九州大学集中講義 July 17-19, 2018:トポロジカル相の発見と展開
(初貝安弘, Yasuhiro Hatsugai)

レポート問題 (Problem)

以下に示す大問3つのうち、1つ以上に答えよ。(途中までの解答でも可)

問題 1. 一様磁場 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}$ 下の電子の運動を考える。i 番目の電子の運動を記述するラグランジアンを $L = \frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{r}}_i{}^2 + \dot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\boldsymbol{A}_i$ とする。$\boldsymbol{r}_i = \boldsymbol{r}_i(t)$ は時刻 t における電子の位置，$\boldsymbol{A}_i = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_i(t))$ である。(電子の電荷 $e < 0$)

(1) 電子の運動量 $\boldsymbol{p}_i = \dfrac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_i}$ (成分ごとに微分) として，ハミルトニアン $h_i = \boldsymbol{p}\cdot\dot{\boldsymbol{r}}_i - L$ を求めよ。

(2) 電子の速度 $\boldsymbol{v}_i = \dot{\boldsymbol{r}}_i$ として $\boldsymbol{v}_i = \dfrac{\boldsymbol{p}_i - e\boldsymbol{A}_i}{m}$ となることを示せ。

(3) $\boldsymbol{A}_i \to \boldsymbol{A}_i + \hat{\boldsymbol{n}}\delta A$, $(|\hat{\boldsymbol{n}}| = 1,\ \delta A$ は定数) とおいて $ev_i^n = -\left.\dfrac{\partial h_i}{\partial \delta A}\right|_{\delta A=0}$ を示せ。ここで $v_i^n = \hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{v}_i$ は i 番目の電子の $\boldsymbol{n}$ 方向への速度である。

(4) $L_x \times L_y$ の大きさの二次元系に面に垂直に磁場 B，x 方向に電場 E_x が印加され，y 方向に電流 I_y が流れている。$\hat{\boldsymbol{n}} = \hat{y}$ として電子の y 方向への平均速度を $\bar{v} = \frac{1}{N}\sum_i v_i^y$ とすれば $I_y = e\rho\bar{v}L_x$ である。 ここで N を全電子数として電子の二次元面密度 $\rho = \frac{N}{L_x L_y}$ である。 N 粒子系のハミルトニアン $H = \sum_i h_i$, $\Phi = L_y\delta A$ として次の関係式を導け。

$$I_y = -\frac{\partial H}{\partial \Phi}$$

(5) 空間座標 $\boldsymbol{r}$ のみに依存する関数 $\chi(\boldsymbol{r})$ を用いてゲージ変換 $\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} + \boldsymbol{\nabla}\chi$ を考える。L' を L において $\boldsymbol{A} \to \boldsymbol{A}'$ としたものとする。以下の関係式を示せ。

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{B}' &= \boldsymbol{B}\\
L' &= L + e\dot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\boldsymbol{\nabla}\chi(\boldsymbol{r}_i)\\
\boldsymbol{p}'_i &= \frac{\partial L'}{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_i} = \boldsymbol{p}_i + e\boldsymbol{\nabla}\chi(\boldsymbol{r}_i)\\
\boldsymbol{v}'_i &= \boldsymbol{v}_i
\end{aligned}$$

(6) $\boldsymbol{p}_i \to -\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{\nabla}_i$ として量子力学における定常状態のシュレディンガー方程式 $\dfrac{(-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{\nabla} - e\boldsymbol{A})^2}{2m}\psi = E\psi$ とゲージ変換後のシュレディンガー方程式 $\dfrac{(-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{\nabla} - e\boldsymbol{A}')^2}{2m}\psi' = E\psi'$ とを考える。以下の関係を示せ。

$$\psi'(\boldsymbol{r}) = \exp(\mathrm{i}\frac{e}{\hbar}\chi)\psi(\boldsymbol{r})$$

(7) $\boldsymbol{\nabla}\chi = \hat{y}\delta A$, とすれば $\chi = y\delta A$ となる。よって $\psi(y + L_y) = \psi(y)$ と ψ が y 方向の周期的境界条件を満たすとき, $\psi'(y + L_y) = e^{i\theta}\psi'(y)$ と ψ' はいわゆる，捻った境界条件を満たす。$\Phi_0 = h/e$ を磁束量子として $\theta = 2\pi\dfrac{\Phi}{\Phi_0}$ であることを示せ。

問題 2. $2\times\ 2$ のエルミート行列 $H=\begin{pmatrix} z & x-\mathrm{i}y \\ x+\mathrm{i}y & -z \end{pmatrix}$ を考える。ただし x,y,z は実数である。なお，3 次元ベクトル $\boldsymbol{A}=(A_x,A_y,A_z)$, $\boldsymbol{B}=(B_x,B_y,B_z)$ に対して $(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\sigma})=(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\sigma_0+\mathrm{i}(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{\sigma}$ となる。ただし σ_0 は $2\times\ 2$ の単位行列，$\boldsymbol{\sigma}=(\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z)$ は，パウリ行列を成分とするベクトルである。

(1) $H=\boldsymbol{R}{\cdot}\boldsymbol{\sigma}$ と書けることを用いて，H の固有値が $\pm R$, $(R=|\boldsymbol{R}|=\sqrt{x^2+y^2+z^2})$ であることを示せ。

(2) $P=\frac{1}{2}(\sigma_0+H/R)$ として $P^2=P$ を示せ。

(3) $|\Phi_1\rangle=\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ として $|\varphi_1\rangle=P|\Phi_1\rangle$ が $H|\varphi_1\rangle=R|\varphi_1\rangle$ と固有値 R の固有ベクトルであることを示せ。

(4) $N_1\equiv\langle\Phi_1|P|\Phi_1\rangle=2^{-1}(R+z)$ を示せ。

(5) 原点を中心とする半径 R の球面を $S_2(R)$ と書き，z 軸正方向と球面との交点を北極，負方向との交点を南極とする。このとき南極以外では $N_1\neq 0$ であることを示せ。

(6) 極座標 $x=R\cos\theta\sin\phi$, $y=R\sin\theta\sin\phi$, $z=R\cos\theta$ を用いて $\sqrt{N_1}=\cos\frac{\theta}{2}$ となることを示せ。

(7) $|\Psi_1\rangle=|\varphi_1\rangle/\sqrt{N_1}$ を極座標で計算し $|\Psi_1\rangle=\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ e^{\mathrm{i}\phi}\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$ を導け。

(8) $|\Phi_2\rangle=\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ として $|\varphi_2\rangle=P|\Phi_1\rangle$ が $H|\varphi_2\rangle=R|\varphi_2\rangle$ と固有値 R の固有ベクトルであることを示せ。

(9) $N_2\equiv\langle\Phi_2|P|\Phi_2\rangle=2^{-1}(R-z)$ を示せ。

(10) 北極以外では $N_2\neq 0$ であることを示せ。

(11) $\sqrt{N_2}=\sin\frac{\theta}{2}$ となることを示せ。

(12) $|\Psi_2\rangle=|\varphi_2\rangle/\sqrt{N_2}$ を極座標で計算し $|\Psi_2\rangle=\begin{pmatrix} e^{-\mathrm{i}\phi}\cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$ を導け。

(13) $|\Psi_1\rangle=|\Psi_2\rangle g_{21}$ と書けば $g_{12}=e^{i\phi}$ となる。これを導け。

(14) $\boldsymbol{A}_1=\langle\Psi_1|\boldsymbol{\nabla}\Psi_1\rangle$, $\boldsymbol{A}_2=\langle\Psi_2|\boldsymbol{\nabla}\Psi_2\rangle$ と書いたとき，前問から $\boldsymbol{A}_1=\boldsymbol{A}_2+\mathrm{i}\boldsymbol{\nabla}\phi$ となることを示せ。

(15) $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}$ としてチャーン数を球面 $S_2(R)$ 上の面積分で以下のように定義する。

$$C=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_{S_2(R)}d\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}$$

$\boldsymbol{B}_1=\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}_1$, $\boldsymbol{B}_2=\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}_2$ としたとき $\boldsymbol{B}_1=\boldsymbol{B}_2$ を示せ。

(16) $S_2^N(R)$ を北半球（面），$S_2^S(R)$ を南半球（面）としたとき，東向きを正の向きとした赤道を $S_1(R)$ とすれば，向きを含めて北半球の境界 $\partial S_2^N = S_1$, 南半球の境界 $\partial S_2^S = -S_1$ となる。よってストークスの定理を北半球と南半球でそれぞれ使えば、$\int_{S_2^N} d\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}_1 = \oint_{S_1} d\boldsymbol{\ell}\cdot\boldsymbol{A}_1$, $\int_{S_2^S} d\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}_2 = \oint_{-S_1} d\boldsymbol{\ell}\cdot\boldsymbol{A}_2$ となる。以下の計算を補い $C=1$ を導け。

$$C = \int_{S_2^N} d\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}_1 + \int_{S_2^S} d\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}_2 = \cdots = \frac{\mathrm{i}}{2\pi\mathrm{i}}\oint_{S_1} d\boldsymbol{\ell}\cdot\boldsymbol{\nabla}\phi = 1$$

なお x, y, z で指定される三次元空間の等方性を仮定して以上の計算が球面の半径 R に依存しないことから，$B_3(R)$ を半径 R の三次元球として $\partial B_3(R) = S_2(R)$

$$C = \frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_{S_2(R)} d\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B} \equiv \frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_{B_3(R)} dV\,\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{B}$$

から

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{B} = \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A} = 2\pi\mathrm{i}\delta^3(\boldsymbol{R})$$

となる。 Maxwell 方程式の類似の議論を使えば $\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{B}$ は磁荷に対応するから，$2\times\ 2$ エルミート行列の縮退点はベリー接続に伴う単磁極を導く（ディラック単磁極）。

問題 3. 前問の考察を波動関数を用いずゲージ不変な形で行おう。(参考: 初貝安弘 「物理学における線形代数 : 量子力学での展開」雑誌 数理科学 5 月号, p15-p22, 2017 年）

(1) $\boldsymbol{B} = \langle\boldsymbol{\nabla}\psi|\times|\boldsymbol{\nabla}\psi\rangle$ を示せ。なお $|\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\nabla}\psi\rangle = 0$ である。

(2) $P = |\psi\rangle\langle\psi|$ として以下の関係式を示せ。ただし，$\langle\psi|\psi\rangle = 1$ より $\langle\boldsymbol{\nabla}\psi|\psi\rangle = -\langle\psi|\boldsymbol{\nabla}\psi\rangle$ であり，$P|\psi\rangle = |\psi\rangle$, $\langle\psi|P = \langle\psi|$ である。

$$P|\boldsymbol{\nabla}\psi\rangle = |\psi\rangle\boldsymbol{A}$$
$$\langle\boldsymbol{\nabla}\psi|P = -\boldsymbol{A}\langle\psi|$$

(3) 次の関係式を確認せよ（式変形を納得せよ）。

$$\begin{aligned}
P(\boldsymbol{\nabla}P\times\boldsymbol{\nabla}P)P &= P(|\boldsymbol{\nabla}\psi\rangle\langle\psi| + |\psi\rangle\langle\boldsymbol{\nabla}\psi|)\times(|\boldsymbol{\nabla}\psi\rangle\langle\psi| + |\psi\rangle\langle\boldsymbol{\nabla}\psi|)P \\
&= (|\psi\rangle\boldsymbol{A}\langle\psi| + |\psi\rangle\langle\boldsymbol{\nabla}\psi|)\times(|\boldsymbol{\nabla}\psi\rangle\langle\psi| - |\psi\rangle\boldsymbol{A}\langle\psi|) \\
&= |\psi\rangle(\boldsymbol{A}\langle\psi| + \langle\boldsymbol{\nabla}\psi|)\times(|\boldsymbol{\nabla}\psi\rangle - |\psi\rangle\boldsymbol{A})\langle\psi| \\
&= |\psi\rangle\boldsymbol{F}\langle\psi| \\
\boldsymbol{F} &= \langle\boldsymbol{\nabla}\psi|\times|\boldsymbol{\nabla}\psi\rangle - \langle\boldsymbol{\nabla}\psi|\psi\rangle\times\boldsymbol{A} \\
&= \langle\boldsymbol{\nabla}\psi|\times|\boldsymbol{\nabla}\psi\rangle + \boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B}
\end{aligned}$$

(4) 任意の $m \times n$ 行列 M,$n \times m$ 行列 N に対して $\mathrm{Tr}_m MN = \mathrm{Tr}_n NM$ に注意して以下の関係式を導け。

$$\boldsymbol{B} = \mathrm{Tr}_2\, P \boldsymbol{\nabla} P \times \boldsymbol{\nabla} P$$

(5) 以下の関係式を導け。

$$\boldsymbol{B} = \frac{\mathrm{i}}{2} \frac{\boldsymbol{R}}{R^3}$$

(6) $R \neq 0$ において $\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{B} = 0$ を示せ。