3　ホール伝導度とそのトポロジカルな意義

量子ホール効果は占有率 ν が特定の有理数 $\nu = p/q$ (q 奇数) のときのホール伝導度が $\sigma_{xy} = \nu\frac{e^2}{h}$ となり、ν を変えて実験したとき小さい q のところに平らな部分 (プラトー) が現れるというものであり、$\sigma_{xy} = \nu\frac{e^2}{h}$ という表式自体は乱れのない連続系の場合容易にしめせるものでそれほどおどろくべきものではない。驚くべきは ν を上記のマジックナンバーの近傍で変化させても σ_{xy} は変化せずプラトーをつくるという点にあり、乱れの効果の議論も本質的に重要である。ただここではそれには触れず、$\sigma_{xy} = \nu\frac{e^2}{h}$ が $\nu =$ 整数の場合、ある種の位相幾何学的量として書き直せることを紹介したい。

なぜ物理量を不変量で書こうとするのか、その気持ちだけをここで述べよう。ある物理量が本質的に離散的な量 (たとえば何かの個数) で書けたとするとすると乱れの強さ、相互作用等を連続に変化させても離散量の方は連続に変化することはできない。唯一許される連続変化は変化しないこと、というわけである。[14]

なおここでは ν が整数の場合に限って議論し ν が分数の場合は後でこの場合に帰着させることを試みる [24]。

3.1　無限系 (バルク) におけるホール伝導度のトポロジカルな意味— 渦度、チャーン数 —

無限系の場合にホール伝導度を久保公式から書き直すことは有名な TKNN の論文でおこなわれた。[16] [15] その結果をまず述べよう。

フェルミエネルギーが下から j 番目のエネルギギャップにある時のホール伝導度 $\sigma_{xy}^{\rm bulk}$ はフェルミエネルギー以下のエネルギーバンドのホール伝導度 σ_{xy}^{ℓ} の和として次のようになる。

TKNN formula

$$
\begin{aligned}
\sigma_{xy}^{\rm bulk} &= \sum_{\ell=1}^{j} \sigma_{xy}^{\ell} \\
\sigma_{xy}^{\ell} &= -\frac{e^2}{h}\frac{1}{2\pi i}\int\int_{T^2_{MBZ}} dk_x dk_y\ \hat{z}\cdot\vec{\mathcal{B}}^{\ell} \\
\vec{\mathcal{B}}^{\ell} &= {\rm rot}\,\vec{\mathcal{A}}^{\ell} \\
\vec{\mathcal{A}}^{\ell} &= \langle\psi^{\ell}|\vec{\nabla}_k\psi^{\ell}\rangle \\
&= \sum_j \psi_j^{\ell}(\vec{k})\vec{\nabla}\psi_j^{\ell}(\vec{k})
\end{aligned}
$$

ここで $\psi^{\ell}(\vec{k})\rangle$ は下から ℓ 番目のバンドの規格化されたブロッホ関数である。

この表式の意味は次節以降で説明するが、チャーン数と呼ばれる位相幾何学的な意味を持つ特徴的な整数であることを注意しておく。[16, 17, **?**, 23, 18, 19]

[14]当然どのくらい変化させても変化しないかという見積もりが重要であり、そこの見積もりをきちんとするのがむずかしい。これを定量的にしようとすれば、例えばエネルギーギャップのある場合に断熱近似を用いることが考えられる。

[15]D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, Phys. Rev. Lett **49** 405 (1982).

3.1.1 断熱近似による TKNN 公式の導出

ホール伝導度を議論するために磁場に加えてさらに x 方向に電場 E_x をかけ y 方向の電流を計算してみよう。まず Maxwell の方程式よりスカラーポテンシャルがない場合 $E_x=-\dfrac{1}{c}\dfrac{\partial A_x}{\partial t}$ であることより、電場の効果を時間に依存するハミルトニアンとして取り込むことを考える。さらに (便宜上) パラメーター Φ を含む形にハミルトニアンを拡張しておく。これはいわゆるアハロノフ・ボーム磁束に対応する。このときのハミルトニアンは次の形をとる。(波数の和は磁気ブリルアンゾーン $0\le k_x\le 2\pi/q,\, 0\le k_y\le 2\pi$ の上でとる。以下これを常に仮定する。$\int_{T_{MBZ}}\frac{d^2k}{(2\pi)^2}$)

$$
\begin{aligned}
H(t,\Phi) &= T_x\, e^{-i2\pi\frac{acE_x}{\Phi_0}t}\ +\ T_y\, e^{i2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\frac{1}{L_y}}\ + h.c. \\
&= \int_{T_{MBZ}}\frac{d^2k}{(2\pi)^2}\,\tilde{H}(t,\Phi,\vec{k}) \\
&= \int_{T_{MBZ}}\frac{d^2k}{(2\pi)^2}\,\boldsymbol{c}^\dagger(\vec{k})\ \boldsymbol{H}(t,\Phi,\vec{k})\boldsymbol{c}(\vec{k}) \\
\boldsymbol{H}(t,\Phi,\vec{k}) &= \boldsymbol{H}_0(k_x+2\pi\frac{acE_x}{\Phi_0}t, k_y-2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\frac{1}{L_y})
\end{aligned}
$$

ここで y 方向の全電流演算子 I_y を次のように書こう。(Byers-Yang の公式とよばれる。)

$$
I_y = \frac{e}{\hbar}i(T_y-T_y^\dagger)=c\frac{\partial H}{\partial\Phi}\bigg|_{\Phi=0}=c\partial_\Phi H(t,\Phi)\bigg|_{\Phi=0}
$$

以下断熱近似の範囲で時間に依存する摂動論により y 方向の電流（電流演算子の期待値）を電場の効果を最低次まで計算する。

まず次の事実から確認しよう。一般に時間に依存するハミルトニアン $H(t)$ の基底状態 $|G(t)\rangle$ はスナップショットハミルトニアンの規格直交化された固有状態 $|\alpha(t)\rangle$

$$
H(t)|\alpha(t)\rangle = E_\alpha|\alpha(t)\rangle,\quad E_g\le E_\alpha
$$

を用いて

$$
|\langle a_\alpha|\dot{g}\rangle| << |E_g-E_\alpha|,\quad \alpha\ne g
$$

の範囲で

$$
\begin{aligned}
|G(t)\rangle &= e^{i\gamma}e^{\frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\,E_g}\left(|g\rangle+i\hbar\sum_{\alpha\ne g}|\alpha\rangle\frac{\langle\alpha|\partial_t g\rangle}{E_\alpha-E_g}\right) \\
i\gamma &= -\int_0^t dt'\langle g|\dot{g}\rangle
\end{aligned}
$$

となる。[16]

[16] まず

$$
\begin{aligned}
|G(t)\rangle &= e^{-i\frac{1}{\hbar}\int_0^t dt'\,E_g(t')}\sum_\alpha a_\alpha(t)|\alpha(t)\rangle \\
a_\alpha(0) &= \begin{cases}1 & \alpha=g\\ 0 & \alpha\ne g\end{cases}
\end{aligned}
$$

まず 1 粒子ハミルトニアンを対角化するユニタリ行列 $\boldsymbol{\psi}$ を求めておく。

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\psi}^\dagger(\vec{k})\boldsymbol{H}(\vec{k})\boldsymbol{\psi}(\vec{k}) &= \mathrm{diag}\,(E^1(\vec{k}),\cdots,E^1(\vec{k}))\\ \boldsymbol{H}(\vec{k})\boldsymbol{\psi}^\ell(\vec{k}) &= E^\ell(\vec{k})\boldsymbol{\psi}^\ell(\vec{k})\\ \boldsymbol{\psi}(\vec{k}) &= (\boldsymbol{\psi}^1(\vec{k}),\cdots,\boldsymbol{\psi}^q(\vec{k}))\end{aligned}$$

これよりスナップショットの固有状態は一体の状態として（シングルスレーター行列式）次のようにとれる。[17]

と展開する。よって

$$|\dot{G}\rangle = \frac{E_g}{i\hbar}|G\rangle + e^{-i\frac{1}{\hbar}\int_0^t dt'\,E_g(t')}\sum_\alpha\left(\dot{a}_\alpha|\alpha\rangle + a_\alpha|\dot{\alpha}\rangle\right) = \frac{1}{i\hbar}H|G\rangle = e^{-i\frac{1}{\hbar}\int_0^t dt'\,E_g(t')}\sum_\alpha\frac{E_\alpha}{i\hbar}a_\alpha|\alpha\rangle$$

$\langle g|$ との内積をとって

$$\frac{E_g}{i\hbar}a_g + \dot{a}_g + \sum_\alpha a_\alpha\langle g|\dot{\alpha}\rangle = \frac{E_g}{i\hbar}|g\rangle$$

$|a_\alpha| << |a_g|,\ \alpha\neq g$ の成立する時間を考えると $\dot{a}_g + a_g\langle g|\dot{g}\rangle \approx 0$ よって

$$a_g = e^{-\int_0^t dt'\,\langle g|\dot{g}\rangle} = e^{i\gamma}$$

$\langle\alpha|,\ \alpha\neq g$ との内積をとると

$$\frac{E_g}{i\hbar}a_\alpha + \dot{a}_\alpha + \sum_{\alpha'} a_{\alpha'}\langle\alpha|\dot{\alpha'}\rangle = \frac{E_\alpha}{i\hbar}a_\alpha$$

よって上と同じ時間においては

$$a_\alpha \approx i\hbar\frac{a_g\langle\alpha|\dot{g}\rangle}{E_g - E_\alpha} = i\hbar e^{i\gamma}\frac{\langle\alpha|\dot{g}\rangle}{E_g - E_\alpha}$$

これより求める表式が得られる。またこの近似の成立条件はこれより、

$$|\langle\alpha|\dot{g}\rangle| << |E_g - E_\alpha|$$

となる。

[17]

$$\tilde{\boldsymbol{c}}^\dagger = \boldsymbol{c}^\dagger\boldsymbol{\psi} = \boldsymbol{c}^\dagger(\boldsymbol{\psi}^1,\cdots,\boldsymbol{\psi}^q)$$

として

$$\boldsymbol{c}^\dagger\boldsymbol{H}\boldsymbol{c} = \sum_\ell E^\ell\tilde{c}^{\ell\dagger}\tilde{c}^\ell$$

これら $\boldsymbol{\psi}^1,\cdots,\boldsymbol{\psi}^q$ から粒子数分だけ状態をピックアップしたものが固有状態となる。なお波数を固定した場合の一粒子状態は

$$|\alpha\rangle = \prod_\ell(\sum_j c_j^\dagger\alpha_j^\ell(\vec{k}))|0\rangle$$

と書け、この状態に列数がこの波数での占有数 M、行数が q である行列 α を

$$\boldsymbol{\alpha} = (\boldsymbol{\alpha}^1,\cdots,\boldsymbol{\alpha}^M)$$

と対応させると ($\boldsymbol{\alpha}^\ell$ は q 次のベクトル)、状態空間としての内積は $M\times M$ 次の行列式で与えられることに注意しよう。

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \det{}_M\,\boldsymbol{\beta}^\dagger\boldsymbol{\alpha}$$

$$
\begin{aligned}
H(t,\Phi)|\alpha(t,\Phi)\rangle &= E_\alpha(t,\Phi)|\alpha(t,\Phi)\rangle \\
|\alpha(t,\Phi)\rangle &= \prod_{\vec{k},\ell}\sum_j c_j^\dagger \psi_j^\ell(\vec{k},t,\Phi)|0\rangle \\
c_j^\dagger &= c_j^\dagger(k_x,k_y) \\
\boldsymbol{H}(t,\Phi,\vec{k})\boldsymbol{\psi}^\ell(t,\Phi,\vec{k}) &= \boldsymbol{H}_0(k_x+2\pi\frac{acE_x}{\Phi_0}t, k_y-2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\frac{1}{L_y})\boldsymbol{\psi}^\ell(t,\Phi,\vec{k}) \\
&= E_0^\ell(t,\Phi,\vec{k})\boldsymbol{\psi}^\ell(t,\Phi,\vec{k})
\end{aligned}
$$

を満たすことに注意する。例えば基底状態は波数 $\vec{k}$ 及びバンドインデックス ℓ を $E^\ell(\vec{k})\le E_F$ を満たすように選ぶ。また特に最後の式より

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\psi}^\ell(t,\Phi,\vec{k}) &= \boldsymbol{\psi}_0^\ell(k_x+2\pi\frac{acE_x}{\Phi_0}t, k_y-2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\frac{1}{L_y}) \\
E^\ell(t,\Phi,\vec{k}) &= E_0^\ell(k_x+2\pi\frac{acE_x}{\Phi_0}t, k_y-2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\frac{1}{L_y})
\end{aligned}
$$

と書ける。ここで

$$
\boldsymbol{H}_0(\vec{k})\boldsymbol{\psi}_0^\ell(\vec{k}) = E_0^\ell(\vec{k})\boldsymbol{\psi}_0^\ell(\vec{k})
$$

は外場の無い場合のブロッホ関数が満たす式である。

よって

$$
\begin{aligned}
|\partial_t\alpha\rangle &= \sum_{\vec{k}_d,\ell_d}\prod_{\vec{k},\ell}{}' \left(\sum_j c_j^\dagger\psi_j^1(\vec{k},t,\Phi)\right)\cdots\left(\sum_j c_j^\dagger\partial_t\psi_j^{\ell_d}(\vec{k}_d,t,\Phi)\right)\cdots|0\rangle \\
&= 2\pi\frac{acE_x}{\Phi_0}\sum_{\vec{k}_d\ell_d}\prod_{\vec{k},\ell}{}' \left(\sum_j c_j^\dagger\psi_j^1(\vec{k},t,\Phi)\right)\cdots\left(\sum_j c_j^\dagger\partial_{k_x}\psi_j^{\ell_d}(\vec{k}_d,t,\Phi)\right)\cdots|0\rangle \\
&\equiv 2\pi\frac{acE_x}{\Phi_0}|\partial_{k_x}\alpha\rangle
\end{aligned}
$$

ここで積の $'$ は $\vec{k}_d,\ell_d$ にだけ微分がかかりその他は $|\alpha\rangle$ と同じものが現れることを意味する。最後の式は前式の略記である。(微分は係数にのみ作用すると思える) これと全く平行に

$$
\begin{aligned}
|\partial_\Phi\alpha\rangle &= \sum_{\vec{k}_d,\ell_d}\prod_{\vec{k},\ell}{}' \left(\sum_j c_j^\dagger\psi_j^1(\vec{k},t,\Phi)\right)\cdots\left(\sum_j c_j^\dagger\partial_\Phi\psi_j^{\ell_d}(\vec{k}_d,t,\Phi)\right)\cdots|0\rangle \\
&= -2\pi\frac{1}{\Phi_0}\frac{1}{L_y}\sum_{\vec{k}_d,\ell_d}\prod_{\vec{k},\ell}{}' \left(\sum_j c_j^\dagger\psi_j^1(\vec{k},t,\Phi)\right)\cdots\left(\sum_j c_j^\dagger\partial_{k_y}\psi_j^{\ell_d}(\vec{k}_d,t,\Phi)\right)\cdots|0\rangle \\
&\equiv -2\pi\frac{1}{\Phi_0}\frac{1}{L_y}|\partial_{k_y}\alpha\rangle
\end{aligned}
$$

ここでも最後の式はその前の式の略記である。

次に以下の事実を確認しよう[18]

$$
\langle\beta|\partial_\Phi H|\alpha\rangle = (E_\alpha-E_\beta)\langle\beta|\partial_\Phi\alpha\rangle = (E_\beta-E_\alpha)\langle\partial_\Phi\beta|\alpha\rangle,\quad (\beta\neq\alpha)
$$

[18] $H(t,\Phi)|\alpha(t,\Phi)\rangle = E_\alpha(t,\Phi)|\alpha(t,\Phi)\rangle$ より $(\partial_\Phi H)|\alpha\rangle + H|\partial_\Phi\alpha\rangle = (\partial_\Phi E_\alpha)|\alpha\rangle + E_\alpha|\partial_\Phi\alpha\rangle$ よって $\beta\neq\alpha$ として

$$
\langle\beta|\partial_\Phi H|\alpha\rangle = (E_\alpha-E_\beta)\langle\beta|\partial_\Phi\alpha\rangle
$$

これより[19] [20]

$$\begin{aligned}
\langle I_y\rangle &= \langle G|I_y|G\rangle \\
&= ci\hbar\sum_{\alpha\neq g}\frac{\langle g|\partial_\Phi H|\alpha\rangle\langle\alpha|\partial_t g\rangle-\langle\partial_t g|\alpha\rangle\langle\alpha|\partial_\Phi H|g\rangle}{E_\alpha-E_g} \\
&= ci\hbar\sum_{\alpha\neq g}(-\langle\partial_\Phi g|\alpha\rangle\langle\alpha|\partial_t g\rangle+\langle\partial_t g|\alpha\rangle\langle\alpha|\partial_\Phi g\rangle) \\
&= (ci\hbar)(2\pi\frac{acE_x}{\Phi_0})(-2\pi\frac{1}{\Phi_0}\frac{1}{L_y})\sum_{\alpha\neq g}\left(\langle\partial_{k_x}g|\alpha\rangle\langle\alpha|\partial_{k_y}g\rangle-\langle\partial_{k_y}g|\alpha\rangle\langle\alpha|\partial_{k_x}g\rangle\right) \\
&= -i2\pi\frac{e^2}{h}\frac{aE_x}{L_y}\sum_{\alpha\neq g}\left(\langle\partial_{k_x}g|\alpha\rangle\langle\alpha|\partial_{k_y}g\rangle-\langle\partial_{k_y}g|\alpha\rangle\langle\alpha|\partial_{k_x}g\rangle\right) \\
&= -i2\pi\frac{e^2}{h}\frac{aE_x}{L_y}\left(\langle\partial_{k_x}g|\partial_{k_y}g\rangle-\langle\partial_{k_y}g|\partial_{k_x}g\rangle\right)
\end{aligned}$$

また $\langle\beta(t,\Phi)|H(t,\Phi)=\langle\beta(t,\Phi)|E_\beta(t,\Phi)$ より

$$\langle\partial_\Phi\beta|H+\langle\beta|\partial_\Phi H=\langle\partial_\Phi\beta|E_\beta+\langle\beta|\partial_\Phi E_\beta$$

よって $\alpha\neq\beta$ として

$$\langle\partial_\Phi\beta|H|\alpha\rangle=(E_\beta-E_\alpha)\langle\partial_\Phi\beta|\alpha\rangle$$

また

$$\langle\alpha|\partial_\Phi H|\alpha\rangle=\partial_\Phi E_\Phi\ \text{(Feynmann)}$$

[19] $\langle g|I_y|g\rangle=0$

[20] $\langle\partial_k g|g\rangle+\langle g|\partial_k g\rangle=0$ を示せ。

以下これを変形して[21]

---

[21] まず、

$$
\begin{aligned}
|\partial_{k_x} g\rangle &= \sum_{k_d,b_d} {\prod_{k,b}}' (\sum_j c_j^\dagger \psi_j^1(k)) \cdots (\sum_j c_j^\dagger \psi_j^{b_d}(k_d)) \cdots |0\rangle \\
\langle \partial_{k_x} g|\partial_{k_y} g\rangle &= \sum_k \sum_m \sum_{m'} \langle 0|(\sum_j c_j \psi_j^{*1}) \cdots (\sum_j c_j \psi_j^{*m}) \cdots \cdot (\sum_j c_j^\dagger \psi_j^1) \cdots (\sum_j c_j^\dagger \psi_j^{m'}) \cdots |0\rangle
\end{aligned}
$$

$$
= \sum_k \sum_m \sum_{m'} \det \begin{array}{c} \\ \\ \\ m \rightarrow \\ \\ \\ \end{array} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\psi}^{1\dagger} \\ \vdots \\ \boldsymbol{\psi}^{m-1\dagger} \\ \partial_{k_x}\boldsymbol{\psi}^{m\dagger} \\ \boldsymbol{\psi}^{m+1\dagger} \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} & & & m'\downarrow & & \end{array} \\ \begin{pmatrix} \boldsymbol{\psi}^1 & \cdots & \boldsymbol{\psi}^{m'-1} & \partial_{k_y}\boldsymbol{\psi}^{m'} & \boldsymbol{\psi}^{m'+1} & \cdots \end{pmatrix} \end{array}
$$

$$
= \quad \sum_k \sum_{m\neq m'} \det \begin{array}{c|cccccccccc|}
 & & & & m & & & & m' & & \\
 & 1 & & & & & & & & & \\
 & & \ddots & & & & & & & & \\
 & & & 1 & & & & & & & \\
m & * & \cdots & * & \partial_{k_x}\boldsymbol{\psi}^{m\dagger}\boldsymbol{\psi}^m & * & \cdots & * & \partial_{k_x}\boldsymbol{\psi}^{m\dagger}\partial_{k_y}\boldsymbol{\psi}^{m'} & * & \cdots \\
 & & & & & 1 & & & & & \\
 & & & & & & \ddots & & & & \\
 & & & & & & & 1 & & & \\
m' & * & \cdots & * & \boldsymbol{\psi}^{m'\dagger}\boldsymbol{\psi}^m & * & \cdots & * & \boldsymbol{\psi}^{m'\dagger}\partial_{k_y}\boldsymbol{\psi}^{m'} & * & \cdots \\
 & & & & & & & & & 1 & \\
 & & & & & & & & & & \ddots
\end{array}
$$

$$
+ \sum_k \sum_m \det \mathrm{diag} \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} & & & m & & \end{array} \\ \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 1 & \partial_{k_x}\boldsymbol{\psi}^{m\dagger}\partial_{k_y}\boldsymbol{\psi}^m & 1 & \cdots \end{pmatrix} \end{array}
$$

$$
\begin{aligned}
= &\quad \sum_k \sum_{m\neq m'} \det \begin{pmatrix} \partial_{k_x}\boldsymbol{\psi}^{m\dagger}\boldsymbol{\psi}^m & \partial_{k_x}\boldsymbol{\psi}^{m\dagger}\partial_{k_y}\boldsymbol{\psi}^{m'} \\ \boldsymbol{\psi}^{m'\dagger}\boldsymbol{\psi}^m & \boldsymbol{\psi}^{m'\dagger}\partial_{k_y}\boldsymbol{\psi}^{m'} \end{pmatrix} + \sum_k \sum_m \partial_{k_x}\boldsymbol{\psi}^{m\dagger}\partial_{k_y}\boldsymbol{\psi}^m \\
= &\quad \sum_k \sum_{m\neq m'} \det \begin{pmatrix} -\boldsymbol{\psi}^{m\dagger}\partial_{k_x}\boldsymbol{\psi}^m & \partial_{k_x}\boldsymbol{\psi}^{m\dagger}\partial_{k_y}\boldsymbol{\psi}^{m'} \\ \boldsymbol{\psi}^{m'\dagger}\boldsymbol{\psi}^m & \boldsymbol{\psi}^{m'\dagger}\partial_{k_y}\boldsymbol{\psi}^{m'} \end{pmatrix} + \sum_k \sum_m \partial_{k_x}\boldsymbol{\psi}^{m\dagger}\partial_{k_y}\boldsymbol{\psi}^m
\end{aligned}
$$

第一項は $m, k_x \leftrightarrow m', k_y$ の入れ換えで不変だから (

$$
\boldsymbol{\varphi}^{m\dagger}\boldsymbol{\psi}^m = \langle \varphi^m|\psi^m\rangle
$$

の記法を用いる。)

$$
\begin{aligned}
\langle \partial_{k_x} g|\partial_{k_y} g\rangle - \langle \partial_{k_y} g|\partial_{k_x} g\rangle &= \sum_k \sum_m (\partial_{k_x}\boldsymbol{\psi}^{m\dagger}\partial_{k_y}\boldsymbol{\psi}^m - \partial_{k_y}\boldsymbol{\psi}^{m\dagger}\partial_{k_x}\boldsymbol{\psi}^m) \\
&= L_x L_y \sum_b \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} (\langle \partial_{k_x}\psi^\ell|\partial_{k_y}\psi^\ell\rangle - \langle \partial_{k_y}\psi^\ell|\partial_{k_x}\psi^\ell\rangle) \\
&= L_x L_y \sum_b \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} (\partial_{k_x}\langle \psi^\ell|\partial_{k_y}\psi^\ell\rangle - \partial_{k_y}\langle \psi^\ell|\partial_{k_x}\psi^\ell\rangle) \\
&= L_x L_y \sum_b \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} (\partial_{k_x}\mathcal{A}_y^\ell - \partial_{k_y}\mathcal{A}_x^\ell) \\
&= L_x L_y \sum_b \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} (\mathrm{rot}_k\, \vec{\mathcal{A}}^\ell)_z \\
\vec{\mathcal{A}}^\ell &= \langle \psi^\ell|\vec{\nabla}_k \psi^b\rangle
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle I_y \rangle &= \frac{e^2}{h} a E_x L_x \sum_\ell \frac{1}{2\pi i} \int_{T_{MBZ}} d^2k\, (\mathrm{rot}_k\, \vec{\mathcal{A}}^\ell)_z \\
&= \sigma_{yx} V_x, \quad (V_x = E_x a L_x) \\
\sigma_{yx} &= \frac{e^2}{h} \sum_\ell \frac{1}{2\pi i} \int_{T_{MBZ}} d^2k\, (\mathrm{rot}_k\, \vec{\mathcal{A}}^\ell)_z = -\sigma_{xy} \\
\vec{\mathcal{A}}^\ell &= \langle \psi^\ell | \vec{\nabla}_k \psi^\ell \rangle
\end{aligned}
$$

これが求める式であった。

3.1.2 チャーン数と渦度、ディラックモノポールとのアナロジー

前節で与えられたホール伝導度の表式のトポロジカルな意味をここで詳しく議論しよう [16, 17, ?, 23, 19]。前節の結果を次の様に書こう。

$$
\begin{aligned}
\sigma_{xy}^{j,\ \mathrm{bulk}} &= -\frac{e^2}{h} C, \qquad C = \sum_{\ell=0}^{j} c_\ell \\
c_\ell &= \frac{1}{2\pi i} \int_{T_{MBZ}} d\vec{S}_k \cdot \vec{\mathcal{B}}^\ell \\
\vec{\mathcal{B}}^\ell &= \mathrm{rot}_k\, \vec{\mathcal{A}}^\ell \\
\vec{\mathcal{A}}^\ell &= \langle \psi^\ell | \vec{\nabla}_k \psi^\ell \rangle \\
|\Psi\rangle &= \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \vdots \\ \Psi_q \end{pmatrix}, \quad \sum_{k=1}^{q} |\Psi_k|^2 = 1
\end{aligned}
$$

この c_ℓ を ℓ 番目のバンドのチャーン数と呼ぶ。

最初に積分領域である磁気的ブリルアンゾーンは x 方向に周期 2π, y 方向に周期 $2\pi/q$ と周期的でありトーラス T^2 と見なせることに注意しよう。　よって単純にストークスの定理を適用すると境界がないことより

$$c_j = 0$$

となる これは正しくない。ブリルアンゾーン上で被積分関数に特異性があり全域で $\vec{A}$ は定義されないのである。

この特異性をていねいに議論しよう。[17, 19] [22]

最初にブロッホ関数 $|\Psi(\vec{k})\rangle$ は位相の自由度を持つことに注意する。つまり任意の関数 $\xi_{BA}(\vec{k})$ に対して

$$|\Psi^B\rangle = e^{i\xi_{BA}(\vec{k})} |\Psi^A\rangle$$

これより

$$
\begin{aligned}
\langle I_y \rangle &= \frac{e^2}{h} a E_x L_x \sum_b \frac{1}{2\pi i} \int_{T_{MBZ}} d^2k\, (\mathrm{rot}_k\, \vec{\mathcal{A}}^b)_z \\
&= \sigma_{yx} V_x, \quad (V_x = E_x a L_x) \\
\sigma_{yx} &= \frac{e^2}{h} \sum_b \frac{1}{2\pi i} \int_{T_{MBZ}} d^2k\, (\mathrm{rot}_k\, \vec{\mathcal{A}}^b)_z = -\sigma_{xy}
\end{aligned}
$$

[22] M. Kohmoto, Ann. Phys. (NY) 160,355 (1985). Y. Hatsugai, Phys. Rev. Lett. 71, 3697 (1993)

と２つのブロッホ関数 $|\Psi^{A,B}\rangle$ をの間の関係を定めれば

$$\vec{\mathcal{A}}^B = \langle \Psi^B | \vec{\nabla}_k \Psi^B \rangle = \vec{\mathcal{A}}^A + \vec{\nabla}_k \xi_{BA}(\vec{k})$$

よって

$$\mathrm{rot}\,\vec{\mathcal{A}}^B = \mathrm{rot}\,\vec{\mathcal{A}}^A$$

とチャーン数は不変である。これは磁気的ブリルアンゾーン上でのゲージ変換と対応する場の量の不変性と解釈できる。このゲージ変換の自由度 (結局、これはよく知られた線形方程式の固有ベクトルの位相は確定しないことにこの自由度は起因する。) を用いて特異性なくチャーン数を計算することを考えよう。具体的に計算を実行するには何らかのゲージ（位相）を固定することが必要である。ここでは第一のゲージとしてある方法で得られた規格化されたブロッホ関数 $|\bar{\Psi}\rangle$ に適当な位相因子をかけ、ブロッホ関数の第 q 成分が正の実数となるようにしよう。

$$\begin{aligned} |\Psi^A\rangle &= e^{-i\mathrm{Arg}\,\bar{\Psi}_q}|\bar{\Psi}\rangle \\ \Psi^A_q &> 0 \end{aligned}$$

これは $\bar{\Psi}_q$ のゼロ点以外であれば常に可能である。逆にいうと $\bar{\Psi}_q$ のゼロ点

$$\bar{\Psi}_q = 0$$

ではこのゲージ A（ルール）ではブロッホ関数が一意に決まらない。そこでこのような点

$$\vec{k} = \vec{k}_s,\ s = 1, \cdots, \quad \bar{\Psi}_q(\vec{k}_s) = 0$$

の近傍 R_s では別なゲージとして

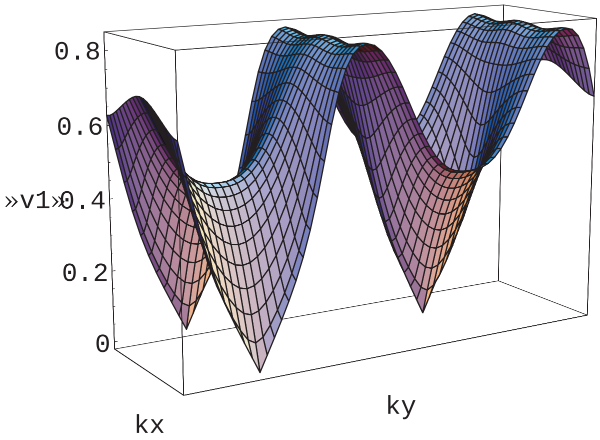
$$\begin{aligned} |\Psi^B\rangle &= e^{-i\mathrm{Arg}\,\bar{\Psi}_1}|\bar{\Psi}\rangle \\ \Psi^B_1 &> 0 \end{aligned}$$

なるものをとることとしよう。(これらの近傍は $\bar{\Psi}_q$ のゼロ点を１個だけ含むみ、$\bar{\Psi}_1$ のゼロ点は含まないように十分小さくとる。) この２つのゲージをつなぐゲージ変換は

$$\xi_{BA} = \mathrm{Im}\log\frac{\bar{\Psi}_q}{\bar{\Psi}_1}$$

であり（$\bar{\Psi}_1, \bar{\Psi}_q$ のゼロ点以外で）定義されることとなる。これらの２つのゲージを使い磁気的ブリルアンゾーン T_{MBZ} を次のように分割する。

$$R = \bigcup_{i=1} R_s, \quad T_{MBZ} \backslash R$$



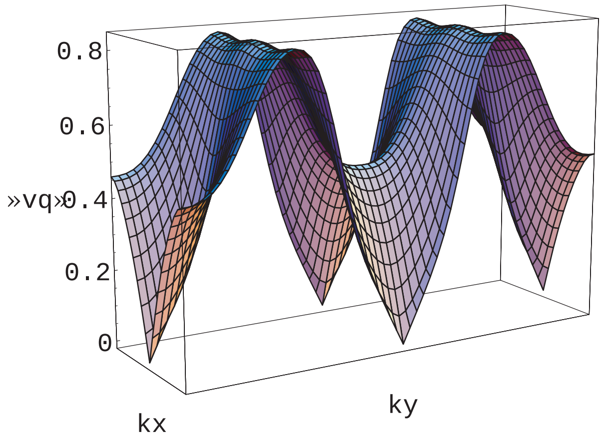


図 5: $\phi = \frac{1}{3}$ の場合の下から 2 番目のエネルギーバンドのブロッホ関数の振幅

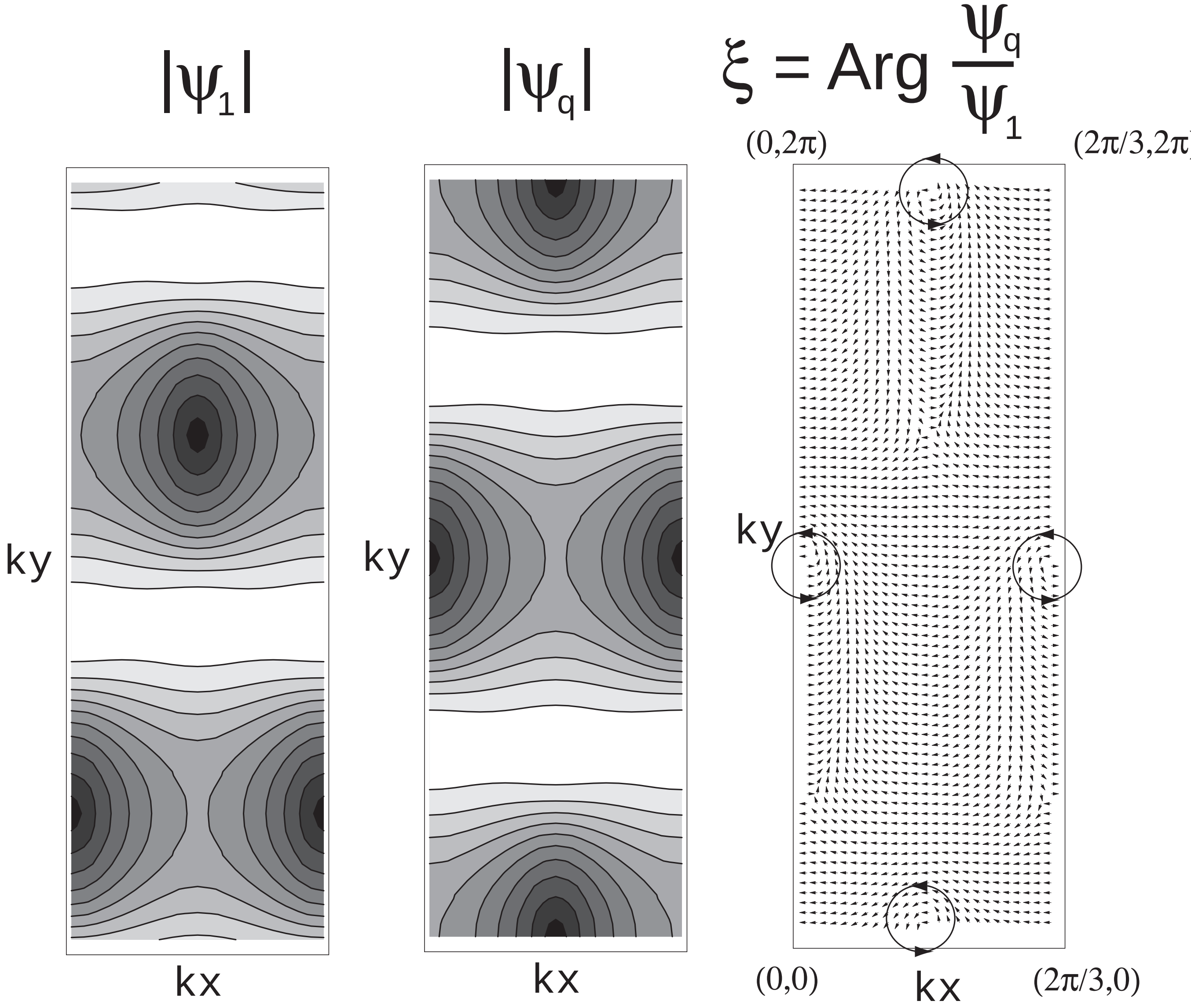
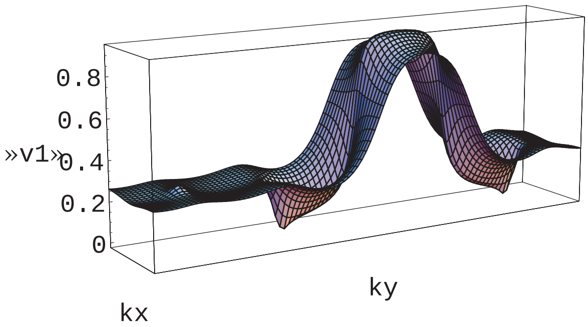


図 6: $\phi = \frac{1}{3}$ の場合の下から２番目のエネルギーバンドのブロッホ関数の振幅と相対位相から定まる渦度



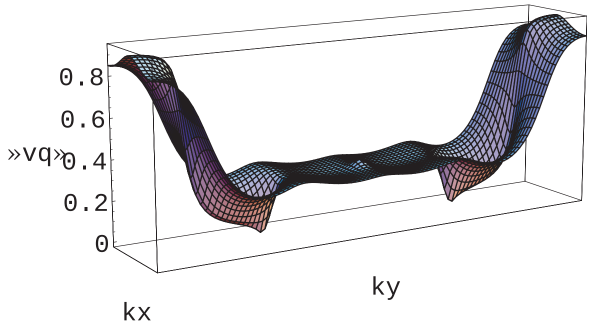


図 7: $\phi = \frac{2}{5}$ の場合の下から 1 番目のエネルギーバンドのブロッホ関数の振幅

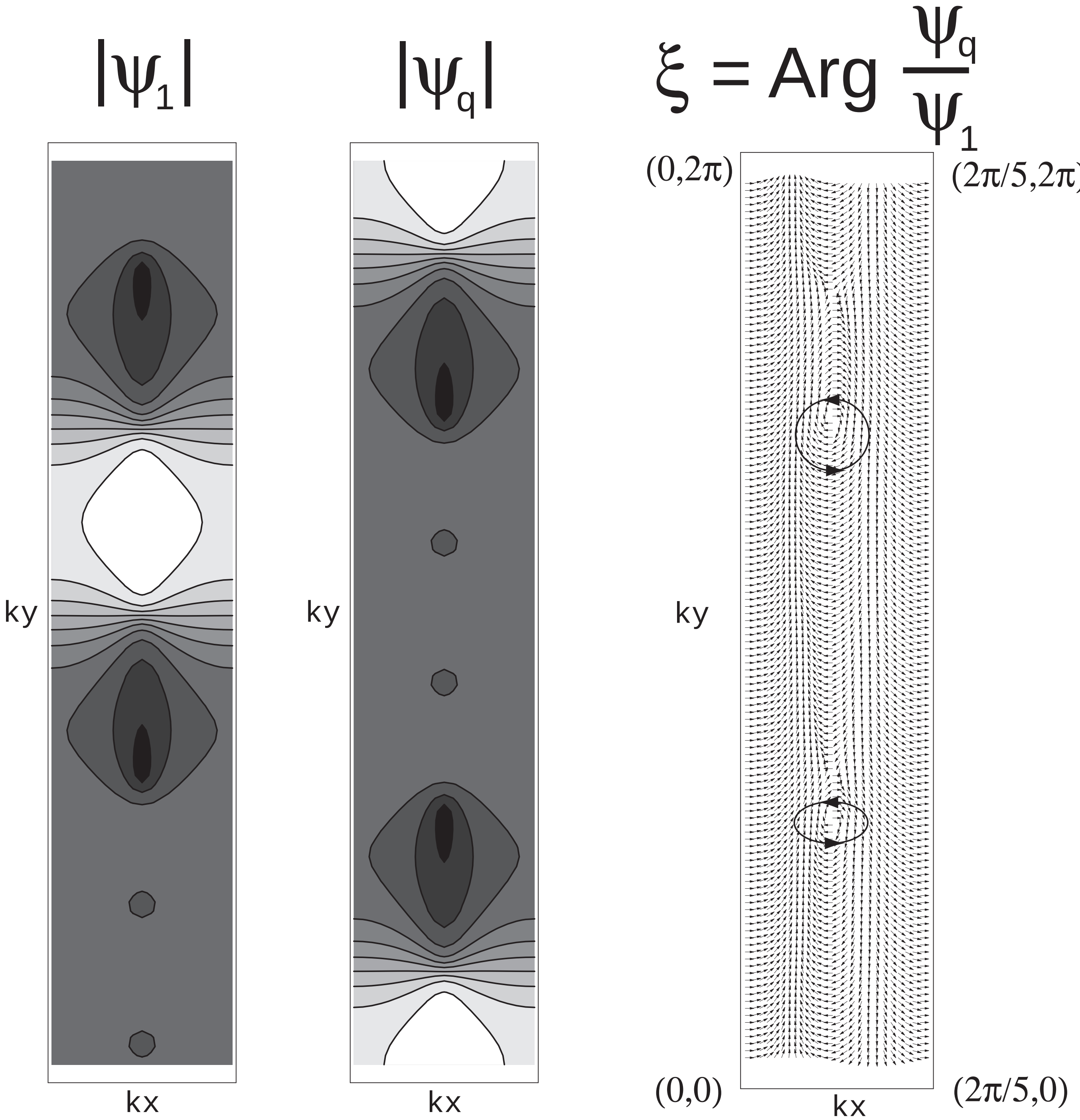


図 8: $\phi = \frac{2}{5}$ の場合の下から 1 番目のエネルギーバンドのブロッホ関数の振幅と相対位相から定まる渦度

その後、それぞれの領域でストークスの定理を使うこととするよって

$$\begin{aligned}
c_j &= \frac{1}{2\pi i}\int_R d^2k\,(\mathrm{rot}\,\mathcal{A}^B)_z + \int_{T_{MBZ}\setminus R} d^2k\,(\mathrm{rot}\,\mathcal{A}^A)_z \\
&= \frac{1}{2\pi i}\oint_{\partial R} d\vec{k}\cdot\vec{\mathcal{A}}^B + \oint_{\partial(T\setminus R)} d\vec{k}\cdot\vec{\mathcal{A}}^A \\
&= \frac{1}{2\pi i}\sum_s\oint_{\partial R_s} d\vec{k}\cdot\left(\vec{\mathcal{A}}^B - \vec{\mathcal{A}}^A\right) \\
&= \sum_s\frac{1}{2\pi}\oint_{\partial R_s} d\vec{k}\cdot\vec{\xi}_{BA} \\
&= \sum_s\frac{1}{2\pi}\oint_{\partial R_s} d\vec{k}\cdot\mathrm{Im}\log\Psi_q(\vec{k}) \\
&= \sum_s N_s \\
N_s &= \frac{1}{2\pi}\oint_{\partial R_s} d\vec{k}\cdot\mathrm{Im}\log\Psi_q(\vec{k})
\end{aligned}$$

となる。

つまりチャーン数はブロッホ関数 (の任意) のある成分のゼロ点が定義するゼロ点 (s) まわりの整数である渦度 N_s の和として与えられることがわかった。

これは数学的にはこの状況はファイバーバンドルとして記述されることを意味する。よく知られた類似の例としは Dirac の単磁極の例がある [29, 30]。このアナロジーによれば、ホール伝導度の量子化は単磁極の量子化のアナログとも考えられる。

これを復習してみよう。極座標表示された次の２つの異なるベクトルポテンシャルを考える。

$$\begin{aligned}
\vec{\mathcal{A}}^A &= g\frac{1-\cos\theta}{r\sin\theta}\vec{e}_\phi = g\frac{1}{r(r+z)}(-y,x),\ \vec{e}_\phi = (-\sin\phi,\cos\phi) \\
\vec{\mathcal{A}}^B &= -g\frac{1-\cos\theta}{r\sin\theta}\vec{e}_\phi = -g\frac{1}{r(r-z)}(-y,x)
\end{aligned}$$

これらは

$$\begin{aligned}
\vec{\mathcal{A}}^A - \vec{\mathcal{A}}^B &= g\frac{2}{r\sin\theta}\vec{e}_\phi, = \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial\xi_{BA}}{\partial\phi}\vec{e}_\phi, \\
&= \vec{\nabla}\xi_{BA} \\
\xi_{BA} &= 2g\phi
\end{aligned}$$

と書ける。これらは ξ_{BA} によるゲージ変換で結ばれているためその磁場は等しく

$$\begin{aligned}
\vec{B} &= \mathrm{rot}\,\vec{\mathcal{A}}^A = \mathrm{rot}\,\vec{\mathcal{A}}^B \\
&= \frac{\vec{r}}{r^3}
\end{aligned}$$

となり原点に磁場の湧き出しがあることとなる (磁気単極子)。ただし $\mathcal{A}^A$, $\mathcal{A}^B$ の定義域について考えてみると分母がゼロとなるところでは定義されていないことから

$$\begin{cases}
\vec{\mathcal{A}}^A & : z\ \text{軸負方向をのぞく},\ (\cos\theta \neq -1) \\
\vec{\mathcal{A}}^B & : z\ \text{軸正方向をのぞく},\ (\cos\theta \neq +1)
\end{cases}$$

となっていることに注意しよう。（これらの特異点はストリングと呼ばれることがある。）次に原点を含む閉曲面上（例えば単位球面上）で全磁束を計算することを考えると

$$\Phi_{total} = \int_S d\vec{S}\cdot\vec{B} = 4\pi g$$

となるのは $\vec{B}$ の表式よりすぐにわかる。一方これをストークスの定理を用いてベクトルポテンシャルから計算してみよう。その際、上記のベクトルポテンシャルの特異性に注意すると球面 A を北半球 S_A、 南半球 S_B、に分けそれぞれで異なるゲージを用いて計算することが必要となる。

$$\begin{aligned}
\Phi_{total} &= \int_S d\vec{S}\cdot\vec{B} = \int_A d\vec{S}\cdot\vec{B} + \int_B d\vec{S}\cdot\vec{B} \\
&= \int_A d\vec{S}\cdot\mathrm{rot}\,\vec{\mathcal{A}}^A + \int_B d\vec{S}\cdot\mathrm{rot}\,\vec{\mathcal{A}}^B \\
&= \int_{\partial S_A} d\vec{r}\cdot\vec{\mathcal{A}}^A + \int_{\partial S_B} d\vec{r}\cdot\vec{\mathcal{A}}^B \\
&= \int_{C_{eq}} d\vec{r}\cdot(\vec{\mathcal{A}}^A - \vec{\mathcal{A}}^B), \quad (C_{eq} = \partial C_A : \text{赤道}, \theta = 0) \\
&= \int_{C_{eq}} d\vec{r}\cdot\vec{\nabla}\xi_{BA} = \int_0^{2\pi} d\phi\, 2g = 4\pi g
\end{aligned}$$

つまり、ベクトルポテンシャルに特異性が（必然的に）ある場合、全系で一度に積分定理を使うのではなく適宜領域をパッチにわけそれぞれの領域ごとに適用すればよいことのである。

3.2 境界のある系でのゲージ不変性による Laughlin の議論

ここでは Lauglin によるホール伝導度の量子化に関するゲージ不変性の議論を紹介したい [7, 8]。

現実のサンプルには必ず境界があることを考え図のようなシリンダー状のいわゆる Laughlin の配置を考えよう。ここで Φ はシリンダーを貫くアハロノフ・ボーム磁束である。

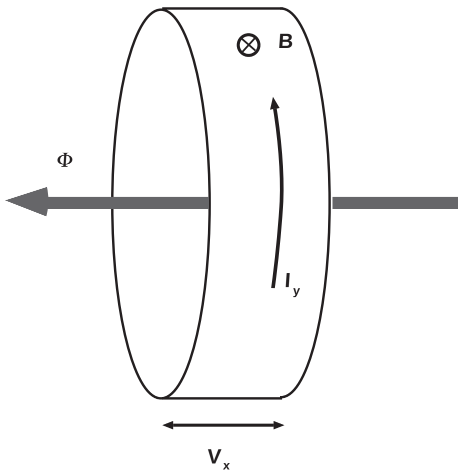


図 9: Laughlin の配置。シリンダー状の系に幅をよぎる方向に電圧をかけ、輪の方向の電流を測定する

この配置で Laughlin は次のような議論を行った。Φ を断熱的に $\Delta\Phi$ だけ変化させる。その過程で系にした仕事量 ΔE を計算しよう。そのときシリンダーの輪方向の電流 I_y はいわゆる Byers-Yang の公式 [25] により、

$$I_y = c\frac{\Delta E}{\Delta\Phi}$$

となる。[23]

このとき $\Delta\Phi = \Phi_0$ $\Phi_0 = \frac{hc}{e}$ は磁束量子である場合を考える。(系が十分大きいとき磁束単位の変化は境界条件の変化とみなせるので微小変化と考えられ微分に置き換えられる) アハロノフ・ボーム磁束を磁束量子変化させた場合、物理系は（大きな）ゲージ変換によりもとの状態に戻る。よってこのあいだになされた仕事量は、シリンダーの一方の端から他端へ 何個か (整数 n 個) 電子が移動されたことによると考えられる。そこでこの両端の間の電位差を V_x とすると $\Delta E = neV_x$ となる。これらを代入すれば

$$I_y = n\frac{e^2}{h}V_x$$

これが Laughlin による整数量子ホール効果の量子化に関する説明である。[7] これは非常に強力な議論で乱れのある場合等、種々の状況に拡張可能である汎用の考察である。ただし「ここでの n は整数ではあるがいくつであるかはこの議論からは定められない」点にその最大の弱点がある。

さらにこの議論は分数量子ホール効果の場合にも拡張されそこでの有効的な分数電荷の存在と基底状態の多重性を意味することとなる。(講義では時間があれば議論する予定)

実はこの Laughlin の議論では不定であった整数 n にはバルク（無限系）の場合とは全く異なる位相幾何学的意味があるのである。それについて次に紹介したい [18]。

3.3 境界を持つ系におけるホール伝導度のトポロジカルな意味— リーマン面上でのエッジ状態の回転数と交点数 —[18]

配置としては Laughlin のものと同じシリンダー状の系を考える。具体的には図のような系を考え y 方向へは周期的境界条件をとる。ゲージとしては、シリンダーの両端をつなぐ方向へ増加するランダウゲージで考える。

[23] 当面のところこれをまず認めよう。

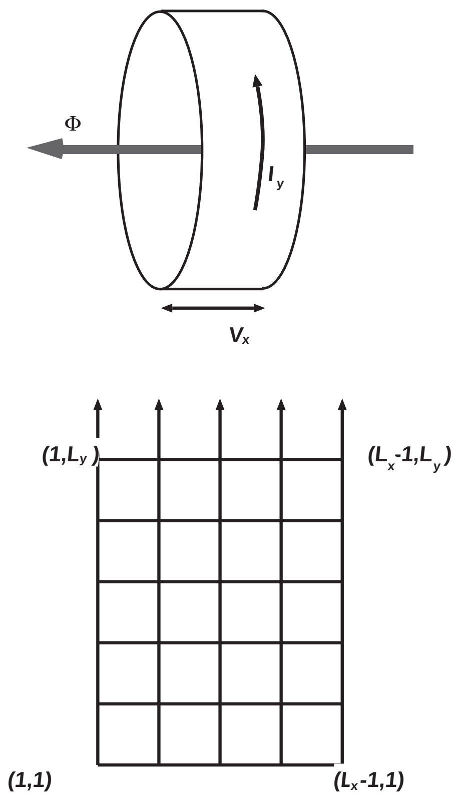


図 10: 格子上での境界のある系、Laughlin の配置。y 方向に L_y サイト、x 方向に $L_x - 1$ サイトとし、y 方向には周期的境界条件をおく。

次の数節は少し話が細かく、長くなる。そこで以下具体的に議論するまえに議論の大筋を説明しておこう。

このゲージのもとで系はシリンダーの輪の方向には最小の並進で不変であることに注意しよう。これより 2 次元の問題は、シリンダーの輪の方向の波数 k_y ごとの 1 次元系に帰着することに注意する。さらにこの 1 次元系は両端をもつのでその両端に局在した束縛状態をもつ場合がある。この束縛状態が 2 次元系の言葉では量子ホール効果においてエッジ状態と呼 ばれるものである。その束縛状態の振る舞いがホール伝導度、つまり Laughlin の議論の未定の整数 n を定めるわけだが、その振る舞いはこの 1 次元系の複素エネルギー面を考えるとわかりやすい。(量子力学で習う Levinson の定理を思い出してもらうといいかもしれない。束縛状態（エッジ状態）と散乱状態（バルク状態）はお互いに関連しており、他の有名な応用としては Friedel の総和則があるのはよく知られている。) この複素エネルギー面はやや複雑でエネルギーバンドが q 個 ($\phi = p/q$ の時を考えて。) あることに対応して $g = q - 1$ 個の穴をもつ浮輪となる。(図 11) これはリーマン面と呼ばれる。

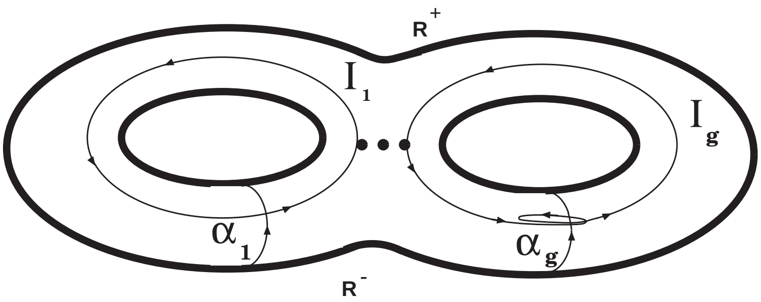


図 11: 磁場中の電子系の複素エネルギー面としてのリーマン面 Σ_g。穴の数 $g = q - 1$ はエネルギーギャップの個数に等しく、単位格子あたりの磁束は $\phi\Psi_0 = \frac{p}{q}\Psi_0$ である。

この g 個の穴が $q-1$ 個のエネルギーギャップに対応する。この複素エネルギー面上で束縛状態 (エッジ状態) のエネルギーは g 個存在することとなる。以上はシリンダーの輪方向の波数 k_y を固定した 1 次元系の議論である。次に、波数 k_y を 0 から 2π まで変化させることを考え 2 次元の問題を議論しよう。すると 0 と 2π は同一視すべきであることを考えると g 個のエッジ状態のエネルギーはこの浮輪上で閉曲線をつくることになる。復習すると浮輪の穴はエネルギーギャップ (下から j 番目のエネルギーギャップとしよう) に対応していたわけだがその穴のまわりをエッジ状態のエネルギーが何回か (I_j 回) まわるわけである。実はここで与えた回転数 I_j がフェルミエネルギーがそのエネルギーギャップにある状況における Laughlin の未定整数 n を与えることとなるのである。[18, 19] [24]

境界を持つ系でのホール伝導度のトポロジカルな表式

$$\sigma_{xy}^{edge} = -I_j \frac{e^2}{h}$$

3.3.1 転送行列とエッジ状態

ハミルトニアンはバルクの場合と同じ次のものをとる。境界条件は y 方向には aL_y の長さで周期的 x 方向には $a(L_x - 2)$ の長さで固定端の境界条件をおく (サイト数としては $L_x - 1$ 個。)

配置としては Laughlin のものと同じシリンダー状の系を考える。具体的には図のような系を考え y 方向へは周期的境界条件をとる。ゲージとしては、シリンダーの両端をつなぐ方向へ増加するランダウゲージで考える。

$$H(\Phi) \;=\; \sum_{m,n} c^\dagger_{m+1,n} c_{m,n} + e^{i2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\frac{1}{L_y}} \sum_{m,n} c^\dagger_{m,n+1} e^{i2\pi\phi m} c_{m,n}$$

現在の系は y 方向にだけ周期的であることに注意して y 方向には運動量表示とした演算子 $c_m(\vec{k})$ を導入しよう。

$$c_{m,n} = \frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_{\vec{k}_y = 2\pi\frac{n_y}{L_y}} e^{ik_y n} c_m(k_y), \quad (n_y = 1, \cdots, L_y)$$

[24] Y. Hatsugai, Phys. Rev. Lett. **71** 3697 (1993) , Phys. Rev. **B48** 11851 (1993)

すると

$$\begin{aligned} H &= \sum_{k_y} H(k_y,\Phi) \\ H(k_y,\Phi) &= -t\sum_{m=1}^{L_x-2}[c^\dagger_{m+1}(k_y)c_m(k_y)+c^\dagger_m(k_y)c_{m+1}(k_y)] \\ &\quad -2t\sum_{m=1}^{L_x-1}\cos(k_y-2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0 L_y}-2\pi\phi m)c^\dagger_m(k_y)c_m(k_y). \end{aligned}$$

この系はをパラメターとする 1 次元系のハミルトニアンの和であるから、1 次元系の一粒子シュレディンガー方程式

$$\begin{aligned} H(k_y,\Phi)|\Psi(k_y,\Phi)\rangle &= E(k_y,\Phi)|\Psi(k_y,\Phi)\rangle \\ |\Psi(k_y,\Phi)\rangle &= \sum_m \Psi_m(k_y,\Phi)c^\dagger_m(k_y)|0\rangle \end{aligned}$$

をまず考えよう。ここで

$$\Psi_m(k_y,\Phi)=\Psi^0_m(k_y-2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0})$$

と Φ 依存性は k_y 依存性に吸収できることに注意しよう。まずこの波動関数 Ψ^0_m は次の関係式を満たすことに注意しよう。

$$-t(\Psi^0_{m+1}(k_y)+\Psi^0_{m-1}(k_y))-2t\cos(k_y-2\pi\phi m)\Psi^0_m(k_y)=E\Psi^0_m(k_y)$$

これを $\epsilon=\frac{E}{t}$ として、いわゆる転送行列の形で次のように書こう。

$$\begin{pmatrix} \Psi^0_{m+1}(\epsilon,k_y) \\ \Psi^0_m(\epsilon,k_y) \end{pmatrix} = \tilde M_m(\epsilon,k_y)\begin{pmatrix} \Psi^0_m(\epsilon,k_y) \\ \Psi^0_{m-1}(\epsilon,k_y) \end{pmatrix}$$

$$\tilde M_m(\epsilon,k_y)=\begin{pmatrix} -\epsilon-2\cos(k_y-2\pi\phi m) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

これを繰り返しつかうことで (添え字の 0 を省略する)

$$\begin{pmatrix} \Psi_{L_x+1}(\epsilon) \\ \Psi_{L_x}(\epsilon) \end{pmatrix} = \big(M(\epsilon)\big)^l\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_0 \end{pmatrix},$$

$$M(\epsilon)=\tilde M_q(\epsilon)\tilde M_{q-1}(\epsilon)\cdots\tilde M_2(\epsilon)\tilde M_1(\epsilon)=\begin{pmatrix} M_{11}(\epsilon) & M_{12}(\epsilon) \\ M_{21}(\epsilon) & M_{22}(\epsilon) \end{pmatrix},$$

を得る。ここで $M_{11}(\epsilon),M_{12}(\epsilon),M_{21}(\epsilon),M_{22}(\epsilon)$ は ϵ のそれぞれ q, $q-1$,$q-1$ $q-2$ 次の多項式である。

この転送行列及び境界条件から系の波動関数、スペクトルが求まることとなる。(この 1 次元系は格子上の Hill 方程式と呼ばれ Strum-Liouville 型の微分方程式の一般論の格子アナログが古くからある（例えば戸田盛和著「非線形格子」等) ここでの 1 次元系での議論はその結果を使うこととなる。ここで我々の問題とする点はそれらがどのように 2 次元の物理と関連するかにある。[26, 27, 28])

付加的な条件として、ここで系の大きさに対して整合性の

$$L_x-1=q\ell,\quad \ell|(L_x-1)$$

を要求しよう。

このとき、系のスペクトルは境界条件

$$\Psi_0 = \Psi_{L_x} = 0$$

から定まることとなる。規格化の条件として

$$\Psi_1 = 1$$

をとれば

$$\Psi_{L_x} = M_{21}(\epsilon) = 0$$

は $Lx - 1$ 次の方程式の解であり $L_x - 1$ 個の実根を持つ。これがこの 1 次元系のスペクトルを与えることとなる。(実根であることはそれらがエルミート行列の固有値であることから保証される。)

まず

$$M_{12}(\epsilon) = 0$$

の解 μ_j, $j = 1, \cdots, q-1 = g$ が $\Psi_{L_x} = M_{21}(\epsilon) = 0$ を満たすことは三角行列の冪乗は三角行列であることからわかる。これらがすべて実であることは $g = q-1$ サイトの系の固有値であることが保証する。実はこの $g = q-1$ 個がエッジ状態のエネルギーである。

転送行列より k を一般の整数として

$$\Psi_{qk+1}(\mu_j) = [M_{11}(\mu_j)]^k$$

となる。これより一般には $|M_{11}(\mu_j)| \neq 1$ であるから

$$\begin{array}{lll} |M_{11}(\mu_j)| < 1: & x \approx 1 \text{ に局在したエッジ状態} & :\text{(左の境界)} \\ |M_{11}(\mu_j)| > 1: & x \approx L_x - 1 \text{ に局在したエッジ状態} & :\text{(右の境界)}. \end{array}$$

であることがわかる。($|M_{11}(\mu_j)| \neq 1$ を満たす状態は後で判るようにバルク状態と縮退した状態であり、トポロジカルな議論においてもバルクとエッジの議論をつなぐ重要な役割を持つ。)

3.3.2 転送行列とバルク状態

転送行列を使って境界が無い場合つまりバルクの系について議論しよう。

境界の無い場合この 1 次元系は周期 q を持つ周期系であるからブロッホの定理により

$$\Psi_{m+q}(\epsilon) = \rho(\epsilon)\Psi_m(\epsilon),\ |\rho(\epsilon)| = 1.$$

と書ける。これは

$$\begin{pmatrix} \Psi_{q+1} \\ \Psi_q \end{pmatrix} = \boldsymbol{M} \begin{pmatrix} \Psi_{q+1} \\ \Psi_q \end{pmatrix} = \rho \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_0 \end{pmatrix}$$

つまり ρ は転送行列 $\boldsymbol{M}$ の固有値であることを意味する。これから ($\det \tilde{M}_m(\epsilon) = 1$ がすべての m で成立するので

$$\det M(\epsilon) = M_{11}(\epsilon)M_{22}(\epsilon) - M_{12}(\epsilon)M_{21}(\epsilon) = 1,$$

)

$$\rho^2 - \Delta\rho + 1 = 0,\quad \Delta = \mathrm{Tr}M = M_{11} + M_{22}$$

を満たす。二次方程式の議論から $|\rho|=1$ はエネルギー ϵ を実として

$$\big(\Delta(\epsilon)\big)^2 \le 4$$

と同値で、これがエネルギーバンドのエネルギーを与える式となることを注意しよう。一般にエネルギーバンドは q 個あるから

$$\Delta(\epsilon)^2-4=(\epsilon-\lambda_1)(\epsilon-\lambda_2)\cdots(\epsilon-\lambda_{2q-1})(\epsilon-\lambda_{2q})$$

とバンド端のエネルギー $\lambda_j,(\lambda_i<\lambda_j,i<j)$ を用いて因数分解できることに注意しよう。よって

$$\rho(z)=\frac{1}{2}(\Delta(z)-\sqrt{\Delta(z)^2-4})$$

ここで分枝を定めるためにエネルギー ϵ を解析接続して複素エネルギー z を導入した。

次にバルクの系に対しても波動関数は境界を持つ場合と同様の規格化条件

$$\Psi_1=1$$

を要求すると転送行列の固有ベクトルから次のように Ψ_q は定まる。[25]

$$\begin{aligned}\Psi_q(z) &= \frac{\rho(z)}{\rho(z)-M_{22}(z)}M_{21}(z)\\ &= \frac{M_{11}+M_{22}-\sqrt{\Delta^2-4}}{M_{11}-M_{22}-\sqrt{\Delta^2-4}}M_{21}\end{aligned}$$

ここで波動関数は複素エネルギー面上で定義されていることに注意しよう。

この複素エネルギー面（リーマン面）についてここでしばらく議論しよう。

次の複素関数のリーマン面について考えよう。

$$f(z)=\sqrt{\Delta(z)^2-4}=\sqrt{(z-\lambda_1)(z-\lambda_2)\cdots(z-\lambda_{2q-1})(z-\lambda_{2q})}$$

まず、図の様に $g=q-1$ 個のブランチカットを

$$[\lambda_1,\lambda_2],\ \cdots,\ [\lambda_{2q-1},\lambda_{2q}]$$

を入れた R^+,R^- 2枚のシート（リーマン球：無限遠点を同一視した複素平面）を用意する。

次にそれらをはりあわせてリーマン面を構成する。その際ブランチカットにおける向きに注意する。(図を参照)　ただし分枝は R^+ 上で　$z\infty$ のとき $\sqrt{\Delta^2-4}>0$ ととろう。すると下から j 番目のエネルギーギャップのエネルギー内のエネルギー ϵ に関しては

$$\alpha(-1)^j\sqrt{\Delta^2-4}>0,\ z\in R^\alpha,(\alpha=\pm)$$

となる。

25

$$\begin{pmatrix} M_{11}-\rho & M_{12}\\ M_{21} & M_{22}-\rho\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_0\end{pmatrix}=\vec{0}$$

より

$$\Psi_0(z)=\frac{M_{21}(z)}{\rho(z)-M_{22}(z)}=\frac{M_{11}(z)-\rho(z)}{M_{12}(z)}$$

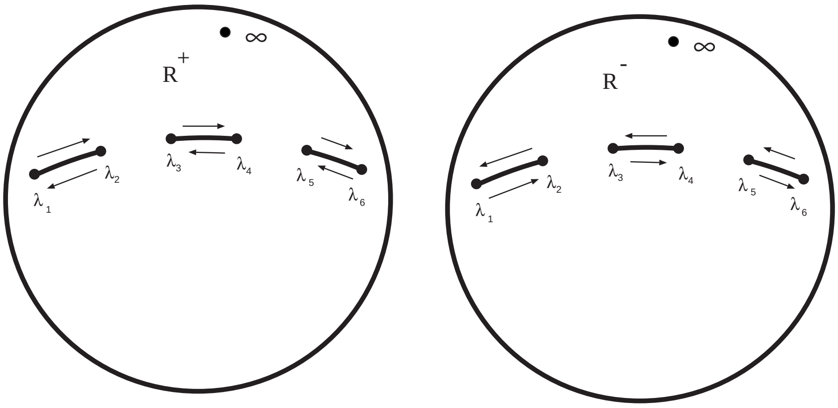


図 12: ステップ 1：実軸にブランチカットをいれる

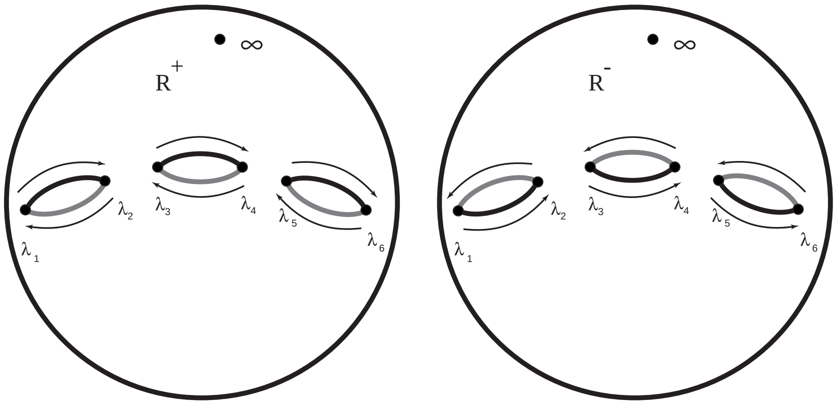


図 13: ステップ 2：実軸にブランチカットをを切り開く

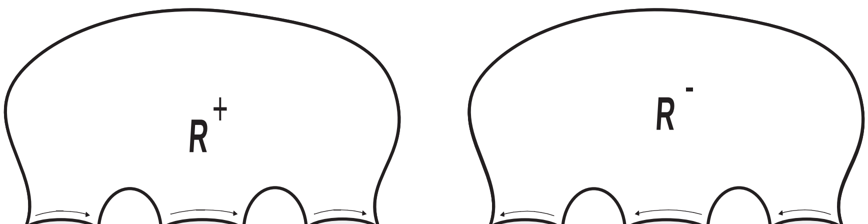


図 14: ステップ 3：少し変形する

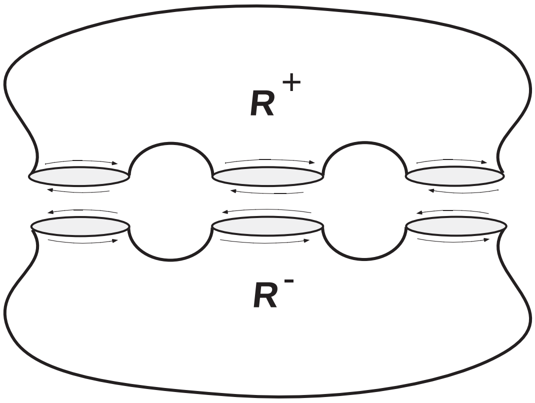


図 15: ステップ 4：相対的な配置をかえ、張り合わせよう。

labelfig:step4

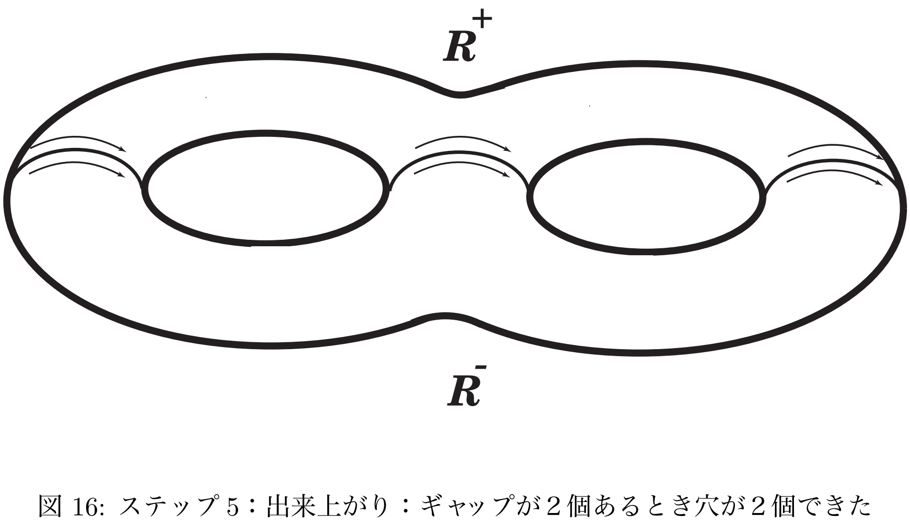


図 16: ステップ 5：出来上がり：ギャップが 2 個あるとき穴が 2 個できた

この数学的事実を現在の物理的状況の下でまとめると

1 次元系のリーマン面

複素エネルギー面	$\leftrightarrow$	種数（穴の数）g のリーマン面Σ_g
q 個のエネルギーバンド	$\leftrightarrow$	q 個のブランチカット
(q 個)		(: リーマン面上くびれの部分)
$g = q - 1$ 個のエネルギーギャップ	$\leftrightarrow$	$g = q - 1$ 個のリーマン面上の穴

と対応することになる。

3.3.3 リーマン面上のエッジ状態

前節での議論より、波動関数はそのエネルギーに関してリーマン面 Σ_q 上で定義されていると考えられることがわかった。

ここでエッジ状態のエネルギー μ_j に関しては

$$M_{21}(\mu_j) = 0$$

であるから、$\det \boldsymbol{M} = 1$ より

$$M_{11}M_{22} = 1, \quad \Delta^2 - 4 = (M_{11} - M_{22})^2$$

さらに $\Delta(\epsilon)$ の最高次の係数を考えて

$$\Delta = M_{11} + M_{22} \begin{cases} \geq +2 & j\text{：偶数} \\ \leq -2 & j\text{：奇数} \end{cases}$$

よって

これからリーマン面上のブロッホ関数のエッジ状態のエネルギー近傍の振る舞いは[26]

$$\Psi_q(\mu_j + \delta) \approx \frac{M_{11} + M_{22} - \alpha(-1)^j |M_{11} - M_{22}|}{M_{11} - M_{22} - \alpha(-1)^j |M_{11} - M_{22}|} M_{21}, \quad (\mu_j \in R^\alpha),$$

この分母をエッジ状態のエネルギー近傍で考えよう。まず j が偶数の場合 $M_{11} + M_{22} \geq 0$ であるから $M_{11}M_{22} = 1$ より

$$\begin{aligned} & M_{11} - M_{22} - \alpha|M_{11} - M_{22}| \\ &= \begin{cases} M_{11} - M_{22} - \alpha(M_{22} - M_{11}) & \text{左の境界に局在 } |M_{11}| \leq 1 : (M_{22} \geq M_{11}) \\ M_{11} - M_{22} - \alpha(M_{11} - M_{22}) & \text{右の境界に局在 } |M_{11}| \geq 1 : (M_{11} \geq M_{22}) \end{cases} \end{aligned}$$

より

$$\begin{aligned} M_{11} - M_{22} \quad &- \quad \alpha|M_{11} - M_{22}| \\ &\approx \quad 0 \text{ (リニアにゼロとなる)}, \quad \begin{cases} \text{左の境界に局在} : \alpha = - & \text{の時} \\ \text{右の境界に局在} : \alpha = + & \text{の時} \end{cases} \end{aligned}$$

[26]
$$\sqrt{\Delta(\mu_j)^2 - 4} = \alpha(-1)^j |M_{11} - M_{22}|$$

つぎに j が奇数の場合 $M_{11}+M_{22}\le 0$ であるから $M_{11}M_{22}=1$ より

$$M_{11}-M_{22}+\alpha|M_{11}-M_{22}| \\ =\begin{cases} M_{11}-M_{22}+\alpha(M_{11}-M_{22}) & \text{左の境界に局在 } |M_{11}|\le 1:(M_{11}\ge M_{22}) \\ M_{11}-M_{22}+\alpha(M_{22}-M_{11}) & \text{右の境界に局在 } |M_{11}|\ge 1:(M_{22}\ge M_{11}) \end{cases}$$

より

$$\begin{aligned} M_{11}-M_{22} &+ \alpha|M_{11}-M_{22}| \\ &\approx 0\ (\text{リニアにゼロとなる}), \quad \begin{cases} \text{左の境界に局在}:\alpha=- & \text{の時} \\ \text{右の境界に局在}:\alpha=+ & \text{の時} \end{cases} \end{aligned}$$

つまり j の偶奇によらず、$\Psi_q(\mu_j)$ の上記の表式の分母はエッジ状態が左の境界に局在している時は $\alpha=-$ の時にまたは右の境界に局在しているときは $\alpha=+$ の時にリニアにゼロとなることがわかる。ここで $M_{21}(\epsilon)$ は μ_j でリニアにゼロとなるから Ψ_q はリーマン面上片方のシート上のエッジ状態のエネルギーでのみゼロとなり、つまりエッジ状態の境界条件をみたし ($\Psi_q=\rho\Psi_0$) そのときのエッジ状態のエネルギーのシートとエッジ状態の局在している空間的位置が対応することがわかる。

これらの対応をまとめると

ブロッホ状態のリーマン面とエッジ状態

エッジ状態は左の境界に局在する	$\leftrightarrow$	$\Psi_q(z)$ は R^+上 ($z=\mu_j$) で零点を持つ
エッジ状態は右の境界に局在する	$\leftrightarrow$	$\Psi_q(z)$ は R^-上 ($z=\mu_j$) で零点を持つ
エネルギーバンド	$\leftrightarrow$	ブランチカット
(q 個)		(: リーマン面上のくびれ)
エネルギーギャップ	$\leftrightarrow$	リーマン面上の穴
($g=q-1$ 個)		

つまり複素エネルギー面としてのリーマン面上のブロッホ関数のゼロ点をみればエッジ状態の空間的な情報がえられることとがわかった [18]。

3.3.4 リーマン面上の回転数、交点数と Laughlin の議論

前節の議論はすべて y 方向の波数 k_y を固定した 1 次元系のものであったがここでそれを 2 次元の問題へ適用しよう。まず、k_y を変化させても 1 次元系のエネルギーギャップは閉じないものとしよう。つまり 2 次元の問題として安定なエネルギーギャップの存在を仮定しよう。(これが閉じる場合リーマン面にトポロジカルチェンジがおきるわけで、そこでは量子相転移が起こり、後述する Dirac Fermion に有効的に現れることとなる。) この仮定のもとでは各波数でのリーマン面のトポロジカルな構造は不変であることに注意し、それらを同一視しよう。さらに波数 $k_y=0$ と 2π は同一視されるから（ブリルアンゾーン）束縛状態 (エッジ状態) の個数だけあるエッジ状態のエネルギーを与えるゼロ点 μ_j はリーマン面上で向きのついた閉ループ

$$C_j:\{z=\mu_j(k_y)|k_y\in[0,2\pi]\}$$

を作ることとなる。一般には、これらの閉ループはリーマン面上の穴の周りを数回回転し、その符号をつけた回転数 I_j が定義されることとなる。

ここでいくつか具体的な計算例をしめそう。(図参照)

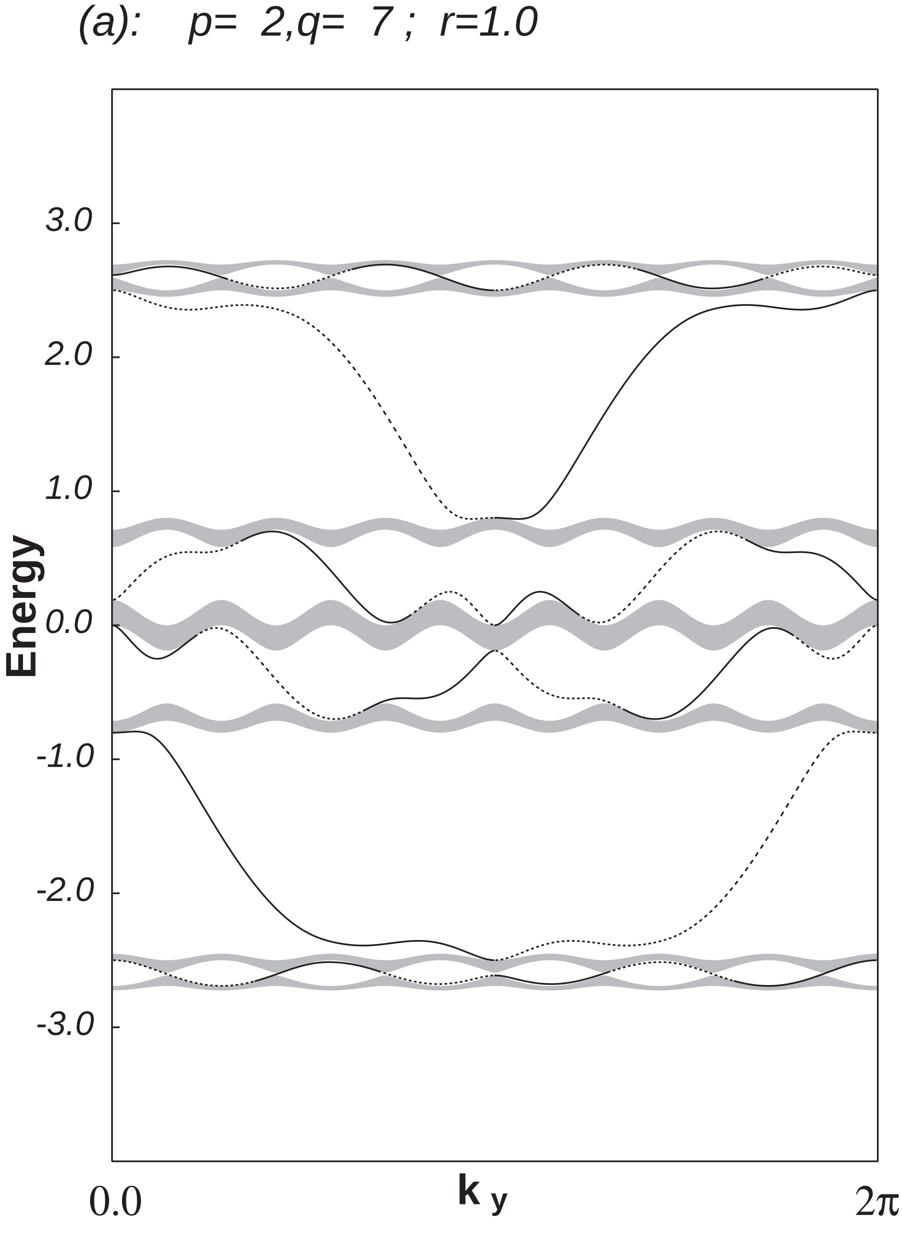


図 17: $\phi = \frac{2}{7}$ の場合のエネルギーバンド (斜線の領域) とエッジ状態のエネルギー (実線：右端に局在したエッジ状態、破線：左端に局在したエッジ状態)。エッジ状態が作る閉曲線のリーマン面上での交点数は下のエネルギーギャップから順に 1 である。

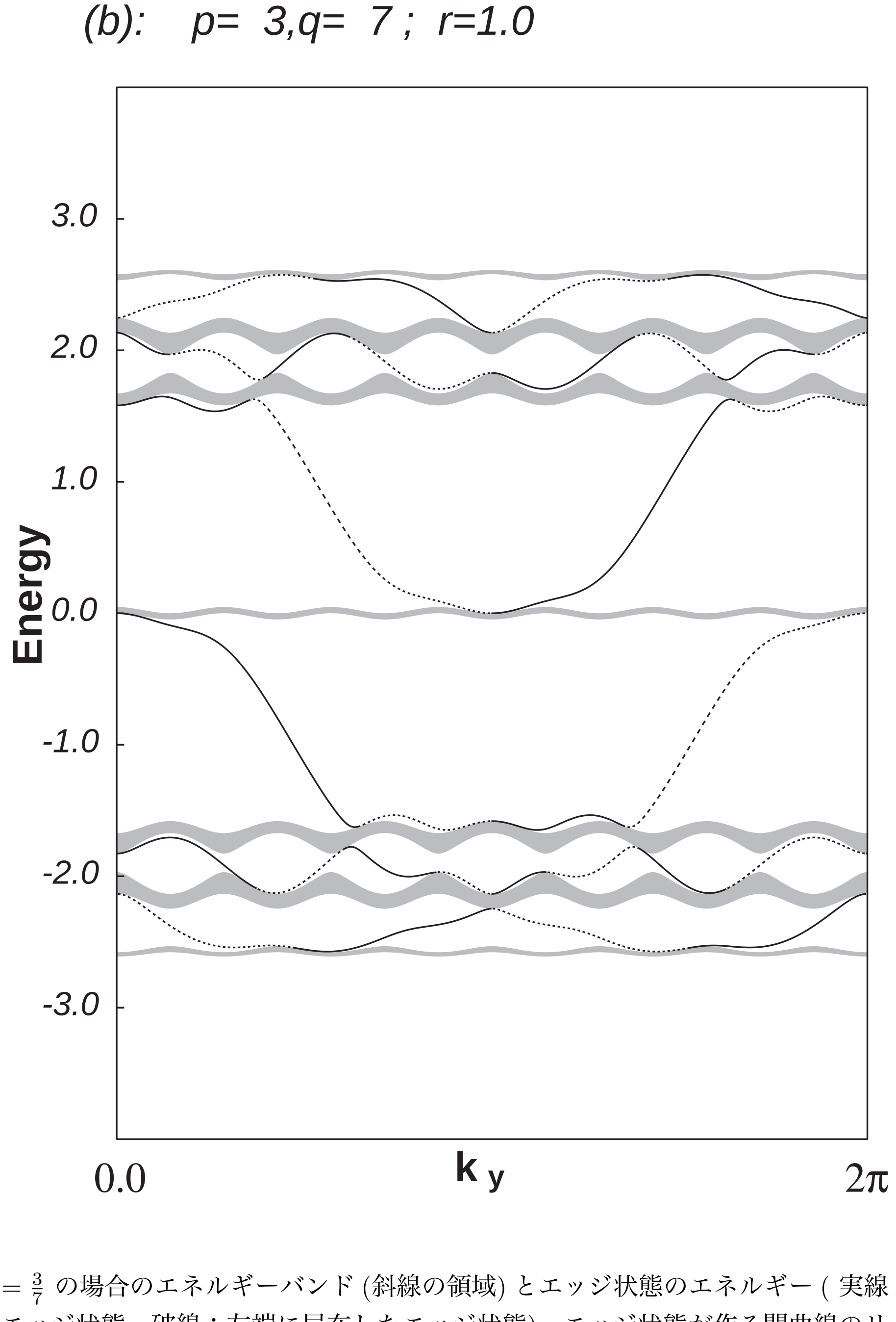


図 18: $\phi = \frac{3}{7}$ の場合のエネルギーバンド (斜線の領域) とエッジ状態のエネルギー (実線：右端に局在したエッジ状態、破線：左端に局在したエッジ状態)。エッジ状態が作る閉曲線のリーマン面上での交点数は下のエネルギーギャップから順に $-3, 1, -2, 2, -1, 3$ である。

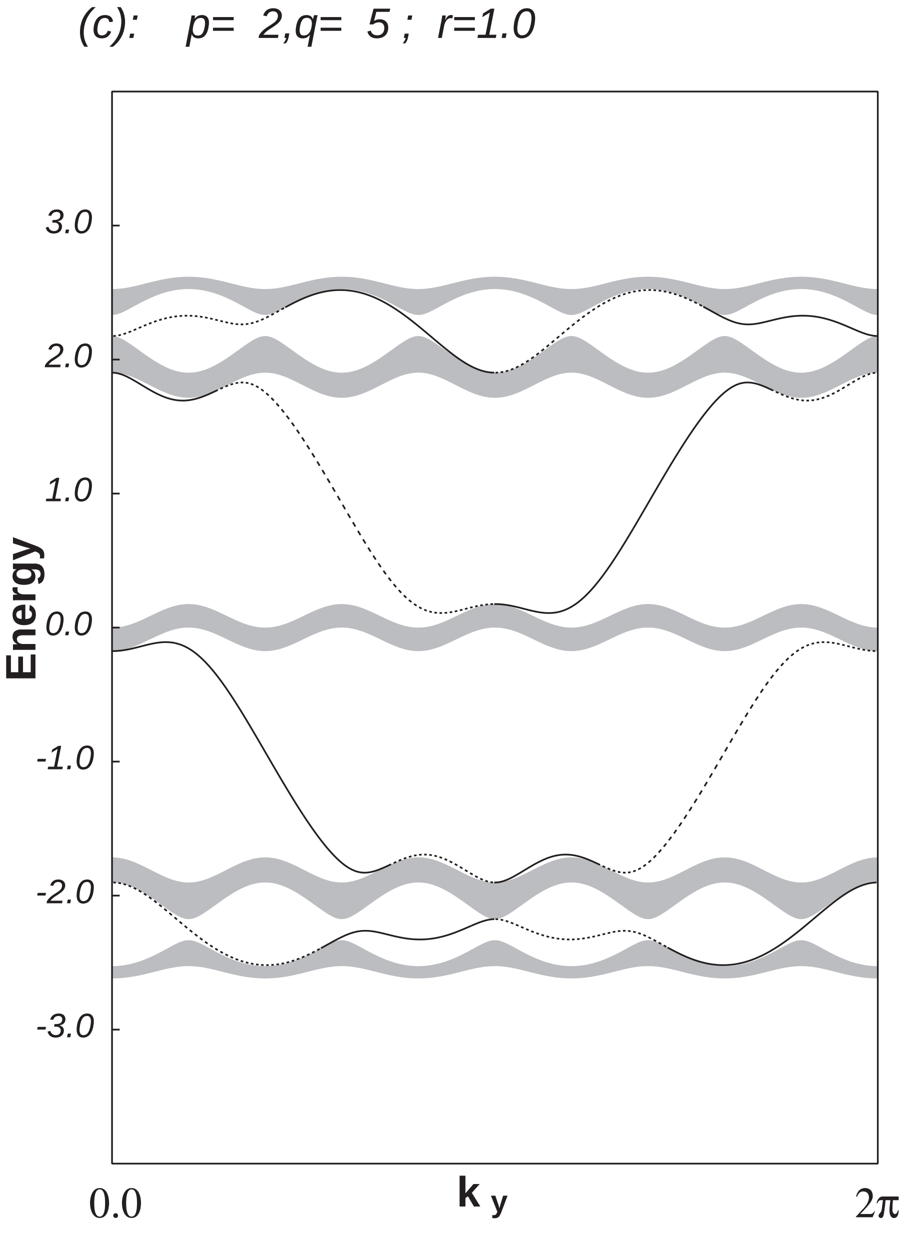


図 19: $\phi = \frac{2}{5}$ の場合のエネルギーバンド (斜線の領域) とエッジ状態のエネルギー (実線：右端に局在したエッジ状態、破線：左端に局在したエッジ状態)。エッジ状態が作る閉曲線のリーマン面上での交点数は下のエネルギーギャップから順に $-2, 3, 1, -1, -3, 2$ である。

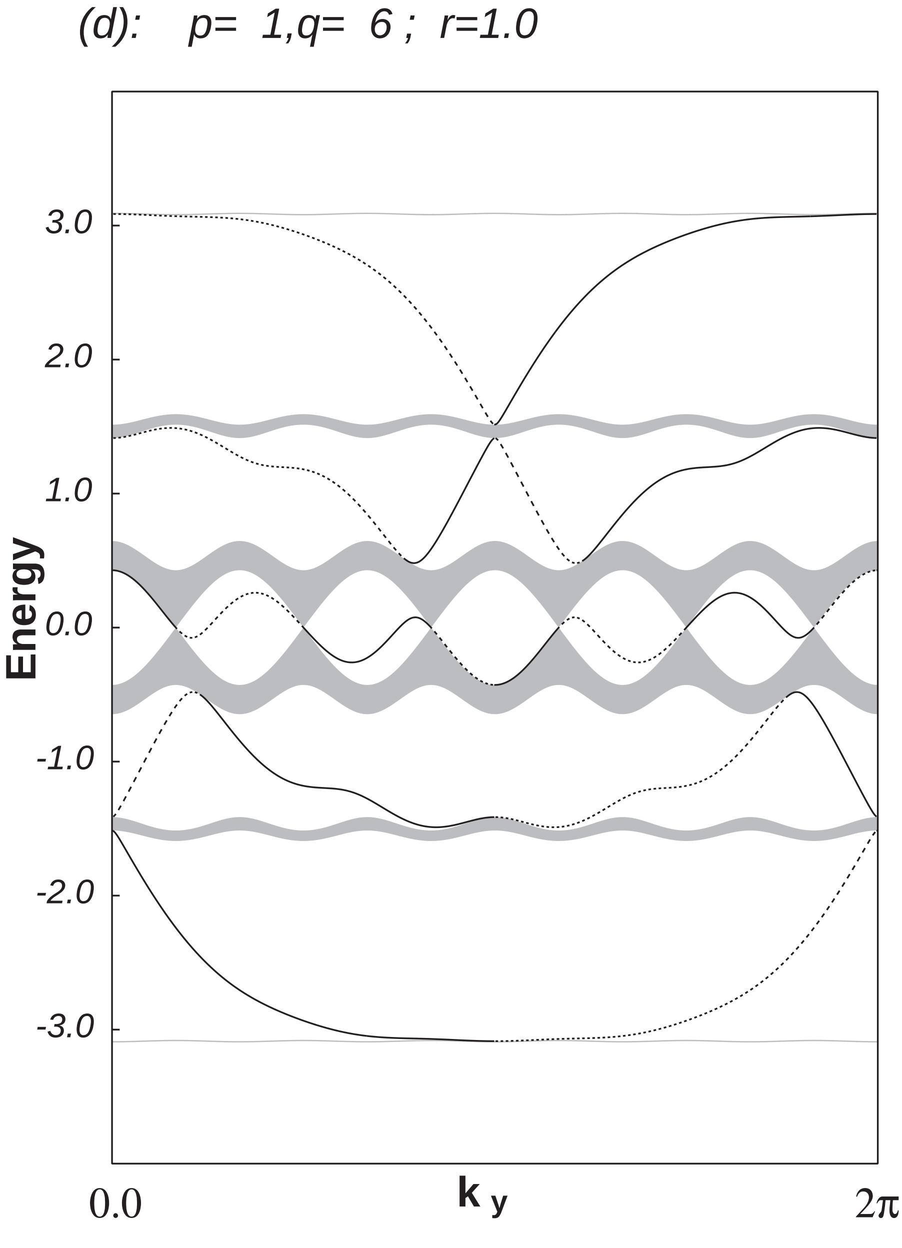


図 20: $\phi = \frac{1}{6}$ の場合のエネルギーバンド (斜線の領域) とエッジ状態のエネルギー (実線：右端に局在したエッジ状態、破線：左端に局在したエッジ状態)。エッジ状態が作る閉曲線のリーマン面上での交点数は下のエネルギーギャップから順に $1, 2$, 不定, $-2, -1$ である。この場合、ギャップが途中で閉じるトポロジカルチェンジが起きる例である。

図中では各波数 k_y ごとに複素エネルギー面としてのリーマン面 $\Sigma_g(k_y)$ を考える。そのときの安定なギャップの数が $g = q - 1$ で、図で斜線で示した q 個の領域がエネルギーバンド、その間の領域がエネルギーギャップである。そのエネルギーギャップの中の実線、及び点線がエッジ状態のエネルギー μ_j、すなわちブロッホ関数 Ψ_q のゼロ点で実線、点線はそのゼロ点がリーマン面 Σ_g 上 R^+, R^- にあること、つまりエッジ

状態が左端、または右端に局在していることを意味する。

一般的な状況にかえって、リーマン面上の基本的な閉ループ

$$\alpha_j, \quad j = 1, \cdots, q$$

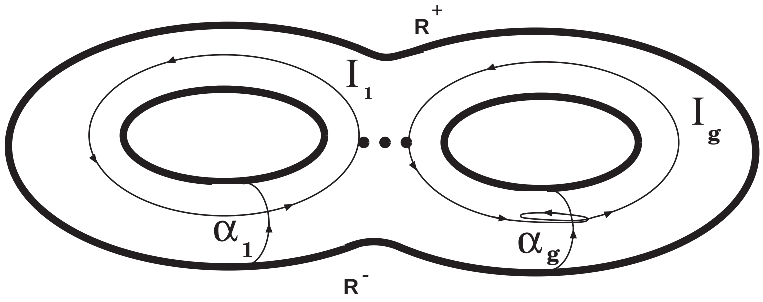


図 21: リーマン面上の閉曲線

を用いてブッロホ関数のゼロ点（エッジ状態のエネルギー）の回転数はエネルギーギャップごとに定義されるこの曲線 C_j と標準的な曲線 α_j との交点数となることも見て取れるであろう [27]。

$$I_j = I(\alpha_j, C_j)$$

なお交点数については曲線間の交点ごとに図 22 のように向きにより符号をつけた交点数を定義し、曲線 A, B 間の交点数 $I(A, B)$ はその和と定義される。

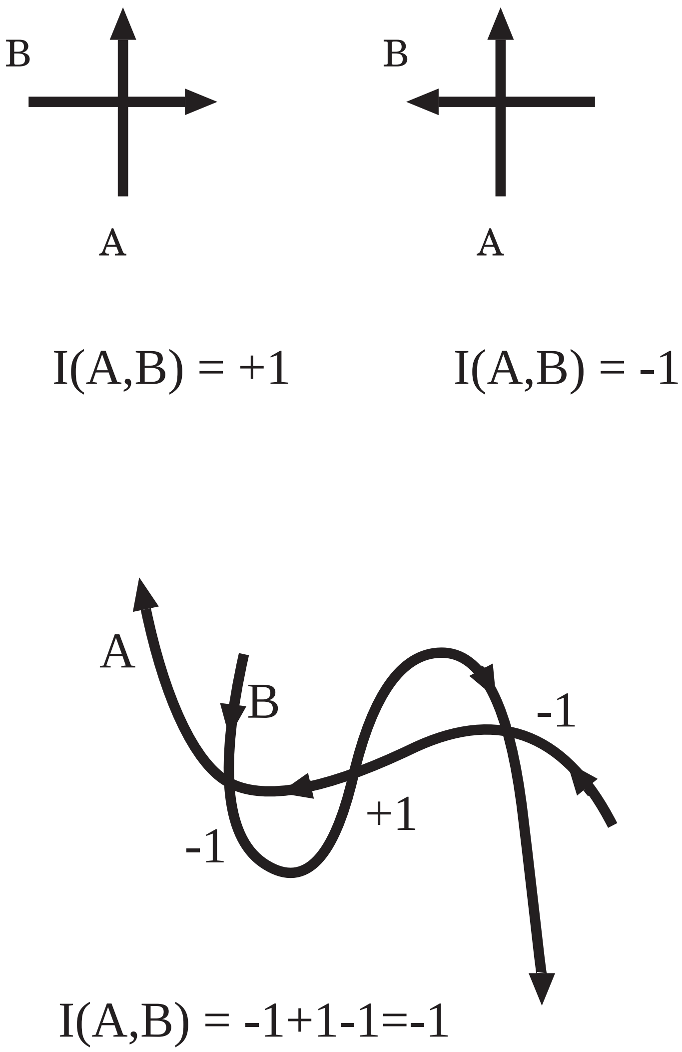


図 22: 曲線間の符号付き交点数

ここまでは数学の話だが、実は Laughlin の議論を用いるとこれが量子化されたホール伝導度となることがわかる。

これを次に説明しよう。

図の様にフェルミエネルギーがバルクのエネルギーギャップの中にある場合を考えよう。また y 方向の系の大きさ L_y も有限であることを思い出しすと波数 k_y が離散的となる。さらに波数と Aharonov-Bohm 磁束 Φ は

$$k_y + 2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}$$

と結合し離散化された波数は

$$k_y = 2\pi\frac{整数}{L_y}$$

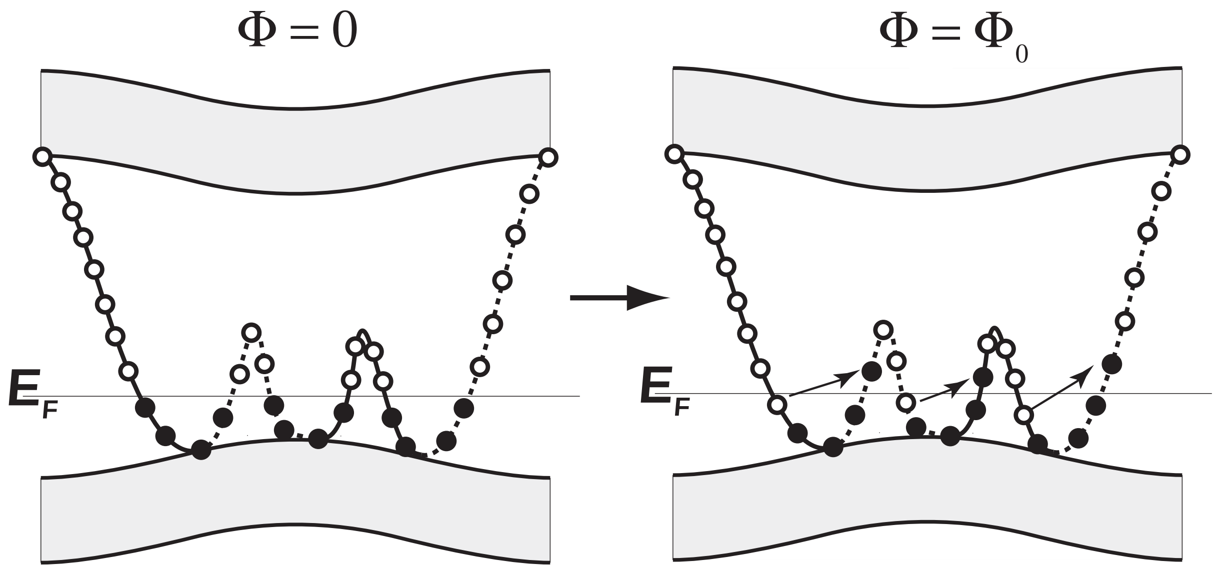


図 23: Laughlin の議論とエッジ状態、リーマン面上のゼロ点の移動の関係

であることに注意すれば、 Aharonov-Bohm 磁束 Φ を Φ_0 だけ変化させたとき一粒子状態全体は不変であることはすぐわかる。

特に図のようにフェルミエネルギーがギャップ内にある場合、図で黒丸で示したエッジ状態が占有されていることとなる。そこで Aharonov-Bohm 磁束 Φ を Φ_0 だけ断熱的に増加させると、マクロな系では左右のエッジ状態間の行列要素は系の大きさに関して指数関数的に小さいのでその間での遷移は起こらないと考えてよい。よってこの過程の終状態としては下図の様な占有状態となる。ここでこの過程の前後、つまり図の左右を比べると、エネルギーバンド内の状態（バルク状態）はすべて元の状態に戻ったがエッジ状態は一つだけ玉突き式にずれた状態となっているのがわかるだろう。ここで与えられる状態の変化の個数がこの過程により両境界間を左から右へ移動した電子の数であり、Laughlin の議論で不定であった整数である。またリーマン面上のブロッホ関数のゼロ点とエッジ状態の対応からこの整数はエッジ状態の作る閉曲線の回転数となる！

つまり

ホール伝導度のエッジ状態によるトポロジカルな表式

フェルミエネルギーが下から j 番目のエネルギーギャップにあるとき複素エネルギー面としてのしてのしてのブロッホ関数のゼロ点の作る閉曲線のリーマン面上の回転数（もしくは符号付き交点数）をもちいて、ホール伝導度は次のように与えられる [18]。

$$\sigma_{xy}^{j,\,\mathrm{edge}} = -\frac{e^2}{h} I(C_j)$$

3.4 ２つの位相不変量: — バルクかエッジか —

ここまでの議論でフェルミエネルギーが下から j 番目のエネルギーギャップの中にある場合系のホール伝導度に対して２つのトポロジカルな表式が与えられたこととなる。

$$
\begin{aligned}
\sigma_{xy}^{j,\,\mathrm{bulk}} &= -\frac{e^2}{h}C, \qquad C = \sum_{\ell=0}^{j} c_\ell \\
\sigma_{xy}^{j,\,\mathrm{edge}} &= -\frac{e^2}{h}I(C_j)
\end{aligned}
$$

この節ではこの２つの表式の間の関係を考えよう。チャーン数の位相幾何学的意味を議論した際用いたゲージによると Ψ_q のゼロ点周りの渦度の和としてチャーン数が与えられたことを思い出そう。転送行列の議論では規格化しない波動関数を常に扱っていたことに注意し、

$$\Psi_q = 0$$

はエッジ状態を定義したことを思い出そう。また x 方向の波数 k_x はブロッホの定理から

$$\rho = e^{iqk_x}$$

と対応し、バンド端の条件

$$\Delta = \pm 2$$

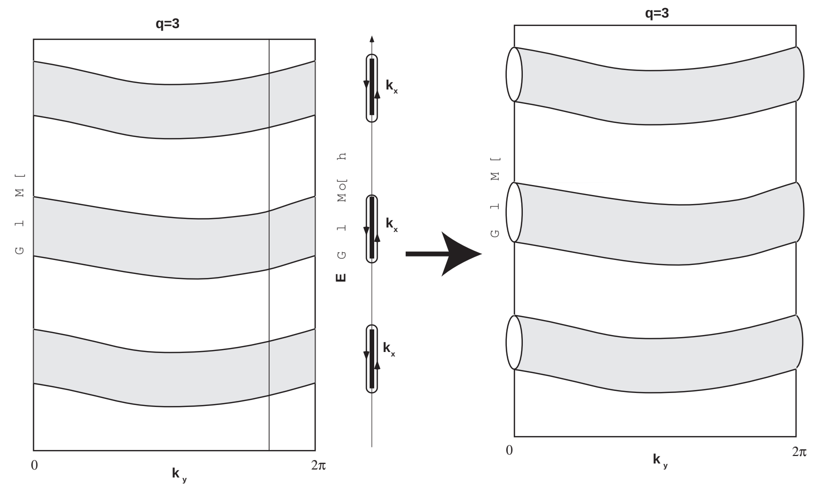


図 24: エッジ状態とバルクの関係。ブランチカットの領域は x 方向の波数 k_x でパラメトライズすると円となる (k_x の周期性)。

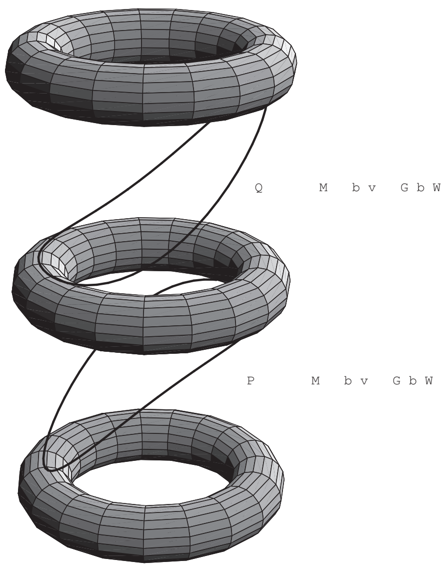


図 25: 図 24 のチューブの領域は $k_y = 0, 2\pi$ を同一視する事でトーラスとなる（磁気的ブリルアンゾーン)。さらにエッジ状態は概念的にはエネルギーバンドからなるトーラスをつなぐ閉曲線となる。

は $\rho = \frac{1}{2}(\Delta - \sqrt{\Delta^2 - 4})$ より

$$k_x = 0, 2\pi/q$$

と対応する。つまり概念的には前節で示したエネルギーバンドの領域はブリルアンゾーンがトーラスであることに対応して図のような筒状の領域と考えられ $k_y = 0, 2\pi$ を同一視することでトーラスとなる。これより、チャーン数に寄与するブロッホ関数のゼロ点はバンド端のみに存在し、具体的にはエッジ状態がエネルギーバンドに縮退する点であたえられることとなる。エネルギーバンドの上端と下端からの寄与を少していねいに調べると下から j 番目のエネルギーバンドのチャーン数 c_j と j 番目と $j-1$ 番目のエッジ状態を与えるブロッホ関数のゼロ点の回転数の間に

$$c_j = I(C_j) - I(C_{j-1})$$

という関係式が成り立つことがわかる。(微積分の基本定理 $\int_a^b dx\, f'(x) = f(b) - f(a)$ のアナログ) よって ($I(C_0) = 0$ に注意して)

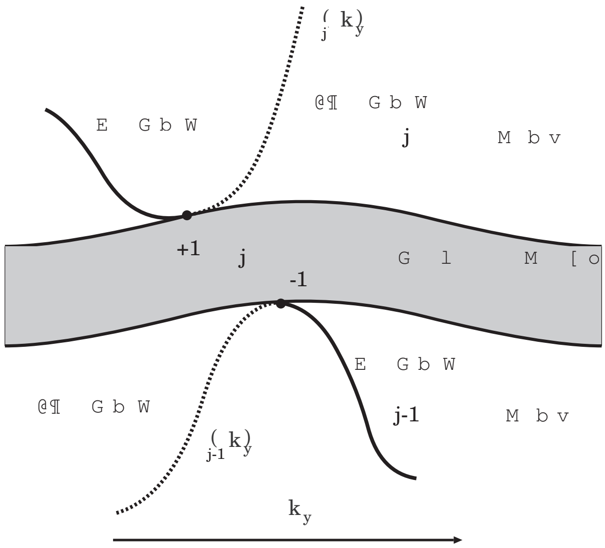


図 26: エッジ状態がエネルギーバンドに接するところでチャーン数を与える渦を与える。エネルギーバンドの上端、下端での接点で波動関数を展開すれば前節で説明したワインディング数 (交点数) とチャーン数の関係が与えられる。

エッジとバルク

$$
\begin{aligned}
\sigma_{xy}^{j,\mathrm{bulk}} &= -\frac{e^2}{h}\sum_{\ell=1}^{j} c_\ell = -\frac{e^2}{h}\sum_{\ell=1}^{j}\Big(I(C_j) - I(C_{j-1})\Big) \\
&= -\frac{e^2}{h} I(C_\ell) \\
&= \sigma_{xy}^{j,\mathrm{edge}}
\end{aligned}
$$

すなわち二つのトポロジカルな整数は等しい。つまりホール伝導度はバルクで考えてもエッジで考えても等しいこととなる [19]。