

# 研究終了報告書

## 「指数理論に基づく多様な形状の系のトポロジーの研究と展開」

研究期間：2019年10月～2023年3月

研究者：林 晋

### 1. 研究のねらい

物性物理学において数学に由来する概念であるトポロジーが重要な役割を果たしている。いわゆるトポロジカル絶縁体物質には、モデルの次元と対称性で分類されるトポロジーが内在し、対応して現れる表面状態（バルク・エッジ対応）は不純物や系の形状等によらない安定性を持つなどの特異な性質を持つ（例：量子ホール系、量子スピンホール系）。一方でこれらのトポロジーは数学の側では指数と呼ばれる量と関係して活発に研究されており、指数理論やそれを記述する枠組みを与えるK理論は、指数を取り扱う手法と統一的に理解する視点を与える。実際にトポロジカル絶縁体に対してはK理論を用いた分類や指数理論を用いたバルク・エッジ対応の証明等が行われてきた。近年物性物理学では高次トポロジカル絶縁体と呼ばれる対象と関連して、系の内部（バルク）や表面の議論以外にも、角やヒンジ等に局在した波動関数が着目され、多様な形状の系におけるトポロジーが研究対象となってきた。本研究では数学の指数理論の立場からある種の絶縁体物質において特徴的なトポロジーの研究を行う。特に多様な形状の系において現れるトポロジーの数学的解明や理論基盤の構築等を通じたトポロジカル材料科学への貢献を広くねらいとしている。

数学のトポロジー研究において、正方格子を原点を通る二直線で切った四半面上で定義される作用素（四半面 Toeplitz 作用素）に対する指数理論が知られている。四半面 Toeplitz 作用素の指数理論を用いることで、バルクと角をなす二つのエッジがある種絶縁系である場合に、系にある種のトポロジーが内在し、そのトポロジーを反映してトポロジカルな角状態が現れることを議論することができる。本研究課題の開始に先立って、ここでの理論が Benalcazarらの高次トポロジカル絶縁体のモデルの一つに適用可能であることを確認していた。本研究ではこの指数理論と高次トポロジカル絶縁体の接点に関する本研究独自のアイデアを手がかりとして、特に角において特徴的なトポロジーの理論展開とその高次トポロジカル絶縁体研究への応用に取り組む。本研究の立場からは、トポロジカルな現象が個別のモデルの特性によらずに議論できると同時に、指数理論の観点から従来のトポロジカル絶縁体の議論とパラレルな理論が自然に展開できることが期待される。これらの利点を活かした理論展開に取り組む。

### 2. 研究成果

#### (1) 概要

高次トポロジカル絶縁体と指数理論の接点を中心に研究を行なった。本研究では並進不変な一体のハミルトニアンを主に格子 $\mathbb{Z}^2$ や $\mathbb{Z}^3$ 上で議論する。

指数理論に基づく本研究のアプローチは、研究開始時点では特別な対称性のクラスのハミルトニアンのみを扱うなど十分に展開されていなかった。まずは我々の理論で議論できる対象の範囲を広げることを目的として、三次元系の角に局在した波動関数や、時間反転対称性、粒子

正孔対称性を保つ系まで取り扱える形に理論を拡張し、いわゆる Altland-Zirnbauer 10-fold way のそれぞれのクラスに対して、本研究の指数理論の立場から、角状態やヒンジ状態と関連したトポロジーの定義とその分類を行なった。さらに具体例の構成法を整備している。また、得られた表が Geier らによる高次トポロジカル絶縁体の分類の特別なケース (extrinsic なもの) と一致することを確認した。

続いて本研究が着目するトポロジーの計算手法の開拓に取り組んだ。本研究のトポロジーは抽象的に定義されており、角/ヒンジ状態との関連は述べられるものの、それが非自明なのかを実際に計算することが難しい状況にある。この点について高次トポロジカル絶縁体において特徴的な「エッジで絶縁系である」という条件の背後にある幾何的描像を明らかにすることで、我々のトポロジーに幾何的定義を与え、計算手法を開拓する研究に取り組んだ。結果として例えば二次元でカイラル対称性を保つ系の場合には、角状態と関連したトポロジーを「二次元トラス上のバルクハミルトニアンを、ある種の三次元球面上に拡張したものの三次元回転数」として幾何的に表示する指数公式を導出した。これにより抽象的であった本研究のトポロジーに一つの幾何的理解を与えた。実際の計算には課題が残るものの、検討すべき対象は明示的となったものと考えている。

## (2) 詳細

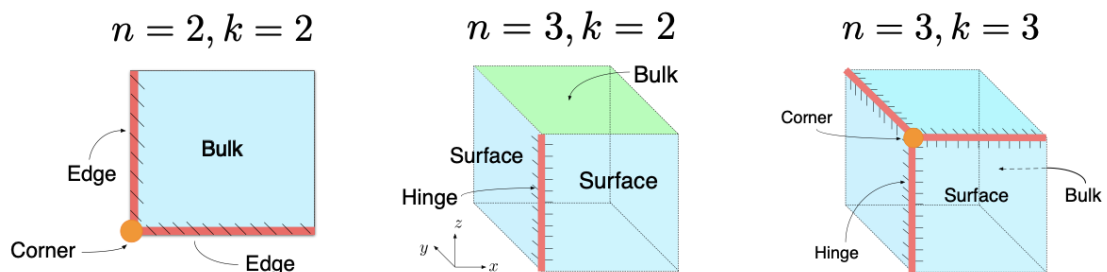
### 研究テーマ A: 指数理論の高次トポロジカル絶縁体への応用

#### 成果 1. Altland-Zirnbauer 10-fold way のそれぞれのクラスに対する、指数理論に基づく角/ヒンジ状態と関連したトポロジーの分類

四半面 Toeplitz 作用素の指数理論に基づく我々のトポロジカル角状態の議論は、余次元2の角を持つ系であって特別なクラスのハミルトニアン (二次元 class AIII の角と三次元 class A のヒンジ) に議論が限られていた。これを Altland-Zirnbauer 10-fold way のそれぞれのクラスと任意の余次元を持つ角へと理論を展開し、それぞれの対称性のクラスにおいて角/ヒンジ状態と関連したトポロジーの定義や分類に本研究の立場から取り組んだ。得られた結果をまとめたものが下図の表である (図1)。ここで  $n$  は系の次元、 $k$  は着目するコーナーの余次元であり、 $k=1$  の場合は Kitaev のトポロジカル絶縁体・超伝導体の分類表に一致する。下図のような形状で決まる  $n$ 、 $k$  と対称性のクラスに対し、表のゼロでないエントリーでは  $\mathbb{Z}$  や  $\mathbb{Z}_2$  で分類されるトポロジーが系に内在し、対応して角状態やヒンジ状態が現れる。具体的にはある作用素環の  $KO$  群の計算と、境界準同型と呼ばれるある  $KO$  群の間の準同型の計算を行った。それぞれ、バルクと角をなす二つのエッジにギャップのあるハミルトニアンの分類、系に内在するトポロジーと角/ヒンジ状態の対応関係、を与える。さらに表のそれぞれのエントリーに対して具体例の構成法を整備した。構成は従来のトポロジカル絶縁体・超伝導体の例二つを用意し、その二つのある種の積を取るものである ( $K$  群の外部積に着目する)。ここでの議論は系に点群対称性を仮定しない。得られた表は Geier らによる extrinsic な高次トポロジカル絶縁体の分類表に一致することを確認した。このことは、系に点群対称性を仮定しない議論であり、境界近傍の摂動で変化する位相不変量を考察していることから自然である。

Symmetry	$n - k \pmod 8$											
	AZ	$\Theta$	$\Xi$	$\Pi$	0	1	2	3	4	5	6	7
A	0	0	0		0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$
AIII	0	0	1		$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0
AI	1	0	0		0	0	$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	
BDI	1	1	1		$\mathbb{Z}$	0	0	$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	
D	0	1	0		$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	
DIII	-1	1	1		$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$2\mathbb{Z}$	0
AII	-1	0	0		0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$2\mathbb{Z}$
CII	-1	-1	1		$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0
C	0	-1	0		0	$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0
CI	1	-1	1		0	0	$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0

図1：指数理論を用いた、角/ヒンジ状態と関連したトポロジーの分類表



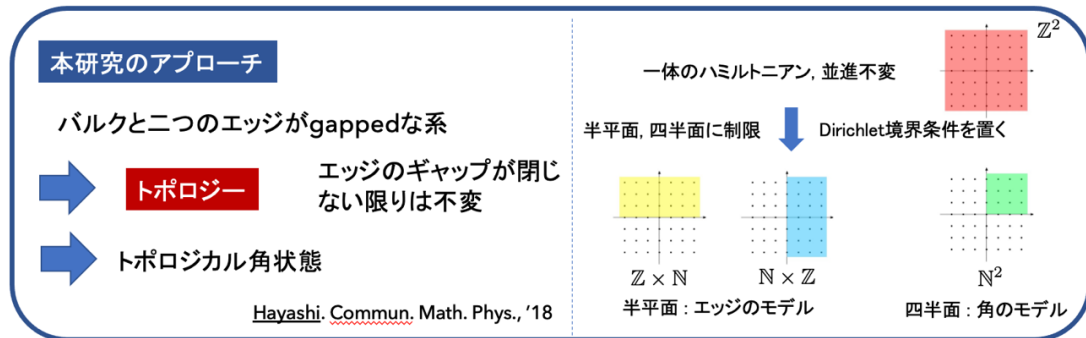
## 研究テーマB:形状に依存して現れるトポロジーの性質の解明とさらなる展開

### 成果1. 四半面 Toeplitz 作用素の幾何学的な指数公式の導出を通じた計算手法の開拓

トポロジカル絶縁体研究で広く知られている回転数や Chern は幾何的に定義される量であり、様々に計算が行われている。一方で本研究が着目するバルクとエッジにギャップのある系のトポロジーは、まずは作用素環の  $\mathbf{K}$  群の要素として抽象的に定義され、実際の計算が難しい状況にある。ここでの困難の一つの要因として、我々のアプローチでは「エッジで絶縁系である」系という状況を、無限半平面上の作用素の可逆性という、解析的条件として取り扱っていることが挙げられる。ここでは「エッジで絶縁系である」という条件の背後にある幾何的描像を明らかにし、我々のトポロジーに幾何的理解を与えることで、本研究が着目するトポロジーの計算手法を開拓する研究を行った。

結果として、二次元で余次元2の直角の角を持つ系であって、境界条件として Dirichlet 境界条件を課す場合には、「角をなす二つのエッジにギャップのある」状況では、二次元トラス上で定義されるバルクのハミルトニアンがある種の三次元球面にギャップを保ったまま標準的に拡張することを示した。ここでは Gohberg-Krein による行列分解の手法とある種の解析接続を用いて拡張を与える。さらに拡張したハミルトニアンの三次元回転数が四半面 Toeplitz 作用素の Fredholm 指数と一致すること、対応して角状態の個数と対応することを証明した。

さらに得られた議論を任意の次元、Altrand-Zirnbauer 10-fold way のそれぞれのクラスに拡張した(角やヒンジの角度は直角に限る)。例えば三次元 class A の系では Bloch 束をある種の三次元球面と円周の積の形の空間に拡張したものの第二 Chern 数がカイラルヒンジ状態の個数と対応することを確認した。一方で我々の三次元球面は滑らかではない。このために本研究の着目するトポロジカル数の積分表示は得られておらず実際の計算には課題が残るものの、少なくとも検討すべき幾何的対象は明らかにできたものと考えている。



その他に広義の成果として、多様な系への理論展開に関する以下の研究を行なった。

- 中西毅教授(産業技術総合研究所)、奥川亮助教(東京理科大学)と共同で、カイラル対称性で保たれた高次トポロジカル半金属相に関する理論提案を行った。
- 高根美武教授研究室(広島大学大学院先進理工系科学研究科)、中西毅教授研究室と共同で階段状の境界において現れる端状態の解析を行った。

### 3. 今後の展開

#### (1) 角状態と関連したトポロジーの計算手法の開拓

本研究が着目する角状態と関連したトポロジーについては、本研究を通して一つの幾何的理解が得られたものの、その計算手法の提出には至らなかった。この点は実用に向けても可能性のあるところと考えており引き続き研究を行ってゆく。実用に向けては計算機援用を一つの候補として考え、理論の展開に取り組むと同時に実用の場面で必要な議論を検討することの両面から、可能なアプローチを考察する。

#### (2) 多様な系への展開

多様な系への展開については、当初目指していた網羅的展開から本研究のトポロジー自体の理解を深める方向に方針を変更した面があり、十分に進められなかった。また、本研究では並進不変な系における議論に注力したために不純物等によって並進対称性が破れた系への理論展開まで行うことができなかった。一方で、本研究を通して今後の展開の足場となる物事やきっかけとなる成果は一定程度得られたものと考えており、今後それぞれ理論を展開してゆきたいと考えている。

#### (3) 角と関連して現れた数学的対象の理解の深化を通じた理論提案

本研究の出発点は、従来のトポロジカル絶縁体のバルク・エッジ対応と指数理論を用いた議論がなされていたことと、離散的な角を持つ空間の上の指数理論が展開されていたことにある。本研究では指数理論と高次トポロジカル絶縁体の接点は一定程度形にすることができたものと考えている。今後の展開として、一方では本研究の中で現れた数学的対象の理解を深めるとともに、本研究から得られた接点を通じた物性物理学に対する理論提案等に繋げたい。

本研究は理論研究であり社会実装を予測することは難しいものの、(1)の計算手法の提案は数年のうちに実用的な形にまで整備したい。その他の研究についても数学理論の展開と共に可能な応用等は都度取り組んでいきたい。

#### 4. 自己評価

高次トポロジカル絶縁体において特徴的な、「エッジで絶縁系である」という解析的条件の背後に幾何的描像を与えたことと、現れた幾何的対象とトポロジカル角状態の関連を見出したことは評価したい。高次トポロジカル絶縁体において特徴的なトポロジーをある種の指数として理解することや、本研究が着目するトポロジーの計算法については一つのアプローチが得られたものと考えている。これらの結果は、本研究を進める中で本研究が着目するトポロジー自体の理解の深化が必要であると考えに至り、得られた成果である。全体として、特に高次トポロジカル絶縁体に特徴的なトポロジーに対して、指数理論に基づく数学的議論を行うための一定の足場は構築することができたのではないかと考えている。一方で当初目指していた網羅的展開は十分に進められておらず、本研究のトポロジーの計算についても、幾何的なトポロジーの定義を与えたもののその計算手法の提案には至らなかった。これらについては今後更に研究を進め、指数理論の立場からの新たな手法の提案や理論提案等に繋げたい。

研究期間にコロナウイルス感染拡大により研究交流が縮小される中でも、研究補助員を雇用し、またさきがけ領域を通じた議論やセミナー等を通して情報収集をすることができたのはさきがけのおかげである。

本研究のトポロジーの計算手法の開拓に取り組む過程で、境界や角と正則性の関係が見られたことは当初計画では想定されていなかった展開である。物性物理学の視点からも示唆を受けながら数学的対象に対する理解を深められたことは、今後の研究の一つの足場としたい。

#### 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: 4件

1. Shin Hayashi. An index theorem for quarter-plane Toeplitz operators via extended symbols and gapped invariants related to corner states. *Communications in Mathematical Physics*. 400. 429-462. 2023.

本研究のこれまでのアプローチでは位相不変量が抽象的に定義されその計算に課題があった。本論文では角状態と関連した指数の幾何学的な表示式の導出に取り組み、Gohberg-Krein による行列分解の手法を用いることで、トーラス上で定義されるバルクハミルトニアンをある種の解析接続によって三次元球面上に拡張したものの回転数が、着目する指数と一致すること、従ってトポロジカルな角状態の個数と対応すること、を証明した。

2. Shin Hayashi. Classification of topological invariants related to corner states. Letters in Mathematical Physics. 111. Article number:118. 2021. Online First.

DOI: 10.1007/s11005-021-01460-8

トポロジカルな角/ヘンジ状態の分類を指数理論の立場から考察した。Altland-Zirnbauer 10-fold way の各クラスに対して角/ヘンジ状態と関連した位相不変量を定義し、その分類表を提出した。従来の余次元2までの角に対する指数理論を任意の余次元の角に拡張して整備すると共に、具体例の構成法等を整備した。高次トポロジカル絶縁体研究との関連では、Geier らによる extrinsic な高次トポロジカル絶縁体の分類表と我々の表が一致することを確認した。

3.

## (2) 特許出願

研究期間全出願件数: 0 件 (特許公開前のものも含む)

## (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)

### 国際学会

1. Shin Hayashi, “Index theory for quarter-plane Toeplitz operators and topological corner states”, Japan-Netherlands Joint Seminar: Index Theory and Operator Algebras in Topological Physics, 東北大学, 2023 年 3 月 (招待講演)
2. Shin Hayashi, “On a topological invariant related to corner states via index theory and matrix factorizations”, Variety and universality of bulk-edge correspondence in topological phases: From solid-state physics to transdisciplinary concepts, 筑波大学, 2022 年 2 月 (招待講演)

### 国内学会

3. 林 晋, “An index theorem for quarter-plane Toeplitz operators via extended symbols”, 日本数学会2022年度秋季総合分科会, 北海道大学, 2022 年 9 月
4. 林 晋, “トポロジカルな角状態への指数理論的アプローチ”, 応用数理学会2022年度年会, 北海道大学, 2022 年 9 月
5. 林 晋, “Classification of topological invariants related to corner states”, 日本数学会2

021年度年会, 慶應義塾大学, 2021年3月