

研究終了報告書

「一般コホモロジー理論に基づいたトポロジカル材料科学理論の構築」

研究期間：2018年10月～2022年3月

研究者：塩崎 謙

1. 研究のねらい

当初は電子系において理論的に発見されたトポロジカル相であるが、現在までに、量子スピン計、光学系、周期駆動系、量子開放系、古典力学系、流体系など、トポロジカル物性は物理学な様々な分野において重要性を増してきている。本研究においてはトポロジカル物性を貫く普遍的な理論体系の確立を目指した。

特に、本研究においては Kitaev による Ω スペクトル予想と呼ばれる、short-range entanglement (SRE) 状態(基底状態に縮退のない量子状態)の高次トポロジーに関する予想に基づいた理論展開を進めている。SRE 状態全体の空間の非連結成分(0次トポロジー)が物質相の分類、つまりトポロジカル相に対応する。 Ω スペクトル予想は、空間(d+1)次元の SRE 状態の空間のループ空間が空間 d 次元の SRE 状態の空間にホモトピー同値である、という予想であり [A. Kitaev, talk at Simons Center for Geometry and Physics, Stony Brook University, 2013], 物性物理学的に換言すると、空間(d+1)次元における断熱サイクルと空間 d 次元における状態が、ある種の同値関係のもとで一対一対応する、というものである。具体例として Thouless ポンプ [D. J. Thouless, PRB 27, 6083 (1983)] があるが、より一般の空間次元、一般の対称性クラスにおける SRE 状態において成立する、という予想である。

数学的には、一つの Ω スペクトルに一つの一般コホモロジー理論が対応する。 Ω スペクトル予想は SRE 状態のトポロジカル物性は一般コホモロジー理論の数学的枠組みによって包括的に記述できる、という強力な理論的指針の存在を意味する。特に、本研究では以下の点に注目して研究を進めている。

- ✓ 固体結晶の有する(磁気)空間群対称性とトポロジカル物性の関係について理論の整備することは、トポロジカル相研究の材料科学としての段階に進める上で重要なステップである。一般コホモロジー理論の利点の一つは、空間群対称性を理論に取り入れることが容易である点である。本研究では一般コホモロジー理論に基づいて、汎用性があり、かつ手計算ではなく計算機を利用した解析が可能な数学理論の定式化を目指している。
- ✓ 特に、空間群を取り入れたトポロジカル物性の定式化の上で、スペクトル系列(具体的には、Atiyah-Hirzebruch スペクトル系列)と呼ばれる数学的ツールが従来の結晶理論と数値解析の点で相性が良い。あらゆる物理系において空間群を課したトポロジカル相の分類とトポロジカル不変量のデータベースの構築を行うことを目指している。
- ✓ Kitaev による Ω スペクトル予想を検証すべく、予想をサポートするモデルの構築、パラメータ依存する量子多体系におけるトポロジカル不変量の構築などを行い、関連する物理現象の提案を目指している。

2. 研究成果

(1) 概要

本研究課題は大きく分けて以下の2つ観点から研究を進めた。説明の都合上2つに分けるが、それぞれ「一般ホモロジー理論の数学的構造」、「一般コホモロジー理論の数学的構造」を物理現象によって解釈し、トポロジカル物性の研究を推し進める、という性質があり、いずれも本研究課題の目的である、一般コホモロジー理論に関わるテーマである。研究概要を以下に図示する。

研究テーマ A 「Kitaev による Ω スペクトル予想の検証, 及び関連物理現象の提案」

Kitaev による Ω スペクトル予想は「SRE 状態全体の空間」の高次トポロジーに関する予想であるが、未解明な点が多く残されている。そもそも「SRE 状態全体の空間」は数理物理学的に定義されるか。パラメータ依存する SRE 状態からどのようにトポロジカル不変量を構築するか。パラメータ依存する SRE 状態に関連する物理現象は何か、等の基本的な問いがある。本研究では特に以下の研究を行った。(i)有限群の対称性が存在する量子スピン系において、非自明な断熱サイクルを示す可解模型の系統的な構築を行い、 Ω スペクトル予想を支持する結果を得るとともに、断熱サイクルのトポロジカル不変量を構築し、関連する物理現象の議論を行った。(ii) Ω スペクトル予想に基づくと、トポロジカル相の基本的性質であるバルク境界が一般ホモロジー理論の境界作用素の役割を果たす点に注目し、Symmetry-protected topological (SPT) 相の分類問題を、理論が定義された実空間上の一般ホモロジー理論として定式化し、空間群対称な SPT 相の分類問題を同変ホモロジー理論の枠組みで定式化した。詳しくは以下の(2)詳細で述べる。

研究テーマ B 「バンド理論における Atiyah-Hirzebruch 系列計算の実装と定式化」

並進対称性の存在する自由フェルミオントポロジカル相(所謂、トポロジカル絶縁体・超伝導体)においては、ハミルトニアンがフェルミオンの 2 次形式で与えられ、さらに空間の足についてフーリエ変換することにより、波数空間、あるいはブリルアンゾーンと呼ばれるトーラスによってパラメータ付けされたエルミート行列 $H(k)$ が物質系を特徴づけ、よってトポロジカル相の分類問題は行列 $H(k)$ の分類と等価である。Kitaev によって、行列 $H(k)$ の分類問題は代数トポロジーの K 理論と等価であることが指摘されていた。[AIP Conference Proceedings, 1134, 22 (2009)]. 内部対称性のみを考慮する場合は過去の数学の KR 理論の結果 [M.F. Atiyah, The Quarterly Journal of Mathematics 17 367 (1966)] をそのまま適用してトポロジカル絶縁体・超伝導体の分類が得られるが、一方で現実物質は系固有の空間群対称性を有し、空間群を取り入れた K 理論については、Freed と Moore によって K 理論の定式化は進められたものの [Annales Henri Poincaré 14, 1927 (2013)] 具体的な計算方法については未整備であった。先行研究によって、一般コホモロジーにおける Atiyah-Hirzebruch スペクトル系列がバンド理論における種々の知見から計算実行可能であることを見出していたが [KS, M Sato, K Gomi, arXiv:1802.06694], スペクトル系列の高次微分については定式化なされていなかった。このスペクトル系列の

高次微分の定式化と数値計算の実装, 及び, E_∞ 頁から拡大列を解くアルゴリズムの構築が研究テーマ B であった. 残念ながら本研究期間においてこれらの問題は解決に至らなかったが, 研究テーマ B を進める上で得られた技術が他の研究課題に応用され, 以下の(2)詳細において述べるいくつかの研究成果[2,3,8,12,13,16]を得た.

(2) 詳細

得られた研究成果について, 研究テーマ A, B のそれぞれについて関連論文を挙げて記述する.

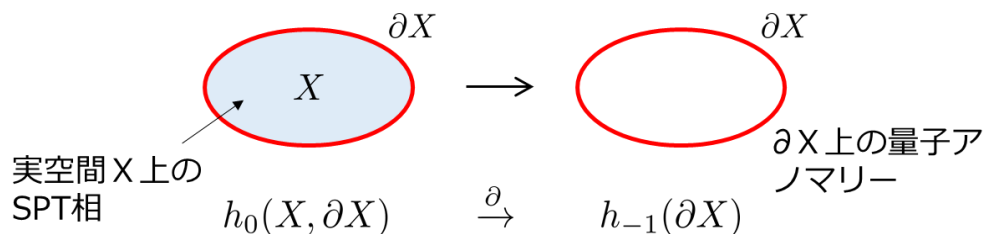
研究テーマ A「Kitaev による Ω スペクトル予想の検証, 及び関連物理現象の提案」

[17] 量子スピン系における断熱サイクルの一般化.

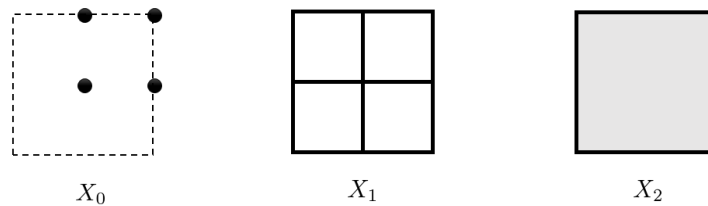
時間反転対称性, スピン反転の Z_2 対称性など有限群の対称性が存在する量子スピン系において, 断熱サイクルのモデルを構成した. 関連研究として, SPT 相の分類が群コホモロジーによって与えられるとともに, 可解のおもちゃモデルが構成できることは, Chen=Gu=Liu=Wen の研究によって良く知られており, [Phys. Rev. B 87, 155114 (2013)] 可解モデルの存在は SPT 相を研究する上で重要な役割を果たした. 本研究では Chen=Gu=Liu=Wen の群コホモロジー構成を一般化し, Bockstein 準同型を群コホモロジーモデルにおいて解釈し, 対称性に依存しない断熱サイクルの統一的なモデル構成を行った. 得られた分類結果は Ω スペクトル予想と矛盾がない. 特に, 断熱サイクルのトポロジカル不変量を明示的に構成した. また, 非自明な断熱サイクルに関連する物理現象を可解モデルを用いて検証した. 例えば, 空間 d 次元において, ハミルトニアンが空間的に変調して, その空間変調を断熱パラメータとみなした場合に, 断熱サイクルのトポロジカル不変量を有する場合に, 空間 $(d-1)$ 次元の SPT 相がトラップされることを厳密に示した.

[1,14] SPT 相の分類問題の, 一般ホモロジー理論としての定式化

バルク境界対応はトポロジカル相の基本的性質のひとつである. その内容は, トポロジカルに非自明な SPT 相が d 次元の実空間 X の上で定義された場合に, 実空間 X の境界 ∂X において, 低エネルギー状態が何らかの意味で 't Hooft 量子アノマリーを有する, という現象である. (下図参照)



実空間 X から境界 ∂X を取る操作は一般ホモロジー理論における境界作用素を想起させるが、トポロジカル相における物性を考慮すると、バルク境界対応が一般ホモロジー理論の公理を満たすことが、数学的に厳密な議論ではないが、トポロジカル相物性の見地から合理的な議論が展開できる。本研究では、SPT 相が一般ホモロジー理論によって記述されると仮定し、理論展開を試みた。特に、実空間上 X 上のホモロジー理論である点は、空間的な対称性を取り込むことが容易である、というメリットがある。この点に注目して、空間群対称な SPT 相の分類理論を、一般ホモロジー理論の計算する基本的ツールの一つである Atiyah-Hirzebruch スペクトル系列(AHSS)として定式化した。AHSS の概略を述べる[1,14]。まず、実空間を空間対称にセル分割する。以下に 2 次元文様群 $p4$ の場合の例を示す。



各セルの上で「局所的なトポロジカルな分類」を実行し、それを $E1$ 頁とする。AHSS は微分と呼ばれる操作があるが、これは、トポロジカル物性の言葉では、隣接するセル間の量子アノマリーを測る、と換言でき、この微分をトポロジカル物性の知見を用いて計算する。全ての量子アノマリーを消去することで、 $E\infty$ 頁に到達し、分類を計算したい一般ホモロジー群を近似する方程式(完全列)を得る。この方程式をまたトポロジカル物性の知見から計算し、分類の計算結果を得る。以上の定式化を論文[14]にまとめた。

AHSS の第1微分については群の指標を用いた計算公式を見出したが、第2以上の高次微分については、現状では完全な公式の構築には至っていない。第1微分のみで分類結果が得られる物理系もあり、例えば、磁気点群対称な電子系におけるトポロジカル絶縁体の分類については論文[1]にまとめた。

ある種の超伝導体系における第2微分については、トポロジカル物性を用いた公式の構築に成功しており、現在は結果をまとめている。

未だ AHSS の高次微分の定式化・数値計算実装に至っておらず、今後も研究を進める。

研究テーマ B 「バンド理論における Atiyah-Hirzebruch 系列計算の実装と定式化」

概要で述べたように、空間群対称なトポロジカル絶縁体・超伝導体の分類問題は、ある種の K 理論(ねじれ同変 K 理論)によって定式化される。この K 理論の K 群を計算するアルゴリズムの構築と数値計算実装が本研究の主目的である。特に、研究テーマ A でも用いた AHSS に注目して研究を進めた。研究テーマ A では一般ホモロジー理論の AHSS が応用されたが、本研究テーマ B においては一般コホモロジー理論の AHSS が応用される点に注意する。本研究の

技術的テーマは AHSS の高次微分の定式化と数値計算実装にあった。残念ながら研究期間においては AHSS 高次微分の計算アルゴリズムの定式化には至らなかったが、研究過程で得られた知見がいくつかの研究プロジェクトに対して応用された。以下で詳細を述べる。

[6] 磁気点群対称なトポロジカル絶縁体・超伝導体の表面状態の新しい分類手法の開発

Cornferd と Chapman によって、点群対称な Dirac ハミルトニアンにおいては、ガンマ行列の代数構造を用いて、点群対称性を、空間位置を変化させない内部対称性に、トポロジカルな分類を保ったまま、変更できることが指摘されていた[Phys. Rev. B 99, 075105 (2019)]. 数学的には同変 K 理論における Thom 同型として知られる技術である。本研究では、(i)彼らの手法を既約指標を用いた群の表現論として定式化し、(ii)3次元の球面上の K 群から、表面状態を持たないような「自明な K 群」を差引く手法について開発し、122通りの全磁気点群に対して表面状態の分類を行った。

[3,13] 超伝導ノードの分類理論の開発

超伝導体におけるノード構造の有無は、比熱の温度依存性等の観測可能物理量に影響し、非従来型の超伝導体のシグナルとして重要な研究対象である。波数空間の AHSS の $E1$ 頁が、波数空間の任意の点における超伝導ノードの局所的な安定性の分類を意味する点に注目して、超伝導ノードの分類理論を展開した。[3]においては共役な空間群対称性において、「点を通る対称線上の超伝導ノードの分類、つまり、(i)安定なノードの存在の有無、(ii)安定なノードが存在すれば点、線、面ノードのいずれか、という間に答えた。[13]においては、前述の[6]において発展させた点群対称な Dirac ハミルトニアン分類手法を数値計算に実装し、1651通りの全磁気空間群、及び全超伝導ギャップ関数の1次元表現に対して、対称線上のノードの分類を行った。

3. 今後の展開

本研究テーマ B の主目的であるスペクトル系列の計算実装の成功により、波数空間におけるトポロジカル不変量の列挙、及び具体的な定義を得る手法が整備され、電子系に限らず、トポロジカル物質科学の基本的ツールとなることが期待できる。本研究の成果の将来的な社会実装に繋がるための展開とタイムスパンであるが、今後継続して研究を進めて、基礎理論の段階で3~5年程度の期間が必要である。その後、第一原理計算のツールの整備など進める。この際、第一原理計算の専門家の協力が不可欠である。

研究テーマ A については理論的側面が大きく、現段階では基礎科学の興味の範囲内であり、社会実装について具体案はないが、断熱サイクルは量子状態の時間的操作について非摂動論的制限を与える基礎理論であり、将来の量子情報技術分野における応用の方向性を模索したい。

4. 自己評価

研究実施体制であるが、研究補助者は雇わず、さきがけ研究課題は主に個人で進めたが、これは本研究の基礎理論的な研究の側面を鑑みて、研究時間の確保を優先したためである。達成状況であるが、2の研究成果で述べたように、当初予定されていた研究計画のうち、スペクトル系列の数値計算実装については、未解決のまま研究期間を終えた。一方で、さきがけ研究課題の研究で得られた知見を通して様々な共同研究に発展した。特に国内外の大学院生・ポストドクターとの共同研究([1,2,3,4,5,8,9,10,11,12,13,14,15,18])が多く、国内研究者のネットワークの構築に寄与した。

5. 主な研究成果リスト

(1) 代表的な論文(原著論文)発表

研究期間累積件数: 13件.

代表的な論文に*印を付した.

- * [1] Nobuyuki Okuma, Masatoshi Sato, KS, PRB 99, 085127 (2019).
- [2] Heejae Kim, KS, Shuichi Murakami, PRB 100, 165202 (2019).
- [3] Shuntaro Sumita, Takuya Nomoto, KS, Youichi Yanase, PRB 99, 134513 (2019).
- [4] Byungmin Kang, KS, Gil Young Cho, PRB 100, 245134 (2019).
- [5] Kohei Kawabata, KS, Masahito Ueda, Masatoshi Sato, PRX 9, 041015 (2019).
- * [6] KS, arXiv:1907.09354 (to appear in PTEP).
- [7] Nobuyuki Okuma, Kohei Kawabata, KS, Masatoshi Sato, PRL 124, 086801 (2020).
- [8] Seishiro Ono, Hoi Chun Po, KS, PRRResearch 3, 023086 (2021).
- [9] Kohei Kawabata, Masatoshi Sato, KS, PRB 102, 205118 (2020).
- [10] Kohei Kawabata, KS, Shinsei Ryu, PRL 126, 216405 (2021).
- [11] Ryohei Kobayashi, Yasunori Lee, KS, Yuya Tanizaki, JHEP 08 (2021) 075.
- * [12] KS, Seishiro Ono, PRB 104, 035424 (2021).
- [13] Seishiro Ono, KS, Phys. Rev. X 12, 011021 (2022).

プレプリント: 5件.

- [14] KS, Charles Zhaoxi Xiong, Kiyonori Gomi, arXiv:1810.00801.
- [15] Ryohei Kobayashi, KS, arXiv:1901.06195.
- [16] KS, arXiv:1907.13632.
- [17] KS, arXiv:2110.10665.
- [18] Kohei Kawabata, KS, Shinsei Ryu, arXiv:2202.02548.

以下代表的な論文3件について概要を示す.

[1] Nobuyuki Okuma, Masatoshi Sato, Ken Shiozaki, "Topological classification under

nonmagnetic and magnetic point group symmetry: Application of real-space Atiyah-Hirzebruch spectral sequence to higher-order topology” PRB 99, 085127 (2019).

[14]において、空間群対称性存在化におけるトポロジカル相の分類が実空間上の一般ホモロジー理論によって定式化されることを示した。本論文では一般ホモロジー理論を計算するツールのひとつである Atiyah-Hirzebruch スペクトル系列を磁気点群対称なトポロジカル絶縁体に対して適用し、分類を実行した。

[6] Ken Shiozaki, “The classification of surface states of topological insulators and superconductors with magnetic point group symmetry”, arXiv:1907.09354, to appear in PTEP. 本論文ではトポロジカル絶縁体・超伝導体の、磁気点群対称な表面状態の完全な分類を世界で始めて行った。Cornfeld と Chapman によって点群対称性が系統的に内部対称性へと変換されることが示されていたが[Phys. Rev. B 99, 075105 (2019)], 本研究では彼らの手法を群の表現論として定式化すると共に、122 通りの全磁気点群と可能な全超伝導ギャップ関数に対して分類計算を実行した。

[12] Ken Shiozaki and Seishiro Ono, “Symmetry indicator in non-Hermitian systems” PRB 104, 035424 (2021).

対称性指標 [HC Po, A Vishwanath, H Watanabe, Nature communications 8, 50 (2017)] と呼ばれる波数空間の高対称点における既約表現の情報から系のトポロジカルな性質について制限を与える手法の、非エルミート系に対する一般化を行った。非エルミート系における空間群対称性について定式化すると共に、スピニフル電子系、スピinless電子系における乗数系に対する対称性指標の計算を行った。

(2) 特許出願

研究期間全出願件数:0 件(特許公開前のもも含む)

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

(受賞)第 35 回 西宮湯川記念賞受賞. 2021 年 12 月

(国際会議招待講演)“Classification of Dirac Hamiltonians with point group symmetry”, PROGRESS IN THE MATHEMATICS OF TOPOLOGICAL STATES OF MATTER, 29 July – 2 August 2019, AIMR, Tohoku University, Katahira Campus, Sendai, Japan. (2019/7/29).

(国際会議招待講演)“Partial point group operation and Symmetry protected topological phases”, Youth Symposium on theoretical high energy physics in Southeast University, Seminar room 1502, Yifu architecture hall, Sipailou Campus of Southeast University, Nanjing, China, Aug. 20th–22th, 2019. (2019/8/21).

(国際会議招待講演)“Topology of matrix product states with onsite symmetry”, Rigorous Statistical Mechanics and Related Topics II, 24 November– 27 November 2020, Online, (2020/11/25).

(国際会議招待講演)“Symmetry protected topological phases and generalized (co)homology theory”, KEK Theory workshop 2020, 15 Dec 2020– 18 Dec 2020, Online,

(2020/12/15).