

バンド理論のトポロジーと Atiyah-Hirzebruch スペクトル系列

塩崎 謙 / 京都大学基礎物理学研究所助教（連携研究 D01）

1. はじめに

最近、SPT(Symmetry Protected Topological) 相と呼ばれる基底状態に縮退の存在しないトポロジカル相において、空間群のような空間的に非局所な対称性と系のトポロジカルな性質を同時に扱うことが可能な枠組みとして、アティヤ=ヒルツェブルフ・スペクトル系列（Atiyah-Hirzebruch spectral sequence. 以下、AHSS と略す。）[1] と呼ばれる数学的ツールが有効であることがわかってきた [2,3]。本稿ではバンド理論のトポロジーを調べる上で AHSS がどのように定式化されるか [2] について簡単に紹介したい。

2. 占有状態数の変化とフェルミ面

占有状態数の変化とそれに伴うフェルミ面の生成は、トポロジカル不変量の変化と生成とみなすことができる。AHSS はこの観点の、考え得る限り最大限の一般化なので、まずはこの簡単な例をトポロジーの観点から再考しよう。

波数空間内のある 1 点 "A" に注目しよう。この点における占有状態の数を N_A と書こう。 N_A は何らかの整数値に値を取り、Bloch 状態がエネルギーのゼロ点を横切らない限り変化しないので、バンド理論におけるトポロジカル不変量の一つである。点 A における占有状態の数が $N_A \mapsto N_A + 1$ のように 1 だけ変化したとき、点 A の近傍では何が起こるだろうか。バンドは連続的に繋がっているので、点 A の近傍で新たに 1 枚のフェルミ面が生じる（図 1 [a]）。

この単純な過程は、点 A におけるトポロジカル不変量を 1 だけ“消費”して、点 A 近傍における“フェルミ面”というトポロジカル電荷を 1 だけ“増大”させる過程とみることができる。

3. トポロジカルに安定なギャップレス点

上ではフェルミ面がトポロジカル電荷を持つことを前提にして話を進めた。実際、フェルミ面はスペクトル流と呼ばれる、(Weyl 点のような) トポロジカルなギャップレス点の一種である。この点について詳しく述べよう。話を具体的にするために、空間 1 次元系を考えよう。1 次元波数空間のある部分区間 $[k_1, k_2]$ に注目する。端点 k_1, k_2 においては、有限のエネルギーギャップを仮定する。スペクトル流は、区間 $[k_1, k_2]$ 点において（正の向きに $E=0$ を横切る回数）-（負の向きに $E=0$ を横切る回数）として定義される。図 2 参照。スペクトル流は点 k_1, k_2 におけるエネルギーギャップが保たれている限り不変であり、この意味において整数に値を取るトポロジカル不変量である。+1 のスペクトル流は、エネルギーギャップが閉じる点近傍において

$$H(k_x) = k_x$$

のように書くことができる。これは Dirac 型のハミルトニアンである。

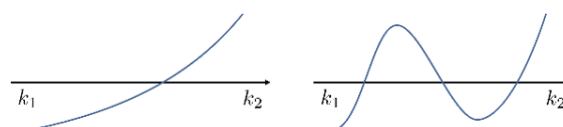
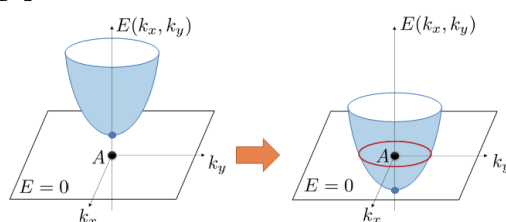


図 2: スペクトル流の例。いずれもスペクトル流 = +1 を持つ。

[a]



[b]

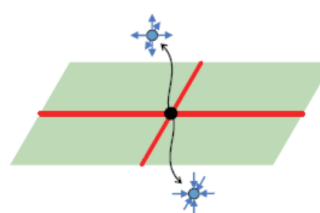


図 1: [a] 点 A における占有状態数が 1 だけ増加すると、その近傍においてフェルミ面（赤線）の数が 1 だけ増加する。[b] 空間反転対称性が存在する場合、反転中心におけるバンド反転に伴い Weyl 点が対生成される。

一般に、波数空間内のある部分 p セル (p 次元円板のこと) D^p に注目し、その境界 ∂D^p において有限のエネルギーギャップを仮定したときに、内部のギャップレス点のトポロジカル電荷を定義できる。 $p=2,3$ の例を見よう。

波数空間内の部分 2 セル D^2 (2 次元円板) に注目する。境界 $\partial D^2 \cong S^1$ においてエネルギーギャップを仮定する。対称性が存在しなければ D^2 内部において安定なギャップレス点は存在しない。しかし、カイラル対称性 $\{H(k_x, k_y), \Gamma\}=0$ が存在すれば、整数値に値を取る巻き付き数によって特徴づけられる安定なギャップレス点が存在する。ギャップレス点近傍のハミルトニアンは

$$H(k_x, k_y) = k_x \sigma_x + k_y \sigma_y, \quad \Gamma = \sigma_z$$

によって与えられる。ここで、 σ_μ ($\mu=x, y, z$) はパウリ行列である。カイラル対称性のため、質量項 $m \sigma_z$ が禁止される。グラフェンなどでよく知られた "Dirac 点" である。

同様に、波数空間内の 3 セル D^3 (3 次元円板) 内においては Weyl 点が安定なギャップレス点となり、Dirac 型のハミルトニアン

$$H(k_x, k_y, k_z) = k_x \sigma_x + k_y \sigma_y + k_z \sigma_z$$

によって記述される。トポロジカル電荷は整数の値をとる Chern 数によって与えられる。

4. "局所的" なギャップフル・ハミルトニアンの分類
2 節で、波数空間内のある 1 点における占有状態の数はトポロジカル不変量の 1 種であることに注意した。これは、0 セル (つまり、1 点) におけるギャップフル・ハミルトニアンの分類の例である。より一般の p セル D^p に対しても、以下のようにして「 p セル内のギャップフル・ハミルトニアンの分類」が定義できる。

波数空間内の部分 p セル D^p を考えよう。 p セル上のギャップフル・ハミルトニアンの分類を考えたい。しかし p セル D^p は 1 点に可縮なのでこのままでは意味のある分類は得られない。「 p セル内のギャップフル・ハミルトニアンの分類」は、 p セルの境界 $\partial D^p \cong S^{p-1}$ においてハミルトニアン $H(k_1, \dots, k_p)$ をある自明なハミルトニアン H_0 に固定したときの、 p セル内部のギャップフル・ハミルトニアンの分類、と定義される。

例えば、対称性が存在しない場合に、2 セル D^2

内のギャップフル・ハミルトニアンの分類は $\mathbb{Z}$ で与えられ、整数 $\mathbb{Z}$ は Chern 数によって特徴づけられる。 $\mathbb{Z}$ を生成するモデルはやはり Dirac 型であり、2 セルの境界を 1 点コンパクト化した

$$H(k_x, k_y) = k_x \sigma_x + k_y \sigma_y + (m - k_x^2 - k_y^2) \sigma_z$$

によって与えられる。ここで $m > 0$ は質量項である。

5. トポロジカルな特異点

スペクトル系列の構造を理解するためには、さらに、"トポロジカルな特異点" を導入する必要がある。

例として、フェルミ・アークの端の特異点がある。波数空間のある 2 次元曲面におけるフェルミ線を考えよう。フェルミ線はスペクトル流 $= \pm 1$ を持つギャップレス点である。仮にスペクトル流がフェルミ線の途中で 1 から 0 に変化するとバンド構造はその点で特異的となる。

ここでの特異性の意味は、複素関数 $\log(z)$ における $z=0$ の特異性を一般化したものである。ここでは単に、「ギャップレス点のトポロジカル電荷が変化する点」をバンド構造の特異点と定義しよう。すると、特異点はギャップレス点のトポロジカル電荷の変化量によって特徴づけられるので、バンド構造の連続的変化に対して不変であり、トポロジカルな分類を持つ。特異点近傍は Dirac 型の標準的な表式

$$H(k_1, \dots, k_p) = \text{Im} \text{Ln} \left[k_p + i \sum_{\mu=1}^{p-1} k_\mu \gamma_\mu \right]$$

で記述することができる。ここで γ_μ は Γ 行列である。

6. Atiyah-Hirzebruch スペクトル系列 (AHSS)

3、4、5 節では、バンド理論における (部分 p セル D^p 上という意味で) 局所的なトポロジーの情報として、以下の 3 つを定義した：

- $n=0$: ギャップフル・ハミルトニアンのトポロジー
- $n=1$: ギャップレス点のトポロジー
- $n=2$: 特異点のトポロジー

ここで、考えているトポロジーの種類に応じて、 $n=0, 1, 2$ と "トポロジーの次数" を導入した。これらは互いに無関係ではなく、 **n 次のトポロジーが変化するとき $(n+1)$ 次のトポロジカル電荷が生じる**、という関係がある。

TOPICS

次数の異なるトポロジ間の関係を用いて、一般コホモロジー理論におけるスペクトル系列の1種であるAHSSを構成することができる。AHSSとは以下の一連の手続きのことを指す。

ステップ1：波数空間のセル分割

対称性を保ちつつ波数空間を分割する。例えば、2次元トーラスの波数空間において4回回転対称性が存在する場合は図3のように分割される。

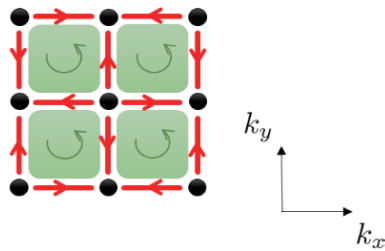


図3：2次元波数空間の4回回転対称なセル分割。黒点は0セル，赤矢印は1セル，緑面は2セルである。

ステップ2：E₁ ページ

各 p セルにおける n 次のトポロジ、つまり、ギャップフル・ハミルトニアン、ギャップレス点、特異点のトポロジカルな分類 (Z, Z_2 など) を計算し、これを $E_1^{p,p+n}$ とする。この可換群 $E_1^{p,p+n}$ たちをまとめた表を E_1 ページと呼ぶ。図4参照。 E_1 ページはWigner criterionによって機械的に計算される。

ステップ3：第1微分とE₂ ページ

E_1 ページのトポロジの情報は、各 p セルにおける局所的なトポロジの情報であり、波数空間全体の大域的な情報ではない。 E_1 ページのトポロジの情報を大域的なものとすべく、各 p セルにおけるトポロジの情報を隣接する $(p+1)$ セルに拡張する。これを系統的に計算する手続きがスペクトル系列の第1微分

$$d_1^{p,p+n}: E_1^{p,p+n} \rightarrow E_1^{p+1,p+n}$$

である。 $d_1^{p,p+n}$ は可換群の間の準同型写像である。例えば、第1微分 $d_1^{p,p}$ (図4の青矢印) は、 p セルにおけるギャップフル・ハミルトニアンのトポロジカル不変量の変化に伴い、隣接する $(p+1)$ セルにギャップレス点のトポロジカル電荷を放出する過程である。

同様に、第1微分 $d_1^{p,p+1}$ (図4の赤矢印) は、 p セルにおけるトポロジカル・ギャップレス点の生成に伴い、隣接する $(p+1)$ セルにおいて特異点を放出する過程である。(例えば、フェルミ・アー

クを生成すると必ずその両端に特異点を持つが、これが $d_1^{1,0}$ である。)

準同型 $d_1=(d_1^{p,p+n})$ は微分作用素である。つまり、2回続けて実行すると恒等的にゼロ写像、 $d_1^{p+1,p+n}d_1^{p,p+n}=0$ 、であることを示すことができる。よって d_1 のコホモロジーを取ることができ、これを E_2 ページと定義する：

$$E_2^{p,p+n} = \text{Ker}[d_1^{p,p+n}]/\text{Im}[d_1^{p-1,p+n}]$$

E_2 ページは、 E_1 ページに比べるとより大域的なトポロジの情報を持っている。

この点を理解するために、 $E_1^{p,p+1}$ と $E_2^{p,p+1}=\text{Ker}[d_1^{p,p+1}]/\text{Im}[d_1^{p-1,p+1}]$ とを比較しよう。 $E_1^{p,p+1}$ は各 p セルにおける局所的なギャップレス点の分類を与える。 $E_1^{p,p+1}$ の部分群である $d_1^{p,p+1}$ の核 (kernel) を取る点は、各 p セルにおけるギャップレス点が隣接する $(p+1)$ セルに特異点なしに拡張できることを意味する。さらに $d_1^{p-1,p+1}$ の像 (image) で割る点は、隣接する $(p-1)$ セル上のギャップフル・ハミルトニアンのトポロジカル転移によって生成できるような“自明な”ギャップレス点を除去することを意味する。

なお、第1微分は波数空間における小群の既約表現の指標を用いて機械的に計算可能である。

ステップ4：高次微分とE_∞ ページ

E_2 ページでは次元が1だけ異なるセル間のトポロジを適切に“くっつけた”。実はこれでは不十分であり、波数空間全体の大域的トポロジの情報を得るためには、任意の隣接セル間において局所的なトポロジの情報を適切に“くっつける”必要がある。この手続きがAHSSにおける高次微分 $d_r^{p,p+n}$ ($r \geq 2$) である。

例えば、第3微分 $d_3^{0,0}$ (図4緑矢印) は、0セル (対称点) におけるバンド反転に伴い隣接する3セルへWeyl点を放出する過程 (図1 [b]) である。実際、空間反転対称性が存在するときはこの過程が非自明に残る。

E_2 ページと同様に、第 r 微分のコホモロジーとして E_{r+1} ページが定義される。空間3次元であれば、この一連の手続きは第3微分で止まる。最終ページを E_∞ ページと呼ぶ。

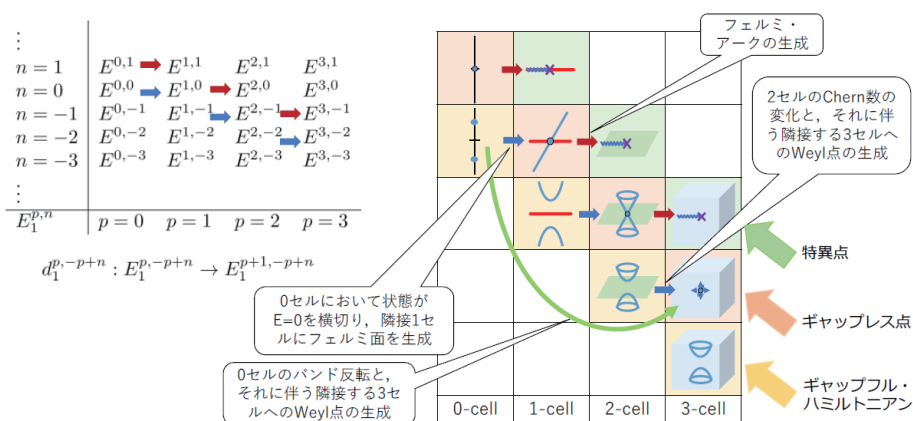


図4: E_1 ページ (左図) と対応する局所的なバンド・トポロジー (右図)。表中の赤矢印と青矢印はそれぞれ第1 微分 $d_1^{p,p}, d_1^{p,p+1}$ を表す。表中の緑矢印は第3 微分 $d_3^{0,0}$ を表す。

ステップ5: バンド・トポロジーへ

詳しくは述べないが、 E_∞ ページそのものが波数空間全体の大域的トポロジーの分類を与えるわけではない。 E_∞ ページは、近似を与える。例えば、 $\{E_\infty^{[p,p]}\}_{[p=0,1,2,3]}$ は波数空間全体のギャップフル・ハミルトニアンのトポロジーを近似する。近似である理由であるが、 E_∞ ページは E_1 ページの部分群であるので、例えば、1 セル直上の Weyl 点、といった「低次元セル直上に出現する高次元のトポロジカル電荷」が考慮されていないからである。

しかし、 E_∞ ページが、可換群の群構造だけに注目すると、近似でなく厳密になる場合もあり、そのような場合は AHSS により (少なくとも K 理論の範囲内で) トポロジカル絶縁体の分類が完全に決定される。例えば、Altland-Zirnbauer の対称性クラス A に何らかの空間群対称性を課す場合がこの場合に相当する。

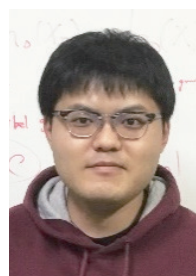
7. 空間群とバンド・トポロジー

我々は、Altland-Zirnbauer の対称性クラス A, AIII において空間群 230 通りに対する E_∞ ページの計算を行った [2]。その結果、空間群が存在する場合は、 Z_2, Z_3, Z_4, Z_6 に値を取る数多くのトポロジカル不変量が存在することがわかった。例えば、クラス A において空間群 F222 が Z_2 不変量を持つことが新たにわかった。また、クラス AIII (カイラル対称性が存在する場合) においては、驚くほど多くの未知のトポロジカル不変量が存在することがわかった。どうやら我々は、バンド理論のトポロジカル不変量について、ほとんど何も知らないようである。新たに見つかったトポロジカル不変量と物理現象との関係の解明など、まだまだ課題があるだろう。

本稿は佐藤昌利氏 (京都大学・研究分担 D01) 及び五味清紀氏 (信州大学) との共同研究に基づく。

- [1] M. F. Atiyah, F. Hirzebruch, Proc. Sympos. Pure Math., Vol. III pp. 7–38 American Mathematical Society, Providence, R.I. (1961).
- [2] K. Shiozaki, M. Sato, K. Gomi, arXiv:1802.06694.
- [3] K. Shiozaki, C. Z. Xiong, K. Gomi, arXiv:1810.00801.

著者紹介



しおざき けん

1987 年生まれ。2010 年京都大学理学部卒業。2015 年京都大学大学院理学研究科博士課程修了。日本学術振興会海外特別研究員 (受入先: イリノイ大学アーバナ・シャンペーン校), 理化学研究所基礎科学特別研究員を経て 2018 年 9 月より現職。