

SPT 相とその分類 *

東京大学理学部物理学科 4 年 安藤貴政

2021 年 5 月 12 日

概要

この解説 PDF では、対称性に保護されたトポロジカル相 (SPT 相) と呼ばれる量子相について、初学者を対象として簡単な例を中心に解説をします。1 節では具体例を通じて分類の気持ちを掴んでもらいます。この部分は大学 1, 2 年生でも理解できるように丁寧に書くことを心がけました。2 節では量子スピン系における Haldane 相と呼ばれる具体例を見ることで SPT 相の性質を一步深く見ます。この節は結果のまとめが中心で、量子力学のスピンを知っている人が、1 次元量子スピン系の重要な例である Haldane 相の話をさらっと知ることができるような内容となっています。3 節では 1 次元の量子スピン系の分類について、ある限定的な条件のもとでの証明を与えています。最後の 4 節ではより進んだ勉強をしたい人に向けて文献紹介を簡単に行いました。少し難しい話や、読まなくても先に進める部分については見出しに星印 * をつけています。必要に応じて飛ばして読めばよいと思います。

この解説 PDF は対象レベルを大きく下げる目的のため、本来すべき話で省かれている部分が多くあります。そのため物理学の解説書としてはあまり価値のないものになってしまっているかもしれません。しかし、私の知る限り現時点で SPT 相についての完全な初学者を対象にした入門的な解説は存在しませんので、そのような初めて学ぶ人の入門の一助となれば幸いです。

* この記事は東京大学理学部物理学科学生有志企画 [Physics Lab. 2021](#) の物性班の活動の一環として作成されたものです。作成にあたっては複数の学科同期から意見をもらいました。特に、同期の渡邊明大君には初稿段階では数学的に随分いい加減だった記述を丁寧に指摘してもらいました。この場で感謝したいと思います。

目次

1	導入	3
1.1	量子相とその分類	3
1.2	SPT 相とは	3
1.3	条件の意味	4
1.4	他の条件	5
1.5	ハミルトニアン連続変形	6
1.6	簡単な例	6
1.7	SPT 相の分類	8
1.8	不変量	9
1.9	言葉についてのコメント	9
2	量子スピン鎖における Haldane 相	10
2.1	準備 (スピンの復習)	10
2.2	Haldane 予想	11
2.3	AKLT 模型	12
2.4	VBS 状態の特徴	16
2.5	$\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ 対称性	19
3	SPT 相の分類	23
3.1	1次元スピン系	23
3.2	SPT 相との関係	26
3.3	Haldane 相	27
4	進んだ勉強のために	27
	付録 A 群コホモロジー	28
	参考文献	29

1 導入

1.1 量子相とその分類

量子相とは、絶対零度における物質の相のことです。物質の相については、[物性班](#)で多くの解説を用意していますので、そちらもご覧ください。量子相では絶対零度を考えるので、温度を変化させるといようなことは考えず、磁場などの外場を変化させたときの相転移を扱います。

日常生活で触れる物質の相はほとんどの場合**対称性の破れ**という考え方により特徴付けることができます（[物性班の紹介記事](#)や[ランダウ理論の解説 PDF](#)で詳しく解説しているのでそちらも併せてご覧ください）。対称性の破れの考え方は量子力学の世界でも極めて重要な役割を担います。量子相においても対称性の破れで記述される物質の相は重要な役割を果たします。

ところが自然界には対称性の破れでは記述できないような相転移が存在します。このような相転移を**トポロジカル相転移**と呼び、トポロジカル相転移で特徴付けられる物質の相をトポロジカル相と言います。^{*1}（トポロジカル相に限らず）相の分類というのは、対象としている系の状態たちを、ある条件のもとで同一視したものです。SPT 相においては、このとき対称性がとても重要な意味を持つこととなります。

分類の肝は、ほどよく大雑把に、またほどよく細かく状態たちを見るところです。原理的には系のハミルトニアンなりを設定して、温度や圧力などの外部パラメータを指定すれば（少なくとも平衡状態として実現される）状態は決まってしまうわけです。状態を指定するパラメータたちの自由度は無量大なので、分類を細かくしすぎるととても扱えたものではなくなってしまいます。一方で、大雑把すぎるとそれはそれで理論としてつまらないものになってしまいます。このような例を [1.6](#) で具体的に見ます。

1.2 SPT 相とは

対称性に保護されたトポロジカル相（Symmetry Protected Topological Phases, SPT 相）では、考える系に以下の条件を課します。

1. 基底状態に縮退がないこと。
2. 基底状態と励起状態の間に有限のエネルギーギャップがあること。

これらの条件は今後何度も登場することになります。要するに、「SPT 相と言ったときには上の条件を満たすもののみ考えなさい」ということです。^{*2}

^{*1}トポロジカル相という言葉の指す範囲について、正確な定義は今のところないと思います。この記事では量子相におけるトポロジカル相について扱っていますが、トポロジカル相転移自体は絶対零度に限った話ではありません。例えば BKT 転移と呼ばれる相転移は有限温度で起こるトポロジカル相転移の例です。

^{*2}量子相の分類ではこの条件を満たしていないものも対象となります。しかし、そのような制限がない Hamiltonian を扱おうとすると一般に問題は難しくなります。SPT 相はある意味でもっともやさしい量子相の分類とすることができます。

1.2.1 細かい注意*

この解説 PDF では格子上で定義されたハミルトニアンのみを対象とします。最終的には系のサイズが無限大の場合を考えたいわけですが、いきなりそういうことを考えるのは難しいので、特に断りのない限りは d 次元立方格子上で定義されたハミルトニアンを対象として扱います。ただし、この PDF では具体的には 1 次元格子 $\Lambda_L = \{1, 2, \dots, L\}$ しか扱いません。

1.3 条件の意味

なんだかムツカシイ条件がいろいろ登場してしまいました。一つずつゆっくりその意味を考えてみましょう。

まず、量子力学について思い出してみましょう。^{*3}量子力学では「複素ヒルベルト空間 \mathcal{H} 上の自己共役作用素 (演算子) のスペクトル (固有値) を求めたい!」というのが大きなモチベーションなのでした。複素ヒルベルト空間というのは \mathbb{C} ベクトル空間のもうちょっと偉い対象なのですが、この解説では (少なくとも具体的に計算をする上では) 基本的に有限次元の場合しか考えないので、単に N 次元の \mathbb{C} ベクトル空間のことだと考えて問題ありません。この場合、物理量に対応する演算子は $N \times N$ エルミート行列たちだと思えることができます。エルミート行列とは、正方行列であって自身の複素共役転置が自身と一致する行列のことです。エルミート行列の固有値は実数となることを示すことができます。

量子力学での主役の一人はハミルトニアンです。有限次元を考える限りこれもエルミート行列であり、その固有値が系が取りうるエネルギーに対応します。より正確には、 $|\psi\rangle$ がハミルトニアン \hat{H} の固有値 E の固有状態、つまり

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (1.1)$$

を満たすヒルベルト空間 \mathcal{H} の元 (状態ベクトル) であったとき、状態 $|\psi\rangle$ はエネルギー E のエネルギー固有状態であると言います。

1.3.1 基底状態に縮退がないこと

基底状態とは、もっともエネルギーが低い固有状態のことです。このエネルギーを基底エネルギーと言います。基底状態に縮退がないとは、基底エネルギーに対する固有状態が 1 次元であることを意味します。要するに、ハミルトニアンの固有エネルギーを小さい順にラベリングしていったとき、もっとも小さい値に重複があってはいけないという条件です。^{*4}以下この条件を「(基底状態が) unique である」という風に表現することにします。

^{*3}思い出してみましょうと書いていますが、量子力学をあまり勉強したことがない人が対象です。復習と言いつつ初学者への配慮を行うのは私たちの業界?では常套手段です。

^{*4}基底状態以外のエネルギーの縮退については条件は何も課しません。

1.3.2 基底状態と励起状態の間に有限のエネルギーギャップがあること

励起状態とは、基底状態以外のエネルギー固有状態のことです。ここでは基底状態の次にエネルギーが低い固有状態（第一励起状態）に注目します。基底状態のエネルギーを E_{GS} 、第一励起状態の $E_{1\text{st}}$ と書くことにします。

エネルギーギャップがある、というと単に

$$E_{1\text{st}} - E_{\text{GS}} > 0 \quad (1.2)$$

を意味しますが、これは有限次元を考える限り当たり前です。物理では系のサイズが無限に大きい極限（熱力学極限と言います）を最終的な対象としますが、このときハミルトニアンの特値（固有値の分布）は連続的になり得ます。^{*5}この極限においても式 (1.2) が成り立つべしというのが今の条件となります。

ただし初めから無限次元のハミルトニアンを扱うことは難しく、多くの場合十分大きいサイズを考えておいて後で極限を取るといようなことをしばしばします。^{*6}このような場合は、系のサイズによらない有限の値 $\Delta > 0$ があって、

$$E_{1\text{st}} - E_{\text{GS}} \geq \Delta \quad (1.3)$$

が成り立つべしというのが今の条件となります。この条件を gapped と表現します。

1.4 他の条件

SPT 相といったときは unique かつ gapped という条件は常に課しますが、これ以外にもいくつかの条件が必要です。ここではその詳細については述べません。^{*7}それら追加のいくつかの条件を満たすような状態を **SRE 状態** (Short Range Entangled states) といいます。SRE 状態が基底状態であるようなハミルトニアンたちの分類が SPT 相の分類です。

1.4.1 補足

SRE 状態をきちんと定義するためにはすぐ下で話すハミルトニアンの連続変形について言及する必要があります。したがって、この文章だけでは論理的にややぼやかしがあります。このあたりの定義は人や文脈にも依存するため、真面目に勉強するときはその都度よく確認する必要があります。

^{*5}格子系を考えると、各格子には有限自由度のハミルトニアンが作用しているとしても、無限に広がった格子を考えるならば対象となるヒルベルト空間は無限次元となってしまいます。無限次元では有限次元ではあり得ないことが数多く起こることが知られています。

^{*6}もちろん、初めから無限系を考えた場合と有限系での結果の極限が一致する保証はありません。物理の文脈ではこのあたりを絶妙にうまく回避しながら議論をすることが多いです。

^{*7}どういふことを考えるかという、まず unique かつ gapped なハミルトニアンたちに対して stack と呼ばれる演算を定義することで可換モノイドの構造を作り、そのうち可逆な元のことを SRE 状態というように定義します。詳しくは例えば [23] を参照してください。SRE 状態の定義は文脈に依存するため、ここで書いているようなものとは違う定義をすることもあります。

す。この解説 PDF を読む上では、基底状態が unique であるという条件と基底状態の上にエネルギーギャップがあるという条件さえ理解していれば十分だと思います。

1.5 ハミルトニアン連続変形

対象となる系に対して、unique かつ gapped なハミルトニアンたちが与えられたとします。このハミルトニアンの集合を \mathcal{H} と書くことにします。 \mathcal{H} の元 \hat{H}_1, \hat{H}_2 が連続的につながる ($\hat{H}_1 \sim \hat{H}_2$ と書くことにします) ことを、連続写像 $h: [0, 1] \rightarrow \mathcal{H}, s \mapsto \hat{H}(s)$ であって $\hat{H}(0) = \hat{H}_1$ かつ $\hat{H}(1) = \hat{H}_2$ を満たすものが存在することと定義します。^{*8}要するに、 \mathcal{H} たちの元をうまく選ぶことで \hat{H}_1 から \hat{H}_2 へつなぐ道 (path) が存在するということです。以下の例で説明するように、SPT 相を定義する上ではハミルトニアンたちに対して系の対称性 (後述) も要求します。

以降、 \mathcal{H} は SRE 状態を与えるハミルトニアンの集合であるとしてします。

1.6 簡単な例

SPT 相についてまだ十分な説明、特に対称性についての説明を行っていませんが、ここで空間 0 次元の場合の簡単な模型を考えてみます。この例を通じてハミルトニアンを分類することの気持ち、また分類をする上で対称性が担う役割について掴んでもらうことが目標です。

ハミルトニアン \hat{H} として次の 2×2 行列を考えます。

$$\hat{H} = -\mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\sigma} = -d_1 \sigma^x - d_2 \sigma^y - d_3 \sigma^z. \quad (1.4)$$

ここで d_1, d_2, d_3 は実数のパラメータであり、 $d_1^2 + d_2^2 + d_3^2 = 1$ であるとしてします。また $\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z$ は次で定義されるパウリ行列です。

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.5)$$

一般に 2×2 のエルミート行列は (1.6) の行列に単位行列の定数倍を足すことで表現することができます。単位行列は固有値を一斉にずらすだけなので、パラメータの連続変形のもとでハミルトニアンを同一視する上では本質的でなく、また $\mathbf{d} = (d_1, d_2, d_3)$ を単位球面上に制限することも本質的な制限ではありません。以上の記述は分からなければとりあえず無視して先を読んでください。

^{*8}連続性について。ここでは基本的に有限サイズの格子上で定義されたハミルトニアンを考えるので、あまり気にする必要はありません。熱力学極限を取った無限系の上で定義されたハミルトニアンを考えるならば、(作用素ノルムなどの) 位相の定義に気をつける必要があります。また無限系では \mathcal{H} の定義などにも気を遣う必要があります。私はこの辺りの話は詳しくないので、気になる場合は数学の論文などを参照してください。

このハミルトニアン固有値と固有状態を計算してみましょう。まず \hat{H}^2 を計算してみます。
 $(\sigma^x)^2 = (\sigma^y)^2 = (\sigma^z)^2 = I_2$ であることと、 $\alpha \neq \beta$ ($\alpha, \beta = x, y, z$) に対して $\sigma^\alpha \sigma^\beta + \sigma^\beta \sigma^\alpha = 0$ であることに注意すれば、

$$\hat{H}^2 = (d_1^2 + d_2^2 + d_3^2) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

であることが分かります。このようにして調べると \hat{H} の固有値は ± 1 となることが分かります。ハミルトニアンの固有値に縮退はなく、(二準位系なので明らかですが) エネルギーギャップも存在することが分かります。このとき、基底状態を書くために、 $\mathbf{d} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ と極座標表示しておきます。この表示を用いると、 \hat{H} の固有状態は

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{+i\phi/2} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \sin \frac{\theta}{2} \\ -e^{+i\phi/2} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (1.7)$$

の二つで、それぞれ $\hat{H}|+\rangle = |+\rangle, \hat{H}|-\rangle = -|-\rangle$ を満たします。^{*9}したがって、基底状態は $|-\rangle$ であり、基底状態のエネルギーは -1 ということになります。

今の場合、パラメータ d_1, d_2, d_3 を連続的に動かしたときにハミルトニアン \hat{H} たちがすべてつながることを示すことができます。まず、パウリ行列 σ^α を用いて

$$\hat{U}_\theta^\alpha = \exp\left(-i\theta \frac{\sigma^\alpha}{2}\right) \quad (1.8)$$

と定義します。このとき、

$$\hat{U}_\theta^\alpha (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{d}) (\hat{U}_\theta^\alpha)^\dagger = \boldsymbol{\sigma} \cdot (\hat{R}_\theta^\alpha \mathbf{d}) \quad (1.9)$$

を示すことができます。ただしここで

$$\hat{R}_\theta^x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}, \quad \hat{R}_\theta^y = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix}, \quad \hat{R}_\theta^z = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.10)$$

はそれぞれ、 x, y, z 軸回りの回転行列です。3次元単位球面上の点はすべてこの \hat{R}_θ^α の組み合わせにより連続的に移り変わるので、 \mathbf{d} で指定される (1.4) のハミルトニアンたちはすべて連続的につながることが分かります。

今度はこのハミルトニアンに対称性を課することを考えます。具体的には

$$[\sigma^x, \hat{H}] = \sigma^x \hat{H} - \hat{H} \sigma^x = 0 \quad (1.11)$$

という条件をハミルトニアンに要求します。この条件はスピンの x 軸回りの π 回転対称性を表します。この条件を課すと許されるハミルトニアンの形は

$$\hat{H} = -d_1 \sigma^x = \pm \sigma^x \quad (1.12)$$

^{*9}基底状態には位相分だけの不定性があることに注意してください。

の二つだけとなり、ハミルトニアンがほとんど定まってしまいます。固有状態はどちらのハミルトニアンも同じで、

$$|\rightarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\leftarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (1.13)$$

となります。 $\hat{H} = +\sigma^x$ のときは $|\leftarrow\rangle$ が基底状態、 $\hat{H} = -\sigma^x$ のときは $|\rightarrow\rangle$ が基底状態となります。今はあり得るハミルトニアンは $\hat{H} = \pm\sigma^z$ の二つだけであって、基底状態が異なるため、この二つのハミルトニアンを連続的につなぐことはできません。このようなとき、二つのハミルトニアン $\pm\sigma^x$ は異なる SPT 相にあると定義されます。

ところで、今の場合二つの相の異なる状態は、 σ^x の固有値の符号で区別することができます。これは SPT 不変量と呼ばれるものの例となっています。

1.7 SPT 相の分類

先ほどの例を見ることで得た教訓をまとめます。

- SPT 相の分類とは、ある対称性を持つハミルトニアンたちのうち連続的につながるもの同一視することである。
- 対称性を課すことで、分類はより細くなる。

一般の SPT 相の分類でもすることは基本的に同じです。つまり、ある対称性を課した SRE 状態に対して、それらが連続的につながるときに同じ SPT 相に、つながらないときは異なる SPT 相にあるとするのが SPT 相の定義です。

SPT 相と言ったときは基底状態に縮退がなくエネルギーギャップのあるハミルトニアンたちを考えるのでした。上の例では対称性を課しないと分類が自明（一つの相しか存在しないこと）となりましたが、これは SPT 相の多くの場合で期待される性質です。^{*10}先ほどの例では x 方向のスピンの π 回転の対称性を課しましたが、系に課す対称性は一般に群の表現によって記述されます。具体的には、ハミルトニアン \hat{H} が G の対称性を持つとは、 G の（非自明な）ユニタリ表現 $\rho: G \rightarrow U(V)$ であって任意の $g \in G$ に対して $\rho(g)$ と \hat{H} が可換であるようなものが存在することを言います。^{*11*12}ただし群 G を決めてもその表現は一意に定まらないため、この解説 PDF では G の対称性と言ったときはその表現 ρ も対称性という言葉に含むものとして考えます。具体的に対称性を述べるときはその表現について言及しますが、文章としては単に G の対称性と書くこ

^{*10}例えば [3] [7]などで採用されている定義では、むしろ対称性を課さないときに自明な相と連続的につながる相を SRE 状態と定義しています。この定義では量子ホール系は SPT 相の枠組みには入りません。

^{*11}群 G とは、簡単にいうと一つの演算が備わっている集合のことです。群 G の V 上の表現 ρ とは、 G からベクトル空間 V 上の同型写像の集合 $GL(V)$ への群準同型 $\rho: G \rightarrow GL(V)$ のことです。今は有限次元表現しか考えないので、群 G の要素 g に対して $n \times n$ 正則行列を対応させるもの（であって性質の良いもの）と思ってもらえれば大丈夫です。

^{*12}ここで表現はユニタリであるとしましたが、時間反転対称性も記述するためには反ユニタリ表現も含める必要があります。この解説 PDF ではユニタリ表現の場合しか扱いませんが、いずれの話も反ユニタリな場合に拡張することができます。

とにします。また、この解説 PDF では基本的に有限群の対称性に注目します。これは主に技術的な問題です。

1.8 不変量

\mathcal{H} の元がいくつか与えられたとき、それらが同じ SPT 相に属するか否かというのは、定義よりそれらを結ぶ path が存在するかどうかで判定できます。しかし、勝手なハミルトニアンを持ってきたときそれらを連続的につなぐ path が存在するかどうかを直接調べることは一般には非常に難しい問題です。先ほどの空間 0 次元の例ではたかだか 2 次元のベクトル空間に作用する行列を調べればよかったわけですが、系のサイズに対して考えるハミルトニアン \mathcal{H} の次元は指数的に増えるので、ありうる path も急激に増えてしまいます。 $\hat{H}_1, \hat{H}_2 \in \mathcal{H}$ に注目するとき、もしこの二つのハミルトニアンが同じ SPT 相にあるのであれば、連続的につなげる path を一つ見つけてくれば終わりです。しかし、異なる SPT 相にある場合は、定義にしたがう限り、あり得るすべての path について調べ、どのようにしても二つのハミルトニアンが連続的につながらないことを確かめる必要があります。

そこで、系の状態に対してある値を返すような対応を作り、その値を見ることでどの SPT 相に分類されるかどうかを調べるというような作戦がしばしば取られます。先ほどの例では、 σ^x の固有値の符号がそれに相当します。

どういう値を対応させれば良いのでしょうか？もちろん、SPT 相の分類に完全に一致するものを計算できればうれしいわけですが、これもまた一般には難しい問題です。先ほどの話では異なる SPT 相にあるかどうかの判定が難しいということでしたから、「対称性を保つハミルトニアンの連続変形のもとで不変となる」ような量を見つければ、対偶を考えることで、そのような量が異なれば違う SPT 相に属すると言うことができることになります。このような考え方は数学にもあり、位相幾何学と呼ばれる分野では（空間の）連続変形に対して不変となる量を位相不変量などと呼びます。SPT 相において、この「同じ相ならば同じ」となる量は **SPT 不変量** と呼ばれます。

1.9 言葉についてのコメント

SPT 相では通常何か一つの状態を自明状態として選び、自明状態と連続的につながる状態たちを自明相、自明状態と連続的につながらない状態を SPT 相と言います。自明相としては、単純なテンソル積状態（例えば 1 次元のスピン 1 の模型で、各サイトの z 方向のスピンがすべて 0 であるような状態）を選びます。

これまでは対称性を課した SRE 状態の分類相をすべて SPT 相と表現していましたが、次節以降ではしばしば SPT 相と言うと非自明な状態、自明相ではない相の元のことを指すことにします。

2 量子スピン鎖における Haldane 相

この節では Haldane 相と呼ばれる、1次元スピン系における SPT 相について解説します。

SPT 相に属する具体的な状態として、AKLT 模型と呼ばれるハミルトニアン基底状態 (VBS 状態) を構成し、その特徴を観察することで Haldane 相の性質を調べます。

この節の内容は、詳細な議論を大幅に省略している部分が多く、この解説 PDF だけでは不十分な記述もあります。^{*13}この節の内容は概ね [22] に沿っているため Haldane 現象自体を詳しく勉強したい方はそれらの文献に当たってください。

2.1 準備 (スピンの復習)

まず記法を確認する意味も含めてまずは格子上のスピン系について簡単にまとめることにします。用語などは物理の慣習にしたがうことにします。ふつうの量子力学の教科書には必ず書いてある内容なので、詳細については適当な量子力学の教科書を参照してください。

まずはスピンが一つしかない場合についてまとめます。スピン演算子 $\hat{S}^\alpha (\alpha = x, y, z)$ は自己共役であって、交換関係

$$[\hat{S}^\alpha, \hat{S}^\beta] = \hat{S}^\alpha \hat{S}^\beta - \hat{S}^\beta \hat{S}^\alpha = i \sum_{\gamma=x,y,z} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{S}^\gamma \quad (2.1)$$

を満たす演算子です。^{*14}演算子 \hat{S}^2 は

$$\hat{S}^2 = (\hat{S}^x)^2 + (\hat{S}^y)^2 + (\hat{S}^z)^2 \quad (2.2)$$

であり、 \hat{S}^2 と \hat{S}^z を同時対角化します。

スピン S の部分空間 V とは、 $2S + 1$ 次元ベクトル空間であって、その基底は $\hat{S}^2 |\sigma\rangle = S(S+1) |\sigma\rangle, \hat{S}^z |\sigma\rangle = \sigma |\sigma\rangle$ を満たす $\{|\sigma\rangle\}_\sigma$ たち ($\sigma = -S, -S+1, \dots, S$) です。このとき \hat{S}^2 は V 上 $S(S+1)$ 倍のスカラーとして作用します。

S は $0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ の値を取ります。スピン S の粒子を考えると言ったときはある S を選んだ不変部分空間を考えることに相当します。

スピンが複数ある場合もほとんど同様です。ここでは (主に説明の簡略のため) 同じ大きさのスピン粒子が各サイトにあるような格子 Λ を考えます。各サイト $i \in \Lambda$ に対して (2.1) を満たす \hat{S}_i^α たちが定義されているわけですが、合成系でのサイト i のスピン演算子 \hat{S}_i^α は

このとき、系のスピン演算子 \hat{S}^α は、

$$\hat{S}^\alpha = I \otimes \dots \otimes I \otimes \hat{S}_i^\alpha \otimes I \otimes \dots \otimes I \quad (2.3)$$

^{*13}例えば摂動に対する安定性とか、物理的にどの程度意味があるかなどの議論をほとんど省略しています。

^{*14}ここでは $\hbar = 1$ とします。

により定義されます。ここで I は $2S + 1$ 次元ベクトル空間上の恒等演算子です。

このときの交換関係は

$$[\hat{S}_i^\alpha, \hat{S}_j^\beta] = i\delta_{i,j} \sum_{\gamma=x,y,z} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{S}_i^\gamma \quad (2.4)$$

となります。合成系の全体のスピン演算子 \hat{S}^α を、

$$\hat{S}^\alpha = \sum_{i \in \Lambda} \hat{S}_i^\alpha \quad (2.5)$$

で定義すると、これは交換関係 (2.1) を満たします。このように書いたとき、もはや \hat{S}^α はブロック対角化されていないことに注意してください。

スピン配位 σ を、 $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{|\Lambda|})$ で定義します。全体の系の基底は

$$|\Phi^\sigma\rangle = \bigotimes_{i \in \Lambda} |\sigma_i\rangle_i \quad (2.6)$$

となります。ここで $|\sigma_i\rangle_i$ は $\hat{S}_i^z |\sigma_i\rangle_i = \sigma_i |\sigma_i\rangle_i$ なる状態としました。

2.2 Haldane 予想

この節では基本的に 1 次元のスピン系を考えます。各サイトに作用するスピン演算子はいずれも同じ大きさのスピン S を持つとします。まず Haldane 予想と呼ばれる、スピンの大きさと基底状態の性質の関係についての予想を説明します。出発となるのは次のハミルトニアンで記述される反強磁性 Heisenberg 模型です。

$$\hat{H} = J \sum_{i=1}^L \hat{S}_i \cdot \hat{S}_{i+1}. \quad (2.7)$$

ただし J は正の定数であり、また $L + 1$ 番目のサイトを 1 番目のサイトと同一視する周期境界条件を課すことにします。

SPT 相を考えたいのですから、ハミルトニアン (2.7) を解いたときの基底状態は一意で、さらに L を大きくする極限で有限のエネルギーギャップを持つ必要があります。これはいずれも非自明な条件です。しかし、 L が偶数のときはスピンの大きさ S に関係なく基底状態は一意となることが分かっています。^{*15}

エネルギーギャップについての条件はどうでしょうか。ハミルトニアンを見る限りスピンこのような性質はスピンの大きさにはあまり関係がないような気がします。Haldane 模型の性質について、1983 年に Haldane はある予想を行いました。[9] [10]

^{*15}Marshall Lieb Mattis 定理といいます。

Haldane 予想：1次元 Heisenberg 模型について以下が成り立つ。

スピンの半整数 ($1/2, 3/2, \dots$) のとき

- 基底状態は一意だが、エネルギーギャップは存在しない。
- 相関関数はべき的に減衰する。^{*16}

スピンの正整数 ($1, 2, 3, \dots$) のとき

- 基底状態は一意で、その上に有限のエネルギーギャップが存在する。
- 相関関数は指数的に減衰する。

スピンの $1/2$ の場合には十分大きな系に対しての（少なくとも物理のレベルでは）厳密な解が存在し、その結果から半整数の場合の性質は類推することができます。一方で整数のときの性質はそれとは全く異なります。相関関数が指数的な減衰を示すということは、絶対零度においてもスピンは激しくバラバラで、まったく秩序が存在しないことを示唆しています。

Haldane 予想によるとスピンの整数のときについては、Heisenberg 模型の基底状態は SRE 状態であると期待されるため、1次元のスピン系における SPT 相について詳しく勉強することで、このような現象をより深く理解することができます。

2.3 AKLT 模型

AKLT 模型 [1] [2] は 1次元格子上次のハミルトニアンで定義される模型です。

$$\hat{H}_{\text{AKLT}} = \sum_{i=1}^L \left\{ \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_{i+1} + \frac{1}{3} (\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_{i+1})^2 \right\}. \quad (2.8)$$

ただし $L+1=1$ の周期境界条件を課すことにします。AKLT 模型は一般のスピンについて定義することができますが、ここでは

AKLT 模型は次の点で重要な模型です。

- 基底状態を具体的に計算できる。
- 基底状態は唯一であり、基底状態と第一励起状態の間に系のサイズによらないエネルギーギャップがあることを示すことができる。
- AKLT 模型の基底状態 (VBS 状態) は SPT 相の意味で反強磁性 Heisenberg 模型の基底状態と同じ相に存在することが期待される。^{*17}

^{*16}log に比例するような（長距離では無視できる）補正がつくと思われています。

^{*17}Heisenberg 模型の基底状態が SRE 状態であることの証明はまだ存在しませんが、数値計算などにより多くの人がこのことを信じていると思います。「同じ SPT 相」というのはもちろんどうい対称性のもとで考えるかで変わってきます。

AKLT 模型の基底状態は比較的綺麗な形をしており、SPT 相の性質を具体的に確認することができます。

以下の小節では AKLT 模型の基底状態（VBS 状態）を具体的に構成します。これはスピン系の扱いについてある程度慣れている人向けのパートとなっています。結果から分かる VBS 状態の性質については VBS 状態の構成の部分を読まなくてもある程度理解できるようにしているので、スピン系に慣れてない人は 2.4 まで飛ばして読むとよいと思います。

2.3.1 基底状態の構成 *

AKLT 模型の基底状態を調べる上で、スペクトルを考える限り AKLT 模型のハミルトアン (2.8) が次のハミルトニアンと等価であることがポイントとなります。

$$\hat{H}'_{\text{AKLT}} = \sum_{i=1}^L \hat{P}_2[\hat{\mathbf{S}}_i + \hat{\mathbf{S}}_{i+1}]. \quad (2.9)$$

ただしここで \hat{P}_2 はスピンの大きさが 2 の部分空間への射影です。

二つのハミルトニアン (2.8)(2.9) が等価であることは、次の関係式から直ちに理解できます。

$$\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_{i+1} + \frac{1}{3}(\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_{i+1})^2 = 2\hat{P}_2[\hat{\mathbf{S}}_i + \hat{\mathbf{S}}_{i+1}] - \frac{2}{3} \quad (2.10)$$

(2.10) の証明：

愚直に計算するだけです。定義から

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_{i+1} &= \frac{1}{2} \left\{ (\hat{\mathbf{S}}_i + \hat{\mathbf{S}}_{i+1})^2 - \hat{\mathbf{S}}_i^2 - \hat{\mathbf{S}}_{i+1}^2 \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ 2(2+1)\hat{P}_2[\hat{\mathbf{S}}_i + \hat{\mathbf{S}}_{i+1}] + 1(1+1)\hat{P}_1[\hat{\mathbf{S}}_i + \hat{\mathbf{S}}_{i+1}] \right\} - 2 \end{aligned}$$

であり、同様の計算により

$$(\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_{i+1})^2 = -3 \left(\hat{P}_2[\hat{\mathbf{S}}_i + \hat{\mathbf{S}}_{i+1}] + \hat{P}_1[\hat{\mathbf{S}}_i + \hat{\mathbf{S}}_{i+1}] \right) + 4 \quad (2.11)$$

も示すことができるので、(2.10) が成り立つことが分かります。

2.3.2 VBS 状態 *

ここでは AKLT 模型の基底状態（VBS 状態）を具体的に構成します。前の結果から、もし各 i に対して

$$\hat{P}_2[\hat{\mathbf{S}}_i + \hat{\mathbf{S}}_{i+1}]|\Phi\rangle = 0 \quad (2.12)$$

を満たす固有状態が存在したとすると、この状態は (2.9) の基底状態であり、同じ状態が元の模型 (2.8) の基底状態にもなります。AKLT 模型の基底状態を $|\text{VBS}\rangle$ と書くことにします。

SPT 相の文脈で VBS 状態も Heisenberg 模型の基底状態も同じ相にあると期待されるような対称性が存在するという意味です。

次のような方針で VBS 状態を作ります。まず、各サイトのスピン 1 を 1/2 スピン 2 つに分解します。そして隣のサイトの 1/2 と組み合わせることで singlet のペアの積の状態を作ります (pre-VBS 状態)。最後に各サイトのスピンの大きさが 1 となるように上手いように演算子を作用させます。

一つずつ順番に見ていきます。まず、各サイトのスピンを 1/2 スピン 2 つに分解します。各サイトの 1/2 スピンは、サイトの添字 i に加えて、2 つのどちらであるかを特定するラベル (L, R) によって指定されます。

このもとの、pre-VBS 状態は次のように定義されます。

$$|\text{pre-VBS}\rangle = \bigotimes_{x=1}^L \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |\uparrow\rangle_{i,R} |\downarrow\rangle_{i+1,L} - |\downarrow\rangle_{i,R} |\uparrow\rangle_{i+1,L} \right\}. \quad (2.13)$$

これは i 番目のサイトの R のスピンと $i+1$ 番目のサイトの L のスピンとが singlet となっている状態です。

こうして作った状態に各サイト上対称化する働きを持つ演算子 $\hat{\mathcal{S}}_i$ を作用させたものが VBS 状態です。^{*18}

$$|\text{VBS}\rangle = \left(\bigotimes_{i=1}^L \hat{\mathcal{S}}_i \right) |\text{pre-VBS}\rangle. \quad (2.14)$$

ただし、 $\hat{\mathcal{S}}_i$ は $|\sigma\rangle_{i,L} |\sigma'\rangle_{i,R}$, ($\sigma, \sigma' = \uparrow, \downarrow$) に対して

$$\hat{\mathcal{S}}_i(|\sigma\rangle_{i,L} |\sigma'\rangle_{i,R}) = \frac{1}{2} \left\{ |\sigma\rangle_{i,L} |\sigma'\rangle_{i,R} + |\sigma'\rangle_{i,L} |\sigma\rangle_{i,R} \right\} \quad (2.15)$$

のように作用する演算子です。この操作により VBS 状態が各サイト上のスピンの大きさが 1 である状態となることが保証されます。

各サイトの L, R のスピンに対するスピン演算子を $\hat{S}_{1,L}, \hat{S}_{i,R}$ とするとき、

$$\hat{S}_i \hat{\mathcal{S}}_i = \hat{\mathcal{S}}_i (\hat{S}_{i,L} + \hat{S}_{i,R}) \quad (2.16)$$

であることに注意すれば、すべての i に対して

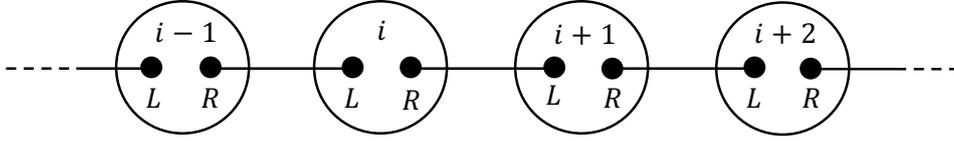
$$\hat{P}_2[\hat{S}_i + \hat{S}_{i+1}]|\text{VBS}\rangle = 0 \quad (2.17)$$

となることを示すことができます (確かめてみてください)。また、 $|\text{VBS}\rangle \neq 0$ であることも示すことができます。したがって、 $|\text{VBS}\rangle$ は確かに AKLT 模型の基底状態となっていることが分かります。

図 1 は、VBS 状態を表現した模式図です。各サイトには 1/2 のスピンが二つずつあり、となりのサイトのスピンと singlet pair を作っています。図だと、 i 番目のサイトの R と $i+1$ 番目のサイトの L をつなぐような直線が singlet pair を表しています。各サイトの円は演算子 $\hat{\mathcal{S}}_i$ の作用を表しています。

^{*18}この VBS 状態は規格化されていません。後述の MPS 表現を使って計算すると $\langle \text{VBS} | \text{VBS} \rangle = (3/4)^L + 3(-1/4)^L$ であることが分かります。

図1 VBS 状態の模式図



ここでは基底状態を一つ作ることにしませんが、実はこの VBS 状態は AKLT 模型のユニークな基底状態となっています。また、エネルギーギャップの存在も示すことができます。詳しくは [22] をご覧ください。

2.3.3 行列積表現*

VBS 状態は行列積状態 (Matrix Product State, MPS) と呼ばれる状態となっています。これを見ていきたいと思えます。断りのない限り並進不変な状態について考えることにします。

まず一般の (並進不変な) MPS について説明します。^{*19} $\Lambda = \{1, 2, \dots, L\}$ をスピン S のスピンド (1次元の各サイト上に大きさ S のスピンがある模型) とします。 $\sigma = -S, -S+1, \dots, S$ とします。これはスピン S の \hat{S}^z の固有値に対応します。サイト i の \hat{S}^z の値が σ_i である状態を $|\sigma_i\rangle_i$ と書くことにすると、 $\sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_L)$ を動かしたとき

$$|\Psi^\sigma\rangle = \bigotimes_{i=1}^L |\sigma_i\rangle_i \quad (2.18)$$

が今考えているヒルベルト空間の基底となります。

このとき、MPS とは $D \times D$ 行列 A^{σ_i} を用いて

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma} \text{Tr} [A^{\sigma_1} A^{\sigma_2} \dots A^{\sigma_L}] |\Psi^\sigma\rangle \quad (2.19)$$

のように書ける状態のことです。ある状態が与えられたとき、それに対応する MPS は一意ではないことに注意してください。 D の大きさを系のサイズ L に応じて十分大きくとればすべての状態はこのように書けるわけですが、私たちは系のサイズが無大の極限を考えたので D が系のサイズによらないような場合が重要となります。さらに injective MPS と呼ばれる状態が後で重要となります。

$(A^\sigma)_{\sigma \in \{-S, \dots, S\}}$ が injective であるとは、 $\lambda > 0$ に対して $\sum_{\sigma=-S}^S A^\sigma (A^\sigma)^\dagger = \lambda I$ が成り立ち、さらにある定数 l_0 があって $\sigma_1, \dots, \sigma_{l_0}$ を動かしたとき $A^{\sigma_1} A^{\sigma_2} \dots A^{\sigma_{l_0}}$ が $D \times D$ 行列の空間全体を張ることを言います。

injective MPS に対しては、MPS 表現の行列 A^σ がユニタリ変換で書ける違いを除いて一意に定まります。すなわち、 $(A^\sigma)_{\sigma \in \{-S, \dots, S\}}$ と $(B^\sigma)_{\sigma \in \{-S, \dots, S\}}$ がともに injective MPS であるとき

^{*19}MPS 自体は並進不変でない状態に対しても定義することができます。

であって、同じ MPS を表すとき、つまり

$$\sum_{\sigma} \text{Tr} [A^{\sigma_1} A^{\sigma_2} \cdots A^{\sigma_L} | \Psi^{\sigma} \rangle] = \sum_{\sigma} \text{Tr} [B^{\sigma_1} B^{\sigma_2} \cdots B^{\sigma_L} | \Psi^{\sigma} \rangle] \quad (2.20)$$

の関係を満たすとき、

$$B^{\sigma} = U^{\dagger} A^{\sigma} U \quad (2.21)$$

を満たすユニタリ行列 U が位相の違いを除いて一意に定まります。(証明略)

AKLT 模型の基底状態である VBS 状態は MPS で表現されます。具体的には

$$A^{+} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}, \quad A^{-} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad A^0 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

のように選ぶことで

$$| \text{VBS} \rangle = \sum_{\sigma} \text{Tr} [A^{\sigma_1} A^{\sigma_2} \cdots A^{\sigma_L} | \Psi^{\sigma} \rangle] \quad (2.23)$$

のように書けることを確かめることができます。^{*20}

2.4 VBS 状態の特徴

ここでは上で構成した VBS 状態が持つ性質について見ていきます。

2.4.1 隠れた反強磁性秩序

AKLT 模型における基底状態 (VBS 状態) を、各サイトの \hat{S}^z の固有値 $0, \pm 1$ の固有状態 $|0\rangle, |\pm\rangle$ (のテンソル積) で展開したとき、現れる状態は図 2 の上のような形のもののみとなることが分かります。^{*21} この状態から 0 を取り除くと、図 2 の下のような \pm の列が得られます。この状態を見ると分かるように、この列では $+$ と $-$ が交互に並んでいます。 $+$ と $-$ が交互に並んでいるような秩序のことを **反強磁性秩序** と言い、VBS 状態が持つ秩序のことを **隠れた反強磁性秩序** と言います。「隠れた」と言っているのは、そのままの状態だと $+$ と $-$ の間にランダムに 0 が配置されていて、反強磁性秩序を示さないことに由来します。

VBS 状態が反強磁性秩序を示さないことは具体的な計算により示すことができます。一般に状態 $|\Phi\rangle$ が α 方向の反強磁性秩序を持つとは、状態 $|\Phi\rangle$ が関係式

$$\lim_{|j-i| \rightarrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} (-1)^{j-i} \langle \Phi | \hat{S}_i^{\alpha} \hat{S}_j^{\alpha} | \Phi \rangle \neq 0 \quad (2.24)$$

^{*20}以下の解説でこの表示を使うことはないのでここでは詳細については省略します。VBS 状態が pre-VBS 状態から作られることに留意すれば自力でも確かめられるはずです。

^{*21}VBS 状態の構成の説明を追った人向け：ポイントとなるのはとなり合う $1/2$ スピン同士で singlet pair を作っている点です。あるサイトのスピンの $+$ であったとすると、となりのサイトのスピンは 0 か $-$ であり、仮に 0 だとすると、そのもう一つとなりのサイトもまた 0 か $-$ であることが VBS 状態の形からしたがいまます。このことは VBS 状態が pre-VBS 状態から作られることに留意すれば確認することができます。

2.4.2 境界がある場合の AKLT 模型

VBS 状態の他の特徴として、系に端を付けたときに、縮退した 4 つの状態が現れることが挙げられます。系に端をつけるというのは、次のハミルトニアンを考えるということです。

$$\hat{H}_{\text{AKLT}}^{\text{open}} = \sum_{i=1}^{L-1} \left\{ \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_{i+1} + \frac{1}{3} \left(\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_{i+1} \right)^2 \right\}. \quad (2.28)$$

2.4.3 ハミルトニアン (2.28) の基底状態の構成 *

このハミルトニアンの基底状態は VBS 状態と同じようにして構成することができます。具体的には、左端と右端の 1/2 スピンをそれぞれ σ_L, σ_R として ($\sigma_L, \sigma_R = \uparrow, \downarrow$), 4 つの pre-VBS 状態を

$$|\text{pre-VBS}^{\sigma_L, \sigma_R}\rangle = |\sigma_L\rangle_{1,L} \otimes \left(\bigotimes_{x=1}^{L-1} \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |\uparrow\rangle_{i,R} |\downarrow\rangle_{i+1,L} - |\downarrow\rangle_{i,R} |\uparrow\rangle_{i+1,L} \right\} \right) \otimes |\sigma_R\rangle_{L,R} \quad (2.29)$$

で定義し、VBS 状態をそれぞれ

$$|\text{VBS}^{\sigma_L, \sigma_R}\rangle = \left(\bigotimes_{i=1}^L \hat{\mathcal{S}}_i \right) |\text{pre-VBS}^{\sigma_L, \sigma_R}\rangle \quad (2.30)$$

と定めると、これらがハミルトニアン (2.28) の基底状態であることが示されます。また、基底状態はこの 4 つだけであることも示されます。

2.4.4 端状態の非自明な縮退

境界がある場合の AKLT 模型 (2.28) の基底状態は直観的には図 3 のように理解することができます。open な境界条件のもとでは、左端と右端の 1/2 スピンは singlet pair を組むことはないの、各端にはスピン 1/2 の自由度があるという風に考えることができます。系のサイズ L が十分大きいとこれらの二つの間の相互作用は十分小さいと期待されるため、今のハミルトニアンは有効的には 1/2 スピンが二つある状態と考えることができます。このハミルトニアンの次元は 4 次元なので、基底状態が 4 重に縮退していることが期待されます。^{*23}

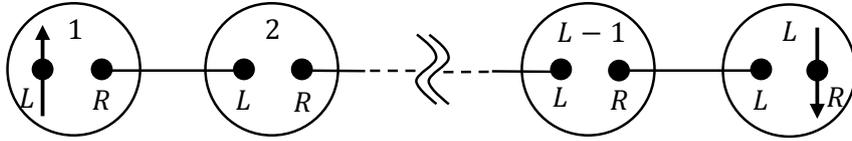
この直観的な描像が正しいことを直接確認することもできます。具体的には、任意のサイト i のスピン演算子 \hat{S}_i^z の期待値を計算すると、

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\langle \text{VBS}^{\uparrow, \uparrow} | \hat{S}_i^z | \text{VBS}^{\uparrow, \uparrow} \rangle}{\langle \text{VBS}^{\uparrow, \uparrow} | \text{VBS}^{\uparrow, \uparrow} \rangle} = -2(-3)^{-i} \quad (2.31)$$

となります。 $\sum_{i=1}^{\infty} -2(-3)^{-i} = 1/2$ なので、この場合だと左端にスピン \uparrow が局在していることが分かります。

^{*23}この縮退は有限サイズでの結果です。熱力学極限では基底状態は一意となることが知られています。系のサイズが大きい極限では端の影響はなくなると期待されるため、この結果は周期境界条件を課したときに基底状態が一意であるという結果と整合的です。

図 3 端がある場合の VBS 状態



2.4.5 隠れた反強磁性秩序と端状態の縮退の関係

AKLT 模型の基底状態の特徴として、隠れた反強磁性秩序の存在と境界のある条件下での端状態の縮退の存在を確認しました。実はこの二つは関係があることを示すことができます。具体的には、あるユニークな基底状態が隠れた反強磁性秩序を持つとき、基底状態は少なくともほとんど 4 重に縮退することを示すことができます。「ほとんど」と言っていることの意味は、基底状態のエネルギーを E_{GS} と書いたとき、ある系のサイズに依存しない定数 C_i (C_i は i にのみ依存) に対して、

$$E_{\text{GS}} < E_i \leq E_{\text{GS}} + \frac{C_i}{L} \quad (2.32)$$

を満たすような固有エネルギー E_i が (重複度込みで) 少なくとも 3 つ存在するという事です。証明は [22] を見てください。

2.5 $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ 対称性

これまでの解析から、隠れた反強磁性秩序がどうやら大切だということが見えてきました。ここでは $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ の対称性を観察することで、この対称性が Haldane 相 (反強磁性 Heisenberg 模型の基底状態が属する相) の発現に必要な対称性ではないかということ (発見的な方法により) を観察します。ここでの推測は次節のような議論により正当化する必要があることをあらかじめ断っておきます。

2.5.1 準備

まず、群 $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ について説明します。これは次で定義されるアーベル群です。^{*24}

$$\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2 = \{e, a, b, c \mid e \text{ は単位元}, a^2 = b^2 = c^2 = e, ab = c, bc = a, ca = b\}. \quad (2.33)$$

次に、スピン 1 のスピン演算子 $\hat{S}^x, \hat{S}^y, \hat{S}^z$ ^{*25} に対して、各軸回りの回転を表すユニタリ演算子を $\hat{U}_\pi^\alpha = \exp(-i\pi\hat{S}^\alpha)$, ($\alpha = x, y, z$) で定義します。また、ベクトル空間 \mathbb{C}^3 の恒等演算子を I と書くことにします。

^{*24}アーベル群とは、すべての積が可換であるような群のことです。

^{*25}これはベクトル空間 \mathbb{C}^3 上のエルミート演算子です。

このとき,

$$e \mapsto I, \quad a \mapsto \hat{U}_\pi^x, \quad b \mapsto \hat{U}_\pi^y, \quad c \mapsto \hat{U}_\pi^z \quad (2.34)$$

とすることで群 $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ の表現が得られます. 群の表現に馴染みのない人は, ここでは $\{I, \hat{U}_\pi^x, \hat{U}_\pi^y, \hat{U}_\pi^z\}$ が群 $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ と同じであると思えば大丈夫です.

ハミルトニアン \hat{H} が $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ の対称性を持つとは, $\alpha = x, y, z$ に対して

$$(\hat{U}_\pi^\alpha)^\dagger \hat{H} \hat{U}_\pi^\alpha = \hat{H} \quad (2.35)$$

が成り立つことを言います.

2.5.2 設定

モデルハミルトニアンとして次のようなものを考えます. $\Lambda_L = \{1, 2, \dots, L\}$ とし, 周期境界条件 $L+1 = 1$ は課します.

$$\hat{H}_{\lambda, D} = \sum_{i \in \Lambda_L} \left\{ \hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^y + \lambda \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z + D(\hat{S}_i^z)^2 \right\}. \quad (2.36)$$

これは $\lambda = 1, D = 0$ で Heisenberg 模型 (2.7) に帰着する模型です.

$\hat{H}_{\lambda, D}$ は D を保ったまま $\lambda \nearrow \infty$ にする極限で Ising 模型のハミルトニアンに, λ を保ったまま $D \nearrow \infty$ にする極限で自明なハミルトニアン (基底状態が $|0\rangle$ のテンソル積となる) に近づくことが分かります. こうした極端な場合と比較すると Heisenberg 模型の基底状態^{*26}の定性的な振る舞いは異なることが期待されます. 例えば D の項だけを考えると基底状態は $\otimes_{i=1}^L |0\rangle_i$ となりますが, これは明らかに隠れた長距離秩序のようなものは持ちません. このような意味でパラメータ λ, D を動かしたとき, SPT 相が複数あるのではないかという考えに至ります.

ここまでの流れと以下でのモチベーションを改めて整理します. 当初の目的は反強磁性 Heisenberg 模型の基底状態を SPT 相の意味で理解することに注意します.

- 反強磁性 Heisenberg 模型の基底状態の性質を調べるために, 具体的に解ける模型である AKLT 模型を導入した.
- AKLT 模型の基底状態 (VBS 状態) を調べることで, その特徴をいくつか観察した. 特に, 隠れた反強磁性秩序は VBS 状態を特徴付けるものとして重要そうである.
- こうした特徴を持つ SPT 相を考えることはできないか. つまり, ある対称性のもとで, Heisenberg 模型の基底状態^{*27}と VBS 状態が同じ SPT 相であるとみなせるような対称性を与えることはできないか.

^{*26}これが unique かつ gapped であることはここでは仮定しています.

^{*27}ここではある意味で Heisenberg 模型の基底状態が unique かつ gapped であることは信じています. ただし, Heisenberg 模型そのもののズバリがそのような条件を満たしているかどうかは SPT 相を考える上では本質的ではないことに注意してください.

このような気持ちになってきます。SPT 相では一つ対称性を決めると、考える模型に対して \mathcal{H} の元としてはすべてその対称性を満たしている必要があるのです。したがって、ここで言っている対称性というのは、モデルハミルトニアン (2.36) が持つ対称性に含まれている必要があります。(2.36) 自体は $SU(2)$ 対称性のような連続対称性を持っていますが、この後で考えるのは $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ で書かれる離散的な対称性です。

一つ注意として、 $\hat{H}_{\lambda,D}$ たちの基底状態は unique であるとも gapped であるとも限らず、ある与えられたパラメータ λ_0, D_0 に対して $\hat{H}_{\lambda_0, D_0} \in \mathcal{H}$ となっているかは非自明です。^{*28}

以下では、反強磁性 Heisenberg 模型の基底状態が属する SPT 相を **Haldane 相** と言うことにします。

2.5.3 KT 変換

以下の観察で重要となるのが、KT 変換と呼ばれるユニタリ変換です。これは演算子

$$\hat{U}_{\text{KT}} = \prod_{i,j \in \Lambda_L, i < j} \exp\left(i\pi \hat{S}_i^z \hat{S}_j^x\right) \quad (2.37)$$

により定義されるもので、これがユニタリであって $\hat{U}_{\text{KT}}^2 = I$ となることを示すことができます。この変換は熱力学極限でもはや non local であることに注意してください。ややこしいのですが、以下では熱力学極限を取らずに議論します。

$\hat{H}_{\lambda,D}$ の \hat{U}_{KT} による変換後のハミルトニアンを、 $\hat{H}'_{\lambda,D} = \hat{U}_{\text{KT}} \hat{H}_{\lambda,D} \hat{U}_{\text{KT}}$ とします。このとき、(2.36) から

$$\hat{H}'_{\lambda,D} = \sum_{i=1}^L \left\{ -\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^x + \hat{S}_i^y \exp\left[i\pi(\hat{S}_i^z + \hat{S}_{i+1}^z)\right] \hat{S}_{i+1}^y - \lambda \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z + D(\hat{S}_i^z)^2 \right\} \quad (2.38)$$

となります。^{*29}

2.5.4 隠れた $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ 対称性

KT 変換の持つ重要な性質は、隠れた反強磁性秩序を持つ状態を、強磁性秩序を持つ状態に移すという点です。これは演算子の作用をゆっくり観察することで納得することができるのですが、それについてはここでは省略します。より正確には、状態 $|\Phi\rangle$ が α 方向の強磁性秩序を持つことを、

$$\mathcal{O}_{\text{ferro}}^\alpha(\Phi) = \lim_{j \rightarrow i \rightarrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \langle \Phi | \hat{S}_i^\alpha \hat{S}_j^\alpha | \Phi \rangle \quad (2.39)$$

が 0 でない正の値を持つことと定義します。このもとで $|\Phi'\rangle = \hat{U}_{\text{KT}} |\Phi\rangle$ として、

$$\mathcal{O}_{\text{string}}^\alpha(\Phi) = \mathcal{O}_{\text{ferro}}^\alpha(\Phi') \quad (2.40)$$

^{*28}非自明であるばかりでなく、各々の $\hat{H}_{\lambda,D}$ について、その基底状態が unique かつ gapped であることを厳密に証明することは難しいと思います。AKLT 模型は具体的に証明されている珍しい例で、そういう意味で重要な模型です。なお、AKLT 模型は $\hat{H}_{\lambda,D}$ の元ではないことに注意してください。

^{*29}計算の詳細については [22] を見てください。

となることを示すことができます。^{*30}

KT 変換は non local な変換だったので、変換後のハミルトニアン $\hat{H}'_{\lambda,D}$ が short ranged^{*31} である保証はありません。実は変換後のハミルトニアン $\hat{H}'_{\lambda,D}$ が short ranged であることの必要十分条件は、もとのハミルトニアン $\hat{H}_{\lambda,D}$ が $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ の対称性を持つことであることが示されます。したがって以下の議論はもとのハミルトニアン $\hat{H}_{\lambda,D}$ が $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ の対称性を持っていることが前提となります。

(2.27) によると VBS 状態は隠れた強磁性秩序を持ちます。この事実を踏まえて、 $\lambda = 1, D = 0$ に近い範囲で隠れた強磁性秩序を持つような $\hat{H}_{\lambda,D}$ が存在すると信じることにします。そのようなハミルトニアンの基底状態の一つを $|\Phi_{\text{Haldane}}\rangle$ とするとき、KT 変換後の強磁性秩序は、

$$\mathcal{O}_{\text{ferro}}^x(\Phi'_{\text{Haldane}}) = \mathcal{O}_{\text{ferro}}^y(\Phi'_{\text{Haldane}}) \neq 0, \quad \mathcal{O}_{\text{ferro}}^z(\Phi'_{\text{Haldane}}) \neq 0 \quad (2.42)$$

で特徴付けられるでしょう。

次に注目するのは、(2.38) は $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ の離散的な対称性を持っている点です。^{*32}

$|\Phi_{\text{Haldane}}\rangle$ は (2.42) の関係を満たす状態でした。 x 方向の強磁性秩序 (スピンの揃った状態) は z 軸回りの π 回転対称性を、 z 方向の強磁性秩序 x 軸回りの π 回転対称性をそれぞれ破ると期待される (直観的な議論) ので、 $|\Phi_{\text{Haldane}}\rangle$ は $\hat{H}_{\lambda,D}$ が持つ $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ の対称性が破れている、あるいは基底状態に縮退が起きているような状態であろうという気分になります。^{*33}

次に λ が大きいときを考えます。このときは (2.38) を見るとハミルトニアンは強磁性 Ising 模型の形に近く、基底状態は z 軸方向にのみ強磁性秩序があり、対称性については x 軸回りの π 回転対称性だけが破れているような状態であることが期待されます。ただし、元のハミルトニアンで考えたときに unique かつ gapped な \mathcal{H} の元である $\hat{H}_{\lambda,D}$ であるようなものが存在していて、さらに KT 変換によってそれが所望のハミルトニアンになるかは非自明です。

同様に D が大きいときを考えると、($\hat{H}'_{\lambda,D}$ の世界で) これは $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ の対称性を破らないような基底状態となっていることが期待されます。そもそもそのような $\hat{H}_{\lambda,D} \in \mathcal{H}$ の存在が非自明なのは先ほどと同様です。

ともかくも、以上のような簡単な観察を踏まえると、「 $\hat{H}_{\lambda,D}$ 」の $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ 対称性が Haldane 相を特徴付けるのに役立ちそうであり、このとき KT 変換後の $\hat{H}'_{\lambda,D}$ の基底状態の $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ のレベ

^{*30} $\mathcal{O}_{\text{ferro}}^\alpha(\Phi)$ は (2.26) で定義していました。改めて書くと、

$$\mathcal{O}_{\text{string}}^\alpha(\Phi) = - \lim_{j \rightarrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} (-1)^{j-i} \langle \Phi | \hat{S}_i^\alpha \exp \left(i\pi \sum_{k=i+1}^{j-1} \hat{S}_k^\alpha \right) \hat{S}_j^\alpha | \Phi \rangle \quad (2.41)$$

です。

^{*31} 1次元格子系 Λ 上定義されたハミルトニアンが short ranged であるとは、ある定数 $r \in \mathbb{R}$ があって、任意の $i \in \Lambda$ に対して $|j - i| > r$ ならば $\langle i, j \rangle$ の相互作用が 0 であるような模型のことです。

^{*32} 紛らわしいのですが、この $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ 対称性は KT 変換で移った先のハミルトニアン $\hat{H}'_{\lambda,D}$ での対称性です。同じ名前を使ってしまっていますが、これは元の $\hat{H}_{\lambda,D}$ の $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ 対称性とは別の、「隠れた」対称性ということになります。

^{*33} KT 変換は有限系ではふつうのユニタリ変換なので、熱力学極限を取る前は unique かつ gapped な条件は保たれることに注意してください。

ル,あるいは縮退度が異なる SPT 相であることを示す指標になっているのではないかという気分になります.

2.5.5 不満な点

しかし,これまでの考察で SPT 不変量は構成できているのでしょうか. ここまでの議論では有限系に対して KT 変換をした後,強磁性秩序を見るために熱力学極限を取っていましたが,本来ははじめに熱力学極限を取った後に KT 変換を行うべきです.ところが KT 変換は non local な写像だったので,熱力学極限でどのようなものになるのかは全く分からないと思われま.また,仮にそのような課題をクリアしたとしても, $\hat{H}'_{\lambda,D}$ の基底状態の縮退などは摂動などで簡単に破れると考えられるため,どう頑張っても今の議論では SPT 不変量は構成できないように思われま.

ではここでの議論が全く意味がなかったかという, (あくまでも結果的にですが) 実は良い線を行っていたことが次節で分かります.ここで候補として考えた $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ は Haldane 相を特徴付ける対称性となるのです.次節の議論は抽象的な議論が多く,物理的にどういうことが起こっているのかは分かりにくいものになっていると思います.この節で見てきたような隠れた反強磁性秩序などはイメージもしやすく,Haldane 相の理解を深める上ではこの節のような内容は大切であると思われま.

3 SPT 相の分類

3.1 1次元スピン系

ここでは Haldane 相に限らない,1次元スピン系の SPT 相を分類する方法について述べま.これについては数学者による極めて一般的な結果があるのですが,ここでは簡単のために injective MPS で表現される基底状態に限った話をしま.並進対称性を課してしま,これは技術的な理由からであり,本質的な仮定ではありません.

3.1.1 系の持つ対称性から射影表現が定まること

$\{1, 2, \dots, L\}$ で書かれる 1次元格子上的スピン系を考えま.各サイトのスピンは S で等しいとしま.また,系には並進対称性を課しま.このとき,次の injective MPS で表現される状態が unique かつ gapped な基底状態である系を考えま. MPS 表現を次のように書きま.

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma} \text{Tr}[A^{\sigma_1} A^{\sigma_2} \dots A^{\sigma_L}] |\Psi^{\sigma}\rangle. \quad (3.1)$$

ここで $\sigma = -S, -S+1, \dots, S$ であり, A^{σ} はそれぞれ $D \times D$ 行列です. $(A^{\sigma})_{\sigma \in \{-S, \dots, S\}}$ が injective であることとは, $\lambda > 0$ に対して $\sum_{\sigma=-S}^S A^{\sigma} (A^{\sigma})^{\dagger} = \lambda I$ が成り立ち,さらにある定数 l_0 があって $\sigma_1, \dots, \sigma_{l_0}$ を動かしたとき $A^{\sigma_1} A^{\sigma_2} \dots A^{\sigma_{l_0}}$ が $D \times D$ 行列の空間全体を張ることを言うのでした.

さて、系には on site な対称性が備わっているとします。これを説明するために、まず有限群 G のベクトル空間 $V \cong \mathbb{C}^{2S+1}$ 上のあるユニタリ表現 $u : G \rightarrow U(V), g \mapsto \hat{u}(g)$ を取ります。このとき、各サイトの上に乗っかっているベクトル空間 $V_i \cong \mathbb{C}^{2S+1}$ (これはスピン演算子が作用する空間) 上の G のユニタリ表現を $u_i : G \rightarrow U(V), g \mapsto \hat{u}_i(g) = \hat{u}(g)$ で定め、そのテンソル表現 $U : G \rightarrow U(V^{\otimes L}), g \mapsto \hat{U}(g) = \otimes_{i=1}^L \hat{u}_i(g)$ と系のハミルトニアン \hat{H} が可換であるとします。以下これらのユニタリ表現 u, U を固定します。^{*34}

$|\Psi^\sigma\rangle = \otimes_{i=1}^L |\sigma_i\rangle_i$ であったことを思い出せば、定義より

$$\hat{U}(g) |\Psi\rangle = \sum_{\sigma} \text{Tr}[A^{\sigma_1} A^{\sigma_2} \dots A^{\sigma_L}] \hat{U} |\Psi^\sigma\rangle \quad (3.2)$$

$$= \sum_{\sigma, \sigma'} \text{Tr}[A^{\sigma_1} A^{\sigma_2} \dots A^{\sigma_L}] |\Psi^{\sigma'}\rangle \left(\prod_{i=1}^L \langle \sigma'_i | \hat{u}_i(g) | \sigma_i \rangle \right) \quad (3.3)$$

$$= \sum_{\sigma} \text{Tr}[\tilde{A}^{\sigma_1} \tilde{A}^{\sigma_2} \dots \tilde{A}^{\sigma_L}] |\Psi^\sigma\rangle \quad (3.4)$$

となります。ここで、 \tilde{A}^σ を

$$\tilde{A}^\sigma = \sum_{\sigma'=-S}^S \langle \sigma | \hat{u}(g) | \sigma' \rangle A^{\sigma'} \quad (3.5)$$

で定義しました。このとき、 $\sum_{\sigma=-S}^S \tilde{A}^\sigma (\tilde{A}^\sigma)^\dagger = \sum_{\sigma=-S}^S A^\sigma (A^\sigma)^\dagger$ が分かり、したがって $\{\tilde{A}^\sigma\}_\sigma$ もまた injective です。

基底状態が一意で G の対称性を持つという仮定より、任意の $g \in G$ に対してある $\eta_L(g)$ が存在して

$$\hat{U}(g) |\Psi\rangle = e^{i\eta_L(g)} |\Psi\rangle \quad (3.6)$$

となります。これは

$$\tilde{A}^\sigma = e^{i\eta_L(g)/L} V^\dagger(g) A^\sigma V(g) \quad (3.7)$$

であるような $D \times D$ 行列 $V(g)$ が存在すれば満たされます。ところが³, injective MPS の性質より (2.20 あたりの記述を参照), このような $V(g)$ は位相の違いを除いて一意に決まり, $\eta_L/L = \zeta$ となるような L によらない $\zeta(g)$ も存在することが分かります。よって (3.5) は

$$\sum_{\sigma'=-S}^S \langle \sigma | \hat{u}(g) | \sigma' \rangle A^{\sigma'} = e^{i\zeta(g)} V^\dagger(g) A^\sigma V(g) \quad (3.8)$$

となります。これを次のように変形しておきます。

$$A^\sigma = e^{i\zeta(g)} \sum_{\sigma'=-S}^S \langle \sigma | \hat{u}^\dagger(g) | \sigma' \rangle V^\dagger(g) A^{\sigma'} V(g). \quad (3.9)$$

^{*34}以前にも述べたように、この解説 PDF ではユニタリな対称性のときのみ考えます。反ユニタリに対しても同様の議論により同じことが言えます。

同じことを繰り返すことで,

$$A^\sigma = e^{i\{\zeta(g)+\zeta(h)\}} \sum_{\sigma', \sigma''} \langle \sigma | \hat{u}^\dagger(h) | \sigma'' \rangle \langle \sigma'' | \hat{u}^\dagger(g) | \sigma' \rangle V^\dagger(h) V^\dagger(g) A^{\sigma'} V(g) V(h) \quad (3.10)$$

$$= e^{i\{\zeta(g)+\zeta(h)\}} \sum_{\sigma'} \langle \sigma | \hat{u}^\dagger(gh) | \sigma' \rangle \{V(g)V(h)\}^\dagger A^{\sigma'} V(g) V(h) \quad (3.11)$$

を得ます. 一方で, はじめに gh を考えても同じことなので,

$$A^\sigma = e^{i\zeta(gh)} \sum_{\sigma'=-S}^S \langle \sigma | \hat{u}^\dagger(gh) | \sigma' \rangle V^\dagger(gh) A^{\sigma'} V(gh) \quad (3.12)$$

も成り立ちます.

\hat{U} が G の表現だったので, $\hat{U}(g)\hat{U}(h) = \hat{U}(gh)$ であり, これより $|\psi\rangle$ の不変性から $\zeta(g)+\zeta(h) = \zeta(gh)$ がしたがい, よって上の式より任意の $g, h \in G$ および任意の σ に対して

$$\{V(g)V(h)\}^\dagger A^{\sigma'} V(g)V(h) = V^\dagger(gh) A^{\sigma'} V(gh) \quad (3.13)$$

であることが分かりました.

$W = V(g)V(h)V^\dagger(gh)$ と書くと, この式は任意の σ に対して $[W, A^\sigma] = 0$ であることを意味します. これより, 任意の $\sigma_1, \dots, \sigma_{l_0}$ に対して, $[W, A^{\sigma_1} A^{\sigma_2} \dots A^{\sigma_{l_0}}]$ となりますが, $\{A^\sigma\}_\sigma$ は injective だったので, W はすべての $D \times D$ 行列と可換なユニタリ行列であることが分かります. よって, ある $\phi(g, h) \in \mathbb{R}$ を用いて $W = e^{i\phi(g, h)} I$ と書けます. 結局, $V(g)$ が満たすべき関係式は

$$V(g)V(h) = e^{i\phi(g, h)} V(gh) \quad (3.14)$$

となります.

V には位相の自由度があったので, G の単位元 e に対して $V(e) = I$ とすることができます. このとき, $V(g)$ はほとんど G の表現となっていますが, 元の群での積 gh と g, h を別々に写したとき, (3.14) の位相因子だけの違いがあるものになっています. このような, G からベクトル空間上の線形写像への対応を群の射影表現と言います.

3.1.2 同値でない射影表現が 2 次の群コホモロジーで分類されること

上で現れた射影表現 (3.14) は 2 次の群コホモロジー $H^2(G, U(1))$ と呼ばれるもので分類することができます. 群コホモロジーについては付録 A に簡単にまとめておきました.

群 G の射影表現 V を考えます. これは G から $D \times D$ 行列への写像であって, G の単位元 e を単位行列に写し, 関係式 (3.14) を満たすようなものです.

写った先の行列の積の結合律より任意の $g_1, g_2, g_3 \in G$ について $\{V(g_1)V(g_2)\}V(g_3) = V(g_1)\{V(g_2)V(g_3)\}$ が成り立つ必要がありますが, (3.14) を用いればこれは

$$\phi(g_1, g_2) + \phi(g_1g_2, g_3) = \phi(g_2, g_3) + \phi(g_1, g_2g_3) \pmod{2\pi} \quad (3.15)$$

と言う条件に等しいことが分かります。したがって (A.8) より $\phi \in Z^2(G, U(1))$ であることが分かります。

次に、射影表現を $V'(g) = e^{i\psi(g)}V(g)$ と、位相の分だけ異なるものに取り替えて考えます。この場合も (3.9) は満たされるので、二つの関係式

$$V(g)V(h) = e^{i\phi(g,h)}V(gh) \quad (3.16)$$

$$V'(g)V'(h) = e^{i\phi'(g,h)}V'(gh) \quad (3.17)$$

がそれぞれ成り立つ必要があります。 V' の選び方より二つ目の式は

$$e^{i\{\psi(g)+\psi(h)\}}V(g)V(h) = e^{\phi'(g,h)}e^{i\psi(gh)}V(gh) \quad (3.18)$$

となるので、これを一つ目の式と比較することで

$$\phi'(g,h) = \phi(g,h) - \psi(gh) + \psi(g) + \psi(h) \pmod{2\pi} \quad (3.19)$$

という関係式が得られます。この関係式を満たす射影表現 ϕ, ϕ' は等価であるということなので、(A.9) での話を思い出せば、同値でない射影表現は 2 次の群コホモロジー $H^2(G, U(1))$ で分類されることが分かりました。

3.2 SPT 相との関係

今、 G の表現は一つに固定していたので、unique かつ gapped なハミルトニアンであって、injective MPS で表現される基底状態 $|\Psi\rangle$ に対してある射影表現が対応し、同値でない射影表現に対して異なる 2 次の群コホモロジーの要素 $\omega(\Psi) \in H^2(G, U(1))$ が対応することが分かりました。

このとき、 ω が異なる基底状態は異なる SPT 相にある、つまり ω は SPT 不変量であると言えるのでしょうか？

2.5 で観察した対称性で考えてみます。群コホモロジーを計算すると、 $H^2(\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2, U(1)) = \mathbb{Z}_2$ となります。物理的には小さな摂動に対してこの離散的な要素は不変に保たれると考えられるため、 ω は SPT 不変量だろうという推測ができます。

これは（物理的には自然ですが）数学的にはいい加減な議論です。さらに、ここで議論できていたのは injective MPS で書ける基底状態だけでしたから、一般の 1 次元スピン系に対して SPT 相を定義できるかは依然として問題のままです。

数学的な事実として、MPS で表現される状態は並進不変な 1 次元スピン系の任意の状態を「近似」することが知られている*35ので、物理的には MPS に限定した状態について定義された SPT 不変量（のようなもの）は実際に SPT 不変量となっているだろうと期待されます。[8] などではそのような議論によって Haldane 相を特徴付ける対称性について議論しています。

実はすごいことに、こうした物理学者の結果を完全に含む SPT 不変量が数学者によって厳密に構成されているのです！一般的な仕事によるものはや状態は MPS 表現に限定する必要はなく、並

*35 [4] など。

進対称性も必要としません。[16] [17]などで議論されています。2021年になって2次元のスピン系についても [18] などの仕事があります。^{*36}

3.3 Haldane 相

前小節で Haldane 相が $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ 対称性に保護された SPT 相であることを説明しました。しかし Haldane 相を特徴付ける対称性は他にもあることが知られており、例えば時間反転対称性もその一つで、これは物理的には端状態の $1/2$ 有効スピンの時間反転対称性で守られることに対応します。また、inversion symmetry と呼ばれる対称性を考えると、これは隠れた反強磁性秩序や端状態を考えても非自明相であることを調べることができないものであることが分かっています。これについては [8] で調べてられており、この論文では Entanglement Spectrum と呼ばれるものを考えることで、与えられた対称性に対して Haldane 相が非自明な SPT 相であることを調べることができることを示しています。^{*37}

今回はスピンの 1 のときのみを扱いましたが、一般の整数のスピンについて調べると、スピンの奇数のときと偶数のときで本質的な違いがあることが分かっています。奇数のときはすでに調べたように非自明な相となるが、偶数の場合は自明相になることが知られています。[19]

4 進んだ勉強のために

この節では SPT 相に関連した話を紹介すると共に、勉強に役立つと思われる文献を紹介します。なお、この節の内容は筆者自身勉強中の内容であり、内容に誤りが含まれる可能性が高いです。内容については全て筆者の責任です。^{*38}

SPT 相に関して、初めて勉強する人向けの系統立った解説のようなものは残念ながら（私の知る限り）現時点で存在しません。後述の [22] はスピン系に絞っていますが、とても分かりやすく書かれていると思います。この PDF の 2 節の内容に関しては、概ね [22] の内容に沿っていますが、細かい式の導出や、物理的な解釈について非常に丁寧に書かれているので、興味を持たれた方はこの本の Part II を読むことを勧めます。日本語で書かれているものとしては、[21] などがありますが、少しハードルが高い気がします。文献がないとは言ってもモダンな文献も探せば見つかるようで、例えば私は上記以外にも [23] の 2 章などを参考にしています。

格子系の模型の SPT 相について、低次元に関しては結構いろいろなことが分かっていると思います。例えば量子ホール効果などは（広義の意味での）SPT 相ですが、これは Free Fermion の周

^{*36}いずれも数学者による数学の論文です。私はこの論文の内容を、結果の概要以外ほとんど理解していません。

^{*37}ただしここでの議論も MPS に限定したものであり、やはり上で述べた数学的な結果はとても偉いということになると思います。

^{*38}ほとんど自分用のメモで公開するのはかなり恥ずかしいのですが、自分自身昨年に勉強を始めた頃は文献を探したり外観を掴んだりするだけで随分苦労したので、初学者の方のお役に立てばという思いから公開することにしました。専門家の方で何かございましたら連絡していただきたいです。

期表と呼ばれるものの一つに相当します。Free Fermion（ハミルトニアンを第二量子化表示したとき、フェルミ演算子の2次で表されるようなもの）のSPT相についてはとてもよく分かっており、いくつかの対称性の種類それぞれに応じて一般の次元での分類が分かっています。[13]や[20]が有名です。

相互作用のある系についても[3][7]のような仕事があり、例えば[3]ではBosonicな d 次元のSPT相は $d+1$ 次の群コホモロジーで分類されるだろうということが書かれてあります。ただし、高次元では群コホモロジーでの分類は粗いだろうと考えられているようです。高次元ではMPSに限った議論だと物理的にも不十分であり、1次元のように簡単な問題にはならないようです。

SPT相の話を経験論的な場の理論の言葉で表現すると、 d 次元のSPT相の分類は d 次元のinvertibleなトポロジカル場の理論と呼ばれるものに相当するそうです（私の理解は[5]などを分からないなあ難しいなあと言いつつ眺めたりしている程度です）。この場合もやはり一般的な仕事があり、そのような理論はコボルディズム群と呼ばれるものを使って分類されるという話があります。群コホモロジーによる分類とコボルディズムによる分類は一般には一致せず、高次元に行くと群コホモロジーによる分類の方がやや粗くなることが知られています。^{*39}これは[11]や[12]などで予想され、比較的新しい仕事として[6]や[24]があります。場の理論の方だと d 次元のSPT相はおおよそ $d-1$ 次元のアノマリーと対応するみたいな話があるそうです。

一般にSPT相は何らかのコホモロジー理論により分類されるだろうというKitaevの予想[14]などもありますが、完全な理解からは遠く、SPT相についての人類の理解はまだ不完全であるというのが私の理解です。

付録 A 群コホモロジー

ここでは群コホモロジーについて、この解説PDFで必要となる最低限の内容をまとめます。^{*40}

G を有限群^{*41}、 M を左 G 加群とします。このPDFでは $M = U(1)$ のときしか扱いません。このとき、加群 $C^n(G, M)$ を

$$C^n(G, M) := \text{Map}(G^n, M) = \{f : G^n \rightarrow M\} \quad (\text{A.1})$$

で定義します。 $f \in C^n(G, M)$ に対して $\delta^n f(g_1, \dots, g_{n+1})$ を

$$\delta^n f(g_1, \dots, g_{n+1}) := g_1 \cdot f(g_2, \dots, g_{n+1}) + \sum_{i=1}^n (-1)^i g(g_1, \dots, g_i g_{i+1}, g_{n+1}) + (-1)^{n+1} f(g_1, \dots, g_n) \quad (\text{A.2})$$

^{*39}ただしコボルディズムを用いた分類は経験論的な場の理論の世界の話なので、そこでの話が物性系とどのような対応があるのかは非自明な部分も多いと思います。

^{*40}私はコホモロジーの一般論などは不勉強なので、ここでは物理屋が計算をする上でのミニマムな内容に限ります。群コホモロジーについては[15]を参考にしました。

^{*41}群コホモロジー自体は有限群でなくても全く同様に定義できます。このAppendixの話は有限群に限る必要はないのですが、本文中では有限群のみを考えるので、とりあえず有限群としておくことにします。

で定めます. 単純な計算により $\delta^{n+1} \circ \delta^n = 0$ を示すことができます. $Z^n(G, M), B^n(G, M), H^n(G, M)$ をそれぞれ次のように定義します.

$$Z^n(G, M) := \text{Ker}(\delta^n), \quad (\text{A.3})$$

$$B^n(G, M) := \text{Im}(\delta^{n-1}), \quad (\text{A.4})$$

$$H^n(G, M) := Z^n(G, M)/B^n(G, M). \quad (\text{A.5})$$

この $H^n(G, M)$ を n 次群コホモロジーと呼びます. 以下では M は自明係数 (G の M への左作用が自明) であるとします.

具体例をいくつか見ます. $f \in C^1(G, U(1)), h \in C^2(G, U(1))$ に対して,

$$(\delta^1 f)(g_1, g_2) = f(g_2) - f(g_1 g_2) + f(g_1), \quad (\text{A.6})$$

$$(\delta^2 h)(g_1, g_2, g_3) = h(g_2, g_3) - h(g_1 g_2, g_3) + h(g_1, g_2 g_3) - h(g_1, g_2) \quad (\text{A.7})$$

です. 今, アーベル群として $U(1)$ を選んでいます, 群の演算は足し算で書いています. これは $u \in U(1)$ を $u = e^{if}$ と書いたときの f のことだと思えば consistent です. ただし, このとき関係式 (A.6)(A.7) は $\text{mod } 2\pi$ で見る必要があることに気をつけてください.

大切なのは, まず $\phi \in C^2(G, U(1))$ のとき

$$\phi \in Z^2(G, U(1)) \Leftrightarrow \phi(g_2, g_3) - \phi(g_1 g_2, g_3) + \phi(g_1, g_2 g_3) - \phi(g_1, g_2) = 0 \pmod{2\pi} \quad (\text{A.8})$$

であること. そして $H^2(G, U(1))$ を考える上では, $\phi, \phi' \in Z^2(G, U(1))$ がある $\psi \in C^1(G, U(1))$ を用いて

$$\phi'(g_1, g_2) = \phi(g_1, g_2) + \psi(g_2) - \psi(g_1 g_2) + \psi(g_1) \pmod{2\pi} \quad (\text{A.9})$$

と書けているとき $\phi \sim \phi'$ とする同値関係を入れるという点です.

参考文献

- [1] I. Affleck, T. Kennedy, E.H. Lieb, and H. Tasaki, Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.* **59**, 799 (1987).
- [2] I. Affleck, T. Kennedy, E.H. Lieb, and H. Tasaki, Valence bond ground states in isotropic quantum antiferromagnets. <https://projecteuclid.org/euclid.cmp/1104161001>
- [3] X. Chen, Z.-C. Gu, Z.-X. Liu, and X.-G. Wen, Symmetry protected topological orders and the group cohomology of their symmetry group. *Phys. Rev. B* **87**, 155114 (2013), [arXiv:1106.4772](https://arxiv.org/abs/1106.4772).
- [4] M. Fannes, B. Nachtergaele, R.F. Werner, Finitely correlated pure states. *J. Funct. Anal.* **120**, 511-534 (1994).
- [5] D. S. Freed, Short-range entanglement and invertible field theories, [arXiv:1406.7278](https://arxiv.org/abs/1406.7278).

- [6] D. S. Freed and M. J. Hopkins, Reflection positivity and invertible topological phases, [arXiv:1604.06527](#).
- [7] Z.-C. Gu and X.-G. Wen, Symmetry-protected topological orders for interacting fermions – Fermionic topological nonlinear σ models and a special group supercohomology theory. *Phys. Rev. B* **90**, 115141 (2014), [arXiv:1201.2648](#).
- [8] F. Pollmann, A.M. Turner, E. Berg, and M. Oshikawa, Entanglement spectrum of a topological phase in one dimension. *Phys. Rev. B* **81**, 064439 (2010), [arXiv:0910.1811](#).
- [9] F. D. M. Haldane, Continuum dynamics of the 1-D Heisenberg antiferromagnet: Identification with the $O(3)$ nonlinear sigma model. *Phys. Lett. A* **93**, 464-468 (1983).
- [10] F. D. M. Haldane, Nonlinear Field Theory of Large-Spin Heisenberg Antiferromagnets: Semiclassically Quantized Solitons of the One-Dimensional Easy-Axis Néel State. *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1153-1156 (1983).
- [11] A. Kapustin, Symmetry Protected Topological Phases, Anomalies, and Cobordisms: Beyond Group Cohomology, [arXiv:1403.1467](#).
- [12] A. Kapustin, R. Thorngren, A. Turzillo, and Z. Wang. Fermionic symmetry protected topological phases and cobordisms. doi:10.1007/JHEP12(2015)052, [arXiv:1406.7329](#).
- [13] A. Kitaev, Periodic table for topological insulators and superconductors. AIP Conf. Proc. **1134**, 22 (2009), doi:10.1063/1.3149495, [arXiv:0901.2686](#).
- [14] A. Kitaev, On the Classification of Short-Range Entangled States. In Topological Phases of Matter Program Seminar, Stony Brook, New York, Jun 2013. Simons Center for Geometry and Physics, Stony Brook University. [Video](#)
- [15] 野坂武史, 群コホモロジーの授業ノート, <http://www.math.titech.ac.jp/~nosaka/17.grp.homology4.pdf>
- [16] Y. Ogata, A \mathbb{Z}_2 -index of symmetry protected topological phases with time reversal symmetry for quantum spin chains. doi:10.1007/s00220-019-03521-5, [arXiv:1810.01045](#).
- [17] Y. Ogata, A \mathbb{Z}_2 -index of symmetry protected topological phases with reflection symmetry for quantum spin chains, [arXiv:1904.01669](#).
- [18] Y. Ogata, A $H^3(G, \mathbb{T})$ -valued index of symmetry protected topological phases with on-site finite group symmetry for two-dimensional quantum spin systems, [arXiv:2101.00426](#).
- [19] F. Pollmann, A.M. Turner, E. Berg, and M. Oshikawa, Symmetry protection of topological phases in one-dimensional quantum spin systems. *Phys. Rev. B* **85**, 075125 (2012), [arXiv:0909.4059](#).
- [20] S. Ryu, A. P. Schnyder, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, Topological insulators and superconductors: ten-fold way and dimensional hierarchy. *New J. Phys.* **12**, 065010 (2010), [arXiv:0912.2157](#).
- [21] 塩崎謙, 対称性によって保護されたトポロジカル相における非秩序変数と位相的場の量子論, Summer School 数理物理 2018 位相的場の量子論, 東京大学.

- [22] H. Tasaki, *Physics and Mathematics of Quantum Many-Body Systems* (Springer, 2020).
- [23] C.Z. Xiong, *Classification and Construction of Topological Phases of Quantum Matter*, Ph.D. thesis, Harvard University, 2019. [arXiv:1906.02892](#).
- [24] K. Yonekura, On the cobordism classification of symmetry protected topological phases. doi:[10.1007/s00220-019-03439-y](#), [arXiv:1803.10796](#).