量子輸送現象における幾何学的位相の効果

秋田大学工学資源学部 小野田勝

目次

1 はじめに

本稿では波動関数における幾何学的位相が中心的な役割をはたす輸送現象について解説する．主に固体中電子の量子力学的波動関数を想定して「量子」輸送現象について話を進めるが，コヒーレントな巨視的電磁波が関係する問題についても考える．したがって「量子」と言う言葉には，あまり厳密な意味をもたせずに干渉性を保っている波動が関わる輸送現象についての話だと考えていただきたい．前半では幾何学的位相に関する基本事項について必要最低限と思われるものを取り上げ，できるだけ飛躍が無いように説明を心がけた．また全体を通じて，Schrödinger 方程式や角運動量演算子の代数などの量子力学の基礎，周期系における Bloch の定理と Bloch 関数，一様磁場中 2 次元電子系の Landau 量子化，電磁気学における Maxwell 方程式についての知識があれば十分理解可能な内容となっている．残念ながら幾何学的位相に関する話題に限らずゲージ理論一般の背後にある数理との関連については触れられなかったが，最近では幾何学的位相に関する数理や関連した物理現象について解説している優れた教科書が何冊も出版されている．ここでは筆者にとって特に参考になった文献 [1, 2, 3, 4] をあげておく．より深く学びたい読者はぜひご一読をお勧めする．また，幾何学的位相に関する初期の重要な仕事を集めた論文集の定番として文献 [5] をあげておく．

幾何学的な位相に関するさまざまな解釈のうちで，もっともわかりやすいのは Berry による断熱近似に基づいた解釈（Berry 位相）[5, 6] であろう．それゆえ幾何学的位相と Berry 位相がほぼ同義に用いられることが多いのではないかと思われる．したがって順番からいけばまずこの断熱近似における幾何学的位相について説明し，その後，より一般的な Aharonov と Anandan[5, 7] らの議論を紹介すべきだと思われるが，前半部の基本事項の解説ではこの順番を逆にした．紙面の節約という意味もあるが，加えて断熱近似の意味するところがわかりやすいように思えたからである.「幾何学的」位相という名前のつかみどころのなさからも窺えるが，この概念は非常に一般性が高いものである．数学・物理・化学やそれらを横断する領域において古くから研究されており [5]，量子情報との関連性も指摘されている [8]．また固体物理の範囲内だけでも，実に多くの物理現象が関わっている．後半では固体中電子の Bloch 波や電磁波の輸送現象に見られる幾何学的位相が関係した様々な効果について解説する．これらは（位相）幾何学的 Hall 効果とでも呼べるものであるが，よく知られた量子 Hall 効果はその典型例あるいはひな形であると言える．その他にも異常 Hall 効果 [9, 10]，スピン Hall 効果 [10, 11, 12, 13]，光の Hall 効果 [14, 15] について触れる.（参考文献はこれらの効果の幾何学的側面に触れている邦文解説記事である.）

以下では特に断らない限り $\hbar = c = 1$ の自然単位系をとるものとする．

2 幾何学的位相とは？

2.1 回転磁場中のスピン模型

まずは古典とも言える「回転磁場中のスピン模型」[16] をもとに，そもそも幾何学的位相とは何かについて解説し，その後の予備知識導入の準備としたい．はじめに述べたように幾何学的位相が広く認識されるようになったのは，断熱近似を用いた Berry による議論 [5, 6] に負うところが大きいのであるが，このことは必ずしもこの近似が幾何学的位相に必須のものであることを意味するものではない．断熱近似とは，系を制御する外部パラメータ（例：外部磁場の向き）の時間変化が，系に固有の時間スケール（例：Lamor 歳差運動の周期）に比べて十分に遅いとする近似である．当然、実際の物理過程ではこのような近似は必ずしも成り立たない．そこでもう少し一般的に，系が循環的に時間発展をする場合について導入された考え方（Aharonov-Anandan 位相）[5, 7] をはじめに紹介したい．ただしここではより具体的な議論をしている文献 [17] に基づいて説明する．

さて，磁気モーメント $\boldsymbol{\mu} = \gamma \boldsymbol{S}$ をもつ量子に強さ B が一定でその向き $\boldsymbol{e}_B(t)$ が周期的に変化する磁場 $\boldsymbol{B}(t) = B\boldsymbol{e}_B(t)$ をかけた場合を考えよう．ただし $\boldsymbol{S}$ は角運動量演算子で $[S_i, S_j] = i\sum_k \epsilon_{ijk} S_k$ の交換関係を満たすものとする．説明の便宜上 $\boldsymbol{S}$ のことをスピンと呼ぶことにする．このとき磁気モーメントの状態変化は次のハミルトニアンで記述される．

$$\mathcal{H}(t) = -\boldsymbol{B}(t) \cdot \boldsymbol{\mu} = -\omega_L \boldsymbol{e}_B(t) \cdot \boldsymbol{S} \tag{1}$$

ただし $\omega_L = \gamma B$ とおいた．想定している状況は上記のようなものであるが，ここでは物理的背景を一旦忘れることにする．特にスピンの状態変化が物理的な外部磁場によって引き起こされる云々は忘れることにして，座標変換を行うときも $\omega_L \boldsymbol{e}_B(t)$ は単なる外部パラメータであると考える．ただし以後も便宜上この模型を「回転磁場中のスピン模型」と呼ぶ．ここではつぎのような回転磁場を考える．

$$\boldsymbol{e}_B(t) = \boldsymbol{e}(\theta_0, \omega t) = \begin{pmatrix} \sin\theta_0 \cos\omega t \\ \sin\theta_0 \sin\omega t \\ \cos\theta_0 \end{pmatrix} \tag{2}$$

ただし $\boldsymbol{e}(\theta, \phi)$ は極角 θ, 方位角 ϕ の方向を向いた単位ベクトルである．以下では $\theta = 0, \phi = 0$ の方向を z 軸（正の）方向と呼ぶことにして，適宜，$\boldsymbol{e}_z = \boldsymbol{e}(0, 0)$ の記号も使うこととする．

2.2 1 価固有状態と固有値の量子化

まずは準備として演算子 $\boldsymbol{e}(\theta, \phi) \cdot \boldsymbol{S}$ に対する固有値 m をもつ固有状態のうち 1 価のものを $|m; \theta, \phi\rangle_N$ $(\theta \neq \pi)$ で表し，特に S_z に対する固有状態を単に $|m\rangle$ と書くことにする．

次に $|m;\theta,\phi\rangle_N$ を $|m\rangle$ を元に構成するために，量子化軸 $\boldsymbol{e}_z$ を量子化軸 $\boldsymbol{e}(\theta,\phi)$ $(\theta\neq\pi)$ に移す回転操作を導入する．もっとも簡単な操作としては，以下の式で定義される回転軸 $\boldsymbol{n}(\phi)$ のまわりの角度 θ の回転を考えればよい．

$$\boldsymbol{n}(\phi) \;=\; \frac{\boldsymbol{e}_z\times\boldsymbol{e}(\theta,\phi)}{|\boldsymbol{e}_z\times\boldsymbol{e}(\theta,\phi)|}=\begin{pmatrix}-\sin\phi\\ \cos\phi\\ 0\end{pmatrix} \tag{3}$$

回転操作の演算子は次のようになる．

$$R(\theta,\phi) \;=\; e^{-i\theta\boldsymbol{n}(\phi)\cdot\boldsymbol{S}}=e^{-i\phi S_z}e^{-i\theta S_y}e^{i\phi S_z} \tag{4}$$

ただし最後の表式に書き換えるときに以下の関係式を用いた．

$$e^{-i\phi S_z}\boldsymbol{S}e^{i\phi S_z}=\begin{pmatrix}\cos\phi & \sin\phi & 0\\ -\sin\phi & \cos\phi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\boldsymbol{S},\quad e^{-i\theta S_y}\boldsymbol{S}e^{i\theta S_y}=\begin{pmatrix}\cos\theta & 0 & -\sin\theta\\ 0 & 1 & 0\\ \sin\theta & 0 & \cos\theta\end{pmatrix}\boldsymbol{S} \tag{5}$$

状態 $|m;\theta,\phi\rangle_N$ は $|m\rangle$ と $R(\theta,\phi)$ を用いて以下のように構成できる．

$$|m;\theta,\phi\rangle_N \;=\; R(\theta,\phi)|m\rangle=e^{-i\phi S_z}e^{-i\theta S_y}e^{i\phi S_z}|m\rangle=e^{-i\phi(S_z-m)}e^{-i\theta S_y}|m\rangle \tag{6}$$

定義より明らかに $R(\theta,\phi+2\pi)=R(\theta,\phi)$ なので，$|m;\theta,\phi\rangle_N$ は確かに 1 価 $(|m;\theta,\phi+2\pi\rangle_N=|m;\theta,\phi\rangle_N)$ であることが分かる．

固有状態 $|m;\theta,\phi\rangle_N$ の構成のところで単位球面の南極 $(\theta=\pi)$ に相当する点をその定義から除外したが，次に示すようにこの場合は 1 価にならないためである．

$$|m;\pi,\phi\rangle_N \;=\; e^{-i\phi(S_z-m)}e^{-i\pi S_y}|m\rangle=e^{-i\pi S_y}e^{i\phi(S_z+m)}|m\rangle=e^{i2m\phi}e^{-i\pi S_y}|m\rangle \tag{7}$$

南極において 1 価にならない原因は $e^{i2m\phi}$ の因子であることがわかるので，$|m;\theta,\phi\rangle_N$ に次のゲージ変換をほどこした状態 $|m;\theta,\phi\rangle_S$ を考えてみる．

$$\begin{aligned}|m;\theta,\phi\rangle_S \;&=\; e^{-i2m\phi}|m;\theta,\phi\rangle_N=e^{-i\phi S_z}e^{-i\theta S_y}e^{i\phi(S_z-2m)}|m\rangle=e^{-i\phi S_z}e^{-i\theta S_y}e^{-i\phi S_z}|m\rangle\\ &=\; e^{-i\phi S_z}e^{-i(\theta-\pi)S_y}e^{i\phi S_z}e^{-i\pi S_y}|m\rangle=R(\theta-\pi,\phi)R(\pi,0)|m\rangle\end{aligned} \tag{8}$$

右辺の 3 番目の式より，この状態は北極 $(\theta=0)$ では 1 価ではない．しかし右辺 4 番目の式よりそれ以外では 1 価となっている．

北極と南極以外では $|m;\theta,\phi\rangle_N$ と $|m;\theta,\phi\rangle_S$ はともに 1 価であるので，式 (8) の右辺最初の表式より，$e^{i4\pi m}=1$ でなければならないことがわかる．したがって，ある領域で 1 価であるような状態をゲージ変換により張り合わせて単位球面全体 $(0\leq\theta\leq\pi, 0\leq\phi<2\pi)$ を覆うためには，固有値 m は整数または半整数でなければならない．以下ではこの条件が満たされる場合を考えることにする．また，状態ベクトルの変化の過程でスピンが南極を指すような状態は現れないと仮定して，固有状態 $|m;\theta,\phi\rangle_N$ を単に $|m;\theta,\phi\rangle$ と表すことにする．

2.3 循環的解における幾何学的位相

それでは式 (1) のハミルトニアンで時間発展する状態を求めることにしよう．状態ベクトルを $|\psi(t)\rangle$ と表すことにすると，以下の方程式が成り立つ．

$$i\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle \quad = \quad -\omega_L \boldsymbol{e}(\theta_0, \omega t)\cdot \boldsymbol{S}|\psi(t)\rangle \tag{9}$$

この方程式が簡単には解けない原因は何か考えてみると，単位ベクトル $\boldsymbol{e}(\theta_0, \omega t)$ の時間変化に他ならない．そこで $\boldsymbol{e}(\theta, \omega t)$ が静止して見えるような回転座標系に座標変換して，問題をながめ直してみることにする．静止座標系における状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ に対応する回転座標系における状態ベクトルは $|\psi(t)\rangle_{RF} = e^{i\omega t S_z}|\psi(t)\rangle$ と表すことができる．$|\psi(t)\rangle$ に対する方程式より，$|\psi(t)\rangle_{RF}$ の満たすべき方程式は次のようになる．

$$\begin{aligned} i\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle_{RF} &= -\left[\omega_L e^{i\omega t S_z}\boldsymbol{e}(\theta_0, \omega t)\cdot \boldsymbol{S}e^{-i\omega t S_z} + \omega S_z\right]|\psi(t)\rangle_{RF} \\ &= -\left[\omega_L \boldsymbol{e}(\theta_0, 0)\cdot \boldsymbol{S} + \omega S_z\right]|\psi(t)\rangle_{RF} \\ &= -\omega_{\text{eff}}\boldsymbol{e}(\theta_{\text{eff}}, 0)\cdot \boldsymbol{S}|\psi(t)\rangle_{RF} \end{aligned} \tag{10}$$

ただし最後の表式では次の記号を導入した．

$$\omega_{\text{eff}} = \omega_L\sqrt{1 + 2\frac{\omega}{\omega_L}\cos\theta_0 + \frac{\omega^2}{\omega_L^2}}, \tag{11}$$

$$\cos\theta_{\text{eff}} = \frac{\omega_L}{\omega_{\text{eff}}}\left(\cos\theta_0 + \frac{\omega}{\omega_L}\right), \quad \sin\theta_{\text{eff}} = \frac{\omega_L}{\omega_{\text{eff}}}\sin\theta_0 \tag{12}$$

方程式 (10) の解は $|\psi(t)\rangle_{RF} = e^{i\omega_{\text{eff}} t\boldsymbol{e}(\theta_{\text{eff}},0)\cdot \boldsymbol{S}}|\psi(0)\rangle$ となるので，$|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t S_z}|\psi(t)\rangle_{RF}$ の関係式より静止座標系における解が求められる．

$$|\psi(t)\rangle \quad = \quad U(t)|\psi(0)\rangle, \quad U(t) = e^{-i\omega t S_z}e^{i\omega_{\text{eff}} t\boldsymbol{e}(\theta_{\text{eff}},0)\cdot \boldsymbol{S}} = e^{i\omega_{\text{eff}} t\boldsymbol{e}(\theta_{\text{eff}},\omega t)\cdot \boldsymbol{S}}e^{-i\omega t S_z} \tag{13}$$

次に幾何学的位相を定義するために，ある一定の周期 T で（位相の不定性を除いて）初期状態に戻って来るような解について考えることにする．注意すべき点として，同じ状態変化を周期的に繰り返す解だけでなく，周期 T ごとに初期状態に戻りさえすれば各周期ごとの状態変化は異なる解も含むという点である．このような解を循環的な解と呼ぶことにする．式 (13) により，循環的な解の初期状態は演算子 $U(T) = e^{-i\omega T S_z}e^{i\omega_{\text{eff}} T\boldsymbol{e}(\theta_{\text{eff}},0)\cdot \boldsymbol{S}}$ の固有状態になっている必要がある．このような固有状態の可能性も数多くあるわけであるが，ここでは $T = 2\pi/|\omega|$ と $T = 2\pi/|\omega_{\text{eff}}|$ の場合をそれぞれ見ていくことにする．なぜこの様な周期に特定するのかといえば，以下の理由により解を構成するための見通しが良いためである．

- $T = 2\pi/|\omega|$ または $T = 2\pi/|\omega_{\text{eff}}|$ のとき，$e^{-i\omega T S_z}$ または $e^{i\omega_{\text{eff}} T\boldsymbol{e}(\theta_{\text{eff}},0)\cdot \boldsymbol{S}}$ のいずれかは z 軸または $\boldsymbol{e}(\theta_{\text{eff}}, 0)$ 方向を軸とする 2π の回転となる．

- 上記の演算子のうち，2π 回転でないほうの演算子の固有状態を見つければ，$U(T)$ の固有状態となっており，求めるべき初期状態としての条件を満たす．

ここで後の計算のために確認して置きたいこととして，2π の回転に関しては回転演算子が回転軸の方向に依存しないことが上げられる．例えばお互いに平行でない回転軸 $\boldsymbol{e}_A$ および $\boldsymbol{e}_B$ のまわりの回転を考える．このとき $\boldsymbol{e}_A$ を $\boldsymbol{e}_B$ に移すような回転の軸の方向を $\boldsymbol{n}_{AB}=\boldsymbol{e}_A\times\boldsymbol{e}_B/|\boldsymbol{e}_A\times\boldsymbol{e}_B|$ とし, $\boldsymbol{e}_A$ および $\boldsymbol{e}_B$ のなす角度を θ_{AB} と書くことにすると，次の関係式が得られる．

$$e^{-i2\pi\boldsymbol{e}_B\cdot\boldsymbol{S}} \;=\; e^{-i\theta_{AB}\boldsymbol{n}_{AB}\cdot\boldsymbol{S}}e^{-i2\pi\boldsymbol{e}_A\cdot\boldsymbol{S}}e^{i\theta_{AB}\boldsymbol{n}_{AB}\cdot\boldsymbol{S}}=e^{-i2\pi\boldsymbol{e}_A\cdot\boldsymbol{S}} \tag{14}$$

最後の式変形では 2π の回転演算子が任意の回転演算子と交換することを使った．

循環的な解が見つかったとしよう．このとき，周期 T の間に得る位相 ϑ_T を $|\psi(T)\rangle=e^{-i\vartheta_T}|\psi(0)\rangle$ と定義することにする．また後の便宜上，$t=T$ においてこの結果を与えるような位相因子 $e^{-i\frac{\vartheta_T}{T}t}$ を抜き出し，位相まで含めて循環的な部分 $|u_m(t)\rangle$ を次式により定義しておく．

$$|\psi(t)\rangle \;=\; e^{-i\frac{\vartheta_T}{T}t}|u_m(t)\rangle, \quad |u_m(T)\rangle=|u_m(0)\rangle. \tag{15}$$

次に動力学的な位相 ϑ_d を次式で定義する．

$$\vartheta_d \;=\; \int_0^T dt\,\langle\psi(t)|\mathcal{H}(t)|\psi(t)\rangle \tag{16}$$

この量の計算には各時刻におけるエネルギー期待値を知る必要があるが，特にいま扱っている模型の場合は，回転座標系への変換のときに用いた以下の関係式を使って容易に計算できる．

$$\mathcal{H}(t) \;=\; -\omega_L\boldsymbol{e}(\theta_0,\omega t)\cdot\boldsymbol{S}=-\omega_{\rm eff}\boldsymbol{e}(\theta_{\rm eff},\omega t)\cdot\boldsymbol{S}+\omega S_z \tag{17}$$

最後に，幾何学的位相 ϑ_g を ϑ_T と ϑ_d の差として定義する．$|\psi(t)\rangle$ に対する方程式，$|u_m(t)\rangle$ および ϑ_d の定義より，ϑ_g は次のように表すことができる．

$$\vartheta_g \;=\; \vartheta_T-\vartheta_d=-i\int_0^T dt\langle u_m(t)|\frac{d}{dt}|u_m(t)\rangle \tag{18}$$

周期 $T=2\pi/|\omega|$ の場合

先の議論より循環的解の初期状態は演算子 $U(T)$ の固有状態でなければならないが，$T=2\pi/|\omega|$ のとき次が成り立つ．

$$U(T) \;=\; e^{-i2\pi\frac{\omega}{|\omega|}S_z}e^{i2\pi\frac{\omega_{\rm eff}}{|\omega|}\boldsymbol{e}(\theta_{\rm eff},0)\cdot\boldsymbol{S}}=e^{-i2\pi\frac{\omega}{|\omega|}\boldsymbol{e}(\theta_{\rm eff},0)\cdot\boldsymbol{S}}e^{i2\pi\frac{\omega_{\rm eff}}{|\omega|}\boldsymbol{e}(\theta_{\rm eff},0)\cdot\boldsymbol{S}} \tag{19}$$

したがって $\boldsymbol{e}(\theta_{\rm eff},0)\cdot\boldsymbol{S}$ の固有状態を見つけてやればよく，これは $|m;\theta_{\rm eff},0\rangle$ に他ならない．したがって周期 $T=2\pi/|\omega|$ の間に得る位相 ϑ_T は次式で与えられる．

$$\vartheta_T \;=\; 2\pi m\frac{\omega}{|\omega|}\left(1-\frac{\omega_{\rm eff}}{\omega}\right) \tag{20}$$

一般の時刻 t の解をあらためて書き下すと以下のようになる．

$$|\psi(t)\rangle \;=\; e^{-i\omega tS_z}e^{i\omega_{\rm eff}t\boldsymbol{e}(\theta_{\rm eff},0)\cdot\boldsymbol{S}}|m;\theta_{\rm eff},0\rangle = e^{-im(\omega-\omega_{\rm eff})t}|u_m(t)\rangle, \tag{21}$$

$$|u_m(t)\rangle \;=\; |m;\theta(t),\phi(t)\rangle = |m;\theta_{\rm eff},\omega t\rangle \tag{22}$$

この状態に対するエネルギー期待値は次式で与えられる．

$$\begin{aligned}\langle\psi(t)|\mathcal{H}(t)|\psi(t)\rangle &= \langle u_m(t)|\left[-\omega_{\rm eff}\boldsymbol{e}(\theta_{\rm eff},\omega t)\cdot\boldsymbol{S}+\omega S_z\right]|u_m(t)\rangle\\ &= -m(\omega_{\rm eff}-\omega\cos\theta_{\rm eff})\end{aligned} \tag{23}$$

上記の結果は時間によらないので，動力学的位相 ϑ_d は単に周期 $T=2\pi/|\omega|$ を掛ければ得られ，幾何学的位相 ϑ_g まで含めて以下の結果が得られる．

$$\vartheta_d \;=\; \int_0^{\frac{2\pi}{|\omega|}}dt\,\langle\psi(t)|\mathcal{H}(t)|\psi(t)\rangle = -2\pi m\frac{\omega}{|\omega|}\left(\frac{\omega_{\rm eff}}{\omega}-\cos\theta_{\rm eff}\right) \tag{24}$$

$$\vartheta_g \;=\; \vartheta_T-\vartheta_d = 2\pi m\frac{\omega}{|\omega|}\left(1-\cos\theta_{\rm eff}\right) \tag{25}$$

周期 $T=2\pi/|\omega_{\rm eff}|$ の場合

先ほどと同様に循環的な解は $U(T)$ の固有状態である必要があるが，周期が $T=2\pi/|\omega_{\rm eff}|$ のときは次式が成り立つ．

$$U(T) \;=\; e^{-i2\pi\frac{\omega}{|\omega_{\rm eff}|}S_z}e^{i2\pi\frac{\omega_{\rm eff}}{|\omega_{\rm eff}|}\boldsymbol{e}(\theta_{\rm eff},0)\cdot\boldsymbol{S}} = e^{-i2\pi\frac{\omega}{|\omega_{\rm eff}|}S_z}e^{i2\pi\frac{\omega_{\rm eff}}{|\omega_{\rm eff}|}S_z} \tag{26}$$

したがって条件を満たす初期状態として S_z の固有状態 $|m\rangle$ が考えられ，このとき周期 $T=2\pi/|\omega_{\rm eff}|$ の間に得る位相 ϑ_T は次式で与えられる．

$$\vartheta_T \;=\; 2\pi m\frac{\omega_{\rm eff}}{|\omega_{\rm eff}|}\left(\frac{\omega}{\omega_{\rm eff}}-1\right) \tag{27}$$

時刻 $t=T$ でこの位相を与える因子を括りだすと，一般の時刻 t の解を次のように書くことができる．

$$|\psi(t)\rangle \;=\; e^{-i\omega tS_z}e^{i\omega_{\rm eff}t\boldsymbol{e}(\theta_{\rm eff},0)\cdot\boldsymbol{S}}|m\rangle = e^{-im(\omega-\omega_{\rm eff})t}|u_m(t)\rangle \tag{28}$$

$$|u_m(t)\rangle \;=\; |m;\theta(t),\phi(t)\rangle = e^{i\omega_{\rm eff}t[\boldsymbol{e}(\theta_{\rm eff},\omega t)\cdot\boldsymbol{S}-m]}|m\rangle \tag{29}$$

ここで $\theta(t)$ および $\phi(t)$ は次式を満たす関数である.

$$\boldsymbol{e}(\theta(t),\phi(t))\cdot\boldsymbol{S} \;=\; e^{i\omega_{\text{eff}}t\boldsymbol{e}(\theta_{\text{eff}},\omega t)\cdot\boldsymbol{S}}S_z e^{-i\omega_{\text{eff}}t\boldsymbol{e}(\theta_{\text{eff}},\omega t)\cdot\boldsymbol{S}} \tag{30}$$

後ほど再び触れるが，$\boldsymbol{e}(\theta(t),\phi(t))$ はスピン期待値の向きと一致する．この状態に対するエネルギー期待値は次のようになる.

$$\begin{aligned}
&\langle\psi(t)|\mathcal{H}(t)|\psi(t)\rangle\\
&=\langle u_m(t)|\left[-\omega_{\text{eff}}\boldsymbol{e}(\theta_{\text{eff}},\omega t)\cdot\boldsymbol{S}+\omega S_z\right]|u_m(t)\rangle\\
&=\langle m|\left[-\omega_{\text{eff}}\boldsymbol{e}(\theta_{\text{eff}},\omega t)\cdot\boldsymbol{S}+\omega e^{-i\omega_{\text{eff}}t\boldsymbol{e}(\theta_{\text{eff}},\omega t)\cdot\boldsymbol{S}}S_z e^{i\omega_{\text{eff}}t\boldsymbol{e}(\theta_{\text{eff}},\omega t)\cdot\boldsymbol{S}}\right]|m\rangle\\
&=-m\left[\omega_{\text{eff}}\cos\theta_{\text{eff}}-\omega\left\{\cos^2\theta_{\text{eff}}+\sin^2\theta_{\text{eff}}\cos(\omega_{\text{eff}}t)\right\}\right]
\end{aligned} \tag{31}$$

この結果を 1 周期分積分することにより動力学的位相 ϑ_d と幾何学的位相 ϑ_g が得られる.

$$\vartheta_d \;=\; \int_0^{\frac{2\pi}{|\omega_{\text{eff}}|}} dt\,\langle\psi(t)|\mathcal{H}(t)|\psi(t)\rangle = -2\pi m\frac{\omega_{\text{eff}}}{|\omega_{\text{eff}}|}\cos\theta_{\text{eff}}\left(1-\frac{\omega}{\omega_{\text{eff}}}\cos\theta_{\text{eff}}\right) \tag{32}$$

$$\vartheta_g \;=\; \vartheta_T-\vartheta_d = -2\pi m\frac{\omega_{\text{eff}}}{|\omega_{\text{eff}}|}(1-\cos\theta_{\text{eff}})\left[1-\frac{\omega}{\omega_{\text{eff}}}(1+\cos\theta_{\text{eff}})\right]. \tag{33}$$

2.4 幾何学的位相の意味

さて次に，幾何学的位相が果たしてその名前にふさわしい意味を持っているのかを確認してみよう．先に答えを言うと，これまで見てきたいずれの場合にも，スピンの期待値 $\langle\psi(t)|\boldsymbol{S}|\psi(t)\rangle$ が周期 T の間に描く軌跡によって囲まれる曲面の立体角を Ω として，幾何学的位相 ϑ_g は厳密に $\vartheta_g = m\Omega$ となっている．(ただし原点から見て右ねじ方向にまわる軌跡の立体角を正とし，逆は負となる符号付きの立体角を考える.) 以下ではこのことを具体的に確認して行くことにする.

まず，注意すべき点として時刻 t におけるスピンの期待値は t の関数であると同時に θ_{eff} の関数にもなっている．そこで $\langle\psi(t)|\boldsymbol{S}|\psi(t)\rangle$ の方向の単位ベクトルを $\boldsymbol{n}(\theta_{\text{eff}},t)$ と表すことにし，θ_{eff} を θ で置き換えたベクトル関数 $\boldsymbol{n}(\theta,t)$ を考える．ただし θ は単なるパラメータであり，必ずしも $\boldsymbol{n}(\theta,t)$ の方向の極角に一致するわけではない．符号付きの立体角は次の表式により計算することができる.

$$\Omega \;=\; \int_0^{\theta_{\text{eff}}} d\theta\int_0^T dt\,\boldsymbol{n}(\theta,t)\cdot\left[\frac{\partial\boldsymbol{n}}{\partial\theta}(\theta,t)\times\frac{\partial\boldsymbol{n}}{\partial t}(\theta,t)\right] \tag{34}$$

周期 $T=2\pi/|\omega|$ の場合

周期が $T=2\pi/|\omega|$ の場合のスピンの期待値は次のようになる.

$$\langle\psi(t)|\boldsymbol{S}|\psi(t)\rangle \;=\; m\boldsymbol{n}(\theta_{\text{eff}},t) = m\begin{pmatrix}\sin\theta_{\text{eff}}\cos(\omega t)\\ \sin\theta_{\text{eff}}\sin(\omega t)\\ \cos\theta_{\text{eff}}\end{pmatrix} \tag{35}$$

これは z 軸に対して一定の角度 θ_{eff} の傾きを保ちながら角速度 ω で一様に回転する正則歳差運動である．この場合は立体角の計算式 (34) を用いずとも，$\Omega = 2\pi\frac{\omega}{|\omega|}(1-\cos\theta_{\text{eff}})$ となることは明らかであろう．したがって $\vartheta_g = m\Omega$ が確かめられた．

周期 $T = 2\pi/|\omega_{\text{eff}}|$ の場合

周期が $T = 2\pi/|\omega_{\text{eff}}|$ の場合は少々計算が面倒であるが，回転演算子を地道に計算することで，スピンの期待値に対して以下の表式を得る．

$$\langle\psi(t)|\boldsymbol{S}|\psi(t)\rangle = m\boldsymbol{n}(\theta_{\text{eff}}, t), \tag{36}$$

$$\boldsymbol{n}(\theta, t) = \begin{pmatrix} \sin\theta\left[2\cos\theta\cos(\omega t)\sin^2\left(\frac{\omega_{\text{eff}}t}{2}\right) - \sin(\omega t)\sin(\omega_{\text{eff}}t)\right] \\ \sin\theta\left[2\cos\theta\sin(\omega t)\sin^2\left(\frac{\omega_{\text{eff}}t}{2}\right) + \cos(\omega t)\sin(\omega_{\text{eff}}t)\right] \\ \cos^2\theta + \sin^2\theta\cos(\omega_{\text{eff}}t) \end{pmatrix} \tag{37}$$

この表式だけからではイメージが掴みにくいが，状態ベクトルの表式

$$|\psi(t)\rangle \;=\; e^{-i\omega t S_z} e^{i\omega_{\text{eff}} t\boldsymbol{e}(\theta_{\text{eff}},0)\cdot\boldsymbol{S}}|m\rangle = e^{-im\omega t} e^{i\omega_{\text{eff}} t\boldsymbol{e}(\theta_{\text{eff}},\omega t)\cdot\boldsymbol{S}}|m\rangle \tag{38}$$

を参考にすると，z 軸に対して一定の角度 θ_{eff} の傾きを保ちながら角速度 ω で歳差運動する $\boldsymbol{e}(\theta_{\text{eff}}, \omega t)$ に付き従いながら，この軸のまわりを角速度 $(-1)\times\omega_{\text{eff}}$ で回っていると言うことになる．つまり章動（首振り）を伴ったコマ運動となる．

さて立体角を計算するためには $\frac{\partial\boldsymbol{n}}{\partial\theta}(\theta,t)$ と $\frac{\partial\boldsymbol{n}}{\partial t}(\theta,t)$ を計算する必要があるが，表式が煩雑なのでここでは省略する．ただし式 (34) の非積分関数は次のように簡単な表式にまとまる．

$$\boldsymbol{n}(\theta,t)\cdot\left[\frac{\partial\boldsymbol{n}}{\partial\theta}(\theta,t)\times\frac{\partial\boldsymbol{n}}{\partial t}(\theta,t)\right] \;=\; -2(\omega_{\text{eff}} - 2\omega\cos\theta)\sin\theta\sin^2\left(\frac{\omega_{\text{eff}}t}{2}\right) \tag{39}$$

これを式 (34) に代入して積分を実行すると，立体角が次のように求められる．

$$\Omega \;=\; -2\pi\frac{\omega_{\text{eff}}}{|\omega_{\text{eff}}|}(1-\cos\theta_{\text{eff}})\left[1 - \frac{\omega}{\omega_{\text{eff}}}(1+\cos\theta_{\text{eff}})\right] \tag{40}$$

先に求めた幾何学的位相 ϑ_g の結果 (33) と比べると，$\vartheta_g = m\Omega$ が確認できる．

2.5 断熱近似と Berry 位相

ここで断熱近似に基づいたBerryの議論についてもう一度触れておこう．これまで見てきた例のうち，$T = 2\pi/|\omega|$ の周期的な解において $|\omega| \ll |\omega_L|$ とした場合がそれに相当する．このとき $\theta_{\text{eff}} \sim \theta_0$ より，各時刻のスピン期待値の向きは $(\theta_{\text{eff}}, \phi(t)) \sim (\theta_0, \omega t)$ となり回転磁場の向きと一致する．また，幾何学的位相は $\vartheta_g \sim 2\pi m \mathrm{sgn}(\omega)(1-\cos\theta_0)$ となり，その絶対値は動力学的なパラメータ ω に依存せず，純粋に幾何学的な量となることが見て取れる．つまり，状態が状態空間の中をどのような速さで歩いてきたのかは重要でなくなり，どの道を通ったのかと言う幾何学的な情報だけを通じて ϑ_g を解釈することが可能となる．

2.6 Berry 接続と Berry 曲率

この節の最後に,「回転磁場中のスピン模型」に見た幾何学的位相の概念をより多くの系に適用するための準備として，Berry 接続および Berry 曲率と呼ばれるものを導入する．まず，あるパラメータ $\boldsymbol{k}=(k_1,k_2,\cdots)$ に依存し，そのパラメータ空間のある領域において 1 価である状態ベクトル $|u_{m\boldsymbol{k}}\rangle$ を考える．ただし m はこの状態を特徴付ける適当な離散的量子数である．スピン模型の場合には縮退はないとして話を進めてきたが，ここではもう少し一般化していくつかの状態が縮退している場合を考え，これらの状態を区別するための量子数を λ としよう．つまり 1 価の状態ベクトルのグループ $|u_{m\boldsymbol{k}\lambda}\rangle$ を考える [18]．この状態ベクトルに対する Berry 接続および Berry 曲率をそれぞれ以下の式で定義する [19]．

$$[\Lambda_{m\boldsymbol{k},\mu}]_{\lambda\lambda'} = -i\langle u_{m\boldsymbol{k}\lambda}|\frac{\partial}{\partial k_\mu}|u_{m\boldsymbol{k}\lambda'}\rangle, \tag{41}$$

$$F_{m\boldsymbol{k},\mu\nu} = -i[D_\mu, D_\nu], \quad D_\mu = \frac{\partial}{\partial k_\mu} + i\Lambda_{m\boldsymbol{k},\mu}. \tag{42}$$

特にパラメータが 3 成分の場合には，$\Omega_i = \epsilon_{ijk}F_{jk}/2$ を定義すると 3 次元ベクトルの外積を使って次のように書くことができる．

$$\boldsymbol{\Omega}_{m\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{\Lambda}_{m\boldsymbol{k}} + i\boldsymbol{\Lambda}_{m\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{\Lambda}_{m\boldsymbol{k}}, \tag{43}$$

$$\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}} = (\nabla_{k_1}, \nabla_{k_2}, \nabla_{k_3})^T = \left(\frac{\partial}{\partial k_1}, \frac{\partial}{\partial k_2}, \frac{\partial}{\partial k_3}\right)^T \tag{44}$$

縮退がない場合は $\boldsymbol{\Lambda}_{m\boldsymbol{k}}$ と $\boldsymbol{\Omega}_{m\boldsymbol{k}}$ を通常の 3 次元ベクトルとみなすことができて，電磁気学におけるベクトルポテンシャル磁束密度との間の関係と同様の式 $\boldsymbol{\Omega}_{m\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{\Lambda}_{m\boldsymbol{k}}$ が成り立つことがわかる．これまで見てきたスピン模型の例において，$|u_{m\boldsymbol{k}}\rangle$ に相当するのは $|m;\theta,\phi\rangle$ である．パラメータを 3 つにするためにダミーのパラメータ k を追加して，次のパラメータ空間を考えてみることにする．

$$k_1 = k\sin\theta\cos\phi, \quad k_2 = k\sin\theta\sin\phi, \quad k_3 = k\cos\theta \tag{45}$$

パラメータ空間における動径方向，極角方向，方位角方向の単位ベクトルをそれぞれ $\boldsymbol{e}_k$, $\boldsymbol{e}_\theta$, $\boldsymbol{e}_\phi$ と書くことにすると，結果を次のように表すことができる．

$$\boldsymbol{\Lambda}_{m\boldsymbol{k}} = \frac{m}{k}\cdot\frac{(1-\cos\theta)}{\sin\theta}\boldsymbol{e}_\phi, \quad \boldsymbol{\Omega}_{m\boldsymbol{k}} = \frac{m}{k^2}\boldsymbol{e}_k, \tag{46}$$

南極 $(\theta=\pi)$ において Berry 接続が特異的になりうまく定義できていないが，これは $|m;\theta,\phi\rangle(=|m;\theta,\phi\rangle_N)$ が南極で 1 価になっていないことと関係している．この状態ベクトルとゲージ変換で結ばれ，北極 $(\theta=0)$ 以外で 1 価となる状態ベクトル $|m;\theta,\phi\rangle_S$ を用いて計算した Berry 接続は，ゲージ変換の分だけ上記の結果とは異なったものとなる．(南極が特異点ではなくなる代わりに北極が特異点となる.) しかし，いずれの状態ベクトル

を用いても Berry 曲率のほうは同じ結果となる．つまり状態が離散的で縮退がないとしている場合には Berry 曲率はゲージ不変な量となる．先に電磁気学におけるベクトルポテンシャルと磁束密度との類似について述べたが，ゲージ変換に対する事情も類似した状況になっていわけである．また，上記の結果は Dirac の磁気単極子 [20, 21] におけるベクトルポテンシャルと磁束密度と同様のものである．Dirac 磁気単極子が電磁場（可換ゲージ場）の特殊解であったように，非可換ゲージ場の特殊解にも様々なものが見つかっており，幾何学的な観点からの理解が与えられている [21, 22]．したがって縮退状態のグループに対する Berry 位相・曲率に表れる特異性は，これらの特殊解やそれらを低次元に射影したものと関係することになる．

さて，回転磁場中のスピン模型の場合，時間に依存するパラメータとしてすぐに思いつくのは外部回転磁場の向き $(\theta_{\rm ex}(t), \phi_{\rm ex}(t)) = (\theta_0, \omega t)$ であろう．しかし，解の循環的な部分 $|u_m(t)\rangle = |m; \theta(t), \phi(t)\rangle$ におけるスピン量子化軸の方向 $(\theta(t), \phi(t))$ （スピン期待値の方向と一致）は回転磁場の方向とは異なることに注意されたい．仮に $(\theta(t), \phi(t))$ が $(\theta_{\rm ex}(t), \phi_{\rm ex}(t))$ の微分可能な関数として表せる場合であっても，$(\theta_{\rm ex}(t), \phi_{\rm ex}(t))$ のパラメータ空間で考えた Berry 接続・曲率は，上記の結果とは異なり，一般には複雑な様相を呈する．(原理的には変数変換行列を用いて式 (46) の結果を変換することにより計算することができる．) また，そもそも上記のような状況は必ずしも保証されず，$T = 2\pi/|\omega_{\rm eff}|$ の解における $\omega = 0$ の場合などがわかりやすい反例になっている．(固定された磁場の周りを $\omega_{\rm eff} = \omega_L$ で正則歳差運動する．) ここではそのような計算を具体的にすることはせずに，幾何学的位相 ϑ_g と Berry 接続・曲率との間に成り立つ関係について形式的に見ておくことにする．時刻 $t = 0$ から $t = T$ までの経路を C，経路 C によって囲まれる曲面を S として，式 (18) の最後の表式から幾何学的位相を直接評価してみると次のようになる．

$$\begin{aligned}
\vartheta_g &= -i\int_0^T dt \langle u_m(t)|\frac{d}{dt}|u_m(t)\rangle = -i\int_0^T dt\langle m;\theta(t),\phi(t)|\frac{d}{dt}|m;\theta(t),\phi(t)\rangle \\
&= -i\oint_C dt\frac{d\boldsymbol{k}}{dt}(t)\cdot\langle m;\theta(t),\phi(t)|\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}(t)}|m;\theta(t),\phi(t)\rangle = \oint_C d\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{k}} \\
&= \int_S d\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{k}} = m\int_S d\boldsymbol{S}\cdot\frac{\boldsymbol{e}_k}{k^2} \qquad (47)
\end{aligned}$$

ただし $d\boldsymbol{S}$ は面素ベクトル．最後の表式より，ϑ_g が曲面 S の立体角に m を掛けたものとなることが再び示される．これまで幾何学的位相を解の循環的な部分 $|u_m(t)\rangle$ が周期 T の間に得る位相として見てきたが，これはパラメータ空間における Berry 接続・曲率の線積分・面積分として与えられるということである．ここにも幾何学的位相の幾何学的たる所以が垣間見えるであろう．(パラメータの数が 3 以上の場合には上記の 3 次元ベクトル空間の議論はそのままでは適用できないが，多次元空間における幾何学を通じて理解することができる．) 以上のことは，幾何学的位相ひいてはその効果を考える上で Berry 接続・曲率がより基本的なものであることを意味している．次節以降ではこれらを通じて幾何学的位相の効果を見ていくことにする．

3 電子輸送現象の半古典論と幾何学的位相の効果

3.1 量子波束の半古典的運動方程式

ここでは量子輸送現象にみられる幾何学的位相の効果を理解するための準備として，その直観的な理解を助けてくれる半古典論を紹介する．これはSchrödinger方程式にしたがう波束の運動を半古典的に記述するため形式であり，もともとは電子のBloch波からつくった波束の運動に対するものとして導入された[23, 24, 25, 26, 27]．ここでは若干の拡張性を持たせるために，いくつかの仮定のもとでもう少し一般的な観点から説明することにする．実のところ波束の運動を解析することはそれほどたやすいことではない．原理的には無限自由度の波動方程式を解かなければならないからだ．そこで波束の中心座標や中心速度などの鍵となる変数を通してその運動を理解することを考える．量子力学によれば, 解析力学における作用とは波動関数の位相と対応しており, 古典的粒子の運動はこの作用が停留値をとる軌跡として導かれる．量子波がスピンなどの内部自由度をもっている場合には，前節でみてきたように幾何学的位相が現れる．したがって波束を粒子描像から捉えた運動方程式には，この位相の効果も考慮しなければいけない．話を進める前に，まずは表記上の注意をしておこう．以下では様々な引数をもつ関数が出てくるのだが，スペースを節約するために，次のような表記を用いることにする．例えば実空間の位置 $\boldsymbol{r}$ と時間 t を引数とする関数 $f(\boldsymbol{r}, t)$ を次のように書くことにする．

$$f(\boldsymbol{r}, t) \quad \rightarrow \quad f_{\boldsymbol{r},t}. \tag{48}$$

ただしある引数へのあらわな依存性（例えば時間依存性）が明らかな場合には対応する添え字は適宜省略する．

さて以下のSchrödinger型の波動方程式にしたがう波束を考えてみよう．

$$i\frac{d}{dt}|\psi\rangle \;\;=\;\; \mathcal{H}|\psi\rangle \tag{49}$$

量子力学の場合, $|\psi\rangle$ は量子力学的波動関数, $\mathcal{H}$ はハミルトニアンであり, Schrödinger方程式そのものである．電磁波に対しては, 誘電率テンソル ϵ および透磁率テンソル μ が座標のみの関数として近似できる場合は, 次の対応関係によりMaxwell方程式の書き変えになっている．

$$\langle \boldsymbol{r}|\psi\rangle \;\;=\;\; \frac{1}{\sqrt{2E_{EM}}}\begin{pmatrix} \epsilon_{\boldsymbol{r}}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{r},t} \\ \mu_{\boldsymbol{r}}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{r},t} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{H}_{\boldsymbol{r}} = \begin{pmatrix} 0 & \epsilon_{\boldsymbol{r}}^{-\frac{1}{2}}(\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{S})\mu_{\boldsymbol{r}}^{-\frac{1}{2}} \\ -\mu_{\boldsymbol{r}}^{-\frac{1}{2}}(\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{S})\epsilon_{\boldsymbol{r}}^{-\frac{1}{2}} & 0 \end{pmatrix}, \tag{50}$$

ただし $\boldsymbol{S}$ は ϵ_{ijk} を完全反対称テンソルとして $[S_i]_{jk} = -i\epsilon_{ijk}$. である．また光波束の全エネルギーを E_{EM} として，以下では規格化した波動関数を考える．実は，巨視的な電磁波を想定したこの形式には，運動方程式の導出において若干の問題があるのだが，とりあ

えず電磁波の場合も電子の場合と大体同じように取り扱えるものだと納得いただきたい．こういった事情により文献[28, 29]では第2量子化の形式を用いて光子の運動方程式を導出している．

波動方程式(49)が解ければ波束の運動も詳細に分ることになるが，問題を置き換えて次式を時間積分したものの停留値問題を考えてみる[30]．

$$\mathcal{L} = \langle\psi|i\frac{d}{dt} - \mathcal{H}|\psi\rangle \tag{51}$$

この量は波動関数 $|\psi\rangle$ が厳密なものであれば，$\mathcal{L}=0$ でなければならない．ここでは中心座標と中心運動量に対応する変数 $\boldsymbol{r}_c$ と $\boldsymbol{k}_c$ を用いて試行関数を構成し，$\int dt\,\mathcal{L}$ の停留値問題を考えることにより，波束の運動を理解しようというわけである[31]．これらの変数は時間 t に依存するものとし，以下ではその時間変化を支配する運動方程式を変分原理から導くという手続きをとる．また偏極状態などの内部自由度に縮退がある場合は，その自由度に対応した変数の組 $\{z_{\boldsymbol{k}\lambda}\}$ (λ: 縮退状態の指標, $\sum_\lambda |z_{\boldsymbol{k}\lambda}|^2 = 1$) を導入する．この変数も時間依存性をもつものとする．摂動がなく系が周期的である場合の解とその固有エネルギー $\epsilon_{n\boldsymbol{k}}$ (n:バンド指標) は分っているものとして，動的位相因子 $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-i\epsilon_{n\boldsymbol{k}}t}$ を除いた部分を $\langle\boldsymbol{r}|u_{n\boldsymbol{k}\lambda}\rangle$ と表すことにする．次に，$|u_{n\boldsymbol{k}\lambda}\rangle$ を参考にして，摂動のもとで $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_c$ 近傍において良い近似解となり，エネルギー期待値の近似値 $\mathcal{E}_{n\boldsymbol{k};\boldsymbol{r}_c} \cong \langle\psi|\mathcal{H}|\psi\rangle$ をもつ $|u_{n\boldsymbol{k}\lambda;\boldsymbol{r}_c}\rangle$ を構成する．例えば電子系において摂動として弱磁場 $\boldsymbol{B}_{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}} \times \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{r}}$ を考えた場合，$\langle\boldsymbol{r}|u_{n\boldsymbol{k}\lambda;\boldsymbol{r}_c}\rangle = e^{ie\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{r}_c}\cdot\boldsymbol{r}}\langle\boldsymbol{r}|u_{n\boldsymbol{k}\lambda}\rangle$ のような関数を考えることを意味する．

一般的には摂動により縮退が解ける可能性があるが，簡単のために縮退の分裂が無視できるとして，以下の試行関数を考えてみよう．

$$\langle\boldsymbol{r}|W\rangle = \int_{\mathrm{BZ}} \frac{d\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3} w_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}_c} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-i\vartheta_{\boldsymbol{k},t}} \sum_\lambda z_{\boldsymbol{k}\lambda}\langle\boldsymbol{r}|u_{n\boldsymbol{k}\lambda;\boldsymbol{r}_c}\rangle \tag{52}$$

積分範囲の添え字BZは積分範囲を第1Brillouinゾーンに制限することを表す．(ただし周期系でない場合や運動量空間における局所的な有効模型などに対しては，適宜解釈しなおすこととする．) ここで $|w_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}_c}|$ は $\boldsymbol{k}\sim\boldsymbol{k}_c$ 近傍にピークをもち，κ 程度の拡がりをもってる関数である．(したがって実空間における拡がりは $1/\kappa$ 程度．) また $\int_{\mathrm{BZ}}\frac{d\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}|w_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}_c}|^2 = 1$ および $\int_{\mathrm{BZ}}\frac{d\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}|w_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}_c}|^2\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}_c$ を満たすものとする．

波束の座標期待値は次式のように評価することができる．

$$\boldsymbol{r}_c \cong \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}_c}\vartheta_{\boldsymbol{k}_c,t} - (z_{\boldsymbol{k}_c}|\boldsymbol{\Lambda}_{n\boldsymbol{k}_c}|z_{\boldsymbol{k}_c}) + i(z_{\boldsymbol{k}_c}|\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}_c}|z_{\boldsymbol{k}_c}), \tag{53}$$

$$[\boldsymbol{\Lambda}_{n\boldsymbol{k}}]_{\lambda\lambda'} = -i\langle u_{n\boldsymbol{k}\lambda}|\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}|u_{n\boldsymbol{k}\lambda'}\rangle \tag{54}$$

ここで $|z_{\boldsymbol{k}_c})$ は $\{z_{\boldsymbol{k}_c\lambda}\}$ をベクトル表示したものであり，$|u_{n\boldsymbol{k}\lambda}\rangle$ は $\langle u_{n\boldsymbol{k}\lambda}|u_{n\boldsymbol{k}\lambda'}\rangle = \delta_{\lambda\lambda'}$ と規格化されているとした．式(54)で定義される $\boldsymbol{\Lambda}_{n\boldsymbol{k}}$ は運動量空間におけるBerry接続と呼ばれ，$|u_{n\boldsymbol{k}\lambda}\rangle$ の幾何学的位相を反映して第2項の補整をもたらす．この関係式をつかって，式(51)の $|\psi\rangle$ を $|W\rangle$ で置き換えたものを計算すると次式が得られる．

$$\mathcal{L} \cong (\boldsymbol{k}_c + e\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{r}_c})\cdot\frac{d\boldsymbol{r}_c}{dt} - \frac{d\boldsymbol{k}_c}{dt}\cdot(z_{\boldsymbol{k}_c}|\boldsymbol{\Lambda}_{n\boldsymbol{k}_c}|z_{\boldsymbol{k}_c}) + i(z_{\boldsymbol{k}_c}|\frac{d}{dt}|z_{\boldsymbol{k}_c}) - \mathcal{E}_{n\boldsymbol{k}_c;\boldsymbol{r}_c} \tag{55}$$

ただし摂動の微分$/k_c$およびκ/k_cの2次以上を無視し，時間に関する全微分項を省略した．したがって，この結果が良い評価式であるためには，摂動の空間変化は波長$(2\pi/k_c)$に比べて十分に緩やかであり，また波束の拡がりも波長に比べて十分に大きい必要がある．前者の条件は波束が波長程度進む間の状態変化が十分遅い状況を考えていることになり，ある種の断熱近似に相当する．最後に式(55)の変分をとることにより，目的とする運動方程式が得られる．以下では表示を簡素にするために，$\boldsymbol{r}_c$や$\boldsymbol{k}_c$を単に$\boldsymbol{r}$や$\boldsymbol{k}$と表した．

$$\frac{d\boldsymbol{r}}{dt} = \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}\mathcal{E}_{n\boldsymbol{k};\boldsymbol{r}} + \frac{d\boldsymbol{k}}{dt} \times (z_{\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{\Omega}_{n\boldsymbol{k}}|z_{\boldsymbol{k}}), \tag{56}$$

$$\frac{d\boldsymbol{k}}{dt} = -\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}}\mathcal{E}_{n\boldsymbol{k};\boldsymbol{r}} + \frac{d\boldsymbol{r}}{dt} \times e\boldsymbol{B}_{\boldsymbol{r}}, \tag{57}$$

$$i\frac{d}{dt}|z_{\boldsymbol{k}}) = \frac{d\boldsymbol{k}}{dt} \cdot \boldsymbol{\Lambda}_{n\boldsymbol{k}}|z_{\boldsymbol{k}}). \tag{58}$$

ここで$\boldsymbol{B}_{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}} \times \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{r}}$は外部磁場，$\boldsymbol{\Omega}_{n\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{\Lambda}_{n\boldsymbol{k}} + i\boldsymbol{\Lambda}_{n\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{\Lambda}_{n\boldsymbol{k}}$は運動量空間のBerry曲率である．式(56)と式(57)を対比してみると，Berry曲率が運動量空間における磁場としての働きをしていることが見て取れる．また，エネルギー保存則$d\mathcal{E}_{n\boldsymbol{k};\boldsymbol{r}}/dt = 0$も確認できるであろう．

式(56)の第2項はエネルギー分散から決まる群速度と区別して，異常速度と呼ばれる[32]．後ほど見るように異常速度は，電子系における量子Hall効果，異常Hall効果，スピンHall効果に対する幾何学的な解釈を与えてくれる．また電子系に限らず界面における光の全反射の際に見られるImbert-Fedorov効果[33, 34, 35, 36]もこの効果の一形態，つまり光のスピンHall効果として理解することができる．

3.2 量子Hall効果の半古典論

ここでは半古典的運動方程式の具体的な例として，周期ポテンシャル$V_{\boldsymbol{r}}$中の2次元電子系に一様な磁場$\boldsymbol{B}$をかけた場合[23, 24]について見ていくことにする．ただし簡単のために電子スピンは無視して話を進める．外部電場$\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{r}}$の効果も考慮するが，これは十分に小さいとして摂動的に扱う．外部磁場に関しては次のように2つの部分に分けて，第2項に関しては摂動的に扱うことにする．

$$\boldsymbol{B} = \frac{\phi_0}{a^2}\frac{p}{q}\boldsymbol{e}_z + \delta\boldsymbol{B} \tag{59}$$

ただしϕ_0は磁束量子，aは周期ポテンシャルの格子定数，pおよびqは互いに素な整数．このような分離は必ずしも一意的ではないが，ここでは半古典的な描像を通した理解のための1つの方便だと考えてもらいたい．いま第1項だけを考えると，Landau準位の分裂に比べて周期ポテンシャルが十分弱い場合には，各Landau準位がp本のサブバンドに分裂するという描像が成り立ち，一方，周期ポテンシャルが非常に強い場合には，周期ポテンシャルによるBlochバンドがq本のサブバンドに分裂するという描像が成り立

つ．両者の物理的な状況はまったく異なるわけだが，いずれも周期性をうまく利用して見通しを良くしている点が重要であり，同じようにして取り扱うことが出来る [37, 38]．以下で使うバンドの指標 n は，このようにして分裂したサブバンドを表す．簡単のためサブバンドには縮退がないものとして話を進める．この場合，パラメータ $|z_{\boldsymbol{k}}\rangle$ は絶対値が 1 の単純な 1 成分複素変数となり幾何学的位相シフトを記述することになるが，以下の議論には直接関係しないので以後省略する．周期ポテンシャルと整合する磁場を与えるベクトルポテンシャルを $\boldsymbol{A}_{0\boldsymbol{r}}$ と表すことにすると，Bloch 関数 $\langle\boldsymbol{r}|\psi_{n\boldsymbol{k}}\rangle = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\langle\boldsymbol{r}|u_{n\boldsymbol{k}}\rangle$ は次の方程式を満たす．

$$\epsilon_{n\boldsymbol{k}}\langle\boldsymbol{r}|\psi_{n\boldsymbol{k}}\rangle = \mathcal{H}_{0\boldsymbol{r}}\langle\boldsymbol{r}|\psi_{n\boldsymbol{k}}\rangle, \quad \mathcal{H}_{0\boldsymbol{r}} = \frac{1}{2m_e}\left(-i\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}} - e\boldsymbol{A}_{0\boldsymbol{r}}\right)^2 + V_{\boldsymbol{r}} \tag{60}$$

次に周期ポテンシャルと整合的な磁束密度からのずれを与える $\delta\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{r}}$ と弱電場を与える静電ポテンシャル $\phi_{\boldsymbol{r}}$ の摂動が入った場合を考える．

$$\mathcal{H}_{\boldsymbol{r}} = \frac{1}{2m_e}\left(-i\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}} - e\boldsymbol{A}_{0\boldsymbol{r}} - e\delta\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{r}}\right)^2 + V_{\boldsymbol{r}} + e\phi_{\boldsymbol{r}} \tag{61}$$

前者の摂動 $\delta\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{r}}$ の効果を考慮するために試行関数の構成要素に次の近似を導入する．

$$\langle\boldsymbol{r}|u_{n\boldsymbol{k};\boldsymbol{r}_c}\rangle = e^{ie\delta\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{r}_c}\cdot\boldsymbol{r}}\langle\boldsymbol{r}|u_{n\boldsymbol{k}}\rangle \tag{62}$$

ベクトルポテンシャルに対して対称ゲージ $\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{r}} = \frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}$ をとるとエネルギー期待値が次のように評価される．

$$\mathcal{E}_{n\boldsymbol{k}_c;\boldsymbol{r}_c} = \epsilon_{n\boldsymbol{k}_c} - \frac{e}{2m_e}\delta\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\mathcal{S}}_{n\boldsymbol{k}_c} + e\phi_{\boldsymbol{r}_c}, \tag{63}$$

$$\boldsymbol{\mathcal{S}}_{n\boldsymbol{k}} = -im_e\langle\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}u_{n\boldsymbol{k}}|\left(\epsilon_{n\boldsymbol{k}} - \mathcal{H}_0\right)\times|\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}u_{n\boldsymbol{k}}\rangle \tag{64}$$

ただし摂動 $\delta\boldsymbol{B}$ が弱く，磁気長 $1/\sqrt{e\delta B}$ が波束の広がりに比べて十分大きく，$e\delta B/m_e$ は $\epsilon_{n\boldsymbol{k}}$ などのエネルギースケールに比べて十分小さいとして摂動の 2 次以上は無視した．ここで $\boldsymbol{\mathcal{S}}_{n\boldsymbol{k}_c}$ は以下の評価から出てきたもので，波束の中心 $\boldsymbol{r}_c$ の周りの回転を特徴付ける量になっており直観的には内部軌道角運動量と同等のものと考えられる．

$$\int d\boldsymbol{r}\langle W|\boldsymbol{r}\rangle(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_c)\times\left(-i\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}} - e\boldsymbol{A}_{0\boldsymbol{r}}\right)\langle\boldsymbol{r}|W\rangle \cong \boldsymbol{\mathcal{S}}_{n\boldsymbol{k}_c} \tag{65}$$

興味深いことに，左辺は波束に対するものであるにも関わらず，式 (64) の $\boldsymbol{\mathcal{S}}_{n\boldsymbol{k}}$ は Bloch 関数さえわかれば評価できる表式になっている．Bloch 状態は広がった状態なので，素朴な意味での内部角運動量というものを定義することはできないが，$\boldsymbol{\mathcal{S}}_{n\boldsymbol{k}}$ がそのような広がった状態の内部回転というものに対する目安だと考えることもできるであろう．

さて以上の結果および $\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}}\phi_{\boldsymbol{r}} = -\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{r}}$ を用いて運動方程式を書き下して見よう．再び表示の簡素化のために $\boldsymbol{r}_c$ および $\boldsymbol{k}_c$ を単に $\boldsymbol{r}$ および $\boldsymbol{k}$ と書くことにする．

$$\frac{d\boldsymbol{r}}{dt} = \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}\tilde{\epsilon}_{n\boldsymbol{k}}[\delta\boldsymbol{B}] + \frac{d\boldsymbol{k}}{dt}\times\boldsymbol{\Omega}_{n\boldsymbol{k}}, \quad \tilde{\epsilon}_{n\boldsymbol{k}}[\delta\boldsymbol{B}] = \epsilon_{n\boldsymbol{k}} - \frac{e}{2m_e}\delta\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\mathcal{S}}_{n\boldsymbol{k}}, \tag{66}$$

$$\frac{d\boldsymbol{k}}{dt} = e\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{r}} + \frac{d\boldsymbol{r}}{dt}\times e\delta\boldsymbol{B}. \tag{67}$$

上記の方程式の意味するところを理解するために，2つの特徴的な状況を考えてみる．1つは磁場が非常に弱く $\boldsymbol{B} = \delta \boldsymbol{B}$ である場合，もう1つは磁場は強いが $\delta \boldsymbol{B} = 0$ の場合である．前者の場合は，周期ポテンシャルによる通常の Bloch バンドに対して摂動を考えることになるので，$\boldsymbol{\Omega}_{n\boldsymbol{k}} = 0$ かつ $\boldsymbol{\mathcal{S}}_{n\boldsymbol{k}} = 0$ であり，磁場の効果は2番目の方程式の右辺に Lorentz 力として現れる．一方，後者の場合は Lorentz 力が現れないかわりに，一般には $\boldsymbol{\Omega}_{n\boldsymbol{k}} \neq 0$ となり，磁場の効果は1番目の方程式の右辺第2項の異常速度項として現れる．ところで，$\boldsymbol{\mathcal{S}}_{n\boldsymbol{k}_c}$ は波束の内部軌道角運動量に相当するものだと述べたが，この量は Berry 曲率 $\boldsymbol{\Omega}_{n\boldsymbol{k}}$ とも非常に似た形をしている．つまり運動方程式に現れる Berry 位相の効果とは Bloch 波がもつ内部軌道角運動量に由来しているという見方もでき，それはスピンなどのもともと持っている内部角運動量に限らないということができる．この内部回転の起源は何かを正確に答えることは難しいが，直観的には波束の広がり程度まで縮んだサイクロトロン運動だと考えられる．

文献 [23, 24, 25] では上記の運動方程式と Boltzmann 方程式を組み合わせた輸送現象の半古典的な記述法についても議論されている．この節の最後にこの話題を紹介する．以下の議論では系の次元は当面問題にならないので，しばらく一般的に d 次元系を想定しているとして話を進める．まず Bloch 波から構成した波束を古典的な粒子だと見なし，n バンド電子の分布関数 $f_{n\boldsymbol{k},\boldsymbol{r},t}$ を考える．ただし一様平衡状態における分布には Fermi 統計性を考慮して，Fermi 分布 $f_F(\epsilon)$ を仮定する．

$$f_F(\epsilon) = \frac{1}{1+e^{\beta(\epsilon-\mu)}} \tag{68}$$

ここで ϵ はエネルギー，μ は化学ポテンシャル，$\beta = k_B T$（k_B：Boltzmann 定数，T：温度）である．特に定常状態（$f_{n\boldsymbol{k},\boldsymbol{r},t} \to f_{n\boldsymbol{k},\boldsymbol{r}}$）を考え，さらに散乱などによる緩和の効果を緩和時間 $\tau_{n\boldsymbol{k},\boldsymbol{r}}$ で近似することにすると，Boltzmann 方程式を次のように表わすことができる．

$$\frac{d\boldsymbol{r}}{dt}\cdot\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}} f_{n\boldsymbol{k},\boldsymbol{r}} + \frac{d\boldsymbol{k}}{dt}\cdot\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}} f_{n\boldsymbol{k},\boldsymbol{r}} = -\frac{1}{\tau_{n\boldsymbol{k},\boldsymbol{r}}}\left[f_{n\boldsymbol{k},\boldsymbol{r}} - f_F(\epsilon_{n\boldsymbol{k}})\right] \tag{69}$$

一様な場合（$f_{n\boldsymbol{k},\boldsymbol{r}} \to f_{n\boldsymbol{k}}$，$\tau_{n\boldsymbol{k},\boldsymbol{r}} \to \tau_{n\boldsymbol{k}}$）には，線形応答の範囲で次の近似解が得られる．

$$f_{n\boldsymbol{k}} = f_F(\epsilon_{n\boldsymbol{k}}) - \tau_{n\boldsymbol{k}}\frac{d\boldsymbol{k}}{dt}\cdot\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}} f_F(\epsilon_{n\boldsymbol{k}}) \tag{70}$$

特に $\delta\boldsymbol{B} = 0$ の場合を考えると，上記の結果と運動方程式より電流密度 $\boldsymbol{J}$ の電場 $\boldsymbol{E}$ に対する線形応答が得られる．

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J} &= \sum_n \int_{\mathrm{BZ}} \frac{d\boldsymbol{k}}{(2\pi)^d} f_{n\boldsymbol{k}}\, e\frac{d\boldsymbol{r}}{dt} \\ &= e^2 \sum_n \int_{\mathrm{BZ}} \frac{d\boldsymbol{k}}{(2\pi)^d}\left[\left\{-\frac{df_F}{d\epsilon}(\epsilon_{n\boldsymbol{k}})\right\}\tau_{n\boldsymbol{k}}\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}\epsilon_{n\boldsymbol{k}}\left(\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}\epsilon_{n\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{E}\right) - f_F(\epsilon_{n\boldsymbol{k}})\,\boldsymbol{\Omega}_{n\boldsymbol{k}}\times\boldsymbol{E}\right]\end{aligned} \tag{71}$$

第1項はFermi面近傍からの寄与を表しており，幾何学的な位相の有無にかかわらず通常の金属であれば有限の伝導率を与える．第2項はFermi面以下の状態のBerry曲率を積分したものとなっており，この表式をもとにすればFermi面以下のすべての状態が寄与している効果だと解釈することができる.（ただし，部分積分をすればわかるように，これらの解釈はあくまで上記の表式に基づくものであることに注意されたい.）また，第2項の寄与を$\boldsymbol{J}_{\rm geo}$と書くことにすると，$\boldsymbol{J}_{\rm geo}\cdot\boldsymbol{E}=0$であることより，この寄与がエネルギー散逸のないHall電流であることが見て取れる．

話を一様磁場中2次元系の話に戻し，Fermi準位がサブバンド間のギャップにある場合を考えてみよう．この場合は第1項からの寄与は消えることになるが，第2項は必ずしも消えるとは限らない．前にBerry曲率と磁束密度の類似性を述べたが，第2項の伝導率への寄与は2次元運動量空間における占有領域を貫く仮想磁束数を数えていることになる．いまの場合，運動量空間の積分範囲は第1Brillouinゾーン全体にわたるので，運動量空間の閉曲面をつらぬく全仮想磁束数となる．この仮想磁束は1価波動関数$|u_{n\boldsymbol{k}}\rangle$を用いて定義されているが，この1価関数は必ずしも第1Brillouinゾーン全体にわたり定義することはできず，一般には各領域において定義された1価関数をゲージ変換により張り合わせることにより，第1Brillouinゾーン全体にわたる関数として定義されるものである．このような事情により，Hall伝導率がゼロでない場合は（$\hbar=1$の単位系では）$\frac{e^2}{2\pi}$を単位として量子化することが結論される [37, 38].（Planck定数をあらわにに書くと，$\frac{e^2}{h}$を単位として量子化される.）簡単のために，2つの領域$D_{\rm I}$および$D_{\rm II}$を考えれば十分である場合を例に量子化の仕組みを見てみよう．$D_{\rm I}$において定義される1価関数$|u^{\rm I}_{n\boldsymbol{k}}\rangle$と$D_{\rm II}$において定義される1価関数$|u^{\rm II}_{n\boldsymbol{k}}\rangle$を考え，それらが$D_{\rm I}\cap D_{\rm II}$において，ゲージ変換$|u^{\rm II}_{n\boldsymbol{k}}\rangle=e^{i\vartheta_{n\boldsymbol{k}}}|u^{\rm I}_{n\boldsymbol{k}}\rangle$により関係づけられているとしよう．このとき，$n_F$をFermi準位以下のバンドの指標の最大値として，Hall伝導率を次のように書くことができる．

$$
\begin{aligned}
\sigma_{xy} &= e^2\sum_{n\le n_F}\int\frac{d\boldsymbol{k}}{(2\pi)^2}\,\Omega_{n\boldsymbol{k},z}=e^2\sum_{n\le n_F}\int\frac{d\boldsymbol{k}}{(2\pi)^2}\,\left[(-i)\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}\times\langle u_{n\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}|u_{n\boldsymbol{k}}\rangle\right]_z \\
&= \frac{e^2}{(2\pi)^2}\sum_{n\le n_F}\oint_{C\in D_{\rm I}\cap D_{\rm II}}d\boldsymbol{k}\cdot(-i)\left[\langle u^{\rm II}_{n\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}|u^{\rm II}_{n\boldsymbol{k}}\rangle-\langle u^{\rm I}_{n\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}|u^{\rm I}_{n\boldsymbol{k}}\rangle\right] \\
&= \frac{e^2}{(2\pi)^2}\sum_{n\le n_F}\oint_{C\in D_{\rm I}\cap D_{\rm II}}d\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}\vartheta_{n\boldsymbol{k}}
\end{aligned}
\tag{72}
$$

ただしCは$D_{\rm I}\cap D_{\rm II}$に含まれる任意の閉曲線である．波動関数$|u^{\rm I}_{n\boldsymbol{k}}\rangle$および$|u^{\rm II}_{n\boldsymbol{k}}\rangle$はともに1価であるので，上記の線積分は必ず$2\pi$の整数倍でなければならない．したがって，Hall伝導率が$\frac{e^2}{2\pi}$を単位として量子化されることになる．

以上の議論では不純物散乱や電子間相互作用などの効果を考慮していないが，不純物散乱を考慮した場合でも位相幾何学的な理由により量子化が起こり，それ故にこの効果が堅牢であることが示されている [39, 40, 41]．またこれに先立ちゲージ対称性に基づいたかなり一般的な観点から量子化を説明する「Laughlinの思考実験」が知られている [42]．ただし歴史的には，位相幾何学的な観点からの理解に先行して，線形応答理論に基づいた

量子化の理論的示唆があり [43]，実験的に Hall 抵抗率の量子化が確認されている [44, 45]．この効果は応用上も重要で電気抵抗標準や微細構造定数の決定に使われている．

これまで暗黙に無限系を仮定して議論してきたが，現実の試料は有限サイズであり必ず試料端が存在する．また Fermi 準位がバルクの Landau 準位の中間にある場合でも試料の両端につないだ電極間には電流が流れる．どうしてこのようなことが起こり得るのであろうか．この問題に対する一つの解答として，カイラル・エッジ状態と呼ばれる特殊な端状態の存在による説明がある [46]．カイラル・エッジ状態とは，試料端垂直方向には局在しているが試料端に沿った方向には広がっている状態で，しかもそのエネルギー分散がバルクの Landau 準位間のエネルギーギャップを跨ぐような形になっているため，少なくともギャップ中のあるエネルギー領域においては特定の方向にしか伝搬できないような状態である．このような状態をいったん仮定すると，Hall 伝導率が自動的に量子化することが示される [47]．さて，バルク状態に対する久保公式から導いた量子化 Hall 伝導率とカイラル・エッジ状態による量子化 Hall 伝導率の関係はどうなっているのでろうか．先にバルクの Hall 伝導率が量子化するのは，位相幾何学的な理由によるものだと述べたが，実は e^2/h を単位としたバルクの Hall 伝導率は Chern 数と呼ばれる位相不変量になっている [37, 38]．また，ある特定の試料端上のカイラル・エッジ状態の本数（正確には winding 数と呼ばれる量）も位相不変量になっているおり，これら 2 種類の位相不変量の対応関係をもとに，バルクの Hall 伝導率とエッジの Hall 伝導率の等価性が数学的に示されている [48]．正確ではないが，もう少し素朴な言い方をすると，Fermi 準位がバルクのギャップ中にあって Hall 伝導率が量子化していると，量子化の整数値に応じた数のカイラル・エッジ状態が Fermi 準位に必ず存在することになる．

3.3 幾何学的異常 Hall 効果

前節の結果より幾何学的位相の効果が顕著になるのは十分大きな一様磁場がある場合であるが，スピンや原子軌道などによる自由度を考慮すると，実は必ずしもそのような制限はないことが強磁性体における異常 Hall 効果の例に見ることができる.（このような多自由度への拡張としては副格子系なども含まれる.）異常 Hall 効果とは，Hall 抵抗率が磁場に依存する部分に加え磁化にも依存する部分をもつという効果である．多くの場合これらの依存性は線形で現れるため，現象論的には次の式で表わされる．

$$\rho_{xy} = R_0 H_z + R_s M_z. \tag{73}$$

ただし H_z および M_z はそれぞれ磁場および磁化の z 方向成分である．異常 Hall 効果の起源としては様々な提案があるが，よく知られたものとして多バンド効果による機構 [49, 50] や不純物散乱による機構 [51, 52] が挙げられる．いずれもスピン軌道相互作用などにより，スピンと軌道運動の自由度が独立ではなく，一方の変化が必然的にもう一方の変化を引き起こすような結合がその鍵となっている．後者の機構には散乱角がスピンに依存するスキュー散乱による機構 [51] と不純物ポテンシャルによる横シフトがスピンに依存する

というサイドジャンプによる機構 [52] がある．幾何学的位相の効果として解釈することができるのは，多バンド効果による機構とサイドジャンプによる機構である．ここでは前節の議論との対応を考えて，多バンド効果による機構を紹介する．

簡単のため各バンドは縮退していないものとし，また不純物効果は無視できるもとの仮定すると，前節の議論より Hall 伝導率を次のように表すことができる．(当面 d 次元系を考える．)

$$\begin{aligned}\sigma_{xy} &= e^2\sum_n\int\frac{d\boldsymbol{k}}{(2\pi)^d}f_F(\epsilon_{n\boldsymbol{k}})\,\Omega_{n\boldsymbol{k},z} = e^2\sum_n\int\frac{d\boldsymbol{k}}{(2\pi)^d}2f_F(\epsilon_{n\boldsymbol{k}})\mathrm{Im}\left[\langle\nabla_{k_x}u_{n\boldsymbol{k}}|\nabla_{k_y}u_{n\boldsymbol{k}}\rangle\right]\\ &= \sum_{n\neq m}\int\frac{d\boldsymbol{k}}{(2\pi)^d}\frac{f_F(\epsilon_{n\boldsymbol{k}})-f_F(\epsilon_{m\boldsymbol{k}})}{(\epsilon_{n\boldsymbol{k}}-\epsilon_{m\boldsymbol{k}})^2}\mathrm{Im}\left[\langle u_{n\boldsymbol{k}}|J_{\boldsymbol{k},x}|u_{m\boldsymbol{k}}\rangle\langle u_{m\boldsymbol{k}}|J_{\boldsymbol{k},y}|u_{n\boldsymbol{k}}\rangle\right] \qquad (74)\end{aligned}$$

ただし $H_{\boldsymbol{k}}$ を $H_{\boldsymbol{k}}|u_{n\boldsymbol{k}}\rangle = \epsilon_{n\boldsymbol{k}}|u_{n\boldsymbol{k}}\rangle$ を満たす演算子，つまり $|u_{n\boldsymbol{k}}\rangle$ に対するハミルトニアンとして，$|u_{n\boldsymbol{k}}\rangle$ に対する電流演算子 $\boldsymbol{J}_{\boldsymbol{k}} = e\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}H_{\boldsymbol{k}}$ を導入した．最後の表式は周期系に対する久保公式に他ならず，文献 [50] によりマスター方程式から導かれた結果とも一致する．この表式より一様外部磁場がなくとも，多バンド系において電流演算子 $\boldsymbol{J}_{\boldsymbol{k}}$ が非対角要素をもつ場合には，Hall 伝導率が有限になりえることが分かる．ただし電流演算子の x 方向成分と y 方向成分の非対角要素の積が虚数部分をもつ必要があり，ハミルトニアンが実行列であらわされるような場合にはゼロになってしまう．したがって複素構造が入ってくるような効果が必要になる．実際，複素構造が入ったハミルトニアンで表わされる系に対しては，時間反転対称性がある場合でも Berry 曲率 $\Omega_{n\boldsymbol{k}}$ が有限となる．ただし時間反転対称性が保たれている場合は，時間反転操作により関係づけられる状態同士の寄与が相殺して，Hall 伝導率自体はゼロになってしまう．(例えば副格子間にポテンシャル差がある蜂の巣格子模型 [53].) したがって，多バンド効果により Hall 伝導率が有限になるためのポイントとしては以下のものが必須だと言える．

1. スピン軌道相互作用などによるスピンと軌道運動の結合．
2. 自発磁化や自発的渦電流パターンなどによる時間反転の破れ．

このような状況を再現している模型としては，結晶構造と同じ周期性の交替磁場が入った蜂の巣格子模型 [54] がある．(周期的な交替磁場は渦電流の周期的パターンだとも見なせる．) 状況設定としては少々現実離れしているが，一様磁場がない場合でも系が本来もっている特性によって自発的に Hall 効果が起こり得ることを示す好例となっている．(しかもフェルミ準位がギャップ中にある場合は自発的量子 Hall 効果が起こる．) この模型ではスピンは考慮されていないが，蜂の巣格子は 2 つの副格子からなるので，これら副格子の自由度を擬スピンと見なすことができる．もともとが格子構造からくる内部自由度であるため，必然的に擬スピンと軌道運動は結合しており，そこに交替磁場（あるいは渦電流パターン）が生じることで時間反転対称性が破れ Hall 伝導率が有限となるわけである．

より現実的な模型としては，後述のスピン・カイラル秩序による異常 Hall 効果 [9, 10] の説明に用いられたカゴメ格子模型 [55] があげられる．この模型はパイロクロア結晶構

造をもつ酸化物 $Nd_2Mo_2O_7$ における異常 Hall 効果 [56] を解明するために提案されたものである．$Nd_2Mo_2O_7$ は金属強磁性体であるが，スピンの秩序が単純に一方向を向いた配置ではなく，スピン同士がある一定の角度をもって配列し，しかも隣り合った3つのスピンが作る立体角が有限となるような配置をとる．この立体角（の半分）はスピン・カイラリティと呼ばれ，スピン・カイラリティが有限となるようなスピン配置をカイラル秩序と呼ぶ．さて，このような非自明なスピン秩序の上の伝導電子は，サイトごとに異なる方向のスピン異方性を感じ，スピンの頭を振りながら走り抜けることになる．つまり，スピンと軌道運動が結合しており，実効的なスピン軌道相互作用が生じているわけである．もっとも，カイラル秩序の出現自体が微視的なスピン軌道相互作用の働きによるものであるので，階層的にスピン軌道相互作用が現れていることになり，この点も興味深い．この機構による異常 Hall 効果はスピン・カイラリティ機構による異常 Hall 効果と呼ばれている．以上のシナリオは内因的な機構であるが，スピン・カイラリティをもった局在スピンによる散乱効果から説明するシナリオも提案されている [57]．この点は，多バンド効果による機構とサイドジャンプによる機構が，内因的か外因的かの違いはあれ，いずれも幾何学的位相の効果の現れであることと類似している．

さて，それでは多バンド効果による機構の提案において当初想定されていた平行配置のスピン秩序の場合にはどうなのであろうか．このような状況に対しても，強磁性金属に対する t_{2g} バンド模型 [58] や強磁性半導体に対する Luttinger 模型 [59] に基づいた計算から，幾何学的位相の効果による寄与が有限になることが確かめられている．(Luttinger 模型に関しては後述のスピン Hall 効果のところで詳しく述べる．) その後，第一原理計算と実験との比較も行われ，$SrRuO_3$[60] や bcc Fe[61] など多くの強磁性金属の異常 Hall 効果において，幾何学的位相の効果が主要な寄与をすることが示されている．

ところで Hall 伝導率の表式 (74) は久保公式からも導出されることから，幾何学的位相の効果は線形応答理論に織り込み済みのものであると言える．では幾何学的位相の効果という観点から眺めることで，何がうれしいのであろうか．これまで見てきた中でもっとも顕著だったのは，量子 Hall 効果に見られる Hall 伝導率の量子化の厳密性とその堅牢性を裏付けてくれるということであろう [37, 38, 39, 41]．それでは強磁性金属における異常 Hall 効果の場合にはどうであろうか．式 (74) より，Hall 伝導率に寄与するのは Fermi 準位以下の状態の Berry 曲率であるので，Berry 曲率の分布が劇的に変化すれば Hall 伝導率にもその影響が現れるはずである．実はこのような変化がどのような場合に起こりえるのかについては，量子 Hall 系における位相幾何学的相転移の議論 [62, 63, 64, 65] が重要な知見を与えてくれるのである．この節の最後にこの議論 [58] について紹介しよう．鍵となるのはバンド間の交差と反発である．

バンド交差近傍の 2 つの隣接バンドの有効模型として次のものを考える．

$$\mathcal{H}_{\boldsymbol{k}} = V_{\boldsymbol{k}} + \boldsymbol{T}_{\boldsymbol{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \tag{75}$$

ただし $V_{\boldsymbol{k}}$ および $\boldsymbol{T}_{\boldsymbol{k}}$ は $\boldsymbol{k}$ を変数とする関数，$\boldsymbol{\sigma}$ は Pauli 行列である．Berry 曲率はバンド

の指標を $n=1,2$ として次のようになる．

$$\Omega_{n\boldsymbol{k},\mu} = \frac{(-1)^n}{4}\sum_{\nu,\lambda}\epsilon_{\mu\nu\lambda}\boldsymbol{n_k}\cdot(\nabla_{k_\nu}\boldsymbol{n_k}\times\nabla_{k_\lambda}\boldsymbol{n_k}), \quad \boldsymbol{n_k}=\frac{\boldsymbol{T_k}}{|\boldsymbol{T_k}|} \tag{76}$$

量子Hall系との対応を見るために，まずは2次元における次の例を考えてみる．バンド交差の起こる格子運動量 $\boldsymbol{k}_0$ におけるバンド間隔を $2|\Delta|$，また $\delta\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0$ としたとき，典型的な例として $\boldsymbol{T_k}=(\delta k_x,\delta k_y,\Delta)^T$ を考えよう．このとき，Berry 曲率は次のような分布になる．

$$\Omega_{n\boldsymbol{k},z} = \frac{(-1)^n}{2}\cdot\frac{\Delta}{(\delta k^2+\Delta^2)^{\frac{3}{2}}} \tag{77}$$

磁化やスピン軌道相互作用の強さなど，系を特徴づけるパラメータが変化すると，Δ もそれらの変化に依存して変化し，$\boldsymbol{k}_0$ でのバンド間隔 $2|\Delta|$ が小さくなり，バンド交差がおこる前後ではBerry 曲率の分布が $\boldsymbol{k}_0$ 近傍に鋭いピークとなって現れることがわかる．またバンド交差の前後で Δ の符号が変わる場合には，上下バンドのBerry 曲率分布が入れ替わり，それぞれのバンドにおける分布が激しく変化することになる．このとき n バンドの $\boldsymbol{k}_0$ 近傍からのホール伝導率への寄与は次のようなる．

$$\sigma_{xy}^n = e^2\int\frac{d\boldsymbol{k}}{(2\pi)^2}f_F(\epsilon_{n\boldsymbol{k}})\Omega_{n\boldsymbol{k},z}\cong\frac{(-1)^n}{2}\mathrm{sgn}(\Delta)\frac{e^2}{2\pi}f(\epsilon_{n\boldsymbol{k}_0}). \tag{78}$$

ただし $\epsilon_{n\boldsymbol{k}}=V_{\boldsymbol{k}}+(-1)^n|\boldsymbol{T_k}|$ はそれぞれのバンドのエネルギーである．この有効模型はバンド交差近傍にのみ適用できるものであるが，仮に隣接バンドにギャップが開いており量子Hall効果が起きている場合，バンド交差の前後でHall伝導率に $e^2/2\pi$ を単位とした飛びが生じ，異なる量子Hall状態へと転移することになる [62, 63, 64, 65]．金属の場合は，このような顕著な効果は望めないが，バンド交差自体はむしろ頻繁に起こることが予想される．このようなバンド交差・反発がFermi準位の近傍にあるときに，磁化の単調な変化に対して Δ が符号を変えたり，Fermi準位がバンド交差・反発を横切ったりすると，Hall伝導率にピーク構造が現れたり符号反転をすることになる．

3次元系についてはバンド交差点 $\boldsymbol{k}_0$ が磁化などの関数として動く模型が考えられる．例えば，もっとも簡単な $\boldsymbol{T_k}=\delta\boldsymbol{k}$ の場合には，Berry 曲率が $\boldsymbol{k}_0$ を中心とした典型的な磁気単極子型のものになる．Fermi準位の近くにこの単極子があり，磁化などの変化に応じてこの単極子がFermi面の中に入ったり出たりすることでHall伝導率に特徴的な構造が生じるものと予想される．もちろん実際の物質のバンド交差近傍のBerry 曲率は非常に複雑な形をしているため，具体的にどのような構造がHall伝導率に現れるのかを知るためには，第一原理計算などのシリアスな取扱が必要になる [60, 61]．しかし逆に，上記の単純な模型に対応するような実験系が実現できれば，単極子を系統的に制御することができてたいそう愉快な事になりそうである．この点については周期構造中の電磁波に関する話のところでもう一度触れる．

3.4 幾何学的スピン Hall 効果

量子 Hall 効果や異常 Hall 効果では磁場や自発磁化などにより，時間反転対称性が破れている必要があった．しかし時間反転対称性の破れは幾何学的位相の発現にとって必須のものではない．このことはスピン Hall 効果の例に見ることができる．スピン Hall 効果とは外部電場に垂直な方向にスピン流が誘起される現象であり，不純物によるスピン依存散乱による外因的な機構 [66, 67, 68] が古くから知られていた．しかし近年，バンド自体の特性に基づく内因的な機構 [69, 70] の重要性も指摘され，双方の機構が実験的に検証 [71, 72] されるにいたり，スピントロニクスをはじめとする多くの分野で注目を集めている．ここでは幾何学的位相が関係する現象として，p 型 GaAs などの半導体における価電子バンドが起こす内因的スピン Hall 効果についての議論を紹介する [69]．価電子バンドは 2 つの 2 重縮退バンド（重い正孔バンドと軽い正孔バンド）からなり，その有効模型として Luttinger 模型が知られている [73]．

$$\mathcal{H}_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{2m^*}\left[\left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2\right)k^2 - 2\gamma_2\left(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{S}\right)^2\right] \tag{79}$$

ここで γ_1 および γ_2 は物質に依存するパラメータ，$\boldsymbol{S}$ は $[S_i, S_j] = i\epsilon_{ijk}S_k$ を満たす $\frac{3}{2}$ スピン演算子であり，例えば次の 4×4 の行列として表現することができる．

$$S_x = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{pmatrix}, S_y = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2}i & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2}i & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2}i \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}i & 0 \end{pmatrix}, S_z = \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{3}{2} \end{pmatrix}. \tag{80}$$

各バンドは $\boldsymbol{k}$ 方向のスピン成分 $\boldsymbol{e}_k\cdot\boldsymbol{S}$ の固有値（ヘリシティ）λ によって分類され，それぞれの状態ベクトルを $|u_{\boldsymbol{k}\lambda}\rangle$ と表すと，式 (4) において (θ,ϕ) を $\boldsymbol{k}$ の極角と方位角と解釈すれば，4×4 行列の各列ベクトルが左から順に $|u_{\boldsymbol{k},+\frac{3}{2}}\rangle$, $|u_{\boldsymbol{k},+\frac{1}{2}}\rangle$, $|u_{\boldsymbol{k},-\frac{1}{2}}\rangle$, $|u_{\boldsymbol{k},-\frac{3}{2}}\rangle$ に対応する．これらのうち $\lambda=\pm\frac{3}{2}$ の状態が重い正孔バンド (HH)，$\lambda=\pm\frac{1}{2}$ の状態が軽い正孔バンド (LH) となる．

$$\epsilon_{\mathrm{HH}\,\boldsymbol{k}} = \frac{\gamma_1 - 2\gamma_2}{2m^*}k^2, \quad \epsilon_{\mathrm{LH}\,\boldsymbol{k}} = \frac{\gamma_1 + 2\gamma_2}{2m^*}k^2. \tag{81}$$

定義式 (43) に従ってそれぞれのバンドに対する Berry 曲率を求めると次の結果が得られる．

$$\boldsymbol{\Omega}_{\mathrm{HH}\,\boldsymbol{k}} = \frac{3}{2}\cdot\frac{\boldsymbol{e}_k}{k^2}\,\sigma_3, \quad \boldsymbol{\Omega}_{\mathrm{LH}\,\boldsymbol{k}} = -\frac{3}{2}\cdot\frac{\boldsymbol{e}_k}{k^2}\,\sigma_3. \tag{82}$$

ただし σ_3 は Pauli 行列第 3 成分であり，それぞれのバンドに射影したヘリシティ演算子が次のように表せる表現をとった．

$$[\boldsymbol{e}_k\cdot\boldsymbol{S}]_{\mathrm{HH}} = \frac{3}{2}\,\sigma_3, \quad [\boldsymbol{e}_k\cdot\boldsymbol{S}]_{\mathrm{LH}} = \frac{1}{2}\,\sigma_3, \tag{83}$$

電場 $\boldsymbol{E}$ による摂動を考えると，力に対する運動方程式 (57) から $d\boldsymbol{k}/dt = e\boldsymbol{E}$ の関係が得られる．速度に対する運動方程式 (56) にこの式と Berry 曲率を入れると，$\lambda = +\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$ の状態と $\lambda = +\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$ の状態が，電場に対して垂直で逆向きにシフトしていくことがわかる．それぞれの状態のスピン期待値 $\langle u_{\boldsymbol{k}\lambda}|\boldsymbol{S}|u_{\boldsymbol{k}\lambda}\rangle = \lambda \boldsymbol{e}_k$ を考慮すると，S_μ 成分のスピン流に対するそれぞれの状態の寄与を以下のように見積ることができる．

$$\boldsymbol{J}_{\mathrm{HH}}^{S_\mu} = -\int \frac{d\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3} f_F(\epsilon_{\mathrm{HH}\,\boldsymbol{k}}) \frac{9k_\mu}{2k^3} \boldsymbol{e}_k \times e\boldsymbol{E} = -\frac{3e}{4\pi^2} k_F^{\mathrm{HH}} \hat{\boldsymbol{\mu}} \times \boldsymbol{E} \tag{84}$$

$$\boldsymbol{J}_{\mathrm{LH}}^{S_\mu} = \int \frac{d\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3} f_F(\epsilon_{\mathrm{LH}\,\boldsymbol{k}}) \frac{3k_\mu}{2k^3} \boldsymbol{e}_k \times e\boldsymbol{E} = \frac{e}{4\pi^2} k_F^{\mathrm{LH}} \hat{\boldsymbol{\mu}} \times \boldsymbol{E} \tag{85}$$

ただし $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ は μ 軸方向の単位ベクトル，k_F^{HH} および k_F^{LH} は重い正孔と軽い正孔のフェルミ波数である．スピン $\frac{3}{2}$ 演算子 $\boldsymbol{S}$ がスピン $\frac{1}{2}$ 演算子 $\boldsymbol{s}$ と軌道角運動量演算子の合成によるものであることを考慮すると，$\boldsymbol{s}$ の各成分に対するスピン流は上記の $\frac{1}{3}$ となるため s_z に対するスピン Hall 伝導率は次式で与えられる．

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{1}{3}\sigma_{xy}^{S_z} = \frac{e}{12\pi^2}(3k_F^{\mathrm{HH}} - k_F^{\mathrm{LH}}). \tag{86}$$

半古典論に基づいたこの評価はスピン軌道相互作用がない場合（$\gamma_2 = 0$）にも有限になってしまうが，一つにはスピン流の定義においてスピンの量子性を十分に考慮していないということと，量子性を考慮してもスピン軌道相互作用のもとでは素朴な定義のスピン流が連続の方程式を満たさないことに起因している [74]．文献 [74] では，この問題を克服するために各バンドへの射影演算子を用いて保存スピン流を定義し，久保公式に基づいた計算を行うことにより，$\gamma_2 = 0$ において正しくゼロとなる次の結果を得ている．

$$\sigma_{xy}^{s_z} = \frac{1}{3}\sigma_{xy}^{S_z} = \frac{e}{6\pi^2}(k_F^{\mathrm{HH}} - k_F^{\mathrm{LH}}). \tag{87}$$

上記の問題を除けば，半古典論に基づく計算はその簡便さにも関わらず，半定量的に十分な評価を与えてくれることが見て取れる．

ところで，量子 Hall 効果のところで述べたように，系が Chern 数と呼ばれる位相不変量を持つような場合には，試料端に沿って 1 方向に伝搬するカイラル・エッジ状態と呼ばれる状態がバルクのエネルギー・ギャップを跨いで現れる．同じようなことが 2 次元スピン Hall 系でも起こりえることが予言された [75, 76, 77]．つまり量子スピン Hall 状態である．この場合の位相不変量は $\mathbb{Z}_2$ 位相不変量と呼ばれ，ヘリカル・エッジ状態とよばれる状態の対の偶奇と対応している．(時間反転対称性によりエッジ状態は必ず 1 対となって現れる.) それぞれ対になっているエッジ状態は，試料端に沿って互いに逆向きに 1 方向に伝搬する．実験的にも HgTe の量子井戸中の 2 次元電子系において観測されている [78]．しかもこの位相不変量は 3 次元系に対しても拡張できるため，位相幾何学的に安定な表面状態をもった 3 次元量子スピン Hall 絶縁体の存在も予言され [79, 80, 81]，$\mathrm{Bi}_{1-x}\mathrm{Sb}_x$ の光電子分光において観測されている [82]．

4 光子系との比較対応から見えてくるもの

4.1 内部角運動量と幾何学的位相

異常Hall効果やスピンHall効果などの輸送現象においてはスピン軌道相互作用が幾何学的位相の発現に一役買うことを見てきた.「スピン軌道相互作用は相対論的効果である」との説を耳にすることがあると思うが, Berryの議論の後まもなく, 相対論的粒子の幾何学的位相の効果についても議論されている [83, 84, 85]. これまでは電子系を中心に見て来たが, スピンの自由度は必ずしも電子に限った話ではなく光子もスピンをもっており偏光の自由度と対応している. さらに光子は質量を持たないため究極の相対論的粒子でもある. 実際, 歴史的には偏光に付随した幾何学的位相に関する研究が先行して発展していた [5, 86, 87, 88, 89]. ここでは電子と光子の類似点と相異点を見るために,「相対論的電子型の分散をもつ2バンド模型」と「局所的に等方な媒質中の光」に対するものを対比させながら, それぞれの場合の幾何学的位相の効果を概観してみる.

「相対論的電子型の分散をもつ2バンド模型」とは例えば次のような模型のことである.

$$\mathcal{H}_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} \Delta\sigma_0 & v\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\sigma} \\ v\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\sigma} & -\Delta\sigma_0 \end{pmatrix}, \tag{88}$$

ただし σ_0 は 2×2 単位行列, v および Δ はそれぞれ速度とギャップを特徴づける定数である. 2重に縮退した2つのバンドのエネルギー固有値は $\pm\sqrt{v^2k^2+\Delta^2}$ となる. 上部バンド ($\epsilon_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{v^2k^2+\Delta^2}$) についてのみ考える事にして, $|u_{n\boldsymbol{k}\lambda}\rangle$ を改めて $|u_{\boldsymbol{k}\lambda}\rangle$ などと表すことにすると縮退したそれぞれの解が次式で与えられる.

$$|u_{\boldsymbol{k}\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\epsilon_{\boldsymbol{k}}}}\begin{pmatrix} \sqrt{\epsilon_{\boldsymbol{k}}+\Delta}\,\chi_{\boldsymbol{k}\pm} \\ \pm\sqrt{\epsilon_{\boldsymbol{k}}-\Delta}\,\chi_{\boldsymbol{k}\pm} \end{pmatrix}, \quad \chi_{\boldsymbol{k}+} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\phi}{2}}\cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\frac{\phi}{2}}\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad \chi_{\boldsymbol{k}-} = -i\sigma_2\chi^*_{\boldsymbol{k}+} \tag{89}$$

ただし (θ,ϕ) は $\boldsymbol{k}$ 方向の極座標であり, 以下では $[\boldsymbol{e}_\theta, \boldsymbol{e}_\phi, \boldsymbol{e}_k]$ を $\boldsymbol{k}$-空間極座標系の基底ベクトルとする. この解は1価関数になっていないが, 次のゲージ変換を考えれば $\boldsymbol{e}_k = \boldsymbol{k}/k$ が単位球面の南極または北極以外で1価となる解 $|u_{\boldsymbol{k}\pm}\rangle_N$ または $|u_{\boldsymbol{k}\pm}\rangle_S$ が得られる.

$$|u_{\boldsymbol{k}\pm}\rangle_N = e^{\pm i\frac{\phi}{2}}|u_{\boldsymbol{k}\pm}\rangle, \quad |u_{\boldsymbol{k}\pm}\rangle_S = e^{\mp i\frac{\phi}{2}}|u_{\boldsymbol{k}\pm}\rangle \tag{90}$$

しかし式 (89) の解を用いたほうが, Berry接続や曲率などについて簡素な表式が得られるため, 以下ではこの解に対する結果を示す. 1価の解に対する結果はゲージ変換により容易に得られる. 例えば $|u_{\boldsymbol{k}\pm}\rangle_N$ に対する結果は次の変換から得られる.

$$\boldsymbol{\Lambda}^N_{\boldsymbol{k}} = M^\dagger_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{k}}M_{\boldsymbol{k}} - iM^\dagger_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}M_{\boldsymbol{k}}, \quad \boldsymbol{\Omega}^N_{\boldsymbol{k}} = M^\dagger_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{k}}M_{\boldsymbol{k}}, \tag{91}$$

$$|z_{\boldsymbol{k}})_N = M^\dagger_{\boldsymbol{k}}|z_{\boldsymbol{k}}), \quad M_{\boldsymbol{k}} = \exp\left[i\frac{\phi}{2}\sigma_3\right] \tag{92}$$

それぞれの状態の意味を理解するために, スピン演算子を $\boldsymbol{s}=\frac{1}{2}\mathrm{diag}(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\sigma})$ として, 波束のスピン期待値 $\langle W|\boldsymbol{s}|W\rangle$ を計算してみよう. ($\mathcal{H}_{\boldsymbol{k}}$ は $\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{k}+\boldsymbol{s}$ と交換することより, $\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{k}$ を軌道角運動量演算子として, $\boldsymbol{s}$ をスピン演算子とするのが自然であろう.) 以下では特に断らない限り $\boldsymbol{r}_c$ および $\boldsymbol{k}_c$ を単に $\boldsymbol{r}$ および $\boldsymbol{k}$ と表す.

$$\langle W|\boldsymbol{s}|W\rangle \cong (z_{\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{s}_{\boldsymbol{k}}|z_{\boldsymbol{k}}), \quad \boldsymbol{s}_{\boldsymbol{k}}=\frac{1}{2}\left[\frac{\Delta}{\epsilon_{\boldsymbol{k}}}(\sigma_1\boldsymbol{e}_\theta+\sigma_2\boldsymbol{e}_\phi)+\sigma_3\boldsymbol{e}_k\right], \tag{93}$$

($|u_{\boldsymbol{k}\pm}\rangle_N$ に対しては $\boldsymbol{s}^N_{\boldsymbol{k}}=M^\dagger_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{s}_{\boldsymbol{k}}M_{\boldsymbol{k}}$) したがって $|z_{\boldsymbol{k}})=(1,0)^T$ と $(0,1)^T$ は $\pm\boldsymbol{k}$ 方向に偏極した状態を表している. 先に示した $|u_{\boldsymbol{k}\lambda}\rangle$ に対する Berry 接続は

$$\boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{k}} \;=\; \frac{1}{2k}\left[\frac{\Delta}{\epsilon_{\boldsymbol{k}}}(-\sigma_2\boldsymbol{e}_\theta+\sigma_1\boldsymbol{e}_\phi)-\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sigma_3\boldsymbol{e}_\phi\right], \tag{94}$$

となり, Berry 曲率に対して次の結果を得る.

$$\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{k}} \;=\; \frac{v^2}{2\epsilon^2_{\boldsymbol{k}}}\left[\frac{\Delta}{\epsilon_{\boldsymbol{k}}}(\sigma_1\boldsymbol{e}_\theta+\sigma_2\boldsymbol{e}_\phi)+\sigma_3\boldsymbol{e}_k\right]=\frac{v^2}{\epsilon^2_{\boldsymbol{k}}}\boldsymbol{s}_{\boldsymbol{k}} \tag{95}$$

この結果より幾何学的位相の効果と内部角運動量が密接に関係していることが理解できるであろう. スピン Hall 効果のところで見た Luttinger 模型の場合にも同様の関係が成り立つ.

$$\boldsymbol{\Omega}_{\mathrm{HH}\,\boldsymbol{k}}=\frac{1}{k^2}\boldsymbol{S}_{\mathrm{HH}\,\boldsymbol{k}}, \quad \boldsymbol{\Omega}_{\mathrm{LH}\,\boldsymbol{k}}=-\frac{3}{k^2}\boldsymbol{S}_{\mathrm{LH}\,\boldsymbol{k}} \tag{96}$$

ただし $\boldsymbol{S}_{\mathrm{HH}\,\boldsymbol{k}}$ および $\boldsymbol{S}_{\mathrm{LH}\,\boldsymbol{k}}$ は重い正孔バンドおよび軽い正孔バンドに射影したスピン演算子.

さて摂動が加わり, 例えば $\mathcal{E}_{\boldsymbol{k};\boldsymbol{r}}=\epsilon_{\boldsymbol{k}}+V_{\boldsymbol{r}}$ などとなった場合を考えてみよう. 偏極率 $(z_{\boldsymbol{k}}|\sigma_3|z_{\boldsymbol{k}})$ およびスピンの変化は以下のようになる.

$$\frac{d}{dt}(z_{\boldsymbol{k}}|\sigma_3|z_{\boldsymbol{k}}) \;=\; \frac{\Delta}{2k\epsilon_{\boldsymbol{k}}}\frac{d\boldsymbol{k}}{dt}\cdot(z_{\boldsymbol{k}}|[\sigma_1\boldsymbol{e}_\theta+\sigma_2\boldsymbol{e}_\phi]|z_{\boldsymbol{k}}), \tag{97}$$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}(z_{\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{s}_{\boldsymbol{k}}|z_{\boldsymbol{k}}) \;&=\; -\frac{v^2k}{2\epsilon^2_{\boldsymbol{k}}}\boldsymbol{e}_k\cdot(z_{\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{s}_{\boldsymbol{k}}|z_{\boldsymbol{k}})\left[\boldsymbol{e}_k\times\left(\boldsymbol{e}_k\times\frac{d\boldsymbol{k}}{dt}\right)\right]\\ &\quad -\frac{1}{\epsilon_{\boldsymbol{k}}}\frac{d\epsilon_{\boldsymbol{k}}}{dt}\left[(z_{\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{s}_{\boldsymbol{k}}|z_{\boldsymbol{k}})-\boldsymbol{e}_k\cdot(z_{\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{s}_{\boldsymbol{k}}|z_{\boldsymbol{k}})\boldsymbol{e}_k\right]\end{aligned} \tag{98}$$

相対論的極限に対応する $\Delta=0$ の場合はエネルギー分散が線形になるが, このとき偏極率が保存することがわかる. 逆に非相対論的極限に相当する $|\Delta|\gg vk$ の場合はどうであろうか. $|\Delta|\to\infty$ の極限をとってみると, $d(z|\boldsymbol{s}_{\boldsymbol{k}}|z)/dt\propto 1/\Delta^2\to 0$ のようにスピン軌道相互作用が小さくなっていく. 固体電子論的に解釈すると, $|\Delta|\to\infty$ はギャップが大きくなりバンド間の相関が稀薄になることを意味するので, この効果が多バンド効果であり, 上部バンドへの射影という手続が幾何学的効果の背景にあることがわかる.

軌道角運動量とスピンをあわせて, 全角運動量を

$$\boldsymbol{j} \;=\; \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{k}+(z_{\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{s}_{\boldsymbol{k}}|z_{\boldsymbol{k}}), \tag{99}$$

と定義すると，右辺のそれぞれの変化は複雑なものとなるが，全体の変化に対しては次式の簡単な結果が得られる．

$$\frac{d\boldsymbol{j}}{dt} \;=\; \boldsymbol{r}\times\frac{d\boldsymbol{k}}{dt}. \tag{100}$$

右辺はトルクであり, 中心力 $(d\boldsymbol{k}/dt\propto\boldsymbol{r})$ に対しては $\boldsymbol{j}$ が保存することが確かめられる．

さて今度は光の場合を見てみよう．少し一般化して内部軌道角運動をもった波束を考えてみる．まず内部軌道角運動量が無い場合の無摂動系の解は, $\{\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}\}$ を任意の直交する偏光ベクトルの組として, $|u_{\boldsymbol{k}\lambda}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda},\boldsymbol{e}_k\times\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda})^T$, と表される．内部軌道角運動量をもった状態の構成法は一通りではないが [90, 91], l_λ を任意の整数として以下のものを考えよう．

$$u_{\boldsymbol{k}\lambda}\to e^{il_\lambda\varphi_{\boldsymbol{k};\boldsymbol{k}_c}}u_{\boldsymbol{k}\lambda},\quad \varphi_{\boldsymbol{k};\boldsymbol{k}_c}=\arctan\frac{\boldsymbol{e}_{\phi_c}\cdot\boldsymbol{k}}{\boldsymbol{e}_{\theta_c}\cdot\boldsymbol{k}}, \tag{101}$$

ここでは再び $\boldsymbol{k}$ と $\boldsymbol{k}_c$ の記号を区別した点に注意されたい．

ある適当な偏光状態 λ に対して $l_\lambda=l$ とし，それと直交する状態 λ' に対して $l_{\lambda'}=l'$ としてそれらの重ね合わせを考えると, Berry 接続と Berry 曲率は円偏光を基底とする表示において以下のように表される．

$$\boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{k}}=-\frac{\cos\theta}{k\sin\theta}(l_{\mathrm{OAM}}+\sigma_3)\boldsymbol{e}_\phi,\quad \boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{k}}=\frac{1}{k^2}(l_{\mathrm{OAM}}+\sigma_3)\boldsymbol{e}_k, \tag{102}$$

ただし l_{OAM} は整数固有値の組 (l,l') をもつ 2×2 エルミート行列である．

したがって波束が $d\boldsymbol{k}/dt$ の力を受けて曲げられると運動方程式 (56) に異常速度が現れ, 偏光状態に依存して波束がシフトしていく．特に内部軌道角運動量がゼロ $(l=l'=0)$ の場合は，光のスピン Hall 効果となる [28, 29]．同様の結果は偏光ベクトルの運動方程式を用いた理論形式 [92] や Maxwell 方程式に対する特性方程式を光子の有効ハミルトニアンだと見なした理論形式 [93] においても導かれている．界面における全反射の際に見られる光線の横シフトである Imbert-Fedorov 効果 [33, 34, 35, 36] もこの効果の一形態だと考えらる [28, 29, 92]．ただし，この場合は界面の屈折率変化が急峻であることから断熱近似が破れ，界面近傍の異方性により偏光状態が変化する．このため半古典的運動方程式 (56)-(58) だけからでは正しいシフト量を見積もることはできない．しかし運動方程式から導出される角運動量の保存則と反射率に対する Fresnel の公式とを組み合わせることで, 正確な結果が得られる [28, 29]．

さらに部分反射における透過光・反射光に対しても同様のシフトが起こることが，波動光学に基づいて古くから指摘されていた [94, 95]．やはり正確なシフト量の評価には偏光状態の変化を考慮する必要がある．この点を考慮すると，透過光・反射光のそれぞれ

に対して角運動量の界面に垂直な成分が保存することが示される [28, 29].（一般の偏光に対してはその定義によって補正が必要となるが，円偏光入射に関しては入射角によらず正確に成り立つ [15].）これは Maxwell 方程式という古典波動理論の中に光子という粒子描像が隠されていることを意味しており大変興味深い．しかし部分反射によるシフトは大きくてもせいぜい波長の数分の 1 程度であるため，長い間実験的な研究は進展していなかった．しかし昨年の春，量子測定理論の分野で知られている弱測定と呼ばれる方法を用いた実験により，驚くべき精度で検証されるに至っている [96]．また内部軌道角運動量に依存した効果 [91, 97] に関しても，興味深い実験結果が報告されている [98, 99].

最後に一般の内部角運動量をもった光子の角運動量保存則について，もう少し具体的に見てみよう．緩やかに変化する屈折率分布 $n_{\boldsymbol{r}}$ を考えると，摂動を受けたエネルギーは $\mathcal{E}_{\boldsymbol{k}_c;\boldsymbol{r}_c} = v_{\boldsymbol{r}}k$ $(v_{\boldsymbol{r}} = 1/n_{\boldsymbol{r}})$ と表される．この結果を運動方程式 (56)-(58) に代入すると次のことが見て取れる．円偏光の基底において l_{OAM} が対角形になっている場合 [97] を除き，一般に $l \neq l'$ のときは偏極率 $(z_{\boldsymbol{k}}|\sigma_3|z_{\boldsymbol{k}})$ は保存しない．しかし興味深いことに，この場合も一般化した偏極率を $(z_{\boldsymbol{k}}|[l_{\mathrm{OAM}}+\sigma_3]|z_{\boldsymbol{k}})$ とすると，こちらは保存していることが確かめられる．先ほどの電子系の例との類推から，$\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{k}}$ の表式より，次式のベクトルを内部角運動量と見なしてみる．

$$\boldsymbol{j}_{\mathrm{int}} = (z_{\boldsymbol{k}}|[l_{\mathrm{OAM}}+\sigma_3]|z_{\boldsymbol{k}})\boldsymbol{e}_k, \tag{103}$$

さらに全角運動量を次式で定義すると，式 (100) が成り立つことがわかる．

$$\boldsymbol{j} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{k}+\boldsymbol{j}_{\mathrm{int}}, \tag{104}$$

したがって平坦な界面のように $n_{\boldsymbol{r}}$ が特定の方向にのみ変化する場合は，その方向の全角運動量の成分が保存することになる．

以上より，幾何学的位相の効果は電子または光子によらず，それぞれの波束の半古典的動力学は同様の理論形式で理解できることが分かる．加えて，スピンに限らずの内部角運動量と Berry 曲率が，かなり一般的に対応関係を持っていることが理解できたであろう．ところで電子系では上部バンドへの射影という手続きが重要な要素であったが，光子の例では特定のバンドへの射影と言う手続なしに幾何学的位相の効果が出て来た．これは物理的状態への射影を暗黙のうちにとっていたためである．ただしフォトニック結晶中の電磁波は固体中の電子と同様にバンドをつくるので，これらのバンドへの射影によっても幾何学的効果が現れる [28, 29].

4.2 断熱近似の破れと偏光状態の変化

前節で断熱近似の破れによる偏光状態の変化について触れたが，この点に関する興味深い理論・実験 [100] があるので紹介したい．実験では円柱ガラスの底面から光線を入射し，円柱表面における全反射を使ってらせん状に光線を走らせ，上面からの出射光線を観

測して Imbert-Fedorov 効果によるシフト量と入射光線からの偏光状態の変化を測定している．また理論もこの実験で得られた結果を定量的なレベルで非常によく説明している．

まず入射光線と円柱の中心軸との成す角度として円柱ガラス底面への入射角 θ を定義しよう．入射した光線の軌跡が半径 R_0 の円柱ガラス側面に沿ってらせん状になっており，その軌跡に沿った長さを ℓ として測ることにすると，軌道の曲率半径 R と捩率 T が次のように定義される．ただし $[\boldsymbol{e}_\theta, \boldsymbol{e}_\phi, \boldsymbol{e}_k]$ は $\boldsymbol{e}_k$ を光線の進行方向とする極座標系（光線に貼り付けた局所座標系）の基底ベクトルである．

$$\frac{d\boldsymbol{e}_k}{d\ell} = \frac{\sin^2\theta}{R_0}\,\boldsymbol{e}_\phi = \frac{1}{R}\,\boldsymbol{e}_\phi, \quad \frac{d\boldsymbol{e}_\theta}{d\ell} = \frac{\sin\theta\cos\theta}{R_0}\,\boldsymbol{e}_\phi = \frac{1}{T}\,\boldsymbol{e}_\phi, \tag{105}$$

ここで $\boldsymbol{e}_\phi$ は実空間の円筒座標系方位角方向の基底ベクトル $\hat{\boldsymbol{\phi}}$ とは異なることに注意されたい．(実空間の円筒座標系動径方向の基底ベクトル $\hat{\boldsymbol{\rho}}$ の逆方向 $\boldsymbol{e}_\phi = -\hat{\boldsymbol{\rho}}$ になっている．）また，光線上の点の方位角を ϕ として $d\ell\sin\theta = R_0 d\phi$ を用いた．速度の運動方程式を時間の代わりに ℓ を用いて書き直すと次のようになる．

$$\frac{d\boldsymbol{r}}{d\ell} \;=\; \boldsymbol{e}_k + \frac{d\boldsymbol{k}}{d\ell}\times (z|\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{k}}|z) = \boldsymbol{e}_k + \frac{(z|\sigma_3|z)}{kR}\,\boldsymbol{e}_\theta \tag{106}$$

したがって Imbert-Fedorov シフトの量を次のように評価することができる．

$$\Delta_{\mathrm{IF}} \;=\; \frac{1}{kR}\int d\ell\,(z|\sigma_3|z) = \frac{\lambda\sin^2\theta}{2\pi R_0}\int d\ell\,(z|\sigma_3|z) \tag{107}$$

ただし全反射の場合は偏光状態を表わす変数 $|z_{\boldsymbol{k}})$ の $\boldsymbol{k}$ 依存性は重要でなくなるので，この依存性はないものとして単に $|z)$ と表した [15]．上記の結果より，らせん状の光線の長さ ℓ の関数としての偏光状態 $|z)$ が分かればシフト量 Δ_{IF} が評価できることになる．

側面での全反射は連続的なものであるが，考察の便宜上，有限の入射角 $\theta_1 = \pi/2 - \delta\alpha$ $(0 < \delta\alpha \ll 1)$ の全反射の繰り返しとして考え，$\delta\alpha \to 0$ の極限として連続な状況に対応させる事にする．(注意：θ_1 は側面に対する入射角であり，先の底面に対する入射角 θ とは異なる.）若干の注意で「空気中の円柱ガラス」の問題をその他の媒質の組み合わせにも拡張できるので，以下ではしばらくそのような形式で話を進める．まず p 偏光と s 偏光に対する反射率は Fresnel の公式より次のように表わすことができる．

$$r_p = \frac{Z_1\cos\theta_1 - Z_2\cos\theta_2}{Z_1\cos\theta_1 + Z_2\cos\theta_2}, \quad r_s = \frac{Z_1^{-1}\cos\theta_1 - Z_2^{-1}\cos\theta_2}{Z_1^{-1}\cos\theta_1 + Z_2^{-1}\cos\theta_2}, \tag{108}$$

$$\cos\theta_2 = \left(1 - \frac{n_1^2}{n_2^2}\sin^2\theta_1\right)^{\frac{1}{2}}, \quad n_i = \epsilon_i^{\frac{1}{2}}\mu_i^{\frac{1}{2}}, \quad Z_i = \frac{\mu_i^{\frac{1}{2}}}{\epsilon_i^{\frac{1}{2}}}. \tag{109}$$

特に側面に対して非常に浅い角度 $\delta\alpha \ll 1$ で入射する場合を考えると，それぞれの位相変化は次のようになる．(ただし $n_1 > n_2$ とした.)

$$\varphi_p = \arg r_p \cong \pi + \frac{2Z_1\sin\delta\alpha}{Z_2\left(\frac{n_1^2}{n_2^2}-1\right)^{\frac{1}{2}}}, \quad \varphi_s = \arg r_s \cong \pi + \frac{2Z_2\sin\delta\alpha}{Z_1\left(\frac{n_1^2}{n_2^2}-1\right)^{\frac{1}{2}}} \tag{110}$$

この過程でp偏光とs偏光を基底としたときの $|z)$ の各要素は $z_p \to e^{i\varphi_p} z_p$ および $z_s \to e^{i\varphi_s} z_s$ となる．したがって幾何学的位相の効果まで含めた変化は円偏光を基底とした場合，次のように表すことができる．

$$|z) \to \left(\frac{e^{i\varphi_p} + e^{i\varphi_s}}{2} + \frac{e^{i\varphi_p} - e^{i\varphi_s}}{2} \sigma_1 \right) e^{-i\delta \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{k}}} |z) \tag{111}$$

運動方程式(58)より幾何学的位相の効果によっても位相変化が起こるが，こちらの寄与は次のようになる．

$$\delta \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{k}} = (k \sin\delta\alpha\, \boldsymbol{e}_\phi) \cdot \left(-\frac{\cos\theta}{k\sin\theta} \boldsymbol{e}_\phi \sigma_3 \right) = -\sin\delta\alpha \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \sigma_3 \tag{112}$$

らせん状の光線の軌跡を各辺 $\delta\ell = 2R\sin\delta\alpha$ の微小な直線からできていると考え，$\delta\ell$ を使って書き直すと次のようにまとめることができる．

$$\delta\varphi = \varphi_p - \varphi_s = \delta\ell \frac{1}{R\left(\frac{n_1^2}{n_2^2} - 1\right)^{\frac{1}{2}}} \left(\frac{Z_1}{Z_2} - \frac{Z_2}{Z_1} \right), \quad \delta \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{k}} = -\frac{\delta\ell}{T} \sigma_3 \tag{113}$$

ところで光学分野では偏光状態を特定するのにStokesベクトル $(z|\boldsymbol{\sigma}|z)$ を使うと便利であることが知られている．この単位ベクトルが動く単位球面を考えると，北（南）極は右（左）円偏光に対応する．上記の結果を用いると各反射ごとのStokesベクトルの変化量は次のようになる．

$$\delta(z|\boldsymbol{\sigma}|z) \;=\; {}_{\ell+\delta\ell}(z|\boldsymbol{\sigma}|z)_{\ell+\delta\ell} - {}_{\ell}(z|\boldsymbol{\sigma}|z)_{\ell} = -i(z| \left[\boldsymbol{\sigma}, \left(\delta \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{\Lambda}_{\boldsymbol{k}} - \frac{\delta\varphi}{2} \sigma_1 \right) \right] |z). \tag{114}$$

最後に $\delta\ell \to 0$ の極限をとると，光線の長さに対するStokesベクトルの微分方程式が得られる．この方程式にはp偏光とs偏光の反射率の違いを考慮しているので，界面による局所的異方性の効果が入っていることになる．

$$\frac{d}{d\ell}(z|\boldsymbol{\sigma}|z) \;=\; \boldsymbol{B}_S \times (z|\boldsymbol{\sigma}|z), \quad \boldsymbol{B}_S = \begin{pmatrix} \frac{1}{R\left(\frac{n_1^2}{n_2^2}-1\right)^{\frac{1}{2}}} \left(\frac{Z_2}{Z_1} - \frac{Z_1}{Z_2} \right) \\ 0 \\ -\frac{2}{T} \end{pmatrix} \tag{115}$$

これは磁場 $\boldsymbol{B}_S$ 中のスピンの運動方程式にほかならず，回転磁場中のスピン模型のところで見たように，厳密に解くことができる．磁場 $\boldsymbol{B}_S$ の方向は止まっているので，$(z|\boldsymbol{\sigma}|z)$ の運動は正則歳差運動となる．この周期的な変化を受けてシフト量 Δ_{IF} にも ℓ の関数として振動成分が現れることが予測できるが，実験においても確かにこの振動が観測されている [100].

4.3 周期構造中の電磁波にみる幾何学的位相の効果

異常 Hall 効果のところで述べたように，幾何学的位相はある種の特徴的なバンド構造（典型的には Dirac フェルミオン型のバンド構造）により発現し，バンド構造の変化に対して敏感に反応する傾向がある．また，いくつかの簡単な模型を通じてスピンをはじめとする内部角運動量と Berry 曲率とが密接に関係していることを見てきたが，この点は電子系あるいは光子系に限らないことであった．これらの知見から，誘電率や透磁率の周期構造であるフォトニック結晶 [101, 102] 中の電磁波についても同様のことが予想される．ここでは上記の点について詳しく見てみることにする．後の便宜上，電場および磁場に対する Bloch 関数をそれぞれ $|u^E_{n\boldsymbol{k}\lambda}\rangle$ および $|u^H_{n\boldsymbol{k}\lambda}\rangle$ と表して区別し，次のように規格化したものを考える．

$$\langle u^E_{n\boldsymbol{k}\lambda}|\epsilon|u^E_{n\boldsymbol{k}\lambda}\rangle = \delta_{nn'}\delta_{\lambda\lambda'}, \quad \langle u^H_{n\boldsymbol{k}\lambda}|\mu|u^H_{n\boldsymbol{k}\lambda}\rangle = \delta_{nn'}\delta_{\lambda\lambda'} \tag{116}$$

これらの関数は Maxwell 方程式と同等の次の固有方程式の解であるとする．

$$\epsilon\,\epsilon_{n\boldsymbol{k}\lambda}|u^E_{n\boldsymbol{k}\lambda}\rangle = i\boldsymbol{P_k}\cdot\boldsymbol{S}|u^H_{n\boldsymbol{k}\lambda}\rangle, \quad \mu\,\epsilon_{n\boldsymbol{k}\lambda}|u^H_{n\boldsymbol{k}\lambda}\rangle = -i\boldsymbol{P_k}\cdot\boldsymbol{S}|u^E_{n\boldsymbol{k}\lambda}\rangle, \tag{117}$$

$$[S_i]_{jk}(\boldsymbol{G},\boldsymbol{G}') = -i\epsilon_{ijk}\delta(\boldsymbol{G},\boldsymbol{G}'), \quad \boldsymbol{P_k}(\boldsymbol{G},\boldsymbol{G}') = (\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})\delta(\boldsymbol{G},\boldsymbol{G}') \tag{118}$$

ここで $\boldsymbol{G}$ は逆格子ベクトルである．

それではフォトニック結晶中の光波束に対する内部角運動量について考えてみるが，以下では第 2 量子化の表記法を用いることにする．つまり波束状態 $|W\rangle$ は上記の固有方程式の解の各モードに対する生成演算子を用いて構成され，電場 $\boldsymbol{E_r}$ および磁場 $\boldsymbol{H_r}$ はそれらの生成演算子と消滅演算子を使って展開できる場の演算子であると考える．（形式論の詳細については文献 [29] を参照いただきたい．）角運動量 $\boldsymbol{J}$ は電束密度 $\boldsymbol{D_r} = \epsilon_{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{E_r}$ および磁束密度 $\boldsymbol{B_r} = \mu_{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{H_r}$ を用いて，次式により定義される．

$$\boldsymbol{J} = \int d\boldsymbol{r}\,\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{D_r}\times\boldsymbol{B_r}) \tag{119}$$

しかしフォトニック結晶中の電磁波を考える場合，この量は必ずしも取り扱いやすい量ではない．そこで代わりに次式のエネルギー流の回転 $\boldsymbol{\mathcal{J}}$ を便宜上の角運動量と見なすことにする．

$$\boldsymbol{\mathcal{J}} = \int d\boldsymbol{r}\,\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{E_r}\times\boldsymbol{H_r}) \tag{120}$$

特に波束を考えると角運動量は，中心自身の運動にともなう角運動量と中心周りの回転に相当する内部角運動量に分離することができる．

$$\boldsymbol{\mathcal{J}} = \boldsymbol{\mathcal{L}} + \boldsymbol{\mathcal{S}}, \quad \boldsymbol{\mathcal{L}} = \int d\boldsymbol{r}\,\boldsymbol{r}_c\times(\boldsymbol{E_r}\times\boldsymbol{H_r}), \quad \boldsymbol{\mathcal{S}} = \int d\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_c)\times(\boldsymbol{E_r}\times\boldsymbol{H_r}) \tag{121}$$

内部角運動量の波束に対する期待値を計算してみると次の結果が得られる.

$$\langle W|\boldsymbol{S}|W\rangle \cong (z_{\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{S}_{n\boldsymbol{k}}|z_{\boldsymbol{k}}) \tag{122}$$

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{S}_{n\boldsymbol{k}}]_{\lambda\lambda'} = \frac{1}{4}\Big[& i\langle\boldsymbol{\nabla} u^{E}_{n\boldsymbol{k}\lambda}| \times (\boldsymbol{P_k}\cdot\boldsymbol{S}\mu^{-1}\boldsymbol{P_k}\cdot\boldsymbol{S} - \epsilon\,\epsilon^2_{n\boldsymbol{k}})|\boldsymbol{\nabla} u^{E}_{n\boldsymbol{k}\lambda'}\rangle + \langle u^{E}_{n\boldsymbol{k}\lambda}|\mu^{-1}\boldsymbol{S}|u^{E}_{n\boldsymbol{k}\lambda'}\rangle \\ & + i\langle\boldsymbol{\nabla} u^{H}_{n\boldsymbol{k}\lambda}| \times (\boldsymbol{P_k}\cdot\boldsymbol{S}\epsilon^{-1}\boldsymbol{P_k}\cdot\boldsymbol{S} - \mu\,\epsilon^2_{n\boldsymbol{k}})|\boldsymbol{\nabla} u^{H}_{n\boldsymbol{k}\lambda'}\rangle + \langle u^{H}_{n\boldsymbol{k}\lambda}|\epsilon^{-1}\boldsymbol{S}|u^{H}_{n\boldsymbol{k}\lambda'}\rangle\Big].\end{aligned} \tag{123}$$

一見すると第1項および第3項は内部軌道角運動量とでも呼ぶべき寄与であり，第2項および第4項はスピン角運動量の寄与だと解釈したくなるところであるが，この解釈は必ずしも妥当ではない．周期構造が無く一様な媒質中（光速 v）の光を考え，Bloch 関数を偏光ベクトルで置き換えると，式 (123) の4つの項はまったく同じ寄与をして，全体として $\langle W|\boldsymbol{S}|W\rangle = v^2(z_{\boldsymbol{k}}|\sigma_3|z_{\boldsymbol{k}})\boldsymbol{e}_k$，となり，$v^2\times$ スピン角運動量の結果を再現する．これは電磁場がゲージ対称性をもつことと，物理量がゲージ不変であることの要請から，厳密には軌道角運動量とスピン角運動量を分離できないことに由来している．つまり波束を考えることにより分離できたのは，軌道角運動量とスピン角運動量ではなく，外部角運動量（中心自身の回転）と内部角運動量（中心周りの回転）であることを注意しておくべきであろう．

ここで周期構造に上乗せして緩やかな変調 $\gamma_{\boldsymbol{r}}$ を考えてみよう．例えば $1/\epsilon_{\boldsymbol{r}} \to \gamma^2_{\boldsymbol{r}}/\epsilon_{\boldsymbol{r}}$ のように上乗せした状況を考え，$\gamma_{\boldsymbol{r}}$ について摂動的に取り扱うことにすると，次の運動方程式が導かれる.（その他にもいくつかの補正項 [29] があるのだが，煩雑になるので省略した.）

$$\frac{d\boldsymbol{r}}{dt} = \gamma_{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}\epsilon_{n\boldsymbol{k}} + \frac{d\boldsymbol{k}}{dt}\times(z_{\boldsymbol{k}}|\boldsymbol{\Omega}_{n\boldsymbol{k}}|z_{\boldsymbol{k}}), \tag{124}$$

$$\frac{d\boldsymbol{k}}{dt} = -[\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}}\gamma_{\boldsymbol{r}}]\epsilon_{n\boldsymbol{k}}, \tag{125}$$

$$i\frac{d}{dt}|z_{\boldsymbol{k}}) = \frac{d\boldsymbol{k}}{dt}\cdot\boldsymbol{\Lambda}_{n\boldsymbol{k}}|z_{\boldsymbol{k}}), \tag{126}$$

$$[\boldsymbol{\Lambda}_{n\boldsymbol{k}}]_{\lambda\lambda'} = -\frac{i}{2}\left[\langle u^{E}_{n\boldsymbol{k}\lambda}|\epsilon|\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}} u^{E}_{n\boldsymbol{k}\lambda'}\rangle + \langle u^{H}_{n\boldsymbol{k}\lambda}|\mu|\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}} u^{H}_{n\boldsymbol{k}\lambda'}\rangle\right]. \tag{127}$$

ただし Berry 曲率 $\boldsymbol{\Omega}_{n\boldsymbol{k}}$ は以前と同様に，$\boldsymbol{\Omega}_{n\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}\times\boldsymbol{\Lambda}_{n\boldsymbol{k}} + i\boldsymbol{\Lambda}_{n\boldsymbol{k}}\times\boldsymbol{\Lambda}_{n\boldsymbol{k}}$ と定義される．以上より，界面による反射・屈折の例と同様，フォトニック結晶中の電磁波に対しても，変調 $\gamma_{\boldsymbol{r}}$ と垂直方向に光線がシフトすることが予想される．さらに，Berry 曲率は Bloch 関数により与えられるので，結晶構造を変えることで，その大きさを制御することができる．また $\boldsymbol{\Omega}_{n\boldsymbol{k}}$ の表式を具体的に計算してみれば分かるのだが，量子 Hall 効果の半古典論のところで見たのと同様に，波束の内部角運動量 $\langle W|\boldsymbol{S}|W\rangle$ との類似性が見て取れる．内部角運動量にはスピン以外にも結晶構造に由来する内部軌道角運動量も含まれることから，当然，$\boldsymbol{\Omega}_{n\boldsymbol{k}}$ にもその効果が表れているものと考えられる．また，内部角運動量はそもそも有限の大きさの波束を想定して定義したものであるが，最終的な表式は Bloch 関

数のみで書けている．一方，Berry 曲率ははじめから Bloch 状態ごとに定義できるものである．したがって，広がった状態である Bloch 波に対しても内部角運動量と Berry 曲率の間には何らかの関係があるものと予想される．それでは Berry 曲率を持つ Bloch 状態とは，実空間においていったいどのような様相を示しているのであろうか．次節ではこの点について触れる．

4.4 対称性の破れと幾何学的位相

前節までフォトニック結晶中の電磁波に関して一般的に縮退したバンドまで含めて議論してきたが，多くの場合，結晶構造により縮退は解けてしまう．このような場合は，異常 Hall 効果のところで議論したように，Berry 曲率をもった状態ができるためには系の対称性に対して条件がでてくる．例えば，誘電率関数と透磁率関数がともに空間反転対称性と時間反転対称性を持つと，固有方程式 (117) は実数方程式とすることができるので Berry 曲率をもった状態は現れない．この点は Berry 曲率を運動量空間の磁束密度だと見なせば，その対称性からも結論される．したがって空間反転対称性または時間反転対称性の破れたフォトニック結晶を考える必要がある．文献 [29] では空間反転の破れた蜂の巣格子型 2 次元フォトニック結晶に関して Berry 曲率および内部角運動量の対応関係を調べたが，両者には明らかな類似が見られ互いに関係していることを窺わせる．また，異常 Hall 効果のところでバンド交差・反発近傍のバンド間隔と Berry 曲率の関係について述べたように，バンド反発が起きている Brillouin ゾーンのコーナー近傍で両者は大きくなる傾向がある．最近我々は大きな Berry 曲率をもった Bloch 波が実空間でどのような状態になっているのか数値計算により調べ，このような状態は実空間においては渦構造の周期的パターンとして現れることを確認した [103]．考察した結晶構造は 2 種類のロッドからなる蜂の巣格子構造であり，2 種類のロッドの違い（例えば誘電率の差）を変えることで空間反転対称性の破れの程度，ひいてはバンド反発によるバンド間隔の制御が簡単に行えるようになっている．また文献 [103] では，このような渦構造がナノ粒子に与える輻射圧に対しても考察し，応用例として周期構造による光攪拌機を提案している．

空間反転対称性ではなく時間反転対称性の破れも興味深い効果を引き起こす．量子 Hall 効果のところで述べたように，非自明な位相不変量をもっている系では，その試料端に沿って 1 方向にのみ伝搬するカイラル・エッジ状態が現れる．周期構造中の電磁波についても同様のこと，つまりこのようなエッジ状態（正確には表面状態）を利用した「一方通行導波路」の可能性が指摘され [104]，様々な模型やデモンストレーションが提示されている [105, 106, 107, 108]．最近我々は，磁気光学効果を示す媒質から成るロッドを蜂の巣格子構造に並べた模型における光カイラル・エッジ状態について調べた [109]．この模型の特徴として，蜂の巣格子構造を反映して 2 種類の試料端が存在することがあげられる．1 つは zigzag エッジと呼ばれ，もう 1 つは armchair エッジと呼ばれる．興味深い事に zigzag エッジ上のカイラル・エッジ状態はフォトニック結晶外の自由空間のモードとは結合しない．つまり特別な工夫をしなくても安定な「一方通行導波路」と成るので

ある．一方，armchair エッジ上のカイラル・エッジ状態は自由空間のモードと結合しており，正確には共鳴モードとなっている．したがってカイラル・エッジ状態を励起できたとしても結晶の外側に漏れてしまうのである．この状況を電子系の場合と比べたとき，光子系の不利な点と見る見方もあるだろうが，ものは考えようである．例えばいま考えているフォトニック結晶では試料端の形状を適当に工夫してやるだけで，簡単にカイラル・エッジ状態を励起し，それを安定に伝搬させ，また自由空間に取りだすことができる．具体的には armchair エッジにレーザ光を照射してカイラル・エッジ共鳴モードを励起し，それをそのまま zigzag エッジ上の安定な「一方通行導波路」に導いてやればよいのである．文献 [109] では実空間のシミュレーションにより，このようなことが可能であることを確認している．

また最近話題になっているマルチフェロイックス物質 [110] では，電気分極 $\boldsymbol{P}$ と磁化 $\boldsymbol{M}$ が同時に発生し空間反転対称性と時間反転対称性が両方とも破れている．このような物質における幾何学的位相の効果についても研究されており，トロイダル・モーメント $\boldsymbol{T} = \boldsymbol{P} \times \boldsymbol{M}$ と呼ばれる量が光子にとってのベクトルポテンシャルとして働くため，光子に対するローレンツ力が生じ得るという興味深い提案がなされている [111].

5　おわりに

まずは拙文に長々とお付き合いいただいたことをお礼申し上げる．何がしかご参考になることがあれば幸いである．最後にとりとめのない話で申し訳ないが，輸送現象における幾何学的位相の効果の直観的イメージについて触れておきたい．電子系において各種の Hall 効果を考えるとき，伝導率を中心にした線形応答理論的な立場では，外部電場と直交する方向の電流あるいはスピン流の生成としてとらえることが多いように思う．しかし光子系のスピン Hall 効果やフォトニック結晶中の Hall 効果で見えてくるのは，摂動の異方性に直交する方向への波動の歪みといったイメージである．これは電子系の異常 Hall 効果におけるサイドジャンプのイメージと同じものだと考えられる．このイメージが常に正しいものなのかいまひとつ確信が持てないのだが，少なくとも本稿で触れた幾何学的 Hall 効果のいずれにおいても波動の主たる回転軸方向と摂動による異方性の双方に直交する方向に波が歪んでいる．半古典的運動方程式の異常速度項から解釈している故のトートロジーなのだろうか。また，こういったイメージは回転流体を想像すると全てが当たり前のことのように思えてくるのであるが，いざ具体的にそのイメージと個々の問題の対応を考えるとどうも曖昧なつながりしか見えて来ない．すっきりとした説明または例などをご存じの方がいたらぜひご教示願いたい。

参考文献

[1] ”量子論における位相”, 矢吹治一 著（日本評論社，1998）.

[2] "理論物理学のための幾何学とトポロジー　,　", 中原幹夫 著, 中原幹夫・佐久間一浩 訳, （ピアソン・エデュケーション，2000）．

[3] "幾何学的量子力学", 倉辻比呂志 著（シュプリンガー・ファラーク東京，2005）．

[4] *The Geometrical Phase in Quantum Systems*, A. Bohm, A. Mostafazadeh, H. Koizumi, Q. Niu, and J. Zwanziger (Springer-Verlag, Berlin, 2003).

[5] *Geometrical Phases in Physics*, edited by A. Shapere and F. Wilczek (World Scientific, Singapore, 1989).

[6] M. V. Berry, Proc. Roy. Soc. London A**392**, 45 (1984).

[7] Y. Aharonov and A. Anandan, Phys. Rev. Lett. **58**, 1593 (1987).

[8] W. Nasalski, Phys. Rev. E **74**, 056613 (2006).

[9] 永長直人, 固体物理 **36**, No. 10, 52 (2001).

[10] 永長直人, 日本物理学会誌 **59**, No. 8, 520 (2004).

[11] 村上修一, 永長直人, 固体物理 **39**, No. 1, 27 (2004).

[12] 村上修一, 日本物理学会誌 **62**, No. 1, 2 (2007).

[13] 村上修一, 数理科学 **No. 528**, 14 (2007).

[14] 小野田勝, 固体物理 **39**, No. 12, 27 (2004).

[15] 小野田勝, 数理科学 **No. 528**, 20 (2007).

[16] I. I. Rabi, N. F. Ramsey, J. Schwinger, Rev. Mod. Phys. **26**, 167 (1954).

[17] S.-J. Wang, Phys. Rev. A **42**, 5107 (1990).

[18] 必ずしも厳密な縮退状態に限らず，ある状態のグループが他のグループと明確に区別できる場合への拡張も考えられる．例えば，グループ内の状態間のエネルギー差に比べて十分大きなエネルギーギャップにより，各グループが明確に隔てられている場合などがそれに相当する．

[19] F. Wilczek and A. Zee, Phys. Rev. Lett. **52**, 2111 (1984)

[20] P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. London **133**, 60 (1931).

[21] T.-T. Wu and C.-N. Yang, Phys. Rev. D **12**, 3845 (1975).

[22] T. Eguchi, P. B. Gilkey, and A. J. Hanson, Phys. Rep. **66**, 213 (1980).

[23] M. Chang and Q. Niu, Phys. Rev. Lett **75**, 1348 (1995).

[24] M. Chang and Q. Niu, Phys. Rev. B **53**, 7010 (1996).

[25] G. Sundaram and Q. Niu, Phys. Rev. B **59**, 14195 (1999).

[26] R. Shindou and K. Imura, Nucl. Phys. B **720**, 399 (2005).

[27] D. Culcer, Y. Yao, and Q. Niu, Phys. Rev. B **72**, 085110 (2005).

[28] M. Onoda, S. Murakami, and N. Nagaosa, Phys. Rev. Lett. **93**, 083901 (2004).

[29] M. Onoda, S. Murakami, and N. Nagaosa, Phys. Rev. E **74**, 066610 (2006).

[30] R. Jackiw and A. Kerman, Phys. Lett. A **71**, 158 (1979).

[31] A. Pattanayak and W. C. Schieve, Phys. Rev. E **50**, 3601 (1994).

[32] E. N. Adams and E. I. Blount, Phys. Chem. Solids **10**, 286 (1959).

[33] F. I. Fedorov, Dokl. Akad. Nauk SSSR **105**, 465 (1955).

[34] C. Imbert, Phys. Rev. D **5**, 787 (1972).

[35] D. G. Boulware, Phys. Rev. D **7**, 2375 (1973).

[36] N. Ashby and S. C. Miller Jr., Phys. Rev. D **7**, 2383 (1973).

[37] D. Thouless, M. Kohmoto, N. Nightingale, and N. den Njis, Phys. Rev. Lett. **49**, 405 (1982).

[38] M. Kohmoto, Ann. Phys. (N. Y.) **160**, 343 (1985).

[39] Q. Niu, D. J. Thouless, and Y.-S. Wu, Phys. Rev. B **31**, 3372 (1985).

[40] A. M. M. Pruisken, Phys. Rev. B **32**, 2636 (1985).

[41] H. Aoki and T. Ando, Phys. Rev. Lett. **57**, 3093 (1986).

[42] R. B. Laughlin, Phys. Rev. B **23**, 5632 (1981).

[43] T. Ando, Y. Matsumoto, and Y. Uemura J. Phys. Soc. Jpn. **39**, 279 (1975).

[44] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, Phys. Rev. Lett. **45**, 494 (1980).

[45] S. Kawaji and J. Wakabayashi , J. Phys. Soc. Jpn. **56**, 21 (1987).

[46] B. I. Halperin, Phys. Rev. B **25**, 2185 (1982).

[47] M. Büttiker, Phys. Rev. B **38**, 9375 (1988).

[48] Y. Hatsugai, Phys. Rev. Lett. **71**, 3697 (1993).

[49] R. Karplus and J. M. Luttinger, Phys. Rev. **95**, 1154 (1954).

[50] J. M. Luttinger, Phys. Rev. **112**, 739 (1958).

[51] J. Smit, Physica **21**, 877 (1955); *ibid* **24**, 39 (1958).

[52] L. Berger, Phys. Rev. B **2**, 4559 (1970).

[53] G. W. Semenoff, Phys. Rev. Lett. **53**, 2449 (1984).

[54] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **61**, 2015 (1988).

[55] K. Ohgushi, S. Murakami, and N. Nagaosa, Phys. Rev. B **62**, R6065 (2000).

[56] Y. Taguchi, Y. Oohara, H. Yoshizawa, N. Nagaosa, Y. Tokura, Science **291**, 2573 (2001).

[57] G. Tatara and H. Kawamura, J. Phys. Soc. Jpn. **71**, 2613 (2002).

[58] M. Onoda and N. Nagaosa, J. Phys. Soc. Jpn. **71**, 19 (2002).

[59] T. Jungwirth, Q. Niu, A. H. MacDonald, Phys. Rev. Lett. **88**, 207208 (2002).

[60] Z. Fang, N. Nagaosa, K. S. Takahashi, A. Asamitsu, R. Mathieu, T. Ogasawara, H. Yamada, M. Kawasaki, Y. Tokura, K. Terakura, Science **302**, 92 (2004).

[61] Y. Yao, L. Kleinman, A. H. MacDonald, J. Sinova, T. Jungwirth, D.-S. Wang, E. Wang, and Q. Niu, Phys. Rev. Lett. **92**, 037204 (2004).

[62] J. E. Avron, R. Seiler, and B. Simon, Phys. Rev. Lett. **51**, 51 (1983).

[63] B. Simon, Phys. Rev. Lett. **51**, 2167 (1983).

[64] Y. Hatsugai and M. Kohmoto, Phys. Rev. B **42**, 8282 (1990).

[65] M. Oshikawa, Phys. Rev. B **50**, 17357 (1994).

[66] M. I. Dyakonov and V. I. Perel, JETP Lett. **13**, 467 (1971); Phys. Lett. A **35**, 459 (1971).

[67] J. E. Hirsch, Phys. Rev. Lett. **83**, 1834 (1999).

[68] S. Zhang, Phys. Rev. Lett. **85**, 393 (2000).

[69] S. Murakami, N. Nagaosa, and S.-C. Zhang, Science **301**, 1348 (2003).

[70] J. Sinova, D. Culcer, Q. Niu, N. A. Sinitsyn, T. Jungwirth, and A. H. MacDonald, Phys. Rev. Lett. **92**, 126603 (2004).

[71] Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, Science **306**, 1910 (2004).

[72] J. Wunderlich, B. Kaestner, J. Sinova, and T. Jungwirth, Phys. Rev. Lett. **94**, 047204 (2005).

[73] J. M. Luttinger, Phys. Rev. **102**, 1030 (1956).

[74] S. Murakami, N. Nagaosa, and S.-C. Zhang, Phys. Rev. B **69**, 235206 (2004).

[75] C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **95**, 226801 (2005).

[76] B. A. Bernevig and S.-C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **96**, 106802 (2006).

[77] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, Science **314**, 1757 (2006).

[78] M. König, S. Wiedmann, C. Brune, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, Science **318**, 766 (2007).

[79] L. Fu, C. L. Kane, and E. J. Mele Phys. Rev. Lett. **98**, 106803 (2007).

[80] J. E. Moore and L. Balents, Phys. Rev. B **75**, 121306(R) (2007).

[81] L. Fu and C. L. Kane, Phys. Rev. B **76**, 045302 (2007).

[82] D. Hsieh, D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y. S. Hor, R. J. Cava, M. Z. Hasan, Nature **452**, 970 (2008).

[83] I. Bialynicki-Birula and Z. Bialynicki-Birula, Phys. Rev. D **35**, 2383 (1987).

[84] T. F. Jordan, J. Math. Phys. **28**, 1759 (1987).

[85] H. Mathur, Phys. Rev. Lett. **67**, 3325 (1991).

[86] R. Y. Chiao and Y. S. Wu, Phys. Rev. Lett. **57**, 933 (1986).

[87] A. Tomita and R. Y. Chiao, Phys. Rev. Lett. **57**, 937 (1986).

[88] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **59** , 1788(1987).

[89] M. V. Berry, Nature **326**, 277 (1987).

[90] *Optical Angular Momentum*, edited. by A. Allen, S. M. Barnett, and M. J. Padgett, Institute of Physics Publishing (2003).

[91] V. G. Fedoseyev, Opt. Commun. **193**, 9 (2001).

[92] V. S. Liberman and B. Ya. Zel'dovich, Phys. Rev. A **46**, 5199 (1992).

[93] K. Yu. Bliokh and Yu. P. Bliokh, Phys. Rev. E **70**, 026605 (2004).

[94] H. Schilling, Ann. Phys. (Leipzig) **16** (1965) 122.

[95] V. G. Fedoseev, Opt. Spectrosk. **71**, 992 (1991) [Opt. Spectrosc. (USSR) **71**, 570 (1991)].

[96] O. Hosten and P. Kwiat, Science **319**, 787 (2008).

[97] K. Yu. Bliokh, Phys. Rev. Lett. **97**, 043901 (2006).

[98] R. Dasgupta and P. K. Gupta, Opt. Commun. **257**, 91 (2006).

[99] H. Okuda and H. Sasada, Opt. Express **14**, 8393 (2006).

[100] K. Y. Bliokh, A. Niv, V. Kleiner, and E. Hasman, Nature Photonics **2**, 748 (2008).

[101] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade, and J. N. Winn, *Photonic Crystals* (Princeton University Press, Princeton, 1995).

[102] K. Sakoda, *Optical Properties of Photonic Crystals* (Springer, Berlin, 2005).

[103] M. Onoda and T. Ochiai, Phys. Rev. Lett. **103**, 033903 (2009).

[104] F. D. M. Haldane and S. Raghu, Phys. Rev. Lett. **100**, 013904 (2008).

[105] Z. Wang, Y. D. Chong, J. D. Joannopoulos, and M. Soljačić, Phys. Rev. Lett. **100**, 013905 (2008).

[106] S. Raghu and F. D. M. Haldane, Phys. Rev. A **78**, 033834 (2008).

[107] Z. Yu, G. Veronis, Z. Wang, and S. Fan, Phys. Rev. Lett. **100**, 023902 (2008).

[108] H. Takeda and S. John, Phys. Rev. A **78**, 023804 (2008).

[109] T. Ochiai and M. Onoda, Phys. Rev. B **80**, 155103 (2009).

[110] 永長直人, 十倉好紀, 日本物理学会誌 **64**, No. 6, 413 (2009).

[111] K. Sawada and N. Nagaosa, Phys. Rev. Lett. **95**, 237402 (2005).