

2024 年度卒業論文

3次元トポロジカル絶縁体の電磁応答の研究

主査 多田 靖啓 准教授
副査 黒田 健太 准教授



*Computational physics group
at Department of Physics, Faculty of Science,
Hiroshima University*

B210831 伍井 直輝

Submission Date: February 2025

Abstract

2005 年の Kane と Mele による理論的な提案以降, トポロジカル絶縁体の研究は爆発的に進展した. トポロジカル絶縁体とはバルクではフェルミエネルギーがバンドギャップの中にあるが、表面にギャップレスな状態が現れる特徴的な状態のことである. さらに, トポロジカル絶縁体のギャップレスな表面状態は, バルクのバンドギャップが閉じない範囲での対称性を守る摂動に対して安定して存在する. このようなトポロジカル絶縁体の特徴的な性質から, その外場に対する応答においては通常の絶縁体に見られないような現象が実現すると期待されている. 本論文では次元縮小という手法を使い, 時間反転対称な 3 次元トポロジカル絶縁体を記述する有効場の理論を導出する. そしてこの有効作用から時間反転対称な 3 次元トポロジカル絶縁体中の電磁場を記述する拡張された Maxwell 方程式を導出し, その特徴的な電磁応答であるトポロジカル電気磁気効果について議論する. さらにこの拡張された Maxwell 方程式は Axion 電磁気学と呼ばれ, その物質系での実現方法についても考察する.

Contents

Abstract	1
Contents	2
1 序論	4
1.1 Background	4
1.2 Summary	6
2 相互作用のない fermion 系のトポロジカル相の分類	7
2.1 離散対称性の演算子	7
2.1.1 時間反転対称性	8
2.1.2 粒子正孔対称性	9
2.1.3 Chiral 対称性	10
2.1.4 空間対称性	11
2.1.5 10 通りの分類	12
2.2 トポロジカル絶縁体・超伝導体の分類	13
3 トポロジカルに非自明な模型	15
3.1 Haldane 模型	15
3.1.1 バルクの状態	16
3.1.2 トポロジカル数の計算	18
3.2 Kane-Mele 模型	21
3.2.1 バルクの状態	21
3.2.2 エッジ状態	23
3.3 Fu-Kane-Mele 模型	25
3.3.1 バルクの状態	26
3.3.2 エッジ状態	27
3.4 トポロジカルバンド理論	28
3.4.1 時間反転分極	28
3.4.2 2次元の $\mathbb{Z}_2$ トポロジカル数	32
3.4.3 3次元の $\mathbb{Z}_2$ トポロジカル数	33
3.4.4 空間反転対称性がある場合の $\mathbb{Z}_2$ 不変量	36
3.4.5 Kane-Mele 模型と Fu-Kane-Mele 模型の $\mathbb{Z}_2$ 不変量の計算	38
4 3次元トポロジカル絶縁体の有効場理論	40
4.1 量子ホール効果と Chern-Simons gauge 理論	40
4.1.1 2次元量子ホール効果	40
4.1.2 4次元量子ホール効果	41

4.2	3次元トポロジカル絶縁体の有効作用	42
4.2.1	3次元トポロジカル絶縁体への次元縮小	42
4.2.2	3次元トポロジカル絶縁体の $\mathbb{Z}_2$ 分類	43
4.3	3次元トポロジカル絶縁体のトポロジカルな電磁応答	44
4.3.1	表面半整数量子ホール効果	45
4.3.2	トポロジカル電気磁気効果	46
4.3.3	磁気モノポール鏡像	48
4.3.4	Witten 効果	51
5	物質中の Axion 電磁気学	53
5.1	3次元トポロジカル絶縁体と Fujikawa の方法	53
5.2	反強磁性トポロジカル絶縁体	56
5.3	Weyl 半金属	58
6	結論	61
A	Maxwell 場の理論	62
A.1	Notation	62
A.2	SI 単位系と Gauss 単位系	62
A.3	真空の Maxwell 場の作用	63
A.4	物質中の Maxwell 場の作用	64
A.5	電磁場の境界条件	65
B	Chiral Anomaly	67
B.1	Notation	67
B.2	Dirac 方程式	67
B.3	古典論での chiral 対称性	68
B.4	量子論での chiral 変換と Fujikawa の方法	69
B.5	Atiyah-Singer の指数定理	76
C	Weyl 半金属	78
C.1	Background	78
C.2	Weyl 半金属のトポロジカルな性質	80
C.2.1	Weyl 半金属の有効模型	80
C.2.2	Fermi arc 表面状態	82
C.2.3	異常ホール効果	84
C.3	3次元トポロジカル絶縁体のトポロジカル相転移	85
D	計算の詳細	88
D.1	非可換 Berry 接続と曲率	88
D.2	非可換 Berry 接続と曲率の gauge 変換	88
D.3	非可換 Berry 接続と曲率 (微分形式)	90
D.4	時間反転演算子	91
D.5	w 行列	91
D.6	π 行列	92
D.7	電気磁気分極	93
D.8	その他の公式	94
	Acknowledgments	98
	Bibliography	99

Chapter 1

序論

物性物理学とは主に物質中の電子を研究する学問である。物質中の電子は電子同士や正に帯電した格子と電磁的な相互作用をするので、物性物理学とは4つの力のうちの電磁相互作用のみを研究する分野と言って良いかもしれない。しかしながら、物性物理学は格子の形、取り入れる相互作用の形、多体であること、非自明な位相などの影響で、それぞれの物質・現象にそれぞれの有効理論が存在する。ここではそれぞれの物質群に対して、その構造の豊かさゆえそれぞれの有効理論が存在することを「それぞれの物質にはそれぞれの宇宙がある」と言うことにする^{*1}。例を挙げるとすると、「物質中の宇宙」として、相互作用が弱い極低温の boson 系では超流動と呼ばれる粘性が0の量子流体状態になるが、これはスカラー場の理論で記述され、グラフェンと呼ばれる炭素で構成された2次元物質の波数空間のある点付近の電子は Dirac 場の理論で記述され、Kitaev スピン液体と呼ばれるあるクラスのスピンモデルの基底状態は $\mathbb{Z}_2$ gauge 理論で記述されるなどである。本論文では、トポロジカル絶縁体と呼ばれるある興味深い特徴を持った物質の宇宙について解明していく。

1.1 Background

物理学の重要な目標の一つとして、秩序を特徴付けるといふものがある。同じような振る舞いをする秩序の集合は相と呼ばれ、固体、液体、気体はそれぞれ固相、液相、気相と呼ばれる相である。Landau は相を特徴づける方法として、対称性に注目した。物理学での対称性とはある世界を変える変換に対して不変な性質を言う。例えば、空間並進対称性とは、世界全体の空間をある方向に平行移動させてもその物理現象は不変であることを意味し、時間反転対称性とは、時間を逆戻りさせても物理現象が不変であることである。Landau は相とはある Hamiltonian が与えられたとき実現する状態が同じ対称性を持っているものの集合であり、2つの状態が異なる対称性を持っていたら異なる相に属し、また相が移り変わる相転移とは対称性の数が変わるものであると指摘した。例えば、固相と液相では、液相では連続的な空間並進対称性を持っているのに対して、固相では結晶構造に依存した離散的な対称性しか持っていない、固体液体相転移とは、空間の並進対称性が変わることに対応する。さらに Ginzburg と Landau は対称性変換に対して非自明に変換する秩序変数という量を導入することにより、相と相転移の一般論を構築した。この Ginzburg と Landau による理論は大成功し、その当時の物理学者は原理的には全ての相を理解できると感じ始め、まるで物性物理学の終わりの始まりが見え始めているかのように感じた [1]。

しかし、1980年代に対称性のみで特徴づけられない相が登場した。それが整数量子ホール効果である [2]。整数量子ホール効果とは相互作用が無い2次元電子系に垂直な強磁場を印加すると発現する現象で、電場を印加した時の Hall 伝導度が e^2/h を単位として量子化し、この値は磁場の変化や不純物などに対して安定となる [3, 4]。さらにエッジでは片方に流れるカイラルな電流が流れる。整数量子ホール相は対称性の変化で特徴づけられず、トポロジカルに等価か異なるかで区別できる最初の例である。トポロジーとは数学的な概念で、連続変形の下で不変な性質のことである。例えば、図 1.1.1 にあるようにトーラスを考える。トーラスは穴が1個あり、同じく穴が1つあるコーヒーカップに連続的に変形できる。しかし、トーラスは球に連続的に変形できない。これは球は穴がないからである。この場合、トーラスとコーヒー

^{*1}ここでの物質と宇宙の関係は多対一である。例えば、3次元トポロジカル絶縁体である Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 などは異なる物質だが、同じ有効理論を持つ。



Figure 1.1.1: トポロジーの具体例. 真ん中のトーラスは左側のコーヒーカップに連続変形できるが、右側の球には連続変形できない. 連続変形で不変な穴がトポロジカル不変量の役割を果たしている.

カップは**トポロジカルに等価**と呼び、トーラスと球は**トポロジカルに異なる**と呼ぶ. また穴のように連続変形の下で不変な量を**トポロジカル不変量**と呼び、2つの系がトポロジカルに等価か異なるかを判別する不変量となる. 仮にトーラスの上と球の上に住む2種類の人間が存在した時、彼らは自分が球にいるのかトーラスにいるのか区別できない. これはトポロジーという概念は細かな詳細に依存しない大域的な量であることの表れである.

トポロジーが整数量子ホール効果のみに出てくる概念ではないのは明白である. なぜならば、トポロジーの本質は連続変形の下での移り変わりであるからである. 今パラメータに依存したバンドギャップがある Hamiltonian を考える. この場合、バンドギャップを閉じない Hamiltonian の連続変形が定義できる. バンドギャップを閉じない Hamiltonian の連続変形で2つの Hamiltonian がお互い移り合えたら、その2つの系はトポロジカルに等価であり、バンドギャップを閉じない Hamiltonian の連続変形ができない、つまり途中で gapless になり量子相転移を起こすような場合、2つの系はトポロジカルに異なると分類できる. この場合のトポロジカル不変量は存在するが、どんなトポロジカル不変量かは模型に依存する.

量子ホール効果の話に戻すと、Haldane により整数量子ホール効果は時間反転対称性の破れが本質であると突き止められた [5]. この当時、トポロジカルに非自明な模型は2次元で時間反転対称性が破れているものしかなかったので、トポロジカルに非自明な量子状態はこの2つの条件が必要であるという認識があった. しかし、2001年に Zhang と Hu が2次元の量子ホール効果を4次元に拡張した4次元量子ホール効果を提唱した [6, 7]. 4次元量子ホール効果は時間反転対称性を満たす模型でトポロジカルに非自明な量子状態を持つ. この時間反転対称性なトポロジカルに非自明な模型の構築に触発され、Murakami, Nagaosa, Zhang らは時間反転対称なスピン軌道相互作用を用いることにより、スピンホール絶縁体と呼ばれる2次元の時間反転対称性な新しいトポロジカルなクラスの模型を構築した [8, 9]. スピンホール絶縁体とは量子ホール効果に対応する散逸が無いスピン流が流れる絶縁体である. さらにこのスピンホール絶縁体の発見が Kane と Mele による量子スピンホール絶縁体、または2次元のトポロジカル絶縁体の発見の契機となった [10, 11]. この2次元のトポロジカル絶縁体の模型は Kane-Mele 模型と呼ばれ、グラフェンにスピン軌道相互作用を入れた形で定義される. Kane-Mele 模型はバルクではバンドギャップがあるが境界ではヘリカルなスピン流が流れ、時間反転対称性を満たす摂動の下で安定して存在する. Kane-Mele 模型は初めて提案された2次元トポロジカル絶縁体であるが、炭素原子核は正の電荷が小さい影響でスピン軌道相互作用が小さいから、実験的には実現されていない. しかし Kane と Mele の提案のすぐあと、Bernevig, Hughes, Zhang らによって提案された BHZ 模型は実験的に初めて2次元トポロジカル絶縁体であると確認された [12, 13]. その後、トポロジカル絶縁体は3次元に拡張されその特異な性質と、実験的にも多くの物質が見つかった影響でトポロジカル絶縁体の研究は爆発的に進展した^{*2}. この進展の背景には Fu, Kane, Mele によるトポロジカル不変量を計算するトポロジカルバンド理論 [15–17] の構築と、それを用いた具体的な物質の予言がある [17].

トポロジカル絶縁体の基礎理論が完成した後すぐ、2008年に Qi, Hughes, Zhang らはトポロジカル絶縁体の電磁応答を記述する有効場理論としてのトポロジカル場の理論を構築した [18]. この論文によれば、3次元トポロジカル絶縁体の有効場理論は4次元量子ホール効果を記述する有効理論である (4+1)-d Chern-Simons gauge 理論の空間次元を1つ落とすことにより得られ、この作用から得られる3次元トポロジカル絶縁体中を記述する拡張された Maxwell 方程式は **Axion 電磁気学**と呼ばれる [19]. 3次元トポ

^{*2}2013年までに発見されたトポロジカル絶縁体の物質一覧については review 論文 [14] を参照.

ロジカル絶縁体の Axion 電磁気学は半整数量子ホール効果, トポロジカル電気磁気効果, 磁気モノポール虚像, Witten 効果などの非自明な電磁応答を記述し, トポロジカルバンド理論で定義したトポロジカル不変量が応答係数としてそれらの現象に現れる.

Axion とは 1970 年代に量子色力学での強い CP 問題を解決するために導入された粒子である [20–23]. 現在では Axion はダークマターの候補物質であるがその存在は観測されていない [24–26]. Axion は Axion 場 $\theta(t, \mathbf{x})$ で記述され, 光子と結合することで Maxwell 方程式が修正される. この Maxwell 方程式で記述される電磁気学を Axion 電磁気学と呼ぶ. 3 次元トポロジカル絶縁体中の電磁気学は Axion 電磁気学を実現するが, 実は他にも Axion 電磁気学を実現する物質系は存在する. その有名な例として Weyl 半金属がある [27, 28]. Weyl 半金属とはバンドが波数空間のある点で gapless で, その点付近での電子の方程式が Weyl 方程式となる物質である. Weyl 半金属中の Axion 電磁気学は chiral gauge 場の影響で 3 次元トポロジカル絶縁体に見られない現象が予言される [29, 30]. 物質系での Axion 電磁気学の構築は, 高エネルギー物理学で観測されていない粒子を代わりに物質系でシミュレートすることに対応するから, これ以外にもいくつかの模型が提案されている [31].

1.2 Summary

本論文は, 3 次元トポロジカル絶縁体の電磁応答を記述する有効場の理論を導出し, そのトポロジカルな電磁応答について議論し, さらに物質中で Axion 電磁気学を実現する模型についても議論する. 本論文の構成は以下である. Chapter 2 ではトポロジカル絶縁体を現代的に導入するためにトポロジカル絶縁体・超伝導体の分類である相互作用が無い fermion 系のトポロジカル相の分類について議論する. 3 つの離散対称性の時間反転対称性と粒子正孔対称性と chiral 対称性を使って, それぞれのクラス・次元ごとにトポロジカルに非自明な状態があるかないか紹介する. Chapter 3 では Chapter 2 で明らかになった分類を基にしてその具体例を 3 つ紹介する. 1 つ目は整数量子ホール効果の格子模型である Chern 絶縁体の例として Haldane 模型, 2 つ目は 2 次元トポロジカル絶縁体の具体例として Kane-Mele 模型, 3 つ目は 3 次元トポロジカル絶縁体の具体例として Fu-Kane-Mele 模型である. さらに後半にはトポロジカル絶縁体のトポロジカル不変量を計算するトポロジカルバンド理論を構築する. Chapter 4 は本論文の主要部分である. 4 次元量子ホール効果とそれを記述する場の理論を review した後, 次元縮小という方法を用いて 3 次元トポロジカル絶縁体の有効場理論を導出し, さらにトポロジカル不変量を与える. そしてそのトポロジカルな電磁応答である半整数量子ホール効果, トポロジカル電気磁気効果, 磁気モノポール虚像, Witten 効果を議論する. Chapter 5 は 3 次元トポロジカル絶縁体, 反強磁性トポロジカル絶縁体, Weyl 半金属を例にとって物質中での Axion 電磁気学について紹介する.

本論文で参考にした論文は適宜引用するが, 全体的に参考にした日本語の書籍はここで列挙する. まず物性物理の基礎的な話題については [32–34] を参考にした. トポロジカル絶縁体関連については [35–38] を参考にした. Dirac 場の理論については [39, 40] を参考にした. これらの高度な話題が母国語である日本語で読めるのは, 先人たちの努力の賜物である. ここで参考文献として挙げることでこれらの書籍に敬意を払いたい. また本論文の話題は, 日本語の文献として存在しないか, 存在したとしても異なる論理展開を用いている箇所が多々ある. 本論文が物理学を日本語に翻訳してきた先人たちの意思を少しでも継ぐことが出来れば, 著者としてこれほど嬉しいことはない.

Chapter 2

相互作用のない fermion 系のトポロジカル相の分類

Landau の自発的対称性の破れの理論の成功の後、物理学者は相は全て自発的対称性の破れで特徴づけられると思うようになった [1]. しかし整数量子ホール効果の登場を発端として自発的対称性の破れで特徴づけられない相が登場した. トポロジカル相である. トポロジカル相とは Hamiltonian が局所的で、エネルギーギャップが存在し、自発的対称性の破れが無い相である. トポロジカル相は boson 系, fermion 系, スピン系でどのような性質があるか、どのような分類ができるか活発に議論されている [1, 41]. 本章では相互作用が無い fermion 系のトポロジカル相の分類を議論する. 特に Altland – Zirnbauer クラスと呼ばれる時間反転対称性, 粒子正孔対称性, chiral 対称性を課した時に何個のクラスに分類されるのか、どのような非自明なトポロジが存在するのかに重点を置く. そして最後にある対称性のクラスに属するトポロジカルに非自明な模型を、本論文の中心的な話題であるトポロジカル絶縁体として導入する. 本書の離散対称性の議論は [42] を主に参考にし、後半の分類表では全体的に日本語の文献 [43] を参考にした.

2.1 離散対称性の演算子

$\hat{\psi}_I, \hat{\psi}_I^\dagger$ を fermion の生成消滅演算子とする. 添え字 $I, J, K, L \dots$ は 1 粒子状態を表し例えばサイトとスピン $I = (i, \sigma)$ を表したりする. $I = 1, 2, \dots, N$ とする. $\hat{\psi}_I, \hat{\psi}_I^\dagger$ は fermion の生成消滅演算子なので反交換関係

$$\{\hat{\psi}_I, \hat{\psi}_J\} = \{\hat{\psi}_I^\dagger, \hat{\psi}_J^\dagger\} = 0 \quad (2.1.1)$$

$$\{\hat{\psi}_I, \hat{\psi}_J^\dagger\} = \delta_{IJ} \quad (2.1.2)$$

を満たす. 相互作用がない fermion 系を考える. 第二量子化表示で Hamiltonian は

$$\hat{H} = \hat{\psi}_I^\dagger H^{IJ} \hat{\psi}_J = \hat{\psi}^\dagger H \hat{\psi} \quad (2.1.3)$$

と書くことが出来る. H^{IJ} は $N \times N$ の行列の (I, J) 成分で $\psi^\dagger = (\hat{\psi}_1^\dagger, \hat{\psi}_2^\dagger, \dots, \hat{\psi}_N^\dagger)$ である. Free fermion 系なので、Hamiltonian には 1 体の相互作用しかなく、生成演算子と消滅演算子が 1 回ずつペアで出てくる (2.1.3) のような形に限られる. 量子力学では Wigner の定理より、対称性変換を表す演算子は、線形かつユニタリか、反線形かつ反ユニタリなものに限られる. ここで対称性変換を fermion の生成消滅演算子の変換として導入すると便利である. ある対称性変換をして $\hat{\psi}_I \rightarrow \hat{\psi}'_I$ と変換したとしたとき、この対称性変換は線形変換として

$$\hat{\psi}_I \rightarrow \hat{\psi}'_I = \hat{U} \hat{\psi}_I \hat{U}^{-1} = U_I^J \hat{\psi}_J \quad (2.1.4)$$

$$\hat{\psi}_I^\dagger \rightarrow \hat{\psi}'^\dagger_I = \hat{U}' \hat{\psi}_I^\dagger \hat{U}'^{-1} = U'^J_I \hat{\psi}_J^\dagger \quad (2.1.5)$$

と変換すると定義する. $\hat{U}$ は対称性変換の演算子でユニタリ演算子もしくは反ユニタリ演算子で, U は行列である. 対称性変換の演算子の要請として, 対称性変換の前後で fermion の反交換関係は不変になるべきなので,

$$\{\hat{\psi}'_I, \hat{\psi}'_J\} = \{\hat{U}\hat{\psi}_I\hat{U}^{-1}, \hat{U}\hat{\psi}_J\hat{U}^{-1}\} = \delta_{IJ} \quad (2.1.6)$$

$$\{\hat{\psi}'_I, \hat{\psi}'^\dagger_J\} = \{U_I^K \hat{\psi}_K, U'^L_J \hat{\psi}^\dagger_L\} = U_I^K U'^L_J \{\hat{\psi}_K, \hat{\psi}^\dagger_L\} = U_I^K U'^L_J \delta_{KL} = \delta_{IJ} \quad (2.1.7)$$

を満たす必要がある. これを満たすためには, $\hat{U} = \hat{U}'$ かつ $U_I^K U'^L_J = \delta_{IJ}$ が必要である. $\hat{U} = \hat{U}'$ かつ $\hat{U}$ はユニタリまたは反ユニタリ演算子なので, 生成演算子の対称性変換は, 消滅演算子の対称性変換にエルミート共役を取ったものになる.

$$\hat{\psi}^\dagger_I \rightarrow \hat{\psi}^{\dagger'}_I = (\hat{U}\hat{\psi}_I\hat{U}^{-1})^\dagger = U_I^{*J} \hat{\psi}^\dagger_J \quad (2.1.8)$$

また $U'^J_I = U^{*J}_I$ かつ, $U_I^K U'^L_J = \delta_{IJ}$ より, 行列 U は $UU^\dagger = \hat{1}$ を満たすユニタリ行列であることが導出できる. 以上より, 量子力学の対称性変換はユニタリ演算子または反ユニタリ演算子 $\hat{U}$ で表され, その表現行列はユニタリ行列 U となる:

$$\hat{\psi}_I \rightarrow \hat{\psi}'_I = \hat{U}\hat{\psi}_I\hat{U}^{-1} = U_I^J \hat{\psi}_J \quad (2.1.9)$$

$$\hat{\psi}^\dagger_I \rightarrow \hat{\psi}^{\dagger'}_I = \hat{U}\hat{\psi}^\dagger_I\hat{U}^{-1} = U_I^{*J} \hat{\psi}^\dagger_J. \quad (2.1.10)$$

次に, 対称性変換の下で系が不変であるとは, Hamiltonian と対称性変換の演算子 $\hat{U}$ が可換であると定義する.

$$[\hat{H}, \hat{U}] = 0 \longrightarrow \hat{U}\hat{H}\hat{U}^{-1} = \hat{H}. \quad (2.1.11)$$

$\hat{U}$ がユニタリ演算子のとき, 式 (2.1.3), (2.1.9), (2.1.10) を使うと,

$$\begin{aligned} \hat{U}\hat{H}\hat{U}^{-1} &= \hat{U}\hat{\psi}^\dagger_I H^{IJ} \hat{\psi}_J \hat{U}^{-1} = \hat{U}\hat{\psi}^\dagger_I \hat{U}^{-1} H^{IJ} \hat{U}\hat{\psi}_J \hat{U}^{-1} \\ &= \hat{\psi}^\dagger_K U_I^{*K} H^{IJ} U_J^L \hat{\psi}_L \end{aligned} \quad (2.1.12)$$

$$(2.1.13)$$

と変換する. 途中で $\hat{U}$ の線形性を使った. $\hat{U}\hat{H}\hat{U}^{-1} = \hat{H}$ を満たすためには

$$U_I^{*K} H^{IJ} U_J^L = H^{KL} \longleftrightarrow U^\dagger H U = H \quad (2.1.14)$$

を満たす必要がある. これは系が対称であるという条件を 1 粒子 Hamiltonian に対する条件として言い換えたものである.

次に $\hat{U}$ が反ユニタリ演算子のとき, 反線形性 $\hat{U}c = c^*\hat{U}$ に注意すると, 同様の計算で, 1 粒子 Hamiltonian に対する対称性の条件

$$U_I^{*K} H^{*IJ} U_J^L = H^{KL} \longleftrightarrow U^\dagger H^* U = H \quad (2.1.15)$$

が導出できる.

2.1.1 時間反転対称性

対称性変換として時間反転対称性 (TRS) を考える. 時間反転演算子 $\hat{T}$ は反ユニタリ演算子で,

$$\hat{T}\hat{\psi}_I\hat{T}^{-1} = [U_T]_I^J \hat{\psi}_J, \quad \hat{T}\hat{\psi}^\dagger_I\hat{T}^{-1} = [U_T^*]_I^J \hat{\psi}^\dagger_J, \quad \hat{T}c\hat{T}^{-1} = c^* \quad (2.1.16)$$

を満たすものと定義する. c は複素数である. fermion の反交換関係を満たすべきという要請から表現行列 U_T はユニタリ行列である. 1 粒子 Hamiltonian に対する条件で言い換えたら, $\hat{T}$ は反ユニタリ演算子であることに注意して,

$$\hat{T} : U_T^\dagger H^* U_T = H \quad (2.1.17)$$

となる. 演算子 $\hat{O}$ を Heisenberg 表示したら, $\hat{O}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{O}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ となる. $\hat{O}$ が $\hat{T}$ の下で不変のとき,

$$\hat{T}\hat{O}(t)\hat{T}^{-1} = \hat{T}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{O}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{T}^{-1} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{O}e^{+\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \hat{O}(-t) \quad (2.1.18)$$

より, 時間が反転している. これは時間反転演算子の反ユニタリ性により虚数単位の符号が変わるためである. これが $\hat{T}$ が反ユニタリ演算子である理由である.

ここで, 1 粒子 Hamiltonian の TRS の条件 (C.2.1d) を 2 回使うと,

$$(U_T^* U_T)^\dagger H (U_T^* U_T) = U_T^\dagger U_T^{\dagger\dagger} H U_T^* U_T = U_T^\dagger H^* U_T = H \quad (2.1.19)$$

より $[H, U_T^* U_T] = 0$ が成立する. 2 つの演算子が交換するなら同時固有状態が取れるので, $U_T^* U_T$ を対角化する基底を使うと, Hamiltonian はブロック対角化される. 各部分空間上で行列 $U_T^* U_T$ は対角成分のみで全て同じ値だから定数のように振舞う. よって $U_T^* U_T = e^{i\alpha}\hat{1}$ と書くことが出来る. 右から $U_T^\dagger$ を作用させて, 両辺エルミート共役を取ると, $U_T^T = e^{i\alpha}U_T$ となる.

$$(U_T^T)^T = U_T = (e^{i\alpha}U_T)^T = e^{2i\alpha}U_T \quad (2.1.20)$$

が成立するから, $e^{2i\alpha} = 1$ より, $U_T^* U_T = e^{i\alpha} = \pm 1$ となる. これを用いて fermion の演算子に時間反転演算子を 2 回作用させると,

$$\hat{T}^2 \hat{\psi}_I \hat{T}^{-2} = \hat{T} [U_T]_I^J \hat{\psi}_J \hat{T}^{-1} = [U_T^*]_I^J [U_T]_J^K \hat{\psi}_K = \pm \hat{\psi}_I \quad (2.1.21)$$

を得る. 2 回時間反転をした結果符号が元に戻るものと, 符号が反転するものが存在する. これは時間反転演算子には $+1$ のクラスと -1 のクラスがあることを意味する. また n 個の fermion から構成されている演算子 $\hat{O}$ に対して,

$$\hat{T}^2 \hat{O} \hat{T}^{-2} = (\pm 1)^n \hat{O} \quad (2.1.22)$$

を示すことが出来る. まとめると, 時間反転演算子は

$$\hat{T}^2 = (\pm 1)^{\hat{N}}, \quad \text{where } U_T^* U_T = \pm \hat{1} \quad (2.1.23)$$

を満たす. ここで $\hat{N} = \sum_I \hat{\psi}_I^\dagger \hat{\psi}_I$ で粒子数演算子である. $U_T^* U_T = -\hat{1}$ を満たす場合には $\hat{T}$ により fermion parity を定義でき,

$$\hat{G}_f \equiv \hat{T}^2 = (\pm 1)^{\hat{N}} \quad (2.1.24)$$

である. Fermion parity が奇 $\hat{G}_f = -1$ の系では TRS は Kramers の定理を導く.

2.1.2 粒子正孔対称性

粒子正孔対称性 (PHS) の演算子 $\hat{C}$ は fermion の生成演算子と消滅演算子を混ぜるユニタリ変換

$$\hat{C} \hat{\psi}_I \hat{C} = [U_C^*]_I^J \hat{\psi}_J^\dagger, \quad \hat{C} \hat{\psi}_I^\dagger \hat{C} = [U_C]_I^J \hat{\psi}_J \quad (2.1.25)$$

と定義される。\$\hat{C}\$ は荷電共役とも呼ばれている。粒子正孔変換とは定義より、消滅演算子が生成演算子になっているから、粒子を反粒子に変換する対称性変換である。Fermion の反交換関係が不変だと要請すると、行列 \$U_C\$ はユニタリ行列であることが分かり、Hamiltonian が \$\hat{C}\$ 変換で不変であるという条件は、

$$\begin{aligned}\hat{C}\hat{H}\hat{C}^{-1} &= \hat{C}\hat{\psi}_I^\dagger H^{IJ}\hat{\psi}_J\hat{C}^{-1} = \hat{C}\hat{\psi}_I^\dagger\hat{C}^{-1}H^{IJ}\hat{C}\hat{\psi}_J\hat{C}^{-1} \\ &= [U_C]_I^K\hat{\psi}_K H^{IJ}[U_C^*]_J^L\hat{\psi}_L^\dagger = [U_C]_I^K H^{IJ}[U_C^*]_J^L \left(-\hat{\psi}_L^\dagger\hat{\psi}_K + \delta_{KL}\right) \\ &= -\hat{\psi}^\dagger \left(U_C^\dagger H^T U_C\right)\hat{\psi} + \text{Tr} \left[U_C^\dagger H^T U_C\right]\end{aligned}\tag{2.1.26}$$

より、1 粒子 Hamiltonian の条件として

$$\hat{C} : U_C^\dagger H^T U_C = -H \tag{2.1.27}$$

を得る。\$U_C^\dagger H^T U_C = -H\$ という条件は \$\text{Tr} [H] = 0\$ も満たすので、確かに Hamiltonian は粒子正孔変換の下で不変になっている。ここで 1 粒子 Hamiltonian の PHS の条件 (2.1.27) を 2 回使うと、

$$(U_C^* U_C)^\dagger H (U_C^* U_C) = U_C^\dagger U_C^* H U_C^* U_C = -U_C^\dagger H^* U_C = H \tag{2.1.28}$$

となり不変である。TRS のときと同じ議論を用いると、\$U_C^* U_C = \pm \hat{1}\$ となる。これを用いて \$\hat{C}\$ を 2 回 \$\hat{\psi}_I\$ に作用させると

$$\hat{C}^2 \hat{\psi}_I \hat{C}^{-2} = \hat{C} [U_C^*]_I^J \hat{\psi}_J^\dagger \hat{C}^{-1} = [U_C^*]_I^J [U_C]_J^K \hat{\psi}_K = \pm \hat{\psi}_I \tag{2.1.29}$$

を得る。つまり粒子正孔対称性は +1 のクラスと -1 のクラスが存在することを意味する。時間反転の所で議論した、\$n\$ 個の fermion 系の演算子に \$\hat{C}^2\$ を作用させたことと同様にして、

$$\hat{C}^2 = (\pm 1)^{\hat{N}}, \quad \text{where } U_C^* U_C = \pm 1 \tag{2.1.30}$$

を満たす。今 1 粒子 Hamiltonian が固有方程式

$$H |u^A\rangle = \epsilon^A |u^A\rangle \tag{2.1.31}$$

を満たすとする。\$A\$ は異なる固有値を区別するための添え字である。全体を複素共役を取り、左から \$U_C^\dagger\$ を作用させると、

$$U_C^\dagger H^T U_C U_C^\dagger |u^{A*}\rangle = -H U_C^\dagger |u^{A*}\rangle = \epsilon^A U_C^\dagger |u^{A*}\rangle \tag{2.1.32}$$

より、\$H(U_C^\dagger |u^{A*}\rangle) = -\epsilon^A (U_C^\dagger |u^{A*}\rangle)\$ が成り立つ。これは粒子正孔対称性があるとき、\$\epsilon^A, |u^A\rangle\$ が系の固有値、固有状態ならば \$-\epsilon^A, U_C^\dagger |u^{A*}\rangle\$ も系の固有状態である。つまり PHS な系ではエネルギーが正負ペアで出てくる。

2.1.3 Chiral 対称性

Chiral 変換は時間反転と粒子正孔変換を合わせた変換である^{*1}。TRS と PHS がある系は chiral 対称性を持つが、時間反転と粒子正孔変換の対称性がどちらも無くても chiral 対称性を持つことが出来る。Chiral 変換の演算子は

$$\hat{S} = \hat{T} \cdot \hat{C} \tag{2.1.33}$$

と書くことができ、fermion の演算子には

$$\hat{S}\hat{\psi}_I\hat{S}^{-1} = [U_C]_I^J[U_T]_J^K\hat{\psi}_K^\dagger \tag{2.1.34}$$

^{*1}場の量子論で出てくる chiral 対称性、つまり異なる chirality を持つ粒子に対して異なる位相変換をする変換とは異なる。なぜ同じ言葉を用いているのかは不明である。ここで議論する chiral 変換とは sublattice 変換と呼ぶこともある。

として作用する. これを参考にして, fermion の生成消滅演算子に作用する chiral 変換を

$$\hat{S}\hat{\psi}_I\hat{S}^{-1}=[U_S^*]_I^J\hat{\psi}_J^\dagger, \quad \hat{S}\hat{\psi}_I^\dagger\hat{S}^{-1}=[U_S]_I^J\hat{\psi}_J, \quad \hat{S}c\hat{S}^{-1}=c^* \quad (2.1.35)$$

と定義する. Hamiltonian が chiral 対称性であるという条件は,

$$\begin{aligned} \hat{S}\hat{H}\hat{S}^{-1} &= \hat{S}\hat{\psi}_I^\dagger\hat{S}^{-1}H^{*IJ}\hat{S}\hat{\psi}_J\hat{S}^{-1} = [U_S]_I^K\hat{\psi}_K H^{*IJ}[U_S^*]_J^L\hat{\psi}_L^\dagger \\ &= [U_S]_I^K H^{*IJ}[U_S^*]_J^L \left(-\hat{\psi}_L^\dagger\hat{\psi}_K + \delta_{KL} \right) \\ &= -\hat{\psi}^\dagger U_S^\dagger H^\dagger U_S \hat{\psi} + \text{Tr} \left[U_S^\dagger H^\dagger U_S \right] \end{aligned} \quad (2.1.36)$$

より, 1 粒子 Hamiltonian を用いた形で

$$\hat{S}: U_S^\dagger H U_S = -H, \quad U_S^2 = 1 \quad (2.1.37)$$

と書ける. 第 2 式はこのように導かれる: $(U_S^2)^\dagger H (U_S^2) = H$ より, TRS と PHS と同じ議論を適用して $U_S^2 = e^{i\alpha}$ となるが, $U_S \rightarrow e^{i\alpha/2} U_S$ という変換をしてあげれば $U_S^2 = 1$ を得る.

2.1.4 空間対称性

Section 2.1.5 で議論する最も基本的なトポロジカル絶縁体・超伝導体の分類では TRS, PHS, chiral 対称性を用いるが, ここでは追加で空間対称性がある場合の 1 粒子 Hamiltonian の変換則を議論する. ここでの議論は Section 3.4.4 の空間反転対称性がある場合のトポロジカル絶縁体の $\mathbb{Z}_2$ 不変量の導出で使う.

空間や結晶の対称性は, 例えば反転, 鏡映, 回転などがあり, 空間群 G により記述される. 結晶は離散的な並進対称性があるが, 並進対称性を満たすことが出来る回転は 1, 2, 3, 4, 6 回対称しかないことが知られている. 空間群 G は位置 $\mathbf{r}$ にある単位胞中の m 番目のサイトから位置 $u_G \mathbf{r} + \mathbf{R}_m$ にある単位胞中の m' 番目のサイトへ写す写像である. ここで u_G は $d \times d$ の直交行列で (d は空間の次元), $\mathbf{R}_m$ は格子ベクトルである. 空間群 G に対応して, fermion の生成演算子は G に対応するユニタリ演算子 $\hat{\mathcal{G}}$ を用いて

$$\hat{\mathcal{G}}\hat{\psi}_I(\mathbf{r})\hat{\mathcal{G}}^{-1}=[U_G]_I^J\hat{\psi}_J(u_G\mathbf{r}+\mathbf{R}_I) \quad (2.1.38)$$

と変換すると定義する. I, J は単位胞内のサイトやスピンなどの内部自由度を表す添え字で, U_G は 1 粒子 Hamiltonian に作用するユニタリ行列である. 波数空間上での生成演算子 $\hat{\psi}_I(\mathbf{k})$ の変換則は

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{G}}\hat{\psi}_I(\mathbf{r})\hat{\mathcal{G}}^{-1} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{\mathcal{G}}\hat{\psi}_I(\mathbf{k})\hat{\mathcal{G}}^{-1} \\ &= [U_G]_I^J \hat{\psi}_J(u_G\mathbf{r}+\mathbf{R}_I) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(u_G\mathbf{r}+\mathbf{R}_I)} [U_G]_I^J \hat{\psi}_J(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (2.1.39)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} e^{i[u_G\mathbf{k}']\cdot\mathbf{R}_I} [U_G]_I^J \hat{\psi}_J(u_G\mathbf{k}') \quad (2.1.40)$$

となるので ($\mathbf{k} = u_G\mathbf{k}'$ を用いた), $[U_G(u_G\mathbf{k})]_I^J \equiv [U_G]_I^J e^{i[u_G\mathbf{k}']\cdot\mathbf{R}_I}$ と定義して,

$$\hat{\mathcal{G}}\hat{\psi}_I(\mathbf{k})\hat{\mathcal{G}}^{-1}=[U_G(u_G\mathbf{k})]_I^J\hat{\psi}_J(u_G\mathbf{k}) \quad (2.1.41)$$

となる. これを用いると, free fermion 系 $\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\psi}_I^\dagger(\mathbf{k}) H^{IJ}(\mathbf{k}) \hat{\psi}_J(\mathbf{k})$ が空間群 G に対応する変換で不変であるとき, つまり $[\hat{H}, \hat{\mathcal{G}}] = 0$ のとき,

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{G}}\hat{H}\hat{\mathcal{G}}^{-1} &= \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mathcal{G}}\hat{\psi}_I^\dagger(\mathbf{k})\hat{\mathcal{G}}^{-1} H^{IJ}(\mathbf{k}) \hat{\mathcal{G}}\hat{\psi}_J(\mathbf{k})\hat{\mathcal{G}}^{-1} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \hat{\psi}_K^\dagger(u_G\mathbf{k}) [U_G^*(u_G\mathbf{k})]_I^K H^{IJ}(\mathbf{k}) [U_G(u_G\mathbf{k})]_J^L \hat{\psi}_L(u_G\mathbf{k}) \\ &= \hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\psi}_I^\dagger(\mathbf{k}) H^{IJ}(\mathbf{k}) \hat{\psi}_J(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (2.1.42)$$

であるから, 1 粒子 Hamiltonian $H^{IJ}(\mathbf{k})$ は

$$U_G^{-1}(\mathbf{k})H(u_G^{-1}\mathbf{k})U_G(\mathbf{k}) = H(\mathbf{k}) \quad (2.1.43)$$

と変換する. 変換 G の下で不変な波数を $\mathbf{k}_0$ とすると, $[H(\mathbf{k}_0), U_G(\mathbf{k}_0)] = 0$ より, $U_G(\mathbf{k}_0)$ は Hamiltonian を対角化する基底で部分対角化できるから, それぞれの固有空間上でトポロジカル不変量を定義することが出来る.

空間対称性の例として空間反転を考える. 空間反転は $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ と変換するので, $\text{diag } u_G = (-1, -1, \dots, -1)$ となる. つまり $u_G\mathbf{k} = -\mathbf{k}$ となる. 空間反転の場合, $U_G(\mathbf{k}) = P$ と書けば, 系が空間反転対称性を持つとき, 1 粒子 Hamiltonian は

$$P^{-1}H(-\mathbf{k})P = H(\mathbf{k}) \quad (2.1.44)$$

と変換する.

2.1.5 10 通りの分類

前節までで, 時間反転, 粒子正孔変換, chiral 変換の 3 つの離散変換を多体 Hamiltonian に作用させたとき 1 粒子 Hamiltonian がどのように変化するか議論した. c 数のみに作用して複素共役にする複素共役演算子 K を導入すると, 3 つの離散対称性は 1 粒子 Hamiltonian を用いた表式で

$$T^{-1}HT = H, \quad T = U_T K, \quad T^2 = U_T U_T^* = \pm 1 \quad (2.1.45)$$

$$C^{-1}HC = -H, \quad C = U_C K, \quad C^2 = U_C U_C^* = \pm 1 \quad (2.1.46)$$

$$S^{-1}HS = -H, \quad S = U_S, \quad S^2 = U_S^2 = 1 \quad (2.1.47)$$

と表せる. 多体 Hamiltonian $\hat{H}$ に作用する多体の離散対称性演算子 $\hat{T}, \hat{C}, \hat{S}$ の議論が, 1 粒子 Hamiltonian H に作用する 1 粒子の離散対称性演算子 T, C, S の議論に簡略化された.

Free fermion 系のトポロジカル相の分類は必ずしも並進対称性を必要としないが, ここでは系が並進対称であると仮定して議論する. 並進対称性がある場合, free fermion 系の多体 Hamiltonian は (2.1.3) より,

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \hat{\psi}_I^\dagger(\mathbf{r}) H^{IJ}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}_J(\mathbf{r}') \quad (2.1.48)$$

と書くことが出来る. 添え字 I, J は位置以外のスピンや軌道の自由度である. 生成消滅演算子と 1 粒子 Hamiltonian の Fourier 変換

$$\hat{\psi}_I(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\psi}_I(\mathbf{k}) \quad (2.1.49)$$

$$H^{IJ}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} H^{IJ}(\mathbf{k}) \quad (2.1.50)$$

を用いて (V は体積), 波数により Hamiltonian を部分対角化すると,

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \hat{\psi}_I^\dagger(\mathbf{k}) H^{IJ}(\mathbf{k}) \hat{\psi}_J(\mathbf{k}) \quad (2.1.51)$$

を得る. 多体 Hamiltonian が TRS, PHS, chiral 対称性を持つ場合, 波数空間での 1 粒子 Hamiltonian は

$$T^{-1}H(\mathbf{k})T = H(-\mathbf{k}), \quad C^{-1}H(\mathbf{k})C = -H(-\mathbf{k}), \quad S^{-1}H(\mathbf{k})S = -H(\mathbf{k}) \quad (2.1.52)$$

のように変換する. 式 (2.1.52) のように変換する行列は 10 個のクラスに分類できる. まず T について, TRS がないことを $T = 0$ と表すと, T には $0, +1, -1$ の 3 つのクラスが存在する. 同様に C についても $0, +1, -1$ の 3 つのクラスが存在する. この時点で $3 \times 3 = 9$ 個の対称性のクラスが存在する. S については T と C が満たされれば自動的に満たされるが, T と C が存在しなくても S は存在できる. つまり対称性のクラスは $3 \times 3 + 1 = 10$ 個存在することになる. 図 2.1.1 は 10 個の Hamiltonian のクラスの一覧表である. それぞれのクラスは A, AI など名前が付いている. この名前は時間発展演算子 $e^{-iHt/\hbar}$ と同型な対称空間の分類に由来する.

Cartan label	T	C	S	Hamiltonian	G/H (ferm. NL σ M)
A (unitary)	0	0	0	$U(N)$	$U(2n)/U(n) \times U(n)$
AI (orthogonal)	+1	0	0	$U(N)/O(N)$	$Sp(2n)/Sp(n) \times Sp(n)$
AII (symplectic)	-1	0	0	$U(2N)/Sp(2N)$	$O(2n)/O(n) \times O(n)$
AIII (ch. unit.)	0	0	1	$U(N+M)/U(N) \times U(M)$	$U(n)$
BDI (ch. orth.)	+1	+1	1	$O(N+M)/O(N) \times O(M)$	$U(2n)/Sp(2n)$
CII (ch. sympl.)	-1	-1	1	$Sp(N+M)/Sp(N) \times Sp(M)$	$U(2n)/O(2n)$
D (BdG)	0	+1	0	$SO(2N)$	$O(2n)$
C (BdG)	0	-1	0	$Sp(2N)$	$Sp(2n)/U(n)$
DIII (BdG)	-1	+1	1	$SO(2N)/U(N)$	$O(2n)$
CI (BdG)	+1	-1	1	$Sp(2N)/U(N)$	$Sp(2n)$

Table 2.1.1: 時間反転, 粒子正孔変換, chiral 変換の下での 1 粒子 Hamiltonian の分類. 0, +1, -1 という記号によって対称性が存在するか, 存在したらどのような対称性かを表している. Hamiltonian の列は時間発展演算子 $e^{-iHt/\hbar}$ が属する対称空間である. G/H という列は非線形シグマ模型の標的空間である.

2.2 トポロジカル絶縁体・超伝導体の分類

時間反転対称性, 粒子正孔対称性, chiral 対称性を用いると Hamiltonian は 10 個のクラスに分類できるということを見た. このクラスそして与えられた空間次元においてトポロジカルに非自明な模型, つまりトポロジカル絶縁体・超伝導体が存在するか, そして存在した時トポロジカル数はどのようなものかについて書かれた一覧表が表 2.2.1 である. このトポロジカル周期表の見方および特徴をまとめる.

- クラス A, AIII は複素クラスと呼ばれ, その他の 8 個は実クラスと呼ばれる. これは A, AIII に含まれる Hamiltonian で実のものが存在しないことに由来する.
- 0 と表記してある場所はそのクラス・次元にトポロジカルに非自明な状態が存在しないことを表しており, それ以外の場所はそのクラス・次元にトポロジカルに非自明な状態が存在することを表している. $\mathbb{Z}, 2\mathbb{Z}, \mathbb{Z}_2$ はその場合のトポロジカル数である.
- 複素クラスはトポロジカル数の周期が 2 である. 一方実クラスの場合はトポロジカル数の周期が 8 である. 表 2.2.1 は $d = 0$ から $d = 7$ までしか書いてないが, この周期性のためこれだけで十分である.
- 表 2.2.1 の実クラスを見ると, 左上から右下にトポロジカル数が移動しているように見える. また $\mathbb{Z}$ から同じクラスの 1 次元低い場所に $\mathbb{Z}_2$ が存在しさらに同じクラスの 1 次元低い場所にも $\mathbb{Z}_2$ が存在する. これらをそれぞれ第一 descendent, 第二 descendent と呼ぶ.

Free fermion 系のトポロジカル相の分類 2.2.1 の導出法としては

- 境界の非線形シグマ模型の分類 [44, 45]
- K 理論を用いた分類 [46]
- Dirac Hamiltonian の分類 [47]
- Anomaly の分類 [48]

がある. 境界の非線形シグマ模型の分類とはトポロジカルに非自明な模型はバルク境界対応があるから, 境界の電子が Anderson 局在しない条件を求めることによって, 分類 2.2.1 を導出する. この方法は系の並進対称性は仮定しない. Dirac Hamiltonian の分類とは系に並進対称性があると仮定して, 1 粒子 Hamiltonian $H(\mathbf{k})$ を Dirac Hamiltonian の形に書き, 次元縮小を用いて分類する.

Symmetry class	T	C	S	$d = 0$	1	2	3	4	5	6	7
Complex case:											
A	0	0	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0
AIII	0	0	1	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$
Real case:											
AI	1	0	0	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$
BDI	1	1	1	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$
D	0	1	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$2\mathbb{Z}$	0
DIII	-1	1	1	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$2\mathbb{Z}$
AII	-1	0	0	$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0
CII	-1	-1	1	0	$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0
C	0	-1	0	0	0	$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0
CI	1	-1	1	0	0	0	$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$

Table 2.2.1: Free fermion 系でのトポロジカル絶縁体・超伝導体の分類. 0 はその場所にトポロジカルに非自明な状態が存在しないことを表し, $\mathbb{Z}, 2\mathbb{Z}, \mathbb{Z}_2$ はその場所にトポロジカルに非自明な状態が存在することを表しており, 記号はトポロジカル数に対応する.

Chapter 3

トポロジカルに非自明な模型

Chapter 2 で相互作用が無い fermion 系のトポロジカル相の分類という立場からトポロジカル絶縁体を導入した。本章ではその具体的な模型を議論する。まず整数量子ホール効果の格子模型として Chern 絶縁体, 特に Haldane 模型 [5] を考える。Chern 絶縁体は電場を印加した時, Hall 伝導度が量子化することを示す。次に 2 次元トポロジカル絶縁体として最初に理論的に提案された Kane-Mele 模型を考える。Kane-Mele 模型は量子スピンホール絶縁体とも呼ばれるが, スピンが保存されない場合も考えて 2 次元トポロジカル絶縁体と呼ぶことにする^{*1}。Kane-Mele 模型はバルクではギャップがあるが, エッジには gapless な状態があることを示す。次に 3 次元トポロジカル絶縁体である Fu-Kane-Mele 模型を導入し, 同様のことを示す。そして最後にトポロジカルバンド理論と呼ばれるバンド絶縁体がトポロジカルに非自明か自明なものかの指針を与える理論を導入する。本章は全体としてトポロジカル絶縁体の有名な review 論文 [49, 50] を参考にしている。

3.1 Haldane 模型

$d = 2$ の class A の模型の例として, Haldane 模型 [5] を考える。Haldane 模型は量子ホール効果を実現する格子模型 (Chern 絶縁体) であり, それまでは Hall 伝導度が量子化するためには磁場が必要だと考えられてきたが, Haldane は時間反転対称性の破れが Hall 伝導度の量子化に必要であることを明らかにした。Haldane 模型は蜂の巣格子上に定義された模型であるが, 通常のグラフェンの模型とは異なり, 複素数の次近接 hopping が入っている。この複素数の次近接 hopping は単位格子に入る磁束は 0, つまり正味の磁場は 0 だが, 局所的に磁場を入れていることに相当し時間反転対称性を破る。

考える蜂の巣格子模型は, A 副格子, B 副格子が存在する。蜂の巣格子の格子定数を a として, 基本並進ベクトルは

$$\mathbf{a}_1 = a \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = a \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} \quad (3.1.1)$$

であり, 副格子ベクトルは

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \frac{a}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\delta}_2 = \frac{a}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\delta}_3 = \frac{a}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad (3.1.2)$$

である。A 副格子は Bravais 格子ベクトル $\mathbf{R}_{n_1, n_2} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2$ で指定され, B 副格子は $\mathbf{R}_{n_1, n_2} + \boldsymbol{\delta}_i$ で指定される。基本並進ベクトルから基本逆格子ベクトルが定義でき,

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \quad (3.1.3)$$

^{*1}トポロジカル絶縁体という単語の明確な定義は存在しないようである。最も狭義の意味としては時間反転対称性を満たす class AII の $d = 2, 3$ のモデルである。本論文ではトポロジカル絶縁体と使うとき, この狭義の意味で使う。時間反転対称性を強調したいとき, 時間反転対称なトポロジカル絶縁体と呼ぶときもある。広義の意味としては周期表 2.2.1 に書いてあるトポロジカルに非自明な絶縁体のことを総じてトポロジカル絶縁体と呼ぶ。

となる．図 3.1.2 は蜂の巣格子の Brillouin Zone である．

Haldane 模型の Hamiltonian は電子の生成消滅演算子 $c_i^\dagger, c_i$ を用いて，

$$\hat{H} = t_1 \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j + t_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} e^{i\nu_{ij}\phi} c_i^\dagger c_j + M \sum_i \xi_i c_i^\dagger c_i \quad (3.1.4)$$

である．図 3.1.1 に Haldane 模型の実空間での様子を描いた．第 1 項は通常の最近接 hopping 項で，最近接 hopping が作る閉回路は単位格子（の整数倍）になるので，磁束の影響を受けない．第 2 項は次近接 hopping で局所磁場の効果を表す位相 $e^{i\nu_{ij}\phi}$ が入っており，時間反転対称性を破る． ν_{ij} は $i \rightarrow j$ の経路が反時計回りなら $+1$ で時計回りなら -1 である．量子力学では磁場は位相として感じ， $i \rightarrow j$ の hopping に関しては A をベクトルポテンシャルとして $\exp\left[ie/\hbar \int_i^j \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}\right]$ として感じる． ν_{ij} をこのように設定することにより，次近接 hopping が作る閉回路の中を貫く正味の磁束は 0 になる．しかし各 bond 上では局所的な磁場を感じている．第 3 項は on-site ポテンシャルで，副格子 A のとき $\xi = +1$ で B のとき $\xi = -1$ である．この項は空間反転対称性を破る^{*2}．

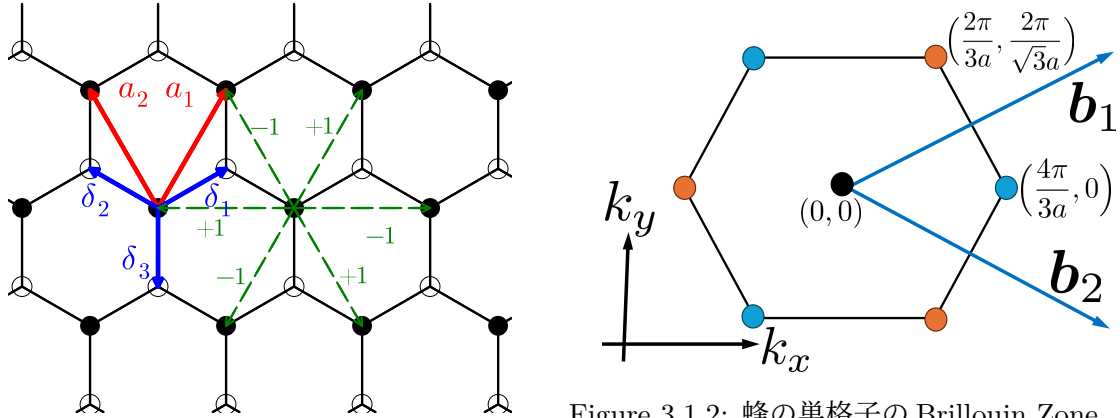


Figure 3.1.1: 蜂の巣格子． ν_{ij} は図の緑色のようにになっている．

Figure 3.1.2: 蜂の巣格子の Brillouin Zone. 波数空間の周期性より 3 つの青の点と 3 つの橙色の点はそれぞれ同じである．

3.1.1 バルクの状態

x, y 方向が周期境界条件の場合つまり Haldane 模型のバルクの状態を考える． N をサイト数として生成消滅演算子の Fourier 変換

$$c_{A,\mathbf{R}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} c_{A,\mathbf{k}} \quad (3.1.5)$$

$$c_{B,\mathbf{R}+\boldsymbol{\delta}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}+\boldsymbol{\delta})} c_{B,\mathbf{k}} \quad (3.1.6)$$

^{*2}今の議論では空間反転対称性に関係ないが，原論文 [5] に沿って議論しているため，第 3 項を入れた．

を用いて、波数により Hamiltonian (3.1.4) を部分対角化する.

$$t_1 \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j = t_1 \sum_{i=1,2,3} \sum_{\mathbf{k}} \left(e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_i} c_{A,\mathbf{k}}^\dagger c_{B,\mathbf{k}} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_i} c_{B,\mathbf{k}}^\dagger c_{A,\mathbf{k}} \right) \quad (3.1.7)$$

$$\begin{aligned} t_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} e^{i\nu_{ij}\phi} c_i^\dagger c_j &= 2t_2 \sum_{\mathbf{k}} \left[\cos \phi \{ \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 + \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2 + \cos \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) \} \right. \\ &\quad \left. + \sin \phi \{ \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 - \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2 - \sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) \} \right] c_{A,\mathbf{k}}^\dagger c_{A,\mathbf{k}} \\ &\quad + 2t_2 \sum_{\mathbf{k}} [\phi \rightarrow -\phi] c_{B,\mathbf{k}}^\dagger c_{B,\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (3.1.8)$$

$$M \sum_i \xi_i c_i^\dagger c_i = M \sum_{\mathbf{k}} \left(c_{A,\mathbf{k}}^\dagger c_{A,\mathbf{k}} - c_{B,\mathbf{k}}^\dagger c_{B,\mathbf{k}} \right) \quad (3.1.9)$$

のように各項が変換されるので、Hamiltonian (3.1.4) は

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{A,\mathbf{k}}^\dagger & c_{B,\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} H(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} c_{A,\mathbf{k}} \\ c_{B,\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad (3.1.10)$$

$$H(\mathbf{k}) = \sum_{\mu=0}^3 R_\mu(\mathbf{k}) \tau^\mu \quad (3.1.11)$$

$$R_0(\mathbf{k}) = 2t_2 \cos \phi \{ \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 + \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2 + \cos \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) \} \quad (3.1.12)$$

$$R_1(\mathbf{k}) = t_1 \sum_{i=1,2,3} \cos \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_i \quad (3.1.13)$$

$$R_2(\mathbf{k}) = -t_1 \sum_{i=1,2,3} \sin \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_i \quad (3.1.14)$$

$$R_3(\mathbf{k}) = M + 2t_2 \sin \phi \{ \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 - \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2 - \sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) \} \quad (3.1.15)$$

$$\tau^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \tau^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.1.16)$$

となる. τ は Pauli 行列だが、スピンではなく副格子の自由度に相当するで τ で書いた. この **tau** は擬スピンとも呼ばれる. エネルギー固有値は

$$E(\mathbf{k}) = R_0(\mathbf{k}) \pm \sqrt{\sum_{i=1,2,3} R_i^2(\mathbf{k})} \quad (3.1.17)$$

で与えられ、これをプロットするとバンド図が得られる. 図 3.1.3 は各パラメーターに対して描いた Haldane 模型のバンド図である. 黒の点線は Brillouin zone を表している.

Haldane 模型が時間反転対称性を破ることを確かめる. 1 粒子 Hamiltonian (3.1.11) に作用する時間反転演算子の行列表示は反ユニタリで副格子の自由度は時間反転に対して不変なので、 $\mathsf{T} = K$ (複素共役) になる. Pauli 行列は時間反転に対して

$$\mathsf{T}^{-1} \tau^\mu \mathsf{T} = \begin{cases} \tau^\mu & (\mu = 0, 1, 3) \\ -\tau^2 & \end{cases} \quad (3.1.18)$$

と変換するので、Haldane 模型の Hamiltonian (3.1.11) は

$$\begin{aligned} \mathsf{T}^{-1} H(\mathbf{k}) \mathsf{T} &= R_0(\mathbf{k}) \tau^0 + R_1(\mathbf{k}) \tau^1 - R_2(\mathbf{k}) \tau^2 + R_3(\mathbf{k}) \tau^3 \\ &= R_0(-\mathbf{k}) \tau^0 + R_1(-\mathbf{k}) \tau^1 + R_2(-\mathbf{k}) \tau^2 + R_3(\mathbf{k}) \tau^3 \\ &\neq H(-\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (3.1.19)$$

となる. 途中で $R_0(\mathbf{k}) = R_0(-\mathbf{k})$, $R_1(\mathbf{k}) = R_1(-\mathbf{k})$, $R_2(\mathbf{k}) = -R_2(-\mathbf{k})$ を使った. たとえ $M = 0$ でも $R_3(\mathbf{k}) = -R_3(-\mathbf{k})$ より $\mathbf{T}^{-1}H(\mathbf{k})\mathbf{T} \neq H(-\mathbf{k})$ なので Haldane 模型は時間反転対称性がない. また $\phi = 0$ のとき, 時間反転対称性を満たすので, 確かに Hamiltonian (3.1.11) の第 2 項の局所的な磁場の効果は時間反転対称性を破る.

3.1.2 トポロジカル数の計算

次に $d = 2$ の class A を特徴づけるトポロジカル数である第 1 Chern 数を求める. 方針としては Hamiltonian を Dirac 点 $\mathbf{K}_\pm = (\pm 4\pi/(3a), 0)$ 周りで展開して, 導出された Dirac Hamiltonian が作る Chern 数を計算する. $\mathbf{k} = \mathbf{K}_\pm + \mathbf{q}$ として

$$\mathbf{K}_\pm \cdot \mathbf{a}_1 = \pm \frac{2\pi}{3}, \quad \mathbf{K}_\pm \cdot \mathbf{a}_2 = \mp \frac{2\pi}{3}, \quad \mathbf{K}_\pm \cdot \boldsymbol{\delta}_1 = \pm \frac{2\pi}{3}, \quad \mathbf{K}_\pm \cdot \boldsymbol{\delta}_2 = \mp \frac{2\pi}{3}, \quad \mathbf{K}_\pm \cdot \boldsymbol{\delta}_3 = 0 \quad (3.1.20)$$

を用いると, $\mathbf{q}$ の 1 次までで Hamiltonian (3.1.11) は

$$H_{\mathbf{K}_+}(\mathbf{q}) = -\frac{3}{2}t_2 \cos \phi \tau^0 - \frac{\sqrt{3}}{2}at_1q_x\tau^1 + \frac{\sqrt{3}}{2}at_1q_y\tau^2 + \left(M - \frac{3\sqrt{3}}{2}t_2 \sin \phi\right)\tau^3 \quad (3.1.21)$$

$$H_{\mathbf{K}_-}(\mathbf{q}) = -\frac{3}{2}t_2 \cos \phi \tau^0 + \frac{\sqrt{3}}{2}at_1q_x\tau^1 + \frac{\sqrt{3}}{2}at_1q_y\tau^2 + \left(M + \frac{3\sqrt{3}}{2}t_2 \sin \phi\right)\tau^3 \quad (3.1.22)$$

なる. ここで簡単のために $\phi = \pi/2, M = 0$ の場合を考える. $\phi = \pi/2$ とは次近接 hopping が it_2 のように純虚数になり, 最初から $\phi = \pi/2$ を仮定している文献が多いようである. このときは τ^0 の係数が 0 となり Hamiltonian は $\mathbf{R} \cdot \boldsymbol{\tau}$ で与えられる. 有効 Hamiltonian は

$$H_{\mathbf{K}_\pm}(\mathbf{q}) = \frac{\sqrt{3}}{2}at_1(\mp q_x\tau^1 + q_y\tau^2) \mp \frac{3\sqrt{3}}{2}t_2\tau^3 \quad (3.1.23)$$

となる. Berry 曲率に Hamiltonian を定数倍する項は寄与しないから, 有効 Hamiltonian

$$H_{\mathbf{K}_\pm}(\mathbf{q}) = \mp q_x\tau^1 + q_y\tau^2 \mp m\tau^3, \quad m = \frac{3t_2}{at_1} \quad (3.1.24)$$

を用いて第 1 Chern 数を導出する. この系の Hall 伝導度は TKNN 公式で与えられ,

$$\sigma_{xy} = \frac{e}{h}Ch_1 \quad (3.1.25)$$

となる [3, 4, 51]. Ch_1 は第 1 Chern 数で $d = 2$ の class A を特徴付けるトポロジカル数になっている. 第 1 Chern 数は

$$Ch_1 = \frac{1}{4\pi} \int d^2k \epsilon^{ij} \text{Tr}[f_{ij}] = \frac{1}{2\pi} \int d^2k \text{Tr} \left[\frac{\partial a_y(\mathbf{k})}{\partial k_x} - \frac{\partial a_x(\mathbf{k})}{\partial k_y} \right] \quad (3.1.26)$$

で与えられる. ここで a_i, f_{ij} は非可換 Berry 接続, 曲率で

$$f_{ij}^{\alpha\beta} = \partial_{k_i} a_j^{\alpha\beta} - \partial_{k_j} a_i^{\alpha\beta} + i[a_i, a_j]^{\alpha\beta} \quad (3.1.27)$$

$$a_i^{\alpha\beta} = -i \left\langle u_{\alpha, \mathbf{k}} \left| \frac{\partial}{\partial k_i} \right| u_{\beta, \mathbf{k}} \right\rangle \quad (3.1.28)$$

で与えられる. 以下では Hamiltonian が $H(\mathbf{k}) = \mathbf{R}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\tau}$, $\mathbf{R}(\mathbf{k}) = (\mp q_x, q_y, \mp m)$ で与えられているときの第 1 Chern 数を求める. この系は 2 バンド模型であり, 占有バンドは 1 つのみなのでセル周期関数,

Berry 接続, Berry 曲率はそれぞれ $|-, \mathbf{R}(\mathbf{k})\rangle, a_i^-(\mathbf{k}), f_{ij}^-(\mathbf{k})$ と書くことにする. まずは Berry 接続を求める.

$$\begin{aligned} a_i^-(\mathbf{k}) &= -i \langle -, \mathbf{R}(\mathbf{k}) | \partial_i | -, \mathbf{R}(\mathbf{k}) \rangle \\ &= -i \frac{\partial R_a(\mathbf{k})}{\partial k_i} \left\langle -, \mathbf{R} \left| \frac{\partial}{\partial R_a} \right| -, \mathbf{R} \right\rangle = \frac{\partial R_a(\mathbf{k})}{\partial k_i} a_a^-(\mathbf{R}) \end{aligned} \quad (3.1.29)$$

であるので, Berry 曲率は

$$\begin{aligned} f_{xy}^-(\mathbf{k}) &= \frac{\partial a_y^-(\mathbf{k})}{\partial k_x} - \frac{\partial a_x^-(\mathbf{k})}{\partial k_y} \\ &= \frac{\partial}{\partial k_x} \frac{\partial R_a(\mathbf{k})}{\partial k_y} a_a^-(\mathbf{R}) - \frac{\partial}{\partial k_y} \frac{\partial R_a(\mathbf{k})}{\partial k_x} a_a^-(\mathbf{R}) \\ &= \frac{\partial R_a(\mathbf{k})}{\partial k_x} \frac{\partial R_b(\mathbf{k})}{\partial k_y} \left(\frac{\partial a_b^-(\mathbf{R})}{\partial R_a} - \frac{\partial a_a^-(\mathbf{R})}{\partial R_b} \right) = \frac{\partial R_a(\mathbf{k})}{\partial k_x} \frac{\partial R_b(\mathbf{k})}{\partial k_y} f_{ab}^-(\mathbf{R}) \end{aligned} \quad (3.1.30)$$

となる. ここで $\mathbf{R}$ 空間の Berry 曲率が $\epsilon^{cab} f_{ab}^-(\mathbf{R}) = -R_c/(2R^3)$ であることを用いると (証明はすぐ後), $\mathbf{k}$ 空間での Berry 曲率は

$$f_{xy}^-(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2R^3} \mathbf{R} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{R}(\mathbf{k})}{\partial k_x} \times \frac{\partial \mathbf{R}(\mathbf{k})}{\partial k_y} \right) \quad (3.1.31)$$

となる. これを用いれば, 第 1 Chern 数を求める式は

$$Ch_1 = - \int_{\text{BZ}} \frac{d^2 k}{4\pi} \frac{\mathbf{R}}{|\mathbf{R}|^3} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial k_x} \times \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial k_y} \right) \quad (3.1.32)$$

で与えられる. 最後に $\mathbf{R}(\mathbf{k}) = (\mp q_x, q_y, \mp m)$ を代入すれば, 第 1 Chern 数は $\mathbf{K}_\pm$ 関係なく

$$Ch_1 = -\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^\infty q dq \frac{m}{(q_x^2 + q_y^2 + m^2)^{3/2}} = -\frac{1}{2} \text{sgn}(m) \quad (3.1.33)$$

で与えられる. Haldane 模型は Brillouin zone 内に 1 つずつ $\mathbf{K}_+$ と $\mathbf{K}_-$ があるので, 合計すると Haldane 模型の第 1 Chern 数は $-\text{sgn}(m)$ となり整数となる. したがって Hall 伝導率は $-e^2/h \text{sgn}(m)$ のように量子化される.

最後に $\mathbf{R}$ 空間での Berry 曲率が $\epsilon^{cab} f_{ab}^-(\mathbf{R}) = -R_c/(2R^3)$ であることを導出する. Hamiltonian が $H = \mathbf{R} \cdot \boldsymbol{\tau}$ で与えられたとき, エネルギー固有値は $\pm |\mathbf{R}|$ となり, $-|\mathbf{R}|$ に対応するエネルギー固有状態は

$$|-, \mathbf{R}\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \\ -\cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (3.1.34)$$

となる. ここで 3 次元極座標 $\mathbf{R} = R(\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ を使った. このときの Berry 接続は

$$\begin{aligned} a^-(\mathbf{R}) &= -i \langle -, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | -, \mathbf{R} \rangle \\ &= \frac{1}{2} (-1 + \cos \theta) \nabla_{\mathbf{R}} \phi = \frac{-1 + \cos \theta}{2R \sin \theta} \mathbf{e}_\phi \end{aligned} \quad (3.1.35)$$

となる. 途中で 3 次元極座標の勾配

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\mathbf{e}_\theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\mathbf{e}_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (3.1.36)$$

を使った. 最後に 3 次元極座標の回転

$$\nabla \times \mathbf{E} = \frac{\mathbf{e}_r}{r \sin \theta} \left\{ \frac{\partial}{\partial \theta} (E_\phi \sin \theta) - \frac{\partial E_\theta}{\partial \phi} \right\} + \frac{\mathbf{e}_\theta}{r} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial E_r}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial r} (r E_\phi) \right\} + \frac{\mathbf{e}_\phi}{r} \left\{ \frac{\partial}{\partial r} (r E_\theta) - \frac{\partial E_r}{\partial \theta} \right\} \quad (3.1.37)$$

を使えば, $\mathbf{R}$ 空間での Berry 曲率は

$$\nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{a}^-(\mathbf{R}) = -\frac{\mathbf{R}}{2R^3} \quad (3.1.38)$$

となる. 図 3.1.4 は Haldane 模型の各パラメーターに対して Berry 曲率をプロットしたものである.

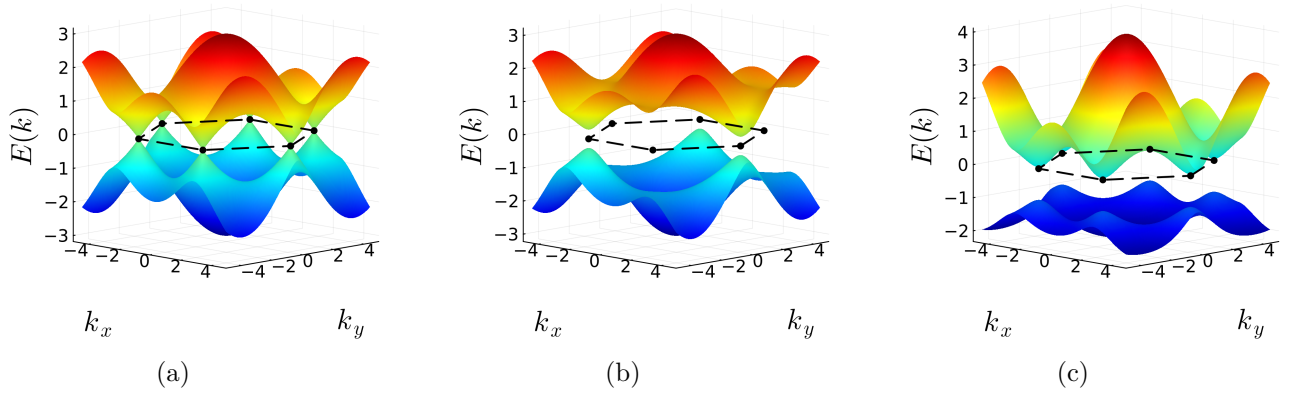


Figure 3.1.3: Haldane 模型のバンド図. 全ての図において $a = 1, t_1 = 1$ である. (a) は $t_2 = 0, \phi = 0, M = 0$ で最近接 hopping のみ入ったグラフェンのバンド図である. (b) は $t_2 = 0.3, \phi = \pi/2, M = 0.5$ で Chern 数が 1 のバンド図である. (c) は $t_2 = 0.3, \phi = 0, M = 0.5$ で Chern 数が 1 のバンド図である. 図の中にある黒の点線は Brillouin Zone を表している.

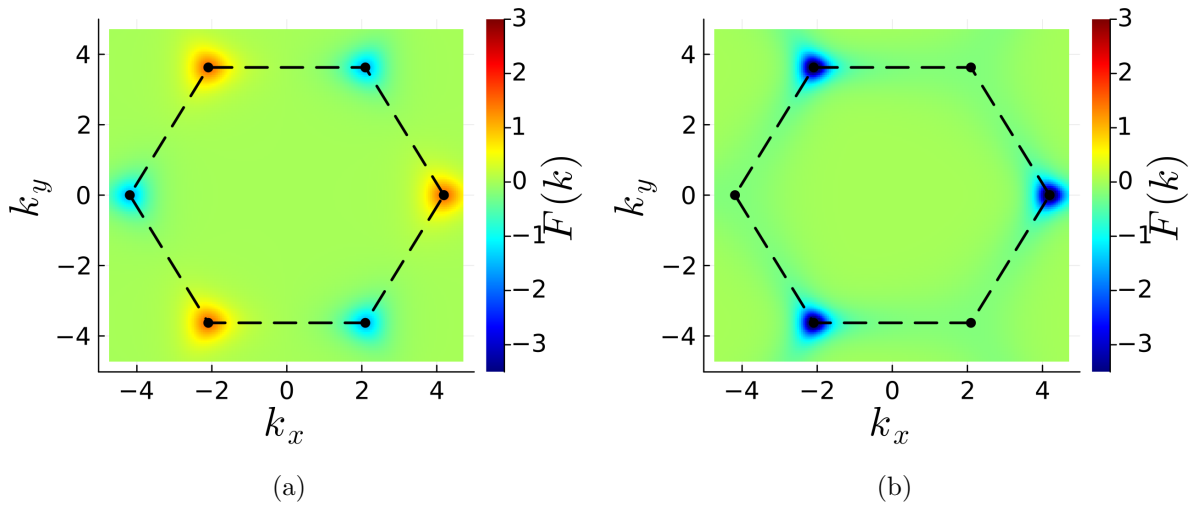


Figure 3.1.4: Haldane 模型の Berry 曲率の様子. (a) は $M = 0.5, t_2 = 0$ で Chern 数は 0 であり (b) は $M = 0.5, t_2 = 0.3$ で Chern 数は 1.

3.2 Kane-Mele 模型

Kane と Mele はスピンホール効果の一般化として 2 次元の $\mathbb{Z}_2$ トポロジカル絶縁体を提唱した [10, 11]. 原論文の段階では量子スピンホール絶縁体と呼んでいるが, スピンの z 成分が保存しない一般の場合を考えるので $\mathbb{Z}_2$ トポロジカル絶縁体と呼ぶ方が正確である. この Kane と Mele が提唱した Kane-Mele 模型と呼ばれる 2 次元の $\mathbb{Z}_2$ トポロジカル絶縁体は $d = 2$ の class AII の模型の具体例となっている. Kane-Mele 模型は Haldane 模型を「重ね合わせた」と見ることが出来る. Haldane 模型は局所的な磁場を挿入することで時間反転対称性を破った. Kane-Mele 模型は上下の方向から局所的な磁場を挿入して時間反転対称性を満たした模型である. もちろん上下の方向から磁場を印加することは不可能なのだが, スピン軌道相互作用がこの役割を担っている. Kane-Mele 模型は 2 次元の蜂の巣格子模型上に定義される. Hamiltonian は

$$\hat{H} = t \sum_{\langle i,j \rangle, s} c_{i,s}^\dagger c_{j,s} + i\lambda \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, s, s'} \nu_{ij} c_{i,s}^\dagger \sigma_{ss'}^3 c_{j,s'} + M \sum_{i,s} \xi_i c_{i,s}^\dagger c_{i,s} \quad (3.2.1)$$

である. 基本的に Haldane 模型 (3.1.4) と同じだが, spinful な模型なので, 添え字 $s = \uparrow, \downarrow$ が付いている. 原論文 [10, 11] では鏡映対称性を破る Rashba 項が入っているが, ここでは簡単のために無視する. Kane-Mele 模型は最初に提案されたトポロジカル絶縁体の模型だが, 実験的には実現されていない. なぜならばグラフェンを構成する炭素は元素番号が小さいため, スピン軌道相互作用が小さいからである. 代わりに Bernevig, Hughes, Zhang により提案された BHZ 模型 [12] が初めて実験的に観測された 2 次元 $\mathbb{Z}_2$ トポロジカルである [13].

3.2.1 バルクの状態

x, y 方向が周期境界条件つまり, Kane-Mele 模型のバルクの状態を考える. Hamiltonian (3.2.1) を波数により部分対角化する. Fourier 変換して各項は

$$t \sum_{\langle i,j \rangle, s} c_{i,s}^\dagger c_{j,s} = t \sum_{\mathbf{k}} \left[e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_i} \left(c_{A,\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{B,\mathbf{k},\uparrow} + c_{A,\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{B,\mathbf{k},\downarrow} \right) + e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_i} \left(c_{B,\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{A,\mathbf{k},\uparrow} + c_{B,\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{A,\mathbf{k},\downarrow} \right) \right] \quad (3.2.2)$$

$$\begin{aligned} i\lambda \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, s, s'} c_{i,s}^\dagger \sigma_{ss'}^3 c_{j,s'} &= 2\lambda \sum_{\mathbf{k}} \left[\{ \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 - \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2 - \sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) \} c_{A,\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{A,\mathbf{k},\uparrow} \right. \\ &\quad - \{ \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 - \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2 - \sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) \} c_{B,\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{B,\mathbf{k},\uparrow} \\ &\quad - \{ \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 - \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2 - \sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) \} c_{A,\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{A,\mathbf{k},\downarrow} \\ &\quad \left. + \{ \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 - \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2 - \sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) \} c_{B,\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{B,\mathbf{k},\downarrow} \right] \end{aligned} \quad (3.2.3)$$

$$M \sum_{i,s} \xi_i c_{i,s}^\dagger c_{i,s} = M \sum_{\mathbf{k}} \left(c_{A,\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{A,\mathbf{k},\uparrow} + c_{A,\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{A,\mathbf{k},\downarrow} - c_{B,\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{B,\mathbf{k},\uparrow} - c_{B,\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{B,\mathbf{k},\downarrow} \right) \quad (3.2.4)$$

となるので, Hamiltonian は

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}}^\dagger H(\mathbf{k}) C_{\mathbf{k}} \quad (3.2.5)$$

$$C_{\mathbf{k}}^\dagger = \begin{pmatrix} c_{A,\mathbf{k},\uparrow}^\dagger & c_{A,\mathbf{k},\downarrow}^\dagger & c_{B,\mathbf{k},\uparrow}^\dagger & c_{B,\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (3.2.6)$$

$$H(\mathbf{k}) = R_3(\mathbf{k})\alpha^3 + R_4(\mathbf{k})\alpha^4 + R_5(\mathbf{k})\alpha^5 + R_{45}(\mathbf{k})\alpha^{45} \quad (3.2.7)$$

$$R_3(\mathbf{k}) = 2\lambda(\sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 - \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2 - \sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)) \quad (3.2.8)$$

$$R_4(\mathbf{k}) = t \sum_{i=1,2,3} \cos \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_i \quad (3.2.9)$$

$$R_5(\mathbf{k}) = -t \sum_{i=1,2,3} \sin \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_i \quad (3.2.10)$$

$$R_{45}(\mathbf{k}) = M \quad (3.2.11)$$

となる. ここで α^a は 4×4 の行列で全部で 16 個存在する. 任意の 4×4 のエルミート行列は 16 個の実パラメータを含んでいるので, 16 個の基底となる行列 α^a と実パラメータ R_a を用いれば全ての 4×4 のエルミート行列を表現できる. α 行列の選び方は何通りもあるが, ここでは

$$\alpha^1 = \tau^3 \otimes \sigma^1 = \begin{pmatrix} \sigma^1 & 0 \\ 0 & -\sigma^1 \end{pmatrix}, \quad \alpha^2 = \tau^3 \otimes \sigma^2 = \begin{pmatrix} \sigma^2 & 0 \\ 0 & -\sigma^2 \end{pmatrix}, \quad (3.2.12)$$

$$\alpha^3 = \tau \otimes \sigma^3 = \begin{pmatrix} \sigma^3 & 0 \\ 0 & -\sigma^3 \end{pmatrix}, \quad \alpha^4 = \tau^1 \otimes I = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.2.13)$$

$$\alpha^5 = \tau^2 \otimes I = \begin{pmatrix} 0 & -iI \\ iI & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha^{ab} = \frac{1}{2i} [\alpha^a, \alpha^b] \quad (3.2.14)$$

のように選ぶとする. α^a ($a = 1, 2, 3, 4, 5$) は Clifford 代数の関係 $\{\alpha^a, \alpha^b\} = 2\delta^{ab}$ を満たす. α 行列は $\tau \otimes \sigma$ という形で与えられるが, τ が副格子の自由度で σ がスピンの自由度に対応する. バルクの Hamiltonian (3.2.7) を各波数に対して対角化して plot すると, Kane-Mele 模型のバルクのバンド図 3.2.1 が得られる.

次に Kane-Mele 模型の時間反転対称性を確認する. 時間反転において副格子の自由度は変わらず, スピンの自由度は $\boldsymbol{\sigma} \rightarrow -\boldsymbol{\sigma}$ と変換するので, 時間反転演算子の 1 粒子 Hamiltonian に対する行列表現は $T = -i(I \otimes \sigma^2)K$ となる. 時間反転に対して, α 行列は

$$T^{-1}\alpha^a T = \begin{cases} -\alpha^a & (a = 1, 2, 3, 5) \\ +\alpha^a & (a = 4, 45) \end{cases} \quad (3.2.15)$$

のように変換する. これを用いると, Kane-Mele 模型の 1 粒子 Hamiltonian (3.2.7) は

$$T^{-1}H(\mathbf{k})T = -R_3(\mathbf{k})\alpha^3 + R_4(\mathbf{k})\alpha^4 - R_5(\mathbf{k})\alpha^5 + R_{45}(\mathbf{k})\alpha^{45} \quad (3.2.16)$$

$$= R_3(-\mathbf{k})\alpha^3 + R_4(-\mathbf{k})\alpha^4 + R_5(-\mathbf{k})\alpha^5 + R_{45}(-\mathbf{k})\alpha^{45} = H(-\mathbf{k}) \quad (3.2.17)$$

と変換する. $T^{-1}H(\mathbf{k})T = H(-\mathbf{k})$ より Kane-Mele 模型は時間反転対称性を持ち, $T^2 = -1$ である. これは Kane-Mele 模型が $d = 2$ の class AII のに属することを表している. 次に Kane-Mele 模型の空間反転対称性を議論する. 空間反転をすると, 副格子の自由度が $A \rightarrow B, B \rightarrow A$ となるので, 空間反転演算子は $P = \tau^1 \otimes I$ となる. α 行列は空間反転で

$$P^{-1}\alpha^a P = \begin{cases} -\alpha^a & (a = 1, 2, 3, 5, 45) \\ +\alpha^a & (a = 4) \end{cases} \quad (3.2.18)$$

と変換する. これを用いると, Kane-Mele 模型の 1 粒子 Hamiltonian (3.2.7) は

$$P^{-1}H(\mathbf{k})P = -R_3(\mathbf{k})\alpha^3 + R_4(\mathbf{k})\alpha^4 - R_5(\mathbf{k})\alpha^5 - R_{45}(\mathbf{k})\alpha^{45} \quad (3.2.19)$$

$$= R_3(-\mathbf{k})\alpha^3 + R_4(-\mathbf{k})\alpha^4 + R_5(-\mathbf{k})\alpha^5 - R_{45}(\mathbf{k})\alpha^{45} \quad (3.2.20)$$

となり, $R_{45} = M = 0$ のとき, $P^{-1}H(\mathbf{k})P = H(-\mathbf{k})$ となって Kane-Mele 模型は空間反転対称性を持つようになる.

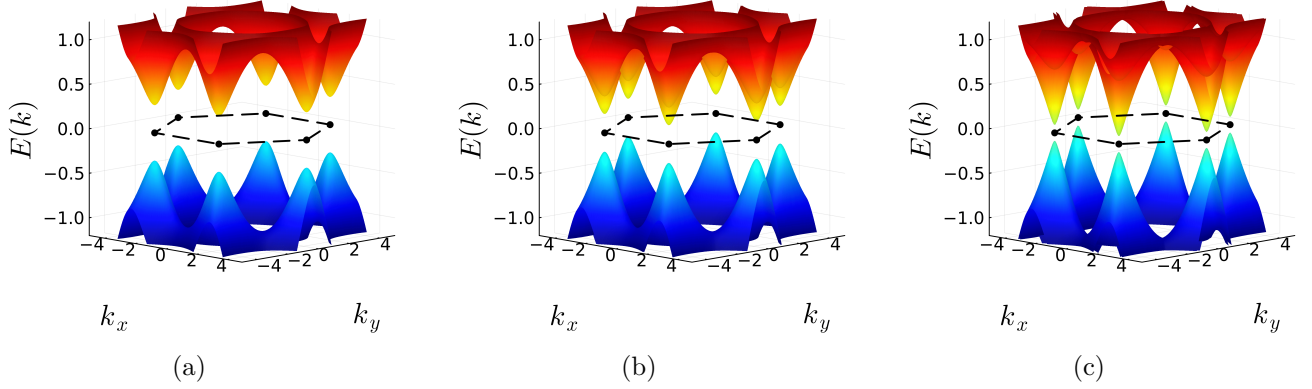


Figure 3.2.1: Kane-Mele 模型のバンド図. (a) は $M = 0, \lambda = 0.06t$, (b) は $M = 0.1t, \lambda = 0.06t$, (c) は $M = 0.4t, \lambda = 0.06t$. スピン軌道相互作用が小さいために2つしかバンドが無いように見える. バンドの外形は Haldane 模型と似ており, 図 3.2.2 との比較から $-1 \leq E(\mathbf{k}) \leq 1$ 付近を表示している.

3.2.2 エッジ状態

x 軸方向が周期境界条件で y 方向が開放端条件の境界がある場合の Kane-Mele 模型を考える. Hamiltonian (3.2.1) を x 軸方向のみに Fourier 変換する. 境界はジグザグ型を考える. Hamiltonian の各項は

$$t \sum_{\langle i,j \rangle, s} c_{i,s}^\dagger c_{j,s} = t \sum_{k_x, s} \sum_{n=1}^{N_2} \left[2 \cos \frac{k_x a}{2} c_{A,s}^\dagger(k_x, n) c_{B,s}(k_x, n) + c_{A,s}^\dagger(k_x, n+1) c_{B,s}(k_x, n) \right] + [\text{h.c.}] \quad (3.2.21)$$

$$\begin{aligned} & i\lambda \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, s, s'} c_{i,s}^\dagger \sigma_{ss'}^3 c_{j,s'} \\ &= 2\lambda \sum_{k_x, s, s'} \sum_{n=1}^{N_2} \left[-\sin k_x a c_{A,s}^\dagger(k_x, n) \sigma_{s,s'}^3 c_{A,s}(k_x, n) + \sin k_x a c_{B,s}^\dagger(k_x, n) \sigma_{s,s'}^3 c_{B,s}(k_x, n) \right. \\ &\quad + \sin \frac{k_x a}{2} c_{A,s}^\dagger(k_x, n) \sigma_{s,s'}^3 c_{A,s}(k_x, n+1) + \sin \frac{k_x a}{2} c_{A,s}^\dagger(k_x, n+1) \sigma_{s,s'}^3 c_{A,s}(k_x, n) \\ &\quad \left. - \sin \frac{k_x a}{2} c_{B,s}^\dagger(k_x, n) \sigma_{s,s'}^3 c_{B,s}(k_x, n+1) + \sin \frac{k_x a}{2} c_{B,s}^\dagger(k_x, n+1) \sigma_{s,s'}^3 c_{B,s}(k_x, n) \right] \end{aligned} \quad (3.2.22)$$

$$M \sum_{i,s} \xi_i c_{i,s}^\dagger c_{i,s} = M \sum_{k_x, s} \sum_{n=1}^{N_2} \left(c_{A,s}^\dagger(k_x, n) c_{A,s}(k_x, n) - c_{B,s}^\dagger(k_x, n) c_{B,s}(k_x, n) \right) \quad (3.2.23)$$

と変換する. ここで y 方向の格子点を $n = 1, 2, \dots, N_2$ で区別して, 副格子 $I (= A, B)$, スピン s , 波数 k_x , y 方向の n 番目のサイトの生成消滅演算子を $c_{I,s}^\dagger(k_x, n), c_{I,s}(k_x, n)$ と書いた. これを用いて Kane-Mele

模型の Hamiltonian (3.2.1) を行列の形に書くと,

$$\hat{H} = \sum_{k_x} C^\dagger(k_x) H(k_x) C(k_x) \quad (3.2.24)$$

$$C^\dagger(k_x) = \begin{pmatrix} c_{A,\uparrow}^\dagger(k_x, 1) & c_{A,\downarrow}^\dagger(k_x, 1) & c_{B,\uparrow}^\dagger(k_x, 1) & c_{B,\downarrow}^\dagger(k_x, 1) \\ \cdots & c_{A,\uparrow}^\dagger(k_x, N_2) & c_{A,\downarrow}^\dagger(k_x, N_2) & c_{B,\uparrow}^\dagger(k_x, N_2) & c_{B,\downarrow}^\dagger(k_x, N_2) \end{pmatrix} \quad (3.2.25)$$

$$H(k_x) = \begin{pmatrix} F & G & \cdots & & \\ G^\dagger & F & G & \cdots & \\ & G^\dagger & F & G & \cdots \\ & & \ddots & & \\ & \cdots & G^\dagger & F & G \\ & \cdots & G^\dagger & F & \end{pmatrix} \quad (3.2.26)$$

となる. $H(k_x)$ のブロック対角成分を除いた何も書いてない成分は全て 0 である. また y 方向に関する和 $\sum_n$ も行列の中に含まれるようにした. ここで F, G は 4×4 の行列で

$$F = \begin{pmatrix} M - 2\lambda \sin k_x a & 0 & 2t \cos \frac{k_x a}{2} & 0 \\ 0 & M + 2\lambda \sin k_x a & 0 & 2t \cos \frac{k_x a}{2} \\ 2t \cos \frac{k_x a}{2} & 0 & -M + 2\lambda \sin k_x a & 0 \\ 0 & 2t \cos \frac{k_x a}{2} & 0 & -M - 2\lambda \sin k_x a \end{pmatrix} \quad (3.2.27)$$

$$G = \begin{pmatrix} 2\lambda \sin \frac{k_x a}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2\lambda \sin \frac{k_x a}{2} & 0 & 0 \\ t & 0 & -2\lambda \sin \frac{k_x a}{2} & 0 \\ 0 & t & 0 & 2\lambda \sin \frac{k_x a}{2} \end{pmatrix} \quad (3.2.28)$$

である. Hamiltonian (3.2.26) を各 k_x ごとに対角化して plot すると, x 方向が周期境界条件で y 方向が開放端条件の Kane-Mele 模型のバンド図 3.2.2 が得られる. また比較のために図 3.2.2 と同じ向きでプロットした x, y が周期境界条件のバルクの Kane-Mele 模型のバンド図が 3.2.3 である. 図 3.2.2 の (a), (b) がトポロジカルに非自明な状態で, (c) がトポロジカルに自明な状態である. (a) は $M = 0$ なのでスピンの自由度が常に縮退しているが, (b) は分裂している. このバンド図で上下の密集したバンドはバルクのバンドである. 実際, 図 3.2.2 と図 3.2.3 のバルクの部分は同じ形をしている. 一方バルクのバンド図 3.2.3 でギャップが空いている領域に図 3.2.2 の (a), (b) にはバンドが存在する. これはエッジモードでエッジは金属的になっていることに対応する. エッジでは時間反転対称性より電流は流れないが, 反対のスピンの反対向きに流れるヘリカルエッジモードが存在する.

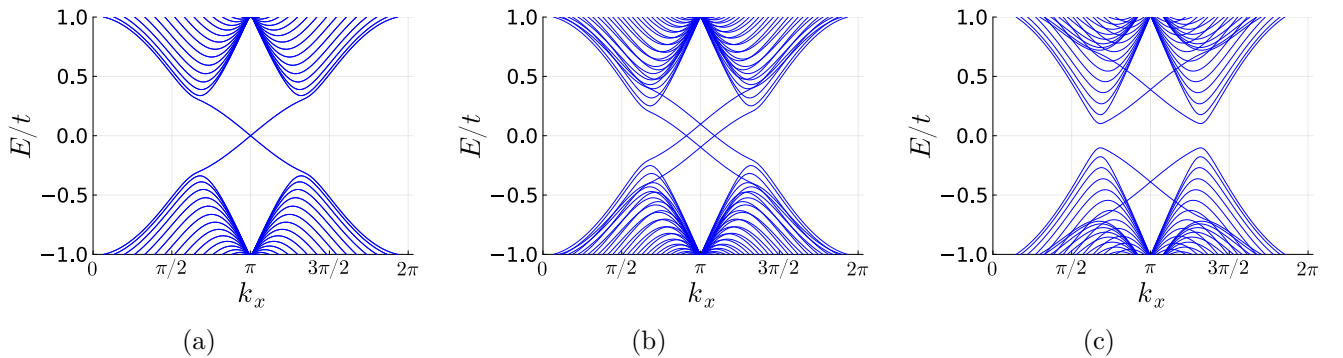


Figure 3.2.2: Kane-Mele 模型の x 方向が周期境界条件で y 方向が開放端条件でのバンド図. (a) は $M = 0, \lambda = 0.06t$, (b) は $M = 0.1t, \lambda = 0.06t$, (c) は $M = 0.4t, \lambda = 0.06t$.

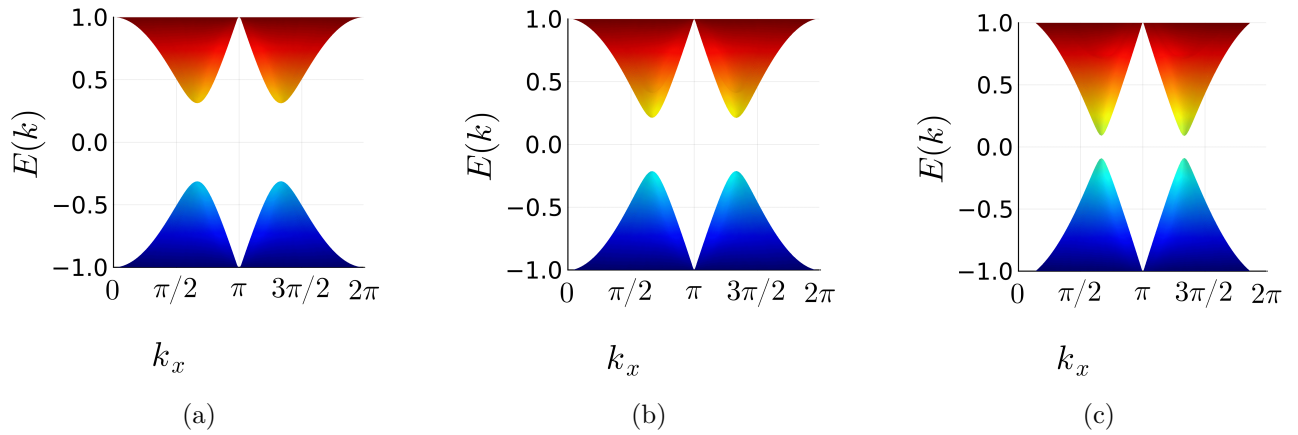


Figure 3.2.3: Kane-Mele 模型のバンド図を y 軸が紙面の表から裏へ貫く向きになるように回転させたもの。パラメータは図 3.2.1, 3.2.2 と同じである。

3.3 Fu-Kane-Mele 模型

最後に $d = 3$ の class AII の模型の具体例として, Fu-Kane-Mele 模型 [16, 17] を考える. Fu-Kane-Mele 模型は [16] で提案され, [17] において具体的な物質の予言が行われ, 初めて実験的に観測された 3 次元トポロジカル絶縁体である [52]. Fu-Kane-Mele 模型は物質として $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ に対応するが, 様々な実験的困難から Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 などが標準的な 3 次元トポロジカル絶縁体として認識されている [53, 54]. 実験に関しては Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 が 2009 年, Sb_2Te_3 が 2012 年にトポロジカル絶縁体であると確認された [55–58].

Fu-Kane-Mele 模型はダイヤモンド格子上に定義される模型である. 格子定数を a として, 基本並進ベクトルは

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.3.1)$$

であり, 副格子ベクトルは

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \frac{a}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\delta}_2 = \frac{a}{4} \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\delta}_3 = \frac{a}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\delta}_4 = \frac{a}{4} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (3.3.2)$$

である. ダイヤモンド格子の基本逆格子ベクトルは

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (3.3.3)$$

となる. 図 3.3.1 の (a) がダイヤモンド格子の図で, (b) がダイヤモンド格子の Brillouin zone である. Fu-Kane-Mele 模型の Hamiltonian は Kane-Mele 模型と同じで,

$$\hat{H} = \sum_{\langle i,j \rangle, s} t_{ij} c_{i,s}^\dagger c_{j,s} + i \frac{8\lambda}{a^2} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, s, s'} c_{i,s}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{ss'} \cdot (\boldsymbol{\delta}_{ik} \times \boldsymbol{\delta}_{kj}) c_{j,s'} \quad (3.3.4)$$

である. 第 1 項は最近接 hopping, 第 2 項はスピン軌道相互作用である. 第 1 項の hopping は $\boldsymbol{\delta}_1$ から $\boldsymbol{\delta}_4$ の 4 つの方向があるが, 全ての方向の hopping の大きさが異なるとする. つまり hopping は t_1, t_2, t_3, t_4 の 4 つが存在する. 第 2 項の $\boldsymbol{\delta}_{ik} \times \boldsymbol{\delta}_{kj}$ は Kane-Mele 模型で ν_{ij} に対応する項で, $j \rightarrow k \rightarrow i$ という向きで次近接サイトと結ばれているとき, $(j, k), (k, i)$ で指定されるボンドの副格子ベクトルの外積という意味である.

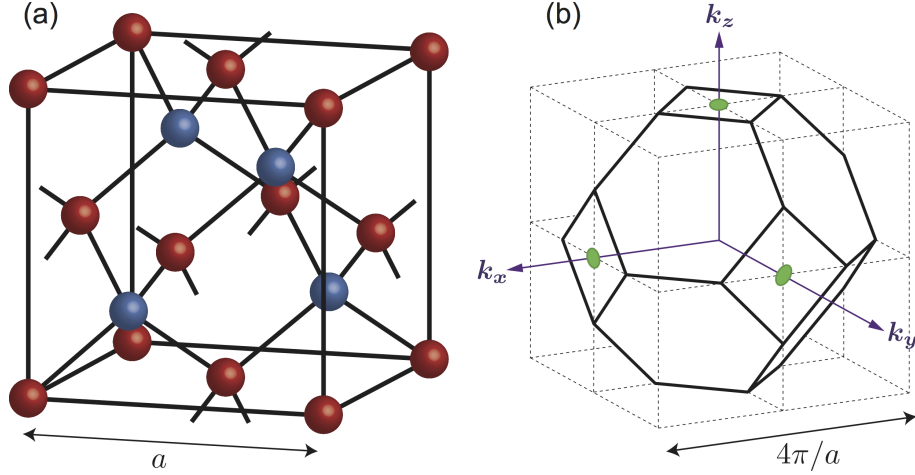


Figure 3.3.1: (a) ダイヤモンド格子の模式図, (b) ダイヤモンド格子の Brillouin zone. [59] より引用.

3.3.1 バルクの状態

x, y, z 方向が周期境界条件のとき, Hamiltonian (3.3.4) を波数により部分対角化する. Fourier 変換して各項は

$$\sum_{\langle i,j \rangle, s} t_{ij} c_{i,s}^\dagger c_{j,s} = \sum_{i=1,2,3,4} \mathbf{k} t_i \left[e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_i} \left(c_{A,\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{B,\mathbf{k},\uparrow} + c_{A,\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{B,\mathbf{k},\downarrow} \right) + e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_i} \left(c_{B,\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{A,\mathbf{k},\uparrow} + c_{B,\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{A,\mathbf{k},\downarrow} \right) \right] \quad (3.3.5)$$

$$\begin{aligned} & i \frac{8\lambda}{a^2} \sum_{\langle \langle i,j \rangle \rangle, s, s'} c_{i,s}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{ss'} \cdot (\boldsymbol{\delta}_{ik} \times \boldsymbol{\delta}_{kj}) c_{j,s'} \\ &= 2\lambda \sum_{\mathbf{k}} \left[\begin{pmatrix} c_{A,\mathbf{k},\uparrow}^\dagger & c_{A,\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} X(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} c_{A,\mathbf{k},\uparrow} \\ c_{A,\mathbf{k},\downarrow} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} c_{B,\mathbf{k},\uparrow}^\dagger & c_{B,\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} X(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} c_{B,\mathbf{k},\uparrow} \\ c_{B,\mathbf{k},\downarrow} \end{pmatrix} \right] \end{aligned} \quad (3.3.6)$$

$$\begin{aligned} X(\mathbf{k}) &= \{ \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2 - \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3 + \sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_1) - \sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1) \} \sigma^1 \\ &+ \{ \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3 - \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 + \sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) - \sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_2) \} \sigma^2 \\ &+ \{ \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 - \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2 + \sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_3) - \sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_3) \} \sigma^3 \end{aligned} \quad (3.3.7)$$

となるので, Hamiltonian は

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}}^\dagger H(\mathbf{k}) C_{\mathbf{k}} \quad (3.3.8)$$

$$C_{\mathbf{k}}^\dagger = \begin{pmatrix} c_{A,\mathbf{k},\uparrow}^\dagger & c_{A,\mathbf{k},\downarrow}^\dagger & c_{B,\mathbf{k},\uparrow}^\dagger & c_{B,\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (3.3.9)$$

$$H(\mathbf{k}) = R_1(\mathbf{k})\alpha^1 + R_2(\mathbf{k})\alpha^2 + R_3(\mathbf{k})\alpha^3 + R_4(\mathbf{k})\alpha^4 + R_5(\mathbf{k})\alpha^5 \quad (3.3.10)$$

$$R_1(\mathbf{k}) = 2\lambda(\sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2 - \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3 + \sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_1) - \sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1)) \quad (3.3.11)$$

$$R_2(\mathbf{k}) = 2\lambda(\sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3 - \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 + \sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) - \sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_2)) \quad (3.3.12)$$

$$R_3(\mathbf{k}) = 2\lambda(\sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 - \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2 + \sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_3) - \sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_3)) \quad (3.3.13)$$

$$R_4(\mathbf{k}) = \sum_{i=1,2,3,4} t_i \cos \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_i \quad (3.3.14)$$

$$R_5(\mathbf{k}) = - \sum_{i=1,2,3,4} t_i \sin \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_i \quad (3.3.15)$$

となる. $R_i(-\mathbf{k}) = -R_i(\mathbf{k})$ ($i = 1, 2, 3, 5$), $R_4(-\mathbf{k}) = R_4(\mathbf{k})$ より, α 行列の時間反転 T (3.2.15) と空間反転 P (3.2.18) を考えれば, $T^{-1}H(\mathbf{k})T = H(-\mathbf{k})$ $P^{-1}H(\mathbf{k})P = H(-\mathbf{k})$, であると容易に示せるので,

Fu-Kane-Mele 模型は時間反転対称性と空間反転対称性を持つことが分かる。

図 3.3.2 は $k_z = 0$ の断面についてプロットした Fu-Kane-Mele 模型のバンド図である。Fu-Kane-Mele 模型は $t_1 = t_2 = t_3 = t_4$ のとき, Brillouin zone 中の点 $2\pi/a(1, 0, 0)$, $2\pi/a(0, 1, 0)$, $2\pi/a(0, 0, 1)$ で gap が閉じる。

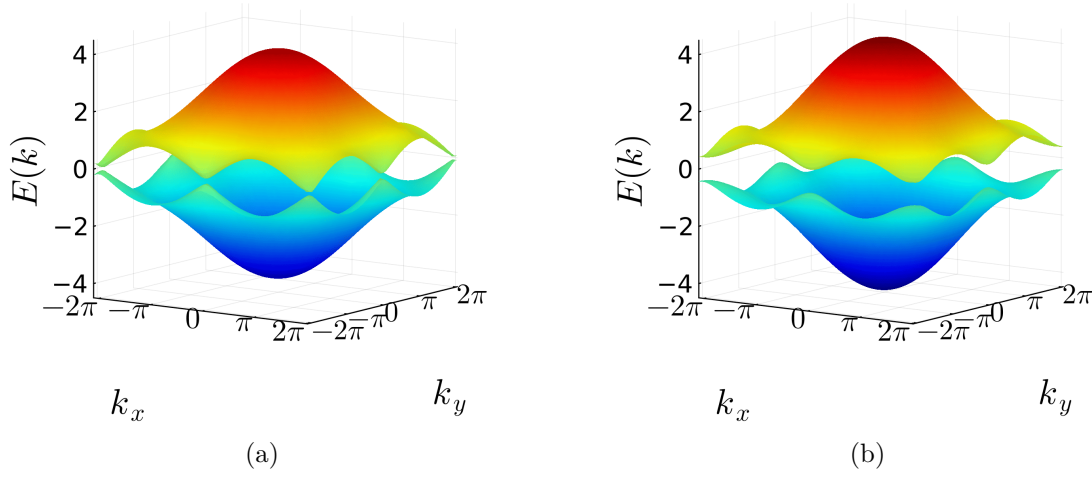


Figure 3.3.2: Fu-Kane-Mele 模型の $k_z = 0$ のバンド図. (a) は $t_1 = t_2 = t_3 = t_4 = 1.0$, $\lambda = 0.125$ で, (b) は $t_1 = 1.4$, $t_2 = t_3 = t_4 = 1.0$, $\lambda = 0.125$.

3.3.2 エッジ状態

Fu-Kane-Mele 模型を (111) 方向に境界があるとして Hamiltonian を対角化してプロットしたのが図 3.3.3 である。この図に $0; (111)$ のような記号が割り振られているが、これは後に説明する 4 つの $\mathbb{Z}_2$ 不変量 $\nu_0; (\nu_1 \nu_2 \nu_3)$ のことである。図 3.3.3 で表面のバンドが交差している点があるが、これは 2 次元の Dirac 点を表している。 $\nu_0 = 0$ のときは偶数個の (0 個を含む) Dirac 点が存在しており、 $\nu_0 = 1$ のときは奇数個の Dirac 点が存在している。

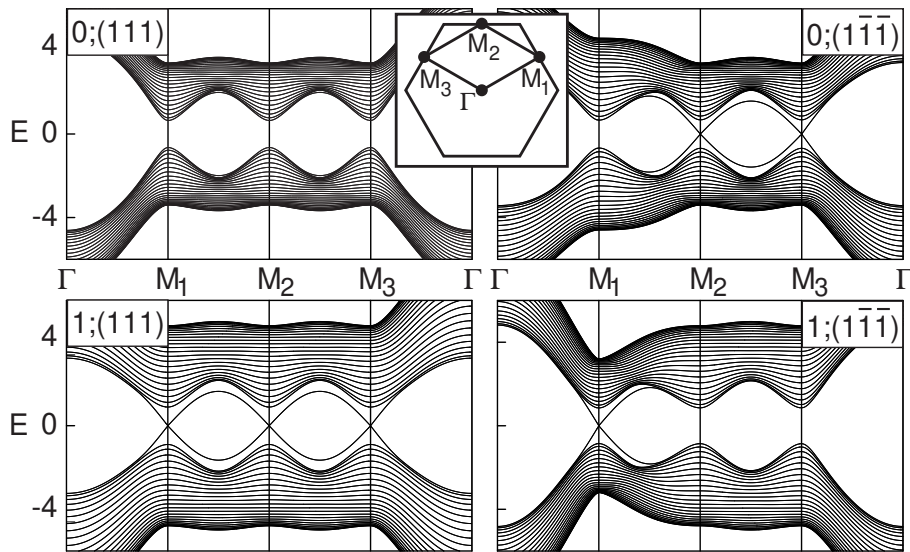


Figure 3.3.3: (111) 方向に境界があるときの Fu-Kane-Mele 模型のバンド図. [16] より引用.

3.4 トポロジカルバンド理論

class A, $d = 2$ である Chern 絶縁体のトポロジカル数は天下りのであるが, 第 1 Chern 数で与えられるとした. 本節では class AII $d = 2, 3$ のトポロジカル数を求めるトポロジカルバンド理論を導出する. 方針としては 2 次元の場合に導出して 3 次元へ一般化する.

3.4.1 時間反転分極

まず 2 次元について, 量子ホール効果と Thouless ポンピングの関係のように空間 2 次元の系は, 空間 1 次元と 1 つの断熱パラメーターに依存した系と等価になる. 2 次元のトポロジカル数を求めるために, 時間に依存した周期 T の 1 次元系を考える. 1 粒子 Hamiltonian は $H(t, k)$ と書き,

$$H(t + T, k) = H(t, k) \quad (3.4.1)$$

$$\mathsf{T}^{-1} H(t, k) \mathsf{T} = H(-t, -k) \quad (3.4.2)$$

を満たす. これは $k \rightarrow k_y, t \rightarrow k_x$ と置き換えれば, $H(k_x, k_y)$ は時間反転対称な 2 次元系の Hamiltonian になっている. 以下では 2 次元のバンド絶縁体を特徴付けるために, 断熱パラメーターに依存した 1 次元系の分極を考える. 本節は原論文 [15] を非常に参考に行っている.

電気分極の review

$H(t, k)$ の固有関数であり, Hilbert 空間の正規直交基底としてセル周期関数 $|u_{\alpha, k}(t)\rangle$ の Fourier 変換として Wannier 関数

$$|R, \alpha, t\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk e^{-ik(R-r)} |u_{\alpha, k}(t)\rangle \quad (3.4.3)$$

が定義できる. Wannier 関数はバンド α , Bravais 格子ベクトル R で指定される Hilbert 空間の正規直交基底で, 位置表示 $\langle x | \alpha, R, t \rangle$ は空間的に局在した関数となっている. セル周期関数と Wannier 関数は Fourier 変換というユニタリ変換で結ばれるので等価な情報を持つが, Wannier 関数はもはや Hamiltonian の固有状態ではない. また, Chern 数が 0 でないとき指数関数的に局在した Wannier 関数を構成できないという関係があるが, この関係を利用して Chern 絶縁体を Wannier 関数の立場から定義しようとする試みもある [60].

ここで電気分極 P_ρ を $R = 0$ の Wannier 関数の中心の全てのバンドについての和として定義する [61, 62].

$$P_\rho = \sum_{\alpha} \langle R = 0, \alpha | r | R = 0, \alpha \rangle \quad (3.4.4)$$

Wannier 関数の定義式を代入して, また付録の公式 (D.8.1), $i \langle u_{\alpha, k'} | \frac{\partial}{\partial k} | u_{\alpha, k} \rangle e^{i(k-k')r} = 2\pi \delta(k-k') i \langle u_{\alpha, k} | \frac{\partial}{\partial k} | u_{\alpha, k} \rangle$ を使くと, 電気分極は

$$\begin{aligned} P_\rho &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int dk dk' \langle u_{\alpha, k'} | r e^{i(k-k')r} | u_{\alpha, k} \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int dk dk' \langle u_{\alpha, k'} | -i \left(\frac{\partial}{\partial k} e^{i(k-k')r} \right) | u_{\alpha, k} \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int dk dk' \langle u_{\alpha, k'} | i \frac{\partial}{\partial k} | u_{\alpha, k} \rangle e^{i(k-k')r} \\ &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk \text{Tr} [a(k)], \quad a^{\alpha\beta}(k) = -i \left\langle u_{\alpha, k} \left| \frac{\partial}{\partial k} \right| u_{\beta, k} \right\rangle \end{aligned} \quad (3.4.5)$$

のように Berry 接続の積分で書くことが出来る. $U(2N)$ Gauge 変換

$$|u_{\alpha, k}\rangle \rightarrow |u'_{\alpha, k}\rangle = U_{\beta\alpha}(k) |u_{\beta, k}\rangle \quad (3.4.6)$$

の下で Berry 接続は gauge 変換するが、電気分極は $P'_\rho = P_\rho + m$ のように変化する。 m は整数である。つまり電気分極は整数分だけ不定性を持っておりこれは電気分極は単位胞内でのみ意味を持つことに対応する。 Marzari と Vanderbilt は最局在 Wannier 関数を選択するように $U_{\beta\alpha}(k)$ を選ぶ手続きを開発したが [63], 今は全電気分極を考えているため $U_{\beta\alpha}(k)$ の詳細は関係ない。

Hamiltonian $H(t, k)$ が断熱パラメーター t に対して連続的に変化するとき、電気分極の差が定義できる。今 t_1 から t_2 へ連続的に変化した時、電気分極の差は

$$P_\rho(t_2) - P_\rho(t_1) = -\frac{1}{2\pi} \left[\oint_{c_2} dk \operatorname{Tr} [a(t, k)] - \oint_{c_1} dk \operatorname{Tr} [a(t, k)] \right] \quad (3.4.7)$$

と書くことができる。ここで c_1, c_2 は $t = t_1, t_2$ での $k = -\pi$ から π までの閉じた loop を表している。 Stokes の定理を使うと、電気分極の差は Berry 曲率の積分で書ける。

$$P_\rho(t_2) - P_\rho(t_1) = -\frac{1}{2\pi} \oint_{\tau_{12}} dk dt \operatorname{Tr} [f_{tk}(t, k)], \quad (3.4.8)$$

ここで $f_{tk}(t, k) = -i \sum_\alpha [\langle \partial_t u_{\alpha,k}(t) | \partial_k u_{\alpha,k}(t) \rangle - \text{c.c.}]$ で (t, k) 空間中での Berry 曲率である。また τ_{12} は曲線 c_1, c_2 で囲まれる 2 次元面である。 $t_1 = 0, t_2 = T$ とすると、電気分極の差は

$$P_\rho(T) - P_\rho(0) = -\frac{1}{2\pi} \oint_{\text{BZ}} dk dt \operatorname{Tr} [f_{tk}(t, k)] \quad (3.4.9)$$

となり、 (t, k) 空間全体の積分となり、これを 2 次元 Brillouin zone と見なすと電気分極の差は第 1 Chern 数で与えられる [64, 65]。第 1 Chern 数は各サイクルでどれだけ電荷がポンプされるか特徴づける量であり整数となる。しかし、時間反転対称性がある場合、Berry 曲率は $f_{tk}(-k, -t) = -f_{tk}(t, k)$ を満たすので、第 1 Chern 数は 0 となる。我々は時間反転対称性な断熱パラメーターに依存した 1 次元系を考えたいので、この系を特徴付けるために電気分極以外の量を考える必要がある。

Kramers ペアに対する時間反転分極と $\mathbb{Z}_2$ 不変量

次に時間反転対称性がある場合の分極について考える。占有バンドが $2N$ 本あるとすると、 $T^2 = -1$ から各バンドは Kramers ペアを作っている。実際、固有方程式

$$H(k) |u_{\alpha,k}\rangle = E(k) |u_{\alpha,k}\rangle \quad (3.4.10)$$

を満たすとき、時間反転対称性の条件 $T^{-1}H(k)T = H(-k)$ から

$$H(k)[T |u_{\alpha,-k}\rangle] = E(-k)[T |u_{\alpha,-k}\rangle] \quad (3.4.11)$$

という固有方程式も成立する。つまり、波数 k でエネルギーが $E(k)$ の状態 $|u_{\alpha,k}\rangle$ が存在したら、同時にエネルギーが $E(-k)$ の状態 $T |u_{\alpha,-k}\rangle$ が存在することになる。さらに $\mathbf{k} = -\mathbf{k}$ が成立する**時間反転対称性運動量 (TRIM)** では、この点を Γ_i で表すと、 $E(\Gamma_i) = E(-\Gamma_i)$ より必ず 2 重縮退する。位相差を考慮して、 $|u_{\alpha,k}^{\text{I}}\rangle = |u_{\alpha,k}\rangle$, $|u_{\alpha,k}^{\text{II}}\rangle = e^{-i\chi_{\alpha,k}} T |u_{\alpha,-k}\rangle$ とすると、

$$|u_{\alpha,-k}^{\text{I}}\rangle = e^{i\chi_{\alpha,k}} T |u_{\alpha,k}^{\text{II}}\rangle \quad (3.4.12)$$

$$|u_{\alpha,-k}^{\text{II}}\rangle = -e^{i\chi_{\alpha,-k}} T |u_{\alpha,k}^{\text{I}}\rangle \quad (3.4.13)$$

が成立する。 $\alpha = 1, 2, \dots, N$ である。係数は $T^2 = -1$ を使って元に戻るようにした。時間反転対称性より電気分極は 0 になってしまうが、Kramers ペア $s = \text{I}, \text{II}$ それぞれについて、部分分極

$$P^s = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk \operatorname{Tr} [a^s(k)] \quad (3.4.14)$$

$$a^s(k) = -i \left\langle u_{\alpha,k}^s \left| \frac{\partial}{\partial k} \right| u_{\beta,k}^s \right\rangle \quad (3.4.15)$$

が定義できる. この部分分極は $s = \text{I}, \text{II}$ の Kramers ペアの Wannier 中心が断熱パラメーターが変化した時どのように変化するか表す物理量である. 以下では部分分極は $U(2N)$ gauge 変換に対して不変であることを示す.

$$P^{\text{I}} = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi dk \left[\text{Tr} [a^{\text{I}}(k)] + \text{Tr} [a^{\text{I}}(-k)] \right] \quad (3.4.16)$$

と変形して付録の公式 (D.8.2)

$$\text{Tr} [a^{\text{II}}(k)] = \text{Tr} [a^{\text{I}}(-k)] + \sum_{\alpha} \frac{\partial \chi_{\alpha,k}}{\partial k} \quad (3.4.17)$$

を使うと, 部分分極は

$$P^{\text{I}} = \frac{1}{2\pi} \left[\int_0^\pi dk \text{Tr} [a(k)] - \sum_{\alpha} (\chi_{\alpha,\pi} - \chi_{\alpha,0}) \right] \quad (3.4.18)$$

となる. ここで $a(k) = a^{\text{I}}(k) + a^{\text{II}}(k)$ である. 実は第2項目は時間反転演算子の行列表示である w 行列 $w_{\alpha\beta}(k) = \langle u_{\alpha,-k} | \mathcal{T} | u_{\beta,k} \rangle$ を使うと綺麗に書き換えられる.

$$w(k) = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\chi_{1,k}} & 0 & 0 & \cdots \\ -e^{-i\chi_{1,-k}} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\chi_{2,k}} & \cdots \\ 0 & 0 & -e^{-i\chi_{2,-k}} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.4.19)$$

ここで時間反転対称運動量 $k = \Lambda_i$ のとき, $w(\Lambda_i)$ は反対称行列になっている. 反対称行列にはパフィアンという量が定義でき,

$$\text{Pf}[w(\Lambda_i)] = w_{12}(\Lambda_i) w_{34}(\Lambda_i) \cdots w_{2N-1, 2N}(\Lambda_i) = \exp \left[-i \sum_{\alpha=1}^N \chi_{\alpha, \Lambda_i} \right] \quad (3.4.20)$$

が得られる. したがって部分分極は w 行列とパフィアンを使って

$$P^{\text{I}} = \frac{1}{2\pi} \left[\int_0^\pi dk \text{Tr} [a(k)] - i \log \frac{\text{Pf}[w(\pi)]}{\text{Pf}[w(0)]} \right] \quad (3.4.21)$$

と変形できる. パフィアンに対して成り立つ公式 $\text{Pf}[XAX^T] = \det[X] \text{Pf}[A]$ を使うと, $U(2N)$ 変換において $\text{Pf}[w] \rightarrow \text{Pf}[w] \det[U]$ と変換する. したがって $\det[U] = 1$ を満たす $SU(2N)$ 変換の下で P^{I} は不変である. さらに $U(k) = e^{i\theta(k)}$ の $U(1)$ 変換の下で P^{I} の第1項と第2項が互いに打ち消しあうので P^{I} は $U(1)$ 不変である. したがって P^{I} は $U(2N)$ gauge 変換の下で不変である. また電気分極と同様に P^{I} は $\log$ の不定性より整数の不定性を持つが, これは部分分極は単位胞内で well-defined であることに対応する.

同様の式変形を $s = \text{II}$ の部分分極に対して行くと,

$$P^{\text{II}} = \frac{1}{2\pi} \left[\int_0^\pi dk \text{Tr} [a(-k)] + i \log \frac{\text{Pf}[w(\pi)]}{\text{Pf}[w(0)]} \right] \quad (3.4.22)$$

が得られる. ここで**時間反転分極** $P_\theta = P^{\text{I}} - P^{\text{II}}$ を定義する.

$$P_\theta = \frac{1}{2\pi} \left[\int_0^\pi dk \text{Tr} [a(k) - a(-k)] - 2i \log \frac{\text{Pf}[w(\pi)]}{\text{Pf}[w(0)]} \right]. \quad (3.4.23)$$

付録の w 行列と Berry 接続の公式 (D.5.3),

$$a_i(-\mathbf{k}) = w(\mathbf{k}) a_i^*(\mathbf{k}) w^\dagger(\mathbf{k}) + i w(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial k_i} w^\dagger(\mathbf{k}) \quad (3.4.24)$$

について, 両辺トレースを取り, $\text{Tr} [w(\mathbf{k}) \partial_k w^\dagger(\mathbf{k})] = -\text{Tr} [w^\dagger(\mathbf{k}) \partial_k w(\mathbf{k})]$ を使うと,

$$\text{Tr} [a(k) - a(-k)] = i \text{Tr} \left[w^\dagger(k) \frac{\partial}{\partial k} w(k) \right] \quad (3.4.25)$$

が得られる. これを時間反転分極に代入して

$$\begin{aligned} P_\theta &= \frac{1}{2\pi i} \left[-\int_0^\pi dk \text{Tr} \left[w^\dagger(k) \frac{\partial}{\partial k} w(k) \right] + 2 \log \frac{\text{Pf}[w(\pi)]}{\text{Pf}[w(0)]} \right] \\ &= \frac{1}{2\pi i} \left[-\int_0^\pi dk \partial_k \text{Tr} [\log w(k)] + 2 \log \frac{\text{Pf}[w(\pi)]}{\text{Pf}[w(0)]} \right] \\ &= \frac{1}{2\pi i} \left[-\int_0^\pi dk \partial_k \log \det [w(k)] + 2 \log \frac{\text{Pf}[w(\pi)]}{\text{Pf}[w(0)]} \right] \\ &= \frac{1}{\pi i} \left[-\log \sqrt{\frac{\det [w(\pi)]}{\det [w(0)]}} + \log \frac{\text{Pf}[w(\pi)]}{\text{Pf}[w(0)]} \right] \\ &= \frac{1}{\pi i} \left[\log \frac{\sqrt{\det [w(0)]}}{\text{Pf}[w(0)]} \frac{\sqrt{\det [w(\pi)]}}{\text{Pf}[w(\pi)]} \right] \end{aligned} \quad (3.4.26)$$

を得る. $\det w = (\text{Pf } w)^2$ より, $\sqrt{\det w}/\text{Pf } w = \pm 1$ であるから時間反転分極 P_θ は 0 または 1 を与える. また $\log$ の不定性から P_θ は mod 2 の範囲で定義される. したがって

$$(-1)^{P_\theta} = \frac{\sqrt{\det [w(0)]}}{\text{Pf}[w(0)]} \frac{\sqrt{\det [w(\pi)]}}{\text{Pf}[w(\pi)]} \quad (3.4.27)$$

と書き換えられえ. ここで $\sqrt{\det [w]}$ の分枝は $k = 0$ から式 (3.4.26) の積分経路に沿って連続的に $k = \pi$ に繋がるように取る. 式 (3.4.26), (3.4.27) は Berry 位相を使った電気分極の定式化に時間反転対称性を加えて拡張したものである. 時間反転分極 P_θ は 0 と 1 という 2 つの異なった分極の状態を定義する. この P_θ は有限系の端で Kramers ペアが存在する, もしくは存在しないを記述する. しかし P_θ だけでは意味を持たない. なぜならば gauge 変換 $|u_{\alpha,k}^I\rangle \rightarrow e^{ik} |u_{\alpha,k}^I\rangle$ で値を変えてしまうからである. これは端での Kramers ペアの存在は結晶の端の形状に依存することに対応する. しかしながら時間反転分極 P_θ の差は gauge 不変でありこの値はトポロジカルに異なる 2 つの状態を区別する. ここで

$$\nu = P_\theta \left(\frac{T}{2} \right) - P_\theta(0) \pmod{2} \quad (3.4.28)$$

を定義すると, ν は $t = 0$ と $t = T/2$ で Kramers ペアの取り換えが起こる, もしくは起こらないを区別する $\mathbb{Z}_2$ トポロジカル不変量になっている. 図 3.4.1 は Wannier 中心の時間発展の様子で, Kramers ペアの取り換えが起こるときと起こらないときの様子である. 図 3.4.1 の (a) は $\nu = 1$ の場合で $t = 0$ と $t = T/2$ の間で Kramers ペアの取り換えが起こっている. その結果有限系では端にペアを作っていない状態が出現する. 一方図 3.4.1 の (b) は $\nu = 0$ の場合で $t = 0$ と $t = T/2$ の間で Kramers ペアの取り換えが起こっていない自明な状態である.

この $\mathbb{Z}_2$ トポロジカル不変量 ν は (t, k) で張られる 2 次元トーラスから Hilbert 空間への写像 $|u_{\alpha,k}(t)\rangle$ がトポロジカルに異なる 2 つの状態に分けることができると示唆している. 式 (3.4.28) は

$$(-1)^\nu = \prod_{i=1}^4 \frac{\sqrt{\det [w(\Gamma_i)]}}{\text{Pf}[w(\Gamma_i)]} \quad (3.4.29)$$

と書き換えられる. ここで Γ_i は 4 つの時間反転対称な (t, k) 空間上の点である. この表式を適用するためには (t, k) 空間上でセル周期関数が連続的に定義される必要があるが, これは常に可能である. なぜならばセル周期関数を連続的に定義するときの障害となる第 1 Chern 数が時間反転対称性より 0 となるからである.

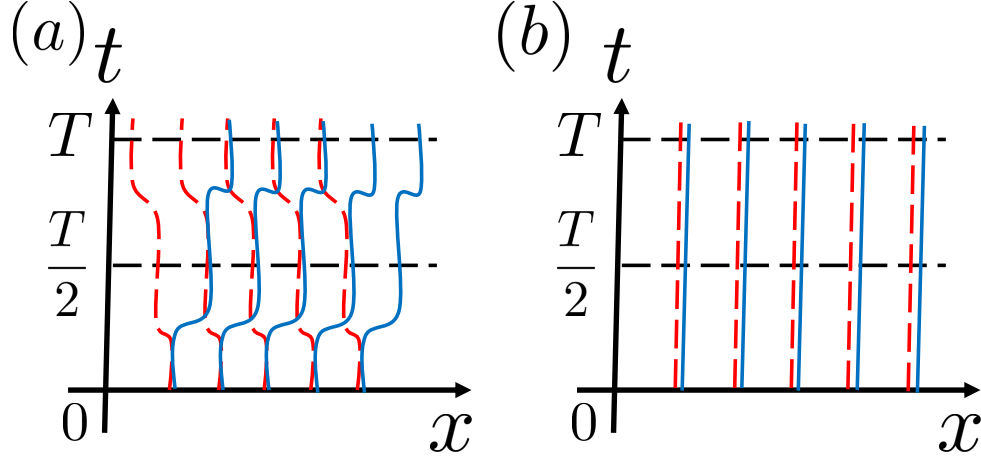


Figure 3.4.1: Wannier 中心の時間発展の様子. (a) は $\nu = 1$ の場合で Kramers ペアの交換が発生している非自明な状態である. (b) は Kramers ペアの交換が起こっていない自明な状態である.

3.4.2 2次元の $\mathbb{Z}_2$ トポロジカル数

前節の議論において $t \rightarrow k_x, k \rightarrow k_y$ とすることで時間反転対称なバンド絶縁体を構成できる. 今, 図 3.4.2 の (a) のような x 方向が周期境界条件で y 方向が開放端条件の円筒系を考える. この系のバンド図を描くと図 3.4.3 のように灰色のバルクのバンドと中央に書かれているエッジのバンドが描かれるようなバンド図が得られる. ここで $k_x = \Lambda_1, \Lambda_2$ の時間反転対称運動量では Kramers 縮退している. このとき, $k_x = \Lambda_1, \Lambda_2$ で (a) Kramers ペアが交換すると (b) 交換しないという 2 つの可能性がある. この 2 つの状態は k_x を断熱パラメーターと見たときの時間反転分極 P_θ の差で区別できる. 具体的には

$$\nu = P_\theta(k_x = \Lambda_2) - P_\theta(k_x = \Lambda_1) \quad (3.4.30)$$

である. $k_x = \Lambda_1, \Lambda_2$ での P_θ は図 3.4.2 の (b) にあるように (k_x, k_y) 空間中の時間反転対称運動量 Γ_{11} と Γ_{12}, Γ_{21} と Γ_{22} で $\delta_i = \sqrt{\det[w(\Gamma_i)]}/\text{Pf}[w(\Gamma_i)]$ を計算してその積 $\pi_i = \delta_{i1}\delta_{i2}$ を計算することで導出できる. したがって Kramers ペアの交換を区別するトポロジカル不変量 ν は

$$(-1)^\nu = \prod_{n_1=0,1} \prod_{n_2=0,1} \frac{\sqrt{\det[w(\Gamma_{n_1 n_2})]}}{\text{Pf}[w(\Gamma_{n_1 n_2})]} \quad (3.4.31)$$

で与えられる. $\nu = 1$ のとき, 図 3.4.3 の (a) のようになり, Kramers ペアの交換が起こる. このとき必ずフェルミエネルギーはバンドと奇数回交差する. 一方, $\nu = 0$ のとき, 図 3.4.3 の (b) のようになり, Kramers ペアの交換が起きない. このとき必ずフェルミエネルギーはバンドと偶数回交差する. 時間反転対称性を満たす摂動の下でフェルミエネルギーとバンドが交差する回数は変わるが, その偶奇は変わらない. $\nu = 0$ の場合はフェルミエネルギーとバンドが 0 回交差する状態へ移れるので, $\nu = 0$ の境界がある 2 次元バンド絶縁体は gapless なエッジモードが存在しない自明な絶縁体となる. 一方で $\nu = 1$ の場合は必ずフェルミエネルギーとバンドが交差するので, このバンド絶縁体は gapless なエッジモードが安定して存在する非自明な絶縁体である. 以上より ν は 2 次元の時間反転対称性なバンド絶縁体を分類するトポロジカル不変量であることが示された.

実際に ν を計算しようとするとき, $\sqrt{\det w}$ の分枝を連続的につながるように選ぶ必要がある. 波動関数を先に 2 次元 Brillouin zone で連続的になるように選ぶ必要がある. Chern 数は 2 次元 Brillouin

zone 全体の積分値として定義されたが, 今回時間反転対称性を加えたことにより波数空間中の 4 つの点の情報のみでトポロジカル数が決まりそうに見えるが, 実際は分枝の取り方などでまだ空間全体の情報を必要としている. しかしながら時間反転対称性のおかげでトポロジカル数を計算するための情報量は下がったと言って良い.

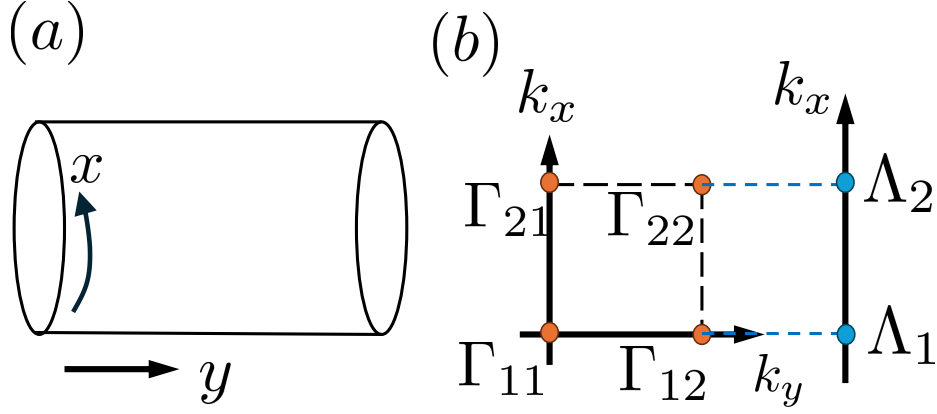


Figure 3.4.2: (a) は次元系を x 方向に周期境界条件, y 方向に境界条件を課したもの. 系は円筒の表面と同一になる. (b) は 2 次元 Brillouin zone 中の 4 つの時間反転対称運動量 Γ_i を k_x 軸に射影して 2 つの時間反転対称運動量 Λ_i が存在する様子.

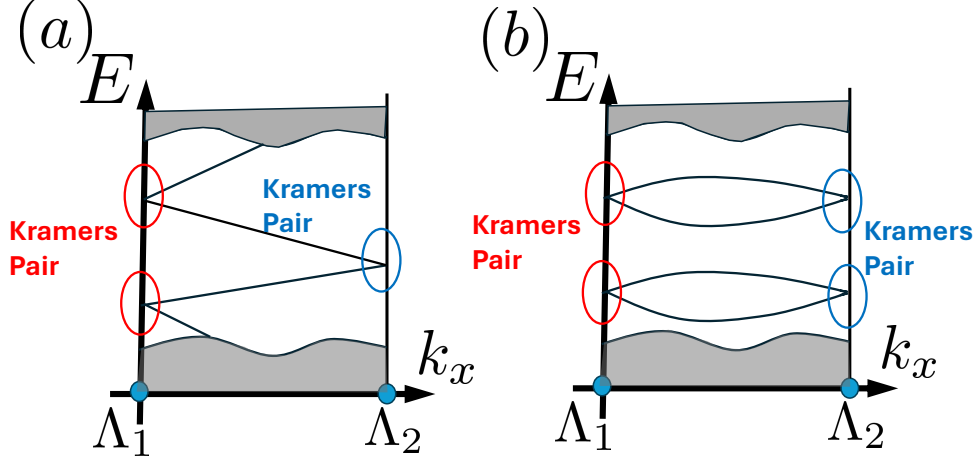


Figure 3.4.3: 図 3.4.2 の (a) の場合のエネルギーバンドの様子. (a) は時間反転対称運動量で Kramers ペアが交換するが, (b) は交換しない.

3.4.3 3 次元の $\mathbb{Z}_2$ トポロジカル数

次に 3 次元の場合について考える. 3 次元では 8 個の時間反転対称運動量が存在する.

$$\Gamma_{n_1 n_2 n_3} = \frac{1}{2}(n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + n_3 \mathbf{b}_3) \quad (3.4.32)$$

$\Gamma_{n_1 n_2 n_3}$ は 8 個の時間反転対称運動量を表し, $n_j = 0, 1$, $\mathbf{b}_j$ は基本逆格子ベクトルである. 3 次元では以下の 4 つの $\mathbb{Z}_2$ インデックスが定義される [16, 66, 67].

$$(-1)^{\nu_0} = \prod_{n_1, n_2, n_3=0,1} \delta(\Gamma_{n_1 n_2 n_3}) \quad (3.4.33)$$

$$(-1)^{\nu_1} = \prod_{n_2, n_3=0,1} \delta(\Gamma_{1 n_2 n_3}) \quad (3.4.34)$$

$$(-1)^{\nu_2} = \prod_{n_1, n_3=0,1} \delta(\Gamma_{n_1 1 n_3}) \quad (3.4.35)$$

$$(-1)^{\nu_3} = \prod_{n_1, n_2=0,1} \delta(\Gamma_{n_1 n_2 1}) \quad (3.4.36)$$

ここで $\delta(\Gamma_i) = \sqrt{\det[w(\Gamma_i)]}/\text{Pf}[w(\Gamma_i)]$ を使った. $\nu_0 = 1$ の場合, **強いトポロジカル絶縁体**と呼び, $\nu_0 = 0$ かつ $\nu_i = 1$ の場合, **弱いトポロジカル絶縁体**と呼ぶ.

2 次元でのトポロジカルバンド理論との対応から 4 つの $\mathbb{Z}_2$ 不変量と表面状態の関係を考察してみる. まず 3 次元 Brillouin zone 中の表面 2 次元 Brillouin zone について図 3.4.3 との対応から表面バンドの Kramers ペアの交換が起きている, もしくは起きていないという 2 つの状態の可能性がある. 図 3.4.4 は表面 2 次元 Brillouin zone について Kramers ペアの交換が起きている様子を表している. 図 3.4.4 の白丸はその点での時間反転分極が $P_\theta(\Lambda_i) = 0 \pmod{2}$ で黒丸は $P_\theta(\Lambda_i) = 1 \pmod{2}$ であることを表している. 白丸から白丸, 黒丸から黒丸への変化では $P_\theta(\Lambda_a) - P_\theta(\Lambda_b) = 0 \pmod{2}$ より Kramers ペアの交換は起こらないが, 白丸から黒丸への変化は $P_\theta(\Lambda_a) - P_\theta(\Lambda_b) = 1 \pmod{2}$ より Kramers ペアの交換が発生している. 結果的に Dirac cone が Kramers ペアが交換した点で生じている.

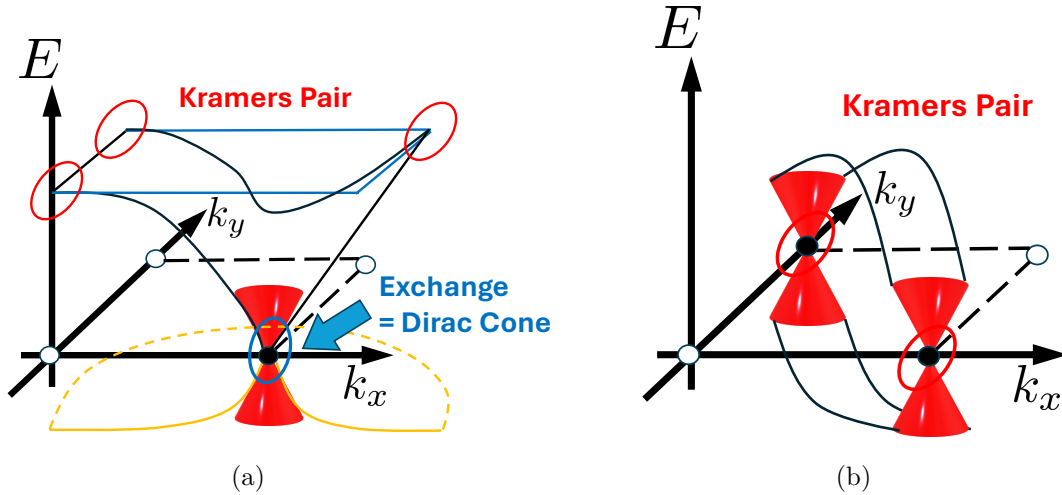


Figure 3.4.4: 3 次元トポロジカル絶縁体の表面 2 次元 Brillouin zone の様子. (a) は 4 つの時間反転対称性運動量のうち 1 点だけ Kramers ペアの交換が起こっており, 結果的に 1 つの Dirac cone が生成している. (b) は 2 つ Dirac cone が生じている様子である. Dirac cone 同士では Kramers ペアの交換は起こる必要はない.

強いトポロジカル絶縁体

最初に $\nu_0 = 1$ の強いトポロジカル絶縁体について考える. 強いトポロジカル絶縁体は 8 個の時間反転対称運動量の δ_i のうち, $\delta_i = -1$ が奇数個存在するので, どの表面 Brillouin zone でも必ず $P_\theta(\Lambda_i) = 1 \pmod{2}$ となる黒丸が 1 つもしくは 3 つ出現する. これは奇数個の Dirac cone が存在することに対応し, 奇数個

のフェルミアーキ*³が存在することに対応する。フェルミアーキの周りで電子は π の Berry 位相を獲得し、この Berry 位相は Hamiltonian の連続的な変形で取り除けない。これより 3 次元トポロジカル絶縁体の表面では奇数個の Dirac cone が安定して存在して、2 次元のトポロジカル金属になっている。

図 3.4.5 の一番右側は $\nu_0 = \nu_1 = \nu_2 = \nu_3 = 1$ の強いトポロジカル絶縁体の 001 表面とフェルミアーキを表している。黒の実線がフェルミアーキである。 $\nu_0 = 1$ よりどのような面を見ても必ず奇数個のフェルミアーキが存在している。

強いトポロジカル絶縁体の場合 2 次元表面に単一の Dirac cone の存在が可能であるが、純粋な 2 次元の格子系では Nielsen-Ninomiya の定理 [68, 69] もしくは Brillouin zone の周期性 [70] より、単一の Dirac cone は存在できない。この表面の単一 Dirac cone は格子 gauge 理論の言葉で domain wall fermion に対応する。2 次元表面はトポロジカルに非自明な絶縁体とトポロジカルに自明な真空との境界に対応し、それぞれの相は Dirac fermion の質量の符号が異なるので、その境界の fermion は massless な fermion (gapless な Dirac cone) となる。

弱いトポロジカル絶縁体

次に $\nu_0 = 0$ の弱いトポロジカル絶縁体について考える。ここで mod 2 逆格子ベクトルとして

$$\mathbf{G}_\nu = \nu_1 \mathbf{b}_1 + \nu_2 \mathbf{b}_2 + \nu_3 \mathbf{b}_3 \quad (3.4.37)$$

を定義する。弱いトポロジカル絶縁体の場合、 $\mathbf{G}_\nu$ に垂直な表面 Brillouin zone では Dirac cone は存在しない。なぜならば 4 つの時間反転対称運動量が全て白丸もしくは黒丸だからである。これは図 3.4.5 の一番左側に対応する。一方、 $\mathbf{G}_\nu$ に垂直でない表面 Brillouin zone では 2 個の Dirac cone が存在する。これは図 3.4.5 の真ん中の 2 つに対応する。しかしこの 2 個の Dirac cone は時間反転対称性を満たす摂動に対して robust ではない。

弱いトポロジカル絶縁体は 2 次元の時間反転対称を満たすトポロジカル絶縁体を重ねたものと解釈できる。今 2 次元トポロジカル絶縁体を z 方向に重ねた状況を考える。2 次元トポロジカル絶縁体間の相互作用を 0 とすると、電子状態は k_z に依存しない。 $k_z = 0$ での 4 つの δ_i の積は -1 となり、 $k_z = \pi/a$ でも 4 つの δ_i の積は -1 となり、 $\nu_0 = 1$ となる。しかし $\nu_3 = 1$ となるので、2 次元トポロジカル絶縁体を z 方向に重ねた絶縁体は弱いトポロジカル絶縁体になる。今、mod 2 逆格子ベクトルは $\mathbf{G}_\nu = \mathbf{b}_3$ で与えられるので $\mathbf{G}_\nu$ に垂直な平面である $k_z = 0, \pi/a$ の平面上では Dirac cone は存在しない。これは z 軸に平行な面は 2 次元トポロジカル絶縁体のバルクなので gapped であるという事実に対応する。

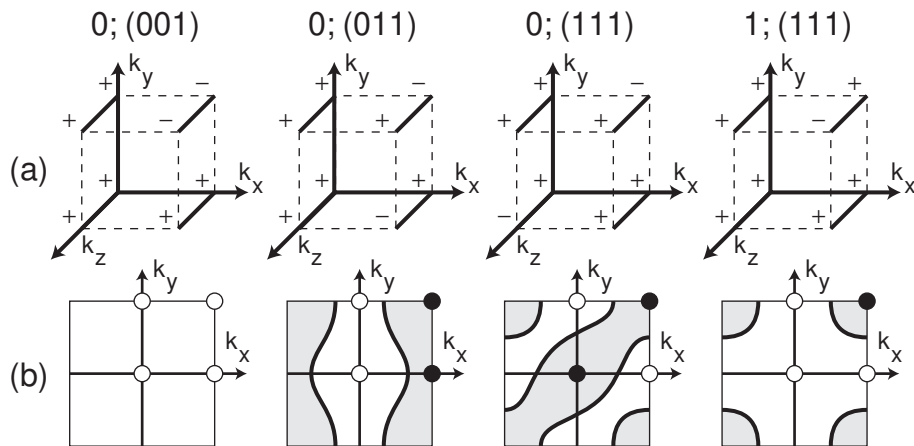


Figure 3.4.5: 3 次元トポロジカル絶縁体の 4 つの $\mathbb{Z}_2$ 不変量と表面状態の関係。[16] より引用。

*³フェルミエネルギーがバルクのギャップ中にある場合、表面状態のエネルギー分散とフェルミエネルギーが交差する点の集合は曲線となるが、この曲線をフェルミアーキと呼ぶ。

3.4.4 空間反転対称性がある場合の $\mathbb{Z}_2$ 不変量

空間反転対称性がある場合, $\mathbb{Z}_2$ 不変量の計算が驚くほど簡単になる. 具体的には

$$\delta_i = \frac{\sqrt{\det[w(\Gamma_i)]}}{\text{Pf}[w(\Gamma_i)]} \quad (3.4.38)$$

という量が空間反転対称性がある場合,

$$\delta_i = \prod_{\alpha=1}^N \xi_{2\alpha}(\Gamma_i) \quad (3.4.39)$$

となる. ここで $\xi_{2\alpha}(\Gamma_i)$ は時間反転対称運動量 Γ_i での $2m$ 番目のバンドのパリティである. Γ_i では Kramers 縮退のために $2\alpha - 1$ 番目と 2α 番目のバンドは縮退しているので, 2α 番目のバンドのみを計算すればよい. 以下ではこの事実を証明していく.

1 粒子 Hamiltonian $H(\mathbf{k})$ に作用する空間反転演算子を P とすると, 空間反転対称性があるとは $P^{-1}H(\mathbf{k})P = H(-\mathbf{k})$ を満たすことである. ここで付録の計算 (D.5.4), (D.6.4) より, 時間反転対称性と空間反転対称性があるとき, 非可換 Berry 曲率は拘束条件

$$f_{ij}(-\mathbf{k}) = w(\mathbf{k})[-f_{ij}^*(\mathbf{k})]w^\dagger(\mathbf{k}) \quad (3.4.40)$$

$$f_{ij}(-\mathbf{k}) = \pi(\mathbf{k})f_{ij}(\mathbf{k})\pi^\dagger(\mathbf{k}) \quad (3.4.41)$$

を満たす. ここで π 行列 $\pi(\mathbf{k})$ はユニタリ行列で空間反転演算子のセル周期関数による行列表示 $\pi_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \langle u_{\alpha, -\mathbf{k}} | P | u_{\beta, \mathbf{k}} \rangle$ である. 両辺トレースを取れば,

$$\text{Tr}[f_{ij}(-\mathbf{k})] = -\text{Tr}[f_{ij}(\mathbf{k})], \quad \text{Tr}[f_{ij}(-\mathbf{k})] = \text{Tr}[f_{ij}(\mathbf{k})] \quad (3.4.42)$$

が成り立つので, 時間反転対称性と空間反転対称性の両方がある場合, 非可換 Berry 曲率のトレースは常に 0 $\text{Tr}[f_{ij}(\mathbf{k})] = 0$ である. このとき, 非可換 Berry 接続のトレースが常に 0 である $\text{Tr}[a_i(\mathbf{k})] = 0$ ような gauge (transverse gauge) を取ることが可能である. この gauge の下で $\delta_i = \prod_{\alpha=1}^N \xi_{2\alpha}(\Gamma_i)$ と表せることを示す.

まず $2N \times 2N$ 行列である

$$v_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \langle u_{\alpha, \mathbf{k}} | PT | u_{\beta, \mathbf{k}} \rangle \quad (3.4.43)$$

を定義する. v 行列は反対称行列かつユニタリ行列である. 証明以下である.

$$\begin{aligned} v_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) &= \langle u_{\alpha, \mathbf{k}} | PT | u_{\beta, \mathbf{k}} \rangle = -\langle Pu_{\beta, \mathbf{k}} | T | u_{\alpha, \mathbf{k}} \rangle \\ &= -\langle u_{\beta, \mathbf{k}} | PT | u_{\alpha, \mathbf{k}} \rangle = -v_{\beta\alpha}(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (3.4.44)$$

途中で T の性質 $\langle \psi_{\mathbf{k}} | T | \phi_{\mathbf{k}} \rangle = -\langle \phi_{\mathbf{k}} | T | \psi_{\mathbf{k}} \rangle$ と P のユニタリ性 $P^\dagger = P$ を使った. また,

$$\begin{aligned} \sum_{\beta} v_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) v_{\gamma\beta}^*(\mathbf{k}) &= \sum_{\beta} \langle u_{\alpha, \mathbf{k}} | PT | u_{\beta, \mathbf{k}} \rangle \langle u_{\gamma, \mathbf{k}} | PT | u_{\beta, \mathbf{k}} \rangle^* \\ &= -\sum_{\beta} \langle u_{\alpha, \mathbf{k}} | PT | u_{\beta, \mathbf{k}} \rangle \langle u_{\beta, \mathbf{k}} | PT | u_{\gamma, \mathbf{k}} \rangle \\ &= -\langle u_{\alpha, \mathbf{k}} | PTPT | u_{\gamma, \mathbf{k}} \rangle \\ &= \langle u_{\alpha, \mathbf{k}} | u_{\gamma, \mathbf{k}} \rangle = \delta_{\alpha\gamma} \end{aligned} \quad (3.4.45)$$

である. 途中で $T^2 = -1$ を使った. したがって v 行列は反対称行列かつユニタリ行列であると示された. つまり v 行列に対してパフィアンが定義でき, その大きさは 1 であると言える. さらに v 行列は

$$\text{Tr}[a(\mathbf{k})] = \frac{i}{2} \text{Tr}[v^\dagger(\mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{k}} v(\mathbf{k})] \quad (3.4.46)$$

を満たす. 証明は右辺を単純に計算すればよい.

$$\begin{aligned}
\frac{i}{2} \text{Tr} [v^\dagger(\mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{k}} v(\mathbf{k})] &= \frac{i}{2} \langle u_{\beta, \mathbf{k}} | \text{PT} | u_{\alpha, \mathbf{k}} \rangle^* \nabla_{\mathbf{k}} \langle u_{\beta, \mathbf{k}} | \text{PT} | u_{\alpha, \mathbf{k}} \rangle \\
&= \frac{i}{2} \langle \text{PT} u_{\alpha, \mathbf{k}} | u_{\beta, \mathbf{k}} \rangle (\langle \nabla_{\mathbf{k}} u_{\beta, \mathbf{k}} | \text{PT} | u_{\alpha, \mathbf{k}} \rangle + \langle u_{\beta, \mathbf{k}} | \text{PT} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{\alpha, \mathbf{k}} \rangle) \\
&= \frac{i}{2} (\langle \nabla_{\mathbf{k}} u_{\beta, \mathbf{k}} | \text{PT} | u_{\alpha, \mathbf{k}} \rangle \langle \text{PT} u_{\alpha, \mathbf{k}} | u_{\beta, \mathbf{k}} \rangle + \langle \text{PT} u_{\alpha, \mathbf{k}} | u_{\beta, \mathbf{k}} \rangle \langle u_{\beta, \mathbf{k}} | \text{PT} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{\alpha, \mathbf{k}} \rangle) \\
&= \frac{i}{2} (\langle \nabla_{\mathbf{k}} u_{\beta, \mathbf{k}} | u_{\beta, \mathbf{k}} \rangle + \langle \text{PT} u_{\alpha, \mathbf{k}} | \text{PT} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{\alpha, \mathbf{k}} \rangle) \\
&= -i \langle u_{\alpha, \mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{\alpha, \mathbf{k}} \rangle = \text{Tr} [\mathbf{a}(\mathbf{k})].
\end{aligned} \tag{3.4.47}$$

ここで $\langle \nabla_{\mathbf{k}} u_{\alpha, \mathbf{k}} | u_{\beta, \mathbf{k}} \rangle = -\langle u_{\alpha, \mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} u_{\beta, \mathbf{k}} \rangle$ と時間反転対称性演算子の性質 $\langle \mathbf{T} \psi_{\mathbf{k}} | \mathbf{T} \phi_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \phi_{\mathbf{k}} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle$ を使った. 公式 (3.4.46) はさらに変形できる.

$$\begin{aligned}
\text{Tr} [\mathbf{a}(\mathbf{k})] &= \frac{i}{2} \text{Tr} [v^\dagger(\mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{k}} v(\mathbf{k})] = \frac{i}{2} \text{Tr} [\nabla_{\mathbf{k}} \log v(\mathbf{k})] \\
&= \frac{i}{2} \nabla_{\mathbf{k}} \log \det [v(\mathbf{k})] = i \nabla_{\mathbf{k}} \log \text{Pf}[v(\mathbf{k})].
\end{aligned} \tag{3.4.48}$$

セル周期関数 $|u_{\alpha, \mathbf{k}}\rangle$ の位相が全ての $\mathbf{k}$ に対して $\text{Pf}[v(\mathbf{k})] = 1$ を満たすように適当に gauge 変換すれば $\text{Tr} [\mathbf{a}(\mathbf{k})] = 0$ とできる.

次に w 行列を計算する. 時間反転対称性運動量 Γ_i において, $P^{-1}H(\Gamma_i)P = H(\Gamma_i)$ より, Hamiltonian と P の同時固有状態が取れるから, $P |u_{\alpha, \Gamma_i}\rangle = \xi_{\alpha}(\Gamma_i) |u_{\alpha, \Gamma_i}\rangle$ を満たすことを用いると,

$$\begin{aligned}
w_{\alpha\beta}(\Gamma_i) &= \langle u_{\alpha, -\Gamma_i} | \mathbf{T} | u_{\beta, \Gamma_i} \rangle = \langle u_{\alpha, \Gamma_i} | \text{PPT} | u_{\beta, \Gamma_i} \rangle \\
&= \xi_{\alpha}(\Gamma_i) \langle u_{\alpha, \Gamma_i} | \text{PT} | u_{\beta, \Gamma_i} \rangle = \xi_{\alpha}(\Gamma_i) v_{\alpha\beta}(\Gamma_i)
\end{aligned} \tag{3.4.49}$$

が成立する. したがって両辺パフィアンを取ると, $\text{Pf}[v(\mathbf{k})] = 1$ より,

$$\text{Pf}[w(\Gamma_i)] = \prod_{\alpha=1}^N \xi_{2\alpha}(\Gamma_i) \text{Pf}[v(\Gamma_i)] = \prod_{\alpha=1}^N \xi_{2\alpha}(\Gamma_i) \tag{3.4.50}$$

となる. 以上より

$$\delta_i = \frac{\sqrt{\det [w(\Gamma_i)]}}{\text{Pf}[w(\Gamma_i)]} = \frac{\sqrt{\left(\prod_{\alpha=1}^N \xi_{2\alpha}(\Gamma_i) \text{Pf}[v(\Gamma_i)] \right)^2}}{\prod_{\alpha=1}^N \xi_{2\alpha}(\Gamma_i) \text{Pf}[v(\Gamma_i)]} = \prod_{\alpha=1}^N \xi_{2\alpha}(\Gamma_i) \tag{3.4.51}$$

であり, 空間反転対称性がある場合 δ_i の計算が驚くほど簡潔になることが示された. 空間反転対称性がない場合, δ_i を数値的に計算しようとしたら 1 回波動関数を計算し $\mathbf{k} = 0$ から他の時間反転対称性運動量に連続的につながる分枝を選んでから w 行列を構成しその $\det$ と Pf を計算する必要があった. 空間反転対称性が入ることで, Brillouin zone 中の代表的な点にトポロジカルな情報が集約してトポロジカル不変量の計算が簡潔になったと解釈できる. これに伴い, $\mathbb{Z}_2$ 不変量も簡潔に書けるようになる. 例えば 3 次元の ν_0 不変量は

$$\begin{aligned}
(-1)^{\nu_0} &= \prod_{n_1, n_2, n_3=0,1} \delta(\Lambda_{i=(n_1 n_2 n_3)}) = \prod_{n_1, n_2, n_3=0,1} \frac{\sqrt{\det [w(\Gamma_{n_1 n_2 n_3})]}}{\text{Pf}[w(\Gamma_{n_1 n_2 n_3})]} \\
&= \prod_{n_1, n_2, n_3=0,1} \prod_{\alpha=1}^N \xi_{2\alpha}(\Gamma_{n_1 n_2 n_3})
\end{aligned} \tag{3.4.52}$$

となる. つまり ν_0 は 8 個の時間反転対称性運動量におけるバンドのパリティの積で計算できる. このトポロジカル不変量の簡素化はトポロジカル絶縁体を示す物質の探索に大きく貢献する. 実際, 空間反転対称性がある場合トポロジカル不変量が簡潔に書けると示した Fu と Kane による論文 [17] の後半で, 3 次元トポロジカル絶縁体を示す物質の具体的な予言を行っている. この予言のおかげで $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ が実験的に初めて確認された 3 次元トポロジカル絶縁体になった [52].

3.4.5 Kane-Mele 模型と Fu-Kane-Mele 模型の $\mathbb{Z}_2$ 不変量の計算

Kane-Mele 模型や Fu-Kane-Mele 模型は式 (3.2.7), (3.3.10) のように

$$H(\mathbf{k}) = \sum_{a=1}^5 R_a(\mathbf{k}) \alpha^a \quad (3.4.53)$$

と書ける^{*4}. ここで時間反転対称性より, α 行列は式 (3.2.15) を満たすから, 係数の $R_a(\mathbf{k})$ は

$$R_a(-\mathbf{k}) = \begin{cases} -R_a(\mathbf{k}) & (a = 1, 2, 3, 5) \\ +R_a(\mathbf{k}) & (a = 4) \end{cases} \quad (3.4.54)$$

を満たす. ここで時間反転対称性運動量 $\mathbf{k} = \Gamma_i$ のとき, $\Gamma_i = -\Gamma_i$ を満たすから,

$$R_a(\Gamma_i) = \begin{cases} 0 & (a = 1, 2, 3, 5) \\ R_a(\Gamma_i) & (a = 4) \end{cases} \quad (3.4.55)$$

を満たす. つまり $\mathbf{k} = \Gamma_i$ のとき, Hamiltonian は $H(\mathbf{k}) = R_4(\mathbf{k})\alpha^4$ と簡潔に書ける. ここで α^4 は空間反転演算子 P と同一である. $\mathbb{Z}_2$ 不変量を求めるために $\mathbf{k} = \Gamma_i$ での占有バンドのパリティを求めるが, これは α^4 の固有値で与えられる. $|+\rangle, |-\rangle$ をそれぞれパリティが正, 負の状態とする. $|+\rangle, |-\rangle$ のエネルギーは

$$\langle + | H(\Gamma_i) | + \rangle = R_4(\Gamma_i), \quad \langle - | H(\Gamma_i) | - \rangle = -R_4(\Gamma_i) \quad (3.4.56)$$

となる. したがって $R_4(\Gamma_i) > 0$ のとき, 占有バンドのパリティは負であり, $R_4(\Gamma_i) < 0$ のとき, 占有バンドのパリティは正である. 以上より, $\mathbf{k} = \Gamma_i$ での占有バンドのパリティは

$$\xi(\Gamma_i) = -\text{sgn}[R_4(\Gamma_i)] \quad (3.4.57)$$

で与えられる.

Kane-Mele 模型の $\mathbb{Z}_2$ 不変量

Kane-Mele 模型では $R_4(\Gamma_{n_1 n_2}) = t \sum_{i=1,2,3} \cos \Gamma_{n_1 n_2} \cdot \boldsymbol{\delta}_i$ なので, 2 次元トポロジカル絶縁体を特徴付ける $\mathbb{Z}_2$ 不変量は

$$(-1)^\nu = \prod_{n_1=0,1} \prod_{n_2=0,1} \text{sgn} \left[t \sum_{i=1,2,3} \cos \Gamma_{n_1 n_2} \cdot \boldsymbol{\delta}_i \right] \quad (3.4.58)$$

で与えられる. 実際, $\Gamma_{n_1 n_2} = \frac{1}{2}(n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2)$ で $\Gamma_{00}, \Gamma_{10}, \Gamma_{01}, \Gamma_{11}$ を代入して計算すると,

$$\text{sgn}[R_4(\Gamma_{00})] = +1, \quad \text{sgn}[R_4(\Gamma_{10})] = +1, \quad \text{sgn}[R_4(\Gamma_{01})] = +1, \quad \text{sgn}[R_4(\Gamma_{11})] = -1 \quad (3.4.59)$$

なので, $M = 0$ の Kane-Mele 模型は t, λ の値に関わらず $\nu = 1$ の 2 次元トポロジカル絶縁体である.

Fu-Kane-Mele 模型の $\mathbb{Z}_2$ 不変量

Fu-Kane-Mele 模型では $R_4(\Gamma_{n_1 n_2 n_3}) = \sum_{i=1}^4 t_i \cos \Gamma_{n_1 n_2 n_3} \cdot \boldsymbol{\delta}_i$ なので, 3 次元の強いトポロジカル絶縁体を特徴付ける $\mathbb{Z}_2$ 不変量は

$$(-1)^{\nu_0} = \prod_{n_1=0,1} \prod_{n_2=0,1} \prod_{n_3=0,1} \text{sgn} \left[\sum_{i=1}^4 t_i \cos \Gamma_{n_1 n_2 n_3} \cdot \boldsymbol{\delta}_i \right] \quad (3.4.60)$$

^{*4}ここでは Kane-Mele 模型で $R_{45}(\mathbf{k}) = M = 0$ の空間反転対称性を満たす場合を考える.

で与えられる. 実際, $\Gamma_{n_1 n_2 n_3} = \frac{1}{2}(n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + n_3 \mathbf{b}_3)$ で $\Gamma_{000}, \Gamma_{100}, \Gamma_{010}, \Gamma_{110}, \Gamma_{001}, \Gamma_{101}, \Gamma_{011}, \Gamma_{111}$ を代入して計算すると, $t_1 = t + \delta t_1, t_2 = t_3 = t_4 = t$ で $0 < \delta t_1 < 2t$ のとき,

$$\begin{aligned} \text{sgn}[R_4(\Gamma_{000})] &= +1, & \text{sgn}[R_4(\Gamma_{100})] &= +1, & \text{sgn}[R_4(\Gamma_{010})] &= +1, & \text{sgn}[R_4(\Gamma_{110})] &= +1 \\ \text{sgn}[R_4(\Gamma_{001})] &= +1, & \text{sgn}[R_4(\Gamma_{101})] &= +1, & \text{sgn}[R_4(\Gamma_{011})] &= +1, & \text{sgn}[R_4(\Gamma_{111})] &= -1 \end{aligned} \quad (3.4.61)$$

なので, Fu-Kane-Mele 模型は $\nu_0 = 1$ の 3 次元の強いトポロジカル絶縁体である.

ここで改めて境界がある Fu-Kane-Mele 模型のバンド図 3.3.3 を見てみる. $\nu_0 = 0$ の弱いトポロジカル絶縁体の場合, 図の上 2 枚が対応するが, Dirac 点が 0 個か 2 個であり偶数個である. また図 3.3.3 は (111) 方向に境界があるとしているが, 0; (111) の左上の場合, mod 2 逆格子ベクトル $\mathbf{G}_\nu$ に垂直な方向に境界があるから Dirac cone は 0 である. 一方, $\nu_0 = 1$ の強いトポロジカル絶縁体の図 3.3.3 の下 2 枚は, Dirac 点が 1 つまた 3 つであり奇数個である. この Dirac 点の個数は時間反転対称性を守る摂動により変化するが, 奇数個であることは変わらない. つまり強いトポロジカル絶縁体場合, 常に表面は gapless な状態である.

Chapter 4

3次元トポロジカル絶縁体の有効場理論

トポロジカル絶縁体の理論が確立した後、それを記述する有効場の理論が Qi, Hughes, Zhang によって明らかになった [18]. この論文によるとトポロジカル絶縁体の有効作用は電場 $\mathbf{E}$ と磁場 $\mathbf{B}$ が結合する形で現れる. これはトポロジカル絶縁体中で磁場により電気分極が誘起され、電場により磁化が誘起されるというトポロジカル電気磁気効果を预言する. 本章ではまず次元縮小という手法を使い3次元トポロジカル絶縁体の有効作用を導出し、そしてその特徴的な電磁応答であるトポロジカル電気磁気効果について議論する.

4.1 量子ホール効果と Chern-Simons gauge 理論

4.1.1 2次元量子ホール効果

2次元量子ホール効果を記述する場の理論を考える [18, 50, 71, 72]. 2次元量子ホール効果では

$$j^i = \sigma_H \epsilon^{ij} E_j \quad (4.1.1)$$

のような電流が流れる. さらに電荷保存則 $\partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$ より,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\partial_i j^i = -\sigma_H \nabla \times \mathbf{E} = \sigma_H \frac{\partial B_z}{\partial t} \quad (4.1.2)$$

が成立する. 途中で Faraday 則 $\nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} = 0$ を用いた. $j^0 = \rho$ とすれば、電荷と電流の式をまとめて

$$j^\mu = -\sigma_H \epsilon^{\mu\nu\rho} \partial_\nu A_\rho = -\frac{Ch_1}{2\pi} \epsilon^{\mu\nu\rho} \partial_\nu A_\rho \quad (4.1.3)$$

と表せる. ここで自然単位系を使い、 $\sigma_H = (e^2/h)Ch_1 = (e^2/2\pi\hbar)Ch_1 = (1/2\pi)Ch_1$ を使った. ∂_μ, A_μ などの定義は付録 A を参照されたい. ここで Ch_1 は第 1 Chern 数であり、

$$Ch_1 = \frac{1}{4\pi} \int d^2k \epsilon^{ij} \text{Tr} [f_{ij}] \quad (4.1.4)$$

で与えられる. カレント (4.1.3) を再現する有効作用を $S_{\text{CS}}^{(2+1)}$ とすると、

$$j^\mu = \frac{\delta S_{\text{CS}}^{(2+1)}}{\delta A_\mu} \quad (4.1.5)$$

という関係式より、

$$S_{\text{CS}}^{(2+1)} = -\frac{Ch_1}{4\pi} \int d^2x dt \epsilon^{\mu\nu\rho} A_\mu \partial_\nu A_\rho \quad (4.1.6)$$

である. 実際 A_μ について変分を取ってカレントを計算すると,

$$\begin{aligned}
 \delta S_{\text{CS}}^{(2+1)} &= S_{\text{CS}}^{(2+1)}[A_\mu + \delta A_\mu] - S_{\text{CS}}^{(2+1)}[A_\mu] \\
 &= -\frac{Ch_1}{4\pi} \int d^2x dt \epsilon^{\mu\nu\rho} (\delta A_\mu \partial_\nu A_\rho + A_\mu \partial_\nu \delta A_\rho) \\
 &= -\frac{Ch_1}{2\pi} \int d^2x dt \epsilon^{\mu\nu\rho} \delta A_\mu \partial_\nu A_\rho \\
 \longrightarrow j^\mu &= \frac{\delta S_{\text{CS}}^{(2+1)}}{\delta A_\mu} = -\frac{Ch_1}{2\pi} \epsilon^{\mu\nu\rho} \partial_\nu A_\rho
 \end{aligned} \tag{4.1.7}$$

となるので, 有効作用 $S_{\text{CS}}^{(2+1)}$ は正しいことが確認できた. 時間反転 $A_0 \rightarrow A_0, \mathbf{A} \rightarrow -\mathbf{A}$ において作用 $S_{\text{CS}}^{(2+1)}$ は不変でない. これは2次元量子ホール効果は時間反転対称性を持たないことに対応する.

2次元量子ホール効果を記述する有効作用 $S_{\text{CS}}^{(2+1)}$ は (2+1) 次元の **Chern-Simons gauge 理論** と呼ばれる. Chern-Simons gauge 理論は時空の次元が奇数のときに定義できる場の理論でトポロジカルな効果を含んでいる. (2+1)-d の Chern-Simons 作用は Maxwell 方程式よりも微分を含んでいないので, 低エネルギーではくりこみ群の観点から Maxwell 作用より Chern-Simons 作用の方が relevant である. したがって低エネルギーでの量子ホール効果のトポロジカルな電磁応答は厳密に Chern-Simons 作用 (4.1.6) に全て含まれる [50].

4.1.2 4次元量子ホール効果

Chern-Simons gauge 理論は時空次元が奇数のときに定義できる. この事実は Zhang と Hu が 2 次元の量子ホール効果を 4 次元に拡張させることに繋がった [6, 7]. 2次元の量子ホール効果の有効理論が (2+1)-d Chern-Simons gauge 理論であることの対応から, 4次元量子ホール効果の有効理論は (4+1)-d Chern-Simons gauge 理論である. 有効作用は

$$S_{\text{CS}}^{4+1} = \frac{Ch_2}{24\pi^2} \int d^4x dt \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma\tau} A_\mu \partial_\nu A_\rho \partial_\sigma A_\tau \tag{4.1.8}$$

である. ここで Ch_2 は第 2 Chern 数であり, 非可換 Berry 接続 a_i と非可換 Berry 曲率 f_{ij} を用いて

$$Ch_2 = \frac{1}{32\pi^2} \int d^4k \epsilon^{ijkl} \text{Tr} [f_{ij} f_{kl}] \tag{4.1.9}$$

$$f_{ij}^{\alpha\beta} = \partial_{k_i} a_j^{\alpha\beta} - \partial_{k_j} a_i^{\alpha\beta} + i[a_i, a_j]^{\alpha\beta} \tag{4.1.10}$$

$$a_i^{\alpha\beta} = -i \left\langle u_{\alpha, \mathbf{k}} \left| \frac{\partial}{\partial k_i} \right| u_{\beta, \mathbf{k}} \right\rangle \tag{4.1.11}$$

と表される. S_{CS}^{2+1} は時間反転対称を持たなかったが, S_{CS}^{4+1} は時間反転対称を持つ. これは 4次元量子ホール効果は時間反転対称性を持つことに対応する. 実は 4次元量子ホール効果は初めて発見された時間反転対称性を満たすトポロジカルに非自明な現象である. 実際, それまでに見つけていたトポロジカルに非自明な現象である量子ホール効果や Chern 絶縁体は時間反転対称性を持たなかったし, むしろ時間反転対称性の破れが本質であった [5]. また他のトポロジカルに非自明な現象としてトポロジカル秩序が発見されていたが, トポロジカル秩序は対称性を必要としない [1]. 現代的に見れば, 4次元量子ホール効果や 2次元, 3次元の時間反転対称性なトポロジカル絶縁体は時間反転対称性を満たす範囲でトポロジカルに非自明な現象が発生する. このようにある対称性を満たす範囲内でトポロジカルに非自明な現象が起こる相を **対称性に守られたトポロジカル相 (Symmetry Protected Topological Phases, SPT 相)** と呼ぶ.

作用 S_{CS}^{4+1} を A_μ について変分を取るとカレントについての式

$$j^\mu = \frac{Ch_2}{8\pi^2} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma\tau} \partial_\nu A_\rho \partial_\sigma A_\tau \tag{4.1.12}$$

が得られる。これは外場 A_μ に対しての非線形応答の式である。具体例として $A_x = 0, A_y = B_z x, A_w = A_t = 0$ とする。式 (4.1.12) に代入すると、 w 方向のカレント

$$j^w = \frac{Ch_2}{4\pi^2} B_z E_z \quad (4.1.13)$$

が得られる。ここで x, y 方向に周期境界条件を課して、 x, y 平面で積分すると、 w 方向の x, y 平面を貫くカレントの総量が得られ、

$$I^w = \int dxdy j^w = \frac{Ch_2}{4\pi^2} \left(\int dxdy B_z \right) E_z = \frac{Ch_2 N_{xy}}{2\pi} E_z \quad (4.1.14)$$

となる。ここで $N_{xy} = \int dxdy B_z / 2\pi = \int dxdy B_z / (h/e)$ で x, y 平面を貫く磁束を磁束量子で割った量である。つまり N_{xy} は x, y 平面を貫く磁束量子の本数である。これがまさに [6] で提案された 4 次元量子ホール効果の概要である。

4.2 3次元トポロジカル絶縁体の有効作用

時間反転対称性な 3 次元トポロジカル絶縁体の有効場の理論を導出する。4 次元量子ホール効果の次元を 1 つ下げるという方針で議論する。4 次元量子ホール効果は 3 次元トポロジカル絶縁体より 1 つ次元の高い時間反転対称性を満たすトポロジカルに非自明な現象であり、その有効場の理論は (4+1)-d Chern-Simons gauge 理論で与えられることが既に分かっている。この有効場の理論の空間次元を 1 つ下げれば時間反転対称性を満たすトポロジカルに非自明な現象の有効場の理論、つまり 3 次元トポロジカル絶縁体の有効場の理論が導出されると予想できる。このように 1 つ次元の高い理論を考え、次元を 1 つ落とすことで求める理論を得る方法を **次元縮小 (Dimensional reduction)** と呼ぶ。この節では 4 次元量子ホール効果からの次元縮小により 3 次元トポロジカル絶縁体の有効場の理論が導出でき、またトポロジカルバンド理論で導入したものと同一な $\mathbb{Z}_2$ 不変量が定義できることを示す。

4.2.1 3次元トポロジカル絶縁体への次元縮小

図 4.2.1 のように w 方向に周期境界条件を取った 4 次元的な円筒を考える。この円筒の中に磁束 $\Phi(t, \mathbf{x})$ を挿入する。ベクトルポテンシャルは $A_\mu = (A_0, A_1, A_2, A_3, \Phi(t, \mathbf{x})/L_w)$ として、 w 方向に依存しないようにする。最終的に w 方向の長さ L_w を 0 にすることにより空間次元を 1 つ落とす。したがって 4 次元量子ホール効果の有効作用は

$$\begin{aligned} S_{\text{CS}}^{4+1} &= \frac{Ch_2}{24\pi^2} \int d^4x dt \left(\epsilon^{4\nu\rho\sigma\tau} A_4 \partial_\nu A_\rho \partial_\sigma A_\tau + \epsilon^{\mu\nu 4\sigma\tau} A_\mu \partial_\nu A_4 \partial_\sigma A_\tau + \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma 4} A_\mu \partial_\nu A_\rho \partial_\sigma A_4 \right) \\ &= \frac{Ch_2}{8\pi^2} \int d^4x dt \frac{\Phi(t, \mathbf{x})}{L_w} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \partial_\mu A_\nu \partial_\rho A_\sigma \\ &= \frac{1}{8\pi^2} \int d^3x dt \theta(t, \mathbf{x}) \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \partial_\mu A_\nu \partial_\rho A_\sigma \end{aligned} \quad (4.2.1)$$

のように次元縮小される。ここで theta 場 $\theta(t, \mathbf{x}) = Ch_2 \Phi(t, \mathbf{x})$ を導入した。次に $\theta(t, \mathbf{x})$ を具体的に表す。第 2 Chern 数 Ch_2 を付録 (D.8.3) の式を使って変形すると、

$$\begin{aligned} Ch_2 &= \frac{1}{8\pi^2} \int d^4k \partial_i \epsilon^{ijkl} \text{Tr} \left[a_j \partial_k a_l + \frac{2}{3} i a_j a_k a_l \right] \\ &= \int dk_w \frac{\partial P_3}{\partial k_w} \end{aligned} \quad (4.2.2)$$

と書ける。ここで

$$P_3 = -\frac{1}{8\pi^2} \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} \left[a_i \partial_j a_k + \frac{2}{3} i a_i a_j a_k \right] \quad (4.2.3)$$

は1次元の分極に対応する3次元の電気磁気分極と呼ばれるものである。実は $P_3 = Ch_2\Phi(t, \mathbf{x})/2\pi$ という関係がある。これは両辺 Φ について微分した後、 Φ について積分して $\int \partial P_3 / \partial \Phi d\Phi = Ch_2$ を使えば簡単に示せる。以上より、 $\theta(t, \mathbf{x})$ 表式は

$$\begin{aligned}\theta(t, \mathbf{x}) &= Ch_2\Phi(t, \mathbf{x}) = 2\pi P_3 \\ &= -\frac{1}{4\pi} \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} \left[a_i \partial_j a_k + \frac{2}{3} i a_i a_j a_k \right]\end{aligned}\quad (4.2.4)$$

となる。まとめると、物理定数を復活させて、4次元量子ホール効果の有効作用から次元縮小を経て得られた3次元の作用

$$\begin{aligned}S_{3D} &= \frac{e^2}{8\pi^2\hbar c} \int d^3x dt \theta(t, \mathbf{x}) \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \partial_\mu A_\nu \partial_\rho A_\sigma \\ &= \frac{e^2}{4\pi^2\hbar c} \int d^3x dt \theta(t, \mathbf{x}) \mathbf{E}(t, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{B}(t, \mathbf{x})\end{aligned}\quad (4.2.5)$$

は3次元トポロジカル絶縁体を記述する有効作用になっている。なぜ3次元トポロジカル絶縁体の有効作用になっているのかという点で後で示すが、作用 S_{3D} の中に登場する θ または P_3 はトポロジカルバンド理論で説明した $\mathbb{Z}_2$ 指数と等価なものを与えるからである。3次元トポロジカル絶縁体の有効作用 S_{3D} は電場と磁場の内積の形が入っており、このような項を **Axion 項** と呼ぶ。Axion 項の帰結として数々の非自明な現象が予言される。

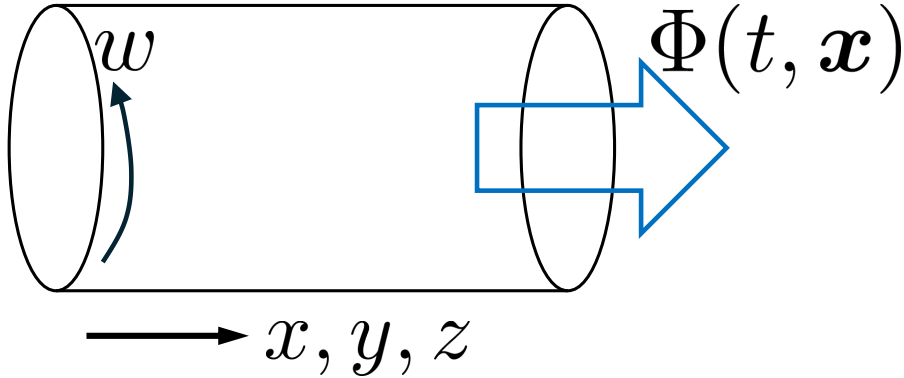


Figure 4.2.1: 磁束を挿入する様子。図の方向に磁束を挿入することでこの磁束は w 軸方向のベクトルポテンシャルとして作用する。最終的に $L_w \rightarrow 0$ の極限を取ることで、1次元の低い理論が得られる。

4.2.2 3次元トポロジカル絶縁体の $\mathbb{Z}_2$ 分類

付録の公式 (D.7.3) より電気磁気分極 P_3 の gauge 変換は

$$\begin{aligned}P'_3 &= -\frac{1}{8\pi^2} \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} \left[a'_i \partial_j a'_k + \frac{2}{3} i a'_i a'_j a'_k \right] \\ &= P_3 + \frac{1}{24\pi^2} \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} \left[(U^\dagger \partial_i U) (U^\dagger \partial_j U) (U^\dagger \partial_k U) \right]\end{aligned}\quad (4.2.6)$$

のようになる。ここで第2項の $1/(24\pi^2) \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} [(U^\dagger \partial_i U) (U^\dagger \partial_j U) (U^\dagger \partial_k U)]$ は3次元の巻き付き数で整数となる。つまり P_3 は整数の不定性を持つ。この電気磁気分極の整数の不定性は P_3 は単位胞内で定義されることを示している。ここでさらに P_3 に時間反転対称性を課してみる。時間反転対称性のもとで Berry 接続は w 行列を用いて

$$a_i(-\mathbf{k}) = w(\mathbf{k}) a_i^*(\mathbf{k}) w^\dagger(\mathbf{k}) + i w(\mathbf{k}) \partial_i w^\dagger(\mathbf{k}) \quad (4.2.7)$$

のように変換するので, これを P_3 に代入すると, 付録公式 (D.7.4) から

$$2P_3 = \frac{1}{24\pi^2} \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} \left[\left(w^\dagger \partial_i w \right) \left(w^\dagger \partial_j w \right) \left(w^\dagger \partial_k w \right) \right] \quad (4.2.8)$$

となる. 右辺は3次元の巻き付数であるから整数となる. したがって時間反転対称性の下で

$$P_3 = 0, \frac{1}{2} \pmod{1} \quad (4.2.9)$$

となる. この P_3 は3次元トポロジカル絶縁体の $\mathbb{Z}_2$ 不変量を与える. $P_3 = 0$ のとき, $\theta(t, \mathbf{x}) = 2\pi P_3 = 0$ より, 有効作用は $S_{3D} = 0$ となるから, 通常の絶縁体と同じである. 一方, $P_3 = 1/2$ のとき, $\theta(t, \mathbf{x}) = 2\pi P_3 = \pi$ より, 有効作用は

$$S_{3D} = \frac{e^2}{4\pi\hbar c} \int d^3x dt \mathbf{E}(t, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{B}(t, \mathbf{x}) \quad (4.2.10)$$

となり, この有効作用 S_{3D} は3次元トポロジカル絶縁体の電磁応答を記述する. したがって $P_3 = 0$ のときは系は通常のバンド絶縁体で, $P_3 = 1/2$ のときは系はトポロジカル絶縁体となり, P_3 は3次元トポロジカル絶縁体の $\mathbb{Z}_2$ 不変量を与える.

今回, 場の理論的な議論から3次元トポロジカル絶縁体の $\mathbb{Z}_2$ 不変量を導出した. 一方でトポロジカルバンド理論から3次元トポロジカル絶縁体には ν_0 という $\mathbb{Z}_2$ 不変量が存在するということも議論した. この2つの $\mathbb{Z}_2$ 不変量

$$(-1)^{\nu_0} = \prod_{n_1, n_2, n_3=0,1} \delta(\Lambda_{i=(n_1 n_2 n_3)}) \quad (4.2.11)$$

$$P_3 = -\frac{1}{8\pi^2} \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} \left[a_i \partial_j a_k + \frac{2}{3} i a_i a_j a_k \right] \quad (4.2.12)$$

は $(-1)^{\nu_0} = (-1)^{2P_3}$ という関係が成り立つことから, 同一なものであるということが [73] で示されている. ν_0 という $\mathbb{Z}_2$ 不変量は系がトポロジカル絶縁体か通常の絶縁体が簡単に判別でき, P_3 という $\mathbb{Z}_2$ 不変量は実際に系の応答量と密接に結びついているという特徴があり, それぞれの $\mathbb{Z}_2$ 不変量にはそれぞれの利点がある^{*1}.

4.3 3次元トポロジカル絶縁体のトポロジカルな電磁応答

Section. 4.2において3次元トポロジカル絶縁体の有効場の理論を導出した. 本節では3次元トポロジカル絶縁体の応答現象を議論していく. まず作用 (4.2.5) について $\theta = \pi \pmod{2\pi}$ より, 2π の不定性を入れて書き下すと,

$$S_{3D} = \frac{2n+1}{8\pi} \int d^3x dt \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \partial_\mu A_\nu \partial_\rho A_\sigma \quad (4.3.1)$$

となる. ここで系が周期境界条件など閉多様体であるとき, 作用 S_{3D} は時間反転対称性を満たすことが示される. 実際, 積分 $\int d^3x dt \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \partial_\mu A_\nu \partial_\rho A_\sigma = 1/4 \int d^3x dt \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma}$ と第2Chern数の定義式とを比較することで,

$$S_{3D} = \frac{2n+1}{32\pi} \int d^3x dt \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma} = \frac{2n+1}{32\pi} 32\pi^2 Ch_2 = (2n+1)\pi Ch_2 \quad (4.3.2)$$

であることが示せる. 量子論は分配関数によって記述されるので,

$$Z = e^{iS_{3D}} = e^{i(2n+1)\pi Ch_2} = (-1)^{Ch_2} \quad (4.3.3)$$

^{*1} P_3 は弱いトポロジカル絶縁体を区別しないことに注意する.

となり, n に依存しない. 時間反転の下で作用は

$$\begin{aligned} S_{3D} &= \frac{2n+1}{4\pi} \int d^3x dt \mathbf{E} \cdot \mathbf{B} \\ &\rightarrow -\frac{2n+1}{4\pi} \int d^3x dt \mathbf{E} \cdot \mathbf{B} \end{aligned} \quad (4.3.4)$$

となるが, n に依存しないので $n \rightarrow -(n+1)$ と変更すれば, 時間反転の下で

$$S_{3D} \rightarrow -\frac{2n+1}{4\pi} \int d^3x dt \mathbf{E} \cdot \mathbf{B} = \frac{2n+1}{4\pi} \int d^3x dt \mathbf{E} \cdot \mathbf{B} = S_{3D} \quad (4.3.5)$$

となるので, 系が閉多様体であるとき作用 (4.2.5) は時間反転対称性を満たす. これは3次元トポロジカル絶縁体が時間反転対称性を持つことと整合している.

一方, 系が開放端条件を持つときは状況が異なる. このとき S_{3D} は量子化しないので時間反転対称性が破れる. この場合 θ の $2\pi n$ という不定性は作用に顔を出し, 物理的な量となる.

4.3.1 表面半整数量子ホール効果

境界がある場合の作用 S_{3D} を理解するために図 4.3.1 の (a) のように $z < 0$ にトポロジカル絶縁体があり, $z > 0$ に自明な真空がある場合を考える. $z < 0$ では $\theta = (2n+1)\pi$ で $z > 0$ では $\theta = 0$ なので, $\partial_z \theta(z) = (2n+1)\pi \delta(z)$ となる. 作用は

$$\begin{aligned} S_{3D} &= \frac{1}{8\pi^2} \int d^3x dt \theta(z) \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \partial_\mu A_\nu \partial_\rho A_\sigma = \frac{1}{8\pi^2} \int d^3x dt \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} A_\mu \partial_\nu \theta(z) \partial_\rho A_\sigma \\ &= \frac{1}{8\pi^2} \int d^3x dt \epsilon^{\mu 3 \rho \sigma} A_\mu \partial_3 \theta(z) \partial_\rho A_\sigma = \frac{1}{8\pi^2} \int d^3x dt (2n+1)\pi \delta(z) \epsilon^{\mu\rho\sigma} A_\mu \partial_\rho A_\sigma \\ &= \frac{2n+1}{8\pi} \int dx dy dt \epsilon^{\mu\nu\rho} A_\mu \partial_\nu A_\rho \end{aligned} \quad (4.3.6)$$

となる. このときのカレントは

$$j^\mu = \frac{\delta S_{3D}}{\delta A_\mu} = \frac{1}{2\pi} \left(n + \frac{1}{2} \right) \epsilon^{\mu\nu\rho} \partial_\nu A_\rho = \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{e^2}{h} \epsilon^{\mu\nu\rho} \partial_\nu A_\rho \quad (4.3.7)$$

となる. 途中で $e, \hbar$ を復活させた. 式 (4.3.7) は Hall 伝導度が半整数に量子化された半整数量子ホール効果を表している. さらに $z = 0$ のトポロジカル絶縁体の表面上で発生している現象なので**表面半整数量子ホール効果 (Surface half-integer quantum hall effect)** と呼ばれる.

一方で3次元トポロジカル絶縁体の表面には奇数個の Dirac cone が存在する. 3次元トポロジカル絶縁体の表面の有効 Hamiltonian は

$$\hat{H}_{\text{surface}}(k_x, k_y) = \hbar v_F (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) \quad (4.3.8)$$

である [53]. ここで3次元トポロジカル絶縁体の表面に磁性不純物を加えて表面のみ時間反転対称性を破る状況を考える. 磁気不純物と電子スピンの相互作用するので表面の有効 Hamiltonian は

$$\hat{H}_{\text{surface}}(k_x, k_y) = \hbar v_F (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) + \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (4.3.9)$$

のようになる. $\mathbf{m}$ は磁化ベクトルである. このときのエネルギー固有値は

$$E_{\text{surface}}(k_x, k_y) = \sqrt{(\hbar v_F k_x + m_x)^2 + (\hbar v_F k_y - m_y)^2 + m_z^2} \quad (4.3.10)$$

となり, z 方向の磁化の影響で表面 Dirac cone が gapped になった. 図 4.3.1 の (b) はトポロジカル絶縁体の表面に垂直な磁化を持つ磁性不純物を加えて表面 Dirac cone が gapped になった様子を表している. Haldane 模型の Hall 伝導度の計算から, Hamiltonian がパウリ行列との内積で与えられる時,

$$\sigma_H = \frac{e^2}{2h} \text{sgn}(m_z) \quad (4.3.11)$$

で与えられる。今 $2n+1$ 個の表面 Dirac cone が存在するとする。そこに磁性不純物を印加して z 方向に m_i ($i = 1, 2, \dots, 2n+1$) の磁化が発生したとする。これは各表面 Dirac cone に m_i という gap が生成されたことに対応する。この場合、Hall 伝導度が計算可能で、

$$\sigma_H = \sum_{i=1}^{2n+1} \frac{e^2}{2h} \text{sgn}(m_i) \quad (4.3.12)$$

となる。磁化の向きが同じだとすると、 m_i の符号が全て同じになるので、正だすると最終的に Hall 伝導度は

$$\sigma_H = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{e^2}{h} \quad (4.3.13)$$

となる。この Hall 伝導度はまさにトポロジカル絶縁体の表面の有効作用から計算した結果と整合している。以上より作用 (4.2.5) はバルクでは時間反転対称性を守る状態を記述し、境界では時間反転対称性を破っている。バルクのトポロジーが $1/2$ の Hall 伝導度を保障し、表面の時間反転対称性が破れた項が整数 n を決めている。

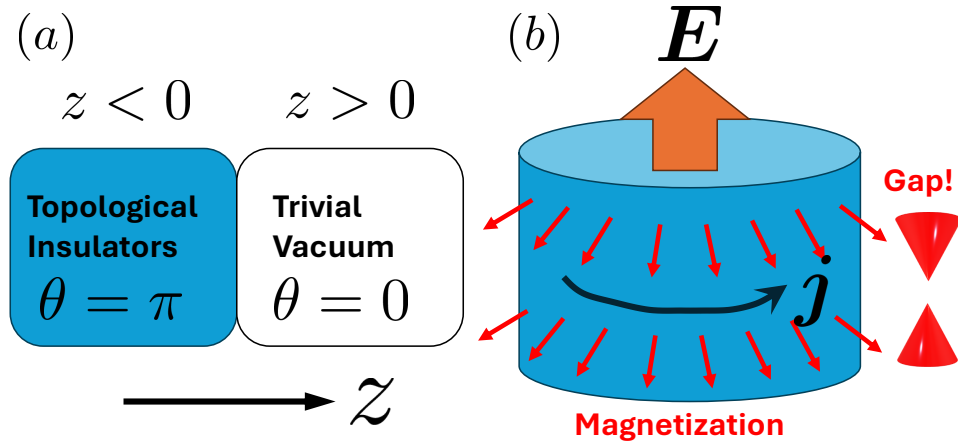


Figure 4.3.1: (a) $z < 0$ にトポロジカル絶縁体が存在し、 $z > 0$ が自明な真空である状態の模式図。境界 $z = 0$ において θ の微分が 0 でなくなり、半整数量子ホール効果が発生する。(b) は表面に磁気不純物があるトポロジカル絶縁体が円柱形の場合に、その円周方向に半整数ホール電流が流れる様子。

4.3.2 トポロジカル電気磁気効果

3次元トポロジカル絶縁体の電磁応答は作用 (4.2.5) で書けることを議論した。しかし通常物質中の電磁場は Maxwell 場の作用で記述される。Maxwell 場の作用は付録 A.4 から

$$S_{\text{Maxwell}} = \int d^4x \left[-\frac{1}{16\pi} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} + \frac{1}{2} F_{\mu\nu} \mathcal{P}^{\mu\nu} - \frac{1}{c} j^\mu A_\mu \right] \quad (4.3.14)$$

である。これと作用 (4.2.5) を合わせることで、3次元トポロジカル絶縁体の電磁場を記述するトータルの作用は

$$\begin{aligned} S_{\text{tot}} &= S_{\text{Maxwell}} + S_{3D} \\ &= \int d^4x \left[-\frac{1}{16\pi} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} + \frac{1}{2} F_{\mu\nu} \mathcal{P}^{\mu\nu} - \frac{1}{c} j^\mu A_\mu \right] + \frac{e^2}{8\pi^2 \hbar c} \int d^3x dt \theta(t, \mathbf{x}) \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \partial_\mu A_\nu \partial_\rho A_\sigma \end{aligned} \quad (4.3.15)$$

となる. S_{tot} を A_μ について変分を取れば, 3次元トポロジカル絶縁体の電磁場を記述する拡張された Maxwell 方程式が導出できる. S_{Maxwell} に関する計算は付録で行ったので, S_{3D} について変分を取ると,

$$\begin{aligned}\delta S_{3D} &\equiv S_{3D}[A^\mu + \delta A^\mu] - S_{3D}[A^\mu] \\ &= \frac{e^2}{8\pi^2\hbar c} \int d^4x \theta(t, \mathbf{x}) \epsilon^{\mu\nu\rho\lambda} [\partial_\mu (A_\nu + \delta A_\nu) \partial_\rho (A_\lambda + \delta A_\lambda) - \partial_\mu A_\nu \partial_\rho A_\lambda] \\ &= \frac{e^2}{4\pi^2\hbar c} \int d^4x \delta A_\mu \epsilon^{\mu\nu\rho\lambda} \partial_\nu \theta(t, \mathbf{x}) \partial_\rho A_\lambda \\ &\longrightarrow \frac{\delta S_{3D}}{\delta A_\mu} = \frac{\alpha}{4\pi^2} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \partial_\nu \theta(t, \mathbf{x}) \partial_\rho A_\sigma\end{aligned}\quad (4.3.16)$$

のように S_{3D} からの寄与が求まる. ここで $\alpha = e^2/(\hbar c)$ で微細構造定数である. 以上より S_{tot} から導出された電磁場の運動方程式は

$$\partial_\nu F^{\nu\mu} + 4\pi \partial_\nu \mathcal{P}^{\mu\nu} + \frac{\alpha}{\pi} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \partial_\nu \theta(t, \mathbf{x}) \partial_\rho A_\sigma = \frac{4\pi}{c} j^\nu \quad (4.3.17)$$

となる. 成分ごとに書き下すと,

$$\nabla \cdot (\mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}) = 4\pi \rho - \frac{\alpha}{\pi} \nabla \theta \cdot \mathbf{B} \quad (4.3.18)$$

$$\nabla \times (\mathbf{B} - 4\pi \mathbf{M}) - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{\alpha}{\pi} \left[\nabla \theta \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \theta}{\partial t} \mathbf{B} \right] \quad (4.3.19)$$

のようになる. 式(4.3.18), (4.3.19)と A_μ の定義式から自動的に満たされる $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \nabla \times \mathbf{E} + (1/c) \partial_t \mathbf{B} = 0$ を合わせた4つの式が3次元トポロジカル絶縁体の電磁場を記述する拡張された Maxwell 方程式で, **Axion 電磁気学**と呼ばれる[19].

ここで, 式(4.3.18)と(4.3.19)の右辺第2項について, θ 項の影響で外部電荷, 外部電流以外の電荷, 電流の項が発生している. この電荷と電流が電気分極と磁化由来とすると, 関係式

$$\rho = -\nabla \cdot \mathbf{P} \quad (4.3.20)$$

$$\mathbf{j} = c \nabla \times \mathbf{M} + \frac{\mathbf{P}}{t} \quad (4.3.21)$$

から S_{3D} に由来するトポロジカルな電気分極と磁化である

$$\mathbf{P}_t = \frac{\alpha}{4\pi} \mathbf{B} \quad (4.3.22)$$

$$\mathbf{M}_t = \frac{\alpha}{4\pi} \mathbf{E} \quad (4.3.23)$$

が得られた^{*2}. 通常電気分極は電場に比例して, 磁化は磁場に比例するが, トポロジカルな項由来の式(4.3.22), (4.3.23)は電気分極は磁場に比例して, 磁化は電場に比例しかつその比例定数が普遍的な定数である微細構造定数 α で与えられている. このような3次元のトポロジカル絶縁体中の磁場が電気分極を結誘起し, 電場が磁化を誘起する現象を**トポロジカル電気磁気効果 (Topological Magnetoelectric Effect, TME)**と呼ぶ. 今回は有効作用 S_{3D} の帰結としてトポロジカル電気磁気効果を議論したが, 表面の半整数量子ホール効果からもトポロジカル電気磁気効果が導出できる.

今, 円筒状の3次元のトポロジカル絶縁体を考える. 表面に磁性不純物を加えて表面だけ時間反転対称性を破り, Dirac cone に gap m を開ける. 表面の Dirac cone は1つと仮定して議論を進める. この状況で電場を円筒に平行な方向に印加したとする. 表面の円筒の円周方向の Hall 電流 j_H は

$$j_H = -\text{sgn}(m) \frac{e^2}{2h} \mathbf{n} \times \mathbf{E} \quad (4.3.24)$$

^{*2}ここでは θ の $2\pi n$ の不定性の n を0とした.

のように誘起される．ここで $\mathbf{n}$ は側面の法線ベクトルである．ソレノイド中の磁場は l を単位長さ当たりの巻き数とすると，

$$|\mathbf{B}| = \frac{4\pi}{c} l |\mathbf{j}|, \quad (4.3.25)$$

で与えられることを思い出すと，Hall 電流により誘起された磁化 $\mathbf{M}_t$ は，

$$\mathbf{M}_t = \text{sgn}(m) \frac{\alpha}{4\pi} \mathbf{E} \quad (4.3.26)$$

で与えられる．ここで磁場と磁化の関係 $\mathbf{B} = 4\pi \mathbf{M}$ を用いた．同様にして，円筒に平行な方向に磁場を徐々に印加した場合を考える．このとき Faraday 則から $\nabla \times \mathbf{E}_{\text{ind}} + \partial \mathbf{B} / \partial t = 0$ より誘導電場 $\mathbf{E}_{\text{ind}}$ が円筒の円周方向に発生する．そしてその誘導電場により生成された円筒に平行な方向に Hall 電流 $\mathbf{j}_H$ が電気分極 $\mathbf{P}_t$ に寄与する．

$$\frac{\partial \mathbf{P}_t}{\partial t} = \frac{1}{c} \mathbf{j}_H = -\text{sgn}(m) \frac{e^2}{2hc} \mathbf{n} \times \mathbf{E}_{\text{ind}} \longrightarrow \mathbf{P}_t = \text{sgn}(m) \frac{\alpha}{4\pi} \mathbf{B}. \quad (4.3.27)$$

以上より，表面半整数量子ホール効果からトポロジカル電気磁気効果

$$\mathbf{P}_t = \text{sgn}(m) \frac{\alpha}{4\pi} \mathbf{B} \quad (4.3.28)$$

$$\mathbf{M}_t = \text{sgn}(m) \frac{\alpha}{4\pi} \mathbf{E} \quad (4.3.29)$$

が導けた．

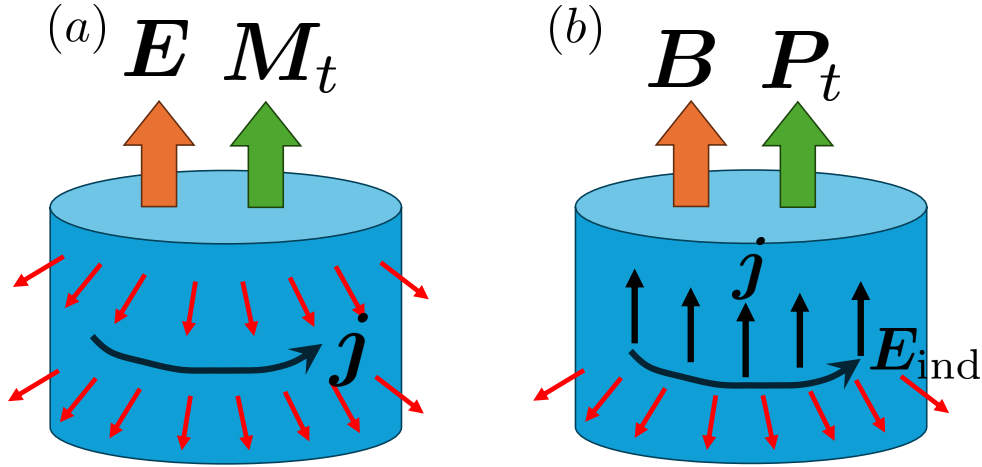


Figure 4.3.2: トポロジカル電気磁気効果の模式図．(a) は電場を印加すればバルクで磁化が発生し，(b) は磁場を印加したらバルクで電気分極が発生する様子を描いている．

4.3.3 磁気モノポール鏡像

3次元トポロジカル絶縁体の表面に電荷を近づけるとトポロジカル絶縁体の内部に磁気モノポールが出現する．この現象を**磁気モノポール鏡像**と呼ぶ [74, 75]．本節では磁気モノポール鏡像について議論する．

図 4.3.3 の (a) のように $z > 0$ に誘電率，透磁率が ϵ_1, μ_1 の自明な絶縁体 ($\theta = 0$)， $z < 0$ に ϵ_2, μ_2 のトポロジカル絶縁体 ($\theta = \pi$) がある状況を考える．今，点 $(0, 0, d)$ に電荷 q の粒子を置いたとする．このとき， $z < 0$ に誘起される電場は q に加えて点 $(0, 0, d)$ に電荷 q_1 の粒子があると考えたときに等しい．またトポロジカル電気磁気効果により磁場も誘起されその磁場は点 $(0, 0, d)$ に磁荷 g_1 の磁気モノポールに由来するとする．また $z > 0$ での電場は q に加えて鏡像の位置 $(0, 0, -d)$ に q_2 の粒子があるとしたときに誘起されるものとし，磁場は $(0, 0, -d)$ に g_2 の磁気モノポールに誘起されるとする．

この物質中の Maxwell 方程式は

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 4\pi\rho \quad (4.3.30)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \quad (4.3.31)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (4.3.32)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \quad (4.3.33)$$

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} + \frac{\alpha}{\pi}\theta\mathbf{B} = \epsilon\mathbf{E} + \frac{\alpha}{\pi}\theta\mathbf{B} \quad (4.3.34)$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{B} - 4\pi\mathbf{M} - \frac{\alpha}{\pi}\theta\mathbf{E} = \frac{\mathbf{B}}{\mu} - \frac{\alpha}{\pi}\theta\mathbf{E} \quad (4.3.35)$$

である. $\mathbf{E}, \mathbf{B}, \mathbf{D}, \mathbf{H}$ の境界条件を使って q_1, q_2, g_1, g_2 の具体形を決めていく. まず電場について, 電場を求めるために初めに静電ポテンシャル ϕ を求める. $z > 0, z < 0$ のそれぞれについて, 今は Gauss 単位系に注意して, 静電ポテンシャルは

$$\phi^{z>0} = \frac{q}{\sqrt{x^2 + y^2 + (z-d)^2}} + \frac{q_2}{\sqrt{x^2 + y^2 + (z+d)^2}} \quad (4.3.36)$$

$$\phi^{z<0} = \frac{q + q_1}{\sqrt{x^2 + y^2 + (z-d)^2}} \quad (4.3.37)$$

となる. ここで $E_x = -\partial_x \phi, E_y = -\partial_y \phi$ であるから, 電場の境界面 $z = 0$ に平行な x 成分は

$$E_x^{z>0} = \frac{xq}{(x^2 + y^2 + (z-d)^2)^{3/2}} + \frac{xq_2}{(x^2 + y^2 + (z+d)^2)^{3/2}} \quad (4.3.38)$$

$$E_x^{z<0} = \frac{x(q + q_1)}{(x^2 + y^2 + (z-d)^2)^{3/2}} \quad (4.3.39)$$

である. 電場は境界面に対して平行な成分が連続となるので, $E_x^{z>0}(z=0) = E_x^{z<0}(z=0)$ より,

$$\frac{x(q + q_2)}{(x^2 + y^2 + d^2)^{3/2}} = \frac{x(q + q_1)}{(x^2 + y^2 + d^2)^{3/2}} \quad (4.3.40)$$

であるから, $q_1 = q_2$ である. 以下では $q_1 = q_2 = q'$ を使う.

次に磁場について, 時間に依存しなく外部電流が無いとき, $\nabla \times \mathbf{B} = 0$ より, 磁場ポテンシャル $\mathbf{B} = -\nabla\Omega$ が定義できる. この磁場ポテンシャル Ω は基本的な量ではなく今回は磁場を簡潔に計算するための道具である. $z < 0, z > 0$ について, 磁場ポテンシャルは

$$\Omega^{z>0} = \frac{g_2}{\sqrt{x^2 + y^2 + (z+d)^2}} \quad (4.3.41)$$

$$\Omega^{z<0} = \frac{g_1}{\sqrt{x^2 + y^2 + (z-d)^2}} \quad (4.3.42)$$

である. 磁場の z 成分は $B_z = -\partial_z \Omega$ より,

$$B_z^{z>0} = \frac{g_2(z+d)}{(x^2 + y^2 + (z+d)^2)^{3/2}} \quad (4.3.43)$$

$$B_z^{z<0} = \frac{g_1(z-d)}{(x^2 + y^2 + (z-d)^2)^{3/2}} \quad (4.3.44)$$

となる. 磁場は境界に垂直な成分に対して連続なので $B_z^{z>0}(z=0) = B_z^{z<0}(z=0)$ より, 磁荷の条件として

$$\frac{g_2 d}{(x^2 + y^2 + d^2)^{3/2}} = \frac{-g_1 d}{(x^2 + y^2 + d^2)^{3/2}} \quad (4.3.45)$$

が成立する．したがって $g_1 = -g_2$ である．以下では $g_1 = -g_2 = g$ を使う．

次に電束密度 $\mathbf{D}$ について、トポロジカル電気磁気効果より、 $\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E} + \frac{\alpha}{\pi} \theta \mathbf{B}$ を用いると、 z 成分は

$$D_z^{z>0} = \epsilon_1 E_z^{z>0} = \epsilon_1 \left[\frac{q(z-d)}{(x^2 + y^2 + (z-d)^2)^{3/2}} + \frac{q'(z+d)}{(x^2 + y^2 + (z+d)^2)^{3/2}} \right] \quad (4.3.46)$$

$$D_z^{z<0} = \epsilon_2 E_z^{z<0} + \frac{\alpha}{\pi} \theta B_z^{z<0} = \epsilon_2 \frac{(q+q')(z-d)}{(x^2 + y^2 + (z+d)^2)^{3/2}} + \frac{\alpha}{\pi} \theta \frac{g(z-d)}{(x^2 + y^2 + (z+d)^2)^{3/2}} \quad (4.3.47)$$

となる．電束密度は外部電荷が無いときは境界面に対して垂直な成分が連続なので、 $D_z^{z>0}(z=0) = D_z^{z<0}(z=0)$ より、

$$\epsilon_1 \frac{-q+q'}{(x^2 + y^2 + d^2)^{3/2}} d = -\frac{\epsilon_2(q+q') + \frac{\alpha}{\pi} \theta g}{(x^2 + y^2 + d^2)^{3/2}} d \quad (4.3.48)$$

であるから、 q', g の条件として、

$$g = \frac{q(\epsilon_1 - \epsilon_2) - q'(\epsilon_1 + \epsilon_2)}{\alpha} \quad (4.3.49)$$

が得られた．同様にして磁場の大きさ $\mathbf{H}$ について議論する．トポロジカル電気磁気効果より、 $\mathbf{H} = \frac{\mathbf{B}}{\mu} - \frac{\alpha}{\pi} \theta \mathbf{E}$ を用いて、 $z > 0, z < 0$ で $\mathbf{H}$ の表式を導出して、外部電流が無い場合の $\mathbf{H}$ の境界条件である境界面に平行な成分が連続であるという要請を使うと、 q', g の条件として、

$$g = \frac{q+q'}{\frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2}} \alpha \quad (4.3.50)$$

が得られた．連立方程式 (4.3.49), (4.3.50) を解くと、鏡像電荷と鏡像磁荷は

$$q' = q_1 = q_2 = \frac{(\epsilon_1 - \epsilon_2) \left(\frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2} \right) - \alpha^2}{(\epsilon_1 + \epsilon_2) \left(\frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2} \right) + \alpha^2} q \quad (4.3.51)$$

$$g = g_1 = -g_2 = \frac{2\epsilon_1 \alpha}{(\epsilon_1 + \epsilon_2) \left(\frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2} \right) + \alpha^2} q \quad (4.3.52)$$

で与えられる．この q', g はトポロジカル絶縁体の表面に電荷を近づけたら電荷 q' 、磁荷 $-g$ が鏡像の位置 $(0, 0, -d)$ の位置に誘起されることを表している．特別な場合として $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \mu_1 = \mu_2 = 1$ の場合を考える．鏡像電荷と磁化の関係は

$$q' = -\frac{\alpha^2}{4 + \alpha^2} q, \quad g = \frac{2\alpha}{4 + \alpha^2} q \quad (4.3.53)$$

$$\rightarrow q_1 = -\frac{\theta}{2\pi} g, \quad q_2 = \frac{\theta}{2\pi} g \quad (\alpha = 1, \theta = \pi) \quad (4.3.54)$$

となる．これは θ 真空中の dyon の電荷と磁荷の関係に等しい．Dyon とは高エネルギー物理学で提案された電荷と磁荷の両方を持つ粒子である．

これまでの磁気モノポール虚像の議論は鏡像電荷と磁荷を仮定した．次にこの物理的な起源について議論する． $z = 0$ は3次元トポロジカル絶縁体の表面なので、今までの議論から半整数量子ホール効果が発生する．Hall 電流は

$$\mathbf{j} = \frac{1}{2} \sigma_H (\mathbf{e}_z \times \mathbf{E}) \quad (4.3.55)$$

である. ここで e_z は境界の法線ベクトルである. 図 4.3.3 の (b) は系を z 軸正の方向から見下ろした様子である. ちょうど Hall 電流 x, y 平面上で円形に流れている. 境界 $z = 0$ の電場の x, y 成分は, 今までの計算から

$$E_x(z=0) = \frac{x(q+q')}{(x^2+y-2+d^2)^{3/2}} \quad (4.3.56)$$

$$E_y(z=0) = \frac{y(q+q')}{(x^2+y-2+d^2)^{3/2}} \quad (4.3.57)$$

となる. 鏡像電荷の具体系を代入すると, Hall 電流は

$$\mathbf{j} = \frac{e^2}{2h} \frac{4q}{4 + \alpha^2} \frac{r}{(r^2 + d^2)^{3/2}} \mathbf{e}_\phi \quad (4.3.58)$$

と計算できる. ここで $\mathbf{e}_\phi$ は 2次元極座標の角度方向の単位ベクトルである. 物理的にはこの Hall 電流 $\mathbf{j}$ は磁場を誘起し, この誘起された磁場は磁気モノポール鏡像により生成されたと見なせることができる [74].

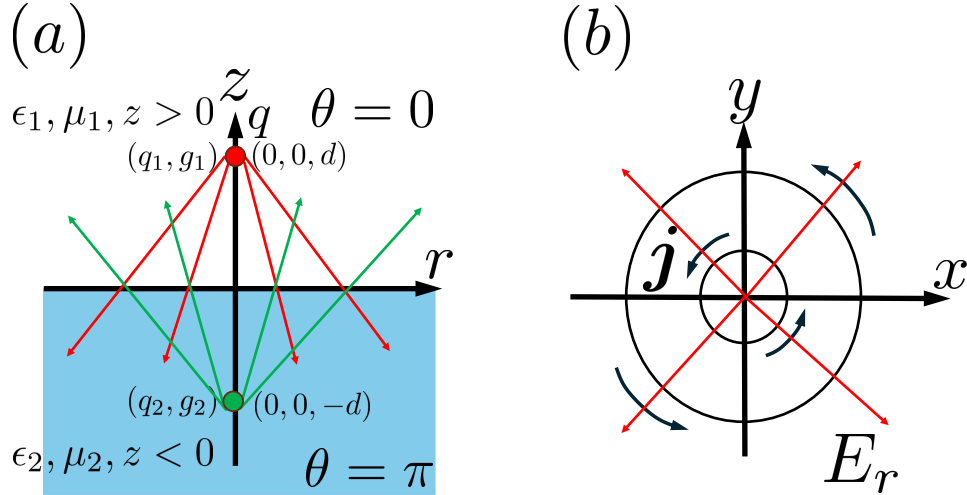


Figure 4.3.3: 磁気モノポール虚像の様子. (a) はトポロジカル絶縁体の表面に電荷を近づけたらその鏡像の位置に電荷と磁荷を持った粒子が創発する様子を描いている. (b) は $z > 0$ かえ見下ろした様子. 円形に流れる半整数ホール電流が生成する磁場は磁気モノポールが生成した磁場と見なせる.

4.3.4 Witten 効果

3次元トポロジカル絶縁体の電磁応答の例として最後に Witten 効果について議論する [18, 75, 76]. S_{3D} 項は磁気モノポールが磁荷だけではなく電荷を持つようにする. これを **Witten 効果**と呼ぶ. Witten 効果は量子色力学のトポロジカルな項から Witten が最初に導いた [76]. 作用 (4.2.5) で $\theta(t, \mathbf{x})$ が空間的に一様で時間的に変動する場合を考える. 時間的に θ が変動するような系をどのように構成するかは今は議論しない. $\partial_t \theta(t)$ はゼロでないので, 作用 (4.2.5) を変形して

$$S_{3D} = -\frac{1}{8\pi^2} \int d^3x dt \partial_t \theta(t) \epsilon^{ijk} A_i \partial_j A_k \quad (4.3.59)$$

を得る. カレントは空間成分だけで,

$$j^i = -\frac{\partial_t \theta(t)}{4\pi^2} \epsilon^{ijk} \partial_j A_k = \frac{\partial_t \theta(t)}{4\pi^2} B_i \quad (4.3.60)$$

左から $\nabla \cdot$ を作用させて、磁荷密度 $\rho_m = \nabla \cdot \mathbf{B}/(2\pi)$ を使うと、

$$\nabla \cdot \mathbf{j} = \frac{\partial_t \theta(t)}{4\pi^2} \nabla \cdot \mathbf{B} \longrightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial_t \theta(t)}{2\pi} \rho_m \quad (4.3.61)$$

を得る. $\theta(t)$ が 0 から Θ まで断熱的に時間発展すると、電荷密度と磁荷密度を積分した電荷と磁荷は

$$q = -\frac{\Theta}{2\pi} g \quad (4.3.62)$$

という関係になり、磁気モノポールは電荷を持つようになる.

Chapter 5

物質中の Axion 電磁気学

3次元トポロジカル絶縁体の有効作用から、拡張された Maxwell 方程式を導出した。この Maxwell 方程式で記述される電磁気学は Axion 電磁気学と呼ばれる [19]。Axion は 1970 年代に量子色力学 (QCD) で強い CP 問題を解決するものとして導入された粒子であり [20–23]、現在はダークマターの候補となっている [24–26]。しかし未だ Axion は観測されていない。しかしながら 3次元トポロジカル絶縁体の内部では Axion が創発する。本節では 3次元トポロジカル絶縁体を始めとした物質系で Axion を実現する方法について具体的な模型を通して議論する。本章では物質系での Axion 電磁気学の review [31, 77, 78] を参考にしている。

5.1 3次元トポロジカル絶縁体と Fujikawa の方法

Chapter. 4 で (4+1)-d Chern-Simons gauge 理論の次元縮小から 3次元の時間反転対称性なトポロジカル絶縁体の有効作用を導出した。この有効作用をもう一度書くと、

$$\begin{aligned} S_\theta &= \frac{e^2}{32\pi^2} \int d^3x dt \theta(t, \mathbf{x}) \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu/\nu} F_{\rho\sigma} \\ &= \frac{e^2}{8\pi^2} \int d^3x dt \theta(t, \mathbf{x}) \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \partial_\mu A_\nu \partial_\rho A_\sigma \\ &= \frac{e^2}{4\pi^2} \int d^3x dt \theta(t, \mathbf{x}) \mathbf{E}(t, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{B}(t, \mathbf{x}) \end{aligned} \quad (5.1.1)$$

$$\theta(t, \mathbf{x}) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} \left[a_i \partial_j a_k + \frac{2}{3} i a_i a_j a_k \right] \quad (5.1.2)$$

である。ここで作用を S_{3D} から S_θ と書き直した。 S_θ を θ 項と呼ぶ。また電荷 e は明示したが、 $\hbar = c = 1$ とした。時間反転対称性がある場合は Berry 接続に拘束条件が付くことから、 $\theta = 0, \pi \pmod{2\pi}$ となった。実は空間反転対称性がある場合も Berry 接続への拘束条件から $\theta = 0, \pi \pmod{2\pi}$ へ量子化される^{*1}。この θ の量子化は別の議論で導出できる。時間反転対称性や空間反転対称があるとき、その変換の下で S_θ は不変である。ここで電磁場の時間反転、空間反転について

$$\mathbf{T} : \mathbf{E} \rightarrow \mathbf{E}, \quad \mathbf{B} \rightarrow -\mathbf{B} \quad (5.1.4)$$

$$\mathbf{P} : \mathbf{E} \rightarrow -\mathbf{E}, \quad \mathbf{B} \rightarrow \mathbf{B} \quad (5.1.5)$$

^{*1}空間反転対称性がある場合、Berry 接続と π 行列は

$$a_i(-\mathbf{k}) = -\pi(\mathbf{k}) a_i(\mathbf{k}) \pi^\dagger(\mathbf{k}) + i\pi(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial k_i} \pi^\dagger(\mathbf{k}) \quad (5.1.3)$$

という関係にある。これを電気磁気分極 P_3 に代入すると、時間反転対称性と同様にして $2P_3 = \text{整数} \pmod{1}$ より、 $P_3 = 0, 1/2$ なので $\theta = 0, \pi \pmod{2\pi}$ という結論を得る。

であるので、 $\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}$ という項は、時間反転、空間反転に関してどちらも奇である。したがって S_θ が不変であるためには (θ の 2π の不定性は仮定して)、 $\theta = 0, \pi$ が必要である。以上より、時間反転対称性と空間反転対称性のどちらかがある場合は θ は量子化されることが示された。

3次元トポロジカル絶縁体のように時間反転対称性があれば、 θ の複雑な表式を計算する必要なくその値が分かる。ここで時間反転対称性と空間反転対称性が破れた絶縁体の電磁応答を記述する有効理論を考えたいとき、 θ の値を求めるためにはその複雑な定義式を計算する必要がある。これは解析的に計算するのは困難であり、例えば数値計算を行おうとしても Berry 接続の gauge の選び方などを考慮する必要があり、同じく困難が付きまとう。さらに時間反転対称性と空間反転対称性が破れた絶縁体の有効作用は S_θ で与えられる保証はどこにもない。なぜならばこの S_θ は (4+1)-d Chern-Simons gauge 理論からの次元縮小から得られて、この手法が適用できる理由はどこにもないからである。

以上の理由から、トポロジカル絶縁体や他の絶縁体の電磁応答を記述する有効作用を導出する新しいやり方が必要である。ここでは **Fujikawa の方法** という anomaly を計算する手法を紹介する [79–81]。Fujikawa の方法を使えば、ミクロな模型から出発して有効作用を求められる。Fujikawa の方法を使った chiral anomaly の計算とその詳細は付録 B を参照されたい。

3次元トポロジカル絶縁体の有効 Hamiltonian を考える。現在標準的な3次元トポロジカル絶縁体である Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 は最初に [53] で3次元トポロジカル絶縁体と予言された。この論文では Γ 点である $\mathbf{k} = (0, 0, 0)$ 付近での有効 Hamiltonian を

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} M(\mathbf{k}) & A_1 k_z & 0 & A_2(k_x - ik_y) \\ A_1 k_z & -M(\mathbf{k}) & A_2(k_x - ik_y) & 0 \\ 0 & A_2(k_x + ik_y) & M(\mathbf{k}) & -A_1 k_z \\ A_2(k_x + ik_y) & 0 & -A_1 k_z & -M(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (5.1.6)$$

と導出している。ここで $M(\mathbf{k}) = m - B_1 k_z^2 - B_2(k_x^2 + k_y^2)$ である。パラメータ A_1, A_2, m, B_1, B_2 は第一原理計算のフィッティングで決められる。本節では有効 Hamiltonian (5.1.6) を用いて、 S_θ を導出してみる。 α 行列を

$$\alpha^1 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^1 \\ \sigma^1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma^1 \\ i\sigma^1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha^3 = \begin{pmatrix} \sigma^1 & 0 \\ 0 & -\sigma^1 \end{pmatrix}, \quad \alpha^4 = \begin{pmatrix} \sigma^3 & 0 \\ 0 & \sigma^3 \end{pmatrix} \quad (5.1.7)$$

と定義すると、Clifford 代数の関係 $\{\alpha^a, \alpha^b\} = 2\delta^{ab}$ を満たし、有効 Hamiltonian (5.1.6) は

$$H(\mathbf{k}) = A_2 k_x \alpha^1 + A_2 k_y \alpha^2 + A_1 k_z \alpha^3 + M(\mathbf{k}) \alpha^4 \quad (5.1.8)$$

となる。時間反転演算子と空間反転演算子は

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} K, \quad \mathbf{P} = \begin{pmatrix} \sigma^3 & 0 \\ 0 & \sigma^3 \end{pmatrix} \quad (5.1.9)$$

で与えられる^{*2}。時間反転対称運動量 Γ_i で、Hamiltonian は $H(\Gamma_i) = M(\Gamma_i)\alpha^4$ より、強い $\mathbb{Z}_2$ 不変量 ν_0 は $M(\Gamma_i)$ の符号で与えられる。 B_1, B_2 は固定されていてどちらも正のとき、時間反転対称運動量は $(0, 0, 0)$, $(\infty, 0, 0)$, $(0, \infty, 0)$, $(0, 0, \infty)$, $(\infty, \infty, 0)$, $(\infty, 0, \infty)$, $(0, \infty, \infty)$, (∞, ∞, ∞) であるので、 $M(0, 0, 0) = m > 0$ のとき、1つだけ正であるから、 $\nu_0 = 1$ の強いトポロジカル絶縁体となる。一方、 $M(0, 0, 0) = m < 0$ のとき、自明な絶縁体となる^{*3}。つまりこの有効模型では m の符号によりトポロジカル絶縁体か自明な絶縁体かを区別している。 m は物性物理の言葉で言えば、バンドギャップに対応し、場の量子論の言葉で言えば Dirac fermion の質量に対応する。次にこの有効 Hamiltonian から有効作用を導出し、 m が Dirac fermion の質量であることを示す。

有効 Hamiltonian (5.1.6) を Dirac Hamiltonian と見て、Schrödinger 方程式は

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) = H(\mathbf{k}) \psi(x) \quad (5.1.10)$$

^{*2} この有効 Hamiltonian の基底は (スピン $\otimes$ p 軌道) で与えられているので、 $\mathbf{T}, \mathbf{P}$ はこの形になっている。

^{*3} ここでは弱いトポロジカル絶縁体を区別しないこととする。

である. $\psi(x)$ は 4 成分の Dirac 場である. 左から $\alpha^4 = \gamma^0$ を作用させて, $\gamma^i = \gamma^0 \alpha^i$ を使って, Dirac 方程式

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu + m)\psi = 0 \quad (5.1.11)$$

が導ける. ここで $m > 0$ として自明な絶縁体の場合を考えた. γ^μ が gamma 行列で代数関係 $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu}$ を満たす. 確かに m は Dirac 方程式の質量項に対応する. Dirac 場の Dirac 共役を $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$ と定義する. $U(1)$ gauge 場と結合させたこの Dirac 方程式を導出する作用は

$$S = \int d^4x \bar{\psi}(i\mathcal{D} + m)\psi \quad (5.1.12)$$

である. $\mathcal{D} = \gamma^\mu D_\mu = \gamma^\mu(\partial_\mu - ieA_\mu)$ である. $U(1)$ gauge 場と結合させた作用を与えたのは, 3 次元トポロジカル絶縁体の電磁応答を記述する有効作用を求めるためである. ここで chirality $\gamma_4 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$ を定義して^{*4}, chiral 変換

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{-i\theta d\phi \gamma_4/2} \psi, \quad \bar{\psi} \rightarrow \bar{\psi}' = \bar{\psi} e^{-i\theta d\phi \gamma_4/2} \quad (5.1.13)$$

を考える. $\phi \in [0, 1]$ で $d\phi$ は微小パラメータである. Chiral 変換後, 作用 (5.1.12) は

$$S = \int d^4x \bar{\psi}[i\mathcal{D} + m(\cos(\theta d\phi) + i\gamma_4 \sin(\theta d\phi))]\psi \quad (5.1.14)$$

となる. つまり質量項が $m \rightarrow m(\cos(\theta d\phi) + i\gamma_4 \sin(\theta d\phi))$ と変換される. $\theta = \pi$ と置き, この微小変換を無限回繰り返したとして $d\phi = 1$ とすれば, $m \rightarrow -m$ になる. これは作用 (5.1.12) が自明な絶縁体相から chiral 変換によりトポロジカル絶縁体相へ変換されたことに対応する^{*5}. 自明相の有効作用 S_{eff} は (5.1.12) を用いて

$$e^{iS_{\text{eff}}} = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{iS} \quad (5.1.15)$$

で与えられるが, トポロジカル絶縁体相での有効作用は自明相から微小 chiral を無限に繰り返した時に導出できる. このとき, 最終的に作用は m の符号が反転するだけなので, 有効作用は自明相とトポロジカル絶縁体相で殆ど変わらないと思うが, Jacobian からの寄与 $\mathcal{D}\bar{\psi}' \mathcal{D}\psi' = J \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi$ があるので, 2 つの作用は質量の符号を反転させただけにならない. 実は (3+1)-d Dirac fermion の chiral 変換に伴って顔を出す Jacobian J は **chiral anomaly** [82, 83] に対応し, chiral anomaly が 3 次元トポロジカル絶縁体の θ 項の起源になる. Chiral anomaly については付録 B を参照されたい.

次に具体的に Jacobian を計算して θ 項を導出する. しかし計算は付録 B の式 (B.4.43) で $\alpha = -\theta d\phi/2$ と置いたものと全く同じである. したがって Jacobian は

$$J(d\phi) = \exp \left[i \int d^4x d\phi \frac{e^2}{32\pi^2} \theta \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma} \right] \quad (5.1.16)$$

となる. これを無限回繰り返して, $S_\theta = -i \log J$ より, θ 項

$$S_\theta = \int d^4x \frac{e^2}{32\pi^2} \theta \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma}, \quad \theta = \pi \quad (5.1.17)$$

が得られた. 以上より, 次元縮小とは違う Fujikawa の方法を用いて微視的な模型から chiral anomaly の計算を通じて θ 項を導出できた. 以下では Fujikawa の方法を用いて θ 項を導出し 3 次元トポロジカル絶縁体以外の物質中での Axion 電磁気学について議論する.

^{*4}Notation 統一のために chirality は γ^5 ではなく, γ_4 とした. 詳しい Notation は付録 B.1 を参照.

^{*5}変換 $m(\cos(\theta d\phi) + i\gamma_4 \sin(\theta d\phi))$ は連続的であるが, γ_4 の影響で変換の経路の途中では時間反転対称性が破れる. しかしその代わり常に gapped である.

5.2 反強磁性トポロジカル絶縁体

時間反転対称性と空間反転対称性の両方が破れた模型の電磁応答を考える．まず有効 Hamiltonian を提示し、どのように S_θ が現れるか見た後、それを実現する格子模型について議論する．今、有効 Hamiltonian として $\alpha^5 = \alpha^1 \alpha^2 \alpha^3 \alpha^4$ を定義して

$$H(\mathbf{k}) = k_x \alpha^1 + k_y \alpha^2 + k_z \alpha^3 + m \alpha^4 + m' \alpha^5 \quad (5.2.1)$$

を考える． $k_x \alpha^1 + k_y \alpha^2 + k_z \alpha^3 + m \alpha^4$ は時間反転対称性と空間反転対称性を満たすが、 $m' \alpha^5$ により、どちらも破れる．なぜならば

$$\mathbf{T}^{-1} \alpha^5 \mathbf{T} = \mathbf{T}^{-1} \alpha^1 \mathbf{T} \mathbf{T}^{-1} \alpha^2 \mathbf{T} \mathbf{T}^{-1} \alpha^3 \mathbf{T} \mathbf{T}^{-1} \alpha^4 \mathbf{T} = (-\alpha^1)(-\alpha^2)(-\alpha^3)\alpha^4 = -\alpha^5 \quad (5.2.2)$$

$$\mathbf{P}^{-1} \alpha^5 \mathbf{P} = \mathbf{P}^{-1} \alpha^1 \mathbf{P} \mathbf{P}^{-1} \alpha^2 \mathbf{P} \mathbf{P}^{-1} \alpha^3 \mathbf{P} \mathbf{P}^{-1} \alpha^4 \mathbf{P} = (-\alpha^1)(-\alpha^2)(-\alpha^3)\alpha^4 = -\alpha^5 \quad (5.2.3)$$

であるからである^{*6}．式 (5.2.1) を Dirac Hamiltonian をと見なして、Schrödinger 方程式を導出し、左から $\gamma^0 = \alpha^4$ を作用させて Dirac 方程式を求めると、

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m - im'\gamma_4)\psi = 0 \quad (5.2.4)$$

である．ここで chirality $\gamma_4 = i\gamma^0 \alpha^5$ と定義した．2つの質量項 $m + im'\gamma_4$ について、以下の恒等式が性質するように θ を定める．

$$m + im'\gamma_4 = M \left(\frac{m}{M} + i\gamma_4 \frac{m'}{M} \right) = M e^{i\theta \gamma_4} \quad (5.2.5)$$

$$M = \sqrt{m^2 + (m')^2}, \quad \cos \theta = \frac{m}{M}, \quad \sin \theta = \frac{m'}{M}. \quad (5.2.6)$$

以上より、有効 Hamiltonian (5.2.1) に対応する作用は、

$$S = \int d^4x \bar{\psi} [i\mathcal{D} - M e^{i\theta \gamma_4}] \psi \quad (5.2.7)$$

である．ここで作用 (5.2.7) と自明な相を記述する作用がどのように結ばれるか考える．自明な相の作用を

$$S = \int d^4x \bar{\psi} [i\mathcal{D} - M] \psi \quad (5.2.8)$$

とすると、微小 chiral 変換

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{i\theta d\phi \gamma_4/2} \psi, \quad \bar{\psi} \rightarrow \bar{\psi}' = \bar{\psi} e^{i\theta d\phi \gamma_4/2} \quad (5.2.9)$$

をパラメータ $\phi \in [0, 1]$ の経路に沿って無限回繰り返されたとき、作用 (5.2.7) になることが確かめられる．つまり、有効 Hamiltonian (5.2.1) の電磁応答を記述する有効作用は、自明な相から微小 chiral 変換を無限回繰り返した時に得られる．したがって付録 B の Fujikawa の方法と Jacobian (B.4.43) より、微小 chiral 変換を無限回繰り返した Jacobian が有効作用に対応するから、

$$S_\theta = \frac{1}{i} \log J = \int d^4x \frac{e^2}{32\pi^2} \theta \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma} \quad (5.2.10)$$

である． θ の表式について、 $m > 0$ のときトポロジカル絶縁体相で $\theta = \pi$ となることを考慮すると、

$$\theta = \frac{\pi}{2} (1 + \text{sgn}(m)) - \arctan \frac{m'}{m} \quad (5.2.11)$$

^{*6} $m'(-\mathbf{k}) \neq -m'(\mathbf{k})$ を仮定している．

である. $m' = 0$ の時間反転対称性があるとき, $\theta = 0, \pi$ と量子化されるが, $m' \neq 0$ の時間反転対称性と空間反転対称性がないとき, θ は 0 から 2π の任意の値を取る.

次に有効 Hamiltonian (5.2.1) を実現する格子模型として, Fu-Kane-Mele 模型に Hubbard タイプの相互作用を入れた Fu-Kane-Mele-Hubbard 模型 [31, 59, 84] を考える. この模型はダイヤモンド格子の上に定義されているとして, Hamiltonian は

$$\hat{H} = \sum_{\langle i,j \rangle, s} t_{ij} c_{i,s}^\dagger c_{j,s} + i \frac{8\lambda}{a^2} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, s, s'} c_{i,s}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{ss'} \cdot (\boldsymbol{\delta}_{ik} \times \boldsymbol{\delta}_{kj}) c_{j,s'} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (5.2.12)$$

である. ここで $U > 0$ の反強磁性的なオンサイト相互作用で, $n_{i\uparrow} = c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow}$, $n_{i\downarrow} = c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}$ である. Fu-Kane-Mele-Hubbard 模型は U が小さく, $t_1 = t + \delta t_1$, $t_2 = t_3 = t_4 = t$, $0 < \delta t_1 < 2t$ のとき, トポロジカル絶縁体であり, U が大きいとき, 反強磁性的な秩序を持つ. Hamiltonian (5.2.12) を反強磁性相で平均場近似して, 周期境界条件の下で波数で部分対角化して, Brillouin zone 中のパラメータの変化によりギャップが閉じる点 X_1, X_2, X_3 の周りで有効 Hamiltonian を求めると^{*7},

$$\begin{aligned} H(X_1 + \mathbf{k}) &= k_x \alpha_1 + k_y \alpha_2 + k_z \alpha_3 + \delta t_1 \alpha_4 + U m_1 \alpha_5 \\ H(X_2 + \mathbf{k}) &= k_x \alpha_1 + k_y \alpha_2 + k_z \alpha_3 + \delta t_1 \alpha_4 + U m_2 \alpha_5 \\ H(X_3 + \mathbf{k}) &= k_x \alpha_1 + k_y \alpha_2 + k_z \alpha_3 + \delta t_1 \alpha_4 + U m_3 \alpha_5 \end{aligned} \quad (5.2.13)$$

となる. ここで m_1, m_2, m_3 は系は反強磁性相として, 磁化ベクトルが

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{S}_{iA} \rangle &= -\langle \mathbf{S}_{iB} \rangle = (m \sin \theta \cos \varphi, m \sin \theta \sin \varphi, m \cos \theta) \\ &\equiv m_1 \mathbf{e}_x + m_2 \mathbf{e}_y + m_3 \mathbf{e}_z, \end{aligned} \quad (5.2.14)$$

$$\langle \mathbf{S}_{i\mu} \rangle = \frac{1}{2} \langle c_{i\mu s}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{ss'} c_{i\mu s'} \rangle \quad (\mu = A, B) \quad (5.2.15)$$

であることを用いた. ここで A, B は副格子の自由度で i は単位胞の添え字である. 反強磁性秩序 (Néel 状態) を考えているので副格子 A, B で磁化ベクトルの向きは逆である.

有効 Hamiltonian が 3 つあるのは Brillouin zone 中で 3 種類の massive Dirac fermion が住んでいるということなので, 3 つのフレーバーがあるとしこれに対応する作用は

$$S = \int d^4x \sum_{f=1,2,3} \bar{\psi} \left[i \not{D} - M_f e^{i\theta_f \gamma_4} \right] \psi \quad (5.2.16)$$

$$M_f = \sqrt{\delta t_1^2 + (U m_f)^2}, \quad \cos \theta_f = \frac{\delta t_1}{M_f}, \quad \sin \theta_f = \frac{U m_f}{M_f} \quad (5.2.17)$$

である. 以上より, Fujikawa の方法を使うと有効作用は

$$S_\theta = \int d^4x \frac{e^2}{32\pi^2} \theta \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma} \quad (5.2.18)$$

$$\theta = \frac{\pi}{2} (1 + \text{sgn}(\delta t_1)) - \sum_{f=1,2,3} \arctan \frac{U m_f}{\delta t_1} \quad (5.2.19)$$

である. ここで磁化 m_f が何らかの理由で時間的空間的に変動している場合を考える. S_θ より Maxwell 方程式は

$$\nabla \cdot (\mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}) = 4\pi \rho - \frac{\alpha}{\pi} \nabla \theta \cdot \mathbf{B} \quad (5.2.20)$$

$$\nabla \times (\mathbf{B} - 4\pi \mathbf{M}) - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{\alpha}{\pi} \left[\nabla \theta \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \theta}{\partial t} \mathbf{B} \right] \quad (5.2.21)$$

^{*7} 詳しい計算は [59] を参照.

のように修正される。Chapter 4 では右辺第 2 項を左辺に移してトポロジカル電気磁気効果について議論したが、ここでは右辺のままで電荷と電流と見なしてみる。特に S_θ 由来の電流について、

$$\mathbf{j} = \frac{e^2}{2\pi h} \left[\nabla\theta(t, \mathbf{x}) \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial\theta(t, \mathbf{x})}{\partial t} \mathbf{B} \right] \quad (5.2.22)$$

である。3 次元トポロジカル絶縁体の場合 $\theta = \pi$ で固定値だったので $\nabla\theta$ はトポロジカル絶縁体表面しか値を持たず $\partial_t\theta$ は値を持たなかった。しかし、 θ 式 (5.2.19) が時間と空間に依存している場合は S_θ 由来の $\mathbf{j}$ は第 1 項、第 2 項とも意味を持つ。式 (5.2.19) を実際に代入して実際に計算すると、まず第 1 項について、

$$\mathbf{j}_{\text{AHE}} = -\frac{e^2}{2\pi h} \sum_{f=1,2,3} \frac{U\delta t_1}{\delta t_1^2 + (Um_f(t, \mathbf{x}))^2} \nabla m_f(t, \mathbf{x}) \times \mathbf{E} \quad (5.2.23)$$

である。これはゼロ磁場で電流が電場に垂直な方向に流れるので**異常ホール効果 (Anomalous Hall Effect, AHE)** である [85]。次に第 2 項について、代入して計算すると、

$$\mathbf{j}_{\text{CME}} = -\frac{e^2}{2\pi h} \sum_{f=1,2,3} \frac{U\delta t_1}{\delta t_1^2 + (Um_f(t, \mathbf{x}))^2} \frac{\partial m_f(t, \mathbf{x})}{\partial t} \mathbf{B} \quad (5.2.24)$$

である。これは電流が磁場に比例して流れるので、**カイラル磁気効果 (Chiral Magnetic Effect, CME)** と呼ばれる [86]。カイラル磁気効果は最初 gapless Dirac fermion において提案され、右巻き chirality を持つ粒子と左巻き chirality が同数でないとき、磁場を印加した時に流れる粒子が同数にならないので、正味の電流が流れるという現象である。近年 Dirac 半金属 ZrTe₅ で観測された [87]。

5.3 Weyl 半金属

Axion 電磁気学を実現する物質として Weyl 半金属を考える [27, 28, 88]。Weyl 半金属とは 3 次元の massless Dirac Hamiltonian において、時間反転対称性か空間反転対称性の片方もしくは両方破れたことにより、エネルギーバンドの縮退が解けて、4 重縮退していた Dirac 点が 2 重縮退している **Weyl 点** を作り、フェルミエネルギーが Weyl 点付近に位置する物質である。図 5.3.1 の (a), (b) がそれぞれ Dirac 点、Weyl 点を表している。Weyl 点付近では電子は Weyl 方程式で記述でき、Weyl 点は ± 1 の chirality を持つ。Nielsen – Ninomiya の定理より、Brillouin zone 全体では Weyl 点の chirality が 0 になる必要があり、そのため Weyl 点は必ず偶数個存在する。また Weyl 点は ± 1 の磁荷を持つ磁気モノポールと見なせる。Weyl 半金属の簡単な review は付録 C を参照されたい。

量子化されていない θ 項を導出するために、時間反転対称性と空間反転対称性が破れた Weyl 半金属の有効 Hamiltonian を考える。Massless Dirac Hamiltonian に時間反転と空間反転を破れる項を入れて、Hamiltonian は

$$H(\mathbf{k}) = \mathbf{k} \cdot (\boldsymbol{\tau}^3 \otimes \boldsymbol{\sigma}) + \mathbf{b} \cdot (I \otimes \boldsymbol{\sigma}) - \mu_5 (\boldsymbol{\tau}^3 \otimes I) \quad (5.3.1)$$

である。 $\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\sigma}$ はそれぞれ Weyl 点とスピンの自由度である。 $\mathbf{b} \cdot (I \otimes \boldsymbol{\sigma})$ は伝導電子と磁気不純物の磁気相互作用の項で、 $\mathbf{b}$ は Brillouin zone 中で 2 つの Weyl 点の波数方向のずれに対応する。また μ_5 は 2 つの Weyl 点がエネルギー的に異なる状況を作り出す。図 5.3.1 の (c) は Weyl 点と $\mu_5, \mathbf{b}$ の関係を模式的に表した。Hamiltonian (5.3.1) より、Schrödinger 方程式は

$$i\partial_t\psi = [\mathbf{k} \cdot (\boldsymbol{\tau}_3 \otimes \boldsymbol{\sigma}) + \mathbf{b} \cdot (I \otimes \boldsymbol{\sigma}) - \mu_5 (\boldsymbol{\tau}_3 \otimes I)]\psi \quad (5.3.2)$$

である。 $\gamma^0 = \tau^1 \otimes I$ として左から作用させると、

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu + \mu_5 \gamma^0 \gamma_4 - b_j \gamma^j \gamma_4)\psi = 0 \quad (5.3.3)$$

となる. ここで $\gamma^j = \gamma^0(\tau^3 \otimes \sigma^j)$, $\gamma_4 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$ を使った. ちょうどこのとき, γ 行列は

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^j = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^j \\ \sigma & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_4 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (5.3.4)$$

のように Weyl 表示となる. Chiral gauge 場 $b_\mu = (\mu_5, -\mathbf{b})$ を定義すると, $U(1)$ gauge 場と結合した Weyl 半金属 (5.3.1) の作用は

$$S = \int d^4x \bar{\psi} i\gamma^\mu [\partial_\mu - ieA_\mu - ib_\mu\gamma_4] \psi \quad (5.3.5)$$

である. b_μ は作用の中で chirality γ_4 と結合するので chiral gauge 場と呼ばれる. 次に作用 (5.3.5) と自明な相の作用がどう結ばれるか考える. 自明な相の作用を

$$S = \int d^4x \bar{\psi} i\gamma^\mu [\partial_\mu - ieA_\mu] \psi \quad (5.3.6)$$

とすると, 微小な chiral gauge 変換

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{id\phi\theta(t,\mathbf{x})\gamma_4/2} \psi, \quad \bar{\psi} \rightarrow \bar{\psi}' = \bar{\psi} e^{id\phi\theta(t,\mathbf{x})\gamma_4/2}, \quad \theta(t, \mathbf{x}) = -2b_\mu x^\mu \quad (5.3.7)$$

をパラメータ $\phi \in [0, 1]$ の経路に沿って無限回繰り返されたとき,

$$\bar{\psi}' i\gamma^\mu [\partial_\mu - ieA_\mu] \psi' \longrightarrow \bar{\psi} i\gamma^\mu [\partial_\mu - ieA_\mu - ib_\mu\gamma_4] \psi \quad (5.3.8)$$

が成り立つ. 以上より, Fujikawa の方法を適用すると, Weyl 半金属の電磁応答を記述する有効作用として

$$S_\theta = \int d^4x \frac{e^2}{32\pi^2} \theta(t, \mathbf{x}) \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma}, \quad \theta(t, \mathbf{x}) = 2(\mathbf{b} \cdot \mathbf{x} - \mu_5 t) \quad (5.3.9)$$

を得る [29, 30]. 電流を計算すると,

$$\mathbf{j} = \frac{e^2}{\pi h} (\mathbf{b} \times \mathbf{E} - \mu_5 \mathbf{B}) \quad (5.3.10)$$

であり, 第 1 項は異常ホール効果, 第 2 項はカイラル磁気効果である. Weyl 半金属の異常ホール効果に関しては観測されているが, Weyl 半金属でのカイラル磁気効果については議論がある. 式 (5.3.10) より Weyl 半金属のカイラル磁気効果は基底状態において, Weyl 点同士に μ_5 のエネルギー差があったら静磁場を印加すると電流が流れると読み取れる. しかし [30] で格子系の平衡状態でカイラル磁気効果は起きないと議論されている. これは静磁場は平衡電流を生成しないという我々の理解に対応する. しかし非平衡状態では Weyl 半金属でカイラル磁気効果が発生すると考えられている. 前章の反強磁性トポロジカル絶縁体のカイラル磁気効果の議論では, 本当にカイラル磁気効果が実現するかは議論しなかった. これは Fu-Kane-Mele-Hubbard 模型の場合は, 外部から電磁波を当て θ を動的にしている影響である.

また, Weyl 半金属の異常ホール効果について, 式 (5.3.10) は場の理論的に元づいて導出されたものである. しかし Weyl 半金属の異常ホール効果はバンド理論的にも導出できる. 詳細は付録 C.2.3 に譲るが, Hall 伝導率は

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{(2\pi)^2 \hbar} \int_{k_+}^{k_-} dk_z Ch_1(k_z) = \frac{e^2}{2\pi \hbar} (k_- - k_+) \quad (5.3.11)$$

となる. これは k_z 方向の Weyl 点間の距離が $2b_z = k_- - k_+$ である状況に対応するから, 式 (5.3.10) の第 1 項と同じ結果を得る.

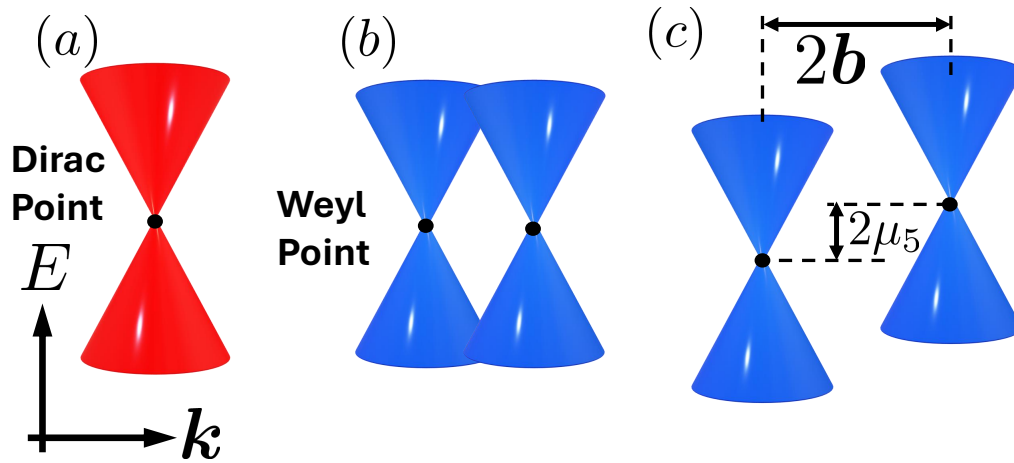


Figure 5.3.1: (a) 3次元の Dirac 点. 上下のバンドは2重に縮退していて Dirac 点は4重縮退してる. (b) Weyl 点の様子. 時間反転対称や空間反転対称性が破れた影響で Dirac cone が分裂している. (c) 2つの Weyl 点間に波数方向に $2b$, エネルギー方向に $2\mu_5$ の距離がある様子.

Chapter 6

結論

本論文では 3 次元トポロジカル絶縁体の電磁応答について調べ、物質中での Axion 電磁気学の実現について議論した。Chapter 2 では相互作用が無い fermion 系のトポロジカル相の分類からトポロジカル絶縁体を導入し、Chapter 3 では 3 つモデルを具体的に調べた。Chapter 4 では 3 次元トポロジカル絶縁体中の電磁場を記述する有効作用は、1 つ次元の高い同じく時間反転対称性を満たすトポロジカルに非自明な模型である 4 次元量子ホール効果の有効場理論である (4+1)-d Chern-Simons gauge 理論からの次元縮約で導出した。この手続きで得られた θ はトポロジカルバンド理論で得られた強い $\mathbb{Z}_2$ 不変量を再現する。この作用から、トポロジカル絶縁体の表面で半整数に量子化ホール電流が流れる半整数量子ホール効果、電場を印加しすると磁化が発生し、磁場を印加した場合電気分極が発生するトポロジカル電気磁気効果、トポロジカル絶縁体の表面に電荷を近づけたときバルクに磁気モノポールが発生する磁気モノポール虚像、磁気モノポールに電荷が付与される Witten 効果、という特異な電磁応答を導き出した。さらにこれらの特異な電磁応答は場の理論的な観点だけでなく、バンド理論的な観点から、3 次元の強いトポロジカル絶縁体の表面に存在する奇数個の Dirac cone が本質であることも突き止めた。Chapter 5 では 3 次元トポロジカル絶縁体、反強磁性トポロジカル絶縁体、Weyl 半金属を例に取り、物質中での Axion 電磁気学を議論した。これらの作用に含まれる Axion 電磁気学で中心的な役割を果たす S_θ は chiral anomaly に由来し、Fujikawa の方法と呼ばれる anomaly を計算する方法でミクロな模型から統一的に導出できることを示した。さらに θ が動的な場合、バルクで異常ホール効果とカイラル磁気効果の発生が预言され、反強磁性トポロジカル絶縁体の場合は実際にカイラル磁気効果が起こる可能性があることも議論した。以上より、3 次元の時間反転対称なトポロジカル絶縁体の宇宙には Axion が存在すると解明できた。

Appendix A

Maxwell場の理論

A.1 Notation

基本的に (3+1)-d 時空を考えるが, (2+1)-d 時空や一般の $(D+1)$ -d 時空を考える場合がある. 時空の要素を表すときは $\mu, \nu, \rho, \sigma = 0, 1, \dots, D$ のようにギリシア文字を使い, 空間の要素を表すときは $i, j, k, l = 1, 2, \dots, D$ のようにアルファベットを使う. Minkowski 計量は $\text{diag } \eta_{\mu\nu} = (1, -1, \dots, -1)$ のように時間成分が +1, 空間成分が -1 を採用する.

座標は $(x^0, x^1, \dots, x^D) = (ct, x^1, \dots, x^D)$ と上付き文字が基本とし, 下付きの座標は Minkowski 計量を用いて定義するとする: $x_\mu = \eta_{\mu\nu} x^\nu$. また偏微分については $(\partial/\partial x^0, \partial/\partial x^1, \dots, \partial/\partial x^D) = (\partial_0, \partial_1, \dots, \partial_D) = ((1/c)\partial_t, \partial_{x^1}, \dots, \partial_{x^D})$ とする. また上付きの偏微分は, $\partial^\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \eta^{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial x^\nu}$ のように定義する. ここで, $\eta^{\mu\nu}$ は Minkowski 計量の逆行列で $\eta^{\mu\rho}\eta_{\rho\nu} = \delta^\mu_\nu$ を満たす.

例として (3+1)-d のとき, 座標と偏微分の内積は

$$x_\mu x^\mu = c^2 t^2 - x^2 - y^2 - z^2 \quad (\text{A.1.1})$$

$$\partial_\mu \partial^\mu = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 = \square \quad (\text{A.1.2})$$

となる. 式 (A.1.2) の最右辺は d'Alembertian である.

A.2 SI 単位系と Gauss 単位系

我々にとって馴染みのある SI 単位系の Maxwell 方程式から始める:

$$\nabla \cdot \mathbf{E}_S(t, \mathbf{x}) = \frac{\rho_S(t, \mathbf{x})}{\epsilon_0}, \quad (\text{A.2.1})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}_S(t, \mathbf{x}) = 0, \quad (\text{A.2.2})$$

$$\nabla \times \mathbf{E}_S(t, \mathbf{x}) + \frac{\partial \mathbf{B}_S(t, \mathbf{x})}{\partial t} = 0, \quad (\text{A.2.3})$$

$$\nabla \times \mathbf{B}_S(t, \mathbf{x}) - \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}_S(t, \mathbf{x})}{\partial t} = \mu_0 \mathbf{j}_S(t, \mathbf{x}), \quad (\text{A.2.4})$$

ここで $\mathbf{E}_S(t, \mathbf{x})$, $\mathbf{B}_S(t, \mathbf{x})$, $\rho_S(t, \mathbf{x})$, $\mathbf{j}_S(t, \mathbf{x})$, ϵ_0 , μ_0 はそれぞれ電場, 磁場, 電荷密度, 電流密度, 真空の誘電率, 真空の透磁率である. この Maxwell 方程式は SI 単位系で表されており, 明示的にするために添え字 S を付けている. しかしながら相対論的場の理論からの観点から, Gauss 単位系の方が好まれる. なぜならば (i) 時間の次元が入っている量は必ず光速 c を伴い, (ii) $\mathbf{E}$ と $\mathbf{B}$ の次元が同じになり大きさの比

較が容易になるからである。SI 単位系から Gauss 単位系への変換は以下のように行う。

$$\mathbf{E}_G(t, \mathbf{x}) = \sqrt{4\pi\epsilon_0} \mathbf{E}_S(t, \mathbf{x}) \quad (\text{A.2.5})$$

$$\mathbf{B}_G(t, \mathbf{x}) = c\sqrt{4\pi\epsilon_0} \mathbf{B}_S(t, \mathbf{x}) = \sqrt{\frac{4\pi}{\mu_0}} \mathbf{B}_S(t, \mathbf{x}) \quad (\text{A.2.6})$$

$$\rho_G(t, \mathbf{x}) = \frac{\rho_S(t, \mathbf{x})}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}} \quad (\text{A.2.7})$$

$$\mathbf{j}_G(t, \mathbf{x}) = \frac{\mathbf{j}_S(t, \mathbf{x})}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}}. \quad (\text{A.2.8})$$

ここで添え字 G は Gauss 単位系での物理量であることを明示的に表している。これを用いると Maxwell 方程式は

$$\nabla \cdot \mathbf{E}_G(t, \mathbf{x}) = 4\pi\rho_G(t, \mathbf{x}) \quad (\text{A.2.9})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}_G(t, \mathbf{x}) = 0 \quad (\text{A.2.10})$$

$$\nabla \times \mathbf{E}_G(t, \mathbf{x}) + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}_G(t, \mathbf{x})}{\partial t} = 0 \quad (\text{A.2.11})$$

$$\nabla \times \mathbf{B}_G(t, \mathbf{x}) - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}_G(t, \mathbf{x})}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_G(t, \mathbf{x}), \quad (\text{A.2.12})$$

のように変換される。単位系の変換に伴ってスカラーポテンシャルとベクトルポテンシャルも

$$\phi_G(t, \mathbf{x}) = \sqrt{4\pi\epsilon_0} \phi_S(t, \mathbf{x}) \quad (\text{A.2.13})$$

$$\mathbf{A}_G(t, \mathbf{x}) = c\sqrt{4\pi\epsilon_0} \mathbf{A}_S(t, \mathbf{x}), \quad (\text{A.2.14})$$

のように変換する。Gauge 変換も

$$\mathbf{E}_S(t, \mathbf{x}) = -\nabla\phi_S(t, \mathbf{x}) - \frac{\partial \mathbf{A}_S(t, \mathbf{x})}{\partial t} \longrightarrow \mathbf{E}_G(t, \mathbf{x}) = -\nabla\phi_G(t, \mathbf{x}) - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}_G(t, \mathbf{x})}{\partial t} \quad (\text{A.2.15})$$

$$\mathbf{B}_S(t, \mathbf{x}) = \nabla \times \mathbf{A}_S(t, \mathbf{x}) \longrightarrow \mathbf{B}_G(t, \mathbf{x}) = \nabla \times \mathbf{A}_G(t, \mathbf{x}). \quad (\text{A.2.16})$$

のように変換する。以下では添え字 G は省略する。

A.3 真空の Maxwell 場の作用

Maxwell 方程式 (A.2.9), (A.2.10), (A.2.11), (A.2.12) を導出する作用を考える。作用はスカラーポテンシャルとベクトルポテンシャルで書いた方が便利なので $\phi, \mathbf{A}$ を用いる。この時点で電場と磁場の定義式

$$\mathbf{E}(t, \mathbf{x}) = -\nabla\phi(t, \mathbf{x}) - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}(t, \mathbf{x})}{\partial t} \quad (\text{A.3.1})$$

$$\mathbf{B}(t, \mathbf{x}) = \nabla \times \mathbf{A}(t, \mathbf{x}) \quad (\text{A.3.2})$$

は自動的に満たされるので、Maxwell 方程式 (A.2.10), (A.2.11) は自動的に満たされると考える。したがって Maxwell 方程式 (A.2.9), (A.2.12) を導出する作用について考えればよい。

今、Maxwell 方程式を導出する古典電磁気学の作用を

$$S_{\text{Maxwell}}[A_\mu] = \int d^4x \left[-\frac{1}{16\pi} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} - \frac{1}{c} j^\mu A_\mu \right], \quad (\text{A.3.3})$$

のように天下りの的に導入する。ここで

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu, \quad F_{\mu\nu} = \eta_{\mu\alpha} \eta_{\nu\beta} F^{\alpha\beta} \quad (\text{A.3.4})$$

$$A^\mu = (\phi(t, \mathbf{x}), \mathbf{A}(t, \mathbf{x})), \quad A_\mu = \eta_{\mu\nu} A^\nu = (\phi(t, \mathbf{x}), -\mathbf{A}(t, \mathbf{x})) \quad (\text{A.3.5})$$

$$j^\mu = (c\rho(t, \mathbf{x}), \mathbf{j}(t, \mathbf{x})). \quad (\text{A.3.6})$$

である. $F^{\mu\nu}, F_{\mu\nu}$ は電磁場テンソルと呼ばれ,

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -E_x & -E_y & -E_z \\ E_x & 0 & -B_z & B_y \\ E_y & B_z & 0 & -B_x \\ E_z & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}, \quad F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & E_x & E_y & E_z \\ -E_x & 0 & -B_z & B_y \\ -E_y & B_z & 0 & -B_x \\ -E_z & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.3.7})$$

である. 作用 (A.3.3) の変分を取ると,

$$\begin{aligned} \delta S_{\text{Maxwell}} &\equiv S_{\text{Maxwell}}[A_\mu + \delta A_\mu] - S_{\text{Maxwell}}[A_\mu] \\ &= \int d^4x \left[-\frac{1}{16\pi} (\partial^\mu (A^\nu + \delta A^\nu) - \partial^\nu (A^\mu + \delta A^\mu)) (\partial_\mu (A_\nu + \delta A_\nu) - \partial_\nu (A_\mu + \delta A_\mu)) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{c} j^\mu (A_\mu + \delta A_\mu) \right] \\ &\quad - \int d^4x \left[-\frac{1}{16\pi} (\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) (\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) - \frac{1}{c} j^\mu A_\mu \right] \\ &= \int d^4x \left[-\frac{1}{16\pi} (4\partial^\mu A^\nu \partial_\mu \delta A_\nu - 4\partial^\nu A^\mu \partial_\mu \delta A_\nu) - \frac{1}{c} j^\mu \delta A_\mu \right] \\ &= \int d^4x \left[\frac{1}{4\pi} \partial_\mu F^{\mu\nu} - \frac{1}{c} j^\nu \right] \delta A_\nu. \end{aligned} \quad (\text{A.3.8})$$

となるから (途中で部分積分をした), 汎関数微分を行うと運動方程式

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\delta S_{\text{Maxwell}}}{\delta A_\nu(t, \mathbf{x})} \\ &= \int d^4x' \left[\frac{1}{4\pi} \partial_\mu F^{\mu\lambda} - \frac{1}{c} j^\lambda \right] \frac{\delta A_\lambda(t', \mathbf{x}')}{\delta A_\nu(t, \mathbf{x})} \\ &= \frac{1}{4\pi} \partial_\mu F^{\mu\nu} - \frac{1}{c} j^\nu, \end{aligned} \quad (\text{A.3.9})$$

を得る. 途中で汎関数微分の公式 $\frac{\delta A_\lambda(t', \mathbf{x}')}{\delta A_\nu(t, \mathbf{x})} = \delta_\lambda^\nu \delta(t - t') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ を使った. したがって, Maxwell 方程式

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = \frac{4\pi}{c} j^\nu. \quad (\text{A.3.10})$$

が導出された. 実際に $F^{\mu\nu}, j^\nu$ に具体的に電場, 磁場, 電荷, 電流密度を代入すると (A.2.9), (A.2.12) が得られる.

A.4 物質中の Maxwell 場の作用

物質中の Maxwell 方程式を考える. 物質中では電荷と電流は外部から与えられたものか, 応答量かに分けることができる^{*1} [89]. 応答電荷 ρ_{res} を用いて電気分極を $\rho_{\text{res}} = -\nabla \cdot \mathbf{P}$ と定義し, 応答電流に対して, 通常の応答電流と磁化電流に分けて, 連続の方程式から $\mathbf{j}_{\text{res}} = \partial_t \mathbf{P}$ が成り立ち, 磁化を $\mathbf{j}_{\text{mag}} = c\nabla \times \mathbf{M}$ と定義すると, 物質中の Maxwell 方程式は

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(t, \mathbf{x}) = 4\pi(\rho(t, \mathbf{x}) - \nabla \cdot \mathbf{P}(t, \mathbf{x})), \quad (\text{A.4.1})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(t, \mathbf{x}) = 0, \quad (\text{A.4.2})$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(t, \mathbf{x}) + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}(t, \mathbf{x})}{\partial t} = 0, \quad (\text{A.4.3})$$

$$\nabla \times \mathbf{B}(t, \mathbf{x}) - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}(t, \mathbf{x})}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \left(\mathbf{j}(t, \mathbf{x}) + \frac{\partial \mathbf{P}(t, \mathbf{x})}{\partial t} + \nabla \times c\mathbf{M}(t, \mathbf{x}) \right), \quad (\text{A.4.4})$$

^{*1}多くの電磁気学の教科書では物質中の電荷と電流は自由電荷・自由電流か, 束縛電荷・束縛電流かに分けているが, これは正しくない. 例えば激しく振動する電場を考えたとき, 自由電荷は空間的に狭い領域に束縛されてしまい, 自由・束縛という区別ができなくなるからである [89].

となる. 電束密度 $\mathbf{D}(t, \mathbf{x}) = \mathbf{E}(t, \mathbf{x}) + 4\pi\mathbf{P}(t, \mathbf{x})$, 磁場の大きさ^{*2} $\mathbf{H}(t, \mathbf{x}) = \mathbf{B}(t, \mathbf{x}) - 4\pi\mathbf{M}(t, \mathbf{x})$ を定義すると, 物質中の Maxwell 方程式は

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(t, \mathbf{x}) = 4\pi\rho(t, \mathbf{x}), \quad (\text{A.4.5})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(t, \mathbf{x}) = 0, \quad (\text{A.4.6})$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(t, \mathbf{x}) + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}(t, \mathbf{x})}{\partial t} = 0, \quad (\text{A.4.7})$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(t, \mathbf{x}) - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}(t, \mathbf{x})}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(t, \mathbf{x}), \quad (\text{A.4.8})$$

となる. 物質中の Maxwell 方程式を導出する作用は,

$$S_{\text{Maxwell}}[A_\mu] = \int d^4x \left[-\frac{1}{16\pi} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} + \frac{1}{2} F_{\mu\nu} \mathcal{P}^{\mu\nu} - \frac{1}{c} j^\mu A_\mu \right], \quad (\text{A.4.9})$$

である. ここで $\mathcal{P}^{\mu\nu}$ は電気分極と磁化を表すテンソルで $\mathcal{P}^{0i} = P_i$, $\mathcal{P}^{ij} = -\epsilon^{ijk} M_k$ である. 作用 (A.4.9) を A_μ について変分を取ると, 運動方程式は

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} + 4\pi \partial_\mu \mathcal{P}^{\nu\mu} = \frac{4\pi}{c} j^\nu \quad (\text{A.4.10})$$

となる. 具体系を代入すると物質中の Maxwell 方程式 (A.4.1), (A.4.4) が得られる.

A.5 電磁場の境界条件

物質中の Maxwell 方程式

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(t, \mathbf{x}) = 4\pi\rho(t, \mathbf{x}), \quad (\text{A.5.1})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(t, \mathbf{x}) = 0, \quad (\text{A.5.2})$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(t, \mathbf{x}) + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}(t, \mathbf{x})}{\partial t} = 0, \quad (\text{A.5.3})$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(t, \mathbf{x}) - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}(t, \mathbf{x})}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(t, \mathbf{x}), \quad (\text{A.5.4})$$

から電場 $\mathbf{E}$ は境界面に平行な方向に連続, 磁場 $\mathbf{B}$ は境界面に垂直な方向に連続, 電束密度 $\mathbf{D}$ は外部電荷がない場合は境界面に垂直な方向に連続, 磁場の大きさ $\mathbf{H}$ は外部電流がないときは境界面に平行な方向に連続であることを示す.

まず磁場 $\mathbf{B}$ について, Maxwell 方程式より $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ を満たす. ここで図 A.5.1 の (a) のように $z = 0$ を境界として異なる物質が接している状況を考える. そして図のような高さが微小 ϵ の立方体について体積積分すると, Gauss の定理より

$$\int_V d^3r \nabla \cdot \mathbf{B} = \int_{\partial V} dS \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (\text{A.5.5})$$

を得る. $z > 0$ の磁場を $\mathbf{B}_1$, $z < 0$ の磁場を $\mathbf{B}_2$ として図にある法線ベクトル $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2$ を使うと, 式 (A.5.5) は

$$\mathbf{B}_1(z=0) \cdot \mathbf{n}_1 + \mathbf{B}_2(z=0) \cdot \mathbf{n}_2 = [\mathbf{B}_1(z=0) - \mathbf{B}_2(z=0)] \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (\text{A.5.6})$$

が成立する. ここで $\mathbf{n} = \mathbf{n}_1 = -\mathbf{n}_2$ で, $\epsilon \rightarrow 0$ より側面からの寄与が無いとした. これより磁場は境界に対して垂直な方向に連続であることが示された.

^{*2}本来は $\mathbf{H}$ を磁場, $\mathbf{B}$ を磁束密度と呼ぶべきだが, 本論文では $\mathbf{B}$ を磁場と呼んでいるので $\mathbf{H}$ を磁場の大きさと呼ぶことにする.

次に電場について, Maxwell 方程式より, $\nabla \times \mathbf{E} + (1/c)\partial_t \mathbf{B} = 0$ を満たす. ここで図 A.5.1 の (b) のように異なる物質の境界に対して長方形の領域を考える. 境界に対して垂直な辺の長さは微小 ϵ とする. この領域について面積積分すると, Stokes の定理より

$$\int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = \int_{\partial S} d\mathbf{r} \cdot \mathbf{E} + \frac{\partial}{\partial t} \int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (\text{A.5.7})$$

を得る. $z > 0$ の電場を $\mathbf{E}_1$, $z < 0$ の電場を $\mathbf{E}_2$ として図にある境界の接ベクトル $\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2$ を使うと, 式 (A.5.7) は

$$\mathbf{E}_1(z=0) \cdot \mathbf{t}_1 + \mathbf{E}_2(z=0) \cdot \mathbf{t}_2 = [\mathbf{E}_1(z=0) - \mathbf{E}_2(z=0)] \cdot \mathbf{t} = 0 \quad (\text{A.5.8})$$

が成立する. ここで $\mathbf{t} = \mathbf{t}_1 = -\mathbf{t}_2$ で, $\epsilon \rightarrow 0$ より長方形の面積は 0 であることを用いた. これより電場は境界に対して平行な方向に連続であることが示された.

最後に電束密度 $\mathbf{E}$ と磁場の大きさ $\mathbf{H}$ について, 外部電荷と外部電流が 0 のとき, Maxwell 方程式は

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(t, \mathbf{x}) = 0 \quad (\text{A.5.9})$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(t, \mathbf{x}) - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}(t, \mathbf{x})}{\partial t} = 0 \quad (\text{A.5.10})$$

となる. $\mathbf{B} \leftrightarrow \mathbf{D}, \mathbf{E} \leftrightarrow \mathbf{B}$ の対応より, $\mathbf{D}, \mathbf{H}$ は外部電荷と外部電流が 0 のとき, 境界に対して垂直な方向, 平行な方向にそれぞれ連続である.

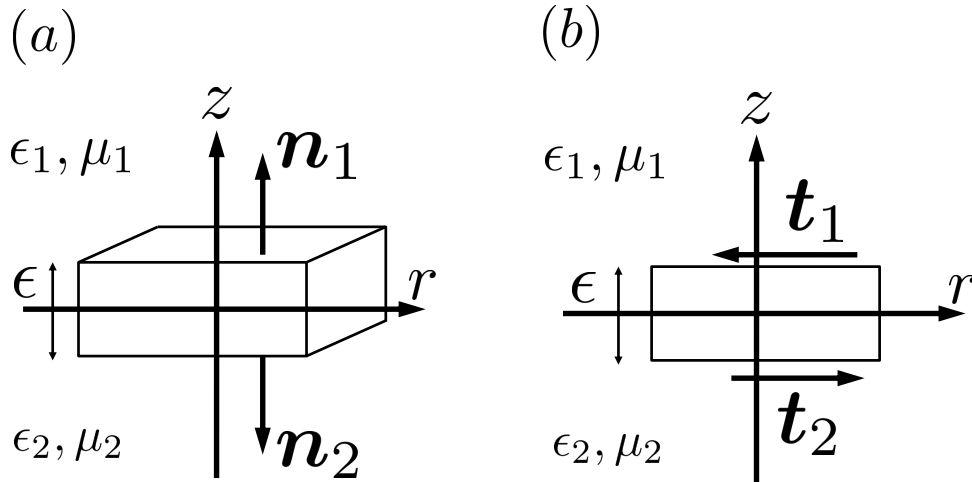


Figure A.5.1: $z = 0$ を境にして誘電率と透磁率が異なる物質が接している様子. (a) は立方体上の領域を取り, (b) は長方形の領域を取った.

Appendix B

Chiral Anomaly

B.1 Notation

Section B.4 では主に (1+1)-d と (3+1)-d を考える. この場合の Dirac 方程式の Notation をまとめておく. まず, (1+1)-d では γ 行列は $\gamma^0 = \sigma^x, \gamma^1 = i\sigma^y$ とする. (1+1)-d での chirality は $\gamma_2 = -\gamma^0\gamma^1 = \sigma^z$ とする. 次に (3+1)-d では γ 行列は Chiral/Weyl 表現を使って,

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & I_2 \\ I_2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_4 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix} \quad (\text{B.1.1})$$

である. ここで I_2 は 2×2 の単位行列で γ_4 は Chirality である. 通常 Chirality は γ^5 で書くが, Notation の統一のために, $D+1$ 次元の Chirality は下添え字で γ_{D+1} と書くことにする. Chirality は他の γ 行列とは反可換である $\{\gamma_{D+1}, \gamma^\mu\} = 0$.

次に Wick 回転の Notation について. $D+1$ 次元時空の計量は $\text{diag } \eta_{\mu\nu} = (1, -1, \dots, -1)$ で与えられるが, 時間成分と空間成分の符号が異なるので, 時間を複素数である虚時間を導入して計量の符号を揃えた計量を Euclid 空間と同じものにした方が便利な時がある. このように Minkowski 空間から Euclid 空間へ移行する手続きを **Euclid 化**もしくは **Wick 回転**と呼ぶ. まず虚時間 τ は実時間 t と $t = -i\tau$ の関係であるとする. 空間成分は変わらない. この場合時空の計量は $\text{diag } \eta_{\mu\nu}^E = (-1, -1, \dots, -1)$ となり, 全ての成分がマイナスになる. 微分演算子は $\partial_t = i\partial_\tau$ となり, 空間成分は変わらない. Wick 回転により γ 行列も変換する. Euclid 化した γ 行列を大文字で書くとすると, $\gamma^0 = -i\Gamma^0, \gamma^i = \Gamma^i, \gamma_{D+1} = -i\Gamma_{D+1}$ を満たす. $\{\Gamma^\mu, \Gamma^\nu\} = 2\eta^{E\mu\nu}$ という反交換関係を満たす. Dirac 場が $U(1)$ gauge 場と couple しているとき, gauge 場は $A_0 = iA_0^E, A_i = A_i^E$ と変換する. 時間成分だけ変わり, 空間成分は変わらない. 上付き添え字 E を使って Euclid 化した量を表すことがある.

B.2 Dirac 方程式

Dirac 方程式とはスピン 1/2 の Fermion を記述する特殊相対論の効果が入った方程式である. Dirac 方程式に従う粒子を **Dirac 粒子**と呼ぶ. Dirac 方程式の導入の仕方は色々ある. Klein-Gordon 方程式の「因数分解」から導入する方法や Dirac 場の Lagrangian を考えてから Euler-Lagrange 方程式を使って, 導出する方法などである. このノートでは**公理として Dirac 方程式を導入する**.

まずは, (3+1)-d について考える. Dirac 方程式は Dirac 場を $\psi(t, \mathbf{x}) = \psi(x)$ とすると,

$$\left(i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{mc}{\hbar}\right)\psi(x) = 0 \quad (\text{B.2.1})$$

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu} I \quad (\text{B.2.2})$$

である. m は Dirac 粒子の質量で主に電子の質量を念頭に置いている. γ^μ は γ 行列と呼ばれ, $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu}$ を満たすことから Clifford algebra と呼ばれる. γ 行列はその反交換関係を見れば, 通常の c 数ではないことが分かる. γ 行列は最低でも 2×2 行列になり, これはスピンの自由度が自然に入っていること

を意味する. Dirac 方程式 (B.2.1) を Schrödinger 方程式のような形に変換することが出来る. $(\gamma^0)^2 = 1$ を使うと,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) = (-i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2) \psi(x) = H_{\text{Dirac}} \psi(x) \quad (\text{B.2.3})$$

$$\beta = \gamma^0, \quad \alpha^i = \beta \gamma^i \quad (\text{B.2.4})$$

$$\{\alpha^i, \alpha^j\} = 2\delta^{ij}, \quad \{\alpha^i, \beta\} = 0, \quad \beta^2 = 1 \quad (\text{B.2.5})$$

を得る. H_{Dirac} を **Dirac Hamiltonian** と呼ばれ, 相対論的なスピン 1/2 の Fermion を記述する Hamiltonian である. 注意するのは Dirac 場 $\psi(x)$ は通常の波動関数と違い, γ 行列の次元と同じ数だけの要素を持っている. Hamiltonian はエルミート演算子なので α 行列と行列 β はエルミートである. それに伴い, γ 行列の空間成分は反エルミートであることが分かる. 実際, エルミート共役を取ると,

$$(\gamma^i)^\dagger = (\beta \alpha^i)^\dagger = (\alpha^i)^\dagger \beta^\dagger = -\beta^\dagger (\alpha^i)^\dagger = -\gamma^i \quad (\text{B.2.6})$$

となるからである. γ 行列は偶数次元であり, (3+1)-d 系では γ 行列の次元は 4 以上に限られる. まず γ 行列が偶数次元に限られることを示す. N を γ 行列の次元として, γ^0, γ^1 は反可換であるので, $\{\gamma^0, \gamma^1\} = 0$ に対して, 両辺の行列式を取ると,

$$\det \gamma^0 \det \gamma^1 = (-1)^N \det \gamma^1 \det \gamma^0 \quad (\text{B.2.7})$$

となるから $1 = (-1)^N$ より, γ 行列の次元 N は偶数である. 次に (3+1)-d 系では γ 行列は 4 次元以上であることを示す. (3+1)-d 系で γ 行列が Pauli 行列 σ^i を使って

$$\gamma^i = i\sigma^i \quad (\text{B.2.8})$$

と置いてみる. これは反交換関係 (B.2.2) の空間成分を満たす. 残るは, $(\gamma^0)^2 = 1, \{\gamma^0, \gamma^i\} = 0$ を満たす 2×2 行列 γ^0 を見つければ良いが, そのような行列は存在しない. γ^0 は 2×2 のエルミート行列なので, 4 つの基底となる行列の線形結合で表せる. この基底を単位行列 I_2 と Pauli 行列としたら,

$$\gamma^0 = b_\mu \sigma^\mu, \quad \sigma^0 = I_2 \quad (\text{B.2.9})$$

となる. $b_\mu \in \mathbb{C}$ である. この γ^0 を $\{\gamma^0, \gamma^i\} = 0$ に代入すると, $b_0 = b_j = 0$ という結果となる. これは $\gamma^0 = 0$ を意味するが $(\gamma^0)^2 = 1$ を満たさないで矛盾. 以上より, γ 行列は偶数次元で (3+1)-d では γ 行列の次元は 4 以上であることが示された.

B.3 古典論での chiral 対称性

まず $U(1)$ gauge 場と結合した古典的な $(D+1)$ -d の Dirac 場について考える. 作用は

$$S[\bar{\psi}, \psi, A_\mu] = \int d^{D+1}x \bar{\psi} [i\gamma^\mu D_\mu - m] \psi \quad (\text{B.3.1})$$

である. この節では $\hbar = 1, c = 1$ 自然単位系を用いる. 電子の電荷 $-e$ は明記する. $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$ で ψ の Dirac 共役であり, $D_\mu = \partial_\mu - ieA_\mu$ は共変微分である. $\gamma^\mu D_\mu = \not{D}$ と省略することがある. $\not{D}$ を **Dirac 演算子** と呼ぶ. 作用 (B.3.1) に対して **chiral 変換**

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{i\alpha \gamma_{D+1}} \psi \quad (\text{B.3.2})$$

$$\bar{\psi} \rightarrow \bar{\psi}' = \bar{\psi} e^{i\alpha \gamma_{D+1}} \quad (\text{B.3.3})$$

を考える. α は実定数である. (1+1)-d では chirality は $\gamma_2 = \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ より chiral 変換とは Dirac 場の右巻き chirality 成分と左側 chirality 成分の位相を逆向きに回転する変換である. 質量が 0 のとき

まり massless Dirac Fermion のとき, 作用 (B.3.1) は chiral 変換に対して不変である. 実際計算すると,

$$\begin{aligned} S[\bar{\psi}', \psi', A_\mu] &= \int d^{D+1}x \bar{\psi} e^{i\alpha\gamma_{D+1}} i\gamma^\mu D_\mu e^{i\alpha\gamma_{D+1}} \psi \\ &= \int d^{D+1}x \bar{\psi} e^{i\alpha\gamma_{D+1}} e^{-i\alpha\gamma_{D+1}} i\gamma^\mu D_\mu \psi \\ &= S[\bar{\psi}, \psi, A_\mu] \end{aligned} \quad (\text{B.3.4})$$

となる. ここで反交換関係 $\{\gamma_D, \Gamma^\mu\} = 0$ より導かれる公式 $\gamma^\mu e^{i\alpha\gamma_{D+1}} = -e^{i\alpha\gamma_{D+1}} \gamma^\mu$ を使った. したがって $m = 0$ のとき Dirac 場は Chiral 対称性がある. Chiral 対称性がある場合, Noether の定理より, 保存カレントが存在する. Chiral 対称性の場合 **chiral カレント** j_{D+1}^μ が保存し,

$$\partial_\mu j_{D+1}^\mu = 2im\bar{\psi}\gamma_{D+1}\psi, \quad j_{D+1}^\mu \equiv \bar{\psi}\gamma^\mu\gamma_{D+1}\psi \quad (\text{B.3.5})$$

を満たす. ここで $m = 0$ のとき, 確かに $\partial_\mu j_{D+1}^\mu = 0$ となり, chiral カレントは保存している. 導出は左辺を計算すればよい. 途中で以下の公式

$$\begin{aligned} [i\gamma^\mu(\partial_\mu - ieA_\mu) - m]A\psi &= 0 \\ \xrightarrow{\dagger} -i(\partial_\mu\psi)^\dagger(\gamma^\mu)^\dagger - i(ieA_\mu)\psi^\dagger - m\psi^\dagger &= 0 \\ \xrightarrow{\times\gamma^0} -i(\partial_\mu\psi)^\dagger(\gamma^\mu)^\dagger\gamma^0 - i(ieA_\mu)\psi^\dagger(\gamma^\mu)^\dagger\gamma^0 - m\psi^\dagger\gamma^0 &= 0 \\ \longrightarrow -i(\partial_\mu\bar{\psi})\gamma^\mu - i(ieA_\mu)\bar{\psi}\gamma^\mu - m\bar{\psi} &= 0 \end{aligned} \quad (\text{B.3.6})$$

を使う. 計算すると,

$$\begin{aligned} \partial_\mu j_{D+1}^\mu &= \partial_\mu(\bar{\psi}\gamma^\mu\gamma_{D+1}\psi) \\ &= (\partial_\mu\bar{\psi})\gamma^\mu\gamma_{D+1}\psi + \bar{\psi}\gamma^\mu\gamma_{D+1}\partial_\mu\psi \\ &= [(-ieA_\mu)\bar{\psi}\gamma^\mu + im\bar{\psi}]\gamma_{D+1}\psi - \bar{\psi}\gamma_{D+1}[\gamma^\mu ieA_\mu - im]\psi \\ &= -ieA_\mu\bar{\psi}(\gamma^\mu\gamma_{D+1} + \gamma_{D+1}\gamma^\mu)\psi + 2im\bar{\psi}\gamma_{D+1}\psi \\ &= 2im\bar{\psi}\gamma_{D+1}\psi \end{aligned} \quad (\text{B.3.7})$$

となり, $\partial_\mu j_{D+1}^\mu = 2im\bar{\psi}\gamma_{D+1}\psi$ が証明できた. つまり古典的には chiral 対称性がある場合 chiral current が保存するという結果が導けた. しかし量子論で考える場合, chiral 対称性があっても chiral current は保存せず $\partial_\mu j_{D+1}^\mu = F$ となることが導ける. このように古典論で保たれている対称性が量子論に移行した時になくなることを**量子異常 ((Quantum) Anomaly)**と呼ぶ [82, 83, 90]. 今の場合 chiral 対称性に対する anomaly なので chiral anomaly と呼ばれる [82, 83]. これから導出する (1+1)-d と (3+1)-d の chiral anomaly は

$$D = 2: \partial_\mu j_2^\mu = 2mi\bar{\psi}\gamma_2\psi + \frac{e}{2\pi}\epsilon^{\mu\nu}F_{\mu\nu} = 2mi\bar{\psi}\gamma_2\psi + \frac{e}{\pi}E_x \quad (\text{B.3.8})$$

$$D = 4: \partial_\mu j_4^\mu = 2mi\bar{\psi}\gamma_4\psi + \frac{e^2}{16\pi^2}\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma}F_{\mu\nu}F_{\rho\sigma} = 2mi\bar{\psi}\gamma_4\psi + \frac{e^2}{2\pi^2}\mathbf{E} \cdot \mathbf{B} \quad (\text{B.3.9})$$

となる.

B.4 量子論での chiral 変換と Fujikawa の方法

古典論では系は作用 S で記述されたが, 量子論では系は分配関数 Z で記述される. 経路積分を使うと, 分配関数は

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\psi}\mathcal{D}\psi e^{iS} \quad (\text{B.4.1})$$

と書くことが出来る. S は作用である. Dirac 場の分配関数は作用

$$\begin{aligned} S[\bar{\psi}, \psi, A_\mu] &= \int d^{D+1}x \bar{\psi} [i\gamma^\mu (\partial_\mu - ieA_\mu) - m] \psi \\ &= \int d^{D+1}x \bar{\psi} [i\mathcal{D} - m] \psi \end{aligned} \quad (\text{B.4.2})$$

を用いて $Z = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{iS[\bar{\psi}, \psi, A_\mu]}$ という形で与えられる.

分配関数 Z に chiral 変換を行った場合を考える. ここで量子論では chiral 変換によって作用ではなく, **分配関数全体が不変であることを要請する**. つまり,

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{iS[\bar{\psi}, \psi, A_\mu]} = \int \mathcal{D}\bar{\psi}' \mathcal{D}\psi' e^{iS[\bar{\psi}', \psi', A_\mu]} \quad (\text{B.4.3})$$

であることを要請する. Section B.3 で chiral カレントを計算した. Chiral 変換の下で作用の変化は,

$$S[\bar{\psi}', \psi', A_\mu] = S[\bar{\psi}, \psi, A_\mu] + \int d^{D+1}x \alpha [\partial_\mu j_{D+1}^\mu - 2im\bar{\psi}\gamma_{D+1}\psi] \quad (\text{B.4.4})$$

である. chiral 変換で作用以外にも積分測度も変化する. Jacobian を $J(\alpha)$ として積分測度が

$$\mathcal{D}\bar{\psi}' \mathcal{D}\psi' = J(\alpha) \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \quad (\text{B.4.5})$$

と変化するとすると, 分配関数が chiral 変換の下で

$$\begin{aligned} Z &= \int \mathcal{D}\bar{\psi}' \mathcal{D}\psi' e^{iS[\bar{\psi}', \psi', A_\mu]} \\ &= \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{iS[\bar{\psi}, \psi, A_\mu] + i \int d^{D+1}x \alpha [\partial_\mu j_{D+1}^\mu - 2im\bar{\psi}\gamma_{D+1}\psi] + \log J(\alpha)} \end{aligned} \quad (\text{B.4.6})$$

と変換するので, chiral 変換の下で分配関数が不変になるためには

$$i \int d^{D+1}x \alpha [\partial_\mu j_{D+1}^\mu - 2im\bar{\psi}\gamma_{D+1}\psi] + \log J(\alpha) = 0 \quad (\text{B.4.7})$$

が成立する必要がある. α で汎関数微分をすると, 古典論での chiral current の保存の式は

$$\partial_\mu j_{D+1}^\mu = 2mi\bar{\psi}\gamma_{D+1}\psi + i \frac{\delta}{\delta\alpha} \log J(\alpha) \quad (\text{B.4.8})$$

と変更される. $m = 0$ の massless Dirac Fermion の場合, Jacobian が 1 でなければ右辺が 0 でないので, これはまさに chiral anomaly である.

このように anomaly を計算する際に Feynman ダイアグラムを使わずに経路積分の積分測度の変化に着目する方法を **Fujikawa の方法** と呼ぶ [79, 80, 91].

Jacobian $J(\alpha)$ の計算

次に具体的に Jacobian $J(\alpha)$ を計算してみる. 分配関数は $Z = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{iS}$ のように計算したが, $J(\alpha)$ の計算では虚時間表示に移った方が計算しやすい. 虚時間表示での分配関数は, Euclid 化した作用 S^E を用いて,

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{S^E} \quad (\text{B.4.9})$$

と計算できる^{*1}. Dirac 場の分配関数は作用 (B.3.1) を Euclid 化した作用

$$\begin{aligned} S^E[\bar{\psi}, \psi, A_\mu] &= \int_0^\beta d\tau \int d^D x \bar{\psi} [\Gamma^\mu (\partial_\mu - ieA_\mu^E) - m] \psi \\ &= \int d^{D+1} x^E \bar{\psi} [\not{D}^E - m] \psi, \quad \bar{\psi} = \psi^\dagger \Gamma^0 \end{aligned} \quad (\text{B.4.10})$$

を用いて $Z = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{S^E[\bar{\psi}, \psi, A_\mu]}$ という形で与えられる. 虚時間成分は $\mu = 0$ に対応する. Dirac 演算子 $\not{D}^E = \Gamma^\mu (\partial_\mu - ieA_\mu^E)$ はエルミート演算子である. まず微分演算子 ∂_μ と虚数単位 i は反エルミートである. 微分演算子の方は部分積分を行えば反エルミート性を確認できる. 次に Γ^μ であるが, 空間成分は $\Gamma^i = \gamma^i$ かつ γ^i は反エルミートであるので Γ^i は反エルミートである. また虚時間成分については $\Gamma^0 = i\gamma^0$ かつ γ^0 はエルミートなので Γ^0 は反エルミートである. したがって Dirac 演算子 $\not{D}^E$ はエルミート演算子である. 作用を虚時間形式にした理由は Dirac 演算子がエルミート演算子になり, Dirac 演算子の固有値は実数となり, 固有ベクトルは正規直交基底となるからである.

Dirac 演算子 $\not{D}^E$ の固有方程式を $\not{D}^E \phi_n(x) = l_n \phi_n(x)$ と書くとする. $l_n, \phi_n(x)$ はそれぞれ n 番目の固有値, 固有ベクトルである. 固有ベクトル $\phi_n(x)$ は正規直交基底なので規格化条件と完全性条件を満たす:

$$\text{Orthonormality: } \int d^{D+1} x^E \phi_m^\dagger(x) \phi_n(x) = \delta_{mn} \quad (\text{B.4.11})$$

$$\text{Completeness: } \sum_n \phi_n^\dagger(x) \phi_n(y) = \delta(x - y). \quad (\text{B.4.12})$$

Dirac 演算子の固有ベクトル $\phi_n(x)$ を基底として Dirac 場を展開する:

$$\psi = \sum_n a_n \phi_n(x), \quad \bar{\psi} = \sum_n \bar{b}_n \phi_n^\dagger(x), \quad (\text{B.4.13})$$

ここで展開係数 $a_n, \bar{b}_n$ は grassmann 数である. Dirac 場を展開した形に微小 chiral 変換を行うと,

$$\psi' = \sum_n a'_n \phi_n(x) = \sum_n (1 + i\alpha \gamma_{D+1}) a_n \phi_n(x) \quad (\text{B.4.14})$$

となる. 左から $\phi_m^\dagger(x)$ を作用させて時空について積分すると, 式 (B.4.11), (B.4.12) を用いて,

$$a'_m = M_{mn} a_n = \sum_n \left(\delta_{mn} + i \int d^{D+1} x^E \phi_m^\dagger(x) \alpha \gamma_{D+1} \phi_n(x) \right) a_n \quad (\text{B.4.15})$$

と展開係数が変化する. Chiral 変換の下で展開係数 a_n は行列 M_{mn} を作用させた形に変換する. 展開係数 $\bar{b}_n$ についても計算すると, a_n と同様に chiral 変換の下で $\bar{b}'_m = M_{mn} \bar{b}_n$ という法則で変換することが分かる. 計算の途中で γ_{D+1} は grassmann 偶なので $[\bar{b}_n, \gamma_{D+1}] = 0$ であることを用いた. この変換則を用いて積分測度は, Fermion 系なので grassmann 積分であることに注意すると,

$$\begin{aligned} \mathcal{D}\bar{\psi}' \mathcal{D}\psi' &= \prod_n d\bar{b}'_n da'_n = \prod_n (\det M)^{-1} d\bar{b}_n (\det M)^{-1} da_n = \prod_n (\det M)^{-2} d\bar{b}_n da_n \\ &= e^{-2 \log \det [M]} \prod_n d\bar{b}_n da_n = e^{-2 \text{Tr} [\log M]} \prod_n d\bar{b}_n da_n \\ &= \exp \left[-2i \sum_n \int d^{D+1} x^E \phi_n^\dagger(x) \alpha \gamma_{D+1} \phi_n(x) \right] \prod_n d\bar{b}_n da_n \\ &= J(\alpha) \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \end{aligned} \quad (\text{B.4.16})$$

^{*1}分配関数の方が e^S という形になっており, 普通の虚時間表示での分配関数の計算は e^{-S} という形だが, 今回は e^S という形になっている. この原因は恐らく計量が $\text{diag } \eta_{\mu\nu}^E = (-1, -1, \dots, -1)$ となる Wick 回転を行ったので, それに伴って $e^{-S} \rightarrow e^S$ と変わったと思われる.

と変換することが導ける. 計算の途中で線形代数の公式 $\log \det M = \text{Tr} [\log M]$ を用いて, α が小さいことから, 以下のような計算式

$$\log M_{mn} = \log \left[\delta_{mn} + i \int d^{D+1} x^E \phi_m^\dagger(x) \alpha \gamma_{D+1} \phi_n(x) \right] \approx i \int d^{D+1} x^E \phi_m^\dagger(x) \alpha \gamma_{D+1} \phi_n(x) \quad (\text{B.4.17})$$

を用いた. したがって Jacobian $J(\alpha)$ が求まった:

$$J(\alpha) = \exp \left[-2i \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N \int d^{D+1} x^E \phi_n^\dagger(x) \alpha \gamma_{D+1} \phi_n(x) \right]. \quad (\text{B.4.18})$$

しかし $J(\alpha)$ が (B.4.18) のような形だと位相部分が発散してしまうので正則化する必要がある. 正則化のために $f(x \rightarrow 0) \rightarrow 1$ かつ $x > 1$ で素早く $f(x) \rightarrow 0$ になるような滑らかな関数 $f(x)$ を用意する. このような $f(x)$ を用意したら, $J(\alpha)$ に $\lim_{M \rightarrow \infty} f(l_n^2/M^2) = 1$ を挿入する. 固有値 l_n は gauge 不変な量である.

$$\begin{aligned} \frac{i}{2} \log J(\alpha) &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int d^{D+1} x^E \alpha \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n^\dagger(x) \gamma_{D+1} f\left(\frac{l_n^2}{M^2}\right) \phi_n(x) \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int d^{D+1} x^E \alpha \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n^\dagger(x) \gamma_{D+1} f\left(\frac{[\not{D}^E]^2}{M^2}\right) \phi_n(x) \end{aligned} \quad (\text{B.4.19})$$

途中で固有方程式 $\not{D}^E \phi_n(x) = l_n \phi_n(x)$ を使った. ここで $\not{D}^E$ の固有状態である Dirac 場の正規直交基底 $\phi_n(x)$ は状態ベクトル $|\phi_n\rangle$ の基底 $|x, s\rangle$ を使ったスピノル表示であるとする. 具体的に (3+1)-d の場合は, Dirac 場は 4 成分なので

$$\phi_n(x) = \begin{pmatrix} \phi_n^{(1)}(x) \\ \phi_n^{(2)}(x) \\ \phi_n^{(3)}(x) \\ \phi_n^{(4)}(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle x, s=1 | \phi_n \rangle \\ \langle x, s=2 | \phi_n \rangle \\ \langle x, s=3 | \phi_n \rangle \\ \langle x, s=4 | \phi_n \rangle \end{pmatrix} \quad (\text{B.4.20})$$

である. Dirac 場 $\phi_n(x)$ は位置を基底として表示しているが, 波数 k を基底に表示すると便利である. つまり $|x, s\rangle \rightarrow |k, s\rangle$ という基底の変換を行う.

$$\phi_n^{(s)}(x) = \langle x, s | \phi_n \rangle = \int d^{D+1} k \langle x, s | k, s \rangle \langle k, s | \phi_n \rangle = \int d^{D+1} k \frac{1}{(2\pi)^{D+1/2}} e^{ik_\mu x^\mu} \langle k, s | \phi_n \rangle, \quad (\text{B.4.21})$$

ここで $k_\mu = (-k^0, -k^1, \dots, -k^{D-1})$ で $k_\mu x^\mu = -k^0 x^0 - k^1 x^1 - \dots - k^{D-1} x^{D-1}$ である. 式 (B.4.19) に代入して計算すると,

$$\begin{aligned} \frac{i}{2} \log J(\alpha) &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int d^{D+1} x^E \alpha \sum_{n=1}^{\infty} \int \frac{d^{D+1} k d^{D+1} k'}{(2\pi)^D} e^{-ik_\mu x^\mu} \langle \phi_n | k, s \rangle \gamma_{D+1} f\left(\frac{[\not{D}^E]^2}{M^2}\right) e^{ik'_\mu x^\mu} \langle k', s' | \phi_n \rangle \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int d^{D+1} x^E \alpha \int \frac{d^{D+1} k}{(2\pi)^D} \text{Tr} \left[e^{-ik_\mu x^\mu} \gamma_{D+1} f\left(\frac{[\not{D}^E]^2}{M^2}\right) e^{ik_\mu x^\mu} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.4.22})$$

となる. 途中で関係式 $\sum_{n=1}^{\infty} |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = 1$, $\langle k, s | k', s' \rangle = \delta(k - k') \delta_{ss'}$ を使い, トレースを導入して基底に依らない形に書き直した. このトレースは γ 行列に対するトレースである. 次に関数 $f(x)$ の中の $[\not{D}^E]^2$

という項を計算する.

$$\begin{aligned}
[\not{D}^E]^2 &= \not{D}^E \not{D}^E = \Gamma^\mu D_\mu^E \Gamma^\nu D_\nu^E = \Gamma^\mu \Gamma^\nu D_\mu^E D_\nu^E \\
&= \frac{1}{2} \{\Gamma^\mu, \Gamma^\nu\} D_\mu^E D_\nu^E + \frac{1}{2} [\Gamma^\mu, \Gamma^\nu] D_\mu^E D_\nu^E \\
&= \frac{1}{2} 2\eta^{\mu\nu} D_\mu^E D_\nu^E + \frac{1}{2} \Gamma^\mu \Gamma^\nu [D_\mu^E, D_\nu^E] \\
&= D^{E\mu} D_\mu^E - \frac{ie}{4} [\Gamma^\mu, \Gamma^\nu] F_{\mu\nu}^E
\end{aligned} \tag{B.4.23}$$

と変形できる. 途中で gauge 場の field strength の定義式 $[D_\mu^E, D_\nu^E] = -ieF_{\mu\nu}^E$ を用いた. 可換 gauge 理論では field strength (または電磁場テンソル) は $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ で定義できるが, 実は共変微分 D_μ の交換関係を使っても定義できる. 非可換 gauge 理論での field strength を前者の形で定義しようとする可換 gauge 理論で出てこない gauge 場の交換関係が余計につくが, 後者の共変微分で定義しようすると, 可換, 非可換 gauge 理論で形が変わらない.

さらに式 (B.4.22) の計算を進めていく. 等式 $e^{-ik_\mu x^\mu} D_\mu^E e^{ik_\mu x^\mu} g(x) = e^{-ik_\mu x^\mu} (\partial_\mu - ieA_\mu^E) e^{ik_\mu x^\mu} g(x) = (D_\mu^E + ik_\mu)g(x)$ が成り立つ. $g(x)$ は適当な関数である. 式 (B.4.22) に出てくる $f(x)$ は滑らかなので Taylor 展開でき, $e^{-ik_\mu x^\mu} f([D^E]^2) e^{ik_\mu x^\mu} = f([D^E + ik_\mu]^2)$ のように共変微分を $D^E \rightarrow D^E + ik_\mu$ と置き換えれば $e^{-ik_\mu x^\mu} f([D^E]^2) e^{ik_\mu x^\mu}$ の部分が計算できる. これらを用いて式 (B.4.22) をさらに変形していくと,

$$\begin{aligned}
\frac{i}{2} \log J(\alpha) &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int d^{D+1} x^E \alpha \int \frac{d^{D+1} k}{(2\pi)^{D+1}} \text{Tr} \left[e^{-ik_\mu x^\mu} \gamma_{D+1} f \left(\frac{D^{E\mu} D_\mu^E - \frac{ie}{4} [\Gamma^\mu, \Gamma^\nu] F_{\mu\nu}^E}{M^2} \right) e^{ik_\mu x^\mu} \right] \\
&= \lim_{M \rightarrow \infty} \int d^{D+1} x^E \alpha \int \frac{d^{D+1} k}{(2\pi)^{D+1}} \text{Tr} \left[\gamma_{D+1} f \left(\frac{(D^E + ik)^2 - \frac{ie}{4} [\Gamma^\mu, \Gamma^\nu] F_{\mu\nu}^E}{M^2} \right) \right] \\
&= \lim_{M \rightarrow \infty} \int M^D d^{D+1} x^E \alpha \int \frac{d^{D+1} k}{(2\pi)^{D+1}} \text{Tr} \left[\gamma_{D+1} f \left(\left(\frac{D^E}{M} + ik \right)^2 - \frac{ie}{4} [\Gamma^\mu, \Gamma^\nu] \frac{F_{\mu\nu}^E}{M^2} \right) \right]
\end{aligned} \tag{B.4.24}$$

を得る. $(D^E + ik)^2 = (D^{E\mu} + ik^\mu)(D_\mu^E + ik_\mu)$ と置いて, 最後の等式で波数を $k_\mu \rightarrow Mk_\mu$ として積分の変数を変換した. ここまでは D 次元の Dirac 場に対する chiral 変換の Jacobian の計算式であった. ここからは具体的に次元をしていく.

(1+1)-d の場合

$D+1=2$ の (1+1)-d の場合について考える. この場合が 2 次元量子ホール効果のエッジの理論に対応する. Jacobian (B.4.24) は

$$\frac{i}{2} \log J(\alpha) = \lim_{M \rightarrow \infty} \int M^2 d^2 x^E \alpha \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \text{Tr} \left[\gamma_2 f \left(\left(\frac{D^E}{M} + ik \right)^2 - \frac{ie}{4} [\Gamma^\mu, \Gamma^\nu] \frac{F_{\mu\nu}^E}{M^2} \right) \right] \tag{B.4.25}$$

である. 式 (B.4.25) の関数 f を $-k_\mu k^\mu$ 周りに展開する. 展開するときに $1/M$ の 3 次以上が出ると, $\lim_{M \rightarrow \infty} M^2/M^3 \rightarrow 0$ となるから, Taylor 展開は高々 2 次までで十分である. また $\text{Tr}[\gamma_2] = 0$ より Taylor 展開において 1 次の $[\Gamma^\mu, \Gamma^\nu]$ が付いている項以外の寄与は 0 になる. したがって (B.4.25) は

$$\begin{aligned}
\frac{i}{2} \log J(\alpha) &= - \int d^2 x^E \alpha \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} f'(-k^\mu k_\mu) \text{Tr} \left[\frac{ie}{4} \gamma_2 [\Gamma^\mu, \Gamma^\nu] F_{\mu\nu}^E \right] \\
&= - \frac{ie}{4} \int d^2 x^E \alpha \left(-\frac{1}{4\pi} \right) (-4i) \epsilon^{\mu\nu} F_{\mu\nu}^E \\
&= \int d^2 x^E \alpha \frac{e}{4\pi} \epsilon^{\mu\nu} F_{\mu\nu}^E
\end{aligned} \tag{B.4.26}$$

と変形できる. 途中2つの等式 $\text{Tr} [\gamma_2 [\Gamma^\mu, \Gamma^\nu]] = -4i\epsilon^{\mu\nu}$ と $\int d^2k/(2\pi)^2 f'(-k^\mu k_\mu) = -1/(4\pi)$ を使った. 導出はそれぞれ以下である.

$$\begin{aligned} \text{Tr} [\gamma_2 [\Gamma^0, \Gamma^1]] &= \text{Tr} [\gamma_2 [i\gamma^0, \gamma^1]] = \text{Tr} [\sigma^z [i\sigma^x, i\sigma^y]] \\ &= -i \text{Tr} [2(\sigma^z)^2] = -4 \end{aligned} \quad (\text{B.4.27})$$

$\mu = \nu$ では0で $\mu, \nu = 0, 1$ しかないから $\text{Tr} [\gamma_2 [\Gamma^\mu, \Gamma^\nu]] = -4i\epsilon^{\mu\nu}$ が成立.

$$\begin{aligned} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} f'(-k^\mu k_\mu) &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty k dk \int_0^{2\pi} d\phi \frac{df(k^2)}{d(k^2)} \quad (k^2 = (k^0)^2 + (k^1)^2) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty k dk \frac{df(k)}{2k dk} = \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty dk \frac{df(k)}{dk} \\ &= \frac{1}{4\pi} (f(\infty) - f(0)) = -\frac{1}{4\pi} \end{aligned} \quad (\text{B.4.28})$$

である. 2次元波数空間中で極座標表示して関数 $f(x)$ の0で値が1になり, 値が大きくなると素早く0に近づく性質を使った.

最後に $\tau = it$, $F_{\mu\nu}^E = -iF_{\mu\nu}$ と置いて^{*2}, 実時間に戻ると, 最終的に (1+1)-d の Jacobian は式 (B.4.26) より

$$J(\alpha) = \exp \left[-i \int d^2x \alpha \frac{e}{2\pi} \epsilon^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \right] \quad (\text{B.4.30})$$

と求めることが出来る. Chiral anomaly 方程式 (B.4.8) に $J(\alpha)$ を代入して, 以上より, (1+1)-d の chiral anomaly

$$\partial_\mu j_2^\mu = 2mi\bar{\psi}\gamma_2\psi + \frac{e}{2\pi} \epsilon^{\mu\nu} F_{\mu\nu}, \quad j_2^\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu\gamma_2\psi \quad (\text{B.4.31})$$

が得られる.

(3+1)-d の場合

次に $D+1=4$ の (3+1)-d の場合について計算する. 4次元量子ホール効果の境界の理論を求めることに対応する. $D+1$ 次元の Jacobian の途中式 (B.4.24) に $D+1=4$ を代入して,

$$\frac{i}{2} \log J(\alpha) = \lim_{M \rightarrow \infty} \int M^4 d^4x^E \alpha \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \text{Tr} \left[\gamma_4 f \left(\left(\frac{D^E}{M} + ik \right)^2 - \frac{\frac{i\epsilon}{4} [\Gamma^\mu, \Gamma^\nu] F_{\mu\nu}^E}{M^2} \right) \right] \quad (\text{B.4.32})$$

を得る. (1+1)-d と同じように f を Taylor 展開する. $M \rightarrow \infty$ の極限を取るなので, Taylor 展開は高々 $1/M^4$ のオーダーまで取ればよい. (3+1)-d での γ 行列は

$$\Gamma^0 = -i\gamma^0 = -i \begin{pmatrix} 0 & I_2 \\ I_2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Gamma^i = \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_4 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix} \quad (\text{B.4.33})$$

であるから, これを用いて, $\text{Tr} [\gamma_4] = 0, \text{Tr} [\gamma_4 [\Gamma^\mu, \Gamma^\nu]] = 0$ を示すことが出来る. つまり式 (B.4.32) の f の Taylor 展開で2つの $[\Gamma^\mu, \Gamma^\nu]$ が付く項しか Jacobian に寄与しない.

$$\frac{i}{2} \log J(\alpha) = \int d^4x^E \alpha \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \frac{1}{2} f''(-k^\mu k_\mu) \left(-\frac{e^2}{16} \right) F_{\mu\nu}^E F_{\rho\sigma}^E \text{Tr} [\gamma_4 [\Gamma^\mu, \Gamma^\nu] [\Gamma^\rho, \Gamma^\sigma]]. \quad (\text{B.4.34})$$

^{*2} $F_{\mu\nu}^E = -iF_{\mu\nu}$ について, 具体的に計算する. $\partial_\tau = -i\partial_t, A_0^E = -iA_0$ より,

$$F_{01}^E = \partial_\tau A_1^E - \partial_1 A_0^E = -i(\partial_t A_1 - \partial_1 A_0) = -iF_{01} \quad (\text{B.4.29})$$

である. $F_{00} = F_{11} = 0, F_{01} = -F_{10}$ より, $F_{\mu\nu}^E = -iF_{\mu\nu}$ が得られた.

最後に (B.4.34) を計算するために 2 つの公式を使う.

$$\text{Tr} [\gamma_4 [\Gamma^\mu, \Gamma^\nu] [\Gamma^\rho, \Gamma^\sigma]] = -16\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \quad (\text{B.4.35})$$

$$\int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} f''(-k^\mu k_\mu) = \frac{1}{16\pi^2}, \quad f(x) = e^{-x}. \quad (\text{B.4.36})$$

後者の公式の証明をする. まず $f(-k^\mu k_\mu)$ は k^2 にのみ依存するので, 4 次元の極座標に積分を変数変換したら計算しやすい:

$$\int d^4 k = \int_0^\infty k^3 dk \int_0^\pi \sin^2 \theta d\theta \int_0^\pi \sin \phi d\phi \int_0^{2\pi} d\sigma \quad (\text{B.4.37})$$

$$= \int_0^\infty k^3 dk \times \frac{\pi}{2} \times 2 \times 2\pi = 2\pi^2 \int_0^\infty k^3 dk. \quad (\text{B.4.38})$$

また関数 $f(x)$ の具体形として $f(x) = e^{-x}$ を考える. $e^{-0} = 1$ かつ x が大きいと素早く 0 に近づくので, 関数 $f(x)$ の要請に適合している. よって積分を計算すると,

$$\begin{aligned} \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} f''(-k^\mu k_\mu) &= \frac{2}{16\pi^2} \int_0^\infty k^3 dk \frac{d}{d(k^2)} \frac{d}{d(k^2)} e^{-k^2} = \frac{1}{16\pi^2} \int_0^\infty k^2 d(k^2) e^{-k^2} \\ &= \frac{1}{16\pi^2} \int_0^\infty x dx e^{-x} = \frac{1}{16\pi^2} \end{aligned} \quad (\text{B.4.39})$$

となり, 公式が導出できた. 式 (B.4.34) に代入して

$$\begin{aligned} \frac{i}{2} \log J(\alpha) &= \int d^4 x^E \alpha \frac{1}{2} \times \frac{1}{16\pi^2} \times (-16\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma}) \times \left(-\frac{e^2}{16}\right) F_{\mu\nu}^E F_{\rho\sigma}^E \\ &= \int d^4 x^E \alpha \frac{e^2}{32\pi^2} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu}^E F_{\rho\sigma}^E \end{aligned} \quad (\text{B.4.40})$$

$$\longrightarrow J(\alpha) = -i \int d^4 x^E \alpha \frac{e^2}{16\pi^2} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu}^E F_{\rho\sigma}^E \quad (\text{B.4.41})$$

を得る. 最後に $\tau = it$, $\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu}^E F_{\rho\sigma}^E = 4\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \partial_\mu A_\nu^E \partial_\rho A_\sigma^E = -4i\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \partial_\mu A_\nu \partial_\rho A_\sigma = -i\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma}$ と置き換えて^{*3} 実時間表示へ戻ると, 最終的に Jacobian は

$$J(\alpha) = \exp \left[-i \int d^4 x \alpha \frac{e^2}{16\pi^2} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma} \right] \quad (\text{B.4.43})$$

となる. Chiral anomaly 方程式 (B.4.8) より, (3+1)-d での chiral anomaly は

$$\partial_\mu j_4^\mu = 2mi\bar{\psi}\gamma_4\psi + \frac{e^2}{16\pi^2} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma}, \quad j_4^\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu\gamma_4\psi \quad (\text{B.4.44})$$

となる.

^{*3} $F_{\mu\nu}^E F_{\rho\sigma}^E = -i\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma}$ を示す.

$$\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu}^E F_{\rho\sigma}^E = 4\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \partial_\mu A_\nu^E \partial_\rho A_\sigma^E \quad (\text{B.4.42})$$

より, μ, ν, ρ, σ の中で必ず 1 回だけ虚時間成分が出てくる. 微分に虚時間成分が出てきたら, $\partial_\tau = -i\partial_t$, ベクトルポテンシャルに虚時間成分が出てきたら, $A_0^E = -iA_0$ より, (μ, ν, ρ, σ) がどんな組み合わせでも必ず $-i$ が出てくるので, $F_{\mu\nu}^E F_{\rho\sigma}^E = -i\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma}$ が成立する.

B.5 Atiyah-Singer の指数定理

(1+1)-d と (3+1)-d の Jacobian について, それぞれ

$$D = 2 : J(\alpha) = \exp \left[-i \int d^2x \alpha \frac{e}{2\pi} \epsilon^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \right] \quad (\text{B.5.1})$$

$$D = 4 : J(\alpha) = \exp \left[-i \int d^4x \alpha \frac{e^2}{16\pi^2} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma} \right] \quad (\text{B.5.2})$$

である. これらは Jacobian (B.4.18)

$$J(\alpha) = \exp \left[-2i \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N \int d^{D+1}x^E \alpha \phi_n^\dagger(x) \gamma_{D+1} \phi_n(x) \right] \quad (\text{B.5.3})$$

を正則化することによって導かれるのであった. 実はこの 2 つの Jacobian の表式の間には非自明な関係式が存在する.

まず, Dirac 演算子 $\not{D}^E$ の固有方程式 $\not{D}^E \phi_n(x) = l_n \phi_n(x)$ について左から γ_{D+1} を作用させて, 反交換関係 $\{\not{D}^E, \gamma_{D+1}\} = 0$ を使うと, $\gamma_{D+1} \phi_n(x)$ に対する固有方程式

$$\not{D}^E(\gamma_{D+1} \phi_n(x)) = -l_n(\gamma_{D+1} \phi_n(x)) \quad (\text{B.5.4})$$

が導ける. これはつまり, $l_n \neq 0$ のとき, $\phi_n(x)$ は固有値 l_n を持つ固有ベクトルで $\gamma_{D+1} \phi_n(x)$ は固有値 $-l_n$ を持つ固有ベクトルである. Dirac 演算子はエルミートなので, $\phi_n(x)$ と $\gamma_{D+1} \phi_n(x)$ は直交する. すなわち, $l_n = 0$ を満たす zero mode のみが Jacobian に寄与する. よって Jacobian の exp の中の因子について

$$\begin{aligned} & \sum_n \int d^{D+1}x^E \phi_n^\dagger(x) \gamma_{D+1} \phi_n(x) \\ &= \sum_{n \in \{l_n=0\}} \int d^{D+1}x^E \left[\phi_n^\dagger(x) \left(\frac{1+\gamma_{D+1}}{2} \right)^2 \phi_n(x) - \phi_n^\dagger(x) \left(\frac{1-\gamma_{D+1}}{2} \right)^2 \phi_n(x) \right] \\ &= \sum_{n \in \{l_n=0\}} \left[\int d^{D+1}x^E \phi_{R,n}^\dagger(x) \phi_{R,n}(x) - \int d^{D+1}x^E \phi_{L,n}^\dagger(x) \phi_{L,n}(x) \right] \\ &= n_R - n_L \\ &\equiv \text{Index}(\not{D}) \end{aligned} \quad (\text{B.5.5})$$

となる. ここで $\phi_{R,n}, \phi_{L,n}$ はそれぞれ zero mode の右巻き, 左巻きの Dirac 場で, n_R, n_L はそれぞれ zero mode の右巻き, 左巻きの Dirac Fermion の数である. 右巻き左巻きの Dirac 場は射影演算子

$$P_R = \frac{1+\gamma_{D+1}}{2}, \quad P_L = \frac{1-\gamma_{D+1}}{2} \quad (\text{B.5.6})$$

を用いて, $\phi_{R,n} = P_R \phi_n, \phi_{L,n} = P_L \phi_n$ で得られる. P_R, P_L は射影演算子なので, 射影演算子が満たすべき性質

$$P_R + P_L = 1, \quad P_R^2 = P_R, \quad P_L^2 = P_L \quad (\text{B.5.7})$$

を満たす. 右巻き zero mode の Dirac Fermion と左巻き Dirac Fermion の差は指数と呼ばれ $\text{Index}(\not{D})$ で表す. 式 (B.5.1), (B.5.2), (B.5.5) を比較すると, 指数と gauge 場の間に非自明な関係式

$$D = 2 : \text{Index}(\not{D}) = n_R - n_L = \int d^2x \frac{e}{4\pi} \epsilon^{\mu\nu} F_{\mu\nu} = \int d^2x \frac{e}{2\pi} E_x \quad (\text{B.5.8})$$

$$D = 4 : \text{Index}(\not{D}) = n_R - n_L = \int d^4x \frac{e^2}{32\pi^2} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma} = \int d^4x \frac{e^2}{4\pi^2} \mathbf{E} \cdot \mathbf{B} \quad (\text{B.5.9})$$

が成立する。左辺は Dirac 場の微分方程式の解の個数で、右辺は gauge 場のトポロジカルな数であり、この異なる量が結びついている非自明な関係式である。実はこの関係式は **Atiyah-Singer の指数定理** という非自明な定理の特別な場合である。Atiyah-Singer の指数定理の一般形は、 $D = 2n$ 次元閉多様体 X 上の Dirac Fermion 系に $SU(N)$ gauge 場が結合しているとする。そのとき、

$$\text{Index}(\not{D}) = n_R - n_L = \int_X \frac{1}{n!} \text{Tr} \left[\left(\frac{e}{2\pi} F \right)^n \right], \quad (\text{B.5.10})$$

$$F = \frac{1}{2} F_{\mu\nu} dx^\mu \wedge dx^\nu, \quad F_{\mu\nu} = \frac{i}{e} [D_\mu, D_\nu]. \quad (\text{B.5.11})$$

である。 F は $SU(N)$ gauge 場の field strength で微分形式で定式化されている。Atiyah-Singer の指数定理は Dirac Fermion が gauge 場に加えて重力場にも結合する場合に定式化されており、式 (B.5.10) はその特別な場合である。Atiyah-Singer の指数定理は境界付き多様体の場合にも拡張され、**Atiyah-Patodi-Singer の指数定理 (APS 指数定理)** と呼ばれる。APS 指数定理の性質は、anomaly の相殺を通じて、トポロジカル絶縁体のバルクエッジ対応を説明する、その数学的保証を与えるこのことから近年、素粒子論、物性理論の研究で注目されている定理である [92]。

Appendix C

Weyl半金属

C.1 Background

基礎的な Weyl 半金属を review する前に, 簡単な歴史について述べておく [28, 93]. 1928 年の P.A.M. Dirac による相対論的な電子を記述する Dirac 方程式の構築のすぐあと, 1929 年に Hermann Weyl は massless Dirac fermion の場合に Dirac 方程式は簡単になることを示した [94]. この方程式では massless Dirac fermion は 2 つの massless で異なる決まった chirality を持つ fermion で記述されている. この massless fermion は Weyl fermion と呼ばれ, 素粒子の 1 つであるニュートリノは Weyl fermion だと思われていた. しかしニュートリノには質量があると明らかになったことで [95, 96], 高エネルギー物理学ではまだ Weyl fermion は観測されていない.

しかしながら, 物性物理学ではある波数空間上の点付近でバンド構造が線形分散になり, 物質系での Weyl fermion の実現の議論がしばしばあった. 例として Murakami らによる 3 次元トポロジカル絶縁体のトポロジカル相転移に関する研究である [97, 98]. Murakami らは空間反転対称性が破れた 3 次元トポロジカル絶縁体のギャップが閉じるとき, Weyl 点が出現し, Weyl 点は波数空間での磁気モノポールの効果を持つことを示した. これは Weyl 点のトポロジカルな効果を持つことを表している. さらに Wan らは Weyl 点のトポロジカルな性質はフェルミアーケ表面状態と呼ばれる特徴的な状態を実現し, フェルミエネルギーが Weyl 点付近の物質を Weyl 半金属と命名した [27]. 原論文 [27] では第一原理計算により $\text{Y}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ が Weyl 半金属であると予言したが, 最初に発見された Weyl 半金属は TaAs であり, 2015 年に観測された [99–102]. 実験的に観測された Weyl 半金属や他のトポロジカル半金属の一覧は [93] の Appendix A を参照されたい.

Dirac 方程式と Weyl 方程式

(3+1)-d の massless Dirac fermion について考える. Dirac 方程式は

$$i\gamma^\mu \partial_\mu \psi = 0 \quad (\text{C.1.1})$$

である. γ は 4×4 の γ 行列で, ψ は 4 成分 Dirac 場である. ここでは γ 行列として, Weyl 表示

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_4 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (\text{C.1.2})$$

を取るとする. ここで 4 成分 Dirac 場 ψ を 2 成分ずつに $\psi^\dagger = (\psi_+^\dagger, \psi_-^\dagger)$ に分ける. $\psi_\pm$ は $\gamma_4\psi_\pm = \pm\psi_\pm$ を満たすから, $\psi_\pm$ は chirality が ± 1 の状態である. このとき, Dirac 方程式は

$$\begin{aligned} i \begin{pmatrix} 0 & \partial_0 - \sigma^j \partial_j \\ \partial_0 + \sigma^j \partial_j & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} &= 0 \\ \longrightarrow i(\partial_0 - \sigma^j \partial_j)\psi_- &= 0, \quad i(\partial_0 + \sigma^j \partial_j)\psi_+ = 0 \end{aligned} \quad (\text{C.1.3})$$

のように、2つに分解できる。ここで chirality が $\pm$ の **Weyl Hamiltonian** を $H_{\pm} = \pm \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mp i \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}$ と定義すると、Dirac 方程式は

$$i\partial_t \psi_{\pm} = H_{\pm} \psi_{\pm} \quad (\text{C.1.4})$$

となる。これは (3+1)-d の massless Dirac fermion は +1 と -1 の chirality を持つ 2 つの粒子で記述できることを表している。この粒子を **Weyl fermion** と呼び、Weyl fermion を記述する方程式 (C.1.4) を **Weyl 方程式** と呼ぶ。以下では波数空間中のある点 ($\mathbf{k} = \mathbf{0}$ のような高対称点とは限らない) 付近の電子を記述する方程式が Weyl 方程式となるような物質について議論するが、その前にバンドの縮退について考える。

偶然縮退

基本的にエネルギーバンドはレベル反発によりお互い反発し、時間反転対称性などの何らかの対称性が無ければ縮退はしない。対称性由来の縮退は対応する対称操作に対して不変な波数に縮退点が現れる。ここでは対称性由来以外の縮退について考える。

2 バンド模型について考える。2 バンド模型は 2×2 の Hamiltonian によって記述されるが、一般の物質は常に 2×2 の Hamiltonian によって記述できるわけではない。しかし今は 2 つのバンドが縮退するかしないかを議論するため、数あるバンドのうちから 2 つのバンドを選んでその Hamiltonian を考えているとする。Hamiltonian は

$$H(\mathbf{k}) = \mathbf{R}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (\text{C.1.5})$$

と表せる。この時のエネルギー固有値は $E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{R_1^2 + R_2^2 + R_3^2}$ であり、 $2\sqrt{R_1^2 + R_2^2 + R_3^2}$ のエネルギーギャップが存在し、このギャップ中にフェルミエネルギーが位置しているとする、系は絶縁体となる。エネルギーギャップが閉じるためには、 $R_1(\mathbf{k}) = R_2(\mathbf{k}) = R_3(\mathbf{k}) = 0$ という 3 つの方程式を満たす必要がある。今 3 次元系を考えており、変数は k_x, k_y, k_z の 3 つがあるので、3 つの変数に対して 3 つの方程式があるから解が存在する。解を $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ とすると、この点は 2 つのバンドが縮退し、しかも $\mathbf{k}_0$ は高対称点とは限らない。実は $\mathbf{k}_0$ での縮退は外部からの摂動に対して安定して存在してトポロジカルな意味を持つ。安定して存在するということの説明として図 C.1.1 の (a) がある。3 つの方程式 $R_a(\mathbf{k}) = 0$ は 3 次元中に 3 つの平面を出現させ、この交点が $\mathbf{k}_0$ となる。外部から摂動を加えても、方程式が変化し 3 つの平面が動くだけで、縮退点 $\mathbf{k}_0$ は場所は多少変わるが安定して存在し続ける。

縮退点 $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ の周辺の電子を記述する有効 Hamiltonian を求める。 $R_a(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}) = R_a(\mathbf{k}_0) + \nabla R_a(\mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{k} = v\mathbf{k}$ と展開できる。ここで $\nabla R_1(\mathbf{k}_0) = \nabla R_2(\mathbf{k}_0) = \nabla R_3(\mathbf{k}_0) = \pm v$ ($v > 0$) とした。したがって Hamiltonian は

$$H(\mathbf{k}) = \pm v \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (\text{C.1.6})$$

となる。これはまさに ± 1 の chirality を持つ Weyl Hamiltonian である。つまり、2 バンド模型が縮退する周辺の電子は Weyl 方程式に従い、この縮退点を **Weyl 点** と呼ぶ。 v は相対論的な場の理論では光速 c に対応するが、ここでは光速より遅い Weyl fermion の速度である。

ここで $H(\mathbf{k}) = \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ のときの Berry 曲率を求める。Section 3.1.2 の議論より、2 バンド系の Berry 曲率は

$$\mathbf{f} = \pm \frac{1}{2} \frac{\mathbf{k} - \mathbf{k}_0}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|^3} = - \left(\pm \frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{k}} \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|} \right) \quad (\text{C.1.7})$$

である。先頭の $\pm$ は Hamiltonian の符号に対応している。ここでモノポール電荷を

$$\rho(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi} \nabla_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{k}) \quad (\text{C.1.8})$$

と定義する. デルタ関数の公式 $\nabla^2(1/r) = -4\pi\delta(r)$ を使うと,

$$\rho(\mathbf{k}) = \mp \frac{1}{4\pi} \nabla^2 \frac{1}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0|} = \pm \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \quad (\text{C.1.9})$$

を得る. これは Weyl 点 $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ に ± 1 のモノポール電荷を持ったモノポールが存在し, その電荷は chirality に対応していることを表している. モノポール電荷を Brillouin zone 全体で足し合わせると, Brillouin zone の周期性から

$$\int_{\text{BZ}} d^3k \rho(\mathbf{k}) = \int_{\text{BZ}} d^3k \frac{1}{2\pi} \nabla_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi} \int_{\partial \text{BZ}} d\mathbf{S}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{f} = 0 \quad (\text{C.1.10})$$

となる. これは Brillouin zone 全体でのモノポール電荷の総和は 0 になる必要があることを表している. つまり, 3次元系の格子系で Weyl fermion は単独で存在できなく, chirality の和が 0 になるように偶数個の Weyl fermion でしか存在できない.

Weyl 点がフェルミエネルギー付近に存在し, それ以外の点でギャップが開いているような場合, そのような物質を **Weyl 半金属** と呼ぶ. まとめて, Weyl 半金属とは Brillouin zone のギャップが閉じる Weyl 点周りの Hamiltonian が Weyl Hamiltonian によって与えられ, Weyl 点では ± 1 のモノポール電荷を持つモノポールが存在し, その総和は 0 となる. 図 C.1.1 の (b) は Weyl 点とモノポール電荷と Berry 曲率を形式的に表した図である.

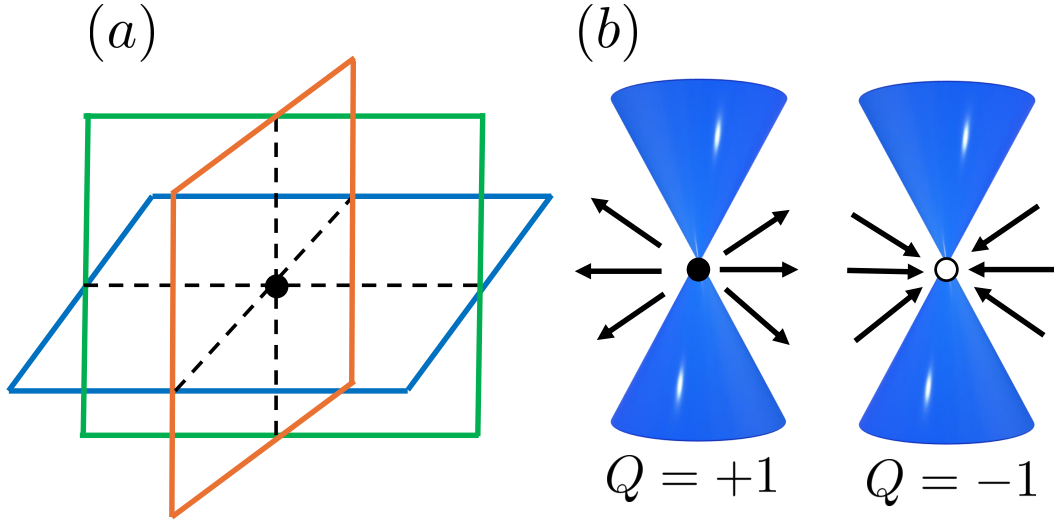


Figure C.1.1: (a) Weyl 点が安定している様子. Weyl 点は 3 つの変数に対する 3 つの方程式の解となる点であり, 図示すると 3 枚の平面が交わる 1 点に対応する. 外部から摂動を加えてもこの点が多少移動するだけであり, 存在し続ける. (b) は Weyl 点にモノポールが存在する. モノポール電荷に応じて Berry 接続が湧きだし吸い込みかになる.

C.2 Weyl 半金属のトポロジカルな性質

C.2.1 Weyl 半金属の有効模型

Weyl 半金属の理解を深めるために, Weyl 半金属の有効模型を考える. τ を軌道の自由度, σ をスピンの自由度として, Γ 点付近の有効 Hamiltonian

$$H(\mathbf{k}) = v(\tau^1 \otimes \sigma) \cdot \mathbf{k} + m(\tau^3 \otimes I) + b(I \otimes \sigma^3) + b'(\tau^3 \otimes \sigma^3) \quad (\text{C.2.1})$$

について議論する [103]. m, b, b' はそれぞれ質量, x, z 方向の Zeeman 磁場である. Hamiltonian 中の 4×4 行列について,

$$\begin{aligned}\alpha^i &= \tau^1 \otimes \sigma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha^4 = \tau^3 \otimes I = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \\ \beta &= I \otimes \sigma^3 = \begin{pmatrix} \sigma^3 & 0 \\ 0 & \sigma^3 \end{pmatrix}, \quad \beta' = \tau^3 \otimes \sigma^1 = \begin{pmatrix} \sigma^1 & 0 \\ 0 & -\sigma^1 \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (\text{C.2.2})$$

と定義する. α 行列については Clifford 代数の関係 $\{\alpha^a, \alpha^b\} = 2\delta^{ab}$ を満たす. これを用いると, 有効 Hamiltonian は

$$H(\mathbf{k}) = v\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{k} + m\alpha^4 + b\beta + b'\beta' = R_a(\mathbf{k})\alpha^a + b\beta + b'\beta' \quad (\text{C.2.3})$$

と書き直せる. $R_1 = vk_x, R_2 = vk_y, R_3 = vk_z, R_4 = m$ である. このときのエネルギー固有値を求める. 式 (C.2.3) を 2 乗して,

$$\begin{aligned}[H(\mathbf{k})]^2 &= [R_a(\mathbf{k})\alpha^a + b\beta + b'\beta'] [R_b(\mathbf{k})\alpha^b + b\beta + b'\beta'] \\ &= \frac{1}{2}R_a R_b \{\alpha^a, \alpha^b\} + b^2 + (b')^2 + R_a [b\{\alpha^a, \beta\} + b'\{\alpha^a, \beta'\}] + bb'\{\beta, \beta'\}\end{aligned}\quad (\text{C.2.4})$$

となる. ここで反交換関係についての公式

$$\begin{aligned}\{\alpha^a, \alpha^b\} &= 2\delta^{ab}, \quad \{\alpha^4, \beta\} = 2\begin{pmatrix} \sigma^3 & 0 \\ 0 & -\sigma^3 \end{pmatrix}, \quad \{\alpha^4, \beta'\} = 2\begin{pmatrix} \sigma^1 & 0 \\ 0 & \sigma^1 \end{pmatrix} \\ \{\alpha^3, \beta\} &= 2\begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}, \quad \{\alpha^2, \beta'\} = 2\begin{pmatrix} 0 & i\sigma^3 \\ -i\sigma^3 & 0 \end{pmatrix}, \quad \{\alpha^3, \beta'\} = 2\begin{pmatrix} 0 & -i\sigma^2 \\ i\sigma^2 & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (\text{C.2.5})$$

を使う. ただしここに書いていない反交換関係は 0 である.

$$\begin{aligned}[H(\mathbf{k})]^2 &= R_a R_a + b^2 + (b')^2 + 2b \left[R_3 \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} + R_4 \begin{pmatrix} \sigma^3 & 0 \\ 0 & -\sigma^3 \end{pmatrix} \right] \\ &\quad + 2b' \left[R_2 \begin{pmatrix} 0 & i\sigma^3 \\ -i\sigma^3 & 0 \end{pmatrix} + R_3 \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma^2 \\ i\sigma^2 & 0 \end{pmatrix} + R_4 \begin{pmatrix} \sigma^1 & 0 \\ 0 & \sigma^1 \end{pmatrix} \right]\end{aligned}\quad (\text{C.2.6})$$

なので, エネルギー固有値を求めるためには式 (C.2.6) を対角化してからルートを取ればよい. $R_1 = vk_x, R_2 = vk_y, R_3 = vk_z, R_4 = m$ を復活させると, エネルギー固有値は

$$E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{v^2 k^2 + m^2 + b^2 + (b')^2 \pm 2\sqrt{b^2(v^2 k_z^2 + m^2) + (b')^2(v^2 k_y^2 + v^2 k_z^2 + m^2)}} \quad (\text{C.2.7})$$

となる. 4 バンド模型なので 4 つのエネルギー固有値が出てくる. 以下では特定のパラメータのときのバンド図を調べていく.

1. $m = b = b' = 0$ のとき, エネルギー固有値は

$$E(\mathbf{k}) = \pm v|\mathbf{k}| \quad (\text{C.2.8})$$

となる. 各バンドは常に 2 重に縮退していて, 4 重に縮退する点が存在する. フェルミエネルギーが 4 重に縮退している点上に位置しているとき, この物質を **Dirac 半金属** と呼ぶ. Dirac 半金属のような 4 重の縮退が一般に起こるためには空間の次元が 5 以上である必要があり, Dirac 半金属を実現するためには何らかの空間対称性を考慮する必要がある. Dirac 半金属のバンド図は図 C.2.1 の (a) である.

2. $b' = 0, |m| > |b|$ のとき, エネルギー固有値は

$$E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{v^2 k^2 + m^2 + b^2 \pm 2\sqrt{b^2(v^2 k_z^2 + m^2)}} \quad (\text{C.2.9})$$

で $|m| > |b|$ より, $E(\mathbf{k}) = 0$ となる点は存在しない. これはエネルギーギャップが生成し系は磁性半導体となることを意味する. 磁性半導体のバンド図は図 C.2.1 の (b) である.

3. $b' = 0, |m| < |b|$ のとき, エネルギー固有値は

$$E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{v^2 k^2 + m^2 + b^2 \pm 2\sqrt{b^2(v^2 k_z^2 + m^2)}} \quad (\text{C.2.10})$$

となり, $\mathbf{k} = (0, 0, \pm\sqrt{b^2 - m^2}/v)$ で $E(\mathbf{k}) = 0$ となる. フェルミエネルギーが縮退点上にあるとき Weyl 半金属となり, $\mathbf{k} = (0, 0, \pm\sqrt{b^2 - m^2}/v)$ が Weyl 点となる. Weyl 半金属のバンド図は図 C.2.1 の (c) である.

4. $m = b = 0$ のとき, エネルギー固有値は

$$E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{v^2 k_x^2 + \left[v \sqrt{k_y^2 + k_z^2} + \pm b' \right]^2} \quad (\text{C.2.11})$$

となり, $k_x = 0, \sqrt{k_y^2 + k_z^2} = b'/v$ を満たす領域で $E(\mathbf{k}) = 0$ となっている. このように曲線上に縮退し, フェルミエネルギーがこの曲線付近の物質を **ノードルライン半金属** と呼ぶ. ノードルライン半金属のバンド図は図 C.2.1 の (d) である.

C.2.2 Fermi arc 表面状態

フェルミエネルギーがバルクのギャップ中にある場合, 表面状態のエネルギー分散とフェルミエネルギーが交差する点の集合は曲線となるが, この曲線をフェルミアークと呼ぶ. 一般的にフェルミアークは閉曲線となるが, Weyl 半金属の場合はフェルミアークが開曲線となる. これは Weyl 半金属の大きな特徴であり, **フェルミアーク表面状態** と呼ばれる. 本節ではフェルミアーク表面状態を説明していく.

Brillouin zone 中に図 C.2.2 のように $Q = \pm 1$ のモノポール電荷を持つ 2 つの Weyl 点がある Weyl 半金属を考える. この 2 つの Weyl 点は k_z 方向に離れているとし, それぞれの k_z 値を $k_{\pm}$ ($k_+ < k_-$) とする. ここで $k_z = \text{const.}$ で切断した 2 次元 Brillouin zone を考える. Weyl 点以外 gapped なので, この 2 次元 Brillouin zone に対して, 第 1 Chern 数

$$Ch_1(k_z) = \int_{k_z=\text{const.}} \frac{dk_x dk_y}{2\pi} f_z(\mathbf{k}) \quad (\text{C.2.12})$$

が定義できる. 第 1 Chern 数 $Ch_1(k_z)$ は $k_z = \text{const.}$ を貫く Berry 曲率の磁束であるから図 C.2.2 より, $k_z < k_+$, $k_- < k_z$ では 2 つの Weyl 点からの Berry 曲率が打ち消し合い $Ch_1(k_z) = 0$ となる. しかし $k_+ < k_z < k_-$ のとき, 図 C.2.2 のように Berry 曲率は打ち消されずに残り, $Ch_1(k_z) = 1$ となる. つまりこの Weyl 半金属中の 2 次元 Brillouin zone は量子ホール相に対応する. このとき, (100) 表面の 2 次元 Brillouin zone について考える. ここで k_z を固定して k_y, E のバンド図を描くとちょうど量子ホール相の x 方向が開放端条件で y 方向が周期境界条件のバンド図が得られる. 図 C.2.3 は各 k_z に対しての (100) 表面のバンド図を形式的に書いたものである. $k_z < k_+$, $k_- < k_z$ では $Ch_1(k_z) = 0$ なので, (a), (c) のようにエネルギーギャップがある. しかし $k_+ < k_z < k_-$ では $Ch_1(k_z) = 1$ なので, (b) のように gapless なカイラルエッジモードが発生する. (b) の赤点がフェルミエネルギーとエッジバンドの交点だとすると, k_z を動かせば赤点が線となり, (100) 表面の 2 次元 Brillouin zone に $k_+ < k_z < k_-$ の領域で図 C.2.2 のように両端が閉じていない赤色のフェルミアーク表面状態が出現する. 以上の議論は Weyl 半金属が量子ホール相と自明な相の間にあることを示している. 実は Weyl 半金属は空間反転対称性が破れた 3 次元トポロジカル絶縁体と自明な絶縁体との間にも出現することも示すことが出来る. Section C.3 でこれについて証明を行う.

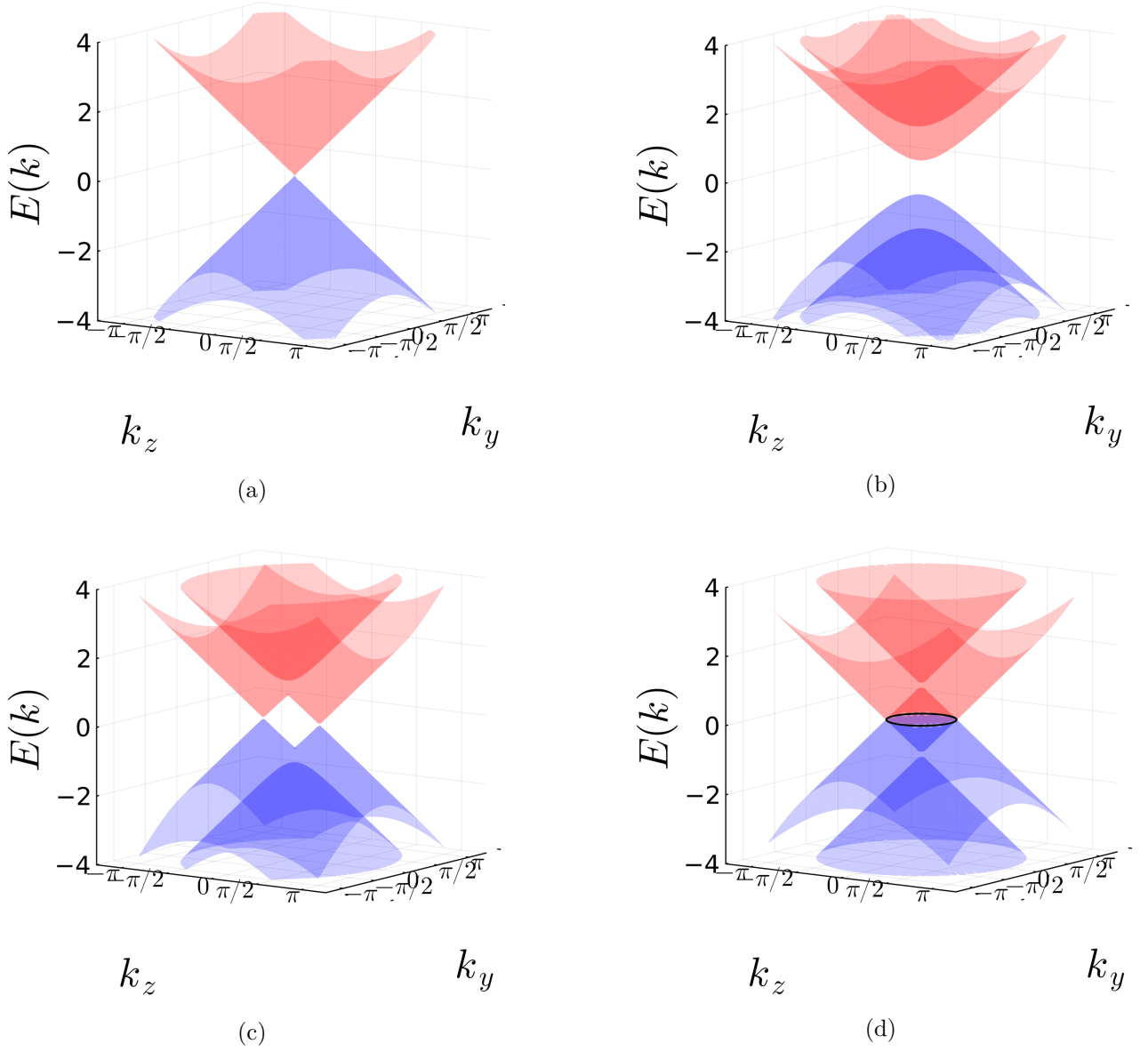


Figure C.2.1: 各パラメータに対する有効 Hamiltonian (C.2.3) のバンド図. (a) は $m = b = b' = 0, v = 1$ で Dirac 半金属である. (b) は $m = 1, b = 0.5, b' = 0$ で磁性半導体である. (c) は $m = 1, b = 0.2, b' = 0$ で Weyl 半金属である. (d) は $m = b = 0, b' = 1$ でノーダルライン半金属である. ノーダルライン半金属は図の黒の実線の部分で縮退している.

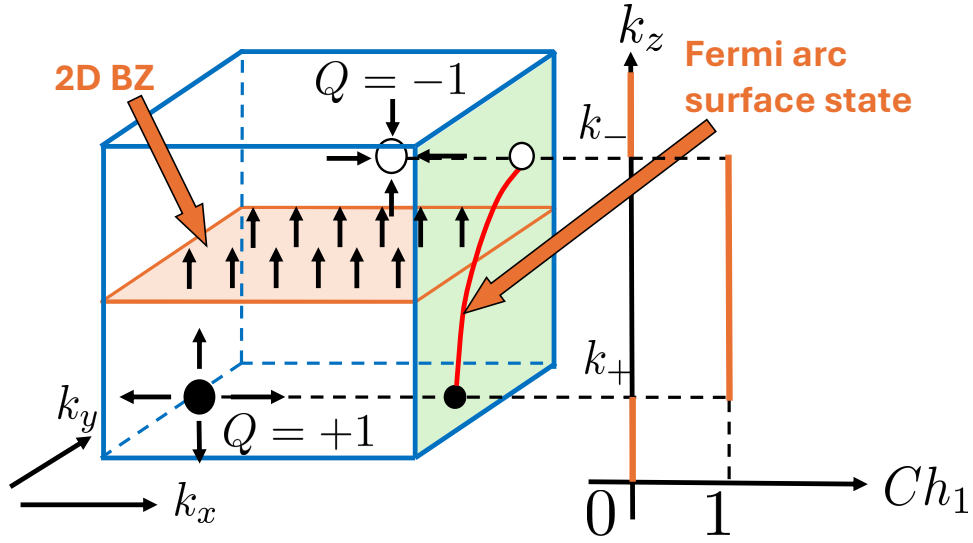


Figure C.2.2: Weyl 半金属のフェルミアーク表面状態の模式図.

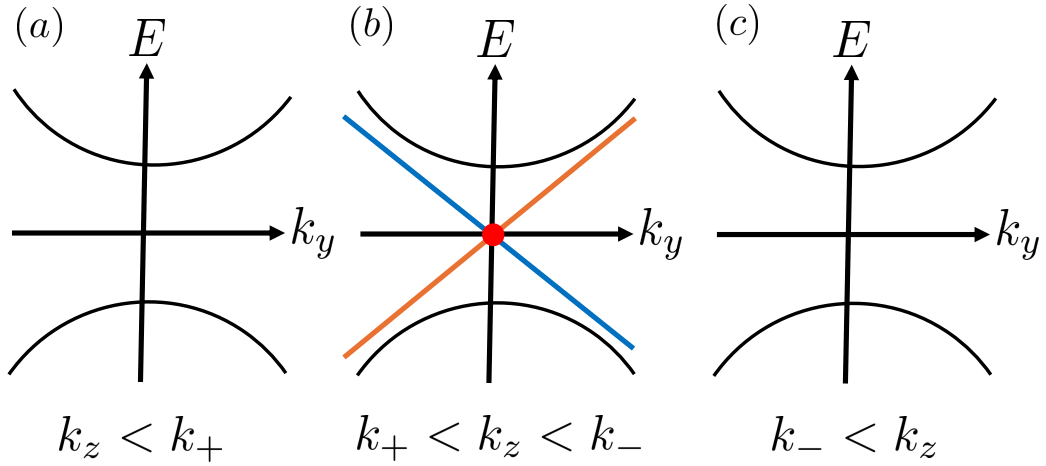


Figure C.2.3: Weyl 半金属中の表面 Brillouin zone のバンド図の様子. 上下のバンドはそれぞれバルクのバンドで, 第 1 Chern 数が 0 でないときはカイラルエッジモードが出現する.

C.2.3 異常ホール効果

Weyl 半金属の電磁応答として異常ホール効果を考える. Kubo 公式より, Hall 伝導率は絶対零度で

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\text{BZ}} d^3k f_z(\mathbf{k}) \quad (\text{C.2.13})$$

である. この計算を $k_z = \text{const.}$ の 2 次元 Brillouin zone で先に計算してから k_z について和を取るとすると,

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{(2\pi)^2 \hbar} \int_{k_+}^{k_-} dk_z Ch_1(k_z) = \frac{e^2}{2\pi \hbar} (k_- - k_+) \quad (\text{C.2.14})$$

となる. Weyl 半金属の異常ホール効果の Hall 伝導度は Weyl 点間の距離 $k_- - k_+$ に依存する.

C.3 3次元トポロジカル絶縁体のトポロジカル相転移

本節では空間反転対称性が破れた3次元トポロジカル絶縁体と自明な絶縁体との間にWeyl半金属相が出現することを示す[97, 98]. トポロジカル絶縁体について議論するので, 時間反転対称性 $T^{-1}H(\mathbf{k})T = H(-\mathbf{k})$, $T^2 = -1$ を満たすとする. また空間反転以外の結晶対称性により発生する縮退は考えない, 一般的な状況で議論する. さらに本節では単一のパラメータ m を変化させることにより, トポロジカル絶縁体と自明な絶縁体のトポロジカル相転移を制御できる状況を考える.

4バンド模型のHamiltonianの構成

P-symmetric な場合の3次元トポロジカル絶縁体のトポロジカル相転移を考える前に, 4バンド模型のHamiltonianの対称性について考える. Dirac Hamiltonian

$$H(\mathbf{k}) = \sum_{a=1}^4 R_a(\mathbf{k})\alpha^a \quad (\text{C.3.1})$$

について, 4×4 の行列である α 行列で表されているとする. Chirality に対応する $\alpha^5 = \alpha^1\alpha^2\alpha^3\alpha^4$ を定義し, Clifford 代数の関係 $\{\alpha^a, \alpha^b\} = 2\delta^{ab}$ ($a, b = 1 \cdots 5$) を満たす. α 行列の具体形は Clifford 代数の関係を満たせば何でも良いが, $\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3$ は Dirac 方程式の運動項, α^4 は質量項に対応することを考えれば, 時間反転と空間反転に対して,

$$T^{-1}\alpha^a T = \begin{cases} -\alpha^a & (a = 1, 2, 3, 5) \\ +\alpha^a & (a = 4) \end{cases}, \quad P^{-1}\alpha^a P = \begin{cases} -\alpha^a & (a = 1, 2, 3, 5) \\ +\alpha^a & (a = 4) \end{cases} \quad (\text{C.3.2})$$

と変換する必要がある. ここで任意の4バンド模型のHamiltonianを構成するためには, 単位行列を含めたこの5つの α 行列では足りない. なぜならばエルミートな 4×4 行列は16個のパラメータで表せられるからである. 残りの10個の α 行列に関しては, α^a ($a = 1, \dots, 5$) を用いて,

$$\alpha^{ab} = \frac{1}{2i} [\alpha^a, \alpha^b], \quad (a < b) \quad (\text{C.3.3})$$

で定義される. 表 C.3.1 は α 行列の時間反転, 空間反転に対する変換性の一覧である. 以上の16個の α 行列を用いて, 任意の4バンド模型は

$$H(\mathbf{k}) = R_0(\mathbf{k})I + \sum_{a=1}^5 R_a(\mathbf{k})\alpha^a + \sum_{\substack{a,b=1 \\ a < b}}^5 R_{ab}(\mathbf{k})\alpha^{ab} \quad (\text{C.3.4})$$

と表される.

P-symmetric な場合

ここで時間反転対称性と空間反転対称性がある4バンド模型を考え, そのときの価電子バンドと伝導バンドのギャップが閉じることがあるのかを考える^{*1}. それぞれの対称性の条件は

$$T^{-1}H(\mathbf{k})T = H(-\mathbf{k}), \quad P^{-1}H(\mathbf{k})P = H(-\mathbf{k}) \quad (\text{C.3.5})$$

である. α 行列は表 C.3.1 のように変換することを用いると, T, P 対称性がある場合は $R_{ab}(\mathbf{k}) = 0$ であることが導ける. なぜならば, 時間反転と空間反転で α 行列の変換の仕方が異なり, $R_{ab}(\mathbf{k})$ は奇関数かつ偶

^{*1}2 バンド模型では T, P の両方の対称性を満たす Hamiltonian は構成できない. Hamiltonian を $\mathbf{R}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ としたとき, $T: \boldsymbol{\sigma} \rightarrow -\boldsymbol{\sigma}$ であるが, $P: \boldsymbol{\sigma} \rightarrow \boldsymbol{\sigma}$ なので係数の $\mathbf{R}(\mathbf{k})$ は奇関数かつ偶関数となり 0 となるからである.

α 行列	時間反転 T	空間反転 P
$\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3$	-1	-1
α^4	+1	+1
α^5	-1	-1
$\alpha^{12}, \alpha^{13}, \alpha^{23}$	-1	+1
$\alpha^{14}, \alpha^{24}, \alpha^{34}$	+1	-1
$\alpha^{15}, \alpha^{25}, \alpha^{35}$	-1	+1
α^{45}	+1	-1

Table C.3.1: α 行列の時間反転, 空間反転に対する変換性の一覧.

関数という条件が付くからである. したがって T, P 対称性がある 4 バンド模型の一般的な Hamiltonian はエネルギーの原点を決める $R_0(\mathbf{k})$ を 0 として,

$$H(\mathbf{k}) = \sum_{a=1}^5 R_a(\mathbf{k}) \alpha^a \quad (\text{C.3.6})$$

となる. Hamiltonian (C.3.6) のエネルギー固有値を求める. 式 (C.3.6) を 2 乗して

$$[H(\mathbf{k})]^2 = \sum_{a,b=1}^5 R_a(\mathbf{k}) \alpha^a R_b(\mathbf{k}) \alpha^b = \frac{1}{2} R_a R_b \{ \alpha^a, \alpha^b \} = \sum_{a=1}^5 [R_a]^2 \quad (\text{C.3.7})$$

となるから, エネルギー固有値は $E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\sum_{a=1}^5 [R_a(\mathbf{k})]^2}$ となる. つまり T, P 対称性がある場合, エネルギーバンドは常に 2 重縮退している. 価電子バンドと伝導バンドが縮退し, エネルギーギャップが閉じる条件は $R_a = 0$ ($a = 1, \dots, 5$) である. これは 5 本の方程式であるが, 系の変数は $(m, \mathbf{k})$ の 4 つより, エネルギーギャップは閉じないように思えるかもしれない. しかしこの場合でも時間反転対称運動量 Γ_i で閉じることが示せる^{*2}. 時間反転対称運動量は $\Gamma_i = -\Gamma_i$ を満たすので, $R_a(\Gamma_i) = 0$, ($a = 1, 2, 3, 5$) となる. したがって $\mathbf{k} = \Gamma_i$ での Hamiltonian は $H(\Gamma_i) = R_4(\Gamma_i) \alpha^4$ より, 変数 m に対して方程式が $R_4(\Gamma_i) = 0$ の 1 個であるからエネルギーギャップが閉じる. 以上より, 時間反転対称性と空間反転対称性を満たす 3 次元トポロジカル絶縁体のエネルギーギャップはある $m = m_0$ のとき, $\mathbf{k} = \Gamma_i$ で閉じ, バンドの反転が起こり, トポロジカルに自明な絶縁体へ転移する.

P-asymmetric な場合

次に時間反転対称性があり, 空間反転対称性が無い場合を考える. このとき $\mathbf{k} = \Gamma_i$ を除いてバンドは縮退していないから, エネルギーギャップが閉じるか考える場合は, 価電子帯, 伝導帯からそれぞれ 1 つずつの計 2 つのバンドのみを考慮すればよい. Hamiltonian は $\mathbf{R}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ となり, エネルギーギャップが閉じるための条件は $R_a = 0$ ($a = 1, 2, 3$) の 3 つになる. 今変数は $(m, \mathbf{k})$ の 4 つであるから, ある 0 でない領域でエネルギーギャップが閉じる. このエネルギーギャップが閉じる領域は $(m, \mathbf{k})$ で曲線として現れる. Section C.1 の偶然縮退の議論からこの gapless 点は Weyl 点になっている. したがって空間反転対称性が破れた 3 次元トポロジカル絶縁体と自明な絶縁体との間に Weyl 半金属相が出現することが示された.

図 C.3.1 の次元トポロジカル絶縁体と自明な絶縁体のトポロジカル相転移の概念図である. (b) の赤線のようにパラメータが変化した時, Weyl 半金属相に入ると (a) のように Weyl 点がペアで生成し, (b) で Weyl 半金属相を抜け gapped なトポロジカル絶縁体相に入ると, (a) のように Weyl 点はペアで消滅

^{*2}実はここで議論している模型は価電子バンドと伝導バンドが異なるパリティを持つことが仮定されている. 同じパリティを持つ場合, α 行列の P に対する変換性が少し異なる.

する^{*3}。空間反転対称性がある場合はエネルギーギャップが閉じるのはある m_0 だけであり、そこでは Dirac 半金属相が出現する。

さらに Murakami らは1つのパラメータ m に依存している時間反転対称性を満たし空間反転対称性を満たさないバンド絶縁体に対して、全ての空間反転対称性を破る空間群について、どのような gapless 相が出現するか調べた。この結果、系は常に Weyl 半金属相もしくはノーダルライン半金属相を持つことが分かった [104]。

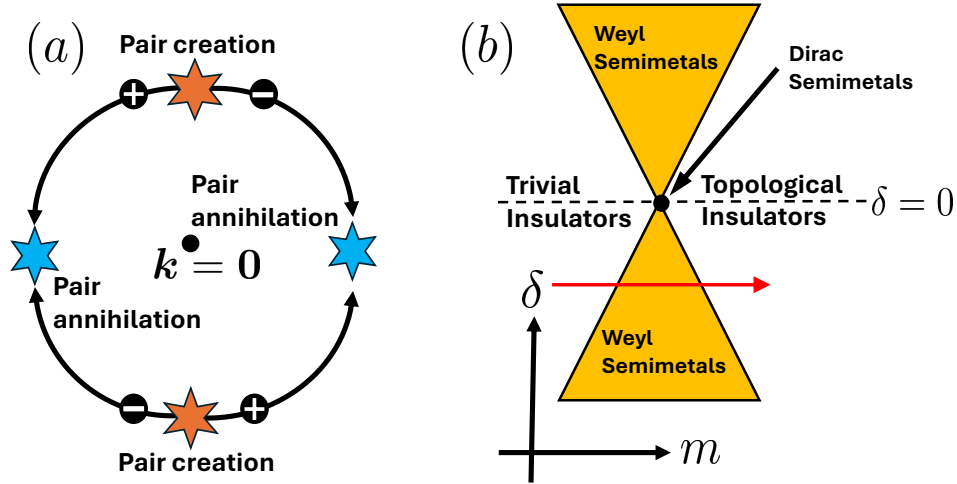


Figure C.3.1: Weyl 点の様子と 3 次元トポロジカル絶縁体の相図. (a) は m が (b) の赤線のように動いた時、Weyl 点の生成と消滅の様子を描いている. (b) は 3 次元トポロジカル絶縁体の相図でパラメータ m を自明な絶縁体から動かすと、Weyl 半金属相に入りトポロジカル絶縁体相へ転移する. $\delta = 0$ は空間反転対称性がある場合を表し、そのときは Dirac 半金属相が 1 点だけ出現する。

^{*3}時間反転対称性を満たすとき、Berry 曲率は $\mathbf{f}(-\mathbf{k}) = -\mathbf{f}(\mathbf{k})$ より、モノポール電荷は $\rho(-\mathbf{k}) = \rho(\mathbf{k})$ となるから、Weyl 点は原点对称で分布している。さらに Kramers 縮退より、 $+1, -1$ の chirality を持つ Weyl 点が偶数個出てくるので、最低でも Weyl 点は 4 つ存在する。

Appendix D

計算の詳細

D.1 非可換 Berry 接続と曲率

本文の中で定義されているが、ここでもう一度非可換 Berry 接続と曲率の定義を与えておく。

非可換 Berry 接続と曲率

非可換 Berry 曲率 $a_i^{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ と非可換 Berry 曲率 $f_{ij}^{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ を以下のように定義する。

$$a_i^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = -i \left\langle u_{\alpha,\mathbf{k}} \left| \frac{\partial}{\partial k_i} \right| u_{\beta,\mathbf{k}} \right\rangle \quad (\text{D.1.1})$$

$$f_{ij}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \frac{\partial}{\partial k_i} a_j^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) - \frac{\partial}{\partial k_j} a_i^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) + i[a_i(\mathbf{k}), a_j(\mathbf{k})]^{\alpha\beta} \quad (\text{D.1.2})$$

$|u_{\alpha,\mathbf{k}}\rangle$ はバンド α , 波数 $\mathbf{k}$ のセル周期関数である。 $a_i^{\alpha\beta}$ の (α, β) は行列の添え字で, i は $k_1, k_2, \dots$ 方向を区別する添え字である。 バンドの添え字が $\alpha, \beta = 1, 2, \dots, N$ で, 波数の添え字が $i, j = 1, 2, \dots, d$ であるとする。

本文やこの付録では Einstein の縮約規則を用い, 同じ文字が 2 度出てきたら和を取ることを意味する。 全ての和を Einstein の縮約規則を用いて表すとは限らず, 普通に $\sum$ を使う場合もある。 また行列とその成分を厳密に区別した記法は用いない。 例えば, $A, A_{\alpha\beta}$ はそれぞれ行列と行列の要素であるが, 式変形の途中で $A = A_{\alpha\beta}$ のような使い方をする場面がある。

D.2 非可換 Berry 接続と曲率の gauge 変換

セル周期関数は, gauge 変換の自由度を持つが, それに伴う非可換 Berry 接続と曲率の gauge 変換について議論する。

非可換 Berry 接続と曲率の gauge 変換

セル周期関数を混ぜ合わせる $U(N)$ gauge 変換を

$$|u'_{\alpha,\mathbf{k}}\rangle = \sum_{\beta} U_{\beta\alpha}(\mathbf{k}) |u_{\beta,\mathbf{k}}\rangle \quad (\text{D.2.1})$$

と定義する. $U(\mathbf{k})$ は $N \times N$ のユニタリ行列である. 添え字の順番に注意する. この変換の下で, 非可換 Berry 接続と曲率は

$$a'_i(\mathbf{k}) = U^\dagger(\mathbf{k})a_i(\mathbf{k})U(\mathbf{k}) - iU^\dagger(\mathbf{k})\frac{\partial}{\partial k_i}U(\mathbf{k}) \quad (\text{D.2.2})$$

$$f'_{ij}(\mathbf{k}) = U^\dagger(\mathbf{k})f_{ij}(\mathbf{k})U(\mathbf{k}) \quad (\text{D.2.3})$$

と変換する. 非可換 Berry 接続と曲率は gauge 不変ではないが, $\text{Tr}[f_{ij}(\mathbf{k})]$ は gauge 不変な量であることが分かる.

証明

定義通りの計算していく. まずは非可換 Berry 接続について,

$$\begin{aligned} a_i'^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) &= -i \left\langle u'_{\alpha,\mathbf{k}} \left| \frac{\partial}{\partial k_i} \right| u'_{\beta,\mathbf{k}} \right\rangle \\ &= -i \left[\sum_{\gamma} U_{\gamma\alpha}(\mathbf{k}) |u_{\gamma,\mathbf{k}}\rangle \right]^\dagger \frac{\partial}{\partial k_i} \left[\sum_{\delta} U_{\gamma\beta}(\mathbf{k}) |u_{\delta,\mathbf{k}}\rangle \right] \\ &= \sum_{\gamma,\delta} U_{\gamma\alpha}^*(\mathbf{k}) U_{\delta\beta}(\mathbf{k}) (-i) \left\langle u_{\gamma,\mathbf{k}} \left| \frac{\partial}{\partial k_i} \right| u_{\delta,\mathbf{k}} \right\rangle - i \sum_{\gamma,\delta} U_{\gamma\alpha}^*(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial k_i} U_{\delta\beta}(\mathbf{k}) \delta_{\gamma\delta} \\ &= [U^\dagger(\mathbf{k})]_{\alpha\gamma} a_i^{\gamma\delta}(\mathbf{k}) [U(\mathbf{k})]_{\delta\beta} - i [U^\dagger(\mathbf{k})]_{\alpha\gamma} \frac{\partial}{\partial k_i} [U(\mathbf{k})]_{\delta\beta} \end{aligned} \quad (\text{D.2.4})$$

である. 次に非可換 Berry 曲率について,

$$\begin{aligned} f'_{ij}(\mathbf{k}) &= \frac{\partial}{\partial k_i} a'_j(\mathbf{k}) - \frac{\partial}{\partial k_j} a'_i(\mathbf{k}) + i[a'_i(\mathbf{k}), a'_j(\mathbf{k})] \\ &= \frac{\partial}{\partial k_i} \left(U^\dagger(\mathbf{k})a_j(\mathbf{k})U(\mathbf{k}) - iU^\dagger(\mathbf{k})\frac{\partial}{\partial k_j}U(\mathbf{k}) \right) - \frac{\partial}{\partial k_j} \left(U^\dagger(\mathbf{k})a_i(\mathbf{k})U(\mathbf{k}) - iU^\dagger(\mathbf{k})\frac{\partial}{\partial k_i}U(\mathbf{k}) \right) \\ &\quad + i \left[U^\dagger(\mathbf{k})a_i(\mathbf{k})U(\mathbf{k}) - iU^\dagger(\mathbf{k})\frac{\partial}{\partial k_i}U(\mathbf{k}), U^\dagger(\mathbf{k})a_j(\mathbf{k})U(\mathbf{k}) - iU^\dagger(\mathbf{k})\frac{\partial}{\partial k_j}U(\mathbf{k}) \right] \\ &= (\partial_i U^\dagger) a_j U + U^\dagger (\partial_i a_j) U + U^\dagger a_j (\partial_i U) - i(\partial_i U^\dagger) \partial_j U - iU^\dagger \partial_i \partial_j U \\ &\quad - (\partial_j U^\dagger) a_i U - U^\dagger (\partial_j a_i) U - U^\dagger a_i (\partial_j U) + i(\partial_j U^\dagger) \partial_i U - iU^\dagger \partial_j \partial_i U \\ &\quad + i[U^\dagger a_i U, U^\dagger a_j U] + i[U^\dagger a_i, -iU^\dagger \partial_j U] + i[-iU^\dagger \partial_i U, U^\dagger a_j U] + i[-iU^\dagger \partial_i U, -iU^\dagger \partial_j U] \\ &= (\partial_i U^\dagger) a_j U - i(\partial_i U^\dagger) \partial_j U - (\partial_j U^\dagger) a_i U + i(\partial_j U^\dagger) \partial_i U - U^\dagger (\partial_j U) U^\dagger a_i U + U^\dagger (\partial_i U) U^\dagger a_j U \\ &\quad + U^\dagger (\partial_i a_j - \partial_j a_i + i[a_i, a_j]) U \end{aligned}$$

となる. ここで $0 = \partial_i(U^\dagger U) = (\partial_i U^\dagger)U + U^\dagger(\partial_i U)$ を使うと,

$$\begin{aligned} f'_{ij}(\mathbf{k}) &= U^\dagger(\mathbf{k}) \left(\frac{\partial}{\partial k_i} a_j(\mathbf{k}) - \frac{\partial}{\partial k_j} a_i(\mathbf{k}) + i[a_i(\mathbf{k}), a_j(\mathbf{k})] \right) U(\mathbf{k}) \\ &= U^\dagger(\mathbf{k}) f_{ij}(\mathbf{k}) U(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (\text{D.2.5})$$

となり, 公式を証明できた.

D.3 非可換 Berry 接続と曲率 (微分形式)

本文では微分形式は用いないが, 微分形式を用いて議論した方が簡潔であることがあるので, 微分形式を用いた非可換 Berry 接続と曲率を書いておく.

非可換 Berry 接続と曲率 (微分形式)

微分形式で書かれた非可換 Berry 接続と曲率をそれぞれ $\tilde{a}^{\alpha,\beta}, \tilde{f}^{\alpha\beta}$ とすると,

$$\tilde{a}^{\alpha,\beta} = a_i^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) dk^i \quad (\text{D.3.1})$$

$$\tilde{f}^{\alpha\beta} = d\tilde{a}^{\alpha\beta} + \tilde{a}^{\alpha\gamma} \wedge \tilde{a}^{\gamma\beta} = \frac{1}{2} f_{ij}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) dk^i \wedge dk^j \quad (\text{D.3.2})$$

で与えられる. Gauge は g を 0-form とすると, gauge 変換は

$$\tilde{a}' = g^{-1} \tilde{a} g + g^{-1} dg \quad (\text{D.3.3})$$

$$\tilde{f}' = g^{-1} \tilde{f} g \quad (\text{D.3.4})$$

で与えられる.

証明

非可換 Berry 曲率は微分形式の計算より,

$$\begin{aligned} \tilde{f}^{\alpha\beta} &= d\tilde{a}^{\alpha\beta} + \tilde{a}^{\alpha\gamma} \wedge \tilde{a}^{\gamma\beta} \\ &= \frac{\partial}{\partial k_i} a_j^{\alpha\beta} dk^i \wedge dk^j + a_i^{\alpha\gamma} dk^i \wedge a_j^{\gamma\beta} dk^j \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial k_i} a_j^{\alpha\beta} - \frac{\partial}{\partial k_j} a_i^{\alpha\beta} + [a_i, a_j]^{\alpha\beta} \right) dk^i \wedge dk^j \\ &= \frac{1}{2} f_{ij}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) dk^i \wedge dk^j \end{aligned} \quad (\text{D.3.5})$$

となる. 微分形式では虚数単位 i を含まずに

$$a_i^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \left\langle u_{\alpha,\mathbf{k}} \left| \frac{\partial}{\partial k_i} \right| u_{\beta,\mathbf{k}} \right\rangle \quad (\text{D.3.6})$$

$$f_{ij}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \frac{\partial}{\partial k_i} a_j^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) - \frac{\partial}{\partial k_j} a_i^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) + [a_i(\mathbf{k}), a_j(\mathbf{k})]^{\alpha\beta} \quad (\text{D.3.7})$$

と定義した方が表式が綺麗になる. Gauge 変換についても微分形式の計算より, Berry 接続については

$$\begin{aligned} \tilde{a}' &= g^{-1} \tilde{a} g + g^{-1} dg \\ &= g^{-1} a_i g dk^i + g^{-1} \frac{\partial}{\partial k_i} g dk^i \\ &= \left(g^{-1} a_i g + g^{-1} \frac{\partial}{\partial k_i} g \right) dk^i \end{aligned} \quad (\text{D.3.8})$$

であり, Berry 曲率については,

$$\begin{aligned}
\tilde{f}' &= d\tilde{a}' + \tilde{a}' \wedge \tilde{a}' \\
&= \frac{\partial}{\partial k_i} \left(g^{-1} a_j g + g^{-1} \frac{\partial}{\partial k_j} g \right) dk^i \wedge dk^j \\
&\quad + \left(g^{-1} a_i g + g^{-1} \frac{\partial}{\partial k_i} g \right) \left(g^{-1} a_j g + g^{-1} \frac{\partial}{\partial k_j} g \right) dk^i \wedge dk^j \\
&= [(\partial_i g^{-1}) a_j g + g^{-1} (\partial_i a_j) g + g^{-1} a_j (\partial_i g) + (g^{-1} \partial_i g) (\partial_j g) + g^{-1} \partial_i \partial_j g] dk^i \wedge dk^j \\
&\quad + [g^{-1} a_i a_j g + g^{-1} a_i (\partial_j g) + g^{-1} (\partial_i g) g^{-1} a_j g + g^{-1} (\partial_i g) g^{-1} (\partial_j g)] dk^i \wedge dk^j
\end{aligned}$$

となる. ここで $0 = \partial_i (g^{-1} g) = (\partial_i g^{-1}) g + g^{-1} (\partial_i g)$ を使うと,

$$\begin{aligned}
\tilde{f}' &= g^{-1} (\partial_i a_j + a_i a_j) g dk^i \wedge dk^j = g^{-1} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial k_i} a_j - \frac{\partial}{\partial k_j} a_i + [a_i, a_j] \right) g dk^i \wedge dk^j \\
&= g^{-1} f_{ij} g dk^i \wedge dk^j
\end{aligned} \tag{D.3.9}$$

となるので, 微分形式での Berry 曲率の gauge 変換の公式が求められた.

D.4 時間反転演算子

時間反転演算子

本文で具体的に出てくる class AII の時間反転演算子 T は 1 粒子 Hamiltonian に作用する反ユニタリ演算子で $T^2 = -1$ も満たす. この時間反転演算子は以下の公式

$$\langle \psi_{\mathbf{k}} | T | \phi_{\mathbf{k}} \rangle = - \langle \phi_{\mathbf{k}} | T | \psi_{\mathbf{k}} \rangle \tag{D.4.1}$$

$$\langle T \psi_{\mathbf{k}} | T \phi_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \phi_{\mathbf{k}} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle \tag{D.4.2}$$

$$\langle T \psi_{\mathbf{k}} | T A T^{-1} | T \phi_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \phi_{\mathbf{k}} | A^\dagger | \psi_{\mathbf{k}} \rangle \tag{D.4.3}$$

を満たす. ここで $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle, |\phi_{\mathbf{k}}\rangle$ は 1 粒子 Hamiltonian $H(\mathbf{k})$ の固有関数が張る 1 粒子 Hilbert 空間上の適当なベクトルである.

D.5 w 行列

時間反転演算子 T の行列表示である w 行列が満たす公式について議論する. w 行列は時間反転対称性があるときの非可換 Berry 接続の拘束条件として使われる.

w 行列

w 行列 $w_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \langle u_{\alpha, -\mathbf{k}} | T | u_{\beta, \mathbf{k}} \rangle$ は以下の性質・公式を満たす.

$$w^\dagger(\mathbf{k}) w(\mathbf{k}) = I \tag{D.5.1}$$

$$|u_{\alpha, -\mathbf{k}}\rangle = \sum_{\beta} w_{\alpha\beta}^* |T u_{\beta, \mathbf{k}}\rangle \tag{D.5.2}$$

$$a_i(-\mathbf{k}) = w(\mathbf{k}) a_i^*(\mathbf{k}) w^\dagger(\mathbf{k}) + i w(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial k_i} w^\dagger(\mathbf{k}) \tag{D.5.3}$$

$$f_{ij}(-\mathbf{k}) = w(\mathbf{k}) [-f_{ij}^*(\mathbf{k})] w^\dagger(\mathbf{k}) \tag{D.5.4}$$

1つの式は w 行列のユニタリ性を表し, 3,4つ目の式は $T^2 = -1$ の時間反転対称性による Berry 接続, 曲率への拘束条件を表す.

証明

定義に沿って計算していく. 第1式について,

$$\begin{aligned}
 w^\dagger(\mathbf{k})w(\mathbf{k}) &= \sum_{\gamma} w_{\gamma\alpha}^*(\mathbf{k})w_{\gamma\beta}(\mathbf{k}) \\
 &= \sum_{\gamma} \langle u_{\gamma,\mathbf{k}} | T u_{\alpha,\mathbf{k}} \rangle^* \langle u_{\gamma,\mathbf{k}} | T u_{\beta,\mathbf{k}} \rangle \\
 &= \sum_{\gamma} \langle T u_{\alpha,\mathbf{k}} | u_{\gamma,\mathbf{k}} \rangle \langle u_{\gamma,\mathbf{k}} | T u_{\beta,\mathbf{k}} \rangle \\
 &= \langle T u_{\alpha,\mathbf{k}} | T u_{\beta,\mathbf{k}} \rangle = \langle u_{\beta,\mathbf{k}} | u_{\alpha,\mathbf{k}} \rangle = \delta_{\beta\alpha}
 \end{aligned} \tag{D.5.5}$$

となる. 途中で時間反転演算子の公式 $\langle T\psi_{\mathbf{k}} | T\phi_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \phi_{\mathbf{k}} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle$ を使った. 第2式について,

$$\begin{aligned}
 |u_{\alpha,-\mathbf{k}}\rangle &= -T^2 |u_{\alpha,-\mathbf{k}}\rangle \\
 &= \sum_{\beta} T |u_{\beta,\mathbf{k}}\rangle \langle u_{\beta,\mathbf{k}} | T |u_{\alpha,-\mathbf{k}}\rangle \\
 &= \sum_{\beta} T [|u_{\beta,\mathbf{k}}\rangle w_{\alpha\beta}] = \sum_{\beta} w_{\alpha\beta}^*(\mathbf{k}) |T u_{\beta,\mathbf{k}}\rangle
 \end{aligned} \tag{D.5.6}$$

となる. 途中で公式 $\langle \psi_{\mathbf{k}} | T | \phi_{\mathbf{k}} \rangle = -\langle \phi_{\mathbf{k}} | T | \psi_{\mathbf{k}} \rangle$ を使った. 第3式について, 第2式を使って,

$$\begin{aligned}
 a_i^{\alpha\beta}(-\mathbf{k}) &= -i \left\langle u_{\alpha,-\mathbf{k}} \left| \frac{\partial}{\partial(-k_i)} \right| u_{\beta,-\mathbf{k}} \right\rangle \\
 &= i \left[\sum_{\gamma} w_{\alpha\gamma}^*(\mathbf{k}) |T u_{\gamma,\mathbf{k}}\rangle \right]^\dagger \frac{\partial}{\partial k_i} \left[\sum_{\delta} w_{\beta\delta}^*(\mathbf{k}) |T u_{\delta,\mathbf{k}}\rangle \right] \\
 &= i \sum_{\gamma,\delta} \left[\left\langle T u_{\gamma,\mathbf{k}} \left| \frac{\partial}{\partial k_i} \right| T u_{\delta,\mathbf{k}} \right\rangle w_{\alpha\gamma}(\mathbf{k}) w_{\beta\delta}^*(\mathbf{k}) + \langle T u_{\gamma,\mathbf{k}} | T u_{\delta,\mathbf{k}} \rangle w_{\alpha\gamma}(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial k_i} w_{\beta\delta}^*(\mathbf{k}) \right] \\
 &= i \sum_{\gamma,\delta} \left[\left\langle \frac{\partial}{\partial k_i} u_{\delta,\mathbf{k}} \left| u_{\gamma,\mathbf{k}} \right\rangle w_{\alpha\gamma}(\mathbf{k}) w_{\beta\delta}^*(\mathbf{k}) + w_{\alpha\gamma}(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial k_i} w_{\beta\delta}^*(\mathbf{k}) \delta_{\delta\gamma} \right] \\
 &= w_{\alpha\gamma}(\mathbf{k}) a^{\gamma\delta}(\mathbf{k}) [w^\dagger(\mathbf{k})]_{\delta\beta} + i w_{\alpha\gamma}(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial k_i} [w^\dagger(\mathbf{k})]_{\gamma\beta}
 \end{aligned} \tag{D.5.7}$$

となる. 第4式については第3式を使って定義通りに計算したら導出できる. ちょうど非可換 Berry 曲率の gauge 変換の計算と似ている.

D.6 π 行列

π 行列

空間反転演算子 P の行列表示である π 行列 $\pi_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \langle u_{\alpha, -\mathbf{k}} | P | u_{\beta, \mathbf{k}} \rangle$ は以下の性質・公式を満たす.

$$\pi^\dagger(\mathbf{k})\pi(\mathbf{k}) = I \quad (\text{D.6.1})$$

$$|u_{\alpha, -\mathbf{k}}\rangle = \sum_{\beta} \pi_{\alpha\beta}^* |P u_{\beta, \mathbf{k}}\rangle \quad (\text{D.6.2})$$

$$a_i(-\mathbf{k}) = -\pi(\mathbf{k})a_i(\mathbf{k})\pi^\dagger(\mathbf{k}) + i\pi(\mathbf{k})\frac{\partial}{\partial k_i}\pi^\dagger(\mathbf{k}) \quad (\text{D.6.3})$$

$$f_{ij}(-\mathbf{k}) = \pi(\mathbf{k})f_{ij}(\mathbf{k})\pi^\dagger(\mathbf{k}) \quad (\text{D.6.4})$$

1 つの式は π 行列のユニタリ性を表し, 3,4 つ目の式は空間反転対称性による Berry 接続, 曲率への拘束条件を表す.

証明

w 行列と同様に証明できる.

D.7 電気磁気分極

電気磁気分極

$$P_3 = -\frac{1}{8\pi^2} \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} \left[a_i \partial_j a_k + \frac{2}{3} i a_i a_j a_k \right] \quad (\text{D.7.1})$$

が満たす公式を示す. ここで $\partial_i = \partial/\partial k_i$, 空間の次元次元 $d = 3$ である.

電気磁気分極

電気磁気分極 P_3 は以下の公式を満たす.

$$P_3 = -\frac{1}{16\pi^2} \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} \left[\left\{ f_{ij} - \frac{2}{3} i a_i a_j \right\} a_k \right] \quad (\text{D.7.2})$$

$$P'_3 = P_3 + \frac{1}{24\pi^2} \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} \left[(U^\dagger \partial_i U) (U^\dagger \partial_j U) (U^\dagger \partial_k U) \right] \quad (\text{D.7.3})$$

$$2P_3 = \frac{1}{24\pi^2} \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} \left[(w^\dagger \partial_i w) (w^\dagger \partial_j w) (w^\dagger \partial_k w) \right] \quad (\text{D.7.4})$$

第 3 式は $T^2 = -1$ の class の時間反転対称性を満たすときに成立する式である.

証明

第 1 式の第 1 項について,

$$\begin{aligned} \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} [f_{ij} a_k] &= \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} [(\partial_i a_j - \partial_j a_i + i[a_i, a_j]) a_k] \\ &= \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} [(\partial_i a_j) a_k - (\partial_j a_i) a_k + i a_i a_j a_k - i a_j a_i a_k] \\ &= 2 \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} [a_i \partial_j a_k + i a_i a_j a_k] \end{aligned} \quad (\text{D.7.5})$$

という恒等式を使う。途中で Tr の巡回性を使い添え字を適当に交換した。電気磁気分極 P_3 は

$$\begin{aligned} P_3 &= -\frac{1}{8\pi^2} \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} \left[a_i \partial_j a_k + \frac{2}{3} i a_i a_j a_k \right] \\ &= -\frac{1}{8\pi^2} \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} \left[\frac{1}{2} f_{ij} a_k - i a_i a_j a_k + \frac{2}{3} i a_i a_j a_k \right] \\ &= -\frac{1}{16\pi^2} \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} \left[\left\{ f_{ij} - \frac{2}{3} i a_i a_j \right\} a_k \right] \end{aligned} \quad (\text{D.7.6})$$

となるので、公式が示された。次に第2式について、非可換 Berry 接続と曲率の gauge 変換を使うと、

$$\begin{aligned} P'_3 &= -\frac{1}{16\pi^2} \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} \left[\left\{ U^\dagger f_{ij} U - \frac{2}{3} i \left(U^\dagger a_i U - i U^\dagger \frac{\partial}{\partial k_i} U \right) \left(U^\dagger a_j U - i U^\dagger \frac{\partial}{\partial k_j} U \right) \right\} \right. \\ &\quad \left. \times \left(U^\dagger a_k U - i U^\dagger \frac{\partial}{\partial k_k} U \right) \right] \\ &= -\frac{1}{16\pi^2} \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} \left[f_{ij} a_k - \frac{2}{3} i a_i a_j a_k + \frac{2}{3} \left(U^\dagger \partial_i U \right) \left(U^\dagger \partial_j U \right) \left(U^\dagger \partial_k U \right) \right. \\ &\quad \left. i U^\dagger (\partial_i a_j - \partial_j a_i + i [a_i, a_j]) (\partial_k U) + \frac{2}{3} i \left\{ 3 i U^\dagger a_i a_j (\partial_k U) - 3 a_i (\partial_j U) (\partial_k U^\dagger) \right\} \right] \\ &= P_3 + \frac{1}{24\pi^2} \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} \left[\left(U^\dagger \partial_i U \right) \left(U^\dagger \partial_j U \right) \left(U^\dagger \partial_k U \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{D.7.7})$$

となる。途中で添え字 i, j, k を適当に入れ替え、 ϵ^{ijk} の完全反対称性と、 $(\partial_i U^\dagger) U = U^\dagger (\partial_i U)$ と、部分積分と Tr の巡回性を使った。したがって電気磁気分極 P_3 の gauge 変換は

$$P'_3 = P_3 + \frac{1}{24\pi^2} \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} \left[\left(U^\dagger \partial_i U \right) \left(U^\dagger \partial_j U \right) \left(U^\dagger \partial_k U \right) \right] \quad (\text{D.7.8})$$

のようになる。ここで第2項の $1/(24\pi^2) \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} \left[\left(U^\dagger \partial_i U \right) \left(U^\dagger \partial_j U \right) \left(U^\dagger \partial_k U \right) \right]$ は3次元の巻き付き数で整数となる。つまり P_3 は整数の不定性を持つ。

最後に第3式について、時間反転対称性があるときの Berry 接続の拘束条件

$$\begin{aligned} a_i(-\mathbf{k}) &= w(\mathbf{k}) a_i^*(\mathbf{k}) w^\dagger(\mathbf{k}) + i w(\mathbf{k}) \partial_i w^\dagger(\mathbf{k}) \\ f_{ij}(-\mathbf{k}) &= w(\mathbf{k}) [-f_{ij}^*(\mathbf{k})] w^\dagger(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (\text{D.7.9})$$

を使うと、 P_3 は

$$\begin{aligned} P_3 &= -\frac{1}{16\pi^2} \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} \left[\left\{ f_{ij}(-\mathbf{k}) - \frac{2}{3} i a_i(-\mathbf{k}) a_j(-\mathbf{k}) \right\} a_k(-\mathbf{k}) \right] \\ &= -\frac{1}{16\pi^2} \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} \left[-f_{ij}^* a_k^* - \frac{2}{3} i a_i^* a_j^* a_k^* - \frac{2}{3} \left(w^\dagger \partial_i w \right) \left(w^\dagger \partial_j w \right) \left(w^\dagger \partial_k w \right) \right. \\ &\quad \left. - 2 i w (\partial_i a_j^* + i a_i^* a_j^*) (\partial_k w^\dagger) - \frac{2}{3} i \left\{ 3 i a_i^* a_j^* (\partial_k w^\dagger) + 3 a_i^* (\partial_j w^\dagger) (\partial_k w^\dagger) \right\} \right] \\ &= -P_3^* + \frac{1}{24\pi^2} \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} \left[\left(w^\dagger \partial_i w \right) \left(w^\dagger \partial_j w \right) \left(w^\dagger \partial_k w \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{D.7.10})$$

となる。途中で添え字 i, j, k を適当に入れ替え、 ϵ^{ijk} の完全反対称性と、 $(\partial_i w^\dagger) w = w^\dagger (\partial_i w)$ と、部分積分と Tr の巡回性を使った。したがって時間反転対称性がある場合、電気磁気分極 P_3 は

$$2P_3 = \frac{1}{24\pi^2} \int d^3k \epsilon^{ijk} \text{Tr} \left[\left(w^\dagger \partial_i w \right) \left(w^\dagger \partial_j w \right) \left(w^\dagger \partial_k w \right) \right] \quad (\text{D.7.11})$$

となり公式が示された。

D.8 その他の公式

その他の公式

Wannier 中心と電気分極の計算において,

$$i \left\langle u_{\alpha,k'} \left| \frac{\partial}{\partial k} \right| u_{\alpha,k} \right\rangle e^{i(k-k')r} = 2\pi\delta(k-k')i \left\langle u_{\alpha,k} \left| \frac{\partial}{\partial k} \right| u_{\alpha,k} \right\rangle \quad (\text{D.8.1})$$

が成立する.

部分分極 P^s の計算の途中において,

$$\text{Tr} \left[a^{\text{II}}(k) \right] = \text{Tr} \left[a^{\text{I}}(-k) \right] + \sum_{\alpha} \frac{\partial \chi_{\alpha,k}}{\partial k} \quad (\text{D.8.2})$$

が成立する.

$d = 4$ のとき, 非可換 Berry 接続と曲率について,

$$\epsilon^{ijkl} \text{Tr} [f_{ij} f_{kl}] = 4\partial_i \epsilon^{ijkl} \text{Tr} \left[a_j \partial_k a_l + \frac{2}{3} i a_j a_k a_l \right] \quad (\text{D.8.3})$$

が成り立つ.

A_{μ} を $U(1)$ gauge 場, $F_{\mu\nu}$ を電磁場テンソル, $\mathbf{E}, \mathbf{B}$ を電場と磁場とする.

$$\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma} = 4\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \partial_{\mu} A_{\nu} \partial_{\rho} A_{\sigma} = 8\mathbf{E} \cdot \mathbf{B} \quad (\text{D.8.4})$$

が成立する.

証明

第 1 式を示す. セル周期関数 $|u_{\alpha,k}\rangle$ を位置表示で計算する.

$$\begin{aligned} i \left\langle u_{\alpha,k'} \left| \frac{\partial}{\partial k} \right| u_{\alpha,k} \right\rangle e^{i(k-k')r} &= i \int_0^L dx u_{\alpha,k'}^*(x) \frac{\partial}{\partial k} u_{\alpha,k}(x) e^{i(k-k')x} \\ &= \sum_{m=0}^{N_c-1} \int_0^1 dx u_{\alpha,k'}^*(m+x) \frac{\partial}{\partial k} u_{\alpha,k}(x+m) e^{i(k-k')(x+m)} \\ &= \left(\sum_{m=0}^{N_c-1} e^{i(k-k')m} \right) \int_0^1 dx u_{\alpha,k'}^*(x) \frac{\partial}{\partial k} u_{\alpha,k}(m) e^{i(k-k')x} \\ &= 2\pi\delta(k-k')i \left\langle u_{\alpha,k} \left| \frac{\partial}{\partial k} \right| u_{\alpha,k} \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{D.8.5})$$

ここで系の長さが L , 格子定数は $a = 1$, 全サイト数は N_c であることを用いた. またセル周期関数の周期性も用いた.

次に第2式を示す. $|u_{\alpha,-k}^{\text{II}}\rangle = -e^{i\chi_{\alpha,-k}} \mathsf{T} |u_{\alpha,k}^{\text{I}}\rangle$ より,

$$\begin{aligned}
\text{Tr} [a^{\text{II}}(k)] &= -i \sum_{\alpha} \langle u_{\alpha,k}^{\text{II}} | \partial_k | u_{\alpha,k}^{\text{II}} \rangle \\
&= -i \sum_{\alpha} \left(-e^{i\chi_{\alpha,k}} \mathsf{T} |u_{\alpha,-k}^{\text{I}}\rangle \right)^{\dagger} \partial_k \left(-e^{i\chi_{\alpha,k}} \mathsf{T} |u_{\alpha,-k}^{\text{I}}\rangle \right) \\
&= -i \sum_{\alpha} \langle \mathsf{T} u_{\alpha,-k}^{\text{I}} | \partial_k | \mathsf{T} u_{\alpha,-k}^{\text{I}} \rangle + \sum_{\alpha} \frac{\partial \chi_{\alpha,k}}{\partial k} \\
&= i \sum_{\alpha} \langle u_{\alpha,-k}^{\text{I}} | \partial_k | u_{\alpha,-k}^{\text{I}} \rangle + \sum_{\alpha} \frac{\partial \chi_{\alpha,k}}{\partial k} \\
&= \text{Tr} [a^{\text{I}}(-k)] + \sum_{\alpha} \frac{\partial \chi_{\alpha,k}}{\partial k}
\end{aligned} \tag{D.8.6}$$

となる. 途中で $\langle \mathsf{T} \psi_{\mathbf{k}} | \mathsf{T} \phi_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \phi_{\mathbf{k}} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle$ を使った.

第3式を示す. Berry 曲率について $f_{ij} = \partial_i a_j - \partial_j a_i + i[a_i, a_j] = (\partial_i + ia_i)a_j - (\partial_j + ia_j)a_i$ を用いると,

$$\begin{aligned}
\epsilon^{ijkl} \text{Tr} [f_{ij} f_{kl}] &= \epsilon^{ijkl} \text{Tr} [\{(\partial_i + ia_i)a_j - (\partial_j + ia_j)a_i\} \{(\partial_k + ia_k)a_l - (\partial_l + ia_l)a_k\}] \\
&= 4\epsilon^{ijkl} \text{Tr} [(\partial_i + ia_i)a_j (\partial_k + ia_k)a_l] \\
&= 4\epsilon^{ijkl} \text{Tr} [(\partial_i a_j)(\partial_k a_l) + (\partial_i a_j)ia_k a_l + ia_i a_j (\partial_k a_l) + (ia_i a_j)(ia_k a_l)] \\
&= 4\epsilon^{ijkl} \text{Tr} [\partial_i (a_j \partial_k a_l) + 2i(\partial_i a_j)a_k a_l]
\end{aligned} \tag{D.8.7}$$

途中で Tr の巡回性と ϵ^{ijkl} は反対称なので $\epsilon^{ijkl} \times [(i, j, k, l) \text{ について対称}] = 0$ を使った. また適宜添え字を入れ替えている. ここで恒等式

$$\begin{aligned}
\partial_i \epsilon^{ijkl} \text{Tr} [a_j a_k a_l] &= \epsilon^{ijkl} \text{Tr} [(\partial_i a_j)a_k a_l + a_j (\partial_i a_k)a_l + a_j a_k (\partial_i a_l)] \\
&= 3\epsilon^{ijkl} \text{Tr} [(\partial_i a_j)a_k a_l]
\end{aligned} \tag{D.8.8}$$

を用いると, 公式

$$\epsilon^{ijkl} \text{Tr} [f_{ij} f_{kl}] = 4\partial_i \epsilon^{ijkl} \text{Tr} \left[a_j \partial_k a_l + \frac{2}{3} i a_j a_k a_l \right] \tag{D.8.9}$$

が成り立つことが示された.

第4式を示す. まずは $\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma} = 4\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \partial_{\mu} A_{\nu} \partial_{\rho} A_{\sigma}$ について, $F_{\mu\nu} = \partial_{\mu} A_{\nu} - \partial_{\nu} A_{\mu}$ を代入すると,

$$\begin{aligned}
\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma} &= \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} (\partial_{\mu} A_{\nu} - \partial_{\nu} A_{\mu}) (\partial_{\rho} A_{\sigma} - \partial_{\sigma} A_{\rho}) \\
&= \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} (\partial_{\mu} A_{\nu} \partial_{\rho} A_{\sigma} - \partial_{\mu} A_{\nu} \partial_{\sigma} A_{\rho} - \partial_{\nu} A_{\mu} \partial_{\rho} A_{\sigma} + \partial_{\nu} A_{\mu} \partial_{\sigma} A_{\rho}) \\
&= 4\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \partial_{\mu} A_{\nu} \partial_{\rho} A_{\sigma}
\end{aligned} \tag{D.8.10}$$

となる. 途中で添え字を交換し $\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma}$ の反対称性を用いた. 次に $\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma} = 8\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}$ を示す. $F_{\mu\nu}$ は電磁場テンソルでその具体形は

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & E_x & E_y & E_z \\ -E_x & 0 & -B_z & B_y \\ -E_y & B_z & 0 & -B_x \\ -E_z & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix} \tag{D.8.11}$$

で与えられる. さらに電磁場テンソルの双対テンソルとして

$$\tilde{F}^{\mu\nu} = \frac{1}{2}\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma}F_{\rho\sigma} = \begin{pmatrix} 0 & B_x & B_y & B_z \\ -B_x & 0 & -E_z & E_y \\ -B_y & E_z & 0 & -E_x \\ -B_z & -E_y & E_x & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{D.8.12})$$

が存在する. これを用いると,

$$\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma}F_{\mu\nu}F_{\rho\sigma} = 2\tilde{F}^{\mu\nu}F_{\mu\nu} = 8\mathbf{E} \cdot \mathbf{B} \quad (\text{D.8.13})$$

となる. 以上より $\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma}F_{\mu\nu}F_{\rho\sigma} = 4\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma}\partial_\mu A_\nu\partial_\rho A_\sigma = 8\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}$ が示された.

Acknowledgments

本卒業研究を進めるにあたり、多くの方のご指導・ご協力を賜りました。まず、指導教員の多田靖啓准教授には学部3年生の時から研究室のメンバーに加えていただき、勉強・研究・発表姿勢・文章の書き方など様々なことを学ばせていただきました。この場を借りて感謝申し上げます。また、多田研究室の皆様にも日々の雑談から物理の議論までお世話になりました。特に多田研究室の方々には私が4年生の前期に沖縄科学技術大学院大学 (OIST) に Research Internship として4ヵ月滞在した間、特にセミナーなどでご迷惑をおかけしました。さらに、OIST の Research Internship で滞在した Quantum System Units では、将来研究者として必須になる英語が公用語の環境で研究するという貴重な体験をさせていただきました。特に、PI の Thomas Busch 教授、実質的な指導教官であったポスドクの Giedrius Žlabys 博士には感謝申し上げます。最後に、これまで私を育て私がやりたいことについて様々な援助をしてくださった両親に心から感謝を申し上げます。

Bibliography

- [1] X.-G. Wen, *Colloquium: zoo of quantum-topological phases of matter*, *Rev. Mod. Phys.* **89**, 041004 (2017).
- [2] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, *New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance*, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 494 (1980).
- [3] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, *Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential*, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 405 (1982).
- [4] M. Kohmoto, *Topological invariant and the quantization of the hall conductance*, *Annals of Physics* **160**, 343 (1985).
- [5] F. D. M. Haldane, *Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly"*, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2015 (1988).
- [6] S.-C. Zhang and J. Hu, *A four-dimensional generalization of the quantum hall effect*, *Science* **294**, 823 (2001).
- [7] B. A. Bernevig, C.-H. Chern, J.-P. Hu, N. Toumbas, and S.-C. Zhang, *Effective field theory description of the higher dimensional quantum hall liquid*, *Annals of Physics* **300**, 185 (2002).
- [8] S. Murakami, N. Nagaosa, and S.-C. Zhang, *Dissipationless Quantum Spin Current at Room Temperature*, *Science* **301**, 1348 (2003).
- [9] S. Murakami, N. Nagaosa, and S.-C. Zhang, *Spin-Hall Insulator*, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 156804 (2004).
- [10] C. L. Kane and E. J. Mele, *Quantum Spin Hall Effect in Graphene*, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 226801 (2005).
- [11] C. L. Kane and E. J. Mele, *Z_2 Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect*, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146802 (2005).
- [12] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, *Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells*, *Science* **314**, 1133734 (2006).
- [13] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S. Zhang, *Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells*, *Science* **318**, 766 (2007).
- [14] Y. Ando, *Topological insulator materials*, *Journal of the Physical Society of Japan* **82**, 102001 (2013).
- [15] L. Fu and C. L. Kane, *Time reversal polarization and a Z_2 adiabatic spin pump*, *Phys. Rev. B* **74**, 195312 (2006).
- [16] L. Fu, C. L. Kane, and E. J. Mele, *Topological Insulators in Three Dimensions*, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 106803 (2007).

- [17] L. Fu and C. L. Kane, *Topological insulators with inversion symmetry*, *Phys. Rev. B* **76**, 045302 (2007).
- [18] X.-L. Qi, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, *Topological field theory of time-reversal invariant insulators*, *Phys. Rev. B* **78**, 195424 (2008).
- [19] F. Wilczek, *Two applications of axion electrodynamics*, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1799 (1987).
- [20] R. D. Peccei and H. R. Quinn, *CP Conservation in the Presence of Pseudoparticles*, *Phys. Rev. Lett.* **38**, 1440 (1977).
- [21] R. D. Peccei and H. R. Quinn, *Constraints imposed by CP conservation in the presence of pseudoparticles*, *Phys. Rev. D* **16**, 1791 (1977).
- [22] S. Weinberg, *A New Light Boson?*, *Phys. Rev. Lett.* **40**, 223 (1978).
- [23] F. Wilczek, *Problem of Strong P and T Invariance in the Presence of Instantons*, *Phys. Rev. Lett.* **40**, 279 (1978).
- [24] J. Preskill, M. B. Wise, and F. Wilczek, *Cosmology of the invisible axion*, *Physics Letters B* **120**, 127 (1983).
- [25] L. Abbott and P. Sikivie, *A cosmological bound on the invisible axion*, *Physics Letters B* **120**, 133 (1983).
- [26] M. Dine and W. Fischler, *The not-so-harmless axion*, *Physics Letters B* **120**, 137 (1983).
- [27] X. Wan, A. M. Turner, A. Vishwanath, and S. Y. Savrasov, *Topological semimetal and fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates*, *Phys. Rev. B* **83**, 205101 (2011).
- [28] N. P. Armitage, E. J. Mele, and A. Vishwanath, *Weyl and dirac semimetals in three-dimensional solids*, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015001 (2018).
- [29] A. A. Zyuzin and A. A. Burkov, *Topological response in weyl semimetals and the chiral anomaly*, *Phys. Rev. B* **86**, 115133 (2012).
- [30] M. M. Vazifeh and M. Franz, *Electromagnetic response of weyl semimetals*, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 027201 (2013).
- [31] A. Sekine and K. Nomura, *Axion electrodynamics in topological materials*, *Journal of Applied Physics* **129**, 141101 (2021).
- [32] 加藤岳生, 一歩進んだ理解を目指す物性物理学講義, *SGC ライブラリ* **173** (2022).
- [33] 浅野建一, *固体電子の量子論* (東京大学出版会, 2019).
- [34] 永長直人, *物性論における場の量子論* (岩波書店, 1995).
- [35] 齊藤英治 and 村上修一, *スピン流とトポロジカル絶縁体* (共立出版, 2014).
- [36] 越野幹人, *グラフェンの物理学* (内田老鶴圃, 2023).
- [37] 安藤陽一, *トポロジカル絶縁体入門* (講談社サイエンティフィック, 2014).
- [38] 野村健太郎, *トポロジカル絶縁体・超伝導体* (岩波書店, 2016).
- [39] 川村嘉春, *相対論的量子力学* (裳華房, 2012).
- [40] 坂本真人, *場の量子論 – 不変性と自由場を中心にして –* (裳華房, 2014).
- [41] 渡辺悠樹, *量子多体系の対称性とトポロジー*, *SGC ライブラリ* **179** (2022).

- [42] C.-K. Chiu, J. C. Y. Teo, A. P. Schnyder, and S. Ryu, *Classification of topological quantum matter with symmetries*, [Rev. Mod. Phys. **88**, 035005 \(2016\)](#).
- [43] 笠真生 and 古崎昭, *トポロジカル絶縁体と超伝導体の分類学*, *固体物理* **45**, 731 (2010).
- [44] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, *Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions*, [Phys. Rev. B **78**, 195125 \(2008\)](#).
- [45] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, *Classification of topological insulators and superconductors*, [AIP Conference Proceedings **1134**, 10 \(2009\)](#).
- [46] A. Kitaev, *Periodic table for topological insulators and superconductors*, [AIP Conference Proceedings **1134**, 22 \(2009\)](#).
- [47] S. Ryu, A. P. Schnyder, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, *Topological insulators and superconductors: tenfold way and dimensional hierarchy*, [New Journal of Physics **12**, 065010 \(2010\)](#).
- [48] S. Ryu, J. E. Moore, and A. W. W. Ludwig, *Electromagnetic and gravitational responses and anomalies in topological insulators and superconductors*, [Phys. Rev. B **85**, 045104 \(2012\)](#).
- [49] M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Colloquium: Topological insulators*, [Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 \(2010\)](#).
- [50] X.-L. Qi and S.-C. Zhang, *Topological insulators and superconductors*, [Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 \(2011\)](#).
- [51] Q. Niu, D. J. Thouless, and Y.-S. Wu, *Quantized hall conductance as a topological invariant*, [Phys. Rev. B **31**, 3372 \(1985\)](#).
- [52] D. Hsieh, D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, *A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase*, [Nature **452**, 970 \(2008\)](#).
- [53] H. Zhang, C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S.-C. Zhang, *Topological insulators in Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 with a single Dirac cone on the surface*, [Nature Physics **5**, 438 \(2009\)](#).
- [54] C.-X. Liu, X.-L. Qi, H. Zhang, X. Dai, Z. Fang, and S.-C. Zhang, *Model Hamiltonian for topological insulators*, [Phys. Rev. B **82**, 045122 \(2010\)](#).
- [55] Y. Xia, D. Qian, D. Hsieh, L. Wray, A. Pal, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, *Observation of a large-gap topological-insulator class with a single Dirac cone on the surface*, [Nature Physics **5**, 398 \(2009\)](#).
- [56] Y. L. Chen, J. G. Analytis, J.-H. Chu, Z. K. Liu, S.-K. Mo, X. L. Qi, H. J. Zhang, D. H. Lu, X. Dai, Z. Fang, S. C. Zhang, I. R. Fisher, Z. Hussain, and Z.-X. Shen, *Experimental Realization of a Three-Dimensional Topological Insulator, Bi_2Te_3* , [Science **325**, 178 \(2009\)](#).
- [57] D. Hsieh, Y. Xia, D. Qian, L. Wray, F. Meier, J. H. Dil, J. Osterwalder, L. Patthey, A. V. Fedorov, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, *Observation of Time-Reversal-Protected Single-Dirac-Cone Topological-Insulator States in Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3* , [Phys. Rev. Lett. **103**, 146401 \(2009\)](#).
- [58] Y. Jiang, Y. Wang, M. Chen, Z. Li, C. Song, K. He, L. Wang, X. Chen, X. Ma, and Q.-K. Xue, *Landau Quantization and the Thickness Limit of Topological Insulator Thin Films of Sb_2Te_3* , [Phys. Rev. Lett. **108**, 016401 \(2012\)](#).
- [59] A. Sekine and K. Nomura, *Axionic Antiferromagnetic Insulator Phase in a Correlated and Spin – Orbit Coupled System*, [Journal of the Physical Society of Japan **83**, 104709 \(2014\)](#).

- [60] 塩崎謙, 結晶対称性とトポロジカル絶縁体, *物性若手夏の学校テキスト* **2**, 25 (2024).
- [61] N. Marzari and D. Vanderbilt, *Maximally localized generalized Wannier functions for composite energy bands*, *Phys. Rev. B* **56**, 12847 (1997).
- [62] D. Vanderbilt, *Berry Phases in Electronic Structure Theory: Electric Polarization, Orbital Magnetization and Topological Insulators* (Cambridge University Press, Cambridge, 2018).
- [63] N. Marzari, A. A. Mostofi, J. R. Yates, I. Souza, and D. Vanderbilt, *Maximally localized Wannier functions: Theory and applications*, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1419 (2012).
- [64] D. J. Thouless, *Quantization of particle transport*, *Phys. Rev. B* **27**, 6083 (1983).
- [65] Q. Niu and D. J. Thouless, *Quantised adiabatic charge transport in the presence of substrate disorder and many-body interaction*, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **17**, 2453 (1984).
- [66] J. E. Moore and L. Balents, *Topological invariants of time-reversal-invariant band structures*, *Phys. Rev. B* **75**, 121306 (2007).
- [67] R. Roy, *Topological phases and the quantum spin hall effect in three dimensions*, *Phys. Rev. B* **79**, 195322 (2009).
- [68] H. Nielsen and M. Ninomiya, *Absence of neutrinos on a lattice: (I). Proof by homotopy theory*, *Nuclear Physics B* **185**, 20 (1981).
- [69] H. Nielsen and M. Ninomiya, *Absence of neutrinos on a lattice: (II). Intuitive topological proof*, *Nuclear Physics B* **193**, 173 (1981).
- [70] E. Witten, *Three lectures on topological phases of matter*, *Riv. Nuovo Cim.* **39**, 313 (2016).
- [71] S.-C. Zhang, *The Chern-Simons-Landau-Ginzburg theory of the fractional quantum Hall effect*, *Int. J. Mod. Phys. B* **6**, 25 (1992).
- [72] D. Tong, *Lectures on the Quantum Hall Effect*, *David Tong: Lectures on Theoretical Physics* (2016).
- [73] Z. Wang, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, *Equivalent topological invariants of topological insulators*, *New Journal of Physics* **12**, 065007 (2010).
- [74] X.-L. Qi, R. Li, J. Zang, and S.-C. Zhang, *Inducing a Magnetic Monopole with Topological Surface States*, *Science* **323**, 1184 (2009).
- [75] D. Tong, *Lectures on Gauge Theory*, *David Tong: Lectures on Theoretical Physics* (2018).
- [76] E. Witten, *Dyons of charge $e\theta/2\pi$* , *Physics Letters B* **86**, 283 (1979).
- [77] D. M. Nenner, C. A. C. Garcia, J. Gooth, C. Felser, and P. Narang, *Axion physics in condensed-matter systems*, *Nature Reviews Physics* **2**, 682 (2020).
- [78] 関根聡彦, 物質中のアクシオン電磁気学—アクシオン絶縁体からワイル半金属まで—, *固体物理* **670** (2021).
- [79] K. Fujikawa, *Path-integral measure for gauge-invariant fermion theories*, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 1195 (1979).
- [80] K. Fujikawa, *Path integral for gauge theories with fermions*, *Phys. Rev. D* **21**, 2848 (1980).
- [81] P. Hosur, S. Ryu, and A. Vishwanath, *Chiral topological insulators, superconductors, and other competing orders in three dimensions*, *Phys. Rev. B* **81**, 045120 (2010).

- [82] S. L. Adler, *Axial-Vector Vertex in Spinor Electrodynamics*, *Phys. Rev.* **177**, 2426 (1969).
- [83] J. S. Bell and R. Jackiw, *A PCAC puzzle: $\pi^0 \rightarrow \gamma\gamma$ in the σ model*, *Nuovo Cim. A* **60**, 47 (1969).
- [84] A. Sekine and K. Nomura, *Chiral Magnetic Effect and Anomalous Hall Effect in Antiferromagnetic Insulators with Spin-Orbit Coupling*, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 096401 (2016).
- [85] N. Nagaosa, J. Sinova, S. Onoda, A. H. MacDonald, and N. P. Ong, *Anomalous Hall effect*, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1539 (2010).
- [86] K. Fukushima, D. E. Kharzeev, and H. J. Warringa, *Chiral magnetic effect*, *Phys. Rev. D* **78**, 074033 (2008).
- [87] Q. Li, D. E. Kharzeev, C. Zhang, Y. Huang, I. Pletikosić, A. V. Fedorov, R. D. Zhong, J. A. Schneeloch, G. D. Gu, and T. Valla, *Chiral magnetic effect in ZrTe_5* , *Nature Physics* **12**, 550 (2016).
- [88] 村上修一, トポロジカル半金属〜ディラック半金属, ワイル半金属など〜, *数里科学* **731** (2024).
- [89] 岸根順一郎, 電磁気学と物質〜物質中の電磁気学の考え方〜, *数里科学* **712** (2022).
- [90] R. Arouca, A. Cappelli, and T. H. Hansson, *Quantum Field Theory Anomalies in Condensed Matter Physics*, *SciPost Phys. Lect. Notes*, 62 (2022).
- [91] A. Parhizkar, C. Rylands, and V. Galitski, *Path integral approach to quantum anomalies in interacting models*, *Phys. Rev. B* **109**, 155109 (2024).
- [92] 深谷英則, 大野木哲也, and 山口哲, *Atiyah – Patodi – Singer の指数定理——素粒子・物性・数学の交叉点*, *日本物理学会誌* **75**, 210 (2020).
- [93] B. Q. Lv, T. Qian, and H. Ding, *Experimental perspective on three-dimensional topological semimetals*, *Rev. Mod. Phys.* **93**, 025002 (2021).
- [94] H. Weyl, *Gravitation and the electron*, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **15**, 323 (1929).
- [95] T. Kajita, *Nobel lecture: discovery of atmospheric neutrino oscillations*, *Rev. Mod. Phys.* **88**, 030501 (2016).
- [96] A. B. McDonald, *Nobel lecture: the sudbury neutrino observatory: observation of flavor change for solar neutrinos*, *Rev. Mod. Phys.* **88**, 030502 (2016).
- [97] S. Murakami, *Phase transition between the quantum spin hall and insulator phases in 3d: emergence of a topological gapless phase*, *New Journal of Physics* **9**, 356 (2007).
- [98] S. Murakami and S.-i. Kuga, *Universal phase diagrams for the quantum spin hall systems*, *Phys. Rev. B* **78**, 165313 (2008).
- [99] B. Q. Lv, H. M. Weng, B. B. Fu, X. P. Wang, H. Miao, J. Ma, P. Richard, X. C. Huang, L. X. Zhao, G. F. Chen, Z. Fang, X. Dai, T. Qian, and H. Ding, *Experimental Discovery of Weyl Semimetal TaAs*, *Phys. Rev. X* **5**, 031013 (2015).
- [100] B. Q. Lv, N. Xu, H. M. Weng, J. Z. Ma, P. Richard, X. C. Huang, L. X. Zhao, G. F. Chen, C. E. Matt, F. Bisti, V. N. Strocov, J. Mesot, Z. Fang, X. Dai, T. Qian, M. Shi, and H. Ding, *Observation of Weyl nodes in TaAs*, *Nature Physics* **11**, 724 (2015).
- [101] S.-Y. Xu, I. Belopolski, N. Alidoust, M. Neupane, G. Bian, C. Zhang, R. Sankar, G. Chang, Z. Yuan, C.-C. Lee, S.-M. Huang, H. Zheng, J. Ma, D. S. Sanchez, B. Wang, A. Bansil, F. Chou,

- P. P. Shibayev, H. Lin, S. Jia, and M. Z. Hasan, *Discovery of a Weyl fermion semimetal and topological Fermi arcs*, *Science* **349**, 613 (2015).
- [102] L. X. Yang, Z. K. Liu, Y. Sun, H. Peng, H. F. Yang, T. Zhang, B. Zhou, Y. Zhang, Y. F. Guo, M. Rahn, D. Prabhakaran, Z. Hussain, S.-K. Mo, C. Felser, B. Yan, and Y. L. Chen, *Weyl semimetal phase in the non-centrosymmetric compound TaAs*, *Nature Physics* **11**, 728 (2015).
- [103] A. A. Burkov, M. D. Hook, and L. Balents, *Topological nodal semimetals*, *Phys. Rev. B* **84**, 235126 (2011).
- [104] S. Murakami, M. Hirayama, R. Okugawa, and T. Miyake, *Emergence of topological semimetals in gap closing in semiconductors without inversion symmetry*, *Science Advances* **3**, e1602680 (2017).