

ホール伝導度と位相不変量

青山学院大学 理工学部 物理・数理学科 御領 潤¹

(2007年3月27日受理)

このノートは、2005年8月27日から29日にかけて油壺観光ホテルにて行われた、東京大学生産技術研究所羽田野研究室の夏合宿の講義ノートに手を加えたものである。簡単なモデルを用いて2次元電子系のホール伝導度と位相不変量の間関係を導出するテクニックを紹介するのが目的である。2次元における磁場中ブロッホ電子系およびディラック理論のホール伝導度と位相不変量の間関係について入門的なレビューが行われている。近年、これらの知識は異常ホール効果、スピンホール効果、異方的超伝導等の様々な分野で盛んに応用されている。最近の進展に関してはコメント程度しか与えられていないが、それらの論文をフォローするための計算力養成にお役に立てば幸いである。

1 イントロダクション

まず、ホール効果と空間の対称性の関係、および位相不変量に関する簡単な紹介を行う。以下、特に断らない限り2次元系を議論する。

1.1 ホール効果

ホール効果は、電流に対してその垂直な方向に電場が発生する現象である。式で書けば

$$J_x = \sigma_{xy} E_y \quad (1.1)$$

である。ここで、 J_x は電流密度であり、 σ_{xy} をホール伝導度という。

まず、対称性の観点から式(1.1)の特徴をみてみよう。

1. 時間反転対称性を破る。ここで、時間反転変換を $T: t \rightarrow -t$ とする。

まず、電流密度 $\vec{J} = e \langle d\vec{r}_e/dt \rangle$ は時間反転に対して

$$\vec{J} = e \left\langle \frac{d\vec{r}_e}{dt} \right\rangle \xrightarrow{T} -\vec{J} \quad (1.2)$$

¹E-mail: jungoryo@phys.aoyama.ac.jp

と符号を変える。また、マクスウェル方程式

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \rho_e \quad (1.3)$$

と電荷密度 ρ_e が時間反転で変わらないことに注意すると、電場 \vec{E} は時間反転不変であることがわかる。したがって式 (1.1) は時間反転対称性を破る。

2. パリティを破る。

まず、2次元におけるパリティ変換を定義しよう。3次元のパリティ変換はすべての座標の向きを入れ替えることによって定義される。仮に2次元でも同様に定義すると

$$x \rightarrow -x, \quad y \rightarrow -y, \quad t \rightarrow t$$

となる。ところが、この変換は座標系を180度回転させたことにほかならない (図1)。

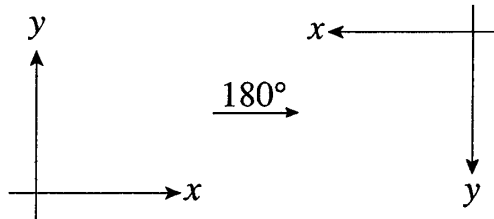


図1: 2次元面の180度回転。

そこでパリティ変換を次のようにしておく (図2):

$$P: \quad x \rightarrow -x, \quad y \rightarrow y, \quad t \rightarrow t.$$

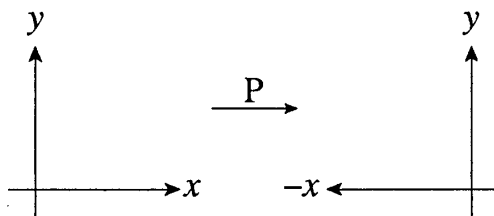


図2: 2次元面のパリティ変換。

すると、電流密度 \vec{J} は

$$P: \quad J_x \rightarrow -J_x, \quad J_y \rightarrow J_y$$

となる。また式 (1.3) は

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \rho_e \xrightarrow{P} -\frac{\partial}{\partial x} E_x^P + \frac{\partial}{\partial y} E_y^P = \rho_e$$

となる。ここで、 E_x^P, E_y^P は変換後の電場の成分である。マクスウェル方程式の不変性から

$$E_x^P = -E_x, \quad E_y^P = E_y$$

であることがわかる。したがって式 (1.1) はパリティも破る。

3. $\vec{J} \perp \vec{E}$ より仕事ゼロ。よって、エネルギー散逸がない。

着目すべき点は、パリティ P の破れと時間反転対称性 T の破れである。P や T の破れを引き起こす原因のひとつに外部磁場があげられる。磁場 \vec{B} は、P 変換や T 変換で

$$\vec{B} \xrightarrow{P,T} -\vec{B}$$

である。これは、マクスウェル方程式

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

において

$$P: \partial_x \rightarrow -\partial_x, \quad \partial_y \rightarrow \partial_y, \quad \partial_t \rightarrow \partial_t$$

であるから、

$$\vec{B} \xrightarrow{P} \vec{B}^P = -\vec{B} \quad (1.4)$$

となることがわかる。時間反転に関しては

$$T: t \rightarrow -t, \quad \vec{\nabla} \rightarrow \vec{\nabla}, \quad \vec{E} \rightarrow \vec{E}$$

となるので、

$$\vec{B} \xrightarrow{T} \vec{B}^T = -\vec{B} \quad (1.5)$$

となることが分かる。

P および T の破れからホール効果が生じる。特に、(後に詳しく述べることになるが) 2次元電子系で励起エネルギーにギャップが存在する場合は、ホール伝導度が普遍定数 $e^2/2\pi\hbar c$ の整数倍に量子化される。すなわち量子ホール効果が生じる [1]。

2次元 Dirac 理論の質量項も、磁場と同様 P および T を破る [2]。この場合も量子ホール効果が現れる (励起ギャップの条件はゼロでない質量項があることから自然に満たされている)。量子ホール効果は磁場下の系特有の現象ではないことに注意しよう。蜂の巣格子系における無磁場の量子ホール効果を指摘した論文として、文献 [3] も有名である。

1.2 位相不変量

位相不変量とは、関数を持つトポロジカルな性質、すなわち関数形の連続変形に対しても robust に生き残る性質を特徴づける量である [4]。例として genus 数 g (曲面に開いている穴の数) がある (図 3)。すなわち、位相不変量は関数形の詳細によらず、その大局

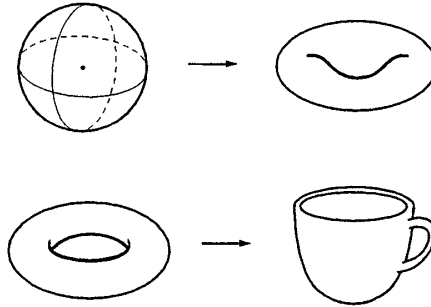


図 3: 曲面に開いている穴の数は、連続的な変形に対して不変である。

的な構造のみによる。また、とびとびに量子化された値を持つという特徴も見逃さない。

位相不変量が物理量として顔を出す例として最も有名なものの 1 つに量子ホール効果がある。位相不変量とホール伝導度の関係を導くのがこのノートの目的である。

第 2 節では、磁場中 2 次元ブロッホ電子系のホール伝導度がチャーン数と呼ばれる位相不変量で表されることを紹介する。オリジナルは文献 [5, 6] である。第 3 節では、2 次元ディラック系の無磁場で生ずる量子ホール効果と位相不変量との関係を議論する [2]。なお、以後、 $\hbar = c = 1$ とする。

2 磁場中の 2 次元ブロッホ電子系のホール伝導度

2.1 ブロッホの定理 (磁場がない場合)

2 次元周期ポテンシャル中の電子を考える。ここで、簡単のために周期ポテンシャルは正方形であるとし、格子定数を a とする (図 4)。

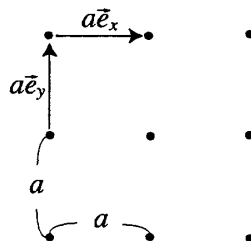


図 4: 格子定数 a の結晶格子。

まず、磁場 $\vec{B} = 0$ とする。ハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}$ は弱束縛近似では

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{x})$$

である。また、ポテンシャル $U(\vec{x})$ は M, N を整数として

$$U(\vec{x}) = U(\vec{x} + Ma\vec{e}_x + Na\vec{e}_y)$$

を満たすものとする。

ここで、並進オペレーター $T_{\Delta\vec{x}} = e^{i\Delta\vec{x}\cdot\hat{p}}$ とハミルトニアンの交換関係を調べてみよう。
 $\Delta\vec{x} = \vec{R}_{MN} = Ma\vec{e}_x + Na\vec{e}_y$ のとき

$$[\hat{\mathcal{H}}, T_{\Delta\vec{x}}] = [U(\vec{x}), T_{\Delta\vec{x}}] = U(\vec{x}) - U(\vec{x} + \vec{R}_{MN}) = 0 \quad (2.1)$$

となる。したがって、

$$\begin{cases} \hat{\mathcal{H}}\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) &= E_{\vec{k}}\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) \\ T_{\vec{R}_{1,1}}\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) &= e^{i\vec{R}_{1,1}\cdot\vec{k}}\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) \end{cases} \quad (2.2)$$

なる同時固有関数 $\psi_{\vec{k}}(\vec{x})$ を考えることができる。ここで、 $M = N = 1$ とした。

$T_{\vec{R}_{1,1}}$ の固有値 $e^{iak_x + iak_y}$ の独立な自由度として

$$\begin{cases} -\frac{\pi}{a} \leq k_x \leq \frac{\pi}{a} \\ -\frac{\pi}{a} \leq k_y \leq \frac{\pi}{a} \end{cases} \quad (2.3)$$

ととることができる。この領域を（第1）ブリルアンゾーンという。

また、

$$\begin{cases} \psi_{\vec{k}}(\vec{x}) &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}u_{\vec{k}}(\vec{x}) \\ \hat{\mathcal{H}} &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}\hat{\mathcal{H}}_{\vec{k}}e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \end{cases} \quad (2.4)$$

とおくと式 (2.2) より

$$\hat{\mathcal{H}}_{\vec{k}}u_{\vec{k}}(\vec{x}) = E_{\vec{k}}u_{\vec{k}}(\vec{x}) \quad (2.5)$$

が成り立つ。さらに、

$$T_{\vec{R}_{MN}}\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = e^{i\vec{R}_{MN}\cdot\vec{k}}\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = e^{i\vec{R}_{MN}\cdot\vec{k}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}u_{\vec{k}}(\vec{x}) \quad (2.6)$$

であり、他方

$$T_{\vec{R}_{MN}}\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{x} + \vec{R}_{MN}) = e^{i\vec{R}_{MN}\cdot\vec{k}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}u_{\vec{k}}(\vec{x} + \vec{R}_{MN}) \quad (2.7)$$

であるから、

$$u_{\vec{k}}(\vec{x} + \vec{R}_{MN}) = u_{\vec{k}}(\vec{x}) \quad (2.8)$$

が成り立つ。これはブロッホの定理として知られている。

2.2 磁氣的ブリルアンゾーンとブロッホの定理

次に、 z 軸方向に一様磁場 $\vec{B} = B\vec{e}_z$ をかける。このとき、ハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m}(\vec{p} + e\vec{A})^2 + U(\vec{x}) \quad (2.9)$$

である。ここで、ベクトルポテンシャル \vec{A} は

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{x} \times \vec{B}, \quad (2.10)$$

ととることとする。このゲージは対称ゲージと呼ばれる。もちろん、他のゲージをとっても物理量に対しては同じ結果が得られる。

ハミルトニアンを \vec{R}_{MN} だけ並進変換してみる。すると、

$$\begin{aligned} T_{\vec{R}_{MN}} \hat{\mathcal{H}} &= \left[\frac{1}{2m} \left(\hat{p} + e\vec{A} + \frac{e}{2}\vec{R}_{MN} \times \vec{B} \right)^2 + U(\vec{x} + \vec{R}_{MN}) \right] T_{\vec{R}_{MN}} \\ &\neq \hat{\mathcal{H}} T_{\vec{R}_{MN}} \end{aligned} \quad (2.11)$$

となり、並進不変でないことが解る。これは、 \vec{A} が \vec{x} にあらわに依存しているからである。そこで、次のようなオペレーターを定義しよう：

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{\vec{R}_{MN}} &= e^{i\vec{R}_{MN} \cdot (\hat{p} - e\vec{A})} \\ &= e^{i\vec{R}_{MN} \cdot (\hat{p} - \frac{e}{2}\vec{x} \times \vec{B})}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

すると

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{\vec{R}_{MN}} \hat{\mathcal{H}} &= e^{i\vec{R}_{MN} \cdot (\hat{p} - \frac{e}{2}\vec{x} \times \vec{B})} \left[\frac{1}{2m} \left(\hat{p} + \frac{e}{2}\vec{x} \times \vec{B} \right)^2 + U(\vec{x}) \right] \\ &= e^{i\vec{R}_{MN} \cdot \hat{p} - i\frac{e}{2}\vec{x} \cdot (\vec{B} \times \vec{R}_{MN})} \left[\frac{1}{2m} \left(\hat{p} + \frac{e}{2}\vec{x} \times \vec{B} \right)^2 + U(\vec{x}) \right] \\ &= \left[\frac{1}{2m} \left(\hat{p} + e\vec{A} + \frac{e}{2}\vec{R}_{MN} \times \vec{B} + \frac{e}{2}\vec{B} \times \vec{R}_{MN} \right)^2 + U(\vec{x}) \right] \tilde{T}_{\vec{R}_{MN}} \\ &= \hat{\mathcal{H}} \tilde{T}_{\vec{R}_{MN}} \end{aligned} \quad (2.13)$$

となり交換する。ポイントは、 \vec{A} のあらわな \vec{x} 依存性により生じた項をゲージ変換の自由度を用いて吸収したことにある。

ここで、図4にある周期ポテンシャルの単位胞のまわりのふたつの経路 I, II それぞれに沿った \tilde{T} による並進変換を比べてみると、

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{a\vec{e}_x} \tilde{T}_{a\vec{e}_y} &= e^{ia\vec{e}_x \cdot (\vec{p} - e\vec{A})} e^{ia\vec{e}_y \cdot (\vec{p} - e\vec{A})} \\ &= e^{ia(\hat{p}_x - \frac{e}{2}yB)} e^{ia(\hat{p}_y + \frac{e}{2}xB)} \\ &= e^{ia^2eB} \tilde{T}_{a\vec{e}_y} \tilde{T}_{a\vec{e}_x} \end{aligned} \quad (2.14)$$

となり、交換しない。これはアハラノフ-ボーム効果である (図 5)。式 (2.14) を単位胞を通る磁束 $\Phi = Ba^2$ 、および単位磁束量子 $\Phi_0 = 2\pi/e$ を用いて書けば、

$$\tilde{T}_{a\vec{e}_x} \tilde{T}_{a\vec{e}_y} = e^{2\pi i \frac{\Phi}{\Phi_0}} \tilde{T}_{a\vec{e}_y} \tilde{T}_{a\vec{e}_x} \quad (2.15)$$

となる。ここで、 $\Phi/\Phi_0 = p/q$ (=有理数) である場合は、一方向を q 倍した経路について

$$\tilde{T}_{a\vec{e}_x} \tilde{T}_{qa\vec{e}_y} = \tilde{T}_{qa\vec{e}_y} \tilde{T}_{a\vec{e}_x} \quad (2.16)$$

が可換になる (図 6)。

以上により

$$[\hat{\mathcal{H}}, \tilde{T}_{a\vec{e}_x}] = [\hat{\mathcal{H}}, \tilde{T}_{qa\vec{e}_y}] = [\tilde{T}_{a\vec{e}_x}, \tilde{T}_{qa\vec{e}_y}] = 0 \quad (2.17)$$

が成り立つ。このような不変性は磁気並進不変性と呼ばれている。したがって、ブロッホの定理の拡張として

$$\begin{cases} \hat{\mathcal{H}}\Psi_{m\vec{k}}(\vec{x}) &= E_{m\vec{k}}\Psi_{m\vec{k}}(\vec{x}) \\ \tilde{T}_{a\vec{e}_x}\Psi_{m\vec{k}}(\vec{x}) &= e^{iak_x}\Psi_{m\vec{k}}(\vec{x}) \\ \tilde{T}_{qa\vec{e}_y}\Psi_{m\vec{k}}(\vec{x}) &= e^{iqak_y}\Psi_{m\vec{k}}(\vec{x}) \end{cases} \quad (2.18)$$

となる同時固有関数 $\Psi_{m\vec{k}}(\vec{x})$ が存在する。ここで、添字 m はバンドを意味する。このとき、ブリルアンゾーンは

$$\begin{cases} -\frac{\pi}{a} \leq k_x \leq \frac{\pi}{a} \\ -\frac{\pi}{qa} \leq k_y \leq \frac{\pi}{qa} \end{cases} \quad (2.19)$$

であることがわかる。これを磁気ブリルアンゾーン (Magnetic Brillouin Zone, 略して MBZ) という。

式 (2.19) からわかるように、ブリルアンゾーンと比べて MBZ は面積が $1/q$ 倍になっている。但し、自由度が $1/q$ 倍になったわけではなく、1つのエネルギーバンドが q 個のバンドに分かれる：

$$E_{\vec{k}} \quad (\vec{k} \text{ の範囲は式 (2.3)}) \xrightarrow{\text{分裂}} E_{m\vec{k}} \quad (\vec{k} \text{ の範囲は式 (2.19)、} m = 1, 2, \dots, q). \quad (2.20)$$

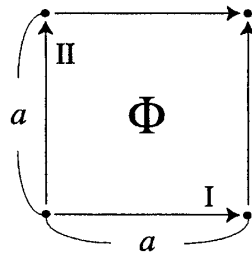


図 5: 周期ポテンシャルの単位胞のまわりの 2 つの経路 I と経路 II。

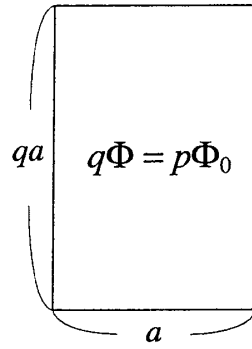


図 6: y 軸方向のセルの長さが qa になった単位胞。

式 (2.2) と同様に、

$$\begin{cases} \Psi_{m\vec{k}}(\vec{x}) &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} u_{m\vec{k}}(\vec{x}) \\ \hat{\mathcal{H}} &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \hat{\mathcal{H}}_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \end{cases} \quad (2.21)$$

とおくと

$$\hat{\mathcal{H}}_{\vec{k}} u_{m\vec{k}}(\vec{x}) = E_{m\vec{k}} u_{m\vec{k}}(\vec{x}) \quad (2.22)$$

が成り立つ。ここで、 $\{|u_{m\vec{k}}\rangle \mid m = 1, 2, \dots, q\}$ は \vec{k} を固定した Hilbert 空間で正規直交完全系をなす。すなわち

$$\begin{cases} \langle u_{m\vec{k}} | u_{n\vec{k}} \rangle = \delta_{mn} \\ \sum_m |u_{m\vec{k}}\rangle \langle u_{m\vec{k}}| = \hat{1} \end{cases} \quad (2.23)$$

である。

式 (2.18) と式 (2.21) より

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{a\vec{e}_x} \Psi_{m\vec{k}}(\vec{x}) &= e^{iak_x} \Psi_{m\vec{k}}(\vec{x}) \\ &= e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}+a\vec{e}_x)} u_{m\vec{k}}(\vec{x}) \end{aligned} \quad (2.24)$$

である。また、式 (2.12) より

$$\tilde{T}_{a\vec{e}_x} \Psi_{m\vec{k}}(\vec{x}) = e^{ia(\hat{p}_x - \frac{e}{2}yB)} \Psi_{m\vec{k}}(\vec{x}) \quad (2.25)$$

$$= e^{-i\frac{ae}{2}yB} \Psi_{m\vec{k}}(\vec{x} + a\vec{e}_x) \quad (2.26)$$

$$= e^{-i\frac{aeB}{2}y} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}+a\vec{e}_x)} u_{m\vec{k}}(\vec{x} + a\vec{e}_x) \quad (2.27)$$

である。したがって、

$$u_{m\vec{k}}(\vec{x} + a\vec{e}_x) = e^{i\frac{aeB}{2}y} u_{m\vec{k}}(\vec{x}) \quad (2.28)$$

であり、同様に

$$u_{m\vec{k}}(\vec{x} + qa\vec{e}_y) = e^{-i\frac{qaeb}{2}x} u_{m\vec{k}}(\vec{x}) \quad (2.29)$$

であることがわかる。ゼロ磁場のブロッホの定理の場合と比べ、余分な位相がつくことに注目されたい。この余分な位相はゲージの取り方に依存する。

2.3 断熱近似とベリー位相

この節ではいったんブロッホ電子系から離れて、断熱近似とベリー位相のお話をする。

断熱近似は、系のハミルトニアンがゆっくりと時間変化する場合に使われる近似法である。 t をパラメタと見なし、時間 t を固定したハミルトニアンの固有状態を $\Phi_\alpha(\vec{x}; t)$ とする。(ここで α は系がもつ良い量子数の組で、エネルギー準位のほかにも、系が並進対称な場合は(結晶)運動量、回転対称な場合は各運動量を指定するインデックスの組み合わせである。)すなわち、 $\Phi_\alpha(\vec{x}; t)$ は

$$\mathcal{H}(t)\Phi_\alpha(\vec{x}; t) = E_\alpha(t)\Phi_\alpha(\vec{x}; t) \quad (2.30)$$

を満たす解であるとする。

ここで、時間変化が十分ゆっくりで、かつ各時刻において異なる準位間のギャップは十分大きいとする(図7)。このような場合、準位間遷移は起こらない(断熱定理)。すなわち、時刻 $t=0$ に固有エネルギー $E_\alpha(0)$ を持つ状態 $\Phi_\alpha(\vec{x}; 0)$ は、時刻 t には固有エネルギー $E_\alpha(t)$ を持つ状態 $\Phi_\alpha(\vec{x}; t)$ となる。よって、初期条件 $\Psi(t, \vec{x}) = \Phi_\alpha(\vec{x}; 0)$ の下で、断熱近似による解は

$$\Psi(t, \vec{x}) \simeq e^{-i\int_0^t dt' E_\alpha(t') + i\gamma_\alpha(t)} \Phi_\alpha(\vec{x}; t) \quad (2.31)$$

と書ける。ここで、位相因子

$$e^{-i\int_0^t dt' E_\alpha(t') + i\gamma_\alpha(t)}$$

の前者 $e^{-i\int_0^t dt' E_\alpha(t')}$ は動的位相因子と呼ばれている。また、後者 $e^{i\gamma_\alpha(t)}$ における $\gamma_\alpha(t)$ は式(2.31)を時間依存するシュレーディンガー方程式に代入すると求まる。結果は

$$\gamma_\alpha(t) = \int_0^t dt' \left\langle \Phi_\alpha(t') \left| \frac{\partial}{\partial t'} \right| \Phi_\alpha(t') \right\rangle$$

である。この量はハミルトニアンの各瞬間の固有状態 $\Phi_\alpha(t)$ の位相の選び方(ゲージの選択)に依存する。ゲージの選び方は任意であるため、 $\gamma_\alpha(t)$ は非物理的な量である。実際、 $\Phi'_\alpha(t) = e^{i\delta_\alpha(t)}\Phi_\alpha(t)$ とすると、新たなゲージの選び方に対する任意位相 $\gamma'_\alpha(t)$ と、元

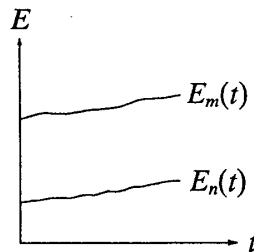


図 7: エネルギーの時間変化の概念図。

のゲージの選び方に対する任意位相 $\gamma_\alpha(t)$ の間には

$$\begin{aligned}\gamma'_\alpha(t) &= \int_0^t dt' \left\langle \Phi'_\alpha(t') \left| \frac{\partial}{\partial t'} \right| \Phi'_\alpha(t') \right\rangle \\ &= \gamma_\alpha(t) + \delta_\alpha(t) - \delta_\alpha(0)\end{aligned}\quad (2.32)$$

という関係があることがわかる。ところが断熱過程が時間に関して周期的であるとき、周期を T として 1 周期分の時間積分

$$\gamma_\alpha(T) = \oint dt \left\langle \Phi_\alpha(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| \Phi_\alpha(t) \right\rangle \quad (2.33)$$

を考えると、これはゲージの選び方によらない量となることが式 (2.32) からわかる。 $t=0$ と $t=T$ ではハミルトニアンが等価であるため、 $\delta_\alpha(0) = \delta_\alpha(T)$ となるからである (ゲージ選択に用いる $\delta_\alpha(t)$ は一価であるため、 2π の不定性はない)。ゲージ選択に依存しない $\gamma_\alpha(T)$ はベリー位相 [7] と呼ばれる。任意位相 $\gamma_\alpha(t)$ と混同しないよう、注意されたい。

特に、系がパラメタ $\vec{g}(t)$ を通して時間依存している場合。すなわち、 $|\Phi_\alpha(t)\rangle = |\Phi_\alpha(\vec{g}(t))\rangle$ となっている場合を考える。パラメタ空間中のベクトル場

$$\vec{A}(\vec{g}) = \left\langle \Phi_\alpha(\vec{g}) \left| \frac{\partial}{\partial \vec{g}} \right| \Phi_\alpha(\vec{g}) \right\rangle \quad (2.34)$$

を導入すると [6, 8]、ベリー位相は閉経路に沿ったベクトル場の線積分

$$\oint d\vec{g} \cdot \vec{A}(\vec{g}) \quad (2.35)$$

で与えられる。この積分は一般に経路による。

ベリー位相に関しては、文献 [9] に詳しいレビューと数多くの参考文献が与えられている。また、最近日本物理学会誌に掲載された藤川氏の解説 [10] も参照されたい。

2.4 ホール伝導度とチャーン数

磁場中プロッホ電子系の話に戻そう。以下では、断熱近似を用いてホール伝導度を計算する。

y 軸方向に一様電場 E_y をかけた状況を考えよう。このとき、ベクトルポテンシャル \vec{A} は

$$\vec{A}(t) = \vec{A} - \vec{e}_y E_y t \quad (2.36)$$

ととればよい。したがって、ハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \frac{1}{2m} (\hat{p} + e\vec{A} - \vec{e}_y e E_y t)^2 + U(\vec{x}) \quad (2.37)$$

となる。時間に依存するシュレーディンガー方程式

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t, \vec{x}) = \hat{\mathcal{H}}(t)\Psi(t, \vec{x}) \quad (2.38)$$

を解くために、 $E_y \ll 1$ として断熱近似を用いる。

ハミルトニアンに新たに加えた電場の項 $-\vec{e}_y E_y t$ は磁気並進対称性を壊さない。したがって、結晶運動量 \vec{k} は良い量子数である。ハミルトニアンの瞬間的な固有状態は

$$\hat{\mathcal{H}}(t)\Phi_{m\vec{k}}(\vec{x}; t) = E_{m\vec{k}}(t)\Phi_{m\vec{k}}(\vec{x}; t) \quad (2.39)$$

より得られる。 $u_{m\vec{k}}(t)$ と $\hat{\mathcal{H}}_{\vec{k}}(t)$ を

$$\begin{cases} \Phi_{m\vec{k}}(t) &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}u_{m\vec{k}}(t) \\ \hat{\mathcal{H}}(t) &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}\hat{\mathcal{H}}_{\vec{k}}(t)e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \end{cases}$$

で定義すると、

$$\hat{\mathcal{H}}_{\vec{k}}(t)u_{m\vec{k}}(t) = E_{m\vec{k}}(t)u_{m\vec{k}}(t)$$

が成り立つ。また、

$$\hat{\mathcal{H}}_{\vec{k}}(t) = \frac{1}{2m}(\hat{p} + \vec{k} + e\vec{A} - \vec{e}_y e E_y t)^2 + U(\vec{x}) \quad (2.40)$$

$$= \hat{\mathcal{H}}_{k_x, k_y - e E_y t} \quad (2.41)$$

と書くことができる。したがって、

$$\begin{cases} u_{m\vec{k}}(t) &= u_{m; k_x, k_y - e E_y t} \\ E_{m\vec{k}}(t) &= E_{m; k_x, k_y - e E_y t} \end{cases} \quad (2.42)$$

とすることができる。 k_y を $2\pi/qa$ ずらした状態は元の状態と等価であるから、この系は時間に対して周期的に変化し、その時間周期 T は

$$eE_y T = \frac{2\pi}{qa} \quad (2.43)$$

から $T = 2\pi/eE_y qa$ と求まる。

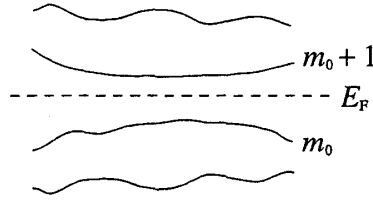
以上の性質を用いて、電流密度の期待値を求める。電流密度オペレーターは

$$\hat{\vec{J}} = \frac{e}{i}[\hat{\vec{x}}, \hat{\mathcal{H}}] \quad (2.44)$$

である。したがって、その期待値は

$$\langle \hat{J}_x \rangle = \sum_{m \leq m_0} \int_{\text{MBZ}} \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} \langle \Psi_{m\vec{k}}(t) \left| \frac{e}{i} [\hat{x}, \hat{\mathcal{H}}] \right| \Psi_{m\vec{k}}(t) \rangle \quad (2.45)$$

より求まる。ここで、 m_0 はフェルミエネルギー E_F 以下の最大エネルギーを持つバンドである (図 8)。また \vec{k} の積分範囲は MBZ である。

図 8: フェルミエネルギー E_F とバンドの関係。

式 (2.45) を変形すると

$$\langle \hat{J}_x \rangle = \sum_{m \leq m_0} \int_{\text{MBZ}} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \left[e \langle \Psi_{m\vec{k}}(t) | \hat{x} | \dot{\Psi}_{m\vec{k}}(t) \rangle + e \langle \dot{\Psi}_{m\vec{k}}(t) | \hat{x} | \Psi_{m\vec{k}}(t) \rangle \right] \quad (2.46)$$

$$= \sum_{m \leq m_0} \int_{\text{MBZ}} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} e \left[\langle u_{m\vec{k}}(t) | \hat{x} | \dot{u}_{m\vec{k}}(t) \rangle + \text{h.c.} \right] \quad (2.47)$$

$$= \sum_{m \leq m_0} \int_{\text{MBZ}} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \sum_n e \left[\langle u_{m\vec{k}}(t) | \hat{x} | u_{n\vec{k}}(t) \rangle \langle u_{n\vec{k}}(t) | \dot{u}_{m\vec{k}}(t) \rangle + \text{h.c.} \right] \quad (2.48)$$

となる。ここで、第 1 行目 (2.46) では

$$\hat{\mathcal{H}} | \Psi_{m\vec{k}}(t) \rangle = i \frac{\partial}{\partial t} | \Psi_{m\vec{k}}(t) \rangle \quad (2.49)$$

を使った。第 2 行目 (2.47) は式 (2.31)

$$| \Psi_{m\vec{k}}(t) \rangle \simeq e^{-i \int_0^t dt' E_{m\vec{k}}(t')} e^{i \gamma_{m\vec{k}}(t)} e^{i \vec{k} \cdot \mathbf{x}} | u_{m\vec{k}}(t) \rangle \quad (2.50)$$

を代入した。さらに、第 3 行目 (2.48) は、恒等演算子

$$\sum_m | u_{m\vec{k}}(t) \rangle \langle u_{m\vec{k}}(t) | = \hat{1} \quad (2.51)$$

を挿入した。

さて、関係式

$$0 = \frac{d}{dt} \langle u_{m\vec{k}}(t) | u_{m\vec{k}}(t) \rangle = \langle u_{m\vec{k}}(t) | \dot{u}_{m\vec{k}}(t) \rangle + \langle \dot{u}_{m\vec{k}}(t) | u_{m\vec{k}}(t) \rangle \quad (2.52)$$

に注意すると式 (2.48) で $m = n$ の項はゼロになる。一方、 $m \neq n$ の項は

$$\begin{aligned} \langle u_{m\vec{k}}(t) | \hat{x} | u_{n\vec{k}}(t) \rangle &= \frac{1}{E_{n\vec{k}}(t) - E_{m\vec{k}}(t)} \langle u_{m\vec{k}}(t) | [\hat{x}, \hat{\mathcal{H}}_{\vec{k}}] | u_{n\vec{k}}(t) \rangle \\ &= \frac{1}{E_{n\vec{k}}(t) - E_{m\vec{k}}(t)} \left\langle u_{m\vec{k}}(t) \left| i \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}_{\vec{k}}(t)}{\partial k_x} \right| u_{n\vec{k}}(t) \right\rangle \end{aligned} \quad (2.53)$$

$$= \frac{-i}{E_{n\vec{k}}(t) - E_{m\vec{k}}(t)} \left[\left\langle \frac{\partial u_{m\vec{k}}(t)}{\partial k_x} \right| \hat{\mathcal{H}}_{\vec{k}}(t) \right| u_{n\vec{k}}(t) \rangle + \left\langle u_{m\vec{k}}(t) \right| \hat{\mathcal{H}}_{\vec{k}}(t) \left| \frac{\partial u_{n\vec{k}}(t)}{\partial k_x} \right\rangle \right] \quad (2.54)$$

$$= \frac{-i}{E_{n\vec{k}}(t) - E_{m\vec{k}}(t)} \left[E_{n\vec{k}}(t) \left\langle \frac{\partial u_{m\vec{k}}(t)}{\partial k_x} \right| u_{n\vec{k}}(t) \right\rangle + E_{m\vec{k}}(t) \left\langle u_{m\vec{k}}(t) \left| \frac{\partial u_{n\vec{k}}(t)}{\partial k_x} \right\rangle \right] \quad (2.55)$$

$$= -i \left\langle \frac{\partial u_{m\vec{k}}(t)}{\partial k_x} \right| u_{n\vec{k}}(t) \rangle = i \left\langle u_{m\vec{k}}(t) \left| \frac{\partial u_{n\vec{k}}(t)}{\partial k_x} \right\rangle \quad (2.56)$$

となる。ここで、第2行目 (2.53) は

$$[\hat{x}, \hat{\mathcal{H}}_{\vec{k}}(t)] = i \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}_{\vec{k}}(t)}{\partial \hat{p}_x} = i \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}_{\vec{k}}(t)}{\partial k_x} \quad (2.57)$$

を使い、第3行目 (2.54) は

$$\frac{\partial}{\partial k_x} \langle u_{m\vec{k}}(t) | \hat{\mathcal{H}} | u_{n\vec{k}}(t) \rangle = 0 \quad (2.58)$$

を利用した。さらに第5行目 (2.56) は

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial}{\partial k_x} u_{m\vec{k}}(t) \middle| u_{n\vec{k}}(t) \right\rangle &= \frac{\partial}{\partial k_x} \langle u_{m\vec{k}}(t) | u_{n\vec{k}}(t) \rangle - \left\langle u_{m\vec{k}}(t) \middle| \frac{\partial u_{n\vec{k}}(t)}{\partial k_x} \right\rangle \\ &= - \left\langle u_{m\vec{k}}(t) \middle| \frac{\partial u_{n\vec{k}}(t)}{\partial k_x} \right\rangle \end{aligned} \quad (2.59)$$

を使った。

また、 $u_{m\vec{k}}(t)$ において時間 t は $k_y - eE_y t$ の形で入っているはずなので、 $u_{m\vec{k}}(t)$ は時間に陽によらない。したがって、式 (2.48) において、

$$\langle u_{n\vec{k}}(t) | \dot{u}_{m\vec{k}}(t) \rangle = -eE_y \left\langle u_{n\vec{k}}(t) \middle| \frac{\partial u_{m\vec{k}}(t)}{\partial k_y} \right\rangle$$

である。

以上の結果を使うと式 (2.48) はさらに変形できて、

$$\begin{aligned} \langle \hat{J}_x \rangle &= \sum_{m \leq m_0} \sum_n \int_{\text{MBZ}} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} e [\langle u_{m\vec{k}}(t) | \hat{x} | u_{n\vec{k}}(t) \rangle \langle u_{n\vec{k}}(t) | \dot{u}_{m\vec{k}}(t) \rangle + \text{h.c.}] \\ &= -ie^2 E_y \sum_{m \leq m_0} \sum_n \int_{\text{MBZ}} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \left[\left\langle \frac{\partial u_{m\vec{k}}(t)}{\partial k_x} \middle| u_{n\vec{k}}(t) \right\rangle \left\langle u_{n\vec{k}}(t) \middle| \frac{\partial u_{m\vec{k}}(t)}{\partial k_y} \right\rangle - \text{h.c.} \right] \\ &= -ie^2 E_y \sum_{m \leq m_0} \int_{\text{MBZ}} \frac{d^2 \tilde{k}}{(2\pi)^2} \left[\left\langle \frac{\partial u_{m\tilde{k}}}{\partial \tilde{k}_x} \middle| \frac{\partial u_{m\tilde{k}}}{\partial \tilde{k}_y} \right\rangle - \text{h.c.} \right] \end{aligned} \quad (2.60)$$

となる。ここで、第3行目 (2.60) では $\tilde{k}_y = k_y - eEt$, $\tilde{k}_x = k_x$ と置換した。

以上より、ホール伝導度は

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} &= \frac{e^2}{2\pi} \sum_{m \leq m_0} \int \frac{d^2 \tilde{k}}{2\pi i} \left[\left\langle \frac{\partial u_{m\tilde{k}}}{\partial \tilde{k}_x} \middle| \frac{\partial u_{m\tilde{k}}}{\partial \tilde{k}_y} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial u_{m\tilde{k}}}{\partial \tilde{k}_y} \middle| \frac{\partial u_{m\tilde{k}}}{\partial \tilde{k}_x} \right\rangle \right] \\ &= \frac{e^2}{2\pi} N_{\text{ch}} \end{aligned}$$

であることがわかる。ここで

$$N_{\text{ch}} = \sum_{m \leq m_0} \int \frac{d^2 \tilde{k}}{2\pi i} \left[\left\langle \frac{\partial u_{m\tilde{k}}}{\partial \tilde{k}_x} \middle| \frac{\partial u_{m\tilde{k}}}{\partial \tilde{k}_y} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial u_{m\tilde{k}}}{\partial \tilde{k}_y} \middle| \frac{\partial u_{m\tilde{k}}}{\partial \tilde{k}_x} \right\rangle \right] \quad (2.61)$$

はチャーン数と呼ばれている。この量は位相不変量となっており、整数に量子化される。ホール伝導度のチャーン数表示は文献 [5] によって初めて与えられた。

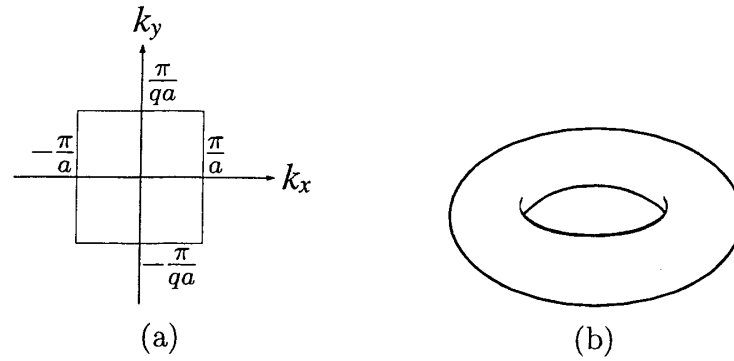


図 9: MBZ を k 空間で表した図 (a) と、周期性を考慮してトーラスにした図 (b)。

2.5 チャーン数の整数量子化

文献 [6] に従ってチャーン数の整数量子化を導いてみよう。以下では 1 つのバンドに着目することにして、バンドインデックス m を省略する。また、 \vec{k} の \sim を省略する。まず、 \vec{k} 空間における「ベクトルポテンシャル」

$$\vec{A}(\vec{k}) = \langle u_{m\vec{k}} | \vec{\nabla}_{\vec{k}} | u_{m\vec{k}} \rangle, \quad \vec{\nabla}_{\vec{k}} = \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \quad (2.62)$$

を導入する。(これは現実のベクトルポテンシャルではないことに注意。) これを用いてチャーン数を表現する。まず、

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial u_{m\vec{k}}}{\partial k_x} \middle| \frac{\partial u_{m\vec{k}}}{\partial k_y} \right\rangle &= \frac{\partial}{\partial k_x} \left\langle u_{m\vec{k}} \middle| \frac{\partial u_{m\vec{k}}}{\partial k_y} \right\rangle - \left\langle u_{m\vec{k}} \middle| \frac{\partial^2}{\partial k_x \partial k_y} u_{m\vec{k}} \right\rangle \\ &= \frac{\partial}{\partial k_x} A_y(\vec{k}) - \left\langle u_{m\vec{k}} \middle| \frac{\partial^2}{\partial k_x \partial k_y} u_{m\vec{k}} \right\rangle \end{aligned}$$

であるから、式 (2.61) は

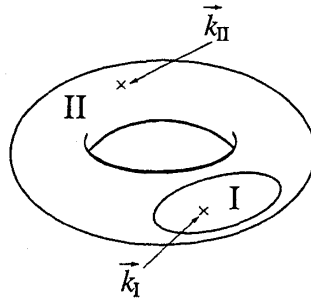
$$N_{\text{ch}} = \sum_{m \leq m_0} \int_{\text{MBZ}} \frac{d^2 k}{2\pi i} [\vec{\nabla}_{\vec{k}} \times \vec{A}(\vec{k})]_z \quad (2.63)$$

と書くことができる。この式は、「ベクトルポテンシャル」 \vec{A} がつくる「磁束」を与えていると見ることができる。

ここでわかることは、チャーン数にあらわれる積分領域 MBZ はトーラスなので (図 9)、ベクトルポテンシャルが正則ならば自明に $N_{\text{ch}} = 0$ となることである。一般に \vec{A} が正則ならば $\vec{\nabla} \times \vec{A}$ の面積分はストークスの定理を用いて境界上における \vec{A} の線積分に直すことができるが、積分領域がトーラスの場合は境界が存在しないので、必ずゼロになるのである。よって、 $N_{\text{ch}} \neq 0$ となるにはベクトルポテンシャルが特異性を持たなければならない。それはどのような特異性だろうか？

議論の準備として、 \vec{k} 空間における「ゲージ変換」を導入する。波動関数に対し、次のようなゲージ変換

$$|u'_{\vec{k}}\rangle = e^{if(\vec{k})} |u_{\vec{k}}\rangle \quad (2.64)$$

図 10: \vec{k} 空間のトーラスを 2 つの領域に分ける。

を導入する。ここで、 $f(\vec{k})$ は \vec{k} の滑らかな一価関数である。ベクトルポテンシャルは式 (2.62) より

$$\vec{A}(\vec{k}) \rightarrow \vec{A}(\vec{k}) + i\vec{\nabla}_{\vec{k}}f(\vec{k}) \quad (2.65)$$

のように変化する。そして、シュレーディンガー方程式はこのゲージ変換に対して不変である：

$$\hat{\mathcal{H}}'_k|u'_k\rangle = E_k|u'_k\rangle. \quad (2.66)$$

この対称性と波動関数の一価性より、チャーン数の整数量子化が以下のように導かれる。状態ベクトル $|u_{\vec{k}}\rangle$ の座標表示における成分 $u_{\vec{k}}(\vec{r}) = \langle \vec{r}|u_{\vec{k}}\rangle$ に着目する。その中の 1 つの成分 $u_{\vec{k}}(\vec{r}_1)$ は $\vec{k} = \vec{k}_1$ でゼロになり、また別の成分 $u_{\vec{k}}(\vec{r}_2)$ は $\vec{k} = \vec{k}_{II} \neq \vec{k}_1$ でゼロになるとする。簡単のため、これら 2 つの点以外には（他のすべての成分も合わせて）ゼロ点は存在しないとする。そして、トーラスを \vec{k}_1 を含む領域 H_I と \vec{k}_{II} を含む領域 H_{II} のふたつに分ける（図 10）。まとめると

$$\begin{cases} u_{\vec{k}_1}(\vec{r}_1) = \langle \vec{r}_1|u_{\vec{k}_1}\rangle = 0, & \vec{k}_1 \in H_I, \\ u_{\vec{k}_{II}}(\vec{r}_2) = \langle \vec{r}_2|u_{\vec{k}_{II}}\rangle = 0, & \vec{k}_{II} \in H_{II} \end{cases}$$

となる。この時、 $u_{\vec{k}}(\vec{r}_1)$ と $u_{\vec{k}}(\vec{r}_2)$ の位相をそれぞれ $\theta(\vec{k}; \vec{r}_1)$ と $\theta(\vec{k}; \vec{r}_2)$ とすると、これらはそれぞれ \vec{k}_1 , \vec{k}_{II} の回りで 2π の整数倍巻くことができる。その理由は以下の通りである。一般に、複素数値をとる一価な 2 変数関数 $f(k_x, k_y) = |f(k_x, k_y)|e^{i\theta(k_x, k_y)}$ について考える。 f のゼロ点、すなわち振幅がゼロとなる点では位相は任意となる。 f の一価性から、ゼロ点以外の点では位相は $\text{mod } 2\pi$ の不定性を除けば一意に定まっていなければならない。よってゼロ点の回りの閉経路に沿って $\vec{\nabla}\theta$ を線積分すると、 2π の整数倍に量子化される、すなわち θ はゼロ点の回りで 2π の整数倍巻くことができる。

ゲージ変換を利用して

$$\begin{cases} u_{\vec{k}}(\vec{r}_1) \text{ は } H_{II} \text{ で実数} \\ u_{\vec{k}}(\vec{r}_2) \text{ は } H_I \text{ で実数} \end{cases}$$

となることを要請しよう。つまり、 H_{II} に置ける状態ベクトル $|u^{II}\rangle$ の位相は \vec{k}_1 の回りで 2π 回る $\theta(\vec{k}; \vec{r}_1)$ となるように、 H_I に置ける状態ベクトル $|u^I\rangle$ の位相は \vec{k}_{II} の回りで 2π 回

る $\theta(\vec{k}; \vec{r}_2)$ となるようにゲージ固定をする。すなわち、トーラス上でパッチを張り合わせる。(これは、ディラック・モノポールの量子化の議論の類似となっている)。すると、ベクトルポテンシャルはそれぞれの領域で

$$\vec{A}^I(\vec{k}) \equiv \langle u_{\vec{k}}^I | \vec{\nabla} | u_{\vec{k}}^I \rangle = i \vec{\nabla} \theta(\vec{k}; \vec{r}_2); \quad \vec{k} \in H_I \quad (2.67)$$

$$\vec{A}^{II}(\vec{k}) \equiv \langle u_{\vec{k}}^{II} | \vec{\nabla} | u_{\vec{k}}^{II} \rangle = i \vec{\nabla} \theta(\vec{k}; \vec{r}_1); \quad \vec{k} \in H_{II} \quad (2.68)$$

となり、いずれも正則であることが解る。2つの領域の境界上でも正則である。

以上のようにパッチワークを用いると、 N_{ch} は正則なベクトルポテンシャルのみを使ってあらわされると同時に境界が生じることからストークスの定理を用いることができるようになり、

$$N_{\text{ch}} = \int_I \frac{d^2 k}{2\pi i} [\vec{\nabla} \times \vec{A}_I(\vec{k})]_z + \int_{II} \frac{d^2 k}{2\pi i} [\vec{\nabla} \times \vec{A}_{II}(\vec{k})]_z \quad (2.69)$$

$$= \oint_{\partial H} \frac{d\vec{k}}{2\pi i} \cdot [\vec{A}_I(\vec{k}) - \vec{A}_{II}(\vec{k})] \quad (2.70)$$

$$= \oint_{\partial H} \frac{d\vec{k}}{2\pi} \cdot \vec{\nabla} [\theta(\vec{k}; \vec{r}_2) - \theta(\vec{k}; \vec{r}_1)] \quad (2.71)$$

$$= n, \quad n \in \mathbf{Z} \quad (2.72)$$

のように整数量子化が導かれる。

以上ではゼロ点が2個の場合で証明したが、任意の個数の場合に拡張できる。最も簡単な例は1個の場合で、それももちろん可能だが、証明の見通しの良さの都合上、2個の場合で行っている。

以上の議論を見返してみると、チャーン数はトーラス上にある波動関数の渦度を計算しているということがわかる。というのも、波動関数のゼロ点の周りにおける位相の巻きは、まさしくトポロジカル欠陥の中でも最も有名な量子渦 (quantized vortex) であり [11]、2変数であること (2次元性) が本質的に効いている。式 (2.70) の各項を見ると、ベリー位相の式 (2.35) と同じ形になっている点が興味深い [6, 8]。

2.6 コメント、最近の話題に関する「漫談」

以下、コメントおよび最近の話題を順不同に列挙する。

- チャーン数の量子化は積分領域がトーラスの表面全体になっていることが本質的である。よって、フェルミレベルがエネルギーギャップの中に存在することが条件となる。さもなければ (すなわち金属状態では)、積分領域はトーラスの部分表面となり、自明に境界が生じるので、積分結果 (境界に沿ったベクトル場の線積分、すなわちベリー位相) は任意の値を取りうる。金属状態の異常ホール効果の伝導度と

の関連が文献 [12] に与えられている。異常ホール効果については文献 [13] を参照されたい。

- 有限系の量子ホール効果を考えると、エッジ状態が非常に重要な役割を担う。チャーン数とエッジ状態の数の間の関係について詳細な議論が文献 [14] に与えられている。この議論の入門が文献 [15] に与えられている。
- チャーン数を具体的に求めるには数値計算を用いる [14, 15]。解析的には、ディオファントス方程式を用いると磁束の大きさ、および何番目のエネルギーギャップにフェルミレベルが存在するかを指定することにより、チャーン数が取りうる値を絞り込むことができる（が、一意には決まらない）[5]。これらを相補的に用いることにより具体的な結果が求められている。最近、チャーン数の数値計算について簡便化された方法が考案されている [16]。磁場中ブロッホ電子系のスペクトルは Hofstadter の蝶と呼ばれるフラクタル構造をとる。蝶とチャーン数の関係を表す美しい図が

<http://physics.technion.ac.il/~odim/hofstadter.html>

で見られる。

- ブロッホ電子の量子ホール伝導度を断熱近似をさらに進めた近似で計算すると、時間に依存する補正項が生じることが文献 [17] に示されている。この時間依存性はバンド構造に対してセンシティブである。また、量子ホール伝導度の不純物効果に対する新たな知見も得られつつある [18, 19]。
- 量子ホール効果の 3 次元系への拡張が文献 [20] に与えられている。
- チャーン数の応用は量子ホール効果以外にも多岐にわたりつつある。断熱ポンピングとチャーン数の関連が TKNN の論文の直後に Thouless により指摘された [21]。最近では（先にも述べた）異常ホール効果 [13]、半導体のスピンホール効果 [22]、超伝導・超流動のスピン量子ホール効果 [23] 等の分野に応用されつつある。また、断熱過程とチャーン数の関連に関する一般論が提案されている [24]。また、グラフェンの量子ホール効果も最近のホット・トピックの 1 つである（文献 [25] およびその参考文献を参照）。

以上、取り上げたテーマならびに文献は全く網羅的になっていないが、ご容赦いただければ幸いである。

3 2次元ディラック理論のホール伝導度（ゼロ磁場で起こる量子ホール効果）

この節では、2次元ディラック理論のホール伝導度を計算する。ディラック理論は相対論的不変性をもつフェルミオンの理論である。物性系に対しても数々の応用例があり（フェルミ面近傍の電子、超伝導ギャップのノード近傍における準粒子状態、グラファイト系の電子など）、適用範囲の広い理論である。この理論からは、ゼロ磁場で生ずる量子ホール効果が導かれる。

3.1 2次元ディラック方程式と平面波解

ウォーミング・アップとしてディラック方程式を解いてみよう。記号を整えるという目的以上にはあまり後の議論との関連はないので読み飛ばして頂いてもかまわない。

2次元ディラック理論のハミルトニアンは、

$$\hat{\mathcal{H}} = \alpha_x \hat{p}_x + \alpha_y \hat{p}_y + \beta m \quad (3.1)$$

である。ここで、 $\alpha_x, \alpha_y, \beta$ は 2×2 行列で、次の関係式を満たす

$$\begin{aligned} \{\alpha_i, \alpha_j\} &= 2\delta_{ij}, & \{\alpha_i, \beta\} &= 0 \\ [\alpha_i, \alpha_j] &= i\epsilon_{ij}\beta, & [\alpha_i, \beta] &= i\epsilon_{ij}\alpha_j. \end{aligned} \quad (3.2)$$

また、 $i, j = x, y$ とし、 ϵ_{ij} は反対称単位テンソルである。この関係式を満たすものとして $\alpha_x = \sigma_x, \alpha_y = \sigma_y, \beta = \sigma_z$ と取れる。ここで、 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ はパウリ行列

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

である。

ディラック方程式

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{x}) = \hat{\mathcal{H}} \psi(t, \vec{x}) \quad (3.4)$$

の定常解と方程式は

$$\psi(t, \vec{x}) = e^{-iEt} \phi(\vec{x}) \quad (3.5)$$

$$\hat{\mathcal{H}} \phi(\vec{x}) = E \phi(\vec{x}) \quad (3.6)$$

である。この平面波解

$$\phi(\vec{x}) = e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}} u_{\vec{p}} = e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}} \begin{pmatrix} u_{1\vec{p}} \\ u_{2\vec{p}} \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

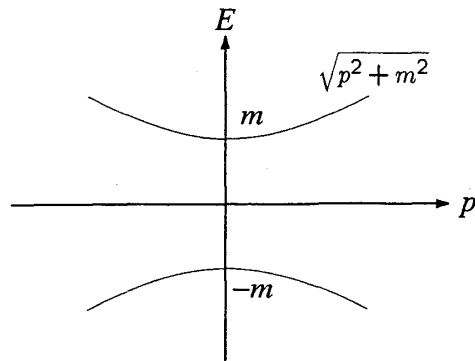


図 11: ディラック粒子のエネルギー準位

を式 (3.6) に代入すると

$$\begin{pmatrix} m & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{1\vec{p}} \\ u_{2\vec{p}} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} u_{1\vec{p}} \\ u_{2\vec{p}} \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

となる。したがって、エネルギー E は

$$\begin{vmatrix} m - E & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -m - E \end{vmatrix} = 0 \quad (3.9)$$

を解いて、

$$E = \pm \sqrt{\vec{p}^2 + m^2} \quad (3.10)$$

である。ここで、エネルギーが負の状態が出現する。そこで、基底状態は、負のエネルギーが粒子で満たされた状態と解釈する。したがって、基底状態と第1励起状態にはエネルギー $2m$ のギャップがある (図 11)。

正エネルギーの波動関数は

$$u_{\vec{p}}^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{(m - \sqrt{p^2 + m^2})^2 + p^2}} \begin{pmatrix} p_x + ip_y \\ m - \sqrt{p^2 + m^2} \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

であり、負エネルギー状態の波動関数は

$$u_{\vec{p}}^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{(m - \sqrt{p^2 + m^2})^2 + p^2}} \begin{pmatrix} m - \sqrt{p^2 + m^2} \\ p_x + ip_y \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

である。

3.2 パリティ P および時間反転対称性 T

次に、ディラック方程式 (3.4) で質量を 0 とした

$$i\partial_t\Psi(t, \vec{x}) = (\alpha_x\hat{p}_x + \alpha_y\hat{p}_y)\Psi(t, \vec{x}) \quad (3.13)$$

が P および T に対して不変になるように $\Psi(t, \vec{x})$ の変換性を決めよう。式 (3.13) の両辺にパリティ変換を施すと

$$i\partial_t\Psi(t, -x, y) = (-\alpha_x\hat{p}_x + \alpha_y\hat{p}_y)\Psi(t, -x, y) \quad (3.14)$$

となる。ここで、ユニタリ行列 U_P を用いて $\Psi(t, -x, y) = U_P^{-1}\tilde{\Psi}^P(t, x, y)$ なる $\Psi^P(t, \vec{x})$ がディラック方程式をみたすように U_P を決める。これを代入して、

$$i\partial_t\tilde{\Psi}^P(t, \vec{x}) = U_P(-\alpha_x\hat{p}_x + \alpha_y\hat{p}_y)U_P^{-1}\tilde{\Psi}^P(t, \vec{x}) \quad (3.15)$$

となるので、

$$-U_P\alpha_xU_P^{-1} = \alpha_x, \quad U_P\alpha_yU_P^{-1} = \alpha_y \quad (3.16)$$

であることがわかる。したがって

$$U_P = \alpha_y = \sigma_y \quad (3.17)$$

である。

時間反転についても同様に考える。まず、 $t \rightarrow -t$ とするとディラック方程式は

$$-i\partial_t\Psi(-t, \vec{x}) = (\alpha_x\hat{p}_x + \alpha_y\hat{p}_y)\Psi(-t, \vec{x}) \quad (3.18)$$

となる。両辺の複素共役をとって、

$$i\partial_t\Psi^*(-t, \vec{x}) = (-\alpha_x^*\hat{p}_x - \alpha_y^*\hat{p}_y)\Psi^*(-t, \vec{x}) \quad (3.19)$$

が得られる。ここで、ある、ユニタリ行列 U_T を用いて、 $\Psi^*(-t, \vec{x}) = U_T^{-1}\tilde{\Psi}^T(t, \vec{x})$ なる $\tilde{\Psi}^T(t, \vec{x})$ がディラック方程式を満たすように U_T をきめる。すると、先ほどと同じようにして

$$U_T = \alpha_y = \sigma_y \quad (3.20)$$

であることがわかる。

変換性が分かったところで質量 m を有限にすると、ディラック方程式はパリティおよび時間反転対称性を破る (\mathcal{P} および \mathcal{T} である) ことがわかる。というのも、質量項が

$$U_P(\beta m\Psi(t, \vec{x})) = U_P\beta mU_P^{-1}U_P\Psi(t, \vec{x}) \quad (3.21)$$

$$= -\beta m\tilde{\Psi}^P(t, -x, y) \quad (3.22)$$

$$U_T(\beta m\Psi^*(t, \vec{x}))^* = U_T\beta mU_T^{-1}\Psi^*(t, \vec{x}) \quad (3.23)$$

$$= -\beta m\tilde{\Psi}^T(-t, \vec{x}) \quad (3.24)$$

のように変換するからである。質量項による \mathcal{P} および \mathcal{T} により、ゼロ磁場でもホール効果が生じることが期待できる。

3.3 ゼロ磁場の量子ホール効果

ここでは場の理論的手法を用いてこの系のホール伝導度を計算する。最終的にホール伝導度はポントリャーギン数と呼ばれる位相不変量で表されることを見る。ゼロ磁場で有限のホール伝導度が得られること、かつその伝導度が普遍定数であらわされることが特徴的である。

3.3.1 低エネルギー有効作用とチャーン・サイモン項

一般にエネルギースケールの異なる物理量が結合しているような系で、低エネルギーの自由度に対する有効理論を求めるには、高エネルギーの自由度を積分して消去する必要がある。

2次元ディラックフェルミオン Ψ とゲージ場 $A_\mu = (A_0, A_1, A_2)$ が結合している系を考えよう。ゲージ場との結合は微分を共変微分 $D_\mu = \partial_\mu - ieA_\mu$ に置き換えることにより得られる。ハミルトニアンから、この系の作用は

$$S[\Psi, \bar{\Psi}, A_\mu] = \int d^3x \bar{\Psi}(x) (i\not{D} - m) \Psi(x) \quad (3.25)$$

となるのが解る。ここで、 $x = (x_0, x_1, x_2)$ は3元座標（空間2次元、時間1次元）で、 $\not{D} \equiv \gamma^\mu D_\mu$ 、 $\bar{\Psi} = \Psi^\dagger \gamma_0$ であり、メトリックは $g^{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1)$ を用いている。すなわち、2つの3元ベクトル A_μ, B_μ の内積をとるとき、ローレンツの足の縮約は $A_\mu B^\mu = g^{\mu\nu} A_\mu B_\nu = A_0 B_0 - A_1 B_1 - A_2 B_2$ となる。共変微分を用いていることから、この作用は明白にゲージ不変である。

ゲージ場に対する有効作用 $S_{\text{eff}}[A_\mu]$ は経路積分を用いて以下のように求められる：

$$\begin{aligned} S_{\text{eff}}[A_\mu] &= -i \ln \int \mathcal{D}\Psi \mathcal{D}\bar{\Psi} e^{iS[\Psi, \bar{\Psi}, A_\mu]} \\ &= \int d^3x d^3y A_\mu(x) \pi^{\mu\nu}(x-y) A_\nu(y) + \mathcal{O}(A^3). \end{aligned} \quad (3.26)$$

ここで、

$$j_\mu = e \bar{\Psi}(x) \gamma_\mu \Psi(x) \quad (3.27)$$

は3元カレント、

$$\pi(x-y) \equiv \langle 0 | T j_\mu(x) j_\nu(y) | 0 \rangle \quad (3.28)$$

はカレント-カレント相関関数である²。

もともとの理論がゲージ不変であるため、 $S_{\text{eff}}[A_\mu]$ もゲージ不変でなければならない。よって、そのなかに含まれる項の形は限定される。3次元空間（4次元時空）の場合に

²注1: T は時間順序積。注2: カレントといっても3元カレントなので、第ゼロ成分は電荷密度を表し、 π_{00} は密度相関関数となる。相対論の用語を使っているので混同しないよう注意されたい。

は、ゲージ不変でなおかつ低エネルギーで支配的な項、すなわちゲージ場の次数および微分の階数が最も低い項は

$$\int d^3x \left[-\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \right] = \int d^3x \left[\frac{1}{2} \mathbf{E}^2 - \frac{1}{2} \mathbf{B}^2 \right], \quad F_{\mu\nu} \equiv \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$$

である。この項は微分の階数が2である。ところが、2次元空間（3次元時空）では、さらに微分の階数が低い項が存在しうる：

$$\int d^3x \frac{\kappa}{2} \epsilon^{\mu\rho\nu} A_\mu \partial_\rho A_\nu. \quad (3.29)$$

ここで $\epsilon^{\mu\rho\nu}$ は完全反対称テンソルである。この項はチャーン・サイモン (C-S) 項と呼ばれ³、2次元の電磁力学の低エネルギー・長距離有効理論のなかでは最も支配的な項として知られている [26]。C-S 項に関する講義録として文献 [27]、日本語の解説では [28] が挙げられる。

3.3.2 ホール伝導度

C-S 項より得られるカレントは

$$j_\mu = \frac{\delta S_{\text{eff}}[A_\mu]}{\delta A^\mu} = \kappa \epsilon_{\mu\rho\nu} F^{\rho\nu} \quad (3.30)$$

となり、特に $\mu = x$ ととれば

$$j_x = \kappa E_y$$

となる。これはまさしくホール電流であり、C-S 項の係数 κ はホール伝導度 σ_{xy} に他ならないことがわかる。また、この事実からも C-S 項が P および T を破る項であることがわかる。以下、 $\kappa = \sigma_{xy}$ とおくことにする。

式 (3.29) より、C-S 項が存在する場合 $\pi_{\mu\nu}(x-y)$ のなかには微分の最低次の項として

$$i\sigma_{xy} \epsilon_{\mu\rho\nu} \partial^\rho \delta^3(x-y)$$

という項が含まれる。 σ_{xy} を $\pi_{\mu\nu}(x-y)$ から抜き出すには、フーリエ変換して反対称テンソルの性質を使って得られる関係

$$\sigma_{xy} = \lim_{q \rightarrow 0} \frac{1}{3!} \epsilon^{\mu\rho\nu} \frac{\partial}{\partial q^\rho} \pi_{\mu\nu}(q) \quad (3.31)$$

³C-S 項は境界でゲージ不変性を破る。では境界がある場合の有効作用のゲージ不変性はどうか？ C-S 項が有効作用中に誘起されるような系ではミクロレベル（積分前の理論）で境界に張り付いたカイラル・エッジモードが存在する。このモードを積分すると C-S 項による対称性の破れをキャンセルする項が S_{eff} に誘起され（この項はカイラル量子異常によって生じる）、結局、理論全体としてはゲージ対称性が保たれることが示される。詳しくは X. G. Wen, Phys. Rev. Lett. **64**, 2206 (1990) 参照。

を用いればよい。 $\pi_{\mu\nu}(q)$ の電磁気結合に関する摂動の最低次の項は、自由なフェルミオンの伝搬関数（2点関数）

$$S^{(0)}(p) = \langle 0 | \Psi(q) \bar{\Psi}(q) | 0 \rangle = \frac{i}{p - m} \quad (3.32)$$

を用いて

$$\pi_{\mu\nu}(q) = -e^2 \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \text{Tr}[\gamma_\mu S^{(0)}(p+q) \gamma_\nu S^{(0)}(p)] \quad (3.33)$$

と書かれる。 Tr はスピノルに関するトレースである。ここで、ゲージ不変性から導かれるワード-高橋恒等式の摂動最低次に関する式

$$\gamma_\mu = \frac{\partial}{\partial p^\mu} (S^{(0)}(p))^{-1} \quad (3.34)$$

を用いて⁴式(3.31)の右辺を計算すると

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} &= \frac{-e^2}{3!} \epsilon^{\mu\rho\nu} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \text{Tr} \left[\gamma_\mu \left(\frac{\partial}{\partial p^\rho} S^{(0)}(p) \right) \gamma_\nu S^{(0)}(p) \right] \\ &= \frac{e^2}{3!} \epsilon^{\mu\rho\nu} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \text{Tr} \left[\left(S^{(0)}(p) \frac{\partial}{\partial p^\mu} S^{(0)}(p)^{-1} \right) \left(S^{(0)}(p) \frac{\partial}{\partial p^\rho} S^{(0)}(p)^{-1} \right) \right. \\ &\quad \left. \times \left(S^{(0)}(p) \frac{\partial}{\partial p^\nu} S^{(0)}(p)^{-1} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.35)$$

$$= \frac{e^2}{4\pi} \frac{m}{|m|} \quad (3.36)$$

となる。最後の行を導くには伝搬関数の具体的な表式(3.32)とトレース公式 $\text{Tr}[\gamma_\mu \gamma_\rho \gamma_\nu] = 2i\epsilon_{\mu\rho\nu}$ を用いた。この量はポントリャーギン数と呼ばれる位相不変量の形をしている[4]。ところで、コールマン・ヒルの定理によると、赤外発散がない系ではC-S項の係数に対して高次補正が存在しない[29]。すなわち、式(3.35)は $S^{(0)}(q)$ を摂動の高次をフルに取り込んだ伝搬関数 $S(q)$ に置き換えた量

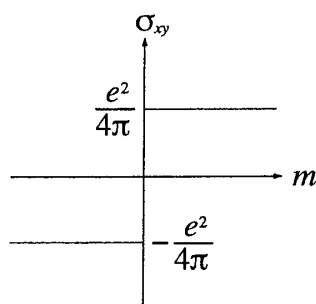
$$\frac{e^2}{3!} \epsilon^{\mu\rho\nu} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \text{Tr} \left[\left(S(p) \frac{\partial}{\partial p^\mu} S(p)^{-1} \right) \left(S(p) \frac{\partial}{\partial p^\rho} S(p)^{-1} \right) \left(S(p) \frac{\partial}{\partial p^\nu} S(p)^{-1} \right) \right] \quad (3.37)$$

と等しい、という定理である。位相不変な量は摂動に対してrobustであるという事実が見て取れる。

まとめると、2次元で有限質量のディラック理論ではゼロ磁場で量子ホール効果が生じ、ホール伝導度は位相不変量で与えられ、微細構造定数 $e^2/4\pi$ を単位として+1か-1に量子化される。この符号は $\text{sign}(m) = m/|m|$ で与えられる(図12)。ここで注目すべきは $m \rightarrow 0$ の極限、すなわち P および T が回復する極限でもホール伝導度が有限で現れる点である。強磁性相における磁化の無限小磁場に対する応答を思い起こさせる。この性質は量子異常⁵の一種であるパリティ異常、あるいは奇数時空次元のカイラル量子異常として理解されている[2]。蜂の巣格子系への応用として文献[3]が知られている。

⁴ワード-高橋恒等式は摂動の各次数に対して成り立つ。

⁵古典論のレベルで存在する対称性が量子効果により破れる現象。

図 12: ホール伝導度の m 依存性。

4 おわりに

以上、磁場中 2 次元プロック電子系の量子ホール効果、2 次元ディラック理論のゼロ磁場量子ホール効果と位相不変量の間について概観した。これらの議論は最近さまざまな分野に応用されている。最新の話題に関しては筆者の実力と時間の関係でほとんどコメントできなかったが、それらの論文をフォローする際にこのノートが少しでもお役に立てば幸いである。

謝辞

羽田野研究室の皆様、とくにお招きいただいた羽田野直道先生、助手の町田学さん、講義ノートを用意してくれた（当時修士 1 年の）藤永君、それを TEX に起こしたりきれいな図を用意してくれた佐藤君、そして著者の拙い「講義」に参加して議論を盛り上げてくださった方々に心より感謝致します。

参考文献

- [1] 例えば、吉岡大二郎、新物理学選書「量子ホール効果」（岩波書店）。
- [2] K. Ishikawa, Phys. Rev. Lett. **53** (1984) 1615; A. Redlich, *ibid.* **52** (1984) 18; A. J. Niemi and G. W. Semenoff, *ibid.* **51** (1983) 2077.
- [3] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 2015.
- [4] 例えば、中原幹夫「理論物理学者のための幾何学とトポロジー I, II」（ピアソン・エデュケーション）。
- [5] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, Phys. Rev. Lett. **49** (1982) 405.

- [6] M. Kohmoto, *Ann. Phys. (NY)* **160** (1985) 343.
- [7] M. V. Berry, *Proc. R. Soc. London* **A392** (1984) 45.
- [8] B. Simon, *Phys. Rev. Lett.* **51** (1983) 2167.
- [9] A. Shapere and F. Wilczek, “Geometric Phases in Physics” (World Scientific, Singapore, 1989).
- [10] 藤川和男: *日本物理学会誌* **62**, No. 73, (2007) 163.
- [11] A. A. Abrikosov and *Zh. Eksperim. i Teor. Fiz.* **32** (1957) 1442 [*Sov. Phys. JETP* **5** (1957) 1174]; H. B. Nielsen and P. Olsen, *Nucl. Phys. B* **61** (1973) 45.
- [12] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **93** (2004) 206602.
- [13] M. Onoda and N. Nagaosa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **71** (2002) 19.
- [14] Y. Hatsugai, *J. Phys. C: Condens. Matter* **9** (1997) 2507 (Review Article).
- [15] 初貝安弘、物性若手夏の学校2001年夏「一量子ホール効果— その意義と幾何学的構造」(講義ノート)。
- [16] T. Fukui, Y. Hatsugai, and H. Suzuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **74** (2005) 1674.
- [17] M. Machida, N. Hatano, and J. Goryo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **75** (2006) 063704.
- [18] M. Koshino and T. Ando, *Phys. Rev. B* **73** (2006) 155304.
- [19] M. Machida *et al.*, in preparation.
- [20] B. I. Halperin, *Jpn. J. Appl. Phys. Suppl.* **26** (1987) 1913; G. Montambaux and M. Kohmoto, *Phys. Rev. B* **41** (1990) 11 417; M. Kohmoto, B. I. Harpelin, and Y.-S. Wu, *ibid.* **45** (1992) 13 488.
- [21] D. J. Thouless, *Phys. Rev. B* **27**, 6083 (1983).
- [22] S. Murakami, N. Nagaosa, and S. C. Zhang, *Science* **301** (2003) 1348; *Phys. Rev. B* **69** (2004) 235206.
- [23] A. Vishwanath, *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001) 217004; O. Vafek, A. Melikyan, and Z. Tešanović, *Phys. Rev. B* **64** (2001) 224508; J. Goryo and M. Kohmoto, *Phys. Rev. B* **66** (2002) 174503; 3次元への拡張: J. Goryo, M. Kohmoto, and Y.-S. Wu, *cond-mat/0612005*.

- [24] J. Goryo and M. Kohmoto, cond-mat/0606758.
- [25] Y. Hatsugai, T. Fukui, and H. Aoki, Phys. Rev. B **74** (2006) 205414.
- [26] S. Deser, R. Jackiw, and S. Templeton, Ann. Phys. (NY) **140** (1982) 372; Phys. Rev. Lett. **48** (1982) 975.
- [27] Les Houches 夏の学校講義録 ; G. Dunne "Aspects of Chern-Simons Theory", Les Houches Session LXIX "Topological aspects of low dimensional systems" Course 3 (Springer-Verlag, 1999).
- [28] 1991年原子核三者若手夏の学校講義録におさめられている石川健三氏の講義ノート参照。
- [29] S. Coleman and B. Hill, Phys. Lett. **159B** (1985) 184.