



[ジェイカイク / džéikaiv]

Title	トポロジカル物質入門：SSH模型、グラフェン、ホールデイン模型
Author(s)	久保勝規
Citation	Journal title (Repository name etc.), Volume, Issue, Pages(Article number) etc. ・ ジャーナル名（刊行物・サイト名）・巻号・ページ（その他論文番号等）： K. Kubo, Jxiv https://doi.org/10.51094/jxiv.1620 (2025). ・ DOI (URL) https://doi.org/10.51094/jxiv.1620 Publication Date: yyyy/mm/dd ・ 出版日：2025 年 10 月 08 日 Publisher ・ 出版者：Japan Science and Technology Agency
Declaration	This preprint is the Translated Paper of the above. ・ 本プレプリントは、上記論文の 翻訳版(Translated Paper) である。 All necessary permissions from the publisher have been obtained (得ている) ・ ジャーナル（出版者）から必要な許諾を
Notes	

【翻訳】

本稿は K. Kubo, Jxiv <https://doi.org/10.51094/jxiv.1620> (2025) の日本語訳である。

トポロジカル物質入門： SSH 模型、グラフェン、ホールデイン模型

久保 勝規*

日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター

トポロジカル物質の典型的な模型である Su–Schrieffer–Heeger (SSH) 模型、グラフェン、ホールデイン模型を紹介する。本稿ではハニカム格子上の最近接ホッピングを持つ強束縛模型をグラフェンと呼ぶことにする。SSH 模型は 1 次元トポロジカル絶縁体の模型であるが、2 次元模型として見たとき、2 成分ベクトルの点欠陥が現れる。この点欠陥に起因して、トポロジカル絶縁体の実現し、端のある系では端状態が現れる。グラフェンは 2 次元トポロジカル半金属の模型であるが、SSH 模型と同様に、2 成分ベクトルの点欠陥が現れる。この点欠陥に起因して、端のある系では端状態が現れる。また、グラフェンを拡張することによって、ホールデイン模型が得られる。ホールデイン模型は 2 次元トポロジカル絶縁体の模型であるが、3 次元模型として見たとき、3 成分ベクトルの点欠陥が現れる。この点欠陥に起因して、トポロジカル絶縁体の実現し、端のある系では端状態が現れる。これらの系やその点欠陥のトポロジーは巻き付き数で特徴付けられる。

SSH 模型

ハミルトニアンとエネルギーバンド

Su–Schrieffer–Heeger (SSH) 模型は図 1 のようにホッピングが交互に異なる大きさを持つ

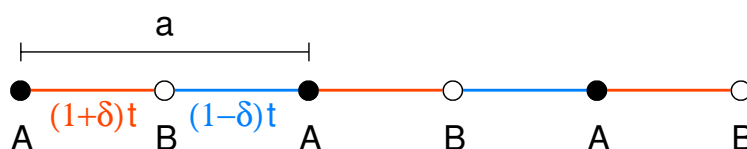


図 1 SSH 模型。 a は格子定数。

* kubo.katsunori@jaea.go.jp

つ模型である [1]。\$(1 + \delta)t\$ のホッピングで繋がれた 2 サイトを単位胞とすると、ハミルトニアンは以下の式で表される。

$$\begin{aligned}
H &= t \sum [(1 + \delta)c_{rA}^\dagger c_{rB} + (1 - \delta)c_{rA}^\dagger c_{r-aB}] + \text{h.c.} \\
&= t \frac{1}{N} \sum [(1 + \delta)e^{-ikr+ik'r} + (1 - \delta)e^{-ikr+ik'(r-a)}] c_{kA}^\dagger c_{kB} + \text{h.c.} \\
&= t \sum [(1 + \delta) + (1 - \delta)e^{-ika}] c_{kA}^\dagger c_{kB} + \text{h.c.} \\
&= t \sum \{[(1 + \delta) + (1 - \delta)e^{-ika}] c_{kA}^\dagger c_{kB} + [(1 + \delta) + (1 - \delta)e^{ika}] c_{kB}^\dagger c_{kA}\} \\
&= \sum c_k^\dagger [h_x(k)\sigma_x + h_y(k)\sigma_y] c_k.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
h_x(k) &= t(1 + \delta) + t(1 - \delta) \cos(ka), \\
h_y(k) &= t(1 - \delta) \sin(ka).
\end{aligned}$$

ここで \$\sigma_x\$ と \$\sigma_y\$ はパウリ行列で、\$c_k = (c_{kA}, c_{kB})^T\$ とした。エネルギー固有値は \$\pm h(k) = \pm |\mathbf{h}(k)|\$ である。ここで \$\mathbf{h}(k) = (h_x(k), h_y(k))\$ とした。

エネルギーバンドは図 2 のようになる。以下では、ハーフフィルドの場合を考える。各波数 \$k\$ でのエネルギーギャップは \$2h(k)\$ であるから、\$h(k) = 0\$ となる点がある場合は金属、そうでなければ絶縁体になる。金属となるのは \$\delta = 0\$ の場合のみで、そのとき \$h(k) = 0\$ となるのは \$k = \pi/a\$ の点である。それ以外の \$\delta\$ では絶縁体になっている。

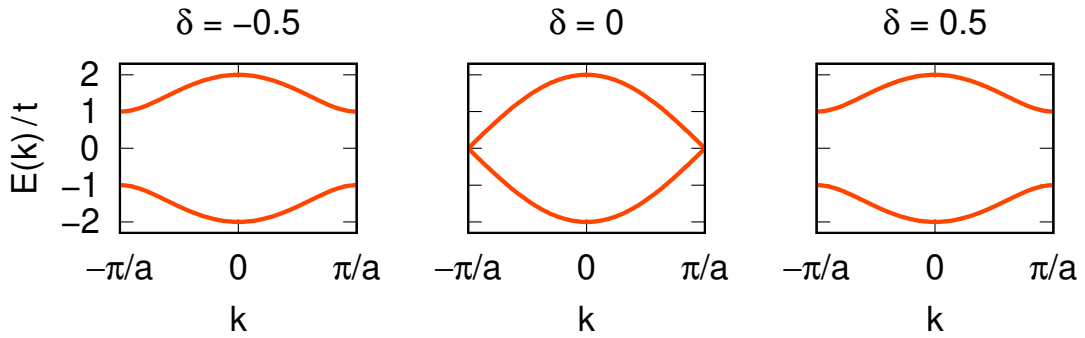


図 2 SSH 模型のエネルギーバンド。

ベクトル $\mathbf{h}(k)$ の巻き付き数

k を 0 から $2\pi/a$ まで変化させたときに、 $\mathbf{h}(k)$ というベクトルがどう変化するかを調べたものが、図 3 である。 $\delta = -1$ のときには、 k が 0 から $2\pi/a$ まで変化する間に、 $\mathbf{h}(k)$ は左回りに一回転する。これを巻き付き数 $w = 1$ とする。これは δ が負であれば変わらない。それに対して、 $\delta > 0$ の場合には $\mathbf{h}(k)$ にそのような特別な構造はなく、 k が 0 から $2\pi/a$ まで変化する間に、 $\mathbf{h}(k)$ は一回も回転しない。これを巻き付き数 $w = 0$ とする。この巻き付き数は整数であるから連続的には変われない。実際、 $w = 1$ の領域と $w = 0$ の領域の境界である $\delta = 0$ の場合には、 $k = \pi/a$ で $\mathbf{h}(k) = \mathbf{0}$ となるので、巻き付き数が定義できない。巻き付き数を δ の関数として図 4 に示す。なお、巻き付き数は次の式で表すこともできる。

$$w = \int_0^{2\pi/a} \frac{dk}{2\pi} \left[\hat{h}_x(k) \frac{d}{dk} \hat{h}_y(k) - \hat{h}_y(k) \frac{d}{dk} \hat{h}_x(k) \right].$$

ここで、 $\hat{\mathbf{h}}(k) = \mathbf{h}(k)/h(k)$ である。

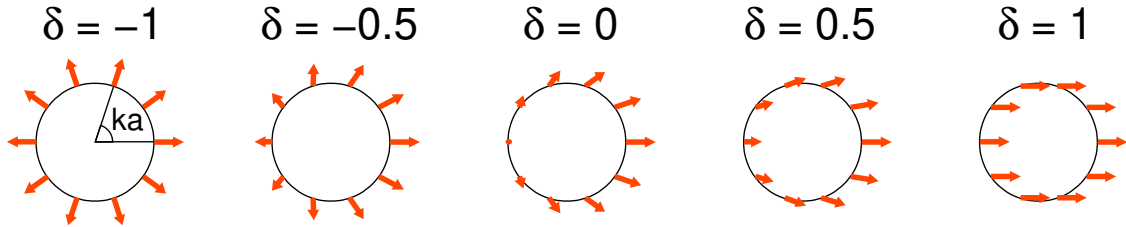


図 3 ベクトル $\mathbf{h}(k)$ 。 $0 \leq k < 2\pi/a$ を円周上の点に対応させて、それぞれの点での $\mathbf{h}(k)$ を図示した。

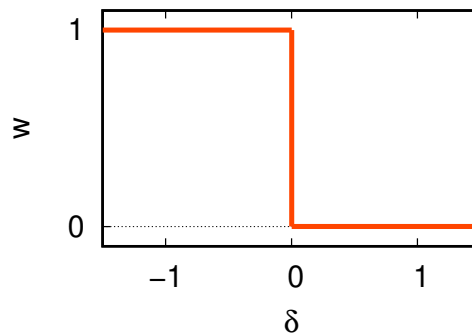


図 4 SSH 模型の巻き付き数。

トポロジカル絶縁体と端状態

$\delta < 0$ の系は $w = 1$ というトポロジカルな構造を持った絶縁体である。これをトポロジカル絶縁体という。それに対して $\delta > 0$ の系はそのような特別な構造を持たないので、自明な絶縁体という。巻き付き数を変化させるには、巻き付き数の定義できない $\delta = 0$ の金属状態を経る必要があった。つまり、トポロジカル絶縁体から自明な絶縁体に移り変わるには、途中で金属状態を経る必要がある。

ところで、真空は自明な絶縁体と考えることができる。端のあるトポロジカル絶縁体を考えると、端はトポロジカル絶縁体から自明な絶縁体に移り変わる領域である。よって、そのどこかに金属的な領域が現れる必要がある。つまり、トポロジカル絶縁体の端には金属的な状態が現れるはずである。端のある系の 1 粒子エネルギーをプロットしたものが、図 5 である。端のある場合は波数が定義できないので、単に 1 粒子エネルギーの小さい方から順にプロットしている。確かに $\delta = -0.5$ のトポロジカル絶縁体のときには、エネルギーゼロの金属的な状態が現れている。これは、バルクのバンド（図 2）は現れないエネルギー領域にあるので、端がある場合に初めて出てくる状態、つまり端に局在した状態である。一方、 $\delta = 0.5$ の自明な絶縁体のときには、そのような端状態は現れない。

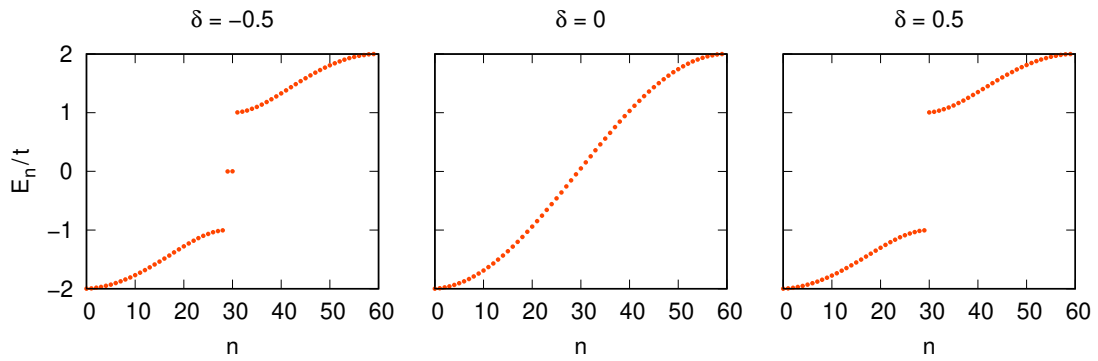


図 5 有限の長さ $L = 30a$ の SSH 模型の 1 粒子エネルギー。

カイラル対称性とゼロエネルギー固有状態

SSH 模型のような、AB 副格子間のホッピングのみを持つ模型のハミルトニアンは、次のような行列で表すことができる。

$$H = \begin{pmatrix} 0 & H_{AB} \\ H_{BA} & 0 \end{pmatrix}.$$

ここでユニタリー行列

$$\Gamma = \begin{pmatrix} I_A & 0 \\ 0 & -I_B \end{pmatrix},$$

を考える。ここで I_A 、 I_B はそれぞれ A 副格子、B 副格子に関する単位行列である。この Γ はハミルトニアンと反交換する。このようなユニタリー演算子 Γ が存在するとき、ハミルトニアンはカイラル対称性を持つといい、 Γ をカイラル演算子と呼ぶ。ここでは Γ はエルミートでもあるので、 $\Gamma^2 = \Gamma^\dagger \Gamma = I$ である。ここで I は単位行列。よって Γ の固有値は $\gamma = \pm 1$ である。 $\gamma = 1$ の状態は A 副格子のみに振幅を持ち、 $\gamma = -1$ の状態は B 副格子のみに振幅を持つ。

ハミルトニアン H が Γ と反交換するとき、 H^2 と Γ が交換することがわかる。つまり H^2 と Γ は同時対角化可能である。 H^2 のゼロ固有値状態を $|u_0\rangle$ とする。

$$\langle u_0 | H^\dagger H | u_0 \rangle = \langle u_0 | H^2 | u_0 \rangle = 0.$$

よって $H|u_0\rangle = 0$ 、つまり $|u_0\rangle$ はゼロエネルギー固有状態である。逆にゼロエネルギー固有状態は H^2 のゼロ固有値状態であることは明らか。以上から、ゼロエネルギー固有状態はカイラル演算子の固有状態にすることができる [2]。

図 5 で得られた 2 つのゼロエネルギー固有状態は、左右の端に局在した状態の重ね合わせであるが、長さ L が十分大きければ、左端に局在した状態と右端に局在した状態はそれぞれ独立した状態と考えて良い。そして、それぞれの端に局在した状態はカイラル演算子の固有状態になっている。つまり、これらの端状態は片方の副格子のみに振幅を持つ状態になっている。実際に計算したゼロエネルギー固有状態の電荷密度を図 6 に示す。左端では A 副格子、右端では B 副格子でのみ電荷密度が有限になっている。

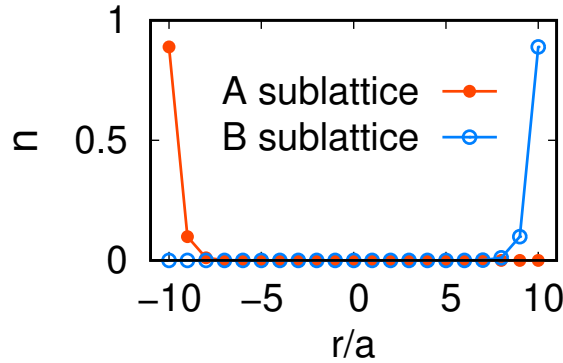


図 6 有限の長さ $L = 21a$ の SSH 模型のゼロエネルギー固有状態の電荷密度。 $\delta = -0.5$ とした。縮退している 2 つの状態について足し合わせている。

2次元模型として見た SSH 模型

有限幅の系のエネルギーバンド

端のある系で図 5 のように各 δ に対して得られたエネルギー分布を、 δ の関数としてプロットしたものが図 7 である。これを見ると、 $\delta < 0$ 、つまりトポロジカル絶縁体 ($w \neq 0$) の領域でゼロエネルギーの端状態が現れていることが一目でわかる。また、これは (δ, r) の 2 次元空間で定義される系を $0 \leq r < L$ の有限幅にしたときの端に沿った方向 (δ 方向) の 1 次元系のエネルギーバンドともみなせる。

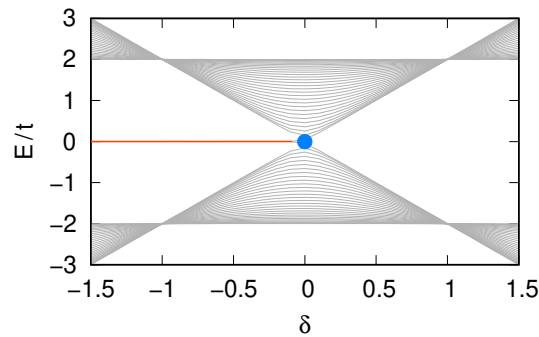


図 7 δ の関数としての SSH 模型のバンド。系の長さは $L = 30a$ 。赤色の線は $w = 1$ に対応するゼロエネルギー端状態。青色の点は巻き付き数 -1 のディラック点（後述）を射影したもの。

エネルギーバンド

上記を踏まえて、SSH 模型を (δ, k) の 2 次元波数空間内の模型だと考える。そのバンドを描いたものが図 8 である。 δ に関しては周期性はないが、ここでは $|\delta| < 1$ の範囲をプロットしている。 $(\delta, k) = (0, \pi/a)$ で上下のバンドが点で接している。このような点をディラック点という。

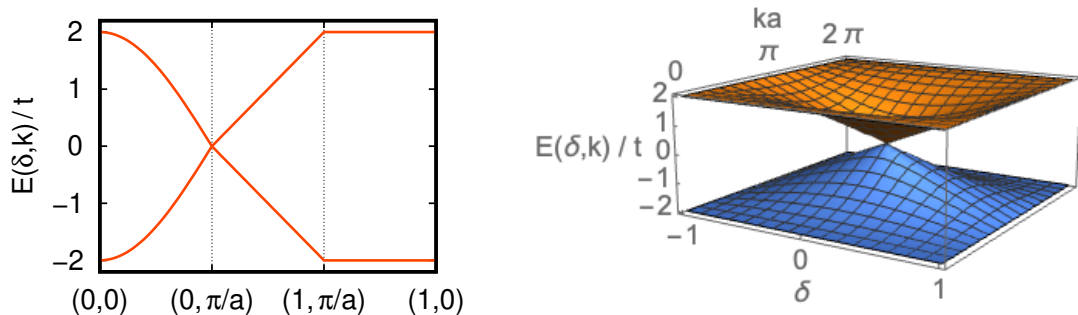


図 8 (δ, k) の関数としての SSH 模型のバンド。左は特定の線上でのバンド、右は $|\delta| < 1$ の範囲内でのバンド全体を示している。

ベクトル $\mathbf{h}(k_{2D})$ の巻き付き数

$\hat{\mathbf{h}}(k)$ を δ - k 平面上でプロットしたものが図 9 である。ディラック点では $\hat{\mathbf{h}}(k)$ は定義できないので描いていない（点欠陥）。ディラック点の周りを左回りに一周すると、 $\hat{\mathbf{h}}(k)$ は右回りに一回転する。これを巻き付き数 -1 と呼ぶ。同様に巻き付き数 1 のベクトル場の例も図 10 に示す。このような 2 次元空間内の 2 成分ベクトルの点欠陥はトポロジカルに安定であることが知られている（例えば、参考文献 [3,4] を参照）。つまり、 $\hat{\mathbf{h}}(k)$ を連続的に変化させることでは、この点欠陥は取り除くことはできない。

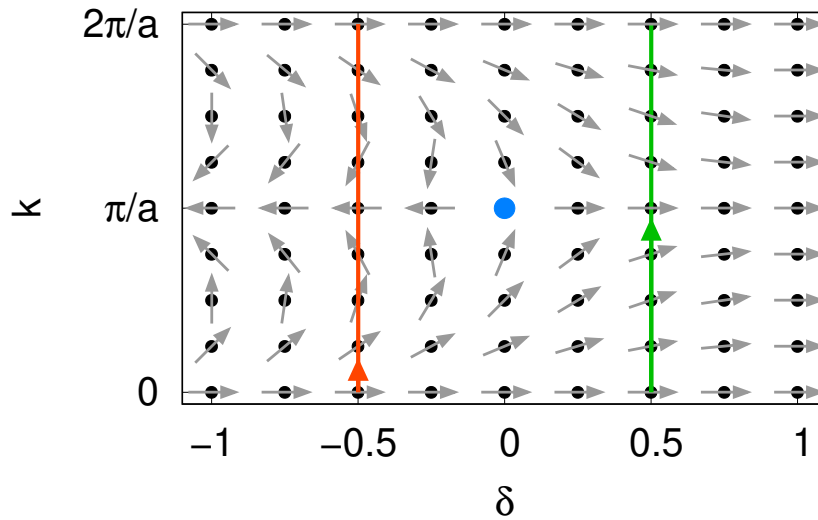


図 9 SSH 模型の δ - k 平面上での $\hat{\mathbf{h}}(k)$ 。青色の点は巻き付き数 -1 のディラック点を示している。赤色の経路では $\hat{\mathbf{h}}(k)$ は左回りに 1 回転する。緑色の経路では $\hat{\mathbf{h}}(k)$ は 1 回も回転しない。

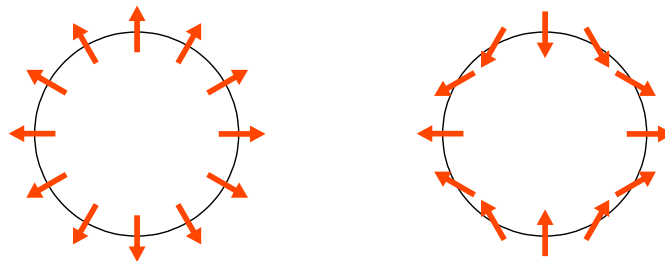


図 10 有限の巻き付き数を持つベクトル場の例。左が巻き付き数 1 、右が巻き付き数 -1 。

表 1 SSH 模型の巻き付き数。固定する δ を変えると、 $0 \leq k < 2\pi/a$ の経路が $w_C = -1$ のディラック点を跨ぐので、巻き付き数 w は一つ減る。

$\delta < 0$	$w_C = -1$	$0 < \delta$
$w = 1$	$\xrightarrow{-1}$	$w = 0$

また、巻き付き数は次の式でも表すことができる。

$$w_C = \oint_C \frac{d\mathbf{k}_{2D}}{2\pi} \cdot [\hat{h}_x(\mathbf{k}_{2D}) \nabla \hat{h}_y(\mathbf{k}_{2D}) - \hat{h}_y(\mathbf{k}_{2D}) \nabla \hat{h}_x(\mathbf{k}_{2D})].$$

ここで $\mathbf{k}_{2D} = (\delta, k)$ 、 C は閉曲線を表す。 C がディラック点を囲む場合は $w_C = -1$ 、そうでなければ $w_C = 0$ である。

また図 9 からは、 δ を固定し k を 0 から $2\pi/a$ まで変化させた時に、 $\delta < 0$ の場合には $\hat{\mathbf{h}}(k)$ は左回りに一回転する ($w = 1$ 、赤色の経路)、 $\delta > 0$ の場合には $\hat{\mathbf{h}}(k)$ は一回も回転しない ($w = 0$ 、緑色の経路) こともわかる。これは図 3 で描いたものをまとめて一つの図で表したものになっている。 δ を変えて、経路がディラック点を跨ぐと巻き付き数が変わる (表 1 も参照)。

ディラック点のようなトポロジカルに安定な縮退を持つ系をトポロジカル半金属と呼ぶ。2次元模型として見た SSH 模型はトポロジカル半金属である。元々の 1次元模型の SSH 模型は、この 2次元模型の $\delta = \text{const.}$ の断面と考えることができる。 $\delta < 0$ の断面はトポロジカル絶縁体、 $\delta > 0$ の断面は自明な絶縁体、ディラック点を通る $\delta = 0$ の断面は金属になっている。このようにトポロジカル絶縁体はトポロジカル半金属の (波数空間での) 断面と考えることができる。

グラフェン

グラフェンの端状態を調べる。本稿でグラフェンと呼ぶのは、ハニカム格子上の最近接ホッピングを持つ強束縛模型のことである。グラフェンの典型的な端形状は図 11 に示すように 4 つあり、bearded edge は参考文献 [5]、armchair edge と zigzag edge は参考文献 [6]、twig edge は参考文献 [7] で端状態が調べられている。本稿では参考文献 [8] に基づいてその導出を行う。

ハミルトニアンとエネルギーバンド

ハニカム格子を考える。基本並進ベクトルは $\mathbf{a}_1 = a(\sqrt{3}, 3)/2$ と $\mathbf{a}_2 = a(-\sqrt{3}, 3)/2$ である。ここで a はボンドの長さ。最近接サイトを結ぶベクトルは $\delta_0 = a(0, 1)$ 、 $\delta_1 = a(-\sqrt{3}, -1)/2$ 、 $\delta_2 = a(\sqrt{3}, -1)/2$ である。基本並進ベクトルの選び方には自由度がある。例えば、 $\mathbf{a}_1$ と $\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2 = a(\sqrt{3}, 0)$ を基本並進ベクトルとしても良い。ここで、 $\mathbf{a}_i^{(\mu)} \equiv \delta_\mu - \delta_i$ というベクトルを定義する。すると $\{\mathbf{a}_0^{(\mu)}, \mathbf{a}_1^{(\mu)}, \mathbf{a}_2^{(\mu)}\}$ は基本並進ベクトルとゼロベクトル $\mathbf{a}_0 = (0, 0)$ の組になっていることがわかる。特に $\{\mathbf{a}_0^{(0)}, \mathbf{a}_1^{(0)}, \mathbf{a}_2^{(0)}\} = \{\mathbf{a}_0, \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2\}$ である。

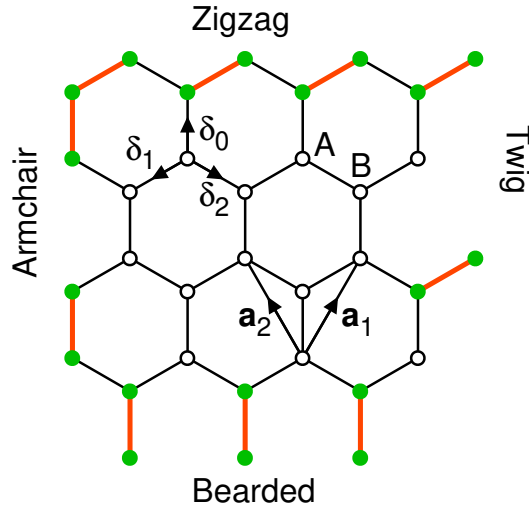


図 11 ハニカム格子。ボンドの長さを a とする。基本格子ベクトルは $\mathbf{a}_1 = a(\sqrt{3}, 3)/2$ と $\mathbf{a}_2 = a(-\sqrt{3}, 3)/2$ 。最近接サイトを繋ぐベクトルは $\delta_0 = a(0, 1)$ 、 $\delta_1 = a(-\sqrt{3}, -1)/2$ 、 $\delta_2 = a(\sqrt{3}, -1)/2$ 。典型的な 4 つの端形状も示している。赤色の線はそれぞれの端形状での単位胞を構成する 2 サイト（緑色の丸）を繋いでいる。

ハニカム格子では単位胞に2つのサイトが含まれるが、単位胞の選び方には自由度がある。ここでは、 μ を一つ決めて δ_μ で結ばれる2サイトを単位胞とする。A 副格子のサイト $\mathbf{r}$ の最近接サイトは B 副格子のサイト $\mathbf{r} + \delta_i = \mathbf{r} - \mathbf{a}_i^{(\mu)} + \delta_\mu$ である。よって、ハミルトニアンは以下ようになる。

$$\begin{aligned} H &= t \sum_{\mathbf{r}i} c_{\mathbf{r}A}^\dagger c_{\mathbf{r}-\mathbf{a}_i^{(\mu)}B} + \text{h.c.} \\ &= t \sum_{\mathbf{k}i} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i^{(\mu)}} c_{\mathbf{k}A}^\dagger c_{\mathbf{k}B} + \text{h.c.} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger [h_x^{(\mu)}(\mathbf{k})\sigma_x + h_y^{(\mu)}(\mathbf{k})\sigma_y] c_{\mathbf{k}}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} h_x^{(\mu)}(\mathbf{k}) &= t \sum_i \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i^{(\mu)}, \\ h_y^{(\mu)}(\mathbf{k}) &= t \sum_i \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i^{(\mu)}. \end{aligned}$$

ハミルトニアンに現れる係数 $\sum_i e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i^{(\mu)}}$ は単位胞の選び方に依存する。異なる単位胞を選んだ場合の係数とは $\sum_i e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i^{(\nu)}} = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_\nu^{(\mu)}} \sum_i e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i^{(\mu)}}$ という“ゲージ変換”で結ばれている。

エネルギー固有値は SSH 模型の場合と同様に $\pm h(\mathbf{k}) = \pm |\mathbf{h}^{(\mu)}(\mathbf{k})|$ となるが、これは上記のゲージ変換のため μ に依らない。エネルギーバンドを図 12 に示す。K 点は上下のバンドが接している点になっており、ディラック点である。つまり、グラフェンはトポロジカル半金属である。

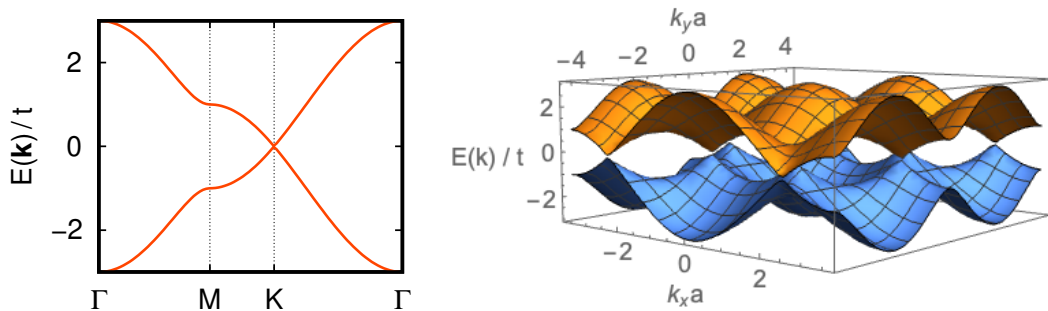


図 12 グラフェンのバンド構造。左は高対称線上でのバンド。ここで、 $\Gamma = (0, 0)$ 、 $M = 2\pi(0, 1/3)/a$ 、 $K = 2\pi(1/3\sqrt{3}, 1/3)/a$ 。右はバンド全体。SSH 模型の図 8 に対応している。

ベクトル $\mathbf{h}^{(\mu)}(\mathbf{k})$ の巻き付き数

ここで SSH 模型の場合と同様に $\hat{\mathbf{h}}^{(\mu)}(\mathbf{k}) = \mathbf{h}^{(\mu)}(\mathbf{k})/h(\mathbf{k})$ の構造を調べたい。ただし、これは単位胞の選び方 μ に依存する。ここで重要なのは、端のある系を考える場合、端の形状に適合するように単位胞を選ぶ必要があるということである。図 11 を見ると、armchair edge や bearded edge を考える場合には $\mu = 0$ 、twig edge や zigzag edge を考える場合には $\mu = 1$ もしくは $\mu = 2$ とする必要がある。

そこで、 $\mu = 0$ と $\mu = 1$ の場合の $\hat{\mathbf{h}}^{(\mu)}(\mathbf{k})$ を図 13 に示す。この図で $\tilde{a}_1 = (\sqrt{3}/2)a$ は k_y を固定した系の x 方向の格子定数、 $\tilde{a}_2 = (3/2)a$ は k_x を固定した系の y 方向の格子定数である。 $K = 2\pi(1/3\sqrt{3}, 1/3)/a = (\pi/3\tilde{a}_1, \pi/\tilde{a}_2)$ の近傍を左回りに 1 回転する間に $\hat{\mathbf{h}}(\mathbf{k})$ は右回りに 1 回転するので、 K 点の巻き付き数は $w_C = -1$ である。これはゲージ変換のため μ に依存しないことがわかる。同様に $K' = 2\pi(-1/3\sqrt{3}, 1/3)/a = (-\pi/3\tilde{a}_1, \pi/\tilde{a}_2)$ の巻き付き数は $w_C = 1$ である。

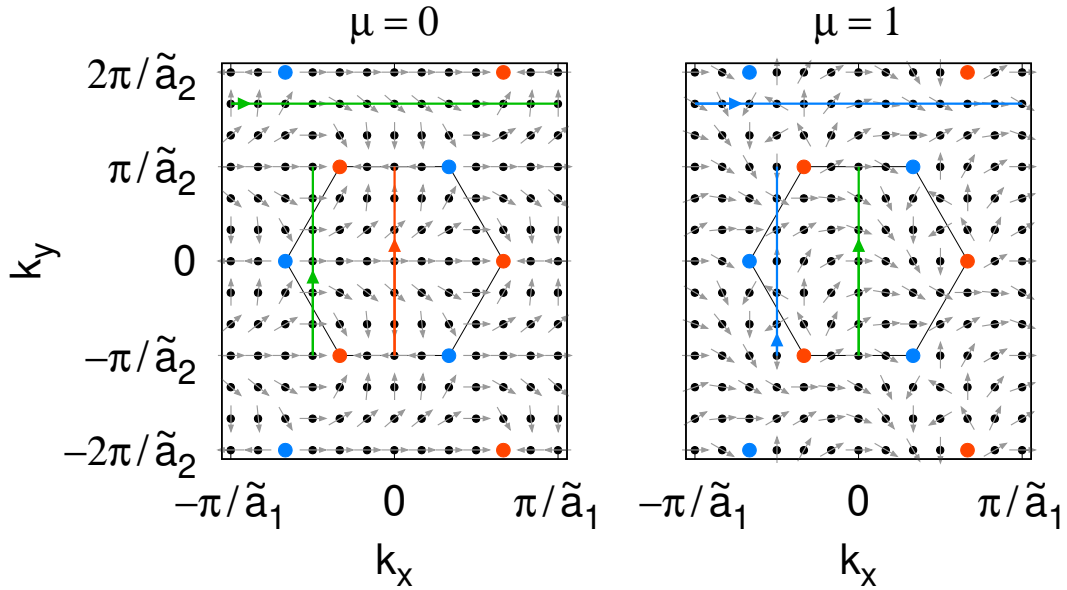


図 13 グラフェンの $\hat{\mathbf{h}}^{(\mu)}(\mathbf{k})$ 。 $\mu = 0$ は armchair edge と bearded edge に対応、 $\mu = 1$ は twig edge と zigzag edge に対応している。黒の実線で囲まれた領域が第 1 ブリルアンゾーンである。赤色の点は $w_C = 1$ のディラック点、青色の点は $w_C = -1$ のディラック点を示している。 $\hat{\mathbf{h}}^{(\mu)}(\mathbf{k})$ は、赤色の経路では左回りに 1 回転、青色の経路では右回りに 1 回転して、緑色の経路では 1 回も回転しない。SSH 模型の図 9 に対応している。

まず、 y 方向に並行な端、つまり armchair edge や twig edge の場合を考える。このとき y 方向には波数 k_y が定義できる。この k_y を固定した系（トポロジカル半金属の断面）は x 方向の 1 次元系とみなせる。この 1 次元系がトポロジカル絶縁体であれば、端がある場合には端状態が現れる。その判定には巻き付き数 $w(k_y)$ を求めればよい。 $\mu = 0$ の図で k_y を固定して k_x を $-\pi/\tilde{a}_1$ から $\pi/\tilde{a}_1$ まで変化させれば、armchair edge の場合の巻き付き数がわかる。同様に、 $\mu = 1$ の図から twig edge の場合の巻き付き数がわかる。 x 方向に並行な端の場合も同様で、 k_x を固定して k_y を $-\pi/\tilde{a}_2$ から $\pi/\tilde{a}_2$ まで変化させれば、 $\mu = 0$ では bearded edge、 $\mu = 1$ では zigzag edge の場合の巻き付き数がわかる。

このように求めた巻き付き数を図 14 に示す。armchair edge の巻き付き数は全領域でゼロである。反対に twig edge の巻き付き数は全領域でゼロでない。bearded edge の巻き付き数は、zigzag edge の巻き付き数がゼロの領域でゼロではなく、また、逆も成り立っている。 $k_{\parallel}$ を変えて経路がディラック点を跨ぐときに、巻き付き数が変化しうる（表 2、表 3）。

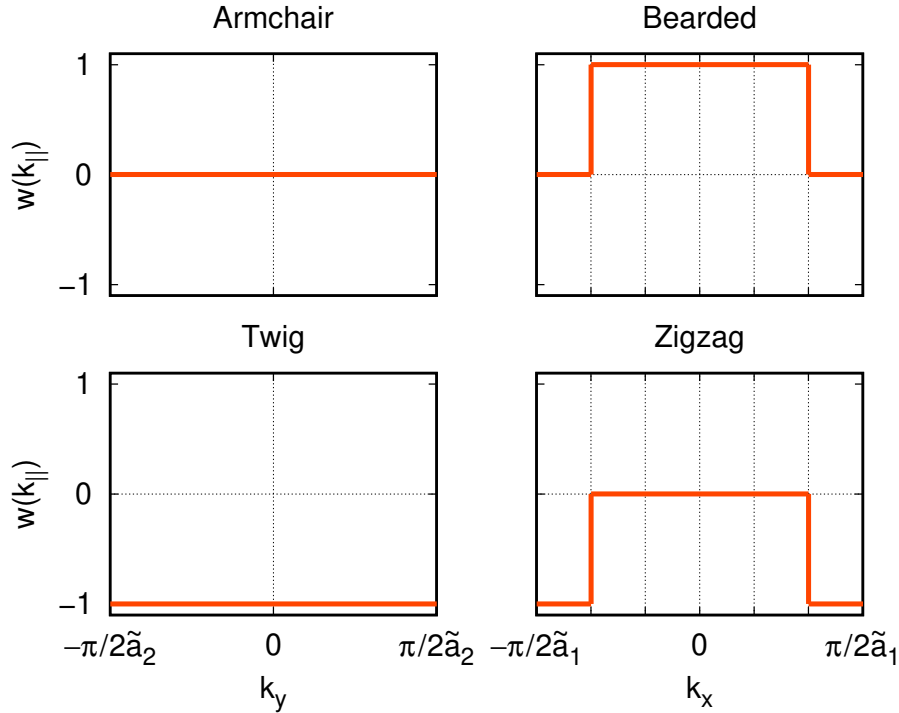


図 14 グラフェンの巻き付き数。twig edge の場合は単位胞の選び方に依存するが、 $\mu = 1$ の場合を示した。 $\mu = 2$ の場合は $w(k_{\parallel}) = 1$ となる。ここで $k_{\parallel}$ は端に並行な方向の波数で、armchair edge と twig edge の場合は $k_{\parallel} = k_y$ 、bearded edge と zigzag edge の場合は $k_{\parallel} = k_x$ である。SSH 模型の図 4 に対応している。

表2 armchair edge ($\mu = 0$) と twig edge ($\mu = 1, 2$) の巻き付き数。固定する k_y を変えると、 $-\pi/\tilde{a}_1 \leq k_x < \pi/\tilde{a}_1$ の経路がディラック点を跨ぐが、 $w_C = 1$ と $w_C = -1$ のディラック点を同時に跨ぐので、巻き付き数 $w(k_y)$ は変化しない。SSH 模型の表1に対応している。

	$\frac{\pi}{2\tilde{a}_2} \geq k_y > 0$	$w_C = \pm 1$	$0 > k_y \geq -\frac{\pi}{2\tilde{a}_2}$
$\mu = 0$	$w(k_y) = 0$	$\xrightarrow{+0}$	$w(k_y) = 0$
$\mu = 1$	$w(k_y) = -1$	$\xrightarrow{+0}$	$w(k_y) = -1$
$\mu = 2$	$w(k_y) = 1$	$\xrightarrow{+0}$	$w(k_y) = 1$

表3 bearded edge ($\mu = 0$) と zigzag edge ($\mu = 1, 2$) の巻き付き数。固定する k_x を変えて、 $-\pi/\tilde{a}_2 \leq k_y < \pi/\tilde{a}_2$ の経路がディラック点を跨ぐとき、そのディラック点の巻き付き数 w_C に応じて、巻き付き数 $w(k_x)$ が変化する。SSH 模型の表1に対応している。

	$-\frac{\pi}{2\tilde{a}_1} \leq k_x < -\frac{\pi}{3\tilde{a}_1}$	$w_C = 1$	$-\frac{\pi}{3\tilde{a}_1} < k_x < \frac{\pi}{3\tilde{a}_1}$	$w_C = -1$	$\frac{\pi}{3\tilde{a}_1} < k_x \leq \frac{\pi}{2\tilde{a}_1}$
$\mu = 0$	$w(k_x) = 0$	$\xrightarrow{+1}$	$w(k_x) = 1$	$\xrightarrow{-1}$	$w(k_x) = 0$
$\mu = 1, 2$	$w(k_x) = -1$	$\xrightarrow{+1}$	$w(k_x) = 0$	$\xrightarrow{-1}$	$w(k_x) = -1$

有限幅の系のエネルギーバンド

実際に有限幅のグラフェンのバンド構造をそれぞれの端形状の場合に計算したものが、図 15 である。確かに、巻き付き数がゼロでない領域で、ゼロエネルギーの端状態が現れていることがわかる。このようなグラフェンにおける巻き付き数と端状態の対応は参考文献 [9] で示された。また、グラフェンは SSH 模型と同様にカイラル対称性を持つ。そのため、ここで得られたゼロエネルギー端状態（2 重縮退している）は、それぞれの端で片方の副格子のみに振幅を持っている（図 16）。

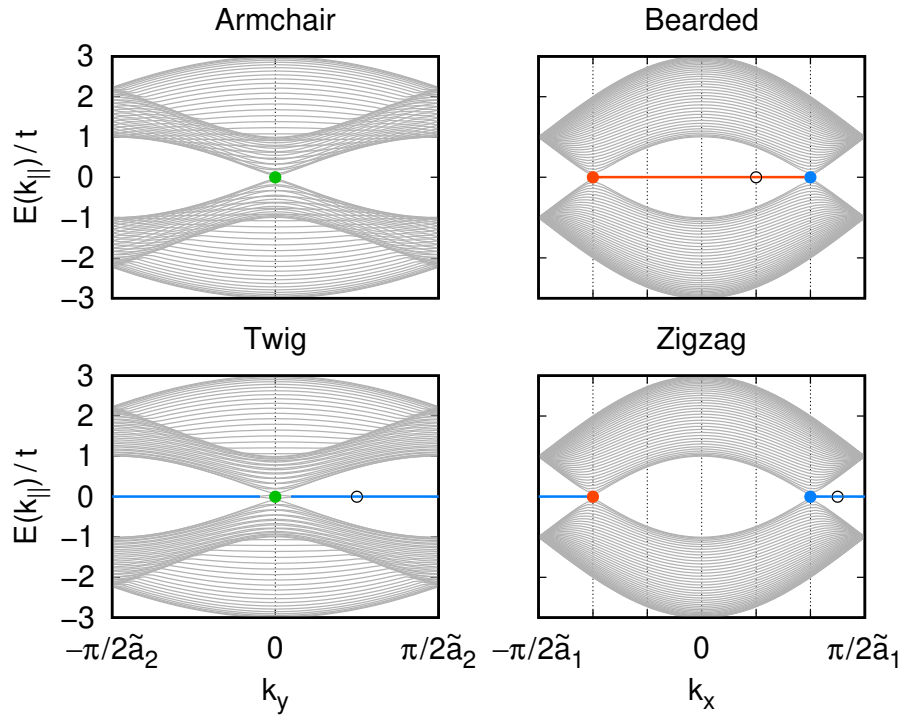


図 15 有限幅のグラフェンのバンド構造。赤色の点は $w_C = 1$ のディラック点、青色の点は $w_C = -1$ のディラック点、緑色の点は $w_C = \pm 1$ の 2 つのディラック点を射影したもの。赤色の線は $w = 1$ 、青色の線は $w = -1$ に対応するゼロエネルギー端状態。白抜きの丸で示した端状態については、電荷密度を図 16 に示す。SSH 模型の図 7 に対応している。

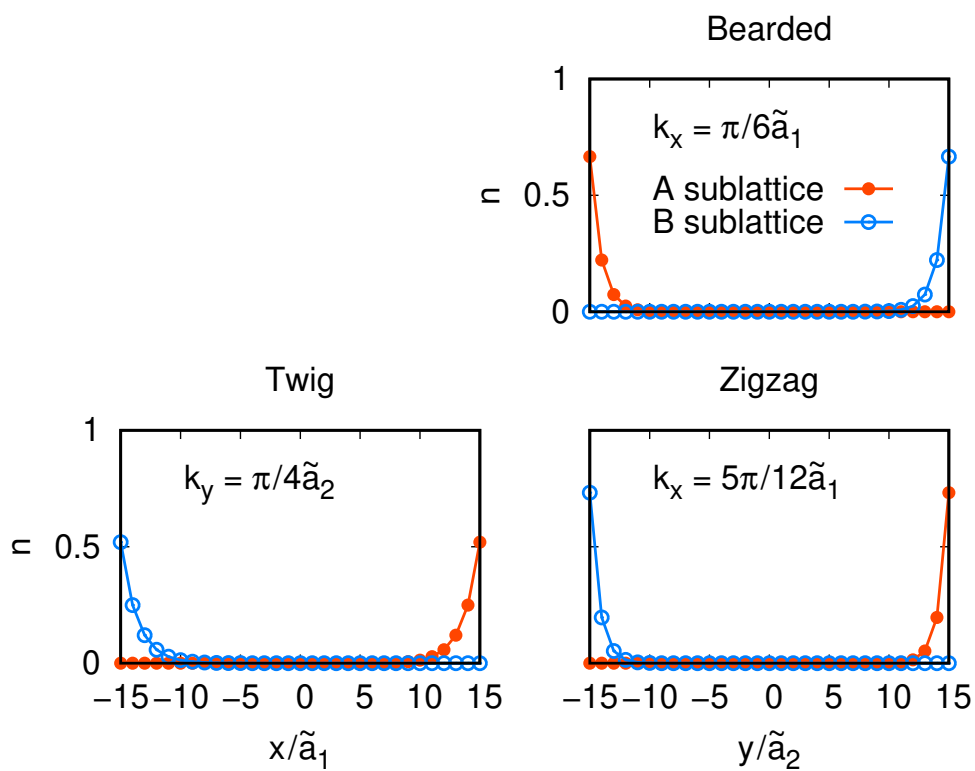


図 16 グラフェンのゼロエネルギー端状態の電荷密度。図 15 の白抜きの丸の状態について示している。二重縮退している 2 つの状態について足し合わせている。twig edge の場合は単位胞の選び方に依存するが、 $\mu = 1$ の場合を示した。 $\mu = 2$ の場合は副格子が入れ替わる。SSH 模型の図 6 に対応している。

ホールデイン模型

SSH 模型やグラフェンは、1 次元トポロジカル絶縁体や 2 次元トポロジカル半金属の模型になっていた。それは、2 次元波数空間における 2 成分ベクトルの点欠陥が存在したためである。これを 2 次元トポロジカル絶縁体や 3 次元トポロジカル半金属に拡張するには、3 成分ベクトルを考える必要がある。グラフェンをそのように拡張したものは、ホールデイン模型と呼ばれる [10]。

ハミルトニアンとエネルギーバンド

グラフェンのハミルトニアンには σ_x や σ_y に比例する項があった。3 成分ベクトルにするためには σ_z に比例する項を導入する必要がある。そのためには、副格子に依存するポテンシャルや同じ副格子に属するサイト間のホッピングを考えれば良い。ただし、ホッピングの入れ方には工夫が必要で、ホールデインは図 17 のような次近接ホッピングを考えた。

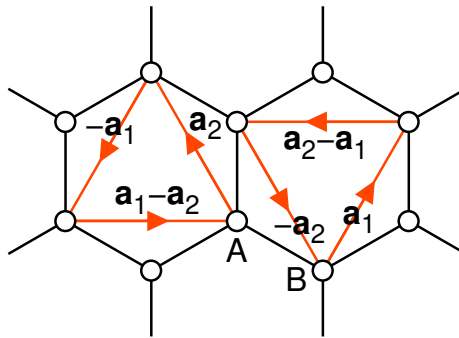


図 17 ホールデイン模型の次近接ホッピング。矢印の向きのホッピングに対して、 it_2 のとび移り積分を対応させる。矢印と逆向きのホッピングに対しては、 $-it_2$ のとび移り積分を対応させる。

次近接サイトを繋ぐベクトルを $\mathbf{a}'_0 \equiv \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}'_1 \equiv \mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}'_2 \equiv -\mathbf{a}_1$ とする。次近接ホッピングのハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_{\text{nnn}} &= it_2 \sum \left(c_{\mathbf{r}A}^\dagger c_{\mathbf{r}-\mathbf{a}'_1 A} + c_{\mathbf{r}B}^\dagger c_{\mathbf{r}+\mathbf{a}'_2 B} \right) + \text{h.c.} \\ &= it_2 \sum \left(e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}'_1} c_{\mathbf{k}A}^\dagger c_{\mathbf{k}A} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}'_2} c_{\mathbf{k}B}^\dagger c_{\mathbf{k}B} \right) + \text{h.c.} \\ &= 2t_2 \sum \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}'_1) (c_{\mathbf{k}A}^\dagger c_{\mathbf{k}A} - c_{\mathbf{k}B}^\dagger c_{\mathbf{k}B}) \\ &= 2t_2 \sum \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}'_1) c_{\mathbf{k}}^\dagger \sigma_z c_{\mathbf{k}}. \end{aligned}$$

副格子に依存するポテンシャルも加えれば、 σ_z の係数は

$$\begin{aligned} h_z(\mathbf{k}) &= \Delta + 2t_2 \sum_i \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}'_i) \\ &= \Delta + 2t_2 \{ \sin[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)] + \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2) - \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) \}, \end{aligned}$$

となる。これは単位胞の選び方に依存しない。

ギャップが閉じるのは $\mathbf{h}^{(\mu)}(\mathbf{k}) = (h_x^{(\mu)}(\mathbf{k}), h_y^{(\mu)}(\mathbf{k}), h_z(\mathbf{k})) = \mathbf{0}$ のときである。 $h_x^{(\mu)}(\mathbf{k}) = h_y^{(\mu)}(\mathbf{k}) = 0$ となるのは K 点および K' 点である。よって、これらの点で $h_z(\mathbf{k})$ がゼロになればギャップが閉じる。 $K = 2\pi(1/3\sqrt{3}, 1/3)/a = (K_x, K_y)$ 、 $K' = 2\pi(-1/3\sqrt{3}, 1/3)/a = (K'_x, K'_y)$ とする。

$$h_z(K) = \Delta + 3\sqrt{3}t_2,$$

$$h_z(K') = \Delta - 3\sqrt{3}t_2.$$

よって、 $\Delta = -3\sqrt{3}t_2$ のとき K 点で、 $\Delta = 3\sqrt{3}t_2$ のとき K' 点でギャップが閉じる。バンド分散は図 18 のようになる。

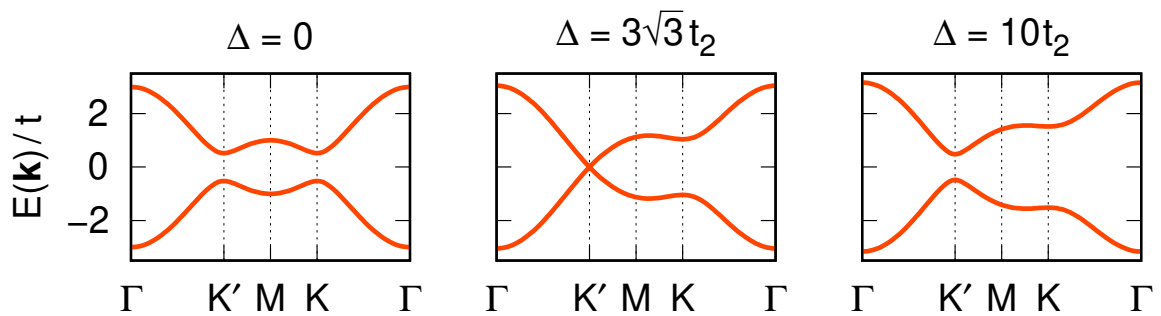


図 18 ホールデイン模型のバンド分散。 $t_2 = 0.1t$ とした。 $\Delta = 3\sqrt{3}t_2$ のとき K' 点でギャップが閉じる。SSH 模型の図 2 に対応している。

ベクトル $\mathbf{h}^{(\mu)}(\mathbf{k})$ の巻き付き数

規格化された 3 成分ベクトル場 $\hat{\mathbf{h}}^{(\mu)}(\mathbf{k}) = \mathbf{h}^{(\mu)}(\mathbf{k})/|\mathbf{h}^{(\mu)}(\mathbf{k})|$ を考える。巻き付き数は

$$w = \int \frac{dk_x dk_y}{4\pi} \hat{\mathbf{h}}^{(\mu)}(\mathbf{k}) \cdot \frac{\partial \hat{\mathbf{h}}^{(\mu)}(\mathbf{k})}{\partial k_x} \times \frac{\partial \hat{\mathbf{h}}^{(\mu)}(\mathbf{k})}{\partial k_y},$$

で与えられる。積分は第 1 ブリルアンゾーン全体で行う。これは単位胞の選び方 μ に依存しない。これはチャーン数とも呼ばれる。 w がゼロでないとき、系はトポロジカル絶縁体になる。 Δ を変化させて巻き付き数を求めると図 19 のようになる。確かに $w \neq 0$ となる領域があり、ホールデイン模型は 2 次元トポロジカル絶縁体の模型になっていることがわかる。

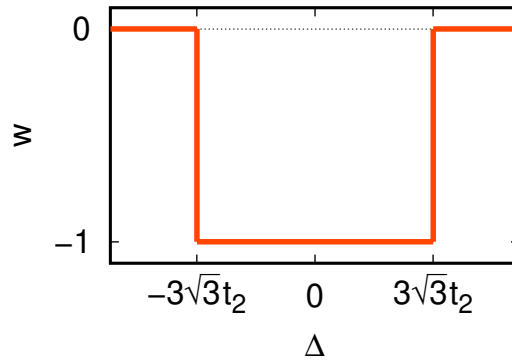


図 19 ホールデイン模型の巻き付き数。SSH 模型の図 4 やグラフェンの図 14 に対応している。

端状態

端のある系のバンド構造を図 20 に示す。 $w = -1$ のトポロジカル絶縁体である $\Delta = 2t_2 < 3\sqrt{3}t_2$ の場合は、バルクのバンドギャップを跨ぐ端状態がある。つまり、トポロジカル絶縁体で期待される金属的な端状態が存在する。端状態の分散などの詳細は端の形状に依存するが、バルクバンドのギャップを跨ぐ 2 つの端状態が存在するということは、端の形状に依存しない。また、それぞれの端状態は反対の端に局在していて、逆の群速度を持っている。つまり、左端に局在している状態は、右端に局在している状態と逆の群速度を持っている。このような端状態をカイラルエッジ状態と呼ぶ。それに対して $w = 0$ の自明な絶縁体である $\Delta = 8t_2 > 3\sqrt{3}t_2$ の場合は、端状態が現れてもそれはバルクのバンドギャップを跨がない。

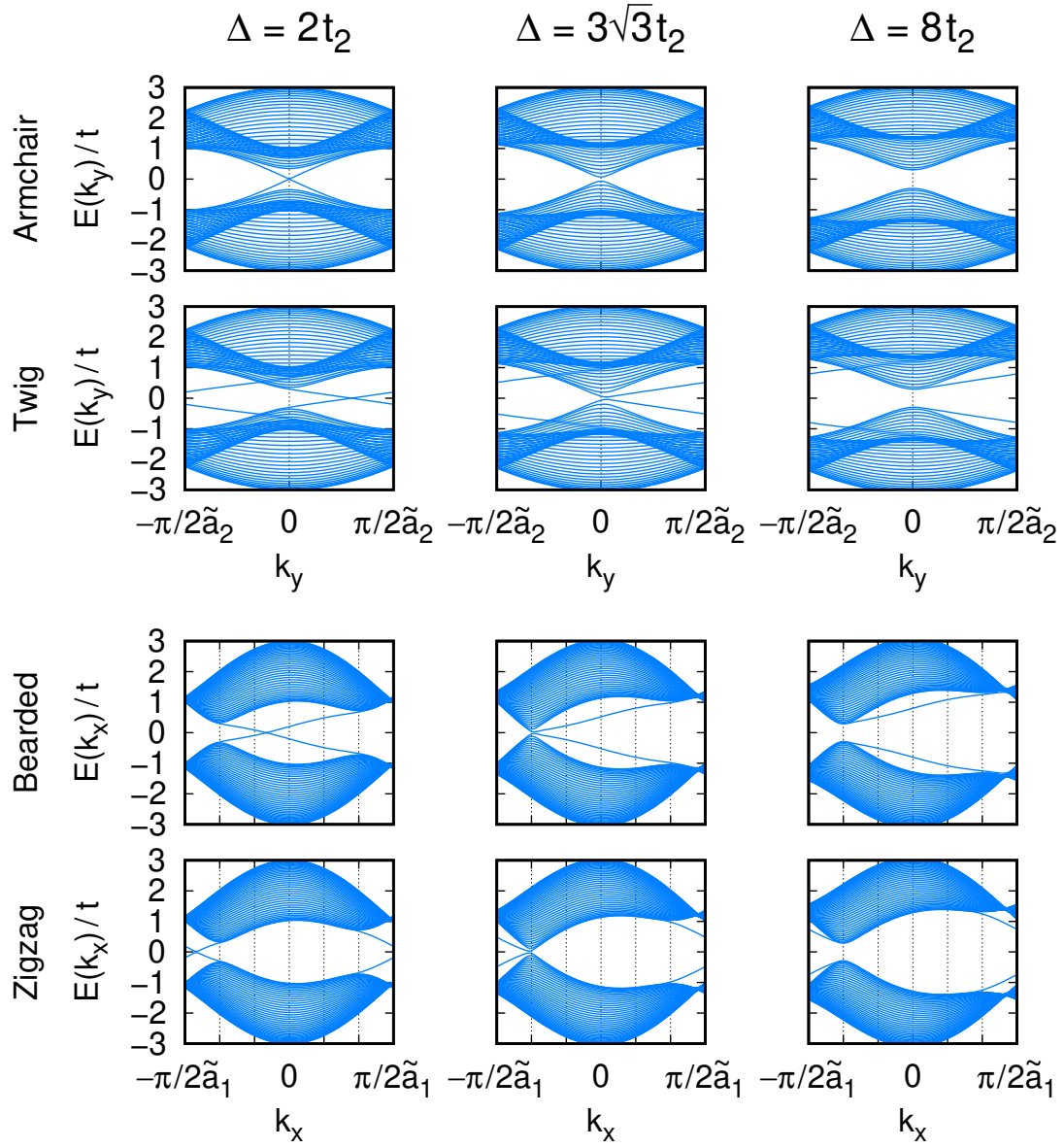


図 20 有限幅のホールデイン模型のバンド構造。 $t_2 = 0.1t$ とした。twig edge の場合は単位胞の選び方に依存するが、 $\mu = 1$ の場合を示した。 $\mu = 2$ の場合は k_y を反転したものが得られる。SSH 模型の図 5 に対応している。

3次元模型として見たホールデイン模型

ホールデイン模型を元々の波数空間 2 次元に Δ を加えて、3 次元波数空間で定義された模型と考える。 $\mathbf{k}_{3D} = (k_x, k_y, \Delta)$ とすれば、 $\mathbf{k}_{3D} = (K_x, K_y, -3\sqrt{3}t_2)$ と $\mathbf{k}_{3D} = (K'_x, K'_y, 3\sqrt{3}t_2)$ がディラック点である。このように、3 次元模型として見たホールデイン模型は 3 次元トポロジカル半金属であり、その $\Delta = \text{const.}$ の断面が 2 次元トポロジカル絶縁体になりうる。

ベクトル $\mathbf{h}^{(\mu)}(\mathbf{k}_{3D})$ の巻き付き数

規格化された 3 成分ベクトル場 $\hat{\mathbf{h}}^{(\mu)}(\mathbf{k}_{3D}) = \mathbf{h}^{(\mu)}(\mathbf{k}_{3D})/|\mathbf{h}^{(\mu)}(\mathbf{k}_{3D})|$ を考える。閉曲面 S が $\mathbf{k}_{3D}(u, v)$ によってパラメーター表示される時、この閉曲面上での $\hat{\mathbf{h}}^{(\mu)}(\mathbf{k}_{3D})$ の巻き付き数は

$$w_S = \int \frac{du dv}{4\pi} \hat{\mathbf{h}}^{(\mu)}(\mathbf{k}_{3D}(u, v)) \cdot \frac{\partial \hat{\mathbf{h}}^{(\mu)}(\mathbf{k}_{3D}(u, v))}{\partial u} \times \frac{\partial \hat{\mathbf{h}}^{(\mu)}(\mathbf{k}_{3D}(u, v))}{\partial v},$$

で与えられる。これは単位胞の選び方 μ に依存しない。 $\mathbf{k}_{3D} = (K_x, K_y, -3\sqrt{3}t_2)$ のディラック点の巻き付き数は $w_S = -1$ 、 $\mathbf{k}_{3D} = (K'_x, K'_y, 3\sqrt{3}t_2)$ のディラック点の巻き付き数は $w_S = 1$ である。図 21 に有限の巻き付き数を持つベクトル場の例を示す。このような 3 次元空間内の 3 成分ベクトルの点欠陥はトポロジカルに安定であることが知られている [3,4]。

ホールデイン模型のディラック点の分布を図 22 に示す。 Δ を変えて、第 1 ブリルアンゾーンがディラック点を跨ぐと巻き付き数 w の値が変わる（表 4 も参照）。

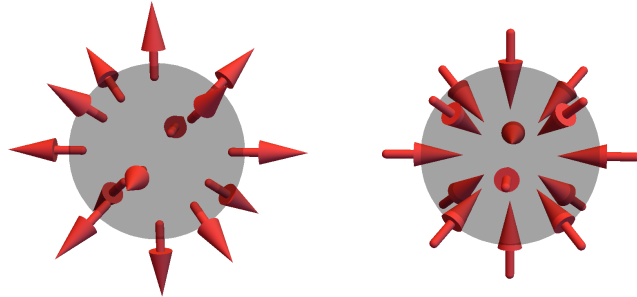


図 21 有限の巻き付き数を持つベクトル場の例。左が $w_S = 1$ 、右が $w_S = -1$ 。SSH 模型の図 10 に対応している。

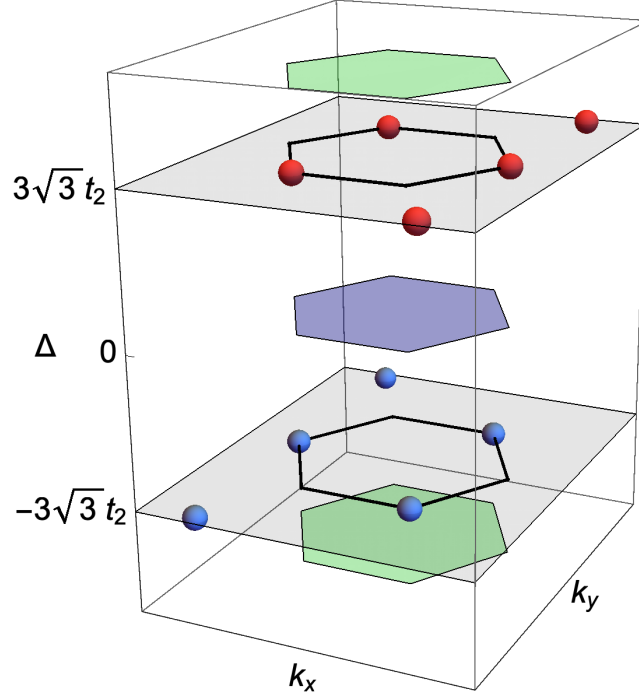


図 22 3次元波数空間で描いたホールデイン模型のディラック点。赤色の点が $w_S = 1$ のディラック点、青色の点が $w_S = -1$ のディラック点。黒線で囲まれた領域は $\Delta = \pm 3\sqrt{3}t_2$ での第1ブリルアンゾーン。緑の領域では $w = 0$ 、青の領域では $w = -1$ 。 Δ を変えて、第1ブリルアンゾーンがディラック点を跨ぐと w の値が変わる。SSH 模型の図9やグラフェンの図13に対応している。

表4 ホールデイン模型の巻き付き数。 Δ を変化させて、第1ブリルアンゾーンがディラック点を跨ぐとき、そのディラック点の巻き付き数 w_S に応じて、巻き付き数 w が変化する。

$\Delta < -3\sqrt{3}t_2$	$w_S = -1$	$-3\sqrt{3}t_2 < \Delta < 3\sqrt{3}t_2$	$w_S = 1$	$3\sqrt{3}t_2 < \Delta$
$w = 0$	$\xrightarrow{-1}$	$w = -1$	$\xrightarrow{+1}$	$w = 0$

フェルミアーク

有限幅の系の 1 粒子エネルギーの絶対値の最小値 $|E|_{\min}$ を $k_{\parallel}$ - Δ 平面上でプロットしたものが図 23 である。ここで $k_{\parallel}$ は端に並行な波数である。この平面は、ホールデイン模型を 3 次元模型としてみたときの x 軸もしくは y 軸に垂直な表面を持つ系の表面ブリルアンゾーンともみなせる。 Δ を固定したとき、トポロジカル絶縁体 ($-3\sqrt{3}t_2 < \Delta < 3\sqrt{3}t_2$) ではバルクのバンドギャップを跨ぐ端状態があるので、 $k_{\parallel}$ のどこかで $|E|_{\min} = 0$ となる。 $|E|_{\min} = 0$ の点を繋ぐと、それは $w_S = -1$ のディラック点を射影した点と $w_S = 1$ のディラック点を射影した点を繋ぐ線になる。この線をフェルミアークと呼ぶ [11]。フェルミアークは 3 次元トポロジカル半金属の表面状態に特徴的な構造である。

2 次元の金属でも $|E|_{\min} = 0$ の線は現れる。これはフェルミ面に他ならないが、これは閉曲線として現れる。それに対してフェルミアークは開曲線として現れるところが、フェルミ面とは異なる。

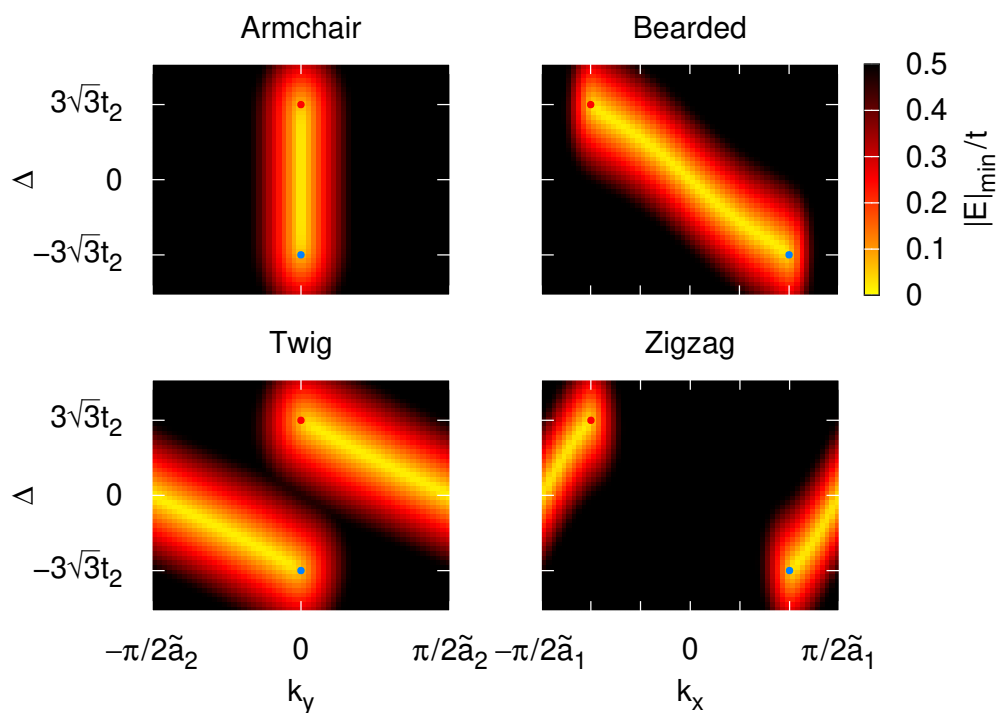


図 23 有限幅のホールデイン模型の 1 粒子エネルギーの絶対値の最小値 $|E|_{\min}$ 。 $t_2 = 0.1t$ とした。twig edge の場合は単位胞の選び方に依存するが、 $\mu = 1$ の場合を示した。 $\mu = 2$ の場合は k_y を反転したものが得られる。赤色の点は $w_S = 1$ のディラック点、青色の点は $w_S = -1$ のディラック点を射影したもの。SSH 模型の図 7 やグラフィエンの図 15 に対応している。

関連する系

SSH 模型とグラフェンの端状態を調べた。これらの系では 2 次元波数空間内に 2 成分ベクトルの点欠陥があり、それが端状態の起源であった。また、1 次元トポロジカル絶縁体は、2 次元トポロジカル半金属の断面として理解できることもわかった。

トポロジカル半金属は上下のバンドが縮退することで実現するため、その実現には複数のバンドが必要となる。SSH 模型やグラフェンでは単位胞が 2 つのサイトから構成されるので、2 バンドになっていた。このような、副格子自由度を利用する以外にも、2 バンドを構成する方法はある。例えば、スピン自由度を用いるには、スピン軌道相互作用を考慮してスピンバンドを分裂させればよい。また、軌道自由度を用いることも可能である。実際、同様な点欠陥による端状態の研究としては、2 次元ラッシュバ型スピン軌道相互作用系のワイル点と端状態の研究 [12]、2 次元 e_g 軌道系のディラック点と八極子端状態の研究 [13] などがある。これらの系では、特定のパラメーターではカイラル対称性があり、端状態はカイラル演算子の固有状態となる。一般的なパラメーターにおいても、端状態ではこのカイラル演算子の期待値が有限の値をとる。

また、3 次元空間内の 2 成分ベクトルの線欠陥は、2 次元空間内の 2 成分ベクトルの点欠陥と同等である。なぜなら、線欠陥のある 3 次元空間の 2 次元断面は点欠陥を持つからである。そのため、3 次元ノーダルライン半金属では表面状態が現れる [14]。その研究例としてはダイヤモンド格子（グラフェンと同様に副格子自由度がある）の表面状態の研究 [8, 15–17] や 3 次元 e_g 軌道系の八極子表面状態の研究 [18] などがある。特にダイヤモンド格子は、本稿で調べたグラフェンの 3 次元空間への拡張となっており、表面の形状によって表面状態の存在する波数が変わる [8]。また、グラフェンを ABC 積層した菱面体晶グラファイトは、サイトの繋がり方が (111) 表面を持つダイヤモンド格子と同じなので、同様な表面状態が現れる [19]。

また、3 成分ベクトルの点欠陥に拡張することによって、3 次元トポロジカル半金属やその断面としての 2 次元トポロジカル絶縁体も議論した。ここで用いたホールデイン模型は、虚数のホッピングを持ち、時間反転対称性を破っている。この模型にスピン自由度を導入し、虚数ホッピングの符号をスピンによって逆にすることで、時間反転対称性を回復したものはケイン・メレ模型と呼ばれる [20]。この模型は Z_2 のトポロジカル数で特徴付けられることが知られている [21]。

表 5 と表 6 に本稿および本節で述べた系をまとめた。

表 5 波数空間において欠陥のある系。(1)–(5) の具体例は表 6 に示す。

ベクトル場	空間次元・名称	端、表面状態
2 成分ベクトル	3 次元ノーダルライン半金属	カイラル演算子の固有状態 (1)
	2 次元トポロジカル半金属	カイラル演算子の固有状態 (2)
	1 次元トポロジカル絶縁体	カイラル演算子の固有状態 (3)
3 成分ベクトル	3 次元トポロジカル半金属	フェルミアーキ (4)
	2 次元トポロジカル絶縁体	カイラルエッジ状態 (5)

表 6 波数空間において欠陥のある系。表 5 の (1)–(5) の具体例を示す。

具体例	端、表面状態
(1) ダイヤモンド格子 [8, 15–17] 3 次元 e_g 軌道系 [18]	片方の副格子に偏在する表面状態 八極子表面状態
(2) グラフェン [5–8] 2 次元ラシュバ型スピン軌道相互作用系 [12] 2 次元 e_g 軌道系 [13] 2 次元模型として見た SSH 模型	片方の副格子に偏在する端状態 スピン偏極端状態 八極子端状態 片方の副格子に偏在する端状態
(3) SSH 模型 [1] 片方の波数を固定したグラフェン	片方の副格子に偏在する端状態 片方の副格子に偏在する端状態
(4) 3 次元模型として見たホールデイン模型	フェルミアーキ
(5) ホールデイン模型 [10]	カイラルエッジ状態

参考文献

- [1] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, Phys. Rev. Lett. **42**, 1698 (1979).
- [2] M. Sato, Y. Tanaka, K. Yada, and T. Yokoyama, Phys. Rev. B **83**, 224511 (2011).
- [3] 和達三樹: 微分・位相幾何 (岩波書店, 1996).
- [4] 中原幹夫: 理論物理学のための幾何学とトポロジー I [原著第 2 版] (日本評論社, 2018).
- [5] D. J. Klein, Chem. Phys. Lett. **217**, 261 (1994).
- [6] M. Fujita, K. Wakabayashi, K. Nakada, and K. Kusakabe, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 1920 (1996).
- [7] K. Wakabayashi, S. Okada, R. Tomita, S. Fujimoto, and Y. Natsume, J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 034706 (2010).
- [8] K. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. **94**, 074701 (2025).
- [9] S. Ryu and Y. Hatsugai, Phys. Rev. Lett. **89**, 077002 (2002).
- [10] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **61**, 2015 (1988).
- [11] X. Wan, A. M. Turner, A. Vishwanath, and S. Y. Savrasov, Phys. Rev. B **83**, 205101 (2011).
- [12] K. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. **93**, 024708 (2024).
- [13] K. Kubo, Phys. Rev. B **110**, 075110 (2024).
- [14] T. T. Heikkilä and G. E. Volovik, JETP Lett. **93**, 59 (2011).
- [15] Y. Takagi and S. Okada, Surf. Sci. **602**, 2876 (2008).
- [16] R. Takahashi and S. Murakami, Phys. Rev. B **88**, 235303 (2013).
- [17] D. S. Hirashima, J. Phys. Soc. Jpn. **85**, 044705 (2016).
- [18] K. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. **94**, 054703 (2025).
- [19] M. Koshino, Phys. Rev. B **81**, 125304 (2010).
- [20] C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **95**, 226801 (2005).
- [21] C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **95**, 146802 (2005).