今はもう忘れてしまった RVB 理論に触れながら、強相関からのアプローチについて述べ、そこで gauge 場が有用である事を垣間見ます。この節ではスピンなどが関わる議論において、ここでは全て $\hbar = 1$ としています。またスピン変数 σ について、 $+\Rightarrow\uparrow, -\Rightarrow\downarrow$ と 2 通りの表記を用いています。

3.1.1 銅酸化物高温超伝導体の相図と結晶構造

まず親物質である銅酸化物 La_2CuO_4 は反強磁性絶縁体であり、La を Sr に一部置換するか酸素をドーブするかして、キャリア濃度すなわち doping rate x を上げていくと、この絶縁体はある転移温度 $T_c(x)$ 以下で伝導性を獲得して超伝導になり、ある x で転移温度は最大値 T_c^{max} をとり、さらにキャリア濃度 x を上げていくと、転移温度は下がっていき、遂には超伝導体でなくなり、金属となります。これらの振る舞いを phase diagram にしたものが fig1. で、 $\frac{dT_c}{dx} > 0$ の領域を under-doped domain、 $\frac{dT_c}{dx} < 0$ の領域を over-doped domain と呼び、 T_c が最大値に近いような時、 x を optimal doping(およそ $x \sim 0.15$) と呼びます。ただしこれはあくまで大雑把な振る舞いを述べたもので、例えば最初に発見された $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ などでは stripe order と呼ばれる超伝導がある x で突如消失する状態が出現します。(1/8 問題) これはドーブされた正孔が fig2. のように、4 周期毎に特殊な 1 次元配列を形成してその間が Mott 絶縁体になるような秩序状態の方が安定であるために起こります。

さて、具体的に銅酸化物の 2 次元伝導面で何が起こり、どのような振る舞いをしているのか理論的に見ていきます。まず La 原子は $(\text{Xe})4f^05d^16s^2$ という電子状態で、 La^{3+} となり、Sr 原子は $(\text{Kr})4d^05s^2$ という電子状態で、 Sr^{2+} となりますが、価数が異なります。つまり、La の代わりに Sr を導入すると、絶縁層に負電荷がたまり、結晶の総電荷が中

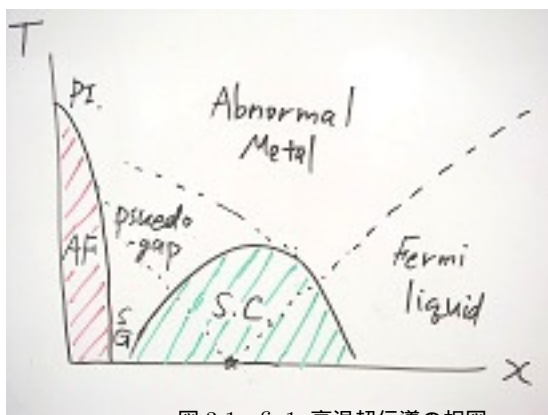


図 3.1 fig1. 高温超伝導の相図



ストライプ秩序

図 3.2 fig2. 周期的な安定構造

性となるためには、伝導層に正電荷が導入されなければなりません。すなわち正孔濃度が高くなり、半導体の原理同様、電気伝導性を獲得しやすくなります。

次に伝導層と呼ばれている CuO_2 面について見てみます。伝導層とは書きましたが、実際は $x = 0$ で絶縁体となっている事に注意してください。Cu の電子状態は $(\text{Ar})3d^104s^1$ で、 Cu^{2+} の時、 $(\text{Ar})3d^9$ で、d 軌道には 10 個まで電子が占有できるので、ある d 軌道には電子が 1 つしか存在しない事になります。ここで CuO_2 面とは書きましたが、実際は伝導層を挟んでいる 2 つの絶縁層側にも酸素原子は含まれており、Cu 原子の周りには fig3. のように、6 個の O 原子が八面体上に取り囲んでいて、正方対称場を形成している事に着目します。^{*1} 以下、 c 軸と z 軸は平行であるとし、伝導層内での CuO 結合がある 2 方向 (a 軸、 b 軸と言ってもよい) をそれぞれ x 軸、 y 軸に取ります。有名な結晶場理論によると、5 つの d 軌道の縮退が解けていて、電子の存在する方向に軌道が伸びている e_g 軌道 ($d_{3z^2-r^2}$, $d_{x^2-y^2}$) は、酸素原子との電子が存在する方向に軌道が伸びていない t_{2g} 軌道 (d_{xy} , d_{yz} , d_{zx}) に比べて電子のエネルギーが高くなります。さらに、Cu 原子と隣接する絶縁層の O 原子との距離が、伝導層の隣接する O 原子との距離よりも大きい事から、 e_g 軌道内でさらに軌道分裂が起き、伝導層内の隣接する O 原子の電子軌道とのオーバーラップが大きな $d_{x^2-y^2}$ 軌道の方がエネルギーが高くなります。よって Cu では d 電子が 9 個で、Hund の規則などを気にする事なく、 $d_{x^2-y^2}$ 軌道以外は 2 個ずつ占有され、 $d_{x^2-y^2}$ 軌道だけ電子が 1 個占有している状態となります。一方、酸素は $(\text{He})2s^22p^4$ で、 p_x 軌道と p_y 軌道が Cu 原子の $d_{x^2-y^2}$ 軌道と結合を作り、混成軌道として捉えられます。単位胞あたりで見ると、Cu の $d_{x^2-y^2}$ 軌道で電子 1 個が不足している状態で、 dp_σ (σ は x, y に対応する) の最もエネルギーの高い混成軌道では電子が 1 個です。バンド理論によるとこれは金属的で、各単位胞にスピンの $\frac{1}{2}$ だけある事を意味しています。しかし最初に述べたように、この系は反強磁性絶縁体です。これはいわゆる Mott 絶縁体と呼ばれる絶縁体になっているためです。

3.1.2 d-p 模型の正孔による記述

銅酸化物の 2 次元伝導面を記述する最も基本的な (Emery の) d-p 模型について、それを出発点にして議論を進めます。^{*2}

まず最も単純化するための仮定として、Born-Oppenheimer 近似で格子は固定されているものとし、またスピン軌道相互作用は十分小さいとして無視し、相互作用に関与する軌道は Cu 原子の $d_{x^2-y^2}$ 軌道と O 原子の 2 つの $2p_\sigma$ 軌

^{*1} もちろんこれらの議論は、原子がイオン結晶を構成したものが実際に存在し、それを説明するための後付けにすぎない事に注意してください。

^{*2} これを解説している文献は幾つもありますが、いずれも説明にギャップが多く、分かりにくいので、敢えて非常に丁寧に解説を試みました。この辺の模型の有効性についてはパラメーターの数値を含め未だ議論があるようで、多バンドの強相関系の難しさがよくわかります。

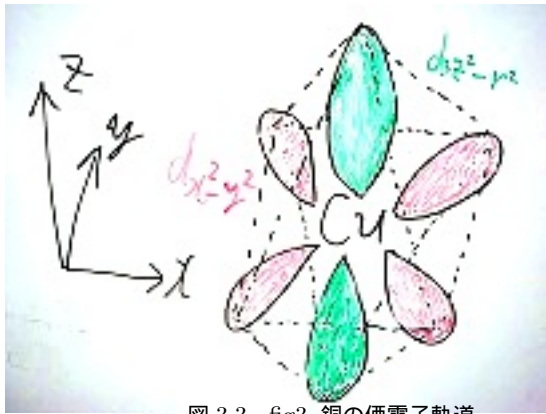


図 3.3 fig3. 銅の価電子軌道

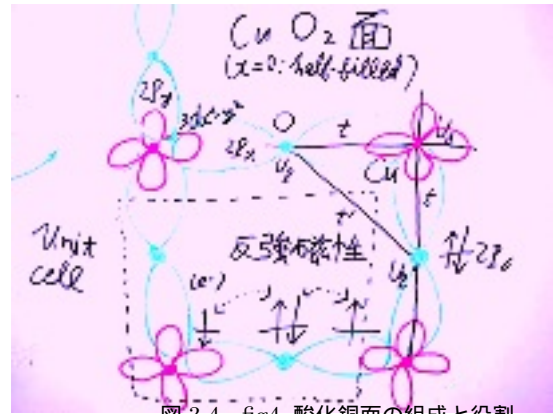


図 3.4 fig4. 酸化銅面の組成と役割

道のみ、すなわち 3-band^{*3}であるとしします。([11]) またこの単位胞の数を N (伝導層の原子数は $3N$) としします。この時、orbital energy の寄与、hopping の項 (交換相互作用)、電子間の Coulomb 反発を取りこんだ銅酸化物伝導面の Effective Hamiltonian は Hubbard 型 (ただし隣接 site 間の相互作用も考慮している) で、以下で与えられます：

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{dpp} = & -t_{dp} \sum_{\langle i,j \rangle \in E_{dp}} \sum_{\sigma=\pm} (d_{i\sigma}^\dagger p_{jc(j)\sigma} + h.c.) - t_{pp} \sum_{\langle j,k \rangle \in E_p} \sum_{\sigma=\pm} (p_{jc(j)\sigma}^\dagger p_{kc(k)\sigma} + h.c.) \\ & + \epsilon_d \sum_{i \in V_d} \sum_{\sigma=\pm} n_{i\sigma}^d + \epsilon_p \sum_{i \in V_p} \sum_{\sigma=\pm} n_{ic(i)\sigma}^p + U_d \sum_{i \in V_d} n_{i\uparrow}^d n_{i\downarrow}^d + U_p \sum_{i \in V_p} n_{ic(i)\uparrow}^p n_{ic(i)\downarrow}^p \\ & + W_{pd} \sum_{\langle i,j \rangle \in E_{dp}} \sum_{\sigma_1=\pm} \sum_{\sigma_2=\pm} n_{i\sigma_1}^d n_{jc(j)\sigma_2}^p + W_{p_x p_y} \sum_{\langle j,k \rangle \in E_p} \sum_{\sigma_1=\pm} \sum_{\sigma_2=\pm} n_{jc(j)\sigma_1}^p n_{kc(k)\sigma_2}^p \end{aligned}$$

V_d, V_p はそれぞれ Cu と O を格子点と見たときの、graph の各 vertex の集合、 E_{dp}, E_p は vertices 間を結ぶ 2 種類の edge の集合を表します。(fig4. 参照の事) $\sigma = \pm$ は spin variable^{*4}で、今の場合電子または正孔なので大きさ $\frac{1}{2}$ で、 $c(i) = x, y$ は site i の O 原子の $2p_\sigma$ 軌道に対する添え字、 $p_{ic\sigma}, p_{ic\sigma}^\dagger, d_{i\sigma}, d_{i\sigma}^\dagger, n_{i\sigma}^d =: d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma}, n_{ic\sigma}^p := p_{ic\sigma}^\dagger p_{ic\sigma}$ は site $i (\in V_d \cup V_p)$ にあるスピン $\sigma (S_z$ を量子数にとる) の $2p_c$ 軌道、 $d_{x^2-y^2}$ 軌道への電子の消滅演算子、生成演算子^{*5}と個数演算子を表しますが、各 vertex に対しては 1 軌道しかないので、以下 $ic(i)$ はまとめて i と書いても混同がなく、さらに個数演算子についても必要ない限り $n_{i\sigma}$ のように書きます。また t_{dp}, t_{pp} は d - p 間または p - p 間の transfer integral、 ϵ_d, ϵ_p は $d_{x^2-y^2}$ 軌道、 $2p_\sigma$ 軌道の 1 電子エネルギー準位、 U_p, U_d は $2p_\sigma$ 軌道、 $d_{x^2-y^2}$ 軌道上での Colomb 反発エネルギー、 $W_{pd}, W_{p_x p_y}$ は $2p_\sigma$ 軌道と $d_{x^2-y^2}$ 軌道間の Colomb 反発エネルギーと $2p_x$ 軌道と $2p_y$ 軌道間の Colomb 反発エネルギーです。

今回、系の化学 potential については露わに導入しない代わりに、こういう模型で一般に導入される全 (有効) 電子数 N_e (または全 (有効) 正孔数 N_h) を固定します。すなわちこれは、状態が $|\Psi\rangle$ で与えられる時、定義より

$$N_e = \langle \Psi | \sum_{i \in V_p \cup V_d} \sum_{\sigma=\pm} n_{i\sigma} | \Psi \rangle$$

で、Hamiltonian と可換なので (時間に関する) 保存量です。また z 方向のスピンも保存量である事は、 $N_{e\sigma} := \langle \Psi | \sum_i n_{i\sigma} | \Psi \rangle$ と定義して、 $[\mathcal{H}_{dpp}, \sum_i n_{i\sigma}] = 0$ ($\sigma = \pm$) から分かります。正孔についても同様で、全総数については後で正孔に関する式に書き換えた際に出てきますが、doping というのは正孔数を調整する事に他ならないので、 N_h は doping rate x に直接関わっています。

^{*3} fig4. のように Cu の $d_{x^2-y^2}$ 軌道、ある O の $2p_x$ 軌道と別の O の $2p_y$ 軌道が単位胞あたりに存在します。特に $2p_x$ 軌道と $2p_y$ 軌道間の交わりが無視できる場合は有名な Lieb lattice とみなせます。

^{*4} σ 軌道と混同しないこと。

^{*5} 電子は fermion なので反交換関係を満たします。

以上で模型のセットアップは終了し、原理的にはこれを（厳密に）解析すればこの模型で表される系の振る舞いをよく知る事ができますが、あまりに複雑すぎて手に負えないので、系の振る舞いについて情報をほとんど落さないような近似や簡単化を実行します。またこれ以後、 $d_{x^2-y^2}$ 軌道と $2p_\sigma$ 軌道を単に d 軌道、 p 軌道と略します。

まず異なる軌道間の Colomb 反発は同一軌道間でのそれに比べて小さいと考えられるので、落してしまいます。すなわち $W_{pd} = W_{p_x p_y} = 0$ とします。一方、 p - p 間の遷移エネルギー t_{pp} は実験や数値計算の結果より、 $U_p, U_d, \Delta\epsilon, t_{dp}$ に比べると小さい事が知られているので、 t_{pp} も 0 とおいて近似します。また d 軌道のエネルギー準位は p 軌道のそれに比べて高く、そのエネルギー準位差を $\Delta\epsilon := \epsilon_d - \epsilon_p > 0$ とおき、全有効電子数一定の拘束条件 $\sum n_{i\sigma}^d + \sum n_{i\sigma}^p = N_e$ (定数)^{*6}を用いて、 $\epsilon_d(N_e - \sum (n_{i\sigma}^p)) + \epsilon_p \sum n_{i\sigma}^p = -\Delta\epsilon \sum n_{i\sigma}^p + \text{const.}$ と書き換えてしまいます。

銅酸化物へ hole doping をした場合について考えているので、正孔による記述に書き換えます。各軌道の正孔の生成・消滅演算子は、対応する軌道のスピンの逆向きの電子の消滅・生成演算子に相当するので、 $c_* := d_*^\dagger, q_* := p_*^\dagger, c_*^\dagger := d_*, q_*^\dagger := p_*$ (*には各添え字の組があてはまるが、スピンを反転させている事に注意) と定義されます。これらは fermion の演算子なので電子の時同様、反交換関係を満たします。また $\tilde{n}_*^p := q_*^\dagger q_*, \tilde{n}_*^d := c_*^\dagger c_*$ と個数演算子を定義してやると、反交換関係より $\tilde{n}_{i-\sigma} + n_{i\sigma} = 1$ (Pauli の原理) を満たし、さらに $\sum \tilde{n}_{i\sigma}^d + \sum \tilde{n}_{i\sigma}^p = N_e$ (定数) である事を用いると、d-p 模型の Hamiltonian は、

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{dpp} &= -t_{dp} \sum_{\langle i,j \rangle \in E_{dp}} \sum_{\sigma=\pm} (c_{j-\sigma}^\dagger q_{i-\sigma} + h.c.) - \Delta\epsilon \sum_{i \in V_d} \sum_{\sigma=\pm} (-\tilde{n}_{i-\sigma}^p) \\ &\quad + U_d \sum_{i \in V_d} (1 - \tilde{n}_{i\downarrow}^d)(1 - \tilde{n}_{i\uparrow}^d) + U_p \sum_{i \in V_p} (1 - \tilde{n}_{i\downarrow}^p)(1 - \tilde{n}_{i\uparrow}^p) \\ &= t_{dp} \sum_{\langle i,j \rangle \in E_{dp}} \sum_{\sigma=\pm} (q_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) + \Delta\tilde{\epsilon} \sum_{i \in V_d} \sum_{\sigma=\pm} \tilde{n}_{i\sigma}^p \\ &\quad + U_d \sum_{i \in V_d} \tilde{n}_{i\uparrow}^d \tilde{n}_{i\downarrow}^d + U_p \sum_{i \in V_p} \tilde{n}_{i\uparrow}^p \tilde{n}_{i\downarrow}^p + \text{const.} \end{aligned}$$

のように書き換えられます。ただし、正孔に d, p 各軌道に関するエネルギー準位を $\tilde{\epsilon}_d = -\epsilon_d - U_d, \tilde{\epsilon}_p = -\epsilon_p - U_p$ とおいて、 $\Delta\tilde{\epsilon} = \tilde{\epsilon}_p - \tilde{\epsilon}_d = \Delta\epsilon - U_p + U_d$ と書ける事に注意。なおここで、銅酸化物 (特に LSCO) についてパラメータは、 $t_{dp} \sim 1\text{eV}, U_p \sim 4\text{eV}, U_d \sim 10\text{eV}, \Delta\tilde{\epsilon} \sim 3\text{eV}$ のオーダーとなっています。(電荷移動型絶縁体) ただ注意してほしいのが、これらの近似の正当性について何も述べていませんし、実際、上の議論と数値を用いると、電子の軌道エネルギーについて奇妙な結果が得られたりして、限界がある事が分かります。時間の都合上省きますが、この後、単一バンドで近似し、2次元正方格子の Hubbard 模型にまで落として、摂動計算をする事で反強磁性を引き起こしている超交換相互作用が導かれますし、また低エネルギー極限 (Coulomb 相互作用が大) では t-J 模型が導かれます。細かな内容については後ろの参考文献を参照してください。

3.1.3 高温超伝導における場の理論的解析

高温超伝導のアプローチには大きく分けて2通りの方法が存在します。1つは underdoped domain、つまり $x = 0$ の Mott 絶縁体からの強結合側からのアプローチで、もう1つは overdoped domain、つまり $x \gtrsim 0.25$ の Fermi liquid からの弱結合側からのアプローチです。一昔前には、Anderson という有名な物性物理学者が提唱した RVB 模型 (resonance valence bond) が高温超伝導を説明すると期待されていましたが、現在では有効でないという結論に至って

^{*6} 以後、summation の範囲を省略した場合は、断らない限り、全ての添え字について和をとるものとします。

いますが、RVB が全く破棄された昔の理論になったかというとはそうではなく、考え方自体は他のいろんな場所でも使われているようで、また後で出てくる量子液体の一例になっていると考えられています。

弱相関側からのアプローチは、反強磁性長距離秩序が絶対零度で消失する量子臨界点付近のスピン揺らぎを展開するものですが、Fermi 液体を基礎とする弱結合系という事もあり解析的には fluctuation exchange approximation などの近似を含めた摂動論が有効で、また臨界点近傍でも量子反磁性の解析手法 (self-consistent renormalization) が確立しているため、こちらの方が高温超伝導状態を広く記述すると考えられています。実際、超伝導状態への転移温度以上の非 Fermi 液体的振る舞いが示す異常物性や d-wave pairing の形成に関する理解は数値計算に大きく頼る強相関側からのアプローチに比べて進んでいると考えられています。この辺りの事情については [17] と [19] の2つを対比させた議論などが面白いので、参照してください。また [18]、[16] など分かりやすいと思われる。

強相関からのアプローチの1つとして、t-J 模型における slave boson 法・slave fermion 法による平均場近似を用いるものがあります。これは電子の生成消滅演算子 $c_{i\sigma}, c_{i\sigma}^\dagger$ を新しい補助粒子の生成消滅演算子でまず分解するものです。各サイトに電子が1個ずつある状態を真空として、正孔、↑スピン、↓スピン、電子の二重占有の4通りがあり、この状態に関する生成消滅演算子を (h_i, h_i^\dagger) , $(s_{i\sigma}, s_{i\sigma}^\dagger)$ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$), (d_i, d_i^\dagger) のように導入し、各補助粒子を holon, spinon, doublon と呼びます。するとスピン σ の電子の生成は、holon がある場合は holon を消してスピン σ の spinon を作るか、逆スピンの spinon がある場合はその spinon を消して doublon を作る事に対応するので、

$$\begin{aligned} c_{i\sigma}^\dagger &= s_{i\sigma}^\dagger h_i + \epsilon_{\sigma\bar{\sigma}} s_{i\bar{\sigma}} d_i^\dagger \\ c_{i\sigma} &= s_{i\sigma} h_i^\dagger + \epsilon_{\sigma\bar{\sigma}} s_{i\bar{\sigma}}^\dagger d_i \end{aligned} \quad (3.1)$$

と分解できます。ここで $\epsilon_{\sigma\bar{\sigma}}$ は $\epsilon_{+-} = 1$ とする2階の反対称テンソルです。もう1つ重要なのが Hilbert 空間を拡大した事によって物理的に意味のある元の Hilbert 空間に制限を加えなければなりません、これは以下のような拘束条件で表せます。

$$h_i^\dagger h_i + s_{i\uparrow}^\dagger s_{i\uparrow} + s_{i\downarrow}^\dagger s_{i\downarrow} + d_i^\dagger d_i = 1 \quad (3.2)$$

実は slave 法が有効なのは、各サイトに電子が2個以下 (あるいは Coulomb 反発が大きい場合は1個以下) という拘束条件が $c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \leq 2$ or 1 のように不等式で課されるものを、Lagrange の未定乗数法などが使いやすい等式の拘束条件で書かれる事にあります。^{*7} なお電子の生成消滅演算子が fermion 型で反交換関係を満たしますが、spinon, holon, doublon の生成消滅演算子が満たすべき関係式のとり方に関しては自明ではありません。これについては簡単のため、次に述べるように doublon を消した後で考えます。

さて、これを t-J 模型に適用します。低エネルギー有効理論である t-J 模型では二重占有は禁止されるので、doublon は存在せず、式 (3.1) と式 (3.2) は次のように書き換えます：

$$\begin{aligned} \text{演算子の分離: } c_{i\sigma}^\dagger &= s_{i\sigma}^\dagger h_i \quad c_{i\sigma} = s_{i\sigma} h_i^\dagger \\ \text{拘束条件: } h_i^\dagger h_i &+ s_{i\uparrow}^\dagger s_{i\uparrow} + s_{i\downarrow}^\dagger s_{i\downarrow} = 1 \end{aligned} \quad (3.3)$$

これは本来、電子が持っていた不可分な電荷とスピンの自由度を、電荷の自由度を担う holon とスピンの自由度を担う spinon に分離したという事で、spin-charge separation と呼ばれます。もちろん、各演算子、つまり導入した補助粒子が物理的にどのような意味を持つかについては議論しなければなりません、実際に強相関系でこれらの自由度が物理量に反映される事はあります。doublon を消したところで、spinon と holon の生成消滅演算子が満たすべき関係について考えると、spinon が fermion で holon が boson とするか、spinon が boson で holon が fermion とするか、の

^{*7} これは拘束系の gauge 場を想起させますが、実際のこれはそうになっています。(後述)

どちらかがまず考えられます。前者を採用する場合を slave boson 法、後者の場合を slave fermion 法と言います。後は平均場を使って数値計算を用いて相図が書けるのですが、締め切りを過ぎて催促がきたので以下略です。参考文献 [1]、[5]、[6]、[14]

3.2 量子 Hall 効果概論***

低次元物性物理が面白い理由は主に量子揺らぎが大きい事と、系に topology が絡んでくる事があると言っても過言ではないでしょう。先ほど挙げた高温超伝導は2次元強相関系でした。他にも1次元量子系では半整数スピンで基底状態付近で gapless(素粒子で言う massless) にも関わらず、整数スピンの場合は、gapped(同じく massive) になるという Haldane conjecture があり、これは後で述べる Berry phase という topological term が入った non-linear σ model で考察する事ができます。*8

もう1次元を上げて、2次元に行くと量子 Hall 効果と呼ばれる現象が登場しますが、これには大きく分けて2種類あります。1つは整数量子 Hall 効果と呼ばれる、強磁場下で電気伝導度 σ が $\sigma = n \frac{e^2}{h}$ される現象で、これは本質的には2次元平面に運動が束縛され、磁場下でのエネルギー準位の離散化 (Landau 準位) と、不規則系である事による電子の局在化 (Anderson 局在) にあり、1体問題として捉える事もできます。一方の分数量子 Hall 効果は、簡潔に言うと電気伝導度の n が分数 ($\frac{q}{2sq+1}$ ($s, q \in \mathbb{N}$)) に置き換わったものです。これは Fermi エネルギーのある Landau 準位が full-filled でない事から、電子の励起が生じ得るので、摂動に対して大きな影響を受ける強相関状態になっています。そして不純物ポテンシャルに Coulomb 相互作用が打ち勝って現れる多体効果によるものです。

3.2.1 Landau 準位と巨視的縮重度

さて、端を無視した2次元系の強磁場下での1体 Hamiltonian は物質中の電子の有効質量を m_e として次のように書けます。

$$\mathcal{H}_{free} = \frac{1}{2m_e} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 = \frac{1}{2m_e} \pi^2 \quad (3.4)$$

$$\pi := \mathbf{p} + e\mathbf{A}$$

ただし、相互作用項は運動項に比べてある程度小さく、無視しました。先述のように不規則系ポテンシャルの存在は整数量子 Hall 効果では重要で、電子間の Coulomb 相互作用も完全に無視できませんが、第0近似として式 (3.4) で与えられる Hamiltonian を考えて、その後それらの効果を議論しても (それが有効な範囲であれば) 問題ありません。*9 実際には磁場が数テスラあれば良いと考えられています。まず正準量子化 $[x, p] = i\hbar$ を課し、磁場の方向を z 軸正方向にとると、

$$[\pi_x, \pi_y] = -i\hbar eB =: -i \frac{\hbar^2}{\ell_B^2} \quad (\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z) \quad (3.5)$$

という幾何学的には磁場の存在による空間が曲がる効果*10が現れ、 $\ell_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$ は magnetic length と呼ばれる磁場に依存にする特徴的な長さです。

また中心座標演算子 X, Y *11と昇降演算子 $a, a^\dagger, b, b^\dagger$ を

$$X = x - \frac{\ell_B^2}{\hbar} \pi_y \quad Y = y + \frac{\ell_B^2}{\hbar} \pi_x \quad (3.6)$$

$$a = \frac{\ell_B}{\sqrt{2\hbar}} (\pi_x + i\pi_y) \quad a^\dagger = \frac{\ell_B}{\sqrt{2\hbar}} (\pi_x - i\pi_y) \quad (3.7)$$

*8 スピンが $\frac{1}{2}$ の場合には Bethe 仮説による厳密解を始めとして、詳しく調べられていて、そこでは例えば共形場理論のようなものも顔を出します。

*9 別の観点から言えば、ダイナミクスの時間スケールが異なるためとも言えます。

*10 π が共変微分、 \mathbf{A} が接続、 B がに対応します。

*11 これは今、擬運動量演算子と呼ばれるものに一致しており、これが本来 Hamiltonian や力学的運動量 π と可換となっていますが、ここでは区別しません。

$$b = \frac{1}{\sqrt{2}\ell_B}(X + iY) \quad b^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}\ell_B}(X - iY) \quad (3.8)$$

で定義すると、

$$\begin{aligned} [X, \pi_x] &= [X, \pi_y] = [Y, \pi_x] = [Y, \pi_y] = [X, \mathcal{H}_{free}] = [Y, \mathcal{H}_{free}] = 0 \\ [X, Y] &= i\ell_B^2, \quad [a, a^\dagger] = 1, [b, b^\dagger] = 1, \quad X^2 + Y^2 = 2\ell_B^2(b^\dagger b + \frac{1}{2}) \end{aligned}$$

となり、

$$\mathcal{H}_{free} = \hbar\omega_c \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (\omega_c = \frac{eB}{m_e}) \quad (3.9)$$

でこれは調和振動子のエネルギースペクトルと一致し、2次元強磁場下では Landau 準位と呼びます。

ここで X, Y が中心座標演算子と呼ぶ理由について軽く触れておきます。古典的 Cyclotron 運動から、回転中心からの相対座標を $(\Delta x, \Delta y)$ とおくと、その速度は $(-\omega_c \Delta y, \omega_c \Delta x) = (\frac{\pi_x}{m_e}, \frac{\pi_y}{m_e})$ で与えられるので、

$$(\Delta x, \Delta y) = \left(\frac{\ell_B^2}{\hbar} \pi_y, -\frac{\ell_B^2}{\hbar} \pi_x \right) \quad (3.10)$$

となって、式 (3.6) より $(X, Y) = (x - \Delta x, y - \Delta y)$ となるためです。(演算子ではなく、全て c -数として扱っています。) また注目すべきは、中心座標演算子または相対座標を力学的運動量演算子で表示したものに可換でなく、 $\ell_B^2 = \frac{\hbar}{eB}$ 程度の非可換性、すなわち不確定性があり、電子が半径 ℓ_B 程度の円板内に拡がっている描像を与えています。

さてこれを踏まえて各 Landau 準位の縮重度を求めてみます。2次元の自由粒子の単位面積当たりの(スピンを含めた)状態密度は $D(\epsilon) = \frac{m_e}{\pi \hbar^2}$ で与えられ、エネルギー準位の幅は等間隔で $\hbar\omega_c$ となるので、縮重度 D_e は系の面積を S として、 $D_e = \frac{m_e \omega_c S}{\pi \hbar^2} = \frac{eBS}{2\hbar}$ となります。よって単位面積当たりの縮重度は $\frac{eB}{2\hbar} = \frac{1}{\pi \ell_B^2}$ となり、系の面積を先の1電子当たりの半径 ℓ_B の円の面積で割ったものとなります。一方、系を貫く磁束密度を単位磁束 ($\Phi_0 = \frac{\hbar}{2e}$) で割った値 n_ϕ は、 $n_\phi = \frac{2eB}{\hbar}$ でこれは単位面積当たりの縮重度 D_e/S そのものです。

また系の電子密度を n_e とおけば、占有率は

$$\nu := \frac{n_e}{D_e} = \frac{n_e}{n_\phi} \propto 1/B \quad (3.11)$$

で与えられ、磁場に反比例するので、より小さな充填率となって抵抗値は上昇します。一方その逆数、

$$\nu^{-1} = \frac{n_\phi}{n_e} \propto B \quad (3.12)$$

は1電子辺りの磁束の本数を表していて、後に電子に磁束を張り付けるという描像で用います。なお量子 Hall 効果が見れるのは $\nu \sim 1$ の範囲の強磁場下で、これから巨視的な数の電子が同一エネルギーに縮退している事がわかります。

3.2.2 対称ゲージ下での複素表示と固有解

ここまでは gauge に依存しない演算子の代数的な議論のみをしてきましたが、具体的な計算を実行するために、gauge 固定します。一様磁場でよく用いられる gauge としては、Landau gauge $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$ と対称 gauge $\mathbf{A} = (-By/2, Bx/2, 0)$ がありますが、以下の議論では複素表示を活用した対称 gauge を採用します。

まず無次元した複素座標を $z = (x - iy)/\ell_B$, $\bar{z} = (x + iy)/\ell_B$ で定義すると、

$$a = -\sqrt{2}i(\bar{\partial} + \frac{1}{4}z) \quad a^\dagger = -\sqrt{2}i(\partial - \frac{1}{4}\bar{z}) \quad (3.13)$$

$$b = \sqrt{2}(\partial + \frac{1}{4}\bar{z}) \quad b^\dagger = \sqrt{2}(-\bar{\partial} + \frac{1}{4}z) \quad (3.14)$$

と書き換えられ、さらに z 方向の角運動量演算子は

$$\mathcal{M}_z := \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \frac{\hbar}{i}(x\partial_y - y\partial_x) = -\hbar(z\partial - \bar{z}\bar{\partial}) = \hbar(a^\dagger a - b^\dagger b) \quad (3.15)$$

と書ける事が分かります。

よって $n_a = a^\dagger a$, $n_b - n_a = b^\dagger b - a^\dagger a$ の固有値 N, m を量子数として、状態を $\psi_{N,m}(z, \bar{z})$ とおくと、

$$\mathcal{H}_{free}\psi_{N,m}(z, \bar{z}) = \hbar\omega_c \left(N + \frac{1}{2}\right) \psi_{N,m}(z, \bar{z}) \quad (3.16)$$

$$\mathcal{M}_z\psi_{N,m}(z, \bar{z}) = -m\hbar\psi_{N,m}(z, \bar{z}) \quad (3.17)$$

を満たし、 N は Landau index でどの Landau 準位にあるかを表し、 $m(\geq -N)$ は軌道角運動量の (z 成分の) 大きさを表しますが、 $X^2 + Y^2 = 2\ell_B^2(b^\dagger b + 1) = 2\ell_B^2(N + m + 1)$ で原点からの距離の指標にもなっています。

さて、基底状態の解は

$$a\psi_{0,0}(z, \bar{z}) = 0 \quad b\psi_{0,0}(z, \bar{z}) = 0 \quad (3.18)$$

を求める事で得られますが、 a, b の複素表示より容易に

$$\psi_{0,0}(z, \bar{z}) = C_{0,0} \exp\left[-\frac{1}{4}|z|^2\right] \quad C_{0,0} \text{は規格化定数} \quad (3.19)$$

が得られます。さらに励起状態については、昇降演算子をかけて、

$$\psi_{n,m}(z, \bar{z}) = \frac{a^{\dagger n}}{\sqrt{n!}} \frac{b^{\dagger(n+m)}}{\sqrt{(n+m)!}} \psi_{0,0}(z, \bar{z}) \quad (3.20)$$

で得られます。 $N = 0$ の時は、 b^\dagger を作用させて定数倍を除き z 倍される事から

$$\psi_{0,m}(z, \bar{z}) = C_{0,m} z^m \exp\left[-\frac{1}{4}|z|^2\right] \quad (m \geq 0) \quad (3.21)$$

が得られ、一方、

$$\psi_{n,m}(z, \bar{z}) = C_{n,m} z^m f_{n,m}\left(\frac{|z|^2}{2}\right) \exp\left[-\frac{1}{4}|z|^2\right]$$

と置くと、 $f_{n,m}(s)$ ($s := \frac{|z|^2}{2}$) の満たすべき方程式は、

$$\left(s \frac{d}{ds} + m - s\right) f_{n,m}(s) = c f_{n+1,m-1}(s)$$

で、これは以下の Laguerre 陪多項式に他ならない事が分かります：

$$L_k^{(\ell)}(x) := \frac{e^x x^{-\ell}}{k!} \frac{d^k}{dx^k} (e^{-x} x^{k+\ell})$$

$$\left(x \frac{d}{dx} + \ell - x\right) L_k^{(\ell)}(x) = (k+1) L_{k+1}^{(\ell-1)}(x)$$

よって、一般の $\psi_{n,m}(z, \bar{z})$ は、

$$\psi_{n,m}(z, \bar{z}) = C_{n,m} z^m L_k^{(m)}(|z|^2/2) \exp\left[-\frac{1}{4}|z|^2\right] \quad (3.22)$$

と求める事ができます。

また式 (3.21) から、最低 Landau 準位 (LLL) に属する固有関数は一般に

$$\phi(z, \bar{z}) = f(z) \exp\left[-\frac{|z|^2}{4}\right] \quad (f(z) \text{は解析関数}) \quad (3.23)$$

と書ける事が分かりますが、これは次に述べる Laughlin の試行関数の基礎となります。

3.2.3 Laughlin の試行関数

前節までは1体問題として磁場下の2次元系を扱ってきましたが、ここで電子間のCoulomb相互作用をとり入れる事を試みます。ただしPauliの排他律から2電子は同じ状態に來れないため、波動関数は完全反対称ですが、磁場とCoulomb相互作用が強いという事で、二つの電子が同じ位置に來る波動関数の値が小さい方が実現しやすく、(またZeemanエネルギーが大きいために)スピン関数は揃っているとして軌道関数が反対称と仮定します。^{*12} まずは簡単のため占有率が $\nu = 1$ を満たす時を考えます。この時、最低Landau準位は電子で詰まっているので、その多体系の基底の波動関数としてSlater行列式を用いると

$$\begin{aligned} \Psi_{\nu=1} &= \begin{vmatrix} \phi_0(z_1) & \phi_1(z_1) & \cdots & \phi_{N_\phi-1}(z_1) \\ \phi_0(z_1) & \phi_1(z_1) & \cdots & \phi_{N_\phi-1}(z_1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_0(z_{N_\phi}) & \phi_1(z_{N_\phi}) & \cdots & \phi_{N_\phi-1}(z_{N_\phi}) \end{vmatrix} \\ &= \begin{vmatrix} 1 & z_1 & \cdots & z_1^{N_\phi-1} \\ 1 & z_2 & \cdots & z_2^{N_\phi-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & z_{N_\phi} & \cdots & z_{N_\phi}^{N_\phi-1} \end{vmatrix} \exp \left[-\frac{1}{4} \sum_{i=1}^{N_\phi} |z_i|^2 \right] = \prod_{i>j} (z_i - z_j) \exp \left[-\frac{1}{4} \sum_{i=1}^{N_\phi} |z_i|^2 \right] \end{aligned} \quad (3.24)$$

と書ける事が推察できます。ただし最後の等式ではVandermonde行列式を展開しました。この波動関数は有限系なので対称性の自発的対称性の破れも起こらず、強磁場極限では相互作用も無視できるため、厳密な基底状態となります。

次に ν が一般の場合(整数でない場合も含む)について考えましょう。ここで準位間エネルギーが $\Delta E = \hbar\omega_c = \frac{\hbar e B}{m_e} = \frac{\hbar^2}{m_e \ell_B^2}$ と磁場に比例する^{*13}ので、磁場が十分強ければ異なる準位間遷移は無視できます。これは各Landau準位に対応する部分Hilbert空間($\psi_{n,m}(x)$ for $\forall m = \{-N, -N+1, \dots, -N+N_\phi-1\}$ の張る空間)に制限して考える事に対応しています。そして異なる $n = 0, 1, 2, \dots$ からSlater行列で構成される多体波動関数の形は変化しますが、占有率の整数部分は無視した場合も $\nu - [\nu]$ と概念上は違いがないと考えられるので、最低Landau準位に制限、すなわち $0 < \nu < 1$ の時のみ考えればよい事が分かります。ちなみにこの時、運動エネルギーが無視できて電子・正孔対称性を用いれば、 $\nu > \frac{1}{2}$ の電子系は $\nu < \frac{1}{2}$ の正孔系の場合に書き直せるので、 $\nu < \frac{1}{2}$ としても問題ありません。

さて ν がどのような値をとり得るかを議論するために、先の試行関数を一般化します。式(3.23)から

$$\Psi_\nu(\{z_i, \bar{z}_i\}) = F(z_1, \dots, z_{N_e}) \exp \left[-\frac{1}{4} \sum_{i=1}^{N_\phi} |z_i|^2 \right] \quad (3.25)$$

$F(z_1, \dots, z_{N_e})$ は z_1, \dots, z_{N_e} の完全反対称関数

で、 $F(z_1, \dots, z_{N_e})$ は次数が奇数の完全反対称多項式となりますが、全角運動量の固有状態である事から斉次多項式になり^{*14}、基底状態の関数として以下のような形のを仮定します。

$$\Psi_\nu = \prod_{i>j} (z_i - z_j)^m \exp \left[-\frac{1}{4} \sum_{i=1}^{N_\phi} |z_i|^2 \right] \quad (3.26)$$

これはHard coreの³He系で最初導入されたJastrow型波動関数の特殊な場合です。またこれが $\nu = 1/m$ なる関係を満たすことは、電子間の距離が $N = 0$ で(相対)角運動量の $\frac{1}{2}$ 乗に比例する事から、電子密度は m に反比例して、

^{*12} この仮定については全く自明ではありませんが、実際に基底状態では強磁性が実現されています。

^{*13} 不確定性関係からこの比例関係はすぐに推察できます。

^{*14} 各変数の次数は等しく、それが角運動量と直接結びついているためです。

$\nu = 1$ 、つまり全て詰まった場合の $1/m$ 倍で、 $\nu = 1/m$ が推測できます。今 m は奇数であったので、分数量子 Hall 効果は基本的には奇数分母で起こる事が説明できます。

また波動関数の零点 (多粒子実空間は \mathbb{C}^{N_e} で記述される) は $z_i = z_j$ ($i \neq j$) を満たすような $N_e C_2$ 個の $(N_e - 1)$ 次元超平面の集まり^{*15}ですが、これは強い Colomb 相互作用のためとも言えます。このような相互作用で運動が強く制限される状態を非圧縮性量子液体^{*16}と呼び、一般に基底状態と第1励起状態の間に energy gap が存在し、安定な状態になる場合があります。これは短距離型の密度相関をもち、またスピンの全て揃った強磁性状態となります。詳しくは [2, 5章] を参照してください。

^{*15} これを対称群 (=同種粒子は区別できない) で割ってその基本群は組み紐群に他なりません。これが

^{*16} Wigner crystal が量子効果で融解した “液体” という言い方をする人もいます。

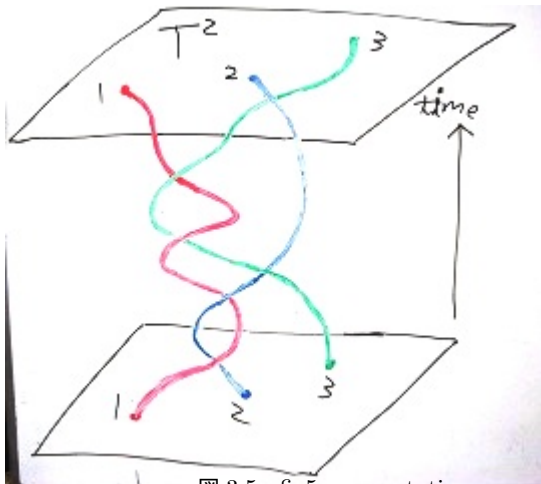


図 3.5 fig5.anyon statics



図 3.6 fig6. 準粒子の交換

3.3 トポロジカル秩序 ~ エニオンを例として ~ ***

相転移という現象は Landau 理論によれば、(局所) 秩序パラメーターの関数として書かれる“自由エネルギー”の持つ元々の基底状態、(ある転移点以下の温度つまり低エネルギーで) 基底状態が新たに分岐し発生し、その周りで元々の基底状態が持っていた対称性が消えてしまうというもので、その分岐点が相転移点あるいは臨界点に対応します。この時、秩序パラメーターの真空期待値 (統計的なものではなく、固定された基底状態に関する期待値である事に注意) が一般に 0 から有限の値をとるようになり、これから相転移の存在が確かめられます。ここで見方を少し変えてもう少し一般的に述べると、対称性の自発的破れでは、系の持つ対称性 G がその正規部分群である H に変化したときに、基底状態が G/H の対称性を持つ、つまり基底状態の縮重が必ず発生します。ここで基底状態が縮退する事と対称性の自発的破れは等価でしょうか？実は逆、『基底状態の縮退 \Rightarrow 対称性の破れ』については量子多体系では成り立たず、この新しい縮退の事を一般に topological degeneracy と呼びます。

この topological degeneracy はどのような状況で発生するのでしょうか？文字通り、系の topology が関係しているのですが、topological insulator のような内部自由度の (接続の) 渦の数え上げに起因するものではありません。それよりは Aharonov-Bohm 効果のような幾何学的位相に関連していますが、外部からの操作に対する位相のずれの応答や monopole 解のような量子化などではなく、考えている系が存在する空間の topology の構造 (つまりは位相不変量) に起因するものです。特に最初、Wen らによって研究が始められるきっかけとなり、割とこの topological degeneracy の本質をついていると考えられているのが、先の分数量子 Hall 効果です。この系の $\nu = \frac{1}{q}$ の Laughlin 状態の基底状態の縮重度は、考えている系が存在する 2次元曲面の topology、(今は向き付け可能なもののみ考えているので) 穴の数 genus を g として q^g -fold、つまり q^g 重縮退しています。これは何を意味するかと言うと、異なる Laughlin state、すなわち $\nu = \frac{1}{q_1}$ と $\nu = \frac{1}{q_2}$ (q_1, q_2 は異なる奇数) は、球上 ($g = 0$) で考えていると区別する手段は存在しないのですが、これを例えば $g = 1$ である torus 上で考えると、縮重度に違いが見られますので、区別できるようになります。このように区別される秩序を topological order と呼びます。ちなみにこの秩序間には一般に量子相転移 (点) が存在すると考えられているようです。(理由は topological insulator などと同様に、縮重度という離散値が不連続に変化するため。) ちなみに系が 3次元以上でも例えば quantum dimer model でこの概念は存在するようです。([9])

まずは分数量子統計に関する組み紐群の定式化を見てください。2次元トーラスつまり大きさ $L_x \times L_y$ (x, y はトーラスの大域的座標で、共に S^1 の元と見なせる) で周期境界条件がついた系を考えます。まずここに $e^* = \frac{p}{q}e$ (p, q は互いに

素)の電荷をもつ内部自由度を持たない N 個の準粒子を置いて、その準粒子に対して幾つかの“断熱操作”を定義します。ここで励起状態は gapped であり、Fermi level は gap 中にあると仮定しますが、操作が断熱的とした事から有限エネルギーが必要な励起は起きない、つまり粒子数は以下の操作で保存します。図は fig6.~8. を参照してください。

(i) 粒子の交換： i 番目の準粒子と $i + 1$ 番目の準粒子を、他の準粒子を囲むことなく時計回りに交換する操作を $\sigma_i (i = 1, 2, \dots, N - 1)$ で表します。⇔ 隣り合う組み紐の半捻れ

(ii) 粒子の周回移動： i 番目の粒子を x, y 正方向に1週だけさせる操作を $\tau_i, \rho_i (i = 1, 2, \dots, N)$ で表します。⇔ 組み紐の巻きつけ

(iii) 磁束の挿入： x, y 方向のループの中に単位磁束 $\Psi_0 = 2\pi/e$ (自然単位系 $\hbar = 1$) を通す操作を U_x, U_y で表します。⇔ 異なる組み紐の生成元への自己同型写像 (これについては後で見る) = 大域的ゲージ変換

以上の5つの操作は互いに独立ではなく、トーラス上の anyon の軌道がトーラス間の組み紐^{*17}に対応するため、組み紐に由来したある関係式を満たします。その関係式を組み紐 (正確には絡み目) の計算と物理的考察に基づいて求めます。

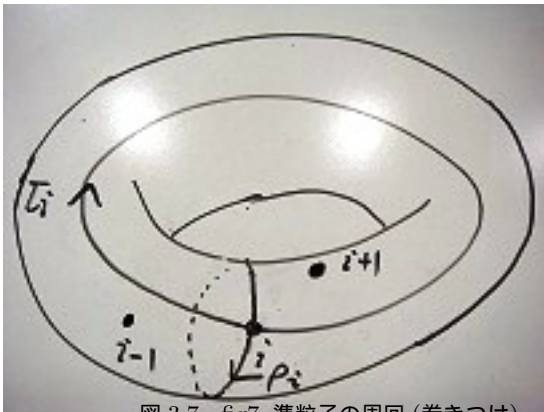


図 3.7 fig7. 準粒子の周回 (巻きつけ)

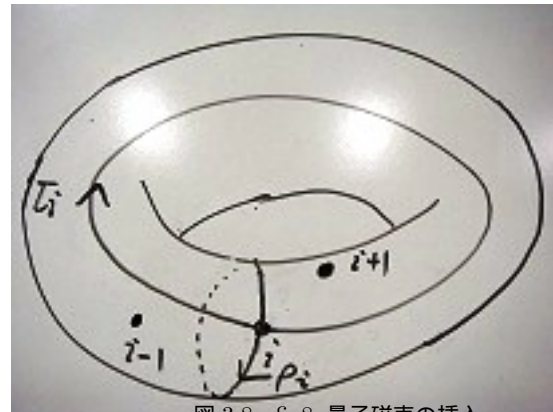


図 3.8 fig8. 量子磁束の挿入

(I). 組み紐の満たすべき関係

anyon の交換は組み紐群の元に対応し、 $\sigma_i \sigma_j = \sigma_j \sigma_i (|i - j| \geq 2)$ と braid relation $\sigma_i \sigma_{i+1} \sigma_i = \sigma_{i+1} \sigma_i \sigma_{i+1}$ を満たします。

(II). 2つの紐の巻きつけ

まず i 番目と j 番目の粒子を各方向に1週させた時に、どちらを先にやろうと同時に動かそうと、相対的には互いに動いていないので、 $\tau_i \tau_j = \tau_j \tau_i, \rho_i \rho_j = \rho_j \rho_i$ を満たします。(トーラス上のこの2つの組み紐を考えると、これは明らかに連続的に変形できます。)

ここで次のような演算子を導入します。

$$A_{j,i} := \tau_j^{-1} \rho_i \tau_j \rho_i^{-1} \quad C_{j,i} := \rho_j^{-1} \tau_i \rho_j \tau_i^{-1} \quad 1 \leq i < j \leq N \tag{3.27}$$

この意味するところは、実際に2次元トーラス上の組み紐、つまり準粒子の軌跡を描けば分かります。ただし連続的に変形して解く際に、周期境界条件になっている事に注意してください。すると $A_{j,i}$ は j 番目の準粒子が i 番目の準粒

^{*17} ここでは anyon が時刻 0 から T に動くのに対応して、 $f_i : [0, T] \rightarrow T^2 \simeq S^1 \times S^1$ s.t. $\forall i \forall j (\neq i) \forall t (\in [0, T]) f_i(t) \neq f_j(t) (i, j = 1, \dots, N)$ で表される写像の組 $\{f_i\}$ と定義しています。特に元の位置に戻る場合は、 $\forall i f_i(0) = f_i(T)$ であるので、 $\tilde{f}_i : S^1 \rightarrow T^2, \tilde{f}_i|_{S^1/\{0\}} = f_i, \tilde{f}_i|_{\{0\}} = f_i(0) i = 1, \dots, N$ のように組み紐 $\{f_i\}$ から (全ての) 絡み目 $\{\tilde{f}_i\}$ を構成する事ができます。

子に対して時計回りに周る、あるいは i 番目の準粒子が j 番目の準粒子に対して時計回りに周るという操作に対応している事が分かります。一方、 $C_{j,i}$ は j 番目の準粒子が i 番目の準粒子に対して反時計回りに周る、あるいは i 番目の準粒子が j 番目の準粒子に対して反時計回りに周るという操作の前後に対応しています。(ただし間の組み紐の存在によっては挟む位置は2か所あり、 $A_{i+1,i}$ と $C_{i+1,i}$ は常に逆の関係にあるとは限らない事に注意してください。) またこれから、

$$\sigma_i^2 := A_{i+1,i} = C_{i+1,i}^{-1} \quad (3.28)$$

となります。

(III). 捩れと巻きつけの関係

以下の等式などが成立します。

$$\begin{aligned} A_{m,l}\tau_k &= \tau_k A_{m,l}, & A_{m,l}\rho_k &= \rho_k A_{m,l} \quad (1 \leq k < l < m \leq N) \\ C_{j,i} &= (\tau_i \tau_j) A_{j,i}^{-1} (\tau_j^{-1} \tau_i^{-1}), & A_{j,i} &= (\rho_i \rho_j) C_{j,i}^{-1} (\rho_j^{-1} \rho_i^{-1}) \\ C_{j,i} &= (A_{j,j-1}^{-1} \cdots A_{j,i+1}^{-1}) A_{j,i}^{-1} (A_{j,i+1} \cdots A_{j,j-1}) \\ \tau_1 \rho_1 \tau_1^{-1} \rho_1^{-1} &= A_{2,1} A_{3,1} \cdots A_{N-1,1} A_{N,1} \quad 1 \leq i < j \leq N \end{aligned} \quad (3.29)$$

1行目は、捩ると巻きつけがある条件の下で可換となる事を意味しています。2行目は(II)で述べたように、一般に $A_{i+1,i}$ と $C_{i+1,i}$ は互いに逆元の関係にあるとは限らず、間に何も無い領域へ移した時に互いに逆の関係で結ばれる(可換になる)事を表しており、3行目は j 番から出た紐を、順々に隣の紐に巻きつけて行き、帰り (i 番目含む) は逆の巻き付け方をする事で、 i 番目との巻きつけが、 $i+1$ 番目、 $i+2$ 番目 \cdots と次々解けていき、 $i+1$ 番目、 $i+2$ 番目 \cdots から見て反対側に送られていくと、結局、もう1つの i 番目と j 番目の逆の巻きつき方に変わるという事を表しています。4行目は遠く(番号が大きい)のものから順々に巻きついて戻る、という操作を繰り返すと、全体に対して1度巻きついた事に相当していて、それはトラスを切り開いたものに沿った線で巻きつく事と等しい事を表しています。

(IV). 巻きつきと半捩じれの関係これは次の関係を満たします。

$$\begin{aligned} \tau_{i+1} &= \sigma_i^{-1} \tau_i \sigma_i^{-1}, & \rho_{i+1} &= \sigma_i^{-1} \rho_i \sigma_i^{-1} \\ \tau_1 \sigma_j &= \sigma_j \tau_1, & \rho_1 \sigma_j &= \sigma_j \rho_1 \quad (j \geq 2) \end{aligned} \quad (3.30)$$

1行目は、隣と交換した一方が1周する際に(最初の交換で生じた捩じれと)逆方向に解けて、再交換すると、1周した方のみが巻きついた事になるという結果を示しています。特に1番目の巻きつけは、2番目以降の間で生じる交換と何ら相関を持たない事を意味しています。

(V). 大域的ゲージ変換と交換操作・独立な捩じれ操作の可換性単位磁束を入れるのと、磁束を囲まない操作は可換なので、

$$U_x \tau_i = \tau_i U_x, \quad U_x \sigma_i = \sigma_i U_x, \quad U_y \tau_i = \tau_i U_y, \quad U_y \rho_i = \rho_i U_y \quad (3.31)$$

となる。

(VI). Aharanov-Bohm 効果最も重要なのが、幾何学的位相の現れである次の非可換性です。

$$U_x \tau_i = \exp(-2\pi i p/q) \tau_i U_x, \quad U_y \rho_i = \exp(-2\pi i p/q) \rho_i U_y \quad (3.32)$$

これは単位磁束に電子の電荷で現れているのに対し、準粒子が分数電荷をもつ事に起因しています。(位相のずれは普通の AB 効果と同じです。) また gauge 変換の非可換性についてみますと、 $U_x U_y U_x^{-1} U_y^{-1}$ は交換操作や巻きつけ操作(組み紐群の生成子)と可換だったので、Schur の補題より、任意の既約表現について恒等表現の定数倍で、

$$U_x U_y U_x^{-1} U_y^{-1} = \exp(2\pi i \lambda) \Leftrightarrow U_x U_y = \exp(2\pi i \lambda) U_y U_x \quad (3.33)$$

となります。ただし λ については Hall 伝導度の整数値に対応するのですが、例えば [10] 参照してください。

以上が系の代数構造ですが、もう1つ大域的 gauge 変換と呼んでいたものがあり、それは

$$\sigma'_i(\tau'_i \text{ or } \rho'_i) = U_\alpha \sigma_i(\tau_i \text{ or } \rho_i) U_\alpha^{-1} \quad (3.34)$$

という変換です。これは物理的に考えて至極当然の結果です。さらに準粒子は内部自由度を持たない可換工ニオンであったから、表現として

$$\sigma_j = e^{i\theta} \mathbf{1}, \quad \tau_j = e^{-2i\theta(j-1)} T_x, \quad \rho_j = e^{2i\theta(j-1)} T_y \quad (\theta = m/n \text{ は有理数}) \quad (3.35)$$

とすると、 T_x, T_y, U_x, U_y は、

$$T_x T_y = e^{-2i\theta} T_y T_x \quad (3.36)$$

$$U_x T_x U_x^{-1} = e^{-2\pi i p/q} T_x \quad U_y T_y U_y^{-1} = e^{-2\pi i p/q} T_y$$

$$U_y T_x U_y^{-1} = T_x \quad U_x T_y U_x^{-1} = T_y \quad (3.37)$$

で、これらの非可換性が実は基底状態の縮退を引き起こしています。これについて説明します。今、励起状態に対してこれらの演算が定義されましたが、基底状態に対しても準粒子としての電子と正孔の対生成・対消滅過程の量子過程を考える事によって定義されます。

具体的には、 $T_x |\eta\rangle = e^{i\eta} |\eta\rangle$ と T_x の固有状態をおくと、

$$T_x (T_y^k |\eta\rangle) = \exp [i(\eta - 2\pi k m/n)] (T_y^k |\eta\rangle) \quad (3.38)$$

となるので、少なくとも n 重縮退している事が分かります。

また $T_x T_y^n = T_y^n T_x$ から同時対角化して、

$$T_x |\eta\rangle = e^{i\eta_1} |\eta_1, \eta_2\rangle \quad T_y^n |\eta\rangle = e^{i\eta_2} |\eta_1, \eta_2\rangle \quad (3.39)$$

と書けます。さらに $U_x^s U_y^t$ を作用させても T_x や T_y^n 固有状態で、その固有値は異なる事が分かります。その固有値はそれぞれ、 $\exp [i(\eta_1 + 2\pi s p/q)] \exp [i(\eta_2 + 2\pi t n p/q)]$ で、 $Q = q/\gcd(n, q)$ とおくと、それぞれ q, Q 重縮退しているので、結局 qQ 重縮退しています。これらの結果から少なくとも縮退は n, qQ の最小公倍数 nQ^2 重だけ縮退している事が分かります。これが最初に述べた topological order に他なりません。詳しく知りたい方は今回ベースにした文献 [10] や関連文献 [13],[8],[9],[15],[12]などを参照してください。

参考文献

- [1] 黒木和彦・青木秀夫：多体電子論 II 超伝導 (東京大学出版会)
- [2] 中島龍也・青木秀夫：多体電子論 III 分数量子ホール効果 (東京大学出版会)
- [3] 吉岡大二郎：新物理学選書 量子ホール効果 (岩波書店)
- [4] 山田耕作：新物理学選書 電子関連の物理 (岩波書店)
- [5] 永長直人：電子関連における場の量子論 (岩波書店)
- [6] 永長直人：物性論における場の量子論 (岩波書店)
- [7] Alexander Altland, Ben Simons, *Condensed Matter Field Theory* (2ed.) (Cambridge University Press)
- [8] Xiao-Gang Wen, *Quantum Field Theory of Many-Body Systems* (Oxford Graduate Texts)
- [9] R.Moessner, S.L.Sondhi, *Ising and dimer models in two and three dimensions*, Phys. Rev. **B** 68 (2003) 054405.
- [10] M.Sato, Kohmoto, Wu, *Braid Group, Gauge Invariance and Topological Order*, Phys. Rev. Lett. 97 (2006) 010601.
- [11] V.J.Emery, *Theory of High-Tc Superconductivity in Oxides*, Phys. Rev. Lett. 58 (1997) 2794.
- [12] X.G.Wen, Q.Niu, *Ground-state degeneracy of fractional quantum Hall states in the presence of a random potential and on high-genus Riemann surfaces*, Phys. Rev. **B** 41 (1990) 9377.
- [13] 押川正義：“トポロジカル秩序” 数理科学 2007 年 6 月号
- [14] 数理科学 1997 年 10 月号 『高温超伝導理論の新展開』
- [15] 初貝安弘・甲元真人・Wu-Yong-Shi：“シリンダー及びトーラス上の分数量子統計：くみひも群およびゲージ不変性” 日本物理学会誌 47(11),881-888 1992-11-05
- [16] 守谷亨・上田和夫：“スピンゆらぎと高温超伝導” 日本物理学会誌 52(6),422-429,1997-06-05
- [17] 守谷亨：“高温超伝導はどこまで理解されたか：その後の経緯” 日本物理学会誌 59(11),791-796,2004-11-05
- [18] 守谷亨：“有機超伝導と高温超伝導：起源は同じか?” 日本物理学会誌 54(12),984-987,1999-12-05
- [19] 小形正男：“高温超伝導はどこまで理解されたか：強相関からのアプローチ” 日本物理学会誌 59(11),796-801,2004-11-05

第 4 章

磁気 BZ から見た整数量子ホール効果 小澤遼

4.1 この Chapter でやりたいこと**

topological insulator は、ある種の絶縁体の総称です。その物理量がトポロジーの言葉で書き表せるため、この名前がついているとよいでしょう。このことは、トポロジーの抽象性を追求する姿勢と物性物理の（比較的直接的）現実に基づいた姿勢を比べると、驚きに値します。しかし物性物理におけるトポロジーとの関連は、他にも同様なものが整数量子 Hall 効果 (IQHE) でもみられています。IQHE とは、Hall 伝導度*1が $\frac{e^2}{h}$ の整数倍の値をとる現象のことです。ここではその最もシンプルな IQHE と幾何学の関連の触りについて解説をしたいと思います。あくまで主眼は物理側に置き、数学に詳しい人が「あ、この表式ということは・・・」と察せる程度にまとめてみました。

4.2 Hall 効果**

Hall 効果*2とは、試料*3のある面に磁場をあてると、その試料の面の 1 方向に電場をかけたとき、キャリアーが Lorentz 力を受けて、面内で電場に垂直な方向に電流が流れる現象です。今回は、z 軸方向を磁場の向きにとり、電場を y 方向にかけると、x 軸方向に電流が流れるという配置になるように座標とります。それぞれの量を B_z, E_y, J_x とおくと、

$$J_x =: \sigma_{xy} E_y \quad (4.1)$$

なる関係性があることが知られており、 σ_{xy} を Hall 伝導度 と呼びます。

4.3 一様磁場中の固体物理***

前章で見たように、Hall 効果を起こすには、通常、磁場をかけます。この章では、2 次元結晶に垂直に磁場をかけたときの固体物理を考えます。

*1 次章で定義されています。

*2 Hall は人名です。1879 年に Edwin Hall (America) によってこの現象は発見されました。

*3 伝導体、半導体を念頭に置いています。

xy 平面の 2 次元の結晶に z 軸方向の磁場 $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ をかけたとします。結晶構造は基本並進 vector が $\mathbf{a} := (a, 0), \mathbf{b} := (0, b)$ なる Bravais 格子であると、実格子 vector ^{*4}を $\mathbf{R} := (na, mb)$ とします ($n, m \in \mathbb{Z}$)。

また、磁場による vector potential \mathbf{A} を

$$\mathbf{A} := \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{x} \quad (4.2)$$

で定めます。

まずこの系の Hamiltonian \mathcal{H} を考えます。磁場がないとき、固体物理の原子核の相互作用、電子間相互作用を無視した最も簡潔に近似された Hamiltonian \mathcal{H}_0 は

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{x}) \quad (4.3)$$

ただし、

$$U(\mathbf{x} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{x}) \quad (4.4)$$

でした。

ここからの類推で磁場を加えた Hamiltonian は

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 + U(\mathbf{x}) \quad (4.5)$$

$$= \frac{1}{2m}\mathbf{\Pi}^2 + U(\mathbf{x}) \quad (4.6)$$

ただし、

$$U(\mathbf{x} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{x}) \quad (4.7)$$

となると考えられます。 $\mathbf{\Pi} = \mathbf{p} + e\mathbf{A}$ は力学的運動量と言われるもので、 $m\frac{d}{dt}\mathbf{x}$ に相当する演算子でした^{*5}。この設定でどのような話が展開されてゆくか見ていきましょう。

\mathcal{H}_0 は「系を \mathbf{R} だけずらしても不変である」という離散並進対称性を持ちます。一方、磁場の入った \mathcal{H} の系は \mathbf{A} も \mathbf{x} に陽に依存するので、 \mathbf{R} の並進に対して、Hamiltonian \mathcal{H} の形が変わってしまいます。

これを数式でかくと、 \mathbf{R} だけ並進させる演算子 $T_{\mathbf{R}}$ を、

$$T_{\mathbf{R}} := \exp[-i\mathbf{R} \cdot \mathbf{p}] \quad (4.8)$$

で定義して、

$$[\mathcal{H}_0, T_{\mathbf{R}}] = 0, [\mathcal{H}, T_{\mathbf{R}}] \neq 0 \quad (4.9)$$

と表せます。

この $T_{\mathbf{R}}$ を作用させたときの、 \mathcal{H} 中の vector potential \mathbf{A} の寄与を打ち消すため、 $T_{\mathbf{R}}$ 少し変形させた

$$\tilde{T}_{\mathbf{R}} := \exp[-i\mathbf{R} \cdot \mathbf{p} + \frac{e}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{R}) \cdot \mathbf{x}] \quad (4.10)$$

^{*4} 任意の結晶格子間の vector です。

^{*5} 例えば J.J.Sakurai2.6 章参照。

を定義しましょう。すると、

$$[\mathcal{H}, \tilde{T}_{\mathbf{R}}] = 0 \quad (4.11)$$

とすることができます。これで系を変えない離散並進対称性 “ のようなもの ” を得ることができました。

この並進演算子の取り換えで、Hamiltonian \mathcal{H} と同時対角化可能になったわけですが、しかしまだ、不満なところがあります。

$\mathbf{R} = \mathbf{a}, \mathbf{b}$ の場合に注目すると

$$\tilde{T}_{\mathbf{a}}\tilde{T}_{\mathbf{b}} = \exp[-2\pi i \frac{eabB}{h}] \tilde{T}_{\mathbf{b}}\tilde{T}_{\mathbf{a}} \quad (4.12)$$

$$=: \exp[-2\pi i \phi] \tilde{T}_{\mathbf{b}}\tilde{T}_{\mathbf{a}} \quad (4.13)$$

$$(4.14)$$

ただし

$$\phi = \frac{eabB}{h} \quad (4.15)$$

となります*6。

これは a だけ並進した後 b だけ並進するのと、b だけ並進した後 a だけ並進する経路の違いで、一般に有限な位相のずれが現れると解釈できます。

これは外磁場の Aharonov-Bohm 効果によるものと考えられ、 ϕ は磁束と呼ばれます。この位相のずれがあるので、もはや a, b は系に周期を持たせる基本の vector と見るには不十分です*7。

この問題を解決する 1 つの方法として、あらたなる周期を再考するというアプローチをとりましょう。先の視点では、新しい周期では、その領域の境界を 1 周すると 2π の整数倍だけ位相がずれるように修正しようという自然な発想が浮かびます。それを実現するには $\phi = \frac{p}{q}$ という有理数のとき*8、(p, q は互いに素な整数) もともとの unit cell (単位胞) を q 倍した、 $q\mathbf{a}, \mathbf{b}$ を基本の並進 vector とすれば、良いことが分かります。

i.e.

$$\tilde{T}_{q\mathbf{a}}\tilde{T}_{\mathbf{b}} = \exp[-2\pi ip] \tilde{T}_{\mathbf{b}}\tilde{T}_{q\mathbf{a}} = \tilde{T}_{\mathbf{b}}\tilde{T}_{q\mathbf{a}} \quad (4.16)$$

となります。

この基本 vector に対して、

$$\tilde{\mathbf{R}} := (nqa, mb) \quad (n, m \in \mathbb{Z}) \quad (4.17)$$

と実格子 vector を新たにおきましょう。

ここで、固体物理の基礎と同様のロジックで、式 (4.11), (4.16) より同時対角化可能な 3 つの演算子に対する固有関数 ; Bloch 関数*9 を以下のように考えます。

$$\mathcal{H}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = E_n(\mathbf{k})\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (4.18)$$

*6 Baker-Campbell-Hausdorff 公式; $e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}+\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]+\frac{1}{12}[[\hat{A},\hat{B}],\hat{B}]+\dots}$ を使いましょう。

*7 以下の $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ の議論をみると、より納得がいくと思います。

*8 確率的に無理数にならないことはほぼ 0 ですが、あくまで近似的な有理数でおけます。

*9 完全正規直交系をなすとする。

$$\tilde{T}_{q\mathbf{a}}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{ik_1qa}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (4.19)$$

$$\tilde{T}_{\mathbf{b}}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{ik_2b}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (4.20)$$

ここでここで n は band index です。また k_1, k_2 は磁場中の一般化された結晶運動量ですが、上式より周期をもつので、特に

$$0 \leq k_1 < \frac{2\pi}{qa} \quad (4.21)$$

$$0 \leq k_2 < \frac{2\pi}{b} \quad (4.22)$$

なる領域のみを考えれば十分です。この式 (4.21)、(4.22) の領域を、magnetic Brillouin Zone(以下 MBZ と略) と呼びます。

MBZ は一見長方形のように見えますが、それぞれの向かい合う辺が周期性により同一視されるので、実は1つ穴のあいたドーナツの形ととらえることができます。一般にこのドーナツのような形を torus(トーラス) と呼びます。実はこのことが、後の5章で根本的に効いてきます。今はまだその準備段階です。

さて、Bloch の定理からの類推で、Bloch 関数を

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (4.23)$$

と因数分解します。(なお以下ではしばしば $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ などを $\psi(\mathbf{x})$ などと略記します。) 磁場がない場合の Bloch の定理との違いは周期関数 $u(\mathbf{x})$ の変換性です^{*10}。実際、

$$\tilde{T}_{q\mathbf{a}}\psi(\mathbf{x}) = \exp\left[\frac{ie\pi}{h}Bay\right]\psi(\mathbf{x} + q\mathbf{a}) \quad (4.24)$$

$$= \exp\left[\frac{ie\pi}{h}Bay\right]e^{ik_1qa}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}u(x + qa, y) \quad (4.25)$$

となることより

$$u(x + qa, y) = e^{-i\pi\frac{2y}{b}}u(\mathbf{x}) \quad (4.26)$$

また同様に

$$u(x, y + b) = e^{i\pi\frac{2x}{qa}}u(\mathbf{x}) \quad (4.27)$$

となり、余分な位相が生じます。

しかし、先ほどの要請 ; 「unit cell を1周すると位相は 2π の整数倍ずれる」ということは変わらず、むしろ以下のように簡単に示せます。

$$u(0, 0) = e^{i0}u(qa, 0) = e^{i\pi p}u(qa, b) = e^{2i\pi p}u(0, b) \quad (4.28)$$

$$= e^{2i\pi p}u(0, 0) = u(0, 0) \quad (4.29)$$

4.4 Hall 伝導度の導出***

以下では周期関数 $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ 、および ket vector $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ ^{*11*12} に注目していきます。

^{*10} 磁場がないとき周期関数は $u(\mathbf{x} + \mathbf{R}) = u(\mathbf{x})$ を満たしました。

^{*11} $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | u_{n\mathbf{k}} \rangle$ 。

^{*12} $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ は各 \mathbf{k} で完全正規直交系をなすとする。

$$\tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{k}) := e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\mathcal{H}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (4.30)$$

$$= \frac{1}{2m}(\hbar\mathbf{k} + \mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 \quad (4.31)$$

$$(4.32)$$

で定義すると、これは $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ を固有関数とする Hamiltonian です*13。

i.e.

$$\tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{k})|u_{n\mathbf{k}}\rangle = E_n(\mathbf{k})|u_{n\mathbf{k}}\rangle \quad (4.33)$$

さて、ここで Hall 効果を起こすため、 y 軸方向に電場 E_y をかけます。電場は十分弱くこの系は断熱過程で時間発展しているとします*14。いま $\mathbf{k}(t)$ は式 (4.22) の周期性をもつので、時間 $T = \frac{2\pi\hbar}{eE_y p}$ で周期をもつ parameter となっています。

電場 E_y をかけたことにより、電磁場の vector potential は

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r} - (0, E_y t, 0) \quad (4.34)$$

となり、Hamiltonian.etc は

$$\tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k} + e\mathbf{A}')^2 + U(\mathbf{x}) \quad (4.35)$$

$$= \tilde{\mathcal{H}}(k_1, k_2 - \frac{eE_y t}{\hbar}) \quad (4.36)$$

$$u_{m\mathbf{k}}(\mathbf{x}, t) = u_{mk_1, k_2 - \frac{eE_y t}{\hbar}} \quad (4.37)$$

$$E_{m\mathbf{k}}(t) = E_{mk_1, k_2 - \frac{eE_y t}{\hbar}} \quad (4.38)$$

$$(4.39)$$

となります。

Hall 効果によって流れる電流を、密度電流演算子*15

$$\hat{\mathbf{J}} = \frac{ie}{\hbar}[H, \mathbf{x}] \quad (4.40)$$

を用いて、評価し、 σ_{xy} を求めてみましょう。

以下、電流の期待値 $\langle J_x \rangle$ を順々に計算していきます。計算問題なので、結果を見たければ式 (4.52) まで飛ばしてください。

いま x 方向の電流を考えているので、式 (4.40) で $\mathbf{x} = x$ とすればよいわけです。 $\langle J_x \rangle$ を E_y に比例する形に持つていければ、その比例係数が σ_{xy} になります。

$$\langle J_x \rangle = \frac{ie}{\hbar} \sum_{m < m_f} \int_{\text{MBZ}} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \langle \psi_{m\mathbf{k}(t)} | [H, x] | \psi_{m\mathbf{k}(t)} \rangle \quad (4.41)$$

*13 式 (4.23) より。

*14 Energy 固有状態が時間発展しても同じ準位の固有状態であり続ける過程のことです。ただし縮退は考えていません。

*15 $\frac{ie}{\hbar}[H, \mathbf{x}] = \frac{ie}{2m\hbar}[(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2, \mathbf{x}] = \frac{ie}{2m\hbar}2(-i\hbar)(\mathbf{p} + e\mathbf{A}) = \frac{e}{m}\boldsymbol{\Pi}$ となり確かに電流を表していることが分かります。

いきなり色々でてきたので、一つずつ見ていきましょう。 m_f は Fermi energy を表し \sum は Fermi energy より低い energy にある band に対する和を表します。積分は MBZ における結晶運動量での積分を表します。分母の 2π は Fourier 変換と同じ要因でついた因子です。

式 (4.41) は以降、hamiltonian をブラ・ケットに作用させて、Scrödinger equation より

$$\begin{aligned} \langle J_x \rangle &= \frac{ie}{\hbar} \sum_{m < m_f} \int_{\mathbf{k}} (-i\hbar) \langle \partial_t \psi_{m\mathbf{k}(t)} | x | \psi_{m\mathbf{k}(t)} \rangle - (i\hbar) \langle \psi_{m\mathbf{k}(t)} | x | \partial_t \psi_{m\mathbf{k}(t)} \rangle \\ &= e \sum_{m < m_f} \int_{\mathbf{k}} [\langle \partial_t u_{m\mathbf{k}(t)} | x | u_{m\mathbf{k}(t)} \rangle + h.c.] \end{aligned} \quad (4.42)$$

$$= e \sum_{m < m_f} \int_{\mathbf{k}} \sum_n [\langle \partial_t u_{m\mathbf{k}(t)} | u_{n\mathbf{k}(t)} \rangle \langle u_{n\mathbf{k}(t)} | x | u_{m\mathbf{k}(t)} \rangle + h.c.] \quad (4.43)$$

*16

ここで、 $n = m$ のとき

$$\begin{aligned} &\langle \partial_t u_{m\mathbf{k}(t)} | u_{m\mathbf{k}(t)} \rangle \langle u_{m\mathbf{k}(t)} | x | u_{m\mathbf{k}(t)} \rangle + h.c. \\ &= \langle u_{m\mathbf{k}(t)} | x | u_{m\mathbf{k}(t)} \rangle \partial_t (\langle u_{m\mathbf{k}(t)} | u_{m\mathbf{k}(t)} \rangle) = 0 \end{aligned} \quad (4.44)$$

なので、 $n = m$ のとき電流への寄与はありません。以下 $n \neq m$ として解いていきましょう。式 (4.43) の式を2つに分けてそれぞれ計算しましょう。

まず、

$$\langle u_{m\mathbf{k}(t)} | x | u_{n\mathbf{k}(t)} \rangle \quad (4.45)$$

$$= \frac{1}{E_{n\mathbf{k}(t)} - E_{m\mathbf{k}}} \langle u_{m\mathbf{k}(t)} | [x, \tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{k})] | u_{n\mathbf{k}(t)} \rangle \quad (4.46)$$

$$= \frac{1}{E_{n\mathbf{k}(t)} - E_{m\mathbf{k}}} \langle u_{m\mathbf{k}(t)} | i\partial_{k_1} \tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{k}) | u_{n\mathbf{k}(t)} \rangle \quad (4.47)$$

*17

$$= \frac{-i}{E_{n\mathbf{k}(t)} - E_{m\mathbf{k}}} (\langle \partial_{k_1} u_{m\mathbf{k}(t)} | \tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{k}) | u_{n\mathbf{k}(t)} \rangle + \langle u_{m\mathbf{k}(t)} | \tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{k}) | \partial_{k_1} u_{n\mathbf{k}(t)} \rangle) \quad (4.48)$$

$$= -i \langle \partial_{k_1} u_{m\mathbf{k}(t)} | u_{n\mathbf{k}(t)} \rangle \quad (4.49)$$

次に、

$$\langle u_{\mathbf{k}(t)} | \partial_t u_{m\mathbf{k}(t)} \rangle = -\frac{eE_y}{\hbar} \langle u_{n\mathbf{k}(t)} | \partial_{k_2} u_{m\mathbf{k}(t)} \rangle \quad (4.50)$$

となります。以上、式 (4.43)(4.49)(4.50) を合わせて、

$$\langle J_x \rangle = \frac{e^2 E_y}{\hbar} \sum_{m < m_f, n} \int_{\mathbf{k}} (-i \langle \partial_{k_1} u_{m\mathbf{k}(t)} | u_{n\mathbf{k}(t)} \rangle \langle u_{n\mathbf{k}(t)} | \partial_{k_2} u_{m\mathbf{k}(t)} \rangle + h.c.)$$

*16 いま断熱過程なので、 $|\psi(t)\rangle = \exp[-i \int E + i\gamma(t) dt] e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} |u_{\mathbf{k}(t)}\rangle$ なることに注意すれば示せます。(注: $|u_{\mathbf{k}(t)}\rangle$ は時間に陽に依存しません。) $\gamma(t)$ は Berry's phase で詳しくは Chapter 5. を参照ください。

*17 $n \neq m$ を用いて証明できます。

$$= -i \frac{e^2 E_y}{\hbar} \sum_{m < m_f} \int_{\text{MBZ}} \frac{d^2 \tilde{k}}{(2\pi)^2} \left[\left\langle \frac{\partial u_{m\tilde{\mathbf{k}}}}{\partial \tilde{k}_1} \middle| \frac{\partial u_{m\tilde{\mathbf{k}}}}{\partial \tilde{k}_2} \right\rangle - \text{h.c.} \right] \quad (4.51)$$

となります。これより Hall 伝導度 σ_{xy} が求まり、

$$\sigma_{xy}^m = \frac{e^2}{\hbar} \int_{\text{MBZ}} \frac{d^2 \tilde{k}}{2\pi i} \left[\left\langle \frac{\partial u_{m\tilde{\mathbf{k}}}}{\partial \tilde{k}_1} \middle| \frac{\partial u_{m\tilde{\mathbf{k}}}}{\partial \tilde{k}_2} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial u_{m\tilde{\mathbf{k}}}}{\partial \tilde{k}_2} \middle| \frac{\partial u_{m\tilde{\mathbf{k}}}}{\partial \tilde{k}_1} \right\rangle \right] \quad (4.52)$$

ここで \sum が外れましたが、これは単に各 band の寄与を見るため、Hall 伝導度は和になります。

さて、これで、当面の目標が達成できたわけですが、この式を眺めても一見「整数」とは何の関連も見えません。これは次章で見ていきましょう。

4.5 整数量子 Hall 効果***

Hall 伝導度が求まりました。これを考察していきましょう。

まず MBZ における vector 場

$$\tilde{\mathbf{Z}}(\tilde{k}) := \langle u_{m\tilde{\mathbf{k}}} | \nabla_{\tilde{\mathbf{k}}} | u_{m\tilde{\mathbf{k}}} \rangle \quad (4.53)$$

を定義しましょう。この導入により Hall 伝導度は

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{2\pi i \hbar} \int_{\text{MBZ}} d^2 \tilde{k} [\nabla_{\tilde{\mathbf{k}}} \times \tilde{\mathbf{Z}}(\tilde{k})]_3 \quad (4.54)$$

とかけます。以下で実際に計算してみましょう。

$$\begin{aligned} [\nabla_{\tilde{\mathbf{k}}} \times \tilde{\mathbf{Z}}(\tilde{k})]_z &= \partial_{\tilde{k}_1} \langle u_{m\tilde{\mathbf{k}}} | \partial_{\tilde{k}_2} | u_{m\tilde{\mathbf{k}}} \rangle - \partial_{\tilde{k}_2} \langle u_{m\tilde{\mathbf{k}}} | \partial_{\tilde{k}_1} | u_{m\tilde{\mathbf{k}}} \rangle \\ &= \sigma_{xy}^m \end{aligned} \quad (4.55)$$

さて、この式を吟味していきたいと思います。

式 (4.54) の右辺は Stokes の定理より

$$\sigma_{xy} = \int_{\partial \text{MBZ}} \tilde{\mathbf{Z}} \quad (4.56)$$

となります。しかし MBZ は式 (4.21)(4.22) であたえられていて、これはトーラスになっているのでした。このトーラスに境界はありません。よって積分すると一見 Hall 伝導度は 0 になるのではないかと思います。しかし実際には、Hall 効果があることが実験的に確かめられています。

この疑問を解決しましょう。それにより実は Hall 伝導度 σ_{xy} が $\frac{e^2}{h}$ の整数になることも分かります。

解決するために、まず gauge 変換によって、どの変数がどう変わるのを見ていきましょう。電磁場の vector potential (\mathbf{A} のことです。直前の $\tilde{\mathbf{Z}}$ との混同に注意してください*18。) の変化は波動関数の位相の変化に帰着できました*19。

$$|u_{m\tilde{\mathbf{k}}}\rangle \rightarrow e^{i\theta(\tilde{\mathbf{k}})} |u_{m\tilde{\mathbf{k}}}\rangle \quad (4.57)$$

$$\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}) \rightarrow \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}) + i \nabla_{\tilde{\mathbf{k}}} \theta(\mathbf{k}) \quad (4.58)$$

$$\sigma_{xy}^m \rightarrow \sigma_{xy}^m \quad (4.59)$$

*18 もちろん電磁場がかかっている、 $\tilde{\mathbf{Z}}$ を考えるわけですが、“直接は”関係ないということです

*19 例えば J.J.Sakurai の 2.6 章参照

まず、式 (4.58) に目がいきますが、これは、「観測量^{*20}は vector potential のとり方によらない」という基本的な要請に従っていることを表して、いままでの議論の整合性を確認できます。

式 (4.59) に注目しましょう。これが最も注意すべきポイントです。式 (4.56) で「トーラスに境界がないから積分が 0 になる」という議論は \tilde{Z} が全トーラス上で解析的な場合のみです。式 (4.58) よりもし ket vector の位相 $\theta(\tilde{\mathbf{k}})$ が特異点を持てば、 \tilde{Z} も特異点を持ちえます。また位相 $\theta(\tilde{\mathbf{k}})$ が特異点を持つというのは $\langle \mathbf{x} | u_{m\tilde{\mathbf{k}}} \rangle = 0$ のとき起こりえます。

いま (\mathbf{x}_a) に対する周期関数 $u_{m\tilde{\mathbf{k}}}(\mathbf{x}_a) = \langle \mathbf{x}_a | u_{m\tilde{\mathbf{k}}} \rangle$ に対してある位相 $\theta_a(\tilde{\mathbf{k}})$ が定まっているとし、トーラスである MBZ の 1 点 r で位相が特異点を持つとしましょう。 σ_{xy} を式 (4.56) で計算するには、 r の周りで特異点を持たない ($u_{m\tilde{\mathbf{k}}}(\mathbf{x}_b)$ から定まる) 別の位相 $\theta_b(\tilde{\mathbf{k}})$ を導入する必要があります。両者は

このときそれぞれ特異点のない領域を H_a, H_b とします。

$$|u_{m\tilde{\mathbf{k}}} \rangle_b = \exp[i g(\tilde{\mathbf{k}})] |u_{m\tilde{\mathbf{k}}} \rangle_a \quad (4.60)$$

とし、これより

$$\tilde{\mathbf{Z}}_b = \tilde{\mathbf{Z}}_a + i \nabla_{\tilde{\mathbf{k}}} g(\tilde{\mathbf{k}}) \quad (4.61)$$

で $\tilde{\mathbf{Z}}_a, \tilde{\mathbf{Z}}_b$ を定め、さらに $\theta_a(\tilde{\mathbf{k}}), \theta_b(\tilde{\mathbf{k}})$ の両者が特異点を持たない r の周りに境界 ∂H をいれ、式 (4.56) を用いると、

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{2i\pi\hbar} \left[\int_{H_a} d^2\tilde{\mathbf{k}} [\nabla_{\tilde{\mathbf{k}}} \tilde{\mathbf{Z}}_a(\tilde{\mathbf{k}})]_3 + [\nabla_{\tilde{\mathbf{k}}} \tilde{\mathbf{Z}}_b(\tilde{\mathbf{k}})] \right] \quad (4.62)$$

$$= \frac{e^2}{2i\pi\hbar} \int_{\partial H} dk [\tilde{\mathbf{Z}}_a - \tilde{\mathbf{Z}}_b] \quad (4.63)$$

$$= \frac{e^2}{2\pi\hbar} \int_{\partial H} \nabla_{\tilde{\mathbf{k}}} g(\tilde{\mathbf{k}}) \quad (4.64)$$

ここで $g(\tilde{\mathbf{k}})$ は位相なので、式 (4.64) の積分は波動関数の 1 価であることより 2π の整数倍であることが物理的に要請されます。

$$\int_{\partial H} \nabla_{\tilde{\mathbf{k}}} g(\tilde{\mathbf{k}}) 2\pi n \quad (4.65)$$

とおくと、

$$\sigma_{xy}^m = \frac{e^2}{h} n \quad (4.66)$$

となり、Hall 伝導度が $\frac{e^2}{h}$ の整数倍 (の和) となることが示されました。

4.6 最後に***

以上で、Hall 伝導度 σ_{xy} が $\frac{e^2}{h}$ の整数倍になることが分かりました。

少し意外な手法だったと思われるかもしれませんが、今回の方法以外にも、Hall 伝導度がある整数倍の値のみとすることは、Landau 準位などを用いたりして説明できます。今回の方法はより「幾何的」なアプローチだったと言えるでしょう。

参考文献の [1] の後半に詳しく書かれていますが、この議論は fiber bundle という微分幾何も枠組みでとらえることができます。そもそもこの系は全空間が $|u_{m\mathbf{k}} \rangle$ で張られる解空間、底空間が MBZ であるトーラス、fiber が位相で

^{*20} 正確には今の観測量は $\sigma_{xy} = \sum_{m < m_f} \sigma_m$ のはずですが...

ある $U(1)$ となる principal bundle になっていて、位相を選ぶことは切断に対応し、Hall 伝導度が接続に対応 $\theta(\mathbf{k})$ が特異点をもつことは fiber が自明ではないことに対応する、などなどバンバン幾何用語に置き換えられます。

そうすると Hall 伝導度が Charn 数で表せ、整数倍になることが数学的に言及できます。

このような、解析や線形代数とはまた違った (比較的) 抽象数学が固体物理の中に登場するという一見意外な関連を感じて頂けたら幸いです。

参考文献

- [1] M. Kohmoto "Topological Invariant and the Quantization of Hall Conductance" Ann. of Phys. (New York) 160, 343 (1985).
- [2] 御領潤: 「ホール伝導度と位相不変量」物性研究 88 (2007) 413.

第 5 章

トポロジカル絶縁体上の有効作用

大森寛太郎

5.1 概観**

Topology(位相幾何学)とは数学の1分野で、連続写像で移りあうものについては同一視をするような幾何学です。つまり、ドーナツとコーヒーカップは連続変形で移りあうので、区別されません。

トポロジカル絶縁体は通常の絶縁体とはトポロジカルに異なる(かつ時間反転対称性を持った)絶縁体のことです。つまり、(良い条件下で)摂動(ハミルトンのパラメータの十分小さな連続変化)によってトポロジカル絶縁体と通常の絶縁体は移りあうことはありません。

トポロジカル絶縁体では、バルク-エッジ対応によって表面に奇数個の Dirac コーンが現れます。この Dirac コーンがこれまで見られなかった現象を起こすと予言されていて、注目を浴びています。

本稿では主に [1] を参考に Berrys' phase と場の量子論を用いて絶縁体の Z_2 不変量とトポロジカル絶縁体の有効作用について考察します。有効作用に Chern-Simons 項と呼ばれる補正が付くことにより、トポロジカル絶縁体の電磁場への得意な応答が予言されます。また、Chern-Simons 項の係数は時間反転対称性のもとで 0 か 1 のみを取ることが示され、それが Z_2 不変量よばれます。これは絶縁体のハミルトニアン の解空間に主束の構造が入ることから、そのチャーン数によって表され、まさにトポロジカルな量となっています。

本稿では $\hbar = 1$ を用います。また、 $x^0 := t$ とします。

5.2 Berry 位相***

パラメータ R に依存するハミルトニアン $H(R)$ による量子力学を考えます。パラメータ R は多様体 M の元とします。たとえば、 R が n 次ベクトルで、 $|R| = a$ という拘束条件がかかっているときは、 M は S^{n-1} です。

$H(R)$ の固有状態のうち、あるひとつ $|\phi(R)\rangle$ に注目します。この固有状態は縮退していないとします。 R をなめらかに動かしたとき、 $|\phi(R)\rangle$ も滑らかに動くとし、 $a \in \mathbb{R}$ とすると、 $e^{ia}|\phi\rangle$ も解であり、物理的に区別できません。つまり、 $|\phi\rangle$ は $U(1)$ ゲージ変換を受けるとみなせます。

M の十分小さい開集合 U を取ってきて、 $\{(R, e^{ia}|\phi(R)\rangle) | R \in U, a \in [0, 2\pi)\}$ を、 $U \times U(1)$ と同相であって、 $\{(R, |\phi(R)\rangle) | R \in U\}$ がその滑らかな切断であるように位相を入れることができます。 M の十分細かい開被覆 $\{U_\lambda\}_\lambda$ をとり、このように構成した $U_\lambda \times U(1)$ を貼りあわせてできた M 上の主 $U(1)$ 束 P を考えます。

P の局所的な接続 A を

$$A(R) := \langle \phi(R) | d | \phi(R) \rangle \quad (5.1)$$

を定義します。これは R の座標変換に伴う変換関数を $t(R)$ として、変換前の接続 A と変換後の A' が

$$A'(R) = A(R) + t(R)^{-1} dt(R) \quad (5.2)$$

となるので、十分細かい開被覆 U_λ とその上の接続 A_λ に対して、 (U_λ, A_λ) は P の接続となります。これを Berry's connection(ベリー接続) といいます。

Berry's curvature F を Berry's connection A から、 $F := dA$ と定義します。

さて、ハミルトニアン H のパラメータ R が時間に依存しているとしましょう。さらに、 R は時間 T 後に元に戻るとします ($R(0) = R(T)$)。 $R(t)$ が通過する M 上の閉曲線を C 、 S を C を境界とするような曲面とします。

時間依存ハミルトニアン $H(R(t))$ による $|\psi(t=0)\rangle := |\phi(R(0)), t=0\rangle$ の時間発展を、断熱仮定を置いて、

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left[i\gamma(t) - i\int_0^t E(R(s))ds\right] |\phi(R(t))\rangle \quad (5.3)$$

として $\gamma(t)$ を定義します。ここで、 $E(R(s))$ はパラメータ R を $R(s)$ に固定した(時間に依存しない)ハミルトニアンの固有状態 $|\phi(R(s))\rangle$ の固有エネルギーです。

式 (5.3) を Schrödinger 方程式に代入すると、

$$\frac{d}{dt}\gamma(t) = i\left\langle\phi(R(t))\left|\frac{d}{dt}\right|\phi(R(t))\right\rangle \quad (5.4)$$

となります。

よって、 $|\phi\rangle$ が時間 T でずれる phase は

$$\gamma(T) = \int_0^T \frac{d}{dt}\gamma(t)dt \quad (5.5)$$

$$= \int_0^T i\left\langle\phi(R(t))\left|\frac{d}{dt}\right|\phi(R(t))\right\rangle dt \quad (5.6)$$

$$= i\int_C \langle\phi(R(t))|d|\phi(R(t))\rangle \quad (5.7)$$

$$= i\int_C A \quad (5.8)$$

$$= i\int_S F \quad (5.9)$$

となります。これを Berry's phase といいます。これはゲージ変換で不変な量になっています。

通常、波動関数の phase は観測量ではありませんが、Berry's phase は干渉などにより観測されます。Aharonov-Bohm 効果も Berry's phase として表すことができます。^{*1}

5.3 4+1 次元での有効作用***

3+1 次元のトポロジカル絶縁体について考える準備として、[4] に沿って 4+1 次元電磁場の有効作用について考えます。

簡単のため、連続極限を考えます。

一例として、Dirac 模型を挙げます。これは、Dirac ガンマ γ^μ :

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu} \quad (5.10)$$

^{*1} J.J. サクライ 和訳版補遺

を使って、*2 ラグランジアンが

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_{Dirac} &= \bar{\psi}(i\mathcal{D} - m)\psi - \frac{1}{4e^2}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \\ &= \bar{\psi}(i\mathcal{D} - m)\psi - \frac{1}{4e^2}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + j^\mu A_\mu\end{aligned}\quad (5.11)$$

$$(D_\mu := \partial_\mu - iA_\mu, j^\mu := \bar{\psi}\gamma^\mu\psi)$$

と書かれるものです。ここで、結合定数 e はゲージ場 A に押し込みました。

これは素粒子論の QED ラグランジアンと同じ形ですが、スピノール ψ の意味は素粒子論でのスピノールと異なり、スピノールの各成分は電子の (スピンを区別した) バンド準位のラベルを表します。つまり、このモデルは、電子のスピンの上下で二重縮退したバンド二組でできた 4 バンド系を表しています。よって、 m も電子の質量を意味せず、系によって変化するパラメータです (正であることも要求されません)。また、離散変換に対する変換性も QED のスピノールと異なります。

あとのために、より一般のラグランジアン \mathcal{L} で表される系を考えます。ただし、電流 $j^\mu = \frac{\delta\mathcal{L}}{\delta A_\mu}$ は大域的 U(1) ゲージ変換に関する Nöther カレントであるとして。

大域的 U(1) ゲージ対称性からくる Ward-Takahashi 恒等式から、*3

$$\begin{aligned}-k_\mu\Gamma^\mu(p+k, p) &= G^{-1}(p+k) - G^{-1}(p) \\ \therefore \Gamma^\mu(p+k, p) &= -\left.\frac{\partial}{\partial k_\mu}G^{-1}(p+k)\right|_{k=0} + \mathcal{O}(k)\end{aligned}\quad (5.12)$$

となります。ここで、 Γ は電子と電磁場の相互作用の頂点関数、 $G(p^\mu) = [\omega - H(k_i) + i\varepsilon]^{-1}$, $p^\mu = (\omega, k_1, k_2, k_3, k_4)$, $H(k_i)$: ハミルトニアン運動量表示は電子の 1 粒子グリーン関数 (運動量表示) です。

さて、電磁場の応答を知るために、電磁場の有効作用 $S_{eff}[A]$ を考えます。ここで、有効作用 $S_{eff}[A]$ は元の作用の電子の自由度を積分してしまうことで、

$$e^{iS_{eff}[A]} := \int \mathcal{D}\bar{\psi}\mathcal{D}\psi \exp\left[i\int d^5x\mathcal{L}[\bar{\psi}, \psi, A]\right]\quad (5.13)$$

と定義されます。

S_{eff} を A で形式的に展開すると、

$$\begin{aligned}S_{eff} &= -\frac{1}{4e^2}\int d^5x F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \frac{1}{2}\int d^5x d^5y A_\mu(x)A_\nu(y)\Pi^{\mu\nu}(x-y) \\ &\quad + \frac{1}{6}\int d^5x d^5y d^5z A_\mu(x)A_\nu(y)A_\rho(z)\Pi^{\mu\nu\rho}(x-y, x-z) + \dots\end{aligned}\quad (5.14)$$

$$\begin{aligned}\Pi^{\mu\nu}(x-y) &:= \left.\frac{\delta^2 S_{eff}}{\delta A_\mu(x)\delta A_\nu(y)}\right|_{A=0} \\ &= \left.\frac{\delta^2}{\delta A_\mu(x)\delta A_\nu(y)}\frac{1}{i}\log\left[\int \mathcal{D}\bar{\psi}\mathcal{D}\psi \exp\left[i\int d^5x\mathcal{L}[\bar{\psi}, \psi, A]\right]\right]\right|_{A=0} \\ &= -i\langle 0|T\{j^\mu(x)j^\nu(y)\}|0\rangle\end{aligned}\quad (5.15)$$

$$\begin{aligned}\Pi^{\mu\nu\rho}(x-y, x-z) &:= \left.\frac{\delta^3 S_{eff}}{\delta A_\mu(x)\delta A_\nu(y)\delta A_\rho(z)}\right|_{A=0} \\ &= -i\langle 0|T\{j^\mu(x)j^\nu(y)j^\rho(z)\}|0\rangle\end{aligned}\quad (5.16)$$

*2 4+1 次元でのスピノールの成分は 4 つであり、 γ たちは 3+1 次元の時の $\gamma^{0,1,2,3}$ と γ^5 からなります。

*3 [5] 7.4 参照

j^μ はラグランジアン of Nöther カレントですから、Ward-Takahashi 恒等式から、コンタクトタームを除いて、

$$\begin{aligned}\partial_{x,\mu}\Pi^{\mu\nu}(x-y) &= \partial_{y,\nu}\Pi^{\mu\nu}(x-y) = 0 + (\text{コンタクトターム}) \\ \partial_{x,\mu}\Pi^{\mu\nu\rho}(x-y, x-z) &= 0 + (\text{コンタクトターム}) \quad \text{etc}\end{aligned}\quad (5.17)$$

を満たします。

よって、 Π の可能な形は、

$$\Pi_{\mu\nu}(x-y) = \chi(\eta_{\mu\nu}\square_y - \partial_{y,\mu}\partial_{y,\nu})\delta(x-y) + \dots \quad (5.18)$$

$$\Pi_{\mu\nu\rho}(x-y, x-z) = \kappa \varepsilon_{\mu\sigma\nu\lambda\rho}\partial_y^\sigma\partial_z^\lambda\delta^{(2)}(x-y, x-z) + \dots \quad (5.19)$$

式 (5.18) の第一項は $F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} = -2A^\mu(\eta_{\mu\nu}(\square - \partial_\mu\partial_\nu)A^\nu)$ から、電磁場の Maxwell ラグランジアンへの誘電率の補正を与えるものであることがわかります。

式 (5.19) の右辺の初項は 5 階完全反対称テンソルが存在するという 5 次元の性質からくる項です。

低エネルギー領域では微分が少ない項の寄与が大きいため、式 (5.19) の右辺の初項からくる寄与が誘電率補正以外の項よりも大きいです。この項が作る有効作用への補正を S_{CS} とすると、

$$\begin{aligned}S_{eff} &=: S_{Maxwell} + S_{CS} + \dots \\ S_{CS} &:= \frac{\kappa}{3} \int d^5x \varepsilon_{\mu\sigma\nu\lambda\rho} A^\mu \partial^\sigma A^\nu \partial^\lambda A^\rho\end{aligned}\quad (5.20)$$

となります。 S_{CS} は 5 次元の Chern-Simons 作用として知られているもので、計量によらずに定義される位相的場の理論として有名です。^{*4}

$\Pi_{\mu\nu\rho}(x-y, x-z)$ のフーリエ変換を $\Pi_{\mu\nu\rho}(k, q)$ とすると、

$$\Pi_{\mu\nu\rho}(k, q) = -\kappa \varepsilon_{\mu\sigma\nu\lambda\rho} k^\sigma q^\lambda + \mathcal{O}(q^2, k^2, kq) \quad (5.21)$$

$$\kappa = \left. \frac{-1}{5!} \varepsilon^{\mu\sigma\nu\lambda\rho} \partial_{k,\sigma} \partial_{q,\lambda} \Pi_{\mu\nu\rho} \right|_{k,q=0} \quad (5.22)$$

となり、 κ がカレントの 3 点関数で表されました。

式 (5.12)、(5.19) から、

$$\begin{aligned}\Pi_{\mu\nu\rho}(k, q) &= \int \frac{d^5p}{(2\pi)^5} \text{Tr} [(\partial_\mu G^{-1}(p))G(p+k+q) \\ &\times (\partial_\nu G^{-1}(p))G(p+q)(\partial_\rho G^{-1}(p))G(p)] + \mathcal{O}(k, q)\end{aligned}\quad (5.23)$$

よって、

$$\begin{aligned}\kappa &= \frac{-1}{5!} \int \frac{d^5p}{(2\pi)^5} \varepsilon^{\mu\sigma\nu\lambda\rho} \text{Tr} [(\partial_\mu G^{-1}(p))\partial_\sigma G(p) \\ &\times (\partial_\nu G^{-1}(p))\partial_\lambda G(p)(\partial_\rho G^{-1}(p))G(p)] \\ &= \frac{-1}{5!} \int \frac{d^5p}{(2\pi)^5} \varepsilon^{\mu\sigma\nu\lambda\rho} \text{Tr} [(G\partial_\mu G^{-1})(G\partial_\sigma G^{-1})(G\partial_\nu G^{-1})(G\partial_\lambda G^{-1})(G\partial_\rho G^{-1})]\end{aligned}\quad (5.24)$$

^{*4} 主 $U(1)$ 束の接続 1 形式を A とすれば、 $S_{CS} = \frac{\kappa}{3} \int A \wedge dA \wedge dA$

5.4 非可換 Berry 接続 と 第二チャーン数***

前章で導いた Chern-Simons 項の係数 $\frac{\kappa}{3}$ は 2 章で定義した Berry 接続を非可換に拡張することでトポロジカルに表すことができます。

離散並進対称性を持つ (全粒子) ハミルトニアン H は連続極限で前章のラグランジアン \mathcal{L} に対応するとします。また、1 粒子ハミルトニアンの端数表示 $h(k)$ の固有値のラベルを α などとし、固有状態を $|\alpha, k\rangle$ などと書きます。

今考えている系はバンド絶縁体、つまり、フェルミエネルギーがバンドとバンドの間にあるとすると、基底状態は電子がフェルミエネルギーエネルギーの下準位 M まで詰まっている状態です。よって、全電子の基底状態のうち結晶運動量 k をもつ部分は

$$|\text{ground}, k\rangle := \bigwedge_{1 \leq \alpha \leq M} |\alpha, k\rangle \quad (5.25)$$

となります。 \wedge は反対称積です。さて、この状態は $U(M)$ の作用でノルムと $H(k)$ の固有状態であることが保たれますから、2 章と同様の考えから k の空間、つまりブリルアンゾーン (これは 4 次元トーラスに同相) 上の主 $U(M)$ 束を考えることができます。

この束の接続 a と曲率 f を

$$a(k) := \langle \text{ground}, k | d | \text{ground}, k \rangle \quad (5.26)$$

$$f(k) := da + a \wedge a \quad (5.27)$$

$$(5.28)$$

と定義し^{*5}、第二チャーン数を

$$C_2 := \frac{-1}{8\pi^2} \int \text{Tr} [f \wedge f] \quad (5.29)$$

と定義します。これは整数になることが知られています。

さらに、詳細を省きますが、^{*6}全章の κ は

$$\kappa = \frac{C_2}{8\pi^2} \quad (5.30)$$

と表されます。これは、式 (5.24) の右辺および C_2 がともにハミルトニアンの断熱的变化 (フェルミエネルギーを固有値が跨がない変化) で不変であることから、フラットバンド模型

$$h_0(k) = \varepsilon_G \sum_{1 \leq \alpha \leq M} |\alpha, k\rangle \langle \beta, k| + \varepsilon_E \sum_{M \leq \gamma} |\gamma, k\rangle \langle \gamma, k| \quad (5.31)$$

に帰着され、示されます。

5.5 3+1dim トポロジカル絶縁体***

ここまで、実際には存在しない 4+1 次元の絶縁体について考えてきました。ここから、空間 4 次元のうちひとつの自由度をパラメータとみなして 3+1 次元の理論を作ります。

^{*5} a は $a^{\alpha\beta} = \langle \alpha, k | d | \beta, k \rangle$ を行列要素にもつ行列 ($u(M)$) 値 1 形式です。

^{*6} [1] Appendix C 参照

4+1次元の電磁場 A が4つ目の空間座標 w に依存しない ($\partial_w A = 0$) 場合を考えます。この時、系は w 方向の並進 (離散格子系では離散並進対象性) を持ちますから、 w 方向の (結晶) 運動量 k_w はハミルトニアンと交換する量子数となります。

よって、この k_w を系のパラメータとみなしてしまうことで3次元の模型を考えることができます。

例えば、式 (5.11) の Dirac 模型の場合、電子に関する部分のラグランジアンは

$$\mathcal{L}_{3DDirac}[\psi, \bar{\psi}, A, \theta] = \bar{\psi}(i\mathcal{D} - (m + \theta\gamma^4))\psi \quad (5.32)$$

$$\theta := -ik_w - A_w \quad (5.33)$$

($\theta := -ik_w - A_w, \mathcal{D} = \partial_\mu \gamma^\mu, \mu = 0, 1, 2, 3$) となります。

このような三次元のラグランジアン $\mathcal{L}_{3D}[\psi, \bar{\psi}, A, \theta]$ から作られる有効作用 $S_{3D}[A, \theta]$ を

$$e^{iS_{3D}[A, \theta]} := \int \mathcal{D}\bar{\psi}\mathcal{D}\psi \exp \left[i \int d^4\mathcal{L}[\psi, \bar{\psi}, A, \theta] \right] \quad (5.34)$$

とします。

S_{3D} の $A = 0, \theta = \theta_0$ 周りの展開の3次の項から、 $\delta\theta := \theta - \theta_0$ として、3章と同様に

$$S_{3DCS}[A, \delta\theta] = \frac{G(\theta_0)}{4\pi} \int d^4x \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \delta\theta \partial_\mu A_\nu \partial_\rho A_\sigma \quad (5.35)$$

$$G(\theta_0) = -\frac{\pi}{6} \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \text{Tr} [(G\partial_\mu G^{-1})(G\partial_\nu G^{-1})(G\partial_\rho G^{-1})(G\partial_\sigma G^{-1})(G\partial_\theta G^{-1})] \quad (5.36)$$

となります。ただし、グリーン関数 G は \mathcal{L} から定まるハミルトニアン $H(k, \theta = \theta_0)$ を使って定めています。

ハミルトニアン $H(k, \theta)$ の基底状態 $|\text{ground}, k, \theta\rangle$ から、 k_1, k_2, k_3, θ で張られる4次元空間の Berry 接続を4章と同様に

$$a = \langle \text{ground}, k, \theta_0 | d | \text{ground}, k, \theta \rangle \quad (5.37)$$

と定義し、曲率を $f := da + a \wedge a$ 、 $f := \frac{1}{2} f_{ij} dk^i \wedge dk^j (k^4 := \theta)$ とします。

$G(\theta)$ は式 (5.30) と同様の計算から、

$$G(\theta_0) = \frac{1}{8\pi^2} \int_{\theta=\theta_0} d^3k \varepsilon^{ijk} \text{Tr} [f_{\theta i} f_{jk}] \quad (5.38)$$

となります。

これは、Berry 接続から定義される Chern-Simons 形式

$$Q(a) := \frac{-1}{8\pi^2} \text{Tr} \left[a \wedge da + \frac{2}{3} a \wedge a \wedge a \right] \quad (5.39)$$

$$\frac{-1}{8\pi^2} \text{Tr} [f \wedge f] = dQ(a) \quad (5.40)$$

によって

$$G(\theta_0) = \int_{\theta=\theta_0} *d*Q \quad (5.41)$$

と書けます。 $*$ は Hodge スター作用素です。^{*7}

$$P(\theta) := \int_{\theta=\theta_0} Q \quad (5.42)$$

^{*7} $*1 = dk^1 dk^2 dk^3 d\theta$ になるように向きをいれました。

とすると、 $\partial_{\theta_0} P(\theta_0) = G(\theta_0)$ となります。

ただし、Chern-Simons form の積分はゲージ変換、つまり局所的な切断 U に対して $a \mapsto a' := U^{-1}(a + d)U$, $f \mapsto f' = U^{-1}fU$ とする変換に対して不変ではなく、このままでは P は物理的な意味を持ちません。

ゲージ変換に対する P の変化を計算すると、 $P'(\theta_0)$ を接続 a' で定義された Chern-Simons form $Q(a')$ の $\theta = \theta_0$ の積分として、

$$\begin{aligned} P(\theta_0) - P'(\theta_0) &= \int_{\theta=\theta_0} (Q(a) - Q(a')) \\ &= \int_{\theta=\theta_0} Q(U^{-1}dU) \in \mathbb{Z} \end{aligned} \quad (5.43)$$

となります。^{*8}よって、 P は mod 1 では意味を持ちます。

$\theta(x, t)$ の変化が小さく $H(x, \theta = \theta(x_0, t_0))$ のエネルギー準位が x_0, t_0 を変化させたときにフェルミエネルギーを跨がないとすると、 $P(x, t) := P[\theta(x, t)]$ はなめらかな関数となります。

この範囲で、 $\partial_{\theta} P(\theta) \partial_{\mu} \delta \theta = \partial_{\mu} P(x, t)$ より、有効作用の補正項 (式 (5.34)) は

$$\begin{aligned} S_{DCS} &= \frac{1}{4\pi} \int d^4x \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \partial_{\theta} P(\theta) \delta \theta \partial_{\mu} A_{\nu} \partial_{\rho} A_{\sigma} \\ &= \frac{-1}{4\pi} \int d^4x \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \partial_{\theta} P \partial_{\mu} \delta \theta A_{\nu} \partial_{\rho} A_{\sigma} \\ &= \frac{-1}{4\pi} \int d^4x \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \partial_{\mu} P(x, t) A_{\nu} \partial_{\rho} A_{\sigma} \\ &= \frac{1}{4\pi} \int d^4x \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} P(x, t) \partial_{\mu} A_{\nu} \partial_{\rho} A_{\sigma} \end{aligned} \quad (5.44)$$

と表されます。

ここで、ハミルトニアンが時間反転対称性をもつことを要請しましょう。時間反転演算子を $T^{\dagger}T = 1, T^*T = -1$ ^{*9},

$$T^{\dagger} h(-k, -\theta) T = h^T(-k, -\theta) \quad (5.45)$$

となります。^{*10}ここから、共役演算子を K として、

$$h^T(-k, -\theta) T^{\dagger} |k, \theta, \alpha\rangle = E_{\alpha}(k, \theta) T^{\dagger} |k, \theta, \alpha\rangle \quad (5.46)$$

$$h(-k, -\theta) T^T K |k, \theta, \alpha\rangle = E_{\alpha}(k, \theta) |k, \theta, \alpha\rangle \quad (5.47)$$

よって、 $T^T K |k, \theta, \alpha\rangle$ は $|-k, -\theta, \alpha\rangle$ と同じ準位にあります。これは Kramers 縮退とよばれるものです。

$T^T K |k, \theta, \alpha\rangle$ を $h(-k, -\theta)$ の固有ケットで展開して、

$$T^T K |k, \theta, \alpha\rangle = \sum_{\beta} U_{\alpha\beta}(k, \theta) |-k, -\theta, \beta\rangle \quad (5.48)$$

ここから、Berry 接続に関して、

$$\begin{aligned} a^{\alpha\beta}(k, \theta) &= \langle k, \theta, \alpha | d | k, \theta, \beta \rangle \\ &= U_{\alpha\gamma} a^{\gamma\delta}(-k, -\theta) U_{\delta\beta}^{\dagger} + U_{\alpha\gamma} dU_{\gamma\beta}^{\dagger} \end{aligned} \quad (5.49)$$

という関係を得ます。これは、 $a(k, \theta)$ と $a^{\dagger}(-k, -\theta)$ がゲージ変換で結ばれていることを意味します。

^{*8} [2]11,5 参照

^{*9} T は転置を表す

^{*10} T はバンド準位を表す添字にかんする転置を表します。

式 (5.44) の右辺のうち、 $\partial_\mu A_\nu \partial_\rho A_\sigma \propto \mathbf{E} \cdot \mathbf{B}$ は時間反転で-1 倍されますから、 $P(\theta)$ も-1 倍されなければいけません。よって、 $P(-\theta) = P(\theta)$ 。これと、式 (5.49),(5.43) から、

$$\begin{aligned} 2P(\theta) &= P(\theta) - P(-\theta) \\ &= P(\theta) - P'(\theta) \\ &= \int_{\theta=\theta_0} Q(U dU^\dagger) \in \mathbb{Z} \end{aligned} \quad (5.50)$$

よって、 P は 0 か $\frac{1}{2}$ をとります。これにより、時間反転対称性をもつ絶縁体の Z_2 が定義できました。フラットバンドモデルは $P = 0$ となるので、 $P = 0$ が自明な絶縁体、 $P = \frac{1}{2}$ がトポロジカルな絶縁体となります。 P が定数となるので有効作用 S_{3DCS} は全微分となり寄与しませんが、真空などの自明な絶縁体とトポロジカルな絶縁体の境界では 2+1 次元の ChernSimons 項

$$S_{\text{surface}} = \frac{1}{8\pi} \int_{\text{surface}} A \wedge dA \quad (5.51)$$

が現れます。

参考文献

- [1] X.L.Qi, T.L.Hughes, S.C.Zhang, Phys,Rev.B 78, 195424(2008)
- [2] “Geometry,Topology and Physics” 2nd ed.
- [3] 御領 潤, “ホール伝導度と位相不変量” 物性研究 88-3 (2007) 413
- [4] 御領 潤 “トポロジカル絶縁体の理論に関するノート” 物性研究 96-2 (2011)187
- [5] Peskin,Schroeder “An Introduction to Quantum Field Theory”

第 6 章

トポロジカル絶縁体と dyon

中川裕也

6.1 はじめに**

本稿ではトポロジカル絶縁体の表面付近に電荷を配置したときに現れる dyon(ダイオン) という束縛状態について紹介します。前半の議論の流れは [1] に、後半は [2] に依っています。まず始めにトポロジカルな項を含む電磁場の有効作用から、修正された Maxwell 方程式を導きます。そしてその Maxwell 方程式を使ってトポロジカル絶縁体の表面付近に電荷を置いたときの電場・磁場の境界値問題を解き、dyon の存在を示します。単位系は CGS gauss 単位系を用いています。

(以下、トポロジカルでないという意味で conventional という語を用います)

6.2 電磁場の有効作用から修正された Maxwell 方程式を導く***

電磁場の有効作用を変分して、3次元トポロジカル絶縁体でも成り立つ修正された Maxwell 方程式を導いていきます。4元電磁ポテンシャルを A^μ 、4元電流ベクトルを j^μ とし、electromagnetic tensor $F_{\mu\nu}$ を $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ とします。また、分極ベクトル P^i と磁化ベクトル M_i を使って magnetization-polarization tensor $\mathcal{P}^{\mu\nu}$ を $\mathcal{P}^{\mu\nu} = \mathcal{P}^{\nu\mu}$ 、 $\mathcal{P}^{0i} = P^i$ 、 $\mathcal{P}^{ij} = \varepsilon^{ijk} M_k$ ($i, j, k = 1, 2, 3$) と定義します。こうすると電磁場の conventional な有効作用は

$$S_{\text{Maxwell}} = \int d^3x dt \left(\frac{1}{16\pi} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \frac{1}{2} F_{\mu\nu} \mathcal{P}^{\mu\nu} - \frac{1}{c} j^\mu A_\mu \right) \quad (6.1)$$

と書けます。誘電率 ε 、透磁率 μ の絶縁体の場合は

$$S_{\text{Maxwell}} = \int d^3x dt \left(\varepsilon \mathbf{E}^2 - \frac{1}{\mu} \mathbf{B}^2 - \frac{1}{c} j^\mu A_\mu \right) \quad (6.2)$$

と見慣れた形になります。しかし、電磁場の有効作用には S_{Maxwell} だけでなく

$$S_\theta = \frac{\theta}{2\pi} \frac{\alpha}{16\pi} \int d^3x dt \varepsilon^{\mu\nu\sigma\tau} F_{\mu\nu} F_{\sigma\tau} = \frac{\theta}{2\pi} \frac{\alpha}{2\pi} \int d^3x dt \mathbf{E} \cdot \mathbf{B} \quad (6.3)$$

というトポロジカルな(時空の計量に依らない)項が存在します [1]。ここで $\alpha = e^2/\hbar c$ は微細構造定数です。このトポロジカル項は一般には時間反転対称性を破りますが、 $\theta = 0$ か $\theta = \pi$ のときのみ時間反転対称性を保ちます。そして、 $\theta = 0$ がトポロジカルに trivial な絶縁体*1に対応し、 $\theta = \pi$ が3次元トポロジカル絶縁体に対応しています。この θ の

*1 例えば真空。

二値性が3次元トポロジカル絶縁体の \mathbb{Z}_2 数による分類に対応しています。以下では $P_3 = \theta(\mathbf{x})/2\pi$ とおきます*²。すると通常の絶縁体で $P_3 = 0$ 、トポロジカル絶縁体で $P_3 = 1/2$ となります*³。

さて、作用 $S_{\text{Maxwell}} + S_\theta$ を A^μ で変分して結果を0に等しいとおくと次の式が得られます。

$$\frac{1}{4\pi} \partial_\nu F^{\mu\nu} + \partial_\nu \mathcal{P}^{\mu\nu} + \frac{\alpha}{4\pi} \varepsilon^{\mu\nu\sigma\tau} \partial_\nu (P_3 F_{\sigma\tau}) = \frac{1}{c} j^\mu \quad (6.4)$$

この式を $\mu = 0, 1, 2, 3$ について書き下すと

$$\nabla \cdot \mathbf{D}_c = 4\pi\rho + 2\alpha(\nabla P_3 \cdot \mathbf{B}) \quad (6.5)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}_c - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}_c}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} - 2\alpha \left((\nabla P_3) \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial P_3}{\partial t} \mathbf{B} \right) \quad (6.6)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \quad (6.7)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (6.8)$$

となります。ただしここで分極 \mathbf{P} と磁化 \mathbf{M} を使って conventional な電束密度 \mathbf{D}_c と磁場 \mathbf{H}_c を $\mathbf{D}_c = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}$, $\mathbf{H}_c = \mathbf{B} - 4\pi\mathbf{M}$ のように定義しました。式(6.5)~式(6.8)より、 \mathbf{E} と \mathbf{B} はそのままにして、 \mathbf{D} と \mathbf{H} にトポロジカル項による電磁相互作用 (topological magnetoelectric effect; TME effect) を含めて

$$\mathbf{D}_{\text{top}} = \mathbf{D}_c - 2\alpha P_3 \mathbf{B}, \quad \mathbf{H}_{\text{top}} = \mathbf{H}_c + 2\alpha P_3 \mathbf{B} \quad (6.9)$$

と定義してやれば通常の Maxwell 方程式

$$\nabla \cdot \mathbf{D}_{\text{top}} = 4\pi\rho, \quad \nabla \times \mathbf{H}_{\text{top}} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}_{\text{top}}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, \quad \nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (6.10)$$

がそのまま成り立つことが分かります。これが3次元トポロジカル絶縁体まで含めた修正された Maxwell 方程式です。

6.3 dyon の出現***

図6.3のような状況を考えてみます。領域1は誘電率 ε_1 、透磁率 μ_1 の trivial な絶縁体 ($P_3 = 0$)、領域2は誘電率 ε_2 、透磁率 μ_2 のトポロジカル絶縁体 ($P_3 = 1/2$) とします。そして、トポロジカル絶縁体の表面から高さ d のところに電荷 q をおきます。このとき生じる電場と磁束密度を鏡像法を使って求めます。すなわち、領域1での電場と磁束密度は座標 $(0, 0, d)$ にある電荷 q ・座標 $(0, 0, -d)$ にある電荷 q_2 ・座標 $(0, 0, -d)$ にある磁荷 g_2 で表されるとして、領域2での電場と磁束密度は座標 $(0, 0, d)$ にある電荷 q ・座標 $(0, 0, d)$ にある電荷 q_1 ・座標 $(0, 0, d)$ にある磁荷 g_1 で表されるとします*⁴。こうすると領域1,2において電場 \mathbf{E} 、磁束密度 \mathbf{B} は修正された Maxwell 方程式(10)を充たします。そこであとは境界条件を考えてやれば OK です。定常場であり、境界面に電荷も電流もないので境界条件は「境界面で \mathbf{D}_{top} と \mathbf{B} の法線成分が連続、 \mathbf{E} と \mathbf{H}_{top} の接線成分が連続」です*⁵。領域1では $P_3 = 0$ 、領域2では $P_3 = 1/2$ であることに注意して、4つの境界条件から q_1, q_2, g_1, g_2 を求めると

$$q_1 = q_2 = \frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(1/\mu_1 + 1/\mu_2) - \alpha^2}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(1/\mu_1 + 1/\mu_2) + \alpha^2} \cdot q \quad (6.11)$$

*² 分極の P とは何の関係もありません。

*³ トポロジカル絶縁体の表面は伝導性を持つので、強磁性体の薄い層で覆って時間反転対称性を破り、表面でのバンドギャップを開けてやります。すると表面では Chern-Simons 項が支配的になり、量子 Hall 伝導度が現れます [1]。

*⁴ $\mathbf{E}\mathbf{B}$ 対応で考えていて、電荷 q から距離 r の位置での電場が $E = q/r^2$ 、磁荷 g から距離 r の位置での磁束密度が $B = g/r^2$ となるように定義しています。

*⁵ 定常場なので修正された Maxwell 方程式において時間微分の項は消えます。後述しますが、ここで考える鏡像磁荷はトポロジカル絶縁体表面に現れる電流がつくる磁場を代表させたものなので、磁荷を使って考える限りでは $\mathbf{j} = 0$ です。

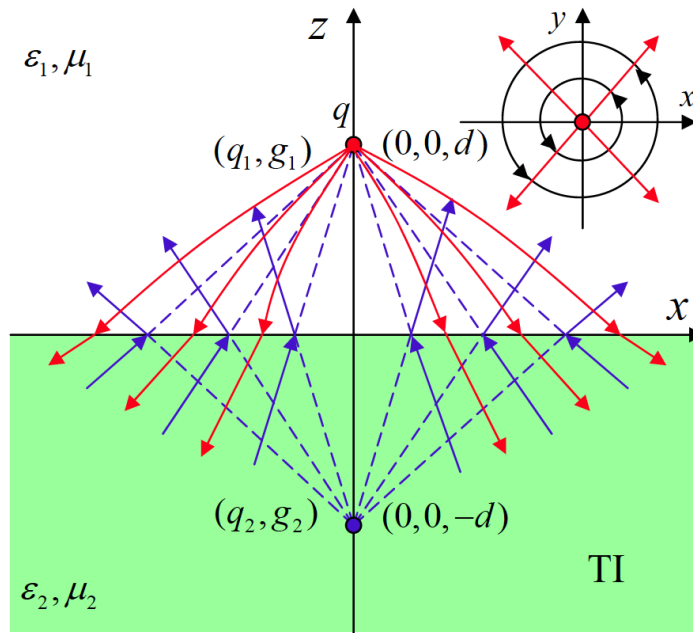


図 6.1 [2] より引用．赤線（青線）が電場（磁束密度）を表しています．右上の図は真上から見た図で，赤線は表面での電場，黒線は表面電流を表しています．

$$g_1 = -g_2 = \frac{-2\alpha}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(1/\mu_1 + 1/\mu_2) + \alpha^2} \cdot q \quad (6.12)$$

となります．

この結果を考察してみます．この段落のみ，簡単のために $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \mu_1 = \mu_2 = 1$ とします．修正された Maxwell 方程式 $\nabla \times \mathbf{H}_{top} = \nabla \times (\mathbf{B} + 2\alpha P_3 \mathbf{E}) = 0$ において， $P_3 = 1/2$ ($z > 0$)， $P_3 = 0$ ($z < 0$) だから

$$\nabla \times \mathbf{B} = \alpha \delta(z) \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{E} \quad (6.13)$$

となります．これは則ち $z = 0$ の面（境界面）に面電流密度 $\mathbf{j} = c\alpha/4\pi \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{E} = e^2/2h \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{E} = \sigma_{xy} \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{E}$ が存在していることを表しています*6． $\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{E}$ は電場に垂直で境界面内の方向ですから，この電流は電荷 q がつくる電場によって生じた Hall 電流です．しかも $P_3 = 1/2$ をあらわに書くと Hall 伝導度 σ_{xy}

は

$$\sigma_{xy} = P_3 \cdot \frac{e^2}{h} \quad (6.14)$$

となり， P_3 は量子化されていますから [1]，この電流は量子 Hall 電流を表しています*7．今回の問題設定で \mathbf{j} を具体的に計算すると

$$\mathbf{j} = 2\alpha P_3 \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{E} = P_3 \cdot \frac{e^2}{h} \cdot \frac{q}{1 + \alpha^2 P_3^2} \cdot \frac{r}{(r^2 + d^2)^{3/2}} \hat{\mathbf{e}}_\varphi \quad (6.15)$$

となります．[3] ではこの量子 Hall 電流の形を仮定して同じ問題を解いています．

物理的には，この電流密度がつくる磁束密度を点磁荷で代表させたものが鏡像磁荷 g_1, g_2 です．つまり，トポロジカル絶縁体と電荷との距離 d を小さくしていけば，トポロジカル絶縁体の表面に磁荷単極子 (monopole) が存在するようみえます*8．電子を動かすとそれにともなって monopole も移動しますから，トポロジカル絶縁体の表面に電荷をお

*6 $\hat{\mathbf{n}}$ は境界面の法線ベクトル．

*7 脚注*3 参照．

*8 存在するようみえる磁荷の符号は，表面を挟んで反対になります．

くとその反対側の位置に電荷と磁荷を持った束縛状態，すなわち dyon が出現するのです．この monopole がつくる磁場の観測が [2] で提案されています．

また、表面付近に複数個の電荷を置くと dyon が複数個現れる事になりますが，2つの dyon の位置を入れ替えると，お互いがつくる磁場のせいでそれぞれが Aharonov-Bohm 位相を獲得して位相がずれます．このとき，2つの dyon の系全体での位相のずれは2次元内の dyon の軌跡によりません [2]．そこでこの位相を2つの dyon を交換したときの統計的位相と解釈する事ができます．2つの dyon がともに電荷 q と磁荷 g をもっている場合，統計的位相 $e^{i\theta}$ は

$$\theta = \frac{gq}{2\hbar c} \quad (6.16)$$

で与えられます．2次元系以外では $e^{i\theta} = \pm 1$ ，つまり $\theta = 0, \pi \pmod{2\pi}$ しか許されませんが，2次元系では θ は任意の値をとり得ます．今回の問題設定では電子の動きを2次元に制限すればトポロジカル絶縁体の表面に現れる dyon は2次元上に制限されているとみなせるので，この dyon は anyon(分数統計に従う粒子) になりえます．電子がつくる dyon の場合に具体的に統計的位相を計算すると，式 (6.11) と式 (6.12) より

$$\theta = \frac{gq}{2\hbar c} = \frac{\alpha^2}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(1/\mu_1 + 1/\mu_2) + \alpha^2} \quad (6.17)$$

となります．この効果の観測も [2] で提案されています．

参考文献

- [1] X. L. Qi, T. L. Hughes, S. C. Zhang, Phys.Rev.B **78**, 195424(2008)
- [2] X. L. Qi, R. Li, J. Zang and S. C. Zhang, Science **323** 1184(2009)
- [3] K. T. MacDonald, *Image Method for an Electric Charge above a Topological Insulator with a Quantum Hall Surface* (2010)
http://www.physics.princeton.edu/~mcdonald/examples/image_monopole.pdf