Bussei Kenkyu

物性におけるBerryの位相

名大・理　高　野　健　一

§1　序

パラメータに依存するようなハミルトニアンで記述される量子系が，1つの固有状態にある場合を考える。パラメータをゆっくりと変化させていって最終的にもとの値にもどしたとき，系の状態ベクトルは，単純に考えて期待されるような力学的な位相因子の他に，付加的な位相因子だけ変化することがある。この付加的な位相は，最近になってBerry[1]によって一般的な理解が与えられ，Berryの位相と呼ばれることとなった。Berryの位相は，非常に一般的な概念なので，いろいろなところに現われてくる。ここではBerryの位相について簡単に復習したのちに，いくつかの応用例を紹介する。

§2　Berryの位相

ハミルトニアンに含まれているパラメータの組を$\mathbf{R}$とし，これを時間とともにゆっくりと（断熱的に）変化させる。このとき，Shrödinger方程式および，各瞬間ごとの固有値方程式は，次のようになる。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)>=H(\mathbf{R}(t))|\psi(t)> \tag{1}$$

$$H(\mathbf{R}(t))|n(\mathbf{R}(t))>=E_n(\mathbf{R}(t))|n(\mathbf{R}(t))> \tag{2}$$

式(2)では固有状態の位相因子までは決まらない。パラメータ空間中の閉じたパスCを一周したとき（図1；3パラメータの場合），位相因子を含めた固有状態の時間発展は，

$$|\psi(t)>=e^{i\gamma_n(t)}\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' E_n(t')\right\}|n(\mathbf{R}(t))> \tag{3}$$

とおいて，式(1)に代入して得られる。式(3)の第一因子に現われる$\gamma_n(t)$のパスCを一周したのち変化$\gamma_n(C)\equiv\gamma_n$（一周後）$-\gamma_n$（初期値）がBerryの位相である。$\gamma_n(C)$は，パスCのみに依存しており，どのようにCを通過するかには依存せず，純粋に幾何学的な性格のものである。

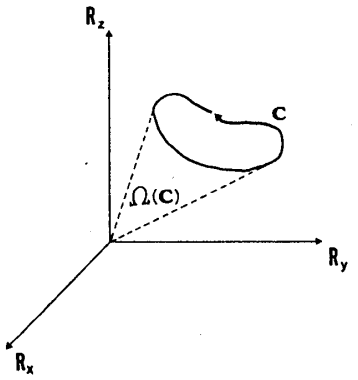

図1

§3　磁場中のスピン

最っともわかり易い例は，磁場中に置かれた1個のスピンからなる系であろう。磁場がこの場合の断熱パラメータで，磁場を変化させて最終的に元にもどしたとき，スピンの状態ベクトルにBerryの位相が現われる。

スピンを$\mathbf{s}$とすると，ハミルトニアンは，$H(B)=\varkappa\hbar\mathbf{s}\cdot\mathbf{B}$で与えられる。磁場$\mathbf{B}$をパラメータ空間中でパスCに沿って一周させたとき（図1で$\mathbf{R}$を$\mathbf{B}$と考える），Berryの位相は次のように計算される（n

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

$=-s, \cdots, s$)。

$$\gamma_n(C) = \iint_C dS \cdot \left(n\frac{B}{B^3}\right) = -n\Omega(C) \tag{4}$$

ここで，積分はCの張る任意の曲面上での面積分，$\Omega(C)$は原点から見たその曲面の立体角である。この式は，パスCから離れた所にある原点（$B=0$）の影響が$\gamma_n(C)$の原因であることを示している。

式(4)で与えられるBerryの位相は，中性子のスピン（$n=\pm\frac{1}{2}$）を用いて直接検証できる。[2] 図2（文献[2]より）のようにコイルを巻いて磁場B_1を発生させ，その他にZ軸方向にも磁場B_zをかける。コイル中を通過する中性子から見ると，磁場は円錐を描いて回転している（図3；文献[2]より）。スピンの偏極を測定することによってBerryの位相を決定し，磁場の回転（図3）から立体角$\Omega(C)$を計算して，式(4)が成り立つかどうかを調べる。B_1とB_zの比をいろいろと変えて実験がなされ，立体角の大きい場合にはかなりよく式(4)が成り立つことが確認されている。

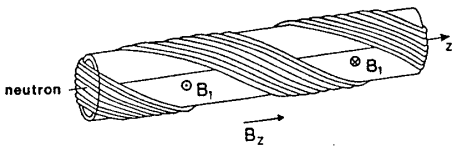

図2

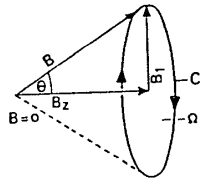

図3

§4 グラスファイバー中の光子

光子の偏極についても，中性子のスピンとのアナロジーがあって，Berryの位相の測定が行なわれている。[3]

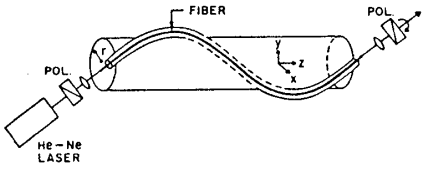

図4

実験装置では，グラスファイバーが筒のまわりに巻きつけられており，その中をシングルモードの光が通過する（図4；文献[3]より）。1個の光子に着目し，そのスピンをsとする。ヘリシティは$\sigma = s\cdot k(t)$で与えられ，± 1の2つの固有値をとる。ここで$k(t)$は，ファイバーに沿った方向の単位ベクトルであり，光子が進むにつれてファイバーの曲がり方に合わせて変化していく。σは保存量であって，中性子のスピンにおけるハミルトニアンと同様の役割をはたす。$k(t)$は，磁場$B(t)$のかわりとなり，ファイバーを筒に巻きつけることは，kの空間中で1つのループを作ることを意味している。Berryの位相は，中性子スピンの場合とのアナロジーから，$\gamma_\sigma(C) = -\sigma\Omega(C)$で与えられる。

実験は，筒に対する巻きつけ方をいろいろと変えて行なわれている。計算によって求めた$\Omega(C)$の値と，測定した偏光角から直接得られた$\gamma_\sigma(C)$の値は，どの場合にもかなりよく一致している。

ただし，この結果に関しては，光を古典的な波動とみなしても同様の結論が出てくるという批判もある。どちらにしろ，Berryの位相の概念が実験事実と矛盾しないことだけは示されたと考えてよいであろう。

§5 量子ホール効果

整数量子ホール効果および分数量子ホール効果の両方に関して，Berryの位相の応用がある。整数量子

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

ホール効果においては，ホール伝導度そのものがBerryの位相で表現づき，これからe^2/hの整数倍に量子化されることが出てくる。

分数量子ホール効果に関しては，ラフリンの提案した非圧縮性流体状態[5]に生ずる素励起（準粒子）の電荷と統計性を，Berryの位相を用いて決定することができる。[6]まず，準粒子が1個ある状態を表わす，電子の多体の波動関数を考える。これには，ラフリンによって提出された試行関数を用いる。この中で，準粒子は1つの点状欠陥として表現されており，その位置はパラメータで指定されている。この位置を表わすパラメータを，任意の円を描いて一周させると，それに伴ってBerryの位相が現われる。一方，準粒子そのものの一体の波動関数が存在するはずである。準粒子の位置は，今度は，波動関数の中の変数であるが，これを同一の円を描いて一周させると，磁場に依存した位相の変化を求めることができる。この位相は，先に求めたBerryの位相と等しくなければならず，このことから，準粒子の電荷が決定される。統計性については，2つの準粒子を点欠陥として含むような試行関数を用いて，それらの位置をゆっくりした移動によって交換することが求められる。結果は，ランダウレベルの占有率が1/m（mは奇数）のとき，準粒子の電荷がe/m，2つの準粒子の交換に伴なう波動関数の位相変化はπ/m，となる。m＝1のときは通常のフェルミ統計となるが，それ以外のときは「分数統計」となる。

§6 おわりに

Berryの位相について，簡単な説明をして，いくつかの応用例を見てきた。Berryの位相は非常に一般的な概念であるので，さらに多くの応用や，今まで知られていた現象のBerryの位相を用いた再解釈も行なわれよう。ヤン＝テラー効果への応用については，他の講演[7]で述べられている。

さらに，Berryの位相の概念自体を，もっと一般化することも行なわれている。たとえば，奇数個の電子を含む原子では，エネルギー準位はKramersの縮退を起こしており，2成分の量に対して拡張されたBerryの位相が必要となる。[8]今まで外場として扱ってきたパラメータを，力学変数と見なす定式化も行なわれている。[9]また，断熱過程に限定せず，一般的な周期運動に伴う幾何学的位相へも拡張がなされている。[10]

文　献

[1] M. V. Berry : Proc. Roy. Soc. Lond. **A392** (1984) 45.

[2] T. Bitter and D. Dubbers : Phys. Rev. Lett. **59** (1987) 251.

[3] R. Y. Chao and Y.-S. Wu : Phys. Rev. Lett. **57** (1986) 933.
A. Tomita and R. Y. Chiao : Phys. Rev. Lett. **57** (1986) 937.

[4] J. E. Avron and R. Seiler : Phys. Rev. Lett. **54** (1985) 259.

[5] R. B. Laughlin : Phys. Rev. **B23** (1981) 5632.

[6] D. Arovas, J. R. Schriefer and F. Wilczek : Phys. Rev. Lett. **53** (1984) 722.

[7] 青木：本研究会の講演

[8] C. A. Mead : Phys. Rev. Lett. **59** (1987) 161.

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

研究会報告

[9] 倉辻，飯田：本研究会の講演

[10] Y. Aharanov and J. Anandan : Phys. Rev. Lett. **58** (1987) 1593.

ヤーン・テラー効果におけるBerryの位相

東大・理　青　木　秀　夫

1. 序

ベリーの位相は量子力学の基本的帰結であるが，これが物理の様々な分野に現われることに最近興味がもたれている。この中には

a) 量子ホール効果[1-3]

b) 分子やクラスターの変形と電子構造[4]

c) ゲージ場の理論[5]

等が含まれる。最近 Ham[6]が，化学物理において馴染み深いヤーン・テラー効果においても，ボルン・オッペンハイマー近似での波動関数の性質をベリーの位相という観点で理解できることを示しているので，この仕事を紹介した。

これは，ヤーン・テラー（複数軌道）問題における電子の波動関数ψが，空間を360°回転させても元に戻らず

$$\psi(2\pi) = -\psi(0)$$

のように符号が変わるという，Longuet-Higgins[7]の時代から知られていた性質を，原子核の座標を断熱パラメータとしたときの電子波動関数のベリーの位相と見なせる，ということである。フォノンの波動関数ϕも符号が変わるので，全波動関数$\psi\phi$は勿論一価関数となる。

2. ヤーン・テラー効果

結晶中の錯体（例えばMgO中のCu）の電子と原子核に対する全ハミルトニアン

$$\mathcal{H}_{\text{total}} = \mathcal{H}_{\text{el}} + \mathcal{H}_{\text{n}} + \mathcal{H}_{\text{el-n}}$$

の中の電子と核との相互作用は，核の平衡の回りの基準振動座標Qを用いて

$$\mathcal{H}_{\text{el-n}} = V_{\text{cf}} + \sum_{\Gamma} V_{\Gamma}^{(1)} Q_{\Gamma} + \cdots$$

のように展開される。ここでV_{cf}は結晶場ポテンシャル，Γは錯体の対称群の既約表現。$\mathcal{H}_{\text{el}} + V_{\text{cf}}$で決まる電子状態が縮退している（ヤーン・テラー・イオン）の場合，この展開は，上式右辺のようにQの一

NII-Electronic Library Service