3つのスピンが作る立体角 (spin chirality) がスピンの内積および外積で表されること

2014.6.20　　鈴木　実

[spin chirality]

近接する3つのスピンが立体構造を形成し，そのスピンが見込む立体角に符号を付した値をスピンキラリティという．符号は左手系なら +，右手系なら − である，

格子点にあるキャリアのスピンがフント則によりその格子点にある原子の内核電子のスピンと一致するように制限されているような物質において（二重交換相互作用），キャリアがいくつかの格子点を経由してもとの格子点に戻る確率が無視できないような場合，一巡したスピンの方向が立体構造を作る場合，スピンの波動関数の位相は一巡したことにより付加的な位相を獲得することになる．この位相はベリー位相と言われ，ちょうどベクトルポテンシャルを経路にそって積分すると位相になるように，このベリー位相はそのスピンを持つ電子に対して仮想的な磁場の効果を示す．

最も簡単な場合が3つの格子点 i，j，k を一巡する場合で，それぞれの格子点のスピンの方向を単位ベクトル $\mathbf{n}_i$，$\mathbf{n}_j$，$\mathbf{n}_k$ で表し，軌道波動関数，スピン波動関数を $|\phi_i\rangle$，$|\mathbf{n}_i\rangle$ などで表すと，ハミルトニアンの期待値には $i \to j \to k \to i$ の移動積分 (transfer integral) を表す次の項が含まれる．

$$\langle \mathbf{n}_i, \phi_i | H_{\mathrm{DE}} | \mathbf{n}_j, \phi_j \rangle \langle \mathbf{n}_j, \phi_j | H_{\mathrm{DE}} | \mathbf{n}_k, \phi_k \rangle \langle \mathbf{n}_k, \phi_k | H_{\mathrm{DE}} | \mathbf{n}_i, \phi_i \rangle = V_{ij} V_{jk} V_{ki} \langle \mathbf{n}_i | \mathbf{n}_j \rangle \langle \mathbf{n}_j | \mathbf{n}_k \rangle \langle \mathbf{n}_k | \mathbf{n}_i \rangle \tag{1}$$

ここで，$V_{ij} = \langle \phi_i | H_{\mathrm{DE}} | \phi_j \rangle$ である．ベリー位相 Ω は右辺と，

$$\langle \mathbf{n}_i | \mathbf{n}_j \rangle \langle \mathbf{n}_j | \mathbf{n}_k \rangle \langle \mathbf{n}_k | \mathbf{n}_i \rangle = |\mathrm{Tr}\,[P_j P_k P_i]| \mathrm{e}^{\mathrm{i}\Omega} \tag{2}$$

の関係を有し，スピンの方向単位ベクトルを用いて

$$\tan \frac{\Omega}{2} = \frac{\mathbf{n}_1 \cdot (\mathbf{n}_2 \times \mathbf{n}_3)}{1 + \mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2 + \mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{n}_3 + \mathbf{n}_3 \cdot \mathbf{n}_1} \tag{3}$$

のように表される．論文には (3) は (2) から直線的に導かれると書いてあるが [1]，これも，Ω が $\mathbf{n}_1$，$\mathbf{n}_2$，$\mathbf{n}_3$ の3本のベクトルが張る立体角であることも，必ずしも自明ではないように思われる．そこで，以下では，最初に (2) 式および (3) 式の導出を具体的に示し，その後で，Ω が $\mathbf{n}_1$，$\mathbf{n}_2$，$\mathbf{n}_3$ の張る立体角であることを示す．

[(3) の導出]

射影演算子 P_j は $P_j = |\mathbf{n}_j\rangle\langle\mathbf{n}_j|$ であるから，

$$P_j P_k P_i = |\mathbf{n}_j\rangle \langle \mathbf{n}_j | \mathbf{n}_k \rangle \langle \mathbf{n}_k | \mathbf{n}_i \rangle \langle \mathbf{n}_i | \tag{4}$$

であり，これから，

$$\langle \mathbf{n}_i | \mathbf{n}_j \rangle \langle \mathbf{n}_j | \mathbf{n}_k \rangle \langle \mathbf{n}_k | \mathbf{n}_i \rangle = \langle \mathbf{n}_i | \mathbf{n}_j \rangle \langle \mathbf{n}_j | \mathbf{n}_k \rangle \langle \mathbf{n}_k | \mathbf{n}_i \rangle \langle \mathbf{n}_i | \mathbf{n}_i \rangle = \sum_{i'} \langle \mathbf{n}_{i'} | P_j P_k P_i | \mathbf{n}_{i'} \rangle = \mathrm{Tr} P_j P_k P_i \tag{5}$$

となる．ここで，$|\mathbf{n}_{i'}\rangle$ として2つの固有状態を考え，$i' \neq i$ の時に $\langle \mathbf{n}_i | \mathbf{n}_{i'} \rangle = 0$ であることを用いている．したがって，$\mathrm{Tr} P_j P_k P_i$ の偏角が Ω となる．Ω が (3) 式で表されることを示すため，まず，次の式が成り立つことを示す．

$$P_n = \frac{1}{2}(1 + \sigma_n) \tag{6}$$

$\mathbf{n}$ を極角 θ，方位角 ϕ の方向を表す単位ベクトルとし，$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ をベクトル表記したパウリの行列とすると，σ_n は $\boldsymbol{\sigma}$ の $\mathbf{n}$ 方向パウリ行列を表す．

パウリの行列成分で σ_n を表そう．

$$
\begin{aligned}
\sigma_n &= \mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma} = n_x\sigma_x + n_y\sigma_y + n_z\sigma_z = n_x\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + n_y\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ i & 0 \end{pmatrix} + n_z\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} n_z & n_x - \mathrm{i}n_y \\ n_x + \mathrm{i}n_y & -n_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_z & n_- \\ n_+ & -n_z \end{pmatrix} \qquad (7)
\end{aligned}
$$

ただし，$n_x = \cos\phi\sin\theta$，$n_y = \sin\phi\sin\theta$，$n_z = \cos\theta$，$n_\pm = n_x \pm n_y$ である．スピン $\mathbf{S}$ が $\mathbf{n}$ 方向を向いている時，スピンの $\mathbf{n}$ 方向成分は $S_n = (\hbar/2)\sigma_n$ であり，$\mathbf{n}$ 方向スピンは，固有値が 1 の場合の σ_n の固有ケット（アイコナル）$|n\rangle$ で，

$$
|n\rangle = \sqrt{\frac{1+n_z}{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \dfrac{1-n_z}{n_-} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2} \\ \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} \end{pmatrix} \qquad (8)
$$

となる．いま，任意のスピンの状態を $|a\rangle = (\alpha, \beta)$ で示すと，

$$
\begin{aligned}
P_n|n\rangle &= |n\rangle\langle n|a\rangle \\
&= \left[\sqrt{\frac{1+n_z}{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \dfrac{1-n_z}{n_-} \end{pmatrix}\right]\left[\sqrt{\frac{1+n_z}{2}}\left(1,\ \ \frac{1-n_z}{n_+}\right)\right]\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} (1+n_z)\alpha + n_-\beta \\ n_+\alpha + (1-n_z)\beta \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left[\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} n_z & n_- \\ n_+ & -n_z \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}\right] \\
&= \frac{1}{2}(1+\sigma_n) \qquad (9)
\end{aligned}
$$

が成り立つ．

以下，記述をわかりやすくするために，$i=1$，$i=2$，$i=3$ と書く．そうすると，(9) より，

$$
\begin{aligned}
P_1P_2P_3 &= \frac{1}{8}(1+\sigma_{n1})(1+\sigma_{n2})(1+\sigma_{n3}) \\
&= \frac{1}{8}[1 + (\sigma_{n1}+\sigma_{n2}+\sigma_{n3}) + (\sigma_{n2}\sigma_{n3} + \sigma_{n3}\sigma_{n1} + \sigma_{n1}\sigma_{n2}) + \sigma_{n1}\sigma_{n2}\sigma_{n3}] \qquad (10)
\end{aligned}
$$

が成り立つ．ただし，σ_{n1}，σ_{n2}，σ_{n3} は $\boldsymbol{\sigma}$ の $\mathbf{n}_1$，$\mathbf{n}_2$，$\mathbf{n}_3$ 方向成分である．$P_1P_2P_3$ の Tr は (10) の右辺各項の Tr の和になる．まず，$\sigma_{n1}\sigma_{n2}\sigma_{n3}$ の Tr から計算しよう．

$$
\begin{aligned}
\sigma_{n1}\sigma_{n2}\sigma_{n3} &= \begin{pmatrix} n_{1z} & n_{1-} \\ n_{1+} & -n_{1z} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} n_{2z} & n_{2-} \\ n_{2+} & -n_{2z} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} n_{3z} & n_{3-} \\ n_{3+} & -n_{3z} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} n_{1z}n_{2z} + n_{1-}n_{2+} & n_{1z}n_{2-} - n_{1-}n_{2z} \\ n_{1+}n_{2z} - n_{1z}n_{2+} & n_{1+}n_{2-} + n_{1z}n_{2z} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} n_{3z} & n_{3-} \\ n_{3+} & -n_{3z} \end{pmatrix} \qquad (11)
\end{aligned}
$$

となるから，$\sigma_{n1}\sigma_{n2}\sigma_{n3}$ の第 1 行第 1 列は

$$
\begin{aligned}
&(n_{1z}n_{2z} + n_{1-}n_{2+})n_{3z} + (n_{1z}n_{2-} - n_{1-}n_{2z})n_{3+} \\
=\ & n_{3z}[n_{1z}n_{2z} + (n_{1x} - \mathrm{i}n_{1y})(n_{2x} + \mathrm{i}n_{2y}) + (n_{3x} + \mathrm{i}n_{3y})[n_{1z}(n_{2x} - \mathrm{i}n_{2y}) - n_{2z}(n_{1x} - \mathrm{i}n_{1y})] \\
=\ & n_{3z}[\mathbf{n}_1\cdot\mathbf{n}_2 + \mathrm{i}(n_{1x}n_{2y} - n_{1y}n_{2x})] + n_{1z}(n_{2x} - \mathrm{i}n_{2y})(n_{3x} + \mathrm{i}n_{3y}) - n_{2z}(n_{3x} + \mathrm{i}n_{3y})(n_{1x} - \mathrm{i}n_{1y}) \\
=\ & n_{3z}\mathbf{n}_1\cdot\mathbf{n}_2 + \mathrm{i}\mathbf{n}_3\cdot(\mathbf{n}_1\times\mathbf{n}_2) + n_{3x}(n_{1z}n_{2x} - n_{1x}n_{2z}) + n_{3y}(n_{1z}n_{2y} - n_{1y}n_{2z}) \qquad (12)
\end{aligned}
$$

となる．同様に，第 2 行第 2 列は

$$
\begin{aligned}
&(n_{1+}n_{2z} - n_{1z}n_{2+})n_{3-} - (n_{1+}n_{2-} + n_{1z}n_{2z})n_{3z} \\
=\ & -n_{3z}\mathbf{n}_1\cdot\mathbf{n}_2 + \mathrm{i}\mathbf{n}_3\cdot(\mathbf{n}_1\times\mathbf{n}_2) - n_{3x}(n_{1z}n_{2x} - n_{1x}n_{2z}) - n_{3y}(n_{1z}n_{2y} - n_{1y}n_{2z}) \qquad (13)
\end{aligned}
$$

となる．(12) と (13) から Tr は，

$$\mathrm{Tr}\,[\sigma_{n1}\sigma_{n2}\sigma_{n3}] = 2i\mathbf{n}_3 \cdot (\mathbf{n}_1 \times \mathbf{n}_2) \tag{14}$$

となる．他の項の Tr は簡単に得られて，

$$\mathrm{Tr}\,[\sigma_{n1}\sigma_{n2}] = 2\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2, \quad \mathrm{Tr}\,[\sigma_{n2}\sigma_{n3}] = 2\mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{n}_3, \quad \mathrm{Tr}\,[\sigma_{n3}\sigma_{n2}] = 2\mathbf{n}_3 \cdot \mathbf{n}_2 \tag{15}$$

および，

$$\mathrm{Tr}\,[\sigma_{n1}] = \mathrm{Tr}\,[\sigma_{n2}] = \mathrm{Tr}\,[\sigma_{n3}] = 0 \tag{16}$$

となる．(14)–(16) より，

$$\mathrm{Tr}\,[P_1P_2P_3] = \frac{1}{4}[1 + \mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2 + \mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{n}_3 + \mathbf{n}_3 \cdot \mathbf{n}_2 + i\mathbf{n}_3 \cdot (\mathbf{n}_1 \times \mathbf{n}_2)] \tag{17}$$

という関係式が得られる．これから (3) 式が得られる．

[$\mathbf{n}_1$，$\mathbf{n}_2$，$\mathbf{n}_3$ の作る立体角が Ω であることの証明]

単位ベクトル $\mathbf{n}_1$，$\mathbf{n}_2$，$\mathbf{n}_3$ の作る立体角が Ω であることを示そう．$\mathbf{n}_1$，$\mathbf{n}_2$，$\mathbf{n}_3$ は，中心 O の単位球面上にある 3 つの点を示す．これを A, B, C とする．球面三角形 ABC の頂点の角度を A，B，C とする．また，A, B, C が対向する辺の長さを a，b，c とする．a，b，c は明らかに $\mathbf{n}_2$ と $\mathbf{n}_2$，$\mathbf{n}_2$ と $\mathbf{n}_3$，$\mathbf{n}_3$ と $\mathbf{n}_1$ の間の角度である．単位球面上の球面三角形の面積は，すなわち立体角は，良く知られるように [3]，球面過剰 (spherical excess)E で与えられ，E は

$$E = A + B + C - \pi \tag{18}$$

と表される．これから，E が (3) 式と同じように表されることを示せば，上の命題が証明されたことになる．

まず，(18) より，

$$\begin{aligned}\cos\frac{E}{2} &= \sin\frac{A+B+C}{2} \\ &= \sin\frac{A+B}{2}\cos\frac{C}{2} + \cos\frac{A+B}{2}\sin\frac{C}{2} \\ &= \frac{\cos\dfrac{a-b}{2}\cos^2\dfrac{C}{2} + \cos\dfrac{a+b}{2}\sin^2\dfrac{C}{2}}{\cos\dfrac{c}{2}}\end{aligned} \tag{19}$$

となる．ただし，右辺第 3 式は次の球面三角法 [3] の公式 (20)(21) を用いた．

$$\cos\frac{A+B}{2} = \sin\frac{C}{2}\,\frac{\cos\dfrac{a+b}{2}}{\cos\dfrac{c}{2}} \tag{20}$$

$$\sin\frac{A+B}{2} = \cos\frac{C}{2}\,\frac{\cos\dfrac{a-b}{2}}{\cos\dfrac{c}{2}} \tag{21}$$

$$\sin^2\frac{C}{2} = \frac{\sin(s-a)\sin(s-b)}{\sin a\,\sin b}, \quad \text{ただし，}\quad s = \frac{a+b+c}{2} \tag{22}$$

さらに，(22) を使うと，(19) は

$$\cos\frac{E}{2} = \frac{2\cos\dfrac{a}{2}\cos\dfrac{b}{2}\cos\dfrac{a-b}{2} - \sin(s-a)\sin(s-b)}{2\cos\dfrac{a}{2}\cos\dfrac{b}{2}\cos\dfrac{c}{2}} \tag{23}$$

となる．(23) の分子で，$\sin(s-a)\sin(s-b) = \cos^2[(a-b)/2] - 1/2 - (1/2)\cos c$，$2\cos(a/2)\cos(b/2) = \cos(a+b)/2 + \cos(a-b)/2$ となることに注意すると，

$$\begin{aligned}(23)\text{ の分子} &= \cos\frac{a+b}{2}\cos\frac{a-b}{2} + \frac{1}{2}\cos c + \frac{1}{2} \\ &= \frac{1}{2}(\cos a + \cos b + \cos c + 1) \end{aligned} \tag{24}$$

となる．結局，(23) と (24) から

$$\cos\frac{E}{2} = \frac{\cos a + \cos b + \cos c + 1}{4\cos\frac{a}{2}\cos\frac{b}{2}\cos\frac{c}{2}} \tag{25}$$

となる．$\tan^2 E/2 = \sec^2 E/2 - 1$ であるから，

$$\begin{aligned}\tan^2\frac{E}{2} &= \frac{2(\cos a+1)(\cos b+1)(\cos c+1) - (\cos a + \cos b + \cos c + 1)^2}{(\cos a + \cos b + \cos c + 1)^2} \\ &= \frac{1 + 2\cos a\cos b\cos c - \cos^2 a - \cos^2 b - \cos^2 c}{(\cos a + \cos b + \cos c + 1)^2}\end{aligned} \tag{26}$$

となり，したがって，

$$\tan\frac{E}{2} = \frac{\sqrt{1 + 2\cos a\cos b\cos c - \cos^2 a - \cos^2 b - \cos^2 c}}{(\cos a + \cos b + \cos c + 1)} \tag{27}$$

ここで，後で証明するように，

$$\sqrt{1 + 2\cos a\cos b\cos c - \cos^2 a - \cos^2 b - \cos^2 c} = 2\eta \tag{28}$$

が成り立つ．ただし，

$$\eta = \sqrt{\sin s\sin(s-a)\sin(s-b)\sin(s-c)} \tag{29}$$

である．したがって，

$$\tan\frac{E}{2} = \frac{2\eta}{(\cos a + \cos b + \cos c + 1)} \tag{30}$$

が成り立つ．また，これも後で証明するように，

$$\sin C = \frac{2\eta}{\sin a\sin b} \tag{31}$$

が成り立つ．

一方，球面直角三角形 ABC　($C = \pi/2$ とする) では，球面三角法により $\sin A = \sin a/\sin c$ が成り立つので [3]，球面三角形 ABC において，A から辺 BC に垂ろした垂線の長さを h とすると，

$$\sin C = \frac{\sin h}{\sin b} \tag{32}$$

が成り立つ．(31)(32) から，

$$\sin a\sin b = 2\eta \tag{33}$$

が成り立つ．以上から，(32) を (30) に代入すると，

$$\tan\frac{E}{2} = \frac{\sin a\sin h}{(\cos a + \cos b + \cos c + 1)} \tag{34}$$

という関係式が得られる．ここで，a は $\angle$BOC であり，A を通り面 BOC に直交する大円が弧 BC と交わる点を H とすると，h は $\angle$AOH である．すなわち $\sin a$ は $\sin\angle$BOC である．$\mathbf{n}_2$ と $\mathbf{n}_3$ を用いて，$\sin a = \mathbf{n}_2 \times \mathbf{n}_3$ で

ある．一方，$\sin a = \mathbf{n}_2 \times \mathbf{n}_n$ は BC を赤道とする場合の北極を指すので，$\mathbf{n}_1$ と $\mathbf{n}_2 \times \mathbf{n}_3$ の間の角度は $\pi/2 - h$ である．すなわち，$\sin h = \cos(\pi/2 - h)$ であるので，以上の 2 つの角度から，

$$\sin a \sin h = \mathbf{n}_1 \cdot (\mathbf{n}_2 \times \mathbf{n}_3) \tag{35}$$

が成り立つ．明らかに，$\cos a = \mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{n}_3$，$\cos a = \mathbf{n}_3 \cdot \mathbf{n}_1$，および $\cos a = \mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2$ であるから，(35) とこれらのことを (30) に代入することにより，

$$\tan \frac{E}{2} = \frac{\mathbf{n}_1 \cdot (\mathbf{n}_2 \times \mathbf{n}_3)}{1 + \mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2 + \mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{n}_3 + \mathbf{n}_3 \cdot \mathbf{n}_1} \tag{36}$$

が成り立つ．この式は (3) の右辺と一致する．すなわち

$$E = \Omega \tag{37}$$

が成り立つ．すなわち，ベリー位相 Ω はスピン方向を示す単位ベクトル $\mathbf{n}_1$，$\mathbf{n}_2$，$\mathbf{n}_3$ の構成する立体角と一致することを示す．

[(28) の証明]

$$\begin{aligned}
& \sin s \sin(s-a) \sin(s-b) \sin(s-c) \\
= & \frac{1}{2}[\cos a - \cos(b+c)]\frac{1}{2}[\cos(c-b) - \cos a] \\
= & \frac{1}{4}[\cos a - \cos b \cos c + \sin b \sin c][\cos b \cos c + \sin b \sin c - \cos a] \\
= & \frac{1}{4}[(\sin b \sin c)^2 - (\cos b \cos c - \cos a)^2] \\
= & \frac{1}{4}[(1-\cos b)^2(1-\cos c)^2 - (\cos b \cos c - \cos a)^2] \\
= & \frac{1}{4}(1 - \cos^2 a - \cos^2 b - \cos^2 c + 2\cos a \cos b \cos c)
\end{aligned}$$

したがって，(28) が成り立つ．

[(31) の証明]

球面三角形 ABC において，

$$\cos a = \cos b \cos c + \sin b \sin c \cos A \tag{38}$$

が成り立つ [3]．これから $\cos(b-c) - \cos a = \sin b \sin c (1 - \cos A)$ となるので，

$$\sin \frac{A}{2} = \sqrt{\frac{\sin(s-b)\sin(s-c)}{\sin b \sin c}} \tag{39}$$

同様にして，$\cos a - \cos(b+c) = \sin b \sin c(1 + \cos A)$ より，

$$\cos \frac{A}{2} = \sqrt{\frac{\sin s \sin(s-a)}{\sin b \sin c}} \tag{40}$$

(39)(40) より，

$$\sin \frac{A}{2} \cos \frac{A}{2} = \frac{\sqrt{\sin s \sin(s-a) \sin(s-b) \sin(s-c))}}{\sin b \sin c} \tag{41}$$

となる．すなわち，

$$\sin A = \frac{2\eta}{\sin b \sin c} \tag{42}$$

が成り立つ．

以上

[1] Y. Lyanda-Gellar *et al.*, Phys. Rev. B, **63**, 184426 (2001).

[2] A. van Oosterom and J. Strackee, IEEE Trans. Biomedical Eng. BME-**30**, 125 (1983).

[3] たとえば，Rob Johnson, “Spherical Trigonometry”,
http://www.whim.org/nebula/math/pdf/spheretrig.pdf