

# 整数量子 Hall 効果\*

文責：Physics Lab.2021 物性班 増木貫太

2021 年 5 月 15 日

## 目次

<b>0</b>	<b>ノーテーションのまとめ</b>	<b>3</b>
0.1	よく使う定数 . . . . .	3
0.2	電気伝導率テンソル . . . . .	3
0.3	電磁場のゲージ変換 . . . . .	4
0.4	Berry 接続, Berry 曲率 . . . . .	4
0.5	Bloch 状態の規格化条件 . . . . .	5
<b>1</b>	<b>磁場中の自由電子系における整数量子 Hall 効果</b>	<b>5</b>
1.1	実験事実 . . . . .	5
1.2	系の Hamiltonian . . . . .	6
1.3	磁場中の自由電子の伝導度 . . . . .	7
1.4	磁場中のディスオーダーがある系の伝導度 . . . . .	9
<b>2</b>	<b>TKNN 公式</b>	<b>11</b>
2.1	摂動論を用いた TKNN 公式の導出 . . . . .	11
2.2	結晶を磁場中に置いた場合の取り扱い . . . . .	15
<b>3</b>	<b>バルクエッジ対応</b>	<b>18</b>
3.1	TKNN 公式の再導出 . . . . .	19
3.2	境界がある場合の議論 . . . . .	22
3.3	実験系の伝導度とエッジモードの関係 . . . . .	24
3.4	簡単な 2 準位系におけるバルクエッジ対応 . . . . .	27
<b>4</b>	<b>磁場中の自由電子系：再考</b>	<b>32</b>
4.1	tight-binding model . . . . .	32
4.2	Landau ゲージにおける tight-binding model . . . . .	34
4.3	開端方向に境界をつけた場合の tight-binding model . . . . .	35
4.4	Chern 数とエッジのペア数の関係 (結果のみ) . . . . .	36
4.5	数値計算 . . . . .	36

---

\* この記事は 2021 年度における東京大学理学部物理学科の学生有志企画 [Physics Lab. 2021](#) の活動の一環として作成されたものです。

4.6	量子 Hall 系のエッジ状態	41
<b>付録 A</b>	<b>簡単な 2 準位系におけるバルクエッジ対応</b>	<b>42</b>
A.1	モデル	42
A.2	Chern 数	42
A.3	開端条件における Hamiltonian	43
A.4	開端条件の Hamiltonian の対称性	43
A.5	バルクモード, エッジモードの解析	45
A.6	簡単なまとめ	48
<b>付録 B</b>	<b>Berry 位相</b>	<b>48</b>
B.1	Berry 位相, Berry 接続, Berry 曲率の説明	49
B.2	二準位系での Berry 位相の計算	50
B.3	チャーン数	53
<b>C</b>	<b>Bloch の定理</b>	<b>53</b>

## はじめに

この PDF の主な目的は, バルクエッジ対応の説明である. 固体物理の初歩的な事柄 (Bloch の定理, Berry 位相, 第二量子化, tight-binding model など) を知っている方に向けた内容になっている. PDF には図を多めに入れたので, パラパラと眺めるだけでも楽しいと思う. 是非後ろの方まで眺めていただくと嬉しい.

ここで, 構成について簡単に説明しておく.

まず初めに磁場中の 2 次元自由電子系について説明した. バルクエッジ対応を理解する上で重要となる, スペクトルフローという概念を導入することが一番の目的である. スペクトルフローを使って, 系にディスオーダーがあっても Landau 準位一つあたりの伝導度が量子化することを説明した. 自由電子系に関する議論の最後に, 伝導度が磁場を少し変えても量子化した値を取り続けるためには, 系にディスオーダーがあることが必要であることを説明した.

次に, バルクエッジ対応について説明した. バルク系で計算される伝導度と, エッジをつけた系で計算される伝導度が一致するべきであるという点を原理にして議論を進めた. また, 実験で伝導度を測定をする際の系の配置についても説明し, バルクエッジ対応のおかげで, 実験で測定される伝導度とバルクで計算される伝導度が一致することを説明した.

バルクエッジ対応は物理的に考えれば非常に自然な対応であるとして数学的な証明は与えなかったが, 代わりに簡単なモデルで計算をした結果を示すことにした. 一部冗長になってしまった部分に関しては, 付録に回し, 重要な結果だけを本文に示すことにした.

最後に, 境界のある系の議論に慣れたところで, 再び磁場中の 2 次元自由電子系の問題を考えた. ここでは, ある適当な極限のもとで磁場中の 2 次元自由電子系に一致すると考えられる tight-binding model を考え, Landau 準位の伝導度やエッジモードが, バルクエッジ対応で出てくるようなものと対応しているだろうという議論をした.

この解説 PDF を書くに当たって, 多くの文献を参考にした. ただし, 文献を (端折って) 丸写しするのではなく, 理論を自分なりに再構成し, 私なりの理解を詳しく伝えることを心がけた. 勿論文責は私増木にある. この記事が, バルクエッジ対応の理解の一助となれば嬉しい限りである.

当初は、学部2年生レベルの量子力学を知っていれば読めるようなPDFにしようとしたが、あまりに説明すべき事柄が多すぎて断念した。固体物理のごく入門的な教科書に書いてあるような内容に関しては（定義は明記しても）本文中で詳しく説明することはしなかった。なお、前提知識を全てカバーしているわけではないが、いくつかの基本的な事柄の説明を付録として載せたので参考にとると良いかもしれない。Blochの定理、Berry位相の説明はそれぞれ、3年生の渡邊君と井ノ上君が書いてくれた。

基本的にこの記事の執筆は増木が担当した。ただし、2.1節は渡邊君が担当してくれた。また、僕と二人でゼミをして議論に付き合ってくれた班長の安藤君に感謝したい。

文責：増木貫太

## 0 ノーテーションのまとめ

CGS 単位系を使った\*1.

### 0.1 よく使う定数

$$e > 0 \quad (\text{電気素量}) \quad (0.1.1)$$

$$l_B = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}} \quad (\text{磁気長}) \quad (0.1.2)$$

$$\omega_C = \frac{eB}{mc} \quad (\text{サイクロトロン振動数}) \quad (0.1.3)$$

$$\phi_0 = \frac{hc}{e} \quad (\text{磁束量子}) \quad (0.1.4)$$

### 0.2 電気伝導率テンソル

電気伝導率テンソル  $\sigma$  は、

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E} \quad (0.2.1)$$

となるように定義する。ただしここで、 $\mathbf{j}$  は電流密度、 $\mathbf{E}$  は電場を表す。また、電気抵抗率テンソルは

$$\rho = \sigma^{-1} \quad (0.2.2)$$

で定義され、

$$\mathbf{E} = \rho \mathbf{j} \quad (0.2.3)$$

が成り立つ。

---

\*1 単位系に強い思想があるわけではなく、皆が使ってるからという理由である。何も考えずに windows パソコンを買うときの心理に近い。

### 0.3 電磁場のゲージ変換

ベクトルポテンシャル, スカラーポテンシャルは次を満たすように定義される.

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad (0.3.1)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (0.3.2)$$

電荷  $-e$  の荷電粒子の電磁場中の Hamiltonian は,

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - e\phi \quad (0.3.3)$$

で与えられる.

電磁ポテンシャルのゲージ変換は, スカラー関数  $\Lambda(\mathbf{r}, t)$  によって, 次で与えられる.

$$\phi \rightarrow \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t}, \quad (0.3.4)$$

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla \Lambda. \quad (0.3.5)$$

荷電粒子のハミルトニアンは, このゲージ変換に応じて次のように変換される.

$$\hat{U} := \exp\left(-\frac{ie}{\hbar c} \Lambda(\mathbf{r}, t)\right) \quad (0.3.6)$$

$$\hat{H} \rightarrow \hat{H}' = \hat{U} \hat{H} \hat{U}^{-1} + \frac{e}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t}. \quad (0.3.7)$$

このとき, 状態ケットが

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \hat{U} |\psi\rangle \quad (0.3.8)$$

のように変化すると, Schrödinger 方程式は不変になる. つまり,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle \iff i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi'\rangle = \hat{H}' |\psi'\rangle \quad (0.3.9)$$

が成り立つ.

### 0.4 Berry 接続, Berry 曲率

2次元 Brillouin Zone 上に  $n$  番目のバンドの Bloch 状態  $|\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |u_{n,\mathbf{k}}\rangle$  を取っているとき, Berry 接続は,

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{k}) := i \langle u_{n,\mathbf{k}} | d | u_{n,\mathbf{k}} \rangle \quad (0.4.1)$$

$$\equiv i \left( \langle u_{n,\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial k_1} | u_{n,\mathbf{k}} \rangle dk_1 + \langle u_{n,\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial k_2} | u_{n,\mathbf{k}} \rangle dk_2 \right) \quad (0.4.2)$$

もしくは

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{k}) := i \langle u_{n,\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n,\mathbf{k}} \rangle \quad (0.4.3)$$

で定義される. Berry 曲率は,

$$\mathbf{B}_n(\mathbf{k}) := d\mathbf{A}_n(\mathbf{k}) \quad (0.4.4)$$

$$\equiv i \left( \langle \partial_{k_1} u_{n,\mathbf{k}} | \partial_{k_2} u_{n,\mathbf{k}} \rangle - \langle \partial_{k_2} u_{n,\mathbf{k}} | \partial_{k_1} u_{n,\mathbf{k}} \rangle \right) dk_1 \wedge dk_2 \quad (0.4.5)$$

$$(0.4.6)$$

もしくは

$$\mathbf{B}_n(\mathbf{k}) := \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{k}) \quad (0.4.7)$$

で定義される。

## 0.5 Bloch 状態の規格化条件

特に断りがない限り、規格化条件は、Bloch 状態同士の内積が

$$\langle \psi_{n,\mathbf{k}} | \psi_{m,\mathbf{k}} \rangle \equiv \int_{\text{unit cell}} \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})^* \psi_{m,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (0.5.1)$$

$$= \delta_{n,m} \quad (0.5.2)$$

$$\langle u_{n,\mathbf{k}} | u_{m,\mathbf{k}} \rangle \equiv \int_{\text{unit cell}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})^* u_{m,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (0.5.3)$$

$$= \delta_{n,m} \quad (0.5.4)$$

となるように定めている。より詳しい計算例などが知りたい方は[付録 B](#)を参考にするとういかもしれない。

# 1 磁場中の自由電子系における整数量子 Hall 効果

まずはじめに簡単に実験事実を説明する。系のモデルとして自由電子系を考え、磁場中に置かれた二次元の自由電子系の伝導度について議論する。この節では周期境界条件をつけたバルク系を考える。並進対称性のある方向に周期境界条件をつけたときに役立つスペクトルフローという概念について説明する。この概念は後にバルクエッジ対応を理解する助けとなる。また、伝導度にプラトーが出るために系にディスオーダーがあることが必要となることを説明する。

## 1.1 実験事実

整数量子ホール効果は、低温（理想的には絶対零度）の 2 次元電子系に対して垂直に磁場をかけると、2 次元電子系の伝導度が  $e^2/h$  を単位に量子化するという現象である。ドイツの物理学者 Klaus von Klitzing によって、1980 年に初めて実験的に検証された [1]。Klitzing は、Si と MOSFET という二つの半導体の界面を利用して二次元電子系を作り出し、系を絶対温度 1.5 K、磁束密度 15 T という低温強磁場領域に置くことで、量子ホール系を作り出した。Klitzing は整数量子ホール効果の発見によってノーベル賞を受賞している。

整数量子ホール系の伝導度  $\sigma_{xy}$  は、磁束密度  $B$  を変化させると図 1 のような変化を見せる。ここで重要なのは以下の二点である。

(i)  $B = \rho\phi_0/n$ , ( $\rho$  は 2 次元電子系の電子密度,  $\phi_0$  は磁束量子,  $n$  はある整数) になるときに,  $\sigma_{yx} = ne^2/h$  となる。

(ii)  $B$  を  $\rho\phi_0/n$  のまわりにある程度変化させても,  $\sigma_{xy}$  の値が変わらない。

なお、磁場を変化させても伝導度が変わらない領域（グラフが平らになっている領域）をプラトーという。(i) に関しては、自由電子的なモデルを考えることによって説明される。(ii) については、ディスオーダー（不純物）の効果を考えることで説明できる。以下で詳しく説明を行う。

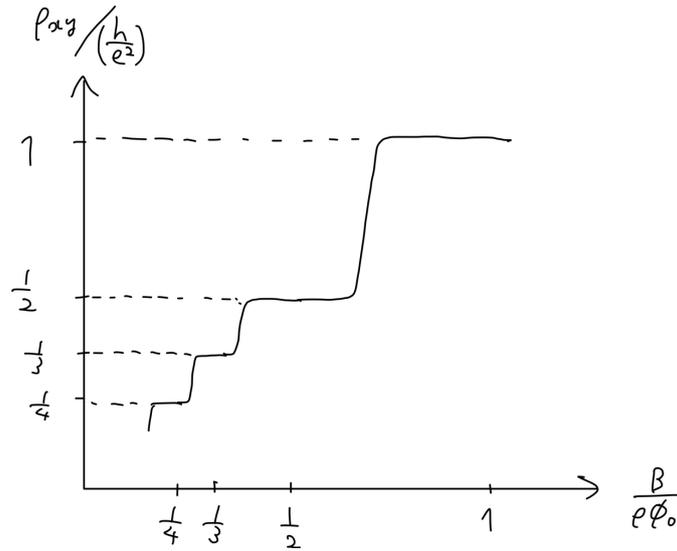


図1 磁場とホール抵抗の関係. 実験により直接測定されるのは抵抗であることを意識して, 伝導度  $\sigma_{yx}$  ではなくホール抵抗  $\rho_{xy}$  を縦軸にとったグラフを描いた.

## 1.2 系の Hamiltonian

$xy$  面内にある二次元自由電子系に対して, 垂直方向 ( $+z$  方向) に磁場をかける. ベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  を,  $\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) = B\mathbf{e}_z$  となるようにとるとき, 電荷  $-e$  の電子の Hamiltonian は,

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 \quad (1.2.1)$$

で与えられる. まずは具体的にゲージを指定して時間に依存しない Schrödinger 方程式を解く.

### 1.2.1 Landau ゲージにおける解

Landau ゲージ  $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = (-By, 0, 0)$  をとる. このとき,  $[\hat{H}, \hat{p}_x] = 0$  なので,  $p_x = \hbar k_x$  が良い量子数になる. このとき解くべき Schrödinger 方程式は,

$$\frac{1}{2m} \left( \left( \hbar k_x - \frac{eBy}{c} \right)^2 + \hat{p}_y^2 \right) \psi(x, y) = E\psi(x, y) \quad (1.2.2)$$

である. これは  $y = \frac{\hbar k_x}{eB}$  を中心とする, 角振動数  $\omega_c \equiv \frac{eB}{mc}$  の調和振動子の Hamiltonian に対する Schrödinger 方程式なので, よく知られている形である. 固有状態についてまとめておくと,

- $k_x, n$  で状態  $\psi_{k_x, n}$  が指定される. ( $n = 0, 1, 2, \dots$ )
- エネルギー固有値は  $E_{n, k_x} = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c$ .
- エネルギー固有関数は

$$\psi_{k_x, n}(x, y) = \frac{1}{(\pi 2^{2n} (n!)^2)^{1/4}} e^{ik_x x} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{y}{l_B} - l_B k_x\right)^2\right) H_n\left(\frac{y}{l_B} - l_B k_x\right) \quad (1.2.3)$$

となる. ただし,  $H_n$  は  $n$  次のエルミート多項式である.

となる. なお, 固有関数は,  $x$  方向に広がっていて  $y$  方向には局在している.

同じ  $n$  でラベルされる状態は全て縮退している. この縮退した準位を  $n$  番目の Landau 準位という.  $x$  方向にさ  $L_x$  の周期境界条件をつけると,  $e^{ik_x L_x} = 1$  が要求されるので  $k_x \in \frac{2\pi}{L_x} \mathbb{Z}$  が要求される. 上でとつ

た波動関数では、 $k_x$  が  $\Delta k_x$  だけずれたときに、固有関数は  $y$  方向に  $\frac{c\hbar\Delta k_x}{eB}$  だけ平行移動するから、単位面積当たりの縮退度は

$$\frac{1}{L_x} \frac{eB}{c\hbar\Delta k_x} = \frac{1}{L_x} \frac{eBL_x}{c\hbar 2\pi} = \frac{B}{\phi_0} \quad (1.2.4)$$

となる。

### 1.3 磁場中の自由電子の伝導度

電場をかけたときの応答を知りたいので、電場をかけたときの Hamiltonian を考える。電場は十分に小さいとする。

まずは空間に周期境界条件を課さずに、(安心してゲージ変換ができるような) 無限に広がった系を考えよう。

電磁ポテンシャルが  $(\phi_0, \mathbf{A}_0)$  のときの Hamiltonian を  $\hat{H}_0$  とする。この系の固有値問題は解けているとする。この系に一樣な電場  $\mathbf{E}$  をかけて、電磁ポテンシャルが  $(\phi = \phi_0, \mathbf{A} = \mathbf{A}_0 - c\mathbf{E}t)$  のときの Hamiltonian を  $\hat{H}(t)$  とする。このゲージは  $(\phi_0 - \mathbf{E} \cdot \mathbf{r}, \mathbf{A}_0)$  を  $\Lambda(\mathbf{r}, t) = -ct\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$  でゲージ変換したものになっている。従って量子力学におけるゲージ対称性から、 $\hat{U} = e^{-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda}$  として、

$$\hat{H}(t) = \hat{U}(\hat{H}_0 + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r})\hat{U}^{-1} + \frac{e}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \quad (1.3.1)$$

$$= \hat{U}\hat{H}_0\hat{U}^{-1} \quad (1.3.2)$$

となる。従って電場をかけたときの Hamiltonian  $\hat{H}(t)$  とかける前の Hamiltonian  $\hat{H}_0$  がユニタリ変換で結びつくから、 $\hat{H}(t)$  の固有値問題は完全に解けたことになる。

ただし、ここまでの議論は系に周期性を課していなかったために  $\hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda(t)\right) = \exp\left(\frac{iet}{\hbar}\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}\right)$  が任意の時刻で空間上の一価関数になり、 $H_0$  の固有状態と  $\hat{H}$  の固有状態が  $\hat{U}(t)$  でそのまま結びついたことが重要である。系に周期境界条件があるような場合には、 $\hat{U}(t)$  が任意の時刻で一価になるとは限らず慎重な議論が必要になる。

具体例があったほうが話が進めやすいので、自由電子系を考える。  $x$  方向に長さ  $L$  の周期境界条件をつけて、  $y$  方向には無限に広がったような形の系を考える。  $x$  方向に電場をかける。 Landau ゲージ  $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$  をとる。

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} \left( (\hat{p}_x - \frac{e}{c}By)^2 + \hat{p}_y^2 \right) \quad (1.3.3)$$

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2m} \left( (\hat{p}_x - \frac{e}{c}By - eEt)^2 + \hat{p}_y^2 \right) \quad (1.3.4)$$

となる。任意の時刻で、 $[\hat{H}(t), \hat{p}_x] = 0$  なので、Hamiltonian は波数  $k_x$  の空間ごとにブロック対角化されていて、これらの状態が時間発展により混ざることはない。つまり最初に波数  $k_x$  だった状態 (ただし  $x$  方向の周期性により  $k_x \in \frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}$ ) は時間が経っても波数  $k_x$  のままである。

Hamiltonian が

$$\frac{1}{2m} \left( (\hbar k - \frac{e}{c}By)^2 + p_y^2 \right) \quad (1.3.5)$$

であるときの  $y$  方向の固有関数が  $H_n(y - \frac{c\hbar k}{eB})$  であったことと合わせると、時刻  $t$  で波数が  $k_x$  の状態は、

$$\psi_{k_x}(\mathbf{r}, t) = e^{ik_x x} \sum_n c_n H_n \left( y - \left( \frac{c\hbar k_x}{eB} - \frac{cE}{B}t \right) \right) \quad (1.3.6)$$

という形になっていなければならない。なお、波数  $k_x$  の部分空間に限れば状態の縮退は起きていないから、断熱定理により、 $n$  番目の Landau 準位にいた状態が時間発展する場合は  $c_m = 0$  ( $m \neq n$ ) が分かる。これで時刻  $t$  の波動関数が（全体の位相を除いて）決定できた。

以上の議論をゲージ変換を中心にして（少し定性的に）見てみる。 $x$  方向に周期  $L_x$  の周期境界条件を課さなかった場合、 $k_x$  がとる値は  $\frac{2\pi}{L_x}\mathbb{Z}$  から  $\mathbb{R}$  になる。さらにゲージ変換に伴う  $\hat{U} = \exp\left(-\frac{ie}{\hbar c}\Lambda\right) = \exp\left(\frac{iet}{\hbar}Ex\right)$  が任意の時刻で well-defined になる。従って無限に広がる系を考えた場合、この  $\hat{U}$  による変換を考えることにより、時刻  $t$  における全ての固有関数は

$$\exp\left(i\left(k_x + \frac{eEt}{\hbar}\right)x\right) H_n\left(y - \frac{c\hbar k_x}{eB}\right) \quad (1.3.7)$$

の重ね合わせになることが分かる。 $x$  方向に長さ  $L_x$  の周期境界条件状態をつけた系では、この中で周期境界条件を満たすものが許される状態となる。従って、最初に波数  $k_x$  であった状態が周期境界条件を満たし続けるには、1.3.7 の波数  $k_x$  が、 $k_x(t) = k_x - \frac{eEt}{\hbar}$  のように変化していく必要がある。したがって最初の議論と同じ結論が得られた。

$t = \frac{\hbar}{eEL_x} =: t_0$  では  $\hat{U}(t_0)$  が空間の一価関数になる。従って、 $t = 0$  で波数が  $k_x$  であった状態を  $\hat{U}(t_0)$  でゲージ変換した状態は時刻  $t_0$  の Hamiltonian  $\hat{H}(t_0)$  の固有状態になっている。しかし、時間発展によって移った先はこの状態ではないことを強調しておく。この状態の  $y$  方向の局在中心は  $\frac{c\hbar k_x}{eB}$  であり、実際に時間発展で移った状態の中心は  $\frac{c\hbar k_x}{eB} - \frac{c\hbar}{eB} \frac{2\pi}{L_x} = \frac{c\hbar(k_x - \Delta k_x)}{eB}$  だから、一つ分となりの状態（を  $U$  でゲージ変換した状態）に時間発展で移っている。

以上の議論により、 $k_y$  がどのように変わっていくか分かったから、 $y$  方向の局在中心がどのように動いていくかが分かる。少し計算をすると、 $y$  方向の局在中心は速度  $v_y = -\frac{cE}{B}$  で動くことが確かめられる。従って、一つの Landau 準位あたりの電流密度は

$$j_y = \frac{B}{\phi_0} \times -e(-cE/B) \quad (1.3.8)$$

$$= \frac{e^2}{h} E \quad (1.3.9)$$

となる。従って1つの Landau 準位の伝導度は、

$$\sigma = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{e^2}{h} \\ \frac{e^2}{h} & 0 \end{pmatrix} \quad (1.3.10)$$

となる。

二つ目の議論（ゲージ変換を中心にした議論）を抽象化してポイントを整理しておく。これは系にディスオーダーがある場合にも、Landau 準位一つ当たりの伝導度が量子化されることを理解するのに役立つ。ポイントは以下の二点である。

(i) 周期境界条件をつけている系では  $\hat{U}(t)$  が任意の時刻で一価にならないので、 $t = 0$  の解を  $\hat{U}(t)$  でゲージ変換したものは、 $t = 0$  の解が  $x = 0$  から  $x = L$  まで広がっている場合には許される状態にはなっていない。（一方で局在した状態に対しては、波動関数が有限の値を持っている領域に限れば  $\hat{U}(t)$  が一価になるので、 $\hat{U}(t)$  でゲージ変換した状態は許される状態である。）

(ii) 一旦周期境界条件を外して全ての解を考える。全ての解は時刻  $t = 0$  の解を  $\hat{U}(t)$  でゲージ変換することで得られる。そのうち周期境界条件を満たすものが許される状態である選ぶ。 $t = 0$  で許されていた状態をゲージ変換して得られる解は、一般の時刻  $t = t$  では許されない状態になる。これが原因で、 $x$  方向に広がった状態については、時間発展させた状態とゲージ変換させた状態は異なることになる。

(iii)  $t$  が  $t_0 \equiv \frac{2\pi\hbar}{eEL}$  の整数倍のときには  $\hat{U}(t_0)$  はトーラス上で well-defined になる。従って  $t = t_0$  にお

る全ての状態は  $t = 0$  のときの解を  $\hat{U}(t_0)$  でゲージ変換して得られるものになっている。そして、(ii) の結果、 $t = 0$  で  $k_x$  だった状態を時間発展させたものは、 $k_x$  の状態を  $\hat{U}(t_0)$  でゲージ変換させた状態は一つ隣にずれたものになっている。

要するに、 $x$  方向に周期境界条件をつけて考えると、時間発展の途中で波動関数が一価関数であり続けるという制約のために、 $x$  方向に広がった状態は、次の  $x$  方向に広がった状態まで ( $y$  方向に) ずれたということである。これはかなり一般的な議論である。なお、一般には何個ずれるかは分からないが、 $\hat{U}(t)$  が一価になる時刻では、固有関数は  $\hat{U}(t)$  (各点で位相因子をかける変換) の分しか変わらないので、位置が状態整数個分だけずれたということは分かる。

## 1.4 磁場中のディスオーダーがある系の伝導度

前節では、Landau 準位一つあたりの伝導度 ( $\sigma_{xy}$ ) が  $-\frac{e^2}{h}$  であることを計算した。Landau 準位が  $\nu$  個満たされていれば  $\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h}\nu$  となり、伝導度は量子化するように思える。しかしこの議論をもって、伝導度が量子化するというのは不完全である。Landau 準位の占有数  $\nu$  がどのように決まっていたかを振り返ってみるとその理由がわかる。Landau 準位の単位面積当たりの縮退数は  $B/\phi_0$  であったから、粒子密度を  $n$  として、占有数は  $\nu = n\phi_0/B$  で与えられるのだった。従って、伝導度は  $\sigma_{xy} = -\nu\frac{e^2}{h} = -\frac{e^2}{h}\frac{n\phi_0}{B} = -\frac{ceE}{B}$  となる。つまり、伝導度は磁場の連続関数となってしまい、これはそもそも古典的な結果と同じである。これでは磁場をある程度変化させても伝導度が全く変わらないというプラトーの出現を説明することは全くできていない。

系にディスオーダーが入ると、系のポテンシャルは図 2 のように凸凹があるものになる。セミクラシカルな描像で考えると、ディスオーダーのある系に磁場がかかっているときの電子の運動の軌道は等ポテンシャル線を運動するから (図 2)、ほとんどの電子軌道は局在する。上に凸なポテンシャルにトラップされた電子軌道、下に凸なポテンシャルにトラップされた電子軌道のエネルギーは Landau 準位のエネルギー  $\hbar\omega_c(n + \frac{1}{2})$  から少しずれる。そして、 $x$  方向に広がった軌道は少数になる。この軌道のエネルギーは大体  $\hbar\omega_c(n + \frac{1}{2})$  である。これらの定性的な理解が量子力学的に考えても実際に成り立っていると思うと、図 3 のようなエネルギー準位になる。

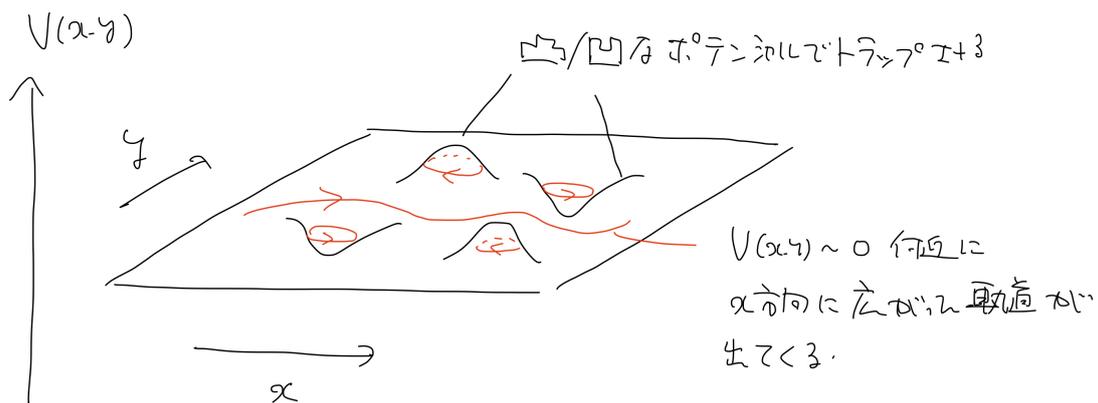


図 2 系にディスオーダーポテンシャルが入った場合のセミクラシカルな軌道。ほとんどの軌道はディスオーダーによる凸凹なポテンシャルにトラップされて局在する。 $x$  方向に広がった軌道は少数となる。

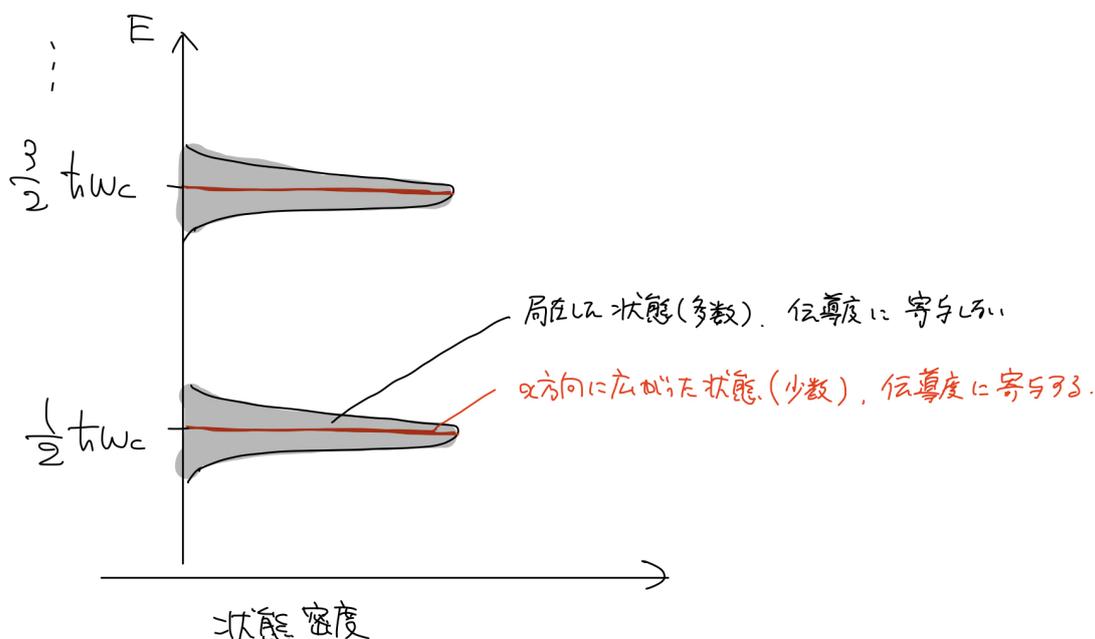


図3 系にディソオーダーポテンシャルが入った場合に Landau 準位が少し変化する．非局在な状態のエネルギーは  $\hbar\omega_c(n + 1/2)$  付近にあり，そのまわりに局在した状態が分布する．

前に自由電子の場合に議論したときと同じように， $x$  方向には周期境界条件をつけて， $y$  方向には広がった系を考える．電場を  $x$  方向にかける．

自由電子の場合のスペクトルフローの議論と同様にして， $t = \frac{\hbar}{eEL_x}$  で次のことが成り立つことが分かる．

(i)  $x$  方向に広がっていない状態は，その波動関数が 0 にならない領域に限れば  $U$  は任意の時刻で well-defined になるため，スペクトルフローは起きない．つまり状態は移動していない．移動していない局在した状態なので，これらの状態は伝導度に寄与していない．

(ii) 一方で， $x$  方向に広がった状態は， $U$  が途中の時刻で一価関数にならないため．スペクトルフローして，いくつか隣の  $x$  方向に広がった状態に（局在した状態を飛び越えて）移動する．これらの状態が伝導度に寄与する．

これにより， $y = \text{const.}$  の面を通過する電子の個数は，時間  $\Delta t = \frac{\hbar}{eEL_x}$  の間に整数個 ( $m$  個) となるから，伝導度は，

$$\sigma_{yx} = \frac{y \text{ 方向の電流密度}}{E_x} \tag{1.4.1}$$

$$= \frac{y \text{ 方向の電流}/L_x}{E_x} \tag{1.4.2}$$

$$= \frac{-em/\Delta t}{L_x E_x} \tag{1.4.3}$$

$$= -m \frac{e^2}{h} \tag{1.4.4}$$

となり，確かに Landau 準位一つ当たりの伝導度は  $\frac{e^2}{h}$  を単位に量子化したままであることがわかる．ディソオーダー（のポテンシャルの大きさ）が Landau 準位間のエネルギーギャップに比べて小さい場合には，Landau 準位一つ当たりの伝導度（これはいつでも量子化されている）は自由電子のそれと同じになると考えられるので， $m = 1$  になっていると結論づけられる．

以上の議論は，難しい解析を何も使っていないことに注意されたい．この議論は Laughlin によって提案された非常に簡潔で強力な議論である．

さて、ここで本題であった伝導度のプラトーの出現の問題に戻ろう。磁場を変化させていくと、Landau 準位がどこまで埋まっているか（上の記法で言えば占有数  $\mu$ ）が変化していく（図 4）。しかし、ほとんどの状態は伝導度に寄与しないので、Landau 準位の占有数が変化しても伝導度は基本的に変化しない。唯一の例外は、Fermi エネルギーが、 $\hbar\omega_C(n + 1/2)$  付近にある伝導度に寄与する状態を跨ぐ時である。このときに伝導度が増える。より詳しく言えば、 $n\phi_0/B$  が  $\nu - 0$  から  $\nu + 0$  に変化するときだけ、伝導度が  $(-\frac{h}{e^2}(\nu - 1)$  から  $-\frac{h}{e^2}\nu$  に) 変化する。（ただし  $\nu \in \mathbb{Z}$ 。）それ以外の磁場領域では伝導度が変化しない。これによりプラトーの出現が説明できる。

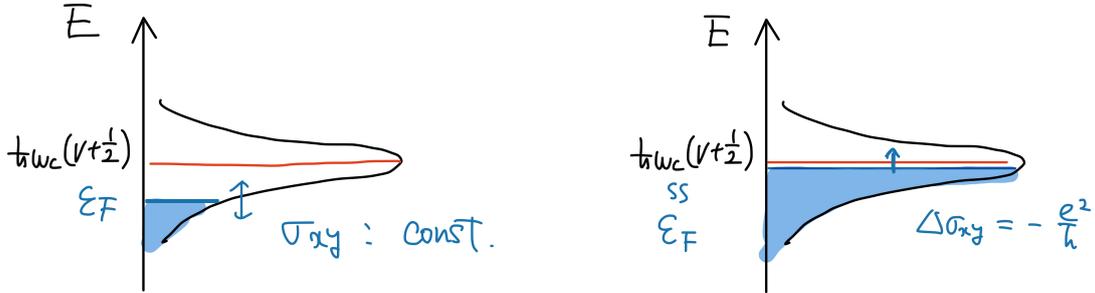


図 4  $E_F$  が非局在な状態のエネルギー ( $\sim \hbar\omega_C(\nu + 1/2)$ ) を飛び越えない限り伝導度は変化しない。飛び越えると伝導度が  $-e^2/h$  だけ変化する。

以上の説明は、全てバルクで考えた（境界がないような系で考えた）説明だった。確かに、伝導度のようなマクロな物理量は細かい境界条件によらずに求められるはずだから、今までの議論で十分といえば十分である。しかし、実際に伝導度の測定を行う試料には境界があるために、今まで考えてきた系とは形状に差がある。実は境界がある場合を真面目に考えると、様々な非自明な性質が明らかになる。境界がある場合の議論は重箱の隅をつつくようなものではなく、本質的に重要な議論であることがわかる。境界をつけた系の議論は、今まで議論してきた系だけでなく、これから議論する異常量子 Hall 系でも共通したものになるので、後ろに回すことにする。

## 2 TKNN 公式

この章では、まず初めに、磁場をかけていない 2 次元結晶のバルク系の伝導度が占有バンドの Chern 数に関係づけられることを、摂動論を用いて説明する。次に、その議論を、 $z$  方向に磁場をかけた 2 次元結晶に拡張する。

### 2.1 摂動論を用いた TKNN 公式の導出

相互作用も外部磁場もない電子系に、摂動を加えた状況を見ていくことにする。系は結晶構造をなしているとして考える。すなわち、系は格子ベクトル分の並進対称性があるものと仮定する。この仮定により、無摂動 Hamiltonian の固有状態として Bloch 状態が取れる\*2。以上の状況下で系に摂動を加え、状態ケットの摂動展開を用いてまず簡単な表示の久保公式を導出する。次に得られた式をもとに TKNN 公式\*3を導出する。TKNN 公式は Hall 伝導率が Chern 数と呼ばれるトポロジカル数で特徴付けられることを表す式で

\*2 外部磁場があると、たとえ外部磁場が一樣であっても系の並進対称性が崩れてしまうので、Bloch 状態をとるためには磁場がないという仮定が本質的に重要である。Bloch 状態を取るために並進対称性が必要であることは、例えば C にある Bloch の定理の証明を見ればわかると思う。

\*3 Thouless-Kohmoto-Nightingale-Nijs

ある。

まず、相互作用も外部磁場もない 2 次元系の Hamiltonian は 1 電子の Hamiltonian

$$\hat{H}(p_x, p_y) = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + V(\mathbf{r}) \quad (2.1.1)$$

で表せる。但し、 $V(\mathbf{r})$  は格子ベクトル  $\mathbf{R}_n$  分の並進で元に戻るとする。すなわち、 $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n)$  が成立するものとする。この系に対して一様電場  $\mathbf{E} = (0, E)$  を印加し、 $x$  方向に生じる電流密度  $\langle j_x \rangle_{\mathbf{E}}$  を計算する。そのために印加した電場によって Hamiltonian に加わる項  $V = eEy$  を摂動とみなす。

摂動展開の結果から、電場の 1 次までの近似でエネルギー固有状態は

$$|n\rangle_{\mathbf{E}} = \underbrace{|n\rangle}_{\text{電場が 0 のときのエネルギー固有状態}} + \sum_{m(\neq n)} \frac{\langle m | eEy | n \rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m} |m\rangle + \dots \quad (2.1.2)$$

( $\mathcal{E}_n$  : 電場が 0 のときのエネルギー固有状態  $|m\rangle$  のエネルギー固有値)

と求まる。ここで  $|n\rangle$  は無摂動 Hamiltonian の固有エネルギー  $\mathcal{E}_n$  の固有状態である。

一電子近似で考えているのだから、エネルギー準位  $\mathcal{E}$  に対する電子の数の分布は  $f(\mathcal{E})$ <sup>\*4</sup> に従う。よって、電流密度は

$$\begin{aligned} \langle j_x \rangle_{\mathbf{E}} &= \frac{1}{L^2} \sum_n \underbrace{f(\mathcal{E}_n)}_{\text{系の面積}} \langle n |_{\mathbf{E}} j_x | n \rangle_{\mathbf{E}} \quad (2.1.3) \\ &= \frac{1}{L^2} \sum_n f(\mathcal{E}_n) \left( \langle n | + \sum_{m(\neq n)} \frac{\langle n | eEy | m \rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m} \langle m | + \mathcal{O}(E^2) \right) j_x \left( |n\rangle + \sum_{m(\neq n)} \frac{\langle m | eEy | n \rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m} |m\rangle + \mathcal{O}(E^2) \right) \\ &= \frac{1}{L^2} \sum_n f(\mathcal{E}_n) \left( \langle n | j_x | n \rangle + \sum_{m(\neq n)} \frac{\langle n | eEy | m \rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m} \langle m | j_x | n \rangle + \sum_{m(\neq n)} \frac{\langle m | eEy | n \rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m} \langle n | j_x | m \rangle + \mathcal{O}(E^2) \right) \\ &\simeq \langle j_x \rangle_{E=0} + \frac{1}{L^2} \sum_n f(\mathcal{E}_n) \sum_{m(\neq n)} \left( \frac{\langle n | eEy | m \rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m} \langle m | j_x | n \rangle + \frac{\langle m | eEy | n \rangle}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m} \langle n | j_x | m \rangle \right) \end{aligned}$$

と書ける。また速度演算子  $v_y = (1/i\hbar)[y, H]$  の行列表現は

$$\begin{aligned} \langle m | v_y | n \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle m | (yH - Hy) | n \rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle m | (y\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m y) | n \rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} (\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m) \langle m | y | n \rangle \end{aligned}$$

となることから

$$\langle m | eEy | n \rangle = \frac{i\hbar}{\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m} \langle m | eE v_y | n \rangle \quad (2.1.4)$$

と変形できる。さらに電場によって駆動される Hall 電流を考えるので  $\langle j_x \rangle_{E=0} = 0$  に注意すれば、

$$\begin{aligned} \frac{\langle j_x \rangle_{\mathbf{E}}}{E} &= -\frac{i\hbar e^2}{L^2} \sum_{n \neq m} f(\mathcal{E}_n) \frac{\langle n | v_x | m \rangle \langle m | v_y | n \rangle - \langle n | v_y | m \rangle \langle m | v_x | n \rangle}{(\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m)^2} \\ &=: \sigma_{xy} \end{aligned}$$

<sup>\*4</sup>  $\mu$  を化学ポテンシャル、 $\beta$  を逆温度として、 $f(\mathcal{E}) := \frac{1}{e^{\beta \hat{A}(\mathcal{E} - \mu)} + 1}$  である。

が得られる。これが Hall 伝導率に対する久保公式である。

ここでは結晶に離散並進対称性がある場合を考えているので、2.1.1 節で触れたように、エネルギー固有状態は Bloch 状態となる。従って、エネルギー固有状態はバンドインデックス  $n$  と波数ベクトル  $\mathbf{k}$  で特徴付けられることになる。そのため、和は  $\sum_n \rightarrow \sum_{n,\mathbf{k}}$ 、固有状態は  $|n\rangle \rightarrow |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}}|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ 、エネルギー固有値は  $\mathcal{E}_n \rightarrow \mathcal{E}_{n\mathbf{k}}$  とそれぞれ書き換えられる。これより、式 (2.1.3)

$$\langle j_x \rangle_{\mathbf{E}} = \frac{1}{\underbrace{L^2}_{\text{系の面積}}} \sum_n f(\mathcal{E}_n) \langle n |_{\mathbf{E}} j_x | n \rangle_{\mathbf{E}}$$

は

$$\langle j_x \rangle_{\mathbf{E}} = \frac{1}{\underbrace{L^2}_{\text{系の面積}}} \sum_{n,\mathbf{k}} f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}) \langle \psi_{n\mathbf{k}} |_{\mathbf{E}} j_x | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle_{\mathbf{E}}$$

と書き直される。残りの計算は同様にできるので、結局  $\sigma_{xy}$  は

$$\sigma_{xy} = -\frac{i\hbar e^2}{L^2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{n \neq m} f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}) \frac{\langle \psi_{n\mathbf{k}} | v_x | \psi_{m\mathbf{k}} \rangle \langle \psi_{m\mathbf{k}} | v_y | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle - \langle \psi_{n\mathbf{k}} | v_y | \psi_{m\mathbf{k}} \rangle \langle \psi_{m\mathbf{k}} | v_x | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle}{(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{m\mathbf{k}})^2} \quad (2.1.5)$$

と書き換わる。これをさらに書き換えていく。そのために2つの式を準備する。

まずは速度演算子の行列要素表示を書き直していく。最初に

$$\begin{aligned} \langle \psi_{m\mathbf{k}} | \hat{v} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle &= \langle \psi_{m\mathbf{k}} | \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}] | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle \\ &= \langle u_{m\mathbf{k}} | e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}} \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}] e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \\ &= \langle u_{m\mathbf{k}} | \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{r}}, e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}} \hat{H} e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}}] | u_{n\mathbf{k}} \rangle \quad (\because \hat{\mathbf{r}} \text{は自身と可換。}) \\ &= \langle u_{m\mathbf{k}} | \frac{1}{i\hbar} (\hat{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}} \hat{H} e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}} \hat{H} e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}} \hat{\mathbf{r}}) | u_{n\mathbf{k}} \rangle \\ &= \langle u_{m\mathbf{k}} | \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} (e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}} \hat{H} e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}}) | u_{n\mathbf{k}} \rangle \\ &\quad \left( \text{この等号は } \hat{H} \text{ は } \mathbf{k} \text{ によらないことに注意して偏微分すると直ちにわかる。} \right) \\ &= \langle u_{m\mathbf{k}} | \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \quad (\because \hat{\mathcal{H}}(\mathbf{k}) := e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}} \hat{H} e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}}) \quad (2.1.6) \end{aligned}$$

を得る。次に Schrödinger 方程式を Bloch 状態で考えたものは  $\hat{H} |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle = \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$  であることから

$$\begin{aligned} \hat{H} e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle &= \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \\ \hat{\mathcal{H}}(\mathbf{k}) | u_{n\mathbf{k}} \rangle &= \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \quad (\because \text{左から } e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}} \text{ をかけて, } \hat{\mathcal{H}}(\mathbf{k}) \text{ の定義を用いる。}) \end{aligned}$$

を得る。これを  $\mathbf{k}$  で偏微分すると

$$\frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle + \hat{\mathcal{H}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle = \frac{\partial \mathcal{E}_{n\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle + \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle.$$

左辺から  $\langle u_{m\mathbf{k}} |$  をかけて内積をとると

$$\begin{aligned} \langle u_{m\mathbf{k}} | \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle + \langle u_{m\mathbf{k}} | \hat{\mathcal{H}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle &= \langle u_{m\mathbf{k}} | \frac{\partial \mathcal{E}_{n\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle + \langle u_{m\mathbf{k}} | \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \\ \Leftrightarrow \langle u_{m\mathbf{k}} | \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle + \langle u_{m\mathbf{k}} | \mathcal{E}_{m\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle &= \langle u_{m\mathbf{k}} | \frac{\partial \mathcal{E}_{n\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle + \langle u_{m\mathbf{k}} | \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \\ \Leftrightarrow \langle u_{m\mathbf{k}} | \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle &= (\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{m\mathbf{k}}) \langle u_{m\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \quad (2.1.7) \end{aligned}$$

を得る.

以上の (2.1.6), (2.1.7) から

$$\langle \psi_{m\mathbf{k}} | \hat{v} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle = \frac{\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{m\mathbf{k}}}{\hbar} \langle u_{m\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \quad (2.1.8)$$

を得る. これが第一の式である.

続いて

$$0 = \frac{\partial}{\partial k_i} \langle u_{m\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle = \left\langle \frac{\partial}{\partial k_i} u_{m\mathbf{k}} \middle| u_{n\mathbf{k}} \right\rangle + \left\langle u_{m\mathbf{k}} \middle| \frac{\partial}{\partial k_i} u_{n\mathbf{k}} \right\rangle \quad (2.1.9)$$

を得る. \*5これが第二の式である.

以上 (2.1.8), (2.1.9) を用いて (2.1.5) を変形していくと,

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} &= -\frac{ie^2}{\hbar L^2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{n \neq m} f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}) \left( -\langle u_{n\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial k_x} | u_{m\mathbf{k}} \rangle \langle u_{m\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial k_y} | u_{n\mathbf{k}} \rangle + \langle u_{n\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial k_y} | u_{m\mathbf{k}} \rangle \langle u_{m\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial k_x} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \right) \\ &= -\frac{ie^2}{\hbar L^2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{n \neq m} f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}) \left( \left\langle \frac{\partial}{\partial k_x} u_{n\mathbf{k}} \middle| u_{m\mathbf{k}} \right\rangle \left\langle u_{m\mathbf{k}} \middle| \frac{\partial}{\partial k_y} u_{n\mathbf{k}} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial}{\partial k_y} u_{n\mathbf{k}} \middle| u_{m\mathbf{k}} \right\rangle \left\langle u_{m\mathbf{k}} \middle| \frac{\partial}{\partial k_x} u_{n\mathbf{k}} \right\rangle \right) \\ &= -\frac{ie^2}{\hbar L^2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_n f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}) \left( \left\langle \frac{\partial}{\partial k_x} u_{n\mathbf{k}} \middle| \frac{\partial}{\partial k_y} u_{n\mathbf{k}} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial}{\partial k_y} u_{n\mathbf{k}} \middle| \frac{\partial}{\partial k_x} u_{n\mathbf{k}} \right\rangle \right) \\ &\quad (\because |u_{m\mathbf{k}}\rangle \text{ の完全性, すなわち } \sum_m |u_{m\mathbf{k}}\rangle \langle u_{m\mathbf{k}}| = \hat{1}.) \\ &= -\frac{ie^2}{\hbar L^2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_n f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}) \left( \frac{\partial}{\partial k_x} \left\langle u_{n\mathbf{k}} \middle| \frac{\partial}{\partial k_y} u_{n\mathbf{k}} \right\rangle - \frac{\partial}{\partial k_y} \left\langle u_{n\mathbf{k}} \middle| \frac{\partial}{\partial k_x} u_{n\mathbf{k}} \right\rangle \right) \end{aligned} \quad (2.1.10)$$

となる.

いま, Berry 接続を

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{k}) = i \langle u_{n\mathbf{k}} | \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle, \quad (2.1.11)$$

Berry 曲率を

$$\mathbf{B}_n(\mathbf{k}) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{k}) \quad (2.1.12)$$

と定義すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial k_x} \left\langle u_{n\mathbf{k}} \middle| \frac{\partial}{\partial k_y} u_{n\mathbf{k}} \right\rangle - \frac{\partial}{\partial k_y} \left\langle u_{n\mathbf{k}} \middle| \frac{\partial}{\partial k_x} u_{n\mathbf{k}} \right\rangle &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{k}) \Big|_z \\ &= B_{nz}(\mathbf{k}) \end{aligned}$$

となるから, (2.1.10) は

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} &= -\frac{e^2}{\hbar L^2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_n f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}) B_{nz}(\mathbf{k}) \\ &= -\frac{e^2}{\hbar L^2} \sum_n \sum_{\mathbf{k}} f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}) B_{nz}(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (2.1.13)$$

となる. \*6ここでさらに  $\mathbf{k}$  の連続極限, すなわち系のサイズ  $L$  が大きい極限をとると  $\frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2}$  となる.

\*5  $\frac{\partial}{\partial k_i} (\langle \psi_{m\mathbf{k}} |), \frac{\partial}{\partial k_i} (| \psi_{m\mathbf{k}} \rangle)$  のことを  $\left\langle \frac{\partial}{\partial k_i} \psi_{m\mathbf{k}} \middle|, \left| \frac{\partial}{\partial k_i} \psi_{m\mathbf{k}} \right\rangle$  と略記した.

\*6 無限和の交換の正統性についてはここでは議論しない.

以上から、Hall 伝導率の表式は結局

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h} \sum_n \int \frac{d^2\mathbf{k}}{2\pi} f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}) B_{nz}(\mathbf{k}) \quad (2.1.14)$$

になる。

特に、Fermi 準位がギャップの中にある場合、 $f(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}})$  は 1 と近似できるので、Hall 伝導率の表式は

$$\sigma_{xy} = -\nu \frac{e^2}{h}, \quad (2.1.15)$$

$$\nu = \sum_n \int_{\text{Brillouin Zone}} \frac{d^2\mathbf{k}}{2\pi} B_{nz}(\mathbf{k}) = \sum_n \nu_n, \quad (2.1.16)$$

$$\nu_n := \int_{\text{Brillouin Zone}} \frac{d^2\mathbf{k}}{2\pi} B_{nz}(\mathbf{k}) \quad (2.1.17)$$

となる。この式は **TKNN 公式** と呼ばれ、 $\nu_n$  は **Chern 数** と呼ばれる。Chern 数は整数値をとることが知られている。

## 2.2 結晶を磁場中に置いた場合の取り扱い

上の TKNN 公式の導出では、バンド描像を仮定していた。つまり、系に離散並進対称性がある Bloch の定理が成り立つことを仮定していた。例えば普通の結晶を考える場合には、当然離散並進対称性があるので、この仮定は満たされている。それでは 2 次元系を  $xy$  平面内に置いて、 $z$  方向に一様磁場をかけた場合はどうだろうか。  $xy$  平面内のどの点においても、かかっている磁場の向きと大きさは等しいから、系の並進対称性は崩れていないように思える。しかしこの直観に反して、系の並進対称性は崩れてしまう。それは、磁場の効果は Hamiltonian に  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  として取り入れられるからである。例えば Landau ゲージや Symmetric ゲージでは、明らかに  $\mathbf{A}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \neq \mathbf{A}(\mathbf{r})$  であり、確かにベクトルポテンシャルを加えた Hamiltonian の並進対称性が崩れていることが分かる。したがって、2 次元結晶系に垂直な磁場をかけた場合には、Bloch の定理が使えず、従ってバンド描像は成り立たない。

この節では、Bloch の定理を磁場がある場合に拡張する。この節の議論により、例えば上の TKNN 公式の計算が、磁場がある場合に拡張されることが分かる。

### 2.2.1 Magnetic translation

並進演算子  $T_{\mathbf{R}}$  の定義や性質は次のようなものであった。

$$T_{\mathbf{R}} = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}}\right) \quad (2.2.1)$$

$$T_{\mathbf{R}} f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad (2.2.2)$$

$$T_{\mathbf{R}} |\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r} - \mathbf{R}\rangle \quad (2.2.3)$$

$$T_{\mathbf{R}} \hat{O}(\mathbf{r}) T_{\mathbf{R}}^{-1} = \hat{O}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad (2.2.4)$$

磁場がないときには

$$G := \{T_{\mathbf{R}} | \mathbf{R} \text{ は格子ベクトル}\} \quad (2.2.5)$$

を考えると、 $G$  が可換群になり、 $G$  の各元と結晶の Hamiltonian  $\hat{H}$  が交換するから、 $G$  の既約表現を考えることにより、 $\hat{H}$  をブロック対角化できる。(Bloch の定理)

磁場があるときには  $\hat{H}$  の格子ベクトルによる離散並進対称性が崩れるから、慎重に考える必要がある。一様磁場を  $\mathbf{B}$  として、そのベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}$  を一つ固定すると、

$$\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad (2.2.6)$$

$$\Rightarrow \nabla \times (\mathbf{A}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) - \mathbf{A}(\mathbf{r})) = 0 \quad (2.2.7)$$

$$\Rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) - \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \nabla \xi(\mathbf{r}; \mathbf{R}) \quad (\exists \xi(\mathbf{r}; \mathbf{R})) \quad (2.2.8)$$

が成り立つ。特に  $\mathbf{R} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b}$  なら、

$$\xi(\mathbf{r}; \mathbf{R}) = m\xi(\mathbf{r}; \mathbf{a}) + n\xi(\mathbf{r}; \mathbf{b}) \quad (2.2.9)$$

となるように  $\xi(\mathbf{r}; \mathbf{R})$  を選ぶことができる。

このような  $\xi$  を一つ固定して、格子ベクトル  $\mathbf{R}$  に対する Magnetic Translation Operator を次で定義する ( $T$  と  $\mathcal{T}$  が似ていて、少し判別しづらいので注意されたい。).

$$\mathcal{T}_{\mathbf{R}} := e^{\frac{ie}{\hbar c} \xi(\mathbf{r}; \mathbf{R})} T_{\mathbf{R}}. \quad (2.2.10)$$

このとき、

$$\mathcal{T}_{\mathbf{R}} \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right) \mathcal{T}_{\mathbf{R}}^{-1} \quad (2.2.11)$$

$$= e^{\frac{ie}{\hbar c} \xi(\mathbf{r}; \mathbf{R})} T_{\mathbf{R}} \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right) T_{\mathbf{R}}^{-1} e^{-\frac{ie}{\hbar c} \xi(\mathbf{r}; \mathbf{R})} \quad (2.2.12)$$

$$= e^{\frac{ie}{\hbar c} \xi(\mathbf{r}; \mathbf{R})} \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \right) e^{-\frac{ie}{\hbar c} \xi(\mathbf{r}; \mathbf{R})} \quad (2.2.13)$$

$$= \mathbf{p} - \frac{e}{c} \nabla \xi(\mathbf{r}; \mathbf{R}) + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad (2.2.14)$$

$$= \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad (2.2.15)$$

であるから、 $[\mathcal{T}_{\mathbf{R}}, \hat{H}] = 0$  が成り立つ。ただし、一般には  $[\mathcal{T}_{\mathbf{R}_1}, \mathcal{T}_{\mathbf{R}_2}] \neq 0$  なので、すぐには磁場がないときのようにブロック対角化はできない。以下でよく使うゲージについて、Magnetic Translation Operator 同士を交換するとどのようになるかを計算する。結論を先に述べると、並進ベクトルで張られる面を貫く磁束に比例した位相因子が出てくる。

### Landau ゲージ

$\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$ ,  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$  のとき。  $\xi(\mathbf{r}; \mathbf{R}) = -BR_y x$  ととれる。ただし、 $R_y$  は  $\mathbf{R}$  の  $y$  成分である。このとき、

$$\mathcal{T}_{\mathbf{R}} = \exp\left(-\frac{ie}{\hbar c} BR_y x\right) T_{\mathbf{R}} \quad (2.2.16)$$

であり、

$$\mathcal{T}_{\mathbf{R}_1} \mathcal{T}_{\mathbf{R}_2} = \exp\left(-\frac{ie}{\hbar c} BR_{1y} x\right) T_{\mathbf{R}_1} \exp\left(-\frac{ie}{\hbar c} BR_{2y} x\right) T_{\mathbf{R}_2} \quad (2.2.17)$$

$$= \exp\left(-\frac{ie}{\hbar c} BR_{1y} x\right) \exp\left(-\frac{ie}{\hbar c} BR_{2y} (x + R_{1x})\right) T_{\mathbf{R}_1} T_{\mathbf{R}_2} \quad (2.2.18)$$

$$= \exp\left(-\frac{ie}{\hbar c} BR_{2y} R_{1x}\right) \mathcal{T}_{\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2} \quad (2.2.19)$$

$$= \exp\left(-\frac{ie}{\hbar c} B(\mathbf{R}_1 \times \mathbf{R}_2)_z\right) \mathcal{T}_{\mathbf{R}_2} \mathcal{T}_{\mathbf{R}_1} \quad (2.2.20)$$

$$= \exp\left(-2\pi i \frac{BS}{\phi}\right) \mathcal{T}_{\mathbf{R}_2} \mathcal{T}_{\mathbf{R}_1} \quad (2.2.21)$$

となる。ただしここで、 $S = (\mathbf{R}_1 \times \mathbf{R}_2)_z$  である。

## Symmetric ゲージ

以下で使うことはないが,  $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}$ ,  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$  のとき,  $\xi(\mathbf{r}; \mathbf{R}) = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{R} \cdot \mathbf{r}$  ととると,

$$\mathcal{T}_{\mathbf{R}} = \exp\left(\frac{ie}{2\hbar c}\mathbf{B} \times \mathbf{R} \cdot \mathbf{r}\right) T_{\mathbf{R}} \quad (2.2.22)$$

となり,

$$\mathcal{T}_{\mathbf{R}_1}\mathcal{T}_{\mathbf{R}_2} = \exp\left(\frac{ie}{2\hbar c}\mathbf{B} \times \mathbf{R}_1 \cdot \mathbf{r}\right) T_{\mathbf{R}_1} \exp\left(\frac{ie}{2\hbar c}\mathbf{B} \times \mathbf{R}_2 \cdot \mathbf{r}\right) T_{\mathbf{R}_2} \quad (2.2.23)$$

$$= \exp\left(-\frac{ie}{\hbar c}BR_{1y}x\right) \exp\left(-\frac{ie}{\hbar c}BR_{2y}(x + R_{1x})\right) T_{\mathbf{R}_1}T_{\mathbf{R}_2} \quad (2.2.24)$$

$$= \exp\left(-\frac{ie}{\hbar c}B(\mathbf{R}_1 \times \mathbf{R}_2)_z\right) \mathcal{T}_{\mathbf{R}_2}\mathcal{T}_{\mathbf{R}_1} \quad (2.2.25)$$

$$= \exp\left(-2\pi i \frac{BS}{\phi}\right) \mathcal{T}_{\mathbf{R}_2}\mathcal{T}_{\mathbf{R}_1} \quad (2.2.26)$$

となる. ただしここで,  $S = (\mathbf{R}_1 \times \mathbf{R}_2)_z$  である.

## 2.2.2 Magnetic sublattice とバンド構造

Magnetic Translation の節で見たように, Landau ゲージでも Symmetric ゲージでも  $\mathcal{T}_{\mathbf{R}}$  同士を交換すると, 二つの Magnetic translation 演算子の並進ベクトルに囲まれる磁束 (を磁束量子で割って  $2\pi$  かけた) 分の位相因子が出てくる. 以下ではこのどちらかのゲージしか考えないことにする. Unit cell を貫く磁束が磁束量子の  $p/q$  倍 ( $q \in \mathbb{Z}_{>0}, p \in \mathbb{Z}$ ) のとき,

$$G := \{\mathcal{T}_{\mathbf{R}} | \mathbf{R} = m\mathbf{q}\mathbf{a} + n\mathbf{b}, m, n \in \mathbb{Z}\} \quad (2.2.27)$$

とすると,  $G$  が可換群になり,  $G$  の全ての元が Hamiltonian と交換するから,  $G$  の既約表現を考えることにより, Hamiltonian をブロック対角化できる. これが一般化された Bloch の定理である.  $G$  の元と  $\hat{H}$  の同時固有状態を一般化された Bloch 状態という. なお,  $G$  の並進に含まれる格子 ( $\mathbf{R} = m\mathbf{q}\mathbf{a} + n\mathbf{b}$ ) を Magnetic sublattice という.

$q \times 1$  個分の Unit cell が単位格子 (Magnetic Unit Cell) として扱われるので  $\mathbf{k}$  の動く範囲 (Magnetic Brillouin Zone) は  $[0, 2\pi/(qa)] \times [0, 2\pi/b]$  となる. Magnetic unitcell の大きさが unit cell の  $q$  倍なので, 対応する Brillouin Zone が  $1/q$  倍になるところがポイントである. このように大きさが  $1/q$  倍になった Brillouin Zone を Magnetic Brillouin Zone (MBZ) という. なお, 系の面積を  $V$  とするとき,

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \int_{MBZ} \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \quad (2.2.28)$$

のように置き換えをすれば良いことも簡単にわかる.

一般化された Bloch 状態の, Magnetic Unit Cell における境界条件には注意が必要である. 一般化された Bloch 状態は定義より Magnetic Translation Operator の固有状態なので, 境界条件は次のような形をしている.

$$\mathcal{T}_{\mathbf{R}}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.2.29)$$

$$\Leftrightarrow e^{\frac{ie}{\hbar c}\xi(\mathbf{r}; \mathbf{R})}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.2.30)$$

あるいは,  $|u_{n,\mathbf{k}}\rangle = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle \Leftrightarrow \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u(\mathbf{r})$  を使うと, 境界条件は次のように書き直せる.

$$e^{\frac{ie}{\hbar c}\xi(\mathbf{r};\mathbf{R})}u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.2.31)$$

Bloch の定理のときと違い, Unit Cell で波動関数  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  が周期的にならないことに注意されたい.

なお, 具体的なゲージでこの条件を書き下すと,

$$e^{-\frac{ie}{\hbar c}BR_y x}u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (\text{Landau ゲージ}) \quad (2.2.32)$$

$$e^{\frac{ie}{2\hbar c}\mathbf{B}\times\mathbf{R}\cdot\mathbf{r}}u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (\text{Symmetric ゲージ}) \quad (2.2.33)$$

となる.

さて, 速度演算子を  $\hat{v} = [\hat{r}, H] = \frac{1}{m}(\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A})$  とするとき, 上の少し変な境界条件のおかげで

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})^*\hat{v}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})^*\hat{v}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.2.34)$$

が一般に確かめることができる, これより,  $|u_{\mathbf{k}}\rangle$  を使って電流密度期待値を計算するということがうまくいく. つまり,

$$\mathbf{j} = \int_{\text{MBZ}} \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \langle \psi_{n,\mathbf{k}} | \hat{v} | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle \quad (2.2.35)$$

$$= \int_{\text{MBZ}} \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \langle u_{n,\mathbf{k}} | \hat{v}(\mathbf{k}) | u_{n,\mathbf{k}} \rangle \quad (2.2.36)$$

ただし,  $\hat{v}(\mathbf{k}) \equiv e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}}\hat{v}e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}}$

$$\langle \psi_{n,\mathbf{k}} | \hat{v} | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle = \langle u_{n,\mathbf{k}} | \hat{v}(\mathbf{k}) | u_{n,\mathbf{k}} \rangle \quad (2.2.37)$$

$$= \int d^2\mathbf{r} \psi_{n,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})\hat{v}(\mathbf{r})\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.2.38)$$

$$(\text{積分領域は適当な Magnetic unit cell}) \quad (2.2.39)$$

というような計算が正当化される. 以上の点 (バンドがとれたことと,  $|u_{\mathbf{k}}\rangle$  によって電流密度期待値が計算できること.) により, 上の TKNN 公式を求めたときの議論と全く同じ議論が使えて, 磁場がある場合にも Magnetic Brillouin Zone 上のバンドの Chern 数と伝導度が関係づけられることが分かる<sup>\*7</sup>.

### 3 バルクエッジ対応

TKNN 公式は, Brillouin Zone 上のバンド (トーラス上のベクトル束) の構造から計算されるトポロジカル不変量 (Chern 数) を系の伝導度に結びつけるものだった. Brillouin Zone 上のバンドを考える時点で, 既に系がバルクであることが仮定されていたことに注意しておく. それでは系に境界がある場合にはどのようなになるだろうか. 簡単のため, 片方の方向 (例えば  $x$  方向) に境界があって, もう片方の方向には系が無限に広がっている場合を考えよう (図 5). このような場合,  $y$  方向の並進対称性は保たれているけれど,  $x$  方向の並進対称性はなくなる. 従って, バンドを考えるときのように  $(k_x, k_y)$  ごとにエネルギースペクトルを考えることはできなくなり,  $k_y$  ごとにエネルギースペクトルを考える必要が出てくる. このエネルギースペクトルは, 安直には  $k_x, k_y$  のエネルギースペクトル (つまりはバルクのエネルギーバンド) の  $k_x$  方向をつぶしたときに得られるようなものになると考えられる (図 6). しかし,  $x$  方向に境界をつけたことにより, バルクでは見られなかったようなエネルギー状態が出現する. 実はこのモードが, バルクで計算される伝導度と境界付きの系で計算される伝導度を対応づける上で本質的に重要である.

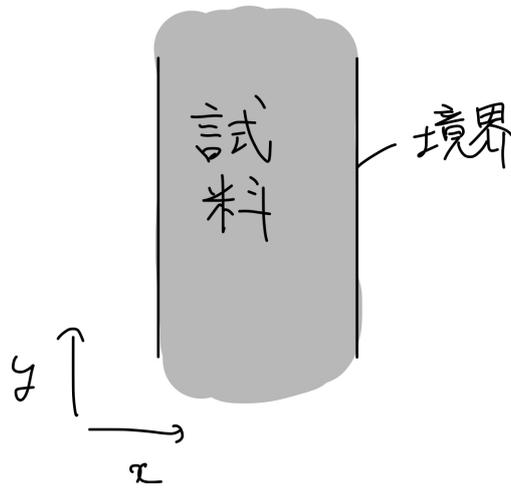


図5  $x$  方向に境界をつけた系のセットアップ.

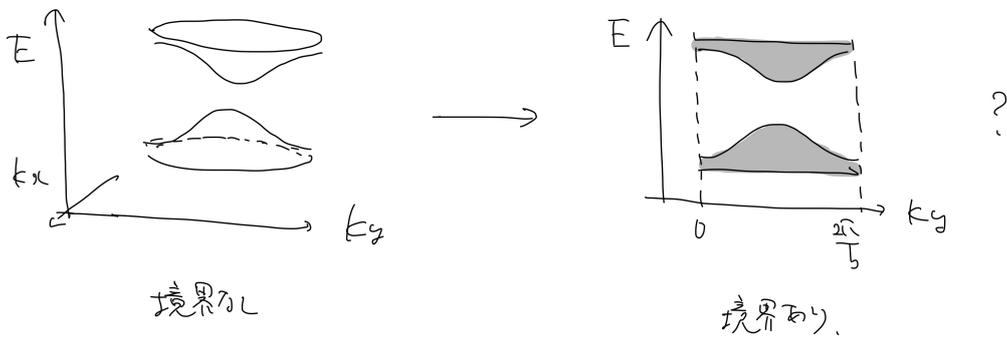


図6  $x$  方向に境界がある系のエネルギースペクトル.  $k_x$  は良い量子数にならないので, 2次元のバンドを考慮することができなくなる.  $k_y$  ごとに Schrödinger 方程式を解いてスペクトルを計算する必要がある. このスペクトルは, 左図のエネルギースペクトル (エネルギーバンド) の  $k_x$  方向を潰したようなスペクトルになりそうな気持ちがある (しかし実際にはエッジモードが出てくる.).

なお前節で, 磁場があったとしても (磁場の強さがいい感じの条件を満たすときには) バンドを構成することができることを示したので, これからおこなうバンド描像に基づいた議論は, 磁場の有無にかかわらず成り立つ. 磁場がある場合には, 積分領域が Unit cell や Brillouin Zone になっているところは Magnetic unit cell, Magnetic Brillouin Zone に変えた上で, 適切に境界条件を変えたりすると同様の結論が得られる.

### 3.1 TKNN 公式の再導出

この節ではエッジがある場合の議論に接続しやすいように, TKNN 公式を再導出しておく. 上で自由電子系を考えたときに導入したスペクトルフローが, ここでも有効であることを確かめることが目的である.

端のないバルクを考える. 系は長さ  $L_x, L_y$  の大きな箱に周期境界条件をつけたもの考える. Brillouin

\*7 TKNN 公式の導出では, 波数  $\mathbf{k}$  をパラメータとするハミルトニアン  $\hat{H}(\mathbf{k})$  の固有状態を考えることでトーラス上のベクトル束を作り, そのチャーン数と伝導度が一致することを示した. したがって  $|\mathbf{u}_{\mathbf{k}}\rangle$  で電流密度期待値が計算できることは必要な条件である.

又x方向に局在,  
y方向に広がっている.

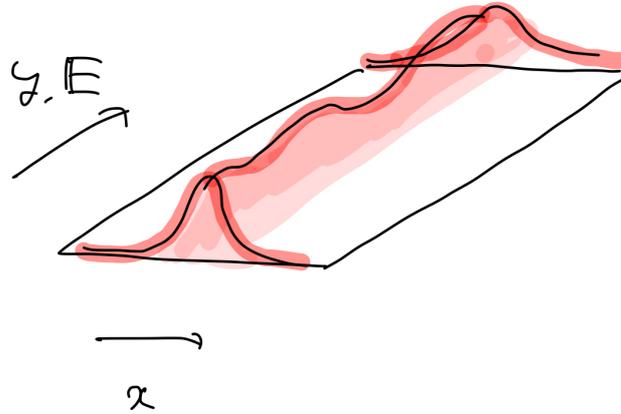


図7 hybrid wannier function のイメージ.  $|h_{R,k_y}\rangle$  は  $x$  方向には局在していて,  $y$  方向には広がっている.

Zone( $[2\pi/a, 2\pi/b]$ ) 上に Bloch 関数  $|u_{\mathbf{k}}\rangle$  をとる.  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  の境界条件などは,

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = |\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}\rangle \quad (3.1.1)$$

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |u_{\mathbf{k}}\rangle \quad (3.1.2)$$

$$e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} |u_{\mathbf{k}}\rangle = |u_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}\rangle \quad (3.1.3)$$

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (3.1.4)$$

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (3.1.5)$$

のようにとっておく. 特に,  $\psi_{\mathbf{k}}$  について, BZ 上で  $k_x$  方向に関して周期的になるように取っておくことに注意する. なお, 物理的に面白いのはバンド構造が非自明 (Chern 数が 0 にならない) ときなので, 当然 Brillouin Zone 全域で周期的に  $\psi_{\mathbf{k}}$  をとることは假定しない. なお,

$$\int_{\text{unit cell}} d^2\mathbf{r} u_{n,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 1 \quad (3.1.6)$$

となるように規格化しておく.

ここで,  $k_x$  方向の境界条件を利用して,  $k_x$  方向で Fourier 変換した次のベクトル

$$|h_{R,k_y}\rangle := \int_0^{2\pi/a} \frac{a dk_x}{2\pi} e^{-ik_x R} |\psi_{\mathbf{k}}\rangle \quad (3.1.7)$$

を定義する.  $|h\rangle$  は  $y$  方向には広がっていて,  $x$  方向には局在した状態になっている. この関数 (状態) は, Wannier 関数の一方向バージョンだから, これを hybrid Wannier function という (図7).

$|h\rangle$  に関して次が成り立つ.

$$\langle h_{R',k_y} | h_{R,k_y} \rangle = \int_0^{2\pi/a} \frac{a dk'_x}{2\pi} \int_0^{2\pi/a} \frac{a dk_x}{2\pi} e^{ik'_x R' - ik_x R} \langle \psi_{k'_x, k_y} | \psi_{k_x, k_y} \rangle \quad (3.1.8)$$

$$= \int_0^{2\pi/a} \frac{a dk'_x}{2\pi} \int_0^{2\pi/a} \frac{a dk_x}{2\pi} e^{ik'_x R' - ik_x R} \frac{2\pi \delta(k'_x - k_x)}{a} \quad (3.1.9)$$

$$= \delta_{R',R}. \quad (3.1.10)$$

ただし,  $|h\rangle$  は  $x$  方向には局在していて周期性がなく,  $y$  方向には周期性があることを反映して,  $|h\rangle$  同士は内積は  $y$  方向には  $(0, b)$  で積分をおこない,  $x$  方向には  $(-\infty, \infty)$  で積分をおこなうものと定義している. それに応じて, ふたつ目の式の  $|\psi\rangle$  同士の内積は空間  $(-\infty, \infty) \times (0, b)$  で積分をしていることに注意する.

また,

$$\hat{x}|h_{R,k_y}\rangle = \int_0^{2\pi/a} \frac{a dk_x}{2\pi} e^{-ik_x R} \hat{x} |\psi_{k_x,k_y}\rangle \quad (3.1.11)$$

$$= \int_0^{2\pi/a} \frac{a dk_x}{2\pi} e^{-ik_x R} \hat{x} (e^{ik_x \hat{x} + ik_y \hat{y}} |u_{k_x,k_y}\rangle) \quad (3.1.12)$$

$$= \int_0^{2\pi/a} \frac{a dk_x}{2\pi} e^{-ik_x R} [(-i\partial_{k_x})(e^{ik_x \hat{x} + ik_y \hat{y}})] |u_{k_x,k_y}\rangle \quad (3.1.13)$$

$$= \int_0^{2\pi/a} \frac{a dk_x}{2\pi} e^{ik_x \hat{x} + ik_y \hat{y}} [(i\partial_{k_x})(e^{-ik_x R} |u_{k_x,k_y}\rangle)] \quad (3.1.14)$$

$$= R|h_{R,k_y}\rangle + \int_0^{2\pi/a} \frac{a dk_x}{2\pi} e^{-ik_x R} e^{ik_x \hat{x} + ik_y \hat{y}} (i\partial_{k_x}) |u_{k_x,k_y}\rangle \quad (3.1.15)$$

だから (4 つ目の等号では,  $k_x$  方向に関する  $|\psi_k\rangle$  の周期性を利用して部分積分した.),

$$\langle h_{R,k_y} | \hat{x} | h_{R,k_y} \rangle = R + \int_0^{2\pi/a} \frac{a dk'_x}{2\pi} \int_0^{2\pi/a} \frac{a dk_x}{2\pi} \langle u_{k'_x,k_y} | i\partial_{k_x} | u_{k_x,k_y} \rangle \quad (3.1.16)$$

$$= R + \int_0^{2\pi/a} \frac{a dk_x}{2\pi} \langle u_{k_x,k_y} | i\partial_{k_x} | u_{k_x,k_y} \rangle \quad (3.1.17)$$

が満たされている. 2 番目の等号では,  $\langle u | i\partial | u \rangle$  が空間  $(-\infty, \infty) \times (0, b)$  で積分されていたところを unit cell での積分に書き換えた. この表式は,  $|h_{R,k_y}\rangle$  の位置期待値 ( $\approx$  局在中心) が,  $k_y$  を固定したときの  $k_x$  方向の Berry 位相に関係していることを示している. なお最初に決めた境界条件から,  $k_y = 0, \frac{2\pi}{b}$  における  $k_x$  方向の Berry 位相は等しいとは限らず,

$$\langle h_{R,k_y=2\pi/b} | \hat{x} | h_{R,2\pi/b} \rangle - \langle h_{R,k_y=0} | \hat{x} | h_{R,k_y=0} \rangle \quad (3.1.18)$$

$$= \int_0^{2\pi/a} \frac{a dk_x}{2\pi} \langle u_{k_x,k_y=2\pi/b} | i\partial_{k_x} | u_{k_x,k_y=2\pi/b} \rangle - \int_0^{2\pi/a} \frac{a dk_x}{2\pi} \langle u_{k_x,k_y=0} | i\partial_{k_x} | u_{k_x,k_y=0} \rangle \quad (3.1.19)$$

$$= -\frac{a}{2\pi} \oint_{\partial BZ} \mathbf{A}(\mathbf{k}) \quad (3.1.20)$$

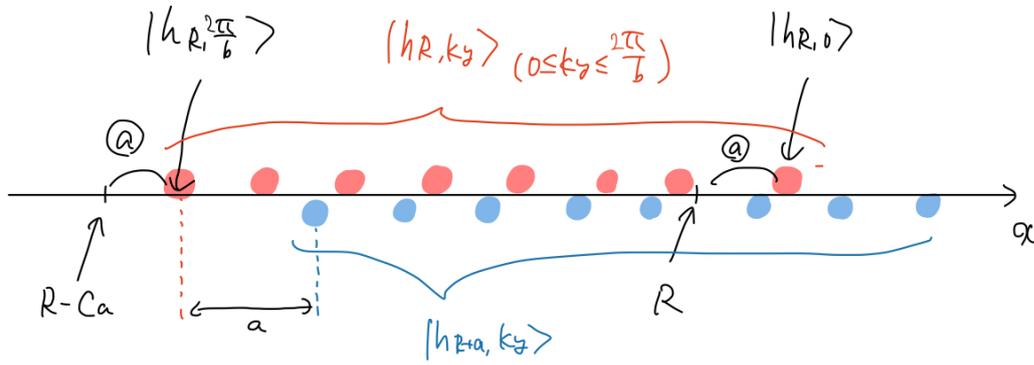
$$= -\frac{a}{2\pi} \int_{BZ} B(\mathbf{k}) \quad (3.1.21)$$

$$= -aC \quad (3.1.22)$$

というような差がある. ただし  $\mathbf{A}$  は Berry 接続である.  $|h_{R,k_y}\rangle$  と  $|h_{R+a,k_y}\rangle$  の位置は式 3.1.17 から明らかのように  $a$  だけずれるから, 全ての hybrid wannier function ( $0 \leq k_y \leq \frac{2\pi}{b}, R = 0, \pm a, \pm 2a, \dots$ ) を集めてくると図 8 のような分布になることが分かる.  $y$  方向に一様電場  $E\hat{y}$  をかけるとき, 自由電子のスペクトルフローを思い出すと, 時間  $t_0 = \frac{2\pi\hbar}{eEL_y}$  で全ての Bloch 状態が

$$\psi_{k_x,k_y}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{k_x,k_y}(\mathbf{r}) \quad (t = 0) \quad (3.1.23)$$

$$\rightarrow e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{k_x,k_y - \frac{2\pi}{L_y}}(\mathbf{r}) \quad (t = t_0) \quad (3.1.24)$$



全ての  $k_y$  ( $0 \leq k_y \leq \frac{2\pi}{b}$ ).  $R$  は  $n$  個の状態を集めてくる。

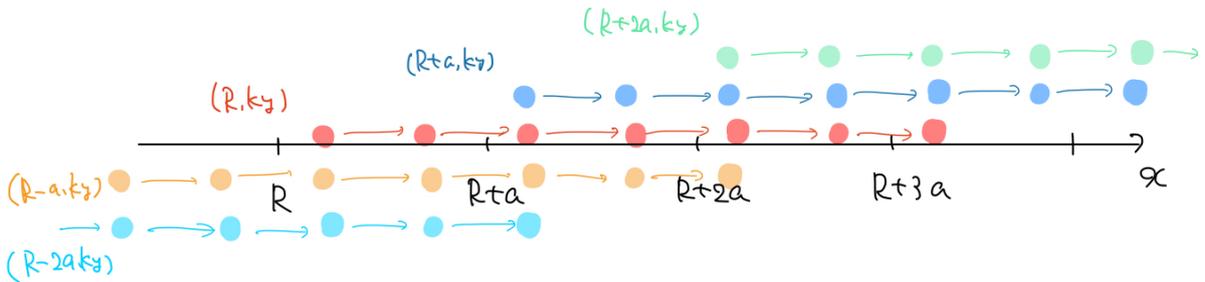


図8  $|h, k_y\rangle$  の分布.  $|h_{R, \frac{2\pi}{b}}\rangle$  は  $|h_{R, 0}\rangle$  よりも  $Ca$  だけ左にいる (上図).  $|h_{R+a, k_y}\rangle$  は  $|h_{R, k_y}\rangle$  の  $a$  だけ右にいる (上図) から, 全ての  $|h\rangle$  を集めてくる ( $0 \leq k_y \leq \frac{2\pi}{b}, R = \dots, -2a, a, 0, a, 2a, \dots$ ) と局在中心は下図のようになる.  $y$  方向に電場をかけると, それぞれの状態は時間  $\frac{2\pi\hbar}{eEL_y}$  の間に矢印のようにスペクトルフローする (下図).

というふうなスペクトルフローするので, 局在中心は図8のようにずれていく.  $x = \text{const.}$  の面を通過する電子の数は図から明らかなように  $C$  個 (右向き) であるから, 電流密度は,

$$\frac{1}{L_y} \times (-e) \times C / \left( \frac{2\pi\hbar}{eEL_y} \right) = -\frac{e^2}{h} CE \quad (3.1.25)$$

となるから, 伝導度は

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h} C \quad (3.1.26)$$

となることが示された.

### 3.2 境界がある場合の議論

上の議論によって,  $y$  方向に長さ  $L_y$  で周期境界条件をつけて, スペクトルフローによって伝導度を計算するという強力な手法の有効性が再確認された. しかし, 系に境界がある場合には, 本質的に違う点がある.

まず, 図6のような境界がある系のスペクトルは, 単純に空間  $(0, L_x) \times (0, b)$  上で, 境界条件  $\psi(x, y+b) = e^{ik_y b} \psi(x, y)$  の下で Hamiltonian の固有値問題を解いてえられる状態を考えたものであるから, そもそも  $k_y = 0, \frac{2\pi}{b}$  の状態は同じ状態である (図9). つまり  $k_y$  方向に周期性がある. したがって今回の事情は,

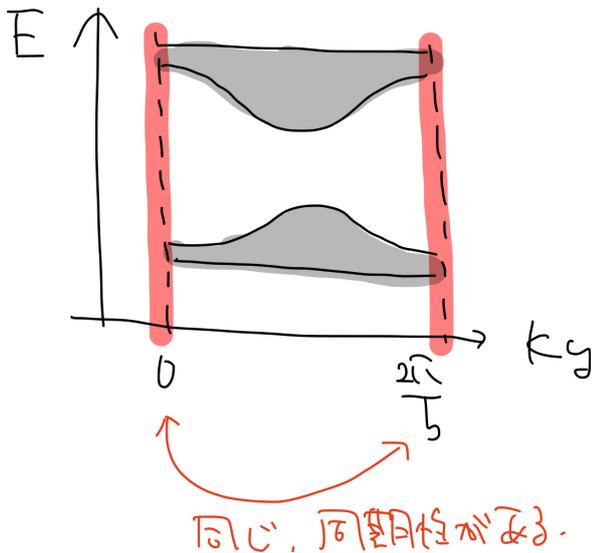


図9  $k_y$  方向の周期性

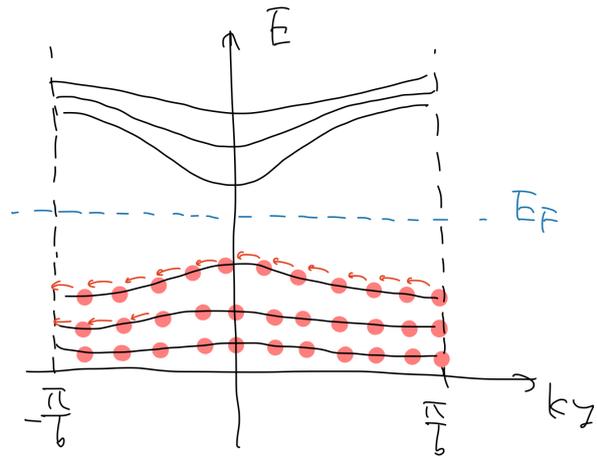


図10 スペクトルフローによって  $k_y$  がずれる。

$|h_{R,k_y}\rangle$  を構成したときのように、 $k_x$  方向に周期性を課した状態を考えた結果、 $k_y$  方向には周期性がなくなったときは大きく異なる。

また、エネルギースペクトルを考えるときの各々の状態はエネルギー固有状態であるから、局在具合の気持ちとしては  $|h\rangle$  (これは固有状態ではない!) よりも  $|\psi\rangle$  に近いものであることも注意しておく。

$y$  方向に長さ  $L_y$  で周期境界条件をつけて電場をかけた場合のスペクトルフローの議論は今まで同様成り立つので、これで電子状態がどのように変化するか確かめてみよう。絶縁体ではバンドギャップが開いていたから、境界がある場合に電子は図 10 のように詰まっている。そして、各々の電子がスペクトルフローで移動していく。従って、図 10 のようなエネルギースペクトルであった場合、 $k_y$  方向の周期性から、 $x = \text{const.}$  の面を通過する電荷の総量は必ず 0 になるはずである。従って必ず電荷は流れないということになってしまう。これはバルクで計算した結果とは全く異なるものである。系が十分に大きければ、バルクで計算した伝導度と境界付きの系で計算した伝導度は一致するはずである (してほしい) のにそうならなかったのは、どこが間違っていたのだろうか。

まず、図 10 に描かれている状態はエネルギー固有状態だから  $|\psi\rangle$  のように  $x$  方向にかなり広がった bulk-like な状態だろう。今は  $x$  方向に境界をつけた系を考えているので、 $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$  のような Bloch 状態とは異なり、境界に局在した状態が出てきても良いと考えられるが、図 10 のようなエネルギースペクトルは、このような状態は考慮に入れていない。従って、図 10 に描かれている状態の他に、(上下のバンドからはみ出した) 境界に局在したモードが出てきてもおかしくはないと考えられる。そのようなモードは左端、もしくは右端に局在していて、bulk-like な状態を一旦経なければ右端/左端のどちらに局在しているかは変わらないだろう (図 11)。

この考察の元で、どのようなエネルギースペクトルになっていけば伝導度がバルクで求めたものに一致するかを考えると、図 12 のようになっていけば良いことが分かる。図のようになっていけばスペクトルフローで電子一つが右端から左端に移動する。その結果、伝導度は前節と同様に計算して  $\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h}$  となることが分かる。

$k_y$  を大きくしていったときに右端に局在した状態が下のバンドに接してから左端に局在するようになるときにエッジモードのペア数を  $+1$  とカウントして、その逆になっているときに  $-1$  とカウントすることにして、 $n$  番目と  $n+1$  番目のバンド間のエッジモードのペア数を  $I_n$  とする。このエッジモードのペア数  $I_n$  と

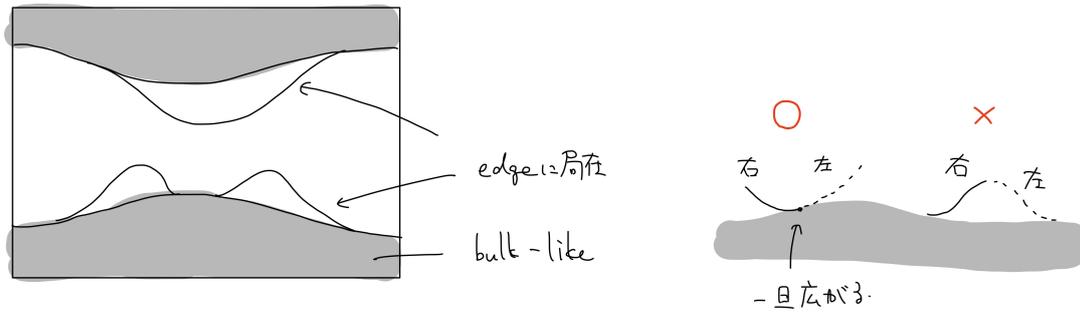


図 11 境界がある場合には bulk-like な状態の他に、端に局在した状態が出てくるだろう。右と左のどちらに局在しているかは、bulk-like な状態を経なければ変わることができない。

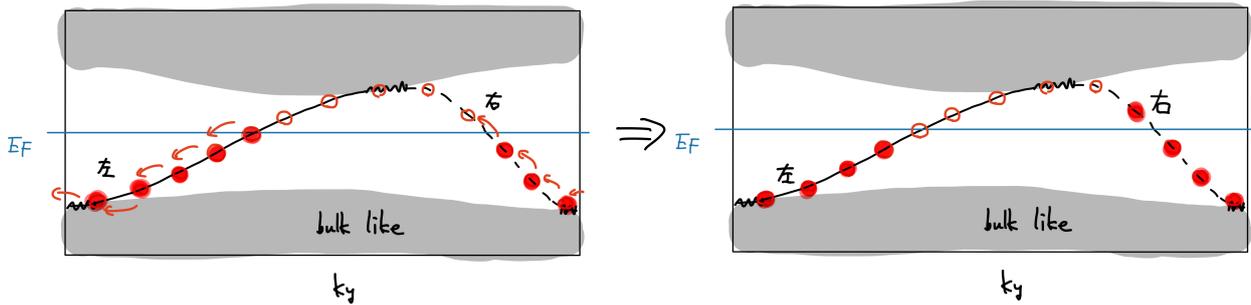


図 12 上下のバンドを繋ぐ (=gapless な) 右端に左端に局在したモードがある場合、スペクトルフローによって、左端に局在した状態一つが右端に局在した状態に移る。この図のような場合には占有バンドの Chern 数が 1 である。

$m$  番目のバンドの Chern 数  $C_m$  の間に、

$$\sum_{m=1}^n C_m = I_n \quad (3.2.1)$$

が成り立てば、どこに Fermi エネルギーがあっても、バルクだけで計算される伝導度と境界がある系で計算される伝導度が等しくなる。この関係は非常に自然な仮定（境界をつけた系でもバルクでも、系が十分に大きければマクロな物理量である伝導度は変わらない）に基づくものであるから成り立つはずであり、ここではこの関係が成り立つことを認めることにする。この関係がバルクエッジ対応である。後に簡単なモデルで具体的に計算をすることで、この対応が成り立っていることを確かめる。

バルクエッジ対応は、バルクで計算されるバンドのトポロジカルな量から、境界がついた系のエッジモードの様子が分かるという点で非常に強力な対応である。そして、Hamiltonian がバンドギャップを保ったまま連続的に変化する場合には、Chern 数（必ず整数値をとる）は変化できないから、バルクエッジ対応によれば、エッジモードは必ずずっと存在している。この意味で、このエッジモードはトポロジカルに守られた頑強な状態である。境界の形が少し変わっても、バンド描像が崩れないような小さなディスオーダーが入っても、バンドギャップが閉じない限りエッジモードは安定して存在している。

### 3.3 実験系の伝導度とエッジモードの関係

今までは、伝導度を計算するために、 $y$  方向に周期境界条件をつけて  $y$  方向に電場をかけるというセットアップで議論を進めてきた。これは実際に実験的に考えられる系とは異なっている。実際の実験におけるセットアップは、図 13 のようになっている。

実際に実験をして伝導率を求めるには以下のようにする。試料のサイズを  $L_x \times L_y$ 、 $x$  方向につけた端子

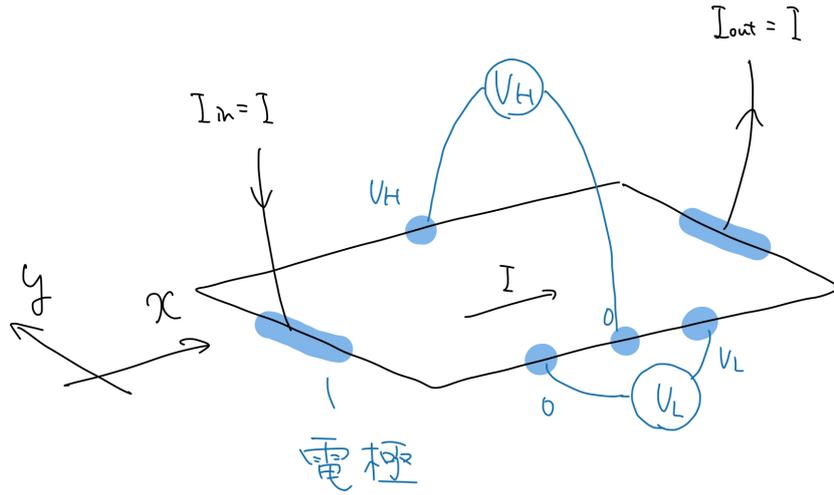


図 13 実際の実験のセットアップ.

間の距離を  $l$  とすると,  $E_y = \frac{V_H}{L_y}, E_x = \frac{V_L}{L_x}$  であり, 図 13 のようなセットアップでは,

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} V_L/l \\ V_H/L_y \end{pmatrix} \quad (3.3.1)$$

$$= \rho \mathbf{j} \quad (3.3.2)$$

$$= \begin{pmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} \\ \rho_{yx} & \rho_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I/L_y \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.3.3)$$

$$= \begin{pmatrix} \rho_{xx}I/L_y \\ \rho_{yx}I/L_y \end{pmatrix} \quad (3.3.4)$$

の関係が成り立つから, この関係式を使うことで  $\rho_{xx}$  と  $\rho_{yx}$  を測定することができる. 試料を  $90^\circ$  回転させて  $\rho_{yy}, \rho_{xy}$  を測定すれば抵抗率テンソルが求まる. 最後に逆行列をとって, 伝導率テンソルが求められる.

さて, 境界  $y = \text{const.}$  にあるエッジモードが, 前の節で考えたようなよくあるようなバンド構造 (図 11) になっているとしよう. エッジモードの群速度は  $v_x = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{k_x}}{\partial k_x}$  で与えられるから, エッジモードの電子は全て同じ方向に動いていて, さらに  $y = L_y$  と  $y = 0$  のエッジモードの電子は逆向きに動いていることが分かる.  $y = L_y$  のエッジモードの電子 (エネルギーはバンドギャップの間に位置する) が後方散乱されて向きを変える場合, エネルギーがあまり変わらないとすると  $y = 0$  のエッジモードに移らないといけない. 試料の幅  $L_y$  がエッジモードの局在長に比べて十分長い場合, このようなこと (電子が片方の端から片方の端にジャンプするという事象) が起きる確率は非常に小さいので, エッジモードでは後方散乱がほとんど起こらないと考えられる. 従って, エッジモードを流れる電子はスイスイと流れていく.

図 11 のバンドのように Chern 数が 1 のバンドの場合には, 図 14 のように, サンプルの上側と下側にエッジモードが存在している. 占有バンドの Chern 数が 1 のときには, 上側のエッジモードでは電子が左から右に動いていて, 下側のエッジモードでは電子が右から左に動いている.  $I_{in}$  の方の電子の化学ポテンシャルを  $\mu_-$  とし,  $I_{out}$  の方の電子の化学ポテンシャルを  $\mu_+$  とする. 電流の方向と電子の運動の方向は逆なので  $\mu_+ > \mu_-$  である (あまり大きな電流は流さないとしているので,  $\mu_+ \approx \mu_-$  となっている.).

上側のエッジに化学ポテンシャルが  $\mu_-$  より大きい電子があったとすると, スイスイ流れて右端に吸収されていく. さらに上端には化学ポテンシャルが  $\mu_-$  の電子が常に左側から供給されている. 従って, 系の上端の化学ポテンシャルは  $\mu_-$  に保たれている. 下側のエッジには化学ポテンシャルが  $\mu_+$  の電子が常に右側から供給されているので, 下側のエッジの化学ポテンシャルは  $\mu_+$  に保たれている. 従って電子の占有状態

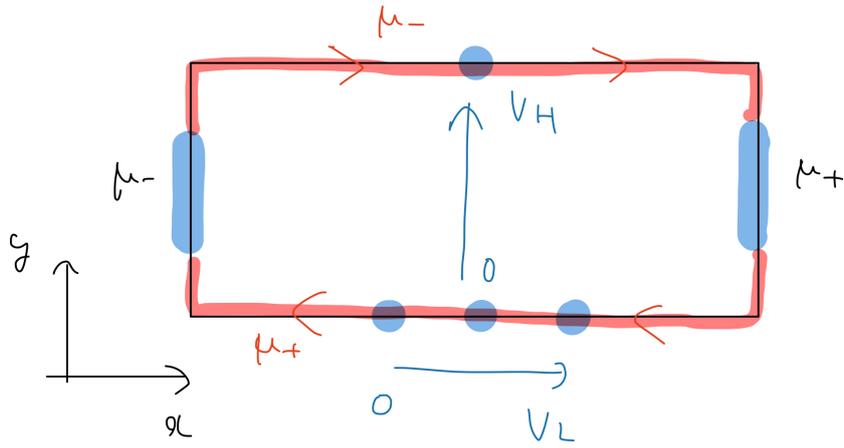


図 14 系の化学ポテンシャル.

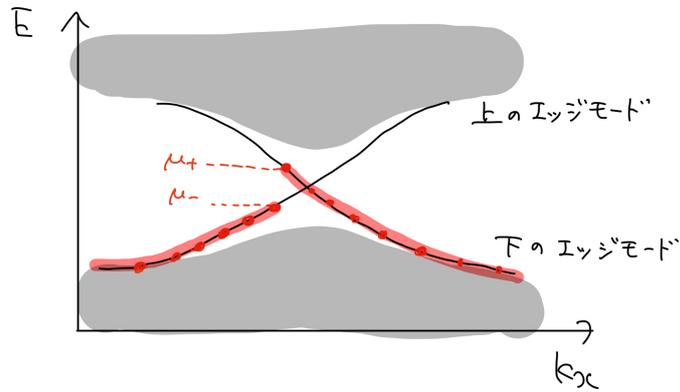


図 15 系の電子状態.

は図 15 のようになる.

エネルギースペクトルが右肩上がりのエッジモードのうち波数が  $k_{\min} < k_x < k_{\max}$  のエッジモードが占有された場合に  $x$  方向の電流密度への寄与は,

$$j_x = \frac{-e}{L_x L_y} \sum_{k_x=k_{\min}}^{k_{\max}} \langle k_x, n | \hat{v}_x | k_x, n \rangle \quad (3.3.5)$$

$$= \frac{-e}{L_y} \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \frac{dk_x}{2\pi} \langle k_x, n | \hat{v}_x | k_x, n \rangle \quad (3.3.6)$$

$$= \frac{-e}{L_y} \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \frac{dk_x}{2\pi} \frac{1}{m} \langle k_x, n | \hat{p}_x + \frac{e}{c} A_x | k_x, n \rangle \quad (3.3.7)$$

$$= \frac{-e}{L_y} \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \frac{dk_x}{2\pi} \frac{1}{m} \langle k_x, n | \hbar k_x + \frac{e}{c} A_x | k_x, n \rangle \quad (3.3.8)$$

$$= \frac{-e}{L_y} \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \frac{dk_x}{2\pi \hbar} \langle k_x, n | \frac{\partial \hat{H}_{k_x}}{\partial k_x} | k_x, n \rangle \quad (3.3.9)$$

$$= \frac{-e}{L_y} \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \frac{dk_x}{2\pi \hbar} \frac{\partial}{\partial k_x} \langle k_x, n | \hat{H}_{k_x} | k_x, n \rangle \quad (3.3.10)$$

$$= \frac{-e}{L_y} \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \frac{dk_x}{2\pi \hbar} \frac{\partial E_{k_x}}{\partial k_x} \quad (3.3.11)$$

$$= -\frac{e}{\hbar} \frac{E_{k_{\max}} - E_{k_{\min}}}{L_y} \quad (3.3.12)$$

となる。エネルギースペクトルが右肩下がりのエッジモードはその逆になるから、図 15 の電子状態の場合に系の電流密度は、

$$j_x = \frac{e}{h} \frac{\mu_+ - \mu_-}{L_y} \quad (3.3.13)$$

$$= \frac{e}{h} \frac{(-e\phi_+) - (-e\phi_-)}{L_y} \quad (3.3.14)$$

$$= \frac{e^2}{h} \frac{V_H}{L_y} \quad (3.3.15)$$

$$= -\frac{e^2}{h} E_y \quad (3.3.16)$$

となる。この議論から分かるように、エッジモードのペアの数が  $I_n$  であるときには、

$$j_x = -I_n \frac{e^2}{h} E_y \quad (3.3.17)$$

となる。  $V_L = 0$  であることも図を見ると明らかなので、フェルミエネルギーが  $n$  番目のバンドと  $n+1$  番目のバンドの間にあるときは、  $\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h} I_n$  が成り立つという、以前の結果が再現された。

仮想的に周期境界条件をつけたり外したりして考えたバルクエッジ対応及びエッジモードが、実際に実験で伝導度を測定する場合においても整合的になるということが以上の議論のポイントである。

### 3.4 簡単な 2 準位系におけるバルクエッジ対応

ここでは、簡単なモデルについて数値計算をして、チャーン数とエッジ状態が整合的になっていることを確かめる。

以下で仮定するモデルはやや天下一りに思えるかもしれない。これは波数空間の Hamiltonian をいきなり導入していることがその原因の一つだろう。実空間に戻して考えると、そこまで変なモデルではない（と思われると思う）のだが、とりあえずここではバルクエッジ対応を確かめるための便宜的なモデルだと思ってもらって差し支えない。

#### 3.4.1 モデル

次の Hamiltonian

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \psi(\mathbf{k})^\dagger \hat{H}(\mathbf{k}) \psi(\mathbf{k}) \quad (3.4.1)$$

$$\psi(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} a(\mathbf{k}) \\ b(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (3.4.2)$$

$$\psi(\mathbf{k})^\dagger = \left( a(\mathbf{k})^\dagger \ b(\mathbf{k})^\dagger \right) \quad (3.4.3)$$

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = (A \sin k_x) \sigma_x + (A \sin k_y) \sigma_y + \left( \Delta - 4B \sin^2 \frac{k_x}{2} - 4B \sin^2 \frac{k_y}{2} \right) \sigma_z \quad (3.4.4)$$

$$\equiv \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (3.4.5)$$

を考える。  $A > 0$  とする。

### 3.4.2 Chern 数

まず 2 バンドが閉じない条件を求める。バンドが閉じるとき、

$$0 = \mathbf{d}(\mathbf{k})^2 = (A \sin k_x)^2 + (A \sin k_y)^2 + \left( \Delta - 4B \sin^2 \frac{k_x}{2} - 4B \sin^2 \frac{k_y}{2} \right)^2 \quad (3.4.6)$$

であるが、これを可能性があるのは第一項と第二項から  $\mathbf{k} = (0, 0), (0, \pi), (\pi, 0), (\pi, \pi)$  だけである。従って第三項を考え、バンドギャップが閉じる点とパラメータの関係は

$$\Delta = 0B \leftrightarrow \mathbf{k} = (0, 0) \quad (3.4.7)$$

$$\Delta = 4B \leftrightarrow \mathbf{k} = (0, \pi), (\pi, 0) \quad (3.4.8)$$

$$\Delta = 8B \leftrightarrow \mathbf{k} = (\pi, \pi) \quad (3.4.9)$$

$$(3.4.10)$$

のようになる。従って Chern 数が変わる可能性があるのは  $\Delta = 0B, 4B, 8B$  の 3 点である。実際に 3 次元空間中で  $\mathbf{d}(\mathbf{k})$  が描く曲面がどのようなようになるかをイメージすると、

$$B > 0 \rightarrow \begin{cases} C = 0 & (\Delta < 0, \Delta > 8B) \\ C = -1 & (0 < \Delta < 4B, 4B < \Delta < 8B) \end{cases} \quad (3.4.11)$$

$$B < 0 \rightarrow \begin{cases} C = 0 & (\Delta < 0, \Delta > 8B) \\ C = 1 & (0 < \Delta < 4B, 4B < \Delta < 8B) \end{cases} \quad (3.4.12)$$

$$(3.4.13)$$

のようになっていることが分かる。(多くの場合、バンドギャップが閉じるパラメータで Chern 数は 1 だけ増減するが、 $\Delta = 4B$  では  $\mathbf{k} = (0, \pi), (\pi, 0)$  の二点でバンドが閉じていて結局 Chern 数は変わらない。)

上で述べたことから、 $\Delta$  が 0 と  $8B$  の間にあるときにバンドが非自明な構造を持っていて、開端条件で問題を解くとエッジモードが出てくることが期待される。

### 3.4.3 開端条件

$y$  方向に境界をつけたい。まずは  $y$  方向に Fourier 変換する。サイト数を  $N$ 、サイト間の間隔を 1 にとり、

$$a_{k_x, k_y} \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{-ik_y m} a_{k_x, m} \quad (3.4.14)$$

$$a_{k_x, k_y}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{ik_y m} a_{k_x, m}^\dagger \quad (3.4.15)$$

$$a_{k_x, m} \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_y} e^{ik_y m} a_{k_x, k_y} \quad (3.4.16)$$

$$a_{k_x, m}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_y} e^{-ik_y m} a_{k_x, k_y} \quad (3.4.17)$$

で Fourier 変換する。例えば

$$\sum_{k_y} -i \sin k_y a(\mathbf{k})^\dagger b(\mathbf{k}) = \sum_{k_y, m, n} -\frac{e^{ik_y} - e^{-ik_y}}{2} \frac{1}{N} e^{ik_y(m-n)} a_{k_x, m}^\dagger a_{k_x, n} \quad (3.4.18)$$

$$= \sum_m -\frac{1}{2} a_{k_x, m}^\dagger a_{k_x, m+1} + -\frac{1}{2} a_{k_x, m}^\dagger a_{k_x, m-1} \quad (3.4.19)$$

のように計算する. 添字  $k_x$  を省略して書くと,  $y$  方向の 1 次元ハミルトニアンは,

$$\hat{H}(k_x) = \sum_m \psi_m^\dagger \hat{h}_{m,m} \psi_m + \psi_m^\dagger \hat{h}_{m,m+1} \psi_{m+1} + \psi_{m+1}^\dagger \hat{h}_{m+1,m} \psi_m \quad (3.4.20)$$

$$\text{where } \begin{cases} \psi(m)^\dagger = (a_m^\dagger \ b_m^\dagger) \\ \hat{h}_{m,m} = \sin k_x \sigma_x + (\Delta - 2B - 4B \sin^2 \frac{k_x}{2}) \sigma_z \\ \hat{h}_{m,m+1} = B \sigma_z - \frac{i}{2} \sigma_y \\ \hat{h}_{m+1,m} = B \sigma_z + \frac{i}{2} \sigma_y \end{cases} \quad (3.4.21)$$

となる. この 1 次元 Hamiltonian を開端条件でとけば良い. とりあえずここでは, 数値計算によってバンド図を計算することにする. 簡単なモデルなので, 手計算によってかなりの物理的な情報を引き出すことができる. 詳しい計算は, [付録 A](#) を参照していただきたい.

### 3.4.4 数値計算

$y = \text{const.}$  の境界をつけた系のエネルギー分散を,  $y$  方向に cell を 20 個 (=site 数 40) 並べて数値計算した結果を以下に載せておく.  $B = 1$  とした. チャーン数が非自明  $C = \pm 1$  なときに, 上下のバンドをつなぐエッジモードが 1 ペア出てくる様子がわかる.

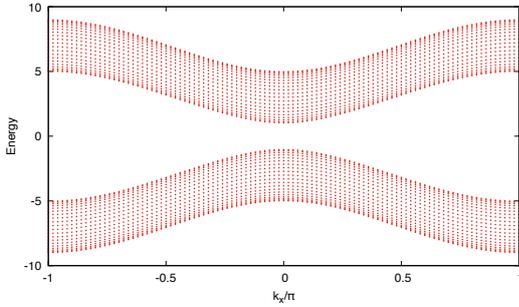


図 16  $B = 1.0, \Delta = -1.0B$

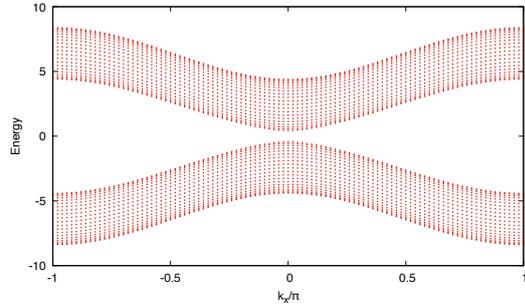


図 17  $B = 1.0, \Delta = -0.4B$

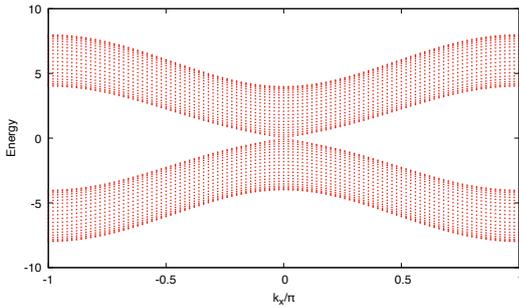


図 18  $B = 1.0, \Delta = 0.0B$

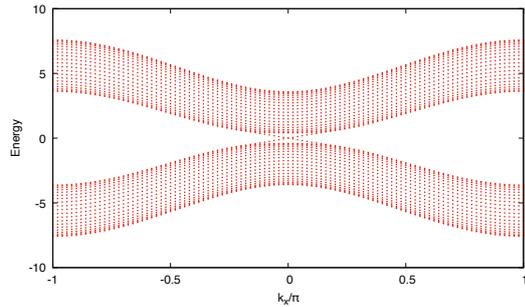


図 19  $B = 1.0, \Delta = 0.4B$

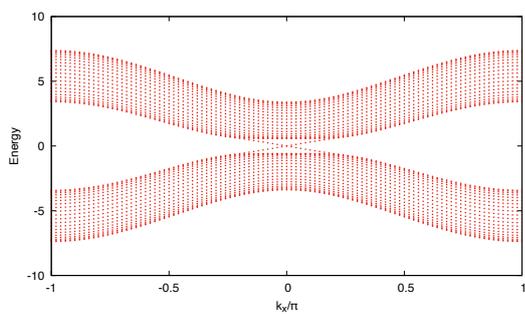


图 20  $B = 1.0, \Delta = 0.6B$

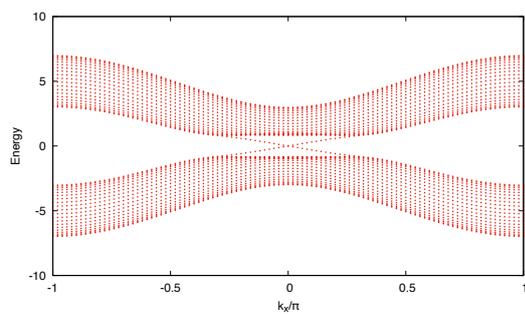


图 21  $B = 1.0, \Delta = 1.0B$

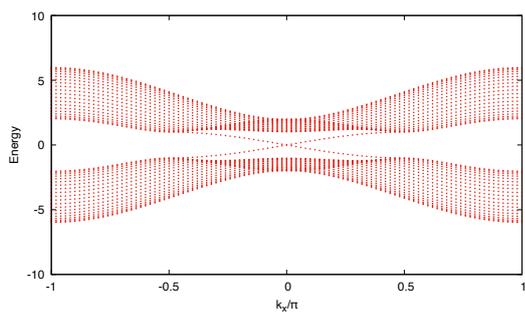


图 22  $B = 1.0, \Delta = 2.0B$

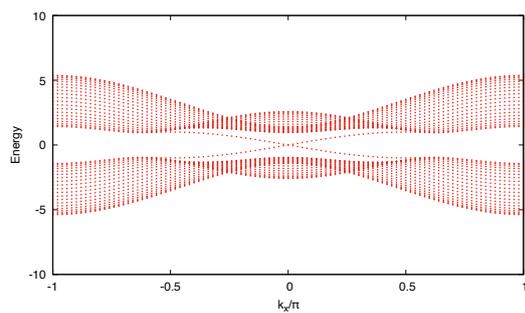


图 23  $B = 1.0, \Delta = 2.6B$

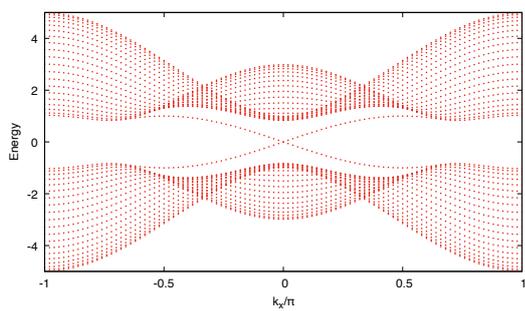


图 24  $B = 1.0, \Delta = 3.0B$

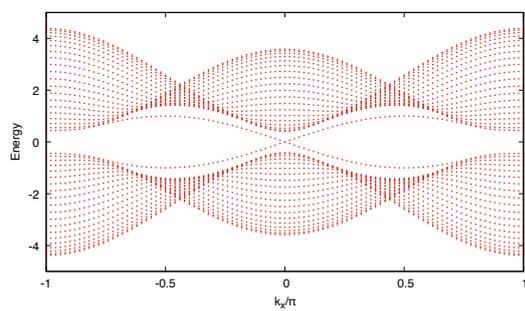


图 25  $B = 1.0, \Delta = 3.6B$

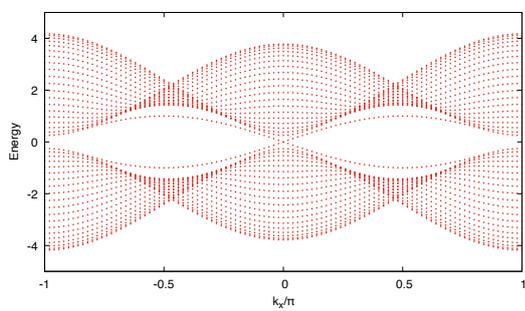


图 26  $B = 1.0, \Delta = 3.8B$

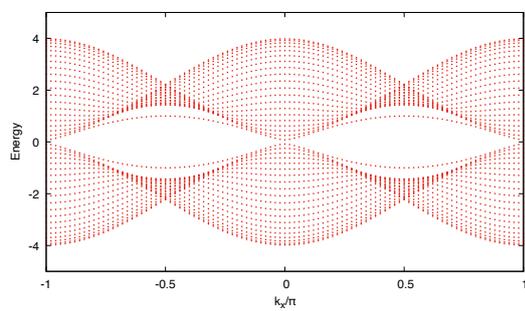


图 27  $B = 1.0, \Delta = 4.0B$

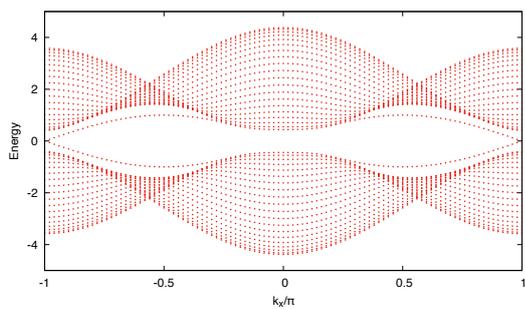


图 28  $B = 1.0, \Delta = 4.4B$

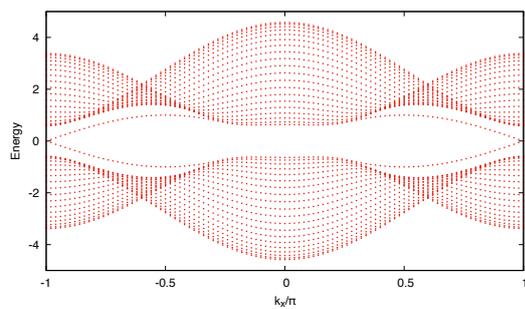


图 29  $B = 1.0, \Delta = 4.6B$

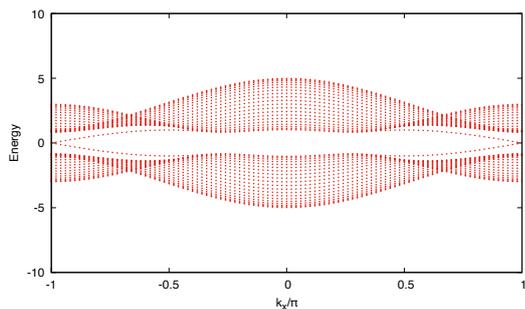


图 30  $B = 1.0, \Delta = 5.0B$

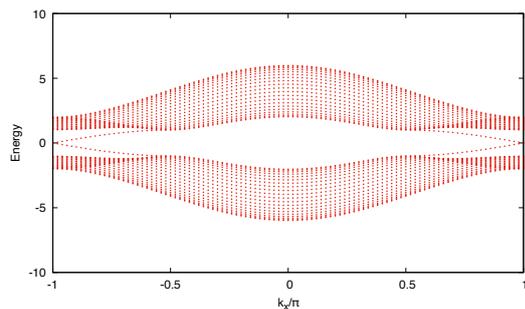


图 31  $B = 1.0, \Delta = 6.0B$

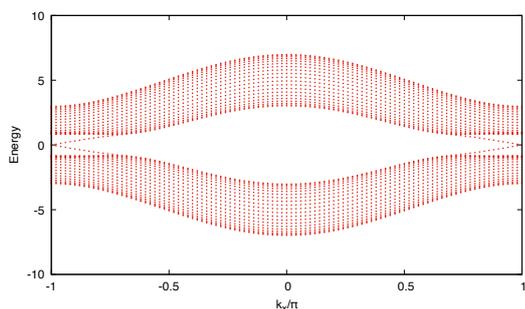


图 32  $B = 1.0, \Delta = 7.0B$

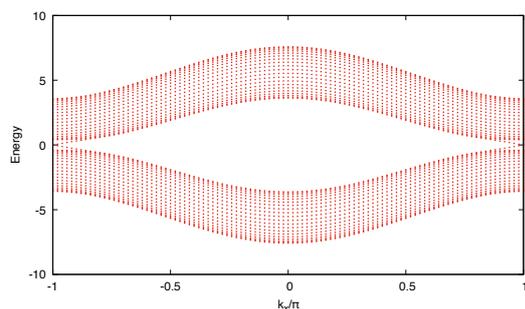


图 33  $B = 1.0, \Delta = 7.6B$

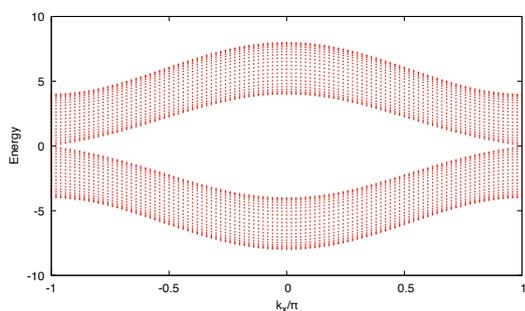


图 34  $B = 1.0, \Delta = 8.0B$

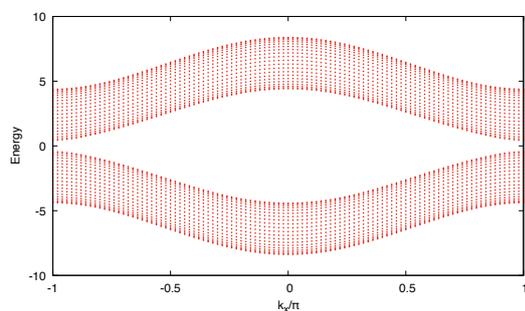


图 35  $B = 1.0, \Delta = 8.4B$

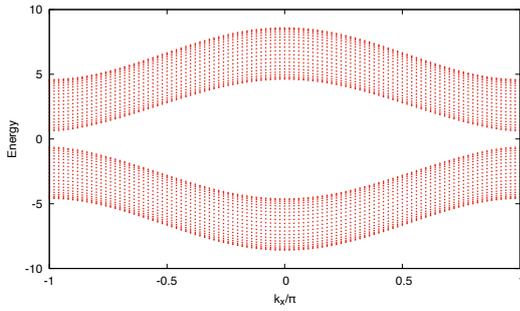


図 36  $B = 1.0, \Delta = 8.6B$

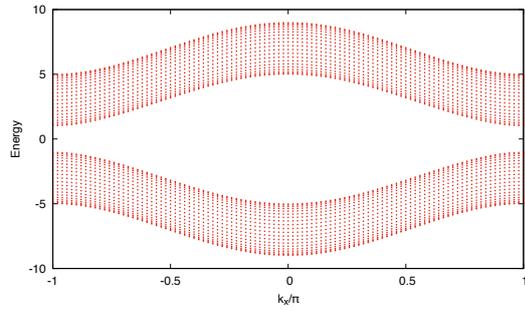


図 37  $B = 1.0, \Delta = 9.0B$

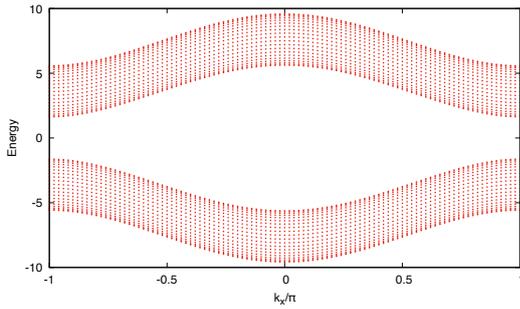


図 38  $B = 1.0, \Delta = 9.6B$

## 4 磁場中の自由電子系：再考

整数量子ホール効果の節で磁場中に置かれた自由電子系を考えた．そこでは触れなかったエッジモードの解析を，バルクエッジ対応の観点から見直すことがこの節の目標である．バルクエッジ対応の節で，バンド描像を使った議論は非常に強力であることを見てきた．従って，まずは磁場中の自由電子系を格子上に再現することから始める．最後に適切な極限で，磁場中の自由電子系と格子上の tight-binding model を対応することを定性的に議論する．この議論から，Landau 準位の伝導度がバンドのチャーン数と関係していることや，系に境界をつけた場合に Landau 準位をつなぐエッジモードが現れることが示唆される．

### 4.1 tight-binding model

電子が曲線  $C$  に沿ってベクトルポテンシャル中を移動すると，AB 位相  $\exp(-i\frac{e}{c\hbar} \int_C \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r})$  を獲得するのだった．従って，tight-binding model において，サイト  $i$  から  $j$  へのホッピングの際に，AB 位相を獲得するように，

$$\text{hopping term} : e^{i\theta_{ij}} c_j^\dagger c_i \quad (4.1.1)$$

$$\theta_{ij} = -\frac{e}{c\hbar} \int_{\mathbf{r}_i}^{\mathbf{r}_j} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \quad (4.1.2)$$

というようなモデルを考えると良いように思われる．従って，格子間隔  $a$  の格子の上で次のような tight-binding model を考える．

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle} e^{i\theta_{ij}} c_j^\dagger c_i \quad (4.1.3)$$

$$= -t \sum_{\langle ij \rangle} \exp\left(-i \frac{e}{c\hbar} \int_{\mathbf{r}_i}^{\mathbf{r}_j} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r}\right) c_j^\dagger c_i \quad (4.1.4)$$

ここで， $\mathbf{r}_i = ma\mathbf{e}_x + na\mathbf{e}_y$  のサイトを  $(m, n)$  で表すことにする． $\mathbf{r}_i = (m, n)$  から  $a\mathbf{e}_x, a\mathbf{e}_y$  だけホッピングするときの  $\theta_{ij}$  を  $\theta_{mn}^x, \theta_{mn}^y$  と書くことにする．このとき Hamiltonian は，

$$\hat{H} = \sum_{m,n} e^{i\theta_{mn}^x} c_{m+1,n}^\dagger c_{m,n} + e^{i\theta_{mn}^y} c_{m,n+1}^\dagger c_{m,n} + \text{h.c.} \quad (4.1.5)$$

と書ける．

Schrödinger 方程式は

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (4.1.6)$$

$$\Psi = -t \sum_{m,n} \psi_{m,n} c_{m,n}^\dagger |0\rangle \quad (\psi_{m,n} \in \mathbb{C}) \quad (4.1.7)$$

である．

以下で実際に，この tight-binding model の連続極限 ( $a \rightarrow +0$ ) をとると磁場中の自由電子の Schrödinger 方程式が得られることを確かめる．確かめる方法は地道にテイラー展開するだけである．

Schrödinger 方程式中の  $c_{m,n}^\dagger |0\rangle$  の係数をとってくることによって，

$$-t \left( e^{i\theta_{m-1,n}^x} \psi_{m-1,n} + e^{i\theta_{m,n-1}^y} \psi_{m,n-1} + e^{-i\theta_{m,n}^x} \psi_{m+1,n} + e^{-i\theta_{m,n}^y} \psi_{m,n+1} \right) = E\psi_{m,n} \quad (4.1.8)$$

という漸化式が得られる．

実際に  $\theta_{mn}^\alpha$  を計算すると，

$$\theta_{mn}^\alpha = -\frac{e}{\hbar} \int_{(m,n)}^{(m,n)+a\mathbf{e}_\alpha} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \quad (4.1.9)$$

$$= -\frac{e}{c\hbar} \int_0^a ds A^\alpha((m,n) + s\mathbf{e}_\alpha) \quad (4.1.10)$$

$$= \begin{cases} -\frac{ea}{c\hbar} A^x\left(m + \frac{1}{2}, n\right) + O(a^3) & (\alpha = x) \\ -\frac{ea}{c\hbar} A^y\left(m, n + \frac{1}{2}\right) + O(a^3) & (\alpha = y) \end{cases} \quad (4.1.11)$$

が得られる．これと  $\psi_{m\pm 1,n} = \psi_{m,n} \pm a \frac{\partial \psi_{m,n}}{\partial x} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 \psi_{m,n}}{\partial x^2} + O(a^3)$  などの近似式を使うと，

$$e^{i\theta_{m-1,n}^x} \psi_{m-1,n} + e^{-i\theta_{m,n}^x} \psi_{m+1,n} - 2\psi_{m,n} \quad (4.1.12)$$

$$= \left(1 - \frac{iea}{c\hbar} A_{m-1/2,n}^x - \frac{1}{2} \left(\frac{ea}{c\hbar}\right)^2 (A_{m-1/2,n}^x)^2\right) \left(\psi_{m,n} - a \frac{\partial \psi_{m,n}}{\partial x} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 \psi_{m,n}}{\partial x^2}\right) \quad (4.1.13)$$

$$+ \left(1 + \frac{iea}{c\hbar} A_{m+1/2,n}^x - \frac{1}{2} \left(\frac{ea}{c\hbar}\right)^2 (A_{m+1/2,n}^x)^2\right) \left(\psi_{m,n} + a \frac{\partial \psi_{m,n}}{\partial x} + \frac{a^2}{2} \frac{\partial^2 \psi_{m,n}}{\partial x^2}\right) \quad (4.1.14)$$

$$- 2\psi_{m,n} + O(a^3) \quad (4.1.15)$$

$$= a^2 \frac{\partial^2 \psi_{m,n}}{\partial x^2} + a^2 \frac{ie}{c\hbar} \partial_x A_{m,n}^x \psi_{m,n} + 2a^2 \frac{ie}{c\hbar} A_{m,n}^x \partial_x \psi_{m,n} - a^2 \left(\frac{e}{c\hbar}\right)^2 (A_{m,n}^x)^2 + O(a^3) \quad (4.1.16)$$

$$= -a^2 \left(-\partial_x^2 - \frac{ie}{c\hbar} (A_x \partial_x + \partial_x A_x) + \left(\frac{e}{c\hbar}\right)^2 A^2\right) \psi_{m,n} + O(a^3) \quad (4.1.17)$$

となるから, Schrödinger 方程式は, 左辺で  $O(a^2)$  までとって,

$$\frac{ta^2}{\hbar^2} \left( -\hbar^2 \nabla^2 - \frac{ie\hbar}{c} (\nabla \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \nabla) + \left( \frac{e}{c} \right)^2 A^2 \right) \psi_{m,n} = (E + 4t) \psi_{m,n} \quad (4.1.18)$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{2m} \left( -i\hbar \nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{E + 4t}{t} \psi \quad (4.1.19)$$

となる. これは確かに磁場中における固有エネルギー  $\epsilon = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{E+4t}{t}$  の Schrödinger 方程式である.

この導出をよく見ると,

$$\theta_{mn}^\alpha = -\frac{ea}{c\hbar} A_{mn}^\alpha \quad (4.1.20)$$

としても問題ないことが分かる. (絶妙に打ち消して  $O(a^2)$  までは同じになる.) 以下では計算を簡単にするため, こちらで  $\theta_{mn}^\alpha$  を定義する.

## 4.2 Landau ゲージ における tight-binding model

Landau ゲージ  $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$  をとる.  $x$  方向に境界をつけたときに,  $k_y$  が良い量子数になっていると問題が解きやすいのでこのようなゲージをとっている. このときに,  $\theta_{mn}^\alpha$  を計算すると,

$$\begin{cases} \theta_{mn}^x = 0 \\ \theta_{mn}^y = -\frac{ea}{c\hbar} Bma = -2\pi m \frac{Ba^2}{\phi_0} \end{cases} \quad (4.2.1)$$

となる. ここで,  $\phi_0 \equiv \frac{hc}{e}$  は磁束量子である.  $\frac{Ba^2}{\phi_0}$  は一つのプラケット ( $a \times a$  のマス) を貫いている磁束と磁束量子の比である.

Magnetic Translation を思い出すと,  $\frac{Ba^2}{\phi_0} = \frac{p}{q}$  のときに,  $q \times 1$  個数分の supercell を一つの cell だと思ってバンド描像が使えることが予想される. 今は tight-binding モデルなので,  $e^{ikx}$  と  $e^{i(k+\frac{2\pi}{a})x}$  は同じになってしまうから, Magnetic translation で考えていたときよりも簡単で,

$$\hat{T}_{q,x} := \sum_{m,n} c_{m-q,n}^\dagger c_{m,n} \quad (4.2.2)$$

$$\hat{T}_y := \sum_{m,n} c_{m,n-1}^\dagger c_{m,n} \quad (4.2.3)$$

$$\hat{H} \equiv -t \sum_{m,n} c_{m+1,n}^\dagger c_{m,n} + e^{-2\pi im \frac{p}{q}} c_{m,n+1}^\dagger c_{m,n} + \text{h.c.} \quad (4.2.4)$$

が交換する. これを見ると, 系には  $N_x \times N_y = qn_x \times N_y$  個のサイトがあるとして,

$$c_{j,\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{n_x N_y}} \sum_{m=0}^{n_x-1} \sum_{n=0}^{N_y-1} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} c_{qm+j,n} \quad (4.2.5)$$

$$\text{where } \begin{cases} \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} := k_x qma + k_y na \\ j = 1, 2, \dots, q \\ k_y = \frac{2\pi m}{N_y} \frac{1}{a} \quad (m = 0, 1, \dots, N_y-1) \\ k_x = \frac{2\pi m}{n_x} \frac{1}{qa} = \frac{2\pi m}{N_x} \frac{1}{a} \quad (m = 0, 1, \dots, n_x-1) \end{cases} \quad (4.2.6)$$

$$c_{qm+j,n} = \frac{1}{\sqrt{n_x N_y}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} c_{j,\mathbf{k}} \quad (4.2.7)$$

のように演算子の Fourier 変換を定義するとブロック対角化ができることが分かる。具体的には、

$$\hat{H} = -t \sum_{j=1}^q \sum_{m=0}^{n_x-1} \sum_{n=0}^{N_y-1} c_{mq+j+1,n}^\dagger c_{mq+j,n} + e^{-2\pi i j \frac{p}{q}} c_{mq+j,n+1}^\dagger c_{mq+j,n} + \text{h.c.} \quad (4.2.8)$$

$$= \sum_{j=1}^q \sum_{\mathbf{k}} e^{i\star} c_{j+1,\mathbf{k}}^\dagger c_{j,\mathbf{k}} + e^{-2\pi i j \frac{p}{q}} e^{-ik_y a} c_{j,\mathbf{k}}^\dagger c_{j,\mathbf{k}} + \text{h.c.} \quad (4.2.9)$$

$$\text{where } \star = \begin{cases} 0 & (j = 1, \dots, q-1) \\ -qk_x a & (j = q) \end{cases} \quad (4.2.10)$$

のようになる。少々見づらいので、長さの単位を  $a$  にとって  $a = 1$  として、 $\phi := \frac{p}{q}$  と定義し直すと、

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{1,\mathbf{k}}^\dagger & \cdots & c_{q,\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} \hat{H}(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} c_{1,\mathbf{k}} \\ \vdots \\ c_{q,\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad (4.2.11)$$

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = -t \begin{pmatrix} 2 \cos(k_y + 2\pi\phi) & 1 & 0 & \cdots & e^{-iqk_x} \\ 1 & 2 \cos(k_y + 4\pi\phi) & 1 & \ddots & 0 \\ 0 & 1 & 2 \cos(k_y + 6\pi\phi) & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ e^{iqk_x} & 0 & \cdots & 1 & 2 \cos(k_y + 2q\pi\phi) \end{pmatrix} \quad (4.2.12)$$

である。あとは、この  $q \times q$  の Hamiltonian を対角化すれば、Magnetic Brillouin Zone  $\left[0, \frac{2\pi}{q}\right] \times [0, 2\pi]$  上の  $q$  個のサブバンドが得られる。

### 4.3 開端方向に境界をつけた場合の tight-binding model

$x$  方向に境界をつける。同じ Landau ゲージをとる。依然として  $k_y$  は良い量子数である。このとき、 $y$  方向のみ Fourier 変換することができる。即ち、

$$c_{m,k_y} = \frac{1}{\sqrt{N_y}} \sum_{n=0}^{N_y-1} e^{-ik_y n} c_{m,n} \quad (4.3.1)$$

$$c_{m,n} = \frac{1}{\sqrt{N_y}} \sum_{k_y} e^{ik_y n} c_{m,k_y} \quad (4.3.2)$$

$$(4.3.3)$$

と定義して、( $a = 1$  とした.)

$$\hat{H} = \sum_{k_y} c_{m,k_y}^\dagger H(k_y) c_{m,k_y}. \quad (4.3.4)$$

ただし、

$$\hat{H}(k_y) = -t \left( \sum_{m=1}^{N_x-1} c_{m+1,k_y}^\dagger c_{m,k_y} + \sum_{m=1}^{N_x} e^{-2\pi i m \frac{p}{q} - ik_y} c_{m,k_y}^\dagger c_{m,k_y} \right) + \text{h.c.} \quad (4.3.5)$$

$$= -t \left( \sum_{m=1}^{N_x-1} c_{m+1,k_y}^\dagger c_{m,k_y} + \text{h.c.} \right) - t \sum_{m=1}^{N_x} 2 \cos(k_y + 2\pi m \phi). \quad (4.3.6)$$

となる。これを解けば、エッジモードが存在しているかが分かる。

#### 4.4 Chern 数とエッジのペア数の関係 (結果のみ)

今は  $k_y$  が良い量子数なので, 図 39 のように,  $k_y$  を増やしていったときに, 右端に局在したモードが下のバンドに入ったのち左端に局在したモードに変わっているときにペア数を +1, その逆のときにペア数を -1 と数える.  $n$  番目のバンドと  $n+1$  番目のバンドの間のエッジモードのペア数を  $I_n$  とする.  $n$  番目のバンドの Chern 数を  $C_n$  とする. この系に関しては, 次の結果が知られている (Tong に書いてあった文献を引っ張る).

$$r = qs_r + pt_r \quad (4.4.1)$$

を満たすような  $|t_r| \leq \frac{q}{2}$  をとってくると,  $t_r = I_n$  が成り立つ. さらに,

$$C_r = I_r - I_{r-1} \quad (4.4.2)$$

が成り立つ.

つまり, この系においてもバルクエッジ対応が完全に成り立つ. なお, 伝導度は,  $\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h} I_n$  で与えられる.

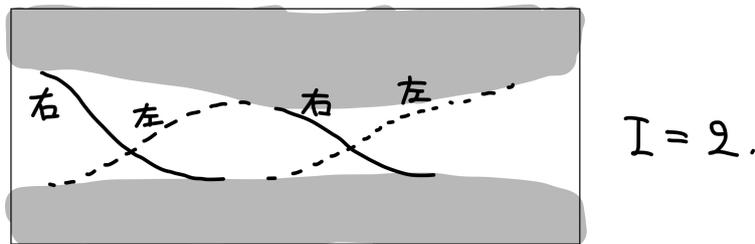


図 39  $x$  方向を切り開いた場合のエッジのペア数の数え方.

#### 4.5 数値計算

適当な値で数値計算したものを以下に示す.

### 4.5.1 $p = 2, q = 3$ の場合

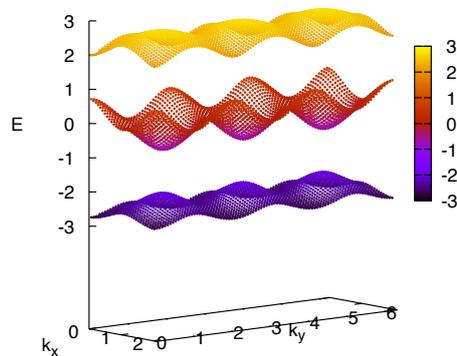


図 40  $p = 2, q = 3$ . バルクのバンド構造.  $k_x$  のとる値が 0 から  $\frac{2\pi}{3}$  になり, Brillouin Zone が小さくなっていることに注意.

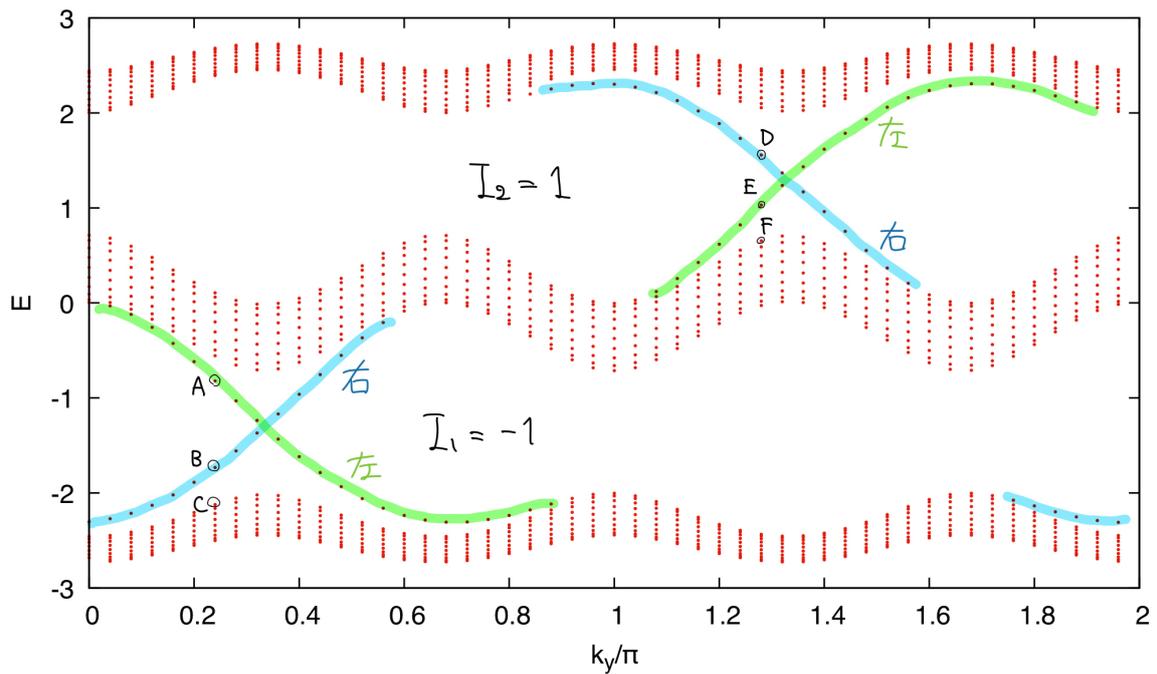


図 41  $p = 2, q = 3$ .  $x$  方向に境界をつけた. エッジ状態の左右の局在はこの図のようになっている.  $I_1 = -1, I_2 = 1$  となっていて, これは前節で (結果だけ) 示したものを確かに再現している.

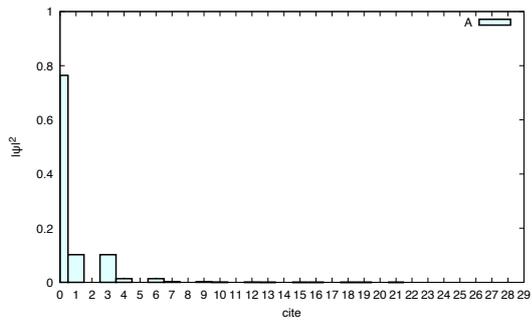


図 42 図 41 の状態 A における確率分布. 系の左端に局在している様子が分かる.

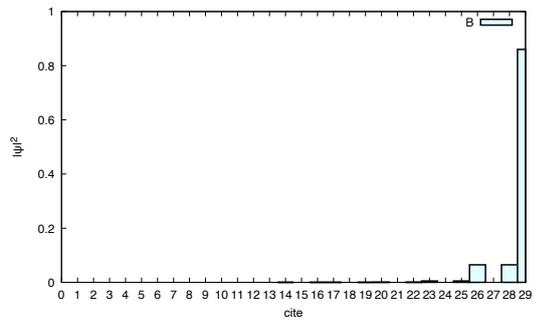


図 43 図 41 の状態 B における確率分布. 系の右端に局在している様子が分かる.

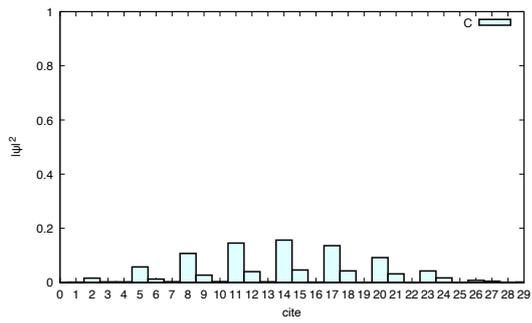


図 44 図 41 の状態 C における確率分布. bulk-like になっていることが分かる.

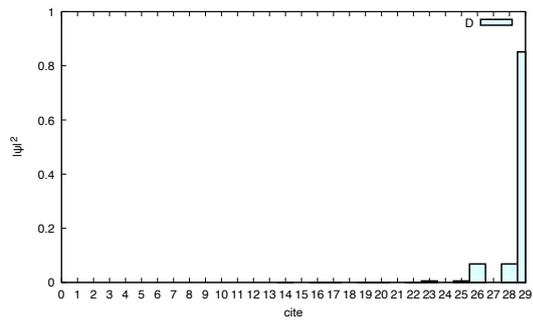


図 45 図 41 の状態 D における確率分布. 系の右端に局在している様子が分かる.

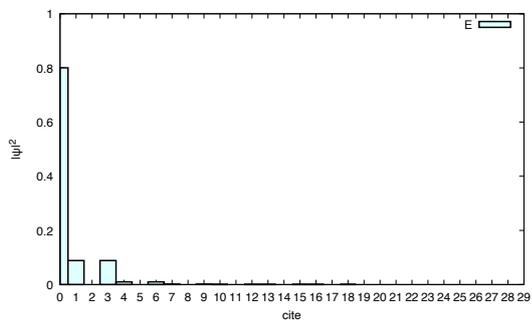


図 46 図 41 の状態 E における確率分布. 系の左端に局在している様子が分かる.

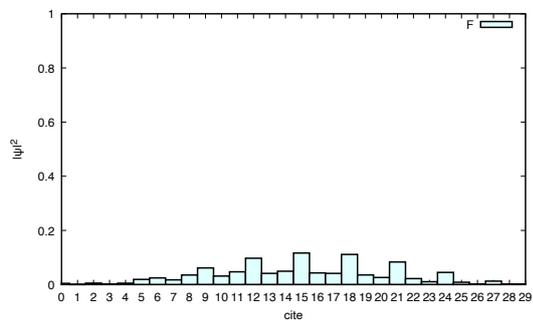


図 47 図 41 の状態 E における確率分布. bulk-like になっていることが分かる.

### 4.5.2 $p = 1, q = 5$ の場合

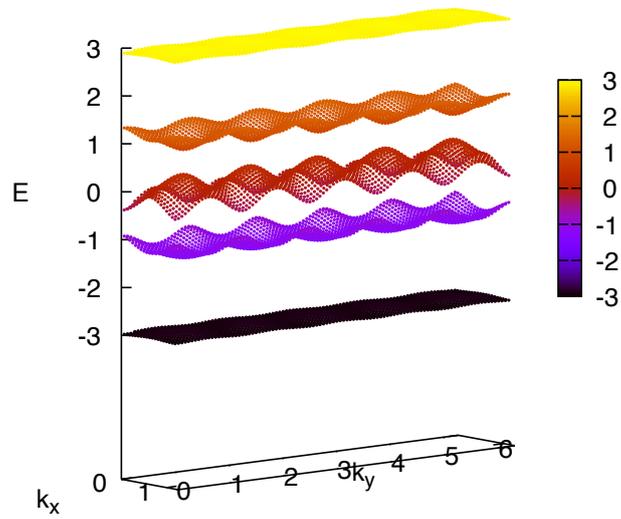


図 48  $p = 1, q = 5$ . バルクのバンド構造.  $k_x$  のとる値が 0 から  $\frac{2\pi}{5}$  になり, Brillouin Zone が小さくなっていることに注意.

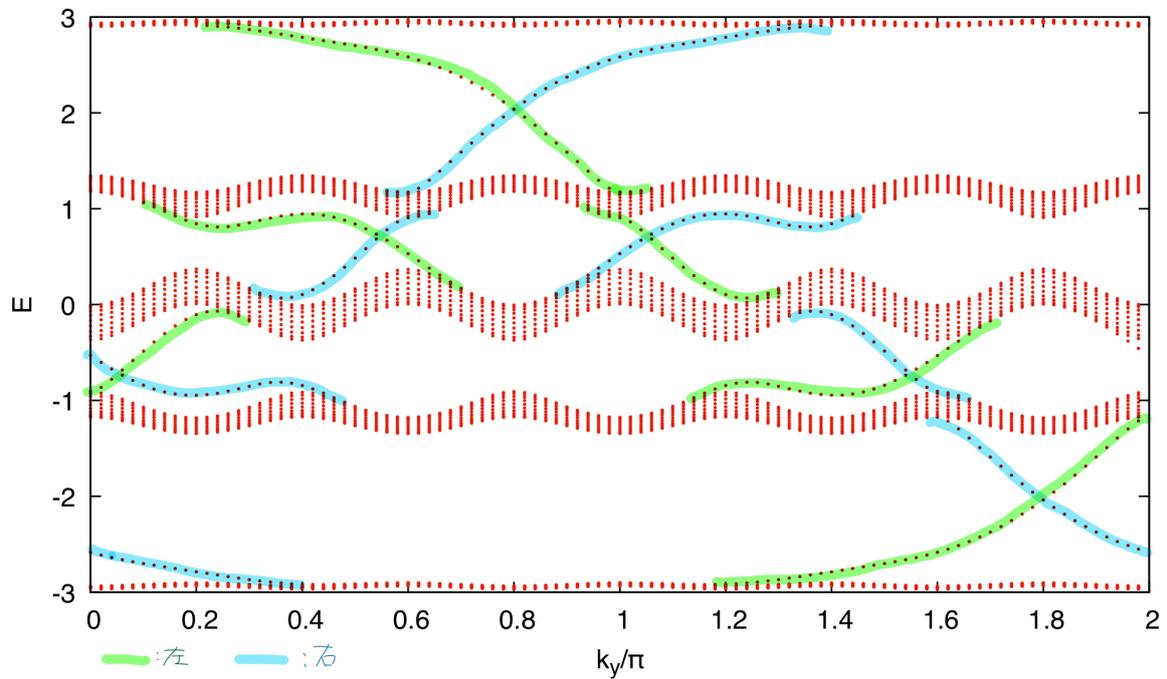


図 49  $p = 1, q = 5$ .  $x$  方向に境界をつけた. エッジ状態の左右の局在はこの図のようになっている.  $I_1 = 1, I_2 = 2, I_3 = -2, I_4 = -1$  である.

### 4.5.3 $p = 2, q = 5$ の場合

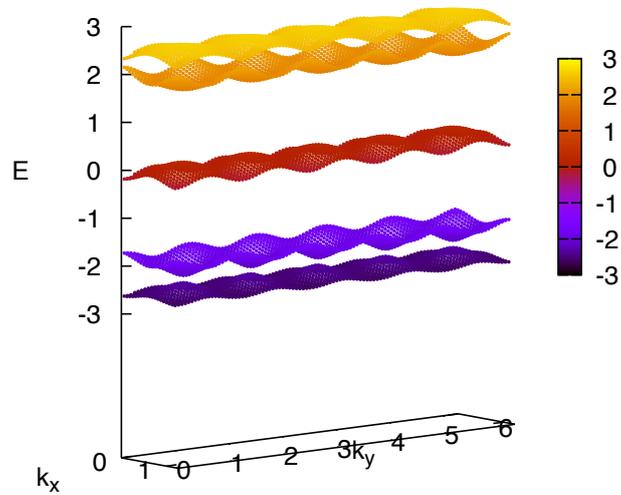


図 50  $p = 2, q = 5$ . バルクのバンド構造.  $k_x$  のとる値が 0 から  $\frac{2\pi}{5}$  になり, Brillouin Zone が小さくなっていることに注意.

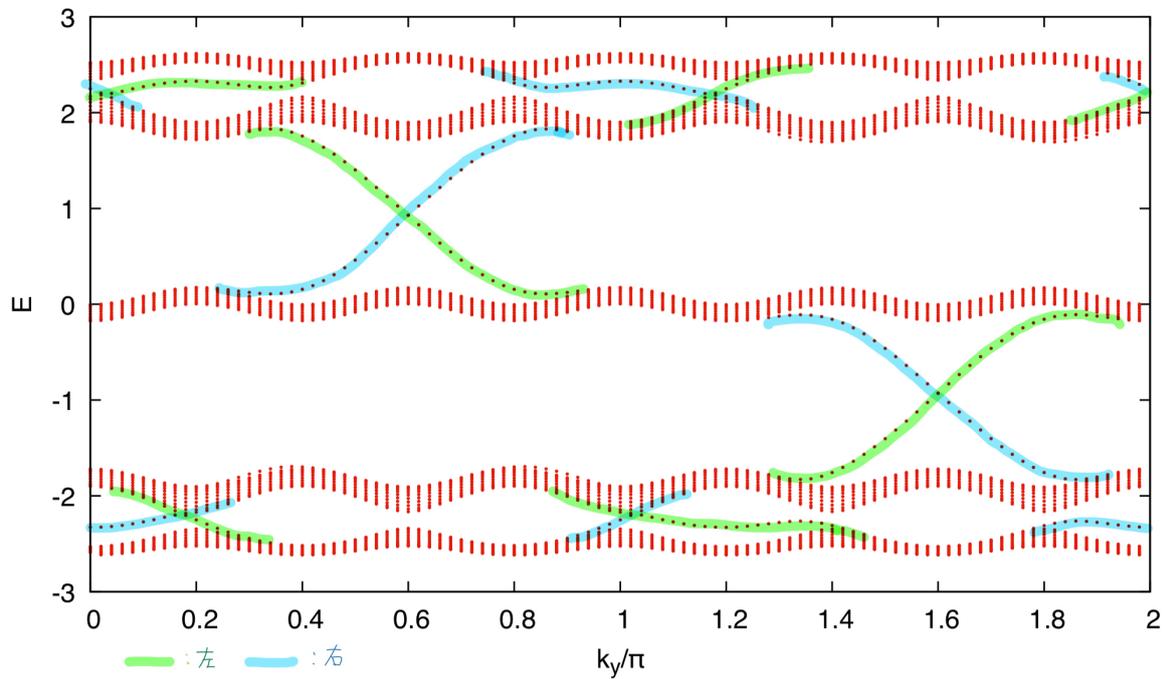


図 51  $p = 2, q = 5$ .  $x$  方向に境界をつけた. エッジ状態の左右の局在はこの図のようになっている.  $I_1 = -2, I_2 = 1, I_3 = -1, I_4 = 2$  となっていて, これは前節で (結果だけ) 示したものを確かに再現している.

## 4.6 量子 Hall 系のエッジ状態

ここで扱っていた tight-binding model では、Schrödinger 方程式は、 $O(a^2)$  までで、

$$\frac{1}{2m} \left( -i\hbar\nabla + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 \psi = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{E + 4t}{t} \psi \quad (4.6.1)$$

となるのだった。

全サイト数が  $N_x N_y = q n_x N_y$  であるとき、 $k_x = \frac{2\pi m}{aq n_x} (m = 1, \dots, n_x)$ ,  $k_y = \frac{a2\pi m}{N_y} (m = 1, \dots, N_y)$  となるから、一つの Magnetic サブバンドあたりの状態数（単位面積当たり）は、

$$n_x N_y \times \frac{1}{N_x N_y a^2} = \frac{1}{q a^2} \quad (4.6.2)$$

である。今は一つのプラケット（面積は  $a^2$ ）あたりを貫く磁束  $B a^2$  が  $\frac{p}{q} \phi_0$  となるように  $\frac{p}{q}$  が定義されているから、磁場は  $B = \frac{p}{q} \frac{\phi_0}{a^2}$  となっている。

一方で Landau 準位の単位面積当たりの状態数は、 $\frac{B}{\phi_0}$  だったことを思い出すと、今のように磁場が  $\frac{p}{q} \frac{\phi_0}{a^2}$  であるときには、単位面積当たりの Landau 準位の状態数は  $\frac{p}{q a^2}$  となる。式 (4.6.2) と見比べると、 $p = 1$  として  $B = \frac{\phi_0}{q a^2}$  となるように  $a \rightarrow 0, q \rightarrow \infty$  の極限をとったものが Landau 準位に対応すると考えられる。

$\hat{H}(\mathbf{k})$  (式 (4.2.12)) を見ると、一行に含まれる全成分の絶対値の総和は  $4t$  を超えないから、 $-4t \leq E \leq 4t$  という評価ができる。この間に  $q$  個のバンドができるから、tight-binding model におけるバンド間のエネルギー  $\Delta E$  の見積もりは、 $8t/q$  であり、これと Schrödinger 方程式におけるエネルギー  $\epsilon = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{E+4t}{t}$  との対応を思い出すと、連続極限 ( $B = \frac{\phi_0}{q a^2}$  となるように  $a \rightarrow 0$ ) におけるエネルギースペクトルは、

$$E_n \approx \frac{8}{q} \times n \times \frac{\hbar^2}{2ma^2} = \frac{8\hbar^2 n}{2m} \frac{1}{q a^2} = \frac{8\hbar^2 n}{2m} \frac{B}{\phi_0} = \frac{2}{\pi} \times n \hbar \frac{eB}{mc} \approx n \hbar \omega_C \quad (4.6.3)$$

となり、エネルギースペクトルは Landau 準位と大体は整合的になっていることが容易に分かる。

さらに、 $p = 1$  のときには、

$$r = q s_r + p t_r \quad (4.6.4)$$

の解は、 $r < q/2$  のときには、 $(s_r, t_r) = (0, r)$  となるから、

$$\begin{cases} I_r = r \\ C_r = 1 \end{cases} \quad \text{where } \left( r < \frac{q}{2} \right) \quad (4.6.5)$$

が得られる。従って、tight-binding model を解いて得られる下半分のエネルギーバンドの Chern 数は 1 になる。これは確かに、自由電子系で得られた Landau level 一つ当たりの伝導度  $\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h}$  と整合的である。

以上の考察から、定性的には、連続極限  $a \rightarrow 0$  における下半分のエネルギーバンドは Landau 準位と対応すると考えられる。このような視点からは、境界がある磁場中の 2 次元自由電子系の端には、トポロジカルに守られたエッジ状態が出現することが予想できる。これが最初に磁場中の 2 次元自由電子系を説明したときには先延ばしにした、エッジ状態に関する考察である。

## 参考文献

- [1] K. Klitzing, G. Dorda, M. Pepper, New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance. *Phys. Rev. Lett.* **45**, 494 (1980).

- [2] M. Kohmoto, Topological invariant and the quantization of the Hall conductance. *Ann. Phys.* **160**, 343 (1985).
- [3] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Phys. Rev. Lett.* **49**, 405 (1982).
- [4] D. Tong, Lectures on the Quantum Hall Effect. <https://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/qhe.html>
- [5] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Holt- Saunders, Philadelphia, 1976).
- [6] E. Fradkin, *Field Theories of Condensed Matter Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2013).
- [7] S.-Q. Shen, *Topological Insulators* (Springer Nature, Singapore, 2017).
- [8] D. Vanderbilt, *Berry Phases in Electronic Structure Theory* (Cambridge University Press, Cambridge, 2018).
- [9] 野村健太郎『トポロジカル絶縁体・超伝導体』(丸善出版, 東京, 2016).
- [10] 吉岡大二郎『量子ホール効果』(岩波書店, 東京, 1998).
- [11] 初貝 安弘「量子ホール効果 その意義と 幾何学的・代数的構造」(第 46 回物性若手夏の学校講義). [http://rhodia.ph.tsukuba.ac.jp/~hatsugai/modules/pico/index.php?content\\_id=17](http://rhodia.ph.tsukuba.ac.jp/~hatsugai/modules/pico/index.php?content_id=17)

## 付録 A 簡単な 2 準位系におけるバルクエッジ対応

考えるモデルを思い出しておく.

### A.1 モデル

考えるバルクの Hamiltonian は,

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \psi(\mathbf{k})^\dagger \hat{H}(\mathbf{k}) \psi(\mathbf{k}) \quad (\text{A.1.1})$$

$$\psi(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} a(\mathbf{k}) \\ b(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.2})$$

$$\psi(\mathbf{k})^\dagger = \left( a(\mathbf{k})^\dagger \ b(\mathbf{k})^\dagger \right) \quad (\text{A.1.3})$$

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = A \sin k_x \sigma_x + A \sin k_y \sigma_y + \left( \Delta - 4B \sin^2 \frac{k_x}{2} - 4B \sin^2 \frac{k_y}{2} \right) \sigma_z \quad (\text{A.1.4})$$

$$\equiv \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (\text{A.1.5})$$

である.  $A > 0$  とする.

### A.2 Chern 数

下のバンドのチャーン数  $C$  は,

$$B > 0 \rightarrow \begin{cases} C = 0 & (\Delta < 0, \Delta > 8B) \\ C = -1 & (0 < \Delta < 4B, 4B \ll \Delta < 8B) \end{cases} \quad (\text{A.2.1})$$

$$B < 0 \rightarrow \begin{cases} C = 0 & (\Delta < 0, \Delta > 8B) \\ C = 1 & (0 < \Delta < 4B, 4B < \Delta < 8B) \end{cases} \quad (\text{A.2.2})$$

$$(\text{A.2.3})$$

のようになっていることが分かる。(多くの場合, バンドギャップが閉じるパラメータで Chern 数は 1 だけ増減するが,  $\Delta = 4B$  では  $\mathbf{k} = (0, \pi), (\pi, 0)$  の二点でバンドが閉じていて結局 Chern 数は変わらない.)

これから,  $\Delta$  が 0 と  $8B$  の間にあるときにバンドが非自明な構造を持っていて, 開端条件で問題を解くとエッジモードが出てくることが期待される.

### A.3 開端条件における Hamiltonian

$y$  方向に境界をつけたい. まずは  $y$  方向に Fourier 変換する. サイト数を  $N$ , サイト間の間隔を 1 にとり,

$$a_{k_x, k_y} \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{-ik_y m} a_{k_x, m} \quad (\text{A.3.1})$$

$$a_{k_x, k_y}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{ik_y m} a_{k_x, m}^\dagger \quad (\text{A.3.2})$$

$$a_{k_x, m} \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_y} e^{ik_y m} a_{k_x, k_y} \quad (\text{A.3.3})$$

$$a_{k_x, m}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_y} e^{-ik_y m} a_{k_x, k_y}^\dagger \quad (\text{A.3.4})$$

で Fourier 変換する. 添字  $k_x$  を省略して書くと,  $y$  方向の一次元 Hamiltonian は,

$$\hat{H}(k_x) = \sum_m \psi_m^\dagger \hat{h}_{m,m} \psi_m + \psi_m^\dagger \hat{h}_{m,m+1} \psi_{m+1} + \psi_{m+1}^\dagger \hat{h}_{m+1,m} \psi_m \quad (\text{A.3.5})$$

$$\text{where } \begin{cases} \psi(m)^\dagger = (a_m^\dagger \ b_m^\dagger) \\ \hat{h}_{m,m} = \sin k_x \sigma_x + (\Delta - 2B - 4B \sin^2 \frac{k_x}{2}) \sigma_z \\ \hat{h}_{m,m+1} = B \sigma_z - \frac{i}{2} \sigma_y \\ \hat{h}_{m+1,m} = B \sigma_z + \frac{i}{2} \sigma_y \end{cases} \quad (\text{A.3.6})$$

となる. この一次元 Hamiltonian を開端条件でとけば良い.

### A.4 開端条件の Hamiltonian の対称性

まず,  $A \rightarrow B$  (これは  $\sigma_x$  による変換) によって,

$$\sigma_x \hat{H}(k_x) \sigma_x = -\hat{H}(-k_x) \quad (\text{A.4.1})$$

となる. 従って,  $k_x$  におけるエネルギースペクトルをひっくり返したものが  $-k_x$  のエネルギースペクトルになる.

次に, サイト  $m$  を  $-m$  に変える変換を  $C$  とするとき,

$$(C\sigma_y)^{-1} \hat{H}(k_x) (C\sigma_y) = \sigma_y C \hat{H}(k_x) C \sigma_y = -\hat{H}(k_x) \quad (\text{A.4.2})$$

となる. 従って,  $k_x$  のエネルギースペクトルは上下対称になる. この対称性からは, 片方の端に局在した固有状態があるとき, 逆側の端に局在したエネルギーが  $-1$  倍の固有状態があることも分かる.

以上二つの対称性により, 横軸に  $k_x$  をとって縦軸にエネルギーをとってエネルギースペクトルを図示すると,  $k_x = 0, E = 0$  に対する折り返しの対称性があることがわかる (図 52).

この対称性から 0 エネルギーモードがあった場合, 必ず level crossing が起きることがわかる.

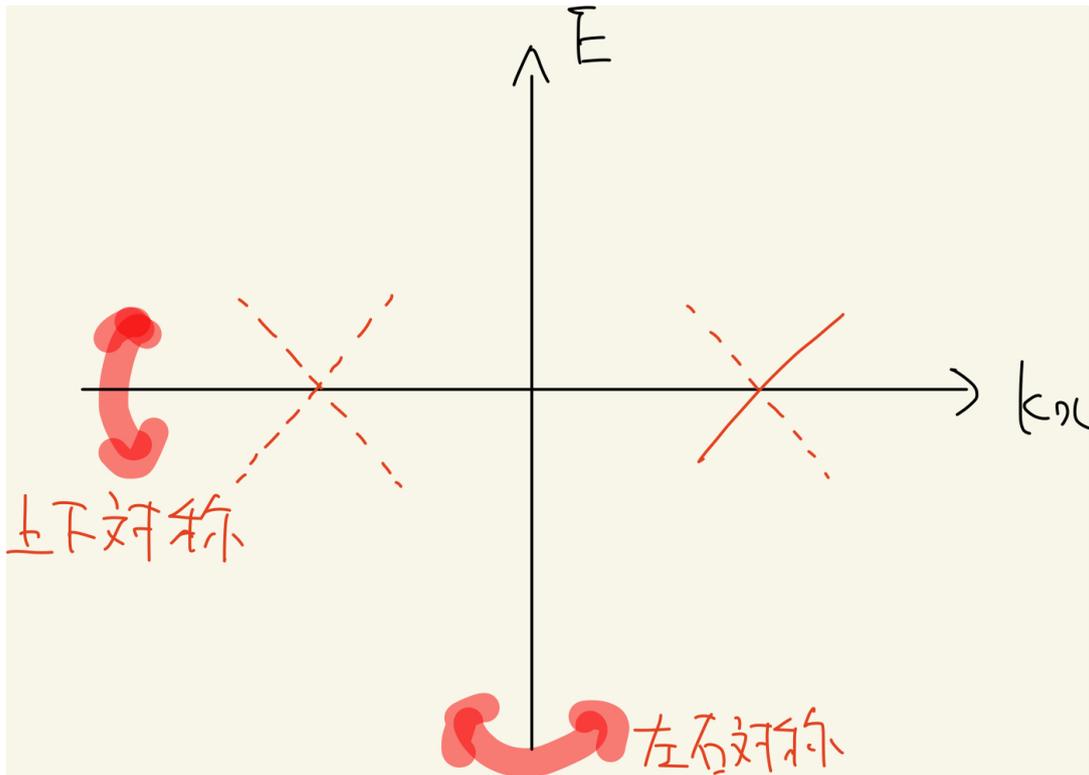


図 52 上下左右が対称なので、1つゼロモードがあると基本的に4つのゼロモードが出てくる。

この図から、基本的に level crossing (スペクトル図の  $E = 0$  における準位交差) は偶数箇所出ることがわかる。ただし、 $k_x = 0, \pi$  で level crossing がある場合は level crossing は奇数箇所になる。level crossing が奇数箇所ある場合は、上のバンドと下のバンドを繋ぐモードが少なくとも1ペア現れることになる。従って、 $k_x = 0, k_x = \pi$  にゼロモードがあるかどうか調べるのが重要になる。

バルクではバンドギャップが閉じていないときにゼロモードがあった場合、定性的にはこれがエッジモードであると考えられる。後の計算で実際にエッジに局在していることは確かめる。

$k_x = 0, \pi$  のところにゼロモードがあったとする。対称性からゼロモードは2重縮退していて、この部分空間で  $C\sigma_y$  と  $\hat{H}(k_x)$  を同時対角化できる。 $\sigma_x H(k) \sigma_x = -H(-k) = H(k)$  であることと  $\{\sigma_x, C\sigma_y\} = 0$  であることにより、 $C\sigma_y$  の固有状態は固有値1の状態と固有値-1の状態がそれぞれ一つずつであることがわかる。つまり大雑把には、奇関数になっているモードと偶関数になっているモードが一つずつあるということになる。これらのモードは端に局在しているので、右端に局在したモードと左端に局在したモードの線型結合を取り直して偶関数、奇関数にしたものがこれら二つのモードだと予想できる。実際、波動関数が両橋に局在したエネルギー固有状態があった場合、Hamiltonian は局所的であるから、左端の波動関数を0にしたものもエネルギー固有状態になっているはずである。従って右端、左端に局在したモードが crossing していると考えるのが自然であり、それらの線型結合をとった結果、偶関数、奇関数になるものが出てきたと考えるわけである。

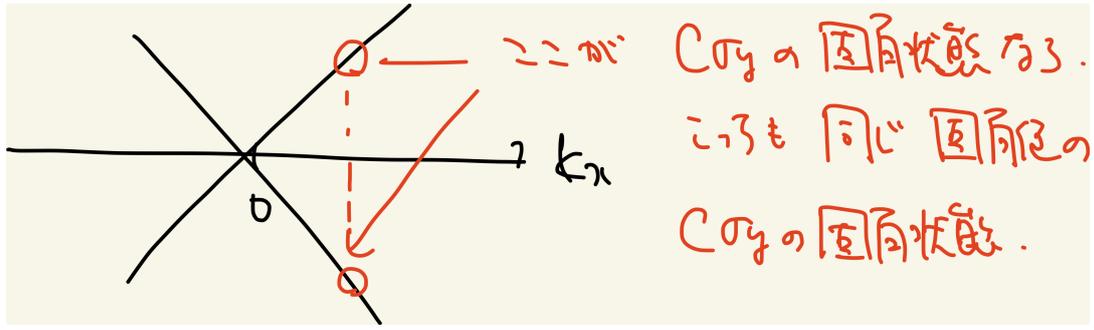


図 53 対称性から crossing している二つの状態は、もし  $C_{\sigma_y}$  の固有状態になっているなら同じ固有値を持たなければいけないが、一方で  $k_x = 0$  では二つの固有値が出てこないといけない。これはありえないので、 $C_{\sigma_y}$  の固有状態にはなっていない。より辻褃が合うのは、右端に局在したモードと左端に局在したモードが crossing しているという状況である。

結局  $k_x = 0, \pi$  にゼロモードがあれば、左と右に局在したエッジ状態が crossing して上下のバンドを繋いでいそうであるという定性的な予想が立てられた。

このようなバンド構造があれば、バルクの電子輸送 (Wannier center が chern 数の数だけ移動する) とともに辻褃があう。従って、Chern 数が非自明になっているときには  $k_x = 0$  or  $\pi$  に (右端と左端にそれぞれ局在した) エッジ状態が crossing しているだろうという定性的な理解ができる。

## A.5 バルクモード，エッジモードの解析

実際に  $k_x = 0, \pi$  にエッジモードがあるかを考えてみる。境界条件を簡単にしつつエッジモードの計算をするために、左端にのみ開端をつけて半無限系を考える。サイトのインデックス  $m$  は  $m \geq 1$  の範囲を動くとする。

$$|\Phi\rangle = \sum_m \xi_m a_m^\dagger |0\rangle + \eta_m b_m^\dagger |0\rangle \quad (\text{A.5.1})$$

$$\equiv \sum_m \xi_m |A, m\rangle + \eta_m |B, m\rangle \quad (\text{A.5.2})$$

として、

$$\hat{H}|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle \quad (\text{A.5.3})$$

に代入する。両辺の  $|A, m\rangle, |B, m\rangle$  の係数を比べることにより、

$$\begin{pmatrix} B & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_{m+1} \\ \eta_{m+1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Delta - 2B & 0 \\ 0 & -(\Delta - 2B) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_m \\ \eta_m \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} B & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & -B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_{m-1} \\ \eta_{m-1} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \xi_m \\ \eta_m \end{pmatrix} \quad (\text{A.5.4})$$

となる。境界条件は  $(\xi_{m=0}, \eta_{m=0}) = (0, 0)$  である。

$$T := B\sigma_z - \frac{i}{2}\sigma_y \quad (\text{A.5.5})$$

$$\bar{\Delta} := \Delta - 2B \quad (\text{A.5.6})$$

と定義すると、この漸化式は、

$$T \begin{pmatrix} \xi_{m+1} \\ \eta_{m+1} \end{pmatrix} + \bar{\Delta}\sigma_z \begin{pmatrix} \xi_m \\ \eta_m \end{pmatrix} + T^\dagger \begin{pmatrix} \xi_{m-1} \\ \eta_{m-1} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \xi_m \\ \eta_m \end{pmatrix} \quad (\text{A.5.7})$$

と書き直すことができる。ここで解の ansatz として,

$$\begin{pmatrix} \xi_m \\ \eta_m \end{pmatrix} = \lambda^m \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} \equiv \lambda^m |\phi\rangle \quad (\text{A.5.8})$$

を仮定しよう。これを漸化式に代入することで,

$$E|\phi\rangle = (\lambda T + \bar{\Delta} + \lambda^{-1} T^\dagger)|\phi\rangle \quad (\text{A.5.9})$$

が得られる。つまり  $|\phi\rangle$  は,

$$P := -\frac{i}{2}(\lambda - \lambda^{-1})\sigma_y + (\bar{\Delta} + B(\lambda + \lambda^{-1}))\sigma_z \quad (\text{A.5.10})$$

の固有値  $E$  の固有状態になっている。  $E$  はエネルギーなので実数でないといけないが、これが満たされるためには二つのケースがある。まず一つ目に、  $P$  の  $\sigma_y, \sigma_z$  の係数が実であるケースで、二つ目はエネルギーが 0 であるケースである。

一つ目のケースでは  $\lambda = e^{i\theta}$  となっている必要がある。このとき,

$$P = \sin\theta\sigma_y + (\bar{\Delta} + 2B\cos\theta)\sigma_z \quad (\text{A.5.11})$$

となっていて、  $E \neq 0$  である。すなわちゼロモードではないので、これは考えたいケースではない。なお、この場合は  $|\phi\rangle$  とエネルギーが同じになるような異なる  $\theta$  は存在しないので、開端の境界条件を満たす（許される）状態は構成できない。開端ではなく無限に広がっている 1 次元系であれば（境界条件がないために）許される状態となるが、これはまさに  $k_x = \theta, k_y = 0$  の Bloch 状態である。

二つ目のケースでは、  $E = 0$  ゼロモードを考えているから、これがまさに考えたいケースである。境界条件を満たすようなゼロモードが構成できる条件を考える。まず、  $E = 0$  から,

$$\pm i \left( -\frac{i}{2}(\lambda - \lambda^{-1}) \right) = \bar{\Delta} + B(\lambda + \lambda^{-1}) \quad (\text{A.5.12})$$

$$\Leftrightarrow s \frac{1}{2}(\lambda - \lambda^{-1}) = \bar{\Delta} + B(\lambda + \lambda^{-1}) \quad (s = \pm 1) \quad (\text{A.5.13})$$

が必要である。このとき  $P$  はただ一つの（ゼロエネルギー）固有状態  $(1, s)^T$  をもつ\*8。境界条件を満たすような解が構成できるためには,

$$s \frac{1}{2}(\lambda - \lambda^{-1}) = \bar{\Delta} + B(\lambda + \lambda^{-1}) \quad (\text{A.5.14})$$

を解いて得られる  $\lambda = \lambda_1, \lambda_2$  について、  $\lambda_1 \neq \lambda_2$  かつ  $|\lambda_1|, |\lambda_2| < 1$  となること\*9が必要十分であり、このとき

$$\begin{pmatrix} \xi_m \\ \eta_m \end{pmatrix} = (\lambda_1^m - \lambda_2^m) \begin{pmatrix} 1 \\ s \end{pmatrix} \quad (\text{ただし } s = -\text{sgn}B) \quad (\text{A.5.15})$$

が境界条件を満たすゼロモードを与える。このゼロモードは確かにエッジに局在した（内部にいくにつれて指数関数的に減衰する）状態になっている。

この条件は結局 2 次方程式の解の配置問題であるが、地道に調べることにより,

$$0 < \bar{\Delta}^2 < 4B^2 \Leftrightarrow \begin{cases} B > 0 \text{ のとき} & 0 < \Delta < 4B \\ B < 0 \text{ のとき} & 4B < \Delta < 0 \end{cases} \quad (\text{A.5.16})$$

\*8  $\text{Tr}P = 0, P \neq 0$  なので、固有状態が 2 つ存在することはあり得ない。

\*9 後者の条件は  $m \rightarrow \infty$  の極限で波動関数が発散しないために必要となる。

と言い換えることができる。

以上の解析は  $k_x = 0$  のものだったが,  $k_x = \pi$  の場合にも全く同様に考えることができ, ゼロモードが存在する条件は,

$$\begin{cases} B > 0 \text{ のとき} & 4B < \Delta < 8B \\ B < 0 \text{ のとき} & 8B < \Delta < 4B \end{cases} \quad (\text{A.5.17})$$

となる。

結局以上の結果をまとめると, ( $B > 0$  のとき)

$$\begin{cases} \Delta < 0, \Delta > 8B \text{ のとき} & k_x = 0, \pi \text{ にゼロモードは存在しない.} \\ 0 < \Delta < 4B \text{ のとき} & k_x = 0 \text{ にゼロエッジモードが存在. } k_x = \pi \text{ には存在しない.} \\ 4B < \Delta < 8B \text{ のとき} & k_x = \pi \text{ にゼロエッジモードが存在. } k_x = 0 \text{ には存在しない.} \end{cases} \quad (\text{A.5.18})$$

となる。従って,  $0 < \Delta < 4B$  のときには  $k_x = 0$  を通るモードによって上下のバンドがつながれることがわかり,  $4B < \Delta < 8B$  のときには  $k_x = \pi$  を通るモードによって上下のバンドがつながれることがわかる。

なお, 今の  $k_x = 0$  の解析は系の左端に境界をつけたが, 右端に境界をつける場合には  $|\tilde{\lambda}_1|, |\tilde{\lambda}_2| > 1$  となるような条件を探すことになる。ゼロモードが存在するためのパラメータの条件 ( $\Delta, B$  の大小関係) は全く同じであり, 結局ゼロモードは

$$\begin{pmatrix} \xi_m \\ \eta_m \end{pmatrix} = (\lambda_1^m - \lambda_2^m) \begin{pmatrix} 1 \\ \text{sgn}B \end{pmatrix} : \text{左端に局在} \quad (\text{A.5.19})$$

$$\begin{pmatrix} \xi_m \\ \eta_m \end{pmatrix} = (\tilde{\lambda}_1^m - \tilde{\lambda}_2^m) \begin{pmatrix} 1 \\ -\text{sgn}B \end{pmatrix} : \text{右端に局在} \quad (\text{A.5.20})$$

となることがわかる。従って, これら二つのエッジモードは  $\sigma_x$  の固有値  $\text{sgn}B$  の固有状態であることが分かる。

波数  $k_x$  が 0 から少しずれたときに Hamiltonian に入ってくる摂動項は,

$$\sin k_x \sigma_x \quad (\text{A.5.21})$$

となるから, 摂動的に考えるとき, これらの固有状態はそのまま固有状態になることがわかる<sup>\*10</sup>。従って  $k_x = 0$  で crossing がおきるとき, 次の図のような状況になっていることがわかる<sup>\*11</sup>。

\*10 今はたまたまあった対称性などがら具体的に証明している。しかし, 右端に局在した状態と左端に局在した状態が縮退している場合, local な摂動に対するこれらの行列要素が 0 になるので, 右端に局在した状態と左端に局在した状態が crossing しているという描像が一般に成り立つ。

\*11 対称性などから予想した定性的な結果が確かめられたことになる。

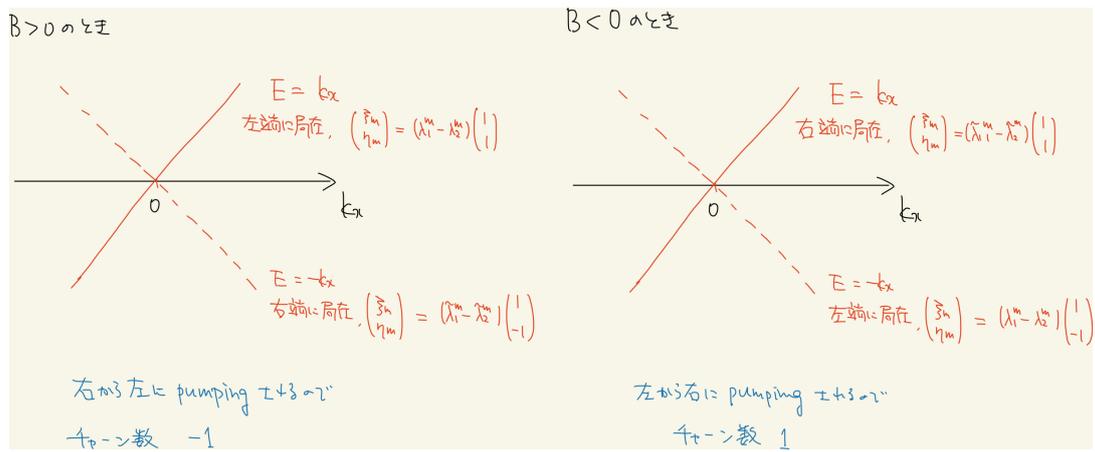


図 54  $B > 0, 0 < \Delta < 4B$  のときには左端のエッジモード（右肩上がりのエネルギー分散）と右端のエッジモード（右肩下がりのエネルギー分散）が  $k_x = 0$  で crossing して，Chern 数  $-1$  と整合的な結果を与える． $B < 0$  の場合も同様．

## A.6 簡単なまとめ

一つシンプルなモデルを仮定して，以下のことを確かめた．

- 一つのモデルに対して，Chern 数を計算して，バンドが非自明な構造を持つパラメータの範囲を求めた．
- Chern 数が 0 でないときには，電子輸送の観点から上下のバンドを繋ぐ状態が出てきて欲しい．
- 片方の方向に開端をつけた Hamiltonian の対称性をみると，今回の場合には上下のバンドを繋ぐ状態（ギャップレスなエッジモード）があるかどうかは， $k_x = 0, \pi$  のゼロモードがあるかどうかにかかわらず帰着されることが分かる．
- 実際に Chern 数が 0 でないときに， $k_x = 0, \pi$  にエッジモード（ゼロモード）があることを確かめ，上下のバンドが繋がれることを具体的に確かめた．
- 上下のバンドを繋ぐ状態（対称性から右肩上がりと右肩下がりの二つが出てくる．）は右端と左端のそれぞれに局在したエッジモードであることが確かめられた<sup>\*12</sup>．
- エッジモードの分散関係と Chern 数は整合的になっていて， $I_n$  と  $C_n$  の関係がバルクエッジ対応を満たしていることが確かめられた．（バルクエッジ対応の節では  $x$  方向に境界をつけていたが，この節では  $y$  方向に境界をつけてしまったので，ペアリングの数は符号を変える必要がある．）

物理的な観点（電子輸送など）からは成り立つのが自然である関係（バルクエッジ対応）を実際に，簡単なモデルで手を動かすことにより確かめられた<sup>\*13</sup>．

## 付録 B Berry 位相

<sup>\*14</sup> この付録では，物理的なモチベーションが分かるように Berry 位相を導入し，実際に 2 準位系で具体的な計算を行う．最後に，固体物理で重要となる Chern 数の定義を行い，自明な例では Chern 数が 0 とな

<sup>\*12</sup> 摂動的に考えることにより， $k_x$  が  $0, \pi$  からずれたところでも言えていた．

<sup>\*13</sup> いろいろな対称性があったから出来た計算だが，実際に手で色々確かめられる系というのはそんなにない気がするので，結構面白いと思う．あと計算に使った手法とかは割と汎用性があるように思われる．

<sup>\*14</sup> この付録は物性班 3 年の井ノ上が担当しました．

ることなどを説明した。

## B.1 Berry 位相, Berry 接続, Berry 曲率の説明

量子力学で学んだように, 系の Hamiltonian が時間に依存しないとき, エネルギー  $E_n$  を持つ固有状態  $|\psi_n\rangle$  は, 時間とともに  $e^{-iE_n t/\hbar} |\psi_n\rangle$  と変化する。

一般に時間に依存する Hamiltonian で記述される系を考えると, 状態ケットは時間発展のもとで,  $e^{-iE_n t/\hbar}$  以外の位相の変化を受ける。本項ではこの位相因子の導出を目標とする。

さて, Hamiltonian  $\hat{H}$  が時間変化する場合を考える。この変化が十分ゆっくりであれば, 断熱定理によって固有状態は時間変化で同じ準位に留まることが示される。

実数のパラメータの組  $\mathbf{R} = (R_1, \dots, R_N)$  に対して系の Hamiltonian  $\hat{H}[\mathbf{R}]$  が決まるとして, 各パラメータが  $\mathbf{R}(t)$  のように時間変化するとする。

単純な類推によれば, それぞれの時間で固有状態の位相は

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \longrightarrow \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n[\mathbf{R}(t')] dt'\right) \quad (\text{B.1.1})$$

と変化するように思えるが, 実際にはパラメータ  $\mathbf{R}(t)$  の断熱変化のもとで波動関数には余分な位相因子が付く。この変化分を  $i\gamma_n(t)$  として

$$|\psi_n; t\rangle = \exp\left(i\gamma_n(t) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n[\mathbf{R}(t')] dt'\right) |n, \mathbf{R}(t)\rangle \quad (\text{B.1.2})$$

と書く。ここで  $|n, \mathbf{R}(t)\rangle$  はそれぞれの時刻  $t$  における  $\hat{H}[\mathbf{R}(t)]$  のエネルギー  $E_n[\mathbf{R}(t)]$  の固有状態である。第二項は通常の位相変化である。この  $\gamma_n$  を **Berry 位相** と呼ぶ。

### B.1.1 $\gamma_n$ を求める

(B.1.2) 式の波動関数も Schrödinger 方程式に従うことを思い出して

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_n; t\rangle = \hat{H}[\mathbf{R}(t)] |\psi_n; t\rangle \quad (\text{B.1.3})$$

に代入すると,

$$0 = (\hat{H} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}) |\psi_n; t\rangle \quad (\text{B.1.4})$$

$$= (\hat{H} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}) \exp\left(i\gamma_n(t) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n[\mathbf{R}(t')] dt'\right) |n, \mathbf{R}(t)\rangle \quad (\text{B.1.5})$$

$$= \exp\left[i\gamma_n(t) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n[\mathbf{R}(t')] dt'\right] \cdot \left(\hat{H} + \hbar \frac{d\gamma_n}{dt} - E_n[\mathbf{R}(t)] - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right) |n, \mathbf{R}(t)\rangle \quad (\text{B.1.6})$$

となる。左から  $\langle n, \mathbf{R}(t)|$  を掛けて

$$\frac{d\gamma_n}{dt} = i \langle n, \mathbf{R}(t)| \frac{\partial}{\partial t} |n, \mathbf{R}(t)\rangle \quad (\text{B.1.7})$$

$$= i \langle n, \mathbf{R}(t)| \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}(t)} |n, \mathbf{R}(t)\rangle \cdot \dot{\mathbf{R}}(t) \quad (\text{B.1.8})$$

という形の式を得る。

従って,  $t = 0$  から  $t = T$  の間にパラメータ空間において  $\mathbf{R}(t)$  が閉曲線  $C$  を描く場合, Berry 位相  $\gamma_n[C]$  は

$$\gamma_n[C] = \int_0^T dt \dot{\mathbf{R}}(t) \cdot i \langle n, \mathbf{R}(t)| \nabla_{\mathbf{R}} |n, \mathbf{R}(t)\rangle \quad (\text{B.1.9})$$

となる。この式を書き換えると

$$\gamma_n[C] = \oint_C d\mathbf{R} \cdot i \langle n, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | n, \mathbf{R} \rangle \quad (\text{B.1.10})$$

$$\equiv \oint_C d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \quad (\text{B.1.11})$$

$$\equiv \int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}_n(\mathbf{R}) \quad \text{Stokes の定理} \quad (\text{B.1.12})$$

と書ける ( $S$  は  $\partial S = C$  を満たす曲面)。ここで Berry 接続, Berry 曲率をそれぞれ

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = i \langle n, \mathbf{R}(t) | \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}(t)} | n, \mathbf{R}(t) \rangle \quad (\text{B.1.13})$$

$$\mathbf{B}_n(\mathbf{R}) = \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \quad (\text{B.1.14})$$

と定義した。このように書くと Berry 位相  $\gamma_n[C]$  は (十分ゆっくりであれば) パラメータがどのように時間変化したかによらず, パラメータ空間内での軌跡のみによって決まることが分かる。このような意味で, Berry 位相は幾何学的な位相と呼ばれる。

固有状態の位相の取り方を変えるとベリー接続は変化してしまうが, ベリー曲率は変化しない。このような Berry 接続の自由度をゲージ自由度という。

## B.2 二準位系での Berry 位相の計算

Berry 位相を計算する上で簡単な例である二準位系を通して Berry 位相の量子化を見てみる。二準位系の Hamiltonian は一般的に

$$H[\mathbf{R}] = \mathbf{R} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (\text{B.2.1})$$

として書くことができる。ここで  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  は,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.2.2})$$

であり, これらはパウリ行列と呼ばれるものである。<sup>\*15</sup>

基底として  $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ,  $|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  を選ぶ。いま,  $\mathbf{R} = (R \sin \theta \cos \phi, R \sin \theta \sin \phi, R \cos \theta)$  とする。このとき Hamiltonian は

$$H[\mathbf{R}] = R(\sin \theta \cos \phi) \sigma_x + R(\sin \theta \sin \phi) \sigma_y + R(\cos \theta) \sigma_z \quad (\text{B.2.4})$$

$$= R \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \cdot e^{-i\phi} \\ \sin \theta \cdot e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (\text{B.2.5})$$

となる。

固有値  $\lambda$  に対する固有値方程式は

$$\begin{vmatrix} R \cos \theta - \lambda & R \sin \theta \cdot e^{-i\phi} \\ R \sin \theta \cdot e^{i\phi} & -R \cos \theta - \lambda \end{vmatrix} = R^2 \left( \left( \frac{\lambda}{R} \right)^2 - 1 \right) = 0 \quad (\text{B.2.6})$$

<sup>\*15</sup> 一般に  $2 \times 2$  のエルミート行列  $A$  は  $I$  を  $2 \times 2$  の単位行列として, 実数  $a, b, c, d$  を用いて

$$A = aI + b\sigma_x + c\sigma_y + d\sigma_z \quad (\text{B.2.3})$$

のように書くことができる。ここでは単位行列の定数倍を足す自由度は Berry 位相には影響しないのでここでは無視して考えることにしている。

より，固有値は  $\lambda = \pm R$  とわかる．対応する固有ベクトルはそれぞれ

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \cdot e^{-i\phi} \\ \sin \theta \cdot e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (\text{B.2.7})$$

を満たす．この方程式は解けて

$$|+, \mathbf{R}\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi/2} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad |-, \mathbf{R}\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \sin \frac{\theta}{2} \\ -e^{i\phi/2} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (\text{B.2.8})$$

と求められる．

一般に固有ケットには位相の自由度があるので，固有ケットは次のように書ける．

$$|+, \mathbf{R}\rangle = e^{-i\psi/2} \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi/2} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (\text{B.2.9})$$

$$|-, \mathbf{R}\rangle = e^{-i\psi/2} \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \sin \frac{\theta}{2} \\ -e^{i\phi/2} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (\text{B.2.10})$$

ここで  $\psi$  はパラメータ  $\mathbf{R}$  を変数とする実数値関数である．これらの固有ケットを使ってそれぞれの準位について式 (B.1.13) の Berry 接続を計算すると．

$$\mathbf{A}_+(\mathbf{R}) = i \langle +, \mathbf{R} | \nabla | +, \mathbf{R} \rangle \quad (\text{B.2.11})$$

$$= ie^{i\psi/2} \begin{pmatrix} e^{i\phi/2} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{-i\phi/2} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \times \nabla \begin{pmatrix} e^{-i(\psi+\phi)/2} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{-i(\psi-\phi)/2} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (\text{B.2.12})$$

$$= ie^{i\psi/2} \begin{pmatrix} e^{i\phi/2} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{-i\phi/2} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \frac{-i\nabla(\psi+\phi)}{2} e^{-\frac{i(\psi+\phi)}{2}} \cos \frac{\theta}{2} + e^{-\frac{i(\psi+\phi)}{2}} \cdot \nabla \left( \frac{\theta}{2} \right) \cdot (-\sin \frac{\theta}{2}) \\ \frac{-i\nabla(\psi-\phi)}{2} e^{-\frac{i(\psi-\phi)}{2}} \sin \frac{\theta}{2} + e^{-\frac{i(\psi-\phi)}{2}} \cdot \nabla \left( \frac{\theta}{2} \right) \cdot \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (\text{B.2.13})$$

$$= i \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \frac{-i\nabla(\psi+\phi)}{2} \cos \frac{\theta}{2} + \nabla \left( \frac{\theta}{2} \right) \cdot (-\sin \frac{\theta}{2}) \\ \frac{-i\nabla(\psi-\phi)}{2} \sin \frac{\theta}{2} + \nabla \left( \frac{\theta}{2} \right) \cdot \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (\text{B.2.14})$$

$$= i \left[ -\frac{i}{2} \nabla \psi - \frac{i}{2} \nabla \phi \cdot \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\theta}{2} \\ -\sin^2 \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \right] \quad (\text{B.2.15})$$

$$= \frac{1}{2} (\nabla \psi + \nabla \phi \cos \theta) \quad (\text{B.2.16})$$

と計算できる．

$\nabla \phi$  について，球面座標系での勾配は  $\nabla = e_r \frac{\partial}{\partial r} + e_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + e_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}$  だったから  $\nabla \phi = \frac{1}{r \sin \theta} e_\phi$  となって  $\theta = 0, \pi$  の部分でこの値は特異的になってしまう．これを避けるために，次のように  $\psi$  をうまく選んで  $\mathbf{A}_+$  が特異にならないように接続を書く．

$$\underline{\psi = -\phi}, \quad \mathbf{A}_+^N(\mathbf{R}) = \frac{1}{2} \cdot (-1 + \cos \theta) \nabla \phi = \frac{-1 + \cos \theta}{2R \sin \theta} e_\phi \quad (\text{B.2.17})$$

$$\underline{\psi = +\phi}, \quad \mathbf{A}_+^S(\mathbf{R}) = \frac{1}{2} \cdot (+1 + \cos \theta) \nabla \phi = \frac{+1 + \cos \theta}{2R \sin \theta} e_\phi \quad (\text{B.2.18})$$

式 (B.2.17) は  $\theta = \pi$  については特異的であるが， $\theta = 0$  については特異的ではない．逆に (B.2.18) は  $\theta = 0$  については特異的であるが， $\theta = \pi$  については特異的ではない．よって式 (B.2.17) を  $\theta \geq 0$  の上半面について用い，式 (B.2.18) を下半面について適用すればうまく接続が定義できる．

なお，二つの接続の差を計算すると，

$$\mathbf{A}_+^N(\mathbf{R}) - \mathbf{A}_+^S(\mathbf{R}) = \frac{-1}{R \sin \theta} e_\phi = -\nabla \phi \quad (\text{B.2.19})$$

となるので，確かに  $\mathbf{A}_+^N(\mathbf{R})$  と  $\mathbf{A}_+^S(\mathbf{R})$  は同じベリー曲率  $\mathbf{B}_+(\mathbf{R})$  を与えることが分かる．

また,  $|-, \mathbf{R}\rangle$  についての接続  $\mathbf{A}_-$  は, 式 (B.2.9), (B.2.10) を見ると

$$\theta \rightarrow \pi - \theta, \quad \phi \rightarrow \phi + \pi, \quad \psi \rightarrow \psi - \pi \quad (\text{B.2.20})$$

としてやれば  $|+, \mathbf{R}\rangle$  は  $|-, \mathbf{R}\rangle$  に移り変わるから, 先の結果を利用することができる.

$$\mathbf{A}_-(\mathbf{R}) = \frac{1}{2} (+\nabla\psi - \nabla\phi \cos\theta) \quad (\text{B.2.21})$$

であるから, 上半面と下半面の接続が以下のように書き下せる.

$$\underline{\psi = +\phi}, \quad \mathbf{A}_-^N(\mathbf{R}) = \frac{1}{2} \cdot (+1 - \cos\theta) \nabla\phi = \frac{+1 - \cos\theta}{2R \sin\theta} \mathbf{e}_\phi \quad (\text{B.2.22})$$

$$\underline{\psi = -\phi}, \quad \mathbf{A}_-^S(\mathbf{R}) = \frac{1}{2} \cdot (-1 - \cos\theta) \nabla\phi = \frac{-1 - \cos\theta}{2R \sin\theta} \mathbf{e}_\phi \quad (\text{B.2.23})$$

この場合もベリー接続の差は  $\mathbf{A}_+^N(\mathbf{R}) - \mathbf{A}_+^S(\mathbf{R}) = \nabla\phi$  となり, 二つが同じベリー曲率を与えることが確認できる.

Berry 接続が求まったので Berry 曲率が計算できる. 球面座標系での rot は, ベクトル解析の公式より

$$\nabla \times \mathbf{A} = \left( \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} (\sin\theta A_\phi) - \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial A_\theta}{\partial\phi} \right) \mathbf{e}_r \quad (\text{B.2.24})$$

$$+ \left( \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial A_r}{\partial\phi} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r A_\phi) \right) \mathbf{e}_\theta + \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r A_\theta) - \frac{1}{r} \frac{\partial A_r}{\partial\theta} \right) \mathbf{e}_\phi \quad (\text{B.2.25})$$

であった. 接続  $\mathbf{A}_\pm$  は  $\mathbf{e}_\phi$  成分しか持たないから, 例えば  $\mathbf{A}_+^N$  について計算してみると

$$\nabla \times \mathbf{A}_+^N = \frac{1}{R \sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} (A_\phi \sin\theta) \mathbf{e}_R - \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} (A_\phi R) \mathbf{e}_\theta \quad (\text{B.2.26})$$

$$= \frac{1}{R \sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \frac{-1 + \cos\theta}{2R \sin\theta} \sin\theta \right) \mathbf{e}_R - \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left( \frac{-1 + \cos\theta}{2R \sin\theta} R \right) \mathbf{e}_\theta \quad (\text{B.2.27})$$

$$= \frac{1}{R \sin\theta} \frac{-\sin\theta}{2R} \mathbf{e}_R + 0 \quad (\text{B.2.28})$$

$$= -\frac{1}{2} \frac{\mathbf{R}}{R^3} \quad (\text{B.2.29})$$

となる. 他も同様に計算すると

$$\mathbf{B}_\pm(\mathbf{R}) = \nabla \times \mathbf{A}_\pm^N(\mathbf{R}) = \nabla \times \mathbf{A}_\pm^S(\mathbf{R}) \quad (\text{B.2.30})$$

$$= \mp \frac{1}{2} \frac{\mathbf{R}}{R^3} \quad (\text{B.2.31})$$

が得られる. \*16

従って経路  $C$  を通るとき Berry 位相は  $\gamma_\pm$  が  $E = \pm|\mathbf{R}|$  のエネルギー準位に対応するとして, Berry 位相  $\gamma[C]_\pm$  は

$$\gamma[C]_\pm = \oint_C d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \quad (\text{B.2.32})$$

$$= \int_D d\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}_{n,\pm}(\mathbf{R}) \quad (D \text{ は } \partial D = C \text{ を満たす, ある閉曲面}) \quad (\text{B.2.33})$$

$$= \mp \frac{1}{2} \int_D \frac{\hat{\mathbf{e}}_r}{R^2} (R^2 \sin\theta) \hat{\mathbf{e}}_r d\theta d\phi \quad (\text{B.2.34})$$

$$= \mp \frac{1}{2} \int_D \sin\theta d\theta d\phi \quad (\text{B.2.35})$$

$$= \mp \frac{\Omega}{2} \quad (\text{B.2.36})$$

\*16  $N$  と  $S$  で同じ  $\mathbf{B}$  が得られることは Berry 曲率がゲージによらないことから明かなことであった.

と書ける。ここで  $\Omega$  は閉曲線  $C$  が囲む立体角である。

### B.3 チャーン数

パラメータ空間が境界のないコンパクトな 2 次元多様体であるとする。

Berry 接続  $\mathbf{B}_{n,\pm}$  をこのパラメータ空間全体に渡って積分した値は (第一)Chern 数と呼ばれ

$$C_1 = \frac{1}{2\pi} \oint_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} \quad (\text{B.3.1})$$

として定義される。この値  $C_1$  は整数になることが知られている。

実際今回の二準位系の例でパラメータ  $\mathbf{R}$  の大きさが  $|\mathbf{R}| = R$  に制限されているときを考える。このとき、パラメータ空間は半径が  $R$  の球面となり、Chern 数が定義できる条件を満たしている。このとき、Chern 数を計算してみると

$$C_{1,\pm} = \frac{1}{2\pi} \oint_S \pm \frac{\sin\theta d\theta d\phi}{2} = \pm \frac{1}{4\pi} \int_S d\Omega = \pm 1 \quad (\text{B.3.2})$$

となり、確かに整数になっていることがわかる。

今回の二準位系の計算では、パラメータ空間上全体で固有状態を滑らかに取ることはできなかった。もし全体で固有状態を滑らかに取ることができるならば、Berry 接続  $\mathbf{A}$  はグローバルに滑らかな関数になる。このようなとき一般に Chern 数はゼロになることが言える。

実際、 $\mathbf{B}$  をベリー曲率として

$$C_1 = \frac{1}{2\pi} \oint_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} \quad (\text{B.3.3})$$

$$= \frac{1}{2\pi} \oint_S \nabla \times \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S} \quad (\text{B.3.4})$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{\partial S=\emptyset} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} \quad (\text{B.3.5})$$

$$= 0 \quad (\text{B.3.6})$$

となり、確かに Chern 数がゼロとなることが分かる。<sup>\*17</sup>

## 参考文献

- [1] 野村健太郎『トポロジカル絶縁体・超伝導体』(丸善出版, 東京, 2016).

## C Bloch の定理

<sup>\*18</sup>結晶は秩序だった構造を持つ固体であり、原子・分子やイオンが周期的に配列をなしている。構造の周期性からポテンシャルにも周期性を要請することができる。ここから Schrödinger 方程式の解に位相因子を除いた周期性が現れることになる。これは **Bloch の定理**と呼ばれ、Bloch の定理を満たす関数 (状態) のことを **Bloch 関数 (状態)** と呼ぶ。

<sup>\*17</sup> 変形を見れば分かるように、パラメータ空間に境界がないことが重要となる。

<sup>\*18</sup> この付録は物性班 3 年の渡邊が担当しました。

結晶中の 1 電子の Schrödinger 方程式

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

を考え、ポテンシャル  $V(\mathbf{r})$  が周期的であるとする。つまり  $V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = V(\mathbf{r})$  (但し、 $\mathbf{R}_n$  は格子ベクトル) が成り立つとする。このときエネルギー固有関数<sup>a</sup>は

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \psi(\mathbf{r})$$

を満たすようにとれる。<sup>b</sup>

<sup>a</sup>  $\varphi(\mathbf{r})$  は状態ケット  $|\varphi\rangle$  であってもよい。以下の証明で  $\varphi(\mathbf{r})$  を  $|\varphi\rangle$  と読み替えれば全く同じことが言えるためである。

<sup>b</sup> ここで導入した  $\mathbf{k}$  は波数ベクトルと呼ばれ、単位長さ (の変位) あたりの位相を与える。Bloch 状態は波数  $\mathbf{k}$  と Landau 準位の番号  $n$  で特徴付けられる。

**Proof.** 時間に依存しない Schrödinger 方程式は、

$$\underbrace{\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right\}}_{\hat{H}(\mathbf{r})} \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (\text{C.0.1})$$

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = V(\mathbf{r}) \quad (\text{C.0.2})$$

である。(C.0.1), (C.0.2) より

$$\hat{H}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = \hat{H}(\mathbf{r}) \quad (\text{C.0.3})$$

を得る。ここで空間並進演算子  $\hat{T}_{\mathbf{R}_n}$  を

$$\hat{T}_{\mathbf{R}_n} f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) \quad (\text{C.0.4})$$

と定義する。(C.0.3), (C.0.4) より

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\mathbf{R}_n} \hat{H}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) &= \hat{H}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) \\ &= \hat{H}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) \\ &= \hat{H}(\mathbf{r}) \hat{T}_{\mathbf{R}_n} \psi(\mathbf{r}) \\ \therefore [\hat{T}_{\mathbf{R}_n}, \hat{H}(\mathbf{r})] &= 0 \end{aligned}$$

を得る。従って、 $\hat{T}_{\mathbf{R}_n}$  と  $\hat{H}(\mathbf{r})$  は可換である。

さらに、空間並進演算子  $\hat{T}_{\mathbf{a}_1}, \hat{T}_{\mathbf{a}_2}, \hat{T}_{\mathbf{a}_3}$  も可換となる。

以上により、 $\hat{T}_{\mathbf{a}_1}, \hat{T}_{\mathbf{a}_2}, \hat{T}_{\mathbf{a}_3}, \hat{H}(\mathbf{r})$  が可換である。ゆえに、Hamiltonian の固有関数  $\psi(\mathbf{r})$  は空間並進演算子  $\hat{T}_{\mathbf{a}_j}$  の固有関数にとることができる。このとき、 $\psi(\mathbf{r})$  は格子ベクトル  $\mathbf{R}_n$  分の空間並進演算子  $\hat{T}_{\mathbf{R}_n}$  の固有関数にもなっている。 $\hat{T}_{\mathbf{R}_n}$  に対する固有値を  $C(\mathbf{R}_n)$  と書くことにすると、

$$\hat{T}_{\mathbf{R}_n} \psi(\mathbf{r}) = C(\mathbf{R}_n) \psi(\mathbf{r}) \quad (\text{C.0.5})$$

と書くことができる。

また空間並進演算子の可換性より

$$C(\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2) = C(\mathbf{R}_1)C(\mathbf{R}_2) \quad (\text{C.0.6})$$

である.

ここで  $|\hat{T}_{\mathbf{R}_n}\psi(\mathbf{r})|^2 = |\psi(\mathbf{r})|^2 = 1$  と規格化されているから  $\hat{T}_{\mathbf{R}_n}$  はユニタリーである. 従って固有値  $C(\mathbf{R}_n)$  の絶対値は 1 となる.

$$|C(\mathbf{R}_n)| = 1 \quad (\text{C.0.7})$$

(C.0.6), (C.0.7) より基本並進演算子の固有値は

$$C(\mathbf{a}_j) = \exp(2\pi i\theta_j) \quad (\theta_j: \mathbf{a}_j \text{ に対応する位相})$$

と表せる.

並進ベクトル  $\mathbf{R}_n$  は基本並進ベクトル  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  の整数倍の和で表せるので,  $\mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$  ( $n_j \in \mathbb{Z}, j = 1, 2, 3$ ) とおくと, (C.0.6) により,

$$\begin{aligned} C(\mathbf{R}_n) &= C(n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3) \\ &= C(n_1\mathbf{a}_1)C(n_2\mathbf{a}_2)C(n_3\mathbf{a}_3) \\ &= C(\mathbf{a}_1)^{n_1}C(\mathbf{a}_2)^{n_2}C(\mathbf{a}_3)^{n_3} \\ &= \exp[2\pi i(n_1\theta_1 + n_2\theta_2 + n_3\theta_3)] \end{aligned}$$

が成立する. ここで

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

となるように  $\mathbf{b}_j$  ( $j = 1, 2, 3$ ) を取り,

$$\mathbf{k} = \theta_1\mathbf{b}_1 + \theta_2\mathbf{b}_2 + \theta_3\mathbf{b}_3$$

とおくと

$$C(\mathbf{R}_n) = \exp[2\pi i(n_1\theta_1 + n_2\theta_2 + n_3\theta_3)] = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n)$$

となり, 証明が終了する. □

定理のイメージポテンシャルが周期的なら波動関数も

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n) = \psi(\mathbf{r})$$

のように周期的に戻って欲しいと思うかも知れない. しかし, 量子力学的な状態は位相の違いを区別することができないのだった. それゆえ, 格子ベクトル分の並進を経て同じポテンシャルに至ってもずれの因子  $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n}$  が波動関数にかかることになると考えれば上の主張は自然に思える.

## 参考文献

- [1] 野村健太郎『トポロジカル絶縁体・超伝導体』(丸善出版, 東京, 2016).
- [2] 矢口裕之『初歩から学ぶ固体物理学』(講談社, 東京, 2017).