

## $Z_2$ トポロジカル絶縁体の3階建て理論

広島大学大学院先端物質科学研究科 井村 健一郎<sup>1</sup>

(2010年7月2日受理)

グラフェンを舞台にしてトポロジカル絶縁体を議論する。近年グラフェンが盛んに議論されているが、その面白さはどこにあるのだろうか。グラフェン系の物理は、本質的に一体問題で議論されているにも関わらず豊富な物理を含んでいる。例えば、Dirac型分散関係の帰結として至る所に顔を出すBerry位相や、(2+1)次元Dirac粒子の量子Hall効果（あるいは量子化されたスピンHall効果）におけるパリティ異常などなど。量子力学における対称性が至る所に顔を出すのも興味深い<sup>2</sup>。

このノートは、2008年8月21日から23日にかけて長野県茅野市白樺湖で行われた、東京大学生産技術研究所羽田野研究室の合同夏期セミナーにおける講義に基いている。講義の内容を準備するにあたっては、著者が2008年4月から2010年2月まで籍を置いた東北大学大学院理学研究科物理学専攻量子多体論グループ<sup>3</sup>において、当時大学院生であった堀田翔君を指導（と共同研究）するにあたって学んだことが基礎になっている。堀田翔君、及び、私をこのような研究分野に導いて下さった倉本義夫先生に感謝する。また、本ノートの作成に関しては、羽田野直道先生を中心とする羽田野研究室のメンバーの方々の多大なお世話になった。ここに謝意を表したい。なお、引用に関しては、本解説が非専門家を対象にした講義ノートの性質を持っていることに鑑み、必ずしもプライオリティーを尊重するのではなく、（特に非専門家が読んで）分かりやすいものという観点から著者が主観的な選定を行った。

---

<sup>1</sup>E-mail: imura@hiroshima-u.ac.jp<sup>2</sup>例えば、並進 (Bloch) 対称性、SU(2) 回転対称性、時間反転対称性、パリティ対称性...<sup>3</sup>通称、倉本研。

## 1 はじめに

最初にタイトルについてひと言述べておこう (図1も参照)。グラフェン中の伝導電子は蜂の巣格子 (より純粹幾何学的に言えば六角格子) という2次元的な格子構造の中で特有のバンド構造を持ち、Dirac 点がちょうどフェルミ準位の直上に現れるような対称性のいい Dirac cone の構造を示す。ここまでの (Dirac 電子系が実現したことによる様々な帰結 [1] まで含めて) 一階部分としよう。

次に、格子模型に関しては Nielsen-二宮の定理があつて、Dirac 的なギャップの閉じは必ずペアで起こるという制約がある [3]。ちなみに、これは中二階。この制約のために、例えば Dirac 点におけるパリティ異常は  $K$  点と  $K'$  点で互いにキャンセルし、観測量として表に顔を出すことは通例ない。しかし、内因的なスピン軌道相互作用の存在下で、あるいはスピンの自由度を考慮に入れることにより、このキャンセル—つまり「引き算」—が実効的に「足し算」に変わるような状況—この状況を (A) としよう—がある。このような状況で起こるのが、本解説記事でも中心的に議論したい「量子化されたスピン Hall 効果 (quantized spin Hall effect, QSHE)」である (以上、二階部分) [4]。

スピン軌道相互作用としては、上記の QSHE を引き起こすもの以外に、外因的な (例えばグラフェンの2次元面と垂直方向に電場をかけることで発生する) Rashba 型のものもある [5]。一般にスピン軌道相互作用は時間反転対称であり、Rashba 型のものも当然その範疇にある。しかし Rashba 型のスピン軌道相互作用は、二階部分で量子化されたスピンの軸 ( $s_z$  軸にとる) に関して非対角の行列要素を持つため、QSHE は破綻する。問題は、2つのタイプのスピン軌道相互作用—すなわち QSHE を起こす内因的なものと Rashba 型の外因的なもの—の存在下で何が起こるか? つまり、前者の帰結としての状況 (A) は依然として有効であるが、QSHE は壊れている、そんな状況をどうやって特徴づけるか。それに答えてくれるのが三階部分で導入される時間反転対称性に付随した  $Z_2$  トポロジカル秩序である [6]。

以下、記法に関しては、文献 [4, 6, 7] 等の中で最良の妥協点を見いだすよう努力する。

## 2 (Dirac 電子系としての) グラフェン—一階部分

本節の記述は三階建て構造の一階部分に相当する。従って、グラフェンにおける Dirac 的なバンド構造の導出がその中心的な部分を占めることになる。しかし、あとで上部に追加される二階、三階部分への導入も視野に入れ、後半部分では Berry 位相について簡単な導入を行う。

### 2.1 六角格子の記述

グラフェン (graphene) とは、炭素が1枚のシート上に並んで六角格子を組んだ炭素の同素体の一つ<sup>4</sup>。グラファイトの一層と言った方が分かりやすいかもしれない。ここではまず、記号の統

<sup>4</sup>グラフェンと似た物質で、Cの代わりにBとNが六角格子上に交互に並んだ物質BNもある。前者は質量のない (massless な) Dirac 粒子を与え、後者は質量のある (massive な) Dirac 粒子を与える。詳しくは2.3節を参照。

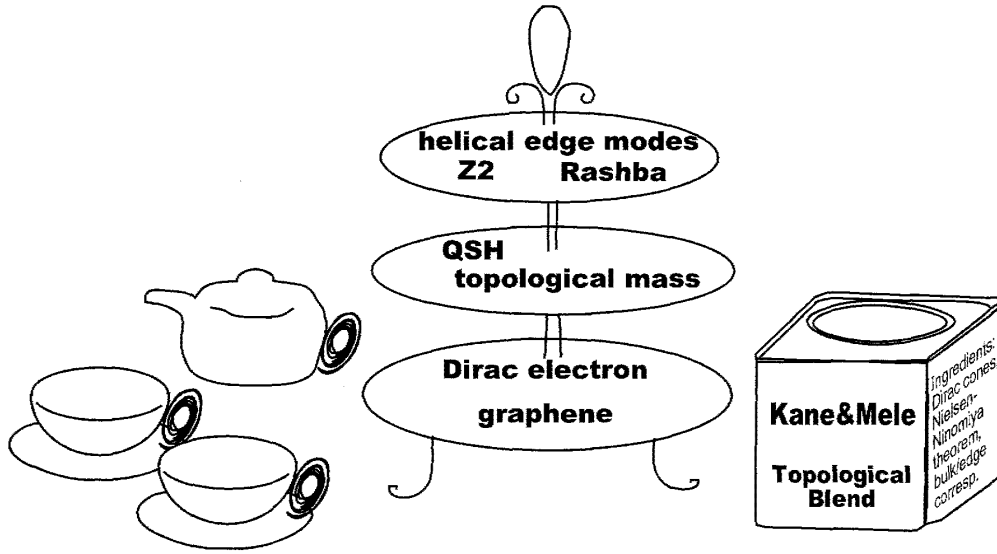


図 1:  $Z_2$  トポロジカル絶縁体の 3 階建て理論の概念図 [2]。

一の意味も込めて六角格子の記述の仕方を述べよう。六角格子は Bravais 格子ではない。Bravais 格子とは、全ての格子点から見た景色が同じ格子である。2次元格子の場合、基本並進ベクトルを  $\vec{a}_1, \vec{a}_2$  とし、整数の係数  $n_1, n_2$  を使って全ての格子点が  $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2$  と表現できるのが Bravais 格子である。しかし六角格子においては A 副格子と B 副格子は同等ではない。副格子 A と B を図 2(a) のようにとると、それぞれの副格子は三角格子を形成しているが、副格子 A の格子点は副格子 B の格子点を逆三角形型に囲んでいるのに対し、副格子 B の格子点は副格子 A の格子点を上向き三角の形に囲んでいる。

六角格子の基本並進ベクトルは軸の取り方によるが、ここでは図 2(b) のようにとる:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}. \quad (1)$$

ここで  $a$  は三角格子の格子定数である。この 2 つのベクトルで作られる平行四辺形がユニット・セルで、その中に副格子 A の格子点が 1 つと副格子 B の格子点が 1 つ入っている。

逆格子は、全てのユニット・セル  $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2$  からの平面波が強め合う条件  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = 1$  から求められる。逆格子ベクトルを  $\vec{b}_1, \vec{b}_2$  とすると、任意の  $\vec{k} = m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2$  に対して  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = 1$  が成り立つためには、 $\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$  となるように  $\vec{b}_i$  を決めればよい。これは、 $\vec{b}_1$  が  $\vec{a}_2$  と直交するように、そして  $\vec{b}_2$  が  $\vec{a}_1$  と直交するようにとることを意味するので、

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -\sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

となる (図 3(a))。

ユニット・セル内に格子点が 2 つ入っていることを反映して、逆格子空間 (波数空間) ではエネルギー・バンドが 2 つある。Brillouin zone (BZ) は逆格子空間で Wigner-Seitz cell をとればよいので、図 3(b) のようになる。次節で見るように、BZ の六角形の頂点にあたる点において上下のエネルギー・バンドが接してギャップレスになっている。(図 4(b) を見よ。)

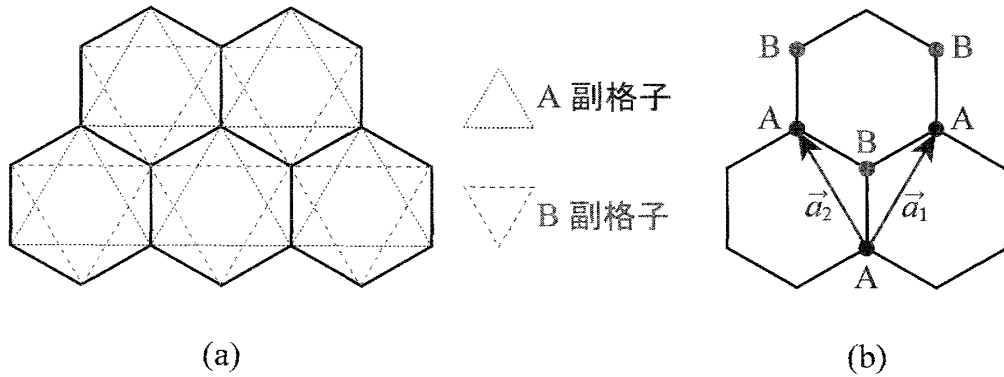


図 2: (a) 六角格子の A 副格子と B 副格子それぞれが作る三角格子。この正三角形の一辺の長さが格子定数  $a = 0.246\text{nm}$ 。 (b) 基本並進ベクトル  $\vec{a}_1$  と  $\vec{a}_2$ 。

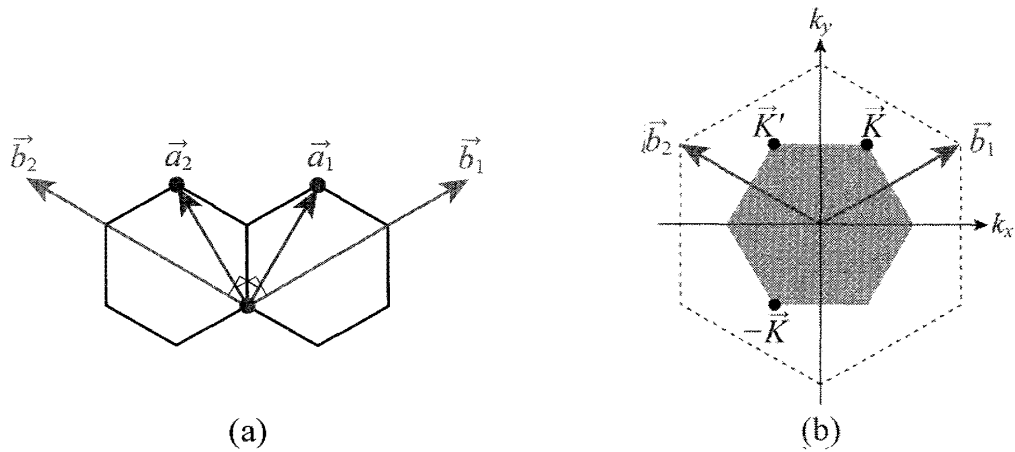


図 3: (a) 基本並進ベクトルと逆格子ベクトル。 (b) 逆格子空間での Wigner-Seitz cell, すなわち Brillouin zone (灰色に塗りつぶされた領域)。

6つの頂点のうちで独立なのは2点である。ここでは図3(b)の上方の2つを独立な2点にとり、それぞれ  $K$  点、 $K'$  点と呼ぶ。(  $K$  点と、その対角に位置する  $-\vec{K}$  点を独立にとる方法もある。)  $K$  点と  $K'$  点は、 $|\vec{K}| = |\vec{K}'| = |\vec{b}|/\sqrt{3} = 4\pi/3a$  から

$$\vec{K} = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad \vec{K}' = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} \quad (3)$$

となる。電子がユニット・セルに1個ずつ(スピン自由度も考慮すれば各格子点に1個ずつ)存在するような化学ポテンシャルの場合、絶対零度では下のバンドが埋まり、上のバンドが空になっている。したがって、低温では  $K$  点と  $K'$  点付近の励起のみを考えれば良い。

## 2.2 六角格子上の電子の運動

以下では、六角格子上の各原子に電子が局在するという atomic limit で、強束縛模型 (tight-binding model) を使って電子の運動を考える。六角格子の前に、まず1次元格子(格子定数  $a$ )

上の強束縛模型で Bloch の定理を復習しておこう [8]。ハミルトニアンとして

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_1, \\ H_0 &= E_0 \sum_n |n\rangle\langle n| \quad (\text{つまり } H_0|n\rangle = E_0|n\rangle) \\ H_1 &= t_1 \sum_n (|n+1\rangle\langle n| + |n\rangle\langle n+1|) \end{aligned} \quad (4)$$

をとる。ここで  $E_0$  は各格子点のポテンシャル、 $t_1$  はホッピングの強さを表す係数である。ハミルトニアン  $H$  の固有状態を

$$|k\rangle = \sum_n e^{inka} |n\rangle \quad (5)$$

の形に仮定すると

$$H|k\rangle = (E_0 + 2t_1 \cos ka) |k\rangle \quad (6)$$

となり、確かに固有状態になっている。

ハミルトニアンに  $x \rightarrow x + a$  という並進対称性があると、波動関数  $\psi_k(x)$  が  $\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x)$  の形に書いて、 $u_k(x)$  が  $u_k(x+a) = u_k(x)$  を満たすというのが Bloch の定理である。これを言い直すと、波動関数が

$$\psi_k(x+a) = e^{ika} \psi_k(x) \quad (7)$$

を満たすということである。実際に、並進演算子  $T$  を  $T|n\rangle = |n-1\rangle$  で定義すると、状態 (5) に対して

$$T|k\rangle = \sum_n e^{inka} |n-1\rangle = e^{ika} \sum_n e^{i(n-1)ka} |n-1\rangle = e^{ika} |k\rangle \quad (8)$$

となる。左側から  $\langle x|$  をかけて、 $\langle x+a| = \langle x|T$  であることを使えば式 (7) になるので、状態 (5) が Bloch の定理を満たしていることがわかる。

グラフェンの六角格子に対しても同じことをしよう。まず、簡単のため副格子 A だけを取り出して、それが作る三角格子を考える。固有状態を

$$|\vec{k}\rangle = \sum_{n_1, n_2} \left( e^{in_1 \vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{in_2 \vec{k} \cdot \vec{a}_2} \right) |n_1, n_2\rangle \quad (9)$$

の形に仮定する。 $a_1$  方向の並進移動演算子を  $T_1$ ,  $a_2$  方向の並進移動演算子を  $T_2$  とする:

$$T_1|n_1, n_2\rangle = |n_1 - 1, n_2\rangle, \quad T_2|n_1, n_2\rangle = |n_1, n_2 - 1\rangle. \quad (10)$$

これらを状態 (9) に演算すると、

$$T_1|\vec{k}\rangle = e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} |\vec{k}\rangle, \quad T_2|\vec{k}\rangle = e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} |\vec{k}\rangle \quad (11)$$

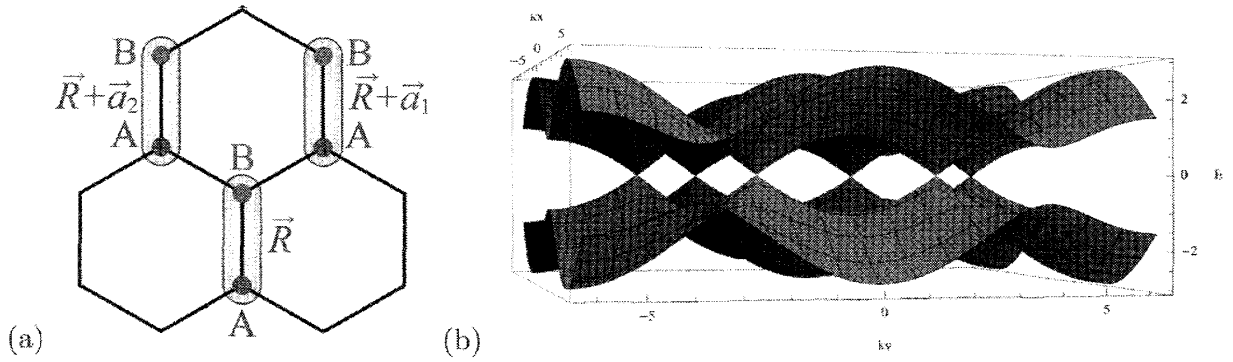


図 4: (a) ユニット・セルの位置を  $\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2$  で表し、ユニット・セル内の副格子 A と B を新しい指標  $\ell$  で区別する。(b) グラフェンのエネルギー・バンド。六角格子の第 1 BZ よりも大きな領域  $-\pi < k_x, k_y < \pi$  の範囲を表示している。そのため、図 3(b) の六角形の BZ のゾーン境界に位置する 6 つの Dirac cone を全て見ることができる。

となる。また、次のような周期的境界条件を課す:

$$T_1^{N_1} |n_1, n_2\rangle = T_2^{N_2} |n_1, n_2\rangle = |n_1, n_2\rangle. \quad (12)$$

これは

$$\begin{aligned} N_1 \vec{k} \cdot \vec{a}_1 &= 2\pi m_1 & (m_1 = 0, 1, 2, \dots, N_1), \\ N_2 \vec{k} \cdot \vec{a}_2 &= 2\pi m_2 & (m_2 = 0, 1, 2, \dots, N_2) \end{aligned} \quad (13)$$

意味するから、波数ベクトル  $\vec{k}$  は、逆格子ベクトル (2) を使って

$$\vec{k} = 2\pi \left( \frac{m_1}{N_1} \vec{b}_1 + \frac{m_2}{N_2} \vec{b}_2 \right) \quad (14)$$

と表されることがわかる。この波数ベクトルは図 3(a) の空間に存在するが、図 3(b) の Brillouin zone と等価である。

以上では副格子 A の作る三角格子のみを考えた。実際には、ユニット・セル内に副格子 A と副格子 B の 2 格子点が存在する。そこで、副格子 A と副格子 B でも各ユニット・セルはこれまで通り  $\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2$  で表し、そこに副格子 A と B を区別するインデックス  $\ell = A, B$  を追加することによって全格子点を表現することにする (図 4)。固有状態 (9) は、新しいインデックスを追加して

$$|\vec{k}, \ell\rangle = \sum_{n_1, n_2} e^{in_1 \vec{k} \cdot \vec{a}_1 + in_2 \vec{k} \cdot \vec{a}_2} |n_1, n_2, \ell\rangle = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} |\vec{R}, \ell\rangle \quad (15)$$

と拡張される。

これまでの議論を第 2 量子化しておこう。ユニット・セル  $\vec{R}$  内の副格子  $\ell$  ( $\ell = A, B$ ) における生成消滅演算子を  $c_{\ell \vec{R}}^\dagger$  と  $c_{\ell \vec{R}}$  と書くことにすると、ハミルトニアン  $H = H_0 + H_1$  のホッピング項  $H_1$  は

$$H_1 = \sum_{\vec{R}} \left[ \left( c_{A\vec{R}}^\dagger c_{B\vec{R}} + c_{A\vec{R}+\vec{a}_1}^\dagger c_{B\vec{R}} + c_{A\vec{R}+\vec{a}_2}^\dagger c_{B\vec{R}} \right) + \text{h.c.} \right] \quad (16)$$

と書ける<sup>5</sup>。生成消滅演算子をフーリエ変換して

$$c_{\ell\vec{k}}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{N_1 N_2}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} c_{\ell\vec{R}}^\dagger \quad (\ell = A, B) \quad (18)$$

を定義すると、ホッピング項 (16) の各項が

$$\begin{aligned} c_{A\vec{R}}^\dagger c_{B\vec{R}} &\longrightarrow 1 \times c_{A\vec{k}}^\dagger c_{B\vec{k}}, \\ c_{A\vec{R}+\vec{a}_1}^\dagger c_{B\vec{R}} &\longrightarrow e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} \times c_{A\vec{k}}^\dagger c_{B\vec{k}}, \\ c_{A\vec{R}+\vec{a}_2}^\dagger c_{B\vec{R}} &\longrightarrow e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} \times c_{A\vec{k}}^\dagger c_{B\vec{k}} \end{aligned} \quad (19)$$

のように変換されるので、全体として

$$\begin{aligned} H_1 &= t_1 \sum_{\vec{k}} \begin{pmatrix} c_{A\vec{k}}^\dagger & c_{B\vec{k}}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} \\ 1 + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{A\vec{k}} \\ c_{B\vec{k}} \end{pmatrix} \\ &\equiv \sum_{\vec{k}} \begin{pmatrix} c_{A\vec{k}}^\dagger & c_{B\vec{k}}^\dagger \end{pmatrix} h_1(\vec{k}) \begin{pmatrix} c_{A\vec{k}} \\ c_{B\vec{k}} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (20)$$

のようになる。ここで行列  $h_1(\vec{k})$  は、パウリ行列  $\sigma_x, \sigma_y$  を使って

$$\begin{aligned} h_1(\vec{k}) &= t_1 \left[ \sigma_x \left( 1 + \cos \vec{k} \cdot \vec{a}_1 + \cos \vec{k} \cdot \vec{a}_2 \right) - \sigma_y \left( \sin \vec{k} \cdot \vec{a}_1 + \sin \vec{k} \cdot \vec{a}_2 \right) \right] \\ &= t_1 [\sigma_x (1 + 2 \cos x \cos y) - \sigma_y \times 2 \cos x \sin y] \end{aligned} \quad (21)$$

と表せる。文献 [6] では、これを

$$h_1(\vec{k}) = d_1(\vec{k})\sigma_x + d_{12}(\vec{k})\sigma_y \quad (22)$$

と表記している。ただし、

$$d_1(\vec{k}) = t_1(1 + 2 \cos x \cos y), \quad d_{12}(\vec{k}) = -2t_1 \cos x \sin y \quad (23)$$

である。また、変数  $x, y$  を

$$\begin{aligned} \vec{k} \cdot \vec{a}_1 &= \frac{1}{2}ak_x + \frac{\sqrt{3}}{2}ak_y \equiv x + y, \\ \vec{k} \cdot \vec{a}_2 &= -\frac{1}{2}ak_x + \frac{\sqrt{3}}{2}ak_y \equiv -x + y, \end{aligned} \quad (24)$$

のように定義した。式 (20)、式 (21) において、各波数  $\vec{k}$  の部分空間でハミルトニアンが  $2 \times 2$  行列になったことがポイントである。

<sup>5</sup>文献 [4] の式 (6) では、右辺第 1 項がこれに相当する ( $t = t_1$ ) :

$$H_1 = t_1 \sum_{(i,j)} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\alpha} \quad (17)$$

ここで  $(i, j)$  に関する和は、六角格子上の全ての最近接格子点対に対してとるものと解釈する。また、 $\alpha$  は実スピンを表す添字で、このホッピングが実スピンによらない (を変えない) ことを示している。文献 [6] の式 (1) では実スピンの添字を省略している。

### 2.3 Dirac ハミルトニアンと擬スピン

六角格子上の電子の運動を記述する tight-binding ハミルトニアン (16) や (20)、より正確には式 (21) が  $2 \times 2$  行列になったのは、六角格子に 2 つの副格子があったからである<sup>6</sup>。一方、図 4(b) にも示したように、グラフェンのバンド構造は、ゾーン境界に位置する六角形の頂点でギャップが閉じるユニークな形をしている。ギャップが閉じる  $K$  点、 $K'$  点それぞれの近傍で、式 (21) に「 $\vec{k} \cdot \vec{p}$  近似」[9] を適用し、低エネルギー励起を記述する有効ハミルトニアンを求めると、これが実は ( $K$  点、 $K'$  点それぞれで)  $(2+1)$  次元の Dirac ハミルトニアンと形式的に同一視できる。これを示すのが本節の最大の目的である。Dirac 粒子の最大の特徴はスピン  $1/2$  を持つことである。いまの場合、この大役を演じるのは副格子の自由度—すなわち擬スピン (pseudo spin)—である。

Dirac ハミルトニアンについて少し復習しておこう。Dirac 粒子の「相対論的な」ダイナミクスを記述するこのハミルトニアンは、しばしば次の形に書かれる：

$$H = \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta M = \alpha_\mu p_\mu. \quad (25)$$

ここで  $\vec{p}$  は運動量演算子、 $M$  は質量、また  $\vec{\alpha}$  と  $\beta$  は、この段階ではとりあえず行列かも知れない—あとで行列であるとわかる—何らかの係数としておく。運動量  $\vec{p}$  は原理的には何成分あっても構わないが、いずれにせよそれによって最低限必要な  $\vec{\alpha}$  の要素の数が決まる。式 (25) の右辺では  $\beta = \alpha_0$ 、 $M = p_0$  としている。

係数  $\alpha_\mu$  は、ハミルトニアンの 2 乗  $H^2$  が Dirac 粒子に期待される分散関係  $E^2 = \vec{p}^2 + M^2$  を満たすように決める。そこで、実際に式 (25) を 2 乗すると、

$$H^2 = \alpha_\mu p_\mu \alpha_\nu p_\nu = \frac{1}{2} \{ \alpha_\mu, \alpha_\nu \} p_\mu p_\nu \quad (26)$$

となる。ここで  $\{ \cdot, \cdot \}$  は反交換関係である。式 (26) が  $H^2 = \vec{p}^2 + M^2 = p_\mu p_\mu$  となるためには  $\{ \alpha_\mu, \alpha_\nu \} = 2\delta_{\mu\nu}$  でなければならない。

$(3+1)$  次元の時空の場合は  $\vec{p}$  は 3 成分あるから、 $\vec{\alpha}$  の要素も最低限 3 つないと困る。この場合、 $\alpha_\mu$  の「ミニマルな」表現は  $4 \times 4$  行列になる。それに対して、六角格子を運動する電子にとってこの宇宙は  $(2+1)$  次元である。この場合、 $\alpha_\mu$  のミニマルな表現は  $2 \times 2$  行列、具体的にはパウリ行列で表される：

$$H = \sigma_\mu p_\mu, \quad p_\mu \equiv \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ M \end{pmatrix}, \quad \sigma_\mu \equiv \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix}. \quad (27)$$

以下、 $K$  点、 $K'$  点それぞれの近傍で式 (21) が実効的に式 (27) と同じ形になることを見ていく。まず  $K$  点においては

$$\vec{K} \cdot \vec{a}_1 = \frac{4\pi}{3}, \quad \vec{K} \cdot \vec{a}_2 = \frac{2\pi}{3}, \quad (28)$$

<sup>6</sup> 3次元の結晶において、低エネルギー励起を記述する有効ハミルトニアンが3次元 Dirac ハミルトニアン ( $4 \times 4$  行列) の形になることはあるだろうか？ 実スピンの自由度は効かないとすると、副格子が4つあるような結晶格子でなければならない...



なので、

$$1 + e^{\pm i\vec{K}\cdot\vec{a}_1} + e^{\pm i\vec{K}\cdot\vec{a}_2} = 0 \quad (29)$$

である。従ってハミルトニアン (21) はゼロになる： $h_1(\vec{K}) = 0$ 。同様に  $K'$  点においては

$$\vec{K}'\cdot\vec{a}_1 = \frac{2\pi}{3}, \quad \vec{K}'\cdot\vec{a}_2 = \frac{4\pi}{3} \quad (30)$$

なので、やはり  $h_1(\vec{K}') = 0$  と計算できる。つまりハミルトニアン (21) は  $K$  点と  $K'$  点でギャップレスになる。

次に、 $K$  点や  $K'$  点それぞれの近傍で分散関係が線形になることを示そう<sup>7</sup>。まず  $K$  点近傍から考える。 $K$  点からの微小なずれを  $\vec{p}$  とする： $\vec{k} = \vec{K} + \vec{p}$ 。このとき、

$$\begin{aligned} 1 + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} &\simeq 1 + e^{i4\pi/3} (1 + i\vec{p}\cdot\vec{a}_1) + e^{i2\pi/3} (1 + i\vec{p}\cdot\vec{a}_2) \\ &= \left(-\frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \times ia \left(\frac{1}{2}p_x + \frac{\sqrt{3}}{2}p_y\right) + \left(-\frac{1}{2} - i\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \times ia \left(-\frac{1}{2}p_x + \frac{\sqrt{3}}{2}p_y\right) \\ &= \frac{\sqrt{3}}{2}a(p_x - ip_y), \end{aligned} \quad (31)$$

$$1 + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_1 - i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} \simeq \frac{\sqrt{3}}{2}a(p_x + ip_y) \quad (32)$$

となる。従って、

$$\begin{aligned} h_1(\vec{K} + \vec{p}) &= \frac{\sqrt{3}}{2}at_1 \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \\ &= v_F(p_x\sigma_x + p_y\sigma_y) \end{aligned} \quad (33)$$

となる。こうして、 $K$  点近傍で線形分散であることがわかる。ここで  $v_F = \sqrt{3}at_1/2$  は線形分散の傾きである。式 (27) において光速  $c = 1$  の単位系が用いられていることに鑑みると、式 (33) は本質的にこれと同形である。(ただし  $M = 0$  の massless の場合に相当。) また  $\sigma$  のアップとダウンの空間は、量子化軸を  $\vec{p}$  の向きにとったとき、それぞれ上のバンドの粒子励起と下のバンドの正孔励起に対応している。このスピン  $\sigma$  は副格子が2つあることに起因した「擬スピン」である。 $K'$  点近傍でも同様にして

$$\begin{aligned} h_1(\vec{K}' + \vec{p}) &= \frac{\sqrt{3}}{2}at_1 \begin{pmatrix} 0 & -p_x - ip_y \\ -p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \\ &= v_F(-p_x\sigma_x + p_y\sigma_y) \end{aligned} \quad (34)$$

となり、やはり線形分散となることがわかる。

<sup>7</sup>単純な三角格子でも、同様の計算により  $K$  点で massless になることが示せるが、 $K$  点の近傍では分散関係が parabolic になってしまい、いわゆる Dirac 型の分散関係は得られない。副格子がないので、そもそも Dirac 型の有効ハミルトニアンが得られるはずはないが... 六角格子では副格子が2つあって、しかも  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}}$  と  $e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}}$  が非対角要素に分かれて入るために、線形項が生き残るのである。

先に述べたように、電子がユニット・セルに1個ずつ存在するような化学ポテンシャルの場合、絶対零度では下のバンドが埋まり、上のバンドが空になっている。従って、低温では  $K$  点と  $K'$  点付近の線形分散のみを考えれば良い。つまりここまでの計算で、低温のグラフェンは  $K$  点と  $K'$  点付近という2種類の Dirac フェルミオンが存在する系と見なせることがわかった。

ここで「谷 (valley)」の自由度を表すもう一つの擬スピンを導入して、 $K$  点と  $K'$  点をまとめて表そう。 $K$  点近傍の励起を valley 擬スピン  $\uparrow$  の空間、 $K'$  近傍の励起を valley 擬スピン  $\downarrow$  の空間で表すことにすると、

$$H \equiv \begin{pmatrix} h_1(\vec{K} + \vec{p}) & 0 \\ 0 & h_1(\vec{K}' + \vec{p}) \end{pmatrix} = v_F (\tau_z \sigma_x p_x + \sigma_y p_y) \quad (35)$$

と書くことができる。ハミルトニアン  $H$  が作用する先は、4成分スピノル

$$\psi \equiv \begin{pmatrix} c_{AK} \\ c_{BK} \\ c_{AK'} \\ c_{BK'} \end{pmatrix} \quad (36)$$

となる。こうして、2種類の Dirac フェルミオンは2つの「擬スピン」を持った1種類の Dirac フェルミオンとして記述できる。 $\sigma$  が上のバンドの粒子励起と下のバンドの正孔励起を区別する擬スピン、 $\tau$  が  $K$  点と  $K'$  点を区別する擬スピンである。現実にはこの他に実スピンの自由度がある。

以上では副格子 A と B が同等の場合を考えてきたが、例えば2つの副格子にそれぞれ  $N$  原子と  $B$  原子が入った系では、副格子 A と B が同等ではなくなる。同等でなくなった効果は、ここまで議論してきたホッピング・ハミルトニアン  $H_1$  に、オンサイト部分  $H_0$  として副格子 A-B 間で交代するような (staggered な) 化学ポテンシャル

$$H_0 = M \sigma_z \quad (37)$$

を加えることで表現できる<sup>8</sup>。このとき、全系のハミルトニアンは  $H = H_0 + H_1$  になり、従って、グラフェンではギャップが閉じていた  $K$  点や  $K'$  点でも、有限のギャップ  $2m$  が生じる。その近傍の励起は massive な Dirac 粒子となる。

## 2.4 Berry 位相

さて、ここで Dirac 粒子によって生じる Berry 位相 [10] について議論しておこう。グラフェンやナノチューブの輸送特性において、いわゆる「Berry 位相  $\pi$ 」の役割は本質的である [11]。初めにこれを定性的に説明しておこう。まず、Dirac 電子系においては、運動量空間がスピン  $1/2$  の空間と似た性質を持っている—運動量表示の波動関数に現れる Berry 位相はこのことの数学的表現である— ため、例えば運動量  $+\vec{p}$  の状態 (スピン  $\uparrow$  の状態に相当) と  $-\vec{p}$  の状態 (スピン  $\downarrow$  の状

<sup>8</sup>この項は、文献 [6] の (1) 式でも考慮されている—右辺の最後の項。六角格子上で “staggered” であることを表現するため、 $\xi_i = \pm 1$  という符号因子が導入されている。また、 $M = \lambda_0$  である

態に相当) が直交する。その結果、後方散乱が起こらない [12]。例えば、グラフェンで伝導電子の波動関数がきわめて局在しにくいこと [13] も「後方散乱の不在」の直接的帰結である。

$K$  点近傍において質量  $M$  を考えると、ハミルトニアン  $H$  は

$$H = v_F (\sigma_x p_x + \sigma_y p_y + M \sigma_z) \equiv v_F \sigma_\mu p_\mu \quad (38)$$

と書ける。すなわち、 $p_\mu = (\vec{p}, M)$ 。これはスピン 1/2 の量子力学で見慣れた形でもある [8]。実際、上のハミルトニアン  $H$  はスピンの量子化軸を  $p_\mu$  の向きにとることで直ちに対角化される：

$$\begin{aligned} H|p_\mu \pm\rangle &= \epsilon_\pm(p_\mu)|p_\mu \pm\rangle, \\ \epsilon_\pm(p_\mu) &= \pm|p_\mu| = \pm\sqrt{\vec{p}^2 + M^2}. \end{aligned} \quad (39)$$

エネルギー固有状態  $|p_\mu \pm\rangle$  は、 $\sigma_z$  の固有状態

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (40)$$

に適当な回転演算子を作用させることでも得られる。 $p_\mu$  空間に 3 次元の極座標  $(p, \theta, \varphi)$  を導入すると、

$$\begin{aligned} |p_\mu \pm\rangle &= e^{-i\sigma_z \varphi/2} e^{-i\sigma_y \theta/2} |\pm\rangle \\ &= \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} & 0 \\ 0 & e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta/2 & -\sin \theta/2 \\ \sin \theta/2 & \cos \theta/2 \end{pmatrix} |\pm\rangle \\ &= \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \cos \theta/2 \\ e^{i\varphi/2} \sin \theta/2 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi/2} \sin \theta/2 \\ e^{i\varphi/2} \cos \theta/2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (41)$$

となる。本質的にこれでいいのだが、少しだけ注意が必要である。「スピン」 $\sigma$  の  $z$  軸周りに  $2\pi$  回転させて  $\varphi \rightarrow \varphi + 2\pi$  とすると、 $|p_\mu \pm\rangle \rightarrow e^{i\pi}|p_\mu \pm\rangle$  となり、位相が  $\pi$  ついてしまう。これは、 $\sigma$  の二価性のためであるが、この「スピン」は、実際には上のバンドの粒子励起と下のバンドの正孔励起を区別する擬スピンである。 $2\pi$  回転させているのは運動量空間なのだから、位相  $\pi$  がついてしまうのは物理的におかしい。そこで、

$$|p_\mu \pm\rangle \rightarrow e^{i\varphi/2}|p_\mu \pm\rangle \quad (42)$$

のように位相を変更するゲージ変換をしておく。これで一価関数になる<sup>9</sup>。例えば  $M = 0$  の場合、 $\theta = \pi/2$  とおけばよいから、

$$|\vec{p}^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi} \end{pmatrix}, \quad |\vec{p}^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ e^{i\varphi} \end{pmatrix} \quad (43)$$

<sup>9</sup> $e^{i\varphi/2}$  をかけるゲージ変換は境界条件を変えるような singular な変換である。また、 $\sigma$  をそもそも「スピン」と考えずにハミルトニアン (38) を愚直に対角化していれば、当然一価関数になるので、上のような注意をする必要はない。

となる。また  $M = 0$  で  $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$  とすることは、 $\varphi \rightarrow \varphi + \pi$  とすることに対応するから、

$$|-\vec{p}+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\varphi} \end{pmatrix}. \quad (44)$$

明らかに、これと式 (43) の第 1 式—つまり、 $|\vec{p}+\rangle$  と  $|\vec{p}+\rangle$ —は直交している。

同じことを Berry 位相の立場から検証してみよう。式 (38) で与えられたハミルトニアンに対して、運動量空間の中で  $p_\mu$  を一周変化 (周期  $T_0$  で一周) させることを考える。この変化  $p_\mu(t)$  ( $0 \leq t \leq T_0$ ) によって、固有状態 (41) あるいは (42) は Berry 位相を獲得する。最初に、ほぼ自明な例として  $M = 0$  の場合を考える。固有状態

$$|p_\mu(t)+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi(t)} \end{pmatrix}$$

を  $z$  軸の周りに一周したとすると、

$$i \frac{\partial}{\partial t} |p_\mu(t)+\rangle = -\frac{\dot{\varphi}(t)}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\varphi(t)} \end{pmatrix}$$

となるので、Berry 位相<sup>10</sup>は、

$$\begin{aligned} \alpha_+(T_0) - \alpha_+(0) &= \int_0^{T_0} dt \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & e^{-i\varphi(t)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\dot{\varphi}(t) \\ \sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\varphi(t)} \end{pmatrix} \\ &= -\frac{1}{2} \int_0^{T_0} dt \dot{\varphi}(t) = -\frac{1}{2} (\varphi(T_0) - \varphi(0)) = -\pi \end{aligned} \quad (51)$$

<sup>10</sup>ある瞬間  $t$  での「スナップショット」ハミルトニアン  $H(p_\mu(t))$  に対する固有エネルギーを  $\varepsilon_s(p_\mu(t))$ 、固有状態を

$$H(P(t))|p_\mu(t), s\rangle = \varepsilon_s(p_\mu(t))|p_\mu(t), s\rangle \quad (45)$$

とする。ただし  $s = \pm$  である。初期条件を

$$|p_\mu(0), s\rangle = |\psi_s(t=0)\rangle \quad (46)$$

とするとき、時刻  $t$  における固有状態は一般に

$$|\psi_s(t)\rangle = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \varepsilon_s(p_\mu(t')) \right] e^{i\alpha_s(t)} |p_\mu(t), s\rangle \quad (47)$$

となる。右辺では、時刻  $t$  の瞬間のスナップショットのハミルトニアンに対する固有状態 (47) に二種類の位相がかかっていることに注意しよう。第一の位相は時間発展による通常の位相であり、第二の位相が Berry 位相である。Berry 位相を具体的に計算するために、式 (47) を Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_s(t)\rangle = H(p_\mu(t)) |\psi_s(t)\rangle \quad (48)$$

に代入する。Berry 位相の項に対して

$$i \left( \frac{d}{dt} \alpha_s(t) \right) |p_\mu(t), s\rangle + \frac{\partial}{\partial t} |p_\mu(t), s\rangle = 0 \quad (49)$$

となるので、一周した後の最終的な Berry 位相は、

$$\alpha_s(T_0) - \alpha_s(0) = \int_0^{T_0} dt \langle p_\mu(t), s | i \frac{\partial}{\partial t} | p_\mu(t), s \rangle \quad (50)$$

となる。

と計算できる。この Berry 位相は、2次元 ( $p_x, p_y$ ) 平面の原点に強さ  $-\pi$  のソレノイドがある場合の位相に一致する。そのようなソレノイドが点  $\vec{p}$  につくるポテンシャルは  $A_\varphi = -1/2|\vec{p}|$  なので、原点からの距離を一定にして一周したときの位相は

$$\int_0^{2\pi} A_\varphi |\vec{p}| d\varphi = - \int_0^{2\pi} \frac{|\vec{p}|}{2|\vec{p}|} d\varphi = -\pi \quad (52)$$

となり、確かに式 (51) と一致する<sup>11</sup>。

次に、 $M \neq 0$  の場合に Berry 位相を計算してみよう。状態 (42) (ゲージ変換後) において、 $\theta$  を一定にして  $\varphi$  を変化させる：

$$|p_\mu(t)\rangle = \begin{pmatrix} \cos \theta/2 \\ e^{i\varphi(t)} \sin \theta/2 \end{pmatrix}. \quad (55)$$

このとき

$$i \frac{\partial}{\partial t} |p_\mu(t)\rangle = -\dot{\varphi}(t) \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\varphi(t)} \sin \theta/2 \end{pmatrix} \quad (56)$$

なので、

$$\begin{aligned} \langle p_\mu(t) | i \frac{\partial}{\partial t} |p_\mu(t)\rangle &= -\dot{\varphi}(t) \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi(t)} \sin \theta/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\varphi(t)} \sin \theta/2 \end{pmatrix} \\ &= -\dot{\varphi}(t) \sin^2 \frac{\theta}{2} \end{aligned} \quad (57)$$

となる。従って Berry 位相は

$$\begin{aligned} \alpha_+(T_0) &= \int_0^{T_0} dt (-\dot{\varphi}(t)) \sin^2 \frac{\theta}{2} = -\frac{1 - \cos \theta}{2} \int_0^{T_0} \dot{\varphi}(t) dt \\ &= -\frac{1 - \cos \theta}{2} \int_0^{2\pi} d\varphi = -\frac{\Omega}{2} \end{aligned} \quad (58)$$

と計算される。ここで  $\Omega$  は  $p_\mu(t)$  の軌跡がなす立体角である<sup>12</sup>。

<sup>11</sup>なお、式 (43) のようなゲージ変換を忘れて計算してしまうと、

$$i \frac{\partial}{\partial t} |p_\mu(t)\rangle = \frac{\dot{\varphi}(t)}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi/2} \\ e^{i\varphi/2} \end{pmatrix} \quad (53)$$

となるので、

$$\alpha_+(T_0) = -\frac{1}{2\sqrt{2}} \int_0^{T_0} dt \dot{\varphi}(t) \times 0 = 0 \quad (54)$$

となり Berry 位相は出てこない。

<sup>12</sup> $\phi$  が  $d\phi$  だけ動いたときに  $p_\mu$  空間で動く距離は  $\sin \theta d\phi$  である。従って、その間に掃く単位球面上の面積は

$$\int_0^\theta \sin \theta' d\theta' d\phi = (1 - \cos \theta) d\phi \quad (59)$$

である。これを  $\phi$  で積分すれば、 $p_\mu(t)$  の軌跡が作る立体角が得られる。

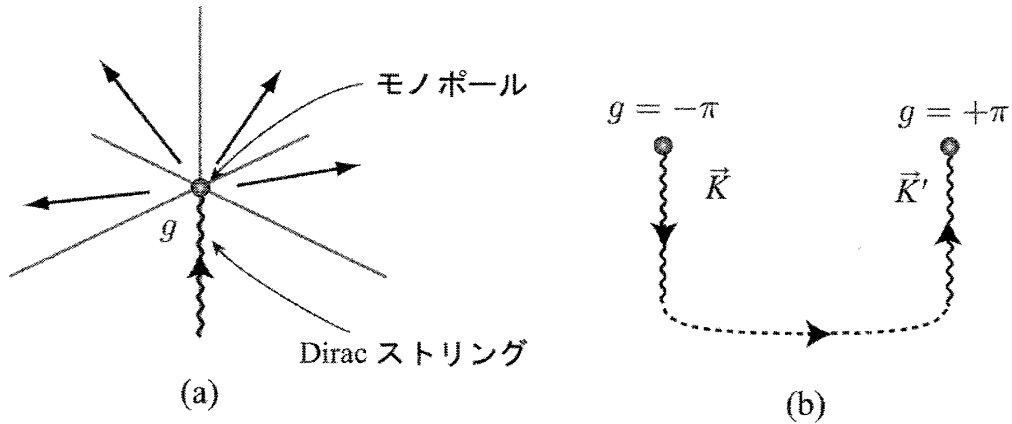


図 5: (a) Berry 位相は  $p_\mu$  空間の原点にあるモノポールの作る磁場という見方。モノポールから見かけ上「沸き出す」ように見える磁束は、ベクトル・ポテンシャルの特異点（線）上を走る Dirac ストリングを伝って無限遠方から供給されている。本文中の定式化に対応させて、Dirac ストリングは  $z$  軸の負の部分にとったが、これはゲージの選び方に依存する。(b) グラフェンの場合、 $K$  点、 $K'$  点という 2 つの Dirac 点に逆符号磁荷のモノポールがあり、一方の Dirac 点から他方の Dirac 点に Dirac ストリングを介して、ちょうど  $2\pi$  の磁束が供給される。

この Berry 位相は、原点におけるモノポールの寄与と見なすことができる。原点に「磁荷」 $g$  を持ったモノポールがある ( $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = g\delta^3(\vec{r})$ ) とすると、モノポールの周囲に

$$\vec{B} = \frac{g}{4\pi} \frac{\vec{r}}{r^3} \tag{60}$$

という磁場が作られる。この磁場を表すベクトル・ポテンシャルを無理に作ると

$$\vec{A} = \frac{g}{4\pi} \frac{1}{r(r+z)} \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix} \tag{61}$$

となる。本来は  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$  なら  $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$  なので矛盾しているように見えるが、実は  $z = -r$  のところ（すなわち  $z$  軸の負の部分）に特異性（singularity）があるためにモノポールが存在できている。つまり、図 5(a) に図示したように、磁束がこの singularity の上を通過して供給されていると考えれば矛盾はない。この「磁束供給チューブ」のことをしばしば Dirac ストリングと呼ぶ。グラフェンの場合、 $K$  点と  $K'$  点は磁荷の符号が反対の（ $K$  点は  $g = -2\pi$ 、 $K'$  点は  $g = +2\pi$  の）モノポールになっている。つまり、図 5(b) に示したように、一方の Dirac 点から他方の Dirac 点に磁束が Dirac ストリングを介して供給される形になっているわけだが、このとき磁束の需要と供給のバランスがぴったり合っている。グラフェンにおいて、Dirac 点は—Nielsen-二宮の定理 [3] が暗示するように—実際にペアで現れ、しかもお互いの特異性—あるいは、量子異常（anomaly）—

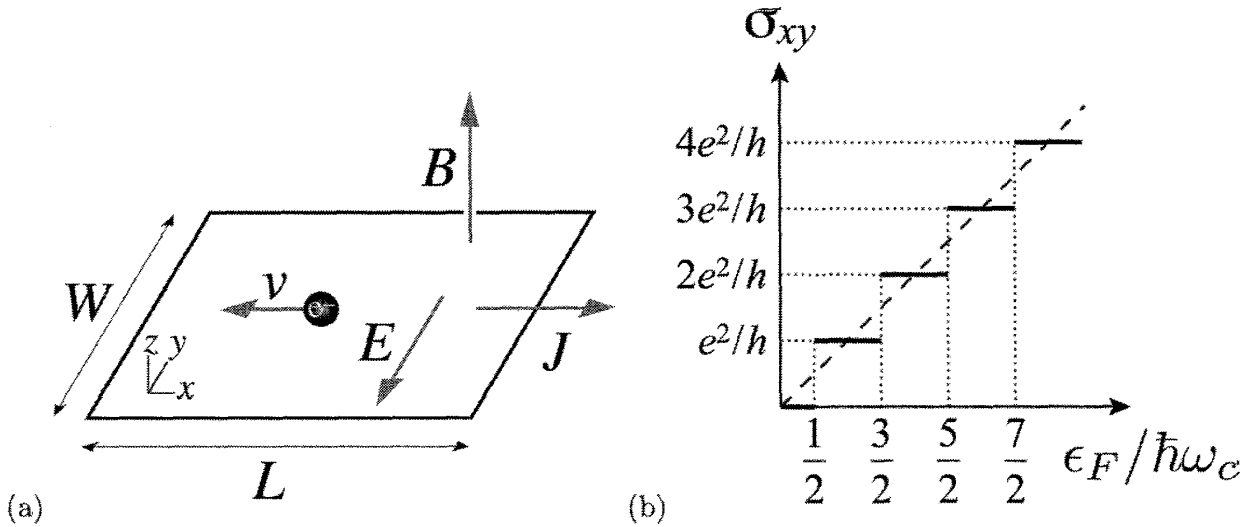


図 6: (量子) Hall 効果: (a) Hall 効果と Hall bar geometry。磁場を  $z$  軸方向に、電場を  $-y$  方向にかけると、電子は  $-x$  方向に動き、 $x$  方向に電流が流れる。(b) Hall 伝導率  $\sigma_{xy}$  の量子化。

をちょうど打ち消すようになっているため、Brillouin zone 全体を考えると特異性は残らない<sup>13</sup>。

### 3 内因的スピン軌道相互作用と量子スピン Hall 効果—二階部分

本節後半で、この講義ノートの中心的なテーマでもある量子スピン Hall 効果（より正確に言う  
と量子化されたスピン Hall 効果）を議論する。そのための準備として、本節前半ではまず六角格  
子上の電子に対する通常の（電荷の）量子 Hall 効果を議論しよう。グラフェンの量子 Hall 効果  
はそれ自体大変興味深く、今日のグラフェンブームの極めて初期に実験的に観測されたことから、  
ブームの先駆的存在であると言えるかもしれない [1]。

<sup>13</sup>なお、式 (42) のゲージ変換を忘れて状態 (41) のまま計算すると以下ようになる。まず

$$i \frac{\partial}{\partial t} |p_\mu(t)\rangle = -\frac{\dot{\varphi}(t)}{2} \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi(t)} \cos \theta/2 \\ e^{i\varphi(t)} \sin \theta/2 \end{pmatrix} \quad (62)$$

なので、

$$\begin{aligned} \langle p_\mu(t) | + i \frac{\partial}{\partial t} |p_\mu(t)\rangle &= -\frac{\dot{\varphi}(t)}{2} \begin{pmatrix} e^{i\varphi(t)} \cos \theta/2 & -e^{-i\varphi(t)} \sin \theta/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi(t)} \cos \theta/2 \\ e^{i\varphi(t)} \sin \theta/2 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\dot{\varphi}(t)}{2} \left( \cos^2 \frac{\theta}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2} \right) = \frac{\dot{\varphi}(t)}{2} \cos \theta \end{aligned} \quad (63)$$

となる。Berry 位相は

$$\alpha_+(T_0) = \frac{\cos \theta}{2} \int_0^{T_0} \dot{\varphi}(t) dt = \frac{\cos \theta}{2} \int_0^{2\pi} d\varphi = \pi - \frac{\Omega}{2} \quad (64)$$

と計算され、式 (58) と  $\pi$  だけずれている。実は、一般にゲージ変換 (42) をする前後で結果は  $\pi$  ずれる。位相  $\pi$  は二  
価性によって出てくるもので、二価性をなくすような singular なゲージ変換をしたために、式 (58) ではそれが消えて  
いる。

### 3.1 Hall 伝導度とその量子化

図 6(a) のように、幅  $W$ 、長さ  $L$  の領域に「閉じ込められた」2次元電子系 (“Hall bar”) を考える。 $z$  方向に磁場  $B$  をかけ、 $-y$  方向に電場  $E$  をかけると、古典論的には、電子は振動数  $\omega_c = eB/(mc)$  でサイクロトロン運動しながら、 $-x$  方向に速さ  $v = (E/B)c$  で「ドリフト」する。このような電子のドリフト運動によって  $x$  方向に電流が生じる。これが Hall 電流  $J_x$  である。電子数を  $N_e$ 、すなわち電荷密度を  $n_e = N_e/(LW)$  とすると、Hall 電流密度  $j_x = J_x/W$  は

$$j_x = en_e v = e \frac{N_e}{LW} \frac{E}{B} c = \frac{e^2 N_e hc/e}{h \Phi} E \quad (65)$$

となる。ここで  $\Phi = LWB$  は2次元電子系にかかっている全磁束である。

量子論では、Hall系の電子のエネルギー準位は Landau 量子化される。非相対論的な場合、Landau 準位は

$$\varepsilon_n = \hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (66)$$

のように等間隔になる。また、各 Landau 準位には多くの状態が縮退している。1つの磁束量子  $\Phi_0 = hc/e$  あたり1つの状態があると考え、1つの Landau 準位当たりの状態数は

$$N_s = \frac{\Phi}{\Phi_0} \quad (67)$$

である<sup>14</sup>。一方、全電子数は  $N_e$  だから、縮退している状態のうちで電子に占有されている状態の割合は

$$\nu = \frac{N_e}{N_s} = \frac{N_e \Phi_0}{\Phi} = \frac{N_e hc/e}{\Phi} \quad (71)$$

となる。これを充填率 (filling factor) と呼ぶ。これを用いると、式(65)の電流密度は  $j_x = \nu(e^2/h)E$  と書け、従って Hall 伝導率  $\sigma_{xy}$  は、

$$\sigma_{xy} = \nu \frac{e^2}{h} \quad (72)$$

<sup>14</sup>非相対論的な場合、分散関係が  $\varepsilon(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$  となっているので、波数  $k$  以下の状態の数は

$$N(k) = \frac{\pi k^2}{(2\pi/L)^2} = L^2 \frac{k^2}{4\pi} = L^2 \frac{2m\varepsilon(k)}{4\pi\hbar^2} \quad (68)$$

である。状態密度は、

$$D(\varepsilon) = \frac{dN(\varepsilon)}{d\varepsilon} = L^2 \frac{m}{2\pi\hbar^2} \quad (69)$$

のように定数になる。Landau 準位の間隔は  $\hbar\omega_c$  であるが、その間に入っている状態が1つの Landau 準位に縮退する考えると、その縮退度は

$$L^2 \frac{m}{2\pi\hbar^2} \times \hbar\omega_c = \frac{BL^2}{hc/e} = \frac{\Phi}{\Phi_0} \quad (70)$$

となり、式(67)と一致している。



となる。Hall 伝導率は充填率  $\nu$  に比例して線形に増加する。 $\nu$  が 1 増える毎に、詰まっている Landau 準位が一つ増えるわけだから、一つの Landau 準位当たり、 $\sigma_{xy}$  に  $e^2/h$  だけの寄与がある。

ところが、現実の半導体ヘテロ構造において実現される実効的な 2 次元電子系においては、図 6(b) のような  $\sigma_{xy}$  の量子化が観測されている [14]。そのような現実の系で起こっている現象に対して、上で展開したような不純物や閉じ込めポテンシャルの影響を考えない、過度に理想化（単純化）された議論がどこまで意味を持つかは難しい問題である。以下、少々の飛躍を恐れずに思い切った解釈を与えることを試みる。まず、量子化されたエネルギー準位 (66) に対してフェルミ・エネルギー  $\epsilon_F$  を少しずつ変えていくことを考えよう。そうすると、 $\epsilon_F$  が式 (66) で与えられる Landau 準位をよぎる度に巨視的な数の状態が新たに占有され、充填率  $\nu$  が 1 だけ増加することが分かる。つまり、 $\epsilon_F$  の関数として  $\nu$  の変化は不連続なものとなり、 $\sigma_{xy}$  で見れば、式 (69) で  $\nu = n$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ) としたところにプラトー (plateau) ができる。これが図 6(b) に模式的に示した Hall 伝導率量子化の最も荒っぽい説明である。

Hall 伝導率の量子化は、しばしば「端状態」(edge state) という観点からも議論される。これは、 $\sigma_{xy}$  の量子化が観測されるような実験系が（当然のことながら）無限に広い 2 次元系ではなく、有限の幅の帯（おび）あるいはリボン—Hall bar—であることに着目した、より現実的な視点である。つまり、この系は見ようによっては、2 次元的な系とも 1 次元的な系ともとれる。先ほど「1 つの Landau 準位当たり  $\sigma_{xy}$  に  $e^2/h$  だけの寄与がある」と述べたが、 $e^2/h$  という量は Landauer-Büttiker 的な輸送現象の記述 [15] においても量子化伝導度の基本単位になっている。実際、1 つの Landau 準位当たりちょうど 1 つの<sup>15</sup>端状態とよばれるギャップレスの伝導チャンネルが存在し、これが系の輸送特性を支配する。

Hall 伝導率の量子化が起こっている時、バルクで  $\epsilon_F$  が Landau 量子化によるギャップの中にある一方、エッジに局在したギャップレスのモードがひとつ存在する。具体的には、電子を Hall bar の中に閉じ込めておくような「閉じ込めポテンシャル」 $V(y)$ <sup>16</sup>を導入する。 $V(y)$  は、系の  $y$  方向の並進対称性を破り、系に端 (edge) を導入する。Landau ゲージを考え [14]、 $x$  軸方向の運動量  $k_x$ （これは中心座標  $\vec{R}$  の  $y$  成分  $Y$  に比例する）が良い量子数になるようにとる。このとき、Landau 状態の波動関数は、 $y$  軸方向に関して（与えられた  $k_x$  に対して一意に決まる）中心座標  $Y$  のまわりに局在する。つまり、図 6(a) で  $x$  軸方向に伸びた Landau 状態が、 $y$  軸方向には列をなす形になる。ここに閉じ込めポテンシャル  $V(y)$  が加わったとしよう。Landau 状態のエネルギー  $\epsilon_n$  は、 $\epsilon_n(Y)$  のように中心座標  $Y$  に依存するようになる。このように、先ほどの巨視的な縮退度を持った Landau 準位も 1 つのモードのように見なすことができる<sup>17</sup>。これが  $\epsilon_F$  を切るところにギャップレスの端状態ができる。このようにして、いわゆる bulk picture と edge picture（バルク／エッ

<sup>15</sup> 正確には、「一対 (1 ペア) の」と言った方がよいかもしれない。つまり、「帯」である限り（半無限系でなければ）端は 2 つ（図 6 で言えば上下に）存在し、それぞれの端に端状態が、1 つの Landau 準位あたり（今度は本当に）1 つずつ現れる。一対の端状態は逆向きの運動量を持っているが、空間的に巨視的な距離を離れているので、両者の間の波動関数の重なりは指数関数的に小さく、輸送現象に致命的な影響を及ぼさうる後方散乱が実質的に存在しない。つまり端状態は完全伝導チャンネルである。

<sup>16</sup> ここで  $y$  は Hall bar を横切る座標軸、 $x$  はエッジに沿った座標軸である。図 6(a) 参照。

<sup>17</sup> 中心座標  $Y$  はエッジに沿った運動量  $k_x$  と同一視できるから、 $\epsilon_n(Y)$  を 1 次元系のエネルギー分散関係と見ることが出来る。

ジ的な見方<sup>18)</sup> の間に一定の関係をつけることができる。

### 3.2 量子 Hall 効果：グラフェンの場合

分散関係が非相対論的な (parabolic な) 2次元電子系と異なり、Dirac 電子系は  $M = 0$  の場合には線形分散  $\varepsilon = v_F \hbar k$  を持つので、波数  $k$  以下の状態数は

$$N(\varepsilon) = \frac{\pi k^2}{(2\pi/L)^2} = L^2 \frac{k^2}{4\pi} = L^2 \frac{\varepsilon^2}{4\pi \hbar^2 v_F^2} \quad (73)$$

である。したがって、 $B = 0$  のときの状態密度は

$$D(\varepsilon) = \frac{N(\varepsilon)}{d\varepsilon} = L^2 \frac{|\varepsilon|}{2\pi \hbar^2 v_F^2} \quad (74)$$

となり、エネルギーに比例して状態密度が増加する。一方、この場合も Landau 準位の縮退度は式 (70) で与えられる。その結果、非相対論的な場合と異なり、Landau 準位の間隔が一定でなくなる。

以下では、より一般的に  $M \neq 0$  として計算を進める [16] :

$$H = v_F (\tau_z \sigma_x p_x + \sigma_y p_y) + M \sigma_z. \quad (75)$$

まず、 $K$  点まわりについて考えよう ( $\tau_z = 1$ )。磁場によるベクトル・ポテンシャル  $\vec{A}$  を考えて、正準 (canonical) 運動量  $\vec{p}$  を力学的 (mechanical) 運動量

$$\pi_x = p_x + \frac{e}{c} A_x, \quad \pi_y = p_y + \frac{e}{c} A_y \quad (76)$$

で置き換える。 $z = x + iy$  と  $\bar{z} = x - iy$  に対応する  $\pi_{\pm} \equiv \pi_x \pm i\pi_y$  も導入しておくとも便利である<sup>19)</sup>。 $K$  点まわりのハミルトニアン  $H_K$  は、

$$H_K = v_F (\sigma_z \pi_x + \sigma_y \pi_y) + M \sigma_z = \begin{pmatrix} M & v_F \pi_- \\ v_F \pi_+ & -M \end{pmatrix} \quad (78)$$

となった。 $\pi_{\pm}$  を調和振動子の昇降演算子  $a, a^\dagger$  と関係づけると、上のハミルトニアンの固有値と固有状態を厳密に計算できる。そこで、交換子  $[\pi_-, \pi_+]$  — 具体的には、式 (77) のように与えられる — の右辺が 1 になるように、

$$\pi_+ = \sqrt{\frac{2e\hbar B}{c}} a^\dagger = \sqrt{2} \frac{\hbar}{l} a^\dagger, \quad \pi_- = \sqrt{2} \frac{\hbar}{l} a \quad (79)$$

<sup>18)</sup> (量子) 物理学では、picture をしばしば「描像 (びようぞう)」と訳す。例えば Schrödinger 描像と Heisenberg 描像など。これに倣うなら、バルク描像/エッジ描像と言われるべきもの。

<sup>19)</sup> ちなみに  $\pi_+$  と  $\pi_-$  は交換しない:

$$[\pi_-, \pi_+] = 2i [\pi_x, \pi_y] = 2i \left[ p_x + \frac{e}{c} A_x, p_y + \frac{e}{c} A_y \right] = \frac{2ie}{c} ([p_x, A_y] - [p_y, A_x]) = \frac{2ie}{c} \frac{\hbar}{i} (\partial_x A_y - \partial_y A_x) = \frac{2e\hbar}{c} B_z. \quad (77)$$

右辺の符号は  $B_z$  の正負によって異なるが、ここでは  $B_z = B > 0$  として議論する。

とする。ここで、磁気長 (magnetic length)  $l = \sqrt{\hbar c / (eB)}$  を導入した。これは、非相対論的な場合と共通の標準的な定義である。一方、Dirac 粒子の「サイクロトロン振動数」(cyclotron frequency)  $\omega_c$  を半古典的に考えると、

$$\hbar\omega_c = v_F \sqrt{\frac{2e\hbar B}{c}} = v_F \sqrt{2} \frac{\hbar}{l} \quad (80)$$

となる。以下、この記号  $\omega_c$  を式 (80) の意味で使うが、この値は非相対論的量子論の場合の値とは異なっているので注意されたい。

式 (79) で定義した演算子  $a, a^\dagger$  を使うと、 $K$  点まわりのハミルトニアン (78) は

$$H_K = \begin{pmatrix} M & \hbar\omega_c a \\ \hbar\omega_c a^\dagger & -M \end{pmatrix} \quad (81)$$

と記述できる。調和振動子の固有状態

$$\begin{aligned} a|0\rangle &= 0, \\ a^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \\ a|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle \end{aligned} \quad (82)$$

を使うと、 $H_K$  の固有状態は、後で求める係数  $a_n, b_n$  を使って

$$|n\rangle\rangle = \begin{pmatrix} a_n|n-1\rangle \\ b_n|n\rangle \end{pmatrix} \quad (n \geq 1), \quad (83)$$

$$|0\rangle\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ |0\rangle \end{pmatrix} \quad (n = 0) \quad (84)$$

の形に書ける。 $n = 0$  に対応する固有状態を式 (80) の  $H_K$  に作用させると

$$H_K|0\rangle\rangle = -M|0\rangle\rangle \quad (85)$$

となる。 $n \geq 1$  の状態 (83) に対するシュレーディンガー方程式は

$$H_K|n\rangle\rangle = \begin{pmatrix} (a_n M + b_n \hbar\omega_c \sqrt{n})|n-1\rangle \\ (a_n \hbar\omega_c \sqrt{n} - b_n M)|n\rangle \end{pmatrix} = \varepsilon_n \begin{pmatrix} a_n|n-1\rangle \\ b_n|n\rangle \end{pmatrix}, \quad (86)$$

つまり

$$\begin{pmatrix} M & \hbar\omega_c \sqrt{n} \\ \hbar\omega_c \sqrt{n} & -M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} = \varepsilon_n \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} \quad (87)$$

となるので、永年方程式

$$\left| \begin{pmatrix} M - \varepsilon_n & \hbar\omega_c \sqrt{n} \\ \hbar\omega_c \sqrt{n} & -M - \varepsilon_n \end{pmatrix} \right| = 0 \quad (88)$$

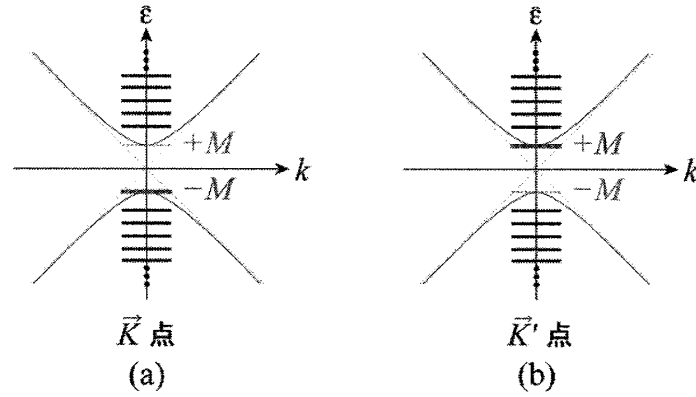


図 7: (a)  $K$  点と (b)  $K'$  点における Landau 準位 (太い横線)。 $K$  点ではゼロ・モードが  $\varepsilon = -M$  のみに存在し、 $K'$  点では逆に  $\varepsilon = +M$  のみに存在する。曲線は  $B = 0$  の場合の分散関係  $\varepsilon = \sqrt{M^2 + \hbar^2 k^2}$  を表す。

を解いて、 $n \geq 1$  のときに

$$\varepsilon_n = \pm \sqrt{M^2 + n(\hbar\omega_c)^2}, \quad \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{\varepsilon_n + M}{2\varepsilon_n}} \begin{pmatrix} \pm 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (89)$$

となる (図 7(a))。

ここまで、グラフェンの  $K$  点近傍の有効理論を念頭に置きつつ、一般に  $M \neq 0$  の場合も考えて Dirac 電子系の Landau 準位を調べてきた。式 (84), (85) の  $|0\rangle$  は  $K$  点まわりのゼロ・モード ( $n = 0$  に対応する固有モード) である。式 (84) は、このゼロ・モードが副格子  $B$  のみに局在することを示している。逆に  $K'$  点でのゼロ・モードは固有値  $+M$  であり、副格子  $A$  のみに局在する<sup>20</sup>。このように、一つの Dirac 点だけに着目すると、パリティ (あるいは副格子の) 対称性を自発的に破るようなゼロ・モードが出てくるというのがこの問題に特徴的な点である。

massless ( $M = 0$ ) の場合、 $n = 0$  の準位はいずれも  $\varepsilon_0 = 0$  になり、 $K$  点と  $K'$  点でゼロ・モードの固有値が一致する。 $(n \neq 0$  の固有値はそもそも等しい。) その結果、(よく知られているように) 各状態のエネルギー固有値は

$$\varepsilon_n = \pm \hbar\omega_c \sqrt{n} \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (92)$$

<sup>20</sup>  $K'$  点まわりの有効理論についても考えておこう。ハミルトニアンは

$$H_{K'} = v_F (-\sigma_z \pi_x + \sigma_y \pi_y) + M\sigma_z = \begin{pmatrix} M & -v_F \pi_+ \\ -v_F \pi_- & -M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M & -\hbar\omega_c a^\dagger \\ -\hbar\omega_c a & -M \end{pmatrix}. \quad (90)$$

と書ける。固有状態は、式 (89) と同じ係数を使って

$$|n\rangle = \begin{pmatrix} b_n |n\rangle \\ a_n |n-1\rangle \end{pmatrix} \quad (n \geq 1), \quad |0\rangle = \begin{pmatrix} |0\rangle \\ 0 \end{pmatrix} \quad (n = 0) \quad (91)$$

と与えられる。 $n \geq 1$  に対する固有値は式 (89) と同じである。一方、 $n = 0$  に対応するゼロ・モードを式 (90) の  $H_{K'}$  に作用させると、今度は  $H_{K'}|0\rangle = +M|0\rangle$  となり、固有値が  $+M$  であることがわかる (図 7(b))。磁場  $B$  が負の場合には、式 (77) を昇降演算子の交換関係にするためには、式 (79) で  $a$  と  $a^\dagger$  を入れ替える必要があり、従って  $K$  点と  $K'$  点の役割が入れ替わることになる。

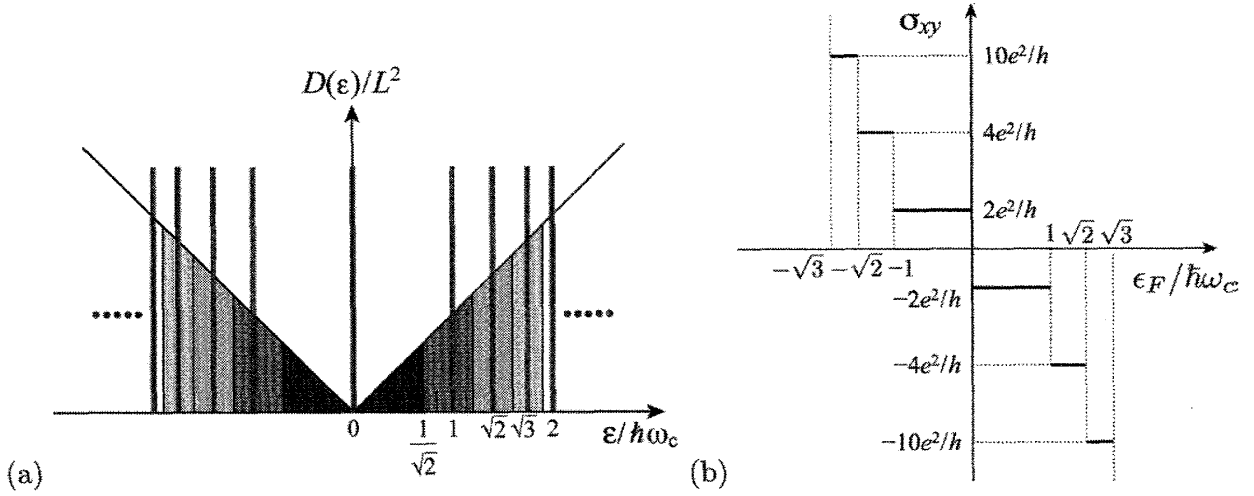


図 8: グラフェンの量子 Hall 効果: (a) 状態密度と Landau 準位。磁場  $B = 0$  のときの状態が  $B \neq 0$  で Landau 準位に縮退していく様子。太い縦線が Landau 準位を表し、それを挟む範囲の状態が各 Landau 準位に縮退する。(b) グラフェンの量子化された Hall 伝導率。

で与えられる。また  $n = 0$  のゼロ・モードは、 $\varepsilon_0 = 0$  の対称的な位置にあることをあることを除けば、他の ( $n \neq 0$ ) 準位に比べて特別なことはない。Landau 準位の縮退度も他の準位と同じで、かつ非相対論的な場合とも共通な値になる<sup>21</sup>。

実験でも確かめられているように [1]、グラフェンの Hall 伝導率は、

$$\sigma_{xy} = 4 \frac{e^2}{h} \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots \quad (97)$$

のように量子化される (図 8(b))。最初の因子 4 は、実スピンと valley 擬スピンに関する縮重度から来ている。後者に関しては、既に指摘したようにゼロ・モードからの寄与について微妙な点があったが、結果的には  $K$  点と  $K'$  点からの寄与は単純に重なると考えてよい (2 倍すればよい)。なお、副格子の自由度は Landau 準位の議論で既に考慮されていた。式 (97) を非相対論的な量子

<sup>21</sup>各 Landau 準位の縮退度が全ての  $n$  について等しいことは、以下のようにして確かめることもできる。まず、 $B = 0$  のときの Dirac 粒子の状態密度は、式 (74)、あるいは  $\hbar\omega_c$  を使って

$$D(\varepsilon) = L^2 \frac{|\varepsilon|}{2\pi\hbar^2 v_F^2} = L^2 \frac{2eB}{(\hbar\omega_c)^2 hc} |\varepsilon| \quad (93)$$

で与えられる。従って、 $-\hbar\omega_c/\sqrt{2} \leq \varepsilon \leq \hbar\omega_c/\sqrt{2}$  の範囲にある状態数は図 8(a) の三角形の面積から

$$2 \int_0^{\hbar\omega_c/\sqrt{2}} D(\varepsilon) d\varepsilon = 2L^2 \frac{2eB}{(\hbar\omega_c)^2 hc} \times \frac{1}{2} \left( \frac{\hbar\omega_c}{\sqrt{2}} \right)^2 = \frac{BL^2}{hc/e} \quad (94)$$

となり、非相対論的な場合の式 (70) と一致している。同様に  $\varepsilon_n = \hbar\omega_c$  を挟む範囲

$$\sqrt{1 - \frac{1}{2n}} \varepsilon_n = \hbar\omega_c \sqrt{n - \frac{1}{2}} \leq \varepsilon \leq \hbar\omega_c \sqrt{n + \frac{1}{2}} = \sqrt{1 + \frac{1}{2n}} \varepsilon_n \quad (95)$$

にある状態数は、図 8(a) の台形の面積から

$$L^2 \frac{2eB}{(\hbar\omega_c)^2 hc} \times \frac{(\hbar\omega_c)^2}{2} \left( \sqrt{n + \frac{1}{2}} + \sqrt{n - \frac{1}{2}} \right) \left( \sqrt{n + \frac{1}{2}} - \sqrt{n - \frac{1}{2}} \right) = \frac{BL^2}{hc/e} \quad (96)$$

となり、やはり同じ値である。

化の式と比較して顕著なことは、もちろん量子化プラトーの位置が半分だけずれていることである。つまり、先の(擬)スピン縮重度による因子4を除けば、 $\sigma_{xy}$  は、 $e^2/h$ を単位として、 $n$ ではなく  $n+1/2$  のところに量子化されているわけで、その意味で、これを整数量子 Hall 効果ではなく「半整数」量子 Hall 効果と呼ぶ人もいる。では、式(97)になぜ  $1/2$  が出てくるのかを言えば、それは当然ゼロ・モードの寄与による。さらに遡るなら、式(51)の Berry 位相が起源であると言ってもよいかもしれない。

既に強調したように、 $M \rightarrow 0$  の極限で  $n=0$  のゼロ・モードは他の  $n \neq 0$  のモードと比べて、縮重度など何ら特異なところはない(i)。このことは、 $\varepsilon_F = 0$  における  $\sigma_{xy}$  のステップ ( $4e^2/h$ を単位として、から  $-1/2$  から  $1/2$  に変化) が他のステップと何ら変わらないことに現れている。ただし非相対論的な場合と違い、Dirac 粒子は負エネルギー解を持っているので、 $\varepsilon_F$  を正から負まで振ることができるのが、今の場合の新しい点である。また、正確に  $\varepsilon_F = 0$  となっている点では、粒子・正孔対称性からゼロ・モードはちょうど半部だけ占有されているはずである(ii)。式(97)の半整数量子化は、上記の条件(i), (ii)の必然的な帰結である。

### 3.3 時間反転対称性

Kane-Mele 模型でスピン軌道相互作用について議論する時、時間反転対称性が重要となってくる。これについて少し触れておこう。時間反転操作  $T$  の下で、位置と運動量は  $\vec{x} \rightarrow \vec{x}$ ,  $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$  という変換性を持つ。角運動量は両者の積であるから、必然的に  $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p} \rightarrow -\vec{L}$  と変換される。もちろん、これは角運動量の直感的なイメージからも明らかである。スピンも角運動量の一つであるから、同じ変換性  $\vec{s} \rightarrow -\vec{s}$  を持つ。すなわち、スピン演算子に対して時間反転演算子  $T$  を作用させると符号が反転する。

時間反転演算子  $T$  の具体的な表現を求めておこう。 $z$  軸方向にスピンの向いている状態を  $|+\rangle$  と書く。任意の方向を向いたスピンを作るには、まず  $|+\rangle$  を  $y$  軸まわりに  $\theta$  だけ回転し、さらに  $z$  軸まわりに  $\varphi$  だけ回転すればよい：

$$|\vec{s}\rangle = e^{is_z\varphi/\hbar} e^{is_y\theta/\hbar} |+\rangle. \quad (98)$$

このスピンを反転するには、まず複素共役をとる演算子  $K$  を作用させる：

$$K|\vec{s}\rangle = e^{-is_z\varphi/\hbar} e^{is_y\theta/\hbar} |+\rangle. \quad (99)$$

なお、 $is_y$  は実数行列であることに注意する。これによってスピンは  $xz$  平面で鏡映された。さらに  $y$  軸まわりに  $\pi$  反転すればスピンの反転できる。したがって、

$$T = e^{i\alpha} (-is_y) K \quad (100)$$

と書ける。ここで  $\alpha$  は任意の位相因子で、 $\exp(is_y\pi/\hbar)$  を  $-is_y$  と書いている。なお、時間反転を

2回作用させると

$$\begin{aligned} T^2 &= e^{i\alpha} (-is_y) K e^{i\alpha} (-is_y) K \\ &= e^{i\alpha} (-is_y) e^{-i\alpha} (-is_y) K^2 = -s_y^2 = -1 \end{aligned} \quad (101)$$

となる。

クラマース縮退 (Kramers degeneracy) についてもひと言触れておこう。ハミルトニアン  $H$  が時間反転操作に対して不変 ( $[H, T] = 0$ ) であるとき、任意の固有値  $E$  を持つ固有状態  $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$  に対して、それを時間反転した状態  $|\psi'\rangle = T|\psi\rangle$  も同じ固有値を持っている:  $H|\psi'\rangle = E|\psi'\rangle$ 。これを Kramers 縮退という。また、 $|\psi\rangle$  と  $|\psi'\rangle$  は互いに Kramers partner の関係にあり、両者は Kramers pair を形成する。 $|\psi\rangle$  と  $|\psi'\rangle$  が異なる状態 (線形独立) であることは、背理法を用いて示すことができる<sup>22</sup>。

一般に、 $+k \uparrow$  の状態と  $-k \downarrow$  の状態がは、時間反転操作で結ばれた Kramers ペアである。グラフェンの場合、 $K'$  点は  $-\vec{K}$  点と等価なので、 $K$  点の  $\uparrow$  スピンと  $K'$  点の  $\downarrow$  スピンが Kramers partner ということになる。

### 3.4 Kane-Mele 模型と量子化されたスピン Hall 効果

ここまでいろいろと準備、脱線が長かったが、本節でいよいよ Kane-Mele 理論の中枢に位置する内因的 (intrinsic)<sup>23</sup> スピン軌道相互作用による「トポロジカルな」質量項を議論する。後者は、本講義ノートの導入部分でも述べたような、Dirac 点における量子異常がキャンセルしないような状況 (導入部では状況 (A) と呼んだ) を担う中心的存在である。

第 3.2 節では、Dirac 電子系の Landau 準位を  $M \neq 0$  の場合に調べた。特徴的なことの一つは、1 個の Dirac 点—例えば、 $K$  点—に着目すると、パリティ対称性をいわば「自発的に」破るようなゼロ・モードが存在することであった。一般に、Hall 伝導度  $\sigma_{xy}$  へは一つの Landau 準位から  $e^2/h$  の寄与がある。 $M = 0$  で、フェルミ準位が正確に粒子・正孔対称な位置  $\epsilon_F = 0$  にあるとすると、 $n = 0$  の Landau 準位 (ゼロ・モード) は半分だけ詰まっただけで  $\sigma_{xy} = 0$  となることが期待される。しかし、この状況は明らかに不安定である。実際に、 $M \neq 0$  の状況で  $\epsilon_F$  がギャップの中にあるとする ( $-M < \epsilon_F < +M$ ) と、ゼロ・モードは完全に詰まっているか完全に空いているかのどちらかである。つまり、1 個の Dirac 点に着目すると、この状況で  $\sigma_{xy}$  へ有限の寄与  $\pm(1/2)e^2/h$  があることがわかる。 $\sigma_{xy}$  の符号は  $M$  の符号で決まる。 $\epsilon_F$  をギャップの中に置いた

<sup>22</sup>もし仮に、 $|\psi'\rangle$  が  $|\psi\rangle$  の定数倍

$$T|\psi\rangle = |\psi'\rangle = c|\psi\rangle \quad (102)$$

であるとする、

$$-|\psi\rangle = T^2|\psi\rangle = c^*T|\psi\rangle = |c|^2|\psi\rangle \quad (103)$$

で、 $|c|^2 = -1$  となり最初の仮定に矛盾する [8]。

<sup>23</sup>例えば、4 節で議論する Rashba 型のスピン軌道相互作用は、電場をかけて初めて生じるという意味で「外因的」(extrinsic) である。本節で議論するのは、系に固有の、系の持つ本来の対称性を破らないような形のスピン軌道相互作用である。

ま、磁場  $B$  を断熱的に切っても状況は変わらない。従って  $\lim_{m \rightarrow 0} \sigma_{xy}$  の極限は不定となる。これをしばしば、Dirac 電子系における「パリティ異常」と呼ぶ [21]。もちろん、 $K$  点と  $\bar{K}'$  点からの寄与を足し合わせれば  $\sigma_{xy}$  への寄与はキャンセルし、どこにも異常は現れない [3]。

もし仮に  $K$  点と  $\bar{K}'$  点を区別して valley の自由度をスピンの見立て、“valley current” のようなものを考えられるとしたら [17]、このゼロ・モードによって運ばれる電流を観測できるかもしれない。Semenoff はすでにこのことに気づいていたと思われるが、文献 [18] によれば、この電流を誘起するような外場 “unphysical” であり、直接観測できるような代物ではないと述べている。数年後 Haldane は、式 (16) に第 2 近接のホッピング項を加えた模型で、何らかの内部磁場がユニット・セルの内部で交代しているような状況（磁束の和はゼロ）を作れば、実効的に逆符号の質量項（トポロジカルな質量項）が  $K$  点と  $\bar{K}'$  点に生じ、パリティ異常がキャンセルしないので、「ランダウ準位なしの量子 Hall 効果」が実現することを示した [7]。

Haldane の模型は、実スピンの自由度が凍結した状況を考えているが、交代する磁束が時間反転対称性を破っている。Kane-Mele 理論 [4] においては Haldane の模型を 2 枚用意し（それぞれが実スピン  $\uparrow$  と  $\downarrow$  に対応）、トポロジカルな質量項の起源としてスピン軌道相互作用を考えると、もっと簡単に、しかも時間反転対称性を破らない形で、パリティ異常が顕在化する状況を作り出せることを指摘した点が新しい。もちろん時間反転対称性が保たれているので、顕在化の仕方も通常の量子 Hall 効果ではなく、量子スピン Hall 効果 (QSH) となった。以下、その議論を紹介する。

六角格子上の tight-binding 模型にどのような形でスピン軌道相互作用を導入するかは工夫のしどころである。詳細は文献に譲るが、いくつかの対称性<sup>24</sup> から要請される形として、文献 [4] の式 (6) で、

$$H_2 = \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} it_2 \nu_{ij} s_{\alpha\beta}^z c_{i\alpha}^\dagger c_{j\beta} \quad (104)$$

のように書かれている項（右辺第 2 項）を考えよう。 $\langle\langle i,j \rangle\rangle$  に関する和は、次近接 (next-nearest neighbor、略して NNN) 格子点間についてとることを意味する<sup>25</sup>。式 (104) のもうひとつの特徴は、ホッピングの（複素）振幅が  $it_2$ 、つまり、純虚数ホッピングになっていることだ ( $t_2 (= \lambda_{SO})$  は実数)。電子がサイト  $i$  から  $j$  にホップするとき位相  $\pi/2$  をひっかけてくるということで、Haldane の考えた模型 [7] との類似性が想起される<sup>26</sup>。 $\nu_{ij}$  はホップする向きに関して反対称な符号因子  $\nu_{ij} = -\nu_{ji} = \pm 1$  であるが、具体的にどちらの符号を選ぶべきかについては、以下の議論を参考にしてほしい<sup>27</sup>。

まず、副格子 A でのホッピングを考えよう。 $\nu_{ij}$  の符号を、実スピン  $\uparrow$  に対して

$$\begin{aligned} H_{2A\uparrow} &= it_2 \left( c_{\bar{A}_1\uparrow}^\dagger c_{\bar{A}_2\uparrow} + c_{\bar{A}_2\uparrow}^\dagger c_{\bar{A}_3\uparrow} + c_{\bar{A}_3\uparrow}^\dagger c_{\bar{A}_1\uparrow} \right) + \text{h.c.} \\ &= it_2 \left( c_{\bar{A}_1\uparrow}^\dagger c_{\bar{A}_1+\bar{a}_1-\bar{a}_2\uparrow} + c_{\bar{A}_1+\bar{a}_1-\bar{a}_2\uparrow}^\dagger c_{\bar{A}_1+\bar{a}_1\uparrow} + c_{\bar{A}_1+\bar{a}_1\uparrow}^\dagger c_{\bar{A}_1\uparrow} \right) + \text{h.c.} \end{aligned} \quad (105)$$

<sup>24</sup>時間反転対称性、( $z$  軸に関する) 反転対称性、etc.

<sup>25</sup>NNN ホッピングは、同じ副格子内のホッピングである (図 9(a) も参照)。従って第 2 近接と同じ。

<sup>26</sup>実際、Kane-Mele 模型で  $\lambda_R \rightarrow 0$  とした (Rashba 相互作用を切った) 極限は、文献 [7] の模型で Haldane が考えた交代する内部磁束の強さを  $\phi = \pi/2$  としたもの—正確には、それを 2 枚張り合わせたもの—と数学的に等価である。

<sup>27</sup>もちろん、数学的な定義は文献 [4] にも与えられているのだが...



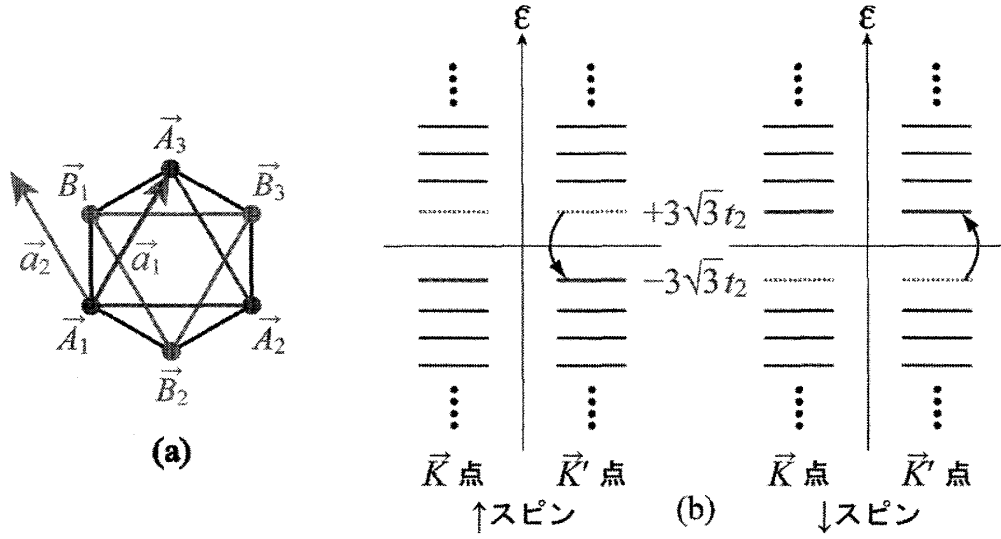


図 9: (a) 内因的スピン軌道相互作用を起源とする次近接ホッピング  $t_2$ 。(b)  $t_2$ がある場合の Landau 準位の構造。トポロジカル質量項によりゼロ・モードの位置が反転する。

となるように決めよう (添字は図 9(a) を参照)。式 (16) 以下における  $H_1$  の取り扱いを参考にし、式 (105) にフーリエ変換を施し、 $c_{Ak\uparrow}^\dagger c_{Ak\uparrow}$  の項の係数を計算すると、

$$\begin{aligned}
 h_{2A\uparrow}(\vec{k}) &= it_2 \left[ e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{a}_1-\vec{a}_2)} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} \right] + \text{c.c.} \\
 &= 2t_2 \left[ \sin \vec{k} \cdot (\vec{a}_1 - \vec{a}_2) + \sin (\vec{k} \cdot \vec{a}_2) - \sin (\vec{k} \cdot \vec{a}_1) \right] \\
 &= 2t_2 [\sin 2x + \sin (-x + y) - \sin (x + y)] \\
 &= 2t_2 (\sin 2x - 2 \sin x \cos y)
 \end{aligned} \tag{106}$$

となる。2 行目から 3 行目に進むところで式 (24) で導入した変数  $x, y$  を用い、 $\vec{k} \cdot \vec{a}_1 = x + y$ ,  $\vec{k} \cdot \vec{a}_2 = -x + y$  とおいた。これで、文献 [6] の TABLE I との対応関係が見えてきた。式 (106) は、表中右の段の上から上 2 つ目、 $d_{15}$  と書かれている項に対応する。ここでの記号で書くと

$$d_{15}(\vec{k}) = t_2(2 \sin 2x - 4 \sin x \cos y) \tag{107}$$

である。

特別な点における式 (106) の値を調べておこう。その前に、 $K$  点と  $K'$  点における  $x, y$  等の値を表にしておく。後で役に立つかもしれない。 $K$  点と  $K'$  点で  $x = ak_x/2 = \pm\pi/3$ ,  $y = \sqrt{3}ak_y/2 = \pi$  であることに注意すると、表 1 のようになる。逆に表 1 の値を用いれば、直ちに

$$h_{2A\uparrow}(\vec{K}) = d_{15}(\vec{K}) = 3\sqrt{3}t_2, \quad h_{2A\uparrow}(\vec{K}') = d_{15}(\vec{K}') = -3\sqrt{3}t_2 \tag{108}$$

となることが分かる。

ここまでは実スピンの  $\uparrow$  の場合だけ考えてきたが、実スピンの  $\downarrow$  の場合はホッピングの符号が反転する<sup>28</sup>。従って、前節の最後のところで触れたように、 $K$  点で実スピン  $\uparrow$  の状態と  $K'$  点で実

<sup>28</sup>これは、式 (105) に実際に (explicit に) 時間反転操作を施して確かめることもできる。また、式 (104) は  $s_z$  を対

表 1:  $K$  点と  $K'$  点における  $x = ak_x/2$ ,  $y = \sqrt{3}ak_y/2$  等の値。

	$x$	$\cos x$	$\sin x$	$y$	$\cos y$	$\sin y$
$\vec{K}$	$\pi/3$	$1/2$	$\sqrt{3}/2$	$\pi$	$-1$	$0$
$\vec{K}'$	$-\pi/3$	$1/2$	$-\sqrt{3}/2$	$\pi$	$-1$	$0$

スピン  $\downarrow$  の状態が Kramers 縮退していることわかる。このことから、式 (108) の 2 つをまとめて式 (35) 流に有効ハミルトニアン の形に書いてみたくなるかもしれない： $H_{2A} = 3\sqrt{3}t_2\tau_z s_z$ 。

副格子 B におけるホッピングは、副格子 A のホッピングを  $\pi/3$  だけ回転させて入れればよい：

$$\begin{aligned} H_{2B\uparrow} &= it_2 \left( c_{\vec{B}_1\uparrow}^\dagger c_{\vec{B}_2\uparrow} + c_{\vec{B}_2\uparrow}^\dagger c_{\vec{B}_3\uparrow} + c_{\vec{B}_3\uparrow}^\dagger c_{\vec{B}_1\uparrow} \right) + \text{h.c.} \\ &= it_2 \left( c_{\vec{B}_1\uparrow}^\dagger c_{\vec{B}_1-\vec{a}_2\uparrow} + c_{\vec{B}_2\uparrow}^\dagger c_{\vec{B}_3\uparrow} + c_{\vec{B}_1+\vec{a}_1-\vec{a}_2\uparrow}^\dagger c_{\vec{B}_1\uparrow} \right). \end{aligned} \quad (109)$$

先程と同様に Fourier 変換を施し、

$$\begin{aligned} h_{2B\uparrow}(\vec{k}) &= it_2 \left[ e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\cdot(\vec{a}_1-\vec{a}_2)} \right] + \text{c.c.} \\ &= -2t_2 (\sin 2x - 2 \sin x \cos y) = -d_{15}(\vec{k}) \end{aligned} \quad (110)$$

となる。実スピンが  $\downarrow$  の項については、先程と同じように式 (109) の 1 行目に時間反転操作を施してやればよい。式 (106) と式 (110) と、それらに時間反転操作を施したものを全て足し合わせると、文献 [6] の TABLE I で  $d_{15}$  と書かれている項が完成する：

$$H_2 = d_{15}(\vec{k})\sigma_z s_z = t_2\sigma_z s_z (2 \sin 2x - 4 \sin x \cos y). \quad (111)$$

ここで  $\sigma_z$  は副格子を区別する擬スピンである。これが内因的スピン軌道相互作用による次近接ホッピングのハミルトニアンである。

$d_{15}(\vec{k})$  の特別な点における値が式 (108) のように与えられることを思い出して、式 (109) を再び式 (35) 流に—つまり Dirac 点近傍の有効理論の形に—書いてみよう<sup>29</sup>：

$$H_2 = 3\sqrt{3}t_2\sigma_z\tau_z s_z \equiv \Delta\sigma_z\tau_z s_z. \quad (112)$$

ここで、(なぜそう呼ぶかは後で述べるとして) 「トポロジカル質量」 $\Delta$  を導入した。式 (112) は、陽に (explicit に) 時間反転対称な形をしている。時間反転操作によって、 $K$  点と  $K'$  点を区別する valley 擬スピン  $\tau_z$  と電子の実スピン  $s_z$  は符号を変えるが、副格子に起因する擬スピン  $\sigma_z$  は不変に保たれる： $\sigma_z \rightarrow \sigma_z$ ,  $\tau_z \rightarrow -\tau_z$ ,  $s_z \rightarrow -s_z$ <sup>30</sup>。

角化する形になっていることにも注意してほしい。一方、式 (105) は式 (104) の一部をピックアップしたものにすぎない。例えばここで考えているように、式 (105) に時間反転操作を施して実スピンを反転させた項も式 (104) に加わるべき項の一つである。

<sup>29</sup>これは、 $K$  点あるいは  $K'$  点近傍の有効理論において、Dirac 点近傍の点における  $H_2$  の値を Dirac 点直上の値で代表させて (代用して) いることに相当する。

<sup>30</sup>式 (37) で導入した「通常の」—あるいは、BN 型の—質量項も、もちろん時間反転対称性を破らない。こうして改めて見てみて、副格子擬スピン  $\sigma$ 、valley 擬スピン  $\tau$ 、実スピン  $s$  の 3 つのスピンの直積空間で、式 (37) と式 (112) 以外に時間反転対称性を破らないような質量項の導入の仕方はあるだろうか？ 難しそうだ...

全ハミルトニアン  $H = H_0 + H_1 + H_2$  は

$$\begin{aligned} H &= M\sigma_z + \hbar v_F (\tau_z \sigma_x p_x + \sigma_y p_y) + \Delta \sigma_z \tau_z s_z \\ &= \hbar v_F (\tau_z \sigma_x p_x + \sigma_y p_y) + (M + \Delta \tau_z s_z) \sigma_z \end{aligned} \quad (113)$$

と書ける。つまり、式(112)をハミルトニアンに加えた効果は、Dirac粒子の質量がスピン軌道相互作用によって  $M$  から  $m_{\pm} \equiv M \pm \Delta$  に「繰り込まれた」と解釈すればよい。 $\vec{K} \uparrow$  と  $\vec{K}' \downarrow$  の Dirac 粒子は質量  $m_+$  を、 $\vec{K} \downarrow$  と  $\vec{K}' \uparrow$  の Dirac 粒子は質量  $m_-$  を持っている。

式(112)で表された内因的スピン軌道相互作用による「質量項」は、しばしば「トポロジカルな」質量項 (topological mass term) と言われる。そのところを以下に少し述べたい。まず最初に、通常の質量項  $H_0 = M\sigma_z$  だけがある場合を考えよう。このとき、 $\uparrow$  スピンに対してはゼロ・モードが  $K$  点で  $-M$ 、 $K'$  点で  $+M$  の位置にある (図7)。逆にトポロジカルな質量項(112)だけがある場合、 $\uparrow$  スピン ( $s_z = +1$ ) かつ  $K'$  点 ( $\tau_z = -1$ ) では質量の符号が反転するので、ゼロ・モードが  $-\Delta$  の位置に移動する。これは  $K$  点 ( $\tau_z = +1$ ) のゼロ・モードの位置と縮退している (図9(b)の左側のパネル)。 $\downarrow$  スピンに対してはさらにもう一つ符号反転が全体にかかるため、ゼロ・モードが  $-(-\Delta) = +\Delta$  の位置に縮退する (図9(b)の右側のパネル)。

さて、このようなゼロ・モードの反転現象は、グラフェンの低温における輸送特性にどのような帰結をもたらすであろうか？ 簡単のため、フェルミ準位  $\epsilon_F$  は常にギャップの中にあるとしよう。さらに、通常の質量項は無視できる ( $M = 0$ ) とすれば<sup>31</sup>  $-\Delta < \epsilon_F < +\Delta$  である。このとき、図9(b)に示したゼロ・モードの偏りのため、Hall伝導率に対する  $K$  点と  $K'$  点からの寄与は単純にはキャンセルしない (量子異常が顕在化する)。すなわち、実スピン  $\uparrow$  と実スピン  $\downarrow$  の各セクターは、それぞれ有限の (しかも整数量子化された) Hall 伝導率

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{\uparrow} &= \sigma_{xy}^{\uparrow(K)} + \sigma_{xy}^{\uparrow(K')} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{h} + \frac{1}{2} \frac{e^2}{h} = \frac{e^2}{h}, \\ \sigma_{xy}^{\downarrow} &= \sigma_{xy}^{\downarrow(K)} + \sigma_{xy}^{\downarrow(K')} = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{h} - \frac{1}{2} \frac{e^2}{h} = -\frac{e^2}{h} \end{aligned} \quad (114)$$

を示す。もちろん、式(113)は時間反転対称性を守っているので<sup>32</sup>、電荷に対する Hall 伝導率は

$$\sigma_{xy}^c = \sigma_{xy}^{\uparrow} + \sigma_{xy}^{\downarrow} = 0 \quad (115)$$

とキャンセルする。一方、スピンに関する Hall 伝導率

$$\sigma_{xy}^{(s)} = \frac{\hbar}{2e} (\sigma_{xy}^{\uparrow} - \sigma_{xy}^{\downarrow}) = \frac{e}{2\pi}. \quad (116)$$

は有限に残り、 $e/(2\pi)$  を単位として量子化される。これが量子スピン Hall 効果である。

<sup>31</sup>  $M \neq 0$  の場合でも、これが  $-3\sqrt{3}t_2 < M < 3\sqrt{3}t_2$  の範囲であれば量子スピン Hall 効果が可能である (以下の議論からほぼ明らか)。なおこの結果は、文献[7]の FIG. 2において、横軸  $\phi = \pm\pi/2$  のところで、 $\nu = +1$  あるいは  $-1$  のゼロ磁場量子 Hall 相 (サイン・カーブの中) が、縦軸  $M/t_2$  に対して  $-3\sqrt{3}$  から  $+3\sqrt{3}$  まで延びていることに対応する。

<sup>32</sup> 本物の磁場はないので、スピン軌道相互作用は時間反転対称性を破らない。

つまりグラフェンは、内因的スピン軌道相互作用が無視できないような低温領域に非自明なトポロジカル相を持つ。あるいは、そのような温度領域においてトポロジカル絶縁体であると言える。これが、Kane-Mele 理論 (= 文献 [4]+ 文献 [6]) の大きな主張のおそらく前半分である。

一般に「トポロジカル絶縁体」というとき、通常の (整数) 量子 Hall 系も含まれる。そもそも、トポロジカル秩序 (topological order) なるものをどうやって定義するのは、本講義ノートの程度を超えた大問題であるが [19]、ここでは簡単に、バンド絶縁体が非自明な Chern 数 [20] によって特徴づけられるとき、あるいはゼロでない  $\sigma_{xy}$  の量子化値を持つとき<sup>33</sup>、これをトポロジカル絶縁体と呼ぶことにしよう。また、非自明なトポロジーの起源を Dirac 型の有効理論のレベルで特徴づけようとするとき、例えば Kane-Mele 模型のような QSH 系では、これがトポロジカルな質量項と深く関係していることが分かる。

## 4 Rashba スピン軌道相互作用と「ヘリカルな」端状態—最上階へ

前節では、内因的スピン軌道相互作用に起因するトポロジカルな質量項  $\Delta\sigma_z\tau_zs_z$  により、外部磁場なしでもグラフェンをゼロギャップ半導体からトポロジカル絶縁体に化けさせることができることを見た。同じトポロジカル絶縁体とは言っても、式 (116) で特徴づけられるような量子スピン Hall 絶縁体と、例えば通常の電荷の量子 Hall 効果を示す量子 Hall 絶縁体を比べたとき、何が共通点で何が相違点なのだろうか？ 外部磁場を印可することにより、はなっから時間反転対称性を破ってしまう通常の量子 Hall 効果と比べ、Kane-Mele 理論の革新的だったところは、これを破っていないことである。では、時間反転対称性を遵守してきたことで、何か系のトポロジカルな性質にある種の robustness が加わったというようなことはないのでしょうか？ そのような考察を加えるにあたって、今まで考えてきた模型  $H = H_0 + H_1 + H_2$  は若干、単純化され過ぎている嫌いがある。例えば、スピン軌道相互作用は一般に時間反転対称性を破らないが、少し対称性の要請を弱めれば、前節で扱った  $H_2$  とは異なるタイプのものも出てくる (例えば Rashba 型スピン軌道相互作用)。また、系に非磁性の不純物を導入して並進対称性を破っても時間反転対称性は当然残る。本節では、前節までで扱った言わば理想的な量子スピン Hall 絶縁体に、時間反転対称性を破らないような弱い摂動が加わったとき、系のトポロジカルな性質がどの程度 robust に残るのかを考察し、その到達点として  $Z_2$  不変量という概念に行き着くことを目指す。

### 4.1 Rashba スピン軌道相互作用

Rashba 型のスピン軌道相互作用は  $z$  軸 (2次元面に垂直な方向) に対する反転対称性の破れからくる項で、具体的には  $z$  方向に電場をかけることによって現れる「外因的」(extrinsic) 効果である。Rashba 相互作用項の具体的な形は  $\vec{E} \cdot (\vec{s} \times \vec{p})$  に比例した形になるが [5]、ここでは tight-binding

<sup>33</sup>  $\sigma_{xy}$  を与える線形応答の久保公式は、バンド絶縁体の場合 (あるいは、磁場中の問題を考えるなら、 $\epsilon_F$  が Landau 準位のギャップの中にあるとき)、第 2.4 節で議論した Berry 曲率の BZ 全体にわたる積分の形に書き直すことができる [20]。その結果、 $\sigma_{xy}$  は Chern 数と呼ばれる topological number の一つで表され、これが非自明な (つまりゼロでない) 値を持つとき、量子 (スピン) Hall 効果が起こる。

模型で考えたいので、 $\vec{p}$ の行列要素を考える必要がある。後者はホッピング  $\vec{r}_{ij}$  に比例するから、第ゼロ近似ではこれを最近接格子点間で考え、Rashba 相互作用の影響として

$$H_R = i\lambda_R \sum_{\langle i,j \rangle} c_{Ai}^\dagger (\vec{s} \times \hat{r}_{ij})_z c_{Bj} \quad (117)$$

を全ハミルトニアン  $H = H_0 + H_1 + H_2$  に加える。 $\hat{r}_{ij}$  は  $\vec{r}_{ij}$  の向きの単位ベクトルである<sup>34</sup>。虚数単位  $i$  がハミルトニアンに現れるのはエルミート性の要請による。また、式(117)は  $s_x, s_y$  を含むことからすぐわかるように、 $s_z$  を保存しない。

さて、式(117)をもう少し具体的な形に書いておこう。文献[6]のTABLE I との関係も明らかにしたい。式(16)を手本にして、式(117)を

$$H_R = i\lambda_R \sum_{\vec{R}} \left[ c_{A\vec{R}}^\dagger c_{B\vec{R}} (\vec{s} \times \vec{e}_1)_z + c_{A\vec{R}+\vec{a}_1}^\dagger c_{B\vec{R}} (\vec{s} \times \vec{e}_2)_z + c_{A\vec{R}+\vec{a}_2}^\dagger c_{B\vec{R}} (\vec{s} \times \vec{e}_3)_z \right] + \text{h.c.} \quad (118)$$

のように書き換えるのが見通しよい。ここで  $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$  は単位ベクトル  $\hat{r}_{ij}$  の具体的な表式で、第2.2節の式(16)以下で  $H_1$  を扱ったときと同様、ホッピングの始点  $i$  をサイト  $(B, \vec{R})$  に固定し、終点  $j$  をそれぞれ  $(A, \vec{R}), (A, \vec{R} + \vec{a}_1), (A, \vec{R} + \vec{a}_2)$  に取った場合に相当する。すなわち

$$\vec{e}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \vec{e}_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{e}_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (119)$$

である。式(19)の変換則に注意し、式(24)で導入した記法(文献[6]による)を用いると、式(118)の前半分で、三角格子上の全ての点  $\vec{R}$  について  $[\dots]$  の和を取っている部分は、

$$(\text{前半}) = \lambda_R \sum_{\vec{k}} \left[ i s_x (-1 + e^{iy} \cos x) + \sqrt{3} s_y e^{iy} \sin x \right] c_{A\vec{k}}^\dagger c_{B\vec{k}} \quad (120)$$

と書ける。

tight-binding 型のハミルトニアンを第2量子化で書いているので、 $H_R$  は生成消滅演算子に関する2次形式になっている。式(20)のように、この2次形式の係数を行列の形に書くと、式(120)はこの行列の右上、(1,2)成分を計算したことになる。式(120)にはそのエルミート共役が加わって  $H_R$  全体を形成するわけだが、後者はこの行列の左下、(2,1)成分を与える。明らかのように、係数行列の左下成分は、式(120)の  $[\dots]$  の中身のエルミート共役をとることによって求まるから、これは右上成分が決まれば自明に決まる。つまり、右上成分の実数係数<sup>35</sup>部分は有効ハミルトニアンの  $\sigma_x$  に比例する項、虚数部分は  $\sigma_y$  に比例する項となる。ということで、式(120)の  $[\dots]$  内を実部と虚部に分けると、

$$[\dots] = s_x [(-i)(1 - \cos x \cos y) - \cos x \sin y] + \sqrt{3} s_y [\sin x \cos y - (-i) \sin x \sin y] \quad (121)$$

のように4つの項が出てくる。ここで“1”は  $\sigma_x$ ，“ $-i$ ”は  $\sigma_y$  を意味することを頭に入れて文献[6]のTABLE I と比べてみると、式(121)が表の下半分を占めている4つの  $\lambda_R$  に比例する項とびっ

<sup>34</sup>文献[6]の(1)式では、 $\hat{d}_{ij}$  と表記されているもの。

<sup>35</sup>実スピン  $s_x, s_y$  は「外に出した」後の係数という意味。

たり一致することが分かる。すなわち、文献 [6] の記法を用いて

$$h_R(\vec{k}) = d_3(\vec{k})\sigma_y s_x + d_{23}(\vec{k})\sigma_x s_x + d_{24}(\vec{k})\sigma_x s_y + d_4(\vec{k})\sigma_y s_y \quad (122)$$

と書ける。ただし、式 (20) に倣い、 $h_R(\vec{k})$  を

$$H_R \equiv \sum_{\vec{k}} \begin{pmatrix} c_{A\vec{k}}^\dagger & c_{B\vec{k}}^\dagger \end{pmatrix} h_R(\vec{k}) \begin{pmatrix} c_{A\vec{k}} \\ c_{B\vec{k}} \end{pmatrix} \quad (123)$$

のように導入した。 $d_3(\vec{k})$ ,  $d_{23}(\vec{k})$ ,  $d_{24}(\vec{k})$ ,  $d_4(\vec{k})$  の具体形も書いておくと、

$$\begin{aligned} d_3(\vec{k}) &= \lambda_R(1 - \cos x \cos y), & d_{23}(\vec{k}) &= -\lambda_R \cos x \sin y, \\ d_{24}(\vec{k}) &= \sqrt{3}\lambda_R \sin x \cos y, & d_4(\vec{k}) &= -\sqrt{3}\lambda_R \sin x \sin y \end{aligned} \quad (124)$$

である。

Rashba 型のスピン軌道相互作用は、トポロジカルな質量項による量子スピン Hall 効果にどの程度影響を与えるのだろうか<sup>36</sup>? その問いに答えるためにも、式 (122) が Dirac 点近傍においてどんな形になるのか調べておく必要がある。第 3.4 節で作った表 1 を思い出そう。表中の値を式 (124) に代入していくと、

$$\begin{aligned} d_3(\vec{K}) &= \frac{3}{2}\lambda_R, & d_{23}(\vec{K}) &= 0, & d_{24}(\vec{K}) &= -\frac{3}{2}\lambda_R, & d_4(\vec{K}) &= 0, \\ d_3(\vec{K}') &= \frac{3}{2}\lambda_R, & d_{23}(\vec{K}') &= 0, & d_{24}(\vec{K}') &= \frac{3}{2}\lambda_R, & d_4(\vec{K}') &= 0 \end{aligned} \quad (125)$$

となる。つまり、式 (122) に出てくる 4 つの項のうち、Dirac 点近傍で有限に残るのは  $d_3(\vec{k})$  と  $d_{24}(\vec{k})$  の 2 つだけであることがわかる。ここで、再び式 (122) を式 (35) や (112) のような有効理論の形に書いておこう：

$$H_R = \frac{3}{2}\lambda_R(\sigma_y s_x - \tau_z \sigma_x s_y). \quad (126)$$

ここまで来て、ようやく Kane-Mele 理論の全体像を、有効理論の立場から議論することができるとなる。全有効ハミルトニアンを  $H = H_0 + H_1 + H_2 + H_R$  の形に書くとして、 $H_0$  は式 (37),  $H_1$  は式 (35),  $H_2$  は式 (112),  $H_R$  は式 (126) に与えられている。 $H_0$  と  $H_2$  は (式 (113) 以下でもそうしたように) ひとつにまとめて、2 種類の質量  $m_{\pm} = M \pm 3\sqrt{3}t_2\tau_z s_z$  を考えるのが分かりやすい。valley 擬スピンの際には  $\tau_z$  しか出てこないの、Ising スピン、あるいは単に 2 つの valley を区別するだけの指標とみなしてよい。以下の取り扱いでも  $\tau_z = 1$  ( $K$  点) と  $\tau_z = -1$  ( $K'$  点) の部分空間を独立に考え、特にスピンとしての扱いはしない。

$K$  点に着目しよう ( $\tau_z = 1$ )。  $m_{\pm} = M \pm 3\sqrt{3}t_2 s_z$  となるから、実スピン  $\uparrow$  の空間で質量が実効的に  $m_+$ 、実スピン  $\downarrow$  の空間で質量が実効的に  $m_-$  になる。  $4 \times 4$  のハミルトニアンが、2 種類の (擬) スピン  $\uparrow$  と  $\downarrow$  の直積で張られる 4 成分のスピン空間に作用する形になっている。これを

<sup>36</sup>2 階部分までで非自明なトポロジカル相にある系に対して、 $\lambda_R$  をゼロから断熱的に入れていったとき、QSHE はどの程度の robustness を示すのだろうか? すぐに壊れる? それとも有限の  $\lambda_R$  まで robust か?

行列表示するのに、まず最初、外側の2×2のブロック構造を実スピン $s$ 、各ブロックの中の小さな2×2行列を副格子擬スピン $\sigma$ に対応させてみよう。スピノルの並びで言えば、これは(A, ↑), (B, ↑), (A, ↓), (B, ↓)の順に並べることを意味する。この表示で、K点直上における有効ハミルトニアン $H_K$ の形はどうなるであろうか？ Dirac点の直上では $H_1 = 0$ である。Rashba相互作用 $H_R$ は非対角のブロックに入る。右上のブロックを考えると(左下はエルミート性から自動的に決まる)  $s_x = 1, s_y = -i$ なので、

$$H_K^{\uparrow\downarrow}(0, 0) = \frac{3}{2}\lambda_R(\sigma_y - i\sigma_x) = -3i\lambda_R\sigma_+ \quad (127)$$

である。ここで、 $H_K(0, 0)$ はK点まわりの有効ハミルトニアン $H_K(p_x, p_y)$ の、K点直上( $p_x = p_y = 0$ )における値である。上付きの添字 $\uparrow\downarrow$ は、右上のブロックを指定している。また、

$$\sigma_{\pm} = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (128)$$

である。従って、

$$H_K(0, 0) = \left( \begin{array}{cc|cc} m_+ & & & -3i\lambda_R \\ & -m_+ & & \\ \hline & & m_- & \\ 3i\lambda_R & & & -m_- \end{array} \right) \quad (129)$$

となる。つまり、式(126)の形のRashba相互作用は、K点近傍で(直上では厳密に)(A, ↑)と(B, ↓)の電子の間だけに働き、(A, ↓)および(B, ↑)の電子は全くこの影響を受けないことになる<sup>37</sup>。

そこで、基底の並べ方の順序を変えて、(A, ↑)と(B, ↓)を上2つに、残りの(B, ↑)と(A, ↓)が下2つに来るようにする—つまり(A, ↑), (B, ↓), (A, ↓), (B, ↑)の順に並べる—と、式(129)は

$$H_K(0, 0) = \left( \begin{array}{cc|cc} m_+ & -3i\lambda_R & & \\ 3i\lambda_R & -m_- & & \\ \hline & & m_- & \\ & & & -m_+ \end{array} \right) \quad (130)$$

のように書き直される。これから、 $H_K$ の $p_x = p_y = 0$ (K点直上)における固有値 $\epsilon_K(0, 0)$ はほぼ自明に求まり<sup>38</sup>、

$$\begin{aligned} \epsilon_K(0, 0) &= -m_+, m_-, 3\sqrt{3}t_2 \pm \sqrt{M^2 + 9\lambda_R^2} \\ &= -\Delta - M, -\Delta + M, +\Delta - \sqrt{M^2 + 9\lambda_R^2}, +\Delta + \sqrt{M^2 + 9\lambda_R^2} \end{aligned} \quad (131)$$

となる。ただし、2行目ではエネルギー準位を $\Delta \gg M, \lambda_R$ の状況で小さい順に並べた<sup>39</sup>。

<sup>37</sup>もちろん、時間反転対称性があるのでK'点まわりではこの事情が逆転する。

<sup>38</sup>K点近傍の分散関係は、 $\epsilon = \epsilon_K(p_x, p_y)$ である。ただし、 $H_K(p_x, p_y)|\Psi_K\rangle = \epsilon_K(p_x, p_y)|\Psi_K\rangle$ 。  $H_K(p_x, p_y)$ には、 $H_1$ から来る線形の項も含まれる。 $\epsilon_K(p_x, p_y)$ の具体的な形については文献[23]のFIG. 1を参照。

<sup>39</sup>簡単のため、 $M, t_2, \Delta, \lambda_R$ は全て正の量であるとする。

系のトポロジカルな性質を掌るのは、トポロジカル質量項  $\Delta\sigma_z s_z$  ( $\tau_z = 1$  とした) である。そこで、 $M = 0, \lambda_R = 0$  の状況を第ゼロ近似に考えると、このとき  $K$  点で

$$\sigma_{xy}^{\uparrow(K)} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{h}, \quad \sigma_{xy}^{\downarrow(K)} = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{h} \quad (132)$$

が生じる。トポロジカル質量項が、スピン  $\uparrow$  とスピン  $\downarrow$  で逆符号になっているからである。その結果として、 $K$  点で有限のスピン Hall 伝導度

$$\sigma_{xy}^{(s)(K)} = \frac{\hbar}{2e} \left( \sigma_{xy}^{\uparrow(K)} - \sigma_{xy}^{\downarrow(K)} \right) = \frac{e}{4\pi} \quad (133)$$

が残る<sup>40</sup>。

さて、ここに BN 型質量項  $M$  と Rashba 相互作用  $\lambda_R$  を入れていくと、どうなるだろう？  $\pm\Delta$  の位置でそれぞれ二重縮退していたバンドの底あるいは頂上は、式 (131) で与えられる 4 つの位置に分裂する。式 (131) から明らかのように、 $M$  あるいは  $\lambda_R$  の値がある程度大きくなると、2 番目の準位と 3 番目の準位が逆転する。準位交差が起きる点は、

$$-\Delta + M = +\Delta - \sqrt{M^2 + 9\lambda_R^2} \quad (134)$$

となる点である。つまり、この点でギャップが閉じる。

一般に、トポロジカルな性質は系の断熱的な変化で不変に保たれる。トポロジカルな相転移点においては、バンドギャップが一度閉じる。いまの場合も実際そうなっていて、 $\Delta \gg M, |\lambda_R|$  のトポロジカル相が式 (134) の与える相境界上で消失する。この様子を  $\lambda_R/t_2$  を横軸、 $M/t_2$  を縦軸にとって図示すると、図 10(a) のような相図を描くことができる。式 (134) の与える放物線の下側

$$\frac{M}{t_2} < 3\sqrt{3} \left[ 1 - \frac{1}{12} \left( \frac{\lambda_R}{t_2} \right)^2 \right] \quad (135)$$

がトポロジカル相である<sup>41</sup>。

## 4.2 「ヘリカルな」端状態

内因的スピン軌道相互作用によるトポロジカル相が、式 (134) で与えられる相境界を以て消失することは、ここまで考えたような無限系ではなく、有限幅の「グラフェン・リボン」を作っても見ることできる。リボンの場合、低エネルギーでは、空間的にリボンの端に局在した端状態が系の輸送特性を支配する。その意味で、リボン系は実効的に 1 次元の系となる。

一般に、バルク (無限系) のトポロジカルに非自明な (Chern 数が有限になるというような) 性質は、エッジにギャップレスの端状態が現れることと 1 対 1 に対応しており、これをしばしば、バ

<sup>40</sup> もちろん、これが  $K'$  点からの寄与と足し合わさったときにちゃんと有限に残るかも考えなければいけないが、とりあえず今はその心配をしない。

<sup>41</sup> 相境界 (134) の向こう側がどうなっているかも、もちろん面白い問題である。 $\lambda_R = 0$  で  $M$  を入れていった場合、相境界のところまで式 (132) が破綻し、それ以降  $\sigma_{xy}^{\uparrow(K)}$  と  $\sigma_{xy}^{\downarrow(K)}$  は同符号になる。その結果、 $\sigma_{xy}^{(c)}$  と  $\sigma_{xy}^{(s)}$  の両方に対して  $K$  点と  $K'$  点の間でキャンセルが生じ、系は「自明な」絶縁体になる。一方、 $M = 0$  で  $\lambda_R$  を入れていった場合、今度は相境界を超えてもギャップが開かず、2 つの放物線が 1 点で接するようなバンド構造になる [23]。この状況は 2 層グラフェンの場合に似ている。



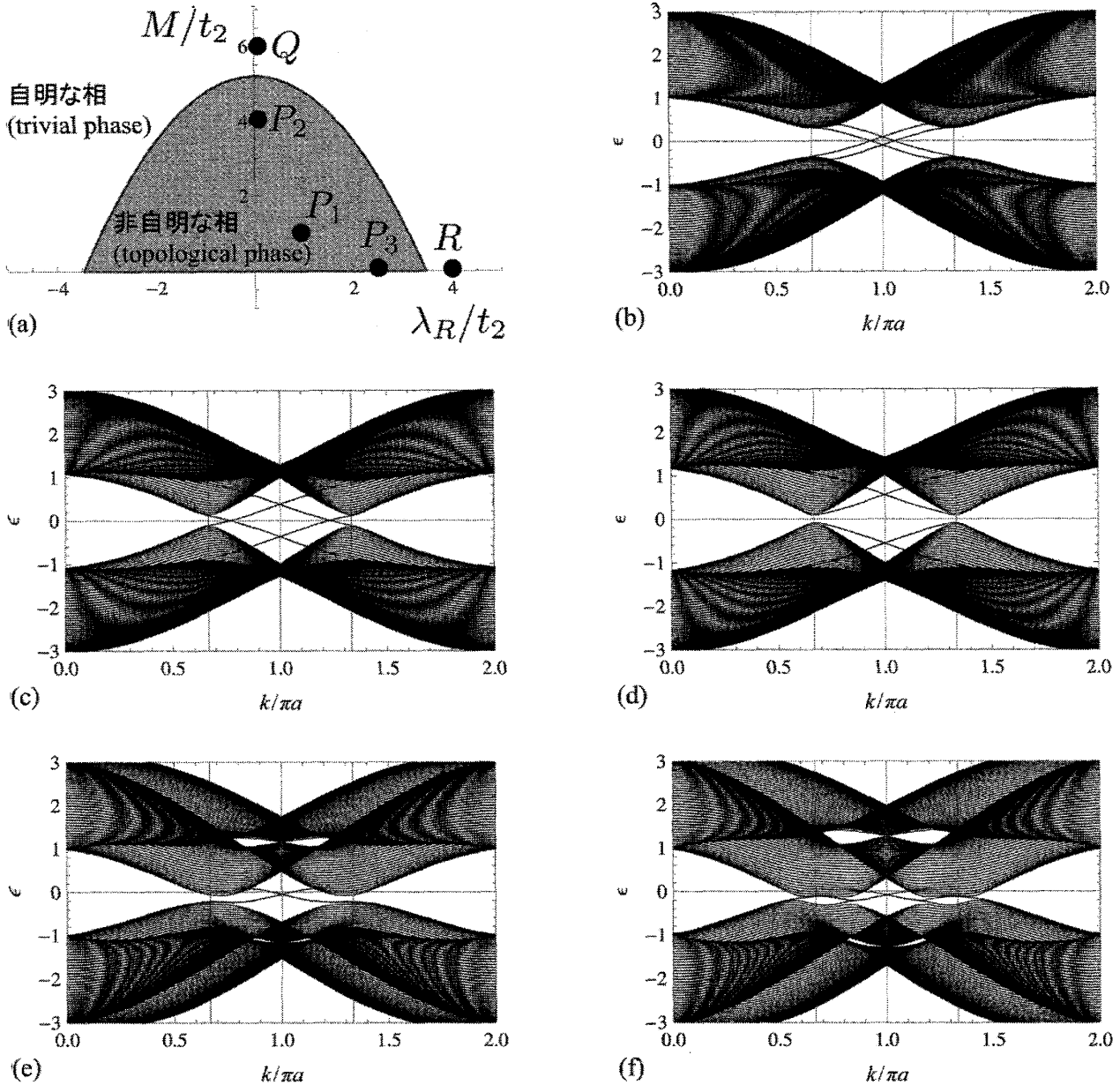


図 10: (a) 量子スピン Hall 絶縁体の  $(M/t_2, \lambda_R/t_2)$  平面における相図。式 (135) の与える放物線の下側がトポロジカル相である。 $M/t_2 < 0$  の部分はこのパネルを  $M/t_2 = 0$  で線対称に折り返したものになる。(b-f) 有限 (リボン) 系のスペクトル。ヘリカル端状態を示す (端の形状はジグザグ端)。BN 型質量項  $M$  と Rashba 相互作用  $\lambda_R$  の両方がある場合。 $M$  と  $\lambda_R$  の値は、(a) の相図中の点  $P_1, P_2, P_3, Q, R$  に対応。(b)  $P_1$ :  $M/t_2 = 1, \lambda_R/t_2 = 1$ 。有限の  $M$  と  $\lambda_R$  があるにも関わらず、上下の端にそれぞれ 1 ペアのヘリカル端状態が存在。ただし、 $\lambda_R$  により両者の縮退が解けている。(c)  $P_2$ :  $M/t_2 = 4, \lambda_R/t_2 = 0$ 。 $M$  だけが存在する場合。まだトポロジカル相。(d)  $Q$ :  $M/t_2 = 6, \lambda_R/t_2 = 0$ 。 $M/t_2 = 3\sqrt{3}$  で一度ギャップが閉じた後の様子。上下のバンド間を橋渡しするような gapless edge mode はもはや存在しない。自明な絶縁体相。(e)  $P_3$ :  $M/t_2 = 0, \lambda_R/t_2 = 3$ 。今度は  $\lambda_R$  だけある場合。トポロジカル相。 $M$  がないので 2 組のヘリカル・ペアは縮退している。(f)  $R$ :  $M/t_2 = 0, \lambda_R/t_2 = 4$ 。 $\lambda_R/t_2 = 2\sqrt{3}$  で topological gap が潰れた後の様子。ギャップは潰れたまま。バルクのエネルギー・スペクトルは 2 つの放物線が接する形で、2 層グラフェンと同様。

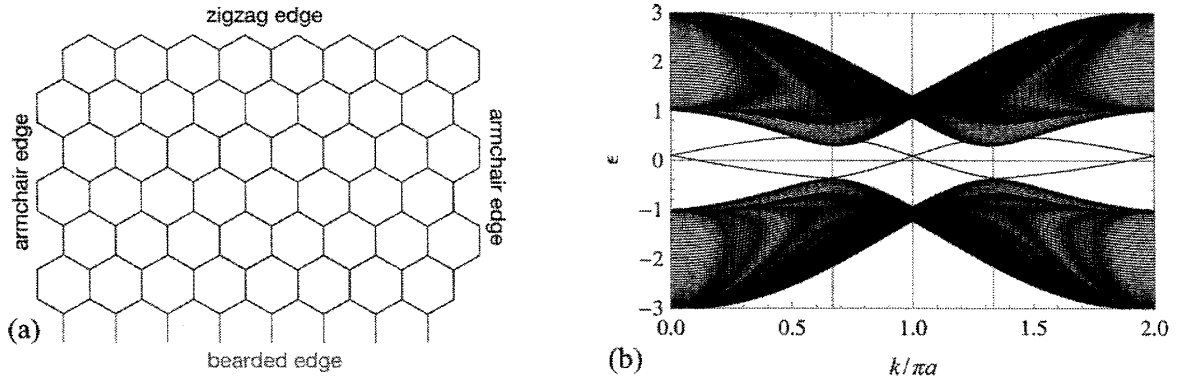


図 11: ひげ付き端状態。(a) 上がジグザグ端、横が armchair 端、下がひげ付き (bearded) 端。(b) ひげ付き端の分散関係。ヘリカル端状態の交わる位置に注目。一方の端だけにひげを付けたので、形状が変化した方の端に局在するヘリカル対だけ、交差する位置が  $k_x = \pi/a$  から  $k_x = 0$  に変わった。 $M/t_2$  および  $\lambda_R/t_2$  の値は図 10 (b) と同じ:  $M/t_2 = 1$ ,  $\lambda_R/t_2 = 1$ 。

ルク/エッジ対応と言う [21]。量子スピン Hall 系においても、(電荷の) 量子 Hall 効果の時と同様、端状態はバリステック伝導を担い、(量子化された) 伝導度に寄与する<sup>42</sup>。(電荷の) 量子 Hall 効果の場合、端状態は、特定のエッジに着目すれば一方向に流れていて、後方散乱に対して robust であるという意味でカイラル (chiral) であると言われる。量子スピン Hall 系の場合、時間反転対称性の要請から、一方のスピンと他方のスピンで流れる向き (つまり運動量) が逆の一对の端状態が現れる。これを Dirac 電子系における helicity ( $h \equiv \sigma \cdot \vec{p}/|\vec{p}|$ ) との類推から「ヘリカル (helical) な」端状態と呼んでいる。

ヘリカルな端状態は、Rashba 相互作用や、より一般に、時間反転対称性を破らないような弱い摂動に対しても一定の robustness を示す。図 10(b-f) は、Kane-Mele 模型のリボン系におけるエネルギー分散関係を、トポロジカル質量  $\Delta = 3\sqrt{3}t_2$  に加えて BN 型質量項  $M$  と Rashba 相互作用  $\lambda_R$  の全てが入った場合に示している。リボンは  $x$  軸方向 (水平方向) に延びているとして、上下 2つの端はいわゆるジグザグ (zigzag) 端 (図 11 参照) とした<sup>43</sup>。図 10(b,c) は図 10(a) の  $P_1$  点と  $P_2$  点 (トポロジカル相の内部)、図 10(d) は図 10(a) の  $Q$  点 (トポロジカル相の外、あるいはトポロジカルに自明な相) に対応している。

図 10(b) に注目しよう。 $k_x = \pm(2/3)\pi/a$  の近傍に認められる (massive な) Dirac 的な構造は、それぞれ  $K$  点と  $K'$  点を  $k_x$  軸に射影した名残りである。もし仮に端がなかったとすれば (バルクのバンド構造を単に横から眺めた場合)、上下 2つのバンド間の隔たりが  $k_x = \pm(2/3)\pi/a$  のところで最小になっていて、それでおしまいである。ヘリカルな端状態は、例えば  $K$  点の伝導帯の底付近から  $K'$  点の荷電子帯の頂上付近に向かって延びている (あるいはその逆)。ヘリカルな端状

<sup>42</sup>という言い方は、少し説明を要するだろう。文献 [4] に従い、Landauer-Büttiker 的なアプローチで、2端子および4端子測定で測ったときの伝導度を考えてみよう。まず、4端子測定で測った Hall 伝導度  $G_H$  あるいは  $G_4$  を考えると、もちろん電荷の輸送はない:  $G_H^{(c)} = 0$ 。端状態はスピンの輸送  $G_H^{(s)}$  にもみ寄与する。一方、2端子測定ではチャンネル数のみが問題となり、QSH 相でも  $G_2^{(c)} = 2e^2/h$  と、ヘリカルな端状態が電荷の輸送係数に直接顔を出す。詳細は文献 [4] を参照。

<sup>43</sup>edge の形状を例えば armchair 型に変更すると、ヘリカル端ペアの生えて来方、交差する位置なども変わる [22]。armchair 端の場合、バルクのスペクトルをエッジに射影するとき、 $K$  点と  $K'$  点は同じ点に重なってしまうため、ジグザグ端とは事情が異なってくる。

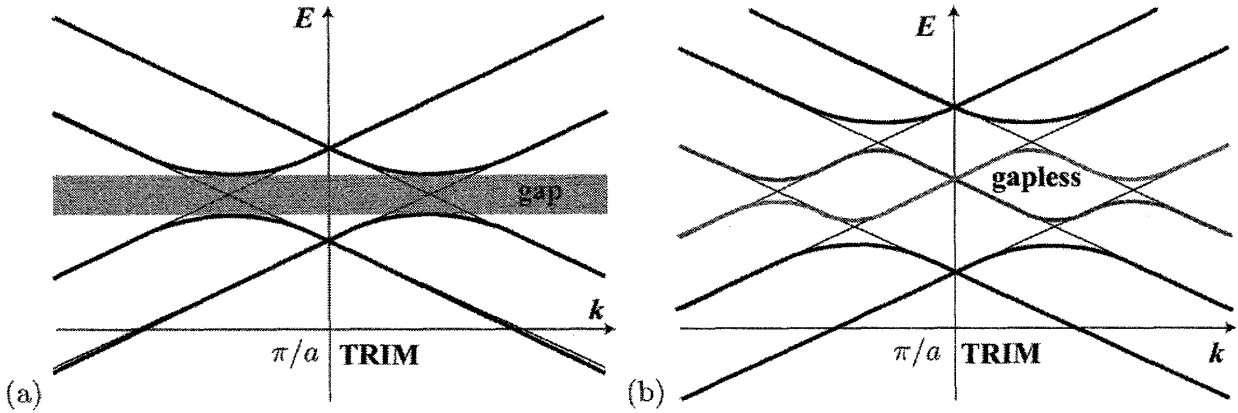


図 12: ヘリカル端状態の robustness. (a) 偶数 ( $N = 2$ ) ペアと (b) 奇数 ( $N = 3$ ) ペアの場合。一对のヘリカルな端状態は TRIM で交差する。この交差は、時間反転対称性を破らない摂動に対して robust である。一方、TRIM 以外の点における交差に関しては、一般には摂動によりギャップが開く。このとき、 $N$  が奇数だと ((b) の場合) 必ず左上 (下) から右下 (下) に抜ける gapless の端状態がある。

態は 4 本あるが、2 つずつが Kramers ペアを作っている。 $k_x = \pi/a + \delta k_x, \uparrow$  の状態を時間反転した状態は、BZ の対称性から  $k_x = \pi/a - \delta k_x, \downarrow$  である。また、リボン系では上下に端があることも思い出すと、ヘリカルな端状態は「端 1 つあたり 1 Kramers ペア」できている。このことは、対応する波動関数の空間依存性を具体的に見て確かめることができる。一对のヘリカルな端状態は  $k_x = \pi/a$  で交差している。これは、 $k_x = \pi/a$  が時間反転対称な運動量空間の点 (time-reversal invariant momentum, TRIM) だからである。TRIM においては、運動量空間上で時間反転の結果、自分自身に移るわけだから、Kramers ペアを形成する一对の端状態は必然的に交わることになる。つまり、この交差は時間反転対称性により保護されている。TRIM は、1 次元の BZ に  $k_x = 0$  と  $k_x = \pi/a$  の 2 点ある。図 10(b) の場合、両方のペアとも  $k_x = \pi/a$  で交差しているが、これは端の形状に依存した現象で、例えば片方の端に「ひげ」を付けただけでも、端のスペクトルは大局的な変化を受ける：図 11(b)。

ここで最も重要な点は、 $M = 0, \lambda_R = 0$  で QSHE 絶縁体を特徴づける「gapless な」ヘリカル端状態が、有限の  $M, \lambda_R$  の値でも (図 10(a) の放物線の下にある限り) そのまま robustに残っているということである。以上のような点に注意して図 10(d) を見てみよう。もちろん、図 10(b), (c) との決定的な違いは gapless の端状態がなくなったことである。

以上のように、Kane-Mele 模型  $H = H_0 + H_1 + H_2 + H_R$  のトポロジカル相の場合、端 1 つあたりいつも一对のヘリカル端状態があることが分かった。もう少しモデルを一般化して考えるとき、このようなヘリカル端状態の組が「端 1 つあたり整数組」あってもいいのではないだろうか？

バルクで言えば、これはスピン Hall 伝導率が

$$\sigma_{xy}^{(s)} = \frac{\hbar}{2e} (\sigma_{xy}^\uparrow - \sigma_{xy}^\downarrow) = N \frac{e}{2\pi}. \quad (136)$$

のように、整数  $N = 1, 2, 3, \dots$  に量子化されることを意味する。(  $N = 0$  は自明な場合に相当するので、とりあえず除いておく。) このとき、リボン系のエネルギー分散関係を模式的に描くと図

12 のようになる。つまり、 $N$  個の組のそれぞれ (= Kramers partners) 同士は TRIM で交差するが、他の組の端状態とは一般に任意の  $k_x$  のところで交わる。先程強調したように、TRIM のところにおける edge 状態間の準位交差がトポロジカルに保護されている反面、それ以外の場所での準位交差は、一般に時間反転対称性を破らないような弱い摂動で壊れてしまう (ギャップが空いてしまう)。図 12 においては、端状態の組の数  $N$  が (a) 偶数および (b) 奇数の場合にこの様子を示してある。一見して分かるように、(b) の場合、gapless のヘリカル端状態が 1 組だけ生き残って、系は (かろうじてだが) 「gapless のまま」なのに対し、(a) では、ギャップが開いてしまっている (つまり、後者の場合、系は「自明な」相にある)。

以上の考察から、時間反転対称性が  $N$  偶数と  $N$  奇数の場合を本質的に区別し、前者/後者の場合、系はトポロジカルに自明な/非自明な絶縁体と連続的につながっていることがわかる。 $Z_2$  トポロジカル絶縁体を特徴づける  $Z_2$  不変量  $I$  は、実際、この  $N$  の偶奇性に一致する。つまり  $N$  が偶数/奇数のとき、 $I = 0$  (自明) /  $I = 1$  (非自明) である [6]。

## 5 あとがき

本講義ノートを執筆するにあたって「 $Z_2$  絶縁体の … 理論」などという大それたタイトルをつけておきながら、 $Z_2$  不変量の姿がおぼろげに見えてきて、それに手を伸ばしかけたところで筆を置くことになった。従って、 $Z_2$  不変量の数学的な内容には全く立ち入ることができなかった。後者に関しては、より専門的な文献に譲る [6, 24]。

グラフェン研究から派生した (?)  $Z_2$  トポロジカル絶縁体の研究は、その後いくつかの方向に膨らみを見せている。まず、Kane と Mele が考えたのと同じ 2 次元のリボン系—しかし、六角格子ではなく正方格子の系 [25, 26]—で、ヘリカル端状態の存在が実験的に確認された [27]。その後、バルクが 3 次元の  $Z_2$  トポロジカル絶縁体、およびその表面状態に関する研究が精力的に行われている [28]。 $Z_2$  トポロジカル絶縁体の研究は関連する諸分野—トポロジカルな超伝導や超流動—における研究も刺激し、とりわけトポロジカル秩序という新しい切り口から見た分野横断的な研究がなされるようになった。トポロジカルな絶縁体とそうでない超伝導体 (あるいはその逆) の境界面に現れる Majorana 粒子が注目を浴び、非可換な統計性を持つ準粒子の制御可能性が議論されている [29]。後者は、トポロジカルに保護された量子計算 [30] を実現する可能性を秘めている。

## 参考文献

- [1] A.K. Geim and K.S. Novoselov, Nature Mater. **6**, 183 (2007).
- [2] 3 階建て構造は、例えば系の弱局在の性質 (symmetry class) を決める上でも本質的な役割をする: K.-I. Imura, Y. Kuramoto and K. Nomura, Europhys. Lett. **89**, 17009 (2010); Phys. Rev. B **80**, 085119 (2009).
- [3] H.B. Nielsen and M. Ninomiya, Phys. Lett. **105 B**, 219 (1981).
- [4] C.L. Kane and E.J. Mele, Phys. Rev. Lett. **95**, 146802 (2005).

- [5] Rashba 型スピン軌道相互作用に関しては、例えば以下の論文の Sec. II を参照: N. Hatano, R. Shirasaki and H. Nakamura, *Phys. Rev. A* **75**, 032107 (2007).
- [6] C.L. Kane and E.J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 226801 (2005).
- [7] F.D.M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **61** 2015 (1988).
- [8] J.J. Sakurai, “Modern Quantum Mechanics”, Addison Wesley, 1994. ちなみに「日本語訳」も吉岡書店から出ている。
- [9] C. Kittel, “Quantum Theory of Solids”, John Wiley, 1963.
- [10] 原論文は M.V. Berry, *Proc. Roy. Soc. London A* **392**, 45 (1984). 日本語の解説書として、倉辻比呂志, *パリティ物理学コース・クローズアップ『トポロジーと物理』*, 丸善, 1995.
- [11] T. Ando, *J. Phys. Soc. Jpn.* **74**, 777 (2005).
- [12] T. Ando, T. Nakanishi and R. Saito, *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 2857 (1998).
- [13] K. Nomura, M. Koshino and S. Ryu, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 146806 (2007).
- [14] 量子 Hall 効果に関しては、日本語の解説記事や教科書も複数存在する。代表的なものを挙げると、安藤恒也, *量子 Hall 効果—岩波講座-現代の物理学 18『局在・量子ホール効果・密度波』の第 II 部*, 岩波書店, 1993; 吉岡大二郎, *新物理学選書『量子ホール効果』*, 岩波書店, 1998.
- [15] S. Datta, “Electronic Transport in Mesoscopic Systems,” Cambridge University Press, 1995.
- [16] 平澤 梨良, 『多層グラフェンにおける輸送現象と磁氣的性質』修士論文, 東京工業大学, 2008.
- [17] “valleytronics”においては実際そういう状況が実現できると考える。例えば、次の論文を参照: A. Rycerz, J. Tworzydło and C.W.J. Beenakker, *Nature Physics* **3**, 172 (2007).
- [18] G.W. Semenoff, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2449 (1984).
- [19] X.G. Wen, “Quantum Field Theory of Many-body Systems: from the Origin of Sound to an Origin of Light and Electrons”, Oxford University Press, 2004.
- [20] D.J. Thouless, M. Kohmoto, P. Nightingale and M. den Nijs, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 405 (1982); M. Kohmoto, *Ann. Phys.* **160**, 343 (1985).
- [21] 御領 潤, 『ホール伝導度と位相不変量』, *物性研究* **88-3**, 413 (2007).
- [22] S. Murakami, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **176**, 279 (2008).
- [23] A. Yamakage, K.-I. Imura, J. Cayssol and Y. Kuramoto, *Europhys. Lett.* **87**, 47005 (2009).
- [24] L. Fu and C.L. Kane, *Phys. Rev. B* **76**, 045302 (2007).
- [25] B.A. Bernevig, T.A. Hugues and S.C. Zhang, *Science* **314**, 1757 (2006).
- [26] K.-I. Imura, A. Yamakage, S. Mao, A. Hotta and Y. Kuramoto, arXiv:1004.5019.
- [27] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L.W. Molenkamp, X.L. Qi and S.C. Zhang, *Science* **318**, 766 (2007).
- [28] M.Z. Hasan and C.L. Kane, arXiv:1002.3895.
- [29] L. Fu and C.L. Kane, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 096407 (2008).
- [30] A. Kitaev, *Ann. Phys.* **303**, 2 (2003).