

物性物理にあらわれるトポロジカル応答現象

東京大学工学系研究科 森本 高裕

1 アブストラクト

物性物理学は、ある物質が電気を通すか、磁石としての性質を示すかといった「ものの性質」を、固体中の電子の振る舞いに即して研究する学問分野である。物質の電氣的・磁氣的性質の多くは、結晶中の電子を記述するバンド理論に基づいてそのエネルギー構造から理解することができる。一方で、近年の研究において、結晶中の電子の波動関数の構造、特にその位相の構造が顕著な物性現象を引き起こすことが明らかになってきた。このため、波動関数の位相のなす幾何学的な構造（トポロジー）に由来する新しい量子相や応答現象の研究が、現在の物性物理学の大きな流れの一つになっている。

本講義ではこのような物性物理にあらわれるトポロジカルな応答現象について解説を行う。物質中の幾何学の基礎であるベリー位相やベリー曲率といった概念からはじめて、量子ホール効果、トポロジカル絶縁体などにあらわれるトポロジカル応答現象を解説する。さらには、非線形応答現象にあらわれるトポロジカル現象であるシフト電流といった最新の話題についても触れる予定である。

3日間の講義は以下のような構成ですすめることを予定している。

- 1日目：物質中の幾何学：ベリー曲率、異常速度、量子ホール効果、電気分極
- 2日目：場の量子論と応答現象：経路積分法、グリーン関数、電磁応答のためのダイアグラム法、トポロジカル応答現象への応用
- 3日目：非線形応答におけるトポロジカル現象：シフト電流

2 物質中の幾何学

2.1 バンド理論とベリー接続

結晶中の電子は、イオンからのポテンシャル $V(r)$ のもとで運動を行う。その波動関数 $\psi(r)$ はシュレーディンガー方程式

$$H\psi = E_n\psi, \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r), \quad (1)$$

により与えられる。格子定数を a として、ポテンシャルの周期性 $V(r+a) = V(r)$ から、ハミルトニアンは空間的に周期性を持つ。空間方向に周期的なハミルトニアンの固有関数に対してはブロッホの定理を適用することができる。つまり、固体中の電子の波動関数は、波数 k 、バンド n に対し

て、平面波とユニットセルで周期的な部分 $u_{nk}(x)$ に分解することで、 $\psi_{nk}(r) = u_{nk}(r)e^{ikr}$ と書くことができ、

$$H(k)u_{nk}(r) = E_n(k)u_{nk}(r) \quad (2)$$

が成り立つ。 $u_{nk}(x)$ はユニットセルで周期的（周期 L ）で $u_{nk}(x + L) = u_{nk}(x)$ を満たす。ここで $H(k)$ はハミルトニアン H をフーリエ変換して得られるブロッホハミルトニアンであり、 $E_n(k)$ はエネルギー分散関係を与える。

次に、ブロッホ電子の幾何学的位相について簡単に説明しよう。波数空間描像では、位置演算子は波動関数の k 微分、

$$r = i\partial_k. \quad (3)$$

として表現される。 $c(k)$ を $k = k_0$ の近傍のみで値を持つある関数として、ブロッホ波束

$$\Psi_B(r) = \int \frac{dk}{(2\pi)^d} c(k)e^{ikr} u_{nk}(r), \quad (4)$$

を考えよう (d :空間次元)。このブロッホ波束について、位置演算子 r の期待値をとると、

$$\langle r \rangle = \int dr \Psi_B^*(r)r\Psi_B(r) = \int \frac{dk}{(2\pi)^d} c^*(k)[i\partial_k + i\langle u_{nk}|\partial_k u_{nk}\rangle]c(k). \quad (5)$$

と書ける。^{*1} つまり、 k 空間での位置演算子は最右辺の括弧の中の演算子で与えられると考えることができる。特にその第二項

$$a_n(k) = i\langle u_{nk}|\nabla_k u_{nk}\rangle, \quad (7)$$

がベリー接続と呼ばれ、ブロッホ電子のセル内座標、つまりユニットセルの内部でブロッホ波動関数の中心位置という意味合いを持つ [1, 2]。上の式は n 番目のバンドのブロッホ電子からなる波束の位置 r は

$$r = i\partial_k + a_n(k) \quad (8)$$

*1 この関係式は以下のように積分計算を行うことにより得られる：

$$\begin{aligned} \int dr \Psi_B^*(r)r\Psi_B(r) &= \int \frac{dk}{(2\pi)^d} \frac{dk'}{(2\pi)^d} dr c^*(k')\langle u_{nk'}|u_{nk}\rangle c(k) r e^{i(k-k')r} \\ &= \int \frac{dk}{(2\pi)^d} \frac{dk'}{(2\pi)^d} dr c^*(k')\langle u_{nk'}|u_{nk}\rangle c(k) (-i\partial_k) e^{i(k-k')r} \\ &= \int \frac{dk}{(2\pi)^d} \frac{dk'}{(2\pi)^d} dr c^*(k') i\partial_k [\langle u_{nk'}|u_{nk}\rangle c(k)] e^{i(k-k')r} \\ &= \int \frac{dk}{(2\pi)^d} dk' c^*(k') i\partial_k [\langle u_{nk'}|u_{nk}\rangle c(k)] \delta(k-k') \\ &= \int \frac{dk}{(2\pi)^d} dk' c^*(k') [i\langle u_{nk'}|u_{nk}\rangle \partial_k c(k) + i\langle u_{nk'}|\partial_k u_{nk}\rangle c(k)] \delta(k-k') \\ &= \int \frac{dk}{(2\pi)^d} c^*(k) [i\partial_k + i\langle u_{nk}|\partial_k u_{nk}\rangle] c(k). \end{aligned} \quad (6)$$

と k についての共変微分の形で与えられることを意味している。

k 空間の曲がり方を表す量はベリー曲率と呼ばれ、ベリー接続から

$$F_n(k) = \nabla \times \mathbf{a}_n, \quad (9)$$

と定義される。

2.2 ベリー曲率と異常速度

k 空間の幾何学が輸送現象にどのようにあらわれるかを見るため、ブロッホ電子（波束）の速度について考えてみよう。ハイゼンベルグの運動方程式

$$v = \dot{r} = -\frac{i}{\hbar}[r, H], \quad (10)$$

と、固体中では位置演算子が k についての共変微分で与えられることから

$$\langle v \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [i\partial_k + a_n(k), H(k)] \rangle = \frac{1}{\hbar} \langle \partial_k H(k) \rangle = \frac{1}{\hbar} \partial_k E_n(k), \quad (11)$$

となることがわかる。最後の等式は Hellmann-Feynman の定理を用いた。これは群速度であり、バンド構造の勾配により波束の速度が与えられることを示している。

次に、電場中での波束の運動を考えよう。 x 方向に電場をかけたとすると、静電ポテンシャルによりハミルトニアンは $H' = H - qEx$ と変化する。ここで、電子の電荷を q とした。これは素電荷を $e (e > 0)$ とすると、 $q = -e$ と与えられるが電子の電荷が負であることによる計算上の煩雑さを防ぐためである。同様にハイゼンベルグ方程式を用いて波束の速度を考えると、 x 方向は

$$\langle v_x \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [x, H(k) - qEx] \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [x, H(k)] \rangle = \frac{1}{\hbar} \partial_{k_x} E_n(k), \quad (12)$$

と上の結果と変わらず群速度のみがあらわれる。一方、 y 方向は、

$$\langle v_y \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [y, H(k) - qEx] \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [y, H(k)] \rangle + \frac{iq}{\hbar} E \langle [y, x] \rangle = \frac{1}{\hbar} \partial_{k_y} E_n(k) - \frac{iq}{\hbar} E \langle [x, y] \rangle, \quad (13)$$

となり、群速度に加え x と y の交換子を含む項があらわれる。一般に結晶中では x と y は交換しない。実際、共変微分の形で位置演算子が表されることを用いると、

$$[x, y] = [i\partial_{k_x} + a_{x,n}, i\partial_{k_y} + a_{y,n}] = i\partial_{k_x} a_{y,n} - i\partial_{k_y} a_{x,n} = iF_n(k), \quad (14)$$

となり、ベリー曲率があらわれる。（これは z 方向のベリー曲率であるが、添字 z を省略した。）つまり、 k 空間の曲がり具合を測るベリー曲率は結晶中での x 方向と y 方向の非可換性という意味合いを持っている。これを上の式に代入して、

$$\langle v_y \rangle = \frac{1}{\hbar} \partial_{k_y} E_n(k) + \frac{q}{\hbar} E F_n(k), \quad (15)$$

をえる。右辺第二項は異常速度と呼ばれ、 k 空間の非自明な幾何学構造によりあらわれる電流応答をあらわしている。電流の方向は電場の方向と垂直であり、ベリー曲率が存在するとホール電流が流れることがわかる。このようにベリー曲率に由来したホール効果は異常ホール効果とよばれ、必ずしも磁場を必要とせず、磁気構造などによりブロッホ波動関数が非自明な位相構造をもつときにあらわれる。

ホール電流は $\langle v_y \rangle$ を占有状態について足し上げて得られる。一つのバンドのみがすべて占有されている場合には、そのバンドのベリー曲率を $F(k)$ として、

$$J_y = q \int \frac{dk}{(2\pi)^d} \langle v_y \rangle = \frac{q^2}{\hbar} E \int \frac{dk}{(2\pi)^d} F(k). \quad (16)$$

これは伝導度テンソルを用いて $J_y = \sigma_{yx} E_x$ とかけることと $\sigma_{xy} = -\sigma_{yx}$ であることから、

$$\sigma_{xy} = -\frac{q^2}{\hbar} \int \frac{dk}{(2\pi)^d} F(k), \quad (17)$$

を意味する。特に2次元系では、

$$\sigma_{xy} = -\frac{q^2}{h} \int \frac{dk^2}{2\pi} F(k) = -\frac{q^2}{h} C, \quad (18)$$

と書き表され、 C は整数値をとりチャーン数と呼ばれるトポロジカルな量である。以上が量子ホール効果の準古典的な理解である。

ホール効果はトポロジカルに非自明なバンドが占有されていることにより起こる。これは通常の電気伝導 (σ_{xx} に対応する縦伝導) がフェルミ面近傍での電子分布の変化に起因することと対照的である。このことを理解するために、金属的な伝導度を準古典的なボルツマン運動方程式から導いてみよう。ニュートンの運動方程式 $F = ma$ は、運動量 $p = mv$ を用いて $\dot{p} = F$ とかける。これを固体中の電子の運動に適用するため p を結晶運動量 $\hbar k$ と読み替え、外場 F は電場 E から生じて $F = qE$ であるとする、

$$\hbar \dot{k} = qE, \quad (19)$$

なるブロッホ電子の運動方程式を得る。^{*2} 散乱の起こらない理想的な結晶中では、電場がかかると波数は $k(t) = k_0 + qEt/\hbar$ と変化し、ブリルアンゾーンの中でぐるぐると回り続ける (ブロッホ振

^{*2} よりきちんとした導出は、結晶中の並進演算子 T の時間発展方程式 $\dot{T} = (i/\hbar)[H, T]$ を用いて与えられる。 $f(r)$ を位置 r の関数、 a を格子定数として $Tf(r) = f(r+a)$ なるものと定義する。電場 E のもとでのハミルトニアンをもとのハミルトニアン H_0 を用いて $H = H_0 - qEr$ とすると、 $[H, T] = -qE[r, T] = qEaT$ から、

$$\dot{T} = \frac{i}{\hbar} qEaT \quad (20)$$

を得る。波数 k の状態に対して T の期待値は $\langle T \rangle = e^{ika}$ であるため、

$$\langle \dot{T} \rangle = ikae^{ika} = ika\langle T \rangle \quad (21)$$

である。これらを比較して、

$$\hbar \dot{k} = qE \quad (22)$$

を得る。

動と呼ばれる)。一方で、通常は散乱が起こり緩和時間 τ 程度でもとの状態に引き戻される。つまり、定常状態では $t \rightarrow \tau$ と置き換えることができ $k \rightarrow k + qE\tau/\hbar$ と結晶運動量が変化する。このため、1次元系を考えると電流 J は、 $\Delta k = qE\tau/\hbar$ として、

$$J = q \int_{-k_F + \Delta k}^{k_F + \Delta k} \frac{dk}{2\pi} v(k) = \frac{q}{\hbar} \int_{-k_F + \Delta k}^{k_F + \Delta k} \frac{dk}{2\pi} \partial_k \epsilon(k) = \frac{q}{\hbar} (\epsilon(k_F + \Delta k) - \epsilon(-k_F + \Delta k)) \quad (23)$$

で与えられる (k_F :フェルミ波数)。 k に関して対称なバンドの場合 (時間反転対称性がある場合)、フェルミ速度 v_F を用いて $\epsilon(\pm k_F + \Delta k) \simeq E_F \pm \hbar v_F \Delta k = E_F \pm qE\tau v_F$ となるため、 $J = 2(q^2/\hbar)\tau v_F E$ となり、伝導度は

$$\sigma = 2 \frac{q^2}{\hbar} \tau v_F \quad (24)$$

で与えられる。特に放物線バンド $\epsilon(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$ の場合、 $v_F = \hbar k_F / m$ となる。このとき、電子密度 $n = 2k_F / (2\pi)$ を用いて、

$$\sigma = \frac{q^2 n \tau}{m} \quad (25)$$

という電気伝導度の表式 (ドルーデの式) を得る。金属伝導はフェルミ面の効果であり、緩和時間 τ に比例する。一方で、式 (17) のホール伝導度は占有状態全体 (Fermi sea) の寄与とみなすことができ緩和時間によらないという特徴を持つ。

2.3 ベリー位相と分極

ベリー曲率は異常ホール効果をもたらすことをみたが、ベリー接続やそれを周回積分したベリー位相はどのような物理現象をもたらすだろうか? ベリー接続は電子波束のセル内座標の意味をもっているため、電子の位置のずれにより引き起こされる電子分極と関係している。これは電気分極の現代的理論 (the modern theory of polarization) として知られている [1, 3]。次にこれを解説しよう。

結晶中電子による電気分極 P はブロッホ電子がどのくらい反転対称な位置からずれているかを測るものであり、位置演算子 r を用いて

$$P = q \int \frac{dk}{(2\pi)^d} \langle r \rangle, \quad (26)$$

により与えられると考えられる。ここで問題が生じるのだが、それは、結晶は周期構造を持つので r の原点をどこにとるか、つまりどのユニットセルから位置のずれを測ればよいのかというものである。つまり結晶中では r が mod a の恣意性を持ち空間的に広がったブロッホ関数と相性が良くない。このため、分極を考えるためにも波数空間 (k 空間) による記述が必要であることを意味する。

まずは空間的に局在したワニエ関数というものを導入しよう。ワニエ関数は

$$W_n(r - R) = \sum_k e^{-ikR} \psi_{n,k}(r) \quad (27)$$

により与えられる。ここで $\psi_{n,k}(r) = \frac{1}{N} e^{ikr} u_{n,k}(r)$ はブロッホ波動関数であり、 R は格子ベクトル、 N はユニットセルの数である。このワニエ関数は n 番目のバンドの波動関数のフーリエ変換であり、格子ベクトル R で指定されたユニットセルの近傍に空間的に局在した波動関数である。原点近傍に空間的に局在したワニエ関数 $W_n(r)$ を用いることで、 n 番目のバンドの電気分極への寄与 P_n を

$$P_n = \frac{q}{NV_0} \int dr r |W_n(r)|^2, \quad (28)$$

と定義することができる (V_0 : ユニットセルの体積)。ブロッホ波動関数を用いてこれを書き直すと

$$P_n = \frac{q}{NV_0} \sum_{k,k'} \langle \psi_{n,k} | r | \psi_{n,k'} \rangle \quad (29)$$

となる。ここで空間的に広がったブロッホ波動関数について r の期待値をうまく定義する必要がある。このため、 r の期待値を直接計算するかわりに、ユニットセルで周期的な関数 $\exp(-i2\pi r/a)$ を使って、位置のずれ $\langle r \rangle$ として

$$\langle \psi_{n,k} | r | \psi_{n,k'} \rangle = \frac{ia}{2\pi} \log \langle \psi_{n,k} | \exp(-i2\pi r/a) | \psi_{n,k'} \rangle \quad (30)$$

を考えることにする。ワニエ関数は原点近傍に局在しているため、 $\exp(-i2\pi r/a) \simeq 1 - i2\pi r/a$ がよい近似となり、この取り扱いが正当化できる。この右辺は

$$\begin{aligned} \langle \psi_{n,k} | \exp(-i2\pi r/a) | \psi_{n,k'} \rangle &= \frac{1}{N} \int_{N \text{ unit cells}} dr e^{i(-k+k'-\frac{2\pi}{a})r} u_{n,k}^* u_{n,k'} \\ &= \delta_{k',k+\frac{2\pi}{a}} \int_{\text{unit cell}} dr u_{n,k}^* u_{n,k'} \end{aligned} \quad (31)$$

となることから、 k, k' に関する和の中でデルタ関数が非ゼロになる項だけを残すことにすると

$$\begin{aligned} P_n &= \frac{q}{NV_0} \sum_k \frac{ia}{2\pi} \log \langle u_{n,k} | u_{n,k+\frac{2\pi}{a}} \rangle \\ &\simeq q \int \frac{dk}{(2\pi)^d} \frac{ia}{2\pi} \log \left(1 + \frac{2\pi}{a} \langle u_{n,k} | \partial_k u_{n,k} \rangle \right) \\ &= q \int \frac{dk}{(2\pi)^d} i \langle u_{n,k} | \partial_k u_{n,k} \rangle = q \int \frac{dk}{(2\pi)^d} a_n(k) \end{aligned} \quad (32)$$

となる。(2行目で $u_{n,k+\frac{2\pi}{a}}$ をテーラー展開し、3行目で小さな x に対して $\log(1+x) \simeq x$ であることを用いた。)

1次元系の場合、ベリー位相 $\theta = \int dk a(k)$ を用いて、

$$P = \frac{q}{2\pi} \theta \quad (33)$$

と表される。ベリー位相は局所ゲージ変換に対して不変であり P がうまく k 表示を用いて記述できていることを意味する。一方で、大域的ゲージ変換 $u(r) \rightarrow u(r) e^{in\pi ka}$ ($n \in \mathbb{Z}$) に対しては

$\theta \rightarrow \theta - 2\pi na$ となり、 P は $\text{mod } na$ の不定性をもつことがわかる。これはちょうどどのユニットセルから分極を測るかの不定性に対応している。

最後に電気分極とベリー曲率との関係について説明しよう。分極が発生するためには反転対称性が破れている必要があるが、系の反転対称性の破れ具合がパラメータ λ によってコントロールされている状態を考える。このとき分極は各 λ に対して定義できるため、これを $P(\lambda)$ と書こう。 $\lambda = 0$ のときに反転対称性があるとして、 $P(\lambda = 0) = 0$ と定義する。物理的には系を変化させたときの分極の変化のみが意味をもつため（たとえば系の状態が変化した場合、分極電流として取り出すことができる）、パラメータ λ を $\lambda = 0$ から $\lambda = \lambda_0$ まで変化させた際に分極変化

$$\Delta P(\lambda_0) = P(\lambda_0) - P(\lambda = 0) \tag{34}$$

を考える。これは1次元の場合、ベリー位相公式を用いて

$$\Delta P = q \int \frac{dk}{2\pi} [a^{(\lambda=\lambda_0)}(k) - a^{(\lambda=0)}(k)] \tag{35}$$

と書き表される。パラメータ (λ, k) についての2次元空間で考えると、ちょうど $\lambda = 0$ と $\lambda = \lambda_0$ に挟まれた領域 S の周回積分であると考えることができる。ストークスの定理を用いると、

$$\Delta P = \frac{q}{2\pi} \int dk [a^{(\lambda=\lambda_0)}(k) - a^{(\lambda=0)}(k)] = \frac{q}{2\pi} \int_0^{\lambda_0} d\lambda \int dk F_{\lambda k} \tag{36}$$

と書き換えることができる。ここで、 $F_{\lambda k}$ はパラメータ空間 (λ, k) におけるベリー曲率で、

$$\begin{aligned} F_{\lambda k} &= \partial_\lambda a_k - \partial_k a_\lambda, \\ a_x &= i \langle u_k^{(\lambda)} | \partial_x u_k^{(\lambda)} \rangle \end{aligned} \tag{37}$$

で与えられる ($x = \lambda, k$)。

2.4 Rice Mele 模型における電気分極

電気分極のベリー位相公式の適用例をみるために、1次元強誘電体のモデルである Rice Mele 模型について考えてみよう。Rice Mele 模型は2サイトがユニットセルを構成し、ハミルトニアン

$$H = \sum_i \left\{ \left[\frac{t}{2} - (-1)^i \frac{\delta t}{2} \right] c_{i+1}^\dagger c_i + h.c. \right\} + (-1)^i m c_i^\dagger c_i \tag{38}$$

により与えられる (図 1(a) を参照)。 c_i はサイト i での電子の消滅演算子、 t は平均的なホッピング強度、 δt は交替ホッピングの強度、 m はユニットセル内の2サイトのポテンシャル差 (の半分) を表す。これを k 空間で表示すると、

$$\begin{aligned} H &= \sum_k \Psi_k^\dagger H(k) \Psi_k, \\ H(k) &= \begin{pmatrix} m & t \cos \frac{k}{2} - i\delta t \sin \frac{k}{2} \\ t \cos \frac{k}{2} + i\delta t \sin \frac{k}{2} & -m \end{pmatrix}, \\ \Psi_k &= (c_{k,A}, c_{k,B})^T \end{aligned} \tag{39}$$

と書くことができる。ここで $c_{k,A/B}$ はユニットセル内の2つのサイト (A/B) における電子の消滅演算子であり、格子定数は簡単のため $a = 1$ とした。ブロッホハミルトニアン $H(k)$ は 2×2 行列であり、パウリ行列を用いて

$$H(k) = \mathbf{d}(k) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad \mathbf{d}(k) = (t \cos \frac{k}{2}, \delta t \sin \frac{k}{2}, m) \quad (40)$$

と書くことができる。一般に、 $H = \mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ でハミルトニアンが与えられる場合、その固有エネルギーは $E_{\pm} = \pm |\mathbf{d}|$ で与えられ、対応する波動関数は $\cos \theta = d_z/|\mathbf{d}|$, $\tan \phi = d_y/d_x$ として

$$u_+ = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad u_- = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad (41)$$

と与えられる。このときベリー接続 \mathbf{a}_{\pm} は

$$\mathbf{a}_{\pm} = \frac{1}{2}(-1 \pm \cos \theta) \nabla \phi \quad (42)$$

となる。注意すべきなのは、ブリルアンゾーン境界 ($k = \pm\pi$) においてブロッホ波動関数は一般に周期的ではない。実際、Rice-Mele 模型においては、($\delta t/t > 0$ として) $\phi(\pm\pi) = \pm\pi/2$ であるため、 $u_{\pm, k=-\pi} = \sigma_z u_{\pm, k=\pi}$ となっている。これは一般に natural gauge と呼ばれるゲージのとり方の例になっている。natural gauge は分極計算のときにとるべきゲージであり、逆格子ベクトル G に対して、

$$u_k(r) = e^{iGr} u_{k+G}(r) \quad (43)$$

を満たすものである。これは波動関数全体が $\psi_k = \psi_{k+G}$ を満たすという条件に対応している。 $u_{\pm, k=-\pi} = \sigma_z u_{\pm, k=\pi}$ という関係は、A サイト、B サイトのセル内座標をそれぞれ $r = 0, r = 1/2$ ととることに対応している。

占有状態 u_- の電気分極への寄与は、ベリー位相公式から

$$P_- = \frac{q}{4\pi} \int dk \frac{-E_+ - m}{E_+} \partial_k \tan^{-1} \left(\frac{\delta t}{t} \tan \frac{k}{2} \right) \quad (44)$$

と与えられる。図 1(b) に P_- をバンド交替 δt の関数としてプロットした。 $\delta t = 0$ では電子は B サイトにいるため、そのセル内座標 $r = 1/2$ を反映して $P/q = \pm 1/2$ となっている。 $\delta t = 0$ で不連続であるが ($d_x = d_y = 0$ のときに ϕ が不定となるため)、とびは $\Delta P/q = 1$ であり、分極の mod 1 の不定性のもとで連続であると考えられる。 $\delta t > 0$ では P/q は単調に増加していき、B サイトからその右の A サイトへと電子が動いていくことによる分極変化と対応している。

natural gauge を満たす波動関数は複数考えられる。別の固有関数として

$$\tilde{u}_+ = \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad \tilde{u}_- = \begin{pmatrix} -e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad (45)$$

を考えてみよう。これは、 $\tilde{u}_{\pm, k=-\pi} = \text{diag}(-1, 1) \tilde{u}_{\pm, k=\pi}$ という条件を満たし (diag(...) は対角行列をあらわす)、A サイト、B サイトのセル内座標をそれぞれ $r = -1/2, r = 0$ ととることに対応

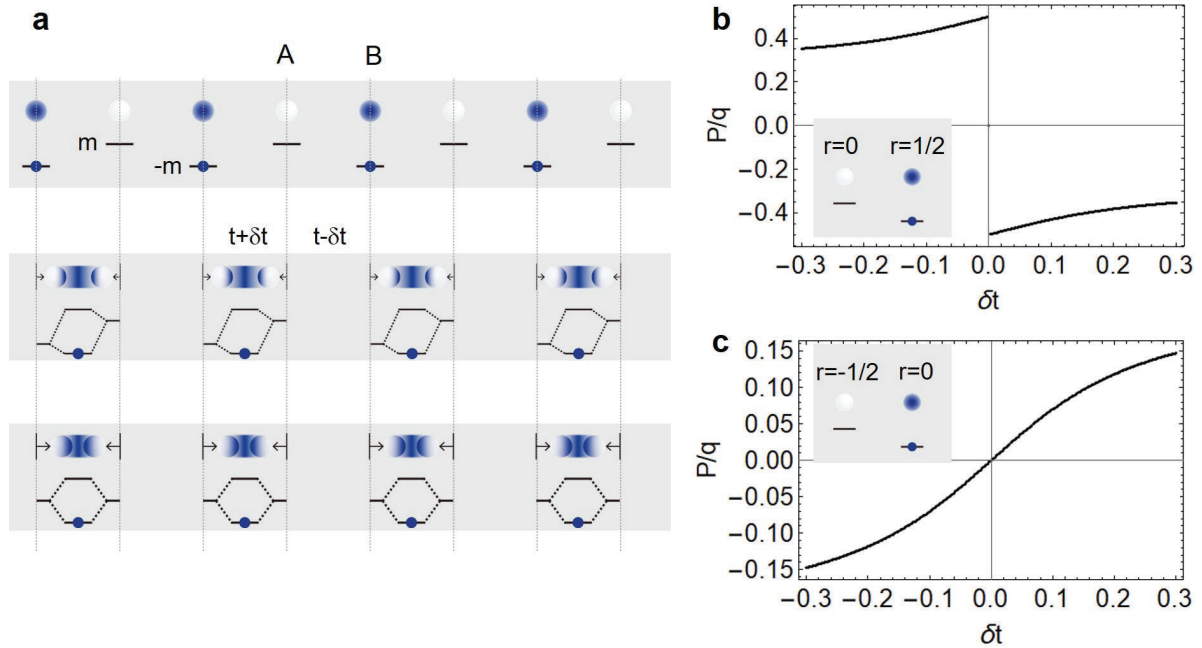


図1 Rice-Mele 模型における電気分極。(a) Rice-Mele 模型の模式図。(b,c) δt の関数としての電気分極 P 。それぞれ P を (b) u_- 、(c) \tilde{u}_- から求めた。($t = 1, m = 0.2$)

している。これはさきほどの場合からユニットセルを $1/2$ ずらしたゲージに対応している。この場合、ベリー接続は

$$\tilde{a}_{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm \cos \theta) \nabla \phi \tag{46}$$

となる、これから分極 $\tilde{P}_- = (q/2\pi) \int dk \tilde{a}$ を計算したものを図 1(c) に示す。 \tilde{P} は、 P と比べて全体に $\pm 1/2$ シフトし、 $\delta t = 0$ において $P = 0$ で連続になる。これはちょうどユニットセルの $1/2$ の結果である。また物理的に観測可能な量である δt を変化させたときの分極の差 $\Delta P(\text{mod } q)$ は、2つのゲージで同じ結果を与える。

3 電磁応答のための場の量子論

この章は場の量子論とグリーン関数法を用いた電磁応答の導出について説明する。グリーン関数を用いた応答関数の計算の一般論について解説し、ホール伝導度や分極電流などのトポロジカルな量子応答現象に適用する。

3.1 フェルミオン系の経路積分とグリーン関数

まず電磁応答をグリーン関数を用いて計算するために、ダイアグラム法に基づいた応答関数の導出法の一般的なルールについて解説する。このための簡潔な理論枠組みとして経路積分法を本稿

では用いる。経路積分法の詳細については Altland-Simons [4]、永長 [5] や Negele-Orland [6] と
 いった教科書を参照されたい。この後の節を読みすすめるためにはダイアグラム法のルールのみ
 知っていればいいので、もしも導出の詳細には興味がない場合は、本節の最後にルールをまとめた
 部分まで読み飛ばしていただければ結構である。

電子系の電磁応答を考えるために、フェルミオンの経路積分表示を用いる。簡単のため相
 互作用しない電子系を考え、ハミルトニアンが電子の生成消滅演算子 c^\dagger, c の 2 次形式として
 $\hat{H} = \sum_k c_k^\dagger H(k) c_k$ と表される場合を考える。このとき分配関数は虚時間形式の経路積分表示を用
 いて

$$Z = \int Dc^\dagger Dc e^{-S}, \quad S = \int d\tau \sum_k c_k^\dagger(\tau) (\partial_\tau + H(k)) c_k(\tau), \quad (47)$$

で与えられる。ここで $c(\tau), c^\dagger(\tau)$ はグラスマン数として取り扱うものとし、 τ は虚時間である。^{*3}
 虚時間方向にフーリエ変換（逆温度 β を用いて $c(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n c_n e^{-i\omega_n \tau}$ と定義される）を行い松原
 周波数 $i\omega_n$ を用いて表示すると、 $\partial_\tau \rightarrow -i\omega_n$ となるので、^{*4}

$$\begin{aligned} Z &= \int Dc^\dagger Dc \prod_{\omega_n, k} e^{-c_{n,k}^\dagger (-i\omega_n + H(k)) c_{n,k}} \\ &= \prod_{\omega_n, k} \det[-i\omega_n + H(k)] \\ &= \prod_{\omega_n, k, a} (-1)(i\omega_n - \epsilon_a(k)), \end{aligned} \quad (48)$$

となる。ここで $c_{n,k}$ は松原周波数 $i\omega_n$ ($\omega_n = \pi k_B T(2n + 1)$ と与えられる)、波数 k の電子のモー
 ドを表すグラスマン数である。 a はバンドのラベルであり、 $\epsilon_a(k)$ はバンド a のエネルギー分散で
 ある。2 行目において、グラスマン数についての積分公式 $\int d\xi^* d\xi e^{-\xi^* M \xi} = \det M$ を用いた。^{*5}グ
 リーン関数は

$$\begin{aligned} G(\tau) &= -\langle T_\tau c(\tau) c^\dagger(0) \rangle \\ &= -\frac{1}{Z} \int Dc^\dagger Dc c(\tau) c^\dagger(0) e^{-S} \end{aligned} \quad (49)$$

と定義される。1 行目右辺は演算子形式での表示で T_τ は時間順序積を表す。2 行目はその経路積

^{*3} グラスマン数 ξ は非可換性 $\{\xi, \xi'\} = 0$ を満たす数であり、フェルミオンの経路積分表示に用いられる。その積分は
 $\int d\xi 1 = 0, \int d\xi \xi = 1$ より定義される。

^{*4} 虚時間形式は実時間 t , 実周波数 ω を $t \rightarrow -i\tau, \omega \rightarrow i\omega_n$ と解析接続することで得られる。

^{*5} この公式は $e^{-\xi^* M \xi} = 1 - \xi^* M \xi, \int d\xi \xi = 1$ およびグラスマン数の非可換性を用いてすぐに導出できる。

分表示である。これをフーリエ変換した周波数表示のグリーン関数は

$$\begin{aligned} G_a(i\omega_n, k) &= -\frac{1}{Z} \int Dc^\dagger Dcc_{n,a,k} c_{n,a,k}^\dagger e^{-S} \\ &= -\frac{\prod_{(m,b,k') \neq (n,a,k)} (-1)(i\omega_m - \epsilon_b(k'))}{\prod_{m,b,k'} (-1)(i\omega_m - \epsilon_b(k'))} \\ &= \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_a(k)} \end{aligned} \quad (50)$$

と与えられる。^{*6}

次に外場による摂動のもとでの応答現象について考えてみよう。摂動項 \hat{A} がフェルミオン演算子の2次形式でかけることとし、摂動のもとでのハミルトニアン

$$\hat{H}'(t) = \hat{H} + c^\dagger A(t) c \quad (51)$$

であらわされるものとしよう。(簡単のため波数やバンドの添字は省略する。一般に c はベクトルで $A(t)$ は行列である。) ここで $A(t)$ は時間に依存する摂動を表す。経路積分法で物理量 $\hat{B} = c^\dagger B c$ について考える。時刻 τ_0 における \hat{B} の期待値は

$$\langle \hat{B}(\tau_0) \rangle = \frac{1}{Z'} \int Dc^\dagger Dcc^\dagger(\tau_0) B c(\tau_0) e^{-\int d\tau (\hat{H} + c^\dagger(\tau) A(\tau) c(\tau))} \quad (52)$$

と与えられる。ここで $Z' = \int Dc^\dagger Dce^{-S - \int d\tau c^\dagger A(\tau) c}$ は外場のもとでの分配関数である。 A に関して展開すると、期待値は

$$\begin{aligned} \langle \hat{B}(\tau_0) \rangle &= \frac{1}{Z'} \int Dc^\dagger Dcc^\dagger(\tau_0) B c(\tau_0) \left[1 + \int d\tau_1 c^\dagger(\tau_1) [-A(\tau_1)] c(\tau_1) \right. \\ &\quad \left. + \int d\tau_1 \int d\tau_2 c^\dagger(\tau_1) [-A(\tau_1)] c(\tau_1) c^\dagger(\tau_2) [-A(\tau_2)] c(\tau_2) + \dots \right] e^{-S}, \end{aligned} \quad (53)$$

とかける。Wick の定理から、展開の各項においてすべての縮約 ($-c(\tau) c^\dagger(\tau') \rightarrow G(\tau - \tau')$ の組) のパターンが経路積分に寄与する。このうち縮約が1つのループをなしているもの以外は分母の Z' からの寄与と相殺するため、縮約をとって1つのループをなすもののみを考えることとする。例えば期待値への A の一次の寄与 $\langle \hat{B}(\tau_0) \rangle^{(1)}$ は、

$$\begin{aligned} \langle \hat{B}(\tau_0) \rangle^{(1)} &= \frac{1}{Z'} \int Dc^\dagger Dc \int d\tau_1 c^\dagger(\tau_0) B c(\tau_0) c^\dagger(\tau_1) [-A(\tau_1)] c(\tau_1) e^{-S} \\ &= \frac{1}{Z'} \int Dc^\dagger Dc \int d\tau_1 B [-c(\tau_0) c^\dagger(\tau_1)] A(\tau_1) [-c(\tau_1) c^\dagger(\tau_0)] e^{-S} \\ &= \int d\tau_1 \text{tr}[B G(\tau_0 - \tau_1) A(\tau_1) G(\tau_1 - \tau_0)] \end{aligned} \quad (54)$$

^{*6} $\det(i\omega_n - H(k)) = \prod_a (i\omega_n - \epsilon_a(k))$, および $\int dc^\dagger dccc^\dagger e^{-ac^\dagger c} = \int dc^\dagger dccc^\dagger (1 - ac^\dagger c) = 1$ であることを用いた。

となる (tr: 行列のトレース)。ここで A についてのマイナス符号と $c^\dagger(\tau_0)$ を右端に移動させた際にでるマイナス符号はそれぞれ縮約を G で書き換える際に吸収されている。^{*7}外場が $A(\tau) = Ae^{-i\omega_n\tau}$ と単一のフーリエ成分で与えられるときには、一次の応答も $B(\tau) = Be^{-i\omega_n\tau}$ と単一のフーリエ成分で与えられる。このため両辺をフーリエ変換し周波数 $i\omega_n$ のフーリエ成分を書き下すと、

$$\begin{aligned} \langle \hat{B}(i\omega_n) \rangle^{(1)} &= \int_0^\beta d\tau_0 e^{i\omega_n\tau_0} \text{tr}[BG(\tau_0 - \tau_1)A(\tau_1)G(\tau_1 - \tau_0)] \\ &= \frac{1}{\beta^2} \int_0^\beta d\tau_0 \sum_{l,m} e^{-i(-\omega_n + \omega_l - \omega_m)(\tau_0 - \tau_1)} \text{tr}[BG(i\omega_l)AG(i\omega_m)] \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_{l,m} \delta_{\omega_l, \omega_m + \omega_n} \text{tr}[BG(i\omega_l)AG(i\omega_m)] \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_m \text{tr}[BG(i\omega_m + i\omega_n)AG(i\omega_m)] \end{aligned} \tag{55}$$

と表される。^{*8}特に、ゼロ温度 ($T = 0$) においては松原周波数 $i\omega_n$ は連続変数 $i\omega$ と書くことができ、 $\frac{1}{\beta} \sum_n \rightarrow \int \frac{d\omega}{2\pi}$ と置き換えることができる。

3.2 グリーン関数法による電磁応答

次に外部電場 E のもとでの電磁応答を摂動論的に考えてみよう。ac 電場を考え $E(t) = E(\omega)e^{-i\omega t}$ と電場が与えられるものとする。対応するベクトルポテンシャルは $E(t) = -\partial_t A(t)$ から、 $A(t) = \frac{E(\omega)}{i\omega} e^{-i\omega t}$ と与えられる。電場の電子との相互作用を minimal coupling $p \rightarrow p - qA$ により導入すると、外場中でのハミルトニアン $\tilde{H}(t)$ は

$$\tilde{H}(t) = \sum_k c_k^\dagger H\left(k - \frac{q}{\hbar} A(t)\right) c_k = \sum_k c_k^\dagger H\left(k + \frac{iq}{\hbar\omega} E(t)\right) c_k \tag{56}$$

と書き表すことができる。ブロッホハミルトニアンは、電場 E に関してテーラー展開することで

$$H\left(k + \frac{iq}{\hbar\omega} E(t)\right) = H(k) + \frac{iq}{\hbar\omega} \partial_k H(k) E(t) + \frac{1}{2} \left(\frac{iq}{\hbar\omega}\right)^2 \partial_k^2 H(k) E(t)^2 + \dots, \tag{57}$$

と表せる。

次に外部電場のもとで電流がどう与えられるか考えよう。電流演算子 J はハミルトニアンのベクトルポテンシャル A に関する微分により $J = -\partial H / \partial A$ と与えられるので、外部電場の効果こ

^{*7} 一般に、 n 次の項においては、マイナス符号が A の係数から n 個と c^\dagger の入れ替えから一つ現れる。これらはちょうど $n + 1$ 個のグリーン関数 G で書き換える際に吸収される。

^{*8} c のフーリエ変換の形から、 $G(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n\tau} G(i\omega_n)$ となることがわかる。

みのハミルトニアン \tilde{H} から電流演算子は

$$\begin{aligned} J &\equiv -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial A} = \frac{q}{\hbar} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial k} = \frac{q}{\hbar} \sum_k \partial_k H \left(k - \frac{q}{\hbar} A(t) \right) c_k^\dagger c_k \\ &= \frac{q}{\hbar} \sum_k \left[\partial_k H(k) + \frac{iq}{\hbar\omega} \partial_k^2 H(k) E(t) + \dots \right] c_k^\dagger c_k \end{aligned} \quad (58)$$

と与えられることがわかる。第一項はちょうど群速度に比例する電流を示し、第二項以降は電場による電流の補正に対応する。前者は常磁性電流 (paramagnetic current) と呼ばれ、後者は反磁性電流 (diamagnetic current) と呼ばれる。特に、放物線バンド $H = (p - qA)^2/2m$ の場合を考えると、 $J = \sum_k q[(p - qA)/m]c_k^\dagger c_k$ となり、括弧内第一項が常磁性電流、第二項の A に比例する項が反磁性電流である。反磁性電流は応答関数の dc 極限や E に関する非線形応答を考える際に重要となる。

電場 E に関して 1 次の応答を考え、伝導度の公式を導こう。外部電場に対する電流の線形応答

$$J(\omega) = \sigma(\omega)E(\omega) \quad (59)$$

を考える。線形伝導度 σ は、2つの寄与からなり $\sigma = \sigma_p + \sigma_d$ と書き表される。ここで σ_p は常磁性電流 ($J_p = \frac{q}{\hbar} \partial_k H(k)$) の寄与であり、もう一つ σ_d は反磁性電流 (J のうち E の 1 次に比例する部分 $J_d = \frac{iq^2}{\hbar^2\omega} \partial_k^2 H(k)E(t)$) の寄与である。常磁性電流の寄与 σ_p は式 (55) において、

$$A = \frac{iq}{\hbar\omega} \partial_k H(k)E(t) \quad B = \frac{q}{\hbar} \partial_k H(k) \quad (60)$$

とすることにより

$$\sigma_p(i\omega_n) = \frac{iq^2}{\hbar^2\omega} \int \frac{d\omega_m}{2\pi} \int \frac{dk}{(2\pi)^d} \text{tr}[\partial_k H(k)G(i\omega_m + i\omega_n, k)\partial_k H(k)G(i\omega_m, k)] \quad (61)$$

と得られる (d :空間次元)。反磁性電流の寄与はグリーン関数の導出と同様の計算により、

$$\sigma_d(i\omega_n) = \frac{iq^2}{\hbar^2\omega} \int \frac{d\omega_m}{2\pi} \int \frac{dk}{(2\pi)^d} \text{tr}[\partial_k^2 H(k)G(i\omega_m, k)] \quad (62)$$

と与えられ、電場の周波数 ω に依存しない。これらをファインマン・ダイアグラムを用いて表すと、 σ_p は 2つの J_p を頂点とするバブル・ダイアグラム (bubble diagram) に対応し、 σ_d は 1つの頂点 J_d とループのみからなるおたまじゃくしのようなダイアグラム (tadpole diagram) に対応する (図 2)。

$T = 0$ の場合に、線形の伝導度をハミルトニアンの固有状態を用いて書き表してみよう。ブロッホハミルトニアン $H(k)$ が

$$H(k)|u_{a,k}\rangle = \epsilon_{a,k}|u_{a,k}\rangle, \quad (63)$$

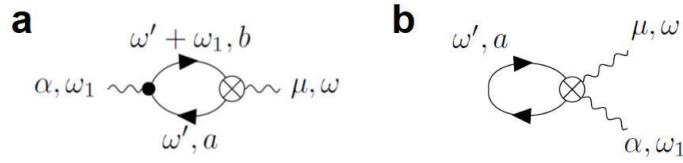


図2 線形伝導度に寄与するファインマン・ダイアグラム。(a) σ_p に対応するバブル・ダイアグラム (bubble diagram)。(b) σ_d に対応するおたまじゃくしダイアグラム (tadpole diagram)。

と対角化されとしよう。(a はバンドのラベルである。) $v \equiv \partial_k H(k)$ として、 σ_p は、tr の中で 1 の分解 $1 = \sum_a |u_{a,k}\rangle\langle u_{a,k}|$ を用いることにより、

$$\begin{aligned} \sigma_p(i\omega_n) &= \frac{iq^2}{\hbar^2\omega} \int \frac{d\omega_m}{2\pi} \int \frac{dk}{(2\pi)^d} \sum_{a,b} \frac{v_{ab}v_{ba}}{(i\omega_m + i\omega_n - \epsilon_b)(i\omega_m - \epsilon_a)} \\ &= \frac{iq^2}{\hbar^2\omega} \int \frac{dk}{(2\pi)^d} \sum_{a,b} \frac{f_{ab}v_{ab}v_{ba}}{i\omega_n - \epsilon_{ba}} \end{aligned} \tag{64}$$

と書くことができる。ここで、 $v_{ab} = \langle u_a | v | u_b \rangle$ は v の行列要素、 $\epsilon_{ba} = \epsilon_b - \epsilon_a$ である。また、 $f_{ab} = f(\epsilon_a) - f(\epsilon_b)$ ($f(x)$ は $T = 0$ のフェルミ分布関数) である。^{*9} 求めた表式は $T \neq 0$ の場合にも有効であり、その場合は f_{ab} を有限温度のフェルミ分布関数を用いて定義すればよい。同様に、 σ_d は

$$\begin{aligned} \sigma_d(i\omega_n) &= \frac{iq^2}{\hbar^2\omega} \int \frac{d\omega_m}{2\pi} \int \frac{dk}{(2\pi)^d} \sum_a \frac{(\partial_k v)_{aa}}{i\omega_m - \epsilon_a} \\ &= \frac{iq^2}{\hbar^2\omega} \int \frac{dk}{(2\pi)^d} \sum_a f_a (\partial_k v)_{aa} \end{aligned} \tag{66}$$

とかける ($f_a = f(\epsilon_a)$, $(\partial_k v)_{ab} = \langle u_a | \partial_k v | u_b \rangle$)。

実周波数 ω についての光学伝導度 $\sigma(\omega)$ は松原周波数 $i\omega_n$ を $i\omega_n \rightarrow \hbar\omega + i\delta$ と解析接続することにより得られる。ここで微小な $\delta > 0$ は因果律を担保するための因子である。^{*10} 系に散逸や緩和があるときは、この微小な δ を散乱強度 γ と置き換えることで現象論的に緩和の効果を取り込むこ

^{*9} ω_m 積分は、留数定理を用いて

$$\begin{aligned} &\int \frac{d\omega_m}{2\pi} \frac{1}{(i\omega_m + i\omega_n - \epsilon_b)(i\omega_m - \epsilon_a)} \\ &= \int \frac{d(i\omega_m)}{2\pi i} \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_b + \epsilon_a} \left(\frac{1}{i\omega_m - \epsilon_a} - \frac{1}{i\omega_m + i\omega_n - \epsilon_b} \right) \\ &= \frac{f(\epsilon_a) - f(\epsilon_b)}{i\omega_n - \epsilon_b + \epsilon_a} \end{aligned} \tag{65}$$

となる。

^{*10} 摂動項が $e^{-i(\hbar\omega + i\delta)t/\hbar} = e^{-i\omega t + \delta t/\hbar}$ という時間依存性を持つため、無限の過去 $t \rightarrow -\infty$ において摂動がない (系がもとの H の基底状態にある) ということを保証する。

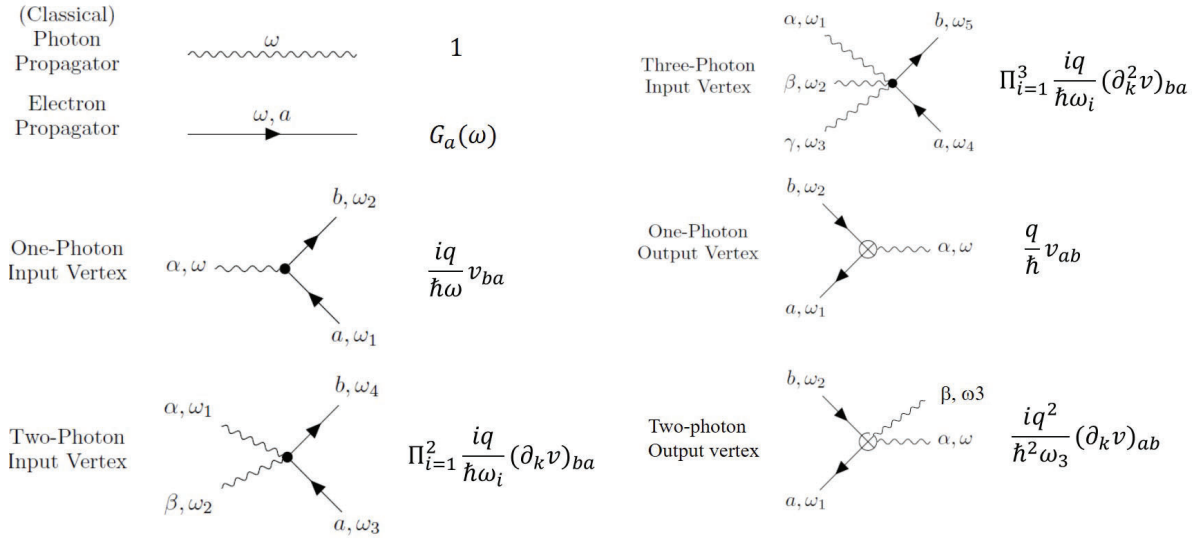


図3 一般の電磁応答のためのファインマン・ダイアグラム。Ref. [7] より転載。

とができる。解析接続を実行すると、光学伝導度の表式

$$\sigma(\omega) = \frac{iq^2}{\hbar^2 \omega} \int \frac{dk}{(2\pi)^d} \left(\sum_a f_a(\partial_k v)_{aa} + \sum_{a,b} \frac{f_{ab} v_{ab} v_{ba}}{\hbar\omega - \epsilon_{ba} + i\delta} \right) \quad (67)$$

を得る。

3.3 一般の電磁応答のためのダイアグラム法

より一般的に、外部電場 $E(\omega)$ のもとでの n 次の電流応答

$$J(\omega) = \sigma^{(n)}(\omega; \omega_1, \dots, \omega_n) E(\omega_1) \dots E(\omega_n) \quad (68)$$

について考えてみよう。 $\sigma^{(n)}(\omega; \omega_1, \dots, \omega_n)$ は n 次の非線形伝導度であり、 $\omega_1, \dots, \omega_n$ は入射光の周波数たち、 $\omega = \sum_{i=1}^n \omega_i$ は電流応答のもつ周波数である。このとき、 $\sigma^{(n)}(\omega; \omega_1, \dots, \omega_n)$ は次のファインマン・ダイアグラムの寄与をすべて足し上げるにより得られる [7] :

1. $\sum_i n_i + \sum_j m_j = n$ を満たす自然数 n_i, m_j の組を考え、 n_i -photon input vertex たちと m_j -photon output vertex たちを考える。
2. n_i -photon input vertex に $\prod_{l=1}^{n_i} \left(\frac{iq}{\hbar\omega_l} \partial_k \right) H(k)$ を対応させる。
3. m_j -photon output vertex に $\frac{q}{\hbar} \partial_k \prod_{l=1}^{m_j-1} \left(\frac{iq}{\hbar\omega_l} \partial_k \right) H(k)$ を対応させる。
4. すべての頂点の一つのループをなすように electron propagator $G_a(\omega)$ で結ぶ。各頂点ではエネルギー保存則が満たされるように電子のエネルギーを決める。
5. 対応するダイアグラムはすべての頂点とグリーン関数に対応する因子を掛け合わせたものとする。

このダイアグラムのルールを図3にまとめた。実際に、1次の光学伝導度 $\sigma(\omega)$ は、図2の2つのダイアグラムにこのルールを適用することにより得られることをすぐに確かめることができる。

3.4 金属伝導度

グリーン関数法による電磁応答理論の最も簡単な適用例として金属中での電気伝導を考えてみよう。これはすでに求めた $\sigma(\omega)$ の表式において dc 極限 ($\omega \rightarrow 0$) をとればよい。式(67)を簡単化するために、反磁性電流の項 $(\partial_k v)_{aa}$ を書き換えたい。シュレーディンガー方程式の両辺を k 微分していくことにより、関係式

$$\langle u_b | \partial_k u_a \rangle = -\frac{v_{ba}}{\epsilon_{ba}}, \quad (\partial_k v)_{aa} = \partial_k^2 \epsilon_a + 2 \sum_{b \neq a} \frac{v_{ab} v_{ba}}{\epsilon_{ba}}, \quad (69)$$

が得られる。(1つ目の関係式は $b \neq a$ のときに成立。)*¹¹ 式(67)において、括弧内第二項については $\hbar\omega + i\delta \rightarrow 0$ とし、2つ目の関係式を用いることで、

$$\sigma(\omega \rightarrow 0) = \frac{iq^2}{\hbar^2 \omega} \int \frac{dk}{(2\pi)^d} \sum_a f_a \partial_k^2 \epsilon_a = \frac{q^2 \tau}{\hbar^2} \int \frac{dk}{(2\pi)^d} \sum_a f_a \partial_k^2 \epsilon_a \quad (73)$$

を得る。ここで全体にかかる ω は散乱の効果を経験論的に取り込むために、緩和時間 τ (散乱強度は $\delta = \hbar/\tau$ に対応) を用いて $\omega \rightarrow 0 + i/\tau$ と置き換えた。*¹² 特に1次元系で一つのバンドが $k \in (-k_F, k_F)$ において部分的に占有されている場合を考えよう。フェルミ速度 $v_F = (1/\hbar) \partial_k \epsilon(k_F)$ を用いて、金属伝導度 σ_{dc} は

$$\sigma_{dc} = 2 \frac{q^2}{h} \tau v_F \quad (74)$$

と与えられる。放物線バンド $\epsilon(k) = (\hbar k)^2/2m$ (m :有効質量) の場合を考えると、フェルミ速度は $v_F = \hbar k_F/m$ で与えられる。 $k \in (-k_F, k_F)$ が占有されているときの電子密度 $n = 2k_F/2\pi$ を用いると、

$$\sigma_{dc} = \frac{nq^2 \tau}{m} \quad (75)$$

という電気伝導度のドルーデの式 (Drude formula) を得る。これは準古典的なボルツマン方程式から得られた伝導度の結果と一致していることがわかる。

*¹¹ $H(k)u_a = \epsilon_a u_a$ を k 微分して

$$\partial_k H(k)u_a + H(k)\partial_k u_a = \partial_k \epsilon_a u_a + \epsilon_a \partial_k u_a \quad (70)$$

を得る。両辺において u_b との内積をとり整理することで、1つ目の関係式を得る。上式をさらに k 微分することで、

$$\partial_k^2 H(k)u_a + 2\partial_k H(k)\partial_k u_a + H(k)\partial_k^2 u_a = \partial_k^2 \epsilon_a u_a + 2\partial_k \epsilon_a \partial_k u_a + \epsilon_a \partial_k^2 u_a \quad (71)$$

を得、 u_a との内積をとると

$$(\partial_k v)_{aa} + 2 \sum_b v_{ab} \langle u_b | \partial_k u_a \rangle + \epsilon_a \langle u_a | \partial_k^2 u_a \rangle = \partial_k^2 \epsilon_a + 2\partial_k \epsilon_a \langle u_a | \partial_k u_a \rangle + \epsilon_a \langle u_a | \partial_k^2 u_a \rangle \quad (72)$$

となる。 $\langle u_b | \partial_k u_a \rangle$ を含む項に1つ目の関係式を用いてさらに整理することにより、2つ目の関係式を得る。

*¹² この置き換えは現象論的であるが、よりマイクロスコピックには不純物散乱によるバーテックス補正として考えることができる。詳しくは Mahan [8] や阿部 [9] などの教科書を参照されたい。

3.5 ホール伝導度

次にホール伝導度 σ_{xy} を考えてみよう。ホール効果は y 方向に電場をかけたときに x 方向に電流が $J_y = \sigma_{xy} E_y$ と流れる現象である。これまでの伝導度計算では電場や電流の方向は特に指定してこなかったが、ホール伝導度を考えるために、 α 方向の電流演算子を考えることに対応して、 k_α に関する微分をとることとする。2次元系を考えることにすると、ホール伝導度 $\sigma_{xy}(\omega)$ は式 (67) から、

$$\sigma_{xy}(\omega) = \frac{iq^2}{\hbar^2\omega} \int \frac{dk}{(2\pi)^2} \left(\sum_a f_a (\partial_{k_x} v_y)_{aa} + \sum_{a,b} \frac{f_{ab} v_{x,ab} v_{y,ba}}{\hbar\omega - \epsilon_{ba} + i\delta} \right) \quad (76)$$

と書き表すことができる。ここで、 $v_\alpha = \partial_{k_\alpha} H(k)$ ($\alpha = x, y$) と定義する。反磁性電流からくる第一項は、金属伝導度のときに行ったようにシュレーディンガー方程式を k 微分していくことにより得られる関係式を用いて書き換えることができる。^{*13} これを用いて、さらにギャップ中にフェルミエネルギーが存在する絶縁体の状況を考えると、

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}(\omega \rightarrow 0) &= \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{iq^2}{\hbar^2\omega} \int \frac{dk}{(2\pi)^2} \left(\sum_a f_a \sum_{b \neq a} \frac{v_{x,ab} v_{y,ba} + v_{y,ab} v_{x,ba}}{\epsilon_{ba}} + \sum_{a,b} \frac{f_{ab} v_{x,ab} v_{y,ba}}{\hbar\omega - \epsilon_{ba}} \right) \\ &= \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{iq^2}{\hbar^2\omega} \int \frac{dk}{(2\pi)^2} \sum_{a \in occ.} \sum_{b \in unocc.} \left[v_{x,ab} v_{y,ba} \left(\frac{1}{\epsilon_{ba}} + \frac{1}{\hbar\omega - \epsilon_{ba}} \right) + v_{y,ab} v_{x,ba} \left(\frac{1}{\epsilon_{ba}} - \frac{1}{\hbar\omega + \epsilon_{ba}} \right) \right] \\ &= \frac{iq^2}{\hbar} \int \frac{dk}{(2\pi)^2} \sum_{a \in occ.} \sum_{b \in unocc.} \left(-\frac{v_{x,ab} v_{y,ba}}{\epsilon_{ba}^2} + \frac{v_{y,ab} v_{x,ba}}{\epsilon_{ba}^2} \right) \end{aligned} \quad (79)$$

^{*13} $H(k)u_a = \epsilon_a u_a$ を k_y と k_x で微分することで

$$\begin{aligned} \partial_{k_x} \partial_{k_y} H(k)u_a + \partial_{k_x} H(k) \partial_{k_y} u_a + \partial_{k_y} H(k) \partial_{k_x} u_a + H(k) \partial_{k_x} \partial_{k_y} u_a \\ = \partial_{k_x} \partial_{k_y} \epsilon_a u_a + \partial_{k_x} \epsilon_a \partial_{k_y} u_a + \partial_{k_y} \epsilon_a \partial_{k_x} u_a + \epsilon_a \partial_{k_x} \partial_{k_y} u_a \end{aligned} \quad (77)$$

を得る。 u_a との内積をとり、さらに式 (69) を用いることで、

$$(\partial_{k_x} v_y)_{aa} + \sum_{b \neq a} \left(v_{x,ab} \frac{-v_{y,ba}}{\epsilon_{ba}} + v_{y,ab} \frac{-v_{x,ba}}{\epsilon_{ba}} \right) = \partial_{k_x} (v_y)_{aa} \quad (78)$$

を得る。左辺の和のなかで $b = a$ の項は右辺の $\partial_{k_x} \epsilon_a$ を含む項たちとキャンセルした。

と変形できる。^{*14}ここで、 $occ.(unocc.)$ は占有状態 (非占有状態) を表す。式 (69) を用いて行列要素をベリー接続により書き換えると、

$$\begin{aligned}
 \sigma_{xy} &= \frac{iq^2}{\hbar} \int \frac{dk}{(2\pi)^2} \sum_{a \in occ.} \sum_{b \in unocc.} [\langle u_a | \partial_{k_x} u_b \rangle \langle u_b | \partial_{k_y} u_a \rangle - (x \leftrightarrow y)] \\
 &= -\frac{iq^2}{\hbar} \int \frac{dk}{(2\pi)^2} \sum_{a \in occ.} \sum_{b \in unocc.} [\langle \partial_{k_x} u_a | u_b \rangle \langle u_b | \partial_{k_y} u_a \rangle - (x \leftrightarrow y)] \\
 &= -\frac{iq^2}{\hbar} \int \frac{dk}{(2\pi)^2} \sum_{a \in occ.} \left[\langle \partial_{k_x} u_a | \partial_{k_y} u_a \rangle - \sum_{a' \in occ.} \langle \partial_{k_x} u_a | u_{a'} \rangle \langle u_{a'} | \partial_{k_y} u_a \rangle - (x \leftrightarrow y) \right] \\
 &= -\frac{iq^2}{\hbar} \int \frac{dk}{(2\pi)^2} \sum_{a \in occ.} [\langle \partial_{k_x} u_a | \partial_{k_y} u_a \rangle - (x \leftrightarrow y)] \tag{80}
 \end{aligned}$$

3行目から4行目にいく際に、 a' を含む項は $(a \leftrightarrow a')$ の入れ替えにより $(x \leftrightarrow y)$ の中の項とキャンセルすることを用いた。一方で、 k 空間でのベリー曲率は

$$\begin{aligned}
 F_{k_x k_y} &= \partial_{k_x} a_y - \partial_{k_y} a_x \\
 &= i \langle \partial_{k_x} u | \partial_{k_y} u \rangle + i \langle u | \partial_{k_x} \partial_{k_y} u \rangle - (x \leftrightarrow y) \tag{81}
 \end{aligned}$$

と書くことができる。これを用いるとホール伝導度のベリー曲率による表式

$$\begin{aligned}
 \sigma_{xy} &= -\frac{q^2}{\hbar} \int \frac{dk}{(2\pi)^2} \sum_{a \in occ.} F_{k_x k_y, a} \\
 &= -\frac{q^2}{\hbar} \sum_{a \in occ.} C_a \tag{82}
 \end{aligned}$$

を得る。ここで

$$C_a = \frac{1}{2\pi} \int dk_x dk_y F_{k_x k_y, a} \tag{83}$$

はバンド a のチャーン数で整数値をとる。前章では準古典的な電子の異常速度からホール伝導度の公式を得たが、本章ではよりミクロな量子論から同じ公式を導出できることがわかった。

3.6 分極電流

次に分極電流について応答理論に基づいて考えよう。分極電流は、系のパラメータを変化させたときに電気分極が変化することにより流れる電流である。電気分極は反転対称性が破れた際に現れるので、系の反転対称性の破れをコントロールするあるパラメータ λ を考えることにし、ハミルトニアンのパラメータ族 $H(\lambda)$ を考えよう。電気分極を λ の関数として $P(\lambda)$ と書くと、分極電流は分極の時間微分で与えられるため、

$$J = \dot{P}(\lambda) = \partial_\lambda P(\lambda) \dot{\lambda} \tag{84}$$

^{*14} $(\partial_{k_x} v_y)_{aa}$ を書き換えた際に現れる $\partial_{k_x} (v_y)_{aa}$ の項は全微分であるため、絶縁体でフェルミ面がない状況では k_x 積分により消える。

と λ の時間変化率 $\dot{\lambda}$ に比例する。 λ の時間変化が微小振動していて $\lambda(t) = \lambda_0 + \delta\lambda e^{-i\omega t}$ と与えられる場合を考え、このときの電流応答を求めてみよう。このときハミルトニアン H' は

$$H' = H(\lambda_0) + \partial_\lambda H(\lambda)|_{\lambda=\lambda_0} \delta\lambda e^{-i\omega t} = H(\lambda_0) + \frac{i}{\omega} \partial_\lambda H(\lambda)|_{\lambda=\lambda_0} \dot{\lambda} \quad (85)$$

と与えられる。ここで、 $\dot{\lambda} = -i\omega \delta\lambda e^{-i\omega t}$ であることを用いた。これに対応して、電流演算子は $J = (1/\hbar) \partial_k H'$ となる。ここでパラメータの時間変化率 $\dot{\lambda}$ を摂動、電流 J を応答と考えると、応答関数 $\partial_\lambda P$ は式 (55) において、

$$A = \frac{i}{\omega} \partial_\lambda H \dot{\lambda} \quad B = \frac{q}{\hbar} \partial_k H \quad (86)$$

と置くことにより得られる事がわかる。これはホール伝導度の式 (76) において、 $\partial_{k_x} \rightarrow \partial_k, (q/\hbar) \partial_{k_y} \rightarrow \partial_\lambda$ と置き換えて得られる表式に等しい。(反磁性電流の項は、電流演算子の変化 $\partial_\lambda J \dot{\lambda}$ の寄与に対応する。) このため前節の結果をそのまま用いることができ、分極電流は

$$J = -q \dot{\lambda} \int \frac{dk}{2\pi} \sum_{a \in occ.} F_{k\lambda, a} \quad (87)$$

と与えられる。ここで $F_{k\lambda}$ は (k, λ) 空間のベリー曲率であり、 λ 方向のベリー接続 $a_\lambda = i \langle u | \partial_\lambda u \rangle$ を用いて、 $F_{k\lambda} = \partial_k a_\lambda - \partial_\lambda a_k$ と定義される。 $\lambda = 0$ で反転対称性があり分極がゼロだとすると、 $\lambda = \lambda_0$ での分極は分極電流を積分することにより、

$$P(\lambda_0) = \int J dt = -q \int_0^{\lambda_0} d\lambda \int \frac{dk}{2\pi} \sum_{a \in occ.} F_{k\lambda, a} \quad (88)$$

と与えられる。1バンドが全て電子で占有されている場合を考えると、

$$P(\lambda_0) = -q \int \frac{dk}{2\pi} \int_0^{\lambda_0} d\lambda (\partial_k a_\lambda - \partial_\lambda a_k) = q \int \frac{dk}{2\pi} a_k = \frac{q}{2\pi} \theta \quad (89)$$

となり、分極のベリー位相公式 ($\theta = \int dk a_k$) を与える。さらにパラメータ λ に関してハミルトニアンが周期的な場合 (例えば $H(\lambda = 0) = H(\lambda = 2\pi)$ の場合)、 λ についても周回積分をおこなうことで、

$$P(2\pi) - P(0) = -q \int_0^{2\pi} d\lambda \int \frac{dk}{2\pi} \sum_{a \in occ.} F_{k\lambda, a} = -q \sum_{a \in occ.} C_a \quad (90)$$

とチャーン数 $C_a = \frac{1}{2\pi} \int dk d\lambda F_{k\lambda, a}$ を用いて書き表すことができ、分極変化は整数値をとることがわかる。このようなパラメータサイクルによるチャーン数に対応した分極変化はトポロジカルなチャージポンプと呼ばれる。

4 非線形応答におけるトポロジカル現象：シフト電流

この章では反転対称性の破れた結晶において現れる光起電力効果であるシフト電流について紹介しよう。シフト電流はバンドギャップを超えて電子正孔対が光励起された際に、その電子正孔対の

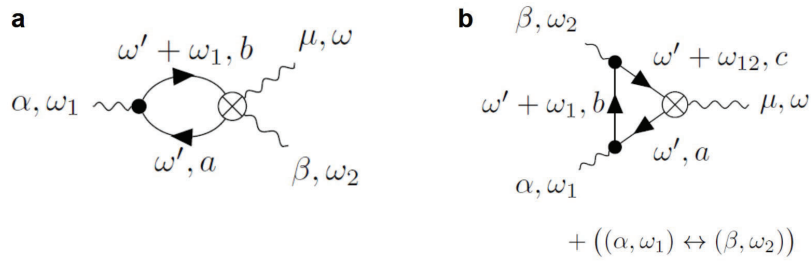


図4 シフト電流に寄与するファインマン・ダイアグラム。(a) 反磁性電流を含むバブル・ダイアグラム。(b) 常磁性電流のみからなる三角ダイアグラム。

もつ電気分極に駆動された非線形 (dc) 電流応答である。シフト電流の記述には、物質中の幾何学的位相（ベリー位相）があらわれ、現代的な分極理論と密接に関連したトポロジカルな非線形応答現象であるといえる。以下では、筆者らによる固体物理の記事 [10] に基づいてシフト電流について解説する。

4.1 ダイアグラム法によるシフト電流の導出

まずは前章で紹介したダイアグラム法を用いてシフト電流の表式を導出してみよう。シフト電流は周波数 ω の光が物質に照射したときに現れる dc 電流応答であり、

$$J_\mu = \sigma_{\mu\alpha\beta}^{(2)}(\omega) E_\alpha(\omega) E_\beta(-\omega) \tag{91}$$

という電流応答として書き表すことができる。ここで μ, α, β は電流および電場の方向を表す。シフト電流はバンドギャップよりも大きな光子エネルギーの光により電子正孔対が生成されることによって生じる dc 電流応答である。このため $\sigma^{(2)}$ の表式には電子の光励起に対応したエネルギー分母 (デルタ関数) が現れる。このような寄与は図4の2種類のダイアグラムにより表される。図4(a) は常磁性電流と反磁性電流のバブルダイアグラムであり、式 (55) において、

$$A = (iq/\hbar\omega)\partial_{k_\alpha} H(k)E(\omega), \quad B = [iq^2/\hbar^2(-\omega)]\partial_{k_\mu}\partial_{k_\beta} H(k)E(-\omega) \tag{92}$$

として与えられる。図4(b) は常磁性電流の三角ダイアグラムであり、2つの入射光の頂点は

$$A_1 = (iq/\hbar\omega)\partial_{k_\alpha} H(k)E(\omega), \quad A_2 = [iq/\hbar(-\omega)]\partial_{k_\beta} H(k)E(-\omega) \tag{93}$$

により与えられ、dc 電流に対応する頂点は $B = (q/\hbar)\partial_{k_\mu} H(k)$ で与えられる。これらの寄与をあわせることで、非線形伝導度のシフト電流に対応する部分 σ^{shift} がえられる。特に、直線偏光

$\alpha = \beta$ の場合には、 σ^{shift} は

$$\sigma_{\mu\alpha\alpha}^{\text{shift}}(\omega) = \frac{q^3}{\hbar^3\omega^2} \int \frac{dk}{(2\pi)^d} \left[\sum_{a,b} \frac{f_{ab}(\partial_{k_\mu} v_\alpha)_{ab} v_{\alpha,ba}}{\hbar\omega - \epsilon_{ba} + i\delta} + \sum_{a,b,c \neq a} \frac{v_{\mu,ac} v_{\alpha,cb} v_{\alpha,ba}}{\epsilon_{ac}} \left(\frac{f_{ab}}{\hbar\omega - \epsilon_{ba} + i\delta} - \frac{f_{cb}}{\hbar\omega - \epsilon_{bc} - i\delta} \right) \right] + (\omega \leftrightarrow -\omega). \quad (94)$$

と与えられる。^{*15} 第一項は線形の伝導度のバブルダイアグラムの計算と同様に求めることができる。第二項は三角ダイアグラムについての松原周波数の和の公式から得ることができる。^{*16} ここで、 $1/(\hbar\omega - \epsilon_{ba} + i\delta)$ のようなエネルギー分母たちは、 $1/(\hbar\omega - \epsilon_{ba} + i\delta) = -i\pi\delta(\hbar\omega - \epsilon_{ba})$ のように、デルタ関数の形に書き換えることができる。これは、シフト電流が光吸収に伴う電子正孔対の実励起に伴って生じる dc 電流であることを示している。非線形伝導度 σ^{shift} は 3 次元 ($d = 3$) においては $[A/V^2]$ の次元を有する。

この表式 (94) は、さらにいくつかの和則を用いることで、ベリー接続を用いた形に書き直すことができることが知られている [11]。つまり、シフト電流はブロッホ波動関数の幾何学的性質を反映した非線形応答現象であるといえる。次節では、 σ^{shift} における幾何学位相の効果をより簡明に理解するために、シフト電流の別の導出法であるフロッケ理論に基づいた非線形応答の定式化を紹介する。

4.2 フロッケ理論

次に、シフト電流のより簡便な記述法を与えるフロッケ理論について簡単に解説を行う。フロッケ (Floquet) 理論は周期的な外場で駆動された系を実効的に静的なバンド描像で記述する方法で、

^{*15} 式 (94) と同等のシフト電流の表式は、[7, 11, 12] において導出されている。[11, 12] は length gauge と呼ばれる手法を用いている。[7] では本稿と同じダイアグラム法を用いている。

^{*16} 三角ダイアグラムの計算にあらわれる松原周波数の和は以下のようにとることができる。

$$\begin{aligned} I &\equiv \int \frac{d\omega_l}{2\pi} \frac{1}{(i\omega_l + i\omega_m + i\omega_n - \epsilon_c)(i\omega_l + i\omega_m - \epsilon_b)(i\omega_l - \epsilon_a)} \\ &= \frac{f_a}{(i\omega_m + i\omega_n - \epsilon_{ca})(i\omega_m - \epsilon_{ba})} + \frac{f_b}{(i\omega_n - \epsilon_{cb})(-i\omega_m - \epsilon_{ab})} + \frac{f_c}{(-i\omega_n - \epsilon_{bc})(-i\omega_m - i\omega_n - \epsilon_{ca})} \\ &= \frac{f_{ab}}{(i\omega_m + i\omega_n - \epsilon_{ca})(i\omega_m - \epsilon_{ba})} + \frac{f_{cb}}{(i\omega_n - \epsilon_{cb})(i\omega_m + i\omega_n - \epsilon_{ca})} \end{aligned} \quad (95)$$

となる。2行目から3行目に行く際に、

$$\frac{f_b}{(i\omega_n - \epsilon_{cb})(-i\omega_m - \epsilon_{ab})} = -f_b \left(\frac{1}{i\omega_n - \epsilon_{cb}} + \frac{1}{i\omega_m - \epsilon_{ba}} \right) \frac{1}{i\omega_m + i\omega_n - \epsilon_{ca}} \quad (96)$$

を用いた。さらに、シフト電流の場合、松原周波数は $i\omega_m \rightarrow \hbar\omega + i\delta$ および $i\omega_n \rightarrow -\hbar\omega + i\delta$ と解析接続する。これにより、

$$I = \frac{1}{\epsilon_{ac}} \left(\frac{f_{ab}}{\hbar\omega - \epsilon_{ba} + i\delta} - \frac{f_{cb}}{\hbar\omega - \epsilon_{bc} - i\delta} \right) \quad (97)$$

を与える。

周期ポテンシャル中の波動関数を記述するブロッホ理論の時間方向版と考えることができる。具体的には、時間依存シュレーディンガー方程式を直接扱うのではなく、フロッケハミルトニアン

$$(H_F)_{mn} = \frac{1}{T} \int_0^T dt e^{i(m-n)\Omega t} H_0(t) - \delta_{mn} m \hbar \Omega. \quad (98)$$

を考える。フロッケハミルトニアンはもとのバンドインデックスに加え、余分な整数によるラベル（フロッケインデックス： m, n など）によって拡張されたヒルベルト空間に作用し、フロッケハミルトニアンから得られるフロッケバンドは、もとの時間依存方程式を解いて得られるダイナミクスと等価な情報を与える。

単色光が照射された系は、周期的な電場により駆動された系であるためにフロッケ理論を適用することができる。この場合、余分な整数ラベルであるフロッケインデックスは、もとのバンドが実効的に n 個の光子をまとった状態と捉えることができ、実効的に静的なフロッケバンドを考えることで、非平衡・非線形現象を取り扱うことができる。特に、図5に示すような光学遷移による非線形光学応答を考える場合、1つの光子をまとった価電子バンドと光子をまとわない伝導バンドからなるバンド交差を考えることになる。これらフロッケバンドのバンド交差は 2×2 のフロッケハミルトニアン [13]

$$H_F = \begin{pmatrix} \epsilon_1 + \Omega & -iA^*v_{12} \\ iAv_{21} & \epsilon_2 \end{pmatrix} \equiv d_0 + \vec{d} \cdot \vec{\sigma}, \quad (99)$$

で記述することができる。(ここで簡単のために $e = 1, \hbar = 1$ と置いた。) ここで、添字 1, 2 は価電子、伝導バンドを意味し、ベクトルポテンシャルを $A = E/\Omega$ 、速度演算子を $v = \partial H_0(A=0)/\partial k$ とした。これに伴い、フロッケ描像での電流演算子 \tilde{v} は

$$\tilde{v} = \begin{pmatrix} v_{11} & -iA^*(\partial_k v)_{12} \\ iA(\partial_k v)_{21} & v_{22} \end{pmatrix} \equiv b_0 + \vec{b} \cdot \vec{\sigma}. \quad (100)$$

と与えられる。このフロッケ理論と、非平衡定常状態における電子分布を記述できるケルディッシュグリーン関数法とを組み合わせることで、光照射下で実現する非平衡定常状態における電流応答現象を一般に記述することができる。

4.3 反転対称性の破れた結晶におけるシフト電流

以上の道具立てを用いることで、シフト電流を考察する。シフト電流は光照射したときにあらわれる dc 電流応答で、2 次の非線形伝導度 $\sigma^{(2)}(\omega)$ を用いて

$$J_{shift} = \sigma^{(2)}(\omega) |E(\omega)|^2. \quad (101)$$

と書き表される。空間反転操作により電流 J は符号反転する一方、 $|E|^2$ は符号反転しないのでシフト電流がノンゼロになるためには空間反転対称性が破れている必要がある。つまり、反転心を欠いた結晶においてシフト電流応答が一般にあらわれる。おもしろいのは、磁気カイラル異方性の時のように時間反転対称性の破れを必要としないということである。このことは、シフト電流が光

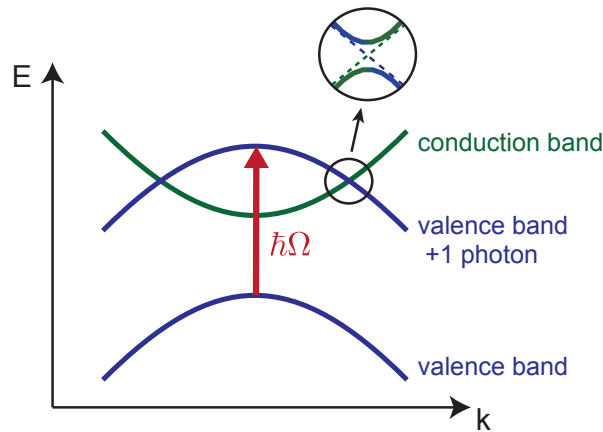


図5 フロッケバンドによる（非線形）光学応答の描像。フロッケ理論では、ブロッホ状態が光子をまとったフロッケバンドを考える。光学遷移が起こる状況では、1光子をまとった価電子バンドともとの伝導バンドが交差することになる。このフロッケバンドのバンド交差が非平衡定常状態を表し、そこにおけるベリー位相の構造がシフト電流をもたらししていると考えることができる。[13] より転載。

キャリアの群速度によって起こるものではなく（ \mathcal{T} があればバンド構造は $\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon(-\mathbf{k})$ となるので群速度の寄与は $\pm k$ で相殺する）、むしろブロッホ波動関数の量子力学的性質から現れることを示唆している。

光照射下での dc 電流応答にフロッケ理論を適用すると、電流 J は

$$J = -i\text{Tr}(\tilde{v}G^<) = \int d\mathbf{k} \frac{\Gamma}{2} \frac{(-d_x b_y + d_y b_x)}{d^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}, \quad (102)$$

与えられる。ここで Tr は、バンドインデックスに関するトレースと、 ω および \mathbf{k} に関する積分を意味する。被積分関数は、速度演算子に現れる $\partial_k v$ の行列要素を書き直すことで、

$$-d_x b_y + d_y b_x = A^2 |v_{12}|^2 R_k, \quad (103)$$

と書くことができる。ここで R_k はシフトベクトルと呼ばれる長さの次元を持つ量で

$$R_k = \left[\frac{\partial}{\partial k} \text{Im}(\log v_{12}) + a_1 - a_2 \right]. \quad (104)$$

と2バンドのベリー接続の差によって与えられる。これによりシフト電流の表式

$$J_{\text{shift}} = \frac{2\pi e^3}{\hbar^2 \omega^2} |E(\omega)|^2 \int [dk] |v_{12}|^2 R_k \delta(\omega_{21} - \omega), \quad (105)$$

を導くことができる。ここでは1と置いていた e, \hbar をあらわに書き、 $[dk] = dk/(2\pi)^d$ (d :次元) という表記を用いた [13]。

このシフト電流は、直感的には光励起された電子正孔対の分極電流として理解できる。励起された電子正孔対は、2バンドのセル内座標の差 ($\approx R_k \approx a_1 - a_2$) に相当する分極を有しており、こ

の分極が電子正孔対の定常的な光励起によって時間的に増加していく。分極の時間微分は電流に対応するため、この過程により dc の定常電流、シフト電流が流れるわけである。ただし、系の分極は増え続けていくわけではなく、キャリアが電流として外部に取り出される過程で分極が開放されることで、非平衡定常状態が成り立っている。

4.4 電子間相互作用のもとであらわれるシフト電流

空間反転が破れた結晶であれば、相互作用する電子系についてもシフト電流を考えることができる。半導体における相互作用効果の例として、電子正孔間の引力相互作用による励起子形成が考えられる。フロッケ理論を用いると、引力相互作用を平均場近似で扱い励起子が形成された非平衡定常状態下での光学応答をフロッケ理論により解析することができる [14]。これにより、反転心を欠いた結晶中の励起子共鳴によってもシフト電流応答が現れることを示すことができる。おもしろいのは、励起子は光励起された電子正孔対の束縛状態であるため自由な光キャリアがないにもかかわらず dc 電流が流れる点である。シフト電流応答は、励起子の場合も電子正孔対の分極がノンゼロであることから生じる。つまり、分極を持つ励起子が光照射により定常的に生成されるため分極が時間的に増加し、これが定常電流をなすわけである。さらに、時間反転と空間反転が同時に破れているマルチフェロイックス物質においては、エレクトロマグノンという電気分極と磁化の揺らぎが結合した素励起が低エネルギーに存在するが、これを光で励起するとやはり dc のシフト電流が流れることが理論的に示されている [15]。

参考文献

- [1] Raffaele Resta. Macroscopic polarization in crystalline dielectrics: the geometric phase approach. *Rev. Mod. Phys.*, Vol. 66, pp. 899–915, Jul 1994.
- [2] Naoto Nagaosa and Takahiro Morimoto. Concept of quantum geometry in optoelectronic processes in solids: Application to solar cells. *Advanced Materials*, Vol. 29, No. 25, p. 1603345, 2017.
- [3] David Vanderbilt and R. D. King-Smith. Electric polarization as a bulk quantity and its relation to surface charge. *Phys. Rev. B*, Vol. 48, pp. 4442–4455, Aug 1993.
- [4] Alexander Altland and Ben D Simons. *Condensed matter field theory*. Cambridge university press, 2010.
- [5] 永長直人. 物性論における場の量子論 -. 岩波書店, 2014.
- [6] John W Negele and Henri Orland. *Quantum many-particle systems (advanced book classics)*, 1998.
- [7] Daniel E. Parker, Takahiro Morimoto, Joseph Orenstein, and Joel E. Moore. Diagrammatic approach to nonlinear optical response with application to weyl semimetals. *Phys. Rev. B*, Vol. 99, p. 045121, Jan 2019.

- [8] Gerald D Mahan. *Many-particle physics*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [9] 阿部龍蔵. 統計力学. 東京大学出版会, 1992.
- [10] 永長直人, 森本高裕. ダイナミクスにおける右と左 : 固体における非相反現象. 固体物理, Vol. 55, pp. 85–102, 2020.
- [11] J. E. Sipe and A. I. Shkrebtii. Second-order optical response in semiconductors. *Phys. Rev. B*, Vol. 61, pp. 5337–5352, Feb 2000.
- [12] Ashley M Cook, Benjamin M Fregoso, Fernando De Juan, Sinisa Coh, and Joel E Moore. Design principles for shift current photovoltaics. *Nature communications*, Vol. 8, p. 14176, 2017.
- [13] Takahiro Morimoto and Naoto Nagaosa. Topological nature of nonlinear optical effects in solids. *Science Advances*, Vol. 2, No. 5, p. e1501524, 2016.
- [14] Takahiro Morimoto and Naoto Nagaosa. Topological aspects of nonlinear excitonic processes in noncentrosymmetric crystals. *Phys. Rev. B*, Vol. 94, p. 035117, Jul 2016.
- [15] Takahiro Morimoto and Naoto Nagaosa. Shift current from electromagnon excitations in multiferroics. *Phys. Rev. B*, Vol. 100, p. 235138, Dec 2019.