

バンド構造をもつ固体の輸送現象の半古典的取り扱いにおける Berry 位相の応用について

京都大学理学部 4 回生 塩崎 謙

2010 年 3 月 31 日

概要

本レポートでは、まず断熱近似の概念を説明し、系の時間発展に断熱近似を適用すると自然に Berry 位相の概念が生じることを示す。続いて、バンド構造をもつ固体の輸送現象を半古典近似による取り扱いを定式化する。そのなかで、Bloch 波状態に含まれる格子の周期を持つ変調関数に注目し、その変調関数の波数変化を詳しく解析することにより、波束の群速度に従来のバンドエネルギーの波数微分に加えて、anomalous velocity などといった項が生じることを説明し、それらの効果は Berry 位相の概念により簡潔にまとめることを示す。さらに、それらの効果の起源が断熱近似により他のバンドへの遷移を禁止する点であることを説明し、応用例としてスピンホール効果を紹介する。

目次

1	断熱近似	3
1.1	断熱定理	3
2	Berry 位相	5
2.1	Berry 位相の導出	5
2.2	Berry 曲率	6
2.3	2 準位系における Berry 位相 ~ モノポールについて ~	7
2.4	ハミルトニアン の 対 称 性 と Berry 曲率 の 対 称 性	9
3	断熱輸送	11
3.1	バンド構造も持つ固体における断熱近似	11
3.2	Bloch バンドと Berry 位相	12
3.3	Bloch バンドにおける断熱輸送	13
3.4	ポテンシャルが周期的な時間変化をする 1 次元バンド絶縁体	14
3.5	一様電場下のバンド絶縁体	15
3.6	Berry 曲率がノンゼロである条件	16
4	Bloch 波束の力学	18
4.1	Introducton	18
4.2	Time-Dependent Variational Principle	19
4.3	縮退のないバンドにおける Bloch 波束の運動	20

4.4	状態密度の補正	23
5	縮退のあるバンドにおける Berry 位相	24
5.1	状態の制限と Berry 位相について	24
5.2	射影と Berry 曲率	26
5.3	スピンホール効果	26
5.4	半古典近似における Berry 位相の意義	29
付録 A	軌道磁気モーメント、effective Lagrangian の導出	30

1 断熱近似

ゆっくりと時間変化するハミルトニアンの下での粒子の運動を考えたい。系の固有の時間発展のスケールに比べてハミルトニアンの時間変化が十分遅い場合には、ハミルトニアンの時間変化を摂動として扱える。

本節では上の近似スキームの適用条件を明らかにし、計算上有用な低次の断熱近似公式を導く。

1.1 断熱定理

時間変化するハミルトニアン $H(t)$ を考える。各時刻 t においてエネルギー固有状態は離散的と仮定する。さらに、簡単のため各エネルギー固有状態は縮退していないものとする時刻 τ における瞬間的エネルギー固有状態を $|n(\tau)\rangle$ 、対応する固有値を $\varepsilon_n(\tau)$ とする。

$$H(\tau)|n(\tau)\rangle = \varepsilon_n(\tau)|n(\tau)\rangle \quad (1.1)$$

$$\varepsilon_n(\tau) \neq \varepsilon_m(\tau) (n \neq m \text{ のとき}) \quad (1.2)$$

時刻 $\tau = t_0$ において系の状態 $|\Psi(t_0)\rangle$ が、 n 番目のエネルギー固有状態 $|\Psi(t_0)\rangle = |n(t_0)\rangle$ にあるときの状態の時間発展を考えよう。

ハミルトニアンが時間変化しているから、瞬間的エネルギー固有状態 $|n(\tau)\rangle$ は位相部分以外にも方向が時間変化する。

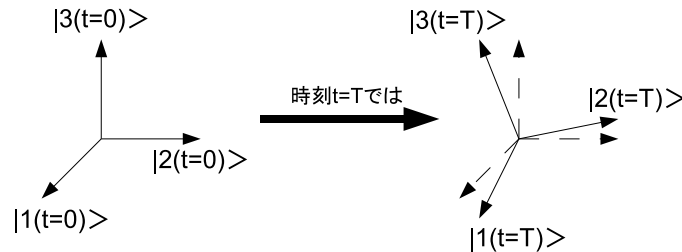


図1 左図と右図のベクトルはそれぞれ時刻 $t = 0, t = T$ における瞬間的固有状態。

ハミルトニアン $H(t)$ が”ゆっくり”時間変化するときの状態の変化を考える。ゆっくりの意味はあとで述べる。ナイーブな予想では、時刻 t_0 から時刻 t_1 の間に自明な位相変化を別にして、

$$|\Psi(t_0)\rangle = |n(t_0)\rangle \quad \mapsto \quad |\Psi(t_1)\rangle \approx e^{i\alpha}|n(t_1)\rangle \quad (1.3)$$

と近似できるだろう。

この予想を数学的に保障するのが断熱定理である。

ここでは結果だけ示す。

[断熱定理][5]

ハミルトニアン $H(t)$ が時間変化し、瞬間的エネルギー固有状態 $|n(\tau)\rangle$ は離散的だとする。このとき、時刻 $t = t_0$ において $|n(t_0)\rangle$ にある状態の時間発展は、 $T = t_1 - t_0$ とすると

$$|n(t_0)\rangle \mapsto e^{i\alpha} |n(t_1)\rangle + O\left(\frac{T_\omega}{T}\right) \quad (1.4)$$

となる。ここで、 T_ω は系に固有な運動の周期。たとえば振動周期

$$T_\omega = \max_{n,m} \left\{ \frac{2\pi\hbar}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \right\} \quad (1.5)$$

である。

したがって、ゼロ次のオーダーでは状態 $|n(t_0)\rangle$ は時間発展でハミルトニアンの固有状態にとどまる。

位相の不定性は瞬間的エネルギー固有状態 $|n(\tau)\rangle$ の位相の選び方の不定性よりくる。この不定性は $U(1)$ ゲージの構造を与える。このゲージ構造からゲージ不変な量を取り出すと物理的に意味のある結果が生まれる。

1次の結果については、 $|n(\tau)\rangle$ が完全系をなしているとき

$$|n(t_0)\rangle \mapsto |n(t_1)\rangle - i\hbar \sum_{m \neq n} \frac{|m(t_1)\rangle \langle m(t_1)| \frac{d}{dt} n(t_1)\rangle}{\varepsilon_n(t_1) - \varepsilon_m(t_1)} \quad (1.6)$$

である。

いわゆる断熱近似とは、上の意味での最低次の断熱近似のことを指すことが多い。離散的なエネルギー準位を持ち、パラメタを通して時間に陰に依存するようなハミルトニアンに従う時間発展を考える際、他の準位への遷移振幅を無視して1つの準位に時間発展を制限する、という近似法をいわゆる断熱近似という。

2 Berry 位相

2.1 Berry 位相の導出

断熱近似 0 次の結果を系の時間発展に適用したときの状態の位相の変化を考える。ハミルトニアンはパラメータ R を通して陰に時間 t に依っているとす。 (簡単のためパラメータ空間は 3 次元とする。他の次元でも以下の議論は同様)

$$H = H(\mathbf{R}(t)) \quad (2.1)$$

時間発展によりパラメータ R はパラメータ空間内を経路 $C = \{\mathbf{R}(t) | 0 \leq t \leq T\}$ を走るとする。時刻 $t = 0$ に状態 $|n(\mathbf{R}(0))\rangle$ なる状態に断熱近似 0 次の結果を適用すると、時刻 t における状態 $|\Psi(t)\rangle$ は次のようになる

$$|\Psi(t)\rangle = e^{i\alpha(t)} |n(\mathbf{R}(t))\rangle \quad (2.2)$$

位相因子 $e^{i\alpha(t)}$ を求めるために、Schrödinger 方程式に式 (2.2) を代入すると

$$i\hbar \frac{d}{dt} e^{i\alpha(t)} |n(\mathbf{R}(t))\rangle = H(\mathbf{R}(t)) e^{i\alpha(t)} |n(\mathbf{R}(t))\rangle \quad (2.3)$$

より

$$\frac{d}{dt} \alpha(t) = i \langle n(\mathbf{R}(t)) | \frac{d}{dt} n(\mathbf{R}(t)) \rangle - \frac{\varepsilon_n(\mathbf{R}(t))}{\hbar} \quad (2.4)$$

よって

$$\alpha(t) = i \int_C d\mathbf{R} \cdot \left\langle n(\mathbf{R}) \left| \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \right. \right\rangle - \int_0^t dt \frac{\varepsilon_n(t)}{\hbar} \quad (2.5)$$

となる。第 1 項の被積分関数を Berry 接続といい、

$$\mathcal{A}^n(\mathbf{R}) := i \langle n(\mathbf{R}) | \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \rangle \quad (2.6)$$

とかく。ここで、第 1 項はパラメータ空間の経路のみに依存することに注意する。これを $\gamma(C)$ とかく。つまり

$$\gamma(C) = \int_C d\mathbf{R} \cdot \mathcal{A}^n(\mathbf{R}) \quad (2.7)$$

瞬間的エネルギー固有状態 $|n(\mathbf{R})\rangle$ はその定義式 (1.1)、(1.2) だけでは位相は決まらない。この位相の自由度は $U(1)$ ゲージ変換を導く。つまり

$$|n(\mathbf{R})\rangle \mapsto e^{i\zeta(\mathbf{R})} |n(\mathbf{R})\rangle \quad (2.8)$$

なる位相の再定義に対し、Berry 接続 $\mathcal{A}^n(\mathbf{R})$ は次のように変換する。

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^n(\mathbf{R}) &\mapsto i \langle n(\mathbf{R}) | e^{-i\zeta(\mathbf{R})} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \left(e^{i\zeta(\mathbf{R})} n(\mathbf{R}) \right) \rangle \\ &= \mathcal{A}^n(\mathbf{R}) - \frac{\partial \zeta}{\partial \mathbf{R}}(\mathbf{R}) \end{aligned} \quad (2.9)$$

同様に $\gamma(C)$ も変換し、

$$\begin{aligned} \gamma(C) &\mapsto \int_C \left(d\mathbf{R} \cdot \mathcal{A}^n(\mathbf{R}) - \frac{\partial \zeta}{\partial \mathbf{R}} \right) \\ &= \gamma(C) - (\zeta(\mathbf{R}(T)) - \zeta(\mathbf{R}(0))) \end{aligned} \quad (2.10)$$

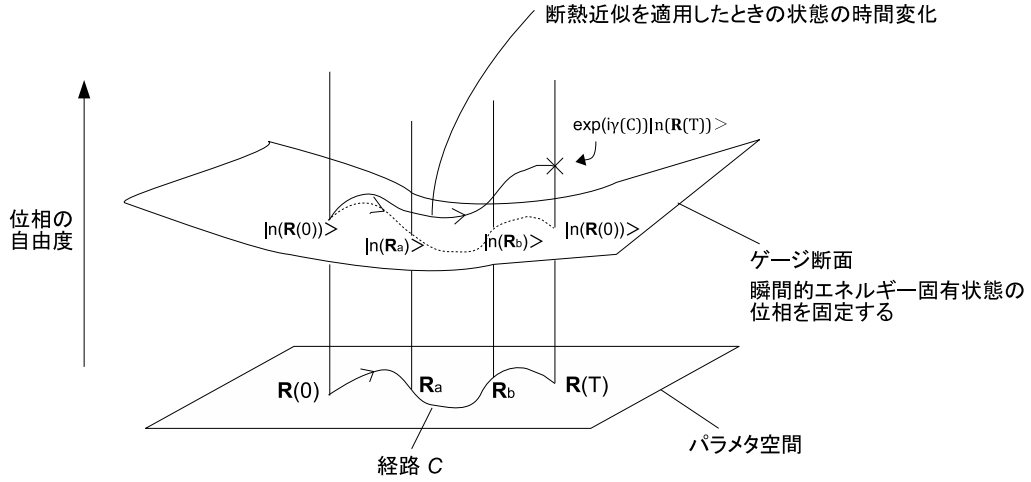


図 2 断熱発展の幾何学的イメージ図。各パラメタ値におけるエネルギー固有状態には位相の自由度がありゲージ断面により位相を指定する。ゲージ変換はゲージ断面のとりかえに相当する。

この表式をみると、 $\gamma(C)$ は位相の再定義により消すことができるように思える。つまりゲージ変換を

$$\zeta(\mathbf{R}(T)) - \zeta(\mathbf{R}(0)) = \gamma(C) \quad (2.11)$$

となるように選べば $\gamma(C) \mapsto 0$ となり、ゲージによるような量である $\gamma(C)$ は一見観測にかかるような物理的意味はなさそうに思える。

しかし $\mathbf{R}(T) = \mathbf{R}(0)$ の場合、つまり経路がループをなす場合は $\gamma(C)$ はゲージ不変である。よって、観測にかかるような物理的効果を引き起こしうる。経路がループをなすときの $\gamma(C)$ を Berry 位相という。

2.2 Berry 曲率

電磁気学と同様、場の強さ $F_{\mu\nu}$ に相当する量が定義できる。

$$\Omega_{\mu\nu} := \frac{\partial}{\partial R^\mu} \mathcal{A}_\nu^n(\mathbf{R}) - \frac{\partial}{\partial R^\nu} \mathcal{A}_\mu^n(\mathbf{R}) \quad (2.12)$$

これを Berry 曲率という。

ストークスの定理により、Berry 位相 $\gamma(C)$ は閉曲線で囲まれる閉曲面を S とすると

$$\gamma(C) = \oint_C \mathcal{A}_\mu^n(\mathbf{R}) dR^\mu = \int_S \frac{1}{2} \Omega_{\mu\nu}(\mathbf{R}) dR^\mu \wedge dR^\nu \quad (2.13)$$

となる。Berry 曲率 $\Omega_{\mu\nu}$ はゲージ不変かつ局所的な量なので、Berry 位相より重要な量である。

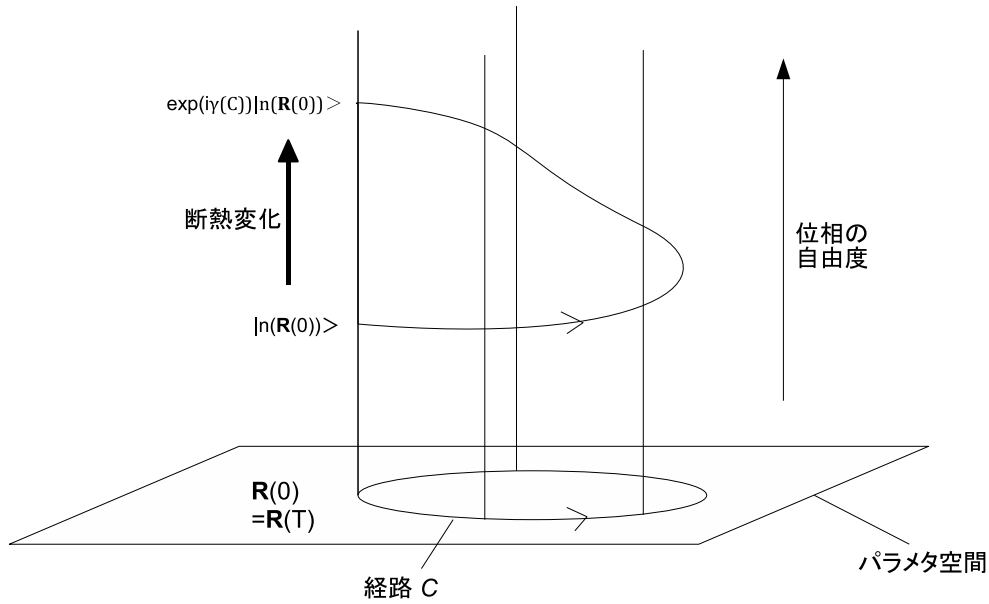


図3 パラメタ変化がループを成しているときの断熱変化に伴う位相の変化。この位相の変化はゲージ断面のとりかえで消すことはできない。

さて、エネルギー固有状態の集合 $|n(\mathbf{R})\rangle$ が完全系をなしているとき、簡単な計算により次を示すことができる。

$$\Omega_{\mu\nu}^n(\mathbf{R}) = i \sum_{m \neq n} \frac{\langle n(\mathbf{R}) | \frac{\partial H(\mathbf{R})}{\partial R^\mu} | m(\mathbf{R}) \rangle \langle m(\mathbf{R}) | \frac{\partial H(\mathbf{R})}{\partial R^\nu} | n(\mathbf{R}) \rangle - \langle n(\mathbf{R}) | \frac{\partial H(\mathbf{R})}{\partial R^\nu} | m(\mathbf{R}) \rangle \langle m(\mathbf{R}) | \frac{\partial H(\mathbf{R})}{\partial R^\mu} | n(\mathbf{R}) \rangle}{(\varepsilon_n(\mathbf{R}) - \varepsilon_m(\mathbf{R}))^2} \quad (2.14)$$

この表式をみると Berry 曲率は $\varepsilon_n(\mathbf{R}) = \varepsilon_m(\mathbf{R})$ なる点、つまりエネルギー準位が縮退するような点 \mathbf{R} で特異的であることがわかる。一般にパラメタ空間上の縮退点はモノポールとしてふるまい Berry 曲率のソースとなる。

2.3 2 準位系における Berry 位相 ~ モノポールについて ~

Berry 位相を具体的にみる例として 2 準位系を考える。[1]

2 準位系のハミルトニアンは定数を無視すると、一般に Pauli 行列とパラメタ \mathbf{R} をもちいて

$$H = \mathbf{R} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.15)$$

とかける。 \mathbf{R} を曲座標表示

$$\mathbf{R} = (R \sin \theta \cos \phi, R \sin \theta \sin \phi, R \cos \theta) \quad (2.16)$$

するとハミルトニアンは

$$H = R \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

となり、 H のエネルギー固有状態は

$$\text{固有地} + R : |u_+(\theta, \phi)\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

$$\text{固有地} - R : |u_-(\theta, \phi)\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ -\cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

のようにとれる。もちろん上の固有状態には位相の不定性がある。 $R = 0$ なる点で2つの準位が縮退していることに注意する。

以下、 $|u_-(\theta, \phi)\rangle$ の断熱変化に伴う Berry 位相を考える。

表式 (2.19) なる位相の選び方は $\theta = \pi$ で値が一意に定まらない。よってこの表式は $\theta = \pi$ を除いた領域でのみ定義される。この領域を北半球 U_N とし、式 (2.19) の位相の選び方を特に $|u_-(\theta, \phi)\rangle_N$ とかく。北半球 U_N 上で Berry 接続 $\mathcal{A}_\theta^N, \mathcal{A}_\phi^N$ 、Berry 曲率 $\Omega_{\theta\phi}^N$ はそれぞれ

$$\mathcal{A}_\theta^N = 0 \quad (2.20)$$

$$\mathcal{A}_\phi^N = \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

$$\Omega_{\theta\phi}^N = \frac{1}{2} \sin \theta \quad (2.21)$$

となる。 $\theta = \pi$ において $|u_-(\theta, \phi)\rangle$ が定義できる領域の例として、 $\theta = 0$ を除いたような領域、南半球 U_S をとる。 U_N と U_S で球面を完全に覆うことができる。この領域上で一意に固有状態 $|u_-(\theta, \phi)\rangle$ を定義するには位相を

$$|u_-(\theta, \phi)\rangle_S = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ -\cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

と選べばよい。これは確かに $\theta = 0$ において不定で $\theta \neq 0$ において一意的である。

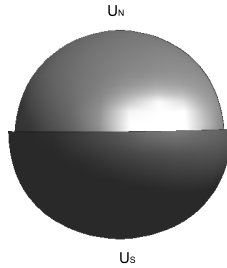


図 4 領域 U_N と U_S 。パラメタ空間が球面だから1つの座標で覆うことはできない。

南半球 U_S 上で Berry 接続 $\mathcal{A}_\theta^S, \mathcal{A}_\phi^S$ 、Berry 曲率 $\Omega_{\theta\phi}^S$ はそれぞれ

$$\mathcal{A}_\theta^S = 0 \quad (2.23)$$

$$\mathcal{A}_\phi^S = -\cos^2 \frac{\theta}{2}$$

$$\Omega_{\theta\phi}^S = \frac{1}{2} \sin \theta \quad (2.24)$$

となる。

北半球 U_N と南半球 U_S の共通部分では $|u_-(\theta, \phi)\rangle_N$ と $|u_-(\theta, \phi)\rangle_S$ はゲージ変換

$$|u_-(\theta, \phi)\rangle_S = e^{i\phi} |u_-(\theta, \phi)\rangle_N \quad (2.25)$$

で結ばれている*1。式 (2.20)、式 (2.23) は確かにゲージ変換 (2.9) を満たす。さらに式 (2.21) と式 (2.24) をみると、確かに Berry 曲率はゲージ不変である。

縮退点がモノポールに対応していることをみるために、Berry 曲率をパラメタ \mathbf{R} で表示すると、変数変換により

$$\Omega = \frac{1}{2} \frac{\mathbf{R}}{R^3} \quad (2.26)$$

となる。これは $\mathbf{R} = \mathbf{0}$ に強さ $\frac{1}{2}$ のモノポールがあるときの、磁場と同じ表式である。

パラメタ空間を (θ, ϕ) とみたとき、Berry 曲率を全空間 (球面 S^2) で積分して 2π で割ると

$$\frac{1}{2\pi} \int_{S^2} d\theta d\phi \Omega_{\theta\phi} = 1 \quad (2.27)$$

となる。一般に、Berry 曲率をパラメタ空間全体で積分して 2π で割った量は第 1 Chern 数と呼ばれる幾何学的な量で整数値をとり、その値はパラメタ空間の幾何学的性質を特徴つける。

2.4 ハミルトニアン対称性と Berry 曲率対称性

パラメタ依存するハミルトニアンに対称性があれば、それに応じて Berry 曲率にも対称性が生じる*2。

いま、ハミルトニアン $H(\mathbf{R})$ がパラメタ空間上の点 $f(\mathbf{R})$ におけるハミルトニアンとユニタリ同値とする。つまり、 \mathbf{R} に依存しないユニタリ変換 W を用いて次のようにかけるとする。

$$H(f(\mathbf{R})) = W^{-1} H(\mathbf{R}) W \quad (2.28)$$

$|n(\mathbf{R})\rangle$ を $H(\mathbf{R})$ の固有状態とする。

$$H(\mathbf{R}) |n(\mathbf{R})\rangle = \varepsilon_n(\mathbf{R}) |n(\mathbf{R})\rangle \quad (2.29)$$

すると

$$\begin{aligned} H(f(\mathbf{R})) W^{-1} |n(\mathbf{R})\rangle &= W^{-1} W H(f(\mathbf{R})) W^{-1} |n(\mathbf{R})\rangle \\ &= W^{-1} H(\mathbf{R}) |n(\mathbf{R})\rangle \\ &= \varepsilon_n(\mathbf{R}) W^{-1} |n(\mathbf{R})\rangle \end{aligned} \quad (2.30)$$

となり、 $W^{-1} |n(\mathbf{R})\rangle$ は $H(f(\mathbf{R}))$ の固有状態となる。よって縮退がなければ

$$|n(f(\mathbf{R}))\rangle \propto W^{-1} |n(\mathbf{R})\rangle \quad (2.31)$$

と比例する。この結果より Berry 曲率の対称性が従う。以下、ユニタリ変換が線形か反線形かとに分けて考える。

*1 この変換性より $\mathbf{R} = \mathbf{0}$ に強さ $\frac{1}{2}$ のモノポールが存在することがわかる。

*2 以下の議論は準位に縮退のない場合の Berry 位相に特有な議論。縮退のある非可換 Berry 位相の場合は適用できない

(1) ユニタリ変換 W が線形の場合

Berry 曲率はゲージ不変だから計算しやすいようにゲージを固定しても良い。

$$|n(f(\mathbf{R}))\rangle = W^{-1} |n(\mathbf{R})\rangle \quad (2.32)$$

とゲージ固定する。すると Berry 接続 $\mathcal{A}_\mu(f(\mathbf{R}))$ は

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_\mu(f(\mathbf{R})) &= \langle n(f(\mathbf{R})) | i\partial_\mu | n(f(\mathbf{R})) \rangle \\ &= \langle n(\mathbf{R}) | W i\partial_\mu W^{-1} | n(\mathbf{R}) \rangle \\ &= \mathcal{A}_\mu(\mathbf{R}) \end{aligned} \quad (2.33)$$

となり、Berry 曲率は

$$\Omega_{\mu\nu}(f(\mathbf{R})) = \Omega_{\mu\nu}(\mathbf{R}) \quad (2.34)$$

とハミルトニアンの特称性を反映する。

(2) ユニタリ変換 W が反線形の時

式 (2.32) と同様にゲージ固定する。 W が反線形でブラケット表示だとはっきりしないので $(,)$ と内積表示する。Berry 接続は

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_\mu(f(\mathbf{R})) &= (n(f(\mathbf{R})), i\partial_\mu n(f(\mathbf{R}))) \\ &= (W^\dagger n(\mathbf{R}), i\partial_\mu W^\dagger n(\mathbf{R})) \\ &= (W i\partial_\mu W^\dagger n(\mathbf{R}), n(\mathbf{R})) \\ &= (-iW \partial_\mu W^\dagger n(\mathbf{R}), n(\mathbf{R})) \\ &= (-i\partial_\mu n(\mathbf{R}), n(\mathbf{R})) \\ &= (n(\mathbf{R}), -i\partial_\mu n(\mathbf{R}))^* \\ &= -\mathcal{A}_\mu(\mathbf{R})^* \\ &= -\mathcal{A}_\mu(\mathbf{R}) \end{aligned} \quad (2.35)$$

となる。ここで反線形演算子に対するエルミート演算子の定義

$$(A^\dagger x, y) := (Ay, x) \quad (2.36)$$

と、Berry 接続 \mathcal{A} が実であることを使った。

Berry 曲率は

$$\Omega_{\mu\nu}(f(\mathbf{R})) = -\Omega_{\mu\nu}(\mathbf{R}) \quad (2.37)$$

となる。式 (2.34) と違い、負号がつく。

具体例については後述する。

3 断熱輸送

輸送現象を断熱近似を用いて考える。特に、バンド構造を持つ固体におけるチャージカレントについて考える。断熱変化させる外部パラメータは、格子の周期ポテンシャル、電場、または磁場を想定する。

方針は、チャージカレントを考えるため速度オペレータ

$$\hat{v} := \frac{1}{i\hbar} [\hat{r}, \hat{H}] \quad (3.1)$$

の期待値

$$\langle v \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{v} | \Psi(t) \rangle \quad (3.2)$$

を考え、その際に状態 $|\Psi(t)\rangle$ に対し断熱近似の最低次の結果でなく、他の準位への遷移も一部取り込んでいる式 (1.6) を用いる。

3.1 バンド構造も持つ固体における断熱近似

断熱近似が成立するためには、遷移し得るエネルギー準位間が離散的でなければならない。これは Bloch 波数が時間変化しない”良い”量子数であることにより満たされる。具体的には、格子ベクトルを \mathbf{a} とし、格子の周期ポテンシャルを持つハミルトニアン

$$\hat{H}(t) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}}, t) \quad (3.3)$$

$$V(\hat{\mathbf{x}} + \mathbf{a}, t) = V(\hat{\mathbf{x}}, t) \quad (3.4)$$

を考える。変化する外部パラメータは周期ポテンシャルである。ただし、格子ベクトルは変化しないものとする。

Bloch の定理により、瞬間的エネルギー固有状態はバンドの指数 n と Bloch 波数 \mathbf{q} でラベルできる。

$$\begin{cases} \hat{H}(\tau) |\phi_n(\mathbf{q}, \tau)\rangle = \varepsilon_n(\mathbf{q}, \tau) |\phi_n(\mathbf{q}, \tau)\rangle \\ e^{-i\frac{\hat{\mathbf{p}}}{\hbar} \cdot \mathbf{a}} |\phi_n(\mathbf{q}, \tau)\rangle = e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}} |\phi_n(\mathbf{q}, \tau)\rangle \end{cases} \quad (3.5)$$

ポテンシャルの関数形は時間変化するが格子ベクトルは変化しないので、

$$\begin{aligned} \left[\hat{H}(t), e^{-i\frac{\hat{\mathbf{p}}}{\hbar} \cdot \mathbf{a}} \right] &= \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}}, t), e^{-i\frac{\hat{\mathbf{p}}}{\hbar} \cdot \mathbf{a}} \right] \\ &= e^{-i\frac{\hat{\mathbf{p}}}{\hbar} \cdot \mathbf{a}} (V(\hat{\mathbf{x}} + \mathbf{a}, t) - V(\hat{\mathbf{x}}, t)) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.6)$$

となり、Bloch 波数はハミルトニアンが時間変化しても変化しない運動の恒量である。

しかしポテンシャルが時間変化するからバンド構造が変化し、バンド指数 n は運動の恒量ではなく、他のバンドへの遷移振幅が存在する。

まとめると、格子ベクトルを一定に保ちつつ周期ポテンシャルを変化させると、Bloch 波数は一定でバンド間遷移のみが起こりうる。遷移し得るエネルギー準位が離散的なので、周期ポテンシャルの変化が十分”ゆっくり”なら断熱近似が適用できる。

3.2 Bloch バンドと Berry 位相

計算の便宜上必要になるので、先にバンド構造から定義できる Berry 位相についてまとめておく。周期ポテンシャルを持つハミルトニアンとエネルギー固有状態

$$\begin{cases} \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \\ V(\hat{x} + \mathbf{a}) = V(\hat{x}) \end{cases} \quad (3.7)$$

$$\begin{cases} \hat{H} |\phi_n(\mathbf{q})\rangle = \varepsilon_n(\mathbf{q}) |\phi_n(\mathbf{q})\rangle \\ e^{-i\frac{\hat{p}}{\hbar} \cdot \mathbf{a}} |\phi_n(\mathbf{q})\rangle = e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}} |\phi_n(\mathbf{q})\rangle \end{cases} \quad (3.8)$$

に対し、格子ベクトルの周期を持つ変調関数

$$|u_n(\mathbf{q})\rangle := e^{-i\mathbf{q} \cdot \hat{r}} |\phi_n(\mathbf{q})\rangle \quad (3.9)$$

を定義し、さらにパラメタ q 依存するハミルトニアン $H(q)$ を

$$H(\mathbf{q}) = e^{-i\mathbf{q} \cdot \hat{r}} H e^{i\mathbf{q} \cdot \hat{r}} \quad (3.10)$$

で定義する。すると、 $|u_n(\mathbf{q})\rangle$ は次を満たす。

$$\begin{cases} \hat{H}(\mathbf{q}) |u_n(\mathbf{q})\rangle = \varepsilon_n(\mathbf{q}) |u_n(\mathbf{q})\rangle \\ e^{-i\frac{\hat{p}}{\hbar} \cdot \mathbf{a}} |u_n(\mathbf{q})\rangle = |u_n(\mathbf{q})\rangle \end{cases} \quad (3.11)$$

式 (3.8) は、 q 依存する境界条件のもと q 依存しないハミルトニアン H を対角化しているのに対し、式 (3.11) は、 q 依存しない境界条件のもと q 依存するハミルトニアン H を対角化している。

$H(\mathbf{q})$ はパラメタ依存するハミルトニアンで離散的なエネルギー固有状態を持っているから、Berry 位相が定義できる。具体的にはバンド指標 n のバンドにおける Berry 接続 $\mathcal{A}^n(\mathbf{q})$ を

$$\mathcal{A}^n(\mathbf{q}) := i \left\langle u_n(\mathbf{q}) \left| \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} u_n(\mathbf{q}) \right. \right\rangle \quad (3.12)$$

で定義する。この Berry 位相が固体の輸送現象にどのように効いてくるかは後述する。

$H(\mathbf{q})$ の並進対称性と Berry 曲率の周期性について注意しておく。

逆格子ベクトル G だけ Bloch 波数 q を変化しても Bloch 波を求める問題は変化しないはずである。よって $H(\mathbf{q})$ と $H(\mathbf{q} + \mathbf{G})$ はユニタリ同値のはず。これを確認しておく。

$$H(\mathbf{q} + \mathbf{G}) = e^{-i\mathbf{G} \cdot \hat{r}} H(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{G} \cdot \hat{r}} \quad (3.13)$$

だから、ユニタリ変換 $e^{i\mathbf{G} \cdot \hat{r}}$ によって式 (3.11) の境界条件が変わらないことを確認すれば良い。これは $[A, B]$ が c -数のとき

$$e^A e^B e^{-A} = e^{B+[A, B]} \quad (3.14)$$

に注意すると

$$e^{-i\mathbf{G} \cdot \hat{r}} e^{-i\frac{\hat{p}}{\hbar} \cdot \mathbf{a}} e^{i\mathbf{G} \cdot \hat{r}} = e^{(-i\frac{\hat{p}}{\hbar} \cdot \mathbf{a} - i\mathbf{G} \cdot \mathbf{a})} = e^{-i\frac{\hat{p}}{\hbar} \cdot \mathbf{a}} \quad (3.15)$$

より成立。したがって 2.4 の議論より、Berry 曲率 $\Omega_{\mu\nu}(\mathbf{q})$ に対し、

$$\Omega_{\mu\nu}(\mathbf{q} + \mathbf{G}) = \Omega_{\mu\nu}(\mathbf{q}) \quad (3.16)$$

が成立。この結果は Berry 曲率を扱う上ではパラメタ空間として第 1 ブリルアンゾーンの端を同一視したコンパクトな空間をとる必要があることを示している。

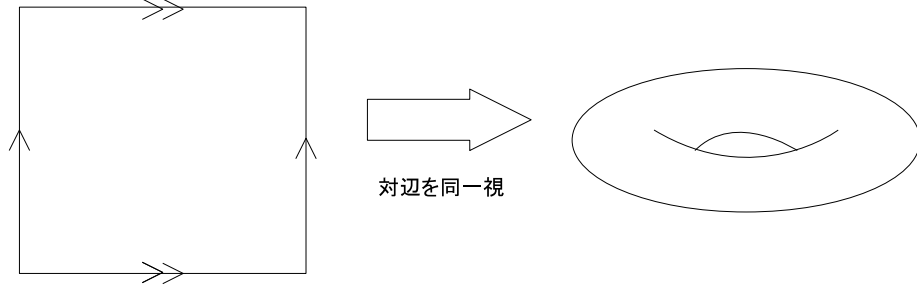


図5 第1ブリルアンゾーンの端を同一視する2次元の場合の例。同一視によりパラメタ空間は2次元トーラスと考える。

3.3 Blochバンドにおける断熱輸送

ハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}}, t) \quad (3.17)$$

に対して、周期ポテンシャル $V(\hat{\mathbf{x}}, t)$ がゆっくり変化するとき状態 $|\phi_n(\mathbf{q}, t)\rangle$ の担う粒子カレントを考える [1]。速度オペレータは

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{x}}, \hat{H}] = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} \quad (3.18)$$

である。時刻 $t = 0$ に $|\Phi(t=0)\rangle = |\phi_n(\mathbf{q}, t=0)\rangle$ であるような状態 $|\Phi(t)\rangle$ に対し、断熱近似1次の結果 (1.6) 式を用いると、速度 $\mathbf{v}_n(\mathbf{q}, t)$ は

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_n(\mathbf{q}, t) &= \left\langle \Phi(t) \left| \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} \right| \Phi(t) \right\rangle \\ &\cong \left\langle \phi_n(\mathbf{q}, t) \left| \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} \right| \phi_n(\mathbf{q}, t) \right\rangle - \sum_{m \neq n} \left\{ \frac{\left\langle \phi_n(\mathbf{q}, t) \left| \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} \right| \phi_m(\mathbf{q}, t) \right\rangle \left\langle \phi_m(\mathbf{q}, t) \left| \frac{\partial}{\partial t} \phi_n(\mathbf{q}, t) \right\rangle}{\varepsilon_n(\mathbf{q}, t) - \varepsilon_m(\mathbf{q}, t)} - \text{c.c.} \right\} \end{aligned} \quad (3.19)$$

となる。c.c. は複素共役。 $|u_n(\mathbf{q})\rangle = e^{-i\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{r}}} |\phi_n(\mathbf{q})\rangle$ を用いて上式の $|\phi_n(\mathbf{q}, t)\rangle$ を $|u_n(\mathbf{q}, t)\rangle$ に書き換える。

パラメタ依存するハミルトニアンは、今の場合

$$H(\mathbf{q}, t) = e^{-i\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{r}}} \left\{ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}}, t) \right\} e^{i\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{r}}} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} + \hbar\mathbf{q})^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}}, t) \quad (3.20)$$

であり、パラメタは (\mathbf{q}, t) である。次に注意する

$$e^{-i\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{r}}} \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} e^{i\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{r}}} = \frac{\hat{\mathbf{p}} + \hbar\mathbf{q}}{m} = \frac{\partial \hat{H}(\mathbf{q}, t)}{\hbar \partial \mathbf{q}} \quad (3.21)$$

よって

$$\left\langle \phi_n(\mathbf{q}, t) \left| \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} \right| \phi_m(\mathbf{q}, t) \right\rangle = \left\langle u_n(\mathbf{q}, t) \left| \frac{\partial \hat{H}(\mathbf{q}, t)}{\hbar \partial \mathbf{q}} \right| u_m(\mathbf{q}, t) \right\rangle \quad (3.22)$$

となる。関係式

$$\left\langle u_n(\mathbf{q}) \left| \frac{\partial \hat{H}(\mathbf{q})}{\hbar \partial \mathbf{q}} \right| u_n(\mathbf{q}) \right\rangle = \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} \quad (3.23)$$

と、 $n \neq m$ のときの

$$\left\langle u_n(\mathbf{q}) \left| \frac{\partial \hat{H}(\mathbf{q})}{\hbar \partial \mathbf{q}} \right| u_m(\mathbf{q}) \right\rangle = (\varepsilon_n(\mathbf{q}) - \varepsilon_m(\mathbf{q})) \left\langle \frac{\partial u_n(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} \left| u_m(\mathbf{q}) \right\rangle \right\rangle \quad (3.24)$$

に注意すると式 (3.19) は結局

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{q}, t) = \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{q}, t)}{\hbar \partial \mathbf{q}} - i \left\{ \left\langle \frac{\partial u_n(\mathbf{q}, t)}{\partial \mathbf{q}} \left| \frac{\partial u_n(\mathbf{q}, t)}{\partial t} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial u_n(\mathbf{q}, t)}{\partial t} \left| \frac{\partial u_n(\mathbf{q}, t)}{\partial \mathbf{q}} \right\rangle \right\} \quad (3.25)$$

となり、成分でかくと Berry 曲率 $\Omega^n(\mathbf{q}, t)$ を用いて

$$v_n^i(\mathbf{q}, t) = \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{q}, t)}{\hbar \partial q_i} - \Omega_{q_i t}^n(\mathbf{q}, t) \quad (3.26)$$

とかける。第 1 項は断熱近似 0 次、つまり他の準位への遷移を完全に無視したときの速度項。第 2 項は断熱近似 1 次、つまり他の準位へ遷移を一部含んだときの寄与であり、anomalous velocity と呼ばれる。anomalous velocity は Berry 曲率でかけることから、この項は Berry 位相の効果といわれるときもある。次の章で波束の動力学を考えることにより Berry 位相の効果を機械的に扱う。

以下、式 (3.26) の応用例を 2 つ述べる。

3.4 ポテンシャルが周期的な時間変化をする 1 次元バンド絶縁体

パラメタ依存するハミルトニアン

$$H(q, t) = \frac{(\hat{p} + \hbar q)^2}{2m} + V(\hat{x}, t) \quad (3.27)$$

において、ゆっくり時間変化するポテンシャルが時間 T の周期をもつとする。

$$V(\hat{x}, t + T) = V(\hat{x}, t) \quad (3.28)$$

このときハミルトニアン $H(q, t)$ は $q \mapsto q + G$ だけでなく、 $t \mapsto t + T$ なる変換に対してもユニタリ同値。

詰まっているバンド指数 n 、Bloch 波数 q の状態の担う粒子カレントは、式 (3.26) により

$$v_n(q, t) = \frac{\partial \varepsilon_n(q, t)}{\hbar \partial q} - \Omega_{qt}^n \quad (3.29)$$

よってバンド指数 n 全体での粒子カレントは Bloch 波数を第 1 ブリルアンゾーンで積分して

$$j_n(t) = - \int_{\text{BZ}} \frac{dq}{2\pi} \Omega_{qt}^n \quad (3.30)$$

時間平均をとると

$$\bar{j}_n = - \frac{1}{T} \int_0^T \int_{\text{BZ}} \frac{dq}{2\pi} \Omega_{qt}^n \quad (3.31)$$

となる。ハミルトニアン H の周期性により Berry 曲率を扱う上ではパラメタ空間はコンパクトなトーラスとみなして良いから、積分領域はパラメタ空間全域となり、積分値は第 1 Chern 数である。

$$\bar{j}_n = -\frac{1}{T} \times (\text{Chern number}) \quad (3.32)$$

詰まっているバンドすべてからの粒子カレントへの寄与は

$$\bar{J} = \sum_{\text{occupied band}} \bar{v}_n = -\frac{1}{T} \sum_{\text{occupied band}} (\text{Chern number of } n \text{ band}) \quad (3.33)$$

第 1 Chern 数は整数値をとるから、この結果はカレントが整数値に量子化されていることを示す。

3.5 一様電場下のバンド絶縁体

一様電場 E を

$$\mathbf{E}(t) = -\frac{\partial \mathbf{A}(t)}{\partial t} \quad (3.34)$$

なるゲージでいれる。ハミルトニアンは

$$H(t) = \frac{(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}(t))^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}}) \quad (3.35)$$

パラメタ依存するハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H(\mathbf{q}, t) &:= e^{-i\mathbf{q}\cdot\hat{\mathbf{r}}} H(t) e^{i\mathbf{q}\cdot\hat{\mathbf{r}}} \\ &= \frac{(\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{q} + e\mathbf{A}(t))^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}}) \end{aligned} \quad (3.36)$$

とする。

$$\mathbf{k}(\mathbf{q}, t) := \mathbf{q} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(t) \quad (3.37)$$

で $\mathbf{k}(\mathbf{q}, t)$ を定義すると、パラメタ空間を (\mathbf{q}, t) から \mathbf{k} に変換できる。

バンド指数 n 、Bloch 波数 \mathbf{q} なる状態の担う粒子カレントは式 (3.25) より

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}(\mathbf{q}, t)) = \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\hbar \partial \mathbf{q}} - i \left\{ \left\langle \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{q}} \left| \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial t} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial t} \left| \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{q}} \right\rangle \right\} \quad (3.38)$$

これは

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \quad (3.39)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = -\frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \quad (3.40)$$

より

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}(\mathbf{q}, t)) = \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{k})}{\hbar \partial \mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \times \boldsymbol{\Omega}^n(\mathbf{k}) \quad (3.41)$$

とかける。ただし

$$\boldsymbol{\Omega}^n(\mathbf{k}) = i \left\langle \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \left| \times \right| \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \right\rangle \quad (3.42)$$

は Berry 曲率である。式 (3.41) を見ると、もし第 2 項がゼロでなければこの項は電場に垂直なカレント、つまり Hall 電流に寄与する。この Hall 電流は散乱由来ではない、内因性の Hall 電流である。

詰まっているバンド指数 n の状態全体で和をとると、バンド n が担う粒子カレントは

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_n(t) &= \int_{\text{BZ}} \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \mathbf{v}_n(\mathbf{q}, t) \\ &= -\frac{e}{\hbar} \mathbf{E}(t) \times \int_{\text{BZ}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \Omega^n(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (3.43)$$

となる。完全に詰まっているバンドにおいて、式 (3.41) の第 1 項が積分すると消えることは、他のバンドへの遷移を考えない断熱近似 0 次においてよく知られた結果である。Berry 位相の効果が存在する場合、つまり Berry 曲率がゼロでないときは、完全に詰まっているバンドからは Hall 電流が生じる。全チャージカレント \mathbf{J} は、詰まっているバンドの和をとって次のようになる。

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(t) &= \sum_{\text{occupied band}} (-e) \mathbf{j}_n(t) \\ &= \mathbf{E}(t) \times \frac{e^2}{\hbar} \sum_{\text{occupied band}} \int_{\text{BZ}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \Omega^n(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (3.44)$$

さらに上の結果は Hall 伝導率が整数値に量子化されることも示唆する。2次元バンド絶縁体に対して上の結果を適用すると Hall 伝導率 σ_{xy} は

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{\hbar} \sum_{\text{occupied band}} \int_{\text{BZ}} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \Omega_{k_x k_y}^n(\mathbf{k}) \quad (3.45)$$

ここで積分 $\int_{\text{BZ}} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \Omega_{k_x k_y}^n(\mathbf{k})$ は第 1 Chern 数だから整数値をとり、

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{\hbar} \times (\text{integer}) \quad (3.46)$$

と、Hall 伝導率が量子化される。

3.6 Berry 曲率がノンゼロである条件

Berry 曲率がノンゼロであるためのハミルトニアンに対する必要条件を調べる。次を示す。

(I) ハミルトニアンがパリティ対称性をもつ $\Rightarrow \Omega(-\mathbf{q}) = \Omega(\mathbf{q})$

P をパリティ変換とすると、ハミルトニアンがパリティ対称性をもつことは

$$PHP = H \quad (3.47)$$

とかける。このときパラメタ依存するハミルトニアン $H(\mathbf{q})$ に対し

$$\begin{aligned} PH(\mathbf{q})P &= Pe^{-i\mathbf{q}\cdot\hat{\mathbf{r}}} He^{i\mathbf{q}\cdot\hat{\mathbf{r}}} P \\ &= (Pe^{-i\mathbf{q}\cdot\hat{\mathbf{r}}} P) (PHP) (Pe^{i\mathbf{q}\cdot\hat{\mathbf{r}}} P) \\ &= e^{i\mathbf{q}\cdot\hat{\mathbf{r}}} He^{-i\mathbf{q}\cdot\hat{\mathbf{r}}} \\ &= H(-\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (3.48)$$

よって、ハミルトニアンが線形なユニタリ変換 P でもってユニタリ同値だから式 (2.34) より (I) が従う。

(II) ハミルトニアンが時間反転対称性をもつ $\Rightarrow \Omega(-\mathbf{q}) = -\Omega(\mathbf{q})$

証明は (I) と同じ*3。今度はユニタリ変換が反線形な時間反転演算だから、式 (2.37) により (II) が従う。

(I) と (II) をみると、Berry 曲率がノンゼロであるためには、ハミルトニアンが時間反転対称性とパリティ対称性のどちらか一方を破っていないといけない。この性質は縮退のないバンドに固有の性質である。縮退がある場合は両方の対称性をもっている場合でも Berry 曲率がノンゼロの場合がある。

格子の周期ポテンシャルが時間変化しないものとする、時間反転対称性を破る場合は強磁場を加えたときだが、強磁場条件下ではバンド構造そのものが壊れるから、本節の議論は適用できない。パリティ対称性を破る場合は、格子の周期ポテンシャルがパリティ対称でない場合である。

よって縮退のないバンドにおいて Berry 位相の効果が生じるのは、格子ポテンシャルがパリティ対称でない場合である。

*3 時間反転演算子の反線形性に注意。

4 Bolch 波束の力学

4.1 Introducton

電場、磁場に対する応答を半古典近似で考えたい。

バンド間のエネルギーギャップに対して外場の大きさが十分小さければ、外場によるバンド間遷移の効果を無視して、バンド構造を保ったまま外場の効果を摂動的に扱えば良い。

バンド間遷移を無視出来る条件は、 E を電場の強さ、 ω_c をサイクロトロン周波数、 ω を外場の振動周期とすると

$$eEa \ll \frac{\varepsilon_{\text{gap}}(\mathbf{q})^2}{\varepsilon_{\text{F}}} \quad (4.1)$$

$$\hbar\omega_c \ll \frac{\varepsilon_{\text{gap}}(\mathbf{q})^2}{\varepsilon_{\text{F}}} \hbar a \quad (4.2)$$

$$\hbar\omega \ll \varepsilon_{\text{gap}} \quad (4.3)$$

である [8]。この条件が満たされないときは、leading の段階で外場も含めてハミルトニアンを対角化しなければならない (例 一様な強磁場 \Rightarrow ランダウ準位)。上の条件が満たされているとき、バンド間遷移を考えないで電子の運動を 1 つのバンド上に制限して考えることができる (断熱近似)。

空間的に非一様な外場を扱うため、空間的に局在、かつ波数空間で局在した波束を考える (半古典近似)。1 つのバンド上に運動を制限しているから波束は 1 つのバンド上で構成する。具体的には、バンド n に縮退がなければ波束 $|w\rangle$ を

$$|w[f(t)]\rangle = \int_{\text{BZ}} d\mathbf{q} f(\mathbf{q}, t) |\phi^n(\mathbf{q})\rangle \quad (4.4)$$

と、Bloch 波の重みをつけた重ね合わせでつくる。このような波束を以下 Bloch 波束と呼ぶことにする。

よく知られているように、Bloch 波束の運動は、波束の位置を $\mathbf{r}_c(t)$ 、Bloch 波数を $\mathbf{q}_c(t)$ を重み関数 $f(\mathbf{q}, t)$ により

$$\mathbf{r}_c(t) := \langle w | \hat{\mathbf{r}} | w \rangle \quad (4.5)$$

$$\mathbf{q}_c(t) := \int_{\text{BZ}} d\mathbf{q} |f(\mathbf{q}, t)|^2 \mathbf{q} \quad (4.6)$$

で定義すると、次の運動方程式に従う。

$$\dot{\mathbf{r}}_c(t) = \frac{\partial \varepsilon_n(\mathbf{q}_c(t))}{\hbar \partial \mathbf{q}} \quad (4.7)$$

$$\hbar \dot{\mathbf{q}}_c(t) = -e\mathbf{E}(\mathbf{r}_c(t), t) - e\dot{\mathbf{r}}_c(t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}_c(t), t) \quad (4.8)$$

しかし、この結果は Bloch 波数 $\mathbf{q}_c(t)$ が変化するときには正しくない。なぜなら Bloch 波 $\phi_n(\mathbf{r}, \mathbf{q}) := \langle \mathbf{r} | \phi_n(\mathbf{q}) \rangle$ は

$$\phi_n(\mathbf{r}, \mathbf{q}) = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} u_n(\mathbf{r}, \mathbf{q}) \quad (4.9)$$

と、 \mathbf{q} 依存する格子ベクトルの周期をもつ変調関数 $u_n(\mathbf{r}, \mathbf{q})$ と平面波 $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ の積である。波束の中心位置は Bloch 波の干渉で決まる。つまり、実空間における波束

$$w(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{q} f(\mathbf{q}, t) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} u_n(\mathbf{r}, \mathbf{q}) \quad (4.10)$$

に対し、波束の中心位置 $\mathbf{r}_c(t)$ は位相

$$\arg(f(\mathbf{q}, t)) + \mathbf{q} \cdot \mathbf{r} + \arg(u_n(\mathbf{r}, \mathbf{q})) \quad (4.11)$$

を停留させる点で決まる。よって $\mathbf{q}_c(t)$ が時間変化すると変調関数 $u_n(\mathbf{r}, \mathbf{q})$ 由来の位相変化が生じ、干渉パターンが変化し、結果的に波束の中心位置 $\mathbf{r}_c(t)$ は、変調関数 $u_n(\mathbf{r}, \mathbf{q})$ が存在しないとき（つまり自由空間の波束の運動）の運動方程式 (4.7)、(4.8) に比べて補正を受ける。この補正は Berry 位相の概念を用いるときれいにまとまる。

4.2 Time-Dependent Variational Principle

波束の運動を記述する便利な方法論として、time-dependent variational principle という変分原理に基づく方法がある。変分の対象となる”作用”を、変分原理を適用した結果 Schrödinger 方程式が得られるようにつくる。そのためには、”作用” S を波動関数 $\psi(x, t)$ の汎関数として

$$S[\psi, \bar{\psi}] = \int dt L[\psi(t), \bar{\psi}(t)] := \int dt \left\langle \psi(t) \left| i\hbar \frac{d}{dt} - H \right| \psi(t) \right\rangle \quad (4.12)$$

を考える。ここで”Lagrangian” L を

$$\begin{aligned} L[\psi(t), \bar{\psi}(t)] &= \left\langle \psi(t) \left| i\hbar \frac{d}{dt} - H \right| \psi(t) \right\rangle \\ &= \int dx \psi^*(x, t) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) \psi(x, t) \end{aligned} \quad (4.13)$$

で定義した。ただし積分変数 x は系の自由度全てに渡る。

Schrödinger 方程式は、上の”作用”を $\psi^*(x, t)$ で変文すれば得られる。

$$\frac{\partial S}{\partial \psi^*(x, t)} = 0 \implies \left(i\hbar \frac{d}{dt} - H \right) \psi(x, t) = 0 \quad (4.14)$$

考える波動関数のクラスとして Hilbert 空間全体、つまり起こりうる全ての状態をとると、変分原理により完全に正しい Schrödinger 方程式が得られるが、波動関数のクラスを

- 断熱近似を仮定し、1つのバンドだけに状態を制限

して変分原理を適用すると、1つのバンド内に制限された effective theory が満たす Schrödinger 方程式が得られる。

さらに簡単化として、

- 考える状態として実空間と波数空間に局在した波束を考え、状態を少数のパラメタで記述できるように Lagrangian を近似する。

波束の自由度は無限自由度だが、その自由度を波束の中心位置 $\mathbf{r}_c(t)$ と Bloch 波数 $\mathbf{q}_c(t)$ (定義は式 (4.5)、式 (4.6) と同様) とそれらの時間微分でもって effective Lagrangian を近似する。この近似は波束が実空間と波数空間に鋭く局在していることにより正当化される。

以上の手続きにより、波束 $|W(t)\rangle$ の運動を記述する effective な Lagrangian $L_{\text{eff}}(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}_c, \dot{\mathbf{r}}_c, \dot{\mathbf{q}}_c)$ が得られる。

$$L_{\text{eff}}(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}_c, \dot{\mathbf{r}}_c, \dot{\mathbf{q}}_c) := \left\langle W(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}_c, \dot{\mathbf{r}}_c, \dot{\mathbf{q}}_c) \left| i\hbar \frac{d}{dt} - H \right| W(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}_c, \dot{\mathbf{r}}_c, \dot{\mathbf{q}}_c) \right\rangle \quad (4.15)$$

この近似のもとでは波束の運動を考えることは、effective Lagrangian $L_{\text{eff}}(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}_c, \dot{\mathbf{r}}_c, \dot{\mathbf{q}}_c)$ に従う Euler-Lagrange 方程式を解くことに帰着される。

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_{\text{eff}}}{\partial \dot{\mathbf{r}}_c} \right) = \frac{\partial L_{\text{eff}}}{\partial \mathbf{r}_c} \quad (4.16)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_{\text{eff}}}{\partial \dot{\mathbf{q}}_c} \right) = \frac{\partial L_{\text{eff}}}{\partial \mathbf{q}_c} \quad (4.17)$$

4.3 縮退のないバンドにおける Bloch 波束の運動

time-dependent variational principle の適用例として、弱い外場中の Bloch 波束の運動を考える。この節ではバンドに縮退がない場合の波束の運動を考える。

ハミルトニアンは

$$H(t) = \frac{(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t))^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}) - e\phi(\hat{\mathbf{r}}, t) \quad (4.18)$$

$$V(\hat{\mathbf{r}} + \mathbf{a}) = V(\hat{\mathbf{r}}) \quad (4.19)$$

外場 E 、 B は断熱近似が成立するための条件 (4.1)、(4.2)、(4.3) を満たすとする。

波束を構成する。外場の空間変化に対して波束の拡がり Δr_c^i が十分小さい場合、つまり A を外場のいずれかの成分としたときに

$$\Delta r_c^i \ll \left| \frac{A}{\frac{\partial A}{\partial r_c^i}} \right| \quad (4.20)$$

が成立しているとき、位置 r_c に局在している波束に対しては外場中の変数の位置演算子 \hat{r} を $\hat{r} - r_c$ で展開するのが良い近似。この近似の下、ハミルトニアンは $\hat{r} - r_c$ について 1 次までの近似で

$$H(t) \approx H_c(\mathbf{r}_c, t) + \Delta H \quad (4.21)$$

$$H_c(\mathbf{r}_c, t) = \frac{(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}_c, t))^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}) - e\phi(\mathbf{r}_c, t) \quad (4.22)$$

$$\Delta H = \frac{1}{2} \left[(\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{r}_c) \cdot \frac{\partial H_c(\mathbf{r}_c, t)}{\partial \mathbf{r}_c} + \text{h.c.} \right] \quad (4.23)$$

とできる。波束は $H_c(\mathbf{r}_c, t)$ に対してつくる。 $H_c(\mathbf{r}_c, t)$ に対して Bloch 波 $|\phi_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{q})\rangle$ を定義する。

$$H_c(\mathbf{r}_c, t) |\phi_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{q})\rangle = \varepsilon_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}) |\phi_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{q})\rangle \quad (4.24)$$

$$e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}_c, t)) \cdot \mathbf{a}} |\phi_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{q})\rangle = e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}} |\phi_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{q})\rangle \quad (4.25)$$

ここで、 $\varepsilon_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{q})$ と $|\phi_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{q})\rangle$ は外場なしのハミルトニアン

$$H_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}) \quad (4.26)$$

に対するエネルギー $\varepsilon_n(\mathbf{q})$ と Bloch 波 $|\phi_n^o(\mathbf{q})\rangle$ を用いて次のようにかける。

$$\varepsilon_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}) = \varepsilon_n^o(\mathbf{q}) - e\phi(\mathbf{r}_c, t) \quad (4.27)$$

$$|\phi_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{q})\rangle = e^{-ie/\hbar \mathbf{A}(\mathbf{r}_c, t) \cdot \hat{\mathbf{r}}} |\phi_n^o(\mathbf{q})\rangle \quad (4.28)$$

これは $H_0(t)$ に比べて $H_c(\mathbf{r}_c, t)$ は運動量の補正とエネルギーの補正でかけることから当然である。

波束を構成する。Bloch 波 $|\phi_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{q})\rangle$ を \mathbf{q}_c に鋭いピークを持つ重み関数 $f(\mathbf{q}, t)$ でもって重ねあわせて波束をつくる。

$$|w[f]\rangle = \int_{\text{BZ}} d\mathbf{q} f(\mathbf{q}, t) |\phi_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{q})\rangle \quad (4.29)$$

波束の中心位置や波数のピークなどは $f(\mathbf{q}, t)$ の関数形で決まる。具体的には式 (4.5)、(4.6) で定義する。

effective Lagrangian L_{eff} は波束状態 $|w[f]\rangle$ を用いて

$$L_{\text{eff}} := \left\langle w[f] \left| i\hbar \frac{d}{dt} - H(t) \right| w[f] \right\rangle \quad (4.30)$$

与えられる。 $\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{r}_c$ の 1 次まで展開すると

$$L_{\text{eff}} \cong \left\langle w[f] \left| i\hbar \frac{d}{dt} - H_c(\mathbf{r}_c, t) - \Delta H \right| w[f] \right\rangle \quad (4.31)$$

これを $(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}_c, \dot{\mathbf{r}}_c, \dot{\mathbf{q}}_c)$ の関数でかくために、なめらかな \mathbf{q} の関数 $g(\mathbf{q})$ に対し次の近似を用いる。

$$\int_{\text{BZ}} d\mathbf{q} |f(\mathbf{q}, t)|^2 g(\mathbf{q}) \cong g(\mathbf{q}_c(t)) \quad (4.32)$$

この近似により L_{eff} は $(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}_c, \dot{\mathbf{r}}_c, \dot{\mathbf{q}}_c)$ の関数でかける。結果は [1]

$$L_{\text{eff}}(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}_c, \dot{\mathbf{r}}_c, \dot{\mathbf{q}}_c, t) = \hbar \dot{\mathbf{q}}_c \cdot \dot{\mathbf{r}}_c - \varepsilon_M(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}_c, t) + e\phi(\mathbf{r}_c, t) - e\dot{\mathbf{r}}_c \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_c, t) + \hbar \dot{\mathbf{q}}_c \cdot \mathcal{A}^n(\mathbf{q}_c) \quad (4.33)$$

となる。(計算過程は付録 A 参照) ここで、上式内の量はそれぞれ

$$\begin{aligned} \varepsilon_M(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}_c) &= \langle w[f] | H_c(\mathbf{r}_c, t) + \Delta H | w[f] \rangle \\ &= \varepsilon_n^0(\mathbf{q}_c) - \mathbf{m}(\mathbf{q}_c) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}_c, t) \end{aligned} \quad (4.34)$$

第 1 項は通常の力学的エネルギーとポテンシャルエネルギー。第二項は軌道磁気モーメントと磁場のカップルである。磁気モーメントは

$$\mathbf{m}(\mathbf{q}_c) := -i \frac{e}{2\hbar} \left\langle \frac{\partial u_n(\mathbf{q}_c)}{\partial \mathbf{q}_c} \left| \times \left[\tilde{H}(\mathbf{q}_c) - \varepsilon_n(\mathbf{q}_c) \right] \right| \frac{\partial u_n(\mathbf{q}_c)}{\partial \mathbf{q}_c} \right\rangle \quad (4.35)$$

$\tilde{H}(\mathbf{q})$ はパラメタ依存するハミルトニアンで、外場なしのハミルトニアン H_0 により

$$\tilde{H}(\mathbf{q}) := e^{-i\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{r}}} H_0 e^{i\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{r}}} \quad (4.36)$$

で定義。 $|u_n(\mathbf{q})\rangle$ は格子の周期関数 :

$$|u_n(\mathbf{q})\rangle := e^{-i\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{r}}} |\phi_n^0(\mathbf{q})\rangle \quad (4.37)$$

$\mathcal{A}^n(\mathbf{q})$ は Berry 接続 :

$$\mathcal{A}^n(\mathbf{q}) := \left\langle u_n(\mathbf{q}) \left| i \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \right| u_n(\mathbf{q}) \right\rangle \quad (4.38)$$

さて Euler-Lagrange 方程式をたてると

$$\dot{\mathbf{r}}_c = \frac{\partial \varepsilon_M(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}_c)}{\hbar \partial \mathbf{q}_c} - \dot{\mathbf{q}}_c \times \boldsymbol{\Omega}^n(\mathbf{q}_c) \quad (4.39)$$

$$\hbar \dot{\mathbf{q}}_c = -e\mathbf{E} - e\dot{\mathbf{r}}_c \times \mathbf{B} - \frac{\partial \varepsilon_M(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}_c)}{\partial \mathbf{r}_c} \quad (4.40)$$

となる。これが波束の運動を決める方程式である。ここで

$$\boldsymbol{\Omega}^n(\mathbf{q}_c) := i \left\langle \frac{\partial u_n(\mathbf{q}_c)}{\partial \mathbf{q}_c} \middle| \times \middle| \frac{\partial u_n(\mathbf{q}_c)}{\partial \mathbf{q}_c} \right\rangle \quad (4.41)$$

は Berry 曲率。

上式を式 (4.7)、(4.8) と比較すると次の 2 点が異なる。

- 軌道磁気モーメントが存在

波束が拡がりをもつことから波束の中心位置 r_c の周りに軌道磁気モーメントをもち、磁場とカップルしてエネルギーをもつ。

- Berry 曲率がノンゼロのとき anomalous velocity が存在

式 (4.39) の第 2 項が anomalous velocity である。Bloch 波数 q_c が時間変化し、Berry 曲率がノンゼロであるようなパリティ対称性が破れた格子ポテンシャルを持つとき、この項が波束の中心速度に寄与する。

(ex) 一様電場、磁場なしのとき

このとき運動方程式は

$$\dot{\mathbf{r}}_c = \frac{\partial \varepsilon_n^0(\mathbf{q}_c)}{\hbar \partial \mathbf{q}_c} - \dot{\mathbf{q}}_c \times \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{q}_c) \quad (4.42)$$

$$\hbar \dot{\mathbf{q}}_c = -e \mathbf{E} \quad (4.43)$$

より

$$\dot{\mathbf{r}}_c = \frac{\partial \varepsilon_n^0(\mathbf{q}_c)}{\hbar \partial \mathbf{q}_c} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \times \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{q}_c) \quad (4.44)$$

となる。第 2 項は anomalous velocity である。

以上の半古典近似を用いて物理量 \hat{O} の期待値を計算するには、バンド n における相空間の状態密度 $D_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}_c)$ を用いて

$$\bar{O}(\mathbf{R}) = \sum_n \int d\mathbf{r}_c \int_{\text{BZ}} d\mathbf{q}_c D_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}_c) \left\langle \hat{O} \delta(\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{R}) \right\rangle_{\mathbf{r}_c, \mathbf{q}_c}^n \quad (4.45)$$

とかける。ただし $\langle \cdot \rangle_{\mathbf{r}_c, \mathbf{q}_c}^n$ はバンド n における、中心位置 r_c 波数のピーク q_c をもつ波束による物理量 \hat{O} の期待値。

以上、縮退のないバンドにおける Bloch 波束の力学を定式化した。縮退のある場合も同様に定式化できる。異なる点は、新たなパラメタとして縮退度のどの自由度にどれだけの重みがあるかを指定する重み関数が加わることで、縮退があるからゲージ群が非可換になることである。

4.4 状態密度の補正

effective Lagrangian L_{eff} の変数 $(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}_c, \dot{\mathbf{r}}_c, \dot{\mathbf{q}}_c)$ は正準変数ではない。具体的には式 (4.33) に従う相空間 $(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}_c)$ の体積は時間発展で保存されない。 $\Delta V = \Delta \mathbf{r} \Delta \mathbf{q}$ を相空間の体積として Jacobian を求めると [11]

$$\frac{1}{\Delta V} \frac{d\Delta V}{dt} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \cdot \dot{\mathbf{q}} \quad (4.46)$$

$$= -\frac{d}{dt} \ln \left(1 + \frac{e}{\hbar} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \cdot \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{q}) \right) \quad (4.47)$$

となる。よって相空間の体積は V_0 を定数として

$$\Delta V = \frac{\Delta V_0}{1 + \frac{e}{\hbar} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \cdot \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{q})} \quad (4.48)$$

となり磁場あり、かつ Berry 曲率がノンゼロのときは時間発展で保存されない。よって $(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}_c)$ は解析力学で言うところの正準変数ではない。

相空間の体積が保存されないことは、半古典近似により物理量を計算する際の状態密度に影響する。相空間の状態密度を $D_n(\mathbf{r}, \mathbf{q})$ とすると、時間発展により (状態密度) \times (相空間の体積) = (一定) と考えるのが自然だから、状態密度は有限温度のとき V を実空間の体積とすると

$$D_n(\mathbf{r}, \mathbf{q}) = \frac{1}{V} \frac{1}{(2\pi)^3} \left(1 + \frac{e}{\hbar} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \cdot \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{q}) \right) f_n(\mathbf{r}, \mathbf{q}) \quad (4.49)$$

となる。ただし、 $f_n(\mathbf{r}, \mathbf{q})$ は Fermi 分布

$$f_n(\mathbf{r}, \mathbf{q}) = \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon_n(\mathbf{r}, \mathbf{q}) - \mu)] + 1} \quad (4.50)$$

である。よって式 (4.45) より \hat{O} の期待値は

$$\bar{O}(\mathbf{R}) = \sum_n \int d\mathbf{r}_c \int_{\text{BZ}} \frac{d\mathbf{q}_c}{(2\pi)^3} \left(1 + \frac{e}{\hbar} \mathbf{B}(\mathbf{r}_c, t) \cdot \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{q}_c) \right) f_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}_c) \left\langle \hat{O} \delta(\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{R}) \right\rangle_{\mathbf{r}_c \mathbf{q}_c}^n \quad (4.51)$$

とかける。この期待値でもって様々な物理量の半古典近似による結果が得られる。

5 縮退のあるバンドにおける Berry 位相

5.1 状態の制限と Berry 位相について

バンド全体からいくつかのバンドに状態を制限した量子力学、という観点で Berry 位相の効果を再考する。

輸送現象を考えるとときに断熱近似を適用するということは、注目しているバンドから他のバンドへの遷移を無視するということである。この近似を量子力学的に実行するには各演算子 \hat{O} を、バンド n への射影演算子 \hat{P}_n ではさんだ有効演算子 $\hat{O}_{n,\text{eff}}$:

$$\hat{O}_{n,\text{eff}} := \hat{P}_n \hat{O} \hat{P}_n \quad (5.1)$$

でもって有効的な量子力学を考えれば良い。

1つのバンドでなく、ここではもっと一般に、バンド全体から一部の複数のバンドに状態を制限した量子力学を考える。

注目しているバンドの集合を I とかく。

n をバンド指数、 β を縮退の自由度、 \mathbf{q} を Bloch 波数、 $|\phi_{n\beta}^0(\mathbf{q})\rangle$ を Bloch 波状態とすると、外場がないときの全ハミルトニアンは

$$\hat{H}_0 = \sum_{n,\beta} \int_{\text{BZ}} d\mathbf{q} \varepsilon_n^0(\mathbf{q}) |\phi_{n\beta}^0(\mathbf{q})\rangle \langle \phi_{n\beta}^0(\mathbf{q})| \quad (5.2)$$

とかける。バンドの集合 I への射影演算子 \hat{P} は

$$\hat{P} = \sum_{n \in I, \beta} \int_{\text{BZ}} d\mathbf{q} |\phi_{n\beta}^0(\mathbf{q})\rangle \langle \phi_{n\beta}^0(\mathbf{q})| \quad (5.3)$$

となる。

有効ハミルトニアンは

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \sum_{n \in I, \beta} \int_{\text{BZ}} d\mathbf{q} \varepsilon_n^0(\mathbf{q}) |\phi_{n\beta}^0(\mathbf{q})\rangle \langle \phi_{n\beta}^0(\mathbf{q})| \quad (5.4)$$

である。

有効位置演算子 $\hat{x}_{\text{eff}} := \hat{P} \hat{x} \hat{P}$ を考える。射影演算子の表式より

$$\hat{x}_{\text{eff}} = \sum_{m \in I, \alpha} \sum_{n \in I, \beta} \int_{\text{BZ}} d\mathbf{q} \int_{\text{BZ}} d\mathbf{q}' |\phi_{m\alpha}^0(\mathbf{q})\rangle \langle \phi_{m\alpha}^0(\mathbf{q})| \hat{x} |\phi_{n\beta}^0(\mathbf{q}')\rangle \langle \phi_{n\beta}^0(\mathbf{q}')| \quad (5.5)$$

ここで、式(付録 A.1)を用いると

$$\begin{aligned} \hat{x}_{\text{eff}} &= \sum_{m \in I, \alpha} \sum_{n \in I, \beta} \int_{\text{BZ}} d\mathbf{q} \int_{\text{BZ}} d\mathbf{q}' |\phi_{m\alpha}^0(\mathbf{q})\rangle \left[\left(-i\delta_{m\alpha, n\beta} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}'} + \mathcal{A}_{m\alpha, n\beta}(\mathbf{q}') \right) \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \right] \langle \phi_{n\beta}^0(\mathbf{q}')| \\ &= \sum_{m \in I, \alpha} \sum_{n \in I, \beta} \int_{\text{BZ}} d\mathbf{q} |\phi_{m\alpha}^0(\mathbf{q})\rangle \left(i\delta_{m\alpha, n\beta} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} + \mathcal{A}_{m\alpha, n\beta}(\mathbf{q}) \right) \langle \phi_{n\beta}^0(\mathbf{q})| \end{aligned} \quad (5.6)$$

となる。ここで偏微分 $\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}$ は右側の $|\phi_{n\beta}^0(\mathbf{q})\rangle$ にかかる。

ここで表記の単純化のため1つの表現に移る。 $|\phi_{n\beta}^0(\mathbf{q})\rangle$ 基底の表示を考える。以下この表示を Bloch 表示と呼ぶことにする。状態 $|\Psi\rangle$ の Bloch 表示における波動関数は

$$\Psi_{n\beta}(\mathbf{q}) := \langle \phi_{n\beta}^0(\mathbf{q}) | \Psi \rangle \quad (5.7)$$

となり、この波動関数に対して \hat{x}_{eff} の作用の仕方は、式 (5.6) より \hat{x}_{eff} の Bloch 表示を考えることにより

$$\hat{x}_{\text{eff}} \mapsto i\delta_{m\alpha,n\beta} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} + \mathcal{A}_{m\alpha,n\beta}(\mathbf{q}) \quad (5.8)$$

となるのがわかる。右辺を $\hat{x}_{\text{eff}}(\mathbf{q})$ とかき、バンド指数と縮退度の足を行列表示して

$$\hat{x}_{\text{eff}}^i(\mathbf{q}) = i \frac{\partial}{\partial q_i} + \mathcal{A}^i(\mathbf{q}) \quad (5.9)$$

とかく。

\hat{x}_{eff} 同士の交換関係を求めると、

$$\begin{aligned} [\hat{x}_{\text{eff}}^i(\mathbf{q}), \hat{x}_{\text{eff}}^j(\mathbf{q})] &= \left[i \frac{\partial}{\partial q_i} + \mathcal{A}^i(\mathbf{q}), i \frac{\partial}{\partial q_j} + \mathcal{A}^j(\mathbf{q}) \right] \\ &= i \left(\frac{\partial \mathcal{A}^j}{\partial q_i}(\mathbf{q}) - \frac{\partial \mathcal{A}^i}{\partial q_j}(\mathbf{q}) \right) + [\mathcal{A}^i(\mathbf{q}), \mathcal{A}^j(\mathbf{q})] \\ &= i \Omega^{ij}(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (5.10)$$

となる。 $\Omega^{ij}(\mathbf{q})$ は Berry 曲率である。

この結果は重要である。Berry 曲率がノンゼロであるようなパリティ対称性の破れた結晶格子では状態を一部のバンドに制限すると、物理的な自由度である位置演算子が非可換になることを示す。この非可換性により Berry 位相の効果が生まれる。

具体例として、一様電場中の有効理論を考える。

ゲージを $\phi(\mathbf{x}, t) = -\mathbf{E} \cdot \mathbf{x}$ と選び、ハミルトニアンを

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + e\mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{x}} \quad (5.11)$$

とする。有効ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{eff}} &= \hat{P} \hat{H} \hat{P} \\ &= \varepsilon(\mathbf{q}) + e\mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{x}}_{\text{eff}} \end{aligned} \quad (5.12)$$

である。ただしバンドと縮退度の足は行列表示している。有効速度演算子 \hat{v}_{eff} は Bloch 表示で

$$\begin{aligned} \hat{v}_{\text{eff}}^i(\mathbf{q}) &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}_{\text{eff}}^i(\mathbf{q}), \hat{H}_{\text{eff}}(\mathbf{q})] \\ &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}_{\text{eff}}^i(\mathbf{q}), \varepsilon(\mathbf{q}) + eE^j \hat{x}_{\text{eff}}^j] \\ &= \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{q})}{\hbar \partial q_i} + \frac{e}{\hbar} E^j \Omega^{ij}(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (5.13)$$

となる。ベクトル表記すると、 $\Omega^1 = \Omega^{23}, \Omega^2 = \Omega^{31}, \Omega^3 = \Omega^{12}$ として

$$\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{q}) = \nabla_{\mathbf{q}} \times \mathcal{A}(\mathbf{q}) - i\mathcal{A}(\mathbf{q}) \times \mathcal{A}(\mathbf{q}) \quad (5.14)$$

とすると結局

$$\hat{v}_{\text{eff}}(\mathbf{q}) = \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{q})}{\hbar \partial \mathbf{q}} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \times \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{q}) \quad (5.15)$$

第2項は位置演算子が非可換なことからくる anomalous velocity である。特別な場合として、縮退していないバンドに状態を制限したときの結果は、波束の力学を考えたときの式 (4.44) と一致する。

5.2 射影と Berry 曲率

断熱近似により一部のバンドに状態を制限することにより Berry 位相の効果が生じることを明示的にみてもみる。Berry 位相の効果の有無は Berry 曲率を調べれば良い。

式 (5.14) より行列の成分表示で

$$\begin{aligned}\Omega_{m\alpha,n\beta}(\mathbf{q}) &= \nabla_{\mathbf{q}} \times \mathcal{A}_{m\alpha,n\beta} - i \sum_{l \in I,\gamma} \mathcal{A}_{m\alpha,l\gamma} \times \mathcal{A}_{l\gamma,n\beta} \\ &= i \left\langle \frac{\partial u_{m\alpha}}{\partial \mathbf{q}} \middle| \times \middle| \frac{\partial u_{l\gamma}}{\partial \mathbf{q}} \right\rangle - i \sum_{l \in I,\gamma} \left\langle \frac{\partial u_{m\alpha}}{\partial \mathbf{q}} \middle| u_{n\beta} \right\rangle \times \left\langle u_{l\gamma} \middle| \frac{\partial u_{n\beta}}{\partial \mathbf{q}} \right\rangle\end{aligned}\quad (5.16)$$

ここで完全性関係 $\sum_{l:total,\gamma} |u_{l\gamma}\rangle \langle u_{l\gamma}| = \hat{1}$ に注意すると [12]

$$\Omega_{m\alpha,n\beta}(\mathbf{q}) = \sum_{l \notin I,\gamma} \mathcal{A}_{m\alpha,l\gamma} \times \mathcal{A}_{l\gamma,n\beta} \quad (5.17)$$

この結果は Berry 曲率と状態の制限の関係をよく表している。上式の和は注目していないバンドについて取る。よって、注目しているバンドが全てのバンドに渡る場合は Berry 曲率はゼロとなり Berry 位相の効果は生じない。断熱近似などの理由により、考える状態が一部のバンドに制限されることにより始めて Berry 位相の効果が生じる。

5.3 スピンホール効果

バンド縮退のある場合の Bloch 波束の力学の例としてスピンホール効果を考える [13]。

Si, Ge, GaAs, InSb といった半導体の valence バンドは、波数 $k = 0$ 近傍においていずれも次の Luttinger ハミルトニアンで記述される。

$$H(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2 \right) k^2 - 2\gamma_2 (\mathbf{k} \cdot \mathbf{S}) \right) \quad (5.18)$$

ここで γ_1, γ_2 は物質固有の定数。

簡単に Luttinger ハミルトニアンについて説明しておく。

1つの原子を考える。スピン-軌道相互作用の効果により6重縮退したp-軌道は、4重縮退の $P_{\frac{3}{2}}$ 準位と2重縮退の $P_{\frac{1}{2}}$ 準位に分裂し、それぞれ $k = 0$ の Γ ポイントで4重縮退、2重縮退している。上に挙げたような半導体では $P_{\frac{3}{2}}$ 準位が valence バンドを構成する。Luttinger ハミルトニアンはこの valence バンドの Γ ポイント近傍を記述する有効理論である。状態を valence バンドのみに制限している。

スピン-軌道相互作用の効果は k が小さいところでは対称性の議論のみで決まる。ハミルトニアンが回転対称性を持つとき、 k 依存する項で許される最低次の項は k^2 と $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{S})^2$ のみである*4。ここで \mathbf{S} はスピン $\frac{3}{2}$ 演算子である。よって Γ ポイント近傍でハミルトニアンは式 (5.18) のようにかかる。ここでホール描像を用い、エネルギーは負の方向に計っている。

ハミルトニアン (5.18) はヘリシティ演算子 $h = \frac{1}{\hbar} \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{S}}{k}$ の固有状態により容易に対角化でき、 $h = \pm \frac{1}{2}$ を LH(light-hole) バンド、 $h = \pm \frac{3}{2}$ を HH(heavy-hole) バンドと呼び、エネルギーはヘリシティ λ の値に対

*4 2重縮退の場合はスピン $\frac{1}{2}$ 演算子、つまり Pauli 行列に対して $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k})^2 = k^2$ だから最低次でスピン依存する項は存在しないことに注意

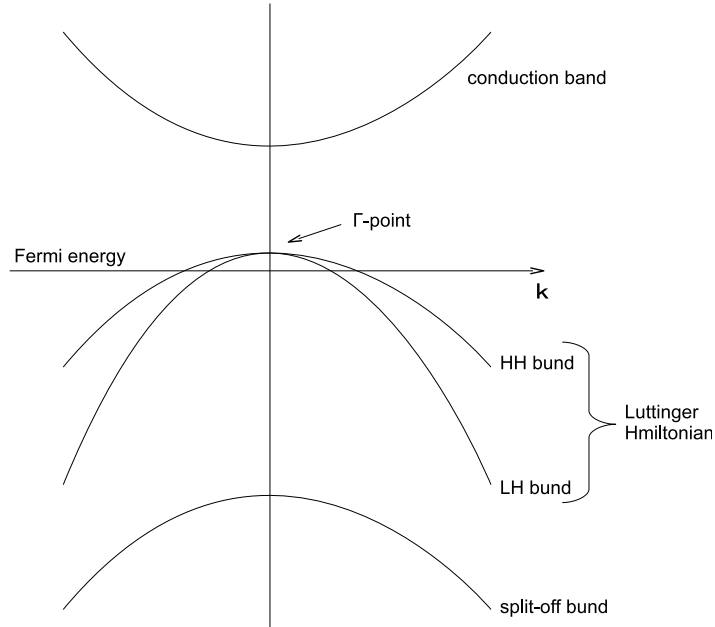


図6 Γ -ポイント近傍のバンド構造。各バンドは2重縮退している。Luttinger ハミルトニアンは valence バンドのみを記述する有効理論である。

して

$$\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(\gamma_1 + \left(\frac{5}{2} - 2\lambda^2 \right) \gamma_2 \right) \quad (5.19)$$

となり、それぞれのバンドのエネルギーと有効質量は

$$\varepsilon_H(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\lambda=\pm 3/2}(\mathbf{k}) = \frac{\gamma_1 - 2\gamma_2}{2m} \hbar^2 k^2 \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m_H} \quad (5.20)$$

$$\varepsilon_L(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\lambda=\pm 1/2}(\mathbf{k}) = \frac{\gamma_1 + 2\gamma_2}{2m} \hbar^2 k^2 \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m_L} \quad (5.21)$$

となり、それぞれ2重縮退している。

固有ベクトルを求めるにはハミルトニアンの $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{S})^2$ を対角化すれば良い。ユニタリー変換 $U(\mathbf{k})$ を

$$U(\mathbf{k})(\mathbf{k} \cdot \mathbf{S})U^\dagger(\mathbf{k}) = kS_z \quad (5.22)$$

とスピン演算子を回転させるようにとればよく、そのためには

$$U(\mathbf{k}) = e^{i\theta S_y} e^{i\phi S_z} \quad (5.23)$$

とすれば良い。 $|e_{\lambda}^0\rangle$ を量子化軸を z-方向にとったときの $S_z = \lambda$ なる固有ベクトルとすると、ヘリシティ $h = \lambda$ なる固有ベクトル $|e_{\lambda}(\mathbf{k})\rangle$ は

$$|e_{\lambda}(\mathbf{k})\rangle = U^\dagger(\mathbf{k}) |e_{\lambda}^0\rangle \quad (5.24)$$

ととれば良い。すると $|e_\lambda(\mathbf{k})\rangle$ 基底で Berry 接続 $\mathcal{A}_{\lambda,\lambda'}(\mathbf{k})$ は

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_{\lambda,\lambda'}(\mathbf{k}) &= i \left\langle e_\lambda(\mathbf{k}) \left| \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} e_{\lambda'}(\mathbf{k}) \right. \right\rangle \\ &= i \left\langle e_\lambda \left| U(\mathbf{k}) \frac{\partial U^\dagger(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \right| e_{\lambda'} \right\rangle\end{aligned}\quad (5.25)$$

となり、行列表示では少し計算すると

$$\begin{aligned}\mathcal{A}(\mathbf{k}) &= iU(\mathbf{k}) \frac{\partial U^\dagger(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \\ &= \frac{1}{k} S_y \hat{\theta} - \frac{1}{k} \left(S_x - \frac{\cos \theta}{\sin \theta} S_z \right) \hat{\phi}\end{aligned}\quad (5.26)$$

となる。ただし、 θ, ϕ は \mathbf{k} の極座標表示である。Berry 曲率は

$$\Omega(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathcal{A}(\mathbf{k}) - i\mathcal{A}(\mathbf{k}) \times \mathcal{A}(\mathbf{k}) = \mathbf{0}\quad (5.27)$$

となる。これは 5.2 節の結果と一致する。いま、全ハミルトニアン (5.18) に対し、1 つのバンドへの制限なしに Berry 曲率を計算したからゼロになって当然である。

Berry 位相の効果は断熱近似により他のバンドへの遷移を禁止することにより生じる。HH バンドと LH バンドへの射影演算子をそれぞれ P_{HH}, P_{LH} とすると

$$P_{HH} = |e_{\frac{3}{2}}(\mathbf{k})\rangle \langle e_{\frac{3}{2}}(\mathbf{k})| + |e_{-\frac{3}{2}}(\mathbf{k})\rangle \langle e_{-\frac{3}{2}}(\mathbf{k})|\quad (5.28)$$

$$P_{LH} = |e_{\frac{1}{2}}(\mathbf{k})\rangle \langle e_{\frac{1}{2}}(\mathbf{k})| + |e_{-\frac{1}{2}}(\mathbf{k})\rangle \langle e_{-\frac{1}{2}}(\mathbf{k})|\quad (5.29)$$

となり、HH バンドと LH バンドへそれぞれ制限したときの Berry 接続は

$$\mathcal{A}_{HH}(\mathbf{k}) := P_{HH} \mathcal{A}(\mathbf{k}) P_{HH} = \frac{3}{2k} \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \sigma_z \hat{\phi}\quad (5.30)$$

$$\mathcal{A}_{LH}(\mathbf{k}) := P_{LH} \mathcal{A}(\mathbf{k}) P_{LH} = \frac{1}{2k} \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \sigma_z \hat{\phi} - \frac{1}{k} \sigma_x \hat{\phi} + \frac{1}{k} \sigma_y \hat{\theta}\quad (5.31)$$

となる。ただし上式中の σ はそれぞれの部分空間で作用する Pauli 行列である。Berry 曲率は式 (5.14) より

$$\Omega_{HH}(\mathbf{k}) = -\frac{3}{2k^2} \sigma_z \hat{k}\quad (5.32)$$

$$\Omega_{LH}(\mathbf{k}) = \frac{3}{2k^2} \sigma_z \hat{k}\quad (5.33)$$

となる。

縮退がない場合と違い、ハミルトニアンが時間反転対称性とパリティ対称性をもっているにも関わらず、Berry 曲率はノンゼロである。非可換 Berry 位相の効果である。また、Berry 曲率の表式をみると $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ の縮退点がモノポールになっていることがわかる。

上の結果と式 (5.15) を合わせると、スピンホール効果が予測できる。HH バンドも LH バンドも Berry 曲率が σ_z に比例している。HH バンドについて考えると、有効速度演算子は

$$\hat{v}_{\text{eff}}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m_H} + \frac{-e}{\hbar} \mathbf{E} \times \left(-\frac{3}{2k^2} \sigma_z \hat{k} \right)\quad (5.34)$$

σ_z の固有値はヘリシティ $h = \pm \frac{3}{2}$ を指定するから、この結果は Hall 電流がヘリシティの正負で逆向きに流れることを示す。つまり、スピンの向きで Hall 電流の流れる向きが逆になる。これはスピンホール電流のソースになる。

LH バンドの Berry 曲率が HH バンドと正負が反対であることからスピホール電流は一部打ち消し合うが、正孔の数は HH バンドの方が多いためスピホール電流は有限の値をもつ。

5.4 半古典近似における Berry 位相の意義

最後に、バンド構造をもつ固体における Berry 位相の効果の意義を考える。

固体の輸送現象において Berry 位相の効果が見られるのは、断熱近似を適用し、問題を半古典近似で扱う場合である。輸送現象を扱う上で必ず半古典近似が必要かというところではなく、より信頼性のある久保公式に基づく方法がある。半古典近似も久保公式も線形応答の範囲の扱いである。久保公式は線形応答の範囲で完全に量子力学的であり、半古典近似よりも信頼できる。

より信頼性のある久保公式でなく半古典近似を考える意義は、ひとつは久保公式に比べて単純に計算が楽であり、イメージをつかみやすく、新しい現象の取っ掛かりとして役立つ点だと思われる。事実、半古典近似は実空間の波束の動きを解析的に追える。

もうひとつは、半古典近似は空間的に局在した波束を扱うため、空間的に非一様な外場、格子ポテンシャルを扱える点である。久保公式では空間的に非一様な外場、格子ポテンシャルを量子力学的に扱うことは難しい。

付録 A 軌道磁気モーメント、effective Lagrangian の導出

まず、一般的な関係式として次の2つを示す

$$\langle \phi_{n'}^0(\mathbf{q}') | \hat{\mathbf{r}} | \phi_n^0(\mathbf{q}) \rangle = \left[-i\delta_{n'n} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} + \mathcal{A}_{n'n}(\mathbf{q}) \right] \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \quad (\text{付録 A.1})$$

$$\left\langle \phi_{n'}^0(\mathbf{q}') \left| \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} \right| \phi_n^0(\mathbf{q}) \right\rangle = \left[\delta_{n'n} \frac{\partial \varepsilon_n^0(\mathbf{q})}{\hbar \partial \mathbf{q}} + \frac{i}{\hbar} (\varepsilon_{n'}^0(\mathbf{q}) - \varepsilon_n^0(\mathbf{q})) \mathcal{A}_{n'n}(\mathbf{q}) \right] \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \quad (\text{付録 A.2})$$

ここで n はバンド指数と縮退を区別する指数の両方を表すものとする。

Proof. 式 (付録 A.1) を示す。演算子としての関係式

$$\hat{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{r}}} = -i \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{r}}} + i e^{i\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{r}}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \quad (\text{付録 A.3})$$

に注意すると

$$\begin{aligned} \langle \phi_{n'}^0(\mathbf{q}') | \hat{\mathbf{r}} | \phi_n^0(\mathbf{q}) \rangle &= \langle u_{n'}(\mathbf{q}') | e^{-i\mathbf{q}' \cdot \hat{\mathbf{r}}} \hat{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{r}}} | u_n(\mathbf{q}) \rangle \\ &= \langle u_{n'}(\mathbf{q}') | e^{-i\mathbf{q}' \cdot \hat{\mathbf{r}}} \left(-i \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{r}}} + i e^{i\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{r}}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \right) | u_n(\mathbf{q}) \rangle \\ &= -i \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \langle \phi_{n'}(\mathbf{q}') | \phi_n(\mathbf{q}) \rangle + i \left\langle u_{n'}(\mathbf{q}') \left| e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \hat{\mathbf{r}}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \right| u_n(\mathbf{q}) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{付録 A.4})$$

第2項は $e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{a}}} | u_n(\mathbf{q}) \rangle = | u_n(\mathbf{q}) \rangle$ に注意すると

$$\begin{aligned} \left\langle u_{n'}(\mathbf{q}') \left| e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \hat{\mathbf{r}}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \right| u_n(\mathbf{q}) \right\rangle &= \left\langle u_{n'}(\mathbf{q}') \left| e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{a}}} e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \hat{\mathbf{r}}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \right| u_n(\mathbf{q}) \right\rangle \\ &= \left\langle u_{n'}(\mathbf{q}') \left| e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \hat{\mathbf{r}}} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{a}}} e^{-i\mathbf{a} \cdot (\mathbf{q}-\mathbf{q}')} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \right| u_n(\mathbf{q}) \right\rangle \\ &= e^{-i\mathbf{a} \cdot (\mathbf{q}-\mathbf{q}')} \left\langle u_{n'}(\mathbf{q}') \left| e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \hat{\mathbf{r}}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \right| u_n(\mathbf{q}) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{付録 A.5})$$

となるが、 $\mathbf{q}, \mathbf{q}' \in 1\text{st Brillouin Zone}$ より $\mathbf{a} \cdot (\mathbf{q} - \mathbf{q}') \neq 2\pi \times (\text{整数})$ だから $\left\langle u_{n'}(\mathbf{q}') \left| e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \hat{\mathbf{r}}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \right| u_n(\mathbf{q}) \right\rangle \propto \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$ となり、

$$\left\langle u_{n'}(\mathbf{q}') \left| e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \hat{\mathbf{r}}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \right| u_n(\mathbf{q}) \right\rangle = \mathcal{A}_{n'n}(\mathbf{q}) \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \quad (\text{付録 A.6})$$

となる。ここで $\mathcal{A}_{n'n}(\mathbf{q})$ は Berry 接続である。 n, n' は複数に渡るからゲージ群は非可換群であり、非可換 Berry 位相を導く。Bloch 波 $|\phi_n^0(\mathbf{q})\rangle$ の直交性に注意すると式 (付録 A.1) が従う。

式 (付録 A.2) は $\left\langle u_{n'}(\mathbf{q}') \left| e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \hat{\mathbf{r}}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \right| u_n(\mathbf{q}) \right\rangle$ と同じ理由で (付録 A.2) $\propto \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$ だから、式 (3.23)、(3.24) より従う。□

次に、縮退のないバンドで構成した波束

$$|w[f]\rangle = \int_{\text{BZ}} d\mathbf{q} f(\mathbf{q}, t) |\phi_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{q})\rangle = \int_{\text{BZ}} d\mathbf{q} f(\mathbf{q}, t) e^{-ie/\hbar \mathbf{A}(\mathbf{r}_c, t) \cdot \hat{\mathbf{r}}} |\phi_n^o(\mathbf{q})\rangle \quad (\text{付録 A.7})$$

に対して、

$$\mathbf{r}_c(t) = -\frac{\partial \arg f}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}_c, t) + \mathcal{A}_{\mathbf{q}}^n(\mathbf{q}_c) \quad (\text{付録 A.8})$$

を示す。

Proof.

$$\begin{aligned}
r_c &= \langle w[f] | \hat{r} | w[f] \rangle \\
&= \int_{\text{BZ}} d\mathbf{q}' \int_{\text{BZ}} d\mathbf{q} f^*(\mathbf{q}', t) f(\mathbf{q}, t) \langle \phi_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}') | \hat{r} | \phi_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}) \rangle \\
&= \int_{\text{BZ}} d\mathbf{q}' \int_{\text{BZ}} d\mathbf{q} f^*(\mathbf{q}', t) f(\mathbf{q}, t) \left[-i \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} + \mathcal{A}_{nn}(\mathbf{q}) \right] \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \quad (\text{付録 A.9}) \\
&= \int_{\text{BZ}} f^*(\mathbf{q}, t) \left(i \frac{\partial f}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}, t) + f(\mathbf{q}, t) \mathcal{A}_{nn}(\mathbf{q}) \right)
\end{aligned}$$

上式に近似 (4.32) を適用すると式 (付録 A.8) を得る。縮退のない同一バンドに対して $\mathcal{A}_{\mathbf{q}}^n(\mathbf{q}) := \mathcal{A}_{nn}(\mathbf{q})$ であることに注意。□

式 (付録 A.8) の第 1 項は平面波により構成した波束の場合と同一の寄与。第 2 項は格子の周期関数 $|u_n(\mathbf{q})\rangle$ 由来の位相変化からくる寄与である。 $\mathcal{A}_{nn}(\mathbf{q})$ はゲージ依存するが、同時に $\frac{\partial \arg f}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}_c, t)$ もゲージ依存し、結果として r_c はゲージ不変であることに注意。

次に Lagrangian (4.33) を導出する。

$$L_{\text{eff}} \cong \left\langle w[f] \left| i\hbar \frac{d}{dt} - H_c(\mathbf{r}_c, t) - \Delta H \right| w[f] \right\rangle \quad (\text{付録 A.10})$$

である。第 1 項は

$$\begin{aligned}
\left\langle w[f] \left| i\hbar \frac{d}{dt} \right| w[f] \right\rangle &= \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{q}' f^*(\mathbf{q}, t) i\hbar \left\langle \phi_n(\mathbf{r}_c(t), \mathbf{q}, t) \left| \frac{d}{dt} f(\mathbf{q}', t) \right| \phi_n(\mathbf{r}_c(t), \mathbf{q}', t) \right\rangle \\
&= \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{q}' i\hbar f^*(\mathbf{q}, t) \left\langle \phi_n^0(\mathbf{q}) \left| e^{ie/\hbar \mathbf{A}(\mathbf{r}_c(t), t) \cdot \hat{\mathbf{r}}} \frac{d}{dt} \left[f(\mathbf{q}', t) e^{-ie/\hbar \mathbf{A}(\mathbf{r}_c(t), t) \cdot \hat{\mathbf{r}}} \right] \right| \phi_n^0(\mathbf{q}') \right\rangle \\
&= \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{q}' i\hbar f^*(\mathbf{q}, t) \left\langle \phi_n^0(\mathbf{q}) \left| \frac{\partial f}{\partial t}(\mathbf{q}', t) - f(\mathbf{q}', t) \frac{ie}{\hbar} \left(\frac{d}{dt} \mathbf{A}(\mathbf{r}_c(t), t) \right) \cdot \hat{\mathbf{r}} \right| \phi_n^0(\mathbf{q}') \right\rangle \\
&\cong -\hbar \frac{\partial \arg f}{\partial t}(\mathbf{q}_c(t), t) + e \left(\frac{d}{dt} \mathbf{A}(\mathbf{r}_c(t), t) \right) \cdot \mathbf{r}_c(t) \\
&= -\hbar \frac{d}{dt} (\arg f(\mathbf{q}_c(t), t)) + \hbar \frac{\partial \arg f}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}_c(t), t) \cdot \dot{\mathbf{q}}_c(t) + e \left(\frac{d}{dt} \mathbf{A}(\mathbf{r}_c(t), t) \right) \cdot \mathbf{r}_c(t) \\
&= -\hbar \frac{d}{dt} (\arg f(\mathbf{q}_c(t), t)) + \hbar (\mathcal{A}_n(\mathbf{q}_c(t)) - \mathbf{r}_c(t)) \cdot \dot{\mathbf{q}}_c(t) + e \left(\frac{d}{dt} \mathbf{A}(\mathbf{r}_c(t), t) \right) \cdot \mathbf{r}_c(t) \quad (\text{付録 A.11})
\end{aligned}$$

第 2 項は

$$\begin{aligned}
\langle w[f] | H_c(\mathbf{r}_c, t) | w[f] \rangle &= \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{q}' f^*(\mathbf{q}, t) f(\mathbf{q}', t) \langle \phi_n(\mathbf{r}_c(t), \mathbf{q}, t) | H_c(\mathbf{r}_c(t), t) | \phi_n(\mathbf{r}_c(t), \mathbf{q}', t) \rangle \\
&= \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{q}' f^*(\mathbf{q}, t) f(\mathbf{q}', t) \\
&\quad \cdot \left\langle \phi_n^0(\mathbf{q}) \left| e^{ie/\hbar \mathbf{A}(\mathbf{r}_c(t), t) \cdot \hat{\mathbf{r}}} \left(\frac{(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}_c(t), t))^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}) - e\phi(\mathbf{r}_c(t), t) \right) e^{-ie/\hbar \mathbf{A}(\mathbf{r}_c(t), t) \cdot \hat{\mathbf{r}}} \right| \phi_n^0(\mathbf{q}') \right\rangle \\
&= \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{q}' f^*(\mathbf{q}, t) f(\mathbf{q}', t) \left\langle \phi_n^0(\mathbf{q}) \left| \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}) - e\phi(\mathbf{r}_c(t), t) \right) \right| \phi_n^0(\mathbf{q}') \right\rangle \\
&\cong \varepsilon_n^0(\mathbf{q}_c(t)) - e\phi(\mathbf{r}_c(t), t) \quad (\text{付録 A.12})
\end{aligned}$$

第3項は

$$\begin{aligned} \langle w[f] | \Delta H | w[f] \rangle &= \Re \left\langle w \left| (\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{r}_c) \cdot \frac{\partial H_c}{\partial \mathbf{r}_c} \right| w \right\rangle \\ &= \Re \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{q}' f^*(\mathbf{q}, t) f(\mathbf{q}', t) \left\langle \phi_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}, t) \left| (\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{r}_c) \cdot \frac{\partial H_c}{\partial \mathbf{r}_c} \right| \phi_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}', t) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{付録 A.13})$$

ここで

$$\begin{aligned} &\left\langle \phi_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}, t) \left| (\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{r}_c) \cdot \frac{\partial H_c}{\partial \mathbf{r}_c} \right| \phi_n(\mathbf{r}_c, \mathbf{q}', t) \right\rangle \\ &= \left\langle \phi_n^0(\mathbf{q}) \left| e^{ie/\hbar \mathbf{A}(\mathbf{r}_c(t), t) \cdot \hat{\mathbf{r}}} (\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{r}_c) \cdot \frac{\partial H_c}{\partial \mathbf{r}_c} e^{-ie/\hbar \mathbf{A}(\mathbf{r}_c(t), t) \cdot \hat{\mathbf{r}}} \right| \phi_n^0(\mathbf{q}') \right\rangle \\ &= \left\langle \phi_n^0(\mathbf{q}) \left| (\hat{r}_i - r_{c,i}) e^{ie/\hbar \mathbf{A}(\mathbf{r}_c(t), t) \cdot \hat{\mathbf{r}}} \left[\frac{\hat{p}_j + eA_j(\mathbf{r}_c, t)}{m} e \frac{\partial A_j}{\partial r_i}(\mathbf{r}_c, t) - e \frac{\partial \phi}{\partial r_i}(\mathbf{r}_c, t) \right] e^{-ie/\hbar \mathbf{A}(\mathbf{r}_c(t), t) \cdot \hat{\mathbf{r}}} \right| \phi_n^0(\mathbf{q}') \right\rangle \\ &= \left\langle \phi_n^0(\mathbf{q}) \left| (\hat{r}_i - r_{c,i}) \left[\frac{\hat{p}_j}{m} e \frac{\partial A_j}{\partial r_i}(\mathbf{r}_c, t) - e \frac{\partial \phi}{\partial r_i}(\mathbf{r}_c, t) \right] \right| \phi_n^0(\mathbf{q}') \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{付録 A.14})$$

より

$$\begin{aligned} \langle w[f] | \Delta H | w[f] \rangle &= \Re \left\langle w \left| (\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{r}_c) \cdot \frac{\partial H_c}{\partial \mathbf{r}_c} \right| w \right\rangle \\ &= \Re \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{q}' f^*(\mathbf{q}, t) f(\mathbf{q}', t) \left\langle \phi_n^0(\mathbf{q}) \left| (\hat{r}_i - r_{c,i}) \left[\frac{\hat{p}_j}{m} e \frac{\partial A_j}{\partial r_i}(\mathbf{r}_c, t) - e \frac{\partial \phi}{\partial r_i}(\mathbf{r}_c, t) \right] \right| \phi_n^0(\mathbf{q}') \right\rangle \\ &= \Re \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{q}' f^*(\mathbf{q}, t) f(\mathbf{q}', t) \left\langle \phi_n^0(\mathbf{q}) \left| (\hat{r}_i - r_{c,i}) \frac{\hat{p}_j}{m} e \frac{\partial A_j}{\partial r_i}(\mathbf{r}_c, t) \right| \phi_n^0(\mathbf{q}') \right\rangle \\ &= \Re \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{q}' \sum_m \int d\mathbf{k} f^*(\mathbf{q}, t) f(\mathbf{q}', t) e \frac{\partial A_j}{\partial r_i}(\mathbf{r}_c, t) \langle \phi_n^0(\mathbf{q}) | (\hat{r}_i - r_{c,i}) | \phi_m^0(\mathbf{k}) \rangle \left\langle \phi_m^0(\mathbf{k}) \left| \frac{\hat{p}_j}{m} \right| \phi_n^0(\mathbf{q}') \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{付録 A.15})$$

となり、式(付録 A.1)、(付録 A.2)を用いると

$$\begin{aligned} &\langle w[f] | \Delta H | w[f] \rangle \\ &= \Re \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{q}' \sum_m \int d\mathbf{k} f^*(\mathbf{q}, t) f(\mathbf{q}', t) e \frac{\partial A_j}{\partial r_i}(\mathbf{r}_c, t) \cdot \left[\left(-i\delta_{nm} \frac{\partial}{\partial k_i} + \mathcal{A}_{nm,i}(\mathbf{k}) - \delta_{nm} r_{c,i} \right) \delta(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \right] \\ &\quad \cdot \left[\delta_{mn} \frac{\partial \varepsilon_n^0(\mathbf{q}')}{\hbar \partial q_j} + \frac{i}{\hbar} (\varepsilon_m^0(\mathbf{q}') - \varepsilon_n^0(\mathbf{q}')) \mathcal{A}_{mn,j}(\mathbf{q}') \right] \delta(\mathbf{k} - \mathbf{q}') \\ &= \Re \sum_m \int d\mathbf{q} f(\mathbf{q}, t) e \frac{\partial A_j}{\partial r_i}(\mathbf{r}_c, t) \left[-i\delta_{nm} \left(\frac{\partial |f|}{\partial q_i}(\mathbf{q}) \frac{f^*(\mathbf{q}, t)}{|f(\mathbf{q}, t)|} - i \frac{\partial \arg f}{\partial q_i}(\mathbf{q}) f^*(\mathbf{q}, t) \right) + f^*(\mathbf{q}, t) (\mathcal{A}_{nm,i}(\mathbf{q}) - \delta_{nm} r_{c,i}) \right] \\ &\quad \cdot \left[\delta_{mn} \frac{\partial \varepsilon_n^0(\mathbf{q})}{\hbar \partial q_j} + \frac{i}{\hbar} (\varepsilon_m^0(\mathbf{q}) - \varepsilon_n^0(\mathbf{q})) \mathcal{A}_{mn,j}(\mathbf{q}) \right] \\ &\cong \Re \sum_m e \frac{\partial A_j}{\partial r_i}(\mathbf{r}_c, t) \mathcal{A}_{nm,i}(\mathbf{q}_c) \frac{i}{\hbar} (\varepsilon_m^0(\mathbf{q}_c) - \varepsilon_n^0(\mathbf{q}_c)) \mathcal{A}_{mn,j}(\mathbf{q}_c) \\ &= \Re \sum_m e \frac{\partial A_j}{\partial r_i}(\mathbf{r}_c, t) \frac{i}{\hbar} i \left\langle u_n(\mathbf{q}_c) \left| \frac{\partial u_m}{\partial q_i}(\mathbf{q}_c) \right. \right\rangle (\varepsilon_m^0(\mathbf{q}_c) - \varepsilon_n^0(\mathbf{q}_c)) i \left\langle u_m(\mathbf{q}_c) \left| \frac{\partial u_n}{\partial q_j}(\mathbf{q}_c) \right. \right\rangle \\ &= \Re \left[\frac{ie}{\hbar} \frac{\partial A_j}{\partial r_i}(\mathbf{r}_c, t) \left\langle \frac{\partial u_n}{\partial q_i}(\mathbf{q}_c) \left| \left(\tilde{H}_0(\mathbf{q}_c) - \varepsilon_n^0(\mathbf{q}_c) \right) \right| \frac{\partial u_n}{\partial q_j}(\mathbf{q}_c) \right\rangle \right] \end{aligned} \quad (\text{付録 A.16})$$

となる。軌道磁気モーメントを式 (4.35) で定義すると

$$\langle w[f] | \Delta H | w[f] \rangle = -\mathbf{m}(\mathbf{q}_c) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}_c, t) \quad (\text{付録 A.17})$$

を得る。

以上をまとめると

$$L_{\text{eff}} = -\hbar \frac{d}{dt} (\text{arg} f(\mathbf{q}_c(t), t)) + \hbar (\mathcal{A}_n(\mathbf{q}_c(t)) - \mathbf{r}_c(t)) \cdot \dot{\mathbf{q}}_c(t) + e \left(\frac{d}{dt} \mathbf{A}(\mathbf{r}_c(t), t) \right) \cdot \mathbf{r}_c(t) \\ - [\varepsilon_n^0(\mathbf{q}_c(t)) - e\phi(\mathbf{r}_c(t), t) - \mathbf{m}(\mathbf{q}_c) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}_c, t)] \quad (\text{付録 A.18})$$

Lagrangian に全微分項を加えても方程式は変化しないことに注意すると Lagrangian(4.33) を得る。

謝辞

本レポートは平成 21 年度課題研究 Q11 において行われた 4 回分の発表のレジメをまとめたものです。本卒業研究を進めるにあたり、京都大学理学研究科物理学・宇宙物理学専攻凝縮系理論グループ准教授、藤本聡先生には終始ご指導頂きました。また、同研究室の川上則雄教授、池田隆介准教授、池田浩章助教には発表の際有用なご意見頂きました。ここに感謝の意を表します。

参考文献

- [1] D. Xiao, M.-C. Chang, Q.Niu, 2009, arXiv:0907.2021v1
- [2] M. V. Berry, 1984, Proc. R. Soc. London Ser. A **392**, 45
- [3] E. N. Adams, and E. I. Blount, 1959, J. Phys. Chem. Solids **10**, 286
- [4] T. Kato, 1950, J. Phys. Soc. Jpn. **5**, 435
- [5] メシア (1962) 『量子力学 3』 第 17 章
- [6] 中原幹夫 (2001) 『理論物理学のための幾何学とトポロジー』
- [7] D. J. Thouless, 1983, Phys. Rev. B **27**, 6083
- [8] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, 1976 *Solid State Physics* (Brooks/Cole, Cengage Learning)
- [9] G.Sundaram, Q.Niu, 1999, Phys. Rev. B **59**, 14915
- [10] D. Culcer, Y. Yao, Q. Niu, 2005, Phys. Rev. B **72**, 085110
- [11] D. Xiao, J. Shi, Q. Niu, 2005, Phys. Rev. Lett. **95**, 137204
- [12] M.-C. Chang, Q. Niu, 2008, Journal of Physics: Condensed Matter **20**, 193202
- [13] S. Murakami, N. Nagaosa, S.-C. Zhang, 2003, Science **301**, 1348
- [14] S. Murakami, N. Nagaosa, S.-C. Zhang, 2004, Phys. Rev. B **69**(23), 235206
- [15] J. Sinova, D. Culcer, Q. Niu, N. A. Sinitsyn, T. Jungwirth, A. H. MacDonald, 2004, Phys. Rev. Lett. **92**, 126603