人工量子物質における量子シミュレーションとトポロジカル 物性

小澤知己 東北大学材料科学高等研究所 2022 年 6 月 9 日

概要

原子・分子・光物理学(AMO 物理学)のプラットフォームを用いて凝縮系物性をはじめとしたさまざまな模型・現象をシミュレートする方法が近年急速に進展している。このような AMO 物理学のプラットフォームを本講義では「人工量子系」と呼ぶことにする。もともと他の系で知られていた興味深い模型や現象と他の系で実現する(シミュレートする)ことを量子シミュレーションなどと呼ぶこともある。本講義では人工量子系を用いた量子シミュレーションを、特にトポロジカル物性のシミュレーションを軸に解説していきたいと考えている。この講義ノートの構成は以下の通りである。

まずは代表的な人工量子系の例として冷却原子系、光共振器系、光導波路、励起子ポラリトン、Newton 力学系を紹介する。これらの系が選ばれたのは私が個人的によく知っているからという理由が大きい。他の研究者に聞けば他の例を出すであろうし、これらの例が他に比べて特に「優れている」というわけではないが、トポロジカル物性の量子シミュレーションを考える上ではある程度広い状況をカバーできていると思う。Newton 力学系というのは全く AMO 物理に思えないし、実際 AMO 物理ではないが、Newton 力学での量子シミュレーション(この意味はノート内で説明する)において使われる回転波近似や Floquet 理論の方法は他の人工量子系とかなり似た考え方が多いためあえて取り上げることにした。

次にトポロジカル物性の基礎的な部分を概観する。トポロジカル物性にはいろいろなアプローチがある。ここでは特に人工量子系との関連で重要なポイントや例に限定して解説している。特にトポロジカルバンド構造という一粒子の性質に注目している。具体例として Chern 絶縁体と 1 次元カイラルハミルトニアンを詳しく解説している。本質的に重要なのはバルク・エッジ対応で、これは運動量空間の量子状態のトポロジカルな性質が実空間でエッジに局在したモードの存在と対応するという関係である。トポロジカルバンド構造のバルク・エッジ対応は本質的に 1 粒子の性質であるためボソンでもフェルミオンでも成り立つため、もともとフェルミ粒子系である電子系で見つかったトポロジカル物性の考え方を多くの場合ボソンを扱う AMO 物理に適用する際に中心的な役割を果たす。

第3章ではトポロジカルバンド構造を持つような格子模型を人工量子系で実現するいくつかの方法を解説する。速い時間周期的変調を加えた時の遅い時間スケールで見た時の有効ハミルトニアン (Floquet 有効ハミルトニアン) としてトポロジカルバンド構造を実現する方法を詳しく説明している。その他にも非空間的自由度を次元として用いてシミュレーションを行う人工次元の方法や、時間反転対称性を破らずに量子スピンホール絶縁体的な状況を実現してトポロジカルバンド構造を得る方法も解説している。最後に、人工量子系に特徴的なトポロジカルな現象について説明する。固体電子系でトポロジカルな現象として発見されたホール伝導度の量子化はそのままでは人工量子系では測定することが難しいが、本質的に似た現象が重心速度の量子化として現れる。ほかにも適当な初期状態からの時間発展の様子からカイラルハミルトニアンの巻きつき数を求めたり、非平衡定常状態からトポロジカルな性質を調べたりする方法を解説する。AMO 系特有の現象としてハミルトニアンの非エルミート性、特にゲインの存在のもとでのトポロジカルな現象であるトポロジカルレーザーについても解説する。

目次

1	人工量子系・古典系	4
1.1	冷却原子系	5
1.2	光共振器	6
1.3	光導波路	8
1.4	ポラリトン	6
1.5	Newton 力学系	13
1.6	そのほかの人工量子系	15
2	トポロジカル物性の基礎	16
2.1	バンド構造と Bloch の定理	16
2.2	Chern 絶縁体	17
2.	2.1 Haldane 模型	17
2.	2.2 バルク・エッジ対応と Jackiw-Rebbi 模型	22
2.	2.3 Harper-Hofstadter 模型	23
2.	2.4 Chern 絶縁体の数学	27
2.3	1次元カイラルハミルトニアン	28
3	トポロジカルバンド構造の実現	34
3.1	Su-Schrieffer-Heeger 模型	34
3.2	Floquet 理論	35
3.3	複素ホッピング	38
3.	3.1 2サイト系	39
3.	3.2 3サイト系、多サイト系	42
3.4	Harper-Hofstader 模型	43
3.5	Haldane 模型	44
3.6	人工次元	46
3.	6.1 周波数人工次元	47
3.	6.2 エネルギー固有状態	47
3.	6.3 人工次元に関してその他のこと	49
3.7	量子スピンホール絶縁体的模型:時間反転対称性を破らない・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	49
3.8	なぜさまざまな系で似たような模型を実現するのか	52
4	人工量子系でのトポロジカル現象の発現	54
4.1	重心速度の量子化:ホール伝導度の量子化に代わって	54
4.2	重心位置の時間発展と Mean Chiral Displacement	54
4.3	定常状態におけるトポロジカル物性:熱平衡状態ではない非平衡状態	57

4.4	トポロジカルレーザー:ゲイン下での物性	 59
5	まとめ	60

1 人工量子系・古典系

人工量子系(Synthetic quantum system)とは、文字通りの意味で言えば人工的に作った量子系という意味だが、そう言っても曖昧さが残る。だいいちほとんどの量子系は多かれ少なかれ人工的に作られている。本講義で人工量子系と言った場合は、光と物質の相互作用の制御を通じて人工的に制御することができる量子系のことを指しことにする。光と物質の相互作用は日本では物性物理学と呼ばれる分野の一部である原子・分子・光物理学(Atomic, Molecular, and Optical physics、AMO 物理とも呼ばれる)で盛んに研究されている。ちなみに物性物理学に対応するうまい英語表現は見つからず、英語では凝縮系物理(Condensed Matter Physics)と AMO 物理は別の分野とみなされることが多い一方、日本ではこれらは物性物理という大きな枠組みの一部と考えられているようである。人工量子系は、下で詳しく説明するように、考察の対象は AMO 物理で扱われる系だが考察時に有用な概念は伝統的に凝縮系物理で使われてきているものが多い。凝縮系物理と AMO 物理の交差点に位置するのが人工量子系の物性物理で、そこが人工量子系の面白さである。人工量子系のもう一つの醍醐味が、実験と理論が混ざってしまっている点である。実験家が理論を行い、理論家も実験を行うのが人工量子系である。さまざまな垣根を越えた交流がうまれる人工量子系の研究は非常にエキサイティングである。

人工量子系を大まかに三種類に分けると、原子を対象にするもの、光を対象にするもの、そして原子と光の複合粒子を対象にするものがある。原子を対象にするものの例が冷却原子系やイオントラップなどである。この場合、考察の対象は中性原子やイオンだが、これらを光を用いてトラップしたり制御したりすることになる。光を対象にする代表例は共振器中の光である。考察の対象は光だが、それを物質(鏡)を用いてトラップして制御することになる。原子と光の複合粒子は通常ポラリトンと呼ばれ、励起子ポラリトンやプラズモンポラリトンなどが人工量子系として盛んに研究されている。ポラリトンは考察の対象にも制御の方法にも物質(原子)と光の両方が関わってくることになる。以下ではおおまかにこれら三種類を念頭に置いて議論を進めるが、これ以外にも人工的に見える量子系は多数存在する。例えば2次元原子層は人工量子系と呼ばれることもあるが、原子・分子・光物理との関係は間接的である。メタマテリアルも非常に人工的に見える(がしばしばそこで見られる物性は古典的である)。これらの系も人工量子系と言っても良いかもしれない。しかし、紙幅と時間の都合上、本講義では主に AMO 物理と関係した人工量子系のみを取り上げることにする。(いうまでもないことだが、本講義で取り上げなかった人工量子系にも面白い系はたくさんある。)

人工量子系の物性物理の研究は対象へのアプローチ方法が特徴的である。ある物質・現象を理解するために、その物質・現象を記述する単純な模型(モデル)を構築し、その模型の解析を通じてもともとの物質・現象を理解しようというのは物理として自然なアプローチである。人工量子系はしばしばこれとは反対のアプローチを取る。まずは理解したい模型を出発点とし、その模型を実現するにはどうすれば良いのかという方向で考える。人工量子系にはさまざまなものがあり、それぞれ可能な測定方法・観測量が異なっている。適切な系を選ぶことで模型を新たな角度から調べることができる。また、既知の模型だけではなく、人工量子系ならではの特徴を用いて既存の系では実現の難しい模型を実現し研究することでき、そこから新しい現象が見つかることもある。本講義では、トポロジカル物性の観点から人工量子系研究の先端をお伝えしたい。

まずは人工量子系の代表的な例をいくつか紹介する。トポロジカル物性で重要な役割を果たすトポロジカルバンド構造は周期ポテンシャル中の粒子の振る舞いに関するものであるため、特に人工量子系でどのように格子模型を実現するのかに焦点を当てて説明する。ここで格子模型というのは固体電子系でいうtight-binding 模型のことである。

1.1 冷却原子系

冷却原子系とは、レーザーや磁場を用いて真空中に捕捉(トラップ)した気体状の原子を極低温に冷却したものである。冷却原子系の入門書としては Pethick and Smith (2008); Pitaevskii and Stringari (2016) がおすすめできる。ヘリウム以外の物質は絶対零度近くでは固体になる。冷却原子系でも気体として捕捉した後ずっと待っていると固体になるが、準安定状態(過冷却状態)としてしばらく気体の形を保っていることができる。物性を調べるのはこの準安定な原子の気体である。

冷却原子系の研究が物性物理において大きな存在感を持ってきたのが 1995 年のルビジウム原子のボーズ・アインシュタイン凝縮の実現である。それ以来、各種の原子をボーズ・アインシュタイン凝縮やフェルミ縮退が見られる温度まで冷却しさまざまな物性を調べる研究が盛んに行われてきている。特に重要な発展が光格子の実現である。光格子とは、レーザー光が原子に対して格子状のポテンシャルエネルギーを与え、原子のエネルギースペクトルが格子中の電子と同様にバンド構造を作るものである。光格子の仕組みを簡単に説明する。中性の原子にレーザー光(電磁波)を与えると何が起きるだろうか。中性(陽子の数と電子の数が等しい)なので、電荷の0次のモーメントは存在しない。しかし、1次のモーメント(双極子モーメント)は存在でき、それは電場と相互作用する。電気双極子モーメントの演算子を \hat{a} と書くと、電気双極子と電場 \hat{a} との相互作用のハミルトニアンは \hat{a} ・ \hat{a} ・ \hat{b} の形をとる。原子の基底状態と励起状態を用いて \hat{b} の摂動を考えると原子は電場の二乗 \hat{b} に比例したエネルギーを感じることになる。通常は静電場ではなく時間に依存した電磁波を原子に当てることになる。その場合も、正確な計算をすれば電場の二乗の長時間平均に比例したエネルギーを感じることがわかる。つまり、原子は有効的に \hat{b} (\hat{b}) の形のエネルギーを感じる。 \hat{b}) は電磁波の周期よりも十分に長い時間の平均である。ここで、 \hat{b}) の形のエネルギーを感じる。 \hat{b}) は電磁波の周期よりも十分に長い時間の平均である。ここで、 \hat{b}) の形のエネルギーを感じる。直線偏光を仮定すると、偏光方向への電場の振幅は次のような形をとる。

$$E(x,t) = E_0 \cos(qx - \omega t) + E_0 \cos(qx + \omega t) = 2E_0 \cos(qx) \cos(\omega t). \tag{1.1}$$

ここでqはレーザーの波数で ω は周波数である。二乗の時間平均は $\langle E(x,t)^2 \rangle_t = 4E_0^2 \cos(qx)^2 \langle \cos(\omega t)^2 \rangle_t = 2E_0^2 \cos(qx)^2$ 。原子はこれに比例したエネルギー、すなわち正弦波的なポテンシャルを感じる。これが光格子である。向かい合わせのレーザー 2 つで 1 次元の格子ができたように、 3 方向からレーザーを当てると 3 次元の格子ができる。レーザーの向き、強さ、位相などを適当に選べば蜂の巣格子をはじめとしたさまざまな格子が実現できるため、格子中の粒子の物理を調べる格好のプラットフォームとなる。模式図を図 1 に示す。

さらに、ここでポテンシャルの強さを十分強くすることも可能で、その場合は Hubbard 模型を実現することもできる。周期ポテンシャルがあればその強さを強くしていけば Hubbard 模型を実現できるのは当たり前のように思えるかもしれないが、これは当初全く自明なことではなかった。例えば、全く異なるプラットフォームであるフォトニック結晶(誘電率が空間的に周期的な構造を持つ物質)では電磁波が周期ポテンシャルを感じるが、ポテンシャルが弱いために Hubbard 模型に代表される tight-binding 模型を実現する



図1 冷却原子系の光格子の概念図

ことはできない。冷却原子系で実験的に到達可能なポテンシャルの強さで Hubbard 模型を実現できることがわかったのは 1998 年のこと Jaksch *et al.* (1998) で、それは大きなブレイクスルーであり、以後冷却原子系で周期ポテンシャル中の粒子を量子シミュレーションする研究が急速に進展する契機となった。

光格子と少し異なるがここ数年で急速に研究が進んでいるのがひとつひとつの原子をトラップして操作する光ピンセット列(optical tweezer array)の技術である Browaeys and Lahaye (2020)。それまでの冷却原子系の実験は、まずポテンシャルを作りそこに多くの原子を入れて何が起きるのかを見るというトップダウン的アプローチが多かった。光ピンセット列はボトムアップ的アプローチで、ひとつひとつの原子を詳細にコントロールすることに主眼を置いている。この方法で冷却原子系で正確に量子スピン系を実現することができるようになり、トラップした原子を量子ビットとした量子コンピュータの研究が急速に進んでいる。

1.2 光共振器

原子やイオンではなく光を対象としてさまざまな物性を調べることもできる。固体物理における tight-binding 理論の対応物を考えるのに非常に適しているのが光共振器を結合させた系である。光共振器とは、光を安定的に閉じ込められる構造のことである。鏡を向かい合わせに置いたものをイメージすると良い。概念図を図 2 に示す。

tight-binding 理論の対応物を考える、という意味をもう少し詳しく見てみる。二つの共振器を考える。 それぞれの共振器内に振動数が ω のモードが立っているとすると、それぞれの共振器の電場の振幅は $a_1(t) \propto e^{-i\omega t}$ と $a_2(t) \propto e^{-i\omega t}$ のという時間依存性を持つ。微分方程式の形では

$$i\frac{da_1}{dt} = \omega a_1 \qquad \qquad i\frac{da_2}{dt} = \omega a_2 \tag{1.2}$$

と書ける。次に、二つの共振器の間に弱い結合が存在する状況を考える。この場合、共振器の時間発展方程 式は結合の最低次で次にようになる。

$$i\frac{da_1}{dt} = \omega a_1 + J_{12}a_2$$
 $i\frac{da_2}{dt} = \omega a_2 + J_{21}a_1.$ (1.3)

なぜ結合の最低次がこの形なのか、詳しいことは Haus and Huang (1991) の解説文が詳しい。この方程式を行列の形で書くと次のようになる。

$$i\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega & J_{12} \\ J_{21} & \omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \tag{1.4}$$

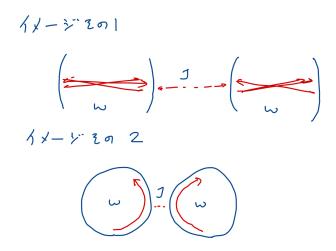


図 2 光共振器の概念図。上は鏡を向い合わせに置いて共振器を作っている。下は円形の共振器の内部を外周に沿って回るモードをイメージしている。

これはまさに2準位系あるいは2サイト系の tight-binding 模型での Schrödinger 方程式である。波動関数 に対応するものは $\psi=\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix}$ 、ハミルトニアンに対応するものは $H=\begin{pmatrix}\omega&J_{12}\\J_{21}&\omega\end{pmatrix}$ である。ここで、エネルギーの保存、つまり $|a_1|^2+|a_2^2|$ が保存すると仮定すると $J_{12}=J_{21}^*$ となりハミルトニアン H がエルミートであるという要請になる。この方程式を Heisenberg の運動方程式と見ることもできる。サイト i の生成(消滅)演算子を \hat{a}_i^\dagger (\hat{a}_i)で書くことにすると、方程式(1.4)はハミルトニアン

$$\hat{H} = \omega \sum_{i=1,2} \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_i + \sum_{i,j} J_{ij} \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_j$$
 (1.5)

における演算子 \hat{a}_i の Heisenberg 運動方程式において演算子の平均値 $a_i \equiv \langle \hat{a}_i \rangle$ を取ったものに等しい。 2 つの共振器を結合させると 2 サイトの Schrödinger 方程式になるということは、N 個の共振器を結合 させると N サイトの tight-binding 模型ができることになる。共振器の配置を変えることでさまざまな tight-binding の格子模型が実現できるため、格子模型の物理を調べる格好の舞台である。

ただし、ここで実現しているのは格子中の一粒子の Schrödinger 方程式である。共振器内に存在しているのは光なのでそのままでは量子的相互作用は普通存在しないが、古典的相互作用なら存在することができる。ここで古典的相互作用と言っているのはいわゆる非線形性で、ハミルトニアンの中に平均場の形で $|a_i|^2$ に比例する項が入ってくるような形になる。量子的相互作用が存在する場合は式(1.5)の右辺に $\hat{a}_i^{\dagger}\hat{a}_j^{\dagger}\hat{a}_j\hat{a}_i$ のような形の項が入ってくる場合に対応するが、光でこのような相互作用を作るのは一般に難しい。しかし、最近は AMO 物理の進展がめざましく、光の量子的相互作用を実現するさまざまな方法が開発されてきており、光の Mott 絶縁体相の実験的実現などもでてきている Ma et al. (2019)。

1.3 光導波路

共振器とは全く異なる方法で Schrödinger 方程式が実現される光のセットアップが光導波路 (optical waveguide) である。図 3 に概念図を書いてある。まずソース項がない場合の Maxwell 方程式から出発する。

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \qquad \nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{E}) = 0, \qquad \nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0, \qquad \nabla \times (\mu^{-1} \mathbf{B}) - \frac{\partial (\varepsilon \mathbf{E})}{\partial t} = 0$$
 (1.6)

電場 ${\bf E}$ と磁場 ${\bf B}$ はここでは位置と時間に依存した 3成分ベクトルである。誘電率 ε と透磁率 μ は一般には位置の関数で散逸のない媒質においては一般にはエルミート行列の形をとるが、等方的な媒質を考えるとこれらは対角行列となる。また、空間依存性としては誘電率だけを考え、透磁率は一定だとする。すなわち、 $\varepsilon=\varepsilon({\bf r})I_3$ と $\mu=\mu I_3$ という形になり、以下でもこの形を仮定する。ここで I_3 は 3x3 の単位行列である。この Maxwell 方程式の解で振動数 ω で振動するものを探す。つまり、 ${\bf E}({\bf r},t)={\bf E}({\bf r})e^{-i\omega t}$ 、 ${\bf B}({\bf r},t)={\bf B}({\bf r})e^{-i\omega t}$ という形を仮定し、上の方程式に代入する。最初の二つの方程式は電磁波が横波だということを表しており、これは可能な解の形を制限する役割を果たす。(例えば平面波であれば波数が電磁場と直行するという制限が課される。)重要なのは時間依存性を持つ最後の二つの方程式で、これらはつぎのような形になる。

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) - i\omega \mathbf{B}(\mathbf{r}) = 0, \qquad \nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}) + i\omega \mu \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0. \tag{1.7}$$

左の方程式から $\mathbf{B}(\mathbf{r})=(1/i\omega)\nabla\times\mathbf{E}(\mathbf{r})$ なので、これを右の方程式に代入すると磁場 $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ を方程式から 消去することができ、次の形の電場に関する方程式が得られる。

$$\nabla \times [\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})] = \omega^2 \mu \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}). \tag{1.8}$$

左辺の rot の rot という形は以下の形に書き換えることができる

$$\nabla \times [\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r})] = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r})) - \nabla^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}). \tag{1.9}$$

Maxwell 方程式の $\nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{E}) = 0$ は $\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla \ln \varepsilon(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r})$ という形に書き直すこともできる。ここで右辺の ∇ は $\ln \varepsilon(\mathbf{r})$ だけにかかっている。これを用いると、式(1.8)は以下のような形になる。

$$-\nabla \left(\nabla \ln \varepsilon(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r})\right) - \nabla^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) - \omega^2 \mu \varepsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0. \tag{1.10}$$

ここまでは誘電率と透磁率の等方性と透磁率が一定であること以外特に仮定はおいていない。次のステップからだんだん近似が入ってくる。誘電率 $\varepsilon(\mathbf{r})$ の空間変化はのちに使うので残しておきたいが、その対数 $\ln \varepsilon(\mathbf{r})$ は空間的に十分ゆるやかに変化するので左辺第一項は無視できると仮定する。すると、真空中の光速 c と屈折率 $n(\mathbf{r})=c\sqrt{\varepsilon(\mathbf{r})\mu(\mathbf{r})}$ を導入してこの式は下のように書けることになる。

$$-\nabla^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) - \frac{\omega^2 n(\mathbf{r})^2}{c^2} \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0.$$
 (1.11)

次に、考えている電磁波が主に一方向に伝播していると仮定し、その方向をz方向に取る。電場の偏光はx方向に向いていると仮定する。すると、 $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ のz方向への変化を取り出して電場を次のように書くと見通しが良くなる。

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \tilde{E}(\mathbf{r})e^{ik_0z}\hat{e}_x,\tag{1.12}$$

ここでx方向への単位ベクトル \hat{e}_x はx方向に直線偏光していることを表しており、 $\tilde{E}(\mathbf{r})$ は空間的にゆるやかに変化するエンベロープ関数となる。すると、式(1.11)はこのエンベロープ関数に関して次のような形になる。

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2ik_0\frac{\partial}{\partial z} + k_0^2 - \frac{\omega^2 n(\mathbf{r})^2}{c^2}\right)\tilde{E}(\mathbf{r}) = 0.$$
(1.13)

ここで、z 方向への変化は主に e^{ik_0z} で表されるという近軸近似を用いる。これは $\left|\frac{\partial \tilde{E}(\mathbf{r})}{\partial z}\right| \ll k_0 \tilde{E}(\mathbf{r})$ を意味するため、上の式で第3項を第2項に比べて無視できることを意味する。すると、上の式は次の形に書ける。

$$i\frac{\partial}{\partial z}\tilde{E}(x,y,z) = \frac{1}{2k_0}\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\tilde{E}(x,y,z) + \frac{k_0^2 - \omega^2 n(\mathbf{r})^2/c^2}{2k_0}\tilde{E}(x,y,z). \tag{1.14}$$

これはまさに空間 2 次元の Schrödinger 方程式である。ただし、通常の Schrödinger 方程式の時間 t が z 方向の座標 z で置き換えられており、質量に対応する量は k_0 である。スカラーポテンシャルは

$$V(\mathbf{r}) = \frac{k_0^2 - \omega^2 n(\mathbf{r})^2 / c^2}{2k_0}$$
 (1.15)

に対応している。つまり、屈折率 $n(\mathbf{r})$ を x と y の関数として変化させると粒子が感じるポテンシャルエネルギーを変化させることができる。屈折率を z 方向に周期的に変化させることは Schrödinger 方程式との対応では時間周期的な変調をかけることに相当し、Floquet 理論が適用できる。z 方向の変化を Floquet 理論と対応させてトポロジカル絶縁体のバンド構造を作り出すという方法が光のトポロジカル絶縁体の実験で非常に重要な役割を果たした Rechtsman et al. (2013)。

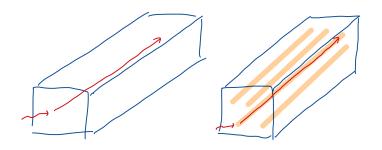


図3 光導波路のイメージ。左図にように、光は媒質内で主に一方向に進んでいる場合を記述する。右図では色がついている部分では屈折率が他の部分とは変わっていることをイメージしている。色付きの部分がポテンシャルが極小となっているところを表す。

1.4 ポラリトン

原子と光の複合粒子は一般にポラリトンと呼ばれている。例えば励起子ポラリトンは半導体量子井戸における電子・正孔の束縛状態である励起子にさらに光が結合してできる複合準粒子である。励起子ポラリトンを用いてボーズ・アインシュタイン凝縮をはじめとしたさまざまな物性の現象が観測されている。

ここでは励起子ポラリトンに着目し、まずは励起子と結合させる前の共振器に閉じ込められた光のエネルギーを考えてみる。共振器内部の媒質の屈折率を n_0 とすると、共振器内の光のエネルギーは波数 $\mathbf{k}=(k_x,k_y,k_z)$ を用いて

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar c|\mathbf{k}|}{n_0} \tag{1.16}$$

と書ける。ここで屈折率 n_0 が分母に来ているのは、媒質中の光の速度が c/n_0 だからである。分子に波数 の絶対値 $|\mathbf{k}|=\sqrt{k_x^2+k_y^2+k_z^2}$ が入っているためエネルギーは波数に関して線形分散を示す。さて、ここで共振器は x と y 方向には大きく広がっているが z 方向に非常に狭く光を閉じ込めているとする。図 4 左に概念図を示した。共振器の z 方向の長さを L_z とすると z 方向には z 方向の波数は $k_z=\pi n/L_z$ という飛び飛びの値しか取ることができない。ここで n は正の自然数である。十分低エネルギーを考えると z 方向の波数は $k_z=\pi/L_z$ という固定した値を取ると考えて良い。(ここで、 $k_z\geq\pi 2/L_z$ はエネルギーが高すぎる状況を考えている。)その場合にエネルギーを k_x および k_y で展開すると

$$E(k_x, k_y, \pi/L_z) = \frac{\hbar c}{n_0} \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + \left(\frac{\pi}{L_z}\right)^2} \approx \frac{\hbar c\pi}{n_0 L_z} + \frac{1}{2} \frac{\hbar c L_z}{n_0 \pi} (k_x^2 + k_y^2).$$
 (1.17)

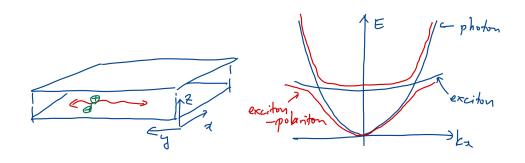


図4 励起子ポラリトンのイメージ。左図にように、光と励起子は2次元共振器中に閉じ込められている。右図は光の分散関係と励起子の分散関係が混ざって励起子ポラリトンの分散関係を作る様子を描いている。

ここまではまだ共振器中の光を記述しているだけである。次に共振器中の光と励起子との複合粒子である励起子ポラリトンを考える。共振器はz方向に光を閉じ込めていたが、x-y方向には閉じ込めはないとする。そして、そのz方向に狭いx-y平面に半導体の量子井戸があるとし、そこに励起子(電子一正孔

の束縛準粒子)が存在できる場合を考える。励起子はボソン的な励起であることに注意する。x-y 方向に一様、あるいは周期的なポテンシャルがある場合は x-y 方向の波数 $\mathbf{k}=(k_x,k_y)$ を良い量子数とみなすことができる。そして、スピン(偏光)を固定したとき、波数 \mathbf{k} の光子および励起子を生成する演算子をそれぞれ $a_{\rm cav}^{\dagger}(\mathbf{k})$ 、 $a_{\rm exc}^{\dagger}(\mathbf{k})$ とすると、励起子間の相互作用がない場合のハミルトニアンは次のように書ける Carusotto and Ciuti (2013):

$$H = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left[\omega_{\text{exc}}(\mathbf{k}) a_{\text{exc}}^{\dagger}(\mathbf{k}) a_{\text{exc}}(\mathbf{k}) + \omega_{\text{cav}}(\mathbf{k}) a_{\text{cav}}^{\dagger}(\mathbf{k}) a_{\text{cav}}(\mathbf{k}) + \Omega_R \left\{ a_{\text{exc}}^{\dagger}(\mathbf{k}) a_{\text{cav}}(\mathbf{k}) + a_{\text{cav}}^{\dagger}(\mathbf{k}) a_{\text{exc}}(\mathbf{k}) \right\} \right].$$
(1.18)

ここで第一項および第二項はそれぞれ励起子と光子の運動エネルギーで二行目は励起子と光が Rabi 振動数 Ω_R で結合していることを表しており、 Ω_R は励起子の電気双極子モーメントと光の電場の振幅の積に比例する。このハミルトニアンは 2次形式なので容易に対角化でき、波数 $\mathbf k$ を固定すると 2つのエネルギー固有値・固有状態が得られる。これらが励起子ポラリトンである。図 4 右に励起子ポラリトンの分散関係の様子を示した。普通はエネルギーが高い方を upper polariton branch (UP)、低い方を lower polariton branch (LP) と呼ぶ。これら励起子ポラリトンの消滅演算子は

$$a_{\rm UP}(\mathbf{k}) = C(\mathbf{k})a_{\rm exc}(\mathbf{k}) - X(\mathbf{k})a_{\rm cav}(\mathbf{k}) \tag{1.19}$$

$$a_{\rm LP}(\mathbf{k}) = X(\mathbf{k})a_{\rm exc}(\mathbf{k}) + C(\mathbf{k})a_{\rm cav}(\mathbf{k})$$
(1.20)

と書ける。共振器と励起子のエネルギーのデチューニングを $\delta(\mathbf{k})=\omega_{\mathrm{cav}}(\mathbf{k})-\omega_{\mathrm{exc}}(\mathbf{k})$ とおくとこれらの係数は具体的には

$$C(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[1 - \frac{\delta(\mathbf{k})}{\sqrt{\delta(\mathbf{k})^2 + 4\Omega_R^2}} \right]^{1/2}, \qquad X(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[1 + \frac{\delta(\mathbf{k})}{\sqrt{\delta(\mathbf{k})^2 + 4\Omega_R^2}} \right]^{1/2}$$
(1.21)

と書くことができ、Hopfield 係数と呼ばれる。対応するエネルギー固有値は

$$E_{\rm UP}(\mathbf{k}) = \frac{\omega_{\rm cav}(\mathbf{k}) + \omega_{\rm exc}(\mathbf{k})}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\delta(\mathbf{k})^2 + 4\Omega_R^2},$$

$$E_{\rm LP}(\mathbf{k}) = \frac{\omega_{\rm cav}(\mathbf{k}) + \omega_{\rm exc}(\mathbf{k})}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{\delta(\mathbf{k})^2 + 4\Omega_R^2}$$
(1.22)

である。Hopfield 係数が励起子と光がどの程度の割合で混ざっているのかを規定する。例えば $|X(\mathbf{k})|^2 = |C(\mathbf{k})|^2 = 1/2$ のとき両者は半々で混ざっていると考えられる。低エネルギーの物理に着目すると lower polariton branch にどの程度の混合が発生しているかが大事である。先ほど、共振器に閉じ込められた光は有効質量の非常に小さな粒子として振る舞うと書いた。ポラリトンの光部分は、そのような軽い有効質量の元となっていると思える。一方、励起子部分は有効質量を重くしてしまうが、励起子部分を通じて粒子間相互作用が発生するので重要である。(光同士は基本的に相互作用をしない。媒質の分極を通じた間接的な相互作用は発生するが、小さい。)例えば励起子ポラリトンのボーズ・アインシュタイン凝縮が実現しているが、そのためには励起子部分を通じた相互作用による熱化が本質的に重要であった。相互作用があることで粒子間にコヒーレンスが生まれ、量子多体効果が見えてくる。励起子部分が大きいと相互作用は大きいがその分有効質量が大きくなってしまい、光部分が大きいと有効質量は軽いがその分相互作用は小さくなってしまう。見たい物理現象に応じて励起子部分と光部分のうまい結合を探してくることになるが、結合をさまざまに変化させて多様な物性を調べられるのも励起子ポラリトンの面白い点である。

励起子ポラリトンのマイクロ共振器は柱の形にして並べることで格子にすることができる。すると、格子の物理現象が見えてくる。共振器柱を単独で作った場合と二つつなげた場合の模式図を図 5 に示す。単独で存在する柱は2次元の井戸型ポテンシャルで近似的に記述できる。二つつなげた場合は、例えばそれぞれの柱の最低エネルギー準位が対称・反対称的に結合することによって最低準位がエネルギー的に2つに分かれる。これは単純には2サイトの格子模型でホッピングが存在する状況として理解できる。さらに大きくつなげていくと格子模型となり、エネルギーはバンド構造を示す。例えば蜂の巣格子状にするとグラフェンのような分散関係を持つ Jacqmin et al. (2014)。これはフォトニック・グラフェンと呼ばれたりもする。分散関係をいろいろコントロールできるとトポロジカルバンド構造も実現することも可能になってくる Amo and Bloch (2016)。Tight-binding 模型の実現という方向では、ポラリトンを閉じ込めるマイクロ共振器を柱状に加工する方法が広く用いられている。

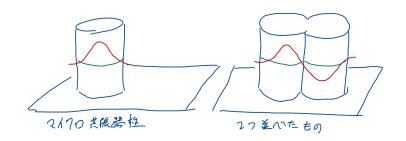


図 5 マイクロ共振器を柱状にして格子を作る模式図。左図は格子を1つだけ作った場合、右図は2つを結合させた場合を示している。

ここまでで、光共振器、光導波路、ポラリトンと光に大きく関係した3つのプラットフォームを取り上げ たが、それらの違いも議論しておこう。光導波路では一方の端(面)から光を入れ、その光が Schrödinger 方程式に従って実時間発展した結果の波動関数(に対応するエンベロープ関数)がもう一方の端(面)から 出てくる。つまり観測可能なのはクエンチダイナミクスにおける波動関数の実空間分布である。一方、光 共振器系やポラリトンではしばしば外部から系に連続的に光を注入し、散逸下で定常状態に達してその定 常状態を観測する。光共振器では定常状態における実空間分布が観測量である。ポラリトンは各サイトの 光の強さ(実空間分布)に加え、運動量空間の分布を見ることもできる。これは系から放出された光の角度 の情報が系内部での運動量の情報を伝えるためである。(固体電子系の ARPES に非常に似ている。) ポラ リトンでは波数空間のバンド構造が見えるためトポロジカルバンド構造を直接見るのに適している。一方 光共振器系はポラリトン系に比べ複素ホッピングの導入などもできるため模型作成のフレキシビリティは 共振器系の方が優れていると言える。どの光のプラットフォームにおいても「基底状態」を観測するという のは電子系で考えるほど自然に行えるものではない。「熱平衡状態」というのもそれほど自然に出てくるも のではない。(一方、冷却原子系では基底状態や熱平衡状態はある程度自然な概念である。)このように異な るプラットフォームは何が観測量かという点が異なるため、観測したい現象や実現したい模型に応じてプ ラットフォームを選ぶ必要がある。逆に何らかのプラットフォームにコミットした実験家は各自のプラッ トフォームで実現できる模型や観測できる量を拡大して行くことでその系の可能性を探求していくことが できる。

1.5 Newton 力学系

光共振器系や導波路列は古典的な Maxwell 方程式に従う古典系である。同様に、Newton 力学に従う古典力学系でも Schrödinger 方程式のシミュレーションを行うことができる。こういった量子系のシミュレーションを行うことのできる古典系をここでは人工古典系と名付けておく。(この名称は一般的なものではないので注意してほしい。)そもそもなぜ古典系で量子系をシミュレートできるのだろうか、という疑問が湧くかもしれないが、最も身近なところでは普通のコンピュータ(つまり古典コンピュータ)を使ってシュレディンガー方程式の数値解を求めるというのは日常茶飯事である。これは量子力学の古典的なデジタルシミュレーションである。これはある意味トリビアルだが重要な例で、古典コンピュータを使った量子系のシミュレーションはこの意味では可能だと言うのは念頭に置いておく必要がある。古典コンピュータを用いた量子力学のシミュレーションにおいては量子系の粒子の数が増えるに従って古典コンピュータで必要なメモリが指数的に増えていくところが本質的で、その意味で古典系による量子系のシミュレーションは困難さがある。

人工古典系は上述のような量子系のデジタルシミュレーションではなく、量子系のアナログシミュレーションを可能にする古典型である。ここでアナログシミュレーションと呼ぶのは、古典系の時間発展や固有モードのスペクトルを記述する方程式が量子系のシュレディンガー方程式と同じ形をしていることを言う。Maxwell 方程式も古典系なので上述の Maxwell 方程式の Schrödinger 方程式へのマッピングも人工古典系を用いた量子系のアナログシミュレーションと呼ぶこともできる。本節では Newton 力学の系を用いた量子シミュレーションを取り上げる。

アナログシミュレーションの場合でも量子系の古典シミュレーションの困難さが多粒子の扱いにあるという点は変わらない。それは逆に言えば、少数粒子の量子系のシミュレートを古典系で行うのはそんなに難しくないはずだということを意味する。あとで説明するように、整数量子ホール効果などのトポロジカルな現象の本質は一粒子の問題であり、古典系でのシミュレーションが可能である。

具体例として質点が一次元的にバネで繋がっている状況を考える。質点 i と質点 j はバネ定数 $k_{i,j}$ のバネで繋がっているとする。図 6 参照。なお、質点の静止状態でバネは自然長さであるとする。i 番目の質点

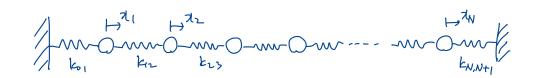


図 6 バネと質点の系。質点は垂直方向には適当に支えられておりたわまないと仮定する。

に関する運動方程式は次のような形をとる。

$$m\frac{d^2x_i}{dt^2} = -k_{i-1,i}(x_i - x_{i-1}) + k_{i,i+1}(x_{i+1} - x_i).$$
(1.23)

質点は N 個つながっているものとし、 $x_0=x_{N+1}=0$ とする。行列の形で書くとこの運動方程式は以下の形になる。

$$m\frac{d^2}{dt^2} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -k_{01} - k_{12} & k_{12} & 0 & \cdots & 0 \\ k_{12} & -k_{12} - k_{23} & k_{23} & \cdots & 0 \\ k_{23} & -k_{23} - k_{34} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & k_{N-1,N} & -k_{N-1,N} - k_{N,N+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix}. \tag{1.24}$$

右辺に現れている大きな行列を-Mと書くことにする。系の固有振動数、すなわち全ての質点が $x_i \propto \cos(\omega t + \phi_i)$ という形で振動するときの ω はMの固有値 λ と $m\omega^2 = \lambda$ という関係で結ばれる。すなわち、仮に-Mをハミルトニアンとして持つ量子系が存在すれば、この量子系のエネルギースペクトルは今考えている古典系のエネルギースペクトルと強く結びついていることになる。例えば、ハミルトニアン-Mが後述するトポロジカルなバンド構造を示すような量子系だとすれば、関連するMで記述される上述の古典系においてもバルク・エッジ対応が存在すると期待できる。例えば、バネ定数 $k_{i,i+1}$ をiが偶数のときにある一定値、そしてiが奇数のときに別の一定値にとるとする。Mの対角成分は全て等しいので固有値を全体的にシフトさせる効果しかない。しかしMの非対角成分は交互に強さが変わる。これはまさに後で取り上げる1次元のトポロジカル模型である Su-Schrieffer-Heeger 模型になっており、Su-Schrieffer-Heeger 模型のバルク・エッジ対応がこの Newton 力学系で観測できることになる。

いま説明した例では古典系の固有振動数の二乗と量子系の固有エネルギーが対応しているが、Newton 力学系をうまく作れば近似的に Schrödinger 方程式に従わせることもでき、古典系の固有振動数と対応する量子系の固有エネルギーを一致させることもできる。その一例を Salerno *et al.* (2016) から示す。先ほどは質点がバネでつながっている状況を考えたが、今度は振り子がバネにつながっている状況を考える。質点

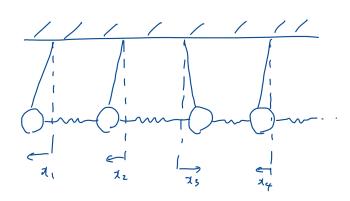


図 7 バネでつながれた振り子の系。回転波近似の元で Schrödinger 方程式が得られる。

との違いは、バネからの力以外にも振り子が元の位置に戻る重力もかかってくる点にある。振り子の自然振動数を ω とおくと、i 番目の振り子に関する運動方程式は次の形をとる:

$$m\frac{d^2x_i}{dt^2} = -m\omega^2x_i - k_{i-1,i}(x_i - x_{i-1}) + k_{i,i+1}(x_{i+1} - x_i).$$
(1.25)

ここで、複素変数

$$\alpha_i \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2}} x_i + i \frac{p_i}{\sqrt{2m\omega}} \tag{1.26}$$

を導入する。この定義は、位置と運動量が量子力学的な演算子だった場合の調和振動子の消滅演算子の定義と同じである。ただし、ここでは位置と運動量は古典的な変数であり、この複素変数 α_i も古典的な変数である。この複素変数を用いると運動方程式は以下の等価な形に書き換えることができる:

$$i\frac{d\alpha_{i}}{dt} = \left(\omega + \frac{k_{i-1,i} + k_{i,i+1}}{2m\omega}\right)\alpha_{i} - \frac{k_{i-1,i}}{2m\omega}\alpha_{i-1} - \frac{k_{i,i+1}}{2m\omega}\alpha_{i-1} + \frac{k_{i-1,i}}{m\omega}(\alpha_{i}^{*} - \alpha_{i-1}^{*}) + \frac{k_{i,i+1}}{m\omega}(\alpha_{i}^{*} - \alpha_{i+1}^{*}).$$
(1.27)

さて、ここで振り子の振動数 ω が他のエネルギースケールに比べてずっと大きいと仮定する。すると、他のスケールを無視する第 0 近似では右辺は $\omega\alpha_i$ となり、 $\alpha_i \propto e^{-i\omega t}$ が成り立つ。これはすなわち $\alpha_i^* \propto e^{i\omega t}$ ということで、 α_i^* は α_i に比べて 2ω 速く位相が変化している。ここで、運動方程式の残りの項を摂動的に加えることを考える。 α_i^* の項は α_i の項に比べて十分速く振動するため、 $1/\omega$ より十分長い時間スケールで考えると α_i^* の項は平均としてはゼロだとみなせる。これは回転波近似(Rotating wave approximation)と呼ばれている近似で、もちろんもっと正確に議論することもできる。 α_i^* の項を無視できるなら運動方程式は

$$i\frac{d\alpha_i}{dt} = \left(\omega + \frac{k_{i-1,i} + k_{i,i+1}}{2m\omega}\right)\alpha_i - \frac{k_{i-1,i}}{2m\omega}\alpha_{i-1} - \frac{k_{i,i+1}}{2m\omega}\alpha_{i-1}$$
(1.28)

となり、これはまさしく波動関数のi成分として α_i を持つような最近接ホッピングを持った格子模型のSchrödinger 方程式となっている。Newton 力学系で量子力学(Schrödinger 方程式)をシミュレートできる、というのは量子力学で知られているさまざまな現象(の一部)をNewton 力学系でも観測できるということであり、量子力学的な格子模型であってもその一粒子の性質はNewton 力学系で観測できることを意味する。

Newton 力学系ではさまざまな非エルミートな格子模型も比較的自由に実現することができる Anandwade et al. (2021)。本講義では非エルミート系はあまり取り上げないが、たとえば Newton 力学系で非エルミート系特有の Berry 位相の虚部を測定した実験が最近報告された Singhal et al. (2022)。

1.6 **そのほかの人工量子系**

ここで例を挙げたもの以外に非常に活発な研究が行われている人工量子系の例は多い。特に重要な例でここに取り上げなかったものに、超伝導量子ビット系、イオントラップ、光結晶、ナノフォトニクス、メタマテリアル、電気回路などがあるが、どれひとつをとっても一大研究分野を成している。ここに取り上げなかったのは紙幅と私の得意分野の都合であり、これらの系が他の系に比べて重要ではないということは全く意味しない。特に超伝導量子ビット系は最近は量子コンピュータの文脈で急速に研究が進展している。人工量子系に興味を持たれた方は一つの系にこだわらずさまざまな系を調べてみられることを勧めたい。往々にして一つの系で見つかった重要な概念は他の系にも適用できることがある。

2 トポロジカル物性の基礎

量子ホール効果とそのトポロジカルな意味付けの発見以来、トポロジカル物性の研究は大きな発展を遂げてきた。トポロジカル物性の考え方は人工量子系にも波及し、活発な研究が行われている。本節ではトポロジカル物性の基礎について、特に人工量子系への適用を念頭に置いて説明する。まず、そもそもトポロジカル物性とはなんだろうか。もしかして、以下のようなステートメントを見たことがあるかもしれない。(見たことがなくても問題ないので見たことのない方は気にする必要はない。)

ある量子状態 $|\alpha\rangle$ と別の量子状態 $|\beta\rangle$ が同じトポロジカル相に属するというのは、量子状態 $|\alpha\rangle$ があるハミルトニアン H のエネルギーギャップを持つ基底状態であり、そのギャップを保ったままハミルトニアンを変形して $|\beta\rangle$ を基底状態として持つ別のハミルトニアンに到達することができる場合を言う。また、このようなハミルトニアンの変形が存在しない場合 $|\alpha\rangle$ と $|\beta\rangle$ はトポロジカルに異なる相であると呼ぶ。

あるいは、次のようなステートメントを見たことがある方もいるかもしれない。

ある多体の量子状態 $|\alpha\rangle$ がトポロジカルに自明なのは、エネルギーギャップを保ったまま局所的は量子状態のテンソル積状態へと変形することが可能な場合のことを呼び、テンソル積状態に変形できない場合をトポロジカルに非自明と呼ぶ。

以下で見るように、これらのトポロジカル相の特徴づけは、人工量子系のトポロジカル状態の特徴づけとしてはあまり相応しくない。もちろん上記の状況に対応する状況も人工量子系には存在し、それらは上記の意味でトポロジカルである。しかし、上記の意味でトポロジカルと言うわけではないがトポロジカル物性の概念と深く関わるような状況も人工量子系ではしばしば現れる。人工量子系でより重要な概念はトポロジカルバンド構造である。トポロジカルバンド構造とは何であるか、簡単に説明する。

2.1 **バンド構造と** Bloch **の定理**

トポロジカルバンド構造はバンド構造の一種である。バンド構造とは、周期的なポテンシャル中で量子力学的な粒子がとるエネルギースペクトルと、対応する量子状態のことである。周期的なポテンシャル $V(\mathbf{r})$ の中を動く粒子を考える。例えば3次元系だと $\mathbf{r}=(x,y,z)$ である。周期的だというのはあるベクトル a の並進のもとで変わらない、つまり $V(\mathbf{r}+\mathbf{a})=V(\mathbf{r})$ ということである。このハミルトニアンの固有状態に関して Bloch の定理と呼ばれる定理が成り立つことが知られている。Bloch の定理とは、固有状態は自然数 n と擬運動量 $\mathbf{k}=(k_x,k_y,k_z)$ でラベル付けられ、固有値方程式を $H\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})=E_n(\mathbf{k})\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ とすると、固有状態を $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})=e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ のように平面波部分を取り出して書いたときに平面波以外の部分も元のポテンシャルと同じ周期性を持つ、つまり $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{a})=u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ というものである。以上の連続系における Bloch の定理はあらゆる固体物理の教科書に載っている。格子模型でもほぼ同じ Bloch の定理が成り立つ。人工量子系ではしばしば格子模型を考えることになる。格子系では N_i 個のサイトからなるユニットが周期的に分布している状況を考える。内部自由度 N_i は例えば電子の異なる軌道であったり、結晶を構成する異なる原子核上のサイトであったりする。すると、Bloch 関数 $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ の引数 \mathbf{r} は N_i 個の異なる内

部サイトを表すため、Bloch 関数は N_i 成分の複素ベクトルとなる。また、バンドの数は N_i 個であり、バンドインデックスは $n=1,2,\cdots,N_i$ という値をとり得る。

固有状態のうち周期的な部分は連続系では無限次元ヒルベルト空間の元であり、格子模型では N_i 次元のヒルベルト空間の元であり、どちらにしろ適当な複素ベクトル空間の元、つまりベクトルである。トポロジカルバンド構造というのは、このベクトルが運動量空間において織り成すテクスチャーの形(トポロジー)が非自明になる場合を言う。たとえば、一次元系であれば運動量空間を端から端まで移動するとこのベクトルが一回転しているというような状態である。ただし、このベクトルは一般に高次元の複素ベクトル空間の元なので以下に示すような単純な状況以外はトポロジーを視覚的に捉えるのは必ずしも容易ではない。ありがたいことに、数学者はこういった場合にトポロジカルな性質を計算する方法を昔から発展させてきており、物理学者はそれを使わせてもらうことができる。

以下、具体的に2次元のChern 絶縁体と1次元のカイラル対称なトポロジカル模型の例を考える。

2.2 Chern 絶縁体

Chern 絶縁体とは 2 次元の格子模型で、以下で定義する「バンドの Chern 数」がゼロでないトポロジカルな模型のことである。 2 次元の Chern 絶縁体の例として、まず Haldane 模型 Haldane (1988) を説明した後、Harper-Hofstadter 模型 Harper (1955); Hofstadter (1976) を説明する。

2.2.1 Haldane 模型

Haldane 模型では図 8(a) のように 2 次元の蜂の巣格子を考える。図に示すように蜂の巣格子を白いサイト(A サイト)と黒いサイト(B サイト)に分け、A サイトと B サイトの間にはエネルギーの差 2M があるとする。青矢印 \mathbf{R}_i で表される最近接のホッピングに加え、緑矢印 \mathbf{R}_i' の次近接のホッピングも考えるが、次近接のホッピングは図の左下の六角形中の矢印の方向にホップする場合は位相 ϕ をもち、逆向きのときには逆の位相 $-\phi$ になるとする。(逆向きでは逆位相でなければいけないのはハミルトニアンがエルミートであるという要請からくる。)最近接のホッピングは全て等しく位相は無いとする。

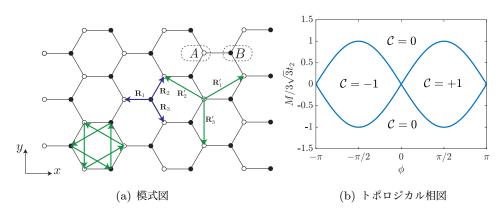


図 8 Haldane 模型 (a) 模式図。次近接のホッピングは位相 $\pm \phi$ を持つ。左下の六角形中に示された矢 印の方向にホップするときは位相は $+\phi$ である。(b) パラメータ空間 ϕ -M におけるトポロジカル相図。

この状況に対応するハミルトニアンを第二量子化された形で書くと以下のようになる:

$$\hat{H}_{\text{Haldane}} = t_1 \sum_{\mathbf{r},j} \left(a_{\mathbf{r}+\mathbf{R}_j}^{\dagger} b_{\mathbf{r}} + \text{H.c.} \right) + t_2 \sum_{\mathbf{r},j} \left(e^{i\phi} a_{\mathbf{r}+\mathbf{R}_j'}^{\dagger} a_{\mathbf{r}} + e^{-i\phi} b_{\mathbf{r}+\mathbf{R}_j'}^{\dagger} b_{\mathbf{r}} + \text{H.c.} \right) + M \sum_{\mathbf{r}} \left(a_{\mathbf{r}}^{\dagger} a_{\mathbf{r}} - b_{\mathbf{r}}^{\dagger} b_{\mathbf{r}} \right),$$
(2.1)

ここで $a_{\mathbf{r}}^{\dagger}$ $(a_{\mathbf{r}})$ は位置 \mathbf{r} にあるユニットセル内の A サイトの粒子の生成(消滅)演算子で、同様に $b_{\mathbf{r}}^{\dagger}$ $(b_{\mathbf{r}})$ は B サイトに粒子を生成(消滅)する演算子である。生成消滅演算子に対して次のフーリエ変換を行う:

$$a_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \int_{-\pi}^{\pi} dk_y e^{ik_x x + ik_y y} a_{\mathbf{k}}, \qquad b_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \int_{-\pi}^{\pi} dk_y e^{ik_x x + ik_y y} b_{\mathbf{k}}$$
(2.2)

するとハミルトニアンの異なる波数のセクターが分離され、波数に関してブロック対角の形になっている

$$\hat{H}_{\text{Haldane}} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} a^{\dagger}(\mathbf{k}) & b^{\dagger}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} H_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} a(\mathbf{k}) \\ b(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \tag{2.3}$$

ここで、2x2 のエルミート行列である H_k はそれぞれの波数において内部状態(A サイトと B サイト)が どのように混ざるのかを表す部分で波数空間のハミルトニアンと呼ばれ、次のような形をとっている:

$$H_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} M + 2t_2 \sum_{j} \cos(\phi - \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}'_j) & t_1 \sum_{j} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \\ t_1 \sum_{j} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} & -M + 2t_2 \sum_{j} \cos(\phi + \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}'_j) \end{pmatrix}$$
$$= d_0(\mathbf{k}) \hat{I}_{2 \times 2} + \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \tag{2.4}$$

ここで

$$d_0(\mathbf{k}) = 2t_2 \sum_j \cos(\phi) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}'_j), \qquad d_x(\mathbf{k}) = t_1 \sum_j \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j),$$

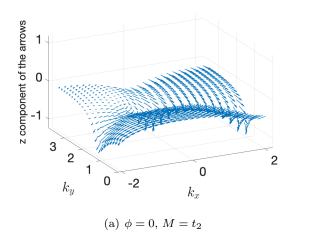
$$d_y(\mathbf{k}) = t_1 \sum_j \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j), \qquad d_z(\mathbf{k}) = M + 2t_2 \sum_j \sin(\phi) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}'_j). \qquad (2.5)$$

波数空間のハミルトニアンの固有値は以下の二つであり、これがエネルギーバンド構造を成す。

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = d_0(\mathbf{k}) \pm \sqrt{d_x(\mathbf{k})^2 + d_y(\mathbf{k})^2 + d_z(\mathbf{k})^2}.$$
 (2.6)

系は適当な \mathbf{k} において $d_x(\mathbf{k}) = d_y(\mathbf{k}) = d_z(\mathbf{k}) = 0$ が成り立つときバンドギャップが閉じており、ギャップレスになる。これは $M = \pm 3\sqrt{3}t_2\sin\phi$ のときにのみ成り立ち、それ以外の場合には系はエネルギーギャップがある。 ϕ と M で張られるパラメータ空間においてエネルギーギャップがない領域を青い線で描くと図 $8(\mathbf{b})$ のようになる。図中の C は Chern 数と呼ばれるトポロジカル不変量だが、その意味は後で解説する。

このパラメータ空間はギャップが閉じる青い線によって 4 つの領域に分かれている。この中で $\mathcal{C}=+1$ と書かれている領域と $\mathcal{C}=0$ と書かれている領域から代表的な点をひとつずつ選び、そこにおいて $H_{\mathbf{k}}$ の エネルギーが低い方の固有状態を矢印としてプロットしたものが図 9 である。この矢印が何をプロットしているのか少し説明が必要である。 $H_{\mathbf{k}}$ の固有状態は 2 成分の複素ベクトルで (z_1,z_2) の形をしているが、全体に複素定数倍をしても同じ状態を表す。したがって、大事なのは第一成分と第二成分の比である。第一成分を第二成分で割った数は複素数で、それを $z\equiv z_1/z_2$ とする。第二成分がゼロの場合は z が無限遠に対応していると考える。複素平面に無限遠点を付け加えたものは球面との自然な対応関係があることが



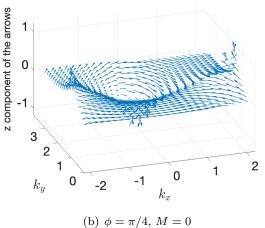


図 9 Haldane 模型の固有状態を矢印として波数空間で表示したもの。 $t_2 = 0.1t_1$ としている。z 軸は矢印の z 成分を表しているが特に意味はない。左はトポロジカルに自明で右は非自明。

知られている。この球面上の点を単位長のベクトルとして表したものが各点の矢印である。より具体的に書くと、(無限遠点を含む) 複素数 z に対して 3 次元空間に埋め込まれた単位球上の点を次のように対応させる:

$$z = \text{Re}[z] + i \text{Im}[z] \iff \left(\frac{2\text{Re}[z]}{|z|^2 + 1}, \frac{2\text{Im}[z]}{|z|^2 + 1}, \frac{|z|^2 - 1}{|z|^2 + 1}\right)$$
(2.7)

以上の説明をもう少し数学的な言葉で言うと、 $H_{\mathbf{k}}$ の固有状態で定数倍を同一視したものは複素射影空間 $\mathbb{C}P^1$ の元なので、立体射影を通じた $\mathbb{C}P^1$ と球面 S^2 の同相関係を用いて球面上の点を図示しているということである。

さて、図 9(a) では矢印が全て下を向いている。上を向いた矢印が存在しないということは矢印が球面を覆っていないことを意味し、トポロジカルには自明な状態に対応する。一方、図 9(b) では矢印が上も下も向いており、矢印が全体として球面を一回覆っている。これがトポロジカルに非自明な状態である。矢印が球面を何回覆うかというのを定量的に計算する方法がある。波数 k に関する正規化された(長さが 1 の)固有状態をケット表示して $|u_n(\mathbf{k})\rangle$ と書く。ここで n は何番目の固有状態を見ているか、つまりどのバンドなのかを指定している。固有状態の矢印が波数空間でどの程度曲がっているのかを定量的に表す量として Berry 曲率 $\Omega(\mathbf{k})$ という量を定義できる。

$$\Omega(\mathbf{k}) = i \left[\left\langle \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial k_x} \middle| \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial k_y} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial k_y} \middle| \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial k_x} \right\rangle \right]$$
(2.8)

ここで $\left|\frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial k_i}\right\rangle = \frac{\partial}{\partial k_i}|u_n(\mathbf{k})\rangle$ のような記法を用いている。この Berry 曲率は $|u_n(\mathbf{k})\rangle$ の位相の不定性に依存しないいわゆるゲージ不変な量である。Berry 曲率は波数空間の各点での固有状態の「曲がり方」を表しているが、これを波数空間全体で積分すると全体として固有状態の矢印が球面を何回覆っているのかを表すトポロジカル数(不変量)が得られる:

$$C = \frac{1}{2\pi} \int_{i \not = \pm \infty} d^2 k \Omega(\mathbf{k}). \tag{2.9}$$

この量は Chern 数と呼ばれ、常に整数の値を取ることが分かる。図 8(b) の各領域において対応する Chern 数を記しておいた。Chern 数がゼロではないバンドを持つような模型を Chern 絶縁体と呼ぶ。(絶縁体というのはいくつかのバンドをフェルミオンが完全に占有している状況を表しており、電子系その他のフェルミオン系を意識した用語ではあるが、単に一粒子のバンド構造として Chern 数がゼロではないようなバンドを持つようなものも Chern 絶縁体と呼ぶことがある。ボソンを扱う人工量子系では Chern 絶縁体は必ずしも本来の意味での絶縁体ではない。)

Chern 数がゼロでないバンドを得るためには時間反転対称性を破る必要があるということを少し説明する。時間反転対称性 T とはハミルトニアン H と可換な反ユニタリ演算子のことである。反ユニタリ演算子とは複素共役とユニタリ演算子の積で、ユニタリ演算子は内部自由度(スピンなど)の空間に作用する。今ここではスピンのない粒子を考えているので時間反転対称性の演算子は複素共役のことである。ハミルトニアンと可換であるというのは(ここでは $T^{-1}=T$ なので)THT=H のことだが、波数空間のハミルトニアンを考えると時間反転操作は \mathbf{k} を $-\mathbf{k}$ に移すため $TH(\mathbf{k})T=H(-\mathbf{k})$ という関係が成り立つ。したがって、 $H(\mathbf{k})|u_n(\mathbf{k})\rangle=E_n(\mathbf{k})|u_n(\mathbf{k})\rangle$ の両辺に左から T をかけると $H(-\mathbf{k})T|u_n(\mathbf{k})\rangle=E_n(\mathbf{k})T|u_n(\mathbf{k})\rangle$ を得る。これはすなわち時間反転対称な系では $T|u_n(\mathbf{k})\rangle=|u_n(\mathbf{k})\rangle^*$ は $H(-\mathbf{k})$ の固有関数で固有値は $E_n(\mathbf{k})$ であることを示している。したがって、 $|u_n(-\mathbf{k})\rangle=|u_n(\mathbf{k})\rangle^*$ と書ける。この関係を用いると時間 反転対称な系では反対の波数に関して Berry 曲率に以下の関係が成り立つことが分かる。

$$\Omega(-\mathbf{k}) = i \left[\left\langle \frac{\partial u_n(-\mathbf{k})}{\partial k_x} \middle| \frac{\partial u_n(-\mathbf{k})}{\partial k_y} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial u_n(-\mathbf{k})}{\partial k_y} \middle| \frac{\partial u_n(-\mathbf{k})}{\partial k_x} \right\rangle \right]
= i \left[\left\langle \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial k_x} \middle| \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial k_y} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial k_y} \middle| \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial k_x} \right\rangle \right]^*
= -i \left[\left\langle \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial k_x} \middle| \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial k_y} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial k_y} \middle| \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial k_x} \right\rangle \right] = -\Omega(\mathbf{k}).$$
(2.10)

Chern 数は Berry 曲率の運動量空間での積分で得られるが、時間反転対称な系では $\Omega(-\mathbf{k}) = -\Omega(\mathbf{k})$ という関係により Chern 数が常にゼロであることが分かる。つまり、ゼロではない Chern 数を得るためには時間反転対称性を破るようなハミルトニアンを考える必要がある。実際、Haldane 模型はホッピングに位相がついていることにより時間反転(ここでは複素共役)と可換ではなくなっており、時間反転対称性を破っている。次の章で人工量子系での Chern 絶縁体の実現方法を見るが、いかに時間反転対称性を破るかというのが一つのテーマとなる。

「固有状態を表す矢印が球面を何回覆うか」を表すトポロジカル数である Chern 数は単に数学的に定義された量のように思えるが、そこには重大な物理的帰結がある、というのがトポロジカルバンド構造の核心である「バルク・エッジ対応」である。詳しくは以下の関係が成り立つ:

あるエネルギーバンドの Chern 数がゼロでは無い場合、(周期境界条件ではなく)境界がある系を考えるとその境界に局在した固有状態が存在する。境界に局在した状態はエネルギー的にはバンドギャップ中に存在し、境界に局在する固有状態のモードの数と Chern 数が一致する。

Chern 数を計算する際には周期境界条件を仮定し波数空間で行う。これはバルクの性質、と呼ばれる。それが境界(エッジ)に局在した状態と関係しているため、バルク・エッジ対応と呼ばれる。

バルク・エッジ対応を確認するため、実際に境界(エッジ)がある形のエネルギースペクトルを示す。x方向に 200 サイト分のびている有限系を考える。y方向には周期境界条件を保っておくと k_u は良い量子数

のままであり、ハミルトニアンを各 k_y で対角化してスペクトルを計算することができる。その結果を図 10 に示す。左が Chern 数がゼロの場合、真ん中が Chern 数が1 の場合、そして、右がx 方向にも周期境界条件を取りエッジを無くした場合のスペクトルである。Chern 数が1 のときには上下のバンドをつなぐモードが存在するが、これがエッジに局在したモードである。2 本の線で繋がれているが、そのうちの一つが系の右側に局在し、もう一つが左側に局在している。これらギャップ内モードの固有状態の波動関数を実空間でプロットしたのが図 10(d) と (e) である。バンド間を左下から右上につなぐ線は右側のエッジに局在し、左上から右下につなぐ線は左側のエッジに局在していることが分かる。2 本の線が系の周囲をまわるモード1 つ分に対応している。Chern 数がゼロの場合にはバンドをつなぐモードは存在しないことが分かる。ただし、バンドギャップをつながないエッジモードの存在は見てとれる。Chern 数とバルク・エッジ対応が教えてくれるのはあくまでもバンド間をつなぐエッジモードの数である。周期境界条件の場合(右図)にはもちろんエッジモードはどこにも存在しない。

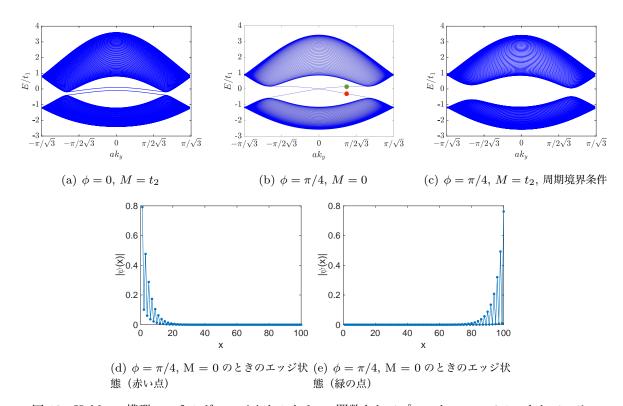


図 10 Haldane 模型のエネルギースペクトルを k_y の関数としてプロット。 $t_2=0.1t_1$ としている。 (a) と (b) では x 方向に境界を考えている。(c) は周期境界条件。(d, e) エッジ状態の波動関数の実空間の分布。

バンドをつなぐエッジ状態のうち右側に局在したモードは主に一つの方向に群速度を持ち、左側に局在したモードは逆方向の群速度を持つ。(群速度の向きはバンド構造の傾きから分かる。)右側をある方向に伝播するモードが仮に不純物にぶつかったとしても、逆向きに進むモードは(左側のエッジまで散乱しない限り)存在せず、結局不純物を迂回してもとの方向に流れ続けることになる。このように一方向にしか流れないエッジ状態をカイラルエッジ状態と呼ぶ。カイラルエッジ状態は逆向きに散乱しないためロバストで、このロバスト性がトポロジカルバンド構造の応用への興味も生んでいる。

バルク・エッジ対応の一般的な証明を与えるのはそれほど簡単ではないが、次に Jackiw-Rebbi 模型と呼ばれる理想化された状況でその仕組みを見てみよう。

2.2.2 バルク・エッジ対応と Jackiw-Rebbi 模型

Jackiw-Rebbi 模型は2次元空間の2成分スピノルに関する次のハミルトニアンで与えられる。

$$H_{\rm JR} = v_D \left(\hat{p}_x \sigma_x + \hat{p}_y \sigma_y \right) + m \sigma_z = H_{\rm JR}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} m & v_D (-i\partial_x - \partial_y) \\ v_D (-i\partial_x + \partial_y) & -m \end{pmatrix}$$
(2.11)

ここで m=0 のとき二つのエネルギーバンドは運動量ゼロの点でギャップが閉じている $m\neq 0$ でギャップが開く。この m を(高エネルギー物理の言葉遣いに由来して)質量項と呼ぶ。質量ゼロ (m=0) でギャップが閉じている時、分散は線形であり、その傾きは v_D で与えられる。この v_D は(また高エネルギー物理に由来して)Dirac 速度と呼ばれる。すぐ下で m を空間変化させる状況を考えるが、m が定数の場合には運動量演算子 $\hat{p}_i = -i\partial_i$ は波数 k_i と同一視して良い。Haldane 模型とは似ても似つかないように見えるが、Haldane 模型の波数空間のハミルトニアン(2.4)をギャップが閉じる点の周りで波数空間で展開した時の波数の小さいところでは Jackiw-Rebbi 模型のようになっているので、トポロジカル相転移の付近を有効的に記述する模型だと考えて欲しい。

さて、 $m \neq 0$ と v_D を固定したとき、波数空間のハミルトニアンは

$$H_{\rm JR}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} m & v_D(k_x - ik_y) \\ v_D(k_x + ik_y) & -m \end{pmatrix}$$
 (2.12)

であり、エネルギー固有値は $E_{\pm}(\mathbf{k})=\pm\sqrt{m^2+v_D^2(k_x^2+k_y^2)}$ である。固有状態は

$$|\psi_{\pm}(\mathbf{k})\rangle \propto \begin{pmatrix} m \pm \sqrt{m^2 + v_D^2(k_x^2 + k_y^2)} \\ v_D(k_x + ik_y) \end{pmatrix}$$
 (2.13)

である。定義に従って Berry 曲率を計算すると

$$\Omega_{\pm}(\mathbf{k}) = \mp \frac{mv_D^2}{(m^2 + v_D^2(k_x^2 + k_y^2))^{3/2}}.$$
(2.14)

であることが分かる。ここで波数空間は無限に広がっている(コンパクトではない)が、気にせず Chern 数を Berry 曲率の積分から計算してみると

$$C_{\pm} = \mp \frac{1}{2} \operatorname{sign}(m), \tag{2.15}$$

となる。まず、mの符号が本質的に効いてくることが分かる。あと、Chern 数の絶対値は 1/2 になり、整数値にならない。整数にならないのは波数空間がコンパクトではないからである。整数にならないといろいろ都合が悪いような気がするが、そこには目をつぶってここで m の符号が異なる領域をくっつけて見ることを考えてみる。すると、領域の境界での両側の Chern 数の差は 1 になって整数である。Chern 数の差が整数だということに着目し、もう少し何が起きるのかを探ってみよう。

質量 m の符号の異なる領域をくっつけるという状況を考えるため、質量 m に x 方向への空間依存性を持たせ、m(x) として m(0)=0 で x<0 の領域で m(x)<0、x>0 の領域で m(x)>0 だとする。y 方向

への空間依存性はないものとすると y 方向への波数は依然として良い量子数である。しかし x 方向の波数 は良い量子数ではない。Jackiw-Rebbi ハミルトニアンが次の固有状態を持つことが直接の計算でわかる

$$|\psi_b\rangle = e^{ik_y y} \exp\left(-\frac{1}{v_D} \int_0^x m(x')x'\right) \begin{pmatrix} 1\\i \end{pmatrix}.$$
 (2.16)

対応する固有エネルギーは $v_D k_y$ である。質量 m(x) が x=0 を境に符号を変えることから、解 $|\psi_b\rangle$ は x=0 の周りに局在していることが分かる。また、エネルギーが $v_D k_y$ であることから、($v_D>0$ を仮定すると) この解は y 方向に正の群速度を持つことが分かる。つまり、Chern 数の差が 1 であるような境界に おいて境界に垂直方向には局在し、境界に沿った方向には一方向に流れるような解、つまりカイラルエッジ 状態を解として持つことが分かる。一般に Chern 数が変化するような境界には局在する解が存在するというのがバルク・エッジ対応であり、Jackiw-Rebbi 模型でそれを具体的に確認できる。

トポロジカル物性は整数量子ホール効果の発見で始まったと言える Klitzing et~al.~(1980)。整数量子ホール効果とは2次元電子系でホール伝導度が量子化されるという現象である。もう少し具体的にいうと2次元電子系でx方向に電場 E_x をかけるとy方向へ電流が流れる。この電場に対する垂直方向の電流をホール電流と呼ぶ。磁場が強い時、ホール電流の密度 j_y と電場の間に以下の関係が成り立つことが発見された。

$$j_y = \frac{e^2}{h} E_x \mathcal{C},\tag{2.17}$$

ここで e は電子の電荷、h はプランク定数で C 電子によって占有されたランダウ準位の数である。のちの人たちにより、ランダウ準位の Chern 数は 1 であることがわかった。したがって、ホール電流密度は占有された準位の Chern 数の合計である。バルク・エッジ対応により、占有された準位の Chern 数の合計に等しい数のエッジモードが存在する。ホール電流はまさにエッジモードを通じて流れており、ホール電流の流れやすさ(伝導度)がエッジモードの数に比例し、エッジモードの数が占有された準位の Chern 数の合計に等しいためにホール電流が Chern 数の合計に等しいという関係が成り立っている。整数量子ホール効果はバルク・エッジ対応の一つの帰結である。

2.2.3 Harper-Hofstadter 模型

バンドのトポロジーが非自明であることから起きる現象として最初に見つかったのはこの整数量子ホール効果であった。Landau 準位は磁場下の連続空間の固有状態だが、それを格子模型で考えるのがHarper-Hofstadter 模型である。

2次元正方格子に垂直磁場がかかっている状況を考えたいが、tight-binding の格子模型で磁場(ベクトルポテンシャル)の影響はホッピングに位相がつくことで取り込むことができる。粒子が位置 \mathbf{r}_1 のサイトから \mathbf{r}_2 のサイトへホッピングする時、ホッピングには以下の位相が付く:

$$e \int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{r}_2} d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}), \tag{2.18}$$

ここで線積分は直線を取る。この位相を Peierls 位相と呼ぶ。したがって、Landau ゲージ $\mathbf{A}=(0,Bx)$ を取ると Harper-Hofstadter 模型のハミルトニアンは次のように書ける

$$H_{H-H} = -t \sum_{x,y} \left(c_{x+a,y}^{\dagger} c_{x,y} + e^{i2\pi\alpha x/a} c_{x,y+a}^{\dagger} c_{x,y} + \text{H.c.} \right)$$
 (2.19)

ここで a はサイト間の距離で t は実数である。消滅演算子 $c_{x,y}$ は位置 (x,y) のサイトの粒子を消滅する演算子である。パラメータ $\alpha=eBa^2/h$ が磁場の強さを表している。正方格子の一つの格子をぐるりとホップすると合計で $2\pi\alpha$ の位相を得るため、パラメータ α が格子一つをつらぬく磁束の数を表している。模式図を図 11 に示した。

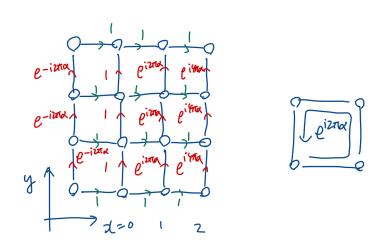


図 11 Harper-Hofstadter 模型の模式図。y 方向のホッピングにx 依存性のある位相がつく。

運動量空間のハミルトニアンを導出し、エネルギースペクトルや Berry 曲率、Chern 数などを計算してみよう。まず、 $\alpha \neq 0$ があるために周期性が少し変わってくることに注意する。もし α が有理数で $\alpha = p/q$ という形で互いに素な自然数 p と q を用いて α が書けるなら $e^{i2\pi\alpha q}=1$ なので x 方向に q サイトを含む細長いユニットセルを取ればハミルトニアンは周期的になる。この場合はユニットセル内に q サイト存在するために波数空間のハミルトニアンは $q\times q$ となり、全部で q バンド現れる。一方 α が無理数の場合にはどんなユニットセルを取ってもハミルトニアンは周期的にならない。以下の議論では α は有理数だと仮定する。有理数の集合の中で稠密なのでどんな α を取ってきてもそれに十分近い有理数を考えることができるので実用上の問題はないが、無理数の場合には以下の議論はそのままでは成り立たないことは念頭に置いておくと良い。まず生成消滅演算子をフーリエ変換する:

$$c_{x,y} = \frac{1}{\sqrt{L_x L_y}} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \int_{-\pi}^{\pi} dk_y \, e^{ik_x x + ik_y y} c_{\mathbf{k}}, \tag{2.20}$$

ここで L_x と L_y は x と y 方向の格子点の数である。フーリエ変換するとハミルトニアン (2.19) は以下の

形になる。

$$H_{\rm H-H} = -\frac{t}{L_x L_y} \sum_{x,y} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \int_{-\pi}^{\pi} dk_y \int_{-\pi}^{\pi} dk_x' \int_{-\pi}^{\pi} dk_y' \left(e^{-ik_x(x+a) - ik_y y + ik_x' x + ik_y' y} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} \right)$$

$$+ e^{i2\pi\alpha x/a - ik_x x - ik_y(y+a) + ik_x' x + ik_y' y} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} + \text{H.c.}$$

$$= -t \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \int_{-\pi}^{\pi} dk_y \left(e^{-ik_x a} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + e^{-ik_y a} c_{\mathbf{k}+(2\pi\alpha/a,0)}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + \text{H.c.} \right)$$

$$= -t \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \int_{-\pi}^{\pi} dk_y \left(2\cos(k_x a) c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + e^{-ik_y a} c_{\mathbf{k}+(2\pi\alpha/a,0)}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + e^{ik_y a} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+(2\pi\alpha/a,0)} \right).$$
 (2.21)

このハミルトニアンは波数が $(2\pi\alpha/a,0)$ だけ違う部分が結合しているため ${\bf k}$ に関して対角ではない。書き直すと

$$H_{\mathrm{H-H}} = -t \int_{-\pi/q}^{\pi/q} dk_x \int_{-\pi}^{\pi} dk_y \sum_{j=0}^{q-1} \left(2\cos(k_x a + 2\pi j\alpha) c_{\mathbf{k}+(2\pi j\alpha/a,0)}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+(2\pi j\alpha/a,0)} \right)$$

$$+ e^{-ik_y a} c_{\mathbf{k}+(2\pi (j+1)\alpha/a,0)}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+(2\pi j\alpha/a,0)} + e^{ik_y a} c_{\mathbf{k}+(2\pi j\alpha/a,0)}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+(2\pi (j+1)\alpha/a,0)} \right)$$

$$\equiv \int_{-\pi/q}^{\pi/q} dk_x \int_{-\pi}^{\pi} dk_y \hat{H}_{\mathbf{k}}, \qquad (2.22)$$

ここで波数空間のハミルトニアン $\hat{H}_{\mathbf{k}}$ を定義したが、これは \mathbf{k} に関して対角である。しかし \mathbf{k} に関する積分区間が $-\pi/qa \le k_x \le \pi/qa$ と $-\pi \le k_y \le \pi$ という形で k_x 方向に少し短くなっている。 k_x 方向に波数空間が q 倍短いのはまさにユニットセルとして x 方向に q サイトを含むような長いものをとっているからである。この小さくなった波数空間(Brillouin ゾーン)を通常「magnetic Brillouin zone」と呼ぶ。

 $\hat{H}_{\mathbf{k}}$ の固有状態が Bloch 状態であり、固有値がエネルギースペクトルを与える。

$$\Psi^{\dagger}(\mathbf{k}) \equiv \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} & c_{\mathbf{k}+(2\pi\alpha/a,0)}^{\dagger} & c_{\mathbf{k}+(4\pi\alpha/a,0)}^{\dagger} & \cdots & c_{\mathbf{k}+(2\pi(q-1)\alpha/a,0)}^{\dagger} \end{pmatrix}, \tag{2.23}$$

と定義すると波数空間のハミルトニアンは $\hat{H}_{\mathbf{k}}=\Psi^{\dagger}(\mathbf{k})H_{\mathbf{k}}\Psi(\mathbf{k})$ と書ける。ここで

$$H_{\mathbf{k}} \equiv -t \begin{pmatrix} 2\cos(k_{x}a) & e^{ik_{y}a} & 0 & \cdots & e^{-ik_{y}a} \\ e^{-ik_{y}a} & 2\cos(k_{x}a + 2\pi\alpha) & e^{ik_{y}a} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ e^{ik_{y}a} & 0 & 0 & \cdots & 2\cos(k_{x}a + 2\pi(q - 1)\alpha) \end{pmatrix}.$$
(2.24)

である。この行列の n 番目の固有ベクトルが Bloch 状態 $|u_{n,k}\rangle$ である。磁束の大きさ α の関数としてエネルギースペクトルをプロットしたものが Hofstader's butterfly と呼ばれるもので、図 12 に示す。

さて、Bloch 関数が得られたなら定義に従って Berry 曲率を計算することができ、Berry 曲率を積分すれば Chern 数を計算することもできる。具体的に $\alpha=1/5$ でどうなるのか見てみよう。図 13(a) で magnetic Brillouin zone 中でのエネルギースペクトルをプロットした。それぞれのバンドについて Berry 曲率をプロットしたのが図 13(b-f) である。真ん中のバンド以外は Berry 曲率は基本的に負の値をとって いることがわかる。Berry 曲率を積分することで Chern 数は下のバンドから順に -1, -1, +4, -1, -1 で あることがわかる。Chern 数の和はゼロであり、これは運動量空間の各点で Berry 曲率の和がゼロである こと(これは簡単に示せる)から従う。

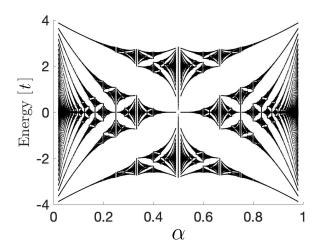


図 12 Harper-Hofstadter 模型のエネルギースペクトル。Hofstadter's butterfly と呼ばれる。

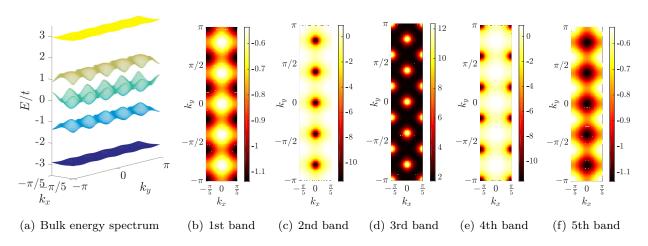


図 13 Harper-Hofstadter 模型の $\alpha=1/5$ でのエネルギースペクトルと Berry 曲率

さて、先述のバルク・エッジ対応により Chern 数に対応したエッジ状態が存在するはずである。エッジがあるときのエネルギースペクトルの計算方法を示し、そしてエネルギースペクトルを示す。y 方向には周期的だが x 方向にはエッジが存在するような状況を考える。y 方向にだけフーリエ変換を行う:

$$c_{x,y} = \frac{1}{\sqrt{L_y}} \int_{-\pi}^{\pi} dk_y \, e^{ik_y y} c_{x,k_y}. \tag{2.25}$$

するとハミルトニアンは

$$H_{H-H} = -t \int_{-\pi}^{\pi} dk_y \sum_{x} \left(c_{x+a,k_y}^{\dagger} c_{x,k_y} + c_{x-a,k_y}^{\dagger} c_{x,k_y} + 2\cos(2\pi\alpha x/a - k_y a) c_{x,k_y}^{\dagger} c_{x,k_y} \right)$$

$$\equiv \int_{-\pi}^{\pi} dk_y H_{\text{edge}}(k_y). \tag{2.26}$$

ここで $H_{\rm edge}(k_y)$ を対角化すれば x 方向にエッジがある時のエネルギースペクトルを k_y の関数として計算することができる。その結果を図 $14({\rm a-c})$ に示す。 $\alpha=1/3$ 、1/4 そして 1/5 の 3 種類の磁場の強さについ

て計算している。バンド間をつなぐ状態が発生していることがわかる。このバンド間の状態を二つ選んで その Bloch 関数の空間分布を表示したのが図 14(d,e) であり、実際にエッジに局在していることがわかる。

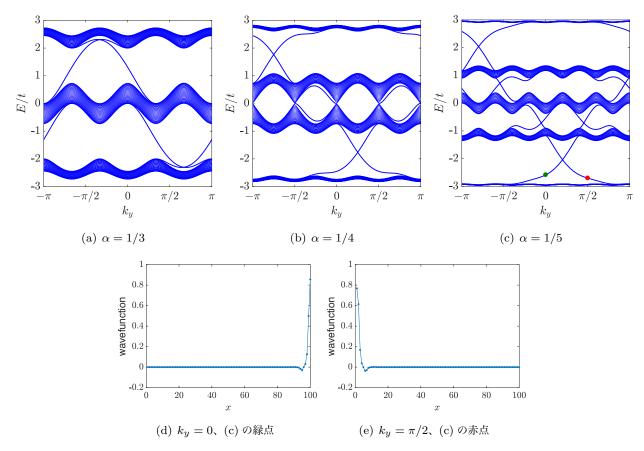


図 14 (a-c) x 方向に 100 サイトを考えエッジをつけた場合の Harper-Hofstadter 模型のエネルギースペクトルを k_y の関数としてプロット。(d,e) $\alpha=1/5$ でエッジ状態を二つ選んで Bloch 波動関数の空間分布をプロット。選んだ点は (c) で緑と赤の点で示してある。

2.2.4 Chern **絶縁体の数学**

上で固有状態の曲がり方を表す Berry 曲率やそれを積分した Chern 数を定義した。これらの数学的な意味を簡単に解説する。波数空間のハミルトニアン $H_{\mathbf{k}}$ を対角化して得られる固有状態を $|u_n(\mathbf{k})\rangle$ と書く。以下の議論ではバンドインデックス n は固定する。 N_i バンド系では $H_{\mathbf{k}}$ は N_i × N_i のエルミート行列であり、 $|u_n(\mathbf{k})\rangle$ は N_i 成分の複素ベクトルである。固有状態に定数をかけても固有状態なので、固有状態は $|u_n(\mathbf{k})\rangle$ を基底とした一次元の複素ベクトル空間を指定すると言っても良い。つまり、n を固定した時、バンドの固有状態は波数空間の各点に一次元複素ベクトル空間を対応させるものだと考えられる。波数空間は(いま2次元を考えると)2次元のトーラスを成している。つまり、バンドの固有状態はトーラス上の複素ベクトル東、特にベクトル空間が1次元なので複素線束(Complex Line Bundle)に対応している。 N_i 成分ベクトル $|u_n(\mathbf{k})\rangle$ はこの複素線束の一つの切断を与えている。こうして問題はトーラス上の複素線束のトポロジカルな分類ということになるが、ベクトル束の分類は数学的な研究が進んでおり、その結果を使うことができる。

特に複素ベクトル東のトポロジカルな不変量として Chern 類や Chern 指標という底空間(ここではトーラス)のド・ラームコホモロジー類が存在することが知られている。 Chern 類や Chern 指標は整数に値を持つコホモロジー類なのでそれを底空間(ここではトーラス)上で積分すると整数値が得られる。特に Chern 指標を積分して得られる整数が上に出てきた Chern 数である。波数空間上の複素ベクトル東の Chern 数がゼロでない場合に実空間の境界にエッジ状態が発生する事情は数学的には指数定理と関係しているが、物理学者にも分かりやすい説明が講義ノート Delplace (2022) に見られる。

2.3 1次元カイラルハミルトニアン

1 次元のカイラルハミルトニアンは Su-Schrieffer-Heeger 模型に代表される。 1 次元系でトポロジカルなバンド構造を得ようとすると何らかの対称性が必要になる。その意味をまず説明する。

Chern 絶縁体の例と同様に、波数空間上に定義された Bloch 状態のトポロジーを考える。波数空間は 0 から 2π までの値をとり、0 と 2π は同一視される、つまり円周 S^1 と同相である。一方、Bloch 状態は先に も述べたように N バンド系では N 次元複素ベクトルで表されるが、全体にかかる複素数倍だけの不定性 がある、つまり $\mathbb{C}P^{N-1}$ である。つまり \mathbb{I} 次元系で波数空間から $\mathbb{C}P^{N-1}$ である。つまり $\mathbb{C}P^{N-1}$ である。 類とは S^1 から $\mathbb{C}P^{N-1}$ への連続写像のトポロジカルな分類を考えることに相当する。 S^1 から位相空間へ の連続写像は基本群と呼ばれる群で分類される。波数空間から Bloch 状態への写像が一つ与えられたらそ れが基本群の一つの要素と対応し、基本群の異なる要素とは連続変形で移り合えない。ここで基本群と言っ ているのは群構造があるからだが、トポロジカルな分類を考える上でこの群構造は差し当たって意味を持 たないので群であることは気にする必要はない。つまり、波数空間から Bloch 状態への写像のトポロジカ ルな分類は $\mathbb{C}P^{N-1}$ の基本群を調べればわかることになるが、実は $\mathbb{C}P^{N-1}$ の基本群は N の値がいくつで あっても自明であることが知られている。つまり、どんな写像であっても互いに連続変形で移り変われる のである。例えば N=2 のときに $\mathbb{C}P^1 \approx S^2$ で、 S^1 である 1 次元波数空間から S^2 への連続写像は S^2 の 上に閉じた線を描くことに対応しているが、 S^2 上の閉じた線は常に連続変形で一点に縮めることができる ことは直感的に理解できるのではないかと思う。2次元では波数空間から Bloch 状態への写像が適切に定 義された球面を何回覆うかに応じてトポロジカルに異なるセクターに別れていたが、1次元ではそれと全 く異なりトポロジカルなセクターが一つしか存在しないことになる。2次元で非自明なトポロジーが生じ た理由を少し補足する。基本群は1次のホモトピー群と呼ばれる量に対応しており、2次元の拡張として は 2次のホモトピー群を考えることになる。 $\mathbb{C}P^{N-1}$ の 2次のホモトピー群は \mathbb{Z} 、つまり整数(の加法群) となっていることが知られている。この整数値が2次元のときに矢印が球面を何回覆っていたかに対応し、 具体的には Chern 数を計算することで求めることができる。

若干数学的な話が続いてしまったが、要するに 1 次元の格子模型は全てトポロジカルに同等であってトポロジカルに異なる模型は存在しないということである。それでは 1 次元では打つ手なしかというと、そういうわけでもない。波数空間から Bloch 状態の空間への写像のあらゆる連続変形を考えると上述のように全てトポロジカルに自明になってしまうが、系に対称性を課して、可能な連続変形のクラスを制限すると、その対称性を保つ限りでは連続的に移り変われない写像というのが存在する。それが次に説明する 1 次元のカイラルハミルトニアンで、その代表例が Su-Schrieffer-Heeger 模型である Su et al. (1979)。

Su-Schrieffer-Heeger 模型(以下 SSH 模型と呼ぶ)は一次元の格子模型で、ホッピングの強さが交互に変化する。図 15(a) にその模式図を示す。図 15(b) のように二つの格子点でユニットセルを構成すると並

進対称性がある。ユニットセル内のホッピングを t_1 、セル間のホッピングを t_2 とする。以下表記上の煩雑さを避けるために t_1 と t_2 は共に実数だとするが、この仮定は別に必要ではない。ユニットセル内の左側の格子点からなる点の集合を A 副格子、そして右側の点の集合を B 副格子と呼ぶことにする。SSH 模型ではホッピングは異なる副格子の間にだけ存在し、同一の副格子の間にはホッピングは存在しないことに注意する。これが次に述べるカイラル対称性である。

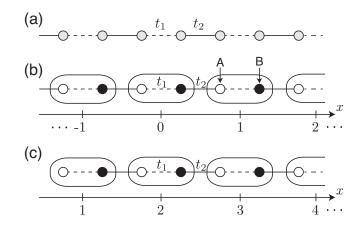


図 15 Su-Schrieffer-Heeger (SSH) 模型の模式図 (a) SSH 模型は交互にホッピングが代わる一次元の模型。ここではホッピングを t_1 と t_2 とおいている。 (b) 横長の丸で囲んだようにユニットセルを取れば並進対称性がある。副格子 A に属する格子を白抜きの丸で、副格子 B に属する格子を黒丸で表している。 (c) 左端に境界がある場合はこのようになる。

SSH 模型のハミルトニアンは次の形をとる。

$$H = \sum_{x} \left(t_1 b_x^{\dagger} a_x + t_2 a_{x+1}^{\dagger} b_x + h.c. \right). \tag{2.27}$$

ここで a_x は位置 x にあるユニットセルの左側の格子(つまり A 副格子)に関する消滅演算子で、 b_x は位置 x にあるユニットセル内の B 副格子の点に関する消滅演算子である。演算子を並べて

$$\Psi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{2.28}$$

という順番に書く。(格子は x=1 から始まっていると仮定しているが、そこは別に本質的な仮定ではない。)すると、ハミルトニアンは次の形になる

$$H = \Psi^{\dagger} \begin{pmatrix} \mathbf{0} & Q^{\dagger} \\ Q & \mathbf{0} \end{pmatrix} \Psi. \tag{2.29}$$

ここで

$$Q = \begin{pmatrix} t_1 & t_2 & 0 & \cdots \\ 0 & t_1 & t_2 & \cdots \\ 0 & 0 & t_1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$
 (2.30)

であり、 Q^\dagger は Q の複素共役と転地をとったものである。(いま、Q の中身は実数なので複素共役は必要ないが、一応一般的に書いておいた。)ハミルトニアンの中の(生成消滅演算子を含まない)行列部分を

$$H_M = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & Q^{\dagger} \\ Q & \mathbf{0} \end{pmatrix} \tag{2.31}$$

とおくことにする。この行列の固有値・固有ベクトルが系の固有状態やエネルギースペクトルに対応するので、この行列の性質を調べてみる。すぐわかるように、この行列には対角成分がない。次の「カイラル対称 性演算子」を表す行列を考える。

$$C = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbb{I} \end{pmatrix} \tag{2.32}$$

 C^2 が単位行列であることに注意する。すると、次の関係が成り立っていることがわかる。

$$CH_MC = -H_M. (2.33)$$

一般に、このようにハミルトニアンと反可換な行列が存在する時にその行列をカイラル対称性の演算子と呼び、系にはカイラル対称性が存在すると言う。カイラル対称性が存在するとき、エネルギー固有値 E の状態があれば -E の状態も存在することが以下のようにわかる。まず $H_M|\psi\rangle=E|\psi\rangle$ とする。すると

$$H_M C |\psi\rangle = C^2 H_M C |\psi\rangle = -C H_M |\psi\rangle = -E C |\psi\rangle$$
 (2.34)

つまり $C|\psi\rangle$ はエネルギー固有値 -E の固有状態になっている。演算子 C は副格子 B 上の波動関数にだけ 負符号をつけるような演算子である。つまり、エネルギー E の固有状態が得られたら、その固有状態の副格子 B の部分にだけ -1 をかけるとエネルギー -E の固有状態が得られることになる。

さて、SSH 模型の波数空間のトポロジーを考えるためにハミルトニアンを波数空間で見てみる。次のように生成消滅演算子をフーリエ変換する

$$a_x = \frac{1}{\sqrt{N}} \int_0^{2\pi} dk e^{ikx} a_k,$$
 $b_x = \frac{1}{\sqrt{N}} \int_0^{2\pi} dk e^{ikx} b_k,$ (2.35)

ここでNは系のユニットセルの個数である。すると

$$H = \int_{0}^{2\pi} dk dk' \frac{1}{N} \sum_{x} \left(t_{1} b_{k}^{\dagger} a_{k'} e^{-i(k-k')x} + t_{2} a_{k}^{\dagger} b_{k'} e^{-i(k-k')x-ik} \right) + h.c.$$

$$= \int_{0}^{2\pi} dk \left(t_{1} b_{k}^{\dagger} a_{k} + t_{2} a_{k}^{\dagger} b_{k} e^{-ik} \right) + h.c.$$

$$= \int_{0}^{2\pi} dk \left(a_{k}^{\dagger} b_{k}^{\dagger} \right) \left(\begin{matrix} 0 & t_{1} + t_{2} e^{-ik} \\ t_{1} + t_{2} e^{ik} & 0 \end{matrix} \right) \begin{pmatrix} a_{k} \\ b_{k} \end{pmatrix}. \tag{2.36}$$

ここで波数空間のハミルトニアンを

$$H_k \equiv \begin{pmatrix} 0 & t_1 + t_2 e^{-ik} \\ t_1 + t_2 e^{ik} & 0 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 0 & q(k)e^{-i\theta(k)} \\ q(k)e^{i\theta(k)} & 0 \end{pmatrix}$$
(2.37)

と定義する。後の便宜のために非対角成分の絶対値を q(k)、位相を $\pm \theta(k)$ とおいた。するとハミルトニアンは

$$\hat{H} = \int_0^{2\pi} dk \begin{pmatrix} a_k^{\dagger} & b_k^{\dagger} \end{pmatrix} H_k \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix}. \tag{2.38}$$

と書ける。異なる波数の間に結合が存在しないことが分かる。(ハミルトニアンは波数に関して対角的だということ。これは並進対称性から従う当然の結果ではある。)波数空間のハミルトニアン H_k にもカイラル対称性が存在し、それは σ_z で与えられることがわかる。つまり、それぞれの k についてエネルギー固有値は原点に対して対称的であり、一方の固有状態に σ_z をかけると他方の固有状態が得られる。

波数空間のハミルトニアン H_k から簡単に分散関係が求まる。具体的には

$$E_{\pm}(k) = \pm q(k) = \pm |t_1 + t_2 e^{ik}| = \pm \sqrt{(t_1 + t_2 \cos k)^2 + (t_2 \sin k)^2}.$$
 (2.39)

である。トポロジーは波数から Bloch 状態への写像で決まるのであったが、規格化された Bloch 状態(つまり H_k の固有状態)は次の形をとる。

$$|u_{\pm}(k)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta(k)} \\ \pm 1 \end{pmatrix} \tag{2.40}$$

第一成分と第二成分の絶対値が等しいことに注目してほしい。ここでは SSH 模型という特定の模型を考えているが、より一般にカイラル対称性を持つ 2 バンド模型でも波数空間のハミルトニアンが(2.37)の右側の形で書け、Bloch 状態は(2.40)という形をとる。固有状態は規格化を考えなければ任意の複素数をかけてもよかったため第一成分と第二成分の比によって指定されるのであった。(そして第二成分がゼロの場合はその比は無限遠点を表すと考え、複素平面+無限遠点つまり 2 次元球面に値を取るというのであった。)式(2.40)の第一成分と第二成分の比をとると $\pm e^{-i\theta(k)}$ という形を取り、複素平面+無限遠点の中で単位円上にしか値を取らないことが分かる。1 次元の波数空間 S^1 から複素平面+無限遠点(つまり S^2)への写像のトポロジーは全て自明だったが、カイラル対称性を課すことにより波数空間 S^1 から複素平面上の単位円つまり S^1 への写像のトポロジーを考えることになり、これは S^1 から S^1 に何回巻き付いているのかによってトポロジカルに異なるセクターに別れる。

図 16 に t_1 と t_2 の値をいくつか変えて分散関係 $\pm E(k)$ と Bloch 状態が複素平面で単位円上で示す方向の矢印を重ねて描いた。バンドギャップは $t_1=t_2$ ときに閉じる。Bloch 状態をあらわす矢印を見れば分かるように $t_1 < t_2$ のときに矢印は一回転している。一方 $t_1 > t_2$ のときに矢印は回転していない。つまり $t_1 < t_2$ は巻きつき数 1 で表されるトポロジカルに非自明な状態であり、 $t_1 > t_2$ は巻きつき数がゼロの自明な状態である。

次に両端にエッジがある有限の長さの SSH 模型のエネルギースペクトルを計算する(図 15(c))。 t_1/t_2 を変化させてエネルギーをプロットしたものが図 17(a) である。ここではユニットセルが 100(つまり格子点の数は 200)の状況を考えている。 大きく青い部分は本質的にエネルギーバンドを表している。それに加えて $t_1 < t_2$ のときに E = 0 のところに状態が存在することが分かる。この状態は 2 重に縮退している。

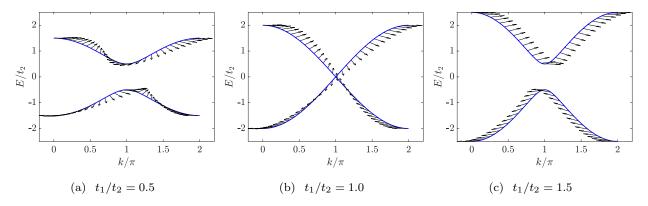


図 16 SSH 模型の分散関係を 3 つの異なる t_1/t_2 の値を選んでプロットした。縦軸は t_2 で規格化している ($t_2 > 0$ を仮定している)。

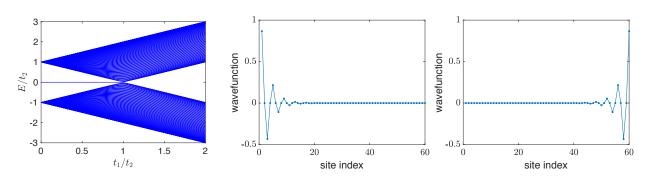


図 17 (a) 端がある状況での SSH 模型のエネルギースペクトルを t_1/t_2 の関数としてプロットしたもの。縦軸は t_2 で規格化している。計算は 100 ユニットセル(200 サイト)で行っている。 (b,c) $t_1/t_2=0.5$ でのゼロエネルギー状態の空間分布。こちらは 30 ユニットセル(60 サイト)で行っている。

 $t_1/t_2=0.5$ におけるゼロエネルギーの固有状態の空間分布を図 17(b,c) にプロットした。ゼロエネルギー解は 2つあるが、一つは左端にもう一つは右端に局在している。つまりエッジ状態である。バンドの巻き付き数が 1 のときに一方の端に一つエッジ状態があるというのは 2 次元のときに見たバルク・エッジ状態の 1 次元版である。さらに一般的に、カイラル対称性がある 1 次元系で巻きつき数が W のときに一つの端には W 個の局在したエッジ状態が存在することも言える。両端を考えると 2W 個のエッジ状態が存在する。

もう少しこのエッジ状態の性質を調べておく。エッジ状態の波動関数の空間分布を見ると分かるように、左側に局在したエッジモードは偶数番目のサイトで波動関数がゼロになっている。これは波動関数が副格子 A の上でしか値を取らないことを意味する。カイラル対称性のもとでは、ある固有状態があればその固有状態の副格子 B の部分にだけ -1 をかけるとエネルギーが反対の状態が得られるのであった。エッジ状態は副格子 B 上の波動関数がゼロなのでカイラル対称性の演算子をかけても状態は変わらない。これは E=-E=0 だから可能なことである。エッジ状態にカイラル対称性の演算子をかけて得られる状態は同じ状態である。逆に右端を見てみると副格子 A 上で波動関数がゼロになっている。したがって右端のエッジ状態にカイラル対称性の演算子をかけると全体に -1 がかかることになり、これも同じ状態が得られることになる。 1 次元カイラルハミルトニアンのトポロジカルエッジ状態はこのようにカイラル対称性の演算

子で自分自身に移るようなゼロエネルギー状態である。

最後に、より一般的な場合に巻きつき数を計算する方法を与える。(上で説明した2バンド系でBloch 状態の第一成分と第二成分の比を矢印としてプロットする、というのはあまり普通の人が行っているやり方ではない。もちろん以下の議論と等価であることはすぐに分かることだが。以下で一般のNバンド系で巻きつき数を計算する方法を与える。)まずカイラル対称性がある場合に波数空間のハミルトニアンは

$$H_k = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & Q(k)^{\dagger} \\ Q(k) & \mathbf{0} \end{pmatrix} \tag{2.41}$$

という形に書ける。ここで N は偶数だと仮定して、 $\mathbf{0}$ は $N/2 \times N/2$ のゼロ行列、 $Q(k) \in \operatorname{GL}(N/2,\mathbb{C})$ は行列式がゼロではない $N/2 \times N/2$ の複素行列である。ちなみに N が奇数の場合にはバルクのゼロモードが存在することが言えるが、その場合は考えないことにする。(バルクのゼロモードとエッジのゼロモードが縮退する、という事態が発生する。)また、Q(k) の行列式が任意の k でゼロではないというのはバルクのエネルギーギャップがあるという状況に対応しており、逆に Q(k) の行列式が k を変えていくとどこかでゼロになる場合はバルクのエネルギーギャップが閉じている。SSH 模型は N=2 で $Q(k)=q(k)e^{i\theta(k)}$ という状況に対応する。SSH 模型の場合はそれぞれのバンドの巻きつき数を考えたが、矢印の周り方は下のバンドも上のバンドも同様であった。これはカイラルハミルトニアンの巻きつき数はそれぞれのバンドというよりも系全体の性質を表すものであることによる。N が大きい場合も含め一般の場合の巻きつき数は次のように定義できる。まず Q(k) の行列式を考え、その位相を取り出す: $\det(Q(k))=|\det(Q(k))|e^{i\theta(k)}$ 。そしてこの位相の巻きつきを考える:

$$W \equiv \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dk \frac{d\theta(k)}{dk}.$$
 (2.42)

これが一般の場合の巻きつき数の定義である。SSH 模型の場合には上でそれぞれのバンドで考えた巻きつき数と一致することはすぐに分かる。この巻きつき数は、波数が 0 から 2π まで変化した時に $\det(Q(k))$ が複素平面で何回原点を回るかを表している。この巻きつき数 W と端に局在した状態の数が一致するのが 1 次元カイラルハミルトニアンのバルク・エッジ対応である。

3 トポロジカルバンド構造の実現

上で見たバンドのエネルギースペクトルとトポロジー、そしてエッジ状態の有無は一粒子の Schrödinger 方程式を解いて得られたものである。つまり、上で見た結果は基本的に一粒子の性質に関するものであり、考えている粒子の統計性(ボソンかフェルミオンか)やエンタングルメントの有無などとは関係がない。大事なのは、一粒子のバンド構造を考えた時にその固有状態が波数空間上でトポロジカルに非自明な分布をしていることと、それに対応して実空間に境界を作った時に境界に局在した固有状態が発生するということである。このような意味で固有状態(Bloch 状態)がトポロジカルに非自明なバンド構造をトポロジカルバンド構造と呼び、前述のように粒子の統計性とは関係なく実現される。このトポロジカルバンド構造が整数量子ホール効果の本質である。

歴史的にはフェルミオンである固体電子系で整数量子ホール効果が見つかったとはいえ、トポロジカルバンド構造が本質的に一粒子の性質なら、人工量子系で多く見られるボソン系でもトポロジカルバンド構造は実現できるはずである。実は、量子系である必要もなく、古典的な波動の系(電磁波や音波など)でもトポロジカルバンド構造を実現できることが知られている。人工量子系でのトポロジカルバンド構造の実現の代表的な研究についていくつか紹介する。冷却原子系でのトポロジカル物性についてはレビュー Cooper et al. (2019) が、フォトニクスでのトポロジカル物性(トポロジカル・フォトニクスと呼ばれる)についてはレビュー Ozawa et al. (2019) がある程度網羅的である。

3.1 Su-Schrieffer-Heeger 模型

1次元カイラルハミルトニアン、特に Su-Schrieffer-Heeger 模型は格子模型でホッピングの強さを交互に変えれば良いだけなので人工量子系・古典系で比較的簡単に実現できる。例えば質点をバネで繋いだ系を思い出してみる。式(1.24)が Newton の運動方程式であったが、ここで i を偶数とした時 $k_{i,i+1}=t_1$ 、 $k_{i-1,i}=t_2$ とするとこの方程式は以下の形になる。

$$m\frac{d^{2}}{dt^{2}}\begin{pmatrix} x_{1} \\ x_{2} \\ x_{3} \\ \vdots \\ x_{N} \end{pmatrix} = -(t_{1} + t_{2})\begin{pmatrix} x_{1} \\ x_{2} \\ x_{3} \\ \vdots \\ x_{N} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & t_{1} & 0 & \cdots & 0 \\ t_{1} & 0 & t_{2} & \cdots & 0 \\ 0 & t_{2} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & t_{1} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{1} \\ x_{2} \\ x_{3} \\ \vdots \\ x_{N} \end{pmatrix}.$$
(3.1)

こうすると右辺の行列はまさに SSH 模型のハミルトニアンである。ここで、質点の運動として一定の周波数 ω で振動するものを考える。つまり、 $x_i(t)=A_i\cos(\omega t)$ という形のものを考える。これは振動数 ω の固有モードを考えるということである。この形の解を上の式に入れると次の固有値方程式が得られる。

$$(t_1 + t_2 - m\omega^2) \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ \vdots \\ A_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & t_1 & 0 & \cdots & 0 \\ t_1 & 0 & t_2 & \cdots & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & t_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ \vdots \\ A_N \end{pmatrix} .$$
 (3.2)

これは SSH 模型のハミルトニアンに対する固有値方程式であり、SSH 模型のエネルギースペクトルと全く同じものが得られる。ただし、SSH 模型にエネルギー E の固有値があった場合、対応する古典系の振動数

は $t_1+t_2-m\omega^2=E$ を満たすもの、つまり固有振動の振動数は $\omega=\sqrt{(t_1+t_2-E)/m}$ である。SSH 模型は $t_1< t_2$ のときに端に局在する E=0 のエッジモードが存在するのだった。対応する古典系でもエッジモードが存在するが、その振動の周波数は $\omega=\sqrt{(t_1+t_2)/m}$ である。この振動の周波数は、系に一つしか質点がなくその質点が左右の壁にバネ定数 t_1 と t_2 のバネで繋がっている場合の振動数と等しい。

他にも光共振器を結合の強度を変えて交互につなげたり、ポラリトンの格子をジグザグにつなげたりなどさまざまな方法で SSH 模型は実現されている。また、SSH 模型に散逸や利得を組み合わせて世界で初めてのトポロジカル・レーザーが実現している。これについてはあとでより詳しく述べる。冷却原子系でも二つの光格子を組み合わせることで SSH 模型を実現できる。具体的には、周期が 2 倍異なる二つの光格子を次のように組み合わせて次のようなポテンシャルを作る

$$V(x) = V_1 \sin^2(qx) + V_2 \sin^2((q/2)x + \phi). \tag{3.3}$$

ここで $\phi=\pi/4$ と選んでできる光格子はホッピングの強さが交互に変化する SSH 模型になっている。模式 図を図 18 に示した。冷却原子系で SSH 模型を作る場合、エッジ状態が見えにくいのがひとまずの問題で

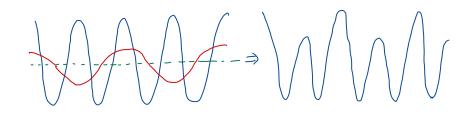


図 18 2つの光格子を組み合わせて SSH 模型を作り出す方法の模式図

ある。冷却原子系でシャープなエッジを実現することはできないことはないがそれほど簡単な技術ではない。普通はゆるい閉じ込めポテンシャルがかかっている。その場合にエッジ状態がどう見えるのか、エッジが見えにくい時にトポロジカルな模型を実現したことをどのように確かめればいいのか、というのは意味のある問題設定である。冷却原子系でエッジのある SSH 模型は人工次元の方法を用いて実現されている。人工次元についてはあとでもう少し詳しく述べる。他にも、エッジを見ることはできないけれども(Zak 位相の測定などから)バルクの性質からトポロジーを読み取ることもできる。

SSH 模型は単純だからこそさまざまな系で実現されており、調べられてきている。もう少し難しいのが Chern 絶縁体の実現で、この章では以後 Chern 絶縁体(に類似したもの)をどのように人工量子系で実現 するのかについて解説していく。

3.2 Floquet **理論**

Chern 絶縁体の実現には時間反転対称性を破る必要がある。その格子模型での帰結が複素数になったホッピングである。人工量子系では格子模型のホッピングを複素数にするのは簡単でないことが多い。複素ホッピングを得るためにしばしば使われるのは外部から時間周期的な変調を加えてその適切な意味での時間平均された模型を調べる方法である。時間周期的な変調を加えられた系を記述する方法が Floquet 理

論と呼ばれており、変調下での物性を記述する時間依存しないハミルトニアンを Floquet 有効ハミルトニアンなどと呼んだりする。ここでは Floquet 理論と有効ハミルトニアンを概説する。

Floquet 理論とはハミルトニアンが時間に周期的に依存している時、つまり H(t+T)=H(t) に従うときを扱う理論である。特に、周期 T が見たい物理の時間スケールに比べて十分短い場合には長い時間スケールの物理を記述する時間に依存しないハミルトニアンを得ることができる。これが Floquet 有効ハミルトニアンであり、以下その具体的形を求める。

まず、特に周期 T にこだわらず、時間が 0 から t まで経過した時の系の時間発展を記述するユニタリ演算子と対応する有効ハミルトニアンを考えることにする。最終的には t あるいは T が他のエネルギースケールに比べて小さいとして有効ハミルトニアンを摂動的に展開することが目標である。以下の議論をより詳しく知りたい方は文献 Blanes et al. (2010, 2009); Bukov et al. (2015) などをみていただきたい。時間 0 から t まで時間発展するときに波動関数にかかるユニタリ演算子は以下の形である。

$$U(t,0) = \mathcal{T} \exp\left(-i \int_0^t H(t')dt'\right). \tag{3.4}$$

ここで T は時間順序を取る演算子である。この時間発展を最後の時間 t だけに依存する有効ハミルトニアン $H_{\rm eff}(t)$ で記述したいが、時間 t 後の時間発展を正しく記述するという要請から以下の形でなければならない:

$$U(t,0) = \exp(-iH_{\text{eff}}(t)t). \tag{3.5}$$

つまり、有効ハミルトニアンは以下の形をとる:

$$H_{\text{eff}} = \frac{i}{t} \ln \left[\mathcal{T} \exp \left(-i \int_0^t H(t') dt' \right) \right]. \tag{3.6}$$

右辺に時間順序演算子が入っているため、一般に右辺は複雑な形をとる。時間 t がその他の時間スケールに比べて十分小さい場合に摂動的に右辺を展開する方法が知られており、それが Magnus 展開である。本質的に重要なのは非可換行列 X と Y についての Baker-Campbell-Hausdorff 公式である。

$$\exp(X)\exp(Y) = \exp\left(X + Y - \frac{1}{2}[Y, X] + \frac{1}{12}[Y, [Y, X]] + \mathcal{O}(Y^3X) + \mathcal{O}(X^2)\right). \tag{3.7}$$

この展開公式を用いて以下でまずは $H_{\rm eff}(t)$ に関する微分方程式を導き、それを逐次的に解いていくことによって摂動的に $H_{\rm eff}(t)$ を求めるという道筋をたどる。まず、時間 dt を(最終的にゼロに近づける)微小な時間とする。時間発展演算子に関して U(t+dt,0)=U(t+dt,t)U(t,0) という式が成り立つが、U(t+dt,t) は微小な時間 dt の間の時間発展なのでハミルトニアン H(t) はこの時間間隔でほぼ一定値を取るとみなせて $U(t+dt) \approx \exp\left(-iH(t)dt\right)$ と書ける。なので、時間発展演算子を有効ハミルトニアンで書き直して Baker-Campbell-Hausdorff の公式を使うと

$$\exp(-iH_{\text{eff}}(t+dt)(t+dt)) = \exp(-iH(t)dt) \exp(-iH_{\text{eff}}(t)t)$$

$$= \exp\left(-iH(t)dt - iH_{\text{eff}}(t)t + \frac{1}{2}[H_{\text{eff}}(t)t, H(t)dt]\right)$$

$$+ \frac{i}{12}[H_{\text{eff}}(t)t, [H_{\text{eff}}(t)t, H(t)dt]] + \mathcal{O}((H_{\text{eff}}(t)t)^{3}dt) + \mathcal{O}(dt^{2}).$$
(3.8)

両辺の指数関数の中身を比較すると次の形を得る。

$$H_{\text{eff}}(t+dt)(t+dt) = H(t)dt + H_{\text{eff}}(t)t + \frac{i}{2} \left[H_{\text{eff}}(t)t, H(t)dt \right] - \frac{1}{12} \left[H_{\text{eff}}(t)t, \left[H_{\text{eff}}(t)t, H(t)dt \right] \right] + \mathcal{O}((H_{\text{eff}}(t)t)^3 dt) + \mathcal{O}(dt^2).$$
(3.9)

右辺から左辺に $H_{ ext{eff}}(t)t$ を移行し、全体を dt で割ってから dt o 0 の極限を取ると

$$\frac{d}{dt} \left\{ H_{\text{eff}}(t)t \right\} = H(t) + \frac{i}{2} \left[H_{\text{eff}}(t)t, H(t) \right] - \frac{1}{12} \left[H_{\text{eff}}(t)t, \left[H_{\text{eff}}(t)t, H(t) \right] \right] + \mathcal{O}((H_{\text{eff}}(t)t)^3). \tag{3.10}$$

これで $H_{\rm eff}(t)t$ に関する微分方程式が得られた。これを逐次的に解いていく。ハミルトニアンの積に関する次数ごとに逐次的 $H_{\rm eff}(t)t=\sum_{k=1}^\infty H_{\rm eff,k}(t)t$ と書いて順に解いていくことになる。不思議な展開に見えるかもしれないが、そのように展開すると、結果的に時間 t が小さい場合にうまい展開になっていることをあとで確認する。まず、一次の項としては式 (3.10) の 1 項目だけを取り、積分する。すると

$$H_{\text{eff},1}(t)t = \int_0^t dt_1 H(t_1)$$
 (3.11)

である。次にこれを第2項目に代入すると次を得る

$$H_{\text{eff},2}(t)t = \frac{i}{2} \int_0^t dt_1 \left[\int_0^{t_1} dt_2 H(t_2), H(t_1) \right] = -\frac{i}{2} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \left[H(t_1), H(t_2) \right]. \tag{3.12}$$

また、これらを第2項目と第3項目に代入すると次を得る

 $H_{\rm eff,3}(t)t$

$$= \frac{1}{4} \int_{0}^{t} dt_{1} \left[\int_{0}^{t_{1}} dt_{2} \int_{0}^{t_{2}} dt_{3} \left[H(t_{2}), H(t_{3}) \right], H(t_{1}) \right] - \frac{1}{12} \int_{0}^{t} dt_{1} \left[\int_{0}^{t_{1}} dt_{3} H(t_{3}), \left[\int_{0}^{t_{1}} dt_{2} H(t_{2}), H(t_{1}) \right] \right]$$

$$= -\frac{1}{4} \int_{0}^{t} dt_{1} \int_{0}^{t_{1}} dt_{2} \int_{0}^{t_{2}} dt_{3} \left[H(t_{1}), \left[H(t_{2}), H(t_{3}) \right] \right] - \frac{1}{12} \int_{0}^{t} dt_{1} \int_{0}^{t_{1}} dt_{2} \int_{0}^{t_{1}} dt_{3} \left[H(t_{3}), \left[H(t_{2}), H(t_{1}) \right] \right].$$

$$(3.13)$$

この式はこのままでも良いけれど、一応もう少しよく見る形に書き直してみる。そのために、任意の積分可能な関数 $f(t_2,t_3)$ に関する以下の関係を使う

$$\int_{0}^{t_{1}} dt_{2} \int_{0}^{t_{1}} dt_{3} f(t_{2}, t_{3}) = \int_{0}^{t_{1}} dt_{2} \int_{0}^{t_{2}} dt_{3} f(t_{2}, t_{3}) + \int_{0}^{t_{1}} dt_{2} \int_{t_{2}}^{t_{1}} dt_{3} f(t_{2}, t_{3})
= \int_{0}^{t_{1}} dt_{2} \int_{0}^{t_{2}} dt_{3} f(t_{2}, t_{3}) + \int_{0}^{t_{1}} dt_{3} \int_{0}^{t_{3}} dt_{2} f(t_{2}, t_{3}).$$
(3.14)

この関係を式 (3.13) の第2項目に使うと

$$H_{\text{eff},3}(t)t = -\frac{1}{4} \int_{0}^{t} dt_{1} \int_{0}^{t_{1}} dt_{2} \int_{0}^{t_{2}} dt_{3} \left[H(t_{1}), \left[H(t_{2}), H(t_{3}) \right] \right] - \frac{1}{12} \int_{0}^{t} dt_{1} \int_{0}^{t_{1}} dt_{2} \int_{0}^{t_{2}} dt_{3} \left[H(t_{3}), \left[H(t_{2}), H(t_{1}) \right] \right] - \frac{1}{12} \int_{0}^{t} dt_{1} \int_{0}^{t_{1}} dt_{3} \int_{0}^{t_{3}} dt_{2} \left[H(t_{3}), \left[H(t_{2}), H(t_{1}) \right] \right].$$
(3.15)

最後の項の積分変数 t_2 と t_3 を入れ替えた後に $[H(t_2),[H(t_3),H(t_1)]]=-[H(t_3),[H(t_1),H(t_2)]]-[H(t_1),[H(t_2),H(t_3)]]$ を使って書き直すと

$$H_{\text{eff},3}(t)t = -\frac{1}{6} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 \left[H(t_1), \left[H(t_2), H(t_3) \right] \right] -\frac{1}{6} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 \left[H(t_3), \left[H(t_2), H(t_1) \right] \right].$$
(3.16)

となる。すなわち、有効ハミルトニアンの3次までの展開は以下のようになる:

$$H_{\text{eff}}(t) = H_{\text{eff},1}(t) + H_{\text{eff},2}(t) + H_{\text{eff},3}(t) + \cdots$$

$$= \frac{1}{t} \int_{0}^{t} dt_{1} H(t_{1}) - \frac{i}{2t} \int_{0}^{t} dt_{1} \int_{0}^{t_{1}} dt_{2} \left[H(t_{1}), H(t_{2}) \right]$$

$$- \frac{1}{6t} \int_{0}^{t} dt_{1} \int_{0}^{t_{1}} dt_{2} \int_{0}^{t_{2}} dt_{3} \left\{ \left[H(t_{1}), \left[H(t_{2}), H(t_{3}) \right] \right] + (t_{1} \leftrightarrow t_{3}) \right\} + \cdots$$
(3.17)

さて、3次までの展開と書いたが、一体何に関して3次までの展開をしているのだろうか。それを理解するためにtが非常に小さい場合を考える。被積分関数がほとんど定数とみなせるとすると 1 項目は積分をtで割っているのでt 依存性はない。一方、2 項目の積分をt で割ったものはt/2 に比例する。3 項目の積分をt で割ると $t^2/3$ である。つまり、n 項目は $\mathcal{O}(t^{n-1})$ となっており、この展開はt が小さい時のt に関する展開になっていることがわかる。

ここまでの議論では H(t) が時間周期的かどうかについては特に気にしていなかった。ハミルトニアンが周期 T での時間周期性 H(t+T)=H(t) を持っているとすると、一周期あたりの有効ハミルトニアンを考えると便利である。その場合は $H_{\mathrm{eff}}(T)$ を考えることになり、周期 T に関する展開 $H_{\mathrm{eff}}(T)=\sum_{k=1}^\infty H_{\mathrm{eff},k}(T)$ の最初の 3 項は上に書いたように以下の形をとる:

$$H_{\text{eff},1}(T) = \frac{1}{T} \int_0^T dt_1 H(t_1)$$
 (3.18)

$$H_{\text{eff},2}(T) = -\frac{i}{2T} \int_0^T dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \left[H(t_1), H(t_2) \right]$$
(3.19)

$$H_{\text{eff},3}(T) = -\frac{1}{6T} \int_0^T dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 \left\{ [H(t_1), [H(t_2), H(t_3)]] + (t_1 \leftrightarrow t_3) \right\}. \tag{3.20}$$

高次の項はTが小さい時に無視できる。さて、これらの有効ハミルトニアンを用いてさまざまなハミルトニアンを作り出すことができる。以下、いくつかの例を見る。

3.3 複素ホッピング

Chern 絶縁体の例として見た Harper-Hofstadter 模型も Haldane 模型もホッピングが複素数になっているのが特徴的である。まったく一般的な議論からホッピングが全て実数の格子模型の Chern 数は必ずゼロであることが言えるため、複素ホッピングは Chern 絶縁体を得るために不可欠である。(正確には Chern 数がゼロのバンドを得るためには時間反転対称性を破らなければいけないことが言える。)しかし、人工量子系でホッピングに位相をつけるのはそう簡単ではない。しかし人類は複素ホッピングを人工的に作り出すさまざまな方法を考え出してきた。複素ホッピングを作る有力な方法の一つが以下で説明する Floquet 有効ハミルトニアンを使う方法である。

3.3.1 2サイト系

最も単純な例として2サイト系を考える。たとえば二重井戸でそれぞれの井戸から一つずつ準位を取ってきた場合に対応する。(より高い準位は無視できるくらいエネルギーが高い場合を考えている。)井戸間にはエネルギー差 ω があり、井戸間のホッピングは実数Jであるとする。図 19 に模式的に示した。ハミルトニアンは

$$H_0 = \begin{pmatrix} \omega/2 & J \\ J & -\omega/2 \end{pmatrix}. \tag{3.21}$$

である。ここで両方の井戸のポテンシャルエネルギーに周期的な変調を加える。変調の周波数は井戸間のエネルギー間隔 ω に等しいとし

$$H'(t) = \Omega \begin{pmatrix} \cos(\omega t + \phi_1) & 0\\ 0 & \cos(\omega t + \phi_2) \end{pmatrix}$$
 (3.22)

という時間変化する項をハミルトニアンに加える。変調の振幅 Ω は両サイトで等しいが、変調の位相が ϕ_1 と ϕ_2 で異なっているとする。どのような位相を選ぶと良いのかはのちに判明する。系のトータルのハミルトニアンは $H(t)=H_0+H'(t)$ である。ここでエネルギー間隔と変調周波数 ω が等しいことがのちに大事になってくる。

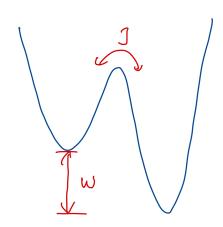


図 19 2 サイト系。サイト間にはエネルギー ω の差があり、ホッピングはJで与えられる。

さて、ハミルトニアンが時間変化しているが、先ほどの Floquet 理論を用いて一周期 $T=2\pi/\omega$ にわたって平均した有効ハミルトニアン $H_{\rm eff}$ を求めてみよう。有効ハミルトニアンの Magnus 展開の k 次項は $\mathcal{O}(T^{k-1})=\mathcal{O}(1/\omega^{k-1})$ だったことを思い出しておく。H'(t) の時間平均はゼロなので、有効ハミルトニアンの最低次は

$$H_{\text{eff},1}(T) = \frac{1}{T} \int_0^T dt_1 H(t_1) = H_0 = \begin{pmatrix} \omega/2 & J\\ J & -\omega/2 \end{pmatrix} = \mathcal{O}(\omega).$$
 (3.23)

最低次が $\mathcal{O}(\omega)$ となっており、これは $T\to 0$ つまり $\omega\to\infty$ の極限で発散してしまう。もともと最低次は $\mathcal{O}(\omega^0)$ のはずだったのでこれはおかしい。なにがおかしいのかというと、時間変化しない H_0 がそもそ

も $\omega \to \infty$ で発散する項を含んでいる点で、こういう状況では Magnus 展開はそのままでは使えないのである。

せっかく前節で有効ハミルトニアンを導いたのにそれが使えないなら一体何のために前節の説明をしたのかということになるが、確かにそのままでは使えないが適切に基底の変換を行えば前節の方法は使える、ということをこれから説明する。まずは時間依存するユニタリ変換のもとでハミルトニアンがどう変換するのかを考える。まず、時間変化するハミルトニアンの元での Schrödinger 方程式は以下の形である。

$$i\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = H(t)|\Psi(t)\rangle.$$
 (3.24)

ここで $|\Psi(t)\rangle$ は系の波動関数である。この波動関数を別の基底で見てみることを考える。基底の変換行列はユニタリ行列 U(t) で表される。ここで基底の変換行列が時間 t に依存するような状況を考えている。この基底で見た時の波動関数は $|\tilde{\Psi}(t)\rangle=U^\dagger(t)|\Psi(t)\rangle$ という形になる。新しい基底の波動関数が従う時間発展の方程式は

$$i\frac{d}{dt}|\tilde{\Psi}(t)\rangle = i\frac{dU^{\dagger}(t)}{dt}|\Psi(t)\rangle + U^{\dagger}(t)i\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \left(i\frac{dU^{\dagger}(t)}{dt}U(t) + U^{\dagger}(t)H(t)U(t)\right)|\tilde{\Psi}(t)\rangle \equiv \tilde{H}(t)|\tilde{\Psi}(t)\rangle. \tag{3.25}$$

つまり、波動関数 $|\tilde{\Psi}(t)\rangle$ はハミルトニアン

$$\tilde{H}(t) = i\frac{dU^{\dagger}(t)}{dt}U(t) + U^{\dagger}(t)H(t)U(t). \tag{3.26}$$

に依存することになる。

さて、ハミルトニアン $H(t) = H_0 + H'(t)$ に対してユニタリ変換

$$U(t) = \exp\left(-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z - i\int_0^t dt' H'(t')\right)$$
(3.27)

で移った基底で見てみる。ここで H'(t) は対角行列だったため異なる時間の H'(t) が可換であるためユニタリ変換 U に時間順序 T を付ける必要がないことに注意する。この変換はそれぞれの成分に時間変化する位相をつけるような変換になっている。この基底でのハミルトニアンは

$$\tilde{H}(t) = -\frac{\omega}{2}\sigma_z - H'(t) + U^{\dagger}(t)(H_0 + H'(t))U(t) = U^{\dagger}(t)\begin{pmatrix} 0 & J\\ J & 0 \end{pmatrix}U(t)$$
(3.28)

という形になる。ユニタリ変換U(t)の具体的な形は

$$U(t) = \begin{pmatrix} \exp\left(-i\frac{\omega t}{2} - i\frac{\Omega}{\omega}\sin(\omega t + \phi_1)\right) & 0\\ 0 & \exp\left(i\frac{\omega t}{2} - i\frac{\Omega}{\omega}\sin(\omega t + \phi_2)\right) \end{pmatrix}$$
(3.29)

なのでこれを代入すると新しい基底でのハミルトニアンは

$$\tilde{H}(t) = J \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega t + i\frac{\Omega}{\omega}(\sin(\omega t + \phi_1) - \sin(\omega t + \phi_2))} \\ e^{-i\omega t - i\frac{\Omega}{\omega}(\sin(\omega t + \phi_1) - \sin(\omega t + \phi_2))} & 0 \end{pmatrix}$$

$$= J \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega t + i\frac{2\Omega}{\omega}\cos(\omega t + \frac{\phi_1 + \phi_2}{2})\sin(\frac{\phi_1 - \phi_2}{2})} \\ e^{-i\omega t - i\frac{2\Omega}{\omega}\cos(\omega t + \frac{\phi_1 + \phi_2}{2})\sin(\frac{\phi_1 - \phi_2}{2})} & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.30}$$

式変形で和積の公式 $\sin x - \sin y = 2\cos(\frac{x+y}{2})\sin(\frac{x-y}{2})$ を使った。さて、このハミルトニアンが最初のハミルトニアン H(t) と大きく違う点は、二つの井戸間のポテンシャルエネルギーの差 ω がなくなっているという点である。正確には、対角成分の時間依存しない ω 依存性は、ユニタリ変換によって非対角成分に時間依存する $e^{\pm i\omega t}$ の形で追いやられている。もともと対角成分に ω があったために Floquet 有効ハミルトニアンの Magnus 展開の第一項目が $\omega \to \infty$ で発散してしまうという問題があったが、新しいハミルトニアン $\tilde{H}(t)$ に関しては発散の心配はなくなっているように見える。次に注目すべき点は $\tilde{H}(t)$ ももとのハミルトニアンと同じ時間周期性を持っている、すなわち $\tilde{H}(t+T)=\tilde{H}(t)$ であるという点である。これは、ユニタリ変換 U(t) が周期性を保つように作られているからだが、このように H(t) の対角成分を消し、かつ周期性を保つようなユニタリ変換が可能なのは対角成分のエネルギー差 ω が時間変調の振動数 ω と等しい(もしくは正数倍の)場合だけである。新しいハミルトニアン $\tilde{H}(t)$ の Floquet 有効ハミルトニアンを求めてみる。最低次では

$$\tilde{H}_{\text{eff},1} = \frac{1}{T} \int_{0}^{T} dt_{1} \tilde{H}(t_{1}) = \frac{\omega}{2\pi} \int_{0}^{2\pi/\omega} dt_{1} \tilde{H}(t_{1})
= \frac{J}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} d\tau \begin{pmatrix} 0 & e^{i\tau + i\frac{2\Omega}{\omega}\cos(\tau + \frac{\phi_{1} + \phi_{2}}{2})\sin(\frac{\phi_{1} - \phi_{2}}{2})} \\ e^{-i\tau - i\frac{2\Omega}{\omega}\cos(\tau + \frac{\phi_{1} + \phi_{2}}{2})\sin(\frac{\phi_{1} - \phi_{2}}{2})} & 0 \end{pmatrix}
= \frac{J}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} d\tau \begin{pmatrix} 0 & e^{-i(\frac{\phi_{1} + \phi_{2}}{2})e^{-i\tau - i\frac{2\Omega}{\omega}}\sin(\frac{\phi_{1} - \phi_{2}}{2})\cos(\tau)} \\ e^{i(\frac{\phi_{1} + \phi_{2}}{2})e^{-i\tau - i\frac{2\Omega}{\omega}}\sin(\frac{\phi_{1} - \phi_{2}}{2})\cos(\tau)} & 0 \end{pmatrix} (3.31)$$

一行目から二行目への変形で $\omega t_1 = \tau$ とおいた。この積分は Bessel 関数と関係づけることができる。n 次の Bessel 関数 $\mathcal{J}_n(x)$ は積分で以下のように書ける:

$$\mathcal{J}_n(x) = \frac{1}{2\pi i^n} \int_0^{2\pi} d\tau e^{i(n\tau + x\cos\tau)}.$$
 (3.32)

この関係を用いれば、例えば右上の項の積分は

$$\frac{J}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\tau e^{-i(\frac{\phi_1 + \phi_2}{2})} e^{i\tau + i\frac{2\Omega}{\omega}\sin(\frac{\phi_1 - \phi_2}{2})\cos(\tau)} = iJe^{-i(\frac{\phi_1 + \phi_2}{2})} \mathcal{J}_1\left[\frac{2\Omega}{\omega}\sin(\frac{\phi_1 - \phi_2}{2})\right], \tag{3.33}$$

つまり、有効ハミルトニアンの最低次は1次のBessel 関数を用いて以下のようになる:

$$\tilde{H}_{\text{eff},1} = J\mathcal{J}_1 \left[\frac{2\Omega}{\omega} \sin(\frac{\phi_1 - \phi_2}{2}) \right] \begin{pmatrix} 0 & e^{-i(\frac{\phi_1 + \phi_2 - \pi}{2})} \\ e^{i(\frac{\phi_1 + \phi_2 - \pi}{2})} & 0 \end{pmatrix}.$$
(3.34)

これは $\omega \to \infty$ で発散するという以前の問題を回避している。そして、ホッピングに位相がついている。位相は ϕ_1 と ϕ_2 で決まっている。例えばホッピングの位相を θ にしたいときには $\phi_1 = \theta + \pi$ 、 $\phi_2 = \phi_1 - \pi = \theta$ と選ぶと良い。このとき有効ハミルトニアンは

$$\tilde{H}_{\text{eff},1} = J \mathcal{J}_1 \left[2\Omega/\omega \right] \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\theta} \\ e^{i\theta} & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.35}$$

さて、ここまで何をやったのかを振り返っておく。二つのサイトの間に ω という大きなポテンシャルエネルギーがあるときに、系に周波数 ω の変調を加えると、高周波極限で適切な基底で見た時に Floquet 有効ハミルトニアンの最低次ではサイト間のエネルギー差がなくなりホッピング位相がつくということである。もともと大きなポテンシャルエネルギー差が存在したのでサイト間の遷移は抑制されていた。しかし、時間周期的変調によってサイト間遷移が誘導された形になっている。これを modulation assisted tunneling などと呼ぶことがある。

3.3.2 3サイト系、多サイト系

先ほどの 2 サイト系の議論はより多くのサイトを含む系に拡張することができる。ここでは 3 サイト系で具体的に拡張法を見ることで多サイト系への拡張の手がかりを得る。 2 サイト系のときと同様、3 サイト系でもそれぞれのサイトの間にエネルギー差 ω がある状況を考える。模式図を図 ω に示す。

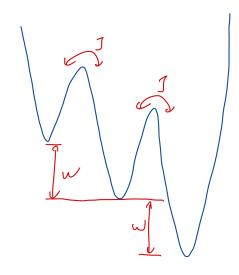


図 20 3 サイト系。サイト間にはエネルギー ω の差があり、ホッピングはどちらもJ で与えられる。

先ほどと同様にそれぞれのサイトのエネルギーに周波数 ω の時間変調を加えたハミルトニアンは以下の形となる

$$H(t) = \begin{pmatrix} \omega & J & 0 \\ J & 0 & J \\ 0 & J & -\omega \end{pmatrix} + \Omega \begin{pmatrix} \cos(\omega t + \phi_1) & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\omega t + \phi_2) & 0 \\ 0 & 0 & \cos(\omega t + \phi_3) \end{pmatrix}.$$
(3.36)

また単純な時間平均が $\omega \to \infty$ で発散してしまう形を取るため、回転系に移る。回転系へと移るユニタリ変換は H(t) の対角項を消すようなものだった。それはここでは

$$U(t) = \exp\left(-i\int_0^t dt'(\text{diagonal component of } H(t'))\right)$$

$$= \begin{pmatrix} \exp\left(-i\omega t - i\frac{\Omega}{\omega}\sin(\omega t + \phi_1)\right) & 0 & 0\\ 0 & \exp\left(-i\frac{\Omega}{\omega}\sin(\omega t + \phi_2)\right) & 0\\ 0 & 0 & \exp\left(i\omega t - i\frac{\Omega}{\omega}\sin(\omega t + \phi_3)\right) \end{pmatrix}.$$
(3.37)

この回転系でのハミルトニアンは

$$\begin{split} \tilde{H}(t) &= i \frac{dU^{\dagger}(t)}{dt} U(t) + U^{\dagger}(t) H(t) U(t) = U^{\dagger}(t) \begin{pmatrix} 0 & J & 0 \\ J & 0 & J \\ 0 & J & 0 \end{pmatrix} U(t) \\ &= J \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega t + i\frac{2\Omega}{\omega} \sin(\frac{\phi_1 - \phi_2}{2})\cos(\omega t + \frac{\phi_1 + \phi_2}{2})} & 0 \\ e^{-i\omega t - i\frac{2\Omega}{\omega} \sin(\frac{\phi_1 - \phi_2}{2})\cos(\omega t + \frac{\phi_1 + \phi_2}{2})} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega t - i\frac{2\Omega}{\omega} \sin(\frac{\phi_2 - \phi_3}{2})\cos(\omega t + \frac{\phi_2 + \phi_3}{2})} & 0 \end{pmatrix}. \end{split}$$

$$(3.38)$$

したがって、Floquet 有効ハミルトニアンの最低次は

$$\tilde{H}_{\text{eff},1} = \frac{1}{T} \int_{0}^{T} dt_{1} \tilde{H}(t_{1})$$

$$= J \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{J}_{1} \left[\frac{2\Omega}{\omega} \sin(\frac{\phi_{1} - \phi_{2}}{2}) \right] e^{-i\left(\frac{\phi_{1} + \phi_{2} - \pi}{2}\right)} & 0 \\ \mathcal{J}_{1} \left[\frac{2\Omega}{\omega} \sin(\frac{\phi_{1} - \phi_{2}}{2}) \right] e^{i\left(\frac{\phi_{1} + \phi_{2} - \pi}{2}\right)} & 0 \\ 0 & \mathcal{J}_{1} \left[\frac{2\Omega}{\omega} \sin(\frac{\phi_{2} - \phi_{3}}{2}) \right] e^{i\left(\frac{\phi_{2} + \phi_{3} - \pi}{2}\right)} & 0 \end{pmatrix}.$$

$$(3.39)$$

変調の位相 ϕ_1 、 ϕ_2 、 ϕ_3 を調節することでもう少し綺麗な形にすることができる。例えば $\phi_1=\theta+\pi$ 、 $\phi_2=\theta$ 、 $\phi_3=\theta+\pi$ と選ぶと

$$\tilde{H}_{\text{eff},1} = J\mathcal{J}_1[2\Omega/\omega] \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\theta} & 0\\ e^{i\theta} & 0 & -e^{-i\theta}\\ 0 & -e^{i\theta} & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.40}$$

2サイト系と同様にホッピングに位相 θ がついた形になっている。(ただし、2サイトから3サイトへのホッピングにはさらに負符号もついている。)

同様の方法で任意の長さの一次元系において隣り合うサイト間にエネルギー差 ω があれば、周波数 ω の変調を適当な位相をつけて与えることでホッピングに位相をつけることができる。具体的には、各サイトの変調の位相をサイトインデックスi が奇数の場合は $\phi_i=\theta+\pi$ 、偶数の場合は $\phi_i=\theta$ ととるとサイトi から i+1 へのホッピングは $J\mathcal{J}_1[2\Omega/\omega](-1)^{i+1}e^{i\theta}$ となる。 $\phi_i=\theta+i\pi$ と書くと奇数の場合と偶数の場合と統一的に扱える。(ここで $i\pi$ のi はサイトインデックスであり、虚数単位ではない。)交互に符号が変わるが、その点を除いてホッピングの位相は θ である。

Q: もしエネルギー差と変調周波数が少し異なっていれば何が起きるだろうか?

3.4 Harper-Hofstader 模型

一次元系のホッピングに位相をつける方法がわかったので、一次元系を並べることで二次元の格子系を作り、Harper-Hofstadter 模型を作ることができる。前節の方法をそのまま拡張する形で具体的に構成法を述べる。まずは水平方向に伸びた 1 次元系を垂直方向に並べていく。格子点は二つの整数 (x,y) でパラメータづけられる。Harper-Hofstadter 模型を作るには格子一つを一方向(例えば反時計回り)に一周した時にホッピングがトータルでゼロではない位相を獲得することが必要である。そのため、例えば y=1 では水平方向のホッピングに位相 θ 、y=2 では水平方向のホッピングに位相 2θ 、y=3 では水平方向のホッピン

グに位相 3θ という風に一次元列を作る。つまり、サイト (x,y) の変調の位相を $\phi_{x,y}=y\theta+x\pi$ と取る。変調がないときの x 方向のホッピングを J_x とすると、変調の結果得られる有効ハミルトニアンでは (x,y) から (x+1,y) のホッピングの振幅が

$$J_x \longrightarrow J_x \mathcal{J}_1 \left[2\frac{\Omega}{\omega} \right] (-1)^{x-1} e^{iy\theta}$$
 (3.41)

という形になる。

ここまでは特に y 方向のホッピングを考えていなかった。変調がないときの y 方向のホッピングを J_y とし、それが変調でどのように変化するのかを考えてみる。回転系で y 方向のホッピングは以下の修正を受ける:

$$J_{y} \longrightarrow J_{y} e^{-i\frac{\Omega}{\omega}(\sin(\omega t + \phi_{x,y}) - \sin(\omega t + \phi_{x,y+1}))} = J_{y} e^{-i\frac{2\Omega}{\omega}\sin(\frac{\phi_{x,y} - \phi_{x,y+1}}{2})\cos(\omega t + \frac{\phi_{x,y} + \phi_{x,y+1}}{2}))}$$

$$= J_{y} e^{i\frac{2\Omega}{\omega}\sin(\theta)\cos(\omega t + y\theta + \theta/2 + x\pi))}$$
(3.42)

ただしここではサイト (x,y) からサイト (x,y+1) へのホッピングを考えている。サイト (x,y) とサイト (x,y+1) の間にはエネルギーギャップが存在しないことに注意する。それにより、修正されたホッピング の指数に $i\omega t$ が入ってこない。この修正されたホッピングを一周期で平均したものが Floquet 有効ハミルトニアンにおける y 方向へのホッピングである。具体的に計算すると

$$\frac{1}{T} \int_{0}^{T} dt' J_{y} e^{i\frac{2\Omega}{\omega} \sin(\theta) \cos(\omega t' + y\theta + \theta/2 + x\pi)} = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} d\tau J_{y} e^{i\frac{2\Omega}{\omega} \sin(\theta) \cos(\tau + y\theta + \theta/2 + x\pi)}$$

$$= J_{y} \mathcal{J}_{0} \left[2\frac{\Omega}{\omega} \sin(\theta) \right]. \tag{3.43}$$

以上をまとめて Floquet 有効ハミルトニアンを第二量子化の形で書くと次のようになる。

$$\tilde{H}_{\text{eff},1} = \sum_{x,y} \left(J_x \mathcal{J}_1 \left[2 \frac{\Omega}{\omega} \right] (-1)^{x-1} e^{iy\theta} c_{x+1,y}^{\dagger} c_{x,y} + J_y \mathcal{J}_0 \left[2 \frac{\Omega}{\omega} \sin(\theta) \right] c_{x,y+1}^{\dagger} c_{x,y} + \text{H.c.} \right). \tag{3.44}$$

Bessel 関数がかかっているため複雑に見えるかもしれないが、 J_x と J_y をうまく選んで $J=J_x\mathcal{J}_1$ $\left[2\frac{\Omega}{\omega}\right]=J_y\mathcal{J}_0$ $\left[2\frac{\Omega}{\omega}\sin(\theta)\right]$ としてしまえばホッピングの絶対値はどのリンクでも等しい通常の Harper-Hofstadter 模型と同じものができる。格子を反時計回りに一周すると位相 $-\theta$ が得られ、 $\theta\neq 0$ のときに確かに一様な磁場がかかっている状況を再現している。

ここで説明した方法と本質的に同じ方法で初めて Harper-Hofstadter 模型を実現したのが Munich Aidelsburger et al. (2013) および MIT Miyake et al. (2013) の冷却原子の実験グループである。以上の方法はどこにも粒子間相互作用が入ってこなかったことに注目してほしい。全てが一粒子のハミルトニアンに一粒子の変調を加えることで実現された。相互作用のない格子模型は古典系でも実現が可能であり、実際に上記の方法は例えば振り子を並べた系に適用することもでき、振り子の自然振動数を時間変化させることで(例えば振り子の長さを振動させれば自然振動数が時間変化する)Harper-Hofstadter 模型を実現することができる。

3.5 Haldane 模型

Haldane 模型も Floquet 有効ハミルトニアンの方法を用いて実現することができる。ただし、Haldane 模型は蜂の巣格子上の模型で次近接のホッピングの位相まで考えなければいけないので Harper-Hofstadter

模型に比べて若干複雑に思える。実は Haldane 模型を Floquet 有効ハミルトニアンでえいやっと作って しまう方法が知られている。それが Oka-Aoki によって提案された円偏光の外場を当てる方法である Oka and Aoki (2009)。これを人工量子系を念頭に簡単に説明する。

まず、2次元の蜂の巣格子を用意する。ちなみに斜めから光を当ててうまく定在波を作ることで蜂の巣格子の光格子を作ることができることは知られている。次に、蜂の巣格子をぐるぐると円形にゆする。全体を回転させるわけではなくて円形にゆすることに注意する。図 21 に模式的に状況を示している。

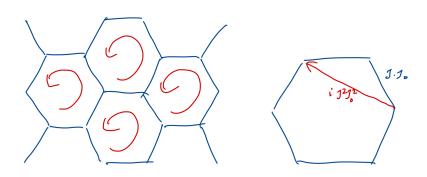


図 21 蜂の巣格子をゆすると次近接ホッピングが誘導される。誘導された次近接ホッピングは純虚数となるので Haldane 模型が実現できる。

ゆすられた格子の中にいる粒子にとってはどういう影響があるのか考える。ぐるぐるとゆすられると、格子中の粒子は遠心力を感じる。振動の周波数を ω とすると、各サイトに以下の形の力がかかることになる。

$$\mathbf{F}(t) = F\left(\cos(\omega t), \sin(\omega t)\right) \tag{3.45}$$

力は時間変化するベクトルポテンシャルの形でハミルトニアンの中に取り込むことができる。遠心力がかかっているときの格子模型を一般的な形で次のように書く。ホッピングとしてはこの時点では任意のサイトから任意のサイトへのものを考えている。

$$H(t) = \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} c_i^{\dagger} c_j + \sum_{i} \mathbf{F}(t) \cdot \mathbf{r}_i c_i^{\dagger} c_i.$$
 (3.46)

ここで \mathbf{r}_i は格子点 i の位置座標である。ここで回転系への変換を行うことにするが、先ほどまでと同様に系の対角成分を指数の肩にのせたものを考える。具体的には

$$U = \exp\left(-i\int_0^t dt' \mathbf{F}(t') \cdot \mathbf{r}_i c_i^{\dagger} c_i\right)$$
 (3.47)

というユニタリ変換を考える。するとこの回転系でのハミルトニアンは以下の形をとる。

$$\tilde{H}(t) = \sum_{\langle i,j \rangle} \exp\left(i \int_0^t dt' \mathbf{F}(t') \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\right) t_{ij} c_i^{\dagger} c_j \tag{3.48}$$

Harper-Hofstadter 模型の実現のときのように、ホッピングに時間変化する位相がついている。ここで蜂の巣格子を考える。サイト間にエネルギー差をつけていないため、 $\tilde{H}(t)$ を時間平均した有効ハミルト

ニアンの最低次では最近接ホッピングに 0 次の Bessel 関数の補正がつく。Harper-Hofstadter 模型では考えていなかった有効ハミルトニアンの次の項を考えることになる。そこではハミルトニアンの交換子 $\left[\tilde{H}(t_1), \tilde{H}(t_2)\right]$ を積分することになるが、この交換子によって次近接のホッピングが生まれ、そのホッピングが蜂の巣格子でどちらの向きにホップするのかに従い i あるいは -i に比例した形になる。これはまさに Haldane 模型が考えている状況である。この方法で Haldane 模型を実験的に実現したのがスイスの ETH Zürich のグループで、光格子を円形にゆすることで時間反転対称性を破り、トポロジカルなバンド構造を実現している Jotzu et al. (2014)。Harper-Hofstadter 模型も Haldane 模型も提案された当初は実験とは無縁の理論的な模型だと考えられてきた。しかし冷却原子系でこれらの模型が実現できたことから、これらの模型とそのトポロジカルな性質を観測可能性と関連させて議論できるようになった。

蜂の巣格子の各サイトを一方向に回すというのは冷却原子系以外でもさまざまな系で Haldane 模型を実現する際に有効な方法である。例えば導波路列では、それぞれの導波路を進行方向に向かって一方向にぐるぐる回すような状況を作ることができる。導波路列では進行方向への座標が Schrödinger 方程式で時間の役割を果たしていたため、ぐるぐる回る導波路を作ることは各サイトを円形にゆすることに相当し、上で述べたのと同じ理由で Haldane 模型が実現される。この方法で光を使って時間反転対称性の破れた Chern 絶縁体が初めて実現された Rechtsman et al. (2013)。同じ方法は古典力学系にも使うことができる。ジャイロスコープを蜂の巣格子状に並べ、ジャイロスコープ間にバネと同等の力が働くようにして Haldane 模型と似た状態を実現し、そのカイラルエッジ状態を測定した実験がある Nash et al. (2015)。

3.6 人工次元

人工次元というのは、粒子の内部自由度などを次元として用いて低次元の空間で高次元の物理現象をシミュレートする方法のことである。まず簡単な例を示す。スピンSの粒子に磁場Bをかけると、ハミルトニアンに Zeeman エネルギー項 $H_{\rm Zeeman} \propto B \cdot S$ が加わる。例えばスピンがS=2のときにx方向に磁場をかけるという状況を考える。ちなみに、スピン2の粒子はアルカリ土類金属原子の2つの最外殻電子の混成軌道として冷却原子の文脈では自然に出てくる。スピンの量子化軸をz方向にとると Zeeman エネルギー項は次のような形をとる

$$H_{\text{Zeeman}} \propto BS_x = B \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \sqrt{3/2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3/2} & 0 & \sqrt{3/2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3/2} & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$
(3.49)

ここで出てくる行列はスピン 2 のときのスピン演算子の x 成分だが、これは最近接ホッピングがある 5 サイトの tight-binding 模型と全く同じ形をしている。 (ホッピングの強度はサイト間で 1 もしくは $\sqrt{3/2}$ であり、若干非一様になっている。) つまり、この粒子を 1 次元方向に動けるように光格子でトラップすると、5 本脚の梯子模型が実現される。これは、2 次元模型で 2 つ目の長さが 5 サイトしかない場合だと考えることもできる。このように、内部自由度(今の場合はスピン)を次元のように用いて高次元模型をシミュレートする方法が人工次元である。ここで大事なのは、単に「内部自由度を次元とみなします」と言うのではなく、内部自由度方向に粒子が動けるようにすることで次元とみなすという点である。上の例で言えば、x 方向へ磁場をかけることが内部自由度方向への「ホッピング」のハミルトニアンを作ることになっている。逆

に言えば、ハミルトニアンの中に通常の空間次元以外の自由度への運動エネルギーやホッピング項の形を しているものが含まれていれば、その自由度を次元とみなして良い。

3.6.1 周波数人工次元

人工次元の研究は冷却原子系で始まり、この方法を用いればトポロジカルバンド構造を実現できるという点が注目されて研究が劇的に進展した Celi et al. (2014); Mancini et al. (2015); Stuhl et al. (2015)。その後、人工次元の研究はフォトニクスにも波及し、デバイスへの応用も視野に入れて研究が進んでいる Ozawa et al. (2016); Yuan et al. (2016)。フォトニクスで特に注目されているのが周波数人工次元で、これは光共振器のモードの自由度を次元として用いる方法である。これは Floquet 有効ハミルトニアンの観点から理解できるのでここで少し解説する。まず、光共振器のハミルトニアンは次のように書ける。

$$H_0 = \sum_{n \in \mathbb{N}} (\omega_0 + n\omega) a_n^{\dagger} a_n \tag{3.50}$$

ここで n は何番目のモードなのかを表している。ここで時間周期的に共振器の屈折率を変えるような変調をかけることを考える。このような変調は一つとなりのモードとの結合を生むことが知られており、ハミルトニアンは全体として次のようになる。

$$H(t) = \sum_{n \in \mathbb{N}} (\omega_0 + n\omega) a_n^{\dagger} a_n + \Omega \sum_i \left(e^{i\omega t + \phi} a_{n+1}^{\dagger} a_n + H.c. \right). \tag{3.51}$$

ここで変調の周波数はモード間の周波数間隔 ω と等しくしており、また、変調に位相 ϕ もつけている。(もし変調周波数とモードの周波数間隔が等しくなければ、以下の議論はどう変更されるだろうか。)ここで (いつもと同じように) 対角成分を消すような回転系にうつる。ユニタリ変換は次で与えられる。

$$U = \exp\left(-i\sum_{n}(\omega_0 + n\omega)t\,a_n^{\dagger}a_n\right). \tag{3.52}$$

するとこの回転系でのハミルトニアンは

$$\tilde{H} = U^{\dagger} \Omega \sum_{i} \left(e^{i\omega t + \phi} a_{n+1}^{\dagger} a_n + H.c. \right) U = \Omega \sum_{i} \left(e^{i\phi} a_{n+1}^{\dagger} a_n + H.c. \right). \tag{3.53}$$

つまり、Floquet 理論を使うまでもなく回転系では時間依存しないハミルトニアンが得られ、ホッピングには位相がついている。ここで一つの共振器のモードから一次元の格子模型が得られらことになる。二つ以上の共振器を例えば一列に並べて共振器間に結合を考えると実 1 次元と人工 1 次元の合計 2 次元の格子模型が実現できることになる。位相 ϕ を共振器ごとに変化させれば Harper-Hofstadter 模型を実現することもできる。

3.6.2 エネルギー固有状態

先ほどの例は光共振器に特有のものと思われるかもしれないが、他の系でも似たような考え方は適用できる。(本講義のメッセージの一つが、ある人工量子系で適用できる方法は往々にして別の人工量子系にも適用できるということである。) その例として調和振動子中の粒子のモードの自由度を使う方法を紹介する Price et al. (2017)。まず、1次元調和振動子のハミルトニアンは次の形である。

$$H_0 = -\frac{1}{2m}\partial_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. {(3.54)}$$

光共振器のハミルトニアンとだいぶ異なっているように見えるかもしれないが、調和振動子の生成消滅演算子を用いると光共振器と似たような形にかける。生成消滅演算子を(通常通り)以下のように定義する

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2}} \left(x + \frac{1}{m\omega} \partial_x \right), \qquad a^{\dagger} = \sqrt{\frac{m\omega}{2}} \left(x - \frac{1}{m\omega} \partial_x \right).$$
 (3.55)

すると、ハミルトニアンは次の形に書ける。

$$H_0 = \omega \left(a^{\dagger} a + \frac{1}{2} \right). \tag{3.56}$$

このハミルトニアンの固有状態はゼロを含む自然数 $n=0,1,2,\cdots$ でラベルされ、 $|n\rangle$ と書ける。この状態に対して a と a^{\dagger} は $a|n\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle$ 、 $a^{\dagger}|n\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle$ と作用する。固有状態 $|n\rangle$ に対応するハミルトニアンの固有値は $\omega(n+1/2)$ である。(このあたりの事柄は標準的なので適当な量子力学の教科書を参照してほしい。)したがって、ハミルトニアンをスペクトル分解すると

$$H_0 = \sum_{n} \left(n\omega + \frac{\omega}{2} \right) |n\rangle\langle n| \tag{3.57}$$

と書くこともできる。こう書くと光共振器のハミルトニアンとの類似は明らかである。さて、調和振動子を左右に揺すってみることを考える。左右にゆすると、粒子は時間変化する遠心力を感じる。具体的には $V(t)=\Omega x\cos(\omega t)$ という時間変化するポテンシャルをかけることを考える。この時間変化するポテンシャルを書き直すと

$$V(t) = \Omega \cos(\omega t) \frac{a+a^{\dagger}}{\sqrt{2m\omega}} = \frac{\Omega \cos(\omega t + \phi)}{\sqrt{2m\omega}} \sum_{n} \sqrt{n} \left(|n-1\rangle\langle n| + |n\rangle\langle n-1| \right). \tag{3.58}$$

このポテンシャルは光共振器のときに加えた時間変調と似た形をしている。光共振器の時に結合が $e^{\pm i\omega t}$ という位相をもっていたのに対し、ここでは $\cos(\omega t + \phi)$ という周期変化する実数関数だという違いはある。(しかし、すぐみるようにこの違いは ω が大きい時に無視できる。)さて、系全体のハミルトニアンは $H(t) = H_0 + V(t)$ だが、いつもと同じように対角成分がなくなるような回転系にユニタリ変換

$$U = \exp\left(-iH_0t\right) \tag{3.59}$$

で移動する。この回転系でのハミルトニアンは

$$\tilde{H}(t) = U^{\dagger}V(t)U = \frac{\Omega\cos(\omega t + \phi)}{\sqrt{2m\omega}} \sum_{n} \left(\sqrt{n}e^{i\omega t}|n-1\rangle\langle n| + \sqrt{n}e^{-i\omega t}|n\rangle\langle n-1|\right)$$

$$= \frac{\Omega}{2\sqrt{2m\omega}} \sum_{n} \left(\sqrt{n}\left(e^{-i\phi} + e^{2i\omega t + i\phi}\right)|n-1\rangle\langle n| + \sqrt{n}\left(e^{i\phi} + e^{-2i\omega t - i\phi}\right)|n\rangle\langle n-1|\right). \tag{3.60}$$

ここで $e^{\pm 2i\omega t}$ で振動する項は ω が十分大きい時に無視できる(回転波近似)。あるいは、Floquet 有効ハミルトニアンの最低次を考えると $\tilde{H}(t)$ の時間平均を考えることになるが、 $e^{\pm 2i\omega t}$ の時間平均はゼロになるという風に考えても良い。すると、回転系でハミルトニアンは有効的に以下の形になる

$$\tilde{H}(t) = U^{\dagger}V(t)U \approx \frac{\Omega}{2\sqrt{2m\omega}} \sum_{n} \left(\sqrt{n}e^{-i\phi}|n-1\rangle\langle n| + \sqrt{n}e^{i\phi}|n\rangle\langle n-1| \right). \tag{3.61}$$

これは $|n\rangle$ をサイトインデックスとしたときの一次元の格子のハミルトニアンである。すなわち n を人工 次元とする一次元格子ができている。ここで注意することはホッピングが \sqrt{n} に依存しているという点である。この \sqrt{n} 依存性のために人工次元方向への並進対称性は存在しない。しかし、このような非一様なホッピングの模型でも一様なホッピングの(通常の)模型と同様な物理現象は得られる。例えばこのような調和振動子を y 方向に並べると n-y の二次元格子を作ることができ、振動に位相 ϕ を y 方向に変化させるとホッピングが非一様な Harper-Hofstadter 模型ができる。そこでもカイラルエッジ状態は見られることが知られている。最近この人工次元方向への Bloch 振動を観測したという実験も報告されている Oliver et al. (2021)。エネルギー固有状態というのは"自由度"としては抽象的なものに思えるが、量子状態のラベルであればこのような抽象的なものを含めある程度なんでも人工次元として使う道が開けていると考えて良い。

3.6.3 人工次元に関してその他のこと

他にも人工次元として利用できる自由度は多数存在する。例えば運動量空間を実空間のように用いて運動量空間の点をサイトとするような格子模型を実現する方法も知られており、運動量空間の SSH 模型も実現されている。また、他にも光のパルスが「到着する時間」を人工次元として使う方法も知られている。さまざまな自由度を次元のように使って格子模型(やその他の調べたい模型)を実現することができることを常に念頭に置いておくと良い。

人工次元と通常の次元の違いとして一つ考えられるのは、人工次元は非常に短い場合があることである。例えばスピン自由度を使った冷却原子系の実験では人工次元は3サイトの長さしかない場合がある。たった3サイトで次元と呼べるのかという疑問はあるかもしれない。例えば Harper-Hofstadter 模型で二番目の方向が3サイトしかない場合の Hofstadter's butterfly(エネルギースペクトル)をプロットすると図 22のようになる。二番目の方向がずっと長い通常の Hofstadter's butterfly(図 12)と比べてみるとそれほど違わないことが分かるであろう。見たい現象によっては3サイトでも十分に用が足りるので、どのような現象を見たいのか、そしてたとえ人工次元方向が短くても人工次元はその現象を見るために使えるのかと考えてみることが大事である。

人工次元が通常の次元と決定的に異なるのは粒子間相互作用である。人工次元としてスピン自由度などの内部自由度を使うと、人工次元方向の相互作用はしばしば非常に長距離になり、空間的な短距離相互作用を仮定する理論は通用しないことがある。長距離相互作用ならではの物性の開拓や、人工次元方向に短距離相互作用を作る方法などさまざまな研究が進行している。

人工次元を用いて高次元模型を実現できるということは 4 次元以上の模型も作れるということである。高次元模型は人工次元を使えばもはや単なる理論上の興味を超えて実験と関連させてその物性を議論できることになる。人工次元との関連で最もよく調べられている高次元模型は 4 次元量子ホール効果で、4 次元量子ホール効果のバンド構造を観測した実験も存在する Wang $et\ al.\ (2020)$ 。より詳しくはレビュー Ozawa and Price (2019) を参照していただきたい。

3.7 量子スピンホール絶縁体的模型:時間反転対称性を破らない

ここまで時間依存する変調を与え、そこから得られる時間依存しない有効ハミルトニアンで Chern 絶縁体の模型を実現する方法を説明してきた。Chern 絶縁体の実現には時間反転対称性を破る必要がある

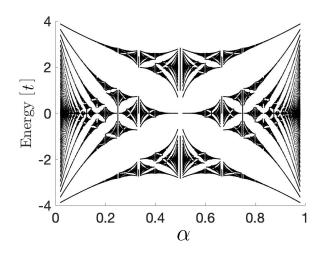


図 22 二番目の方向に 3 サイトしかない場合の Harper-Hofstadter 模型のエネルギースペクトル。両方向に周期境界条件を仮定している。

が、それが時間依存する変調によって与えられるのである。しかし、時間変調を与えずに何か静的な方法で Chern 絶縁体のような状況を実現できると実験的にはもっと楽である。その解決の一つが量子スピンホー ル絶縁体的な状況を作ることである。

光共振器の格子を用いて Harper-Hofstadter 模型を作った実験がある Hafezi et al. (2011)。その実験では複素ホッピングを以下のような方法で実現した。模式図を図 23 に示す。まず、同じ共振器を二つ並べる。これらの間を導波路でつなぐが、つなぐ導波路(リンク共振器と呼ばれる)の長さは共振器で共振する波長がちょうど打ち消すような長さを用いる。この場合、光は主に共振器の中をぐるぐると回っており、たまに隣の共振器にホップする、という格子模型ができあがる。隣の共振器にホップするときに光が受け取る位相はリンク共振器の長さと関係している。左から右へホップする場合と右からホップする場合で光が通る路の長さが異なる場合、それに対応してホッピングに位相がつく。具体的には、リンク共振器の長さがどちら向きでも等しい場合に比べ左から右が Δx 、右から左は $-\Delta x$ だけ長さが異なっている場合を考えると、位相 $\phi = 2\pi n \Delta x/\lambda$ がホッピングにつく。ここで n が屈折率、 λ は光の波長である。

さて、これで Harper-Hofstadter 模型ができたように思えるが、時間反転対称性は破っていない。共振器をある方向に回るモードに対して逆方向に回るモードも存在することを考えなければいけないのである。時計回りのモードに関して位相 ϕ の Harper-Hofstadter 模型ができている場合、逆回りのモードに関しては位相 $-\phi$ の Harper-Hofstadter 模型ができている。したがって、それぞれのモードの基底で書くとハミルトニアンはブロック対角な次の形をとっている。

$$H = \begin{pmatrix} H_{\rm H-H}(\phi) & 0\\ 0 & H_{\rm H-H}(-\phi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{\rm H-H}(\phi) & 0\\ 0 & H_{\rm H-H}(\phi)^* \end{pmatrix}$$
(3.62)

このハミルトニアンは全体として時間反転対称性を保っている。時間反転対称性とは反ユニタリな演算子でハミルトニアンと可換なものである。反ユニタリな演算子とは複素共役の演算子 K にユニタリ演算子をかけた形のものである。ここでは演算子 $\sigma_x K$ が時間反転対称演算子になっている。ただし σ_x は右回りと左回りのモードの基底に関するパウリ x 演算子である。 $KH_{\rm H-H}(\phi)K=H_{\rm H-H}(-\phi)$ に注意して具体的に

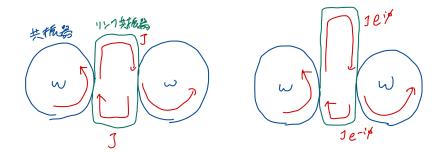


図 23 共振器の間のホッピングを複素数にする方法。左図ではリンク共振器が左から右へのパスと右から左へのパスが同じ長さになるようになっており、ホッピングに位相はつかない。右図では左から右へのパスの方が右から左へのパスよりも長いためホッピングに位相差がつく。

見ると

$$(\sigma_x K)^{\dagger} H(\sigma_x K) = \sigma_x \begin{pmatrix} H_{\mathrm{H-H}}(-\phi) & 0\\ 0 & H_{\mathrm{H-H}}(\phi) \end{pmatrix} \sigma_x = \begin{pmatrix} H_{\mathrm{H-H}}(\phi) & 0\\ 0 & H_{\mathrm{H-H}}(-\phi) \end{pmatrix} = H$$
(3.63)

また、 $\sigma_y K$ が同様に時間反転対称性になっていることも分かる。ここで $\sigma_x K$ は $(\sigma_x K)^2 = +1$ を満たしているのでいわゆるボソンの時間反転対称性、 $\sigma_y K$ は $(\sigma_y K)^2 = -1$ を満たしているのでいわゆるフェルミオンの時間反転対称性であり、この系はボソン的そしてフェルミオン的時間反転対称性の両方を持っていることがわかる。時間反転対称性が二つある場合、それらの積はユニタリな対称性となる。この場合は $\sigma_x K \sigma_y K = -i\sigma_z$ で、すなわち右回りのモードと左回りのモードの二つが結合していないという対称性に対応していることがわかる。

このように、全体として時間反転対称性を保持していてもそれぞれのモードに注目すると Chern 絶縁体が実現しているという状況がある。それぞれのモードを固体電子系のスピンのアナロジーとみなすとこの状況は量子スピンホール絶縁体の状況と類似している。スピンホール絶縁体では上向きスピンと下向きスピンがそれぞれ逆の Chern 数を持っているため時間反転対称性は破っていなくても系のエッジにスピン流が流れる。量子スピンホール絶縁体の驚くべきところは、上向きスピンと下向きスピンの間に結合があってもその結合がフェルミオン的な時間反転対称性を破っていなければスピン流は流れ得るというところである。光共振器や古典力学系では自然に存在する不純物はたとえ時間反転対称性を保っているとしてもたいていはボソン的な時間反転対称性である。したがって、二つのモードの間に結合があればエッジモードにはギャップが開いてしまう。しかし、二つのモードの間に結合がない限りにおいてはエッジ状態が存在し、結合が存在しないという仮定は十分満たされていることが多い。

古典力学系に関してもう少し具体的に何を意味しているのか説明する。質点や振り子とバネをつなげる場合、Floquet 有効ハミルトニアンなどの手段を用いずに静的なハミルトニアンを見た場合結合は通常は実数である。しかし、ハミルトニアン(3.62)は結合に複素ホッピングが入ってしまっている。これをそのまま力学系で実装するのは難しい。しかし、次のようなユニタリ変換を考えてみよう:

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{pmatrix}. \tag{3.64}$$

このユニタリ変換には時間変化は含まれておらず、回転系に行くような(動的な)変換とはちがって静的な 基底の取りかえである。新しい基底で見るとハミルトニアンは

$$\tilde{H} = U^{\dagger} \begin{pmatrix} H_{\mathrm{H-H}}(\phi) & 0 \\ 0 & H_{\mathrm{H-H}}(\phi)^* \end{pmatrix} U = \begin{pmatrix} \operatorname{Re}[H_{\mathrm{H-H}}(\phi)] & \operatorname{Im}[H_{\mathrm{H-H}}(\phi)] \\ \operatorname{Im}[H_{\mathrm{H-H}}(\phi)^*] & \operatorname{Re}[H_{\mathrm{H-H}}(\phi)] \end{pmatrix}. \tag{3.65}$$

このハミルトニアンの各要素は実数である。古典力学系では実数であればバネのつなぎ方などは工夫しなければいけないかもしれないが実現可能である。このハミルトニアンは別の基底でみれば二つの結合のない Harper-Hofstadter 模型(3.62)となっているためトポロジカルエッジ状態が存在し、観測できる。この方法で古典力学系でトポロジカルエッジ状態を初めて実現したのが Süsstrunk and Huber (2015) である。

3.8 なぜさまざまな系で似たような模型を実現するのか

さて、さまざまな模型をいろいろなセットアップで実現する方法を見てきたわけだが、ここで疑問となるのは、なぜ同じ模型をさまざまなセットアップで実現したいのか、そのモチベーションである。例えば、理論家であれば Haldane 模型なら Haldane 模型を理論的に研究すれば十分で、それがいろいろな系でどう実現されるのかということに興味を持つ理由は何かあるのだろうか。理論的には固体電子系がバックグラウンドにあろうと冷却原子系であろうと変わらないのではないか。そういう疑問はあるかもしれない。

例えばある模型が式として与えられたとして、その模型が何らかの「面白い」性質を示す場合、その面白い性質は何らかの物理量や観測量と関連して現れてくるはずである。(原理的にも観測することのできない面白い性質というものは存在するだろうか。)ある模型に対して、測定できる物理量・観測できる現象というのはその模型がどのように実現されるのかに依存する。ある模型の基底状態が面白いなら基底状態にアクセスできるような系を考えなければいけないし、有限温度の振る舞いが面白いなら熱平衡状態が得られる系でないといけない。熱平衡状態における外部からの摂動に対する線形な応答みたいなものを考えるなら、もちろん外部から接動を与えることができる熱平衡状態であって応答が観測可能な系が念頭にあることになる。

人工量子系は何を観測できるのか、何を観測しているのかという点で固体電子系とは異なることが多い。固体電子系ならフェルミオンを適当な化学ポテンシャルのもとでつめたときの基底状態や熱平衡状態の応答が通常は観測量になる。一方、導波路列では基底状態や熱平衡状態を考えても無意味で、むしろ適当な初期状態からのクエンチダイナミクスにおける実空間波動関数が観測量になる。光共振器系なら特定の周波数で系を励起した時の光の透過や定常状態を見ることになるし、励起子ポラリトン系なら高いエネルギーにところに励起を与え、それが低エネルギー状態まで緩和してくるときの定常状態を考えることが多い。模型の「面白さ」が「観測可能性」と結びついているなら、ある模型をある系で考えると面白いけれども別の系で考えるとつまらないのかというと、そういうわけでもない。例えば整数量子ホール効果は固体電子系ではじめ「面白い」現象として見つかった。その後の研究で、整数量子ホール効果が生じる背景にはトポロジカルバンド構造という一粒子の性質が存在することが分かった。そして、トポロジカルバンド構造はここで説明してきた多様な系で実現できることが分かった。人工量子系では「ホール伝導度の量子化」という現象は見えないことが多いが、しかし背後にあるトポロジカルバンド構造由来の他の「面白い」現象を見ることができる。(例えば、直接的にはカイラルエッジ状態を観測できる。ちなみにカイラルエッジ状態を直接固体電子系で観測するのは難しい。) したがって、背景に同じ模型から生まれる同じトポロジカルバンド構造があってもそこで見られる物性・現象は全く異なってくる。このように、ある系で面白い模型は背後に何か

普遍的な性質があるために往々にして別の系でも面白いことがあり、そしてその面白さがどのような形で発現してくるのかは個別の系に依存するということである。この普遍性と個別性のバランスが人工量子系の研究における醍醐味の一つである。

また、人工量子系にはそれぞれの特徴があり、固体電子系と同じ模型を作っているようでも多少異なったものができていることがある。例えば冷却原子系では一様な格子模型を作ったと思っていても通常は全体に閉じ込めポテンシャルがかかっている。励起子ポラリトンで蜂の巣格子を作ったと思っても実際には偏向自由度のスピン軌道相互作用が入っているものができていたりする。人工量子系では往々にして散逸があることがあり、エルミートな模型を作ったと思っても非エルミートなロスが入っている項が実効的には実現していることがある。このような違いはもとの模型の特徴を見る時に影響しないこともあれば、この違いが本質的に新しい物理を生み出すこともある。例えば冷却原子系では長距離相互作用における(平均場を超える)量子効果の高次の補正と閉じ込めポテンシャルの兼ね合いで液滴格子と呼ばれる高密度の格子構造が発生することが知られている。各物理系の特徴に応じて今までは考えることのなかった新しい模型や効果を調べることができるのも人工量子系研究の面白さである。

次の章ではトポロジカルバンド構造に由来するがある程度人工量子系に特有な現象としてどのようなも のがあるのかについて解説していく。

4 人工量子系でのトポロジカル現象の発現

4.1 重心速度の量子化:ホール伝導度の量子化に代わって

整数量子ホール効果はホール伝導度がある普遍的な値を単位として整数に量子化される現象であった。その背後にはトポロジカルバンド構造があることはここまでで見てきた通りである。ホール伝導度の量子化は伝導率を測定することができるようなフェルミオン系に特有の現象であり、人工量子系ではそれほど自然な観測量ではない。しかし、そのアナロジーとして重心速度が量子化することが知られている Price et al. (2016)。それについて簡単に説明する。

2次元の Chern 絶縁体を考える。まずは整数量子ホール効果との関連で、x 方向に電場 E_x を与えた時の y 方向の電流密度 j_y は線形応答理論で

$$j_y = -\frac{e^2}{h} E_x \mathcal{C} \tag{4.1}$$

で与えられることが知られている。ここで e は電子の電荷で $h=2\pi\hbar$ はプランク定数だが、以下では $e=\hbar=1$ とおくことにする。C は埋まっているバンドの Chern 数の合計である。電流密度に体積 V (ここでは 2次元なので面積と呼んでも良い)をかけると全電流が得られる $(J_y=j_yV)$ が、電荷を 1 に取る とこれは粒子の速度の合計に等しいことに注意する。一方、全粒子数 N と粒子密度 n の間には n=N/V の関係がある。系の重心速度 $v_{\rm c.m.}$ は全速度を粒子数で割ったもので定義されるが、それは次の関係を満たす:

$$v_{\text{c.m.}} = \frac{J_y}{N} = \frac{j_y}{n} = -\frac{E_x}{2\pi n} C.$$
 (4.2)

例えばバンドが一つだけ占有されている状況を考える。それはすなわち 1 つのユニットセルに対して 1 つの粒子が存在するような密度なので、粒子密度は $n=1/(\text{size of a unit cell})=A_{\text{BZ}}/(2\pi)^2$ 、ここで A_{BZ} は Brillouin ゾーンの面積である。すると、重心速度は

$$v_{\text{c.m.}} = -2\pi \frac{E_x}{A_{\text{BZ}}} \mathcal{C} \tag{4.3}$$

という形で量子化されることが分かる。ホール伝導度は冷却原子系などでは容易に測れる量ではないが、あるバンドから波束を構成してそれをx方向に力 E_x で押したときのy方向の重心速度は観測可能な量であり、実際にこの関係を用いて冷却原子系で Harper-Hofstadter 模型を作り Chern 数が測定されている Aidelsburger $et\ al.\ (2015)$ 。

4.2 重心位置の時間発展と Mean Chiral Displacement

トポロジカルバンド構造はバルクのトポロジーに対応してエッジに局在する状態があることが特徴であり、最も目立つ観測的結果はエッジ状態の存在である。しかし、エッジ状態を観測することが難しいような人工量子系も多く存在する。そのような場合にエッジ状態を介さずに直接バルクのトポロジカル不変量を測定する方法がいくつか知られている。前節の重心速度の量子化を通じた Chern 数の測定はその一例である。別の例として1次元のカイラルハミルトニアンの巻きつき数は適当な初期状態から重心位置の時間発

展を測定することで得られることが知られている。その考え方を一般化した Mean Chiral Displacement は多くの系で1次元の巻きつき数を測定するために利用されている。

1次元カイラルハミルトニアンを考える。一次元の位置の演算子をxとおく。位置演算子はユニットセルの位置を表しており、例えば2バンド系である SSH 模型ではx=1 に存在するユニットセル内の左側のサイトが副格子 A で右側のサイトが副格子 B に属している。しかしどちらの副格子のサイトも位置としてはx=1 に存在していると解釈する。この演算子の期待値を考えることになるが、どういう状態について期待を考えるのか、というのが大事な点である。ここでは最も単純な SSH 模型に代表される 2バンド系で考える。(一般のバンド数への拡張は知られている。)このとき、状態としてはt=0 でx=0 のユニットセルのどちらか一方のサイトに完全に局在した状態からスタートし、そこから時間発展させた後の時間 t での状態 $|\psi(x,t)\rangle$ を考える。ここで $|\psi(x,t)\rangle$ はxと t を決めると副格子自由度に関する 2成分ベクトルである。図 24 に状況を模式的に描いた。この状態について位置演算子の期待値を計算すると $t\to\infty$ で巻きつき数に収束することを今から説明する。

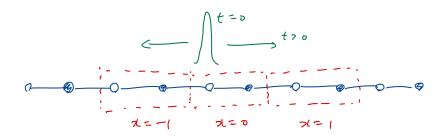


図 24 重心位置から巻きつき数を測定する。t=0で一つのサイトに局在している状況から時間発展させ、その重心位置を調べる。

まず、波数 k の固有状態は

$$e^{ikx}|u_{\pm}(k)\rangle = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta(k)} \\ \pm 1 \end{pmatrix}$$
 (4.4)

だったことを思い出してほしい。それぞれの状態に対応する固有エネルギーは $E_\pm(k)=\pm E(k)$ の形で書ける。以下の議論では E(k) は周期 2π の実関数であるということしか使わないので具体的な形を知っておく必要はない。初期状態としては x=0 でどちらかのサイトに粒子が局在している状況からスタートする。ここでは副格子 B のサイトに局在していると仮定して議論を進めるが、副格子 A に局在していても結論は(符号を除き)変わらない。上に書いた固有状態の具体的な形から

$$e^{ikx}\frac{|u_{+}(k)\rangle - |u_{-}(k)\rangle}{\sqrt{2}} = e^{ikx} \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix} \tag{4.5}$$

であることが分かる。右辺の形は副格子 B に広がる平面波である。したがって、x=0 の副格子 B に完全に局在した初期状態は平面波を重ね合わせた次の形で書ける。

$$|\psi(x,0)\rangle = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ikx} \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ikx} \frac{|u_{+}(k)\rangle - |u_{-}(k)\rangle}{\sqrt{2}}$$
(4.6)

ここで運動量の積分は Brillouin ゾーン内に渡ってのものである。したがって、時間 t における状態は

$$|\psi(x,t)\rangle = e^{-iHt}|\psi(0)\rangle = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ikx} \frac{e^{-iE(k)t}|u_+(k)\rangle - e^{iE(k)t}|u_-(k)\rangle}{\sqrt{2}}.$$
 (4.7)

この状態について x の期待値を考える。 $xe^{ikx}=-i\partial_k e^{ikx}$ という関係に注意すると

$$\begin{split} \langle x \rangle &\equiv \sum_{x} \langle \psi(x,t) | x | \psi(x,t) \rangle \\ &= \sum_{x} \int dk dk' \frac{\left(-i\partial_{k} e^{i(k-k')x}\right)}{2(2\pi)^{2}} \left(e^{iE(k')t} \langle u_{+}(k') | - e^{-iE(k')t} \langle u_{-}(k') | \right) \left(e^{-iE(k)t} | u_{+}(k) \rangle - e^{iE(k)t} | u_{-}(k) \rangle \right) \\ &= \sum_{x} \int dk dk' \frac{ie^{i(k-k')x}}{2(2\pi)^{2}} \left(e^{iE(k')t} \langle u_{+}(k') | - e^{-iE(k')t} \langle u_{-}(k') | \right) \partial_{k} \left(e^{-iE(k)t} | u_{+}(k) \rangle - e^{iE(k)t} | u_{-}(k) \rangle \right) \\ &= \int dk \frac{i}{4\pi} \left(e^{iE(k)t} \langle u_{+}(k) | - e^{-iE(k)t} \langle u_{-}(k) | \right) \partial_{k} \left(e^{-iE(k)t} | u_{+}(k) \rangle - e^{iE(k)t} | u_{-}(k) \rangle \right). \end{split} \tag{4.8}$$

ここで $\sum_x e^{i(k-k')x} = 2\pi\delta(k-k')$ を使った。さて、計算を続けると

$$\langle x \rangle = \frac{i}{4\pi} \int dk \left(\langle u_{+}(k) | \partial_{k} | u_{+}(k) \rangle + \langle u_{-}(k) | \partial_{k} | u_{-}(k) \rangle - e^{2iE(k)t} \langle u_{+}(k) | \partial_{k} | u_{-}(k) \rangle - e^{-2iE(k)t} \langle u_{-}(k) | \partial_{k} | u_{+}(k) \rangle \right). \tag{4.9}$$

固有状態の具体的形を見ると $\langle u_\pm(k)|\partial_k u_\pm(k)\rangle = -i\partial_k \theta(k)/2$ であることが分かる。したがって

$$\langle x \rangle = \frac{1}{4\pi} \int dk \left(\frac{\partial \theta(k)}{\partial k} - 2\cos(2E(k)t) \frac{\partial \theta(k)}{\partial k} \right) = \frac{W}{2} - \frac{1}{2\pi} \int dk \cos(2E(k)t) \frac{\partial \theta(k)}{\partial k}. \tag{4.10}$$

ここで第二項の積分は t が大きい時には非常に速く振動する $\cos(2E(k)t)$ という k に関する周期関数に $\partial_k \theta(k)$ をかけたものを積分することになる。この積分は t が大きくなるに連れてゼロに収束する。したがって、

$$\lim_{t \to \infty} \langle x \rangle = W/2 \tag{4.11}$$

となり、t の関数として $2\langle x \rangle$ を測定すると巻きつき数に収束することになる。具体的に数値シミュレーションをした結果を図 25 に示す。実際に長時間で巻きつき数に収束していく様子が見える。

位置の期待値からトポロジカルな情報が得られたのは、 $x=-i\partial_k$ という対応から位置に関する情報は状態の運動量空間での微分の情報、つまり運動量空間の幾何学的構造を与えるからである。初期状態として一つのサイトに局在した状態を考えることで運動量空間で考えると運動量空間全体に広がっている状態を考えることに対応し、幾何学的構造の運動量空間全体の情報、つまりトポロジカルな情報が得られるという仕組みである。

上では初期状態として副格子 B に局在したものを考えた。副格子 A に局在した状態を考えても符号を除き同じ結論が得られる。しかし、初期状態として x=0 のユニットセル内に局在はしているものの両方の副格子の重ね合わせ状態を出発点とした場合、上の計算は成り立たなくなる。それは幾何学的な項以外に非幾何学的な項が入ってきてしまい、幾何学的な項がサブリーディングとなってしまうからである。しかし、x=0 のユニットセル内に局在した一般の初期状態に対して巻きつき数を計算する方法は知られている。上では x の期待値を計算したが、それにカイラル対称性の演算子 x をかけた演算子 x の期待値を計算する

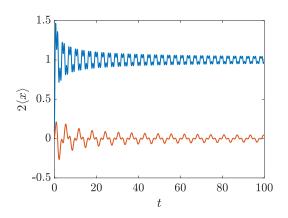


図 25 一つのサイトに局在させた状態から時間発展させた時の $2\langle x\rangle$ を時間の関数としてプロット。青い線は $t_1=1$ 、 $t_2=2$ で巻きつき数が 1 の場合に対応し、赤い線は $t_1=1$ 、 $t_2=0.5$ で巻きつき数がゼロの場合に対応する。

と $t \to \infty$ で W/2 に収束し、しかも初期状態が二つの副格子の重ね合わせでも良いことが知られている。 $\langle Cx \rangle$ を Mean Chiral Displacement と呼び、さまざまな人工量子系でカイラルハミルトニアンの巻きつき数を実験的に測定する際に用いられている Cardano et~al.~(2017); Maffei et~al.~(2018)。

4.3 定常状態におけるトポロジカル物性:熱平衡状態ではない非平衡状態

人工量子系ではしばしば熱平衡状態ではなく非平衡の定常状態を扱うことがある。例えば光の系では外部から一定の強さで光を注入する一方で系からは一定の割合で光が逃げていくためにその釣り合いで決定される定常状態を考えることがよくある。このような全く非平衡の定常状態からにもトポロジカルなバンド構造の影響が現れる。

光共振器や励起子ポラリトン格子などの光の格子系を念頭に定常状態を理論的に記述する方法を説明する。 ハミルトニアン H で記述される系に外部から光を注入することを考える。 Schrödinger 方程式は少し修正を受け、注入を表すソース項を含む以下の形に書ける。

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle + |s(t)\rangle.$$
 (4.12)

ここで $|\psi(t)\rangle$ は光の各サイトの状態(振幅)を表す時間変化するベクトルで、例えば N サイト系なら N 成分の複素ベクトルである。外部からの注入を表すのが $|s(t)\rangle$ で、例えば一つ目のサイトだけに周波数 ω の光を注入するという状況では $|s(t)\rangle$ は第一成分が $e^{-i\omega t}$ で第二成分以降がゼロというベクトルになる。これだと注入があるだけだが、一定のロスを加えたい場合にはハミルトニアンの対角項に純虚数の項を入れて $H-i\gamma I$ という形にすれば良い。ここで γ がロスの割合を表し、I は適当な大きさの単位行列である。

ソースとしては単一周波数の光を入れてその定常状態を見るという状況は人工量子系でしばしば発生する。その場合にはソースは $|s(t)\rangle=e^{-i\omega t}|s\rangle$ という時間依存性を持つ。この場合に同じ振動数で振動する定常状態、つまり $|\psi(t)\rangle=e^{-i\omega t}|\psi_{\rm steady}\rangle$ という形の解を考える。この形の解とソースをロスを加えた Schrödinger 方程式に代入すると

$$\omega e^{-i\omega t} |\psi_{\text{steady}}\rangle = (H - i\gamma I)e^{-i\omega t} |\psi_{\text{steady}}\rangle + e^{-i\omega t} |s\rangle. \tag{4.13}$$

時間依存性は両辺から消去することができ、定常状態は次の形で書けることが分かる:

$$|\psi_{\text{steady}}\rangle = [(\omega + i\gamma)I - H]^{-1}|s\rangle.$$
 (4.14)

ここで $[(\omega+i\gamma)I-H]^{-1}$ は $(\omega+i\gamma)I-H$ の逆行列である。ハミルトニアンとして並進対称なものを考えると Bloch の定理により固有状態はバンドインデックス n と波数 $\mathbf k$ でラベルされる。固有状態を $|n,\mathbf k\rangle$ と書き、対応する固有エネルギーを $E_n(\mathbf k)$ と書くことにしよう。すると $I=\sum_{n,\mathbf k}|n,\mathbf k\rangle\langle n,\mathbf k|$ なので

$$|\psi_{\text{steady}}\rangle = [(\omega + i\gamma)I - H]^{-1} \sum_{n,\mathbf{k}} |n,\mathbf{k}\rangle\langle n,\mathbf{k}|s\rangle = \sum_{n,\mathbf{k}} \frac{\langle n,\mathbf{k}|s\rangle}{\omega + i\gamma - E_n(\mathbf{k})} |n,\mathbf{k}\rangle. \tag{4.15}$$

つまり定常状態は全ての固有状態が重み $\frac{\langle n, \mathbf{k} | s \rangle}{\omega + i\gamma - E_n(\mathbf{k})}$ で重ね合わさったものになっている。分子は ソース $|s\rangle$ と各固有状態とのオーバーラップを表しており、ソースと直行するような固有状態は定常状態に 含まれないということも意味する。分母を見ると、ソースの周波数 ω と近いエネルギー $E_n(\mathbf{k})$ を持つ状態 は大きめの重みで含まれることが分かる。重みの絶対値の二乗を考えると

$$\left| \frac{\langle n, \mathbf{k} | s \rangle}{\omega + i\gamma - E_n(\mathbf{k})} \right|^2 = \frac{|\langle n, \mathbf{k} | s \rangle|^2}{(\omega - E_n(\mathbf{k}))^2 + \gamma^2}$$
(4.16)

というローレンツ分布になっているため、 γ が大きいほど裾野が広い、つまり ω が $E_n(\mathbf{k})$ から離れた状態も重ね合わせに含まれていることを意味する。逆に、 γ が小さいとシャープな分布になり、 ω が $E_n(\mathbf{k})$ と 近いような状態しか含まれないことになる。ここで得られている。 $|\psi_{\text{steady}}\rangle$ はあくまでも一粒子の純粋状態である。しかし、例えばソースの周波数 ω が特定のバンドに対応する周波数になっており、 γ としてローレンツ分布の裾野がそのバンドを含むがその上下のバンドを含まないようなものを取れば $|\psi_{\text{steady}}\rangle$ はそのバンドだけからの寄与を得られる。また、ソースとして実空間に局在しているものをとれば波数空間では広がっているため、 $|\psi_{\text{steady}}\rangle$ はバンド全体の情報を含んでおり、そこからトポロジカルな応答を得ることも可能である。定常状態にどのような固有状態が含まれているのかを模式的に図 26 に示した。

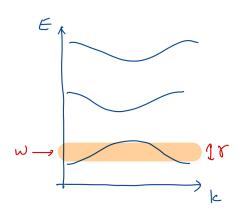


図 26 特定の周波数 ω で空間的に局所的にソースを注入したとき、系全体にはロス γ があるときにどのような状態が定常状態に含まれているのかの模式図。

例えば 2 次元系で x 方向に電場 E_x を加えた時の定常状態について y 方向の位置の期待値を計算すると適切な状況では $\langle \psi_{\rm steady} | y | \psi_{\rm steady} \rangle \propto \mathcal{C}E_x$ という関係が成り立つことが知られている Ozawa and Carusotto

(2014)。ここで \mathcal{C} は $|\psi_{\text{steady}}\rangle$ が含んでいるバンドの Chern 数である。もしロス γ が十分小さい時にはバンド全体ではなくバンドの一部の幾何学的構造(Berry 曲率や量子計量など)の情報を $|\psi_{\text{steady}}\rangle$ から得ることもできる Ozawa (2018)。

4.4 トポロジカルレーザー:ゲイン下での物性

トポロジカルレーザーとは、トポロジカルエッジ状態がレーザー発振するようなレーザーのことである。レーザーはフォトニクス特有の現象であり、トポロジカルバンド構造と人工量子系の特徴が合わさった人工量子系ならではの現象と言える。まず、トポロジカルレーザーと言った場合は2つに大別される。一つは、ゲインやロスの入っていないエルミートな系のバンド構造がトポロジカルに非自明なためにエッジ状態を持ち、そのエッジ状態から選択的にレーザー発振するようなゲイン・ロスを加えてトポロジカルレーザーを実現するもの。もう一つはゲインやロスも含めて周期的になっている非エルミートなハミルトニアンのバンド構造を考えた時にエッジ状態が最も大きなゲインを持ち、したがってエッジからレーザー発振するようなものである。前者について簡単な模型を以下で説明する。

トポロジカルバンド構造の例として Su-Schrieffer-Heeger 模型という 1 次元の tight-binding 模型を考える。Su-Schrieffer-Heeger 模型はホッピングの強度が $t_1,\,t_2,\,t_1,\,t_2,\,\cdots$ のような形で交互に変わる 1 次元の模型で、最初のホッピング t_1 が次のホッピング t_2 より弱い場合、すなわち $|t_1/t_2|<1$ のときに波数空間のトポロジーが非自明になり、実空間では端に局在したモードが存在するトポロジカルな模型である。各サイトが光共振器でできているとし、i 番目の共振器内の電場の時間 t における振幅を $\alpha_i(t)$ とする。波動関数に対応するのが各サイトの電場の振幅を縦に並べたベクトル $\alpha(t)$ である。Su-Schrieffer-Heeger 模型のハミルトニアン $H_{\rm SSH}$ とともにその形を明示しておく。

$$\alpha(t) = \begin{pmatrix} \alpha_1(t) \\ \alpha_2(t) \\ \alpha_3(t) \\ \vdots \end{pmatrix}, H_{\text{SSH}} = \begin{pmatrix} 0 & t_1 & 0 & 0 & \cdots \\ t_1 & 0 & t_2 & 0 & \cdots \\ 0 & t_2 & 0 & t_1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \tag{4.17}$$

前節ど同様に、各サイトに一様なロスγがあときの系の時間発展は以下のように記述される。

$$i\frac{\partial}{\partial t}\alpha(t) = H_{\rm SSH}\alpha(t) - i\gamma\alpha(t) + G(t)\alpha(t).$$
 (4.18)

ただし、最後の項にゲイン G(t) を導入した。エッジ状態からレーザー発振させたいため、エッジにある程度選択的なゲインを与える。そのために、ゲインは系の左半分にだけ与えられるとする。具体的に、G(t) は対角行列であり、左半分のサイトに関して $G_{ii}(t)=i\frac{g}{1+|\alpha_i(t)|^2}$ であり、右半分のサイトに関して $G_{ii}(t)=0$ と仮定する。ここで、g がゲインの強さを与える。分母に $|\alpha_i(t)|^2$ が入っているのは、ゲインが飽和する、つまり各サイトの振幅が大きくなりすぎるとゲインは徐々に小さくなるという効果を入れている。(ゲインの飽和を入れなければ、系からの発振強度が際限なく大きくなってしまい、困る。しかしレーザー発振の近傍を見たいだけであればゲインの飽和は必ずしも取り入れる必要はない。)ランダムな初期状態から出発し、十分時間が経ったあとの系の電場強度をゲインの強さ g の関数としてプロットしたのが図 27(a) である。ゲイン g がロス γ よりも大きくなると系の電場強度が途端に大きくなることがわかり、これがレーザー転移である。 $g/\gamma=1.4$ のときの電場の分布を図 27(b) にプロットしたが、確かにエッジ状

態からレーザー発振している。(Su-Schrieffer-Heeger 模型のエッジ状態は奇数番目のサイトの波動関数のみが非ゼロになることが知られており、電場分布もそれと一致している。)

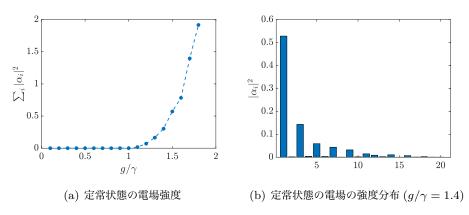


図 27 系の左側だけにゲインを与えた時の定常状態の電場の強度とその分布

ここでエッジ状態からレーザー発振したのは、ゲインと左端に局在したエッジ状態とのオーバーラップが最も大きくなるようにゲインを左半分にだけ与えたからである。最初のトポロジカル・レーザーの実験はこのように Su-Schrieffer-Heeger 模型を用いたものである St-Jean *et al.* (2017)。これ以外にも、奇数番目のサイトにだけゲインを与えるという方法でもトポロジカルエッジ状態からレーザー発振する Parto *et al.* (2018); Zhao *et al.* (2018)。

より面白いのは2次元のトポロジカルバンド構造からレーザー発振する状況であり、この場合はカイラルエッジ状態からのレーザー発振となる。この方向での実験に最初に成功したのは California 大学のグループである Bahari et al. (2017)。光共振器系で時間反転対称性を破らずに2次元トポロジカルバンド構造を作り、そのエッジ状態からレーザー発振する実験も行われている Bandres et al. (2018)。トポロジカル・レーザーおよび広くアクティブ系のトポロジーについてより詳しいことはレビュー Ota et al. (2020) を参考にしていただきたい。

5 **まとめ**

人工量子系で tight-binding 模型をシミュレートするというのはどういうことか、そしてそこでのトポロジカルバンド構造の物理について簡単に説明した。詳しい部分についてはそれぞれのトピックに関するレビュー等を参考にしてほしい。人工量子系の醍醐味はある程度好きなハミルトニアンを実現できるということと、さまざまな観測量があるということである。人工量子系でトポロジカル物性の研究が盛んに行われたのは、まず第一に相互作用のない一粒子のバンド構造が重要だという点にあると思う。しかし、次のステップとして相互作用の重要なトポロジカル相の研究も本格的に進んでおり、光の Laughlin 状態なども簡単なものでは実現している Clark et al. (2020)。相互作用のもとでの Symmetry Protected Topological 相 (SPT 相) の冷却原子系 (特に Rydberg 原子系) での実験もある Léséleuc et al. (2019)。 Rydberg 原子系は量子コンピュータの実装でも最近大きな進展を見せているプラットフォームである Wu et al. (2021)。本講義では人工量子系での量子シミュレーションに関してトポロジカル物性との関連から取り上げたが、人

工量子系を使って調べられる物性はもちろん他にもたくさん存在する。通常の多体物性のシミュレーションが伝統的には幅広く調べられているし、最近では格子ゲージ理論のシミュレーションも非常に盛んである。人工量子系ではアイデアの理論的な提案からそのアイデアの実験的な実現まで少数の研究者で完結させることができる。多くの方に人工量子系の物性研究に興味を持っていただけたら幸いである。

参考文献

- Aidelsburger, M., M. Atala, M. Lohse, J. T. Barreiro, B. Paredes, and I. Bloch (2013), "Realization of the hofstadter hamiltonian with ultracold atoms in optical lattices," Phys. Rev. Lett. 111, 185301.
- Aidelsburger, M., M. Lohse, C. Schweizer, M. Atala, J. T. Barreiro, S. Nascimbòne, N. R. Cooper, I. Bloch, and N. Goldman (2015), "Measuring the chern number of hofstadter bands with ultracold bosonic atoms," Nat. Phys. 11, 162.
- Amo, A., and J. Bloch (2016), "Exciton-polaritons in lattices: A non-linear photonic simulator," Comptes Rendus Physique 17 (8), 934.
- Anandwade, R., Y. Singhal, S. N. M. Paladugu, E. Martello, M. Castle, S. Agrawal, E. Carlson, C. Battle-McDonald, T. Ozawa, H. M. Price, et al. (2021), "Synthetic mechanical lattices with synthetic interactions," arXiv:2107.09649.
- Bahari, B., A. Ndao, F. Vallini, A. El Amili, Y. Fainman, and B. Kanté (2017), "Nonreciprocal lasing in topological cavities of arbitrary geometries," Science **358** (6363), 636.
- Bandres, M. A., S. Wittek, G. Harari, M. Parto, J. Ren, M. Segev, D. N. Christodoulides, and M. Khajavikhan (2018), "Topological insulator laser: Experiments," Science **359** (6381), eaar4005.
- Blanes, S., F. Casas, J. Oteo, and J. Ros (2010), "A pedagogical approach to the magnus expansion," European Journal of Physics **31** (4), 907.
- Blanes, S., F. Casas, J.-A. Oteo, and J. Ros (2009), "The magnus expansion and some of its applications," Physics reports 470 (5-6), 151.
- Browaeys, A., and T. Lahaye (2020), "Many-body physics with individually controlled rydberg atoms," Nature Physics 16 (2), 132.
- Bukov, M., L. D'Alessio, and A. Polkovnikov (2015), "Universal high-frequency behavior of periodically driven systems: from dynamical stabilization to floquet engineering," Advances in Physics 64 (2), 139.
- Cardano, F., A. D' Errico, A. Dauphin, M. Maffei, B. Piccirillo, C. d. Lisio, G. D. Filippis, V. Cataudella, E. Santamato, L. Marrucci, M. Lewenstein, and P. Massignan (2017), "Detection of Zak phases and topological invariants in a chiral quantum walk of twisted photons," Nature Communications 8 (1), 15516.
- Carusotto, I., and C. Ciuti (2013), "Quantum fluids of light," Rev. Mod. Phys. 85, 299.
- Celi, A., P. Massignan, J. Ruseckas, N. Goldman, I. B. Spielman, G. Juzeliūnas, and M. Lewenstein (2014), "Synthetic gauge fields in synthetic dimensions," Phys. Rev. Lett. **112**, 043001.
- Clark, L. W., N. Schine, C. Baum, N. Jia, and J. Simon (2020), "Observation of laughlin states made

- of light," Nature **582** (7810), 41.
- Cooper, N. R., J. Dalibard, and I. B. Spielman (2019), "Topological bands for ultracold atoms," Rev. Mod. Phys. 91, 015005.
- Delplace, P. (2022), "Berry-chern monopoles and spectral flows," SciPost Physics Lecture Notes, 039.
- Hafezi, M., E. A. Demler, M. D. Lukin, and J. M. Taylor (2011), "Robust optical delay lines with topological protection," Nature Physics 7 (11), 907.
- Haldane, F. D. M. (1988), "Model for a quantum hall effect without landau levels: Condensed-matter realization of the "parity anomaly"," Phys. Rev. Lett. **61**, 2015.
- Harper, P. G. (1955), "Single band motion of conduction electrons in a uniform magnetic field," Proceedings of the Physical Society. Section A **68** (10), 874.
- Haus, H., and W. Huang (1991), "Coupled-mode theory," Proceedings of the IEEE 79 (10), 1505.
- Hofstadter, D. R. (1976), "Energy levels and wave functions of bloch electrons in rational and irrational magnetic fields," Phys. Rev. B 14, 2239.
- Jacqmin, T., I. Carusotto, I. Sagnes, M. Abbarchi, D. D. Solnyshkov, G. Malpuech, E. Galopin, A. Lemaître, J. Bloch, and A. Amo (2014), "Direct observation of dirac cones and a flatband in a honeycomb lattice for polaritons," Phys. Rev. Lett. 112, 116402.
- Jaksch, D., C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller (1998), "Cold bosonic atoms in optical lattices," Phys. Rev. Lett. 81, 3108.
- Jotzu, G., M. Messer, R. Desbuquois, M. Lebrat, T. Uehlinger, D. Greif, and T. Esslinger (2014), "Experimental realization of the topological haldane model with ultracold fermions," Nature **515** (7526), 237.
- Klitzing, K. v., G. Dorda, and M. Pepper (1980), "New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance," Phys. Rev. Lett. 45, 494.
- Léséleuc, S. d., V. Lienhard, P. Scholl, D. Barredo, S. Weber, N. Lang, H. P. Bchler, T. Lahaye, and A. Browaeys (2019), "Observation of a symmetry-protected topological phase of interacting bosons with Rydberg atoms," Science **365** (6455), 775.
- Ma, R., B. Saxberg, C. Owens, N. Leung, Y. Lu, J. Simon, and D. I. Schuster (2019), "A dissipatively stabilized mott insulator of photons," Nature **566** (7742), 51.
- Maffei, M., A. Dauphin, F. Cardano, M. Lewenstein, and P. Massignan (2018), "Topological characterization of chiral models through their long time dynamics," New Journal of Physics **20** (1), 013023.
- Mancini, M., G. Pagano, G. Cappellini, L. Livi, M. Rider, J. Catani, C. Sias, P. Zoller, M. Inguscio, M. Dalmonte, et al. (2015), "Observation of chiral edge states with neutral fermions in synthetic hall ribbons," Science 349 (6255), 1510.
- Miyake, H., G. A. Siviloglou, C. J. Kennedy, W. C. Burton, and W. Ketterle (2013), "Realizing the harper hamiltonian with laser-assisted tunneling in optical lattices," Phys. Rev. Lett. 111, 185302.
- Nash, L. M., D. Kleckner, A. Read, V. Vitelli, A. M. Turner, and W. T. Irvine (2015), "Topological mechanics of gyroscopic metamaterials," Proceedings of the National Academy of Sciences 112 (47),

14495.

- Oka, T., and H. Aoki (2009), "Photovoltaic hall effect in graphene," Phys. Rev. B 79, 081406.
- Oliver, C., A. Smith, T. Easton, G. Salerno, V. Guarrera, N. Goldman, G. Barontini, and H. M. Price (2021), "Bloch oscillations along a synthetic dimension of atomic trap states," arXiv:2112.10648.
- Ota, Y., K. Takata, T. Ozawa, A. Amo, Z. Jia, B. Kante, M. Notomi, Y. Arakawa, and S. Iwamoto (2020), "Active topological photonics," Nanophotonics 9 (3), 547.
- Ozawa, T. (2018), "Steady-state hall response and quantum geometry of driven-dissipative lattices," Phys. Rev. B **97**, 041108.
- Ozawa, T., and I. Carusotto (2014), "Anomalous and quantum hall effects in lossy photonic lattices," Phys. Rev. Lett. **112**, 133902.
- Ozawa, T., and H. M. Price (2019), "Topological quantum matter in synthetic dimensions," Nature Reviews Physics 1 (5), 349.
- Ozawa, T., H. M. Price, A. Amo, N. Goldman, M. Hafezi, L. Lu, M. C. Rechtsman, D. Schuster, J. Simon, O. Zilberberg, and I. Carusotto (2019), "Topological photonics," Rev. Mod. Phys. 91, 015006.
- Ozawa, T., H. M. Price, N. Goldman, O. Zilberberg, and I. Carusotto (2016), "Synthetic dimensions in integrated photonics: From optical isolation to four-dimensional quantum hall physics," Phys. Rev. A 93, 043827.
- Parto, M., S. Wittek, H. Hodaei, G. Harari, M. A. Bandres, J. Ren, M. C. Rechtsman, M. Segev, D. N. Christodoulides, and M. Khajavikhan (2018), "Edge-mode lasing in 1d topological active arrays," Phys. Rev. Lett. 120, 113901.
- Pethick, C. J., and H. Smith (2008), *BoseEinstein Condensation in Dilute Gases*, 2nd ed. (Cambridge University Press).
- Pitaevskii, L., and S. Stringari (2016), *Bose-Einstein condensation and superfluidity*, Vol. 164 (Oxford University Press).
- Price, H. M., T. Ozawa, and N. Goldman (2017), "Synthetic dimensions for cold atoms from shaking a harmonic trap," Phys. Rev. A 95, 023607.
- Price, H. M., O. Zilberberg, T. Ozawa, I. Carusotto, and N. Goldman (2016), "Measurement of chern numbers through center-of-mass responses," Phys. Rev. B 93, 245113.
- Rechtsman, M. C., J. M. Zeuner, Y. Plotnik, Y. Lumer, D. Podolsky, F. Dreisow, S. Nolte, M. Segev, and A. Szameit (2013), "Photonic floquet topological insulators," Nature **496** (7444), 196.
- Salerno, G., T. Ozawa, H. M. Price, and I. Carusotto (2016), "Floquet topological system based on frequency-modulated classical coupled harmonic oscillators," Phys. Rev. B 93, 085105.
- Singhal, Y., E. Martello, S. Agrawal, T. Ozawa, H. Price, and B. Gadway (2022), "Measuring the adiabatic non-hermitian berry phase in feedback-coupled oscillators," arXiv:2205.02700.
- St-Jean, P., V. Goblot, E. Galopin, A. Lemaître, T. Ozawa, L. Le Gratiet, I. Sagnes, J. Bloch, and A. Amo (2017), "Lasing in topological edge states of a one-dimensional lattice," Nature Photonics 11 (10), 651.

- Stuhl, B., H.-I. Lu, L. Aycock, D. Genkina, and I. Spielman (2015), "Visualizing edge states with an atomic bose gas in the quantum hall regime," Science **349** (6255), 1514.
- Su, W. P., J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger (1979), "Solitons in polyacetylene," Phys. Rev. Lett. 42, 1698.
- Süsstrunk, R., and S. D. Huber (2015), "Observation of phononic helical edge states in a mechanical topological insulator," Science **349**, 47.
- Wang, Y., H. M. Price, B. Zhang, and Y. Chong (2020), "Circuit implementation of a four-dimensional topological insulator," Nat. Comm. 11, 2356.
- Wu, X., X. Liang, Y. Tian, F. Yang, C. Chen, Y.-C. Liu, M. K. Tey, and L. You (2021), "A concise review of Rydberg atom based quantum computation and quantum simulation*," Chinese Physics B 30 (2), 020305.
- Yuan, L., Y. Shi, and S. Fan (2016), "Photonic gauge potential in a system with a synthetic frequency dimension," Optics letters 41 (4), 741.
- Zhao, H., P. Miao, M. H. Teimourpour, S. Malzard, R. El-Ganainy, H. Schomerus, and L. Feng (2018), "Topological hybrid silicon microlasers," Nature communications 9 (1), 1.