$\pi_n[R_{2-n}] = \mathbb{Z}_2$不変量の構成についてのメモ

塩崎謙

March 6, 2024

分類空間R_nを以下とする．

$$
\begin{array}{c|c}
n & R_n \\
\hline
0 & O(N+M)/O(N)\times O(M) \\
1 & O(N) \\
2 & O(2N)/U(N) \\
3 & U(2N)/Sp(N) \\
4 & Sp(N+M)/Sp(N)\times Sp(M) \\
5 & Sp(N) \\
6 & Sp(N)/U(N) \\
7 & U(N)/O(N)
\end{array}
\tag{1}
$$

Nに対する極限や和集合は省略した． nを対称性クラスと呼ぶ．本ノートの目的は，

$$\pi_n[R_{2-n}] = \mathbb{Z}_2 \tag{2}$$

を検出する不変量の数値計算実装を与えること．

以下，ハミルトニアン$H_{\boldsymbol{k}}$は常にエルミート条件

$$H_{\boldsymbol{k}}^\dagger = H_{\boldsymbol{k}} \tag{3}$$

を満たすものとする．また，平坦化$H_{\boldsymbol{k}}^2 = 1$も仮定する．またハミルトニアンが定義されている空間は，球面S^nとする．

さらに，q_kと書くとユニタリ行列$q_k \in U(N)$を意味するものとする．

1 $\mathbb{R}/2\mathbb{Z}$に値を取る幾何学的量の一部としての定式化

対称性クラス$(2-n)$は，対称性クラス$(3-n)$に対してカイラル対称性Γを加えた対称性とみなすことができることに注意する．よって，対称性クラス$(2-n)$のハミルトニアンは，カイラル対称性Γを忘れることにより，対称性クラス$(3-n)$のハミルトニアンとみなすことができる．このとき，

$$\pi_n[R_{3-n}] = 0 \tag{4}$$

であるから，n次元球面S^n上のハミルトニアン$H_{\boldsymbol{k}}$をS^nの内部である$n+1$次元球D^{n+1}に拡張することができる．拡張$\tilde{H}_{\boldsymbol{k}}$をひとつ固定して，$\pi_{n+1}[R_{3-n}] = 2\mathbb{Z}$を特徴づけるChern数/巻き付き数の被積分関数$f(\tilde{H}_{\boldsymbol{k}})$を用いて幾何学的量を

$$\Theta[H_{\boldsymbol{k}}] = \int_{D^{n+1}} f(\tilde{H}_{\boldsymbol{k}}) \in \mathbb{R} \tag{5}$$

と定義する．このとき拡張の取替は$2\mathbb{Z}$の不定性を生むから，

$$\Theta[H_{\boldsymbol{k}}] \in \mathbb{R}/2\mathbb{Z} \tag{6}$$

の意味でwell-defined．カイラル対称性Γは$\Theta[H_{\boldsymbol{k}}] = -\Theta[H_{\boldsymbol{k}}]$なる制限を導くため，

$$\Theta[H_{\boldsymbol{k}}] \in \{0, 1\} \tag{7}$$

が成立する．これが$\mathbb{Z}_2$不変量に他ならない．

この構成の数値計算実装には，以下の課題がある．

- 通常のChern-Simons項，WZ項は$\mathbb{R}/\mathbb{Z}$に値を取る． $\mathbb{R}/2\mathbb{Z}$に値を取るChern-Simons項，WZ項をどのように数値計算実装するか？

1.1 $(2-n) \to (3-n)$

対称性クラスの変化は，

- カイラル対称性が存在しない場合は，エルミート条件を忘れる．
- カイラル対称性が存在する場合は，カイラル対称性を忘れる．

ことにより実行される．

実際，カイラル対称性が存在しない場合はTRS，PHSのいずれかが存在するから対称性はエルミートなハミルトニアンH_kに対して

$$\mathrm{AI}: \quad H_k^* = H_k, \tag{8}$$
$$\mathrm{D}: \quad H_k^\top = -H_k, \tag{9}$$
$$\mathrm{AII}: \quad \sigma_y H_k^* \sigma_y = H_k, \tag{10}$$
$$\mathrm{C}: \quad \sigma_y H_k^\top \sigma_y = -H_k, \tag{11}$$

と書かれる．H_kのエルミート条件を忘れると，これらの対称性はそれぞれクラスBDI, DIII, CII, CIのエルミートなハミルトニアンH_kの非対角成分に対する対称性に他ならない．

カイラル対称性が存在する場合は，エルミート条件を課したままカイラル対称性を忘れれば良い．

1.2 例：$n=0$．クラス D

クラスDのハミルトニアン

$$H_k^\top = -H_k, \quad k \in \{0,1\} \tag{12}$$

を考える．$\mathbb{Z}_2$不変量

$$\mathrm{Pf}\,[H_0]/\mathrm{Pf}\,[H_1] \in \pm 1 \tag{13}$$

が定義される．この$\mathbb{Z}_2$不変量を上の方針で再定式化する．

エルミート条件を忘れることで対称性のシフトが実現されるが，ここではカイラル対称性を加えた議論もメモしておく．クラスDをクラスDIIIにカイラル対称性を加えたものとみなすには，ハミルトニアンを２倍してカイラル対称性を加えると良い．

$$H'_k = \begin{pmatrix} & H_k \\ H_k^\dagger & \end{pmatrix} \tag{14}$$

とするとH'_kはクラスDIIIの対称性

$$\sigma_z H'_k \sigma_z = -H'_k, \quad \sigma_y H'^*_k \sigma_y = H'_k \tag{15}$$

を満たす．さらにH_kがエルミートであることはさらに対称性

$$\sigma_y H'_k \sigma_y = -H'_k \tag{16}$$

を加えることと等価．

以上の手続きは，H_kを２倍にする必要はなく，単にH_kのエルミート性を忘れることと等価である．クラスDの非エルミートハミルトニアンH_0, H_1をつなぐホモトピー$\tilde{H}_{k\in[0,1]}$をひとつ選ぶ．このとき$\tilde{H}_k$は対称性

$$\tilde{H}_k^\top = -\tilde{H}_k \tag{17}$$

を満たすように定義する．$\mathbb{R}/2\mathbb{Z}$量が以下で定義される．

$$\frac{1}{2\pi i}\int_0^1 d\log\det\tilde{H}_k \in \mathbb{R}/2\mathbb{Z}. \tag{18}$$

不定性が$2\mathbb{Z}$であることは，$\tilde{H}_k^\top = -\tilde{H}_k$の下ではPfaffianが定義され，

$$\frac{1}{2\pi i}\oint d\log\det\tilde{H}_k = \frac{1}{\pi i}\oint d\log\mathrm{Pf}\,\tilde{H}_k \in 2\mathbb{Z} \tag{19}$$

より．

1.3 例：$n=1$．クラス BDI

クラスBDIのハミルトニアン（の非対角部分）

$$q_k^* = q_k, \quad k\in S^1, \tag{20}$$

を考える．つまり，$q_k \in O(N)$である，$\mathbb{Z}_2$不変量は$Spin(N)$へのリフトで計算されるが，上記の方針で定式化しよう．

クラスDハミルトニアンとみなすには，q_kを非対角に並べたハミルトニアンを考えれば良い．

$$H_k = \begin{pmatrix} & q_k \\ q_k^\dagger & \end{pmatrix}, \quad \sigma_z H_k^\top \sigma_z = -H_k. \tag{21}$$

D^2への拡張$\tilde{H}_{k\in D^2}$をひとつとる．$\tilde{H}_k$はクラスDの対称性を満たすように取る．$\mathbb{R}/2\mathbb{Z}$量を

$$\Theta[H_k] = \frac{i}{2\pi}\int_{D^2}\mathrm{tr}\,[F] \in \mathbb{R}/2\mathbb{Z} \tag{22}$$

として定義する．カイラル対称性より$\Theta[H_k] = -\Theta[H_k]$となり，$\Theta[H_k]\in\{0,1\}$が$\mathbb{Z}_2$不変量．

1.4 例：$n=2$．クラスAI

クラスAIのハミルトニアン

$$H_k^* = H_k, \quad k\in S^2, \tag{23}$$

を考える．$\mathbb{Z}_2$不変量は２次のSW量として知られるが，ここでは$\mathbb{R}/4\pi\mathbb{Z}$量としての定式化を試みよう．

$n=0$の場合と同様にして，H_kを非エルミートハミルトニアンとみなすと，$H_k\in O(n)$，つまり分類空間R_1に値を取る．３次元球D^3への拡張$\tilde{H}_{k\in D^3}$をひとつ選び，WZ項

$$\Theta[H_k] = \frac{1}{24\pi^2}\int_{D^3}\mathrm{tr}\,[\tilde{H}_k^\top d\tilde{H}_k] \in \mathbb{R}/2\mathbb{Z} \tag{24}$$

を定義する．エルミート性より$\Theta[H_k] = -\Theta[H_k]$が従い，$\Theta[H_k]\in\{0,1\}$が$\mathbb{Z}_2$不変量．

1.5 例：$n=3$．クラス CI

クラスCIのハミルトニアン（の非対角部分）

$$q_k^\top = q_k, \quad k\in S^3, \tag{25}$$

を考える．クラスAIのハミルトニアンとみなすには，q_kを非対角に並べたハミルトニアンを考えれば良い．

$$H_k = \begin{pmatrix} & q_k \\ q_k^\dagger & \end{pmatrix}, \quad \sigma_x H_k^* \sigma_x = H_k. \tag{26}$$

D^4への拡張$\tilde{H}_{k\in D^4}$をひとつとる． $\tilde{H}_k$はクラスAIの対称性を満たすように取る． $\mathbb{R}/4\pi\mathbb{Z}$量を

$$\Theta[H_k] = \frac{-1}{8\pi^2}\int_{D^4} \mathrm{tr}\,[F^2] \in \mathbb{R}/2\mathbb{Z} \tag{27}$$

として定義する．カイラル対称性より$\Theta[H_k] = -\Theta[H_k]$となり，$\Theta[H_k] \in \{0,1\}$が$\mathbb{Z}_2$不変量.

コメント：

- 結局，$\mathbb{R}/2\mathbb{Z}$の幾何学的量をどのように数値計算実装するか，不定性が$\mathbb{Z}$ではなく$2\mathbb{Z}$であることをどのように担保するか，が問題となる.
- エルミート条件を外した拡張は，$+i\omega$などとしてカノニカルに実行可能かもしれない.（数値計算上有効であるかは別にして）