

# 強相関電子系における波数空間上の量子計量と チャーン数の関係

柏原 昂紘

2023 年 1 月 18 日



# 概要

現代の凝縮系理論においては、物理学の幾何学的側面が重要な役割を果たす。最も重要な幾何学的量の一つは、チャーン数に寄与するベリー曲率である。そのベリー曲率と対をなすのが量子計量であり、量子幾何テンソルの虚部がベリー曲率、実部が量子計量となっている。量子計量は数学的には「計量」と呼ばれる半正定値対称テンソルであり、パラメータ空間上に距離を定義する。相互作用の無い系においては、様々な物理量に量子計量が現れることが知られており、運動量空間上の量子計量とトポロジカル不変量との関係も指摘されている。特に、量子幾何テンソルの半正定値性を応用することで、量子計量とチャーン数の関係が詳しく調べられている。

ところで、電子系のトポロジーは、相互作用がある場合にも盛んに研究されている。その際に用いられる手法の一つは、チャーン数などのトポロジカル不変量をグリーン関数で記述するというものである。相互作用の効果はグリーン関数の自己エネルギーとして取り入れることが出来る。

一方で、波数空間上の量子計量については、相互作用がある系への拡張が Wei Chen らによって提案されているものの、その定義はブロッホ波動関数を用いており、相互作用の効果十分に反映したものとは言えない。ひねり境界条件に基づく量子計量は相互作用がある場合にも基底状態の波動関数を用いて定義できるが、一般の系で基底状態を求めるのは困難である。しかし、強相関係においても一粒子状態は物理量に寄与するはずであるから、この状態を用いた量子計量を定義すれば、強相関係を調べる一つの道具として役立つと期待できる。

そこで、本研究では、すでに知られている光学伝導度と量子計量の間を用いて、運動量空間上の量子計量を相互作用がある場合に拡張する (Generalized Quantum Metric, 以下 GQM)。この GQM は一粒子グリーン関数で記述される光学伝導度に基づいている。GQM は一般にブロッホ波動関数ではなくスペクトル関数の固有状態を用いて表されるから、系の一粒子状態の情報をよく表している。我々は、自由な系において GQM が既存の量子計量に一致することと、GQM が半正定値性を持つことを解析的に示した。したがって、GQM は既存の量子計量の拡張になっており、数学的にも計量としての性質を

満たしている。さらに、チャーン絶縁体の模型として知られる Qi-Wu-Zhang(QWZ) 模型に局所的な斥力相互作用を加えた模型に対して GQM を数値的に計算し、GQM が相互作用のある場合にもトポロジカル不変量と関係があることを示した。相互作用がある場合の自己エネルギーを得る際には動的平均場理論 (DMFT) と数値繰り込み群 (NRG) を用いた。この結果から、GQM は一般の系でトポロジを判定するのに役立つと期待される。

# 目次

第 1 章	イントロダクション	1
第 2 章	量子計量の定義と基本的性質	3
2.1	一つの固有状態に対する量子計量 . . . . .	3
2.2	複数の固有状態に対する量子計量 . . . . .	6
第 3 章	量子計量と物理量の関係	9
3.1	電気伝導度との関係 . . . . .	9
3.2	ワニエ関数の位置揺らぎとの関係 . . . . .	13
第 4 章	強相関電子系における運動量空間上の量子計量	17
4.1	相互作用がある系のトポロジ . . . . .	17
4.2	グリーン関数を用いた波数空間上の量子計量 (GQM) の定義 . . . . .	18
4.3	GQM の半正定値性 . . . . .	22
4.4	GQM とチャーン数の関係 . . . . .	24
第 5 章	本研究で扱うモデルと理論的手法	25
5.1	モデルのハミルトニアンとその対称性 . . . . .	25
5.2	トポロジの判定手法 . . . . .	28
5.3	動的平均場理論 . . . . .	29
第 6 章	数値計算結果	33
6.1	$U = 0$ の場合 . . . . .	33
6.2	$U > 0$ の場合 . . . . .	34
第 7 章	結論	39
	参考文献	43



## 第 1 章

# イントロダクション

物理学の幾何学的側面は、ゲージ理論、トポロジカル欠陥の分類など [1] 様々な物理の理論を構築するために重要な役割を果たしてきた。近年の凝縮系物理においては、運動量空間上の固有ベクトルの幾何学的側面が大きな注目を集めている [2, 3, 4, 5, 6]。運動量空間上の幾何学的量で最も重要な量の一つはベリー曲率である。ベリー曲率の運動量空間上の積分値は量子化し、チャーン数と呼ばれる、量子ホール効果に寄与するトポロジカル不変量に比例する [7]。このベリー曲率と対をなすの量子計量である。量子幾何テンソルの虚部がベリー曲率に比例するのに対し、量子幾何テンソルの実部が量子計量である [8]。量子計量はいわゆる「計量」であり、運動量空間上に距離を定義する。近年の研究では、超伝導 [9, 10, 11, 12]、光学応答 [13, 14, 15]、非エルミート物理学 [16, 17] など様々な凝縮系物理学の分野において、量子計量が重要な役割を果たすことが明らかにされている。

量子計量の積分値は量子化しないものの、量子計量とトポロジーとの関係が報告されている。例えば、量子計量の積分値 (具体的には、量子計量のトレースと、量子計量によって定義されるパラメータ空間の体積 (量子体積)) とチャーン数の関係が指摘されている [9, 18, 19, 20]。文献 [18] では、量子体積によってチャーン数がある程度推定できることが数値的に確かめられている。さらに、脆弱なトポロジー (fragile topology) との関係 [21, 10] や Su-Schrieffer-Heeger (SSH) 模型の巻き付き数との関係 (文献 [21] のサプリを参照) も指摘されている。また、文献 [22] で指摘されているワニエ関数と量子計量の関係も、間接的に量子計量とチャーン数の関係を示している。

物理系のトポロジーは、相互作用がある系においても盛んに研究されている [23, 24]。本来、トポロジカル不変量は自由な系においてブロッホハミルトニアンから定義されるものであるので、相関がある場合には同様の議論ができない。しかし、トポロジカル不変量を 1 粒子グリーン関数で記述することによって、一般的にトポロジカル不変量を定義することが出来る [25, 26, 27, 28]。例えば、上で述べたチャーン数は、グリーン関数で表される式を運動量空間と周波数空間で積分した形で書くことが出来る [25, 29]。チャーン数は

元々ベリー曲率を運動量空間で積分したものだったが、相互作用がある場合にはグリーン関数の周波数依存性を消す必要があるため、周波数空間でも積分しなければならない。相互作用の効果はグリーン関数の自己エネルギーに含まれており、この一般化されたチャーン数も量子化する。

一方で、運動量空間上の量子計量の強相関系における定義は、文献 [30] で提案されているものの、その定義は自由な系の場合と同様にブロッホハミルトニアン固有状態を用いており、系の情報を十分に反映したものとは言えない。(ひねり境界条件によって定義される量子計量は相関がある場合でも定義できる [31, 32, 33]。しかし、その定義は系の基底状態を用いているため、一般の系で実際に計算するのは困難である)

本研究では、1 粒子グリーン関数を用いて運動量空間上の一般化された量子計量 (Generalized Quantum Metric、以下 GQM) を定義することを提案する [34]。のちに示すように、GQM は自由な系では既存の定義 [22] と一致する。また、相互作用がある場合も半正定値性を保つので、一般の系で計量として機能する。

本論文は以下のように構成される; まず、第 2 章では量子計量の導入を行い、量子計量と関連する量である量子幾何テンソルとベリー曲率も含めて、よく知られた基本的性質を振り返る。第 3 章では、電気伝導度とワニエ関数位置のゆらぎに話題を絞って、量子計量と物理量の関係を述べる。この章では、量子計量とチャーン数の関係についても解説する。第 4 章では、本研究の主題である、GQM の定義を述べ、自由な系において既存の定義に一致することと半正定値性を持つことを解析的に示す。第 5 章では、本研究の数値計算で扱ったモデルと理論的手法について説明する。トポロジを調べる際は対称性が重要な役割を果たすので、モデルの対称性に特について詳しく述べる。第 6 章では相互作用がある系での GQM の計算結果を示す。この結果から、GQM は相互作用がある場合でもトポロジーとの関係があることが分かる。最後に、第 7 章で本研究の内容をまとめ、結論を述べる。



## 第 2 章

# 量子計量の定義と基本的性質

この章では、本研究の主題である量子計量を定義し、その基本的性質について説明する。あらかじめ注意しておく、量子計量の定義には一つの固有状態に着目する場合と複数の固有状態に着目する場合との 2 通りがあり、本研究で強相関系に拡張されるのは複数の固有状態に着目したものである。以下では、ハミルトニアン  $H$  の  $n$  番目の固有状態についての量子計量は  $g_{ij}^n(\lambda)$  などのように上付き添え字を示すことでこれら 2 つを区別する。

### 2.1 一つの固有状態に対する量子計量

量子計量や量子幾何テンソル、ベリー曲率を定義する際には、何かしらのパラメータ族  $\{\lambda_i\}_i$  について滑らかなハミルトニアン  $H(\lambda) = H(\lambda_1, \lambda_2, \dots)$  と、滑らかな固有状態  $|\Psi_n(\lambda)\rangle$  が必要である [31]。これらを用いて、まず量子幾何テンソルが以下の式で定義される；

$$\chi_{ij}^n(\lambda) = \langle \partial_{\lambda_i} \Psi_n(\lambda) | (1 - |\Psi_n(\lambda)\rangle \langle \Psi_n(\lambda)|) | \partial_{\lambda_j} \Psi_n(\lambda) \rangle \quad (2.1)$$

ただし、 $|\partial_{\lambda_i} \Psi_n(\lambda)\rangle$  は  $|\Psi_n(\lambda)\rangle$  の  $\lambda_i$  についての偏微分を表す。 $1 - |\Psi_n(\lambda)\rangle \langle \Psi_n(\lambda)|$  は、 $|\Psi_n(\lambda)\rangle$  の張る空間を除いた空間への射影演算子、つまり直交射影を行う演算子である。この直交射影を  $Q_n$  と書き、量子力学的状態間の内積を  $(\cdot, \cdot)$  で表すと、

$$\chi_{ij}^n(\lambda) = (|\partial_{\lambda_i} \Psi_n(\lambda)\rangle, Q_n |\partial_{\lambda_j} \Psi_n(\lambda)\rangle) \quad (2.2)$$

となるが、ヒルベルト空間上の射影演算子の一般的性質である  $Q_n^2 = Q_n$  およびエルミート性を用いると、

$$\chi_{ij}^n(\lambda) = (|\partial_{\lambda_i} \Psi_n(\lambda)\rangle, Q_n |\partial_{\lambda_j} \Psi_n(\lambda)\rangle) \quad (2.3)$$

$$= (|\partial_{\lambda_i} \Psi_n(\lambda)\rangle, Q_n^2 |\partial_{\lambda_j} \Psi_n(\lambda)\rangle) \quad (2.4)$$

$$= (Q_n |\partial_{\lambda_i} \Psi_n(\lambda)\rangle, Q_n |\partial_{\lambda_j} \Psi_n(\lambda)\rangle) \quad (2.5)$$

と書くこともできる。つまり、 $\chi_{ij}^n(\lambda)$  は固有ベクトルを微分して射影したものの同士で内積を取ったものとわかる。これにより、量子計量と複素射影空間の Fubini-Study 計量 [1] とのつながりが分かる。

また、各  $\lambda$  に対し、 $\{\chi_{ij}^n(\lambda)\}_{ij}$  を行列とみなすこともできる。すると、

$$\chi_{ij}^{n*}(\lambda) = (Q_n |\partial_{\lambda_i} \Psi_n(\lambda)\rangle, Q_n |\partial_{\lambda_j} \Psi_n(\lambda)\rangle)^* \quad (2.6)$$

$$= (Q_n |\partial_{\lambda_j} \Psi_n(\lambda)\rangle, Q_n |\partial_{\lambda_i} \Psi_n(\lambda)\rangle) \quad (2.7)$$

$$= \chi_{ji}^n(\lambda) \quad (2.8)$$

であるから、 $\{\chi_{ij}^n(\lambda)\}_{ij}$  はエルミート行列、特に固有値は実である。さらに、任意の複素数列  $\{z_i\}_i$  に対し、

$$\sum_{ij} z_i^* \chi_{ij}^n(\lambda) z_j = \sum_{ij} (z_i |\partial_{\lambda_i} \Psi_n(\lambda)\rangle, Q_n z_j |\partial_{\lambda_j} \Psi_n(\lambda)\rangle) \quad (2.9)$$

であるが、

$$|\phi_n(\lambda)\rangle = \sum_i z_i |\partial_{\lambda_i} \Psi_n(\lambda)\rangle \quad (2.10)$$

とおくと、

$$\sum_{ij} z_i^* \chi_{ij}^n(\lambda) z_j = (|\phi_n(\lambda)\rangle, Q_n |\phi_n(\lambda)\rangle) \geq 0 \quad (2.11)$$

が成り立つ。最後の不等号は射影演算子の半正定値性から従う。よって、 $\{\chi_{ij}^n(\lambda)\}_{ij}$  は半正定値エルミート行列である。

量子計量とベリー曲率はそれぞれ、量子幾何テンソルの実部と虚部に対応している；

$$g_{ij}^n(\lambda) = \text{Re} \chi_{ij}^n(\lambda) \quad (2.12)$$

$$\Omega_{ij}^n(\lambda) = -2\text{Im} \chi_{ij}^n(\lambda) \quad (2.13)$$

$\{\chi_{ij}^n(\lambda)\}_{ij}$  がエルミートであることから、 $\{g_{ij}^n(\lambda)\}_{ij}$  は実対称行列、 $\{\Omega_{ij}^n(\lambda)\}_{ij}$  は実反対称行列となっていることが分かる。また、 $\{g_{ij}^n(\lambda)\}_{ij}$  は実対称行列としての半正定値性を持っている。この証明は量子幾何テンソルの半正定値性の証明と全く同様であるが、後に GQM の半正定値性を示すときに同じアイデアを用いるので念のため確認しておく。

任意の実数列  $\{c_i\}_i$  に対し、

$$\sum_{ij} c_i g_{ij}^n(\lambda) c_j = \frac{1}{2} \sum_{ij} c_i \left[ (|\partial_{\lambda_i} \Psi_n(\lambda)\rangle, Q_n |\partial_{\lambda_j} \Psi_n(\lambda)\rangle) + \right. \quad (2.14)$$

$$\left. (|\partial_{\lambda_j} \Psi_n(\lambda)\rangle, Q_n |\partial_{\lambda_i} \Psi_n(\lambda)\rangle) \right] c_j \quad (2.15)$$

であるが、

$$|\phi_n(\lambda)\rangle = \sum_i c_i |\partial_{\lambda_i} \Psi_n(\lambda)\rangle \quad (2.16)$$

とおくと、 $c_i$  が実数であることにより

$$\sum_{ij} c_i g_{ij}^n(\lambda) c_j = (|\phi_n(\lambda)\rangle, Q_n |\phi_n(\lambda)\rangle) \geq 0 \quad (2.17)$$

が成り立つ。

量子幾何テンソルの半正定値性は、パラメータが2つのとき(2次元系など)に量子計量とベリー曲率との間に成り立つ不等式を導くのに役立つ[9]。例えば、式(2.11)において、特に  $z_x = 1, z_y = -i$  の場合を考えれば、

$$g_{xx}^n(\lambda) + g_{yy}^n(\lambda) + \Omega_{xy}^n(\lambda) \geq 0 \quad (2.18)$$

また、 $z_x = 1, z_y = -i$  の場合を考えれば、

$$g_{xx}^n(\lambda) + g_{yy}^n(\lambda) - \Omega_{xy}^n(\lambda) \geq 0 \quad (2.19)$$

が導かれる。従って、

$$\text{Tr}(g^n(\lambda)) = g_{xx}^n(\lambda) + g_{yy}^n(\lambda) \geq |\Omega_{xy}^n(\lambda)| \quad (2.20)$$

が成り立つ。ベリー曲率はチャーン数と関係する量なので、 $\text{Tr}(g^n(\lambda))$  はチャーン絶縁体において大きくなることが期待される。この点については次章以降でも議論する。

Fubini-Study 計量との関係も簡単に説明しておく。(Fubini-Study 計量自体の説明は文献[1]参照) 例として、Su-Schrieffer-Heeger(SSH) 模型のブロッホハミルトニアン[35, 36]

$$H(k) = (t_1 + t_2 \cos(k))\sigma_x + t_2 \sin(k)\sigma_y \quad (2.21)$$

を考える。ここで、 $t_1, t_2$  は2種類のホッピングであり、 $\sigma_x, \sigma_y$  はパウリ行列である。結晶運動量  $k$  をパラメータ  $\lambda$  だと思えば、このハミルトニアンに対して量子計量が定義できる(今回の場合1次元の模型なので、量子幾何テンソルと量子計量は一致し、ベリー曲率は0)。以下では  $t_1 = 0, t_2 = 1$  とする。このとき、エネルギー固有値は  $\pm 1$  であるが、エネルギー  $-1$  に対応する固有状態は

$$|u(k)\rangle = (1, -\exp(ik))^T / \sqrt{2} \quad (2.22)$$

である。上で述べた定義に基づいて計算すると、

$$g_{11}(k) = \langle \partial_k u(k) | (1 - |u(k)\rangle \langle u(k)|) | \partial_k u(k) \rangle = 1/4 \quad (2.23)$$

と分かるが、これを Fubini-Study 計量から計算してみよう。固有ベクトル  $|u(k)\rangle$  は、複素射影空間 (今回は  $\mathbb{C}P^1$ ) の元としては  $[|u(k)\rangle] = -\exp(ik)$  であり、これを微分すると  $\partial_k[|u(k)\rangle] = -i\exp(ik)$  となる。 $\mathbb{C}P^1$  の局所座標を  $\xi$  で表すと、Fubini-Study 計量はケーラー形式が

$$\Omega = i \frac{1}{(1 + |\xi|^2)^2} d\xi \wedge d\bar{\xi} \quad (2.24)$$

で与えられるようなケーラー計量である。つまり、 $J$  を複素構造として、 $Z$  を  $\mathbb{C}P^1$  の接空間の元としたとき、 $g(Z, Z) = \Omega(Z, JZ)$  である。今回の場合は、 $\xi = -i\exp(ik)$ ,  $Z = -i\exp(ik) \frac{\partial}{\partial \xi}$ ,  $JZ = \exp(ik) \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}}$  とすれば良い。ただし、 $JZ$  の係数は内積を取る際に複素共役にする必要がある。そうすれば、

$$g_{11}(k) = \Omega(Z, JZ) \quad (2.25)$$

$$= i \cdot \frac{1}{(1 + |-i\exp(ik)|^2)^2} \cdot (-i\exp(ik)) \cdot (\exp(-ik)) \quad (2.26)$$

$$= 1/4 \quad (2.27)$$

となり、式 (2.23) の結果と一致する。

## 2.2 複数の固有状態に対する量子計量

前節では一つの固有状態に対する量子計量、量子幾何テンソル、ベリー曲率を定義したが、特にパラメータ  $\lambda$  が結晶運動量  $k$  でフェルミオン系である場合には、占有されている状態全てに対してこれらの量が定義されることも多い。具体的には、量子幾何テンソルが

$$\chi_{ij}(k) = \sum_{n:\text{occupied}} \langle \partial_{k_i} u_n(k) | \left( 1 - \sum_{m:\text{occupied}} |u_m(k)\rangle \langle u_m(k)| \right) | \partial_{k_j} u_n(k) \rangle \quad (2.28)$$

で与えられ、量子計量とベリー曲率はこれまでと同様に

$$g_{ij}(k) = \text{Re} \chi_{ij}(k) \quad (2.29)$$

$$\Omega_{ij}(k) = -2\text{Im} \chi_{ij}(k) \quad (2.30)$$

で定義される。ただし、 $|u_n(k)\rangle$  はブロッホハミルトニアン  $H(k)$  の固有状態である。本研究において強相関系に定義を拡張するのは、この定義の量子計量であるので注意されたい。前節の場合と違うのは占有されている状態で和を取っているところであり、射影演算子

$$Q = 1 - \sum_{m:\text{occupied}} |u_m(k)\rangle \langle u_m(k)| \quad (2.31)$$

は占有されていない状態への射影を行う。これに伴い、この量子計量は Fubini-Study 計量ではなくなっていることに注意。その代わりに、複素射影空間  $\mathbb{C}P^n$  ではなく複素グラ

グラスマン多様体上の計量となっている。グラスマン多様体は射影空間の一般化と呼べるもので、射影空間が直線 (1 次元部分空間) の集まりであるのに対し、グラスマン多様体は平面なども含めた部分空間の空間の集まりである [1]。2 バンドのモデルで一つのバンドが占有されている系においては、この 2 つの定義は一致するが、一般には一致しない。また、各バンドの  $\chi_{ij}^n(k)$  を  $n$  について足し上げても  $\chi_{ij}(k)$  とは一般に等しくならない。

しかし、量子幾何テンソルテンソルと量子計量の半正定値性や、量子計量とベリー曲率の間の不等式は同様に成り立つ。



## 第 3 章

# 量子計量と物理量の関係

前章では述べた量子計量の定義と基本的性質について確認したが、物理量との関わりについては触れなかった。第 1 章で触れたように、量子計量は超伝導状態も含めた光学応答、トポロジー、ワニエ関数との関係がある。この章では、特に電気伝導度と量子計量の関係、ワニエ関数の位置揺らぎと量子計量の関係について詳しく見ていく。この章以降、 $\hbar = e = k_B = 1$  となる単位系を用い、結晶格子の格子定数は 1 とする。

### 3.1 電気伝導度との関係

筆者が知る限り、一番よく知られているのは電気伝導度との関係である（イントロダクションで引用した論文も参照されたい）。前章での量子幾何テンソルの定義（例えば式 2.1）などからは、伝導度との関係は一見分かりづらいが、固有ベクトルの微分をハミルトニアンの微分に押し付けて [31]

$$\chi_{ij}^n(\lambda) = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \Psi_n(\lambda) | \partial_{\lambda_i} H(\lambda) | \Psi_m(\lambda) \rangle \langle \Psi_m(\lambda) | \partial_{\lambda_j} H(\lambda) | \Psi_n(\lambda) \rangle}{(E_n(\lambda) - E_m(\lambda))^2} \quad (3.1)$$

と書き直せば、摂動論の公式に似ていることに気づく。ただし、添え字  $n, m$  はエネルギー順位を表し、 $E_n(\lambda)$  は  $n$  番目のエネルギー固有値である。したがって、摂動項が  $\partial_{\lambda_j} H(\lambda)$  の形で与えられるような場合には、量子幾何テンソルや量子計量、Berry 曲率は物理量に現れると予想される。その例がまさに光学応答であり、ベクトルポテンシャル  $A$  を length gauge で扱う際の応答の計算では

$$H(k + A) = H(k) + \partial_k H(k) \cdot A + \dots \quad (3.2)$$

のようにブロッホハミルトニアンを摂動展開することになる（詳しい計算は例えば文献 [37] を参照されたい）。したがって、結晶運動量  $k$  をパラメータ  $\lambda$  とみなせば、運動量空

間上の量子計量などが光学応答に現れることが分かる。実際、例えば光学伝導度との関係式 [32]

$$\text{Re} \int_0^\infty d\omega \frac{\sigma_{\alpha\beta}(\omega) + \sigma_{\beta\alpha}(\omega)}{2\pi\omega} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int dk g_{\alpha\beta}(k) \quad (3.3)$$

が知られている ( $d$  は系の次元)。後の章では、この関係式を使って運動量空間上の量子計量を強相関係にも定義する。

実は、電気伝導度と関係があるのは運動量空間上の量子計量だけでなく、ひねり境界条件によって導入される量子計量も関係する。以下ではこれについて文献 [32] に基づいて解説する。

通常、物理系を理論的に扱う際には、系に周期境界条件を課することが多い。つまり、系のサイズを  $L$  としたとき、波動関数は周期性

$$\Psi(x + L) = \Psi(x) \quad (3.4)$$

を満たすと仮定される。これに対し、ひねり境界条件の下では、波動関数は周期性を持たず

$$\Psi(x + L) = \exp(i\theta)\Psi(x) \quad (3.5)$$

のように位相因子  $\theta$  が伴う。この  $\theta$  をパラメータ  $\lambda$  とみなせば、ひねり角空間上の量子計量が定義できるのである。具体的には、まずゲージ変換

$$|\Phi_\theta\rangle = \exp(-i\theta \cdot \hat{x}/L)|\Psi\rangle \quad (3.6)$$

を行う。ここで、 $\hat{x}$  は位置演算子である。すると、このゲージ変換と  $|\Psi\rangle$  のひねり境界条件が打ち消しあい、 $|\Phi_\theta\rangle$  は周期境界条件を満たすことが分かる。さらに、 $|\Psi\rangle$  に対するシュレディンガー方程式を

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E_\theta|\Psi\rangle \quad (3.7)$$

とすると、 $|\Phi_\theta\rangle$  は同じ  $E_\theta$  に対する固有値方程式

$$\hat{H}_\theta|\Phi_\theta\rangle = E_\theta|\Phi_\theta\rangle \quad (3.8)$$

を満たす。ただし、ここで

$$\hat{H}_\theta = \exp(-i\theta \cdot \hat{x}/L)\hat{H}\exp(i\theta \cdot \hat{x}/L) \quad (3.9)$$

である。つまり、ひねり境界条件下でのシュレディンガー方程式 (3.7) は、周期境界条件下でのシュレディンガー方程式 (3.8) と等価であると分かった。さらに、いわゆる



Baker–Campbell–Hausdorff の公式を使うことで  $H_\theta$  の具体的な表式を得ることができ、例えば強束縛模型 (tight-binding model) では単にブロッホハミルトニアンを

$$H(k) \mapsto H(k + \theta/L) \quad (3.10)$$

と置き換えればよい。上式は、length gauge でのベクトルポテンシャル  $\theta/L$  が存在する系に等価だから、結局、ひねり境界条件を課すことは、周期境界条件の下で磁束を導入することと等価であると分かった。

ひねり角空間での量子幾何テンソルは、上の  $|\Phi_\theta\rangle$  を用いて

$$\chi_{ij}(\theta) = \langle \partial_{\theta_i} \Phi_\theta | (1 - |\Phi_\theta\rangle\langle\Phi_\theta|) | \partial_{\theta_j} \Phi_\theta \rangle \quad (3.11)$$

と定義される。量子計量とベリー曲率も同様である。この定義は相互作用がある場合にも well-defined である点がメリットだが、現実的には相互作用がある系で多体の波動関数を求めることは非常に困難であると思われる。

ひねり境界条件はやや人工的概念で、物理量との関連が見出しにくいように思われるが、実はひねり角空間上の量子計量 [32]、ベリー曲率 [38] も伝導度との関係が指摘されている。

恐らく有名なのは後者であるが、用いるアイデアは共通である。まず、式 (3.11) を

$$\chi_{ij}(\theta) = \sum_{m \neq 0} \frac{\langle \Phi_{0,\theta} | \partial_{\theta_i} \hat{H}_\theta | \Phi_{m,\theta} \rangle \langle \Phi_{m,\theta} | \partial_{\theta_j} \hat{H}_\theta | \Phi_{0,\theta} \rangle}{(E_{0,\theta} - E_{m,\theta})^2} \quad (3.12)$$

と書き直す。ここで、添え字  $0, m$  はエネルギー準位を表す添え字で、 $0$  は基底状態を表す。 $E_{0,\theta}, E_{m,\theta}$  は対応するエネルギー固有値である。伝導度の計算では、電流演算子  $J_\alpha = \sum_{k,a,b} \partial_{k_\alpha} H(k)_{ab} c_{k,a}^\dagger c_{k,b}$  が現れるが、磁束  $\theta$  の下では

$$J_\alpha(\theta) = \sum_{k,a,b} \partial_k H(k + \theta/L)_{ab} c_{k,a}^\dagger c_{k,b} \quad (3.13)$$

$$= \sum_{k,a,b} L \partial_\theta H(k + \theta/L)_{ab} c_{k,a}^\dagger c_{k,b} \quad (3.14)$$

$$= L \partial_\theta \sum_{k,a,b} H(k + \theta/L)_{ab} c_{k,a}^\dagger c_{k,b} \quad (3.15)$$

$$= L \partial_\theta \left( \sum_{k,a,b} H(k + \theta/L)_{ab} c_{k,a}^\dagger c_{k,b} + \hat{H}_{\text{int}} \right) \quad (3.16)$$

$$= L \partial_\theta \hat{H}_\theta \quad (3.17)$$

となるので、電流演算子と  $\partial_\theta \hat{H}_\theta$  が結びつく。ただし、添え字  $a, b$  は内部自由度を表し、 $c_{k,a}^\dagger, c_{k,a}$  は結晶運動量  $k$ 、内部自由度  $a$  の状態の生成消滅演算子である。 $H(k + \theta/L)_{ab}$

は  $H(k + \theta/L)$  を行列として書いたときの  $(a, b)$  成分を表す。また、 $\hat{H}_\theta$  は  $\hat{H}_{\text{int}}$  の相互作用の項を表す。 $\hat{H}_{\text{int}}$  は  $\theta$  に依存しないことに注意。絶対零度  $T = 0$  での摂動論 (例えば [39] を参照) から、一般に光学伝導度は

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{V} \frac{1}{i\omega} \sum_{m \neq 0} \frac{\langle \Phi_0 | J_\alpha | \Phi_m \rangle \langle \Phi_m | J_\beta | \Phi_0 \rangle}{\omega + E_0 - E_m + i\eta} - \frac{\langle \Phi_0 | J_\beta | \Phi_m \rangle \langle \Phi_m | J_\alpha | \Phi_0 \rangle}{\omega + E_0 - E_m + i\eta} \quad (3.18)$$

と書ける。ただし、 $V$  は系の体積を表し、 $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$  は電場を  $\beta$  方向に印加したときの  $\alpha$  方向の光学伝導度を表す。一般的に知られている形に合わせるため、ここでは  $\theta$  依存性を明示していない。これにより、各  $\theta$  に対し、ホール伝導度が

$$\sigma_{xy}(\theta) \propto \Omega_{xy}(\theta) \quad (3.19)$$

と書けることが分かる。左辺はひねり角空間でのベリー曲率である。まったく同様にして、光学伝導度とひねり角での量子計量が結びつくことが分かる。

ここで、実験などで観測される伝導度はひねり角  $\theta$  に依存しておらず、観測されるのは  $\theta$  で平均を取った量に等しいと仮定する。ただし、任意の  $\theta$  に対して系は絶縁体とする。このとき、

$$\sigma_{xy} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\theta_x \int_0^{2\pi} d\theta_y \sigma_{xy}(\theta) \quad (3.20)$$

$$\propto \int_0^{2\pi} d\theta_x \int_0^{2\pi} d\theta_y \Omega_{xy}(\theta) \quad (3.21)$$

を得る。右辺はチャーン数なので量子化し、相互作用がある場合についてもホール伝導度が量子化することが分かった。

量子計量についても同様にして、

$$\text{Re} \int_0^\infty d\omega \frac{\sigma_{\alpha\beta}(\omega) + \sigma_{\beta\alpha}(\omega)}{2\pi\omega} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\theta_x \int_0^{2\pi} d\theta_y g_{\alpha\beta}(\theta) \quad (3.22)$$

が導かれる。

この2つの関係式を見ると、相互作用がない場合に成り立っていた式で結晶運動量  $k$  を  $\theta$  に変えただけのものであることに気づく。これは、自由な系においてはこれら2つの量子幾何テンソルが結びついていることを示唆している。実際、自由な系においては波動関数が

$$|\Phi_\theta\rangle = \hat{A} \prod_{\epsilon_n(k) < \mu} |k\rangle \otimes |u_n(k + \theta/L)\rangle \quad (3.23)$$

と書けることから従う。ただし、 $\hat{A}$  は反対称演算子 (フェルミオン系)、 $\mu$  は化学ポテンシャル、 $|k\rangle$  は結晶運動量  $k$  の1粒子状態、 $|u_n(k)\rangle$  はブロッホハミルトニアン固有ベ

クトルである。これを  $\theta$  について微分する際、

$$\partial_{\theta_i} \left( |k\rangle \otimes |u_n(k + \theta/L)\rangle \right) = |k\rangle \otimes \frac{1}{L} \partial_{k_i} |u_n(k + \theta/L)\rangle \quad (3.24)$$

によって  $\theta$  についての微分を  $k$  についての微分に変換できる。これにより、

$$\chi_{ij}(\theta) = \frac{1}{L^2} \sum_k \chi_{ij}(k + \theta/L) \quad (3.25)$$

と分かる。ただし、左辺の  $\chi_{ij}(k)$  は前章の後半で紹介した、占有された全ての状態に対しての量子幾何テンソルである。特に、2次元系においては、熱力学極限で

$$\chi_{ij}(\theta) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int dk_x dk_y \chi_{ij}(k) \quad (3.26)$$

が成り立つ [18]。この右辺は  $\theta$  に依存していないから、左辺も実際は  $\theta$  に依存していない。両辺の実部を取ることにより、量子計量についても同様の関係式が成り立つと分かる。また、虚部を見れば、ひねり角から定義されるチャーン数と運動量から定義されるチャーン数は等しいと分かる；

$$C = \frac{1}{2\pi} \int d\theta_x d\theta_y \Omega_{xy}(\theta) = \frac{1}{2\pi} \int dk_x dk_y \Omega_{xy}(k) \quad (3.27)$$

このことは、自由な系においてブロッホ波動関数を用いてホール伝導度を計算しても、基底状態の波動関数を用いてホール伝導度を計算しても、同じチャーン数が現れることを保証している。

## 3.2 ワニエ関数の位置揺らぎとの関係

ワニエ関数とは簡単に言えばブロッホ波動関数をフーリエ級数展開した時の係数であり、ブロッホ波動関数の持つ情報を引き継いでいる。したがって、ワニエ関数も系についての何らかの情報を担っていると考えられる。実際、ワニエ関数の対称性と局在性が系のトポロジーと関係していることが知られている [40, 12]

本研究では特にチャーン絶縁体を扱うので、ワニエ関数の局在性とチャーン絶縁体の関係について説明する。簡単のため、占有されているバンドは一つとする。サイト  $j$  に局在したワニエ関数は

$$|w(j)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp(-ij \cdot k) |k\rangle \otimes |u(k)\rangle \quad (3.28)$$

で定義される [36]。ここで  $N$  は全粒子数である。 $|u(k)\rangle$  にはゲージ変換の自由度  $|u(k)\rangle \mapsto \exp(i\alpha(k))|u(k)\rangle$  ( $\alpha(k)$  は滑らかな実数値関数) があるから、ワニエ関数

にもゲージの自由度がある。よく知られているように、ワニエ関数の位置の平均  $\langle x \rangle = \langle w(j) | \hat{x} | w(j) \rangle$  にはベリー位相

$$\int dk -i \langle u(k) | \partial_k u(k) \rangle \quad (3.29)$$

が現れる [22, 36]。

ベリー位相はゲージ不変なので、 $\langle x \rangle$  もゲージ不変である。同様にして、ワニエ関数の位置揺らぎ  $\Omega = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$  も議論できるが、これはゲージ不変ではない。しかし、ゲージ不変な部分とゲージに依存する部分に分けることができ、

$$\Omega = \Omega_I + \Omega_D \quad (3.30)$$

と書ける。ただし、 $\Omega_I$  がゲージ不変な部分、 $\Omega_D$  がゲージに依存する部分である。平均  $\langle x \rangle$  の場合は波数に関する 1 階微分が現れるが、揺らぎ  $\Omega$  については波数に関する微分は 2 階になる。このことから、 $\Omega$  と量子計量が結びつくことが予想される。量子計量はゲージ不変であるので、特に  $\Omega_I$  と関係があると期待できる。実際、 $\Omega_I$  が量子計量を用いて

$$\Omega_I = \frac{1}{(2\pi)^d} \int dk \quad \text{Tr}(g(k)) \quad (3.31)$$

と表されることが知られている [22]。

チャーン絶縁体においては、ブロッホ波動関数が滑らかな解析的な形で書けない [41] ので、ワニエ関数の局在性は悪くなる。以下ではこれについてフーリエ級数の一般論から説明する。チャーン絶縁体は 2 次元の模型であるが、簡単のため 1 次元のフーリエ級数を扱う。フーリエ級数の理論については文献 [42] を参考にした。

区間  $I = [-\pi, \pi]$  上の関数  $f(\theta)$  を考える。 $f$  は周期的、つまり  $f(-\pi) = f(\pi)$  を満たすとする。まず、 $f$  が  $C^1$  級であると仮定しよう。 $f, f'$  のフーリエ係数をそれぞれ  $a_n, b_n$  とすると、部分積分により

$$b_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} f'(\theta) \exp(-in\theta) d\theta \quad (3.32)$$

$$= in \int_{-\pi}^{\pi} f(\theta) \exp(-in\theta) d\theta \quad (3.33)$$

$$= ina_n \quad (3.34)$$

が成り立つ。ここで、 $f'$  に対するベッセルの不等式から

$$\sum_n |b_n|^2 < +\infty \quad (3.35)$$

であるので、特に  $b_n \rightarrow 0$  ( $n \rightarrow \infty$ )。従って、

$$a_n = o(1/n) \quad (n \rightarrow \infty) \quad (3.36)$$

となる。同じ議論を繰り返すことにより、 $f$  が  $C^2$  級なら  $a_n = o(1/n^2)$  ( $n \rightarrow \infty$ )、 $f$  が  $C^3$  級なら  $a_n = o(1/n^3)$  ( $n \rightarrow \infty$ ) と分かる。従って、 $f$  が滑らかなら  $a_n$  はどんな冪よりも速く 0 に収束する、すなわち指数的に収束する。 $f$  が滑らかで無い場合は上の議論はいつか破綻し、 $a_n$  は冪的に収束する。ワニエ関数に話を戻せば、 $|u(k)\rangle$  が滑らかなら、ワニエ関数が指数的に局在し、 $|u(k)\rangle$  に特異性があれば、ワニエ関数は冪的に局在することになる。従って、チャーン数が有限のときに  $\Omega_I$  は大きくなると考えられる。

実は、これを不等式で評価したのが式 (2.20) であり、式 (2.20) は一つの固有状態に着目した場合の不等式であるが、複数の固有状態に着目した場合にも同じ不等式が成り立つ)2次元系において両辺を積分することで

$$\Omega_I = \frac{1}{(2\pi)^2} \int dk \quad \text{Tr}(g(k)) \quad (3.37)$$

$$\geq 2\pi|C| \quad (3.38)$$

を得る。ただし、 $C$  はチャーン数である。チャーン数が有限の場合には  $\Omega_I$  がある程度大きくなることが分かる。

ところで、量子計量の半正定値性から、行列としての  $\{g_{ij}(k)\}_{ij}$  の固有値は 0 以上である。2次元系においては  $\{g_{ij}(k)\}_{ij}$  は  $2 \times 2$  行列となるので、その固有値を  $\alpha(\geq 0), \beta(\geq 0)$  としよう。このとき、相加平均、相乗平均の関係から

$$\text{Tr}(g(k)) = \alpha + \beta \quad (3.39)$$

$$\geq 2\sqrt{\alpha\beta} \quad (3.40)$$

$$= 2\sqrt{\det g(k)} \quad (3.41)$$

が成り立つと分かる。こうなると、 $\sqrt{\det g(k)}$  と  $\Omega_{xy}(k)$  の大小関係が気になるが、文献 [43] において

$$2\sqrt{\det g(k)} \geq |\Omega_{xy}(k)| \quad (2 \text{ バンドの場合は等号成立}) \quad (3.42)$$

が成り立つことが示されている。両辺を積分すれば、2次元系において

$$\int dk \sqrt{\det g(k)} \geq \pi|C| \quad (3.43)$$

を得る。これらをまとめると、結局

$$\text{Tr}(g(k)) \geq 2\sqrt{\det g(k)} \geq |\Omega_{xy}(k)| \quad (3.44)$$

が成り立ち、各辺を積分することでチャーン数による下限が得られるということである。



## 第 4 章

# 強相関電子系における運動量空間上の量子計量

この章では、本研究の主題である、強相関電子系における運動量空間上の量子計量を 1 粒子グリーン関数に基づいて定義する。ただ、具体的な定義を説明する前に、相互作用がある場合に量子計量を定義する動機を説明しておく。

### 4.1 相互作用がある系のトポロジー

前章では量子計量とチャーン数の関係を指摘したが、トポロジカル絶縁体については相互作用がある場合にも盛んに研究されている [23, 24]。トポロジカル絶縁体の理論は、元々は自由な系について数学的にブロッホハミルトニアンを分類する理論が整備されていた [44]。この理論は相互作用がないことを本質的に用いているので、相互作用がある系にこの理論を拡張するのは困難である。しかし、いくつかのトポロジカル不変量については一般の系に定義が拡張されている。拡張する際に用いるのは、ブロッホ波動関数やブロッホハミルトニアンではなく 1 粒子グリーン関数である [25, 26, 27, 28]。例えば、(波数空間から計算される) チャーン数については

$$C = \frac{\epsilon^{\alpha\beta\gamma}}{24\pi^2} \int dw \int dk_x dk_y \text{Tr} \left( G \partial_\alpha G^{-1} G \partial_\beta G^{-1} G \partial_\gamma G^{-1} \right) \quad (4.1)$$

と定義することで強相関系に拡張されている [25, 29]。ただし、 $\epsilon^{\alpha\beta\gamma}$  は完全反対称テンソルであり、 $G = G(i\omega, k)$  は松原グリーン関数である。また、添え字  $\alpha, \beta, \gamma$  は  $\omega, k_x, k_y$  のいずれかを指す。自由な系において左辺の周波数積分だけ実行するとベリー曲率になり、ブロッホ波動関数によって定義されるチャーン数に等しいことが分かる。

相互作用がある場合も、式 (4.1) は量子化することが知られている [25, 29]。相互作用の効果을自己エネルギーに取り込めば、相関がある系でトポロジカル不変量が定義できた

ことになる。

では、同じ発想で量子計量を定義し、相互作用がある系でチャーン数と波数空間の量子計量の関係を調べることは出来ないだろうか？この疑問に答えるため、本研究では波数空間上の量子計量の一般化を試みた。

## 4.2 グリーン関数を用いた波数空間上の量子計量 (GQM) の定義

前章では、文献 [32] で指摘された光学伝導度と量子計量の関係式 (3.3) に触れた。光学伝導度の計算では必ず波数積分が現れるので、その被積分関数を  $\sigma_{\alpha\beta}(\omega, k)$  とする。すると、式 (3.3) は波数積分の被積分関数のレベルで等しいと分かる、すなわち

$$\text{Re} \int_0^\infty d\omega \frac{\sigma_{\alpha\beta}(\omega, k) + \sigma_{\beta\alpha}(\omega, k)}{2\pi\omega} = g_{\alpha\beta}(k) \quad (4.2)$$

が成り立つと分かる。自由な系においては、 $\sigma_{\alpha\beta}(\omega, k)$  は1粒子グリーン関数を用いて表すことができる [37] ので、これによって  $g_{\alpha\beta}(k)$  が1粒子グリーン関数で量子計量を表せたことになる (相互作用がある場合は、伝導度の計算においてバーテックス補正を無視したことになる);

$$\tilde{g}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \text{Re} \int_0^\infty d\omega_1 \frac{\sigma_{\alpha\beta}(\omega_1, \mathbf{k}) + \sigma_{\beta\alpha}(\omega_1, \mathbf{k})}{2\pi\omega_1} \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}(\omega_1, \mathbf{k}) = & -\frac{1}{\omega_1} \int \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega) \\ & \times \text{Tr} \left[ J_{\alpha\beta} G^{R-A}(\omega) \right. \\ & + J_\alpha G^R(\omega + \omega_1) J_\beta G^{R-A}(\omega) \\ & \left. + J_\alpha G^{R-A}(\omega) J_\beta G^A(\omega - \omega_1) \right] \end{aligned} \quad (4.4)$$

ただし、式 (4.4) の右辺では波数依存性を省略している。 $G^R, G^A$  はそれぞれ遅延、先進グリーン関数であり、 $J_\alpha = \partial_\alpha H(k)$  は電流演算子、 $f(\omega)$  はフェルミ分布関数である。また、 $G^{R-A} = G^R - G^A$  である。上のグリーン関数で定義された量子計量については、これまでの量子計量  $g_{\alpha\beta}(k)$  と区別するため  $\tilde{g}_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$  と書くことにする。以下では  $\tilde{g}_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$  を一般化された量子計量 (Generalized Quantum Metric, GQM) と呼ぶ。グリーン関数の中に自己エネルギーを含めれば、相関がある場合にも量子計量が定義できたことになる [34]。

バーテックス補正を無視したのは、GQM が一粒子状態の性質を表してほしいからである。後に示すように、GQM は一般にはスペクトル関数の固有状態を用いて表される。相



相互作用が無い場合はスペクトル関数の固有状態はブロッホハミルトニアン固有状態と一致することから、従来の量子計量に帰着すると分かる。この意味で、GQM は従来の定義の一般化として相応しいものであると考えられる。

GQM が自由な系において絶対零度  $T = 0$  で既存の定義と一致することを確認しよう。その前に、グリーン関数の基本的性質について確認しておく。ただし、以下では絶対零度  $T = 0$  のみを考える。

遅延グリーン関数、先進グリーン関数はそれぞれ

$$G_{ab}^R(t, k) = -i\theta(t)\langle c_{k,a}(t)c_{k,b}^\dagger + c_{k,b}^\dagger c_{k,a}(t) \rangle \quad (4.5)$$

$$G_{ab}^A(t, k) = i\theta(-t)\langle c_{k,a}(t)c_{k,b}^\dagger + c_{k,b}^\dagger c_{k,a}(t) \rangle \quad (4.6)$$

で定義される。ただし、 $t$  は時刻、 $k$  は運動量、 $a, b$  は内部自由度を表し、 $\theta(t)$  は階段関数、 $c_{k,a}(t)$  は  $c_{k,a}$  のハイゼンベルグ表示である。また、 $\langle \dots \rangle$  は基底状態での量子力学的期待値を表す。これをレーマン表示してフーリエ変換すると、

$$G_{ab}^R(\omega, k) = \sum_n \frac{\langle 0|c_{k,a}|n\rangle\langle n|c_{k,b}^\dagger|0\rangle}{E_0 - E_n + \omega + i\eta} + \frac{\langle 0|c_{k,b}^\dagger|n\rangle\langle n|c_{k,a}|0\rangle}{E_n - E_0 + \omega + i\eta} \quad (4.7)$$

$$G_{ab}^A(\omega, k) = \sum_n \frac{\langle 0|c_{k,a}|n\rangle\langle n|c_{k,b}^\dagger|0\rangle}{E_0 - E_n + \omega - i\eta} + \frac{\langle 0|c_{k,b}^\dagger|n\rangle\langle n|c_{k,a}|n\rangle}{E_n - E_0 + \omega - i\eta} \quad (4.8)$$

を得る。ただし、 $|0\rangle$  は基底状態、 $|n\rangle$  は  $n$  番目のエネルギー固有状態、 $E_0, E_n$  はそれに対応するエネルギー固有値である。また、分母に表れる  $\eta$  は  $\theta(t)$  のフーリエ変換の際に現れる正の微小量である。この表式から、

$$G^R(\omega, k) = G^{A\dagger}(\omega, k) \quad (4.9)$$

の関係があることが分かる。

さらに、スペクトル関数は

$$A_{ab}(\omega, k) = -\frac{1}{2\pi i}(G_{ab}^R(\omega, k) - G_{ab}^A(\omega, k)) \quad (4.10)$$

$$= \sum_n \langle 0|c_{k,a}|n\rangle\langle n|c_{k,b}^\dagger|0\rangle\delta(E_0 - E_n + \omega) \quad (4.11)$$

$$+ \langle 0|c_{k,b}^\dagger|n\rangle\langle n|c_{k,a}|0\rangle\delta(E_n - E_0 + \omega) \quad (4.12)$$

書けるので、 $A_{ab}(\omega, k)$  はエルミート行列である。ただし、 $\delta(E_0 - E_n + \omega), \delta(E_n - E_0 + \omega)$  はディラックのデルタ関数である。さらに、任意の複素数列  $\{z_a\}$  に対し、

$$\sum_{a,b} z_a^* A_{ab}(\omega, k) z_b = \sum_{a,b,n} \langle 0|z_a^* c_{k,a}|n\rangle\langle n|c_{k,b}^\dagger z_b|0\rangle\delta(E_0 - E_n + \omega) \quad (4.13)$$

$$+ \langle 0|z_b c_{k,b}^\dagger|n\rangle\langle n|z_a^* c_{k,a}|0\rangle\delta(E_n - E_0 + \omega) \quad (4.14)$$

であるが、ここで

$$|\phi_k\rangle = \sum_a c_{k,a}^\dagger z_a |0\rangle \quad (4.15)$$

$$|\psi_k\rangle = \sum_a c_{k,a} z_a^* |0\rangle \quad (4.16)$$

を用いると、

$$\sum_{a,b} z_a^* A_{ab}(\omega, k) z_b = \sum_n |\langle \phi_k | n \rangle|^2 \delta(E_0 - E_n + \omega) + |\langle \psi_k | n \rangle|^2 \delta(E_n - E_0 + \omega) \geq 0 \quad (4.17)$$

つまり、エルミート行列  $A(\omega, k)$  半正定値である。これにより、 $A(\omega, k)$  の固有値が全て 0 以上であることがわかる。

話を戻して、自由な系での式 (4.4) を評価しよう。簡単のため、化学ポテンシャルは 0 とする。まず、第一項が純虚数であること、したがって式 (4.3) に寄与しないことを示そう。上で確認したように、 $-i(G^R - G^A)$  はエルミート行列であるから、ユニタリー行列で対角化できる。対応する固有ベクトルを  $|n\rangle$ 、固有値を  $A_n (\geq 0)$  とすると、

$$\text{Tr}[J_{\alpha\beta}(G^R - G^A)] = \sum_{n,m} \langle n | J_{\alpha\beta} | m \rangle \langle m | (G^R - G^A) | n \rangle \quad (4.18)$$

$$= \sum_{n,m} \langle n | J_{\alpha\beta} | m \rangle (-i A_n \delta_{mn}) \quad (4.19)$$

$$= \sum_n -i A_n \langle n | J_{\alpha\beta} | n \rangle \quad (4.20)$$

である。 $J_{\alpha\beta}$  エルミート行列なので、左辺は純虚数だと分かる。この事実は相互作用がある場合にも変わらない。

次に、式 (4.4) の第二項を評価しよう。ここでは、ブロッホハミルトニアン固有状態  $|n\rangle$  を用い、対応する固有値を  $E_n$  とする。また、行列要素  $\langle n | J_\alpha | m \rangle$  を  $(J_\alpha)_{nm}$  などと書く。また、クロネッカーのデルタを  $\delta_{nm}$  などと書く。

$$(\text{第二項}) = \text{Tr}(J_\alpha G^R(\omega + \omega_1) J_\beta (G^R - G^A)) \quad (4.21)$$

$$= (J_\alpha)_{nm} (G^R(\omega + \omega_1))_{ml} (J_\beta)_{lk} ((G^R)_{ln} - (G^A)_{ln}) \quad (4.22)$$

$$= (J_\alpha)_{nm} \frac{\delta_{ml}}{\omega + \omega_1 - E_m + i\eta} (J_\beta)_{lk} \left( \frac{\delta_{ln}}{\omega - E_n + i\eta} - \frac{\delta_{ln}}{\omega - E_n - i\eta} \right) \quad (4.23)$$

$$= \frac{-2\pi i (J_\alpha)_{nm} (J_\beta)_{mn}}{\omega + \omega_1 - E_m + i\eta} \delta(\omega - E_n) \quad (4.24)$$

したがって、

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} (\text{第二項}) = -i \frac{(J_\alpha)_{nm} (J_\beta)_{mn}}{\omega_1 - (E_m - E_n) + i\eta} f(E_n) \quad (4.25)$$

同様にして、

$$(\text{第三項}) = \frac{-2\pi i (J_\alpha)_{nm} (J_\beta)_{mn}}{\omega - \omega_1 - E_n - i\eta} \delta(\omega - E_m) \quad (4.26)$$

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} (\text{第三項}) = i \frac{(J_\alpha)_{nm} (J_\beta)_{mn}}{\omega_1 - (E_m - E_n) + i\eta} f(E_m) \quad (4.27)$$

であるから、

$$\begin{aligned} & \text{Re} \left[ \sigma_{\alpha\beta}(\omega_1, \mathbf{k}) \right] \\ &= \frac{1}{\omega_1} \sum_{nm} \left( f(E_n) - f(E_m) \right) \text{Re} \left[ \frac{i (J_\alpha)_{nm} (J_\beta)_{mn}}{\omega_1 - (E_m - E_n) + i\eta} \right]. \end{aligned} \quad (4.28)$$

$\alpha, \beta$  について対称化すると、

$$\begin{aligned} & \text{Re} \left[ \frac{\sigma_{\alpha\beta}(\omega_1, \mathbf{k}) + \sigma_{\beta\alpha}(\omega_1, \mathbf{k})}{2} \right] \\ &= \frac{1}{2\omega_1} \sum_{n \neq m} \left( f(E_n) - f(E_m) \right) \\ & \quad \times \text{Re} \left[ \frac{i((J_\alpha)_{nm} (J_\beta)_{mn} + (J_\beta)_{nm} (J_\alpha)_{mn})}{\omega_1 - (E_m - E_n) + i\eta} \right] \end{aligned} \quad (4.29)$$

ここで、 $(J_\alpha)_{nm} (J_\beta)_{mn} + (J_\beta)_{nm} (J_\alpha)_{mn} \in \mathbb{R}$  に注意すると、

$$\begin{aligned} & \text{Re} \left[ \frac{\sigma_{\alpha\beta}(\omega_1, \mathbf{k}) + \sigma_{\beta\alpha}(\omega_1, \mathbf{k})}{2} \right] \\ &= \frac{\pi}{\omega_1} \sum_{n \neq m} \delta(\omega_1 - (E_m - E_n)) \left( f(E_n) - f(E_m) \right) \\ & \quad \times \text{Re} \left[ (J_\alpha)_{nm} (J_\beta)_{mn} \right] \end{aligned} \quad (4.30)$$

を得る。 $T = 0$  においては、上式は

$$\begin{aligned} & \frac{\pi}{2\omega_1} \sum_{n: E_n < 0} \sum_{m: E_m > 0} \left( (J_\alpha)_{nm} (J_\beta)_{mn} + (J_\beta)_{nm} (J_\alpha)_{mn} \right) \\ & \quad \times [\delta(\omega_1 - (E_m - E_n)) - \delta(\omega_1 - (E_n - E_m))] \end{aligned} \quad (4.31)$$

と書ける。以上より、

$$\tilde{g}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \text{Re} \int_0^\infty d\omega_1 \frac{\sigma_{\alpha\beta}(\omega_1, \mathbf{k}) + \sigma_{\beta\alpha}(\omega_1, \mathbf{k})}{2\pi\omega_1} \quad (4.32)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{n:E_n < 0} \sum_{m:E_m > 0} \left[ \frac{\langle n | \partial_\alpha H | m \rangle \langle m | \partial_\beta H | n \rangle}{(E_n - E_m)^2} + (\alpha \leftrightarrow \beta) \right]$$

$$= \text{Re} \sum_{n:E_n < 0} \sum_{m:E_m > 0} \left[ \frac{\langle n | \partial_\alpha H | m \rangle \langle m | \partial_\beta H | n \rangle}{(E_n - E_m)^2} \right] \quad (4.33)$$

$$= g_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \quad (4.34)$$

が示された。

### 4.3 GQM の半正定値性

次に、GQM の半正定値性を示そう。前節ではブロッホハミルトニアン固有状態を用いて解析したが、一般の系ではこの方法は不便である。そこで、この節ではスペクトル関数に対応する  $i(G^R - G^A)$  の固有状態  $|n\rangle$  を用いよう。固有値を  $A_n$  とすれば、前節で述べたように  $A_n \geq 0$  である。また、解析しやすくするために、GQM の式を  $G^R - G^A$  で表そう ( $G^R$  のみ、または  $G^A$  のみの項は扱いづらい)。

まず、第二項は

$$\begin{aligned} (\text{第二項}) &= \text{Re} \text{Tr} \left[ J_\alpha G^R(\omega + \omega_1) J_\beta (G^R - G^A) + (\alpha \leftrightarrow \beta) \right] \\ &= \text{Re} \text{Tr} \left[ J_\alpha G^R(\omega + \omega_1) J_\beta (G^R - G^A) \right. \\ &\quad \left. + J_\beta G^R(\omega + \omega_1) J_\alpha (G^R - G^A) \right] \\ &= \text{Re} \text{Tr} \left[ J_\alpha G^R(\omega + \omega_1) J_\beta (G^R - G^A) \right. \\ &\quad \left. + \{ J_\beta G^R(\omega + \omega_1) J_\alpha (G^R - G^A) \}^\dagger \right] \\ &= \text{Re} \text{Tr} \left[ J_\alpha G^R(\omega + \omega_1) J_\beta (G^R - G^A) \right. \\ &\quad \left. + (G^A - G^R) J_\alpha G^A(\omega + \omega_1) J_\beta \right] \\ &= \text{Re} \text{Tr} \left[ J_\alpha G^R(\omega + \omega_1) J_\beta (G^R - G^A) \right. \\ &\quad \left. + J_\alpha G^A(\omega + \omega_1) J_\beta (G^A - G^R) \right] \\ &= \text{Re} \text{Tr} \left[ J_\alpha (G^R(\omega + \omega_1) - G^A(\omega + \omega_1)) J_\beta (G^R - G^A) \right] \\ &= \text{ReTr} \left[ J_\alpha G^{R-A}(\omega + \omega_1) J_\beta G^{R-A}(\omega) \right] \end{aligned} \quad (4.35)$$

と書ける。これを  $|n\rangle$  を用いて書き下すと、

$$\begin{aligned} & \sum_{n,m} -A_n(\omega)A_m(\omega + \omega_1) \times \left( \langle n(\omega)|J_\alpha|m(\omega + \omega_1)\rangle \right. \\ & \quad \left. \times \langle m(\omega + \omega_1)|J_\beta|n(\omega)\rangle + (\alpha \leftrightarrow \beta) \right) / 2. \end{aligned} \quad (4.36)$$

となる。

第三項については、変数変換

$$\omega - \omega_1 \rightarrow \omega, \quad f(\omega) \rightarrow f(\omega + \omega_1) \quad (4.37)$$

行ってから同様にすると、第二項と合わせて

$$\begin{aligned} & \sum_{n,m} A_n(\omega)A_m(\omega + \omega_1) \\ & \quad \times \left( \langle n(\omega)|J_\alpha|m(\omega + \omega_1)\rangle \langle m(\omega + \omega_1)|J_\beta|n(\omega)\rangle \right. \\ & \quad \left. + (\alpha \leftrightarrow \beta) \right) \times \frac{f(\omega) - f(\omega + \omega_1)}{\omega_1^2} \times \frac{1}{8\pi^2}. \end{aligned} \quad (4.38)$$

と書けることが分かる。ここで、

$$h(n, m, \omega, \omega_1) = A_n(\omega)A_m(\omega + \omega_1) \frac{f(\omega) - f(\omega + \omega_1)}{8\pi^2\omega_1^2} \quad (4.39)$$

を定義する。重要なのは、スペクトル関数の半正定値性とフェルミ分布関数の単調性から  $h(n, m, \omega, \omega_1) \geq 0$  成り立つことである。任意の実数列  $\{c_\alpha\}$  に対し、

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha,\beta} c_\alpha \tilde{g}_{\alpha\beta} c_\beta \\ & = 2 \sum_{n,m,\alpha,\beta} \int_0^\infty d\omega_1 \int_{-\infty}^\infty d\omega h(n, m, \omega, \omega_1) \\ & \quad \times \langle n(\omega)|c_\alpha J_\alpha|m(\omega + \omega_1)\rangle \langle m(\omega + \omega_1)|c_\beta J_\beta|n(\omega)\rangle \end{aligned} \quad (4.40)$$

であるが、

$$|\phi_n(\omega)\rangle = \sum_\alpha c_\alpha J_\alpha |n(\omega)\rangle, \quad (4.41)$$

を用いると

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha,\beta} c_\alpha \tilde{g}_{\alpha\beta} c_\beta & = 2 \sum_{n,m} \int_0^\infty d\omega_1 \int_{-\infty}^\infty d\omega h(n, m, \omega, \omega_1) \\ & \quad \times \langle \phi_n(\omega)|m(\omega + \omega_1)\rangle \langle m(\omega + \omega_1)|\phi_n(\omega)\rangle \\ & \geq 0 \end{aligned} \quad (4.42)$$

となり、GQM の半正定値性が示された。

この証明から分かるように、GQM は一般に

$$\begin{aligned} \tilde{g}_{\alpha\beta} = & \sum_{n,m} \int_0^\infty d\omega_1 \int_{-\infty}^\infty d\omega A_n(\omega) A_m(\omega + \omega_1) \\ & \times \left( \langle n(\omega) | J_\alpha | m(\omega + \omega_1) \rangle \langle m(\omega + \omega_1) | J_\beta | n(\omega) \rangle \right. \\ & \left. + (\alpha \leftrightarrow \beta) \right) \times \frac{f(\omega) - f(\omega + \omega_1)}{\omega_1^2} \times \frac{1}{8\pi^2} \end{aligned} \quad (4.43)$$

のように一粒子のスペクトル関数の固有状態を用いて表される。したがって、GQM は相互作用がある系でも一粒子の状態を反映する幾何学的量であると言える。

また、上式からも、自由な場合に既存の量子計量に帰着することが以下のようにして分かる；自由な系では、スペクトル関数の固有状態として、ブロッホハミルトニアン固有状態を取ることが出来る。従って、 $|n(\omega)\rangle = |n\rangle$ ,  $|m(\omega + \omega_1)\rangle = |m\rangle$  ( $\omega$  に依存しない) であり、固有値は  $A_n(\omega) = 2\pi\delta(\omega - E_n)$ ,  $A_m(\omega + \omega_1) = 2\pi\delta(\omega + \omega_1 - E_m)$  とデルタ関数になる。従って、周波数積分を解析的に実行することができ、既存の量子計量に一致することが分かる。

## 4.4 GQM とチャーン数の関係

前節で光学伝導度とひねり角空間の量子計量との関係について述べたが、その関係は相互作用がある場合にも成り立つ。これを用いると、以下に示すように2次元系におけるGQM とチャーン数間の不等式が得られる；

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2\pi)^2} \int dk_x dk_y \text{Tr}(\tilde{g}(k)) & \approx \text{Re} \int_0^\infty \frac{\sigma_{xx}(\omega) + \sigma_{yy}(\omega)}{2\pi\omega} \\ & = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\theta_x d\theta_y \text{Tr}(\tilde{g}(\theta)) \\ & \geq \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\theta_x d\theta_y |\Omega_{xy}(\theta)| \\ & \geq \frac{1}{2\pi} |C| \end{aligned} \quad (4.44)$$

ここで  $C$  はチャーン数である。ただし、1行目でバーテックス補正を無視しているので不等式は厳密ではないが、相互作用がある場合にも GQM はチャーン絶縁体において大きくなることが期待される。

## 第 5 章

# 本研究で扱う模型と理論的手法

本研究では、前章で定義した GQM を具体的な模型に対して数値的に計算した。以下では、その際に使用した模型について説明する。

### 5.1 模型のハミルトニアンとその対称性

使用した模型のハミルトニアンは以下の形で与えられる;

$$H = H_{\text{QWZ}} + H_{\text{int}} - \mu \sum_i (n_{i,a} + n_{i,b}) \quad (5.1)$$

$$H_{\text{QWZ}} = \sum_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k},a}^\dagger \ c_{\mathbf{k},b}^\dagger) H(\mathbf{k}) (c_{\mathbf{k},a} \ c_{\mathbf{k},b})^T \quad (5.2)$$

$$H(\mathbf{k}) = \sin k_x \sigma_x + \sin k_y \sigma_y + (M + \cos k_x + \cos k_y) \sigma_z \quad (5.3)$$

$$H_{\text{int}} = U \sum_i n_{i,a} n_{i,b}, \quad (5.4)$$

ただし、 $a$  と  $b$  は擬スピンの自由度を表し、 $i$  は格子点のラベルであり、 $\sigma_i$  はパウリ行列である。 $n_{i,a} = c_{i,a}^\dagger c_{i,a}$ ,  $n_{i,b} = c_{i,b}^\dagger c_{i,b}$  はそれぞれ、格子点  $i$  での  $a$  サイト、 $b$  サイトの占有数演算子である。また、 $\mu$  は化学ポテンシャルである。 $M$  は  $a$  サイトと  $b$  サイトのポテンシャルの差 [36](もしくは磁場) の役割を果たす。 $U$  は斥力相互作用の強さを表す。 $H_{\text{QWZ}}$  は QWZ 模型として知られる模型であり、X.-L. Qi, Y.-S. Wu, and S.-C. Zhang [45, 36] によって提案された正方格子上のチャーン絶縁体の toy model である。この模型のチャーン数は  $0 < M < 2$  のとき  $C = 1$ 、 $-2 < M < 0$  のとき  $C = -1$  である。 $|M| > 2$  のときはトポロジカルに自明である。 $M = \pm 2$  と  $M = 0$  は量子臨界点であり、エネルギーギャップが閉じる [36]。系を常に half-filled に保つため、化学ポテンシャルは  $\mu = U/2$  とする。

まず、 $U = 0$  の場合について模型の対称性を調べよう。いわゆる Altland-Zirnbauer(AZ) クラスの中でどのクラスに属するかを考える。 $K$  を複素共役演算子として

$$\Xi = \sigma_x K \quad (5.5)$$

とすれば、 $\Xi$  は反ユニタリーであり

$$\Xi H(k) \Xi^{-1} = -H(-k) \quad (5.6)$$

を満たすから、QWZ 模型は粒子正孔対称性 (Particle-Hole-Symmetry, PHS) を持つ。また、チャーン数が有限になりうることから時間反転対称は有しておらず、

$$\Xi^2 = 1 \quad (5.7)$$

であることから AZ クラスでのクラス D に属すると分かる。

結晶対称性についても調べておこう。 $k_x \rightarrow -k_x, k_y \rightarrow -k_y$  とすると、

$$H(-k) = -\sin k_x \sigma_x + -\sin k_y \sigma_y + (M + \cos k_x + \cos k_y) \sigma_z \quad (5.8)$$

となる。従って、

$$\sigma_z H(k) \sigma_z = H(-k) \quad (5.9)$$

が成り立つ。つまり、QWZ 模型は 2 次元での空間反転対称性を持つ。

以上の議論はブロッホハミルトニアンの行列としての性質を調べているので、相互作用がある場合には同じ形式での議論が出来ない。しかし、生成消滅演算子を変換した際のハミルトニアンの不変性を調べることで、相互作用の有無に依らない統一的な議論が出来る [29]。

PHS については、自由な場合に  $\Xi = \sigma_x K$  だったことから示唆されるように、

$$\hat{C} c_{k,a} \hat{C}^{-1} = c_{-k,b}^\dagger \quad (5.10)$$

$$\hat{C} c_{k,b} \hat{C}^{-1} = c_{-k,a}^\dagger \quad (5.11)$$

を満たすユニタリー演算子  $\hat{C}$  を考えればよい。 $\hat{C}$  は当然  $H_{\text{QWZ}}$  と可換であるが、相互作用がある場合に追加される項とも可換であると分かる；

$$\hat{C} \left[ H_{\text{int}} - \mu \sum_i (n_{i,a} + n_{i,b}) \right] \hat{C}^{-1} = H_{\text{int}} - \mu \sum_i (n_{i,a} + n_{i,b}) \quad (5.12)$$

空間反転対称についても、自由な場合において対応する演算子が  $\sigma_z$  であることから分かるように、

$$\hat{I} c_{k,a} \hat{I}^{-1} = c_{-k,a}, \quad \hat{I} c_{k,b} \hat{I}^{-1} = -c_{-k,b} \quad (5.13)$$



を満たすユニタリー演算子  $\hat{I}$  を考えればよい。  $U$  の値によらず、系のハミルトニアンは  $\hat{I}$  と可換である；

$$\hat{I}H\hat{I}^{-1} = H \quad (5.14)$$

以上より、ハミルトニアン  $H$  は PHS と空間反転対称性を持つことが分かった。

これらの対称性により、グリーン関数、スペクトル関数、自己エネルギーが制約を受ける。以下ではこれについて説明する。

レーマン表示を用いると、QWZ 模型の PHS により

$$G_{ab}^R(\omega, k) = \sum_n \frac{\langle 0 | \hat{C}^{-1} \hat{C}_{k,a} \hat{C}^{-1} \hat{C} | n \rangle \langle n | \hat{C}^{-1} \hat{C}_{k,b}^\dagger \hat{C}^{-1} \hat{C} | 0 \rangle}{E_0 - E_n + \omega + i\eta} \quad (5.15)$$

$$+ \frac{\langle 0 | \hat{C}^{-1} \hat{C}_{k,b}^\dagger \hat{C}^{-1} \hat{C} | n \rangle \langle n | \hat{C}^{-1} \hat{C}_{k,a} \hat{C}^{-1} \hat{C} | 0 \rangle}{E_n - E_0 + \omega + i\eta} \quad (5.16)$$

$$= \sum_n \frac{\langle 0 | c_{-k,b}^\dagger | n \rangle \langle n | c_{-k,a} | 0 \rangle}{E_0 - E_n + \omega + i\eta} \quad (5.17)$$

$$+ \frac{\langle 0 | c_{-k,a} | n \rangle \langle n | c_{-k,b}^\dagger | 0 \rangle}{E_n - E_0 + \omega + i\eta} \quad (5.18)$$

$$= -G_{ba}^{R*}(-\omega, -k) \quad (5.19)$$

が成り立つことが分かる。同様にして、

$$G_{aa}^R(\omega, k) = -G_{bb}^{R*}(-\omega, -k) \quad (5.20)$$

$$G_{bb}^R(\omega, k) = -G_{aa}^{R*}(-\omega, -k) \quad (5.21)$$

$$G_{ba}^R(\omega, k) = -G_{ab}^{R*}(-\omega, -k) \quad (5.22)$$

を得る。従って、逆行列を取ることで

$$\left( \omega - H(k) + U/2 - \Sigma^R(\omega, k) \right)_{aa} = - \left( -\omega - H^*(-k) + U/2 - \Sigma^{R*}(-\omega, -k) \right)_{bb} \quad (5.23)$$

であるから、( $U/2$  は化学ポテンシャル、 $\Sigma^R$  は遅延グリーン関数の自己エネルギー)QWZ 模型の  $H(k)$  を当てはめると、

$$U = \Sigma_{aa}^R(\omega, k) + \Sigma_{bb}^{R*}(-\omega, -k) \quad (5.24)$$

を得る。この実部と虚部について分けて見ると、

$$U = \text{Re}\Sigma_{aa}^R(\omega, k) + \text{Re}\Sigma_{bb}^R(-\omega, -k) \quad (5.25)$$

$$0 = \text{Im}\Sigma_{aa}^R(\omega, k) - \text{Im}\Sigma_{bb}^R(-\omega, -k) \quad (5.26)$$

が満たされることが分かる。また、スペクトル関数のトレース  $\text{Tr}A(\omega, k) = -\frac{1}{\pi}\text{ImTr}G^R(\omega, k)$  については、

$$\text{Tr}A(\omega, k) = \text{Tr}A(-\omega, -k) \quad (5.27)$$

が成り立つ。

空間反転対称性についても全く同様の議論を行うことで

$$G^R(\omega, k)_{ab} = -G^R(\omega, -k)_{ab} \quad (5.28)$$

$$G^R(\omega, k)_{aa} = G^R(\omega, -k)_{aa} \quad (5.29)$$

$$G^R(\omega, k)_{bb} = G^R(\omega, -k)_{bb} \quad (5.30)$$

を得る。したがって、スペクトル関数は

$$\text{Tr}A(\omega, k) = \text{Tr}A(\omega, -k) \quad (5.31)$$

を満たす。PHS と合わせると、

$$\text{Tr}A(\omega, k) = \text{Tr}A(-\omega, k) \quad (5.32)$$

も成り立つ。

## 5.2 トポロジーの判定手法

前節では相互作用がある場合のチャーン数の表現について触れたが、より簡便な方法として、 $\omega = 0$  での松原グリーン関数にのみ着目する方法も知られている [26, 27]。松原グリーン関数

$$G_{ab}(i\omega, k) = \sum_n \frac{\langle 0|c_{k,a}|n\rangle\langle n|c_{k,b}^\dagger|0\rangle}{E_0 - E_n + i\omega} + \frac{\langle 0|c_{k,b}^\dagger|n\rangle\langle n|c_{k,a}|0\rangle}{E_n - E_0 + i\omega} \quad (5.33)$$

$$(5.34)$$

において  $i\omega = 0$  とすると、 $G_{ab}(i\omega = 0, k)$  はエルミート行列であることが分かる。したがって、その逆行列である

$$-G_{ab}^{-1}(i\omega, k) = H(k) + \Sigma(i\omega = 0, k) \quad (5.35)$$

もエルミートである。そこで、この有効ハミルトニアン  $H_{\text{eff}}(k) = H(k) + \Sigma(i\omega = 0, k)$  に対して、自由な系で確立された方法に基づいたトポロジカル不変量が定義できる。以上の方法は、自己エネルギーの周波数依存性について詳しく知る必要が無い場合、非常に簡単なトポロジーの判定手法であり、しかも判定結果も正しいことが知られている。

本研究においては、松原グリーン関数の自己エネルギーではなく遅延グリーン関数の自己エネルギーを用いた。一般に、松原グリーン関数と遅延グリーン関数には

$$G_{ab}(i\omega, k) \xrightarrow{i\omega \rightarrow \omega + i\eta} G_{ab}^R(\omega, k) \quad (5.36)$$

の関係があるので、

$$G_{ab}^R(\omega = 0, k) = G_{ab}(i\eta, k) \quad (5.37)$$

が成り立つ。数値計算においては  $T = 0$  に到達することは出来ないから、1 番絶対値が小さい松原周波数は有限となる。それを上式の  $i\eta$  と見なせば、遅延グリーン関数からトポロジーを評価出来ることが分かる。こうして遅延グリーン関数から得た有効ハミルトニアン

$$H_{\text{eff}}(k) = H(k) + \Sigma^R(\omega = 0, k) \quad (5.38)$$

に対して、本研究では離散化された形式の Wilson Loop[36, 46, 47]

$$W(k_x) = \langle u(k_x, 2\pi) | \prod_{n=1}^N P(k_x, 2\pi n/N) | u(k_x, 2\pi) \rangle, \quad (5.39)$$

を計算することでトポロジーを判定した。ただし、 $|u(k_x, k_y)\rangle$  は  $H_{\text{eff}}(k)$  の占有された固有状態であり、 $P(\mathbf{k}) = |u(k_x, k_y)\rangle \langle u(k_x, k_y)|$  は射影演算子である。射影演算子の積は  $k_y$  が左から右に行くにつれて増加するように並べる。また、数値計算においては  $N$  は十分大きく取る必要がある。Wilson Loop の巻き付き数が有限であればその系はトポロジカルに非自明であり、巻き付き数が 0 なら自明であると分かる [36, 46, 47]。

### 5.3 動的平均場理論

この節では、本研究において自己エネルギーを得る際に用いた手法である動的平均場理論 (Dynamical Mean-Field Theory, DMFT) について文献 [48] に基づいて説明する。DMFT は端的に言えば自己エネルギーの周波数依存性も取り込める平均場近似であり、イジング模型などで適用される静的な平均場とは異なる。しかし、1 つのサイトに着目して自己無撞着方程式を得る点は同じであるので、まずはイジング模型の平均場近似について解説する。

イジング模型のハミルトニアンは

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (5.40)$$

で与えられる。ただし、 $S_i$  はスピンを表し、 $J_{ij}$  はスピン同士のカップリング、 $h$  は磁場を表す。また、和記号の  $\langle ij \rangle$  は最近接のサイトとだけ和を取ることを意味する。

平均場近似では、特定のサイト ( $o$  とする) に注目し、そのサイトにおける有効的な磁場が掛かったハミルトニアン

$$H_{\text{eff}} = -h_{\text{eff}} S_o \quad (5.41)$$

で系を記述することを考える。他のサイトからの寄与は全て有効磁場

$$h_{\text{eff}} = h + \sum_i J_{oi} m_i = h + z J m \quad (5.42)$$

で表されとする。ただし、 $z$  は最近接格子数、 $m_i = \langle S_i \rangle$  はサイト  $i$  の磁化であり、並進対称性  $J_{ij} = J, m_i = m$  を課した。この  $H_{\text{eff}}$  から磁化を計算することにより、自己無撞着方程式

$$m = \tanh(\beta z + z \beta J m) \quad (5.43)$$

を得る ( $\beta$  は逆温度)。この方程式を解くことで、イジング模型の相転移を記述できるのであった。

格子上的電子系 (例えば本研究で用いた模型) を静的な平均場で扱うと、単に

$$H_{\text{int}} = U \sum_i n_{i,a} n_{i,b} \mapsto U \sum_i \left( \langle n_{i,a} \rangle n_{i,b} + n_{i,a} \langle n_{i,b} \rangle \right) \quad (5.44)$$

と置き換わるだけであるので、自己エネルギーの周波数依存性を取り込むことができない。したがって、モット転移などを扱えないことになる。その点を改良したのが DMFT である。DMFT は格子模型を不純物にマップするので自己エネルギーの波数依存性を無視しているが、無限次元で厳密であることが知られている。ただし、現実の系は当然有限次元であるので、この点が近似になる。

DMFT においては、自己無撞着に格子系を不純物模型で記述することを試みる。不純物模型の例としては、例えばアンダーソン模型 (single-impurity Anderson Model, SIAM)

$$H_{\text{SIAM}} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} V_k \left( c_{k\sigma}^\dagger f_\sigma + h.c \right) + \sum_{\sigma} \epsilon_f f_\sigma^\dagger f_\sigma + U f_\uparrow^\dagger f_\uparrow f_\downarrow^\dagger f_\downarrow \quad (5.45)$$

がある。本研究ではこの模型を用いた。ただし、 $k$  は波数、 $\sigma$  はスピンを表し、 $f_\sigma^\dagger, f_\sigma$  が不純物サイトの電子に対応する生成消滅演算子、 $c_{k\sigma}^\dagger, c_{k\sigma}$  は bath 中の電子に対応する演算子である。 $\epsilon_k$  は bath の分散関係を表し、 $V_k$  は bath と不純物のカップリングを表す。 $\epsilon_f$  は不純物サイトのエネルギー  $U$  は不純物サイトでの相互作用の強さを表す。DMFT における自己無撞着方程式は、不純物模型の不純物サイトにおけるグリーン関数と、元の格子模型における原点のグリーン関数が等しいとすることで得られる。

具体的には、以下の手続きを繰り返すことになる; (i) 格子模型における原点のグリーン関数  $\tilde{G}_0(\omega) = \sum_k G(\omega, k)$  を求める。(ii) これを  $U = 0$  での不純物サイトのグリーン関数  $\bar{G}(\omega)$  であるとしてアンダーソン模型を解き、自己エネルギー  $\Sigma(\omega)$  を得る。(iii)  $\Sigma(\omega)$  が格子系における原点のグリーン関数の自己エネルギーだとして、格子系の原点グリーン関数  $G(\omega)$  を計算する。(iv)  $G(\omega)$  の自由な部分に相当する  $\tilde{G}(\omega) = 1/(G(\omega)^{-1} + \Sigma(\omega))$  を計算する。(v)  $\tilde{G}(\omega)$  を再び  $U = 0$  での不純物サイトのグリーン関数であるとしてアンダーソン模型を解く。

つまり、DMFT における自己無撞着方程式を明示的に書くと

$$\tilde{G}(\omega) = \bar{G}(\omega) \quad (5.46)$$

である。

手続き (iii) においては、相互作用がある不純物模型を解かなければならない。その手法としてはいくつかの方法が提案されているが、本研究においては数値繰り込み群 (Numerical Renormalization Group, NRG) を用いた。以下では、NRG について文献 [49] に基づいて簡単に説明する。

NRG は量子論的不純物模型を非摂動的に扱える手法であり、歴史的には Wilson によって近藤模型に適用され、高温領域と低温領域のクロスオーバー領域での計算が初めてなされた。その後、アンダーソン模型など近藤模型以外の模型にも適用されている。NRG のアイデアは、bath の伝導帯のエネルギー準位を対数的に離散化し、不純物模型を半無限スピン鎖の模型にマップするというものである。以下では、簡単のため伝導帯のエネルギーは区間  $[-1, 1]$  の間にあるとする。

この区間を離散化するために、パラメータ  $\Lambda > 1$  を導入しする。 $\Lambda$  は NRG discretization parameter と呼ばれる。離散化されたエネルギーは  $\{\pm\Lambda^n\}_{n=0}^{\infty}$  で与えられる。 $\Lambda \rightarrow 1$  の極限で連続的なエネルギースペクトルが回復するが、低エネルギーの様子を調べるのに必要な  $n$  が大きくなってしまいう問題がある。実際の計算では  $\Lambda = 2$  程度で良い精度が出ることが知られており、本研究においても  $\Lambda = 2$  とした。

具体的な手続きは省略するが、アンダーソン模型はいくつかの近似を用いることで以下のスピン鎖模型に置き換えられる;

$$H_{\text{spin}} = H_{\text{imp}} + \sqrt{\frac{\xi_0}{\pi}} \sum_{\sigma} \left( f_{\sigma}^{\dagger} b_{0\sigma} + h.c \right) \quad (5.47)$$

$$+ \sum_{\sigma} \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n b_{n\sigma}^{\dagger} b_{n\sigma} + t_n \left( b_{n+1\sigma}^{\dagger} b_{n\sigma} + h.c \right) \quad (5.48)$$

$$H_{\text{imp}} = \sum_{\sigma} \epsilon_f f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + U f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} f_{\downarrow}^{\dagger} f_{\downarrow} \quad (5.49)$$

ただし、 $\xi_0, \epsilon_n, t_n$  は定数で、 $\{b_{n\sigma}\}_n$  は伝導帯電子の生成消滅演算子の線形結合で定義される新たな生成消滅演算子である。 $H_{\text{imp}}$  は  $H_{\text{SIAM}}$  の不純物サイトのみを記述する部分である。添え字  $n$  はエネルギーの離散化に用いた  $n$  に対応する index であるが、 $H_{\text{spin}}$  においてはスピン鎖のサイトを表す index と見なすことが出来る。サイト 0 は不純物とカップルしている。 $t_n$  は場所に依存したホッピングの役割を果たし、スピン鎖が長くなるにつれて指数的に減衰することが知られている;  $t_n \propto \Lambda^{-n/2}$

数値計算においては無限のスピン鎖 ( $n = \infty$ ) は実装できないため、 $n$  の最大値は有限である。 $n$  の最大値  $N$  を一つ固定する毎にハミルトニアン  $H_{\text{spin},N}$  が定まるので、ハミルトニアン列  $\{H_{\text{spin},N}\}_N$  が定義できる。物理的には、 $N$  を一つ増やす毎にスピン鎖に新しいサイトを増やすことになる。これを逐次的に対角化するのが NRG の手続きである。 $N$  が小さいうちはハミルトニアンのサイズも小さいが、 $N$  が大きくなると指数的に増加する。これに対しては自然数  $N_s$  を一つ固定して、常に下から  $N_s$  個のエネルギーのみを取り出すことで対処する。上述のように  $n$  が大きいときは  $t_n$  は指数的に減衰するから、結局低いエネルギーの状態しか新しく追加されたサイトに寄与しない。これにより、 $N_s$  以下のエネルギーしか考慮しないという取り扱いが正当化される。本研究においては、 $n$  の最大値は 30 とし、 $N_s = 1500$  とした。

## 第 6 章

# 数値計算結果

### 6.1 $U = 0$ の場合

GQM の  $U$  依存性を調べる前に、 $U = 0$  において GQM が式 (4.34) で与えられる既存の定義と一致することを確認する。本研究を通して、GQM の積分では波数は区間  $[-\pi, \pi]$  を 100 分割して計算した。また、グリーン関数に含まれる微小な  $\eta$  は  $\eta = 0.05$  とした。本来無限小である  $\eta$  が有限になっていることで、本来ギャップが空いている模型でも  $\omega = 0$  に有限のスペクトルが生じる。これにより、GQM を  $\omega_1 = 0$  から計算すると発散してしまう。このような人工的な発散を回避するため、本研究では一番小さい  $\omega_1$  を  $\omega_{1\min} = 0.02$  とした。フェルミ分布関数に含まれる温度は  $T = 0.01$  としているが、今回の模型では  $T = 0$  とみなしてよい。

図 6.1 がその計算結果である。左図は  $M = 1.7$  での量子計量の波数依存性であり、右図は量子計量の積分値の  $M$  依存性である。ただし、右図では既存の量子計量の相転移点

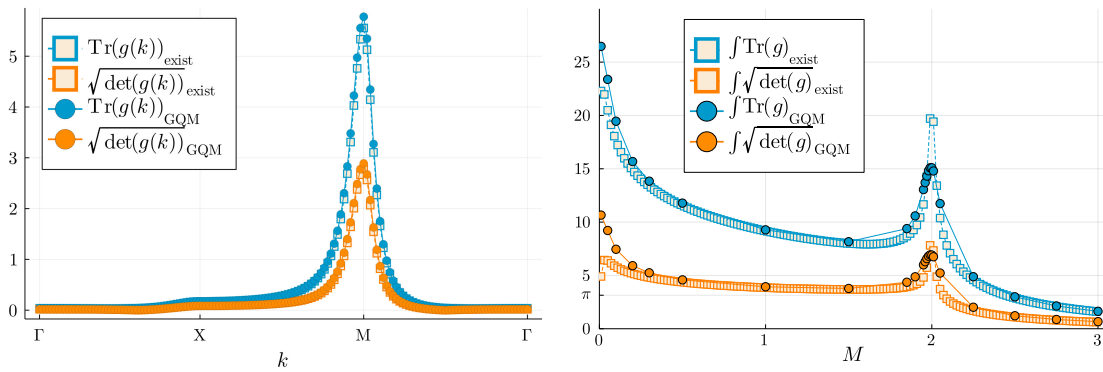


図 6.1 (右図) $U = 0, M = 1.7$  での既存の量子計量 (四角) と GQM (丸) の波数依存性。(左図) $U = 0$  での既存の量子計量の積分値 (四角) と GQM の積分値 (丸) の  $M$  依存性。

における発散を防ぐため、式 (4.34) の分母を  $(E_n - E_m)^2 + \eta^2$  で置き換えた。この  $\eta$  はグリーン関数中の  $\eta$  と同じ値である。両図をみると、GQM は既存の量子計量とよく一致していることが分かる。完全に一致していない理由としては、 $(E_n - E_m)^2 + \eta^2$  と置き換えていることの他に、以下の理由が考えられる;(i)GQM の計算においては、 $\omega_{1\min}$  が有限であるので発散を捉えることが出来ない。つまり、相転移点において既存の定義よりも小さくなると考えられる (ii) 本来は無限小であるべき  $\eta$  が有限であることによって、ギャップが少し小さくなる。すると、 $\sigma_{\alpha\beta}(\omega_1, \mathbf{k})$  が小さい  $\omega_1$  に対して有限になるので、GQM の式 (4.3) 中の  $1/\omega_1$  によって、GQM が大きくなる。この  $\eta$  は物理的には不純物散乱とも見なせるので、微小な不純物散乱がある系では GQM が大きくなると考えられる。(iii) 有限温度の効果によって式 (4.30) の  $|f(E_n) - f(E_m)|$  が小さくなるので、GQM が少し小さくなる。

このような違いはあるが、両者は以下の共通の振る舞いを示す; 臨界点 ( $M = 0, 2$ ) において、積分値は発散的になる。この発散は、臨界点において DC の縦伝導度が有限になることに起因する。また、文献 [18] において指摘された不等式  $\int \sqrt{\det(g)} dk_x dk_y \geq \pi |Ch| = \pi$  がトポロジカル相において成り立っていることが分かる。さらに、積分値はトポロジカル相において大きく、自明相において小さくなる傾向があることがわかる。(文献 [18] では様々なチャーン絶縁体において  $\int \sqrt{\det(g)} dk_x dk_y$  が同じ振る舞いを示すことが数値的に確かめられている。)

## 6.2 $U > 0$ の場合

次に、 $U > 0$  での GQM の計算結果を示す。 $U$  が増加するに伴い、系はトポロジカル相転移を起こすと期待される。これは以下のように理解出来る: 自己エネルギーの効果によってフェルミエネルギー付近のバンド構造は変化し、 $a$  サイトと  $b$  サイトのポテンシャル差  $M$  は  $M_{\text{eff}} = M + (\text{Re}\Sigma^R(\omega = 0)_{AA} - \text{Re}\Sigma^R(\omega = 0)_{BB})/2$  となる。ただし、 $\text{Re}\Sigma^R(\omega = 0)_{AA}$  と  $\text{Re}\Sigma^R(\omega = 0)_{BB}$  は自己エネルギーの対角成分の実部である。したがって、 $M_{\text{eff}} = \{-2, 0, 2\}$  において系はトポロジカル相転移を起こすと予想できる。

実際、 $M = 1.5$  において系はトポロジカル相から自明相へのトポロジカル相転移を起こす。これは図 6.2 に示されている Wilson Loop の結果から分かる。Wilson Loop の巻き付き数は  $U < U_c \approx 3.5$  のとき 1 であり、 $U > U_c$  では 0 である。

図 6.2 の右図では  $M = 1.5$  における GQM の  $U$  依存性が示されている。この図から、 $\int \text{Tr}(g) dk_x dk_y$  と  $\int \sqrt{\det(g)} dk_x dk_y$  が  $U = 0$  の場合と同じ振る舞いを示していると分かる。 $\int \text{Tr}(g) dk_x dk_y$  の発散的な振る舞いは相互作用がある系にも現れている。興味深いことに、不等式  $\int \sqrt{\det(g)} dk_x dk_y \geq \pi$  は相互作用があるトポロジカル相においても成り立っている。さらに、 $\int \text{Tr}(g) dk_x dk_y$  と  $\int \sqrt{\det(g)} dk_x dk_y$  はトポロジカル相において



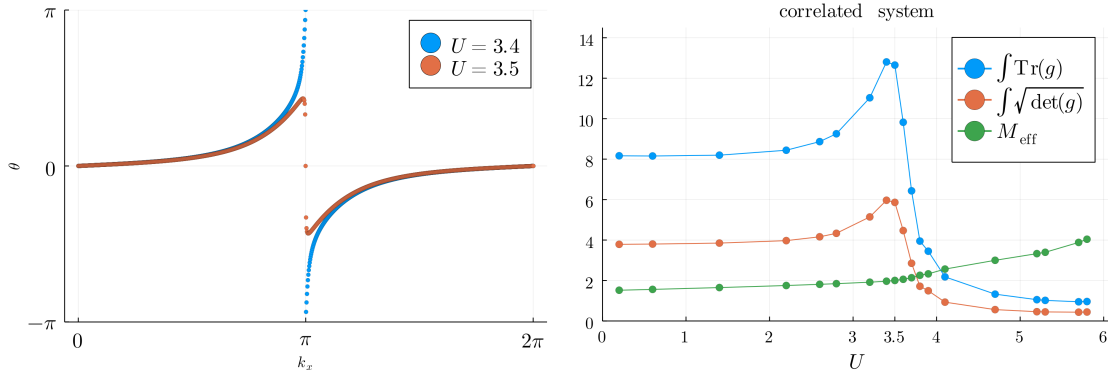


図 6.2 (左図) $M = 1.5$  における  $W(k_x)$  の位相の  $k_x$  依存性。 $U = 3.4$ (青点) においては Wilson Loop の巻き付き数が 1 であるが、 $U = 3.5$ (赤点) では巻き付き数が 0 である。(右図) $M = 1.5$  における  $\int \text{Tr}(g) dk_x dk_y$ (青線) と  $\int \sqrt{\det(g)} dk_x dk_y$ (赤線) の  $U$  依存性。相転移点においては、有効的なポテンシャル差 (緑線) は  $M_{\text{eff}} = M + (\text{Re}\Sigma^R(\omega=0)_{AA} - \text{Re}\Sigma^R(\omega=0)_{BB})/2 = 2$  となり、自由な系の場合と同じ値であると分かる。化学ポテンシャルは  $\mu = U/2$  である。

大きくなる傾向があると分かる。従って、これらの量は相互作用がある系でもトポロジーを推定するのに役立つ。

次に、GQM の半正定値性を確かめる。半正定値性を調べるには、 $\text{Tr}g(\mathbf{k})$  と  $\det g(\mathbf{k})$  見れば良い (図 6.3)。2 次元系においては、半正定値性は任意の  $\mathbf{k}$  に対して  $\text{Tr}g(\mathbf{k}) \geq 0$  と  $\det g(\mathbf{k}) \geq 0$  が成り立つことと同値であることに注意。

図 6.3 を見ると、GQM は BZ の M 点 ( $k_x = k_y = \pi$ ) の近くで大きくなることが分かる。これは図 6.4 に示されているスペクトルから理解出来る。エネルギーギャップが M 点近くで小さいことが分かる。したがって、 $\sigma_{\alpha\beta}(\omega_1, \mathbf{k})$  は小さい  $\omega_1$  に対して有限になり、 $1/\omega_1$  の寄与で GQM が大きくなることが分かる。

最後に、 $U = 2.2$  に固定し、 $M$  を変えて同じ解析を行う。 $M$  が増えるに従い、系はトポジカル相転移を起こす。図 6.5 に示されている Wilson Loop の結果から、 $M \approx 1.69$  においてトポジカル相から自明相への相転移が起きていることが分かる。相互作用の効果によって、相転移が起きる  $M$  の値は自由な系における値よりも小さくなっている。

それに対応した GQM の  $M$  依存性も図 6.5 の右に示されている。GQM は転移点で再び発散的な振る舞いを示している。さらに、この発散前後の値を比べることで、 $M < 1.69$  ではトポジカル相だと推測されるが、この結論は Wilson Loop の結果と符合する。また、不等式  $\int \sqrt{\det(g)} dk_x dk_y \geq \pi$  はこのパラメータ領域でも成り立っている。

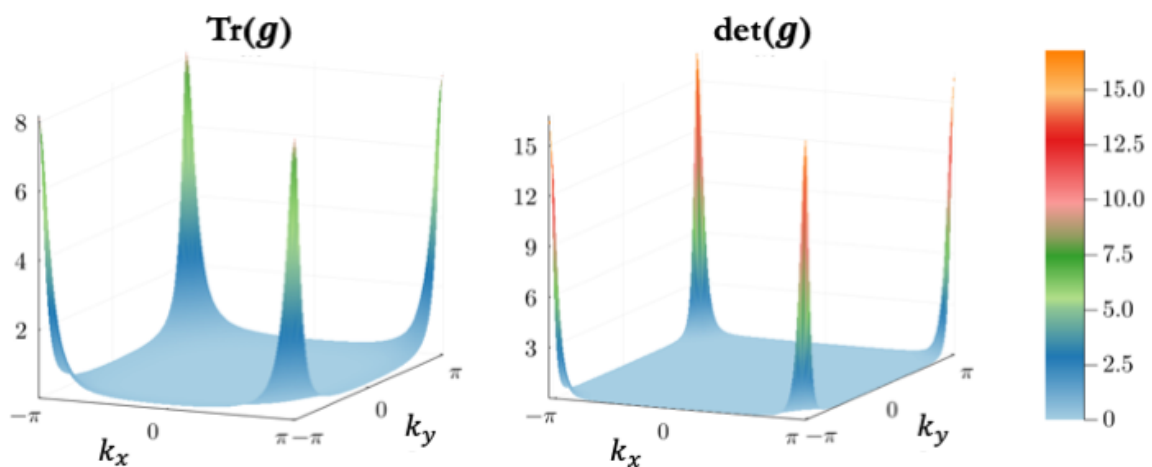


図 6.3  $\text{Tr}g(\mathbf{k})$  と  $\det g(\mathbf{k})$  の波数依存性。GQM の半正定値性が成り立っていると分かる。この図では  $M = 1.5, U = 2.2, \mu = U/2$  である。

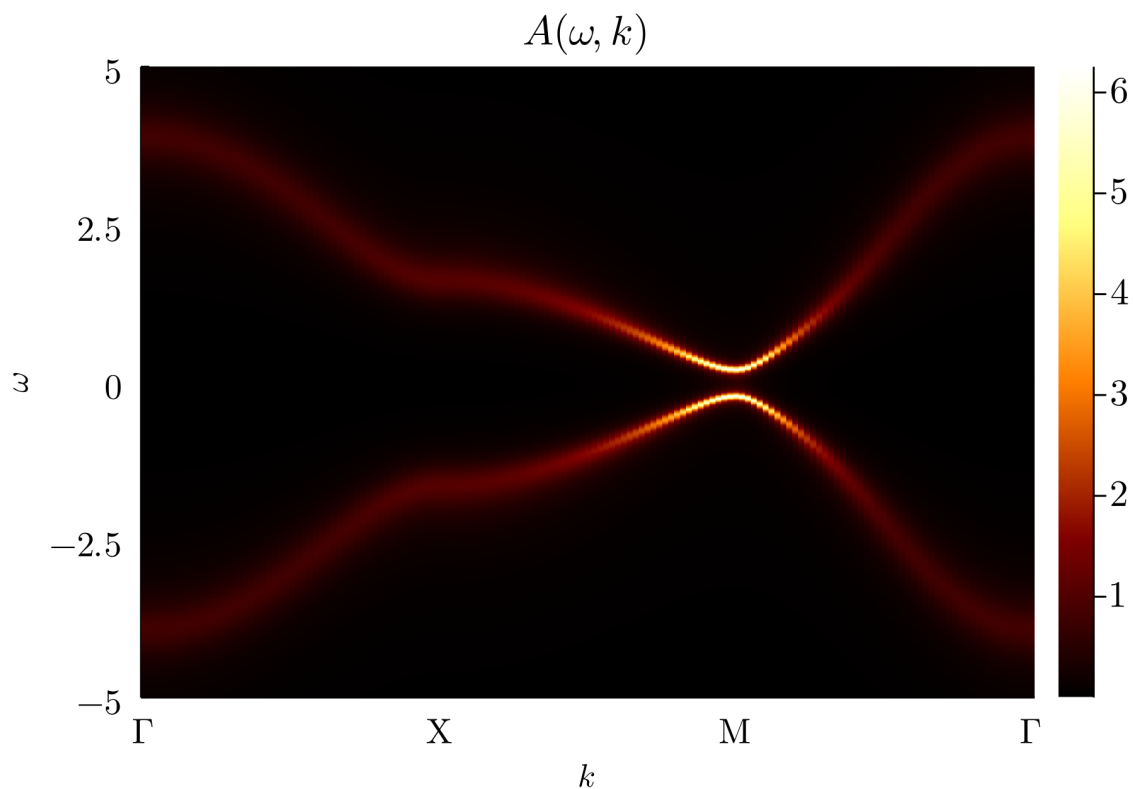


図 6.4 スペクトル関数のトレース  $\text{Tr}A(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{1}{\pi} \text{Tr} \text{Im}G^R(\omega, \mathbf{k})$  を示す。エネルギーギャップが M 点で小さくなることが分かる。スペクトルがぼやけているのは自己エネルギーの虚部の影響である。また、系の PHS と反転対称性から  $\text{Tr}A(\omega, \mathbf{k}) = \text{Tr}A(-\omega, \mathbf{k})$  が成り立っていることが分かる。この図では  $M = 1.5, U = 2.2, \mu = U/2$ 。

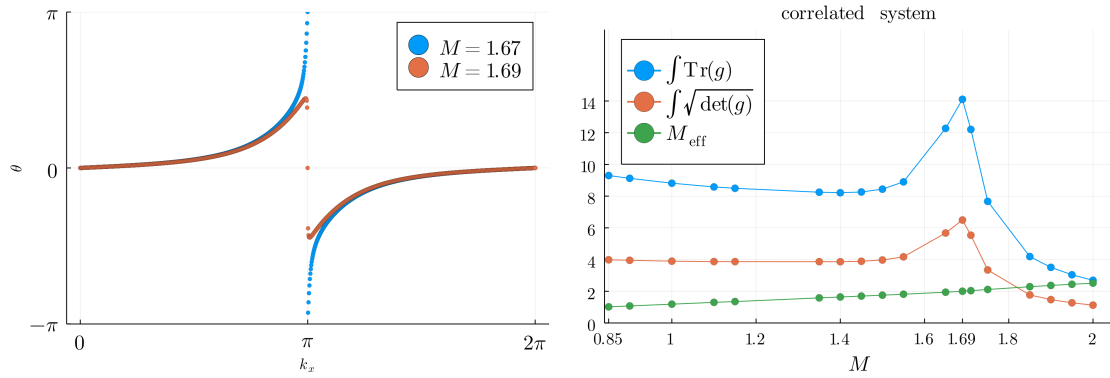


図 6.5 (左図) $U = 2.2$ における  $W(k_x)$  の位相の  $k_x$  依存性。 $M = 1.67$ (青点) においては Wilson Loop の巻き付き数が 1 であるが、 $M = 1.69$ (赤点) では巻き付き数が 0 である。(右図) 式 (4.3) から計算した  $\int \text{Tr}(g)dk_xdk_y$ (青線) と  $\int \sqrt{\det(g)}dk_xdk_y$ (赤線) の  $M$  依存性。 $M_{\text{eff}} = 2$  のときにトポロジカル相転移が起きている。パラメータは  $U = 2.2, \mu = U/2$



## 第 7 章

# 結論

量子計量は様々な物理量に表れる幾何学的量であり、近年注目を集めている。本研究では、1 粒子グリーン関数を用いて BZ 上の一般化された量子計量 (GQM) を定義し、相互作用がある場合にも量子計量を計算できるようにした。GQM は系の光学伝導度に基づいている。相互作用の効果は一粒子グリーン関数の自己エネルギーを通して取り込まれている。我々は、 $T = 0$  の自由な系において GQM が既存の量子計量に一致すること、GQM が半正定値であること、つまり GQM が計量として機能することを解析的に示した。

数値計算においては、チャーン絶縁体の toy model である QWZ 模型に斥力相互作用を加えた系に対して、GQM を計算した。自己エネルギーを得る際は DMFT と NRG を用いた。また、トポロジを判定する際には有効ハミルトニアンの Wilson Loop を用いた。

Wilson Loop による解析結果から、GQM がトポロジカル相において大きくなり、自明相において小さくなる傾向があることが分かった。さらに、量子体積とチャーン数の間の不等式は相互作用がある場合にも成り立っていることを確かめた。したがって、GQM は自由な系だけでなく相互作用がある系においてもトポロジとの繋がりと分かった。自由な系において量子計量は様々な物理量に寄与するので、GQM は強相関における系のトポロジ以外の物理量にも寄与すると考えられる。



# 謝辞

本研究は、京都大学大学院理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻、物理第一教室 凝縮系理論グループにおいて、Robert Peters 講師のご指導のもと行われたものです。私自身は心配性な性格から就職活動に時間を割きすぎてしまい、研究の進捗がなかなか生まれな  
い中でも、辛抱強く見守ってくださった Peters 講師に感謝します。また、量子計量をグリーン関数で記述するというアイデアを与えてくださったこと、私の下手な英語の校正を丁寧に行ってくれたことにも、心から感謝します。同研究グループの川上則雄教授、柳瀬陽一教授、池田隆介准教授、吉田恒也准教授、手塚真樹助教、大同暁人助教の各先生方にも、凝縮系セミナーを通じて沢山の刺激をもらいました。研究室の先輩方、同期、後輩の皆さんにもよくしていただき、楽しい大学院生活を送ることが出来ました。また、修士1回生の何も分からなかった私に、数値計算や研究テーマについて多くのアドバイスを下さった研究室 OB の道下さんに深く感謝します。さらに、学会の参加などで毎回お世話になった秘書の方々、そして OA として雇っていただいた iCeMS 藤田グループの藤田さん、松田さん、秘書の里中さんにも、御礼を申し上げます。最後に、就職活動と大学院の研究に追われて精神的に切迫した状態の私を、常に支えてくれた家族に感謝します。





## 参考文献

- [1] Mikio Nakahara. Geometry, topology and physics. CRC press, 2018.
- [2] B Andrei Bernevig. Topological insulators and topological superconductors. In Topological Insulators and Topological Superconductors. Princeton university press, 2013.
- [3] Kohei Kawabata, Ken Shiozaki, Masahito Ueda, and Masatoshi Sato. Symmetry and topology in non-hermitian physics. Phys. Rev. X, Vol. 9, p. 041015, Oct 2019.
- [4] Takahiro Morimoto and Naoto Nagaosa. Topological nature of nonlinear optical effects in solids. Science Advances, Vol. 2, No. 5, p. e1501524, 2016.
- [5] Yoshinori Tokura and Naoto Nagaosa. Nonreciprocal responses from non-centrosymmetric quantum materials. Nature Communications, Vol. 9, No. 1, p. 3740, Sep 2018.
- [6] Inti Sodemann and Liang Fu. Quantum nonlinear hall effect induced by berry curvature dipole in time-reversal invariant materials. Phys. Rev. Lett., Vol. 115, p. 216806, Nov 2015.
- [7] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. Phys. Rev. Lett., Vol. 49, pp. 405–408, Aug 1982.
- [8] Alfred Shapere and Frank Wilczek. Geometric phases in physics, Vol. 5. World scientific, 1989.
- [9] Sebastiano Peotta and Päivi Törmä. Superfluidity in topologically nontrivial flat bands. Nature Communications, Vol. 6, No. 1, p. 8944, Nov 2015.
- [10] Valerio Peri, Zhi-Da Song, B. Andrei Bernevig, and Sebastian D. Huber. Fragile topology and flat-band superconductivity in the strong-coupling regime. Phys. Rev. Lett., Vol. 126, p. 027002, Jan 2021.
- [11] Jonah Herzog-Arbeitman, Valerio Peri, Frank Schindler, Sebastian D. Huber,

- and B. Andrei Bernevig. Superfluid weight bounds from symmetry and quantum geometry in flat bands. Phys. Rev. Lett., Vol. 128, p. 087002, Feb 2022.
- [12] Jonah Herzog-Arbeitman, Aaron Chew, Kukka-Emilia Huhtinen, Päivi Törmä, and B. Andrei Bernevig. Many-Body Superconductivity in Topological Flat Bands. arXiv e-prints, p. arXiv:2209.00007, August 2022.
- [13] Frédéric Piéchon, Arnaud Raoux, Jean-Noël Fuchs, and Gilles Montambaux. Geometric orbital susceptibility: Quantum metric without berry curvature. Phys. Rev. B, Vol. 94, p. 134423, Oct 2016.
- [14] C. Leblanc, G. Malpuech, and D. D. Solnyshkov. Universal semiclassical equations based on the quantum metric for a two-band system. Phys. Rev. B, Vol. 104, p. 134312, Oct 2021.
- [15] Tyler B. Smith, Lakshmi Pullasser, and Ajit Srivastava. Momentum-space gravity from the quantum geometry and entropy of bloch electrons. Phys. Rev. Research, Vol. 4, p. 013217, Mar 2022.
- [16] Qing Liao, Charly Leblanc, Jiahuan Ren, Feng Li, Yiming Li, Dmitry Solnyshkov, Guillaume Malpuech, Jiannian Yao, and Hongbing Fu. Experimental measurement of the divergent quantum metric of an exceptional point. Phys. Rev. Lett., Vol. 127, p. 107402, Sep 2021.
- [17] D. D. Solnyshkov, C. Leblanc, L. Bessonart, A. Nalitov, Jiahuan Ren, Qing Liao, Feng Li, and G. Malpuech. Quantum metric and wave packets at exceptional points in non-hermitian systems. Phys. Rev. B, Vol. 103, p. 125302, Mar 2021.
- [18] Tomoki Ozawa and Bruno Mera. Relations between topology and the quantum metric for chern insulators. Phys. Rev. B, Vol. 104, p. 045103, Jul 2021.
- [19] Yoonseok Hwang, Junseo Jung, Jun-Won Rhim, and Bohm-Jung Yang. Wavefunction geometry of band crossing points in two dimensions. Phys. Rev. B, Vol. 103, p. L241102, Jun 2021.
- [20] Anwei Zhang. Revealing chern number from quantum metric. Chinese Physics B, Vol. 31, No. 4, p. 040201, mar 2022.
- [21] Fang Xie, Zhida Song, Biao Lian, and B. Andrei Bernevig. Topology-bounded superfluid weight in twisted bilayer graphene. Phys. Rev. Lett., Vol. 124, p. 167002, Apr 2020.
- [22] Nicola Marzari and David Vanderbilt. Maximally localized generalized wannier functions for composite energy bands. Phys. Rev. B, Vol. 56, pp. 12847–12865, Nov 1997.
- [23] Stephan Rachel. Interacting topological insulators: a review. Reports on Progress

- 
- in Physics, Vol. 81, No. 11, p. 116501, oct 2018.
- [24] M Hohenadler and F F Assaad. Correlation effects in two-dimensional topological insulators. Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 25, No. 14, p. 143201, mar 2013.
  - [25] Zhong Wang, Xiao-Liang Qi, and Shou-Cheng Zhang. Topological order parameters for interacting topological insulators. Phys. Rev. Lett., Vol. 105, p. 256803, Dec 2010.
  - [26] Zhong Wang and Shou-Cheng Zhang. Simplified topological invariants for interacting insulators. Phys. Rev. X, Vol. 2, p. 031008, Aug 2012.
  - [27] Zhong Wang and Binghai Yan. Topological hamiltonian as an exact tool for topological invariants. Journal of physics. Condensed matter : an Institute of Physics journal, Vol. 25, p. 155601, 03 2013.
  - [28] Robert-Jan Slager, Louk Rademaker, Jan Zaanen, and Leon Balents. Impurity-bound states and green’s function zeros as local signatures of topology. Phys. Rev. B, Vol. 92, p. 085126, Aug 2015.
  - [29] V. Gurarie. Single-particle green’s functions and interacting topological insulators. Phys. Rev. B, Vol. 83, p. 085426, Feb 2011.
  - [30] Wei Chen and Gero von Gersdorff. Measurement of interaction-dressed Berry curvature and quantum metric in solids by optical absorption. SciPost Phys. Core, Vol. 5, p. 040, 2022.
  - [31] R. Resta. The insulating state of matter: a geometrical theory. The European Physical Journal B, Vol. 79, No. 2, pp. 121–137, Jan 2011.
  - [32] Ivo Souza, Tim Wilkens, and Richard M. Martin. Polarization and localization in insulators: Generating function approach. Phys. Rev. B, Vol. 62, pp. 1666–1683, Jul 2000.
  - [33] Raffaele Resta. Why are insulators insulating and metals conducting? Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 14, No. 20, p. R625, may 2002.
  - [34] Takahiro Kashiara, Yoshihiro Michishita, and Robert Peters. Quantum metric on the Brillouin Zone in correlated electron systems and its relation to topology for Chern insulators. arXiv e-prints, p. arXiv:2211.07924, November 2022.
  - [35] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger. Solitons in polyacetylene. Phys. Rev. Lett., Vol. 42, pp. 1698–1701, Jun 1979.
  - [36] János K Asbóth, László Oroszlány, and András Pályi. A short course on topological insulators. Lecture notes in physics, Vol. 919, p. 166, 2016.
  - [37] Yoshihiro Michishita and Robert Peters. Effects of renormalization and non-

- hermiticity on nonlinear responses in strongly correlated electron systems. Physical Review B, Vol. 103, No. 19, p. 195133, 2021.
- [38] Qian Niu, D. J. Thouless, and Yong-Shi Wu. Quantized hall conductance as a topological invariant. Phys. Rev. B, Vol. 31, pp. 3372–3377, Mar 1985.
- [39] 強相関電子系の物理. 日本評論社, 2009.
- [40] Hoi Chun Po, Haruki Watanabe, and Ashvin Vishwanath. Fragile topology and wannier obstructions. Phys. Rev. Lett., Vol. 121, p. 126402, Sep 2018.
- [41] Mahito Kohmoto. Topological invariant and the quantization of the hall conductance. Annals of Physics, Vol. 160, No. 2, pp. 343–354, 1985.
- [42] 関数解析. 共立数学講座. 共立出版, 1980.
- [43] Tomoki Ozawa and Bruno Mera. Relations between topology and the quantum metric for chern insulators. Physical Review B, Vol. 104, No. 4, p. 045103, 2021.
- [44] トポロジカル絶縁体・超伝導体. 現代理論物理学シリーズ. 丸善出版, 2016.
- [45] Xiao-Liang Qi, Yong-Shi Wu, and Shou-Cheng Zhang. Topological quantization of the spin hall effect in two-dimensional paramagnetic semiconductors. Phys. Rev. B, Vol. 74, p. 085308, Aug 2006.
- [46] Barry Bradlyn, Zhijun Wang, Jennifer Cano, and B. Andrei Bernevig. Disconnected elementary band representations, fragile topology, and wilson loops as topological indices: An example on the triangular lattice. Phys. Rev. B, Vol. 99, p. 045140, Jan 2019.
- [47] Adrien Bouhon, Annica M. Black-Schaffer, and Robert-Jan Slager. Wilson loop approach to fragile topology of split elementary band representations and topological crystalline insulators with time-reversal symmetry. Phys. Rev. B, Vol. 100, p. 195135, Nov 2019.
- [48] Antoine Georges, Gabriel Kotliar, Werner Krauth, and Marcelo J. Rozenberg. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. Rev. Mod. Phys., Vol. 68, pp. 13–125, Jan 1996.
- [49] Ralf Bulla, Theo A. Costi, and Thomas Pruschke. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. Rev. Mod. Phys., Vol. 80, pp. 395–450, Apr 2008.