

トポロジカルなバンド構造と物性物理

大阪大学 大学院理学研究科 越野幹人

1 はじめに

近年、物質科学においてトポロジーの役割が非常に重要になっている。トポロジーとは、「コーヒカップとドーナツが同一視される」という例でよく知られよう、連続変形で移り変わる図形は同一視するという数学の一分野である。物質の物理学とはおよそかけ離れた抽象的な世界のようにも思えるが、実は物質の量子的状態を記述するのにトポロジーの概念が本質的な役割を果たすことがわかってきた。非自明なトポロジー構造をもつ最も単純な物質の一つが、炭素の2次元物質であるグラフェンである。グラフェンにおける電子は「質量の無いディラック電子」と形容され、伝導帯と価電子帯が点で接する特殊なバンド構造を持つ。バンド接点は摂動に対して安定であり、その安定性はBerry位相とよばれる幾何学的位相の「巻つき数」（一種のトポロジカル量）によって理解される。エッジ状態とよばれる特殊な電子状態や、磁場中での異常な物性やなど、さまざまな特徴的な物性がバンド接点の存在と密接に関係する。またグラフェンの3次元への拡張とも言えるのがワイル半金属であり、こちらのバンド接点はベクトル場の湧き出しまたは吸い込みとして理解される。ここではBerry位相の基本的な知識を紹介したあと、トポロジカルなバンド構造の最も基本的な例であるグラフェンを例にとりてBerry位相とバンド構造の関係について詳細に述べる。

2 Berry位相

2.1 Berry位相の定義と導出

いま、系のハミルトニアン $H = H(\mathbf{R})$ が何かのパラメータ \mathbf{R} になめらかに依存しているとしよう [1]。具体例は次節で触れるので適宜参照されたい。いま、このパラメータ \mathbf{R} がゆっくりと時間変化して、 \mathbf{R} 空間上のある閉じた経路 C を一周して、もとに戻ってきたとする。即ち、時刻 $t = 0$ を始点、 $t = T$ を終点とすると、経路 $\mathbf{R}(t)$ は $\mathbf{R}(0) = \mathbf{R}(T)$ を満たす。さて、系の初期状態が $H(\mathbf{R}(0))$ のある固有状態とすると、その後パラメータの変化とともに、波動関数はどのように変化するだろうか？ 解くべき Schrödinger 方程式は

$$H(\mathbf{R}(t))|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \quad (1)$$

である。各時刻での波動関数を表すのに、各時刻におけるハミルトニアンの直交系 $\{\phi_n(\mathbf{R})\}$ を使うと便利である。

$$H(\mathbf{R})|\phi_n(\mathbf{R})\rangle = E_n(\mathbf{R})|\phi_n(\mathbf{R})\rangle. \quad (2)$$

簡単のため経路 C 上のどの \mathbf{R} においても縮退は無いものとする。式 (2) は時間によらない Schrödinger 方程式なので、 $\phi_n(\mathbf{R})$ は、「パラメータがずっと \mathbf{R} にとどまったときの n 番の固有状態」を表す。

さて系の初期状態を $\phi_n(\mathbf{R}(0))$ としよう。パラメータ \mathbf{R} が十分にゆっくりであると仮定すると、断熱定理により、その後の波動関数は、そのまま各時刻での $H(\mathbf{R})$ の固有状態をなぞっていくとして良い。即ち、

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\gamma_n(t)} |\phi_n(\mathbf{R}(t))\rangle. \quad (3)$$

ここで $e^{i\gamma_n(t)}$ という位相が残ることに注意しよう。いま $t = 0$ から時間変化してきた $\psi(t)$ は、断熱定理より $\phi_n(\mathbf{R}(t))$ に比例するが、位相成分は同じという保証はないわけで、その位相差が $e^{i\gamma_n(t)}$ というわけである。実は Berry の位相はこの部分から来る。

位相項 $e^{i\gamma_n(t)}$ を求めるために $\langle \psi(t) | \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) \rangle$ という量を計算する。まず、式 (1) の右から $\langle \psi(t) |$ をかけると、

$$\langle \psi(t) | H(\mathbf{R}(t)) | \psi(t) \rangle = i\hbar \left\langle \psi(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) \right. \right\rangle. \quad (4)$$

ここで明らかに左辺は $E_n(\mathbf{R}(t))$ と等しいので、

$$\left\langle \psi(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) \right. \right\rangle = -\frac{i}{\hbar} E_n(\mathbf{R}(t)) \quad (5)$$

を得る。一方で同じ量は、式 (3) から直接計算することができる。

$$\begin{aligned} \left\langle \psi(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) \right. \right\rangle &= \left\langle \phi_n(\mathbf{R}(t)) \left| e^{-i\gamma_n(t)} \frac{\partial}{\partial t} e^{i\gamma_n(t)} \phi_n(\mathbf{R}(t)) \right. \right\rangle \\ &= i \frac{\partial \gamma_n(t)}{\partial t} + \langle \phi_n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | \phi_n(\mathbf{R}) \rangle \cdot \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial t}. \end{aligned} \quad (6)$$

ここで $\nabla_{\mathbf{R}} = \partial/\partial \mathbf{R}$ であり、また規格化条件 $\langle \phi_n(\mathbf{R}) | \phi_n(\mathbf{R}) \rangle = 1$ を使った。式 (5) と式 (6) が等しいので

$$i \frac{\partial \gamma_n(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E_n(\mathbf{R}(t)) - \langle \phi_n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | \phi_n(\mathbf{R}) \rangle \cdot \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial t} \quad (7)$$

を得る。

さて、 \mathbf{R} が経路 C を一周してもとに戻ると、ハミルトニアンははじめの状態に戻るので、波動関数は位相成分を除いて元に戻る。この始状態の終状態の位相差 $\gamma_n(T) - \gamma_n(0)$ は式 (7) を用いて計算することができる。

$$\begin{aligned} \gamma_n(T) - \gamma_n(0) &= \int_0^T \frac{\partial \gamma_n(t)}{\partial t} dt \\ &= -\frac{1}{\hbar} \int_0^T E_n(\mathbf{R}(t)) dt + i \oint_C \langle \phi_n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | \phi_n(\mathbf{R}) \rangle \cdot d\mathbf{R}. \end{aligned} \quad (8)$$

最後の式で積分変数を t から \mathbf{R} に置換した。最後の表式の第1項は「力学的位相 (dynamical phase)」と呼ばれる。時間に依存しないハミルトニアンでエネルギー固有値 E を持つ状態は、 $e^{-iEt/\hbar}$ に従って位相が振動するが、これがまさに力学的位相であり、時間に依存する Schrödinger 方程式の解に必ず現れる。いまは $E_n(\mathbf{R})$ がパラメータの変化とともに変わるので、 Et/\hbar という位相部分が $E_n(\mathbf{R}(t))/\hbar$ の時間積分に置き換わっていると理解できる。一方で第2項は、経路 C の形状によって決まる「幾何学的位相」である。これが Berry の位相であり、 $\gamma_n[C]$ と表す。改めて書くと

$$\gamma_n[C] = - \oint_C \mathbf{a}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R}, \quad (9)$$

但し

$$\mathbf{a}_n(\mathbf{R}) = -i \langle \phi_n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | \phi_n(\mathbf{R}) \rangle \quad (10)$$

である。 $\mathbf{a}_n(\mathbf{R})$ は Berry 接続と呼ばれる。

まとめると、系のハミルトニアンが経路 C 上を断熱的に変化させると、波動関数は自明な力学的位相の他に、 C の形に純粋に依存する Berry 位相を獲得する。次節では具体的な系に対して Berry 位相の計算してみよう。

2.2 Berry 位相の例: スピン 1/2 の系

スピン 1/2 が外部磁場の中に置かれた系を考えよう。スピンに関するハミルトニアンは

$$H(\mathbf{R}) = \mathbf{R} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (11)$$

と書かれる。但し $\mathbf{R} = (R_x, R_y, R_z)$ は外部磁場であり、 $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ はパウリ行列である。本当は g 因子やボーア磁子などの物理的な係数がつくが、ここでは簡単のためすべて 1 とする（もしくは \mathbf{R} に押し付けたと考えてもよい）。 \mathbf{R} を極座標で $\mathbf{R} = R(\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ と表し、パウリ行列の標準的な表式を入れれば

$$H(\mathbf{R}) = \begin{pmatrix} R_z & R_x - iR_y \\ R_x + iR_y & -R_z \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (12)$$

となる。この固有エネルギーは $E = \pm R$ であり、対応する固有ベクトルは

$$|\phi_+(\mathbf{R})\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\phi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix}, \quad |\phi_-(\mathbf{R})\rangle = \begin{pmatrix} \sin(\theta/2) \\ -e^{i\phi} \cos(\theta/2) \end{pmatrix} \quad (13)$$

となる。スピンの磁場が平行な場合と反平行な場合がそれぞれ $\phi_+(\mathbf{R})$ と $\phi_-(\mathbf{R})$ に対応する。

さて、いま磁場 \mathbf{R} を閉経路 C に沿ってゆっくりと一周させてみよう。但し C は $\mathbf{R} = 0$ を通らないものとする。つまり経路上で磁場はなくならず、2つの状態が縮退することはない。スピンは磁場の平行（または反平行）を保ちながら磁場の変化に追従する。やがて磁場がはじめの値に戻ると、波動関数は始状態と比較して Berry 位相を獲得する。前節の公式 (9)(10) に従って、Berry 位相を計算してみよう。バンドの番号は $n = \pm$ の 2 つだけである。式 (13) を (10) に代入すれば Berry 接続 $\mathbf{a}_n(\mathbf{R})$ を直接計算することができる。例えば $n = +$ に関しては、

$$\mathbf{a}_+(\mathbf{R}) = \frac{1 - \cos \theta}{2} \nabla \phi \quad (14)$$

を得る。 R に依存せず、角度成分 θ, ϕ のみに依存することに注意しよう。

いま、ある半径 R 上の球面上の 4 点 $P_1 : (\theta, \phi), P_2 : (\theta, \phi + \Delta\phi), P_3 : (\theta + \Delta\theta, \phi + \Delta\phi), P_4 : (\theta + \Delta\theta, \phi)$ 、として、閉経路 C として、 $P_1 P_2 P_3 P_4 P_1$ を考え、この上での $\gamma_n[C]$ を計算しよう。但し $\Delta\theta, \Delta\phi$ は微小な角度とする。式 (14) より、 $\mathbf{a}_+(\mathbf{R})$ は $\nabla \phi$ の方向を向いていることに注意すると、

$$\begin{aligned} \gamma_+[C] &= - \oint_C \mathbf{a}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} = - \int_{P_1}^{P_2} \mathbf{a}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} + \int_{P_3}^{P_4} \mathbf{a}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} \\ &= \frac{1 - \cos(\theta + \Delta\theta)}{2} \Delta\phi - \frac{1 - \cos \theta}{2} \Delta\phi \approx -\frac{1}{2} \sin \theta \Delta\theta \Delta\phi. \end{aligned} \quad (15)$$

$\sin \theta \Delta\theta \Delta\phi$ は $P_1 P_2 P_3 P_4 P_1$ 囲む立体角にほかならない。もう一つの状態 $\phi_-(\mathbf{R})$ に関しても同様に計算でき、 $\gamma_-[C] = +(1/2) \sin \theta \Delta\theta \Delta\phi$ を得る。閉経路 C が任意の形であっても、このような微小な経路の和に分解することができるので、結局

$$\gamma_{\pm}[C] = \mp \frac{1}{2} \Omega_C \quad (16)$$

となる。ただし Ω_C は原点から経路 C を望む立体角である。たとえば C が「赤道」($\theta = \pi/2$) を一周する経路の場合、立体角 Ω_C は球の半分なので $4\pi/2 = 2\pi$ 、よって Berry 位相は $\mp\pi$ となり、 $e^{i\gamma_{\pm}[C]} = -1$ となる。スピン $1/2$ が大円を一周すると -1 倍がつくという重要な結果である。

2.3 Berry 接続と Berry 曲率

前節のスピン $1/2$ の例では、Berry 位相は経路 C の囲む立体角の比例した。これは 3 次元のパラメータ空間 \mathbf{R} を実空間だと思ったとき、原点から「磁束」が放射状に出ていて、Berry 位相 $\gamma_{\pm}[C]$ は経路 C が囲む「磁束」の量に等しいと見ることができる。磁束という言葉にかぎがかかっているのは、電磁気学における本物の磁束ではないが、数学的にはよく似た仮想的な磁束である、ということの意味している。

この磁場との間のアナロジーは、実はスピン 1/2 の系に限らずどんな場合も成り立ち、Berry 位相をイメージする上でとても有用である。一般的な議論は以下のようなになる。式 (10) で定義される Berry 接続 $\mathbf{a}_n(\mathbf{R})$ は電磁気学でのベクトルポテンシャル $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ に対応する。これと対応して、磁場 $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ に当たるものは

$$\mathbf{F}_n(\mathbf{R}) = \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{a}_n(\mathbf{R}) \quad (17)$$

と定義できる。これを Berry 曲率という。例えば、前節のスピン 1/2 の系で $\mathbf{F}_n(\mathbf{R})$ を計算すると

$$\mathbf{F}_n(\mathbf{R}) = \pm \frac{1}{2} \frac{\mathbf{R}}{R^3} \quad (18)$$

となり、これはまさに原点から等方的に出るフラックスにほかならない。(放射状に出る磁束密度は、本物の電磁気学では Dirac のモノポールという重要な概念と結びついているので興味のある人は調べてみると良い [2].) 式 (13) に Stokes の定理を用いれば、

$$\gamma_n[C] = - \int_S \mathbf{F}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{S}, \quad (19)$$

と書ける。ただし S は C を境界とする任意の曲面である。 $\gamma_n[C]$ は S を貫く「磁束」に相当することが一目瞭然である。

もう一つの重要な類似点がゲージ不変性である。Berry 接続を計算するとき出発点となる $\phi_n(\mathbf{R})$ は、 $H(\mathbf{R})$ の固有状態ということしか言っていないので、全体にかかる位相に任意性がある。つまり -1 や i を掛けたものでも良いわけである。これを $U(1)$ 対称性という。例えば $\phi_n(\mathbf{R})$ の代わりに $\phi'_n(\mathbf{R}) = e^{i\chi(\mathbf{R})}\phi_n(\mathbf{R})$ を使っても構わないわけで、これに対する Berry 接続は

$$\mathbf{a}'_n(\mathbf{R}) = -i\langle \phi'_n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | \phi'_n(\mathbf{R}) \rangle = \mathbf{a}_n(\mathbf{R}) + \nabla_{\mathbf{R}}\chi(\mathbf{R}) \quad (20)$$

となる。これは電磁気学でのベクトルポテンシャルに対するゲージ変換とそっくりである。従って、「磁場」に当たる Berry 曲率 $\mathbf{F}_n(\mathbf{R})$ は、ゲージのとり方によらない不変量である。

3 グラフェンにおけるベリー位相

3.1 グラフェンの電子を記述する方程式

この章ではグラフェンのバンド構造に関して、Berry 位相とバンド接点の間の密接な関係について述べる。そのためにグラフェンのバンド構造に関してやや詳しく述べる。次の節で結果だけ使うので、詳細は読み飛ばしても構わない。以下、グラフェンの電子のハミルトニアンを簡単な微視的なモデルから導出する [3]。グラフェンは炭素原子が蜂の巣格子状に並んだ 2 次元結晶である。グラフェンの単位胞と第一ブリルアンゾーンを図 1(a),(b) に示す。単位胞には A、B の二つの原子が存在し、格子定数 (最近接の A 同士の距離) は $a = 0.246\text{nm}$ である。一つの B 原子から隣り合った A 原子までを結ぶベクトルを $\boldsymbol{\tau}_1 = a(0, 1/\sqrt{3})$, $\boldsymbol{\tau}_2 = a(-1/2, -1/2\sqrt{3})$, $\boldsymbol{\tau}_3 = a(1/2, -1/2\sqrt{3})$ として定義する。ブリルアンゾーンの角は K 点、 K' 点と呼ばれ、それぞれの波数は $\mathbf{K} = (2\pi/a)(-2/3, 0)$, $\mathbf{K}' = (2\pi/a)(2/3, 0)$ で与えられる。

各炭素原子では $2s, 2p_x, 2p_y$ 軌道が混成して sp^2 軌道を作り σ バンドを形成し、一方で混成に参加しない p_z 軌道は π バンドを形成する。フェルミエネルギーは通常この π バンドの上に存在し、電子の特性の多くは π バンドの性質に起因する。ここでは最も簡単な最近接の強束縛近似 (tight-binding 近似) でこの π バンドを記述しよう。強束縛近似において、グラフェン上の電子の波動関数は

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}_A} \psi_A(\mathbf{R}_A)\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_A) + \sum_{\mathbf{R}_B} \psi_B(\mathbf{R}_B)\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_B) \quad (21)$$

とかかれる。但し $\phi(\mathbf{r})$ は炭素原子の p_z 軌道の波動関数であり、 $\mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B$ は A, B 原子の位置を表わす。最近接の炭素原子間の飛び移り積分を $-\gamma_0$ とすると、シュレーディンガー方程式は

$$E\psi_A(\mathbf{R}_A) = -\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \psi_B(\mathbf{R}_A - \boldsymbol{\tau}_l), \quad E\psi_B(\mathbf{R}_B) = -\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \psi_A(\mathbf{R}_B + \boldsymbol{\tau}_l) \quad (22)$$

となる。ブロッホの定理より波動関数は $\psi_A(\mathbf{R}_A) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_A} f_A$, $\psi_B(\mathbf{R}_B) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_B} f_B$ と書くことができ、これらを代入すると方程式 (22) は

$$H(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} f_A \\ f_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} f_A \\ f_B \end{pmatrix}, \quad (23)$$

但し $H(\mathbf{k})$ は

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & h(\mathbf{k}) \\ h(\mathbf{k})^* & 0 \end{pmatrix}, \quad h(\mathbf{k}) = -\gamma_0 \sum_{l=1}^3 \exp(-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\tau}_l), \quad (24)$$

となる。 $H(\mathbf{k})$ はブロッホ・ハミルトニアンと呼ばれ、波動関数のうちのブロッホ因子 $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ を除いた部分に作用するハミルトニアンとみなせる。これより固有エネルギーは

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{1 + 4 \cos \frac{ak_x}{2} \cos \frac{\sqrt{3}ak_y}{2} + 4 \cos^2 \frac{ak_x}{2}} \quad (25)$$

となる。このバンド構造を図 1(c) に示す。 K, K' 点で $E_{\pm}(\mathbf{K}) = E_{\pm}(\mathbf{K}') = 0$ となるために、正のバンド、負のバンドはエネルギー 0 で接する。炭素原子の電子数を勘定すると、 p_z 軌道がちょうど半分埋まっていることが分かるので、フェルミエネルギーは正負のバンドのちょうど間、このバンド接点上に存在することになる。通常の半導体と同じように、正のエネルギーのバンドを伝導帯、負の方を価電子帯と呼ぶことにする。 K, K' 点の近傍では $E_{\pm}(\mathbf{K} + \mathbf{k}) = E_{\pm}(\mathbf{K}' + \mathbf{k}) = \pm \hbar v k$ と近似され、円錐型の線形バンド（ディラックコーン）が得られる。ここで \mathbf{k} は \mathbf{K} または \mathbf{K}' から測った相対波数であり、また

$$v = \frac{\sqrt{3} a \gamma_0}{2 \hbar} \quad (26)$$

は速度の期待値を与えるパラメータである。実験的に知られているパラメータ $\gamma_0 \sim 3\text{eV}$, $a \approx 0.246\text{nm}$ から求めると $v \sim 1 \times 10^6\text{m/s}$ となり、光速のおよそ $1/300$ である。円錐の頂点、すなわち $k = 0$ は伝導帯と価電子帯が波数空間上の一点で接する特別な点であり、ディラック点と呼ばれる。

K 点近傍における有効ハミルトニアンは、式 (24) の $H(\mathbf{k})$ を \mathbf{k} に関して \mathbf{K} 付近で 1 次まで展開し、相対波数 $\mathbf{k} - \mathbf{K}$ を \mathbf{k} に置き換えることによって得られる。

$$H_K(\mathbf{k}) = \hbar v \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix} = \hbar v (\sigma_x k_x + \sigma_y k_y). \quad (27)$$

これは 2 次元の Weyl ハミルトニアンと呼ばれ、質量ゼロの相対論的粒子（近似的にはニュートリノ）が従う方程式と数学的に同等である。 K' 点に関しても同様の議論が可能で、

$$H_{K'}(\mathbf{k}) = \hbar v (-\sigma_x k_x + \sigma_y k_y) \quad (28)$$

を得る。 k_x が $-k_x$ になっただけである。ユニタリ変換で f_A と f_B の順番を入れ替えると $\mathcal{H}_{K'} = -\hbar v (\sigma_x k_x + \sigma_y k_y)$ と書くことができ、 K とは反対巻きのワイル方程式に対応する。

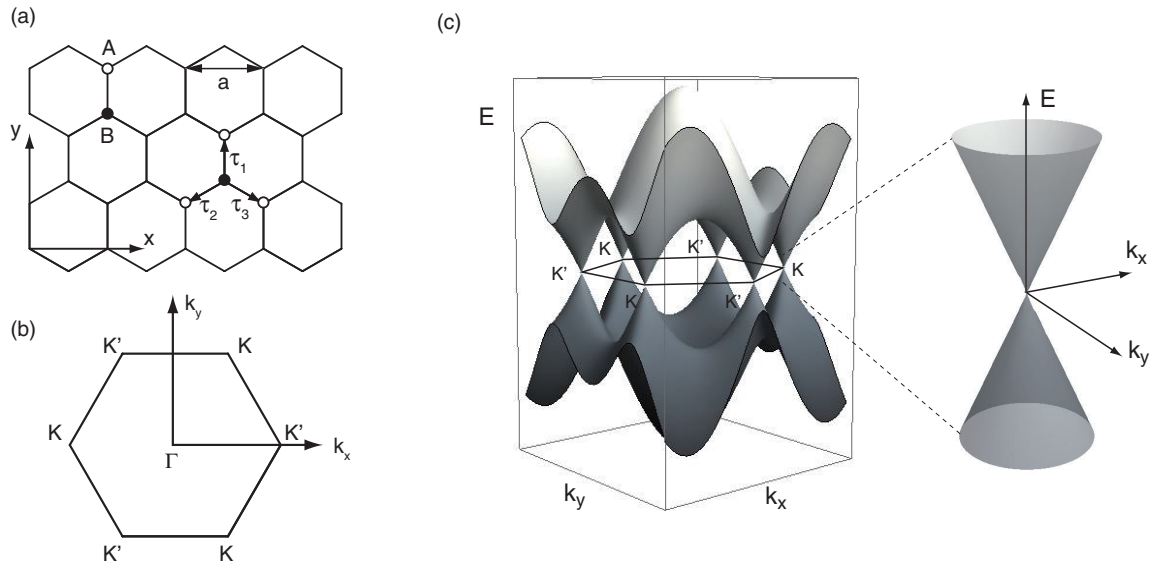


図 1: 単層グラフェンの (a) 結晶構造、(b) 第 1 ブリルアンゾーンと (c) バンド構造。

さて、以上の議論からグラフェンのバンドが K, K' と呼ばれる点で接することがわかったが、これはあくまでこの近似の範囲の中の話である。もし、上のモデルで取り入れていないより遠くの飛び移り積分や、その他細かい補正を加えると、もしかしたらバンド接点に少しかだけギャップが開いてしまうことは無いのだろうか？実は、スピン軌道相互作用が無視できて、かつ、系に固有の対称性が破られない限り、いろんな補正を加えたとしてもバンド接点はなくなることが知られている。これを証明するのに、許される補正項をすべて試してギャップが開くかどうか見る必要はなく、Berry 位相を用いて見事に証明することができる。それを次の項で見てみよう。

3.2 グラフェンにおける Berry 位相

結晶中のハミルトニアン $H(\mathbf{k})$ のプロット波数 $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ をパラメータとみなすと、2章の要領で Berry 位相を計算することができる。 K 点近傍における有効ハミルトニアン $H_K(\mathbf{k})$ [式 (27)] に対して実際に計算を行ってみよう。ハミルトニアンは $H_K = \hbar v \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}$ と書けるので、2.2 節のスピン 1/2 の系と全く同じである。但し外部磁場に当たる部分は $(k_x, k_y, 0)$ なので、平面上しか動かない。

$(k_x, k_y) = k(\cos \phi, \sin \phi)$ と極座標で表示する。 $H_K(\mathbf{k})$ のエネルギー固有値は $E = \pm \hbar v k$ であり、対応する固有ベクトルは

$$|\phi_+(\mathbf{R})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad |\phi_-(\mathbf{R})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad (29)$$

ここから直ちに、Berry 接続は

$$\mathbf{a}_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{k}} \phi \quad (30)$$

となる。従って、正の方向に 1 周回る経路 C に対しては

$$\gamma_{\pm}[C] = - \oint_C \mathbf{a}_{\pm}(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k} = \begin{cases} -\pi & C \text{ が原点 } (k_x, k_y) = (0, 0) \text{ を囲む場合} \\ 0 & C \text{ が原点を囲まない場合} \end{cases} \quad (31)$$

となる。 (k_x, k_y) 空間を実空間と見立て、 $\mathbf{a}_n(\mathbf{k})$ をその空間上の「ベクトルポテンシャル」とみなすと、それが作る Berry 曲率 $\mathbf{F}_n(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{a}_n(\mathbf{k})$ は「磁場」に相当するのだった。ベリー位相 [式 (31)] は、 C の囲む磁束に当たる量なので、今の場合は、原点に大きさ π の「磁束」が存在するということになる。即ち、

$$\mathbf{F}_{\pm}(\mathbf{k}) = \pi\delta(\mathbf{k}). \quad (32)$$

Berry 曲率はバンドが接する $\mathbf{k} = (0, 0)$ に特異的に存在するだけで、それ以外の場所ではゼロである。

3.3 Berry 位相と空間反転、時間反転

グラフェンで Berry 曲率はバンド接点以外で消えるという性質は、実は系の「空間反転対称性」と「時間反転対称性」に起因する一般的な性質である。このことは以下のように証明できる [4]。空間反転対称性は \mathbf{r} を $-\mathbf{r}$ にする操作であり、また時間反転対称性は、(スピンを考えない場合は) 波動関数の複素共役を取る操作である。グラフェンの蜂の巣格子は明らかに点対称な形であるので空間反転に対して対称である。またグラフェン自身に磁性はなく、また外部磁場もないので、時間反転対称である。系に空間反転対称性と時間反転対称性がある場合、 $\psi(\mathbf{r})$ がハミルトニアン固有状態であるならば、 $\psi(-\mathbf{r})$ と $\psi^*(\mathbf{r})$ もまた、同じ固有エネルギーを持つ固有状態である。

さて、いま空間反転対称性と時間反転対称性のある結晶を考える。スピン軌道相互作用は無いものとする。ハミルトニアン固有状態はブロッホの定理より $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ と書ける。 $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ は結晶と同じ周期を持つ周期関数である。この状態を空間反転すると $\psi_{n\mathbf{k}}(-\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(-\mathbf{r})$ となる。これもまた系の固有関数である。ブロッホ因子が $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ となっているので、これは波数 $-\mathbf{k}$ に属する状態である。この点でバンドに縮退が無いとすると、この波動関数は、 $\psi_{n,-\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ と位相係数を除いて等しいことが要請される。この位相係数は 1 になるようにゲージを決めたとすれば

$$u_{n,-\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{k}}(-\mathbf{r}) \quad (33)$$

を得る。つまり、 \mathbf{k} と $-\mathbf{k}$ という異なるブロッホ波数での波動関数の間の関係が導かれた。これより直ちに \mathbf{k} と $-\mathbf{k}$ での Berry 曲率の間の関係が得られる。

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_n(\mathbf{k}) &= -i\nabla_{\mathbf{k}} \times \langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \\ &= -i\nabla_{\mathbf{k}} \times \langle u_{n,-\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n,-\mathbf{k}} \rangle \\ &= -i\nabla_{-\mathbf{k}} \times \langle u_{n,-\mathbf{k}} | \nabla_{-\mathbf{k}} | u_{n,-\mathbf{k}} \rangle = \mathbf{F}_n(-\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (34)$$

1 行目から 2 行目に行くときに式 (33) を使った。また $u_{n,-\mathbf{k}}$ の中の引数が \mathbf{r} が $-\mathbf{r}$ になっているが、 \mathbf{r} で積分してしまうので結果には関係ない。

時間反転に対してもこれとよく似た議論が可能である。状態 $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ を時間反転すると $\psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})$ となり、これもまた系の固有関数である。やはりブロッホ因子が $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ となっているので、これも波数 $-\mathbf{k}$ に属する波動関数である。この点でバンドに縮退が無いとしているので、この波動関数は、 $\psi_{n,-\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ と位相係数を除いて等しいことが要請される。この位相係数は 1 になるようにゲージを決めたとすれば

$$u_{n,-\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \quad (35)$$

を得る。 \mathbf{k} と $-\mathbf{k}$ の波動関数の間のもう一つの関係が得られた。これにより、

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_n(\mathbf{k}) &= -i\nabla_{\mathbf{k}} \times \langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \\ &= -i\nabla_{\mathbf{k}} \times \langle u_{n,-\mathbf{k}}^* | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n,-\mathbf{k}}^* \rangle \\ &= -i\nabla_{-\mathbf{k}} \times [\langle u_{n,-\mathbf{k}} | \nabla_{-\mathbf{k}} | u_{n,-\mathbf{k}} \rangle]^* \\ &= +i\nabla_{-\mathbf{k}} \times \langle u_{n,-\mathbf{k}} | \nabla_{-\mathbf{k}} | u_{n,-\mathbf{k}} \rangle = -\mathbf{F}_n(-\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (36)$$

となる。3行目から4行目に行くときに $\langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle$ が純虚数であることを用いている。これは規格化条件 $\langle u_{n\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle = 1$ の両辺を \mathbf{k} で微分した $\langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} \rangle + \langle \nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle = 0$ より直ちに導かれる。

式(34)と式(36)より、直ちに $\mathbf{F}_n(\mathbf{k}) = 0$ が結論される。空間反転の方と時間反転の方で異なるゲージ固定条件を使っているので、直接比べていいのか?と思うかもしれないが、2.3にも述べたように Berry 曲率 $\mathbf{F}_n(\mathbf{k})$ はゲージ不変なので、このような議論が可能となる。まとめると、空間反転対称性と時間反転対称性をもつ結晶において、縮退していない点での Berry 曲率はゼロである。

先のグラフェンはもちろんこの一例である。ただし、この場合のハミルトニアンとして一つのバレー近傍の $H_K(\mathbf{k})$ または $H_{K'}(\mathbf{k})$ を考えてはならない。元の系で考えると K 点近傍の波数が反転すると K' 点近傍になるためである。上の議論は、 K も K' も含んだ全ハミルトニアンに対しての議論として正しい。

3.4 グラフェンにおけるバンド接点の安定性

さて、ここまで来ればグラフェンのバンド接点の安定性は簡単に理解することができる。式(31)より、経路 C が原点を囲むときの Berry 位相は $\gamma_n[C] = -\pi$ であった。ここで空間反転対称性、時間反転対称性を破らない無限に小さい摂動をいれて、原点でのバンド縮退が解けて、少しだけギャップが開いたとしよう。すると経路 C 中のすべての波数で、バンドが縮退していないことになる。前節の議論より、縮退していない場所でのベリー曲率(仮想的な「磁場」)はゼロであるので、

$$\gamma_n[C] = - \int_S \mathbf{F}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{S} = 0 \quad (37)$$

となる。つまり縮退が消えた瞬間、あったはずの「磁束」が消えてしまったことになる。しかし、摂動に対して固有関数は連続的に変わるはずなのでそこから計算される量が π から 0 に不連続に飛ぶことはありえない。結局この矛盾の原因はギャップがあいたと仮定したことであり、これにより、空間反転対称性、時間反転対称性を破らない限りギャップは開かない、ということが結論されるのである。これは強力な議論で、たとえばグラフェンの持つ空間反転、時間反転以外の対称性を破っても、バンド接点はなくならないことを示している。たとえばグラフェンを一軸方向に引っ張ることで、本来あった六角形の 60 度回転対称性は破れるが、空間反転は破らないので、バンド接点は波数空間上を移動するだけでギャップは開かない。但し極端に摂動を大きくすると、 K 点のバンド接点と K' 点のバンド接点が波数空間上で出会って対消滅し、ギャップを開けることは原理的には可能である。

4 おわりに

Berry 位相は様々な物質や物理現象に顔を出し、現代の物性物理学には欠かすことのできない概念である。最後に、関連するトピックをいくつか挙げたい。非自明な Berry 位相を持つバンド接点はグラフェンに限らず、様々な物質に見られる。例えば、グラフェンの 3次元版に当たるのが「ワイル半金属」と呼ばれる物質であり [5]、3次元波数 $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ に対して $H(\mathbf{k}) = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}$ という形のハミルトニアンを持つ。バンドは原点で縮退し、その Berry 曲率は 3次元空間を放射状に広がる磁気単極子の作る磁場として表現される。バンド接点は仮想的磁場の湧き出しまたは吸い込みに対応し、その湧き出し量が量子化するために、単独では消滅できず、これがバンド接点の安定性を保証する。

非自明なトポロジーを持つバンド構造は、試料に端があるときの表面状態の存在と密接に関わる。よく知られた例がグラフェンで、試料端に局在した「エッジ状態」と呼ばれる特殊な状態が現れる [6]。表面状態の有無は、実はバンドから計算される Berry 接続の巻つき数を計算することで確かめることができる。Berry 接続自体は端のない無限系(バルク)の固有状態から計算される量であり、これが表面のある系の性質を特徴づけるのは非常に

興味深い。バルクと表面の対応は、量子ホール系、トポロジカル絶縁体、トポロジカル超伝導体にもみられる普遍的な特徴である [7]。

また、Berry 位相が観測に直接現れる顕著な例が、整数量子ホール効果である。[8, 9] 量子化ホール伝導度は k 空間の上の Berry 曲率の合計で書き表され、閉曲面を貫く仮想的磁束が量子化されることから、ホール伝導度の量子化が導かれる。これは固体のバンドに現れるトポロジカル構造として認識された最初期の例の一つである。

参考文献

- [1] M. V. Berry, Proc. R. Soc. London, Ser. **A** **392**, 45 (1984).
- [2] P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. (London) **A** **133**, 60 (1931).
- [3] T. Ando, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 777 (2005), and references cited therein.
- [4] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **93**, 206602 (2004).
- [5] N. P. Armitage, E. J. Mele, and Ashvin Vishwanath, Rev. Mod. Phys. **90**, 015001 (2018), , and references cited therein.
- [6] K. Wakabayashi, M. Fujita, H. Ajiki, and M. Sigrist, Phys. Rev. **B59**, 8271 (1999).
- [7] 野村 健太郎, 『トポロジカル絶縁体・超伝導体 (現代理論物理学シリーズ)』 (丸善出版, 2016).
- [8] D. Thouless, M. Kohmoto, M. Nightingale, and M. Den Nijs, Phys. Rev. Lett. **49**, 405 (1982).
- [9] M. Kohmoto, Ann. Phys. (N.Y.) **160**, 343 (1985).