駒場現代物理学(2020)第12回講義ノート

1　復習

量子一次元イジング模型

$$H = -J \sum_k \sigma_y^{(k)} \sigma_y^{(k+1)} + -K \sum_k \sigma_z^{(k)} \tag{1.1}$$

をフェルミオンで書き換えた。フェルミオン演算子とはエルミート演算子 $\psi_1,\ \psi_2,\ \ldots \psi_{2N}$で

$$\psi_a \psi_a = 1, \qquad \psi_a \psi_b = -\psi_b \psi_a \quad (a \neq b) \tag{1.2}$$

を満たすもので、以下のように作った:

$$\begin{aligned}
\psi_1 &= \sigma_y^{(1)} \\
\psi_2 &= \sigma_x^{(1)} \\
\psi_3 &= \sigma_z^{(1)} \sigma_y^{(2)} \\
\psi_4 &= \sigma_z^{(1)} \sigma_x^{(2)} \\
&\vdots \\
\psi_{2k-1} &= \sigma_z^{(1)} \sigma_z^{(2)} \cdots \sigma_z^{(k-1)} \sigma_y^{(k)} \\
\psi_{2k} &= \sigma_z^{(1)} \sigma_z^{(2)} \cdots \sigma_z^{(k-1)} \sigma_x^{(k)} \\
&\vdots
\end{aligned} \tag{1.3}$$

すると

$$i\psi_{2k-1}\psi_{2k} = \sigma_z^{(k)}, \qquad i\psi_{2k}\psi_{2k+1} = \sigma_y^{(k)} \sigma_y^{(k+1)} \tag{1.4}$$

なので量子一次元イジング模型は

$$H = -K \sum_k i\psi_{2k-1}\psi_{2k} - J \sum_k i\psi_{2k}\psi_{2k+1} \tag{1.5}$$

と書き直せた。

すると、無限に長い鎖であれば、 $K \leftrightarrow J$ のいれかえは添え字をひとつずらすだけなので、何も起こさない。これは Kramers-Wannier 双対性のフェルミオン表示でのあらわれである。また、$J = K$ で gapless になり、ここが相転移点だった。しかし有限長さの鎖では $J > K$ と $J < K$ には違いがある。それが今回の話題である。

2　境界のゼロモード

まず $J = 0$ の場合をかんがえると

$$H = -K \sum_k i\psi_{2k-1}\psi_{2k} = -K \sum_j \sigma_z^{(j)} \tag{2.1}$$

である。これより基底状態はすべてのサイト $(j = 1, \ldots, N)$ で $\sigma_z^{(j)}$ が $+1$ をとる

$$|\uparrow\uparrow \cdots \uparrow\rangle \tag{2.2}$$

のひとつである。

逆に $K=0$ を考えると

$$H=-J\sum_{k=1}^{N-1} i\psi_{2k}\psi_{2k+1}=-J\sum_{k=1}^{N-1}\sigma_y^{(k)}\sigma_y^{(k+1)} \tag{2.3}$$

である。σ_y と σ_x を一斉にとりかえても固有値はかわらないので

$$H'=-J\sum_k \sigma_z^{(k)}\sigma_z^{(k+1)} \tag{2.4}$$

を考える。いま $\sigma_z^{(1)}\sigma_z^{(2)}$ だけ考えると、$|\uparrow\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\downarrow\rangle$ で $+1$, $|\uparrow\downarrow\rangle$ と $|\downarrow\uparrow\rangle$ で -1 である。するとエネルギーを最小にするのは

$$|\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle,\qquad |\downarrow\downarrow\cdots\downarrow\rangle \tag{2.5}$$

のふたつである。

一般の J,K の場合はもっと難しいが、$J<K$ だと基底状態はひとつで $J>K$ だと基底状態はふたつある。この結果は議論のはじめの二次元古典イジング模型のふるまいをかんがえてもあたりまえでもある。($J<K$ が高温相で全部ぐちゃぐちゃまざった状態がひとつ、$J>K$ が低温相で真っ黒か真っ白に揃った状態のふたつがある。)

これをフェルミオンのことばで考えるとどうなるか? $K=0$ のとき、H の中には ψ_2 から ψ_{2N-1} までしかあらわれず、 ψ_1 と ψ_{2N} はあらわれない。そのため、$\psi_1 H=H\psi_1$, $\psi_{2N}H=H\psi_{2N}$ がなりたつ。このとき、H の固有状態を $|A\rangle$ と書いて $H|A\rangle=E_A|A\rangle$ だとすると、

$$H(\psi_1|A\rangle)=\psi_1 H|A\rangle=\psi_1 E_A|\Psi\rangle=E_A(\psi_1|A\rangle) \tag{2.6}$$

となるので、$|A\rangle$ と $\psi_1|A\rangle$ は両方とも同じ固有値 E_A の固有状態である。同様に $\psi_{2N}|A\rangle$ も同じ固有値をもつ。これは特に E_A が最低固有値の場合もなりたつ。

すなわち、基底状態には ψ_1 と ψ_{2N} が $(\psi_1)^2=(\psi_{2N})^2=1$, $\psi_1\psi_{2N}=-\psi_{2N}\psi_1$ をみたしながら作用する。このためには、基底状態は複素二次元あり、その二次元空間の上には $\psi_1=\sigma_y$, $\psi_{2N}=\sigma_x$ として作用しているということである。

これを「各境界にマヨラナフェルミオンゼロモードがひとつずつ存在する」という。ゼロモードというのは、エネルギーを変えないモードだということで、マヨラナというのは $\psi_{1,2N}$ がエルミート演算子だということをさす。

$K=0$ のときに限らず一般に $J>K$ なら境界にマヨラナフェルミオンゼロモードが一つあり、$J<K$ なら無くなることが知られている。これを Kitaev の Majorana wire とか Kitaev chain とか言う[1]。

これは次の意味で不思議な状況である: $K=0$ で J がとてつもなく大きいとすると、基底状態の上の状態は非常にエネルギー差が大きく、低エネルギーの物理には関係ない。考える状態空間は基底状態だけに限ってよい。鎖がとても長く、両端が一光年離れているとする。すると、こちらに ψ_1 があり、一光年はなれたところに ψ_{2N} があり、その二つが二次元の状態空間に作用している。すると、一光年離れているにもかかわらず、「こちらの端の状態空間」と「あちらの端の状態空間」に分解出来ない。なぜなら、 $\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2$ というテンソル積だとすると、状態空間の次元は $(\dim\mathcal{H}_1)(\dim\mathcal{H}_2)$ であるが、いま両端は等価だから $\dim\mathcal{H}_1=\dim\mathcal{H}_2$ である。よって $(\dim\mathcal{H}_1)^2=2$ を解かないといけないが、無理に解くと $\dim\mathcal{H}_1=\dim\mathcal{H}_2=\sqrt{2}$ となって整数でない。

[1] Kitaev, "Unpaired Majorana fermions in quantum wires", arXiv:cond-mat/0010440。

エンタングル状態を以前やったが、これは $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ というテンソル積ベクトル空間の中の状態 $|\Psi\rangle$ で状態のテンソル積 $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$ でない状態だった。今回の状況はさらに酷く、一光年離れているので部分系に部分状態空間 $\mathcal{H}_{1,2}$ を割り当てたい気がするが、それすらできないという状況である。

これはエニオン系でもよく起きる状況である。 Fibonacci エニオンというものは、n 個のエニオン粒子があると、その状態空間の次元 c_n が $c_1 = 1, c_2 = 1, c_{n+2} = c_{n+1} + c_n$ という漸化式を満たすというもので、無理に一個あたりの状態空間の次元を $\dim \mathcal{H}$ とすると $(\dim \mathcal{H})^{n+2} = (\dim \mathcal{H})^{n+1} + (\dim \mathcal{H})^n$ を解かねばならず $\dim \mathcal{H} = (1+\sqrt{5})/2$ となってしまう。

とにかく、局所的状態空間に分解出来ないというのは非常に基本的な性質であるので、 (ハミルトニアンに項をすこし増やしたり係数をすこし変えるなど、物理的には不純物をいれる、等々) ちょっとやそっと系を変形したぐらいではかわらない性質である。これは $J > K$ の Kitaev chain が持つトポロジカルな非自明性である。

しかし $J > K$ の Kitaev chain をふたつ持ってくると、ちょっと変形すると境界のマヨラナゼロモードは消えてしまう。実際、 ψ_a たちにくわえて $\tilde{\psi}_a$ を導入し、

$$H_{\times 2} := -J \sum_{k=1}^{N-1} i\psi_{2k}\psi_{2k+1} - J \sum_{k=1}^{N-1} i\tilde{\psi}_{2k}\tilde{\psi}_{2k+1} \tag{2.7}$$

を考える。ただし $\tilde{\psi}_a$ 同士は (1.2) と同じ交換関係をみたし、 $a = b, a \neq b$ にかかわらず

$$\psi_a \tilde{\psi}_b = -\tilde{\psi}_b \psi_a \tag{2.8}$$

とする。

基底状態には $\psi_1, \psi_{2N}, \tilde{\psi}_1, \tilde{\psi}_{2N}$が作用する。よって基底状態は $2 \times 2 = 4$ 次元になる。これはこちらの端に qubit がひとつ、あちらの端に qubit がひとつあり、

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \sigma_y^{(1)} \\ \tilde{\psi}_1 &= \sigma_x^{(1)} \\ \psi_{2N} &= \sigma_z^{(1)}\sigma_y^{(2)} \\ \tilde{\psi}_{2N} &= \sigma_z^{(1)}\sigma_x^{(2)} \end{aligned} \tag{2.9}$$

と作用していると思って良い。まず基底状態が、二つの端にそれぞれ属する qubit の積に分解された。さて、ハミルトニアンを $H_{\times 2} + H_{\text{こちら境界}} + H_{\text{あちら境界}}$ ただし

$$H_{\text{こちら境界}} = Ai\psi_1\tilde{\psi}_1 = A\sigma_z^{(1)}, \qquad H_{\text{あちら境界}} = A'i\psi_{2N}\tilde{\psi}_{2N} = A'\sigma_z^{(2)} \tag{2.10}$$

とする。 $J \gg |A|, |A'$ でかつ $A, A' < 0$ ととっておくと、 $\sigma_z^{(1,2)}$ が $+1$ である状態、すなわち $|\uparrow\uparrow\rangle$ のみが最低エネルギー状態になる。よって基底状態は唯一になった。

これにより、$J > K$ の Kitaev chain が持つトポロジカルな非自明性はふたつあわせると消えてしまうことがわかった。境界マヨラナフェルミオンを一個出すものを 1、出さないものを 0 と思い、系の足し算操作をふたつ系をくっつける (文献ではよく「stack する」と書いてある) こととし、ふたつの系が同じ $=$ というのを、系をすこし変形したら一緒になるという意味に定めると、 $0+0 = 1+1 = 0, 1+0 = 0+1 = 1$ となり、非自明さが $\mathbb{Z}_2 = \{0, 1\}$ という群をなすことがわかる。

これをもって、「1次元でフェルミオンがあり対称性が D 型であるような系のトポロジカルな非自明さは $\mathbb{Z}_2$ という群をなす」といい、これは「トポロジカル絶縁体の周期表」

のひとつの欄に対応する[2]。 (対称性が D 型というのはまだ説明していないが、Kitaev chain はその一例。)

3 ボルディズム群

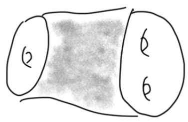
唐突に話を代数トポロジーという数学の分野にうつす。これまでの話との関係は講義のおしまいにあきらかになる。

まず、(向き付け可能な)曲面は連続変形をのぞいて穴の数で分類されるというのは聞いた事があるのではないかと思う:


(3.1)

「トポロジストはコーヒーカップとドーナツの区別がつかない」といわれる話であるが、ドーナツの表面をかんがえていることに注意する。

しかし数学ではいろいろな同値関係を導入して良い。上の話は「同相」(homeomorphic) もしくは「微分同相」(diffeomorphic) という同値関係だが、「同境」(bordant, cobordant)[3] という同値関係もある。二つの d 次元(向き付け可能)多様体 M_1 と M_2 が同境とは、境界つき $(d+1)$ 次元(向き付け可能)多様体でその境界が M_1 と M_2 からなっているものがある場合とする。


(3.2)

すると勝手な n 穴あき曲面は実は空集合と同境である:


(3.3)

これを $\Omega_2^{\text{oriented}} = 0$ と書く。上つき添え字の oriented は向き付きを意味し、下つき添え字は次元、 Ω は同境群 (bordism group, cobordism group) をあらわす。 0 は全部空集合だから自明な群だということ。

0 次元の多様体は点であるが、向きをつけないといけないので $+$ の点と $-$ の点がある。一般の 0 次元向きつき多様体はよって n_+ 個の $+$ の点と n_- 個の $-$ の点からなるが、 $+$ の点 1 つと $-$ の点 1 つをあわせたものは空集合と同境である:

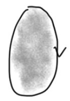
(3.4)

よって、勝手な 0 次元向き付き多様体は n 個の $+$ の点か、空集合か、n 個の $-$ の点か、のどれかと同境である。これを $\Omega_0^{\text{oriented}} = \mathbb{Z}$ と書く。

[2]Kitaev "Periodic table for topological insulators and superconductors", arXiv:0901.2686; Ryu-Schnyder-Furusaki-Ludwig, "Topological insulators and superconductors: ten-fold way and dimensional hierarchy", arXiv:0912.2157. 笠(りゅう)さん本人によるビデオつきの解説が https://topocondmat.org/w8_general/classification.html にある。

[3]Cobordant がもともとの用語であるが、用語が bordant にシフトした。おそらく、数学では「概念」と「co概念」というのがペアであらわれることが認識され、 homology と cohomology もその例であるが、cobordant は cohomology よりも homology に近い概念であることが認識されたので bordant と呼ばれるようになったのではないかと勝手に思っている。

向き付き 1 次元多様体は単に円周をいくつか並べたものであるが、



(3.5)

であるからすべて空集合と同境であり、$\Omega_1^{\text{oriented}} = 0$ である。下のほうは

d	0	1	2	3	4	5	6
$\Omega_d^{\text{oriented}}$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$\mathbb{Z}$	$\mathbb{Z}_2$	0

(3.6)

となっている[4]。

次に多様体に向きだけでなくてスピン構造というものを考える。スピン構造というのは、多様体をパッチを貼り合わせて作る際に 720° 回したか 360° 回したかの情報をきちんと指定したもので、その上ではフェルミオンを考えることが出来る。たとえば二次元のトーラス

(3.7)

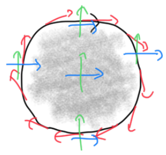
を考えると、縦の辺を同一視する際に 360° 回して貼るか 720° 回す = 0° 回して貼るかを指定しないといけない。同様に横の辺を同一視する際にもその情報が必要である。あわせてトーラス上には四つのスピン構造がある。

同様に円周も線分の端点を同一視していると思うと:

(3.8)

貼る際に 360° 回すか回さないかで二つのスピン構造がある[5]。

さて、円周は空集合と向き付き同境だったが、円周のスピン構造は二種類のうち 360 ° 回してあるもののみ空集合と(スピン構造を考えた上で)同境である。なぜかというと、次の絵を考える:



(3.9)

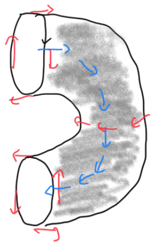
内部の円板上のスピン構造はひとつしかない。回していない座標系を青と緑で書いた。一方で、円周上で「回していない」座標系を赤で書いた。「回していない」というのは、円周を線分の端点をまわさずに同一視したものと考えた際に自然に生じるスピン構造を指定している。ここで赤のベクトルと青のベクトルをみると、円周を一周すると互いに 360° まわっていることがわかる。よって、円板のスピン構造を円周に制限したものは、360° 回して端点を貼ったほうであって、回さずに端点を貼ったものではない。

一方で、回さずに端点を貼ったスピン構造をもつ円周をふたつとってくると、それは

[4]http://www.map.mpim-bonn.mpg.de/Oriented_bordism

[5]弦理論では回すほうを Neveu-Schwarz セクター、回さないほうを Ramond セクターという。略して NS セクター、R セクターという。

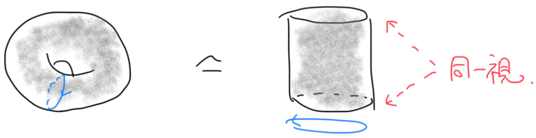
空集合と(スピン構造つき)同境である:



(3.10)

これより、スピン構造付き一次元同境群は $\Omega_1^{\mathrm{spin}} = \mathbb{Z}_2 = \{0, 1\}$ であることがわかる。ただし、1 は 360° まわさずに貼ってつくった円周であり、$1 + 1$ は 0 であることは上の (3.10) が示している。

同じ理屈で、トーラスの中をうめてドーナツにしたばあい、ドーナツのスピン構造を表面のトーラスに制限したスピン構造は、青い方向を一周回った際に 360° 回ったものである。



(3.11)

よって、トーラスを作る際の同一視 (3.7) でどちらも 360° 回さずに貼ってつくったものは中を埋めてドーナツに出来ない。これを 1 として、スピン構造付き二次元同境群はやはり $\Omega_2^{\mathrm{spin}} = \mathbb{Z}_2 = \{0, 1\}$ をなすことが知られている。スピン同境群の下のほうは

d	0	1	2	3	4	5	6
Ω_d^{spin}	$\mathbb{Z}$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	0	$\mathbb{Z}$	0	0

(3.12)

となっている[6]。

4 ボルディズム群とトポロジカル物性

何故ボルディズム群の話をしたのかというと、次のことがある。

いま、d 次元量子系でフェルミオンのあるものを考える。さらに、境界がない場合には基底状態が一次元であるとする。 Kitaev chain はその一例であり、トポロジカル絶縁体/超伝導体はすべてそのタイプの理論である。

これを分類するにはどうするか? 数理物理学者の一連の仕事があり[7] 非常に一般的な結論が出ている。まず、トポロジカル絶縁体 T をひとつ取ってくる。以前学んだ関係を逆にもちいて、$d+1$ 次元の古典系[8]に書き換える。さて、$d+1$ 次元のスピン構造つき多様体 M_{d+1} を考えて、そこをトポロジカル超伝導体がすべて埋めているとする。そのときの分配関数を $Z_T(M_{d+1})$ と書く。そこで対応

$$f_T : M_{d+1} \mapsto \frac{Z_T(M_{d+1})}{|Z_T(M_{d+1})|} \tag{4.1}$$

[6] http://www.map.mpim-bonn.mpg.de/Spin_bordism

[7] Kapustin-Thorngren-Turzillo-Wang "Fermionic Symmetry Protected Topological Phases and Cobordisms" arXiv:1406.7329, Freed-Hopkins "Reflection positivity and invertible topological phases" arXiv:1604.06527, Yonekura "On the cobordism classification of symmetry protected topological phases" arXiv:1803.10796 など。 Freed の講義録 "Lectures on Field Theory and Topology" https://bookstore.ams.org/cbms-133/ も数学が好きな人にはとても良い解説だと思う。

[8] より正確には「$d+1$ 次元の反転正値なユークリッド場の理論」と呼ばれるタイプの理論。

というものを考えると、これは M_{d+1} と M'_{d+1} が同境ならば同じ値になることが[9] 一般的に議論できる。よって、f_T は

$$f_T : \Omega^{\mathrm{spin}}_{d+1} \to U(1) \tag{4.2}$$

という群準同型を定める。ただし $U(1)$ は複素数の偏角のなす群。こういう関数をボルディズム不変量という。一般論は「トポロジカル超伝導体[10]の分類は対応するボルディズム不変量の分類である」という標語にまとまる。

$d=1$ の場合は $\Omega^{\mathrm{spin}}_{d+1} = \mathbb{Z}_2$ だったので、

$$f_T : \mathbb{Z}_2 \to U(1) \tag{4.3}$$

である。$0 \in \mathbb{Z}_2$ の行き先は $1 \in U(1)$ のみであるので、f_T は $1 \in \mathbb{Z}_2$ の行き先 $f_T(1) \in U(1)$ できまるが、$1+1=0 \in \mathbb{Z}_2$ より $f_T(1)^2 = 1$ でなければならず、$f_T(1) = \pm 1$ のどちらかである。これが1次元の(この対称性タイプの)トポロジカル超伝導体の分類をあたえることになる。これが Kitaev chain の $J < K$ と $J > K$ に対応するわけである。

このスピン付き二次元曲面のボルディズム不変量は Arf 不変量として数学では古くから知られているものである。[11] よって、非自明な Kitaev Majorana chain は数学的にはスピン付き二次元面の Arf 不変量であるということがわかった。

5 話せなかったが話したかった内容

Kitaev chain にさらに時間反転を要求すると、対称性クラス BDI とよばれるものになり、自由 (すなわち fermion の二次) な理論を考えている段階では分類は $\mathbb{Z}$ である。しかし、相互作用を導入すると $8 \in \mathbb{Z}$ が自明な理論になり、分類が $\mathbb{Z}_8$ になる[12]。

これは境界のフェルミオンの立場からは、実 Clifford 代数の mod 8 周期性であり[13]、バルクの gapped 理論の立場からは、$\Omega^{\mathrm{pin}-}_2 = \mathbb{Z}_8$ であるということに対応する[14]。Kitaev chain 自体は Arf-Brown-Kervaire 不変量[15]とよばれるボルディズム不変量に対応する。

また、$8 \in \mathbb{Z}$ を自明化するために導入する相互作用で特に綺麗な形のものは Cayley 4 形式という八元数からつくられるもので書ける[16]。

[9] T が torsion なら、すなわち T をいくつか stack すれば自明になるなら

[10] で torsion なもの

[11] https://en.wikipedia.org/wiki/Arf_invariant 。これを 1941 に導入した Cahit Arf はトルコ人で、トルコの切手で Arf 不変量の公式を書いたものがあるらしい。スピン付き二次元面についてその Arf 不変量を考えたのは Atiyah の “Riemann surfaces and spin structures” Annales scientifiques de l'École Normale Supérieure, Série 4, Tome 4 (1971) no. 1, p. 47-62, https://doi.org/10.24033/asens.1205 がはじめだと思う。

[12] Fidkowski-Kitaev “The effects of interactions on the topological classification of free fermion systems” arXiv:0904.2197。

[13] Atiyah-Bott “Clifford modules”, Topology 3 (1963) 3–38, https://doi.org/10.1016/0040-9383(64)90003-5 Wall, “Graded Brauer Group”, J. Reine Angew. Math. 213 (1963/64) 187–199, https://doi.org/10.1515/crll.1964.213.187

[14] R. C. Kirby and L. R. Taylor, “Pin structures on low-dimensional manifolds”, London Mathematical Society Lecture Note Series, vol. 151, 1990, pp. 177–242.

[15] Brown, “Generalizations of the Kervaire invariant”, Ann. of Math. (2) 95 (1972) 368–383, https://www.jstor.org/stable/1970804

[16] Cayley 4 形式は Harvey-Lawson “Calibrated geometries,” Acta Math. 148 (1982), 47–157 https://projecteuclid.org/euclid.acta/1485890157 で指摘されたもの。