ノート：トポロジカル不変量の格子近似公式について

塩崎　謙

April 5, 2024

Abstract

バンド理論で議論されるようなトポロジカル不変量の，数値計算に適した定式化についてまとめる．

1　$S^1 \to U(N)$

S^1の座標を$k \in [0, 2\pi]$と書き，$k = 2\pi$と$k = 0$を同一視する．連続写像

$$g : S^1 \to U(N), \quad k \mapsto g_k, \tag{1}$$

を考える． gの写像度，あるいは‘1次元巻き付き数’$W_1[g]$は$U(1)$位相$\det g_k$が何回巻き付いたかによって定義される． gが滑らかであれば，

$$W_1[g] = \frac{1}{2\pi i}\oint_0^{2\pi} d \log \det g_k = \frac{1}{2\pi i}\oint_0^{2\pi} \mathrm{tr}\,[g_k^\dagger f g_k] \in \mathbb{Z} \tag{2}$$

によって与えられる．

バンド理論等における数値計算においては，$U(N)$値g_kの表式が与えられず，S^1を近似した格子点の集合Λにおいてのみ与えられている場合が多い．例えば，

$$\Lambda = \{k = \frac{2\pi n}{L} \in [0, 2\pi] | n = 0m \dots, L-1\} \tag{3}$$

としてL個の$U(N)$行列のデータ

$$\{g_k\}_{k \in \Lambda} \tag{4}$$

であって，隣り合った$U(N)$値g_k, g_{k+1}が十分‘近く’にあるような状況を考える． ‘近い’という状況を正確に述べると，2点g_k, g_{k+1}を連続的に内挿する方法が一意的であるような条件を満たす，ということである．例えば，

$$g_{k+1} g_k^\dagger = \gamma \mathrm{diag}(e^{i\theta_1}, \dots, e^{i\theta_N}) \gamma^\dagger \tag{5}$$

と対角化したとき，全ての固有値$e^{i\theta_n}, n = 1, \dots, N$の偏角$\theta_n$がある有限の定数$\theta_{\mathrm{gap}} > 0$が存在して$-\pi + \theta_{\mathrm{gap}} < \theta_n < \pi - \theta_{\mathrm{gap}}$を満たす場合は，$g_k, g_{k+1}$を一意的に内挿できる：

$$g_{k+t} = \gamma \mathrm{diag}(e^{it\theta_1}, \dots, e^{it\theta_N}) \gamma^\dagger g_k, \quad t \in [0, 1]. \tag{6}$$

また，有限のθ_{gap}は，数値的安定性を保証する．格子点上における$U(N)$値の集合$\{g_k\}_{k \in \Lambda}$から連続な$g_k, k \in S^1$への内挿が一意的である場合は，格子点上でのみ定義されたg_kであっても写像度$W_1[g]$が定義される．

問題設定は以下．

格子Λの点の数を$|\Lambda|$とする．格子点におけるデータ$\{g_k\}_\Lambda$から写像度$W_1[g]$を計算するための，量子化し，かつ計算量が$O(|\Lambda|)$である [a]アルゴリズムを与えよ．ここで，量子化するとは，結果が必ず整数値で与えられるものを指す．

[a]計算量が$|\Lambda|$の多項式時間であればWilson Dirac fermionと結合させてスペクトル流を見る，overlap fermionを構成して指数を計算する，等の方法があると指摘されて，$O(|\Lambda|)$に変更しました．

上を満たすアルゴリズム，あるいは不変量の表式を単に格子近似公式と呼ぶことにする．

$W_1[g]$については簡単な方法がある．積分を区間に区切り部分積分として書き換える．トポロジカル不変量$W_1[g]$に対して格子近似公式を$W_1^{\rm lat}[g]$と書く．

$$W_1^{\rm lat}[g] = \frac{1}{2\pi} \sum_{k=0}^{L-1} {\rm Arg}(\det g_{k+1}/\det g_k) \tag{7}$$

で良い．ここで，$-\pi \leq {\rm Arg}\ z < \pi$．量子化が保証されるのは，

$$e^{2\pi i W_1^{\rm lat}[g]} = \prod_{k=0}^{L-1} \det g_{k+1}/\det g_k = 1 \tag{8}$$

より．

2 $X_2 \to {\rm Gr}_N(\mathbb{C}^{N+M})$

非自明な例として，グラスマン多様体へのマップの写像度を考える． X_2を向き付けのある閉じた２次元多様体，${\rm Gr}_N(\mathbb{C}^{N+M}) = U(N+M)/(U(N)\times U(M))$を複素グラスマン多様体とする．滑らかな写像

$$P : X_2 \to {\rm Gr}_N(\mathbb{C}^{N+M}), \quad X_2 \ni k \mapsto P_k, \tag{9}$$

を考える． P_kの具体的表示として，$(N+M)\times(N+M)$次元行列のランクNの直交射影とする：

$$P_k \in {\rm Mat}_{(N+M)\times(N+M)}(\mathbb{C}), \quad {\rm rank}[P_k] = N, \quad P_k^2 = P_k, \quad P_k^\dagger = P_k. \tag{10}$$

（ここで，$P_k^\dagger$は行列P_kのエルミート共役.） Pの写像度（第一Chern指標）は以下で与えられる．

$$ch_1[P] = \frac{i}{2\pi} \int_{X_2} {\rm Tr}[PdPdP] \in \mathbb{Z}. \tag{11}$$

$ch_1[P]$の格子近似公式は，バンド理論においては，福井=初貝=鈴木公式として知られる [1]．構成を述べる． X_2を三角形分割により近似し，頂点集合をΛと書く．（任意の多角形分割でも問題ない．）格子Λの各三角形は，あとで述べる条件を満たす程度に‘小さい’ものとする．各三角形Δ^2においての$P_k, k\in\Delta$,の‘局所自明化’$\Phi_{\Delta^2,k}$を取る．

$$P_k = \Phi_{\Delta^2,k}\Phi_{\Delta^2,k}^\dagger, \quad k \in \Delta^2. \tag{12}$$

ここで，$\Phi_{\Delta^2,k}$は$\Phi_{\Delta^2,k}^\dagger\Phi_{\Delta^2,k} = 1_N$を満たす正規直交フレームである．単純計算より，

$${\rm Tr}[PdPdP] = d\ {\rm tr}\,[\Phi_{\Delta^2}^\dagger d\Phi_{\Delta^2}], \quad k \in \Delta^2, \tag{13}$$

を得る．ここで，${\rm tr}$ は$N\times N$行列に対するトレースである．これから表示

$$\begin{align} ch_1[P] &= \frac{i}{2\pi} \sum_{\Delta^2} \int_{\Delta^2} d\ {\rm tr}\,[\Phi_{\Delta^2}^\dagger d\Phi_{\Delta^2}] \tag{14} \\ &= \frac{i}{2\pi} \sum_{\Delta^2} \oint_{\partial\Delta^2} {\rm tr}\,[\Phi_{\Delta^2}^\dagger d\Phi_{\Delta^2}] \tag{15} \end{align}$$

を得る．２番目の等式は$\Phi_{\Delta^2,k}$が三角形Δ^2の内部においても連続的に定義されている場合においてのみ成立することに注意する．仮に$\Phi_{\Delta^2,k}$が三角形Δ^2の境界$k\in\partial\Delta^2$においてのみ連続的に定義されている場合は，線積分の値は2πの不定性が存在する．

$$\oint_{\partial\Delta^2} i{\rm tr}\,[\Phi_{\Delta^2}^\dagger d\Phi_{\Delta^2}] \sim \oint_{\partial\Delta^2} i{\rm tr}\,[\Phi_{\Delta^2}^\dagger d\Phi_{\Delta^2}] + 2\pi. \tag{16}$$

換言すると，$U(1)$位相

$$z_{\Delta^2} := \exp\left[-\oint_{\partial\Delta^2} {\rm tr}\,[\Phi_{\Delta^2}^\dagger d\Phi_{\Delta^2}]\right] \in U(1) \tag{17}$$

は局所自明化$\Phi_{\Delta^2,k}$が境界$\partial\Delta^2$上においてのみ与えられている場合においてもwell-definedである．

三角形Δ^2の頂点を$\Delta^2 = (v_0 v_1 v_2)$と書く． $U(1)$位相z_{Δ^2}は頂点v_0, v_1, v_2のみにおける局所自明化$\Phi_{v_0}, \Phi_{v_1}, \Phi_{v_2}$を用いて近似できる．

$$z_{\Delta^2} \cong z^{\rm lat}_{\Delta^2} := \exp\left[i \arg \det [\Phi^\dagger_{v_0} \Phi_{v_2} \Phi^\dagger_{v_2} \Phi_{v_1} \Phi^\dagger_{v_1} \Phi_{v_0}] \right] \tag{18}$$

$$= \exp\left[i \arg \det [\Phi^\dagger_{v_0} \Phi_{v_2}] \det [\Phi^\dagger_{v_2} \Phi_{v_1}] \det [\Phi^\dagger_{v_1} \Phi_{v_0}] \right]. \tag{19}$$

$U(1)$位相$z^{\rm lat}_{\Delta^2}$は，局所自明化Φ_vを導入せずに，頂点上の直交射影P_vを用いて

$$z^{\rm lat}_{\Delta^2} = Z[P_{v_2} P_{v_1} P_{v_0}] \tag{20}$$

としても得られる．ここで，対角化可能な正方行列Aに対して$Z[A]$は行列Aの非ゼロの固有値の積として定義した．つまり，

$$Z[A] := \prod_{\lambda \in {\rm Spec}(A), \lambda \neq 0} \lambda. \tag{21}$$

（重複を含めたAの固有値集合を${\rm Spec}(A)$と書いた．）格子Λは，以下の条件を満たす程度に‘細かい’ものとする：ある有限の$\theta_{\rm gap} > 0$が存在して，

$$|{\rm Arg}\ z^{\rm lat}_{\Delta^2}| < \pi - \theta_{\rm gap}. \tag{22}$$

この条件のもとで，偏角は数値的に安定に$\mathbb{R}$値として定義される．結局，$ch_1[P]$の格子近似公式は以下のように得られる：

$$ch^{\rm lat}_1[P] := \frac{1}{2\pi} \sum_{\Delta^2} {\rm Arg}\ z^{\rm lat}_{\Delta^2}. \tag{23}$$

量子化$ch^{\rm lat}_1[P] \in \mathbb{Z}$は

$$e^{2\pi i ch^{\rm lat}_1[P]} = \prod_{\Delta^2} z^{\rm lat}_{\Delta^2} = \prod_{\Delta^2} \prod_{v_0 v_1 \in {\rm edges\ \ in\ \ } \partial\Delta^2} \exp i \arg \det [\Phi^\dagger_{v_1} \Phi_{v_0}] \tag{24}$$

であるが，各辺$v_0 v_1$への寄与は隣接する２つの三角形の寄与がキャンセルして，$e^{2\pi i ch^{\rm lat}_1[P]} = 1$が示される．

3 $X_3 \to U(N)$

X_3を向き付けのある閉じた３次元多様体とする．滑らかな写像

$$g : X_3 \to U(N), \quad X_3 \ni k \mapsto g_k, \tag{25}$$

を考える．写像度，あるいは，‘３次元巻き付き数’は

$$W_3[g] = \frac{1}{24\pi^2} \int_{X_3} {\rm tr}\, [(g^\dagger dg)^3] \in \mathbb{Z} \tag{26}$$

で与えられる．（$\frac{1}{24\pi^2} {\rm tr}\, [(g^\dagger dg)^3]$は$H^3[U(N), \mathbb{Z}] = \mathbb{Z}$の生成元に対応するドラムコホモロジー$H_{\rm dR}[U(N)]$の生成元を表現する3形式である．）

$W_3[g]$の格子近似公式は，[2]で与えられている．

4 $X_4 \to {\rm Gr}_N(\mathbb{C}^{N+M})$．未解決問題の例

X_4を向き付けのある閉じた4次元多様体，${\rm Gr}_N(\mathbb{C}^{N+M}) = U(N+M)/(U(N) \times U(M))$を複素グラスマン多様体とする．滑らかな写像

$$P : X_4 \to {\rm Gr}_N(\mathbb{C}^{N+M}), \quad X_4 \ni k \mapsto P_k, \tag{27}$$

$$P_k \in {\rm Mat}_{(N+M)\times(N+M)}(\mathbb{C}), \quad {\rm rank}[P_k] = N, \quad P_k^2 = P_k, \quad P_k^\dagger = P_k, \tag{28}$$

を考える．Pの写像度（第 2 Chern指標）は以下で与えられる．

$$ch_2[P] = \frac{1}{2}(\frac{i}{2\pi})^2 \int_{X_4} \mathrm{Tr}[P(dPdP)^2]. \tag{29}$$

量子化値はX_4の大域的構造に依存する．$X_4 = S^4, T^4$などの場合は$ch_2[P] \in \mathbb{Z}$である．$ch_2[P]$の格子近似公式は未解決問題である．

5 より一般の問題設定

K理論，KO理論の10通りの分類空間，一般次元の多様体Xに対してトポロジカル不変量の格子近似公式は，大部分が未解決問題である．10通りの空間はそれぞれ以下で与えられる．

C_0	$\cup_M \lim_{N\to\infty} U(2N)/U(2N-M)\times U(2N+M)$
C_1	$\lim_{N\to\infty} U(N)$
R_0	$\cup_M \lim_{N\to\infty} O(2N)/O(2N-M)\times O(2N+M)$
R_1	$\lim_{N\to\infty} O(N)$
R_2	$\lim_{N\to\infty} O(2N)/U(N)$
R_3	$\lim_{N\to\infty} U(2N)/Sp(N)$
R_4	$\cup_M \lim_{N\to\infty} Sp(2N)/Sp(2N-M)\times Sp(2N+M)$
R_5	$\lim_{N\to\infty} Sp(N)$
R_6	$\lim_{N\to\infty} Sp(N)/U(N)$
R_7	$\lim_{N\to\infty} U(N)/O(N)$

ここで，

$$Sp(N) = \{g \in U(2N) | i\sigma_y g^* (i\sigma_y)^\dagger = g\}, \quad i\sigma_y = \begin{pmatrix} & 1_N \\ -1_N & \end{pmatrix}, \tag{30}$$

は斜交群である．また，行列Aに対してAの複素共役をA^*と書いた．C_nはK理論の分類空間であり，R_nはKO理論の分類空間である．

$$K^{-n}(X) = [X, C_n], \tag{31}$$

$$KO^{-n}(X) = [X, R_n]. \tag{32}$$

特に，球面上の分類は以下で与えられる．

$$\tilde{K}^{-n}(S^p) = K^{-n}(X, pt) = \pi_p[C_n] = \pi_0[C_{n+p}], \tag{33}$$

$$\tilde{K}O^{-n}(S^p) = KO^{-n}(X, pt) = \pi_p[R_n] = \pi_0[R_{n+p}], \tag{34}$$

n mod 2	0	1
$\pi_0[C_n]$	$\mathbb{Z}$	0

n mod 8	0	1	2	3	4	5	6	7
$\pi_0[R_n]$	$\mathbb{Z}$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	0	$2\mathbb{Z}$	0	0	0

10通りの空間の点は，エルミートな行列$h^\dagger = h$であって$h^2 = 1$を満たす（つまり，固有値が± 1である）行列か，あるいは$U(N)$値の行列$q \in U(N)$に，必要であれば追加の条件を課して実現される．以下にその条件をまとめる：

C_0	h, no constraint
C_1	q, no constraint
R_0	$h, h^* = h$
R_1	$q, q^* = q$
R_2	$h, h^* = -h$
R_3	$q, q^\top = -q$
R_4	$h, (i\sigma_y)h^*(i\sigma_y)^\dagger = h$
R_5	$q, (i\sigma_y)q^*(i\sigma_y)^\dagger = q$
R_6	$h, (i\sigma_y)h^*(i\sigma_y)^\dagger = -h$
R_7	$q, q^\top = q$

問題設定は以下：

与えられたh, qに対して，K, KO群を特徴づけるトポロジカル不変量の格子近似公式を与えよ．

References

[1] Takahiro Fukui, Yasuhiro Hatsugai, Hiroshi Suzuki, *Chern Numbers in Discretized Brillouin Zone: Efficient Method of Computing (Spin) Hall Conductances*, arXiv:cond-mat/0503172.

[2] KS, *A discrete formulation for three-dimensional winding number*, arXiv:2403.05291.