固体物理学 III

05231527 小島悠杜

A. トポロジカル物性
B. 強相関電子系

1　物性物理におけるトポロジー

1.1　ベリー位相，ベリー接続，ベリー曲率

- 幾何学的位相
  まず，エネルギー縮退のない系を考える。

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(t):&\ \text{時間依存するハミルトニアン} \\ \{|n(t)\rangle\}:&\ \mathcal{H}(t)\ \text{の固有状態で正規直交完全系} \end{aligned}$$

とすると

$$\mathcal{H}(t)\,|n(t)\rangle = E_n\,|n(t)\rangle\,. \tag{1.1.1}$$

$\sum_n |n(t)\rangle\langle n(t)| = \mathbb{1}$ より

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t)\,|n(t)\rangle \tag{1.1.2}$$

となる。ただし，$C_n \coloneqq \langle n(t)|\psi(t)\rangle$。時間依存するシュレディンガー方程式より

$$i\hbar\frac{d}{dt}\,|\psi(t)\rangle = \mathcal{H}(t)\,|\psi(t)\rangle \Longrightarrow i\hbar\sum_n\left(\dot{C}_n\,|n(t)\rangle + C_n|\dot{n(t)}\rangle\right) = \sum_n E_nC_n\,|n(t)\rangle\,.$$

両辺に $\langle m(t)|\ (m\neq n)$ を作用させると

$$i\hbar\dot{C}_m + i\hbar\sum_n C_n\,\langle m|\dot{n}\rangle = E_mC_m. \tag{1.1.3}$$

ここで

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}\,\langle n|m\rangle = \langle\dot{n}|m\rangle + \langle n|\dot{m}\rangle = 0 \Longrightarrow \langle\dot{n}|m\rangle = -\,\langle n|\dot{m}\rangle \\ \dfrac{d}{dt}\,\langle n|\mathcal{H}|m\rangle = \langle\dot{n}|m\rangle\,E_m + \langle n|\dot{\mathcal{H}}|m\rangle + \langle n|\dot{m}\rangle\,E_n = 0 \end{cases} \tag{1.1.4, 1.1.5}$$

$$\therefore \langle n|\dot{m}\rangle = -\frac{\langle n|\dot{\mathcal{H}}|m\rangle}{(E_n - E_m)} \tag{1.1.6}$$

(1.1.6) を (1.1.3) に代入すると

$$i\hbar\dot{C}_m + i\hbar C_m\,\langle m|\dot{m}\rangle + \sum_{n\neq m}\frac{\langle m|\dot{\mathcal{H}}|n\rangle}{E_n - E_m}C_n = C_mE_m$$

$$\therefore \frac{d}{dt}C_m(t) = \frac{1}{i\hbar}E_m(t)C_m(t) - C_m(t)\langle m|\dot{m}\rangle - \sum_{n\neq m}\frac{\langle m|\dot{\mathcal{H}}|n\rangle}{E_n - E_m}C_n(t)$$

$\sum_{n\neq m}\frac{\langle m|\dot{\mathcal{H}}|n\rangle}{E_n-E_m} \ll 1$ と仮定して無視する (断熱近似) と

$$\frac{d}{dt}C_m(t) = \frac{1}{i\hbar}E_m(t)C_m(t) - \langle m|\dot{m}\rangle C_m(t).$$

微分方程式を解くと

$$C_m(t) = C_m(0)\exp(i\theta_m(t))\cdot\exp(i\gamma_m(t))$$

$$\begin{cases} \theta_m(t) \coloneqq -\frac{1}{\hbar}\int_0^t E_m(t')dt' & \text{動的位相 dynamical phase} \\ \gamma_m(t) \coloneqq i\int_0^t \langle m(t')|\dot{m}(t')\rangle\, dt' & \text{幾何学的位相 geometric phase} \end{cases}$$

本当に位相?

$\theta_m \cdots$ 明らかに実数

$\gamma_m \cdots \frac{d}{dt}\langle m|m\rangle = \langle\dot{m}|m\rangle + \langle m|\dot{m}\rangle = 0 \Longrightarrow 2\,\mathrm{Re}\left[\langle m|\dot{m}\rangle\right] = 0 \Longrightarrow \langle m|\dot{m}\rangle$ は純虚数 $\Longrightarrow \gamma_m$ は実数

- パラメータ $\boldsymbol{R}(t)$ を通じてのみ t 依存する場合

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(t) \longrightarrow & \mathcal{H}(\boldsymbol{R}(t)) \\ (1.1.9) \longrightarrow \quad & \theta_m(t) \coloneqq -\frac{1}{\hbar}\int_{\boldsymbol{R_0}\,C}^{\boldsymbol{R}} E(\boldsymbol{R}')d\boldsymbol{R}' \\ & \gamma_m(t) \coloneqq i\int_{\boldsymbol{R_0}\,C}^{\boldsymbol{R}} \langle m(\boldsymbol{R}')|\nabla_{\boldsymbol{R}'}m(\boldsymbol{R}')\rangle\, d\boldsymbol{R}' \end{aligned} \tag{1.1.10}$$

ここでベリー接続を $\boldsymbol{A}_m(\boldsymbol{R}) \coloneqq i\langle m(\boldsymbol{R})|\nabla_{\boldsymbol{R}}|m(\boldsymbol{R})\rangle$ (1.1.11) と定義すると

$$\gamma_m(\boldsymbol{R}) = \int_{\boldsymbol{R_0}\,C}^{\boldsymbol{R}} \boldsymbol{A}_m(\boldsymbol{R}')d\boldsymbol{R}' \tag{1.1.12}$$

- ベリー位相

局所ゲージ変換 $|(\boldsymbol{R})\rangle \to |n'(\boldsymbol{R})\rangle = e^{i\phi(\boldsymbol{R})}|n(\boldsymbol{R})\rangle$ を考える。

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{R}) \to \boldsymbol{A}'_n(\boldsymbol{R}) &= ie^{-i\phi}\langle m|\nabla_{\boldsymbol{R}}(e^{i\phi}|m\rangle) \\ &= \boldsymbol{A}_m(\boldsymbol{R}) - \nabla_{\boldsymbol{R}}\phi(\boldsymbol{R}) \end{aligned}$$

これはゲージ不変ではない。また,

$$\begin{aligned} \gamma_m \to \gamma'_m &= \int_C (\boldsymbol{A}_m(\boldsymbol{R}') - \nabla_{\boldsymbol{R}'}\phi(\boldsymbol{R}'))d\boldsymbol{R}' \\ &= \gamma_m(\boldsymbol{R}) - [\phi(\boldsymbol{R}) - \phi(\boldsymbol{R}_0)] \end{aligned}$$

$\Longrightarrow$closed loop を考えれば良い!

$$\begin{aligned} \gamma_n(\boldsymbol{R}) &\coloneqq \oint_C \sum_\mu \left\langle n(\boldsymbol{R}) \middle| \frac{\partial n}{\partial R_\mu} \right\rangle dR_\mu \\ &= i\oint_C \langle n(\boldsymbol{R})|\nabla_{\boldsymbol{R}}|n(\boldsymbol{R})\rangle\, d\boldsymbol{R} \\ &= \oint_C \boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})d\boldsymbol{R} \end{aligned} \tag{1.1.13}$$

- ベリー曲率 Ω
  ストークスの定理が使えるように定義

$$\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{R}) \coloneqq \nabla_{\boldsymbol{R}} \times \boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}) \tag{1.1.14}$$

$$\therefore \gamma_n = \oint \boldsymbol{A}_n d\boldsymbol{R} = \int_S \boldsymbol{\Omega} d\boldsymbol{S}$$

1.1: まとめ

Berry phase

$$\begin{aligned}\gamma_n(\boldsymbol{R}) &\coloneqq i \oint_C \langle n(\boldsymbol{R}')|\nabla_{\boldsymbol{R}'}|n(\boldsymbol{R}')\rangle \, d\boldsymbol{R}' \\ &= \oint_C \boldsymbol{A} d\boldsymbol{R}' = \int_S \boldsymbol{\Omega} d\boldsymbol{S}\end{aligned}$$

Berry connection

$$\boldsymbol{A}_n(\boldsymbol{R}) \coloneqq i \langle n(\boldsymbol{R})|\nabla_{\boldsymbol{R}}|n(\boldsymbol{R})\rangle$$

Berry curvature

$$\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{R}) \coloneqq \nabla_{\boldsymbol{R}} \times \boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})$$

(1.1.15)

1.2 具体例

1. アハラノフボーム効果
   - $A \to B \to D$ と $A \to C \to D$ で経路差ゼロ
   - 磁場はソレノイドコイルの中のみに存在，経路上はゼロ

   $\Longrightarrow$ 古典的には干渉は生じない?

   $\Longrightarrow$ 量子力学ではベクトルポテンシャルが位相に現れ，干渉を起こす。

   ソレノイドから十分離れた $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{R}_0$(経路上の点) でベクトルポテンシャルはゼロとする。これは基準点の設定なのでいつでもできる。そのときのシュレディンガー方程式の解を $\psi_0(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_0)$ とする。ベクトルポテンシャルが存在しないとみなしたときには

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_0(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_0) = E\psi_0(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_0) \tag{1.2.1}$$

   が成り立つ。実際にはベクトルポテンシャルが経路上に存在するが，(1.2.1) と同じ固有値，(位相のみ異なる) 固有状態のはず。

$$\therefore \psi(\boldsymbol{r}) = e^{i\theta(\boldsymbol{r})}\psi_0(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_0) \tag{1.2.2}$$

$$\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\right)^2 \psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{1.2.3}$$

   θ は (1.2.3) をみたすように決める。

$$\theta(\boldsymbol{r}) = -\frac{e}{\hbar c}\int_{\boldsymbol{R}_0}^{\boldsymbol{r}} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) d\boldsymbol{x}$$

$$\therefore \Delta\theta := \theta_{A\to B\to D} - \theta_{A\to C\to D}$$
$$= -\frac{e}{\hbar c}\oint \boldsymbol{A}d\boldsymbol{x} = -\frac{e}{\hbar c}\Phi = -2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0} \neq 0 \quad \left(\Phi_0 := \frac{2\pi\hbar c}{|e|}: \text{ 磁束量子}\right) \tag{1.2.4}$$

- ベリー位相との対応

  $\boldsymbol{R}(t)$ を実空間の位置ベクトルとすると，

  ベリー接続 $\to$ ベクトルポテンシャル，ベリー曲率 $\to$ 磁場，ベリー位相 $\to$ アハラノフボーム位相

  ソレノイドコイルの外，位置 $\boldsymbol{R}$ に置かれた箱中の電子を考える。

  $$\left\{\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})\right\}\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r})$$

  $\boldsymbol{A}$ が全領域でゼロのときの解を $\psi_0(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})$ とすると

  $$\psi(\boldsymbol{r}) = \exp\left(-i\frac{e}{\hbar c}\int_{\boldsymbol{R}}^{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}\right)\psi_0(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})$$

  ※ ψ_0 には global phase の任意性があるので，箱内で ψ_0 が実数になるように選ぶ。(?)

  ベリー接続

  $$\boldsymbol{A}_B = i\int d^3r\psi(\boldsymbol{r})\nabla_{\boldsymbol{R}}\psi(\boldsymbol{r})$$
  $$= \frac{e}{\hbar c}\boldsymbol{A}\int\psi^*\psi d^3r + i\int\psi_0^*\nabla_{\boldsymbol{R}}\psi_0 d^3r$$

  第 2 項目は ψ_0 が実数であることから

  $$\int\psi\nabla\psi d^3r = \frac{1}{2}\nabla\int\psi^2 d^3r$$

  を考えると 0。

  $$\therefore \boldsymbol{A}_B = \frac{e}{\hbar c}\boldsymbol{A}$$

  ベリー位相

  $$\gamma = \oint\boldsymbol{A}_B d\boldsymbol{R} = -\frac{e}{\hbar c}\int\boldsymbol{A}d\boldsymbol{S} = -2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}$$

2. 飛びあり

   これを使ってベリー接続等を計算してみる。

   $$i\langle\boldsymbol{R}_+|\frac{\partial}{\partial\theta}|\boldsymbol{R}_-\rangle = i\langle\boldsymbol{R}_-|\frac{\partial}{\partial\theta}|\boldsymbol{R}_-\rangle 0$$
   $$i\langle\boldsymbol{R}_+|\frac{\partial}{\partial\phi}|\boldsymbol{R}_+\rangle = \begin{pmatrix} e^{i\phi}\cos\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^{-i\phi}\cos\frac{\theta}{2} \\ 0\end{pmatrix} = \cos^2\frac{\theta}{2}$$
   $$i\langle\boldsymbol{R}_-|\frac{\partial}{\partial\phi}|\boldsymbol{R}_-\rangle = \sin^2\frac{\theta}{2}$$

   球面座標系では

   $$\nabla = \boldsymbol{e}_R\frac{\partial}{\partial R} + \boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial\phi} + \boldsymbol{e}_\phi\frac{1}{R\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}$$

   より

   $$\boldsymbol{A}^+ = i\langle\boldsymbol{R}_+|\nabla|\boldsymbol{R}_+\rangle = \frac{\cos^2\frac{\theta}{2}}{R\sin\theta}\boldsymbol{e}_\phi = \frac{1+\cos\theta}{2R\sin\theta}\boldsymbol{e}_\phi$$
   $$\boldsymbol{A}^- = \frac{\sin\frac{\theta}{2}}{R\sin\theta}\boldsymbol{e}_\phi = \frac{1-\cos\theta}{2R\sin\theta}\boldsymbol{e}_\phi \tag{1.2.9}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{A} = \frac{1}{R^2 \sin\theta}\left[\frac{\partial}{\partial\theta}(R\sin\theta A_\phi) - \frac{\partial}{\partial\phi}(RA_\theta)\right]\boldsymbol{e}_R + \frac{1}{R\sin\theta}\left[\frac{\partial}{\partial\phi}A_R - \frac{\partial}{\partial R}(R\sin\theta A_\phi)\right]\boldsymbol{e}_\theta + \frac{1}{R}\left[\frac{\partial}{\partial R}(RA_\theta) - \right.$$

より

$$\boldsymbol{\Omega}^\pm = \nabla \times \boldsymbol{A}^\pm = \frac{\mp 1}{2R^2}\boldsymbol{e}_R = \mp\frac{\boldsymbol{R}}{2R^3} \tag{1.2.10}$$

ベリー位相は

$$\begin{aligned}\gamma^\pm &= \int_{\text{球面}} \boldsymbol{\Omega}^\pm d\boldsymbol{S} = \mp\int \frac{1}{2R^2}R^2\sin\theta d\theta d\phi \\ &= \mp\int \sin\theta d\theta d\phi \\ &= \mp 2\pi\end{aligned} \tag{1.2.11}$$

電磁気学を思い出すと

$$\nabla\cdot\boldsymbol{E} = 4\pi\rho, \quad \nabla\cdot\boldsymbol{B} = 4\pi\rho_{\mathrm{m}} \to \int \boldsymbol{B}d\boldsymbol{S} = 4\pi Q_{\mathrm{m}}$$

なので，モノポールチャージ $Q_{\mathrm{m}} = \mp 1/2$ を意味する。

$$\boldsymbol{A}^\pm = \frac{1\pm\cos\theta}{R\sin\theta}\boldsymbol{e}_\phi \to \theta = 0, \pi \text{で } A^-, A^+ \text{がそれぞれ定義できない}$$

固有ベクトルが北極，南極で一意に定まっていないことに起因する。

$$\theta = \pi \quad |\boldsymbol{R}_+\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}, \quad |\boldsymbol{R}_-\rangle = \begin{pmatrix}-e^{i\phi}\\0\end{pmatrix}$$

$$\theta = 0 \quad |\boldsymbol{R}_+\rangle = \begin{pmatrix}e^{-i\phi}\\0\end{pmatrix}, \quad |\boldsymbol{R}_-\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

よってゲージ ψ を $\psi = -\phi$ として選んだ

$$|\boldsymbol{R}_+\rangle^{\mathrm{I}}\mathrm{I} = \begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\\ e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}, \quad |\boldsymbol{R}_-\rangle^{\mathrm{I}}\mathrm{I} = \begin{pmatrix}\sin\frac{\theta}{2}\\ e^{i\phi}\cos\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}$$

を赤道でつぎはぎして問題を解決する。

1.3 ベリー曲率の別表式

$$\boldsymbol{\Omega}^n = \nabla\times\boldsymbol{A}^n$$

を成分表示する。

$$\begin{aligned}\Omega_k^n &= \epsilon_{ijk}\partial_i A_j^n \\ &= i\epsilon_{ijk}\partial_i\left(\langle n(\boldsymbol{R})|\partial_j n(\boldsymbol{R})\rangle\right) \\ &= i\epsilon_{ijk}\left\{\langle\partial_i n(\boldsymbol{R})|\partial_j n(\boldsymbol{R})\rangle + \langle n(\boldsymbol{R})|\partial_i\partial_j n(\boldsymbol{R})\rangle\right\} \because \text{対称と反対称の縮約} \\ &= i\epsilon_{ijk}\langle\partial_i n(\boldsymbol{R})|\partial_j n(\boldsymbol{R})\rangle\end{aligned} \tag{1.3.1}$$

ここで $\mathbb{1} = \sum_m |m(\boldsymbol{R})\rangle\langle m(\boldsymbol{R})|$ を挿入

$$\begin{aligned}\Omega_k^n &= i\sum_m \epsilon_{ijk} \langle \partial_i n|m\rangle \langle m|\partial_j n\rangle \\ &= i\sum_{m\neq m} \epsilon_{ijk} \langle \partial_i n|m\rangle \langle m|\partial_j n\rangle \end{aligned} \tag{1.3.2}$$

ここで $|n\rangle$ は $\mathcal{H}$ の固有状態なので

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{R}) |n(\boldsymbol{R})\rangle = E_n(\boldsymbol{R}) |n(\boldsymbol{R})\rangle$$

両辺 ∂_i

$$\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial R_i} |n\rangle + \mathcal{H} |\partial_i n\rangle = \frac{\partial E_n}{\partial R_i} |n\rangle + E_n |\partial_i n\rangle$$

両辺 $\langle m|, m \neq n$

$$\langle m| \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial R_i} |n\rangle + E_m \langle m|\partial_i n\rangle = E_n \langle m|\partial_i n\rangle$$

$$\therefore \langle m|\partial_i n\rangle = \frac{\langle m|\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial R_i}|n\rangle}{E_n - E_m}$$

(1.3.2) に代入して

$$\Omega_i^n(\boldsymbol{R}) = i\sum_{m\neq n} \epsilon_{ijk} \frac{\langle n|\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial R_i}|m\rangle \langle m|\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial R_j}|n\rangle}{(E_n - E_m)^2} \tag{1.3.3}$$

または，ベクトル表示で

$$\boldsymbol{\Omega}^n = i\sum_{m\neq n} \frac{\langle n|\nabla\mathcal{H}|m\rangle \times \langle m|\nabla\mathcal{H}|n\rangle}{(E_n - E_m)^2} \tag{1.3.4}$$

1.4 Bloch 状態のベリー曲率

物質中の電子は波数 $\boldsymbol{k}$ で特徴づけられる Bloch 状態

$$\psi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} u_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \tag{1.4.1}$$