

ディラック・ワイル電子の基本的性質

山影 相 *

2017年9月14日

概要

2017年S研夏の学校のための(副読本)ノート. テキスト [1, 2] を読んだことを前提とする.

目次

1	ディラック方程式とワイル方程式	2
2	固体中のディラック・ワイル電子	2
2.1	PT 対称性とディラック点	3
2.2	結晶の (副格子の) 対称性によるディラック点	8
3	カイラル対称性	8
3.1	トポロジカル不変量	9
4	ランダウ準位	9
5	ディラック電子の超伝導	12
5.1	s 波超伝導におけるマヨラナ磁束	12
5.2	s 超伝導+ゼーマン	13
5.3	スピン3重項・ギャップレス超伝導	15
付録 A	計量	15
A.1	直交座標系	15

* 名古屋大学大学院理学研究科

A.2	斜交座標系	15
A.3	球座標系	16
A.4	局所慣性系	16
付録 B	Chern-Simon 項	17
B.1	2+1 次元 \rightarrow 1+1 次元	17
B.2	4+1 次元 \rightarrow 3+1 次元 \rightarrow 2+1 次元	19
付録 C	結晶における電気分極	20
付録 D	ウィルソンループ	22
D.1	定義	22
D.2	ベリー位相	23
D.3	チャーン数	24
付録 E	電子正孔対称性	27
E.1	\mathbb{Z}_2 トポロジカル不変量	28
E.2	チャーン数	32

1 ディラック方程式とワイル方程式

最初に、真空中の相対論的なフェルミ粒子の量子力学的運動方程式であるディラック方程式と、その粒子質量が零の場合のワイル方程式を示しておく。その導出や解の基本的性質、量子化についてはアドバンスな量子力学 [3] や場の量子論 [4] のテキストを参照してほしい。

2 固体中のディラック・ワイル電子

零ギャップ・ディラック電子は様々な系（グラフェン、有機導体、トポロジカル絶縁体表面、あるいは量子ホール転移点など）で現れることが知られている。零ギャップということは、ある運動量 \mathbf{k}_0 においてバンドが縮退しているということであり、その点（運動量）をディラック点と呼んでいる。

2.1 PT 対称性とディラック点

さて、そもそも何故縮退（ディラック点）が生じるのであろうか。一般には、その点 \mathbf{k}_0 において何か対称性があり、 $[U, H(\mathbf{k}_0)] = 0$ 、その対称操作 U に対して異なるパリティをもつ状態同士は縮退が生じて良い。すなわち、ハミルトニアン $H(\mathbf{k}_0)$ と対称操作 U の同時固有状態 $|\mathbf{k}_0, \alpha\rangle$ と $|\mathbf{k}_0, \beta\rangle$ 、 $U|\mathbf{k}_0, \alpha\rangle = \alpha|\mathbf{k}_0, \alpha\rangle$ 、 $U|\mathbf{k}_0, \beta\rangle = \beta|\mathbf{k}_0, \beta\rangle$ 、に対して、 $\langle \mathbf{k}_0, \alpha | H | \mathbf{k}_0, \beta \rangle \propto \delta_{\alpha\beta}$ ということであるが、このとき、 $|\mathbf{k}_0, \alpha\rangle$ と $|\mathbf{k}_0, \beta\rangle$ は縮退しても良い。

ただし、この議論は、単に縮退「しても良い」と言っているだけに過ぎず、一般には摂動 V 、 $\langle \mathbf{k}_0, \alpha | V | \mathbf{k}_0, \alpha \rangle \neq 0$ もしくは $\langle \mathbf{k}_0, \beta | V | \mathbf{k}_0, \beta \rangle \neq 0$ 、を加えることで縮退が解消するような偶然縮退であり、実際の物質で安定に実現するようなものではない。そうではなく、摂動に対しても安定に存在し続ける“トポロジカルな”縮退点をディラック点と呼んでいる。その安定化機構は空間次元や対称性によって様々であるが、2次元空間におけるディラック点については以下の定理が基本的である。

PT 対称性とディラック点

系が空間反転 (P) と時間反転 (T) を組み合わせた PT 対称性をもっているとき、 $(PT)^2 = 1$ であれば2次元におけるディラック点（3次元におけるディラック線）はトポロジカルに安定である。

$(PT)^2 = 1$ というのは、物理的には、スピン軌道相互作用が無視できるということである。この時にはスピン自由度を無視したスピンレス電子系を考えれば十分であり、 $(PT)^2 = 1$ である。

証明—

運動量空間中の任意の周回経路 C によるベリー位相 $\gamma[C]$

$$\gamma[C] = \oint_C d\mathbf{k} \cdot \text{tr} \mathbf{A}(\mathbf{k}), \quad (1)$$

を導入する。ここで、ベリー接続 $\mathbf{A}(\mathbf{k})$ は、占有状態（価電子帯） $|\mathbf{k}, \alpha\rangle$ 、 $H(\mathbf{k})|\mathbf{k}, \alpha\rangle = E_\alpha(\mathbf{k})|\mathbf{k}, \alpha\rangle$ 、を用いて

$$[\mathbf{A}(\mathbf{k})]_{\alpha\beta} = -i\langle \mathbf{k}, \alpha | \partial_{\mathbf{k}} | \mathbf{k}, \beta \rangle, \quad (2)$$

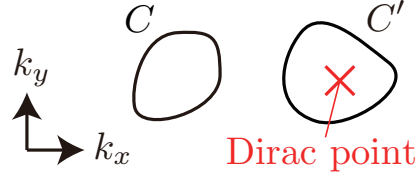


図1 自明な経路 C とディラック点を囲む非自明な経路 C' .

と定義される．なお，経路 C 上ではギャップは閉じていないとする．もしギャップが閉じていると，その点において占有状態の定義が曖昧になり，ベリー位相が定義できなくなる．後に示すように， $(PT)^2 = 1$ のとき， $\gamma[C] \bmod 2\pi$ は 0 か π の 2 値に量子化される．これは，運動量空間中の経路は自明なもの ($\gamma[C] = 0$) と非自明なもの ($\gamma[C'] = \pi$) の 2 種類があり，これらは連続的には移り変わらない（摂動に対して安定）ということの意味する．また，経路を連続的に変形してもベリー位相は不変である．一方，上で述べた通り，ギャップが閉じている点はベリー接続における特異点であり，この点を横切る時にはベリー位相は値が跳んでも良い．すなわち非自明な経路 C' とは，図1に示すように，ディラック点を囲んでいるものである．同時に，ベリー位相はディラック点を保護しており，摂動を加えてもディラック点は安定に存在し続ける．

$\gamma[C]$ はベリー“位相”と呼ばれる通り， 2π の整数倍の不定性がある．これは以下に述べるように，ゲージ自由度に起因する． N 個の占有状態全ての線形結合を取り直す $U(N)$ ゲージ変換を考える． $|\mathbf{k}, \alpha\rangle \rightarrow |\mathbf{k}, \alpha'\rangle [g(\mathbf{k})]_{\alpha'\alpha}$, $g(\mathbf{k}) \in U(N)$. この変換に対して基底状態は不変である*1．つまり，物理的に意味のある量は全てゲージ変換に対して不変でなければならない．ベリー接続はゲージ変換に対して

$$\mathbf{A}(\mathbf{k}) \rightarrow g(\mathbf{k})^\dagger \mathbf{A}(\mathbf{k}) g(\mathbf{k}) - ig(\mathbf{k})^\dagger \partial_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}), \quad (3)$$

$$\text{tr} \mathbf{A}(\mathbf{k}) \rightarrow \text{tr} \mathbf{A}(\mathbf{k}) + \partial_{\mathbf{k}} \arg \det g(\mathbf{k}), \quad (4)$$

と変換され， $\gamma[C]$ は 2π の整数倍だけ値を変える（不定性がある）．このように $\gamma[C]$ 自体はゲージ不変ではないが， $\gamma[C] \bmod 2\pi$ はゲージ不変である．

それでは， $(PT)^2 = 1$ のときにベリー位相が量子化されることを示そう．状態は PT (反ユニタリー) により

$$|\mathbf{k}, \alpha\rangle \rightarrow \overline{|\mathbf{k}, \alpha\rangle} = PT|\mathbf{k}, \alpha\rangle = |\mathbf{k}, \alpha'\rangle [U_{PT}(\mathbf{k})]_{\alpha'\alpha}, \quad (5)$$

*1 基底状態の N 体波動関数は $\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \det(\mathbf{x}_i | \mathbf{k}, \alpha) \rightarrow \det(\mathbf{x}_i | \mathbf{k}, \alpha') [g(\mathbf{k})]_{\alpha'\alpha} = \det(\mathbf{x}_i | \mathbf{k}, \alpha) \det g(\mathbf{k}) = \psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) e^{i\varphi}$ [2].

と変換される。 $|\mathbf{k}, \alpha'\rangle$ も占有状態である。ここで $[U_{PT}(\mathbf{k})]_{\alpha\alpha'} = \langle \mathbf{k}, \alpha | PT | \mathbf{k}, \alpha' \rangle$ はユニタリ行列である。さらに、 $(PT)^2 = \pm 1$ から、

$$[U_{PT}(\mathbf{k})]_{\alpha\alpha'} = \overline{\langle \mathbf{k}, \alpha | \mathbf{k}, \alpha' \rangle}^* = (PT)^2 \langle \mathbf{k}, \alpha' | \mathbf{k}, \alpha \rangle = (PT)^2 [U_{PT}(\mathbf{k})]_{\alpha'\alpha}, \quad (6)$$

であり、 $(PT)^2 = 1$ のときには $U_{PT}(\mathbf{k})$ は対称ユニタリ行列である。一方、 $(PT)^2 = -1$ のときには反対称ユニタリ行列であり、

$$\det U_{PT}(\mathbf{k}) = [\text{Pf } U_{PT}(\mathbf{k})]^2, \quad |\text{Pf } U_{PT}(\mathbf{k})| = 1, \quad (7)$$

という関係が成り立つ*2。

PT 対称性のため、ベリ一接続は $[A(\mathbf{k})]_{\alpha\beta} = -i \overline{\langle \mathbf{k}, \alpha | \partial_{\mathbf{k}} | \mathbf{k}, \beta \rangle}^*$ すなわち

$$\mathbf{A}(\mathbf{k})^* = -U_{PT}(\mathbf{k})^\dagger \mathbf{A}(\mathbf{k}) U_{PT}(\mathbf{k}) + i U_{PT}(\mathbf{k})^\dagger \partial_{\mathbf{k}} U_{PT}(\mathbf{k}), \quad (13)$$

という関係式を満たす。さらに、 $\langle \mathbf{k}, \alpha | \mathbf{k}, \beta \rangle = \delta_{\alpha\beta}$ より得られる $\langle \mathbf{k}, \alpha | \overleftarrow{\partial_{\mathbf{k}}} | \mathbf{k}, \beta \rangle + \langle \mathbf{k}, \alpha | \partial_{\mathbf{k}} | \mathbf{k}, \beta \rangle = 0$ より、

$$\mathbf{A}(\mathbf{k}) = \mathbf{A}(\mathbf{k})^\dagger, \quad (14)$$

であるから、

$$\text{tr } \mathbf{A}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2} \partial_{\mathbf{k}} \arg \det U_{PT}(\mathbf{k}), \quad (15)$$

*2 パフィアン (Pf) は $2n \times 2n$ 反対称行列に対して定義される。これは場の理論のウィックの定理と関係がある。一体のフェルミ粒子の演算子 A_1, \dots, A_{2n} の自由場での期待値は

$$\langle A_1 \cdots A_{2n} \rangle_0 = \text{Pf} (\langle A_i A_j \rangle_0), \quad (8)$$

である。右辺は左辺をウィックの定理で展開したものである。 B を $2n \times 2n$ の反対称行列とするとき、 $n = 1$ の場合には

$$\text{Pf } B = B_{12}, \quad (9)$$

$n = 2$ の場合には

$$\text{Pf } B = B_{12}B_{34} - B_{13}B_{24} + B_{14}B_{23}, \quad (10)$$

となる。また、以下の公式が成り立つ。

$$\det B = (\text{Pf } B)^2, \quad (11)$$

$$\text{Pf}(C^T B C) = \det(C) \text{Pf}(B), \quad (12)$$

ここで C は任意の $2n \times 2n$ 行列である。

となる^{*3}. $(PT)^2 = -1$ のときには, $U_{PT}(\mathbf{k})$ は反対称ユニタリ行列であったから,

$$\mathrm{tr} \mathbf{A}(\mathbf{k}) = -\partial_{\mathbf{k}} \arg \mathrm{Pf} U_{PT}(\mathbf{k}), \quad (16)$$

となり, $\gamma[C]$ は経路 C を一周したときの偏角の変化分, すなわち, 2π の整数倍である.^{*4} 故に, ベリー位相は必ず零になる;

$$\gamma[C] = 0 \pmod{2\pi}, \text{ for } (PT)^2 = -1, \quad (20)$$

一方, $(PT)^2 = +1$ のときにはこのような制限はないので, $\gamma[C]$ は $\det U_{PT}(\mathbf{k})$ の偏角が経路 C を一周したときの変化分の $1/2$ であり,

$$\gamma[C] = 0 \text{ or } \pi \pmod{2\pi}, \text{ for } (PT)^2 = +1, \quad (21)$$

が示される. また, $(PT)^2 = +1$ のときにディラック点が安定であり, $(PT)^2 = -1$ のときにはそうではない, ということは, PT 対称性で保護されたディラック点はスピン軌道相互作用によりギャップを生じることを示唆する.

最後に, ベリー位相の値を実際に計算して確認しよう. まず, 自明な経路 C は連続変形して点に縮められるので, 明らかに $\gamma[C] = 0$ である. 次にディラック点を周る経路 C' によるベリー位相を求める. ディラック点のごく近傍においてハミルトニアンはミニマルな

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & k_-^n \\ k_+^n & 0 \end{pmatrix}, \quad n \in \mathbb{N}, \quad (22)$$

というものを考えれば十分である. 一般のディラック点はここからの摂動と解釈すれば良い (摂動ではベリー位相は変わらない). PT は $PT = \sigma_x \mathcal{K}$, $(PT)^2 = +1$ と表現される. エネルギースペクトルは $E(\mathbf{k}) = k^n$ であり, 占有 (負エネルギー) 状態の固有ベクトルは

$$|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{in\phi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}, \quad (23)$$

^{*3} $\mathrm{tr}(U^\dagger \partial U) = \partial \mathrm{tr} \ln U$. $\mathrm{tr} \ln = \ln \det$.

^{*4} 実際には $\det U_{PT}(\mathbf{k}) = 1$ である. これを示すために, クラマース対を区別するラベル I, II を導入して

$$PT|\mathbf{k}I\alpha\rangle = +|\mathbf{k}II\alpha\rangle, \quad (17)$$

$$PT|\mathbf{k}II\alpha\rangle = -|\mathbf{k}I\alpha\rangle, \quad (18)$$

とゲージを定めると,

$$U_{PT}(\mathbf{k}) = \epsilon \otimes \epsilon \otimes \cdots \otimes \epsilon, \quad \det U_{PT} = 1, \quad \epsilon = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (19)$$

となる [5]. 行列式はゲージ (基底のとり方) によらないから, 常に $\det U_{PT}(\mathbf{k}) = 1$ である.

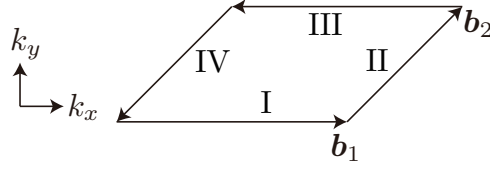


図2 ブリルアン域の境界を周る経路 I-II-III-IV. \mathbf{b}_1 と \mathbf{b}_2 は基本逆格子ベクトル.

の形に与えられる. ここで $\phi_{\mathbf{k}}$ は \mathbf{k} のなす角である. ベリー位相は

$$\gamma[C'] = \frac{n}{2} \oint_{C'} d\mathbf{k} \cdot \frac{\partial \phi_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} = n\pi, \quad (24)$$

と求められる. したがって, n が奇数であれば $\gamma[C'] = \pi \pmod{2\pi}$ であり, ディラック点は安定であることを実際に確認できた. 一方で n が偶数のディラック点は $\gamma[C'] = 0 \pmod{2\pi}$ であり, 少なくとも PT 対称性では保護されていない不安定なものである. なお, 実際には $n=2$ のディラック点 (quadratic band touching) は, 二層グラフェンを含む多くの系で存在するが, これを安定化するにはもう少し別な対称性が必要であることを次節で議論する.

—証明終

また, 同時に, ディラック点の個数について以下の制限があることが分かる.

ディラック点の個数

周期系におけるディラック点の個数は偶数個である.

証明には, ブリルアン域 (BZ) の境界 (∂BZ) を回る経路におけるベリー位相を考える.

$$\gamma[\partial\text{BZ}] = \left[\int_{\text{I}} + \int_{\text{II}} + \int_{\text{III}} + \int_{\text{IV}} \right] d\mathbf{k} \cdot \text{tr} \mathbf{A}(\mathbf{k}). \quad (25)$$

経路 I と III, II と IV は向きは逆であるが等価な経路である. 適切なゲージを選ぶと*5, ハミルトニアンは $H(\mathbf{k}) = H(\mathbf{k} + \mathbf{b}_i)$ という周期性をもつので, ベリー接続も同様の周期

*5 一般のゲージの場合には, ハミルトニアンの周期性は $\hat{B}_i(\mathbf{k})H(\mathbf{k})\hat{B}_i(\mathbf{k})^\dagger = H(\mathbf{k} + \mathbf{b}_i)$, $\hat{B}_i(\mathbf{k}) \in \text{U}(N+M)$ であり, 状態は $|\mathbf{k}, \alpha\rangle \rightarrow \hat{B}_i(\mathbf{k})|\mathbf{k}\alpha\rangle = |\mathbf{k} + \mathbf{b}_i, \alpha'\rangle [B_i(\mathbf{k} + \mathbf{b}_i)]_{\alpha'\alpha}$, $B_i(\mathbf{k}) \in \text{U}(N)$ と変換され, ベリー接続は

$$\mathbf{A}(\mathbf{k}) = B_i(\mathbf{k} + \mathbf{b}_i)^\dagger \mathbf{A}(\mathbf{k} + \mathbf{b}_i) B_i(\mathbf{k} + \mathbf{b}_i) - i B_i(\mathbf{k} + \mathbf{b}_i) \partial_{\mathbf{k}} B_i(\mathbf{k} + \mathbf{b}_i), \quad (26)$$

性をもつ.

$$\mathbf{A}(\mathbf{k}) = \mathbf{A}(\mathbf{k} + \mathbf{b}_i). \quad (28)$$

したがって、経路 I の積分は経路 III の積分と相殺する。経路 II と IV も同じである。結局、 $\gamma[\partial\text{BZ}] = 0$ となる。ディラック点 1 つあたりはベリー位相 π を与える。したがって、その総和が零になるためには、ブリルアン域内に必ず偶数個のディラック点が存在しなければならない。

2.2 結晶の (副格子の) 対称性によるディラック点

3 カイラル対称性

ハミルトニアンと反交換するユニタリー演算子 Γ が存在するとき、系はカイラル対称性をもつと言い、 Γ はカイラル演算子と呼ばれる。

$$\{\Gamma, H\} = 0. \quad (29)$$

これより直ちに、エネルギー E_α の状態 $|\alpha\rangle$ が存在するとき、必ず逆符号のエネルギー $(-E_\alpha)$ の状態 $\Gamma|\alpha\rangle$ が構成できることが分かる; $H(\Gamma|\alpha) = -E_\alpha(\Gamma|\alpha)$ 。すなわち、エネルギースペクトルは正負対称である。一度演算するとエネルギーが負になるということから、位相を適当に選ぶと

$$\Gamma^2 = 1, \quad (30)$$

とできる。このとき、 Γ の固有値 (カイラリティ) は ± 1 であり、ゼロエネルギー状態は Γ の固有状態である。すると、

$$\text{tr} \Gamma = \sum_{\alpha} \langle \alpha | \Gamma | \alpha \rangle = N_+ - N_-, \quad (31)$$

は正カイラリティの零モード数と負カイラリティの零モード数の差を与える。これは零次元のトポロジカル不変量とみなせる。

という関係式を満たす。よって

$$\begin{aligned} \gamma[\partial\text{BZ}] &= - \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \frac{\partial}{\partial k_1} \arg \det B_2(k_1, \pi) + \int_{-\pi}^{\pi} dk_2 \frac{\partial}{\partial k_2} \arg \det B_1(\pi, k_2) \\ &= - \arg \frac{\det B_2(+\pi, \pi)}{\det B_2(-\pi, \pi)} + \arg \frac{\det B_1(\pi, +\pi)}{\det B_1(\pi, -\pi)} = 0, \end{aligned} \quad (27)$$

である。最後の等式には $B_i(\mathbf{k}) = B_j(\mathbf{k} + \mathbf{b}_j)^\dagger B_i(\mathbf{k} + \mathbf{b}_j) B_j(\mathbf{k} + \mathbf{b}_j)$ を用いる。

3.1 トポロジカル不変量

ハミルトニアンがパラメータ \mathbf{k} をもっているとする; $H(\mathbf{k})$. \mathbf{k} は例えば運動量である. このとき,

$$W = \oint d\mathbf{k} \cdot \text{tr} [\Gamma H(\mathbf{k})^{-1} \partial_{\mathbf{k}} H(\mathbf{k})] \in \mathbb{Z}, \quad (32)$$

はトポロジカル不変量である [6]. 但し積分経路上にはノード (エネルギーの零点) はないものとする.

\mathbf{k} を運動量とし, $W \neq 0$ のとき, 系の端には $|W|$ 個のゼロエネルギー状態が存在する [7, 8].

4 ランダウ準位

2次元のディラック電子

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} m & v_x k_x - i v_y k_y \\ v_x k_x + i v_y k_y & -m \end{pmatrix} = v_x k_x \sigma_x + v_y k_y \sigma_y + m \sigma_z, \quad (33)$$

を考える. また, $m \rightarrow v_z k_z$ と置き直すと, これは3次元ワイル電子を表す. なお,

$$\tilde{H}(\mathbf{k}) = v_x k_x \sigma_y - v_y k_y \sigma_x + m \sigma_z, \quad (34)$$

と表されることもあるが, H と \tilde{H} は等価である. すなわち, (擬) スピン σ を z 軸周りに $-\pi/2$ だけ回転してやると, $H(\mathbf{k}) = U \tilde{H}(\mathbf{k}) U$, $U = \exp(i\sigma_z \pi/4)$ である.

ディラック・ワイル電子のランダウ準位

z 軸方向に磁場 B を印加するとランダウ準位

$$E_0 = -\chi m, \quad E_n = \pm \sqrt{m^2 + \hbar^2 \omega_c^2 n}, \quad n \in \mathbb{N}, \quad (35)$$

が形成される. ここで, $\chi = \text{sgn}(v_x v_y B)$ であり, サイクロトロン振動数は $\omega_c = \sqrt{2|v_x v_y B| e / (\hbar c)}$ で定義される. 単位面積あたりの各々の準位の縮退度は $|B|/\Phi_0$, $\Phi_0 = hc/e$ で与えられる.

以下でこれの導出をする. 磁場により, $B\mathbf{e}_z = \nabla \times \mathbf{A}$, $A_z = 0$, を満たすベクトルポテンシャルが生じる. ハミルトニアンは

$$H = v_x \sigma_x \Pi_x + v_y \sigma_y \Pi_y + m \sigma_z, \quad (36)$$

となる．ここで， Π_i は以下で定義される共変運動量である．

$$\Pi_i = -i\hbar\partial_i + \frac{e}{c}A_i. \quad (37)$$

Π は次の交換関係を満たす．

$$[\Pi_x, \Pi_y] = -i\hbar eB/c. \quad (38)$$

更に，次を定義する．

$$\Pi_{\pm} = \frac{v_x\Pi_x \pm iv_y\Pi_y}{\sqrt{|v_xv_y|}}, \quad (39)$$

交換関係は

$$[\Pi_-, \Pi_+] = 2\hbar e|B|\chi/c, \quad (40)$$

となる． $\chi = \text{sgn}(v_xv_yB)$ はカイラリティなどと呼ばれる． Π_{\pm} を用いてハミルトニアンを表すと

$$H = \begin{pmatrix} m & \sqrt{|v_xv_y|}\Pi_- \\ \sqrt{|v_xv_y|}\Pi_+ & -m \end{pmatrix}. \quad (41)$$

また， Π_{\pm} を用いて数固有状態 $a^\dagger a|n\rangle = n|n\rangle$, $n = 0, 1, 2, \dots$, を導入できる．その生成消滅演算子は

$$a = \frac{\Pi_{-\chi}}{\sqrt{2\hbar e|B|/c}}, \quad a^\dagger = \frac{\Pi_{+\chi}}{\sqrt{2\hbar e|B|/c}}, \quad (42)$$

と定義され，以下を満たす．

$$[a, a^\dagger] = 1, \quad a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad (43)$$

さて，カイラリティが正 ($\chi = +$) のとき，ハミルトニアンは

$$H = \begin{pmatrix} m & \hbar\omega_c a \\ \hbar\omega_c a^\dagger & -m \end{pmatrix}, \quad \omega_c = \sqrt{2|v_xv_yB|e/(\hbar c)} = \sqrt{4\pi|v_xv_yB|/\Phi_0}, \quad (44)$$

と表される．上式より，固有状態は $\mathbf{u}_n^\pm \propto (\alpha_n^\pm|n-1\rangle, \beta_n^\pm|n\rangle)^\top$, $n \in \mathbb{N}$, の形を持つことが分かる．ただし，基底状態だけは特別である．基底状態 $\mathbf{u}_0 = (0, |0\rangle)^\top$ のエネルギー E_0 は

$$E_0 = -m, \quad (45)$$

と求められる。励起状態に対するハミルトニアンは

$$H_n = \begin{pmatrix} m & \hbar\omega_c\sqrt{n} \\ \hbar\omega_c\sqrt{n} & -m \end{pmatrix}, \quad (46)$$

と簡約され、エネルギーは

$$E_n = \pm\sqrt{m^2 + \hbar^2\omega_c^2 n}, \quad n \in \mathbb{N}, \quad (47)$$

であり、その固有ベクトルは $(\alpha_n^\pm, \beta_n^\pm)^T$ である。励起状態は必ず正負エネルギーが対になって現れるのに対して、基底状態はただ一つだけしか無いことが特徴である。

次にカイラリティが負 ($\chi = -$) の場合を考える。ハミルトニアンは

$$H = \begin{pmatrix} m & \hbar\omega_c a^\dagger \\ \hbar\omega_c a & -m \end{pmatrix}, \quad (48)$$

であり、正カイラリティのとき (44) と転置行列の関係になっている。基底状態は今度は $\mathbf{u}_0 = (|0\rangle, 0)^T$ であり、そのエネルギーは

$$E_0 = m, \quad (49)$$

と符号が逆になる。励起状態は $\mathbf{u}_n^\pm \propto (\alpha_n^\pm |n\rangle, \beta_n^\pm |n-1\rangle)^T$ であり、ベクトルの形は変わるが、エネルギースペクトルは

$$E_n = \pm\sqrt{m^2 + \hbar^2\omega_c^2 n}, \quad (50)$$

であり、正カイラリティのときと同じである。

正負カイラリティ両方の場合において、ランダウ準位のエネルギースペクトルは

$$E_0 = -\chi m, \quad E_n = \pm\sqrt{m^2 + \omega_c^2 n}, \quad n \in \mathbb{N}, \quad (51)$$

とまとめられる。

ディラック電子系がギャップレス ($m = 0$) のときには、ランダウ準位に $E_0 = 0$ の零モードが存在するが、これは以下の意味で特別である。

零モードの安定性

零ギャップ ($m = 0$) ディラック電子のランダウ準位の零モード (零エネルギー) はカイラル対称性 ($\{\sigma, H\} = 0$) で保護されており、カイラル対称な摂動が加わっても、零エネルギーであり続ける。

より具体的には、指数定理

$$N_+ - N_- = -\frac{1}{2\Phi_0} \int d^2x \epsilon^{ij} F_{ij} = -\frac{\Phi}{\Phi_0}, \quad (52)$$

と関係がある [2]. 右辺は磁束の本数, すなわち, ランダウ準位の縮退度を表している. これは, 磁場が正 (負) であれば, 負 (正) カイラリティのゼロエネルギー・ランダウ準位が存在することを意味する.

5 ディラック電子の超伝導

ディラック電子系で超伝導が生じると, たとえ対ポテンシャルが s 波スピンシングレットであっても非自明な超伝導となりうる.

5.1 s 波超伝導におけるマヨラナ磁束

まずはトポロジカル絶縁体の表面に現れる 2 次元の零ギャップ・ディラック電子を考えよう.

$$H_{D0}^{2D}(\mathbf{k}) = v_F(k_x\sigma_y - k_y\sigma_x). \quad (53)$$

σ はスピンである. 超伝導状態は BdG ハミルトニアン

$$\begin{aligned} H_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} H_{D0}^{2D}(\mathbf{k}) - \mu & \Delta(\mathbf{k}) \\ \Delta(\mathbf{k})^\dagger & -[H_{D0}^{2D}(\mathbf{k}) - \mu] \end{pmatrix} \\ &= \tau_3 [H_{D0}^{2D}(\mathbf{k}) - \mu] + \tau_1 \text{Re}\Delta(\mathbf{k}) - \tau_2 \text{Im}\Delta(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (54)$$

で記述される. ただし, 基底は $(c_\uparrow(\mathbf{k}), c_\downarrow(\mathbf{k}), c_\downarrow^\dagger(-\mathbf{k}), -c_\uparrow^\dagger(-\mathbf{k}))$ と並べている. 以下では, s 波スピンシングレット超伝導 $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta\sigma_0 \in \mathbf{R}$ を考える. これは一見では普通の自明な超伝導体である. それを確認するために, 常伝導状態を対角化する基底に移る. 常伝導状態 $H_{D0}^{2D}(\mathbf{k})$ を対角化する行列を $U(\mathbf{k})$ とすると,

$$U(\mathbf{k})^\dagger H_{D0}^{2D}(\mathbf{k}) U(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} v_F k & 0 \\ 0 & -v_F k \end{pmatrix}, k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}, \quad (55)$$

であるから,

$$\tilde{U}(\mathbf{k})^\dagger H_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) \tilde{U}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} v_F k - \mu & 0 & \Delta & 0 \\ 0 & -v_F k - \mu & 0 & \Delta \\ \Delta & 0 & -v_F k + \mu & 0 \\ 0 & \Delta & 0 & v_F k + \mu \end{pmatrix}, \quad (56)$$

$$\tilde{U}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} U(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & U(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (57)$$

と表せる。エネルギースペクトルは

$$E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{(\pm v_F k - \mu)^2 + \Delta^2}, \quad (58)$$

と与えられる。トポロジカル相転移（ギャップが閉じる）は無く、自明な超伝導状態である。

上で見たように、これは自明な超伝導体であるが、実は磁束にはマヨラナ粒子が現れる。原点に磁束があるとすると、対ポテンシャルの空間依存性は

$$\Delta(\mathbf{x}) = \Delta(r)e^{\pm i\phi}, \quad (59)$$

と与えられる。このとき、BdG 方程式の零エネルギー解 $\psi_0^\pm(\mathbf{x})$ が任意の μ に対して存在する [9, 10]。実際にそれを示すには $\mu = 0$ を考えれば十分である。ゼロエネルギーの角度依存しない解は以下のように構成できる。

$$\psi_0^\pm(\mathbf{x}) = \exp\left[\mp \int_0^r dr' \frac{\Delta(r')}{v_F}\right] \chi^\pm, \quad (60)$$

$$\chi^+ = (1, 0, 0, 1)^T, \quad \chi^- = (0, 1, 1, 0)^T. \quad (61)$$

すなわち、 s 波スピンシングレット超伝導であるにも関わらず、磁束にはマヨラナ粒子が創出する。

このマヨラナ粒子は電子正孔対称性により保護されており、摂動に対して安定である。これは化学ポテンシャル μ のシフトに対しても安定である（任意の μ に対して解が存在する）ことを意味する。なお、 $\mu = 0$ の場合には同時にカイラル対称性 ($\Gamma = \sigma_z \tau_3$) も存在するので、マヨラナ粒子の存在は指数定理 ($N_+ - N_- =$ 磁束の本数) (52) と関係があると思われる。

5.2 s 超伝導 + ゼーマン

さらにゼーマン効果を考えよう。これは例えば、トポロジカル絶縁体に磁性元素をドーピングするなどして作られた磁性トポロジカル絶縁体に s 波超伝導体を接合したような系である。ハミルトニアンは

$$H_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H_{\text{D0}}^{2\text{D}}(\mathbf{k}) + \mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \mu & \Delta \\ \Delta & -H_{\text{D0}}^{2\text{D}}(\mathbf{k}) + \mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mu \end{pmatrix}, \quad (62)$$

と与えられる。ゼーマン項 $\mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ により、電子と正孔を対角化する行列に違いが生じる。そのずれに応じて、常伝導状態を対角化する基底における対ポテンシャルには、スピン 3 重項の成分が誘起される。

5.2.1 $\mathbf{h} \parallel z$

エネルギースペクトル

$$E(\mathbf{k})^2 = v_F^2 k^2 + \mu^2 + \Delta^2 + h_z^2 \pm 2\sqrt{k^2 \mu^2 + (\mu^2 + \Delta^2) h_z^2}, \quad (63)$$

にはゼロ点がない。すなわち、自明な超伝導状態である。ただし、前節で議論したマヨラナ磁束 (Sato-Fu-Kane 状態) は現れる。

5.2.2 $\mathbf{h} \parallel \mathbf{x}$

$\mathbf{h} \parallel \mathbf{x}$ のときは yz 面 (端) に鏡映対称性で保護されたマヨラナ粒子が1つ現れる。

xz 面は磁気鏡映面である。すなわち、 $\Gamma[\sigma_v] = \sigma_y \tau_2$ により、磁気鏡映面においてカイラル演算子が定義される;

$$\{\Gamma[\sigma_v], H_{\text{BdG}}(k_x, 0)\} = 0. \quad (64)$$

カイラル基底に移ると、

$$U_{\Gamma[\sigma_v]}^\dagger H_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) U_{\Gamma[\sigma_v]} = \begin{pmatrix} 0 & q(\mathbf{k}) \\ q(\mathbf{k})^\dagger & 0 \end{pmatrix}, \quad (65)$$

$$q(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} v_F k_x - \mu - i\Delta & -ih_x \\ ih_x & -k_x - \mu + i\Delta \end{pmatrix}, \quad (66)$$

$$\det q(\mathbf{k}) = -k_x^2 + \mu^2 + \Delta^2 - h_x^2 + i2k_x \Delta, \quad (67)$$

したがって、 $h_x^2 > \mu^2 + \Delta^2$ であれば、トポロジカル相である;

$$W[\sigma_v, \mathbf{x}] = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_x}{2\pi} \frac{\partial}{\partial k_x} \arg \det q(\mathbf{k}) = \text{sign}(\Delta) \theta(h_x^2 - \mu^2 - \Delta^2). \quad (68)$$

すなわち、 yz 面 (端) に磁気鏡映対称性で保護されたマヨラナ粒子が現れる。なお同時に、電子正孔対称性で保護された \mathbb{Z}_2 トポロジカル不変量 ν も非自明になっている; $(-1)^\nu = (-1)^{W[\sigma_v, \mathbf{x}]}$ 。したがって、 \mathbf{h} に y 成分が生じて、ギャップが消失しない限りはトポロジカル相であり続ける。 z 軸周りの回転対称性を考慮すると、結局、 $h_x^2 + h_y^2 > \mu^2 + \Delta^2$ であれば、マヨラナを1つもつトポロジカル超伝導であることが分かる。

5.3 スピン 3 重項・ギャップレス超伝導

付録 A 計量

直交座標系においては (x^μ) と $(x^\mu + dx^\mu)$ の 2 点間の距離 (の 2 乗) $ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2$ は回転 (および反転) に対して不変な量である。一方, 球座標系においては $ds^2 = dr^2 + r^2 d\theta^2 + r^2 \sin^2 \theta d\phi^2$ が不変量になる。あるいは, 時空座標系 (ミンコフスキー) においてローレンツ変換に対して不変な量は $ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 - c^2 dt^2$ である。したがって, これらをまとめて, 一般の時空座標系における 2 点間の “距離”

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu, \quad g_{\mu\nu} = g_{\nu\mu}, \quad (69)$$

を定義する。ただし, 必ずしも正にはならない。対称テンソル $g_{\mu\nu}$ は計量と呼ばれる。しばしば

$$dx_\mu = g_{\mu\nu} dx^\nu, \quad dx^\mu = g^{\mu\nu} dx_\nu, \quad g^{\mu\nu} = (g^{-1})_{\mu\nu}, \quad \partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu}, \quad (70)$$

と表す。

下に幾つか例を述べよう。

A.1 直交座標系

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2, \quad (71)$$

$$g_{ij} = \delta_{ij}, \quad (72)$$

A.2 斜交座標系

斜交座標系を考える。その基底ベクトルを e_i , $e_i \cdot e_j \neq 0$ とすると, 斜交座標系における任意の点は $\mathbf{x} = x^i e_i$ である。したがって, 2 点間の距離は

$$ds^2 = d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} = g_{ij} dx^i dx^j, \quad g_{ij} = e_i \cdot e_j. \quad (73)$$

A.3 球座標系

$$ds^2 = dr^2 + r^2 d\theta^2 + r^2 \sin^2 \theta d\phi^2, \quad (74)$$

$$g_{rr} = 1, \quad g_{\theta\theta} = r^2, \quad g_{\phi\phi} = r^2 \sin^2 \theta. \quad (75)$$

このように、計量が座標依存する系を曲線座標系と呼ぶ。

A.4 局所慣性系

$x^0 = ct$ とする。計量は 2 つの符号の決め方がある。

その 1 :

$$ds^2 = -(x^0)^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2, \quad g_{00} = -1, \quad g_{ii} = 1, \quad (76)$$

その 2 :

$$ds^2 = (x^0)^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2, \quad g_{00} = 1, \quad g_{ii} = -1. \quad (77)$$

以下では光速を $c = 1$ とする。四元座標ベクトルとベクトルポテンシャル

$$(x^\mu) = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, x, y, z), \quad (A^\mu) = (\phi/c, A^x, A^y, A^z), \quad (78)$$

とし、計量は

$$(g_{\mu\nu}) = (g^{\mu\nu}) = \text{diag}(+ - - -), \quad (79)$$

と決める。

$$(A_\mu) = (\phi/c, A_x, A_y, A_z) = (\phi/c, -A^x, -A^y, -A^z), \quad (80)$$

電場 $\mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{A} - \nabla \phi$ と磁場 $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$:

$$E_i/c = \partial^0 A_i - \partial_i A^0, \quad B_i = \epsilon_{ijk} \partial_j A^k. \quad (81)$$

電流密度 : $(j^\mu) = (c\rho, j^x, j^y, j^z)$.

場の強さ : $F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu$.

$$F^{0i} = -F^{i0} = -F_{0i} = F_{i0} = -E^i/c, \quad (82)$$

$$F^{ij} = -F^{ji} = F_{ij} = -F_{ji} = -\epsilon^{ijk} B_k. \quad (83)$$

マクスウェル方程式：

$$\partial_\nu F^{\nu\mu} = \mu_0 j^\mu, \quad \partial_\nu \tilde{F}^{\nu\mu} = 0, \quad \tilde{F}^{\mu\nu} = \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\rho\sigma}/2, \quad (84)$$

ラグランジアン密度 $\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\text{EM}} + \mathcal{L}_{\text{int}}$ ：

$$\mathcal{L}_{\text{EM}} = -\frac{1}{4\mu_0} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} = \frac{\epsilon_0 E^2}{2} - \frac{B^2}{2\mu_0}, \quad (85)$$

$$\mathcal{L}_{\text{int}} = -j^\mu A_\mu. \quad (86)$$

マクスウェル方程式：

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_\mu} - \partial_\nu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\nu A_\mu} = 0, \quad (87)$$

なお、 $S \rightarrow -S$ としても変分原理は変わらないので、全体に負符号が付いている流儀があるので注意。

付録 B Chern-Simon 項

B.1 2+1 次元 \rightarrow 1+1 次元

ベリー接続：

$$a_i(\mathbf{k}) = -i\psi(\mathbf{k})^\dagger \frac{\partial \psi(\mathbf{k})}{\partial k^i}, \quad \psi(\mathbf{k}) = (|\mathbf{k}, 1\rangle, \dots, |\mathbf{k}, N\rangle), \quad (88)$$

ベリー曲率：

$$f_{ij}(\mathbf{k}) = \frac{\partial a_j(\mathbf{k})}{\partial k^i} - \frac{\partial a_i(\mathbf{k})}{\partial k^j}. \quad (89)$$

第 1 チャーン数：

$$C_1 = \int \frac{d^2 k}{2\pi} \text{tr} f_{xy}(\mathbf{k}) \in \mathbb{Z}, \quad (90)$$

量子ホール伝導率：

$$\sigma_{xy} = C_1 \frac{e^2}{h} \xrightarrow{\text{natural unit}} C_1 \frac{e^2}{2\pi}. \quad (91)$$

$$\mathbf{j} = -C_1 \frac{e^2}{h} \mathbf{e}_z \times \mathbf{E}, \quad (92)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j} = -C_1 \frac{e^2}{h} \nabla \times \mathbf{E} = C_1 \frac{e^2}{h} \frac{\partial B}{\partial t}, \quad (93)$$

より, $\rho - C_1 e^2 B/h$ が保存量になる. これはすなわち,

$$\rho = \rho|_{B=0} + C_1 \frac{e^2}{h} B, \quad (94)$$

チャーン・サイモン項:

$$S_{\text{CS}}^{2+1} = \int dt d^2 x \frac{C_1 e^2 c}{2 h} \epsilon^{\mu\nu\rho} A_\mu \partial_\nu A_\rho, \quad (95)$$

電流:

$$j^\mu = -\frac{\delta S_{\text{CS}}}{\delta A_\mu} = -C_1 \frac{e^2 c}{h} \epsilon^{\mu\nu\rho} \partial_\nu A_\rho, \quad (96)$$

$$\rho = C_1 \frac{e^2}{h} B, \quad j^x = C_1 \frac{e^2}{h} E_y, \quad j^y = -C_1 \frac{e^2}{h} E_x, \quad (97)$$

次元縮小化:

$$A^\mu(t, x, y) \rightarrow A^\mu(t, x), \quad (98)$$

$$A^2(t, x, y) \rightarrow \frac{\hbar \phi(t, x)}{e L_y} \pmod{\frac{\hbar}{e L_y} 2\pi}, \quad (99)$$

$$S_{\text{CS}}^{2+1} \rightarrow \int dt dx C_1 \phi \frac{ec}{2\pi} \epsilon^{\mu\nu} \partial_\mu A_\nu = \int dt dx \frac{\theta}{2\pi} e E = S_\theta^{1+1}, \quad (100)$$

空間反転により $E \rightarrow -E$ となるので, θ が力学変数ならば, 空間反転により $\theta \rightarrow -\theta$ となる.

$$\rho = -\frac{1}{c} \frac{\delta S_\theta}{\delta A_0} = -e \frac{\partial_1 \theta}{2\pi}, \quad j = -\frac{\delta S_\theta}{\delta A_1} = e \frac{\dot{\theta}}{2\pi}, \quad (101)$$

マクスウェル方程式

$$\nabla \cdot \mathbf{P} = -\rho, \quad (102)$$

より,

$$P = \frac{\theta}{2\pi} e \pmod{C_1 e}. \quad (103)$$

もし系が空間反転対称性をもつなら $P = -P \pmod{C_1 e}$ なので,

$$P = 0 \text{ or } \frac{C_1}{2} e \pmod{C_1 e}. \quad (104)$$

B.2 4+1 次元 → 3+1 次元 → 2+1 次元

ベリ-接続 :

$$a_i(\mathbf{k}) = -i\psi(\mathbf{k})^\dagger \frac{\partial \psi(\mathbf{k})}{\partial k^i}, \quad \psi(\mathbf{k}) = (|\mathbf{k}, 1\rangle, \dots, |\mathbf{k}, N\rangle), \quad (105)$$

ベリ-曲率 :

$$f_{ij}(\mathbf{k}) = \frac{\partial a_j(\mathbf{k})}{\partial k^i} - \frac{\partial a_i(\mathbf{k})}{\partial k^j} + i[a_i(\mathbf{k}), a_j(\mathbf{k})], \quad (106)$$

第 2 チャーン数 :

$$C_2 = \frac{1}{32\pi^2} \int d^4k \epsilon^{ijkl} \text{tr} [f_{ij}(\mathbf{k}) f_{kl}(\mathbf{k})] \in \mathbb{Z}, \quad (107)$$

(以下ではガウス単位系)

$$(A^\mu) = (\phi, \mathbf{A}), \quad F^{0i} = -E_i, \quad F^{ij} = -\epsilon^{ijk} B_k, \quad (108)$$

チャー-ン・サイモン項:

$$S_{\text{CS}}^{4+1} = \int dt d^4x \frac{C_2 \alpha e}{24\pi^2 \hbar c} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma\tau} A_\mu \partial_\nu A_\rho \partial_\sigma A_\tau, \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}. \quad (109)$$

電流 :

$$j^\mu = c \frac{\delta S_{\text{CS}}}{\delta A_\mu} = \frac{C_2 \alpha e}{8\pi^2 \hbar} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma\tau} \partial_\nu A_\rho \partial_\sigma A_\tau = \frac{C_2 \alpha e}{32\pi^2 \hbar} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma\tau} F_{\nu\rho} F_{\sigma\tau}, \quad (110)$$

$$j^z = \frac{C_2 \alpha e}{4\pi^2 \hbar} (E_w B_{xy} + E_y B_{wx} + E_x B_{yw}), \quad (111)$$

次元縮小化 [11] :

$$A^\mu(t, x, y, z, w) \rightarrow A^\mu(t, x, y, z), \quad \mu = 0, 1, 2, 3, \quad (112)$$

$$A^w(t, x, y, z, w) \rightarrow \frac{\hbar c}{e L_w} \phi(t, x, y, z), \quad \phi \in [-\pi, \pi), \quad (113)$$

$$\begin{aligned} S_{\text{CS}}^{4+1} &\rightarrow \int dt d^3x \frac{\theta \alpha}{8\pi^2} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \partial_\mu A_\nu \partial_\rho A_\sigma = \int dt d^3x \frac{\theta \alpha}{32\pi^2} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma} \\ &= - \int dt d^3x \frac{\alpha}{4\pi} \frac{\theta}{\pi} \mathbf{E} \cdot \mathbf{B} = S_\theta^{3+1}, \end{aligned} \quad (114)$$

$$C_2\phi(t, x, y, z) = \theta(t, x, y, z).$$

$$j^\mu = c \frac{\delta S_\theta}{\delta A_\mu} = \frac{\alpha c}{4\pi^2} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \partial_\nu \theta \partial_\rho A_\sigma, \quad (115)$$

$$\rho = -\nabla \cdot \frac{\alpha}{4\pi} \frac{\theta}{\pi} \mathbf{B}, \quad \mathbf{P} = \frac{\alpha}{4\pi} \frac{\theta}{\pi} \mathbf{B}, \quad (116)$$

$$\mathbf{j} = \frac{\alpha}{4\pi^2} \frac{\partial \theta \mathbf{B}}{\partial t} + \frac{\alpha c}{4\pi^2} \nabla \times (\theta \mathbf{E}), \quad (117)$$

マクスウェル方程式

$$\delta \mathbf{j} / c = \nabla \times \mathbf{M} + \partial_0 \mathbf{P}, \quad (118)$$

$\delta \mathbf{j}$ は誘起された電流であり, (117) 式においては \mathbf{j} そのものである.

量子化電気磁気応答:

$$\mathbf{P} = \frac{\alpha}{4\pi} \frac{\theta}{\pi} \mathbf{B}, \quad (119)$$

$$\mathbf{M} = \frac{\alpha}{4\pi} \frac{\theta}{\pi} \mathbf{E}. \quad (120)$$

$z < 0$ にトポロジカル絶縁体, $z > 0$ が真空とすると,

$$\theta = \pi\theta(-z), \quad \partial_\mu \theta = -\pi\delta(z)\delta_{\mu 3}, \quad (121)$$

$$S_\theta^{3+1} = - \int dt d^3x \frac{\alpha}{8\pi^2} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} A_\nu \partial_\mu \theta \partial_\rho A_\sigma = \int dt d^2x \frac{\alpha}{8\pi} \epsilon^{\mu\nu\rho} A_\mu \partial_\nu A_\rho = S_{\text{CS}}^{2+1}|_{C_1=1/2}, \quad (122)$$

表面半整数量子ホール効果:

$$\sigma_{xy} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{h}. \quad (123)$$

付録 C 結晶における電気分極

古典電磁気学によれば, 電気分極 \mathbf{P} は微視的な電荷分布 $\rho(\mathbf{x})$ の単位体積あたりの電気双極子 (1次モーメント) として定義される;

$$\mathbf{P} = \int \frac{d^3x}{V} \mathbf{x} \rho(\mathbf{x}). \quad (124)$$

しかし，結晶中においてはその周期性から \mathbf{P} は任意の値をとり得るわけではないことに注意しなければならない．以下，議論の簡単のために格子定数 a の 1 次元結晶を考える．結晶中の電荷分布は周期関数であるから， $\rho(x) = \rho(x - ma)$, $m \in \mathbb{Z}$ であり，

$$P = \int \frac{dx}{L} x \rho(x) = \int \frac{dx}{L} x \rho(x - ma) = \int \frac{dx}{L} (x + ma) \rho(x) = P + \frac{mQ}{N_{\text{cell}}}, \quad (125)$$

でなければならない．ここで Q は全電荷である．これはすなわち， P それ自体ではなく $P \bmod Q/N_{\text{cell}}$ が well-defined であることを意味する． Q/N_{cell} は単位胞あたりの電子数であり， $Q/N_{\text{cell}} = -eN$, N : (価電子帯の数), である．

次に，量子論における電気分極の表式を導く．場の演算子 $\psi(x)$ はブロッホ波動関数 $N_{\text{cell}}^{-1/2} e^{ikx} u_{k\alpha}(x)$, $e^{-ikx} H e^{ikx} u_{k\alpha}(x) = E_{\alpha}(k) u_{k\alpha}(x)$ を用いて

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{N_{\text{cell}}}} \sum_{k\alpha} e^{ikx} u_{k\alpha}(x) c_{k\alpha}, \quad u_{k\alpha}(x+a) = u_{k\alpha}(x), \quad \int_{-a/2}^{a/2} dx |u_{k\alpha}(x)|^2 = 1, \quad (126)$$

と展開される (α はバンド指標) ので，電子の電荷を $-e$ として，

$$\begin{aligned} P &= \frac{-e}{L} \int dx \psi(x)^\dagger x \psi(x) = \frac{-e}{N_{\text{cell}} L} \sum_{k\alpha k'\alpha'} \int dx e^{-i(k-k')x} u_{k\alpha}(x)^* x u_{k'\alpha'}(x) c_{k\alpha}^\dagger c_{k'\alpha'} \\ &= \frac{-e}{N_{\text{cell}} L} \sum_{k\alpha k'\alpha'} \int dx (-i) \frac{e^{-i(k-k')x}}{\partial k'} u_{k\alpha}(x)^* u_{k'\alpha'}(x) c_{k\alpha}^\dagger c_{k'\alpha'} \\ &= \frac{-e}{N_{\text{cell}} L} \sum_{k\alpha k'\alpha'} \int dx e^{-i(k-k')x} u_{k\alpha}(x)^* i \frac{\partial u_{k'\alpha'}(x)}{\partial k'} c_{k\alpha}^\dagger c_{k'\alpha'} \\ &= \frac{-e}{N_{\text{cell}} L} \sum_{k\alpha k'\alpha'} \sum_{n=1}^{N_{\text{cell}}} e^{-i(k-k')na} \int_{-a/2}^{a/2} dx e^{-i(k-k')x} u_{k\alpha}(x)^* i \frac{\partial u_{k'\alpha'}(x)}{\partial k'} c_{k\alpha}^\dagger c_{k'\alpha'} \\ &= \frac{-e}{L} \sum_{k\alpha\alpha'} \int_{-a/2}^{a/2} dx u_{k\alpha}(x)^* i \frac{\partial u_{k\alpha'}(x)}{\partial k} c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha'}, \end{aligned} \quad (127)$$

一体の状態での期待値は， $f_{k\alpha}$ を分布関数として

$$P = -e \sum_{k\alpha} \int_{-a/2}^{a/2} \frac{dx}{L} u_{k\alpha}(x)^* i \frac{\partial u_{k\alpha}(x)}{\partial k} f_{k\alpha}, \quad (128)$$

と与えられることになる．絶対零度での電気分極 P (単位体積あたりの電気双極子) はベリー接続 $A(k)$ の $U(1)$ 部分と以下の関係がある．

$$P = e \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dk}{2\pi} \text{tr} A(k), \quad [A(k)]_{\alpha\beta} = -i \langle k\alpha | \frac{\partial}{\partial k} | k\beta \rangle. \quad (129)$$

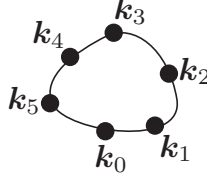


図3 経路 C と離散点 $\mathbf{k}_{i=0, \dots, M-1}$. $M = 6$ の場合.

これが量子論における電気分極の表式である.

ベリー接続は $U(N)$ ゲージの自由度があることに注意する. これは, 全ての占有状態の線形結合を取り直しても, スレーター行列式は不変であることに対応する. $|k\alpha\rangle \rightarrow |k\alpha'\rangle [g(k)]_{\alpha'\alpha}$, $g(k) \in U(N)$ とゲージ変換すると, $A(k) \rightarrow g(k)^\dagger A(k) g(k) - ig(k)^\dagger \partial_k g(k)$, すなわち,

$$\text{tr} A(k) \rightarrow \text{tr} A(k) + \frac{\partial}{\partial k} \arg \det g(k), \quad (130)$$

$$P \rightarrow P + eN, \quad (131)$$

であり, P でなく, $P \bmod e$ がゲージ不変な物理量である.

付録 D ウィルソンループ

D.1 定義

$U(N)$ ウィルソンループ

$U(N)$ ベリー接続 $\mathbf{A}(\mathbf{k})$ の周回経路 C における $U(N)$ ウィルソンループ $W[C]$

$$W[C] = \text{P exp} \left[i \oint_C d\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k}) \right] = \lim_{M \rightarrow \infty} F_{0,1} \cdots F_{M-1,0} \in U(N), \quad (132)$$

の対角和及び行列式はゲージ不変である. ここで $[F_{i,j}]_{\alpha\beta} = \langle \mathbf{k}_i \alpha | \mathbf{k}_j \beta \rangle$ は周回経路 $C : \mathbf{k} = \mathbf{k}(t), t \in [0, 1], \mathbf{k}(0) = \mathbf{k}(1)$ を $\mathbf{k}_i = \mathbf{k}(i/M), i = 0, \dots, M-1$ の M 個に離散化した点上 (図3 参照) で定義される.

証明—

まずは

$$\text{P exp} \left[i \oint_C d\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k}) \right] = \lim_{M \rightarrow \infty} F_{0,1} \cdots F_{M-1,0}, \quad (133)$$

を示しておこう。

$$\begin{aligned} [F_{i,i+1}]_{\alpha\beta} &= \langle \mathbf{k}_i \alpha | \mathbf{k}_{i+1} \beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} + \langle \mathbf{k}_i \alpha | \partial_{\mathbf{k}} | \mathbf{k}_i \beta \rangle \cdot d\mathbf{k}_i + \mathcal{O}(dk^2) \\ &= [1 + i\mathbf{A}(\mathbf{k}_i) \cdot d\mathbf{k}_i]_{\alpha\beta}, \end{aligned} \quad (134)$$

ここで $d\mathbf{k}_i = \mathbf{k}_{i+1} - \mathbf{k}_i$. よって

$$\begin{aligned} F_{0,1} \cdots F_{M-1,0} &= \text{P} \prod_{i=0}^{M-1} [1 + i\mathbf{A}(\mathbf{k}_i) \cdot d\mathbf{k}_i] = \text{P} \prod_{i=0}^{M-1} \exp [i\mathbf{A}(\mathbf{k}_i) \cdot d\mathbf{k}_i] + \mathcal{O}(dk^2) \\ &= \text{P} \exp \left[i \sum_{i=0}^{M-1} \mathbf{A}(\mathbf{k}_i) \cdot d\mathbf{k}_i \right] + \mathcal{O}(dk^2). \end{aligned} \quad (135)$$

となり, (133) 式が示される.

$U(N)$ ゲージ変換 $|\mathbf{k}, \alpha\rangle \rightarrow |\mathbf{k}, \alpha'\rangle [g(\mathbf{k})]_{\alpha'\alpha}$, $g(\mathbf{k}) \in U(N)$ により,

$$F_{i,j} \rightarrow g(\mathbf{k}_i)^\dagger F_{i,j} g(\mathbf{k}_j), \quad (136)$$

であるから, ゲージ変換によりウィルソンループは

$$W[C] \rightarrow g(\mathbf{k}_0)^\dagger W[C] g(\mathbf{k}_0), \quad (137)$$

と変換される. したがって, $\text{tr} W[C]$ と $\det W[C]$ はゲージ不変である.

D.2 ベリー位相

定義より, ベリー位相 $\gamma[C] = \oint_C d\mathbf{k} \cdot \text{tr} \mathbf{A}(\mathbf{k})$ は

$$\gamma[C] = -i \text{tr} \ln W[C] = -i \ln \det W[C], \quad (138)$$

と計算できるが, これはベリー位相の便利な数値計算法をも与えている.

離散和によるベリー位相の近似

ベリー位相 $\gamma[C]$ は十分大きな M を用いて

$$\gamma[C] \approx \sum_{i=0}^{M-1} \text{Arg} \det F_{i,i+1}, \quad (139)$$

と近似できる.

上の表式はゲージ不変性を自明に満たしており, 数値計算に都合が良い. 数値計算では

行列 $H(\mathbf{k})$ を数値対角化し，得られた固有ベクトルを用いて $F_{i,j}$ を計算する．ただし， $H(\mathbf{k}_i)$ と $H(\mathbf{k}_j)$ はまったく独立に対角化されるので，それぞれ全く異なるゲージのもとでの固有ベクトルが得られる．したがって，ゲージ不変な量のみが数値計算可能である．一方，元々の表式を離散化した

$$\gamma[C] = \oint_C d\mathbf{k} \cdot \text{tr} \mathbf{A}(\mathbf{k}) \approx -i \sum_{i=0}^{M-1} \text{tr} \frac{F_{i,i+1} - 1}{dk_i}, \quad (140)$$

は有限の M に対してゲージ不変ではなく，数値計算には適さない．

一つの応用例として，電気分極の数値計算がある [12]．電気分極は (129) 式より，積分経路をブリルアン域を渡る周回経路に採ることで，例えば，分極の z 成分は

$$P_z = e \iint \frac{dk_x}{2\pi} \frac{dk_y}{2\pi} \int \frac{dk_z}{2\pi} \text{tr} A_i(\mathbf{k}) \approx e \iint \frac{dk_x}{2\pi} \frac{dk_y}{2\pi} \frac{1}{2\pi} \sum_{i=0}^{M-1} \text{Arg det } F_{n,n+1}^z, \quad (141)$$

$$[F_{n,n+1}^z]_{\alpha\beta} = \langle (k_x, k_y, k_z^n) \alpha | (k_x, k_y, k_z^{n+1}) \beta \rangle, \quad (142)$$

と計算できる．ここで $k_z^n = -\pi/c + 2\pi n/(Mc)$ は k_z の離散点である．

D.3 チャーン数

ベリー位相と同様にしてチャーン数

$$\nu_{\text{Ch}} = \int \frac{d^2k}{2\pi} \text{tr} F(\mathbf{k}), \quad F(\mathbf{k}) = \epsilon_{ij} \partial_i A_j(\mathbf{k}), \quad \epsilon_{12} = -\epsilon_{21} = 1, \quad (143)$$

を計算することもできる [15]．

チャーン数の近似式

$\mathbf{k}_m = m_1 \delta \mathbf{b}_1 + m_2 \delta \mathbf{b}_2$, $m_i = 0, \dots, M_i - 1$, $\delta \mathbf{b}_i = \mathbf{b}_i / M_i$ をブリルアン域内の点とするとチャーン数は

$$\nu_{\text{Ch}} = \int_{\text{BZ}} \frac{d^2 k}{2\pi} \text{tr} F(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi} \sum_{m_1, m_2} \arg \det W_m, \quad (144)$$

と近似できる。ここで

$$W_m = F_{\mathbf{k}_m, \mathbf{k}_m + \delta \mathbf{b}_1} F_{\mathbf{k}_m + \delta \mathbf{b}_1, \mathbf{k}_m + \delta \mathbf{b}_1 + \delta \mathbf{b}_2} F_{\mathbf{k}_m + \delta \mathbf{b}_2, \mathbf{k}_m + \delta \mathbf{b}_1 + \delta \mathbf{b}_2}^\dagger F_{\mathbf{k}_m, \mathbf{k}_m + \delta \mathbf{b}_2}^\dagger, \quad (145)$$

および $[F_{\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j}]_{\alpha\beta} = \langle \mathbf{k}_i \alpha | \mathbf{k}_j \beta \rangle$ である。周期境界条件 $|\mathbf{k}_{(M_1, m_2)} \alpha\rangle = |\mathbf{k}_{(0, m_2)} \alpha\rangle$, $|\mathbf{k}_{(m_1, M_2)} \alpha\rangle = |\mathbf{k}_{(m_1, 0)} \alpha\rangle$ をとることに注意する。偏角は主値を採るものとする。

証明

まず, $W_{\mathbf{k}}$ は四点からなるウィルソンループであり, これ自体ゲージ不変である。すなわち, 数値計算が可能な量となっている。さて, 上式を示すには, キュムラント展開

$$\begin{aligned} F_{\mathbf{k}, \mathbf{k} + \delta \mathbf{b}_1} &= 1 + i \delta \mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k}) + \frac{\delta b_1^i \delta b_1^j}{2} Q_{ij}(\mathbf{k}) \\ &= \exp \left[i \delta \mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k}) + \frac{[\delta \mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k})]^2}{2} + \frac{\delta \mathbf{b}_1 Q(\mathbf{k}) \delta \mathbf{b}_1}{2} \right] + \mathcal{O}(\delta b^3) \\ &= \exp \left[\frac{[\delta \mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k})]^2}{2} + \frac{\delta \mathbf{b}_1 Q(\mathbf{k}) \delta \mathbf{b}_1}{2} \right] e^{i \delta \mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k})} + \mathcal{O}(\delta b^3), \end{aligned} \quad (146)$$

$$\begin{aligned} &F_{\mathbf{k} + \delta \mathbf{b}_2, \mathbf{k} + \delta \mathbf{b}_1 + \delta \mathbf{b}_2}^\dagger \\ &= \exp \left[-i \delta \mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k} + \delta \mathbf{b}_2) + \frac{[\delta \mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k})]^2}{2} + \frac{\delta \mathbf{b}_1 Q^\dagger(\mathbf{k}) \delta \mathbf{b}_1}{2} \right] + \mathcal{O}(\delta b^3) \\ &= \exp \left[-i \delta \mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k}) - i \delta b_1^i \delta b_2^j \partial_j A_i(\mathbf{k}) + \frac{[\delta \mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k})]^2}{2} + \frac{\delta \mathbf{b}_1 Q^\dagger(\mathbf{k}) \delta \mathbf{b}_1}{2} \right] + \mathcal{O}(\delta b^3) \\ &= \exp^{-i \delta \mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k})} \exp \left[\frac{[\delta \mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k})]^2}{2} + \frac{\delta \mathbf{b}_1 Q^\dagger(\mathbf{k}) \delta \mathbf{b}_1}{2} \right] e^{-i \delta b_1^i \delta b_2^j \partial_j A_i(\mathbf{k})} + \mathcal{O}(\delta b^3) \end{aligned} \quad (147)$$

$$\begin{aligned}
F_{\mathbf{k}+\delta\mathbf{b}_1, \mathbf{k}+\delta\mathbf{b}_1+\delta\mathbf{b}_2} &= \exp \left[i\delta\mathbf{b}_2 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k}) + i\delta b_2^i \delta b_1^j \partial_j A_i(\mathbf{k}) \right. \\
&\quad \left. + \frac{[\delta\mathbf{b}_2 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k})]^2}{2} + \frac{\delta\mathbf{b}_2 Q(\mathbf{k}) \delta\mathbf{b}_2}{2} \right] + \mathcal{O}(\delta b^3) \\
&= e^{i\delta b_2^i \delta b_1^j \partial_j A_i(\mathbf{k})} \exp \left[\frac{[\delta\mathbf{b}_2 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k})]^2}{2} + \frac{\delta\mathbf{b}_2 Q(\mathbf{k}) \delta\mathbf{b}_2}{2} \right] e^{i\delta\mathbf{b}_2 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k})} \\
&\quad + \mathcal{O}(\delta b^3)
\end{aligned} \tag{148}$$

$$F_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\delta\mathbf{b}_2}^\dagger = e^{-i\delta\mathbf{b}_2 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k})} \exp \left[\frac{[\delta\mathbf{b}_2 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k})]^2}{2} + \frac{\delta\mathbf{b}_2 Q^\dagger(\mathbf{k}) \delta\mathbf{b}_2}{2} \right] + \mathcal{O}(\delta b^3), \tag{149}$$

を用いる。ここで $[Q_{ij}^\pm(\mathbf{k})]_{\alpha\beta} = \langle \mathbf{k} \pm \alpha | \partial_i \partial_j | \mathbf{k} \pm \beta \rangle$ 。さらに、

$$\begin{aligned}
W_{\mathbf{k}} &\sim \exp \left([\delta\mathbf{b}_1 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k})]^2 + \frac{\delta\mathbf{b}_1 [Q(\mathbf{k}) + Q^\dagger(\mathbf{k})] \delta\mathbf{b}_1}{2} \right) e^{id^2 b \epsilon_{ij} \partial_i A_j(\mathbf{k})} \\
&\quad \times \exp \left([\delta\mathbf{b}_2 \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k})]^2 + \frac{\delta\mathbf{b}_2 [Q(\mathbf{k}) + Q^\dagger(\mathbf{k})] \delta\mathbf{b}_2}{2} \right),
\end{aligned} \tag{150}$$

を得る。微小面積 $d^2b = \epsilon_{ij} \delta b_i \delta b_j$ を導入した。左と右の指数はエルミート行列であるから偏角には寄与がない。すなわち、

$$\arg \det W_{\mathbf{k}} \sim \arg \det e^{id^2 b \epsilon_{ij} \partial_i A_j(\mathbf{k})} = d^2b \operatorname{tr} F(\mathbf{k}), \quad d^2b \rightarrow 0, \tag{151}$$

以上により、 $\delta b_1, \delta b_2 \rightarrow 0$ の極限において (144) 式が成り立つことがわかる。

(144) 式は近似ではあるが、驚くべきことに、任意の分割数 M_i に対して整数値をとる。これを示すために $W_{\mathbf{k}} + W_{\mathbf{k}+\delta\mathbf{b}_1}$ を考察する。偏角の主値について、一般に、 $-\pi \leq \phi_1, \phi_2 < \pi$ に対して、

$$\phi_1 + \phi_2 = \arg e^{i\phi_1} + \arg e^{i\phi_2} = \arg e^{i(\phi_1+\phi_2)} + \begin{cases} +2\pi, & \pi \leq \phi_1 + \phi_2 < 2\pi, \\ 0, & -\pi \leq \phi_1 + \phi_2 < \pi, \\ -2\pi, & -2\pi \leq \phi_1 + \phi_2 < -\pi, \end{cases} \tag{152}$$

であるから、

$$\begin{aligned}
&\arg \det W_{\mathbf{k}} + \arg \det W_{\mathbf{k}+\delta\mathbf{b}_1} \\
&= \arg \left[\det \left(F_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\delta\mathbf{b}_1} F_{\mathbf{k}+\delta\mathbf{b}_1, \mathbf{k}+2\delta\mathbf{b}_1} F_{\mathbf{k}+2\delta\mathbf{b}_1, \mathbf{k}+2\delta\mathbf{b}_1+\delta\mathbf{b}_2} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \times F_{\mathbf{k}+\delta\mathbf{b}_1+\delta\mathbf{b}_2, \mathbf{k}+2\delta\mathbf{b}_1+\delta\mathbf{b}_2}^\dagger F_{\mathbf{k}+\delta\mathbf{b}_2, \mathbf{k}+\delta\mathbf{b}_1+\delta\mathbf{b}_2}^\dagger F_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\delta\mathbf{b}_2}^\dagger \right) \right. \\
&\quad \left. \times \det \left(F_{\mathbf{k}+\delta\mathbf{b}_1, \mathbf{k}+\delta\mathbf{b}_1+\delta\mathbf{b}_2} F_{\mathbf{k}+\delta\mathbf{b}_1, \mathbf{k}+\delta\mathbf{b}_1+\delta\mathbf{b}_2}^\dagger \right) \right] + 2n_{\mathbf{k}}\pi, \quad n_{\mathbf{k}} \in \mathbb{Z},
\end{aligned} \tag{153}$$

と変形できる．最後の因子は $\det AA^\dagger$ の形であり，これは正であるから，偏角の計算から除いても良い．以上の計算から分かることは，和を取るときに共通のリンクの部分は $\text{mod } 2\pi$ において互いに相殺しあう，ということである．したがって，全領域で和を取ると， $\text{mod } 2\pi$ で，領域境界上の和だけに簡約できる．

$$\nu_{\text{Ch}} = \frac{1}{2\pi} \sum_{i; \mathbf{k}_i \in \partial\text{BZ}} \arg \det F_{\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_{i+1}} \pmod{1}. \quad (154)$$

さらに，BZの周期性から，その境界上での和も $\text{mod } 2\pi$ で相殺しあい，結局

$$\nu_{\text{Ch}} = 0 \pmod{1}, \quad (155)$$

すわなち，有限の分割数で近似されたチャーン数も必ず整数値をとる．

連続極限を採ると (154), (155) 式は

$$\nu_{\text{Ch}} = \int_{\partial\text{BZ}} \frac{d\mathbf{k}}{2\pi} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k}) = 0 \pmod{1}, \quad (156)$$

を得る．これはベクトル解析のストークスの定理に相当するものである．ただし， $\text{mod } 1$ でのみ成り立つ．

付録 E 電子正孔対称性

反ユニタリー変換 \mathcal{C} に対して，ハミルトニアンが

$$\mathcal{C}H(\mathbf{k})\mathcal{C}^{-1} = -H(-\mathbf{k}), \quad (157)$$

を満たすとき，系は電子正孔対称性をもつと言う．明らかに，エネルギースペクトルは原点に関して点対称 ($E_\alpha(\mathbf{k})$ に対して必ず $E_{\alpha'}(-\mathbf{k})$ が存在する) になる．定義より， \mathcal{C}^2 は自明な変換であるが，反ユニタリー変換であるのでその位相は $\mathcal{C}^2 = +$ もしくは $\mathcal{C}^2 = -$ のどちらかである．

正と負のエネルギーが対で現れるので，ハミルトニアンの次元は必ず偶数である．したがって，“電子”と“正孔”の自由度を表すパウリ行列 τ_i を用いて，一般性を失わず，

$$H(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^3 h_i(\mathbf{k})\tau_i, \quad (158)$$

と書ける．電子正孔変換が $\mathcal{C} = \tau_2\mathcal{K}$ と表されるときは， $\mathcal{C}^2 = -$ であり，それ以外の場合には $\mathcal{C}^2 = +$ となる．各々の場合に対して， $h_i(\mathbf{k})$ は適切な対称性を持たなければならない．

電子正孔対称性を有する例の一つは BdG ハミルトニアンである．常伝導状態におけるハミルトニアン $H_0(\mathbf{k})$ と超伝導対ポテンシャル $\Delta(\mathbf{k})$ を用いて

$$H_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H_0(\mathbf{k}) - \mu & \Delta(\mathbf{k}) \\ \Delta(\mathbf{k})^\dagger & -[H_0^*(-\mathbf{k}) - \mu] \end{pmatrix}, \quad (159)$$

が BdG ハミルトニアンである．対ポテンシャルは $[\Delta(\mathbf{k})]_{\alpha\beta} = \langle c_{\mathbf{k}\alpha} c_{-\mathbf{k}\beta} \rangle$ で定義されるので，フェルミ粒子の統計性から $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta(-\mathbf{k})^T$ という対称性をもつ．したがって，電子正孔対称性

$$CH_{\text{BdG}}(\mathbf{k})C^{-1} = -H_{\text{BdG}}(-\mathbf{k}), \quad C = \tau_1 \mathcal{K}, \quad C^2 = 1, \quad (160)$$

が成立する．

E.1 \mathbb{Z}_2 トポロジカル不変量

以下，負エネルギー状態は全て占有されており，正エネルギーと負エネルギーの間にはバンドギャップが開いているとする． $C^2 = 1$ のときには以下のように，ギャップを特徴づけるトポロジカル不変量を導入できる [13]．

電子正孔対称性とトポロジカル不変量

$C^2 = 1$ のとき，空間 d 次元において，

$$\nu^{d=0} = \frac{1}{\pi} \arg \frac{\text{pf}(HU_C)}{\sqrt{\det(HU_C)}} \in \mathbb{Z}_2 \pmod{2}, \quad (161)$$

$$\nu^{d=1} = \int \frac{dk}{\pi} \text{tr} A_-(k) \in \mathbb{Z}_2 \pmod{2}, \quad (162)$$

はトポロジカル不変量である．ここで，電子正孔変換は $C = U_C \mathcal{K}$ と表される．また， $[A_-(k)]_{mn} = -i \langle k-m | \partial_k | k-n \rangle$ は負エネルギー状態 $|k-m\rangle$ からつくられるベリー接続である．

証明

$C^2 = 1$ より， U_C は対称行列であるから， HU_C は反対称行列であり，そのパフィアンを定義できる．したがって， $\det(HU_C) = [\text{pf}(HU_C)]^2$ より， $\text{pf}(HU_C)/\sqrt{\det(HU_C)} = \pm 1$ である．また， $\nu^{d=0}$ は $\det H = 0$ となるとき，すなわち，ギャップが閉じるときには定義できなくなる．言い換えると， $\nu^{d=0} = 0$ から $\nu^{d=0} = 1$ に値を変えるには，ギャップを閉じることが必要になる．これは， $\nu^{d=0}$ がギャップを特徴づける不変量であることを意

味する．一方、 $C^2 = -1$ のときには、 U_C は反対称行列となり、上の議論は成り立たない．

次に $d = 1$ の場合を証明する．まず、関係式として、

$$\int \frac{dk}{\pi} \text{tr}[A_-(k) + A_+(k)] = 0 \pmod{2}, \quad (163)$$

という総和則がある．これは対称性の如何に関わらず常に成立する．何故なら、ハミルトニアンを対角化するユニタリ一行列 $U(k) = (|k-1\rangle, \dots, |k-N\rangle, |k+1\rangle, \dots, |k+N\rangle) \in U(2N)$ を用いて上式は

$$-i \int \frac{dk}{\pi} \text{tr}[U(k)^\dagger \partial_k U(k)] = \int \frac{dk}{\pi} \partial_k \arg \det U(k) = 0 \pmod{2}, \quad (164)$$

である．一方、電子正孔対称性によって

$$A_\pm(k)^* = C_\mp(-k) A_\mp(-k) C_\mp(-k) - i C_\mp(-k)^\dagger \partial_{-k} C_\mp(-k), \quad (165)$$

が課される．ここで

$$[C_\pm(k)]_{mn} = \langle k \pm m | C | -k \mp n \rangle \in U(N), \quad (166)$$

である．この関係式と、ベリ－接続がエルミート行列であることに注意すると

$$\int \frac{dk}{\pi} \text{tr} A_-(k) = \int \frac{dk}{\pi} \text{tr} A_+(k) + \int \frac{dk}{\pi} \partial_k \arg \det C_\mp(k) = \int \frac{dk}{\pi} \text{tr} A_+(k) \pmod{2}, \quad (167)$$

を得る．式 (163) と (167) から、

$$\nu^{d=1} = \int \frac{dk}{\pi} \text{tr} A_-(k) = \int \frac{dk}{\pi} \text{tr} A_+(k) = 0 \text{ or } 1 \pmod{2}, \quad (168)$$

が示される．

証明終

再び、BdG ハミルトニアン $H_{\text{BdG}}(k)$ を考えよう．通常、超伝導ギャップはフェルミエネルギーより十分に小さい．そのような場合には、トポロジカル不変量 $\nu^{d=1}$ が以下のように簡単化される [14].

トポロジカル不変量とフェルミ面の枚数

$k = 0$ および $k = \pi$ におけるエネルギーギャップを閉じることなく対ポテンシャルを $\Delta(k = 0, \pi) \rightarrow 0$ と連続変形できるとき、 $\nu^{d=1}$ は $k = 0$ と $k = \pi$ の間のフェルミ点の数の偶奇で与えられる．

証明

一般に、 $\nu^{d=1}$ は $k = 0$ と $k = \pi$ の 2 点だけで決まる.

$$\begin{aligned}
\nu^{d=1} &= \left[\int_{-\pi}^0 + \int_0^\pi \right] \frac{dk}{\pi} \operatorname{tr} A_-(k) \\
&= \int_0^\pi \frac{dk}{\pi} \{ \operatorname{tr}[A_+(k) + A_-(k)] + \partial_k \arg \det C_+(k) \} \pmod{2} \\
&= \frac{1}{\pi} \arg \frac{\det U(\pi)}{\det U(0)} + \frac{1}{\pi} \arg \frac{\det C_+(\pi)}{\det C_+(0)} \pmod{2} \\
&= \frac{1}{\pi} \arg \frac{\det \tilde{U}(\pi)}{\det \tilde{U}(0)} \pmod{2}, \tag{169}
\end{aligned}$$

ここで,

$$\tilde{U}(k) = U(k) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & C_+(k) \end{pmatrix} = (|k-1\rangle, \dots, |k-N\rangle, U_C |k-1\rangle^*, \dots, U_C |k-N\rangle^*). \tag{170}$$

行列式は列交換により

$$\begin{aligned}
\det \tilde{U}^*(k) &= (-)^N \det (U_C^* |k-1\rangle \cdots U_C^* |k-N\rangle \quad |k-1\rangle^* \cdots |k-N\rangle^*) \\
&= (-)^N (\det U_C^*) \mathcal{C}^{2N} \det U(k), \tag{171}
\end{aligned}$$

を満たす. ここで $\mathcal{C}^2 = U_C U_C^* = \pm 1$ である. U_C は系のパラメーターには依存しないので, 上式が示しているのは, $\arg \det \tilde{U}(k) = -\arg [(-)^N (\det U_C^*) \mathcal{C}^{2N}] / 2 \pmod{\pi}$, すなわち, $\operatorname{Arg} \det \tilde{U}(k)$ が 2 値に量子化されているということである. ギャップが閉じると $|k \pm 1\rangle$ の定義が曖昧になり, $\tilde{U}(k)$ が well-defined でなく, $\det \tilde{U}(k=0, \pi)$ の値が変わり得る. したがって, $\Delta(k=0, \pi) \rightarrow 0$ としたときに, $k=0$ および $k=\pi$ におけるギャップが閉じなければ, $\det \tilde{U}(k=0, \pi)$ を評価する際には $\Delta(k=0, \pi)$ を無視しても良い. こうした状況は $h(k) - \mu$ に対して $\Delta(k)$ が極めて大きくなければ成り立つので, 弱結合の仮定と呼ばれている.

さて, 弱結合の仮定の下で,

$$H_{\text{BdG}}(k=0, \pi) \sim \begin{pmatrix} H_0(k=0, \pi) - \mu & 0 \\ 0 & -H_0^*(k=0, \pi) + \mu \end{pmatrix}, \tag{172}$$

を考えれば十分である. まず $\mu \rightarrow -\infty$ (占有電子数 0) の極限を調べる. この時には $H_0(k) - \mu$ の固有値は全て正であり, $\mathcal{C} = \tau_1 \mathcal{K}$ であることを用いて

$$U(k=0, \pi) \sim \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & \cdots & v_{kN} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & v_{k1}^* \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \cdots & v_{kN}^* \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & v_k^* \\ v_k & 0 \end{pmatrix}, \tag{173}$$

の形になる．ここで $v_k \in U(N)$ は $H_0^*(k) - \mu$ を対角化するユニタリ行列である．したがって

$$\det U(k=0, \pi) = -\det v_k v_k^* = -1. \quad (174)$$

次に μ が増加して，運動量が k の電子の占有数が 1 になった場合を考える．すると， $H_0(k) - \mu$ の固有値の内の一つだけが負になっているので，

$$U(k) \sim \begin{pmatrix} v_{k1}^* \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & v_{k2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & \cdots & v_{kN} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & v_{k1} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & v_{k2}^* \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \cdots & v_{kN}^* \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix}, \quad (175)$$

の形をとる．第 1 列目と $(N+1)$ 列目を交換することで，

$$\det U(k) = -\det \begin{pmatrix} 0 & v_k \\ v_k^* & 0 \end{pmatrix} = 1, \quad (176)$$

と符号が変わる． μ が更に増加して電子数が $N(k)$ 個になった時にも，同様に $N(k)$ 回の列交換をすれば

$$\det U(k) = (-1)^{N(k)+1}, \quad (177)$$

であることが分かる．以上により，

$$\nu^{d=1} = N(\pi) - N(0) \pmod{2}, \quad (178)$$

が結論される． $N(\pi) - N(0)$ はフェルミ面の枚数を与えている．

証明終

ここまでは $\mathcal{C}^2 = +$ (class D) の場合のみを考えてきた．実際， $\mathcal{C}^2 = -$ (class C) に対して $\nu^{d=1} = 0$ を示すことができる． $\mathcal{C} = \tau_2 \mathcal{K}$ に注意して， $\mu \rightarrow \infty$ の場合には

$$U(k) = \begin{pmatrix} v_{k1} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & \cdots & v_{kN} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & -iv_{k1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \cdots & -iv_{kN}^* \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -iv_k^* \\ v_k^* & 0 \end{pmatrix}, \quad (179)$$

ゆえに

$$\det U(k) = i^N. \quad (180)$$

一方，占有数が 1 になると，

$$\begin{aligned} U(k) &= \begin{pmatrix} v_{k1}^* \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & v_{k2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & \cdots & v_{kN} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & iv_{k1} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & -iv_{k2}^* \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \cdots & -iv_{kN}^* \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix}, \\ & \quad (181) \end{aligned}$$

と表される. 第 1 列目と $(N + 1)$ 列目をともに $(-i)$ 倍し, さらにこれらの 2 列を交換することで,

$$\det U(k) = (-i)^2(-1) \det \begin{pmatrix} 0 & -iv_k^* \\ v_k^* & 0 \end{pmatrix} = i^N, \quad (182)$$

となるが, これは (180) 式と同じ値である. したがって, 任意の場合に対して $\det U(k) = i^N$ が成立し, 恒等的に $\nu^{d=1} = 0$ である.

E.2 チャーン数

空間 $d = 2$ 次元においては以下のチャーン数を定義できる.

$$\nu_{\text{Ch}} = \int \frac{d^2k}{2\pi} \text{tr} F^-(\mathbf{k}), \quad (183)$$

ここで, ベリー曲率 $F^\pm(\mathbf{k})$ は

$$F^\pm(\mathbf{k}) = \epsilon_{ij} \frac{\partial}{\partial k_i} A_j^\pm(\mathbf{k}). \quad (184)$$

であり, ベリー接続は

$$[A_j^\pm(\mathbf{k})]_{\alpha\beta} = \langle \mathbf{k} \pm \alpha | \left(-i \frac{\partial}{\partial k_j} \right) | \mathbf{k} \pm \beta \rangle, \quad (185)$$

と定義される.

チャーン数自体は電子正孔対称性, $CH(\mathbf{k})C^{-1} = -H(-\mathbf{k})$, がなくても定義できるが, 電子正孔対称な系に対しては以下の関係式が成り立つ.

電子正孔対称性とチャーンパリティ

電子正孔対称性を有する系において

$$\nu_{\text{Ch}} = \nu_{i0}^{d=1} + \nu_{i1}^{d=1} \pmod{2}, \quad \text{for } i = x \text{ or } y, \quad (186)$$

が成り立つ. ここで $\nu_{i\mu}^{d=1}$ は $k_{j \neq i} = \mu\pi$ と固定した i 方向の 1 次元系と見なしたときのトポロジカル不変量であり,

$$\nu_{i\mu}^{d=1} = \int \frac{dk_i}{\pi} \text{tr} A_i^- |_{k_j = \mu\pi}, \quad \text{for } \mu = 0, 1, \quad (187)$$

と定義される.

証明

ここでは

$$H(\mathbf{k}) = H(\mathbf{k} + \mathbf{b}_i), \quad (188)$$

を満たすようにゲージが選ばれているとする。これに対応して、ベリー接続も

$$\mathbf{A}(\mathbf{k}) = \mathbf{A}(\mathbf{k} + \mathbf{b}_i), \quad (189)$$

と採れる。

まず、(163) の証明と同様にして

$$\int \frac{dk_i}{\pi} \text{tr} [A_i^-(\mathbf{k}) + A_i^+(\mathbf{k})] = 2n_i(k_j), \quad n_i(k_j) \in \mathbb{Z}, \quad (190)$$

を示せる。ただし、ベリー接続の周期性から $n_i(k_j) = n_i(k_j + 2\pi)$ でなければならない。

これより直ちに

$$\int \frac{dk_j}{\pi} \text{tr} F^+(\mathbf{k}) = - \int \frac{dk_j}{\pi} \text{tr} F^-(\mathbf{k}) + 2\epsilon_{ij} \frac{\partial}{\partial k_i} n_j(k_i), \quad (191)$$

および、

$$\int \frac{d^2k}{\pi} \text{tr} F^+(\mathbf{k}) = - \int \frac{d^2k}{\pi} \text{tr} F^-(\mathbf{k}), \quad (192)$$

である。また、電子正孔対称性により、ベリー接続は

$$\mathbf{A}^\pm(\mathbf{k})^* = C_\mp(-\mathbf{k})^\dagger \mathbf{A}^\mp(-\mathbf{k}) C_\mp(-\mathbf{k}) - i C_\mp^\dagger(-\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial(-\mathbf{k})} C_\mp(-\mathbf{k}), \quad (193)$$

を満たす。よって、ベリー曲率も

$$\text{tr} F^+(\mathbf{k}) = - \text{tr} F^-(\mathbf{k}) \quad (194)$$

を満たさなければならない。以上により

$$\begin{aligned} \nu_{\text{Ch}} &= \int_{-\pi}^0 \frac{dk_y}{2} \int \frac{dk_x}{\pi} \text{tr} F^-(\mathbf{k}) + \int_0^\pi \frac{dk_y}{2} \int \frac{dk_x}{\pi} \text{tr} F^-(\mathbf{k}) \\ &= \int_0^\pi \frac{dk_y}{2} \int \frac{dk_x}{\pi} [\text{tr} F^-(\mathbf{k}) - \text{tr} F^+(\mathbf{k})] \\ &= \int_0^\pi dk_y \int \frac{dk_x}{\pi} \text{tr} F^-(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (195)$$

さらに、ストークスの定理により

$$\begin{aligned}\nu_{\text{Ch}} &= \int \frac{dk_x}{\pi} \text{tr} A(k_x, 0) - \int \frac{dk_x}{\pi} \text{tr} A(k_x, \pi) \pmod{2} \\ &= \nu_{x0}^{d=1} - \nu_{x1}^{d=1} \pmod{2},\end{aligned}\tag{196}$$

を得る。ここでのストークスの定理は mod 2 で成立することに注意する [(156) 式参照]. ベリー接続は一般にはブリルアン域の全体で well-defined ではないからである.

証明終

参考文献

- [1] 安藤陽一. トポロジカル絶縁体入門. 講談社, 2014.
- [2] 野村健太郎. トポロジカル絶縁体・超伝導体 (現代理論物理学シリーズ). 丸善出版, 2016.
- [3] 猪木慶治, 川合光. 量子力学 2 (KS 物理専門書). 講談社, 1994.
- [4] 大貫義郎. 場の量子論 (現代物理学叢書). 岩波書店, 2001.
- [5] Liang Fu. Topological Crystalline Insulators. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 106, p. 106802, Mar 2011.
- [6] X. G. Wen and A. Zee. Winding number, family index theorem, and electron hopping in a magnetic field. *Nucl. Phys. B*, Vol. 316, pp. 641–662, April 1989.
- [7] W. Izumida, R. Okuyama, A. Yamakage, and R. Saito. Angular momentum and topology in semiconducting single-wall carbon nanotubes. *Phys. Rev. B*, Vol. 93, p. 195442, May 2016.
- [8] Yuansen Xiong, Ai Yamakage, Shingo Kobayashi, Masatoshi Sato, and Yukio Tanaka. Anisotropic magnetic responses of topological crystalline superconductors. *Crystals*, Vol. 7, p. 58, 2017.
- [9] M. Sato. Non-Abelian statistics of axion strings. *Phys. Lett. B*, Vol. 575, pp. 126–130, November 2003.
- [10] Liang Fu and C. L. Kane. Superconducting Proximity Effect and Majorana Fermions at the Surface of a Topological Insulator. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 100, p. 096407, Mar 2008.
- [11] Xiao-Liang Qi, Taylor L. Hughes, and Shou-Cheng Zhang. Topological field theory of time-reversal invariant insulators. *Phys. Rev. B*, Vol. 78, p. 195424, Nov 2008.

- [12] R. D. King-Smith and David Vanderbilt. Theory of polarization of crystalline solids. *Phys. Rev. B*, Vol. 47, pp. 1651–1654, Jan 1993.
- [13] Ken Shiozaki. *Topological insulators and superconductors: classification of topological crystalline phases and axion phenomena*. PhD thesis, Kyoto University, 2014.
- [14] A. Y. Kitaev. Unpaired Majorana fermions in quantum wires. *Physics Uspekhi*, Vol. 44, p. 131, 2001.
- [15] Takahiro Fukui, Yasuhiro Hatsugai, and Hiroshi Suzuki. Chern Numbers in Discretized Brillouin Zone: Efficient Method of Computing (Spin) Hall Conductances. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 74, No. 6, pp. 1674–1677, 2005.
- [16] Junichiro Inoue, Ai Yamakage, and Syuta Honda. *Graphene in Spintronics: Fundamentals and Applications*. Pan Stanford, 2016.