Quantized Hall Conductivity, Dirac Fermion and the Nielsen-Ninomiya Theorem

東大物性研 押川 正毅*

概要

2次元の相互作用のないBloch電子系のHall伝導度を考察する。このとき、バンドギャップが極小となる点は2＋1次元のDiracフェルミオンと見なすことができるが、一般にBloch電子系のHall伝導度の値は、Diracフェルミオンを用いた議論では与えられないことを示す。その一方で、ハミルトニアン中のパラメータを変化させた時にギャップが閉じるとHall伝導度は変化するが、この変化はDiracフェルミオンを用いた議論で正しく与えられることを証明する。証明には、3+1次元におけるNielsen-Ninomiyaの定理の'intuitive topological proof'を応用する。この証明を通じて、Hall伝導度のトポロジカルな側面とDiracフェルミオンの関係が明らかにされる。

1　序論

量子Hall効果の発見[1]以来，2次元電子系のHall伝導度の理論的な理解についてもいろいろな努力がなされてきた[2]。実験で見られるHall伝導度の量子化には不規則性の存在が本質的だと考えられているが、前提として、まず不規則性がないバルクの系でエネルギーギャップが存在していて、フェルミ準位がギャップ中にある時にHall伝導度が量子化されているということが重要であろう。例えば自由電子系の場合には、1電子状態はギャップで隔てられたLandau準位となり、それぞれのLandau準位はHall伝導度にe^2/hの寄与をする。

相互作用はないが周期的ポテンシャルがある場合、単位格子あたりの磁束が有理数ならばBlochの定理が適用でき、1電子状態はギャップで隔てられたバンドの集まりとなる。これを自由電子系に周期的ポテンシャルを印加していったと考えると、一つのLandau準位がいくつものサブバンドにわかれるので、各サブバンドのHall伝導度への寄与は分数($\times e^2/h$)になりそうにも思える。しかし、Thouless, Kohmoto, Nightingaleとden Nijs(TKNN) [4]はサブバンドのHall伝導度への寄与は常に整数になることを示した。自由電子系のLandau準位とは異なり、この整数は場合によって符号を変えることも興味深い。実験でもこれに対応すると考えられる現象が観測されている[3]。また、この整数は磁気Brillouinゾーン上でのトポロジカル不変量であることがKohmoto [5]によって指摘されている。

Hall伝導度がトポロジカルな意味を持つことはIshikawaら[6]によっても示されており、実験で観測される正確な量子化との関係が論じられている。また、最近Hatsugai [7]は端のある系でのHall伝導度も一種のトポロジカル不変量であることを指摘している。

一方、一般に大きな系の低エネルギーでのふるまいは、適当な場の理論で記述できることが多い。この考え方を今の問題に適用すると、バンドギャップが極小となる点のまわりの低エネルギー励起は2+1次元のDiracフェルミオンとして扱える。すると、Bloch電子系のHall伝導度についてもDiracフェルミオン（の集まり）として扱うことが考えられる。しかし、本来Bloch電子系のHall伝導度は磁気Brillouinゾーン全域にわたっての積分で与えられているのに対し、Diracフェルミオンを用いた議論はギャップが極小となる点の近傍しか見ていないので、これが正しいかどうかは自明ではない。そこで、本講演ではDiracフェルミオンを用いた議論がBloch電子系のHall伝導度について有効かどうか、およびトポロジカル不変量としてのHall伝導度との関係について議論した。

*e-mail: oshikawa@tkyvax.phys.s.u-tokyo.ac.jp

2 ナイーブな期待に対する反例

質量 m の Dirac フェルミオンの Hall 伝導度を適当な方法により計算すると、$-e^2/2h\mathrm{sgn}\ m$ となる [12, 13, 14]。これからまず期待されることは、Bloch 電子系の Hall 伝導度はフェルミ準位のあるギャップの極小に対応する Dirac フェルミオンからの寄与の和で与えられるということである。この考えに基づいた議論はいろいろな人 [10, 11, 15, 13] によってなされている。実際、ある種のタイトバインディング模型では正しいようであるが、一般にはこの期待は正しくない。

反例として、正方格子上で最近接および次近接ホッピングがあり、単位格子当たりの磁束が 1/3 であるようなタイトバインディング模型を考える。最近接ホッピングの大きさを 1、次近接ホッピングの大きさを t_c とする。

このモデルのエネルギースペクトルと Hall 伝導度は Hatsugai と Kohmoto [9] によって調べられている。その結果を用いると、例えば $0 < t_c < 0.3$ で各ギャップは 3 箇所で極小になる。一般に 3 つ以上のバンドがある時、ギャップの極小と Dirac フェルミオンの対応は明確ではないが、あるギャップが他のギャップに比べて非常に小さい時にはそのギャップをはさむ 2 つのバンドのみを考えることが正当化でき、Dirac フェルミオンが well-defined になる。今のモデルでは、$t_c \sim 0.268$ で 2 番目のギャップが閉じるので、少なくともその点の近傍では Dirac フェルミオンが 3 つあると言える。よって、先程の期待によれば 2 番目のギャップにフェルミ準位がある時、Hall 伝導度は e^2/h の半奇数倍になる筈である。しかし、TKNN の一般論によって Hall 伝導度は必ず e^2/h の整数倍なので、Dirac フェルミオンを用いたナイーブな期待は正しくない。

3 主定理

それでは、Dirac フェルミオンを用いた議論は Bloch 電子系の Hall 伝導度に対して無意味なのであろうか。実はそうでもなく、以下に示すことが成立する。

> 単位格子あたりの磁束を一定にしてハミルトニアン中のパラメータを変化させることを考える。（例えば、前節で挙げたモデルで次近接ホッピング t_c を変化させる。）このとき、Hall 伝導度はトポロジカル不変量なので通常は変化しない。ただし、（フェルミ準位の存在する）ギャップがつぶれた時には Hall 伝導度は変化する。このときの Hall 伝導度の変化は Dirac フェルミオンを用いた議論で正しく与えられる

4 Hall 伝導度と Chern 数

主定理の証明を説明する前に、準備として Bloch 電子系の Hall 伝導度について簡単にレビューする。周期ポテンシャル中の相互作用のない電子系について、単位格子あたりの磁束が有理数の時、拡大した単位格子を考えると Bloch の定理を適用することができる。すると、各（結晶）運動量 $\vec{k}$ について独立な Schrödinger 方程式

$$\hat{H}(\vec{k})u^i_{\vec{k}}(\vec{r}) = E^i u^i_{\vec{k}}(\vec{r}) \tag{1}$$

を考えることができる。ここで i はバンドを表し、$u^i_{\vec{k}}(\vec{r})$ は一般化された Bloch 条件を満たす波動関数である。

以下一つのバンドに注目し、バンドの添字は省く。各 $\vec{k}$ について波動関数 $u\vec{k}(\vec{r})$ の位相を勝手に変えても良いことに注意する。これは Brillouin ゾーン上での $U(1)$ ゲージ変換である。さらに、Brillouin ゾーン上でベクトル場

$$\hat{A}(\vec{k}) = \langle u(\vec{k})|\nabla_k|u(\vec{k})\rangle \equiv \int_{MUC} d^2r u^*_{\vec{k}}(\vec{r})\nabla_k u_{\vec{k}}(\vec{r}) \tag{2}$$

を定義すると、これは先ほどのゲージ変換に対応する Brillouin ゾーン上のゲージ場になる。数学的には Brillouin ゾーンを底空間とするファイバーバンドルを考えることになる。

さて、このゲージ場を用いると線形応答理論（Nakano-Kubo 公式）によると、あるバンドの Hall 伝導度への寄与は

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h}\frac{1}{2\pi i}\int_{MBZ} d^2k \nabla_k \times \hat{A}(\vec{k}) \tag{3}$$

で与えられる。Stokes の定理を用いると一見 σ_{xy} は常にゼロになってしまいそうだが、σ_{xy} はもちろん有限の値を取り得る。これはファイバーバンドルの非自明なトポロジーに関連していて、一般には一つのゲージ固定（波動関数

の位相の決め方）で Brillouin ゾーン全体をなめらかに覆うことはできず、 Brillouin ゾーンをいくつかの開集合で被覆し、それぞれで別のゲージ固定をしなくてはならない。例えば具体的に、適当な波動関数との内積 $\langle a|u(\vec{k})\rangle$ が実数になるようなゲージ固定を考える。これは一般になめらかなゲージ固定となりそうだが、内積がゼロとなるところでは特異性を持つ。そこで、内積のゼロ点のまわりでは別のゲージ固定をしなくてはならない。すると、 2 つのゲージ固定の間の位相のずれから (3) への寄与が生じる。

内積のゼロ点を vortex と呼ぶことにする。 vortex のまわりでの位相のずれは一周すると必ず 2π の整数倍になる。この整数をその vortex の vorticity と呼ぶことにする。すると、 (3) よりそのバンドに対応する Hall 伝導度は $e^2/h\times$ (total vorticity) に他ならない。 vortex の位置はゲージのとり方によるが、 total vorticity はゲージに依存せず、数学では Chern number として知られているトポロジカル不変量である。

5 主定理の証明

主定理の証明の方法を簡単に述べる。証明には、 Nielsen-Ninomiya の定理の ‘intuitive topological proof’ [8] が応用される。

Hall 伝導度の変化を考えるので、 Hamiltonian があるパラメータ λ になめらかに依存していると仮定する。このとき、 Bloch の定理を適用した Schroödinger 方程式 (1) も λ に依存する。もともと (1) には $\vec{k}=(k_x,k_y)$ がパラメータとして入っていたので、結局 (k_x,k_y,λ) を座標とする 3 次元のパラメータ空間上で $\hat{H}$ が定義されていると考えられる。

ギャップが閉じるという現象を考えてみよう。すなわち、パラメータ空間上の一点 $(\vec{k}=\vec{k}^*,\lambda=\lambda^*)$ で 2 つのバンドのエネルギーが縮退するのである。

この点の近傍では、縮退する 2 つのバンドだけ考えることができる。すなわち、有効ハミルトニアンとして 2 次元の状態空間に制限したものを考えて良い。これを

$$p=(p_x,p_y,p_z)=(\hbar(k_x-k_x{}^*),\hbar(k_y-k_y{}^*),\lambda-\lambda^*) \tag{4}$$

の 1 次までで展開しよう。 2×2 の Hermite 行列になること、 $\boldsymbol{p}=0$ で縮退することに注意すると、一般に

$$\hat{H}=E^*1+b\cdot p1+V^\nu_\mu\sigma^\mu p_\nu+O(p^2) \tag{5}$$

と書ける。 $\det V\neq 0$ という generic な場合を考えることにする。ここで適当なユニタリ変換と p についての一次変換をおこなうと

$$\hat{H}\sim \mathrm{sgn}(\det V)\tilde{p}_z\sigma^z+\tilde{p}_x\sigma^x+\tilde{p}_y\sigma^y, \tag{6}$$

の形にすることができる。ただし、 1 に比例する項は本質的でないので落した。また、 $\tilde{p}_z=$ (正の定数) $\times\, p_z$ である。これは質量 $\mathrm{sgn}(\det V)\tilde{p}_z$ の $2+1$ 次元 Dirac フェルミオンの 1 体のハミルトニアンに他ならない。

すなわち、パラメータ λ を変えていった時ギャップが閉じる点の付近では Dirac フェルミオンがあると考えられるが、ギャップが閉じる前後で質量の符号が変化する。その変化の向きは展開係数 V^ν_μ の行列式の符号で決まる。

なお、 Nielsen-Ninomiya の定理の証明においては、 (6) は $3+1$ 次元 Weyl フェルミオンの 1 体のハミルトニアンであり、 $\tilde{p}_z$ は運動量の第三成分である。今回の証明では、ハミルトニアンの依存するパラメータを導入することによって次元が 1 つ高い問題と形式的に同じ構造になったわけである。ただし、今回の問題では λ はもとのハミルトニアンが依存するパラメータであって、一次変換の際に運動量と混ざってはいけない。この点は Gram-Schmidt 分解を用いて解決される。

さて、次に 3 次元のパラメータ空間上で適当な波動関数 $|a\rangle$ について次のような集合

$$\{(k_x,k_y,\lambda)|\exists j:\langle a|u^j(\vec{k};\lambda)\rangle=0\} \tag{7}$$

を定義する。内積の実部と虚部がゼロなので 2 つの自由度が固定され、この集合は曲線の集まりとなる。これらの曲線を vortex line と呼ぶことにする。 vortex line の定義は vortex の定義と類似しているが、実際パラメータ空間のある λ での断面はその λ についての Brillouin ゾーンであり、 vortex line の断面が vortex である。 vortex line の向きを、断面の vorticity によって定義することにする。すなわち、図 1のように断面の vorticity が正ならば vortex line は上向き、断面の vorticity が負ならば vortex line は下向きとする。

すると、次の命題が成り立つ。これらは有効ハミルトニアン (6) を用いて簡単に示すことができる。

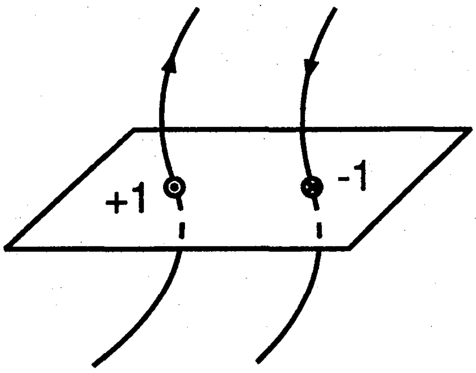

図 1: vortex line の向きの定義。断面の vorticity が正ならば上向き、負ならば下向きとする。

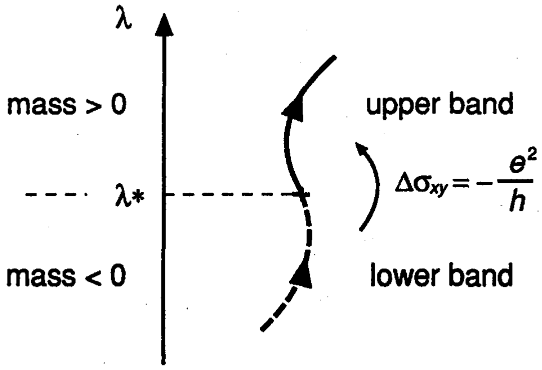

図 2: ギャップが閉じる点 ($\det V > 0$) を通る vortex line の例. 断面の vorticity が +1 で、上向きなので $\lambda < \lambda^*$ では下のバンド、$\lambda > \lambda^*$ では上のバンドにある。

- 任意のギャップが閉じる点に対して、その点を通る vortex line が一つ存在する
- そのギャップが閉じる点において $\det V > 0$ ならば votex line は、その向きに沿って見ると下のバンドから上のバンドに移る。$\det V < 0$ ならば上のバンドから下のバンドに移る。

これらを用いてギャップが閉じる前後での Hall 伝導度の変化を考えてみよう。ギャップが閉じる点で $\det V > 0$ としよう。まず、vortex line が $\lambda = \lambda^*$ の付近で λ が増加する方向に向かっている場合 (図 5) を考える。このとき、$\lambda = \lambda^*$ の近傍では断面の vorticity は +1 である。λ が増加して λ^* を超えると、この vortex line は下のバンドから上のバンドに移るので、下のバンドの total vorticity は 1 減少する。一方、vortex line の向きが逆だとすると、断面の vorticity は -1 になるが vortex line の移動も逆になるので、同様に λ が増加して λ^* を超えると下のバンドの total vorticity が 1 減少する。従って、vortex line の向きによらず、λ が増加して λ^* を超えると（フェルミ準位がこのギャップの中にあるとき）Hall 伝導度は e^2/h だけ減少する。

一方、Dirac フェルミオンを用いて考えても、(6) より $\lambda < \lambda^*(\tilde{p}_z < 0)$ では質量が負で, $\lambda > \lambda^*(\tilde{p}_z > 0)$ では質量が正になるので λ が増加して λ^* を超えると Hall 伝導度が e^2/h 減少することになり、正しい結論を与えることがわかる。

$\det V < 0$の場合も同様に考えることができる。また、同時に複数の点でギャップが閉じる時は、Hall伝導度の変化についてはそれぞれの点での寄与を加えればよいこともわかる。

6 結論

Bloch電子系のHall伝導度について、Diracフェルミオンを用いた議論はHall伝導度の値自体は与えられないが、ギャップの閉じる点の前後での変化は正しく記述する。後者は、Hall伝導度がBrillouinゾーン上でのトポロジカル不変量であることの一つの帰結であると考えられる。

この研究にあたり有意義な議論をして頂いた甲元眞人先生と本研究会で有益な議論をして頂いた石川健三先生に感謝します。

参考文献

[1] K. von Klitzing, G. Dorda and M. Pepper, Phys. Rev. Lett. **45**, 494 (1980).

[2] レビューとして、例えばR. E. Prange and S. M. Girvin (eds), *The Quantum Hall Effect*, Springer-Verlag (1988).

[3] 長谷川 泰正, 本研究会

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

[5] M. Kohmoto, Ann. Phys. (N.Y.) **160**, 343 (1985).

[6] K. Ishikawa, Phys. Rev. Lett. **53**, 1615; N. Imai, K. Ishikawa, T. Matsuyama and I. Tanaka, Phys. Rev. B **42**, 10610; K. Ishikawa, Prog. Theor. Phys. Suppl. **107**,167.

[7] Y. Hatsugai, "Edge states in the integer quantum Hall effect and the Riemann surface of the Bloch function", Phys. Rev. B (to be published); Y. Hatsugai, "The Chern number and the Edge States in the Integer Quantum Hall Effect", MIT preprint.

[8] H. B. Nielsen and M. Ninomiya, Nucl. Phys. B **193**,173 (1981).

[9] Y. Hatsugai and M. Kohmoto, Phys. Rev. B **42**, 8282 (1990).

[10] G. W. Semenoff, Phys. Rev. Lett. **53**, 2449 (1984).

[11] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **61**, 2015 (1988).

[12] A. Redlich, Phys. Rev. Lett. **52**, 18 (1984).; A. J. Niemi and G. W. Semenoff, Phys. Rev. Lett. **51**, 2077 (1983). S. Deser, R. Jackiw and S. Templeton, Phys. Rev. Lett. **48**, 975 (1982).

[13] W. Chen, M. P. A. Fisher and Y. S. Wu, Univ. of British Columbia preprint UBCTP-92-28.

[14] DiracフェルミオンのHall伝導度は正則化に依存するが、本文で述べた値が後で示すように（少なくともBloch電子系に対しては）ある意味でoptimalである。

[15] K. Ishikawa, Phys. Rev. D **31**, 1432 (1985).