# 対称性とハミルトニアン

山影　相

2014 年 1 月 30 日

系がもつ対称性からスピン軌道相互作用の形が制限されることを見る．解析力学によれば，運動方程式は系の対称変換に対して不変な量（スカラー）である作用 $S = \int dtL$ から導出される．固体を考えると、通常は並進・回転・鏡映・時間反転対称性のみが考慮されるから，エネルギー，すなわちハミルトニアンはこれらの変換に対して不変な量でなければならない．ここでは幾つかの場合に具体的にハミルトニアンを構成し，そこからスピンの構造を議論する．

## 1　二次元平面におけるスピンレス粒子

### 1.1　$C_\infty$

並進対称性があるので，基本的な物理量は運動量 $\boldsymbol{k}$ しかない．例えば，位置ベクトル $\boldsymbol{r}$ は並進に対して不変でない．しかし，$\boldsymbol{k}$ は回転に対してベクトルであるから，零次を除いて最低次の回転対称なスカラーをつくると

$$H(\boldsymbol{k}) = \alpha \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{k} = \alpha k^2 \tag{1}$$

がハミルトニアンになる．これはまさに自由粒子の運動エネルギーに他ならない．

### 1.2　$C_3$

実際の結晶では離散的な回転対称性しか持たない．ここでは例として三回対称 $C_3$ の場合を考える．$\boldsymbol{k}$ の一次はスカラーにならない．二次の一般形として

$$H(\boldsymbol{k}) = ak_x^2 + bk_y^2 + 2ck_xk_y = \boldsymbol{k}^{\mathrm{T}} A \boldsymbol{k}, \quad A = \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix} \tag{2}$$

を考えることができる．また，$C_3$ の表現行列は

$$R_3 = \begin{pmatrix} \cos 2\pi/3 & -\sin 2\pi/3 \\ \sin 2\pi/3 & \cos 2\pi/3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix} \tag{3}$$

なので，回転不変の条件として

$$A = R_3^{\mathrm{T}} A R_3 = R_3^{2\mathrm{T}} A R_3^2 \tag{4}$$

が成り立つ．すなわち，$a = b$，$c = 0$ が要請され，$H(\boldsymbol{k}) = ak^2$．ここから，3 回以上の対称性があれば $\boldsymbol{k}$ の 2 次までの範囲では対称性は軸性にまで上昇することが分かる．

# 2 円環におけるスピンレス粒子

スピンレス粒子が半径 $R$ の円環上に拘束されている場合を考える．並進対称性がないので，運動量 $\boldsymbol{k}$ は顕わには出てこない．粒子の運動は円環上の円運動しかない，すなわち，角運動量の $z$ 成分 $L_z = -i\partial_\theta$ のみがハミルトニアンに現れることが許される．実際，運動エネルギー $H = -\nabla^2/(2m)$ を円環上で表すと

$$H(L_z) = \frac{-\partial_\theta^2}{2mR^2} = \frac{L_z^2}{2mR^2}, \quad L_z \in \mathbb{Z} \tag{5}$$

である．

# 3 二次元平面におけるスピン 1/2 粒子

ここからはスピン軌道相互作用も考慮する．二次元平面で許される量は $\boldsymbol{k}$ とスピン $\boldsymbol{s}$ となる．スピン以外の内部自由度はもたず，また，並進対称な系を考えよう．回転対称性と時間反転対称性 ($C_\infty$) からは

$$H(\boldsymbol{k}) = \alpha k^2 + \beta \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{s} + \gamma (\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{s})_z \tag{6}$$

これに加えて，もし $x$ 軸周りの二回回転対称性がある ($D_\infty$) なら $\gamma = 0$ である．あるいは，鏡映対称性があるなら ($C_{\infty v}$)，スピンが軸性ベクトルであることから $\beta = 0$ となる．

# 4 円環におけるスピン 1/2 粒子

回転対称性 ($C_\infty$) と時間反転対称性から

$$H = \alpha L_z^2 + \beta L_z \hat{\boldsymbol{r}} \cdot \boldsymbol{s} + \gamma L_z (\hat{\boldsymbol{r}} \times \boldsymbol{s})_z + \delta L_z s_z \tag{7}$$

である．実空間において，第 2 項ははりねずみ型，第 3 項は渦型のスピン配置を与える．$x$ 軸周りの 2 回対称性 ($D_\infty$) があると $\beta=0$，鏡映対称性 ($C_{\infty v}$) があると $\gamma=0$. $(x,y,z)\to(-x,y,z)$ という鏡映に対して，軌道/スピン角運動量は擬ベクトルであるから $(j_x,j_y,j_z)\to(j_x,-j_y,-j_z)$ と変換されることに注意.

具体例を考えてみる．等方的なポテンシャル $V(r)$ によるスピン軌道相互作用は $\nabla V(r)\times\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{s}=r^{-1}V'(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{s}$ に比例する．系の対称性は $D_{\infty d}$．円環上の運動では $L_z$ しか存在しないから，$r^{-1}V'(r)L_z s_z$ のみ残る．これは (7) 式の $\delta$ 項である．$z$ 方向に電場が印可されると，ラシュバスピン軌道相互作用 $\propto\boldsymbol{z}\times\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{s}=p_x s_y-p_y s_x$ が生じる．対称性は $C_{\infty v}$ に落ちる．円環上では $\partial_r$ は零となるから，$p_x s_y-p_y s_x=-L_z(s_y\sin\theta+s_x\cos\theta)=L_z\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{s}$ となるが，これは (7) 式の $\beta$ 項である．$\gamma$ 項はドレッセルハウス型のスピン軌道相互作用から生じる（はず）.

以上の議論においては，内部自由度としてスピンのみ考えてきた．しかし，固体中の電子はスピンの他に軌道・副格子などの内部自由度をもつため，許されるハミルトニアンの形が上の議論とは異なることに注意する必要がある．例えば，カーボンナノチューブであれば，$p$ 電子でありかつ副格子の自由度をもち，また，トポロジカル絶縁体であればパリティの異なる 2 軌道がある.

## 5 $\mathrm{D_{3d}}$ トポロジカル絶縁体

カルコゲン化合物 $\mathrm{P_2X_3}$ はトポロジカル絶縁体となる基本的な系として認識されるようになった．基本的，の意は表面ディラック粒子を一つだけもつ，ということである．バルクの結晶は $\mathrm{D_{3d}}$ の対称性をもち，したがって，(001) 表面は $\mathrm{C_{3v}}$ の対称性をもつことになる．よって，前節の議論から，(001) 表面のハミルトニアンは

$$H_\mathrm{t}=v_\mathrm{F}(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{s})_z, \tag{8}$$

となる．バルク結晶は空間反転対称性をもつから，裏面である $(00\bar{1})$ 面のハミルトニアンは $H_\mathrm{t}$ の空間反転から得られる．すなわち，

$$H_\mathrm{b}(\boldsymbol{k})=H_\mathrm{t}(-\boldsymbol{k})=-v_\mathrm{F}(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{s})_z, \tag{9}$$

が裏面のハミルトニアンである.

系が十分に大きい場合には $H_\mathrm{t}$ と $H_\mathrm{b}$ を独立に扱って良いが，系の大きさが表面波動関

数の侵入長（$\sim$ 1nm）程度になると，これらの混成を考えた

$$H(\boldsymbol{k}) = \begin{pmatrix} H_{\mathrm{t}}(\boldsymbol{k}) & f(\boldsymbol{k}) \\ f^{\dagger}(\boldsymbol{k}) & H_{\mathrm{b}}(\boldsymbol{k}) \end{pmatrix}, \tag{10}$$

というハミルトニアンを考えなくてはならない．混成行列 $f$ は対称性から制限される．空間反転対称性から

$$f(\boldsymbol{k}) = f^{\dagger}(-\boldsymbol{k}), \tag{11}$$

時間反転対称性から

$$f(\boldsymbol{k}) = s_y f^{*}(-\boldsymbol{k}) s_y, \tag{12}$$

(110) 鏡映対称性から

$$f(k_x, k_y) = s_x f(-k_x, k_y) s_x, \tag{13}$$

さらに，三回回転対称性も課される．これらの対称性と矛盾しないためには

$$f(\boldsymbol{k}) = f_0(k^2),\ f_0 : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}, \tag{14}$$

である．ここで $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$.