超伝導体のための新しい系統的トポロジカル不変量：一般化された巻き付き数とねじれ不変量

塩崎謙

京都大学基礎物理学研究所

ken.shiozaki@yukawa.kyoto-u.ac.jp

2023年12月22日@YITP

共同研究者：小野清志郎氏（理研）

Refs: KS=Ono 2304.01827, Ono=KS 2311.15814.

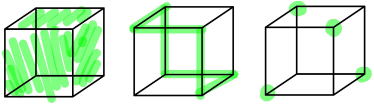
設定と目的

- 波数空間におけるBdGハミルトニアンをinputとする．

$$H_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} h_{\boldsymbol{k}} & \Delta_{\boldsymbol{k}} \\ \Delta_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} & -h_{-\boldsymbol{k}}^{\top} \end{pmatrix}$$

- 磁気空間群の対称性を考慮する．
- ギャップ関数の対称性は手で与える．（この段階で独立な対称性の数は数万通り存在する．）
- トポロジカル不変量とは，ギャップを閉じない$H_{\boldsymbol{k}}$の連続変形（つまり断熱変形）で変化しないような整数値のこと．
- 目標：任意の対称性に対して，トポロジカル不変量を分類し，数値計算アルゴリズムを与える．
- $H_{\boldsymbol{k}}$のトポロジカル不変量の値から何が分かるか？
$\rightarrow$ 表面，ヒンジ状態等の表面ギャップレス状態の有無，あるいは一般点のノードの有無が，原理的には，分かる．（今日はこの話はしません．）

$$(n_1, n_2, \dots,) \in \mathbb{Z}^{\oplus N_\infty} \oplus \mathbb{Z}_2^{\oplus N_2} \oplus \mathbb{Z}_4^{\oplus N_4} \oplus \cdots \quad \Rightarrow$$



磁気空間群の対称性を考慮したトポロジカル不変量はどの程度知られているか？

- ３次元：波数空間のトーラスT^3全体で定義されるトポロジカル不変量は既知.
  Schnyder=Ryu=Furusaki=Ludwig 0803.2786

例：時間反転対称な超伝導体

カイラル演算子Γを用いて，３次元巻き付き数が整数値のトポロジカル不変量.

$$W_3 = \frac{1}{48\pi^2}\int_{T^3} \mathrm{tr}\,[\Gamma(H_{\boldsymbol{k}}^{-1}dH_{\boldsymbol{k}})^3] \in \mathbb{Z}, \quad \Gamma \sim U(\mathcal{T})U(\mathcal{C})^*.$$

- ０次元：波数空間の高対称点におけるトポロジカル不変量，つまり，ある波数点$\boldsymbol{k}$におけるハミルトニアン$H_{\boldsymbol{k}}$の各既約表現のブロックのサイズ，あるいはPfaffianの符号は，トポロジカル不変量の一種.

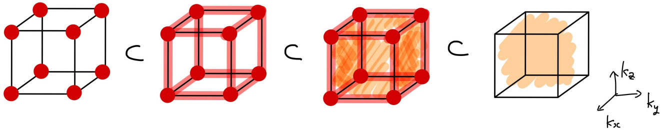
例：電子正孔対称操作で不変な波数$\boldsymbol{k} \equiv -\boldsymbol{k}$

Pfaffianが定義でき，その符号が$\mathbb{Z}_2$値のトポロジカル不変量.

$$\tau_x H_{\boldsymbol{k}}^* \tau_x^\dagger = -H_{\boldsymbol{k}} \quad \Rightarrow \quad (H_{\boldsymbol{k}}\tau_x)^\top = -H_{\boldsymbol{k}}\tau_x \quad \Rightarrow \quad \mathrm{sgn}\ \mathrm{pf}\,[H_{\boldsymbol{k}}\tau_x] \in \{\pm 1\}.$$

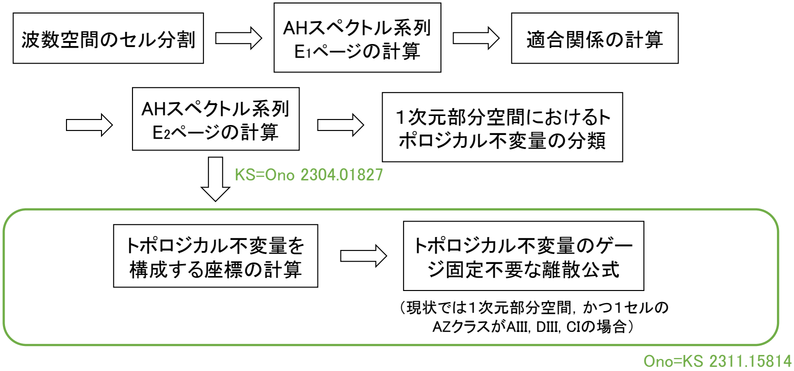
（つづき）

- この中間が未知．つまり，波数空間の 1 次元，2 次元の部分空間において構成されるトポロジカル不変量の機械的な構成方法が知られていなかった．



- 本研究：1 次元部分空間において定義されるトポロジカル不変量のうち，あるクラスについては，トポロジカル不変量の構成アルゴリズムを与えた．
- あるクラスとは，1 次元部分空間を構成する 1 セル（線分）上において，Altland=Zirnbauer（AZ）クラスがAIII, DIII, CIの場合．（例：時間反転対称かつ，ギャップ関数が点群の自明表現の場合．）

- 今日はトポロジカル不変量の数値計算実装の概略を説明します．詳細は論文を見てください．



- １次元巻き付き数と，高対称点のバンド縮退に由来する$\mathbb{Z}_2$不変量の，完全な一般化を行う，という定式化を行うので，まずは１次元巻き付き数と$\mathbb{Z}_2$数を説明します．

カイラル対称性と$\mathbb{Z}$不変量

- カイラル対称性

$$\Gamma H_k \Gamma^{-1} = -H_k, \qquad \Gamma^2 = 1,$$

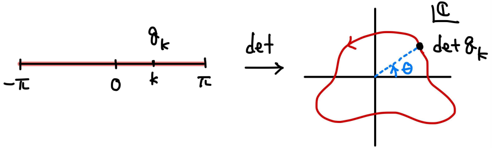
が存在する場合（クラスAIII），$\Gamma = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$なる基底を取ると，ハミルトニアン$H_k$は

$$H_k = \begin{pmatrix} & q_k^\dagger \\ q_k & \end{pmatrix}, \qquad q_k \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{C}),$$

なる表示を取る，

- 波数空間におけるループ$k \in S^1$上において，$\det q_k = |\det q_k| e^{i\theta_k}$のU(1)位相部分 θ_k の巻き付きは$\mathbb{Z}$値のトポロジカル不変量を与える．

$$W_1 := \frac{1}{2\pi} \oint d_k \log \det q_k = \frac{1}{2\pi} \oint d\theta_k \in \mathbb{Z}.$$



バンド縮退と$\mathbb{Z}_2$不変量

- ループではなくても，波数空間上の線分であって端点でバンドが縮退する場合には$\mathbb{Z}_2$に値を取るトポロジカル不変量が構成できる場合がある.
- カイラル対称性に加えて，時間反転対称性

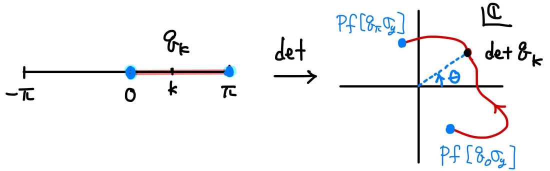
$$\sigma_y H_k^* \sigma_y = H_{-k}$$

が存在する場合（クラスDIII），非対角行列q_kは転置型の対称性を持つ.

$$\sigma_y q_k^\top \sigma_y = q_{-k}.$$

- このとき，対称点$k = 0, \pi$においてはPfaffian $\mathrm{pf}\,[q_{k_0}\sigma_y]$が定義できる.
- $\mathrm{pf}\,[q_{k_0}\sigma_y]^2 = \det[q_{k_0}\sigma_y]$に注意すると，$\{\pm 1\}$に量子化する$\mathbb{Z}_2$不変量を構成することができる.

$$(-1)^\nu := \exp\left[\frac{1}{2}\int_0^\pi d\log\det q_k\right] \times \frac{\mathrm{pf}\,[q_0\sigma_y]}{\mathrm{pf}\,[q_\pi\sigma_y]} \in \{\pm 1\}.$$



既約分解とカイラル演算子：$\boldsymbol{k}$点の対称性

- 1セル上の波数点$\boldsymbol{k}$を固定する部分群$G_{\boldsymbol{k}}=\{g\in G|g\boldsymbol{k}\equiv\boldsymbol{k}\}$の，並進群$\Pi$による商群$G_{\boldsymbol{k}}/\Pi$は，ユニタリ/反ユニタリと，BdGハミルトニアン$H_{\boldsymbol{k}}$と可換/反可換かの$2\times2=4$通りの集合に分離する．

$$G_{\boldsymbol{k}}/\Pi=\underbrace{\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{Uni}}}_{\text{ユニタリ型}}\coprod\underbrace{\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{Chi}}}_{\text{カイラル型}}\coprod\underbrace{\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{TRS}}}_{\text{TRS型}}\coprod\underbrace{\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{PHS}}}_{\text{PHS型}}.$$

群元$g\in G_{\boldsymbol{k}}/\Pi$の対称性行列を$U_{\boldsymbol{k}}(g)$と書くと，各4通りの場合について対称性は以下のように書かれる．

$$\begin{cases}U_{\boldsymbol{k}}(g)H_{\boldsymbol{k}}U_{\boldsymbol{k}}(g)^{\dagger}=H_{\boldsymbol{k}}, & g\in\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{Uni}}\ \text{(ユニタリ型)}\\ U_{\boldsymbol{k}}(g)H_{\boldsymbol{k}}U_{\boldsymbol{k}}(g)^{\dagger}=-H_{\boldsymbol{k}}, & g\in\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{Chi}}\ \text{(カイラル型)}\\ U_{\boldsymbol{k}}(g)H_{\boldsymbol{k}}^{*}U_{\boldsymbol{k}}(g)^{\dagger}=H_{\boldsymbol{k}}, & g\in\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{TRS}}\ \text{(TRS型)}\\ U_{\boldsymbol{k}}(g)H_{\boldsymbol{k}}^{*}U_{\boldsymbol{k}}(g)^{\dagger}=-H_{\boldsymbol{k}}, & g\in\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{PHS}}\ \text{(PHS型)}\end{cases}$$

既約分解とカイラル演算子：AZクラス

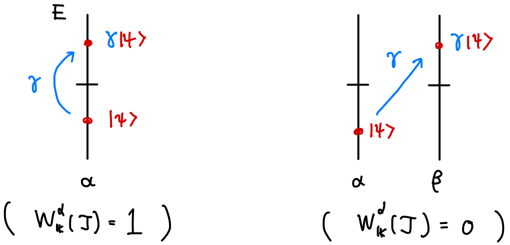
- $H_{\boldsymbol{k}}$は群$\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{Uni}}$の既約表現$\alpha, \beta, \dots$のセクターにブロック対角化される.

$$H_{\boldsymbol{k}} = H_{\boldsymbol{k}}^{\alpha} \oplus H_{\boldsymbol{k}}^{\beta} \oplus \cdots .$$

- カイラル型の対称性群$\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{chi}}$が空集合でない場合を考える．カイラル型の対称性は，既約表現 α で“閉じる”か，別の既約表現にマップされるかどうかは，直交関係を計算すれば判定できる.

$$W_{\boldsymbol{k}}^{\alpha}(\mathcal{J}) := \frac{1}{|\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{Uni}}|} \sum_{g \in \mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{Uni}}} \left[\frac{z_{\boldsymbol{k}}(g,\gamma)}{z_{\boldsymbol{k}}(\gamma, \gamma^{-1} g \gamma)} \chi_{\boldsymbol{k}}^{\alpha}(\gamma^{-1} g \gamma) \right]^{*} \chi_{\boldsymbol{k}}^{\alpha}(g) \in \{0,1\}.$$

ここで，$\gamma \in \mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{Chi}}$は代表元であり，$z_{\boldsymbol{k}}(g,h) \in U(1)$は磁気空間群，内部自由度の乗数系，ギャップ関数の表現で決まる乗数系，$\chi_{\boldsymbol{k}}^{\alpha}$は既約表現$\alpha$の指標.



既約分解とカイラル演算子：カイラル演算子の導入

- $W_{\boldsymbol{k}}^{\alpha}(\mathcal{J})=1$，つまり，既約表現$\alpha$がカイラル型の対称性$\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{Chi}}$で閉じる場合は，既約表現$\alpha$をユニタリな元で構成される群$\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{Uni}}\coprod\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{Chi}}$に拡大できる．
- 具体的には，$\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{Uni}}\coprod\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{Chi}}$の既約表現$\alpha+,\alpha-$であって，$\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{Uni}}$への制限は$\alpha$に等しく，かつ，$\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{Chi}}$の元に対して$\alpha+,\alpha-$は相対的に符号が異なるものが存在する．

$$\chi_{\boldsymbol{k}}^{\alpha\pm}(g\in\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{Uni}})=\chi_{\boldsymbol{k}}^{\alpha}(g),\quad \chi_{\boldsymbol{k}}^{\alpha-}(g\in\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{Chi}})=-\chi_{\boldsymbol{k}}^{\alpha+}(g).$$

- (Remark.) 標準的な$\alpha+,\alpha-$の選び方は存在しないので，どちらが$\alpha+,\alpha-$であるかは手で選ぶ．
- 既約表現$\alpha\pm$への直交射影の差として，αセクターにおけるカイラル演算子$\Gamma_{\boldsymbol{k}}^{\alpha}$が定義される．

$$\Gamma_{\boldsymbol{k}}^{\alpha}:=P_{\boldsymbol{k}}^{\alpha+}-P_{\boldsymbol{k}}^{\alpha-},$$
$$P_{\boldsymbol{k}}^{\alpha\pm}=\frac{\dim(\alpha)}{|\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{Uni}}\coprod\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{Chi}}|}\sum_{g\in\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{Uni}}\coprod\mathcal{G}_{\boldsymbol{k}}^{\mathrm{Chi}}}[\chi_{\boldsymbol{k}}^{\alpha\pm}(g)]^{*}U_{\boldsymbol{k}}(g).$$

- カイラル演算子$\Gamma_{\boldsymbol{k}}^{\alpha}$は，$\alpha$セクターのハミルトニアン$H_{\boldsymbol{k}}^{\alpha}$と反可換であり，カイラル対称性の役割を果たす．

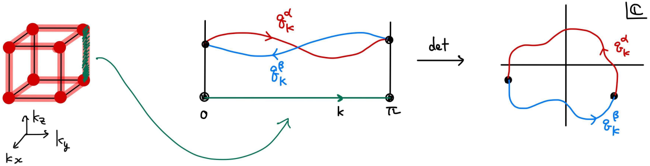
$$\{\Gamma_{\boldsymbol{k}}^{\alpha},H_{\boldsymbol{k}}^{\alpha}\}=0,\qquad(\Gamma_{\boldsymbol{k}}^{\alpha})^{2}=1.$$

既約分解とカイラル演算子：$\mathbb{Z}$不変量

- $\Gamma_{\boldsymbol{k}}^{\alpha} = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$なる基底のもと，ハミルトニアン$H_{\boldsymbol{k}}^{\alpha}$は以下の表示を取る.

$$H_{\boldsymbol{k}}^{\alpha} = \begin{pmatrix} & (q_{\boldsymbol{k}}^{\alpha})^{\dagger} \\ q_{\boldsymbol{k}}^{\alpha} & \end{pmatrix}, \qquad q_{\boldsymbol{k}}^{\alpha} \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{C}).$$

- $\det q_{\boldsymbol{k}}^{\alpha}$の$\mathrm{U}(1)$位相部分の巻き付き，及び端点における固有値縮退を用いて，$\mathbb{Z}$，あるいは$\mathbb{Z}_N$値のトポロジカル不変量が構成される.
- 異なる１セル，異なる既約表現のセクター$\alpha, \beta, \ldots$であっても，全体として$\det q_{\boldsymbol{k}}^{\alpha}$が繋がっている場合は，$\det q_{\boldsymbol{k}}^{\alpha}$の$\mathrm{U}(1)$位相の巻き付き数として，$\mathbb{Z}$不変量が定義できる.
- どの1セル，どの既約表現を用いるか，についてはAtiyah-Hirzebruchスペクトル系列のE_2ページの計算過程で得られる.
  $\to$ 結果はwebpageから確認できる.



非エルミート行列の両立関係

- $\mathbb{Z}_N$トポロジカル不変量の構成において，非エルミート行列の“行列式”が，対称性が低下した場合にどのような関係にあるかを定式化する必要があるので，それを紹介します．
- （一般には，ユニタリ，複素共役，転置，エルミート共役の対称性が存在しますが，以下では簡単のためユニタリな対称性のみを考えます．）

- Gを有限群とし，Gの射影表現$u_g u_h = z_{g,h} u_{gh}, g, h \in G$をひとつ固定する．
- 可逆行列$M \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{C})$は対称性

$$u_g M u_g^{-1} = M, \quad g \in G,$$

を満たすものとする．
- χ_g^βを既約表現βの指標とし，直交射影を

$$P^\beta = \frac{\dim(\beta)}{|G|} \sum_{g \in G} [\chi_g^\beta]^* u_g$$

とする．

非エルミート行列の両立関係（つづき）

- すると，行列Mのβセクターへの射影

$$P^\beta M P^\beta$$

の非ゼロの固有値は$\dim(\beta)$縮退する：

$$\text{Set of eigenvalues of } P^\beta M P^\beta = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{N_\beta}\}^{\times \dim(\beta)}.$$

ここで，$N_\beta = \frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}[\chi_g^\beta]^* \mathrm{tr}\,[u_g] \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$は射影表現$u$に含まれる既約表現$\beta$の数.

- 独立な固有値のみを用いて，一般化された行列式を

$$\mathcal{Z}_G^\beta(M) := \prod_{j=1}^{N_\beta} \lambda_j \in \mathbb{C}$$

と定義する.

- $H \subset G$を部分群とする．Hの既約表現αに対しても同様にして，一般化された行列式

$$\mathcal{Z}_H^\alpha(M) := \prod_{j=1}^{N_\alpha} \lambda_j \in \mathbb{C}$$

が定義される.

非エルミート行列の両立関係（つづき）

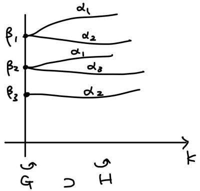
- Gの既約表現βの，部分群Hの既約表現による既約分解を以下のように書く．

$$\beta = \bigoplus_{\alpha} n_{\alpha}^{\beta}\alpha, \quad n_{\alpha}^{\beta} \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$$

非エルミート行列の両立関係（App.C in 2311.15814）.

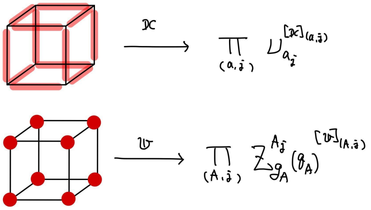
$$\mathcal{Z}_H^{\alpha}(M) = \prod_{\beta \in \{\text{irreps of } G\}} [\mathcal{Z}_G^{\beta}(M)]^{n_{\alpha}^{\beta}}.$$

- → 関係式$\mathrm{pf}\,[M]^2 = \det M$の一般化である．
- 低い対称性（H）のあるセクター（α）における行列式が，高い対称性（G）におけるどのセクターの行列式に分解するか，を示す．



$\mathbb{Z}_N$トポロジカル不変量の構成

- E_2ページ KS=Ono 2311.15814 より，ねじれ群$\mathbb{Z}_N$に値を取るトポロジカル不変量の有無が分かる．
- 必要なセルと既約表現の "座標" を特定する．



- （1 セル a, 既約表現a_j）における$\det q_{\boldsymbol{k}\in A}^{A_j}$の変化

$$\nu_{a_j} = \exp\left[-\frac{2\pi i}{N\,\dim(a_j)}\int_a d\log\det q_{\boldsymbol{k}}^{a_j}\right]$$

と，（0 セルA, 既約表現A_j）における一般化行列式

$$\mathcal{Z}_{\mathcal{G}_A}^{A_j}(q_A)$$

を導入する．

$\mathbb{Z}_N$トポロジカル不変量の構成（つづき）

- その適切な組み合わせで積を構成する：

$$e^{\frac{2\pi i}{N}\mathcal{X}[H_{\boldsymbol{k}}]} = \frac{\prod_{(a,j)}\left[\nu_{a_j}\right]^{[\boldsymbol{x}]_{(a,j)}}}{\prod_{(A,j)}\left[\mathcal{Z}_{\mathcal{G}_A}^{A_j}(q_A)\right]^{[\boldsymbol{v}]_{(A,j)}}} \in \{1, e^{\frac{2\pi i}{N}}, \dots, e^{\frac{(N-1)2\pi i}{N}}\}.$$

- ここで，$\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}$は整数値ベクトルであり，$E_2$ページの計算過程によって得られる.
- $\mathbb{Z}_N$に値を取る，つまり，

$$\left[e^{\frac{2\pi i}{\lambda}\mathcal{X}[H_{\boldsymbol{k}}]}\right]^N = 1$$

が成立することは，前述の非エルミート行列の両立関係

$$\mathcal{Z}_H^{\alpha}(M) = \prod_{\beta\in\{\text{irreps of } G\}} [\mathcal{Z}_G^{\beta}(M)]^{n_{\alpha}^{\beta}}.$$

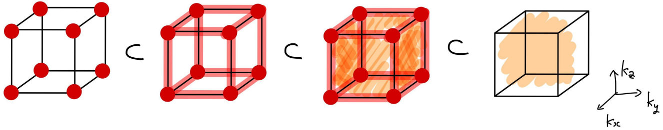
により証明される.

デモ

- E_2ページへのリンク KS=Ono 2304.01827. $E_2^{1,-1}$が1次元部分空間におけるトポロジカル不変量の分類.
- セル分割，既約指標，整数値ベクトル$\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}$へのリンク Ono=KS 2311.15814.

まとめ

- 波数空間において，１次元部分空間において定義されるトポロジカル不変量の一般的な構成方法について議論した．



- 特に，１セルのAZクラスがAIII,DIII,CIの場合（例：時間反転対称かつ，ギャップ関数が点群の自明表現の場合）についてはトポロジカル不変量の具体的な数値実装アルゴリズムを与えた．
- 特に，超伝導ギャップ関数が点群の自明表現の場合（s_{+-}など）に，表面ギャップレス状態を系統的に探索する新たなツールとなる：自明表現の場合は０次元のトポロジカル不変量は存在せず，また，トポロジカル不変量が非自明であれば，何らかの境界ギャップレス状態を意味するため．
- 今日は話しませんでしたが，
  - １セルのAZクラスがAI場合 $\to \mathbb{Z}_2$不変量が定義される．現状ではゲージ固定を要する定式化のみ与えた．
  - １セルのAZクラスがBDIの場合 $\to \mathbb{Z}_2$不変量が定義される．現状では計算実装は議論していない．