

# 結晶点群、時間反転対称性の下での バンド構造の幾何学的分類

特異点論の観点から

寺本 央 (北海道大学/JST/PRESTO)\*

## 1. 研究背景

近年の計測技術、ナノテクノロジーの発展により物性パラメータを変化させ、それによる物性の変化を直接観測することが可能となってきた。本発表ではそのような発展の一つである Dirac-cone engineering [1] を題材として取り上げ、特異点論の立場からその理解の一助になる理論的枠組みを提案したい。

結晶の電子輸送特性、半導体、金属であるあるいは絶縁体、さらにはトポロジカル絶縁体等の特性は結晶のバンドの幾何構造が決めており、Dirac-cone engineering とは概して結晶のパラメータを変化させることにより複数のバンドを衝突させ、その衝突によりバンドの幾何構造を変化させることで結晶の輸送特性を制御することを目指す工学であるということが出来る。

そのためには複数のバンドを衝突させたときに、バンドにどのような幾何構造の変化が生じるのか？その衝突による幾何構造の変化によりどのような大域的なバンドのトポロジカルな性質が変化するのか？という問題に答える必要がある。本発表では特に二つのバンドを衝突させたときに局所的にどのような幾何学的変化が引き起こされるのかを特異点論の観点から調べるための理論的な枠組みを提案し、例として  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  の表面の  $\Gamma$  点周りの  $C_{3v}$  と時間反転対称性の下での余次元7までの二つのバンドの縮退点近傍のハミルトニアンの特異点論による分類とその普遍開折による縮退点近傍で起こる幾何学的変化を調べる。詳細に関しては[2]を参照のこと。

## 2. 設定

$k_1$  と  $k_2$  を表面におけるブロッホ波数の第1、2成分とし、 $\mathbf{k} = (k_1, k_2) \in \mathbb{R}^2$  と書く。ハミルトニアンをバンド交差に係る二つの状態に制限すると

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \delta(\mathbf{k}) & \beta(\mathbf{k}) - i\gamma(\mathbf{k}) \\ \beta(\mathbf{k}) + i\gamma(\mathbf{k}) & -\delta(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (1)$$

のように書くことができる。ただし、 $\beta$ 、 $\gamma$  と  $\delta$  は  $\mathbb{R}^2$  から  $\mathbb{R}$  への関数とし、ハミルトニアンとしてはトレースのないものを考える<sup>1</sup>。もとのハミルトニアンが良い条件を満たすと  $\beta$ 、 $\gamma$ 、および  $\delta$  は  $C^\infty$  級となることが示せるので、以下では特に断らない限り関数、写像としては  $C^\infty$  級のものを考える。この詳細な導出に関しては[3]を参照のこと。

本研究はさがり JST/PRESTO(課題番号:JPMJPR16E8)の助成を受けたものである。

2010 Mathematics Subject Classification: 53Z05, 57R45

キーワード: singularity theory, band theory, invariant theory

\* 〒001-0020 北海道札幌市北区北20条西10丁目 北海道大学電子科学研究所 05-103-2

e-mail: teramoto@es.hokudai.ac.jp

web: <http://www.math.sci.hokudai.ac.jp/researcher/applied-math/teramoto.php>

<sup>1</sup>二つの準位の相対的なエネルギー差の問題にする限りはこれで十分である。一方、二つの準位とフェルミ準位等の絶対的な値と比べるためにはトレースの部分を検討する必要がある。

三つの Pauli 行列  $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ ,  $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ , および  $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$  を使うとハミルトニアンは

$$H(\mathbf{k}) = \beta(\mathbf{k})\sigma_1 + \gamma(\mathbf{k})\sigma_2 + \delta(\mathbf{k})\sigma_3 \quad (2)$$

と書ける。以下では  $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$  をベクトルとして、式(2)の短縮形として

$$(\beta(\mathbf{k}), \gamma(\mathbf{k}), \delta(\mathbf{k})) \cdot \sigma \quad (3)$$

と書く。

### 3. 対称操作のハミルトニアンへの作用

この節ではスピン1/2の粒子の  $C_{3v}$  対称性と時間反転対称性を持つハミルトニアンを考える [4, 5] が他の結晶点群の場合にも同様に扱うことができる。点群  $C_{3v}$  は3回回転

$$C_3: k_{\pm} \mapsto e^{\pm i2\pi/3} k_{\pm}, \sigma_{\pm} \mapsto e^{\pm i2\pi/3} \sigma_{\pm}, \sigma_3 \mapsto \sigma_3 \quad (4)$$

と鏡面反射

$$M: k_{\pm} \mapsto -k_{\mp}, \sigma_{\pm} \mapsto \sigma_{\mp}, \sigma_3 \mapsto -\sigma_3 \quad (5)$$

によって生成される。ただし、 $k_{\pm} = k_1 \pm ik_2$  および  $\sigma_{\pm} = \sigma_1 \pm i\sigma_2$  としている。スピン1/2の粒子に対しては、その時間反転操作は  $K$  を複素共役をとる操作とすると  $\Theta = i\sigma_2 K$  と書くことができる。ハミルトニアンが時間反転操作に対して対称であるということ

$$\Theta H(-\mathbf{k}) \Theta^{-1} = H(\mathbf{k}) \quad (6)$$

が任意の  $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^2$  に対して成り立つことと定義する。時間反転操作は  $\mathbb{R}^2$  ( $\mathbf{k}$  で張られる空間) と  $\mathbb{R}^3$  ( $\sigma$  で張られる空間) に

$$\Theta: k_{\pm} \mapsto -k_{\pm}, \sigma_{\pm} \mapsto -\sigma_{\pm}, \sigma_3 \mapsto -\sigma_3 \quad (7)$$

と作用する。

以上のようなハミルトニアンを三つの基底  $\sigma_1 = (1, 0, 0)$ ,  $\sigma_2 = (0, 1, 0)$ ,  $\sigma_3 = (0, 0, 1)$  で表現すると、対称操作に対するハミルトニアンの不変性は  $\Gamma$  を  $C_3, M$  と  $\Theta$  により生成される対称群、 $\rho_1$  と  $\rho_2$  を  $\mathbb{R}^2$  ( $\mathbf{k}$  で張られる空間) と  $\mathbb{R}^3$  ( $\sigma$  で張られる空間) への  $\Gamma$  の作用とすると、

$$\rho_2(g) H(\rho_1(g)\mathbf{k}) = H(\mathbf{k}) \quad (8)$$

が任意の  $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^2$  と  $g \in \Gamma$  で成り立つことと表現することができる。特にこの例においては

$$\rho_1(C_3) = \begin{pmatrix} \cos 2\pi/3 & -\sin 2\pi/3 \\ \sin 2\pi/3 & \cos 2\pi/3 \end{pmatrix}, \rho_1(M) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \rho_1(\Theta) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

$$\rho_2(C_3) = \begin{pmatrix} \cos 2\pi/3 & -\sin 2\pi/3 & 0 \\ \sin 2\pi/3 & \cos 2\pi/3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \rho_2(M) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$\rho_2(\Theta) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (10)$$

と書ける。以上のような  $C_3, M$  および  $\Theta$  によって生成される対称操作の群を  $C_{3v} + T$  と書くことにする。また、以下では与えられた対称群  $\Gamma$  に対し、その定義域  $\mathbb{R}^n$  への作用を  $\rho_1$  とし、値域  $\mathbb{R}^p$  への作用を  $\rho_2$  とする。上の例では  $n = 2$  および  $p = 3$  としている。

$$\mathcal{E}_{n=2, p=3}^\Gamma = \{H: (\mathbb{R}^2, 0) \rightarrow (\mathbb{R}^3, 0) \mid \forall g \in \Gamma, \mathbf{k} \in \mathbb{R}^2, \rho_2(g) H(\rho_1(g) \mathbf{k}) = H(\mathbf{k})\} \quad (11)$$

を (8) を満たす写像芽全体の集合とする。この集合に属する写像芽を  $\Gamma$  同変写像芽と呼ぶ。以下では [6, 7] に従い  $\mathcal{E}_{2,3}^\Gamma$  を以下の同値関係の下分類する:  $H, H' \in \mathcal{E}_{2,3}^\Gamma$  が  $\mathcal{K}_\Gamma[SO(3)]$  同値であるとは写像芽  $M: (\mathbb{R}^2, 0) \rightarrow (SO(3), M(0))$  で  $\rho_2(g) M(\rho_1(g) \mathbf{k}) = M(\mathbf{k}) \rho_2(g)$  をすべての  $g \in \Gamma$  と  $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^2$  に対して満たすものと微分同相芽  $s: (\mathbb{R}^2, 0) \rightarrow (\mathbb{R}^2, 0)$  で  $s(\rho_1(g) \mathbf{k}) = \rho_1(g) s(\mathbf{k})$  をすべての  $g \in \Gamma$  と  $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^2$  に対して満たすものが存在し、

$$H'(\mathbf{k}) = M(\mathbf{k}) H \circ s(\mathbf{k}) \quad (12)$$

がすべての  $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^2$  に対して成り立つこととする。以下ではこの同値関係を  $\mathcal{K}_\Gamma[SO(3)]$  同値と呼び  $H$  と  $H'$  が  $\mathcal{K}_\Gamma[SO(3)]$  同値であるとき  $H \sim H'$  と書く。

この同値関係の物理的背景は以下である:

**定理 3.1.** 先の例と同じ設定の下、 $H, H' \in \mathcal{E}_{2,3}^\Gamma$  が  $\mathcal{K}_\Gamma[SO(3)]$  同値であるとき、また、そのときに限り写像芽  $U: (\mathbb{R}^2, 0) \rightarrow (SU(2), U(0))$  と微分同相芽  $s: (\mathbb{R}^2, 0) \rightarrow (\mathbb{R}^2, 0)$  が存在して

$$H'(\mathbf{k}) \cdot \sigma = U(\mathbf{k}) (H \circ s(\mathbf{k}) \cdot \sigma) U^\dagger(\mathbf{k}) \quad (13)$$

がすべての  $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^2$  に対して成り立つ。ただし、 $U^\dagger(\mathbf{k})$  は  $U(\mathbf{k})$  のエルミート共役であり、

$$s(C_3 \mathbf{k}) = C_3 s(\mathbf{k}), \quad (14)$$

$$s(M \mathbf{k}) = M s(\mathbf{k}), \quad (15)$$

$$s(-\mathbf{k}) = -s(\mathbf{k}), \quad (16)$$

と

$$U(\mathbf{k}) = C_3 (U(C_3 \mathbf{k})), \quad (17)$$

$$U(\mathbf{k}) = M (U(M \mathbf{k})), \quad (18)$$

$$U(\mathbf{k}) = \Theta U(-\mathbf{k}) \Theta^{-1}, \quad (19)$$

をすべての  $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^2$  に対して満たすものとする。

式 (14, 15, 16) と式 (17, 18, 19) はこれらの変換の作用が写像芽の対称性を保つための十分条件である。

もし  $H$  が  $\Gamma$  同変であれば  $H'(\mathbf{k}) = M(\mathbf{k}) H \circ s(\mathbf{k})$  で定義される  $H'$  も  $\Gamma$  同変である。なぜならば

$$\rho_2(g) H'(\rho_1(g) \mathbf{k}) = \rho_2(g) M(\rho_1(g) \mathbf{k}) H \circ s(\rho_1(g) \mathbf{k}) \quad (20)$$

$$= M(\mathbf{k}) \rho_2(g) H(\rho_1(g) s(\mathbf{k})) \quad (21)$$

$$= M(\mathbf{k}) H \circ s(\mathbf{k}) \quad (22)$$

$$= H'(\mathbf{k}) \quad (23)$$

がすべての  $g \in \Gamma$  と  $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^2$  に対して成り立つからである。故に  $M$  と  $s$  に対する条件は写像芽  $H$  が  $\Gamma$  同変であるとき写像芽  $H'$  も  $\Gamma$  同変となるための自然な十分条件となっている。以上の特異点論の設定は泉屋らの  $\mathcal{K}[\rho(G)]$  同値 [6, 7] に同変性を加えた一般化になっている。

#### 4. $\mathcal{K}_\Gamma[SO(p)]$ 同値の枠組み

**定義 4.1.**  $\Gamma$  をコンパクト Lie 群とし  $H, H' \in \mathcal{E}_{n,p}^\Gamma$  を二つの  $\Gamma$  同変な写像芽であるとする。  $H$  と  $H'$  が  $\mathcal{K}_\Gamma[SO(p)]$  同値であるとは、写像芽  $M: (\mathbb{R}^n, 0) \rightarrow (SO(p), M(0))$  と微分同相芽  $s: (\mathbb{R}^n, 0) \rightarrow (\mathbb{R}^n, 0)$  が存在して

$$H'(\mathbf{k}) = M(\mathbf{k}) H \circ s(\mathbf{k}) \tag{24}$$

がすべての  $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^n$  に対して成り立つこととする。ただし、 $M$  と  $s$  は

$$s(\rho_1(g)\mathbf{k}) = \rho_1(g)s(\mathbf{k}) \tag{25}$$

$$\rho_2(g)M(\rho_1(g)\mathbf{k}) = M(\mathbf{k})\rho_2(g) \tag{26}$$

をすべての  $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^n$  と  $g \in \Gamma$  に対して満たすものとする。また、この関係式が  $s$  を恒等写像芽  $s = id_n$  として成り立つとき  $H$  と  $H'$  は  $\mathcal{C}_\Gamma[SO(p)]$  同値であるという。

次に  $\mathcal{K}_\Gamma[SO(p)]$  同値に関する  $\Gamma$  同変写像芽  $H \in \mathcal{E}_{n,p}^\Gamma$  における接空間  $TK_\Gamma[SO(p)](H)$  を  $\mathcal{K}_\Gamma[SO(p)]$  の  $H$  への無限小作用の集合として次の節のように定義する。

##### 4.1. 接空間 $TK_\Gamma[SO(p)](H)$ の定義とその代数的構造

まず  $\rho_1(\Gamma)$  不変な環を

$$\mathcal{E}_n^\Gamma = \{f: (\mathbb{R}^n, 0) \rightarrow (\mathbb{R}, f(0)) \mid f(\rho_1(g)\mathbf{k}) = f(\mathbf{k})\} \tag{27}$$

と定義し、その極大イデアル  $\mathcal{M}_n^\Gamma$  を  $\mathcal{E}_n^\Gamma$  の写像芽の中で  $\mathbb{R}^n$  の原点を 0 に写すものの集合と定義する。次に  $\rho_1(\Gamma)$  同変写像芽の集合を

$$\theta_\Gamma(n) = \{s: (\mathbb{R}^n, 0) \rightarrow (\mathbb{R}^n, s(0)) \mid s(\rho_1(g)\mathbf{k}) = \rho_1(g)s(\mathbf{k})\} \tag{28}$$

とし  $\rho_1(\Gamma)$  同変写像芽で原点を原点に写すものの集合を  $\theta_\Gamma(n)_0$  とする。

次に  $\mathcal{C}_\Gamma[SO(p)]$  の  $H \in \mathcal{E}_{n,p}^\Gamma$  への無限小作用全体の集合を

$$TC_\Gamma[SO(p)](H) = \left\{ \mathcal{J} \cdot H \left| \begin{array}{l} \mathcal{J}: p \times p \text{ matrix germ, such that} \\ \mathcal{J}^T(\mathbf{k}) = -\mathcal{J}(\mathbf{k}), \\ \rho_2(g)\mathcal{J}(\rho_1(g)\mathbf{k}) = \mathcal{J}(\mathbf{k})\rho_2(g) \end{array} \right. \right\} \tag{29}$$

とする。

$\mathcal{E}_{n,p}^\Gamma$ 、 $\theta_\Gamma(n)$ 、 $\theta_\Gamma(n)_0$ 、および  $TC_\Gamma[SO(p)](H)$  は有限生成  $\mathcal{E}_n^\Gamma$  加群となる。 $\theta_\Gamma(n)_0$  と  $TC_\Gamma[SO(p)](H)$  により  $TK_\Gamma[SO(p)](H)$  は

$$TK_\Gamma[SO(p)](H) = TC_\Gamma[SO(p)](H) + dH(\theta_\Gamma(n)_0) \tag{30}$$

と書くことができ、これは  $\Gamma$  同変写像芽  $\mathcal{E}_{n,p}^\Gamma$  の部分加群となる。

$TK_\Gamma[SO(p)](H)$  と同様にして、 $\mathcal{K}_\Gamma[SO(p)]$  同値に関する  $H \in \mathcal{E}_{n,p}^\Gamma$  における拡大接空間を

$$T_e\mathcal{K}_\Gamma[SO(p)](H) = TC_\Gamma[SO(p)](H) + dH(\theta_\Gamma(n)), \quad (31)$$

と定義する。拡大接空間は  $H$  に作用する微分同相芽として、必ずしも  $\mathbb{R}^n$  の原点を  $\mathbb{R}^n$  の原点に写すとは限らないものも考えるという点が、先の接空間との違いである。この拡大接空間  $T_e\mathcal{K}_\Gamma[SO(p)](H)$  も  $\mathcal{E}_{n,p}^\Gamma$  の部分加群となり、その剰余加群  $\frac{\mathcal{E}_{n,p}^\Gamma}{T_e\mathcal{K}_\Gamma[SO(p)](H)}$  を定義することができる。この剰余加群を  $\mathbb{R}$  係数ベクトル空間と見たときの次元

$$\dim_{\mathbb{R}} \frac{\mathcal{E}_{n,p}^\Gamma}{T_e\mathcal{K}_\Gamma[SO(p)](H)} \quad (32)$$

を  $H$  の  $\mathcal{K}_\Gamma[SO(p)]$  同値に関する余次元と定義する。

#### 4.1.1. 例: $TK_\Gamma[SO(p)]$ ( $n=2, p=3, \Gamma = \mathbf{C}_{3v} + \mathbf{T}$ )

$\mathcal{E}_n^\Gamma$  は  $u = k_+k_-$  と  $v = k_+^6 + k_-^6$  という二つの代数的に独立な不変量で生成される。また、 $\rho_1(\Gamma)$  同変な写像芽は  $\theta_\Gamma(n) = \theta_\Gamma(n)_0$  を満たし、以下のように書ける。

$$\theta_\Gamma(n) = \left\{ (s_1(\mathbf{k}), s_2(\mathbf{k})) \left| \begin{array}{l} s_1(\mathbf{k}) \pm is_2(\mathbf{k}) = S_1(u, v)k_\pm + S_2(u, v)k_\mp^5 \\ u = k_+k_-, v = k_+^6 + k_-^6, S_j: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R} (j=1, 2) \end{array} \right. \right\} \quad (33)$$

$C_\Gamma[SO(p)]$  同値に関する  $H$  における接空間  $TC_\Gamma[SO(p)](H)$  と  $\Gamma$  同変写像芽の集合  $\mathcal{E}_{n,p}^\Gamma$  はそれぞれ

$$TC_\Gamma(H) = \langle (k_+^2\mathcal{J}_+ + k_-^2\mathcal{J}_-) \cdot H, (k_+^4\mathcal{J}_+ + k_-^4\mathcal{J}_-) \cdot H, i(k_+^6 - k_-^6)\mathcal{J}_3 \cdot H \rangle_{\mathcal{E}_n^\Gamma} \quad (34)$$

と

$$\mathcal{E}_{n,p}^\Gamma = \langle i(k_-\sigma_+ - k_+\sigma_-), i(k_+^5\sigma_+ - k_-^5\sigma_-), (k_+^3 + k_-^3)\sigma_3 \rangle_{\mathcal{E}_n^\Gamma} \quad (35)$$

のように書ける。ただしここで

$$\mathcal{J}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \mathcal{J}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \mathcal{J}_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (36)$$

と  $\mathcal{J}_\pm = \mathcal{J}_1 \pm i\mathcal{J}_2$  としており、 $\langle \cdot \rangle_{\mathcal{E}_n^\Gamma}$  は  $\cdot$  で生成される  $\mathcal{E}_n^\Gamma$  加群としている。

### 5. $\Gamma = \mathbf{C}_{3v} + \mathbf{T}$ の場合における $\Gamma$ 同変写像芽の分類

この場合には任意の  $\Gamma$  同変写像芽  $H \in \mathcal{E}_{n,p}^\Gamma$  に対して、ある  $f_j: (\mathbb{R}^2, 0) \rightarrow (\mathbb{R}, f_j(0))$  ( $j=1, 2, 3$ ) が存在して

$$H(\mathbf{k}) = if_1(u, v)(k_-\sigma_+ - k_+\sigma_-) + if_2(u, v)(k_+^5\sigma_+ - k_-^5\sigma_-) + f_3(u, v)(k_+^3 + k_-^3)\sigma_3 \quad (37)$$

のように一通りに表現することができる。ただし、 $u = k_+k_-$  および  $v = k_+^6 + k_-^6$  としている。この節では式(37)の短縮形として  $H = [f_1, f_2, f_3]$  と書くことにする。

以上の設定の下、次が成り立つ。

**定理 5.1.** 任意の余次元7以下の  $\Gamma$  同変写像芽  $H \in \mathcal{E}_{n,p}^\Gamma$  は表1の写像芽のいずれか一つと  $\mathcal{K}_\Gamma[SO(p)]$  同値となる。

Representative	range	codim
$[1, 0, 0]$		0
$[u, 0, c_2 + c_4u]$	$c_2 \neq 0$	3
$[u, c_4 + c_5u, 0]$	$c_4 \neq 0$	4
$[0, u^\ell + c_{\ell+4}u^{\ell+1}, c_2]$	$c_2 \neq 0, \ell = 0, 1, 2, 3$	$\ell + 4$
$[u, c_5u + c_7v + c_8v^2, c_6v]$	$c_5c_6 \neq 0, -9c_6^2 + 4c_5c_7 \neq 0,$ $16c_5^3c_6^2 + 27c_6^4 - 72c_5c_6^2c_7 - 16c_5^2c_7^2 + 64c_7^3 \neq 0$	7
$[u, c_5u + c_7v, c_6v + c_8v^2]$	$c_5c_6 \neq 0, -9c_6^2 + 4c_5c_7 = 0, -c_5^2 + 3c_7 \neq 0$	7
$[u, c_7v + c_8v^2, c_6v]$	$c_6 \neq 0, 64c_7^3 + 27c_6^4 \neq 0$	7
$[u, c_7v + c_8uv, 0]$	$c_7 \neq 0$	7
$[u, c_5u + c_7v + c_8v^2, 0]$	$c_5c_7 \neq 0, -c_5^2 + 4c_7 \neq 0$	7

表 1: 余次元7までの  $\Gamma = C_{3v+\Gamma}$  の場合の  $\Gamma$  同変写像芽の  $\mathcal{K}_\Gamma [SO(p)]$  同値での分類表。一番左の列が各同値類の代表元、中央の列が (モジュライ) パラメータの取りうる範囲 (指定のないものは任意の  $\mathbb{R}$  を取りうる。)、右の列が各類の余次元。

## 6. 同変普遍開折定理

この節では同変普遍開折定理 [8] を我々の設定での  $\Gamma$  同変な場合に適用する。まず、同変普遍開折定理を述べるための用語を説明する。まず  $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_k) \in \mathbb{R}^k$  を  $k$  個のパラメータとし  $\mathcal{E}_{n+k,p}^\Gamma$  を  $k$  個のパラメータを持つ  $\Gamma$  同変な写像芽の集合

$$\mathcal{E}_{n+k,p}^\Gamma = \left\{ \mathcal{H} \left| \begin{array}{l} \mathcal{H}: (\mathbb{R}^{n+k}, 0) \rightarrow (\mathbb{R}^p, 0), \\ \forall g \in \Gamma, (\mathbf{k}, \alpha) \in \mathbb{R}^{n+k}, \rho_2(g) \mathcal{H}(\rho_1(g) \mathbf{k}, \alpha) = \mathcal{H}(\mathbf{k}, \alpha) \end{array} \right. \right\} \quad (38)$$

であるとする。  $H \in \mathcal{E}_{n,p}^\Gamma$  を任意の  $\Gamma$  同変写像芽であるとしたとき、その  $k$  パラメータ  $\Gamma$  開折を写像芽  $\mathcal{H} \in \mathcal{E}_{n+k,p}^\Gamma$  であり  $\mathcal{H}(\mathbf{k}, 0) = H(\mathbf{k})$  を任意の  $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^n$  に対して満たすものとする。次に、 $\Gamma$  同変横断開折 (versal unfolding) を定義する。概していうと  $H$  の  $\Gamma$  同変横断開折とは写像芽  $H$  の任意の  $\Gamma$  同変開折の情報を含んでいるものである。まず  $\mathcal{H}' \in \mathcal{E}_{n+k',p}^\Gamma$  が  $\mathcal{H} \in \mathcal{E}_{n+k,p}^\Gamma$  の因子に含まれる (factors through) ということ、ある写像芽

$$s: (\mathbb{R}^{n+k'}, 0) \rightarrow (\mathbb{R}^n, 0), \quad (39)$$

$$M: (\mathbb{R}^{n+k'}, 0) \rightarrow (SO(p), 0), \quad (40)$$

$$A: (\mathbb{R}^{k'}, 0) \rightarrow (\mathbb{R}^k, 0), \quad (41)$$

が存在して

$$\mathcal{H}'(\mathbf{k}, \beta) = M(\mathbf{k}, \beta) \mathcal{H}(s(\mathbf{k}, \beta), A(\beta)) \quad (42)$$

がすべての  $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^2$  と  $\beta \in \mathbb{R}^{k'}$  に対して満たされることをいう。ただし、それらの写像芽は

$$M(\mathbf{k}, 0) = I_p, \quad s(\mathbf{k}, 0) = \mathbf{k}, \quad (43)$$

および

$$\rho_2(g) M(\rho_1(g) \mathbf{k}, \alpha) = M(\mathbf{k}, \alpha) \rho_2(g), \quad (44)$$

$$s(\rho_1(g) \mathbf{k}, \alpha) = \rho_1(g) s(\mathbf{k}, \alpha), \quad (45)$$

をすべての  $g \in \Gamma$  と  $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^n$  に対して満たすものとする。もし以上のことが成り立つとすると任意の  $\beta \in \mathbb{R}^{k'}$  に対し  $\Gamma$  同変写像芽  $\mathcal{H}'(\cdot, \beta)$  は  $\mathcal{H}(\cdot, A(\beta))$  と  $\mathcal{K}_\Gamma[SO(p)]$  同値となる。 $\mathcal{H} \in \mathcal{E}_{n+k,p}^\Gamma$  が  $H \in \mathcal{E}_{n,p}^\Gamma$  の  $\Gamma$  横断同変開折であるとは  $H$  の任意の  $\Gamma$  同変開折が  $\mathcal{H}$  の因子に含まれることと定義する。 $\Gamma$  同変横断開折が普遍開折であるとは  $\mathcal{H}$  が必要最小限の数のパラメータに依存していることを指す。

**定理 6.1** ( $\Gamma$  同変普遍開折定理).  $\Gamma$  を  $\mathbb{R}^n$  と  $\mathbb{R}^p$  に表現  $\rho_1$  と  $\rho_2$  を通して作用するコンパクト Lie 群であるとする。 $H \in \mathcal{E}_{n,p}^\Gamma$  を  $\Gamma$  同変写像芽とし  $\mathcal{H} \in \mathcal{E}_{n+k,p}^\Gamma$  を  $H$  の  $k$  パラメータ開折とする。ただし、 $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_k)$  とする。すると  $\mathcal{H}$  は

$$\mathcal{E}_{n,p}^\Gamma = T_e \mathcal{K}_\Gamma[SO(p)] + \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{k}, 0)}{\partial \alpha_1}, \dots, \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{k}, 0)}{\partial \alpha_k} \right\rangle_{\mathbb{R}} \quad (46)$$

が成り立つとき、またそのときに限り  $\Gamma$  同変横断開折となる。特に  $k$  が  $H$  の余次元に等しいときそれは  $\Gamma$  同変普遍開折となる。

**系 6.1.**  $H \in \mathcal{E}_{n,p}^\Gamma$  とし  $W \subset \mathcal{E}_{n,p}^\Gamma$  を  $\mathbb{R}$  係数ベクトル空間であり

$$\mathcal{E}_{n,p}^\Gamma = T_e \mathcal{K}_\Gamma[SO(p)] \oplus W \quad (47)$$

を満たすものとする。 $P_1(\mathbf{k}), \dots, P_k(\mathbf{k})$  をベクトル空間  $W$  の基底とすると、

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}, \alpha) = H(\mathbf{k}) + \sum_{j=1}^k \alpha_j P_j(\mathbf{k}) \quad (48)$$

は  $H$  の  $\Gamma$  同変普遍開折となる。

### 6.1. 例: $n = 2, p = 3, \Gamma = \mathbf{C}_{3v} + \mathbf{T}$ の設定における普遍開折の構成

ここでは表 1 のリストの二番目の類の代表元  $H(\mathbf{k}) = [u, 0, c_2 + c_4 u]$  ( $c_2 \neq 0, c_4 \in \mathbb{R}$ ) の  $\Gamma$  同変普遍開折を構成する。この場合には

$$\mathcal{E}_{n,p}^\Gamma = T\mathcal{K}_\Gamma[SO(p)](H) + \langle [1, 0, 0], [0, 0, 1], [0, 0, u] \rangle_{\mathbb{R}} \quad (49)$$

が成立し、系 6.1 を用いると  $\mathcal{H}(\mathbf{k}, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = [u + \alpha_1, 0, (c_2 + \alpha_2) + (c_4 + \alpha_3)u]$  が  $H$  の  $\Gamma$  同変普遍開折となることがわかる。今の場合には  $\alpha_2$  と  $\alpha_3$  はモジュライパラメータを変化させる方向に対応しており、これらのパラメータ方向に沿って  $H$  を変形しても、それはモジュライファミリー内の変化となるが、 $\alpha_1$  に沿った変形ではより大きな定性的な変化を伴う。それを見るために、 $\mathcal{H}(\mathbf{k}, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$  の二つの固有値の  $\mathbf{k}$  に関するグラフの形状が  $\alpha_1$  の値とともにどのように変化するかを図 1 に示す。この図を見ると  $\alpha = 0$  では二つの固有値のグラフが原点において接触しているが、 $\alpha = \pm 1$  ではグラフは原点において円錐状に交差している。これは Dirac cone と呼ばれている。実際、adjacency diagram を書くことにより  $\alpha \neq 0$  では写像芽は  $[1, 0, 0]$  と  $\mathcal{K}_\Gamma[SO(p)]$  同値になることがわかり、グラフは原点で円錐状に交差する。

## 7. 結論と将来展望

我々はバンド交差近傍のハミルトニアンを分類するための一般的な枠組みを提案し例として結晶表面の  $\mathbf{C}_{3v}$  と時間反転対称性の下での余次元 7 までのハミルトニアンの分類を行った。また、その普遍開折を調べることによりバンド衝突近傍でどのようなバン

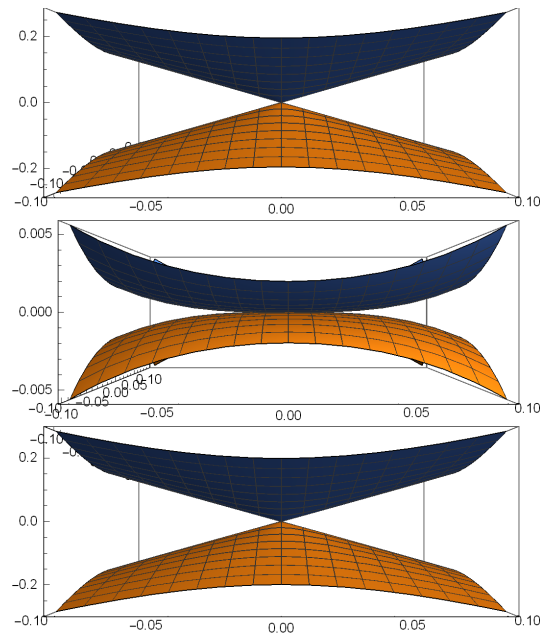


図 1:  $\mathcal{H}(\mathbf{k}, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$  の固有値の  $\mathbf{k}$  に対するグラフが  $\alpha_2 = \alpha_3 = 0$ ,  $c_2 = 1, c_4 = 0$  と固定し  $\alpha_1$  を  $-1$  (上),  $0$  (中),  $1$  (下) と変化させたときにどのように変化するかを示す。

ドの幾何学的変化が引き起こされるのかを議論した。これはより大域的なバンドの幾何学的構造の理解とそのトポロジカルな構造 [9] の変化を調べるための第一歩である。

ここでは  $C_{3v}$  と時間反転対称性の下での分類を示すにとどまったが、どのような磁気 (点) 群の対称性の下で考えるのか、どの既約 (複) 表現に属するバンド間の衝突を考えるのかで様々なバリエーションが考えられる。それらを包括的に扱うため計算代数を用いた特異点の自動分類アルゴリズムも開発中であり [2] で報告する予定である。

## 参考文献

- [1] K. Honma, T. Sato, S. Souma, K. Sugawara, Y. Tanaka, and T. Takahashi. Switching of Dirac-Fermion Mass at the Interface of Ultrathin Ferromagnet and Rashba Metal. *Phys. Rev. Lett.*, 115:266401, 2015.
- [2] H. Teramoto, A. Tsuchida, Y. Kabata, K. Kondo, S. Izumiya, K. Nabeshima, and T. Komatsuzaki. Classification of Hamiltonians under time-reversal symmetry and crystallographic point group symmetries on a surface in neighborhoods of band crossings in terms of singularity theory. *J. Math. Phys.*, in preparation.
- [3] H. Teramoto, A. Tsuchida, K. Kondo, S. Izumiya, M. Toda, and T. Komatsuzaki. Application of Singularity Theory to Bifurcation of Band Structures in Crystals. *the Journal of Singularities*, submitted.
- [4] L. Fu. Hexagonal Warping Effects in the Surface States of the Topological Insulator  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ . *Phys. Rev. Lett.*, 103:266801, 2009.
- [5] C. X. Liu and X. L. Qi and H. Zang and X. Dai and Z. Fang and S. C. Zhang. Model Hamiltonian for topological insulators. *Phys. Rev. B*, 82:045122, 2010.
- [6] H. Teramoto, K. Kondo, S. Izumiya, M. Toda, and T. Komatsuzaki. Classification of Hamiltonians in neighborhoods of band crossings in terms of the theory of singularities. *J. Math. Phys.*, 58:073502, 2017.
- [7] S. Izumiya, M. Takahashi, and H. Teramoto. Geometric equivalence among smooth



section-germs of vector bundles with respect to structure groups. *in preparation*.

- [8] M. Golubitsky and D. G. Schaeffer. *Singularities and Groups in Bifurcation Theory*, volume II of *Applied Mathematical Science*. Springer, 1985.
- [9] K. Shiozaki, M. Sato, and K. Gomi. Topology of nonsymmorphic crystalline insulators and superconductors. *Phys. Rev. B*, 93:195413, 2016.