☆量子力学の現代的話題

Berry 接続, Berry 位相 (phase)

$H|\psi\rangle = |\psi\rangle E$ ： 固有値問題 $\quad \langle\psi|\psi\rangle = 1$

Hが パラメター に依存する時を考える

ここでは $\vec{R} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$ に依存するとしよう.

「$H(\vec{R})$」 よって $|\psi\rangle$ も $\vec{R}$ に依存する, Eも

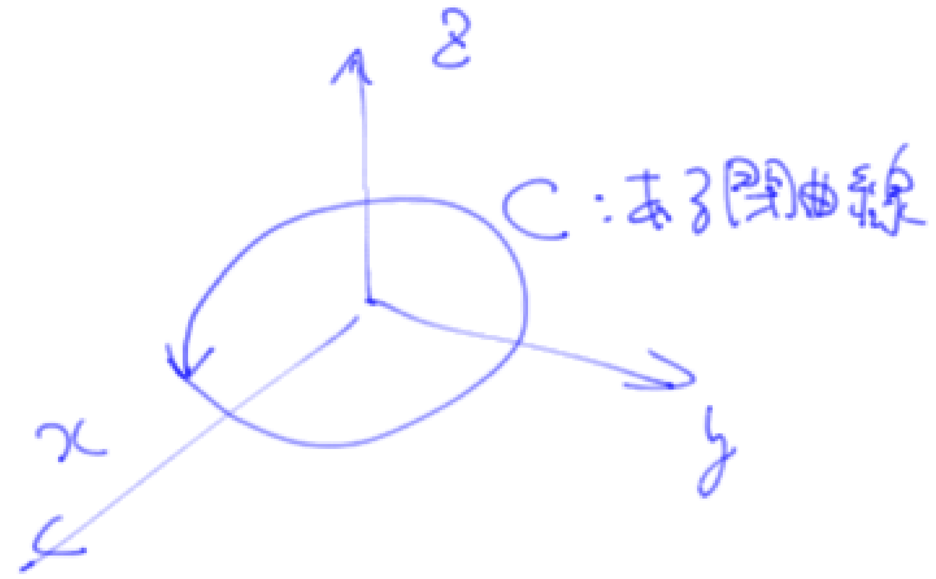
$$H(\vec{R})|\psi(\vec{R})\rangle = E(\vec{R})|\psi(\vec{R})\rangle$$

"ベリー接続" $\vec{A}$ とは?

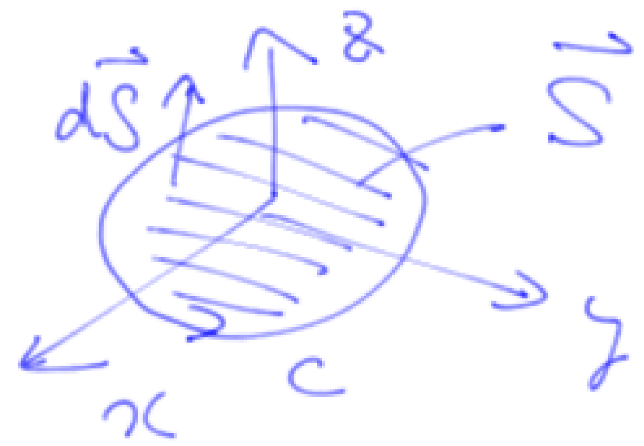
$$\vec{A} = \langle\psi(\vec{R})|\vec{\nabla}_R|\psi(R)\rangle = \langle\psi|\vec{\nabla}\psi\rangle$$

つまり
$$A_x = \langle\psi|\partial_x\psi\rangle$$
$$A_y = \langle\psi|\partial_y\psi\rangle$$
$$A_z = \langle\psi|\partial_z\psi\rangle$$

"ベリー位相" γ とは?



$$i\gamma = \oint_C d\vec{l}\cdot\vec{A}$$
$$= \int_S d\vec{S}\cdot\vec{B} \quad , \vec{B} = \mathrm{rot}\,\vec{A} = \vec{\nabla}\times\vec{A}$$



☆位相変換 と gauge 変換

$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, $e^{i\chi}$ をかけてみよう! (位相変換)

$$H|\psi\rangle e^{i\chi} = E|\psi\rangle e^{i\chi}$$

$|\psi'\rangle = |\psi\rangle e^{i\chi}$ として $\quad H|\psi'\rangle = |\psi'\rangle E$

$|\psi'\rangle$ も固有関数!

$\vec{A}' = \langle\psi'|\vec{\nabla}\psi'\rangle$ とすることができる!

$$= e^{-i\chi}\langle\psi|\vec{\nabla}\{|\psi\rangle e^{i\chi}\} \qquad i(\vec{\nabla}\chi)e^{i\chi}$$
$$= e^{-i\chi}\langle\psi|\{|\vec{\nabla}\psi\rangle e^{i\chi} + |\psi\rangle\vec{\nabla}e^{i\chi}\}$$
$$= e^{-i\chi}\langle\psi|\nabla\psi\rangle e^{i\chi} + e^{-i\chi}\overset{1}{\langle\psi|\psi\rangle}(i\vec{\nabla}\chi)e^{i\chi}$$
$$= \langle\psi|\nabla\psi\rangle + i\nabla\chi$$
$$= \vec{A} + i\vec{\nabla}\chi$$

電磁気学での gauge 変換と同じ

$$\underset{B'}{\mathrm{rot}\,\vec{A}'} = \mathrm{rot}\,\vec{A} + i\underbrace{\vec{\nabla}\times\vec{\nabla}\chi}_{=0} = \underset{B}{\mathrm{rot}\,\vec{A}}$$

$B' = B$

$$i\gamma' = \int_C d\vec{l}\cdot\vec{A}' = \int_C d\vec{l}\cdot(\vec{A} + i\nabla\chi)$$
$$= i\gamma + i\underbrace{\int_C d\vec{l}\cdot\nabla\chi}_{=2\pi n}, \quad n = 0, \pm1, \pm2, \cdots$$

$e^{i\chi}$ が C上で一価関数

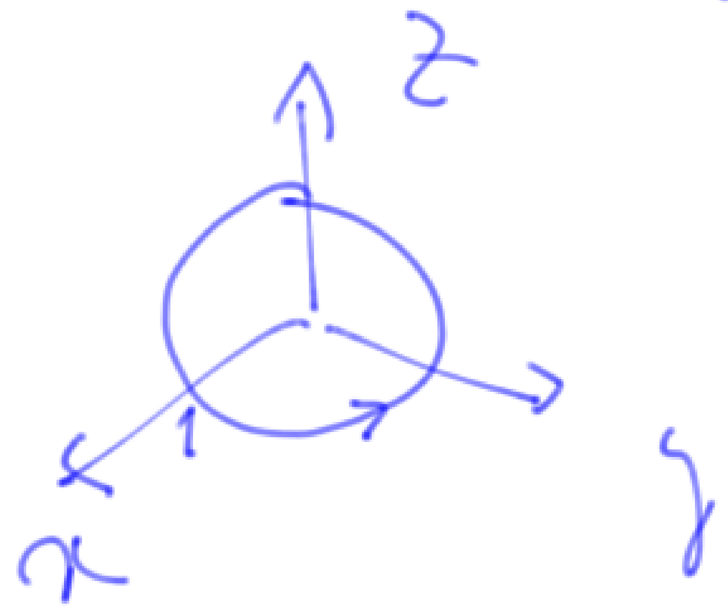
$$\gamma' = \gamma + 2\pi n$$

$\boxed{\gamma' \equiv \gamma \mod 2\pi}$

Berry phase は 2π の不定性をのぞいて定まる.

(例)

$H = \vec{R}\cdot\vec{\sigma} = x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z$　$\sigma_{x,y,z}$：パウリ行列 とする.

C:  xy平面上の単位円

$x = \cos\theta,\ y = \sin\theta,\ z = 0$　$\theta: 0 \to 2\pi$

$$H = \begin{pmatrix} 0 & x-iy \\ x+iy & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\theta} \\ e^{i\theta} & 0 \end{pmatrix}$$

$H|\psi\rangle = +|\psi\rangle$　固有値 +1 について考えると　$\langle\psi|\psi\rangle = 1$

$$\begin{pmatrix} 0 & e^{-i\theta} \\ e^{i\theta} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = +\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix},\quad |\psi\rangle = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\theta} \\ 1 \end{pmatrix}/\sqrt{2}$$
$$= \begin{pmatrix} x-iy \\ 1 \end{pmatrix}/\sqrt{2}$$

$$\partial_x|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}/\sqrt{2},\quad A_x = \langle\psi|\partial_x\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(x+iy, 1)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}$$
$$= \frac{1}{2}(x+iy) = \frac{1}{2}e^{i\theta}$$

$$\partial_y|\psi\rangle = \begin{pmatrix} -i \\ 0 \end{pmatrix}/\sqrt{2},\quad A_y = \langle\psi|\partial_y\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(x+iy, 1)\begin{pmatrix} -i \\ 0 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}$$
$$= \frac{1}{2}(-i)e^{i\theta}$$

$$\partial_z|\psi\rangle = 0,\quad A_z = 0$$

$\vec{l}$：単位円 $(z=0)$　$x = \cos\theta,\ y = \sin\theta$

$$d\vec{l} = d\theta\begin{pmatrix} \frac{dx}{d\theta} \\ \frac{dy}{d\theta} \\ 0 \end{pmatrix} = d\theta\begin{pmatrix} -\sin\theta \\ \cos\theta \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{A}\cdot d\vec{l} = -A_x\sin\theta + A_y\cos\theta = \left(-\frac{1}{2}e^{i\theta}\sin\theta + \frac{1}{2}(-i)e^{i\theta}\cos\theta\right)d\theta$$
$$= d\theta\,\frac{1}{2}(-i)\,e^{i\theta}\underbrace{(\cos\theta - i\sin\theta)}_{e^{-i\theta}} = -i\frac{1}{2}d\theta$$

$$i\gamma = \oint_C d\vec{l}\cdot\vec{A} = \int_0^{2\pi} d\theta\,(-i)\frac{1}{2}d\theta = -i\frac{2\pi}{2} = -i\pi$$

$\gamma = -\pi \equiv +\pi \mod 2\pi$　2π分は不定