非ユニタリな量子ウォークのトポロジカルな性質を用いた分類

北海道大学大学院 理学院 数学専攻
関 元樹 (Motoki SEKI)

1　導入

トポロジカル相は，物質の秩序の中で Landau の対称性の破れの理論では記述できない物質の秩序の一つである．例として，量子ホール効果やトポロジカル絶縁体，トポロジカル超伝導体などが挙げられる．トポロジカル相が発現する原因は時間反転対称性のようなトポロジカルな対称性が系に存在することである．トポロジカル相をトポロジカルな対称性を用いて分類するというのは基本的な興味の一つである．自己共役なハミルトニアンで記述される系に関しては Altland–Zirnbauer (AZ) symmetry class と呼ばれる 10 種類の対称性の分類と K 理論を用いた方法によって index，またはトポロジカル数と呼ばれる整数を得ることによって完全に分類される [1–3]．この index はハミルトニアンがバンドギャップを持つときに定義され，ハミルトニアンがパラメータによって摂動するときにバンドギャップが閉じない限り，index は変化しないという意味で index は摂動に対して安定である．

量子ウォークはランダムウォークの量子版とみなされる数理モデルであり，2000 年頃より盛んに研究されている [4–6]．一般的な設定では，量子ウォーカーの各時刻の状態をヒルベルト空間の元とし，その状態をユニタリな時間発展作用素で時間発展させるモデルである．量子ウォークが量子と呼ばれる理由は，量子力学における量子状態がヒルベルト空間の元で表されること，量子状態の時間発展がユニタリ作用素で表されることと対応関係があることによる．

トポロジカルな量子ウォークとは，時間発展作用素がトポロジカルな対称性をみたし，さらにバンドギャップを持つような量子ウォークである．トポロジカルな量子ウォークも，AZ symmetry class と K 理論を用いて分類することができるが，Cedzich らは K 理論ではなく表現論的な手法を用いて $(\mathrm{si}\_(W), \overleftharpoon{\mathrm{si}}(W), \overrightharpoon{\mathrm{si}}(W))$ という 3 つの index を得て，1 次元のトポロジカルな量子ウォークを完全に分類し，index の摂動に対する安定性を示した [7]．

非エルミートな物理とは，物理系を司るハミルトニアンが非エルミートな系の物理のことで，エルミート性によって保証されていた観測量が実数であるという性質が失われ，一般に観測量は複素数となる．現実には孤立系でない非平衡な物理系はハミルトニアンが非エルミートとなるため，非エルミートな物理を研究する理由となる．非エルミートでトポロジカルな量子系は Kawabata らによって完全に分類された [8]．その際，トポロジカルな対称性は分裂し，その結果 AZ symmetry class も 38 種類に分裂し，拡張された．

非エルミート性が量子ウォークにおいて対応するのは非ユニタリ性である．非ユニタリな量子ウォークのモデルの一つが Mochizuki–Kim–Obuse モデルである [9]．このモデルは光ファイバーのループを用いた光量子実験のモデルで，時間発展の 1 ステップごとに系にエネルギーのゲインとロスが発生して非平衡となるモデルである．

2 拡張された AZ symmetry class

2.1 設定

今回扱う量子ウォークは空間を 1 次元の離散空間 $x \in \mathbb{Z}$，時間も離散 $t \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ とする．また，空間の各点 x に対して有限次元ヒルベルト空間 $\mathcal{H}_x$ を cell とする．状態のヒルベルト空間は cell の各点ごとの直和

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{x \in \mathbb{Z}} \mathcal{H}_x \tag{2.1}$$

で定義する．

また，今回扱う量子ウォークの時間発展作用素として，次を仮定する．まず，時間発展作用素 U は有界で全単射であるとする．これにより，逆作用素 U^{-1} が存在し，有界である．同様に共役作用素 U^* も存在し，有界となるが，U が非ユニタリならば $U^{-1} \neq U^*$ である．一般にヒルベルト空間 $\mathcal{M}$ 上の有界で全単射な作用素全体を $GL(\mathcal{M})$ で表すとする．

命題 2.1. $GL(\mathcal{M})$ は作用素の逆や共役をとる操作に対して閉じている．

2.2 internal symmetry と symmetry representation

群 $G_{\mathrm{all}} := \{e, \eta, \kappa, \tau, \xi, \gamma, \zeta, \chi\}$ を，演算が表 1 で定義された可換群とする．G_{all} の元を **internal symmetry** という．各 symmetry はユニタリまたは反ユニタリの性質を持ち，表 2 のように命名する．

表 1　internal symmetry の演算表：$\mathrm{Ad}\,\sigma_2\sigma_1 = \mathrm{Ad}\,\sigma_3$

$\sigma_2 \setminus \sigma_1$	e	η	κ	τ	ξ	γ	ζ	χ
e	e	η	κ	τ	ξ	γ	ζ	χ
η	η	e	χ	γ	ζ	τ	ξ	κ
κ	κ	χ	e	ζ	γ	ξ	τ	η
τ	τ	γ	ζ	e	χ	η	κ	ξ
ξ	ξ	ζ	γ	χ	e	κ	η	τ
γ	γ	τ	ξ	η	κ	e	χ	ζ
ζ	ζ	ξ	τ	κ	η	χ	e	γ
χ	χ	κ	η	ξ	τ	ζ	γ	e

G_{all} の任意の部分群を G，$\mathcal{H}$ の任意の分空間を $\mathcal{M}$ として，G の $\mathcal{M}$ への表現 $(\rho, \mathcal{M})$ を今後考え

表 2　internal symmetry の名前と記号，ユニタリ・反ユニタリ性，交換関係

名前	記号	ユニタリ・反ユニタリ性
particle-hole symmetry (PHS)	η	反ユニタリ
skew particle-hole symmetry ($\mathrm{PHS}^{\dagger}$)	κ	反ユニタリ
time-reversal symmetry (TRS)	τ	反ユニタリ
skew time-reversal symmetry ($\mathrm{TRS}^{\dagger}$)	ξ	反ユニタリ
chiral symmetry (CS)	γ	ユニタリ
sublattice symmetry (SLS)	ζ	ユニタリ
pseudo unitarity (PU)	χ	ユニタリ

ていく．これを **symmetry representation** という．$(\rho, \mathcal{M})$ の表現空間が明らかなときは，ρ で表すとする．$\sigma \in G$ に対して，$\rho(\sigma)$ は σ がユニタリ性ならばユニタリ作用素，反ユニタリ性ならばユニタリ作用素とする．この $\rho(\sigma)$ を **symmetry operator** といい，誤解がない限りこれも同一視して σ と表す．

さらに，symmetry operator は以下の性質をみたすとする．まず，symmetry operator は $\mathcal{H}$ 上で局所的に作用する．すなわち σ は $\mathcal{H}_x$ 上の作用素 σ_x の直和，$\sigma = \bigoplus_{x\in\mathbb{Z}} \sigma_x$ である．また，symmetry operator は $\mathcal{B}(\mathcal{H}) (\supset GL(\mathcal{H}))$ の元に共役で，すなわち $\mathrm{Ad}\,\sigma\colon X \mapsto \sigma X \sigma^*$ のように作用する．このとき，任意の $\sigma \in G$ は **involution**，すなわち $\mathrm{Ad}\,\sigma^2 = \mathrm{Ad}\,e$ となる．ここで e は G の単位元である．

internal symmetry σ に対して，$GL_\sigma(\mathcal{H})$ を次のように定める．

$$
\begin{aligned}
GL_\eta(\mathcal{H}) &:= \{U \in GL(\mathcal{H}) \mid \eta(U^{-1})^*\eta^* = U\} \\
GL_\kappa(\mathcal{H}) &:= \{U \in GL(\mathcal{H}) \mid \kappa U \kappa^* = U\} \\
GL_\tau(\mathcal{H}) &:= \{U \in GL(\mathcal{H}) \mid \tau(U^{-1})^*\tau^* = U^*\} \\
GL_\xi(\mathcal{H}) &:= \{U \in GL(\mathcal{H}) \mid \xi U \xi^* = U^*\} \\
GL_\gamma(\mathcal{H}) &:= \{U \in GL(\mathcal{H}) \mid \gamma U \gamma^* = U^*\} \\
GL_\zeta(\mathcal{H}) &:= \{U \in GL(\mathcal{H}) \mid \zeta U \zeta^* = U^{-1}\} \\
GL_\chi(\mathcal{H}) &:= \{U \in GL(\mathcal{H}) \mid \chi U^* \chi^* = U^{-1}\}
\end{aligned}
$$

その元は σ の **symmetry をみたす**という．

補題 2.2. σ が反ユニタリ作用素ならば $\sigma^{-1} = \sigma^*$ である．

補題 2.3. 任意の $\sigma \in G$ に対して，$X \in GL_\sigma(\mathcal{H})$ ならば $X^{-1}, X^*, (X^{-1})^* \in GL_\sigma(\mathcal{H})$ である．

この補題を用いると次の表 3 が得られる．この補題の証明からも分かるように，$\sigma X \sigma^* = X'$ の X に $U, U^{-1}, U^*, (U^{-1})^*$ をそれぞれ代入すると，X' は $U, U^{-1}, U^*, (U^{-1})^*$ を重複なく動くことがわかる．このことから，internal symmetry はこの表の 8 種類である意味尽きていると言うことができる．

表 3　internal symmetry と作用素の交換関係

name	σ	ユニタリ/反ユニタリ	U	U^{-1}	U^*	$(U^{-1})^*$
PHS	η	反ユニタリ	$(U^{-1})^*$	U^*	U^{-1}	U
PHS†	κ	反ユニタリ	U	U^{-1}	U^*	$(U^{-1})^*$
TRS	τ	反ユニタリ	U^{-1}	U	$(U^{-1})^*$	U^*
TRS†	ξ	反ユニタリ	U^*	$(U^{-1})^*$	U	U^{-1}
CS	γ	ユニタリ	U^*	$(U^{-1})^*$	U	U^{-1}
SLS	ζ	ユニタリ	U^{-1}	U	$(U^{-1})^*$	U^*
PU	χ	ユニタリ	$(U^{-1})^*$	U^*	U^{-1}	U
identity	e	ユニタリ	U	U^{-1}	U^*	$(U^{-1})^*$

2.3　symmetry class

2 つの G の表現 $(\rho_1, \mathcal{M}), (\rho_2, \mathcal{M})$ においてすべての internal symmetry $\sigma \in G$ に対して $\rho_1(\sigma)$ と $\rho_2(\sigma)$ が絶対値 1 の phase 倍しか異ならないならば，$\mathrm{Ad}\,\rho_1(\sigma) = \mathrm{Ad}\,\rho_2(\sigma)$ であるため，表現としては同値である．

命題 2.4. $\sigma \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ が $\mathrm{Ad}\,\sigma^2 = \mathrm{Ad}\,e$（$\sigma$ が involution）ならば，$\theta \in \mathbb{R}$ が存在して $\sigma^2 = e^{i\theta}\mathbb{1}$ である．

系 2.5. $\sigma \in G$ は，σ がユニタリ作用素ならば $\phi \in \mathbb{R}$ を $\sigma' := e^{i\phi}\sigma$ が $\sigma'^2 = \pm\mathbb{1}$ となるようにとれる．σ が非ユニタリ作用素ならば $\sigma^2 = \pm\mathbb{1}$ である．

この系によって symmetry operator は同値な表現を除いて $\sigma^2 = \pm\mathbb{1}$ のいずれかに分類できることが分かる．

命題 2.6. $\sigma_1, \sigma_2 \in G$ のとき，作用素の等式として $\sigma_1\sigma_2 = \pm\sigma_2\sigma_1$．

この命題により，symmetry operator 同士の交換関係は交換関係か反交換関係のいずれかであることが分かる．

したがって，G の symmetry representation を次の観点で分類したものを **symmetry class** と呼ぶ．

(1) G がどの internal symmetry を含むか．
(2) symmetry operator の 2 乗の符号がいずれであるか．
(3) symmetry operator 同士の交換関係がいずれであるか．

symmetry class は [8] にあるのと同様に 38 種類存在すると推定されている．時間発展作用素 U が symmetry class に含まれる internal symmetry すべてをみたすことを symmetry class をみたすという．

3 index の定義

トポロジカル相の index を定義するのに重要な概念が gap である．

定義 3.1 (essential gap)**.** 時間発展作用素 U が $\sigma(U)\cap\{\pm 1\}\subset\sigma_{\mathrm{d}}(U)$ をみたすとき，U は essential gap をもつ，あるいは essentially gapped であるという．ここで，$\sigma(U),\sigma_{\mathrm{d}}(U)$ はそれぞれ U のスペクトルと離散スペクトルである．また，$\sigma(U)\cap(\mathbb{R}\cup\{e^{i\theta}\mid\theta\in\mathbb{R}\})=\emptyset$ をみたすとき，U は (strictly) gapped という．

定義 3.2 (admissible)**.** 時間発展作用素 U が symmetry class S に対して **admissible** とは，次の 2 つをみたすことをいう．

(1) U が symmetry class S をみたす．
(2) U が essentially gapped である．

symmetry class S に対して admissible なヒルベルト空間 $\mathcal{M}$ 上の時間発展作用素全体を $GL_S(\mathcal{M})$ と表す．

さらに，量子ウォークを特徴付ける概念に局所性がある．

定義 3.3 (locality)**.** 時間発展作用素 $U\in GL(\mathcal{H})$ が **strictly local** であるとは，任意の完全正規直交基底 $\{e_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ に対して

$$\sup_{n\in\mathbb{N}}\#\{m\mid\langle e_m,Ue_n\rangle\neq 0\}<\infty \tag{3.1}$$

が成立することである．また，$U\in GL(\mathcal{H})$ が **essentially local** であるとは，$P_{\geq a}$ を $\bigoplus_{n\geq a}\mathcal{H}_n$ への射影作用素として，ある $a\in\mathbb{Z}$ が存在して，$P_{\geq a}-U^*P_{\geq a}U$ がコンパクト作用素となることである．

定義 3.4 (balanced)**.** symmetry representation ρ が **balanced** であるとは，ρ の symmetry に admissible な時間発展作用素 U で，gapped なものが存在することをいう．

定義 3.5 (symmetry representation の直和)**.** 同じ symmetry type に属する symmetry representation $(\rho_1,\mathcal{M}_1),(\rho_2,\mathcal{M}_2)$ の直和 $(\rho_1\oplus\rho_2,\mathcal{M}_1\oplus\mathcal{M}_2)$ を $(\rho_1\oplus\rho_2)(\sigma):=\rho_1(\sigma)\oplus\rho_2(\sigma)$ で定義する．

定義 3.6. symmetry type S の symmetry representation $(\rho,\mathcal{M})$ のうち，$\dim\mathcal{M}<\infty$ であるもの全体を $\mathrm{Rep}_{\mathrm{f}}(S)$ で表す．また，$\rho_1,\rho_2\in\mathrm{Rep}_{\mathrm{f}}(S)$ が $\rho_1\sim\rho_2$ という関係であることを balanced な表現 β_1,β_2 が存在して，$\rho_1\oplus\beta_1$ と $\rho_2\oplus\beta_2$ がユニタリ同値であることで定義する．すなわち，

$$\rho_1\sim\rho_2:\Longleftrightarrow\ \beta_1,\beta_2\text{: balanced, ユニタリ作用素 }V\text{ が存在して}\rho_1\oplus\beta_1=V(\rho_2\oplus\beta_2)V^*$$

命題 3.7. 関係 $\sim$ は同値関係をなす．また，$\mathrm{Rep}_{\mathrm{f}}(S)$ は $\oplus$ に関して半群をなす．さらに，次の命題が成立する．

(1) $\beta_1,\beta_2\in\mathrm{Rep}_{\mathrm{f}}(S)$ が balanced ならば，$\beta_1\sim\beta_2$．

(2) $\beta \in \mathrm{Rep}_{\mathrm{f}}(S)$ が balanced ならば，任意の $\rho \in \mathrm{Rep}_{\mathrm{f}}(S)$ に対して $\rho \oplus \beta \sim \rho$.

(3) $\rho_1, \rho_2 \in \mathrm{Rep}_{\mathrm{f}}(S)$ が $\rho_1 \sim \rho_2$ ならば，任意の $\rho \in \mathrm{Rep}_{\mathrm{f}}(S)$ に対して $\rho \oplus \rho_1 \sim \rho \oplus \rho_2$.

(4) 任意の $\rho \in \mathrm{Rep}_{\mathrm{f}}(S)$ に対して $\rho' \in \mathrm{Rep}_{\mathrm{f}}(S)$ が存在して，$\rho \oplus \rho'$ は balanced となる．

(5) 任意の $\rho_1, \rho_2 \in \mathrm{Rep}_{\mathrm{f}}(S)$ に対して $\rho_1 \oplus \rho_2 \sim \rho_2 \oplus \rho_1$.

この命題により，$\mathrm{Rep}_{\mathrm{f}}(S)/\sim$ は $\oplus$ に関して可換群をなすことが分かる．単位元は balanced な β に対して $[\beta]$ である．よって，$\mathbf{I}(S) := \mathrm{Rep}_{\mathrm{f}}(S)/\sim$，$[\rho] := \{\rho' \in \mathrm{Rep}_{\mathrm{f}}(S) \mid \rho' \sim \rho\}$ とし，$\mathrm{si}\colon \mathrm{Rep}_{\mathrm{f}}(S) \to \mathbf{I}(S);\ \rho \mapsto [\rho]$ と自然に定める．この $\mathbf{I}(S)$ を **index group** と言い，$\mathbb{Z}$ の部分群と同型になる．

時間発展作用素 U が essential gapped 条件により $\ker(U \mp 1)$ が有限次元であることを用いて，U に対して index を次で定義する．

定義 3.8. 時間発展作用素 U が表現 $(\rho, \mathcal{H})$ をみたすとき，その $\ker(U \mp 1)$ への制限表現 $(\rho', \ker(U \mp 1))$ を用いて

$$\mathrm{si}_{\pm}(U) = \mathrm{si}((\rho', \ker(U \mp 1))) \tag{3.2}$$

で定義する．

4 Mochizuki–Kim–Obuse モデルの計算

Mochizuki–Kim–Obuse モデルは，$\ell^2(\mathbb{Z}) \oplus \ell^2(\mathbb{Z})$ 上の量子ウォークで，その時間発展作用素は次で定義される．

$$U_{\mathrm{MKO}} := SG\Phi C(\theta_2) SG^{-1} \Phi C(\theta_1). \tag{4.1}$$

ここで各作用素は次で定義される．

$$\begin{aligned}
S &:= \begin{bmatrix} L & 0 \\ 0 & L^* \end{bmatrix}, \\
L\Psi(x) &:= \Psi(x+1), \qquad \Psi \in \ell^2(\mathbb{Z}), \\
G &:= \begin{bmatrix} e^{\gamma} & 0 \\ 0 & e^{\gamma} \end{bmatrix}, \qquad \gamma \in \mathbb{R}, \\
\Phi &:= \begin{bmatrix} e^{i\phi} & 0 \\ 0 & e^{i\phi} \end{bmatrix}, \qquad \phi \in \mathbb{R}, \\
C(\theta_j) &:= \begin{bmatrix} \cos\theta_j & i\sin\theta_j \\ i\sin\theta_j & \cos\theta_j \end{bmatrix}, \qquad j = 1, 2.
\end{aligned}$$

各作用素の役割は，S がシフト作用素，G がゲインとロスの作用素，Φ が系全体の位相の作用素，$C(\theta_j)$ がコイン作用素である．

命題 4.1. U_{MKO} は chiral symmetry をみたす [10].

命題 4.2. $\Phi = \mathbb{1}$ のとき，U_{MKO} は skew time-reversal symmetry と skew particle-hole symmetry をみたす．さらに $\gamma_{\mathrm{MKO}}^2 = \tau_{\mathrm{MKO}}^2 = \kappa_{\mathrm{MKO}}^2 = \mathbb{1}$ で，$\gamma_{\mathrm{MKO}}\tau_{\mathrm{MKO}} = \kappa_{\mathrm{MKO}}$ が成立する．

これらの結果を用いて Mochizuki–Kim–Obuse モデルの symmetry class を決定し，index を計算する．

参考文献

[1] A. Altland and M. R. Zirnbauer, “Nonstandard symmetry classes in mesoscopic normal-superconducting hybrid structures”, Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics **55**, 1142–1161 (1997).

[2] M. R. Zirnbauer, “Riemannian symmetric superspaces and their origin in random-matrix theory”, Journal of Mathematical Physics **37**, 4986–5018 (1996).

[3] A. Kitaev, “Periodic table for topological insulators and superconductors”, in Aip conference proceedings, Vol. 1134 (2009), pp. 22–30.

[4] A. Ambainis, E. Bach, A. Nayak, A. Vishwanath, and J. Watrous, “One-dimensional quantum walks”, in Proceedings of the thirty-third annual acm symposium on theory of computing - stoc ’01, 33 (2001), pp. 37–49.

[5] D. Aharonov, A. Ambainis, J. Kempe, and U. Vazirani, “Quantum walks on graphs”, in Proceedings of the thirty-third annual acm symposium on theory of computing - stoc ’01 (2001), pp. 50–59.

[6] N. Konno, “Quantum random walks in one dimension”, Quantum Information Processing **1**, 345–354 (2002).

[7] C. Cedzich, T. Geib, F. A. Grünbaum, C. Stahl, L. Velázquez, A. H. Werner, and R. F. Werner, “The Topological Classification of One-Dimensional Symmetric Quantum Walks”, Annales Henri Poincaré **19**, 325–383 (2018).

[8] K. Kawabata, K. Shiozaki, M. Ueda, and M. Sato, “Symmetry and Topology in Non-Hermitian Physics”, Physical Review X **9**, 041015 (2019).

[9] K. Mochizuki, D. Kim, and H. Obuse, “Explicit definition of PT symmetry for nonunitary quantum walks with gain and loss”, Physical Review A **93**, 062116 (2016).

[10] A. Suzuki, 小布施模型の対称性, private communication, 2018.