

# トポロジカル絶縁体の導入

水野航希

2024年5月14日

この章では、本論文全体に係る導入として、トポロジカル絶縁体、トポロジカル結晶絶縁体、マグノン誘起超伝導の紹介を行う。まず、本論文で通して説明なく用いる用語の定義を示し、その後、量子状態に対するホロノミーによって Berry 位相、Berry 接続、Berry 曲率を定義する。これらをバンド絶縁体の基底状態に適用してトポロジカル絶縁体を定義し、ハミルトニアンホモトピーを考えることでバルク-境界対応を理解する。その後、系の結晶対称性に着目してトポロジカル結晶絶縁体の解説を行う。

## 1 用語の定義

ここでは、以下の議論で特に明示的に定義しておく必要があると思われる用語の定義を示す。以下、数式中など BZ は Brillouin ゾーンの略とする。

### Definition 1: バンド絶縁体

$\exists E_g > 0$ 、任意の  $E_F \in \mathbb{R}$  に対して  $|E - E_F| \leq E_g$  を満たす  $E$  と等しいエネルギー固有値  $E$  を持たない基底状態。

### Definition 2: 可逆なトポロジカル相 [1, 2]

任意の開多様体上で励起ギャップをもち、基底状態がユニークに定まる相

以下、単にトポロジカル相と呼ぶ際にも同様の定義であるものとする。

次に空間群に関してシンモルフィックな対称性とノンシンモルフィックな対称性を定義する。これらの空間群に関する詳細は引用 [3, 4] などの標準的な教科書に示される通りである。

### Definition 3: 空間群

$d$  次元ユークリッド空間  $\mathbb{E}^d$  の合同変換<sup>a</sup>全体からなる群の部分群なので、連続的な並進操作を含まず、離散的な並進操作を含むもの。

<sup>a</sup> 合同変換：ユークリッド空間中の任意の 2 点間の距離を変化させない変換

空間群のうち、2次元ユークリッド空間に対して定義されるものを wallpaper 群と呼ぶ。

空間群  $\mathcal{G}$  の元  $g \in \mathcal{G}$  は  $\vec{x} \in \mathbb{E}^d$  を

$$g(\vec{x}) := p_g \vec{x} + \vec{t}_g \in \mathbb{E}^d \quad (1)$$

へと移す合同変換である。ここで、 $p_g$  は  $d$  次元直交群  $O(d)$  の元であり、 $\vec{t}_g \in \mathbb{E}^d$  は  $g$  の並進操作を表す。空間群の合同変換はこれらによって特徴づけられており、 $g = (p_g, \vec{t}_g)$  と表す。

**Definition 4: 並進部分群**

空間群  $\mathcal{G}$  の部分群

$$T_{\mathcal{G}} = \{g = (\mathbb{1}, \vec{t}_g)\} \subset \mathcal{G} \quad (2)$$

を並進部分群と呼ぶ。

**Definition 5: 点群**

空間群  $\mathcal{G}$  の並進部分群による商空間として

$$P_{\mathcal{G}} := \mathcal{G}/T_{\mathcal{G}} \quad (3)$$

と定義される。これは、並進部分群の単位元  $\vec{t}_g = \vec{0}$  のみを含むもの。すなわち、点群  $P_{\mathcal{G}}$  は  $g = (p_g, \vec{0})$  からなる群と等価である。

ここで、点群  $P_{\mathcal{G}}$  は一般に空間群  $\mathcal{G}$  の部分群でないことに注意する。この性質によりシンモルフィックな空間群を定義することができ、これの否定としてノンシンモルフィックな空間群を定義する。

**Definition 6: シンモルフィックな空間群**

空間群のうち、 $P_{\mathcal{G}} = \mathcal{G}/T_{\mathcal{G}}$  で定義される点群  $P_{\mathcal{G}}$  が元の空間群  $\mathcal{G}$  の部分群であるもの。

ノンシンモルフィックな空間群の特徴を見るため、まず、点群に含まれる操作を示す。

**Definition 7: 反転、回転、鏡映、回反**

反転  $I$  は  $p_I \vec{x} = -\vec{x}$  とする操作であり、 $p_I = -\mathbb{1}$  と定義される。このとき、反転中心  $\vec{x} = \vec{0}$  は反転操作によって移り変わることはない固定点である。

$\vec{n}$  に並行な軸回りの  $q$  回回転  $R_{\vec{n},q}$  は原点を含む平面のうち  $\vec{n}$  に垂直な平面における、原点を基準とした  $\vec{x}$  の偏角  $\theta_{\vec{x},\vec{n}}$  を  $p_{R_{\vec{n},q}} \theta_{\vec{x},\vec{n}} = \theta_{\vec{x},\vec{n}} + 2\pi/q$  とする操作である。よって、回転軸上の任意の点が固定点である。

鏡映  $M_{\vec{n}}$  は原点を含む平面のうち、 $\vec{n}$  に垂直な面に対して対称な位置に移す操作であり、 $p_{M_{\vec{n}}} = -p_{R_{\vec{n},2}}$  と定義できる。このとき、 $\vec{n}$  に垂直な面上の点が固定点となる。

回反操作とは、回転に引き続いて反転操作を行う対称操作であり、鏡映はこの一部である。

したがって、シンモルフィックはこれらの対称操作の組み合わせからなる点群  $P_{\mathcal{G}}$  と並進部分群  $T_{\mathcal{G}}$  の半直積<sup>\*1</sup>  $T_{\mathcal{G}} \times P_{\mathcal{G}}$  と定義できる。

すなわち、以上の点群操作に含まれない対称操作が含まれる空間群のことをノンシンモルフィックな空間群と呼ぶのである。より具体的には以下の特徴的な2つの対象操作が含まれている。

**Definition 8: グライド**

鏡映  $M_{\vec{n}}$  に続いて並進操作  $(\mathbb{1}, \vec{t})$  を続けて行う対称操作のうち、 $\vec{t}$  が鏡映面に並行な成分を持ち、その成分が並進部分群  $T_{\mathcal{G}}$  の要素で表せないもの。ユークリッド空間への作用は  $p_{g_{\vec{n}}} = (p_{M_{\vec{n}}} + \vec{t})$  と表せる。

<sup>\*1</sup> 群  $N, H$  のは直積  $G = N \times H$  は、直積集合  $G = \{(n, h) | n \in N, h \in H\}$  で積が  $(n, h)(n', h') = (nh(n'), hh')$  で定義される群である。ここで、 $h(n) \in N$  は  $h \in H$  に対して定まる  $N$  の準同型写像であり、任意の元  $h \in H, n \in N$  に対して  $h(n) = n$  が成立する場合は直積に対応する。

### Definition 9: スクリュー

回転  $R_{\vec{n},q}$  に続いて並進操作  $(\mathbb{1}, \vec{t})$  を続けて行う対称操作のうち、 $\vec{t}$  が回転軸に並行な成分を持ち、その成分が並進部分群  $T_G$  の要素で表せないもの。ユークリッド空間への作用は  $p_{s_{\vec{n},q}} = (p_{R_{\vec{n},q}} + \vec{t})$  と表せる。

これら2つの対称操作に共通することは固定点を持たないことであり、したがって、ノンシンモルフィックな空間群はその要素に固定点を持たない対称操作を含むものであると定義することもできる。そのため、グライドとスクリューを総称してノンシンモルフィックな対称操作と呼ぶこともある。ノンシンモルフィックな対称操作に含まれる並進操作に関して重要な2つの性質を以下に示す。

**Theorem 1.** グライドに含まれる並進操作  $\vec{t}$  の鏡映面に並行な成分は、その方向の並進操作で並進部分群に含まれるもの  $\vec{a} \in T_G$  の  $1/2$  の大きさを持つ\*2。

*Proof.*  $\vec{n}$  に垂直な鏡映面を持つグライドのユークリッド空間内の点への作用  $p_{g_{\vec{n}}}$  は  $p_{g_{\vec{n}}} = p_{M_{\vec{n}}} + \vec{t}$  と表せる。このとき、グライドを2回作用させることを考えると、

$$p_{g_{\vec{n}}} p_{g_{\vec{n}}} \vec{x} = \vec{x} + p_{M_{\vec{n}}} \vec{t} + \vec{t} \quad (4)$$

が成立する。ここで、 $\vec{t} = \vec{t}_{\parallel} + \vec{t}_{\perp}$  と定義して、 $\vec{t}_{\parallel/\perp}$  をそれぞれ鏡映面に並行/垂直な成分とすると、

$$p_{M_{\vec{n}}} \vec{t} + \vec{t} = 2\vec{t}_{\parallel} \quad (5)$$

が成立する。ここで、群の定義により、グライドの積  $g_{\vec{n}} g_{\vec{n}}$  もまた空間群の元であるため、 $2\vec{t}_{\parallel}$  は並進部分群の元である。したがって、 $\vec{t}_{\parallel} \parallel \vec{a} \in T_G$  なる  $\vec{a}$  を用いて、

$$\vec{t}_{\parallel} = \vec{a}/2 \quad (6)$$

が成立する。 □

**Theorem 2.**  $q$  回回転を伴うスクリューに含まれる並進操作  $\vec{t}$  のうち、回転軸に並行な成分  $\vec{t}_{\parallel}$  は  $\vec{t}_{\parallel} = l\vec{a}_{\parallel}/q$ , ( $l \in \mathbb{Z}$ ) を満たす。ここで、 $\vec{a}$  は  $\vec{t}_{\parallel}$  と並行な並進部分群の元  $\vec{a} \in T_G$  である。

*Proof.*  $\vec{n}$  に並行な軸に関するスクリュー  $s_{\vec{n},q}$  を  $q$  回続けて作用させることを考える。このとき、 $p_{s_{\vec{n},q}} = p_{R_{\vec{n},q}} + \vec{t}$  とすると、

$$(p_{s_{\vec{n},q}})^q \vec{x} = (p_{R_{\vec{n},q}})^q \vec{x} + (p_{R_{\vec{n},q}})^{q-1} \vec{t} + (p_{R_{\vec{n},q}})^{q-2} \vec{t} + \dots + \vec{t} \quad (7)$$

となる。ここで、 $\vec{t} = \vec{t}_{\parallel} + \vec{t}_{\perp}$  と定義して、 $\vec{t}_{\parallel/\perp}$  をそれぞれ  $\vec{n}$  に並行/垂直な成分とすると、垂直な成分に関して、

$$(p_{R_{\vec{n},q}})^{q-1} \vec{t}_{\perp} + (p_{R_{\vec{n},q}})^{q-2} \vec{t}_{\perp} + \dots + \vec{t}_{\perp} = \vec{0} \quad (8)$$

が成立する。また、 $(p_{R_{\vec{n},q}})^q \vec{x} = \vec{x}$  より、

$$(p_{R_{\vec{n},q}})^{q-1} \vec{t}_{\parallel} + (p_{R_{\vec{n},q}})^{q-2} \vec{t}_{\parallel} + \dots + \vec{t}_{\parallel} = q\vec{t}_{\parallel} \quad (9)$$

は並進部分群の元でなくてはならない。したがって  $q > l \in \mathbb{Z}$  として

$$\vec{t}_{\parallel} = l\vec{a}/q \quad (10)$$

となる。 □

以上の空間群の対称操作に関する性質により、シンモルフィックな空間群、ノンシンモルフィックな空間群ともに高々有限の種類しか存在しないことがわかる。実際、3次元空間に対してシンモルフィックな空間群は73種類、ノンシンモルフィックな空間群は157種類存在する。以上で本稿における以下の議論で前提とする用語の定義が完了した。

\*2 グライドに含まれる並進操作の鏡映面に垂直な成分は鏡映面をその方向に移動することで吸収することができるためそれほど重要ではない。

## 2 トポロジカル絶縁体概説

ここでは、本論文の基礎となるトポロジカル絶縁体に関するレビューを行う。まず、数学的な準備として、ベクトルバンドル上の接続を用いたホロノミーに関して簡単に解説する。その後、ホロノミーの概念が量子力学に現れる代表的な例として Aharonov-Bohm 効果を紹介する。この Aharonov-Bohm 効果の一般化として Berry 位相を定義することができ、ここでは、Berry 位相が量子状態のホロノミーを与えることをみる。以上の議論をバンド絶縁体へと適用することにより、トポロジカル絶縁体を定義することができる。さらに、ホロノミーをより広い枠組みへと拡張したホモトピーという概念を用いてトポロジカル絶縁体を再考することにより、トポロジカル絶縁体の特徴的な性質であるバルク-境界対応を理解することができる。本節の最後では、wallpaper fermion を考える基礎となるトポロジカル結晶絶縁体を紹介し、グライドに基づいてトポロジカル不変量を定義する方法を示す。

### 2.1 数学的な準備

ここでは、Aharonov-Bohm 効果においてトポロジーの概念が本質的であることを理解するために必要のホロノミーに関する基本的な事項をまとめる。ホロノミーの定義にはベクトルバンドルなどの少々入り組んだ議論を必要とするが、本筋からは外れてしまうため、付録 A に示すこととする。ベクトルバンドルに関する事柄は [5-8] などの教科書が詳しい。また、ホロノミーに関して、基本群<sup>\*3</sup>からの直感的理解は [9] で明快に議論されている。ホロノミー群を定義するためには、一般の多様体上で曲線に平行な切断を考える必要がある。今、このような切断は次のように定義されるものとする；

#### Definition 10: バンドル上の切断

多様体  $M$  上のベクトルバンドル  $E$  を考える。  $x(t)$ ,  $a \leq t \leq b$  を  $M$  内の曲線、  $\dot{x}(t) = \frac{dx}{dt}$  をその接ベクトルとし、  $\xi$  をこの曲線に沿って定義された  $E$  の切断とする。すなわち、  $x(t) \in M$  におけるファイバーを  $E_{x(t)}$  として  $\xi_t = \xi(x(t)) \in E_{x(t)}$  である。このとき、切断  $\xi$  が

$$\nabla_{\dot{x}(t)} \xi = 0, \quad a \leq t \leq b \quad (11)$$

を満たすならば  $\xi$  は曲線  $x(t)$  に沿って平行であるという。

次に、この条件式 (11) を  $M$  の局所座標系  $x^1, \dots, x^n$ ,  $E$  の局所標構場  $e_1, \dots, e_n$  によって書き下す。まず、切断  $\xi$  を  $\xi = \sum \xi^\lambda e_\lambda$  とし、共変微分を  $\nabla e_\lambda = \sum_\mu \omega_\lambda^\mu e_\mu$  と書く。さらに、接続形式 ( $\omega_\lambda^\mu$ ) は局所座標表示で

$$\omega_\lambda^\mu = \sum_i \Gamma_{\lambda i}^\mu dx^i \quad (12)$$

と書くことができる。以上より、

$$\nabla_{x(t)} \xi = \sum_\lambda \left[ \frac{d\xi^\lambda(x(t))}{dt} + \sum_\mu \Gamma_{\mu i}^\lambda(x(t)) \frac{dx^i}{dt} \xi^\mu(x(t)) \right] e_\lambda \quad (13)$$

と書き下せる。したがって、式 (11) は斉次微分方程式

$$\frac{d\xi^\lambda}{dt} + \sum_\mu \Gamma_{\mu i}^\lambda \frac{dx^i}{dt} \xi^\mu = 0, \quad \lambda = 1, \dots, r \quad (14)$$

に等価である。これは単に 1 次微分方程式であるため、初期条件  $\xi_a \in E_{x(a)}$  に対して解  $\xi$  が一意に定まる。そのとき、 $\xi$  は  $\xi_a$  を  $x(t)$  に沿って平行移動して得られるという。また、写像

$$\xi_a \in E_{x(a)} \rightarrow \xi_b \in E_{x(b)} \quad (15)$$

<sup>\*3</sup> 基本群とは、1 次元ホモトピーの同値類によって定義される多様体上の群であり、この定義は付録 B に示す。

は2つのファイバー間の同型写像となる。

続いて、点  $x_0 \in M$  を一つ固定し、 $x_0 = x(a) = x(b)$  とすることで、 $a \leq t \leq b$  で得られる  $M$  上のループ  $x(t)$  を考える。このループを  $c \ni x(t)$  とし、 $x_0$  を始点とする  $c$  に沿った平行移動が定義する  $E_{x_0}$  の自己同型写像を  $\tau_c$  と書く。 $c$  を逆に動くループを  $c^{-1}$  と書くと、

$$\tau_{c^{-1}} = (\tau_c)^{-1} \quad (16)$$

である。また、 $c'$  も  $x_0$  を始点とするループであるとし、 $c$  に沿って動いた後に  $c'$  に沿って動くことを考えると、

$$\tau_{c' \circ c} = \tau_{c'} \circ \tau_c \quad (17)$$

となる。以上より、全ての微分可能なループ  $c$  に対する  $\tau_c$  全体は群をなし、 $E_{x_0}$  の自己同型写像全体が作る群  $GL(E_{x_0})$  の部分群となる。この群を  $x_0$  を基点とするホロノミー群  $\Psi_{x_0}$  と呼ぶ。一般に  $\Psi_{x_0}$  は  $GL(E_{x_0})$  の閉部分群とはならないが、リー部分群にはなる。

続いて、ホロノミーに関する重要な事項として水平持ち上げとそれを用いたいくつかの定理を示す。

### Definition 11: 水平持ち上げ

主ファイバーバンドル  $(P, M, \pi, G)$  を考える。 $\gamma : [0, 1] \rightarrow M$  を多様体  $M$  上の曲線とする。このとき、 $\tilde{\gamma} : [0, 1] \rightarrow P$  が  $\pi \circ \tilde{\gamma} = \gamma$  を満たし、かつ、 $\tilde{\gamma}(t)$  の接ベクトルが常に  $\tilde{\gamma}(t) \in P$  における水平部分空間  $H_{\tilde{\gamma}(t)}P$  に属するとき、 $\tilde{\gamma}$  は  $\gamma$  の水平持ち上げという。

**Theorem 3** (始点に対する水平持ち上げの一意性).  $\gamma : [0, 1] \rightarrow M$  を多様体  $M$  上の曲線とし、 $u_0 \in \pi^{-1}(\gamma(0))$  とする。このとき、 $\tilde{\gamma}(0) = u_0$  を満たす  $\gamma$  の水平持ち上げ  $\tilde{\gamma}$  が一意に存在する。

*Proof.* 微分方程式の解の一意性より明らか □

**Theorem 4.**  $\tilde{\gamma}'$  を  $\tilde{\gamma}$  とは異なる  $\gamma$  の水平持ち上げであり、 $\tilde{\gamma}'(0) = \tilde{\gamma}(0)g$ ,  $g \in G$  とする。このとき、全ての  $t \in [0, 1]$  に対して  $\tilde{\gamma}'(t) = \tilde{\gamma}(t)g$  が成立する。

*Proof.* まず、水平部分空間は群  $G$  に関して右不変であり、 $(R_g)_* H_u P = H_{ug} P$ ,  $u \in P$ ,  $g \in G$  であることに注意する。ここで、 $\tilde{\gamma}_g : t \mapsto \tilde{\gamma}(t)g$  は接ベクトルが水平部分空間  $H_{\tilde{\gamma}_g} P$  に属するため、 $\gamma$  の水平持ち上げとなる。したがって、始点に対する水平持ち上げの一意性により、 $\tilde{\gamma}'$  は  $\tilde{\gamma}(0)g$  を始点とする水平持ち上げとして一意に定まる。 □

最後に水平持ち上げとホロノミーの関係をまとめる。ここでは、主ファイバーバンドル  $(P, M, \pi, G)$  を考え、 $\gamma : [0, 1] \rightarrow M$  を多様体  $M$  上の曲線、 $\gamma$  の水平持ち上げとして定義されるファイバー  $P$  上の曲線を  $\tilde{\gamma} : [0, 1] \rightarrow P$  とする。また、 $\gamma(0) = \gamma_0 \in M$  上のファイバーで、 $\tilde{\gamma}$  の始点を  $\tilde{\gamma}(0) = \tilde{\gamma}_0 \in P$  と書くことにする。このとき、任意の  $g \in G$  に対して  $\tilde{\gamma}_g$  も水平持ち上げであり、 $\tilde{\gamma}_g(t)$  は  $\tilde{\gamma}(0)g$  を平行移動して得られる。今、 $\gamma(0) = \gamma(1) = \gamma_0$  なる閉曲線  $c$  と、 $c$  の水平持ち上げ  $\tilde{c}$  を考える。ここで、 $\gamma_0$  を基点とするホロノミー群の元  $\tau_c \in \Psi_{\gamma_0}$  は

$$\tilde{\gamma}(1) = \tilde{\gamma}(0) \cdot \tau_c \quad (18)$$

によって定まる。以上より、ホロノミー群の元は  $\tilde{c}$  の終点が始点からどれだけずれたのかを表す量である。

## 2.2 トポロジーと量子力学

ここでは、物理においてトポロジーの概念が現れる最も基本的な例である Aharonov-Bohm 位相に関して解説する。以下の議論は多くの量子力学に関する教科書にて行われているところであるが、その幾何学的な構造、特にホロノミーに着目した議論は引用 [5, 8, 10] を参照する。まずはホロノミーなどの議論を行わずに、Aharonov-Bohm 位相の物理的な効果を考える。実験的には図 1 に示したような、二重スリットのスリット間にソレノイドを置いた状態で、質量  $m$ , 電荷  $e$  を持つ電子のスクリーンにおける干渉を考える。このとき、ソレノイドの漏れ磁場はゼロであるとする。今、ソレノイドを貫くフラックスを  $\Phi$  とし、ソレノイド半径が無小であるとすると、ソレノイド外でベクトル

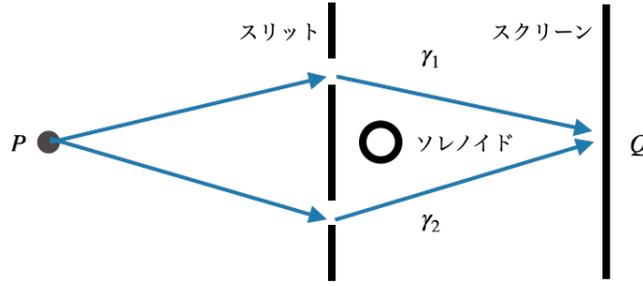


図1 Aharonov-Bohm の実験の概念図。

ポテンシャルは

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \left( -\frac{y\Phi}{2\pi r^2}, \frac{x\Phi}{2\pi r^2}, 0 \right) \quad (19)$$

となる。このとき、系のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \sum_{\mu} \left( \frac{\partial}{\partial x^{\mu}} - ieA_{\mu} \right)^2 + V(\mathbf{r}) \quad (20)$$

と書ける。ここで、 $V(\mathbf{r})$  は実験装置から電子が受けるポテンシャルである。今、 $\mathbf{A} = 0$  に対する経路  $\gamma_i$ ,  $i = 1, 2$  の電子の波動関数が  $\psi_i$  で与えられるとすると、 $\mathbf{A} \neq 0$  のときの電子の波動関数は

$$\psi_i^{\mathbf{A}} = \exp \left( ie \int_{\gamma_i} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' \right) \psi_i(\mathbf{r}) \quad (21)$$

と書くことができる。ここで、 $\gamma_i$  は  $P \rightarrow \mathbf{r}$  の経路に対応する。スクリーン上の点  $Q$  における電子の波動関数の振幅は

$$\begin{aligned} \psi_1^{\mathbf{A}} + \psi_2^{\mathbf{A}} &= \exp \left( ie \int_{\gamma_1} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' \right) \psi_1(Q) + \exp \left( ie \int_{\gamma_2} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' \right) \psi_2(Q) \\ &= \exp \left( ie \int_{\gamma_2} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' \right) \left[ \exp \left( ie \int_{\gamma_2^{-1} \circ \gamma_1} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' \right) \psi_1(Q) + \psi_2(Q) \right] \end{aligned} \quad (22)$$

このとき、経路  $\gamma_2^{-1} \circ \gamma_1$  は閉曲線となるため、Stokes の定理より

$$\int_{\gamma_2^{-1} \circ \gamma_1} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' = \Phi \quad (23)$$

となる。したがって、

$$\psi_1^{\mathbf{A}} + \psi_2^{\mathbf{A}} = \exp \left( ie \int_{\gamma_2} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' \right) [\exp(ie\Phi) \psi_1(Q) + \psi_2(Q)] \quad (24)$$

が成立する。これにより、

$$e(\Phi_a - \Phi_b) = 2\pi \quad (25)$$

を満たすフラックスに対して干渉縞は同じ形になることがわかる。

以上が Aharonov-Bohm 位相と呼ばれるものの物理的な効果であるが、これとホロノミーの関係について考える。まず、上で考えた波動関数は実空間から Hilbert 空間への写像である。ここで、今考えている実空間は  $M = \mathbb{R}^3 \setminus S$  と等価であり、したがって波動関数は写像  $\psi: M \rightarrow \mathcal{H}$  に対応する。また、波動関数は  $U(1)$  のゲージ変換に関して不変であるため、主ファイバーバンドル  $(P, M, \pi, U(1))$  を構成することができ、このときのファイバーの切断が波動関数を与える。このように考えると、実空間の経路  $\gamma: [a, b] \rightarrow M$  に沿った波動関数の変化は  $\gamma$  の水平持ち上げであると期待される。実際、リー環上に値を持つ 1 次微分形式  $\mathcal{A} = ieA_{\mu} dx^{\mu}$  を用いて共変微分は  $\mathcal{D} = d + \mathcal{A}$  と定義することができ、ソレノイド周りの単位円  $e^{i\theta} \in S^1$ ,  $\theta \in [0, 2\pi]$  において

$$\mathcal{D}\psi(\theta) = 0 \quad (26)$$

が要請される。今、

$$\mathcal{A} = i \frac{e\Phi}{2\pi} d\theta \quad (27)$$

とすると、微分方程式の解  $\psi(\theta)$  は

$$\psi(\theta) = e^{-ie\Phi\theta/2\pi} \quad (28)$$

で与えられる。このとき、ホロノミーは  $\Gamma: \pi^{-1}(\theta=0) \rightarrow \pi^{-1}(\theta=2\pi)$  に関する切断の変化を求めればよく、

$$\Gamma: \psi(0) \rightarrow e^{-ie\Phi}\psi(0) \quad (29)$$

となることがわかる。したがって Aharonov-Bohm 位相はソレノイドを囲むループに関するホロノミーに対応している。

### 2.3 Berry 位相、Berry 接続、Berry 曲率

続いて、Aharonov-Bohm 位相の一般化として Berry 位相を定義し、それに基づいて Berry 接続、Berry 曲率を幾何学的な観点から定義する。まず、パラメータ空間として多様体  $M$  を設定し、その局所座標が  $\mathbf{R} = (R^1, \dots, R^k)$  で与えられたものとする。このとき、点  $\mathbf{R}$  においてハミルトニアン  $H(\mathbf{R})$  の固有状態として量子状態  $|\mathbf{R}\rangle_n$  が定義される。今、 $n$  番目の固有状態に縮退がないことを仮定し、この準位の固有状態に着目するものとして、添え字を省略して  $|\mathbf{R}\rangle$  と書く。ここで、 $U(1)$  のゲージ変換に関して状態は区別されないため、物理状態は同値類

$$[|\mathbf{R}\rangle] = \{g|\mathbf{R}\rangle | g \in U(1)\} \quad (30)$$

で与えられる。したがって、これらを用いて多様体  $M$  上に  $U(1)$  を構造群とする主ファイバーバンドル  $([|\mathbf{R}\rangle], M, \pi, U(1))$  を考えることができる。ここで、射影  $\pi$  は

$$\pi(g|\mathbf{R}\rangle) = \mathbf{R} \quad (31)$$

であるため、切断は状態の  $U(1)$  位相を決定する。また、局所自明化は

$$\phi^{-1}(|\mathbf{R}\rangle) = (\mathbf{R}, e), \quad 1 = e \in U(1) \quad (32)$$

で与えられ、右作用により

$$\phi^{-1}(|\mathbf{R}\rangle \cdot g) = (\mathbf{R}, g) \quad (33)$$

となる。以上よりバンドルが定義されたため、多様体  $M$  上の外微分  $d = \partial_{R^\mu} dR^\mu$  を用いて接続を

$$\mathcal{A} = A_\mu dR^\mu \equiv \langle \mathbf{R} | (d|\mathbf{R}\rangle) \quad (34)$$

で定義する。これは Berry 接続と呼ばれるものであり、この  $\mathcal{A}$  の場の強さが Berry 曲率

$$\mathcal{F} = d\mathcal{A} = (d\langle \mathbf{R} |) \wedge (d|\mathbf{R}\rangle) = \frac{\partial \langle \mathbf{R} |}{\partial R^\mu} \cdot \frac{\partial |\mathbf{R}\rangle}{\partial R^\nu} dR^\mu \wedge dR^\nu \quad (35)$$

を与える。さらに、パラメータ空間  $M$  中のループ  $C: [0, 1] \rightarrow M$  に沿った Berry 接続の積分

$$\Gamma(C) = i \oint_C \mathcal{A} \quad (36)$$

は Berry 位相と呼ばれる量である。

次に、Berry 位相がどのような物理的考察によって得られるのかを考えることで、上記で定義した Berry 接続、Berry 曲率がどのような意味を持つのかを示す。まずは断熱定理と呼ばれるものを考える。

**Theorem 5** (断熱定理). 時間依存する *Schrödinger* 方程式

$$i\hbar\partial_t |\mathbf{R}, t\rangle_n = H(\mathbf{R}, t) |\mathbf{R}, t\rangle_n \quad (37)$$

を考える。今、時間に依存したパラメータの変化が断熱的であるとして  $\dot{\mathbf{R}}(t) \simeq 0$  を仮定すると、任意の時刻  $t$  における波動関数は

$$|\mathbf{R}, t\rangle_n = \exp\left[i\gamma_n(t) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \lambda_n(\mathbf{R}(t')) dt'\right] |n; \mathbf{R}\rangle \quad (38)$$

と与えられる。ここで、 $|n; \mathbf{R}\rangle$ ,  $\lambda_n(\mathbf{R}(t))$  はそれぞれ時刻  $t$  を固定した際のスナップショット方程式

$$H(\mathbf{R}, t) |n; \mathbf{R}\rangle = \lambda_n(\mathbf{R}(t)) |n; \mathbf{R}\rangle \quad (39)$$

で与えられる固有値、固有状態である。このとき、 $i\gamma_n(t)$  は量子状態特有の幾何学的位相 (*Berry* 位相) と呼ばれる量である。

以上の断熱定理が主張するのは、断熱的なパラメータの変化の過程で常に量子数  $n$  が保存されるということである。次に、*Berry* 位相の具体的な表式を求めるため、断熱定理で仮定した波動関数を *Schrödinger* 方程式に代入する；

$$\begin{aligned} 0 &= [H - i\hbar\partial_t] |\mathbf{R}, t\rangle_n \\ &= \exp\left[i\gamma_n(t) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \lambda_n(\mathbf{R}(t')) dt'\right] \left[H + \hbar \frac{d\gamma_n}{dt} - \lambda_n(\mathbf{R}(t)) - i\hbar\partial_t\right] |n; \mathbf{R}\rangle \\ &= \exp\left[i\gamma_n(t) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \lambda_n(\mathbf{R}(t')) dt'\right] \left[\hbar \frac{d\gamma_n}{dt} - i\hbar\partial_t\right] |n; \mathbf{R}\rangle \end{aligned} \quad (40)$$

したがって、右から  $\langle n; \mathbf{R}|$  をかけることにより、

$$\frac{d\gamma_n}{dt} = \langle n; \mathbf{R}| i\partial_t |n; \mathbf{R}\rangle \quad (41)$$

と書くことができる。今、断熱的な変化によって、 $\mathbf{R}(T) = \mathbf{R}(0)$  を仮定する、すなわち、パラメータ空間中のループ  $C: [0, T] \rightarrow M$  を考えると、*Berry* 位相は

$$\gamma_n(T) = \int_0^T \langle n; \mathbf{R}| i\partial_t |n; \mathbf{R}\rangle dt = \int_0^T \langle n; \mathbf{R}| i\nabla_{\mathbf{R}} |n; \mathbf{R}\rangle \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dt} dt \quad (42)$$

となり、確かに、 $\Gamma(C) = \gamma_n(T)$  であることがわかる。また、これによって、*Berry* 位相が曲率  $\mathcal{A}$  に伴うホロノミーであることが明確になった。

## 2.4 バンド絶縁体への適用

ここまでの *Berry* 位相に関する議論では一般的なパラメータ空間と量子状態を考えていたが、ここでは、より具体的にバンド絶縁体の基底状態に着目して議論する。以下では、一般次元に関する *Stokes* の定理を証明なしで用いる。

**Theorem 6** (*Stokes* の定理).  $N$  を向きづけられた  $m$  次元多様体  $M$  中の境界を持つコンパクトな  $m$  次元部分多様体であるとする。また、多様体  $N$  およびその境界  $\partial N$  には  $M$  の向きから自然に決まる向き  $\mathcal{O}_N$ ,  $\mathcal{O}_{\partial N}$  が与えられているものとする。このとき、 $M$  上の  $m-1$  次微分形式  $\eta$  に対して次の等式が成立する。

$$\int_N d\eta = \int_{\partial N} \eta$$

### • 空間 1 次元の場合

まず、空間 1 次元の場合に限ってバンド絶縁体の基底状態に対して *Berry* 位相を定義する。ここでは、空間 1 次元の場合を考え、簡単のため、占有バンドが 1 バンドのみであるとする。このとき、*BZ* は  $k \in [-\pi, \pi] \simeq S^1$  で与えられるとし、*Berry* 位相は次のように定義される；

$$\varphi_{\text{BP}} := -\text{Im} \ln \left[ \prod_{i=0}^{L-1} \mathbf{u}_{k_i}^\dagger \mathbf{u}_{k_{i+1}} \right]$$

ここで、 $k_0 = -\pi$ 、 $k_L = \pi$  と定義した。これは、離散的な波数空間に対する Berry 位相の定義であり、また、ゲージ不変量であるため数値計算との相性が良い。

**Remark.** Berry 位相がゲージ不変量である

*Proof.* 波数に依存する  $U(1)$  ゲージ変換

$$\mathbf{u}_{k_i} \rightarrow e^{i\chi(k_i)} \mathbf{u}_{k_i}$$

を考える。このとき、Berry 位相は、

$$\varphi_{\text{BP}} \rightarrow \varphi_{\text{BP}} + \chi(k_0) - \chi(k_L)$$

なる変換を受ける。今、 $k_0 = k_L$  という同一視を行うため、常に  $\chi(k_0) - \chi(k_L) = 2\pi m$  ( $m \in \mathbb{Z}$ ) が成立する。したがって、Berry 位相は  $U(1)$  ゲージ変換に対してゲージ不変量である。□

次に、上で定義した離散的な波数空間に対する Berry 位相を連続的な波数空間に拡張する。まず、 $\mathbf{u}_k$  が  $k$  に対して微分可能であると、 $k_{i+1} = k_i + dk$  と表すと、

$$\mathbf{u}_{k_i}^\dagger \mathbf{u}_{k_{i+1}} = \mathbf{u}_{k_i}^\dagger (\mathbf{u}_{k_i} + (\partial_k \mathbf{u}_{k_i}) dk + \dots)$$

と展開できる。これを Berry 位相の定義式に代入すると、

$$\begin{aligned} \varphi_{\text{BP}} &= -\text{Im} \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{L-1} \ln \left[ 1 + \mathbf{u}_{k_i}^\dagger (\partial_k \mathbf{u}_{k_i}) dk \right] \\ &= -\text{Im} \int_{-\pi}^{\pi} dk \mathbf{u}_k^\dagger \partial_k \mathbf{u}_k \end{aligned}$$

が成立する。ここで、

$$2 \text{Re} \left[ \mathbf{u}_k^\dagger \partial_k \mathbf{u}_k \right] = \mathbf{u}_k^\dagger \partial_k \mathbf{u}_k - \partial_k \mathbf{u}_k^\dagger \mathbf{u}_k = 0$$

であるため、被積分関数は純虚数であり、

$$\varphi_{\text{BP}} = \int_{-\pi}^{\pi} dk \mathbf{u}_k^\dagger i \partial_k \mathbf{u}_k \quad (43)$$

と書くことができる。

- 空間 2 次元の場合

**Definition 12: Chern 数**

空間 2 次元での波数空間を  $\vec{k} = (k_1, k_2) \in [-\pi, \pi] \times [-\pi, \pi]$  とする。このとき、離散化した波数空間における  $\vec{k}$  近傍のプラケット

$$\square_{\vec{k}} = (k_1, k_2) \rightarrow (k_1 + \delta k_1, k_2) \rightarrow (k_1 + \delta k_1, k_2 + \delta k_2) \rightarrow (k_1, k_2 + \delta k_2) \rightarrow (k_1 + \delta k_1, k_2)$$

の境界における Berry 位相を、プラケット  $\square_{\vec{k}}$  を貫く Berry flux  $F(\square_{\vec{k}}) \in (-\pi, \pi)$  と定義する；

$$\begin{aligned} F(\square_{\vec{k}}) &:= \varphi_{\text{BP}}(\partial \square_{\vec{k}}) \\ &= \text{Arg} \left[ \mathbf{u}_{k_1, k_2}^\dagger \mathbf{u}_{k_1 + \delta k_1, k_2} \mathbf{u}_{k_1 + \delta k_1, k_2}^\dagger \mathbf{u}_{k_1 + \delta k_1, k_2 + \delta k_2} \mathbf{u}_{k_1 + \delta k_1, k_2 + \delta k_2}^\dagger \mathbf{u}_{k_1, k_2 + \delta k_2} \mathbf{u}_{k_1, k_2 + \delta k_2}^\dagger \mathbf{u}_{k_1, k_2} \right] \end{aligned}$$

Chern 数  $\mathcal{C}$  は BZ 全体を貫く Berry flux として定義される；

$$\mathcal{C} := \frac{1}{2\pi} \sum_{\square_{\vec{k}} \in \text{BZ}} F(\square_{\vec{k}})$$

続いて、離散的化した波数空間で定義した Chern 数を連続的な波数空間での定義に置き換える。この際、Berry 位相を  $\text{Arg}$  で定義したことで  $-\text{Im} \ln$  の定義と符号が逆であることに注意する。まず、ブラケットの分割が十分細かいものとして、Berry flux を連続空間での表式 (43) を用いて表す;

$$C = -\frac{1}{2\pi} \sum_{\square_{\vec{k}} \in \text{BZ}} \oint_{\partial \square_{\vec{k}}} d\vec{k} \cdot \mathbf{u}_{\vec{k}}^\dagger i \partial_{\vec{k}} \mathbf{u}_{\vec{k}}$$

このとき、隣り合うブラケットの境界における積分はキャンセルするため、Chern 数は第 1BZ 境界における積分に置き換えられる;

$$C = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\partial(\text{BZ})} d\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_{\vec{k}}^\dagger \partial_{\vec{k}} \mathbf{u}_{\vec{k}}$$

この積分は、1 次微分形式  $\mathbf{u}_{\vec{k}}^\dagger \partial_{\vec{k}} \mathbf{u}_{\vec{k}}$  の 2 次元多様体 BZ の境界における周回積分であるため、Stokes の定理より、

$$C = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \int_{-\pi}^{\pi} dk_2 \left( \partial_{k_1} \mathbf{u}_{\vec{k}}^\dagger \partial_{k_2} \mathbf{u}_{\vec{k}} - \partial_{k_2} \mathbf{u}_{\vec{k}}^\dagger \partial_{k_1} \mathbf{u}_{\vec{k}} \right) \quad (44)$$

と書くことができる。

### • 一般次元への拡張

最後に、一般の空間次元で、占有バンドも複数ある場合に Chern 数の定義を拡張する。占有バンド数が  $n_b$ 、ハミルトニアン行列のサイズが  $N_b \times N_b$  であるとして、占有バンドに対するブロッホ関数を並べた  $N_b \times n_b$  行列

$$\Phi_{\vec{k}} := (\mathbf{u}_{\vec{k},1}, \mathbf{u}_{\vec{k},2}, \dots, \mathbf{u}_{\vec{k},n_b}) \quad (45)$$

を定義する。ここで、 $\vec{k}$  は空間  $d$  次元の BZ で定義される  $d$  次元運動量ベクトルである。これを用いて、Berry 接続、Berry 曲率を次のように定義する;

$$\vec{A}_{\vec{k}} := \text{Tr} \left[ \Phi_{\vec{k}}^\dagger i \nabla_{\vec{k}} \Phi_{\vec{k}} \right] \quad (46)$$

$$(\mathcal{F}_{\vec{k}})_{i,j} := \partial_{k_i} (\vec{A}_{\vec{k}})_j - \partial_{k_j} (\vec{A}_{\vec{k}})_i \quad (47)$$

まず、 $d \geq 1$  に対して Berry 位相は

$$\varphi_{\text{BP}} := \int_{(\text{BZ})^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^{d-1}} \vec{A}_{\vec{k}} \quad (48)$$

と定義される。ここで、 $(\text{BZ})^d$  は  $d$  次元空間における第 1BZ である。次に、 $d \geq 2$  の一般次元における Chern 数を定義する。空間 2 次元の場合、BZ を貫く flux で定義していたが、これは、Berry 位相の巻きつき数に等価である。(c.f. Stokes の定理を使う前の表式) したがって、一般次元の場合も同様に第 1Chern 数は

$$C := -\frac{1}{2\pi} \oint_{\partial(\text{BZ})^d} d\vec{k} \cdot \vec{A}_{\vec{k}}$$

と定義される。したがって、Chern 数は BZ の境界に沿った経路に関する波動関数のホロノミーを計算していることに等価である。特に、空間 2 次元の場合には経路  $\partial(\text{BZ})^2$  は  $S^1$  であるため、ループ  $C: [0, 1] \rightarrow \text{BZ}$  を与える。実際、このときのホロノミーは基本群  $\pi_1(U(1)) = \mathbb{Z}$  であることから、Chern 数は整数値を取る。ここで、基本群はホモトピー不変であるから、Chern 数によって Hilbert 空間に対してホモトピー同値類を定義できる。逆に、ホモトピー同値な Hilbert 空間に対する Chern 数は等しい。

## 2.5 トポロジカル絶縁体

ここまでで、トポロジカル絶縁体を定義する準備が整った。上で定義した Chern 数に関してブロッホ関数  $\mathbf{u}_{\vec{k},n}$  の観点で、次の定理に注意する。

**Theorem 7.** 空間次元が  $d \leq 3$  のとき、Chern 数がゼロであればゲージ固定によってブロッホ関数  $u_{\mathbf{k},n}$  を BZ 全域で滑らかに定義できる。

*Proof.* まず、 $(BZ) = U_1 \oplus U_2$  なる 2つの領域を定義する。これらの領域に関してゲージ固定を行うことで Berry 接続  $A_1, A_2$  を定義する。ここで、Chern 数がゼロであるとする、

$$0 = \oint_{\partial U_1} d\mathbf{k} \cdot A_1 + \oint_{\partial U_2} d\mathbf{k} \cdot A_2 = \oint_{\partial U_1} d\mathbf{k} \cdot A_1 - \oint_{\partial U_1} d\mathbf{k} \cdot A_2 \quad (49)$$

したがって、 $A_1 = A_2$  とすることができ、BZ 全域で滑らかなゲージを定義することができる。□

この命題の逆は上記証明を見れば明らかである。すなわち、Chern 数とブロッホ関数について次の命題が成立する；

**Theorem 8.** 空間次元が  $d \leq 3$  のとき、ブロッホ関数  $u_{\mathbf{k},n}$  を BZ 全域で滑らかに定義できるための必要十分条件は Chern 数がゼロとなることである。

次に、Wannier 関数と呼ばれる関数を定義する；

#### Definition 13: Wannier 関数

$d$  次元結晶の単位胞の位置を  $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^d$ 、そこから測った位置を  $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^d$  とし、 $n$  番目のバンドに関する cell-periodic なブロッホ関数を  $u_{n,\mathbf{k}}$  とする。このとき  $n$  番目のバンドに関する Wannier 関数  $W_{n,\mathbf{R}}(\mathbf{r})$  を

$$W_{n,\mathbf{R}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k} \in (BZ)^d} u_{n,\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R})} \quad (50)$$

と定義する。

上のように定義した Wannier 関数に関して、フーリエ変換の一般論より、 $u_{n,\mathbf{k}}$  が BZ 全域で解析的であるとき、Wannier 関数は  $|\mathbf{r} - \mathbf{R}|$  の増大に対して指数関数的に減衰する。このことを用いてトポロジカル絶縁体は次のように定義することができる；

#### Definition 14: トポロジカル絶縁体

バンド絶縁体の占有バンドに関する Wannier 関数を構成し、任意のパラメータにおいて内部対称性を保ちつつ Wannier 関数が指数関数的に局在するようにできるとき、バンド絶縁体を自明な絶縁体と呼ぶ。逆に、指数関数的に局在する Wannier 関数が構成できない条件が存在する場合、このときのバンド絶縁体をトポロジカル絶縁体と呼ぶ。

この定義により、あるバンド絶縁体がトポロジカルに非自明な相を持つか否か、という問いは、任意のパラメータにおいてブロッホ関数を BZ 全域で滑らかに定義できるか否かという問いに帰着される。実際、量子ホール絶縁体などでは、Chern 数がノンゼロの値を取ることから基底状態は非自明なトポロジカル絶縁体であると理解できる。しかし、この逆は成立しないことに注意する。というのも、時間反転対称性を有する量子スピンホール絶縁体などの内部対称性によって保護されるトポロジカル絶縁体では、Kramers 対が Chern 数に対してそれぞれ逆符号の寄与を与えるため、基底状態では Chern 数が常にゼロになる。しかし、このような場合には、局在する Wannier 関数に対して内部対称性の局所性が失われ、Wannier 関数の重心位置が内部対称性に対して不変にならない。よって、内部対称性を保つ限り局在する Wannier 関数を定義することができず、基底状態はトポロジカルに非自明な絶縁体となり得る。

ここで、上のトポロジカル絶縁体の定義はいつでも well-defined であるが、Wannier 関数の局在性と Chern 数の対応は非自明であり、実際、シンプルな Chern 数では局在性を判定出来ない系は数多く存在する。そこで、次節においてバルク-境界対応を考える際にはホモトピーに基づいて、より多くの系に拡張可能なトポロジカル不変量の定義を用いることにする。

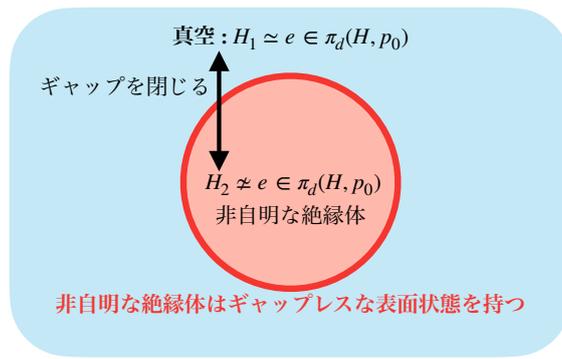


図2 バルク-境界対応とホモトピークラス

## 2.6 バルク-境界対応

トポロジカル絶縁体をもつ象徴的であり最も驚くべき性質はここで示すバルク-境界対応である。これを示す方法はいくつか知られており、ここではホモトピーを用いて理解するが、より現象論的に示す方法は引用 [11] などを参照することとする。

以下では、ホモトピーの概念をトポロジカル絶縁体に対応づけて考える。ホモトピーに関する詳細は付録 B を参照していただきたい。位相空間  $X$  はハミルトニアンが定義された空間 (実空間や波数空間) に対応し、ターゲット空間  $Y$  はハミルトニアンによって写される Hilbert 空間に対応する。このとき、Hilbert 空間はハミルトニアンを特徴づけるパラメータ空間によって与えられる。すなわち、1 次元波数空間上で定義されたハミルトニアンによって写される Hilbert 空間を  $\mathcal{H}$  とすると、このときのトポロジカル不変量は  $\pi_1(\mathcal{H}, p_0)$  で与えられる。ここで、空間  $\mathcal{H}$  が弧状連結であるとき、 $\pi_1(\mathcal{H}, p_0)$  の元は基点に依存しないことに注意する。したがって、トポロジカル絶縁体の特徴づける問題はハミルトニアンホモトピー同値関係に基づく Hilbert 空間の同値類別に帰着する。このとき、ホモトピーは連続写像で定義されるため、ハミルトニアンホモトピー同値は、「エネルギーギャップを閉じずに変換可能か」、という問いに読み替えることができ、Definition 14 にコンシステントである。この意味で、 $d$  次元空間における自明な絶縁体はホモトピー群  $\pi_d(\mathcal{H}, p_0)$  の単位元に対応する<sup>\*4</sup>。

例として、図 2 に示すような、ホモトピー同値類別の異なるクラスに属するハミルトニアン  $H_1, H_2$  で記述される系が隣り合っている場合を考える。ここで、ホモトピー群を考えるためにはハミルトニアンの底空間が閉曲面でなくてはならないため、これらのハミルトニアンは系のバルクを記述するものとする。今、 $H_1$  がホモトピー群の単位元にホモトープであり、 $H_2$  が単位元では無いホモトピー群の元にホモトープであると仮定する。このとき、ホモトピーの定義により、ホモトピーは連続的な関数で定義されるため、エネルギーギャップを閉じることなく  $H_1$  から  $H_2$  へと変換することは出来ない。すなわち、この系の境界では必ずエネルギーギャップを閉じなければならないことになる。したがって、真空状態が自明な絶縁体に対応することを考えると、 $H_2$  で記述される系のエッジにはギャップレスな表面状態が存在する。このバルクにおけるハミルトニアンと系のエッジ状態との対応をバルク-境界対応と呼ぶ。

## 2.7 トポロジカル結晶絶縁体

トポロジカル結晶絶縁体とは、上で定義したトポロジカル絶縁体の一種であり、特に、そのトポロジカル不変量が系の有する結晶対称性に基づいて定義されるものである。これが意味するのは、結晶対称性を保ったまま局在する Wannier 状態を構成できるのか、ということであり、これは結晶対称性の Wannier 状態に対する作用の局所性を議論することと等価である。そのため、トポロジカル結晶絶縁体表面には結晶対称性で保護された特有の表面状態が存在する。ここで注意するのは、トポロジカル結晶絶縁体の場合、非自明なトポロジカル相を創発する結晶対称性をもつ結晶表面にのみ表面状態が存在するということであり、このような結晶対称性を破る表面ではエネルギーギャップは開く。ここでは、その例の一つとして、グライドを 1 つだけ持つ 3 次元のバルク絶縁体に対して結晶対称性に基づ

<sup>\*4</sup> ホモトピー群の単位元はゼロにホモトープな同値類からなっており、真空状態は自明な絶縁体となる。

いてトポロジカル不変量を定義する方法の一つを示す [12, 13]。着目する系は  $xy$  平面で閉じたノンシンモルフィックな結晶対称性が存在する場合を想定し、 $z$  軸に垂直な表面における表面状態を次で定義する  $z$ -projection Wilson loop holonomy matrix によって判定する。これは次節で定義する wallpaper fermion に関係する不変量に直接拡張することができる点で非常に重要である。

**Definition 15: Wilson loop holonomy matrix**

まず、3次元結晶のバルクにおいてバンド絶縁体を実現しているものとし、プロッホ波動関数の cell-periodic part を  $|u^i(k_x, k_y, k_z)\rangle$  とする。ここで、 $i$  はバンドインデックスである。この cell-periodic 関数を用いて波数  $(k_x, k_y, k_z)$  における占有状態への射影演算子は

$$\hat{P}(k_x, k_y, k_z) = \sum_{i=1}^{\text{occ}} |u^i(k_x, k_y, k_z)\rangle \langle u^i(k_x, k_y, k_z)| \quad (51)$$

と定義される。これを用いて Wilson loop holonomy matrix は次式で定義される；

$$[W(k_x, k_y, k_{z_0})]_{i,j} = \langle u^i(k_x, k_y, k_{z_0} + 2\pi) | \hat{\Pi}(k_x, k_y, k_{z_0}) | u^j(k_x, k_y, k_{z_0}) \rangle, \quad (52)$$

ここで、

$$\hat{\Pi}(k_x, k_y, k_{z_0}) = \hat{P}(k_x, k_y, k_{z_0} + 2\pi) \hat{P}(k_x, k_y, k_{z_0} + 2\pi(N-1)/N) \cdots \hat{P}(k_x, k_y, k_{z_0} + 2\pi/N) \quad (53)$$

と定義される射影演算子の積である。このとき、波数空間は離散的であるとしており、 $N$  は離散的な波数  $k_z$  の点の数に対応する。

ここで、上で定義した Wilson loop holonomy matrix はユニタリ行列であるため、固有値は  $e^{i\theta(k_x, k_y)}$  で与えられ、このときの  $\theta(k_x, k_y)$  は Wilson phase と呼ばれる量である。

以下では、Wilson loop holonomy matrix が持つ重要な性質として次の命題を示す；

**Theorem 9** (固有値の縮退度). 系が wallpaper 群  $pgg$  または  $p4g$  の対称性と時間反転対称性を持つとき、Wilson loop holonomy matrix の固有値は表面ブリルアンゾーンの  $\bar{X}\bar{M}$  線及び  $\bar{Y}\bar{M}$  線上で 2 重縮退を持ち、また、 $\bar{M}$  点上で 4 重縮退を持つ。

**Lemma 1.** 波数  $k_z$  を不変に保ち、また、実空間で  $z$  軸方向の並進を含まない演算子  $\hat{g}$  と  $\hat{T}^2 = -1$  を満たす反ユニタリ演算子  $\hat{T}$  が存在し、系が  $\hat{T}_g \equiv \hat{T}\hat{g}$  に対する対称性  $H(k_\perp, k_z) = \hat{T}_g^{-1} H(-D_g k_\perp, k_z) \hat{T}_g$  を持つとき、 $D_g k_\perp = -k_\perp + a\mathbf{G}$ ,  $a \in \mathbb{Z}$  を満たす波数点上において Wilson loop holonomy matrix  $W(k_\perp, 0)$  の固有値は 2 重に縮退する。ここで、 $\mathbf{G}$  は逆格子空間の基本ベクトルであり、 $k_\perp$  は  $(k_x, k_y)$  平面上の任意のベクトルである。

*Proof.* まず、系が  $\hat{T}_g$  に対する対称性を有することより、

$$\begin{aligned} \hat{T}_g^{-1} [W(-D_g k_\perp, 0)]_{i,j} \hat{T}_g &= \hat{T}_g^{-1} \langle u^i(-D_g k_\perp, 2\pi) | \hat{\Pi}(-D_g k_\perp, 0) | u^j(-D_g k_\perp, 0) \rangle \hat{T}_g \\ &= \hat{T}_g^{-1} \langle u^i(k_\perp, 2\pi) | \hat{T}_g \hat{P}(k_x, k_y, -2\pi) \cdots \hat{P}(k_x, k_y, -2\pi/N) \hat{T}_g^{-1} | u^j(k_\perp, 0) \rangle \hat{T}_g \\ &= \langle u^i(k_\perp, 0) | \hat{P}(k_x, k_y, 0) \hat{P}(k_x, k_y, +2\pi(N-1)/N) \cdots \hat{P}(k_x, k_y, 2\pi - 2\pi/N) | u^j(k_\perp, 2\pi) \rangle \\ &= [W^\dagger(k_\perp, 0)]_{i,j} \end{aligned} \quad (54)$$

であるため、 $\hat{T}_g^{-1} W(-D_g k_\perp, 0) \hat{T}_g = W^\dagger(k_\perp, 0)$  が成立する。したがって、 $\psi(k_\perp)$  を固有値  $e^{i\theta(k_\perp)}$  に対する  $W(k_\perp, 0)$  の固有ベクトルであるとする、 $\hat{T}_g \psi(k_\perp)$  は  $W(-D_g k_\perp, 0)$  の固有ベクトルとなる。ここで、 $k_\perp$  が  $-D_g k_\perp = k_\perp + a\mathbf{G}$  を満たすものとする、 $\hat{T}_g \psi(k_\perp)$  もまた  $W(k_\perp, 0)$  の固有ベクトルであり、固有値は  $e^{i\theta(k_\perp)}$  である。このとき、 $\hat{T}_g$  は  $\hat{T}_g^2 = -1$  を満たす反ユニタリ演算子であるため、2つの固有ベクトル  $\psi(k_\perp)$ ,  $\hat{T}_g \psi(k_\perp)$  は直交する。以上より、 $-D_g k_\perp$  が逆格子空間における基本ベクトルの整数倍で表される並進で同一視できる点  $k_\perp$  において  $W(k_\perp, 0)$  の固有状態は Kramers 対を形成し、縮退する。□

上記の証明において  $\hat{g}$  としてグライドを採用するなら高対称線  $\bar{X}\bar{M}$  または  $\bar{Y}\bar{M}$  上の点で Wilson loop holonomy

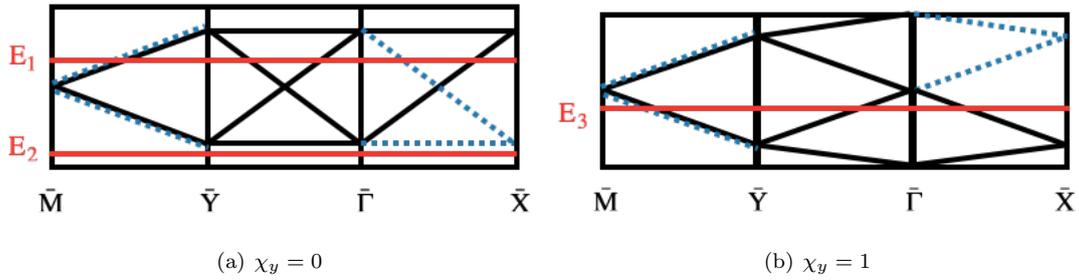


図3 Wilson loop を用いた不変量  $\chi_y$  の計算。図の領域  $\bar{M}\bar{Y}, \bar{\Gamma}\bar{X}$  において黒の実線は  $g_y = +e^{ik_x/2}$  の成分、青の点線は  $g_y = -e^{ik_x/2}$  の成分に対応する。すなわち、計算においては黒の実線に着目すれば良い。(a) は  $\chi_y = 0$  となる例であり、 $E_2$  の線で考えれば明らかである。(b) は  $\chi_y = 1$  の例であり、手順 2., 3. を実行すると合計が 4 となり、手順 4. の結果が 1 であることから  $\chi_y = 1$  であることがわかる。

matrix の固有状態が縮退していることになる。この補題により Theorem 9 の成立は明らかである。

次に、引用 [12] で示された 1 つのグライド対称性に加えて時間反転対称性が存在する場合における  $\mathbb{Z}_4$  不変量の定義を示す。この不変量は上で定義した Wilson loop を用いて比較的簡単に計算することができる [14]。ここではこれらの方法を紹介し、次節における議論の準備を行う。

1 つのグライド  $g_y = \{m_y|1/2, t, 0\}$  を持つ時間反転対称な系を考える。ここで  $t$  は格子定数の有理数倍で表される量である。

**Definition 16:  $\mathbb{Z}_4$  不変量 [12]**

1 つのグライド  $g_y = \{m_y|1/2, t, 0\}$  を持つ時間反転対称な系に対して

$$\begin{aligned} \chi_y \equiv & \frac{2}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_z (\text{tr } A_{+,z}^I(\pi, \pi, k_z) - \text{tr } A_{+,z}^I(\pi, 0, k_z)) \\ & + \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} dk_x \int_{-\pi}^{\pi} dk_z (\text{tr } F_{+,y}(k_x, \pi, k_z) - \text{tr } F_{+,y}(k_x, 0, k_z)) \\ & - \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} dk_y \int_{-\pi}^{\pi} dk_z \text{tr } F_x(0, k_y, k_z) \quad \text{mod } 4 \end{aligned} \quad (55)$$

がトポロジカル不変量として定義される。このとき、 $A_{\pm,i} \equiv i \langle u^{\pm} | \partial_{k_i} | u^{\pm} \rangle$ ,  $F_{\pm} \equiv \nabla \times A_{\pm}$  であり、 $\pm$  はグライドのセクターに対応する。また、添え字  $I$  は Kramers 対の片一方のバンドを表す。

この不変量は Wilson loop を用いて表すこともでき、その場合、Wilson phase  $\theta(k_x, k_y)$  を用いて

$$\chi_y = \frac{1}{\pi} \sum_{j=1}^{n_{\text{occ}}/2} \left[ \theta_j^+(\bar{M}) - \theta_j^+(\bar{X}) + \int_{\bar{M}\bar{Y}} d\theta_j^+ + \int_{\bar{\Gamma}\bar{X}} d\theta_j^+ \right] + \frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^{n_{\text{occ}}} \int_{\bar{Y}\bar{\Gamma}} d\theta_j \quad \text{mod } 4 \quad (56)$$

と定義される。このことから  $\chi_y$  がゲージ不変量であることがわかる。この節の最後に上の不変量を  $\bar{M}\bar{Y}\bar{\Gamma}\bar{X}$  線上で Wilson loop の固有値をプロットすることによって計算する手法 [14] を紹介する。これは以下の手順で実行される;

1. プロットを横切るように水平線を描く
2.  $\bar{M}\bar{Y}$  の領域においてグライドの + セクターが正の傾きで横切る数から負の傾きで横切る数を引き、全体を 2 倍する
3.  $\bar{\Gamma}\bar{X}$  の領域で 2. の操作を行う
4. 領域  $\bar{Y}\bar{\Gamma}$  において固有値が正の傾きで横切る数から負の傾きで横切る数を引く (この領域では固有値は  $g_y$  のセクターに分かれない)
5. 以上で得られた数を合計し、mod 4 を計算すると  $\chi_y$  が得られる

以上の手順による計算のイメージ図を図 3 に示した。

## 2.8 Wallpaper fermion に関して

Wallpaper fermion は 2018 年に Wieder によって定義された 3 次元結晶の 2 次元表面におけるギャップレスな準粒子励起である [13]。この言葉が定義される以前から、wallpaper fermion の一種である表面状態は研究されていたが、一部のノンシンモルフィックな wallpaper 群で記述される結晶対称性が存在する表面においてそれまで考えられていたものよりも縮退度の高い状態が実現することが示された。本研究の目的はこのような高い縮退度をもつ表面状態がもつ特有の物性現象を見出すことである。ここでは、イントロダクションとして、wallpaper fermion の定義とそれに関する基本的な事項を紹介した後に、wallpaper fermion に関する研究の現状を分析する。

## 2.9 Wallpaper fermion の定義と基本的な性質

ここでは、本論文の主要なテーマである引用 [13] で提唱された wallpaper fermion に関してこの論文をもとにレビューを行う。

### 2.9.1 対称性によるバンド縮退

具体的にトポロジカル相の分類を考える前に、wallpaper fermion の運動量空間における性質をまとめる。以下では、グライドと時間反転対称性に着目して、これらの対称性に起因する wallpaper fermion の特徴を示していく。まず、wallpaper fermion とは以下で定義されるトポロジカル結晶絶縁体 (TCI) 表面における準粒子励起のことである。

#### Definition 17: Wallpaper fermion

3 次元結晶の 2 次元表面において wallpaper 群によって保護されるギャップレス励起

この定義に基づくと、wallpaper fermion はシンモルフィックな対称性によって保護されるもの [15] と、ノンシンモルフィックな対称性によって保護されるもの [12, 16, 17], に大別される。本論文では後者のノンシンモルフィックな結晶対称性が存在する場合に着目し、以降、単に wallpaper fermion と表記する場合には常にノンシンモルフィックな対称性によって保護されたものを指すことにする。wallpaper 群は全部で 17 種類存在するが、そのうちノンシンモルフィックなものはグライドを含むものであり  $pg$ ,  $pmg$ ,  $pgg$ ,  $p4g$  の 4 種類である。これらの wallpaper 群によって保護される状態はシンモルフィックな wallpaper 群で保護されるもの比べて高い縮退度をもつ\*5。上記 4 つのグライドを含む wallpaper 群のうち、グライドが単独に含まれる  $pg$ ,  $pmg$  によって保護される表面状態は hourglass 型 [22, 23] と時間反転対称性の破れを伴う Möbius の帯型 [24, 25], の 2 種類が存在し、これらは運動量空間におけるグライドの対称線上で 2 重縮退をもつ。一方、2 つのグライドが含まれる  $pgg$  または  $p4g$  で保護される表面状態は時間反転対称性も存在する場合、時間反転対称点 (TRIM) において 4 重縮退を持つことができる。wallpaper fermion に関する以下の議論では特にこの wallpaper 群  $pgg$  または  $p4g$  によって保護される表面状態に着目する。

まず、次の主張を証明することから始める。

**Theorem 10** (wallpaper fermion の縮退度).  $z$  軸に垂直な表面に 2 つの直交するグライド  $\hat{g}_x = \{m_x|0, 1/2, 0\}$ ,  $\hat{g}_y = \{m_y|1/2, 0, 0\}$  と、 $\hat{\Theta}^2 = -1$  を満たす時間反転対称性が存在するとき、スピフルな系を考えると、BZ の  $\bar{M}$  点 ( $k_x = k_y = \pi$ ) においてエネルギー固有状態は 4 重縮退する。ここで、格子定数は  $a = 1$  としている。

**Lemma 2.**  $\{\hat{A}, \hat{B}\} = [\hat{A}, \hat{\Theta}] = [\hat{B}, \hat{\Theta}] = 0$ ,  $\hat{A}^2 = 1$  を満たすユニタリ演算子  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$  に加え、反ユニタリ演算子  $\hat{\Theta}$  と可換なハミルトニアンと  $\hat{A}$  の同時固有状態  $|\psi\rangle$  は直交する 4 つの縮退している状態  $|\psi\rangle$ ,  $\hat{B}|\psi\rangle$ ,  $\hat{\Theta}|\psi\rangle$ ,  $\hat{\Theta}\hat{B}|\psi\rangle$  の一部である。

*Proof.* まず、演算子  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$ ,  $\hat{\Theta}$  全てとハミルトニアンは可換であるため、4 つの状態  $|\psi\rangle$ ,  $\hat{B}|\psi\rangle$ ,  $\hat{\Theta}|\psi\rangle$ ,  $\hat{\Theta}\hat{B}|\psi\rangle$  が全

\*5 実際、シンモルフィックな対称性で保護される 3 次元系 [18] は量子スピンホール相であり、ミラー TCI 表面の回転対称性は BZ における高対称線上に 2 重縮退する自由 fermion の状態を保護する [19–21] のに対し、ノンシンモルフィックな wallpaper 群で保護されるものは 4 重縮退をもつものもあり、本論文ではこのような縮退度の高い状態に着目する。

て同じエネルギー固有値を持つことは明らかである。これらの状態の直交性を示す。まず、 $\hat{T}^2 = -1$  より、

$$\langle \psi | \hat{\Theta} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{B}^{-1} \hat{\Theta} \hat{B} | \psi \rangle = 0 \quad (57)$$

が成立する。<sup>\*6</sup> ここで、 $\hat{A}^2 = 1$  より同時固有状態に対する演算子  $\hat{A}$  の固有値は  $\pm 1$  であり、これを明示的に  $|\psi, \pm\rangle$  と書くことにする。今、 $\{\hat{A}, \hat{B}\} = 0$  であるため、

$$\hat{B} |\psi, \pm\rangle = w_B |\psi, \mp\rangle, \quad w_B \in U(1) \quad (58)$$

が成立する。したがって、

$$\langle \psi | B | \psi \rangle = 0 \quad (59)$$

が導かれる。また、 $\hat{B} |\psi\rangle, \hat{\Theta} |\psi\rangle$  に対して  $[\hat{A}, \hat{\Theta}] = 0, \hat{A}^2 = 1$  を用いて

$$\begin{aligned} \langle \psi, \pm | \hat{B}^{-1} \hat{\Theta} | \psi, \pm \rangle &= \frac{1}{w_B} \langle \psi, \mp | \hat{\Theta} | \psi, \pm \rangle \\ &= \frac{1}{w_B} \langle \psi, \mp | \hat{A} \hat{\Theta} \hat{A} | \psi, \pm \rangle \\ &= -\frac{1}{w_B} \langle \psi, \mp | \hat{\Theta} | \psi, \pm \rangle = 0 \end{aligned} \quad (60)$$

を導ける。同様に

$$\langle \psi | \hat{\Theta} \hat{B} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{\Theta}^\dagger \hat{\Theta} \hat{B} | \psi \rangle = 0 \quad (61)$$

である。以上より命題は示された。  $\square$

**Theorem 10** の証明. まず、系を記述するハミルトニアンを  $H$  として、仮定より、

$$[H, \hat{g}_x] = [H, \hat{g}_y] = [H, \hat{T}] = 0 \quad (62)$$

という交換関係が成立する。今、スピフルな系を考えており、時間反転対称性が  $\hat{\Theta}^2 = -1$  を満たすため、この演算子は具体的に

$$\hat{\Theta} = i\sigma_y K \quad (63)$$

と定義できる。ここで、 $\sigma_i$  はスピンに対応するパウリ行列であり、 $K$  は複素共役演算子である。グライド対称性の性質を示すために、実空間に位置基底  $|x, y\rangle$  に直交するグライドを作用させる場合を考える。

$$\hat{g}_y \hat{g}_x |x, y\rangle = \hat{g}_y (-i\sigma_x) |-x, y + 1/2\rangle = -\sigma_y \sigma_x |-x + 1/2, -y - 1/2\rangle \quad (64)$$

$$\hat{g}_x \hat{g}_y |x, y\rangle = \hat{g}_x (-i\sigma_y) |x + 1/2, -y\rangle = -\sigma_x \sigma_y |-x - 1/2, -y + 1/2\rangle \quad (65)$$

したがって、並進演算子  $\hat{T}$  を用いて

$$\hat{g}_y \hat{g}_x = -\hat{T}(\hat{x} - \hat{y}) \hat{g}_x \hat{g}_y \quad (66)$$

が成立する。ここで、 $T(\hat{x})$  は  $x$  軸方向に単位長さ分並進することに対応している。これを運動量空間  $(k_x, k_y)$  で表示すると、

$$\hat{g}_y \hat{g}_x = -e^{-i(k_x - k_y)} \hat{g}_x \hat{g}_y \quad (67)$$

と書くことができる。したがって、 $\bar{M}$  点 ( $k_x = k_y = \pi$ ) では

$$\{\hat{g}_x, \hat{g}_y\} = 0 \quad (68)$$

---

<sup>\*6</sup> これは Kramers 縮退として知られる

という反交換関係が成立する。次に、時間反転対称性  $\hat{\Theta}$  とグライドの関係を求める。ここで、反ユニタリ演算子  $\hat{\Theta}$  の表現行列を  $U(\hat{T})$  として、時間反転対称性は波数空間において

$$U(\hat{\Theta})H_kU(\hat{\Theta})^{-1} = H_{-k} \quad (69)$$

と定義されることに注意すると、

$$\hat{\Theta}\hat{g}_x|k_x, k_y\rangle = \hat{\Theta}e^{-ik_y/2}(-i\sigma_x)|-k_x, k_y\rangle = (-i\sigma_z)e^{ik_y/2}K|k_x, -k_y\rangle \quad (70)$$

$$\hat{g}_x\hat{\Theta}|k_x, k_y\rangle = \hat{g}_xi\sigma_yK|-k_x, -k_y\rangle = \sigma_z e^{-ik_y/2}K|k_x, -k_y\rangle \quad (71)$$

となる。したがって、 $\hat{g}_x\hat{\Theta} = -e^{-ik_y}\hat{\Theta}\hat{g}_x$  であり、 $\hat{g}_y$  についても単に  $x$  と  $y$  を入れ替えた関係が成立する。したがって、 $\bar{M}$  においては

$$[\hat{\Theta}, \hat{g}_x] = [\hat{\Theta}, \hat{g}_y] = 0 \quad (72)$$

を満たす。以上で導いた関係式 (62), (68), (72) と、 $\bar{M}$  点において  $\hat{g}_x^2 = \hat{g}_y^2 = 1$  であることより、Lemma 2 を用いると 4 重縮退する状態の存在が示される。□

ここまでで、結晶表面に  $pgg$  または  $p4g$  の結晶対称性が存在し、かつ時間反転対称である場合、表面 BZ の  $\bar{M}$  点において 4 重縮退する状態の存在が示された。これは本研究で着目する wallpaper fermion の最も根本的な特徴であり、ノンシンモルフィックな結晶対称性が存在しない通常のトポロジカル結晶絶縁体表面におけるギャップレス励起としての Dirac fermion とは根本的に異なる点である。さらに、上記の代数的性質を満たす対称性が存在する非磁性表面群は wallpaper 群  $pgg$ ,  $p4g$  のみであることから、wallpaper fermion はスピン軌道相互作用の強い系において存在する 4 重縮退する表面状態の唯一の例である [26]。ここで、wallpaper fermion が縮退点周りで線形分散を持つことは、第??章において対称性の観点から導出した一般的な有効ハミルトニアンが線形分散を持つことから逆説的に示される。

続いて、wallpaper fermion の特徴として運動量空間の高対称線上における縮退を示す。ここでは具体的に  $\bar{X}\bar{M}$  線 ( $k_x = \pi, k_y \in [0, \pi]$ ) を考える。今、周期境界条件によって  $k_x = \pi$  と  $k_x = -\pi$  は同一視されるため、この線上におけるハミルトニアンの固有状態は  $\hat{g}_x$  の同時固有状態となる。すなわち、

$$\hat{g}_x|(k_x = \pi; k_y), \pm\rangle = \pm ie^{ik_y/2}|(k_x = \pi; k_y), \pm\rangle \quad (73)$$

以降この表示を簡略化して  $|(k_x = \pi; k_y), +\rangle \equiv |+\rangle$  と定義する。この状態に  $\hat{\Theta}\hat{g}_y$  を作用させたとき、 $\hat{g}_x$  の固有値は

$$\hat{g}_x(\hat{\Theta}\hat{g}_y|+\rangle) = -ie^{ik_y/2}(\hat{\Theta}\hat{g}_y|+\rangle) \quad (74)$$

となる。したがって、 $(\hat{\Theta}\hat{g}_y|+\rangle)$  は異なる  $\hat{g}_x$  のセクターに属しており、すなわち、 $\bar{X}\bar{M}$  及び  $\bar{Y}\bar{M}$  線上で状態は 2 重に縮退する。

## 2.9.2 不変量の定義

ここでは、2.7 で定義した  $\mathbb{Z}_4$  不変量  $\chi_y$  を拡張して、グライドが 2 つ存在する時間反転対称な系に対して不変量を構成し、それを Wilson loop によって計算する手法を示す。式 (56) はグライド  $g_y$  に基づいて定義した不変量であったが、今、wallpaper 群  $pgg$ ,  $p4g$  を想定するともう 1 つのグライド  $g_x = \{m_x|t, 1/2, 0\}$  も存在する。このとき、グライド  $g_x$  に基づいて不変量  $g_x$  を

$$\chi_x = \frac{1}{\pi} \sum_{j=1}^{n_{\text{occ}}/2} \left[ \theta_j^+(\bar{M}) - \theta_j^+(\bar{Y}) + \int_{\bar{M}\bar{X}} d\theta_j^+ + \int_{\bar{\Gamma}\bar{Y}} d\theta_j^+ \right] + \frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^{n_{\text{occ}}} \int_{\bar{X}\bar{\Gamma}} d\theta_j \quad \text{mod } 4 \quad (75)$$

と定義することができ、このときの  $\pm$  は  $g_x$  の固有値の符号に対応するものである。したがって、(001) 面内で wallpaper 群  $pgg$ ,  $p4g$  の対称性を持ち、かつ、時間反転対称な系に対して、不変量の組み  $(\chi_x, \chi_y)$  が定義される。また、Wilson phase の固有値を用いた計算においても 2.7 で示した手順で  $\bar{X} \leftrightarrow \bar{Y}$  とすればよく、

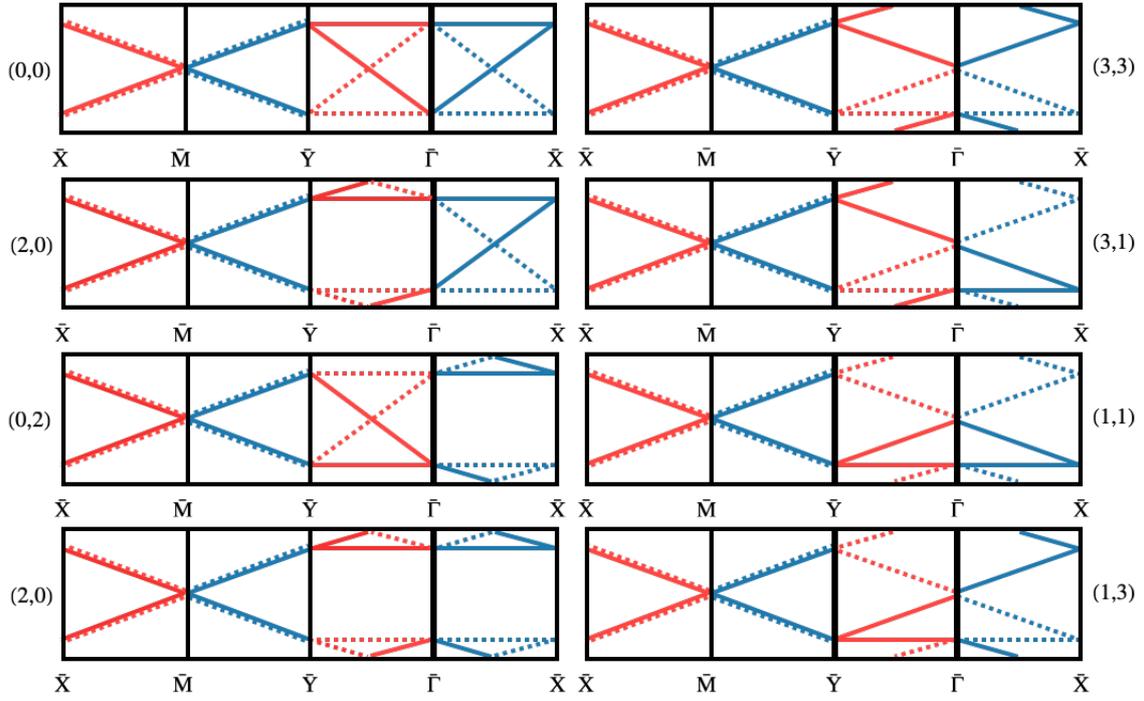


図4 Wilson phase による不変量  $(\chi_x, \chi_y)$  の計算。ここで、赤と青の線はそれぞれグライド  $g_x, g_y$  の固有値でセクターに分けたものであり、実線は + セクター、点線は - セクターに対応する。 $\chi_x$  ( $\chi_y$ ) を計算する際に、 $g_y$  ( $g_x$ ) のセクターで分けられた領域においては両方のセクターに関して和をとることに注意する。

1. プロットを横切るように水平線を描く
2.  $\bar{X}\bar{M}$  の領域においてグライドの + セクターが正の傾きで横切る数から負の傾きで横切る数を引き、全体を 2 倍する
3.  $\bar{Y}\bar{\Gamma}$  の領域で 2. の操作を行う
4. 領域  $\bar{\Gamma}\bar{X}$  において固有値が正の傾きで横切る数から負の傾きで横切る数を引く (この領域では固有値は  $g_y$  のセクターに分かれない)
5. 以上で得られた数を合計し、mod 4 を計算すると  $\chi_y$  が得られる

という手順で求められる。すなわち、図 3 に領域  $\bar{X}\bar{M}$  を書き足して全ての領域において  $g_x$  または  $g_y$  のセクターに分けて書けば良いことになる。以上の手順による計算のイメージ図を図 4 に示す。

ここで、不変量の組み  $(\chi_x, \chi_y)$  には以下で示すいくつかの制約が存在することに注意する。

**Theorem 11.** バルクがバンド絶縁体であるとき、 $\chi_x + \chi_y = 0 \pmod{2}$

*Proof.* まず、グライド対称性の存在により、領域  $\bar{X}\bar{M}\bar{Y}$  においてグライドの固有値に関するセクターは必ず縮退している。よって、 $\bar{Y}\bar{\Gamma}\bar{X}$  において水平線を横切る Wilson phase の回数を数えれば良い。今、バルクの状態は常にバンド絶縁体を実現しているもの仮定している。このとき、ワイル点が存在しないため、3DBZ 中の任意の閉曲面で定義した Chern 数はゼロとならなければならない。したがって、閉路  $\bar{\Gamma}\bar{X}\bar{M}\bar{Y}\bar{\Gamma}$  において Wilson phase が水平線を横切る回数は偶数回でなければならない。 $\bar{X}\bar{M}\bar{Y}$  における縮退を考慮すると、 $\bar{Y}\bar{\Gamma}\bar{X}$  において水平線を横切る Wilson phase の回数は偶数回でなければならない。□

この制約により、存在し得るトポロジカル相の数は図 4 で示した 8 通りのみであることがわかる。したがって、系の基底状態を指定する不変量は  $\eta_{\chi_x, \chi_y} = (\chi_x - \chi_y)/2 \pmod{2}$  を用いて  $(\chi_x, \eta_{\chi_x, \chi_y})$  で定義される  $\mathbb{Z}_4 \times \mathbb{Z}_2$  不変量となる。また、wallpaper 群  $p4g$  を仮定すると、回転対称性  $C_{4z}$  によって  $\chi_x = \chi_y$  が要請される。

以上で定義した  $\mathbb{Z}_4 \times \mathbb{Z}_2$  不変量によってトポロジカルに非自明な基底状態は主に以下の 3 つのトポロジカル相に分類される;

- ( $\chi_x = 1, 3$ ) **Strong topological insulator (STI)**

この相は double glide spin Hall 相と呼ばれ、 $\bar{\Gamma}$ ,  $\bar{X}$ ,  $\bar{M}$  点において 2 重縮退する Kramers 対に加え、 $\bar{M}$  点に 4 縮退点を持つ Dirac fermion が生じる

- ( $\chi_x = 0, 2, \chi_x \neq \chi_y$ ) **Topological crystalline phase**

この相は回転対称性  $C_{4z}$  を破る結晶表面、すなわち、wallpaper 群 pgg が存在する結晶表面において実現し、hourglass fermion[22] と呼ばれる表面状態が実現する。

- ( $\chi_x = \chi_y = 2$ ) **Nonsymmorphic Dirac insulating 相**

この相では、 $\bar{M}$  点において単一の 4 重縮退点を持つ Dirac fermion(以下単に wallpaper fermion と呼ぶ) が創発する

第??章以降の議論においては、3 つ目の nonsymmorphic Dirac insulating 相に着目し、wallpaper fermion の存在に起因する特異な物性現象を明らかにする。

## 2.10 Wallpaper fermion の現状

ここでは、wallpaper fermion に関する近年の進展を紹介する。wallpaper fermion が理論的に発見、定義されたのは 2018 年であり [13]、この段階では単純にノンシンモルフィックな wallpaper 群と時間反転対称性が存在する場合を考慮していた。これは磁気空間群においては gray group に属していることになるが、これをより一般化して、Hwang らによって磁気点群の対称性によって保護される magnetic wallpaper fermion の存在が示された [27]。このような潮流を受け、我々は wallpaper fermion の輸送特性に関する研究を先駆的に行なっていると言える [28]。一方、実験的には wallpaper 群 pgg, p4g を保護するような乱れの少ない表面を作成することが非常に困難であることに起因して wallpaper fermion の直接観測の例は見られなかった。しかし、最近になって wallpaper fermion の存在を示唆するような実験結果が報告され [29]、今後の更なる発展が期待される場所である。

## 付録 A ベクトルバンドルと接続

ここではベクトルバンドルと接続に関する基本的な事柄をまとめておく。以下の内容は多様体や幾何学に関する教科書 [6, 7] や、引用 [5, 8] などの教科書でより詳しい解説がされている。

### A.1 ベクトルバンドル

#### Definition 18: 主バンドル

主バンドル  $(P, M, \pi, G)$  は以下の条件を全て満たすものである

1.  $P, M$  は多様体である
2.  $G$  は  $P$  に対して右から作用する Lee 群である。すなわち、滑らかな写像  $R_g : P \times G \rightarrow P : (p, g) \mapsto pg = R_gp$  が存在し、 $R_{gh^{-1}} = R_{h^{-1}}R_g$  であり、単位元を  $e$  として  $g \neq e$  なる  $g$  に関して  $R_gp \neq p$  が成立する。
3.  $M$  は商空間  $P/G$  であり、射影  $\pi : P \rightarrow M$  が滑らかであるとする。
4.  $P$  は局所自明である。すなわち、 $\forall x \in M$  に対して局所近傍  $U \subset M$  が存在し、かつ、全単射  $\psi : \pi^{-1}(U) \rightarrow U \times G$  が存在するという意味で  $\pi^{-1}(U)$  は  $U \times G$  への微分同相写像である。したがって、任意の  $p \in \pi^{-1}(U)$  に対して  $\phi(pg) = \phi(p)g, \forall g \in G$  なる関数  $\phi : P \rightarrow G$  を用いて  $\psi(p) = (\pi(p), \phi(p))$  となる。

上記の 2. 及び 3. より、任意の組  $p, p' \in \pi^{-1}(x)$  に対して  $p' = pg$  なる  $g \in G$  が存在することがわかる。ここで、 $M$  はバンドルの底空間と呼ばれ、 $P$  はバンドル空間と呼ばれる。また、 $\pi^{-1}(x)$  は  $x \in M$  上のファイバーと呼ばれる。さらに、主バンドルにおけるすべてのファイバーは Lee 群  $G$  への同型写像を与える。

次に transition function と呼ばれる関数  $\psi_{\alpha\beta} : U_\alpha \cap U_\beta \rightarrow G$  を次のように定義する;

**Definition 19: transition function**

自明なバンドル  $M \times G$  を考える。ここで、多様体  $M$  の開被覆  $\{U_\alpha\}$  に関する  $\pi^{-1}(U_\alpha)$  は主バンドルとなる。すなわち、自明な主バンドル  $\pi^{-1}(U_\alpha)$  上において微分同相写像  $p \mapsto \psi_\alpha(p) = (\pi(p), \phi_\alpha(p))$  が存在する。ここで、 $\phi_\alpha$  は  $U_\alpha \times G \rightarrow G$  なる関数である。今、空集合でない領域  $U_\alpha \cap U_\beta$  及び  $p \in \pi^{-1}(U_\alpha \cap U_\beta)$  を考える。このとき、

$$\phi_\beta(pg) (\phi_\alpha(pg))^{-1} = \phi_\beta(p)g g^{-1} (\phi_\alpha(p))^{-1} = \phi_\beta(p) (\phi_\alpha(p))^{-1} \quad (76)$$

が成立する。ここで  $(\phi_\alpha(pg))^{-1}$  は  $(\phi_\alpha(pg))$  の逆元となる  $G$  の要素である。したがって、 $\phi_\beta(pg) (\phi_\alpha(pg))^{-1}$  は  $g$  に依存せず、さらに、すべての  $p, p' \in \pi^{-1}(x)$  に対して  $p = p'g$  となる  $g \in G$  が存在する。以上より、 $\phi_\beta(pg) (\phi_\alpha(pg))^{-1}$  は  $\pi(p) \in U_\alpha \cap U_\beta \subset M$  のみを通して  $p$  に依存している。結果として、 $U_\alpha \cap U_\beta \neq \emptyset$  を満たすすべての組  $(U_\alpha, U_\beta)$  に対して transition function  $\psi_{\beta\alpha}(\pi(p)) = \phi_\beta(p) (\phi_\alpha(p))^{-1}$ ,  $\pi(p) \in U_\alpha \cap U_\beta$  が存在し、これは次の関係式を満たす;

$$\psi_{\alpha\beta}(x) = (\psi_{\beta\alpha}(x))^{-1}, \quad \psi_{\gamma\alpha}(x) = \psi_{\gamma\beta}(x)\psi_{\beta\alpha}(x) \quad \forall x \in U_\alpha \cap U_\beta \cap U_\gamma \quad (77)$$

これらは関数  $\psi_{\alpha\beta}(x)$  の値が Lie 群であることより自明であり、等式の右辺は Lie 群の作用を表す。また、 $\gamma = \alpha = \beta$  に関して第 2 式は  $\psi_{\alpha\alpha}(x) = e$  となる。

上で定義した transition function は底空間を掃いた際にファイバー  $\pi^{-1}(x)$  がどのように変化するかを示すものであり、その具体的な様子は次に考える具体例で明確なものとなる。

## A.2 Möbius の帯

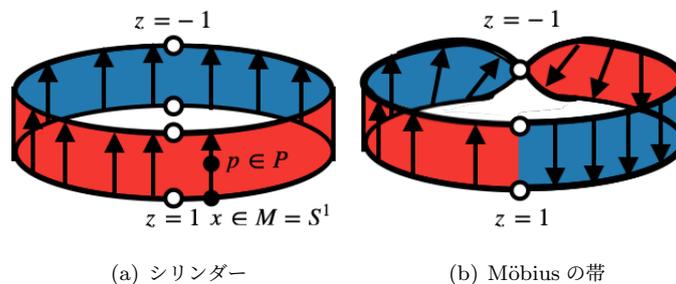


図 5  $g \in G$  の定義域を有限区間で区切って表示したバンドル  $P$ 。(a) は  $\psi_{12}(z) = \psi_{21}(z) = e$  のバンドルに対応しており、下底は底空間  $M = S^1$  であり、そこから伸びる矢印がファイバー  $\pi^{-1}(x)$  に対応する。 $g \in G$  のファイバーに対する作用は点  $p \in P$  を矢印に沿って動かす。(b) は  $\psi_{12}(z) = \psi_{21}(z) = I$  のバンドル  $P$  に対応しており、これは Möbius の帯になっていることがわかる。ここで、本来、矢印の向きは ill-be-defined であるが (c.f. Möbius の帯は向きづけ不可能な図形として知られる)、便宜上  $\lim_{\alpha \rightarrow +0} e^{i\alpha}$  において赤の面で上向になるように表示している。底空間を一周したとき矢印の向きが反転していることから確かに Möbius の帯は  $\psi_{12}(z) = \psi_{21}(z) = I$  のバンドルに対応していることがわかる。

次に transition function が重要な役割を果たす最も簡単な例として Möbius の帯を紹介する。ここで、底空間として  $M = S^1 \ni e^{i\alpha} = z$  を設定する。このとき  $\alpha$  は  $M$  上の位置を与える。この底空間  $M$  の開被覆  $\{U_1, U_2\}$ ,  $U_1 = S^1 \setminus \{1\}$ ,  $U_2 = S^1 \setminus \{-1\}$  を考える。また、Lie 群  $G$  は  $g \in \mathbb{R}$  で与えられる並進と反転  $\{I\}$  を含む  $G = \mathbb{R} \cup \{I\}$  とする。この Lie 群  $G$  において積は

$$gh = hg = g + h, \quad gI = Ig = -g, \quad I^2 = e, \quad \forall g, h \in \mathbb{R} \quad (78)$$

で与えられる。このとき、等式 (77) を満たす最も簡単な例は  $\psi_{21}(z) = \psi_{12}(z) = e$  と  $\psi_{21}(z) = \psi_{12}(z) = I$  である。まず、 $\psi_{21}(z) = \psi_{12}(z) = e$  のとき、バンドル  $P$  は無限に長いシリンダーとなる (図 5(a))。一方、 $\psi_{21}(z) = \psi_{12}(z) = I$

のとき、これは、底空間を掃引した際に  $\phi(p) \rightarrow (\phi(p))^{-1}$  となることを示しており、このとき、バンドルは Möbius の帯となる (図 5(b))。逆に、開被覆  $\{U_1, U_2\}$ ,  $U_1 = S^1 \setminus \{1\}$ ,  $U_2 = S^1 \setminus \{-1\}$  を持つ底空間  $M = S^1 \ni e^{i\alpha} = z$  に関して、 $\psi_{21}(z) = \psi_{12}(z) = I$  を満たすファイバー  $\pi^{-1} : M \rightarrow P$  でにより表されるバンドル  $P = M \times G$ ,  $G = \mathbb{R} \cup \{I\}$  が無限に長い Möbius の帯の定義であると言える。

### A.3 接続と並行移動

#### Definition 20: 切断

写像  $\sigma : M \rightarrow P$  であり、

$$\pi \circ \sigma(x) = x, \quad x \in M \quad (79)$$

となるもの。すなわちこれは、ファイバー  $\pi^{-1}(x)$  から一つの元を選び出すものと言える。

ここで、ファイバーバンドル  $P$  上の切断全体を  $\Gamma(P) \ni \sigma$  と書くこととし、多様体  $M$  上の微分可能な関数全体を  $A^0(M)$  とする\*7。このとき、関数  $f \in A^0(M)$  と切断  $\sigma \in \Gamma(P)$  の積はまた切断  $f\sigma \in \Gamma(P)$  である。さらに、関数  $f \in A^0(M)$  に対して微分  $d$  は線形写像

$$d : A^0(M) \rightarrow A^1(M) \quad (80)$$

であり、Leibniz の式

$$d(f \cdot g) = df \cdot g + f \cdot dg, \quad \forall f, g \in A^0(M) \quad (81)$$

が成立するものと定義される。このとき、 $A^1(M)$  は共変接ベクトルバンドル  $T^*M$ \*8の切断全体  $\Gamma(T^*M)$  に一致する。このことに注意して、バンドル  $P$  の接続 (共変微分) を次のように定義する;

#### Definition 21: 接続

線形写像

$$\nabla : \Gamma(P) \rightarrow \Gamma(T^*M \otimes P) \quad (82)$$

で、Leibniz の式

$$\nabla(f\sigma) = df \otimes \sigma + f \cdot \nabla\sigma. \quad f \in A^0(M), \sigma \in \Gamma(P) \quad (83)$$

を満たすもの。ここで、 $\nabla\sigma$  は  $\sigma$  の共変微分と呼ばれ、接ベクトル  $Z \in T_x(M)$  に対して  $\nabla\sigma(X)$  はバンドル  $\pi^{-1}(x)$  の元である。

#### Definition 22: 接続形式

バンドル  $P$  は局所的に 1 次独立な切断  $(e_1, e_2, \dots, e_r)$  が存在し、 $P$  の任意の切断  $\sigma$  を次のように書く;

$$\sigma = \sum_{\lambda} \sigma^{\lambda} e_{\lambda} \quad (84)$$

この  $(e_1, e_2, \dots, e_r)$  を局所標構場と呼ぶ。任意の切断はこの形で一意に書くことができるため、 $\nabla$  を  $P$  の共変微分とすると、

$$\nabla e_{\lambda} = \sum_{\mu} \omega_{\lambda}^{\mu} e_{\mu} \quad (85)$$

\*7 一般に、 $M$  上の  $p$  次微分形式を  $A^p(M)$  とする

\*8  $x \in M$  における  $M$  上の接空間を  $T_x(M)$  とし、その双対空間を  $T_x^*(M)$  とする。接空間の集合  $TM = \cup_{x \in M} T_x(M)$  を接ベクトルバンドル、 $T^*M = \cup_{x \in M} T_x^*(M)$  を共変接ベクトルバンドルと呼ぶ。

とんる。ここで、 $\omega_\lambda^\mu$  は局所的に定義される 1 次微分形式である。以上より、一般の切断の共変微分は

$$\nabla\sigma = \sum_\lambda \left[ d\sigma^\lambda + \sum_\mu \omega_\mu^\lambda \sigma^\mu \right] e_\lambda \quad (86)$$

と書くことができる。このときの  $\omega = (\omega_\mu^\lambda)$  を  $\nabla$  の接続形式と呼ぶ。

次に主ファイバーバンドルの接続を考える。まず、transition function  $\{\psi_{\alpha\beta}\}$  を用いて行列値に値を持つ微分形式  $\omega_\alpha$  を用いて  $M$  の開被覆  $\{U_\alpha\}$  で定義されるベクトルバンドルの接続は

$$\omega_\beta = \psi_{\alpha\beta}^{-1} \omega_\alpha \psi_{\alpha\beta} + \psi_{\alpha\beta}^{-1} d\psi_{\alpha\beta}, \quad \text{on } U_\alpha \cap U_\beta \quad (87)$$

を満たすもので与えられる。次にリー環  $\mathfrak{g}$  値に値を持つ  $U_\alpha \times G$  上の 1 次微分形式  $\tilde{\omega}_\alpha$  を

$$\tilde{\omega}_\alpha = s_\alpha^{-1} \omega_\alpha s_\alpha + s_\alpha^{-1} ds_\alpha, \quad s_\alpha \in G \quad (88)$$

と定義できる。ここで、 $U_\alpha \cap U_\beta$  上で  $\tilde{\omega}_\alpha = \tilde{\omega}_\beta$  であるため、 $\pi^{-1}(U_\alpha)$  上で

$$\omega = s_\alpha^{-1} \omega_\alpha s_\alpha + s_\alpha^{-1} ds_\alpha \quad (89)$$

とおけば、 $\omega$  は  $P$  上で定義された  $\mathfrak{g}$  値に値を持つ 1 次微分形式である。

これを用いて、主ファイバーバンドル上の接続は次のように与えられる；

**Theorem 12.** 主ファイバーバンドル  $P$  上の接続は群  $G$  のリー環  $\mathfrak{g}$  に値を持つ  $P$  上の 1 次微分形式  $\omega$  で、

$$(R_g)_* \omega = g^{-1} \omega g, \quad g \in G, \quad (90)$$

$$\omega(A^*) = A, \quad A \in \mathfrak{g}, \quad (91)$$

を満たすもので与えられる。ここで、 $A^*$  は 1 パラメータ部分群  $e^{tA}$  の作用が  $P$  上に引き起こすベクトル場であり、ファイバーに沿ったベクトル場となる。

ここで与えられる接続は次で特徴づけられるものと全く等価なものとなる：

#### Definition 23: 垂直部分空間と水平部分空間

主ファイバーバンドル  $(P, M, \pi, G)$  を考える。ここで、 $T_p(P)$  は点  $p$  における  $P$  上の接空間であり、 $G_p$  は  $T_p(P)$  の線形部分空間であるとする。また、 $P$  に対する群  $G$  の作用  $R_gp = pg$  により誘導される接空間の写像を  $(R_g)_* : T_p(P) \rightarrow T_{pg}(P)$  と表すこととする。このとき、 $P$  上の接続  $\Gamma$  は次の関係式を満たす  $Q_p \subset T_p(P)$  で特徴づけられる；

1.  $T_p(P) = G_p \oplus Q_p$
2.  $Q_{pg} = (R_g)_* Q_p$
3.  $Q_p$  は  $p \in P$  で滑らかである

ここで、 $G_p$  は垂直部分空間、 $Q_p$  は水平部分空間と呼ばれる。

換言すると、接続とは接空間を垂直部分空間と水平部分空間に一意的に分解する操作そのものである。

## 付録 B ホモトピー

ここでは、ホモトピーに関して、トポロジカル絶縁体におけるバルク-境界対応を理解するための最低限の前提知識をまとめる。ホモトピーに関する数学的な詳細は引用 [9] が詳しく、これをトポロジカル絶縁体に適用することに関しては引用 [11] などで解説されている。

まず、関数のホモトピーを次のように定義する。

**Definition 24: 関数のホモトピー**

$X, Y$  を位相空間、 $f, g : X \rightarrow Y$  を連続写像とする。 $f$  が  $g$  にホモトープであるとは、連続写像  $H : X \times [0, 1] \rightarrow Y$  が存在して、

$$H(x, 0) = f(x), \quad H(x, 1) = g(x) \quad (\forall x \in X) \quad (92)$$

が成立することである。ここで、 $H$  を  $f$  から  $g$  へのホモトピーと呼び、 $f$  と  $g$  が互いにホモトープであることを

$$f \simeq g \quad (93)$$

と表す。この関係は同値関係となる。

今、位相空間  $X$  として  $[0, 1] \in S^1$  を選ぶと、写像  $f, g$  は位相空間  $Y$  上のループに対応することになる。ここで、ホモトピー同値関係を用いてループに関して基本群  $\pi_1$  を次のように定義できる。

**Definition 25: 基本群**

位相空間  $Y$  上の2つのループ  $l, l' : [0, 1] \rightarrow Y$  に対して  $l \simeq l'$  が成立することを考える。このとき、基点  $l(0) = l(1) = p_0 \in Y$  をもつループ全体の集合  $\Omega(Y, p_0)$  に対してホモトピー同値に関する同値類別

$$\pi_1(Y, p_0) = \Omega(Y, p_0) / \simeq \quad (94)$$

を定義する。ここで、ループの積

$$l' \circ l(t) = \begin{cases} l(t) & 0 \leq t \leq 1/2 \\ l'(t) & 1/2 \leq t \leq 1 \end{cases} \quad (95)$$

を定義し、同値類に積構造

$$[l] \circ [l'] = [l \circ l'] \quad (96)$$

を定義すると、 $\pi_1(Y, p_0)$  は群をなし、この  $\pi_1(Y, p_0)$  を基本群と呼ぶ。

続いて、この定義を拡張して高次元ホモトピー群を定義する。

**Definition 26: ホモトピー群**

位相空間  $X$  を  $d$  次元閉曲面とし、連続写像  $f_1, f_2 : X \rightarrow Y$  に対して  $f_1 \simeq f_2$  が成立することを考える。このとき、連続写像全体の集合  $\{f_i\} = \Omega(Y, p_0)$  に対してホモトピー同値に関する同値類別

$$\pi_d(Y, p_0) = \Omega(Y, p_0) / \simeq \quad (97)$$

を与える。このとき、写像  $f_i$  の合成写像を用いて積構造を与えると、 $\pi_d(Y, p_0)$  は群をなし、これを  $d$  次元ホモトピー群と呼ぶ。

ここで、ホモトピーに関する重要な性質をいくつか紹介する。詳しい証明は参考文献を参照していただきたい。まず、ホロノミーとホモトピーの間には以下の関係が成立する。

**Theorem 13.** 位相空間  $X$  のループ  $l, l'$  に対して、 $l \simeq l'$  が成立するとき、このループに対するホロノミー  $\Gamma(l), \Gamma(l')$  に対して  $\Gamma(l) = \Gamma(l')$  が成立する。

この性質は、ホモトピーがホロノミーをより広い枠組みへと一般化したものに相当することを示している。

**Theorem 14.** 位相空間  $X, Y$  それぞれに基点  $p_0, q_0$  が存在し、連続写像  $f : (X, p_0) \rightarrow (Y, q_0)$  が与えられたとき、

$$f_* : \pi_1(X, p_0) \rightarrow \pi_1(Y, q_0) \quad (98)$$

が定まる。

ここで定義された  $f_*$  は誘導された準同型写像とよぶ。この誘導された準同型写像は次のような性質をもつ。

**Theorem 15.**  $f, g : (X, p_0) \rightarrow (Y, q_0)$  が基点を止めた連続写像であるとし、これらが基点を止めたままホモトープならば、 $f, g$  によって誘導される準同型  $f_*, g_*$  は互いに一致する；

$$f_* = g_* : \pi_1(X, p_0) \rightarrow \pi_1(Y, q_0) \quad (99)$$

## 参考文献

- [1] R. Kobayashi, [Phys. Rev. B \*\*105\*\*, 035153 \(2022\)](#).
- [2] M. Barkeshli, Y.-A. Chen, P.-S. Hsin, and N. Manjunath, [Phys. Rev. B \*\*105\*\*, 235143 \(2022\)](#).
- [3] C. Bradley and A. Cracknell, [The mathematical theory of symmetry in solids](#) (Oxford University Press, 2010).
- [4] G. Burns and M. Glazer, Anthony, [SPACE GROUPS FOR SOLID STATE SCIENTISTS, 3rd Edition](#) (Academic Press, 2013).
- [5] M. Nakahara, [Geometry, Topology and Physics](#) (IOP Publishing Ltd, 1990).
- [6] 小林昭七, [接続の微分幾何とゲージ理論](#) (裳華房, 1989).
- [7] L. Tu, W., [An Introduction to Manifolds](#) (Springer, 2010).
- [8] H. Eschring, [Topology and Geometry for Physics](#) (Springer, 2011).
- [9] 松本幸夫, [トポロジー入門](#) (岩波書店, 1985).
- [10] 倉辻比呂志, [幾何学的量子力学](#) (丸善出版, 2012).
- [11] 野村健太郎, [トポロジカル絶縁体・超伝導体](#) (丸善出版, 2016).
- [12] K. Shiozaki, M. Sato, and K. Gomi, [Phys. Rev. B \*\*93\*\*, 195413 \(2016\)](#).
- [13] B. J. Wieder, B. Bradlyn, Z. Wang, J. Cano, Y. Kim, H.-S. D. Kim, A. M. Rappe, C. Kane, and B. A. Bernevig, [Science \*\*361\*\*, 246 \(2018\)](#).
- [14] C. Z. Xiong and A. Alexandradinata, [Phys. Rev. B \*\*97\*\*, 115153 \(2018\)](#).
- [15] L. Fu, [Phys. Rev. Lett. \*\*106\*\*, 106802 \(2011\)](#).
- [16] K. Shiozaki, M. Sato, and K. Gomi, [Phys. Rev. B \*\*95\*\*, 235425 \(2017\)](#).
- [17] H. Song, S.-J. Huang, L. Fu, and M. Hermele, [Phys. Rev. X \*\*7\*\*, 011020 \(2017\)](#).
- [18] B. Bradlyn, L. Elcoro, J. Cano, M. G. Vergniory, Z. Wang, C. Felser, M. I. Aroyo, and B. A. Bernevig, [Nature \*\*547\*\*, 298 \(2017\)](#).
- [19] T. H. Hsieh, H. Lin, J. Liu, W. Duan, A. Bansil, and L. Fu, [Nature communications \*\*3\*\*, 982 \(2012\)](#).
- [20] Y. Tanaka, Z. Ren, T. Sato, K. Nakayama, S. Souma, T. Takahashi, K. Segawa, and Y. Ando, [Nature Physics \*\*8\*\*, 800 \(2012\)](#).
- [21] S.-Y. Xu, C. Liu, N. Alidoust, M. Neupane, D. Qian, I. Belopolski, J. Denlinger, Y. Wang, H. Lin, L. a. Wray, et al., [Nature communications \*\*3\*\*, 1192 \(2012\)](#).
- [22] Z. Wang, A. Alexandradinata, R. J. Cava, and B. A. Bernevig, [Nature \*\*532\*\*, 189 \(2016\)](#).
- [23] A. Alexandradinata, Z. Wang, and B. A. Bernevig, [Phys. Rev. X \*\*6\*\*, 021008 \(2016\)](#).
- [24] C. Fang and L. Fu, [Phys. Rev. B \*\*91\*\*, 161105 \(2015\)](#).
- [25] K. Shiozaki, M. Sato, and K. Gomi, [Phys. Rev. B \*\*91\*\*, 155120 \(2015\)](#).
- [26] X.-Y. Dong and C.-X. Liu, [Phys. Rev. B \*\*93\*\*, 045429 \(2016\)](#).
- [27] Y. Hwang, Y. Qian, J. Kang, J. Lee, D. Ryu, H. C. Choi, and B.-J. Yang, [npj Computational Materials \*\*9\*\*, 65 \(2023\)](#).

- [28] K. Mizuno and A. Yamakage, [Phys. Rev. B](#) **107**, 235301 (2023).
- [29] L. Chen, L. Zhou, Y. Zhou, C. Liu, Z. Guo, K. Liao, S. Gao, W. Fan, J. Xu, Y. Guo, et al., [Science China Physics, Mechanics & Astronomy](#) **66**, 217011 (2023)