

物性物理における保存則

東京大学大学院理学系研究科 青木秀夫

1 対称性と保存則

物性物理学においても、保存量は基本的な要素である。ここでは、思いつくままに、

- 連続対称性に由来する保存則
- 離散的対称性に由来する保存則
- トポロジカル保存量

といった項目を並べながら、議論してみよう。この並びからもすぐ分かるように、保存則という対句のように出てくるのは対称性である。これは、「対称性があれば、それに付随した保存量がある」という基本的な定理に他ならない。この定理をはっきりとした形で（つまり、場の理論のコンテキストで）最初に定式化したのはネター (Emmy Noether ; 図 1) である [1]。彼女 [2] は、ゴードンが育てた唯一の博士である。[ゴードン (Paul Gordan) は代数関数論や不変式論で有名な数学者だが、物理学者には Clebsch-Gordan 係数で馴染み深い。] ネターの数学の才能は、早くからドイツ数学界の認めるところであった。実際、ヒルベルトに招かれて 1915 年にゲッチンゲンに行ったが、ドイツで大学教官になるには *habilitation* と呼ばれる資格をとらなければならない。当時のドイツでは女性に博士号はやっと許された頃であったが、*habilitation* には門前払いを食わせていた。ヒルベルトが学部（当時自然科学は哲学部所属）と喧嘩して、4 年後にやっとネターへの資格を認めさせた。その 3 年後に彼女が実際に手にした職名は *außerordentlicher Professor*。Außerordentlich (=extraordinary) とは、非凡な、番外のなどの意だが、当局はどうやら後者のニュアンスで使ったようで、そのためゲッチンゲンでは、非凡教授は普通でなく、普通教授は非凡でない、という揶揄が流布したという。それはともかく、彼女がゲッチンゲンで最初にした仕事は、今ではネターの定理といわれている非凡なものである。

この定理を正確にいうと、「作用が、或る連続変換に対して不変ならば、これに付随した保存量が存在する」。これにより、エネルギー（関連する変換は時間の並進）、運動量（空間の並進）、角運動量（空間の回転）、電荷（ゲージ変換）などの保存則が出てくるのは、「数理科学」の読者なら、いう



図 1: ネター (Emmy Noether; 1882-1935)。

までもないであろう。ここで大事なのは、“連続変換”ということである。その場合には、「無限小変換」が存在して、これが変換のジェネレーターとなり、ネターの定理の証明もこれを利用する。ちなみにファインマン (Feynman) も、量子力学の新しい定式化を模索していた頃、先ず、ネターの定理を、(彼らしく) その存在を知らずに自分で導いたり、彼の「経路に互る和」による表現において、保存量と思っていた量が経路に依存する場合はどうになってしまうのだろうか、と悩んだという [3]。学生諸君は、自分で悩んでみるのも一興であろう [4]。

物性物理においても、保存則は至るところで出発点となる。統計力学において保存則が一つ興味深い形で顔を出すところがある。統計力学で必ず習う「エルゴード定理」に関してである。この定理は、物理量の時間平均は位相空間における平均と等価であるということを主張し、イメージとしては系の時間発展を十分長く追いかければ、位相空間を隈なく覆うであろう、というものである。これは普通は成立するが、追跡する物理量が保存量と関わっていると、破れることがある。つまり、保存量は定義からして運動の定数だから、これに関わる量を追跡すれば、位相空間で別のセクターに飛び移りようがない。数学的には、考えている系が保存量 $\{C_i\}$ をもつとき、物理量 A が、線形応答理論でいう孤立感受率と等温感受率が等しいという意味でエルゴード的であるためには、全ての $\{C_i\}$ に対して $\langle (A - \langle A \rangle) C_i \rangle = 0$ を要することが知られている [5]。

2 保存近似

物理の問題は一般には厳密に解けないので、近似法が重要になるが、近似法を構成するときの一つの大事な指針となるのが、「保存則を崩さないような近似（保存近似）」ということである。つまり、近似したせいで保存則が壊れてしまったら、いろいろ不都合なことが出てくる。物性でも保存近似は大事である。典型的な例は、相互作用する電子系（電子気体）という多体問題に現れる。電子気体の問題は、電子が互いに避けあう「電子相関」の効果をいかに扱うか、という難問である。物性物理の一つの究極の問題であり、ゲルマンとブリュックナー (Gell-Mann-Brueckner)、澤田などに始まる長い歴史をもっている。一つの正攻法は、ファインマン・ダイアグラムを足して行くことであるが、この無限和は勿論近似無しには実行できない。しかし、不用意に近似をすると普通は全運動量保存などの保存則が破れてしまう。これに注意したのがベイムとカダノフ (Baym-Kadanoff) の保存近似である [6]。具体的には、先ず、ラッティンジャーとウォード (Luttinger-Ward) のポテンシャル Ω という、閉じた図形を描く一連のファインマン・ダイアグラム (図2) に対応する汎関数を構成する。これをグリーン関数で汎関数微分すると図形が切り開かれ、自己エネルギー Σ に対応するダイアグラムとなることを利用する。このような過程を経ると、たとえ Ω に近似を導入しても、汎関数微分から求めた Σ を用いれば、全運動量保存が自動的に満たされる、というのがベイム・カダノフ法の味噌である。

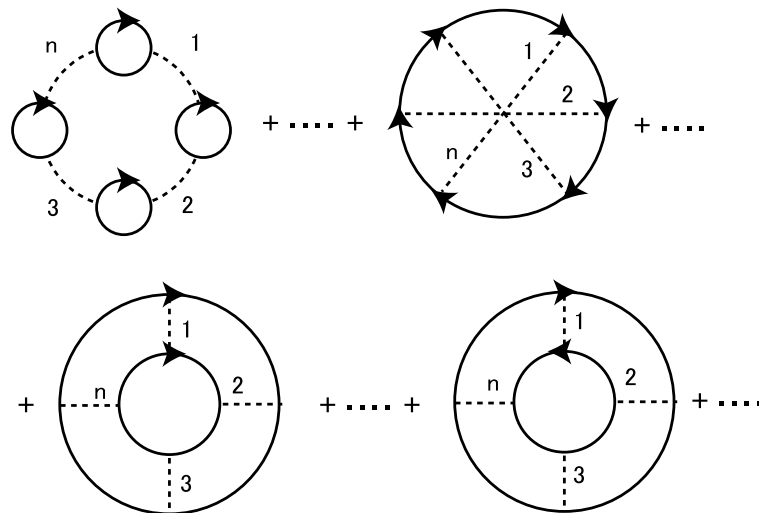


図 2: ラッティンジャーとウォード (Luttinger-Ward) のポテンシャル Ω を表す一連のファインマン・ダイアグラム。実線はグリーン関数、点線は相互作用線。

3 近似的対称性と保存則

対称性が破れたらどうなるだろうか。対称性が何らかの理由で（外場により、あるいは相転移において自発的に）破れれば、それに付随する保存量も勿論保存量でなくなる。そのときに、保存量は全く意味を失うであろうか。これはケースバイケースであり、一般論は難しいであろうから、ここでは一例を挙げてみよう。半導体の界面に電子を閉じ込めることができ、2次元電子系と呼ばれる。さらに電子を円形の有限領域に閉じ込めたものが、量子ドットといわれるものである。ドットが完全に円形の場合は、軸対称性が保たれているから、角運動量は保存量である。電子と電子の間のクーロン相互作用を考えても、全角運動量は保存されることに変わりはない。このように、全角運動量は良い量子数であるが、それがどのような値をとるかは別問題である。電子間斥力が（運動エネルギーに比べて）強い場合には、電子は互いに強く避けあい、マクシム (Maksym) 等が「電子分子」と呼ぶ、電子結晶のかけらのような状態となる。電子相関は、外部磁場を加えたときにさらに強くなる。このときに、電子分子の対称性（群論的には点群）と、電子がフェルミオンであるためのパウリの排他律を両立させるために、量子数には強い制限が課せられる。特に全角運動量は「魔法数」とよばれる特別な値をとる [7]。これは、原子核物理からの用語であるが、より詳しくは原子核における高角運動量状態 (yrast spectrum) に対応している。

現実のドットは完全な円ではない。そのとき、上記の性質は直ちに失われるであろうか。具体系に、マクシムに従いドットを円から楕円に変えてみよう [8]。先ず円の場合は、軸対称な調和ポテンシャル $[V = \frac{m^*}{2}\omega^2(x^2 + y^2)]$ に閉じ込められた電子の磁場中での量子力学的運動は、1920年代にフォックとダーウィン (Fock-Darwin) により解かれており、エネルギーは磁場の関数として図 3(a) のようになる。弱磁場では、軌道ゼーマン効果により縮退が解け、強磁場ではランダウ準位に束ねられて行く。これを楕円型閉じ込め $[V = \frac{m^*}{2}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2)]$ にすると、ゼロ磁場から既に縮退は解けている（図 3(b)；面白いことに有限磁場での縮退列は残るが、今の話題からは外れる）。これに電子を放り込み、電子間斥力を考えると、角運動量はもはや良い量子数ではないのにもかかわらず、「魔法数」は残る。そんなことが何故分かるかということ、基底状態における全スピンというのは（系が軸対称であろうがなかろうが）定義できる。円形ドット中の電子分子では角運動量の魔法数と全スピンは（やはり電子分子の点群とパウリ原理の相乗効果で）連動し、このためスピンも魔法数を持ち、磁場を変えると或る魔法数スピンから別の魔法数スピンの遷移する。この遷移が、楕円ドットでも、円形の場合とあまり変わらない位置に見えるのである（図 3(c)）。物理的には、ポテンシャルを楕円にしたときの摂動は $\propto (1 + \cos 2\theta)$ なので、角運動量を $0, \pm 2$ 変える行列要素をもつ。一方、例えば3電子からなる電子分子の例においては磁場の変化に伴う角運動量魔法数変化は $1, 3$ であることが示せるので、楕円にしても魔法数に影響しない。このように、群論の詳細に依るので、ケースバイケースといった

訳である。

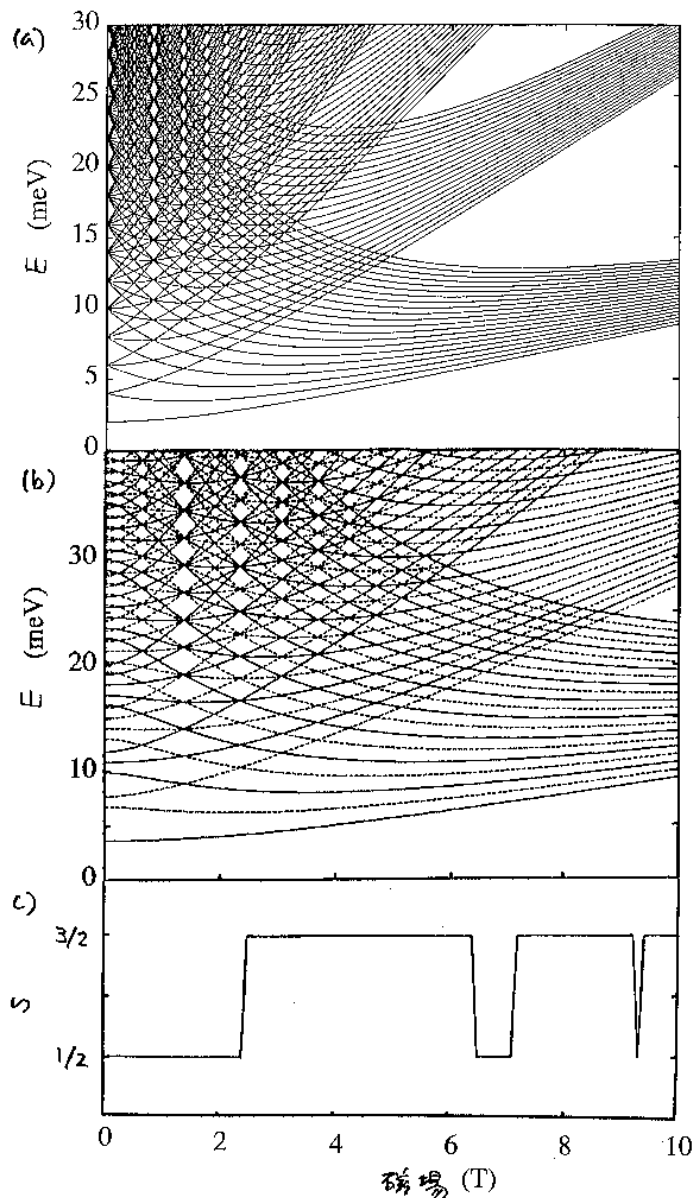


図 3: (a) 2次元調和ポテンシャルに閉じ込められた2次元電子の磁場中での量子力学的エネルギー準位 [フォック・ダーウィン (Fock-Darwin) 状態] を、磁場の関数として示す。
 (b) 楕円型閉じ込めに対する同様の図 ($\hbar\omega_x = \sqrt{17}$ meV, $\hbar\omega_y = \sqrt{10}$ meV) [8]。

4 隠れた対称性と保存量

模型によっては、時間・空間の並進、空間回転など、直感的に自明な変換だけでなく、一寸見ただけでは分からないような変換に対する対称性と、それに伴う保存量をもつ場合がある。すぐ思いつく例は、古典力学で既に存在する。ケプラー問題、つまり $1/r$ に比例する引力ポテンシャル中の粒子の問題である。この場合、中心力ポテンシャルでは常に保存する角運動量 L の他に、Runge-Lenz ベク

トルと呼ばれる $A = \mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{r}/r$ が保存する。この余分な保存量があるために、中心力ポテンシャル中の軌道は束縛軌道といえども一般には閉じないのに対して、ケプラー問題では常に閉じる（楕円軌道の長軸の方向が動かない）。このような自明でない対称性は、時間・空間に内在するものではなく、力学量に関するものであることから、ダイナミカルな対称性と呼ばれることがある。量子力学に行くとうどうだろうか。つまり、水素原子の問題に他ならない。1920年代にパウリが示したように、演算子 $A = \frac{1}{2}(\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{p}) - \mathbf{r}/r$ を定義すれば、やはりハミルトニアンと交換し、保存量となる。これが、水素のエネルギー準位が「偶然縮退」する（主量子数のみに依存し、角運動量の大きさに依らない）理由であるが、縮退が偶然なのではなく、余分な保存量があることが偶然というべきである。それでは、逆にこの保存量をもたらした（一寸見ただけでは分からない）対称性は何なのだろうか。 L の各成分は非可換でありリー代数を構成することは角運動量の量子力学で必ず学ぶが、 A の各成分も非可換であり、面倒だが初等的に確かめられるように、 L と共に別のリー代数を構成する。従って、これを規定する代数は $SU(2) \times SU(2) \sim SO(4)$ という、ダイナミカルな対称性にふさわしい抽象的な対称性になる [9]。隠れた対称性には、この他様々なものがあり、量子ホール系における隠れた対称性 [10] というエキゾチックな（しかし、数学的には、ランダウ量子化が調和振動子の問題と同形ということに関連している）ものもある。

さらに数理科学的に著しい例は、「自由度の数だけの保存量」がある、という厳密可解模型であろう。これは、数理科学「物性論とその数理」特集号 [11] のテーマの一つにもなった。1次元多体系は、或る [ヤン・バクスター (Yang-Baxter) と呼ばれる] 条件が満たされると、ベータ仮説解と呼ばれる厳密解が可能となり、この場合には、自由度の数だけの、独立に保存する（つまり互いに可換な）量が存在する（勿論全エネルギーと全運動量も保存するが、これら以外に、という意味）。このために、微分方程式論でいう可積分の場合になる。

ここで多数保存している量の直感像は何だろうか。これは易しく云うのは少々難しいが、荒っぽくは、（電荷とスピンに関する）運動量のようなもの (rapidity という名がついている) である。簡単のために粒子間相互作用が接触したときにのみ働くような短距離力だとしよう。すると、衝突と衝突の間は自由な平面波のように伝播するだろうが、粒子達が様々な散乱をした後で、粒子達の波数がぐちゃぐちゃになってしまえば、どうやって解いたらよいか分からない（数学的にいえば、多体の散乱は一般には2体の散乱の位相のズレを順次掛けたような単純なものでは表せない）。ところが、ヤン・バクスター条件が満たされていると、位相のズレは逐次2体散乱として表せる。厳密可解模型で有名なサザーランド (Sutherland) は、大変良い講義録を著している [12] が、彼はその中でここの事情を、散乱が non-diffractive（回折が無い）という言葉で表現している。回折がないとは、波の伝播が、光でいえば射線を追ったものと同じになるような、という意味である。すると運動量のような

もの (rapidity) が多体系でも定義される。

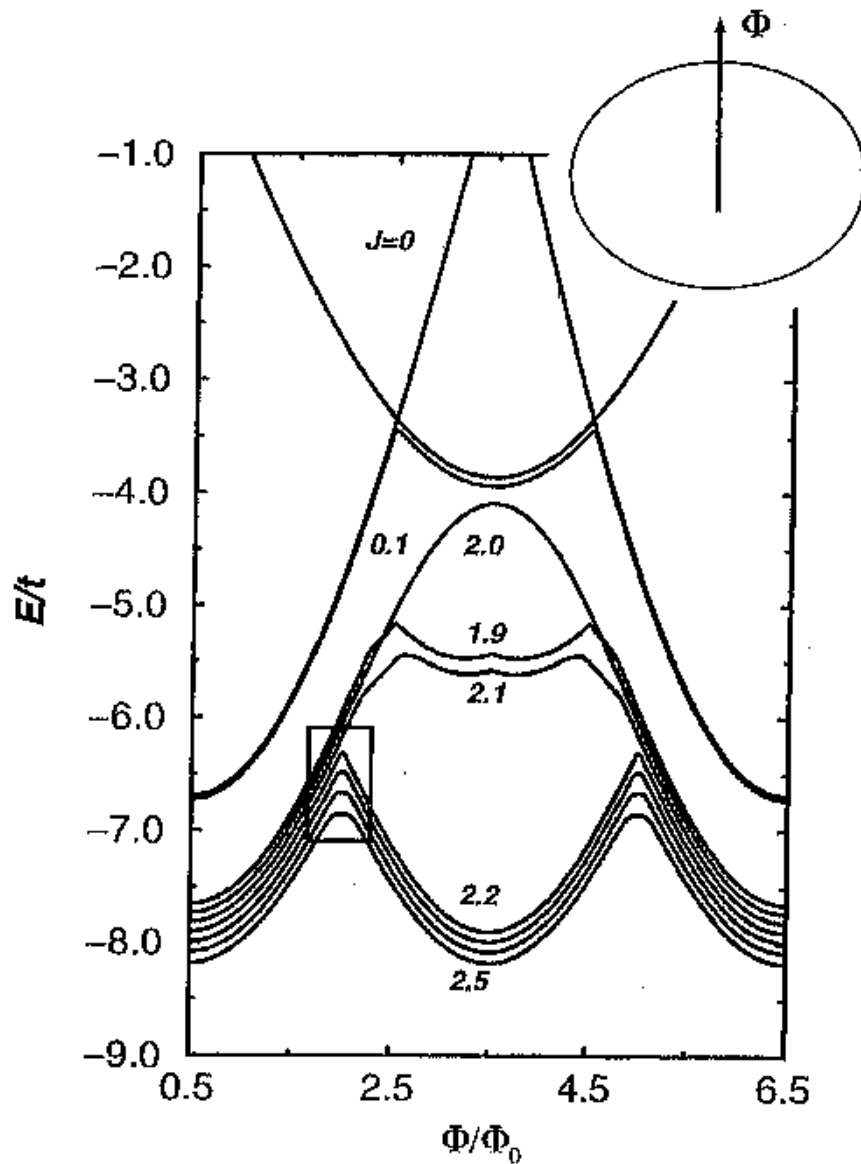


図 4: 斥力相互作用する 1 次元電子系 (tJ 模型) に対する、エネルギー準位の AB 磁束依存性を、様々な J/t の値に対してプロット [14]。

では、これらの保存量に伴う対称性は何か。これは、 $SU(2)$ (リー代数) を一般化したような、「量子群」といわれるもので規定される対称性で、やはりひどく抽象的なものである。その詳細は文献 [11, 13] 等を参照していただくとして、具体的にエネルギー準位の例を図 4 で見てみよう [14]。普通の場合は、或る系のエネルギー準位を沢山取り上げて、系を規定する何らかのパラメータを変えてプロットすると、準位はパラメータに依存する (断熱準位と呼ばれるものになる) から、沢山の線が入り乱れたプロット (所謂スパゲッティ) となる。しかし、量子力学の「準位交差」の節で習うように、一般には、或る準位と別の準位の交差点では、これらの 2 状態を結ぶ行列要素がゼロでないか

ら、準位は跳ね合う。これを anticrossing と呼ぶ。従って、スパゲッティは良く見ればよけ合っている。跳ね合わずに本当に交差するのは、行列要素がゼロという特殊な場合のみであるが、2 状態が異なる量子数をもっていればこのようなことはあり得る。自由度の数だけの保存量をもつ可積分模型では、このようなことが頻繁に起きるので、この場合のスパゲッティは交差点を沢山もつ。

図 4 では、強く斥力相互作用する代表的な電子模型に対して、スパゲッティの全体ではなく、一番下の線（基底状態から出発する線）を克明に追いかけたものである。克明という意味は、anticrossing があれば勿論跳ね合った線に従い、交差があればそれを突き抜けて追う。よって、一般には頻繁に跳ね合いながらひどくギザギザした線になろうし、保存量が沢山ある場合では交差を突き抜けて行くので滑らかな線になろう。図 4 で採用した電子模型は tJ 模型と呼ばれるもので、電子が t の確率で隣の原子に跳び移り（但しどの原子にも電子はたかだか一個しか来られないという強い制限つきで）、電子間には J だけの交換相互作用が働く、という模型である [15]。この模型は、 $J = 0$ の極限（この場合もどの原子にも電子が 2 個来られないという強い制限はついたままなので、多体問題である）では、ハバード模型と呼ばれるもので相互作用を無限大にした場合の有効模型になり、1 次元鎖の場合には可積分である。また、 $J = 2t$ という一点では、超対称性というものをもつので、この場合も可積分となる。従って、 J を連続的に変えていったときに、準位は $J = 0, 2t$ の場合は滑らかに、それ以外はギザギザになることが期待されるが、図は実際にそうなっている。ちなみに、この図で横軸（系を規定するパラメータ）は何かというと、1 次元系に対して周期的境界条件を課す際に、境界でつなぐときに位相をひねることにする。これは、1 次元系を輪と思ったときには、その中に AB 効果をもたらすような磁束を通したと思ってよく（図の添図）、横軸はその磁束の大きさに対応する。

ちなみに、このような斥力相互作用模型においても、超伝導状態が出現し得るが、この場合、磁束の量子化がどうなるか、という面白い問題がある。特に、上記の断熱準位の振舞いから、超伝導ペアリングが検出できるか（つまり rapidity に何が起きるのか）ということについて興味がある方は、原論文 [14] を参照していただきたい。

この様な可積分系の元祖であるベータ仮説（実は厳密解）は、ベータ (Hans Bethe) が 1931 年に提唱したものである。1906 年生まれのベータは、原子核の理論が本職であるが、何と今も現役 (!) で仕事をしている由である。ベータ仮説は、アルザス・ローヌ生まれの彼が、ナチスのためにアメリカに頭脳流出せねばならなかった直前の仕事である。ネターが habilitation をとった約十年後にミュンヘンで、ゾンマーフェルトの元で PhD を取った後の頃である。

5 離散対称性と保存則 — ブロッホ定理

ネーターの定理で大事なものは、“連続変換”ということであった。それでは、系に存在する対称性が離散的対称性のときはどうなるのだろうか。離散対称性としては、C（電荷共役）、P（空間反転）、T（時間反転）が思い浮かぶが、物性物理としては結晶における対称性が先ず思い浮かぶ。つまり、結晶では連続的な並進対称性は破れ、結晶の格子間隔の整数倍、といった離散的な並進についてのみ系は不変である。また、特定の回転に対しても不変となり得る。これに伴い、結晶を規定する群は、点群や空間群となる。点群は一転を不動に保つ対称操作に関するもので、有限の分子にも適用される。空間群は無限結晶に関するものである。結晶に電子を放したときの量子力学の問題（シュレディンガー方程式の解で空間群と両立するものは何か）という問題はブロッホ（Bloch；図5）により、1929年に解かれた。離散対称性に関する定理という点で意味深い定理である。これは、彼がライプチヒのハイゼンベルクのもとでPhDを取った後のことである。奇しくも、ブロッホもナチスのためにアメリカ流出を余儀なくされた一人であった [16]。



図 5: ブロッホ (Felix Bloch; 1905-1983) (Nobel Foundation より許可を得て転載)。

出発点はやはり、系に何らかの対称性があれば、固有波動関数 Ψ はその対称群の既約表現をとる、という量子力学の基本的性質である。このことから、単純に「周期ポテンシャル中では波動関数も同じ周期をもった周期関数である」とは云えず、実は、波動関数 Ψ の位相まで考える必要があるという点が鍵である。具体的に見てみよう。結晶では、或る原子位置を別の原子位置に l だけ並行移動させる並進操作に対して系は不変だから、ハミルトニアン H は、この並進操作を \hat{T}_l として

$$[H, \hat{T}_l] = 0$$

となり、 H と \hat{T}_l は同時対角化可能となる。つまり、 Ψ は

$$\hat{T}_l \Psi(\mathbf{r}) \equiv \Psi(\mathbf{r} + \mathbf{l}) = \lambda \Psi(\mathbf{r})$$

の様に、 \hat{T}_l の固有関数にもできる。これは、座標原点を格子定数の整数倍ずらせても Ψ には位相因子がかかるのみ、という当然の事実他にない [位相因子 ($|\lambda| = 1$) でないと無限遠で Ψ が発散または減衰してしまう]。従って、

$$\Psi_\alpha(\mathbf{r}) = e^{if_\alpha(\mathbf{r})} u_\alpha(\mathbf{r})$$

と書ける。ここで α は固有関数のラベル、 $f_\alpha(\mathbf{r})$ は実関数、 u_α は、結晶の周期性をもった関数である。2個の並進 \hat{T}_{l_1} と \hat{T}_{l_2} を続けて行くと $\hat{T}_{l_2} \hat{T}_{l_1} = \hat{T}_{l_1+l_2}$ に等しいことから、 $f(\mathbf{r})$ は \mathbf{r} に線形 ($f(l_1) + f(l_2) = f(l_1 + l_2)$) によって、比例係数を k (実数) と書き、これで Ψ をラベルすると

$$\Psi_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{s\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

となる。ここで、 f が局所関数であることは暗に仮定した。 k の各値に対してシュレディンガー方程式の固有解は無数個あるので、これを s (バンド指数) でラベルした。これがブロッホが 1929 年に得た「ブロッホの定理」である。

ここで現れた量子数 k は、どのような意味を持つのであろうか。ブロッホ定理に現れる位相は $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{l}}$ だから、 k の定義には不定性がある。実際、3次元では3つある基本並進ベクトル $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ に双対 ($\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$) な逆格子ベクトル $\mathbf{G} = n_1\mathbf{b}_1 + n_2\mathbf{b}_2 + n_3\mathbf{b}_3$ (n_i は整数) を定義すると、 $k \rightarrow k + \mathbf{G}$ としても、 $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{l}}$ の値は変わらない。

厳密に云えば波動関数 u も不変 ($u_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}$) であることを云う必要がある。初等的には、シュレディンガー方程式のフーリエ変換が、 $k \rightarrow k + \mathbf{G}$ に対して不変であることから、このことが云える。群論的には、並進群は (3次元では3つの) 基本並進ベクトルの方向への並進操作 $\hat{T}_1, \hat{T}_2, \hat{T}_3$ から成るが、これらは可換なので、並進群は直積 $\hat{T}_1 \otimes \hat{T}_2 \otimes \hat{T}_3$ となる。結晶に対し、周期的境界条件を課すと各 \hat{T}_i は巡回群となりその既約表現は1次元表現である (つまり縮退がない)。その指標は $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{l}}$ の形となり、この指標の値が同じである既約表現は同一でなければならないことから、波動関数の不変がいえる。これに応じて固有値 $E_s(\mathbf{k})$ も $E_s(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = E_s(\mathbf{k})$ のように k の周期関数である。また、時間反転対称性があれば (つまり磁場や磁性不純物がなければ) Ψ が固有関数ならば Ψ^* も固有関数故、 $E_s(-\mathbf{k}) = E_s(\mathbf{k})$ となる。

保存量という観点からは、自由空間での連続的な並進対称性のために運動量 p が保存量 (並進のジェネレーター) となったのとは違い、周期場中では k はもはや保存量ではない。実際 k には \mathbf{G} だけの不定性があることから、このことは明らかである。このため、 $\hbar k$ のことを特に運動量と区別し

て、結晶運動量 (crystal momentum) と呼ぶ。電子の散乱において結晶運動量に関する保存則は

$$k \rightarrow k + G$$

であり、これは一種の選択則といえる。特に、運動量を保存しない散乱 ($G \neq 0$ を巻き込む散乱) はパイエルス (Peierls) によりウムクラップ (Umklapp) 散乱と名付けられた。ベクトルがパタンと折り返されるという意味である。このように、今現れた量子数 (離散群論の指標) は奇妙な性質をもっているが、その直感的理由は、量子力学では粒子が波の性質ももっているので、周期ポテンシャルの中を伝わると、波動光学でいえばブラッグ (Bragg) 反射をされるためといえる。

電子・電子散乱を考えた場合も、結晶中の 2 電子の全 k を、2 電子の波動関数の並進の性質 $\Psi(r_1, r_2) \rightarrow e^{ik \cdot l} \Psi(r_1, r_2)$ で定義すると、 k も G の不定性をもつ。よって、2 電子間散乱において k の和は、 G のずれを伴い乍ら保存される。

格子上の相互作用電子系では、特に次のようなことがある。結晶 (例えば正方格子) 中の電子を考えてみよう。格子は完全 (格子欠陥や不純物が無い) として、電子の散乱は電子・電子相互作用によるものだけとしよう。問題: この系の電気抵抗は? ちょっと考えると、電子・電子相互作用は所謂内力だから、抵抗には効かないように思える。ところが格子の上ではそうではない。格子上の散乱で保存されるのは結晶運動量であるために、ウムクラップの入った散乱では元来の運動量は保存されない。したがって抵抗が生じる。実際、山田・芳田 [17] は、電流に対するファインマン・ダイアグラムにおいて、バーテックス補正と呼ばれる大事な項をちゃんと考えれば、電気伝導度はウムクラップ散乱を無視すれば発散し、取り入れれば有限になることを示した。このような性質を尊重するには、近似には保存近似を用いる必要がある。例えば、電子相関の強い物質において、負の磁気抵抗 (系に外部磁場をかけると、伝導度が上昇する現象) が電子相関のために生じ得ることが、保存近似を用いて示されている [18]。

このように、ウムクラップ散乱は物性の様々なシーンで重要な役を果たすが、 k に対する選択則は、電子・電子散乱や電子・フォノン散乱だけでなく、電子系に光を当てたときの光遷移の選択則なども与える。

以上で見たように、連続群論における保存則は、離散群論では、より一般的な選択則となる。ちなみに、ケプラーは、連続空間中での複数の粒子 (惑星) のケプラー問題を考えたときに、これが離散対称性に支配されているのでは、というアイデアを得た。これが水金地火木土の公転半径の系列 (図 6) [19] を与えているのでは、という訳である。言うまでもなくこれは荒唐無稽な妄想であったが、連続問題に離散性を導入するというアイデア自身は天才的といえれば天才的であろう。

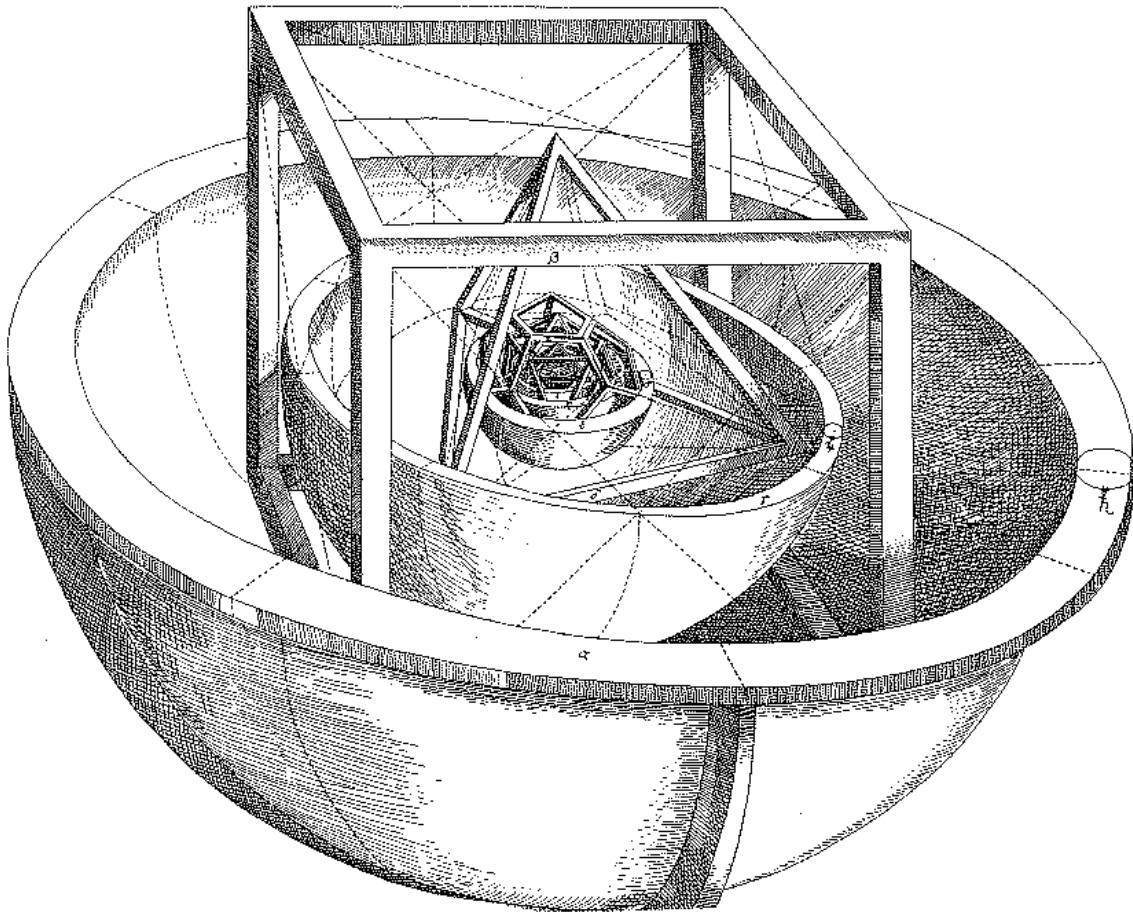


図 6: ケプラーによる、正多面体の入籠構造。

6 内部自由度をもつ離散対称性

粒子が内部自由度をもつ場合に、離散対称性に伴う群論はどうなるだろうか。電子はスピン自由度をもつから、結晶内の電子にとって、この問題は重要である。先ず、結晶に行く前に、一般的な定理として、クラマース (Kramers) の定理がある。これは、「奇数個の電子からなる系では、時間反転対称性が破れていない限り、スピン自由度に伴う、偶数重 (少なくとも 2 重) の縮退がある」ことを主張する。結晶の場合に適用すると、時間反転演算子が反ユニタリなので、代数的には反ユニタリ空間群という面倒なものになるが、例を挙げるのが早いであろう。バルクの結晶が反転対称性をもたない場合 (例えば GaAs のように、ジंकブレンド型という、二種の元素が空間反転対称を破るように並んだ化合物半導体) に、スピン・軌道相互作用のように、相対論的效果のためにスピン自由度と軌道自由度を混ぜるような相互作用があると、そのバンド構造は、 $E(\mathbf{k}, \uparrow) = E(-\mathbf{k}, \downarrow)$ という等式を満たしながらも、図 7 のように分裂する。GaAs のバンド構造にも実際これが反映されている。

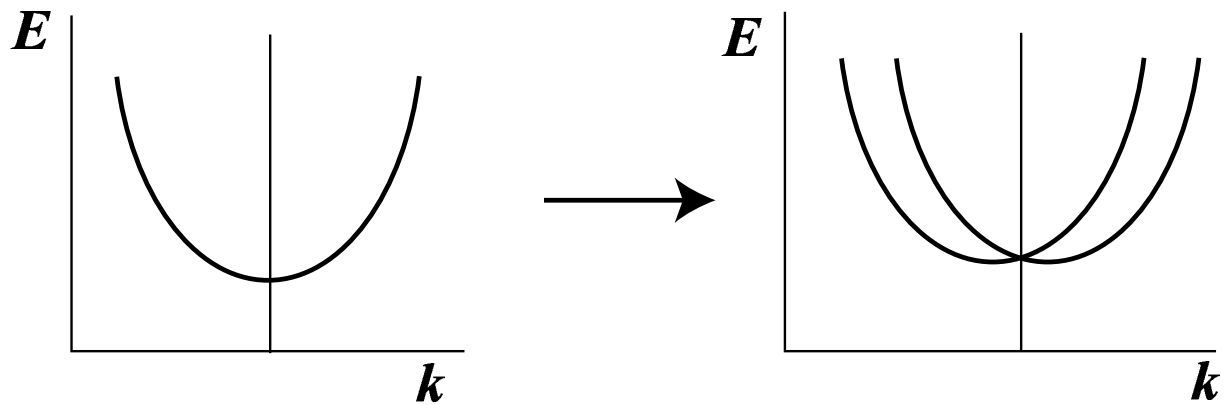


図 7: 空間反転対称をもたない結晶構造上のバンド構造は、スピン・軌道相互作用があると右のように分裂する。

結晶構造が空間反転非対称である代わりに、外部ポテンシャルが、片方は切り立ち他方は斜めになったような非対称的であるようなものに電子を閉じ込めた場合も類似の効果が生じ、2次元電子系で観測されている。これは、ラシュバ (Rashba) 効果と呼ばれている。

空間群は、結晶中のあらゆる状態を規定する。超伝導状態もそれに支配される。超伝導というのは、荒っぽくいうとフェルミオンである電子が2個束縛してクーパーペアというものになり、これがボース凝縮した状態である。この束縛状態の対称性、ひいてはそれから生じる相転移の秩序パラメータ (BCS のギャップ関数 Δ) も空間群の既約表現でなければならない。例えば、酸化銅の高温超伝導体は、(ほぼ) 正方晶なので、 Δ はその既約表現であり、実際、その中の (B_{1g} という) 表現であることが確立している。一方、ルテニウムの酸化物で、結晶構造が銅の酸化物と同じもので超伝導が前野により発見されているが、ここでは、時間反転対称性が自発的に破れた、スピン・トリプレット超伝導になっており、群論的には、2次元表現をもつ既約表現の場合には時間反転対称の破れが可能であり、実際ルテニウム酸化物では2次元既約表現 (E_u) が関与していると考えられている。

7 カオスと保存則

隠れた対称性のところで、保存量が沢山ある場合を見たが、逆に保存量の数が少ない場合はどうだろうか。この場合にはカオスが問題になることがあり、有限系や小数自由度系で良く調べられている。古典系では、「自由度の数より保存量の数が少ないとカオス」という性質があるからである。量子力学に行くと、量子カオスとは何か、という定義すら完全には分かっていないといってよく、殆ど唯一の定理は、グッツヴィラー (Gutzwiller) による半古典理論である。これは、古典で周期軌道が存在するときは、量子に行くとエネルギー・スペクトルや波動関数にその痕跡が残ることがあり、これ

は半古典近似で理解できるというものである [20]。有限系としては磁場中の水素原子が典型例で、ここでは自由度が 3 に対し、保存量はエネルギーと L_z の二個しかなく、吸収スペクトルにその特徴が観測されている。

問題をもう少し一般化して、多様体の上の粒子の運動を考えるという問題も興味深い。特に、19 世紀のアダマール (Hadamard) 以来、負曲率空間上の運動が考えられてきた。何故負曲率かということ、微分幾何学が教えるように、種数 (genus) が 2 以上の面はトポロジカルには定負曲率面と等しいためである。この場合には、半古典近似による跡公式 (trace formula) が厳密に成り立つので、興味もたれている。これも、本特集のテーマから離れるので、数理科学「跡公式」特集号 [21] および文献 [22, 23] を挙げておこう。

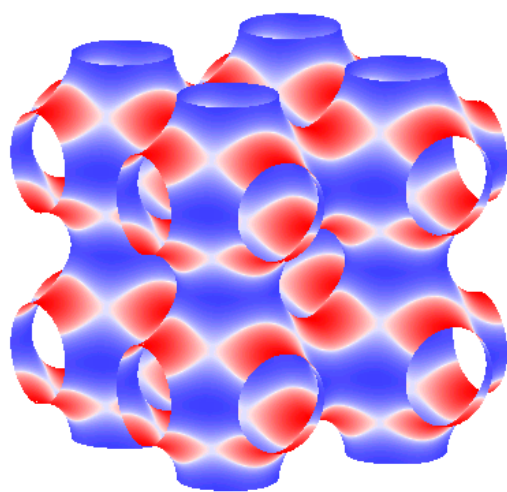


図 8: 至るところ負曲率をもつ、周期的な無限曲面の典型例である、周期的極小曲面 [シュワルツ (Schwarz) の P 曲面]。無限に続く曲面の一部を示す。濃淡は、この曲面上に電子を走らせた場合のシュレディンガー方程式の解 (周期系だからブロッホ状態) の一例の振幅を表す。

ちなみに、負曲率をもつ曲面は、図 8 に示したように、3 次元空間に埋め込まれた、周期的な無限曲面として実現することができる。この構造はトポロジカルにはパイプを連結したようなもので、いわば「面から成る結晶」である。現実にもゼオライトという一連の結晶で実現している構造で、最近負曲率フラレンなどの新奇物質での実現も提案されている。この類の曲面は、周期的極小曲面としてシュワルツ (Schwarz) 等により昔から調べられており、ここで「極小」というのは、平均曲率が至るところでゼロ (直感的には石鹸膜のように、表面積が極小) ということである。この上に電子を放したとき、つまり周期的極小曲面上の量子力学の問題も最近考えられている [24]。周期性があるの

で、上で述べたブロッホの定理が適用され、エネルギー・バンド構造が生じる。これは普通の結晶同様、空間群という離散群で規定されている。バンド構造は、周期曲面がどのように接続されているかというトポロジーで基本的には決まっているので、いわば「トポロジカル・バンド構造」といえる。また、一つの極小周期曲面と別の極小周期曲面とがボンネ (Bonnet) 変換と呼ばれる共形変換で連続的に結ばれているときは、それらのバンド構造の間に関連があることも示されている。

8 トポロジカル保存量

対称性から来る保存量 (つまりネターの定理に代表される保存量) に対して、これとは全く異なった、トポロジカル保存量と呼ばれるものが存在する。すぐにイメージされる典型例は、超流動における渦度の保存や、超伝導における磁束の量子化である。近似的保存量という話もしたが、対称性から来る保存量は厳密には勿論、対称性が破られた瞬間に無くなる。それに対して、トポロジカル保存量は、状況を少し位変えても保存し続ける。そもそも定義からしてトポロジカルな量とはそういうもので、例えば、ガウス・ボンネの定理で、曲面を特徴付ける指数は、曲面の連続変形で不変であった。逆に、トポロジカル保存量は、どんな系でもある訳ではなく、特別な系や物理量に限られる。超流動や超伝導では何が特別だったかというところでは $U(1)$ ゲージ対称性が自発的に破れ、位相が生き残り、これに対するトポロジカル保存量が可能となったわけである (数学的には波動関数がホモトピー・クラスで分類されるようになる)。直感的には、或る経路に沿って位相が何回回転するか、という巻きつき数を定義できる。

サウレス (Thouless) はトポロジカル量子数を解説した著書 [25] の中で、ディラックの磁気モノポールの量子化をその事始めであるとして挙げている。ディラックはこれを非可積分位相 (nonintegrable phase) による効果といているが、これは今の言葉でいえばベリー (Berry) の位相である [26]。

量子ホール効果も、トポロジカル保存量が活躍する。そもそも、量子化ホール伝導度自身がトポロジカル保存量であり、これは、線形応答理論によるホール伝導度が、波動関数の位相に対する (微分幾何学でいうところの) 接続を表す式になっている、という事実からきている [27]。従って、量子ホール効果も系の詳細にはよらない。

9 おわりに

保存量にまつわる、新旧の話題を挙げてみた。面白い問題は古くて新しい、ということの見本のよう、という感じを得ていただければ嬉しい。

負曲率系と跡公式の関連については、中村勝弘氏にご教示をいただいた。

参考文献

- [1] Emmy Noether, *Nachr. Gesellsch. Wiss. Göttingen* **2**, 235 (1918).
- [2] ネターの伝記はあまり目にしない。いまだに、青木秀夫: 数理科学「ゲージ場理論の新展開」特集号 p.28 (1997) [別冊数理科学「場の理論」(サイエンス社、1999)、p.80 に再録]でも引用した、Constance Reid: *Hilbert* (Springer, New York, 1996) の中の記述が彼女を知るには良い。ちなみに、もう一人の歴史的な女性数学者 Sonya Kovalevskaya については、最近、Joan Spicci: *Beyond the limit — The dream of Sonya Kovalevskaya* (Tom Doherty Associates, New York, 2002) という伝記が出版された。
- [3] Jagdish Mehra, *The Beat of a Different Drum — The life and science of Richard Feynman* (Oxford Univ. Press, 1996).
- [4] 対称性について云えば、ファインマン・ダイアグラムを足して行くと、古典的には存在する対称性が破れる場合があり、量子異常と呼ばれる。例えば、藤川和男: 経路積分と対称性の量子的破れ (岩波書店、2001) を参照。
- [5] M. Suzuki, *Physica* **51**, 277 (1971).
- [6] 高田康民: 多体問題 (朝倉書店、1999)。
- [7] 今村裕志、青木秀夫、Peter A. Maksym: 日本物理学会誌、**53**, 36 (1998)。
- [8] P.A. Maksym, *Physica B* **249-251**, 233 (1998).
- [9] 例えば、Brian G. Wybourne, *Classical Groups for Physicists* (Wiley, 1974).
- [10] 例えば、K. Asano and T. Ando, *Phys. Rev. B* **65**, 115330 (2002) 中の引用文献。
- [11] 数理科学「物性論とその数理」特集号 (1996年1月号)。
- [12] Bill Sutherland in *Exactly Solvable Problems in Condensed Matter and Relativistic Field Theory* ed. by B.S. Shastri et al (Springer, 1985), p.1.
- [13] 神保道夫: 量子群とヤンバクスター方程式 (シュプリンガー東京、1990)。
- [14] R. Arita, K. Kusakabe, K. Kuroki and H. Aoki, *J. Phys. Soc. Jpn* **66**, 2086 (1997).
- [15] 例えば、黒木和彦、青木秀夫: 「超伝導」(東京大学出版会、1999) 参照。

- [16] 青木秀夫：日本物理学会誌 **57**, 118 (2002)。
- [17] K. Yamada and K. Yosida, Prog. Theoer. Phys. **76**, 621 (1986).
- [18] R. Arita, K. Kuroki and H. Aoki, Phys. Rev. B **61**, 3207 (2000).
- [19] Johannes Kepler: Gesammelte Werke (Frankfurt, 1634; Beck'sche Verlag, München から 1988 年に復刊)。
- [20] Martin C. Gutzwiller, *Chaos in classical and quantum mechanics* (Springer, 1990).
- [21] 数理科学「跡公式」特集号 (1999年3月号)。
- [22] 中村勝弘:別冊数理科学「カオスと量子物理学」(サイエンス社, 1997)。
- [23] E.B. Bogomolny et al, Phys. Rep. **291**, 219 (1997).
- [24] H. Aoki, M. Koshino, H. Morise, D. Takeda, and K. Kuroki, Phys. Rev. B **65**, 035102 (2001).
- [25] David J. Thouless: *Topological Quantum Numbers in Nonrelativistic Physics* (World Scientific, Singapore, 1998).
- [26] 青木秀夫、数理科学 **29**, No.11, p.11 (1991) [別冊数理科学「場の理論」(サイエンス社、1999) p.107 に再録]。
- [27] 例えば、文献 [25] や Y. Hatsugai, J. Phys. Condens. Matt. **9**, 2507 (1997) を参照。