

# トポロジカル絶縁体・超伝導体の分類理論とトポロジカル結晶絶縁体への応用

森本 高裕、古崎 昭<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 理化学研究所  
(Dated: April 2, 2015)

トポロジカル絶縁体・超伝導体の分類理論について解説する。まずクリフォード代数を用いた分類理論について説明し、トポロジカル絶縁体・超伝導体の周期表の系統的な導出を与える。その後、結晶対称性のもとであらわれるトポロジカル相であるトポロジカル結晶絶縁体への、クリフォード代数を用いた分類理論の応用について述べる。

## I. はじめに

固体は原子が周期的にならんだ構造をもつ。ある固体が電気を通すか通さないかという基本的な性質は、固体中の電子の振る舞いによって決定される。固体中の電子は原子の周期構造からくる周期的なポテンシャル中を運動するため、ブロッホの定理により、エネルギーバンドによってその運動が記述される。フェルミエネルギーがエネルギーバンドをよぎれば小さな外場で電子を駆動することができるので金属となり、フェルミエネルギーがエネルギーギャップ中にあれば小さな外場で電子を駆動することができず絶縁体となる。

本稿では絶縁体を舞台としたトポロジカルな現象について取り扱う。バンド構造のために、各波数に対してブロッホ波動関数が指定されるわけだが、エネルギーギャップが存在すると価電子帯のブロッホ波動関数がブリルアンゾーン上で連続的に定義されるので、その幾何学的な構造を議論することができる。ブロッホ波動関数の非自明な幾何構造は局所的にはベリー接続やベリー曲率といった量で記述されるが、ブリルアンゾーン全体で大域的に非自明な幾何学的構造をもつ場合に、バンド絶縁体はトポロジカル絶縁体と呼ばれる。トポロジカル絶縁体は表面にギャップレスの伝導状態を伴うなど特異な物性を示す。

トポロジカルな絶縁体の例としては、古くは量子ホール効果が知られている。2次元系のホール伝導度はブロッホ波動関数のねじれをあらわすチャーン数(整数)に $e^2/h$ をかけたものに等しくなり、チャーン数が非自明な量子ホール状態では系の境界にカイラルなエッジ状態があらわれる[1]。時間反転対称性をもつ2次元系ではチャーン数はゼロになることが知られているが、時間反転操作で波数 $k$ のブロッホ波動関数と波数 $-k$ のブロッホ波動関数が対応づけられるため、チャーン数に代わって $\mathbb{Z}_2$ トポロジカル数という量でブロッホ波動関数の大域的な幾何構造を特徴づけることができる。 $\mathbb{Z}_2$ トポロジカル数が非自明であるものは $\mathbb{Z}_2$ トポロジカル絶縁体として知られ、系の境界にヘリカルなエッジ状態があらわれる[2, 3]。 $\mathbb{Z}_2$ トポロジカル絶縁体がHgTeで実現しているという理論的提案が、実験的に確かめられた[4, 5]。さらに3次元物質においても同様に $\mathbb{Z}_2$ トポロジカル数によって特徴付けられる絶縁体が発見された。これらトポロジカル絶縁体の登場以降、物質のトポロジカルな性質が盛んに研究されている。また準粒子スペクトルにギャップの開いた超伝導体もBogoliubov-deGennes (BdG) 方程式のレベルでは絶縁体の一種と考えられるため、同様にトポロジカルな超伝導状態について議論することができる。特に超伝導体では表面のギャップレス状態がマヨラナフェルミオンになりうるので、マヨラナフェルミオンの物性における実現という観点で精力的に研究がなさ

れている。

系の対称性のもとでどのような種類のトポロジカル絶縁体・超伝導体であらわれるかは重要な問題だ。相互作用のないフェルミオン系はハミルトニアンのもつ対称性によって、10の対称類に分類されることが知られている[6]。各次元で、10の対称類のうち5つの対称類で非自明なトポロジカル絶縁体もしくは超伝導体を実現しうる。このトポロジカル絶縁体の分類理論は、表面状態の局在問題に着目した非線形シグマ模型による解析、ディラックハミルトニアンによる解析、K理論による解析など複数の方法によって得られている[7-9]。これらのうちKitaevによるK理論を用いたトポロジカル絶縁体の分類理論はエレガントで、系統的に結果を得ることが可能である。トポロジカル絶縁体の分類理論により、我々は様々なトポロジカル相について系のもつ対称性の観点から包括的に理解することが可能になった。本稿では、K理論に基づいたトポロジカルな分類理論について解説する。

固体中の原子は様々な結晶対称性をもつ。結晶対称操作はブリルアンゾーン内の異なる波数に対応するブロッホ波動関数を結びつけるため、結晶対称性のもとでは新しいタイプのブロッホ波動関数の大域的な構造を定義できる場合がある。このような物質はトポロジカル結晶絶縁体・超伝導体とよばれる。鏡映対称性と時間反転対称性をもつ3次元系では非自明なトポロジカル結晶絶縁体であらわれ、SnTeにおいて実現していることが理論的に提案され[10]、実際に実験的にトポロジカル結晶絶縁体の存在が観測された[11-13]。これ以降、鏡映対称性のもとであらわれるトポロジカル結晶絶縁体・超伝導体についてはよく理解されるようになってきた[14-17]。本稿ではK理論による分類理論のトポロジカル結晶絶縁体への応用についても解説する。鏡映対称性を考慮したトポロジカル結晶絶縁体・超伝導体の分類理論は、まだ現実には知られていない多くの非自明なトポロジカル物質の存在を予言しており、今後の実験研究に対称性の観点から指針をあたえるものと考えられる。

## II. トポロジカル絶縁体・超伝導体の例とディラックハミルトニアン

バンド絶縁体で、系の対称性を保ちバンドギャップを開けたままで、互いに連続変形できないものを異なるトポロジカル相に属するといひ、とくに真空のような自明な絶縁体に連続変形できないものをトポロジカル絶縁体と呼ぶ。トポロジカル絶縁体・超伝導体の相転移点近傍の低エネルギー有効理論は、ディラックハミルトニアンで書き表すことができる。たとえば、2次元の量子スピンホール絶縁体

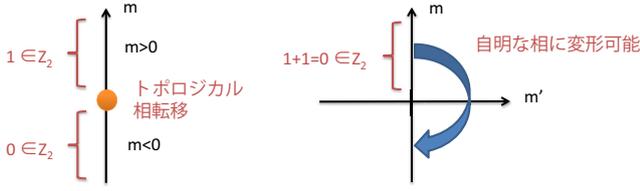


FIG. 1.  $\mathbb{Z}_2$  トポロジカル相のディラック質量項による理解。非自明な相のコピーを二つあわせて考えると、自明な相に連続変形することができる。

HgTe は Bernevig-Hughes-Zhang 模型と呼ばれる

$$H_{\text{BHZ}}(\mathbf{k}) = k_x \sigma_x \tau_z + k_y \sigma_y + m \sigma_z, \quad (1)$$

というディラックハミルトニアンで記述される [4]。ここで  $k_x, k_y$  は波数、 $\sigma, \tau$  はスピン、軌道に作用するパウリ行列である。このハミルトニアンは

$$T H_{\text{BHZ}}(-\mathbf{k}) T^{-1} = H_{\text{BHZ}}(\mathbf{k}), \quad T = i \sigma_y \mathcal{K}, \quad (2)$$

を満たし、時間反転対称である。ここで  $T$  は時間反転演算子で、 $\mathcal{K}$  は複素共役演算子である。時間反転  $T$  のもとで許される、運動項と反交換するディラック質量項は  $m \sigma_z$  に限られる。このとき、 $m$  の正負によって、基底状態は異なるトポロジカル相に属する。実際、 $m$  の符号を変えようとするとき必ず  $m = 0$  を通り系がギャップレスになってしまう (図 1 左)。

時間反転対称性のもとであられる 2次元のスピンホール絶縁体は  $\mathbb{Z}_2$  トポロジカル数で特徴づけられる。これは先ほどのディラックハミルトニアンを二つあわせたもの  $H_{\text{BHZ}} \otimes \rho_0$  を考えることにより理解できる。ここで  $\rho_0$  は二つのコピーの自由度の上に作用する単位行列であり、 $\rho_{x,y,z}$  をパウリ行列とする。  $H_{\text{BHZ}} \otimes \rho_0$  で考えると、もとの質量項  $m \sigma_z$  と反交換する新しいディラック質量項  $m' \sigma_x \tau_x \rho_y$  をみつけることができる。このため、ランクを二倍にしたハミルトニアン

$$\tilde{H}_{\text{BHZ}} = (k_x \sigma_x \tau_z + k_y \sigma_y + m \sigma_z) \otimes \rho_0 + m' \sigma_x \tau_x \rho_y, \quad (3)$$

においては、 $m > 0, m' = 0$  の基底状態と  $m < 0, m' = 0$  の基底状態は、質量項の 2次元空間  $(m, m')$  で 180 度回転をすることにより、ギャップを閉じることなく連続的に変形することができる、同じ相に属することになる (図 1 右)。4行4列のハミルトニアン  $H_{\text{BHZ}}$  では、 $m$  の正負が異なるトポロジカル相があらわれたが、二つコピーをもってきて  $\tilde{H}_{\text{BHZ}}$  を考えると互いに連続的に変形することができる。これは  $1 + 1 = 0$  に対応し、 $\mathbb{Z}_2$  トポロジカル数でスピンホール絶縁体が特徴づけられることを意味する。

トポロジカルな絶縁相は超伝導体にもあらわれる。BdG 方程式のレベルでは、バンド絶縁体と同じように取り扱うことができるからだ。トポロジカルな超伝導体の代表例としてはスピンレスの  $p + ip$  超伝導体あげられる。その低エネルギー BdG ハミルトニアンは

$$H_{p+ip}(\mathbf{k}) = k_x \sigma_x + k_y \sigma_y + m \sigma_z, \quad (4)$$

で与えられる。ここで  $\sigma$  は粒子・正孔の自由度に作用するパウリ行列である。例えば、 $\nu = \frac{5}{2}$  分数量子ホール系の

基底状態の有力候補として Moore-Read 状態が知られている。Moore-Read 状態は単位磁束 2つをまとった複合フェルミオンがスピンレス  $p + ip$  超伝導体になっている状態である [18, 19]。

この BdG ハミルトニアンは粒子正孔変換  $C = \sigma_x \mathcal{K}$  のもとで

$$C H_{p+ip}(-\mathbf{k}) C^{-1} = -H_{p+ip}(\mathbf{k}) \quad (5)$$

をみたし、粒子正孔対称性をもつ。先ほどの例と同様に運動項と反交換する質量項は  $m \sigma_z$  しかないため、 $m$  の正負によって、基底状態は異なるトポロジカル相に属することになる。

粒子正孔対称性をもつ 2次元の  $p + ip$  超伝導体は整数の  $\mathbb{Z}$  トポロジカル数で特徴づけられる。これもハミルトニアンのランクを 2倍にして  $H_{p+ip} \otimes \rho_0$  を考えることで理解できる。つまり  $H_{p+ip} \otimes \rho_0$  に対して、 $C = \sigma_x \otimes \rho_0 \mathcal{K}$  及びもとの質量項  $m \sigma_z \otimes \rho_0$  と反交換するような新しい質量項を見つけることはできない。このため  $m > 0$  のときと  $m < 0$  のときの基底状態は  $H_{p+ip} \otimes \rho_0$  でも異なるトポロジカル相に属する。これはまさに  $1 + 1 = 2$  に対応し、 $\mathbb{Z}$  トポロジカル数で  $p + ip$  超伝導体が特徴づけられることを意味する。

このようにトポロジカル相の分類は有効ディラックハミルトニアンの質量項の構造を調べることで理解できる。以下では、この操作をクリフォード代数と K 理論という道具立てを用いて様々な対称性のもとで系統的に行い、トポロジカル絶縁体・超伝導体の分類理論について解説していく。

### III. トポロジカル絶縁体・超伝導体の分類理論

この章ではまず、相互作用のないフェルミオン系を系のもつ対称性の観点から分類する 10 の Altland-Zirnbauer (AZ) 対称類について説明する。その次に、クリフォード代数を用いたトポロジカル絶縁体・超伝導体の分類理論について説明する。

#### A. 10 の Altland-Zirnbauer 対称類

相互作用のないフェルミオン系は、第二量子化でのハミルトニアンが  $\mathcal{H} = \sum_{i,j} c_i^\dagger H_{i,j} c_j$  と書けるために、ハミルトニアン行列  $H$  によって記述される。Altland-Zirnbauer (AZ) 対称類は系のもつ対称性に基づいて、ハミルトニアン行列  $H$  の属する空間を決定する。ユニタリーな対称性が存在し、 $H$  と交換するユニタリー行列が存在する場合には  $H$  をブロック対角化し、そのブロック一つを  $H$  と考えることにする。つまり  $H$  と交換する行列はないと仮定することと同等である。その上でハミルトニアン行列  $H$  は離散的な反ユニタリー対称性とカイラル対称性をもつことが許され、その存在・不在に対応して 10 の対称類に分類されることを、Altland と Zirnbauer は見いだした。つまり波数  $k$  の関数としてのブロックハミルトニアン  $H(\mathbf{k})$  に、時間反転対称性  $T$ 、電子正孔対称性  $C$ 、カイラル対

TABLE I. 10 の Altland-Zirnbauer (AZ) 対称類と対応する分類空間の 0 次のホモトピー群によるトポロジカルな分類。2つの複素対称類と 8つの実対称類はそれぞれ時間反転対称性 ( $T$ ), 電子正孔対称性 ( $C$ ), およびカイラル対称性 ( $\Gamma$ ) の有無によって特徴づけられる。いずれかの対称性が存在する場合には  $T^2 = \pm 1$  もしくは  $C^2 = \pm 1$  を示し、 $\Gamma$  については 1 と示した。存在しない場合は 0 と示した。それぞれの対称類について  $d$  次元の場合に対応する拡大問題とそれから得られる分類空間  $V_d$  (表 II) を示す。0 次のホモトピー群を  $d = 0, \dots, 7$  について示す。分類空間の非自明なホモトピー群はトポロジカル絶縁体・超伝導体に対応する。

対称類	$T$	$C$	$\Gamma$	拡大問題	$V_d$	$\pi_0(V_{d=0})$	$\pi_0(V_{d=1})$	$\pi_0(V_{d=2})$	$\pi_0(V_{d=3})$	$\pi_0(V_{d=4})$	$\pi_0(V_{d=5})$	$\pi_0(V_{d=6})$	$\pi_0(V_{d=7})$
A	0	0	0	$Cl_d \rightarrow Cl_{d+1}$	$C_{0+d}$	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0
AIII	0	0	1	$Cl_{d+1} \rightarrow Cl_{d+2}$	$C_{1+d}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$
AI	+1	0	0	$Cl_{0,d+2} \rightarrow Cl_{1,d+2}$	$R_{0-d}$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$
BDI	+1	+1	1	$Cl_{d+1,2} \rightarrow Cl_{d+1,3}$	$R_{1-d}$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$
D	0	+1	0	$Cl_{d,2} \rightarrow Cl_{d,3}$	$R_{2-d}$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$\mathbb{Z}$	0
DIII	-1	+1	1	$Cl_{d,3} \rightarrow Cl_{d,4}$	$R_{3-d}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$\mathbb{Z}$
AII	-1	0	0	$Cl_{2,d} \rightarrow Cl_{3,d}$	$R_{4-d}$	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0
CII	-1	-1	1	$Cl_{d+3,0} \rightarrow Cl_{d+3,1}$	$R_{5-d}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0
C	0	-1	0	$Cl_{d+2,0} \rightarrow Cl_{d+2,1}$	$R_{6-d}$	0	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0
CI	+1	-1	1	$Cl_{d+2,1} \rightarrow Cl_{d+2,2}$	$R_{7-d}$	0	0	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$

称性  $\Gamma$ ,

$$TH(-\mathbf{k})T^{-1} = H(\mathbf{k}), \quad (6a)$$

$$CH(-\mathbf{k})C^{-1} = -H(\mathbf{k}), \quad (6b)$$

$$\Gamma H(\mathbf{k})\Gamma^{-1} = -H(\mathbf{k}), \quad (6c)$$

が存在するかしないかによって、その属する位相空間のタイプが決まる。ハミルトニアン  $H$  が時間反転対称性も電子正孔対称性ももたないときは複素対称類に属するという (表 I)。カイラル対称性  $\Gamma$  がないときに class A、カイラル対称性があるときは class AIII と呼ぶ。

時間反転対称性と電子正孔対称性を表す演算子  $T$  と  $C$  は複素共役を含む反ユニタリ演算子で、二乗すると +1 か -1 になる (1 は恒等演算子を意味する)。この符号は複素共役のために位相のとりかえで消せない。 $T$  もしくは  $C$  が存在するとき  $H$  は実対称類に属するという。 $T^2$  と  $C^2$  の符号によって 8 つの異なる実対称類が存在する (表 I)。また  $T$  と  $C$  が両方存在する場合は  $\Gamma = TC$  とすることでカイラル対称性も存在することがわかる。

## B. クリフォード代数とその拡大問題

トポロジカル絶縁体・超伝導体の分類をクリフォード代数を用いて導出しよう。クリフォード代数は以下のように、互いに反交換する生成子たちのなす代数である。

複素クリフォード代数  $Cl_n$  は

$$\{e_i, e_j\} = 2\delta_{i,j} \quad (7)$$

をみたす  $n$  個の生成子  $e_i$  をもつ。 $Cl_n$  は和に関しては  $e_1^{p_1} e_2^{p_2} \dots e_n^{p_n}$  ( $p_i = 0, 1$ ) の線形結合の生成する  $2^n$  次元複素ベクトル空間となる。

実クリフォード代数  $Cl_{p,q}$  は

$$\{e_i, e_j\} = 0 \quad (i \neq j),$$

$$e_i^2 = \begin{cases} -1, & 1 \leq i \leq p, \\ +1, & p+1 \leq i \leq p+q, \end{cases} \quad (8)$$

をみたす  $p+q$  個の生成子  $e_i$  をもつ。複素ベクトル空間のときと同様に、 $Cl_{p,q}$  は和に関しては  $2^{p+q}$  次元の実ベクトル空間をなす。

トポロジカル絶縁体・超伝導体を分類することは、ギャップをもつハミルトニアン行列を分類することに他ならない。Kitaev はこれが K 理論によって得られることを示した [9]。この議論では、一般のハミルトニアン行列のなす位相空間を、クリフォード代数の拡大問題を考えることを通じて分類空間とよばれる位相空間として同定する。以下では簡単のために、一般のハミルトニアン行列ではなくディラックハミルトニアンを考えることにする。この場合運動項を固定して考えると、トポロジカル絶縁体の分類はディラック質量項の分類に簡単化される。一般のギャップをもつハミルトニアンの取り扱い Ref. [9, 16] を参照していただきたい。

$d$  次元のディラックハミルトニアン

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^d k_i \alpha_i + m \beta, \quad (9a)$$

を考える。ここで  $\mathbf{k} \equiv (k_1, \dots, k_d) \in \mathbb{R}^d$  は波数、 $\boldsymbol{\alpha} \equiv (\alpha_1, \dots, \alpha_d)$  はガンマ行列で

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{i,j}, \quad i, j = 1, \dots, d. \quad (9b)$$

を満たす。また  $m\beta$  はディラック質量項で

$$\{\beta, \alpha_i\} = 0, \quad \beta^2 = 1. \quad (9c)$$

を満たし、ギャップの大きさを表す係数は  $m > 0$  ととることにする。それぞれの AZ 対称類において  $T, C, \Gamma$  のいづ

れかの対称性が存在する場合には、式 (6) から運動項、質量項は

$$\text{TRS: } [T, \beta] = \{T, \alpha\} = 0, \quad (10a)$$

$$\text{PHS: } \{C, \beta\} = [C, \alpha] = 0, \quad (10b)$$

$$\text{CHS: } \{\Gamma, \beta\} = [\Gamma, \alpha] = 0, \quad (10c)$$

をみたさなければならない。特に  $T$  と  $C$  は反ユニタリー性のために運動項と質量項で交換、反交換が逆になる。また  $T, C, \Gamma$  は、

$$T^2 = \pm 1, \quad C^2 = \pm 1, \quad [T, C] = 0, \quad \Gamma^2 = 1, \quad (11a)$$

という関係を互いに満たすようにとることができる。

### C. ディラック行列のなすクリフォード代数

ここでクリフォード代数の出番である。それを用いる利点は、互いに反交換するディラック行列と対称性の演算子を同じレベルで系統的に取り扱い、ディラック行列と対称性の満たすべき代数関係 [式 (9)、式 (10)] を簡潔に記述できる点にある。それぞれの AZ 対称類に属する  $d$  次元のディラックハミルトニアンに対して、以下のようにクリフォード代数を構成することができる。

まず対称類 A と AIII に対しては複素クリフォード代数を

$$\text{A: } Cl_{d+1} = \{\beta, \alpha\}, \quad (12a)$$

$$\text{AIII: } Cl_{d+2} = \{\beta, \Gamma, \alpha\}, \quad (12b)$$

のように運動項、質量項、 $\Gamma$  から構成する。ここで、 $Cl_n = \{e_1, \dots, e_n\}$  という表記を用いた。

他の 8 つの対称類は反ユニタリーな  $T$  か  $C$  を含むので、虚数単位  $i$  との代数関係を記述するために、虚数単位を代数的に表す  $J$  という演算子を導入する。すると  $J$  は

$$\{T, J\} = \{C, J\} = [\Gamma, J] = [\alpha, J] = [\beta, J] = 0, \quad (13)$$

を満たし、実クリフォード代数の中で虚数単位  $J^2 = -1$  の役割を果たすと考える。こうすると対称類 AI, BDI, D, DIII, AII, CII, C, および CI に対して実クリフォード代数を [16]

$$\text{AI: } Cl_{1,d+2} = \{J\beta; T, T J, \alpha\}, \quad (14a)$$

$$\text{BDI: } Cl_{d+1,3} = \{J\alpha, T C J; C, C J, \beta\}, \quad (14b)$$

$$\text{D: } Cl_{d,3} = \{J\alpha; C, C J, \beta\}, \quad (14c)$$

$$\text{DIII: } Cl_{d,4} = \{J\alpha; C, C J, T C J, \beta\}, \quad (14d)$$

$$\text{AII: } Cl_{3,d} = \{J\beta, T, T J; \alpha\}, \quad (14e)$$

$$\text{CII: } Cl_{d+3,1} = \{J\alpha, C, C J, T C J; \beta\}, \quad (14f)$$

$$\text{C: } Cl_{d+2,1} = \{J\alpha, C, C J; \beta\}, \quad (14g)$$

$$\text{CI: } Cl_{d+2,2} = \{J\alpha, C, C J; T C J, \beta\}, \quad (14h)$$

と運動項、質量項、対称性の演算子から構成することができる。ここで、 $Cl_{p,q} = \{e_1, \dots, e_p; e_{p+1}, \dots, e_{p+q}\}$  という表記を用いた。

TABLE II. クリフォード代数と分類空間。二列目は各クリフォード代数と同型な行列代数。最後の列は各分類空間の 0 次のホモトピー群を示す。

(a) 複素対称類			
$q$	$Cl_q$	$C_q$	$\pi_0(C_q)$
0	$\mathbb{C}$	$(U(n+m)/U(n) \times U(m)) \times \mathbb{Z}$	$\mathbb{Z}$
1	$\mathbb{C} \oplus \mathbb{C}$	$U(n)$	0

### (b) 実対称類

$q$	$Cl_{0,q}$	$R_q$	$\pi_0(R_q)$
0	$\mathbb{R}$	$(O(n+m)/O(n) \times O(m)) \times \mathbb{Z}$	$\mathbb{Z}$
1	$\mathbb{R} \oplus \mathbb{R}$	$O(n)$	$\mathbb{Z}_2$
2	$\mathbb{R}(2)$	$O(2n)/U(n)$	$\mathbb{Z}_2$
3	$\mathbb{C}(2)$	$U(2n)/Sp(n)$	0
4	$\mathbb{H}(2)$	$(Sp(n+m)/Sp(n) \times Sp(m)) \times \mathbb{Z}$	$\mathbb{Z}$
5	$\mathbb{H}(2) \oplus \mathbb{H}(2)$	$Sp(n)$	0
6	$\mathbb{H}(4)$	$Sp(n)/U(n)$	0
7	$\mathbb{C}(8)$	$U(n)/O(n)$	0

### D. ディラック質量項のなす分類空間とその例

分類空間とトポロジカル数の関係について直感的な理解を得るために、ここではいくつかのディラックハミルトニアンを例にとって、分類空間 (=質量項  $\beta$  のなす空間) を具体的に構成してみよう (表 II)。

はじめに対称類 A に属する二次元系を考える。これは量子ホール系に対応するモデルで、 $2N$  行  $2N$  列のハミルトニアン行列

$$H_{2D} = k_x \sigma_x \otimes 1_N + k_y \sigma_y \otimes 1_N + \beta \quad (15)$$

を考えよう。 $1_N$  は  $N$  行  $N$  列の単位行列である。ここでギャップの大きさは  $m = 1$  に連続的に変形した後の状況を考える。(この操作で系のトポロジカルな性質は変わらない。)  $\beta$  は運動項と反交換するので、

$$\beta = \sigma_z \otimes A \quad (16)$$

という形をとる。 $A$  は  $N \times N$  のエルミート行列で二乗すると  $1_N$  になる。つまり  $\beta$  の形を決めるということは  $A$  の形をきめることだが、これはユニタリ行列  $U$  を用いて対角化すると

$$A = U I_{n,m} U^\dagger, \quad I_{n,m} = \begin{pmatrix} 1_n & 0 \\ 0 & -1_m \end{pmatrix}, \quad (17)$$

とかける。 $I_{n,m}$  は対角行列で固有値  $+1$  と  $-1$  がそれぞれ  $n$  個、 $m$  個ずつあらわれ、 $N = n + m$  となるものとする。 $n, m$  の値をきめると、 $U$  をユニタリ行列群  $U(N)$  から一つ選ぶことによって  $A$  が決まる。しかし、ここで同じ  $A$  を与える  $U$  の取り方が複数ある。固有値  $\pm 1$  に対応する固有空間の基底の選び方はそれぞれ  $U(n), U(m)$  の自由度をもつため、結局、 $n$  と  $m$  を固定したとき、 $A$  は複素グ

ラスマニアン  $U(n+m)/[U(n) \times U(m)]$  に属している。分類空間全体は異なる  $n$  について  $U(n+m)/[U(n) \times U(m)]$  の和をとったもので与えられる。ここで  $N$  が十分大きい場合を考えると、個々の複素グラスマン多様体はほぼ等しいものとなるので、この極限において分類空間は

$$\{U(n+m)/[U(n) \times U(m)]\} \times \mathbb{Z} \quad (18)$$

と書くことができ、これはまさに表 II の  $C_0$  と一致する。それぞれの複素グラスマン多様体は連結なので、分類空間の非連結成分 (断熱変形で移り変わらない異なるトポロジカル相) は行列  $A$  の +1 固有値の数  $n$  でラベルされる。実際に、次のような正則化のもとで  $n$  は 2 次元系のチャーン数と一致する。ディラックハミルトニアンに、小さな正の係数  $C$  をもちいて  $k^2$  に比例する質量項を  $H_{2D} - Ck^2\sigma_z \otimes 1_N$  のように加えて正則化する (大きなギャップのあいたディラックコーンを  $k = \infty$  にもつてくることによって、Nielsen-Ninomiya の定理を回避し、格子模型でも実現できるようにする)。簡単のために  $A = I_{n,m}$  とすると、ハミルトニアンは  $2 \times 2$  行列を  $N$  個直和した形

$$H_{2D} = \bigoplus_{i=1}^N H_i \quad (19)$$

$$H_i = k_x\sigma_x + k_y\sigma_y + (\epsilon_i - Ck^2)\sigma_z, \quad (20)$$

に書くことができる。ここで、 $1 \leq i \leq n$  に対しては  $\epsilon_i = +1$ 、 $n+1 \leq i \leq N$  に対しては  $\epsilon_i = -1$  とする。 $H_i$  に対してチャーン数 (ベリー曲率のブリルアンゾーン上の積分で与えられる不変量) を計算すると、 $\epsilon_i = +1$  の時は +1 に、 $\epsilon_i = -1$  の時は 0 になり、結局全チャーン数は  $n$  に一致する。

次に、対称類 A に属する一次元系を考えてみよう。先ほどと同様に  $2N$  行  $2N$  列のハミルトニアン

$$H_{1D} = k_x\sigma_x \otimes 1_N + \beta \quad (21)$$

を考え、ディラック質量項  $\beta$  は、 $\sigma_z$  と反交換し 2 乗すると  $1_{2N}$  になるエルミート行列だとする。そのような  $\beta$  は  $N$  行  $N$  列のユニタリ行列  $U$  を用いて

$$\beta = \begin{pmatrix} 0 & U \\ U^\dagger & 0 \end{pmatrix} \quad (22)$$

と書き表すことができる。ユニタリ行列  $U$  を一つ選ぶことによって質量項  $\beta$  が決まるので、表 II にある通り、分類空間  $C_1$  はユニタリ行列群  $U(N)$  で与えられる。ユニタリ行列群  $U(N)$  は連結なので、二つの異なるディラックハミルトニアンの間を常に連続変形で行き来することができる。つまりトポロジカルに自明な一つの相しか存在しない。このことは、上の行列のランクが一番小さい 2 行 2 列のディラック模型において、

$$H_{1D} = k_x\sigma_x + m_1\sigma_x + m_2\sigma_y \quad (23)$$

となるように、二つの互いに反交換する質量項が存在することに由来する。前の例 [式 (20)] のようにただ一つの質量項 ( $m_0\sigma_z$ ) しかない場合には、この質量項の符号の異なる二つの状態は、互いに移り変わるためにはギャップレス点  $m_0 = 0$  を通らなければならないために、トポロジカルに異なる相に属する。一方で、今の例のように二つの質量項 ( $m_1$

及び  $m_2$ ) が存在する場合には、 $(m_1, m_2) = (\pm 1, 0)$  の二つの質量項をもつ状態は質量項のなす 2 次元空間  $(m_1, m_2)$  中の回転を行うことによってギャップレス点を通ることなく連続的に変形することが可能である。この 2 次元空間中の回転の自由度は、まさに  $N = 1$  としたときの  $U(1)$  に対応する。

#### E. 10 の AZ 対称類に対するクリフォード代数を用いた分類の手順

10 の AZ 対称類に対して、クリフォード代数を用いてどのようにトポロジカル絶縁体・超伝導体の分類を行うかその手順をみてみよう。トポロジカル絶縁体・超伝導体は質量項をもつディラックハミルトニアンで表現されるということをもとに仮定する。次に、運動項のディラック行列を固定すると、ディラックハミルトニアンの分類論はディラック質量項の分類をおこなえばよいことになる。さらに系にギャップが存在するので、ディラック質量項の固有値はノンゼロであるが、固有値の連続変形を行って  $\pm 1$  のいずれかの固有値しかもたないようにしてやることができる。つまり与えられた次元  $d$ 、系の対称性のもとで許される、二乗すると 1 になるようなディラック行列  $\beta$  のなす空間  $V$  のなかの点がそれぞれトポロジカル絶縁体・超伝導体を表す。このディラック行列全体のなす空間  $V$  を分類空間と呼ぶ。前節でみたように分類空間  $V$  の連結性は最小ランクのディラック模型において、式 (9) にあらわれる質量ディラック行列  $\beta$  がただ一つか複数あるかという性質と密接に関係している。分類空間  $V$  はクリフォード代数を使って以下のように系統的に求めることができる。

**ステップ 1:** それぞれの AZ 対称類に対して、対称性の演算子とディラック行列のなすクリフォード代数を考える (式 12,14)。このクリフォード代数から質量ディラック行列を含む生成子を取り除いたクリフォード代数

$$\text{A:} \quad Cl_d = \{\alpha\}, \quad (24a)$$

$$\text{AIII:} \quad Cl_{d+1} = \{\Gamma, \alpha\}, \quad (24b)$$

および

$$\text{AI:} \quad Cl_{0,d+2} = \{; T, T J, \alpha\}, \quad (25a)$$

$$\text{BDI:} \quad Cl_{d+1,2} = \{J\alpha, T C J; C, C J\}, \quad (25b)$$

$$\text{D:} \quad Cl_{d,2} = \{J\alpha; C, C J\}, \quad (25c)$$

$$\text{DIII:} \quad Cl_{d,3} = \{J\alpha; C, C J, T C J\}, \quad (25d)$$

$$\text{AII:} \quad Cl_{2,d} = \{T, T J; \alpha\}, \quad (25e)$$

$$\text{CII:} \quad Cl_{d+3,0} = \{J\alpha, C, C J, T C J\}, \quad (25f)$$

$$\text{C:} \quad Cl_{d+2,0} = \{J\alpha, C, C J\}, \quad (25g)$$

$$\text{CI:} \quad Cl_{d+2,1} = \{J\alpha, C, C J; T C J\}. \quad (25h)$$

を考える。それぞれの AZ 対称類について、上に示した質量項を含まないクリフォード代数を、質量項を含む生成子 (AI, AII では  $J\beta$ 、そのほかでは  $\beta$ ) を加えて「拡大」することを考える。具体的にはクリフォード代数 (24)(25) の行列表現を与えたときに、クリフォード代数をなすように追加できる新しい生成子 (対称類 AI, AII では  $J\beta$ 、それ以外では  $\beta$ ) の行列表現を探す。10 の対称類について、このクリフォード代数の拡大問題を表 I の 5 列目に示した。

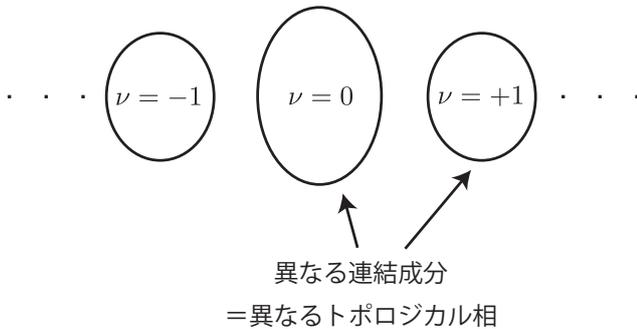


FIG. 2. 分類空間の概念図。分類空間は系の対称性のもとで許されるディラック質量項のなす空間である。

ステップ 2: 次にクリフォード代数の拡大を実現するような新しい生成子の可能な行列表現となりうるものをすべて列挙することを考える。新しい生成子の可能な行列表現全体がなす空間が「分類空間」 $V$ である。この分類空間 $V$ は、結局与えられた対称性のもとで不変で、運動項と反交換するようなディラック質量項たちのなす空間に他ならない(図3)。実は、クリフォード代数の拡大問題から得られる分類空間 $V$ はK理論とよばれる代数的位相幾何学においてすでに知られている[9, 20]。複素クリフォード代数の拡大問題 $Cl_q \rightarrow Cl_{q+1}$ に対して分類空間 $C_q$ が対応し、実クリフォード代数の拡大問題 $Cl_{p,q} \rightarrow Cl_{p,q+1}$ に対して分類空間 $R_{q-p}$ が対応する。すなわち

$$Cl_q \rightarrow Cl_{q+1} : C_q, \quad (26)$$

$$Cl_{p,q} \rightarrow Cl_{p,q+1} : R_{q-p}, \quad (27)$$

という対応関係である。分類空間 $C_q, R_q$ の具体的な形は表IIに示す。対称類AI,AIIであらわれる $Cl_{p,q} \rightarrow Cl_{p+1,q}$ という拡大問題に対しては、新しい生成子の行列表現の種類を変えない $2 \times 2$ の行列代数 $Cl_{0,2} \simeq \mathbb{R}(2)$ とのテンソル積をとっても分類空間は変わらない(森田同値)ので、環同型 $Cl_{p,q} \otimes Cl_{0,2} \simeq Cl_{p,q+2}$ を用いることで上の形に帰着できる。複素分類空間は周期2、実分類空間は周期8のボット周期性をもち、

$$C_{q+2} \simeq C_q, \quad R_{q+8} \simeq R_q, \quad (28)$$

が成立する。

各対称類に対応する分類空間を表Iの6列目に示す。

今のように $d$ 次元空間の運動項と対称性を表す演算子の表現を固定して考えると、ディラックハミルトニアンはディラック質量項の表現により定まる。ディラックハミルトニアンが決まれば基底状態が決まるので、分類空間から一つディラック質量項を選ぶことは、対称性のもとで $d$ 次元の(トポロジカル)相を一つ選ぶことに対応する。もしも分類空間が非連結で複数個の連結成分からなっている場合には、異なる連結成分から選んだ二つのディラック質量項に対応する基底状態は、たがいに断熱変形によって移り変わらないことを意味する。そのような二つの基底状態を結ぶためには、対称性を破るか、運動項との反交換関係を破る、つまり系のギャップを閉じるかのいずれしかない。つまり分類空間が非連結か否かを測るゼロ次のホモトピー群

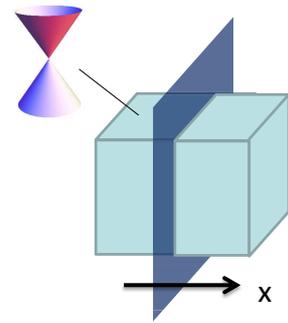


FIG. 3. 鏡映操作とトポロジカル結晶絶縁体の概念図。

$\pi_0(V)$ が、異なるトポロジカル相のラベルを与える。表IIの4列目に $\pi_0(V)$ の一覧を示す。異なるトポロジカル相の間にギャップレス状態があらわれることは以下のような議論でわかる。 $d$ 次元空間が二つの半無限系に分けられていて、 $(d-1)$ 次元の境界で接しているとする。二つの半無限系ではディラック質量項は分類空間の異なる連結成分に属しているとする。二つの半無限系の間でディラックハミルトニアンをつなげようとする(と $(d-1)$ 次元の境界部分で質量項がゼロにならないといけな。このためディラックハミルトニアン[式(9)で $m\beta$ に空間依存性をもつもの]は $(d-1)$ 次元の境界に沿って広がったゼロエネルギー状態をもつこととなる。このゼロエネルギー状態の波動関数は境界から離れると指数関数的に減衰する。これはBDI一次元系でディラック質量項にキックがある場合によく知られている現象の一般化である[21]。この表面ギャップレス状態の存在はまさにトポロジカル絶縁体・超伝導体の特徴である。表IIの4列目及び表Iの7列目以降に列挙した分類空間のゼロ次のホモトピー群から、 $d$ 次元においてどの対称類で非自明なトポロジカル絶縁体・超伝導体があるかということがみてとれる。分類空間のボット周期性から周期構造があらわれるため、表Iはトポロジカル絶縁体・超伝導体の周期表と呼ばれている[8, 9]。

#### IV. トポロジカル結晶絶縁体への応用

##### A. 鏡映対称性とクリフォード代数、分類理論

これまで述べてきたトポロジカル絶縁体の分類理論をトポロジカル結晶絶縁体の分類に応用しよう。系の対称性をクリフォード代数の形で表現できれば、クリフォード代数の拡大問題としてトポロジカル相を分類する理論が応用できる。実際に鏡映対称性は以下のようにすればクリフォード代数の形で表現することができる。 $d$ 次元のディラックハミルトニアン $H_d$ で $x_l$ 方向の鏡映操作 $R$ について不変なものを考えよう。この鏡映操作で波数 $k_j$ は

$$k_j \rightarrow (-1)^{\delta_{j,l}} k_j \quad (29)$$

のように変更を受ける。ディラックハミルトニアンが $[R, H_d] = 0$ を満たすという制約から、ガンマ行列につ

TABLE III. 鏡映対称性のもとでのトポロジカル結晶絶縁体・超伝導体の分類表。一列目では  $R$  の上付き添え字で  $\Gamma, T, C$  との交換・反交換関係を示す。二列目は AZ 対称類を、三列目は 0 次元の分類空間を表し、4 列目以降はトポロジカル不変量を表す。

Reflection	Class	$C_q$ or $R_q$	$d = 0$	$d = 1$	$d = 2$	$d = 3$	$d = 4$	$d = 5$	$d = 6$	$d = 7$
$R$	A	$C_1$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$
$R^+$	AIII	$C_0$	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0
$R^-$	AII	$C_1$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$
$R^+, R^{++}$	AI	$R_1$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$
	BDI	$R_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$\mathbb{Z}$	0
	D	$R_3$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$\mathbb{Z}$
	DIII	$R_4$	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0
	AII	$R_5$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0
	CII	$R_6$	0	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0
	C	$R_7$	0	0	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$
	CI	$R_0$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$
$R^-, R^{--}$	AI	$R_7$	0	0	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$
	BDI	$R_0$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$
	D	$R_1$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$
	DIII	$R_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$\mathbb{Z}$	0
	AII	$R_3$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$\mathbb{Z}$
	CII	$R_4$	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0
	C	$R_5$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0
	CI	$R_6$	0	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0
$R^{+-}$	BDI	$R_1$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$
$R^{-+}$	DIII	$R_3$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$\mathbb{Z}$
$R^{+-}$	CII	$R_5$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0
$R^{-+}$	CI	$R_7$	0	0	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$
$R^{-+}$	BDI, CII	$C_1$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$
$R^{+-}$	DIII, CI	$C_1$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$

いて

$$\{\alpha_l, R\} = 0, \quad [\alpha_j, R] = 0, \quad (j \neq l) \quad (30)$$

という条件が従う。簡単のために適当なゲージ変換を施して  $R^2 = 1$  としよう。さて鏡映操作からつくられる演算子

$$M = J\alpha_l R \quad (31)$$

を考えると、 $M^2 = 1$  がかつ  $\{H, M\} = 0$  を満たす。つまり  $\{\alpha_j, M\} = 0$  ( $1 \leq j \leq d$ ) であるので、あとは対称操作の演算子  $T, C$  などと反交換すればクリフォード代数の生成子として付け加えることができる。実際に  $T, C$  と  $R$  が交換するか、反交換するかによって、 $M, JM, TCM, JTCM$  のいずれかが 10 種類の対称類に対応するクリフォード代数の生成子全部 (12), (14) と反交換または交換するため、鏡映操作を含んだクリフォード代数をつくることのできる。クリフォード代数を作ってしまうと、あとは拡大問題からどの分類空間が対応するか調べることにより、トポロジカル不変量を系統的に得ることができる。このようにして得られたトポロジカル結晶絶縁体、超伝導体の分類表を表 III に掲げる。一列目に鏡映対称操作  $R$  と  $T, C, \Gamma$  との交換・反交換関係を示す。実対称類の場合は  $T, C$  の有無

に応じて  $T, C$  との交換・反交換関係 ( $RT = \tilde{\eta}_T TR$  及び  $RC = \tilde{\eta}_C CR$ ) を、 $R$  の上付き添え字で  $R^{\eta_T}, R^{\eta_C}, R^{\eta_T \eta_C}$  と示す。同様に複素対称類 AIII に対しては、 $\Gamma$  との交換・反交換関係 ( $R\Gamma = \tilde{\eta}_\Gamma \Gamma R$ ) を  $R$  の上付き添え字で  $R^{\eta_\Gamma}$  と示す。2 列目は対称類、3 列目は 0 次元系に対する分類空間を表し、4 列目以降にトポロジカル不変量を列挙した。いずれの場合も鏡映対称操作由来の生成子がクリフォード代数に加わることにより、実効的な対称類もしくは次元が変化し、鏡映対称性を考慮しない場合と分類が変化しうることがわかる。また鏡映対称性のもとでのトポロジカル結晶絶縁体も、ポット周期性由来の周期構造をもつこともわかる。

## B. SnTe: class AII + $R^-$ , ディラック質量項の観点から

代表的なトポロジカル結晶絶縁体 SnTe について、ディラックハミルトニアンでのディラック質量項の観点からどのようなトポロジカル相があらわれうるかを議論し、さらにそれがクリフォード代数を用いてどのように得られるかについて見てみよう。

SnTe は時間反転対称性と鏡映対称性に守られた 3 次元トポロジカル結晶絶縁体で、偶数個の表面ディラックコーンが存在することが観測されている [10–13]。通常の 3 次元トポロジカル結晶絶縁体では安定して存在しうる表面ディラックコーンは一つ（または奇数）なのに対して、SnTe では鏡映対称性により新しいトポロジカルな構造があらわれており、それらはミラーチェーン数という量により特徴づけられている。

SnTe の  $L$  点周りの低エネルギー有効ハミルトニアンは

$$H = m\sigma_z + v(k_x s_y - k_y s_x)\sigma_x + v_z k_z \sigma_y, \quad (32)$$

で与えられる。ここで  $\sigma_i$ ,  $s_i$  は軌道とスピンを表すパウリ行列である [10]。時間反転対称性  $T = is_y K$  をもち、対称類 AII に属する。時間反転対称性を保ち運動項と反交換するディラック質量項は  $m\sigma_z$  しかないの、 $m$  の異なる符号は異なるトポロジカル相に対応する。さて、二つの  $L$  点まわりのディラックハミルトニアン  $H_2 = H \otimes \tau_0$  を次に考える。 $\tau_0$  は  $2 \times 2$  の単位行列で二つの  $L$  点 ( $L_1$  and  $L_2$ ) の自由度に作用するものとする。二つの  $L$  点を混ぜる質量項まで考えると、もう一つの  $T$  不変な質量項  $m's_z \sigma_x \tau_y$  をみつけることができる。このため、 $m$  の異なる符号の表す状態は 2 次元の質量空間  $m-m'$  で 180 度回転を行うことにより連続的に変形することが可能になる。これはもとの  $H$  であらわされるトポロジカルに非自明な相を二つもってきて合わせるとトポロジカルに自明になるということなので、対称類 AII の 3 次元系が  $\mathbb{Z}_2$  トポロジカル数によって特徴づけられるということに対応している。すなわち、時間反転対称性のみを考える範囲では、SnTe は  $\mathbb{Z}_2$  分類で自明な絶縁体である。

さて次に  $x$  方向の鏡映対称性 ( $k_x \rightarrow -k_x$ ) を考えよう。上のハミルトニアン  $H$  は鏡映変換  $R = s_x$  に対して、 $R^{-1}H(-k_x, k_y, k_z)R = H(k_x, k_y, k_z)$  のように鏡映対称不変になる。 $R^2 = 1$  となるように  $R = s_x$  ととったので、 $R$  は  $T$  と反交換し  $\eta_T = -1$  である。表 III によると、対称類 AII に鏡映対称性  $R^-$  を付加すると、 $d = 3$  では整数値のトポロジカル数  $\mathbb{Z}$  をもつ。この整数値のトポロジカル数  $\mathbb{Z}$  が実はミラーチェーン数に対応する [10, 16]。先ほどのディラックハミルトニアンの質量項の議論に戻ると、二つの  $L$  点をあわせたときのハミルトニアン  $H_2 = H \otimes \tau_0$  に対して見つけたもうひとつの質量項  $m's_z \sigma_x \tau_y$  は鏡映対称性を破るため許されない。つまり、もとの  $H$  であらわされるトポロジカルに非自明な相を二つもってきても、鏡映対称性のもとでは自明な相に変形することはできず、非自明なトポロジカル相は足しあわされる構造をもつ。これ

はまさに整数値のトポロジカル数をもつことと対応する。

最後に、以上のディラック質量項を用いた議論がクリフォード代数によってどう再現されるかを簡単に見てみよう。3 次元の対称類 AII に対応するクリフォード代数の拡大問題は

$$\begin{aligned} Cl_{2,3} &= \{T, TJ; \alpha_x, \alpha_y, \alpha_z\} \\ \rightarrow Cl_{3,3} &= \{J\beta, T, TJ; \alpha_x, \alpha_y, \alpha_z\} \end{aligned} \quad (33)$$

で与えられ、トポロジカル数は  $\pi_0(R_1) = \mathbb{Z}_2$  となる。ここに鏡映対称性  $R^-$  を付け加えると拡大問題は

$$\begin{aligned} Cl_{2,4} &= \{T, TJ; \alpha_x, \alpha_y, \alpha_z, J\alpha_x R^-\} \\ \rightarrow Cl_{3,4} &= \{J\beta, T, TJ; \alpha_x, \alpha_y, \alpha_z, J\alpha_x R^-\} \end{aligned} \quad (34)$$

に変更され、トポロジカル数は  $\pi_0(R_0) = \mathbb{Z}$  となる。鏡映対称性を付け加えると、トポロジカル数が  $\mathbb{Z}_2$  から  $\mathbb{Z}$  になるために、SnTe では偶数個の表面ディラックコーンが安定的に存在できるようになったのだと理解できる。

## V. おわりに

本稿では、K 理論に基づいたクリフォード代数を用いたトポロジカル絶縁体・超伝導体の分類理論について解説した。従来の 10 の対称類に対するトポロジカルな周期表をクリフォード代数を用いて導出し、さらに鏡映対称性のもとであらわれるトポロジカル結晶絶縁体・超伝導体の分類理論に応用を行った。ここで解説した方法は、系の対称性をクリフォード代数の生成子として表現できる場合には非常に有効で、さまざまな応用がありうる。とくに私たちは、空間対称性のもとで安定化するワイル点・ディラック点の分類、とくに  $\mathbb{Z}_2$  チャージをもつワイル点について解析を行った [22]。また、質量項がランダムなディラックハミルトニアンの Anderson 局在問題では、クリフォード代数の方法を応用して系統的に相図を得ることができる [23]。クリフォード代数の生成子として表現できない一般の空間対称性のもとで、どのようなトポロジカル結晶絶縁体であらわれるかを理解することは将来の課題である。

笠真生さん、Christopher Mudry さんと本稿に関連する内容について有益な議論をかわしたことをここに感謝する。

[1] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, Phys. Rev. Lett. **49**, 405 (1982).  
 [2] C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **95**, 226801 (2005).  
 [3] C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **95**, 146802 (2005).  
 [4] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, Science **314**, 1757 (2006).  
 [5] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang,

Science **318**, 766 (2007).  
 [6] A. Altland and M. R. Zirnbauer, Phys. Rev. B **55**, 1142 (1997).  
 [7] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, Phys. Rev. B **78**, 195125 (2008).  
 [8] S. Ryu, A. P. Schnyder, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, New J. Phys. **12**, 065010 (2010).  
 [9] A. Kitaev, AIP Conf. Proc. **1134**, 22 (2009).  
 [10] T. H. Hsieh, H. Lin, J. Liu, W. Duan, A. Bansil, and L. Fu, Nat. Commun. **3**, 982 (2012).

- [11] S.-Y. Xu, C. Liu, N. Alidoust, M. Neupane, D. Qian, I. Belopolski, J. D. Denlinger, Y. J. Wang, H. Lin, L. A. Wray, B. Landolt, J. H. Slomski, J. H. Dil, A. Marcinkova, E. Morosan, Q. Gibson, R. Sankar, F. C. Chou, R. J. Cava, A. Bansil, and H. M. Z, *Nat. Commun.* **3**, 1192 (2012).
- [12] Y. Tanaka, Z. Ren, T. Sato, K. Nakayama, S. Souma, T. Takahashi, K. Segawa, and Y. Ando, *Nat. Phys.* **8**, 800 (2012).
- [13] P. Dziawa, B. J. Kowalski, K. Dybko, R. Buczko, A. Szczerbakow, M. Szot, E. Łusakowska, T. Balasubramanian, B. M. Wojek, M. Berntsen, O. Tjernberg, and T. Story, *Nat. Mater.* **11**, 1023 (2012).
- [14] C.-K. Chiu, H. Yao, and S. Ryu, *Phys. Rev. B* **88**, 075142 (2013).
- [15] Y. Ueno, A. Yamakage, Y. Tanaka, and M. Sato, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 087002 (2013).
- [16] T. Morimoto and A. Furusaki, *Phys. Rev. B* **88**, 125129 (2013).
- [17] K. Shiozaki and M. Sato, *Phys. Rev. B* **90**, 165114 (2014).
- [18] G. Moore and N. Read, *Nuclear Physics B* **360**, 362 (1991).
- [19] N. Read and D. Green, *Phys. Rev. B* **61**, 10267 (2000).
- [20] M. Karoubi, *K-theory: An introduction* (Springer-Verlag (Berlin and New York), 1978).
- [21] R. Jackiw and C. Rebbi, *Phys. Rev. D* **13**, 3398 (1976).
- [22] T. Morimoto and A. Furusaki, *Phys. Rev. B* **89**, 235127 (2014).
- [23] T. Morimoto, A. Furusaki, and C. Mudry, arXiv:1503.00119 (2015).