フロッケ理論と量子物質の制御

横浜国大 集中講義 板書ノート

岡 隆史

2　フロッケ理論の骨格

時間に周期的な外場のもとでは，エネルギーは保存しないが，離散的な時間並進対称性が残る．この対称性から，時間発展が「ゆっくりした部分」と「1 周期内の細かい運動」に分かれることを示す．今回の結論は一本の式 $U(t) = P(t)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_F t}$ である．

2.1　設定と規約　〔5 分〕

$\hbar = 1$ とする．ハミルトニアンは周期 T をもつ：

$$H(t+T) = H(t), \qquad \Omega = \frac{2\pi}{T}.$$

時間発展演算子は

$$\mathrm{i}\partial_t \,|\Psi(t)\rangle = H(t)\,|\Psi(t)\rangle\,, \qquad U(t,t_0) = \mathcal{T}\exp\Bigl[-\mathrm{i}\int_{t_0}^{t} H(s)\,ds\Bigr],$$

で，合成則 $U(t,t_0) = U(t,t_1)U(t_1,t_0)$ を満たす．H の周期性から

$$U(t+T,\,t_0+T) = U(t,t_0).$$

以下 $U(t) \equiv U(t,0)$ と書く．

2.2　Floquet の定理　〔10 分〕

1 周期の発展 $U(T)$ はユニタリなので，固有値は絶対値 1 の複素数である：

$$U(T)\,|\alpha\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon_\alpha T}\,|\alpha\rangle\,.$$

実数 ε_α を**擬エネルギー**と呼ぶ．

定理

Schrödinger 方程式の解として，次の形のもの（Floquet 状態）が完全系をなす：

$$\boxed{\,|\Psi_\alpha(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon_\alpha t}\,|u_\alpha(t)\rangle\,, \qquad |u_\alpha(t+T)\rangle = |u_\alpha(t)\rangle\,.\,}$$

証明

$|u_\alpha(t)\rangle \equiv \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon_\alpha t}U(t)\,|\alpha\rangle$ と定義する．$U(t+T) = U(t+T,T)\,U(T) = U(t)\,U(T)$ を使うと

$$|u_\alpha(t+T)\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon_\alpha (t+T)}U(t)\,U(T)\,|\alpha\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon_\alpha t}U(t)\,|\alpha\rangle = |u_\alpha(t)\rangle\,.$$

一般解

$\{|\alpha\rangle\}$ は完全系なので，任意の初期状態について

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_\alpha c_\alpha\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon_\alpha t}\,|u_\alpha(t)\rangle\,, \qquad c_\alpha = \langle\alpha|\Psi(0)\rangle\,.$$

係数 c_α は時間に依らない．Floquet 状態は，周期駆動系における「定常状態」の役割を果たす．

Bloch の定理との対応

	結晶（空間）	周期駆動（時間）
対称性	$x \to x + a$	$t \to t + T$
固有状態	$\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}u_k(x)$	$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon t}u(t)$
保存量	結晶運動量 k	擬エネルギー ε
同一視	$k \sim k + 2\pi/a$	$\varepsilon \sim \varepsilon + \Omega$
基本領域	Brillouin ゾーン	$-\Omega/2 < \varepsilon \le \Omega/2$

$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon T}$ だけが決まるので，ε は Ω の整数倍の不定性をもつ．

エネルギー保存は「擬エネルギーが Ω を法として保存する」に弱まる．系は外場と Ω の整数倍のエネルギー（光子）をやりとりできる．

2.3 ストロボ的発展とミクロモーション

〔15 分〕

定義

$$H_F \equiv \frac{\mathrm{i}}{T}\log U(T) = \sum_\alpha \varepsilon_\alpha \,|\alpha\rangle\langle\alpha|\,, \qquad P(t) \equiv U(t)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_F t} = \sum_\alpha |u_\alpha(t)\rangle\langle\alpha|\,.$$

H_F を **Floquet ハミルトニアン**と呼ぶ．Floquet の定理は次のように言い換えられる：

$$\boxed{U(t) = P(t)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_F t}, \qquad P(t+T) = P(t), \quad P(0) = 1.}$$

- $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_F t}$：時刻 $t = nT$ だけで見た発展（**ストロボ的発展**）．$U(nT) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_F nT}$ で，時間に依らないハミルトニアン H_F による発展と区別がつかない．
- $P(t)$：1 周期の中の運動（**ミクロモーション**）．$t = nT$ では見えない．

二つの任意性

1. **対数の分岐**．$\varepsilon_\alpha \to \varepsilon_\alpha + n_\alpha\Omega$ としても $U(T)$ は変わらない．H_F を決めるには，擬エネルギーをどの区間にとるか（分岐切断をどこに置くか）を決める必要がある．このとき $P(t)$ も変わる．
2. **時刻の原点**．t_0 から始めると $H_F[t_0] = P(t_0)H_F P(t_0)^\dagger$．スペクトルは同じで，基底が違う．原点に依らない書き方は

$$U(t, t_0) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}K(t)}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_{\mathrm{eff}}(t-t_0)}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}K(t_0)}, \qquad K(t+T) = K(t).$$

H_{eff} を有効ハミルトニアン，$K(t)$ をキック演算子と呼ぶ（次回）．

任意性 1 は平衡系にはない．「分岐をどこに置くか」が，第 5 回の異常フロッケ相で主役になる．

2.4　最も簡単な例：AC 電場中の自由電子　〔10 分〕

電荷を $\boldsymbol{A}$ に含めて $H(t) = (\boldsymbol{p} + \boldsymbol{A}(t))^2/2m$ とする．円偏光 $\boldsymbol{A}(t) = A(\cos\Omega t, \sin\Omega t)$ を考える．$\boldsymbol{p}$ は保存し，異なる時刻の $H(t)$ は可換なので

$$U(t) = \exp\Big[-\mathrm{i}\int_0^t \frac{(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{A}(s))^2}{2m}ds\Big] = \underbrace{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\xi}(t)}}_{P(t)} \exp\Big[-\mathrm{i}\Big(\underbrace{\frac{p^2}{2m}+\frac{A^2}{2m}}_{H_F}\Big)t\Big],$$

$$\boldsymbol{\xi}(t) = \frac{1}{m}\int_0^t \boldsymbol{A}(s)\,ds = \rho\,(\sin\Omega t,\ 1-\cos\Omega t), \qquad \rho = \frac{A}{m\Omega}.$$

- $P(t)$ は $\boldsymbol{\xi}(t)$ だけの並進である．波束の重心は $\langle \boldsymbol{x}\rangle(t) = \boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{p}t/m + \boldsymbol{\xi}(t)$：等速運動に半径 ρ の円運動が重なる．
- H_F は自由粒子に定数 $A^2/2m$ が加わっただけ．
- 重心は 1 周期に向きのついた面積 $\pi\rho^2$ を囲む．時間平均の軌道磁気モーメントは $\frac{1}{2}\overline{(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v})_z} = \pi\rho^2/T$，すなわち（面積）$/T$ である．
- 直線偏光 $\boldsymbol{A} = A\sin\Omega t\,\hat{\boldsymbol{x}}$ なら $\xi_x = \rho(1-\cos\Omega t)$ の往復運動で，面積は 0．このとき $H_F = p^2/2m + A^2/4m$．定数 $A^2/4m$ は震え運動の平均運動エネルギー（ポンデロモーティブエネルギー）である．



円偏光　　直線偏光（面積 0）

自由粒子では，ミクロモーションは H_F に定数しか残さない．H_F が本質的に変わるのは，(a) 格子（分散が放物線でない），(b) 内部自由度（スピン・副格子）がある場合である（次回）．「ミクロモーションの面積」は第 5 回に再登場する．

2.5　Sambe 空間　〔15 分〕

$|u_\alpha(t)\rangle$ は周期関数なので Fourier 展開できる．$H(t)$ も同様：

$$H(t) = \sum_m H_m\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\Omega t}, \qquad |u_\alpha(t)\rangle = \sum_m \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\Omega t}\,|u_\alpha^m\rangle\,.$$

$|\Psi_\alpha\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon_\alpha t}\,|u_\alpha(t)\rangle$ を Schrödinger 方程式に代入すると $[H(t) - \mathrm{i}\partial_t]\,|u_\alpha(t)\rangle = \varepsilon_\alpha\,|u_\alpha(t)\rangle$．各 Fourier 成分について

$$\boxed{\sum_n \big(H_{m-n} - m\Omega\,\delta_{mn}\big)\,|u_\alpha^n\rangle = \varepsilon_\alpha\,|u_\alpha^m\rangle\,.}$$

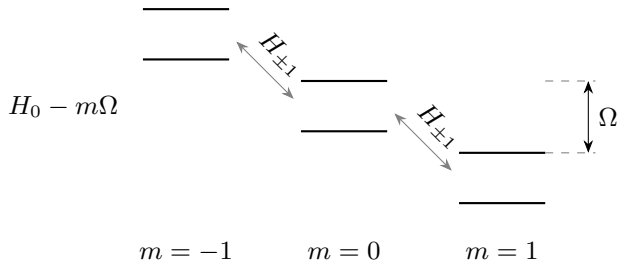
時間に依存する問題が，時間に依らない固有値問題になった．行列で書くと（行 m，列 n）

$$\begin{pmatrix} \ddots & & & & \\ & H_0+\Omega & H_{-1} & H_{-2} & \\ & H_1 & H_0 & H_{-1} & \\ & H_2 & H_1 & H_0-\Omega & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ u^{-1} \\ u^0 \\ u^1 \\ \vdots \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \vdots \\ u^{-1} \\ u^0 \\ u^1 \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

元の Hilbert 空間に Fourier 添字 m を加えた空間を **Sambe 空間**と呼ぶ.

描像：1 次元高い格子

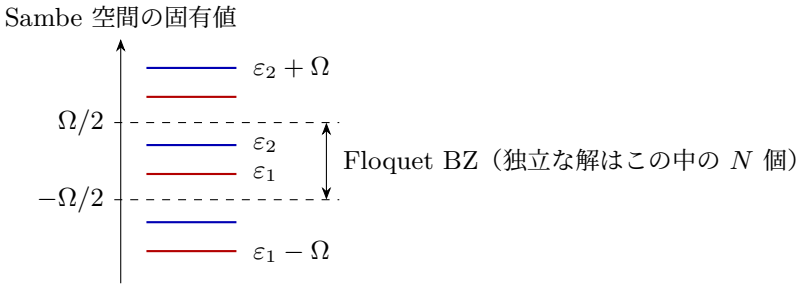
- m は「吸収した光子の数」. これを座標とみなすと，m は新しい方向の格子点である.
- 対角の $-m\Omega$ は，m 方向の一様な静電場（傾いたポテンシャル）.
- $H_{\pm 1}$ は隣の層へのホッピング（1 光子の吸収・放出），$H_{\pm 2}$ は次近接.



D 次元の周期駆動系 = 静電場のかかった $D{+}1$ 次元の静的な系. m 方向は「合成次元」である（第 6 回の地図の最初の列）.

冗長性

$(\varepsilon, \{u^m\})$ が解なら，$(\varepsilon + n\Omega, \{u^{m+n}\})$ も解で，同じ物理的状態 $|\Psi(t)\rangle$ を表す. Sambe 空間のスペクトルは，同じものが Ω ごとに繰り返す. 独立なのは 1 つの Floquet BZ の中だけである. 数値計算では，$|m| \le M$ で打ち切った行列を対角化し，中央付近の固有値を採用する.



内積

Sambe 空間の内積は 1 周期の平均：$\langle\langle u|v\rangle\rangle = \frac{1}{T}\int_0^T dt\, \langle u(t)|v(t)\rangle = \sum_m \langle u^m|v^m\rangle$.

2.6　擬エネルギーの中身　〔10 分〕

$[H - \mathrm{i}\partial_t]\,|u_\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha\,|u_\alpha\rangle$ に $\langle u_\alpha|$ を掛けて 1 周期で平均する：

$$\varepsilon_\alpha = \underbrace{\frac{1}{T}\int_0^T dt\, \langle u_\alpha(t)|H(t)|u_\alpha(t)\rangle}_{\text{平均エネルギー}} - \underbrace{\frac{1}{T}\int_0^T dt\, \langle u_\alpha|\mathrm{i}\partial_t|u_\alpha\rangle}_{\gamma_\alpha\ (\text{幾何学的位相})} \quad (\mathrm{mod}\ \Omega).$$

γ_α は Aharonov–Anandan 位相（断熱でない場合の Berry 位相）である. 擬エネルギーは，動的位相と，状態が 1 周期で描く閉じた経路の幾何学的位相からなる.

Hellmann–Feynman の定理

パラメータ λ に対して

$$\frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial \lambda} = \frac{1}{T}\int_0^T dt\ \langle u_\alpha(t)|\frac{\partial H}{\partial \lambda}|u_\alpha(t)\rangle\,.$$

特に $\lambda = k$（波数）なら，$\partial\varepsilon_\alpha/\partial k$ は 1 周期で平均した速度である（第 4 回で使う）．

物理量

Floquet 状態での期待値は周期的である：$\langle\Psi_\alpha(t)|O|\Psi_\alpha(t)\rangle = \langle u_\alpha(t)|O|u_\alpha(t)\rangle = \sum_m O_m \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\Omega t}$．$m=0$ が時間平均，$m\neq 0$ が外場の高調波での応答（高次高調波発生など）を与える．

2.7　例：回転磁場中のスピンと共鳴　〔15 分〕

$$H(t) = \frac{B_z}{2}\sigma_z + \frac{B_\perp}{2}\big(\sigma_x\cos\Omega t + \sigma_y \sin\Omega t\big).$$

一般に，時間に依存するユニタリ変換 $|\Psi\rangle = R(t)\left|\tilde\Psi\right\rangle$ を行うと，$\left|\tilde\Psi\right\rangle$ は

$$\tilde H = R^\dagger H R - \mathrm{i}R^\dagger\partial_t R$$

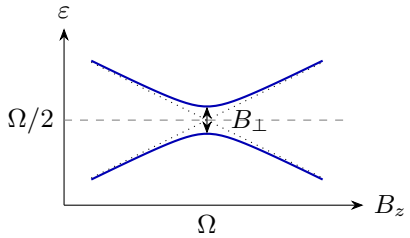
に従う．磁場と一緒に回る座標系 $R(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Omega t\sigma_z/2}$ に移ると，ハミルトニアンは時間に依らない：

$$\tilde H = \frac{B_z-\Omega}{2}\sigma_z + \frac{B_\perp}{2}\sigma_x.$$

$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Omega t\sigma_z/2}$ は周期 $2T$ なので，T 周期になるよう位相を付け替えると

$$P(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Omega t(\sigma_z-1)/2},\qquad H_F = \tilde H + \frac{\Omega}{2},\qquad \varepsilon_\pm = \frac{\Omega}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{(B_z-\Omega)^2 + B_\perp^2}.$$

- 共鳴 $\Omega = B_z$ で $\varepsilon_\pm = \Omega/2 \pm B_\perp/2$．Floquet BZ の**境界** $\Omega/2$ に，幅 $B_\perp$ のギャップが開く．
- Sambe 空間では $H_1 = \frac{B_\perp}{2}\sigma_+$，$H_{-1} = \frac{B_\perp}{2}\sigma_-$．結合するのは $(\uparrow, m)$ と $(\downarrow, m-1)$ の組だけで，行列は 2×2 のブロックに分かれる．この二つの準位は $B_z = \Omega$ で交差し，$H_{\pm 1}$ が準位反発を起こす．
- Rabi 振動は，二つの Floquet 状態の重ね合わせのうなり（振動数 $\varepsilon_+ - \varepsilon_-$）である．



擬エネルギーの中身を確かめる

Floquet 状態 $|u_+(t)\rangle = P(t)\,|+\rangle$ では，スピンは z 軸から角度 ϑ（$\tan\vartheta = B_\perp/(B_z-\Omega)$）傾いた円錐の上を，磁場と同期して回る．

$$\gamma_+ = \int_0^T dt\ \langle u_+|\mathrm{i}\partial_t|u_+\rangle = -\pi(1-\cos\vartheta) = -\frac{(\text{円錐の立体角})}{2},\qquad \overline{E}_+ = \frac{B_z\cos\vartheta + B_\perp\sin\vartheta}{2}.$$

$\varepsilon_+ = \overline{E}_+ - \gamma_+/T$ は上の結果に一致する．共鳴（$\vartheta = \pi/2$）では $\gamma_+ = -\pi$ で，擬エネルギーの $\Omega/2$ は幾何学的位相 π そのものである．

外場の入れ方

初期状態を $|\uparrow\rangle$ とする．

- **突然入れる**：$c_\pm = \langle \pm|\uparrow\rangle$．共鳴では $|c_\pm|^2 = 1/2$ で，二つの Floquet 状態が等しく混ざる．$\langle\sigma_z\rangle$ は振動数 $B_\perp$ で振動する．
- **ゆっくり入れる**（共鳴から離れて）：状態は一つの Floquet 状態に断熱的に乗り移り，うなりは起きない．

どの Floquet 状態が占有されるかは，外場の入れ方で決まる．断熱的な追従は，擬エネルギーの準位が交差する点（共鳴）で破れる．

直線偏光の場合

［省略可］ $H' = B_\perp \sigma_x \cos\Omega t$ では $H_{\pm 1} = \frac{B_\perp}{2}\sigma_x$ で，$(\uparrow, m)$ は $(\downarrow, m-1)$ だけでなく $(\downarrow, m+1)$ とも結合する（逆回転項）．ブロックは閉じず，厳密には解けない．共鳴位置のずれ（Bloch–Siegert シフト）や，$B_z \simeq 3\Omega, 5\Omega, \ldots$ での多光子共鳴が現れる．

2.8 空間にも周期的な場合：Floquet–Bloch 状態 〔5 分〕

格子上の粒子に空間的に一様な外場をかけると，波数 $\boldsymbol{k}$ は保存する．各 $\boldsymbol{k}$ で $H(\boldsymbol{k}, t)$ に Floquet の定理を使うと

$$\psi_{\alpha\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}, t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} - \varepsilon_\alpha(\boldsymbol{k})t)}\, u_{\alpha\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}, t),$$

u は空間と時間の両方について周期的である．$\varepsilon_\alpha(\boldsymbol{k})$ を **Floquet–Bloch バンド**と呼ぶ．

平衡系のバンド $E(\boldsymbol{k})$ は，$\boldsymbol{k}$ については周期的だが E は実数直線上にある．Floquet–Bloch バンドは $\boldsymbol{k}$ と ε の**両方が周期的**である．この違いが第 4 回の出発点になる．

2.9 まとめ 〔5 分〕

- 周期駆動系の発展は $U(t) = P(t)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_F t}$ と分解できる．H_F はストロボ的発展，$P(t)$ はミクロモーションを表す．
- 擬エネルギーは Ω を法として定義され，Floquet BZ をなす．共鳴は BZ の境界でのギャップとして現れる．
- Sambe 空間では，周期駆動系は 1 次元高い格子上の静的な問題になる．

注意：Floquet 状態は時間発展の**基底**である．実際にどの Floquet 状態がどれだけ占有されるかは，初期状態・外場の入れ方・環境との結合で決まる別の問題である（第 6 回）．