Physics Lab. 2024 統計物理班

中柴柊馬

トポロジカル物性

1　必要な量子力学

エネルギーの演算子と固有状態

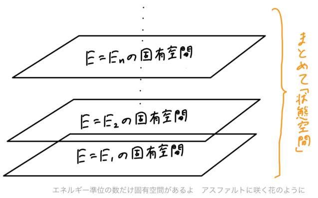
量子力学では物理量を「状態」に作用する演算子によって表します。
量子論では不確定性のために全ての物理量の値を同時に決定できませんが、ある一つの物理量の値が定まった状態を考えることは可能です。物性物理ではそのような物理量としてエネルギーを採用します。
系が「n 番目に低いエネルギー準位 E_n にいる」という状態は、エネルギーを表す演算子 (**ハミルトニアン**) によって

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle$$

となります。つまり、これは物理系の状態の情報を担う演算子です。

物理状態がつくる空間

同じエネルギーの値を持つ状態が複数存在する時、エネルギー準位に**縮退がある**といいます。エネルギー E_n の縮退した状態たちを集めてなす空間をエネルギー E_n の**固有空間**、その元は**固有状態**と呼びます。各エネルギー準位ごとに固有空間があり、全てのエネルギー固有空間を合わせたものが電子の状態の住む空間 (**状態空間**) です。

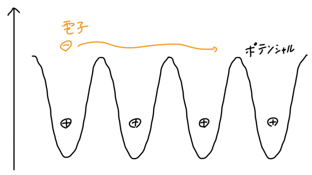


状態空間と固有空間のイメージ図

2　状態空間の構造

波数空間表示

結晶中では格子状に配置された原子核が周期的なポテンシャルを作り、位置を格子間隔 a の分だけずらしても性質が同じという**並進対称性**があります。



結晶中の周期ポテンシャルのイメージ

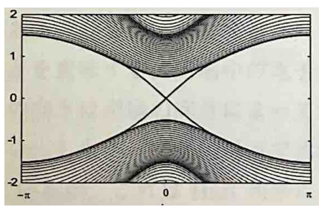
結晶では運動量またはその $1/\hbar$ 倍 (**波数**) を変数に取る表示が便利です。結晶の周期性から、波数は $1/a^d$ 程度の広がりを持つ有限な領域 (**ブリルアンゾーン**、BZ) の内部に限られます。

状態空間の構造

ハミルトニアンを波数で展開して

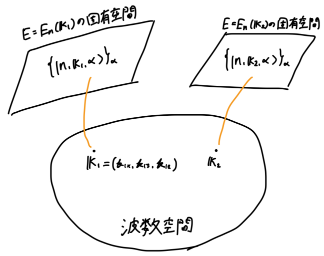
$$\hat{H} = \sum_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_\sigma(\boldsymbol{k}) H_{\sigma,\sigma'}(\boldsymbol{k}) c_{\sigma'}(\boldsymbol{k})$$

と書くと、系のエネルギーの波数依存性 (**バンド分散**) は行列 $H(\boldsymbol{k})$ の固有値 $E_n = E_n(\boldsymbol{k})$ で与えられます。



バンド分散の図 (異常量子ホール系を例に)。

$\boldsymbol{k}$ を「波数空間」の中の 1 点と捉えると、波数空間の各点に対してエネルギー $E_n(\boldsymbol{k})$ の固有空間が対応します。



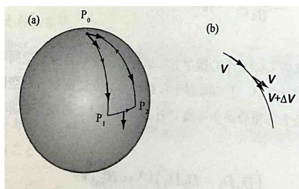
波数空間とエネルギー固有空間の図。エネルギー準位ごとにこのような構造が存在する

空間 (底空間と呼ぶ) の各点にベクトル空間が結びついた構造を**ベクトル束**といいます[*1]。固有空間はエネルギー固有状態を基底[*2]とするベクトル空間であり、これを波数空間全体にわたって集めたものは波数空間を底空間とするベクトル束の構造を持つのです。

3　状態空間の「かたち」

曲がった空間の幾何学

曲がった空間上のある点における接ベクトル $\boldsymbol{V}$ を、接平面[*3]の方向に「平行移動」させる事を考えます。



曲がった空間上で接ベクトルを移動させる

曲がった空間では、ある点で空間に接する接平面を張る基底が各点ごとに異なってきます。そのため、空間上で点を動かした時の接ベクトルの変化は

$$\sum_{i=1}^{3}\left(V^i(\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x})\hat{e}_i(\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x}) - V^i(\boldsymbol{x})\hat{e}_i(\boldsymbol{x})\right)$$

となります。今、曲がった空間内の移

[*1] 正確には「局所的に自明である」事が要請されますが、ここではそれが成り立っているものとして話を進めます。
[*2] 基底とは「ベクトル空間を張る『もと』となるもの」です。ベクトル空間のあらゆる元は基底の足し合わせによって書くことができます。
[*3] ここではイメージしやすさの都合上空間を 3 次元としましたが、別に一般の n 次元の場合を考えてもらっても良いです。

動に伴って接空間の基底が

$$\hat{e}_i(\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x}) = \hat{e}_i(\boldsymbol{x}) + \sum_{j,k=1}^{3} \Gamma^k_{ji}(\boldsymbol{x})\Delta x^j \hat{e}_k(\boldsymbol{x})$$

と変化する時、「空間内の点を j 方向に動かした時の、接ベクトル $\boldsymbol{V}$ の第 i 成分の変化」は次で書けます:

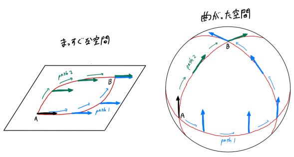
$$D_j V^i = \frac{\partial V^i}{\partial x^j} + \sum_{k=1}^{3} \Gamma^i_{jk} V^k \,.$$

ここから、空間の「曲率」を

$$D_a D_b - D_b D_a$$

と定義します。言葉で表すと、これは「空間上で『b 方向に動かしてから a 方向に動かす』時と『a 方向に動かしてから b 方向に動かす』時の、接ベクトルの成分の変化の差」、という量です。

曲がった空間では平行移動の操作が「どの方向に動かすか」の順序に依存します。そのため、「移動方向の順序の違いによって結果にどれだけ差が生じるか」を調べることで、空間の曲がり具合が測れるのです。



曲がった空間上で接ベクトルを移動させる

状態空間の曲がり具合

波数 $\boldsymbol{k}$ でエネルギー $E_n(\boldsymbol{k})$ を持つ状態を $|n,\boldsymbol{k},\alpha\rangle$($\alpha$: 縮退のラベル) と書く時、$\boldsymbol{k}$ の変化に応じて状態は

$$|n,\alpha,\boldsymbol{k}+\delta\boldsymbol{k}\rangle = |n,\alpha,\boldsymbol{k}\rangle + i\sum_{\beta} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{k})_{\alpha\beta}|n,\beta,\boldsymbol{k}\rangle \cdot \delta\boldsymbol{k}$$

のように変化します。ここで、

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{k})_{\alpha\beta} \equiv -i\langle n,\alpha,\boldsymbol{k}|\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{k}}|n,\beta,\boldsymbol{k}\rangle$$

は**ベリー接続**と呼ばれる量 (行列) です。ここから**ベリー曲率**という量を

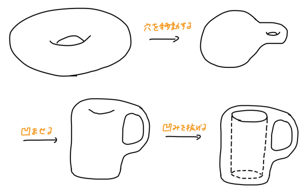
$$\left(\frac{\partial}{\partial k_a} + iA_a\right)\left(\frac{\partial}{\partial k_b} + iA_b\right) - \left(\frac{\partial}{\partial k_b} + iA_b\right)\left(\frac{\partial}{\partial k_a} + iA_a\right)$$

と定義します。これは固有空間の波数空間上への「生え方」の「曲がり具合」を測るもの、という意味を持ちます。系を記述するハミルトニアンの $\boldsymbol{k}$ 依存性によって、状態空間の「曲がり具合」が決まります。例えば、ハミルトニアンが $\boldsymbol{k}$ に全く依存しない時、固有空間は「まっすぐに生え」ます。

4　トポロジカル物性

トポロジーとは

トポロジーとは、ものすごく簡単に言うと「連続的に変形しても保たれる空間の性質」を調べる学問です。
例えば、ドーナツという空間の「穴の数」は、ドーナツをマグカップに変形させても変わりません。穴の数という量は、連続変形のもとで値が保たれる**トポロジカル不変量**の一つです。



ドーナツをマグカップに連続変形する操作

物理系の状態空間がトポロジカルに非自明な構造を持つ (「まっすぐな」空間に連続変形で移れない) とき、その系は**トポロジカル相**にあるといいます。

接続の発散とトポロジー

$H(\boldsymbol{k})$ の関数形によっては、波数空間のある点でベリー接続に発散が生じるという事態が起こり得ます。発散が生じる点は連続変形によって消せません。この時、状態空間はトポロジカルに非自明な構造を取ります。
ベリー接続 (およびベリー曲率) は状態空間の「かたち」の情報を持っているので、ベリー接続を調べれば状態空間の形が非自明なトポロジーを持つかどうかが分かる、という事になります。

トポロジカル不変量

状態空間のベリー接続から、系のトポロジカル不変量を定義できます。それは例えば空間 2 次元の系では*4

$$\nu^{(1)}_{\mathrm{Ch}} := \frac{1}{2\pi}\int d^2 \sum_{i,j} \epsilon^{ij}\left(\frac{\partial a_i}{\partial k^i} - \frac{\partial a_j}{\partial k^i}\right)$$

と書けます*5(積分区間は BZ 全域です)。$\nu^{(1)}_{\mathrm{Ch}}$ は **TKNN 数**とよばれ、これは **Chern 数**というベクトル束のトポロジカル不変量の一つになっています。状態空間のベリー接続が底空間上で発散する時、この値がゼロでない整数値を取ります (その値によって状態空間のトポロジーが区別されます)。

トポロジカル不変量が 0 でない値を持つとき、縮退した固有状態たちの中に**エッジ状態**という特別な状態が出現します。これは空間のエッジ、すなわち表面 (境界) に局在して運動するような電子の状態です。エッジ状態はまさにトポロジカル物性の代表例です。

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 (2016)

*4 空間次元が 2 の時、トポロジカル不変量の表式が比較的簡単になります。例えば 3 次元の物体の表面上を運動する電子などは 2 次元系の例です。
*5 具体的な計算を実行する上では、ベリー接続が発散する点の周りで「ゲージ変換」$\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} + \frac{\partial\chi}{\partial\boldsymbol{k}}\chi$ を施すことで形式上発散を回避します。このベリー接続を BZ で積分すると、ゲージ変換の関数 χ に応じて $\int_\Omega d^2\boldsymbol{k}\nabla\times\frac{\partial\chi}{\partial\boldsymbol{k}} = \oint_{\partial\Omega} d\boldsymbol{k}\frac{\partial\chi}{\partial\boldsymbol{k}}$ という項が残り、非ゼロな積分値を得ます。