

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。

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

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。

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

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、

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

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。

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

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

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

一電子系、N 電子系で交換関係を確認する。

2.1 一電子系の交換関係

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

式 (??) の第一項を分解して、それぞれの項を整理する..

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

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 (??) の第一項は 0 になることがわかった. この結果は式 (??) 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 (??) の中で, スピン演算子でできた項は式 (??) 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 (??) である.

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

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

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

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

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

(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

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

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

(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

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

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

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