異常 Hall 効果：線形応答理論から Berry 曲率を用いて記述する

東大理，藤本純治 †

1　はじめに

Berry 曲率による異常 Hall 効果の導出をまとめた．同じテーマを扱った文献として野村 [1] など多数あると思われるが，ハミルトニアンから出発して線形応答理論に基づいて導出したものはなかなか見つけられなかった．そこでこのノートでは，一般的な格子系のハミルトニアンから始めて，線形応答理論に基づいて異常 Hall 伝導度を計算し，それを Berry 曲率を用いて書き下すことを行った．

大まかな計算の流れは，以下の通りである．まず与えられたハミルトニアンを対角化し，固有状態で記述する．電流演算子がハミルトニアンの波数微分で与えられることから，電流演算子を固有状態の基底に書き換えたとき，一般化された Berry 接続が現れる．一般化された Berry 接続は，波数空間のゲージ場に他ならない．また，Green 関数も固有状態の基底で記述する．そののち，線形応答理論に基づいて電気伝導度テンソルを計算する．このとき，電気伝導度テンソルを固有状態の基底で書き換えると，異常 Hall 伝導度は Berry 曲率で記述されることが分かる．波数空間のゲージ場の場の強さが，Berry 曲率に他ならないことも分かる．また，縮退がある場合についても議論した．

2　強束縛模型と波数空間のゲージ場 (縮退のない場合)

以下で表される強束縛模型を考える．$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_M$ として，

$$\mathcal{H}_0 = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_j + \mathrm{h.c.}) - t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} (c_i^\dagger c_j + \mathrm{h.c.}) + \cdots , \tag{2.1}$$

$$\mathcal{H}_M = -\sum_i c_i^\dagger \boldsymbol{M} \cdot \boldsymbol{\sigma} c_i, \tag{2.2}$$

ここで，$c_i = {}^{\mathrm{t}}(c_{i,\uparrow}, c_{i,\downarrow})$ は i サイトの電子の消滅 (生成) 演算子で，t, t' は最近接と次近接の飛び移り積分で，和の $\langle i, j\rangle$ と $\langle\langle i, j\rangle\rangle$ は最近接のみ，次近接のみでの和を意味する．$\cdots$ の意味は，そのような飛び移り積分の強さが一定のホッピング項が幾つあってもよいことを意味している．$\boldsymbol{M}$ は時空間に依存しない磁化であり，$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ は Pauli 行列である．これを Fourier 変換すると，

$$\mathcal{H} = \sum_{\boldsymbol{k}} \tilde{c}_{\boldsymbol{k}}^\dagger H_{\boldsymbol{k}} \tilde{c}_{\boldsymbol{k}} \tag{2.3}$$

と波数に対角的になった表式になる．ただし，$\tilde{c}_{\boldsymbol{k}}$ は 2 成分スピノルではなく，副格子の自由度 a も含めた $2a$ 成分スピノルである．ハミルトニアン $H_{\boldsymbol{k}}$ は一般には対角的ではないので，

$$U_{\boldsymbol{k}}^\dagger H_{\boldsymbol{k}} U_{\boldsymbol{k}} = E_{\boldsymbol{k}} \tag{2.4}$$

とユニタリ変換して対角化する．すなわち，$\tilde{c}_{\boldsymbol{k}} = U_{\boldsymbol{k}} \bar{c}_{\boldsymbol{k}}$ と書き換えることに相当する．このときの固有状態を $|n, \boldsymbol{k}\rangle$ と書くことにする．すると，

$$U_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} \cdots & |n-1, \boldsymbol{k}\rangle & |n, \boldsymbol{k}\rangle & |n+1, \boldsymbol{k}\rangle & \cdots \end{pmatrix}, \qquad U_{\boldsymbol{k}}^\dagger = \begin{pmatrix} \vdots \\ \langle n-1, \boldsymbol{k}| \\ \langle n, \boldsymbol{k}| \\ \langle n+1, \boldsymbol{k}| \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{2.5}$$

† fujimoto.junji@gmail.com

と表され，ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \sum_{\boldsymbol{k}} \bar{c}_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} E_{\boldsymbol{k}} \bar{c}_{\boldsymbol{k}} \tag{2.6}$$

$$= \sum_{\boldsymbol{k},l} \epsilon_{\boldsymbol{k}l} \bar{c}_{\boldsymbol{k}l}^{\dagger} \bar{c}_{\boldsymbol{k}l} \tag{2.7}$$

と対角的になる．

電流演算子は，一般に

$$J_i = \sum_{\boldsymbol{k}} \tilde{c}_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial H_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} \right) \tilde{c}_{\boldsymbol{k}} \tag{2.8}$$

と書けるが，これに対してもユニタリ変換 $\tilde{c}_{\boldsymbol{k}} = U_{\boldsymbol{k}} \bar{c}_{\boldsymbol{k}}$ を施すと，

$$J_i = \sum_{\boldsymbol{k}} \bar{c}_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} U_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial H_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} \right) U_{\boldsymbol{k}} \bar{c}_{\boldsymbol{k}} \tag{2.9}$$

となるが，式 (2.4) を逆に解いて $H_{\boldsymbol{k}} = U_{\boldsymbol{k}} E_{\boldsymbol{k}} U_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}$ であるので，

$$\begin{aligned} U_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} \frac{\partial H_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} U_{\boldsymbol{k}} &= U_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} \frac{\partial (U_{\boldsymbol{k}} E_{\boldsymbol{k}} U_{\boldsymbol{k}}^{\dagger})}{\partial k_i} U_{\boldsymbol{k}} \\ &= \frac{\partial E_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} + U_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} \frac{\partial U_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} E_{\boldsymbol{k}} + E_{\boldsymbol{k}} \frac{\partial U_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}}{\partial k_i} U_{\boldsymbol{k}} \end{aligned} \tag{2.10}$$

を得るが，ここで $1 = U_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} U_{\boldsymbol{k}}$ から

$$\begin{aligned} 0 &= U_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} \frac{\partial U_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} + \frac{\partial U_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}}{\partial k_i} U_{\boldsymbol{k}} \\ \therefore \frac{\partial U_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}}{\partial k_i} U_{\boldsymbol{k}} &= -U_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} \frac{\partial U_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} \end{aligned} \tag{2.11}$$

であり，

$$U_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} \frac{\partial U_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} = -i A_{\boldsymbol{k},i} \tag{2.12}$$

として波数空間のゲージ場を導入すると，

$$J_i = \sum_{\boldsymbol{k}} \bar{c}_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} + \frac{1}{i\hbar} [A_{\boldsymbol{k},i}, E_{\boldsymbol{k}}]_{-} \right) \bar{c}_{\boldsymbol{k}} \tag{2.13}$$

$$= \sum_{\boldsymbol{k},l} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_{\boldsymbol{k}l}}{\partial k_i} \bar{c}_{\boldsymbol{k}l}^{\dagger} \bar{c}_{\boldsymbol{k}l} - \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{l \neq m} \frac{\epsilon_{\boldsymbol{k}l} - \epsilon_{\boldsymbol{k}m}}{i\hbar} A_{\boldsymbol{k},i}^{lm} \bar{c}_{\boldsymbol{k}l}^{\dagger} \bar{c}_{\boldsymbol{k}m} \tag{2.14}$$

式 (2.5) を用いると，

$$A_{\boldsymbol{k},i}^{lm} = i \langle l, \boldsymbol{k} | \frac{\partial}{\partial k_i} | m, \boldsymbol{k} \rangle \tag{2.15}$$

であることが分かる．つまり波数空間のゲージ場は一般化された Berry 接続に他ならない．（狭義の Berry 接続は $l = m$ のみを表す．）

Green 関数は，

$$G_{\boldsymbol{k}}(z) = (z - H_{\boldsymbol{k}})^{-1} \tag{2.16}$$

で与えられるが，ユニタリ変換を施すと，

$$\begin{aligned}\{G_{\boldsymbol{k}}(z)\}^{-1} &= U_{\boldsymbol{k}}(z - U_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} H_{\boldsymbol{k}} U_{\boldsymbol{k}}) U_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} \\ &= U_{\boldsymbol{k}}(z - E_{\boldsymbol{k}}) U_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}\end{aligned} \tag{2.17}$$

となることから，式 (2.5) を用いると

$$G_{\boldsymbol{k}}(z) = \sum_{l} \frac{|\boldsymbol{k}, l\rangle \langle \boldsymbol{k}, l|}{z - \epsilon_{\boldsymbol{k}l}} \tag{2.18}$$

が得られる．

3　異常 Hall 伝導度と Berry 曲率 (縮退のない場合)

電流-電流相関関数

$$\langle J_i; J_j \rangle (i\omega_\lambda) = e^2 \int_0^\beta \mathrm{d}\tau\, e^{i\omega_\lambda \tau} \langle \mathrm{T}_\tau J_i(\tau) J_j \rangle \tag{3.1}$$

が以下のように計算される．

$$\langle J_i; J_j \rangle (i\omega_\lambda) = -e^2 k_{\mathrm{B}} T \sum_n \sum_{\boldsymbol{k}} \mathrm{tr}\left[v_{\boldsymbol{k},i} G_{\boldsymbol{k}}(i\epsilon_n^+) v_{\boldsymbol{k},j} G_{\boldsymbol{k}}(i\epsilon_n) \right], \tag{3.2}$$

ただし

$$v_{\boldsymbol{k},i} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} + \frac{1}{i\hbar} [A_{\boldsymbol{k},i}, E_{\boldsymbol{k}}]_- \tag{3.3}$$

である．ここで，Green 関数の表式 (2.18) を代入すると，

$$\mathrm{tr}\left[v_{\boldsymbol{k},i} G_{\boldsymbol{k}}(i\epsilon_n^+) v_{\boldsymbol{k},j} G_{\boldsymbol{k}}(i\epsilon_n) \right] = \sum_{l,m} \frac{\langle \boldsymbol{k}, m| v_{\boldsymbol{k},i} |\boldsymbol{k}, l\rangle \langle \boldsymbol{k}, l| v_{\boldsymbol{k},j} |\boldsymbol{k}, m\rangle}{(i\epsilon_n^+ - \epsilon_{\boldsymbol{k}l})(i\epsilon_n - \epsilon_{\boldsymbol{k}m})} \tag{3.4}$$

となるので，

$$\langle \boldsymbol{k}, l| v_{\boldsymbol{k},j} |\boldsymbol{k}, m\rangle = \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_{\boldsymbol{k}l}}{\partial k_j} \right) \delta_{l,m} - \frac{\epsilon_{\boldsymbol{k}l} - \epsilon_{\boldsymbol{k}m}}{i\hbar} A_{\boldsymbol{k},i}^{lm} \tag{3.5}$$

となり，第 1 項は $l \neq m$ ではゼロであり，第 2 項は $l = m$ ではゼロになる．よって，

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}\left[v_{\boldsymbol{k},i} G_{\boldsymbol{k}}(i\epsilon_n^+) v_{\boldsymbol{k},j} G_{\boldsymbol{k}}(i\epsilon_n) \right] &= \sum_{l} \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_{\boldsymbol{k}l}}{\partial k_i} \right) \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_{\boldsymbol{k}l}}{\partial k_j} \right) \frac{1}{(i\epsilon_n^+ - \epsilon_{\boldsymbol{k}l})(i\epsilon_n - \epsilon_{\boldsymbol{k}l})} \\ &\quad + \sum_{l \neq m} \frac{\epsilon_{\boldsymbol{k}m} - \epsilon_{\boldsymbol{k}l}}{i\hbar} A_{\boldsymbol{k},i}^{ml} \frac{\epsilon_{\boldsymbol{k}l} - \epsilon_{\boldsymbol{k}m}}{i\hbar} A_{\boldsymbol{k},j}^{lm} \frac{1}{(i\epsilon_n^+ - \epsilon_{\boldsymbol{k}l})(i\epsilon_n - \epsilon_{\boldsymbol{k}m})}.\end{aligned} \tag{3.6}$$

以下では波数空間のゲージ場を含む項のみを考察する．

$$\varphi_{ij}(i\epsilon_n^+, i\epsilon_n) = -\sum_{l \neq m} \left(\frac{\epsilon_{\boldsymbol{k}l} - \epsilon_{\boldsymbol{k}m}}{i\hbar} \right)^2 \frac{A_{\boldsymbol{k},i}^{ml} A_{\boldsymbol{k},j}^{lm}}{(i\epsilon_n^+ - \epsilon_{\boldsymbol{k}l})(i\epsilon_n - \epsilon_{\boldsymbol{k}m})} \tag{3.7}$$

とすると，

$$-e^2 k_{\mathrm{B}} T \sum_n \varphi_{ij}(i\epsilon_n^+, i\epsilon_n) = -e^2 \int \frac{\mathrm{d}\epsilon}{2\pi i} \left[(f(\epsilon_+) - f(\epsilon_-))\, \varphi_{ij}^{\mathrm{RA}}(\epsilon_+, \epsilon_-) + f(\epsilon_-) \varphi_{ij}^{\mathrm{RR}}(\epsilon_+, \epsilon_-) - f(\epsilon_+) \varphi_{ij}^{\mathrm{AA}}(\epsilon_+, \epsilon_-) \right] \tag{3.8}$$

と書き直せる．ただし，$\epsilon_\pm = \epsilon \pm \hbar\omega$ として $f(\epsilon) = (e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1)^{-1}$ は Fermi-Dirac 分布関数であり，

$$\varphi_{ij}^{\mathrm{XY}}(\epsilon_+, \epsilon_-) = -\sum_{l\neq m}\left(\frac{\epsilon_{\boldsymbol{k}l}-\epsilon_{\boldsymbol{k}m}}{i\hbar}\right)^2 \frac{A_{\boldsymbol{k},i}^{ml}A_{\boldsymbol{k},j}^{lm}}{(\epsilon_+ + s_{\mathrm{X}} i\gamma - \epsilon_{\boldsymbol{k}l})(\epsilon_- + s_{\mathrm{Y}} i\gamma - \epsilon_{\boldsymbol{k}m})} \qquad (\mathrm{X}, \mathrm{Y} = \mathrm{R}, \mathrm{A}), \tag{3.9}$$

また $s_{\mathrm{R}} = +1$, $s_{\mathrm{A}} = -1$ であり，γ は減衰定数である．ここで，

$$\begin{aligned}
&(f(\epsilon_+) - f(\epsilon_-))\,\varphi_{ij}^{\mathrm{RA}}(\epsilon_+, \epsilon_-) + f(\epsilon_-)\varphi_{ij}^{\mathrm{RR}}(\epsilon_+, \epsilon_-) - f(\epsilon_+)\varphi_{ij}^{\mathrm{AA}}(\epsilon_+, \epsilon_-) \\
&= -2i\sum_{l\neq m}\left(\frac{\epsilon_{\boldsymbol{k}l}-\epsilon_{\boldsymbol{k}m}}{i\hbar}\right)^2 A_{\boldsymbol{k},i}^{ml}A_{\boldsymbol{k},j}^{lm}\left(\frac{f(\epsilon_+)}{\epsilon_- - i\gamma - \epsilon_{\boldsymbol{k}m}}\mathrm{Im}\,\frac{1}{\epsilon_+ + i\gamma - \epsilon_{\boldsymbol{k}l}} + \frac{f(\epsilon_-)}{\epsilon_+ + i\gamma - \epsilon_{\boldsymbol{k}l}}\mathrm{Im}\,\frac{1}{\epsilon_- + i\gamma - \epsilon_{\boldsymbol{k}m}}\right) \\
&= 2\pi i\sum_{l\neq m}\left(\frac{\epsilon_{\boldsymbol{k}l}-\epsilon_{\boldsymbol{k}m}}{i\hbar}\right)^2 A_{\boldsymbol{k},i}^{ml}A_{\boldsymbol{k},j}^{lm}\left(\frac{f(\epsilon_{\boldsymbol{k}l})}{\epsilon_{\boldsymbol{k}l} - \hbar\omega - \epsilon_{\boldsymbol{k}m}}\delta(\epsilon_+ - \epsilon_{\boldsymbol{k}l}) + \frac{f(\epsilon_{\boldsymbol{k}m})}{\epsilon_{\boldsymbol{k}m} + \hbar\omega - \epsilon_{\boldsymbol{k}l}}\delta(\epsilon_- - \epsilon_{\boldsymbol{k}m})\right).
\end{aligned} \tag{3.10}$$

ここで，減衰定数が小さいとして

$$\mathrm{Im}\,\frac{1}{\epsilon + i\gamma - \epsilon_{\boldsymbol{k}l}} = -\pi\delta(\epsilon - \epsilon_{\boldsymbol{k}l}) \tag{3.11}$$

を用いた．よって，

$$\langle J_i; J_j\rangle(\omega) = -e^2\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{l\neq m}\left(\frac{\epsilon_{\boldsymbol{k}l}-\epsilon_{\boldsymbol{k}m}}{i\hbar}\right)^2 (A_{\boldsymbol{k},i}^{ml}A_{\boldsymbol{k},j}^{lm} - A_{\boldsymbol{k},j}^{ml}A_{\boldsymbol{k},i}^{lm})\frac{f(\epsilon_{\boldsymbol{k}l})}{\epsilon_{\boldsymbol{k}l} - \epsilon_{\boldsymbol{k}m} - \hbar\omega}. \tag{3.12}$$

$\hbar\omega \ll \mu$ のときの，波数空間のゲージ場に由来する電気伝導度 σ_{ij}^{a} は

$$\sigma_{ij}^{\mathrm{a}} = \lim_{\omega\to 0}\frac{\langle J_i; J_j\rangle(\omega) - \langle J_i; J_j\rangle(0)}{i\omega} \tag{3.13}$$

で与えられる．よって，

$$\sigma_{ij}^{\mathrm{a}} = -\frac{e^2}{i\hbar}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{l\neq m}(A_{\boldsymbol{k},i}^{ml}A_{\boldsymbol{k},j}^{lm} - A_{\boldsymbol{k},j}^{ml}A_{\boldsymbol{k},i}^{lm})f(\epsilon_{\boldsymbol{k}l}). \tag{3.14}$$

そして，右辺最後の項は m に依存する部分はゲージ場のみであるから

$$\begin{aligned}
\sum_m\left(A_{\boldsymbol{k},i}^{ml}A_{\boldsymbol{k},j}^{lm} - A_{\boldsymbol{k},j}^{ml}A_{\boldsymbol{k},i}^{lm}\right) &= \sum_m\left(-\langle m,\boldsymbol{k}|\frac{\partial}{\partial k_i}|l,\boldsymbol{k}\rangle\langle l,\boldsymbol{k}|\frac{\partial}{\partial k_j}|m,\boldsymbol{k}\rangle + \langle m,\boldsymbol{k}|\frac{\partial}{\partial k_j}|l,\boldsymbol{k}\rangle\langle l,\boldsymbol{k}|\frac{\partial}{\partial k_i}|m,\boldsymbol{k}\rangle\right) \\
&= \sum_m\left[\left(\frac{\partial}{\partial k_j}\langle l,\boldsymbol{k}|\right)|m,\boldsymbol{k}\rangle\langle m,\boldsymbol{k}|\frac{\partial}{\partial k_i}|l,\boldsymbol{k}\rangle - \left(\frac{\partial}{\partial k_i}\langle l,\boldsymbol{k}|\right)|m,\boldsymbol{k}\rangle\langle m,\boldsymbol{k}|\frac{\partial}{\partial k_j}|l,\boldsymbol{k}\rangle\right] \\
&= \left(\frac{\partial}{\partial k_i}\langle l,\boldsymbol{k}|\right)\frac{\partial}{\partial k_j}|l,\boldsymbol{k}\rangle - \left(\frac{\partial}{\partial k_j}\langle l,\boldsymbol{k}|\right)\frac{\partial}{\partial k_i}|l,\boldsymbol{k}\rangle \\
&= -i\Omega_{l,ij}(\boldsymbol{k})
\end{aligned} \tag{3.15}$$

となり，Berry 曲率に等しい．ここで $\delta_{lm} = \langle\boldsymbol{k},l|\boldsymbol{k},m\rangle$ から $\langle\boldsymbol{k},l|\,\partial_i\,|\boldsymbol{k},m\rangle = -(\partial_i\langle\boldsymbol{k},l|)\,|\boldsymbol{k},m\rangle$ を用いた．また Berry 曲率は

$$\Omega_{l,ij}(\boldsymbol{k}) = \frac{\partial}{\partial k_i}A_{\boldsymbol{k},j}^{ll} - \frac{\partial}{\partial k_j}A_{\boldsymbol{k},i}^{ll} \tag{3.16}$$

$$= i\left[\left(\frac{\partial}{\partial k_i}\langle l,\boldsymbol{k}|\right)\frac{\partial}{\partial k_j}|l,\boldsymbol{k}\rangle - \left(\frac{\partial}{\partial k_j}\langle l,\boldsymbol{k}|\right)\frac{\partial}{\partial k_i}|l,\boldsymbol{k}\rangle\right] \tag{3.17}$$

で定義される．

以上から，

$$\sigma_{ij}^{\mathrm{a}} = \frac{e^2}{\hbar}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{l} f(\epsilon_{\boldsymbol{k}l})\Omega_{l,ij}(\boldsymbol{k}) \tag{3.18}$$

となり，Berry 曲率で記述されることが分かる．

4 縮退のある場合の波数空間のゲージ場と異常 Hall 伝導度，Berry 接続行列

前節までの議論は，一見すると一般的に見えるが，系に縮退がある場合には成り立たない．まず具体的に，準位 $n = a$ が k 重に縮退している場合を考える[1)]．このとき，

$$\epsilon_{a,s} = \epsilon_{a,s'}, \qquad s, s' = 1, 2, \cdots k \tag{4.1}$$

となる．ゆえに速度演算子の行列要素は

$$\langle \boldsymbol{k}, a, s| v_{\boldsymbol{k},j} |\boldsymbol{k}, a, s'\rangle = \left(\frac{1}{\hbar}\frac{\partial \epsilon_{\boldsymbol{k}l}}{\partial k_j}\right)\delta_{s,s'} \tag{4.2}$$

であることが分かる．$\epsilon_{a,s} = \epsilon_{a,s'}$ なので非対角成分が残らない．この場合の電流電流相関関数は

$$\langle J_i; J_j\rangle(\omega) = -e^2 \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{l\neq m} \left(\frac{\epsilon_{\boldsymbol{k}l} - \epsilon_{\boldsymbol{k}m}}{i\hbar}\right)^2 (A^{ml}_{\boldsymbol{k},i} A^{lm}_{\boldsymbol{k},j} - A^{ml}_{\boldsymbol{k},j} A^{lm}_{\boldsymbol{k},i}) \frac{f(\epsilon_{\boldsymbol{k}l})}{\epsilon_{\boldsymbol{k}l} - \epsilon_{\boldsymbol{k}m} - \hbar\omega} \tag{4.3}$$

と書ける．縮退がない場合の式と変わらない．ゆえに，Hall 伝導度は

$$\sigma^{\mathrm{a}}_{ij} = -\frac{e^2}{i\hbar} \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{l\neq m} (A^{ml}_{\boldsymbol{k},i} A^{lm}_{\boldsymbol{k},j} - A^{ml}_{\boldsymbol{k},j} A^{lm}_{\boldsymbol{k},i}) f(\epsilon_{\boldsymbol{k}l}) \tag{4.4}$$

となる．ここで

$$\sum_{m(\neq l)} |m, \boldsymbol{k}\rangle \langle m, \boldsymbol{k}| = 1 - \delta_{l,a} \sum_{s=1}^{k} |a, s, \boldsymbol{k}\rangle \langle a, s, \boldsymbol{k}| - (1 - \delta_{l,a}) |l, \boldsymbol{k}\rangle \langle l, \boldsymbol{k}| \tag{4.5}$$

なので，

$$\begin{aligned}
&\sum_{m(\neq l)} \left(A^{ml}_{\boldsymbol{k},i} A^{lm}_{\boldsymbol{k},j} - A^{ml}_{\boldsymbol{k},j} A^{lm}_{\boldsymbol{k},i}\right) \\
&= \sum_{m(\neq l)} \left(-\langle m, \boldsymbol{k}| \frac{\partial}{\partial k_i} |l, \boldsymbol{k}\rangle \langle l, \boldsymbol{k}| \frac{\partial}{\partial k_j} |m, \boldsymbol{k}\rangle + \langle m, \boldsymbol{k}| \frac{\partial}{\partial k_j} |l, \boldsymbol{k}\rangle \langle l, \boldsymbol{k}| \frac{\partial}{\partial k_i} |m, \boldsymbol{k}\rangle\right) \\
&= \sum_{m(\neq l)} \left[\left(\frac{\partial}{\partial k_j} \langle l, \boldsymbol{k}|\right) |m, \boldsymbol{k}\rangle \langle m, \boldsymbol{k}| \frac{\partial}{\partial k_i} |l, \boldsymbol{k}\rangle - \left(\frac{\partial}{\partial k_i} \langle l, \boldsymbol{k}|\right) |m, \boldsymbol{k}\rangle \langle m, \boldsymbol{k}| \frac{\partial}{\partial k_j} |l, \boldsymbol{k}\rangle\right] \\
&= \left(\frac{\partial}{\partial k_i} \langle l, \boldsymbol{k}|\right) \frac{\partial}{\partial k_j} |l, \boldsymbol{k}\rangle - \left(\frac{\partial}{\partial k_j} \langle l, \boldsymbol{k}|\right) \frac{\partial}{\partial k_i} |l, \boldsymbol{k}\rangle \\
&\quad - \delta_{l,a} \sum_{s'} \left[\left(\frac{\partial}{\partial k_j} \langle a, s, \boldsymbol{k}|\right) |a, s', \boldsymbol{k}\rangle \langle a, s'\boldsymbol{k}| \frac{\partial}{\partial k_i} |a, s, \boldsymbol{k}\rangle - \left(\frac{\partial}{\partial k_i} \langle a, s, \boldsymbol{k}|\right) |a, s', \boldsymbol{k}\rangle \langle a, s', \boldsymbol{k}| \frac{\partial}{\partial k_j} |a, s, \boldsymbol{k}\rangle\right] \\
&= -i\Omega_{l,ij}(\boldsymbol{k}) - \delta_{l,a} \sum_{s'} \left(A^{a,ss'}_{\boldsymbol{k},j} A^{a,s's}_{\boldsymbol{k},i} - A^{a,ss'}_{\boldsymbol{k},i} A^{a,s's}_{\boldsymbol{k},j}\right).
\end{aligned} \tag{4.6}$$

よって

$$\begin{aligned}
\sigma^{\mathrm{a}}_{ij} &= \frac{e^2}{\hbar} \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{l\neq a} f(\epsilon_{\boldsymbol{k}l}) \Omega_{l,ij}(\boldsymbol{k}) + \frac{e^2}{\hbar} \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{s} f(\epsilon_{\boldsymbol{k}a}) \left[\Omega_{a,s,ij}(\boldsymbol{k}) - i \sum_{s'} \left(A^{a,ss'}_{\boldsymbol{k},j} A^{a,s's}_{\boldsymbol{k},i} - A^{a,ss'}_{\boldsymbol{k},i} A^{a,s's}_{\boldsymbol{k},j}\right)\right] \\
&= \frac{e^2}{\hbar} \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{l\neq a} f(\epsilon_{\boldsymbol{k}l}) \Omega_{l,ij}(\boldsymbol{k}) + \frac{e^2}{\hbar} \sum_{\boldsymbol{k}} f(\epsilon_{\boldsymbol{k}a}) \mathrm{tr} \left[\partial_i A^a_{\boldsymbol{k},j} - \partial_j A^a_{\boldsymbol{k},i} + i[A^a_{\boldsymbol{k},i}, A^a_{\boldsymbol{k},j}]\right]
\end{aligned} \tag{4.7}$$

1) この計算は分子研の下出さんに教わった．

ここで

$$(A^{a}_{\boldsymbol{k},i})_{s,s'} = A^{a,ss'}_{\boldsymbol{k},i} \tag{4.8}$$

となる行列を導入した．

次に系全体が 2 重に縮退している場合を考える．縮退度を表すラベルを $s = 1, 2$ で示す．今の場合の Green 関数は

$$G_{\boldsymbol{k}}(z) = \sum_{l,s} \frac{|l, s, \boldsymbol{k}\rangle \langle l, s, \boldsymbol{k}|}{z - \epsilon_{\boldsymbol{k}l}} \tag{4.9}$$

で与えられ，速度演算子は

$$\langle \boldsymbol{k}, l, s| v_{\boldsymbol{k},j} |\boldsymbol{k}, m, s'\rangle = \left(\frac{1}{\hbar}\frac{\partial \epsilon_{\boldsymbol{k}l}}{\partial k_j}\right)\delta_{l,m}\delta_{s,s'} + \frac{\epsilon_{\boldsymbol{k}l} - \epsilon_{\boldsymbol{k}m}}{i\hbar} A^{ls,ms'}_{\boldsymbol{k},i}, \tag{4.10}$$

ただし波数空間のゲージ場 $A^{ls,ms'}_{\boldsymbol{k},i}$ は以下で与えられる．

$$A^{ls,ms'}_{\boldsymbol{k},i} = -i \langle \boldsymbol{k}, l, s| \frac{\partial}{\partial k_i} |\boldsymbol{k}, m, s'\rangle . \tag{4.11}$$

電流-電流相関関数は

$$\langle J_i; J_j\rangle(i\omega_\lambda) = -e^2 k_{\mathrm{B}} T \sum_n \sum_{\boldsymbol{k}} \mathrm{tr}\left[v_{\boldsymbol{k},i} G_{\boldsymbol{k}}(i\epsilon_n^+) v_{\boldsymbol{k},j} G_{\boldsymbol{k}}(i\epsilon_n)\right] \tag{4.12}$$

で与えられることは変わらず，tr $[\cdots]$ の計算は

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}\left[v_{\boldsymbol{k},i} G_{\boldsymbol{k}}(i\epsilon_n^+) v_{\boldsymbol{k},j} G_{\boldsymbol{k}}(i\epsilon_n)\right] &= \sum_{l,s}\left(\frac{1}{\hbar}\frac{\partial \epsilon_{\boldsymbol{k}l}}{\partial k_i}\right)\left(\frac{1}{\hbar}\frac{\partial \epsilon_{\boldsymbol{k}l}}{\partial k_j}\right)\frac{1}{(i\epsilon_n^+ - \epsilon_{\boldsymbol{k}l})(i\epsilon_n - \epsilon_{\boldsymbol{k}l})} \\ &\quad + \sum_{l\neq m}\sum_{s,s'} \frac{\epsilon_{\boldsymbol{k}m} - \epsilon_{\boldsymbol{k}l}}{i\hbar} A^{ms',ls}_{\boldsymbol{k},i} \frac{\epsilon_{\boldsymbol{k}l} - \epsilon_{\boldsymbol{k}m}}{i\hbar} A^{ls,ms'}_{\boldsymbol{k},j} \frac{1}{(i\epsilon_n^+ - \epsilon_{\boldsymbol{k}l})(i\epsilon_n - \epsilon_{\boldsymbol{k}m})}.\end{aligned} \tag{4.13}$$

同様に波数空間のゲージ場に比例する項のみに着目して，電気伝導度を計算すると，

$$\sigma^{\mathrm{a}}_{ij} = -\frac{e^2}{i\hbar}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{l\neq m}\sum_{s,s'}\left(A^{ms',ls}_{\boldsymbol{k},i} A^{ls,ms'}_{\boldsymbol{k},j} - A^{ms',ls}_{\boldsymbol{k},j} A^{ls,ms'}_{\boldsymbol{k},i}\right) f(\epsilon_{\boldsymbol{k}l}) \tag{4.14}$$

と書ける．

$$\begin{aligned}&\sum_{m(\neq l),s'}\left(A^{ms',ls}_{\boldsymbol{k},i} A^{ls,ms'}_{\boldsymbol{k},j} - A^{ms',ls}_{\boldsymbol{k},j} A^{ls,ms'}_{\boldsymbol{k},i}\right) \\ &= \sum_{m(\neq l),s'}\left(-\langle m, s', \boldsymbol{k}| \frac{\partial}{\partial k_i} |l, s, \boldsymbol{k}\rangle \langle l, s, \boldsymbol{k}| \frac{\partial}{\partial k_j} |m, s', \boldsymbol{k}\rangle + \langle m, s', \boldsymbol{k}| \frac{\partial}{\partial k_j} |l, s, \boldsymbol{k}\rangle \langle l, s, \boldsymbol{k}| \frac{\partial}{\partial k_i} |m, s', \boldsymbol{k}\rangle\right) \\ &= \sum_{m(\neq l),s'}\left[\left(\frac{\partial}{\partial k_j}\langle l, s, \boldsymbol{k}|\right)|m, s', \boldsymbol{k}\rangle \langle m, s', \boldsymbol{k}| \frac{\partial}{\partial k_i} |l, s, \boldsymbol{k}\rangle - \left(\frac{\partial}{\partial k_i}\langle l, \boldsymbol{k}|\right)|m, s', \boldsymbol{k}\rangle \langle m, s', \boldsymbol{k}| \frac{\partial}{\partial k_j} |l, s, \boldsymbol{k}\rangle\right]\end{aligned} \tag{4.15}$$

となるが，ここで，完全系の条件

$$\sum_n \sum_s |n, s, \boldsymbol{k}\rangle \langle n, s, \boldsymbol{k}| = 1 \tag{4.16}$$

から

$$\sum_{m(\neq l)} \sum_s |n, s, \boldsymbol{k}\rangle \langle n, s, \boldsymbol{k}| = 1 - \sum_s |l, s, \boldsymbol{k}\rangle \langle l, s, \boldsymbol{k}| \tag{4.17}$$

となることを用いると，

$$\begin{aligned}
\sum_{m(\neq l),s'}\left(A^{ms',ls}_{\boldsymbol{k},i}A^{ls,ms'}_{\boldsymbol{k},j}-A^{ms',ls}_{\boldsymbol{k},j}A^{ls,ms'}_{\boldsymbol{k},i}\right) &= \left(\frac{\partial}{\partial k_i}\langle l,s,\boldsymbol{k}|\right)\frac{\partial}{\partial k_j}|l,s,\boldsymbol{k}\rangle-\left(\frac{\partial}{\partial k_j}\langle l,s,\boldsymbol{k}|\right)\frac{\partial}{\partial k_i}|l,s,\boldsymbol{k}\rangle \\
&\quad -\sum_{s'}\left[\left(\frac{\partial}{\partial k_j}\langle l,s,\boldsymbol{k}|\right)|l,s',\boldsymbol{k}\rangle\langle l,s',\boldsymbol{k}|\frac{\partial}{\partial k_i}|l,s,\boldsymbol{k}\rangle\right. \\
&\qquad \left.-\left(\frac{\partial}{\partial k_i}\langle l,s,\boldsymbol{k}|\right)|l,s',\boldsymbol{k}\rangle\langle l,s',\boldsymbol{k}|\frac{\partial}{\partial k_j}|l,s,\boldsymbol{k}\rangle\right] \\
&= -i\left(\frac{\partial A^{ls,ls}_{\boldsymbol{k},j}}{\partial k_i}-\frac{\partial A^{ls,ls}_{\boldsymbol{k},i}}{\partial k_j}\right)-\sum_{s'}\left[A^{ls',ls}_{\boldsymbol{k},i},A^{ls,ls'}_{\boldsymbol{k},j}\right]. \qquad (4.18)
\end{aligned}$$

よって，

$$\sigma^{\mathrm{a}}_{ij}=\frac{e^2}{\hbar}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{l}f(\epsilon_{l\boldsymbol{k}})\mathrm{tr}\left[\left(\frac{\partial A^{l}_{\boldsymbol{k},j}}{\partial k_i}-\frac{\partial A^{l}_{\boldsymbol{k},i}}{\partial k_j}\right)-i\left[A^{l}_{\boldsymbol{k},i},A^{l}_{\boldsymbol{k},j}\right]\right] \qquad (4.19)$$

と書ける．ただし

$$(A^{l}_{\boldsymbol{k},i})_{s,s'}=A^{ls,l,s'}_{\boldsymbol{k},i} \qquad (4.20)$$

で与えられる行列を導入した．

参考文献

[1] 野村健太郎 著『トポロジカル絶縁体・超伝導体』丸善出版, 2016.