

乱れたトポロジカル絶縁体： Z_2 指数の新しい数値計算法

トポロジカル絶縁体、それはバンド絶縁体であるが、その表面には、乱れや相互作用にも影響されず安定に電流が流れる物質である。その理論模型では、トポロジカル不変量と呼ばれるものが非自明な値をとらなければならない。しかし、系に乱れがあると、その値を決めることは数値的にも難しい。特に、トポロジカル不変量の一つである Z_2 指数の値を計算する方法は、今までにも数多く試みられてきた。この論文では、非可換微分幾何に基づいた Z_2 指数の新たな数値計算法を提案し、それを乱れのあるトポロジカル絶縁体の典型的な模型に適用し、転送行列の方法から予想された値を再現してみせている。

トポロジカル絶縁体の研究が隆盛を極めている背景には、次のような理由がある：それは、バンド絶縁体であるが、表面に安定した電流が生ずる。これは、昔からよく知られていた絶縁体の表面電流と、何ら変わらないように思われるかもしれないが、その特異な性質によって、不純物による乱れや電子間相互作用にも影響されず、安定な電流を生じさせることができると期待されている。

この論文に注目すべき理由を、タイトルに含まれる3つのキーワード、「乱れ」・「トポロジカル」・「 Z_2 指数」を用いて説明しよう。そのために、まず歴史を振り返ってみる。半導体の界面における2次元電子系の実現は、その後、その面に垂直な強磁場をかけることにより、整数量子Hall効果の発見へと至った。これらについては、学習院大学の川路グループやドイツのvon Klitzing のグループの貢献が大きい。ここで重要なのは、界面には「乱れ」、さらに電子間に相互作用もあるにもかかわらず、Hall抵抗は整数量子化を示し、Anderson 局在により量子化プラトーも出現することである。

この摂動に対する安定性を説明するのが、「トポロジカル」という概念である。この概念が確立されるまでには、少なからず紆余曲折の歴史がある。その発端は、Thouless・甲元・Nightingale・den Nijs の4人が、周期ポテンシャルがある磁場中2次元電子系を考え、Hall 伝導度の表式をBloch関数の波数微分で書いた事だった。この表式は、Avron・Seiler・Simon のホモトピーおよびホロノミーの考察を経て、甲元による微分幾何を用いた表式へと結実する。甲元は、Brillouinゾーン上のBloch関数の「トポロジカルな」捻じれを表現するため、Bloch関数の波数微分を用いて、微分幾何ではお馴染みの接続と曲率を導入し、Hall 伝導度が Chern 数と呼ばれる「トポロジカル」不変量で書けることを示した。この「トポロジカル」物性の幕開けを機に、次々と大きな進展が続くことになる：バルク端対応の発見、すなわち安定な表面電流の存在、また、Bellissardらは、Connes の非可換微分幾何を用いることによって、系に「乱れ」があってもHall 伝導度は整数量子化を保つ事を示した。さらには、Niu・Thouless・Wu による捻り境界条件の方法も、電子間相互作用がある系にも適用可能という意味で、特筆すべきものである。

それでは3つ目のキーワード「 Z_2 指数」の説明に移ろう。このためには、Haldane および Kane と Mele の仕事を振り返る必要がある。量子 Hall 効果は外部強磁場下の現象と考えられていたが、Haldane は、非現実的ではあるが、ある種の内部磁場 (系全体を貫く磁場はゼロ) があれば、整数量子ホール効果が起こることを示した。この Haldane の模型は時間反転対称ではないが、Kane と Mele は、この Haldane 模型にスピンの自由度を導入し、時間反転対称な模型を構成した。この模

型では、元の内部磁場は、時間反転によりスピン軌道相互作用に取って代わったと読みかえられる。従って、実験的にも実現可能な現実的なモデルとなった。しかし、時間反転対称なためHall 伝導度はゼロとなり、その結果、対応した「トポロジカル」不変量、Chern数もゼロとなってしまうが、驚くべきことに、Atiyah-Singer の「 Z_2 指数」が別の「トポロジカル」不変量となって現れる。これは、系が時間反転対称性を持ち、Chern 数が消えていても、まだエネルギー固有関数にある種の捻じれが残っており、それが「トポロジカル」不変量となって現れることを意味する。実際、この奇妙な不変量は、エネルギー固有関数から構成されるパフィアンという量を用いて定義される。この量は、並進対称な系や、それに加えてある種の空間反転対称性があるような系については、その値を決めることは比較的容易であるが、「乱れた」系に対してその値を数値的に求めることは難しく、今までにも、上で述べたNiu-Thouless-Wu の方法を「 Z_2 指数」の計算へ拡張した方法や、散乱行列、Bott 指数を用いた方法などの多くの試みがなされている。

さて、3つのキーワード「乱れ」・「トポロジカル」・「 Z_2 指数」を念頭に置き、注目論文を見てみよう。東京大学大学院理学系研究科物理学専攻の赤城・桂と学習院大学理学部物理学科の高麗は、時間反転対称な「トポロジカル」絶縁体の「 Z_2 指数」を計算する新たな方法を提案している。しかも、強い「乱れ」がある場合にも適用可能で、「 Z_2 指数」を数値的に効率良く計算できると主張している。彼らは、2次元系の例として Bernevig-Hughes-Zhang 模型、3次元系の例としては Wilson-Dirac 模型を扱った。彼らの結果は、日本物理学会が発行する英文誌 Journal of the Physical Society of Japan (JPSJ)の 2017年12月号に掲載された。

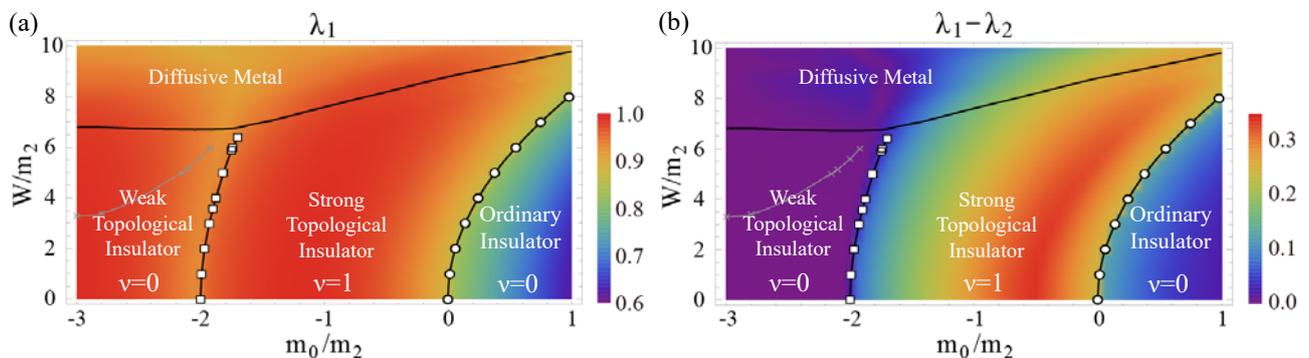


図1. Wilson-Dirac 模型における質量項 m_0 と乱れの強さ W に対する(a) λ_1 と(b) $\lambda_1 - \lambda_2$ の分布と Z_2 指数 ν 。ここで、 λ_1 と λ_2 は、A の固有値を、縮退度を含めて降順に並べ替えた場合の、1 番目と 2 番目の固有値にそれぞれ対応する。

論文には非可換微分幾何という難解な数学が使われているが、それは後回しにして、まず結果を見てみよう。図1は、Wilson-Dirac 模型の相図を、質量項 m_0 と乱れの強さ W に対して描いたものである。相図の境界線は、小林・大槻・井村による転送行列法によって決められたものを引いている。色の違いから分かるように、両者は良く一致している。さらに、2次元の Bernevig-Hughes-Zhang 模型も扱い、山影・野村・井村・倉本による先行研究と同様の一致を得ている。これらは確かに、彼らの主張通り、転送行列の方法によって予想された「 Z_2 指数」が、彼らの方法によって正しく計算できることを意味している。彼らの手法は、乱れのあるトポロジカル絶縁体/超伝導体の全てのクラス、全次元に対しても拡張が可能のため、多くの研究者の注目を集めている。

最後に、計算手法の説明をしよう。彼らの論文で「 Z_2 指数」は、2つの射影演算子の差で表され

る演算子 $A = P_F - D_a P_F D_a$ の固有値 $\lambda = 1$ の縮退度の偶奇によって定義される。ここで、 P_F は Fermi エネルギー以下の準位への射影演算子、 D_a は $D_a^2=1$ を満たす Dirac 作用素である。この「 Z_2 指数」は、厳密には無限系で定義されるものである。論文では、どのように A を有限次元の行列で近似し、有限系で「 Z_2 指数」 ν を数値的に計算するかが提案されている。また、結果として図 1 にあるように、強いトポロジカル絶縁相は非自明な「 Z_2 指数」 $\nu = 1$ によって特徴付けられ、それ以外の相では $\nu = 0$ となり、乱れがあっても、この「 Z_2 指数」がトポロジカル絶縁体を特徴付けているトポロジカル不変量だということを示している。

原論文

[A New Numerical Method for \$Z_2\$ Topological Insulators with Strong Disorder](#)

Yutaka Akagi, Hosho Katsura, and Tohru Koma: *J. Phys. Soc. Jpn.* **86** (2017) 123710.

問合せ先： 赤城 裕（東京大学大学院理学系研究科）