

ボゾン量子相転移における量子幾何構造の変化

窪田 真俊^A、仲野 紘人^A、田中 智^{A,B}、神吉 一樹^{A,B}、Gonzalo Ordóñez^C, Bruno Mera^D
阪公大院理^A、南部研^B、バトラー大^C、リスボン大^D

Geometric Structure Changes in Bosonic Quantum Phase Transition Systems

M. Kubota^A, H. Nakano^A, S. Tanaka^{A,B}, K. Kanki^{A,B}, G. Ordóñez^C, B. Mera^D

Department of Physical Science^A, NITEP^B

Osaka Metropolitan University, Butler Univ.^C, Univ. Lisbon^D

The geometric interpretation of quantum phase transitions is provided by the principal fiber bundle structure. Quantum Geometric Tensor defined by the Hilbert inner product serves as a quantity characterizing the geometric properties of the principal fiber bundle. This cannot be applied to unstable regions where states do not belong to the Hilbert space. We provide a new definition of Quantum Geometric Tensor for operator spaces that can be applied even to unstable regions. In unstable regions, the Riemannian metric obtained from the new definition is negative, and the Berry curvature becomes complex. We also present a quantum geometric tensor specifically applied to the Hamiltonian of a boson system exhibiting a superradiant phase transition.

1 はじめに

波動関数に付随する量子位相はゲージ不变な観測量には現れないと考えられていた。しかし、1984年にM. V. Berryによって量子位相がトポロジカル不变量（Berry位相）として観測されることが指摘された[1]。1983年にはB. Simonは主（ファイバー）束構造（以下、主束構造と呼ぶ）の概念を用いてBerry位相に対する幾何学的な解釈を与えており[2]。さらに近年では、Berry位相やChern数などの幾何学的な量によって、量子ホール効果などに代表されるトポロジカルな量子相転移が特徴づけられることが明らかにされている。

また、ボゾン系量子相転移の代表として超放射相転移が知られている。この超放射相転移についても幾何学的な観点から量子相転移の研究が行われており、A. Carollo や P. Zanardi によって量子幾何学的な考察が与えられている[3, 4]。そこでは局所的な幾何学的特徴を表す量として量子幾何テンソルが注目されている：その対称部分がリーマン計量、反対称部分がBerry曲率となる。しかしながら、彼らが扱った量子幾何テンソルはヒルベルト空間におけるエルミート内積によって定義されており、真空の不安定化によって状態関数がヒルベルト空間に属さなくなると、従来の定義が適用できない。本研究では、正準演算子空間において量子幾何テンソルを定義し、ボゾン系の量子相転移に伴う幾何学的な転移の様相を明らかにする。

2 量子相転移を示すボゾン系の例

本研究の目的は、特定のハミルトニアンに依らず、ボゾン演算子空間における量子幾何テンソルの一般的な構築法を与えることである。しかしその前に、この幾何構造が現れる物理的背景を明確にするため、量子相転移を示す代表的なボゾン系として超放射相転移の有効ハミルトニアンを見てみることとする。超放射相転移の低エネルギー有効ハミルトニアンとして

$$\hat{H} = \left(\omega - \frac{g^2}{2\Omega} \right) \hat{a}^\dagger \hat{a} - \frac{g^2}{4\Omega} (\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2}) \quad (1)$$

が知られている[5]。ここで、 Ω が 2 準位原子のエネルギー gap、 ω がボゾン場の振動数、 g がボゾン場と 2 準位原子の結合定数、 \hat{a}, \hat{a}^\dagger がボゾン場の生成・消滅演算子である。

このハミルトニアンは、 $g < \sqrt{\omega\Omega}$ のとき固有振動数が実数で安定な真空を持つが、 $g > \sqrt{\omega\Omega}$ では固有振動数が虚数となり真空が不安定化する。すなわち、 $g = \sqrt{\omega\Omega}$ において量子相転移が生じ、基底状態はもはやヒルベルト空間に属さない。このような領域では、従来のヒルベルト空間上のエルミート内積を基礎とする Berry 接続や量子幾何テンソルは適用できない。

そこで本研究では、量子相転移を示すボゾン系に対し、正準演算子空間における量子幾何テンソルを新たに定義し、量子相転移に伴う幾何学的構造の転移を明らかにする。

3 シンプレクティック変換による演算子基底

ここでは、最も基本的なシングルモードのボソン正準演算子 (\hat{a}, \hat{a}^\dagger) が形成する量子位相空間の幾何構造を構築する。一般に、量子・古典を問わず位相空間を特徴づける基本的な幾何学的量は、反対称性・閉性・非退化性を併せ持つシンプレクティック 2 形式 Ω である。量子論的演算子空間では、正準交換関係に基づき次のように定義する：

$$\Omega(\hat{a}, \hat{a}^\dagger) := [\hat{a}, \hat{a}^\dagger]. \quad (2)$$

正準演算子対が作る演算子基底 (frame) は、この Ω を保存しなければならない。その様な連続的変換は、シンプレクティック変換 S と呼ばれ

$$S^T \Omega S = \Omega \quad (3)$$

を満たす。

局所演算子基底 (\hat{a}, \hat{a}^\dagger) を取ると、この基底におけるシンプレクティック形式は次のように 2×2 の行列として表現できる：

$$\Omega(\hat{a}, \hat{a}^\dagger) = (\hat{a} \ \hat{a}^\dagger) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{a}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (4)$$

よく知られている様に、複素演算子 (\hat{a}, \hat{a}^\dagger) は実正準演算子 (\hat{q}, \hat{p}) からユニタリ変換によって表され、その交換関係は

$$\Omega(\hat{a}, \hat{a}^\dagger) = 1 \quad (5)$$

となる。実正準演算子に対する実シンプレクティック変換は、Bloch-Messiah 分解によって、2つの実回転行列と1つの実シンプレクティック変換で表せることが知られている [6]。本研究では、これを複素正準演算子 (\hat{a}, \hat{a}^\dagger) に拡張適用し、次の複素シンプレクティック変換を用いる：

$$S = \begin{pmatrix} e^{i\eta} & 0 \\ 0 & e^{-i\eta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cosh \beta & \sinh \beta \\ \sinh \beta & \cosh \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{\frac{i\theta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i\theta}{2}} \end{pmatrix} \quad (6)$$

ここで、 (η, β, θ) は、この変換を表す複素変数である。ただし、本研究では、位相空間上での並進運動を表す剪断変換は考えないことをとする。

この変換 S によって、局所演算子基底 (\hat{a}, \hat{a}^\dagger) は座標変換を受け、変換された新たな局所演算子基底は (6) を用いて、

$$\hat{\phi}(\beta, \theta, \eta) := \begin{pmatrix} \hat{\varphi} \\ \hat{\varphi}^* \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{a}^\dagger \end{pmatrix} \quad (7)$$

と表すことができる。重要な注意は、 (η, β, θ) が実変数の時は、 $\hat{\varphi}^* = \hat{\varphi}^\dagger$ となるが、複素化するとこのエルミート共役対称性が失われる点である。これが真空不安定化による幾何学的構造変化に重要な役割を果たしていることを以下に示す。

次節において、この局所演算子空間が作る幾何学的構造を定義する。

4 演算子空間の量子幾何

本節では、シンプレクティック変換によって表された演算子基底 (7) (および (6)) が持つ幾何学的構造を、主束の概念を用いて構築する。これに関連して、すでに B. Simon は、ヒルベルト空間の状態ベクトルのゲージ自由度に由来するホロノミーとして Berry 位相に幾何学的な理解を与えていた [2]。本研究においては、(7) の $\text{diag}(e^{i\eta}, e^{-i\eta})$ の部分が、演算子空間におけるゲージ自由度に対応する。

演算子基底 $\hat{\phi}$ が張る主束構造を以下の様に設定する。底多様体は、シンプレクティック変換のパラメータ $\xi := (\beta, \theta)$ によって座標付けられる非コンパクト複素 2 次元多様体である：

$$M = \{(\beta, \theta) \mid \beta \in \mathbb{C} \setminus \{0\}, \theta \in \mathbb{C}\}. \quad (8)$$

演算子基底 (\hat{a}, \hat{a}^\dagger) は底多様体上の 2 次元 framing をなし、 $\hat{\phi}$ のうち、

$$\begin{pmatrix} \cosh \beta & \sinh \beta \\ \sinh \beta & \cosh \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\theta} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta} \end{pmatrix} \quad (9)$$

は底多様体 M 上で定義された局所フレーム変換である。一方、(7) の $\text{diag}(e^{i\eta}, e^{-i\eta})$ が $G = \mathbb{C}^\times$ をもつ主束を定義する。したがって、幾何学的には

$$\mathbb{C}^\times \hookrightarrow P \xrightarrow{\pi} M(\beta, \theta) \quad (10)$$

という主束構造が成立する。ここで P は (7) が作る主束構造における全空間を表す。

この主束構造の概念図を図 1 に示す。演算子空間における主束構造において、 M は底多様体、この上に、位相自由度を無視した（位相について全て同値類とみなした）演算子基底、さらに、ゲージ変換に対応する $G = \mathbb{C}^\times$ 構造群、演算子基底の frame と構造群ファイバー \mathbb{C}^\times の直積空間からなる全空間 P を考える。

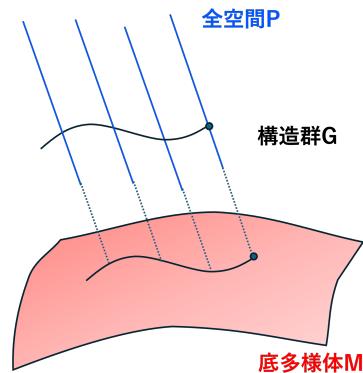


図 1：主束構造の概念図

この演算子空間において、底多様体 M 上の経路を全空間 P の水平接空間に持ち上げることを考え

る。式(6)で表される変換の構造群は非コンパクトな \mathbb{C}^\times 群であること、また、演算子空間において内積を定義することができないという理由のため、主ファイバー束の接続の際には、通常のエルミート内積を用いた接続の定義を用いることができない。そこで、本研究では、非コンパクトな構造群に対して適用可能な主束構造における Ehresmann 接続の考え方を用いて、Berry 接続を定義する[7]。

Ehresmann 接続は以下の3つの条件を満たすように、主束上の点 u における接空間 $T_u P$ を水平部分空間 $H_u P$ と垂直部分空間 $V_u P$ に分ける操作である。

- (i) $T_u P = H_u P \oplus V_u P$
- (ii) $\mathbf{X} = \mathbf{X}^H + \mathbf{X}^V$
 $(\mathbf{X} \in T_u P, \mathbf{X}^H \in H_u P, \mathbf{X}^V \in V_u P)$
- (iii) $H_{ug} P = R_{g*} H_u P$ ($g \in G$, $R_g : g$ の右作用)

これらの条件を自動的に満たす P 上の \mathfrak{g} 値1形式 ω を

$$\begin{cases} \omega(A^\#) = A \\ R_g^* \omega = g^{-1} \omega g \end{cases} \quad (11)$$

と定義する。ここで、 $A^\#$ は

$$A^\# \equiv \left. \frac{d}{dt} u e^{tA} \right|_{t=0} \quad (A \in \mathfrak{g}) \quad (12)$$

と定義される垂直部分空間における左作用不变な基本ベクトル場である。

P 上の \mathfrak{g} 値1形式を用いて水平部分空間を

$$H_u P = \{\mathbf{X} \in T_u P \mid \omega(\mathbf{X}) = 0\} \quad (13)$$

と定義すれば、接続の3つの条件が満たされる。

底多様体上の接基底 ∂_μ を水平接空間に持ち上げた接基底 ∂_μ^P は、

$$\partial_\mu^P = \sigma_* \partial_\mu - \mathbf{A}^\# \quad (14)$$

と書くことができる。ただし、 σ_* は底多様体 M から主束上への接基底の push-forward である。

主束に対する同伴ベクトル束 $E = P \times_{\rho(\mathbb{C}^\times)} V$ を考えることにより、 E 上での共変微分を定義する：

$$\mathbf{D}_\mu = \begin{pmatrix} D_\mu \\ D_\mu^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_\mu + iA_\mu \\ \partial_\mu - iA_\mu \end{pmatrix} \quad (15)$$

ここで、 \mathbf{A}_μ は底多様体上での \mathfrak{g} 値1形式であり、これが演算子空間における Berry 接続である。

さて、同伴ベクトル束 E 上における局所演算子基底 $(\hat{\varphi}, \hat{\varphi}^*)$ の平行移動を考える。ここで、平行移動とは、この演算子基底を水平持ち上げされた経路上に沿って移動させることである。局所演算子基底 $(\hat{\varphi}, \hat{\varphi}^*)$ の平行移動の微小変化 $(\hat{\varphi}_D, \hat{\varphi}_D^*)$ は共変テ

ラー展開によって表される：

$$\begin{aligned} \hat{\varphi}_D(\mathbf{x} + d\mathbf{x}) &= \hat{\varphi}(\mathbf{x}) + D_\mu \hat{\varphi}(\mathbf{x}) dx^\mu \\ &\quad + \frac{1}{4} (D_\mu D_\nu + D_\nu D_\mu) \hat{\varphi}(\mathbf{x}) dx^\mu dx^\nu + \dots \\ \hat{\varphi}_D^*(\mathbf{x} + d\mathbf{x}) &= \hat{\varphi}^*(\mathbf{x}) + D_\mu^* \hat{\varphi}^*(\mathbf{x}) dx^\mu \\ &\quad + \frac{1}{4} (D_\mu^* D_\nu^* + D_\nu^* D_\mu^*) \hat{\varphi}^*(\mathbf{x}) dx^\mu dx^\nu + \dots \end{aligned} \quad (16)$$

ただし、 \mathbf{x} は M 上の点を表す。この平行移動した演算子基底 $(\hat{\varphi}_D, \hat{\varphi}_D^*)$ に対する正準交換関係は、

$$\begin{aligned} [\hat{\varphi}_D(\mathbf{x} + d\mathbf{x}), \hat{\varphi}_D^*(\mathbf{x} + d\mathbf{x})] &= [\hat{\varphi}(\mathbf{x}), \hat{\varphi}^*(\mathbf{x})] \\ &\quad + ([D_\mu \hat{\varphi}(\mathbf{x}), \hat{\varphi}^*(\mathbf{x})] + [\hat{\varphi}(\mathbf{x}), D_\mu^* \hat{\varphi}^*(\mathbf{x})]) dx^\mu \\ &\quad + [D_\mu^* \hat{\varphi}^*(\mathbf{x}), D_\nu \hat{\varphi}(\mathbf{x})] dx^\mu dx^\nu + \dots \end{aligned} \quad (17)$$

と表されるが、これが正準交換関係を保存するとは限らない。そこで、1次の項まで正準交換関係を保存する条件を課すことにより、演算子空間における Berry 接続

$$A_\mu = i [\partial_\mu \hat{\varphi}^*, \hat{\varphi}] \quad (18)$$

具体的に定める。これが、本研究によって初めて定められた演算子空間における Berry 接続の定義である。

さらに、2次の項は共変微分の非可換性により、演算子空間での計量と Berry 曲率を表す量子幾何テンソルを定義する：

$$\begin{aligned} Q_{\mu\nu} &:= [D_\mu^* \hat{\varphi}^*, D_\nu \hat{\varphi}] \\ &= [\partial_\mu \hat{\varphi}^*, \partial_\nu \hat{\varphi}] - [\partial_\mu \hat{\varphi}^*, \hat{\varphi}] [\partial_\nu \hat{\varphi}, \hat{\varphi}^*]. \end{aligned} \quad (19)$$

こうして得られた演算子空間における量子幾何テンソル (QGT) に対して、(10) の表現を用い、シングルモードボゾン空間に対応する底多様体上の QGT として具体的な表現を得た：

$$Q_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} \sinh^2 2\beta \end{pmatrix} + \frac{i}{4} \begin{pmatrix} 0 & -\sinh 2\beta \\ \sinh 2\beta & 0 \end{pmatrix} \quad (20)$$

ここで、第1成分は $d\theta$ 、第2成分は $d\beta$ である。この QGT は、演算子空間の同伴ベクトル束の全空間 E 上での接続を、底多様体上に引き戻すことによって得られたものであることに注意する。この対称成分は底多様体上での量子計量、反対称成分はベリー曲率を表す。

次節ではこの結果をボゾンハミルトニアンに適用し、量子相転移に伴う量子幾何学的な転移の特徴を明らかにする。

5 量子相転移における量子幾何構造の変化

ここでは、§2 で紹介した超放射相転移ハミルトニアンを念頭におきながら、より一般化したシングル

モードボゾン 2 次形式：

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = k_3 \hat{K}_3 + k_1 \hat{K}_1 + k_2 \hat{K}_2 \quad (k_i \in \mathbb{R}), \quad (21)$$

を考える。ここで、 $\hat{K}_{1,2,3}$ は、ボゾン正準演算子 $(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ によって生成される $\mathfrak{sp}(2, \mathbb{C})$ の Lie 代数の生成子である。具体的には、

$$\begin{aligned} \hat{K}_3 &= \frac{1}{2} (\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) , \quad \hat{K}_1 = -i\frac{1}{2} (\hat{a}^2 - \hat{a}^{\dagger 2}) , \\ \hat{K}_2 &= \frac{1}{2} (\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2}) , \end{aligned} \quad (22)$$

であり、交換関係

$$\begin{aligned} \left[\frac{\hat{K}_1}{2}, \frac{\hat{K}_2}{2} \right] &= -i \frac{\hat{K}_3}{2} , \quad \left[\frac{\hat{K}_2}{2}, \frac{\hat{K}_3}{2} \right] = i \frac{\hat{K}_1}{2} , \\ \left[\frac{\hat{K}_3}{2}, \frac{\hat{K}_1}{2} \right] &= i \frac{\hat{K}_2}{2} \end{aligned} \quad (23)$$

を満たす。係数 k_i が実であるため、 \hat{H} はエルミートとなる。

演算子空間(量子位相空間)上でハミルトニアンを特定すると、シンプレクティック形式 Ω を用いて \hat{H} に対応するハミルトニアン・ベクトル場(リウビリアン)

$$\mathcal{L}_{\hat{H}} \cdot := -\Omega(\hat{H}, \cdot) , \quad (24)$$

が定まる。これにより演算子基底のダイナミクスは $i\dot{\hat{a}}(t) = \mathcal{L}_{\hat{H}}\hat{a}(t)$, $i\dot{\hat{a}}^\dagger(t) = \mathcal{L}_{\hat{H}}\hat{a}^\dagger(t)$ と表される。ハミルトニアンのエルミート性により、 $\mathcal{L}_{\hat{H}}$ は、以下の 2 つの対称性を満足することがわかる：

$$(\mathcal{L}_{\hat{H}}\Omega)^T = \mathcal{L}_{\hat{H}}\Omega , \quad (\mathcal{L}_{\hat{H}}K)^* = \mathcal{L}_{\hat{H}}K \quad (25)$$

ここで、* はエルミート共役、 $K = \text{diag}(1, -1)$ 。具体的な $\mathcal{L}_{\hat{H}}$ の表現は

$$\mathbf{L}_H = -\Omega \mathbf{H} = \begin{pmatrix} k_3 & k_1 + ik_2 \\ -k_1 + ik_2 & -k_3 \end{pmatrix} \quad (26)$$

となる。

\mathbf{L}_H の複素固有値問題を解くことにより、演算子基底 $(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ からの連続変換として、固有演算子基底

$$\begin{pmatrix} \hat{\varphi}_\xi \\ \hat{\varphi}_\xi^* \end{pmatrix} = S_\xi \begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{a}^\dagger \end{pmatrix} \quad (27)$$

を得る。このとき、このとき、 $k_{\parallel} := \sqrt{k_1^2 + k_2^2}$ として、 $S_\xi(9)$ のパラメーターは

$$\beta = \frac{1}{4} \ln \left(\frac{k_3 + k_{\parallel}}{k_3 - k_{\parallel}} \right) , \quad \tan \theta = -\frac{k_1}{k_2} \quad (28)$$

となる。

この固有演算子基底により、任意の k_i に対して、ハミルトニアンは

$$\hat{H} = z \left(\hat{\varphi}^* \hat{\varphi} + \frac{1}{2} \right) \quad (29)$$

と対角表示される。ここで、固有振動数は、

$$z = \sqrt{k_3^2 - k_1^2 - k_2^2} = \sqrt{k_3^2 - k_{\parallel}^2} \quad (30)$$

となり、 $|k_3| < k_{\parallel}$ のとき固有振動数が純虚数となり、不安定化が起こる。超放射相転移の臨界点が $|k_3| = k_{\parallel}$ に対応する。

式(28)から、安定領域($|k_3| > k_{\parallel}$)では $\beta \in \mathbb{R}$ 、不安定領域($|k_3| < k_{\parallel}$)では $\beta \in \mathbb{C}$ となる。これに応じて(20)の QGTにおいて、量子計量は正定値から一部負値を取り得る(リーマン計量 \rightarrow 擬リーマン計量)、同時に Berry 曲率は実値から純虚値へ移行する。結果としてトポロジカル不变量としての Berry 位相は純虚数をとり、真空不安定化における指数崩壊を反映する。さらに、安定領域では、QGT の対称成分(量子計量)と反対称成分(シンプレクティック構造)が複素構造と整合し、演算子空間の底多様体は量子系特有のケーラー構造をなすことを確認した[8]。不安定化後も複素構造との整合性は保たれ、擬リーマン計量と純虚シンプレクティック構造から成る擬ケーラー構造が存在することを見出した。このケーラー構造から擬ケーラー構造への幾何学的な構造転移は、ボゾン系の量子相転移の一般的な特徴であると考えられる。

References

- [1] M. V. Berry, Proc. Roy. Soc. Lond. A **392**, 45 (1984).
- [2] B. Simon, Phys. Rev. Lett. **51**, 2167 (1983).
- [3] P. Zanardi, P. Giorda, and M. Cozzini, Phys. Rev. Lett. **99**, 100603 (2007).
- [4] A. Carollo, D. Valenti, and B. Spagnolo, Phys. Rep. **838**, 1 (2020), 1911.10196.
- [5] K. Gietka and T. Busch, Phys. Rev. E **104**, 034132 (2021).
- [6] S. L. Braunstein, Phys. Rev. A **71**, 1 (2005).
- [7] 森田茂之、”微分形式の幾何学”(岩波、2016).
- [8] A. Ashtekar and T. A. Schilling, Geometrical Formulation of Quantum Mechanics, in On Einstein's Path (1999), pp. 23-65.