Berry の位相に対する動力学的効果

大阪大学核物理研究センター　　福井　隆裕

本研究会においては、我々の研究に基づいた「Berry の位相に対する動力学的効果」について述べた後、そのカオスとの関連について多少言及した。後者については今後の研究を待つ状態なので、以下では前者をまとめておくことにする。

量子力学系に対する断熱近似は古くから用いられてきたものであるが、8年ほど前に新しい効果が認識された。十分にゆっくりと動く外部パラメーターに依存したハミルトニアン $H(\mathrm{R}(t))$ を考えよう。量子断熱定理により、このハミルトニアンの固有状態 $|n(\mathrm{R}(t))\rangle$ は同じ量子数 n を持った状態のまま時間発展していく。したがって素朴に考えると、この系の波動関数は $\exp(-i\int^t dt E_n/\hbar)$ $|n(\mathrm{R}(t))\rangle$ で与えられる。もし外部パラメーター R が $R(0)=R(T)$ の条件を満たして、ある閉じた軌道を描く場合には、$t=0$ において出発した波動関数は $t=T$ において、ダイナミカルな位相 $\exp(-i\int^t dt E/\hbar)$ を除いて元に戻ることが予想される。

１９８４年に Berry はこの断熱近似において、ダイナミカルな位相に加えて、幾何学的性質を持った位相が波動関数に付随することを示した。[1] すなわち断熱近似のもとで、波動関数は $\exp i\Gamma(C)\exp(-i\int^t dt E_n/\hbar)\,|n(\mathrm{R}(t))\rangle$ で与えられるべきであることを指摘したのである。この位相を例えば最も簡単な２準位モデルハミルトニアン$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} Z & X+iY \\ X-iY & -Z \end{pmatrix}$ に対して計算してみよう。エネルギー準位は $E_\pm=\pm\sqrt{X^2+Y^2+Z^2}/2$ で与えられ、$X=Y=Z=0$ において互いに交差する。いま外部パタメーター (X,Y,Z) をゆっくりとある経路 C に沿って動

かそう。この時 Berry の位相 $\exp i\Gamma(C)$ は、準位交差によってパラメーター空間の原点が特異になることによって生じ、原点から経路 C を見込んだ立体角に比例する。これはあたかも「パラメーター空間の原点に"モノポール"が存在するときに、経路 C を貫く磁束」と解釈できる。外部パラメーターを断熱的に動かして、ある経路を辿って最初の値に戻しても波動関数は $\exp i\Gamma(C)$ の位相のため元には戻らないのである。

以上のように Berry の位相は外部パラメーター空間上で与えられるものである。しかし物理的に興味のある多くの状況では、力学変数が外部パラメーターの役割を果たすことが多い。互いに相互作用しあっている系をいくつかの部分に分け、そのうちのあるものを外場として扱う場合である。原子・分子系におけるボルン・オッペンハイマー近似はその典型例であり、原子核の自由度を静的外部パラメーターとして扱った上で、電子の波動関数を求める。この時断熱近似を適用して、電子の状態をある一つの固有状態で置き換えれば、先に述べたように幾何学的位相が現われるであろう。したがって次に原子核の状態を決定する際、この位相の効果を考慮に入れなければならない。特に原子核の状態を決定するのに、半古典近似を用いてボーア・ゾンマーフェルト型の量子化を施すときに $W = \oint_C P \cdot dQ = 2\pi\hbar(n - \Gamma(C)/2\pi)$ の形で通常の量子化条件が修正されることが倉辻・飯田によって示された。[3] これらの Berry の位相に関する初期の重要な仕事については、Ref.2 を参照されたい。

このボルン・オッペンハイマー近似は２つの系のタイム・スケールが大きく異なる場合に有効であることは言うまでもなかろう。原子・分子系における原子核と電子は、質量が大きく異なるため断熱近似が機能するのである。しかしながら、次に例えば原子核の集団運動を考えると、集団自由度と独立粒子自由度が明確には分離していないことが特徴となっている。これは原子核が有限系であるために、その集団運動は完全に発達することはなく、独立粒子運動の影響が強く残っているからである。したがって原子核のスペクトルを見ると、同程度のエネルギー領域に両者が同時に存在することがわかる。この両者を如何に分離するか、という問題を巡って原子核の低励起集団運動理論は展開されてきたのである。したがって我々にとって、断熱近似という仮定については大きな不満が残る。

我々は以上の理由により、まず断熱近似を仮定しない「一般化された Berry の位相」の可能性を追求する。[4] 先にも述べたように、３つの外部パラメーターを含んだ 2×2 エルミート行列によって表される 2 準位モデルは、幾何学的位相の現われる典型的なモデルである。いま我々は孤立した相互作用系に興味があるので、外部パラメーターの代わりにボソン自由度を導入し、ハミ

ルトニアン $H = \hbar\omega(b^\dagger b + \frac{1}{2}) + \begin{pmatrix} \epsilon & vb \\ vb^\dagger & -\epsilon \end{pmatrix}$ によって記述される系を考察する。このモデルは Jaynes-Cummings モデルと呼ばれ、2準位原子メーザーの realistic なモデルとして知られている。2準位に存在する電子にとっては、光子の変数があたかも遅い外部パラメーターに見えるはずである。以下では、電子の自由度を消去することによって、光子の自由度に対する有効作用を計算し、そこにどのような形で幾何学的位相が現われるかを調べる。

このハミルトニアンに対して断熱近似を適用してみよう。すなわち、まずボソン自由度を凍結した上で、2×2 行列を対角化することによって固有値 $E_\pm = \pm\sqrt{\epsilon^2 + v^2 g^* g}$ と、各々に対応する規格化された固有状態 $|n = \pm\rangle$ を得る。ただし、g は 演算子 b に対応した古典的数であり、$\pm$ は2つの固有値をラベルする量子数である。次に全波動関数を $|\mathrm{boson}\rangle \otimes |n\rangle$ と近似した上で、ボソンの状態を決める。この時、断熱的2準位が互いに交差することに起因する Berry の位相が現われることは、最初のモデルの時の事情と全く同じである。この近似は大雑把に言って $\hbar\omega \ll \epsilon$、すなわち2準位のエネルギー・スケールがボソンのそれに比べて十分大きいときに機能するであろうが、ではこの条件が必ずしも満たされていない場合には、「Berry の位相」に対応するものは現われるのか、現われるとしたらどんな形で現われるのか。

量子力学にはいくつかの近似法があるが摂動論、断熱近似、半古典近似などはなんらかの意味で小さなパラメーターによる展開に基づいている。このパラメーターが存在しない場合には、一般的手法としては変分法が殆ど唯一のものと言ってもよいであろう。上のモデルでは2準位とボソンの自由度が、まさに競合する状況を考察したいのであるから、断熱近似が成り立たない状況を想定して、変分法による記述を試みよう。試行関数は2準位の電子に対して一般化された SU(2) コヒーレント状態を用いる。すなわち全波動関数を $|\phi\rangle = \exp(gb^\dagger - g^* b)\exp(fS_+ - f^* S_-)|0\rangle\,|1/2, -1/2\rangle$ の形にして、時間依存変分原理 $\delta\langle\phi|\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right)|\phi\rangle = 0$ によって、状態を記述するパラメーター g, g^*, f, f^* の時間依存性を決める。したがって、我々には断熱的固有状態を用いる必要は必ずしもない。Berry の位相は、断熱近似に付随する位相であったが、これに対して我々は、一般化されたコヒーレント状態を用いた変分法という近似に付随する位相を求めようとしているわけである。これには言葉の上だけではない実質的なアナロジーがある。[4]

さて、変分方程式を実際に計算をすると、パラメーターに対する一般化された正準方程式が導かれる。この方程式の解を用いると、先に述べたボーア・ゾンマーフェルト量子化で用いる作用 W は $W = 2\pi\hbar(g^* g + I_F)$ で与えられる。ここで I_F は、$g^* g \gg 1$ 更に $\hbar\omega \ll \epsilon$ なる近似

を施すことによって

$$I_F \to \frac{1}{2}\left(1 \pm \frac{\epsilon - \frac{\hbar\omega}{2}}{\sqrt{(\epsilon - \frac{\hbar\omega}{2})^2 + v^2 g^* g}}\right) \to \frac{1}{2}\left(1 \pm \frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + v^2 g^* g}}\right)$$

で与えられる。ここで上式の最後が通常の Berry の位相である。したがって、少なくとも第2式には、「遅い自由度」の運動の効果が取り込まれており、極限的に Berry の位相を再現する点において、より一般化された位相であることがわかる。Berry の位相は断熱極限における位相であり、そこには少なくとも遅い自由度の速度の効果 $\hbar\omega$ は入らない。我々の提案した半古典量子化条件は、倉辻・飯田の「 Berry の位相の修正を伴ったボーア・ゾンマーフェルト量子化条件」をより一般化したものになっている。[5] 更にこの効果が簡単な $\hbar\omega$ の展開の形ではなく、摂動の無限次まで取り入れられた形になっていることに注意をしなければならない。これは単純に Berry の位相に対する修正として捉えるべきではなく、むしろ Berry の位相をより一般化した位相、断熱近似ではなく変分という近似に付随する位相と解釈すべきである。変分法は小さな展開パラメーターを持たない系に対しても有効であり、したがって系が断熱的でないどんな場合でも我々の位相は定義され得るのである。

実際に W を用いて半古典的に量子化したスペクトルと正確なスペクトルはよい一致を示しており、それは特に $\hbar\omega$ が小さくない場合に顕著であることも数値計算で示されている。また我々は「一般化された調和振動子と SU(2) 自由度のカップルしたモデル」を提案し、同様の分析を行った。この一般化された調和振動子モデルは、Hanney が純粋な古典力学系においても Berry の位相に対応するものが現われることを示すときに用いられて以来、[6] 多くの研究者によって議論されている、きわめて興味深いモデルである。我々はこのモデルに対しても、先と同様にして一般化された Berry の位相を導くことに成功している。

最後にまとめとして、断熱近似と変分法とを比較しておく。

近似的波動関数	$\exp(-i\int dtE_n(\mathbf{R})/\hbar)\cdot\lvert n(\mathbf{R})\rangle$	$\leftrightarrow$	$\exp(i\hat{G})\,\lvert 0\rangle$
その近似	$\dot{\mathbf{R}}$を無視	$\leftrightarrow$	変分的に Schrödinger 方程式を満たす
ゲージ依存量	ベクトル・ポテンシャル $\mathbf{A}$	$\leftrightarrow$	1-form ω
	$\mathbf{A}\cdot d\mathbf{R}=i\langle n\vert\nabla_{\mathbf{R}}n\rangle\cdot d\mathbf{R}$		$\omega=i\hbar\langle\phi\vert\,d\,\vert\phi\rangle\,(=p_idq_i)$
ゲージ非依存量	磁場	$\leftrightarrow$	シンプレクティック 2-form
	$\mathbf{V}=\nabla_{\mathbf{R}}\times\mathbf{A}$		$\Omega=d\omega(=dp_i\wedge dq_i)$
経路	パラメーター空間の閉じたループ	$\leftrightarrow$	位相空間の閉軌道、或は不変トーラス上の既約積分路
経路に沿った全位相変化	$\exp\left(i\oint\mathbf{A}\cdot d\mathbf{R}\right)\times\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_0^T dtE_n(\mathbf{R}(t))\right\}$	$\leftrightarrow$	$\exp\left(i\oint\omega\right)\times\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^T dt\mathcal{H}\right)$

本研究は京都大学理学部　津江保彦氏との共同研究によるものである。

REFERENCES

1. M. V. Berry, Proc. Roy. Soc. London **A392** (1984), 45.
2. *Geometric Phases in Physics* eds. A. Shapere and F. Wilczek (World Scientific, Singapore, 1989)
3. H. Kuratsuji and S. Iida, Prog. Theor. Phys. **74** (1985), 439.
4. T. Fukui and Y. Tsue, Prog. Theor. Phys. **87**, (1992) 627.
5. H. Kuratsuji, Phys. Rev. Lett. **61** (1988), 1687; H. Kuratsuji and M. Matsumoto, Phys. Lett. **A155** (1991), 99.
6. J. H. Hannay, J. Phys. **A18** (1985), 221.