

周期駆動量子系の物理

東京大学大学院工学系研究科 北村想太

2022年8月3日 – 8月5日

概要

物質の性質を自在に設計・制御することは凝縮系物理学の究極の目標の一つといえるが、物性制御の新たな可能性を切り開く試みとして、光誘起相転移の研究が挙げられる。新たに光という自由度を導入することは、単に既存の相図に新しい軸を加えることに留まらず、動的に物性をスイッチングできる可能性をもたらしたり、強い外場によって起こる非平衡現象を利用することで平衡状態では思いもかけないような状態を実現させたりといった、質的に新しい物理を生み出す舞台を提供する。一般には強い外場のもとでの非平衡状態を微視的な理論に基づいて解析することは困難であるが、外場が時間に関して周期的である場合には、Floquet の定理を用いて非平衡系のダイナミクスを実効的な平衡系の問題と対応づけることで、多くの情報を引き出すことができる。特に近年では、外場のもとで異なる時刻のハミルトニアンが非可換となることに起因する量子効果によって、トポロジカル量子相をはじめとするさまざまな新奇相が実現される可能性が議論されている。本講義では、周期外場に駆動された量子系を対象として、Floquet 理論を用いた物性の解析方法や、様々な新奇量子相の実現方法の理論提案について基礎的な部分から解説する。

はじめに

この講義ノートの主題である周期駆動量子系とは、時間に関して周期的な外場によって駆動された量子系のことである。量子系の時間発展は時間依存 Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\Psi(t)\rangle \quad (1)$$

によって記述され、外場の効果は系を記述するハミルトニアン \hat{H} に含まれるパラメータの時間変化によって表現される。すなわち、この講義で扱う対象は、外場の周期を T としたとき

$$\hat{H}(t) = \hat{H}(t + T) \quad (2)$$

なる周期性を満たす時間依存するハミルトニアン $\hat{H}(t)$ と、そのもとでの時間発展や定常状態等の性質である。

通常の物性物理では多くの場合、時間依存する外場は時間依存しないハミルトニアンに対する摂動として扱われ、平衡統計力学の枠組みの中で議論が完結する。ではその範囲を超えて、系が強い外場に晒されており非平衡状態となっている場合の物性はどのように調べたらよいだろうか？これは一般には難しい問題で、数値的に時間発展シミュレーションを行ってみる他に手立てがないことも少なくない*1。

ところが外場が上に述べたような時間に関する周期性を備えている場合には、それを足がかりにして具体的な時間発展を計算せずとも非平衡物性に関する様々な情報を引き出せることがわかってきている。これを可能にするのは、数学的な道具としては線形微分方程式の一般論である Floquet の定理である。Floquet の定理を量子力学 (時間依存 Schrödinger 方程式) に応用することでもたらされる非自明な帰結を物性の解析に役立てようというわけである。Floquet の定理を量子力学に即して述べると以下ようになる：

Floquet の定理 ハミルトニアン $\hat{H}(t)$ が式 (2) で表される周期性を持つ場合、時間依存 Schrödinger 方程式 (1) の一般解は以下の Floquet 状態と呼ばれる正規直交関数

$$|\Psi_\alpha(t)\rangle = |v_\alpha(t)\rangle e^{-i\epsilon_\alpha t/\hbar} \quad (3)$$

の線形結合で表すことができる。ここで $|v_\alpha(t)\rangle$ は

$$|v_\alpha(t+T)\rangle = |v_\alpha(t)\rangle \quad (4)$$

を満たす周期関数である。

この定理が固体物理では馴染み深い Bloch の定理とほとんど同じ形式を取っていることにすぐ気づくであろう。そこから想像がつくように、量子力学における Floquet の定理は、時間に関する並進対称性が離散的である場合に保存量としてのエネルギーは連続対称性の場合からどのように修正されるべきか？という物理的な考察から自然に導くことができる。この考察を深めていくと、周期駆動量子系の時間発展を計算する問題は固有値方程式を解くことに帰着させられるということが複数の側面から見えてくる。つまり、周期駆動系の時間発展はある種の時間依存しない有効ハミルトニアンに支配されているとみなすことができ、対応する平衡系の性質から非平衡状態がある程度理解できる。この点は元か

*1 外部環境を陽に考慮しない理論で本当に現実の非平衡状態がきちんと記述できるのか？陽に考慮するとしたらどのように考慮すればよいのか？というより難しい問題も存在するが、その点に目をつぶって与えられた時間依存 Schrödinger 方程式の性質を調べるといっただけでも十分に難しい。

ら時間依存しない Schrödinger 方程式を扱っている Bloch の定理の場合には見られない周期駆動量子系の大きな特徴である。

この特徴は凝縮系物理学としては物質相の制御への応用という観点で重要なものである。平衡系の理論的な枠組みを周期駆動系の実効的な静的問題に拡張することで、温度・圧力・化学ドーピングといった物質の相を制御する従来の手段に、強いレーザー光のような本質的に非平衡的な方法を加えることができる。平衡系と同様の議論が展開できるという観点では、外場の持つ対称性が物質系の有効ハミルトニアンにも反映されるという点が重要で、例えばレーザーの偏光を直線偏光に選ぶか円偏光に選ぶかに応じて異なる物性が現れる。特に円偏光は時間反転対称性を破った外場であり、従来の手段では実現の難しい時間反転対称性の破れた相互作用を系に導入することが可能である。これは時間反転対称性の有無が分類上重要となるトポロジカル相の制御に有用である。平衡系との類似性がある一方で、非平衡状態に特有の新しい物理現象が現れうる点もレーザー光を物質相の制御に用いる観点では重要な特徴である。

この講義ノートでは Floquet 理論を用いた物性の解析を基礎から解説し、固体物理の標準的なモデルであるタイトバインディング模型・Hubbard 模型を題材として、レーザー外場による周期駆動によってトポロジー・磁性・超伝導といった多彩な物理現象がいかにより制御できるかを議論する。第 1 章では上で述べた Floquet の定理を時間並進対称性の観点から整理し、有効ハミルトニアンによる静的な描像がいかにより現れるかを見る。Floquet 理論の枠組みを以ってしても一般の周期駆動系は平衡の問題と比べると扱いが難しいが、駆動周波数が大きい極限からの摂動論を考えると、外場の強度に関する非摂動性を保ったまま扱いの容易な有効ハミルトニアンを得ることができる。第 2 章ではこの高周波展開の枠組みを解説する。第 3 章では一旦一般論から離れ、相互作用しない電子系 (タイトバインディング模型) を題材として電子のバンド構造やバンドトポロジーのレーザー光による変化やそれに付随する物理現象を紹介する。ここまでの内容は時間発展を特徴づける有効ハミルトニアンとその固有値の持つ構造についての議論が主であるが、有効ハミルトニアンは平衡系と同様に統計力学的な性質をも特徴づけるのだろうか？周期駆動系の統計力学は必ずしも完成された理論ではないが、相互作用のない簡単な系で分布を決定する処方箋や、一般の相互作用する非可積分系についてこれまで得られている知見を第 4 章では紹介する。第 5 章では強相関電子系の雛形である Hubbard 模型を題材として、金属絶縁体転移、磁性、トポロジー、超伝導といった物性のレーザー光による制御についての研究を、筆者のこれまでの研究を中心に紹介する。

以下では $\hbar = 1$, 電子の電荷を -1 , 格子定数を 1 とする単位系を用いる。

参考文献について

量子系における Floquet 理論の入門的な解説としては、英文であればレビュー論文 [1, 2, 3]、和文であれば講義ノート [4] 等が挙げられ、併せて参照すると理解の助けになると思われる。また、この講義ノートではカバーしきれなかった内容に、Floquet 理論の非平衡 Green 関数法への応用があるが、こちらについてはレビュー論文 [5] を参照されたい。類似のトピックとして量子開放系の Floquet 理論に関してはレビュー論文 [6] で詳しく扱われている。また、Floquet 状態の示す伝導現象についても触れる余裕がなかったが、例えば久保公式の Floquet 状態への拡張については [2, 3] にまとまった記述がある。

1 Floquet の定理

量子系が周期外場によって駆動されており、時間に依存するハミルトニアン $\hat{H}(t)$ が周期 T の時間周期性

$$\hat{H}(t) = \hat{H}(t + T) \quad (5)$$

を持つ系の一般的な性質を考察していこう。量子力学で考察の対象とする系の多くはハミルトニアンが時間に依らない。そのためエネルギーが保存しており、エネルギー固有状態を計算することで系の様々な性質を調べることが可能であった。駆動された系ではもはやそのようなアプローチを取ることはできず、ほとんどの場合は $\hat{H}(t)$ の固有状態を考えることには意味がない*2。したがって基礎方程式としては時間依存 Schrödinger 方程式

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\Psi(t)\rangle \quad (6)$$

にまで立ち戻る必要がある。

\hat{H} が時間依存しないとき問題が時間依存しない Schrödinger 方程式に帰着されるのは、エネルギーが保存しておりその固有状態が取れるため、すなわち対称性の観点では連続的な時間並進対称性が存在するためであった。駆動が周期的である場合には周期 T の整数倍だけ時間を並進させることに関する離散的な対称性が残っているので、その固有状態を取ることができるはずである。そこでまずは時間を離散並進させる演算子を考えて、この対称性に対応する「保存則」がどのように表されるかを見ていこう*3。

*2 系のパラメータ変化が遅い極限 (断熱極限) では $\hat{H}(t)$ の固有状態を用いて時間発展を書くことができることが知られている (断熱定理)。

*3 対称性・保存則の有無を量子力学の言葉でどう表すか、という問題もハミルトニアンが時間依存する場合

1.1 離散並進の演算子

初等的な量子力学で学ぶように、時間依存 Schrödinger 方程式の形式的な解は

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle \quad (7)$$

と表すことができた。ここで時間発展演算子 $\hat{U}(t, t_0)$ は時間順序積 \mathcal{T} を含む級数解の形で

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathcal{T} \exp \left[-i \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \right] \quad (8)$$

$$:= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(-i)^N}{N!} \int_{t_0}^t dt_1 \cdots \int_{t_0}^{t_1} dt_N \mathcal{T}[\hat{H}(t_1) \cdots \hat{H}(t_N)] \quad (9)$$

と表される演算子である。すなわち、考察の対象となる時間の離散並進操作は、適当な時刻 t_0 を選んだとき $n \in \mathbb{Z}$ として $\hat{U}(t_0 + nT, t_0)$ と表される演算子である。

式 (9) の被積分関数の時刻を $\hat{H}(t) = \hat{H}(t + T)$ を用いて一斉にシフトすると、

$$\hat{U}(t + T, t' + T) = \hat{U}(t, t') \quad (10)$$

なる性質を時間発展演算子が持つことがただちにわかる。特に、この性質と $\hat{U}(t, t') = \hat{U}(t, t'')\hat{U}(t'', t')$ から

$$\hat{U}(t_0 + nT, t_0) = \hat{U}(t_0 + nT, t_0 + (n-1)T) \cdots \hat{U}(t_0 + 2T, t_0 + T)\hat{U}(t_0 + T, t_0) \quad (11)$$

$$= [\hat{U}(t_0 + T, t_0)]^n \quad (12)$$

が得られる。すなわち、

$$\hat{U}(t_0 + T, t_0) = e^{-i\hat{F}T} \quad (13)$$

となるよう $\hat{F} = iT^{-1} \ln \hat{U}(t_0 + T, t_0)$ を定義すると、時間依存 Schrödinger 方程式の解が

$$|\Psi(t_0 + nT)\rangle = \hat{U}(t_0 + nT, t_0)|\Psi(t_0)\rangle \quad (14)$$

$$= e^{-i\hat{F}nT}|\Psi(t_0)\rangle \quad (15)$$

と表されることになる。時間に依存しないハミルトニアン \hat{H} での時間発展が $|\Psi(t_0 + t)\rangle = e^{-i\hat{H}t}|\Psi(t_0)\rangle$ で表されたことを思い出すと、この表式は、離散的な時刻 $t = t_0 + nT$ に着

には見直しを迫られることに注意が必要である。特に、保存則とはある量が時間変化しないということであるから、一般には時間並進対称性がないときには何らかの概念的な拡張が必要なはずである。

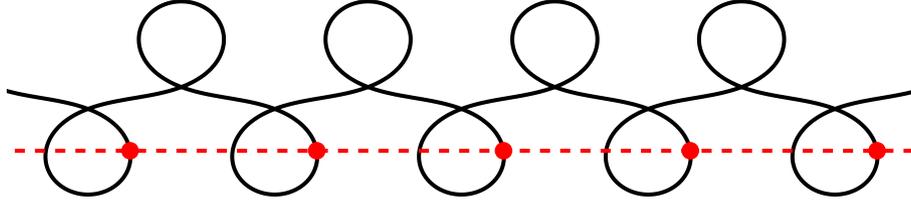


図 1 周期駆動系における時間発展のイメージ。ここでは文献 [7] で議論されている振動磁場中の古典電子が描く複雑な軌道为例に取り、これを黒い実線で図示した。赤い点で示した離散的な時刻 $t = t_0 + nT, n \in \mathbb{Z}$ のみに注目すると、横方向の等速直線運動 (赤の点線) と等価であることがわかる。この古典系と対応する量子系における波束の時間発展も同様な軌道を描くが、粗視化された時間発展を支配する $\hat{F}(t_0) = iT^{-1} \ln \hat{U}(t_0 + T, t_0)$ は有効質量のもとでの運動エネルギー (と波束の形状に関する項) という簡潔な形で表される。

目するかぎり、系の時間発展は時間に依存しないハミルトニアン \hat{F} によるものと等価であるということを意味している。

$t \neq t_0 + nT$ では \hat{F} による時間発展と $\hat{H}(t)$ による時間発展は当然異なるが、基準となる時刻 t_0 をどのように取っても上記の性質は成り立つことに注意されたい。 \hat{F} は基準時刻 t_0 に (mod T で) 依存する関数となっており、具体的には

$$\hat{F}(t_0) = \hat{U}^\dagger(t'_0, t_0) \hat{F}(t'_0) \hat{U}(t'_0, t_0) \quad (16)$$

で関係づけられている*4。 $\hat{U}(t'_0, t_0)$ はユニタリ演算子であるので、 \hat{F} そのものは t_0 に依存するが、その固有値は t_0 には依存しないことがわかる。この t_0 に依らない固有値を擬エネルギーと呼ぶが、以下で見るようにこれが離散並進に関する「保存量」である。

他方、 $n \in \mathbb{Z}$ について $e^{2\pi in} = 1$ であることに起因して、擬エネルギーには $\Omega = 2\pi/T$ について Ω の整数倍の不定性がある (すなわちエネルギーにも Brillouin ゾーンが存在する。これを特に Floquet Brillouin ゾーンと呼ぶ)。 \hat{F} の具体形にも対応する不定性が存在する。

ここで述べた周期駆動系における離散的な時間並進のイメージを図 1 に示した。 $\hat{H}(t)$ によって生成される波束の複雑な運動と $\hat{F}(t_0)$ によって生成される平均的な運動 (今の場合は単純な等速直線運動) は離散的な時刻 $t = t_0 + nT$ では一致する。この図の場合、 $\hat{F}(t_0)$ の解析からは外場に有効質量を重くする働きがあることが読み取れる。

*4 $\because e^{-i\hat{F}(t_0)T} = \hat{U}(t_0 + T, t_0) = \hat{U}(t_0 + T, t'_0 + T) \hat{U}(t'_0 + T, t'_0) \hat{U}(t'_0, t_0) = \hat{U}^\dagger(t'_0, t_0) e^{-i\hat{F}(t'_0)T} \hat{U}(t'_0, t_0) = e^{-i\hat{U}^\dagger(t'_0, t_0) \hat{F}(t'_0) \hat{U}(t'_0, t_0) T}$

1.2 離散並進の固有状態

系が時間の離散並進に対して対称ということは、その固有状態が取れるはずである。前節の議論からその状態は $\hat{F} = iT^{-1} \ln \hat{U}(t_0 + T, t_0)$ の固有状態にほかならない。実際、時間依存 Schrödinger 方程式の解 $|\Psi_\alpha(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\Psi_\alpha(t_0)\rangle$ に $t = t_0$ での初期条件として

$$\hat{F}|\Psi_\alpha(t_0)\rangle = \epsilon_\alpha|\Psi_\alpha(t_0)\rangle \quad (17)$$

を課してみると、 $|\Psi_\alpha(t)\rangle$ は

$$|\Psi_\alpha(t+T)\rangle = \hat{U}(t+T, t_0+T)\hat{U}(t_0+T, t_0)|\Psi_\alpha(t_0)\rangle \quad (18)$$

$$= \hat{U}(t, t_0)e^{-i\epsilon_\alpha T}|\Psi_\alpha(t_0)\rangle \quad (19)$$

$$= e^{-i\epsilon_\alpha T}|\Psi_\alpha(t)\rangle \quad (20)$$

という性質を満たすことがわかる。すなわち、 t_0 に限らない任意の時刻 t からみて T だけ時間並進した状態は位相因子を除いて等価であり、確かに $|\Psi_\alpha(t)\rangle$ は「時間の離散並進に対する固有状態」と呼ぶべき状態になっている。このとき

$$|\Psi_\alpha(t)\rangle = |v_\alpha(t)\rangle e^{-i\epsilon_\alpha t} \quad (21)$$

とおくと、上記関係式は

$$|v_\alpha(t+T)\rangle = |v_\alpha(t)\rangle \quad (22)$$

と書き直すことができる。すなわち時間の離散並進の固有状態は時間に関する周期関数 $|v_\alpha(t)\rangle$ と平面波 $e^{-i\epsilon_\alpha t}$ のかけ合わせ (Floquet 状態と呼ぶ) で表現することができる。特に \hat{F} の固有状態は (通常ハミルトニアンと同じように) 完全系をなすため、任意の初期条件を課した場合にも時間依存 Schrödinger 方程式の解は $C_\alpha = \langle v_\alpha(t_0)|\Psi(t_0)\rangle e^{i\epsilon_\alpha t_0}$ として

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_\alpha C_\alpha |v_\alpha(t)\rangle e^{-i\epsilon_\alpha t} \quad (23)$$

のように、Floquet 状態 (時間離散並進の固有状態) の線形結合で表すことができる。これは空間の離散並進に関する Bloch の定理の時間版となっており、Floquet の定理と呼ばれている。

ここで再度注意として、 \hat{F} の固有値 ϵ_α には $\Omega = 2\pi/T$ の整数倍の不定性がある。この事実は上記 Floquet の定理においては、 $|v_\alpha(t)\rangle$ が周期 T の関数ならば $|v_\alpha(t)\rangle e^{in\Omega t}$ も周期 T の周期関数であるという事実と整合している。

1.3 Sambe 空間

時間依存 Schrödinger 方程式の基本解が Floquet 状態 $|\Psi_\alpha(t)\rangle = |v_\alpha(t)\rangle e^{-i\epsilon_\alpha t}$, $|v_\alpha(t+T)\rangle = |v_\alpha(t)\rangle$ の形に書けること (Floquet の定理) を議論したが、このままでは結局 Floquet 状態を求めるのに時間発展を直接 (一周期にわたって) 計算しなくてはならない。そこでここでは $|v_\alpha(t)\rangle$ と ϵ_α を計算する別の処方箋を紹介する。

時間 T で周期的な関数は Fourier 級数展開することができる。すなわち、 $|v_\alpha(t)\rangle$ および $\hat{H}(t)$ は

$$|v_\alpha(t)\rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty} |v_{\alpha,m}\rangle e^{-im\Omega t}, \quad \hat{H}(t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \hat{H}_m e^{-im\Omega t} \quad (24)$$

と表すことができる*5。Floquet 状態は時間依存 Schrödinger 方程式の解であるので $i\partial_t(|v_\alpha(t)\rangle e^{-i\epsilon_\alpha t}) = \hat{H}(t)|v_\alpha(t)\rangle e^{-i\epsilon_\alpha t}$ が成り立つが、これを Fourier 級数表示すると、 $\hat{H}_{m,n} = \hat{H}_{m-n}$ という記法を導入して

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} [\hat{H}_{m,n} - \delta_{m,n} m\Omega] |v_{\alpha,n}\rangle = \epsilon_\alpha |v_{\alpha,m}\rangle \quad (25)$$

の形に整理できる。この方程式は Fourier 指数を新しい内部自由度とみなして Hilbert 空間を拡張すれば、拡張された Hilbert 空間における時間依存しない Schrödinger 方程式

$$(\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{M}}\Omega)|v_\alpha\rangle = \epsilon_\alpha |v_\alpha\rangle \quad (26)$$

になっている。ここで

$$\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{M}}\Omega = \begin{bmatrix} \ddots & & & & & & \\ \ddots & \ddots & & & & & \\ \ddots & \hat{H}_0 - \Omega & \hat{H}_{+1} & \hat{H}_{+2} & & & \\ \ddots & \hat{H}_{-1} & \hat{H}_0 & \hat{H}_{+1} & \ddots & & \\ & \hat{H}_{-2} & \hat{H}_{-1} & \hat{H}_0 + \Omega & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \end{bmatrix}, \quad |v_\alpha\rangle = \begin{bmatrix} \vdots \\ |v_{\alpha,+1}\rangle \\ |v_{\alpha,0}\rangle \\ |v_{\alpha,-1}\rangle \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (27)$$

*5 周波数に対する Fourier 変換では波数に対する Fourier 変換とは位相を逆符号に取ることに注意せよ。これは物理的な進行波 $e^{ikx-i\omega t}$ での関数の展開が念頭にあることに由来する (ただし、波数と同じ定義で議論している論文も多いので公式等を参照する際には注意が必要である)。この符号の取り方は運動量とエネルギーを $-i\partial_x$ と $i\partial_t$ で表現することとも整合している。

である。すなわち ϵ_α および $|v_\alpha(t)\rangle$ は拡張された Hilbert 空間における固有値・固有ベクトルとして計算することができる*6。拡張された Hilbert 空間には決まった呼び方はないが、文献によっては特に Sambe 空間*7と呼んだり調和空間 (harmonic space) と呼んだりすることがある。

Hilbert 空間の次元が元の問題より大きくなっているので、それに応じて線形独立な固有ベクトルの個数も増えていることに注意せよ。これは Floquet 状態の周期部分を $|v_\alpha(t)\rangle$ と $|v_\alpha(t)\rangle e^{in\Omega t}$ とも取れたことの反映で、Sambe 空間ではこれらの状態が異なる固有ベクトルとして表現される：Sambe 空間でのベクトルの内積は実時間表示すると $\langle\langle v_\alpha|v_\beta\rangle\rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \langle v_{\alpha,m}|v_{\beta,m}\rangle = \int_0^T \frac{dt}{T} \langle v_\alpha(t)|v_\beta(t)\rangle$ のように時間平均で与えられ、 $|v_\alpha(t)\rangle$ と $|v_\alpha(t)\rangle e^{in\Omega t}$ ($n \neq 0$) はこの意味では直交している。実時間での表現 $|\Psi_\alpha(t)\rangle = |v_\alpha(t)\rangle e^{-i\epsilon_\alpha t}$ が等しくなる冗長な解を等価とみなせば、非等価な解の個数は元の Hilbert 空間の次元と一致する。

Sambe 空間の描像は、電磁場との相互作用を特定の周波数 Ω を持ったフォトンの吸収・放出として静的に記述するのになぞらえて理解することができる*8。すなわち \hat{H}_m は m 個のフォトン吸収する過程に対応し、それに応じてエネルギーが $m\Omega$ だけ変化する。式 (26) は物質場とフォトン場の複合系としてのエネルギーが保存することを表している。Floquet の定理の適用範囲は必ずしも電磁場中の電子に限らないが、この意味で Fourier 指数 m をしばしばフォトン数と呼ぶ*9。また、特に一体問題の場合は Fourier 指数 m を新たな空間次元のようにみなすことも可能で、周期駆動系の性質が (m 方向に大きさ Ω の静電場が印加されている) 高次元系の性質から理解できる場合もある*10。

Sambe 空間描像を採用しても結局は対角化すべき行列が無限次元であるので、ほとんどの場合は解析的に解を求めることができない。Sambe 空間描像のメリットとしては、

*6 Hilbert 空間が $\hat{H}(t)$ と同じである \hat{F} に基づく計算からは、Floquet 状態の $t = t_0 + nT$ という離散時刻の情報のみが取り出せた。Hilbert 空間の拡大は Floquet 状態の全情報を表現するための代償ともいえる。

*7 H. Sambe によって文献 [8] ではじめて導入された Hilbert 空間であることによる。本テキストでは便宜的にこの名称を使うが、必ずしも広く普及している呼び方ではない。

*8 実際、量子力学的なフォトン $\hat{H}_{\text{ph}} = \Omega \hat{a}^\dagger \hat{a}$ と結合している静的な系を相互作用表示するとベクトルポテンシャル $\propto \hat{a} + \hat{a}^\dagger$ が $\hat{a}(t) + \hat{a}^\dagger(t) = e^{i\hat{H}_{\text{ph}}t} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) e^{-i\hat{H}_{\text{ph}}t} = \hat{a}e^{-i\Omega t} + \hat{a}^\dagger e^{i\Omega t}$ に置き換わり、ハミルトニアンが時間周期的になる。 \hat{a} が \hat{H}_{+1} と対応していることからわかるように、Sambe 空間に現れるフォトン数 \hat{M} は電子系が吸収したフォトンの個数 ($-\hat{a}^\dagger \hat{a}$) と対応している (吸収と放出どちらに対応するかは Fourier 級数展開の符号の定義に依存する)。

*9 フォトンの「個数」が負値を取るのは、もともと巨視的な数のフォトンがいる (\sim 電磁場が古典的とみなせる) 状況からの差分を考えていることに相当する。

*10 例えば 1 次元系の Thouless ポンプは Sambe 空間では 2 次元系の量子 Hall 効果として記述できる。文献 [9] やレビュー論文 [3] を参照。

平衡系と同様の計算手法がほとんどそのまま適用できるという点が挙げられる。特に次章でも見るように、数値計算手法だけでなく、摂動理論をはじめとする解析的な近似手法を導入するときも Sambe 空間描像を採用すると平衡系との対応が考えやすい。

以上見てきたように、周期駆動系の時間発展は Floquet 状態によって表すことができるが、Floquet 状態を特徴づける方法には、一周期分の時間発展演算子 $\hat{U}(t_0 + T, t_0)$ の固有ベクトルとしてのものと、拡張された Hilbert 空間のハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}} - \hat{M}\Omega$ の固有ベクトルとしてのものの二種類がある。

1.4 時間発展演算子の Floquet 表示

章を終える前に、ここまでの内容を別の視点からも捉え直しておこう。ここまで時間依存 Schrödinger 方程式の解 (Floquet 状態) の性質として Floquet の定理を見てきたが、これを時間発展演算子の性質として再考する。そのためにまず、時間発展演算子を Floquet 状態で展開してみよう：

$$\hat{U}(t, t_0) = \sum_{\alpha} |\Psi_{\alpha}(t)\rangle \langle \Psi_{\alpha}(t_0)| \quad (28)$$

$$= \sum_{\alpha} |v_{\alpha}(t)\rangle \langle v_{\alpha}(t_0)| e^{-i\epsilon_{\alpha}(t-t_0)}. \quad (29)$$

ここでさらに適当な正規直交基底 $|\phi_{\alpha}\rangle$ を用いれば

$$\hat{U}(t, t_0) = \sum_{\alpha} |v_{\alpha}(t)\rangle \langle \phi_{\alpha}| \sum_{\beta} |\phi_{\beta}\rangle e^{-i\epsilon_{\beta}(t-t_0)} \langle \phi_{\beta}| \sum_{\gamma} |\phi_{\gamma}\rangle \langle v_{\gamma}(t_0)| \quad (30)$$

$$=: \hat{V}(t) e^{-i\hat{H}_{\text{eff}}(t-t_0)} \hat{V}^{\dagger}(t_0) \quad (31)$$

と書き直すことができる。すなわち周期的な演算子 $\hat{V}(t+T) = \hat{V}(t) = \sum_{\alpha} |v_{\alpha}(t)\rangle \langle \phi_{\alpha}|$ を用いて上のような形に時間発展演算子を分解できるというのが時間発展演算子に対する Floquet の定理であるといえる。特に、 $|\phi_{\alpha}\rangle = |v_{\alpha}(t_0)\rangle$ に取って $\hat{V}(t_0) = 1$ とした場合は $\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{F}$ となるが^{*11}、一般には \hat{H}_{eff} の固有ベクトル $|\phi_{\alpha}\rangle$ にどのような正規直交基底を選んでもよいことに注意しよう。Floquet 有効ハミルトニアン \hat{H}_{eff} が物理的にどういう意味を持つかは基底関数の選び方に依存する。 $\hat{V}(t)$ を micromotion 演算子^{*12}、 $\hat{V}(t) = e^{-i\hat{\Lambda}(t)}$ と書いたときの $\hat{\Lambda}(t)$ をキック演算子と呼ぶことがある^{*13}。

^{*11} $\because e^{-i\hat{F}T} = \hat{U}(t_0 + T, t_0) = \hat{V}(t_0 + T) e^{-i\hat{H}_{\text{eff}}T} \hat{V}^{\dagger}(t_0) = e^{-i\hat{H}_{\text{eff}}T}$

^{*12} Floquet 状態に現れる時間周期的な運動 $|v_{\alpha}(t)\rangle$ のことをしばしば micromotion と呼ぶことに由来。狭い意味では $|\phi_{\alpha}\rangle = |v_{\alpha}(t_0)\rangle$ に取ったものを指す。

^{*13} キックとは (kicked rotor で知られるように) 撃力的な駆動を表すジャーゴンで、ハミルトニアンにキック項 $\hat{\Lambda}\delta(t)$ を加えると時間発展演算子が $0 \in [t, t']$ のとき $\hat{U}(t, t') \rightarrow \hat{U}(t, 0) e^{-i\hat{\Lambda}} \hat{U}(0, t')$ と変化する。

上記の式 (31) で書かれた時間発展演算子は $i\partial_t \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t)\hat{U}(t, t_0)$ の解になっているので、代入して整理すると $\hat{V}(t)$ が

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{V}^\dagger(t)\hat{H}(t)\hat{V}(t) - \hat{V}^\dagger(t)i\frac{\partial}{\partial t}\hat{V}(t) \quad (32)$$

なる関係を満たすことがわかる。すなわち、Floquet の定理は、 $\hat{H}(t)$ を時間に依存しない演算子 \hat{H}_{eff} に書き換える時間周期的なユニタリ変換 $\hat{V}(t)$ が常に存在する、という主張と等価である^{*14}。

2 高周波展開

前章では、時間周期的なハミルトニアン¹の時間発展が実効的には静的なハミルトニアン²の対角化問題に帰着できることを見た。前章で展開した理論を用いることで、例えば $\hat{F} = iT^{-1} \ln \hat{U}(t_0+T, t_0)$ を数値計算して対角化したり^{*15}、Sambe 空間での表現 $\hat{H} - \hat{M}\Omega$ を数値的に対角化したり^{*16}といった方法で Floquet 状態 $|\Psi_\alpha(t)\rangle = |v_\alpha(t)\rangle e^{-i\epsilon_\alpha t}$ および擬エネルギー ϵ_α のスペクトルを計算することができる。

もちろんこうした数値計算の枠組みは新しい物理を探索する上で役に立つが、Floquet 理論の真価は Floquet 有効ハミルトニアンの (近似的な) 具体形が解析的にわかる場合に発揮される。ハミルトニアン³の形をもとに、外場の周波数や振幅に対して系のパラメータがどう変化するか、さらには本質的に平衡系と異なる相互作用がハミルトニアン⁴に現れるか、といったことを見ていくことで、具体的に対角化を実行することなく系の様々な性質を見通しよく理解することができる。Floquet 有効ハミルトニアンの具体的な形をうまく設計しようという試みを総称して Floquet engineering と呼び、多種多様な物理系について

キック演算子という名称は $\hat{U}(t, t_0) = e^{-i\hat{\Lambda}(t)} e^{-i\hat{H}_{\text{eff}}(t-t_0)} e^{i\hat{\Lambda}(t_0)}$ を物理的なプロセスになぞらえてつけられたものと推測される。

^{*14} $\hat{V}(t)|\phi(t)\rangle$ が時間依存 Schrödinger 方程式の解で $i\partial_t[\hat{V}(t)|\phi(t)\rangle] = \hat{H}(t)[\hat{V}(t)|\phi(t)\rangle]$ であるとき、左から $\hat{V}^\dagger(t)$ をかけると $i\partial_t|\phi(t)\rangle = \hat{H}_{\text{eff}}|\phi(t)\rangle$ となる。

^{*15} 微分方程式 $i\partial_t \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t)\hat{U}(t, t_0)$ を $\hat{U}(t_0, t_0) = 1$ を初期条件にして Runge-Kutta 法等を用いて解き、 $\hat{U}(t_0+T, t_0)$ を対角化すればよい。

^{*16} 数値対角化を行う場合には通常、Fourier 指数 m を $-M \leq m \leq M$ に制限して計算する。ただし、計算量の観点からは、エネルギー⁵スペクトルのみを計算したい場合は Sambe 空間描像を用いるよりは直接 $\hat{U}(t_0+T, t_0)$ を数値計算して対角化するほうが低コストであることが多い。一方、 \hat{U} から計算する場合は $t \neq t_0$ での Floquet 状態の情報を得るのに一手間必要なので、固有ベクトルの情報も必要な場合には Sambe 空間描像が便利である。 m の打ち切り次数をどこに取るかが問題になるが、すべての m について $\|H_m\| \ll 2M\Omega$ が成り立つようにしておけば $M \rightarrow \infty$ の場合を十分よく近似できる、ということが文献 [2] で物理描像に基づいて解説されている。多体問題ではこの条件は (熱力学極限のもとで) 一般に満足できないが、この点については第 4 章を参照されたい。

てその可能性が模索されている。

駆動周波数 $\Omega = 2\pi/T$ が系を特徴づけるエネルギースケールのいずれよりも十分に大きいときには、Floquet 有効ハミルトニアンを Ω の逆幂で展開する摂動理論 (高周波展開; high-frequency expansion) によって Floquet 有効ハミルトニアンの解析的な形を逐次的に計算することができる。本章ではその導出について述べる。

2.1 Sambe 空間でのブロック対角化

1.4 節で、Floquet の定理はハミルトニアン $\hat{H}(t)$ を時間に依存しない演算子 \hat{H}_{eff} に変換する時間周期的なユニタリ変換 $\hat{V}(t+T) = \hat{V}(t)$ が存在することと同値だと述べた。時間に依存しない演算子は Sambe 空間上では Fourier 指数に関してブロック対角な行列として表されるので、 $\hat{V}(t)$ というのは Sambe 空間上ではブロック対角化を行うユニタリ変換にほかならない。一般の演算子をブロック対角化することは難しいが、系がブロック対角とみなせる極限に近い場合には、その極限からの摂動展開を考えることで逐次的にブロック対角化を実行することが可能である。このような摂動展開はカノニカル変換 (canonical transformation) あるいは擬縮退摂動論 (quasi-degenerate perturbation theory) と呼ばれる方法で実行でき、Sambe 空間に応用することで系統的に Floquet 有効ハミルトニアンを導出することができる。特に、被摂動項として $\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{M}}\Omega$ のうち $-\hat{\mathcal{M}}\Omega$ の部分を採用し、残りの $\hat{\mathcal{H}}$ の部分を摂動として扱うと、系のハミルトニアンがどのような形であってもブロック対角な行列^{*17}からの摂動展開になる。これは $\Omega \rightarrow \infty$ からの展開に相当するので高周波展開と呼ばれることが多い [10, 11, 12, 13]。

以下で実際に高周波展開を導出しよう。そのためにはまず式 (32) を Sambe 空間表示に書き直す必要がある。式 (25) を見るとわかるように Sambe 空間の行列構造は畳み込みが行列積で表現されるように導入されており、実時間表示における積は Sambe 空間では行

^{*17} $-\hat{\mathcal{M}}\Omega$ は (ブロック対角というよりは) 対角行列になっているが、各ブロックが $\dim \hat{H}(t)$ 重のマクロな縮退を持っており、これが摂動項である $\hat{H}_0 \otimes 1$ によって解けるという構造をしているため、Fourier 指数に関してブロック対角であるとみなすのが自然である。

列積として表される。実際、時間周期的な演算子 $\hat{A}(t) = \hat{A}(t + T)$ の Sambe 空間表示を

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ \ddots & \hat{A}_0 & \hat{A}_{+1} & \hat{A}_{+2} & & \\ \ddots & \hat{A}_{-1} & \hat{A}_0 & \hat{A}_{+1} & \ddots & \\ & \hat{A}_{-2} & \hat{A}_{-1} & \hat{A}_0 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \end{bmatrix} \quad (33)$$

すなわち

$$[\hat{A}]_{m,n} = \hat{A}_{m-n} = \int_0^T \frac{dt}{T} \hat{A}(t) e^{i(m-n)\Omega t} \quad (34)$$

と定義して実時間での積 $\hat{A}(t)\hat{B}(t)$ の Sambe 空間表示を計算してみると

$$\int_0^T \frac{dt}{T} \hat{A}(t)\hat{B}(t) e^{i(m-n)\Omega t} = \int_0^T \frac{dt}{T} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \hat{A}_k e^{-ik\Omega t} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \hat{B}_l e^{-il\Omega t} e^{i(m-n)\Omega t} \quad (35)$$

$$= \sum_{l=-\infty}^{\infty} \hat{A}_{m-l} \hat{B}_{l-n} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} [\hat{A}]_{m,l} [\hat{B}]_{l,n} \quad (36)$$

$$= [\hat{A}\hat{B}]_{m,n} \quad (37)$$

となっていることがわかる。一方、周期的演算子の時間微分は

$$\int_0^T \frac{dt}{T} i \frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} e^{i(m-n)\Omega t} = (m-n)\Omega \hat{A}_{m-n} \quad (38)$$

$$= [[\hat{M}\Omega, \hat{A}]]_{m,n} \quad (39)$$

のように光子数演算子との交換子で書き直すことができる。以上を踏まえると、式 (32) の Sambe 空間表示は、 $\hat{V}(t)$ の Sambe 空間表示を $\hat{\mathcal{V}}$ として $\hat{\mathcal{V}}^\dagger(\hat{\mathcal{H}} - \hat{M}\Omega)\hat{\mathcal{V}} + \hat{M}\Omega = \hat{H}_{\text{eff}} \otimes 1$ と表すことができる^{*18}。擬縮退摂動論ではユニタリ変換を $\hat{V}(t) = e^{-i\hat{\Lambda}(t)}$ の形に表してキック演算子 $\hat{\Lambda}(t)$ の級数展開を考える。 $\hat{\Lambda}(t)$ の Sambe 空間表示を $\hat{\mathcal{L}}$ とすると、上記の行列積の性質から $\hat{\mathcal{V}} = e^{-i\hat{\mathcal{L}}}$ であるので、

$$e^{i\hat{\mathcal{L}}}(\hat{\mathcal{H}} - \hat{M}\Omega)e^{-i\hat{\mathcal{L}}} = \hat{H}_{\text{eff}} \otimes 1 - \hat{M}\Omega \quad (40)$$

が得られる。これは Sambe 空間のハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}} - \hat{M}\Omega$ が $\hat{\mathcal{V}} = e^{-i\hat{\mathcal{L}}}$ によってブロック対角化されるという関係にほかならない。

^{*18} $[\hat{A} \otimes 1]_{m,n} = \hat{A}_{m,n}$ である。

逐次的にブロック対角化を実行するには、式 (40) を公式*19

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots \quad (41)$$

を用いて $\hat{\mathcal{L}}$ の多重交換子に展開した上で、ブロック行列 $\hat{\Lambda}_m$ および \hat{H}_{eff} をさらに $1/\Omega$ のべき級数に展開して各次数における行列要素を比較していけばよい。 $\hat{V}(t) = e^{-i\hat{\Lambda}(t)}$ が Floquet 状態 $|\psi_\alpha(t)\rangle = |v_\alpha(t)\rangle e^{-i\epsilon_\alpha t}$ を用いて $\hat{V}(t) = \sum_\alpha |v_\alpha(t)\rangle\langle\phi_\alpha|$ の形に表されることからわかるように、式 (40) を満たすような $\hat{\mathcal{L}}$ を逐次的に決定することは通常の摂動論において固有ベクトルを逐次的に決定する手続きに対応する (\hat{H}_{eff} は固有エネルギーの逐次決定と対応)。完全にハミルトニアンを対角化してしまうかブロック対角に留めるかが通常の摂動論とは異なるというわけである。

原理的には今述べたような展開を愚直に実行すればよいのだが、ここではその前にできるだけ被摂動項が簡単に表されるように式 (40) を変形しておこう。上記の多重交換子への展開が超演算子 $\text{ad}_A \hat{B} := [\hat{A}, \hat{B}]$ を用いて

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = e^{\text{ad}_A} \hat{B} := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\text{ad}_A)^n \hat{B} \quad (42)$$

と書けることを利用すると、式 (40) は

$$(e^{i\text{ad}_{\mathcal{L}}} - 1)\hat{\mathcal{M}}\Omega = e^{i\text{ad}_{\mathcal{L}}}\hat{\mathcal{H}} - \hat{H}_{\text{eff}} \otimes 1 \quad (43)$$

と整理できる。ここで更に Bernoulli 数

$$\{B_n\}_{n=0}^{\infty} = 1, -\frac{1}{2}, \frac{1}{6}, 0, -\frac{1}{30}, 0, \dots \quad (44)$$

の母関数

$$\frac{x}{e^x - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{n!} x^n \quad (45)$$

において x を $i\text{ad}_{\mathcal{L}}$ で置き換えたものを左から作用させると、

$$i[\hat{\mathcal{L}}, \hat{\mathcal{M}}\Omega] = \frac{-i\text{ad}_{\mathcal{L}}}{e^{-i\text{ad}_{\mathcal{L}}} - 1} \hat{\mathcal{H}} - \frac{i\text{ad}_{\mathcal{L}}}{e^{i\text{ad}_{\mathcal{L}}} - 1} \hat{H}_{\text{eff}} \otimes 1 \quad (46)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{n!} (-i\text{ad}_{\mathcal{L}})^n [\hat{\mathcal{H}} - (-1)^n \hat{H}_{\text{eff}} \otimes 1] \quad (47)$$

*19 Baker-Hausdorff の補題、Hadamard の補題等と呼ばれる。 $e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}}$ の λ に関する Maclaurin 展開から直ちにわかる。

が得られる*20。Sambe 空間での表示には同じ行列要素が多数現れるので、この関係式をコンパクトな実時間表示に戻すと

$$\frac{\partial \hat{\Lambda}(t)}{\partial t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{n!} (-i \text{ad}_{\Lambda(t)})^n [\hat{H}(t) - (-1)^n \hat{H}_{\text{eff}}] \quad (48)$$

と表すことができる。

2.2 展開の具体形

あとは得られた方程式 (48) の未知数 $\hat{H}_{\text{eff}}, \hat{\Lambda}_m$ を $1/\Omega$ のべき級数に展開して係数比較を行えば低次から順番に解を決定することができる*21。すなわち、 $\hat{H}_{\text{eff}}^{(N)}, \hat{\Lambda}_m^{(N)} \propto 1/\Omega^N$ のもと

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{H}_{\text{eff}}^{(0)} + \hat{H}_{\text{eff}}^{(1)} + \hat{H}_{\text{eff}}^{(2)} + \dots \quad (49)$$

$$\hat{\Lambda}_m = \hat{\Lambda}_m^{(1)} + \hat{\Lambda}_m^{(2)} + \dots \quad (50)$$

として、これを式 (48) に代入する。ただしここで $\Omega \rightarrow \infty$ ではすでに $\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{M}}\Omega = -\hat{\mathcal{M}}\Omega + O(\Omega^0)$ はブロック対角であり、 $\hat{V}(t) = 1$ すなわち $\hat{\Lambda}(t) = 0$ としてよいことを用いて $\hat{\Lambda}_m^{(0)} = 0$ とした*22。

具体的に低次の項を計算してみよう。式 (48) の $1/\Omega$ の 0 次を書き出すと、 m 次の Fourier 成分 (Sambe 空間では m 番目の帯) は

$$-im\Omega \hat{\Lambda}_m^{(1)} = B_0(\hat{H}_m - \hat{H}_{\text{eff}}^{(0)} \delta_{m,0}) \quad (51)$$

である。各 m について比較を行うと

$$i\hat{\Lambda}_{m \neq 0}^{(1)} = -\frac{\hat{H}_m}{m\Omega}, \quad \hat{H}_{\text{eff}}^{(0)} = \hat{H}_0 \quad (52)$$

が得られる。ここで式 (48) は一階微分方程式であるので積分定数に対応する $\hat{\Lambda}_0^{(1)}$ が未知数のまま残ることに注意しよう。これは 1.4 節で述べたように、ハミルトニアンの時間依

*20 Bernoulli 数は $k \geq 1$ について $B_{2k+1} = 0$ である。ここまでの式変形はごく低次を計算する場合にはさほどの恩恵はないが、この変形を行っておくことで式 (40) を愚直に展開した場合に現れる多数の項の相殺を計算しなくて済む。

*21 $\hat{\Lambda}(t) = \sum_m \hat{\Lambda}_m e^{-im\Omega t}$ には位相因子にも Ω が現れるが、 $1/\Omega$ でのべき級数展開は Fourier 成分 $\hat{\Lambda}_m$ に対してのみ行うことに注意。

*22 $\hat{\Lambda}_m^{(0)} \neq 0$ に対応するより一般の展開については、はじめに $\hat{H}(t)$ に Ω 依存しない時間周期的なユニタリ変換を施してから $\hat{\Lambda}_m^{(0)} = 0$ とする高周波展開を実行すればよい。

存性を消去するユニタリ演算子 $\hat{V}(t) = e^{-i\hat{\Lambda}(t)}$ には $|\phi_\alpha\rangle$ の選び方の任意性がありもともと唯一には定まらないことと関係しており、 $\hat{\Lambda}_0^{(1)}$ は $\hat{V}(t)$ に別途課す境界条件に基づいて決める必要がある。

$\hat{\Lambda}_0$ の決め方を一旦保留すると、式 (48) の $1/\Omega$ の 1 次は同様にして

$$-im\Omega\hat{\Lambda}_m^{(2)} = -B_0\hat{H}_{\text{eff}}^{(1)}\delta_{m,0} + B_1 \sum_{n=-\infty}^{\infty} [-i\hat{\Lambda}_n^{(1)}, \hat{H}_{m-n} + \hat{H}_{\text{eff}}^{(0)}\delta_{m,n}] \quad (53)$$

$$= -\hat{H}_{\text{eff}}^{(1)}\delta_{m,0} - \sum_{n \neq 0} \frac{1}{2n\Omega} [\hat{H}_n, \hat{H}_{m-n} + \hat{H}_0\delta_{m,n}] + \frac{1}{2} [i\hat{\Lambda}_0^{(1)}, \hat{H}_m + \hat{H}_0\delta_{m,0}] \quad (54)$$

と書き出せるので

$$i\hat{\Lambda}_{m \neq 0}^{(2)} = \sum_{n \neq 0} \frac{[\hat{H}_n, \hat{H}_{m-n}]}{2mn\Omega^2} + \frac{[\hat{H}_m, \hat{H}_0]}{2m^2\Omega^2} - \frac{[i\hat{\Lambda}_0^{(1)}, \hat{H}_m]}{2m\Omega} \quad (55)$$

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{(1)} = \sum_{n \neq 0} \frac{[\hat{H}_{-n}, \hat{H}_n]}{2n\Omega} + [i\hat{\Lambda}_0^{(1)}, \hat{H}_0] \quad (56)$$

が得られる^{*23}。 \hat{H}_{eff} は展開の 0 次では $\hat{\Lambda}_0$ の取り方には依存しないが、補正項は一般に $\hat{\Lambda}_0$ に依存することがわかる。 $\hat{\Lambda}_0$ の違いは有効ハミルトニアン基底関数の違いであるので、有効ハミルトニアンから計算した擬エネルギー ϵ_α や、有効ハミルトニアンの固有状態に基底変換を施して再構成した Floquet 固有状態 $|v_\alpha(t)\rangle$ は展開の打ち切り次数までの範囲では $\hat{\Lambda}_0$ の取り方に依らず完全に一致する。

代表的な $\hat{\Lambda}(t)$ に対する境界条件 ($\hat{\Lambda}_0^{(N)}$ の決め方) を紹介しておこう。1.4 節で、 $\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{F} = iT^{-1} \ln \hat{U}(t_0 + T, t_0)$ は、 $\hat{V}(t_0) = 1$ すなわち $\hat{\Lambda}(t_0) = 0$ を境界条件とすることで得られることを述べた。したがってこの場合は

$$\hat{\Lambda}_0^{(N)} = - \sum_{m \neq 0} \hat{\Lambda}_m^{(N)} e^{-im\Omega t_0} \quad (57)$$

である。この条件のもとで得られる級数展開を特に Floquet-Magnus 展開と呼ぶ [10, 12]^{*24}。他方、 $\hat{\Lambda}_0$ は摂動プロセスのうち Fourier 指数の変化を伴わないプロセス (つまり

^{*23} 一般に $1/\Omega$ に関する N 次の比較を m 次 Fourier 成分について行くと、左辺は $-im\Omega\hat{\Lambda}_m^{(N+1)}$ となる。一方、右辺は Ω には陽に依存しないことと $\hat{\Lambda}_m^{(0)} = 0$ を踏まえ、右辺は $-B_0\hat{H}_{\text{eff}}^{(N)}\delta_{m,0}$ に、 $\hat{H}_{\text{eff}}^{(0)}, \dots, \hat{H}_{\text{eff}}^{(N-1)}$ と $\hat{\Lambda}_m^{(1)}, \dots, \hat{\Lambda}_m^{(N)}$ のみからなる関数を足した形になる。このようにして $\hat{\Lambda}_{m \neq 0}^{(N+1)}$ と $\hat{H}_{\text{eff}}^{(N)}$ が右辺を具体的に計算するだけで逐次的に決定できる。

^{*24} 他の展開のことも同様の名称で呼ぶ場合もあるが、このテキストでは境界条件で明確に名称を区別することにする。

ブロック行列内のユニタリ変換) を記述しており、もともと Fourier 指数を変化させてしまうようなプロセスを中間過程として取り入れようというのが摂動展開の趣旨であったことを踏まえれば 0 に取っておくのが多くの場合自然である (また結果が簡潔になる)。 $\hat{\Lambda}_0^{(N)} = 0$ とする展開は平衡系での van Vleck の擬縮退摂動論と呼ばれるものに相当し [14, 12]、以下では van Vleck 展開と呼ぶ。結果をまとめると、特に Floquet-Magnus 展開と van Vleck 展開のそれぞれに対応する境界条件のもとでは、

$$i\hat{\Lambda}^{\text{FM}}(t) = - \sum_{m \neq 0} \frac{\hat{H}_m}{m\Omega} (e^{-im\Omega t} - e^{-im\Omega t_0}) + O(\Omega^{-2}), \quad (58)$$

$$i\hat{\Lambda}^{\text{vV}}(t) = - \sum_{m \neq 0} \frac{\hat{H}_m}{m\Omega} e^{-im\Omega t} + O(\Omega^{-2}), \quad (59)$$

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{\text{FM}} = \hat{H}_0 + \sum_{m \neq 0} \frac{[\hat{H}_{-m}, \hat{H}_m]}{2m\Omega} + \sum_{m \neq 0} \frac{[\hat{H}_m, \hat{H}_0]}{m\Omega} e^{-im\Omega t_0} + O(\Omega^{-2}), \quad (60)$$

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{\text{vV}} = \hat{H}_0 + \sum_{m \neq 0} \frac{[\hat{H}_{-m}, \hat{H}_m]}{2m\Omega} + O(\Omega^{-2}) \quad (61)$$

となる*25。

ユニタリ逆変換を用いた Floquet 状態の再構成まで念頭におけば境界条件は自由に選んでよいが、逆変換による補正は小さいと考えてそのまま物理量を計算することもしばしばあるし、章の冒頭で述べたようにハミルトニアンのみから起こるべき物理現象を推察することもある。そのためここでは、文献ではあまり議論されない 2 つの展開での基底関数の物理的な意味の違いを少し考察しておこう。まず、Floquet-Magnus 展開については前章での \hat{F} の導入の仕方から明らかなように、有効ハミルトニアンの固有ベクトルは Floquet 状態の $t = t_0$ でのスナップショットを直接表している。有効ハミルトニアンには境界条件に由来する t_0 依存する項が現れるが、この項は固有エネルギーには打ち切り誤差の範囲では影響を与えず、固有ベクトルの外場と同期した時間変化 (いわゆる micromotion) のみを記述する項である*26。この固有ベクトルで物理量の期待値を計算すると、実際には micromotion を伴う期待値のある瞬間の値を取り出してきたことになる。

*25 より高次の表式は Floquet-Magnus 展開については Ω^{-2} まで、van Vleck 展開については Ω^{-3} までの表式が論文 [13] に掲載されている。また、論文 [15] ではシンボリックな機械計算を効率的に行う方法が議論されており付録に van Vleck 展開の Ω^{-5} までの表式が掲載されている (5 次にまで至ると 4 ページに渡る長大な表式になる)。高次項になるとフォトン数に関する和が多重化されていくが、論文によって和の取る範囲の書き方の流儀が異なるのでよく注意する必要がある。

*26 Floquet-Magnus 展開では時折望ましくない対称性の破れが伴うことを注意しておく。例えば円偏光

これと比べると van Vleck 展開の固有ベクトルは、「光の衣を纏った電子」とでも呼ぶべき状態ではあるが、Floquet 状態からどういう情報を取り出してきたものなのか一見わかりにくい。どのような物理的な意味付けができるかを考えるには、式 (58), (59) が

$$i\hat{\Lambda}^{\text{FM}}(t) = i \int_{t_0}^t dt' [\hat{H}(t') - \hat{H}_0] + O(\Omega^{-2}), \quad (62)$$

$$i\hat{\Lambda}^{\text{vV}}(t) = \lim_{\eta \rightarrow +0} i \int_{-\infty}^t dt' [\hat{H}(t') - \hat{H}_0] e^{\eta t'} + O(\Omega^{-2}) \quad (63)$$

のように書き直せることに着目するとよい。実際、式 (62) の形の表式は、(Fourier 級数を経由せず) 式 (48) の両辺を区間 $[t_0, t]$ で積分して $\hat{\Lambda}(t_0) = 0$ を代入すれば直接得ることができる。同様に式 (48) の積分から van Vleck 展開を得るには、ハミルトニアンを $\hat{H}(t) \rightarrow \hat{H}(t)e^{\eta t}$ と置き換えた上で式 (48) を区間 $(-\infty, t]$ で積分すればよい [ただし $\hat{\Lambda}(-\infty) = 0$ とする]。 η を有限に残した計算は、無限の過去に静的なハミルトニアン \hat{H}_0 で表されていた系*27に振動成分 $\hat{H}_{m \neq 0}$ を断熱的に導入する問題を解いていることに相当するので*28、 van Vleck 展開 $\hat{H}_{\text{eff}}^{\text{vV}}$ の固有状態というのは $\hat{H}(t)$ から振動を断熱的に消し去ったとき、Floquet 状態がどのような状態ベクトルになるかを表していると解釈できる。「振動を消し去る」という操作と対応していることから、有効ハミルトニアンの固有ベクトル $|\phi_\alpha\rangle e^{-i\epsilon_\alpha t}$ を使って計算した物理量の期待値は真の Floquet 状態 $e^{-i\hat{\Lambda}(t)}|\phi_\alpha\rangle e^{-i\epsilon_\alpha t}$ での期待値を時間平均したものに近い値を取る。実際、真の期待値の $1/\Omega$ 展開を一般の $\hat{\Lambda}(t)$ に対して考えてみると、

$$\overline{\langle \phi_\alpha | e^{i\hat{\Lambda}(t)} \hat{O} e^{-i\hat{\Lambda}(t)} | \phi_\alpha \rangle} = \langle \phi_\alpha | \hat{O} | \phi_\alpha \rangle + \langle \phi_\alpha | [i\hat{\Lambda}_0^{(1)}, \hat{O}] | \phi_\alpha \rangle + O(\Omega^{-2}) \quad (64)$$

となっていて、 $\hat{\Lambda}_0^{(N)} = 0$ である van Vleck 展開が最も真の時間平均との誤差が小さくなる基底であることがわかる。この意味では、2つの展開は瞬間的な性質と平均的な性質のどちらに興味があるかで使い分けるべきものであるといえる。

レーザーを照射した場合には、瞬間瞬間では $\hat{H}(t)$ は反転対称性の破れた演算子となるが、時間並進を組み合わせた対称性が残っている。このような場合、定常状態の時間平均的な性質は反転対称であることが期待されるが、特定の時刻 t_0 に着目する Floquet-Magnus 展開では t_0 依存する部分に反転対称性の破れが現れてしまうことがある。

*27 η を有限に残すと \hat{H}_{eff} の N 次に $e^{(N+1)\eta t}$ という因子が余分につくことを踏まえると、無限の過去には振動成分を含まない $\hat{H}_0 e^{\eta t}$ が支配的な寄与を持つ。

*28 久保公式で考える外場を断熱的に導入する時間発展と非常に近いが、 \hat{H}_0 は一般に外場振幅に依存してもよいことに注意。

3 Floquet Engineering I : バンド分散とトポロジ

ここまで一般のハミルトニアンについての抽象的な議論が続いたので、一度物性物理への応用例に目を向けてみよう。ただしここまでの議論ではまだ Floquet 状態の統計力学について触れていないので、関連する話題は次章以降振り返ることにしてこの章では主にエネルギースペクトルやバンドトポロジ^{*29}などの、分布が未知であっても議論できる性質に主に焦点を当てたい。

以下では基本的に、古典的な周期電場を印加したタイトバインディング模型に基づいた議論を行う。このような記述は固体中の電子の振る舞いを定量的に扱うには (特に非平衡の問題を扱うには) 単純化されすぎている側面もあるが、周期外場によってもたらされる非自明な効果の本質を捉えるには十分に役に立つ。相互作用のない電子のタイトバインディング模型は、一様な古典電場中では一般に

$$\hat{H}(t) = \sum_{ij\sigma} t_{ij} e^{-i\mathbf{A}(t)\cdot(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} \quad (65)$$

と表すことができる。ここで $\hat{c}_{j\sigma}$ は j 番目のサイトのスピン $\sigma = \uparrow, \downarrow$ を持つ電子の消滅演算子である。 t_{ij} はサイト i, j の間を電子が飛び移るホッピング振幅で、 \mathbf{R}_j は j 番目のサイトの座標である。 $e^{-i\mathbf{A}(t)\cdot(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)}$ というのが電場を表す因子で、Peierls 位相と呼ばれる (特にこのような電場の導入の仕方を Peierls substitution という)。簡単のため電子の電荷はベクトルポテンシャル $\mathbf{A}(t)$ の係数に押し込めて -1 としている。 $\mathbf{A}(t)$ は電場と $\mathbf{E}(t) = -\partial_t \mathbf{A}(t)$ の関係にある。Peierls substitution による電場の導入については付録にまとめたので、何故このような形で電場を導入できるのかについてはそちらを参照されたい。

3.1 動的局在現象

まずはタイトバインディング模型の中でも最も簡単な 1 次元リング上のフェルミオン

$$\hat{H}(t) = -v \sum_{j=1}^L [e^{iA(t)} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_{j+1} + e^{-iA(t)} \hat{c}_{j+1}^\dagger \hat{c}_j] \quad (66)$$

^{*29} バンドトポロジからはエッジ状態の有無という分布には依らない非自明な性質が議論できるが、量子 Hall 効果等の系の応答との関係を議論するには分布関数の情報が必須である。

を考えよう*30。簡単のためスピン自由度は無視し、格子定数を 1 として \hat{c}_j は $x = j$ の電子を表すものとした。系は周期境界条件 $\hat{c}_{L+1} = \hat{c}_1$ を満たすものとする。

まずは平衡系と同じように離散 Fourier 変換を行ってみよう。 $k = 2\pi n_k/L$ ($n_k = 1, 2, \dots, L$) を用いて消滅演算子を

$$\hat{c}_j = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k \hat{c}(k) e^{ikj} \quad (67)$$

と展開すると*31、

$$\hat{H}(t) = - \sum_k 2v \cos(k + A(t)) \hat{c}^\dagger(k) \hat{c}(k) \quad (68)$$

のように対角な形になる。平衡系 [$A(t) = 0$] を考えるとおなじみの $E(k) = -2v \cos k$ という分散関係の固有エネルギーが得られる。 $\hat{c}^\dagger(k)$ によって励起される電子の一粒子の時間依存 Schrödinger 方程式は

$$i\dot{\psi}_k(t) = -2v \cos(k + A(t)) \psi_k(t) \quad (69)$$

ということになるが*32、容易に解が

$$\psi(t) = \exp \left[2iv \int_0^t dt \cos(k + A(t)) \right] \psi(0) \quad (71)$$

で表されることがわかる*33。この解は Floquet 状態になっていて、擬エネルギー $\epsilon(k)$ は

$$\epsilon(k) = -2v \int_0^T \frac{dt}{T} \cos(k + A(t)) \quad (72)$$

$$= \overline{E(k + A(t))} \quad (73)$$

*30 ホッピングをよく t で表すが、時刻との判別が紛らわしいのでここでは v としている。

*31 生成消滅演算子の Fourier 変換に対する規格化は、 $\hat{c}(k)$ が $\{\hat{c}(k), \hat{c}^\dagger(k')\} = \delta_{k,k'}$ を満たすためにはこの形で取ることが必須である。

*32 一粒子問題の時間依存 Schrödinger 方程式 $i\dot{\psi}_i(t) = \sum_j H_{ij}(t) \psi_j(t)$ が Floquet 状態 $\psi_{j,\alpha}(t) = v_{j,\alpha}(t) e^{-i\epsilon_\alpha t}$ を解に持つとき、 $\hat{\psi}_\alpha^\dagger(t) = \sum_j \psi_{j,\alpha}(t) \hat{c}_j^\dagger$ を定義すると第二量子化されたハミルトニアン $\hat{H}(t) = \sum_{ij} H_{ij}(t) \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j$ に対する多粒子の Floquet 状態は (静的な問題と同様に) $|\Psi(t)\rangle = \prod_{\alpha \in \text{occ.}} \hat{\psi}_\alpha^\dagger(t) |0\rangle$ で表される。実際、上記定義から $i\partial_t \hat{\psi}_\alpha^\dagger(t) = [\hat{H}(t), \hat{\psi}_\alpha^\dagger(t)]$ を得るので

$$i\partial_t \prod_{\alpha \in \text{occ.}} \hat{\psi}_\alpha^\dagger(t) |0\rangle = [\hat{H}(t), \prod_{\alpha \in \text{occ.}} \hat{\psi}_\alpha^\dagger(t) |0\rangle] = \hat{H}(t) \prod_{\alpha \in \text{occ.}} \hat{\psi}_\alpha^\dagger(t) |0\rangle \quad (70)$$

である。特に $|\Psi(t)\rangle = e^{-i \sum_{\alpha \in \text{occ.}} \epsilon_\alpha t} \prod_{\alpha \in \text{occ.}} [\sum_j v_{j,\alpha}(t) \hat{c}_j^\dagger] |0\rangle$ は確かに周期 T のベクトルと平面波のかけ合わせである。

*33 定数変化法等を用いて微分方程式を解いてもよいし、各時刻のハミルトニアンが可換であるので時間発展演算子から時間順序を取り外せると考えてもよい。

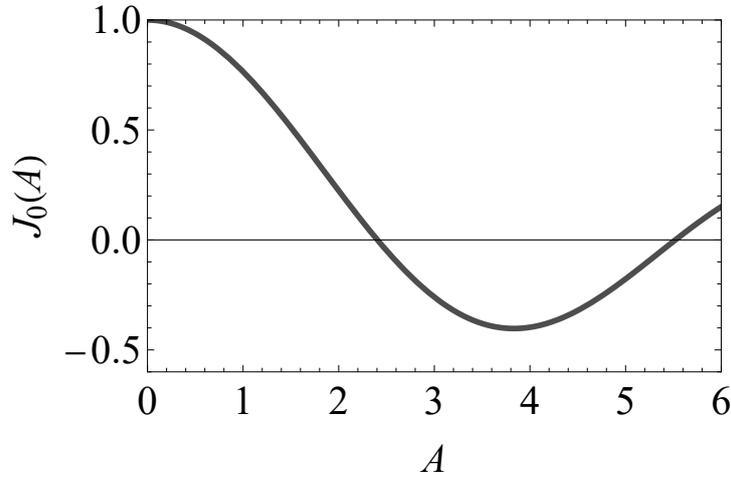


図2 (第一種)Bessel関数の0次 J_0 。

のように瞬間的なエネルギー分散の周期平均で与えられることになる。特に外場が単一周波数のレーザー $A(t) = A_0 \cos \Omega t$ で与えられるときには^{*34}、第一種 Bessel 関数 J_n による Peierls 位相因子の Jacobi-Anger 展開

$$e^{iA_0 \cos \Omega t} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(A_0) i^n e^{-in\Omega t} \quad (74)$$

を考えると、

$$\epsilon(k) = -2vJ_0(A_0) \cos k = J_0(A_0)E(k) \quad (75)$$

である。タイトバインディング模型に AC 電場を印加する問題には上記のような Bessel 関数でのホッピング振幅のくりこみが頻繁に現れる。

ここで特筆すべきこととして、Bessel 関数は図2に示すような振動関数であるので、 A_0 をうまく調整することで値を0にとることができる点が挙げられる。すなわち、電場強度を特定の値に合わせることで擬エネルギーの分散を完全に消すこと(フラットバンドにすること)ができて、電子を局在化させることができる^{*35}。これを動的局在現象(dynamical localization)という^{*36}。

^{*34} (無次元量としての) A_0 は電場振幅 E_0 と $A_0 = eE_0a/\hbar\Omega$ の関係にあるので(格子定数 a と \hbar, e を復活させた)、 A_0 の大小は必ずしも電場強度の大小を意味しない。

^{*35} あらゆる波数の平面波がエネルギー縮退しているので、それらの線形結合を取って作った空間的に局在した状態もまた固有状態である。

^{*36} 狭義にはバンド分散が完全に消失することを言うが、 $[J_0(A_0) \leq 1$ なので] 外場が印加されていないとき

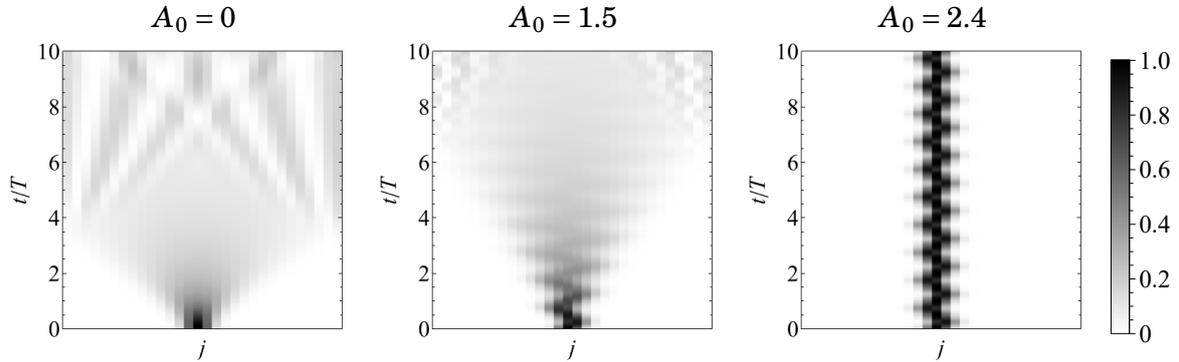


図3 $\Omega = 3v$, $L = 30$ の1次元リング模型での時間発展。 $\langle \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j \rangle$ を j と t の関数としてプロットしている。外場が印加されると波束の運動には外場と同期した振動が加わり、同時に波束の分散が遅くなる。特に外場振幅 A_0 が Bessel 関数の零点 $A_0 \simeq 2.41$ に近い値になると分散が極端に遅くなる。

電子が局在化する様子を波束の時間発展によって可視化したのが図3である。ここでは初期状態を運動量を持たない波束 $|\Psi(t=0)\rangle = \sum_{j=-L/2}^{L/2-1} e^{-j^2/4} \hat{c}_j^\dagger |0\rangle$ に取って、 $\hat{H}(t)$ のもとでの時間発展を $A_0 = 0, 1.5, 2.4$ の3つのパターンについて直接数値計算した。外場を印加すると、波束の重心の振動が起こるのに加えて、波束が分散していく速度が遅くなる様子が見て取れる。特に Bessel 関数の零点 $A_0 \simeq 2.41$ 付近では波束の幅にはほとんど変化が見られない。

上記の結果は1バンド系(波数空間でハミルトニアンが 1×1 行列に帰着する場合)に対するもので、一般に系が多バンドの場合には厳密なフラットバンドは実現しない。ただし、ハミルトニアンを時間平均は高周波展開の初項を与えることを思い出すと、多バンドの場合も駆動周波数が大きい場合には高強度の電場を印加するとバンド幅が狭くなる現象が見られる。特に電子間に相互作用がはたらく場合は、バンド幅が狭くなるにつれて相対的に電子相関効果が強くなっていき、色々と面白い現象が起こる。相関電子系のトピックについては5章で詳しく触れる。

よりバンド幅が狭くなることも広義には動的局在と呼ぶことがある。また、DC電場を印加した場合には、 $A(t) = -Et$ となるので任意の電場強度の場合に $\epsilon(k)$ は完全に平坦になるが、これは Wannier-Stark 局在と呼ばれる現象が対応する。

3.2 Floquet トポロジカル絶縁体

前節の例は系のエネルギースペクトルが著しく変化する例であったが、今度はトポロジが外場によって制御される例を見てみよう^{*37}。ここでは蜂の巣格子上のタイトバインディング模型

$$\hat{H}(t) = \sum_{ij} [t_{ij} e^{-i\mathbf{A}(t) \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \hat{a}_i^\dagger \hat{b}_j + \text{H.c.}] + \sum_i m (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i) \quad (76)$$

を考える。前節同様、スピン自由度は無視した。蜂の巣格子はいわゆる Bravais 格子ではなく、単位胞に 2 個のサイト (A,B) を含むため、A サイトの電子の消滅演算子を \hat{a}_i 、B サイトの電子の消滅演算子を \hat{b}_i とここでは表記した。簡単のため t_{ij} は隣接するサイトとの間でのみ非ゼロの値 v を取るものとする。 $m = 0$ とおいた模型はグラフェンの p_z 軌道自由度を表すタイトバインディング模型としてよく用いられるものであるが、ここでは A と B の間にポテンシャル差が加わっているような状況も含めて議論することにする^{*38}。

図 4(a) に示すように、蜂の巣格子上のサイトは、 $n_j, m_j \in \mathbb{Z}$, $\mathbf{a}_1 = \sqrt{3}(1/2, \sqrt{3}/2)$, $\mathbf{a}_2 = \sqrt{3}(-1/2, \sqrt{3}/2)$ のもと、A サイトは $\mathbf{R}_j = n_j \mathbf{a}_1 + m_j \mathbf{a}_2$ に、B サイトは $\mathbf{R}_j = n_j \mathbf{a}_1 + m_j \mathbf{a}_2 + (0, 1)$ に配置されている。前節と同様、 n_j, m_j が $\text{mod } L$ となる周期境界条件のもとで

$$\hat{a}_j = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j}, \quad \hat{b}_j = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - (0,1))} \quad (77)$$

と離散 Fourier 変換しよう^{*39}。ただし \mathbf{k} に関する和は $\mathbf{b}_1 = (2\pi/\sqrt{3}, 2\pi/3)$, $\mathbf{b}_2 = (-2\pi/\sqrt{3}, 2\pi/3)$ のもとで $\mathbf{k} = (n_k \mathbf{b}_1 + m_k \mathbf{b}_2)/L$ と表される範囲で取る ($n_k, m_k = 1, \dots, L$)^{*40}。 t_{ij} は最近接のサイト、すなわち i が A サイトである場合は $\mathbf{R}_j = \mathbf{R}_i +$

^{*37} バンドトポロジに関する基礎的な事項にはここでは触れる余裕がないので、適宜、[16, 17] 等の教科書を参照いただきたい。

^{*38} $m \neq 0$ の模型は例えば A と B が異なる原子で構成されている六方晶窒化ホウ素 (よく h-BN と略される) 等が対応する。

^{*39} \hat{b}_j の Fourier 変換についている余分な因子 e^{-ik_y} は $\hat{b}(\mathbf{k}) = \hat{b}(\mathbf{k} + \mathbf{b}_1) = \hat{b}(\mathbf{k} + \mathbf{b}_2)$ という周期性を持たせるためにつけた因子である。波数微分を空間座標と対応させたい場合に、(周期性が破れてしまうが) この因子をつけずに Fourier 変換を定義することもある。

^{*40} すなわち A サイトについては $\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j = 2\pi(n_k n_j + m_j m_k)/L$, B サイトについては $\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j = 2\pi(n_k n_j + m_j m_k)/L + k_y$ である。

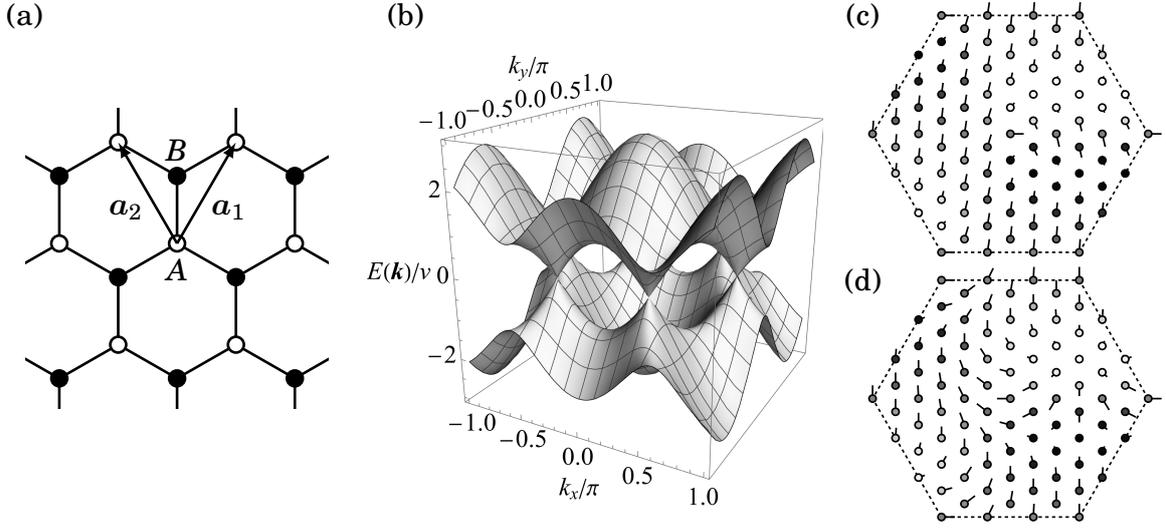


図4 (a) タイトバインディング模型が定義されている蜂の巣格子。(b) $m = 0$ のときのバンド分散。(c) $vJ_0(A_0) = 1, m = 0.2, \kappa = 0$ としたときの $\hat{\mathbf{d}}(\mathbf{k})$ を模式的にプロットしたもの。六角形 (第一 BZ を平行移動したもの) の中心を $\mathbf{k} = \mathbf{K}$ に取っている。丸の色は \hat{d}_y を表し (+1 が白、-1 が黒)、棒は (\hat{d}_z, \hat{d}_x) を表す。(d) $vJ_0(A_0) = 1, m = 0, \kappa = 0.2$ としたときの $\hat{\mathbf{d}}(\mathbf{k})$ 。

$(-\sin 2\pi l/3, \cos 2\pi l/3)$, $l = 0, 1, 2$ でのみ値を持つことから

$$\hat{H}(t) = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \hat{a}(\mathbf{k}) \\ \hat{b}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}^\dagger \begin{pmatrix} m & vf(\mathbf{k} + \mathbf{A}(t))e^{-ik_y} \\ vf^*(\mathbf{k} + \mathbf{A}(t))e^{ik_y} & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{a}(\mathbf{k}) \\ \hat{b}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (78)$$

が得られる。ただし

$$f(\mathbf{k}) = \sum_{l=0}^2 e^{i\mathbf{k} \cdot (-\sin 2\pi l/3, \cos 2\pi l/3)} \quad (79)$$

である。外場がないときの分散関係は $E(\mathbf{k}) = \pm\sqrt{m^2 + v^2|f(\mathbf{k})|^2}$ で与えられる。 $m = 0$ のグラフェンには $\mathbf{k} = \pm\mathbf{K} = \pm(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2)/3 = (\pm 4\pi/3\sqrt{3}, 0)$ の2点に Dirac 分散が現れることがよく知られているが、実際

$$f(\pm\mathbf{K} + \mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k} \cdot (0,1)} + e^{i\mathbf{k} \cdot (-\sqrt{3}/2, -1/2)} e^{\mp 2\pi i/3} + e^{i\mathbf{k} \cdot (\sqrt{3}/2, -1/2)} e^{\pm 2\pi i/3} \quad (80)$$

$$= \frac{3}{2}(\mp k_x + ik_y) + \mathcal{O}(k^2) \quad (81)$$

となっている。図4(b)にこの分散関係のプロットを示した。 $\pm\mathbf{K}$ とそれに等価な波数を結んでできる六角形がこの模型の第一 Brillouin ゾーンである。

縁体状態 (量子 Hall 効果が外部磁場なしに起こる絶縁体) になっている [18, 19]。Chern 絶縁体は本来、時間反転対称性が顕わに破れた模型でしか実現しないが、外場である円偏光のもつ時間反転対称性の破れが Floquet 有効ハミルトニアンにうまく反映されることで、外場を加える前の模型が時間反転対称であっても Chern 絶縁体を実現する。

このことをより詳しく調べるには $\mathbf{k} \neq \pm \mathbf{K}$ での振る舞いを知る必要があるが、上記のような解析解は計算できないのでここでは Ω が v より十分大きいとして高周波展開を適用してみよう。まずは簡単のため波数をギャップが閉じる点 $\pm \mathbf{K}$ の近傍に限って考えると、 $f(\pm \mathbf{K} + \mathbf{k} + \mathbf{A}(t)) \simeq (3/2)(\mp k_x + ik_y \mp A_0 e^{\mp i\Omega t})$ と近似できるので非ゼロの Fourier 成分は

$$\hat{H}_0(\pm \mathbf{K} + \mathbf{k}) = \begin{pmatrix} m & \frac{3}{2}v(\mp k_x + ik_y)e^{-ik_y} \\ \frac{3}{2}v(\mp k_x - ik_y)e^{ik_y} & -m \end{pmatrix}, \quad (87)$$

$$\hat{H}_{\pm 1}(\pm \mathbf{K} + \mathbf{k}) = \hat{H}_{\mp 1}^\dagger(\pm \mathbf{K} + \mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & \mp \frac{3}{2}vA_0e^{-ik_y} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (88)$$

のみである。このとき van Vleck 展開における Floquet 有効ハミルトニアンは $1/\Omega$ の 1 次で打ち切ると

$$\hat{H}_{\text{eff}}(\pm \mathbf{K} + \mathbf{k}) \simeq \hat{H}_0 + \frac{[\hat{H}_{-1}, \hat{H}_{+1}]}{\Omega} \quad (89)$$

$$= \begin{pmatrix} m \mp \frac{9v^2A_0^2}{4\Omega} & \frac{3}{2}v(\mp k_x + ik_y)e^{-ik_y} \\ \frac{3}{2}v(\mp k_x - ik_y)e^{ik_y} & -m \pm \frac{9v^2A_0^2}{4\Omega} \end{pmatrix} \quad (90)$$

である。すなわち円偏光レーザーは $1/\Omega$ の最低次では Dirac ハミルトニアンにおける質量項を制御するはたらきを持つ。ここで m と $9v^2A_0^2/4\Omega$ のどちらかが支配的かに応じて、2つの Dirac 点 (\pm) での質量ギャップの符号が同符号か異符号かが異なることに注意されたい*42。質量項の符号が異なるハミルトニアンどうしはハミルトニアンをいかに連続変形してもギャップを閉じない限りはつなげることができないため、 m が支配的なハミルトニアンと $9v^2A_0^2/4\Omega$ が支配的なハミルトニアンはトポロジカルに区別できるものになっている。

Dirac 点近傍に限らない一般の波数および一般の外場振幅 A_0 の場合も全く同様に計算できるが、実空間表記 (76) を用いて高周波展開を実行すると $1/\Omega$ の補正項が表す物理的なプロセスがわかりやすいのでここではその計算を見てみよう。Peierls 位相込みのホッ

*42 同符号・異符号はギャップが閉じる電場振幅 $A_0 = 2\sqrt{|\Omega m|}/3v$ の前後で切り替わるが、これは先に $\pm \mathbf{K}$ 直上で求めた条件 $A_0 = 2\sqrt{m(\pm\Omega - m)}/3v$ の $\Omega \gg m$ での表式と一致する。

ピング振幅の Fourier 成分を

$$t_{ij}^{(n)} = \int_0^T \frac{dt}{T} t_{ij} e^{-i\mathbf{A}(t) \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} e^{in\Omega t} \quad (91)$$

と書いたとき、一般のタイトバインディング模型 (65) に対する van Vleck ハミルトニアンは実空間の生成消滅演算子の反交換関係を用いることで

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \sum_{ij\sigma} \left[t_{ij}^{(0)} + \sum_{n \neq 0} \sum_k \frac{t_{ik}^{(-n)} t_{kj}^{(n)}}{n\Omega} \right] \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} \quad (92)$$

となることがすぐにわかる。この表式からわかるように、補正項は2回の最近接ホッピングで到達できるサイトへのホッピング、すなわち次近接ホッピングを記述する^{*43}。特に蜂の巣格子の場合に、 $t_{ij}^{(m)}$ を Jacobi-Anger 展開を用いて Bessel 関数で表した上でサイト k の和を実行すると、補正項の具体形が

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{(1)} = i\kappa \sum_{ij} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j - \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j) \sum_{l=0}^2 \delta_{\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j + \sqrt{3}(\cos 2\pi l/3, \sin 2\pi l/3)} + \text{H.c.} \quad (93)$$

$$\kappa = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2v^2 [J_n(A_0)]^2}{n\Omega} \sin \frac{2\pi n}{3} \quad (94)$$

と計算できる^{*44}。つまり、グラフェンにトポロジカルギャップを開ける項は実空間で見ると虚数振幅 $i\kappa$ の次近接ホッピングである。蜂の巣格子にこのような虚数ホッピングを導入した模型は Haldane 模型と呼ばれており、外部磁場を印加せずとも量子 Hall 効果が現れることがはじめて例示された模型である。当初 Haldane 模型は実験的に実現することのできない玩具モデルだと考えられていたが、ここで見たように Floquet 理論の枠組みを用いればグラフェンと円偏光レーザーという比較的シンプルなセットアップによって実現できることがわかり、この研究を契機として周期駆動を利用したトポロジーの制御が盛んに議論されるようになった。

^{*43} 格子構造によっては次近接よりも遠いサイトへ到達できることがある。

^{*44} 結果を波数空間表示すると

$$\hat{H}_{\text{eff}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} m + \kappa g(\mathbf{k}) & vJ_0(A_0) f(\mathbf{k}) e^{-ik_y} \\ vJ_0(A_0) f^*(\mathbf{k}) e^{ik_y} & -m - \kappa g(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (95)$$

$$g(\mathbf{k}) = \sum_{l=0}^2 2 \sin \sqrt{3} \mathbf{k} \cdot \left(\cos \frac{2\pi l}{3}, \sin \frac{2\pi l}{3} \right) \quad (96)$$

であり、 $\mathbf{k} = \pm \mathbf{K}$ のまわりで展開すれば式 (90) が再現する。

詳細には立ち入らないが、Haldane 模型がトポロジカル相転移を示すことは例えば

$$\mathbf{d}(\mathbf{k}) := \frac{1}{2} \text{Tr}[\hat{H}_{\text{eff}}(\mathbf{k})\boldsymbol{\sigma}] \quad (97)$$

$$= (vJ_0(A_0)\text{Re}[f(\mathbf{k})e^{-ik_y}], -vJ_0(A_0)\text{Im}[f(\mathbf{k})e^{-ik_y}], m + \kappa g(\mathbf{k})) \quad (98)$$

の向き $\hat{\mathbf{d}}(\mathbf{k}) = \mathbf{d}(\mathbf{k})/|\mathbf{d}(\mathbf{k})|$ を波数の関数として Brillouin ゾーン全体でプロットしてみることでわかる。実際にトポロジカルに自明な場合と非自明な場合それぞれについて、 $\hat{\mathbf{d}}(\mathbf{k})$ を模式的にプロットしたものを図 4(c), (d) に示した。トポロジカルに非自明な状態では $\hat{\mathbf{d}}(\mathbf{k})$ は球面をちょうど一周覆うようにすべての方角を取るのに対してトポロジカルに自明な状態では球面を覆わない。両者は $\hat{\mathbf{d}}(\mathbf{k})$ をいかに連続変形してもつなげることができず、ギャップが閉じて $\hat{\mathbf{d}}(\mathbf{k})$ が定義できない点が生じたときのみ両者がつながる。この $\hat{\mathbf{d}}(\mathbf{k})$ が球面を覆う回数は一般には Chern 数と呼ばれるトポロジカル量に対応している*45。このようなハミルトニアン幾何学的な性質が物理的な応答にも顔を出し、更にはそれが量子化するというのがトポロジカル物質の面白いところである。トポロジカルな応答を担う表面の伝導状態の個数がトポロジで特徴づけられるという性質は Floquet 有効ハミルトニアンでも平衡系と同様に成り立つが、Floquet 状態に対しては平衡と同様の分布が実現するとは限らないため、非平衡系でも応答の量子化が起こるかどうかは一般に非自明な問題である。

3.3 異常 Floquet トポロジカル絶縁体

前節で高周波駆動におけるグラフェン系のバンドトポロジーを見たが、周波数を小さくしていくと何が起こるだろうか？グラフェンの模型は外場印加前はバンド幅 $W = \max E(\mathbf{k}) - \min E(\mathbf{k})$ が $W = 6v$ であり*46、 $\Omega \gg W$ であれば高周波展開はよい近似を与える。外場ゼロでのエネルギースペクトルを Sambe 空間上で考え、周波数を小さくしていったときの振る舞いを考えると、 Ω が小さくなるにつれバンドのコピーどうしが接近し、 $\Omega < W$ になるとついには異なる Fourier 指数に属していたバンドどうしが交差を持つようになる。ここで外場をオンにするとこれらの交差が準位反発を起こし新たなギャップが開くのだが、実はこのギャップもトポロジカルに非自明なギャップになることが数値計算により確認できる。周波数をさらに小さくしていくと異なる Fourier 指数のバ

*45 線形化した有効ハミルトニアン (90) の Chern 数 C_{\pm} は具体的に計算できて $C_{\pm} = (1/2)\text{sgn}(-9v^2 A_0^2/4\Omega \pm m)$ となる。 m が十分小さければこれらの和はたしかに非自明な値 $C = C_+ + C_- = -\text{sgn}\Omega \neq 0$ になる。

*46 外場が印加されているときは $\sim J_0(A_0)$ 倍される。

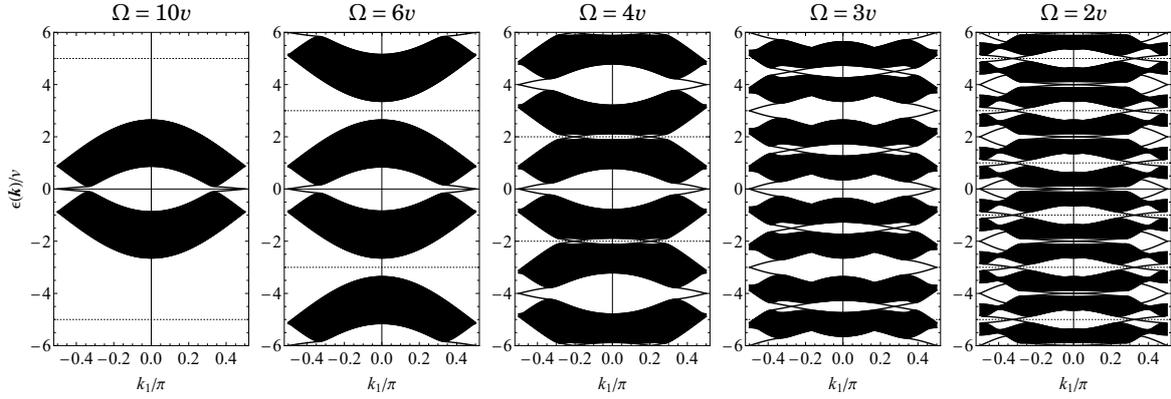


図5 蜂の巣格子モデル (76) で Ω を小さくしていったときの擬エネルギースペクトルの変化を $k_1 := \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1$ の関数としてみたもの。点線は第一 Floquet Brillouin ゾーンの境界 $\pm\Omega/2$ で、エネルギー方向の不定性を含めてプロットしている。 $m = 0, A_0 = 0.7$ とした。 \mathbf{a}_2 方向に固定端条件を設けて解いており、トポロジカルに非自明なギャップにはエッジ状態がみられる。

ンドが何重にも重なるようになって、準位反発の構造はどんどん複雑になっていく。実際に $A_0 \neq 0$ のときの (Sambe 空間における) バンド構造を数値的に計算したものを図5に示す。ここでは \mathbf{a}_2 方向に固定端条件を課したりボン状の系で計算を行っており、トポロジカルに非自明なバンドギャップの中には端に局在した伝導状態が現れている。

実は低周波駆動で現れる構造は単に複雑というわけではなく、平衡系には存在しない周期駆動系に特有なトポロジカル相を含むことがわかっている^{*47}。Sambe 空間での対角化をもとに各バンドの Chern 数を計算してみると、どのバンドも Chern 数0であるにも関わらずエッジ状態が現れる場合がある。このようなケースは異常 Floquet トポロジカル絶縁体と呼ばれる [20, 21]。このような状態が現れるのは、エネルギー方向に周期性があり Brillouin ゾーンが存在するという周期駆動系特有の事情による。2枚のバンドにギャップが開いているとき、エネルギー方向に周期性があると必然的に片方のバンドを基準にして上と下の2種類 (今の例では $\epsilon = 0, \Omega/2$ の2箇所) のギャップが定義できる。これらのギャップそれぞれに対するエッジ状態の本数を表すトポロジカル数は実は独立であるが、通常定義の Chern 数はその差になっている^{*48}。つまり、2つのトポロジカル数が同じ

^{*47} 平衡系に存在しない相があることは時間発展が静的な演算子 $\hat{F} = iT^{-1} \ln \hat{U}(t_0 + T, t_0)$ で書けることと矛盾するように思うかもしれないが、 Ω の整数倍に関する不定性をどのように取っても \hat{F} に k に関する不連続性が残ってしまう、といった形で、 k に関して連続な平衡系の対応物が存在しない場合がある。このような状態は高周波展開が破綻するような領域にのみ現れうる。

^{*48} トポロジカル数の符号をどう定義するかで和か差かは異なるが、エッジ状態の群速度の符号に合わせた場合は差になる。

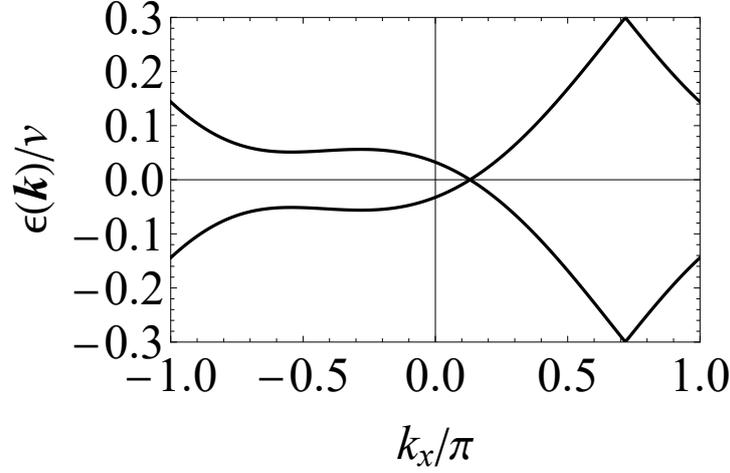


図6 Rice-Mele 模型を用いた電荷ポンピング $\hat{H}(t) = \sum_i (v + \delta(-1)^i \sin \Omega t) \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i+1} + \text{H.c.} + \sum_i m(-1)^i \cos \Omega t \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i$ に対する擬エネルギースペクトル。 $\delta = m = v$, $\Omega = 0.6v$ とした。

値を取る場合には Chern 数が 0 であるにも関わらず端状態が現れるわけである^{*49}。

ここで挙げたのはエネルギー方向の周期性によって生じる「非平衡系に特有なトポロジカル相」という概念の一例にすぎず、Chern 絶縁体に限らず様々な研究の発展がある。たとえば波数方向の周期性のためにバンド分散には普遍的な制限があることを主張する Nielsen-Ninomiya の定理というものが知られているが、エネルギー方向にも周期性がある場合には前提条件が崩れるのでこの定理を破ったバンド分散 [Weyl 分散が (ペアではなく) 単体で現れるバンド分散など] が実現する [9, 22]。その最も単純な例は断熱極限における Thouless ポンピングで、電荷ポンプの起こるハミルトニアン⁵⁰の擬エネルギーを計算すると図6のようにエネルギー方向に巻き付きを持った分散関係が現れる^{*50}。断熱極限では、断熱定理の帰結として得られる Schrödinger 方程式の解が Floquet 状態になっており、その擬エネルギーが

$$\epsilon_\alpha = \int_0^T \frac{dt}{T} \left[E_\alpha(t) - i \langle u_\alpha(t) | \frac{\partial}{\partial t} | u_\alpha(t) \rangle \right] \quad (99)$$

^{*49} Sambe 空間のハミルトニアンを $|m| \leq M$ で打ち切ってしまうと、有限個の内部自由度を持つ平衡系の問題であるので通常のトポロジカル相の分類が適用できて、エッジ状態の本数はギャップより低エネルギーのバンドの Chern 数を足し上げることで計算できる。異常トポロジカル絶縁体⁵⁰が実現する場合には、最低エネルギーバンドと最高エネルギーバンドが、本来は他のバンドと等価な解であるべきなのだが打ち切りの影響を強く受けて非自明な Chern 数を持ち (これらのバンドはトポロジカル転移の際に対を組まず他のバンドと Chern 数がずれる場合がある)、Chern 数の総和にその値が寄与する。

^{*50} ただし、実際には $\Omega \neq 0$ のときは非断熱効果のために $\epsilon = \Omega/2$ に指数関数的に小さなギャップが開いている。文献 [23] を参照。

で与えられる。ここで $E_\alpha(t)$ と $|u_\alpha(t)\rangle$ はそれぞれ瞬時的なハミルトニアン $\hat{H}(t)$ の固有値と固有ベクトルで、第 2 項はいわゆる Berry 位相に $\Omega/2\pi$ を乗じたものである。つまり、電荷のポンピングを特徴づけるトポロジカル量が直接擬エネルギーに現れ、平衡系で実現しえない巻き付きを持った分散を特徴づけている。

また、連続的な時間並進対称性は自発的に破れないことが証明されているが、離散的な並進対称性の場合はその限りではなく、時間結晶と呼ぶべき非平衡系に特有の状態が実現しうることも盛んに議論されている [24]。

4 周期駆動系の統計力学

Floquet の定理は時間発展に関する定理であった。静的な系ではハミルトニアン \hat{H} は時間発展を支配すると同時に、熱平衡状態を記述する Gibbs アンサンブル $\hat{\rho} = e^{-\beta\hat{H}}/\text{Tr}e^{-\beta\hat{H}}$ を介して統計力学的な性質をも支配するのであった。ここまで議論してきたように Floquet 有効ハミルトニアン $\hat{F} = iT^{-1} \ln \hat{U}(t_0 + T, t_0)$ は波動関数の時間発展を支配するが、静的な系と同じように平衡統計力学をそのまま適用することはできるだろうか？ Floquet 有効ハミルトニアンの固有値には Ω の整数倍の不定性が残ることを思い出すと、ナイーブに書き下した Gibbs アンサンブル $\hat{\rho}_{\text{eff}} = e^{-\beta\hat{F}}/\text{Tr}e^{-\beta\hat{F}}$ は一意には定まらず、少なくとも全く同じとはいかないことが直ちにわかる。この問題には、量子力学的な時間発展の末に熱平衡状態は実現するのか、するとしたら何故か、といった基礎的な問題が深く関わっており、関連する知見に照らしながら周期駆動系の定常状態がどうなるべきかを考えなくてはならない。これが本章の主題である。

周期駆動量子系の統計力学を考えるにあたってまず、熱力学的な観点からは、周期駆動された物理系が最終的に迎えるべき定常状態はいわば「熱的な死」であることを注意しておこう。今考えている問題では熱浴との接触がない物理系が絶えず駆動されており、最終的には (エネルギー保存の制約がない状況での) エントロピー最大状態、すなわち温度が無限大の状態に行き着くはずである*⁵¹。量子力学が熱力学や統計力学と整合する体系になっているのだとすれば、一般に (孤立した) 周期駆動量子系は真に長い時間発展ののち

*⁵¹ これはまさしく死と呼ぶべき状態には違いないが、宇宙の終状態を指して言う本来の熱的な死とはかなり様相が異なる。とはいえ実現しうる最も無秩序な状態という意味では共通しており、同様に「死」と形容することがしばしばある (例えば文献 [25])。単に無限温度状態と呼ぶことも多い。また、無限温度に向かうことを Floquet thermalization 等と呼ぶこともある。

にはやはり「死」を迎えるはずである*52。実際にモデル計算の範囲内でこの性質が再現できるかどうかは別にしても、周期駆動系には平衡統計力学のような系にも適用可能な公式というのは(非自明な物理状態に対しては)存在しないことが示唆され、必然的に過渡的な準安定状態や外部へのエネルギー散逸のもとでの非平衡定常状態を議論する必要がある。すなわち外場の導入の仕方や対象が置かれている環境、着目する時間スケール等の詳細に合わせて適切なアプローチを選択する必要がある、取るアプローチによって異なる状態が得られることになる。このような非平衡の統計力学は十分には確立しておらず、どの取り扱いがより適切かについては現状では判断を保留せねばならないことに注意されたい。

以下ではまず、時間に依存しないハミルトニアンでの時間発展における熱平衡化に関する議論*53を簡単に紹介し、そこからの類推で、相互作用のない電子系における非平衡分布の例をいくつか紹介する*54。ここでの計算は外部環境が自由度として考慮されておらず、熱的に孤立しているとみなせる場合に相当する。続いて環境との相互作用のもとでエネルギーが弱く散逸することを仮定したときどのような分布ができるのかを、相互作用のない電子系に相互作用のない粒子浴が結合している最も解きやすい場合について調べる。最後に孤立系に話を戻し、一般の(非可積分な)多体系の熱力学極限で見られる長時間での熱的な死と、それより短い時間スケールで実現しうる準安定状態について紹介する。

4.1 孤立系での対角アンサンブルへの緩和

まずは Floquet の定理が時間発展に関する定理であることに鑑みて、時間依存 Schrödinger 方程式と統計平均値の関係を簡単に見ておこう。統計平均を考えるにあたっては、純粋状態と混合状態の両方が扱えるように(波動関数 $|\Psi(t)\rangle$ ではなく)密度行列 $\hat{\rho}(t)$ を多くの場合考える。 $\hat{\rho}(t)$ は Liouville 方程式

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}(t) = [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)] \quad (101)$$

*52 例えばベクトルポテンシャル $\mathbf{A}(t)$ を通して周期駆動されている電子系では

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{H}(t) \rangle = \left\langle \frac{\partial \hat{H}(t)}{\partial t} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \hat{H}(t)}{\partial \mathbf{A}} \right\rangle \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \mathbf{J} \cdot \mathbf{E} \quad (100)$$

となっており(\mathbf{J} は電流密度期待値)、系の内部エネルギー $\langle \hat{H}(t) \rangle$ は(熱力学的性質を備えた系であれば)Joule 熱の発生にともなって増大していくはずである。

*53 このあたりは筆者の専門ではないので、和文解説 [26] やレビュー [27] 等を併せて参照されたい。

*54 現実には相互作用の影響は(特に長時間発展では)無視できないので、定常状態への緩和が相互作用が無視できるような短時間で実現するとしたらどのようなようになるか、という目安と考えるべきものである。

に従って時間発展するが、その形式的な解は時間発展演算子を用いて

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0) \quad (102)$$

と表すことができる^{*55}。

さて、まずはハミルトニアンが時間に依存せず、エネルギーが保存する場合について考えてみよう。時間発展演算子はハミルトニアンの固有状態 $\hat{H}|u_\alpha\rangle = E_\alpha|u_\alpha\rangle$ を用いて

$$\hat{U}(t, t_0) = \sum_{\alpha} |u_\alpha\rangle \langle u_\alpha| e^{-iE_\alpha(t-t_0)}$$

と展開できるので、 $\rho_{\alpha\beta} = \langle u_\alpha | \hat{\rho}(t_0) | u_\beta \rangle$ のもと

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{\alpha\beta} \rho_{\alpha\beta} |u_\alpha\rangle \langle u_\beta| e^{-i(E_\alpha - E_\beta)(t-t_0)} \quad (104)$$

を得る。特に演算子 \hat{O} の期待値は

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Tr}[\hat{O} \hat{\rho}(t)] = \sum_{\alpha\beta} \rho_{\alpha\beta} \langle u_\beta | \hat{O} | u_\alpha \rangle e^{-i(E_\alpha - E_\beta)(t-t_0)} \quad (105)$$

と計算することができる。

この表式の $\alpha \neq \beta$ の非対角項には $e^{-i(E_\alpha - E_\beta)t}$ という位相因子が現れる。縮退がないことを仮定すれば、これらの非対角項は各々、無限に長い時間にわたって平均すれば 0 とみなせる^{*56}。したがって十分な時間が経ったのちの物理量は対角要素だけを取り出したアンサンブル

$$\hat{\rho}_{\text{diag}} = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha\alpha} |u_\alpha\rangle \langle u_\alpha| \quad (106)$$

を使って計算したものと多くの場合一致する。さらに熱力学的に正常な系であれば、一般の (全エネルギーのゆらぎが小さい) 初期状態から構成した対角アンサンブルの期待値がミクロカノニカル分布での期待値にも一致することが期待されるが、固有状態熱化仮説 (ETH; eigenstate thermalization hypothesis) と呼ばれる仮定を満たすハ

^{*55} $i\partial_t \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0)$ を用いると

$$i \frac{\partial}{\partial t} [\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{\rho}(t) \hat{U}(t, t_0)] = 0 \quad (103)$$

であり、この両辺を $[t_0, t]$ で積分すればただちに示せる。

^{*56} あるいは、十分な時間が経過すれば各非対角項の位相はバラバラな値を取るようになり、多数の非対角項が存在する場合にはそれらが互いに干渉しあって期待値にはほとんど寄与しないはずである、と考えてもよい。

ミルトニアンでは実際にそのようになることが知られている。ETH を満たす系では固有状態 $|u_\alpha\rangle$ の各々が熱平衡とみなせる状態にあり、 $\langle u_\alpha|\hat{O}|u_\alpha\rangle$ が (内部エネルギーを E_α としたときの) 熱力学的な期待値 $\langle \hat{O} \rangle_{\text{th}}$ に一致しており、対角アンサンブルは $\sum_\alpha \rho_{\alpha\alpha} \langle u_\alpha|\hat{O}|u_\alpha\rangle = \langle \hat{O} \rangle_{\text{th}} \sum_\alpha \rho_{\alpha\alpha} = \langle \hat{O} \rangle_{\text{th}}$ のように熱平衡値を返す。

さて、それでは上記の議論は周期駆動系ではどのように修正されるべきだろうか？ 離散的な時刻 $t = t_0 + nT$ に着目する分には、系の時間発展は静的なハミルトニアン \hat{F} での時間発展に一致するというのを思い出すと、周期駆動系での物理量の期待値もやはり対角アンサンブルの期待値へと収束すると期待される。実際、周期駆動系では時間発展演算子が式 (29) のように Floquet 状態に展開できるので、 $\rho_{\alpha\beta} = \langle v_\alpha(t_0)|\hat{\rho}(t_0)|v_\beta(t_0)\rangle$ のもとでやはり

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{\alpha\beta} \rho_{\alpha\beta} |v_\alpha(t)\rangle \langle v_\beta(t)| e^{-i(\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta)(t-t_0)} \quad (107)$$

のように表すことができる。特に $t = t_0 + nT$ の離散的な時刻だけに着目すれば、 $|v_\alpha(t_0 + nT)\rangle = |v_\alpha(t_0)\rangle$ は定数とみなせて形式的には平衡系と全く同じ構造になるので、十分な時間が経過すれば擬エネルギーに関する対角アンサンブルへの帰着が期待される。ただしここまでの議論だけからは \hat{F} が ETH を満たすかどうかは明らかでなく、対角アンサンブルが \hat{F} に関する Gibbs アンサンブルと等価である必然性はない^{*57}。

後の節で詳しく議論するが、周期駆動系のあるべき終状態が無限温度状態であったことを思い出すと、この対角アンサンブルはそのような状態に等価であるべきで、実際に一般の多体系ではそうなる (つまり \hat{F} の固有状態は無限温度状態とみなせる)。ただし、上記の議論は全ての非対角項の位相が全くバラバラになるような十分に長い時間ののちに成立するものであり、擬エネルギー差 $\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta$ が小さい値を取る項についてはしばらくの間寄与が生き残る。ごくわずかな擬エネルギーの差を無視したときに無限温度状態が現れないことはしばしばあり、そのような近似的な \hat{F} のもとでの対角アンサンブルは非自明な期待値を返す準安定状態を記述する。

以下では多体系に普遍的に現れる無限温度状態のことは一旦忘れて、 \hat{F} が (近似的に) 一体問題である場合を考えよう。一体問題では ETH は成立しないが、 \hat{F} の対角アンサンブルへの収束は起こるはずなので、そのもとでどのような分布関数が得られるかをまずは検討する。

^{*57} 逆に \hat{F} あるいはその近似形が ETH を満たす場合には等価な結果を返すことが期待される。章の冒頭に擬エネルギーの不定性について述べたが、仮に ETH を満たすような \hat{F} があったとして、そこから固有値の一部を Ω の整数倍だけシフトさせた場合は ETH が破れるため矛盾は生じない。

4.2 孤立系の一体問題

4.2.1 Sudden approximation

前節で見たように、ある時刻 $t = t_0$ における密度行列 $\hat{\rho}(t_0)$ が既知ならば、緩和後の対角アンサンブルが直接計算できる。そこで例えば、 $\hat{\rho}(t_0)$ として外場なしのハミルトニアン \hat{H}_{eq} の平衡状態

$$\hat{\rho}_{\text{eq}} = \frac{e^{-\beta(\hat{H}_{\text{eq}} - \mu\hat{N})}}{\text{Tr}[e^{-\beta(\hat{H}_{\text{eq}} - \mu\hat{N})}]} \quad (108)$$

を選ぶことがある^{*58}。これは $t < t_0$ では外場が印加されておらず、 $t = t_0$ で突然外場がスイッチオンされた場合の計算に相当する (Sudden approximation 等と呼ぶことがある)^{*59}。

特に $\hat{H}_{\text{eq}} = \sum_{\alpha} E_{\alpha} \hat{c}_{\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha}$ で表されるような相互作用のないハミルトニアンから $\hat{H}(t)$ で表される相互作用のない周期駆動系へのスイッチングでは、非平衡分布関数 f_{α} は

$$f_{\alpha} := \text{Tr}[\hat{\rho}(t) \hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}(t) \hat{\psi}_{\alpha}(t)] = \sum_{\beta} f(E_{\beta}) |\langle \beta | \psi_{\alpha}(t_0) \rangle|^2 \quad (109)$$

と表される^{*60}。ここで $|\beta\rangle$ は \hat{H}_{eq} の一粒子固有ベクトル、 $|\psi_{\alpha}(t)\rangle$ は $\hat{H}(t)$ の一粒子 Floquet 状態で、場の演算子は

$$\hat{\psi}_{\alpha}(t) = \sum_{\gamma} \langle \psi_{\alpha}(t) | \gamma \rangle \hat{c}_{\gamma} \quad (113)$$

の関係で結ばれている。 $f(E) = (1 + e^{\beta(E - \mu)})^{-1}$ はフェルミ分布関数である。非平衡分布の計算には $t = t_0$ での Floquet 状態 $|\psi_{\alpha}(t_0)\rangle$ が必要だが、これは $\hat{F}(t_0) =$

^{*58} β は逆温度、 μ は化学ポテンシャル、 \hat{N} は電子数を数える演算子である。

^{*59} ある時刻 $t = t_0$ で突然 (時間に依存しない) ハミルトニアンを \hat{H}_1 から \hat{H}_2 へと変更したときの時間発展を調べる問題は量子クエンチ (quantum quench) と呼ばれ、様々なモデルでその性質が調べられているが、ここでのセットアップはまさに \hat{H}_2 として Floquet 有効ハミルトニアン \hat{F} を採用したクエンチ問題になっている。

^{*60}

$$\therefore \text{Tr}[\hat{\rho}(t) \hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}(t) \hat{\psi}_{\alpha}(t)] = \frac{\text{Tr}[\hat{U}(t, t_0) e^{-\beta(\hat{H}_{\text{eq}} - \mu\hat{N})} \hat{U}^{\dagger}(t, t_0) \hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}(t) \hat{\psi}_{\alpha}(t)]}{\text{Tr}[e^{-\beta(\hat{H}_{\text{eq}} - \mu\hat{N})}]} \quad (110)$$

$$= \frac{\text{Tr}[e^{-\beta(\hat{H}_{\text{eq}} - \mu\hat{N})} \hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}(t_0) \hat{\psi}_{\alpha}(t_0)]}{\text{Tr}[e^{-\beta(\hat{H}_{\text{eq}} - \mu\hat{N})}]} \quad (111)$$

$$= \sum_{\beta\gamma} \frac{\text{Tr}[e^{-\beta(\hat{H}_{\text{eq}} - \mu\hat{N})} \hat{c}_{\beta}^{\dagger} \hat{c}_{\gamma}]}{\text{Tr}[e^{-\beta(\hat{H}_{\text{eq}} - \mu\hat{N})}]} \langle \beta | \psi_{\alpha}(t_0) \rangle \langle \psi_{\alpha}(t_0) | \gamma \rangle \quad (112)$$

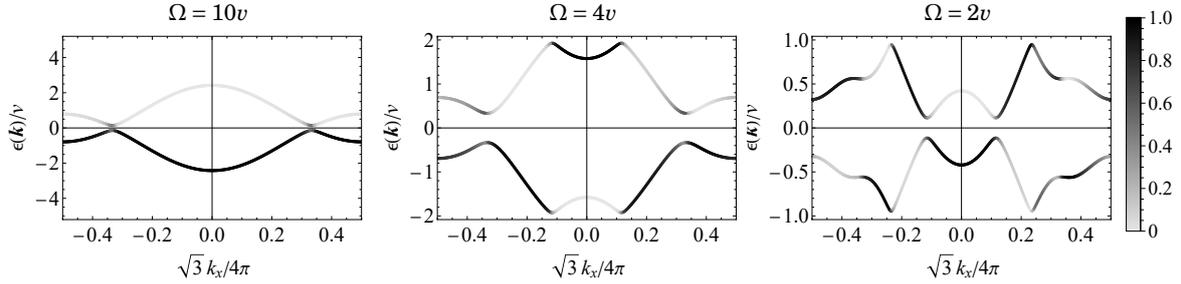


図7 sudden approximation のもとでの蜂の巣格子モデル (76) の非平衡分布関数を $k_y = 0$ について濃淡で描画したもの。 $m = 0, A_0 = 0.9$ とした。初期状態の温度は $k_B T = 0.05v$ である。

$iT \ln \hat{U}(t_0 + T, t_0)$ の固有ベクトルとして計算するのが (Sambe 空間での対角化等と比べると) 簡便である。

駆動が弱く外場の印加前後であまり固有ベクトルに変化がないと仮定すれば、熱平衡分布と近い分布が生じることが期待されるが、準位反発等が発生した場合にどのような分布が実現するかは一般に非自明な問題である。例えばこの分布を仮定したときに、グラフェンを共鳴的に駆動してできる異常 Floquet トポロジカル絶縁体のエッジ状態がどのように占有され Hall 応答を出すのか、といったことが文献 [28] で議論されている。図7には同様の計算をバルクの準位について行い得た分布を $k_y = 0$ に沿って示した^{*61}。

4.2.2 Adiabatic approximation

前節に挙げた場合とは対照的に、外場をゆっくり導入するような極限を考えるとどうだろうか。(縮退のない) 時間に依存しないハミルトニアンの問題では、系のパラメータをゆっくりと変化させたときに、固有状態間の遷移は起こらず、固有状態は固有状態にとどまるという事実が断熱定理として知られている。一般の周期駆動系 (特に高周波駆動) ではパラメータ変化は断熱的ではないが、高周波の振動に加えて振幅をゆっくりと変化させた場合は、各時刻で瞬間的には Floquet 有効ハミルトニアン描像を取ることができてそのパラメータ (振幅) がゆっくりと変化するとみなすことができる。そのような場合は式 (104) で $t_0 \rightarrow -\infty$ とした上で、Floquet 有効ハミルトニアンに対する断熱定理が成り立

^{*61} 注視すると分布が左右非対称になっていることに気づく。これは外場を印加した瞬間の時刻の電場の向きを反映したものであるが、現実の相互作用する系ではこのような初期時刻の情報は通常は長時間にわたっては残存しない。

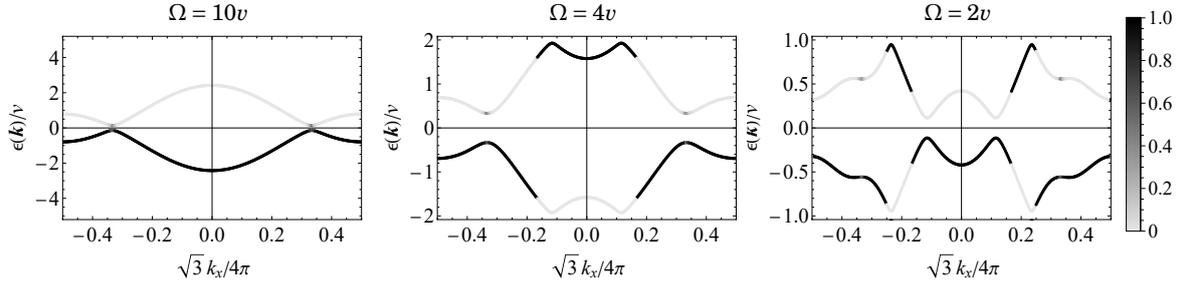


図 8 adiabatic approximation のもとでの蜂の巣格子モデル (76) の非平衡分布関数を $k_y = 0$ について濃淡で描画したもの。 $m = 0, A_0 = 0.9$ とした。初期状態の温度は $k_B T = 0.05v$ である。

つことを仮定すれば^{*62}

$$f_\alpha = f(E_\alpha) \quad (114)$$

となる。ここで Floquet 状態 $\hat{\psi}_\alpha(t)$ のラベル α は外場振幅の関数として擬エネルギーが連続になるように定めるものとし、外場 0 のとき (無限の過去) の固有エネルギーを E_α とした。高周波展開が適用できる系では多くの場合、(対称性による制約がなければ) 有効ハミルトニアン基底状態がそのまま実現すると考えてよい^{*63}。図 8 に、sudden approximation のときと同様にして計算した、グラフェンのモデルでの adiabatic approximation のもとでの分布関数を示す。このモデルには 2 つしかバンドがなく、かつ $\epsilon = 0, \Omega/2$ にはトポロジカル転移の直上を除き常にギャップが開いているので、 ϵ の符号は外場振幅を変化させていく過程で変化しないことを用いてどの初期状態とつながっているかが同定できる。

^{*62} Hilbert 空間が有限次元であれば平衡系の断熱定理が周期駆動系にも拡張できることが知られているが、無限次元の場合には 4.4 節で紹介するような病的なエネルギースペクトルが実現して無数の小さなギャップが生じるために断熱極限が定義できなくなる [29, 30]。このような場合もパラメータの変化速度を有限に固定し適切にカットオフエネルギーを導入すると断熱定理を仮定した結果を近似的に再現できることがある。

^{*63} 一般には、擬エネルギーが連続変化するという条件のもとで系の内部エネルギー $\langle \hat{H}(t) \rangle$ (の時間平均) が小さい状態どうしがつながるとは限らない。特に Sambe 空間において異なる $\mathcal{M}\Omega$ のセクターにあった状態どうしが準位反発する場合 (高周波展開が明らかに破綻する場合) には内部エネルギー期待値が大きく変化する。このような場合に実現する分布は一般には外界へのエネルギー散逸があると不安定になると予想される。

4.3 開放系の一体問題

ここまでは純粋に時間周期ハミルトニアン $\hat{H}(t)$ で表される時間発展のもとで実現する孤立系の非平衡分布を見てきた。実際、冷却原子系などでは孤立系に非常に近い状況を作り出すことができるが、通常はモデルで無視されている自由度や環境との結合を介してエネルギーの散逸が起こる。エネルギーの散逸に関わる典型的な時間スケールより長時間での振る舞いを見る場合は環境との結合を考慮した開放系としての記述を取るほうがふさわしい。量子開放系の一般論に触れる余裕はないが、ここでは相互作用のないフェルミオンの駆動系に相互作用のないフェルミオン粒子浴が結合しているという最も単純なケースについて素朴な計算から分布関数を導出してみよう。

環境を含めた全体のハミルトニアンが

$$\hat{H}_{\text{tot}}(t) = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | \hat{H}_{\text{sys}}(t) | \beta \rangle \hat{c}_{\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{\beta} + \sum_{p\alpha} (V_p \hat{c}_{\alpha}^{\dagger} \hat{b}_{\alpha p} + V_p^* \hat{b}_{\alpha p}^{\dagger} \hat{c}_{\alpha}) + \sum_{p\alpha} \omega_p \hat{b}_{\alpha p}^{\dagger} \hat{b}_{\alpha p} \quad (115)$$

で表されるとしよう。ここで $\hat{H}_{\text{sys}}(t)$ は興味がある周期駆動されている一体問題のハミルトニアンで、 $|\alpha\rangle$ はこの一体問題の Hilbert 空間の適当な正規直交基底、 \hat{c}_{α} はその基底に対応するフェルミオンの消滅演算子である。 $\hat{b}_{\alpha p}$ は $|\alpha\rangle$ と結合している環境の自由度で、各 $|\alpha\rangle$ に対して膨大な数の自由度が結合しているのを p でラベル付けしている。 ω_p は p でラベル付けされた環境自由度の固有エネルギー、 V_p は環境と系の結合の強さである（それぞれ簡単のため α 依存性はないものとした）。これは物理的には \hat{b} で記述される金属基板の上に置いた \hat{c} で記述される低次元系のモデルに相当する。このようなフェルミオンの環境系はしばしば Büttiker 熱浴と呼ばれる。

ここから環境の自由度を消去した運動方程式を導出することで開放量子系としての記述を行うことができる。一般論としては密度行列に着目する量子マスター方程式の方法や一体の相関関数に着目する非平衡グリーン関数の方法等が知られるが、多体系への拡張を念頭に置かなければ場の演算子そのものの運動方程式が簡潔で解きやすい。そこでここでは Heisenberg 表示された場の演算子の運動方程式

$$i\partial_t \hat{c}_{\alpha}(t) = [\hat{c}_{\alpha}(t), \hat{H}_{\text{tot}}(t)] = \sum_{\beta} \langle \alpha | \hat{H}_{\text{sys}}(t) | \beta \rangle \hat{c}_{\beta}(t) + \sum_p V_p \hat{b}_{\alpha p}(t), \quad (116)$$

$$i\partial_t \hat{b}_{\alpha p}(t) = [\hat{b}_{\alpha p}(t), \hat{H}_{\text{tot}}(t)] = V_p^* \hat{c}_{\alpha}(t) + \omega_p \hat{b}_{\alpha p}(t) \quad (117)$$

を考えてみよう。これらは場の演算子について線形なので容易に解くことができる。環境

自由度を消去することを念頭に後者の解

$$\hat{b}_{\alpha p}(t) = \hat{b}_{\alpha p}(t_0)e^{-i\omega_p(t-t_0)} - iV_p^* \int_{t_0}^t dt' \hat{c}_\alpha(t')e^{-i\omega_p(t-t')} \quad (118)$$

を前者に代入すると

$$\begin{aligned} i\partial_t \hat{c}_\alpha(t) &= \sum_{\beta} \langle \alpha | \hat{H}_{\text{sys}}(t) | \beta \rangle \hat{c}_\beta(t) \\ &\quad - i \sum_p |V_p|^2 \int_{t_0}^t dt' \hat{c}_\alpha(t')e^{-i\omega_p(t-t')} + \sum_p V_p \hat{b}_{\alpha p}(t_0)e^{-i\omega_p(t-t_0)} \end{aligned} \quad (119)$$

のようにして、(現在時刻における) 環境自由度の情報を含まない方程式に書き直すことができる。ただしその代償として、第 2 項を通して運動方程式が現在時刻だけでなく過去の履歴に依存したものになる。

熱浴が broad-band condition と呼ばれる条件を満たすときには、第 2 項は即時的な項 $-i\Gamma \hat{c}_\alpha(t)$ に置き換えることができ方程式が Markov 的になる^{*64}。このときの着目系の Floquet 状態に対応する場の演算子

$$\hat{\psi}_\alpha(t) = \sum_{\beta} \langle \psi_\alpha(t) | \beta \rangle \hat{c}_\beta(t) \quad (123)$$

の運動方程式を求めると、

$$i\partial_t \hat{\psi}_\alpha(t) = -i\Gamma \hat{\psi}_\alpha(t) + \sum_{\beta p} V_p \langle \psi_\alpha(t) | \beta \rangle \hat{b}_{\beta p}(t_0)e^{-i\omega_p(t-t_0)} \quad (124)$$

^{*64} 第 2 項は環境のスペクトル密度

$$J(\omega) = \sum_p \pi |V_p|^2 \delta(\omega - \omega_p) \quad (120)$$

を用いると

$$-i \sum_p |V_p|^2 \int_{t_0}^t dt' \hat{c}_\alpha(t')e^{-i\omega_p(t-t')} = -2i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int_{t_0}^t dt' J(\omega) \hat{c}_\alpha(t')e^{-i\omega(t-t')} \quad (121)$$

のように書き直すことができる。右辺が現在時刻 t 近傍のみで決まるのは $J(\omega)$ が幅広いスペクトルを持つときで、理想的には $J(\omega) \simeq \Gamma$ であるとすれば

$$-i \sum_p |V_p|^2 \int_{t_0}^t dt' \hat{c}_\alpha(t')e^{-i\omega_p(t-t')} \simeq -2i\Gamma \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int_{t_0}^t dt' \hat{c}_\alpha(t')e^{-i\omega(t-t')} = -i\Gamma \hat{c}_\alpha(t) \quad (122)$$

が得られる。ただし一般には現実の固体電子がこの条件をよく満たすとは限らない。

を得る^{*65}。これはやはり初等的に解くことができ

$$\hat{\psi}_\alpha(t) = \hat{\psi}_\alpha(t_0)e^{-\Gamma(t-t_0)} - i \int_{t_0}^t dt' \sum_{\beta p} V_p \langle \psi_\alpha(t') | \beta \rangle \hat{b}_{\beta p}(t_0) e^{-\Gamma(t-t') - i\omega_p(t'-t_0)} \quad (125)$$

となる。初期時刻の情報 $\hat{\psi}_\alpha(t_0)$ は時定数 $1/\Gamma$ で減衰していき、 $\hat{b}_{\beta p}(t_0)$ のみで記述される定常状態が $t_0 \rightarrow -\infty$ では実現する^{*66}。対応する場の演算子は、Floquet 状態を

$$|\psi_\alpha(t)\rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty} |v_{\alpha,m}\rangle e^{-i(\epsilon_\alpha + m\Omega)t} \quad (126)$$

と Fourier 級数展開すれば

$$\hat{\psi}_\alpha(t)|_{t_0 \rightarrow -\infty} = \sum_{\beta p m} \frac{V_p \langle v_{\alpha,m} | \beta \rangle \hat{b}_{\beta p}(t_0)}{\omega_p - \epsilon_\alpha - m\Omega + i\Gamma} e^{i(\epsilon_\alpha + m\Omega)t - i\omega_p(t-t_0)} \quad (127)$$

と計算することができる。

$t = t_0$ で熱浴が熱平衡状態にあれば $\langle \hat{b}_{\alpha q}^\dagger(t_0) \hat{b}_{\beta p}(t_0) \rangle = \delta_{\alpha\beta} \delta_{pq} f(\omega_p)$ であるので、定常状態の分布関数はいくつかの式変形ののちに

$$\overline{f_\alpha} := \int_0^T \frac{dt}{T} \langle \hat{\psi}_\alpha^\dagger(t) \hat{\psi}_\alpha(t) \rangle_{t_0 \rightarrow -\infty} \quad (128)$$

$$= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{2\Gamma}{\omega^2 + \Gamma^2} f(\omega + \epsilon_\alpha + m\Omega) \langle v_{\alpha,m} | v_{\alpha,m} \rangle \quad (129)$$

$$\xrightarrow{\Gamma/k_B T \rightarrow 0} \sum_{m=-\infty}^{\infty} f(\epsilon_\alpha + m\Omega) \langle v_{\alpha,m} | v_{\alpha,m} \rangle \quad (130)$$

と計算できる^{*67}。これは駆動されていない系に適用した場合通常フェルミ分布を再現するという点で、ある意味で平衡分布の周期駆動系への拡張となっている。

高周波展開がよく成立する場合には $m = 0$ 成分が主要であるので、Floquet 有効ハミルトニアンに対する平衡分布に非常に近い状態が実現することになる。他方、伝導体と価電子帯のバンドが共鳴的に混成してできる (高周波展開では捉えられない) 状態はこの描像のもとでは $\overline{f_\alpha} \sim 1/2$ なる「高温」状態となっており、物性への寄与は小さいはず

^{*65} $\sum_\beta \langle i\partial_t \psi_\alpha(t) | \beta \rangle \hat{c}_\beta(t) = -\sum_\beta \langle \psi_\alpha(t) | \hat{H}_{\text{sys}}(t) | \beta \rangle \hat{c}_\beta(t) = -\sum_{\beta\gamma} \langle \psi_\alpha(t) | \beta \rangle \langle \beta | \hat{H}_{\text{sys}}(t) | \gamma \rangle \hat{c}_\gamma(t)$ が式 (119) の第 1 項と相殺することを用いた。

^{*66} 対角アンサンブルへの緩和が $t - t_0 \ll 1/2\Gamma$ で実現する場合には、前節で調べた分布への緩和がまず起こり、その後ここで調べている分布への緩和が起こる。

^{*67} ここで再び $J(\omega) \simeq \Gamma$ を用いて $|V_p|^2$ を Γ に書き換えた。

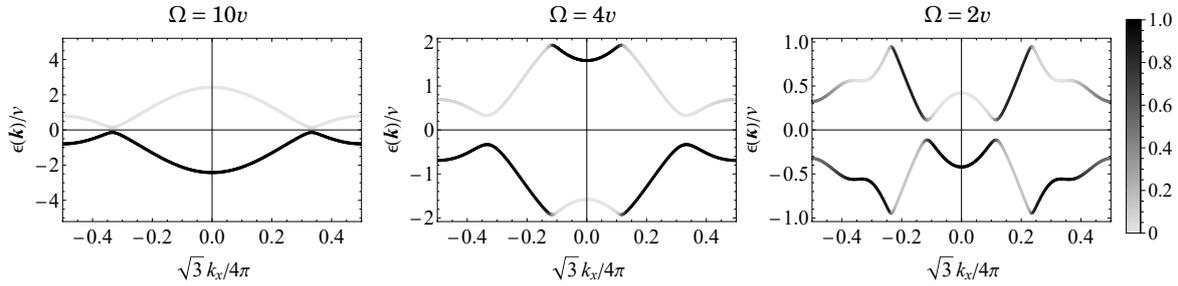


図9 $\Gamma \rightarrow 0$ での Büttiker 熱浴と結合した蜂の巣格子モデル (76) の非平衡分布関数を $k_y = 0$ について濃淡で描画したもの。 $m = 0, A_0 = 0.9$ とした。熱浴の温度は $k_B T = 0.05\nu$ である。

である^{*68}。ここで得られた結果は Floquet Green 関数法 [5] を用いて計算したものと一致する。特にグラフェンに円偏光を照射したときの Hall 電流応答ははじめ上記と類似のセットアップ^{*69}での数値計算によって調べられた [18]。図8に、前節で示したのと同様に $\Gamma/k_B T \rightarrow 0$ での分布関数を示した。

以上、一体問題について、外場の入れ方や環境との結合の有無を加味して、定常状態の分布関数を議論した。一般に共鳴的な励起が存在する場合の分布はこれらの条件に強く依存するが、高周波展開が妥当な場合には有効ハミルトニアンに対してナイーブに平衡統計力学を適用したのと定性的な差異はない。以下ではより現実に近い非可積分な多体系においても、有効ハミルトニアンの平衡状態への緩和が高周波領域で起こることを紹介する。

4.4 孤立系の多体問題

4.4.1 Floquet eigenstate thermalization hypothesis

再び話を孤立系に戻して、今度は一般の多体系の場合について知られていることを述べておこう。すでに述べたように、非可積分な多体系では多くの場合 ETH と呼ばれる条件が満たされていて、エネルギー固有状態の各々が (局所的な物理量を見る限りは) 熱平衡状態とみなせるので、対角アンサンブルでの期待値はミクロカノニカル分布での期待値に一致する (すなわち長時間ののちに系が熱平衡化する)。周期駆動系における熱力学的な意味での定常状態は「熱的な死」であるべきだが、一方で Floquet 有効ハミルトニ

^{*68} ただし、実際には共鳴がある場合には (縮退がない仮定のもとで無視した) 分布の非対角項が非自明な寄与を出す場合があり、特に幾何学的な非線形光学応答では非対角項が本質的な役割を果たす [31]。

^{*69} グラフェンの全サイトではなく左右のエッジに化学ポテンシャルの異なる熱浴を取り付けた状況が考えられている。

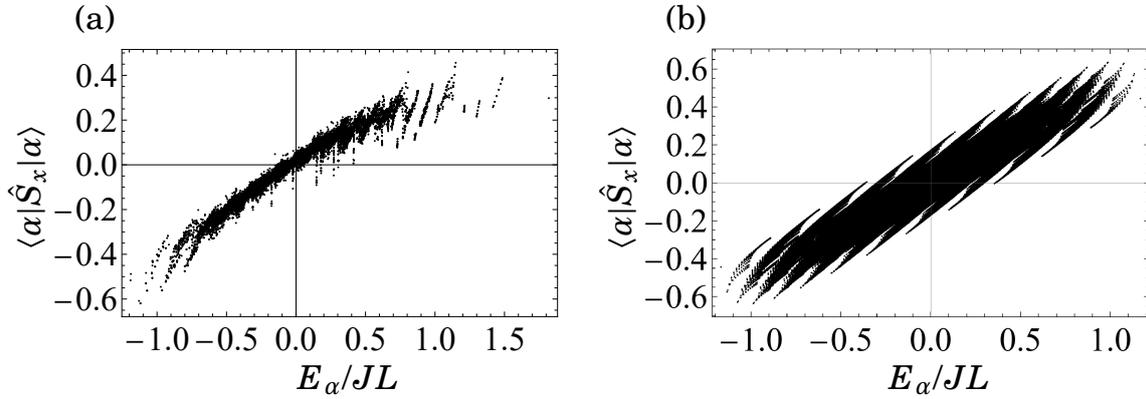


図 10 磁場下の 1 次元 Ising 模型 $\hat{H} = \sum_{i=1}^L (h_x \hat{\sigma}_i^x + h_z \hat{\sigma}_i^z + J \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z)$ において x 方向の磁化 $\hat{S}_x = L^{-1} \sum_{i=1}^L \hat{\sigma}_i^x$ の固有状態 $|\alpha\rangle$ での期待値を固有エネルギー E_α の関数としてプロットしたものを。(a) $L = 14, h_x = 0.8J, h_z = 0.7J$ の非可積分な場合に数値対角化で計算したもの。固有状態熱化仮説が成立しており、熱力学極限 $L \rightarrow \infty$ では磁化が固有エネルギーの関数として一本の曲線に収束していくことが期待される。(b) $L = 26, h_x = 0.8J, h_z = 0$ の可積分な場合 (Jordan-Wigner 変換によって厳密に解くことができる)。システムサイズを大きくしても磁化の値は固有エネルギーに対し定まった値を取らない。

アンが ETH を満たすならばその熱平衡状態への緩和が起こるはずである。両主張が整合するにはどうあるべきかと考えると、Floquet 有効ハミルトニアン固有状態の各々は無限温度状態とみなせるはずだ、という予想に行き着く。このような仮説を Floquet ETH と呼ぶ。実際に非可積分な多体系を周期駆動する数値計算からは、熱力学極限において Floquet ETH が満たされることが示唆されている。

量子力学と熱力学が相矛盾しないことは喜ばしいことにも思えるが、それでは多体系では本質的に Floquet engineering と呼べるものは存在しないのだろうか？ 2 章で述べた高周波展開を多体系にナイーブに応用して得られる Floquet 有効ハミルトニアンの固有状態は無限温度状態にはならないように思われるが、展開理論に何か致命的な誤りがあるのだろうか？こうした疑問に取り掛かるために、まずは典型的に無限温度状態がいかにして現れるかをもう少し詳しく考えてみよう。

無限温度状態が普遍的に現れる事実は、多体系のハミルトニアンを Sambe 空間で考えてみるとイメージしやすい。まず、外場を印加する前の静的な多体系を考えよう。この多体系が ETH を満たすとすれば、図 10 に示すように^{*70}、固有エネルギー E_α を横軸に

*70 ここでの事例では格子サイト数 L は熱力学極限には程遠いが (したがって磁化の値にもある程度揺らぎが

取って物理量の期待値のプロットを描くとすべての点が一つの関数の上に (小さな揺らぎを伴って) 乗る。続いてこの系を (強度 0 の外場が印加されているとみなして) 敢えて Sambe 空間で考えてみよう。Sambe 空間のハミルトニアンは $\hat{H}_0 - m\Omega$ ($m \in \mathbb{Z}$) の形のブロック行列のみからなり、固有値は $E_\alpha - m\Omega$ で与えられる。ここで注意すべきことは E_α は系の電子の個数 $\sim 10^{23}$ に比例する示量的なものである一方で Ω は系のサイズには依存しない示強的なものであるということである。第一 Floquet Brillouin ゾーン $[-\Omega/2, \Omega/2)$ に含まれる固有値のみが物理的に非等価であるが、この狭いエネルギー幅の中には $\sim 2^L$ 個 ($L \sim 10^{23}$) もの準位が押し込められている。

上で述べたのと同様にして、Sambe 空間における固有値 (擬エネルギー) を横軸に取って物理量の期待値をプロットすると、値が一つの関数には乗らず、それどころか実質的には物理的に取りうる値をすべて網羅してしまう。すなわち、一般に多体系は Sambe 空間で (擬エネルギーの関数として) 見ると ETH を満たさないように見える [図 11(a)]。ここに小さな外場を加えると、擬エネルギーが縮退している状態どうしは (隠れた対称性等の) 特別な理由がなければ混成して準位反発を起こす。この混成にともなって物理量の期待値が平均化されるが、今物理的にとり得る値がほとんど網羅されているので、各々の固有状態にはそれらを平均した期待値が現れる [図 11(b)]。これはまさに無限温度状態と呼ぶべきものである。

4.4.2 Floquet prethermalization

前節の考察からは、もともとエネルギーが全く異なる状態^{*71} どうしが Sambe 空間では不可避免的に偶然縮退を作ってしまう、外場が加わると混成してしまうことが無限温度状態が現れる根本的な原因であることがわかった。一方、エネルギーが全く異なる状態間の遷移行列要素は (一般にゼロにはならないが) 非常に小さいはずなので^{*72}、準位反発は極めて小さく、その逆数程度の時間スケールまでは混成の影響は無視してよい。つまり、固有状態が特徴的な構造を持たないことからただちにハミルトニアンが特徴的な構造を持たないことが帰結されるわけではなく、一部の小さい (と期待される) 行列要素を取り除けば

残っている)、それでも ETH の片鱗を観察することができる。

*71 (擬エネルギーでなく) エネルギーが近い状態どうしであれば、物理量の期待値 (熱平衡値と一致) もほとんど同じなので混成しても物理量の値には影響はほとんどない。

*72 例えば図 11 のような系の場合、磁化が最小値・最大値付近の値を取る状態どうしは (レーザー電磁場で駆動する設定であれば) 6 光子吸収で遷移するので遷移確率は $\sim A_0^{12}$ 程度しかなく外場振幅が小さいときは短時間のダイナミクスにはその影響は見えてこない。

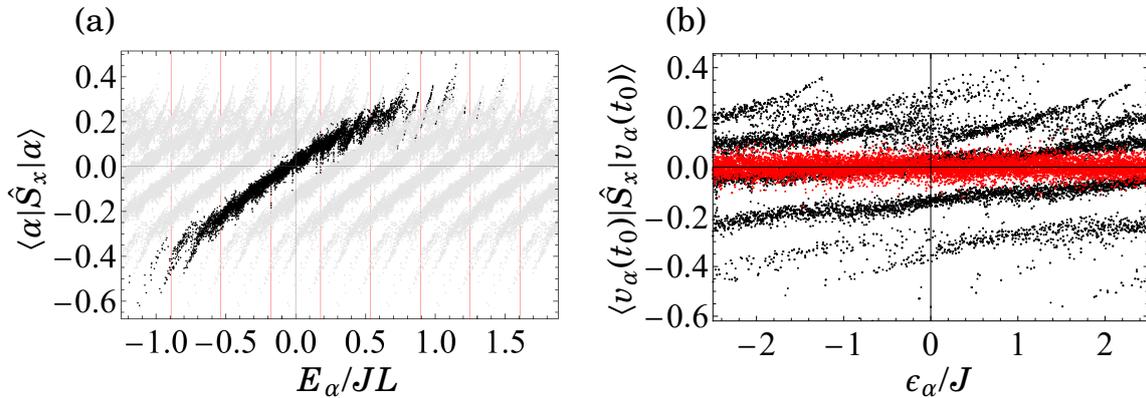


図 11 (a) 図 10(a) の静的な系の磁化を、 $\Omega = 5J$ として Sambe 空間での固有値の関数としてプロットしたもの。繰り返し現れる等価なバンドを灰色で示した。横軸がシステムサイズ $L = 14$ で規格化されているため、エネルギー方向の繰り返しの単位は Ω/L であり、大きな系になるほど間隔が狭くなることに注意。(b) 同じものを擬エネルギー ϵ_α の関数として第一 Floquet Brillouin ゾーンのみ拡大して表示したもの (黒点) と、そこに周期外場を印加した場合の期待値 (赤点)。どの擬エネルギーの値においても黒点は磁化の最大値から最小値までの範囲に広く分布しており、外場による混成によってそれらが平均された赤点は一様な値を取る。周期外場は x 方向の磁場を $\Omega = 5J$ の矩形波として導入し、 $h_x = (0.8 \pm 0.4)J$ とした。ここでは \hat{F} を数値計算し $t = t_0$ [磁場が $h_x = (0.8 + 0.4)J$ に切り替わる時刻] での期待値をプロットした。みやすさのため今の場合系を小さく取っており、曲線が 6 本程度あることが目視できるが、現実の系では L に比例する膨大な数の曲線が同じプロット範囲の中に現れ、ほとんど任意の値を取る。

非自明な物性を示すハミルトニアンが得られてもよいわけである*73。

実は 2 章の高周波展開で得られる Floquet 有効ハミルトニアンがまさにこの「一部の行列要素を無視したハミルトニアン」に相当する。前節の議論を踏まえると、多体系のハミルトニアンの高周波展開は熱力学極限において収束半径 0 と考えられるが、いわゆる漸近展開の性質は満たすので、適切な次数で打ち切ったハミルトニアンは元のハミルトニア

*73 一体問題の場合も、(ここまで考えてきた格子上の離散自由度ではなく) 連続自由度の問題では似たような問題が生じる。外場を導入する前の系にカットオフエネルギー Λ を設けて、それ以下のエネルギー固有状態で周期駆動系のハミルトニアンを行列表示して Floquet 状態を計算することを考えよう。 Λ を大きくしていくと、第一 Floquet Brillouin ゾーン内に新たな準位が増え、それが (平衡系とは異なり) すでにある準位と混成し準位反発するので固有ベクトルは $\Lambda \rightarrow \infty$ の極限でほとんどランダムになってしまう (収束もしない)[29]。一方でそのような準位反発はやはり極めて小さいので長時間にわたってその影響は無視してよく、その範囲内では有限の Λ で計算した固有ベクトルで物性が説明できる。

ンをある程度よく近似する*74。このとき、無限温度状態の原因となるエネルギー的にか
け離れた状態どうしを結ぶ行列要素は展開の打ち切り誤差の部分に押し込められている。
すなわち、打ち切り誤差が無視できる時間スケールでは高周波展開で得られる有効ハミルト
ニアンを用いた Floquet engineering を考えることができ、より長時間の発展では無限温
度状態への緩和が起こる、という構造が一般に存在する。このとき展開を途中で打ち切っ
た有効ハミルトニアンが ETH を満たしていれば、その熱平衡状態への緩和が過渡的に起
こるはずである。真の平衡状態に至る前に非常に長い時間にわたってある種の定常状態が
実現する現象を prethermalization と呼ぶが、特にここで述べたような Floquet 有効ハミ
ルトニアンの平衡状態への緩和は Floquet prethermalization と呼ばれる。

展開の打ち切り誤差を厳密に評価することで、 Ω をある程度大きく取れば指数関数的に長
い時間 $\sim e^{\mathcal{O}(\Omega)}$ にわたって高周波展開の描像が成り立つことが定理として定式化されて
いる [33, 34, 35]。ここではその証明の一部を見ることで、多体系でいかにして高周波展
開の破綻が起こるのか、そして何故それにもかかわらず高周波展開がよい近似を与えるの
かを概観しよう。

まず、一般の多体問題に対する Floquet 有効ハミルトニアン $\hat{F} = iT^{-1} \ln \hat{U}(t_0 + T, t_0)$
を $1/\Omega$ でべき級数展開 $\hat{F} = \hat{F}^{(0)} + \hat{F}^{(1)} + \hat{F}^{(2)} + \dots$ したときに (Floquet-Magnus 展
開)、展開の各項のノルムがどのように振る舞うかを調べよう。そこで、展開の一般項が

$$\begin{aligned} \hat{F}^{(n)} = & \sum_{\sigma \in S_{n+1}} \frac{(-1)^{n-\theta[\sigma]} \theta[\sigma]! (n - \theta[\sigma])!}{i^n (n+1)^2 n! T} \\ & \times \int_0^T dt_{n+1} \cdots \int_0^{t_2} dt_1 [\hat{H}(t_{\sigma(n+1)}), [\hat{H}(t_{\sigma(n)}), \dots, [\hat{H}(t_{\sigma(2)}), \hat{H}(t_{\sigma(1)})] \dots]] \end{aligned} \quad (131)$$

と表されることを利用する [36]。ただし $\theta[\sigma] := \sum_{i=1}^n \theta(\sigma(i+1) - \sigma(i))$ で、 $\theta(x)$ はス
テップ関数、 $\sigma \in S_{n+1}$ は $n+1$ 個の元の置換である。また簡単のため $t_0 = 0$ とした。

この一般項はそのまま扱うには複雑すぎるが、被積分関数に現れる多重交換子のノルム
に対して時間に依存しない上限が評価できれば、 $\hat{F}^{(n)}$ のノルムに対する上限を得ること

*74 漸近展開の簡単な例として、 $x \geq 0$ で $f(x) = \int_0^\infty (1+xt)^{-1} e^{-t} dt$ で表される関数を挙げておこう。こ
れは $f(x) = \sum_{n=0}^{N-1} n! (-x)^n + R_N(x)$, $|R_N(x)| \leq N! x^N$ なる展開を持つ。 $\sum_{n=0}^\infty n! (-x)^n$ はいか
なる $x \neq 0$ に対しても発散する収束半径 0 の展開だが、 $N-1 (\gg 1)$ 次で展開を切断すると、 $x \lesssim N^{-1}$
における元の関数と展開の間の誤差は $|R_N| \lesssim N! N^{-N} \sim e^{-N}$ の非常に小さなものになる。すなわち、
収束級数の場合は打ち切り次数を大きくすればいくらかでも誤差を小さくできるが、今の場合 x の値ご
とに誤差の下限 $\sim e^{-1/x}$ があって、それ以上誤差を小さくすることはできない (実用上は x が小さけれ
ば十分すぎる精度が得られる)。詳しくは教科書 [32] 等を参照されたい。

ができて、級数がどのように発散していくかが見積もれる。すなわち、

$$\hat{\Pi}_0 = \hat{H}(t_0), \quad \hat{\Pi}_n = [\hat{H}(t_n), \hat{\Pi}_{n-1}] \quad (132)$$

なる漸化式で定義される演算子 $\hat{\Pi}_n$ のノルムを (帰納的に) 評価することがここでの主題である。以下で見ていくように、この交換子のノルムは多体問題では $\sim n!$ で発散し、それが展開の破綻を引き起こす。

ここまで主に電子系のハミルトニアンを論じてきたが、ここでは簡単のため $\hat{H}(t) = \sum_{\langle ij \rangle} J(t) \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j$ のようなスピン系に限って議論しよう^{*75}。議論の準備として、 $\hat{\Pi}_n$ が k_n 体までの相互作用項で表されるとして

$$\hat{\Pi}_n = \sum_{\{i_1, i_2, \dots, i_{k_n}\}} \hat{O}_{\{i_1, i_2, \dots, i_{k_n}\}}^{(n)} \quad (133)$$

という記法を導入しよう。ここで $\{i_1, \dots, i_k\}$ は相互作用に関与するスピンのいる k 個のサイトを集合として表記したものであり、和は可能なサイトの組み合わせすべてについて取るものとする^{*76}。さらに、和を取る範囲をサイト j を含む集合 ($j \in \{i_1, \dots, i_k\}$) に制限した総和を $\sum_{\{i_1, \dots, i_k\}}^{(j)}$ で表すことにして、考えている系のハミルトニアンが、任意の時刻・任意のサイト j について

$$\sum_{\{i_1, \dots, i_{k_0}\}}^{(j)} \left\| \hat{O}_{\{i_1, \dots, i_{k_0}\}}^{(0)} \right\| \leq g \quad (134)$$

という上限を持つことを仮定しよう^{*77}。ただしここで $\|\hat{O}\|$ は \hat{O} のノルムで、最大特異値で定義する。

まずは多重交換子 $\hat{\Pi}_n = [\hat{H}(t_n), [\dots, [\hat{H}(t_1), \hat{H}(t_0)] \dots]]$ が表す相互作用に関わるサイト (スピン) の個数 k_n を調べよう。 $\hat{\Pi}_0 = \hat{H}(t_0)$ が k_0 体までの相互作用で表されるので、 $\hat{\Pi}_1 = [\hat{H}(t_1), \hat{H}(t_0)] = \hat{H}(t_1)\hat{H}(t_0) - \hat{H}(t_0)\hat{H}(t_1)$ の各項は高々 $2k_0$ 体に作用するが、 $\hat{H}(t_0)$ と $\hat{H}(t_1)$ が共通して作用するサイトが存在しない場合は可換であるので、

^{*75} スピン系では n 体相互作用は n 個のサイトに作用する、という単純な形を取るのが証明の上で便利である。

^{*76} 例えば $\hat{H} = \sum_{\langle ij \rangle} J \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j$ の場合は、 $\hat{\Pi}_0 = \hat{H}$ について $k_0 = 2$ であり、 $\hat{O}_{\{i,j\}}^{(0)}$ は最近接サイトに対しては $\hat{O}_{\{i,j\}}^{(0)} = J \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j$ 、その他の組については $\hat{O}_{\{i,j\}}^{(0)} = 0$ である。 k 体未満の項がある場合はいずれかの項に (例えば $\hat{O}_{\{i,1\}}^{(0)} = J \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_1 - h \hat{S}_i^z$ のようにして) 加えて定義すればよい。

^{*77} $\hat{H} = \sum_{\langle ij \rangle} J \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j$ では z を配位数として $g = zJ \|\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j\| = zJS(S+1)$ に取れる。ここからわかるように g は相互作用の強さの定数倍程度の量である。連続自由度系の場合は通常このような上限は存在せず、定理が適用できないことに注意。

一般に $k_1 = 2k_0 - 1$ であることがわかる。同様にして、 $\hat{\Pi}_2 = [\hat{H}(t_2), \hat{\Pi}_1]$ については $k_2 = k_0 + k_1 - 1 = 3k_0 - 2$ となる。すなわち、帰納的に

$$k_n = k_0 + k_{n-1} - 1 = (n+1)k_0 - n \quad (135)$$

が得られる。 $k_0 = 1$ の一体問題では $k_n = 1$ となって n をいくら大きくしようとも一体問題であることに変わりはないが、 $k_0 \geq 2$ にした途端に高周波展開の高次項には次々と多数の自由度が絡み合った相互作用が現れてくる。これが多体問題と一体問題の重要な違いである。

このことを踏まえて $\hat{\Pi}_n$ のノルムに対する上限を調べてみよう。式 (132), (133) の定義と三角不等式を用いて

$$\|\hat{\Pi}_n\| = \|\hat{H}, \hat{\Pi}_{n-1}\| \leq \sum_{\{i_1, \dots, i_{k_0}\}} \sum_{\{j_1, \dots, j_{k_{n-1}}\}} \left\| [\hat{O}_{\{i_1, \dots, i_{k_0}\}}^{(0)}, \hat{O}_{\{j_1, \dots, j_{k_{n-1}}\}}^{(n-1)}] \right\| \quad (136)$$

が得られる。先程と同様、交換子は $\{i_1, \dots, i_{k_0}\} \cap \{j_1, \dots, j_{k_{n-1}}\} = \emptyset$ のときは 0 になることを踏まえると、両集合に共通するサイトの 1 つを a として

$$\|\hat{\Pi}_n\| \leq \sum_{\{j_1, \dots, j_{k_{n-1}}\}} \sum_{a=j_1, \dots, j_{k_{n-1}}} \sum_{\{i_1, \dots, i_{k_0}\}}^{(a)} \left\| [\hat{O}_{\{i_1, \dots, i_{k_0}\}}^{(0)}, \hat{O}_{\{j_1, \dots, j_{k_{n-1}}\}}^{(n-1)}] \right\| \quad (137)$$

が成立する。あとは $\|[A, B]\| \leq 2\|A\|\|B\|$ と式 (134) を使えば

$$\|\hat{\Pi}_n\| \leq 2 \sum_{\{j_1, \dots, j_{k_{n-1}}\}} \left\| \hat{O}_{\{j_1, \dots, j_{k_{n-1}}\}}^{(n-1)} \right\| \sum_{a=j_1, \dots, j_{k_{n-1}}} \sum_{\{i_1, \dots, i_{k_0}\}}^{(a)} \left\| \hat{O}_{\{i_1, \dots, i_{k_0}\}}^{(0)} \right\| \quad (138)$$

$$\leq 2 \sum_{\{j_1, \dots, j_{k_{n-1}}\}} \left\| \hat{O}_{\{j_1, \dots, j_{k_{n-1}}\}}^{(n-1)} \right\| \sum_{a=j_1, \dots, j_{k_{n-1}}} g \quad (139)$$

$$= 2k_{n-1}g \sum_{\{j_1, \dots, j_{k_{n-1}}\}} \left\| \hat{O}_{\{j_1, \dots, j_{k_{n-1}}\}}^{(n-1)} \right\| \quad (140)$$

が得られる。この結果から

$$\sum_{\{j_1, \dots, j_{k_n}\}} \left\| \hat{O}_{\{j_1, \dots, j_{k_n}\}}^{(n)} \right\| \leq 2k_{n-1}g \sum_{\{j_1, \dots, j_{k_{n-1}}\}} \left\| \hat{O}_{\{j_1, \dots, j_{k_{n-1}}\}}^{(n-1)} \right\| \quad (141)$$

が成り立つことがわかるので*78、これを再帰的に用いて

$$\sum_{\{j_1, \dots, j_{k_n}\}} \left\| \hat{O}_{\{j_1, \dots, j_{k_n}\}}^{(n)} \right\| \leq (2g)^n \sum_{\{j_1, \dots, j_{k_0}\}} \left\| \hat{O}_{\{j_1, \dots, j_{k_0}\}}^{(0)} \right\| \prod_{m=1}^n k_{m-1} \quad (142)$$

$$\leq (2g)^n \sum_{a=1}^N \sum_{\{j_1, \dots, j_{k_0}\}}^{(a)} \left\| \hat{O}_{\{j_1, \dots, j_{k_0}\}}^{(0)} \right\| \prod_{m=1}^n k_{m-1} \quad (143)$$

$$\leq (2g)^n N g \prod_{m=1}^n (m k_0 - (m-1)) \quad (144)$$

が多重交換子の上限として得られる。すなわち、Floquet-Magnus 展開の一般項は

$$\left\| \hat{F}^{(n)} \right\| \leq \sum_{\sigma \in S_{n+1}} \frac{\theta[\sigma]!(n-\theta[\sigma])!}{(n+1)^2 n! T} \frac{T^{n+1}}{(n+1)!} (2g)^n N g \prod_{m=1}^n (m k_0 - (m-1)) \quad (145)$$

$$\leq \frac{(2gT)^n N g}{(n+1)^2} \prod_{m=1}^n (m k_0 - (m-1)) \leq \frac{(2gk_0 T)^n N g}{(n+1)^2} n! \quad (146)$$

で上から抑えることができる*79。この上限について、 n 次と $(n-1)$ 次の比を取ると、 $n \gg 1$ で $2gk_0 T n$ となるので、

$$n \sim n_0 = \frac{\Omega}{4\pi k_0 g} \quad (147)$$

までは n を大きくするごとに摂動項のノルムはどんどん小さくなっていき、 $\|\hat{F}^{(n_0)}\| \lesssim N g n_0^{-2} e^{-n_0}$ のように指数関数的に小さな値にまで抑えられる。一方、 $n \gtrsim n_0$ では逆にノルム (の上限) はどんどん大きくなり、一般には展開が発散することが示唆される。

以上の導出からわかるように、展開が発散する原因は $\prod_{m=1}^n k_{m-1}$ という因子にある。外場中で相互作用する多体系の運動は、時間を粗視化したとき単純な相互作用で正確に再現できない複雑なものであり、精度を高めるには多数の粒子が同時に関与するような不自然な相互作用を持ち出す必要がある。 g が大まかにはスピンを 1 つフリップさせるのに要するエネルギーと対応しているので、 $n_0 k_0$ 個のスピンの同時相互作用すると $\sim n_0 k_0 g \sim \Omega$ のエネルギー変化がもたらされる。外場によってこのような励起が共鳴的に起こることで摂動的な描像が成り立たなくなってしまうというのが展開の破綻が起こる次数の物理的な意味である。

*78 式 (136) の右辺はこの式の左辺より必ず大きい。

*79 2 つ目の不等号で $k!(n-k)! \leq n!$ を用いた。3 つ目の不等号では総積内の $-(m-1)$ を無視することで結果を簡単にしているが、 $k_0 = 2$ のときは $m-1$ を無視せずとも総積が実行できて $\|\hat{F}^{(n)}\| \leq (2gT)^n N g n! (n+1)^{-1}$ である。

詳細な計算は複雑なので割愛して荒い議論に留めるが、Heisenberg 表示した演算子 $\hat{O}(T) = \hat{U}^\dagger(T, 0)\hat{O}\hat{U}(T, 0)$ についても $1/\Omega$ 展開の一般項を形式的に書き下すことができ、上記と同様にして項別にノルムの上限が評価できる。この場合は \hat{F} の展開とは異なり上限は定数倍を無視して $\sim (4gk_0T)^n$ となり、十分高周波であれば級数が収束する*80。 $\hat{H}(t)$ の代わりに \hat{F} を適当な次数 m で打ち切ったもので時間発展させる場合を考えると、 \hat{F} は k_m 体相互作用を含むことから、ノルム上限は $\sim (4gk_mT)^n \sim (4gmk_0T)^n$ に置き換わる。擬似的な $\hat{O}(T)$ を $1/\Omega$ の級数に表したときの $(m+1)$ 次以降の項が真の時間発展からの誤差を含んでおり、 $\sim \sum_{n=m+1}^{\infty} (4gmk_0T)^n = \sum_{n=m+1}^{\infty} (2m/n_0)^n$ がその上限であるが、この和は $m \sim n_0/4 \propto \Omega$ で打ち切ったときには収束して指数関数的に小さな値 $e^{-O(\Omega)}$ となる。つまり (この誤差からしか生じ得ない) 無限温度状態への緩和の時間スケールは高周波駆動においては指数関数的に遅く、高周波展開を適切な次数 $\sim n_0$ で打ち切ったもの (多くの場合 ETH を満たす) の熱平衡状態への緩和がまず起こる。

以上見たように、多体系では Floquet ハミルトニアンを数値的に厳密に計算すると、固有値・固有ベクトルから物理的に意味のある情報がほとんど引き出せないという事態が起こる。多体系において物理的に意味のある結果を引き出すには近似手法を取り入れることにむしろ本質があるという点は重要である。

5 Floquet Engineering II : Hubbard 模型

相互作用する多体系、特に強相関係系では磁性や超伝導といった多彩な物理が発現する。これらの豊富な物理に Floquet engineering の枠組みを組み合わせることで様々な新しい現象を見出すことができる。この章では強相関模型の代表格である Hubbard 模型

$$\hat{H}(t) = \sum_{ij\sigma} t_{ij} e^{-i\mathbf{A}(t)\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \quad (148)$$

を例にとるだけでも様々な物理が現れることを見てみよう。ここで $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$ である。

5.1 動的局在現象・動的バンド反転

すでに 3 章で見たように、1 バンド系に強い AC 電場を照射するとホッピング振幅が Bessel 関数 $J_0(A_0)$ によってくりこまれ、バンド幅が狭くなる動的局在現象が見られる。多体系の場合は 3 章で調べたような厳密な Floquet 状態を計算することは不可能である

*80 \hat{F} には長時間発展の情報が含まれるが $\hat{O}(T)$ は有限時間経過後の振る舞いのみを記述する点が大きく異なり、級数の収束性にも違いが現れてくる。

が、 $\Omega \gg U$ であるような高周波の駆動を考えた場合には、高周波展開によって得られる有効ハミルトニアンが十分よくダイナミクスを近似する。最低次では

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{H}_0 = \sum_{ij\sigma} J_0(A_{ij}) t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \quad (149)$$

となり、やはりホッピング項が Bessel 関数によって大きく抑制される。ここで $A_{ij} = \mathbf{A}_0 \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)$ とおいた。ここからわかるように、 U が比較的小さい弱相関の系から出発しても、強い外場でホッピングを小さく抑えることで $t_{\text{eff}} < U$ の強相関領域を実現することができる。ただし t_{eff} を基準に見ると $k_B T$ も大きくなることには注意が必要である*⁸¹。強い光の照射によって絶縁体にキャリアを注入して金属化させる、というのは比較的想像しやすいが、それとは全く逆に金属を絶縁化させられるというのは反直感的で面白い。外場によって Mott 転移を引き起こす理論ははじめ Bose-Hubbard 模型で議論され、冷却原子系を用いて実験的な観測も行われた [37, 38, 39]。

動的局在現象およびその応用としての Mott 転移は Bessel 関数の零点を積極的に利用することでバンド分散を消失させるというアイデアに基づくが、さらに外場強度を強くして Bessel 関数が負の値を取る領域 (図 2 では $2.4 < A < 5.5$) まで行くと何が起こるだろうか？単純に有効ハミルトニアンの基底状態を考えるとホッピングの符号を変化させても大した違いはないように思われるが、孤立系でどのような分布が実現するかまで考慮すると非自明な現象が起こる。

静的なハミルトニアン \hat{H}_{eff} に対する時間発展演算子 $e^{-i\hat{H}_{\text{eff}}t}$ は、 $e^{-i(-\hat{H}_{\text{eff}})(-t)}$ と書き直してみると時間反転対称な系では $-\hat{H}_{\text{eff}}$ での時間発展であると考えてもよいことがわかる。すなわち Hubbard 模型においてはホッピングの符号反転は相互作用 U の符号反転と読み替えてもよいということを意味している。これは単なる読み替えなので長時間経過後の平衡状態は元のハミルトニアンと同じはずだが、それはエネルギーの反転にもなって温度も符号反転していると考えれば矛盾はない。 U が比較的弱い系で突然ホッピングの符号を反転させると、運動エネルギーの高い状態だけが占有された反転分布 (負温度状態) が実現する。このような場合は上で見たような読み替えによって、正の温度の引力系であると捉え直したほうが見通しがよい。すると十分低温 (かつ外界から孤立している) とみなせるのであれば超伝導状態が実現することが期待される [40, 41]。

ここで見たように、弱結合の金属的な状態から出発すると、系は外場強度に応じて絶縁体になったり超伝導体になったりといった興味深い振る舞いをする。

*⁸¹ 外場強度をゆっくり変化させることでバンド幅が狭くなることに起因する温度上昇はある程度抑えることができるかと期待される。

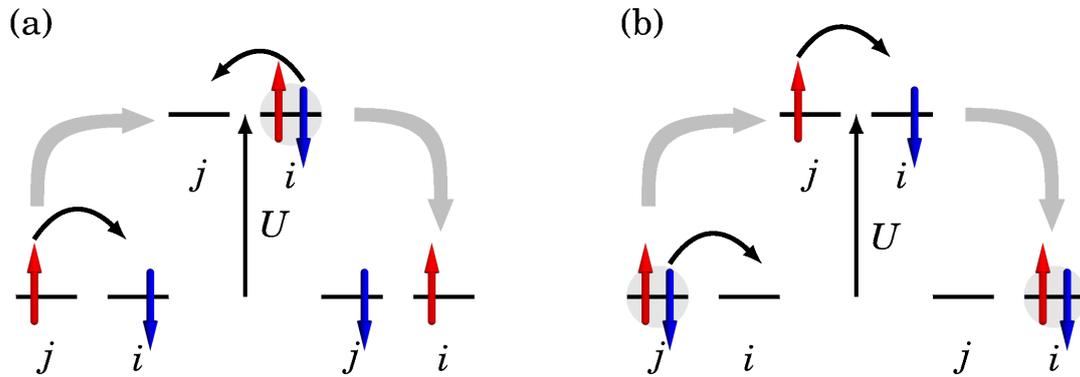


図 12 (a) 斥力系における 2 次摂動過程。 (b) 引力系における 2 次摂動過程。

5.2 有効スピン間相互作用

今度は強結合の Mott 絶縁体状態を駆動することを考えよう。この場合は Bessel 関数のくりこみによって更にバンド幅を狭くしても Mott 絶縁体であることには代わりないし、ホッピングの符号反転を行っても相互作用エネルギーのほうが支配的であるので温度の符号反転などは期待されない。しかし Mott 絶縁体の低エネルギー励起を支配するスピン自由度に目を向けると、(磁気的な駆動を行っていないにも関わらず) その性質がやはり劇的に変化しうることが見えてくる。

外場がない場合は、Hubbard 模型の強結合領域において低エネルギーのスピン励起だけを取り出すには、相互作用項のみからなるハミルトニアン (atomic limit) から出発してホッピング項を摂動とする摂動展開を行えばよい。サイト数と電子数 N が等しいハーフフィリングの場合は、atomic limit では各サイトに 1 個電子がいる状態が基底状態で、スピン配置は任意であるので 2^N 個の縮退がある。この縮退したセクターに対して図 12(a) のような二次摂動を考慮すると結果として反強磁性 Heisenberg 模型

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j \quad (150)$$

が得られる。ここで $J_{ij} = 4|t_{ij}|^2/U$ である。

ここで現れたスピンの間に働く交換相互作用は、atomic limit で完全にサイトに局在している電子が、隣のサイトにホッピングしてすぐ元のサイトに戻るといった運動エネルギー利得に相当する二次摂動過程によって生じるものである。特に kinetic exchange と呼ぶ。その名の通り電子の運動にともなって生じる相互作用であるので、強い電場が照射

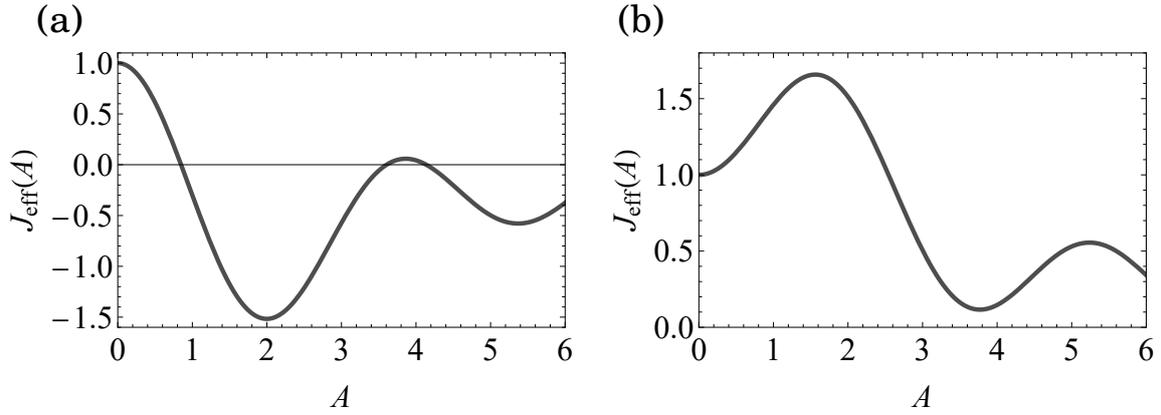


図 13 (a) 周期駆動された斥力 Hubbard 模型を強結合展開して得られる実効的な交換相互作用。駆動周波数は $\Omega = 1.2U$ に取り、平衡系での値を 1 とする単位系のもとでプロットした。引力系におけるクーパーペアの密度・密度相互作用 (η スピンの交換相互作用の z 成分) も同じ関数形となる。(b) 周期駆動された引力 Hubbard 模型を強結合展開して得られる実効的なクーパー対のホッピング (η スピンの交換相互作用の x, y 成分)。(a) と同様に $\Omega = 1.2|U|$ とした。

されている状況では電子の運動がその影響を受け、スピンは電場と直接結合しないにも関わらずスピン間有効相互作用に変化が現れる。上記の Heisenberg 模型を系統的に導出するには 2 章で述べたのと類似のカノニカル変換 (Schrieffer-Wolff 変換) を用いるが^{*82}、周期外場が加わっている場合にはやはりそれを Sambe 空間で実行すればよい。具体的には 2 章で Fourier 指数について行ったブロック対角化を今度は二重占有されているサイトの個数について行えば (あるいは双方を同時にブロック対角化すれば) よく、二重占有サイトの無いセクターのハミルトニアンがスピン自由度のみからなる低エネルギー有効模型になる。定式化の詳細は付録に回し、この章では文献 [43] の結果のみを引用すると 2 次摂動までを考慮したときには

$$\overline{\hat{H}_{\text{eff}}(t)} = \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{\text{eff}} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j, \quad (151)$$

$$J_{\text{eff}} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{4t_{ij}^{(-m)} t_{ji}^{(m)}}{U - m\Omega} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{4|t_{ij}|^2 [J_m(A_{ij})]^2}{U - m\Omega} \quad (152)$$

を得る ($\hat{\mathbf{S}}_i = 1/2 \sum_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{i\sigma'}$ である)。

J_{eff} の表式はやはり電子が隣のサイトに移ってすぐ戻る摂動過程から有効相互作用が生

*82 たとえば [42] の 5 章等を参照されたい。

じてはいるが、そこに電場との相互作用を通じてフォトンの吸収・放出の効果が考慮されていることを直接表している。フォトンが m 個吸収・放出する過程には $J_m(A_{ij}) \sim A_{ij}^m$ の因子が伴うのと同時に、中間状態のエネルギーにはフォトンのエネルギー $m\Omega$ の修正が加わる。特に重要なのは $U - m\Omega$ は負の値を取りうることで、例えば $U - \Omega$ が負かつ (U, Ω に比べて) 比較的小さな値を取る場合には相互作用が強磁性的になることがある。式 (152) の関数形を $\Omega = 1.2U$ の場合について図 13(a) に示した。ただし、前節で議論したように単純にハミルトニアンを符号反転させただけでは温度の符号が反転するだけで強磁性的な基底状態への緩和は少なくとも孤立系では起こらないことには注意が必要である。上記の交換相互作用の変調をはじめて議論した論文 [44] では、相互作用の符号反転を時間反転に読み替えることで、特殊な初期状態から時間発展して平衡化した状態が外場による時間反転を介して初期状態へと戻るといふ、スピンエコーに類似の現象を数値計算で実証している。交換相互作用の変調は冷却原子系で実験検証がなされていて、特に相互作用が強磁性的になる領域で系に強磁性相関が発達していることが確認されている [45]。

上記の相互作用の変調は $A_{ij} = |\mathbf{A}_0 \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)|$ のみに依存しており、 $\mathbf{A}_0 \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)$ の位相 (系に印加された電場が直線偏光か円偏光か) には依存しないものである。第 3 章で見たような円偏光照射に特有な時間反転対称性の破れはスピンにはたらく有効相互作用には反映されないのだろうか？ 平衡系ではホッピング振幅 t_{ij} を複素にして顕わに時間反転対称性を破ると、3 次摂動から

$$\hat{H}^{(3)} = \frac{1}{6} \sum_{ijk} J_\chi (\hat{\mathbf{S}}_i \times \hat{\mathbf{S}}_j) \cdot \hat{\mathbf{S}}_k, \quad (153)$$

$$J_\chi = \frac{24 \text{Im}[t_{ij} t_{jk} t_{ki}]}{U^2} \quad (154)$$

のようにスピンの SU(2) 対称な 3 体相互作用 (スカラーカイラリティ項) が現れることが知られている。複雑な計算が必要だが、周期駆動系の有効ハミルトニアンを計算すると、 t_{ij} が実の場合でもホッピングに関する 4 次摂動から、

$$J_\chi \sim \frac{|t_{ij}|^2 |t_{jk}|^2 \Omega (7U^2 - 3\Omega^2)}{U^2 (U^2 - \Omega^2)^3} i (\mathbf{E}_0^* \times \mathbf{E}_0) \cdot (\mathbf{R}_{ij} \times \mathbf{R}_{jk}) \quad (155)$$

が得られる ($\mathbf{E}_0 = i\Omega \mathbf{A}_0$)。ここで $O(A_0^3)$ を無視した。スカラーカイラリティ項はカゴメ格子等で分数励起を伴うカイラルスピン液体状態を誘起することが知られており、(数値計算から実証することすら難しいが) 光照射によってそのようなエキゾチックな状態を実現する可能性が期待されている [46]。

5.3 η ペアリング超伝導

ここまで斥力 Hubbard 模型 ($U > 0$) を念頭においた議論を行ってきたが、引力相互作用 ($U < 0$) が働く場合はどうだろうか？実は平衡系では、Hubbard 模型の数理的な性質は斥力と引力とで本質的に違いがないことが知られている。これを確かめるために Hubbard 模型にス波変換と呼ばれる変換

$$\hat{c}_{i\uparrow} \rightarrow \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger (-1)^i \quad (156)$$

を考えよう。ここで格子は bipartite で、 $(-1)^i$ は副格子 A に対しては $+1$ 、副格子 B に対しては -1 を取り、ホッピングは AB 副格子間をつなぐボンド上のみ値を持つものとする。このとき、

$$\sum_{ij} t_{ij} \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow} \rightarrow \sum_{ij} t_{ji} \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow}, \quad (157)$$

$$U \sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} - 1/2)(\hat{n}_{i\downarrow} - 1/2) \rightarrow -U \sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} - 1/2)(\hat{n}_{i\downarrow} - 1/2) \quad (158)$$

であることがただちにわかる。すなわち斥力系の計算結果にス波変換を施すだけで引力系の結果を得ることができるわけである*⁸³。斥力系の強結合領域ではスピン自由度 \mathbf{S}_i が低エネルギー励起を支配していたが、引力模型の場合にはここにス波変換を施して得られる η スピン

$$\hat{\eta}_i^x + i\hat{\eta}_i^y = (-1)^i \hat{c}_{i\uparrow} \hat{c}_{j\uparrow}, \quad \hat{\eta}_i^z = \frac{1}{2}(1 - \hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}) \quad (159)$$

が低エネルギー有効模型を記述することになる。すなわち η スピンが x, y 方向に秩序した状態は超伝導的な状態を表し、 z 方向に秩序した状態は電荷密度波状態を表す。ハーフフィリングでは両者が縮退しているが、フィリングをそこからずらすと z 方向に有効的な磁場がはたらき超伝導状態が基底状態となる。

斥力と引力の場合が本質的に同じ模型であるという事実は、よく見ると通常の Hubbard 模型が持つ $t_{ij} = t_{ji}$ という性質から導かれていることがわかる。つまり、電場を印加してホッピングが時間に依存する位相を獲得した場合にはこの等価性は破れることが示唆さ

*⁸³ ただし化学ポテンシャル項は $-\mu \sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}) \rightarrow -\mu \sum_i (1 - \hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}) = -\mu N + 2\mu \sum_i \hat{S}_i^z$ と変換されるので、ハーフフィリング以外の場合には斥力系で粒子数を固定する代わりに \hat{S}_i^z を固定するような拘束 (すなわち磁場が印加されたハミルトニアン) を考える必要があり、基底状態どうしに直接対応がつくのはハーフフィリングの場合のみである。

れる。実際、ス波変換を外場が印加された場合のホッピング項に適用すると

$$\sum_{ij\sigma} t_{ij} e^{-i\mathbf{A}(t)\cdot\mathbf{R}_{ij}} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} \rightarrow \sum_{ij} t_{ij} e^{i\sigma_z \mathbf{A}(t)\cdot\mathbf{R}_{ij}} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} \quad (160)$$

のように Peierls 位相がスピン依存する形に変換される。これは引力模型に電場を印加すると η スピンの SU(2) 対称性 [η -SU(2) 対称性] が破れ、斥力の場合には存在しない SU(2) 対称性の破れに伴う物理が実現するというを示唆している。実際、斥力の場合と同様 atomic limit からの摂動論を考えると、有効模型は

$$\overline{\hat{H}_{\text{eff}}(t)} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij}^{\text{eff}} (\hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow} \hat{c}_{j\uparrow}) + \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij}^{\text{eff}} \frac{\hat{n}_i^z}{2} \frac{\hat{n}_j^z}{2} - \mu \sum_i \hat{n}_i \quad (161)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij}^{\text{eff}} (\hat{\eta}_i^x \hat{\eta}_j^x + \hat{\eta}_i^y \hat{\eta}_j^y) + \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij}^{\text{eff}} \hat{\eta}_i^z \hat{\eta}_j^z + 2\mu \sum_i \hat{\eta}_i^z + \text{const.} \quad (162)$$

で表されることがわかる。ここで

$$J_{ij}^{\text{eff}} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m \frac{4t_{ij}^2 [J_m(A_{ij})]^2}{|U| - m\Omega}, \quad V_{ij}^{\text{eff}} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{4|t_{ij}|^2 [J_m(A_{ij})]^2}{|U| - m\Omega} \quad (163)$$

である。また $\hat{n}_i = \hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}$ とした。

斥力系の場合と異なり、 η -SU(2) 対称性が顕わに破れた XXZ 模型が実現している。 V_{ij}^{eff} の表式は斥力系の交換相互作用と同じ値 [図 13(a)] を取るが、 J_{ij}^{eff} は外場強度や周波数に応じてこれとは異なる値を取る [図 13(b)]。 J_{ij}^{eff} を記述する 2 次摂動過程は図 12(b) のようなもので、二重占有サイトと空サイトを擬スピンの上下に対応させれば斥力系と同様に交換相互作用を表すことがわかるが、摂動過程で電子が動く方向が斥力の場合とは異なるため、電子の進行方向に依存する Peierls 位相が存在する非平衡の場合には斥力系との差異が生まれる。

平均場近似の範囲で基底状態がどうなるかを調べると、ペアホッピングが優勢な $|J_{ij}^{\text{eff}}| > |V_{ij}^{\text{eff}}|$ では超伝導的な状態が、ペア間斥力 (引力) が優勢な $|V_{ij}^{\text{eff}}| > |J_{ij}^{\text{eff}}|$ では電荷秩序的な状態が実現することがわかる。特に着目すべきは $|J_{ij}^{\text{eff}}| > |V_{ij}^{\text{eff}}|$ かつ $J_{ij}^{\text{eff}} < 0$ の場合で、このような場合には重心運動量が Brillouin ゾーンの端に位置するような特殊な超伝導状態 (η ペアリング超伝導と呼ばれる) が実現する。これまで議論してきたように、特に孤立系が念頭にある場合は単に有効ハミルトニアン基底状態を瞬時に切り替えただけでは負温度状態が実現して基底状態への緩和が起こらないことがしばしばありえる。ここでの引力系の場合は、初期状態が s 波超伝導であったとして、 η ペアリングが基底状態となるような外場を突然印加したとしても基底状態への緩和は起こらないが、電荷

密度波が優勢になる $V_{ij}^{\text{eff}} > J_{ij}^{\text{eff}} > 0$ となるような外場強度を印加したときには、 s 波超伝導状態は少しでも摂動を加えると摂動が時間に関して指数関数的に増大するような不安定な状態になる*84。したがって外場強度を二段階にわたって変化させたり、連続的に 0 から大きくしていくなどして時間発展の途中で s 波超伝導から電荷秩序を伴うような状態への崩壊を引き起こさせることで η ペアリング超伝導への相転移を引き起こすことができる [47]。

5.4 Floquet トポロジカル超伝導

外場によって Hubbard 模型に超伝導相を誘起したり超伝導のペアリングを変化させたりすることができることを議論してきた。そうするとやはり、円偏光による時間反転対称性の破れを用いてエキゾチックな超伝導、特にトポロジカルに非自明な超伝導は実現できないだろうか？ということを考えてみたくなる。特に、対称性の観点からは銅酸化物超伝導体における d 波超伝導が円偏光照射によってカイラル d 波超伝導に変化する、といったシナリオを当然期待したくなるのだが、実際には具体的な理論の構築を素朴に試みるといくつかの困難に行き当たる。

特に、超伝導状態のトポロジーは通常、Bardeen-Cooper-Schrieffer ハミルトニアンに平均場近似を施したのちに得られる実効的な一体問題を記述する Bogoliubov-de Gennes ハミルトニアン

$$\hat{H}_{\text{BdG}} = \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}^\dagger \begin{pmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}} & \Delta_{\mathbf{k}} \\ \Delta_{\mathbf{k}}^* & -\epsilon_{-\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (164)$$

について考えられる*85。ここに外場を印加して高周波展開を実行したときにグラフェンの場合と類似の状況が実現すればトポロジカル相転移を引き起こすことができると期待されるが、実際には光電場はここに

$$\hat{H}_{\text{BdG}}(t) = \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}^\dagger \begin{pmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{A}(t)} & \Delta_{\mathbf{k}} \\ \Delta_{\mathbf{k}}^* & -\epsilon_{-\mathbf{k}+\mathbf{A}(t)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (165)$$

という形で対角要素にのみ (かつ電子と正孔で波数に対し異符号で) 結合し、非対角のギャップ関数 $\Delta_{\mathbf{k}}$ には直接結合しない。強い光で超伝導体を駆動すると Higgs モードが

*84 この不安定性は動的不安定性と呼ばれるもので、素励起のエネルギー分散を計算してみると固有値に有限の虚部が現れる。これは s 波超伝導状態が自由エネルギーの極小値ではなく鞍点になっていることに対応する (負温度になるのは極大値になる場合に対応)。

*85 ここでは典型的な 1 バンド模型の超伝導状態を考えているが、一般に内部自由度がある系では ϵ や Δ はブロック行列に置き換える必要がある。

励起できて Δ_k がコヒーレントに振動することが知られているが、そのような効果を含めない限りは高周波展開からは非対角項を変調するような項は現れ得ず、したがってギャップ関数の対称性を動的に破ることはこの枠組では実現できそうもない。

この困難を回避する方法としては、ギャップ関数を変化させるのではなく対角部分のバンド構造を Floquet engineering を用いて変化させることでトポロジカル相転移を誘起するという方法が一例としては挙げられる [48, 49]。ここではこれとは別の方法として、Hubbard 模型の多体効果によって超伝導の起源たる有効引力相互作用を変調することでペアリング対称性を変化させるアプローチ [50] について紹介したい。

すでに見たように、ハーフフィリングの Hubbard 模型では強結合領域において円偏光照射により時間反転の破れたスカラースピカイラリティ項が現れた。Hubbard 模型をハーフフィリングから少しずらして電荷をドープすると超伝導が現れることが知られているが、時間反転対称性の破れた相互作用が超伝導の有効相互作用に加わると、通常とは異なるエキゾチックなペアリング対称性がより好まれるだろうというのがここでの基本的なアイデアである。

ドープされた Hubbard 模型の超伝導状態の研究は、強結合領域では t - J 模型と呼ばれる模型に基づいて議論されることが多い*86。これは 5.2 節で議論した強結合展開を正孔が存在する場合に実行することで導出される有効模型であり、円偏光照射の場合への拡張をここでは考えることになる。詳細は割愛するが、有効ハミルトニアンにはスカラーカイラリティ項以外にも 2 次摂動から 3 サイト項と呼ばれる項

$$\hat{H}_{3\text{-site}} = \sum_{ij\sigma\sigma'} \sum_{k \neq i} \Gamma_{ij;k} \hat{P}_G \left[\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{k\sigma'} \cdot \hat{\mathbf{S}}_j - \frac{1}{2} \delta_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma} \hat{n}_j \right] \hat{P}_G, \quad (166)$$

$$\Gamma_{ij;k} = \frac{t_{ik}^{(0)} t_{kj}^{(0)}}{U} + \sum_{m \neq 0} \frac{t_{ik}^{(-m)} t_{kj}^{(m)}}{m\Omega(1 - m\Omega/U)} \quad (167)$$

$$= \frac{t_{ik} t_{kj} J_0(A_{ik}) J_0(A_{kj})}{U} + \sum_{m \neq 0} \frac{t_{ik} t_{kj} J_m(A_{ik}) J_m(A_{kj})}{m\Omega(1 - m\Omega/U)} e^{im(\theta_{jk} - \theta_{ik})} \quad (168)$$

が今の場合は時間反転の破れを伴って現れる。ここで \hat{P}_G は Gutzwiller 射影で、二重占有されているサイトを排除する射影演算子 $\hat{P}_G = \prod_i (1 - \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow})$ である。 $k = i$ と置いたものがハーフフィリングでも現れるスピンの交換相互作用に対応するが、 $k \neq i$ の項は正孔がドープされたときに特有の項である。

*86 平衡系の研究についてはレビュー論文 [51] を参照のこと。

上式の $\theta_{ij} = \arg \mathbf{A}_0 \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)$ は円偏光 $\mathbf{A}_0 = A_0(1, i)$ の場合に非ゼロの値を取り、 $\Gamma_{ij;k}$ は円偏光のもとでは時間反転対称性を破り複素数になる。特に $\sim \Omega^{-1}$ の寄与は高周波展開の 1 次 $[\hat{H}_{-m}, \hat{H}_m]/2m\Omega$ に由来するが、これは \hat{H}_m が通常のホッピング (\hat{T}_m と書くことにする) であれば正方格子で恒等的に消える因子 $[\hat{T}_{-m}, \hat{T}_m] = 0$ が、 t - J 模型の場合は $[\hat{P}_G \hat{T}_{-m} \hat{P}_G, \hat{P}_G \hat{T}_m \hat{P}_G] \neq 0$ に置き換わり、二重占有サイトが生成しないようにホッピングしなければならないという制約のために相殺せず残るという強相関領域に特有な有効相互作用である。実際、式 (167) は、相互作用がないときの高周波展開から得られた式 (92) と見比べるとほとんど同じ形をしているが、相互作用がないときは単に摂動の中間過程のサイト k について和を取った量 (正方格子では 0 になる) がハミルトニアンに寄与するのに対し、今の場合は k のサイトにいるスピンや正孔との相互作用を表す。 t - J 模型で d 波超伝導を最も素朴に導出する平均場近似の枠組みにおいて上記の時間反転対称性を破る項が摂動的に加わる状況を考えると、摂動が弱くとも $d + id$ 超伝導が誘起されることが議論されている。

付録 A タイトバイディング模型と周期電場

第 3 章で扱ったように、AC 電場を系に導入したときのタイトバイディング模型は

$$\hat{H} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} e^{-i\mathbf{A}(t) \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} \quad (169)$$

のようにベクトルポテンシャル $\mathbf{A}(t)$ を Peierls 位相により導入して議論することが多い。ここでは Peierls 位相の導出を簡単に議論し、どのような仮定のもとで電場がこの形で表現されているのかを見ておこう。

A.1 タイトバイディング模型の導出

タイトバイディング模型はモデル計算の分野ではそれそのものが議論の出発点となることがほとんどではあるが、特に個別の物質の性質を定量的に議論したい場合に、第一原理計算の結果から (細かいパラメータを含めて) 「導出」することも多い (ダウンフォールディングという)。まずは電場の印加されていないタイトバイディング模型の導出過程を見た上で、そこに電場が加わるとどうなるかを調べることで Peierls substitution の導出を行う。

第一原理計算に相当する出発点はバンド理論である。ここでは簡単のために空間 1 次元

を考え、スピン自由度はなく、エネルギーの縮退もないとすると、ハミルトニアンは

$$\hat{H} = -\frac{\partial_x^2}{2m} + V(x), \quad V(x+a) = V(x) \quad (170)$$

で表すことができる。Bloch の定理を用いるとこのハミルトニアンの固有状態は結晶運動量の固有状態に取ることができて、

$$\hat{H}\psi_{n,k}(x) = E_{n,k}\psi_{n,k}(x), \quad (171)$$

$$\psi_{n,k}(x) = u_{n,k}(x)e^{ikx}, \quad u_{n,k}(x+a) = u_{n,k}(x) \quad (172)$$

である。 $E_{n,k}$ や $\psi_{n,k}(x)$ はバンドの番号 n を固定すると k についてなめらかで周期的な関数であるとしよう。このとき、Wannier 関数を $R = Na$ のもと

$$w_n(x, R) := a \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dk}{2\pi} \psi_{n,k}(x) e^{-ikR} \quad (173)$$

$$= a \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dk}{2\pi} u_{n,k}(x-R) e^{ik(x-R)} \quad (174)$$

$$= w_n(x-R, 0) =: w_n(x-R) \quad (175)$$

で導入する。すなわち Bloch 関数を

$$\psi_{n,k}(x) = \sum_n w_n(x-R) e^{ikR} \quad (176)$$

のように、格子点 $x = R$ を中心とする Wannier 関数の和で表現する。このとき Wannier 関数は

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx w_n^*(x-R) w_m(x-R') = \delta_{n,m} \delta_{R,R'} \quad (177)$$

を満たしており、「 $x = R$ にある原子の n 番目の原子軌道」に相当する正規直交基底であることがわかる^{*87}。

この基底で \hat{H} を第二量子化表示したものがタイトバインディング模型である。 \hat{H} の第二量子化表示は

$$\hat{H} = \int dx \hat{\psi}^\dagger(x) \left[-\frac{\partial_x^2}{2m} + V(x) \right] \hat{\psi}(x) \quad (178)$$

であるが、Bloch 関数で場の演算子を展開して

$$\hat{\psi}(x) = a \sum_n \int \frac{dk}{2\pi} \psi_{n,k}(x) \hat{c}_{n,k} \quad (179)$$

^{*87} $\psi_{n,k}(x)$ には k に依存する位相を自由に選べる任意性があるので、Wannier 関数は一意には定まらない。 $\langle x \rangle^2 - \langle x^2 \rangle$ を最小にするように位相を選んだ場合を最局在 Wannier 関数という。

とすると、

$$\hat{\mathcal{H}} = a \sum_n \int \frac{dk}{2\pi} E_{n,k} \hat{c}_{n,k}^\dagger \hat{c}_{n,k} \quad (180)$$

が得られる。これを更に Fourier 級数展開して実空間の格子での表現にしたものがタイトバインディング模型で、

$$\hat{c}_{n,k} = \sum_R \hat{c}_{n,R} e^{-ikR} \quad (181)$$

のもと

$$\hat{\psi}(x) = \sum_{nR} w_n(x-R) \hat{c}_{n,R} \quad (182)$$

であり、ハミルトニアンはホッピング振幅

$$t_{R,R'}^{(n)} = \int dx w_n^*(x-R) \left[-\frac{\partial_x^2}{2m} + V(x) \right] w_n(x-R') \quad (183)$$

$$= a \int \frac{dk}{2\pi} E_{n,k} e^{ik(R-R')} \quad (184)$$

を用いて

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{nRR'} t_{R,R'}^{(n)} \hat{c}_{n,R}^\dagger \hat{c}_{n,R'} \quad (185)$$

と書ける。

A.2 バンド理論における古典電磁場の扱い

バンド理論のハミルトニアンに古典電磁場を外場として結合させたものは

$$\hat{H}(t) = \frac{(-i\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m} - e\phi + V(\mathbf{r}) \quad (186)$$

で与えられる*88。

電磁場はゲージ変換

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} - \nabla\Lambda, \phi \rightarrow \phi + \frac{\partial\Lambda}{\partial t} \quad (187)$$

に対して不変であるが、このときハミルトニアンは

$$\hat{H}(t) \rightarrow \frac{(-i\nabla + e\mathbf{A} - e\nabla\Lambda)^2}{2m} - e\phi - e\frac{\partial\Lambda}{\partial t} + V(\mathbf{r}) \quad (188)$$

$$= e^{ie\Lambda} \left[\hat{H}(t) - i\frac{\partial}{\partial t} \right] e^{-ie\Lambda} \quad (189)$$

*88 $V(\mathbf{r})$ を周辺の電子の影響を含めた実効的なポテンシャルとみなす場合には、電磁場の導入によって $V(\mathbf{r})$ が変化しないというのは必ずしも正しくない仮定であるが、ここでは考察しない。

へと変換される。すなわち、ゲージ変換と $e\Lambda$ でのユニタリ変換は等価である。

特にレーザー外場によってもたらされる電磁場は通常、 \mathbf{A}_0 を $\mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{k} = 0$ を満たす複素数の 3 次元ベクトルとして

$$\phi = 0, \mathbf{A} = \text{Re}[\mathbf{A}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \Omega t)}] \quad (190)$$

で表す。ここで $\Omega = c|\mathbf{k}|$ である。このとき電磁場は

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \Omega \text{Im}[\mathbf{A}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \Omega t)}], \quad (191)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = -\text{Im}[\mathbf{k} \times \mathbf{A}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \Omega t)}] \quad (192)$$

で表される。他方、光の波長は通常、固体物理で議論する系のサイズに比べると十分に大きいことがほとんどなので、ベクトルポテンシャルから波数依存性を無視して

$$\phi = 0, \quad \mathbf{A} = \text{Re}[\mathbf{A}_0 e^{-i\Omega t}] \quad (193)$$

と近似してしまつて議論することがほとんどである。このときは

$$\mathbf{E} = \Omega \text{Im}[\mathbf{A}_0 e^{-i\Omega t}], \quad \mathbf{B} = 0 \quad (194)$$

となつて、電場は空間一様となり、 $|\mathbf{k} \times \mathbf{A}_0| = \frac{\Omega}{c} |\mathbf{A}_0|$ の大きさの (軌道) 磁場が無視されることには注意が必要である。この表示を velocity ゲージという。近似後の AC 電場のみが印加されている式はゲージを変更して

$$\phi = \text{Im}[\Omega \mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{r} e^{-i\Omega t}], \quad \mathbf{A} = 0 \quad (195)$$

と表してもよい。これを length ゲージという。

A.3 AC 電場の Peierls 位相による表現

以上の準備のもとに AC 電場の効果をタイトバインディング模型に取り入れよう。ハミルトニアンに追加の項として電場を導入するには length ゲージで考えるのが便利であるのでそのようにすると、電場に由来する追加の項 $\delta \hat{\mathcal{H}}$ は一次元系では

$$\delta \hat{\mathcal{H}} = \int dx \hat{\psi}^\dagger(x) e E(t) x \hat{\psi}(x) \quad (196)$$

$$= \sum_{nmRR'} \int dx e E(t) w_n^*(x-R) x w_m(x-R') \hat{c}_{n,R}^\dagger \hat{c}_{m,R'} \quad (197)$$

と表される。積分を R, R' の相対距離と中点にわけて表すと

$$\delta\hat{\mathcal{H}} = \sum_{nR} eE(t)R\hat{c}_{n,R}^\dagger\hat{c}_{n,R} + \sum_{nmRR'} eE(t)D_{R-R'}^{(n,m)}\hat{c}_{n,R}^\dagger\hat{c}_{m,R'}, \quad (198)$$

$$D_{R-R'}^{(n,m)} = \int dx w_n^* \left(x - \frac{R-R'}{2} \right) x w_m \left(x + \frac{R-R'}{2} \right) \quad (199)$$

を得る。

正当性はともかく、ここで第 1 項のみを考慮すると電場中のタイトバインディング模型は

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{nRR'} t_{R,R'}^{(n)}\hat{c}_{n,R}^\dagger\hat{c}_{n,R'} + \sum_{nR} eE(t)R\hat{c}_{n,R}^\dagger\hat{c}_{n,R} \quad (200)$$

と表される。これを velocity ゲージに変換すると Peierls 位相が現れる。 $\hat{U} = e^{i\sum_{nR} eA(t)R\hat{c}_{n,R}^\dagger\hat{c}_{n,R}}$ でユニタリ変換すると

$$\hat{U}^\dagger\hat{\mathcal{H}}\hat{U} - i\hat{U}^\dagger\partial_t\hat{U} = \sum_{nRR'} t_{R,R'}^{(n)}e^{-ieA(t)(R-R')}\hat{c}_{n,R}^\dagger\hat{c}_{n,R'} + \sum_{nR} e[E(t) + \partial_t A(t)]R\hat{c}_{n,R}^\dagger\hat{c}_{n,R} \quad (201)$$

を得る。すなわち $E(t) = -\partial_t A(t)$ を満たすように $A(t)$ を選んだとき Peierls substitution を行った形のハミルトニアンに帰着することがわかる。

$\delta\hat{\mathcal{H}}$ の第 2 項 $D_{R-R'}^{(n,m)}$ は、Wannier 関数が $w_n(-x) = w_n^*(x)$ を満たす場合には $D_{R-R'}^{(n,n)} = 0$ であり、電場によるバンド間の遷移を表す項である。Peierls substitution ではこの項の寄与は無視されている。

付録 B 周期駆動された Hubbard 模型の強結合展開

第 5 章で紹介したトピックのいくつかは、 U が大きい極限での振る舞いを議論しており、そこでは強結合展開の手法を Floquet 理論を用いて拡張したものが用いられている。この付録ではその導出を簡単に紹介する。

Hubbard 模型の強結合展開は第 2 章で紹介した高周波展開を導く擬縮退摂動論の枠組みで同じように記述できるものである。第 2 章ではフォトン数 $(-\hat{M}\Omega$ の固有値) を変化させるような項をユニタリ変換 $e^{-i\hat{L}}$ を用いてハミルトニアンから消去して、フォトン数を保存する $(-\hat{M}\Omega$ についてブロック対角な) ハミルトニアンを逐次的に構成した。Hubbard 模型では同じようにして二重占有されたサイトの数 (ダブロン数) を数える演算子 $\hat{D} = \sum_i \hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}$ の固有値を変化させる項をユニタリ変換で消去して、ダブロン数が保

存する有効ハミルトニアンを構築することができる。特に、(平衡系では) 基底状態および低エネルギー励起の性質に主な興味があるので、ダブロン数が最小 (引力の場合は最大) の空間に属するブロック行列のみを取り出せばいい。ハーフフィリングの場合は $\hat{D} = 0$ の空間にはスピン自由度のみが残っていて、有効ハミルトニアンはよく知られているように Heisenberg 模型になる。

周期駆動された Hubbard 模型では、フォトン数とダブロン数のどちら (あるいは両方) を変化しないようにするかで展開のバリエーションが考えられる。フォトン数のみを模型の自由度から消去する場合は既に述べた高周波展開を用いればよいが、ここではまずダブロン数を消去したのちにフォトン数を消去するという二段階の展開を考えよう (同時に消去しても同じ結果が得られる)。ダブロン数が保存する強結合展開の有効ハミルトニアンを $\hat{H}_{\text{SCE}}(t)$ で表すと、式 (32) に対応する関係式は

$$\hat{H}_{\text{SCE}}(t) = e^{i\hat{S}(t)} \hat{H}(t) e^{-i\hat{S}(t)} - e^{i\hat{S}(t)} i \frac{\partial}{\partial t} e^{-i\hat{S}(t)} \quad (202)$$

と表すことができる。ただしここで $\hat{S}(t)$ は擬エネルギーを変化させないように周期関数 $\hat{S}(t) = \hat{S}(t+T)$ に選ぶ。式 (32) では左辺が時間に依存しなかったが、今の場合はその代わりに $[\hat{H}_{\text{SCE}}(t), \hat{D}] = 0$ が満たされる。式 (32) を満たすユニタリ変換の存在は Floquet の定理により保証されていたが、上式はむしろ $\hat{S}(t)$ に対する要請であり、これを満たすような $\hat{S}(t)$ を逐次解法によって決めていく。上式は第 2 章で行ったのとほとんど同じ式変形ができて、式 (48) で $\hat{\Lambda}(t) \rightarrow \hat{S}(t)$, $\hat{H}_{\text{eff}} \rightarrow \hat{H}_{\text{SCE}}(t)$ とした

$$\frac{\partial \hat{S}(t)}{\partial t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{n!} (-i \text{ad}_{\hat{S}(t)})^n [\hat{H}(t) - (-1)^n \hat{H}_{\text{SCE}}(t)] \quad (203)$$

が得られる。第 2 章とは異なり、今はホッピング項のみを摂動として取り扱うので、 $\lambda = 1$ のもと $\hat{H}(t) = \lambda \hat{T}(t) + U \hat{D}$ とホッピングと相互作用に分けて、 λ に関する形式的なべき級数を考えることにしよう。 λ に関するべき級数展開を $\hat{H}_{\text{SCE}}(t) = \hat{H}_{\text{SCE}}^{(0)}(t) + \hat{H}_{\text{SCE}}^{(1)}(t) + \hat{H}_{\text{SCE}}^{(2)}(t) + \dots$ と $\hat{S}(t) = \hat{S}^{(1)}(t) + \hat{S}^{(2)}(t) + \dots$ のように実行すると、0 次から 2 次までの範囲で

$$0 = U \hat{D} - \hat{H}_{\text{SCE}}^{(0)}(t) \quad (204)$$

$$\frac{\partial \hat{S}^{(1)}}{\partial t} = \hat{T}(t) - \hat{H}_{\text{SCE}}^{(1)}(t) + \frac{1}{2} [i \hat{S}^{(1)}(t), U \hat{D} + \hat{H}_{\text{SCE}}^{(0)}(t)] \quad (205)$$

$$= \hat{T}(t) - \hat{H}_{\text{SCE}}^{(1)}(t) + [i \hat{S}^{(1)}(t), U \hat{D}] \quad (206)$$

$$\frac{\partial \hat{S}^{(2)}}{\partial t} = -\hat{H}_{\text{SCE}}^{(2)}(t) + [i \hat{S}^{(2)}(t), U \hat{D}] + \frac{1}{2} [i \hat{S}^{(1)}(t), \hat{T}(t) + \hat{H}_{\text{SCE}}^{(1)}(t)] \quad (207)$$

が得られる。原理的には $\hat{S}^{(n)}$ および $\hat{H}_{\text{SCE}}^{(n)}$ は行列要素ごとの比較で決定できるが、ここではホッピング項を

$$\hat{T}(t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (\hat{T}_{+1,m} + \hat{T}_{0,m} + \hat{T}_{-1,m}) e^{-im\Omega t} \quad (208)$$

の形に分解することを考えよう。ここでホッピング振幅の Fourier 級数展開を式 (91) と同様に定義して

$$\hat{T}_{+1,m} = \sum_{ij\sigma} t_{ij}^{(m)} \hat{n}_{i\bar{\sigma}} \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} (1 - \hat{n}_{j\bar{\sigma}}) \quad (209)$$

$$\hat{T}_{0,m} = \sum_{ij\sigma} t_{ij}^{(m)} [(1 - \hat{n}_{i\bar{\sigma}}) \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} (1 - \hat{n}_{j\bar{\sigma}}) + \hat{n}_{i\bar{\sigma}} \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} \hat{n}_{j\bar{\sigma}}] \quad (210)$$

$$\hat{T}_{-1,m} = \sum_{ij\sigma} t_{ij}^{(m)} (1 - \hat{n}_{i\bar{\sigma}}) \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} \hat{n}_{j\bar{\sigma}} = \hat{T}_{+1,-m}^{\dagger} \quad (211)$$

である。ただし $\bar{\uparrow} = \downarrow, \bar{\downarrow} = \uparrow$ である。左辺の演算子の 1 つ目の添字はダブロン数の変化量を表しており、 $[\hat{D}, \hat{T}_{d,m}] = d\hat{T}_{d,m}$ の関係が成り立つ。そこでこれと同様にして $\hat{S}^{(n)}(t)$ についても $\hat{S}^{(n)}(t) = \sum_d \sum_{m=-\infty}^{\infty} \hat{S}_{d,m}^{(n)} e^{-im\Omega t}$ のようにダブロン数とフォトン数の変化で分解すると、1 次の方程式は

$$-im\Omega \hat{S}_{d,m}^{(1)} = \hat{T}_{d,m} - \int_0^T \frac{dt}{T} \hat{H}_{\text{SCE}}^{(1)}(t) e^{im\Omega t} \delta_{d,0} - iU d \hat{S}_{d,m}^{(1)} \quad (212)$$

とかける。高周波展開のときの境界条件の議論と同様、 $\hat{S}_{0,m}^{(n)}$ に任意性が残るがこれを 0 に取ると

$$i\hat{S}_{\pm 1,m}^{(1)} = \frac{\hat{T}_{\pm 1,m}}{\pm U - m\Omega}, \quad \hat{H}_{\text{SCE}}^{(1)}(t) = \sum_m \hat{T}_{0,m} e^{-im\Omega t} \quad (213)$$

が得られる。すなわち

$$i\hat{S}^{(1)} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left(\frac{\hat{T}_{+1,m}}{U - m\Omega} - \frac{\hat{T}_{-1,m}}{U + m\Omega} \right) e^{-im\Omega t} \quad (214)$$

である。同様にして 2 次は

$$i\hat{S}_{\pm 2, m}^{(2)} = \sum_n \frac{[\hat{T}_{\pm 1, n}, \hat{T}_{\pm 1, m-n}]}{2(\pm 2U - m\Omega)(\pm U - n\Omega)}, \quad (215)$$

$$i\hat{S}_{\pm 1, m}^{(2)} = \sum_n \frac{[\hat{T}_{\pm 1, n}, \hat{T}_{0, m-n}]}{(\pm U - m\Omega)(\pm U - n\Omega)}, \quad (216)$$

$$\hat{H}_{\text{SCE}}^{(2)}(t) = \sum_{nm} \frac{[\hat{T}_{+1, n}, \hat{T}_{-1, m-n}]}{2(U - n\Omega)} e^{-im\Omega t} + \text{H.c.} \quad (217)$$

ということになる。すなわち 2 次の有効ハミルトニアンは

$$\hat{H}_{\text{SCE}}(t) = U\hat{D} + \sum_m \hat{T}_{0, m} e^{-im\Omega t} + \sum_{nm} \frac{[\hat{T}_{+1, n}, \hat{T}_{-1, m-n}]}{2(U - n\Omega)} e^{-im\Omega t} + \text{H.c.} \quad (218)$$

ということになる。

ここで一旦展開の妥当性について考察しておこう。ここで考えた展開はホッピングの次数に関するものであるが、高周波展開と同様、収束半径 0 の展開だと考えられる。展開に現れる項のノルムは高次に行くとき最終的には発散すると予想されるが、ノルムが十分小さくなる次数で打ち切れればダイナミクスを精度よく記述するはずである。ノルムが小さくなるかどうかは、ホッピング振幅 $t_{ij}^{(n)}$ が $(U - n\Omega)$ とくらべて十分小さいかが重要である。高周波展開では分母が Ω だったので、ハミルトニアンの典型的なエネルギー g より Ω を十分高周波に取ればよかったが、今の場合は $(U - n\Omega)$ の組み合わせが出てくるので必ずしも簡単な条件には帰着できない。例えば $U \gg \Omega$ の場合は、 n を大きく取れば分母 $(U - n\Omega)$ の値を小さくすることができてしまうが、一方で $t_{ij}^{(n)}$ は Bessel 関数 $J_n(A_0) \sim A_0^n / 2^n n!$ を因子に含むので、外場振幅が小さければ n を大きくしても分子が小さくなる効果が上回ってノルムは小さく抑えられる。ちなみに、分母がぴったり 0 になる項が存在する場合は、 $\hat{S}(t)$ に対する要請が強すぎて級数解が構成できないということなので、そのような項が現れた時点で展開を打ち切らなくてはならない。

話を展開理論に戻そう。ここから更にホッピングの交換子を具体的に計算する必要があるのだが、その前にさらに高周波展開を行って静的なハミルトニアンの問題に帰着させよう。今、問題を二段階に分割したことで、 $U\hat{D}$ は各ブロック行列において定数項とみなせるので、Hubbard 模型そのものを高周波展開するとき要求される $U \ll \Omega$ の条件は必要なく、低エネルギー有効模型の典型的なエネルギー (ハーフフィリングなら交換相互作用 J 、ドーピングされた系ならホッピング t) とくらべて Ω が十分大きければよい。van Vleck

展開を用いると、ホッピングの2次までを残すとき

$$\hat{H}_{\text{eff}} = U\hat{D} + \hat{T}_{0,0} + \sum_{m \neq 0} \frac{[\hat{T}_{0,-m}, \hat{T}_{0,m}]}{2m\Omega} + \sum_m \frac{[\hat{T}_{+1,m}, \hat{T}_{-1,-m}]}{U - m\Omega} \quad (219)$$

ということになる。

ホッピングの交換子を評価してより具体的な有効ハミルトニアンを計算しよう。以下では簡単のため、斥力相互作用 ($U > 0$) かつハーフフィリングの場合に議論を限定して右辺をスピン演算子で書き直し、Heisenberg 模型の形にまとめよう。斥力・ハーフフィリングの場合は、 $\hat{D} = 0$ の状態が摂動の最低次で最低エネルギー状態を与える。この空間に射影する演算子を \hat{P}_G で表すと、 $\hat{P}_G \hat{T}_{0,m} \hat{P}_G = \hat{T}_{-1,m} \hat{P}_G = \hat{P}_G \hat{T}_{+1,m} = 0$ となるので

$$\hat{P}_G \hat{H}_{\text{eff}} \hat{P}_G = - \sum_m \frac{\hat{P}_G \hat{T}_{-1,-m} \hat{T}_{+1,m} \hat{P}_G}{U - m\Omega} \quad (220)$$

$$= - \sum_{ij\sigma i'j'\sigma'} \sum_m \frac{t_{ij}^{(-m)} t_{j'i'}^{(m)}}{U - m\Omega} \hat{P}_G \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} \hat{n}_{j\bar{\sigma}} \hat{n}_{j'\bar{\sigma}'} \hat{c}_{j'\sigma'}^\dagger \hat{c}_{i'\sigma'} \hat{P}_G \quad (221)$$

$$= - \sum_{ij\sigma\sigma'} \sum_m \frac{t_{ij}^{(-m)} t_{ji}^{(m)}}{U - m\Omega} \hat{P}_G \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i'\sigma'} \hat{c}_{j\sigma} \hat{c}_{j'\sigma'}^\dagger \hat{P}_G \quad (222)$$

となる。ただし、二行目では $(1 - \hat{n}_{i\bar{\sigma}})$ と $(1 - \hat{n}_{i'\bar{\sigma}'})$ は \hat{P}_G の作用のもとで1に置き換えられることを用い、三行目において射影のもとで生き残る項は $i = i', j = j'$ のみであることと (ハーフフィリングの場合に限り) $\hat{n}_{j\bar{\sigma}} \hat{n}_{j'\bar{\sigma}'}$ を \hat{P}_G の作用により1に置き換えられることを用いた。ここでスピン演算子

$$\hat{S}_i = \sum_{\sigma\sigma'} \frac{1}{2} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{i\sigma'} \quad (223)$$

に関する恒等式*89

$$\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma'} = \frac{\hat{n}_i}{2} \delta_{\sigma'\sigma} + \hat{S}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\sigma'\sigma} \quad (226)$$

*89

$$\therefore \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma'} = \sum_{ss'} \left(\begin{array}{cc} \hat{c}_{is}^\dagger \frac{\delta_{ss'} + \sigma_{ss'}^z}{2} \hat{c}_{is'} & \hat{c}_{is}^\dagger \frac{\sigma_{ss'}^x + i\sigma_{ss'}^y}{2} \hat{c}_{is'} \\ \hat{c}_{is}^\dagger \frac{\sigma_{ss'}^x - i\sigma_{ss'}^y}{2} \hat{c}_{is'} & \hat{c}_{is}^\dagger \frac{\delta_{ss'} - \sigma_{ss'}^z}{2} \hat{c}_{is'} \end{array} \right)_{\sigma\sigma'} \quad (224)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{ss'} (\hat{c}_{is}^\dagger \delta_{ss'} \hat{c}_{is'} \delta_{\sigma\sigma'} + \hat{c}_{is}^\dagger \sigma_{ss'}^x \hat{c}_{is'} \sigma_{\sigma\sigma'}^x - \hat{c}_{is}^\dagger \sigma_{ss'}^y \hat{c}_{is'} \sigma_{\sigma\sigma'}^y + \hat{c}_{is}^\dagger \sigma_{ss'}^z \hat{c}_{is'} \sigma_{\sigma\sigma'}^z) \quad (225)$$

と $\hat{P}_G \hat{n}_i \hat{P}_G = 1$ を用いると、

$$\hat{P}_G \hat{H}_{\text{eff}} \hat{P}_G = - \sum_m \sum_{ij\sigma\sigma'} \frac{t_{ij}^{(-m)} t_{ji}^{(m)}}{U - m\Omega} \left(\frac{1}{2} \delta_{\sigma'\sigma} + \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\sigma'\sigma} \right) \left(\frac{1}{2} \delta_{\sigma\sigma'} - \hat{\mathbf{S}}_j \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} \right) \quad (227)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{ij} \sum_m \frac{4t_{ij}^{(-m)} t_{ji}^{(m)}}{U - m\Omega} \left(\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j - \frac{1}{4} \right) \quad (228)$$

となり、Heisenberg 模型が得られる。ただし外場の影響を加味したことにより相互作用の強さが変調を受けている。

ここではハーフフィリングの場合を考えたが、正孔をドーブした場合には $\hat{P}_G \hat{T}_{0,m} \hat{P}_G \neq 0$, $\hat{P}_G \hat{n}_i \hat{P}_G \neq 1$ 等の修正が必要になり正孔のホッピング項等がハミルトニアンに加わる。また、引力系の場合は \hat{D} が最大値を取るセクターを考えることになり。この場合は η スピンでハミルトニアンを簡潔な形にまとめることができる。

参考文献

- [1] A. Eckardt: Colloquium: Atomic quantum gases in periodically driven optical lattices, *Rev. Mod. Phys.* **89** 011004 (2017).
- [2] M. S. Rudner and N. H. Lindner: The Floquet Engineer's Handbook, arXiv:2003.08252.
- [3] T. Oka and S. Kitamura: Floquet engineering of quantum materials, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **10** 387 (2019).
- [4] 佐藤正寛 周期駆動非平衡量子系の理論の入門 物性研究・電子版 **10**, 101210 (2022).
- [5] H. Aoki, N. Tsuji, M. Eckstein, M. Kollar, T. Oka, and P. Werner: Nonequilibrium dynamical mean field theory and applications, *Rev. Mod. Phys.* **86** 779 (2014).
- [6] T. Mori: Floquet States in Open Quantum Systems, arXiv:2203.16358.
- [7] T. Oka and L. Bucciantini: Heterodyne Hall effect in a two-dimensional electron gas, *Phys. Rev. B* **94** 155133 (2016).
- [8] H. Sambe: Steady States and Quasienergies of a Quantum-Mechanical System in an Oscillating Field, *Phys. Rev. A* **7** 2203 (1973).
- [9] T. Kitagawa, E. Berg, M. Rudner, and E. Demler: Topological characterization of periodically driven quantum systems, *Phys. Rev. B* **82** 235114 (2010).

- [10] F. Casas, J. A. Oteo, and J. Ros: Floquet theory: exponential perturbative treatment, *J. Phys. A: Math. Gen.* **34** 3379 (2001).
- [11] E. S. Mananga and T. Charpentier: Introduction of the Floquet-Magnus expansion in solid-state nuclear magnetic resonance spectroscopy., *J. Chem. Phys.* **135** 044109 (2011).
- [12] A. Eckardt and E. Anisimovas: High-frequency approximation for periodically driven quantum systems from a Floquet-space perspective, *New J. Phys.* **17** 093039 (2015).
- [13] T. Mikami, S. Kitamura, K. Yasuda, N. Tsuji, T. Oka, and H. Aoki: Brillouin-Wigner theory for high-frequency expansion in periodically driven systems: Application to Floquet topological insulators, *Phys. Rev. B* **93** 144307 (2016). Erratum: **99**, 019902(E) (2019).
- [14] I. Shavitt and L. T. Redmon: Quasidegenerate perturbation theories. A canonical van Vleck formalism and its relationship to other approaches, *The Journal of Chemical Physics* **73** 5711 (1980).
- [15] J. Venkatraman, X. Xiao, R. G. Cortiñas, A. Eickbusch, and M. H. Devoret: Static Effective Hamiltonian of a Rapidly Driven Nonlinear System, *Phys. Rev. Lett.* **129** 100601 (2022).
- [16] 野村健太郎 トポロジカル絶縁体・超伝導体 (丸善出版).
- [17] 齊藤英治, 村上修一 スピン流とトポロジカル絶縁体 (共立出版).
- [18] T. Oka and H. Aoki: Photovoltaic Hall effect in graphene, *Phys. Rev. B* **79** 081406 (2009). Erratum: **79**, 169901(E) (2009).
- [19] T. Kitagawa, T. Oka, A. Brataas, L. Fu, and E. Demler: Transport properties of nonequilibrium systems under the application of light: Photoinduced quantum Hall insulators without Landau levels, *Phys. Rev. B* **84** 235108 (2011).
- [20] M. S. Rudner, N. H. Lindner, E. Berg, and M. Levin: Anomalous Edge States and the Bulk-Edge Correspondence for Periodically Driven Two-Dimensional Systems, *Phys. Rev. X* **3** 031005 (2013).
- [21] R. Roy and F. Harper: Periodic table for Floquet topological insulators, *Phys. Rev. B* **96** 155118 (2017).
- [22] S. Higashikawa, M. Nakagawa, and M. Ueda: Floquet Chiral Magnetic Effect, *Phys. Rev. Lett.* **123** 066403 (2019).
- [23] L. Privitera, A. Russomanno, R. Citro, and G. E. Santoro: Nonadiabatic Break-

- ing of Topological Pumping, *Phys. Rev. Lett.* **120** 106601 (2018).
- [24] D. V. Else, C. Monroe, C. Nayak, and N. Y. Yao: Discrete Time Crystals, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **11** 467 (2020).
- [25] A. Rubio-Abadal, M. Ippoliti, S. Hollerith, D. Wei, J. Rui, S. L. Sondhi, V. Khemani, C. Gross, and I. Bloch: Floquet Prethermalization in a Bose-Hubbard System, *Phys. Rev. X* **10** 021044 (2020).
- [26] 金子和哉, 伊與田英輝, 沙川貴大 量子力学から熱力学第二法則へ 日本物理学会誌 **73**, 361 (2018).
- [27] T. Mori, T. N. Ikeda, E. Kaminishi, and M. Ueda: Thermalization and prethermalization in isolated quantum systems: a theoretical overview, *J. Phys. B* **51** 112001 (2018).
- [28] H. Dehghani and A. Mitra: Occupation probabilities and current densities of bulk and edge states of a Floquet topological insulator, *Phys. Rev. B* **93** 205437 (2016).
- [29] D. W. Hone, R. Ketzmerick, and W. Kohn: Time-dependent Floquet theory and absence of an adiabatic limit, *Phys. Rev. A* **56** 4045 (1997).
- [30] P. Weinberg, M. Bukov, L. D'Alessio, A. Polkovnikov, S. Vajna, and M. Kolodrubetz: Adiabatic perturbation theory and geometry of periodically-driven systems, *Phys. Rep.* **688** 1 (2017).
- [31] T. Morimoto and N. Nagaosa: Topological nature of nonlinear optical effects in solids, *Sci. Adv.* **2** e1501524 (2016).
- [32] 江沢洋 漸近解析入門 (岩波書店).
- [33] T. Mori, T. Kuwahara, and K. Saito: Rigorous Bound on Energy Absorption and Generic Relaxation in Periodically Driven Quantum Systems, *Phys. Rev. Lett.* **116** 120401 (2016).
- [34] T. Kuwahara, T. Mori, and K. Saito: Floquet–Magnus theory and generic transient dynamics in periodically driven many-body quantum systems, *Ann. Phys. (N.Y.)* **367** 96 (2016).
- [35] D. Abanin, W. D. Roeck, W. W. Ho, and F. Huveneers: A Rigorous Theory of Many-Body Prethermalization for Periodically Driven and Closed Quantum Systems, *Commun. Math. Phys.* **354** 809 (2017).
- [36] I. Białynicki-Birula, B. Mielnik, and J. Plebański: Explicit solution of the continuous Baker-Campbell-Hausdorff problem and a new expression for the phase

- operator, *Ann. Phys.* **51** 187 (1969).
- [37] A. Eckardt, C. Weiss, and M. Holthaus: Superfluid-Insulator Transition in a Periodically Driven Optical Lattice, *Phys. Rev. Lett.* **95** 260404 (2005).
- [38] H. Lignier, C. Sias, D. Ciampini, Y. Singh, A. Zenesini, O. Morsch, and E. Arimondo: Dynamical Control of Matter-Wave Tunneling in Periodic Potentials, *Phys. Rev. Lett.* **99** 220403 (2007).
- [39] A. Eckardt, M. Holthaus, H. Lignier, A. Zenesini, D. Ciampini, O. Morsch, and E. Arimondo: Exploring dynamic localization with a Bose-Einstein condensate, *Phys. Rev. A* **79** 013611 (2009).
- [40] N. Tsuji, T. Oka, P. Werner, and H. Aoki: Dynamical band flipping in fermionic lattice systems: An ac-field-driven change of the interaction from repulsive to attractive, *Phys. Rev. Lett.* **106** 236401 (2011).
- [41] N. Tsuji, T. Oka, H. Aoki, and P. Werner: Repulsion-to-attraction transition in correlated electron systems triggered by a monocycle pulse, *Phys. Rev. B* **85** 155124 (2012).
- [42] P. Fazekas: *Lecture notes on electron correlation and magnetism* (World scientific, 1999).
- [43] S. Kitamura, T. Oka, and H. Aoki: Probing and controlling spin chirality in Mott insulators by circularly polarized laser, *Phys. Rev. B* **96** 014406 (2017).
- [44] J. H. Mentink, K. Balzer, and M. Eckstein: Ultrafast and reversible control of the exchange interaction in Mott insulators, *Nat. Commun.* **6** 6708 (2015).
- [45] F. Görg, M. Messer, K. Sandholzer, G. Jotzu, R. Desbuquois, and T. Esslinger: Enhancement and sign change of magnetic correlations in a driven quantum many-body system, *Nature* **553** 481 (2018).
- [46] M. Claassen, H.-C. Jiang, B. Moritz, and T. P. Devereaux: Dynamical time-reversal symmetry breaking and photo-induced chiral spin liquids in frustrated Mott insulators, *Nat. Commun.* **8** 1192 (2017).
- [47] S. Kitamura and H. Aoki: η -pairing superfluid in periodically-driven fermionic Hubbard model with strong attraction, *Phys. Rev. B* **94** 174503 (2016).
- [48] K. Takasan, A. Daido, N. Kawakami, and Y. Yanase: Laser-induced topological superconductivity in cuprate thin films, *Phys. Rev. B* **95** 134508 (2017).
- [49] H. Chono, K. Takasan, and Y. Yanase: Laser-induced topological s -wave superconductivity in bilayer transition metal dichalcogenides, *Phys. Rev. B* **102**

174508 (2020).

- [50] S. Kitamura and H. Aoki: Floquet topological superconductivity induced by chiral many-body interaction, *Commun. Phys.* **5** (2022).
- [51] M. Ogata and H. Fukuyama: The t - J model for the oxide high- T_c superconductors, *Rep. Prog. Phys.* **71** 036501 (2008).