

結晶対称性とトポロジカル絶縁体

塩崎 謙

京都大学基礎物理学研究所

2023年9月3日

概要

本講義では、トポロジカル絶縁体とは、対称性を満たしつつかつ指数関数的に局在する Wannier 状態を構成できないような Bloch 波動関数である、という観点から解説します。まず講義の前半で指数関数的に局在する Wannier 状態の構成における障害として Chern 数を導入します。次に、Wannier 状態の構成における対称性の役割を調べるために物理的に重要な対称性である時間反転対称性を取り上げます。さらに、結晶対称性の例として、空間反転対称性と Wannier 状態の関係について調べます。結晶対称性が導入されることで現れる絶縁体のクラスとして、「脆いトポロジカル絶縁体」と「高次トポロジカル絶縁体」について紹介します。時間が許す限り、結晶対称性とトポロジカルバンド理論の関係についても解説します^{*1}。

1 設定、記法、バンド絶縁体について

本論に入る前にバンド絶縁体についてまとめる。電子系のハミルトニアンは強束縛近似のもとで以下のように書かれる。

$$\hat{H} = \sum_{ij} (t_{ij} c_i^\dagger c_j + h.c.) + \sum_{ijkl} V_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k + \dots \quad (1)$$

ここで、 $i = (\mathbf{x}, \sigma)$ は格子点 $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d$ と内部自由度 $\sigma = 1, \dots, N$ を表すものとする。 d は空間次元である。本講義では 2 体以上の相互作用項は無視できるか、あるいは平均場近似の範囲内で扱うことができる系、つまり自由フェルミオン系を考える。本講義では、超伝導体は扱わない。結晶対称性の役割に興味があるので、常に並進対称性を課し、ハミルトニアンは以下の形のもの考える。

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} c_\sigma^\dagger(\mathbf{x}) H_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) c_{\sigma'}(\mathbf{y}). \quad (2)$$

1 体のハミルトニアン $H(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ については短距離とする。つまり、 $H(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ は 2 点間の距離 $|\mathbf{x} - \mathbf{y}|$ に関して指数関数的に減衰するものとする^{*2}。フーリエ変換

$$c_\sigma(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{x}} c_\sigma(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (3)$$

^{*1} 本講義で用いる Mathematica のコードは <http://www2.yukawa.kyoto-u.ac.jp/~ken.shiozaki/doc/lec.nb> から入手可能です。

^{*2} 具体的な強束縛近似模型を考える際は、より強い意味の短距離性である、「ある $R > 0$ が存在して $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| > R$ のとき $H(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = 0$ 」なる状況を考える。本講義の範囲内では両者の短距離性の違いに敏感な物性は議論しない。

を導入すると,

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} c_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) H_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{k}) c_{\sigma'}(\mathbf{k}) \quad (4)$$

と書かれる. Bloch 波数 \mathbf{k} は Brillouin ゾーン (BZ) に値を取る. 空間 d 次元であれば, BZ は d 次元トーラスである. 短距離性のため, 1 体のハミルトニアン $H(\mathbf{k})$ は, 滑らかである.

行列 $h(\mathbf{k})$ を対角化する規格化された固有ベクトルを $u_1(\mathbf{k}), \dots$ と書く.

$$H(\mathbf{k})u_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k})u_n(\mathbf{k}), \quad n = 1, \dots, N. \quad (5)$$

生成演算子

$$\chi_n^{\dagger}(\mathbf{k}) := \sum_{\sigma=1}^N c_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) [u_n(\mathbf{k})]_{\sigma} \quad (6)$$

を導入すると, ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_n E_n(\mathbf{k}) \chi_n^{\dagger}(\mathbf{k}) \chi_n(\mathbf{k}) \quad (7)$$

と書かれる. 基底状態は任意の \mathbf{x}, σ に対して $c_{\sigma}(\mathbf{x}) |0\rangle = 0$ によって定義される真空 $|0\rangle$ に対してフェルミエネルギー E_F 以下の状態を詰めた状態として定義される.

$$|GS\rangle = \prod_{E_n(\mathbf{k}) < E_F} \chi_n^{\dagger}(\mathbf{k}) |0\rangle. \quad (8)$$

有限のエネルギーギャップ $E_{\text{gap}} > 0$ が存在して $|E - E_F| \geq E_{\text{gap}}$ に固有値 $E_n(\mathbf{k})$ が存在しない場合の基底状態をバンド絶縁体と呼ぶ.

慣例に従って, 1 粒子状態におけるケット表記を導入する. 1 粒子状態とは,

$$|\mathbf{x}, \sigma\rangle = c_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x}) |0\rangle \quad (9)$$

によって張られる状態空間のことである. おなじことだが,

$$|\mathbf{k}, \sigma\rangle = c_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) |0\rangle \quad (10)$$

で張られる空間である. 自由フェルミオンのハミルトニアン \hat{H} は 1 粒子状態の空間に作用するハミルトニアンとして,

$$\hat{H}^{(1)} = \sum_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} |\mathbf{x}, \sigma\rangle H_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \langle \mathbf{y}, \sigma' | = \sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}, \sigma\rangle H_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{k}) \langle \mathbf{k}, \sigma' | \quad (11)$$

と書くことができる. Bloch 状態 $|\phi_n(\mathbf{k})\rangle$ とは, 1 粒子状態の空間においてハミルトニアン $\hat{H}^{(1)}$ を対角化する状態であり, 固有ベクトル $u_n(\mathbf{k})$ を用いて

$$|\phi_n(\mathbf{k})\rangle = \chi_n^{\dagger}(\mathbf{k}) |0\rangle = \sum_{\sigma=1}^N |\mathbf{k}, \sigma\rangle [u_n(\mathbf{k})]_{\sigma} \quad (12)$$

と書くことができる. 異なる波数点において Bloch 状態 $|\phi_n(\mathbf{k})\rangle$ を比較したいことがある. そのために, Bloch 状態を平面波と内部自由度の依存性に分離する *3 :

$$|u_n(\mathbf{k})\rangle := e^{-i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{x}}} |\phi_n(\mathbf{k})\rangle = \sum_{\sigma} |\mathbf{k} = \mathbf{0}, \sigma\rangle [u_n(\mathbf{k})]_{\sigma}. \quad (13)$$

*3 $\hat{\mathbf{x}}$ は $\langle \mathbf{x}, \sigma | \hat{\mathbf{x}} | \mathbf{x}', \sigma' \rangle = \mathbf{x} \delta_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'} \delta_{\sigma, \sigma'}$ として定義される演算子です.

すると、内積

$$\langle u_n(\mathbf{k} + \delta\mathbf{k}) | u_n(\mathbf{k}) \rangle = \sum_{\sigma=1}^N [u_n(\mathbf{k} + \delta\mathbf{k})]_{\sigma}^* [u_n(\mathbf{k})]_{\sigma} \quad (14)$$

が意味を持ち、後で見ると、異なる波数点における Bloch 状態から Berry 位相を取り出すことができる。状態 $|u_n(\mathbf{k})\rangle$ をセル周期状態、 $u_n(\mathbf{k})$ をセル周期関数と呼ぶことにする^{*4}。 n 番目のバンドに対して、実空間で局在する状態、Wannier 状態、を Bloch 状態の逆フーリエ変換

$$|W_{n\mathbf{R}}\rangle = \sum_{\mathbf{k}} |\phi_n(\mathbf{k})\rangle e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\hat{\mathbf{x}}-\mathbf{R})} |u_n(\mathbf{k})\rangle \quad (15)$$

と定義する。座標基底で $[W_{n\mathbf{R}}(\mathbf{x})]_{\sigma} = \langle \mathbf{x}, \sigma | W_{n\mathbf{R}} \rangle$,

$$W_{n\mathbf{R}}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} u_n(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{R})} \quad (16)$$

である。 $W_{n\mathbf{R}}(\mathbf{x}) = W_{n\mathbf{0}}(\mathbf{x} - \mathbf{R})$ に注意。 Wannier 状態 $|W_{\mathbf{R}}\rangle$ は形式的にいつでも構成できるが、局所基底とみなして良いだろうか。

2 Wannier 状態の局在性と Chern 数

2.1 解析性と局在性

Wannier 状態についてより詳しく見ていく。まず、1次元系を考える。ハミルトニアン $H(k)$ は S^1 上の $N \times N$ エルミート行列である。 $H(k)$ を対角化する基底を $\{u_n(k)\}_{n=1,\dots,N}$ とする。

$$H(k)u_n(k) = E_n(k)u_n(k), \quad u_n(k)^\dagger u_m(k) = \delta_{nm}. \quad (17)$$

図 1(a) にランダムに生成したハミルトニアンのスペクトルを示す。対称性が存在しなければレベル反発のため十分に一般的なハミルトニアン $H(k)$ の固有値は交わりがない点に注意する。以下では孤立した 1 つのバンドに注目し、添字 n を省略することにする。

座標表示の Wannier 状態は

$$W_{\mathbf{R}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi} \oint dk u(k) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{R})}. \quad (18)$$

となる。この Wannier 状態 $|W_{\mathbf{R}}\rangle$ がどの程度 $x = R$ 近傍に局在しているかを調べよう。指数関数的に局在していれば、種々の物理量の計算において長距離から来る寄与を無視できるから、あるサイト近傍に局在していると言って良いだろう。指数関数的に局在するための十分条件はよく知られていて [1, 2]、実数の波数 k を複素数 $k = k' + ik''$ に拡張した際に、ある $A > 0$ が存在して、領域 $|k''| < A$ においてベクトル値関数

^{*4} バンド理論での用語を流用しています。バンド理論において、ここでの「周期」は実空間の並進 $x \mapsto x + 1$ に関する周期性であり、「関数」は単位胞 $x \in [0, 1]$ における関数という意味です。本講義ノートの設定だと、自由度は整数サイト $x \in \mathbb{Z}$ のみを考えているため周期は自明であり、関数という必要もないのですが、バンド理論と同じ用語を用いています。より一般の設定では、連続空間における Schrödinger 方程式 $(-\nabla^2 + V(\mathbf{x}))\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = E_{n\mathbf{k}}\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ の解は $\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ を $\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ と分離して、関数 $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ を周期性 $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ を満たすように取ることができます。連続的な設定でなくても、単位胞内に複数の局在位置 $\mathbf{R} + \mathbf{x}_\alpha, \mathbf{R} + \mathbf{x}_\beta, \dots$ を考えることもあります。

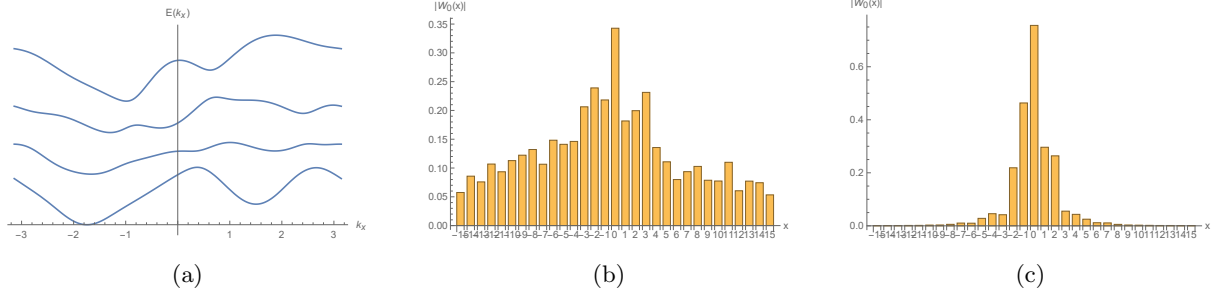


図 1: (a) ランダムに生成したハミルトニアン $H(k)$ のスペクトル. (b) セル周期関数 $u(k)$ の位相を独立に選んで構成した Wannier 状態. (c) セル周期関数 $u(k)$ の位相をできるだけ滑らかにして構成した Wannier 状態.

$u(k)$ が解析的であれば $1/A$ 程度の実空間領域に局在する. この点を [2] の III-B 節に従って確認する. $f(k)$ を $|k''| < A$ において解析的な複素関数であれば, $|k''| < A$ において収束するフーリエ級数に展開できる:

$$f(k) = \sum_{x \in \mathbb{Z}} e^{ikx} g(x), \quad |\text{Im } k| < A. \quad (19)$$

また, フーリエ係数 $g(x)$ は以下を満たす,

$$e^{Ax} g(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0. \quad (20)$$

逆に, $g(x)$ が上記の漸近的振る舞いを持つとき, フーリエ級数は $|k''| < A$ において収束し, 解析的である. (証明) 表式

$$f(k' + ik'') = \sum_{x \in \mathbb{Z}} e^{ik'x - k''x} g(x) \quad (21)$$

を k' について 2π の周期関数と見ると, フーリエ係数は $e^{-k''x} g(x)$ であり, すると Riemann=Lebesgue の補題^{*5}により, $|x| \rightarrow \infty$ で $e^{-k''x} g(x) \rightarrow 0$. $k'' = -\epsilon A \times \text{sign}(x)$, $0 < \epsilon < 1$ と置くと, $|x| \rightarrow \infty$ で $e^{\epsilon A|x|} g(x) \rightarrow 0$. 逆にこの性質が成立するとき, $f(k)$ を上式で定義すると $|k''| < A$ において解析的. \square

複素平面において周期関数 $f(k)$ をある程度解析的に拡張できるとき, フーリエ係数 $g(x)$ に対して指数関数をかけると, ある程度は指数関数的に減衰する, ということである.

セル周期関数 $u(k)$ の変数を複素数値に拡張した際にある $A > 0$ が存在して $|k''| < A$ に対して $u(k)$ は解析的である, という性質はどの程度満たされるのか, を考えておく. 具体的に, 以下のハミルトニアンを考える.

$$H(k) = (m - \cos k)\sigma_x + v \sin k \sigma_y. \quad (22)$$

k は複素数とする. エネルギー固有値は

$$E(k) = \pm \sqrt{(m - \cos k)^2 + v^2 \sin^2 k} \quad (23)$$

であり, よって, $m = \pm 1$ においてギャップが閉じる. 占有状態のセル周期関数 $u(k)$ は

$$u(k) = \frac{1}{|E(k)|} (-|E(k)|, m - \cos(k) + iv \sin(k))^T. \quad (24)$$

*5 「周期関数, Riemann=Lebesgue の補題」等で検索してください.

この表式を見ると、複素 k 空間において解析性が破れる点は、エネルギー $E(k)$ に特異性が生じる点である。実数の波数 k においてバンドが閉じる場合、つまり $m = \pm 1$ において $A \rightarrow 0$ となる。 $m = 1$ の場合は $k = 0$ でギャップが閉じる。解析性の破れを見るため、 $m = 1 + \delta m, k = \delta k = \delta k' + i\delta k''$ として展開すると、

$$\begin{aligned} E(k) &\sim \pm \sqrt{(\delta m + \delta k^2/2)^2 + v^2 \delta k^2} \\ &\sim \pm \sqrt{\delta m^2 + \delta m \delta k^2 + v^2 \delta k^2} \\ &= \pm \sqrt{\delta m^2 + (\delta m + v^2)(\delta k'^2 - \delta k''^2) + 2iv^2 \delta k' \delta k''} \end{aligned} \quad (25)$$

となる。このルートの中身が 0 になる点である $\delta k = \pm i \frac{|\delta m|}{\sqrt{v^2 + \delta m}} \sim \pm i |\delta m/v|$ において分岐が生じる^{*6}。したがって、 $A \sim |\delta m/v|$ である。この例のように、実数値において定義されたセル周期関数 $u(k)$ をどの程度複素 k 平面において解析的に拡張ができるか、というのはハミルトニアンに依存する問題である^{*7}。

では、エネルギーギャップが閉じなければある $A > 0$ が存在して $|\text{Im } k| < A$ においていつでも $u(k)$ を解析的に取ることができるため、よって指数関数的に局在する Wannier 状態が存在する、という結論で良いのだろうか。

2.2 セル周期関数 $u(k)$ の位相

上の議論は $u(k)$ が円周である $\text{BZ} = S^1_{k_x}$ における連続性を暗に仮定している点に注意する。各点 k において $u(k)$ は固有値方程式 (17) の解であるから、 $U(1)$ 位相の不定性が存在する。つまり、各点 k において、 $u(k)$ が解であれば、 $u(k)e^{i\chi(k)}$ も解である。

$$u(k) \mapsto u(k)e^{i\chi(k)}. \quad (26)$$

このような変換をゲージ変換と呼び、ゲージ変換に対して変化しない量をゲージ不変量と呼ぶ。例えば、内積 $u(k)^\dagger u(k) = 1$ は自明なゲージ不変量であり、セル周期関数 $u(k)$ への射影 $P(k) = u(k)u(k)^\dagger$ もゲージ不変量である。 $u(k)$ を $S^1_{k_x}$ 全体で解析的に取ることができるか、という問題は $u(k)$ のゲージに依存する問題であるが、射影 $P(k)$ が $S^1_{k_x}$ 全体で解析的に取ることができるか、という問題はゲージ不変な問題設定であり、バンドギャップが開いていれば射影 $P(k)$ は $S^1_{k_x}$ 全体において解析的に取ることができる^{*8}。したがって、 $P(k)u(k) = u(k)$ で定義されるセル周期関数 $u(k)$ を $S^1_{k_x}$ 全体で解析的に取ることができるか、という問題は、ゲージ不定性 $e^{i\chi(k)}$ の自由度を用いて、 $u(k)$ の位相を連続的に取ることができるか、という、解析性でも滑らか性でもなく、セル周期関数の連続性の問題である。

セル周期関数 $u(k)$ は局所的には連続的に取ることができる。そこで、区間 $k \in [0, 2\pi]$ において $u(k)$ が連続的に得られているとしよう。このとき $u_n(2\pi)$ と $u_n(0)$ は $U(1)$ 位相を除いて一致するから、 $U(1)$ 位相

$$e^{i\phi} = u(0)^\dagger u(2\pi) \in U(1) \quad (27)$$

が定義できる。 $u(2\pi) = u(0)$ を満たすように $u(k)$ の $U(1)$ 位相を再定義することができるだろうか？できる。

$$\tilde{u}(k) = u(k)e^{-i\frac{\phi k}{2\pi}}, \quad k \in [0, 2\pi], \quad (28)$$

^{*6} Riemann 面に分岐が生じ、占有状態と非占有状態が入れ替わっています [1]

^{*7} 1次元の場合の詳細に興味がある場合は Kohn の原論文 [1] を追うことをお勧めします。 [1] においては、1次元系でかつ反転対称性が存在し、かつ単一バンドの場合に、常に指数関数的に局在する Wannier 状態が存在することが証明されています。

^{*8} この主張は [2] において一般の空間次元、任意のバンド数に対して証明されています。本講義ノートの射影 $P(\mathbf{k})$ は [2] の $Q(\mathbf{K})$ に対応します。

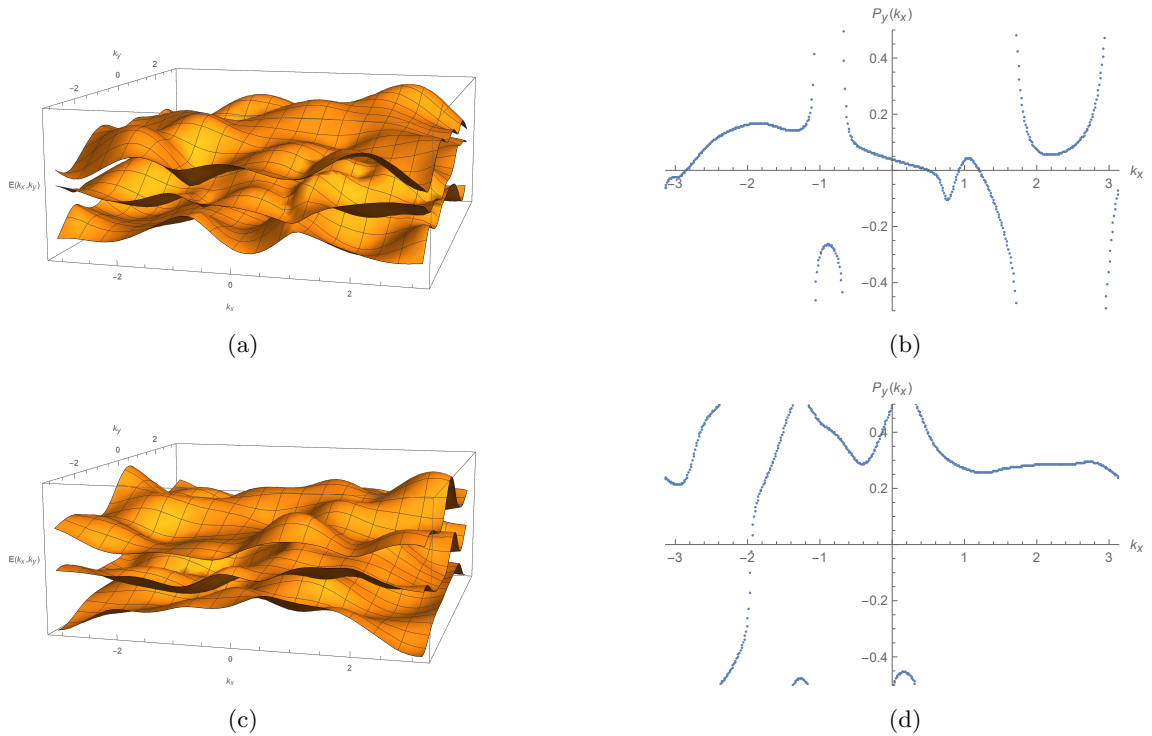


図 2: (a,c) ランダムに生成したハミルトニアン $H(k_x, k_y)$ のスペクトル. (a),(c) はそれぞれ $ch_1 = 0$, 及び $ch_1 = 1$. (b,d) (a), (c) のハミルトニアンの最低エネルギーバンドに対する分極 $P_y(k_x)$.

と再定義すれば良い. したがって, $\tilde{u}(k)$ が $k = 2\pi$ で滑らかでなくても $U(1)$ 位相をならすことによってやはり $\tilde{u}(k)$ を $S^1_{k_x}$ 上で滑らかに取ることができるため, よって, 指数関数的に局在する Wannier 状態が常に構成できる.

例として, 図 1(a) の最低エネルギーバンドの Wannier 状態を, $u(k)$ の位相を独立に選んだ場合 (図 1(b)) と $u(k)$ の位相を滑らかに選んだ場合 (図 1(c) *9) のそれぞれの場合に対して密度 $|W_{R=0}(x)|$ のプロットを示す.

似たような議論を一般の空間 d 次元系に対して適用することにより, いつでも指数関数的に局在する Wannier 状態が構成される.. だろうか?

2.3 空間 2 次元の場合

空間 2 次元の場合を考えよう. $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ と書く. 次近接ホッピングまでを考慮してランダムに構成したハミルトニアンのスペクトルを図 2(a) に示す. 空間 1 次元の場合と同様に, 対称性が存在しなければレベル反発により各バンドは BZ 全体で孤立する *10. そこで, $U(1)$ 位相の不定性を別にして, 単一バンドのセル周期関数 $u(\mathbf{k}) \in \mathbb{C}^N$, $u(\mathbf{k})^\dagger u(\mathbf{k}) = 1$ が得られているものとする. BZ の局所的な領域で $u(\mathbf{k})$ は連続的に取ることができるから, $[0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$ において $u(\mathbf{k})$ は連続的と仮定する. さらに, 前節で見たように, BZ 内の

*9 後述の Berry 位相 γ を計算して, $u(k)^\dagger u(k + \delta k) = e^{2\pi i \gamma / \delta k}$ となるように再定義しています.

*10 空間 3 次元では Weyl 点が存在するため, 不成立

任意のループに対して $u(\mathbf{k})$ は連続的と仮定して良いため、 k_x 方向については連続的、つまり、 $k_y \in [0, 2\pi]$ において $u(2\pi, k_y) = u(0, k_y)$ を仮定する。このとき、 $k_y = 2\pi$ と $k_y = 0$ が連続的に繋がるとは限らず、 k_x 依存する $U(1)$ に値を取る変換関数 ^{*11}

$$e^{i\phi(k_x)} = u(k_x, 0)^\dagger u(k_x, 2\pi) \in U(1) \quad (29)$$

が定義される。さて、円筒 $S^1_{k_x} \times [0, 2\pi]$ 上で定義された連続的なゲージ変換

$$u(k_x, k_y) \mapsto u(k_x, k_y) e^{i\chi(k_x, k_y)} \quad (30)$$

を適当に選んで $e^{i\phi(k_x)} \equiv 1$ となるように再定義することができるだろうか。

空間 1 次元の場合と異なり、できない場合がある [3]。変換関数 $e^{i\phi(k_x)}$ はゲージ変換 (26) で

$$e^{i\phi(k_x)} \mapsto e^{i\phi(k_x) + i\chi(k_x, 2\pi) - i\chi(k_x, 0)} \quad (31)$$

と変化する。 $e^{i\phi(k_x)}$ が非ゼロの巻き付き数

$$\nu := \frac{1}{2\pi} \oint d\phi(k_x) \in \mathbb{Z} \quad (32)$$

持つ場合はゲージ変換で $e^{i\phi(k_x)} \equiv 1$ と取ることができない。実際、 $e^{i\chi(k_x, 0)}$ と $e^{i\chi(k_x, 2\pi)}$ の巻き付き数は $e^{i\chi(k_x, k_y)}$ の k_y 方向の連続性の仮定により同一であるから、ゲージ変換で $e^{i\phi(k_x)}$ の巻き付き数 ν は変化しない。

整数 ν はトポロジカル数（連続変形で不変な量）の一種であり、あとで導入する Chern 数と一致する。 $\nu = 0$ の場合は $e^{i\chi(k_x, 0)} \equiv e^{i\phi(k_x)}$ と選び、さらに連続変形で $e^{i\chi(k_x, 0)} \equiv 1$ と選ぶことができるから、BZ 全体で連続的な $u(\mathbf{k})$ を得ることができ、よってある有限の幅 A に対して k_x, k_y を解析的に拡張することができ、したがって、指数関数的に局在する Wannier 状態が存在する。

では整数 ν が非ゼロの場合に Wannier 状態がどの程度非局在化するかを考えるために、対偶を考える [4]。Wannier 関数 $W_{\mathbf{R}}(\mathbf{x})$ に対してセル周期関数 $u(\mathbf{k})$ は逆変換

$$u(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{x}} W_{\mathbf{R}}(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{R})} \quad (33)$$

で与えられる。右辺が収束する程度に Wannier 状態 $W_{\mathbf{R}}(\mathbf{x})$ が局在していれば $u(\mathbf{k})$ は BZ 全体で連続的に定義され、よって $\nu = 0$ である。例えば、 $\epsilon > 0$ として、 $W_{\mathbf{R}}(\mathbf{x}) = o(\frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{R}|^{1+\epsilon}})$ であれば \mathbf{k} によらず一様に絶対収束する。あるいは x 方向について $W_{\mathbf{R}}(\mathbf{x})$ が有限の台を持つ場合は、 y 方向について $o(\frac{1}{|y - R_y|^\epsilon})$ であればやはり一様に絶対収束する。よって、 $\nu \neq 0$ の場合は、 $u(\mathbf{k})$ の不連続性に由来して、Wannier 関数は少なくとも $O(\frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{R}|})$ 程度に非局在化する ^{*12}。

2.4 Berry 位相, Berry 磁束, Chern 数

トポロジカル数 ν の表式 (32) は $S^1 \times [0, 2\pi]$ において連続な $u(\mathbf{k})$ を与えられたハミルトニアンの固有状態から構成してから計算する必要がある、実用的ではない。バンド理論の任意のトポロジカル数は、以下の条件を満たすように構成されることが望ましい。

^{*11} 「変換関数」はファイバー束の用語で、局所的なセル周期関数 $u(\mathbf{k})$ は $U(1)$ 主束を定義します。

^{*12} 一見、最低 Landau 準位の対称ゲージにおける波動関数が反例だと思われるが、最低 Landau 準位の波動関数は線形独立でない [4]

トポロジカル数のゲージ不変な離散公式

他のバンドから孤立した n 個のバンドの集合 $\mathcal{U}(\mathbf{k}) = (u_1(\mathbf{k}), \dots, u_n(\mathbf{k}))$ に対して定義されるトポロジカル数に対して、以下の条件を満たす構成を「ゲージ不変な離散公式」と呼ぼう。(i) フレーム $\mathcal{U}(\mathbf{k})$ の $U(n)$ ゲージ不定性 $\mathcal{U}(\mathbf{k}) \rightarrow \mathcal{U}(\mathbf{k})V(\mathbf{k}), V(\mathbf{k}) \in U(n)$, に依存しない。(ii) BZ の任意の離散近似に対して明白に量子化する。

ν を上の意味で実用的な表式に書き換えるため、まず Berry 位相を導入する。BZ 内の任意のループ $k \in S^1$ 上の規格化された状態 $u(k) \in \mathbb{C}^N$ を考える。 k と少し離れた点 $k + \delta k$ における内積 $\langle u(k + \delta k) | u(k) \rangle$ の絶対値は 1 に近く *13, その位相が定義できる。Berry 位相を

$$\gamma := \lim_{\delta k \rightarrow 0} \arg \prod_{k=0}^{2\pi - \delta k} \langle u(k + \delta k) | u(k) \rangle \in \mathbb{R}/2\pi\mathbb{Z} \quad (34)$$

と定義する。 $\arg z$ は複素数 z の偏角である。実用上は δk をハミルトニアンの変化に比べて十分小さくしておけば十分である *14。上記の表式は $|u(k)\rangle$ の $U(1)$ 位相の取り方に依存しないことに注意する。よって、 $|u(k)\rangle$ はハミルトニアン $H(k)$ の固有状態として得られる場合は、離散点集合 $\{k\}_k$ に対してハミルトニアン $H(k)$ を対角化して固有状態を求めることにより、Berry 位相が計算される。

Berry 位相を用いて、離散近似された BZ のプラケットを貫く「磁束」が定義される。BZ を離散近似し、 k_x, k_y 方向の刻み幅をそれぞれ $\delta k_x, \delta k_y$ とする。 \mathbf{k} 近傍のプラケット

$$\square_{\mathbf{k}} = "(k_x, k_y) \rightarrow (k_x + \delta k_x, k_y) \rightarrow (k_x + \delta k_x, k_y + \delta k_y) \rightarrow (k_x, k_y + \delta k_y) \rightarrow (k_x, k_y)" \quad (35)$$

を貫く磁束、「Berry 磁束」 $F(\square_{\mathbf{k}})$ をプラケット $\square_{\mathbf{k}}$ の境界における Berry 位相と定義する *15：

$$F(\square_{\mathbf{k}}) := \gamma(\partial \square_{\mathbf{k}}) = \text{Arg} \left[\langle u(k_x, k_y) | u(k_x, k_y + \delta k_y) \rangle \langle u(k_x, k_y + \delta k_y) | u(k_x + \delta k_x, k_y + \delta k_y) \rangle \right. \\ \left. \langle u(k_x + \delta k_x, k_y + \delta k_y) | u(k_x + \delta k_x, k_y) \rangle \langle u(k_x + \delta k_x, k_y) | u(k_x, k_y) \rangle \right] \in (-\pi, \pi). \quad (36)$$

プラケット $\square_{\mathbf{k}}$ がハミルトニアン $H(\mathbf{k})$ の変化に対して十分小さければゲージ不変量 $F(\square_{\mathbf{k}})$ の値は $\mathbb{R}/2\pi\mathbb{Z}$ 値として 0 に近いので、 $F(\square_{\mathbf{k}})$ を実数値とみなすことができる。Chern 数 ch_1 は BZ 全体における Berry 磁束の和として定義される [5].

$$ch_1 := \frac{1}{2\pi} \sum_{\square_{\mathbf{k}} \in BZ} F(\square_{\mathbf{k}}). \quad (37)$$

ch_1 の mod 1 を計算すると、隣り合ったプラケットからの寄与がキャンセルして、BZ の離散近似に依存せず恒等的に 0 となる：

$$e^{2\pi i ch_1} = \prod_{\square_{\mathbf{k}} \in BZ} e^{i F(\square_{\mathbf{k}})} = 1. \quad (38)$$

よって、 ch_1 はゲージ不変な離散公式である。

*13 $\langle u(k + \delta k) | u(k) \rangle = u(k + \delta k)^\dagger u(k)$ であり、Bloch 波数 0 の 1 粒子状態 $|u(k)\rangle$ を導入する理由はないが、視覚的に効果的であるため、以下ではこの記法を採用する。

*14 大雑把には、メッシュサイズの最大値 δk_{\max} はハミルトニアン $H(k)$ のエネルギーギャップと波数方向の変化速度に依存して、注意深く設定されなければならない。

*15 四角形に限らず、任意の n 角形でも同様に定義される。

$\nu = ch_1$ である。これを見るために、Chern 数 ch_1 が、前節で巻き付き数 ν を定義する際に採用したゲージ固定条件のもとでどのように計算されるかを見る。まず、Chern 数 ch_1 は Berry 位相の巻き付きとして書き換えることができることに注意する。

$$ch_1 = \frac{1}{2\pi} \sum_{k_x=0}^{2\pi-\delta k_x} [\gamma_y(k_x + \delta k_x) - \gamma_y(k_x)]. \quad (39)$$

ここで、

$$\gamma_y(k_x) = \arg \prod_{k_y=0}^{2\pi-\delta k_y} \langle u(k_x, k_y + \delta k_y) | u(k_x, k_y) \rangle \quad (40)$$

は各点 k_x における y 方向の Berry 位相である。Berry 位相 $\gamma_y(k_x)$ は $\mathbb{R}/2\pi\mathbb{Z}$ 値であるが、差 $\gamma_y(k_x + \delta k_x) - \gamma_y(k_x)$ は実数値とみなすことができることに注意。(29) で定義される変換関数 $e^{i\phi(k_x)}$ と関係づけるため、各点 k_x において $k_y = 0 \rightarrow 2\pi$ までは $|u(k_x, k_y)\rangle$ が $U(1)$ 位相を獲得しないように、

$$\langle u(k_x, k_y + \delta k) | u(k_x, k_y) \rangle = 1, \quad k_y = 0, \dots, 2\pi - \delta k_y \quad (41)$$

とゲージを固定する。ここで、 $|u(k_x, 2\pi)\rangle$ と $|u(k_x, 0)\rangle$ を区別している。このゲージ固定条件のもとで、Berry 位相 $\gamma_y(k_x)$ は

$$e^{i\gamma_y(k_x)} = \langle u(k_x, 0) | u(k_x, 2\pi) \rangle = e^{i\phi(k_x)} \quad (42)$$

となる。よって示された。

2.5 Berry 位相と Wannier 状態の局在位置の関係

Berry 位相には Wannier 状態の平均位置 $\langle W_R | \hat{x} - R | W_R \rangle$ という物理的意味がある [6]。(18) で与えられる Wannier 状態の波動関数 $W_R(x)$ に対して位置 \hat{x} の期待値を計算すると、単純計算により

$$P := \langle W_R | \hat{x} - R | W_R \rangle = \frac{\gamma}{2\pi} \in \mathbb{R}/\mathbb{Z} \quad (43)$$

が示される^{*16}。 P を（電気）分極と呼ぶ。

(39) 式より、Chern 数は Berry 位相の巻き付きであるから、よって Chern 数は Wannier の中心位置のフローであることがわかる：

$$ch_1 = \oint dP_y(k_x) = \sum_{k_x=0}^{2\pi-\delta k_x} [P_y(k_x + \delta k_x) - P_y(k_x)]. \quad (44)$$

*16

$$\begin{aligned} \langle W_R | \hat{x} - R | W_R \rangle &= \int dx \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 dk dk' u(k)^\dagger e^{-ik(x-R)} (x-R) u(k') e^{ik'(x-R)} = \int dx \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 dk dk' u(k)^\dagger e^{-ik(x-R)} u(k') \left(-i \frac{\partial}{\partial k'}\right) e^{ik'(x-R)} \\ &= \int dx \left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 dk dk' u(k)^\dagger e^{-ik(x-R)} \left(i \frac{\partial}{\partial k'} u(k')\right) e^{ik'(x-R)} = \frac{i}{2\pi} \oint dk u(k)^\dagger \frac{\partial}{\partial k} u(k) \sim \frac{i}{2\pi} \sum_{k=0}^{2\pi-\delta k} u(k)^\dagger (u(k+\delta k) - u(k)) \\ &= \frac{i}{2\pi} \sum_{k=0}^{2\pi-\delta k} (u(k)^\dagger u(k+\delta k) - 1) = \frac{i}{2\pi} \sum_{k=0}^{2\pi-\delta k} \log[u(k)^\dagger u(k+\delta k)] = \frac{i}{2\pi} \log e^{-i\gamma} = \frac{\gamma}{2\pi} \pmod{1}. \end{aligned}$$

ここで、 $P_y(k_x) = \gamma_y(k_x)/2\pi$ は、セル周期関数 $u(k_x, k_y)$ の k_y 方向のみをフーリエ変換して構成された Wannier 関数

$$W_{k_x, R_y}(y) = \frac{1}{2\pi} \oint dk_y u(k_x, k_y) e^{ik_y(y-R_y)} \quad (45)$$

の、 k_x 依存する y 方向の平均位置 $P_y(k_x) = \langle W_{k_x, R_y} | \hat{y} - R_y | W_{k_x, R_y} \rangle$ である *17.

図 2 に次近接ホッピングまで考慮してランダムに生成したハミルトニアンの特値と分極 $P_y(k_x)$ のプロットを示した。

2.6 一般化：多バンドの系と一般次元

これまで空間 1 次元、2 次元に限定したが、任意の空間 d 次元系を考えよう。また、これまで孤立した 1 バンドの系について考えてきたが、一般には対称性によって安定なバンド交差が存在する場合がある。(例えば、次節で調べる時間反転対称性のもとでは波数空間の対称点で必ずバンドが 2 重縮退する。図 2(a) を見よ。) 他に孤立した n バンドをまとめて

$$U(\mathbf{k}) = (|u_1(\mathbf{k})\rangle, \dots, |u_n(\mathbf{k})\rangle) \in \mathbb{C}^{N \times n} \quad (46)$$

と書く。規格直交性より、

$$U(\mathbf{k})^\dagger U(\mathbf{k}) = 1_n \quad (47)$$

である。 $U(\mathbf{k})$ も単にセル周期状態と呼ぶことにする。状態 $|u_m(\mathbf{k})\rangle$ はハミルトニアン $H(\mathbf{k})$ の m 番目のエネルギー固有値の固有状態として決まるため、厳密に n 重縮退していなければハミルトニアン $H(\mathbf{k})$ の対角化により $|u_m(\mathbf{k})\rangle$ 同士は交わらないが、2.1 節で見たようにバンド交差が存在する場合は 1 バンドのみ注目しては指数関数的に局在する Wannier 状態が構成できない場合がある。一方で、互いに交わる n バンドを全てを用いると、セル周期状態 $U(\mathbf{k})$ を連続的に取ることができ、よって指数関数的に局在する Wannier 状態が構成できる可能性がある。そこで、ゲージ変換の自由度を n バンドを全て混ぜる $U(n)$ 変換

$$U(\mathbf{k}) \mapsto U(\mathbf{k})V(\mathbf{k}), \quad V(\mathbf{k}) \in U(n) \quad (48)$$

とする。変換関数も $U(n)$ 群に値を取る。

障害の有無を調べる。まず、線分の端を 1 点でセル周期状態 $U(\mathbf{k})$ を連続的に貼り合わせる際の障害は

$$\pi_0[U(n)] = 0 \quad (49)$$

より存在しない。次に、円筒の境界の円周に沿ってセル周期状態 $U(\mathbf{k})$ を貼り合わせる際の障害は

$$\pi_1[U(n)] = \mathbb{Z} \quad (50)$$

であり、1 バンドの場合と同様に障害が存在する。 $\pi_1[U(n)]$ は変換関数の行列式

$$e^{i\phi(k_x)} = \det[U(k_x, 0)^\dagger U(k_x, 2\pi)] \quad (51)$$

*17 平均中心位置にのみ興味がある場合は、Wannier 状態を計算する必要はなく、ゲージ不変な公式のある Berry 位相 $\gamma_y(k_x)$ のみを計算すれば良いことに注意。

の巻き付き数で計算され、対応して、Berry 磁束は

$$F(\square_{\mathbf{k}}) = \text{Arg det} \left[\mathcal{U}(k_x, k_y)^\dagger \mathcal{U}(k_x, k_y + \delta k_y) \mathcal{U}(k_x, k_y + \delta k_y)^\dagger \mathcal{U}(k_x + \delta k_x, k_y + \delta k_y) \right. \\ \left. \mathcal{U}(k_x + \delta k_x, k_y + \delta k_y)^\dagger \mathcal{U}(k_x + \delta k_x, k_y) \mathcal{U}(k_x + \delta k_x, k_y)^\dagger \mathcal{U}(k_x, k_y) \right] \quad (52)$$

と一般化される。空間 3 次元において、球面に沿って貼り合わせる際の障害は

$$\pi_2[U(n)] = 0 \quad (53)$$

であるから存在しない。同様にして、空間 d 次元において、球面 $S^{m \leq d-1}$ においてセル周期状態 $\mathcal{U}(\mathbf{k})$ を貼り合わせる際の障害が存在する可能性があり、その障害の有無は

$$\pi_m[U(n)] \quad (54)$$

で判定でき、また対応するトポロジカル数が存在する^{*18}。

多バンド系における Berry 位相は Wilson ループとして一般化される。

$$W_{-\pi \rightarrow \pi} := \prod_{k=-\pi, \dots, \pi-\delta k}^{\leftarrow} \mathcal{U}(k + \delta k)^\dagger \mathcal{U}(k) = \mathcal{U}(\pi)^\dagger \mathcal{U}(\pi - \delta k) \cdots \mathcal{U}(-\pi + \delta k)^\dagger \mathcal{U}(-\pi) \in U(n). \quad (55)$$

$\mathcal{U}(-\pi) = \mathcal{U}(\pi)$ に注意。Wilson ループはゲージ不変ではない。始点 (= 終点) のゲージ変換 $\mathcal{U}(\pi) \mapsto \mathcal{U}(\pi)V(\pi)$ に対して

$$W_{-\pi \rightarrow \pi} \mapsto V(\pi)^\dagger W_{-\pi \rightarrow \pi} V(\pi) \quad (56)$$

と変化する。よって、例えば、 $\det W_{-\pi \rightarrow \pi}$, $\text{tr} [W_{-\pi \rightarrow \pi}]$ はゲージ不変量である。特に、Wilson ループ $W_{-\pi \rightarrow \pi}$ の固有値の集合 $\{e^{i\gamma_j}\}_{j=1, \dots, n}$ はゲージ不変量である。 $P_j = \gamma_j/(2\pi) \in \mathbb{R}/2\pi\mathbb{Z}$, $j = 1, \dots, n$ はセル周期状態の集合 $\mathcal{U}(k)$ から定義された n 個の Wannier 状態の集合の平均位置を表す。

2.7 空間 3 次元：Chern 絶縁体と Weyl 半金属

上の分類の結論に従うと、3 次元系では 2 次元の Chern 絶縁体を並進対称性にそってスタックする以外の新しい絶縁体相は出現しないが、Weyl 半金属と呼ばれる Chern 数によって強固に保たれるギャップレス点を持った半金属相が一般的に出現する。この点は時間があれば解説する。

3 時間反転対称性

系に磁性不純物、自発磁化などが存在しない場合は時間反転対称性 (TRS) が存在する。時間反転演算子 T は、サイト \mathbf{x} に定義された電子 (スピン 1/2 を有する) 自由度の生成演算子に対して

$$T c_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{x}) T^{-1} = c_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x}) \quad (57)$$

$$T c_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x}) T^{-1} = -c_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{x}) \quad (58)$$

と作用する、反ユニタリな演算子である。1 粒子状態の空間においても、まとめて書くと、

$$T(|\mathbf{x}, \uparrow\rangle, |\mathbf{x}, \downarrow\rangle) = (|\mathbf{x}, \downarrow\rangle, -|\mathbf{x}, \uparrow\rangle) = (|\mathbf{x}, \uparrow\rangle, |\mathbf{x}, \downarrow\rangle)(-i\sigma_y), \quad (59)$$

*18 一般論については、例えば [7] を見よ。

と作用する。Pauli 行列

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (60)$$

を導入した。より一般に、スピン演算子を $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$ 、スピンの大きさを S とすると、 K を複素共役を表す記号として、TRS は 1 粒子状態の空間において

$$T = e^{-i\pi S_y} K \quad (61)$$

と書くことができる。すると、

$$T^2 = e^{-2\pi i S_y} = (-1)^{2S} \quad (62)$$

となり、スピンの大きさ S に依存して T^2 の符号が変化する。

以下では $T^2 = -1$ の場合に注目し、さらに T のユニタリ部分も一般化し、

$$T = U_T K, \quad U_T^T = -U_T \quad (63)$$

と書くことにする *19。

3.1 性質

TRS を満たす行列の固有値は必ず 2 つが対で出現することが以下のように示される。行列 $A \in \text{Mat}_{2N \times 2N}(\mathbb{C})$ が TRS

$$TAT^{-1} = U_T A^* U_T^\dagger = A \quad (64)$$

を満たすとする。ベクトル x を、行列 A の固有値 λ なる右固有ベクトル、つまり $Ax = \lambda x$ とすると、ベクトル $Tx = U_T x^*$ は固有値 λ^* なる右固有ベクトルである。このとき、 U_T の反対称性に注意すると、 $x^\dagger U_T x^* = \sum_{\sigma, \sigma'} x_\sigma^* [U_T]_{\sigma\sigma'} x_\sigma^* = 0$ となり、 $U_T x^*$ は x と直交する。 A がエルミート行列であれば実固有値 $\lambda^* = \lambda$ が 2 重縮退することに注意する *20。

また、行列 A 転置の形の TRS

$$U_T A^T U_T^\dagger = A \quad (65)$$

を満たすとき、固有値は 2 重縮退する： x を固有値 λ なる右固有ベクトル、 $Ax = \lambda x$ とすると、 $x^T U_T^*$ は固有値 λ なる左固有ベクトル。このとき、 U_T の反対称性より、 $x^T U_T^* x = \sum_{\sigma, \sigma'} x_\sigma [U_T]_{\sigma\sigma'} x_{\sigma'} = 0$ となり、直行する。

U_T は交代行列であるから Pfaffian $\text{Pf } U_T \in \mathbb{C}$ が定義できる *21。この性質は T 対称な行列 A の、 T 作用で閉じた行列 A の固有ベクトルの正規直交集合 $\mathcal{U} = (u_1, \dots, u_{2n})$ 上でも成立し、

$$w = \mathcal{U}^\dagger T \mathcal{U} = \mathcal{U}^\dagger U_T \mathcal{U}^* \in U(2n) \quad (67)$$

*19 行列 A の転置を A^T と書いた。

*20 Kramers 縮退と呼ばれる。

*21 $2n \times 2n$ 交代行列 A に対する Pfaffian の定義は

$$\text{Pf } A = \sum_{\sigma \in S_{2n}, \sigma(2i-1) < \sigma(2i), \sigma(1) < \sigma(3) < \dots < \sigma(2n-1)} \text{sgn}(\sigma) A_{\sigma(1)\sigma(2)} \cdots A_{\sigma(2n-1)\sigma(2n)}. \quad (66)$$

(Pf A)² = det A に注意。

とすると,

$$w^T = \mathcal{U}^\dagger U_T^T \mathcal{U}^* = -w \quad (68)$$

となり, $\text{Pf } w \in U(1)$ が定義される. 大雑把に言って, Pfaffian はクラマース対 $(|u\rangle, T|u\rangle)$ の片方だけの独立な情報を取り出す役割をする. また, $2n \times 2n$ 行列 V に対して, 関係式 $\text{Pf}[VwV^T] = \det(V)\text{Pf } w$ にも注意する.

3.2 指数関数的に局在する Wannier 状態を構成できるか?

前節で, 空間 3 次元以下においては BZ 全体でセル周期状態 $\mathcal{U}(\mathbf{k})$ を連続的に取るための障害は Chern 数 ch_1 で与えられることを示した. 系に TRS が存在する場合は $ch_1 = 0$ であることを示すことができる. まず, 時間反転演算子 T は複素共役を含むため, 波数空間における 1 粒子状態

$$|\mathbf{k}, \sigma\rangle = \sum_{\mathbf{x}} |\mathbf{x}, \sigma\rangle e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (69)$$

に対して

$$T|\mathbf{k}, \sigma\rangle = \sum_{\sigma'} |-\mathbf{k}, \sigma'\rangle [U_T]_{\sigma'\sigma} \quad (70)$$

と作用し, 波数 \mathbf{k} と $-\mathbf{k}$ を入れ替えることに注意する. ハミルトニアン $H(\mathbf{k})$ に対する時間反転対称性かによる制限は

$$U_T H(\mathbf{k})^* U_T^\dagger = H(-\mathbf{k}) \quad (71)$$

と書かれる. $2n$ バンドからなる占有状態 $\mathcal{U}(\mathbf{k}) = (u_1(\mathbf{k}), \dots, u_{2n}(\mathbf{k}))$ に対して, $U(2n)$ ゲージ不定性を別にして,

$$T\mathcal{U}(\mathbf{k}) \sim \mathcal{U}(-\mathbf{k}) \quad (72)$$

が成立する. 具体的には

$$w_T(\mathbf{k}) = \mathcal{U}(-\mathbf{k})^\dagger U_T \mathcal{U}(\mathbf{k})^* \in U(2n) \quad (73)$$

と置くと,

$$\mathcal{U}(-\mathbf{k}) = U_T \mathcal{U}(\mathbf{k})^* w_T(\mathbf{k})^\dagger \quad (74)$$

であり, 他バンド系における Berry 磁束の定義 (52) により上式が確かめられる. すると, 任意のプラケット $\square_{\mathbf{k}}$ に対して

$$F(\square_{(-k_x - \delta k_x, -k_y - \delta k_y)}) = -F(\square_{\mathbf{k}}) \quad (75)$$

が成立するため, 作用 $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ に対して閉じる任意の 2 次元閉曲面 Σ 上の Chern 数はゼロになる. よって, 前節の議論によりセル周期状態 $\mathcal{U}(\mathbf{k})$ は連続的に取ることができ, よって空間 3 次元以下では指数関数的に局在する Wannier 状態を構成することができる.

... しかし, この結論で良いのだろうか?

3.3 時間反転対称な Wannier 状態

TRS は空間位置を変化させない「内部対称性」である。Wannier 状態も Kramers 対を組むと期待されるが、セル周期状態 $U(\mathbf{k})$ から構成された Wannier 状態が内部対称性として振る舞うかどうかは非自明である。 $U(\mathbf{k})$ が滑らかに定義されているとして Wannier 状態の波動関数の集合を

$$\mathcal{W}_{\mathbf{R}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \oint d\mathbf{k} U(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{R})} \quad (76)$$

と書く。TRS が Wannier 状態に対して局所的に作用するのであれば、ある交代ユニタリ行列 w を用いて

$$T\mathcal{W}_{\mathbf{R}}(\mathbf{x}) = \mathcal{W}_{\mathbf{R}}(\mathbf{x})w, \quad w^T = -w. \quad (77)$$

と作用して欲しい。一方で、

$$T\mathcal{W}_{\mathbf{R}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \oint d\mathbf{k} [TU(\mathbf{k})] e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{R})} \quad (78)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^d} \oint d\mathbf{k} [TU(-\mathbf{k})] e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{R})} \quad (79)$$

であるので、 $U(\mathbf{k})$ が BZ 全体で滑らかに取ることができることに加えて、以下の時間反転対称ゲージを満たすことが必要十分条件である。

時間反転対称ゲージ

ある $w \in U(2n)$, $w^T = -w$ が存在して、

$$TU(\mathbf{k}) = U(-\mathbf{k})w. \quad (80)$$

ch_1 がゼロの場合でも、この時間反転対称ゲージを満たしつつセル周期状態 $U(\mathbf{k})$ を BZ 全体に拡張する際の障害が存在する可能性がある。一般の空間 d 次元において、BZ 全体で連続なセル周期状態 $U(\mathbf{k})$ が存在し、かつ $w_T(\mathbf{k}) = \text{一定なるゲージが存在するとき}$ 、時間反転演算子が指数関数的に局在する Wannier 状態に対して局所的に作用する [8].

以下で低次元から順番に見ていく。

いくつかの技術的な点を注意しておく。 $w_T(\mathbf{k})^T = -w_T(-\mathbf{k})$ であるから対称点 $\mathbf{k} \equiv -\mathbf{k}$ において $\text{Pf}[w_T(\mathbf{k})] \in \mathbb{C}^\times$ が定義できる。また、対称点において、ゲージの取り替え $U(\mathbf{k}) \mapsto U(\mathbf{k})V(\mathbf{k})$ に対して、

$$\text{Pf}[w_T(\mathbf{k})] \mapsto \det[V(\mathbf{k})]^* \text{Pf}[w_T(\mathbf{k})] \quad (81)$$

と変化する。

3.4 空間1次元

時間反転は $k \rightarrow -k$ と作用するため、 $k = 0, \pi$ に固定点がある。 $k = 0$ 近傍と $k = \pi$ 近傍のセル周期状態をそれぞれ $\mathcal{U}_0(k), \mathcal{U}_\pi(k)$ とし、時間反転対称ゲージを満たすものとする^{*22}。

$$T\mathcal{U}_{0/\pi}(k) = \mathcal{U}_{0/\pi}(-k)w. \quad (82)$$

変換関数は、 $0 < k_0 < \pi$ なる k_0 をひとつ選んで

$$t(k_0) = \mathcal{U}_0(k_0)^\dagger \mathcal{U}_\pi(k_0) \in U(2n) \quad (83)$$

で与えられる。 $-k_0$ における変換関数 $t(-k_0)$ は TRS より

$$t(-k_0) = \mathcal{U}_0(-k_0)^\dagger \mathcal{U}_\pi(-k_0) = (U_T \mathcal{U}_0(k_0)^* w^\dagger)^\dagger U_T \mathcal{U}_\pi(k_0)^* w^\dagger = w t(k_0)^* w^\dagger \quad (84)$$

となるが、独立な変換関数の自由度は1点の $t(k_0) \in U(2n)$ のみである。 $\pi_0[U(2n)] = 0$ であるから、障害は存在せず1次元 BZ 全域で時間反転対称ゲージ (82) を満たすように取ることができる。

したがって、Wannier 状態に対して TRS は局所的に作用し、Kramers 対を組む。 Kramers 対を組む Wannier 状態の中心位置を検出するために、Berry 位相に類似の量を定義しておく。 通常の Berry 位相は Kramers 対を独立な状態としてカウントするため、縮退した Wannier 状態の中心位置は mod 1/2 でしか与えない。 しかし、TRS のため独立な波数空間の領域は $[0, \pi]$ であるため、通常の Berry 位相の「半分」の量が定義できると期待される。 以下の表式を考える。

$$W_{0 \rightarrow \pi} = \prod_{k=0, \dots, \pi-\delta k}^{\leftarrow} \mathcal{U}(k+\delta k)^\dagger \mathcal{U}(k) = \mathcal{U}(\pi)^\dagger \mathcal{U}(\pi-\delta k) \cdots \mathcal{U}(\delta k)^\dagger \mathcal{U}(0) \in U(2n). \quad (85)$$

(Wilson line と呼ばれる。) この量は $k = 0, \pi$ におけるゲージ変換 $\mathcal{U}(k) \mapsto \mathcal{U}(k)V(k)$ に対して

$$W_{0 \rightarrow \pi} \mapsto V(\pi)^\dagger W_{0 \rightarrow \pi} V(0) \quad (86)$$

と変化するため、ゲージ不変ではないが、 w 行列のゲージ変換性 (81) より、以下の組み合わせがゲージ不変となる [8]。

$$\gamma_T = \arg \left[\frac{\det[W_{0 \rightarrow \pi}]}{\det[w_T(\pi)]} \frac{\text{Pf}[w_T(0)]}{\text{Pf}[w_T(\pi)]} \right] \in \mathbb{R}/2\pi\mathbb{Z}. \quad (87)$$

$P_T = \gamma_T/2\pi \in \mathbb{R}/\mathbb{Z}$ は時間反転分極と呼ばれる [8]。

$$\mathcal{U}(-k-\delta k)^\dagger \mathcal{U}(-k) = w_T(k+\delta k) \mathcal{U}(k+\delta k)^T \mathcal{U}(k)^* w_T(k)^\dagger \quad (88)$$

に注意すると Berry 位相 γ と (絶対値を別にして) 以下の関係がある。

$$\gamma = \arg \prod_{k=0}^{\pi-\delta k} \det[\mathcal{U}(k+\delta k)^\dagger \mathcal{U}(k)] = \arg \prod_{k=0}^{\pi-\delta k} \det[\mathcal{U}(k+\delta k)^\dagger \mathcal{U}(k)]^2 \frac{\det w_T(0)}{\det w_T(\pi)} = 2\gamma_T. \quad (89)$$

^{*22} 以下の式では $k = 0, \pi$ において同一の w を仮定しているが、ゲージを選んでこのように取ることができる。 実際、一般の交代行列 $w^T = -w$ は Q をユニタリ行列として $w = Q\Lambda Q^T$ と取ることができる。 ここで、 $Q = \bigoplus_\lambda \begin{pmatrix} 0 & \lambda \\ -\lambda & 0 \end{pmatrix}$ である。 w が $w^2 = -1$ なるユニタリ行列の場合は $\lambda = \pm 1$ と取ることができる。 よって、より一般に、いつでも $w = 1_n \otimes (i\sigma_y)$ と取ることができる。

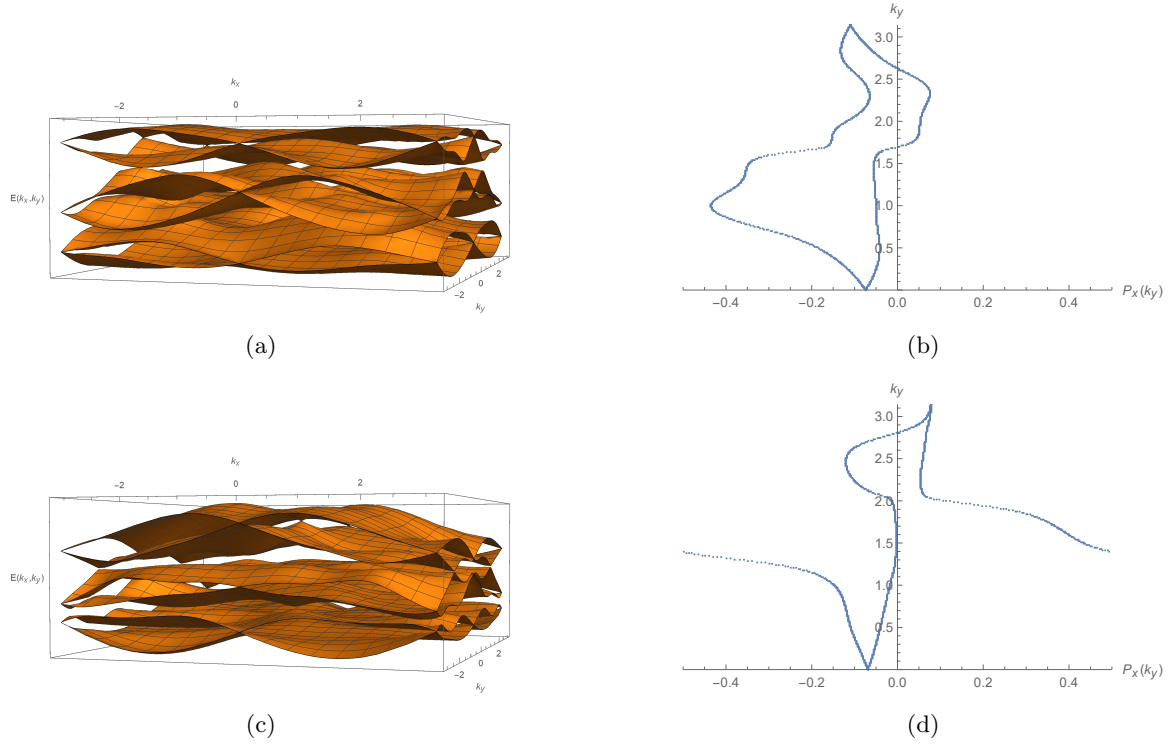


図 3: (a,c) ランダムに生成した時間反転対称性 (71) を満たすハミルトニアン $H(k_x, k_y)$ のスペクトル.
 (a),(c) はそれぞれ $\nu = 0$, 及び $\nu = 1$. (b,d) (a), (c) のハミルトニアンの最低エネルギーバンドに対する分極 $P_y(k_x)$.

となる. よって通常分極と $2P_T = P \pmod{1}$ の関係があり, 時間反転分極 P_T は Kramers 縮退した Wannier 状態の局在位置を $\pmod{1}$ で与えることが分かる.

時間反転分極 P_T は, Wilson 線 $W_{-\pi \rightarrow \pi}$ の 2 重縮退した固有値から定義することもできる. Wilson 線 $W_{-\pi \rightarrow \pi}$ は対称性

$$w_T(\pi)[W_{-\pi \rightarrow \pi}]^T w_T(\pi)^\dagger = W_{-\pi \rightarrow \pi} \quad (90)$$

を満たすから, 全ての固有値が 2 重縮退する. 固有値の集合を $\{\lambda_i, \lambda_i\}_{i=1}^n$ と書いたとき, $\gamma_T = \arg \prod_{i=1}^n \lambda_i$ である.

3.5 空間 2 次元

続いて, 空間 2 次元系を考える. 上で見たように, BZ における任意の時間反転対称な円周上において, 時間反転対称なセル周期状態を取ることができる. パッチ $U_\Gamma = S_{k_x}^1 \times [-\pi/2, \pi/2]$, $U_Y = S_{k_x}^1 \times [\pi/2, 3\pi/2]$ 上で時間反転対称ゲージ (82) を満たすセル周期状態 $\mathcal{U}_\Gamma(\mathbf{k}), \mathcal{U}_Y(\mathbf{k})$ を仮定する. 障害は $k_y = \pi/2$ における変換関数

$$t(k_x) = \mathcal{U}_\Gamma(k_x, \frac{\pi}{2})^\dagger \mathcal{U}_Y(k_x, \frac{\pi}{2}) \in U(2n), \quad k_x \in S_{k_x}^1 \quad (91)$$

の巻き付き数

$$\nu = \frac{1}{2\pi i} \oint d \log \det t(k_x) \in \mathbb{Z} \quad (92)$$

で与えられる。2.3節とは異なり、複数のパッチ U_Γ, U_Y が存在するため、巻き付き数がパッチ上のゲージ変換によって変化する可能性がある。パッチ U_Γ, U_Y における、時間反転対称ゲージを保つゲージ変換はそれぞれ

$$\mathcal{U}_\Gamma(\mathbf{k}) \mapsto \mathcal{U}_\Gamma(\mathbf{k}) V_\Gamma(\mathbf{k}), \quad w V_\Gamma(\mathbf{k})^* w^\dagger = V_\Gamma(-\mathbf{k}), \quad \mathbf{k} \in U_\Gamma, \quad (93)$$

$$\mathcal{U}_Y(\mathbf{k}) \mapsto \mathcal{U}_Y(\mathbf{k}) V_Y(\mathbf{k}), \quad w V_Y(\mathbf{k})^* w^\dagger = V_Y(-\mathbf{k}), \quad \mathbf{k} \in U_Y, \quad (94)$$

と書かれる。このゲージ変換 $V_\Gamma(\mathbf{k}), V_Y(\mathbf{k})$ に対して、変換関数は

$$t(k_x) \mapsto V_\Gamma(k_x, \frac{\pi}{2})^\dagger t(k_x) V_Y(k_x, \frac{\pi}{2}) \quad (95)$$

と変化する。よって、巻き付き数 ν は、ゲージ変換 $V_\Gamma(\mathbf{k}), V_Y(\mathbf{k})$ の巻き付き数だけ変化する：

$$\nu \mapsto \nu + \nu_Y - \nu_\Gamma, \quad (96)$$

$$\nu_\Gamma = \frac{1}{2\pi i} \oint d_{k_x} \log \det V_\Gamma(k_x, k_y), \quad k_y \in [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}], \quad (97)$$

$$\nu_Y = \frac{1}{2\pi i} \oint d_{k_x} \log \det V_Y(k_x, k_y), \quad k_y \in [\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}]. \quad (98)$$

巻き付き数 ν_Γ, ν_Y はトポロジカル数であるので k_y に依存しない。

時間反転対称な $k_y = 0$ 線でトポロジカル数 ν_Γ を評価しよう。 $k_x = 0, \pi$ において $V_\Gamma(k_x, 0)$ は TRS (93) を有するから、固有値は対 $(e^{i\theta}, e^{-i\theta})$ で出現し、よって対称点において位相は 0 に固定される：

$$\det V_\Gamma(k_x, 0) = 1, \quad k_x = 0, \pi. \quad (99)$$

さらに、巻き付き数 ν_Γ への $k_x \in [0, \pi]$ の寄与と $k_x \in [-\pi, 0]$ の寄与が等しいため、巻き付き数は偶数となる。 ν_Y も同様である。したがって、障害 ν の mod 2 はゲージ不変であり、 \mathbb{Z}_2 トポロジカル数である。よって、 \mathbb{Z}_2 で分類される障害が存在する^{*23}。 $\nu \equiv 1$ の絶縁体状態を、(狭い意味で) トポロジカル絶縁体、あるいは量子スピン Hall 絶縁体と呼ばれる [9]。

\mathbb{Z}_2 不変量 ν のゲージ不変な離散公式は以下で与えられる。 TRS のため、2次元 BZ の上半面が独立な領域である。 $S_{k_x}^1 \times [0, \pi]$ における Berry 磁束の総和は、内部の寄与がキャンセルし、 $k_y = 0, k_y = \pi$ における Berry 位相と等価である：

$$\sum_{\square_{\mathbf{k}} \in S_{k_x}^1 \times [0, \pi]} F(\square_{\mathbf{k}}) = \gamma_x(k_y = 0) - \gamma_x(k_y = \pi) \pmod{2\pi}. \quad (100)$$

ここで、 $\gamma_x(k_y) = \arg \prod_{k_x = -\pi}^{\pi - \delta k_x} \det[U(k_x + \delta k_x, k_y)^\dagger U(k_x, k_y)]$ は波数 k_y における x 方向の Berry 位相である。 $k_y = 0, \pi$ における時間反転分極 $\gamma_{T,x}(k_y \in \{0, \pi\})$ を (87) で定義する。 $\gamma_x(k_y \in \{0, \pi\}) = 2\gamma_{T,x}(k_y)$ に注意すると、以下の量は mod 2 で well-defined であり、かつ量子化し、障害 ν と一致する^{*24}。

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sum_{\square_{\mathbf{k}} \in S_{k_x}^1 \times [0, \pi]} F(\square_{\mathbf{k}}) - \frac{1}{\pi} \gamma_{T,x}(k_y = 0) + \frac{1}{\pi} \gamma_{T,x}(k_y = \pi) \pmod{2} \in \{0, 1\}. \quad (101)$$

^{*23} ここでの \mathbb{Z}_2 数の定式化は [8] に従った。

^{*24} KS, unpublished.

$\nu \equiv 1$ の場合は、時間反転対称ゲージを満たすセル周期状態 $U(\mathbf{k})$ が BZ 全体で存在せず、TRS が局所的に作用する Wannier 状態が存在しない。一方で、 $ch_1 = 0$ であるので、BZ 全体で連続的なセル周期状態 $U(\mathbf{k})$ は存在するため、時間反転対称性を満たさない指数関数的に局在する Wannier 状態は存在する。このとき、 $w_T(\mathbf{k})$ は BZ 全体で存在するが、 $w_T(\mathbf{k})$ を一定に取ることができない [8]。つまり、指数関数的に局在する Wannier 状態に対して、時間反転対称性が非局所的に作用する。

図 3(b), (d) にそれぞれ $\nu = 0, 1$ の場合の Wilson ループ $W_{k_x=-\pi \rightarrow \pi}(k_y)$ の固有値の偏角のフローを示す。 $k_y = 0, \pi$ においては TRS のため Wannier 状態は Kramers 対を組む。一方で $k_y \in (0, \pi)$ においては 2 つの状態は縮退しない。よって、TRS が存在する場合の Wannier 状態の中心位置のフローには、互いに連続変形で移り変わることができない 2 通りのフローが存在する。この点は (101) 式の各項の意味から明らかである。

3.6 空間 3 次元

時間反転対称な空間 3 次元の絶縁体の分類を考える。一般点の波数 \mathbf{k} を不変に保つ対称性は存在しないから、TRS が存在しない場合と同様に、 $\pi_2[U(2n)] = 0$ より一般点における障害は存在しない。よって、時間反転変換で閉じる $k_x = 0, \pi, k_y = 0, \pi, k_z = 0, \pi$ 面における 6 つの \mathbb{Z}_2 数 $\nu_{x_0}, \nu_{x_1}, \nu_{y_0}, \nu_{y_1}, \nu_{z_0}, \nu_{z_1}$ が障害を検出するトポロジカル数の全てである。一般のバンド構造においては 6 つのトポロジカル数の任意の組み合わせが実現可能であるが、一般点においてギャップレス点の非存在を仮定すると、

$$\nu_{x_0} + \nu_{x_1} \equiv \nu_{y_0} + \nu_{y_1} \equiv \nu_{z_0} + \nu_{z_1} \pmod{2}, \quad (102)$$

が成立する。よって 4 つの異なる絶縁体相が存在する。上記条件が満たされている状況で

$$\nu_{3D} := \nu_{x_0} + \nu_{x_1} \equiv \nu_{y_0} + \nu_{y_1} \equiv \nu_{z_0} + \nu_{z_1} \pmod{2} \quad (103)$$

と定義すると、 $\nu_{3D} = 1$ は 2 次元の \mathbb{Z}_2 トポロジカル絶縁体を重ねるだけでは得られない絶縁体であり、空間 3 次元において始めて出現する [10]。

(102) の証明であるが、例えば

$$\begin{aligned} & \nu_{z_0} + \nu_{z_1} - \nu_{y_0} - \nu_{y_1} \\ & \equiv \frac{1}{2\pi} \left(\sum_{[-\pi, \pi] \times [0, \pi] \times \{0\}} + \sum_{[-\pi, \pi] \times [0, \pi] \times \{\pi\}} + \sum_{[-\pi, \pi] \times \{0\} \times [0, \pi]} + \sum_{[-\pi, \pi] \times \{\pi\} \times [0, \pi]} \right) F(\square_{\mathbf{k}}) \pmod{2} \end{aligned} \quad (104)$$

は 2 次元の積分領域で定義される Chern 数に他ならないため、 $\nu_{y_0} + \nu_{y_1} - (\nu_{z_0} + \nu_{z_1})$ が奇数のときは内部に Weyl 点が存在する。注意として、時間反転対称性は Weyl 点の電荷を変化させないから、BZ には全部で 4 つの Weyl 点が存在する。

4 結晶対称性

現実物質は結晶対称性を有する。本講義ではこれまで格子の並進対称性

$$\mathbf{x} \mapsto \mathbf{x} + \hat{x}_\mu, \quad \mu = x, y, z, \quad (105)$$

を仮定しているが（そうでないと Bloch 波数が意味をなさない）、これも結晶対称性の一種である。

空間 3 次元において、結晶対称性は 230 通り存在し、固体結晶はいずれかの空間群の対称性を有する。空間群 \mathcal{G} の元 $g \in \mathcal{G}$ は実空間に $g(\mathbf{x}) = p_g \mathbf{x} + \mathbf{t}_g$ と作用する。ここで、 $p_g \in O(3)$ は点群の作用であり、 $\mathbf{t}_g \in \mathbb{R}^3$

は空間並進である。上記の3次元実空間への空間群の作用は忠実であるため、群作用をひとつ固定して、空間群の元を $g = \{p_g | \mathbf{t}_g\}$ で表すことがある。群構造より $p_g p_h = p_{gh}, p_g \mathbf{t}_h + \mathbf{t}_g = \mathbf{t}_{gh}$ を満たす。並進のみで構成される部分群 $\Pi = \{\{1 | \mathbf{t}\} \in \mathcal{G}\}$ を並進群と呼び、商群 $P = \mathcal{G}/\Pi$ を点群と呼ぶ。並進群 Π と切断 $\mathcal{G}/\Pi \rightarrow \mathcal{G}, g \mapsto \{p_g | \mathbf{a}_g\}$ を与えれば空間群が定まる。並進群 Π の生成子と切断 $\{\mathbf{a}_g\}_{g \in \mathcal{G}/\Pi}$ のデータは [11] から入手可能である。*25

結晶対称性が存在する場合も、バンドのトポロジーを調べる基本戦略は今までと同様である。

- BZ のある部分空間において Chern 数が存在しない場合は、その部分空間において滑らかなセル周期状態 $\mathcal{U}(\mathbf{k})$ が存在する。
- 空間群対称性のセル周期状態 $\mathcal{U}(\mathbf{k})$ への作用を $g \in \mathcal{G}, g\mathcal{U}(\mathbf{k}) = \mathcal{U}(p_g \mathbf{k}) w_g(\mathbf{k})$ とする。 $w_g(\mathbf{k}) = \text{const.}$ なるゲージが存在する場合は Wannier 状態に対して空間群が局所的に作用する。
- Wannier 状態の中心位置のフローを調べる。

本節では、結晶対称性によって新しく導入される、「脆いトポロジカル絶縁体」、 「高次トポロジカル絶縁体」について紹介する。両者とも並進対称性に加えて空間反転対称性 $\mathbf{x} \mapsto -\mathbf{x}$ が存在する場合に出現するため、以下では空間反転対称性を考える [12]。

4.1 空間1次元

並進対称性 $x \mapsto x + 1$ に加えて空間反転対称性 $I : x \mapsto -x$ を考える。波数空間に対しても $I : k \mapsto -k$ と作用する。簡単のため、1バンドの場合を考える。空間1次元であるので、滑らかなセル周期状態 $|u(k)\rangle$ が常に存在する。反転対称性は

$$I |u(k)\rangle = |u(-k)\rangle w_I(k), \quad w_I(k) \in U(1), \quad w_I(-k)w_I(k) = 1, \quad (106)$$

と作用する。 $|u(k)\rangle$ のゲージの取り替え $|u(k)\rangle \mapsto |u(k)\rangle V(k), V(k) \in U(1)$ に対して、 $w_I(k) \mapsto V(-k)^\dagger w_I(k) V(k)$ と変化する。3.3 節と同様の議論により、対応する Wannier 状態 $W_R(x) = \frac{1}{2\pi} \oint dk u(k) e^{ik(x-R)}$ に対して空間反転 I が局所的に作用するのは、 $|u(k)\rangle$ のゲージの取り替えにより $w_I(k) = \text{const.}$ に取ることができるときである。

ところが、 $w_I(k) = \text{const.}$ に対する障害が簡単に存在することがわかる。対称点 $k = \Gamma \in \{0, \pi\}$ において、 $w_I(\Gamma)^2 = 1$ であるため、 $w_I(\Gamma) = \pm 1$ である。よって、 $k = 0, \pi$ における反転対称性の固有値 $w_I(\Gamma) \in \{\pm 1\}$ が互いに異なる場合は $w_I(k) = \text{const.}$ と取ることができない。 $|u(k)\rangle$ のゲージ自由度を用いると、次の4通りで分類されることがわかる。

$$w_I(k) = 1, -1, e^{ik}, -e^{ik}. \quad (107)$$

$w_I(k) = \pm 1$ は単位胞 R 近傍に局在する Wannier 状態 $|W_R\rangle$ に対して空間反転対称性が $I |W_R\rangle = \pm |W_R\rangle$ と作用する。一方で $w_I(k) = \pm e^{ik}$ の場合の作用を計算すると、 $I \hat{x} = -\hat{x} I$ に注意して、

$$I |W_R\rangle = \frac{1}{2\pi} \oint e^{ik(-\hat{x}-R)} |u(-k)\rangle (\pm e^{ik}) = \frac{1}{2\pi} \oint e^{ik(\hat{x}+R-1)} |u(k)\rangle (\pm 1) = \pm |W_{-R-1}\rangle \quad (108)$$

と作用する。したがって、単位胞 R 近傍に局在する Wannier 状態 $|W_R\rangle$ が空間反転 I によって $-R-1$ 近傍に局在する Wannier 状態 $|W_{-R-1}\rangle$ に移る。つまり、 $w_I(\pi)/w_I(0) = -1$ のとき、Wannier 状態が単位胞の境界

*25 [11] からは 1651 通りの磁気空間群のデータが入手可能。

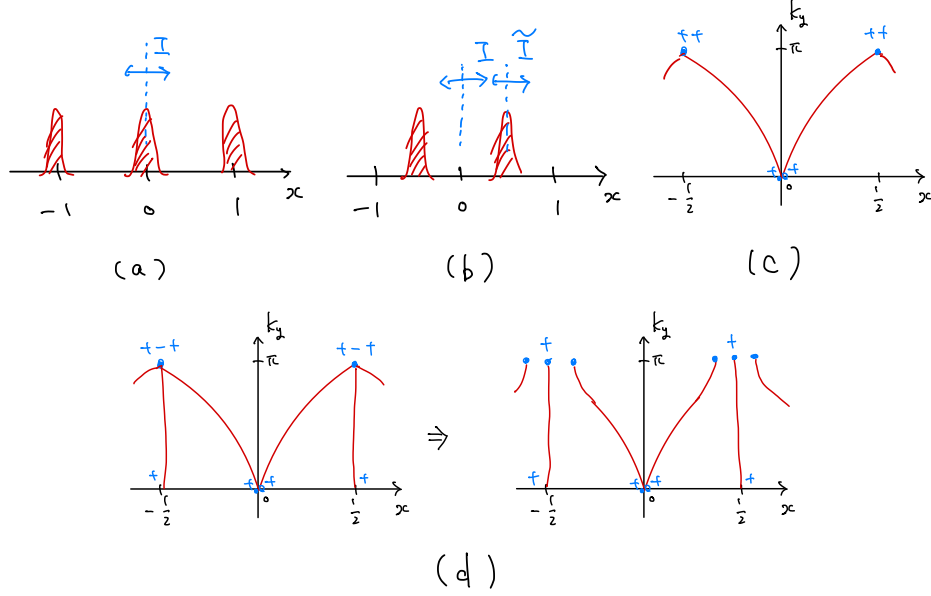


図 4: (a,b) $w_I(\pi)/w_I(0) = 1, -1$ なる Wannier 状態. (c) 脆いトポロジカル絶縁体の例. (d) 原子絶縁体の直和によりフローを消すことができる.

に局在することを意味する. 図 4(a), (b) に 2 通りの Wannier 状態の局在位置を示す. この点は Berry 位相と $w_I(k)$ の関係からも明らかとなる. Berry 位相は, $\langle u(-k - \delta k) | u(-k) \rangle = w_I(k + \delta k)^\dagger \langle u(k + \delta k) | u(k) \rangle w_I(k)$ に注意すると, 積分部分がキャンセルし,

$$\gamma = \arg \prod_{k=-\pi}^{\pi - \delta k} \langle u(k + \delta k) | u(k) \rangle = \arg w_I(\pi)/w_I(0) \quad (109)$$

となり, Wannier 状態の中心位置 $P = \gamma/(2\pi)$ は $w_I(\pi)/w_I(0) = 1$ のときは単位胞の中心位置 $x \equiv 0$ に局在し, 一方で $w_I(\pi)/w_I(0) = -1$ のときは単位胞の境界 $x \equiv 1/2$ に局在する. $w_I(\Gamma) \in \{\pm 1\}$ は, 連続変形に対して変化しないので, トポロジカル数の一種である.

$x = 0, 1/2$ の 2 通りの局在位置であるが, 実は空間群作用の観点からはどちらかを特別視する理由はない. 今まで点群から空間群への切断 $\mathcal{G}/\Pi = \{e, I\} \rightarrow \mathcal{G}$ を暗に $x = 0$ が反転中心となる $\{I|0\} : x \mapsto -x$ と選んでいたが, $x = 1/2$ が反転中心となる $\{I|1\} : x \mapsto -x + 1$ を選んでも良い. 一方で, 系に端が存在するときは $x = 0, 1/2$ の局在位置の違いが意味をなす [6].

$w_I(\pi)/w_I(0) = \pm 1$ の状態のような, 指数関数的に局在する Wannier 状態が空間群の誘導表現を構成する絶縁体を原子絶縁体と呼ぶ.

4.2 空間 2 次元：脆いトポロジカル絶縁体

空間 2 次元系においては, Chern 数がゼロにも拘わらず原子絶縁体ではない絶縁体が存在する. 空間 2 次元においては BZ に 4 つの反転対称点 $p \in \{(0, 0), (\pi, 0), (0, \pi), (\pi, \pi)\}$ が存在する. Chern 数 ch_1 に加えて,

反転対称点における $I = -1$ なる状態の数 $N_p \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ がトポロジカル数として存在する *26.

まず, Chern 数と N_p の総和の偶奇が一致することに注意する. 反転対称性のため Chern 数は BZ の上半面で計算できる. すると,

$$(-1)^{ch_1} = \exp i \sum_{\square_{\mathbf{k}} \in S_{k_x}^1 \times [0, \pi]} F(\square_{\mathbf{k}}) = e^{i\gamma_x(k_y=0) - i\gamma_x(k_y=\pi)} = \prod_{p \in \{(0,0), (\pi,0), (0,\pi), (\pi,\pi)\}} (-1)^{N_p} \quad (110)$$

が成立する. Chern 数がゼロである必要条件是 $\sum_p N_p \equiv 0 \pmod{2}$ である.

以下ではセル周期状態 $U(\mathbf{k})$ を x 方向のみフーリエ変換し, Wannier 状態 $W_{R_x}(k_y)$ の中心位置のフローを考える. 原子絶縁体であれば, セル周期状態は波数依存しないセル周期状態に断熱変形できるため, Wannier 状態 $W_{R_x}(k_y)$ の中心位置のフローは存在しないことに注意する.

バンド数 $n = 2$ で固有値のデータが $(N_{0,0}, N_{\pi,0}, N_{0,\pi}, N_{\pi,\pi}) = (0, 0, 0, 2)$ である場合を考える. $k_y = 0$ において $x = 0$ に局在する $I = 1$ なる状態が 2 つ, $k_y = \pi$ において $x = 1/2$ に局在する $I = 1$ なる状態が 2 つ存在する. $k_y = 0, \pi$ における Wannier 状態は反転対称性のため分離しないため, やはり必ずフローが存在する. 特に, Chern 数がゼロであるような, 2次元のトポロジカル絶縁体に類似のフローが存在する. (図 4(c).) よって, 原子絶縁体とは異なる, という意味で, この状態はトポロジカルに非自明である.

一方で, この絶縁体状態は原子絶縁体を直和することにより原子絶縁体に断熱変形できる. 今の例では $\mathbf{x} = (1/2, 1/2)$ に局在する $I = 1$ なる状態の直和により, $\mathbf{x} = (0, 0), (1/2, 0), (0, 1/2)$ に局在する $I = 1$ なる状態に断熱変形することができる. (図 4(d).) *27 この例のように, 原子絶縁体ではないが, 原子絶縁体の直和により原子絶縁体に連続変形できる絶縁体を脆いトポロジカル絶縁体と呼ぶ [13].

4.3 空間 3 次元：高次トポロジカル絶縁体

空間 3 次元においては, 空間反転対称性のもとで, Chern 数がゼロで, かつ原子絶縁体の直和に対して強固なトポロジカル絶縁体が存在する. まず, $\sum_p N_p \equiv 0 \pmod{2}$ が Weyl 点の非存在のための必要条件である. $\sum_p N_p \equiv 2 \pmod{4}$ の状態を調べる. x 方向のみフーリエ変換した Wannier 状態の中心位置のフローを考えると, 非自明なフローが存在することがわかる. さらに, 対称性指標 [14] の手法により, 原子絶縁体の直和に対して強固であることが示される. この絶縁体相は, 系の境界の 2 次元表面ではなく, 1 次元の「ヒンジ」にギャップレス状態が出現するため, 「2 次のトポロジカル絶縁体」と呼ばれる *28. (時間が余れば詳しく解説します.)

5 補足

– 強束縛近似模型においては飛び移り項を有限の幅に限定する場合が多い. すると, 各種関数の解析性は多項式関数で置き換えられ, Wannier 状態の指数関数的局在性はコンパクトな台を持つかどうか, に置き換えられる. 詳しくは [16] を見よ.

*26 $I = 1$ なる状態の数 $N_p^{(+)}$ もトポロジカル数であるが, ギャップレス点の非存在条件から対称点 p によらず $N_p + N_p^{(+)}$ はバンド数 n に等しいため, 独立なトポロジカル数は N_p に限って良い.

*27 この点は, トポロジカル数の計算により確かめられる. トポロジカル数の組 $(n, ch_1, N_\Gamma, N_X, N_Y, N_M)$ と書く. 図 4(c) のフローを持つ絶縁体を E , $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ に局在する $I = \pm 1$ なる原子絶縁体を $A_{\mathbf{x}_0, \pm}$ と書くと, 絶縁体 E のトポロジカル数の組は $(2, 0, 0, 0, 2)$. 原子絶縁体 $A_{(1/2, 1/2), +}$ のトポロジカル数の組は $(1, 0, 0, 1, 1, 0)$. すると, $E \oplus A_{(1/2, 1/2), +}$ のトポロジカル数の組は $(3, 0, 0, 1, 1, 2)$ であるが, これは $A_{(0,0), +} \oplus A_{(1/2,0), +} \oplus A_{(0,1/2), +}$ のトポロジカル数の組 $(1, 0, 0, 0, 0, 0) + (1, 0, 0, 1, 0, 1) + (1, 0, 0, 0, 1, 1)$ に等しい.

*28 高次トポロジカル絶縁体については, 例えば [15] を挙げる.

- 最局在 Wannier 状態の数値計算手法に興味がある場合は [17] を見よ.
- Chern 数 ch_1 は量子 Hall 係数そのものである. 詳しくは [3] を見よ.
- Chern 数が非ゼロの場合は系の境界にカイラルなギャップレス状態が出現する. 並進対称性が存在する場合の証明については, [18] を見よ.
- 空間 3次元の \mathbb{Z}_2 不変量 ν_{3D} は磁気電気分極という物理的意味がある. 導出と関連する物性は [19] を見よ.
- 時間反転対称性, 粒子・正孔対称性などの内部対称性のみによって保護されるトポロジカル絶縁体・超伝導体は, 格子の結晶対称性を必要としない. 実際, トポロジカル絶縁体・超伝導体の安定性は表面のギャップレス状態の非局在問題として定式化することができる. この点については [20] を見よ.
- 対称性指標は波数空間の高対称点における既約表現の数によって構成されるトポロジカル数であり, 計算が容易であり, 多くの高次トポロジカル絶縁体・超伝導体の検出に利用できる. 詳しくは原論文 [14] を見よ.
- 結晶対称性によって保護されたトポロジカル絶縁体・超伝導体の分類問題の計算可能な枠組みはねじれ同変 K 理論によって与えられる. 詳しくは [21] を見よ.
- 現状, 結晶対称性の存在下におけるトポロジカル数の分類問題, トポロジカル絶縁体・超伝導体の分類問題は未解決問題である. K 理論とスペクトル系列を用いた解決の試みについては [22, 23] を見よ.
- トポロジカル絶縁体の入門的な教科書については, [24] を勧める.

参考文献

- [1] W. Kohn. Analytic properties of bloch waves and wannier functions. *Phys. Rev.*, 115:809–821, Aug 1959.
- [2] Jacques Des Cloizeaux. Energy bands and projection operators in a crystal: Analytic and asymptotic properties. *Phys. Rev.*, 135:A685–A697, Aug 1964.
- [3] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Phys. Rev. Lett.*, 49:405–408, Aug 1982.
- [4] D J Thouless. Wannier functions for magnetic sub-bands. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 17(12):L325, apr 1984.
- [5] Takahiro Fukui, Yasuhiro Hatsugai, and Hiroshi Suzuki. Chern numbers in discretized brillouin zone: Efficient method of computing (spin) hall conductances. *Journal of the Physical Society of Japan*, 74(6):1674–1677, 2005.
- [6] R. D. King-Smith and David Vanderbilt. Theory of polarization of crystalline solids. *Phys. Rev. B*, 47:1651–1654, Jan 1993.
- [7] Jeffrey C. Y. Teo and C. L. Kane. Topological defects and gapless modes in insulators and superconductors. *Phys. Rev. B*, 82:115120, Sep 2010.
- [8] Liang Fu and C. L. Kane. Time reversal polarization and a Z_2 adiabatic spin pump. *Phys. Rev. B*, 74:195312, Nov 2006.
- [9] C. L. Kane and E. J. Mele. Z_2 topological order and the quantum spin hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 95:146802, Sep 2005.
- [10] J. E. Moore and L. Balents. Topological invariants of time-reversal-invariant band structures. *Phys. Rev. B*, 75:121306, Mar 2007.
- [11] H. T. Stokes, D. M. Hatch, and B. J. Campbell, ISO-MAG, ISOTROPY Software Suite, iso.byu.edu.

- [12] Ari M. Turner, Yi Zhang, Roger S. K. Mong, and Ashvin Vishwanath. Quantized response and topology of magnetic insulators with inversion symmetry. *Phys. Rev. B*, 85:165120, Apr 2012.
- [13] Hoi Chun Po, Haruki Watanabe, and Ashvin Vishwanath. Fragile topology and wannier obstructions. *Phys. Rev. Lett.*, 121:126402, Sep 2018.
- [14] Hoi Chun Po, Ashvin Vishwanath, and Haruki Watanabe. Symmetry-based indicators of band topology in the 230 space groups. *Nature communications*, 8(1):50, 2017.
- [15] Eslam Khalaf, Hoi Chun Po, Ashvin Vishwanath, and Haruki Watanabe. Symmetry indicators and anomalous surface states of topological crystalline insulators. *Phys. Rev. X*, 8:031070, Sep 2018.
- [16] N. Read. Compactly supported wannier functions and algebraic k -theory. *Phys. Rev. B*, 95:115309, Mar 2017.
- [17] Nicola Marzari and David Vanderbilt. Maximally localized generalized wannier functions for composite energy bands. *Phys. Rev. B*, 56:12847–12865, Nov 1997.
- [18] Yasuhiro Hatsugai. Chern number and edge states in the integer quantum hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 71:3697–3700, Nov 1993.
- [19] Xiao-Liang Qi, Taylor L. Hughes, and Shou-Cheng Zhang. Topological field theory of time-reversal invariant insulators. *Phys. Rev. B*, 78:195424, Nov 2008.
- [20] Andreas P. Schnyder, Shinsei Ryu, Akira Furusaki, and Andreas W. W. Ludwig. Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions. *Phys. Rev. B*, 78:195125, Nov 2008.
- [21] Daniel S Freed and Gregory W Moore. Twisted equivariant matter. In *Annales Henri Poincaré*, volume 14, pages 1927–2023. Springer, 2013.
- [22] Ken Shiozaki, Masatoshi Sato, and Kiyonori Gomi. Atiyah-hirzebruch spectral sequence in band topology: General formalism and topological invariants for 230 space groups. *Phys. Rev. B*, 106:165103, Oct 2022.
- [23] Ken Shiozaki, Charles Zhaoxi Xiong, and Kiyonori Gomi. Generalized homology and atiyah-hirzebruch spectral sequence in crystalline symmetry protected topological phenomena. *arXiv preprint arXiv:1810.00801*, 2018.
- [24] János K. Asbóth, László Oroszlány, and András Pályi. *A Short Course on Topological Insulators*. Springer International Publishing, 2016.