

対称性指標の基礎から 高次トポロジカル絶縁体への応用まで

東京大学 物理工学専攻 渡辺 悠樹

与えられた対称性のもとで、どのような種類のトポロジカル相がありえるのかを分類したり、それらのトポロジカル相を実現する具体的な物質を探索することは、近年の物性物理学の主要な研究テーマの一つになっている。時間反転対称性や粒子正孔対称、カイラル対称性の組み合わせからなる「内部対称性」に加えて、最近では、離散並進対称性、反転対称性、回転対称性などの組み合わせからなる「空間群の対称性」を含めた分類が盛んに研究されている。本講義では、バンド構造に現れる空間群の対称性の表現を用いて、バンド構造のもつトポロジーを決定する「対称性指標」の方法について詳しく紹介する。

本講義ノートの構成は以下のようになっている¹。第1節では、結晶が持つ対称性である「空間群」の定義やその表現についてまとめる。第2節では、電子のバンド構造を記述する有効模型である「強束縛模型」において、空間群がどのように表現されるかを議論する。これらの準備を元に、第3,4節ではバンド構造に現れる空間群の対称性の表現と、その絶縁体が持つ非自明なトポロジーの関係を詳細に議論する。

1. 空間群・点群の既約表現

まず空間群とその表現に関する基礎事項をおさらいしよう。特に電子系のバンド構造の表現論に欠かせない「射影表現」の詳細や「ノンシンモーフィック空間群」の取り扱いについて文献^{1, 2)}を補足しながらまとめる。

1.1. 空間群の基礎事項

1.1.1. 空間群の種類

我々の住む空間自体は一様かつ等方的であり、3次元ユークリッド群（連続的並進、連続的回転、空間反転およびそれらの組み合わせ）のもとで（少なくとも日常生活のエネルギー・スケールでは）不变である。物質中ではこれらの対称性が部分群に破れている。不純物の存在を無視すれば、原子が周期的に並ぶ結晶構造を持つ物質は離散的並進対称性を持つとして良い。空間群（space group）とは一般に、離散的並進部分群を持つような3次元ユークリッド群の部分群のことである。

全3次元方向への離散並進対称性を持つ空間群は全部で230種類あり、単に空間群と言った場合にはこの意味に理解される。一方、グラフェンの対称性のように2次元方向（これを xy 平面とする）の離散並進対称性しか持たない空間群は、特にレイヤー群（layer group）と呼ばれ、全80種類ある。 z 軸方向への並進対称性は持たないが、空間反

転や鏡映などによって z の符号が変わることも考慮する点が、 x, y 座標の情報しか含まない真に2次元の場合の壁紙群（wallpaper group）との相違点である。同様に、1次元方向（ x 軸とする²）の離散並進対称性しか持たない場合はロッド群（rod group）と呼ばれ、全75種類ある。本稿では主に空間群を議論しつつ、例としてレイヤー群やロッド群も扱うことにする³。

1.1.2. 点群

空間 \mathbb{R}^3 の合同操作からなる群のうち少なくともある一点を動かさないものを点群（point group）という。空間群の議論に現れる点群には全部で32種類あり、その位数（元の数）は有限で1, 2, 3, 4, 6, 8, 12, 16, 24, 48のいずれかである。点群 P の不動点を $\vec{x}_0 \in \mathbb{R}^3$ と書けば、 P の元 g の $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$ への作用は

$$g(\vec{x}) = p_g(\vec{x} - \vec{x}_0) + \vec{x}_0 \in \mathbb{R}^3 \quad (1)$$

と書くことができる。ここに $p_g \in O(3)$ は3次元直交行列である。 p_g としては、恒等変換に対応する単位行列 $\mathbb{1}$ の他に(1)空間反転に対応する $-\mathbb{1}$ 、(2)ある軸周りの角度 $\frac{2\pi m}{n}$ の回転($n = 2, 3, 4, 6$)行列、および(1)と(2)の積が登場する。例えば鏡映は空間反転と角度 π の回転の積である。

1.1.3. 並進群と単位胞

並進群 T は基本並進ベクトル \vec{a}_I ($I = 1, \dots, d$) で特徴付けられる。以下、 $d = 3$ は空間群、 $d = 2$ はレイヤー群、 $d = 1$ はロッド群に対応する。 T の元 g の $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$ への作用は

$$g(\vec{x}) = \vec{x} + \vec{R} \in \mathbb{R}^3, \quad \vec{R} = \sum_I n_I \vec{a}_I \quad (2)$$

の形に書ける。ただし n_I は整数とする。この \vec{R} を並進ベクトルと呼ぶ。以下では並進ベクトル \vec{R} だけ並進する操作を $T_{\vec{R}} \in T$ と書くこととする。

並進群が与えられると、それに対応して単位胞（unit cell）を定義できる。単位胞とは並進の作用によって \mathbb{R}^d 全体を重複なく埋め尽くす領域のことである。これには様々な選び方があるが、本稿では基本並進ベクトルで張られる平行多面体 $\{\sum_I x_I \vec{a}_I | 0 \leq x_I < 1\}$ とする。以下ではこれをUCと書く。

1.1.4. 空間群の実空間への作用

空間群 G の元 g は空間の点 $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$ を

$$g(\vec{x}) \equiv p_g \vec{x} + \vec{t}_g \in \mathbb{R}^3 \quad (3)$$

¹ 本稿は第64回物性若手夏の学校（2019年8月開催）の講義で使用するテキストである。これは雑誌「固体物理」に連載中の誌上セミナーの原稿を得た上でまとめ直したものである。

² z 軸が用いられることが多いが、記法の統一のため x にした。

³ なぜ壁紙群ではなくレイヤー群を扱うのかについては1.3.2節。

へと変換する。ここに $p_g \in O(3)$ は(1)式に現れた3次元直交行列であるが、 $\vec{t}_g \in \mathbb{R}^3$ は基本並進ベクトルやその和の形とは限らない。 \mathcal{G} の2つの元 g, g' の積 gg' は、この変換を合成すると分かるように

$$p_{gg'} = p_g p_{g'}, \quad \vec{t}_{gg'} = p_g \vec{t}_{g'} + \vec{t}_g \quad (4)$$

で特徴付けられる。各空間群のそれぞれの元についての p_g, \vec{t}_g の情報は文献³⁾にまとめられている。

空間群 \mathcal{G} の並進部分群 T は、特に \mathcal{G} の正規部分群である⁴⁾。そのため \mathcal{G} の要素のうち並進の違いを無視したもの、すなわち商集合 \mathcal{G}/T は再び群となる。 \mathcal{G}/T の各元の直交行列 p_g の部分のみに着目することで、 \mathcal{G}/T は $\vec{x} = \vec{0}$ を不動点とする点群とみなすことができる。

1.1.5. シンモーフィック空間群とノンシンモーフィック空間群

点群 P と並進群 T の積集合 $P \times T$ の元 $(p, T_{\vec{R}}), (p', T_{\vec{R}'})$ を考える。点群 P の積は $p * p' = pp' \in P$ 、並進群 T の積は $T_{\vec{R}^*} = T_{\vec{R} + \vec{R}'}$ と定義されている。直積群 $P \times T$ では P, T それぞれ独立に積をとり $(p, T_{\vec{R}}) * (p', T_{\vec{R}'}) = (pp', T_{\vec{R} + \vec{R}'})$ と定めるが、これでは(4)式の積の定義と相容れない。代わりに $(p, T_{\vec{R}}) * (p', T_{\vec{R}'}) = (pp', T_{\vec{R}} * (pT_{\vec{R}'}p^{-1})) = (pp', T_{\vec{R} + p\vec{R}'})$ とすると(4)式と整合することがわかる。これを半直積 $P \ltimes T$ と書く。

このように空間群 \mathcal{G} が、ある点群 P と並進群 T の半直積 $\mathcal{G} = P \ltimes T$ であるとき、 \mathcal{G} はシンモーフィック (symmorphic) であると定義する。もう少し簡単に言い換えると、うまく原点を選ぶことによってすべての元 $g \in \mathcal{G}$ に対して同時に \vec{t}_g [(3)式] を並進ベクトル \vec{R} [(2)式] の形にできればシンモーフィックであり、それ以外のときはノンシンモーフィック (nonsymmorphic) である。3次元の230個の空間群のうち、シンモーフィックなものは73個だけで残りの157個はノンシンモーフィックである。

回転に引き続いて回転軸方向に半端な成分を持つ並進をするらせん操作や、鏡映をした後で面内に半端な成分を持つ並進をするグライド操作を元に持つ空間群は必ずノンシンモーフィックである。他方、空間群 $I2_12_12_1$ (No. 24) や $I2_13$ (No. 199) は例外的でらせん操作やグライド操作を持たない。しかし、各元に対してはそれぞれ適当な原点が存在し \vec{t}_g を並進ベクトル \vec{R} の形に取れるが、そのとき他に半端な並進を持つ元が存在するため、ノンシンモーフィックである。

ロッド群 \bar{A} の例 ロッド群 $\mathcal{G} = \bar{A}$ は、 $\vec{a}_1 \equiv (a, 0, 0)$ の n_1 倍 ($n_1 \in \mathbb{Z}$) だけ並進する並進操作 $T_{n_1 \vec{a}_1} : (x, y, z) \rightarrow (x + n_1 a, y, z)$ に加えて、空間反転 $I : (x, y, z) \rightarrow (-x, -y, -z)$ を持つ。一般の元 $g = T_{n_1 \vec{a}_1} I^m \in \mathcal{G}$ ($m = 0, 1$) は $p_g =$

⁴⁾ H を G の部分群とする。全ての $g \in G, h \in H$ に対して $ghg^{-1} \in H$ であるとき、 H は G の正規部分群と言われる。

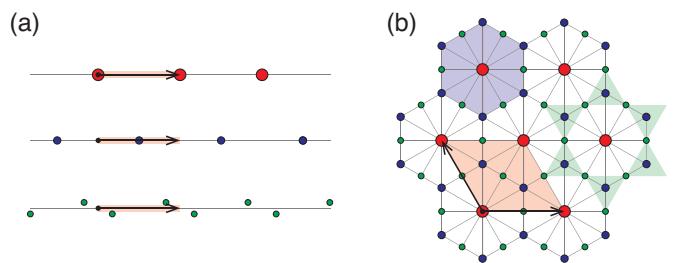


図1 (a) ロッド群 \bar{A} で不变な格子の例。赤、青、緑の点はそれぞれ本文の $\Lambda_{\vec{x}_a}, \Lambda_{\vec{x}_b}, \Lambda_{\vec{x}_c}$ に対応する。(b) レイヤー群 $p6/mmm$ で不变な格子の例。赤、青、緑の点はそれぞれ三角格子、ハニカム格子、籠目格子をなす。この他に、より対称性の低い点が複数存在する。(a),(b) ともに黒点は空間の原点、矢印は基本並進ベクトル、赤色の領域は単位胞 UC を表す。

$(-1)^m \mathbb{1}$ および $\vec{t}_g = n_1 \vec{a}_1$ で特徴付けられ、単位元 e は $n_1 = m = 0$ の場合に対応する。点群 $P = \mathcal{G}/T$ は $p_e = \mathbb{1}$ および $p_I = -\mathbb{1}$ からなる。 $\vec{t}_g = n_1 \vec{a}_1$ が並進ベクトルの形をしているので \bar{A} はシンモーフィックである。

1.1.6. 実空間における軌道と小群

ある $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$ を選んで固定したとき、集合 $\mathcal{G}\vec{x} \equiv \{g(\vec{x}) \mid g \in \mathcal{G}\}$ は点 \vec{x} の \mathcal{G} の作用のもとでの軌道 (orbit) と呼ばれ、物理的には対称性 \mathcal{G} のもとで不变な格子を表す。この格子を $\Lambda_{\vec{x}}$ と表すことによこう。また $\Lambda_{\vec{x}}$ の点のうち単位胞 UC に属するものの集合を $\Lambda_{\vec{x}}^{\text{UC}}$ と書こう。逆に $\Lambda_{\vec{x}}$ は $\Lambda_{\vec{x}}^{\text{UC}}$ を並進対称性 T によって「敷き詰める」ことで得られる。

空間群 \mathcal{G} を固定しても、 \vec{x} の選び方次第で様々な格子が現れる。例えばレイヤー群 $p6/mmm$ (No. 80) の場合には、図1(b)に示したように、 $\Lambda_{\vec{x}}$ は三角格子、ハニカム格子、籠目格子などとなる。空間群 \mathcal{G} の対称性を持つ本質的に異なる格子はワイコフ位置 (1.1.7節) によって分類される。

1.1.5節のシンモーフィック空間群の定義は、この \mathcal{G} 不変な格子の言葉で言い換えることができる。 \vec{x} を変化させて得られる種々の $\Lambda_{\vec{x}}$ の中に「サイト数が単位胞あたり1つ」($|\Lambda_{\vec{x}}^{\text{UC}}| = 1$) であるものが存在するとき、 \mathcal{G} はシンモーフィックである。逆にノンシンモーフィック空間群のときは、どんなにうまく \vec{x} を選んでも $\Lambda_{\vec{x}}^{\text{UC}}$ は必ず2つ以上の点を含む。先の $p6/mmm$ の例では、三角格子は単位胞あたりに1つだけしかサイトを持たないので $p6/mmm$ はシンモーフィックである。

軌道と密接に関連した概念として小群 (little group) というものがある。これは \vec{x} を不变に保つ \mathcal{G} の部分群であり、集合としては $\{h \in \mathcal{G} \mid h(\vec{x}) = \vec{x}\}$ に等しい⁵⁾。以下ではこれを $\mathcal{G}_{\vec{x}}$ と書く。定義より $\mathcal{G}_{\vec{x}}$ は \vec{x} を不動点とする点群である。 $\Lambda_{\vec{x}}^{\text{UC}}$ の元の数 $|\Lambda_{\vec{x}}^{\text{UC}}|$ と $\mathcal{G}_{\vec{x}}$ の位数 $|\mathcal{G}_{\vec{x}}|$ の積 $|\Lambda_{\vec{x}}^{\text{UC}}||\mathcal{G}_{\vec{x}}|$ は、 \vec{x} によらず常に \mathcal{G}/T (1.1.4節) の位数 $|\mathcal{G}/T|$ に等しい。

⁵⁾ 後の都合で小群の元は主に h と書く。

1.1.7. ワイコフ位置

空間の2点 $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^3$ に対する同値関係 $\vec{x} \sim \vec{y}$ を、小群 $\mathcal{G}_{\vec{x}}$ と $\mathcal{G}_{\vec{y}}$ が共役であること、すなわち $\mathcal{G}_{\vec{y}} = g\mathcal{G}_{\vec{x}}g^{-1}$ なる $g \in \mathcal{G}$ が存在すること」と定める。例えば、 \vec{x} と \vec{y} が同じ軌道上にあり、 $\vec{y} = g(\vec{x})$ ($g \in \mathcal{G}$) と書けるならば、 $\mathcal{G}_{\vec{y}} = g\mathcal{G}_{\vec{x}}g^{-1}$ となるので $\vec{x} \sim \vec{y}$ である。しかし同じ軌道上にある必要はない、例えば自明な小群 $\mathcal{G}_{\vec{x}} = \{e\}$ を持つ点はすべて同値である。空間 \mathbb{R}^3 のすべての点をこの同値関係で分類した商集合 (\mathbb{R}^3 / \sim) がワイコフ位置 (Wyckoff position) である。この情報も 230 個の空間群それぞれに対して文献³⁾ にまとめられている。同じ軌道上にある場合には同じワイコフ位置に属することから、異なるワイコフ位置を列挙するためには単位胞 UC 内の点に着目すれば十分である。

例 再びロッド群 \bar{A} の例を用いる。 $g = T_{n_1\vec{a}_1}I^m$ に対して $g(\vec{x}) = \vec{x}$ を解いてみると、 $m = 0$ のときは $n_1 = 0$ (つまり単位元) のときのみ解を持ち、そのときは当然すべての \vec{x} が解となる。一方 $m = 1$ のときは一般の $n_1 \in \mathbb{Z}$ に対して $\vec{x} = (n_1a/2, 0, 0)$ という解を持つことが分かる。すなわち小群 $\mathcal{G}_{\vec{x}}$ は、 \vec{x} が $(na/2, 0, 0)$ ($n \in \mathbb{Z}$) のとき $T_{(na, 0, 0)}I$ を要素に持ち、この他の形のときには自明で単位元 e のみとなる。

また、 $\mathcal{G}_{(na/2, 0, 0)} = \{e, T_{(na, 0, 0)}I^m\}$ が $T_{(n_1a, 0, 0)}\mathcal{G}_{(na/2, 0, 0)}$ $T_{(n_1a, 0, 0)}^{-1} = \mathcal{G}_{((n_1+n/2)a, 0, 0)}$ を満たすことに注意すると、 $\vec{x} = (na/2, 0, 0)$ と $\vec{y} = \vec{x} + n_1\vec{a}$ は同じワイコフ位置に属していることが確認できる。したがってワイコフ位置は3つ存在し、その代表点としては $\vec{x}_a = (0, 0, 0)$, $\vec{x}_b = (a/2, 0, 0)$, $\vec{x}_c = (x, y, z)$ (ただし $0 < x < a/2$) を選ぶことができる。図 1(a) に示したように、それぞれ $\Lambda_{\vec{x}_a}^{\text{UC}} = \{(0, 0, 0)\}$, $\Lambda_{\vec{x}_b}^{\text{UC}} = \{(a/2, 0, 0)\}$, $\Lambda_{\vec{x}_c}^{\text{UC}} = \{(x, y, z), (a-x, -y, -z)\}$ という格子に対応する。

1.2. 波数空間

空間群 \mathcal{G} の表現は、その不变部分群である並進群 T の表現を元に構成される。この T の表現を特徴づけるのが波数 \vec{k} である。

1.2.1. 並進群の表現と波数空間

並進群の元 $T_{\vec{R}} \in T$ の表現を

$$U_{\vec{k}}(T_{\vec{R}}) = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} \quad (5)$$

と定める。この表現のラベルであるベクトル \vec{k} の集合を波数空間と呼ぶ。逆格子ベクトル \vec{b}_J ($J = 1, \dots, d$) を、 $\vec{a}_I \cdot \vec{b}_J = 2\pi\delta_{I,J}$ を満たすように定義する。逆格子ベクトル \vec{b}_J は波数空間における基本並進ベクトルの役割を果たす。波数空間の格子点を

$$\vec{G} = \sum_J m_J \vec{b}_J \quad (6)$$

と書くと、 \vec{k} と $\vec{k} + \vec{G}$ は同じ並進の表現を与えるのですべて同一視する。すなわち波数空間はその単位胞のみを考えれば十分である。これを第1ブリルアン域 (the first Brillouin zone) と呼び、以下では BZ と書く。第1ブリルアン域としてはウィグナーザイツ胞 (Wigner-Seitz cell)¹⁾ が選ばれることが多いので本稿でもこれに習う。 \vec{k} と $\vec{k} + \vec{G}$ を同一視するもとで波数空間は d 次元トーラスと同相になる。

1.2.2. 空間群の波数空間への作用

(5) 式の表現の基底となる状態を $|\vec{k}\rangle$ と書く。すなわち

$$\hat{T}_{\vec{R}}|\vec{k}\rangle = |\vec{k}\rangle e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}}. \quad (7)$$

このとき、 $\hat{g}|\vec{k}\rangle$ という状態を考えてみると、(4) 式を用いて

$$\hat{T}_{\vec{R}}(\hat{g}|\vec{k}\rangle) = \hat{g}(\hat{T}_{p_g^{-1}\vec{R}}|\vec{k}\rangle) = (\hat{g}|\vec{k}\rangle)e^{-i(p_g\vec{k})\cdot\vec{R}} \quad (8)$$

となる。したがって、 $\hat{g}|\vec{k}\rangle$ は表現 $U_{p_g\vec{k}}(T_{\vec{R}}) = e^{-i(p_g\vec{k})\cdot\vec{R}}$ の基底となることが分かる。すなわち空間群の元 g は波数 \vec{k} に対して

$$g(\vec{k}) = p_g\vec{k} \quad (9)$$

と作用する。 \vec{k} の変換には g の並進部分 \vec{t}_g が効かないことに特に注意したい。

1.2.3. 波数空間における軌道と小群

実空間のときと同様、 $\vec{k} \in \text{BZ}$ を選んで固定したとき、集合 $\mathcal{G}_{\vec{k}} \equiv \{g(\vec{k}) \in \text{BZ} \mid g \in \mathcal{G}\}$ は \vec{k} の \mathcal{G} の作用のもとでの軌道を表す。特に波数空間ではこれを \vec{k} の星 (star) と呼び、 $S_{\vec{k}}$ と書くことにする。実空間の場合とは異なり、 \vec{k} の星の要素数 $|S_{\vec{k}}|$ は有限である。

また、 $\vec{k} \in \text{BZ}$ を不变に保つ \mathcal{G} の部分群を \vec{k} の小群 $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ と呼ぶ。集合としては $\{h \in \mathcal{G} \mid h(\vec{k}) = \vec{k} (+\vec{G})\}$ に等しい。並進は \vec{k} を変えないため、 $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ は必ず並進群 T を部分群に含む。したがって $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ 自身は点群ではない。 $|\mathcal{G}_{\vec{k}}/T|$ と $|S_{\vec{k}}|$ の積は、 \vec{k} によらず常に $|\mathcal{G}/T|$ に等しい。

例 またロッド群 \bar{A} の例を用いと、 $\vec{b}_1 = (\frac{2\pi}{a}, 0, 0)$ 、 $\text{BZ} = \{k\vec{b}_1 \mid -\frac{1}{2} < k \leq \frac{1}{2}\}$ となる。 $I(\vec{k}) = -\vec{k}$ なので $\vec{k} = \vec{0}$ と $\vec{k} = \vec{b}_1/2$ は空間反転不变であり、このとき $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ は \mathcal{G} 自身、 $S_{\vec{k}} = \{\vec{k}\}$ となる。この他の \vec{k} については、 $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ は並進群 T と一致し、 $S_{\vec{k}} = \{+\vec{k}, -\vec{k}\}$ となる。

1.3. 空間群の表現

本節では特に射影表現に重点を置きながら、空間群の表現についてまとめる。

1.3.1. 射影表現

一般に、群 G の行列表現とは $g \in G$ から $u(g)$ への写像で

$$u(g)u(g') = u(gg') \quad (10)$$

を満たすもののことである。(この小節の G としては空間群 \mathcal{G} や点群 P を想定している。) しかしバンド構造の表現を議論する際には

$$u(g)u(g') = \omega(g, g')u(gg') \quad (11)$$

を満たす射影表現 (projective representation) を考える必要が生じる。この位相 $\omega(g, g') \in U(1)$ を射影表現の乗数系 (factor system) と呼ぶ。(10) 式を満たす通常の表現は、射影表現と区別して線型表現 (linear representation) と呼ばれる。

乗数系は任意に選ぶことはできず、行列の積の結合則 $[u(g)u(g')]u(g'')] = u(g)[u(g')u(g'')]$ に対応して、コサイクル条件 $\omega(g, g')\omega(gg', g'') = \omega(g, g'g'')\omega(g', g'')$ ($g, g', g'' \in G$) を満たさなければならない。また各 g に対して $u(g)' = u(g)e^{i\varphi_g}$ と取り直すと

$$u(g)'u(g')' = e^{i(\varphi_g + \varphi_{g'} - \varphi_{gg'})}\omega(g, g')u(gg')' \quad (12)$$

となり、乗数系は $\omega(g, g')' = e^{i(\varphi_g + \varphi_{g'} - \varphi_{gg'})}\omega(g, g')$ へと変換されることが分かる。このように $u(g)$ の位相の取替えで結びつく違いは本質的でなく、この位相変換による乗数系の同値類を考えるのが自然である。これによって得られる本質的に異なる乗数系の分類は群の第 2 コホモロジー $H^2(G, U(1))$ で与えられることが知られている。また、この位相変換の自由度を利用して、単位元 e がすべての $g \in G$ に対して $\omega(e, g) = \omega(g, e) = 1$ を満たすように選ぶこととする。

1.3.2. 電子スピンに起因する乗数系

バンド構造に現れる表現の乗数系が非自明になる起源には大きく分けて 2 種類ある。一つ目が、電子がスピン $1/2$ を持つことによる。一般に空間群 \mathcal{G} の元 g の点群部分 $p_g \in O(3)$ は

$$p_g = \pm e^{-i\theta_g \vec{n}_g \cdot \vec{L}} \quad (13)$$

と書くことができる。初めの符号は p_g の行列式 $\det(p_g)$ に対応する。指標関数の部分は軸 \vec{n}_g 周りの角度 θ_g の回転行列を表し、 $\vec{L} = (L_1, L_2, L_3)^T$ は角運動量演算子の 3 次元表現行列である（具体的には完全反対称テンソル ϵ を用いて $(L_i)_{j,k} = -i\epsilon_{ijk}$ ($i, j, k = 1, 2, 3$) とすればよい）。（ \vec{n}_g, θ_g の選び方には不定性があり、 (\vec{n}_g, θ_g) と $(\vec{n}_g, \theta_g + 2\pi n)$ や $(-\vec{n}_g, -\theta_g)$ は同じ回転を表すことに注意したい。例えば $0 \leq \theta_g \leq \pi$ のように制限してこの不定性を取り除こうとしても、 $\theta_g = \pi$ のときの処理が問題になる。何れにせよ、各 $g \in \mathcal{G}$ に対して (13) 式を満たす (\vec{n}_g, θ_g) を一つ選んで固定

することにする。特に $p_g = \pm 1$ のときは $\theta_g = 0$ と約束する。(4) 式により、 p_g は \mathcal{G} の線型表現である。

\vec{x} へ作用する行列 $p_g \in O(3)$ に対応し、電子のスピンに作用する行列 $p_g^{\text{sp}} \in SU(2)$ を

$$p_g^{\text{sp}} = e^{-i\theta_g \vec{n}_g \cdot \vec{S}} \quad (14)$$

と定めることにしよう。ここに $\vec{S} = \vec{\sigma}/2$ はスピン $1/2$ を表し、 $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)^T$ はパウリ行列である。この行列 p_g^{sp} は \mathcal{G} の射影表現となり、

$$p_g^{\text{sp}} p_{g'}^{\text{sp}} = \omega^{\text{sp}}(g, g') p_{gg'}^{\text{sp}} \quad (15)$$

を満たす。

(15) 式は電子のスピン $1/2$ に起因する乗数系 $\omega^{\text{sp}}(g, g') = \pm 1$ の定義式とみることができる。今後現れる空間群 \mathcal{G} や小群 $\mathcal{G}_{\vec{x}}, \mathcal{G}_{\vec{k}}$ の表現はすべてこの $\omega^{\text{sp}}(g, g')$ を乗数系とする射影表現である。(13) 式を満たす角度 (\vec{n}_g, θ_g) の選び方を変えると $\omega^{\text{sp}}(g, g')$ の値も変わるが、この違いは 1.3.1 節で述べた位相変換の自由度に対応する。

ゼーマン磁場やスピン軌道相互作用などがら、スピンの $SU(2)$ 回転対称性を仮定できる場合には、軌道とスピンの変換を別々に行なうことが可能となる。その場合、軌道の変換を議論する際には以下の議論で $\omega^{\text{sp}}(g, g') = 1$ とすればいい。

レイヤー群やロッド群はそれぞれ 2 次元、1 次元の並進群しか持たないが、点群部分 p_g としてはいずれに対しても $O(3)$ 行列を考えていることを思い出そう。これは p_g^{sp} や $\omega^{\text{sp}}(g, g')$ を同定するために必要だからである。例えば空間反転 $I : (x, y, z) \mapsto (-x, -y, -z)$ と z 軸まわりの π 回転 $C_{2z} : (x, y, z) \mapsto (-x, -y, +z)$ は x, y だけを見てても区別できない。しかし電子スピンにとっては全く違う操作を表しており、 $p_I^{\text{sp}} = 1, p_{C_{2z}}^{\text{sp}} = -i\sigma_z$ となる。

点群 222 の例 スピンに起因する乗数系のとても大切な例として、点群 222 を考えよう。この群の位数は 4 で、単位元 e の他に x, y, z それぞれの軸周りの π 回転操作 C_{2i} ($i = x, y, z$) を元として持つ。積は $C_{2x}C_{2y} = C_{2y}C_{2x} = C_{2z}$ や $(C_{2i})^2 = e$ を満たすため、この群は可換群である。

$g = C_{2i}$ ($i = x, y, z$) のそれぞれに対し、 \vec{n}_g を $(1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1)$ とし、 θ_g はすべて $+\pi$ と選んでみる。すると $p_{C_{2i}}^{\text{sp}} = e^{-i\pi\sigma_i/2} = -i\sigma_i$ となるため、電子のスピンに起因する乗数系 ω^{sp} は

$$\omega^{\text{sp}}(C_{2x}, C_{2y}) = \omega^{\text{sp}}(C_{2y}, C_{2z}) = \omega^{\text{sp}}(C_{2z}, C_{2x}) = +1 \quad (16)$$

$$\omega^{\text{sp}}(C_{2y}, C_{2x}) = \omega^{\text{sp}}(C_{2z}, C_{2y}) = \omega^{\text{sp}}(C_{2x}, C_{2z}) = -1 \quad (17)$$

と求めることができる。

1.3.3. ノンシンモーフィックな操作に起因する乗数系

小群 $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ の表現とは

$$U_{\vec{k}}(h)U_{\vec{k}}(h') = \omega^{\text{sp}}(h, h')U_{\vec{k}}(hh') \quad (18)$$

を満たす射影表現のうち、並進部分群 T の表現が(5)式を満たすことである。 $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ の既約表現を求めるために、まずは有限群 $\mathcal{G}_{\vec{k}}/T$ の既約表現を求めておき、それに基づいて $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ の既約表現を構成するということが行われる。そこで $\mathcal{G}_{\vec{k}}/T$ の表現 $u_{\vec{k}}$ を

$$U_{\vec{k}}(h) = u_{\vec{k}}(h)e^{-i\vec{k}\cdot\vec{t}_h} \quad (19)$$

によって導入しよう。並進群の表現を(5)式で定めているために、こうすると確かに h と $T_R h$ はともに同じ $u_{\vec{k}}$ を与え、 $\mathcal{G}_{\vec{k}}/T$ の表現と言えそうである。しかし、この定義式(19)を(18)式に代入すると、 $u_{\vec{k}}$ は

$$u_{\vec{k}}(h)u_{\vec{k}}(h') = \omega^{\text{sp}}(h, h')e^{-i\vec{k}\cdot(p_h\vec{t}_{h'} - \vec{t}_h)}u_{\vec{k}}(hh') \quad (20)$$

を満たさなければならないことがわかる。すなわち群 $\mathcal{G}_{\vec{k}}/T$ の射影表現 $u_{\vec{k}}$ の乗数系は、 $\omega^{\text{sp}}(h, h')$ と

$$\omega_{\vec{k}}^{\text{ns}}(h, h') \equiv e^{-i\vec{k}\cdot(p_h\vec{t}_{h'} - \vec{t}_h')} \quad (21)$$

の積になる。逆に $\omega^{\text{sp}}(h, h')\omega_{\vec{k}}^{\text{ns}}(h, h')$ を乗数系とする $\mathcal{G}_{\vec{k}}/T$ の射影表現 $u_{\vec{k}}(h)$ が得られれば、(19)式を用いて $\omega^{\text{sp}}(h, h')$ を乗数系とする $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ の射影表現が構成できる。 $\omega_{\vec{k}}^{\text{ns}}(h, h')$ は空間群がノンシンモーフィックでかつ \vec{k} が BZ 表面の場合のみ重要になる。

空間群 $P2_12_12_1$ (No. 19) の例 空間群 $P2_12_12_1$ は 2 つのらせん操作 S_x, S_y およびこれらの積(例えば $S_z = (S_x S_y)^{-1}$ や $T_x = S_x^2$) からなるノンシンモーフィック空間群である。これらの操作の具体系は

$$S_x : (x, y, z) \mapsto (x + a_x/2, -y + a_y/2, -z), \quad (22)$$

$$S_y : (x, y, z) \mapsto (-x, y + a_y/2, -z + a_z/2), \quad (23)$$

$$S_z : (x, y, z) \mapsto (-x + a_x/2, -y, z + a_z/2) \quad (24)$$

である。高対称波数 $\vec{k} = (\pi n_x/a_x, \pi n_y/a_y, \pi n_z/a_z)$ (ただし n_x, n_y, n_z は 0 または 1) においては、小群 $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ は $P2_12_12_1$ 自身と一致する。この波数において具体的に $\omega_{\vec{k}}^{\text{ns}}(h, h')$ をいくつか計算してみると、

$$\omega_{\vec{k}}^{\text{ns}}(S_x, S_y) = e^{i\pi(n_y + n_z)}, \quad \omega_{\vec{k}}^{\text{ns}}(S_y, S_x) = e^{i\pi n_x} \quad (25)$$

となる。特に $\omega_{\vec{k}}^{\text{ns}}(S_x, S_y)/\omega_{\vec{k}}^{\text{ns}}(S_y, S_x) = e^{i\pi(n_x + n_y + n_z)} = -1$ となるような高対称波数点に対しては、この乗数系を考慮することで許される既約表現の次元や数が変化する。例えば、電子スピンがない場合には 2 次元表現が 1 つだけ 1 次元表現は許されなくなる(1.3.4 節参照)。

1.3.4. 点群の既約表現とその性質

これまで、実空間における $\mathcal{G}_{\vec{x}}$ (1.1.6 節) と波数空間における $\mathcal{G}_{\vec{k}}/T$ (1.2.3 節) の 2 つの点群が現れた。物理的応用の際には、それぞれ $\omega^{\text{sp}}(h, h')$ と $\omega_{\vec{k}}^{\text{sp}}(h, h')\omega_{\vec{k}}^{\text{ns}}(h, h')$ を乗数系とする射影表現を考えることになる(1.3.2 および 1.3.3 節)。ここではより一般に、乗数系を $\omega(p, p')$ とする点群 P の射影表現の性質についてまとめよう⁶。

P の既約表現を $u^\alpha(p)$ ($\alpha = 1, \dots, N$) と書き、その指標 $\text{tr}[u^\alpha(p)]$ を $\chi^\alpha(g)$ 、次元を $D^\alpha = \chi^\alpha(e)$ と記す。射影表現の場合にも線型表現のときと同様に表現の直交性

$$\sum_{p \in P} [u^\alpha(p)]_{i,j}^* [u^\beta(p)]_{k,l} = \frac{|P|}{D^\alpha} \delta_{i,k} \delta_{j,l} \delta_{\alpha,\beta} \quad (26)$$

が成立する。これより直ちに指標の直交性

$$\sum_{p \in P} [\chi^\alpha(p)]^* \chi^\beta(p) = |P| \delta_{\alpha,\beta} \quad (27)$$

も導かれる。したがって、一般の射影表現 $u(p)$ に含まれる既約表現 $u^\alpha(p)$ の数は

$$n^\alpha \equiv \frac{1}{|P|} \sum_{p \in P} [\chi^\alpha(p)]^* \chi(p), \quad \chi(p) = \text{tr}[u(p)] \quad (28)$$

から求めることができる。また、表現の次元 D^α に対しても線型表現のときと同様に

$$\sum_\alpha (D^\alpha)^2 = |P| \quad (29)$$

が成立する。また、異なる射影既約表現 $u^\alpha(p)$ ($\alpha = 1, \dots, N$) の数は

$$N = \frac{1}{|P|} \sum_{p, p' \in P} \frac{\omega(p, p')}{\omega(p', p)} \delta_{pp', p'p} \quad (30)$$

で与えられる⁴⁾。

例 再び点群 222 を考えよう。この群は可換群であるため、線型表現としては 1 次元表現が 4 つ得られる。具体的には、 $u^\alpha(C_{2x}) = \pm 1$ と $u^\alpha(C_{2y}) = \pm 1$ を選ぶと、 $u^\alpha(C_{2z})$ が自動的に $u^\alpha(C_{2z}) = u^\alpha(C_{2x}C_{2y}) = u^\alpha(C_{2x})u^\alpha(C_{2y})$ から決まる。このとき $1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2 = 4$ のように(29)式が満たされていることに注意する。

一方、電子のスピンに起因する乗数系 ω^{sp} を考慮に入れると、 $u^\alpha(C_{2x})u^\alpha(C_{2y}) = -u^\alpha(C_{2y})u^\alpha(C_{2x})$ のように表現が非可換になる。一般に非可換表現を実現する 1 次元表現は存在しない。実際、この乗数系を持つ点群 222 の表現は 2 次元表現が 1 つであり、 $u^\alpha(C_{2i}) = p_{C_{2i}}^{\text{sp}} = -i\sigma_i$ で与えられる。この場合、(29)式は $2^2 = 4$ として成立している。

⁶ 本稿の目的に沿って点群に限定したが、本節で紹介する内容は一般的な有限群に対して成立する。

例 先に述べた点群 222 の場合には、 $|P| = 4$ であり、4 次元のエルミート行列 h を適当に選ぶ。(16),(17) 式の乗数系を元に正則表現を構成し、 h を対称化する。これを対角化すれば、エネルギー固有値は 2 重縮退した準位が二つ出てくる。これは先述の 2 次元既約表現が 2 つ含まれていることに対応している。

2. バンド構造の表現と適合関係

本節では、周期ポテンシャル中の電子状態を特徴付ける「バンド構造」に対して、結晶の対称性がどのように影響を及ぼすのかについて詳細に議論する。特に空間群の対称性が強束縛模型でどう表現されるかについて特に詳しく解説する。

2.1. 強束縛模型

2.1.1. 模型の定義

強束縛模型 (tight-binding model) は離散格子点 $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ 上に定義された自由粒子の模型であり、ここでは特に自由電子の場合を議論する。各単位胞にスピン自由度を含めて合計 N_{orb} 個の軌道があるとする。それぞれの単位胞を並進ベクトル \vec{R} で指定し、特に $\vec{R} = \vec{0}$ にある単位胞を UC と記す。UC 内の s 番目の軌道 ($s = 1, \dots, N_{\text{orb}}$) の位置を $\vec{r}_s \in \Lambda$ と書く。

横ベクトル $\hat{c}_{\vec{R}}^\dagger$ は、その第 s 成分 $(\hat{c}_{\vec{R}}^\dagger)_s$ が s 番目の軌道の電子を単位胞 \vec{R} に作る生成演算子であり、フェルミオンの反交換関係 $\{(\hat{c}_{\vec{R}})_s, (\hat{c}_{\vec{R}'}^\dagger)_{s'}\} = \delta_{\vec{R}, \vec{R}'} \delta_{s', s}$ を満たすとする。強束縛模型は、これを用いて

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \hat{c}_{\vec{R}}^\dagger H_{\vec{R}-\vec{R}'} \hat{c}_{\vec{R}} \\ &= \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \sum_{s' s} (\hat{c}_{\vec{R}'})_{s'}^\dagger (H_{\vec{R}-\vec{R}'})_{s', s} (\hat{c}_{\vec{R}})_s\end{aligned}\quad (31)$$

と定義される⁷。 $H_{\Delta\vec{R}} (\Delta\vec{R} = \vec{R} - \vec{R}')$ は飛び移り積分やスピン軌道相互作用などを表す N_{orb} 次元行列で $H_{\Delta\vec{R}}^\dagger = H_{-\Delta\vec{R}}$ を満たす。並進対称性 T を仮定し、 $H_{\Delta\vec{R}}$ が \vec{R} と \vec{R}' の差にしか依存しないことを既に用いている。さらにハミルトニアンの局所性、つまり $H_{\Delta\vec{R}}$ が大きな $|\Delta\vec{R}|$ に対して十分早く減衰することも要請する。これはバンド構造の連続性や解析性と関係する重要な仮定である。

以下に示すように \hat{H} を対角化することで N_{orb} 本のエネルギーバンドが得られる。このバンド構造に対し空間群の対称性からどのような一般的な制限をかけることができるのかが本稿の焦点の一つである。

2.1.2. フーリエ変換

フーリエ変換を $\hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \equiv \sum_{\vec{R}} \hat{c}_{\vec{R}}^\dagger e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}$, $\hat{c}_{\vec{R}}^\dagger = \int_{\text{BZ}} \frac{d^d k}{v_{\text{BZ}}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger$ (v_{BZ} は第一ブリルアンゾーン BZ の体積) と定義すると、ハミルトニアンは各 \vec{k} ごとにブロック対角化されて $\hat{H} = \int_{\text{BZ}} \frac{d^d k}{v_{\text{BZ}}} \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \tilde{H}_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}}$ 、生成消滅演算子の規格化は $\{\hat{c}_{\vec{k}}, \hat{c}_{\vec{k}'}^\dagger\} = v_{\text{BZ}} \delta^d(\vec{k} - \vec{k}')$ となる。この定義では $\tilde{H}_{\vec{k}} \equiv \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} H_{\vec{R}}$ の波数依存性は $e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}$ を通してのみ現れるので、 $\tilde{H}_{\vec{k}}$ は $\vec{k} \rightarrow \vec{k} + \vec{G}$ に対して不变であり、波数空間の大域的性質 (d 次元トーラスと同相) と相性が良い。

フーリエ変換には別の流儀も存在する。それは単位胞の位置 \vec{R} の代わりに軌道の実際の位置 $\vec{R} + \vec{r}_s \in \Lambda$ を用いて $(\hat{c}_{\vec{k}}^\dagger)_s \equiv \sum_{\vec{R}} (\hat{c}_{\vec{R}}^\dagger)_s e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R} + \vec{r}_s)} = (\hat{c}_{\vec{k}}^\dagger)_s e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_s}$ とするものである。2 つのフーリエ変換の定義は、例えば $\hat{c}_{\vec{k}}^\dagger = \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger V_{\vec{k}}^\dagger$, $H_{\vec{k}} = V_{\vec{k}} \tilde{H}_{\vec{k}} V_{\vec{k}}^\dagger$ といった具合に、ユニタリ行列 $(V_{\vec{k}})_{s' s} = \delta_{s' s} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_s}$ で結ばれている。 $V_{\vec{G}} \neq \mathbb{1}$ であるため、 $H_{\vec{k}}$ は $\vec{k} \rightarrow \vec{k} + \vec{G}$ に対して不变ではなく、代わりに $H_{\vec{k} + \vec{G}} = V_{\vec{G}} H_{\vec{k}} V_{\vec{G}}^\dagger$ を満たす。このため、波数 \vec{k} の \vec{G} の違いを完全に無視することができなくなってしまうので注意を要する。

この 2 つのフーリエ変換の定義の違いは様々な混乱の原因となるが、それをコンシスティントに使っている限り物理的な差異は生じ得ない。本稿では一つ目の定義で議論を進める (チルダが至る所に現れてしまい煩わしいが、文献⁵⁾ の記法に合わせるためにこのようにした)。

2.1.3. 強束縛模型の対称性

強束縛模型において、空間群の元 $g \in \mathcal{G}$ は $\hat{c}_{\vec{k}}^\dagger$ を

$$\hat{g} \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{g}^{-1} = \hat{c}_{g(\vec{k})}^\dagger \tilde{U}_{\vec{k}}(g), \quad (32)$$

と変換するとする。ここで $g(\vec{k}) = p_g \vec{k}$ は g の波数 \vec{k} への作用である (1.2.2 節)。また $\tilde{U}_{\vec{k}}(g)$ は N_{orb} 次元ユニタリ行列で

$$\tilde{U}_{g'(\vec{k})}(g) \tilde{U}_{\vec{k}}(g') = \omega^{\text{sp}}(g, g') \tilde{U}_{\vec{k}}(gg'), \quad (33)$$

$$\tilde{U}_{\vec{k} + \vec{G}}(g) = \tilde{U}_{\vec{k}}(g) \quad (34)$$

を満たす。例えば g が並進の場合は $\tilde{U}_{\vec{k}}(T_{\vec{R}}) = e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}} \mathbb{1}$ であり、これは状態 $(\hat{c}_{\vec{k}}^\dagger)_s |0\rangle$ が並進対称性 $\hat{T}_{\vec{R}}$ の固有値 $e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}}$ を持つ固有状態であることを意味している。 $\omega^{\text{sp}}(g, g')$ は 1.3.2 節で議論した電子スピンに起因する乗数系であり、電子スピンを考慮しない場合やスピンの SU(2) 回転対称性を仮定する場合には $\omega^{\text{sp}}(g, g') = 1$ とすればよい。 $\tilde{U}_{\vec{k}}(g)$ は軌道の位置 \vec{r}_s が属するワイヤー位置や軌道の種類などに依存する。その具体的な表式は多少込み入るので、2.3 節で改めて議論することにする。

\hat{H} が対称性 \hat{g} の作用のもとで不变であること、すなわち

$$\hat{g} \hat{H} \hat{g}^{-1} = \int_{\text{BZ}} \frac{d^d k}{v_{\text{BZ}}} \hat{c}_{g(\vec{k})}^\dagger \tilde{U}_{\vec{k}}(g) \tilde{H}_{\vec{k}} \tilde{U}_{\vec{k}}(g)^\dagger \hat{c}_{g(\vec{k})} = \hat{H} \quad (35)$$

⁷ 連續空間上の模型 ($\Lambda \rightarrow \mathbb{R}^d$, $N_{\text{orb}} \rightarrow \infty$ に対応) も適当な離散化をすればこの形に書くことができる。自由電子系の模型としては非常に一般的なクラスを扱っていることになる。また \hat{H} は電子数 $\hat{N}_{\text{el}} \equiv \sum_{\vec{R}} \hat{c}_{\vec{R}}^\dagger \hat{c}_{\vec{R}}$ を保存する。

を要請すると、条件 $\tilde{U}_{\vec{k}}(g)\tilde{H}_{\vec{k}}\tilde{U}_{\vec{k}}(g)^\dagger = \tilde{H}_{g(\vec{k})}$ あるいは

$$\tilde{U}_{\vec{k}}(g)\tilde{H}_{\vec{k}} = \tilde{H}_{g(\vec{k})}\tilde{U}_{\vec{k}}(g) \quad (36)$$

が各元 $g \in \mathcal{G}$ に対して得られる。 \hat{H} はすべての \vec{k} をまとめてみているので \hat{g} と交換するが、各 \vec{k} を別個にみている $\tilde{H}_{\vec{k}}$ は必ずしも $\tilde{U}_{\vec{k}}(g)$ とは交換せず、一般には波数が $g(\vec{k})$ へと移り変わる。

2.1.4. 各 \vec{k} での対称性とハミルトニアンの対角化

そこで \vec{k} の小群 $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ (1.2.3 節) に着目しよう。 $h \in \mathcal{G}_{\vec{k}}$ に対しては $\tilde{U}_{\vec{k}}(h)$ と $\tilde{H}_{\vec{k}}$ が交換するので、 $\tilde{H}_{\vec{k}}$ の固有値や固有ベクトルに対して制限をかけることができる。

(33) 式によると $\tilde{U}_{\vec{k}}$ は $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ の射影表現であるが、一般には可約であり、既約表現 $U_{\vec{k}}^{\alpha}$ ($\alpha = 1, \dots, N_{\vec{k}}$) へと既約分解できる。つまり、すべての $h \in \mathcal{G}_{\vec{k}}$ に対して共通のユニタリ行列 $\tilde{\Psi}_{\vec{k}}$ を一つ選んで

$$\tilde{U}_{\vec{k}}(h) = \tilde{\Psi}_{\vec{k}} \begin{pmatrix} U_{\vec{k}}^{\alpha_1}(h) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & U_{\vec{k}}^{\alpha_2}(h) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & U_{\vec{k}}^{\alpha_{M_{\vec{k}}}}(h) \end{pmatrix} \tilde{\Psi}_{\vec{k}}^\dagger \quad (37)$$

とブロック対角化することができる。この基底では $\tilde{H}_{\vec{k}}$ は

$$\tilde{H}_{\vec{k}} = \tilde{\Psi}_{\vec{k}} \begin{pmatrix} \varepsilon_{1\vec{k}} \mathbb{1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \varepsilon_{2\vec{k}} \mathbb{1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \varepsilon_{M_{\vec{k}}\vec{k}} \mathbb{1} \end{pmatrix} \tilde{\Psi}_{\vec{k}}^\dagger \quad (38)$$

のように自動的に対角化されていることがシーアの補題¹⁾ からわかる。 \hat{H} に付加的な対称性がなければ、一般に $\varepsilon_{\vec{k}n}$ は全て異なる。したがってエネルギー固有値 $\varepsilon_{\vec{k}n}$ ($n = 1, \dots, M_{\vec{k}}$) にかかる単位行列 $\mathbb{1}$ の次元はこのエネルギー固有値の縮退度を表し、これは既約表現 $U_{\vec{k}}^{\alpha_n}$ の次元 $D_{\vec{k}}^{\alpha_n}$ と一致する。もともと $\tilde{H}_{\vec{k}}$ が N_{orb} 次元の行列であったことから明らかに $\sum_n D_{\vec{k}}^{\alpha_n} = N_{\text{orb}}$ が満たされていなければならず、これで計 N_{orb} 本のエネルギーバンドが得られたことになる。各 $\varepsilon_{\vec{k}n}$ を \vec{k} の関数としてプロットしたものがエネルギーバンド図である。

(38) 式によれば、 $\tilde{\Psi}_{\vec{k}}$ の各列は $\tilde{H}_{\vec{k}}$ の固有ベクトルを表している。固有値 $\varepsilon_{\vec{k}n}$ を持つ固有ベクトルのうち i 番目 ($i = 1, \dots, D_{\vec{k}}^{\alpha_n}$) のものを $\tilde{\psi}_{\vec{k}ni}$ と書くことにしよう⁸⁾。すると (37) 式より

$$\tilde{U}_{\vec{k}}(h)\tilde{\psi}_{\vec{k}ni} = \sum_{i'} \tilde{\psi}_{\vec{k}ni'} [U_{\vec{k}}^{\alpha_n}(h)]_{i',i} \quad (39)$$

が従い、 $\{\tilde{\psi}_{\vec{k}ni}\}_i$ は既約表現 $U_{\vec{k}}^{\alpha_n}$ の基底となることがわかる。

⁸ u が用いられることが多いが、表現の u と紛らわしいので本稿では ψ とした。

実際の計算では $\tilde{U}_{\vec{k}}(h)$ を (37) 式のようにブロック対角化する行列を天下り的に見つけることは容易ではない。むしろ $\tilde{H}_{\vec{k}}$ を (38) 式のように直接対角化して固有ベクトル $\tilde{\Psi}_{\vec{k}}$ を求め、それを用いて行列要素

$$[U_{\vec{k}}^{\alpha_n}(h)]_{i',i} = \tilde{\psi}_{\vec{k}ni'}^\dagger \tilde{U}_{\vec{k}}(h) \tilde{\psi}_{\vec{k}ni} \quad (40)$$

を計算することによって $U_{\vec{k}}^{\alpha_n}(h)$ を求めることができる。

2.1.5. 異なる波数を結ぶ sewing matrix

前節では小群 $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ の元について議論したので、ここではより一般の元 $g \in \mathcal{G}$ について考えよう。 $\tilde{H}_{\vec{k}}$ の固有状態 $\tilde{\psi}_{\vec{k}ni}$ ($i = 1, \dots, D_{\vec{k}}^{\alpha_n}$) に $\tilde{U}_{\vec{k}}(g)$ を作用させると、(8) 式や (36) 式から、 $\tilde{U}_{\vec{k}}(g)\tilde{\psi}_{\vec{k}ni}$ はハミルトニアン $\tilde{H}_{g(\vec{k})}$ と並進対称性 $\tilde{U}_{g(\vec{k})}(T_{\vec{R}})$ の同時固有状態であり、固有値はそれぞれ $\varepsilon_{g(\vec{k})n} = \varepsilon_{\vec{k}n}$ と $e^{-ig(\vec{k}) \cdot \vec{R}}$ であることが分かる。したがって $\tilde{U}_{\vec{k}}(g)\tilde{\psi}_{\vec{k}ni}$ は

$$\tilde{U}_{\vec{k}}(g)\tilde{\psi}_{\vec{k}ni} = \sum_{i'} \tilde{\psi}_{g(\vec{k})ni'} [W_{\vec{k}n}(g)]_{i',i} \quad (41)$$

と展開できるはずである。ここに現れた $W_{\vec{k}n}(g)$ は $D_{\vec{k}}^{\alpha_n}$ 次元ユニタリ行列で、文献では **sewing matrix** と呼ばれている⁶⁾。 $W_{\vec{k}n}(g)$ も $\tilde{U}_{\vec{k}}(g)$ と同様

$$W_{g'(\vec{k})n}(g)W_{\vec{k}n}(g') = \omega^{\text{sp}}(g, g')W_{\vec{k}n}(gg') \quad (42)$$

を満たす。特に $h \in \mathcal{G}_{\vec{k}}$ に対しては $W_{\vec{k}n}(h) = U_{\vec{k}}^{\alpha_n}(h)$ となる。

2.1.6. ブロッホ状態

固有ベクトル $\tilde{\psi}_{\vec{k}ni}$ を用いて生成演算子

$$\hat{\gamma}_{\vec{k}ni}^\dagger \equiv \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \tilde{\psi}_{\vec{k}ni} = \sum_s (\hat{c}_{\vec{k}}^\dagger)_s^\dagger (\tilde{\psi}_{\vec{k}ni})_s \quad (43)$$

を定義すると、ハミルトニアンは $\hat{H} = \int_{\text{BZ}} \frac{d^d k}{v_{\text{BZ}}} \sum_{n,i} \varepsilon_{\vec{k}n} \hat{\gamma}_{\vec{k}ni}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k}ni}$ のように対角化される。対応する一電子状態 $|\vec{k}ni\rangle \equiv \hat{\gamma}_{\vec{k}ni}^\dagger |0\rangle$ はブロッホ状態 (Bloch state) と呼ばれ、その波動関数は

$$|\vec{k}ni\rangle = \sum_{\vec{R}} \sum_s e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} (\tilde{\psi}_{\vec{k}ni})_s (c_{\vec{R}}^\dagger)_s |0\rangle \quad (44)$$

$$= \sum_{\vec{R}} \sum_s e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R} + \vec{r}_s)} (\psi_{\vec{k}ni})_s (c_{\vec{R}}^\dagger)_s |0\rangle \quad (45)$$

で与えられる。これはハミルトニアン \hat{H} と並進対称性 $\hat{T}_{\vec{R}}$ の一電子同時固有状態であり、エネルギー固有値 $\varepsilon_{\vec{k}n}$ と並進固有値 $e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}}$ を持つ。また、(39) 式や (41) 式から

$$\hat{h}|\vec{k}ni\rangle = \sum_{i'} |\vec{k}ni'\rangle [U_{\vec{k}}^{\alpha_n}(h)]_{i',i} \quad (46)$$

$$\hat{g}|\vec{k}ni\rangle = \sum_{i'} |g(\vec{k})ni'\rangle [W_{\vec{k}n}(g)]_{i',i} \quad (47)$$

が得られ、ブロック状態 $\{|\vec{k}ni\rangle\}_i$ が小群 $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ の既約表現 $U_{\vec{k}}^{\alpha_n}$ の基底をなすことや、より一般の元に $g \in \mathcal{G}$ によってどのように波数点間を移り変わるのがわかる。

2.2. 波数点間の関係

ここまで基本的に各波数 \vec{k} を別個に扱ってきた。次に複数の波数点におけるブロック状態やその表現の間の関係について議論しよう。

2.2.1. $S_{\vec{k}}$ の各点における小群の表現

空間群 \mathcal{G} の元のうち、小群 $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ に含まれていない元を \vec{k} に作用させると違う波数へと移る。このように \vec{k} に \mathcal{G} の元を作用させて得られる波数の集合を \vec{k} の星 $S_{\vec{k}}$ というのであった(1.2.3 節)。以下の議論のために、 $\vec{k}_\ell \in S_{\vec{k}}$ ($\ell = 1, \dots, |S_{\vec{k}}|$) に対して、 $\vec{k}_\ell = g_\ell(\vec{k})$ となる $g_\ell \in \mathcal{G}$ を選んで固定する。特に $\vec{k}_1 = \vec{k}$, $g_1 = e$ とする。これは \mathcal{G} を

$$\mathcal{G} = \sum_{\ell} g_\ell \mathcal{G}_{\vec{k}} \quad (48)$$

と左剩余類分解することと同じである。

いま $\vec{k} = \vec{k}_1$ におけるブロック状態 $|\vec{k}ni\rangle$ ($i = 1, \dots, D_{\vec{k}}^{\alpha_n}$) と、その小群 $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ の既約表現 $U_{\vec{k}}^{\alpha_n}$ が与えられたとしよう。すると波数 $\vec{k}_\ell \in S_{\vec{k}}$ のブロック状態 $|\vec{k}_\ell ni\rangle$ ($j = 1, \dots, D_{\vec{k}}^{\alpha_n}$) が持つ小群 $\mathcal{G}_{\vec{k}_\ell}$ の表現は、対称性の要請により自動的に決まってしまう。これをみるために、まず $h \in \mathcal{G}_{\vec{k}}$ のとき $h' \equiv g_\ell h g_\ell^{-1} \in \mathcal{G}_{\vec{k}_\ell}$ となることに注意しよう。すなわち \vec{k} と \vec{k}_ℓ の小群は共役 $g_\ell \mathcal{G}_{\vec{k}} g_\ell^{-1} = \mathcal{G}_{\vec{k}_\ell}$ の関係にある。これは

$$h'(\vec{k}_\ell) = (p_{g_\ell} p_h p_{g_\ell}^{-1})(p_{g_\ell} \vec{k}) = p_{g_\ell} p_h \vec{k} = p_{g_\ell} \vec{k} = \vec{k}_\ell \quad (49)$$

から直ちにわかる。次に式(47)を逆に解いてみると

$$|\vec{k}_\ell ni\rangle = \sum_i \hat{g}_\ell |\vec{k}ni\rangle [W_{\vec{k}n}(g)^\dagger]_{i,j} \quad (50)$$

となり、 $|\vec{k}_\ell ni\rangle$ を $\{|\vec{k}ni\rangle\}_i$ で表せることに注意する。空間群の元としての関係式 $h'g_\ell = g_\ell h$ は、射影表現の乗数系も考慮すると $\frac{1}{\omega^{\text{sp}}(h', g_\ell)} \hat{h}' \hat{g}_\ell = \frac{1}{\omega^{\text{sp}}(g_\ell, h)} \hat{g}_\ell \hat{h}$ となる。これらの式と(46)式を用いると、 $\{|\vec{k}_\ell ni\rangle\}_j$ は小群 $\mathcal{G}_{\vec{k}_\ell}$ の

$$U_{\vec{k}_\ell}^{\alpha_n}(h') \equiv \frac{\omega^{\text{sp}}(h', g_\ell)}{\omega^{\text{sp}}(g_\ell, h)} W_{\vec{k}n}(g) U_{\vec{k}}^{\alpha_n}(h) W_{\vec{k}n}(g)^\dagger, \quad (51)$$

$$h = g_\ell^{-1} h' g_\ell \quad (52)$$

という既約表現に属することがわかる⁹。

2.2.2. 誘導される空間群の表現

前節では小群 $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ の表現を元に、 \vec{k} の星 $S_{\vec{k}}$ に属する波数点の小群の表現を構成したが、さらに一步進んで、空間

⁹導出は次の通り。 $\hat{h}'|\vec{k}_\ell ni\rangle = \sum_i \hat{h}' \hat{g}_\ell |\vec{k}ni\rangle [W_{\vec{k}n}(g)^\dagger]_{i,j} = \sum_i \frac{\omega^{\text{sp}}(h', g_\ell)}{\omega^{\text{sp}}(g_\ell, h)} \hat{g}_\ell \hat{h} |\vec{k}ni\rangle [W_{\vec{k}n}(g)^\dagger]_{i,j} = \sum_{j'} |\vec{k}_\ell n j'\rangle [U_{\vec{k}_\ell}^{\alpha_n}(h')]_{j',j}$ 。一般に表現 U と WUW^\dagger は同値なので、(51)式の W は重要でない。

群 \mathcal{G} の表現を構成することもできる。このように、部分群 $H < G$ の表現を元に構成された G の表現を誘導表現(induced representation)という。この考え方は2.3節で実空間でも用いられる。

(48)式の剩余類分解によれば、 \mathcal{G} のどの元も $g_\ell h$ ($h \in \mathcal{G}_{\vec{k}}$) の形に書くことができるので、特に $g g_\ell \in \mathcal{G}$ に対しても $g g_\ell = g_{\ell'} h$ となる ℓ' と $h \in \mathcal{G}_{\vec{k}}$ が存在し一意に定まる。言い換えると、 $g \in \mathcal{G}$ が \vec{k}_ℓ を $\vec{k}_{\ell'}$ に移す(つまり $\vec{k}_{\ell'} = g(\vec{k}_\ell)$)ならば、 $g_{\ell'}^{-1} g g_\ell$ は \vec{k} の小群 $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ に属する。すると前節と全く同様に

$$\hat{g} |\vec{k}_\ell ni\rangle = \sum_{i', \ell'} |\vec{k}_{\ell'} ni'\rangle [U_{\vec{k}}^{\alpha_n}(g)]_{\ell', i', \ell, i}, \quad (53)$$

$$[U_{\vec{k}}^{\alpha_n}(g)]_{\ell', i', \ell, i} = \delta_{\vec{k}_{\ell'}, g(\vec{k}_\ell)} \frac{\omega^{\text{sp}}(g, g_\ell)}{\omega^{\text{sp}}(g_{\ell'}, h)} \times [W_{\vec{k}n}(g_{\ell'}) U_{\vec{k}}^{\alpha_n}(h) W_{\vec{k}n}(g_\ell)^\dagger]_{i', i}, \quad (54)$$

$$h = g_{\ell'}^{-1} g g_\ell \quad (55)$$

を示すことができる。 $U_{\vec{k}}^{\alpha_n}(g)$ は $|S_{\vec{k}}| \times D_{\vec{k}}^{\alpha_n}$ 次元のユニタリ行列で、これが $U_{\vec{k}}^{\alpha_n}$ から誘導された \mathcal{G} の表現であり、 $\{|\vec{k}_\ell ni\rangle\}_{\ell, i}$ がその表現基底である。特に $g = h' \in \mathcal{G}_{\vec{k}_\ell}$ の場合には、 \vec{k}_ℓ についてのブロックが(51)式に帰着することができる。

2.2.3. 局所的適合関係

これまで \vec{k} の星 $S_{\vec{k}}$ に属する波数点間の関係に着目していた。逆に、対称性で結びつかない波数点の間には何が言えるだろうか。

\vec{k} を高対称点とする。 \vec{k} からほんのわずかに離れた点 \vec{k}' では一般にいくつかの対称性が破れて対称性が下がる。すなわち小群 $\mathcal{G}_{\vec{k}'}$ は $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ の部分群となる。小群 $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ の既約表現 $U_{\vec{k}}^\alpha$ は、その部分群 $\mathcal{G}_{\vec{k}'}$ の表現としては一般に可約であり、 $\mathcal{G}_{\vec{k}'}$ の既約表現 $U_{\vec{k}'}^{\alpha'}$ へと既約分解できる。この既約分解に c は(28)式を用いればよい。これにより、 \vec{k} 点で $D_{\vec{k}}^\alpha$ 重に縮退していたブロック状態が \vec{k}' においてどのように分裂するか調べることができる。

2.2.4. 波数空間の大域的構造に起因する適合関係

スクリュー操作やグライド操作を含むノンシンモーフィックな空間群に対しては、波数空間の \vec{k} と $\vec{k} + \vec{G}$ を同一視するために生じる条件がある⁷⁾。これは例を通して理解する方が簡単なので、一番簡単な例をみてみよう。

例 ロッド群 $P2_1$ は、 $S_x : (x, y, z) \mapsto (x + \frac{a}{2}, -y, -z)$ というスクリュー操作によって生成される。スクリュー操作を2回繰り返すと $(x, y, z) \mapsto (x + a, y, z)$ となるので、空間群の元として S_x^2 は並進 $T_{\vec{a}_1}$ ($\vec{a}_1 \equiv (a, 0, 0)$) と等しい。BZ $-\frac{\pi}{a} < k_x \leq \frac{\pi}{a}$ における小群は $\mathcal{G} = P2_1$ 自身であり、

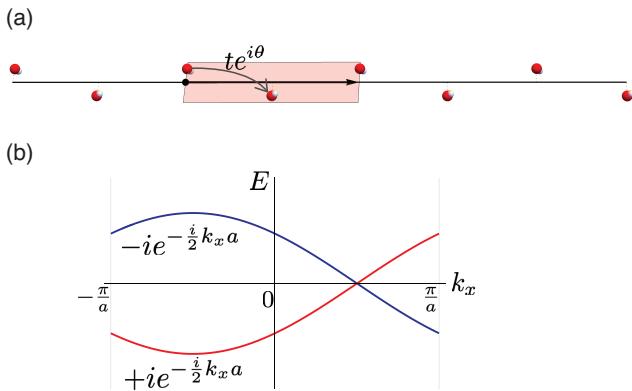


図 2 (a) ロッド群 $\mathcal{A}2_1$ の対称性を持つ強束縛模型の例。最近接の飛び移り積分を図の向きに $te^{i\theta}$ とした。(b) この強束縛模型のバンド構造 $\varepsilon_{k_x n} = \pm 2t \sin(\frac{k_x a}{2} - \theta)$ 。 $k_x a = 2\theta$ で上下のバンドが交差している。

$U_{k_x}(S_x)^2 = -U_{k_x}(T_{\vec{a}_1}) = -e^{-ik_x a}$ を満たす。したがってこの小群の 2 つの既約表現は

$$U_{k_x}^\alpha(S_x) = \alpha i e^{-\frac{i}{2} k_x a} \quad (56)$$

である ($\alpha = \pm 1$)。ここで指数の肩に $\frac{1}{2}$ が現れていることが重要で、このために既約表現は $k_x \rightarrow k_x + \frac{2\pi}{a}$ に対する周期を満たしていない。むしろ $k_x \rightarrow k_x + \frac{2\pi}{a}$ によって二つの表現が入れ替わる [図 2(b)]。このことから、表現 $U_{k_x}^+(S_x)$ を持つブロック状態と $U_{k_x}^-(S_z)$ を持つブロック状態は必ずペアで現れ、そのエネルギー-band は $-\frac{\pi}{a} < k_x \leq \frac{\pi}{a}$ のどこかで必ず交差しなければいけないことがわかる [図 2(b)]。

既約表現 $U_{\vec{k}}^\alpha$ の非周期性は (34) 式とは矛盾しない。実際この対称性をもつミニマムな強束縛模型 [図 2(a)]を考えると、 S_x の表現は

$$\tilde{U}_{k_x}(S_x) = \begin{pmatrix} 0 & -e^{-ik_x a} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (57)$$

となる¹⁰が、この $\tilde{U}_{k_x}(S_x)$ は (34) 式を満たしている。

2.2.5. バンド絶縁体を実現するフィーリング

ここまで、波数点 \vec{k} におけるブロック状態が $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ の既約表現の基底となることや、BZ 内の複数の波数点における表現の間に関係があることをみてきた。これらの関係によって、例えば図 2(b) に示したようなバンド交差が現れる。バンド絶縁体を実現するためには、エネルギーが低い方から ν 本のバンドを完全に占有し、かつ非占有である $\nu+1$ 本目のバンドとの間にバンドギャップが開いているようにする必要がある。しかし空間群の対称性によって保証されるバンド交差のために、バンド絶縁体を実現できる ν の値には空間群の制限がかかることになる。与えられた空間群 \mathcal{G} に対して、バンド絶縁体を実現し得る占有バンド数 ν を求める問題は文献⁸⁾ で調べられた。結果は時間反転対称性 (2.4.1

¹⁰ 次節 (64) 式で $\mathcal{G}_{\vec{r}} = \{e\}$, $u^\beta(e) = 1$, $D_{\vec{r}}^\beta = 1$, $\Lambda_{\vec{r}}^{\text{UC}} = \{\vec{r}, \vec{r} + \frac{1}{2}\vec{a}_1\}$, $g_2 = S_x$ とする。

節) を考慮するかや、スピン軌道相互作用を取り入れるかどうか (1.3.2 節) に依存する。

2.3. 強束縛模型の対称性の表現

2.3.1. site symmetry と軌道

量子力学の講義で学ぶように、水素原子の電子のシュレーディンガー方程式の解は、エネルギー準位を区別する主量子数 n の他に軌道角運動量の量子数 ℓ と磁気量子数 m でラベル付けされ、 $\ell = 0, 1, 2, \dots$ を持つ電子軌道はそれぞれ s, p, d, \dots 軌道と呼ばれる。実際に強束縛模型を構成する際にもこの原子軌道の言葉遣いが用いられることが多い。しかしこのラベル付けは本来、球対称性を持つ中心力ポテンシャル中でこそ厳密なものであり、固体中では近似的には正しくても必ずしも正確とは言えない。実際、例えば点群 O_h の対称性を持つ結晶場によって d 軌道の縮退が解けて、 O_h の (線型) 既約表現である T_{2g} (3 次元表現) や E_g (2 次元表現) を持つ軌道に分裂するといったことが起こる。このような効果を系統的に取り入れるために、原子軌道のことは一旦全て忘れ、対称性だけに基づいて「軌道」を構成することにしよう。

単位胞 UC 内の一点 \vec{r} に着目しよう。点 \vec{r} を不動点に持つ \mathcal{G} の部分群を \vec{r} の小群 $\mathcal{G}_{\vec{r}}$ というのであった (1.1.6 節)。 $\mathcal{G}_{\vec{r}}$ はあらゆる結晶場の効果も取り入れた上で最終的に残る点 \vec{r} 周りの厳密な対称性を表しており、site symmetry と呼ばれる。したがって点 \vec{r} に定義できる軌道の種類は、 ω^{sp} を乗数系とする $\mathcal{G}_{\vec{r}}$ の既約表現 $u_{\vec{r}}^\beta$ ($\beta = 1, \dots, N_{\vec{r}}$) によって分類される。

いま小群 $\mathcal{G}_{\vec{r}}$ の既約表現 $u_{\vec{r}}^\beta$ を一つ選び、その次元を $D_{\vec{r}}^\beta$ と書く。生成演算子 $(\hat{c}_{\vec{0}})_i^\dagger$ ($i = 1, \dots, D_{\vec{r}}^\beta$) は、 $\vec{R} = \vec{0}$ の単位胞内の位置 \vec{r} に i 番目の軌道を持つ電子を作る演算子で、

$$\hat{h}(\hat{c}_{\vec{0}})_i^\dagger \hat{h}^{-1} = \sum_{i'} (\hat{c}_{\vec{0}})_{i'}^\dagger [u_{\vec{r}}^\beta(h)]_{i',i} \quad (58)$$

を満たすとしよう。小群 $\mathcal{G}_{\vec{r}}$ は空間群 \mathcal{G} の部分群なので、この $\mathcal{G}_{\vec{r}}$ の表現 $u_{\vec{r}}^\beta$ から \mathcal{G} の表現が誘導され、それが 2.1.3 節で用いた強束縛模型の対称性の表現となる。

2.3.2. 強束縛模型の対称性の表現の具体形

点 \vec{r} に \mathcal{G} の元を作用させていくと、 \mathcal{G} 不変な格子 $\Lambda_{\vec{r}}$ ができるのであった (1.1.6 節)。対称性 \mathcal{G} を持つ強束縛模型を構成するためには、 $\Lambda_{\vec{r}}$ の各点に点 \vec{r} のものと「等価」な軌道が定義されている必要がある。これを具体的に構成するために、 $\Lambda_{\vec{r}}$ の点のうち单位胞 UC に属しているもの $\Lambda_{\vec{r}}^{\text{UC}}$ をまず考える。 $\vec{r}_\ell \in \Lambda_{\vec{r}}^{\text{UC}}$ ($\ell = 1, \dots, |\Lambda_{\vec{r}}^{\text{UC}}|$) の各点に対して、 $\vec{r}_\ell = g_\ell(\vec{r})$ となる $g_\ell \in \mathcal{G}$ を選んで固定する。これにより \mathcal{G} は

$$\mathcal{G} = \sum_{\vec{R}, \ell} T_{\vec{R}} g_\ell \mathcal{G}_{\vec{r}} \quad (59)$$

と左剰余類分解される。これを用いて位置 $\vec{R} + \vec{r}_\ell$ に i 番目の軌道を作る生成演算子 $(\hat{c}_{\vec{R}})_{\ell i}^\dagger$ を、

$$(\hat{c}_{\vec{R}})_{\ell i}^\dagger \equiv \hat{T}_{\vec{R}} \hat{g}_\ell (\hat{c}_{\vec{0}})_i^\dagger \hat{g}_\ell^{-1} \hat{T}_{\vec{R}}^{-1} \quad (60)$$

によって定めることにする。これで基底が構成できたので、後は $g \in \mathcal{G}$ の作用によってこれらが互いにどのように移り変わるかを調べればよい。いま g によって $\vec{R} + \vec{r}_\ell$ が $\vec{\tilde{R}} + \vec{r}_{\tilde{\ell}}$ に移るとする。すると 2.2.2 節と同様の手順で

$$\hat{g}(\hat{c}_{\vec{R}})_{\ell i}^\dagger \hat{g}^{-1} = \sum_{i'} (\hat{c}_{\vec{R}})_{\ell i'}^\dagger \frac{\omega^{\text{sp}}(g, g_\ell)}{\omega^{\text{sp}}(g_{\ell'}, h)} [u_{\vec{r}}^\beta(h)]_{i', i}, \quad (61)$$

$$h = g_{\ell'}^{-1} T_{\vec{R}}^{-1} g T_{\vec{R}} g_\ell \quad (62)$$

を示すことができる。これをフーリエ変換して少し書き換えると⁹⁾

$$\hat{g}(\hat{c}_{\vec{k}})_{\ell i}^\dagger \hat{g}^{-1} = \sum_{\ell' i'} (\hat{c}_{\vec{k}})_{\ell' i'}^\dagger [\tilde{U}_{\vec{k}}^{(\vec{r}, \beta)}(g)]_{\ell' i', \ell i}, \quad (63)$$

$$[\tilde{U}_{\vec{k}}^{(\vec{r}, \beta)}(g)]_{\ell' i', \ell i} = \delta'_{\vec{r}_{\ell'}, g(\vec{r}_\ell)} e^{-ig(\vec{k}) \cdot (g(\vec{r}_\ell) - \vec{r}_{\ell'})} \times \frac{\omega^{\text{sp}}(g, g_\ell)}{\omega^{\text{sp}}(g_{\ell'}, h)} [u_{\vec{r}}^\beta(h)]_{i', i}, \quad (64)$$

$$h = g_{\ell'}^{-1} T_{\vec{r}_{\ell'} - g(\vec{r}_\ell)} g g_\ell \quad (65)$$

を得る。ただし (64) 式において、 $\delta'_{\vec{x}, \vec{y}}$ は、並進ベクトル分の違いを除いて $\vec{x} = \vec{y}$ のとき 1 で、それ以外のとき 0 であると定義している。 (\vec{r}, β) は既約表現 $u_{\vec{r}}^\beta$ から誘導されたものであることを明示するために添えた。この $\tilde{U}_{\vec{k}}^{(\vec{r}, \beta)}(g)$ が 2.1 節の $\tilde{U}_{\vec{k}}(g)$ であり、(33) 式や (34) 式を満たしていることが確認できる。軌道のラベル s には $\ell = 1, \dots, |\Lambda_{\vec{r}}^{\text{UC}}|$ と $i = 1, \dots, D_{\vec{r}}^\beta$ のペアが対応しており、合計のバンド数は $N_{\text{orb}} = D_{\vec{r}}^\beta |\Lambda_{\vec{r}}^{\text{UC}}|$ となる。(64) 式は、単位胞 UC 内の点 \vec{r} に既約表現 $u_{\vec{r}}^\beta$ に属する軌道をおいた場合の強束縛模型の表現を与える重要な公式であり、3 節でバンド構造のトポロジーを探る際に活躍する。

ここまででは単位胞 UC 内の一点に既約表現に従う軌道を定義した場合を考えた。より一般の強束縛模型では、同じ位置に複数の既約表現を置くこともできるし、 $\Lambda_{\vec{r}}$ に属さない別の位置 \vec{r}' にサイトを追加してもよい。その場合、強束縛模型の表現は直和 $\bigoplus_{\vec{r}, \beta} m_{\vec{r}, \beta} \tilde{U}_{\vec{k}}^{(\vec{r}, \beta)}(g)$ ($m_{\vec{r}, \beta} = 0, 1, 2, \dots$) で与えられる。

2.3.3. フーリエ変換の二つ目の流儀での表式

2.1.2 節で説明したフーリエ変換の二つ目の流儀では、これまでの $\tilde{U}_{\vec{k}}(g)$ や $\tilde{\psi}_{\vec{k}ni}$ を $U_{\vec{k}}(g) = V_{g(\vec{k})} \tilde{U}_{\vec{k}}(g) V_{\vec{k}}^\dagger$ や $\psi_{\vec{k}ni} = V_{\vec{k}} \tilde{\psi}_{\vec{k}ni}$ のように変更すればよいことが分かる。すると (64) 式は

$$[U_{\vec{k}}^{(\vec{r}, \beta)}(g)]_{\ell' i', \ell i} = \delta'_{\vec{r}_{\ell'}, g(\vec{r}_\ell)} e^{-i(p_g \vec{k}) \cdot \vec{r}_g} \frac{\omega^{\text{sp}}(g, g_\ell)}{\omega^{\text{sp}}(g_{\ell'}, h)} [u_{\vec{r}}^\beta(h)]_{i', i} \quad (66)$$

のように変更され、 $\vec{t}_g = \vec{0}$ を満たす元に対しては $U_{\vec{k}}^{(\vec{r}, \beta)}(g)$ は \vec{k} に依存しないという重要な性質が導かれる。並進対称性

やノンシンモーフィックな変換は $\vec{t}_g \neq \vec{0}$ なので、 $U_{\vec{k}}^{(\vec{r}, \beta)}(g)$ は \vec{k} に依存する。

一方で、(39) 式の $U_{\vec{k}}^{\alpha_n}(g)$ や (41) 式の $W_{\vec{k}n}(g)$ は特に変更を受けず、二つのフーリエ変換の定義に共通である。つまりプロッホ状態が持つ既約表現には、フーリエ変換の定義に依存する曖昧さは存在しない。

2.4. 時間反転と磁気空間群

最後に、ここまで触れてこなかった時間反転対称性についてまとめよう。

2.4.1. 時間反転

\mathcal{T} を時間反転操作とする。これも量子力学の講義で習うように、 $\hat{\mathcal{T}}$ は反ユニタリ演算子であり $\hat{\mathcal{T}}(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1^* \hat{\mathcal{T}}|\psi_1\rangle + c_2^* \hat{\mathcal{T}}|\psi_2\rangle$ を満たす。また $|\psi_1\rangle$ と $|\psi_2\rangle$ の内積を $g(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle) \equiv \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$ と書くとき、 $g(\hat{\mathcal{T}}|\psi_1\rangle, \hat{\mathcal{T}}|\psi_2\rangle) = g(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle)^*$ となる。時間反転演算子の自乗は電子数 $\hat{N}_{\text{el}} \equiv \sum_{\vec{R}} \hat{c}_{\vec{R}}^\dagger \hat{c}_{\vec{R}}$ に依存して

$$\hat{\mathcal{T}}^2 = (-1)^{\hat{N}_{\text{el}}} \quad (67)$$

となるため、ハミルトニアンが時間反転対称性を持つならば奇数電子状態に対してはクラマース縮退が起こる¹¹⁾。また時間反転演算子は空間群の操作と可換、つまり

$$\hat{\mathcal{T}} \hat{g} = \hat{g} \hat{\mathcal{T}} \quad (68)$$

を要求する。すると (8) 式と同様にして $\mathcal{T}(\vec{k}) = -\vec{k}$ が従う。

一電子状態に対する表現のユニタリ行列の部分を $U(\mathcal{T})$ と書くと、(67) 式、(68) 式は $U(\mathcal{T})U(\mathcal{T})^* = -\mathbb{1}$ (つまり $\omega^{\text{sp}}(\mathcal{T}, \mathcal{T}) = -1$)、 $U(\mathcal{T})U_{\vec{k}}(g)^* = U_{-\vec{k}}(g)U(\mathcal{T})$ と表現される。うまく基底を選ぶと $U(\mathcal{T})$ は $-i\sigma_y \otimes \mathbb{1}$ と書くことができる。

2.4.2. 磁気空間群のタイプ

磁気空間群とは、これまで議論してきたユニタリな空間群 \mathcal{G} に加えて、反ユニタリな元からなる集合 \mathcal{A} を持つ空間群である。 $g, g' \in \mathcal{G}$ と $a, a' \in \mathcal{A}$ に対して、 $gg' \in \mathcal{G}$, $ga \in \mathcal{A}$, $ag \in \mathcal{A}$, $aa' \in \mathcal{G}$ であるため、 \mathcal{A} の元の数は \mathcal{G} の元の数と等しいか、あるいは 0 でなくてはならない。文献²⁾ に習って磁気空間群を $\mathcal{M} = \mathcal{G} + \mathcal{A}$ と書くことにする。

3 次元空間において、磁気空間群は 1,651 個あると言われる。これは大きく 4 つのタイプに分けることができる²⁾。タイプ I の磁気空間群は、反ユニタリ部分 \mathcal{A} を一切持たない空間群 \mathcal{G} 自身であり、230 種類ある。タイプ II の磁気空間群は、空間群 \mathcal{G} と時間反転の群 $\mathbb{Z}_2^T = \{e, \mathcal{T}\}$ の直積 $\mathcal{G} \times \mathbb{Z}_2^T$ で、 $\mathcal{A} = \mathcal{G}\mathcal{T} = \{g\mathcal{T} | g \in \mathcal{G}\}$ の場合に対応する。これも 230 種類存在する。

¹¹⁾ 電子スピンを考慮しない場合は $\hat{\mathcal{T}}^2 = 1$ とする。

残りのタイプ III, IV の磁気空間群は、 $\mathcal{A} = \mathcal{G}g_0\mathcal{T} = \{gg_0\mathcal{T}|g \in \mathcal{G}\}$ のように、 \mathcal{G} に含まれない g_0 という空間操作が必要になるものである。タイプ IV (517種類) では g_0 は並進 $g_0 : \vec{x} \mapsto \vec{x} + \vec{t}_g$ に選ぶことができるが、この \vec{t}_g は基本並進ベクトルの半分の形をしている。タイプ III (674種類) では、 g_0 は並進以外の操作で $g_0^2 \in \mathcal{G}$ を満たすものである。

2.4.3. 磁気空間群への拡張

これまで整理してきた空間群 (タイプ I の磁気空間群) の場合についての基礎事項を、タイプ II-IV の磁気空間群へと拡張しよう。いま \mathcal{A} の元 a が空間の点 $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$ を

$$a(\vec{x}) = p_a \vec{x} + \vec{t}_a \in \mathbb{R}^3 \quad (69)$$

へ写すとすると、波数 $\vec{k} \in \text{BZ}$ は

$$a(\vec{k}) = -p_a \vec{k} \in \text{BZ} \quad (70)$$

と変換される。負号は a が時間反転を含み反ユニタリであることに起因している。これまでの議論は全て、この \mathcal{A} の \vec{x} や \vec{k} への作用を用いて、これまでの \mathcal{G} を単に $\mathcal{M} = \mathcal{G} + \mathcal{A}$ へと形式的に置き換えればよい。例えば \vec{k} の小群は $\mathcal{M}_{\vec{k}} = \{h \in \mathcal{M} | h(\vec{k}) = \vec{k}\}$ と定義される。仮に \mathcal{M} がタイプ II の磁気空間群であったとしても、 $\mathcal{M}_{\vec{k}}$ はタイプ I, II のみならずタイプ III の磁気空間群になる場合もあることに注意する。

(33) 式や (36) 式は、 a の反ユニタリ性のために

$$U_{\vec{k}}(a) H_{\vec{k}}^* = H_{a(\vec{k})} U_{\vec{k}}(a), \quad (71)$$

$$U_{a(\vec{k})}(g) U_{\vec{k}}(a) = \omega^{\text{sp}}(g, a) U_{\vec{k}}(ga), \quad (72)$$

$$U_{g(\vec{k})}(a) U_{\vec{k}}(g)^* = \omega^{\text{sp}}(a, g) U_{\vec{k}}(ag), \quad (73)$$

$$U_{a'(\vec{k})}(a) U_{\vec{k}}(a')^* = \omega^{\text{sp}}(a, a') U_{\vec{k}}(aa') \quad (74)$$

のように変更される。

電子スピンに起因する乗数系 $\omega^{\text{sp}}(a, a')$ は、1.3.2節と同様に、 $p_a = \pm e^{-i\theta_a \vec{n}_a \cdot \vec{L}}$ のとき $p_a^{\text{sp}} \equiv e^{-i\theta_a \vec{n}_a \cdot \vec{S}} (-i\sigma_y)$ として $p_a^{\text{sp}}(p_{a'}^{\text{sp}})^* = \omega^{\text{sp}}(a, a') p_{aa'}^{\text{sp}}$ によって定める。また $\mathcal{M}_{\vec{k}}/T$ の表現を考える際には $\omega^{\text{sp}}(a, a')$ と $\omega^{\text{ns}}(a, a') \equiv e^{-i\vec{k} \cdot (p_a \vec{t}_{a'} + \vec{t}_{a'})}$ の積を用いる (1.3.3節¹²)。 $\omega(a, g)$ や $\omega(g, a)$ も同様に定義できる。

2.4.4. 磁気点群の表現

ここでは点群 P に反ユニタリ部分 A が加わった群、つまり磁気点群 $M = P+A$ の表現を考えよう。 $M = P+A$ の次の

¹² 反ユニタリ操作のために $\vec{t}_{a'}$ の前の符号が 1.3.3 節とは逆になっていることに注意。

ような射影表現に興味があるとする ($p, p' \in P, a, a' \in A$)。

$$u(p)u(p') = \omega(p, p')u(pp'), \quad (75)$$

$$u(p)u(a) = \omega(p, a)u(pa), \quad (76)$$

$$u(a)u(p)^* = \omega(a, p)u(ap), \quad (77)$$

$$u(a)u(a')^* = \omega(a, a')u(aa'). \quad (78)$$

A が加わったことで、 P の既約表現 u^α がどのように変更を受けるかを調べるには、次の量を計算すればよい。

$$\xi^\alpha \equiv \frac{1}{|P|} \sum_{a \in P} \omega(a, a) \chi^\alpha(a^2). \quad (79)$$

ここで $\chi^\alpha(p) = \text{tr}[u^\alpha(p)]$ は既約表現 u^α の指標である。 ξ^α は必ず 0, +1, または -1 のいずれかになる。その意味するところは、それぞれ以下の通りである。

- $\xi^\alpha = 0$: u^α と別の表現 $u^{\bar{\alpha}}$ がペアを組む¹³。
- $\xi^\alpha = -1$: 2 つの u^α がペアを組む。
- $\xi^\alpha = +1$: u^α のまま変化しない。

この判定条件を用いると、 \mathcal{A} の存在下で、バンド構造の各 \vec{k} における $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ の既約表現がどのようにペアを組むかや、強束縛模型を構成する際に位置 \vec{r} に定義できる軌道 ($\mathcal{G}_{\vec{r}}$ の既約表現) がどうペアを組むかを簡単に判定することができる。

$\xi^\alpha = 0$ の例 点群 2 は 2 回回転 C_{2z} からなり、 $P = \{e, C_{2z}\}$ である。 $u^\alpha(C_{2z}) = \alpha i$ ($\alpha = \pm$) の 2 つの 1 次元表現がある。ここに時間反転対称性 \mathcal{T} を加えると、 \mathcal{A} は $\mathcal{A} = \mathcal{PT} = \{\mathcal{T}, C_{2z}\mathcal{T}\}$ となる。 $\omega^{\text{sp}}(\mathcal{T}, \mathcal{T}) = -1$, $\omega^{\text{sp}}(C_{2z}\mathcal{T}, C_{2z}\mathcal{T}) = +1$, $\mathcal{T}^2 = (C_{2z}\mathcal{T})^2 = e$ なので、 $\xi^\alpha = \frac{1}{2}[-\chi^\alpha(e) + \chi^\alpha(e)] = 0$. したがって u^+ と u^- は時間反転対称性のもとでペアとなり対で現れる。

$\xi^\alpha = -1$ の例 点群 1 は空間反転 I からなり、 $P = \{e, I\}$ である。 $u^\alpha(I) = \alpha$ ($\alpha = \pm$) の 2 つの 1 次元表現がある。ここに時間反転対称性 \mathcal{T} を加えると、 $\mathcal{A} = \mathcal{PT} = \{\mathcal{T}, I\mathcal{T}\}$ となる。 $\omega^{\text{sp}}(\mathcal{T}, \mathcal{T}) = \omega^{\text{sp}}(I\mathcal{T}, I\mathcal{T}) = -1$, $\mathcal{T}^2 = (I\mathcal{T})^2 = e$ なので、 $\xi^\alpha = \frac{1}{2}[-\chi^\alpha(e) - \chi^\alpha(e)] = -1$. したがって時間反転対称性のもとで、 u^+ は u^+ と、 u^- は u^- とペアを組む。そのため、反転対称性の 2 つの固有値はそれぞれ必ず偶数個現れる。

$\xi^\alpha = +1$ の例 点群 222 の位数は 4 で、単位元 e の他に x, y, z それぞれの軸周りの π 回転操作 C_{2i} ($i = x, y, z$) を元として持つ (1.3.2 節)。ここに時間反転対称性 \mathcal{T} を加えると、 $\mathcal{A} = \mathcal{PT} = \{\mathcal{T}, C_{2x}\mathcal{T}, C_{2y}\mathcal{T}, C_{2z}\mathcal{T}\}$ となる。 $\omega^{\text{sp}}(\mathcal{T}, \mathcal{T}) = -1$, $\omega^{\text{sp}}(C_{2i}\mathcal{T}, C_{2i}\mathcal{T}) = +1$, $\mathcal{T}^2 = (C_{2i}\mathcal{T})^2 = e$ なので、2 次元表現 $u^\alpha(C_{2i}) = -i\sigma_i$ に対しては $\xi^\alpha =$

¹³ $A = Pa$ と書くとき、 $u^{\bar{\alpha}}(p) = \frac{\omega(p, a)}{\omega(a, a^{-1}pa)} [u^\alpha(a^{-1}pa)]^*$ となる。

$\frac{1}{4}[-\chi^\alpha(e) + 3\chi^\alpha(e)] = +1$ となり、時間反転対称性を含めても特にさらなるペアは生じないことが分かる。

以上、タイプIIの磁気点群の例を3つ紹介したが、この判定条件はより一般の磁気点群に対しても成立する。電子スピンを考慮するか否かの情報もすべて ω に含まれている。

3. トポロジーの対称性指標

本節ではこれまでの準備をもとに、バンド構造の持つ空間群の表現に基づいてトポロジーを調べる「対称性指標の方法」について解説する。第3.1節で形式的な定義を行なった後、第3.2節以降で、電気分極やチャーン数が対称性の表現とどのように結びつくかについて例を交えながら詳しく議論する。特にトポロジカル絶縁体の中でもよく知られている2次元 \mathbb{Z}_2 トポロジカル絶縁体などの基本的なものに焦点を絞り、高次トポロジカル絶縁体などより最近の話題は次節で議論することにする。

3.1. バンド絶縁体の既約表現による特徴付け

3.1.1. 前節の復習

まず第2節の内容を簡単に復習しよう。対称性 \mathcal{G} を持つ強束縛模型を一つ指定すると、(33)式や(36)式を満たし、 \vec{k} の関数として滑らかな N_{orb} 次元エルミート行列 $\tilde{H}_{\vec{k}}$ と N_{orb} 次元ユニタリ行列 $\tilde{U}_{\vec{k}}(g)$ が $g \in \mathcal{G}$ に対して定まる。 $\omega^{\text{sp}}(g, g') = \pm 1$ は電子スピンに起因する射影表現の乗数系であり、スピン軌道相互作用など電子スピンの効果の有無を区別する。フーリエ変換は、 $\tilde{H}_{\vec{k}}$ や $\tilde{U}_{\vec{k}}(g)$ は \vec{k} を逆格子ベクトル \vec{G} だけずらしても不变であるように定義している。 $\tilde{H}_{\vec{k}}$ の固有状態を、エネルギー固有値 $\varepsilon_{\vec{k}n}$ を区別するラベルを n 、縮退を区別するラベルを i として $\psi_{\vec{k}ni}$ と書く。これに小群 $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ の元 h を作用させると、(41)式のように $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ の $D_{\vec{k}}^{\alpha_n}$ 次元既約表現 $U_{\vec{k}}^{\alpha_n}$ にしたがって変換するのであった。

3.1.2. $\{\text{BS}\}_{\geq 0}^{\mathcal{G}}$ の定義

バンド絶縁体を考えるために、各波数点でエネルギーが低い方から ν 本目のバンドと $\nu+1$ 本目のバンドとの間にバンドギャップが開いていると仮定する。計 ν 本の占有バンドの固有ベクトル $\tilde{\psi}_{\vec{k}ni}$ を並べた $N_{\text{orb}} \times \nu$ 行列を $\tilde{\Phi}_{\vec{k}}$ 、残りの非占有バンドの固有ベクトルを並べた $N_{\text{orb}} \times (N_{\text{orb}} - \nu)$ 行列を $\tilde{\Phi}_{\vec{k}}^c$ と書くこととする。 $\tilde{\Phi}_{\vec{k}}$ も $\tilde{\Phi}_{\vec{k}} = \tilde{\Phi}_{\vec{k}+\vec{G}}$ を満たす。

小群 $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ が並進群 T 以外の元を含むとき、 \vec{k} を高対称波数と呼ぶことにする。 $\tilde{\Phi}_{\vec{k}}$ と $\tilde{\Phi}_{\vec{k}}^c$ の間にバンドギャップを仮定していることから、 $\tilde{\Phi}_{\vec{k}}$ の中に含まれる既約表現 $U_{\vec{k}}^{\alpha}$ の個数 $n_{\vec{k}}^{\alpha}$ (α は既約表現を区別するラベル)が良く定義されている。 $n_{\vec{k}}^{\alpha}$ を変化させるにはバンドギャップを閉じるかまたは対称性を破る必要があるため、 $n_{\vec{k}}^{\alpha}$ は断熱変形では変わらない「トポロジカル不变量」である。この整数の組 $\{n_{\vec{k}}^{\alpha}\}_{\vec{k}, \alpha}$ によってバンド絶縁体を特徴付け、そのトポロジーの情報を引き出すのが対称性指標の方法⁹⁾である。

考慮すべき波数点としては、 Γ 点などの「点」の他に、それらを結ぶ「線」や「面」も高対称波数であれば取り入れる必要がある。線や面には無限に多くの波数点が含まれるが、 \vec{k} と \vec{k}' が一つの線または面上の2点で同じ小群を持つとき、バンドギャップの仮定から常に $n_{\vec{k}}^{\alpha} = n_{\vec{k}'}^{\alpha}$ となる。そのため、実際には各線や面内の任意の一点に着目すれば十分である。以下ではこのように選んだ有限個の高対称波数の集合を K と書くこととする。

合計 D 個の整数の組 $\{n_{\vec{k}}^{\alpha}\}_{\alpha, \vec{k} \in K}$ が得られたと仮定し、これらを1列に並べたベクトル

$$\vec{b} = (n_{\vec{k}_1}^1, n_{\vec{k}_1}^2, \dots, n_{\vec{k}_2}^1, n_{\vec{k}_2}^2, \dots) \quad (80)$$

を考えよう。 \vec{b} は \mathbb{Z}^D の任意の点をとることはできず、例えば

$$n_{\vec{k}}^{\alpha} \geq 0 \quad (81)$$

や、バンドの本数に関する関係式

$$\sum_{\alpha} n_{\vec{k}}^{\alpha} D_{\vec{k}}^{\alpha} = \nu \quad (82)$$

を満たす。この他にも2.2節で議論した局所的あるいは大規模な適合関係が要求される。さらに時間反転対称性などの反ユニタリ対称性が存在する場合には、 $n_{\vec{k}}^{\alpha}$ が偶数になることが要求されたり、 $n_{\vec{k}}^{\alpha} = n_{-\vec{k}}^{\alpha'}$ のような制限がつくことがある(2.4.4節)。以下では、 $\{n_{\vec{k}}^{\alpha}\}_{\vec{k}, \alpha}$ に課されるこれらの条件をすべてひっくるめて「適合関係」と呼ぶこととする。与えられた空間群 \mathcal{G} のもとで可能な、適合関係を満たすあらゆる \vec{b} の集合を $\{\text{BS}\}_{\geq 0}^{\mathcal{G}}$ と書くこととする。定義により $\vec{b}_1, \vec{b}_2 \in \{\text{BS}\}_{\geq 0}^{\mathcal{G}}$ のとき $\vec{b}_1 + \vec{b}_2 \in \{\text{BS}\}_{\geq 0}^{\mathcal{G}}$ である。この和 $\vec{b}_1 + \vec{b}_2$ は、「絶縁体1の ν_1 本の占有バンド」と「絶縁体2の ν_2 本の占有バンド」を合わせてできる「 $\nu_1 + \nu_2$ 本の占有バンドを持つ絶縁体」の持つ既約表現の個数を表す。

3.1.3. $\{\text{AI}\}_{\geq 0}^{\mathcal{G}}$ の定義

仮定された全ての対称性を保つように原子が空間に並んでいる状況を想像してみる。それぞれの原子に属する電子は他の原子へと飛び移らず、局在しているものとする。以下ではこれを原子極限の絶縁体(atomic insulator)と呼ぶこととする。原子極限の絶縁体は実空間における直積状態であるから非自明なトポロジーを持ち得ない。このことを逆手にとって、本稿では「ある絶縁体が原子極限の絶縁体に断熱接続できること」を「その絶縁体のトポロジーが自明であること」の定義とする。ここでいう断熱接続とは、仮定された対称性を破らず、かつ励起ギャップを閉じずに滑らかに強束縛模型を変形することを指す。

さて原子極限の絶縁体も絶縁体であることには代わりないので、バンド構造とそれが各波数点で持つ $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ の既約表現を議論することができる。飛び移り積分がないことからエネルギーバンドは完全にフラットであるが、バンド構造に

現れる既約表現は波数 \vec{k} に依存する (3.2.3 節で簡単な例を扱う)。単位胞内における原子の位置を \vec{r} 、そこに局在する電子の軌道が小群 $\mathcal{G}_{\vec{r}}$ の既約表現 $u_{\vec{r}}^{\beta}$ であるとすると、この原子極限の絶縁体に含まれる $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ の既約表現 $U_{\vec{k}}^{\alpha}$ の個数は、(28) 式を用いて

$$(n_{\vec{k}}^{\alpha})^{(\vec{r}, \beta)} = \frac{1}{|\mathcal{G}_{\vec{k}}/T|} \sum_{h \in \mathcal{G}_{\vec{k}}/T} \text{tr}[U_{\vec{k}}^{\alpha}(h)]^* \text{tr}[\tilde{U}_{\vec{k}}^{(\vec{r}, \beta)}(h)] \quad (83)$$

と表すことができる。ただし $\tilde{U}_{\vec{k}}^{(\vec{r}, \beta)}(h)$ は (64) 式で与えた強束縛模型における対称性の表現である。この $\{(n_{\vec{k}}^{\alpha})^{(\vec{r}, \beta)}\}_{\alpha, \vec{k} \in K}$ を (80) 式のように並べたものを $\vec{a}^{(\vec{r}, \beta)}$ と書くことにしよう。

ここまで単位胞内の一箇所に既約表現を持つ電子を局在させる場合を考えたが、より一般には、同じ位置に複数の電子を局在させることもできるし、別の位置 \vec{r}' に原子を追加してもよい。これに対応する既約表現の個数は単に和 $\vec{a}^{(\vec{r}, \beta)} + \vec{a}^{(\vec{r}', \beta')} + \dots$ で与えられる。これらの原子極限の絶縁体に対応する既約表現の組み合わせからなる集合を

$$\{\text{AI}\}_{\geq 0}^{\mathcal{G}} = \left\{ \sum_{\vec{r}} m_{\vec{r}, \beta}^{\beta} \vec{a}^{(\vec{r}, \beta)} \mid m_{\vec{r}}^{\beta} \in \mathbb{Z}, m_{\vec{r}}^{\beta} \geq 0 \right\} \quad (84)$$

と書くことにする。 \vec{r} は一見すると連続量だが、実際には一つのワイコフ位置からは代表の一点だけを選べば良いので和は離散的である (\vec{r} と \vec{r}' が同じワイコフ位置に属する時、 $(n_{\vec{k}}^{\alpha})^{(\vec{r}, \beta)} = (n_{\vec{k}}^{\alpha})^{(\vec{r}', \beta')}$ となるから)。時間反転対称性などの反ユニタリ対称性が存在する場合には、 $m_{\vec{r}}^{\beta}$ が偶数に制限されたり、 $m_{\vec{r}}^{\beta} = m_{\vec{r}'}^{\beta'}$ という制限がつき得る。

3.1.4. バンドトポロジーの簡便な判定法

さて、強束縛模型や密度汎関数法などによる計算によって、空間群 \mathcal{G} を持つある物質についてのバンド構造が与えられたとする。特に絶縁体について議論するために、フェルミエネルギー付近に大域的なバンドギャップが開いていると仮定する。この絶縁体が何らかの非自明なトポロジーを持つかどうかを簡便に判定することが「対称性指標」の目的である。もちろん、ブロック関数が詳細に分かっており、関係しそうなトポロジカル数も予想が付いているのであれば、実際にそのトポロジカル数の値を計算してしまえばよい。しかし、各波数点ごとに独立に対角化された数値計算結果から大域的に滑らかなブロック関数を構成することや、具体的にどのトポロジカル数を調べればいいのか天下りに予想することは一般に難しい。

そこで、このバンド構造の持つ $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ の既約表現の情報を高対称波数 $\vec{k} \in K$ でそれぞれ抽出することにより、 $\vec{b} \in \{\text{BS}\}_{\geq 0}^{\mathcal{G}}$ を構成し、これが $\{\text{AI}\}_{\geq 0}^{\mathcal{G}}$ にも含まれているかどうか調べる。いま仮に

$$\vec{b} \notin \{\text{AI}\}_{\geq 0}^{\mathcal{G}} \quad (85)$$

だとすると、既約表現の組み \vec{b} を持つような絶縁体の原子極限はそもそも存在しないので、いま考えている絶縁体は

必ず非自明なトポロジーを有することが分かる。逆に、もし $\vec{b} \in \{\text{AI}\}_{\geq 0}^{\mathcal{G}}$ ならば、既約表現の組み合わせだけからは何も言えず、原理的にはこの絶縁体は同じ表現を持つ原子極限の絶縁体に断熱接続され得る。つまり、(85) 式の条件はこの絶縁体がトポロジカルに非自明であるための十分条件であると言える。これは必ずしも必要条件ではない（つまり、 $\vec{b} \in \{\text{AI}\}_{\geq 0}^{\mathcal{G}}$ でもトポロジカルに非自明な絶縁体は存在する）が、上述のような問題を含まず容易に判定できることが長所である。近年我々は「フラジャイルトポロジー」と呼ばれる新しいクラスのトポロジカル絶縁体を提案した¹⁰⁾が、これを同定できたのもこの判定法の簡便さが故であった。

以上、占有バンドが持つ既約表現に基づいて絶縁体が持つトポロジーを判定することの基本的なアイディアを述べた。次節の議論は幾分抽象度が増すため、詳細に興味がない方は飛ばして 3.2 節以降に進んでいただいて構わない。

3.1.5. $X_{\text{BS}}^{\mathcal{G}}$ の定義

前節では、二つの集合 $\{\text{BS}\}_{\geq 0}^{\mathcal{G}}$ と $\{\text{AI}\}_{\geq 0}^{\mathcal{G}}$ の違いに着目することで、バンド構造の持つトポロジーを表現から調べることができることを議論した。しかし集合の差

$$\{\text{BS}\}_{\geq 0}^{\mathcal{G}} \setminus \{\text{AI}\}_{\geq 0}^{\mathcal{G}} \quad (86)$$

は綺麗な数学的な構造を持っておらず、この元を系統的に分類することは難しい。

そこで集合 $\{\text{BS}\}_{\geq 0}^{\mathcal{G}}$ を加群となるように拡張して扱いやすくしよう。このために、(81) 式の条件を一旦忘れて負の整数も含めることにし、これを $\{\text{BS}\}^{\mathcal{G}}$ と書く。こうするとつまり $\vec{b}_1, \vec{b}_2 \in \{\text{BS}\}^{\mathcal{G}}$ のとき差 $\vec{b}_1 - \vec{b}_2$ も $\{\text{BS}\}^{\mathcal{G}}$ に含まれるので $\{\text{BS}\}^{\mathcal{G}}$ は（自由）加群 $\mathbb{Z}^{d_{\text{BS}}}$ ($1 \leq d_{\text{BS}} \leq D$) となる。少し難しく感じられるかもしれないが、この事情は「負でない整数の集合 $\mathbb{Z}_{\geq 0} = \{0, 1, 2, \dots\}$ は群ではないが、全整数の集合 $\mathbb{Z} = \{\dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots\}$ は加群であること」と全く同じである。

同様に、(84) 式右辺の $m_{\vec{r}}^{\beta} \geq 0$ という条件を忘れ、あらゆる整数を許すことにすれば加群 $\{\text{AI}\}^{\mathcal{G}} = \mathbb{Z}^{d_{\text{AI}}^{\mathcal{G}}}$ ($1 \leq d_{\text{AI}} \leq D$) が得られる。定義により $\{\text{AI}\}^{\mathcal{G}}$ は $\{\text{BS}\}^{\mathcal{G}}$ の正規部分群であるから、商群

$$X_{\text{BS}}^{\mathcal{G}} = \{\text{BS}\}^{\mathcal{G}} / \{\text{AI}\}^{\mathcal{G}} \quad (87)$$

が定義できる。原理的には $d_{\text{BS}}^{\mathcal{G}} > d_{\text{AI}}^{\mathcal{G}}$ となり得るが、実際には 230 個全ての空間群に対して $d_{\text{BS}} = d_{\text{AI}}$ が成立している⁹⁾。このため、 $X_{\text{BS}}^{\mathcal{G}}$ は常に

$$X_{\text{BS}}^{\mathcal{G}} = \mathbb{Z}_{n_1} \times \mathbb{Z}_{n_2} \times \dots \times \mathbb{Z}_{n_N} \quad (88)$$

(n_i は 2 以上の整数、 N は $1 \leq N \leq d_{\text{BS}}^{\mathcal{G}}$ の範囲の整数) という形になる。

230 種類の空間群や、1651 種類の磁気空間群に対して、 $d_{\text{BS}}^{\mathcal{G}} = d_{\text{AI}}^{\mathcal{G}}$ の値や $X_{\text{BS}}^{\mathcal{G}}$ の具体形を求める問題は文献⁹⁾で解

決された。例えば並進対称性に加えて空間反転対称性のみを持つ3次元空間群($P\bar{1}$)では時間反転対称性や電子スピンの有無に関わらず $X_{\text{BS}}^{\mathcal{G}} = (\mathbb{Z}_2)^3 \times \mathbb{Z}_4$ という結果が得られた。以下では、具体的に $X_{\text{BS}}^{\mathcal{G}}$ が何を表すのかを具体例を通してみてゆく。

3.2. 分極と表現の関係

3.2.1. ベリー位相と分極

バンド構造が持つ既約表現の情報 $\{n_{\vec{k},\alpha}^{\alpha}\}_{\vec{k},\alpha}$ がバンド構造のトポロジーと深く関わっていることを具体例を通して納得するために、まずは各種のトポロジカル数を議論する上でもっとも基礎的な電気分極(electric polarization)について議論しよう。電気分極を計算するには、本来は物質中の正電荷と負電荷の位置のズレを調べるなければならないが、実際には電子の自由度のみに着目し、以下で説明するワニエ中心(Wannier center)を用いた議論がなされることが多い⁵⁾。

まず簡単のためにエネルギー $\varepsilon_{\vec{k}n}$ を持つ1バンドが他のバンドからバンドギャップで隔てられている場合を考える。このバンドのブロッホ状態を

$$|\vec{k}n\rangle = \sum_{\vec{R},s} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} (\tilde{\psi}_{\vec{k}n})_s |\vec{R}s\rangle \quad (89)$$

とする。 $|\vec{R}s\rangle \equiv (\hat{c}_{\vec{R}})_s^\dagger |0\rangle$ は単位胞 $\vec{R} = \sum_I n_I \vec{a}_I$ に属し座標 $\vec{x} = \vec{R} + \vec{r}_s$ に位置する軌道 s ($s = 1, 2, \dots, N_{\text{orb}}$)の一電子状態である。単位胞 \vec{R}_0 に属するワニエ状態とワニエ関数(Wannier function)は

$$|W_{\vec{R}_0n}\rangle = \int \frac{d^d k}{v_{\text{BZ}}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_0} |\vec{k}n\rangle \quad (90)$$

$$\langle \vec{R}s | W_{\vec{R}_0n} \rangle = \int \frac{d^d k}{v_{\text{BZ}}} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{R}_0-\vec{R})} (\tilde{\psi}_{\vec{k}n})_s \quad (91)$$

で定義され、規格直交条件 $\langle W_{\vec{R}'_0n'} | W_{\vec{R}_0n} \rangle = \delta_{\vec{R}'_0, \vec{R}_0} \delta_{n', n}$ を満たす。したがって、特に $\vec{R}_0 = \vec{0}$ のワニエ関数の中心座標(=ワニエ状態での位置の期待値)は

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} \rangle_n &= \sum_{\vec{R},s} \langle W_{\vec{0}n} | \vec{R}s \rangle (\vec{R} + \vec{r}_s) \langle \vec{R}s | W_{\vec{0}n} \rangle \\ &= \int \frac{d^d k}{v_{\text{BZ}}} \tilde{\psi}_{\vec{k}n}^\dagger (\vec{r} + i\nabla_{\vec{k}}) \tilde{\psi}_{\vec{k}n} \end{aligned} \quad (92)$$

と表すことができる。ここに \vec{r} は単位胞内の位置を表す対角行列で $(\vec{r})_{s',s} \equiv \delta_{s',s} \vec{r}_s$ で定義される。この式の導出には $\sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = v_{\text{BZ}} \delta^d(\vec{k})$ や $\sum_{\vec{R}} \vec{R} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = -v_{\text{BZ}} i\nabla_{\vec{k}} \delta^d(\vec{k})$ を用いればよい。

2.1.2節で説明したように、フーリエ変換には単位胞の位置 \vec{R} を用いて $\hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \equiv \sum_{\vec{R}} \hat{c}_{\vec{R}}^\dagger e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}$ とするものと、実際の軌道の位置 $\vec{R} + \vec{r}_s$ を用いて $(\hat{c}_{\vec{k}}^\dagger)_s \equiv \sum_{\vec{R}} (\hat{c}_{\vec{R}}^\dagger)_s e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}+\vec{r}_s)}$ とするものの二つがある。二つのフーリエ変換の表式は、ユニタリ行列 $V_{\vec{k}} = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ で結ばれており、 $H_{\vec{k}} = V_{\vec{k}} \tilde{H}_{\vec{k}} V_{\vec{k}}^\dagger$ の固有

ベクトルは $\psi_{\vec{k}ni} = V_{\vec{k}} \tilde{\psi}_{\vec{k}ni}$ で与えられる。 $\psi_{\vec{k}n}$ を用いると(92)式は

$$\langle \vec{x} \rangle_n = \int \frac{d^d k}{v_{\text{BZ}}} \psi_{\vec{k}n}^\dagger i\nabla_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}n} \quad (93)$$

とコンパクトに表現できる。

この結果を ν 本の占有バンドからなる絶縁体へと一般化しよう。ワニエ中心の和は

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} \rangle &= \int \frac{d^d k}{v_{\text{BZ}}} \left(\tilde{\vec{A}}_{\vec{k}} + \text{tr}[\tilde{\Phi}_{\vec{k}}^\dagger \vec{r} \tilde{\Phi}_{\vec{k}}] \right) \\ &= \int \frac{d^d k}{v_{\text{BZ}}} \vec{A}_{\vec{k}} \end{aligned} \quad (94)$$

と、占有バンドのベリー接続(Berry connection)

$$\tilde{\vec{A}}_{\vec{k}} = \text{tr}[\tilde{\Phi}_{\vec{k}}^\dagger i\nabla_{\vec{k}} \tilde{\Phi}_{\vec{k}}], \quad (95)$$

$$\vec{A}_{\vec{k}} = \text{tr}[\Phi_{\vec{k}}^\dagger i\nabla_{\vec{k}} \Phi_{\vec{k}}] \quad (96)$$

を用いて表現することができる($\Phi_k \equiv V_k \tilde{\Phi}_k$)。つまり二つ目のフーリエ変換の定義を用いると「ベリー接続のBZ空間での平均がワニエ中心 $\langle \vec{x} \rangle$ を表す」⁵⁾ことになる。もちろんフーリエ変換の一つ目の定義に基づくベリー接続を用いることもできるが、その場合は単位胞内の位置を表す \vec{r} の寄与を加えるのを忘れないようにしなければならない。また、 ν 次元ユニタリ行列 $v_{\vec{k}}$ による変換 $\Phi_{\vec{k}n} \rightarrow \Phi_{\vec{k}n} v_{\vec{k}}$ (ただし $v_{\vec{k}+\vec{G}} = v_{\vec{k}}$)のもとで、 $\vec{A}_{\vec{k}}$ は $\vec{A}_{\vec{k}} \rightarrow \vec{A}_{\vec{k}} + i\nabla_{\vec{k}} \log \det v_{\vec{k}}$ と変化し、結果として $\langle \vec{x} \rangle$ は基本並進ベクトルの整数倍だけ変化し得る¹⁴⁾。したがって $\langle \vec{x} \rangle$ の並進ベクトルの違いに物理的意味はないことに注意が必要である。

このベリー位相と分極の関係は、波数 \vec{k} の代わりにひねり境界条件を用いることで相互作用系へと一般化できる¹¹⁾。

3.2.2. 対称性による分極の量子化

空間群の対称性のもとで分極がどのように変換されるかを見るために、2.1.5節で議論したsewing matrixを思い出そう。これは \mathcal{G} の各元 g に対して行列要素

$$[W_{\vec{k}}(g)]_{n'i',ni} = \psi_{g(\vec{k})n'i'}^\dagger U_{\vec{k}}(g) \psi_{\vec{k}ni} \quad (97)$$

によって定義される。この ν 次元ユニタリ行列 $W_{\vec{k}}(g)$ を用いると、 $\Phi_{\vec{k}}$ の $g \in \mathcal{G}$ のもとでの変換則は

$$U_{\vec{k}}(g) \Phi_{\vec{k}} = \Phi_{g(\vec{k})} W_{\vec{k}}(g) \quad (98)$$

と表現できる。特に $h \in \mathcal{G}_{\vec{k}}$ に対しては(41)式に帰着し $[W_{\vec{k}}(g)]_{n'i',ni} = \delta_{n',n} [U_{\vec{k}}^{\alpha n}(g)]_{i',i}$ となる。2.3.3節でみたように $\vec{t}_g = \vec{0}$ となる元については $U_{\vec{k}}(g) = V_{g(\vec{k})} \tilde{U}_{\vec{k}}(g) V_{\vec{k}}^\dagger$ は波数 \vec{k} に依存しない。この場合は(117)式を用いて $\vec{A}_{\vec{k}}$ の変換則

$$\vec{A}_{g(\vec{k})} = p_g \vec{A}_{\vec{k}} - p_g i\nabla_{\vec{k}} \log \det W_{\vec{k}}(g) \quad (99)$$

¹⁴⁾ $\det v_{\vec{k}} = e^{i\theta_{\vec{k}}}$ や $\vec{k} = \sum_J q_J \vec{b}_J$ ($-0.5 \leq q_J \leq 0.5$) と書くと $\vec{b}_J \cdot \int \frac{d^d k}{v_{\text{BZ}}} \nabla_{\vec{k}} \theta_{\vec{k}} = \int d^d k \partial_{q_J} \theta_{\vec{k}} = 2\pi n$ となることから、 $\int \frac{d^d k}{v_{\text{BZ}}} i\nabla_{\vec{k}} \log \det v_{\vec{k}}$ がある並進ベクトル \vec{R} と一致することが分かる。

が得られる。この導出にはユニタリ行列 $v_{\vec{k}}$ に対して $\text{tr}[v_{\vec{k}}^\dagger \nabla_{\vec{k}} v_{\vec{k}}] = \nabla_{\vec{k}} \log \det v_{\vec{k}}$ となることを用いた。すると

$$\begin{aligned} p_g \langle \vec{x} \rangle - \langle \vec{x} \rangle &= \int \frac{d^d k}{v_{\text{BZ}}} (p_g \vec{A}_{\vec{k}} - \vec{A}_{g(\vec{k})}) \\ &= p_g \int \frac{d^d k}{v_{\text{BZ}}} i \nabla_{\vec{k}} \log \det W_{\vec{k}}(g) \end{aligned} \quad (100)$$

と変形できるが、最後の式の右辺は脚注 1 で述べたようにある並進ベクトル \vec{R} と等しい。つまり「 $\vec{t}_g = \vec{0}$ となる元 g の存在下では、 $\langle \vec{x} \rangle$ は $p_g \langle \vec{x} \rangle - \langle \vec{x} \rangle = \vec{R}$ を満たすように量子化されている」ことが分かる。

3.2.3. 1 次元系における分極と表現の関係

x を $-x$ へと変換する対称操作 g を持つような 1 次元系を考えよう。ロッド群でこれを実現するには、 x 軸方向の並進対称性に加えて鏡映 $M_x : (x, y, z) \mapsto (-x, y, z)$ か 2 回回転 $C_{2z} : (x, y, z) \mapsto (-x, -y, z)$ 、もしくは空間反転 $I : (x, y, z) \mapsto (-x, -y, -z)$ (第 1 節で議論した $\bar{1}$ に対応)を持つ群を考えればよい。これらの対称性のもとでは、前節の結果から $2\langle x \rangle = an$ ($n \in \mathbb{Z}$) となり、 $\langle x \rangle$ は 0 または $a/2 \pmod{a}$ へと量子化される。式を簡単にするために以下では格子定数 a を 1 とする。さらに (99) 式を用いると

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi dk (A_k + A_{-k}) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi dk i \partial_k \log \det W_k(g) \\ &= \frac{1}{2\pi i} \log \frac{\zeta_0(g)}{\zeta_\pi(g)}, \end{aligned} \quad (101)$$

あるいは

$$(-1)^{2\langle x \rangle} = \frac{\zeta_0(g)}{\zeta_\pi(g)} \quad (102)$$

と書くことができる¹²⁾。ここで g 不変な波数 $k = 0, \pi$ において $\zeta_k(g) \equiv \det W_k(g)$ は「各バンドの g の固有値を全ての占有バンドに渡って積をとったもの」を表す。つまり対称性 g の固有値の積の比が分極の量子化値を決定するのである。

原子極限の絶縁体の例 各単位胞内で $r = \xi/2$ ($\xi = 0$ または 1) に電子が局在している状況を考える。それぞれ 1.1.7 節の $\Lambda_{\vec{x}_a}^{\text{UC}} = \{(0, 0, 0)\}$ や $\Lambda_{\vec{x}_b}^{\text{UC}} = \{(1/2, 0, 0)\}$ という格子に対応する。この軌道の持つ g の固有値を $u(g)$ と書く。これを $\nu = N_{\text{orb}} = 1$ の 1 バンド模型 ($\tilde{H}_k = H_k = 0$) だとみなしてこれまでの結果を適用してみると、 $\tilde{U}_k(g) = e^{-i\xi k} u(g)$, $\tilde{\psi}_k = 1$, $V_k = e^{-i\xi k/2}$, $U_k(g) = u(g)$, $\psi_k = e^{-i\xi k/2}$ となる。特に飛び移り積分なども含まない自明な例であるが、ベリー位相 $(1/2\pi) \int_{-\pi}^\pi dk A_k = \xi/2 \pmod{1}$ は正しくワニエ中心の位置 $\langle x \rangle$ を表している。 g の固有値は $\zeta_0(g) = u(g)$, $\zeta_\pi(g) = (-1)^\xi u(g)$ であり、(102) 式の成立も確認できる。この模型では、サイトの位置（正電荷の位置）とワニエ中心の位置（負電荷の位置）が一致しているので、非自明な分極は生じない。

= **非自明な分極を生じる例** より非自明な例として、次の $N_{\text{orb}} = 2$ バンド強束縛模型を考えよう。 $t > 0$ をエネルギーの次元を持つ定数、 m を無次元パラメータとして

$$H_k = \tau_x t \sin k + \tau_z t(m - \cos k) \quad (103)$$

とする。以下、 τ_0 や σ_0 は 2 次元単位行列、 $\vec{\tau} = (\tau_x, \tau_y, \tau_z)$ や $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ はパウリ行列とする。この模型では各単位胞にある 2 サイトはともに $r_s = 0$ にあると仮定したため、 $V_k = 1$ となり二つのフーリエ変換の区別はない。対称性 g は $U_k(g) = u_2 \tau_z$ と表現される。 $u_2 \equiv \sqrt{\omega^{\text{sp}}(g, g)}$ は g が空間反転の場合には 1, g が 2 回回転や鏡映対称性の時は i とする。 $m \neq \pm 1$ のとき 2 バンド間にバンドギャップが開くので、 $\nu = 1$ の絶縁体を考えることができる。

g 不変な波数 $k = 0, \pi$ では H_k の第 1 項が消えて対角な第 2 項のみが残るため、その係数 $t(m - \cos k)$ の符号に着目すればよい。 $|m| > 1$ のときは $k = 0$ と π で同符号なので占有バンドの g の固有値は等しく、(102) 式より $\langle x \rangle = 0 \pmod{1}$ となる。一方 $|m| < 1$ のときは $k = 0$ と π における占有バンドの g の固有値は逆、つまり $\zeta_0(g) = -\zeta_\pi(g)$ となるため、ワニエ中心は $\langle x \rangle = 1/2 \pmod{1}$ に位置する。この場合はサイトの位置 $r_s = 0$ とワニエ中心の位置がずれており、非自明な分極を持っていると言える。

3.2.4. 1 次元では対称性指標がないこと

前節で紹介した 1 次元の「原子極限の絶縁体の例」と「非自明な分極を生じる例」は、残念ながら対称性の固有値だけを見ていても区別できない。 $k = 0$ と $k = \pi$ における g の固有値が異符号であったとしても、元々 $r_s = 1/2$ にサイトがあっただけの自明な状態なのか、それとも元々 $r_s = 0$ にサイトが定義された模型でワニエ中心の位置が $\langle x \rangle = 1/2 \pmod{1}$ にずれた非自明な状態なのか分からぬからである。より一般に、1 次元で全 75 種類あるロッド群に対して、 X_{BS}^G は常に自明 ($X_{\text{BS}}^G = 1$) である⁹⁾。

3.3. 2 次元のトポロジカル数と表現の関係

次に非自明な対称性指標 X_{BS}^G を持つ例として、2 次元系の各種トポロジカル数との関係を議論しよう。

3.3.1. チャーン数

時間反転が破れた系で重要なチャーン数 (Chern number) は、ベリー曲率 (Berry curvature)

$$\tilde{\vec{F}}_{\vec{k}} = \nabla_{\vec{k}} \times \tilde{\vec{A}}_{\vec{k}}, \quad (104)$$

$$\vec{F}_{\vec{k}} = \nabla_{\vec{k}} \times \vec{A}_{\vec{k}} \quad (105)$$

を用いて

$$C_{xy} = -\frac{1}{2\pi} \int_{\text{BZ}} d^2 k (\vec{F}_{\vec{k}})_z = -\frac{1}{2\pi} \int_{\text{BZ}} d^2 k (\tilde{\vec{F}}_{\vec{k}})_z \quad (106)$$

と定義される。チャーン数 $C_{xy} \in \mathbb{Z}$ とホール伝導度 σ_{xy} との間には $\sigma_{xy} = (e^2/2\pi\hbar)C_{xy}$ の関係があり、 C_{xy} が常に整数値をとることが周期的ポテンシャル中の自由電子系におけるホール伝導度の整数量子化を説明する¹³⁾。以下、表記を簡単にするため基本並進ベクトルを $\vec{a}_x = (1, 0, 0)$, $\vec{a}_y = (0, 1, 0)$ とする。

ゲージ変換 $\Phi_{\vec{k}n} \rightarrow \Phi_{\vec{k}n}v_{\vec{k}}$, $\vec{A}_{\vec{k}} \rightarrow \vec{A}_{\vec{k}} + i\nabla_{\vec{k}} \log \det v_{\vec{k}}$ によって、(i) $(\vec{A}_{\vec{k}})_y = (\vec{A}_{\vec{k}+\vec{G}})_y$ かつ (ii) BZ 内に $\vec{A}_{\vec{k}}$ の特異点を持たないようにする。このゲージでは一般に $(\vec{A}_{\vec{k}})_x$ と $(\vec{A}_{\vec{k}+\vec{G}})_x$ は一致せず、チャーン数は

$$\begin{aligned} C_{xy} &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \int_{-\pi}^{\pi} dk_y (\vec{F}_{\vec{k}})_z \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x [\vec{A}_{(k_x, \pi)} - \vec{A}_{(k_x, -\pi)}]_x \\ &= (\langle x_{\pi} \rangle - \langle x_{-\pi} \rangle) \end{aligned} \quad (107)$$

のように、各 k_y に対して定義した分極 $\langle x_{k_y} \rangle$

$$\langle x_{k_y} \rangle \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x [\vec{A}_{(k_x, k_y)}]_x \quad (108)$$

の差で表現することができる。

3.3.2. チャーン数と回転対称性の固有値

z 軸周りの n 回回転対称性 C_{nz} を持つ系では、高対称波数における回転対称性の固有値によって xy 面のチャーン数 C_{xy} を mod n で計算することができる¹⁴⁾。例えば $n = 2$ の場合には

$$(-1)^{C_{xy}} = \frac{\zeta_{(0, \pi)}(C_{2z})}{\zeta_{(0, 0)}(C_{2z})} \frac{\zeta_{(\pi, 0)}(C_{2z})}{\zeta_{(\pi, \pi)}(C_{2z})} \quad (109)$$

によって C_{xy} の偶奇を決定できる。 $\zeta_{\vec{k}}(C_{2z}) \equiv \det W_{\vec{k}}(C_{2z})$ は、波数

$$K_{2D} \equiv \{(n_x \pi, n_y \pi, 0) | n_x, n_y = 0, 1\} \quad (110)$$

(図 3(a)) における C_{2z} 対称性の固有値を全ての占有バンドに渡って積をとったものである。

n 回回転対称性がある場合と言っても、 xy 面に対して回転対称性のように振る舞えば十分で、厳密に 3 次元空間の回転対称性である必要はない。例えば C_{2z} の代わりに空間反転 I 、 C_{4z} の代わりに 4 回回反 $S_{4z} = IC_{4z}$ 、 C_{6z} の代わりに 3 回回反 $S_{3z} = IC_{3z}$ を用いても良い。これら広い意味での n 回回転対称性の固有値と n を法としたチャーン数のが関係していることから、並進対称性に加えてこれらの対称性だけを持つ 2 次元系では $X_{BS}^G = \mathbb{Z}_n$ となる。この巡回群は $C_{xy} = 1 \bmod n$ のチャーン絶縁体で生成される。

回転対称性の固有値を調べるだけでチャーン数の情報を得ることができるのは便利だが、 C_{xy} の n の違いを無視してしまうのが欠点であり、例えば $C_{xy} = +n > 0$ だとしてもバンド構造の持つ表現は $C_{xy} = 0$ の場合と同じになつて

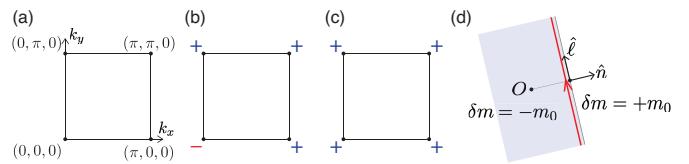


図 3 (a): C_2 回転や空間反転で不变な波数。(b) $0 < m' < 2$ ($C_{xy} = 1$) のときの占有バンドの持つ空間反転対称性の固有値。(c) $2 < m'$ ($C_{xy} = 0$) のときの占有バンドの持つ空間反転対称性の固有値。

しまう。これが (85) 式がトポロジカルに非自明であるための十分条件であるが必要条件ではないことの例である。

(109) 式の簡単な導出は文献に見られないで、ここで示してみよう。(99) 式により $\vec{F}_{\vec{k}}$ が

$$\vec{F}_{g(\vec{k})} = \vec{F}_{\vec{k}} \quad (111)$$

を満たすことに注意する。特に $g = C_{2z}$ 回転の場合を考えると、次のように変形できる。

$$\begin{aligned} C_{xy} &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \int_0^{\pi} dk_y (\vec{F}_{\vec{k}} + \vec{F}_{-\vec{k}})_z \\ &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \int_0^{\pi} dk_y (\vec{F}_{\vec{k}})_z \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x [\vec{A}_{(k_x, \pi)} - \vec{A}_{(k_x, 0)}]_x \\ &= 2(\langle x_{\pi} \rangle - \langle x_0 \rangle). \end{aligned} \quad (112)$$

これに (102) 式を適用して少し書き換えると (109) 式となる¹⁵⁾。2 回回転ではなく n 回回転の場合の式も同様にして導くことができる。

この回転対称性の固有値とチャーン数の関係も、ひねり境界条件を用いることで相互作用系へと一般化できる¹⁵⁾。

チャーン絶縁体の例 g を 2 回回転対称性または空間反転対称性とする。この対称性を持つ 2 次元の 2 バンド強束縛模型で、 $r_s = 0$ にサイトがあるものを考えよう。

$$H_{\vec{k}} = \tau_x t \sin k_x + \tau_y t \sin k_y + \tau_z t(m' - \cos k_x - \cos k_y). \quad (113)$$

m' は無次元パラメータで $\vec{\tau} = (\tau_x, \tau_y, \tau_z)$ はパウリ行列である。ここでも対称性 g は $U_{\vec{k}}(g) = u_2 \tau_z$ と表現される。 $m' \neq 0, \pm 2$ のときは全波数点でバンドギャップが開くため、 $\nu = 1$ の絶縁体を考えることができる。この 2 次元模型は $k_y = 0, \pi$ では (103) 式の 1 次元模型に帰着し、 $k_y = 0$ では $m = m' - 1$, $k_y = \pi$ では $m = m' + 1$ と対応する。したがつて、 $|m'| < 2$ では (バンドギャップが閉じる一点 $m' = 0$ を除いて) $\langle x(\pi) \rangle - \langle x(0) \rangle = 1/2 \pmod{1}$ となり、チャーン数が奇数であることが分かる。同じことだが、(109) 式の公式からも直ちに $(-1)^{C_{xy}} = -1$ が得られる。 $(g$ が空間反転対称性の場合の占有バンドの固有値を図 3(b,c) に示した。) 実際に C_{xy} を計算してみると、 $0 < m' < 2$ なら $C_{xy} = 1$,

¹⁵⁾(112) 式の 3,4 行目には、 $C_{xy} \neq 0$ のときに $\vec{A}_{\vec{k}}$ に生じる特異性のために偶数分の不定性があるが、これは C_{xy} の偶奇には影響しない。

$-2 < m' < 0$ なら $\mathcal{C}_{xy} = -1$ 、 $|m'| > 2$ なら $\mathcal{C}_{xy} = 0$ である。

3.3.3. チャーン絶縁体のカイラル端状態

(113) 式の模型の、 $\mathcal{C}_{xy} = 1$ の相 ($0 < m' < 2$) と $\mathcal{C}_{xy} = 0$ の相 ($2 < m'$) の界面に現れる端状態を調べよう。図 3(d) のように、 $\hat{n} = (\cos \phi, \sin \phi, 0)$ を法線ベクトル、 $\hat{\ell} = (-\sin \phi, \cos \phi, 0)$ を境界に沿う方向とする直線的な境界を考えよう。 $\vec{x} = (x, y, 0)$ を $\vec{x} = x_n \hat{n} + x_{\parallel} \hat{\ell}$ と分解する。 $\mathcal{C}_{xy} = 1$ と $\mathcal{C}_{xy} = 0$ の二つの相の境界が $x_n = L$ となるようにするために、(113) 式の $H_{\vec{k}}$ に含まれるパラメータ m' に x_n 依存性を持たせる。 $\delta m_{x_n} \equiv m'_{x_n} - 2$ が $x_n < L$ のとき一定値 $-m_0$ ($0 < m_0 < 2$) に、 $x_n > L$ のとき $+m_0$ に近づくように、例えば $\delta m_{x_n} = m_0 \tanh \frac{x_n - L}{a}$ とすればよい。

$H_{\vec{k}}$ は $m' = 2$ のときに $\vec{k} = 0$ でギャップを閉じるので、この近傍に着目した低エネルギー有効場の理論を考える。 $\vec{k} = k_n \hat{n} + k_{\parallel} \hat{\ell}$ の一次まで展開したハミルトニアンを \hat{n} 方向に関して実空間へ戻すと

$$H_{\hat{n}, x_n, k_{\parallel}} = -ita \vec{\tau} \cdot \hat{n} \partial_{x_n} + ta \vec{\tau} \cdot \hat{\ell} k_{\parallel} + \tau_z t \delta m_{x_n} \quad (114)$$

となる。このハミルトニアンの固有関数のうち $x_n = L$ 付近に局在するものは、規格化定数を除いて

$$\psi_{\hat{n}, x_n, k_{\parallel}} = e^{-\frac{1}{a} \int_0^{x_n} \delta m_{x'} dx'} \begin{pmatrix} 1 \\ ie^{i\phi} \end{pmatrix} \quad (115)$$

である。これはエネルギー固有値 $\varepsilon_{k_{\parallel}} = tak_{\parallel}$ を持ち、 $\hat{\ell}$ の方向への速度 $v_{k_{\parallel}} = \frac{1}{\hbar} \partial_{k_{\parallel}} \varepsilon_{k_{\parallel}} = \frac{ta}{\hbar} > 0$ を持つカイラル端状態である。(114) 式を $\psi_{\hat{n}, x_n, k_{\parallel}}$ の空間に射影することで、このカイラル端状態を記述する有効 1 次元模型

$$H_{\hat{n}, k_{\parallel}}^{\text{eff}} = tak_{\parallel} \quad (116)$$

が得られる。

3.3.4. 量子スピンホール絶縁体

時間反転対称性 \mathcal{T} を有する 2 次元電子系に対しては \mathbb{Z}_2 トポロジカル数 ν_{xy} (= 0 または 1) を定義することができる。これは次式で定まる時間反転対称性の sewing matrix $W_{\vec{k}}(\mathcal{T})$ を用いて定義される。

$$U(\mathcal{T}) \Phi_{\vec{k}}^* = \Phi_{-\vec{k}} W_{\vec{k}}(\mathcal{T}). \quad (117)$$

時間反転対称性の下では、(99) 式や (111) 式に対応して $\vec{A}_{-\vec{k}} = \vec{A}_{\vec{k}} + i\nabla_{\vec{k}} \log \det W_{\vec{k}}(\mathcal{T})$, $\vec{F}_{-\vec{k}} = -\vec{F}_{\vec{k}}$ が成立するため、チャーン数 \mathcal{C}_{xy} は常にゼロになる。しかし $W_{\vec{k}}(\mathcal{T})$ は時間反転対称波数 K_{2D} [(110) 式]においては反対称行列となるため¹⁶、代わりにパフイアン (Pfaffian) $\text{Pf}[W_{\vec{k}}(\mathcal{T})]$ が定

¹⁶ 証明は、 $[W_{\vec{k}}(\mathcal{T})]_{n'i', ni} = \psi_{-\vec{k}n'i'}^{\dagger} [U(\mathcal{T})] \psi_{\vec{k}ni}^*$ は $\psi_{\vec{k}ni}^{\dagger} [-U(\mathcal{T})] \psi_{-\vec{k}n'i'}^* = -[W_{-\vec{k}}(\mathcal{T})]_{ni, n'i'}$ 。ただし $U(\mathcal{T})^T = -U(\mathcal{T})$ (2.4.1 節) を用いた。

義できる¹⁷。 ν_{xy} はこのパフイアンを用いて

$$(-1)^{\nu_{xy}} = \prod_{\vec{k} \in K_{2D}} \frac{\text{Pf}[W_{\vec{k}}(\mathcal{T})]}{\sqrt{\det W_{\vec{k}}(\mathcal{T})}} \quad (118)$$

と定義される。この式が意味を持つためには $\sqrt{\det W_{\vec{k}}(\mathcal{T})}$ が連続となるように大域的にゲージを固定する必要があり、この定義に従って ν_{xy} を計算するのは容易ではない。

一方、時間反転対称性に加えて空間反転対称性 I がある場合は、Fu-Kane 公式

$$(-1)^{\nu_{xy}} = \prod_{\vec{k} \in K_{2D}} \zeta'_{\vec{k}}(I) \quad (119)$$

を用いることで ν_{xy} を簡単に計算することができる¹⁶⁾。ただし $\zeta'_{\vec{k}}(I)$ は、占有軌道の各クラマース対から片方だけを選んで I の固有値の積を取ることを意味する。

Fu-Kane 公式の証明は原論文¹⁶⁾ やその解説¹⁷⁾ に詳しいので、ここでは概略のみ紹介する。対称性 $I\mathcal{T}$ の sewing matrix は

$$W_{\vec{k}}(I\mathcal{T}) = W_{-\vec{k}}(I) W_{\vec{k}}(\mathcal{T}) \quad (120)$$

と表せる。 $W_{\vec{k}}(I\mathcal{T})$ は反対称行列であり、全波数点でパフイアンが定義できる。(120) 式に適当な基底をとって計算すると、時間反転対称波数 K_{2D} では $\text{Pf}[W_{\vec{k}}(\mathcal{T})] = \zeta'_{\vec{k}}(I) \text{Pf}[W_{\vec{k}}(I\mathcal{T})]$ が成立することが分かる。他方 $W_{-\vec{k}}(I\mathcal{T}) = W_{\vec{k}}(\mathcal{T}) W_{\vec{k}}(I\mathcal{T})^* W_{\vec{k}}(\mathcal{T})^T$ により全波数点で $\text{Pf}[W_{-\vec{k}}(I\mathcal{T})] = \det[W_{\vec{k}}(\mathcal{T})] \text{Pf}[W_{\vec{k}}(I\mathcal{T})]^*$ が成立する¹⁸。いま適当なゲージ変換 $\Phi_{\vec{k}} \rightarrow \Phi_{\vec{k}} v_{\vec{k}}$ によって各点 \vec{k} で $\text{Pf}[W_{\vec{k}}(I\mathcal{T})] = +1$ となるようにすると、 $\text{Pf}[W_{\vec{k}}(\mathcal{T})] = \zeta'_{\vec{k}}(I)$ かつ $\det[W_{\vec{k}}(\mathcal{T})] = +1$ となるため、(118) 式から (125) 式が直ちに従う。

この Fu-Kane 公式からも示唆されるように、空間反転対称性と時間反転対称性を持つ 2 次元系では X_{BS}^g は常に \mathbb{Z}_2 というファクターを含む。

3.3.5. ミラーチャーン数

時間反転対称性の代わりに鏡映対称性 $M_z : (x, y, z) \mapsto (x, y, -z)$ を仮定してみよう。 M_z は波数を変えないため、 $U_{\vec{k}}(M_z)$ は BZ の各点で $H_{\vec{k}}$ の対称性となる。したがって一般性を失うことなく

$$H_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} H_{\vec{k}}^{(+)} & 0 \\ 0 & H_{\vec{k}}^{(-)} \end{pmatrix}, \quad (121)$$

$$U_{\vec{k}}(M_z) = i \begin{pmatrix} +\mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \quad (122)$$

とブロック対角化できる。そのため $H_{\vec{k}}^{(\xi)}$ ($\xi = \pm$) のそれぞれに対してチャーン数 $C^{(\xi)}$ を定義することが可能で、これ

¹⁷ $2n$ 次元の反対称行列 a ($a_{ji} = -a_{ij}$; $1 \leq i, j \leq 2n$) に対して、パフイアンは $\text{Pf}[a] \equiv \frac{1}{2^n n!} \sum_{\sigma \in S_{2n}} \text{sgn}(\sigma) a_{\sigma_1 \sigma_2} a_{\sigma_3 \sigma_4} \cdots a_{\sigma_{2n-1} \sigma_{2n}}$ と定義される。ただし S_{2n} は $2n$ 次の置換からなる集合である。パフイアンと行列式の間には $\det[a] = \text{Pf}[a]^2$ という関係がある。

¹⁸ 一般に a が反対称行列のとき waw^T も反対称行列で、 $\text{Pf}[waw^T] = \det[w] \text{Pf}[a]$ 。

らは一般にミラーチャーン数 (mirror Chern number) と呼ばれる。時間反転対称性のもとでは $C = C^{(+)} + C^{(-)}$ は 0 でなければならないが、 $C^{(+)} = -C^{(-)}$ は任意の整数値を取り得る。この場合、 $C^{(\xi)}$ の偶奇は ν_{xy} と一致する。

鏡映対称性 M_z に加えて n 回回転対称性 C_{nz} も仮定すると、 $U_{\vec{k}}(C_{nz})$ は $U_{\vec{k}}(M_z)$ と交換し

$$U_{\vec{k}}(C_{nz}) = \begin{pmatrix} U_{\vec{k}}^{(+)}(C_{nz}) & 0 \\ 0 & U_{\vec{k}}^{(-)}(C_{nz}) \end{pmatrix} \quad (123)$$

とブロック対角化される。すると高対称波数における回転対称性の固有値を用いて $C^{(\xi)}$ を mod n で決定することができるため、 $X_{\text{BS}}^G = (\mathbb{Z}_n)^2$ となる。

特に鏡映対称性 M_z と時間反転対称性 T 、さらに 2 回回転対称性 C_{2z} がある場合は、 $I = M_z C_{2z}$ により

$$(-1)^{\nu_{xy}} = \prod_{\vec{k} \in K_{2D}} \zeta_{\vec{k}}^{(\xi)}(C_{2z}) = \prod_{\vec{k} \in K_{2D}} \zeta_{\vec{k}}^{(\xi)}(I) \quad (124)$$

となり、 $\xi = \pm$ のどちらか一つのセクターで計算した反転対称性の固有値の積が ν_{xy} を与える。これは鏡映対称性 M_z を仮定した場合の (125) 式に他ならない。

以上、2 次元の各種トポロジカル相と占有バンドが持つ小群の表現との関係について、Fu-Kane 公式などこれまで知られていた結果が対称性指標の方法に含まれていることを見てきた。これだけであれば既存の結果の焼き直しであるが、対称性指標の方法による一般的な取り扱いを通して初めて明らかになった新しいトポロジカル相もある。これについては次節で解説することにする。

4. 新しいトポロジカル相への応用

本節ではこれまで議論してきた対称性指標の方法を「高次トポロジカル絶縁体」や「脆弱なトポロジカル絶縁体」といった新しいトポロジカル相へと応用する。

4.1. 空間反転対称性を持つ 3 次元トポロジカル絶縁体

4.1.1. 空間反転対称性の固有値による分類

空間反転対称性と時間反転対称性を持つ三次元の電子系を考える。この対称性に対しては 3.1.5 節で議論した対称性指標 X_{BS}^G は $(\mathbb{Z}_2)^3 \times \mathbb{Z}_4$ となる。この結果の意味を理解するのが本節の目的である。

始めの 3 つの \mathbb{Z}_2 というファクターは 2 次元の \mathbb{Z}_2 トポロジカル絶縁体を 3 次元的に積層することで得られる弱いトポロジカル絶縁体 (weak topological insulator) を表す。具体的に議論するため、ここでも $\vec{a}_x = (a, 0, 0)$, $\vec{a}_y = (0, a, 0)$, $\vec{a}_z = (0, 0, a)$ とする。 $k_z = 0$ と $k_z = \pi$ の 2 次元面にそれぞれ (125) 式の Fu-Kane 公式

$$(-1)^{\nu_{xy}} = \prod_{\vec{k} \in K_{2D}} \zeta'_{\vec{k}}(I) \quad (125)$$

($\zeta'_{\vec{k}}(I)$ は各クラマース対から片方だけを選んでその I の固有値の積をとったもの) を適用すると、 z 軸方向に積層さ

れた弱いトポロジカル相では $\nu_{xy}^{(k_z=0)} = \nu_{xy}^{(k_z=\pi)} = +1 \bmod 2$ となる。同じことが x 軸、 y 軸にも成立する。

最後の \mathbb{Z}_4 というファクターは真に 3 次元的なトポロジーと関係する。これを理解するために

$$\kappa_1 \equiv \frac{1}{4} \sum_{\vec{k} \in K_{3D}} (n_{\vec{k}}^+ - n_{\vec{k}}^-) \bmod 4 \quad (126)$$

という量を導入しよう¹⁸⁾。ここで K_{3D} は 8 つの時間反転対称な波数の集合 (図 4(a) の立方体の頂点) を表す。これは占有バンドの持つ反転対称性の固有値の (積ではなく) 和を $1/4$ で割ったものである。これらの量を用いて、 $X_{\text{BS}}^G = (\mathbb{Z}_2)^3 \times \mathbb{Z}_4$ の元は一般に $(\nu_{yz}^{(k_x=0)}, \nu_{zx}^{(k_y=0)}, \nu_{xy}^{(k_z=0)}, \kappa_1)$ と書くことができる。

κ_1 の意味を探るために、まず次の関係式に注意する。

$$(-1)^{\kappa_1} = \prod_{\vec{k} \in K_{3D}} \zeta'_{\vec{k}}(I) = (-1)^{\nu_{xy}^{(k_z=0)}} (-1)^{\nu_{xy}^{(k_z=\pi)}} \quad (127)$$

仮に κ_1 が奇数であるとすると、 $k_z = 0$ と $k_z = \pi$ の二つの面での \mathbb{Z}_2 数 ν_{xy} が逆になるため、3 次元的に非自明な構造を持つトポロジカル相が実現できていることが分かる (図 4(b))。これは時間反転対称性によって守られた強いトポロジカル絶縁体 (strong topological insulator) であり、(127) 式はまさしく 3 次元版の Fu-Kane 公式である。しかし (126) 式の κ_1 は mod 4 で定義されるため、話はこれで終わりではない。以下に見るように、実は $(0, 0, 0, 2)$ に属する相は 1 次元的なギャップレス表面状態を有する高次トポロジカル絶縁体 (higher-order topological insulator) である¹⁸⁾。

トポロジカル絶縁体の例 空間反転対称性を持つ 3 次元 \mathbb{Z}_2 トポロジカル絶縁体の例として、次の 4 バンド模型を議論しよう。

$$H_{\vec{k}} = \sum_{I=x,y,z} \tau_x \sigma_I t \sin k_I a + \tau_z \sigma_0 t \left(m - \sum_{I=x,y,z} \cos k_I a \right). \quad (128)$$

この模型で空間反転対称性は $U_{\vec{k}}(I) = \tau_z \sigma_0$ 、時間反転対称性は $U(T) = -i \tau_0 \sigma_y$ と表現される。時間反転不变な波数 K_{3D} におけるフェルミ面以下 2 バンドの空間反転対称性の固有値を調べるには、最後の項の係数に着目すればよい。 $1 < m < 3$ のとき $m - \sum_{I=x,y,z} \cos k_I a$ は $\vec{k} = (0, 0, 0)$ の 1 点でのみ負となり、残りの 7 点で正となる (図 4(b))。一方 $3 < m$ では 8 つ全ての波数で正である (図 4(c))。したがって $(\nu_{yz}^{(k_x=0)}, \nu_{zx}^{(k_y=0)}, \nu_{xy}^{(k_z=0)}, \kappa_1)$ は $1 < m < 3$ のとき $(1, 1, 1, 3)$ 、 $3 < m$ のとき $(0, 0, 0, 0)$ となる。

4.1.2. トポロジカル絶縁体の表面状態

前節の例の $1 < m < 3$ の相と $3 < m$ の相の間の 2 次元界面に現れる表面状態を、3.3.3 節と同じ方法で解析しよう。いま法線ベクトルを \hat{n} とする平面を考え、 $\delta m_{x_n} = m - 3$ が $x_n \equiv \hat{n} \cdot \vec{x} = L$ の前後で $-m_0$ から $+m_0$ ($0 < m_0 < 2$)

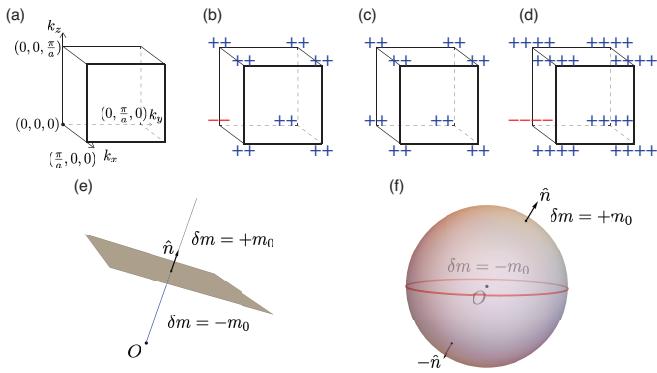


図 4 (a)–(d): 時間反転不变な波数と占有バンドの持つ反転対称性の固有値。(e): $1 < m < 3$ の相と $m > 3$ の相の界面。(f): 高次トポロジカル絶縁体の例。赤色の円がヘリカル端状態を表す。

へと変化するとする(図4(e))。 $\vec{k} = k_n \hat{n} + \vec{k}_{\parallel}$ について線型化されたハミルトニアンを \hat{n} 方向にのみ実空間に戻すと

$$H_{\hat{n}, \vec{k}_{\parallel}, x_n} = -ita\tau_x \vec{\sigma} \cdot \hat{n} \partial_{x_n} + ta\tau_x \vec{\sigma} \cdot \vec{k}_{\parallel} + \tau_z \sigma_0 t \delta m_{x_n} \quad (129)$$

となる。これにチャーン絶縁体のときと同様の解析を行うと

$$H_{\hat{n}, \vec{k}_{\parallel}}^{\text{eff}} = ta \vec{k}_{\parallel} \times \hat{n} \cdot \vec{\sigma} \quad (130)$$

という表面状態を記述する有効模型が得られる。この有効模型も時間反転対称性を保っており、 $U^{\text{eff}}(\mathcal{T}) = -i\sigma_y$ に対して

$$U^{\text{eff}}(\mathcal{T})(H_{\hat{n}, \vec{k}_{\parallel}}^{\text{eff}})^* = H_{-\hat{n}, -\vec{k}_{\parallel}}^{\text{eff}} U^{\text{eff}}(\mathcal{T}) \quad (131)$$

が成立する。この対称性のために質量項 $M_{\hat{n}} \hat{n} \cdot \vec{\sigma}$ を含めることは禁止されており、 $H_{\hat{n}, \vec{k}_{\parallel}}^{\text{eff}}$ は $\varepsilon_{\hat{n}, \vec{k}_{\parallel}} = \pm ta |\vec{k}_{\parallel}|$ というディラック型分散関係を持つギャップレス表面状態を記述する。

この表面有効模型は時間反転対称性だけでなく

$$H_{\hat{n}, \vec{k}_{\parallel}}^{\text{eff}} = H_{-\hat{n}, -\vec{k}_{\parallel}}^{\text{eff}} \quad (132)$$

を満たしていることに注意する。これは $+\hat{n}$ を法線とする表面と $-\hat{n}$ を法線とする表面が空間反転対称性で結びつくことを示している。各表面を個別にみると空間反転対称性は破れているが、図4(f)のように空間反転対称性を保つように有限系を切り出すと、表面全体としては空間反転対称性が保たれるのである。

4.1.3. $(0, 0, 0, 2)$ 相の表面状態

この $(1, 1, 1, 3)$ 相を「二つ重ねた」絶縁体を考えよう。より正確には、(128)式の $H_{\vec{k}}$ を2つ対角に並べて $H'_{\vec{k}} = H_{\vec{k}} \oplus H_{\vec{k}} = H_{\vec{k}} \otimes \lambda_0$ (λ も σ と同様にパウリ行列を表すとする) とし、占有バンドと非占有バンドの数をそれぞれ倍にする。すると占有バンドの反転対称性の固有値 ± 1 の数は単に倍となるため、 $(\nu_{yz}^{(k_x=0)}, \nu_{zx}^{(k_y=0)}, \nu_{xy}^{(k_z=0)}, \kappa_1) = (1, 1, 1, 3) + (1, 1, 1, 3) = (0, 0, 0, 2)$ となる(図4(d))。この状態の表面を記述する有効模型は $(H_{\hat{n}, \vec{k}_{\parallel}}^{\text{eff}})' = H_{\vec{k}}^{\text{eff}} \oplus H_{\vec{k}}^{\text{eff}} = ta \vec{k}_{\parallel} \times \hat{n} \cdot \vec{\sigma} \lambda_0$ で与えられる。

時間反転対称性に守られる強いトポロジカル絶縁体は \mathbb{Z}_2 で分類される。この事実は、 $H_{\hat{n}, \vec{k}_{\parallel}}^{\text{eff}}$ 単体には質量項を含めることはできないが、これを二つ重ねた $(H_{\hat{n}, \vec{k}_{\parallel}}^{\text{eff}})' = H_{\vec{k}}^{\text{eff}} \oplus H_{\vec{k}}^{\text{eff}}$ には質量項 $M_{\hat{n}} \hat{n} \cdot \vec{\sigma} \lambda_0$ を入れられることから理解できる。実際この項を含めても時間反転対称性 $U^{\text{eff}}(\mathcal{T})' = -i\sigma_y \lambda_0$ は破れないが、表面状態の分散関係には $\varepsilon_{\hat{n}, \vec{k}_{\parallel}} = \pm \sqrt{(ta |\vec{k}_{\parallel}|)^2 + M_{\hat{n}}^2}$ のようにギャップが開く。

しかし空間反転対称性を要求する場合は完全にギャップを開けることはできない。なぜなら (132) 式の関係を保つためには、質量項の係数が

$$M_{-\hat{n}} = -M_{\hat{n}} \quad (133)$$

を満たさなければならず、 $M_{\hat{n}}$ の値が正から負へと変化ところで必ず $M_{\hat{n}} = 0$ となる1次元的なドメインウォールが生ずるからである^{18, 19)}。このドメインウォールには2次元 \mathbb{Z}_2 トポロジカル絶縁体のように1次元のヘリカル端状態が現れる(図4(f)の赤円)。3次元バルクの表面に1次元的なギャップレス励起状態を持つため、これは高次トポロジカル絶縁体の例である。

4.1.4. 一様磁場下のトポロジカル絶縁体

3次元の高次トポロジカル絶縁体の例は、3次元の強いトポロジカル絶縁体に一様磁場をかけても作ることができる。時間反転対称性が破れれば(130)式の $H_{\hat{n}, \vec{k}_{\parallel}}^{\text{eff}}$ に質量項 $M_{\hat{n}} \hat{n} \cdot \vec{\sigma}$ を加えることができるが、空間反転対称性と整合するためにはやはり(133)式が満たされなければならない。この場合、 $M_{\hat{n}} = 0$ となる1次元的なドメインウォールには2次元チャーン絶縁体のようにカイラル端状態が現れる。実はこの3次元高次トポロジカル絶縁体は2次元チャーン絶縁体へと断熱接続できる²⁰⁾。

4.2. 2次元の脆弱なトポロジカル絶縁体

ここまで $X_{\text{BS}}^G = \{\text{BS}\}^G / \{\text{AI}\}^G$ の非自明な値に対応する絶縁体を考えてきた。これらのトポロジカル絶縁体はチャーン数や \mathbb{Z}_2 不变量という加法的なトポロジカル数を有していた。加法的なトポロジカル数は、定義により、原子極限の絶縁体と重ね合わせても値を変えない。

ここでは逆に、 X_{BS}^G で見ると自明だが

$$\vec{b} \notin \{\text{AI}\}_{\geq 0}^G \quad (134)$$

である既約表現の組み合わせ $\vec{b} \in \{\text{BS}\}_{\geq 0}^G$ を持つ絶縁体を考えよう。この場合、ある $\vec{a} \in \{\text{AI}\}_{\geq 0}^G$ が存在して

$$\vec{b} + \vec{a} \in \{\text{AI}\}_{\geq 0}^G \quad (135)$$

とならなければならない。(134)、(135)式によれば、この絶縁体それ自体は対応する原子極限が存在しないため必ず非自明なトポロジーを有するが、適当な原子極限の絶縁体

を重ね合わせるだけでトポロジカルに自明になる可能性がある。一般に、原子極限を組み合わせるだけで自明になってしまふトポロジカル絶縁体を「脆弱なトポロジカル絶縁体」と呼ぶ²⁰⁾。脆弱なトポロジカル絶縁体が持つ加法的なトポロジカル数は全て自明である。

例 空間反転対称性を持つ占有バンド数 $\nu = 2$ の 2 次元のバンド絶縁体を考えよう。いま時間反転対称波数 $K_{2D} = \{\Gamma, X, Y, M\}$ における占有バンドの反転対称性の固有値が、 $M = (\pi, \pi)$ では二つ共 -1、残りの 3 点では二つ共 +1 であるとしよう。すなわち

$$\vec{b} = (n_{\Gamma}^+, n_{\Gamma}^-, n_X^+, n_X^-, n_Y^+, n_Y^-, n_M^+, n_M^-) \\ = (2, 0, 2, 0, 2, 0, 0, 2) \in \{\text{BS}\}_{\geq 0}^G \quad (136)$$

仮に時間反転対称性もある場合には、Fu-Kane 公式 (125) によるとこの \vec{b} は 2 次元 \mathbb{Z}_2 トポロジカル絶縁体に対応していることが分かる。しかし今は時間反転対称性を仮定していないので、 \mathbb{Z}_2 不変量は定義できない。しかし実はこの \vec{b} については (134) 式が成立しており、空間反転対称性の仮定の元では如何なる原子極限にも結びつかない。この \vec{b} と一致する空間反転対称性の表現を持つ絶縁体の例は、カゴメ格子に純虚数の飛び移り積分を導入することで実現することができる^{10, 21)}。

ここに

$$\vec{a} = (1, 0, 0, 1, 0, 1, 1, 0) \in \{\text{AI}\}_{\geq 0}^G \quad (137)$$

を加えた $\vec{b} + \vec{a} = (3, 0, 2, 1, 2, 1, 1, 2)$ は $\{\text{AI}\}_{\geq 0}^G$ に属していることを示すことができる。文献¹⁰⁾ では、このカゴメ格子の模型の場合に、原子極限を加えた後の絶縁体では（表現の組み合わせが自明になるだけでなく）トポロジーが完全に自明になることをワニエ軌道をあらわに構成することを示した。つまり元の絶縁体は脆弱なトポロジカル絶縁体であったということである。また相互作用などが加わって空間反転対称性の固有値が波数空間に定義できなくなった場合でも、励起ギャップを閉じたり空間反転対称性を破ったりしない限りこの脆弱な絶縁体が安定に保たれることを示した。

5. 最後に

紙面の都合上、また現時点での準備時間の都合上、第 4 節が尻切れトンボになってしまったが、実際の講義までに空き時間を見つけて加筆することにしたい。

- 3) M. I. Aroyo 編 International Tables for Crystallography A: Space-group symmetry (2016).
- 4) R. Dijkgraaf and E. Witten, Comm. Math. Phys. 129, 393 (1990).
- 5) D. Vanderbilt, “Electric Polarization, Orbital Magnetization and Topological Insulators”, Cambridge University Press (2018); H. Watanabe and M. Oshikawa, Phys. Rev. X 8, 021065 (2018).
- 6) B. A. Bernevig, T. L. Hughes, “Topological Insulators and Topological Superconductors,” Princeton University Press (2013).
- 7) L. Michel, J. Zak, Phys. Rev. B 59, 5998 (1999); Eur. Phys. Lett. 50, 519 (2000); Phys. Rep. 341, 377 (2001).
- 8) H. Watanabe, H. C. Po, M. P. Zaletel, A. Vishwanath, Phys. Rev. Lett. 117, 096404 (2016).
- 9) H. C. Po, A. Vishwanath, and H. Watanabe, Nat. Commun. 8, 50 (2017), H. Watanabe, H. C. Po, and A. Vishwanath, Sci. Adv. 4, eaat8685 (2018).
- 10) H. C. Po, H. Watanabe, and A. Vishwanath, Phys. Rev. Lett. 121, 126402 (2018); D. Else, H. C. Po, H. Watanabe, Phys. Rev. B 99, 125122 (2019).
- 11) G. Ortiz and R. M. Martin, Phys. Rev. B 49, 14202 (1994), H. Watanabe and M. Oshikawa, Phys. Rev. X 8, 021065 (2018).
- 12) T. L. Hughes, E. Prodan, and B. A. Bernevig, Phys. Rev. B 83, 245132 (2011), A. M. Turner, Y. Zhang, R. S. K. Mong, and A. Vishwanath, Phys. Rev. B 85, 165120 (2012).
- 13) D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, Phys. Rev. Lett. 49, 405 (1982), M. Kohmoto, Ann. Phys. 160, 343 (1985).
- 14) C. Fang, M. J. Gilbert, and B. A. Bernevig, Phys. Rev. B 86, 115112 (2012).
- 15) A. Matsugatani, Y. Ishiguro, K. Shiozaki, and H. Watanabe, Phys. Rev. Lett. 120, 096601 (2018).
- 16) L. Fu and C. L. Kane, Phys. Rev. B 76, 045302 (2007).
- 17) 野村 健太郎, トポロジカル絶縁体・超伝導体 (現代理論物理学シリーズ) 丸善出版 (2016).
- 18) E. Khalaf, H. C. Po, A. Vishwanath, H. Watanabe, Phys. Rev. X 8, 031070 (2018).
- 19) C. Fang, L. Fu, arXiv:1709.01929.
- 20) A. Matsugatani, H. Watanabe, Phys. Rev. B 98, 205129 (2018).
- 21) A. Alexandradinata and J. Höller, Phys. Rev. B 98, 184305 (2018).

- 1) 犬井 鉄郎, 田辺 行人, 小野寺 嘉孝, 応用群論 – 群表現と物理学 (裳華房, 1980).
- 2) C. Bradley and A. Cracknell, The Mathematical Theory of Symmetry in Solids (Oxford University Press, 2010).