

トポロジカル物質入門

村上 修一

東京工業大学理学院

概要

トポロジカル絶縁体、トポロジカル金属などのトポロジカル物質が理論・実験両面で注目を集めている。近年の研究により、結晶のバンド構造がトポロジーによって分類され、上記のような物質においてはバンド構造が非自明な構造を持っていることが明らかになっている。これはちょうど、トポロジーによってドーナツとボールとが、穴の数によって区別されることと類似しているが、トポロジカル物質においては波数空間でのトポロジーを問題にするため、直感的な理解はそれほど単純ではない。本講義ではこうしたトポロジカル物質に関して、初学者向けに解説を行う。こうしたトポロジカル物質にはさまざまなクラスがあり、ある種のクラスのトポロジカル物質では、物質のバンド構造の非自明なトポロジーに起因して、特異なエッジ状態・表面状態が現れることが知られていて、そのエッジ状態・表面状態の出現の裏にはトポロジーに基づく美しい理論体系がある。さらに重要なことにはこうした理論に基づく表面状態が、単に理論だけにとどまらず実際の様々な物質で観測されることであり、しかもそのような表面状態は、非トポロジカル物質では実現されない特異な表面状態である。講義では、こうした事柄について、理論体系から実際の物質、実験に至るまで概論を説明する。

1 はじめに：固体のバンド構造と波数空間のベリー曲率

トポロジカル絶縁体の理論的提案 [1–6] 以来 10 年以上経過し、さまざまなトポロジカル物質が提案されてきた。もっと以前に提案された、最初のトポロジカル系は、整数量子ホール系 [7] である。これらを出発点として、近年ではさまざまなカテゴリーのトポロジカル物質が提案されている。特に、量子ホール系とは異なり、トポロジカル絶縁体は現実の 3 次元系でも可能である [8] 点、実験や物質探索の幅を大きく広げることにつながった。こうしたトポロジカル物質の多くでは、バルク、つまり物質内部は絶縁体である一方で、物質の表面や縁など、物質の境界に金属状態（ギャップレス状態）が出る。この表面状態はトポロジカルな秩序から来ており、通常の状態とは素性が異なるため、特異な現象が観測される。特にこうしたトポロジカル秩序に起因した表面状態は、ある種の摂動に対して頑強、つまり金属性を保つことが分かっている [3,4]。これらは（広義の）トポロジカル絶縁体と呼ばれる。またこうした研究の進展により、トポロジカル物質の別のクラスとして、トポロジカル金属ないしトポロジカル半金属と呼ばれる系が理論的に提案されてきて、これも盛んに研究されている。こうした系ではバンドギャップが閉じているため金属ではあるが、伝導帯と価電子帯との間のギャップが閉じる箇所が、 k 空間で点もしくは線になっていて、その縮退がトポロジカルな特徴を持っている。以下ではこうしたトポロジカル物質について概説する。

1.1 ブロッホ定理と波数空間のベリー位相

固体結晶中の電子の固有状態はブロッホ波をなしており、その波動関数はブロッホ波数 \mathbf{k} に依存する。この依存性にはベリー曲率と呼ばれる微分幾何学的な構造が入る。 \mathbf{k} 空間が「曲がっている」という抽象的な概念が、さまざまな物理現象に直接顔を出すことは興味深い。例えばこのベリー曲率により多様なホール効果や種々のトポロジカル相がもたらされる。固体結晶では原子核が周期的に並んでいるため、電子に対するハミルトニアンは結晶の基本並進ベクトル \mathbf{a} の並進に関して不変である。そのため、ブロッホの定理 (Bloch theorem) から、結晶中の電子の波動関数は $\psi(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ という形になる。 $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ は $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a})$ を満たす。 \mathbf{k} はブロッホ波数 (Bloch wavevector) である。 $\psi(\mathbf{r})$ はハミルトニアン \hat{H} の固有状態なので $\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$ であることから、ブロッホ波動関数の周期部分 $u_{\mathbf{k}}$ に関する固有方程式が

$$H_{\mathbf{k}}u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{n,\mathbf{k}}u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad H_{\mathbf{k}} \equiv e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\hat{H}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (1)$$

の形となる．例として $\hat{H} = \frac{(-i\hbar\nabla)^2}{2m} + V(\mathbf{r})$ の場合は、 $H_{\mathbf{k}} = \frac{(-i\hbar\nabla + \hbar\mathbf{k})^2}{2m} + V(\mathbf{r})$ となる．添え字 n は、 n 番目のバンドという意味である．そこで \mathbf{k} 空間でのベリ－接続およびベリ－曲率 [9] をそれぞれ

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{k}) = i\langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle, \Rightarrow A_{n,i}(\mathbf{k}) = i \int_{\text{unit cell}} u_{n\mathbf{k}}^\dagger \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial k_i} d^d x, \quad (2)$$

$$\mathbf{B}_n(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{k}), \Rightarrow B_{n,i}(\mathbf{k}) = i\varepsilon_{ijz} \left\langle \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial k_i} \left| \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial k_j} \right. \right\rangle. \quad (3)$$

で定義する．また式 (2) 中での積分は、結晶の単位胞内での積分である．

1.2 ホール伝導率とベリ－曲率

2次元系で、電場 \mathbf{E} を y 軸方向にかけたときに、 x 軸方向に電流密度 j_x が生じるホール効果 (Hall effect) を考える．特に絶対零度では、 $j_x = \sigma_{xy} E_y$ と表したときのホール伝導率 σ_{xy} は、線形応答理論から、

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h} \sum_n \int_{E_{n\mathbf{k}} < E_F} \frac{d^2 k}{2\pi} B_{n,z}(\mathbf{k}) \quad (4)$$

となり、フェルミエネルギー E_F 以下の全状態に関しベリ－曲率を積分して $-\frac{e^2}{h}$ をかけるとホール伝導率 σ_{xy} となる．特に2次元のバンド絶縁体では、絶対零度で、エネルギーがフェルミエネルギー E_F 以下で充填されたバンドと、 E_F 以上で空のバンドの二つに分かれる (図 1(a))．そのためホール伝導率 (4) は

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h} N, \quad N = \sum_{n:\text{filled}} \text{Ch}_n, \quad \text{Ch}_n \equiv \int_{\text{BZ}} \frac{d^2 k}{2\pi} B_{n,z}(\mathbf{k}) \quad (5)$$

のように、充填されたバンドに関する総和となる． Ch_n はバンドごとに定義される数であり、チャーン数 (Chern number) と呼ばれる．実はこのチャーン数 Ch_n は必ず整数になる [10]．ただしこの n 番目のバンドは他のバンドと、バンドギャップで隔てられているとする．すると σ_{xy} は $\frac{e^2}{h}$ の整数倍となり、2次元バンド絶縁体ではホール伝導率が必ず量子化するという、整数量子ホール効果 (integer quantum Hall effect) が導かれる [10]．チャーン数は、トポロジカルナンバー (topological number) ないし、トポロジカル不変量 (topological invariant) の1つであって、バンド間のギャップを閉じないように系を連続変形しても、注目しているバンドのチャーン数は変化しない．これはチャーン数が整数に量子化されているからである．

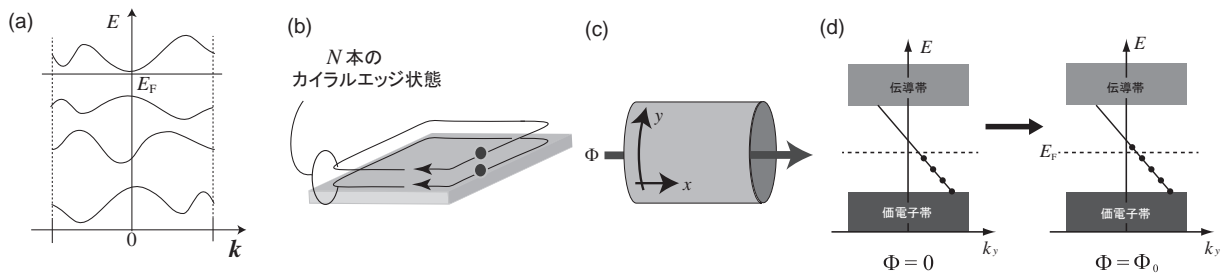


図 1: (a) バンド絶縁体のバンド構造の模式図．(b) 量子ホール系のエッジ状態の模式図．(c) ラフリンの思考実験の模式図．(d) 磁束の変化による、右側のエッジ状態の電荷量変化．エッジには y 軸負の向きのカイラルエッジ状態が 1 本あるとしている．

実はこのチャーン数は、系のエッジ (2次元系の境界) に局在しているエッジ状態の状態数と関係がある．充填されたバンドのチャーン数の和が N のとき、図 1(b) に示すような、時計回りにエッジに沿って回る N

個の状態があることになる。なお $N < 0$ の場合は $|N|$ 個の反時計回りの状態がある。このような一方通行の性質のことをカイラル (chiral) と呼ぶ。チャーン数というバルク (試料内部) の波動関数から計算される量が、エッジ状態の本数と対応するこの非自明な関係をバルクエッジ対応 (bulk-edge correspondence) という。これは数学的には指数定理として知られ、物理では、ラフリンの思考実験 (Laughlin gedanken experiment) [11] から導き出されるものであり、以下ではこのラフリンの思考実験について説明する。

絶対零度の2次元バンド絶縁体を考え、円筒状に丸める (図1(c))。 y 方向の周の長さを L_y としこの方向に周期的境界条件を課し、一方 x 方向には十分長いとする。この円筒内を軸方向に貫く磁束 Φ を考え、 $t = 0$ では $\Phi = 0$ とし、時刻とともに一定の割合で増加させ、時刻 $t = T$ で磁束量子1本分 $\Phi = \phi_0 \equiv h/e$ に等しいとする。すると磁束の変化により、 y 方向に誘導電場 $\frac{h}{eTL_y}$ が生じる。系のホール伝導率を σ_{xy} とすると、この誘導電場は x 方向の電流 $j_x = \frac{h}{eTL_y} \sigma_{xy}$ を誘起する。 $t = 0 \sim t = T$ の間に流れた電荷の総和 Q は $Q = j_x L_y T = \frac{h}{e} \sigma_{xy} = -Ne$ となる。ここでは式 (5) を用いた。チャーン数は整数なので、円筒を左端から右端へ N 個の電子が移動したことになる。

この電子はどのように移動したかを考えてみる。この磁束は境界条件の位相のひねりに対応する。磁束 $\Phi = 0$ のときは y 方向の波数 k_y は、周期的境界条件から $k_y = \frac{2\pi}{L_y} n$ (n :整数) に量子化される。これに磁束が入ると許される波数が一斉にマイナス向きにシフトし、 $t = 0$ から $t = T$ での k_y の減少分は $\frac{2\pi}{L_y}$ である。このように許される波数がずれたときに、例えば右端での電子の個数がどう変わるか考える。右の端に局在しているエッジ状態があり、それが負の傾きの分散 (E の波数 k_y 依存性) を持つとすると (図1(d))、許される波数が時間変化し、時間 T の間に右端のエッジの上の電子数が1増える。したがって右端に、負の傾きのエッジ状態が N 本存在すると、上で述べた N 個の電子の移動を説明できる。同様にして、左端のエッジでは、フェルミエネルギーにおける正の傾きを持つ N 本のエッジ状態がある。なお、バンド分散の傾きは実空間での速度に対応する: $v_y = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_y}$ 。したがって図1(b)のようにエッジには必ず系に時計回りのエッジ状態が N 個あることになる。まとめると、バルクのギャップ中にフェルミエネルギー E_F があるとき、

$$N = \sum_{n:\text{filled}} \text{Ch}_n \quad (6)$$

は、 E_F 上にある時計回りカイラルエッジ状態の本数に等しい。

1.3 (広義の) 絶縁体でのホール効果と量子化

フェルミエネルギー上にギャップがあると、絶対零度でホール伝導率が e^2/h の整数倍に量子化し、その「整数」がチャーン数であり、またそれがカイラルエッジ状態の本数であることを説明してきた。こうしたことが起こる最も有名な例が(狭義の) 整数量子ホール効果 [7]、つまり2次元電子ガスに垂直に強磁場をかけた場合の、ホール伝導率の量子化である。紙面の制約で詳細を省略するが、質量 m の2次元電子ガスに、面直方向に一樣な磁束密度 $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ をかけると、固有エネルギーは $E_n = \hbar\omega_c (n + \frac{1}{2})$, $n = 0, 1, 2, \dots$ ($\omega_c \equiv \frac{eB}{m}$) と離散化される。この離散的な準位はランダウ準位 (Landau level) と呼ばれる。計算すると各ランダウ準位のチャーン数はすべて +1 となることがわかる。ここから、ギャップ内にフェルミエネルギーがありそれより下にランダウ準位が N 個あると、ホール伝導率は Ne^2/h に量子化される。

量子ホール効果は時間反転対称性の破れが必要であり、上の例は外部磁場によるものだが、別の例として、強磁性絶縁体の磁化によるものもあり、量子異常ホール効果 (quantum anomalous Hall effect) と呼ばれる。この可能性は [12] において最初に理論的に示唆され、最近 Bi_2Te_3 に Cr を付加した薄膜で観測された [13]。この系は自発磁化の向きに応じて $N = \pm 1$ となり、 $\pm e^2/h$ の量子化ホール伝導率を示す。

2 トポロジカル絶縁体

量子ホール系、すなわちチャーン数がゼロにならないためには、時間反転対称性が破れている必要がある。なぜなら、時間反転操作によってチャーン数 Ch は符号を変えるため、時間反転対称性があると $\text{Ch} = -\text{Ch}$

より、 $Ch = 0$ が成立するためである。一方時間反転対称性がある場合に実現しうるトポロジカル相としてトポロジカル絶縁体 [1–5, 8] (topological insulator) がある。これは非磁性絶縁体での新しい量子相で、2005年の理論的提唱の後さまざまな物質で実験で観測されている。図2に、2次元トポロジカル絶縁体 [1, 2] および3次元トポロジカル絶縁体 [8] の模式図を示した。バルク (試料内部) のバンド構造にはフェルミエネルギーにギャップが開いて非磁性絶縁体であり、一方そのエッジ (2次元の場合) や表面 (3次元の場合) に、フェルミエネルギーをまたぐ金属的な状態があり、金属的伝導を担う。このエッジ/表面状態は、互いに逆向きのスピンの向きが逆向きに流れる状態対からなる。このような状態対の性質はヘリカル (helical) と呼ばれる。このエッジや表面のヘリカルスピン流は平衡状態でも常に流れており、一方この試料に端子をつけて電場を印加すると、スピン流をホール効果として取り出せる。すなわち、トポロジカル絶縁体はスピンホール効果 [14] の絶縁体版とみなせて、量子スピンホール系 (quantum spin Hall system) とも呼ばれる。

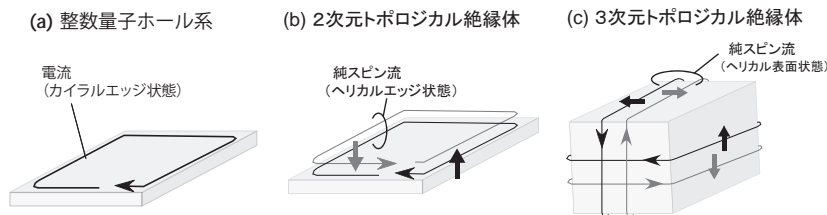


図 2: (a) 整数量子ホール系、(b) 2次元および (c) 3次元トポロジカル絶縁体の模式図

2.1 時間反転対称性

トポロジカル絶縁体は時間反転対称性が保たれている系でのみ実現しうる。物性においては時間反転対称性が保たれているというのは、外部磁場がゼロで磁性秩序がない (非磁性) ということと考えればよい。つまり外部磁場ゼロ、かつ非磁性であることを仮定しておく。電子のようなスピン $\frac{1}{2}$ の粒子では時間反転演算子 Θ は $\Theta = i\sigma_y K$ と表される。ただし σ_y はパウリ行列で、 K は複素共役演算子である。すなわち $\psi = {}^t(\psi_\uparrow \ \psi_\downarrow)$ として $\Theta\psi_\uparrow = \psi_\downarrow^*$ 、 $\Theta\psi_\downarrow = -\psi_\uparrow^*$ となる。なお $\Theta^2 = -1$ も簡単に示せる。

いま、ハミルトニアン \hat{H} が時間反転で不変とすると $[\hat{H}, \Theta] = 0$ 、つまり $\Theta\hat{H}\Theta^{-1} = \hat{H}$ なので、(1) より

$$\Theta H_{\mathbf{k}} \Theta^{-1} = H_{-\mathbf{k}} \quad (7)$$

となる。この時間反転対称性が固有状態の性質に反映される。式 (1): $H_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} = E_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}$ から

$$\Theta H_{\mathbf{k}} \Theta^{-1} \Theta u_{n\mathbf{k}} = E_{n\mathbf{k}} \Theta u_{n\mathbf{k}} \Rightarrow H_{-\mathbf{k}} (\Theta u_{n\mathbf{k}}) = E_{n\mathbf{k}} (\Theta u_{n\mathbf{k}}) \quad (8)$$

となるので、エネルギーバンド構造は $\mathbf{k} \leftrightarrow -\mathbf{k}$ で不変であり、つまり $\mathbf{k} = 0$ に関して対称であることがいえる。これは時間反転操作が \mathbf{k} を $-\mathbf{k}$ に移すことから理解される。

時間反転対称性のある系では、時間反転不変運動量 (time-reversal invariant momenta, TRIM) という運動量 (つまり波数) が、重要な役割を果たす。これは $\mathbf{k} \equiv -\mathbf{k} \pmod{\mathbf{G}}$ で定義され、 $\pmod{\mathbf{G}}$ は逆格子ベクトル \mathbf{G} を法としているという意味であって、つまり \mathbf{k} と $-\mathbf{k}$ とはブロッホ波数としては等価であることを意味する。2次元系では、逆格子基本ベクトルを $\mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2$ とすると、TRIM が 4 つ、 $\mathbf{k} = 0, \mathbf{G}_1/2, \mathbf{G}_2/2, (\mathbf{G}_1 + \mathbf{G}_2)/2$ となり (図 3(a)) これらの TRIM を $\mathbf{k} = \Gamma_i (i = 1, 2, 3, 4)$ と書く。また 3次元系では、逆格子基本ベクトルを $\mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2, \mathbf{G}_3$ とすると、TRIM が、 $\mathbf{k} = \frac{1}{2}(n_1\mathbf{G}_1 + n_2\mathbf{G}_2 + n_3\mathbf{G}_3)$ ($n_1, n_2, n_3 = 0, 1$) の 8 個存在し (図 3(b))、これらの TRIM を $\mathbf{k} = \Gamma_i (i = 1, 2, \dots, 8)$ と書く。

これらの TRIM では固有エネルギーが必ず 2 重縮退を持つことが示せる。なぜならまず定義より、 \mathbf{k} が TRIM の一つであるときには $H_{\mathbf{k}} = H_{-\mathbf{k}}$ なので、(8) から

$$H_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} = E_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}, \quad H_{\mathbf{k}} (\Theta u_{n\mathbf{k}}) = E_{n\mathbf{k}} (\Theta u_{n\mathbf{k}}) \quad (9)$$

がいえ。つまり u_{nk} と Θu_{nk} とは同じ固有値をもっている。しかもこの二つは互いに直交する： $(\langle u_{nk}^\dagger \cdot (\Theta u_{nk}) = (u_{\uparrow}^*, u_{\downarrow}^*) \cdot {}^t(u_{\downarrow}^*, -u_{\uparrow}^*) \equiv 0.$) まとめると、時間反転対称性のある系での TRIM においては固有状態は必ず 2 重縮退し、その 2 状態は互いに時間反転操作で移りあう。これはクラマースの定理 (Kramers theorem) である。

従って一般にバンド構造は、図 3(c) の模式図のように、TRIM でのみ 2 重縮退が現れる。ここでもう一つ重要な概念として、空間反転対称性 ((space) inversion symmetry) がある。これはある点に関して系全体を点対称移動 ($\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$) する操作の下での不変性である。固体結晶では多くの結晶が空間反転対称性を有するが、空間反転対称性を持たない結晶も存在する。仮に系に空間反転対称性があると仮定すると、 $P\hat{H}P^{-1} = \hat{H}$ (P : 空間反転演算子) となる。したがって、 $PH_{\mathbf{k}}P^{-1} = H_{-\mathbf{k}}$ となり、空間反転は波数を \mathbf{k} を $-\mathbf{k}$ とする。つまり時間反転対称性・空間反転対称性が両方あると、 $(P\Theta)H_{\mathbf{k}}(P\Theta)^{-1} = H_{\mathbf{k}}$ となり、任意の波数 \mathbf{k} において、 $P\Theta u_{nk}$ と u_{nk} とは縮退し、互いに直交することが示せる。

$$H_{\mathbf{k}}u_{nk} = E_{nk}u_{nk}, \quad H_{\mathbf{k}}(P\Theta u_{nk}) = E_{nk}(P\Theta u_{nk}). \tag{10}$$

すなわち、時間反転対称性と空間反転対称性をともに持つ系では、任意の波数 \mathbf{k} で 2 重縮退していて、バンド構造の模式図は図 3(d) となる。

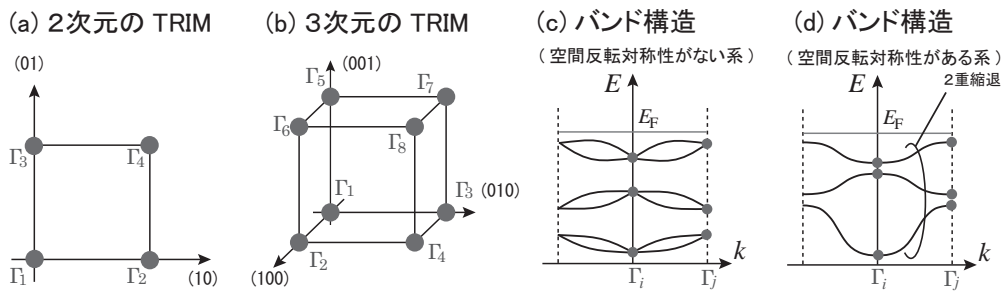


図 3: (a) 2次元系での TRIM. (b) 3次元系での TRIM. (c)(d) 時間反転対称性がある場合のバンド構造の模式図. (c) は空間反転対称性がない場合、(d) は空間反転対称性がある場合を示す。

2.2 トポロジカル絶縁体の性質

これまでのことから、上向きスピンと下向きスピンの 2 種で構成された系を考え、上向きスピンはチャーン数 $Ch = 1$ の量子ホール系、下向きスピンはチャーン数 $Ch = -1$ の量子ホール系とすると、これは実は 2次元トポロジカル絶縁体の最も簡単な例となっている。これを実現するために、上向きスピンには $+z$ 向きの磁場、下向きスピンには $-z$ 向きの磁場がかかっているとす。これらの重ね合わせが 2次元トポロジカル絶縁体である [1, 2]。このように上向きスピンと下向きスピンの間で互いに逆向きとなる磁場を実現するのは、通常の磁場では無理である。しかし一方で、固体中に内在するスピン軌道相互作用はこのような作用をし、2次元トポロジカル絶縁体状態を実現しうる。ここで、上向き・下向きスピンと述べたがこれは最も簡単な場合であって、一般には 2次元面に対するエッジ状態のスピンの向きはさまざまである。一方、どんな 2次元トポロジカル絶縁体においても、時間反転対称性から、時計回りと反時計回りに流れているスピンが互いに逆向きになっている。これらの二つのエッジ状態は時間反転対称性からクラマース縮退しているの、このような二つの状態の対をクラマース対 (Kramers pair) と呼ぶ。

このようなエッジ状態は、例えば半平面のトポロジカル絶縁体を見るとそのバンド構造に現れる (図 4(a))。エッジに沿う方向の波数 k を横軸にとっている。絶縁体なのでフェルミエネルギーはバルクギャップ内にある。一方エッジ状態がギャップ中にあり、伝導帯と価電子帯とをつないでいる [1, 2]。時間反転対称性により、エッジ状態の分散は $k = 0$ に関して互いに対称になっており、対称な点同士は互いに逆向き

のスピンの向きを示すことが要請される．さらに粒子の速度はこのバンド分散の傾きから $v = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$ と表されるので、このトポロジカル絶縁体のエッジ状態 (図 4(a)) を実空間で表示すると、図 4(b) に示す形になる．

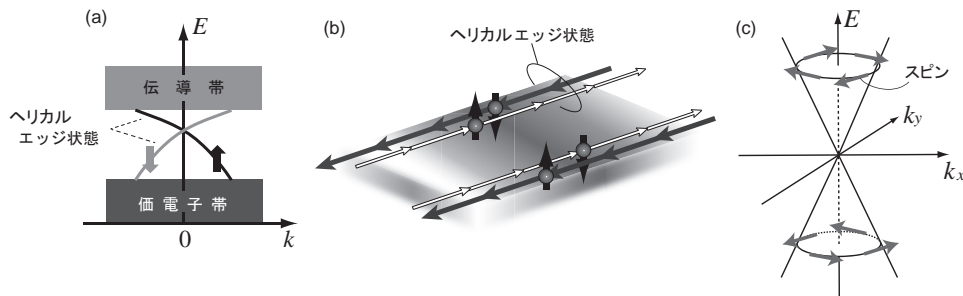


図 4: (a)2次元トポロジカル絶縁体のバンド構造の模式図．(b) エッジ状態の模式図．(c)3次元トポロジカル絶縁体表面のディラックコーン．矢印はスピンの向きを表す．

2.3 Z_2 トポロジカルナンバー

トポロジカル絶縁体を特徴づけるのが、 Z_2 トポロジカル不変量 (Z_2 topological invariant) ないし Z_2 トポロジカルナンバー (Z_2 topological number) [1, 15, 16] である．2次元系は Z_2 トポロジカルナンバーを1個持ち、 $\nu = 0$ と $\nu = 1$ の二つの値をとり、 $\nu = 0$ が通常非磁性絶縁体、 $\nu = 1$ が2次元トポロジカル絶縁体に対応する [15, 16]．前に述べたチャーン数と同じく、 Z_2 トポロジカルナンバーについてもバルクエッジ対応が成立する．つまり Z_2 トポロジカルナンバー ν はエッジ状態の情報を表しているとともに、バルクの系 (無限系) の電子のバンド計算から計算できる．その方法を以下に述べる．なお $\nu = 0$ と $\nu = 1$ とは異なる相で、バルクでの非磁性絶縁体状態を保ったままでは相互に連続変形できない．

2.3.1 2次元系

まず、空間反転対称性が破れている2次元系について説明する．フェルミエネルギー以下のバンドの個数を $2N$ 個 (N : 整数) として、これらのバンドのブロッホ固有状態 $|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$ ($n = 1, 2, \dots, 2N$) に関して、 $2N \times 2N$ 行列 $w(\mathbf{k})$ を $w_{mn}(\mathbf{k}) \equiv \langle u_{m,-\mathbf{k}} | \Theta | u_{n,\mathbf{k}} \rangle$, $m, n = 1, \dots, 2N$ で定義する．この行列 $w(\mathbf{k})$ の、TRIM $\mathbf{k} = \mathbf{\Gamma}_i$ での値は、反対称ユニタリ行列であり、この行列の Pfaffian が定義される．これを用いて、各 TRIM で指数 $\delta_i (= \pm 1)$ を定義し、それら4個の TRIM での指数の積から Z_2 トポロジカルナンバー ν を定義する．

$$(-1)^\nu = \prod_{i=1}^4 \delta_i, \quad \delta_i = \frac{\sqrt{\det[w(\mathbf{\Gamma}_i)]}}{\text{Pf}[w(\mathbf{\Gamma}_i)]} = \pm 1, \quad (11)$$

となる．この計算では実際には、ブリルアンゾーン内全体で波動関数を決める作業が必要になる．

一方空間反転対称性がある系では、計算方法が劇的に簡略化される [16]．空間反転対称性がある系では、各 TRIM は空間反転操作に対して不変 ($\mathbf{k} \equiv -\mathbf{k}$) なので、この点で P とハミルトニアン $H_{\mathbf{k}}$ は可換である．すなわち P と $H_{\mathbf{k}}$ とが同時対角化でき、各固有状態は、空間反転操作 P の固有状態ともなっている． P の固有値をパリティ固有値と呼び、 $P^2 = 1$ からパリティ固有値は $+1$ または -1 となる．このとき、各 TRIM $\mathbf{k} = \mathbf{\Gamma}_i$ でクラマース縮退した状態は同じパリティ固有値を持っている．その TRIM $\mathbf{k} = \mathbf{\Gamma}_i$ において、 E_F 以下の状態についてパリティ固有値を全てかけあわせる (ただし2重縮退しているクラマース対1個について1回ずつかける) 結果、出てきた積を $\delta_i (= \pm 1)$ とし、この δ_i を4個の TRIM について積をとって

$$(-1)^\nu = \prod_{i=1}^4 \delta_i, \quad \delta_i = \prod_{m=1}^N \xi_{2m}(\mathbf{\Gamma}_i), \quad (12)$$

として、 Z_2 トポロジカルナンバー ν を定義する。 $\xi_{2m}(\Gamma_i) (= \pm 1)$ は TRIM Γ_i での $2m$ 番目のクラマース対のパリティ固有値である。

2.3.2 3次元系

3次元系では、図3(b)に示すように TRIM は8個存在し、各 TRIM $\mathbf{k} = \Gamma_i$ での指数を2次元の場合と同様に定義する。3次元の場合は、この指数から以下のように、 Z_2 トポロジカルナンバー ($= 0, 1$) を $\nu_0, \nu_1, \nu_2, \nu_3$ の4個定義し、まとめて $\nu_0; (\nu_1\nu_2\nu_3)$ と書かれる [8, 16]。

$$(-1)^{\nu_0} = \prod_{i=1}^8 \delta_i \quad (-1)^{\nu_j} = \prod_{i=(n_1 n_2 n_3), n_j=1} \delta_i \quad (13)$$

つまり ν_0 はすべての TRIM での指数 δ_i の積から、他の ν_j ($j = 1, 2, 3$) はそれぞれ、逆格子空間での面 $\mathbf{k} = \frac{1}{2}(n_1\mathbf{G}_1 + n_2\mathbf{G}_2 + n_3\mathbf{G}_3)$, $n_j = 1$ 上の TRIM4 個に関する δ_i の積から定義される。このうち ν_0 が最も重要で、 $\nu_0 = 1$ の場合を強いトポロジカル絶縁体 (strong topological insulator)、 $\nu_0 = 0$ の場合を弱いトポロジカル絶縁体 (weak topological insulator) と呼ぶ [8]。強いトポロジカル絶縁体では結晶のどの方向の表面にも必ずギャップ中に表面状態がある。一方弱いトポロジカル絶縁体では結晶表面の方向によってはギャップ中に表面状態がない場合もある。各 TRIM Γ_i での指数 δ_i は、どの TRIM でバンド反転が起こっているかを表している。例えば Bi_2Se_3 や Bi_2Te_3 [22] では、8個の TRIM での指数 δ_i のうち、 $\mathbf{k} = 0$ のみで指数が $\delta = -1$ 、他の全ての TRIM で $\delta_i = +1$ となり、これは $\mathbf{k} = 0$ でバンド反転が起こっていることを示す。これにより (111) 表面では、 Γ 点を射影した $\bar{\Gamma}$ 点で、図4(c)に示すようなディラックコーンが現れる。

2.4 トポロジカル絶縁体の物質

トポロジカル絶縁体となるには時間反転対称性が必要であり、すなわち非磁性絶縁体である必要がある。その上で Z_2 トポロジカルナンバーが非自明であることが条件であり、そのためには一般に重い元素を含んだ化合物であることが多い。今では多くの物質がトポロジカル絶縁体として知られている。

2次元トポロジカル絶縁体の例を2つ挙げる。一つは、ビスマス (Bi) の2層膜である。ビスマスは半金属であるが、2層膜にすると2次元トポロジカル絶縁体となることが理論予言された [17]。Bi の2層膜は不安定で実験での実証は難しいが、いくつかの実験で実証された [18]。もう一つは $\text{CdTe}/\text{HgTe}/\text{CdTe}$ 量子井戸 [19, 20] である。CdTe で HgTe 層をサンドイッチした構造であり、HgTe 層の厚さが $d = d_c = 60\text{\AA}$ 以上になると2次元トポロジカル絶縁体になると理論的に予言され [19]、その後実験 [20] で実証された。量子井戸の厚さ d によりバンド構造が変化し、バンド反転が起こることが分かっている。

3次元トポロジカル絶縁体で最初に提案されたのは $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ 合金 ($0.07 < x < 0.22$) であり、表面フェルミ面の光電子分光による実験 [21] で実証されているが、表面フェルミ面は複雑である。一方最も詳しく研究されている3次元トポロジカル絶縁体は Bi_2Se_3 と Bi_2Te_3 である [22]。バンドギャップは $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ に比べて大きく、また表面状態はディラックコーン (図4(c)) と呼ばれる円錐状のバンドのみからなる。

3 トポロジカル半金属

ここまでの話は広い意味でのトポロジカル絶縁体であり、バルクは絶縁体であるが系のエッジや表面にギャップ内の金属状態があるという状況である。一方で、全く別の系列のトポロジカル物質として、トポロジカル金属ないしトポロジカル半金属と呼ばれるものがある。これは、バンドギャップが閉じる点、つまり伝導帯と価電子帯が縮退する箇所が、 k 空間で点状、線状になるというものである。このような縮退が起こる理由はさまざまであるが、ある場合においてはこうした縮退がトポロジーの理由によるためトポロジカル半金属と呼ばれる。典型的な場合を図5に掲げた。それぞれ (a) ワイル半金属、(b) ディラック半金属、

(c) ノーダルライン半金属、と呼ばれる。(a)(b)においてはともに、ディラックコーンと呼ばれる円錐状の分散が k 空間に存在し、フェルミエネルギー付近にある。(a) (b) の違いは、(b) ではディラックコーンがスピンに関して2重縮退しているのに対して、(a) ではディラックコーンが縮退していないことである。(b) のスピンに関する2重縮退は、クラマース縮退であり、時間反転と空間反転操作の積に対して系が不変である場合に起こる。例えば非磁性 (= 時間反転対称性あり) で空間反転対称性を持つ結晶では、このような状況が実現する。一方そのような対称性がない場合は、縮退のないディラックコーンが実現する。例えば時間反転対称性がある (= 非磁性) だが空間反転対称性がない結晶や、空間反転対称性はあるが、時間反転対称性が壊れている (= 磁性を持つ) 結晶で、ワイル半金属が実現する。一方 (c) では、ノーダルラインと呼ばれる k 空間の曲線に沿って縮退が発生している [6].

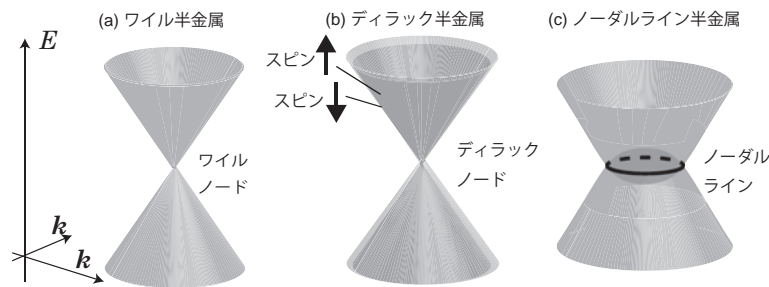


図 5: さまざまなトポロジカル半金属。(a) ワイル半金属、(b) ディラック半金属、(c) ノーダルライン半金属。

3.1 ワイル半金属

まず (a) のワイル半金属はトポロジカル半金属のトポロジーの性質が最も顕著に現れている点で興味深い。ワイル半金属のディラックコーンのハミルトニアンを、最も単純な場合として

$$H = v\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} = v \begin{pmatrix} k_z & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & -k_z \end{pmatrix} \quad (14)$$

ととる。 v はゼロでない定数とする。固有エネルギーは $E_+(\mathbf{k}) = |v|k$, $E_-(\mathbf{k}) = -|v|k$ であり $\mathbf{k} = 0$ にワイルノードを持つ。ベリー曲率は

$$\mathbf{B}_+(\mathbf{k}) = -\text{sgn}(v) \frac{\mathbf{k}}{2k^3}, \quad \mathbf{B}_-(\mathbf{k}) = \text{sgn}(v) \frac{\mathbf{k}}{2k^3} \quad (15)$$

となる。つまり、 $\rho_n(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{B}_n(\mathbf{k})$ で定義されるモノポール密度は、 $\rho_+(\mathbf{k}) = -2\pi \text{sgn}(v) \delta(\mathbf{k})$, $\rho_-(\mathbf{k}) = 2\pi \text{sgn}(v) \delta(\mathbf{k})$ となり、強さ $\pm 2\pi$ のモノポールが原点 ($\mathbf{k} = 0$) にある。すなわちワイルノードはベリー曲率の湧き出しもしくは吸い込みになっている (図 6(a)(b))。この湧き出し・吸い込みの強さ、すなわちフラックスの総和を $\frac{1}{2\pi}$ 倍したものをモノポールの強さと呼ぶことにすると、このモデルでのワイル点のモノポールの強さは ± 1 になる。なお上記の特殊な場合に限らず、一般的なワイルノードの場合にも、モノポールの強さは必ず ± 1 になり、トポロジカルな性質を持つ [23, 24]。さまざまな物質でワイル半金属の予言があるが [25]、特に TaAs や類似物質については、理論 [26]、実験 [27] の両面で盛んに研究されている。

ベリー曲率のモノポール密度 $\rho(\mathbf{k})$ は、時間反転対称性があると \mathbf{k} の偶関数、空間反転対称性があると \mathbf{k} の奇関数となる。そのため仮に時間反転と空間反転の両方の対称性があると、モノポール密度は恒等的にゼロとなりモノポール (つまりワイル点) は存在しない。この2つの対称性のいずれかを破ることで、図 6(c)(d) に示すように、原点 $\mathbf{k} = 0$ に関して対称もしくは反対称にワイル点が分布する。なおブリルアンゾーン内のワイルノードのモノポールの強さの総和は必ずゼロとなる。

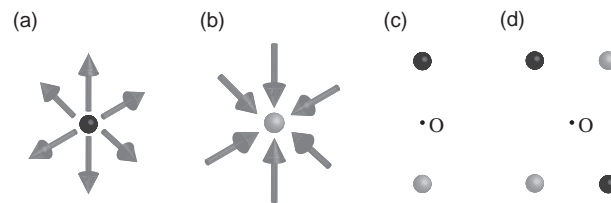


図 6: ワイルノードのトポロジーと対称性. ワイルノードは (a) モノポールか、(b) 反モノポールかどちらかであり、その強さはそれぞれ $+1$ 、 -1 である. 時間反転対称性があるが空間反転対称性のない系では、ワイルノードは (c) のように、 \mathbf{k} 空間で原点に関して対称に分布する. 一方空間反転対称性があるが時間反転対称性のない系では、ワイルノードは (d) のように、 \mathbf{k} 空間で原点に関して反対称に分布する.

このようなワイルノードのトポロジカルな性質が顕在化する例が表面フェルミアークである [24]. ワイル半金属の表面では、フェルミ面が開いた弧の形状で現れ、これをフェルミアークという. このフェルミアークの端の点は、ワイルノードを表面に射影したものであり、かならずモノポールと反モノポールとを結びように現れる [24]. 紙面の関係で詳しい説明は省くが、これはちょうど、3次元系を例えば $k_z = \text{const.}$ 面でスライスした2次元系の集合と考え、それぞれの2次元系でのチャーン数を考えたとき、あるスライスでは例えば $\text{Ch} = 1$ の量子ホール系、別のスライスでは例えば $\text{Ch} = 0$ の絶縁体、というように、 k_z の変化によってチャーン数が変化していることによる.

3.2 ディラック半金属・ノーダルライン半金属

ディラック半金属では、クラマース縮退したディラックコーンがフェルミエネルギー付近に現れる. クラマース縮退を形成するために、時間反転対称性と空間反転対称性の積が保存している必要がある. 代表例としては Na_3Bi [28] や Cd_3As_2 [29] がある. ディラックノードは2つのワイルノード、つまりモノポールと反モノポールとが縮退しているものに相当する. そのため一般には、摂動によりワイル点が対消滅をしてギャップを開ける可能性がある. そのため、現実の物質でこうしたディラックノードが実現するには、なんらかの結晶対称性の助けが必要であり [30]、実際 Na_3Bi や Cd_3As_2 では、ディラックノードは結晶の回転軸上にあり、回転対称性の助けによってディラックノードが安定化している.

ノーダルライン半金属においてはノーダルラインに沿って伝導帯と価電子帯が縮退している. 通常はこうした縮退は安定ではなくギャップを開けるので、この縮退が安定に存在するためには何らかの対称性やトポロジーの助けが必要である. 典型的な場合はいくつかあるが、例えば (A) 鏡映対称性がある結晶で、鏡映面上に現れる場合や、(B) スピン軌道相互作用が無視でき、空間反転対称性と時間反転対称性がある場合、がよく現実の物質で現れる. (A) ではノーダルラインは鏡映面に貼りついているが、(B) では、 π のベリー位相というトポロジカルな性質で保護されているために、ある平面に貼りついているということはない.

4 まとめ

このようにトポロジカル物質には多種多様な性質があり、どのような物質がトポロジカル物質であるか、網羅的に調べる研究が最近では盛んにおこなわれている. 理論、第一原理計算、実験の研究が密接に連携しあうことで、物質科学の地平が新しい方向に拡大しており、今後の研究の新たな展開が期待される.

参考文献

- [1] C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **95**, 146802 (2005); *ibid.* **95**, 226801 (2005).
- [2] B. A. Bernevig and S.-C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **96**, 106802 (2006).

- [3] M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
- [4] X. L. Qi and S. C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
- [5] B. Yan, S.-C. Zhang, *Rep. Prog. Phys.* **75**, 096501 (2012).
- [6] M. Hirayama, R. Okugawa, and S. Murakami *J. Phys. Soc. Jpn.* **87**, 041002 (2018).
- [7] K. von Klitzing, G. Dorda, M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* **45** (1980) 494.
- [8] L. Fu, C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **98** (2007) 106803; J. E. Moore and L. Balents, *Phys. Rev. B* **75** (2007) 121306; R. Roy, *Phys. Rev. B* **79** (2009) 195322.
- [9] M. V. Berry, *Proc. R. Soc. London* **A392**, 45 (1984).
- [10] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 405 (1982); M. Kohmoto, *Ann. Phys. (N.Y.)* **160**, 355 (1985).
- [11] R. B. Laughlin, *Phys. Rev. B* **23**, 5632 (1981).
- [12] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2015 (1988).
- [13] C.-Z. Chang *et al.*, *Science* **340**, 167 (2013).
- [14] S. Murakami, N. Nagaosa, and S. C. Zhang, *Science* **301**, 1348 (2003); J. Sinova *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 126603 (2004); 齊藤 英治, 村上 修一, 「スピン流とトポロジカル絶縁体—量子物性とスピントロニクス的发展—」, 共立出版, 2014.
- [15] L. Fu and C. L. Kane, *Phys. Rev. B* **74**, 195312 (2006).
- [16] L. Fu and C. L. Kane, *Phys. Rev. B* **76**, 045302 (2007).
- [17] S. Murakami, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 236805 (2006).
- [18] C. Sabater, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 176802 (2013).
- [19] B. A. Bernevig, T. L. Hughes and S.-C. Zhang, *Science* **314**, 1757 (2006).
- [20] M. König, *et al.*, *Science* **318**, 766 (2007); M. König *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 031007 (2008).
- [21] D. Hsieh *et al.*, *Nature* **452**, 970 (2008); *Science* **323**, 919 (2009). *Phys. Rev. B* **81** (2010) 041309.
- [22] H. Zhang *et al.*, *Nat. Phys.* **5**, 438 (2009); D. Hsieh *et al.*, *Nature* **460**, 1101 (2009); D. Hsieh *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 146401 (2009); Y. Xia *et al.*, *Nat. Phys.* **5**, 398 (2009).
- [23] S. Murakami, *New J. Phys.* **9**, 356 (2007).
- [24] X. Wan, A. M. Turner, A. Vishwanath, and S. Y. Savrasov, *Phys. Rev. B* **83**, 205101 (2011); R. Okugawa and S. Murakami, *Phys. Rev. B* **89**, 235315 (2014).
- [25] M. Hirayama, R. Okugawa, S. Ishibashi, S. Murakami, and T. Miyake, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 206401 (2015); S.-M. Huang *et al.*, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **113**, 1180 (2016).
- [26] H. Weng, C. Fang, Z. Fang, B. A. Bernevig, and X. Dai, *Phys. Rev. X* **5**, 011029 (2015); S.-M. Huang *et al.*, *Nat. Commun.* **6**, 7373 (2015).
- [27] B. Q. Lv *et al.*, *Phys. Rev. X* **5**, 031013 (2015); *Nat. Phys.* **11**, 724 (2015); S.-Y. Xu *et al.*, *Science* **349**, 613 (2015); *Nat. Phys.* **11**, 748 (2015); L. Yang *et al.*, *Nat. Phys.* **11**, 728 (2015).
- [28] Z. Wang *et al.*, *Phys. Rev. B* **85**, 195320 (2012); Z. K. Liu *et al.*, *Science* **343**, 864 (2014).
- [29] Z. Wang, H. Wong, Q. Wu, X. Dai, Z. Fang, *Phys. Rev. B* **88**, 125427 (2013); M. Neupane *et al.*, *Nat. Commun.* **5**, 3786 (2014); S. Borisenko, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 027603 (2014).
- [30] B.-J. Yang and N. Nagaosa, *Nat. Commun.* **5**, 4898 (2014).