トポロジストのためのトポロジカル絶縁体入門

五味 清紀 (信州大学理学部)*

目 次

1. 導入 1
1.1. トポロジカル絶縁体 1
1.2. トポロジカル絶縁体の分類と K 理論 2
2. バンド絶縁体 3
2.1. バンド絶縁体の定式化 3
2.2. バンド絶縁体の同値 4
3. バンド絶縁体の分類と K 理論 4
3.1. K 理論 4
3.2. バンド絶縁体の分類への応用 5
4. 対称性がある場合 6
4.1. 同変ねじれ K 理論 6
4.2. トポロジカル絶縁体の対称性 7
4.3. トポロジカル結晶絶縁体 8
5. 関連する話題 9

1. 導入

1.1. トポロジカル絶縁体

トポロジカル絶縁体は, 物理学, 特に固体物理学における対象である. 物理的な対象であるので, 数学における対象のように, トポロジカル絶縁体を「定義」することは難しい. できるのは, それを特徴付ける物理的な現象を述べることと, その現象を説明するような数学的なモデルを定義することである.

トポロジカル絶縁体を物理現象として説明すれば, バルクは絶縁体だがエッジは導電体であるような物質である. ここでは仮に長方形の板状の物質を想像して欲しい. この場合, 長方形の内部がバルクで, 辺がエッジである. このような性質を持つものとしてのトポロジカル絶縁体は, 現実の金属結晶として実現され, 実験によって確認されている. 以前から知られている例は整数量子Hall系である. 狭義のトポロジカル絶縁体である量子スピンHall系は, 2005年に理論的に発見され, 2007年には実験で確認された.

また, トポロジカル絶縁体は, トポロジカル相の一例である. この意味には二つの側面がある (cf. [15]). すなわち, 一つの側面は, トポロジカル絶縁体を与える環境 (温度や磁場の強さなど) のパラメータを微小に動かしても, トポロジカル絶縁体である状態は変化しない, ということである. もう一つの側面は, トポロジカル絶縁体であるという状態を指定するパラメータが, トポロジーにおける不変量 (巻き付き数や特整数など) で与えられる, ということである. このことは, 例えば水 (H_2O) 分子を沢山集めた系の固体・液体・気体の状態などが, 分子の運動の乱雑さというパラメータ (秩序変数) によって指定されることとは一線を画す (cf. 2016年のNobel物理学賞). トポロジカル絶縁体を指定する不変量は, 整数量子Hall系においては, Hall伝導率に比例する整数であり, バルクの絶縁体の不変量である. この不変量の非自明性は, エッジに電流が流れる状態の存在に対応している. この現象はトポロジカル絶縁体の特徴づけの一つであり,

* e-mail: kgomi@math.shinshu-u.ac.jp

バルク・エッジ対応と呼ばれる.

トポロジカル絶縁体への理論的なアプローチは幾つかある. その一つで, この講演で考えるものは, まず, トポロジカル絶縁体のバルク部分を無限に広がった格子で近似する. 次に, この格子上の平行移動で不変な量子系として, バルクの絶縁体を記述する. このようにして記述された絶縁体(バンド絶縁体)のうち, 然るべき性質を持つものが, トポロジカル絶縁体を記述していると考える. 現実に合成した金属結晶は格子欠陥や不純物の混入がありうるので, その上の量子系は厳密に平行移動不変性を持つとは限らない. このような場合を想定した解析には, C^* 代数を用いるアプローチがあり長い蓄積がある (例えば [7, 31]). また, 格子上の量子系の記述は, 本質的には相互作用のない一つの電子の振る舞いを記述するものである. 複数の電子の振る舞いを想定したトポロジカル絶縁体を記述としては, 場の理論を用いるアプローチもある (例えば [42]).

1.2. トポロジカル絶縁体の分類と K 理論

量子スピン Hall 系の理論的・実験的発見以降, トポロジカル絶縁体には膨大な研究がある. 理論的な面での重要な結果は, ある内部対称性を持つトポロジカル絶縁体の理論的な分類である ([24, 33, 35]). この分類においては, トポロジカル絶縁体として, ある内部対称性を持つものを考える. その分類結果は, 次元についての周期性を持つ. Kitaev による分類 [24] は, 上で述べた平行移動不変な量子系としてのトポロジカル絶縁体の記述にもとづき, K 理論を応用している. K 理論は Bott 周期性を持つことが知られている. 従って, Kitaev の仕事により, Bott 周期性がトポロジカル絶縁体の周期性を説明することが明らかにされたのである.

上記の分類では, トポロジカル絶縁体の内部対称性を考えた. 一般に, 格子に対しては, 格子固有の対称性 (結晶群・空間群) がある. このような結晶対称性によって守られたトポロジカル絶縁体は, トポロジカル結晶絶縁体と呼ばれ [14], 実験的にも確認されている. Kitaev による分類を一般化すると, トポロジカル結晶絶縁体の分類は Freed-Moore 型のねじれを持つ同変 K 理論 [13] によってなされる. 言い換えると, 同変ねじれ K 理論の計算によって, トポロジカル結晶絶縁体の分類が行えることになる. このアイデアに動機付けられた同変 K 理論の計算は, 例えば [36, 37, 38] でなされている.

上で述べたトポロジカル絶縁体の分類への K 理論の応用について, より詳しい説明をすることが講演の目標である. 以下この予稿では, まず格子上の平行移動不変な量子系・バンド絶縁体について具体的に説明する (§2). 次に K 理論について復習し, バンド絶縁体の分類へ応用する (§3). その上で, 対称性がある場合への一般化を説明する (§4). 最後に関連する話題等について触れる (§5).

なお, トポロジカル絶縁体の説明については, 私の理解不足等により, 間違ったことを書く (あるいは既に書いた) 可能性があり, 引用文献も偏っている. トポロジカル絶縁体については, 専門家が日本語で書いた本 [2, 30, 34] や解説記事 [1, 16, 17, 29] が既にあるので, 参考にして欲しい. 2014 年に東大数理で開催された “Summer School 数理物理 トポロジカル相の数理” の予稿集も参考になる. また, トポロジカル絶縁体を語る上で重要なバルク・エッジ対応および関連文献については, この予稿では詳しく触れないが, [15] が参考になる.

2. バンド絶縁体

2.1. バンド絶縁体の定式化

量子力学においては, 考える系の状態は, ある Hilbert 空間 $(\mathcal{H}, \langle\ ,\ \rangle)$ の非零ベクトル $\psi \in \mathcal{H}$ で指定される. また, 系の発展は, Schrödinger 方程式によって記述される:

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = H\psi.$$

ここで, $H : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ はある自己共役作用素であり, ハミルトニアンと呼ばれる. ある状態 $\psi \in \mathcal{H}$ に対して, $\langle \psi, H\psi \rangle / \langle \psi, \psi \rangle$ は状態 ψ のエネルギーである.

既に述べたとおり, トポロジカル絶縁体の記述として, バルク部分を無限に広がった格子で近似する (バルクの内部にいる電子には, “遠く” にあるエッジの効果は小さいだろう). ここでは簡単のために, 標準的な Euclid 空間の中の d 次元正方格子 $\mathbb{Z}^d \subset \mathbb{R}^d$ を考え, その上の量子系を, いわゆる強結合近似模型 (tight binding model) あるいは一電子近似模型によって記述する. この模型においては, 格子状に配列されている原子あるいは分子は, 格子点から動かないと仮定している. さらに, 格子点に配置されている原子あるいは分子を単独で考えた場合には, その周囲を運動する電子の量子系は理解できたと仮定する. それらの重ね合わせとして格子上の量子系を近似する. 具体的には, 次のような Hilbert 空間 $(\mathcal{H}, \langle\ ,\ \rangle)$ を考える.

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{Z}^d, V) = \left\{ \psi = (\psi(n))_{n \in \mathbb{Z}^d} \,\middle|\, \psi(n) \in V, \sum_{n \in \mathbb{Z}^d} \langle \psi(n), \psi(n) \rangle_V < +\infty \right\},$$

$$\langle \psi, \psi' \rangle = \sum_{n \in \mathbb{Z}^d} \langle \psi(n), \psi'(n) \rangle_V.$$

ここで $(V, \langle\ ,\ \rangle_V)$ はある Hilbert 空間であり, 格子点に配置された原子あるいは分子を単独で考えた場合の量子系の状態を記述する. 一般には, 高エネルギー部分は無視することで, 有限次元のベクトル空間を考える. その際には, V の次元は, 格子点に配置された原子あるいは分子の量子系の内部自由度である.

次に, 格子上の量子系ととらえたときのトポロジカル絶縁体を記述するハミルトニアンとして, 次の仮定を満たすものを考える.

仮定 2.1. 自己共役作用素 $H : L^2(\mathbb{Z}^d, V) \to L^2(\mathbb{Z}^d, V)$ は以下を満たす.

(a) H は平行移動不変である.

(b) H は短距離相関を記述する.

(c) H はエネルギーギャップを持つ.

Hilbert 空間 $L^2(\mathbb{Z}^d, V)$ は, 離散 Fourier 変換により, d 次元トーラス $T^d = \mathbb{R}^d/\mathbb{Z}^d$ 上の L^2 関数の空間と同型になる: $L^2(\mathbb{Z}^d, V) \cong L^2(T^d, V)$. 物理においては, d 次元トーラス $T^d = \mathbb{R}^d/\mathbb{Z}^d$ は (準) 運動量空間と呼ばる. Fourier 変換のもとで, 仮定 2.1(a), (b) を満たす自己共役作用素 $H : L^2(\mathbb{Z}^d, V) \to L^2(\mathbb{Z}^d, V)$ は, 次の掛け算作用素 $L^2(T^d, V) \to L^2(T^d, V)$ に変換される.

$$\hat{\psi} \mapsto \hat{H}(k)\psi(k).$$

ここで, $\hat{H}: T^d \to \mathrm{Herm}(V) \subset \mathrm{End}(V)$ は, V の自己共役 (Hermite) 準同型に値をとる連続関数である. トポロジカル絶縁体の文脈では, この $\hat{H}$ もハミルトニアンと呼ぶ. 最後の仮定 2.1(c) は, $\hat{H}(k)$ の固有値はある実数 $\lambda_F \in \mathbb{R}$ を横切らない, というものである. 物理的には, 今考えている量子系が電子の系である場合に, λ_F はフェルミレベルと呼ばれる数値に設定される. 直感的には, フェルミレベルより大きい固有値を持つ固有ベクトルが指定する状態 (固有状態) が, 今考えている系の電流を担っている. 一方で, 電子は固有値の小さい固有状態から詰まっていく. フェルミレベルによって $\hat{H}(k)$ の固有値が分離されている限り, 今考えている系においては, 電子は自由に動けず, 電流の流れない絶縁体の状態にある. 理論的な考察をする上では, 通常 $\lambda_F = 0$ と設定する. すると, 仮定 2.1(c) は次のように書ける.

$$\det \hat{H}(k) \neq 0. \quad (k \in T^d)$$

2.2. バンド絶縁体の同値

以上が, トポロジカル絶縁体を記述する, d 次元格子上の平行移動不変な量子系 (バンド絶縁体) である. 最終的に, 考えている系は, 連続関数 $\hat{H}: T^d \to \mathrm{Herm}^*(V)$ によって記述されることがわかった. ここで, $\mathrm{Herm}^*(V)$ は, V の Hermite 準同型であって可逆なもののなす空間である. この $\hat{H}$ の然るべき分類によって, バンド絶縁体が分類される. (それらの中で, バルク・エッジ対応などの然るべき条件を満たすものが, トポロジカル絶縁体である.) ハミルトニアンを分類する際の基準は次のとおりである.

仮定 2.2. ハミルトニアン $\hat{H}, \hat{H}': T^d \to \mathrm{Herm}^*(V)$ は, 別のハミルトニアン $\hat{H}'': T^d \to \mathrm{Herm}^*(W)$ との直和をとった $\hat{H} \oplus \hat{H}''$ と $\hat{H}' \oplus \hat{H}''$ が $\mathrm{Herm}^*(V \oplus W)$ の中でホモトピックであれば同値であるとみなす.

物理的には, ハミルトニアンのホモトピー変形は, それが記述する量子系の断熱変形に相当する. 格子上の量子系を記述する際に, 格子に配置された原子あるいは分子の量子系の近似として, ある低エネルギー状態を記述する V を選んだ. その際に, より高エネルギー状態を含むように別の近似 $V \oplus W$ を選ぶこともできる. 近似を取り替えると, バンド絶縁体の記述は変化しうる. しかし, 二つのバンド絶縁体の本質的な差は, 近似の取り替えに依存しないはずである. そのため, V に作用するハミルトニアン $\hat{H}$ と $\hat{H}'$ の比較に際し, W に作用するハミルトニアン $\hat{H}''$ を同時に直和する操作を許している.

3. バンド絶縁体の分類と K 理論

3.1. K 理論

コンパクト Hausdorff 位相空間 X の K 理論 [4] は, X 上のベクトル束を大雑把に分類する Abel 群であった. 標準的な定義では, X 上の (有限ランク) 複素ベクトル束の同型類のなす可換モノイド $\mathrm{Vect}(X)$ に対して, Grothendieck 構成を適用して得られる Abel 群として, X の (複素)K 理論 (K 群) を定める.

$$K(X) = K(\mathrm{Vect}(X)) = \mathrm{Vect}(X) \times \mathrm{Vect}(X)/\sim.$$

ここで, K 群の元は, ベクトル束 (の同型類) の対 (E, F) によって代表され, 同値関係 $\sim$ は, 勝手なベクトル束 G に対して $(E, F) \sim (E \oplus G, F \oplus G)$ というものである.

K 理論の定式化は他にも色々と知られているが, トポロジカル絶縁体の分類においてキーとなるものは, Karoubi によるもの (の一つ) である [22]: Hermite ベクトル束

$\pi : E \to X$ の自己共役対合 η を, E の次数付け (gradation) と呼ぶ. すなわち, ベクトル束の写像 $\eta : E \to E$ であって, X の恒等写像の持ち上げになっており, Hermite 内積について自己共役 (Hermite)$\eta^* = \eta$ かつ対合的 $\eta^2 = 1$ となるものである. 次数付けに対しては自然に同型の概念を導入できる. E 上の二つの次数付けは, それが次数付けの連続族でつなげるとき, ホモトピックであるという. X 上の Hermite ベクトル束 E とその二つの次数付けのなす三つ組 (E, η_0, η_1) を考える. これらの三つ組の同型類は直和操作によって可換モノイド $\mathcal{M}(X)$ を与える. この中には, η_0 と η_1 がホモトピックであるような三つ組 (E, η_0, η_1) の同型類がなす部分モノイド $\mathcal{Z}(X) \subset \mathcal{M}(X)$ がある. この部分モノイドによって商をとって得られるモノイド $\mathcal{M}(X)/\mathcal{Z}(X)$ は, Abel 群の構造を持ち, さらに K 理論と同形になる:

$$K(X) \cong \mathcal{M}(X)/\mathcal{Z}(X).$$

この同型のポイントは, Hermite ベクトル束の次数付け $\eta : E \to E$ と, E の部分ベクトル束 $\mathrm{Ker}(1+\eta) = \bigcup_{x \in X} \mathrm{Ker}(1+\eta_x)$ とが一対一に対応することである (自己共役対合 η と直交射影 $(1+\eta)/2$ が一対一に対応している). K 理論 $K(X)$ の元 $[E, F]$ がベクトル束の差 "$E - F$" に対応するように, 三つ組が代表する元 $[E, \eta_0, \eta_1] \in \mathcal{M}(X)/\mathcal{Z}(X)$ も次数付けの差 "$\eta_0 - \eta_1$" に対応している.

3.2. バンド絶縁体の分類への応用

d 次元バンド絶縁体のハミルトニアン $\hat{H} : T^d \to \mathrm{Herm}^*(V)$ からは, トーラス上の直積束 $T^d \times V$ の次数付け $\eta = \mathrm{sgn}(\hat{H}) = \hat{H}/|\hat{H}|$ が定義できる. この次数付け自体もハミルトニアンとみなせるが (平坦化されたハミルトニアン), ハミルトニアンとして $\hat{H}$ にホモトピックである. Karoubi の定式化を思い出すと, 二つの d 次元バンド絶縁体のハミルトニアン $\hat{H}, \hat{H}' : T^d \to \mathrm{Herm}^*(V)$ から, T^d の K 理論の元が得られる:

$$[T^d \times V, \hat{H}/|\hat{H}|, \hat{H}'/|\hat{H}'|] \in K(T^d).$$

この元は, 仮定 2.2 で述べた意味で $\hat{H}$ と $\hat{H}'$ が同値であれば, $K(T^d)$ の自明な元になる. もし, リファレンスとなるような, "自明な" バンド絶縁体 $\hat{H}_{\mathrm{ref}}$ を選んでくれれば, このバンド絶縁体との "差" として, バンド絶縁体 $\hat{H}$ は $K(T^d)$ の元を定める. すると $K(T^d)$ は, $\hat{H}_{\mathrm{ref}}$ との比較において, バンド絶縁体を分類する群になっている.

ハミルトニアン $\hat{H} : T^d \to \mathrm{Herm}^*(V)$ に対応するベクトル束は, フェルミレベル ($\lambda_F = 0$) 未満の固有値を持つ $\hat{H}(k)$ の固有状態 (占有状態) が張るベクトル束

$$E = \bigcup_{k \in T^d} \bigoplus_{\lambda < 0} \mathrm{Ker}(\hat{H}(k) - \lambda) \subset T^d \times V$$

に同形である. このベクトル束は Bloch 束と呼ばれる. 同型 $K(X) \cong \mathcal{M}(X)/\mathcal{Z}(X)$ のポイントを思い出すと, ハミルトニアン $\hat{H}$ と $\hat{H}'$ の差に相当する $\mathcal{M}(X)/\mathcal{Z}(X)$ の元は, それらの Bloch 束 E と E' の差に相当する元 $[E, E'] \in K(X)$ に対応する.

例として 2 次元 ($d = 2$) の場合を考えよう. このとき, $K(T^2) \cong \mathbb{Z}^2$ である. この同型は, K 理論の元をベクトル束の対 (E, F) によって代表するとき, それらのランク $\mathrm{rank}E, \mathrm{rank}F \in \mathbb{Z}$ と第一 Chern 数 $c_1(E), c_1(F) \in H^2(T^2; \mathbb{Z}) \cong \mathbb{Z}$ の差によって実現される. 従って, 二つのバンド絶縁体は, それらのハミルトニアンが定める Bloch 束のラン

クと第一 Chern 数の差で完全に区別できることがわかる．物理的には, Bloch 束のランクは占有状態の個数である．2 次元トポロジカル絶縁体の例である整数量子 Hall 系においては, Hall 伝導率が Bloch 束の第一 Chern 類に比例することが知られている (TKNN 公式)．これが整数量子 Hall 系のバルク不変量である．この不変量の非自明性は, 適当な設定においては, エッジに電流が流れる状態の存在に対応する．従って, バンド絶縁体の中でトポロジカル絶縁体になるものは第一 Chern 数で分類される, といえる．

4. 対称性がある場合

4.1. 同変ねじれ K 理論

狭義のトポロジカル絶縁体 (量子スピン Hall 効果) では, 量子系の対称性が重要な役割を果たす．対称性を持つ量子系の分類には, K 理論の自然な一般化としての同変 K 理論が用いられる．さらに, 状況によっては, 局所係数つきの K 理論である, ねじれ K 理論 ([10, 32]) が用いられる．ここでは, トポロジカル絶縁体の分類に必要な, Freed-Moore 型のねじれを持つ K 理論 [13] を導入する．

定義 4.1. 有限群 G が作用する位相空間 X が与えられたとする．また, 準同型 $\phi, c : G \to \mathbb{Z}_2 = \{\pm 1\}$ および連続写像 $\tau : G \times G \times X \to U(1)$ であって, 次を満たすものが与えられたとする．

$$\tau(g_2, g_3; x)^{\phi(g)} \tau(g_1 g_2, g_3; x)^{-1} \tau(g_1, g_2 g_3; x) \tau(g_1, g_2; g_3 x)^{-1} = 1.$$

(a) X 上の (ϕ, τ, c) ねじれ G 同変ベクトル束とは, Hermite ベクトル束 $\pi : E \to X$ であって, 各 $g \in G$ の X への作用の持ち上げとなるような Riemann 計量付き実ベクトル束の写像 $\rho(g) : E \to E$ で, 次を満たすものが付与されたものである．

$$\sqrt{-1}\rho(g) = \phi(g)\rho(g)\sqrt{-1}, \qquad \rho(g)\rho(h) = \tau(g, h)\rho(gh).$$

また, このねじれベクトル束が, Clifford 代数 $Cl_{p,q}$ の作用を持つとは, X の恒等写像の持ち上げとなるようなユニタリー写像 $\gamma_i : E \to E$, $(i = 1, \dots, p+q)$ で, 次を満たすものが付与されていることをいう．

$$\gamma_i \rho(g) = c(g)\rho(g)\gamma_i, \qquad \gamma_i\gamma_j + \gamma_j\gamma_i = \begin{cases} 2, & (i = j = 1, \dots, p) \\ -2, & (i = j = p+1, \dots, p+q) \\ 0. & (i \neq j) \end{cases}$$

(b) $Cl_{p,q}$ 作用つきのねじれベクトル束 E に対し, その次数付けとは, Hermite ベクトル束としての次数付け $\eta : E \to E$ であって, 次を満たすものである．

$$\eta\rho(g) = c(g)\rho(g)\eta, \qquad \gamma_i\eta = -\eta\gamma_i.$$

上の定義において, ϕ は $\rho(g)$ が複素反線形かどうかを指定し, c は η が定める E の次数付けについての $\rho(g)$ の偶奇を指定している．また, τ は, ϕ によってねじられた, X 上の $U(1)$ 値連続関数のなす群を G 加群として係数に持つ群 2 コサイクルである．

位相空間 X の K 理論 $K(X)$ の Karoubi による定式化の一般化として, $Cl_{p,q}$ 作用つき (ϕ, τ, c) ねじれベクトル束 E とその二つの次数付け η_0, η_1 からなる三つ組み (E, η_0, η_1) の同型類のなす可換モノイドを ${}^{\phi}\mathcal{M}_G^{(\tau,c)+(p,q)}(X)$ とする．このモノイドの中には, 次数

付けη_0とη_1が上記の関係式を満たしつつホモトピックであるような三つ組みがなす部分モノイド${}^{\phi}\mathcal{Z}_G^{(\tau,c)+(p,q)}(X)$がある. それらの商モノイドを${}^{\phi}K_G^{(\tau,c)+(p,q)}(X)$と書くと, これもやはりアーベル群の構造を持ち, さらに次の自然な同型がある:

$$ {}^{\phi}K_G^{(\tau,c)+(p,q)}(X) \cong {}^{\phi}K_G^{(\tau,c)+(p+1,q+1)}(X). $$

これを踏まえて, Xの(ϕ,τ,c)ねじれG同変K理論を次で定める.

$$ {}^{\phi}K_G^{(\tau,c)+n}(X) := {}^{\phi}K_G^{(\tau,c)+(p,p+n)}(X). $$

ここで次数$n\in\mathbb{Z}$に対して, pは$p+n\geq 0$となる任意の非負整数である. このK理論は, G-CW複体上では(ねじれ)一般同変コホモロジー理論をなし, $n\in\mathbb{Z}$について周期8を持つ. 群Gやねじれのデータϕ, τ, cを特別なものに選ぶことで, これまでに知られている位相的なK理論のほとんどが得られる.

これらの性質についての詳細は[18]を参照されたい. また, ここでは位相的な定義をしたが, C^*代数を用いた定義については, 例えば, [25, 40]を参照されたい.

4.2. トポロジカル絶縁体の対称性

トポロジカル絶縁体の分類[24, 33, 35]においては, 格子上の量子系の内部対称性として, 次のものを考える: 以下, 準運動量空間上の, Hermiteベクトル空間Vに作用するハミルトニアンを$\hat{H}:T^d\to\mathrm{Herm}(V)$とする.

時間反転対称性	$T:V\to V$	反ユニタリー	$T^2=\pm1$	$T\hat{H}(k)=\hat{H}(-k)T$
粒子空孔対称性	$C:V\to V$	反ユニタリー	$C^2=\pm1$	$C\hat{H}(k)=-\hat{H}(-k)C$
カイラル対称性	$\Gamma:V\to V$	ユニタリー	$\Gamma^2=1$	$\Gamma\hat{H}(k)=-\hat{H}(k)\Gamma$

このような対称性の組み合わせは10種類に分類される(Altland-Zirnbauerクラス). 例えば, 上記の対称性がない場合は, クラスAである. また, 時間反転対称性Tのみを持つ場合は, $T^2=1$ならばクラスAIで, $T^2=-1$ならばクラスAIIである.

クラスAIの時間反転対称性Tは, 直積束$T^d\times V$に, Atiyah[5]の意味の“実”構造を与えている. これはねじれベクトル束の言葉で言えば, $G=\mathbb{Z}_2$が作用する$X=T^d$上で, ϕとして$\mathbb{Z}_2$の恒等写像$\mathrm{id}_{\mathbb{Z}_2}$選び, τが自明なときの, ねじれベクトル束である. クラスAIの対称性を持つハミルトニアン$\hat{H}$から, このねじれベクトル束の次数付け$\eta=\hat{H}/|\hat{H}|$が得られるが, この次数付けについて$G=\mathbb{Z}_2$の作用は偶なので, 準同型cも自明である. 従って, 対称性がないときの前節の議論と同様にして, クラスAIの対称性をもつバンド絶縁体は, K理論${}^{\mathrm{id}_{\mathbb{Z}_2}}K_{\mathbb{Z}_2}^0(T^d)$によって(あるリファレンスに対して)分類されることがわかる. このK理論は, Bloch束$E\subset T^d\times V$が“実”構造を引き継ぐことに注意すると, AtiyahのKR理論$KR^0(T^d)$に他ならないことがわかる. まとめると, クラスAIのd次元バンド絶縁体は$KR^0(T^d)$で分類される.

クラスAIIの場合には, 時間反転対称性は直積束$T^d\times V$の“四元数”構造を与えている. ねじれベクトル束の文脈では, クラスAIの場合に自明だったτが, 今度は非自明になる. すると上と同様な議論で, クラスAIIの対称性を持つバンド絶縁体を分類するK理論は${}^{\mathrm{id}_{\mathbb{Z}_2}}K_{\mathbb{Z}_2}^{\tau+0}(T^d)$となり, さらにこの$K$理論は, KQ理論(Dupont[11]のシンプレクティックK理論)に一致する. 一般に, KQ理論とKR理論は次数4のずれを除いて同型である: $KQ^n(X)\cong KR^{n\pm4}(X)$. 例として, $d=2$の場合を考えると, このK理論は

$$ KQ^0(T^2)\cong KR^{\pm4}(T^2)\cong\mathbb{Z}\oplus\mathbb{Z}_2 $$

となる．クラス AII の対称性を持つバンド絶縁体のうち, トポロジカル絶縁体は直和成分 $\mathbb{Z}_2$ で分類され, 量子スピン Hall 系によって実現されている．この $\mathbb{Z}_2$ 成分 (Kane-Mele 指数) については, 多くの研究があるが, ここでは一切触れないことにする．

他の Altland-Zirnbauer クラスのバンド絶縁体を分類するねじれ同変 K 理論も, KR 理論または通常の複素 K 理論と同型になる．結果だけをまとめると, 次のようになる:

AZ クラス	A	AIII	AI	BDI	D	DIII	AII	CII	C	CI
時間反転	0	0	$+1$	$+1$	0	-1	-1	-1	0	$+1$
粒子空孔	0	0	0	$+1$	$+1$	$+1$	0	-1	-1	-1
カイラル	0	$+1$	0	$+1$	0	$+1$	0	$+1$	0	$+1$
K 理論	K^0	K^{-1}	KR^0	KR^{-1}	KR^{-2}	KR^{-3}	KR^{-4}	KR^{-5}	KR^{-6}	KR^{-7}

トーラス T^d の K 理論または KR 理論は, 部分トーラスの寄与に直和分解する．そのうちの最高次元の寄与は, $KR^n(T^d)$ ならば $KR^{n-d}(\mathrm{pt})$, $K^n(T^d)$ ならば $K^{n-d}(\mathrm{pt})$ であり, “強い” トポロジカル絶縁体を分類する．これらの分類が次元について周期を持つことは, 今の文脈では, Bott 周期性の帰結である [24].

4.3. トポロジカル結晶絶縁体

以上で考えたのは結晶の内部対称性だけであったが, 一般には結晶構造に由来する外部対称性 (結晶群・空間群) がある．そのような対称性を持つトポロジカル絶縁体 (トポロジカル結晶絶縁体) の分類も, バンド絶縁体の分類を通して行えることが期待される．この動機のもと, トーラス T^d のねじれ同変 K 理論の具体的な計算が [36, 37, 38] でなされており, これらの結果の一部をここでは紹介する．

一般に, d 次元結晶群 (空間群) とは, 標準的な d 次元 Euclid 空間 $\mathbb{R}^d$ の等長変換のなす群 $\mathbb{R}^d \rtimes O(d)$ の部分群 S であって, 平行移動のなす格子 (自由 Abel 群) $\Pi = \Pi_S$ のランクが d であり, その商をとって得られる直交群 $O(d)$ の部分群 (点群) $P = P_S$ が有限群となるようなものである:

$$
\begin{array}{ccccccccc}
1 & \longrightarrow & \mathbb{R}^d & \longrightarrow & \mathbb{R}^d \rtimes O(d) & \longrightarrow & O(d) & \longrightarrow & 1 \\
 & & \cup & & \cup & & \cup & & \\
1 & \longrightarrow & \Pi & \longrightarrow & S & \longrightarrow & P & \longrightarrow & 1.
\end{array}
$$

ここまでのバンド絶縁体の分類の一般化により, 格子 $\Pi \subset \mathbb{R}^d$ 上のバンド絶縁体であって空間群対称性 S について不変なものは, Π の Pontryagin 双対 $\hat{\Pi} = \mathrm{Hom}(\Pi, \mathbb{R}/\mathbb{Z}) \cong T^d$ の, あるねじれ $\tau = \tau_S$ を持つ, P 同変 K 理論 $K_P^{\tau+0}(\hat{\Pi})$ によって分類される．これは内部対称性がないクラス A のバンド絶縁体の分類であるが, カイラル対称性を持つクラス AIII のバンド絶縁体は, $K_P^{\tau+1}(\hat{\Pi})$ によって分類される．一般に, 空間群 S は Π と P の半直積 $\Pi \rtimes P$ に同型ではない．もし S が半直積に同型である場合は, S は共形 (symmorphic) と呼ばれ, τ は自明である．一方で, S が非共形 (nonsymmorphic) な場合には, その非共形性から非自明な τ が定まる．

最も単純な非共形空間群は, 通常 pg とラベルされる 2 次元空間群 S_{pg} である．この 2 次元非共形空間群は, Klein の壺の基本群と同型である．格子は通常の正方格子 $\Pi_{\mathsf{pg}} = \mathbb{Z}^2$ にとることができ, 点群 $P_{\mathsf{pg}} = \mathbb{Z}_2$ は (たとえば x 軸についての) 鏡映によって生成され

る. τ ねじれ同変 K 理論は, 次のとおりである [37, 38]:

$$K_{P_{\mathsf{pg}}}^{\tau_{\mathsf{pg}}+n}(\hat{\Pi}_{\mathsf{pg}}) = K_{\mathbb{Z}_2}^{\tau_{\mathsf{pg}}+n}(T^2) \cong \begin{cases} \mathbb{Z}, & (n = 0 \mod 2) \\ \mathbb{Z} \oplus \mathbb{Z}_2. & (n = 1 \mod 2) \end{cases}$$

この結果は, 時間反転対称性や粒子空孔対称性がない場合でも, ねじれ群 $\mathbb{Z}_2$ によって本質的に分類されるトポロジカル結晶絶縁体が存在することを示唆する. ねじれ群によって分類されるトポロジカル絶縁体は, 量子スピン Hall 系のように, 時間反転対称性または粒子空孔対称性が必要であると考えられていたようだが, そうではないことが K 理論の計算によってわかったわけである [38]. なお, 同様の結果が, 同時期に K 理論を使わずに得られている [12]. 2 次元空間群 pg によって守られたものではないが, 非共形空間群によって守られた 3 次元トポロジカル結晶絶縁体は, [41] によって具体的な実現方法が提案され, [26] によって実験で確認されたようである.

17 種類の 2 次元空間群について, $K_P^{\tau+n}(\hat{\Pi})$ は具体的に計算できる [37]. その際, K 群にねじれ群が含まれるのは, 空間群が非共形な場合に限る. (しかし, 非共形だからと言って, 必ずしもねじれ群が含まれるわけではない.) 230 種類の 3 次元空間群については, 3 次元トーラス $\hat{\Pi}$ の P-CW 分割にもとづいて, $K_P^{\tau+n}(\hat{\Pi})$ に収束する Atiyah-Hirzebruch(型) スペクトル系列の E_∞ 項が計算された [36]. (その E_2 項は "ねじれ" を持つ Bredon 同変コホモロジー [8] である.) この結果において, 共形であってもねじれ群を含む K 理論があることが確認された.

時間反転対称性や粒子空孔対称性がある場合には, トポロジカル結晶絶縁体を分類する K 理論の包括的な計算はまだ行われていないようである. そのためには, 例えば, Atiyah-Hirzebruch スペクトル系列のより詳しい数学的結果が必要であろう. 普通の複素 K 理論の Atiyah-Hirzebruch スペクトル系列の微分 $d_3 : E_3^{p,q} \to E_3^{p+3,q-2}$ は, 古典的なコホモロジー作用素で記述される. しかし, 同変ねじれ K 理論に対する同様な記述は, 知られていないようである [6]. スペクトル系列の拡大問題も一般には非自明である. 位相的 T 双対 [19] を使うことにより解ける場合もあるが, この手法が使えない場合もある.

5. 関連する話題

トポロジカル絶縁体の特徴である, "バルクが絶縁体で, エッジが導電体である" という性質は, 他の系においても存在する一般的なものであり, そのトポロジカル相の分類は現在でも活発に研究されている. 例えば, トポロジカル超伝導体の分類は, トポロジカル絶縁体の分類とほぼ並行して調べられる. 量子力学における波動関数を電磁波におきかえれば, トポロジカル絶縁体の分類の手法が, フォトニック結晶の分類に応用できる (例えば [9]). 古典力学的な系で, 複数の振動子による "トポロジカル絶縁体" の実現が具体的にあり (例えば [3, 21]), 理論的な研究もなされている.

トポロジカル絶縁体を, 格子上の平行移動不変な量子系 $\hat{H} : T^d \to \mathrm{Herm}(V)$ であって, エネルギーギャップを持つもの ($\det \hat{H}(k) \neq 0$) として記述した. 2015 年に実験的に確認された Weyl 半金属は, $\hat{H}(k) = 0$ となることがある 3 次元量子系である. このように, トポロジカル絶縁体以外の系を記述するような, より一般のハミルトニアンの分類にも様々な研究がある. Weyl 半金属のような $\hat{H}(k) = 0$ となる場合 (例えば [27]) の他, 自己共役とは限らない "non-Hermitian" なハミルトニアン $\hat{H} : T^d \to \mathrm{End}(V)$ の分類も

調べられている (例えば [23]). また, 時間駆動する系 (Floquet 系) においては, ハミルトニアンではなく, 時間発展演算子 $U : T^d \to U(V)$ の分類を考える (例えば [28]).

トポロジカル絶縁体は, バルクが絶縁体でエッジが導電体であるものと述べた. より一般に, コーナー (角) を考慮に入れたトポロジカル絶縁体は, “higher order topological insulator” と呼ばれ, 最近は盛んに研究されている (数学的な研究には [20] がある).

トポロジカル絶縁体を超えた, より一般の相互作用系のトポロジカル相の分類も, 最近研究されているテーマである. その際には, コボルディズム理論などの一般コホモロジー理論が登場する (より詳しくは解説 [39] を参照されたい).

参考文献

[1] 安藤 陽一, “物性物理学と新規物質 ～超伝導体とトポロジカル絶縁体を例として～”. 数理科学 2013 年 11 月号 No.605

[2] 安藤 陽一, “トポロジカル絶縁体入門”. KS 物理専門書, 講談社. (2014)

[3] D. Apigo, K. Qian, C. Prodan and E. Prodan, *Topological edge modes by smart patterning.* Physical Review Materials 2, 124203 (2018)

[4] M. F. Atiyah, *K-theory.* Lecture notes by D. W. Anderson W. A. Benjamin, Inc., New York-Amsterdam 1967

[5] M. F. Atiyah, *K-theory and reality.* Quart. J. Math. Oxford Ser. (2) 17 1966 367–386.

[6] N. Bárcenas, J. Espinoza, B. Uribe and M. Velásquez, *Segal’s spectral sequence in twisted equivariant K-theory for proper and discrete actions.* Proc. Edinb. Math. Soc. (2) 61 (2018), no. 1, 121–150. arXiv:1307.1003.

[7] J. Bellissard, A. van Elst, H. Schulz-Baldes, *The noncommutative geometry of the quantum Hall effect.* Topology and physics. J. Math. Phys. 35 (1994), no. 10, 5373–5451.

[8] G. E. Bredon, *Equivariant cohomology theories.* Lecture Notes in Mathematics, No. 34 Springer-Verlag, Berlin-New York 1967

[9] G. De Nittis and M. Lein, *On the role of symmetries in the theory of photonic crystals.* Ann. Physics 350 (2014), 568–587.

[10] P. Donovan and M. Karoubi, *Graded Brauer groups and K-theory with local coefficients.* Inst. Hautes Études Sci. Publ. Math. No. 38 1970 5–25.

[11] J. L. Dupont, *Symplectic bundles and KR-theory.* Math. Scand. 24 1969 27–30.

[12] C. Fang and L. Fu, *New classes of three-dimensional topological crystalline insulators: Nonsymmorphic and magnetic.* Phys. Rev. B 91, 161105 (2015).

[13] D. S. Freed and G. W. Moore, *Twisted equivariant matter.* Ann. Henri Poincaré 14 (2013), no. 8, 1927–2023.

[14] L. Fu, *Topological crystalline insulators.* Phys. Rev. Lett. 106, 106802 (2011).

[15] 古田 幹雄, “トポロジカル相とバルク・エッジ対応の数学的側面へのイントロダクション”. 日本数学会 2017 年度年会, アブストラクト.

[16] 古崎 昭, “トポロジカル絶縁体・超伝導体の分類学”. 表面科学 Vol. 32, No. 4, pp. 209–215, 2011

[17] 古崎 昭, “トポロジカル物質の理論的発見”. 数理科学 2013 年 11 月号 No.605

[18] K. Gomi, *Freed-Moore K-theory.* arXiv:1705.09134.

[19] K. Gomi and G. C. Thiang, *Crystallographic T-duality.* J. Geom. Phys. (to appear) arXiv:1806.11385.

[20] S. Hayashi, *Topological invariants and corner states for Hamiltonians on a three-dimensional lattice.* Comm. Math. Phys. 364 (2018), no. 1, 343–356.

[21] S. Huber, *Topological mechanics.* Nature Phys. 12, 621 (2016).

[22] M. Karoubi, *K-theory. An introduction.* Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften, Band 226. Springer-Verlag, Berlin-New York, 1978.

[23] K. Kawabata, K. Shiozaki, M. Ueda and M. Sato, *Symmetry and topology in non-Hermitian physics.* arXiv:1812.09133.

[24] A. Kitaev, *Periodic table for topological insulators and superconductors.* AIP Conf. Proc. 1134, 22–30 (2009).

[25] Y. Kubota, *Notes on twisted equivariant K-theory for C^*-algebras.* Internat. J. Math. 27 (2016), no. 6, 1650058, 28 pp.

[26] J. Ma, et. al., *Experimental evidence of hourglass fermion in the candidate nonsymmorphic topological insulator KHgSb.* Science Advances, Vol. 3, no. 5, e1602415 (2017).

[27] V. Mathai and G. C. Thiang, *Differential topology of semimetals.* Comm. Math. Phys. 355 (2017), no. 2, 561–602.

[28] F. Nathan and M. S. Rudner, *Topological singularities and the general classification of Floquet-Bloch systems.* New J. Phys. 17 125014 (2015)

[29] 野村 健太郎, "トポロジカル物質と指数定理". 数理科学　2015年6月号　No.624

[30] 野村 健太郎, "トポロジカル絶縁体・超伝導体". 現代理論物理学シリーズ6 丸善出版 (2016)

[31] E. Prodan and H. Schulz-Baldes, *Bulk and boundary invariants for complex topological insulators. From K-theory to physics.* Mathematical Physics Studies. Springer, 2016.

[32] J. Rosenberg, *Continuous-trace algebras from the bundle theoretic point of view.* J. Austral. Math. Soc. Ser. A 47 (1989), no. 3, 368–381.

[33] S. Ryu, A. P. Schnyder, A. Furusaki and A. W. W. Ludwig, *Topological insulators and superconductors: tenfold way and dimensional hierarchy.* New Journal of Physics 12 (6), 065010 (2010).

[34] 齊藤 英治, 村上 修一, "スピン流とトポロジカル絶縁体 ―量子物性とスピントロニクスの発展―" 基本法則から読み解く物理学最前線 1, 共立出版 (2014)

[35] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki and A. W. W. Ludwig, *Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions.* Phys. Rev. B 78, 195125 (2008).

[36] K. Shiozaki, M. Sato and K. Gomi, *Atiyah-Hirzebruch Spectral Sequence in Band Topology: General Formalism and Topological Invariants for 230 Space Groups.* arXiv:1802.06694.

[37] K. Shiozaki, M. Sato and K. Gomi, *Topological Crystalline Materials –General Formulation and Wallpaper Group Classification–.* Phys. Rev. B 95, 235425 (2017).

[38] K. Shiozaki, M. Sato and K. Gomi, *Z_2-topology in nonsymmorphic crystalline insulators: Mobius twist in surface states.* Phys. Rev. B 91, 155120 (2015).

[39] 立川 裕二, "場の量子論の, 場の量子論による, 場の量子論のための数学". 日本数学会2018年度秋季総合分科会, アブストラクト.

[40] G. C. Thiang, *On the K-theoretic classification of topological phases of matter.* Ann. Henri Poincaré 17 (2016), no. 4, 757–794.

[41] Z. Wang, A. Alexandradinata, R. J. Cava and A. Bernevig, *Hourglass fermions.* Nature 532, 189–194 (2016).

[42] E. Witten, *Three lectures on topological phases of matter.* La Rivista del Nuovo Cimento, 39 (2016) 313–370. arXiv:1510.07698.