虚時間時間発展とBerry位相

塩崎　謙

January 5, 2022

実時間発展と同様にして，虚時間発展についても断熱極限において離散的な固有状態はBerry位相を獲得する．

虚時間依存する（エルミートな）ハミルトニアン$H(\tau)$の虚時間発展を考える． Schrodinger方程式は

$$\frac{d}{d\tau}\left|\psi(\tau)\right\rangle = -H(\tau)\left|\psi(\tau)\right\rangle . \tag{1}$$

$H(\tau)$の固有値は離散的とし，瞬間的固有状態を$|n(\tau)\rangle$を

$$H(\tau)\left|n(\tau)\right\rangle = E_n(\tau)\left|n(\tau)\right\rangle, \quad n = 1, 2, \dots, \tag{2}$$

と書く．規格直行性$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$を課す．これから

$$\langle m(\tau)|\frac{dH}{d\tau}(\tau)|n(\tau)\rangle = \frac{dE_n}{d\tau}(\tau)\delta_{nm} + (E_n(\tau) - E_m(\tau))\langle m(\tau)|\frac{dn}{d\tau}(\tau)\rangle \tag{3}$$

を得る．特に，

$$\langle n(\tau)|\frac{dH}{d\tau}(\tau)|n(\tau)\rangle = \frac{dE_n}{d\tau}(\tau) \tag{4}$$

はヘルマン–ファインマンの公式．また，$E_n(\tau) \neq E_m(\tau)$のとき，

$$\langle m(\tau)|\frac{dn}{d\tau}(\tau)\rangle = \frac{\langle m(\tau)|\frac{dH}{d\tau}(\tau)|n(\tau)\rangle}{E_n(\tau) - E_m(\tau)} \tag{5}$$

に注意.

波動関数を

$$\left|\psi(\tau)\right\rangle = \sum_n c_n(\tau)\left|n(\tau)\right\rangle \tag{6}$$

と展開する． Schrodinger方程式に代入すると，

$$\frac{d}{d\tau}c_n(\tau) = -E_n(\tau)c_n(\tau) - \sum_m \langle n(\tau)|\frac{dm}{d\tau}(\tau)\rangle\, c_m(\tau). \tag{7}$$

$m \neq n$に対して$E_n(\tau) \neq E_m(\tau)$を仮定すると，

$$\frac{d}{d\tau}c_n(\tau) = -E_n(\tau)c_n(\tau) - \langle n(\tau)|\frac{dn}{d\tau}(\tau)\rangle\, c_n(\tau) - \sum_{m\neq n}\frac{\langle n(\tau)|\frac{dH}{d\tau}(\tau)|m(\tau)\rangle}{E_m(\tau) - E_n(\tau)}c_m(\tau) \tag{8}$$

を得る．ここで，系の虚時間発展がエネルギー差$E_m(\tau) - E_n(\tau)$に比べて十分ゆっくりと仮定すると，第3項を無視でき，

$$\frac{d}{d\tau}c_n(\tau) = -E_n(\tau)c_n(\tau) - \langle n(\tau)|\frac{dn}{d\tau}(\tau)\rangle\, c_n(\tau) \tag{9}$$

を得る．これから，

$$c_n(\tau) = e^{-\int_0^\tau E_n(\tau')d\tau'} e^{-\int_0^\tau \langle n(\tau')|\frac{dn}{d\tau}(\tau')\rangle d\tau'} c_n(\tau=0) \tag{10}$$

を得る． $H(\tau)$がエルミートであれば，第1因子は波動関数の$U(1)$位相には効かない．

$$\langle n|dn\rangle^* = \langle dn|n\rangle = -\langle n|dn\rangle \tag{11}$$

であるから，第2因子は$U(1)$位相因子である．特に，閉じた経路$H(T)=H(0)$を考えると，Berry位相を得る：

$$c_n(T) = e^{-\int_0^T E_n(\tau)d\tau} e^{-\oint\langle n|dn\rangle} c_n(\tau=0). \tag{12}$$