講義ノート：トポロジカル物性の基礎

永井佑紀

September 24, 2024

Abstract

トポロジカル物性の基礎について述べます。なお、もともと超伝導とトポロジカル物質を合わせて一つの講義だったため、超伝導の基礎の講義ノートの内容に言及する場合があります。このノートでは全ての図は省略しています。図は実際の講義では描いていますので、そちらを参考にしてください。図なしで全て文章で説明しているためにわかりづらいところがあると思いますが、ご了承ください。

Contents

参考文献

- 野村　健太郎, トポロジカル絶縁体・超伝導体, 丸善出版
- 安藤 陽一, トポロジカル絶縁体入門, 講談社

1　トポロジカル絶縁体

1.1　物質の分類

固体物性では、電気の流れやすさによって

- 絶縁体
- 半導体
- 金属

のように分類することができます。そして、バンド理論によれば、

- 絶縁体: バンドギャップがある
- 半導体: 小さなバンドギャップがある
- 金属: バンドギャップがない

という形で、バンドにおけるギャップの有無で分類することができます。ここで、バンド、とは電子が存在しうる領域のことです。例えば、自由電子では波数を k として、

$$\epsilon_k = \frac{\hbar k^2}{2m} \tag{1}$$

がシュレーディンガー方程式の固有値です。ここで、簡単のため 1 次元系を考えています。この固有値のことを「エネルギー分散」と呼びますが、式からわかりますように、どんな波数 k を入れても $\epsilon_k < 0$

となることはありません。一方、$\epsilon_k \geq 0$ となるようなエネルギーは常に存在します。つまり、$\epsilon_k \geq 0$ にバンドが存在しています。化学ポテンシャル μ を考えますと、

$$\xi_k = \epsilon_k - \mu = \frac{\hbar k^2}{2m} - \mu \tag{2}$$

となりますが、$\xi_k = 0$ となるエネルギーがフェルミエネルギーです。電子はフェルミオンなのでエネルギーの低い順から準位を占有しており、一番最後の電子がいるエネルギー準位のことをフェルミエネルギーと呼びます。

1.2 電流とエネルギー準位

電流を流すためには電子を動かさなければならないためエネルギーを注入する必要があります。注入されたエネルギーは電子を別の準位に引き上げます。しかし、行き先の準位が埋まっている場合には、パウリの排他原理により引き上がることはできません。そのため、小さなエネルギーを与えたときに一番引き上がりやすいのは、フェルミエネルギー近傍の電子です。なぜなら、フェルミエネルギーより上のエネルギー準位は電子がおらず、小さなエネルギーでその準位に移動できるからです。したがって、$\xi_k = 0$ においてエネルギー準位が存在しているかどうかで、電子の流れやすさが決まります。例えば、

$$\xi_k = \pm\sqrt{k^2 + m^2} - \mu \tag{3}$$

のようなエネルギー準位があった場合、$\mu = 0$ かつ $m \neq 0$ の時には $\xi_k = 0$ となる波数 k は存在しません。そのため、$\mu = 0$ の時は、占有されている一番大きなエネルギーは $\xi_k = -m$ であり、占有されていない一番小さなエネルギーは $\xi_k = m$ となっています。これは、電子を別のエネルギー準位に移動させるためには、$E = 2m$ のエネルギーを注入する必要がある、ということです。m が大きい場合、電子が流れにくいということになります。つまり、絶縁体です。

1.3 トポロジカル絶縁体

今回の対象となる「トポロジカル絶縁体」は、

- 試料中心付近（バルク、と呼びます）は絶縁体
- 試料端付近（表面や界面）は金属

という性質を持つ不思議な物質です。そして、このトポロジカル絶縁体は数学の「トポロジー」という手法を使って分類することができます。[1]Wikipedia では

- ”トポロジーは、何らかの形（かたち。あるいは「空間」）を連続変形（伸ばしたり曲げたりすることはするが切ったり貼ったりはしないこと）しても保たれる性質（位相的性質または位相不変量）に焦点を当てたものである” (Wikipedia 「位相幾何学」より)

と書かれています。トポロジーを使うことで物質を分類することができる、ということが本講義で学ぶことです。

[1] トポロジーがどのようなものかは講義では話しますが、このノートでは割愛します。

2　束縛状態

2.1　表面について

トポロジカル絶縁体の表面は金属になっている、ということを述べました。ここでの「金属」とは、電流が流れる、という意味であり、電流が流れやすいのはフェルミエネルギー近傍でエネルギー固有値が存在する場合です。つまり、$E=0$ となる解が存在している場合には、金属と呼びます。特に、その $E=0$ に対応する波動関数が表面付近で局在した関数になっており、試料中心では非常に小さくなっている場合には、「表面に束縛状態が存在する」ということであり、これを「表面は金属」と呼んでいます。

2.2　トポロジーを使わない議論:1 次元シュレーディンガー方程式

トポロジーを使った議論をする前に、通常の方法で表面の束縛状態の有無について議論してみましょう。

2.2.1　周期境界条件

一番簡単な場合として、1 次元シュレーディンガー方程式：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = E\psi(x) \tag{4}$$

を考えます。よくやるのは、長さ L の周期境界条件:

$$\psi(x+L) = \psi(x) \tag{5}$$

を課して解きます。この時は、ポテンシャルがありませんので、シュレーディンガー方程式は

$$\psi(x) = e^{ikx}\psi(k) \tag{6}$$

という解を仮定することで

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi(k) = E\psi(k) \tag{7}$$

となりますから、エネルギー固有値は

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{8}$$

となります。そして、あるエネルギーを持つ解の k は

$$k = \pm\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{9}$$

と得られます。つまり、同じエネルギーに二種類の k の解が存在しますから、波動関数は二つの線型結合：

$$\psi(x) = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx} \tag{10}$$

が一般解です。境界条件を満たすには、

$$k = \frac{2\pi n}{L} \tag{11}$$

とします。n は自然数です。ここまでは量子力学でお馴染みの方法かと思います。この境界条件から自然に k が実数であるということが出てきました。もし k に純虚数を入れた場合、波動関数は指数関数的に発散してしまうため、不適です。

また、上のシュレーディンガー方程式は時間依存性のない場合ですが、時間依存性のあるシュレーディンガー方程式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) \tag{12}$$

ですので、解は

$$\psi(x,t) = e^{-iE(k)t/\hbar}\psi(x) \tag{13}$$

となります。この時間依存する波動関数が過去や未来で発散しないためには、$E(k)$ は実数でなければなりません。

2.2.2 はしがある系

次に、はしがある系を考えます。状況としては、$x < 0$ に無限大のポテンシャルが存在しているとして、

$$\psi(x \leq 0) = 0 \tag{14}$$

という状況を考えます。つまり、領域としては $x \geq 0$ を考え、

$$\psi(x = 0) = 0 \tag{15}$$

という境界条件を考えていることになります。境界条件以外は上と同じ議論ができますので、波動関数は

$$\psi(x) = c_1e^{ikx} + c_2e^{-ikx} \tag{16}$$

と書け、エネルギー固有値は

$$E(k) = \frac{\hbar^2k^2}{2m} \tag{17}$$

となっています。

さて、解の形を仮定したとき、実は k が実数であるということは何も言っていませんでした。エネルギーが実数であるという条件を満たすだけであれば、$k = i\eta(\eta$ は実数$)$ というような純虚数を考えてもシュレーディンガー方程式の解を満たしているように見えます。考えた解は境界条件 $\psi(x = 0) = 0$ を満たす必要があります。パラメータ k は

$$k = \sqrt{2mE}\hbar^2 \tag{18}$$

ですが、$E < 0$ とすると純虚数の k が得られます。$x \to \infty$ で発散しない解は $k = i\eta(\eta > 0)$ とすると、

$$\psi(x) = e^{-\eta x}\psi(k) \tag{19}$$

ですが、この解は $x = 0$ で

$$\psi(x = 0) = \psi(i\eta) \tag{20}$$

となりますから、$\psi(x = 0) = 0$ という境界条件を満たすには $\psi(k) = 0$ でなければならず、これは x の全領域で波動関数の値がゼロということになります。つまり、解にはなりません。

以上から、1 次元シュレーディンガー方程式でポテンシャルのない場合、端に局在するような関数は解とはならないことがわかりました。

2.3 トポロジーを使わない議論:1 次元 Dirac 模型

さて、通常の 1 次元シュレーディンガー方程式の場合は束縛状態を作るのが難しそうだということがわかりました。次に、トポロジカル物質の一番簡単な模型として、1 次元 Dirac 模型を考えることにします。1 次元 Dirac 模型は

$$H = \begin{pmatrix} \psi^\dagger_{k_x,\uparrow} & \psi^\dagger_{k_x,\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m & Ak_x \\ Ak_x & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{k_x,\uparrow} \\ \psi_{k_x,\downarrow} \end{pmatrix} \tag{21}$$

と書けます。ここで、生成消滅演算子についている $\uparrow,\downarrow$ は、必ずしも実際のスピンである必要はなく、何らかの 2 自由度があればよいです（pseudo spin と呼ばれます)。

このモデルの束縛状態を考えてみましょう。超伝導の時と同様に、第二量子化表示のハミルトニアンを

$$H = \sum_{k_x} E_{k_x} a^\dagger_{k_x} a_{k_x} \tag{22}$$

のような形にすれば、基底状態や励起状態を求めることができます。

この説では、第二量子化の表示を通常の表示に戻し、その時のシュレーディンガー方程式を考えることにします。つまり、

$$\hat{H}\vec{\psi}(k_x) = E_{k_x}\vec{\psi}(k_x) \tag{23}$$

$$\hat{H} \equiv \begin{pmatrix} m & Ak_x \\ Ak_x & -m \end{pmatrix} \tag{24}$$

$$\vec{\psi}(k_x) \equiv \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(k_x) \\ \psi_\downarrow(k_x) \end{pmatrix} \tag{25}$$

という 2 自由度のシュレーディンガー方程式を考えます。この固有値方程式の固有値は以下のように簡単に求めることができます。まず、

$$\hat{H} = m\sigma_z + ak_x\sigma_x \tag{26}$$

とします、ここで、パウリ行列を

$$\sigma_0 \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{27}$$

$$\sigma_x \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{28}$$

$$\sigma_y \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{29}$$

$$\sigma_z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{30}$$

と定義しています。このパウリ行列は

$$\sigma_\mu\sigma_\mu = 0 \tag{31}$$

$$\sigma_\mu\sigma_{\mu'} = -\sigma_{\mu'}\sigma_\mu,\ \mu \neq \mu' \tag{32}$$

という関係があります。ここで、

$$\hat{H}^2 = (m\sigma_z + ak_x\sigma_x)(m\sigma_z + ak_x\sigma_x) \tag{33}$$

$$= (m^2 + A^2k_x^2)\sigma_0 \tag{34}$$

となりますから、

$$\hat{H}\hat{H}\vec{\psi}(k_x) = E_{k_x}\hat{H}\vec{\psi}(k_x) \tag{35}$$

$$(m^2 + A^2k_x^2)\vec{\psi}(k_x) = E_{k_x}^2\vec{\psi}(k_x) \tag{36}$$

となり、固有値は

$$E_{k_x} = \pm\sqrt{m^2 + A^2k_x^2} \tag{37}$$

となります。

もし、化学ポテンシャル μ がゼロならば、このシュレーディンガー方程式は $E=0$ で解はありません。つまり、この模型は絶縁体の模型です。そして、$k_x = i\eta$ という純虚数を導入すると、

$$E_{i\eta} = \pm\sqrt{m^2 - A^2\eta^2} \tag{38}$$

となりますから、

$$\eta = \pm\sqrt{\frac{m^2}{A^2}} \tag{39}$$

であれば、$E=0$ になります。つまり、端のあるような系であれば、ゼロエネルギーの解があっても良いということになります。ただし、境界条件 $\psi(x=0)=0$ も満たさなければその系の解ではありません。今回の場合も、$x\to\infty$ で発散しないという条件を満たすには、

$$\eta = \sqrt{\frac{m^2}{A^2}} \tag{40}$$

という一つの η しかありません。しかし、これでは、先ほどの 1 次元シュレーディンガー方程式の場合と同様に境界条件を満たすことができません。それでは、どうすれば解が得られるのでしょうか。

そのため、$E=0$ の解を探してみることにします。 $E=0$ ということは、

$$\hat{H}\vec{\psi} = \vec{0} \tag{41}$$

を満たすようなベクトル $\vec{\psi}$ が解です。両辺に σ_z をかけますと、$\sigma_z\sigma_x = -i\sigma_y$ を用いることで、

$$\sigma_x(m\sigma_z + Ak_x\sigma_x)\vec{\psi} = (m - iAk_x\sigma_y)\vec{\psi} = \vec{0} \tag{42}$$

が得られます。この方程式を満たす解は、実は、σ_y の固有ベクトルです。σ_y の固有値と固有ベクトルは

$$\sigma_y\vec{\psi}_\pm = \pm\vec{\psi}_\pm \tag{43}$$

です。具体的には、

$$\vec{\psi}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} \tag{44}$$

が固有ベクトルです。確かめてみますと、

$$\sigma_y\vec{\psi}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} \tag{45}$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} \tag{46}$$

と確かに固有ベクトルになっています。

これのベクトルをそれぞれ代入しますと、

$$(m - iAk_x)\vec{\psi}_+ = \vec{0} \tag{47}$$
$$(m + iAk_x)\vec{\psi}_- = \vec{0} \tag{48}$$

となります。$\vec{\psi}_-$ に着目しますと、

$$m + iAk_x = 0 \tag{49}$$

となる k_x が必要です。この解は

$$k_x = i\frac{m}{A} \tag{50}$$

です。この解は一つしかありませんので、境界条件 $\psi(x=0)$ は満たせません。つまり、先ほどの繰り返しになってしまいますが、このままではこの系でも束縛状態の解は得られません。そこで、ハミルトニアンを少し変形します。つまり、

$$m \to m(k_x) = m_0 + m_2 k_x^2 \tag{51}$$

と変更します。$k_x = i\eta$ とすると、解を持つ条件は

$$m_0 - m_2\eta^2 - A\eta = 0 \tag{52}$$

ですから、η は

$$\eta_\pm = \frac{-A \pm \sqrt{A^2 + 4m_0 m_2}}{2m_2} \tag{53}$$

という二つが存在します。二つの解がともに $\eta_\pm > 0$ となるためには、$m_0 > 0$,$m_2 < 0$,$A > 0$ にすればよいです。そして、二つの解を使った線型結合を

$$\vec{\psi}(x) = (e^{-\eta_+ x} - e^{-\eta_- x})\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} \tag{54}$$

のようにすると、$x = 0$ で $\psi(x) = 0$ となります。つまり、境界条件を満たすシュレディンガー方程式の解となっています。この解は、

- $x = 0$ 近傍で値が大きくなる
- $x \to \infty$ で値がゼロになる

という形をしていますから、中身が絶縁体で端が金属であるという、トポロジカル絶縁体と同じ物性を持っています。

2.4 トポロジーを使わない議論: 固体中の 1 次元 Dirac 模型

さて、上で定義した模型は固体中の模型ではありません。なぜなら、k_x に関して周期系になっていないからです。通常、固体系の模型ではブリルアンゾーンが存在していますが、上の模型は連続模型と呼ばれる固体中の模型ではない模型となっています。この模型を固体中の模型にするためには、空間 x を離散化し、長さ a で周期的に並んでいる原子の直上でのみ値を持つような、「格子上の模型」に変える必要があります。

連続系から離散系に変えるには、微分を差分にすれば良いです。一階微分と二階微分の演算子は、それぞれ、

$$\frac{\partial\psi(x)}{\partial x} \to \frac{1}{2a}(\psi(x+a) - \psi(x-a)) \tag{55}$$

$$\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} \to \frac{1}{a^2}(\psi(x+a) + \psi(x-a) - 2\psi(x)) \tag{56}$$

とします。これと加えて、

$$\psi(x \pm a) = e^{ik_x(x\pm a)}\psi_{k_x} \tag{57}$$

より、

$$\frac{\partial\psi(x)}{\partial x} \to \frac{1}{a}e^{ik_x x}\sin ka \tag{58}$$

$$\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} \to \frac{1}{a^2}e^{ik_x x}2(\cos ka - 1) \tag{59}$$

となります。a を長さの単位 $(a = 1)$ とすれば、

$$k_x \to \sin k_x \tag{60}$$

$$k_x^2 \to 2(1 - \cos k_x) \tag{61}$$

と置き換えることで、連続系の模型はブリルアンゾーン $-\pi \leq k_x \leq \pi$ を持つ格子上の模型に変わります。1 次元 Dirac 模型は

$$\begin{pmatrix} m & Ak_x \\ Ak_x & -m \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} m(k_x) & A\sin k_x \\ A\sin k_x & -m(k_x) \end{pmatrix} \tag{62}$$

$$m(k_x) \equiv m_0 + 2m_2(1 - \cos k_x) \tag{63}$$

のような格子上の模型になります。これが、固体中の 1 次元 Dirac 模型です。

これまでの同様の境界条件における $E = 0$ の解は、これまでと同様に $k_x = i\eta$ とすると、

$$m(\eta) + iA\sin(i\eta) = 0 \tag{64}$$

$$m(\eta) = m_0 + 2m_2(1 - \cos(i\eta)) \tag{65}$$

となるような η が解となります。ここで、$\sin(i\eta) = i\sinh(\eta)$,$\cos(i\eta) = \cosh(\eta)$ を用いると、関数 $m(\eta)$ と関数 $-A\sinh(\eta)$ の交点が η となります。そして、η の符号は m_2 の符号変化による $m(\eta)$ の変化によって決まります。つまり、$m_2 < 0$ の時、cosh の項が正になりますから、$m(\eta)$ は下に凸になり、この時には奇関数である sinh との交点は同じ符号になります。そして、二つの解 η が同符号の時のみ境界条件を満たすことができます。つまり、m_2 の符号が大事です。

3　1 次元系におけるトポロジー

なぜ $E = 0$ の束縛状態の解が存在するのか、トポロジーを使って考えてみましょう。物質におけるトポロジーを考える時には、波動関数がどうひねられているか、ということとトポロジーを対応づけることができます。

１次元系のディラックハミルトニアンをもう少し一般的な形にしてみましょう。つまり、

$$H = \begin{pmatrix} R_z(k_x) & R_x(k_x) - iR_y(k_x) \\ R_x(k_x) + iR_y(k_x) & -R_z(k_x) \end{pmatrix} = \vec{R}(k_x)\cdot\vec{\sigma} \tag{66}$$

と書きます。ここで、

$$\vec{R} = (R_x, R_y, R_z)^T \tag{67}$$
$$\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)^T \tag{68}$$

です。ハミルトニアンは 3 次元ベクトル $\vec{R}$ が定まれば決定されます。そして、$\vec{R}$ は k_x の関数ですから、

- k_x が決まれば $H(k_x)$ が一意に定まる $\rightarrow$ $\vec{R}$ が決まれば $H(\vec{R})$ が一意に定まる

という関係になっています。そして、k_x を動かすと $\vec{R}$ が動きますから、

- 一次元：$-\pi \leq k_x \leq \pi \rightarrow$ 三次元 $\vec{R}$

という写像になっています。

さて、三次元ベクトル $\vec{R}$ を極座標表示し、

$$\vec{R} = R \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\phi \\ \sin\theta\sin\phi \\ \cos\theta \end{pmatrix} \tag{69}$$
$$R \equiv \sqrt{R_x^2 + R_y^2 + R_z^2} \tag{70}$$

とします。もちろん、θ や ϕ は k_x の関数です。この時、ハミルトニアンは

$$H = R \begin{pmatrix} \cos\theta & e^{-i\phi}\sin\theta \\ e^{i\phi}\sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix} \tag{71}$$

と書けます。H の固有値は、

$$H^2\vec{\psi} = E^2\vec{\psi} \rightarrow R^2\vec{\psi} = E^2\vec{\psi} \tag{72}$$

から、

$$E_{\pm} = \pm R(k_x) \tag{73}$$

となります。それぞれのエネルギーに対する固有ベクトルは、

$$\vec{\psi}_+ = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \tag{74}$$
$$\vec{\psi}_- = \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2} \\ -e^{i\phi}\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \tag{75}$$

となります。固有ベクトルは長さ R に依存していませんから、

- 一次元：$-\pi \leq k_x \leq \pi$ という 1 次元ループ　$\rightarrow$ 三次元: 半径 1 の球の表面に張り付いたループ

という対応関係があることがわかります。そして、k_x を動かした時に球面上のループがどのようなものになるかを見ることで、トポロジーを定義することができます。

3.1　巻きつき

これまで考えてきた 1 次元ディラック模型は

$$\vec{R} = (A\sin k_x, 0, m)^T \tag{76}$$

でした。ここで、簡単のため、$\sigma_z \to \sigma_x$,$\sigma_x \to \sigma_y$ という基底の入れ替えを行います。その結果、$\vec{R} = (m, A\sin k_x, 0)^T$ となり、ハミルトニアンは

$$H = \begin{pmatrix} 0 & m - iA\sin k_x \\ m + iA\sin k_x & 0 \end{pmatrix} \tag{77}$$

$$= R\begin{pmatrix} 0 & e^{-i\phi} \\ e^{i\phi} & 0 \end{pmatrix} \tag{78}$$

のような対角要素のないハミルトニアンになります。この基底の取り替えによって、ハミルトニアンは ϕ のみによる形になりました。この時、固有ベクトルは

$$\vec{\psi}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\phi} \end{pmatrix} \tag{79}$$

$$\vec{\psi}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\phi} \end{pmatrix} \tag{80}$$

となります。つまり、k_x を $-\pi$ から π まで動かした時に、ϕ が $-\pi \leq \phi \leq \pi$ という領域でどのように動くか、という問題を考えることになります。言い換えれば、単位円上で ϕ がどう動くか、という問題です。

今の模型では、

$$e^{i\phi} = \cos\phi + i\sin\phi = (m + iA\sin k_x)\frac{1}{\sqrt{m^2 + A^2\sin^2 k_x}} \tag{81}$$

です。そして、k_x が $k_x = -\pi$ から $k_x = \pi$ まで動いた時の ϕ の変化を考えます。始点 $k_x = -\pi$ と中間地点 $k_x = 0$ において

- $k_x = -\pi$ の時：$m(-\pi) = m_0 + 4m_2$ かつ $A\sin(-\pi) = 0$ より、$e^{i\phi}$ は実数。$m_0 + 4m_2 > 0$ なら $\phi = 0$、$m_0 + 4m_2 < 0$ なら $\phi = \pi$
- $k_x = 0$ の時：$m(0) = m_0$ かつ $A\sin 0 = 0$ より、$\phi = 0$

となりますから、$m_0 + 4m_2$ の符号によって振る舞いが変わることがわかります。

- $m_0 + 4m_2 < 0$: (k_x, ϕ) は $(-\pi, \pi)$、$(0, 0)$、$(\pi, -\pi)$ と変化
- $m_0 + 4m_2 > 0$: (k_x, ϕ) は $(-\pi, 0)$、$(0, 0)$、$(\pi, 0)$ と変化

ここで、これらの点以外での $\phi(k_x)$ ですが、k_x が連続的に変化していることと $iA\sin(-k_x) = -iA\sin(k_x)$ から、$m_0 + 4m_2 < 0$ であればぐるっと単位円を一周していることがわかります。つまり、

- $m_0 + 4m_2 < 0$: 単位円に巻き付いている
- $m_0 + 4m_2 > 0$: 単位円に巻き付いていない

という状況になっています。巻き付いている、巻き付いていない、というのは、連続変形では移り変わることができない性質ですから、これはトポロジーによる分類といえます。

3.2 ベリー位相

さて、上で見てきたものをもう少し数学的に考えてみましょう。数学的に巻きつきを定義するには、ベリー位相 θ を使うとよいということが知られています。そして、ベリー位相は

$$\theta \equiv -i\int_{-\pi}^{\pi} dk_x \vec{\psi}_-^\dagger \frac{\partial}{\partial k_x}\vec{\psi}_- \tag{82}$$

と定義されています。固有ベクトルの k_x による微分は

$$\frac{\partial}{\partial k_x}\vec{\psi}_- = \frac{\partial \phi}{\partial k_x}\frac{\partial}{\partial \phi}\vec{\psi}_- \tag{83}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ -ie^{i\phi}\frac{\partial \phi}{\partial k_x} \end{pmatrix} \tag{84}$$

となりますから、ベリー位相は

$$\theta = -i\frac{i}{2}\int_{-\pi}^{\pi} dk_x \frac{\partial \phi}{\partial k_x} = \frac{1}{2}(\phi(\pi) - \phi(-\pi)) \tag{85}$$

となります。$k_x = \pm\pi$ では固有ベクトルは一致する必要がありますが、

$$e^{i\phi + 2\pi N} = e^{i\phi} \tag{86}$$

ですから、位相の自由度はついてもよいので、

$$\phi(\pi) - \phi(-\pi) = 2\pi N \tag{87}$$

となります。結局、ベリー位相は

$$\theta = \pi N \tag{88}$$

となり整数 N が現れます。そして、この N が波動関数の巻きつきを示す数になっています。

3.3 トポロジーが変化する時

上で取り扱った模型は $m_0 + 4m_2$ の符号によってトポロジーが変化していました。一方、トポロジーは連続的に変化させた時に変わらないものを議論していたはずです。それでは、トポロジーが変化する時、系に何が起きているのでしょうか？符号によって変化するということは、その変化点では

$$m_0 + 4m_2 = 0 \tag{89}$$

となります。つまり、$m_0/m_2 = -4$ がトポロジーが変化する境界です。この境界での系の様子を調べてみます。$m(k_x)$ にこの値を代入しますと、

$$m(k_x) = -4m_2 + 2m_2(1 - \cos k_x) \tag{90}$$

となります。そして、$k_x = \pm\pi$ の時、$m(k_x) = 0$ です。この系の固有値は

$$E_\pm = \pm\sqrt{m(k_x)^2 + A^2 \sin^2 k_x} \tag{91}$$

でしたから、$\sin\pi = 0$ なので、

$$E_\pm(k_x = \pi) = \pm 0 \tag{92}$$

となります。つまり、$E = 0$ となる波数が存在しています。絶縁体の定義を思い返すと、どんな波数を取ってきても $E = 0$ の解が存在しない領域があるのが絶縁体でしたから、このパラメータでは、$E = 0$ の解が存在することになり、系が金属になっていることを意味しています。よって、

- $m_0 + 4m_2 < 0$: トポロジカル絶縁体 $N = 1$
- $m_0 + 4m_2 = 0$: 金属 N は定義できない
- $m_0 + 4m_2 > 0$: 絶縁体 $N = 0$

となっているわけです。なお、ベリー位相は実はギャップがあいている時に下のバンドを使って定義されるものでして、金属の場合には定義できません。つまり、トポロジカル数が変化する場合、「トポロジカル数が定義できない状態」を経由してから変化する、ということになります。これは、連続的な変化ではありません。

3.4 バルクエッジ対応

さて、ここまで、ある系において表面に $E=0$ の束縛状態がある、ということと、ある系においてトポロジカル数が 0 でない値が定義できる、ということを見てきました。実は、この二つは関係していることが知られています。これが「バルクエッジ対応」と呼ばれるものです。

今、$x<0$ にトポロジカル絶縁体、$x>0$ に通常の絶縁体があり、両者が並んでいる状態を考えます。この時、それぞれのトポロジカル数は $N=1$ と $N=0$ とします。今、N は座標 x に依存しているとみなすこともできますから、$N(x)$ としましょう。トポロジカル絶縁体から絶縁体になるためには、N を変化させなければなりませんが、今の模型ではこれは m_2 を変化させていることに相当しています。そして、この m_2 が x に依存していれば、N も x に依存していることになります。さて、$m_2(x)$ が x の変化によって滑らかに変化する時、トポロジカル絶縁体から絶縁体の領域に入るということは、途中に「連続変形できない」領域が出てこなければなりません。なぜなら、トポロジカル数の異なる系は連続的な変形で移り変われないからこそトポロジカル数が異なりますから。一方、それぞれの絶縁体はギャップが開いていることにより、ベリー位相が定義できています。つまり、$N=1$ から $N=0$ へ変化する場合、「途中でギャップが閉じる必要」があります。これは、実空間において、トポロジカル絶縁体と通常の絶縁体の境界、つまり今の問題では $x=0$ において、ギャップが閉じるということです。ギャップが閉じるということは何らかの解が存在しているということですし、この解は $x=0$ 近傍にのみ存在しそれより遠い場所では存在しないはずですから、これは束縛状態です。つまり、

- $x=0$ に束縛状態が存在する

ということになります。これが「バルクエッジ対応」です。トポロジカル数が異なる二つを接触させた時、その界面には束縛状態が現れるのです。なお、真空のトポロジカル数はゼロだとすれば、トポロジカル絶縁体の表面にはいつも束縛状態が現れます。これが「表面は金属状態、中身（バルク）は絶縁体」というトポロジカル絶縁体の性質の起源です。

3.5 波動関数のひねり

最後に、波動関数のひねりについてです。上で取り扱った系の固有ベクトルは

$$\vec{\psi}_+(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\phi} \end{pmatrix} \tag{93}$$

$$\vec{\psi}_-(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\phi} \end{pmatrix} \tag{94}$$

でした。もし、k_x を動かした時に ϕ が一周するのであれば、$\phi' = \phi + \pi$ という状態も現れるはずです。この時、

$$\vec{\psi}_+(\phi') = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\phi} \end{pmatrix} = \vec{\psi}_-(\phi) \tag{95}$$

$$\vec{\psi}_-(\phi') = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\phi} \end{pmatrix} = \vec{\psi}_+(\phi) \tag{96}$$

となっています。つまり、プラスのエネルギーの解とマイナスのエネルギーの解が入れ替わっています。これは、「波動関数がひねられている」と見てもよいでしょう。

4 2次元系におけるトポロジー

1次元系では巻きつき数が定義できました。次は、2次元系を考えます。2次元のディラック模型は、

$$H = A_x p_x \sigma_x + A_y p_y \sigma_y + m(\vec{p})\sigma_z = \begin{pmatrix} m & A_x p_x - iA_y p_y \\ A_x p_x + iA_y p_y & -m \end{pmatrix} \tag{97}$$

です。固体中を考えると、

$$H = A_x \sin k_x \sigma_x + A_y \sin k_y \sigma_y + m(\vec{k})\sigma_z \tag{98}$$

$$m(\vec{k}) = m_0 + 2m_{2x}(1 - \cos k_x) + 2m_{2y}(1 - \cos k_y) \tag{99}$$

のようになります。基本的にはシンプルに1次元系を2次元系に拡張した形になっています。以降は、$m_{2x} = m_{2y} = m_2$ とします。このハミルトニアンは

$$H = \vec{R}(k_x, k_y) \cdot \vec{\sigma} \tag{100}$$

と書くことができます。2次元系の場合、$-\pi \leq k_x \leq \pi$,$-\pi \leq k_y \leq \pi$ という2次元の四角の領域を波数が動くことができます。それに従って、ベクトル $\vec{R}$ が3次元空間で動くことになります。波数空間で面状に動いてますから、$\vec{R}$ の空間でも面状に動きます。固有値は1次元の模型と同じで、$E_{\pm} = -\pm R(R = \sqrt{R_x^2 + R_y^2 + R_z^2})$ です。もちろん固有ベクトルも同じで、

$$\vec{\psi}_+ = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \tag{101}$$

$$\vec{\psi}_- = \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2} \\ -e^{i\phi}\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \tag{102}$$

となります。そして、k_x, k_y が動いた時に、$\theta(k_x, k_y), \phi(k_x, k_y)$ が動くことで $\vec{R}$ がどう動くか、ということを考えることになります。

4.1 ベリー位相について

2次元の系の何らかの計算を行う前に、ベリー位相について述べておきます。ハミルトニアン $H(\vec{R})$ があるパラメータ $\vec{R}$ に依存しているとします。そして、$\vec{R}(k_x, ky_y)$ は k_x, k_y が動くと動きます。

さて、$\vec{R}$ をゆっくりと動かすことを考えます。ここで、時間 t に従って $\vec{R}$ が変化すると考え、時間依存のシュレーディンガー方程式を考えます。

$$H(\vec{R}(t))|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle \tag{103}$$

ここで $|\psi(t)\rangle$ はケットベクトルと呼ばれるものですが、このノートではただのベクトルと思っておいて問題ありません。今回 $\vec{R}$ は $t = 0$ から $t = T$ まで動き、元に戻ってくるとします。つまり、$\vec{R}(t = 0) = \vec{R}(t = T)$ とします。また、固有エネルギーに縮退はないとします。ハミルトニアン $H(\vec{R})$ の固有ベクトルを $|\phi_n(\vec{R})\rangle$ とします。つまり、ハミルトニアン H に対するシュレーディンガー方程式

$$H(\vec{R})|\phi_n(\vec{R})\rangle = E_n(\vec{R})|\phi_n(\vec{R})\rangle \tag{104}$$

が成り立っているとします。

この時、十分ゆっくり t を動かすと、その時その時の t において波動関数は $H(\vec{R}(t))$ の固有状態になっていると期待されます（そうなるように可能な限りゆっくり t を動かしているとも言えます)。この時、波動関数の時刻 t での値は

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\gamma_n(t)}|\phi_n(\vec{R})\rangle \tag{105}$$

と書けるでしょう。ここで、$e^{i\gamma_n(t)}$ は位相の自由度でして、これがついていても状態はハミルトニアン H の固有状態です。

さて、この位相を求めてみましょう。まず、時間依存のシュレディンガー方程式から、

$$i\hbar\langle\psi(t)|\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)|H(\vec{R}(t))|\psi(t)\rangle = E_n(\vec{R}(t)) \tag{106}$$

ですので、

$$\langle\psi(t)|\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}E_n(\vec{R}(t)) \tag{107}$$

となります。一方、式 (105) から、

$$\langle\psi(t)|\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \langle\phi_n(\vec{R})|e^{-i\gamma_n(t)}\frac{\partial}{\partial t}\left[e^{i\gamma_n(t)}|\phi_n(\vec{R}(t))\rangle\right] \tag{108}$$

$$= i\frac{\partial\gamma_n(t)}{\partial t} + \langle\phi_n(\vec{R})|\frac{\partial\vec{R}}{\partial t}\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{R}}|\phi_n(\vec{R}(t))\rangle \tag{109}$$

が得られます。ここで、$\frac{\partial}{\partial\vec{R}}f$ は勾配で、

$$\frac{\partial}{\partial\vec{R}}f = \left(\frac{\partial f}{\partial R_x}, \frac{\partial f}{\partial R_y}, \frac{\partial f}{\partial R_z}\right)^T \tag{110}$$

です。上の $\langle\psi(t)|\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle$ に関する二つの式を組み合わせることで、

$$i\frac{\partial\gamma_n(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E_n(\vec{R}(t)) - \frac{\partial\vec{R}}{\partial t}\cdot\langle\phi_n(\vec{R})|\frac{\partial}{\partial\vec{R}}|\phi_n(\vec{R})\rangle \tag{111}$$

さて、$\vec{R}$ を $t=0$ から $t=T$ まで時間発展させた時のそれぞれの位相の差を計算してみます。これは、

$$\gamma_n(T) - \gamma_n(0) = [\gamma_n(t)]_0^T = \int_0^T dt\frac{\partial\gamma_n(t)}{\partial t} = (-i)\int_0^T dti\frac{\partial\gamma_n(t)}{\partial t} \tag{112}$$

となりますから、

$$\gamma_n(T) - \gamma_n(0) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^T dtE_n(\vec{R}(t)) + i\int_0^T dt\frac{\partial\vec{R}}{\partial t}\cdot\langle\phi_n(\vec{R})|\frac{\partial}{\partial\vec{R}}|\phi_n(\vec{R}(t))\rangle \tag{113}$$

$$= -\frac{1}{\hbar}\int_0^T dtE_n(\vec{R}(t)) + i\oint_C d\vec{R}\cdot\langle\phi_n(\vec{R})|\frac{\partial}{\partial\vec{R}}|\phi_n(\vec{R}(t))\rangle \tag{114}$$

となります。ここで、第二項の周回積分の積分経路 C は、$t=0$ から $t=T$ まで動かした時に $\vec{R}$ が動く経路です。つまり、第二項は経路 C によって変化します。一方、第一項は経路によりません。そのため、

1. 力学的位相：経路に依存しない
2. 幾何学的位相：経路に依存する

という二種類の位相があることになります。

そして、幾何学的位相の項のことをベリー位相と言いまして、定義は

$$\gamma_n(C) \equiv -\oint_C \vec{A}_n(\vec{R})\cdot d\vec{R} \tag{115}$$

です。ここで、$vecA_n(\vec{R})$ はベリー接続と呼ばれておりまして、定義は

$$\vec{A}_n(\vec{R}) \equiv -i\langle\phi_n(\vec{R})|\frac{\partial}{\partial\vec{R}}|\phi_n(\vec{R})\rangle \tag{116}$$

です。ここで言っているのは、ベクトル $\vec{R}$ が何らかの経路 C を辿ると、波動関数はベリー位相を得るということです。それぞれの時刻での波動関数は

$$|\psi(t=0)\rangle = e^{i\gamma_n(0)}|\phi_n(\vec{R}(t=0))\rangle \tag{117}$$

$$|\psi(t=T)\rangle = e^{i\gamma_n(T)}|\phi_n(\vec{R}(t=0))\rangle \tag{118}$$

となります。ベクトル $|\phi_n(\vec{R}(t=0))\rangle$ の部分は両方とも同じですが、位相だけ異なっています。

さて、ストークスの定理：

$$\oint_C \vec{A}_n(\vec{R})\cdot d\vec{R} = \int_S d\vec{B}(\vec{R})\cdot d\vec{S} \tag{119}$$

を使いますと、ベリー曲率：

$$\vec{B}(\vec{R}) \equiv \vec{\nabla}_{\vec{R}} \times \vec{A}_n \tag{120}$$

が定義できます。ここで、$\vec{\nabla}_{\vec{R}} \times \vec{a}$ は $\vec{R}$ 空間における rot を意味していまして、rot$\vec{a}$ です。

そして、波動関数は最初と最後で位相だけ異なっていますが、今周期 T の系を考えていますから、同じ状態に戻らなければなりません。つまり、位相差には条件があり、

$$\gamma_n(T) - \gamma_n(0) = 2\pi N \tag{121}$$

となるべきです。ここで N は整数です。

最後に、このベリー接続とベリー曲率が電磁気学のベクトルポテンシャルと磁場に似ているのではないかと思う方がいるかと思いますが、実際よく似ていることについて述べます。波動関数は任意の位相をつけてよいはずですから、

$$|\phi'_n(\vec{R})\rangle = e^{i\Lambda(\vec{R})}|\phi_n(\vec{R})\rangle \tag{122}$$

でも構わないはずです。この時、ベリー接続は

$$\vec{A}'_n(\vec{R}) = -i\left(\langle\phi_n(\vec{R})e^{-i\Lambda(\vec{R})}\right)\frac{\partial}{\partial\vec{R}}\left(e^{i\Lambda(\vec{R})}|\phi_n(\vec{R})\rangle\right) \tag{123}$$

$$= \vec{A}_n(\vec{R}) + \frac{\partial}{\partial\vec{R}}\Lambda(\vec{R}) \tag{124}$$

となります。これは、まさに、電磁気学におけるベクトルポテンシャルのゲージ変換です。そして、ベリー曲率 $\vec{B}$ は、定義から電磁気学の磁場と同様にゲージ変換で変化しません。つまり、

- ベリー接続 $\vec{A}$: ベクトルポテンシャルに類似
- ベリー曲率 $\vec{B}$: 磁場に類似

となっています。

4.2 ベリー位相と Hall 伝導率の量子化

次に、ベリー位相が測定できる物理量に現れることを見ていきます。

二次元電子系を考え、y 方向に電場をかけた時に x 方向にどのくらい電流が流れるか、という問題を考えます。そして、電場をかけていない時のハミルトニアンを H_0 として、シュレーディンガー方程式：

$$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{125}$$

が解けているとします。そして、電場の効果を摂動論で考えます。つまり、

$$H = H_0 - (-e)Ey \tag{126}$$

とします。第二項が微小だとして一次摂動を使って電流の期待値を計算してみましょう。そして電流にベリー位相が効くことをみてみます。なお、ハミルトニアン H_0 を具体的な形で定義していないのは、トポロジーが物理量に影響を与えることを見るため、ハミルトニアンの詳細に依存せずに計算ができることを示すためです。

計算する量は Hall 伝導率 σ_{xy}:

$$\langle j_x \rangle_E = \sigma_{xy} E \tag{127}$$

$$\sigma_{xy} = \langle j_x \rangle_E / E \tag{128}$$

です。つまり、電流期待値 $\langle j_x \rangle_E$ が計算できれば計算できます。

まず、一次摂動では、状態 $|n\rangle_E$ は

$$|n\rangle_E = |n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle m|(eEy)|n\rangle}{E_n - E_m} |m\rangle \tag{129}$$

となります。電流密度の期待値は、電流は速度と比例関係にありますから、

$$\langle j_x \rangle_E = \sum_n f(E_n)_E \langle n| \frac{-ev_x}{L^2} |n\rangle_E \tag{130}$$

$$= \langle j_x \rangle_{E=0} + \frac{1}{L^2} \sum_n f(E_n) \frac{\langle n|(-ev_x)|m\rangle\langle m|(eEy)|n\rangle}{E_n - E_m} + \frac{1}{L^2} \sum_n f(E_n) \frac{\langle n|(eEy)|m\rangle\langle m|(-ev_x)|n\rangle}{E_n - E_m} + O(E^2) \tag{131}$$

となります。ここで、最後の E^2 の項は無視します。また、L^2 は系の面積です。電流密度を計算するためには $\langle m|v_y|n\rangle$ という量を計算する必要があります。ここで、ハイゼンベルグの運動方程式：

$$\frac{\partial}{\partial t} y = \frac{1}{i\hbar} [y, H_0] \tag{132}$$

および、

$$\frac{\partial}{\partial t} y = v_y \tag{133}$$

より、

$$\langle m|v_y|n\rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle m|(yH_0 - H_0 y)|n\rangle \tag{134}$$

$$= \frac{1}{i\hbar} (E_n - E_m) \langle m|y|n\rangle \tag{135}$$

となりますから、これを使います。

結局、Hall 伝導率 σ_{xy} は

$$\sigma_{xy} = -\frac{i\hbar e^2}{L^2} \sum_n f(E_n) \sum_{m \neq n} \frac{\langle n|v_x|m\rangle\langle m|v_y|n\rangle - \langle n|v_y|m\rangle\langle m|v_x|n\rangle}{(E_n - E_m)^2} \tag{136}$$

と計算されます。この式は久保公式と呼ばれています。

次に、考えている系が固体の系だとして、$\vec{k}$ が良い量子数になっている場合を考えます。この場合、

$$|n\rangle \to |n, \vec{k}\rangle \tag{137}$$

とかけるとします。この時、Hall 伝導率は

$$\sigma_{xy} = -\frac{i\hbar e^2}{L^2}\sum_{\vec{k}}\sum_{n} f(E_n(\vec{k}))\sum_{m\neq n}\frac{\langle n,\vec{k}|v_x|m\rangle\langle m,\vec{k}|v_y|n,\vec{k}\rangle - \langle n,\vec{k}|v_y|m,\vec{k}\rangle\langle m,\vec{k}|v_x|n,\vec{k}\rangle}{(E_n(\vec{k})-E_m(\vec{k}))^2} \tag{138}$$

となります。

上の計算をさらに進めるために、いくつかの準備をします。無摂動状態のハミルトニアンに対するシュレーディンガー方程式：

$$H_0|n,\vec{k}\rangle = E_n(\vec{k})|n,\vec{k}\rangle \tag{139}$$

に対して両辺に $\frac{\partial}{\partial k_\mu}(\mu = x,y,z)$ をかけますと、

$$\frac{\partial H_0}{\partial k_\mu}|n,\vec{k}\rangle + H_0\frac{\partial}{\partial k_\mu}|n,\vec{k}\rangle = \frac{\partial E_n(\vec{k})}{\partial k_\mu}|n,\vec{k}\rangle + E_n(\vec{k})\frac{\partial}{\partial k_\mu}|n,\vec{k}\rangle \tag{140}$$

となりますが、$m\neq n$ となる $\langle m,\vec{k}|$ を左からかけますと、

$$\langle m,\vec{k}|\frac{\partial H_0}{\partial k_\mu}|n,\vec{k}\rangle + \langle m,\vec{k}|H_0\frac{\partial}{\partial k_\mu}|n,\vec{k}\rangle = \langle m,\vec{k}|\frac{\partial E_n(\vec{k})}{\partial k_\mu}|n,\vec{k}\rangle + E_n(\vec{k})\langle m,\vec{k}|\frac{\partial}{\partial k_\mu}|n,\vec{k}\rangle \tag{141}$$

$$\langle m,\vec{k}|\frac{\partial H_0}{\partial k_\mu}|n,\vec{k}\rangle + E_m\langle m,\vec{k}|\frac{\partial}{\partial k_\mu}|n,\vec{k}\rangle = E_n(\vec{k})\langle m,\vec{k}|\frac{\partial}{\partial k_\mu}|n,\vec{k}\rangle \tag{142}$$

$$\langle m,\vec{k}|\frac{\partial H_0}{\partial k_\mu}|n,\vec{k}\rangle = (E_n(\vec{k})-E_m(\vec{k}))\langle m,\vec{k}|\frac{\partial}{\partial k_\mu}|n,\vec{k}\rangle \tag{143}$$

となります。さらに、固体中における群速度が

$$v_\mu \equiv \frac{1}{\hbar}\frac{\partial}{\partial k_\mu}E_n(\vec{k}) \tag{144}$$

と書けることを思い出しますと、その演算子バージョンは

$$\hat{v}_\mu \equiv \frac{1}{\hbar}\frac{\partial}{\partial k_\mu}H_0(\vec{k}) \tag{145}$$

と定義できます。これを使って、

$$\langle m,\vec{k}|\hat{v}_\mu|n,\vec{k}\rangle = \frac{1}{\hbar}(E_n(\vec{k})-E_m(\vec{k}))\langle m,\vec{k}|\frac{\partial}{\partial k_\mu}|n,\vec{k}\rangle \tag{146}$$

が得られます。

これに加えて、$m\neq n$ の時

$$\frac{\partial}{\partial k_\mu}\left(\langle m,\vec{k}|n,\vec{k}\rangle\right) = \left(\frac{\partial}{\partial k_\mu}\langle m,\vec{k}|\right)|n,\vec{k}\rangle + \langle m,\vec{k}|\frac{\partial}{\partial k_\mu}|n,\vec{k}\rangle = 0 \tag{147}$$

から

$$\langle m,\vec{k}|\frac{\partial}{\partial k_\mu}|n,\vec{k}\rangle = -\left(\frac{\partial}{\partial k_\mu}\langle m,\vec{k}|\right)|n,\vec{k}\rangle \tag{148}$$

が成り立ちますから、

$$\langle n,\vec{k}|\hat{v}_\mu|m,\vec{k}\rangle = -\frac{1}{\hbar}(E_m(\vec{k})-E_n(\vec{k}))\left(\frac{\partial}{\partial k_\mu}\langle n,\vec{k}|\right)|m,\vec{k}\rangle \tag{149}$$

という式が得られます。以上から、

$$\langle n,\vec{k}|\hat{v}_\mu|m,\vec{k}\rangle\langle m,\vec{k}|\hat{v}_{\mu'}|n,\vec{k}\rangle = \frac{1}{\hbar^2}(E_n(\vec{k})-E_m(\vec{k}))^2\left(\frac{\partial}{\partial k_\mu}\langle n,\vec{k}|\right)|m,\vec{k}\rangle\langle m,\vec{k}|\frac{\partial}{\partial k_{\mu'}}|n,\vec{k}\rangle \tag{150}$$

が得られます。これで、k_μ の微分が全て m ではなく n にかかることになりました。この関係式を使って Hall 伝導率を書くと、

$$\sigma_{xy} = -\frac{ie^2}{\hbar L^2}\sum_{\vec{k}}\sum_n f(E_n(\vec{k}))\sum_{m\neq n}\left[\left(\frac{\partial}{\partial k_x}\langle n,\vec{k}|\right)|m,\vec{k}\rangle\langle m,\vec{k}|\frac{\partial}{\partial k_y}|n,\vec{k}\rangle - \left(\frac{\partial}{\partial k_y}\langle n,\vec{k}|\right)|m,\vec{k}\rangle\langle m,\vec{k}|\frac{\partial}{\partial k_x}|n,\vec{k}\rangle\right] \tag{151}$$

$$= -\frac{ie^2}{\hbar L^2}\sum_{\vec{k}}\sum_n f(E_n(\vec{k}))\left[\left(\frac{\partial}{\partial k_x}\langle n,\vec{k}|\right)\frac{\partial}{\partial k_y}|n,\vec{k}\rangle - \left(\frac{\partial}{\partial k_y}\langle n,\vec{k}|\right)\frac{\partial}{\partial k_x}|n,\vec{k}\rangle\right] \tag{152}$$

となります。ここで、完全系条件 $\sum_m |m,\vec{k}\rangle\langle m,\vec{k}| = 1$ を使いました。

さらに変形を続けます。

$$\frac{\partial}{\partial k_x}\left(A\frac{\partial}{\partial k_y}B\right) - \frac{\partial}{\partial k_y}\left(A\frac{\partial}{\partial k_x}B\right) = \frac{\partial A}{\partial k_x}\frac{\partial B}{\partial k_y} + A\frac{\partial}{\partial k_x}\frac{\partial B}{\partial k_y} - \frac{\partial A}{\partial k_y}\frac{\partial B}{\partial k_x} + A\frac{\partial}{\partial k_y}\frac{\partial B}{\partial k_x} \tag{153}$$

$$= \frac{\partial A}{\partial k_x}\frac{\partial B}{\partial k_y} - A\frac{\partial}{\partial k_y}\frac{\partial B}{\partial k_x} \tag{154}$$

を用いますと、

$$\sigma_{xy} = -\frac{ie^2}{\hbar L^2}\sum_{\vec{k}}\sum_n f(E_n(\vec{k}))\left[\frac{\partial}{\partial k_x}\left(\langle n,\vec{k}|\frac{\partial}{\partial k_y}|n,\vec{k}\rangle\right) - \frac{\partial}{\partial k_y}\left(\langle n,\vec{k}|\frac{\partial}{\partial k_x}|n,\vec{k}\rangle\right)\right] \tag{155}$$

となります。ここで、

$$\vec{A}_n(\vec{k}) \equiv -i\langle n,\vec{k}|\frac{\partial}{\partial \vec{k}}|n,\vec{k}\rangle \tag{156}$$

を導入しますと、

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{\hbar}\nu \tag{157}$$

$$\nu \equiv \frac{1}{L^2}\sum_{\vec{k}}\sum_n f(E_n(\vec{k}))\left[\frac{\partial}{\partial k_x}A_{ny} - \frac{\partial}{\partial k_y}A_{nx}\right] \tag{158}$$

$$= \frac{1}{L^2}\sum_{\vec{k}}\sum_n f(E_n(\vec{k}))\left[\vec{\nabla}_{\vec{k}}\times\vec{A}_n(\vec{k})\right] \tag{159}$$

です。

さて、次に、固有値 $E_n(\vec{k})$ が持つ性質として、「ギャップがある」という性質があるとしましょう。これは、ある「バンド」n に属する状態が波数 $\vec{k}$ を動かした時に、ある場所でマイナスの値であればどの場所でもマイナスである、という要請です。つまり、$E_n(\vec{k}) < 0$ となる n の状態、というものを定義できるとします。この時、$T = 0$ を考えますと、$f(E_n)$ は $E_n < 0$ のときのみ値を持つことになります。先ほどギャップがある状態を考えることにしましたので、$\vec{k}$ の積分はブリルアンゾーンに渡る積分になります。そして、波数 $\vec{k}$ の連続極限を取りますと、

$$\frac{1}{L^2}\sum_{\vec{k}} \to \frac{1}{(2\pi)^2}\int_{\mathrm{BZ}} d^2\vec{k} \tag{160}$$

になります。その結果、Hall 伝導率は

$$
\begin{aligned}
\sigma_{xy} &= \frac{e^2}{\hbar}\nu && (161)\\
&= \sum_{n,E_n(\vec{k})<0} \frac{e^2}{h/(2\pi)}\frac{1}{(2\pi)^2}\int_{\mathrm{BZ}} d^2\vec{k}\left[\vec{\nabla}_{\vec{k}}\times\vec{A}_n(\vec{k})\right] && (162)\\
&= \frac{e^2}{h}\sum_{n,E_n(\vec{k})<0}\nu_n && (163)\\
\nu_n &= \frac{1}{2\pi}\int_{\mathrm{BZ}} d^2\vec{k}\left[\vec{\nabla}_{\vec{k}}\times\vec{A}_n(\vec{k})\right] && (164)\\
&= \frac{1}{2\pi}\oint_{\partial\mathrm{BZ}} d\vec{k}\vec{A}_n(\vec{k}) && (165)\\
&= -\frac{1}{2\pi}\gamma_n[\partial\mathrm{BZ}] && (166)
\end{aligned}
$$

となります。これで、Hall 伝導率がベリー位相で書けました。

ベリー位相は

$$\gamma_n[\partial\mathrm{BZ}] = 2\pi N \tag{167}$$

ですから、

$$\nu_n = -N \tag{168}$$

と量子化されています。これで、σ_{xy} が e^2/h の整数倍に量子化されることがわかりました。

4.3　2 次元ディラック模型におけるベリー位相

4.3.1　ベリー位相の計算

さて、次は、具体的な系におけるベリー位相を計算してみましょう。対象とするのは 2 次元ディラック模型です。ベリー位相は $E<0$ となる波動関数から計算しますから、$E=-R(k_x,k_y)$ となる固有ベクトルだけを考えることにします。つまり、ベクトルとして

$$\vec{\psi}_- = e^{i\chi(\vec{R})}\begin{pmatrix}\sin\frac{\theta}{2}\\ -e^{i\phi}\cos\frac{\theta}{2}\end{pmatrix} \tag{169}$$

を考えます。なお、波動関数には位相をつけても構いませんので、$e^{i\chi(\vec{R})}$ という因子をつけています。

さて、波数 k_x,k_y を動かすと θ,ϕ が動くわけですが、ここでひとつ仮定をします。今考えているパラメータでは、k_x,k_y を動かすことで $0\le\theta\le\pi$,$-\pi\le\phi\le\pi$ のすべての領域を通るとします。

今、どんな θ,ϕ でも波動関数がちゃんと定まらなければならない、ということを考えます。例えば、$\theta=0$ は単位球上で北極ですが、この時、$\chi=0$ だとすると、

$$\vec{\psi}_- = \begin{pmatrix}0\\ -e^{i\phi}\end{pmatrix} \tag{170}$$

となり、北極では ϕ を決めることができませんから、$\theta=0$ での波動関数は不定となっています。そこで、$\chi^N=-\phi$ とすると、

$$\vec{\psi}_-^N = \begin{pmatrix}e^{-i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\\ -\cos\frac{\theta}{2}\end{pmatrix} \tag{171}$$

となります。この波動関数であれば $\theta = 0$ では

$$\vec{\psi}_-^N(\theta = 0) = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{172}$$

となりますから、ちゃんと北極で波動関数の値が定義されています。さて、ここで定義した波動関数は $\theta = \pi$ でどうなっているでしょうか。これは、

$$\vec{\psi}_-^N(\theta = \pi) = \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \\ 0 \end{pmatrix} \tag{173}$$

となってしまいますから、ϕ の値が決まらずに不定となってしまいます。そこで、南極では、$\chi^S = 0$ とします。その結果、

$$\vec{\psi}_-^S = \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2} \\ -e^{i\phi}\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \tag{174}$$

となります。これは $\theta = \pi$ において

$$\vec{\psi}_-^S(\theta = \pi) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{175}$$

となりますから、問題ありません。

以上からわかることは、北極と南極では、同じ位相を選ぶことができない、ということです。そして、単位球すべての領域で波動関数がちゃんと定義できる状態にしたければ、例えば赤道においてゲージ変換を行い、北半球の位相と南半球の位相を別々にする必要があります。

それでは、南半球でのベリー接続を計算してみましょう。１次元系の時にやったように定義から計算します。その結果は

$$\begin{aligned}
\vec{A}_-^S(\vec{R}) &\equiv -i\vec{\psi}_-^{S,\dagger}\frac{\partial}{\partial\vec{R}}\vec{\psi}_-^S && (176)\\
&= -i\begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2} & -e^{i\phi}\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{2}\vec{\nabla}_{\vec{R}}\theta\cos\frac{\theta}{2} \\ -i\vec{\nabla}_{\vec{R}}\phi e^{i\phi}\cos\frac{\theta}{2} + \frac{1}{2}e^{i\phi}\vec{\nabla}_{\vec{R}}\theta\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} && (177)\\
&= -i(i\vec{\nabla}_{\vec{R}}\phi\cos^2\frac{\theta}{2}) && (178)\\
&= \frac{1}{2}(1+\cos\theta)\vec{\nabla}_{\vec{R}}\phi && (179)
\end{aligned}$$

となります。同様に北半球のベリー接続を計算すると、

$$\vec{A}_-^N(\vec{R}) = -\frac{1}{2}(1-\cos\theta)\vec{\nabla}_{\vec{R}}\phi \tag{180}$$

となり、両者の関係は

$$\vec{A}_-^N(\vec{R}) = \vec{A}_-^S(\vec{R}) - \vec{\nabla}_{\vec{R}}\phi \tag{181}$$

となっています。これはまさに、ベクトルポテンシャルをゲージ変換しているのと同じです。

$\vec{R}$ 空間でのベリー位相を計算しましょう。定義から計算しますと、

$$\begin{aligned}
\nu &= \frac{1}{2\pi}\int_S d^2\vec{R}\vec{\nabla}_{\vec{R}}\times\vec{A}_-(\vec{R}) && (182)\\
&= \frac{1}{2\pi}\left[\int_{S^N} d^2\vec{R}\vec{\nabla}_{\vec{R}}\times\vec{A}_-^N(\vec{R}) + \int_{S^S} d^2\vec{R}\vec{\nabla}_{\vec{R}}\times\vec{A}_-^S(\vec{R})\right] && (183)
\end{aligned}$$

となり、北半球と南半球でそれぞれ計算すれば良いことがわかります。ここで、

$$\int_{S^N} \vec{d}^2\vec{R}\vec{\nabla}_{\vec{R}} \times \vec{A}_-^N(\vec{R}) = \oint_{c^N} d\vec{R}\cdot\vec{A}_-^N(\vec{R}) \tag{184}$$

$$\int_{S^S} \vec{d}^2\vec{R}\vec{\nabla}_{\vec{R}} \times \vec{A}_-^S(\vec{R}) = \oint_{c^S} d\vec{R}\cdot\vec{A}_-^S(\vec{R}) = \oint_{c^S} d\vec{R}\cdot\vec{A}_-^N(\vec{R}) + \oint_{c^S} d\vec{R}\cdot\vec{\nabla}_{\vec{R}}\phi \tag{185}$$

$$= -\oint_{c^N} d\vec{R}\cdot\vec{A}_-^N(\vec{R}) - \oint_{c^N} d\vec{R}\cdot\vec{\nabla}_{\vec{R}}\phi \tag{186}$$

を使います。ストークスの定理を用いて周回積分に変えていますが、ここでの経路 c^N と c^S は赤道を囲む経路で、それぞれ向きが逆になっています。そして、c^N は北極からみた時に反時計回りになっており、ϕ が増加する方向です。その結果、ベリー位相は

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\left[\oint_{c^N} d\vec{R}\cdot\vec{A}_-^N(\vec{R}) - \oint_{c^N} d\vec{R}\cdot\vec{A}_-^S(\vec{R})) - \oint_{c^N} d\vec{R}\cdot\vec{\nabla}_{\vec{R}}\phi\right] \tag{187}$$

$$= -\frac{1}{2\pi}\oint_{c^N} d\vec{R}\cdot\vec{\nabla}_{\vec{R}}\phi \tag{188}$$

となります。ここで、勾配の極座標表示が

$$\vec{\nabla}_{\vec{R}} f = \vec{e}_R\frac{\partial}{\partial R}f + \vec{e}_\theta\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial\theta}f + \vec{e}_\phi\frac{1}{R\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}f \tag{189}$$

となることと、

$$\oint_{c^N} d\vec{R}\cdot\vec{e}_\phi = \int d\phi R\sin\theta \tag{190}$$

となることを使いますと[2]、

$$\nu = -\frac{1}{2\pi}\int d\phi R\sin\theta\frac{1}{R\sin\theta} = -\frac{1}{2\pi}(2\pi - 0) = -1 \tag{191}$$

となります。これで、この系では、ベリー位相が -1 という整数になることが示せました。つまり、固有状態がトポロジカルに非自明な状態となっている、ということです。

さて、この計算をするにあたって、最初に述べましたように、ある仮定をしていました。それは、

- 今考えているパラメータでは、k_x, k_y を動かすことで $0 \le \theta \le \pi$,$-\pi \le \phi \le \pi$ のすべての領域を通る

という仮定です。これは、

- k_x, k_y を動かすことで、球の表面を覆い尽くすことができる

という意味です。この「覆い尽くすことができる」ということが、１次元でいうところの「巻き付くことができる」と同じようにトポロジーとみなすことができます。例えば、球を覆っている布と球を覆っていない球の表面上にある布を考えてみます。球を覆っている布を連続的に変形させても、表面上にある布に変形することはできません。表面上の布にするためには、布のどこかを破って、中の球を取り出せるような状態にしなければなりません。つまり、この二つはトポロジーが異なっています。

さて、次に、

- 今考えているパラメータでは、k_x, k_y を動かすことで $0 \le \theta \le \pi$,$-\pi \le \phi \le \pi$ のすべての領域を通らず、一部どう k_x, k_y を動かしても得られない θ, ϕ がある

[2] 極座標表示で、赤道面にベクトル $\vec{R}$ を射影した時の長さが $R\sin\theta$ となるため。

という状況を考えてみます。この時の波動関数の位相を考えてみましょう。球面上には北極と南極という慎重に取り扱わなければならない領域がありました。この二つの点において波動関数がきちんと定義するためにはゲージ変換が必要でした。もし、k_x, k_y を動かしてもアクセスできない点 θ_0, ϕ_0 という座標が存在しているとしましょう。この時、極座標を回転して座標変換し、θ_0, ϕ_0 が北極になるように変数変換 $(\theta, \phi) \to (\theta', \phi')$ をしたとします。この時、$\theta' = 0$ では ϕ' が不定（特異点）になります。しかし、不定になる点がちょうど θ_0, ϕ_0 に相当する点であれば、この点は決して波動関数として登場しないわけですから、ここでの波動関数の値については考える必要がありません。ですので、特異点が θ, ϕ の動く範囲の外に置かれていれば、ゲージ変換をする必要はなく、一つの位相で書くことができます。その結果、ベリー位相の計算ではお釣りの項のようなものは存在せず、値はゼロになります。

つまり、

- k_x, k_y を動かしたとき、球を何回覆うか

という量がトポロジカル数（ここでは TKNN 数）となっています。

なお、１次元の時と同様にバルクエッジ対応を考えると、異なるトポロジカル数のものを二つくっつけると、その境界は金属状態になります。

4.3.2　モノポール

さて、ベリー位相の計算はベリー曲率を使って書くこともできます。つまり、

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\int_S d\vec{^2}R\vec{\nabla}_{\vec{R}} \times \vec{A}_-(\vec{R}) \tag{192}$$

$$= \int_S d\vec{^2}R\vec{B}_-(\vec{R}) \tag{193}$$

です。そして、ガウスの定理を使うと、

$$\int_S d\vec{^2}R\vec{B}_-(\vec{R}) = \frac{1}{2\pi}\int_V dV \mathrm{div}\vec{B}_-(\vec{R}) \tag{194}$$

となります。ここで V は球の体積です。電磁気学のマクスウェル方程式を思い返しますと、$\mathrm{div}\vec{E}$ がありました。これは電荷からの電場の湧き出しを意味していました。一方、ここでは $\mathrm{div}\vec{B}$ が出てきています。これは、電荷の代わりに磁荷（モノポール）があるとみなすことができます。

つまり、これまでの話をモノポールを使って言い換えますと、

- 覆っている球の中にモノポールが存在する時、ν は有限
- 球を覆えない場合は、モノポールが中にいないので、ν はゼロ

ということになります。

5　バンド指数

5.1　束縛状態

これまで、1 次元系、2 次元系のトポロジカル絶縁体をみてきました。1 次元系は

$$H_{1D}(k_x) = \vec{R}(k_x)\cdot\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} m(k_x) & k_x \\ k_x & -m(k_x) \end{pmatrix} \tag{195}$$

であり、2 次元系は

$$H_{2D}(k_x,k_y)=\vec{R}(k_x,k_y)\cdot\vec{\sigma}=\begin{pmatrix} m(k_x,k_y) & k_x-ik_y \\ k_x+ik_y & -m(k_x,k_y) \end{pmatrix} \tag{196}$$

でした。さて、2 次元系の束縛状態について考えることにします。$x=0$ に境界があるとします。つまり、y 方向には並進対称性があり、k_y が良い量子数となっています。この時、シュレーディンガー方程式は

$$H_{2D}(x,k_y)\vec{\psi}(x,k_y)=E(k_y)\vec{\psi}(x,k_y) \tag{197}$$

となり、k_y はパラメータとみなすことができます。この時、$k_y=0$ としますと、1 次元と同じハミルトニアンになります。なぜなら、束縛状態が存在している場合のエネルギー固有値は

$$E(k_y)=\pm\sqrt{m(\eta_x)^2-A_x^2\eta_x^2+A_y^2k_y^2} \tag{198}$$

ですから、$k_y=0$ とすると 1 次元系と全く同じエネルギー固有値になるからです。そして、$k_y=0$ で束縛状態が存在している時は $m(\eta_x)^2-A_x^2\eta_x^2=0$ が成り立ちますが、この時、$k_y\neq 0$ であれば、

$$E(k_y)=\pm\sqrt{A_y^2k_y^2}=\pm|A_y||k_y| \tag{199}$$

というエネルギー依存性が得られます。このようなエネルギー依存性は光と同じです。光は、

$$E=cv \tag{200}$$

ですから、今は、「光速」が A_y となるような質量のない粒子がいるとみなしてもよさそうです。このような直線のエネルギー固有値（固体物理ではこれをエネルギー分散と呼ぶこともあります）を、「ディラックコーン」と呼びます。そして、このようなディラックコーンは、角度分解光電子分光 (ARPES) という実験装置で観測され、トポロジカル絶縁体には確かにディラックコーンがあることが示されています。

5.2 波動関数のひねりとバンドの指数

系がトポロジカルに非自明かどうかは、波動関数が何らかの意味でひねられているかどうか見ればわかりました。ここでは、そのひねりについてよく考えてみます。

1 次元のディラック模型:

$$H_{1D}(k_x)=A\sin k_x\sigma_x+m(k_x)\sigma_z \tag{201}$$
$$m(k_x)=m_0+2m_2(1-\cos k_x) \tag{202}$$

をまず最初に考えます。この模型を特定の点でテイラー展開してみます。

$k_x=0$ の周りでテイラー展開すると

$$\sin k_x\sim k_x,\ \cos k_x\sim 1,\ m(k_x)\sim m_0 \tag{203}$$

となります。$k_x=\pi$ の周りでテイラー展開すると

$$\sin k_x\sim-(k_x-\pi),\ \cos k_x\sim -1,\ m(k_x)\sim m_0+4m_2 \tag{204}$$

となります。そこで、模型を

$$H(k_x)=\tilde{A}k_x\sigma_x+\tilde{m}_0\sigma_z \tag{205}$$

と、二つの点の周りで線形に近似しておきます。この時、

	δ_0	δ_π	N
$m_0+4m_2>0$	$+$	$-$	0
$m_0+4m_2<0$	$+$	$+$	1

Table 1: 1 次元系のバンド指数とトポロジカル数

- $k_x=0$: $\tilde{A}=A$, $\tilde{m}_0=m_0$
- $k_x=\pi$: $\tilde{A}=-A$, $\tilde{m}_0=m_0+4m_2$

とまとめることができます。
ここで、バンドの指数を

$$\delta_{k_x}\equiv \mathrm{sgn}\,(\tilde{A})\,\mathrm{sgn}\,(\tilde{m}_0) \tag{206}$$

と定義します。すると、表 1のようになります。
バンド指数を使いますと、トポロジカル数（TKNN 数）は

$$N\equiv\frac{1}{2}(\delta_0+\delta_\pi) \tag{207}$$

と計算できます。
確かに、このように定義すると系のトポロジカル数を計算できているように見えます。なぜでしょうか。トポロジカル数が変化する（トポロジカル転移をする）時は、連続的に移り変われないため、絶縁体はギャップを閉じる必要があります。つまり、エネルギー固有値に $E=0$ の解が転移点で現れます。エネルギー固有値は

$$E=\pm\sqrt{m(k_x)^2+A^2\sin^2k_x} \tag{208}$$

ですから、$E=0$ となるのは $\sin k_x=0$ の時です。つまり、$k_x=0,\pi$ の時です。つまり、この点でギャップが閉じるかどうか、つまり変化の前後で符号が変化するかどうかを見ることで、トポロジカル転移を検出できるのです。
次は、２次元ディラック模型を考えます。エネルギー固有値は

$$E=\pm\sqrt{m(k_x,k_y)^2+A_x^2\sin^2k_x+A_y^2\sin^2k_y} \tag{209}$$

ですので、$E=0$ となるのは、$\sin k_x=0$ かつ $\sin k_y=0$ となる点ですので、

- $(k_x,k_y)=(0,0),\ (0,\pi),\ (\pi,0),\ (\pi,\pi)$ の 4 点

においてエネルギーがゼロになります。これらの点において線形に近似し、

$$H(k_x)=\tilde{A}_xk_x\sigma_x+\tilde{A}_yk_y\sigma_y+\tilde{m}_0\sigma_z \tag{210}$$

とし、それぞれの係数がどうなるかをみてみます。$m(k_x,k_y)$ は

$$m(k_x,k_y)=m_0+2m_2(1-\cos k_x)+2m_2(1-\cos k_y) \tag{211}$$

ですので、

- $(0,0)\to m_0,\ A_x,\ A_y$
- $(0,\pi)\to m_0+4m_2,\ A_x,\ A_y$
- $(\pi,0)\to m_0+4m_2,\ -A_x,\ A_y$

	$\delta_{0,0}$	$\delta_{\pi,0}$	$\delta_{0,\pi}$	$\delta_{\pi,\pi}$	C
$m_2 < -1/4$	$+$	$+$	$-$	$+$	1
$-1/4 < m_2 < -1/8$	$+$	$-$	$-$	$-$	-1
$-1/8 < m_2$	$+$	$-$	$+$	$-$	0

Table 2: 2 次元系のバンド指数とトポロジカル数

	$\delta_{0,0}$	$\delta_{\pi,0}$	$\delta_{0,\pi}$	$\delta_{\pi,\pi}$	C
$m_2 < -1/2$	$+$	$+$	$-$	$+$	1
$-1/2 < m_2 < -1/4$	$+$	$+$	$-$	$-$	0
$-1/4 < m_2 < -1/6$	$+$	$-$	$-$	$-$	-1
$-1/6 < m_2$	$+$	$-$	$+$	$-$	0

Table 3: 2 次元系のバンド指数とトポロジカル数。$m_{2y} = 0.5m_{2y}$ の時。

- $(\pi, \pi) \to m_0 + 8m_2,\ -A_x,\ -A_y$

となります。そこで、バンド指数を

$$\delta_{\vec{k}} \equiv \mathrm{sgn}\,(\tilde{A}_x)\,\mathrm{sgn}\,(\tilde{A}_y)\,\mathrm{sgn}\,(\tilde{m}_0) \tag{212}$$

と定義します。すると、

$$C \equiv \frac{1}{2}(\delta_{(0,0)} + \delta_{(\pi,0)} + \delta_{(0,\pi)} + \delta_{(\pi,\pi)}) \tag{213}$$

が TKNN 数になっています（詳細は省きます）。m_2 の値でどう変化するかみてみますと ($m_0 > 0$ とします)、表 2となります。

このように、バンドの指数を見ることで、波動関数のひねりを検知することができ、トポロジカル数を定義することができます。

5.3 弱いトポロジカル絶縁体

さて、これまで 2 次元ディラック模型において $m_{2x} = m_{2y} = m_2$ としていました。これを $m_{2x} \neq m_{2y}$ としたらどうなるでしょうか？

$$m_{2y} = 0.5m_{2x} \tag{214}$$

の時を考えます。この時、それぞれの点における符号は

- $(0, 0) \to m_0,\ A_x,\ A_y$
- $(0, \pi) \to m_0 + 2m_2,\ A_x,\ A_y$
- $(\pi, 0) \to m_0 + 4m_2,\ -A_x,\ A_y$
- $(\pi, \pi) \to m_0 + 6m_2,\ -A_x,\ -A_y$

となります。そして、バンドの指数と TKNN 数は表 3のようになります。

この表を見てみますと、$-1/2 < m_2 < -1/4$ に $C = 0$ という新しい領域が出現していることがわかります。この $C = 0$ の系は、TKNN 数がゼロですが、本当にトポロジカルに自明な系でしょうか？それを見るために、模型を眺めてみます。$m(k_x, k_y)$ は

$$m(k_x, k_y) = m_0 + 2m_{2x}(1 - \cos k_x) + m_{2x}(1 - \cos k_y) \tag{215}$$

です。これに $k_y = 0$ を代入しますと、

$$m(k_x, k_y = 0) = m_0 + 2m_{2x}(1 - \cos k_x) \tag{216}$$

となります。つまり、$k_y = 0$ の系は 1 次元トポロジカル絶縁体とそっくりのハミルトニアンになります。この時、

$$H(k_x) = A_x \sin k_x \sigma_x + m(k_x)\sigma_z \tag{217}$$

です。この系に対して 1 次元のバンド指数

$$\delta_{k_x} = \mathrm{sgn}\,(\tilde{A})\,\mathrm{sgn}\,(\tilde{m}_0) \tag{218}$$

を計算してみますと、$m_{2x} < -m_0/4$ の時、

$$(\delta_0 + \delta_\pi)/2 = 1 \tag{219}$$

となります。つまり、1 次元のトポロジカル数はゼロではありません。つまり、$-1/2 < m_2 < -1/4$ の時、

- 2 次元 TKNN 数 $C = 0$ かつ 1 次元 TKNN 数 $N_{1D} = 1 \to$ x 方向にはトポロジカル

という状況になっています。ですので、

- $x = 0$ の壁には束縛状態がある
- $y = 0$ の壁には束縛状態がない

という結果が得られます。これは、「壁をつけた方向で束縛状態の有無が変化する」ということを意味しており、このような絶縁体を「弱いトポロジカル絶縁体」と呼びます。

大事なことは、「自分が考えたあるトポロジカル数が自明な値になったからといって、その系がはしに束縛状態を持たない、ということではない」ということです。

6　量子スピン Hall 絶縁体

これまでの模型

$$H = \vec{R} \cdot \vec{\sigma} \tag{220}$$

のトポロジカル数は巻きつき数でした。右巻きや左巻きなど、まく方向がありました。このような方向が存在するということは、「系に時間反転対称性がない」ことを意味しています。時間反転対称性がある、とは、逆再生をした時に系を区別できる、というものです。何かが回転している時、逆再生をすると逆向きに回転してしまいますから、このような回転がある場合には時間反転対称性がない、と言います。

さて、量子 Hall 系は強い磁場がある時に起きた現象でした。強い磁場があるということは電子はローレンツ力を受けて回転しますから、何らかの方向が存在するということです。ですので、このような磁場のかかった系は、時間反転対称性がない系、と言えることができます。そして、このような時間反転対称性がない系におけるトポロジカル数が、これまでみてきた TKNN 数です。TKNN 数 ν に比例してはしに電流が流れ、Hall 伝導率は

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h}\nu \tag{221}$$

と量子化されます。ここで、

$$\nu = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \tag{222}$$

という値をとります。このように整数の値を取ることを、

- トポロジカル数は Z で特徴付けられる

と言います。

さて、世の中には時間反転対称性を持つ系もたくさんあります。このような系でのトポロジーはどうなるでしょうか？有名な系に「量子スピン Hall 系」があります。

量子 Hall 系は特定の向きがありましたが、二つの量子 Hall 系をひっくり返して貼り合わすと、それぞれの向きが逆になり、全体としては向きがなくなります。この時、向きがなくなったことによって時間反転対称性が復活し、TKNN 数はゼロになります。しかし、二つの量子 Hall 系が存在しているわけですから、何らかの電流は流れるはずです。ここで、スピンアップの電子に対しての量子 Hall 系と、スピンダウンの電子に対しての量子 Hall 系を貼り合わせたような系を考えているとしますと、アップスピンがある向きに回転しているとすると、ダウンスピンは逆向きに回転していることになります。どちらのスピンを持つ電子も電子であることには変わりありませんから、電流はキャンセルし、流れていません。しかし、スピンの向きによって異なる流れが生じているということは、「スピン流」が生じていることになります。このような系を「量子スピン Hall 系」と呼びます。詳細はこのノートでは省きますが、この時のトポロジカル数は 0 か 1 でして、

- トポロジカル数は Z_2 で特徴付けられる

と言います。

7　3 次元トポロジカル絶縁体

これまで、1 次元、2 次元のトポロジカル絶縁体の模型を考えてきました。1 次元、2 次元の場合、模型は

$$H = \vec{R} \cdot \vec{\sigma} \tag{223}$$

と書き表すことができ、$\vec{R}$ は 3 次元でした。固有値はベクトル $\vec{R}$ のノルムを用いて

$$E = \pm |\vec{R}| \tag{224}$$

と書くことができました。そして、たとえば 2 次元では、k_x,k_y,m という三つのパラメータによって $\vec{R}$ が決まっていました。それではこの模型をそのまま 3 次元系に拡張すれば、トポロジカル絶縁体を作れるでしょうか？3 次元系に拡張したければ、k_x,k_y,k_z,m という四つのパラメータを導入する必要があります。そして、この時のエネルギー固有値は、1 次元,2 次元の自然な拡張として

$$E = \pm \sqrt{A_x^2 k_x^2 + A_y^2 k_y^2 + A_z^2 k_z^2 + m^2} \tag{225}$$

のような形にしたいところです。しかし、ベクトル $\vec{R}$ は 3 次元ベクトルですから、このような「4 次元ベクトルのノルム」のような形では書けません。このように書きたいのであれば、ベクトルとして 4 次元ベクトルを導入する必要があります。しかし、パウリ行列は 3 つしかありませんから、4 次元ベクトルでは書けそうにありません。そこで、新しい行列を導入することになります。

スピン自由度のあるシュレーディンガー方程式はパウリ行列を使って書くことができ、2×2 行列でハミルトニアンが書かれていました。パウリ行列以上のことをやりたければ、相対論的方程式であるディラック方程式を使います。相対論的量子力学で登場しますディラック方程式は 4×4 のハミルトニアンで書かれています。そして、パウリ行列の代わりにガンマ行列というものが使われます。ガンマ行列は二種類のパウリ行列 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$,$\tau_x, \tau_y, \tau_x$ を使って書くことができます。通常、σ はスピン空間を表現し、τ

は固体中の何らかの別の自由度 (軌道の自由度など) を表現します。そして、ガンマ行列は

$$\gamma_0 \equiv \tau_x = \begin{pmatrix} \hat{1} & \hat{0} \\ \hat{0} & -\hat{1} \end{pmatrix} \tag{226}$$

$$\gamma_1 \equiv \tau_x \sigma_x = \begin{pmatrix} \hat{0} & \hat{\sigma_x} \\ \hat{\sigma_x} & \hat{0} \end{pmatrix} \tag{227}$$

$$\gamma_2 \equiv \tau_x \sigma_y = \begin{pmatrix} \hat{0} & \hat{\sigma_y} \\ \hat{\sigma_y} & \hat{0} \end{pmatrix} \tag{228}$$

$$\gamma_3 \equiv \tau_x \sigma_z = \begin{pmatrix} \hat{0} & \hat{\sigma_z} \\ \hat{\sigma_z} & \hat{0} \end{pmatrix} \tag{229}$$

と定義されます[3]。

パウリ行列には反交換関係:

$$[\sigma_\mu, \sigma_\nu]_+ = 2\delta_{\mu\nu} \tag{230}$$

がありましたが、ガンマ行列にも反交換関係:

$$[\gamma_\mu, \gamma_\nu]_+ = 2\delta_{\mu\nu} \tag{231}$$

があります。この反交換関係から、自分自身の二乗は

$$\gamma_\mu^2 = 1 \tag{232}$$

となります。

このガンマ行列を使って 3 次元ディラック模型を

$$H(\vec{p}) = m(\vec{p})\gamma_0 + A_x p_x \gamma_1 + A_y p_y \gamma_2 + A_z p_z \gamma_3 \tag{233}$$

と定義します。この時、固有値は

$$H^2 \vec{\psi} = E \vec{\psi} \tag{234}$$

が成り立ち、

$$E = \pm\sqrt{A_x^2 p_x^2 + A_y^2 p_y^2 + A_z^2 p_z^2 + m^2} \tag{235}$$

となります[4]。また、$m(\vec{p})$ は

$$m(\vec{p}) = m_0 + m_2 \vec{p}^2 \tag{238}$$

としておきます。

[3] ガンマ行列の定義は複数種類ありますので、自分がどの定義を使っているかを気をつけて参考文献を読んでください。

[4]

$$\begin{aligned} H^2 &= m^2\gamma_0^2 + mA_x p_x \gamma_0\gamma_1 + mA_y p_y \gamma_0\gamma_2 + mA_z p_z \gamma_0\gamma_3 \\ &+ A_x p_x m \gamma_1\gamma_0 + A_x^2 p_x^2 \gamma_1^2 + A_x p_x A_y p_y \gamma_1\gamma_2 + A_x p_x A_z p_z \gamma_1\gamma_3 \\ &+ A_y p_y m \gamma_2\gamma_0 + A_y p_y A_x p_x \gamma_2\gamma_1 + A_y^2 p_y^2 \gamma_2^2 + A_y p_y A_z p_z \gamma_2\gamma_3 \\ &+ A_z p_z m \gamma_3\gamma_0 + A_z p_z A_x p_x \gamma_3\gamma_1 + A_z p_z A_y p_y \gamma_3\gamma_2 + A_z^2 p_z^2 \gamma_3^2 \quad (236) \\ &= (m^2 + A_x^2 + p_z^2 + A_y^2 + p_y^2 + A_z^2 + p_z^2) \quad (237) \end{aligned}$$

実際の物質で、このような模型で記述されるものがあります。この模型は相対論的量子力学のハミルトニアンですから、物質中に相対論的粒子が存在するようなものが存在する、ということになります。格子上では、

$$H(\vec{k}) = m(\vec{k})\gamma_0 + A_k \sin k_x \gamma_1 + A_y \sin k_y \gamma_2 + A_z \sin k_z \gamma_3 \tag{239}$$

$$m(\vec{k}) \equiv m_0 + 2m_{2x}(1-\cos k_x) + 2m_{2y}(1-\cos k_y) + 2m_{2z}(1-\cos k_z) \tag{240}$$

です。これを格子上の3次元ディラック模型と呼びます。

今回の講義では詳細は述べませんが、この系には時間反転対称性があり、そのトポロジカル数は Z_2 であると知られています（参考文献を参照してください。導出が載っています）。この講義では、これまでと同じようにバンド指数から波動関数のひねりを見ることにします。今回のバンド指数は

$$\delta_{\vec{k}} = \mathrm{sgn}\,(\tilde{m}_0) \tag{241}$$

とすればよいことが知られています。エネルギー固有値がゼロとなる波数空間上の点は8点あり、(k_x, k_y, k_z) の組は

- $\Gamma : (0,0,0)$
- $X : (\pi,0,0)$
- $Y : (0,\pi,0)$
- $Z : (0,0,\pi)$
- $R : (\pi,\pi,0)$
- $Q : (\pi,0,\pi)$
- $P : (0,\pi,\pi)$
- $M : (\pi,\pi,\pi)$

です。そして、強いトポロジカル指数 ν を

$$(-1)^\nu = \delta_\Gamma \delta_X \delta_Y \delta_Z \delta_R \delta_Q \delta_P \delta_M \tag{242}$$

とし、弱いトポロジカル指数を

$$(-1)^\nu = \delta_\Gamma \delta_X \delta_Y \delta_Z \delta_R \delta_Q \delta_P \delta_M \tag{243}$$

$$(-1)^{\nu_1} = \delta_X \delta_Q \delta_R \delta_M \tag{244}$$

$$(-1)^{\nu_2} = \delta_Y \delta_R \delta_P \delta_M \tag{245}$$

$$(-1)^{\nu_3} = \delta_Z \delta_P \delta_Q \delta_M \tag{246}$$

と定義します。ここで、弱いトポロジカル指数はそれぞれ

- ν_1: $k_x = \pi$ の面を通る 4 点
- ν_2: $k_y = \pi$ の面を通る 4 点
- ν_3: $k_z = \pi$ の面を通る 4 点

を使って定義されています。そして $(-1)^n = 1$ の時 $n = 1$、$(-1)^n = -1$ の時 $n = 1$ となります。

7.1 強いトポロジカル絶縁体

この時、強いトポロジカル絶縁体になっていまして、どの方向に端がついていても端に束縛状態が現れます。これについて、少し具体的にみていきます。今、$x=0$ にはしがあるとします。$\nu=1$ の時、2つの可能性：

- $k_y=\pi$ の 4 つのバンド指数の積が $\delta_Y\delta_R\delta_P\delta_M=1$ となっている場合、$k_y=0$ の 4 つのバンド指数の積は $\delta_X\delta_\Gamma\delta_Z\delta_Q=-1$。
- $k_y=0$ の 4 つのバンド指数の積が $\delta_Y\delta_R\delta_P\delta_M=-1$ となっている場合、$k_y=0$ の 4 つのバンド指数の積は $\delta_X\delta_\Gamma\delta_Z\delta_Q=-1$。

が考えられます。なぜなら、8 点のバンド指数の積が-1 になっていなければならないからです。ここで、一つ目の場合を考えますと、$k_y=0$ の面の 4 点のバンド指数が-1 になっていまして、波動関数がひねりを持っていることを示唆しています。この時、$k_y=k_z=0$ の時、1 次元トポロジカル絶縁体とみなすことができます。そして、束縛状態のエネルギー固有値は

$$E=\pm\sqrt{A_y^2p_y^2+A_z^2p_z^2} \tag{247}$$

となります。つまり、エネルギー固有値の波数依存性は 2 次元の光と同じになります。これをディラックコーンと呼びます。二つ目の場合は、$k_y=k_z=\pi$ にディラックコーンがあります。

どの方向に壁を作っても、$\nu=1$ であれば、必ず 1 次元トポロジカル絶縁体とみなせます。そして、壁には常に一つ（一般的には奇数個）のディラックコーンが存在しています。

7.2 弱いトポロジカル絶縁体

次に、$\nu=0$ の時 ν_i のどれかひとつが 1 の場合を考えます。たとえば、$\nu_1=1$ の時を考えます。この時、$\nu=0$ ですから、

- $k_x=\pi$ の面を通る 4 点のバンド指数の積は $\nu_1=1$ なので $\delta_X\delta_Q\delta_R\delta_M=-1$、$\nu=0$ より $k_x=0$ の面のバンド指数の積 $\delta_Z\delta_P\delta_Y\delta_\Gamma=-1$。

となりますから、$k_x=0$ も $k_x=\pi$ もそれぞれ 1 次元トポロジカル絶縁体とみなすことができます。この時、

- $y=0$ の壁を入れた場合には、$k_x=0,k_z=0$ および $k_x=\pi,k_z=\pi$ にゼロエネルギー状態
- $z=0$ の壁を入れた場合には、$k_x=0,k_y=0$ および $k_x=\pi,k_y=\pi$ にゼロエネルギー状態

となり、ディラックコーンは表面に 2 つでき、束縛状態が二個できることになります。

一方、$x=0$ の壁を入れた場合には、k_y と k_z をパラメータとした 1 次元模型としますと、$k_y=\pi$ を通る 4 点のバンド指数を使って考える必要があります。この時、$\nu_2=0$ かつ $\nu=0$ より、この 1 次元模型にはこれらのトポロジカル数に関する束縛状態がありません。

以上から、$y,z=0$ の壁には束縛状態があっても $x=0$ の壁には束縛状態がない、ということで、方向に依存して束縛状態の有無が変化することになります。一般には、ベクトル $\vec{\nu}=(\nu_1,\nu_2,\nu_3)$ というベクトルを考えた時にその垂直な面には束縛状態はない、ということが言えます。

7.3　物質中のディラック粒子

まとめますと、

- 強いトポロジカル絶縁体には表面に奇数個の質量ゼロの相対論的ディラック粒子がある
- 弱いトポロジカル絶縁体には表面に偶数この質量ゼロの相対論的ディラック粒子がある

ということになります。これらのディラック粒子は、トポロジカルな理由で出現していますので、「表面の条件に依存せずに」常に存在しています。なお、トポロジカル数は関連する対称性がある場合にのみ存在しており、この対称性とトポロジカル数の関係はよく調べられています。たとえば、3 次元の Z_2 トポロジカル数を定義するには時間反転対称性が必要、というようなことが知られています。対称性と次元によってトポロジカル物質が分類できる、という話は、参考文献を参照してください。

最後に、質量のないディラック粒子の興味深い点についてです。たとえば

1. クライントンネリング: 矩形のポテンシャルを入れた 1 次元系において、ポテンシャルを追加した領域をスルッと抜けるという話：物質としては不純物に強くなる
2. スピン運動量ロッキング: 運動量空間でスピンの向きが固定されている。そのため、ある波数 $\vec{k}$ の電子が $-\vec{k}$ に散乱される場合、スピンをひっくり返さない限り散乱されない: 物質としては不純物に強くなる

などがあります。

8　トポロジカル超伝導

8.1　超伝導ギャップ

これまで、絶縁体を考えてきました。絶縁体とは、フェルミエネルギー付近 $E=0$ にエネルギー固有値がないことを意味しており、これを「ギャップが開いている」と表現していたのでした。TKNN 数など、トポロジカル数はフェルミエネルギーより低い占有された状態の波動関数がどのようにひねられているかということから計算されています。そして、占有されたバンドがちゃんと定義できるためには、フェルミエネルギーのところにギャップがある必要があります。逆に言えば、ギャップがとじている場合はトポロジカル数が定義できません。そのため、何らかのパラメータを変化させたときにトポロジーが変化する場合、変化の途中には必ずギャップがとじた状態が存在します。

さて、超伝導 BCS 理論で現れる BCS ハミルトニアンを対角化して得られるエネルギー固有値は $E=0$ に解がありませんでした。つまり、超伝導のハミルトニアンの固有値にもギャップがあるということです。これを具体的にみていきましょう。

超伝導の講義ノートにありますように、超伝導を記述する BCS ハミルトニアンは

$$H^{\mathrm{BCS}} = \sum_{\vec{k}} \begin{pmatrix} c_{\vec{k}\uparrow}^{\dagger} & c_{-\vec{k}\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_{\vec{k}} & -\Delta_{\vec{k}} \\ -\Delta_{\vec{k}}^{*} & -\xi_{-\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\vec{k}\uparrow} \\ c_{-\vec{k}\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix} + \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}}^{*} \langle c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow} \rangle \tag{248}$$

のように書けます。このハミルトニアンは

$$\begin{pmatrix} c_{\vec{k}\uparrow} \\ c_{-\vec{k}\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\vec{k}}^{*} & v_{\vec{k}} \\ -v\vec{k}^{*} & u_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{\vec{k}\uparrow} \\ \gamma_{-\vec{k}\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix} \tag{249}$$

という新しい生成消滅演算子を導入することで対角化できまして、

$$H^{\mathrm{BCS}} = \sum_{\vec{k}} \begin{pmatrix} \gamma^\dagger_{\vec{k}\uparrow} & \gamma_{-\vec{k}\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{\vec{k}} & 0 \\ 0 & -E_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{\vec{k}\uparrow} \\ \gamma^\dagger_{-\vec{k}\downarrow} \end{pmatrix} + \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} \Delta^*_{\vec{k}} \langle c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow} \rangle \tag{250}$$

$$E_{\vec{k}} = \sqrt{\xi^2_{\vec{k}} + |\Delta_{\vec{k}}|^2} \tag{251}$$

となります。ここで、$E_{\vec{k}}$ は励起状態の準粒子のエネルギーです。$\xi_{\vec{k}} \equiv \epsilon_{\vec{k}} - \mu$ ですから、ξ_k はフェルミ波数のところで 0 になります。しかし、$\Delta_{\vec{k}}$ はゼロではありませんから、この準粒子のエネルギーはゼロになることはありません。つまり、ギャップを持っています。ギャップを持っているということは、絶縁体の時と似たような方法で超伝導体の波動関数でもトポロジーを定義できます。

8.2 キタエフモデル

トポロジカル超伝導体として、一番簡単なモデルの一つとしてキタエフモデルがあります。このモデルは 1 次元格子上のスピンレス（スピン自由度のない）p 波超伝導体です[5]。このモデルのハミルトニアンは

$$H = -\frac{t}{2} \sum_i \left(c^\dagger_i c_{i+1} + c^\dagger_{i+1} c_i \right) - \mu \sum_i c^\dagger_i c_i + \frac{1}{2} \sum_i \left(\Delta e^{i\phi} c^\dagger_i c^\dagger_{i+1} + \Delta e^{-i\phi} c_{i+1} c_i \right) \tag{252}$$

です。ここで、第一項の演算子は

- ${}^\dagger_i c_{i+1}$: $i+1$ 番目の電子をけして、i 番目の電子を作る $\rightarrow$ 電子が $i+1$ から i へ移動する

という意味で、運動エネルギー項を表しています。そして、格子の数は N 個とし、それぞれの格子間の距離は a とします。

この模型に対してフーリエ変換:

$$c_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k e^{ikx_i} \tag{253}$$

を使いますと、

$$\sum_i \left(c^\dagger_i c_{i+1} + c^\dagger_{i+1} c_i \right) = \frac{1}{N} \sum_i \sum_k \sum_{k'} c^\dagger_k c_{k'} \left(e^{-ikx_i} e^{ik'(x_i+a} + e^{-k(x_i+a)} e^{ik'x_i} \right) \tag{254}$$

$$= 2 \sum_k \cos ka c^\dagger_k c_k \tag{255}$$

$$\sum_i c^\dagger_i c^\dagger_{i+1} = \frac{1}{N} \sum_i \sum_k \sum_{k'} c^\dagger_k c^\dagger_{k'} e^{-ikx_i} e^{-ik'(x_i+a)} \tag{256}$$

$$= \sum_k c^\dagger_k c^\dagger_{-k} e^{ika} \tag{257}$$

$$\sum_i c_{i+1} c_{i+1} = \frac{1}{N} \sum_i \sum_k \sum_{k'} c_k c_{k'} e^{ik(x_i+a)} e^{ik'x_i} \tag{258}$$

$$= \sum_{k'} c_{-k'} c_{k'} e^{-ik'a} \tag{259}$$

$$= \sum_k c_{-k} c_k e^{-ika} \tag{260}$$

[5] p 波超伝導体の「p 波」とは、超伝導の電子対の組み方を水素原子の電子の波動関数に例えたものです。これは、実空間でどのように電子がペアを組んでいるかを示すものです。よく見る超伝導体は s 波超伝導でして、電子は等方的にペアになっています。一方、p 波超伝導の場合は、sin 関数のような空間依存性を持ちます。

となります。ここで、これ以後は $a=1$ とします。これらを使いますと、ハミルトニアンは

$$H=-t\sum_k \cos k c_k^\dagger c_k - \mu\sum_k c_k^\dagger c_k + \frac{1}{2}\sum_k \left(\Delta e^{i\phi} e^{ik} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + \Delta e^{-i\phi} e^{-ik} c_{-k} c_k\right) \tag{261}$$

となります。さらに、

$$\begin{aligned}\sum_k e^{ik} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger &= \frac{1}{2}\sum_k e^{ik} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + \frac{1}{2}\sum_k e^{ik} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger & (262)\\ &= \frac{1}{2}\sum_k e^{ik} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + \frac{1}{2}\sum_k e^{-ik} c_{-k}^\dagger c_k^\dagger & (263)\\ &= \frac{1}{2}\sum_k e^{ik} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + \frac{1}{2}\sum_k e^{-ik} (-c_k^\dagger c_{-k}^\dagger) & (264)\\ &= \sum_k \frac{e^{ik}-e^{-ik}}{2} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger & (265)\\ &= i\sum_k \sin k c_k^\dagger c_{-k}^\dagger & (266)\end{aligned}$$

を使いますと、

$$\begin{aligned}H &= \frac{1}{2}\sum_k(-t\cos k-\mu)c_k^\dagger c_k - \frac{1}{2}\sum_k(-t\cos k-\mu)c_{-k}c_{-k}^\dagger + \frac{1}{2}\sum_k(-t\cos k-\mu)\\ &+\frac{1}{2}\sum_k\left(i\Delta e^{i\phi}\sin k c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + \Delta(-i\sin k e^{-i\phi})c_{-k}c_k\right) & (267)\\ &= \frac{1}{2}\sum_k \begin{pmatrix} c_k^\dagger & c_{-k}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} -t\cos k-\mu & i\Delta e^{i\phi}\sin k \\ -i\Delta e^{-i\phi}\sin k & t\cos k+\mu\end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_k \\ c_{-k}^\dagger\end{pmatrix} + \frac{1}{2}\sum_k(-t\cos k-\mu) & (268)\end{aligned}$$

となります。このハミルトニアンのトポロジーを考えるためには、

$$h(k)\equiv\begin{pmatrix} -t\cos k-\mu & i\Delta e^{i\phi}\sin k \\ -i\Delta e^{-i\phi}\sin k & t\cos k+\mu\end{pmatrix}\equiv\vec{R}(k)\cdot\vec{\sigma} \tag{269}$$

を考えればよいということになります。$ie^{i\phi}=i\cos\phi-\sin\phi$ から、

$$h(k)\equiv\begin{pmatrix} -t\cos k-\mu & i\Delta\cos\phi\sin k-\Delta\sin\phi\sin k \\ -i\Delta\cos\phi\sin k-\Delta\sin\phi\sin k & t\cos k+\mu\end{pmatrix} \tag{270}$$

となりますから、$\vec{R}(k)$ は

$$\vec{R}(k)=(-\Delta\sin\phi\sin k, -\Delta\cos\phi\sin k, -(t\cos k+\mu))^T \tag{271}$$

となります。ベクトル $\vec{R}$ を使ってハミルトニアンを表現できましたので、固有値は

$$E(k)=\pm R(k),\ R(k)\equiv\sqrt{(t\cos k+\mu)^2+\Delta^2\sin^2 k} \tag{272}$$

となります。この系は、

- $\mu=-t$ の時、$k=0$ で $E=0$
- $\mu=t$ の時、$k=\pi$ で $E=0$
- それ以外のパラメータ領域ではどの k でも $E\neq 0$

という性質を持っています。つまり、$\mu=\pm t$ 以外であれば、ギャップがあいていますから、トポロジカル数が定義できます。

8.3 粒子正孔対称性

上で定義したモデルは、

$$\sigma_x H(-k)^* \sigma_x = -H(k) \tag{273}$$

という条件を満たします。この条件を満たすとき、「粒子正孔対称性（あるいは電子正孔対称性）を満たす」といいます。実際に条件を満たしているか確認してみましょう。ハミルトニアンは

$$H(k) = R_x(k)\sigma_x + R_y(k)\sigma_y + R_z(k)\sigma_z \tag{274}$$

と書けますが、これを変形していくと (R の要素は実数とします)、

$$H(-k)^{ast} = R_x(-k)\sigma_x - R_y(-k)\sigma_y + R_z(-k)\sigma_z \tag{275}$$

$$\sigma_x H(-k)^{ast}\sigma_x = R_x(-k)\sigma_x + R_y(-k)\sigma_y - R_z(-k)\sigma_z \tag{276}$$

$$-H(k) = -R_x(k)\sigma_x - R_y(k)\sigma_y - R_z(k)\sigma_z \tag{277}$$

となりますから、条件を満たすためには、

$$R_x(-k) = -R_x(k) \tag{278}$$

$$R_y(-k) = -R_y(k) \tag{279}$$

$$R_z(-k) = R_z(k) \tag{280}$$

が必要です。式 (271) を代入してみると、ちゃんと成り立っていることがわかります。

8.4 トポロジー

これまでと同じような議論をして、キタエフモデルのトポロジーを議論します。1 次元ディラックモデルの時と同じく、波数空間が $-\pi \le k \le \pi$ の時に、波数が動いた時に $\vec{R}$ が 3 次元空間でどう動くか、というのが問題となります。また、固有ベクトルは $\vec{R}$ の長さには依存しませんから、3 次元の単位球上でどう動くか、という問題を考えることになります。

このモデルには粒子正孔対称性がありますので、

- $k=0$ の時: $R_x(0) = -R_x(0)$,$R_y(0) = -R_y(0)$ が成り立つ必要があり、その結果 $R_x(0) = R_y(0) = 0$。
- $k=\pi$ の時: $R_x(-\pi) = -R_x(\pi)$,$R_y(\pi) = -R_y(-\pi)$ が成り立つ必要があり、その結果 $R_x(\pi) = R_y(\pi) = 0$。

という条件が成り立ちます。つまり、$k=0$ と $k=\pm\pi$ ではベクトル $\vec{R}$ は必ず北極か南極になっている、ということです。つまり、

$$\hat{\vec{R}}(k) = \frac{\vec{R}(k)}{|\vec{R}(k)|} \tag{281}$$

という単位球上の長さ 1 のベクトルを考えますと、

$$\hat{\vec{R}}(0) = \mathrm{sgn}\,(R_z(0))\vec{e}_z \tag{282}$$

$$\hat{\vec{R}}(\pi) = \mathrm{sgn}\,(R_z(\pi))\vec{e}_z \tag{283}$$

となっています。これをふまえて $-\pi \le k \le \pi$ でどう $\hat{\vec{R}}(k)$ が動くかを考えます。

$k=0$ では北極か南極にいます。そして、そこから k を動かして $k=\pi$ に移動した場合、2 通りがあり得て、

1. $k=\pi$ でもう一つの極にいってくる

2. $k=\pi$ でもとの極にもどっている

です。1. の場合、二つの極を経由して球を一周しています。一方、2. の場合は一周していません。この、一周しているかしていないかは、連続的に経路を変形しても移り変わることができませんので（一つは球を囲んでおり、一つは球の上に置かれたループになっているため)、トポロジーが異なっています。なお、北極の上から球を眺めた時に、「左下から北極を経由して右上にいく経路」と「右上から北極を経由して左下に行く経路」という二種類の一見逆むきに回っているような経路を考えることができますが、北極を必ず通るためにそこを中心に 180 度回転すれば両者は移り変わります。つまり、連続的に変形できます。よって、今回の場合は「向き」はありません。つまり、球を囲んでいるか囲んでいないか、だけです。この、囲うか囲わないかという 2 値しかない場合、トポロジカル数は Z_2 になります。そして、トポロジカル数は北極と南極での情報だけで決まりますから、

$$\mathrm{sgn}\,(R_z(0))\mathrm{sgn}\,(R_z(\pi)) = (-1)^{\nu} \tag{284}$$

としたときに、$\nu(=0,1)$ がトポロジカル数です。

今回の系では

$$R_z(k) = -t\cos k - \mu \tag{285}$$

ですから、

- $|\nu| > t$ なら、自明 $(\nu = 0)$
- $|\nu| < t$ なら、非自明 $(\nu = 1)$

となります。$\nu = 1$ は、トポロジカルに非自明な超伝導体を意味し、これをトポロジカル超伝導体と呼びます。そして、トポロジカル超伝導体の場合、系の端にマヨラナ束縛状態が現れることが知られています。

8.5 マヨラナフェルミオン

マヨラナフェルミオンとは、イタリア人物理学者であるマヨラナが提案したものでして、粒子と反粒子が同一な粒子のことです。真空中では、

- 粒子：陽子 $\leftrightarrow$ 反粒子：反陽子
- 粒子：電子 $\leftrightarrow$ 反粒子：陽電子

が知られています。真空にエネルギーを与えますと、粒子・反粒子のペアが生成されます。第二量子化を使った場合、

- 電子を生成する演算子：$c^{\dagger}$
- 電子を消滅させる演算子:c

という生成消滅演算子を考えていましたが、ここで、フェルミエネルギーまで電子が詰まっている時に電子を消滅させるとそこに穴が開きますから、

- 正孔を生成する演算子：$d^{\dagger} \equiv c$

を定義することができます。粒子と反粒子が同一である、という意味は、電子を生成しても正孔を生成しても同じである、ということを意味しています。しかし、もちろん、電子の場合は同じではありません。マヨラナ粒子（フェルミオンなのでマヨラナフェルミオンとも呼びます）の場合は、

- マヨラナ粒子を生成する演算子：$\gamma^\dagger$
- マヨラナ粒子を消滅させる演算子:γ

と定義したときに

$$\gamma^\dagger = \gamma \tag{286}$$

となります（マヨラナ条件)。生成と消滅が同じという不思議粒子です。

この不思議な粒子は、トポロジカル超伝導体の内部で生成されることが知られています。講義では図で説明しますが、言葉で説明すると、「クーパーペアがたくさんある状態に電子をひとつ付け加えた電子がひとつ増えた状態」という状況と「クーパーペアがたくさんある状態に、新しいクーパーペアを作ってそこに正孔を足しておいた、全体で電子がひとつ増えた状態」が同じになりうる、ということです。

以下では式で説明します。まず、バルクを考えてみます。超伝導体を記述する BCS ハミルトニアンを

$$H_{\rm BCS} = \sum_{\vec{k}} \begin{pmatrix} c_{\vec{k}}^\dagger & c_{-\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H(\vec{k}) & \Delta_{\vec{k}} \\ \Delta_{\vec{k}}^\dagger & -H(-\vec{k})^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\vec{k}} \\ c_{-\vec{k}}^\dagger \end{pmatrix} \tag{287}$$

とします。超伝導の講義ノートでやりましたように、このハミルトニアンから物理量を計算するには、$\sum_n E_n \gamma_n^\dagger \gamma_n$ のようにします。これは、行列の対角化をすればよく、つまり、

$$\begin{pmatrix} H(\vec{k}) & \Delta_{\vec{k}} \\ \Delta_{\vec{k}}^\dagger & -H(-\vec{k})^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\vec{k}}^n \\ v_{\vec{k}}^n \end{pmatrix} E_n(\vec{k}) \begin{pmatrix} u_{\vec{k}}^n \\ v_{\vec{k}}^n \end{pmatrix} \tag{288}$$

という固有値問題を解けばよいです。この式は、

$$H(\vec{k}) u_{\vec{k}}^n + \Delta_{\vec{k}} v_{\vec{k}}^n = E_n(\vec{k}) u_{\vec{k}}^n \tag{289}$$

$$\Delta_{\vec{k}}^\dagger u_{\vec{k}}^n - H(-\vec{k})^* v_{\vec{k}}^n = E_n(\vec{k}) v_{\vec{k}}^n \tag{290}$$

という二つの方程式からなっています。この二つの方程式に-1 をかけ、$\vec{k} \to -\vec{k}$ をし、さらに複素共役を取りますと、

$$-H(-\vec{k})^* u_{-\vec{k}}^{n*} - \Delta_{-\vec{k}}^* v_{-\vec{k}}^{n*} = -E_n(-\vec{k}) u_{-\vec{k}}^{n*} \tag{291}$$

$$-\Delta_{-\vec{k}} u_{-\vec{k}}^{n*} + H(\vec{k}) v_{-\vec{k}}^{n*} = -E_n(-\vec{k}) v_{-\vec{k}}^{n*} \tag{292}$$

となります。ここで、$c_{\vec{k}} c_{-\vec{k}} = -c_{-\vec{k}} c_{\vec{k}}$ より $\Delta_{-\vec{k}} = -\Delta_{\vec{k}}$ となることを利用し、行列の形に整理しますと、

$$\begin{pmatrix} H(\vec{k}) & \Delta_{\vec{k}} \\ \Delta_{\vec{k}}^\dagger & -H(-\vec{k})^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{-\vec{k}}^{n*} \\ u_{-\vec{k}}^{n*} \end{pmatrix} - E_n(-\vec{k}) \begin{pmatrix} v_{-\vec{k}}^{n*} \\ u_{-\vec{k}}^{n*} \end{pmatrix} \tag{293}$$

となります。つまり、$(u^n(\vec{k}), v^n(\vec{k}))^T$ が固有値 $E_n(\vec{k})$ の固有ベクトルだった場合、$(v^{n*}(-\vec{k}), v^{n*}(-\vec{k}))^T$ は固有値 $-E_n(-\vec{k})$ の固有ベクトルです。ここで、$E_n(\vec{k}) = E_n(-\vec{k})$ とすると[6]、ハミルトニアンを対角化するユニタリー行列は

$$U_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} u_{\vec{k}} & v_{-\vec{k}}^* \\ v_{\vec{k}} & u_{-\vec{k}}^* \end{pmatrix} \tag{294}$$

[6]簡単のため。この条件がなくても議論を続けることはできる。

となりますから、

$$\begin{pmatrix} \gamma_{\vec{k}} \\ \gamma^\dagger_{-\vec{k}} \end{pmatrix} = U^\dagger_{\vec{k}} \begin{pmatrix} c_{\vec{k}} \\ c^\dagger_{-\vec{k}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u^*_{\vec{k}} & v^*_{\vec{k}} \\ v_{-\vec{k}} & u_{-\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\vec{k}} \\ c^\dagger_{-\vec{k}} \end{pmatrix} \tag{295}$$

となり[7]、

$$\gamma_{\vec{k}} = u^*_{\vec{k}} c_{\vec{k}} + v^*_{\vec{k}} c^\dagger_{-\vec{k}} \tag{296}$$

となります。これがボゴリウボフ準粒子の演算子でした。そして、

- $\gamma^\dagger_{\vec{k}}$: ボゴリウボフ準粒子を生成する演算子
- $\gamma_{\vec{k}}$: ボゴリウボフ準粒子を消滅させる演算子

です。もしボゴリウボフ準粒子がマヨラナ粒子とみなせるのであれば、マヨラナ条件 $\gamma^\dagger = \gamma$ が満たされているはずです。しかし、

$$\gamma^\dagger_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} c^\dagger_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} c_{-\vec{k}} \tag{297}$$

ですから、波数 $\vec{k}$ と $-\vec{k}$ の違いがあり、条件は満たされていません。もちろん、$\vec{k} = 0$ を考えれば満たすことができますが、通常、クーパーペアを作る波数はフェルミ波数付近のものが使われていますので、$\vec{k} = 0$ ではありません。つまり、バルク (並進対称性のある場合) ではダメです。

次に、はしのある系を考えてみます。格子模型を考え、N 個の格子の上に電子がいるとします。実空間の BCS ハミルトニアンは、

$$H_{\rm BCS} = \begin{pmatrix} c^\dagger_1 & c^\dagger_2 & \cdots & c^\dagger_N & c_1 & c_2 & \cdots & c_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{H} & \hat{\Delta} \\ \hat{\Delta}^\dagger & -\hat{H}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_N \\ c^\dagger_1 \\ \vdots \\ c^\dagger_N \end{pmatrix} \tag{298}$$

となります[8]。そして、このハミルトニアンから物理量を計算するには固有値問題を解けばよいわけですので、

$$\hat{H}\vec{u}_n + \hat{\Delta}\vec{v}_n = E_n \vec{u}_n \tag{299}$$
$$\hat{\Delta}^\dagger \vec{u}_n - \hat{H}^* \vec{v}_n = E_n \vec{v}_n \tag{300}$$

と言う固有値方程式を解きます。先ほどと同じように-1 をかけ、複素共役をとると、

$$-\hat{H}^* \vec{u}^*_n - \hat{\Delta}^* \vec{v}^*_n = -E_n \vec{u}^*_n \tag{301}$$
$$-\hat{\Delta}^T \vec{u}^*_n + \hat{H} \vec{v}^*_n = -E_n \vec{v}^*_n \tag{302}$$

となりますが、$c_i c_j = -c_j c_i \ (i \neq j)$ から $\hat{\Delta}^T = -\hat{\Delta}$ となることを使いますと、

$$\begin{pmatrix} \hat{H} & \hat{\Delta} \\ \hat{\Delta}^\dagger & -\hat{H}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{v}^*_n \\ \vec{u}^*_n \end{pmatrix} = -E_n \begin{pmatrix} \vec{v}^*_n \\ \vec{u}^*_n \end{pmatrix} \tag{303}$$

[7]簡単のためシングルバンドとし、n のラベルをとった。
[8]キタエフ模型を考える都合上スピンレスにしているが、スピンがあっても議論はほとんど変わらない。

という形にまとまります。これはバルクのときと同じように、E_n の固有ベクトルから $-E_n$ の固有ベクトルを計算できることを意味しています。先ほどと同様に、

$$U = \begin{pmatrix} \hat{u} & \hat{v}^* \\ \hat{v} & \hat{u}^* \end{pmatrix} \tag{304}$$

$$\hat{u} \equiv \begin{pmatrix} \vec{u}_1 & \vec{u}_2 & \cdots & \vec{u}_N \end{pmatrix} \tag{305}$$

$$\hat{v} \equiv \begin{pmatrix} \vec{v}_1 & \vec{v}_2 & \cdots & \vec{v}_N \end{pmatrix} \tag{306}$$

を定義しますと、ボゴリウボフ準粒子の生成消滅演算子は

$$\begin{pmatrix} \gamma_1 \\ \vdots \\ \gamma_N \\ \gamma_1^\dagger \\ \vdots \\ \gamma_N^\dagger \end{pmatrix} = U^\dagger \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_N \\ c_1^\dagger \\ \vdots \\ c_N^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{u}^\dagger & \hat{v}^\dagger \\ \hat{v}^T & \hat{u}^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_N \\ c_1^\dagger \\ \vdots \\ c_N^\dagger \end{pmatrix} \tag{307}$$

となります。そして、エネルギー E_n を持つボゴリウボフ準粒子の生成消滅演算子は

$$\gamma_n = \sum_l [\vec{u}_n^*]_l c_l + \sum_l [\vec{v}_n^*]_l c_l^\dagger \tag{308}$$

$$\gamma_n^\dagger = \sum_l [\vec{u}_n]_l c_l^\dagger + \sum_l [\vec{v}_n]_l c_l \tag{309}$$

です。マヨラナ条件 $\gamma_n = \gamma_n^\dagger$ を満たすためには、

$$\vec{u}_n = \vec{v}_n^* \tag{310}$$

が必要、ということになります。通常、これは満たされていません。しかし、$E = E_n$ の固有ベクトル：

$$\begin{pmatrix} \vec{u}_n \\ \vec{v}_n \end{pmatrix} \tag{311}$$

は $E = -E_n$ の固有ベクトル:

$$\begin{pmatrix} \vec{v}_n^* \\ \vec{u}_n^* \end{pmatrix} \tag{312}$$

と関係していますから、$E_n = 0$ の解がもし存在しているならば、$E = 0$ は二重縮退しており、この時、$\vec{u}_n = \vec{v}_n^*$ が成り立ちます。つまり、マヨラナ条件を満たします。

以上から、$E = 0$ の解であればマヨラナ粒子とみなしてもよく、そして $E = 0$ の解はトポロジカル超伝導体であれば必ず現れることから、「トポロジカル超伝導体のはしにはマヨラナ粒子が現れる」ということになります。

8.6 キタエフモデルのマヨラナ表示

最後に、マヨラナ粒子の存在をこれまでみてきたトポロジカル超伝導体のシンプルなモデルであるキタエフモデルでみていきましょう。まず初めに、$\gamma = \gamma^\dagger$ というのは、これがもし複素数だと思えば、実数であることを意味しています。ですので、これを「実」のフェルミオンと呼ぶことにします。そして、

マヨラナフェルミオンの生成消滅演算子を用いて、普通の電子の生成消滅演算子を作ってみます。これを作るには、

$$c = \frac{\gamma_1 + i\gamma_2}{2} \tag{313}$$

というように電子の消滅演算子を二つのマヨラナ粒子の演算子で定義すればよいです。この時、

$$c^\dagger = \frac{\gamma_1 - i\gamma_2}{2} \tag{314}$$

です。

さて、キタエフモデルに戻ります。ハミルトニアンは

$$H = -\frac{t}{2}\sum_i \left(c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i\right) - \mu \sum_i c_i^\dagger c_i + \frac{1}{2}\sum_i \left(\Delta e^{i\phi} c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger + \Delta e^{-i\phi} c_{i+1} c_i\right) \tag{315}$$

でした。ここで、電子の消滅演算子を

$$c_i = e^{-i\frac{\phi}{2}} \frac{\gamma_{Bi} + i\gamma_{Ai}}{2} \tag{316}$$

のようにサイト i の二種類のマヨラナフェルミオン（サイト i を二つに分けて、サイト iA とサイト iB としている）を使って書き換えてみることにします。なお、このマヨラナフェルミオンはフェルミオンですので、反交換関係:

$$[\gamma_{\alpha i}, \gamma_{\beta,j}]_+ = 2\delta_{\alpha\beta}\delta_{ij} \tag{317}$$

という条件を満たします。これを用いてキタエフモデルのハミルトニアンを書き換えてみますと、

$$H = \frac{\mu}{2}\sum_i (1 - i\gamma_{Ai}\gamma_{Bi}) + \frac{i}{4}\sum_i \left[(\Delta + t)\gamma_{Ai+1}\gamma_{Bi} + (\Delta - t)\gamma_{Bi+1}\gamma_{Ai}\right] \tag{318}$$

という形になります。なお、このモデルがトポロジカル超伝導になるのは $|\mu| < t$ の時でした。そこで、モデルを簡単化するために、$t = \Delta(\neq 0)$,$\mu = 0$ とします。この時、ハミルトニアンは

$$H = \frac{t}{2}\sum_i \left[-i\gamma_{Bi}\gamma_{Ai+1}\right] \tag{319}$$

となります。これは、マヨラナ粒子がサイト $i+1A$ からサイト iB に移動する模型であると言えます。ここで、

$$d_i = \frac{\gamma_{Ai+1} + i\gamma_{Bi}}{2} \tag{320}$$

という演算子を導入しますと、

$$d_i^\dagger d_i = \frac{\gamma_{Ai+1} - i\gamma_{Bi}}{2}\frac{\gamma_{Ai+1} + i\gamma_{Bi}}{2} = \frac{1}{2} - \frac{i}{2}\gamma_{Bi}\gamma_{Ai+1} \tag{321}$$

より、

$$H = t\sum_{i=1}^{N-1}(d_i^\dagger d_i - \frac{1}{2}) \tag{322}$$

という簡単な形に書き換えることができます。そして、d_i の定義から明らかなように、このハミルトニアンには、γ_{A1} と γ_{BN} が含まれていません。言い換えれば、γ_{A1} と γ_{BN} はいてもいなくてもエネルギーが変化しません。つまり、このようなマヨラナフェルミオンを生成するエネルギーはゼロです。そこで、

$$f = \frac{\gamma_{A1} + i\gamma_{BN}}{2} \tag{323}$$

という両端のマヨラナフェルミオンから作られたフェルミオンを考えます。このフェルミオンを「f-フェルミオン」と呼びますと、この f-フェルミオンを生成するエネルギーはゼロです。なぜなら、ハミルトニアンにこのフェルミオンは含まれていないからです。言い換えれば、もし「f-フェルミオンが含まれていない状態が基底状態」であるならば、「f-フェルミオンが含まれている状態もエネルギーが変わらないため基底状態」であると言えます。つまり、二重縮退しています。以上から、キタエフモデルの両端にはエネルギーゼロの状態があり、これがマヨラナフェルミオン二つからなる、と言えます。そして、f-フェルミオンの定義から明らかのように、この二つは非局所な存在です。

9　トポロジカル結晶絶縁体

執筆中

10　高次トポロジカル物質

執筆中