

Chem 的 数字化



$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} C \quad \text{量子ホール効果}$$

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\mathbb{T}^2} d\vec{s}_k \cdot \vec{\nabla} A$$

$$\vec{s} \parallel \hat{z}$$

Chern 数 σ_{xy} の量子化 $\rightarrow \pi/2$

$$C = \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathbb{T}^2} d^2k (\nabla \times \vec{A})_z$$

TKNN '82

Kohmoto '85

$$\mathbb{T}^2 = \{ (k_x, k_y) \mid k_x: 0 \rightarrow 2\pi, k_y: 0 \rightarrow 2\pi \}$$

2次元トーラス

$|\psi(\vec{k})\rangle$: \mathbb{T}^2 上の関数

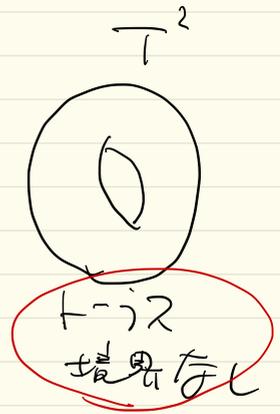
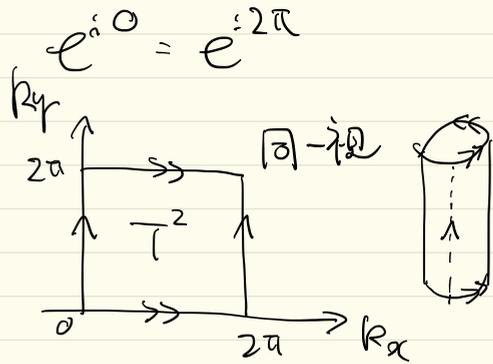
並進対称性

$$[H, T_{x,y}] = 0$$

同時
対称性

$$\begin{cases} H |\psi\rangle = E |\psi\rangle \\ T_x |\psi(\vec{k})\rangle = e^{ik_x} |\psi(\vec{k})\rangle \\ T_y |\psi(\vec{k})\rangle = e^{ik_y} |\psi(\vec{k})\rangle \end{cases}$$

x 方向の並進
" "



\vec{A} ? \mathbb{T}^2 上の接続
Berry connection

$$\vec{A} = \langle \psi | \vec{\nabla}_R \psi \rangle$$

$$\vec{k} \text{ の成分 } \vec{\nabla}_R = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial k_x} \\ \frac{\partial}{\partial k_y} \\ \frac{\partial}{\partial k_z} \end{pmatrix}$$

$$H(\vec{k}) |\psi(\vec{k})\rangle = E |\psi(\vec{k})\rangle \quad *$$

Schrodinger の方程式
 + S 状態

↑
 - 1次元 k_z 軸

本質は?

“ () ” ! (Berry) 3次元に

* $k_z e^{i\theta}$ だけ $\theta = \theta(k)$ と $k_{1,2}$ だけ

$$H(k) |\psi(k)\rangle e^{i\theta} = E |\psi(k)\rangle e^{i\theta}$$

$\underbrace{|\psi(k)\rangle}_{|\psi'\rangle}$

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi' | \psi' \rangle = 1$$

$|\psi\rangle$ と $|\psi'\rangle$ は同等, 位相は選べる!
 c.f. 期待値計算

位相は選べる!

あつたつたあつた!

微分可能な関数 $\frac{|\psi(k+\Delta k)\rangle - |\psi(k)\rangle}{\Delta k}$ 位相は任意だが $\Delta k \rightarrow 0$ なら 導関数!

2"はなぜですか?

位相を一意に定める : gauge 固定

2"の値に一意に定めるには必要だとする

$$|\psi\rangle = |\psi\rangle e^{i\theta}$$

$$\vec{A}' = \langle \psi' | \vec{\nabla} \psi' \rangle = e^{-i\theta} \langle \psi | \vec{\nabla} \psi \rangle e^{i\theta} + e^{-i\theta} \langle \psi | \psi \rangle \nabla \theta e^{i\theta}$$

$$= \vec{A} + \nabla \theta \quad : \text{電磁気学のゲージ変換}$$

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} \quad \text{と} \quad \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \theta = 0 \quad \text{より} \quad \text{と} \quad \text{同じ!}$$

$$\vec{B}' = \nabla \times \vec{A}' = \vec{B} \quad : \text{gauge 不変 (磁場)}$$

$$C = \frac{1}{2\pi i} \int_{T^2} d\vec{s} \cdot \underbrace{\nabla \times \vec{A}}_{\nabla \times \vec{A}' \text{ と同じ}}$$

C はゲージ不変

(一意な位相で計算 (2次元))

2次元計算時には位相が

$A \in$

円周上に存在する
が X !!

これはどうなるか?

gauge 固定 (位相を測る!) Kohmoto '85

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} * \\ * \\ * \\ \vdots \\ * \end{pmatrix} \quad N \text{ 成分!}$$

第1成分を基底に正の定数倍!
(55c の固有状態の γ のように?)

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 2.0 + 3.5i \\ * \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \text{では } |\psi'\rangle = |\psi\rangle / (2.0 + 3.5i)$$

とすると規格化
される!!!

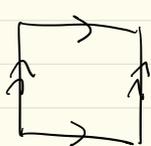
$$A = (4 \ 1 \ 0 \ 4) \quad \text{と } B = \nabla \times A \quad \text{を計算する}$$

$$\rightarrow C = \frac{1}{2\pi i} \int_T d\vec{s} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad ! \quad \text{ストークスの定理を}$$

使えば
簡単に計算できる!

$$= \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial T^2} d\vec{l} \cdot \vec{A} = 0 \quad !?$$

∂T^2



\approx



結果が0!

$\sigma_{xy} \neq 0$

$\frac{P}{F} \geq \sigma_c - \alpha \geq \sigma_{\text{allow}}$

Klitzing

! ?

$\sigma_c = \sigma_c + \alpha \geq \sigma_{\text{allow}}$?

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} * \\ * \\ * \\ \vdots \\ * \end{pmatrix} \quad \text{第1成分を実数に正に定ればよい!}$$

(*) が0だったら $\psi \rightarrow \psi'$ はできる!

$$|\psi'\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ * \\ * \\ \vdots \\ * \end{pmatrix} \leftarrow \text{正の実数に規格化して可}$$

つまり $|\psi\rangle \propto |\psi'\rangle$

$$|\psi'\rangle = |\psi\rangle e^{i\theta} \quad \text{と 対応}$$

$$A' = A + \hbar \nabla \theta$$

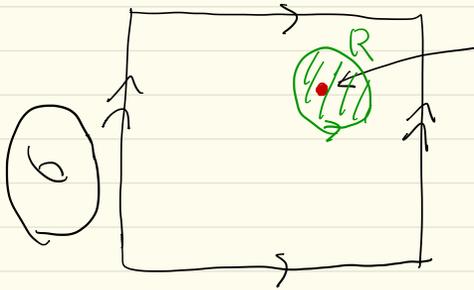
$$A' = \langle \psi' | \nabla \psi \rangle$$

$$B' = \nabla \times A'$$

$$A = \langle \psi | \nabla \psi \rangle$$

$$B = \nabla \times A$$

$T^2 \rightarrow \text{"torus"} = \mathbb{R}^2 / \mathbb{Z}^2$



$\begin{pmatrix} 0 \\ \times \\ \times \\ \vdots \end{pmatrix}$ と存在点. a 因子 $\in \mathbb{R}$ と $\mathbb{Z}^2 \subset \mathbb{R}^2$

$$T^2 = R + \underbrace{(T^2 \setminus R)}_{\approx \mathbb{Z}^2 \setminus \times}$$

$R: \begin{pmatrix} * \\ * \\ * \\ \vdots \end{pmatrix}$ と 2 番目に正の整数に ∂R gauge A'

$T^2 \setminus R \begin{pmatrix} * \\ * \\ * \\ \vdots \end{pmatrix}$ と 1 番目に正の整数に ∂R gauge A

$$C = \frac{1}{2\pi i} \int_{T^2} d\vec{S} \cdot \nabla \times A$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \int_R d\vec{S} \cdot \nabla \times A + \frac{1}{2\pi i} \int_{T^2 \setminus R} d\vec{S} \cdot \nabla \times A$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial R} d\vec{l} \cdot \vec{A}' + \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial(T^2 \setminus R)} d\vec{l} \cdot \vec{A}$$

∂R : 境界近く \mathbb{Z}^2 は 1 番目, 2 番目に \mathbb{Z}^2 の 0 に存在

かつ \mathbb{Z}^2 別々に $\mathbb{Z}^2 \rightarrow \mathbb{Z}^2$ の定理

$$= \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial R} d\vec{l} \cdot \vec{A}' - \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial R} d\vec{l} \cdot \vec{A}$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial R} d\vec{l} \cdot (A' - A)$$

$$\left. \vphantom{\int} \right\} A' = A + i \nabla \theta$$

$e^{i\theta}$ が一個

$$= \frac{i}{2\pi i} \int d\vec{l} \cdot \nabla \theta = \frac{1}{2\pi} \theta \Big|_{\substack{\text{終点} \\ \text{始点}}} = \frac{1}{2\pi} 2\pi n \quad \text{整数}$$

$$= n$$

つまり $C = n$: 整数

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} n$$

整数の量子化の結果

→ TKNN の本質

C. f. Berry Phases

$$\gamma = \int_{\partial R} d\vec{l} \cdot \vec{A}, \quad \gamma' = \int_{\partial R} d\vec{l} \cdot \vec{A}', \quad \gamma' = \gamma \pmod{2\pi}$$

gauge fixing $H = \text{「固定の一般論」}$ Hattugeri 105 P†

$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, $|\psi\rangle :$ $|\psi'\rangle = |\psi\rangle e^{i\theta}$ P

$P \equiv |\psi\rangle\langle\psi|$ 射影 projection , $P^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\overset{d}{|\psi\rangle\langle\psi|} = |\psi\rangle\langle\psi|$
 $= |\psi'\rangle\langle\psi'|$ 位相は消滅 : gauge 不変 well-defined

$H \begin{matrix} | \\ | \\ | \\ | \end{matrix} = E \begin{matrix} | \\ | \\ | \\ | \end{matrix}$ $\leftarrow |\psi\rangle$ 固有 λ の H

$P = \begin{matrix} | \\ | \\ | \\ | \end{matrix} \begin{matrix} | & | & | & | \end{matrix} = \begin{matrix} \boxed{\text{行列}} \end{matrix}$

$HP = H|\psi\rangle\langle\psi|$
 $= E|\psi\rangle\langle\psi|$
 $= EP$ *

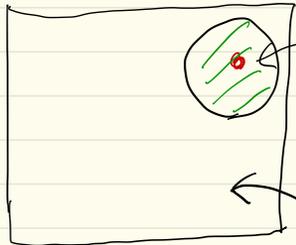
$|\phi_T\rangle$: 任意の基底状態

$|\bar{\psi}\rangle \equiv P|\phi_T\rangle$ とおくと $H|\bar{\psi}\rangle = E|\bar{\psi}\rangle$: 位相は定まる!!

O.K.? No! 規格化されず!!

$N_T = \langle\bar{\psi}|\bar{\psi}\rangle = \langle\phi_T|P^2|\phi_T\rangle = \langle\phi_T|\psi\rangle\langle\psi|\phi_T\rangle = |\langle\psi|\phi_T\rangle|^2$

$|\psi_T\rangle = |\bar{\psi}\rangle / \sqrt{N_T}$ とおけば O.K.? $N_T \neq 0$ 否! $N_T = 0 \Rightarrow$ 別の基底状態!



$N_T = 0 \quad |\psi_{T'}\rangle = P|\phi_{T'}\rangle / \sqrt{N_{T'}} \quad N_{T'} \neq 0$
 $\sum \langle \phi_T | \phi_{T'} \rangle^2$ "gauge 固定"

$N_T \neq 0 \quad |\psi_T\rangle = P|\phi_T\rangle / \sqrt{N_T} \quad \sum \langle \phi_T | \phi_T \rangle$

例 $|\phi_T\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \Rightarrow |\psi\rangle = \begin{bmatrix} a \\ * \\ \vdots \end{bmatrix}$
"RR" $N_T \neq 0, N_{T'} \neq 0$

$\rightarrow \langle \phi_T | \psi \rangle = a \cdot N_T = |a|^2$

例 "の例！

Kohmoto 85