交換関係確かめ定式化

先進理工学研究科電気情報生命工学専攻
学籍番号 5324E085
藤原大地

2024 年 2 月 3 日

鉛直方向に Rashba 外場を印加した系で，スピン多重度が

1　今回使用した関係式

問題に取り掛かる前に，交換関係について復習する．

スピン演算子どうしの交換関係は引数が等しい場合，次の形で書き表される．

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{S}_k \tag{1}$$

ただし，ϵ_{ijk} は $Levi - Civita$記号 と呼ばれる三次元の完全反対称テンソルであり，次のように符号を返す．

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{偶置換} \\ -1 & \text{奇置換} \\ 0 & i, j, k\text{のうちふたつ以上が同じとき} \end{cases} \tag{2}$$

引数がことなる場合，スピン演算子どうしの交換関係は 0 である．また，スピン演算子と運動量演算子の交換関係は引数が異なるために 0 である．

2　$\hat{\mathcal{H}}$ とスピン二乗演算子の交換関係

ここから，本題に入る本来は $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{S}^2]$ のように全ハミルトニアンに対して交換関係を考えるべきだが、$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_r$ のうち $\hat{\mathcal{H}}_0$ にはスピンの演算子が含まれていないので、

$$\begin{aligned} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{S}^2] &= [\hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_r, \hat{S}^2] \\ &= [\hat{\mathcal{H}}_0, \hat{S}^2] + [\hat{\mathcal{H}}_r, \hat{S}^2] \\ &= 0 + [\hat{\mathcal{H}}_r, \hat{S}^2] \\ &= [\hat{\mathcal{H}}_r, \hat{S}^2] \end{aligned} \tag{3}$$

となる。したがって、$[\hat{\mathcal{H}}_r, \hat{S}^2]$ の値だけ考えればよい。これらの二つの演算子をあらわに書き表そう.

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_r(\tau_1,\ldots,\tau_N) &= \sum_i^N \hat{\boldsymbol{s}}(\sigma_i)\cdot\left(\boldsymbol{\Xi}\times\hat{\boldsymbol{P}}_{(\boldsymbol{r_i})}\right) \\
&= \Xi_z \sum_{i=1}^N \left(-\hat{S}_x(\sigma_i)\hat{P}_y(\boldsymbol{r_i}) + \hat{S}_y(\sigma_i)\hat{P}_x(\boldsymbol{r_i})\right)
\end{aligned} \tag{4}$$

$$\begin{aligned}
\hat{S}^2(\tau_1,\ldots,\tau_N) &= \sum_\omega^{x,y,z}\left(\sum_i^N \hat{S}_\omega\right)^2 \\
&= \sum_\omega^{x,y,z}\sum_j^N\sum_l^N \hat{S}_\omega(\sigma_j)\hat{S}_\omega(\sigma_l)
\end{aligned} \tag{5}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{\mathcal{H}}_r\hat{S}^2] =& \Xi_z \sum_i^N \left(-\hat{S}_x(\sigma_i)\hat{P}_y(\boldsymbol{r_i}) + \hat{S}_y(\sigma_i)\hat{P}_x(\boldsymbol{r_i})\right)\sum_\omega^{x,y,z}\sum_j^N\sum_l^N \hat{S}_\omega(\sigma_j)\hat{S}_\omega(\sigma_l) \\
&- \sum_\omega^{x,y,z}\sum_j^N\sum_l^N \hat{S}_\omega(\sigma_j)\hat{S}_\omega(\sigma_l)\Xi_z\sum_i^N\left(-\hat{S}_x(\sigma_i)\hat{P}_y(\boldsymbol{r_i}) + \hat{S}_y(\sigma_i)\hat{P}_x(\boldsymbol{r_i})\right) \\
=& -\sum_\omega^{x,y,z}\sum_i^N\sum_j^N\sum_l^N \hat{P}_y(\boldsymbol{r_i})\left(\hat{S}_x(\sigma_i)\hat{S}_\omega(\sigma_j)\hat{S}_\omega(\sigma_l) - \hat{S}_\omega(\sigma_j)\hat{S}_\omega(\sigma_l)\hat{S}_x(\sigma_i)\right) \\
&+ \sum_\omega^{x,y,z}\sum_i^N\sum_j^N\sum_l^N \hat{P}_x(\boldsymbol{r_i})\left(\hat{S}_y(\sigma_i)\hat{S}_\omega(\sigma_j)\hat{S}_\omega(\sigma_l) - \hat{S}_\omega(\sigma_j)\hat{S}_\omega(\sigma_l)\hat{S}_y(\sigma_i)\right)
\end{aligned} \tag{6}$$

一電子系，N 電子系で交換関係を確かめる.

2.1 一電子系の交換関係

$$\begin{aligned}
[\hat{\mathcal{H}}_r\hat{S}^2] =& -\sum_\omega^{x,y,z}\hat{P}_y(\boldsymbol{r})\left(\hat{S}_x(\sigma)\hat{S}_\omega(\sigma)\hat{S}_\omega(\sigma) - \hat{S}_\omega(\sigma)\hat{S}_\omega(\sigma)\hat{S}_x(\sigma)\right) \\
&+ \sum_\omega^{x,y,z}\hat{P}_x(\boldsymbol{r_i})\left(\hat{S}_y(\sigma)\hat{S}_\omega(\sigma)\hat{S}_\omega(\sigma) - \hat{S}_\omega(\sigma)\hat{S}_\omega(\sigma)\hat{S}_y(\sigma)\right)
\end{aligned} \tag{7}$$

式 (7) の第一項を分解して，それぞれの項を整理する. .

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\omega}^{x,y,z} \hat{P}_y(\boldsymbol{r}) \left(\hat{S}_x(\sigma)\hat{S}_\omega(\sigma)\hat{S}_\omega(\sigma) - \hat{S}_\omega(\sigma)\hat{S}_\omega(\sigma)\hat{S}_x(\sigma) \right) \\
=&\hat{P}_y(\boldsymbol{r}) \left(\hat{S}_x(\sigma)\hat{S}_x(\sigma)\hat{S}_x(\sigma) - \hat{S}_x(\sigma)\hat{S}_x(\sigma)\hat{S}_x(\sigma) \right) \\
+&\hat{P}_y(\boldsymbol{r}) \left(\hat{S}_x(\sigma)\hat{S}_y(\sigma)\hat{S}_y(\sigma) - \hat{S}_y(\sigma)\hat{S}_y(\sigma)\hat{S}_x(\sigma) \right) \\
+&\hat{P}_y(\boldsymbol{r}) \left(\hat{S}_x(\sigma)\hat{S}_z(\sigma)\hat{S}_z(\sigma) - \hat{S}_z(\sigma)\hat{S}_z(\sigma)\hat{S}_x(\sigma) \right)
\end{aligned} \tag{8}
$$

第一項は

$$
\hat{S}_x(\sigma)\hat{S}_x(\sigma)\hat{S}_x(\sigma) - \hat{S}_x(\sigma)\hat{S}_x(\sigma)\hat{S}_x(\sigma) = 0 \tag{9}
$$

第二項は

$$
\begin{aligned}
&\hat{S}_x(\sigma)\hat{S}_y(\sigma)\hat{S}_y(\sigma) - \hat{S}_y(\sigma)\hat{S}_y(\sigma)\hat{S}_x(\sigma) \\
=&\left(\hat{S}_y(\sigma)\hat{S}_x(\sigma)\hat{S}_y(\sigma) + i\hbar\hat{S}_z(\sigma)\hat{S}_y(\sigma) \right) - \left(\hat{S}_y(\sigma)\hat{S}_x(\sigma)\hat{S}_y(\sigma) - i\hbar\hat{S}_y(\sigma)\hat{S}_z(\sigma) \right) \\
=&i\hbar\hat{S}_z(\sigma)\hat{S}_y(\sigma) + i\hbar\hat{S}_y(\sigma)\hat{S}_z(\sigma)
\end{aligned} \tag{10}
$$

第三項は

$$
\begin{aligned}
&\hat{S}_x(\sigma)\hat{S}_z(\sigma)\hat{S}_z(\sigma) - \hat{S}_z(\sigma)\hat{S}_z(\sigma)\hat{S}_x(\sigma) \\
=&\left(\hat{S}_z(\sigma)\hat{S}_x(\sigma)\hat{S}_z(\sigma) - i\hbar\hat{S}_z(\sigma)\hat{S}_y(\sigma) \right) - \left(\hat{S}_z(\sigma)\hat{S}_x(\sigma)\hat{S}_z(\sigma) + i\hbar\hat{S}_y(\sigma)\hat{S}_z(\sigma) \right) \\
=&- i\hbar\hat{S}_z(\sigma)\hat{S}_y(\sigma) - i\hbar\hat{S}_y(\sigma)\hat{S}_z(\sigma)
\end{aligned} \tag{11}
$$

これらを足し合わせた式 (7) の第一項は 0 になることがわかった. この結果は式 (7) の第二項でも同様である．したがって，一電子系の場合交換関係が 0 になることが確かめ得られた.

$$
[\hat{\mathcal{H}}_r \hat{S^2}] = 0 \tag{12}
$$

2.2 N 電子系の交換関係

式 (6) の中で，スピン演算子でできた項は式 (13) の形で書けるが，これらを ab 間の関係，i, j, l 間の関係によって場合分けしたものが，式 (14) である．

$$
\hat{S}_a(\sigma_i)\hat{S}_b(\sigma_j)\hat{S}_b(\sigma_l) - \hat{S}_b(\sigma_j)\hat{S}_b(\sigma_l)\hat{S}_a(\sigma_i) \tag{13}
$$

$$
\begin{aligned}
[\hat{\mathcal{H}}_r, \hat{S}^2] = &\sum_i^N \sum_j^N \sum_l^N \hat{P}_y(\boldsymbol{r_i}) \left(\hat{S}_x(\sigma_i)\hat{S}_x(\sigma_j)\hat{S}_x(\sigma_l) - \hat{S}_x(\sigma_j)\hat{S}_x(\sigma_l)\hat{S}_x(\sigma_i) \right) \\
&+ \sum_i^N \sum_j^N \sum_l^N \hat{P}_x(\boldsymbol{r_i}) \left(\hat{S}_y(\sigma_i)\hat{S}_y(\sigma_j)\hat{S}_y(\sigma_l) - \hat{S}_y(\sigma_j)\hat{S}_y(\sigma_l)\hat{S}_y(\sigma_i) \right) \\
&+ \sum_\omega^{y,z} \sum_i^N \sum_{j\neq i}^N \sum_{l\neq i}^N \hat{P}_y(\boldsymbol{r_i}) \left(\hat{S}_x(\sigma_i)\hat{S}_\omega(\sigma_j)\hat{S}_\omega(\sigma_l) - \hat{S}_\omega(\sigma_j)\hat{S}_\omega(\sigma_l)\hat{S}_x(\sigma_i) \right) \\
&+ \sum_\omega^{y,z} \sum_i^N \sum_{j\neq i}^N \sum_{l\neq i}^N \hat{P}_x(\boldsymbol{r_i}) \left(\hat{S}_y(\sigma_i)\hat{S}_\omega(\sigma_j)\hat{S}_\omega(\sigma_l) - \hat{S}_\omega(\sigma_j)\hat{S}_\omega(\sigma_l)\hat{S}_y(\sigma_i) \right) \\
&+ 2\sum_\omega^{y,z} \sum_i^N \sum_{j\neq i}^N \hat{P}_y(\boldsymbol{r_i}) \left(\hat{S}_x(\sigma_i)\hat{S}_\omega(\sigma_i)\hat{S}_\omega(\sigma_j) - \hat{S}_\omega(\sigma_j)\hat{S}_\omega(\sigma_i)\hat{S}_x(\sigma_i) \right) \\
&+ 2\sum_\omega^{y,z} \sum_i^N \sum_{j\neq i}^N \hat{P}_x(\boldsymbol{r_i}) \left(\hat{S}_y(\sigma_i)\hat{S}_\omega(\sigma_i)\hat{S}_\omega(\sigma_j) - \hat{S}_\omega(\sigma_j)\hat{S}_\omega(\sigma_i)\hat{S}_y(\sigma_i) \right) \\
&+ \sum_\omega^{y,z} \sum_i^N \hat{P}_y(\boldsymbol{r_i}) \left(\hat{S}_x(\sigma_i)\hat{S}_\omega(\sigma_i)\hat{S}_\omega(\sigma_i) - \hat{S}_\omega(\sigma_i)\hat{S}_\omega(\sigma_i)\hat{S}_x(\sigma_i) \right) \\
&+ \sum_\omega^{y,z} \sum_i^N \hat{P}_x(\boldsymbol{r_i}) \left(\hat{S}_y(\sigma_i)\hat{S}_\omega(\sigma_i)\hat{S}_\omega(\sigma_i) - \hat{S}_\omega(\sigma_i)\hat{S}_\omega(\sigma_i)\hat{S}_y(\sigma_i) \right)
\end{aligned}
\tag{14}
$$

それぞれの項を整理していこう．

1. $a = b$ のとき (1 2 項)

$$
\begin{aligned}
&\hat{S}_a(\sigma_i)\hat{S}_a(\sigma_j)\hat{S}_a(\sigma_l) - \hat{S}_a(\sigma_j)\hat{S}_a(\sigma_l)\hat{S}_a(\sigma_i) \\
&= \hat{S}_a(\sigma_i)\hat{S}_a(\sigma_j)\hat{S}_a(\sigma_l) - \hat{S}_a(\sigma_i)\hat{S}_a(\sigma_j)\hat{S}_a(\sigma_l) \\
&= 0
\end{aligned}
\tag{15}
$$

2. $a \neq b$ のとき

   (a) i が j, l のどちらとも等しくないとき (3 4 項)

$$
\begin{aligned}
&\hat{S}_a(\sigma_i)\hat{S}_b(\sigma_j)\hat{S}_b(\sigma_l) - \hat{S}_b(\sigma_j)\hat{S}_b(\sigma_l)\hat{S}_a(\sigma_i) \\
=&\hat{S}_a(\sigma_i)\hat{S}_b(\sigma_j)\hat{S}_b(\sigma_l) - \hat{S}_a(\sigma_i)\hat{S}_b(\sigma_j)\hat{S}_b(\sigma_l) \\
=&0
\end{aligned}
\tag{16}
$$

   項の総和は

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\omega}^{y,z}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N} i\hbar\epsilon_{x\omega c}\hat{S}_\omega(\sigma_j)\hat{S}_c(\sigma_i) \\
=&\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N} i\hbar\epsilon_{xyz}\hat{S}_y(\sigma_j)\hat{S}_z(\sigma_i)\hat{P}_y(\boldsymbol{r_i}) - \sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N} i\hbar\epsilon_{xyz}\hat{S}_z(\sigma_j)\hat{S}_y(\sigma_i)\hat{P}_y(\boldsymbol{r_i}) \\
=&\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N} i\hbar\epsilon_{xyz}\hat{S}_y(\sigma_j)\hat{S}_z(\sigma_i)\hat{P}_y(\boldsymbol{r_i}) - \sum_{j=1}^{N}\sum_{i\neq j}^{N} i\hbar\epsilon_{xyz}\hat{S}_y(\sigma_i)\hat{S}_z(\sigma_j)\hat{P}_y(\boldsymbol{r_i}) \\
=&0
\end{aligned}
\tag{17}
$$

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\omega}^{x,z}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N} i\hbar\epsilon_{y\omega c}\hat{S}_\omega(\sigma_j)\hat{S}_c(\sigma_i) \\
=&\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N} i\hbar\epsilon_{yxz}\hat{S}_x(\sigma_j)\hat{S}_z(\sigma_i)\hat{P}_x(\boldsymbol{r_i}) - \sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N} i\hbar\epsilon_{yxz}\hat{S}_z(\sigma_j)\hat{S}_x(\sigma_i)\hat{P}_x(\boldsymbol{r_i}) \\
=&\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N} i\hbar\epsilon_{yxz}\hat{S}_x(\sigma_j)\hat{S}_z(\sigma_i)\hat{P}_x(\boldsymbol{r_i}) - \sum_{j=1}^{N}\sum_{i\neq j}^{N} i\hbar\epsilon_{yxz}\hat{S}_x(\sigma_i)\hat{S}_z(\sigma_j)\hat{P}_x(\boldsymbol{r_i}) \\
=&0
\end{aligned}
\tag{18}
$$

(b) i が j,l のどちらか一つと等しいとき (5 6 項)

$$
\begin{aligned}
&\hat{S}_a(\sigma_i)\hat{S}_b(\sigma_i)\hat{S}_b(\sigma_k) - \hat{S}_b(\sigma_k)\hat{S}_b(\sigma_i)\hat{S}_a(\sigma_i) \\
=&\hat{S}_b(\sigma_k)[\hat{S}_a(\sigma_i)\hat{S}_b(\sigma_i)] \\
=&i\hbar\epsilon_{abc}\hat{S}_b(\sigma_k)\hat{S}_c(\sigma_i)
\end{aligned}
\tag{19}
$$

項の総和は

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\omega}^{y,z}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N} i\hbar\epsilon_{x\omega c}\hat{S}_\omega(\sigma_j)\hat{S}_c(\sigma_i) \\
=&\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N} i\hbar\epsilon_{xyz}\hat{S}_y(\sigma_j)\hat{S}_z(\sigma_i)\hat{P}_y(\boldsymbol{r_i}) - \sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N} i\hbar\epsilon_{xyz}\hat{S}_z(\sigma_j)\hat{S}_y(\sigma_i)\hat{P}_y(\boldsymbol{r_i}) \\
=&\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N} i\hbar\epsilon_{xyz}\hat{S}_y(\sigma_j)\hat{S}_z(\sigma_i)\hat{P}_y(\boldsymbol{r_i}) - \sum_{j=1}^{N}\sum_{i\neq j}^{N} i\hbar\epsilon_{xyz}\hat{S}_y(\sigma_i)\hat{S}_z(\sigma_j)\hat{P}_y(\boldsymbol{r_i}) \\
=&0
\end{aligned}
\tag{20}
$$

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\omega}^{x,z}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N} i\hbar\epsilon_{y\omega c}\hat{S}_{\omega}(\sigma_j)\hat{S}_c(\sigma_i) \\
=&\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N} i\hbar\epsilon_{yxz}\hat{S}_x(\sigma_j)\hat{S}_z(\sigma_i)\hat{P}_x(\boldsymbol{r_i}) - \sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N} i\hbar\epsilon_{yxz}\hat{S}_z(\sigma_j)\hat{S}_x(\sigma_i)\hat{P}_x(\boldsymbol{r_i}) \\
=&\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N} i\hbar\epsilon_{yxz}\hat{S}_x(\sigma_j)\hat{S}_z(\sigma_i)\hat{P}_x(\boldsymbol{r_i}) - \sum_{j=1}^{N}\sum_{i\neq j}^{N} i\hbar\epsilon_{yxz}\hat{S}_x(\sigma_i)\hat{S}_z(\sigma_j)\hat{P}_x(\boldsymbol{r_i}) \\
=&0
\end{aligned}
\tag{21}
$$

(c) i が j,l のどちらか一つと等しいとき (7 8 項)

$$
\begin{aligned}
&\hat{S}_a(\sigma_i)\hat{S}_b(\sigma_i)\hat{S}_b(\sigma_i) - \hat{S}_b(\sigma_i)\hat{S}_b(\sigma_i)\hat{S}_a(\sigma_i) \\
=&i\hbar\left(\epsilon_{abc}\hat{S}_c(\sigma_i)\hat{S}_b(\sigma_i) + \hat{S}_b(\sigma_i)\hat{S}_a(\sigma_i)\hat{S}_b(\sigma_i)\right) - i\hbar\left(\hat{S}_b(\sigma_i)\epsilon_{bac}\hat{S}_c(\sigma_i) + \hat{S}_b(\sigma_i)\hat{S}_a(\sigma_i)\hat{S}_b(\sigma_i)\right) \\
=&i\hbar\epsilon_{abc}\left(\hat{S}_c(\sigma_i)\hat{S}_b(\sigma_i) + \hat{S}_b(\sigma_i)\hat{S}_c(\sigma_i)\right)
\end{aligned}
\tag{22}
$$

項の総和は

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\omega}^{y,z}\sum_{i=1}^{N} i\hbar\epsilon_{x\omega c}\left(\hat{S}_c(\sigma_i)\hat{S}_{\omega}(\sigma_i) + \hat{S}_{\omega}(\sigma_i)\hat{S}_c(\sigma_i)\right)\hat{P}_y(\boldsymbol{r_i}) \\
=&\sum_{i=1}^{N} i\hbar\left(\epsilon_{xyz}\hat{S}_z(\sigma_i)\hat{S}_y(\sigma_i) + \epsilon_{xzy}\hat{S}_z(\sigma_i)\hat{S}_y(\sigma_i)\right)\hat{P}_y(\boldsymbol{r_i}) + i\hbar\left(\epsilon_{xyz}\hat{S}_y(\sigma_i)\hat{S}_z(\sigma_i) + \epsilon_{xzy}\hat{S}_y(\sigma_i)\hat{S}_z(\sigma_i)\right)\hat{P}_y(\\
=&0
\end{aligned}
\tag{23}
$$

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\omega}^{x,z}\sum_{i=1}^{N} i\hbar\epsilon_{y\omega c}\left(\hat{S}_c(\sigma_i)\hat{S}_{\omega}(\sigma_i) + \hat{S}_{\omega}(\sigma_i)\hat{S}_c(\sigma_i)\right)\hat{P}_x(\boldsymbol{r_i}) \\
=&\sum_{i=1}^{N} i\hbar\left(\epsilon_{yxz}\hat{S}_z(\sigma_i)\hat{S}_x(\sigma_i) + \epsilon_{yzx}\hat{S}_x(\sigma_i)\hat{S}_z(\sigma_i)\right)\hat{P}_x(\boldsymbol{r_i}) + i\hbar\left(\epsilon_{yxz}\hat{S}_x(\sigma_i)\hat{S}_z(\sigma_i) + \epsilon_{xzy}\hat{S}_z(\sigma_i)\hat{S}_x(\sigma_i)\right)\hat{P}_x(\\
=&0
\end{aligned}
\tag{24}
$$

$$
[\hat{\mathcal{H}}_r, \hat{S^2}] = 0 \tag{25}
$$