

半導体 第 13 回

勝本信吾
東京大学物性研究所

2013 年 7 月 17 日

3 整数量子ホール効果

IQHE の発見直後、「なぜ量子化が生じているのか」、「なぜこれほど正確な値が得られるのか」という 2 つの疑問に答えようということに、多くの理論的実験的努力が払われた。その結果、まず現れたのが、これまで述べてきた局在の議論を土台とした説明である。更にそこへ、トポロジカル不変量という革新的なアイデアが生まれ、IQHE については一通りの決着がついたかに思われた。

ところが、そこへ現れたのが、すでに述べてきた量子ポイントコンタクトの実験から始まる Landauer 公式に基づく電気伝導の理論の発達である。理論構築の第一人者であった Büttiker が提唱し始めたのが端状態による IQHE の説明である。これは、mm~cm もの大きな試料を測定しているにもかかわらず、電流は試料の端から磁気長程度従って数十 nm 程度の領域に存在する 1 次元的な状態によって運ばれているというものである。一見大変驚くべきことであるようにも思われるし、また一部の人には、常に無限系を考え、端の影響を排除する努力をしている物性物理学の精神にも反するようにも感じられた。しかし、物性物理学では van Leeuwen の定理 (あるいは Bohr の定理) として古典電子系で軌道磁性が消滅してしまうということの証明に端状態が使われ、試料の端の効果が場合によっては消しようになく、全体の性質に影響を与えることが明らかにされている。Landau の軌道磁性の量子論ではこれが消える。しかし皮肉なことに、Landau 量子化が顕著になる強力な磁場では場合によってはバルクの方が消えてしまい、端の効果のみになる、というわけである。しかも、この「端状態描像」では量子化と正確さの両方を同時に説明できる。

両者の見方は一見非常に異なっており、どちらが現実に近いのか、論争に近い状況にもなった。現在では、実験条件によってどちらの描像が良く成立するかは変化すると考える人が多いと思う。しかし、現在でも完全にすっきり、とはいかない問題でもある。

3.1 端のない試料

IQHE 発見直後において、「なぜ正確な測定結果が得られるのか」という疑問にいち早く答えた理論は、奇しくも「端のない」試料における思考実験であった。もちろん、端状態を意識したものではない。Laughlin が考えたのは、図 13.1(a) のように 2DEG をぐるりと半径 R の円筒状に丸め、円筒の端に円状の電極をつける、という試料である。磁場は円筒の芯から外部に向かって出ており、2DEG に垂直に印加されている。図のように x, y 軸を取ると、電流は x 方向に流れ、 y 方向は閉じてしまっているため、「端」が存在しない。更に、円筒の中心に細長いソレノイドを通し、電流を流すことでこの中に磁束 Φ を通す。この磁束は直接 2DEG に触れることはないが、2DEG 上、円筒を一周する軌道に対しては AB 位相を与える。垂直磁場、およびソレノイド磁場を与えるベクトルポテンシャルは、ランダウ・ゲージを用いて、

$$\mathbf{A} = (0, Bx), \quad A_\Phi = \left(0, -\frac{\Phi}{2\pi R}\right) \quad (13.1)$$

と書く。この場合、波動関数系として、式 (??) のように y 方向に伸び、 x 方向はサイクロトロン半径程度に局在したものが考え易い。

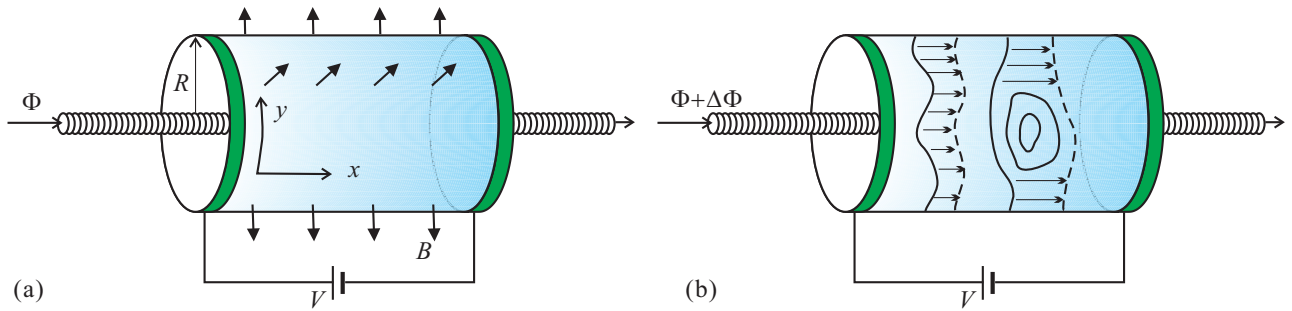


図 13.1 (a) Laughlin の思考実験で使用された「丸められた」2次元系．2DEG は半径 R の円筒状に丸められ，2DEG への磁場 B は放射状になって垂直に印加されている．これに，AB 位相を与えるための無限に細長いソレノイドが円筒中心を通っている．電場は円筒長手方向 (x 方向) にかける．(b) ソレノイド中の磁束を Φ から $\Delta\Phi$ だけ増加させたときの波動関数の変化を模式的に描いたもの．

磁束 Φ を $\Delta\Phi$ だけ増加させたとする (図??(b)) と，波動関数は

$$\psi(\mathbf{r}) \longrightarrow \psi(\mathbf{r}) \exp\left(i\frac{e\chi(\mathbf{r})}{\hbar}\right), \quad \chi(\mathbf{r}) = \frac{\Delta\Phi}{2\pi R}y \quad (13.2)$$

だけの位相変化を生じる．

Case I: ψ が y 方向に十分広がり円筒を 1 周している場合． ψ の空間的 1 価性より，磁束が Φ の時

$$\psi(x, y + 2\pi R) = \psi(x, y) \quad (13.3)$$

である．これは，結局 y 方向の波動関数変調 (k) に量子化条件を与え，これより x 位置が量子化する． $\Phi + \Delta\Phi$ になると

$$\psi(x, y + 2\pi R)e^{ie\chi(x, y + 2\pi R)/\hbar} = \psi(x, y)e^{ie\chi(x, y)/\hbar} \quad (13.4)$$

であるから，(13.2) より

$$\Delta\Phi = n\Phi_0 \quad (n : \text{integer}) \quad (13.5)$$

となり，磁束変化の量子化 (?) が生じてしまう．(連続的ゲージ変換ができない．)

Case II: 局在により，波動関数が円筒を 1 周していない場合．連続的ゲージ変換ができる．

特に Case I が問題となる．まず，ポテンシャル乱れのない系を考えると，すべて Case I である．

$$\mathbf{A} + \mathbf{A}_\Phi = \left(0, B\left(x - \frac{\Phi}{2\pi RB}\right)\right) \quad (13.6)$$

であるから，式 (??) の波動関数形からもわかるように， Φ が $\Delta\Phi$ だけ増加することは，波動関数が x 方向に $\Delta x = \Delta\Phi/2\pi RB$ だけ移動することを意味する．(13.5) の量子化条件では，もともと許されていた状態を n 個移動する変化を与える．

乱れが入ると，Case II も生じ，このような波動関数は移動しない．Case I の波動関数は図 13.1(b) のようにこれらを飛び越えながら移動する．ランダウ量子化の下では，ランダウ準位中心の非局在状態が Case II となり， $\Delta\Phi = \Phi_0$ あたり電極を出入りする電子数は，Fermi 準位より下にあるランダウ準位数 N である．系にかかっている電圧を V とすると，これによるエネルギー変化は $\Delta E = eVN$ である．このエネルギー変化は，電圧が x 方向にかかり，Hall 電流が y 方向に流れてソレノイド方向に磁場をつくっており，この磁場とソレノイド磁場との相互作用によることもできる．

y 方向電流を次のように計算する .

$$\begin{aligned}
 J &= \left\langle \sum_i \frac{-e}{m} [p_{yi} + eA_y(r_i)] \right\rangle \frac{1}{2\pi RL} \\
 &= \left\langle \frac{\partial}{\partial \Phi} \left\{ \sum_i \frac{1}{m} [p_{xi}^2 + (p_{yi} + eA_y)^2] + V_{\text{imp}}(r_i) \right\} \right\rangle \frac{1}{L} \\
 &= \frac{1}{L} \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \Phi} \right\rangle = \frac{1}{L} \frac{\partial}{\partial \Phi} \langle E \rangle. \tag{13.7}
 \end{aligned}$$

ここで, Φ による微分を $\Delta\Phi = \Phi_0$ による差分で代用すると,

$$J = \frac{\Delta E}{L\Delta\Phi} = N \frac{e^2 V}{h L} = N \frac{e^2}{h} E_x, \tag{13.8}$$

すなわち,

$$\sigma_{xy} = N \frac{e^2}{h}. \tag{13.9}$$

3.2 端状態

現実の多くの系では端が存在するため, Laughlin のきれいな議論がそのまま成立するわけではない.むしろ, 端のある試料では端状態 (edge states) が IQHE の真の原因である, ということを言い出したのは Büttiker であり, その論文では「現実の (端がある) 試料では, パルクの美しい理論ではなく, ここに示した泥臭い理論が成立している」と述べている. 「泥臭い理論」と呼ばれた端状態の理論は, 確かに即物的な印象はあったが, やがて電子間相互作用が取り入れられてカイラル・ラッティンジャー流体理論が生まれ, 更にはベリー位相に端を発生したトポロジカル電流理論が生まれ, トポロジカル絶縁体やマヨラナ粒子理論など, 極めて高踏的な理論の礎となったのは, 皮肉というか不思議なめぐり合わせである.

2次元電子を y 方向に細長く切り出して y 方向に電流を流す状況を考え, ポテンシャルとしては x 方向で2次元電子を閉じ込める幅の広い「樋」のようなものを考える.

図??は, 幅 W (ほぼ試料の幅) の樋型のポテンシャルの中で更に磁場による閉じ込めポテンシャルを電子が感じる場合の有効ポテンシャルを描いたものである. 試料の端から十分離れた所では $V(x) = 0$ で, 電子は磁場による放物線形のポテンシャルを感じている, として良い. 一方, 端近傍では, $V(x)$ の影響で, 固有値は上昇し図 13.2 のようになる. この時, 外部から電流を流し込まなくても $\partial E / \partial X$ が有限であるから, (??) より $\langle v_y \rangle$ は有限になり, 端に沿って電流が流れる. これは, 古典的には端にぶつかりながら走るスキッピング軌道による電流に対応しており, サイクロトロン軌道は円として閉じずに試料を一周し, 電流を生じる. ただし, これは平衡状態では単に試料を回っているだけであり, 電極から流れ出す電流ではなく, 試料の断面で積分すると零になる. このように, 平衡状態で試料全体を回って閉じるサイクロトロン軌道に対応する状態を端状態と呼ぶ.

次に, 試料に電流が流れている非平衡状態について考える. この端近傍の試料の y 方向の長さを L_y として L_y で規格化すれば, この状態の運ぶ電流は $j = (e/L_y)v_y$ であるから, 適当なエネルギー基準値 E_0 をとって, これより上の状態の運ぶ, ランダウ準位あたりの電流は

$$\begin{aligned}
 J &= \sum_X \frac{e}{L_y} v_y = \frac{L_y}{2\pi l^2} \int dX \frac{e}{L_y} v_y = \frac{|e|}{h} \int dX \frac{dE}{dX} \\
 &= \frac{|e|}{h} (\mu - E_0) \tag{13.10}
 \end{aligned}$$

ここで, (??), (??) より

$$\sum_X = \frac{L_y}{2\pi} \int dk = \frac{L_y}{2\pi l^2} \int dX$$

を用いた. この基準値以下の状態はすべて満たされているとすると, それらが運ぶ電流を試料断面で積分すると, 電流密度が $(e/h)\partial E / \partial X$ で表されることから零になる. したがって, (13.10) の電流のみ考えればよい.

図 13.3 のような状況を考え、電極 A, B の化学ポテンシャルをそれぞれ μ_A, μ_B とする。左右の端電流の差が全体に流れる電流となると考える。すなわち、(13.10) で $\mu = \mu_A, E_0 = \mu_B$ と置くと、 $J = (e/h)(\mu_A - \mu_B)$ となるので、

$$\sigma_{xy} = \frac{eJ}{\mu_A - \mu_B} = \frac{e^2}{h} \quad (13.11)$$

これはランダウ準位が 1 つの時の伝導度であるから、ランダウ準位が ν 個あれば σ_{xy} はこの ν 倍になり、IQHE が説明された。

これは、 x と y がクロスしている部分があるだけで、ランダウアー公式の導出とほとんど同じである。あたかも端に向きを持った 1 次元的な伝導チャンネルが存在してそこだけを電流が流れているかのようなのである。すなわち、ランダウアー公式は量子細線を左右に流れるチャンネルがあり、その化学ポテンシャルの差が全体の電流になるとして導かれた。今の場合、それが試料の両端に分かれ、ホール電圧分だけの化学ポテンシャル差を持っているとしている点が違っているだけである。ただし、QPC の時はそれ程正確な量子化が得られなかったのに、IQHE では極めて正確になるのはこの違いが原因である。すなわち、QPC では左右方向のチャンネルが空間的に重なっているため、電子の向きを反転させる散乱が容易に起こってこれは透過率 T を 1 からずらしてしまう。それに対し、IQHE の場合、端状態間にはマクロな空間的隔たりがあって散乱は全くないと考えて良く、ランダウアー公式流に言えば透過率は完全に 1 である。従って、逆に試料幅を狭めて端状態間の散乱を起こりやすくすると IQHE の量子化も正確でなくなると考えられ、実験でも確かめられている。

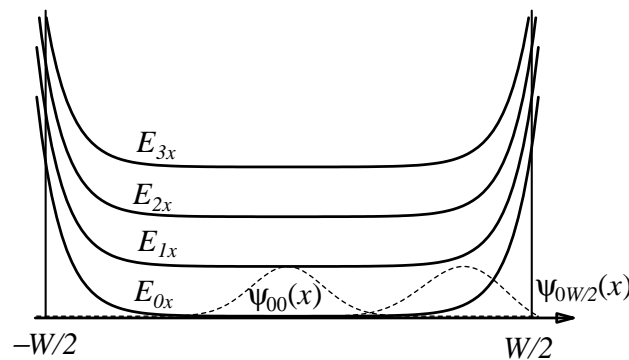


図 13.2

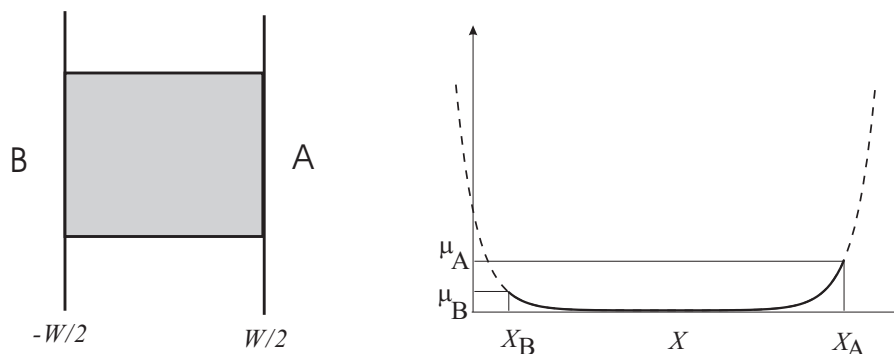


図 13.3

3.3 TKNN 公式

y 方向に電場 E がある場合のハミルトニアン (??) で, x と y を取り替えたものを $\mathcal{H}_0 + V$ ($V = -eEy$) と書いて, V を摂動で扱う. エネルギー固有状態 $|n\rangle$ に対する 1 次の摂動は

$$|n\rangle_E = |n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle m|(-eEy)|n\rangle}{E_n - E_m} |m\rangle \quad (13.12)$$

である. 摂動 V により流れる Hall 電流は, 規格化の長さを L として

$$\begin{aligned} \langle j_x \rangle_E &= \sum_n f(E_n) \langle n|_E \frac{ev_x}{L^2} |n\rangle_E \\ &= \langle j_x \rangle_0 + \frac{1}{L^2} \sum_n f(E_n) \sum_{m \neq n} \left[\frac{\langle n|(ev_x)|m\rangle \langle m|(-eEy)|n\rangle}{E_n - E_m} + \frac{\langle n|(-eEy)|m\rangle \langle m|(ev_x)|n\rangle}{E_n - E_m} \right] \end{aligned} \quad (13.13)$$

となる. y 方向速度演算子は, Heisenberg 運動方程式 $v_y = \frac{1}{i\hbar}[y, \mathcal{H}]$ より, 非摂動固有状態による行列表示で $\langle m|v_y|n\rangle = (E_n - E_m)\langle m|y|n\rangle/i\hbar$ と書くことができるから,

$$\sigma_{xy} = \frac{\langle j_x \rangle_E}{E} = -\frac{i\hbar e^2}{L^2} \sum_{n \neq m} f(E_n) \frac{\langle n|v_x|m\rangle \langle m|v_y|n\rangle - \langle n|v_y|m\rangle \langle m|v_x|n\rangle}{(E_n - E_m)^2} \quad (13.14)$$

が得られる. これは, σ_{xy} に対する久保公式の一種である.

固有状態を Bloch 状態 $|n, \mathbf{k}\rangle$ に取ると, (13.14) は

$$\sigma_{xy} = -\frac{i\hbar e^2}{L^2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{n \neq m} f(E_{n\mathbf{k}}) \frac{\langle n, \mathbf{k}|v_x|m, \mathbf{k}\rangle \langle m, \mathbf{k}|v_y|n, \mathbf{k}\rangle - \langle n, \mathbf{k}|v_y|m, \mathbf{k}\rangle \langle m, \mathbf{k}|v_x|n, \mathbf{k}\rangle}{(E_{n\mathbf{k}} - E_{m\mathbf{k}})^2} \quad (13.15)$$

である. 速度演算子を今度は群速度の表式から $v_\mu = \partial \mathcal{H}(\mathbf{k})/\hbar \partial k_\mu$ とすると, $|n, \mathbf{k}\rangle$ による行列表示は^{*1}

$$\langle m, \mathbf{k}|v_\mu|n, \mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\hbar} (E_{n\mathbf{k}} - E_{m\mathbf{k}}) \langle m, \mathbf{k}|\frac{\partial}{\partial k_\mu}|n, \mathbf{k}\rangle \quad (13.16)$$

であり, また,

$$\frac{\partial}{\partial k_\mu} \langle n, \mathbf{k}|m, \mathbf{k}\rangle = \frac{\partial \langle n, \mathbf{k}|}{\partial k_\mu} + \langle n, \mathbf{k}|\frac{\partial |m, \mathbf{k}\rangle}{\partial k_\mu} = 0$$

を用いて, σ_{xy} を次のように書き換える.

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} &= -\frac{ie^2}{\hbar L^2} \sum_{\mathbf{k}, n \neq m} f(E_{n\mathbf{k}}) \left(\frac{\partial \langle n, \mathbf{k}|}{\partial k_x} |m, \mathbf{k}\rangle \langle m, \mathbf{k}|\frac{\partial |n, \mathbf{k}\rangle}{\partial k_y} - \frac{\partial \langle n, \mathbf{k}|}{\partial k_y} |m, \mathbf{k}\rangle \langle m, \mathbf{k}|\frac{\partial |n, \mathbf{k}\rangle}{\partial k_x} \right) \\ &= -\frac{ie^2}{\hbar L^2} \sum_{\mathbf{k}, n} f(E_{n\mathbf{k}}) \left(\frac{\partial \langle n, \mathbf{k}|}{\partial k_x} \frac{\partial |n, \mathbf{k}\rangle}{\partial k_y} - \frac{\partial \langle n, \mathbf{k}|}{\partial k_y} \frac{\partial |n, \mathbf{k}\rangle}{\partial k_x} \right) \\ &= -\frac{ie^2}{\hbar L^2} \sum_{\mathbf{k}, n} f(E_{n\mathbf{k}}) \left(\frac{\partial}{\partial k_x} \langle n, \mathbf{k}|\frac{\partial |n, \mathbf{k}\rangle}{\partial k_y} - \frac{\partial}{\partial k_y} \langle n, \mathbf{k}|\frac{\partial |n, \mathbf{k}\rangle}{\partial k_x} \right) \end{aligned} \quad (13.17)$$

ここで, ベリー接続を \mathbf{k} 空間で

$$\mathbf{a}_n(\mathbf{k}) \equiv -i \langle n, \mathbf{k}|\frac{\partial |n, \mathbf{k}\rangle}{\partial \mathbf{k}} \quad (13.18)$$

と定義する.

E_F が Landau 準位の間 (ギャップ) に存在する場合, (13.17) の \mathbf{k} の和は Brillouin ゾーン全体で取る. 従って

$$\sigma_{xy} = \eta \frac{e^2}{h}, \quad \eta \equiv \sum_n \int_{\text{BZ}} \frac{d^2 k}{2\pi} \left(\frac{\partial a_{n,y}}{\partial k_x} - \frac{\partial a_{n,x}}{\partial k_y} \right) \equiv \sum_n \eta_n \quad (13.19)$$

^{*1} $\mathcal{H}|n, \mathbf{k}\rangle = E_{n\mathbf{k}}|n, \mathbf{k}\rangle$ の両辺に $\langle n, \mathbf{k}|\frac{\partial}{\partial k_\mu}$ をかけることで得られる.

が得られる．ここでバンド n の η への寄与

$$\eta_n = \int_{\text{BZ}} \frac{d^2k}{2\pi} \left(\frac{\partial a_{n,y}}{\partial k_x} - \frac{\partial a_{n,x}}{\partial k_y} \right) \quad (13.20)$$

は Chern 数と呼ばれる． $\mathbf{a}_n(\mathbf{k})$ が Brillouin ゾーン全域で特異点がなく正則であれば，Stokes の定理より

$$\eta_n = \frac{1}{2\pi} \oint_{\partial\text{BZ}} d\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_n(\mathbf{k}) \quad (13.21)$$

である． ∂BZ は Brillouin ゾーン境界に沿って一周することを示す．ところが， \mathbf{k} 空間内でバンドは Brillouin ゾーン端で周期性があるため，積分 (13.21) は同一関数を反対向きに動く積分路で積分したものの和になってゼロとなる．

すなわち，Chern 数は Brillouin ゾーン内に $\mathbf{a}_n(\mathbf{k})$ が定義できない特異点が存在する場合にのみ有限値を取り，この時，Chern 数は (13.21) の簡単な形には書けない．このような特異性は，一般に「局所的なゲージ選択」をすることで回避される^{*2}．すなわち，Brillouin ゾーンを R_I, R_{II}, \dots に分割し，それぞれの領域で異なるゲージを取りこれによるベリー接続 $\mathbf{a}^I, \mathbf{a}^{II}, \dots$ を定義する．この時，Chern 数はそれぞれの領域の境界を回る積分の和で与えられる．

$$\eta_n = \frac{1}{2\pi} \left[\oint_{\partial R_I} d\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_n^I(\mathbf{k}) + \oint_{\partial R_{II}} d\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_n^{II}(\mathbf{k}) + \dots \right]. \quad (13.22)$$

この時，各項の周回積分は，1 周回の間にはベクトル $\mathbf{a}(\mathbf{k})$ が何回特異点の周りを回ったかという巻き付き数 (winding number) を示している [4]．

3.4 グラフェンのバンド構造

単層グラフェンの結晶は，図 13.4(a) のように，炭素原子が六角格子を組んだ単純な構造をしている．図に示した菱形が単位胞で，単位格子ベクトルおよび逆格子ベクトルは，

$$\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{3}a/2 \\ a/2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ a \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_1 = \begin{pmatrix} 4\pi/\sqrt{3}a \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_2 = \begin{pmatrix} -2\pi/\sqrt{3}a \\ 2\pi/a \end{pmatrix} \quad (13.23)$$

と書くことができる．

以下，最も簡単な近似の下，グラフェンの電子状態を計算してみる．大変粗い近似であるから，実験と比べると精度はないが，真性グラフェンにおいて，フェルミ準位位置にディラック点があることが結晶構造から結論されることは理解できる．C 原子は IV 族で，最外殻電子は $2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$ に詰めることになるが，結晶構造からわかるように，これらは 1 次結合を作ることによって， sp^2 混成の σ 電子と π 電子に別れ， σ 電子は共有結合を作って六角格子を形成しており，そのエネルギー帯は低い位置にある．従って，フェルミ準位付近で問題となるのは π 電子の方である．そこで，六角格子上の π 電子系について Schrödinger 方程式を考える．

これを

$$\psi = \mathcal{H}\psi \quad (13.24)$$

とし，図 13.4(a) のように，格子上的サイトを A サイトと B サイトとに分け，強束縛近似で考える．すなわち，

$$\psi = \zeta_A \psi_A + \zeta_B \psi_B, \quad (13.25)$$

$$\psi_A = \sum_{j \in A} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_j) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \quad (13.26a)$$

$$\psi_B = \sum_{j \in B} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_j) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j). \quad (13.26b)$$

$\phi(\mathbf{r})$ は π 電子の原子波動関数， \mathbf{r}_j は格子位置である．ここで各部分格子波動関数間のハミルトニアン行列要素を

$$H_{AA} = \langle \psi_A | \mathcal{H} | \psi_A \rangle, \quad H_{BB} = \langle \psi_B | \mathcal{H} | \psi_B \rangle, \quad H_{AB} = H_{BA}^* = \langle \psi_A | \mathcal{H} | \psi_B \rangle, \quad (13.27)$$

^{*2} 例えば，磁場を与えるベクトル・ポテンシャルはある意味計算の手段に過ぎないので，全空間で同一ゲージの元で与えられる必要はない．

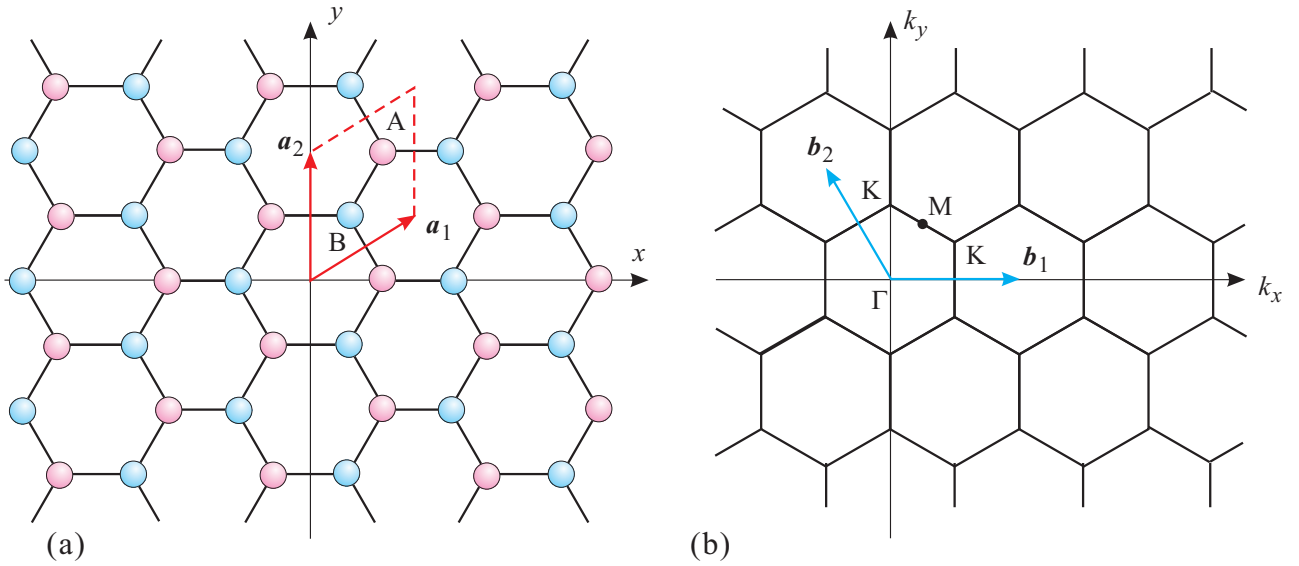


図 13.4 (a) グラフェンの 2 次元結晶構造．炭素原子が蜂の巣的な六角格子構造を組んでいる．A 位置と B 位置の 2 種類の面心平方格子を重ねたものと見こともできる．(b)(a) の逆格子． a_1, a_2 に対応する逆格子ベクトルは b_1, b_2 である．第一ブリルアンゾンの中心を Γ 点，対称性の良い点としては，図に示した K 点，M 点がある．

とする．また，系内の原子数を $2N$ ，すなわち

$$\langle \psi_A | \psi_A \rangle = \langle \psi_B | \psi_B \rangle = N \quad (13.28)$$

とする．強結合近似で $\langle \psi_A | \mathcal{H} | \psi_B \rangle = 0$ とすると，式 (13.25) を (13.24) に代入してトリビアルでない (ζ_A, ζ_B) が存在する条件から，永年方程式

$$\begin{vmatrix} H_{AA} - NE & H_{AB} \\ H_{BA} & H_{BB} - NE \end{vmatrix} = 0 \quad (13.29)$$

が得られ，結局

$$E = (2N)^{-1} \left(H_{AA} + H_{BB} \pm \sqrt{(H_{AA} - H_{BB})^2 + 4|H_{AB}|^2} \right) \equiv h_{AA} \pm |h_{AB}|. \quad (13.30)$$

ただし，対称性より， $H_{AA} = H_{BB}$ であることを用い，また， $(2N)^{-1}$ で原子あたりにした量を小文字で表した．

$$H_{AB} = \sum_{l \in A, j \in B} \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l)] \langle \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) | \mathcal{H} | \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \rangle_r. \quad (13.31)$$

ここで更に， \mathcal{H} の行列要素は最近接波動関数にしかない，と近似する．計算するための中心原子を図 13.4(a) の A と書かれた原子にとると，A から最近接原子 1, 2, 3 までの 3 つのベクトルを $\mathbf{d}_i (i = 1, 2, 3)$ とすると，図から明らかのように，

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_1 = \frac{k_x a}{\sqrt{3}}, \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_2 = \left(-\frac{k_x}{2\sqrt{3}} + \frac{k_y}{2} \right) a, \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_3 = \left(-\frac{k_x}{2\sqrt{3}} - \frac{k_y}{2} \right) a \quad (13.32)$$

である ($a = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2|$)．また， $\langle \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) | \mathcal{H} | \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \rangle_r$ の項については，対称性から全て等しく，これを ξ と置く．結局結晶構造から残りの共鳴積分はこの繰り返しであるから，

$$h_{AB} = \left(\sum_{j=1}^3 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_j) \right) \xi. \quad (13.33)$$

である．

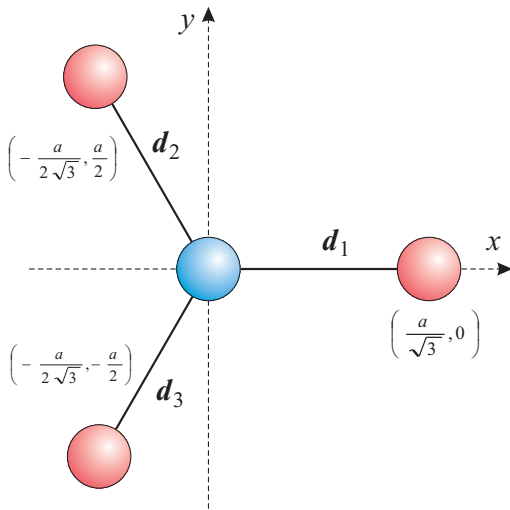


図 13.5 3つの炭素原子最近接間結合を表すベクトル。

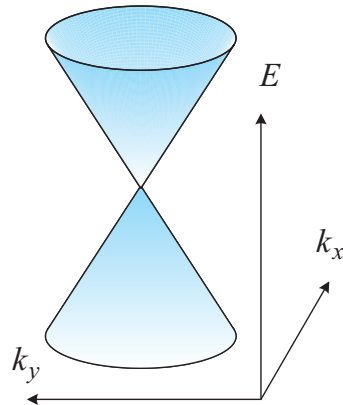
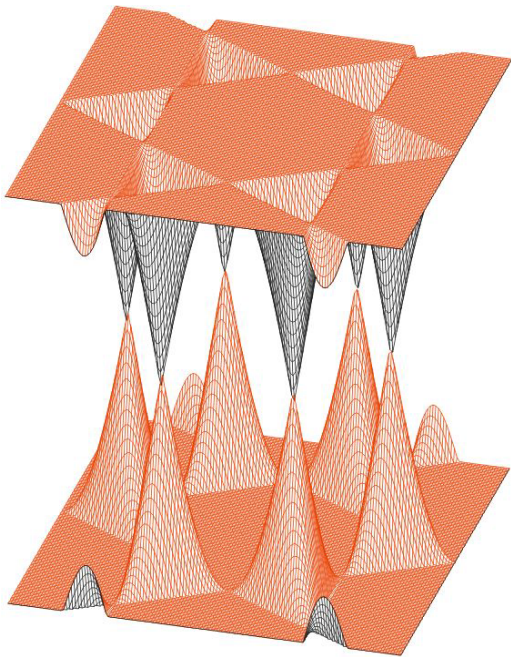


図 13.6 左図：グラフェンのエネルギーバンド表式 (13.34) をプロットし、K 点にコーンの頂点が一致した、ディラック点が現れる様子を示したもの。上図：ディラック・コーンを模式的に描いた。

式 (13.32), (13.33) を式 (13.30) へ代入することで、次のエネルギー表式が得られる。

$$E = h_{AA} \pm \xi \sqrt{1 + 4 \cos \frac{\sqrt{3}k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + 4 \cos^2 \frac{k_y a}{2}}. \quad (13.34)$$

第2項が隣接原子共鳴積分による摂動項であるが、逆格子空間で K 点と呼ばれる

$$(k_x, k_y) = \left(0, \pm \frac{4\pi}{3a}\right), \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \pm \frac{2\pi}{3a}\right), \left(-\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \pm \frac{2\pi}{3a}\right) \quad (13.35)$$

でゼロとなることがわかる。 $k_y = 4\pi/3a$ とすると、 $k_x = 0$ (K 点の一つ) の周りで (13.34) は

$$E \left(k_x, \frac{4\pi}{3a}\right) \approx h_{AA} + \frac{\sqrt{3}\xi a}{2} |k_x| \quad (13.36)$$

と表される。すなわち、K 点では上側のバンドは下側にリニアな尖った形になっている。下側も同様であるから、結局、K 点では図 13.6 のようにディラック点と呼ばれる、エネルギーギャップと有効質量がないバンド構造が生じる。

式 (13.34) 自身は、1次元結晶の強束縛近似で余弦バンドが現れるのと同様に余り現実的なものではないが、上の議論で K 点にディラック点が見れた理由を考えると、式 (13.33) で 2π を 3 等分する方向に等しい共鳴積分が存在す

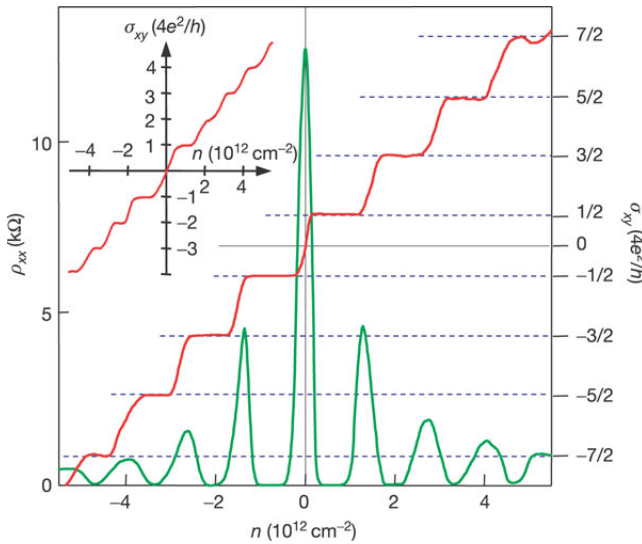


図 13.7 単相グラフェンで測定された整数量子ホール効果 .

ることが挙げられ、このことは、近似の精度を上げて同じ対称性が成立するため、同じようにバンド構造に現れる。すなわち、K 点は現実的にディラック点と考えて良い。

3.5 グラフェンでの実験

グラフェンを実際にする試みは、様々に行われていたが、電気伝導において目覚ましい結果を得たのは、シリコン基板上にグラファイトを圧着し、スコッチテープで上部層を剥ぎとって、最後に残った単原子層に微細加工電極を付けて測定するという方法で行われた。シリコン基板は低温でも金属的な伝導が可能な程度に高濃度ドーパされ、上側表面は酸化膜で覆っており、したがって、グラフェンとの間で一種の MOS(ただし、今の場合、Si 基板が「M」の役割を果たしている) トランジスタを形成しており、グラフェンの電子(正孔)濃度をゲート電圧によって制御できるようになっている。

3.6 整数量子ホール効果

この試料に現れた量子ホール効果が図 13.7 である。磁場は固定して、ゲート電圧によりキャリア数従って充填率を変化させることで IQHE を生じさせている。正ゲート電圧が電子キャリア、負ゲート電圧が正孔キャリアに対応する。通常の IQHE とは異なり、

$$\sigma_{xy} = 4 \left(n + \frac{1}{2} \right) G_q \quad (13.37)$$

の位置に量子化プラトーが現れている。係数 4 の内、2 はバンド計算の時に見たように、A 部分格子と B 部分格子とがあり(この自由度を擬スピン(pseudo-spin)と呼ぶ)この自由度が縮退しているためである。残りの 2 は、図 13.4(b) からわかるように、第一ブリルアンゾーンの中に、K 点が 2 つ縮退して存在しているためである。このようにバンドの縮退によって量子化値が縮退度分だけ大きくなることは他の半導体系でも普通に見られることで、特に異常ではない。

ついでに、半古典論の場合にグラフェンにおけるランダウ量子化がどのようになるか見ておく。バンド分散有効質量が使えないので、有効質量を考えずに成立する一般的な性質を使用して議論し、エネルギーについては、質量のない粒子の相対論的な関係 $E = pc$ (c はこの粒子の速さ)を使用する。正準運動量 p_c を

$$p_c = \pi - eA = \hbar k - eA \quad (13.38)$$

と書く。サイクロトロン半径 r_c は $r_c = \hbar k / eB$ と表すことができるから、半径 r_c のサイクロトロン軌道を一周した

際に電子が獲得する位相は，通常の電子の場合と全く同じで

$$2\pi r_c k + \theta_{AB} = 4\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} - 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} = 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} \quad (13.39)$$

となる．これが $2n\pi$ となる条件から

$$r_0 = \sqrt{2nl} = \sqrt{\frac{2n\hbar}{eB}}. \quad (13.40)$$

エネルギー分散関係を $E = \hbar k$ と書くと，

$$E = \hbar k = \sqrt{2e\hbar c^2 B n} \quad (13.41)$$

となる．分散関係により n 依存性が \sqrt{n} となっているが，電子濃度に対する E_F の変化も同様なのでこれは特に異常を生じない．それ以外については，特に異常は一見ないように思われる．

しかし，式 (9.57) では通常と大きく異なる点として括弧の中に $1/2$ の項があり，これにより，すべてのプラトー位置が通常より半分だけずれた位置に現れることになる．これは，単層グラフェンの K 点の特異なバンド構造^{*3} によるものである．これを見るために，ここでは，バンド構造を調べるときに見た，A, B サブ格子に分けて考えるやり方を再度使用する．ただし，ある K 点の周りの $k \cdot p$ 摂動を考えることにする．

波数 k の K 点 K からのずれを q とする．

$$\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{q}. \quad (13.42)$$

包絡関数 $\zeta_A(\mathbf{q}, \mathbf{r})$, $\zeta_B(\mathbf{q}, \mathbf{r})$ を決める固有値方程式は，

$$\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{3}\xi \begin{pmatrix} 0 & q_x - iq_y \\ q_x + iq_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \zeta_A \\ \zeta_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \zeta_A \\ \zeta_B \end{pmatrix} \quad (13.43)$$

となる（これからも， E が $|q|$ に比例することがすぐにわかる）．磁場 B が入った場合をランダウゲージ $\mathbf{A} = (0, Bx)$ で扱うと，

$$\hbar \begin{pmatrix} 0 & -i\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{x}{l^2} - \frac{\partial}{\partial y} \\ -i\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{x}{l^2} + \frac{\partial}{\partial y} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \zeta_A \\ \zeta_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \zeta_A \\ \zeta_B \end{pmatrix} \quad (13.44)$$

である．ランダウゲージで波動関数を求めたときの手続きに習い，変数分離型

$$\zeta_A(\mathbf{q}, \mathbf{r}) = \exp(iq_y y) \eta_A(q_x, x), \quad \zeta_B(\mathbf{q}, \mathbf{r}) = \exp(iq_y y) \eta_B(q_x, x) \quad (13.45)$$

を仮定すると，

$$\begin{pmatrix} 0 & -i\left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{x}{l^2}\right) - iq_y \\ -i\left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{x}{l^2}\right) + iq_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_A \\ \eta_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \eta_A \\ \eta_B \end{pmatrix} \quad (13.46)$$

である．これを， η_A, η_B のそれぞれの方程式の形に書き直すと，

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(q_y - \frac{x}{l^2}\right)^2 \right] \eta_A = \left(\epsilon^2 - \frac{1}{l^2}\right) \eta_A, \quad (13.47a)$$

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(q_y - \frac{x}{l^2}\right)^2 \right] \eta_B = \left(\epsilon^2 + \frac{1}{l^2}\right) \eta_B \quad (13.47b)$$

と，調和振動子型になるので，エネルギーは， $n_A, n_B = 0, 1, 2, \dots$ の 2 つの指数を使って，それぞれ

$$E = \pm \sqrt{2e\hbar c^2 B (n_A + 1)}, \quad (13.48a)$$

$$E = \pm \sqrt{2e\hbar c^2 B n_B} \quad (13.48b)$$

^{*3} ただし，同様の構造を持つ物質は他にも存在する．また，真性半導体のフェルミ準位に位置していない例であれば相当数存在する．

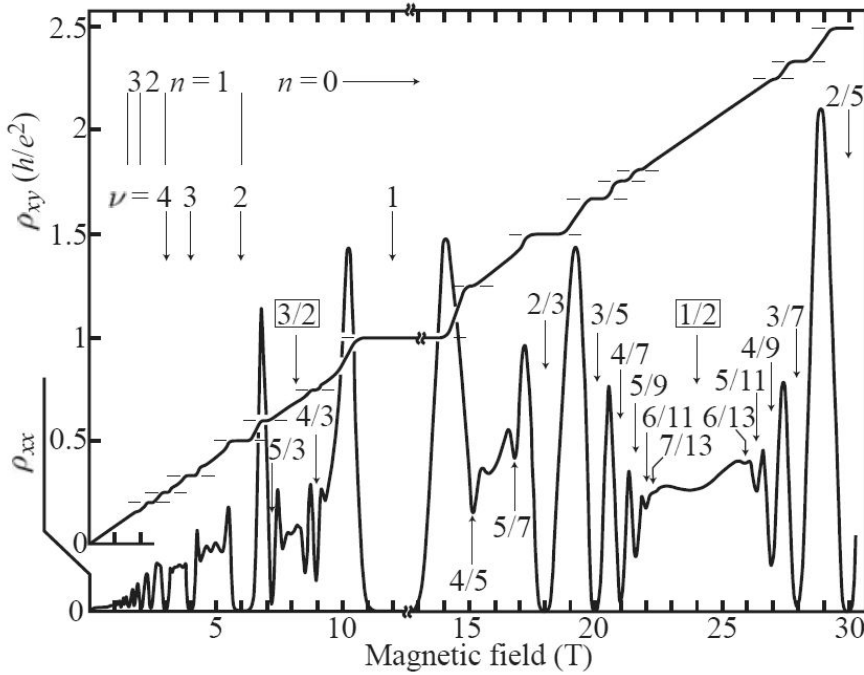


図 13.8 分数量子ホール効果測定
の代表例。

となる．この式を見ると， $E = 0$ に特徴的な準位があり，ただし，ここには B 部分格子に属する準位だけが存在する．すなわち疑スピンの縮退が解けている．ブリルアンゾーン中にあるもう 1 つの K 点について同じ計算を行うと，(13.43) の符号が入れ替わるため，(13.48a) と (13.48b) が入れ替わって A と B に関する非対称性は解消するが， $E = 0$ の縮退が解けている点は変化がなく，従って，最初の量子化ホール伝導度のみ $2G_q$ となる．これ以上は，縮退によって $4G_q$ となるため，式 (13.37) のように半分だけずれた量子ホール効果が現れる．

4 分数量子ホール効果

4.1 分数量子ホール効果の実験

分数量子ホール効果 (Fractional Quantum Hall Effect, FQHE) は，移動度の高い 2DEG での実験で発見された．これは，整数量子ホール効果でプラトー構造が現れるホール伝導度 $\sigma_{xy} = nG_q$ (n は整数) に対して

$$\sigma_{xy} = fG_q, \quad f = \frac{m}{n} \quad (n : \text{odd integer}, \quad m : \text{integer}) \quad (13.49)$$

の位置に量子化プラトーが生じる，というものである．

測定の代表例とされるものが図 13.8 である．IQHE も当然見えてはいるが， ρ_{xy} においては，プラトーの広さはそれほど顕著ではなく，むしろ古典論的な磁場に比例するラインに乗っていて，(13.49) に相当する位置に短いプラトーが現れている．これに対して， ρ_{xx} の磁場変化は大変劇的であり，(13.49) 位置の短いプラトーの所でも $\rho_{xx} = 0$ に落ちるため，非常に激しい振動が現れている．IQHE が終了した充填率 $\nu < 1$ の領域でも FQHE の為に変細かい振動が現れており，特に $\nu = 1/2$ を中心に対称的な形状になっていることがわかる．

FQHE は移動度に変敏感であり，移動度の低い試料では観測することができない．また，IQHE に比べても更に低温でのみ観測され，活性化エネルギーは高々数 K のオーダーである．一般に磁場が強い方が観測が容易である．

その物理に進むために，まず，電子間相互作用と電子の局在について簡単に考えておく．強磁場下の 2 次元電子が不純物による乱雑なポテンシャル中にある場合，この電子は，端状態的になって不純物ポテンシャルの等高線に沿って運動する．局在状態は，閉じた等高線に沿って閉軌道を運動する状態であるが，電子間相互作用は不純物ポテンシャルに対してゆらぎを与えるため，軌道が閉じなくなって局在が解ける可能性がある．

4.2 ラフリン (Laughlin) 状態

FQHE が生じている時の電子状態は、このような電子間相互作用が強く影響した一種の電子液体状態であることがその後の研究により明らかにされてきた。そのような多体状態に対して、BCS 以来とも言える、簡潔な形で非常に良い近似の多体の波動関数を書き下ろしたのがラフリン状態と呼ばれるものである。

IQHE の時と同様、磁場 B 中の xy 平面 2 次元電子系を考える、今度は都合により対称ゲージ $\mathbf{A} = (-By/2, Bx/2)$ を取る。 xy 面を複素平面で表す。また、距離を磁気長で測ることとし $z = (x - iy)/l$ とすると、電子間相互作用を加えたハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \sum_j \left[\frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2 + V(z) \right] + \sum_{j < k} \frac{e^2}{|z_j - z_k|} \quad (13.50)$$

と表すことができる。

まずは、ポテンシャルと電子間相互作用がない場合の最低ランダウ準位の 1 電子波動関数を考えてこれに電子を詰めて多体の関数を作り、これが電子間相互作用の項を小さくするように取ることを考える。 $X^2 + Y^2$ を対角化、従って、角運動量の固有状態となる波動関数は

$$\phi(z) = p(z) \exp\left(-\frac{|z|^2}{l^2}\right) \quad (13.51)$$

と書くことができる。 $p(z)$ は z の多項式である。今、系の電子数を N_e として、これから多体の波動関数を作ると

$$\psi(z_1, \dots, z_{N_e}) = f(z_1, \dots, z_{N_e}) \exp\left(-\sum_i \frac{|z_i|^2}{4}\right) \quad (13.52)$$

と書くことができる。パウリ原理によって、多項式 f は $(1, \dots, N_e)$ の交換に対して反対称でなければならない。

f の一般項は、(係数) $\times \prod_i z_i^{m_i}$ という形をしているが、これは、この項が i 番目の電子が $m_i \hbar$ という角運動量を持った状態を表していることを示している。すなわち、この項が表す状態は全角運動量 \hat{M} が $\sum_i m_i \hbar$ であり、これは \mathcal{H} と交換する保存量であるから、 ψ も \mathcal{H} と \hat{M} を同じ対角化する状態であることが望ましい。そのためには f は斉次多項式である必要がある。

更に、相互作用項を小さくするために 2 体の相関を考える。 i, j 2 電子間の距離は $|z_i - z_j|$ であるから、 f を $z_i - z_j$ にのみ依存する関数 g の積と考えてみる。すなわち、

$$f(z_1, \dots, z_{N_e}) = \prod_{i > j} g(z_i - z_j). \quad (13.53)$$

ここで、 f の反対称性から、 $g(z) = z^q$ で q は奇数でなければならない。以上をまとめた

$$\psi_q(z_1, \dots, z_{N_e}) = \prod_{i > j} (z_i - z_j)^q \exp\left(-\sum_i \frac{|z_i|^2}{4}\right) \quad (13.54)$$

をラフリン状態という。

強磁場下 2 次元電子系には強い電子間相関に伴い、様々な基底状態が存在することが明らかになっているが、このラフリン状態は、その嚆矢として、分数量子ホール効果をよく説明する状態として現れたものである。関数形からもわかるように、電子間相互作用を下げるようにできており、厳密対角化を使った有限系での厳密解にも近いことが知られている。

4.3 ラフリン状態の占有率

式 (13.54) のラフリン状態において、指数の前についている多項式について考えるとひとつの指数 i で指定される電子座標 z_i の最大べきは $M = (N_e - 1)$ である。このべきの項が、電子 i の角運動量が最大値 $M\hbar$ を取る状態を表

しており，半径 $\sqrt{2Ml}$ の円の周りに l だけ広がった (z 平面では $l = 1$ とする) 軌道を取る． N_e 個のランダウ準位に対応する面積は $2\pi l^2 N_e$ であるから，この項が表す状態の占有率は

$$\nu = \frac{2\pi l^2 N_e}{\pi \times 2Ml^2} = \frac{N_e}{M} = \frac{N_e}{(N_e - 1)q} \approx \frac{1}{q} \quad (13.55)$$

であることがわかる．多数の項中で軌道半径が最も大きなものが，このように1つの電子に最大の角運動量を与えるタイプのものであるから，この項の占有率が ψ_q 自身の占有率になると考えられる．すなわち，逆に言うと，占有率によって対応するラフリン状態の q が決定されてしまう．

4.4 励起状態

(13.54) からの励起について考える．各電子の角運動量が1だけ増加する状態を考え， $\prod_i z_i \psi_q$ とする．

$$\prod_i z_i \psi_q = \prod_i z_i \sum A_{m_1, m_2, \dots} z_1^{m_1} z_2^{m_2} \dots z_{N_e}^{m_{N_e}} \exp\left(-\sum_j \frac{|z_j|^2}{4}\right) \quad (13.56)$$

$$= \sum A_{m_1, m_2, \dots} z_1^{m_1+1} z_2^{m_2+1} \dots z_{N_e}^{m_{N_e}+1} \exp\left(-\sum_j \frac{|z_j|^2}{4}\right) \quad (13.57)$$

と各項について展開した形に書く．この $\prod_i z_i$ との積をとる操作は，各電子の角運動量を増加させると共に，原点^{*4}に波動関数のゼロ点を導入している．ゼロ点周りでは，最小ランダウ半径 l 程度の大きさで電子波動関数振幅が小さくなるので，負電荷密度が減少し，背景正電荷によりゼロ点付近に正電荷があるように見え，これを準粒子とみなすことができる．

ここで更に $\prod_k (z_k - z_0)^q$ をかけて，点 z_0 に q 個の準粒子を導入する．ここへ，更に z_0 に1個の別の空間的広がりが l の電子を付け加える操作を行うと，

$$\prod_k (z_k - z_0)^q \prod_{i < j} (z_i - z_j)^q \exp\left(-\sum_l \frac{|z_l|^2}{4} - \frac{|z_0|^2}{4}\right) \quad (13.58)$$

となり，結局これは1個だけ電子が多く，空間的に一樣なラフリン状態に他ならない． q 個の正電荷を持つ準粒子（準正孔）と電荷 $-e$ の電子が対消滅してやや広がったラフリン状態が生じた形であるから，結局準粒子1個が持つ電荷を e/q と考えて良いことになる．

4.5 複合フェルミオン描像

ラフリン状態 ($\nu = 1/q$) では，電子は互いに距離を置こうとするので，ある電子の近傍だけ見れば，一樣な磁場中に1個の電子があるように見える． $\nu = 1$ のランダウ準位では，ちょうど1個の電子あたりに1量子磁束 Φ_0 分の磁場がかかっているから，このラフリン状態では1個の電子あたりの磁束量子の数は q である．そこで，このような電子を，偶数 ($2k$) 本の量子磁束を元々持っている「粒子」と考えてみる．このような粒子はラフリン波動関数に戻って考えればフェルミ統計に従うので，複合フェルミオン (composite fermion, CF) と呼ぶ．「複合フェルミオン」が感じる磁場は，磁束 $q - 2k$ 本分ということになる．

すなわち， $q - 2k = 1$ は CF の占有率を n とし $n = 1$ の IQH 状態とみなせる．同様に， $1/(q - 2k) = n > 1$ の場合， n が整数のところではやはり IQH 状態が生じる．これらは，CF が広がった状態であるから，すなわち，電子波動関数が広がった状態であると考えられる．この時，元の電子の占有率 ν は

$$\nu = \frac{1}{q} = \frac{1}{2k + 1/n} = \frac{n}{2kn + 1} \quad (13.59)$$

^{*4} もちろん，これは $\prod_i (z_i - z_0)$ とすれば，任意の点 z_0 にゼロ点を導入できる．

である．これは， $k = 1$ に対して $2/5, 3/7, 4/9, \dots$ という比較的観測されやすい FQH 系列を与える．更に，これらを次の基底状態とすることで，観測された FQH 状態を説明できる．すなわち，電子の FQH を CF の IQH として解釈することができる． $\nu = 1/2$ まわりの ρ_{xx} が対称で電子のゼロ磁場状態に近く見えるのも，CF の SdH 振動として解釈することができる．

参考文献

- [1] 野村健太郎 「トポロジカル絶縁体の基礎理論」

http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~nomura/note_nomura.pdf

- [2] R. B. Laughlin, Phys. Rev. B **23**, 5632 (1981).
 [3] M. Büttiker, Phys. Rev. B **38**, 9375 (1988).
 [4] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, Phys. Rev. Lett. **49**, 405 (1982).
 [5] D. J. Thouless, “Topological Quantum Number in Nonrelativistic Physics” (World Scientific, 1998).

付録 M：ベリー位相

固有エネルギー E_n の固有状態 $|n\rangle$ の時間発展は $\psi_n = e^{-iE_n t/\hbar}|n\rangle$ と書けるが，ハミルトニアン \mathcal{H} がパラメータ・セット R に依存し，これが断熱的な時間発展 $R(t)$ をするものとする．考えている準位 n では縮退がないものとする．

$$\mathcal{H}[R(t)]|n, R(t)\rangle = E_n[R(t)]|n, R(t)\rangle. \quad (\text{M.1})$$

状態 ψ_n の時間発展は Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = \mathcal{H}[R(t)]\psi_n \quad (\text{M.2})$$

で表される．(M.1) と (M.2) の違いに注意しておこう．

右図のように， $|n, Q\rangle$ はあるパラメータセット Q に対する固有方程式 (M.1) の解であり，ハミルトニアンにおいてパラメータが時間変化しなければ Schrödinger 方程式の解は $|n, Q\rangle \exp(-E_n(Q)t/\hbar)$ である．(M.2) で時間発展が表される ψ_n は「断熱的」変化により n でラベル付けされる準位に張り付いており，ある $t = t_1$ で $R(t_1) = Q$ になったとすると， $\psi_n(t_1) = |n, Q\rangle \times (\text{位相因子})$ と書けるはずである．これを次のように書こう．

$$\psi_n(t) = \exp\left[i\gamma_n - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E[R(t)']\right] |n, R(t)\rangle. \quad (\text{M.3})$$

右辺の括弧中第 2 項は， t の各点で「通過中」の $|n, R(t)\rangle$ が持つ累積位相因子を足しあわせたものであるから当然付く因子であり，それ以外の第 1 項が断熱変化によるベリー位相 (Berry phase) である．

(M.3) を (M.2) へ代入すると

$$\begin{aligned} & \left(\mathcal{H} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right) \psi_n = 0 \\ & = \left(\mathcal{H} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right) \exp\left[i\gamma_n - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E[R(t)']\right] |n, R(t)\rangle \\ & = \exp\left[i\gamma_n - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E[R(t)']\right] \left(\mathcal{H} + \hbar \frac{d\gamma}{dt} - E_n[R(t)] - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right) |n, R(t)\rangle \end{aligned} \quad (\text{M.4})$$

である．左から $\langle n, R(t)|$ を掛けて

$$\frac{d\gamma_n}{dt} = i\langle n, R(t)| \frac{\partial}{\partial t} |n, R(t)\rangle = i\langle n, R(t)| \nabla_R |n, R(t)\rangle \cdot \frac{dR(t)}{dt} \quad (\text{M.5})$$

であるから， R 空間内をパラメタが t に対して系が断熱的となるように動いてあるループ C を描いて元の点に戻ったとすると，このループ運動について付くベリー位相は周回の時間を T として

$$\begin{aligned}\gamma_n[C] &= i \int_0^T dt \frac{d\mathbf{R}}{dt} \cdot \langle n, \mathbf{R}(t) | \nabla_{\mathbf{R}} | n, \mathbf{R}(t) \rangle \\ &= i \oint_C d\mathbf{R} \cdot \langle n, \mathbf{R}(t) | \nabla_{\mathbf{R}} | n, \mathbf{R}(t) \rangle\end{aligned}\quad (\text{M.6})$$

である．

ここで，

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \equiv -i \langle n, \mathbf{R}(t) | \nabla_{\mathbf{R}} | n, \mathbf{R}(t) \rangle, \quad \mathbf{B}_n(\mathbf{R}) \equiv \text{rot}_{\mathbf{R}} \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \quad (\text{M.7})$$

と置く． $\mathbf{A}_n(\mathbf{R})$ ， $\mathbf{B}_n(\mathbf{R})$ はそれぞれベリー接続，ベリー曲率と呼ばれる．ゲージ変換

$$|n, \mathbf{R}\rangle' = \exp(i\Lambda(\mathbf{R})) |n, \mathbf{R}\rangle \quad (\text{M.8})$$

を考える (Λ は R 空間内で連続なスカラー関数) と，ベリー接続は

$$\mathbf{A}'_n(\mathbf{R}) = -i \langle n, \mathbf{R} | e^{-i\Lambda(\mathbf{R})} | \nabla_{\mathbf{R}} e^{i\Lambda(\mathbf{R})} | n, \mathbf{R} \rangle = \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) + \nabla_{\mathbf{R}} \Lambda(\mathbf{R}) \quad (\text{M.9})$$

と変換される (ゲージ不変でない) のに対して，ベリー曲率は

$$\mathbf{B}'_n(\mathbf{R}) = \text{rot}_{\mathbf{R}} \mathbf{A}'_n(\mathbf{R}) = \text{rot}_{\mathbf{R}} \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = \mathbf{B}_n(\mathbf{R}) \quad (\text{M.10})$$

よりゲージ不変であることがわかる．これらを使ってベリー位相は次のように与えられる．

$$\gamma_n[C] = - \oint_C d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = - \int_S ds \cdot \mathbf{B}_n(\mathbf{R}). \quad (\text{M.11})$$

ここで， S は曲線 C で縁取られた曲面で，2つの曲面 S_1 ， S_2 を考えると，これらが与えるベリー位相は， $2n\pi$ (n は整数) の不定性を除いて一致しなければならないから，

$$\int_{S_1} ds \cdot \mathbf{B}_n(\mathbf{R}) = \int_{S_2} ds \cdot \mathbf{B}_n(\mathbf{R}) + 2n\pi. \quad (\text{M.12})$$

これより， C で縁取られた任意の単連結閉曲面 S_c で \mathbf{B}_n を積分すると

$$\int_{S_c} ds \cdot \mathbf{B}_n(\mathbf{R}) = 2n\pi \quad (\text{M.13})$$

が得られる．ただし，面積要素ベクトル ds は，常に閉曲面の外側向き垂直成分を拾うようにする．式 (M.13) はモノポールに対する量子化条件 (Dirac の量子化条件) と呼ばれる．