

# トポロジカル絶縁体の物理<sup>1</sup>

## — シンプルだから美しく、そして深い —

広島大学 先端物質科学研究科 井村 健一郎<sup>2</sup>

本講義では、具体的なモデル (= Wilson-Dirac 型有効 Hamiltonian) を用いて、トポロジカル数、バンド反転、バルクエッジ対応、対称性クラスと周期表といったトポロジカル絶縁体の物理の屋台骨となる概念をひとつひとつ発見的な方法で導入する。「トポロジカルに保護された」という言葉の意味はあとで明確にすることにして、そのような、しかもエネルギー・スペクトル的には、金属的／ギャップレスの表面状態をもつことがトポロジカル絶縁体の定義のようなものである。一方、なぜそのような表面状態が生じるかと言えば、その起源はバルクのバンド構造にある。典型的には、強いスピン・軌道結合によって、バルクで荷電子帯と伝導帯の反転が起き、それがいわゆる「バルク＝エッジ対応」という機構によって表面の性質に現れたのが、前のギャップレス表面状態である。問題はそのような一連の機構が、どのような「仕組み」で機能しているのか、その点を明らかにしていくのが本講義の目的である。

## 1 1次元トポロジカル絶縁体

トポロジカル絶縁体の仕組みを理解するのが目的だから、本講義ではなるべくそのような仕組みのエッセンスだけを含んだミニマルな模型を用いて、説明・定式化を行なっていきたい。そこで本講義では、初めに次のような1次元トポロジカル絶縁体の有効 Hamiltonian を考えたい。<sup>3</sup>

$$H_{1D}(p_x) = Ap_x\tau_x + m\tau_z. \quad (1)$$

<sup>1</sup>この原稿は、第59回物性若手夏の学校（浜名湖ロイヤルホテル、2014年7月29日-8月2日）の講義ノートとして書かれたものである。

<sup>2</sup>E-mail: imura@hiroshima-u.ac.jp

<sup>3</sup>トポロジカル絶縁体と言うと、ふつう思い浮かべるのは3次元の系であろう。実際、現実に見つかっているトポロジカル絶縁体と呼ぶに相応しい系の多くは3次元の系である [1]。一方、トポロジカル絶縁体という概念は最初、2次元の系を舞台に議論され、発展してきた [2, 3]。しかし、それは一部の例外 [4] を除いて、容易に実験的検証が可能とか、多様な系に適用可能と言えるものではなかった。トポロジカル絶縁体という枠組みが今程注目される存在になったのは、やはりそれが3次元の系にも適用可能であった [5, 6, 7, 8, 9] 点が多いのだろう。一方、本講義はその概念的な枠組みを導入することに主眼を置いているので、あえて非標準的な「1次元」のトポロジカル絶縁体をその出発点として、議論を始めることにする。

$\tau_x, \tau_z$  は Pauli 行列のそれぞれ  $x$ -および  $z$ -成分である。式 (1) の Hamiltonian は、質量  $m$  の 1 次元 Dirac 電子系を記述している。スペクトルは実際に

$$E = \pm \sqrt{A^2 p_x^2 + m^2} \quad (2)$$

のような「Dirac 型」になる。<sup>5</sup>さらに  $m = 0$  なら、これは質量ゼロの 1 次元の Dirac 電子系を表す。スペクトルは、 $E = \pm A p_x$  のように線形になり、パラメーター  $A$  は Dirac 電子の速度を表す。式 (1) の質量項： $m = m(p_x)$  は運動量  $p_x$  の関数で、

$$m = m(p_x) = m_0 + m_2 p_x^2 \quad (4)$$

のような形をしている。第 1 項： $m_0$  はこの (トポロジカル) 絶縁体のエネルギーギャップの大きさ (の半分) に対応する。第 2 項： $m_2 p_x^2$  が、Wilson 項と呼ばれる項 [10] で、この系のトポロジカルな性質を決める上で重要な役割を果たす。

## 1.1 格子模型, 端のある系

(1) 式の Hamiltonian は、1 次元の Dirac 系の連続極限に対するものである。少し変形して、例えば

$$H_{1D \text{ 格子}}(k_x) = A \sin k_x \tau_x + m(k_x) \tau_z. \quad (5)$$

$$m(k_x) = m_0 + 2m_2(1 - \cos k_x) \quad (6)$$

のようにすると、これは同じ系を格子定数  $a = 1$  の 1 次元格子に載せたものになる<sup>6</sup>。運動量  $p_x$  を波数、あるいは結晶運動量  $k_x$  で置き換えた。式 (5), (6) を  $k_x = 0$  のまわりで展開すれば、式 (1), (4) が得られる。

感触をつかむため、式 (5), (6) の 1 次元 tight-binding 模型を実際に対角化して、そのスペクトルを求めてみよう。トポロジカル絶縁体の特徴は有限系で、系に表面 (いまの場合は端/エッジ) があるとき顕在化する。1 次元の場合、例えば、 $x$ -軸上の  $x = 1$  から  $x = L$  まで長さ  $L$  の範囲に限られた系を考えるのがよいだろう。そうするとトポロジカル

<sup>4</sup>あとに述べるようにこの Pauli 行列が物理的に表すのは、本物のスピンではなく、軌道の自由度を表す擬スピン (pseudo spin) と考えるのが妥当である。という気持ちを込めて、これを標準的な記法  $\sigma$  ではなく、 $\tau$  と表した。

<sup>5</sup>Pauli 行列  $\sigma_\mu$  は反交換する：

$$\{\sigma_\mu, \sigma_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu}. \quad (3)$$

この性質を反影して、 $2 \times 2$  行列： $A = a_0 1_2 + a_1 \sigma_x + a_2 \sigma_y + a_3 \sigma_z$  の固有値は、 $a_0 \pm \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + a_3^2}$  となる。 $1_n$  は  $n \times n$  の単位行列。

<sup>6</sup>もちろん、Dirac フェルミオンを格子に載せるのは相当なアクロバットである [11]。このプロセスで重要な役割を果たしているのが、先程導入した Wilson 項を生み出す質量パラメーター  $m_2$  である。一方、トポロジカル絶縁体の物理では、式 (5), (6) で与えられるような格子模型が現実の物質系の有効モデルとして現れる。つまり、現文脈においては、Wilson 項は手で加えるのではなく、出発点のモデルにすでに内在していると考えられる [9]。

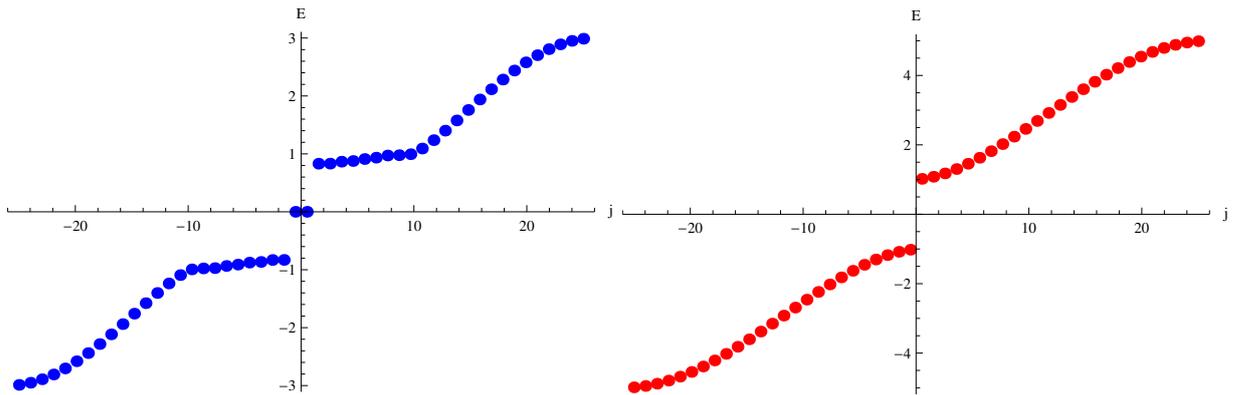


図 1: 1次元トポロジカル絶縁体のスペクトル: 式 (9) の Hamiltonian 行列を数値的に対角化した. 左のパネル:  $m_0/m_2 = -1$  の場合  $\in$  TI-相.  $E = 0$  付近に2つのエッジ/束縛状態が存在. 右のパネル:  $m_0/m_2 = +1$  の場合  $\in$  OI-相. エッジ状態はない. 系のサイズ (長さ) は,  $L = 25$  とした.  $A = 1$ .  $m_2 = 1$ .

相では系の端:  $x = 1$  と  $x = L$  付近に局在したエッジ状態が現れる. エネルギー的に見ると, エッジ状態はバルクのバンドギャップの中に現れ, 典型的にそのエネルギーは  $E = 0$  となる. これは, 3次元的なトポロジカル絶縁体を特徴づける金属的な表面状態の原型と言える. ただし, いまの場合, 次元が1つしかないので, スペクトルが完全に離散的になってしまい, 金属的/ギャップレスと言うには語弊があるかもしれない...

具体的な手続きとしては, 式 (5), (6) をフーリエ逆変換して実空間表示にする (端という構造を実空間で導入したいので). 波数空間だと, Hamiltonian が各波数ごとにブロック対角化されているので式 (5), (6) のようなコンパクトな形に収まったが, これを実空間で表示すると両端がエンドレスな行列になってしまう.

$$H = \begin{bmatrix} \ddots & \ddots & & & & & & \\ & \ddots & M & \Gamma^\dagger & & & & \\ & & \Gamma & M & \Gamma^\dagger & & & \\ & & & \Gamma & M & \Gamma^\dagger & & \\ & & & & \Gamma & M & \ddots & \\ & & & & & \ddots & \ddots & \end{bmatrix}. \tag{7}$$

ここで,

$$\begin{aligned} M &= (m_0 + 2m_2)\tau_z, \\ \Gamma &= -m_2\tau_z + i\frac{A}{2}\tau_x. \end{aligned} \tag{8}$$

さて, いま考えたいのは長さ  $L$  の有限系だったので, 式 (7) の両端を切り取って大きさ

$2L \times 2L$  の Hamiltonian 行列を考える．具体的に書き下すなら，

$$H_L = \begin{bmatrix} M & \Gamma^\dagger & & & & & & & \\ \Gamma & M & \Gamma^\dagger & & & & & & \\ & & \Gamma & \ddots & \ddots & & & & \\ & & & \ddots & M & \Gamma^\dagger & & & \\ & & & & & \Gamma & M & \Gamma^\dagger & \\ & & & & & & \Gamma & M & \end{bmatrix}. \quad (9)$$

長さ  $L$  の系に対する Hamiltonian 行列  $H_L$  を数値的に対角化して，得られた固有値を小さい順に並べたものを図 1 に示す．縦軸がエネルギー  $E = E_n$  ( $n$  番目の固有値の値) で，横軸が  $n$ ，つまり，対応する固有値の大きさが全体の何番目にあたるかという序数．図 1 に示すように，例えば，系のサイズ（長さ）を  $L = 25$ ，また， $m_{2x} = 1$  に固定し， $m_0$  の値をいろいろ変えてこの数値実験をやってみると，次のことが分かる：

- $-4 < m_0/m_{2x} < 0$  のとき， $E \simeq 0$  のところ<sup>7</sup> に状態（固有値）が 2 つ現れる（左のパネル）．この 2 つの状態はバルク由来のものではない．なぜなら，2 つの状態が存在するエネルギー領域はバルクのエネルギーギャップにあたり，本来状態が存在してはいけなところだから．実際，2 つの固有値に対応する波動関数（ $H_L$  の固有ベクトル）を見てみると，その空間分布から，2 つの状態がそれぞれ， $x = 1$  近傍と  $x = L$ -近傍に局在した波動関数を持つエッジ状態であることが分かる（後述，図 2 も参照）．系はトポロジカル絶縁体相（TI-相，TI = topological insulator），トポロジカルに非自明な相にある．
- $m_0/m_{2x}$  が上記以外の領域にあるとき，このような “in-gap state” は現れない（右のパネル）．系は通常絶縁体相（OI-相，OI = ordinary insulator），トポロジカルに自明な相にある．

（エネルギー）固有値だけでなく，対応する固有ベクトルの振る舞いも確認しておこう．式 (9) に対応する固有値方程式を

$$H_L \psi = E \psi, \quad \psi = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{L-1} \\ \psi_L \end{bmatrix} \quad (10)$$

<sup>7</sup>敢えて， $E \simeq 0$  と書いた理由．系の長さ  $L$  が有限のため，エッジ状態のエネルギーは厳密には  $E = 0$  にならない．系の左端に局在するエッジ状態と右端に局在するエッジ状態の間に “hybridization”（状態の混合）が生じ， $E$  はほとんどゼロだが有限になる．もちろん，この有限サイズ効果は  $L$  の増大とともに指数関数的に減少する．以下の記述では，この点には目を瞑り，単に  $E = 0$  と書くことにする．

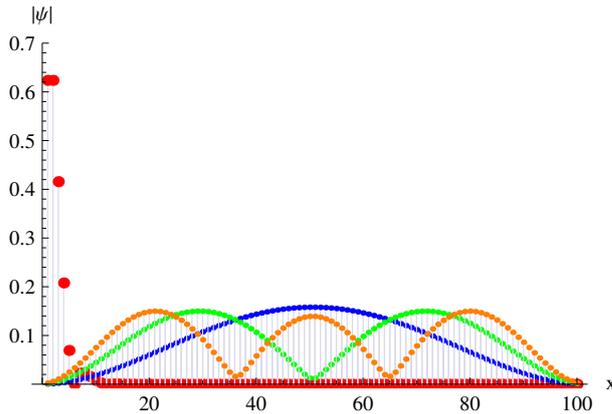


図 2: エッジ vs. バルク状態の波動関数. 赤い点は  $E \simeq 0$  のエッジ状態, 青, 緑, 橙は, バルク状態に対応し, 後者に関しては, ( $E > 0$  の伝導帯側で) エネルギーが低い方からそれぞれ 1, 2, 3 番目の状態の波動関数をプロットしたもの. リボンの幅は,  $L = 100$  とした.  $m_0 = -0.5$ ,  $m_2 = 1$ ,  $A = 1$ .

と書くと,  $\psi_j$  ( $j = 1, 2, \dots, L$ ) は, サイト  $x = j$  における波動関数の振幅に対応するが, このままだと  $\psi_j$  は, まだスピンの足を持っていて,

$$\psi_j = \begin{bmatrix} \psi_j^\uparrow \\ \psi_j^\downarrow \end{bmatrix} \quad (11)$$

という 2 成分のスピンノールの形をしているので, 図 2 では,  $|\psi_j| = \sqrt{|\psi_j^\uparrow|^2 + |\psi_j^\downarrow|^2}$  を  $x = j$  の関数としてプロットした. 図 2 から明らかなように,  $E = 0$  の解と  $E \neq 0$  の解では, 対応する固有ベクトル = 波動関数の定性的な振る舞いが異なっている.  $E = 0$  状態の波動関数はエッジに局在しているのに対し,  $E \neq 0$  状態の波動関数はバルク全体に広がっている.

トポロジカル絶縁相と通常絶縁相はトポロジカルに区別されている. 両相を行き来する唯一の方法は, バルクのギャップを一旦閉じることである. 格子系のエネルギースペクトルは, 式 (2) と同様,

$$E_{1D \text{ 格子}} = \pm \sqrt{A^2 \sin^2 k_x + m(k_x)^2} \quad (12)$$

という「ギャップの開いた構造」をしている. ただし,  $m(k_x)$  は式 (6) の形. 式 (12) のエネルギーギャップが閉じるのは  $k_x = 0$ ,  $k_x = \pi$  (Brillouin 域における反転対称な点) においてであり, この 2 点のいずれかで質量項  $m(k_x) = 0$  となるところが, トポロジカル絶縁相と通常絶縁相の相境界に対応する.

1.  $k_x = 0$  で  $m(k_x) = 0$  となるのは,  $m_0 = 0$  のとき,
2.  $k_x = \pi$  で  $m(k_x) = 0$  となるのは,  $m_0 + 4m_2 = 0$  のとき

である. その結果,  $-4 < m_0/m_2 < 0$  がトポロジカル絶縁相,  $m_0/m_2 > 0$  と  $m_0/m_2 < -4$  が通常絶縁相となる. 相境界となる  $m_0/m_2 = 0, -4$  ではバルクの荷電子帯と伝導帯が反

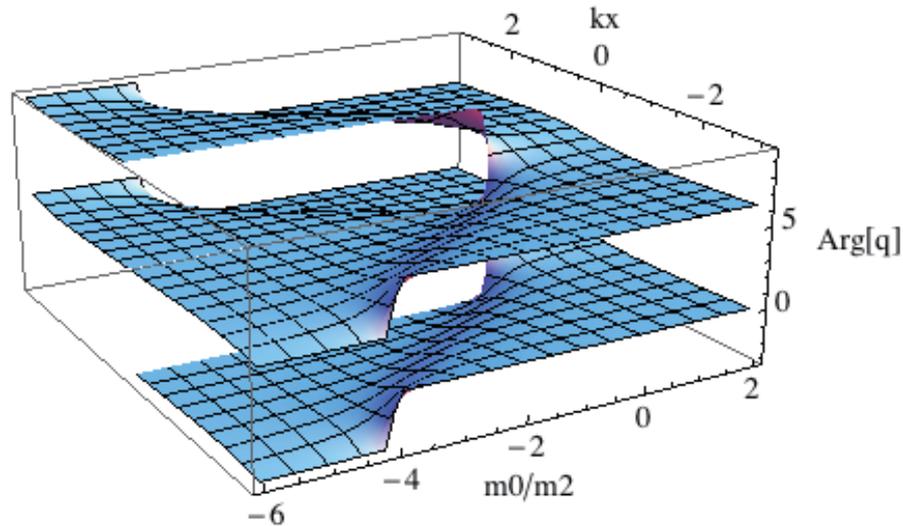


図 3: 1次元トポロジカル絶縁体: どこがトポロジカル?  $(m_0/m_{2x}, k_x)$ -平面における  $\phi = \arg q$  の大域的な振る舞い.  $m_0/m_{2x} \in [-4, 0]$  のとき, 巻付き数  $N_1$  [定義は式 (17)] が有限になる.

転する.  $m_0/m_2 > 0$  の通常絶縁相の場合と比較して,  $-4 < m_0/m_2 < 0$  では,  $k_x = 0$  の近傍でバンドが反転している. 図 1 (b) の  $m_0/m_2 = +1$  の場合が通常バンド, 図 1 (a) の  $m_0/m_2 = -1$  の場合が反転バンドの状況に相当する.

## 1.2 バルクの性質: トポロジカル数

エッジ状態の有無とバルクのバンド反転が関係していることは分かった. バルクのバンド反転に付随してバルクのエネルギーギャップが閉じない限り, エッジ状態の「ある」相から「ない」相に移り変わることはない. 従って, トポロジカルに非自明な相において現れるエッジ状態は (不純物等による摂動に対して) 頑強/robust であると言われる. そして, トポロジカルに保護されているとも.

上の件の最後のところ: 「トポロジカルに」というところを以下では具体化したい. TI-相と OI-相を区別するのに便利なトポロジカル数, あるいは巻付き数を導入する. 本質的なことではないが, Pauli 行列の取り方を少し変えて,  $\tau_z \rightarrow \tau_x, \tau_x \rightarrow \tau_y$  という変更を行なっておくと, 式 (1), (5) の対角項がゼロになってあとで都合が良い.<sup>8</sup>

$$H_{1D}(k_x) = m(k_x)\tau_x + A \sin k_x \tau_y \quad (14)$$

<sup>8</sup>系にカイラル対称性がある場合, このようにとることができる. カイラル対称性とは? 式 (14) の  $H(\mathbf{k}) = H_{1D}(k_x)$  に対して, カイラル演算子  $\Gamma_5 = \tau_z$  を導入することができて, これと  $H(\mathbf{k})$  が反交換する.

$$\{\Gamma_5, H(\mathbf{k})\} = 0. \quad (13)$$

カイラル対称性はグラフェン系でも成立, 重要な役割をする [14, 15].

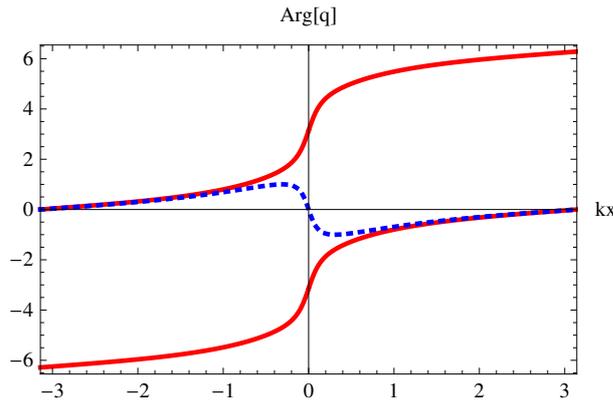


図 4:  $k_x$  の関数として,  $\arg q$  をプロット. 赤線:  $m_0/m_{2x} = -0.1 \in \text{TI-相}$  (非自明な場合), 青点線:  $m_0/m_{2x} = 0.1 \in \text{OI-相}$  (自明な場合).

$$= \begin{bmatrix} 0 & q(k_x) \\ q(k_x)^* & 0 \end{bmatrix}, \quad (15)$$

また,  $q(k_x) = m(k_x) - iA \sin k_x$ . 有効 Hamiltonian が式 (15) の形をとるとき, 次のような巻付き数 (= トポロジカル数)  $N$  を定義することができる. 式 (15) で, 波数  $k_x$  を断熱パラメータとみなし,  $k_x$  が Brillouin 域:  $k_x \in [-\pi, \pi]$  を一周したとき, これに付随する Berry 位相 [12] $\theta$  は,

$$\theta = -i \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \psi_-^\dagger \partial_{k_x} \psi_- \equiv N\pi. \quad (16)$$

ここで,  $\psi_-$  は価電子帯の波動関数 (2成分スピノール),

$$N = \frac{\phi(k_x = \pi) - \phi(k_x = -\pi)}{2\pi} \quad (17)$$

は次のような  $S_1$  (単位円) から (別の)  $S_1$  への写像の「巻き付き度」を表して, これは整数となる. ただし, 偏角  $\phi = \arg q$  は多価関数であるが, 適当な分岐をとってこれが Brillouin 域:  $k_x \in [-\pi, \pi]$  全体に渡って連続的につながっているようにした. 図 3, 4 に示すように, 写像  $q(k_x)$  の振る舞いを具体的に調べることにより,

$$N = \begin{cases} 1 & (-4 < m_0/m_{2x} < 0) \\ 0 & (\text{それ以外の場合}) \end{cases}. \quad (18)$$

となることが確かめられる [16].

巻付き数  $N$  は, 先程議論したバルクにおけるバンドの反転状況とも定量的に結びつけることができる. バンドの指標  $\delta_{k_x}$  を導入しておこう. これは, 例えば, 次のように決める. 式 (5), (6) を  $k_x = 0$  のまわりで展開すれば, 式 (1), (4) が得られる. 一方, 式 (5), (6) を  $k_x = \pi$  のまわりで展開したらどうか?  $k_x = \pi + p_x$  として,  $p_x$  の 1 次の項まで捨てる近似では,

$$H(p_x) = -Ap_x\tau_x + (m_0 + 4m_2)\tau_z \quad (19)$$

となる． $k_x = 0$  と  $k_x = \pi$  という 2 つの点のまわりで展開して得られる連続体近似の有効 Hamiltonian を統一的に

$$H(p_x) = \tilde{A}p_x\tau_x + \tilde{m}_0\tau_z \quad (20)$$

と書くなら， $k_x = \pi$  のまわりでは， $\tilde{A} = -A$ ， $\tilde{m}_0 = m_0 + 4m_2$  ということである．いま，波数  $k_x$  のまわりで展開したときに得られる Hamiltonian が式 (20) のように表されるとして，この点における（占有されたバンドの／価電子帯の）バンドの指数を

$$\delta_{k_x} = \text{sgn}(\tilde{A}) \text{sgn}(\tilde{m}_0) \quad (21)$$

と定義する． $A > 0$ ， $m_2 > 0$  として， $\delta_{k_x}$  の値を表にしてみた（表 1）．このようにして決

	$\delta_{k_x=0}$	$\delta_{k_x=\pi}$	$N$
$0 < m_0/m_2$	+	-	0
$-4 < m_0/m_2 < 0$	-	-	1
$m_0/m_2 < -4$	-	+	0

表 1: 1次元トポロジカル絶縁体におけるバンド指数  $\delta_{k_x}$  の変化と巻付き数  $N_1$  の関係． $A > 0$ ， $m_2 > 0$  の場合．

めたバンド指数  $\delta_{k_x}$  を用いて，巻付き数  $N$  は次のように表される [16, 17]．

$$-N = \frac{1}{2}\delta_{k_x=0} + \frac{1}{2}\delta_{k_x=\pi}. \quad (22)$$

上の関係式が実際に成り立っていることをチェックせよ（表 1 も参照のこと）．

最後に，連続極限：系の Hamiltonian が式 (1) で表されるとき，巻付き数  $N$  がどのように振る舞うか言及しておこう．この場合，式 (15) に現れる  $q(k_x)$  に対応するのは，

$$\begin{aligned} q(p_x) &= m(p_x) - iAp_x \\ &= m_0 + m_2p_x^2 - iAp_x \end{aligned} \quad (23)$$

である．連続極限では， $p_x$  は全実軸上を動く．従って，巻付き数  $N$  は， $p_x \in R$  に対して， $\phi(p_x) = \arg q(p_x)$  が連続になるような  $\phi(p_x)$  の分岐に対して，

$$N = \frac{\phi(p_x \rightarrow \infty) - \phi(p_x \rightarrow -\infty)}{2\pi} \quad (24)$$

と定義でき， $R$  から  $S_1$  への写像の巻き付き度を表す．

1.  $p_x \rightarrow \pm\infty$  で，

$$n(p_x) = \frac{q(p_x)}{|q(p_x)|} = \text{sgn}(m_2) \quad (25)$$

2.  $p_x = 0$  で， $n(p_x) = \text{sgn}(m_0)$

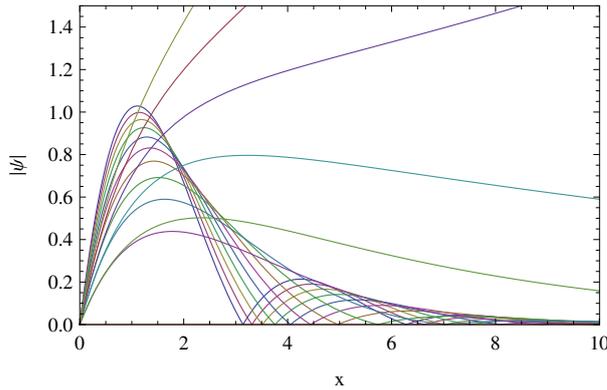


図 5: エッジ解の存在条件.  $m_2 = 1, A = 1$  で固定し,  $m_0$  を  $-1.25$  から  $0.25$  まで  $0.1$  刻みで変えてみたとき, 式 (32) の振る舞いがどのように変わるか?  $m_0 = 0.05, 0.15, 0.25$  に対応する曲線は増大解になってしまい,  $x = 0$  近傍に局在するエッジ状態を記述できない. エッジ解は,  $-1/4 < m_0/m_2 < 0$  のとき過減衰,  $m_0/m_2 < -1/4$  なら減衰振動する.

に注意すれば,

$$N = \frac{\text{sgn}(m_2) - \text{sgn}(m_0)}{2} \quad (26)$$

となることを確かめることができる.

### 1.3 バルク = エッジ対応

エッジ状態の有無とバルクの「トポロジカルな」構造の間に対応関係があることはお分かりいただけただけだと思う. 以下では, この対応関係 (バルク = エッジ対応) [18] をより直接的に検証する. 与えられた Wilson-Dirac 型有効 Hamiltonian に対し, エッジ解を具体的に構成してみて, これが可能になる条件を調べる. エッジ解の存在条件は, バルクの有効 Hamiltonian を規定する質量パラメーターを用いて表される. こうして得られる条件が今まで議論してきたバルクの有効 Hamiltonian を特徴づける巻付き数の自明/非自明性と 1 対 1 に対応することを見ていく. エッジ解の存在/不在の境界はバルクでバンド反転がおきる点でもある.

話を簡単にするため, 連続極限を考えよう. 式 (1) は, 2 成分スピノール  $\psi$  の空間部分が

$$\psi = \mathbf{u} e^{ip_x x} \quad (27)$$

のように平面波で表される場合を想定している. いま, 式 (1) で表される 1 次元のトポロジカル絶縁体が  $x$ -軸の正の部分:  $x > 0$  を占め,  $x = 0$  で残りの部分を占める真空と接しているとしよう.  $x = 0$  の界面 (エッジ) 近傍に局在するエッジ解は, 式 (27) のような平面波ではなく, 減衰波:

$$\psi = \mathbf{u} e^{-\kappa x} \quad (28)$$

の形をとるであろう。つまり、これは式 (27) で  $p_x = i\kappa$  と置いたものだから、

$$H_{1D} = m(\kappa)\tau_z + iA\kappa\tau_x, \quad m(\kappa) = m_0 - m_2\kappa^2 \quad (29)$$

に対し、

$$H_{1D}\mathbf{u} = E\mathbf{u} \quad (30)$$

が成立する必要がある。一般に、 $\mathbf{u}$  の具体的な形はエネルギー固有値  $E = E(\kappa)$  によって異なる。さて、式 (28) の形の基本解を重ね合わせ、「境界条件： $x = 0$  で波動関数  $\psi$  がゼロ」を満たす解を構成する。正確に言うと、 $\psi$  は 2 成分スピノールなので、

$$\psi_{x=0} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (31)$$

そのために、同じエネルギー固有値に属する 2 つの減衰波解を重ね合わせて、

$$\psi = \mathbf{u}_1 e^{-\kappa_1 x} - \mathbf{u}_2 e^{-\kappa_2 x} \quad (32)$$

のような線形結合をとる必要があるが、式 (31) を満たすためにはさらに  $\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2$  でなければならない。これはエネルギーが  $E = 0$  のときにのみ可能。確かめてみよ (→課題)。そこで、

$$[m(\kappa)\tau_z + iA\kappa\tau_x]\mathbf{u} = \mathbf{0}. \quad (33)$$

を解く。両辺に左から  $\tau_z$  をかけて、

$$[m(\kappa) - A\kappa\tau_y]\mathbf{u} = \mathbf{0}. \quad (34)$$

従って、2 つの固有ベクトル  $\mathbf{u}$  は  $\mathbf{u} = |\tau_y \pm\rangle$  と求まる。ここで、 $|\tau_y \pm\rangle$  は  $\tau_y$  の固有状態。 $\mathbf{u} = |\tau_y -\rangle$  の方を採用すると、式 (34) は、

$$\kappa = \frac{A \pm \sqrt{A^2 + 4m_0m_2}}{2m_2}. \quad (35)$$

を意味する。この 2 つの解が、式 (32) の  $\kappa_1, \kappa_2$  に対応する。

さて、式 (32) がちゃんとエッジ解になっているためには、これを構成する基本解の両方が減衰解になっていなければいけない。一方が減衰解、他方が増大解ではダメ。つまり、 $\kappa_1 > 0$  かつ  $\kappa_2 > 0$  が必要。そのような状況は、 $m_0m_2 < 0$  のときのみ実現することが分かる。 $m_2 = 1, A = 1$  で固定し、 $m_0$  をいろいろ変えてみたとき、式 (32) の振る舞いがどのように変わるか図 5 に示した。以上の考察は、エッジ解が構成可能な条件はバルクのトポロジカル数が非自明になる条件と一致することを示唆している。<sup>9</sup>

<sup>9</sup>格子系の場合：有効 Hamiltonian が式 (5) で表される場合にも同様の考察を試みよ (課題)。エッジ解の存在条件として、 $-4 < m_0/m_2 < 0$  が得られるはずである。

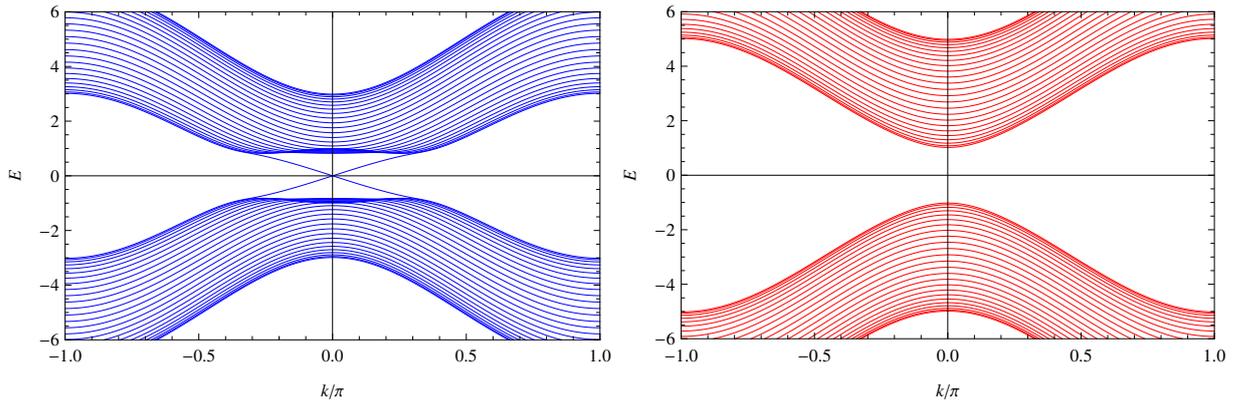


図 6: 2次元トポロジカル絶縁体のスペクトル. 具体的なモデルとしては, 式 (38) で与えられているもの. 左のパネル:  $m_0/m_2 = -1$  のとき,  $\in$  TI-相 (エッジ状態あり). 右のパネル:  $m_0/m_2 = +1$  のとき,  $\in$  OI-相 (エッジ状態なし). 幅  $L = 50$  のリボン系,  $A = 1$ ,  $m_2 = 1$ .

## 2 高次元への一般化

1次元トポロジカル絶縁体はその「シンプルさ」にも関わらず, トポロジカル絶縁体の特徴的な基本的性質をほぼ全て備えていた. ただ1次元の系であるがゆえ, 有限系にすると並進対称性が完全に失われて, スペクトルが離散的になってしまった. そのため, エネルギーギャップの中にエッジ状態ができることは確認できたが, それはバルクのエネルギーギャップを横切って現れるというような現れ方ではなかった.

### 2.1 2次元版

そこで, 以下では次元をひとつ上げて2次元の系を考える. 具体的には, 式 (1), (5) を2次元の場合に拡張した次のようなモデルである.

$$H(\mathbf{p}) = A_x p_x \tau_x + A_y p_y \tau_y + m(\mathbf{p}) \tau_z, \quad (36)$$

$$m(\mathbf{p}) = m_0 + m_2 \mathbf{p}^2 \quad (37)$$

あるいは, これを格子の上に載せた

$$H(\mathbf{k}) = A_x \sin k_x \tau_x + A_y \sin k_y \tau_y + m(\mathbf{k}) \tau_z, \quad (38)$$

$$m(\mathbf{k}) = m_0 + 2m_{2x}(1 - \cos k_x) + 2m_{2y}(1 - \cos k_y) \quad (39)$$

は2次元トポロジカル絶縁体を記述する有効 Hamiltonian である. 当面, Wilson 項は等方的であるとしておく.  $m_{2x} = m_{2y} = m_2$ .

さて, 1次元トポロジカル絶縁体で少々不満だったのは, エッジ状態に分散がないことであった. 1次元の場合, 端を作るとそこは点になってしまうから, エッジ状態といってもそれは束縛状態なので致し方なかったわけだ. そこで以下では, 幅  $L$  ( $y = 1$  から  $y = L$

まで)の帯状,あるいはリボン状の系を考えると,端に沿った方向( $x$ -方向)への並進対称性は残るようにする.

エッジを導入するため,式(38)を実空間表示に戻して,式(7)の形に表現する.実際, $M$ の定義だけ少し変更して,

$$M = A_x \sin k_x \tau_x + \{m_0 + 2m_{2x}(1 - \cos k_x) + 2m_{2y}\} \tau_z \quad (40)$$

のように定義し直せば,式(7)の形はいまの場合でもそのまま成立する.同様に,端のある系:いまの場合,=リボン系のHamiltonian行列には式(9)の形がそのまま通用する.これを数値的に対角化して,エネルギー固有値 $E$ を $k_x$ の関数としてプロットしたのが図6である.得られた結果を1次元のときと比較してほしい.期待通り,2次元系で得られた結果は,1次元の場合のものを「外挿したもの」になっていることがわかる.

1.  $m_0/m_2 < 0$ のとき,<sup>10</sup>エッジ状態がバルクのエネルギーギャップを横切って現れる→図6の左側のパネル.もちろん, $k_x = 0$ で交差している2つの“in-gap states”がエッジ状態であることを確かめるには,対応する波動関数の空間分布をしてみる必要がある.実際,2つの状態はそれぞれ,(横に伸びた)リボンの上下端( $y = 1$ と $y = L$ -近傍)に局在した波動関数を持つエッジ状態であることが確認できる.系は,トポロジカルに非自明な相,あるいは,TI相:トポロジカル絶縁体相にある.
2.  $m_0/m_2 > 0$ のとき,エッジ状態は現れない→図6の右側のパネル.系はトポロジカルに自明な相,あるいは,OI相:通常絶縁体相にある.

上で,系が1.のトポロジカルに非自明な相にある場合,リボンの上下端にはエッジ状態が,それぞれ1本ずつ互いに反対方向に走っている.つまり,1つのエッジに着目すれば,そこに走っているエッジモードは1本.右向きか,左向きのどちらかである.このようなエッジ状態はカイラル/chiralであるという.カイラルなエッジでは後方散乱は起き得ない.逆走するモードはないので(=一方通行ということ).その結果,カイラルなエッジ状態は不純物に対して頑強ということになる.リボン系の場合,逆走チャンネルはリボンの反対の端にある.そのようなリボンを跨ぐプロセスは(リボンの幅の関数として)指数関数的に抑制される.

## 2.2 Chern 数

さて,次に1次元系のときと同様,系のエッジで起こることをバルクの量と関係付けたい.2次元のトポロジカル絶縁体の特徴づけるのに便利なのが,チャーン(Chern)数と呼ばれるトポロジカル数である.Chern数はトポロジカル絶縁体分野の発展において特

<sup>10</sup>もう少し正確に言うと,このシミュレーションを行なった格子系の場合, $-4 < m_0/m_2 < 0$ とそれに続く $-8 < m_0/m_2 < -4$ の領域でエッジ状態が現れる.なぜそうなるかは,後述.

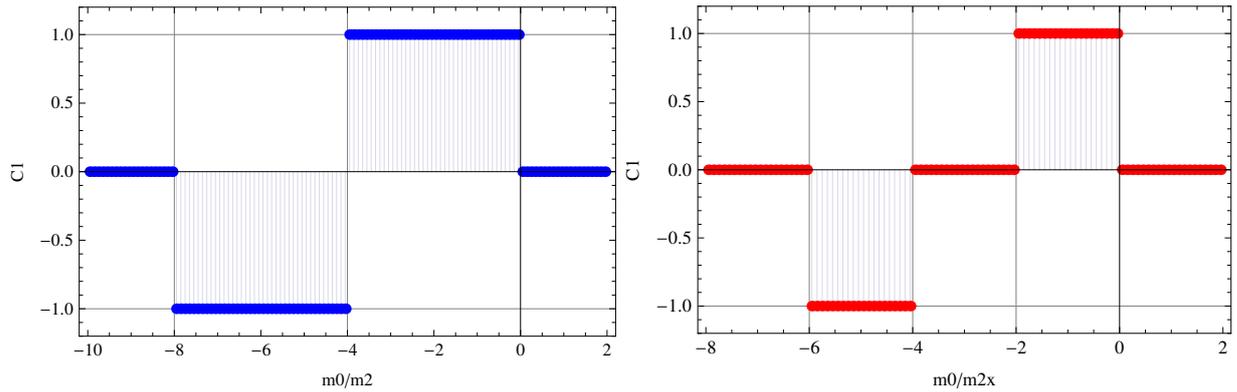


図 7: 数値的に評価した Chern 数  $C_1$ . モデルは式 (38) で与えられる 2次元格子模型. 左: 等方的な場合 ( $m_{2y} = m_{2x}$ ). 右: 異方的な場合. 図 8 の相図で,  $m_{2y}/m_{2x} = 0.5$  の線上.

に重要な意味を持って来た. Chern 数は量子ホール効果の研究で物性物理学に導入された [13]. そもそも, このような特殊な絶縁体 (=トポロジカル絶縁体) の研究が広く世の注目を浴びるようになったのは, その発見以来, 30 年以上の歴史を持つ量子ホール効果の研究に負うところが大きい. 量子ホール効果が起きているとき, 系は一種のトポロジカル絶縁体相にある. 実際, 式 (36), 式 (38) はこのような量子ホール絶縁体, あるいは量子異常ホール絶縁体の有効 Hamiltonian とみなすことができる. 量子ホール効果とは, ホール伝導度  $\sigma_{xy}$  が量子化する現象である. 量子ホール効果においては, Chern 数というトポロジカル数が物理量  $\sigma_{xy}$  に直接結びついていることが注目すべき点である.

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} C_1. \quad (41)$$

ここで,  $C_1$  と表したのが Chern 数 [13] で,

$$\begin{aligned} C_1 &= \int_{\mathbf{k} \in BZ} d^2k [\nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{a}(\mathbf{k})]_z \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbf{k} \in BZ} d^2k \mathbf{n} \cdot [\partial_{k_x} \mathbf{n} \times \partial_{k_y} \mathbf{n}]. \end{aligned} \quad (42)$$

ここで,  $\mathbf{a}(\mathbf{k}) = -i\psi_{-}^{\dagger} \nabla_{\mathbf{k}} \psi_{-}$  は, Berry 接続.  $\mathbf{n} = \mathbf{n}(\mathbf{k})$  は, 次のような長さ 1 の 3次元ベクトルである. まず,  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  と質量項  $m(\mathbf{k})$  をまとめて, これをひとつの 3次元ベクトルとみなす.

$$\mathbf{k}_{3D}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} A \sin k_x \\ A \sin k_y \\ m_0 + 2m_2(2 - \cos k_x - \cos k_y) \end{bmatrix} \quad (43)$$

これを長さ 1 に規格化したものが,  $\mathbf{n}(\mathbf{k}) = \mathbf{k}_{3D}/|\mathbf{k}_{3D}|$ .

最初に, 比較のため, 式 (42) が連続極限でどうなるか, 見ておく. 式 (42) は形式的に,

$$C_1 = \frac{1}{4\pi} \int d^2p \mathbf{n} \cdot [\partial_{p_x} \mathbf{n} \times \partial_{p_y} \mathbf{n}] \quad (44)$$

と書ける．積分範囲は全運動量平面に変更されている．また，

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_{3D} &= \begin{bmatrix} A\mathbf{p} \\ m(\mathbf{p}) \end{bmatrix}, \\ \mathbf{n}(\mathbf{p}) &= \frac{\mathbf{p}_{3D}}{|\mathbf{p}_{3D}|} = \frac{1}{\sqrt{A^2\mathbf{p}^2 + (m_0 + m_2\mathbf{p}^2)^2}} \begin{bmatrix} A\mathbf{p} \\ m_0 + m_2\mathbf{p}^2 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (45)$$

式 (44) の被積分関数は， $\mathbf{p}$  が運動量平面の微小面積  $dp_x dp_y$  を動いたとき， $\mathbf{n}(\mathbf{p})$  の覆い尽くす立体角を表す ( $4\pi$  で規格化される)．従って，Chern 数  $C_1$  は，運動量  $\mathbf{p}$  が全運動量平面上を動いたとき，ベクトル  $\mathbf{n}$  が単位球面上を何回覆い尽くすかの指標となる．式 (45) より，無限遠点： $p = |\mathbf{p}| \rightarrow \infty$  で， $\mathbf{n}(\mathbf{p}) \rightarrow (0, 0, \text{sgn}(m_2))$ ，また，原点： $\mathbf{p} = \mathbf{0}$  で， $\mathbf{n}(\mathbf{p}) = (0, 0, \text{sgn}(m_0))$  が成り立ち，結局

$$C_1 = \frac{\text{sgn}(m_2) - \text{sgn}(m_0)}{2} \quad (46)$$

と表すことができる．つまり，Chern 数が非自明な (ノンゼロの) 値をとるかどうかは質量パラメータ  $m_0$  と  $m_2$  の相対的な符号で完全に決まり， $m_0/m_2 > 0$  のとき，Chern 数は自明： $C_1 = 0$ ． $m_0/m_2 < 0$  のとき，Chern 数は非自明： $C_1 \neq 0$  (いまの場合， $m_2 > 0$  として， $C_1 = 1$ )．

格子系の場合，実際には  $C_1 = \pm 1$  となりうる． $\mathbf{n}(\mathbf{k})$  が，式 (43) で指定される場合に，式 (42) を数値的に評価して得られた結果を図 7 に示す．結果をまとめて式で示すと，

$$C_1 = \begin{cases} 1 & (-4 < m_0/m_2 < 0) \\ -1 & (-8 < m_0/m_2 < -4) \\ 0 & (m_0/m_2 > 0, m_0/m_2 < -8) \end{cases} \quad (47)$$

先程のリボン系のシミュレーション結果と比較すれば，エッジ状態のある vs. なしが Chern 数の非自明 vs. 自明と 1 対 1 に対応していることが分かる．

上の結果は，また 2次元の Wilson-Dirac 模型の場合， $C_1$  の異なる 2 種類の TI-相が存在することを示している．これは，例えば，リボンの両端を切り落として，矩形の (四角い，別に四角くなくてもいいが，とにかく閉じた形状の) 試料を用意した場合，カイラルなエッジ状態の伝搬方向には時計回りと反時計回りがあるためことと関係している． $C_1 = 1$  の TI-相は時計回りの， $C_1 = -1$  の TI-相は反時計回りのカイラルエッジ状態を持つ．また， $C_1 = -1$  の TI-相 ( $-8 < m_0/m_2 < -4$  に対応) で，図 6(a) に示したようなエッジ状態のスペクトルを計算してやると，2つのカイラルエッジ状態は，図 6(a) と異なり， $k_x = \pi$  で交差することが分かる．いずれにせよ，バルクのエネルギーギャップを横切って現れる「金属的な」エッジ状態の現れ方とバルクのトポロジカル数の振る舞いには明白な 1 対 1 対応が見られる．

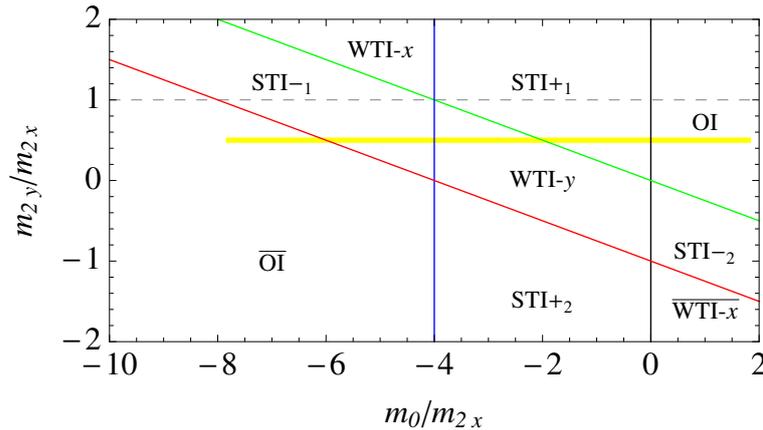


図 8: 2次元版 Wilson-Dirac 模型の相図 (異方性も考慮) [17].

### 2.3 異方的な場合, 弱いトポロジカル絶縁相

2次元版 Wilson-Dirac 模型の相図を考えよう. Wilson 項が等方的な場合の相図は, 図 7 の左のパネル, あるいは, 式 (42) に示唆される通りである. これはバルクのバンド反転の様子からも理解することができる.

以下では, 問題を少し一般化して, 異方性のある場合, つまり,  $m_{2x} \neq m_{2y}$  のときにも適用可能なように定式化を行なっておく. 2次元版 Wilson-Dirac 模型におけるバルクのエネルギースペクトルは, 式 (12) 同様,

$$E_{2D \text{ 格子}}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{A_x^2 \sin^2 k_x + A_y^2 \sin^2 k_y + m(\mathbf{k})^2} \quad (48)$$

となる. ただし,  $m(\mathbf{k})$  は式 (39) で与えられる. 式 (48) のエネルギーギャップは Brillouin 域の反転対称な 4 点:  $\Gamma$ ,  $X$ ,  $Y$ ,  $M$  で閉じることが想定される. ここで,  $\mathbf{k}_\Gamma = (0, 0)$ ,  $\mathbf{k}_X = (\pi, 0)$ ,  $\mathbf{k}_Y = (0, \pi)$ ,  $\mathbf{k}_M = (\pi, \pi)$ . これら 4 点において,  $m(\mathbf{k}) = 0$  となるのは, それぞれ (i)  $m_0 = 0$  ( $\mathbf{k} = \mathbf{k}_\Gamma$ ), (ii)  $m_0 + 4m_{2x} = 0$  ( $\mathbf{k} = \mathbf{k}_X$ ), (iii)  $m_0 + 4m_{2y} = 0$  ( $\mathbf{k} = \mathbf{k}_Y$ ), (iv)  $m_0 + 4m_{2x} + 4m_{2y} = 0$  ( $\mathbf{k} = \mathbf{k}_M$ ) のときで, 実際, 上の (i) から (iv) は図 8 の相図上で異なるトポロジカル相の相境界を与えている. 等方的な場合に倣って, 例えば,  $m_{2y}/m_{2x} = 0.5$  の線上で Chern 数  $C_1$  を計算してみると, 図 7 の右のパネルのようになる.

ちょっと面白くなってきたので, 調子に乗って, もう少しこの問題に深入りしよう [17]. 図 7 の右のパネル (あるいは, 図 8 の  $m_{2y}/m_{2x} = 0.5$  の線上) で, 2つの TI 相 ( $C_1 \neq 0$  の相) に挟まれた  $C_1 = 0$  の相 (図 8 では, WTI-y と命名されている) はどのような相だろうか? 先験的には (Chern 数の計算結果から判断すれば), この相は自明な相でエッジ状態など出ないと考えられる. しかし, 実際に系を  $x$ -軸方向, あるいは,  $y$ -軸方向のリボン状にして, スペクトルを計算してみると図 9 のようになる. エッジ状態は現れる. しかし,  $x$ -軸方向に伸びたりボンでは, エッジ状態は現れない (エッジ状態が現れるかどうかは, リボンの向きに依存する). また, エッジ状態が現れる方の  $y$ -軸方向に伸びたりボン

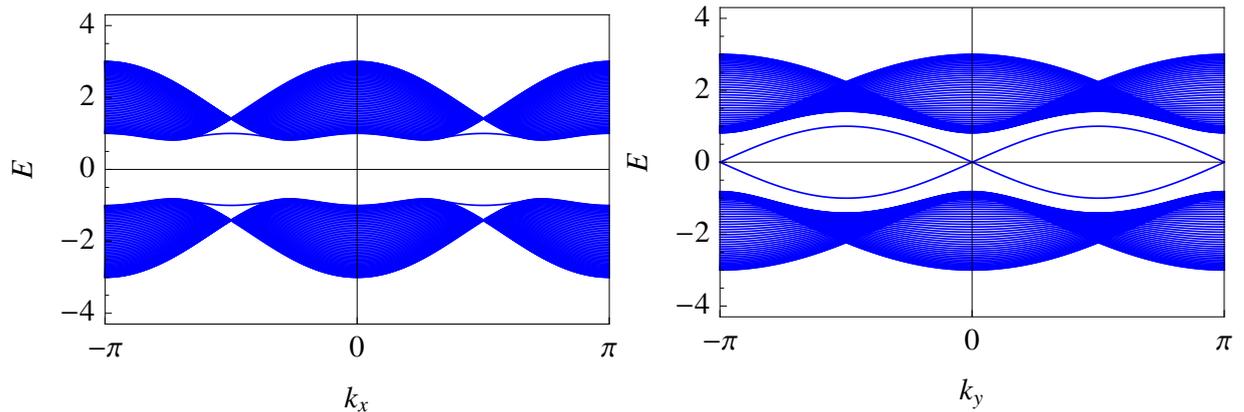


図 9: 2次元の weak 相 (WTI-y 相, 図 8 参照) におけるエッジ状態 (リボン系) のスペクトル. 左 (右) のパネル:  $x$ - ( $y$ -) 軸方向に伸びたリボンの場合.  $m_{2y}/m_{2x} = 0.5$ ,  $m_0/m_{2x} = -3$ .

の場合, 図 6(a) のときと違い, 2つのエッジ状態は  $k_y = 0$  と  $k_y = \pi$  の 2ヶ所で交差している.

3次元のいわゆる  $Z_2$  トポロジカル絶縁体の場合, 表面 (いまの場合, エッジ) に Dirac コーンが 1つ (一般には奇数個) 現れる場合を「強い」トポロジカル絶縁体 (STI: strong topological insulator), 2つ (一般には偶数個) 現れる場合を「弱い」トポロジカル絶縁体 (WTI: strong topological insulator) と呼ぶのが慣例である (Sec. 3 を参照). 強い/弱いという命名は, 当初, 不純物・摂動に対する頑強性に言及して行なわれたものだが, その後の研究でいろいろと物議を醸すこととなった (Sec. 4 結語参照). 少し話しが逸れたが, いま調べていた 2次元模型に話を戻すと, 例えば, 図 8 の WTI- $y$  相に現れるエッジ状態:  $k_y = 0$  と  $k_y = \pi$  の 2ヶ所で交差するエッジ状態は, このような弱いトポロジカル絶縁体において現れる 2つの Dirac コーンの原型/prototype と考えることができるだろう. エッジ状態の現れ方が異方的であるのも WTI の特徴である (Sec. 3 を参照).

	$\delta_\Gamma$	$\delta_X$	$\delta_Y$	$\delta_M$	$C_1$	$\{N_{k_x=0}, N_{k_x=\pi}\}$	$\{N_{k_y=0}, N_{k_y=\pi}\}$
$0 < m_0/m_{2x}$	+	-	-	+	0	{0, 0}	{0, 0}
$-2 < m_0/m_{2x} < 0$	-	-	-	+	1	{1, 0}	{1, 0}
$-4 < m_0/m_{2x} < -2$	-	+	-	+	0	{1, -1}	{0, 0}
$-6 < m_0/m_{2x} < -4$	-	+	+	+	-1	{0, -1}	{0, -1}
$m_0/m_{2x} < -6$	-	+	+	-	0	{0, 0}	{0, 0}

表 2: 2次元版 Wilson-Dirac 模型の相図 (図 8) で,  $m_{2y}/m_{2x} = 0.5$  の線上におけるバンドの指標  $\delta_{\mathbf{k}}$  の変化と Chern 数  $C_1$ , および, 巻付き数  $N_{k_x}$ ,  $N_{k_y}$  との関係.  $A > 0$ ,  $m_2 > 0$ .

さて, バンドの指標も 1次元の場合と同様に定義することができる. 2次元の場合, バンド反転は Brillouin 域の反転対称な 4点:  $\Gamma$ ,  $X$ ,  $Y$ ,  $M$  で起こる. 式 (20) に倣い, これ

らの点のまわりで式 (38) を展開して得られる連続体近似の有効 Hamiltonian を

$$H(p_x) = \tilde{A}_x p_x \tau_x + \tilde{A}_y p_y \tau_y + \tilde{m}_0 \tau_z \quad (49)$$

と書く。いま、波数  $\mathbf{k}$  のまわりで展開したときに得られる Hamiltonian が式 (49) のように表されるとして、この点におけるバンドの指標を式 (21) 同様、

$$\delta_{\mathbf{k}} = \text{sgn}(\tilde{A}_x) \text{sgn}(\tilde{A}_y) \text{sgn}(\tilde{m}_0) \quad (50)$$

と定義する。  $A > 0, m_2 > 0$  として、  $\delta_{\mathbf{k}}$  の値を表にしてみる (表 2)。 Chern 数  $C_1$  とバンドの指標  $\delta_{\mathbf{k}}$  の間には、次の単純な関係が成り立つ。

$$-C_1 = \frac{1}{2}\delta_{\Gamma} + \frac{1}{2}\delta_X + \frac{1}{2}\delta_Y + \frac{1}{2}\delta_M. \quad (51)$$

Chern 数  $C_1$  は Berry 曲率を Brillouin 域全体に渡って積分したものだだったが、(少々の飛躍を恐れずに言うと) 上式はこれが 4 つの Dirac 点からの寄与 ( $= \pm 1/2$ ) に分解できることを示している [19].

さて、  $C_1 = 0$  の weak 相、例えば、先程の WTI-y 相に現れたエッジ状態、とりわけ  $k_y = 0$  と  $k_y = \pi$  におけるエッジ状態の交差はどのようなトポロジカル数に保護されているのだろうか? 一般にこのような “weak” な性質は 1 つ次元が下のトポロジカル数と関係している [20]. いまの場合、 Brillouin 域で  $k_x$  あるいは  $k_y$  のいずれかを  $= 0$  あるいは、  $= \pi$  に固定し、残りの方向にぐるっと一周する閉経路  $C_{k_x}, C_{k_y}$  に対する Berry 位相  $N_{k_x}$  と  $N_{k_y}$  がこれに相当する。

$$N_{k_x} = \frac{1}{i\pi} \oint_{C_{k_x}} dk_y \psi_-^\dagger \partial_{k_y} \psi_-, \quad N_{k_y} = \frac{1}{i\pi} \oint_{C_{k_y}} dk_x \psi_-^\dagger \partial_{k_x} \psi_-, \quad (52)$$

上式では、  $N_{k_x}, N_{k_y}$  を Berry 曲率の経路  $C_{k_x}, C_{k_y}$  にわたる周回積分で表現したが、これを式 (17) のように「巻き付き数」として解釈することもできる。このようなトポロジカル数  $N_{k_x}, N_{k_y}$  に対して、式 (22)、あるいは式 (51) と同様の「分解則」が成り立つ [17].

$$\begin{aligned} -N_{k_x=0} &= \frac{1}{2}\delta_{\Gamma} + \frac{1}{2}\delta_Y, & -N_{k_x=\pi} &= \frac{1}{2}\delta_X + \frac{1}{2}\delta_M, \\ -N_{k_y=0} &= \frac{1}{2}\delta_{\Gamma} + \frac{1}{2}\delta_X, & -N_{k_y=\pi} &= \frac{1}{2}\delta_Y + \frac{1}{2}\delta_M, \end{aligned} \quad (53)$$

上式と表 2 を照らし合わせて、分解則に矛盾がないことをチェックした上で、  $N_{k_x, k_y} = \pm 1$  となるところでエッジ状態の交差が起こっていることを確認してほしい。

## 2.4 スピンホール絶縁体、時間反転対称性、ヘリカルなエッジ状態

トポロジカル絶縁体の分野が現在のように花開いた最大の要因は、あとに述べる 3 次元のトポロジカル絶縁体が  $\text{Bi}_2\text{Se}_3, \text{Bi}_2\text{Te}_3$  に始まる一連の物質群 [1] として、スピン分解角

度分光等の実験で確認されたことに違いない。しかし、歴史がそのような方向に進むきっかけを作ったという意味において、その前駆体である量子スピン Hall 効果、量子スピン Hall 絶縁体の予言 [2, 3] と、その実験的な検証 [4] が大きかったのではないか？

量子ホール効果は強磁場中の 2 次元系で起こり (→従って、時間反転対称性は破れている)、試料の端にカイラルなエッジ状態が現れる。これに似た現象が、ゼロ磁場で時間反転対称性が保たれたまま起こるのが、スピン Hall 効果、そしてそのような現象を示す系をスピン Hall 絶縁体 [21] という。(実効的に) 磁場の役割を果たすのは、スピン軌道結合である。

もう少し模式的に状況を記述するなら、次のようになる。量子スピン Hall 絶縁体中において、スピン up の電子は、 $+B\hat{z}$  という有効磁場を感じて、式 (36)、あるいは式 (38) で記述されるような量子ホール状態にある。この (部分) 系には、時計回りのカイラルエッジ状態が存在する。一方、スピン down の電子は、これと反対の  $-B\hat{z}$  という有効磁場を感じ、同様な有効 Hamiltonian で記述される量子 Hall 状態にあるが、こちらの部分系を周回するカイラルエッジ状態は反時計回りになる。全系の有効 Hamiltonian は、次のようになる [3]。

$$H = \begin{bmatrix} h(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & h^*(-\mathbf{k}) \end{bmatrix}. \quad (54)$$

ここで、 $h(\mathbf{k})$  としては、式 (36)、あるいは式 (38) で与えられる部分系の Hamiltonian を持ってくる。式 (54) は時間反転対称になっている。系のひとつの端：例えばリボン系の上端に着目すると、そこには一对のギャップレス状態がバルクのバンドギャップを横切って現れる。スピンの量子化軸を適当にとると、一方のスピンは up、もう一方は down の状態に対応し、またスピン up は右向き、スピン down は左向きというように互いに逆走している。もちろん、系はエッジを含めて時間反転対称になっているから、この 2 つのエッジモードは互いに時間反転操作で入れ替わる関係になっている。このような系に不純物を導入して、局所的に並進対称性を破ったとしても、スピンが保存される限り、電子は後方散乱しない。ヘリカルなエッジチャンネルは非磁性不純物に対して頑強である。

### 3 3次元版：いわゆる ( $Z_2$ ) トポロジカル絶縁体

高次元化を続行する。

#### 3.1 3次元 Wilson-Dirac 模型：時間反転対称性

式 (1)、式 (36) を自然に 3 次元に拡張したい。しかし、ここでひとつ困ったことがある。3 次元版の Wilson-Dirac 模型を構築しようとする、運動量 3 成分： $p_x, p_y, p_z$  と質量項  $m(\mathbf{p})$ 、合わせて 4 つの「独立な」項が出てくる。これら 4 つの項にひとつずつ Pauli 行列

を割り当てたい。しかし困った。Pauli 行列は 3 つしかない！どうすればいいか？答えは、相対論的量子力学の教科書にも書いてある。答え：2 × 2 の行列では埒が明かない。Pauli 行列の 4 × 4 版： $\gamma$ -行列を導入する。例えば、1 つの取り方に過ぎないが、

$$\gamma_0 = \tau_z, \gamma_1 = \tau_x \sigma_x, \gamma_2 = \tau_x \sigma_y, \gamma_3 = \tau_x \sigma_z. \quad (55)$$

2 種類の Pauli 行列  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  と  $\tau_x, \tau_y, \tau_z$  は異なる物理的な自由度（ここでは、スピンと軌道）に対応し、別の空間で作用する。 $\gamma$ -行列は、Pauli 行列同様→式 (3)，反交換関係を満たす。

$$\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu}, \quad (56)$$

$\mu, \nu = 0, 1, 2, 3$ . 式 (55) のように与えられた  $\gamma$ -行列を用いて、3次元 Wilson-Dirac 模型を構築することができる [8, 9].

$$H_{3D}(\mathbf{p}) = m(\mathbf{p})\gamma_0 + A_x p_x \gamma_1 + A_y p_y \gamma_2 + A_z p_z \gamma_3 \quad (57)$$

$$m(\mathbf{p}) = m_0 + m_2 \mathbf{p}^2 \quad (58)$$

これを立方格子の上に載せて、

$$H_{3D \text{ 格子}}(\mathbf{k}) = m(\mathbf{k})\gamma_0 + A_x \sin k_x \gamma_1 + A_y \sin k_y \gamma_2 + A_z \sin k_z \gamma_3, \quad (59)$$

$$m(\mathbf{k}) = m_0 + 2m_{2x}(1 - \cos k_x) + 2m_{2y}(1 - \cos k_y) + 2m_{2z}(1 - \cos k_z). \quad (60)$$

式 (55) で、2 種類の Pauli 行列の  $\sigma$  の方がスピン、 $\tau$  の方が軌道を表すことにしたから、時間反転操作の下で、これらは、 $\sigma \rightarrow -\sigma, \tau \rightarrow \tau$  と変換する。一方、 $\mathbf{p}$  や  $\mathbf{k}$  は時間反転の下で符号を変える。 $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}, \mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ . 質量項は、 $\mathbf{p}$  または  $\mathbf{k}$  の偶関数になっており、時間反転不変。従って、式 (57), (59) の Hamiltonian は時間反転不変である。

$$\Theta H(-\mathbf{k}) \Theta^{-1} = H(\mathbf{k}) \quad (61)$$

ただし、時間反転演算子は、 $\Theta = \sigma_y K$ .  $K$  は複素共役を表す。従って、 $\Theta^2 = -1$ .<sup>11</sup>

<sup>11</sup>この事実は、分類学的 (Sec. 4 結語参照) には重要である。詳しく述べる余裕はないが、式 (57), (59) で与えられる Hamiltonian (以下では、単に  $H(\mathbf{k})$  と記す) は、このままの形だと、分類学的にはクラス DIII に属する (Ref. [26, 29] 等にある周期表を参照せよ)。具体的には、 $\Theta = \sigma_y K$  に対して、式 (61) が成り立ち (→時間反転対称) かつ、 $\Theta^2 = -1$  であることに加えて、この系には粒子正孔対称性もある。すなわち、 $\Xi = \sigma_y \tau_y K$  に対し、

$$\Xi H(-\mathbf{k}) \Xi^{-1} = -H(\mathbf{k}) \quad (62)$$

も成立する。ただし、 $\Xi^2 = +1$ . さらに、カイラル演算子： $\Gamma_5 = \tau_y$  も定義できて、これが  $H(\mathbf{k})$  と反交換：式 (13) を満たす。→カイラル対称： $\Gamma_5 = +1$ 。これ： $\Theta^2 = -1, \Xi^2 = +1, \Gamma_5 = +1$  は、分類学的には、クラス DIII を意味する。さて、いわゆる  $Z_2$  トポロジカル絶縁体の属するクラスは、AII である。クラス AII だと、空間 3 次元 (2 次元でも) トポロジカルな分類が  $Z_2$  になる (クラス DIII だと分類は  $Z$ )。実は露に書かなかったが、式 (57), (59) には、 $\epsilon(\mathbf{k})1_4$  のような (通常ホッピングから生じる) 項が省略されている。このような項は、粒子正孔対称性とカイラル対称性を破り、系の対称性クラスを DIII から、AII に変更する。クラス AII の対称性は、 $\Theta^2 = -1, \Xi^2 = 0, \Gamma_5 = 0$ . クラス DIII における  $Z$ -トポロジカル数の

### 3.2 $Z_2$ 指数と強い vs. 弱いトポロジカル絶縁体

3次元トポロジカル絶縁体の相図はどのようなものになるだろうか？時間反転対称な3次元“クラス AII”（脚注 11 参照）トポロジカル絶縁体の相図は、4つの  $Z_2$  指数/indices によって特徴付けられる [5, 6, 7] . 4つの  $Z_2$  指数は「強い」指数  $\nu_0$  と「弱い」指数  $\nu_1, \nu_2, \nu_3$  に分類される.

4つの  $Z_2$  指数は、これまで扱ってきたケース同様、バルクの対称点におけるバンドの指標で表すことができる<sup>12</sup>. 式 (59) で与えられる 3次元 Wilson-Dirac 模型の場合、バルクにおけるバンドの反転は Brillouin 域の次の 8 点で起こる： $\Gamma, X, Y, Z, P, Q, R, M$ . ただし、 $\mathbf{k}_\Gamma = (0, 0, 0)$ ,  $\mathbf{k}_X = (\pi, 0, 0)$ ,  $\mathbf{k}_Y = (0, \pi, 0)$ ,  $\mathbf{k}_Z = (0, 0, \pi)$ ,  $\mathbf{k}_P = (0, \pi, \pi)$ ,  $\mathbf{k}_Q = (\pi, 0, \pi)$ ,  $\mathbf{k}_R = (\pi, \pi, 0)$ ,  $\mathbf{k}_M = (\pi, \pi, \pi)$ . これらの点は、Brillouin 域における空間、かつ、時間反転対称な点である. これらの点のまわりで式 (59) を展開し、 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -近似を適用すると、連続体近似の有効 Hamiltonian は、式 (20), (49) 同様、

$$H(p_x) = \tilde{m}_0 \gamma_0 + \tilde{A}_x p_x \gamma_1 + \tilde{A}_y p_y \gamma_2 + \tilde{A}_z p_z \gamma_3 \quad (63)$$

の形に得られる. これを用いて、波数  $\mathbf{k}$  の点におけるバンドの指標を

$$\delta_{\mathbf{k}} = \text{sgn}(\tilde{m}_0) \quad (64)$$

と定義しておく. 今回、分類が  $Z_2$  なので、Dirac コーンの「巻き方」は気にしなくてよい ( $\tilde{A}$  の符号を気にしない理由). 文献 [22] によれば、4つの  $Z_2$  指数は式 (64) の  $\delta_{\mathbf{k}}$  を用いて、次のように表される.

まず、強い指数  $\nu_0$  は、

$$(-1)^{\nu_0} = \delta_\Gamma \delta_X \delta_Y \delta_Z \delta_P \delta_Q \delta_R \delta_M \quad (65)$$

と 8 つの対称点すべてにおける  $\delta_{\mathbf{k}}$  の値をかけたもので決まる. 次に弱い指数  $\nu_1, \nu_2, \nu_3$  であるが、これは

$$\begin{aligned} (-1)^{\nu_1} &= \delta_X \delta_Q \delta_R \delta_M, \\ (-1)^{\nu_2} &= \delta_Y \delta_R \delta_P \delta_M, \\ (-1)^{\nu_3} &= \delta_Z \delta_P \delta_Q \delta_M \end{aligned} \quad (66)$$

偶奇性が、クラス AII における (強い)  $Z_2$ -トポロジカル数  $\nu_0$  に対応する.

一方、最初に扱った 1次元トポロジカル絶縁体のモデル— 式 (1), (5) で与えられた— にも実は形式的な時間反転対称性があった. 式 (1), (5) で与えられる  $H(k)$  に対しては、 $\Theta = \tau_z K$  ととると、式 (61) が成立する ( $\rightarrow$ 時間反転対称). ただし、3次元の場合と 1つ重要な違いがあつて、 $\Theta = \tau_z K$  に対しては、 $\Theta^2 = +1$  である. また、 $\Xi = \tau_x K$ ,  $\Gamma_5 = \tau_y$  ととれば、式 (62), (13) がそれぞれ成立し、粒子正孔対称性、カイラル対称性も存在することが確認できる. 従つて、式 (1), (5) の 1次元 Wilson-Dirac 模型は、 $\Theta^2 = +1$ ,  $\Xi^2 = +1$ ,  $\Gamma_5 = +1$  で特徴付けられ、クラス BDI に属することが分かる. クラス BDI のトポロジカルな分類は、空間次元 1 で  $Z$ . 周期表はうまくいっているようだ. 一方、先程の 3次元の場合と同様、 $\epsilon(\mathbf{k})_{12}$  のような項を Hamiltonian に加えると、粒子正孔対称性とカイラル対称性はなくなり、系の対称性クラスは BDI から AI へと変更になる.

<sup>12</sup>ただし、系が空間反転対称なとき [22].

のように、例えば、 $\nu_1$ であれば、 $k_x = \pi$ の面上にある4つの対称点： $\Gamma, Q, R, M$ における $\delta_{\mathbf{k}}$ の値をかけたもので決まり、 $\nu_2, \nu_3$ についても同様の規則が成り立つ。

強い指数がノンゼロ： $\nu_0 \neq 0$ の相を強いトポロジカル相 (STI-相) と呼び、この相ではどのような向きに表面を作っても表面 Brillouin 域に Dirac コーンが1つ (一般には奇数個) 現れる。強い指数がゼロ： $\nu_0 = 0$ だが、弱い指数 $\nu_1, \nu_2, \nu_3$ のうち少なくともひとつがのノンゼロであるとき、これを弱いトポロジカル相 (WTI-相) と呼ぶ。1次元、2次元の Wilson-Dirac 模型のときと同様、質量パラメーターを適当に変えたとき、式 (64) の $\delta_{\mathbf{k}}$ がどのように変化していくかを表にすることができる。この表と式 (65), (66) の規則を見比べれば、3次元トポロジカル絶縁体の相図を作成することができる。<sup>13</sup>

WTI-相では、一般に、表面 Brillouin 域に「偶数個」の Dirac コーンが現れる。という意味は、典型的には2つ、表面を作る向きによっては、Dirac コーンが現れない場合もあるということ。Dirac コーンが現れない面は、3つの弱い指数 $\nu_1, \nu_2, \nu_3$ で決まるベクトル

$$\boldsymbol{\nu} = (\nu_1, \nu_2, \nu_3) \quad (67)$$

に垂直な面であることが示される。バルクのエネルギーギャップの間の低エネルギー世界に住む電子にとってこのような面は (使える状態がないという意味で) “dark” である。弱い指数 $\nu_1\nu_2\nu_3$ をこのような「ダークな」面の Miller 指数とみなすこともできる。

孤立した Dirac コーン (single Dirac cone) に住む電子は、いわゆる Klein トンネル効果により、ポテンシャル障壁等で跳ね返らないため、有限領域に閉じ込めることができない。<sup>14</sup> STI-相の表面にいる Dirac 電子はこのような電子状態にある。上と同じことは、Dirac 電子が、例えば、箱形の試料のかどに来たときにも言えて、従って、STI-表面の Dirac 電子はかどで跳ね返らない [24]。これが、STI-相では「どのような向きに表面を作っても」Dirac コーンが1つ現れる理由である。一方、表面 Brillouin 域に偶数個の Dirac コーンがある場合：WTI-相では、脚注 14 の状況と異なり、Dirac 電子を有限領域に閉じ込めることができる。→その結果、ダークな面が現れる。ダークな面の存在は、WTI-表面の電子物性を本質的に支配する [25]。

## 4 結語

Wilson-Dirac 型有効模型の立場からトポロジカル絶縁体の物理を議論してきた。最もシンプルな1次元の模型から出発し、2次元版、3次元版等いくつかのバリエーションを通して、トポロジカル絶縁体の物理の記述に必要な道具立てを導入した。紙面の都合上、

<sup>13</sup>例えば、 $m_{2x} = m_{2y} \equiv m_2$ として、 $z$ -方向にだけ異方性を許した場合、相図はどうか？ $m_0/m_2$ と $m_{2z}/m_2$ を2つ独立なパラメーターとして、これらの張る平面上で相図を作成してみよ [23]。

<sup>14</sup>Dirac コーンが1つしかない、という主張は、何かうまい線形結合を作って、空間のある領域で波動関数がゼロという境界条件を満たそうと思っても、(重ね合わせるものがないので) それを達成することはできない。

そろそろ筆を置かねばならないが、トポロジカル絶縁体は深淵でまだその本格的な議論の出発点に立ったに過ぎない。本当は本講義ノートで扱おうと思っていたが、もうちょっと諦めざるを得ない状況になってしまったテーマがいくつもある。最後に未練を込めて、それらをリストアップしておく。

1. トポロジカル絶縁体の分類学—モデルの対称性とトポロジカル数の性質— トポロジカル数によるトポロジカル絶縁体の特徴付けにおいては、モデルの対称性に応じて、 $Z$ -タイプ、 $Z_2$ -タイプがあることを見た。このような対称性によるトポロジカル絶縁体の「クラス分け」を系統的に行なうのが、トポロジカル絶縁体における分類学の考え方で、その結果は元素の周期表同様、一種の周期表の形に収められている [26]. 周期表はいまも増殖中らしい!? [27, 28]
2. 有限サイズ効果：トポロジカル絶縁体の表面状態は、特徴的に強い有限サイズ効果を示す。従って、高が有限サイズ効果と言えど、それは副次的な効果とは言い切れず、例えば、上で言及したトポロジカルな分類の周期表にだって影響する [29, 30]. 強いトポロジカル絶縁体ではスピン接続による形状効果 [31]、弱いトポロジカル絶縁体では層数に関する偶奇性の問題 [23, 25] が、とりわけ重要な役割をする。
3. 強い vs. 弱いトポロジカル絶縁体：局在／非局在の立場から、強いトポロジカル絶縁体と弱いトポロジカル絶縁体の対比という意味では、表面状態の波動関数が不純物の存在下で局在するか否かという問題は、上の有限サイズ効果とも絡み、とりわけ理論研究においては依然 “state of the art” な研究テーマとなっている [32, 33, 34].

## 謝辞

本講義ノートで扱った内容の多くは、共同研究等を通して、著者が以下の方々から体得したことを再構成したものであり、ここに感謝の意を示したい。不完全なリストではあるが、とりわけ、大槻東巳、小林浩二、福井隆裕、初貝安弘、Igor Herbut、田中秋広、木村昭夫、御領潤、倉本義夫、山影相、野村健太郎、吉村幸徳、岡本真由子、松本哲彦、高根美武の各氏に対して。また、本講義ノートを準備するにあたり、今回の夏の学校で私の世話人を努めてくれている東北大金研の紅林大地氏にも謝意を表したい。

## 参考文献

- [1] Y. Ando, “*Topological Insulator Materials*,” J. Phys. Soc. Jpn. **82** (2013) 102001.
- [2] C.L. Kane and E.J. Mele, “*Z<sub>2</sub> Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect*,” Phys. Rev. Lett. **95**, 146802, 2005.
- [3] B.A. Bernevig, T.L. Hughes, and S.-C. Zhang, “*Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells*,” Science **314**, pp. 1757-1761, 2006.
- [4] M. König, *et al.*, “*Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells*,” Science **318**, pp. 766-770, 2007.
- [5] L. Fu, C.L. Kane, and E.J. Mele, “*Topological Insulators in Three Dimensions*,” Phys. Rev. Lett. **98**, 106803, 2007.
- [6] J.E. Moore and L. Balents, “*Topological invariants of time-reversal-invariant band structures*,” Phys. Rev. B **75**, 121306, 2007.
- [7] R. Roy, “*Topological phases and the quantum spin Hall effect in three dimensions*,” Phys. Rev. B **79**, 195322, 2009.
- [8] H. Zhang, *et al.*, “*Topological insulators in Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>, Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> and Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> with a single Dirac cone on the surface*,” Nature physics **5**, pp. 438-442, 2009.
- [9] C.-X. Liu, *et al.*, “*Model Hamiltonian for topological insulators*,” Phys. Rev. B **82**, 045122, 2010.
- [10] M. Creutz and I. Horvath, “*Surface states and chiral symmetry on the lattice*,” Phys. Rev. D **50**, 2297, 1994.
- [11] H.B. Nielsen and M. Ninomiya, “*A no-go theorem for regularizing chiral fermions*,” Phys. Lett. B **105**, 1981, pp. 219-223.
- [12] M.V. Berry, “*Quantal phase factors accompanying adiabatic changes*,” Proc. Roy. Soc. London A **392**, 1984, pp. 45-57.
- [13] M. Kohmoto, “*Topological invariant and the quantization of the Hall conductance*,” Ann. Phys. **160**, 1985, pp. 343-354.
- [14] S. Ryu and Y. Hatsugai, “*Topological Origin of Zero-Energy Edge States in Particle-Hole Symmetric Systems*,” Phys. Rev. Lett. **89**, 077002, 2002.

- [15] Y. Hatsugai, “*Bulk-edge correspondence in graphene with/without magnetic field: Chiral symmetry, Dirac fermions and edge states*,” Solid State Commun. **149**, pp. 1061-1067, 2009.
- [16] M. Okamoto, Y. Takane, and K.-I. Imura, “*One-dimensional topological insulator: A model for studying finite-size effects in topological insulator thin films*,” Phys. Rev. B **89**, 125425, 2014.
- [17] Y. Yoshimura, K.-I. Imura, T. Fukui, and Y. Hatsugai, “*Characterizing the weak topological properties: Berry phase point of view*,” arXiv:1405.4842.
- [18] Y. Hatsugai, “*Chern number and edge states in the integer quantum Hall effect*,” Phys. Rev. Lett. **71**, 3697, 1993.
- [19] Y. Hatsugai, M. Kohmoto, and Y.-S. Wu, “*Hidden massive Dirac fermions in effective field theory for integral quantum Hall transitions*,” Phys. Rev. B **54**, 4898, 1996.
- [20] Y. Ran, “*Weak indices and dislocations in general topological band structures*,” arXiv:1006.5454.
- [21] S. Murakami, N. Nagaosa, and S.-C. Zhang, “*Spin Hall Insulator*,” Phys. Rev. Lett. **93**, 156804, 2004.
- [22] L. Fu and C. L. Kane, “*Topological insulators with inversion symmetry*,” Phys. Rev. B **76**, 045302, 2007.
- [23] K.-I. Imura, M. Okamoto, Y. Yoshimura, Y. Takane, and T. Ohtsuki, “*Finite-size energy gap in weak and strong topological insulators*,” Phys. Rev. B **86**, 245436, 2012.
- [24] Y. Takane and K.-I. Imura, “*Dirac electrons on a sharply edged surface of topological insulators*,” J. Phys. Soc. Jpn. **81** (2012) 093705.
- [25] Y. Yoshimura, A. Matsumoto, Y. Takane, and K.-I. Imura, “*Perfectly conducting channel on the dark surface of weak topological insulators*,” Phys. Rev. B **88**, 045408, 2013.
- [26] A.P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A.W.W. Ludwig, “*Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions*,” Phys. Rev. B **78**, 195125, 2008.

- [27] T. Morimoto and A. Furusaki, “*Topological classification with additional symmetries from Clifford algebras,*” Phys. Rev. B **88**, 125129, 2013.
- [28] K. Shiozaki and M. Sato, “*Topology of crystalline insulators and superconductors,*” arXiv:1403.3331.
- [29] J.C.Y. Teo and C. L. Kane, “*Topological defects and gapless modes in insulators and superconductors,*” Phys. Rev. B **82**, 115120, 2010.
- [30] K.-I. Imura, Y. Takane, and A. Tanaka, “*Weak topological insulator with protected gapless helical states,*” Phys. Rev. B **84**, 035443, 2011.
- [31] Y. Takane and K.-I. Imura, “*Unified Description of Dirac Electrons on a Curved Surface of Topological Insulators,*” J. Phys. Soc. Jpn. **82** (2013) 074712.
- [32] A. Yamakage, K. Nomura, K.-I. Imura and Y. Kuramoto, “*Disorder-Induced Multiple Transition involving  $Z_2$  Topological Insulator,*” J. Phys. Soc. Jpn. **80** (2011) 053703.
- [33] K. Kobayashi, T. Ohtsuki, and K.-I. Imura, “*Disordered Weak and Strong Topological Insulators,*” Phys. Rev. Lett. **110**, 236803, 2013.
- [34] H. Obuse, S. Ryu, A. Furusaki, and C. Mudry “*Spin-directed network model for the surface states of weak three-dimensional  $Z_2$  topological insulators,*” Phys. Rev. B **89**, 155315, 2014.