反転対称性が破れている系での異常 Hall 効果

東大理，藤本純治 †

1 はじめに

前回の計算で，一般のハミルトニアンを対角化すると，それに伴うユニタリ行列から速度演算子にゲージ場が現れ，それが巡りめぐって Hall 伝導度に Berry 曲率として寄与することを見た．今回は具体的にスピン軌道相互作用のある強束縛模型を書き換えて，どのような対応があるのかを見ることにする．

2 反転対称性の破れたスピン軌道相互作用のある単バンド系

以下で表される反転対称性の破れた系でスピン軌道相互作用のある強束縛模型を考える．

$$\mathcal{H} = -t\sum_{\langle i,j\rangle}(c_i^\dagger c_j + \text{h.c.}) + \sum_{i,\alpha=x,y,z}\frac{\lambda_i^\alpha}{ta^2}J_{\text{s},i}^\alpha - \sum_i c_i^\dagger \boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{\sigma}c_i, \tag{2.1}$$

ここで，$c_i = {}^{\text{t}}(c_{i,\uparrow}, c_{i,\downarrow})$ は i サイトの電子の消滅 (生成) 演算子で，t は最近接の飛び移り積分で，和の $\langle i,j\rangle$ は最近接のみでの和を意味する．λ_i^α $(i,\alpha = x,y,z)$ はスピン軌道相互作用の強さを表す．ここで $J_{\text{s},i}^\alpha$ は，いわゆるスピン流で，

$$J_{\text{s},i}^\alpha = -\frac{ita^2}{2a}\sum_j\left(c_j^\dagger\sigma^\alpha c_{j+e_i} - \text{h.c.}\right) \tag{2.2}$$

で $j+e_i$ はシンボリックに i 方向に 1 つ先のサイトを表している．

ここでは簡単のため立方格子を考える．最近接サイトへのベクトルを $\pm\hat{e}_x, \pm\hat{e}_y, \pm\hat{e}_z$ とすると，

$$\begin{aligned}\mathcal{H} = &-t\sum_i\sum_\mu\left(c^\dagger(\boldsymbol{R}_i)c(\boldsymbol{R}_i+\delta_\mu) + \text{h.c.}\right)\\ &-\frac{i}{2a}\sum_{i,\alpha=x,y,z}\lambda_i^\alpha\sum_j\left(c^\dagger(\boldsymbol{R}_j)c\sigma^\alpha(\boldsymbol{R}_j+\hat{e}_i) - \text{h.c.}\right)\\ &-\sum_i c^\dagger(\boldsymbol{R}_i)\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{\sigma}c(\boldsymbol{R}_i)\end{aligned} \tag{2.3}$$

と書き換えられる．これを

$$c(\boldsymbol{R}_i) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{k}}c_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_i}, \qquad c^\dagger(\boldsymbol{R}_i) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{k}}c_{\boldsymbol{k}}^\dagger e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_i} \tag{2.4}$$

という Fourier 変換すると，

$$\mathcal{H} = \sum_{\boldsymbol{k}}c_{\boldsymbol{k}}^\dagger H_{\boldsymbol{k}}c_{\boldsymbol{k}} \tag{2.5}$$

と波数に対角的になった表式になる．具体的には

$$H_{\boldsymbol{k}} = T_{\boldsymbol{k}} + \boldsymbol{g}_{\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{2.6}$$

† fujimoto.junji@gmail.com

と書くと，

$$T_{\boldsymbol{k}} = -2t \sum_i \cos k_i a, \tag{2.7}$$

$$g^\alpha_{\boldsymbol{k}} = \sum_i \frac{\lambda^\alpha_i}{a} \sin k_i a - M^\alpha \tag{2.8}$$

となる．ハミルトニアン $H_{\boldsymbol{k}}$ はスピンについて対角的ではないので，

$$U^\dagger_{\boldsymbol{k}} H_{\boldsymbol{k}} U_{\boldsymbol{k}} = E_{\boldsymbol{k}} \tag{2.9}$$

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

$$U_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} |\boldsymbol{k}, +\rangle & |\boldsymbol{k}, -\rangle \end{pmatrix}, \qquad U^\dagger_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} \langle \boldsymbol{k}, +| \\ \langle \boldsymbol{k}, -| \end{pmatrix} \tag{2.10}$$

と表され，ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \sum_{\boldsymbol{k}} \bar{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}} E_{\boldsymbol{k}} \bar{c}_{\boldsymbol{k}} \tag{2.11}$$

$$= \sum_{\boldsymbol{k}, l} \epsilon_{\boldsymbol{k}l} \bar{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}l} \bar{c}_{\boldsymbol{k}l} \tag{2.12}$$

と対角的になる．

具体的に $|\boldsymbol{k}, s\rangle$ を求めることを考える．$U^\dagger_{\boldsymbol{k}} \boldsymbol{g}_{\boldsymbol{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma} U_{\boldsymbol{k}} = |\boldsymbol{g}_{\boldsymbol{k}}| \sigma^z$ となればよいので，

$$\boldsymbol{g}_{\boldsymbol{k}} = |\boldsymbol{g}_{\boldsymbol{k}}| \left(\sin\theta_{\boldsymbol{k}} \cos\phi_{\boldsymbol{k}}, \sin\theta_{\boldsymbol{k}} \sin\phi_{\boldsymbol{k}}, \cos\theta_{\boldsymbol{k}} \right) \tag{2.13}$$

という極座標表示を導入すると

$$U_{\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{\omega}_{\boldsymbol{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \tag{2.14}$$

$$\boldsymbol{\omega}_{\boldsymbol{k}} = \left(\sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \cos\phi_{\boldsymbol{k}}, \sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \sin\phi_{\boldsymbol{k}}, \cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \right) \tag{2.15}$$

と書ける．これから

$$U_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} & \sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} e^{-i\phi_{\boldsymbol{k}}} \\ \sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} e^{i\phi_{\boldsymbol{k}}} & -\cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \end{pmatrix} \tag{2.16}$$

から

$$|\boldsymbol{k}, +\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \\ \sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} e^{i\phi_{\boldsymbol{k}}} \end{pmatrix}, \qquad |\boldsymbol{k}, -\rangle = \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} e^{-i\phi_{\boldsymbol{k}}} \\ -\cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \end{pmatrix}, \tag{2.17}$$

$$\langle \boldsymbol{k}, +| = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} & \sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} e^{-i\phi_{\boldsymbol{k}}} \end{pmatrix}, \qquad \langle \boldsymbol{k}, -| = \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} e^{i\phi_{\boldsymbol{k}}} & -\cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \end{pmatrix}. \tag{2.18}$$

完全系は

$$\begin{aligned} \sum_s |\boldsymbol{k}, s\rangle \langle \boldsymbol{k}, s| &= \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \\ \sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} e^{i\phi_{\boldsymbol{k}}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} & \sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} e^{-i\phi_{\boldsymbol{k}}} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} e^{-i\phi_{\boldsymbol{k}}} \\ -\cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} e^{i\phi_{\boldsymbol{k}}} & -\cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos^2\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} & \sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} e^{-i\phi_{\boldsymbol{k}}} \\ \sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} e^{i\phi_{\boldsymbol{k}}} & \sin^2\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \end{pmatrix} \\ &\quad + \begin{pmatrix} \sin^2\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} & -\sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} e^{-i\phi_{\boldsymbol{k}}} \\ -\sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} e^{i\phi_{\boldsymbol{k}}} & \cos^2\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{2.19}$$

となるが，

$$|\boldsymbol{k},+\rangle\langle\boldsymbol{k},+| = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+\cos\theta_{\boldsymbol{k}}) & \frac{1}{2}\sin\theta_{\boldsymbol{k}}e^{-i\phi_{\boldsymbol{k}}} \\ \frac{1}{2}\sin\theta_{\boldsymbol{k}}e^{i\phi_{\boldsymbol{k}}} & \frac{1}{2}(1-\cos\theta_{\boldsymbol{k}}) \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\sigma_0 + \hat{g}_{\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{\sigma}) \tag{2.20}$$

であり，

$$|\boldsymbol{k},-\rangle\langle\boldsymbol{k},-| = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1-\cos\theta_{\boldsymbol{k}}) & -\frac{1}{2}\sin\theta_{\boldsymbol{k}}e^{-i\phi_{\boldsymbol{k}}} \\ -\frac{1}{2}\sin\theta_{\boldsymbol{k}}e^{i\phi_{\boldsymbol{k}}} & \frac{1}{2}(1+\cos\theta_{\boldsymbol{k}}) \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\sigma_0 - \hat{g}_{\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{\sigma}) \tag{2.21}$$

と書くこともできる．ここで

$$\hat{g}_{\boldsymbol{k}} = \frac{\boldsymbol{g}_{\boldsymbol{k}}}{|\boldsymbol{g}_{\boldsymbol{k}}|} \tag{2.22}$$

である．

また，固有状態の演算子は

$$\bar{c}_{\boldsymbol{k}} = U^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}c_{\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{\omega}_{\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{\sigma}c_{\boldsymbol{k}} \tag{2.23}$$

から

$$\bar{c}_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2}c_{\boldsymbol{k}\uparrow} + \sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2}e^{-i\phi_{\boldsymbol{k}}}c_{\boldsymbol{k}\downarrow} \\ \sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2}e^{i\phi_{\boldsymbol{k}}}c_{\boldsymbol{k}\uparrow} - \cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2}c_{\boldsymbol{k}\downarrow} \end{pmatrix}. \tag{2.24}$$

電流演算子は，一般に

$$J_i = \sum_{\boldsymbol{k}} \tilde{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} \left(\frac{1}{\hbar}\frac{\partial H_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}\right) \tilde{c}_{\boldsymbol{k}} \tag{2.25}$$

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，

$$J_i = \sum_{\boldsymbol{k}} \bar{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} U^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} \left(\frac{1}{\hbar}\frac{\partial H_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}\right) U_{\boldsymbol{k}}\bar{c}_{\boldsymbol{k}} \tag{2.26}$$

となるが，式 (2.9) を逆に解いて $H_{\boldsymbol{k}} = U_{\boldsymbol{k}}E_{\boldsymbol{k}}U^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}$ であるので，

$$\begin{aligned} U^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\frac{\partial H_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}U_{\boldsymbol{k}} &= U^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\frac{\partial(U_{\boldsymbol{k}}E_{\boldsymbol{k}}U^{\dagger}_{\boldsymbol{k}})}{\partial k_i}U_{\boldsymbol{k}} \\ &= \frac{\partial E_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} + U^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\frac{\partial U_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}E_{\boldsymbol{k}} + E_{\boldsymbol{k}}\frac{\partial U^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}U_{\boldsymbol{k}} \end{aligned} \tag{2.27}$$

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

$$\begin{aligned} 0 &= U^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\frac{\partial U_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} + \frac{\partial U^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}U_{\boldsymbol{k}} \\ \therefore \frac{\partial U^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}U_{\boldsymbol{k}} &= -U^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\frac{\partial U_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} \end{aligned} \tag{2.28}$$

であり，

$$U^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\frac{\partial U_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} = i\mathcal{A}_{\boldsymbol{k},i} \tag{2.29}$$

として波数空間のゲージ場を導入すると，具体的に式 (2.14) を代入すると，

$$\mathcal{A}_{\boldsymbol{k},i} = -i(\boldsymbol{\omega}_{\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{\sigma})\left(\frac{\partial\boldsymbol{\omega}_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}\cdot\boldsymbol{\sigma}\right) = -i\boldsymbol{\omega}_{\boldsymbol{k}}\cdot\frac{\partial\boldsymbol{\omega}_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} + \left(\boldsymbol{\omega}_{\boldsymbol{k}}\times\frac{\partial\boldsymbol{\omega}_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}\right)\cdot\boldsymbol{\sigma} \equiv \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k},i}\cdot\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}, \tag{2.30}$$

ただし

$$\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k},i} = 2\boldsymbol{\omega}_{\boldsymbol{k}} \times \frac{\partial \boldsymbol{\omega}_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} \tag{2.31}$$

である．もう少し具体的に書くと，

$$\mathcal{A}_{\boldsymbol{k},i} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} A^z_{\boldsymbol{k},i} & A^x_{\boldsymbol{k},i} - iA^y_{\boldsymbol{k},i} \\ A^x_{\boldsymbol{k},i} + iA^y_{\boldsymbol{k},i} & -A^z_{\boldsymbol{k},i} \end{pmatrix} \tag{2.32}$$

$$J_i = \sum_{\boldsymbol{k}} \bar{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}} \left(\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} + \frac{i}{\hbar}[\mathcal{A}_{\boldsymbol{k},i}, E_{\boldsymbol{k}}]_- \right) \bar{c}_{\boldsymbol{k}} \tag{2.33}$$

$$= \sum_{\boldsymbol{k},l} \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \epsilon_{\boldsymbol{k}l}}{\partial k_i} \bar{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}l}\bar{c}_{\boldsymbol{k}l} + \sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{l\neq m} \frac{\epsilon_{\boldsymbol{k}l} - \epsilon_{\boldsymbol{k}m}}{i\hbar} \mathcal{A}^{lm}_{\boldsymbol{k},i} \bar{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}l}\bar{c}_{\boldsymbol{k}m}. \tag{2.34}$$

式 (2.10) を用いると，

$$\mathcal{A}^{lm}_{\boldsymbol{k},i} = -i \langle \boldsymbol{k}, l| \frac{\partial}{\partial k_i} |\boldsymbol{k}, m\rangle \tag{2.35}$$

であることが分かる．具体的に計算すると，

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}^{++}_{\boldsymbol{k},i} &= -i \langle \boldsymbol{k}, +| \frac{\partial}{\partial k_i} |\boldsymbol{k}, +\rangle \\
&= -i \left(\cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \frac{\partial}{\partial k_i} \cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} + \sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} e^{-i\phi_{\boldsymbol{k}}} \frac{\partial}{\partial k_i} \sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} e^{i\phi_{\boldsymbol{k}}} \right) \\
&= \frac{\partial \phi_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} \sin^2\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \\
&= \frac{1}{2}\frac{\partial \phi_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}(1 - \cos\theta_{\boldsymbol{k}}), \qquad (2.36) \\
\mathcal{A}^{--}_{\boldsymbol{k},i} &= -i \langle \boldsymbol{k}, -| \frac{\partial}{\partial k_i} |\boldsymbol{k}, -\rangle \\
&= -i \left(\sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} e^{i\phi_{\boldsymbol{k}}} \frac{\partial}{\partial k_i} \sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} e^{-i\phi_{\boldsymbol{k}}} + \cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \frac{\partial}{\partial k_i} \cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \right) \\
&= -\frac{\partial \phi_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} \sin^2\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \\
&= -\frac{1}{2}\frac{\partial \phi_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}(1 - \cos\theta_{\boldsymbol{k}}), \qquad (2.37) \\
\mathcal{A}^{+-}_{\boldsymbol{k},i} &= -i \left(\cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \frac{\partial}{\partial k_i} \sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} e^{-i\phi_{\boldsymbol{k}}} - \sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} e^{-i\phi_{\boldsymbol{k}}} \frac{\partial}{\partial k_i} \cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \right) \\
&= \frac{1}{2} e^{-i\phi_{\boldsymbol{k}}} \left(-i\frac{\partial \theta_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} - \sin\theta_{\boldsymbol{k}} \frac{\partial \phi_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} \right) \qquad (2.38) \\
&= \frac{1}{2}\left[-\frac{\partial \theta_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}\sin\phi_{\boldsymbol{k}} - \sin\theta_{\boldsymbol{k}}\frac{\partial \phi_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}\cos\phi_{\boldsymbol{k}} - i\left(\frac{\partial \theta_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}\cos\phi_{\boldsymbol{k}} - \sin\theta_{\boldsymbol{k}}\frac{\partial \phi_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}\sin\phi_{\boldsymbol{k}} \right) \right], \qquad (2.39) \\
\mathcal{A}^{-+}_{\boldsymbol{k},i} &= -i \left(\sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} e^{i\phi_{\boldsymbol{k}}} \frac{\partial}{\partial k_i} \cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} - \cos\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} \frac{\partial}{\partial k_i} \sin\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}}{2} e^{i\phi_{\boldsymbol{k}}} \right) \\
&= \frac{1}{2} e^{i\phi_{\boldsymbol{k}}} \left(i\frac{\partial \theta_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} - \sin\theta_{\boldsymbol{k}} \frac{\partial \phi_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} \right) \qquad (2.40) \\
&= \frac{1}{2}\left[-\frac{\partial \theta_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}\sin\phi_{\boldsymbol{k}} - \sin\theta_{\boldsymbol{k}}\frac{\partial \phi_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}\cos\phi_{\boldsymbol{k}} + i\left(\frac{\partial \theta_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}\cos\phi_{\boldsymbol{k}} - \sin\theta_{\boldsymbol{k}}\frac{\partial \phi_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}\sin\phi_{\boldsymbol{k}} \right) \right] \qquad (2.41)
\end{aligned}$$

となる．以上から

$$A^x_{\boldsymbol{k},i} = -\frac{\partial\theta_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}\sin\phi_{\boldsymbol{k}} - \sin\theta_{\boldsymbol{k}}\frac{\partial\phi_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}\cos\phi_{\boldsymbol{k}}, \tag{2.42}$$

$$A^y_{\boldsymbol{k},i} = \frac{\partial\theta_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}\cos\phi_{\boldsymbol{k}} - \sin\theta_{\boldsymbol{k}}\frac{\partial\phi_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}\sin\phi_{\boldsymbol{k}}, \tag{2.43}$$

$$A^z_{\boldsymbol{k},i} = \frac{\partial\phi_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i}(1-\cos\theta_{\boldsymbol{k}}) \tag{2.44}$$

が得られる．

Green 関数は，

$$G_{\boldsymbol{k}}(z) = (z - H_{\boldsymbol{k}})^{-1} \tag{2.45}$$

で与えられるが，ユニタリ変換を施すと，

$$\begin{aligned}\{G_{\boldsymbol{k}}(z)\}^{-1} &= U_{\boldsymbol{k}}(z - U^\dagger_{\boldsymbol{k}}H_{\boldsymbol{k}}U_{\boldsymbol{k}})U^\dagger_{\boldsymbol{k}} \\ &= U_{\boldsymbol{k}}(z - E_{\boldsymbol{k}})U^\dagger_{\boldsymbol{k}}\end{aligned} \tag{2.46}$$

となることから，式 (2.10) を用いると

$$G_{\boldsymbol{k}}(z) = \sum_l \frac{|\boldsymbol{k},l\rangle\langle\boldsymbol{k},l|}{z-\epsilon_{\boldsymbol{k}l}} \tag{2.47}$$

が得られる．

3 Hall 伝導度と Berry 曲率

電流-電流相関関数

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

が以下のように計算される．

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

ただし

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

である．ここで，Green 関数の表式 (2.47) 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，

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

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，

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

以下では波数空間のゲージ場を含む項のみを考察する．

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

とすると，

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

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，

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

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，

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

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，

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

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

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

で与えられる．よって，

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

いま考えている模型では $l \neq m$ を満たす (l,m) は $(+,-)$ と $(-,+)$ のみであるから，式 (2.32) を用いると

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}^{-+}_{\boldsymbol{k},i}\mathcal{A}^{+-}_{\boldsymbol{k},j} - \mathcal{A}^{-+}_{\boldsymbol{k},j}\mathcal{A}^{+-}_{\boldsymbol{k},i} &= \left(A^x_{\boldsymbol{k},i} + iA^y_{\boldsymbol{k},i}\right)\left(A^x_{\boldsymbol{k},j} - iA^y_{\boldsymbol{k},j}\right) - \left(A^x_{\boldsymbol{k},j} + iA^y_{\boldsymbol{k},j}\right)\left(A^x_{\boldsymbol{k},i} - iA^y_{\boldsymbol{k},i}\right)\\
&= -2i\left(A^x_{\boldsymbol{k},i}A^y_{\boldsymbol{k},j} - A^x_{\boldsymbol{k},j}A^y_{\boldsymbol{k},i}\right)\\
&= -2i\hat{z}\cdot\left(\boldsymbol{A}^\perp_{\boldsymbol{k},i}\times\boldsymbol{A}^\perp_{\boldsymbol{k},j}\right)
\end{aligned} \tag{3.15}$$

ここで回転行列 $\mathcal{R}_{\boldsymbol{k}}$ を

$$U^\dagger_{\boldsymbol{k}}\hat{g}\cdot\boldsymbol{\sigma}U_{\boldsymbol{k}} = \mathcal{R}_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{\sigma} \tag{3.16}$$

で導入すると，$\mathcal{R}_{\boldsymbol{k}}\hat{z} = \hat{g}_{\boldsymbol{k}}$ であり，$\mathcal{R}_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{A}^{\perp}_{\boldsymbol{k},i} \times \boldsymbol{A}^{\perp}_{\boldsymbol{k},j}) = \partial_i \hat{g}_{\boldsymbol{k}} \times \partial_j \hat{g}_{\boldsymbol{k}}$ なので

$$\begin{aligned} \hat{z} \cdot \left(\boldsymbol{A}^{\perp}_{\boldsymbol{k},i} \times \boldsymbol{A}^{\perp}_{\boldsymbol{k},j}\right) &= (\mathcal{R}_{\boldsymbol{k}}\hat{z}) \cdot \left\{\mathcal{R}_{\boldsymbol{k}}\left(\boldsymbol{A}^{\perp}_{\boldsymbol{k},i} \times \boldsymbol{A}^{\perp}_{\boldsymbol{k},j}\right)\right\} \\ &= \hat{g} \cdot \left(\frac{\partial \hat{g}_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} \times \frac{\partial \hat{g}_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_j}\right) \end{aligned} \tag{3.17}$$

を得る．

ところで

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial k_i} U_{\boldsymbol{k}} \bar{c}_{\boldsymbol{k}} &= U_{\boldsymbol{k}} \left(\frac{\partial}{\partial k_i} + U^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} \frac{\partial}{\partial k_i} U_{\boldsymbol{k}}\right) \bar{c}_{\boldsymbol{k}} \\ &= U_{\boldsymbol{k}} \left(\frac{\partial}{\partial k_i} + i\mathcal{A}_{\boldsymbol{k},i}\right) \bar{c}_{\boldsymbol{k}} \end{aligned} \tag{3.18}$$

なので，波数空間のゲージ場 $\mathcal{A}_{\boldsymbol{k},i}$ に対する場の強さは

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\boldsymbol{k},ij} &= -i\left[\left(\frac{\partial}{\partial k_i} + i\mathcal{A}_{\boldsymbol{k},i}\right), \left(\frac{\partial}{\partial k_j} + i\mathcal{A}_{\boldsymbol{k},j}\right)\right] \\ &= \frac{\partial \mathcal{A}_{\boldsymbol{k},j}}{\partial k_i} - \frac{\partial \mathcal{A}_{\boldsymbol{k},i}}{\partial k_j} - i\left[\mathcal{A}_{\boldsymbol{k},i}, \mathcal{A}_{\boldsymbol{k},j}\right] \end{aligned} \tag{3.19}$$

となり，$\mathcal{F}_{\boldsymbol{k},ij} = F^{\alpha}_{\boldsymbol{k},ij}\sigma^{\alpha}/2$ とパウリ行列で展開すると

$$F^{\alpha}_{\boldsymbol{k},ij} = \frac{\partial A^{\alpha}_{\boldsymbol{k},j}}{\partial k_i} - \frac{\partial A^{\alpha}_{\boldsymbol{k},i}}{\partial k_j} - \left(\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k},i} \times \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k},j}\right)^{\alpha} \tag{3.20}$$

となる．いま対角化したあとの基底で議論しているので z 方向のみが特別な意味を持ち，x, y 方向はゲージの自由度として残っている．$\alpha = z$ とすると，

$$\frac{\partial A^{z}_{\boldsymbol{k},j}}{\partial k_i} - \frac{\partial A^{z}_{\boldsymbol{k},i}}{\partial k_j} = \hat{g}_{\boldsymbol{k}} \cdot \left(\frac{\partial \hat{g}_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} \times \frac{\partial \hat{g}_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_j}\right) \tag{3.21}$$

から

$$F^{z}_{\boldsymbol{k},ij} = 0 \tag{3.22}$$

となる．つまり SU(2) ゲージ場の強さはゼロである．しかし先に $|\boldsymbol{k}, \pm\rangle$ の状態に制限した U(1) のゲージ場の強さは

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^{++}_{\boldsymbol{k},ij} &= \frac{\partial A^{z}_{\boldsymbol{k},j}}{\partial k_i} - \frac{\partial A^{z}_{\boldsymbol{k},i}}{\partial k_j} \\ &= \hat{g}_{\boldsymbol{k}} \cdot \left(\frac{\partial \hat{g}_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} \times \frac{\partial \hat{g}_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_j}\right) \end{aligned} \tag{3.23}$$

であり，

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^{--}_{\boldsymbol{k},ij} &= -\left(\frac{\partial A^{z}_{\boldsymbol{k},j}}{\partial k_i} - \frac{\partial A^{z}_{\boldsymbol{k},i}}{\partial k_j}\right) \\ &= -\hat{g}_{\boldsymbol{k}} \cdot \left(\frac{\partial \hat{g}_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_i} \times \frac{\partial \hat{g}_{\boldsymbol{k}}}{\partial k_j}\right) \end{aligned} \tag{3.24}$$

であり，これは U(1) Berry 曲率に等しく，異常 Hall 伝導度を決める量となっている．すなわち，「実際に電子が感じる場の強さは，バンド分解した場の強さ」ということになる．