

令和5年度 修士論文

CISS 効果によりカイラル分子端に誘起される電子の
スピン状態とエナンチオ選択性の解析的研究

三重大学大学院 工学研究科 物理工学専攻

学籍番号 422M606

加藤 健晃

指導教員： 内海 裕洋 准教授

2024年3月11日

三重大学大学院 工学研究科

概要

カイラル物質を電子が透過する際、そのカイラリティに応じてアップスピン・ダウンスピンの透過率が異なる。この現象はカイラル誘起スピン選択 (chiral-induced spin selectivity : CISS) 効果と呼ばれており、スピン分極率が極めて高く、また室温で観測することができる量子現象として注目されている。CISS 効果は多くのカイラル物質で実験的に観測されているものの、理論的に決定的なモデルは未だ確立されていない。CISS 効果に関連して、カイラル物質を強磁性体基板に吸着する際にその安定性がカイラリティに応じて異なるエナンチオ選択性という性質がある。これは外的要因と無関係に分子の右手系・左手系を分別できるため応用上重要である。

本論文ではエナンチオ選択性に焦点を当てて、カイラル分子端のスピン状態について議論する。カイラル分子として DNA 分子を念頭におき、原子内スピン軌道相互作用を入れた p 軌道タイトバインディングモデルを扱う。このモデルでは時間反転対称性を破ることなく異なる種類のスピンを互いに逆方向へ輸送するスピンフィルタを実現できるが、その時間反転対称性のために分子端でスピン分極は現れない。そこで強磁性基板を模した Zeeman 磁場を印加することによって時間反転対称性を破り、分子端でカイラリティに依存する有限のスピン分極を実現した。また、あらゆる基板磁化向きに対して、カイラリティを入れ替えた時のエネルギーやスピンの期待値の差を調べ、エネルギーとスピン密度に観測可能な差が出ることを明らかにした。

目次

| | | |
|-------|-------------------------------|----|
| 1 | 緒言 | 1 |
| 1.1 | カイラル誘起スピン選択効果 | 1 |
| 1.2 | エナント選択性 | 3 |
| 1.3 | 本論文の構成 | 4 |
| 2 | p 軌道らせん分子鎖 | 5 |
| 2.1 | 系の時間反転対称性とスピン軌道相互作用, スピンフィルタ | 5 |
| 2.2 | p 軌道タイトバインディングモデルのハミルトニアン | 6 |
| 2.3 | らせん対称性 | 7 |
| 2.4 | バンド構造 | 8 |
| 2.5 | 有限系での電荷密度分布 | 10 |
| 2.6 | Rashba 型のスピン分裂 | 11 |
| 2.6.1 | 局所座標系でのハミルトニアン | 11 |
| 2.6.2 | 摂動展開 | 12 |
| 2.6.3 | Schrieffer-Wolff 変換 | 13 |
| 3 | ヘリカル状態の解析解 | 16 |
| 3.1 | ヘリカル状態の固有エネルギーと固有ベクトル | 16 |
| 3.2 | 位相項 $z_{k,p}$ | 17 |
| 3.2.1 | $\Delta_{so} = 0$ のときの波数 | 18 |
| 3.3 | u, v の表式とヘリカル状態の波動関数 | 19 |
| 3.3.1 | 右向き・左向きに進行する電子の波動関数 | 19 |
| 3.3.2 | エネルギーギャップ内のエバネッセント状態 | 20 |
| 3.4 | ヘリカル状態の波動関数 | 21 |
| 4 | 外部磁場の印加とエナント選択性 | 24 |
| 4.1 | 分子端の第 1 サイトに印加する Zeeman 磁場 | 24 |
| 4.1.1 | Δ_{so} に比べて強い磁場をかける場合 | 25 |
| 4.2 | エネルギーとスピンのカイラリティ・磁場の方向依存性 | 26 |
| 4.2.1 | DNA 分子のパラメータ | 28 |
| 5 | 結論 | 29 |
| 付録 6 | 付録 | 33 |
| | 付録 A: らせん対称性を満たす行列 J のパラメータ | 33 |
| | 付録 B: Rashba 型スピン分裂の解析計算 | 34 |
| | 付録 B.1: 局所座標系のハミルトニアンの導出 | 34 |
| | 付録 B.2 Schrieffer-Wolff 変換の計算 | 36 |
| | 付録 C: ヘリカル状態の解析解の導出 | 40 |
| | 付録 C.1 固有エネルギーの導出 | 40 |
| | 付録 C.2 位相項 $z_{k,p}$ の解析計算 | 43 |

| | |
|---|----|
| 付録 C.3 $\Delta_{so} = 0$ のときの解析計算 | 44 |
| 付録 C.4 u, v の解析計算 | 45 |
| 付録 C.5 右向き・左向きに進行する電子の波動関数の解析計算 | 46 |
| 付録 C.6 エネルギーギャップ内のエバネッセント状態の解析計算 | 48 |
| 付録 D: 線形応答理論 | 51 |
| 付録 D.1 久保公式と応答関数 | 51 |
| 付録 D.2 電流-電流相関関数 | 51 |
| 付録 D.3 相関関数 $\Phi^R(t)$ | 54 |
| 付録 D.4 分布関数を用いた表記法 | 55 |
| 付録 E: スピン軌道相互作用の導出 | 57 |
| 付録 F: 原子軌道 | 59 |
| 付録 G: Python の計算コード | 61 |

1 緒言

1.1 カイラル誘起スピン選択効果

電子はアップとダウンの2種類のスピンという属性を持つ。通常物質内を電子が透過する際、輸送される電子のアップスピン・ダウンスピンの数の割合に偏りはない。一方で、右手・左手のように鏡像関係にある構造をもつ物質（カイラル物質）の場合はそのカイラリティに応じてスピンの透過率に差が生じる。このカイラル物質に特有なスピン輸送現象をカイラル誘起スピン選択（chiral-induced spin selectivity : CISS）効果という。このような物質はスピンを選択的に分離することからスピントラップと呼ばれる。

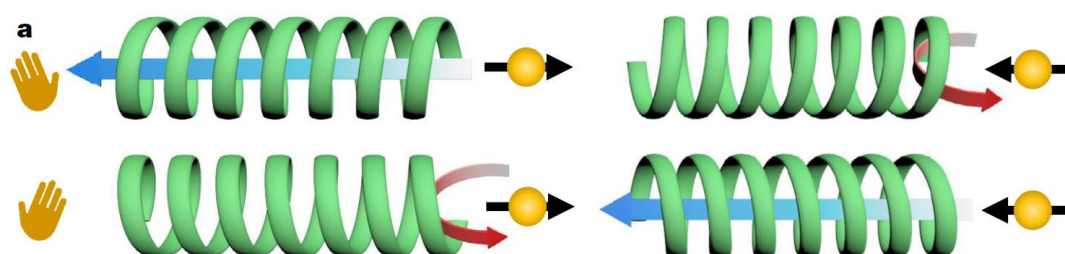


図1 CISS 効果の概念図。分子のカイラリティに応じてスピンの透過率が異なる。図は参考文献¹より転載。

CISS 効果は室温で観測できるメゾスコピックな現象として注目されており、物理・化学・生物の分野を横断して研究が行われている。CISS 効果は 1999 年に実験で観測されて以降²、様々なカイラル物質でも同様のスピン輸送特性があることが示されてきた。

DNA とオリゴペプチドを用いた実験³では、図 2 (i) のように Ni 電極にカイラル分子を吸着させ、分子の另一端に AFM の電極を付けることで分子接合を介した電流－電圧特性を測定した。図 2 (A), (B) は DNA とオリゴペプチドのスピン分極率と分子長の関係を示したものである。この結果から、分子長に比例して分極率が大きくなることや、その分極率が最大 60% にも達する大きな値をもつことが示された。さらに、DNA とオリゴペプチドはカイラリティが異なるために誘起されるスピン分極の符号が反転することも観測されている。図 2 (C)～(J) は電流－電圧特性を示している。アップとダウンのスピンをもつ電流の大きさに差があり、上段の DNA と下段のオリゴペプチドでは透過しやすいスピンの種類が逆転していることが分かる。

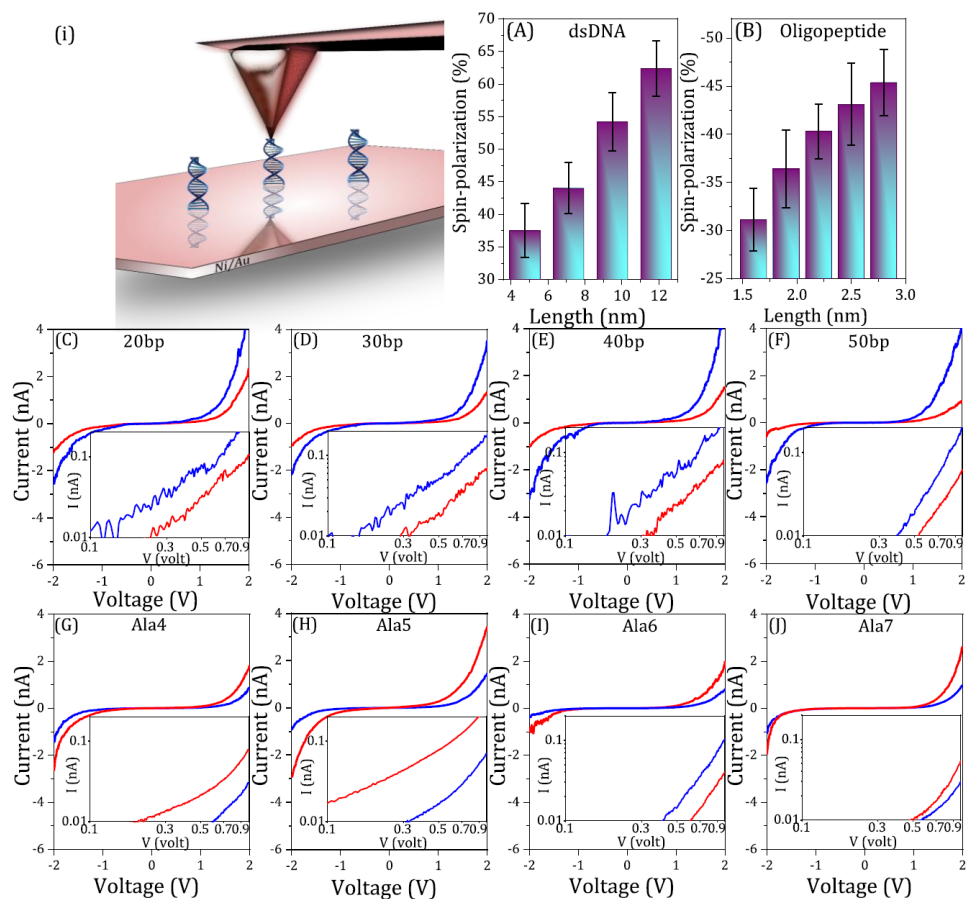


図2 CISS効果の実験による観測。(i) 実験のセットアップ。AFMの探針と金薄膜コーティングしたNi電極の間にカイラル分子を吸着させて計測する。(A), (B) カイラル分子の長さ按比例するスピンス分極。(C) – (F) DNA分子の電流–電圧特性。アップスピンとダウンスピンで流れる電流の大きさが異なる。(G) – (J) オリゴペプチドの電流–電圧特性。DNA分子の場合とカイラリティが反対になるため透過しやすいスピンの種類も反転する。図は参考文献³より転載。

図3左(a)~(c)はカイラル分子を吸着させた強磁性体基板の表面に平行な電流を流したときの磁気抵抗を測定した実験である。⁴ 図3(b)のように何も吸着させていないNi基板では基板磁化の向きで抵抗値に変化は無いが、カイラル分子を吸着させるとそのカイラリティによって抵抗値に差が現れる。すなわち、CISS効果によって分子端に蓄積したスピンの通常の磁気抵抗効果における強磁性体と同様の役割をもつことが示されている。また、図3右(c)のように温度を室温から下げていくと絶対零度に近づくにつれて抵抗値のカイラリティ依存性が小さくなることを示されている。その他にもCISS効果に関する様々な実験や、これらの現象・実験を説明するための理論が数多く提案されている。⁵

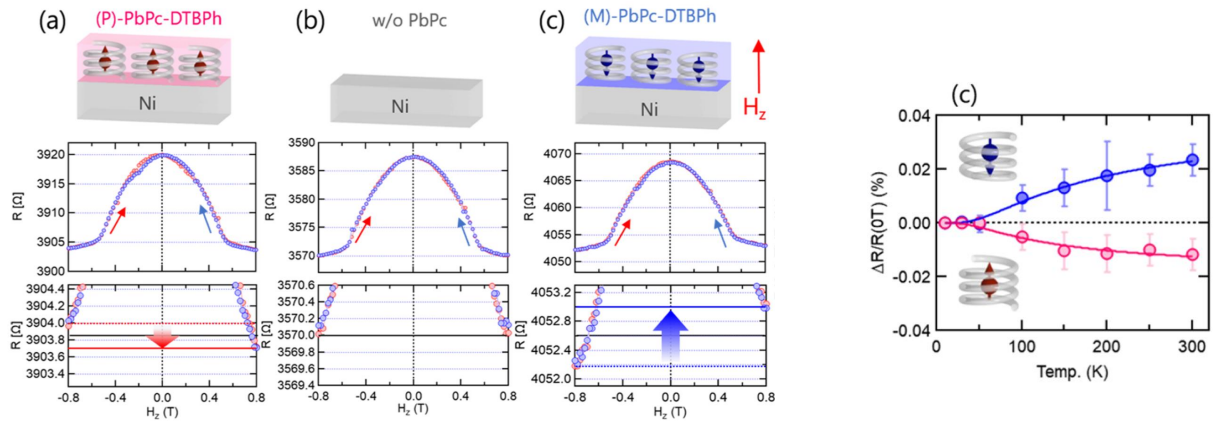


図3 CISS効果による磁気抵抗効果の観測。左図(a)~(c)カイラル分子を吸着させた強磁性体基板の抵抗値の測定。右図(c)抵抗値の温度依存性。図は参考文献⁴より転載。

1.2 エナンチオ選択性

カイラル分子を強磁性体基板の上に吸着させる際に、強磁性体基板の磁化の向きによって対応するカイラリティの分子の吸着率が選択的に大きくなる。このように特定の鏡像異性体が優先的に得られる性質をエナンチオ選択性という。例えばサリドマイドは鏡像異性体を持ち、左手型は毒性をもつが右手型には薬理効果がある。これらの物質をエナンチオ分離し利用するためにエナンチオ選択効果の応用が期待されている。

CISS効果の場合は、図4(A),(B)のように強磁性体のもつスピンと分子端に誘起されるスピンとの間の交換相互作用によってエナンチオ選択性が観測されるという理論が提案されている。⁶ 図4上(C)は基板との距離が近いほど交換エネルギーが下がること、また磁化の向きによってその大きさに差があることを示す。さらに、図4下(B)のように吸着の時間依存性も基板磁化の向きに応じて変化することが示されている。

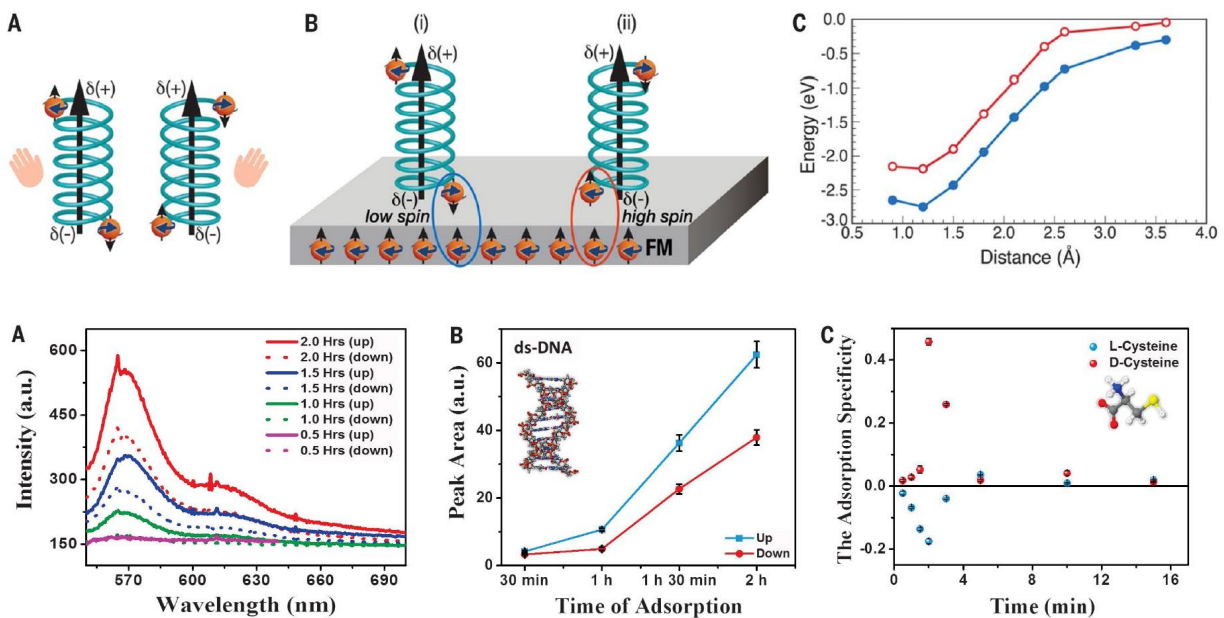


図4 上図(A),(B)エナンチオ選択性の概念図。上図(C)交換エネルギーと距離の関係。下図(A)吸着させたDNA分子の蛍光スペクトル。下図(B)基板磁化の向きに応じた吸着過程の時間依存性。下図(C)吸着特異性。図は参考文献⁶より転載。

この現象は外場などの外的要因と無関係に，強磁性体の存在のみが CISS 効果を引き起こすという特徴がある。さらにエナンチオ選択性に関して，基板への分子の吸着速度や吸着の時間発展などの動的な性質についても研究がなされている。⁷

1.3 本論文の構成

本論文では第 2 章で p 軌道らせん分子鎖を導入し，そのハミルトニアンのもつ時間反転対称性とらせん対称性について議論する。またバンド構造からスピントルタが実現すること，バンドの Rashba 型のスピン分裂について解析する。第 3 章ではヘリカル状態になっているバンドギャップ内の状態に注目し，波動関数を解析的に求める。第 4 章ではスピン分極が現れない原因である時間反転対称性を破るために Zeeman 磁場を印加することで，スピン分極を実現する。さらに，磁場の向きやカイラリティを変化させることでエナンチオ選択性との関係を調べる。

2 p 軌道らせん分子鎖

本研究ではらせん分子鎖のモデルとして p 軌道タイトバインディングモデルを用いる。^{8,9} ここでは、DNA 分子の単純なモデルとして炭素原子がらせんに沿って配置されており、各原子の p 軌道を介して電子が輸送されるモデルを考える (図 5 (a))。 z 軸をらせん軸として取り、 Δh はらせんのピッチ、 $\Delta\phi = 2\pi/N$ は z 軸からみた隣接サイト間の開き角であり、 N はピッチ 1 つ分をユニットセルとした時のセル内に含まれる原子数である。図 5 (b) は局所座標系の基底を表す。各原子のサイト n について $t(\phi_n)$ 、 $n(\phi_n)$ 、 $b(\phi_n)$ はそれぞれ Frenet-Serret 標構での接ベクトル、主法線ベクトル、従法線ベクトルに対応する。ここで、 $\phi_n = \Delta\phi \cdot n$ である。

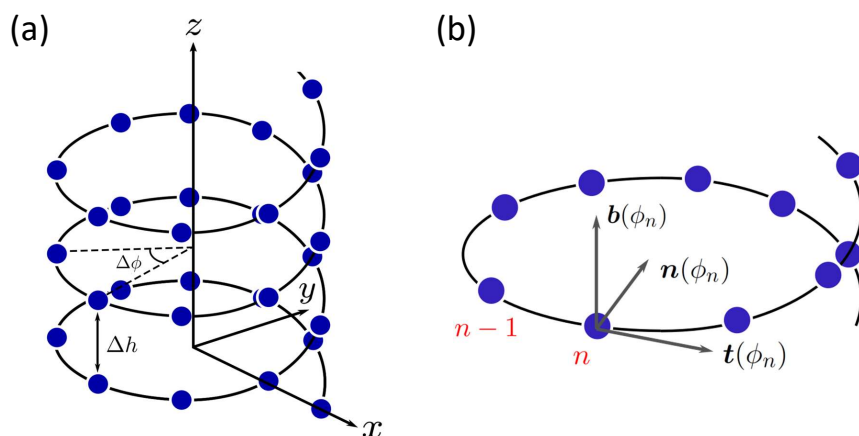


図 5 (a) DNA 分子の模式図。 Δh はピッチ、 $\Delta\phi = 2\pi/N$ は z 軸からみた開き角。(b) Frenet-Serret 標構で局所座標。 n は各原子のサイト番号を表す。

2.1 系の時間反転対称性とスピン軌道相互作用、スピンフィルタ

はじめに系の時間反転対称性について考える。¹⁰ らせん分子のみの系に着目して考えると、この系において時間反転対称性を破る因子は存在しないため、系のハミルトニアンは時間反転操作に対して偶である必要がある。

まずスピンの自由度も含めた 2 つのチャンネルがあり、1 つの軌道のみで電子の伝導がおこる場合を考える (図 6 (a))。軌道 1 つについて電子はスピンの自由度 ($\sigma_s = \uparrow, \downarrow$) と流れの向き ($\pm k$) の自由度を合わせて取り得る状態は 4 つ存在する。DNA スピンフィルタとして機能するためには、例えばアップスピンが右に、ダウンスピンが左に流れる状態が支配的である必要がある。これは $k\uparrow$ と $-k\downarrow$ を混成させ、定在波をつくることで実現でき、この状態を生むハミルトニアンは

$$V_1 = ac_{p_z; k\uparrow}^\dagger c_{p_z; -k\downarrow} + a^* c_{p_z; -k\downarrow}^\dagger c_{p_z; k\uparrow} \quad (1)$$

のように書き表せる。ここで $c_{o; k\sigma_s}^\dagger$ は生成演算子、 $c_{o; k\sigma_s}$ は消滅演算子であり、添え字はそれぞれ軌道、波数、スピンを表す。また、 a は任意の複素係数である。1 つの p 軌道だけではどのように係数を選んだとしても $\hat{\Theta} V_1 \hat{\Theta}^{-1} = -V_1$ と時間反転に対して奇となる。このとき、 $\hat{\Theta} = -i\sigma_y K$ は時間反転操作の演算子であり、 σ_i ($i = x, y, z$) は Pauli 行列、 K は複素共役演算子である。 $\hat{\Theta}$ は生成演算子に作用してそれぞれ

$$\hat{\Theta} c_{k\uparrow}^\dagger \hat{\Theta}^{-1} = c_{-k\downarrow}^\dagger \quad (2)$$

$$\hat{\Theta} c_{k\downarrow}^\dagger \hat{\Theta}^{-1} = -c_{-k\uparrow}^\dagger \quad (3)$$

となる。すなわち、式 (1) の第一項目は時間反転操作で

$$\hat{\Theta} a c_{p_z; k \uparrow}^\dagger c_{p_x; -k \downarrow} \hat{\Theta}^{-1} = -a^* c_{p_z; -k \downarrow}^\dagger c_{p_x; k \uparrow} \quad (4)$$

のように変化する。

次に2つの p 軌道がある場合で同様のことを考える (図 6 (b))。原子内スピン軌道相互作用の導入により、異なる軌道同士の間で混成まで考慮すると、先の $k \uparrow$ と $-k \downarrow$ の混成状態を表すハミルトニアンは

$$V_2 = a c_{p_z; k \uparrow}^\dagger c_{p_x; -k \downarrow} - a c_{p_x; k \uparrow}^\dagger c_{p_z; -k \downarrow} + a^* c_{p_x; -k \downarrow}^\dagger c_{p_z; k \uparrow} - a^* c_{p_z; -k \downarrow}^\dagger c_{p_x; k \uparrow} \quad (5)$$

のように書くことができる。このハミルトニアンは時間反転操作に対して $\hat{\Theta} V_2 \hat{\Theta}^{-1} = V_2$ であるから、時間反転対称性を破ることなくスピントラップを実現することができる。以下では、原子内スピン軌道相互作用を入れた2軌道のモデルを用いて議論を進める。

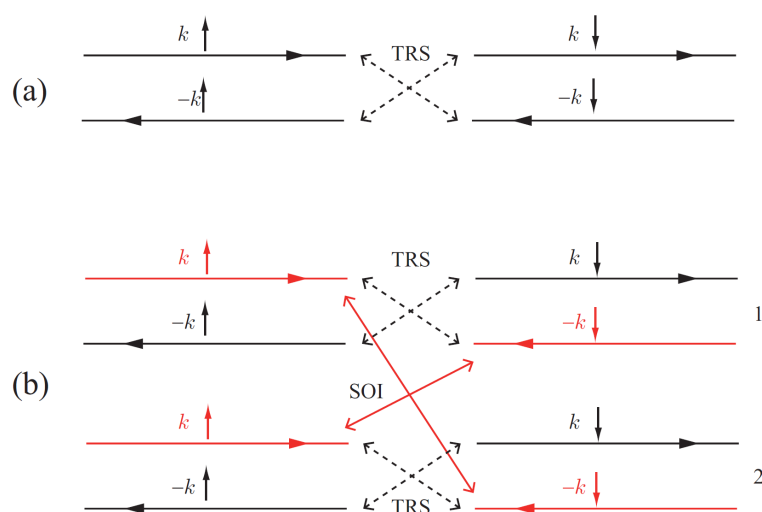


図 6 (a) 1 軌道のモデル。電子の状態を示す $k \uparrow$ と $-k \downarrow$, $-k \uparrow$ と $k \downarrow$ はそれぞれ時間反転の関係にある。(b) 2 軌道のモデル。異なる軌道同士を原子内スピン軌道相互作用 (SOI) によって結びつけることで時間反転対称性を満たしつつスピントラップを実現できる。図は参考文献¹⁰より転載。

2.2 p 軌道タイトバインディングモデルのハミルトニアン

図 5 (a) のようにらせん上に並ぶ原子の位置 $\mathbf{R}(\phi_n)$ は z 軸方向から見たらせんの半径 R を使って、

$$\mathbf{R}(\phi_n) = [R \cos(\phi_n), R \sin(p\phi_n), \Delta h \phi_n / (2\pi)] \quad (6)$$

と書くことができる。ここで、 p は分子のカイラリティで $p = 1$ のとき右巻き、 $p = -1$ のとき左巻きの分子を表す。また、らせんを特徴づける曲率 κ と振率 τ は

$$\kappa = \frac{R}{\sqrt{R^2 + [\Delta h / (2\pi)]^2}} \equiv \cos \theta, \quad \tau = \frac{p \Delta h / (2\pi)}{\sqrt{R^2 + [\Delta h / (2\pi)]^2}} \equiv p \sin \theta \quad (7)$$

で定義され、 $\kappa = \sqrt{1 - \tau^2}$ を満たす。さらに、図 5 (b) の Frenet-Serret 標構での基底ベクトルはそれぞれ

$$\mathbf{t}(\phi_n) = [-\kappa \sin(\phi_n), p \kappa \cos(\phi_n), |\tau|] \quad (8)$$

$$\mathbf{n}(\phi_n) = [-\cos(\phi_n), -p \sin(\phi_n), 0] \quad (9)$$

$$\mathbf{b}(\phi_n) = \mathbf{t}(\phi_n) \times \mathbf{n}(\phi_n) = [p |\tau| \sin(\phi_n), -|\tau| \cos(\phi_n), p \kappa] \quad (10)$$

と表される。これらを用いて p 軌道タイトバインディングモデルのハミルトニアン H_{helix} は

$$\begin{aligned}
H_{helix} = & \sum_n \left(-\tilde{c}_{n+1}^\dagger \mathbf{J} \otimes \sigma_0 \tilde{c}_n + \text{H.c.} \right) \\
& + \sum_n \left(\varepsilon_0 \tilde{c}_n^\dagger \tilde{c}_n + \Delta_{so} \tilde{c}_n^\dagger \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma} \tilde{c}_n + K_t \tilde{c}_n^\dagger \left[(\mathbf{t}(\phi_n) \cdot \mathbf{L})^2 - 1_3 \right] \otimes \sigma_0 \tilde{c}_n \right) \\
& + \sum_n \left(\Delta \varepsilon \tilde{c}_n^\dagger \left[(\mathbf{b}(\phi_n) \cdot \mathbf{L})^2 - (\mathbf{n}(\phi_n) \cdot \mathbf{L})^2 \right] \otimes \sigma_0 \tilde{c}_n \right)
\end{aligned} \tag{11}$$

と書くことができる。各項において \tilde{c}_n^\dagger は

$$\tilde{c}_n^\dagger = [\tilde{c}_{n,x\uparrow}^\dagger, \tilde{c}_{n,x\downarrow}^\dagger, \tilde{c}_{n,y\uparrow}^\dagger, \tilde{c}_{n,y\downarrow}^\dagger, \tilde{c}_{n,z\uparrow}^\dagger, \tilde{c}_{n,z\downarrow}^\dagger] \tag{12}$$

によって定義される生成演算子でサイト (n) と軌道 (p_x, p_y, p_z), スピン (\uparrow, \downarrow) の自由度をもつ。ハミルトニアン (11) の一行目は隣接サイト間の電子のホッピングを表し, \mathbf{J} は軌道空間における 3×3 の遷移行列, σ_0 はスピン空間における 2×2 の単位行列である。二行目第一項はオンサイトポテンシャルで ε_0 はその大きさ, 第二項は原子内スピン軌道相互作用で \mathbf{L} は

$$L_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad L_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{13}$$

で定義される軌道角運動量演算子, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ は Pauli 行列ベクトル, Δ_{so} はスピン軌道相互作用の大きさを表す。二行目第三項はらせんの接線方向の結晶場, 三行目は主法線方向, 従法線方向の結晶場を表す。 $K_t, \Delta \varepsilon$ は各方向成分の結晶場のエネルギーの大きさである。本論文では簡単のためオンサイトポテンシャルと接線方向以外の結晶場をゼロとしたハミルトニアン,

$$\begin{aligned}
H_{helix} = & \sum_n \left(-\tilde{c}_{n+1}^\dagger \mathbf{J} \otimes \sigma_0 \tilde{c}_n + \text{H.c.} \right. \\
& \left. + \Delta_{so} \tilde{c}_n^\dagger \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma} \tilde{c}_n + K_t \tilde{c}_n^\dagger \left[(\mathbf{t}(\phi_n) \cdot \mathbf{L})^2 - 1_3 \right] \otimes \sigma_0 \tilde{c}_n \right)
\end{aligned} \tag{14}$$

について考える。ただし, このハミルトニアンが時間反転対称性を満たしつつスピンフィルタとなるためには特別なパラメータを選ぶ必要がある。以下では, 対称性に基づいた各パラメータに対する制限について述べる。

2.3 らせん対称性

式 (14) に関して, らせんの対称性に基づくパラメータの自由度を調べる。らせん対称性とは, 無限長さの原子鎖において系のハミルトニアンが回転と並進の操作によって不変であるということである。¹¹ すなわち, サイトの並進演算子 \hat{T} と回転角 $\Delta\phi$ の回転演算子 $\hat{D}_z(p\Delta\phi)$ に対して

$$\hat{D}_z(p\Delta\phi) \hat{T} H_{helix} \hat{T}^{-1} \hat{D}_z^{-1}(p\Delta\phi) = H_{helix} \tag{15}$$

を満足する必要がある。並進演算子 \hat{T} はサイトの番号をひとつずらす操作であり, 消滅演算子 \tilde{c}_{n,o,σ_s} に作用して

$$\hat{T} \tilde{c}_{n,o,\sigma_s} \hat{T}^{-1} = \tilde{c}_{n+1,o,\sigma_s} \tag{16}$$

とサイト番号 n を 1 だけ増加させる。一方で, z 軸まわりの回転演算子 $\hat{D}_z(p\Delta\phi)$ は

$$\hat{D}_z(p\Delta\phi) = e^{-i(\hat{L}_z + \hat{S}_z)p\Delta\phi} \tag{17}$$

で定義され, 消滅演算子 \tilde{c}_{n,o,σ_s} に作用して

$$\hat{D}_z(p\Delta\phi) \tilde{c}_{n,o,\sigma_s} \hat{D}_z^{-1}(p\Delta\phi) = \left[e^{i\hat{L}_z p\Delta\phi} \otimes e^{i\hat{S}_z p\Delta\phi} \right] \tilde{c}_{n,o,\sigma_s} \tag{18}$$

となる。ここで、 $\hat{L}_z = \sum_n \tilde{c}_n^\dagger (L_z \otimes \mathbf{1}_2) \tilde{c}_n$ かつ $\hat{S}_z = \sum_n \tilde{c}_n^\dagger (\mathbf{1}_3 \otimes S_z) \tilde{c}_n$ は多体の演算子を表し、 $S_z = \sigma_z/2$ である。この並進と回転の操作をあわせてらせん操作と呼ぶ。

以下では、ハミルトニアンにらせん操作をした場合の各項の制限について論じる。スピン軌道相互作用の項に関しては $[L_z + S_z, \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}] = 0$ よりらせん操作において変化しない。異方性の項も

$$e^{-iL_z p \Delta \phi} [\mathbf{t}(\phi_n) \cdot \mathbf{L}] e^{iL_z p \Delta \phi} = \mathbf{t}(\phi_{n+1}) \cdot \mathbf{L} \quad (19)$$

より変化しない。一方で、ホッピングの項はらせん操作で

$$\hat{D}_z(p \Delta \phi) \hat{T} \left[\tilde{c}_{n+1}^\dagger \mathbf{J} \otimes \sigma_0 \tilde{c}_n \right] \hat{T}^{-1} \hat{D}_z^{-1}(p \Delta \phi) = \tilde{c}_{n+2}^\dagger \left(e^{-iL_z p \Delta \phi} \mathbf{J} e^{iL_z p \Delta \phi} \right) \otimes \sigma_0 \tilde{c}_{n+1} \quad (20)$$

となるので、らせん対称性を満足するためには

$$\mathbf{J} = e^{-iL_z p \Delta \phi} \mathbf{J} e^{iL_z p \Delta \phi} \quad (21)$$

である必要がある。すなわち行列 \mathbf{J} は

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & 0 \\ -J_2 & J_1 & 0 \\ 0 & 0 & J_3 \end{pmatrix} \quad (22)$$

のように3つのパラメータで決定される（付録 A 参照）。また、時間反転対称性 $\hat{\Theta} \mathbf{J} \hat{\Theta}^{-1} = \mathbf{J}$ を考慮すると、これらのパラメータは実数に限られる。

2.4 バンド構造

図 7 は式 (14) のハミルトニアンを Fourier 変換し、周期的境界条件を課して描いたバンド図を様々なパラメータで比較したものである。この図において色はスピンの z 成分の期待値で、赤はアップスピン、青はダウンスピンに対応する。すべての図においてスピン軌道相互作用の大きさは $\Delta_{so} = 0.4J \approx 10\text{meV}$ に取っており、これはカーボンナノチューブにおける原子内スピン軌道相互作用を基準にしている。¹² このときバンドの幅はおおよそ $4J \approx 100\text{meV}$ であり、¹³ 接線方向の結晶場を十分大きく ($K_T = 7J$) 取ることでバンドは上下に分裂する。これは下側が σ 結合由来のバンド、上側は π 結合由来のバンドであることを意味している。上側のバンドでは、スピン軌道相互作用によって準位反発が生じ、このエネルギーギャップ内でヘリカル状態になっている。ここで、ヘリカル状態とは異符号のスピンのそれぞれ逆方向に流れている状態のことを表す。実際、バンド図は縦軸がエネルギー、横軸が波数であるから、その傾きは群速度

$$v_g \equiv \frac{\partial \omega(k)}{\partial k} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k} \quad (23)$$

に対応する。ここで $E(k)$ は Fourier 変換したハミルトニアンのエネルギー固有値 $H(k)|E_k\rangle = E(k)|E_k\rangle$ である。例えば正のバンドの傾きが右向きを表しているとする、図 7 (a) の下側のギャップ内に含まれるエネルギーをもつ電子はアップスピンの左向きに、ダウンスピンの右向きに進んでいる状態だと考えることができる。

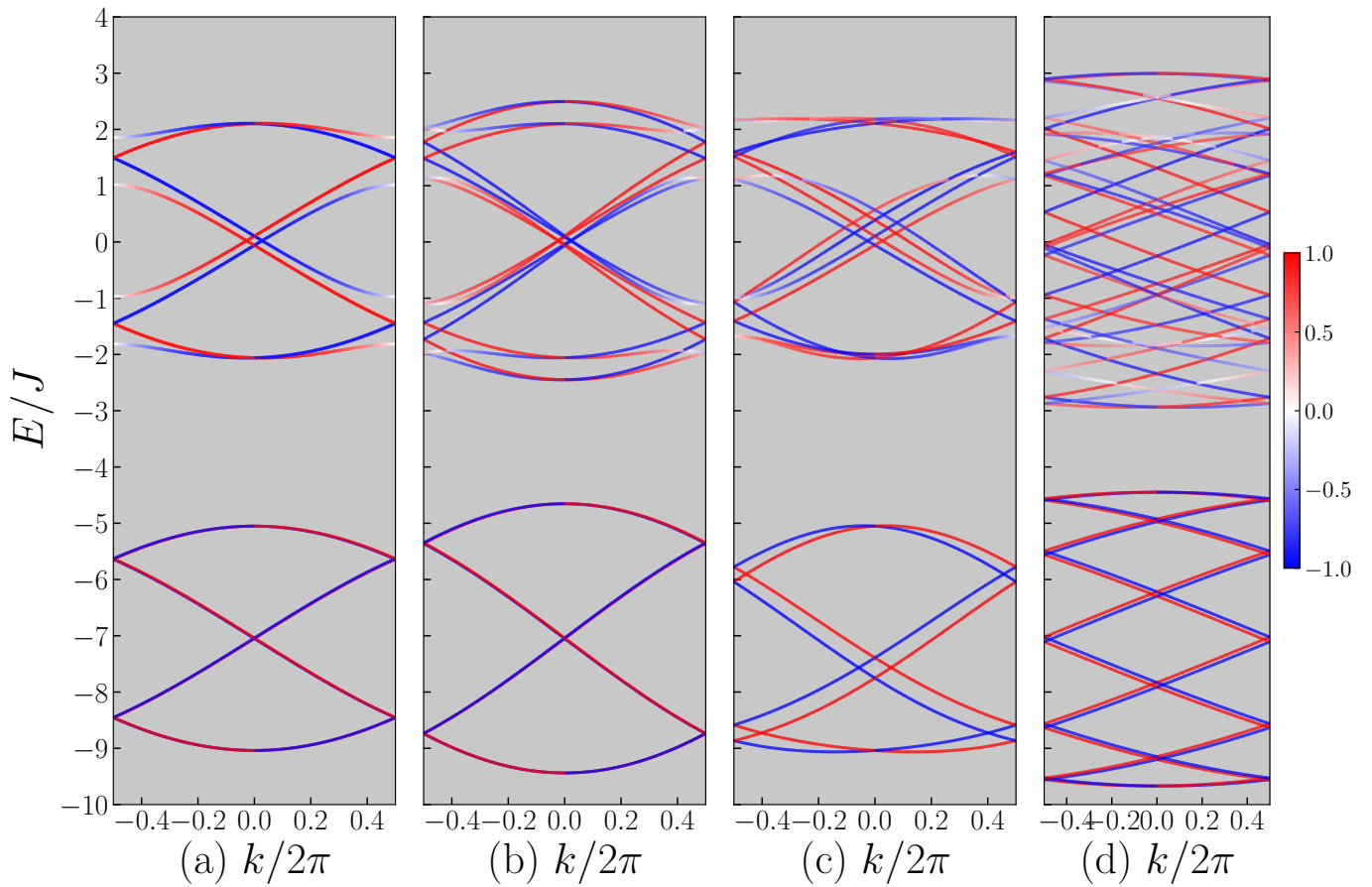


図7 様々なパラメータでのバンド構造。(a) $\alpha = 1$, $\varphi = -\Delta\phi$, $\tau = 0$, $N = 4$, (b) $\alpha = \sqrt{2}$, $\varphi = -\pi/2$, $\tau = 0$, $N = 4$, (c) $\alpha = \sqrt{2}$, $\varphi = -\pi/2$, $\tau = 0.48$, $N = 4$, (d) $\alpha = \sqrt{2}$, $\varphi = -\pi/2$, $\tau = 0.48$, $N = 10$ 。その他のパラメータは $p = 1$, $\Delta_{s0} = 0.4J$, $K_t = 7J$ にすべて固定している。図は参考文献¹⁰より転載。

この章ではホッピングの行列 \mathbf{J} のパラメータを変えたときのバンド構造の変化を調べる。ここでは行列 \mathbf{J} を

$$\mathbf{J} = J \begin{pmatrix} \alpha \cos \varphi & \alpha \sin \varphi & 0 \\ -\alpha \sin \varphi & \alpha \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (24)$$

のように任意の実数パラメータ J , α , φ で表す。

図7(a)はスピントリプルになる理想的なパラメータとして $\alpha = 1$, $\varphi = -\Delta\phi$, $\tau = 0$ を選んだ時のバンド構造である。¹⁰ これに対して図7(b)は $\alpha = 1.2$ と選んだ場合で、 α を大きくするにつれバンド幅も広がっていることがわかる。ヘリカル状態も図7(a)同様にスピントリプル相互作用による準位反発が起きているエネルギー領域で観測できる。ここまでは振率を $\tau = 0$ としており、これはピッチ $\Delta h = 0$ という理想的な状態に対応しているが、 Δh が有限の値をもつ場合であっても図7(c), (d)のようにヘリカル状態を崩すことはない。

図7(c)は $\varphi \neq -\Delta\phi$ と選んだ時のバンド構造である。 $\varphi = -\Delta\phi$ からのずれは軌道間の混成を引き起こし、下側のバンドのような Rashba 型のスピントリプルが現れる。この分裂の大きさは $(\Delta_{s0}/K_t)J$ 程度であり、原子内スピントリプル相互作用 Δ_{s0} に比べても小さい。

図7(d)はDNA分子のパラメータに近い値を用いたときのバンド構造である。ユニットセルに含まれる原子数 $N = 10$ はDNA分子の1ピッチあたりの塩基対の数に対応する。振率 $\tau = 0.48$ はB型DNAの半径 $R = 1\text{nm}$, ピッチ $\Delta h = 3.4\text{nm}$ から算出した値である。有限の振率はヘリカル状態のエネルギー幅を $\tau\Delta_{s0}$ 程度小さくする。⁹

2.5 有限系での電荷密度分布

次に有限系の場合を考える。実際の実験³において DNA 分子の長さは 5~15nm 程度である。DNA 分子の 1 ピッチあたりに塩基対が 10 個含まれるとき、分子全体では塩基対の総数は 15~45 個になる。図 8 (b) は図 8 (a) のバンド構造を持つらせん分子のハミルトニアンを有限系にしたときに、各サイトごとの電荷分布を示したものである。有限系において、分子の長さをユニットセルの個数 M を使ってあらわす。すなわち、有限系の場合の全サイト数は MN 個である。ここで局所的な電荷密度を

$$\langle \rho_n \rangle = \sum_E f(E) \langle E | \rho_n | E \rangle, \quad (25)$$

$$\rho_n = \Pi_n \otimes I_3 \otimes \sigma_0 \quad (26)$$

で定義する。ここで、射影演算子 Π_n は $MN \times MN$ 行列 $(\Pi_n)_{i,j} = \delta_{i,n} \delta_{j,n}$ で定義し、固有ベクトル $|E\rangle$ は $H|E\rangle = E|E\rangle$ を満たす。また、電子密度は Fermi-Dirac 分布関数 $f(E) = 1/(e^{(E-E_F)/k_B T} + 1)$ に従う。ただし、 k_B は Boltzmann 定数、 T は絶対温度である。図 8 における数値計算では理想状態として温度を絶対零度 $T = 0$ に選ぶ。さらに Fermi 準位は準位反発の中心 $E_F = E_{0,-}$ (破線部) にあるものとして考える。

図 8 (b-1) と (b-2) において黒の破線は $\Delta_{so} = 0.4J$ 、赤の実線は $\Delta_{so} = 0$ の時の数値計算の結果である。この結果から、スピン軌道相互作用がある場合の方がバルクでの振動が抑えられ、分子端への電荷集中が強められることが分かる。また、この電荷密度分布はカイラリティに依存しない。

ひとつの原子軌道には最大 2 つの電子が入りうるため、Fermi 準位を図 8 (a) の破線の値に選んだ場合に下側のバンドでは電子が完全に占有されている。一方で上側のバンドは、バンド幅の約 4 分の 1 のところに Fermi 準位があるため、最大 4 個の電子が入るうち平均的には 1 個の電子が存在している。これが図 8 (b) において電荷密度が 3 付近で振動している理由である。

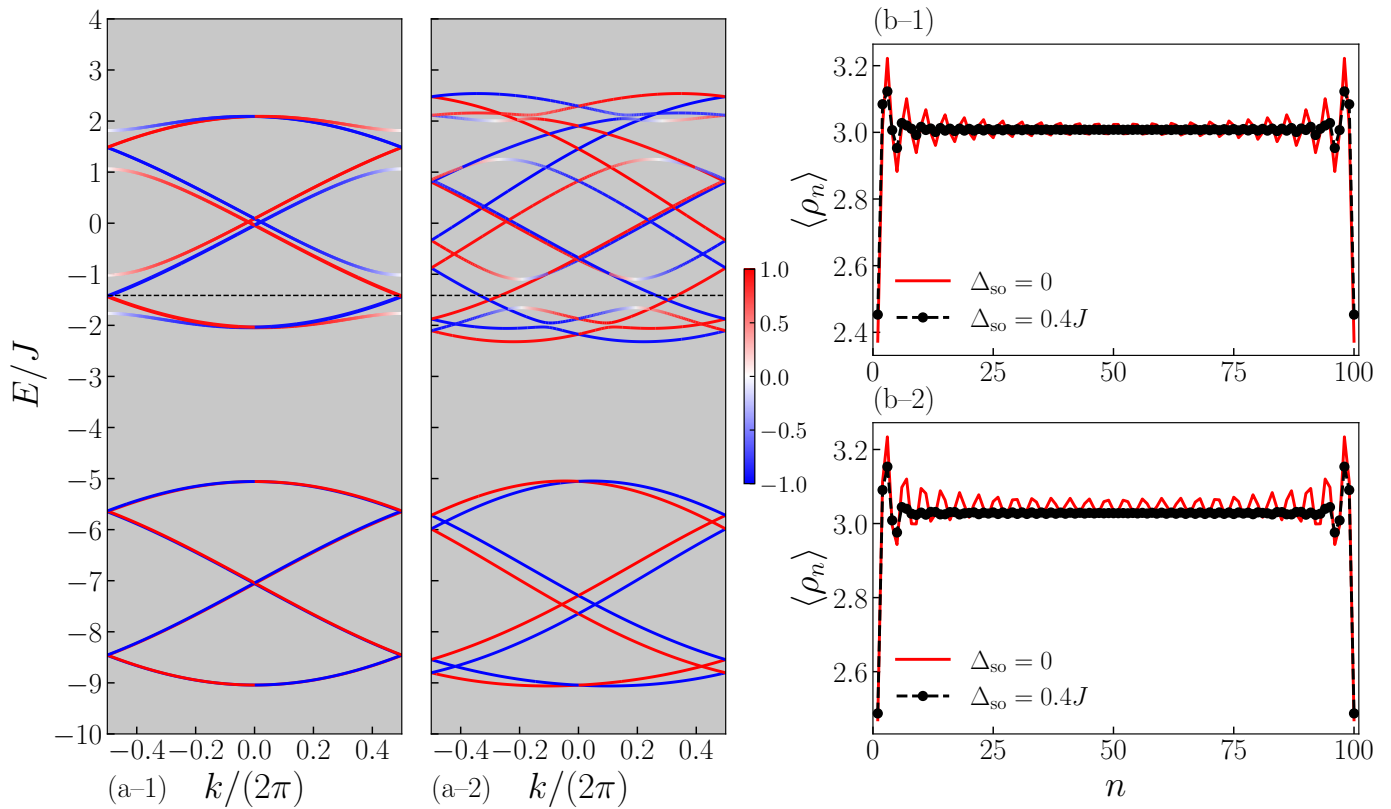


図8 (a-1,2) バンド構造。(a-1)では $\alpha=1, \varphi=\Delta\phi, \tau=0$ とし、(a-2)では $\alpha=\sqrt{2}, \varphi=\Delta\phi/2, \tau=0.48$ と選んでいる。その他のパラメータ $p=1, K_t=7J$ は共通である。バンドはスピンの z 成分の期待値によって色付けしている。(b-1,2) $T=0$ で $M=25, N=4$ の有限分子において電子が Fermi エネルギー $E_F = -2J \cos \frac{\pi}{N}$ まで占有されているときの電荷密度の和。(b-1,2) のパラメータは (a-1,2) のパラメータと対応しており、Fermi エネルギーは図 (a-1,2) に破線で示している。黒の破線はスピン軌道相互作用 $\Delta_{so}=0.4J$ のとき、赤の実線は $\Delta_{so}=0$ のときの電荷密度である。図は参考文献⁸より転載。

2.6 Rashba 型のスピン分裂

この章では図 7 (c) や図 8 (a-2) のように式 (24) の行列 \mathbf{J} で $\varphi \neq -\Delta\phi$ とパラメータを選んだ時にバンドがスピン分裂する要因について詳しく述べる。

2.6.1 局所座標系でのハミルトニアン

まずは式 (14) のハミルトニアンを局所座標系の表示に書きかえる (計算の詳細は付録 B.1 参照)。座標変換の回転演算子 O_n は消滅演算子 \tilde{c}_n に対して

$$c_n = O_n \tilde{c}_n \quad (27)$$

のように作用する。 c_n は局所座標系の消滅演算子、 \tilde{c}_n は元の座標系での消滅演算子であり、

$$O_n = e^{iL_x \theta_p} e^{iL_z p \phi_n} \quad (28)$$

は x 軸まわり、 z 軸まわりそれぞれの回転操作を表す。ここで、 θ_p は $\theta_{p=1} = \theta, \theta_{p=-1} = \pi - \theta$ であり、 θ は式 (7) で定義される。振率 $\tau=0$ ($\kappa=1$) の場合を仮定すると、回転演算子 O_n は行列の形で

$$O_n = \begin{pmatrix} \cos(p\phi_n) & \sin(p\phi_n) & 0 \\ -p \sin(p\phi_n) & p \cos(p\phi_n) & 0 \\ 0 & 0 & p \end{pmatrix} \quad (29)$$

のように書き表すことができる。したがって、式 (14) は局所座標系で

$$H = \sum_n \left(-c_{n+1}^\dagger O_{n+1} \mathbf{J} \otimes \sigma_0 O_n^{-1} c_n + \text{H.c.} \right. \\ \left. + \Delta_{\text{so}} c_n^\dagger O_n \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma} O_n^{-1} c_n + K_t c_n^\dagger O_n \left[(\mathbf{t}(\phi_n) \cdot \mathbf{L})^2 - \mathbf{1}_3 \right] \otimes \sigma_0 O_n^{-1} c_n \right) \quad (30)$$

と書きかえられる。

ホッピングの行列 \mathbf{J} に関しては局所座標での行列を $\tilde{\mathbf{J}}$ とすると、回転操作によって

$$\tilde{\mathbf{J}} = O_{n+1} \mathbf{J} O_n^{-1} = \begin{pmatrix} J_1 \cos(p\phi) - J_2 \sin(p\phi) & p(J_1 \sin(p\phi) + J_2 \cos(p\phi)) & 0 \\ -p(J_1 \sin(p\phi) + J_2 \cos(p\phi)) & J_1 \cos(p\phi) - J_2 \sin(p\phi) & 0 \\ 0 & 0 & J_3 \end{pmatrix}$$

のように変化する。 $\tilde{\mathbf{J}}$ は $J_1 = J \cos(p\phi)$, $J_2 = -J \sin(p\phi)$, $J_3 = J$ とパラメータ選ぶことで局所座標系で対角行列 $\tilde{\mathbf{J}} = J \mathbf{1}_3$ にすることができる。

スピン軌道相互作用の項に関して、回転演算子は軌道の空間のみに作用して

$$O_n \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} O_n^{-1} = (O_n \mathbf{L} O_n^{-1}) \cdot \mathbf{S} \equiv \tilde{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{S} \quad (31)$$

のように変化する。ここで局所座標での角運動量演算子ベクトルを $\tilde{\mathbf{L}}$ と定義する。したがってスピン軌道相互作用の項は局所座標系で

$$\tilde{\mathbf{L}} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -ip & 0 & 0 & pe^{-ip\phi_n} \\ 0 & 0 & 0 & ip & -pe^{ip\phi_n} & 0 \\ ip & 0 & 0 & 0 & 0 & -ie^{-ip\phi_n} \\ 0 & -ip & 0 & 0 & -ie^{ip\phi_n} & 0 \\ 0 & -pe^{-ip\phi_n} & 0 & ie^{-ip\phi_n} & 0 & 0 \\ pe^{ip\phi_n} & 0 & ie^{ip\phi_n} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (32)$$

と書くことができる。

図 5 (b) における $t(\phi_n)$, $n(\phi_n)$, $b(\phi_n)$ はそれぞれ局所座標系での y 軸, $-x$ 軸, z 軸に対応する。すなわち、接線方向に関しては $\mathbf{t}(\phi_n) \cdot \mathbf{L} = O_n^{-1} L_y O_n \equiv \tilde{L}'_y$ であり、異方性の項は

$$\tilde{c}_n^\dagger \left[(\mathbf{t}(\phi_n) \cdot \mathbf{L})^2 - \mathbf{1}_3 \right] \otimes \sigma_0 \tilde{c}_n = -c_n^\dagger |y\rangle \langle y| c_n \quad (33)$$

と書きかえられる。

結果として、局所座標系でのハミルトニアンは

$$H = \sum_n \left(-c_{n+1}^\dagger \tilde{\mathbf{J}} \otimes \sigma_0 c_n + \text{H.c.} + \Delta_{\text{so}} c_n^\dagger \tilde{\mathbf{L}} \cdot \boldsymbol{\sigma} c_n - K_t c_n^\dagger |y\rangle \langle y| \otimes \sigma_0 c_n \right) \quad (34)$$

と表される。

2.6.2 摂動展開

ここでは行列 $\tilde{\mathbf{J}}$ の非対角項を摂動として扱う。特に、図 7 や図 8 の下側のバンドに着目して解析するため、消滅演算子を

$$c_n = [c_{n;x\uparrow}, c_{n;x\downarrow}, c_{n;y\uparrow}, c_{n;y\downarrow}, c_{n;z\uparrow}, c_{n;z\downarrow}] \quad (35)$$

$$= [c_{n;x\uparrow}, c_{n;x\downarrow}, 0, 0, c_{n;z\uparrow}, c_{n;z\downarrow}] + [0, 0, c_{n;y\uparrow}, c_{n;y\downarrow}, 0, 0] \quad (36)$$

$$= c_{n;xz} + c_{n;y} \quad (37)$$

のように、局所座標系での x, z 成分と y 成分に分ける。また、簡単のためカイラリティは $p = 1$ に固定する。改めてハミルトニアンを行列形式で書き下すと

$$\begin{aligned}
H = \sum_n \left\{ [-c_{n+1}^\dagger \begin{pmatrix} J_1 \cos \phi - J_2 \sin \phi & J_1 \sin \phi + J_2 \cos \phi & 0 \\ -J_1 \sin \phi - J_2 \cos \phi & J_1 \cos \phi - J_2 \sin \phi & 0 \\ 0 & 0 & J_3 \end{pmatrix} \otimes \sigma_0 c_n + \text{H.c.}] \right. \\
+ \Delta_{\text{so}} c_n^\dagger \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 & 0 & e^{-i\phi_n} \\ 0 & 0 & 0 & i & -e^{i\phi_n} & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 & 0 & -ie^{-i\phi_n} \\ 0 & -i & 0 & 0 & -ie^{i\phi_n} & 0 \\ 0 & -e^{-i\phi_n} & 0 & ie^{-i\phi_n} & 0 & 0 \\ e^{i\phi_n} & 0 & ie^{i\phi_n} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} c_n \\
\left. + c_n^\dagger \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & K_t & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \sigma_0 c_n \right\} \quad (38)
\end{aligned}$$

である。まず、ハミルトニアンの対角項 H_{xz} と H_y を書き出すと、

$$\begin{aligned}
H_{xz} = \sum_n \left\{ [-c_{n+1,xz}^\dagger \begin{pmatrix} J_1 \cos \phi - J_2 \sin \phi & 0 \\ 0 & J_3 \end{pmatrix} \otimes \sigma_0 c_{n,xz} + \text{H.c.}] \right. \\
\left. + \Delta_{\text{so}} c_{n,xz}^\dagger \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\phi_n} \\ -e^{i\phi_n} & 0 \end{pmatrix} c_{n,xz} \right\} \quad (39)
\end{aligned}$$

$$H_y = \sum_n \left\{ [-c_{n+1,y}^\dagger (J_1 \cos \phi - J_2 \sin \phi) \otimes \sigma_0 c_{n,y} + \text{H.c.}] + K_t c_{n,y}^\dagger c_{n,y} \right\} \quad (40)$$

となる。一方で、非対角項 $V_{xz,y}$ と $V_{y,xz}$ は

$$\begin{aligned}
V_{xz,y} = \sum_n \left\{ [-c_{n+1,xz}^\dagger \begin{pmatrix} J_1 \sin \phi + J_2 \cos \phi \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \sigma_0 c_{n,y} + \text{H.c.}] \right. \\
\left. + \Delta_{\text{so}} c_{n,xz}^\dagger \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \\ 0 & ie^{-i\phi_n} \\ ie^{i\phi_n} & 0 \end{pmatrix} c_{n,y} \right\} \quad (41)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
V_{y,xz} = \sum_n \left\{ [-c_{n+1,y}^\dagger (-J_1 \sin \phi - J_2 \cos \phi, 0) \otimes \sigma_0 c_{n,xz} + \text{H.c.}] \right. \\
\left. + \Delta_{\text{so}} c_{n,y}^\dagger \begin{pmatrix} i & 0 & 0 & -ie^{-i\phi_n} \\ 0 & -i & -ie^{i\phi_n} & 0 \end{pmatrix} c_{n,xz} \right\} \quad (42)
\end{aligned}$$

である。このように、ハミルトニアンをブロック対角項 H_{xz} , H_y と非対角項 $V_{xz,y}$ と $V_{y,xz}$ に分けることが出来た。以下では、非対角項を摂動として扱うことでバンドの Rashba 型のスピン分裂が生じることを示す。

2.6.3 Schrieffer-Wolff 変換

はじめに一般的な形式から考えることとする。ハミルトニアンが

$$H = H_0 + V \quad (43)$$

のようにブロック対角項と非対角項に分けられるとき、あるユニタリ演算子 $U = e^S$ を用いてハミルトニアンを

$$H' = e^{-S} H e^S \quad (44)$$

$$= H_0 + V + [H_0, S] + [V, S] + \frac{1}{2} [[H_0, S], S] + \frac{1}{2} [[V, S], S] + \dots \quad (45)$$

のようにユニタリ変換する。ここで、 $V + [H_0, S] = 0$ となることを要請し、 H' がさらに別のあるユニタリ変換によって H'' に変換されるとする。このとき H_0 は変換によって完全に対角化され、 H'_0 になるとする。

$V' + [H'_0, S'] = 0$ の要請から S' は V' を用いて

$$S'_{ij} = \frac{V'_{ij}}{d_j - d_i} \quad (46)$$

のように表せる。結果として、ユニタリ変換したハミルトニアン H'' は V' の 2 次までのオーダーで

$$H'' = H'_0 + \frac{1}{2}[V', S'] + \mathcal{O}(V'^3) \quad (47)$$

となり、摂動の行列 V' のみを用いるとこのハミルトニアンは

$$H''_{ij} = d_i \delta_{ij} + \frac{1}{2} \sum_k V'_{ik} V'_{kj} \left(\frac{1}{d_i - d_k} + \frac{1}{d_j - d_k} \right) + \mathcal{O}(V'^3) \quad (48)$$

$$\approx d_i \delta_{ij} + \frac{1}{2} \sum_k V'_{ik} V'_{kj} \left(\frac{1}{K_t} + \frac{1}{K_t} \right) + \mathcal{O}(V'^3) \quad (49)$$

という形に書き表せる。最後の変形ではハミルトニアンの対角項が本論文のモデルで結晶場のエネルギーに対応し、局所座標系での y 方向に十分大きなエネルギーをもつことを考慮して K_t で近似した。 H'' を再びユニタリ変換をすることで H' に戻すと

$$H' \simeq H_0 + \frac{V^2}{K_t} \quad (50)$$

となる。

本論文のモデルにおいてブロック対角項 H_0 と非対角項 V にはそれぞれ

$$H_0 = H_{xz} + H_y, \quad V = V_{xz;y} + V_{y;xz} \quad (51)$$

が対応している。以下では p_y 軌道のスピン分裂についてのみ考える。すなわち p_y 軌道部分のハミルトニアンの Schrieffer-Wolff 変換 $H_{yy} = H_y + V_{y;xz} V_{xz;y} / K_t$ を行う。この Schrieffer-Wolff 変換をした H_{yy} を書き下すと

$$\begin{aligned} H_{yy} = \sum_n \left\{ & [-\mathcal{J}_- c_{n+1;y}^\dagger \sigma_0 c_{n;y} + \text{H.c.}] + K_t c_{n;y}^\dagger \sigma_0 c_{n;y} \right. \\ & + \frac{2i\Delta_{\text{so}} \mathcal{J}_+}{K_t} [-c_{n+1;y}^\dagger \sigma_z c_{n;y} + c_{n;y}^\dagger \sigma_z c_{n+1;y}] \\ & \left. - \frac{\mathcal{J}_+^2}{K_t} [c_{n;y}^\dagger \sigma_0 c_{n;y} + c_{n+1;y}^\dagger \sigma_0 c_{n+1;y}] + \frac{2\Delta_{\text{so}}^2}{K_t} c_{n;y}^\dagger \sigma_0 c_{n;y} \right\} \end{aligned} \quad (52)$$

である。ここで、

$$\mathcal{J}_+ = J_1 \sin \phi + J_2 \cos \phi \quad (53)$$

$$\mathcal{J}_- = J_1 \sin \phi - J_2 \cos \phi \quad (54)$$

である。このハミルトニアンに Fourier 変換

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{MN}} \sum_{l=1}^{MN} e^{ik_l n/N} c_{k_l}, \quad k_l = \frac{2\pi l}{M} \quad (55)$$

を施すと、生成消滅演算子は

$$c_{n+1}^\dagger c_n = \frac{1}{MN} \sum_{l,m=1}^{MN} e^{-ik_l(n+1)/N} e^{ik_m n/N} c_{k_l}^\dagger c_{k_m} = \sum_{l=1}^{MN} e^{-ik_l/N} c_{k_l}^\dagger c_{k_l} \quad (56)$$

のように変化する。ここでは全 MN サイトの原子鎖に周期的境界条件を適用する。したがって Fourier 変換後のハミルトニアン $H_{yy}(k)$ は

$$H_{yy}(k) = \sum_l c_{k;y}^\dagger \left(\left[-2\mathcal{J}_- \cos \frac{k_l}{N} + K_t - \frac{2\mathcal{J}_+^2}{K_t} + \frac{2\Delta_{\text{so}}^2}{K_t} \right] \sigma_0 - \left[\frac{4\Delta_{\text{so}} \mathcal{J}_+}{K_t} \sin \frac{k_l}{N} \right] \sigma_z \right) c_{k;y} \quad (57)$$

と書け、このハミルトニアン固有エネルギーは

$$E_{yy} = \mathcal{A} \cos(k \pm \tilde{\theta}) \phi + K_t + \frac{2\mathcal{J}_+^2}{K_t} + \frac{2\Delta_{so}^2}{K_t} \quad (58)$$

と表される。ここで、 $k = k_\ell / (2\pi)$, $\tilde{\theta} = N\theta / (2\pi)$ とおいた。また、この式で \mathcal{A} , θ はそれぞれ

$$\mathcal{A} = \sqrt{(2\mathcal{J}_-)^2 + \left(\frac{4\Delta_{so}\mathcal{J}_+}{K_t}\right)^2} \quad (59)$$

$$\theta = \cos^{-1} \frac{2\mathcal{J}_-}{\mathcal{A}} \quad (60)$$

を表す。具体例として図 8 (a-2) のパラメータと同じ、 $J_1 = \sqrt{2}\cos(\pi/N)$, $J_2 = -\sqrt{2}\sin(\pi/N)$, $N = 4$, $\Delta_{so} = 0.4J$, $K_t = 7J$, $J = 1$ を代入すると、第一項について

$$E_{yy} \approx -2\mathcal{J}_- \cos(k \pm 0.0724) + K_t + \frac{2\mathcal{J}_+^2}{K_t} + \frac{2\Delta_{so}^2}{K_t} \quad (61)$$

のように $\tilde{\theta}$ を近似でき、図 8 (a-2) のバンドと同程度のスピン分裂が確認できる。

3 ヘリカル状態の解析解

この章ではヘリカル状態について解析計算を行い、電荷密度とスピン状態について議論する（計算の詳細は付録C参照）。

3.1 ヘリカル状態の固有エネルギーと固有ベクトル

式(34)の局所座標系でのハミルトニアン

$$H = \sum_{n=1}^{MN} \left(-Jc_{n+1}^\dagger c_n + \text{H.c.} + \Delta_{\text{so}} c_n^\dagger \tilde{\mathbf{L}} \cdot \boldsymbol{\sigma} c_n - K_t c_n^\dagger |y\rangle \langle y| \otimes \boldsymbol{\sigma}_0 c_n \right) \quad (62)$$

を再び用いる。ただし、簡単のためホッピングの行列 $\tilde{\mathbf{J}}$ は単位行列 $\tilde{\mathbf{J}} = \mathbf{J}\mathbf{1}_3$ になるようにパラメータを選ぶ。さらに以下では接線方向の結晶場は $K_t \rightarrow \infty$ とすることで p_y 軌道の影響は無視する。したがって、 p_y 軌道を除いた有効ハミルトニアン H_{xz} は

$$H_{xz} = \sum_{n=1}^{MN} \left(-Jc_{n+1;xz}^\dagger c_{n;xz} + \text{H.c.} + \Delta_{\text{so}} c_{n;xz}^\dagger \tilde{\mathbf{L}} \cdot \boldsymbol{\sigma} c_{n;xz} \right) \quad (63)$$

$$= \sum_{n=1}^{MN} \left(-Jc_{n+1;xz}^\dagger c_{n;xz} + \text{H.c.} + \Delta_{\text{so}} c_{n;xz}^\dagger \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & pe^{-ip\phi_n} \\ 0 & 0 & -pe^{ip\phi_n} & 0 \\ 0 & -pe^{-ip\phi_n} & 0 & 0 \\ pe^{ip\phi_n} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} c_{n;xz} \right) \quad (64)$$

と表せる。このとき、生成演算子 $c_{n;xz}^\dagger$ は

$$c_{n;xz}^\dagger = [c_{n;x\uparrow}^\dagger, c_{n;x\downarrow}^\dagger, c_{n;z\uparrow}^\dagger, c_{n;z\downarrow}^\dagger] \quad (65)$$

のように各サイトに対し軌道とスピンの4つの自由度をもつ。これらはさらに互いに時間反転対称なハミルトニアンに分けることができる。すなわち、

$$H_{\pm} = \sum_{n=1}^{MN} \left(-Jc_{n+1;\pm}^\dagger c_{n;\pm} + \text{H.c.} \pm p\Delta_{\text{so}} c_{n;\pm}^\dagger \begin{bmatrix} 0 & e^{-ip\phi_n} \\ e^{ip\phi_n} & 0 \end{bmatrix} c_{n;\pm} \right) \quad (66)$$

を用いて $H_{xz} = H_+ + H_-$ と書け、 $\Theta H_{\pm} \Theta^{-1} = H_{\mp}$ である。また、ここでの生成演算子 $c_{n;\pm}^\dagger$ は、それぞれ

$$c_{n;+}^\dagger = [c_{n;x\uparrow}^\dagger, c_{n;z\downarrow}^\dagger], \quad c_{n;-}^\dagger = [c_{n;z\uparrow}^\dagger, c_{n;x\downarrow}^\dagger] \quad (67)$$

を意味する。

以下では H_+ のエネルギーバンドのみに着目して議論する。改めて H_+ を書き下すと

$$H_+ = \sum_{n=1}^{MN} \left(-Jc_{n+1;+}^\dagger c_{n;+} + \text{H.c.} + p\Delta_{\text{so}} c_{n;+}^\dagger \begin{bmatrix} 0 & e^{-ip\phi_n} \\ e^{ip\phi_n} & 0 \end{bmatrix} c_{n;+} \right) \quad (68)$$

である。この H_+ の固有ケットは

$$|z_{k,p}; \pm\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} z_{k,p}^n \hat{c}_{n;\pm}^\dagger(z_{k,p}) |0\rangle \quad (69)$$

の形で書かれる。ただし、

$$\hat{c}_{n;-}^\dagger(z_{k,p}) = u(z_{k,p}) c_{n;x\uparrow}^\dagger - v(z_{k,p}) e^{ip\phi_n} c_{n;z\downarrow}^\dagger \quad (70)$$

$$\hat{c}_{n;+}^\dagger(z_{k,p}) = v(z_{k,p}) c_{n;x\uparrow}^\dagger + u(z_{k,p}) e^{ip\phi_n} c_{n;z\downarrow}^\dagger \quad (71)$$

であり, $z_{k,p}$, $u(z_{k,p})$, $v(z_{k,p})$ はそれぞれ

$$z_{k,p} = e^{i\frac{k+2\pi p}{N}} \quad (72)$$

$$u(z_{k,p}) = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{pE_A(z_{k,p})}{\sqrt{E_A(z_{k,p})^2 + \Delta_{\text{so}}^2}} \right)} \quad (73)$$

$$v(z_{k,p}) = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{pE_A(z_{k,p})}{\sqrt{E_A(z_{k,p})^2 + \Delta_{\text{so}}^2}} \right)} \quad (74)$$

を表す。また, $E_A(z_{k,p})$, $E(z_{k,p})$ は

$$E_A(z_{k,p}) = \frac{E(z_{k,p}) - E(z_{k,p}e^{i\phi})}{2} \quad (75)$$

$$E(z_{k,p}) = -J(z_{k,p} + z_{k,p}^{-1}) \quad (76)$$

である。以上を用いて, H_+ の固有方程式は

$$H_+ |z_{k,p}; \pm\rangle = E_{\pm} |z_{k,p}; \pm\rangle \quad (77)$$

と書かれ, 固有値は

$$E_{\pm} = E_S(z_{k,p}) \pm p\sqrt{E_A(z_{k,p})^2 + \Delta_{\text{so}}^2} \quad (78)$$

$$E_{S/A}(z_{k,p}) = \frac{E(z_{k,p}) \pm E(z_{k,p}e^{i\phi})}{2} \quad (79)$$

である。

3.2 位相項 $z_{k,p}$

式 (72) に表されるように $z_{k,p}$ は波動関数の位相を表している。固有エネルギーの式 (78) を $z_{k,p}$ について解くと,

$$z_{s,s'} = -\frac{1}{4\alpha J} \left(X_s + s' \sqrt{X_s^2 - 16\alpha J^2} \right) \quad (80)$$

$$= \frac{1}{\alpha} \left[\left(\frac{-X_s}{4J} \right) - s' \sqrt{\left(\frac{-X_s}{4J} \right)^2 - \alpha} \right] \quad (81)$$

の 4 つの解が得られる。このとき, s と s' はそれぞれ + または - の符号を表す。この式で, X_{\pm} は

$$X_{\pm} = 2e^{i\frac{\Delta\phi}{2}} \left(E \cos \frac{\Delta\phi}{2} \pm \sqrt{(4J^2 - E^2) \sin^2 \frac{\Delta\phi}{2} + \Delta_{\text{so}}^2} \right) \quad (82)$$

である。

結果として, $z_{s,s'}$ は

$$z_{s,s'} = e^{-i\frac{\Delta\phi}{2}} \left(\xi_s - s' \sqrt{\xi_s^2 - 1} \right) \quad (83)$$

$$\xi_s = -\frac{E}{2J} \cos \frac{\pi}{N} + s \sqrt{\left(1 - \left(\frac{E}{2J} \right)^2 \right) \sin^2 \frac{\pi}{N} + \left(\frac{\Delta_{\text{so}}}{2J} \right)^2} \quad (84)$$

と表せる。

3.2.1 $\Delta_{\text{so}} = 0$ のときの波数

この章では以上の計算が数値計算と矛盾なく成立しているかを確認する。 $\Delta_{\text{so}} = 0$ のとき2つのエネルギーバンドは図9 (a) のようにエネルギーが $E_{0,\pm} = \pm 2J \cos \frac{\pi}{N}$ (水平方向の点線部) のところで交わる。ここでは下側のエネルギー $E_{0,-} = -2J \cos \frac{\pi}{N}$ のときを考え、どのような波数をもつかを式 (83) を用いた解析計算によって求める。

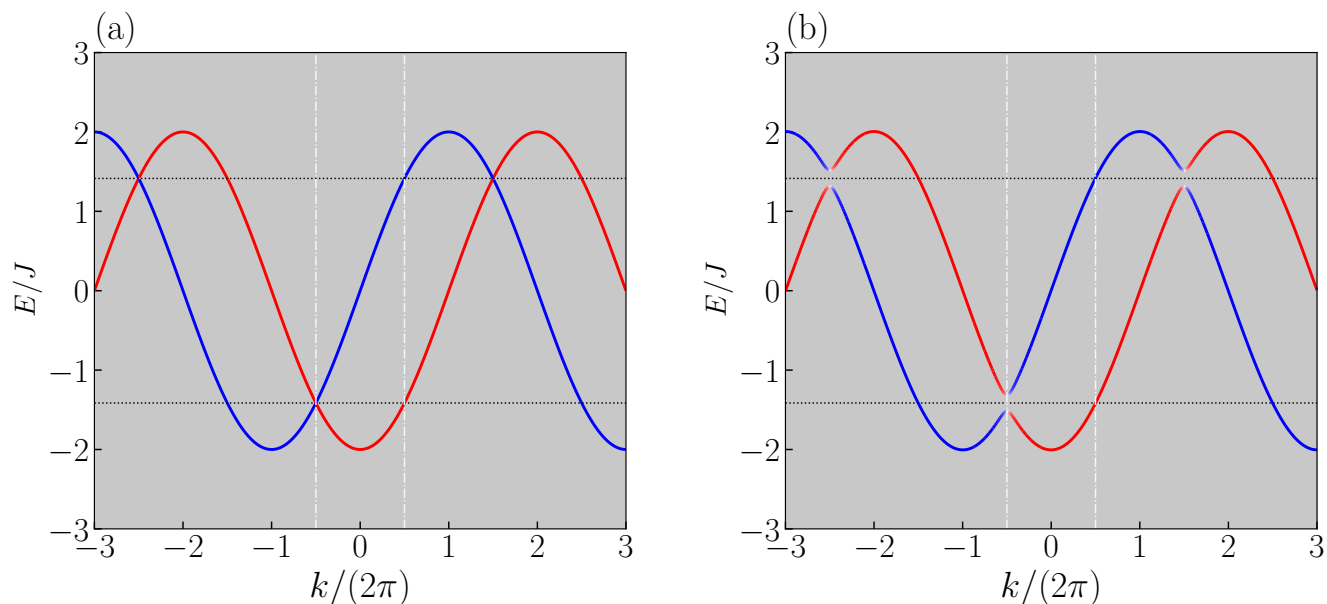


図9 拡張ゾーン形式でのバンド構造。(a) スピン軌道相互作用 $\Delta_{\text{so}} = 0$ の場合。(b) $\Delta_{\text{so}} = 0.1J$ の場合。スピン軌道相互作用がある場合には水平方向の点線で示されるエネルギー近傍で準位反発が起きる。また、鉛直方向の破線は第一 Brillouin ゾーンを示している。その他パラメータは共通して $\alpha = \sqrt{2}$, $\varphi = \Delta\phi/2$ である。

$E_{0,-} = -2J \cos \frac{\pi}{N}$ かつ $J = 1$ のとき ξ_s はそれぞれ

$$\xi_+ = \cos^2 \frac{\pi}{N} + \sqrt{\sin^4 \frac{\pi}{N} + \left(\frac{\Delta_{\text{so}}}{2J}\right)^2} \quad (85)$$

$$\xi_- = \cos^2 \frac{\pi}{N} - \sqrt{\sin^4 \frac{\pi}{N} + \left(\frac{\Delta_{\text{so}}}{2J}\right)^2} \quad (86)$$

となる。したがって、 $z_{s,s'}$ はそれぞれ

$$z_{+-} = z_{++} = e^{-i\frac{\pi}{N}} \quad (87)$$

$$z_{--} = e^{-i\frac{\pi}{N}} e^{i\frac{2\pi}{N}} = e^{i\frac{\pi}{N}} \quad (88)$$

$$z_{-+} = e^{-i\frac{\pi}{N}} e^{-i\frac{2\pi}{N}} = e^{-i\frac{3\pi}{N}} \quad (89)$$

と表される。すなわち、エネルギー $E/J = -2 \cos \frac{\pi}{N}$ のときの波数は

$$k_{+-} = \frac{N}{i} \ln z_{+-} = -\pi \quad (90)$$

$$k_{++} = \frac{N}{i} \ln z_{++} = -\pi \quad (91)$$

$$k_{--} = \frac{N}{i} \ln z_{--} = \pi \quad (92)$$

$$k_{-+} = \frac{N}{i} \ln z_{-+} = -3\pi \quad (93)$$

であり、図9 (a) のバンドと点線が交わる波数の値と合致する。

3.3 u, v の表式とヘリカル状態の波動関数

固有ケット $|E\rangle$ は 4 つの状態の線形結合で

$$|E\rangle = \sum_{s,s'=\pm} a_{s,s'} |z_{s,s'}; \sigma_s\rangle, \quad (94)$$

と書かれる。ここで、 σ_s は + または - の符号を表し、サイト n ごとの確率振幅は

$$\psi(n) = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(n) \\ \psi_{\downarrow}(n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle n; \uparrow | E \rangle \\ \langle n; \downarrow | E \rangle \end{pmatrix} \quad (95)$$

と表せる。この式において $|n; \sigma\rangle = c_{n,o\sigma}^{\dagger} |0\rangle$ ($o = x, z$) である。4 つの係数 $a_{s,s'}$ とエネルギー E は後述の 4 つの式で表される境界条件と規格化条件 $\langle E | E \rangle = 1$ を満たすように定める。

以下では $\Delta_{s0} = 0$ のときにバンドが交わるエネルギー $E_{0,-} = -2J \cos \frac{\pi}{N}$ からのずれ δE 、すなわち

$$E = -2J \cos \frac{\pi}{N} + \delta E \quad (96)$$

の形でエネルギーを扱う。式 (84) の ξ_s は δE と Δ_{s0} の 2 次までの展開で

$$\xi_s \approx 1 + (s-1) \left(\sin^2 \frac{\pi}{N} + \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N} \right) + \frac{s}{2\lambda^2} \quad (97)$$

と書ける。ここで、 $\lambda = 2J \sin \frac{\pi}{N} / \sqrt{\Delta_{s0}^2 - \delta E^2}$ は減衰長を意味する。

3.3.1 右向き・左向きに進行する電子の波動関数

式 (90) ~ (93) によると、 $s = -1$ のときに進行波を表していることが分かる。このとき、 $z_{-,s'}$ と ξ_- はそれぞれ

$$z_{-,s'} = e^{-i\frac{\pi}{N}} \left(\xi_- - s' \sqrt{\xi_-^2 - 1} \right) \quad (98)$$

$$\xi_- = 1 - 2 \left(\sin^2 \frac{\pi}{N} + \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N} \right) - \frac{1}{2\lambda^2} \quad (99)$$

となる。 ξ_- を δE と Δ_{s0} の 1 次までで近似をすることで $z_{-,s'}$ は

$$z_{-,s'} \approx e^{-i\frac{\pi}{N}} (1 - 2\zeta^2 - is'2\zeta) \quad (100)$$

と表すことができる。ここで新たに $\zeta = \sqrt{\sin^2 \frac{\pi}{N} + \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N}}$ を定義した。さらに $z_{-,s'}$ は

$$z_{-,s'} \approx e^{-i\frac{\pi}{N}} e^{-is'2\zeta} = e^{-i(\frac{\pi}{N} + s'2\zeta)} \quad (101)$$

と近似でき、この $z_{-,s'}$ を用いて $E(z_{-,s'})$ や $E(z_{-,s'} e^{i\frac{2\pi}{N}})$ はそれぞれ

$$E(z_{-,s'}) = -J(z_{-,s'} + z_{-,s'}^{-1}) = -2J \cdot \text{Re}[(z_{-,s'})] = -2J \cos \left(\frac{\pi}{N} + s'2\zeta \right) \quad (102)$$

$$E(z_{-,s'} e^{i\frac{2\pi}{N}}) = -2J \cdot \text{Re}[e^{i(\frac{\pi}{N} - s'2\zeta)}] = -2J \cos \left(\frac{\pi}{N} - s'2\zeta \right) \quad (103)$$

と書ける。したがって、 $E_A(z_{-,s'})$ は

$$E_A(z_{-,s'}) = \frac{E(z_{-,s'}) - E(z_{-,s'} e^{i\frac{2\pi}{N}})}{2} = s'2J \sin \frac{\pi}{N} \sin 2\zeta \quad (104)$$

となる。ここで、 $E_A(z_{-,s'})$ の符号は s' のみで決まることに注意する。 $|E_A(z_{-,s'})| \gg \Delta_{\text{so}}$ の場合を仮定すると、式 (73), (74) の $u(z_{-,s'})$, $v(z_{-,s'})$ はそれぞれ

$$u(z_{-,s'}) \approx \sqrt{\frac{1}{2}(1-ps')} \quad (105)$$

$$v(z_{-,s'}) \approx \sqrt{\frac{1}{2}(1+ps')} \quad (106)$$

となる。特に $p=1$ の場合は、

$$u(z_{-,s'}) \approx \sqrt{\frac{1}{2}(1-s')} = \delta_{s',-} \quad (107)$$

$$v(z_{-,s'}) \approx \sqrt{\frac{1}{2}(1+s')} = \delta_{s',+} \quad (108)$$

である。位相を表す $z_{-,s'}$ は ζ が

$$\zeta = \sqrt{\sin^2 \frac{\pi}{N} + \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N}} \approx \frac{\pi}{N} + \frac{\delta E}{4J \sin(\pi/N)} \quad (109)$$

のように近似できるので、

$$z_{-,s'} = e^{-i(\frac{\pi}{N} + s'2\zeta)} \approx e^{-i\frac{\pi}{N}} e^{-is'(\frac{2\pi}{N} + \delta k)}. \quad (110)$$

と書くことができる。ここで、 $\delta k = \delta E / (2J \sin \frac{\pi}{N})$ は波数である。

以上より、右向き・左向きに進行する電子の波動関数はそれぞれ

$$\begin{pmatrix} \langle n; \uparrow | z_{-,s'}; + \rangle \\ \langle n; \downarrow | z_{-,s'}; + \rangle \end{pmatrix} = z_{-,s'}^n \begin{pmatrix} v(z_{-,s'}) \\ u(z_{-,s'}) e^{i\phi_n} \end{pmatrix} = e^{-i\frac{\pi}{N} n \sigma_z} e^{-is'(\frac{2\pi}{N} n + \delta k n)} \begin{pmatrix} \delta_{s',+} \\ \delta_{s',-} \end{pmatrix} \quad (111)$$

$$\begin{pmatrix} \langle n; \uparrow | z_{-,s'}; - \rangle \\ \langle n; \downarrow | z_{-,s'}; - \rangle \end{pmatrix} = z_{-,s'}^n \begin{pmatrix} u(z_{-,s'}) \\ -v(z_{-,s'}) e^{i\phi_n} \end{pmatrix} = e^{-i\frac{\pi}{N} n \sigma_z} e^{-is'(\frac{2\pi}{N} n + \delta k n)} \begin{pmatrix} \delta_{s',-} \\ -\delta_{s',+} \end{pmatrix} \quad (112)$$

と表すことができる。

3.3.2 エネルギーギャップ内のエバネッセント状態

$s = -1$ の計算と同様にして、エバネッセント波を表す $s = +1$ の状態について考える。 $z_{+,s'}$ と ξ_+ はそれぞれ

$$z_{+,s'} = e^{-i\frac{\pi}{N}} \left(\xi_+ - s' \sqrt{\xi_+^2 - 1} \right) \quad (113)$$

$$\xi_+ = 1 + \frac{1}{2\lambda^2} \quad (114)$$

と書かれる。ここで、 $z_{+,s'}$ を $1/\lambda$ のオーダーで近似すると

$$z_{+,s'} = e^{-i\frac{\pi}{N}} \left(\left(1 + \frac{1}{2\lambda^2} \right) - s' \sqrt{\left(1 + \frac{1}{2\lambda^2} \right)^2 - 1} \right) \quad (115)$$

$$\approx e^{-i\frac{\pi}{N}} e^{-s'/\lambda} \quad (116)$$

となり、 $E(z_{+,s'})$ と $E(z_{+,s'} e^{i\frac{\pi}{N}})$ はそれぞれ

$$E(z_{+,s'}) = -J(z_{+,s'} + z_{+,s'}^{-1}) = -J \left(e^{-i\frac{\pi}{N}} e^{-s'/\lambda} + e^{i\frac{\pi}{N}} e^{s'/\lambda} \right), \quad (117)$$

$$E(z_{+,s'} e^{i\frac{\pi}{N}}) = -J(z_{+,s'} e^{i\frac{\pi}{N}} + z_{+,s'}^{-1} e^{-i\frac{\pi}{N}}) = -J \left(e^{i\frac{\pi}{N}} e^{-s'/\lambda} + e^{-i\frac{\pi}{N}} e^{s'/\lambda} \right). \quad (118)$$

と表される。したがって、 $E_A(z_{+,s'})$ は

$$E_A(z_{+,s'}) = \frac{E(z_{+,s'}) - E(z_{+,s'} e^{i\frac{2\pi}{N}})}{2} \quad (119)$$

$$\approx -is' \sqrt{\Delta_{so}^2 - \delta E^2} \quad (120)$$

となる。このとき、 $E_A^2(z_{+,s'}) = -(\Delta_{so}^2 - \delta E^2)$ になることに注意する。結果として、 $u(z_{+,s'})$ と $v(z_{+,s'})$ は

$$u(z_{+,s'}) = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{pE_A(z_{+,s'})}{\sqrt{E_A(z_{+,s'})^2 + \Delta_{so}^2}} \right)} \approx \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + ips' \frac{\sqrt{\Delta_{so}^2 - \delta E^2}}{|\delta E|} \right)} \quad (121)$$

$$v(z_{+,s'}) = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{pE_A(z_{+,s'})}{\sqrt{E_A(z_{+,s'})^2 + \Delta_{so}^2}} \right)} \approx \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - ips' \frac{\sqrt{\Delta_{so}^2 - \delta E^2}}{|\delta E|} \right)} \quad (122)$$

であり、 $p = 1$ のエバネッセント波の波動関数は

$$\begin{pmatrix} \langle n; \uparrow | z_{+,s'}; + \rangle \\ \langle n; \downarrow | z_{+,s'}; + \rangle \end{pmatrix} \approx e^{-i\frac{\pi}{N} n \sigma_z} e^{-s'n/\lambda} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - is' \frac{\sqrt{\Delta_{so}^2 - \delta E^2}}{|\delta E|} \right)} \\ \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + is' \frac{\sqrt{\Delta_{so}^2 - \delta E^2}}{|\delta E|} \right)} \end{pmatrix} \quad (123)$$

$$\begin{pmatrix} \langle n; \uparrow | z_{+,s'}; - \rangle \\ \langle n; \downarrow | z_{+,s'}; - \rangle \end{pmatrix} \approx e^{-i\frac{\pi}{N} n \sigma_z} e^{-s'n/\lambda} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + is' \frac{\sqrt{\Delta_{so}^2 - \delta E^2}}{|\delta E|} \right)} \\ -\sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - is' \frac{\sqrt{\Delta_{so}^2 - \delta E^2}}{|\delta E|} \right)} \end{pmatrix} \quad (124)$$

と表される。エネルギーが $\Delta_{so} = 0$ でのバンドの交点の近傍の値を取るとき、つまり $|\delta E| \ll \Delta_{so}$ であるとき、波動関数はそれぞれ

$$\begin{pmatrix} \langle n; \uparrow | z_{+,s'}; + \rangle \\ \langle n; \downarrow | z_{+,s'}; + \rangle \end{pmatrix} \approx e^{-i\frac{\pi}{N} n \sigma_z} e^{-s'n/\lambda} \sqrt{\frac{\Delta_{so}}{2|\delta E|}} \begin{pmatrix} e^{-is'\pi/4} \\ e^{is'\pi/4} \end{pmatrix} \quad (125)$$

$$= e^{-i\frac{\pi}{N} n \sigma_z} e^{-s'n/\lambda} \sqrt{\frac{\Delta_{so}}{2|\delta E|}} e^{-is'\pi/4} \begin{pmatrix} 1 \\ is' \end{pmatrix} \quad (126)$$

$$\begin{pmatrix} \langle n; \uparrow | z_{+,s'}; - \rangle \\ \langle n; \downarrow | z_{+,s'}; - \rangle \end{pmatrix} \approx e^{-i\frac{\pi}{N} n \sigma_z} e^{-s'n/\lambda} \sqrt{\frac{\Delta_{so}}{2|\delta E|}} \begin{pmatrix} e^{is'\pi/4} \\ -e^{-is'\pi/4} \end{pmatrix} \quad (127)$$

$$= e^{-i\frac{\pi}{N} n \sigma_z} e^{-s'n/\lambda} \sqrt{\frac{\Delta_{so}}{2|\delta E|}} e^{is'\pi/4} \begin{pmatrix} 1 \\ is' \end{pmatrix} \quad (128)$$

と近似できる。

3.4 ヘリカル状態の波動関数

以上より、ヘリカル状態の波動関数は各状態の線形結合として

$$|E\rangle = \sum_{s,s'=\pm} a_{s,s'} |z_{s,s'}; \sigma_s\rangle \quad (129)$$

$$= -|z_{-,+}; -\rangle + a|z_{-,-}; -\rangle + be^{i\pi/4} \sqrt{\frac{2|\delta E|}{\Delta_{so}}} |z_{+,+}; +\rangle + ce^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2|\delta E|}{\Delta_{so}}} |z_{+,-}; +\rangle. \quad (130)$$

のように書くことができる。この式の係数 a , b , c は境界条件によって決定する。固有ケットの具体的表式

$$\begin{pmatrix} \langle n; \uparrow | z_{-,s'}; - \rangle \\ \langle n; \downarrow | z_{-,s'}; - \rangle \end{pmatrix} = e^{-i\frac{\pi}{N}n\sigma_z} e^{-is'(\frac{2\pi}{N}n+\delta kn)} \begin{pmatrix} \delta_{s',-} \\ -\delta_{s',+} \end{pmatrix} \quad (131)$$

$$\begin{pmatrix} \langle n; \uparrow | z_{+,s'}; + \rangle \\ \langle n; \downarrow | z_{+,s'}; + \rangle \end{pmatrix} = e^{-i\frac{\pi}{N}n\sigma_z} e^{-s'n/\lambda} \sqrt{\frac{\Delta_{so}}{2|\delta E|}} e^{-is'\pi/4} \begin{pmatrix} 1 \\ is' \end{pmatrix} \quad (132)$$

を使って、ヘリカル状態の波動関数 $\psi(n)$ は

$$\psi(n) \propto e^{-i\frac{\phi_n}{2}\sigma_z} \left[\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-i(\Delta\phi+\delta k)n} + a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{i(\Delta\phi+\delta k)n} + b \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} e^{-n/\lambda} + c \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} e^{n/\lambda} \right] \quad (133)$$

と書くことができる。前の二項はそれぞれ左向きに進む波と右向きに進む波を表す。残りの二項はエバネッセント状態を表し、指数関数的な減衰を示す。係数を決定する境界条件として、

$$\ell_+(0) = \ell_+(MN+1) = 0 \quad (134)$$

$$\ell_-(0) + \ell_-(MN+1) = 0 \quad (135)$$

のように分子端での波動関数がゼロになることを要請する。ここで $\ell_{\pm}(n) = \psi_{\uparrow}(n) \pm \psi_{\downarrow}(n)$ である。式 (133) における係数の具体的な表式は

$$a = [(i-1)(i+\tilde{\alpha}^2)\tilde{\beta} + i(\tilde{\alpha}^2-1)\tilde{\gamma} + 2\tilde{\alpha}\tilde{\beta}\tilde{\gamma} + \tilde{\beta}^2(\tilde{\gamma} + \tilde{\alpha}(\tilde{\alpha}\tilde{\gamma}-2))]/\tilde{\eta} \quad (136)$$

$$b = -\frac{\tilde{\alpha}(\tilde{\beta} + \tilde{\gamma})(-\tilde{\beta} - i\tilde{\gamma} + \tilde{\alpha}(i + \tilde{\beta}\tilde{\gamma}))}{\tilde{\eta}} \quad (137)$$

$$c = \frac{(\tilde{\beta} + \tilde{\gamma})(i + \tilde{\alpha}(\tilde{\beta} - i\tilde{\gamma}) - \tilde{\beta}\tilde{\gamma})}{\tilde{\eta}} \quad (138)$$

であり、 $\tilde{\alpha}$, $\tilde{\beta}$, $\tilde{\gamma}$, $\tilde{\eta}$ はそれぞれ

$$\tilde{\alpha} = e^{(MN+1)/\lambda} \quad (139)$$

$$\tilde{\beta} = e^{i(MN+1)\Delta\phi/2} \quad (140)$$

$$\tilde{\gamma} = e^{i(MN+1)(\Delta\phi+\delta k)} \quad (141)$$

$$\tilde{\eta} = \tilde{\gamma}[-1 - 2\tilde{\alpha}(\tilde{\beta} - \tilde{\gamma}) - i\tilde{\beta}(\tilde{\beta} + (1+i)\tilde{\gamma}) + \tilde{\alpha}^2(-1 + i\tilde{\beta}^2 + (1+i)\tilde{\beta}\tilde{\gamma})] \quad (142)$$

である。

図 10 (b)~(d) はエネルギーを $E_{0,-}$ 近傍の E' と選んだ時の局所電荷密度 $\langle E' | \rho_n | E' \rangle = \langle \rho_n \rangle$ と擬スピン密度 $\langle E' | \sigma_{i,n} | E' \rangle = \langle \sigma_{i,n} \rangle$ である。ここで擬スピンと表現したのは、 H_+ が式 (67) のように p_x 軌道のアップスピンと p_z 軌道のダウンスピンで表される擬スピン空間の基底で σ_i の期待値を取っているからである。これらの期待値は

$$\langle \sigma_{i,n} \rangle = \frac{\Psi^\dagger(n) \sigma_i \Psi(n)}{\sum_{n=1}^{MN} \Psi^\dagger(n) \Psi(n)} \quad (i = 0, x, y) \quad (143)$$

で計算される。ただしここでは電荷密度 ρ を σ_0 で表している。それぞれの図において、黒の破線で示した解析計算の結果は赤の実線で示す数値計算の結果を良く再現している。図 10 (b) では分子端において電荷密度の指数関数的な増加が見られる。図 10 (c), (d) のスピン成分 σ_x , σ_y についても端で有限の値をもつ。一方で、スピンの z 成分に関してはほとんどゼロを示していた。

以上の議論は H_+ のみのものであったが、時間反転対称な H_- についても同様な電荷密度と反対符号のスピン密度が得られる。このことから、式 (14) で示されるもとのハミルトニアン の時間反転対称性のために、系全体で見ると結果としてスピン分極は現れないことが期待される。

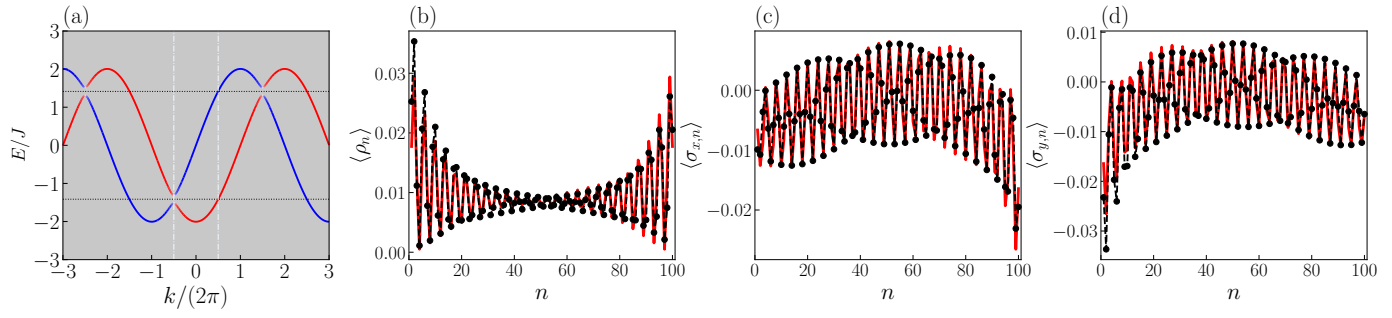


図 10 (a) H_+ のバンド構造。水平方向の上下の点線は準位反発の中心のエネルギー $E_{0,\pm} = \pm 2J \cos \frac{\pi}{N}$ を示す。また、鉛直方向の破線は第一 Brillouin ゾーンを示している。局所電荷密度 (b), x 成分の擬スピン (c), y 成分の擬スピン (d) は $E_{0,-}$ に近いエネルギー $\delta E = 0.035J$ での電荷密度, スピン密度である。いずれの図においても赤の実線は数値計算, 黒の破線は解析計算を示す。その他パラメータは $M = 25$, $N = 4$, $\Delta_{\text{so}} = 0.1J$ である。図は参考文献⁸より転載。

4 外部磁場の印加とエナンチオ選択性

この章では強磁性体基板を模した Zeeman 磁場をカイラル分子に印加することで時間反転対称性が破れ、分子端でカイラリティに依存したスピン分極が生じることを示す。また、エナンチオ選択性との関係についても論じる。

4.1 分子端の第 1 サイトに印加する Zeeman 磁場

強磁性体基板の存在を考慮し、近距離効果の磁場を加えたハミルトニアン

$$\mathcal{H} = H + H_B \quad (144)$$

を考える。ここで、 H_B は Zeeman 磁場を原子鎖の端の 1 サイトにのみ印加した Zeeman 効果を表すハミルトニアンで、

$$H_B = \mu_B B \tilde{c}_1^\dagger \mathbf{e}_r \cdot \boldsymbol{\sigma} \tilde{c}_1 \quad (145)$$

である。ここで $\mathbf{e}_r = (\sin \tilde{\theta} \cos \tilde{\phi}, \sin \tilde{\theta} \sin \tilde{\phi}, \cos \tilde{\theta})$ は球面座標系 (図 11) で表した Zeeman 磁場の向きであり、 B は磁場の大きさ、 μ_B は Bohr 磁子である。

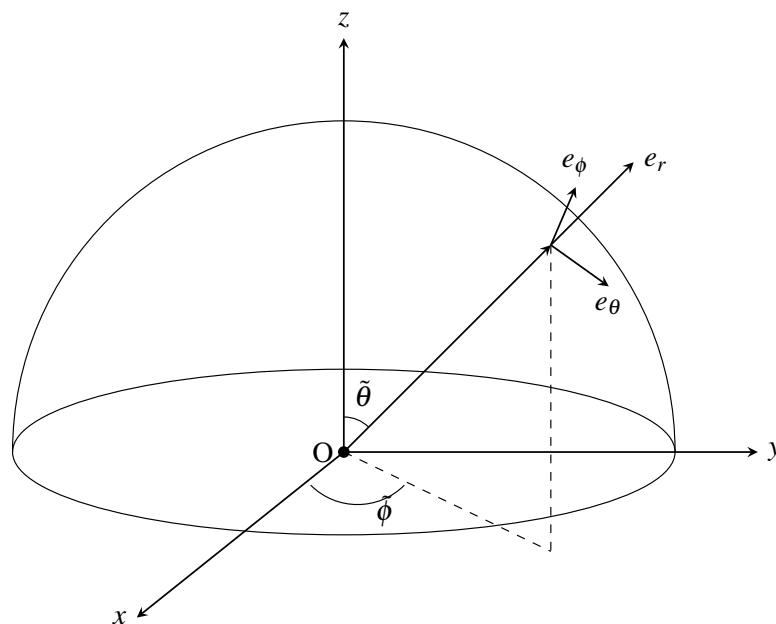


図 11 球面座標系と基底ベクトル

このハミルトニアンを用いたスピン密度の数値計算結果である図 12 が示すように、時間反転対称性が破られた結果として分子端でのスピン分極が観測される。各サイト n ごとの局所スピン密度は

$$\langle \sigma_{i,n} \rangle = \sum_E f(E) \langle E | \sigma_{i,n} | E \rangle \quad (146)$$

$$\sigma_{i,n} = \Pi_n \otimes I_3 \otimes \sigma_i \quad (i = x, y, z) \quad (147)$$

で定義する。

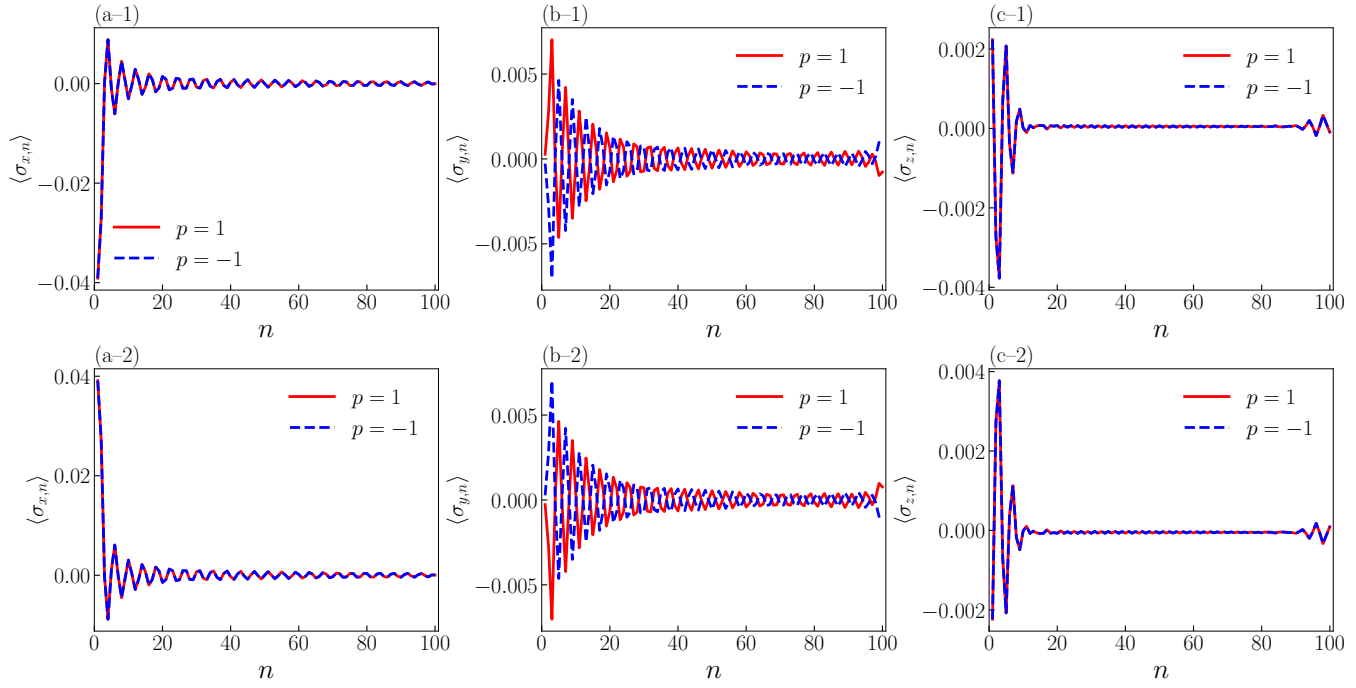


図 12 ±x 方向の Zeeman 磁場下での局所スピン密度。上下の図はそれぞれ $e_r = \pm(1,0,0)$ の方向に磁場をかけたときのスピン密度である。(a), (b), (c) はそれぞれ局所座標系におけるスピンの x, y, z 成分であり、赤の実線は右巻き分子、青の破線は左巻き分子のスピン密度を表す。パラメータは $M = 25$, $N = 4$, $\Delta_{s0} = 0.4J$, $E_F = -2J \cos \frac{\pi}{N}$, $\mu_B B = 0.05J$, $T = 0$ である。図は参考文献⁸より転載。

図 12 において上側の図は Zeeman 磁場を x 方向にかけたとき、下側の図は -x 方向にかけたときの局所スピン密度である。すなわち $e_r = \pm(1,0,0)$ のときに、電荷分布への影響が無視できる程度の小さい Zeeman エネルギー $\mu_B B \ll \Delta_{s0}$ を加えた場合を考える。ここで赤の実線はカイラリティが右巻き ($p = 1$) のとき、青の破線は左巻き ($p = -1$) のときのスピン密度を表す。図から分かるように有限の値をもつスピン成分が第 1 サイト付近で誘起されている。磁場の向きを反転させたとき、スピン成分もまた $\langle \sigma_{i,n} \rangle \rightarrow -\langle \sigma_{i,n} \rangle$ のように反転する。これはハミルトニアン の時間反転操作から期待される結果である。一方でカイラリティを変えた時は $\langle \sigma_{y,n} \rangle \rightarrow -\langle \sigma_{y,n} \rangle$ となっており、Zeeman 磁場に直交する y 成分のスピンのみが反転する。以下の表にカイラリティと磁場の符号関係をまとめる。

表 1 $\langle \sigma_x \rangle$ の符号

| | | B | |
|---|---|---|---|
| | | + | - |
| p | + | - | + |
| | - | - | + |

表 2 $\langle \sigma_y \rangle$ の符号

| | | B | |
|---|---|---|---|
| | | + | - |
| p | + | + | - |
| | - | - | + |

表 3 $\langle \sigma_z \rangle$ の符号

| | | B | |
|---|---|---|---|
| | | + | - |
| p | + | + | - |
| | - | + | - |

4.1.1 Δ_{s0} に比べて強い磁場をかける場合

次に磁場を大きくした場合の電荷密度とスピン密度への影響を考える。図 13 は磁場を図 12 の 20 倍にしたときの局所スピン密度である。端に現れるスピン密度も磁場に比例して約 20 倍になっている。この際、カイラリティ依存性は依然として保たれている。

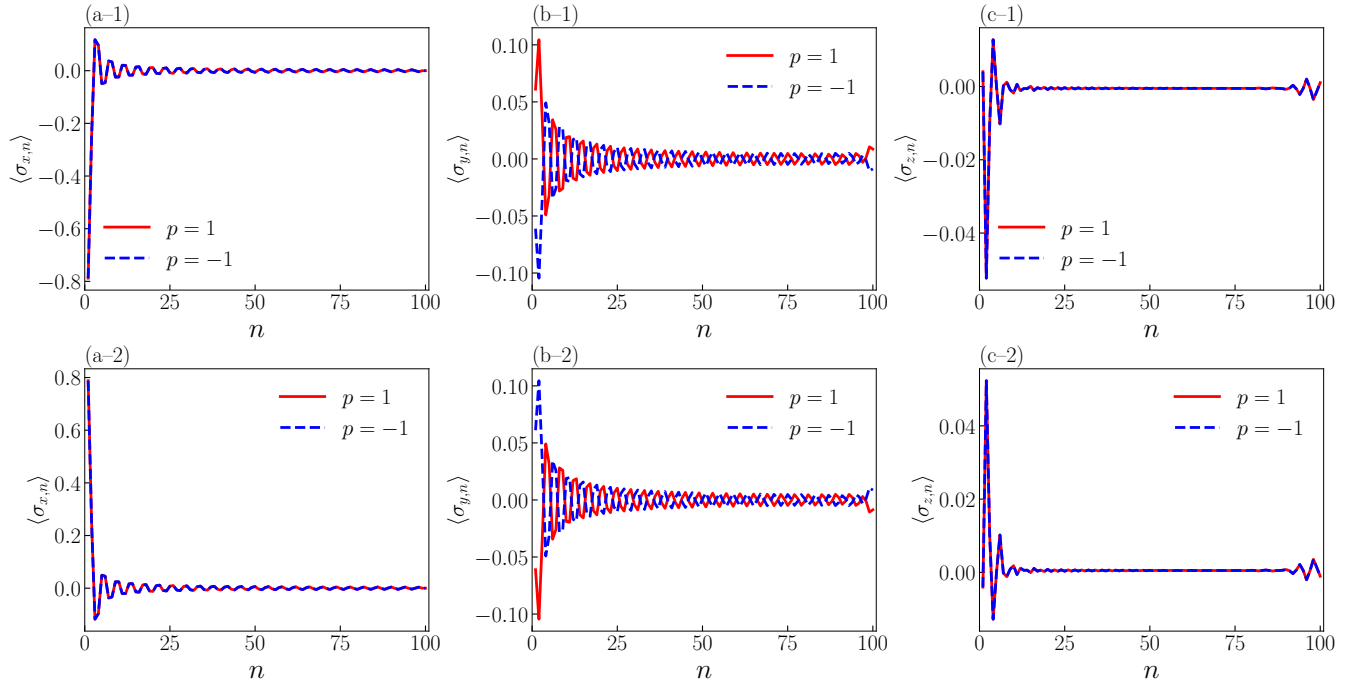


図 13 図 12 に比べて Zeeman エネルギーの大きさを $\mu_B B = 1J$ としたときの局所スピン密度。その他のパラメータは図 12 と同じものを用いている。

しかし電荷密度に関してはスピンと異なり，図 14 のように強い磁場によって分子端における電荷の局在状態が壊れてしまう。

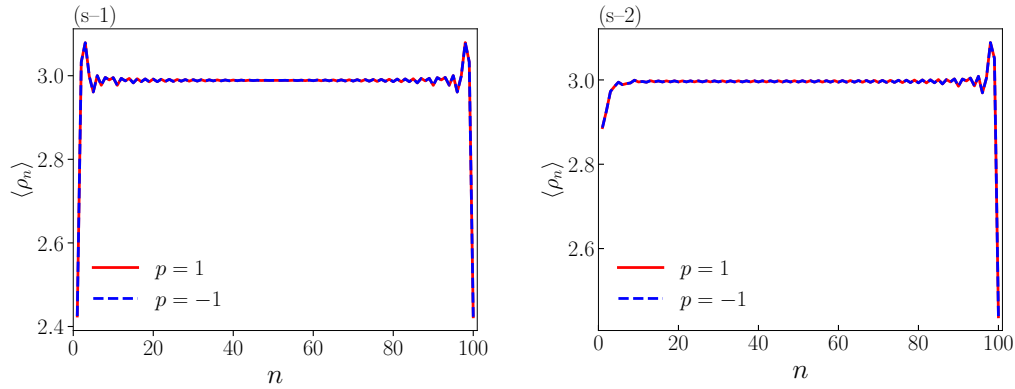


図 14 電荷密度の比較。(s-1) Zeeman エネルギー $\mu_B B = 0.05J$ のとき。(s-2) $\mu_B B = 1J$ のとき。エネルギーが大きくなると端での電荷の局在状態が破壊される。パラメータは $M = 25$, $N = 4$, $\Delta_{so} = 0.4J$, $E_F = -2J \cos \frac{\pi}{N}$, $T = 0$ である。

4.2 エネルギーとスピンのカイラリティ・磁場の方向依存性

以上の結果から，磁場に対して垂直な成分にカイラリティ依存性があると推測できる。これまでは直交座標系でのスピンの分布を見てきたが，以降はスピンを基板磁化に対して平行な成分 (e_r) と垂直な成分 ($e_{\tilde{\theta}}$, $e_{\tilde{\phi}}$) に分けて考える。この章では $\tilde{\theta}$, $\tilde{\phi}$ を変数として磁場をあらゆる方向に変化させたときに，カイラリティによってエネルギーとスピン密度にどの程度の差が出るかを調べる。

Zeeman 磁場を印加することで全エネルギーに関してもカイラリティ依存性が生じる。図 15 (a) は Zeeman 磁場をあらゆる方向に変化させたとき，カイラリティの入れ替えによって生じる全エネルギーの差

$$\Delta \mathcal{E} = \mathcal{E}(p = +1) - \mathcal{E}(p = -1) \quad (148)$$

を示している。ここでは $\mathcal{E}(p)$ をスピン軌道相互作用がゼロのときのエネルギーとの差

$$\mathcal{E}(p) = \sum_E f(E) [E(p) - E(p)|_{\Delta_{\text{so}}=0}] \quad (149)$$

として定義する。この DNA 分子モデルでは、ホッピングエネルギーはおおよそ $J \approx 25\text{meV}$ である。¹³ これは原子内スピン軌道相互作用の大きさをカーボンナノチューブのものと同一 $\Delta_{\text{so}} = 0.4J \approx 10\text{meV}$ 程度と仮定したときのエネルギーに相当する。¹² 数値計算においては Zeeman エネルギーをホッピングエネルギーと同じ $\mu_B B = J$ としている。この場合、エネルギー差の最大値は $\Delta\mathcal{E}_{\text{max}} \approx 0.2J \approx 50\text{K}$ に達し、この計算で用いた温度 $k_B T = 0.1J \approx 25\text{K}$ と比較しても無視できない程の大きさである。

図 15 (b)~(d) はカイラリティの入れ替えによる全スピン密度の差

$$\Delta\sigma_i = \sigma_i(p=+1) - \sigma_i(p=-1) \quad (150)$$

$$\sigma_i(p) = \sum_{n=1}^{MN} \langle \sigma_{i,n}(p) \rangle \quad (151)$$

を示している。すべてのサイトのスピン密度を足しあげることによって、バルクでの振動部分をキャンセルし、実効的に端に現れるスピンを抽出することができる。図 15 (b) は磁場に対して平行なスピン成分 $\Delta\sigma_r = \Delta\sigma \cdot e_r$, 図 15 (c), (d) は磁場に対して垂直なスピン成分 $\Delta\sigma_{\hat{\theta}} = \Delta\sigma \cdot e_{\hat{\theta}}$ と $\Delta\sigma_{\hat{\phi}} = \Delta\sigma \cdot e_{\hat{\phi}}$ をプロットしたものである。ここで垂直成分の基底ベクトルはそれぞれ $e_{\hat{\theta}} = \partial_{\hat{\theta}} e_r / |\partial_{\hat{\theta}} e_r|$, $e_{\hat{\phi}} = \partial_{\hat{\phi}} e_r / |\partial_{\hat{\phi}} e_r|$ で表される。図 15 (b)~(d) のいずれにおいてもスピン密度差は最大で $0.2\hbar$ から $0.4\hbar$ 程度の大きさが観測される。

図 16 は異なるカイラリティ同士の全エネルギー、全スピン密度の平均

$$\bar{\mathcal{E}} = [\mathcal{E}(p=+1) + \mathcal{E}(p=-1)]/2 \quad (152)$$

$$\bar{\sigma}_i = [\sigma_i(p=+1) + \sigma_i(p=-1)]/2 \quad (153)$$

をプロットしたものである。図 15 と図 16 を比較すると、平行成分 $|\Delta\sigma_r|$ の最大値は $|\bar{\sigma}_r|$ の最大値の約 20% であるのに対し、垂直成分 $|\Delta\sigma_{\hat{\theta}(\hat{\phi})}|$ の最大値は $|\bar{\sigma}_{\hat{\theta}(\hat{\phi})}|$ の最大値の 4~5 倍の大きさをもつ。すなわちカイラリティの違いは、磁場の方向と垂直なスピン成分に大きな影響を与えると考えられる。また、図 16 (a) はスピン軌道相互作用による全エネルギーの変化分が約 $7J$ であることを示しているが、図 15 (a) と比較するとスピン軌道相互作用によるエネルギーのうちカイラリティに依存するものは僅か一部であると結論付けられる。

以上の結果は比較的大きな Zeeman 磁場 $\mu_B B \approx 25\text{meV}$ を計算に用いている。この交換磁場の大きさは Ni 電極と結合する C₆₀ フラーレンの量子ドットにおいて近藤効果が観測されるエネルギー $\mu_B B \approx 15\text{meV}$ と同程度である。¹⁴ しかし、強磁性基板に吸着したカイラル分子で同じくらい強いトンネル結合が得られるのかは議論の余地がある。

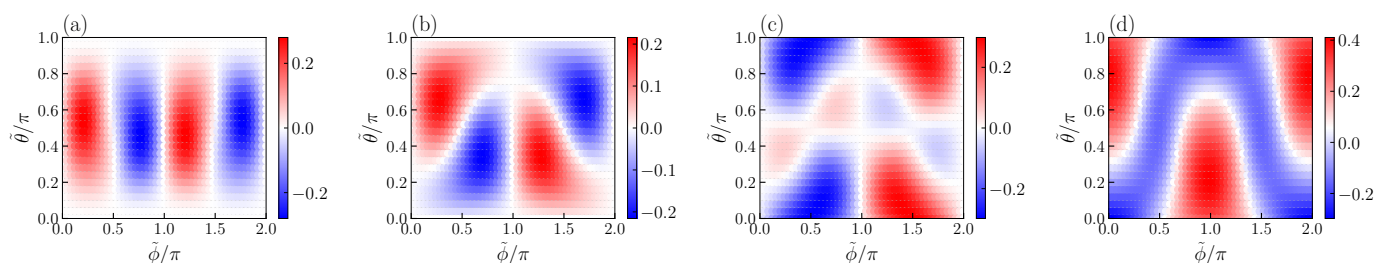


図 15 カイラリティを入れ替えたときの全エネルギーと全スピン密度の変化。(a) 全エネルギーの差 $\Delta\mathcal{E}/J$ (b) Zeeman 磁場に平行なスピン成分の差 $\Delta\sigma_r$ (c) 磁場に垂直なスピン成分の差 $\Delta\sigma_{\hat{\theta}}$ と (d) $\Delta\sigma_{\hat{\phi}}$ パラメータは $M = 10$, $N = 4$, $\Delta_{\text{so}} = 0.4J$, $E_F = -2J \cos \frac{\pi}{N}$, $\mu_B B = 1J$, $k_B T = 0.1J$ である。図は参考文献⁸より転載。

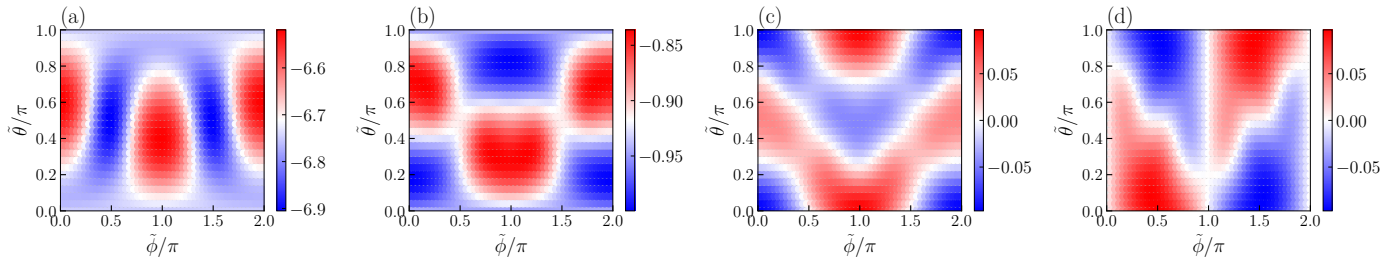


図 16 カイラリティを入れ替えたときの全エネルギーと全スピン密度の平均値。(a) 全エネルギーの平均 $\overline{\mathcal{E}}/J$ (b) Zeeman 磁場に平行なスピン成分の平均 $\overline{\sigma}_r$ (c) 磁場に垂直なスピン成分の平均 $\overline{\sigma}_{\theta}$ と (d) $\overline{\sigma}_{\phi}$ パラメータは図 15 と同じものを用いている。図は参考文献⁸より転載。

4.2.1 DNA 分子のパラメータ

ここでは比較として DNA 分子のパラメータであるユニットセルあたりの原子数 $N = 10$ のときの結果を示す。分子の長さは図 15, 図 16 と同じ全 40 サイトとしている。スピンの差に関しては似たようなパターンが観測されるが、エネルギーやスピンの平均に関しては全く異なる分布をしている。また、図 15, 図 16 と比較してスピンに関してはほとんどの図で最大値が小さくなっている。一方で平行成分のスピンの平均に関してはほとんど最大値に変化がない。エネルギーに関しては平均値は極端に小さくなっていることが分かる。

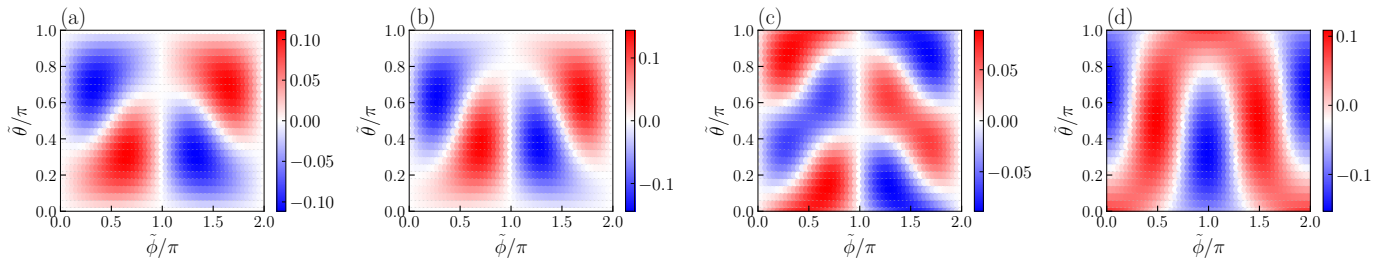


図 17 $M = 4, N = 10$ のときの全エネルギーと全スピン密度の差。(a) 全エネルギーの差 $\Delta\mathcal{E}/J$ (b) Zeeman 磁場に平行なスピン成分の差 $\Delta\sigma_r$ (c) 磁場に垂直なスピン成分の差 $\Delta\sigma_{\theta}$ と (d) $\Delta\sigma_{\phi}$ その他のパラメータは図 15, 図 16 と同じものを用いている。

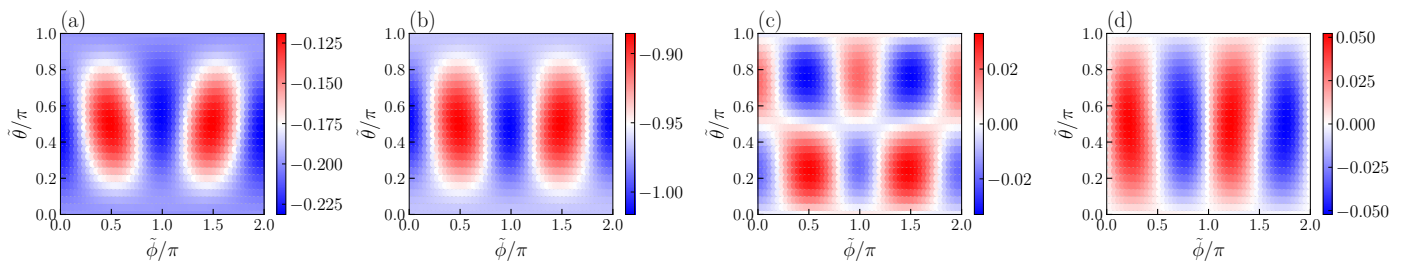


図 18 $M = 4, N = 10$ のときの全エネルギーと全スピン密度の平均。(a) 全エネルギーの平均 $\overline{\mathcal{E}}/J$ (b) Zeeman 磁場に平行なスピン成分の平均 $\overline{\sigma}_r$ (c) 磁場に垂直なスピン成分の平均 $\overline{\sigma}_{\theta}$ と (d) $\overline{\sigma}_{\phi}$ その他のパラメータは図 15, 図 16 と同じものを用いている。

5 結論

本論文では原子内スピン軌道相互作用を含む p 軌道らせん分子鎖のスピン状態について議論した。無限長さの分子で対称性から要請される特別なパラメータを用いると、エネルギーバンドに準位反発が生じ 2 つのヘリカル状態が出来る。Fermi 準位がこのヘリカル状態のエネルギーギャップ内にある場合に電荷分布は分子鎖の両端に局在することを示した。また、解析的にヘリカル状態の波動関数を求めることで、この電荷集中がエネルギーギャップ内のエバネッセント状態によってもたらされることを明らかにした。

磁場が印加されると時間反転対称性が破れることで端への電荷集中がスピン分極する。エナンチオ選択性によるカイラル分子吸着の実験における強磁性基板を再現するため、分子端の 1 サイトのみに印加した Zeeman 磁場はカイラリティに依存した有限のスピン分極を引き起こす。図 12 はカイラリティが基板磁化と垂直なスピン成分にのみ影響を与えることを示している。これはスピン軌道相互作用と磁場が共に存在してはじめて起こる効果である。また、磁場をかけていない反対側の端でも有限のスピン分極が僅かに観測される。図 15 は誘起されるスピンの期待値が Zeeman 磁場の向きに依存して変化することを示している。さらに図 16 との比較からカイラリティ依存性が磁場と垂直な方向に対して顕著であることも示唆している。

このカイラリティ依存性はスピン分極だけでなくエネルギーにも現れるため、CISS 効果によるエナンチオ選択効果に対して深い洞察を与えると期待される。一方で実際の実験を説明するためには強磁性基板に加えて Coulomb 相互作用や格子振動などの別の効果も考慮する必要がある。¹⁵⁻¹⁹

謝辞

本研究を進めるにあたり，指導教員として多大なご指導を賜った三重大学大学院 工学研究科 物理工学専攻の内海裕洋 准教授に感謝申し上げます。研究を通してアメリカでの国際会議に参加する機会や，国内でも複数の学会に参加させていただいたこと，国際誌の論文執筆のご指導など，貴重な経験や多方面にわたるサポート，ご助言いただきましたこと厚く御礼申し上げます。

また，Tel Aviv 大学の Amnon Aharony 教授，並びに同大学の Ora Entin-Wohlman 教授にはお忙しい中，Zoom での議論や論文の推敲，計算結果の議論や考察に至るまで多大なご協力をいただきましたことを深謝いたします。

最後に，北海道大学 工学研究院 応用物理学部門 量子物性工学分野の明楽浩史 教授，分子科学研究所 協奏分子システム研究センター 機能分子システム創成研究部門 山本浩史 教授には国内外の学会において大変お世話になりました。研究に関する貴重な意見や，議論，多大なサポートをいただきましたことを深く感謝申し上げます。

本研究は阪大 CSRN スピン RNJ，一般財団法人丸文財団の助成を受けたものです。ここに感謝の意を表します。

参考文献

- [1] Qi Qian, Huaying Ren, Jingyuan Zhou, Zhong Wan, Jingxuan Zhou, Xingxu Yan, Jin Cai, Peiqi Wang, Bailing Li, Zdenek Sofer, bo li, Xidong Duan, X. Pan, Yu Huang, and Xiangfeng Duan. Chiral molecular intercalation superlattices. *Nature*, 606:902–908, 06 2022.
- [2] K. Ray, S. P. Ananthavel, D. H. Waldeck, and R. Naaman. Asymmetric scattering of polarized electrons by organized organic films of chiral molecules. *Science*, 283(5403):814–816, 1999.
- [3] Suryakant Mishra, Amit Kumar Mondal, Shubhadeep Pal, Tapan Kumar Das, Eilam Z. B. Smolinsky, Giuliano Siligardi, and Ron Naaman. Length-dependent electron spin polarization in oligopeptides and dna. *Journal of Physical Chemistry C*, 124:10776–10782, 2020.
- [4] Kouta Kondou, Masanobu Shiga, Shoya Sakamoto, Hiroyuki Inuzuka, Atsuko Nihonyanagi, Fumito Araoka, Masaki Kobayashi, Shinji Miwa, Daigo Miyajima, and YoshiChika Otani. Chirality-induced magnetoresistance due to thermally driven spin polarization. *Journal of the American Chemical Society*, 144(16):7302–7307, 2022. PMID: 35414173.
- [5] Ferdinand Evers, Amnon Aharony, Nir Bar-Gill, Ora Entin-Wohlman, Per Hedegard, Oded Hod, Pavel Jelinek, Grzegorz Kamieniarz, Mikhail Lemesko, Karen Michaeli, Vladimiro Mujica, Ron Naaman, Yossi Paltiel, Sivan Refaely-Abramson, Oren Tal, Jos Thijssen, Michael Thoss, Jan M. van Ruitenbeek, Latha Venkataraman, David H. Waldeck, Binghai Yan, and Leeor Kronik. Theory of chirality induced spin selectivity: Progress and challenges. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 13:7, 2022.
- [6] Koyel Banerjee-Ghosh, Oren Ben Dor, Francesco Tassinari, Eyal Capua, Shira Yochelis, Amir Capua, See-Hun Yang, Stuart S. P. Parkin, Soumyajit Sarkar, Leeor Kronik, Lech Tomasz Baczewski, Ron Naaman, and Yossi Paltiel. Separation of enantiomers by their enantiospecific interaction with achiral magnetic substrates. *Science*, 360(6395):1331–1334, 2018.
- [7] J. Fransson. Charge and spin dynamics and enantioselectivity in chiral molecules. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 13(3):808–814, 2022.
- [8] Takemitsu Kato, Yasuhiro Utsumi, Ora Entin-Wohlman, and Amnon Aharony. Electronic and spin states at edges of finite p-orbital helical atomic chain. *The Journal of Chemical Physics*, 159(24):244101, 12 2023.
- [9] Yasuhiro Utsumi, Ora Entin-Wohlman, and Amnon Aharony. Spin selectivity through time-reversal symmetric helical junctions. *Phys. Rev. B*, 102:035445, Jul 2020.
- [10] Yasuhiro Utsumi, Takemitsu Kato, Ora Entin-Wohlman, and Amnon Aharony. Spin-filtering in a p-orbital helical atomic chain. *Israel Journal of Chemistry*, 62(11-12):e202200107, 2022.
- [11] Ryosuke Otsuto, Yuya Yatabe, and Hiroshi Akera. Orbital and spin polarizations induced by current through a helical atomic chain. *Phys. Rev. B*, 104:035431, Jul 2021.
- [12] Daniel Huertas-Hernando, F. Guinea, and Arne Brataas. Spin-orbit coupling in curved graphene, fullerenes, nanotubes, and nanotube caps. *Phys. Rev. B*, 74:155426, Oct 2006.
- [13] R. Gutierrez, E. Díaz, R. Naaman, and G. Cuniberti. Spin-selective transport through helical molecular systems. *Phys. Rev. B*, 85:081404, Feb 2012.
- [14] Abhay N. Pasupathy, Radoslaw C. Bialczak, Jan Martinek, Jacob E. Grose, Luke A. K. Donev, Paul L. McEuen, and Daniel C. Ralph. The kondo effect in the presence of ferromagnetism. *Science*, 306(5693):86–89, 2004.
- [15] Akihito Kato, Hiroshi M. Yamamoto, and Jun-ichiro Kishine. Chirality-induced spin filtering in pseudo jahn-teller molecules. *Phys. Rev. B*, 105:195117, May 2022.
- [16] Jonas Fransson. Vibrational origin of exchange splitting and ” chiral-induced spin selectivity. *Physical Review*

- B, 102, 12 2020.
- [17] Dan Klein and Karen Michaeli. Giant chirality-induced spin selectivity of polarons. Phys. Rev. B, 107:045404, Jan 2023.
- [18] Clemens Vittmann, R. Kevin Kessing, James Lim, Susana F. Huelga, and Martin B. Plenio. Interface-induced conservation of momentum leads to chiral-induced spin selectivity. The Journal of Physical Chemistry Letters, 13(7):1791–1796, 2022.
- [19] Clemens Vittmann, James Lim, Dario Tamascelli, Susana F. Huelga, and Martin B. Plenio. Spin-dependent momentum conservation of electron–phonon scattering in chirality-induced spin selectivity. The Journal of Physical Chemistry Letters, 14(2):340–346, 2023.
- [20] 小出昭一郎. 量子力学 (II). 裳華房, 40 edition, 2019.
- [21] 小出昭一郎. 量子力学 (I). 裳華房, 50 edition, 2008.

6 付録

付録 A : らせん対称性を満たす行列 J のパラメータ

式 (21) を満たす J を求める準備として, はじめに角運動量演算子 L_z のべき乗

$$L_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_z^3 = L_z \quad (\text{A.1})$$

を用意する。これらを用いると回転演算子 $e^{iL_z p \Delta \phi}$ の Taylor 展開は

$$e^{iL_z p \Delta \phi} = I + ip \Delta \phi L_z - \frac{1}{2!} (p \Delta \phi)^2 L_z^2 - \frac{i}{3!} (p \Delta \phi)^3 L_z^3 \dots \quad (\text{A.2})$$

$$= I + \left(-\frac{1}{2!} (p \Delta \phi)^2 + \frac{1}{4!} (p \Delta \phi)^4 + \dots \right) L_z^2 + i \left(p \Delta \phi - \frac{i}{3!} (p \Delta \phi)^3 + \dots \right) L_z \quad (\text{A.3})$$

$$= I + (\cos(p \Delta \phi) - 1) L_z^2 + i \sin(p \Delta \phi) L_z \quad (\text{A.4})$$

$$= I + (\cos(p \Delta \phi) - 1) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + i \sin(p \Delta \phi) \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

$$= \begin{pmatrix} \cos(p \Delta \phi) & \sin(p \Delta \phi) & 0 \\ -\sin(p \Delta \phi) & \cos(p \Delta \phi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

というように行列の形に書き直すことができる。行列 J の各要素を 9 つの任意のパラメータを用いて

$$J = \begin{pmatrix} J_{11} & J_{12} & J_{13} \\ J_{21} & J_{22} & J_{23} \\ J_{31} & J_{32} & J_{33} \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

とおき, 式 (21) の右辺を計算をすると

$$\begin{aligned} e^{-iL_z \phi} J e^{iL_z \phi} &= \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_{11} & J_{12} & J_{13} \\ J_{21} & J_{22} & J_{23} \\ J_{31} & J_{32} & J_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} J_{11} \cos^2 \phi + J_{22} \sin^2 \phi - (J_{12} + J_{21}) \sin \phi \cos \phi & J_{12} \cos^2 \phi - J_{21} \sin^2 \phi + (J_{11} - J_{22}) \sin \phi \cos \phi & J_{13} \cos \phi - J_{23} \sin \phi \\ J_{21} \cos^2 \phi - J_{12} \sin^2 \phi + (J_{11} - J_{22}) \sin \phi \cos \phi & J_{22} \cos^2 \phi + J_{11} \sin^2 \phi + (J_{12} + J_{21}) \sin \phi \cos \phi & J_{23} \cos \phi + J_{13} \sin \phi \\ J_{31} \cos \phi - J_{32} \sin \phi & J_{32} \cos \phi + J_{31} \sin \phi & J_{33} \end{pmatrix} \quad (\text{A.8}) \end{aligned}$$

となる。ただし, ここで $p \Delta \phi = \phi$ と置いた。以上より, 式 (21) の関係を満たすには

$$J_{11} = J_{22}, \quad J_{12} = -J_{21}, \quad J_{13} = J_{23} = J_{31} = J_{32} = 0 \quad (\text{A.9})$$

となる必要がある。すなわち行列 J は

$$J = \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & 0 \\ -J_2 & J_1 & 0 \\ 0 & 0 & J_3 \end{pmatrix} \quad (\text{A.10})$$

のように 3 つのパラメータで決定される。

付録 B : Rashba 型スピン分裂の解析計算

付録 B.1 : 局所座標系のハミルトニアン の 導出

らせん対称性の議論と同様に回転演算子を行列形式で表す。まず, x 軸まわりの回転について角運動量演算子 L_x の累乗は

$$L_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad L_x^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad L_x^3 = L_x \quad (\text{B.1})$$

となり, これらを用いて $e^{iL_x\theta_p}$ を Taylor 展開すると

$$e^{iL_x\theta_p} = I + i\theta_p L_x - \frac{1}{2!}\theta_p^2 L_x^2 + \frac{i}{3!}\theta_p^3 L_x^3 \cdots \quad (\text{B.2})$$

$$= I + \left(-\frac{1}{2!}\theta_p^2 + \frac{1}{4!}\theta_p^4 + \cdots \right) L_x^2 + i \left(\theta_p - \frac{i}{3!}\theta_p^3 + \cdots \right) L_x \quad (\text{B.3})$$

$$= I + (\cos \theta_p - 1) L_x^2 + i \sin \theta_p L_x \quad (\text{B.4})$$

$$= I + (\cos \theta_p - 1) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + i \sin \theta_p \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.5})$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta_p & \sin \theta_p \\ 0 & -\sin \theta_p & \cos \theta_p \end{pmatrix} \quad (\text{B.6})$$

を得る。ここで, 式 (7) より $p=1$ のとき

$$\cos \theta_p = \cos \theta = \kappa, \quad \sin \theta_p = \sin \theta = \tau \quad (\text{B.7})$$

であり, $p=-1$ のとき

$$\cos \theta_p = \cos(\pi - \theta) = -\kappa, \quad \sin \theta_p = \sin(\pi - \theta) = \sin \theta = \tau \quad (\text{B.8})$$

であるから, 結果として $\cos \theta_p$, $\sin \theta_p$ はそれぞれ

$$\cos \theta_p = p\kappa, \quad \sin \theta_p = \sin \theta = \tau. \quad (\text{B.9})$$

のように書くことができる。すなわち x 軸まわりの回転演算子は

$$e^{iL_x\theta_p} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & p\kappa & \tau \\ 0 & -\tau & p\kappa \end{pmatrix} \quad (\text{B.10})$$

と表される。次に z 軸まわりの回転演算子についても同様に計算をすると

$$e^{iL_z p\phi_n} = I + ip\phi_n L_z - \frac{1}{2!}(p\phi_n)^2 L_z^2 - \frac{i}{3!}(p\phi_n)^3 L_z^3 \cdots \quad (\text{B.11})$$

$$= I + \left(-\frac{1}{2!}(p\phi_n)^2 + \frac{1}{4!}(p\phi_n)^4 + \cdots \right) L_z^2 + i \left(p\phi_n - \frac{i}{3!}(p\phi_n)^3 + \cdots \right) L_z \quad (\text{B.12})$$

$$= I + (\cos(p\phi_n) - 1) L_z^2 + i \sin(p\phi_n) L_z \quad (\text{B.13})$$

$$= I + (\cos(p\phi_n) - 1) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + i \sin(p\phi_n) \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.14})$$

$$= \begin{pmatrix} \cos(p\phi_n) & \sin(p\phi_n) & 0 \\ -\sin(p\phi_n) & \cos(p\phi_n) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.15})$$

のように、らせん対称性で用いた行列と同様の結果を得る。ただし、今回の場合は回転角が各サイトごとに異なる点に注意する。以下ではヘリカル状態を壊さない理想的ならせん分子として振率 $\tau = 0$ ($\kappa = 1$) の場合を仮定する。このとき、回転演算子 O_n の行列は

$$O_n = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(p\phi_n) & \sin(p\phi_n) & 0 \\ -\sin(p\phi_n) & \cos(p\phi_n) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(p\phi_n) & \sin(p\phi_n) & 0 \\ -p\sin(p\phi_n) & p\cos(p\phi_n) & 0 \\ 0 & 0 & p \end{pmatrix} \quad (\text{B.16})$$

のように書き表すことができる。したがって、式 (14) は局所座標系で

$$H = \sum_n \left(-c_{n+1}^\dagger O_{n+1} \mathbf{J} \otimes \sigma_0 O_n^{-1} c_n + \text{H.c.} \right. \\ \left. + \Delta_{\text{so}} c_n^\dagger O_n \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma} O_n^{-1} c_n + K_I c_n^\dagger O_n \left[(\mathbf{t}(\phi_n) \cdot \mathbf{L})^2 - \mathbf{1}_3 \right] \otimes \sigma_0 O_n^{-1} c_n \right) \quad (\text{B.17})$$

と書きかえられる。以下ではハミルトニアン の各項について、回転操作によって行列の形がどのような変化を受けるのかをそれぞれ調べる。

まずはホッピングの行列 \mathbf{J} について、局所座標での行列を $\tilde{\mathbf{J}}$ とすると、

$$\tilde{\mathbf{J}} = O_{n+1} \mathbf{J} O_n^{-1} \\ = \begin{pmatrix} \cos(p\phi_{n+1}) & p\sin(p\phi_{n+1}) & 0 \\ -\sin(p\phi_{n+1}) & p\cos(p\phi_{n+1}) & 0 \\ 0 & 0 & p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & 0 \\ -J_2 & J_1 & 0 \\ 0 & 0 & J_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(p\phi_n) & -\sin(p\phi_n) & 0 \\ p\sin(p\phi_n) & p\cos(p\phi_n) & 0 \\ 0 & 0 & p \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} J_1 \cos(p\phi) - J_2 \sin(p\phi) & p(J_1 \sin(p\phi) + J_2 \cos(p\phi)) & 0 \\ -p(J_1 \sin(p\phi) + J_2 \cos(p\phi)) & J_1 \cos(p\phi) - J_2 \sin(p\phi) & 0 \\ 0 & 0 & J_3 \end{pmatrix} \quad (\text{B.18})$$

のように表される。 $\tilde{\mathbf{J}}$ は $J_1 = J \cos(p\phi)$, $J_2 = -J \sin(p\phi)$, $J_3 = J$ とパラメータ選ぶことで局所座標系で対角行列 $\tilde{\mathbf{J}} = J \mathbf{1}_3$ にすることができる。

次に、スピン軌道相互作用の項について考える。回転演算子は軌道の空間のみに作用して

$$O_n \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} O_n^{-1} = (O_n \mathbf{L} O_n^{-1}) \cdot \mathbf{S} \equiv \tilde{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{S} \quad (\text{B.19})$$

のように変化する。ここで局所座標での角運動量演算子ベクトルを $\tilde{\mathbf{L}}$ と定義する。 $\tilde{\mathbf{L}}$ の各成分はそれぞれ行列で表現すると、

$$\tilde{L}_x = O_n L_x O_n^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -ip\sin(p\phi_n) \\ 0 & 0 & -i\cos(p\phi_n) \\ ip\sin(p\phi_n) & i\cos(p\phi_n) & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.20})$$

$$\tilde{L}_y = O_n L_y O_n^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & ip\cos(p\phi_n) \\ 0 & 0 & -i\sin(p\phi_n) \\ -ip\cos(p\phi_n) & i\sin(p\phi_n) & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.21})$$

$$\tilde{L}_z = O_n L_z O_n^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -ip & 0 \\ ip & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.22})$$

となる。したがってスピン軌道相互作用の項は局所座標系で

$$\tilde{\mathbf{L}} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \tilde{L}_x \otimes \sigma_x + \tilde{L}_y \otimes \sigma_y + \tilde{L}_z \otimes \sigma_z \quad (\text{B.23})$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -ip & 0 & 0 & pe^{-ip\phi_n} \\ 0 & 0 & 0 & ip & -pe^{ip\phi_n} & 0 \\ ip & 0 & 0 & 0 & 0 & -ie^{-ip\phi_n} \\ 0 & -ip & 0 & 0 & -ie^{ip\phi_n} & 0 \\ 0 & -pe^{-ip\phi_n} & 0 & ie^{-ip\phi_n} & 0 & 0 \\ pe^{ip\phi_n} & 0 & ie^{ip\phi_n} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.24})$$

のように書くことができる。

図 5 (b) における $t(\phi_n)$, $n(\phi_n)$, $b(\phi_n)$ はそれぞれ局所座標系での y 軸, $-x$ 軸, z 軸に対応する。すなわち, 接線方向に関しては $t(\phi_n) \cdot \mathbf{L} = O_n^{-1} L_y O_n \equiv \tilde{L}'_y$ であり, 異方性の項は

$$\tilde{c}_n^\dagger \left[(t(\phi_n) \cdot \mathbf{L})^2 - \mathbf{1}_3 \right] \otimes \sigma_0 \tilde{c}_n \quad (\text{B.25})$$

$$= c_n^\dagger O_n \left(\tilde{L}'_y{}^2 - \mathbf{1}_3 \right) \otimes \sigma_0 O_n^{-1} c_n = c_n^\dagger \left(O_n \tilde{L}'_y{}^2 O_n^{-1} - \mathbf{1}_3 \right) \otimes \sigma_0 c_n \quad (\text{B.26})$$

$$= c_n^\dagger \left[O_n \tilde{L}'_y O_n^{-1} O_n \tilde{L}'_y O_n^{-1} - \mathbf{1}_3 \right] \otimes \sigma_0 c_n = c_n^\dagger \left[L_y^2 - \mathbf{1}_3 \right] \otimes \sigma_0 c_n \quad (\text{B.27})$$

$$= -c_n^\dagger |y\rangle \langle y| c_n \quad (\text{B.28})$$

と書きかえられる。ただしここで,

$$L_y^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{1}_3 - |y\rangle \langle y| \quad (\text{B.29})$$

の関係を用いた。

結果として, 局所座標系でのハミルトニアンは

$$H = \sum_n \left(-c_{n+1}^\dagger \tilde{\mathbf{J}} \otimes \sigma_0 c_n + \text{H.c.} + \Delta_{\text{so}} c_n^\dagger \tilde{\mathbf{L}} \cdot \boldsymbol{\sigma} c_n - K_t c_n^\dagger |y\rangle \langle y| \otimes \sigma_0 c_n \right) \quad (\text{B.30})$$

と表される。

付録 B.2 Schrieffer-Wolff 変換の計算

あるユニタリ演算子 $U = e^S$ を用いてハミルトニアンを

$$H' = e^{-S} H e^S \quad (\text{B.31})$$

$$= \left(1 - S + \frac{1}{2} S^2 - \dots \right) H \left(1 + S + \frac{1}{2} S^2 + \dots \right) \quad (\text{B.32})$$

$$= H + HS - SH + \frac{1}{2} HS^2 - SHS + \frac{1}{2} S^2 H + \dots \quad (\text{B.33})$$

$$= H + [H, S] + \frac{1}{2} [[H, S], S] + \dots \quad (\text{B.34})$$

$$= H_0 + \underbrace{V}_{[H_0, S]} + [V, S] + \frac{1}{2} [[H_0, S], S] + \frac{1}{2} [[V, S], S] + \dots \quad (\text{B.35})$$

のようにユニタリ変換する。このとき, $V + [H_0, S] = 0$ となることを要請する。簡単のためハミルトニアンが 3×3 行列で表現されている場合を仮定し, H' がさらに別のユニタリ変換によって H'' に変換されるとする。このとき H_0 は変換によって完全に対角化され, H'_0 になるとする。すなわち, $V + [H_0, S] = 0$ に対しては

$$V + [H_0, S] = 0 \quad \rightarrow \quad V' + [H'_0, S'] = 0 \quad (\text{B.36})$$

のように変換される場合を考える。ここで, H'_0 と S' は任意のパラメータを用いて

$$H'_0 = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & 0 \\ 0 & d_2 & 0 \\ 0 & 0 & d_3 \end{pmatrix}, \quad S' = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} \end{pmatrix} \quad (\text{B.37})$$

と書くことができる。これを式 (B.36) に代入すると

$$[H'_0, S'] = \begin{pmatrix} 0 & (d_1 - d_2)s_{12} & (d_1 - d_3)s_{13} \\ (d_2 - d_1)s_{21} & 0 & (d_2 - d_3)s_{23} \\ (d_3 - d_1)s_{31} & (d_3 - d_2)s_{32} & 0 \end{pmatrix} = -V' \quad (\text{B.38})$$

と書くことができる。したがって、 S' は V' を用いて

$$V'_{ij} = -(d_i - d_j)S'_{ij} \quad (\text{B.39})$$

$$S'_{ij} = \frac{V'_{ij}}{d_j - d_i} \quad (\text{B.40})$$

のように表せることが分かる。したがって、ユニタリ変換したハミルトニアン H'' は V' の 2 次までのオーダーで

$$H'' = H'_0 + \underbrace{V' + [H'_0, S']} + [V', S'] + \frac{1}{2}[[H'_0, S'], S'] + \frac{1}{2}[[V', S'], S'] + \dots \quad (\text{B.41})$$

$$= H'_0 + [V', S'] - \frac{1}{2}[V', S'] + \frac{1}{2}[[V', S'], S'] + \dots \quad (\text{B.42})$$

$$= H'_0 + [V', S'] - \frac{1}{2}[V', S'] + \mathcal{O}(V'^3) \quad (\text{B.43})$$

$$= H'_0 + \frac{1}{2}[V', S'] + \mathcal{O}(V'^3) \quad (\text{B.44})$$

となり、摂動の行列 V' のみを用いてこのハミルトニアンは

$$H''_{ij} = d_i \delta_{ij} + \frac{1}{2} \sum_k V'_{ik} V'_{kj} \left(\frac{1}{d_i - d_k} + \frac{1}{d_j - d_k} \right) + \mathcal{O}(V'^3) \quad (\text{B.45})$$

$$\simeq d_i \delta_{ij} + \frac{1}{2} \sum_k V'_{ik} V'_{kj} \left(\frac{1}{K_t} + \frac{1}{K_t} \right) + \mathcal{O}(V'^3) \quad (\text{B.46})$$

という形に書き表せる。最後の変形ではハミルトニアンの対角項が本論文のモデルで結晶場のエネルギーに対応し、局所座標系での y 方向に十分大きなエネルギーをもつことを考慮して K_t で近似した。これを再びユニタリ変換をすることで H' に戻すと

$$H' \simeq H_0 + \frac{V^2}{K_t} \quad (\text{B.47})$$

となる。

以下ではこれらの計算を具体的な表式を用いて行う。本論文のモデルにおいてブロック対角項 H_0 と非対角項 V にはそれぞれ

$$H_0 = H_{xz} + H_y, \quad V = V_{xz;y} + V_{y;xz} \quad (\text{B.48})$$

が対応している。式 (B.47) の V^2 を展開した

$$V^2 = (V_{xz;y} + V_{y;xz})^2 \quad (\text{B.49})$$

$$= V_{xz;y} V_{xz;y} + V_{xz;y} V_{y;xz} + V_{y;xz} V_{xz;y} + V_{y;xz} V_{y;xz} \quad (\text{B.50})$$

の各項を以下で別々に計算する。それぞれの項における生成消滅演算子の組み合わせは

$$V_{xz;y} V_{xz;y} = c_{n+1;xz}^\dagger X_1 X_2 c_{n+1;xz} + c_{n;xz}^\dagger X_3 X_2 c_{n+1;xz} + c_{n;y}^\dagger X_2 X_1 c_{n;y} + c_{n;y}^\dagger X_2 X_3' c_{n+1;y} \quad (\text{B.51})$$

$$V_{xz;y} V_{y;xz} = c_{n+1;y}^\dagger X_4 X_5 c_{n+1;y} + c_{n;xz}^\dagger X_5 X_4 c_{n;xz} + c_{n;y}^\dagger X_6 X_5 c_{n+1;y} + c_{n;xz}^\dagger X_5 X_6' c_{n+1;xz} \quad (\text{B.52})$$

$$V_{y;xz} V_{xz;y} = c_{n+1;xz}^\dagger X_1 X_6 c_{n;xz} + c_{n;xz}^\dagger X_3 X_6 c_{n;xz} + c_{n+1;xz}^\dagger X_3 X_4 c_{n;xz} \quad (\text{B.53})$$

$$V_{y;xz} V_{y;xz} = c_{n+1;y}^\dagger X_4 X_3 c_{n;y} + c_{n;y}^\dagger X_6 X_3 c_{n;y} + c_{n+1;y}^\dagger X_6' X_1 c_{n;y} \quad (\text{B.54})$$

である。ここで X_n はそれぞれ

$$X_1 = - \begin{pmatrix} J_1 \sin \phi + J_2 \cos \phi & \\ & 0 \end{pmatrix} \otimes \sigma_0 = - \begin{pmatrix} \mathcal{J}_+ & \\ & 0 \end{pmatrix} \otimes \sigma_0 \quad (\text{B.55})$$

$$X_2 = - (\mathcal{J}_+, 0) \otimes \sigma_0 = X_1^\dagger \quad (\text{B.56})$$

$$X_3 = \Delta_{\text{so}} \begin{pmatrix} -i & 0 & & \\ & 0 & i & \\ & 0 & & ie^{-i\phi_n} \\ ie^{i\phi_n} & & & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.57})$$

$$X_6 = \Delta_{\text{so}} \begin{pmatrix} i & 0 & 0 & -ie^{-i\phi_n} \\ 0 & -i & -ie^{i\phi_n} & 0 \end{pmatrix} = X_3^\dagger \quad (\text{B.58})$$

$$X_4 = -X_2, \quad X_5 = -X_1, \quad X'_i = X'_i(\phi_n \mapsto \phi_{n+1}) \quad (\text{B.59})$$

を表している。この表式で、

$$\mathcal{J}_+ = J_1 \sin \phi + J_2 \cos \phi \quad (\text{B.60})$$

$$\mathcal{J}_- = J_1 \sin \phi - J_2 \cos \phi \quad (\text{B.61})$$

とおいた。このとき、 X_n 同士の積はそれぞれ

$$X_4 X_3 = X'_6 X_1 = -i \Delta_{\text{so}} \mathcal{J}_+ \sigma_z \quad (\text{B.62})$$

$$X_6 X_5 = X_2 X'_3 = i \Delta_{\text{so}} \mathcal{J}_+ \sigma_z \quad (\text{B.63})$$

$$X_2 X_1 = X_4 X_5 = -\mathcal{J}_+^2 \sigma_0 \quad (\text{B.64})$$

$$X_6 X_3 = 2\Delta_{\text{so}}^2 \sigma_0 \quad (\text{B.65})$$

となる。

以下では p_y 軌道のスピン分裂についてのみ考える。すなわち p_y 軌道部分のハミルトニアン Schrieffer-Wolff 変換 $H_{yy} = H_y + V_{y;xz} V_{xz;y} / K_t$ を行う。この H_{yy} を書き下すと

$$\begin{aligned} H_{yy} = \sum_n \left\{ & [-\mathcal{J}_- c_{n+1;y}^\dagger \sigma_0 c_{n;y} + \text{H.c.}] + K_t c_{n;y}^\dagger \sigma_0 c_{n;y} \right. \\ & + \frac{2i\Delta_{\text{so}} \mathcal{J}_+}{K_t} [-c_{n+1;y}^\dagger \sigma_z c_{n;y} + c_{n;y}^\dagger \sigma_z c_{n+1;y}] \\ & \left. - \frac{\mathcal{J}_+^2}{K_t} [c_{n;y}^\dagger \sigma_0 c_{n;y} + c_{n+1;y}^\dagger \sigma_0 c_{n+1;y}] + \frac{2\Delta_{\text{so}}^2}{K_t} c_{n;y}^\dagger \sigma_0 c_{n;y} \right\} \quad (\text{B.66}) \end{aligned}$$

となる。このハミルトニアンに Fourier 変換

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{MN}} \sum_{l=1}^{MN} e^{ik_l n/N} c_{k_l}, \quad k_l = \frac{2\pi l}{M} \quad (\text{B.67})$$

を施すと、生成消滅演算子は

$$c_{n+1}^\dagger c_n = \frac{1}{MN} \sum_{l,m=1}^{MN} e^{-ik_l(n+1)/N} e^{ik_m n/N} c_{k_l}^\dagger c_{k_m} = \sum_{l=1}^{MN} e^{-ik_l/N} c_{k_l}^\dagger c_{k_l} \quad (\text{B.68})$$

のように変化する。ここでは全 MN サイトの原子鎖に周期的境界条件を適用する。したがって Fourier 変換後のハミルトニアン $H_{yy}(k)$ は

$$H_{yy}(k) = \sum_l c_{k;y}^\dagger \left(\left[-2\mathcal{J}_- \cos \frac{k_l}{N} + K_t - \frac{2\mathcal{J}_+^2}{K_t} + \frac{2\Delta_{\text{so}}^2}{K_t} \right] \sigma_0 - \left[\frac{4\Delta_{\text{so}} \mathcal{J}_+}{K_t} \sin \frac{k_l}{N} \right] \sigma_z \right) c_{k;y} \quad (\text{B.69})$$

と書け，このハミルトニアン固有エネルギーは

$$E_{yy} = \left(-2\mathcal{J}_- \cos \frac{k_l}{N} + K_t - \frac{2\mathcal{J}_+^2}{K_t} + \frac{2\Delta_{\text{so}}^2}{K_t} \right) \pm \frac{4\Delta_{\text{so}}\mathcal{J}_+}{K_t} \sin \frac{k_l}{N} \quad (\text{B.70})$$

$$= -\mathcal{A} \cos \left(\frac{k_l}{N} \pm \theta \right) + K_t + \frac{2\mathcal{J}_+^2}{K_t} + \frac{2\Delta_{\text{so}}^2}{K_t} \quad (\text{B.71})$$

となる。最後の変形において

$$\mathcal{A} = \sqrt{(2\mathcal{J}_-)^2 + \left(\frac{4\Delta_{\text{so}}\mathcal{J}_+}{K_t} \right)^2} \quad (\text{B.72})$$

$$\theta = \cos^{-1} \frac{2\mathcal{J}_-}{\mathcal{A}} \quad (\text{B.73})$$

とおいた。ここで $\phi = 2\pi/N$ を使って書きかえると， E_{yy} は

$$E_{yy} = \mathcal{A} \cos(k \pm \tilde{\theta}) \phi + K_t + \frac{2\mathcal{J}_+^2}{K_t} + \frac{2\Delta_{\text{so}}^2}{K_t} \quad (\text{B.74})$$

と書くことができる。ここで $k = k_l/(2\pi)$ ， $\tilde{\theta} = N\theta/(2\pi)$ とおいた。

付録 C : ヘリカル状態の解析解の導出

付録 C.1 固有エネルギーの導出

ここで、天下りの的ではあるが H_+ の固有ケットが

$$|z_{k,p}; \pm\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} z_{k,p}^n \hat{c}_{n;\pm}^\dagger(z_{k,p}) |0\rangle \quad (\text{C.1})$$

の形で書かれると仮定する。ただし、ここで $\hat{c}_{n;-}^\dagger(z_{k,p})$, $\hat{c}_{n;+}^\dagger(z_{k,p})$ は

$$\hat{c}_{n;-}^\dagger(z_{k,p}) = u(z_{k,p}) c_{n;x\uparrow}^\dagger - v(z_{k,p}) e^{ip\phi_n} c_{n;z\downarrow}^\dagger \quad (\text{C.2})$$

$$\hat{c}_{n;+}^\dagger(z_{k,p}) = v(z_{k,p}) c_{n;x\uparrow}^\dagger + u(z_{k,p}) e^{ip\phi_n} c_{n;z\downarrow}^\dagger \quad (\text{C.3})$$

であり、 $z_{k,p}$, $u(z_{k,p})$, $v(z_{k,p})$ はそれぞれ

$$z_{k,p} = e^{i\frac{k+2\pi p}{N}} \quad (\text{C.4})$$

$$u(z_{k,p}) = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{pE_A(z_{k,p})}{\sqrt{E_A(z_{k,p})^2 + \Delta_{\text{so}}^2}} \right)} \quad (\text{C.5})$$

$$v(z_{k,p}) = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{pE_A(z_{k,p})}{\sqrt{E_A(z_{k,p})^2 + \Delta_{\text{so}}^2}} \right)} \quad (\text{C.6})$$

を表す。また、 $E_A(z_{k,p})$, $E(z_{k,p})$ は

$$E_A(z_{k,p}) = \frac{E(z_{k,p}) - E(z_{k,p} e^{i\phi})}{2} \quad (\text{C.7})$$

$$E(z_{k,p}) = -J \left(z_{k,p} + z_{k,p}^{-1} \right) \quad (\text{C.8})$$

である。以下では、この固有ケットにハミルトニアンを作用させて実際に固有ケットになっていることを確かめる。

ハミルトニアン H_+ を

$$H_+ = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\hat{T}_{n+1,n} + \hat{T}_{n,n+1} + \hat{U}_{n,n} \right) \quad (\text{C.9})$$

のようにホッピング項 $\hat{T}_{n+1,n}$ とオンサイト項 $\hat{U}_{n,n}$ に分けて考える。ここで $\hat{T}_{n+1,n}$ と $\hat{U}_{n,n}$ はそれぞれ

$$\hat{T}_{n+1,n} = -J c_{n+1;x\uparrow}^\dagger c_{n;x\uparrow} - J c_{n+1;z\downarrow}^\dagger c_{n;z\downarrow} \quad (\text{C.10})$$

$$\hat{U}_{n,n} = p \Delta_{\text{so}} (e^{-ip\phi_n} c_{n;x\uparrow}^\dagger c_{n;z\downarrow} + e^{ip\phi_n} c_{n;z\downarrow}^\dagger c_{n;x\uparrow}) \quad (\text{C.11})$$

に対応する。ここではサイト n における状態のみについて考えるため、特に $\hat{T}_{n,n+1}$, $\hat{T}_{n,n-1}$, $\hat{U}_{n,n}$ の演算子に着目する。これらの演算子は固有ケット $|z_{k,p}; +\rangle$:

$$|z_{k,p}; +\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} z_{k,p}^n \hat{c}_{n;+}^\dagger(z_{k,p}) |0\rangle \quad (\text{C.12})$$

$$\hat{c}_{n;+}^\dagger(z_{k,p}) = v(z_{k,p}) c_{n;x\uparrow}^\dagger + u(z_{k,p}) e^{ip\phi_n} c_{n;z\downarrow}^\dagger \quad (\text{C.13})$$

に作用して、それぞれ

$$\hat{T}_{n,n+1} |z_{k,p}; +\rangle = \left(-Jz^{n+1} v c_{n;x\uparrow}^\dagger - Jz^{n+1} u e^{ip\phi_{n+1}} c_{n;z\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad (C.14)$$

$$= z^n \left(-Jz v c_{n;x\uparrow}^\dagger - Jz e^{i\phi} u e^{ip\phi_n} c_{n;z\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad (C.15)$$

$$\hat{T}_{n,n-1} |z_{k,p}; +\rangle = \left(-Jz^{n-1} v c_{n;x\uparrow}^\dagger - Jz^{n-1} u e^{ip\phi_{n-1}} c_{n;z\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad (C.16)$$

$$= z^n \left(-Jz^{-1} v c_{n;x\uparrow}^\dagger - Jz^{-1} e^{-i\phi} u e^{ip\phi_n} c_{n;z\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad (C.17)$$

$$\hat{U}_{n,n} |z_{k,p}; +\rangle = \left(p\Delta_{\text{so}} z^n u c_{n;x\uparrow}^\dagger + p\Delta_{\text{so}} z^n v e^{ip\phi_n} c_{n;z\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad (C.18)$$

$$= z^n \left(p\Delta_{\text{so}} \frac{u}{v} v c_{n;x\uparrow}^\dagger + p\Delta_{\text{so}} \frac{v}{u} u e^{ip\phi_n} c_{n;z\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad (C.19)$$

のようになる。これらをまとめると、 n 番目のサイトについて

$$H_+ |z_{k,p}; +\rangle = z^n \left\{ \left(-J(z+z^{-1}) + p\Delta_{\text{so}} \frac{u}{v} \right) v c_{n;x\uparrow}^\dagger + \left(-J(z e^{i\phi} + z^{-1} e^{-i\phi}) + p\Delta_{\text{so}} \frac{v}{u} \right) u e^{ip\phi_n} c_{n;z\downarrow}^\dagger \right\} |0\rangle \quad (C.20)$$

と書くことができる。ここで括弧内について詳しく計算すると、 $p\Delta_{\text{so}} u/v$ は

$$p\Delta_{\text{so}} \frac{u}{v} = \Delta \sqrt{\left(1 - \frac{pE_A}{\sqrt{E_A^2 + \Delta^2}} \right) / \left(1 + \frac{pE_A}{\sqrt{E_A^2 + \Delta^2}} \right)} \quad (C.21)$$

$$= p\Delta \sqrt{\frac{\sqrt{E_A^2 + \Delta^2} - pE_A}{\sqrt{E_A^2 + \Delta^2} + pE_A}} = p\Delta \sqrt{\frac{(\sqrt{E_A^2 + \Delta^2} - pE_A)^2}{\Delta^2}} \quad (C.22)$$

$$= p\sqrt{E_A^2(z) + \Delta^2 - E_A(z)} \quad (C.23)$$

とまとめることができ、同様に $p\Delta_{\text{so}} v/u$ は

$$p\Delta_{\text{so}} \frac{v}{u} = p\Delta \sqrt{\left(1 + \frac{pE_A}{\sqrt{E_A^2 + \Delta^2}} \right) / \left(1 - \frac{pE_A}{\sqrt{E_A^2 + \Delta^2}} \right)} \quad (C.24)$$

$$= p\Delta \sqrt{\frac{\sqrt{E_A^2 + \Delta^2} + pE_A}{\sqrt{E_A^2 + \Delta^2} - pE_A}} = p\Delta \sqrt{\frac{(\sqrt{E_A^2 + \Delta^2} + pE_A)^2}{\Delta^2}} \quad (C.25)$$

$$= p\sqrt{E_A^2(z) + \Delta^2 + E_A(z)} \quad (C.26)$$

と書きかえられる。よって、括弧内は

$$-J(z+z^{-1}) + p\Delta_{\text{so}} \frac{u}{v} = E(z_{k,p}) + p\sqrt{E_A^2(z) + \Delta^2 - E_A(z)} \quad (C.27)$$

$$= E(z_{k,p}) + p\sqrt{E_A^2(z) + \Delta^2} - \frac{E(z_{k,p}) - E(z_{k,p} e^{i\phi})}{2} \quad (C.28)$$

$$= \frac{E(z_{k,p}) + E(z_{k,p} e^{i\phi})}{2} + p\sqrt{E_A^2(z) + \Delta^2} \quad (C.29)$$

$$-J(z e^{i\phi} + z^{-1} e^{-i\phi}) + p\Delta_{\text{so}} \frac{v}{u} = E(z_{k,p} e^{i\phi}) + p\sqrt{E_A^2(z) + \Delta^2 + E_A(z)} \quad (C.30)$$

$$= \frac{E(z_{k,p}) + E(z_{k,p} e^{i\phi})}{2} + p\sqrt{E_A^2(z) + \Delta^2} \quad (C.31)$$

と同じ形で書ける。これを

$$E_+ = \frac{E(z_{k,p}) + E(z_{k,p} e^{i\phi})}{2} + p\sqrt{E_A^2(z) + \Delta_{\text{so}}^2} \quad (C.32)$$

と定義すれば、 E_+ は $|z_{k,p};+\rangle$ の固有エネルギーである。

同様の計算を $|z_{k,p};-\rangle$:

$$|z_{k,p};-\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} z_{k,p}^n \hat{c}_{n;-}^\dagger(z_{k,p}) |0\rangle \quad (\text{C.33})$$

$$\hat{c}_{n;-}^\dagger(z_{k,p}) = u(z_{k,p}) c_{n;x\uparrow}^\dagger - v(z_{k,p}) e^{ip\phi_n} c_{n;z\downarrow}^\dagger \quad (\text{C.34})$$

についても実行する。ホッピングとオンサイトに分けた部分は

$$\begin{aligned} \hat{T}_{n,n+1} |z_{k,p};-\rangle &= \left(-Jz^{n+1} u c_{n;x\uparrow}^\dagger + Jz^{n+1} v e^{ip\phi_{n+1}} c_{n;z\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \\ &= z^n \left(-Jz u c_{n;x\uparrow}^\dagger + Jz e^{i\phi} v e^{ip\phi_n} c_{n;z\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \end{aligned} \quad (\text{C.35})$$

$$\begin{aligned} \hat{T}_{n,n-1} |z_{k,p};-\rangle &= \left(-Jz^{n-1} u c_{n;x\uparrow}^\dagger + Jz^{n-1} v e^{ip\phi_{n-1}} c_{n;z\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \\ &= z^n \left(-Jz^{-1} u c_{n;x\uparrow}^\dagger + Jz^{-1} e^{-i\phi} v e^{ip\phi_n} c_{n;z\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \end{aligned} \quad (\text{C.36})$$

$$\begin{aligned} \hat{U}_{m;n} |z_{k,p};-\rangle &= \left(-p\Delta_{\text{so}} z^n v c_{m;n;x\uparrow}^\dagger + p\Delta_{\text{so}} z^n u e^{ip\phi_n} c_{n;z\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \\ &= z^n \left(-p\Delta_{\text{so}} \frac{v}{u} u c_{n;x\uparrow}^\dagger + p\Delta_{\text{so}} \frac{u}{v} v e^{ip\phi_n} c_{n;z\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \end{aligned} \quad (\text{C.37})$$

となり、結果として

$$H_+ |z_{k,p};-\rangle = z^n \left\{ \left(-J(z+z^{-1}) - p\Delta_{\text{so}} \frac{v}{u} \right) u c_{n;x\uparrow}^\dagger - \left(-J(ze^{i\phi} + z^{-1}e^{-i\phi}) - p\Delta_{\text{so}} \frac{u}{v} \right) v e^{ip\phi_n} c_{n;z\downarrow}^\dagger \right\} |0\rangle \quad (\text{C.38})$$

のように書き表せる。括弧内の部分についても同様に計算すると

$$-J(z+z^{-1}) - p\Delta_{\text{so}} \frac{v}{u} = E(z_{k,p}) - p\sqrt{E_A^2(z) + \Delta^2} - E_A(z) \quad (\text{C.39})$$

$$= E(z_{k,p}) - p\sqrt{E_A^2(z) + \Delta^2} - \frac{E(z_{k,p}) - E(z_{k,p}e^{i\phi})}{2} \quad (\text{C.40})$$

$$= \frac{E(z_{k,p}) + E(z_{k,p}e^{i\phi})}{2} - p\sqrt{E_A^2(z) + \Delta^2} \quad (\text{C.41})$$

$$-J(ze^{i\phi} + z^{-1}e^{-i\phi}) - p\Delta_{\text{so}} \frac{u}{v} = E(z_{k,p}e^{i\phi}) - p\sqrt{E_A^2(z) + \Delta^2} + E_A(z) \quad (\text{C.42})$$

$$= \frac{E(z_{k,p}) + E(z_{k,p}e^{i\phi})}{2} - p\sqrt{E_A^2(z) + \Delta^2} \quad (\text{C.43})$$

であり、これを E_+ に対応させて

$$E_- = \frac{E(z_{k,p}) + E(z_{k,p}e^{i\phi})}{2} - p\sqrt{E_A^2(z) + \Delta_{\text{so}}^2} \quad (\text{C.44})$$

と定義する。

以上をまとめると、 H_+ の固有方程式は

$$H_+ |z_{k,p};\pm\rangle = E_\pm |z_{k,p};\pm\rangle \quad (\text{C.45})$$

と書かれ、固有値は

$$E_\pm = E_S(z_{k,p}) \pm p\sqrt{E_A(z_{k,p})^2 + \Delta_{\text{so}}^2} \quad (\text{C.46})$$

$$E_{S/A}(z_{k,p}) = \frac{E(z_{k,p}) \pm E(z_{k,p}e^{i\phi})}{2} \quad (\text{C.47})$$

である。

付録 C.2 位相項 $z_{k,p}$ の解析計算

固有エネルギーの式 (78) を $z_{k,p}$ について解くと,

$$z_1 = -\frac{1}{4\alpha J} \left\{ (\alpha+1)E + \sqrt{A} + \sqrt{2(B+C)} \right\} \quad (C.48)$$

$$z_2 = -\frac{1}{4\alpha J} \left\{ (\alpha+1)E + \sqrt{A} - \sqrt{2(B+C)} \right\} \quad (C.49)$$

$$z_3 = -\frac{1}{4\alpha J} \left\{ (\alpha+1)E - \sqrt{A} + \sqrt{2(B-C)} \right\} \quad (C.50)$$

$$z_4 = -\frac{1}{4\alpha J} \left\{ (\alpha+1)E - \sqrt{A} - \sqrt{2(B-C)} \right\} \quad (C.51)$$

の 4 つの解が得られる。ただし, エネルギー固有値を E で書いた。ここで

$$\alpha = e^{i\Delta\varphi} \quad (C.52)$$

$$A = (\alpha-1)^2(E^2 - 4J^2) + 4\alpha\Delta_{so}^2 \quad (C.53)$$

$$B = (\alpha^2+1)E^2 - 2(\alpha+1)^2J^2 + 2\alpha\Delta_{so}^2 \quad (C.54)$$

$$C = (\alpha+1)E\sqrt{(\alpha-1)^2(E^2 - 4J^2) + 4\alpha\Delta_{so}^2} = (\alpha+1)E\sqrt{A} \quad (C.55)$$

である。さらに X_{\pm} を

$$X_{\pm}^2 \equiv ((\alpha+1)E \pm \sqrt{A})^2 \quad (C.56)$$

$$= (\alpha^2+1)E^2 + 2\alpha E^2 + A \pm 2(\alpha+1)E\sqrt{A} \quad (C.57)$$

$$= (\alpha^2+1)E^2 + 2\alpha E^2 + (\alpha-1)^2E^2 - 4(\alpha-1)^2J^2 + 4\alpha\Delta_{so}^2 \pm 2C \quad (C.58)$$

$$= (\alpha^2+1)E^2 + (\alpha^2+1)E^2 - 4(\alpha+1)^2J^2 + 4\alpha\Delta_{so}^2 + 16\alpha J^2 \pm 2C \quad (C.59)$$

$$= 2B \pm 2C + 16\alpha J^2 \quad (C.60)$$

のように定義することで, 解 z_n ($n=1,2,3,4$) は

$$z_{s,s'} = -\frac{1}{4\alpha J} \left(X_s + s' \sqrt{X_s^2 - 16\alpha J^2} \right) \quad (C.61)$$

$$= \frac{1}{\alpha} \left[\left(\frac{-X_s}{4J} \right) - s' \sqrt{\left(\frac{-X_s}{4J} \right)^2 - \alpha} \right] \quad (C.62)$$

と 1 つの式にまとめられる。このとき, s と s' はそれぞれ + または - の符号を表す。ここで α の値を使って

$$\alpha + 1 = e^{i\Delta\varphi} + 1 = e^{i\frac{\Delta\varphi}{2}} \left(e^{i\frac{\Delta\varphi}{2}} + e^{-i\frac{\Delta\varphi}{2}} \right) = 2e^{i\frac{\Delta\varphi}{2}} \cos \frac{\Delta\varphi}{2} \quad (C.63)$$

$$\alpha - 1 = e^{i\Delta\varphi} - 1 = e^{i\frac{\Delta\varphi}{2}} \left(e^{i\frac{\Delta\varphi}{2}} - e^{-i\frac{\Delta\varphi}{2}} \right) = 2ie^{i\frac{\Delta\varphi}{2}} \sin \frac{\Delta\varphi}{2} \quad (C.64)$$

を作ることで, X_{\pm} は

$$X_{\pm} = (\alpha+1)E \pm \sqrt{(\alpha-1)^2(E^2 - 4J^2) + 4\alpha\Delta_{so}^2} \quad (C.65)$$

$$= 2e^{i\frac{\Delta\varphi}{2}} E \cos \frac{\Delta\varphi}{2} \pm \sqrt{-4e^{i\Delta\varphi}(E^2 - 4J^2) \sin^2 \frac{\Delta\varphi}{2} + 4e^{i\Delta\varphi}\Delta_{so}^2} \quad (C.66)$$

$$= 2e^{i\frac{\Delta\varphi}{2}} \left(E \cos \frac{\Delta\varphi}{2} \pm \sqrt{(4J^2 - E^2) \sin^2 \frac{\Delta\varphi}{2} + \Delta_{so}^2} \right) \quad (C.67)$$

と書き下せる。結果として, $z_{s,s'}$ は

$$z_{s,s'} = e^{-i\Delta\varphi} \left[\left(\frac{-X_s}{4J} \right) - s' \sqrt{\left(\frac{-X_s}{4J} \right)^2 - \alpha} \right] \quad (\text{C.68})$$

$$= e^{-i\frac{\Delta\varphi}{2}} \left[\left(\frac{-e^{-i\frac{\Delta\varphi}{2}} X_s}{4J} \right) - s' \sqrt{\left(\frac{-e^{-i\frac{\Delta\varphi}{2}} X_s}{4J} \right)^2 - 1} \right] \quad (\text{C.69})$$

$$\equiv e^{-i\frac{\Delta\varphi}{2}} \left(\xi_s - s' \sqrt{\xi_s^2 - 1} \right) \quad (\text{C.70})$$

となる。ここで, ξ_s は

$$\xi_s \equiv \frac{-e^{-i\frac{\Delta\varphi}{2}} X}{4J} \quad (\text{C.71})$$

$$= \frac{1}{2J} \left(-E \cos \frac{\Delta\varphi}{2} + s \sqrt{(4J^2 - E^2) \sin^2 \frac{\Delta\varphi}{2} + \Delta_{\text{so}}^2} \right) \quad (\text{C.72})$$

$$= -\frac{E}{2J} \cos \frac{\Delta\varphi}{2} + s \sqrt{\left(1 - \left(\frac{E}{2J} \right)^2 \right) \sin^2 \frac{\Delta\varphi}{2} + \left(\frac{\Delta_{\text{so}}}{2J} \right)^2} \quad (\text{C.73})$$

である。

以上をまとめると, 位相項 $z_{s,s'}$ は

$$z_{s,s'} = e^{-i\frac{\Delta\varphi}{2}} \left(\xi_s - s' \sqrt{\xi_s^2 - 1} \right) \quad (\text{C.74})$$

$$\xi_s = -\frac{E}{2J} \cos \frac{\pi}{N} + s \sqrt{\left(1 - \left(\frac{E}{2J} \right)^2 \right) \sin^2 \frac{\pi}{N} + \left(\frac{\Delta_{\text{so}}}{2J} \right)^2} \quad (\text{C.75})$$

のように表せる。

付録 C.3 $\Delta_{\text{so}} = 0$ のときの解析計算

$E_{0,-} = -2J \cos \frac{\pi}{N}$ かつ $J = 1$ のとき ξ_s はそれぞれ

$$\xi_+ = \cos^2 \frac{\pi}{N} + \sqrt{\left(1 - \cos^2 \frac{\pi}{N} \right) \sin^2 \frac{\Delta\varphi}{2} + \left(\frac{\Delta_{\text{so}}}{2J} \right)^2} \quad (\text{C.76})$$

$$= \cos^2 \frac{\pi}{N} + \sqrt{\sin^4 \frac{\pi}{N} + \left(\frac{\Delta_{\text{so}}}{2J} \right)^2} \quad (\text{C.77})$$

$$\xi_- = \cos^2 \frac{\pi}{N} - \sqrt{\sin^4 \frac{\pi}{N} + \left(\frac{\Delta_{\text{so}}}{2J} \right)^2} \quad (\text{C.78})$$

となる。さらに、これらの2乗は

$$\xi_+^2 = \cos^2 \frac{\pi}{N} + \sqrt{\left(1 - \cos^2 \frac{\pi}{N}\right) \sin^2 \frac{\pi}{N} + \left(\frac{\Delta_{\text{so}}}{2J}\right)^2} \quad (\text{C.79})$$

$$= \cos^4 \frac{\pi}{N} + \sin^4 \frac{\pi}{N} + \left(\frac{\Delta_{\text{so}}}{2J}\right)^2 + 2\cos^2 \frac{\pi}{N} \sqrt{\sin^4 \frac{\pi}{N} + \left(\frac{\Delta_{\text{so}}}{2J}\right)^2} \quad (\text{C.80})$$

$$= 1 + \left(\frac{\Delta_{\text{so}}}{2J}\right)^2 + 2\cos^2 \frac{\pi}{N} \left(\sqrt{\sin^4 \frac{\pi}{N} + \left(\frac{\Delta_{\text{so}}}{2J}\right)^2} - \sin^2 \frac{\pi}{N} \right) \quad (\text{C.81})$$

$$\xi_-^2 = 1 + \left(\frac{\Delta_{\text{so}}}{2J}\right)^2 - 2\cos^2 \frac{\pi}{N} \left(\sqrt{\sin^4 \frac{\pi}{N} + \left(\frac{\Delta_{\text{so}}}{2J}\right)^2} + \sin^2 \frac{\pi}{N} \right) \quad (\text{C.82})$$

のように書かれる。ここで、 $\Delta_{\text{so}} = 0$ の場合を考えると、 ξ_s や ξ_s^2 は

$$\xi_+ = \cos^2 \frac{\pi}{N} + \sqrt{\sin^4 \frac{\pi}{N} + \left(\frac{\Delta_{\text{so}}}{2J}\right)^2} = 1 \quad (\text{C.83})$$

$$\xi_+^2 = 1 \quad (\text{C.84})$$

$$\xi_- = \cos^2 \frac{\pi}{N} - \sqrt{\sin^4 \frac{\pi}{N} + \left(\frac{\Delta_{\text{so}}}{2J}\right)^2} = \cos^2 \frac{\pi}{N} - \sin^2 \frac{\pi}{N} \quad (\text{C.85})$$

$$\xi_-^2 = 1 - 4\cos^2 \frac{\pi}{N} \sin^2 \frac{\pi}{N} \quad (\text{C.86})$$

となる。したがって、 $z_{s,s'}$ はそれぞれ

$$z_{+-} = e^{-i\frac{\pi}{N}} \quad (\text{C.87})$$

$$z_{++} = e^{-i\frac{\pi}{N}} \quad (\text{C.88})$$

$$z_{--} = e^{-i\frac{\pi}{N}} \left(\cos^2 \frac{\pi}{N} - \sin^2 \frac{\pi}{N} + \sqrt{-4\cos^2 \frac{\pi}{N} \sin^2 \frac{\pi}{N}} \right) \quad (\text{C.89})$$

$$= e^{-i\frac{\pi}{N}} \left(\cos^2 \frac{\pi}{N} - \sin^2 \frac{\pi}{N} + 2i\cos^2 \frac{\pi}{N} \sin^2 \frac{\pi}{N} \right) \quad (\text{C.90})$$

$$= e^{-i\frac{\pi}{N}} \left(\cos \frac{\pi}{N} + i\sin \frac{\pi}{N} \right)^2 \quad (\text{C.91})$$

$$= e^{-i\frac{\pi}{N}} e^{i\frac{2\pi}{N}} = e^{i\frac{\pi}{N}} \quad (\text{C.92})$$

$$z_{-+} = e^{-i\frac{\pi}{N}} \left(\cos^2 \frac{\pi}{N} - \sin^2 \frac{\pi}{N} - \sqrt{-4\cos^2 \frac{\pi}{N} \sin^2 \frac{\pi}{N}} \right) \quad (\text{C.93})$$

$$= e^{-i\frac{\pi}{N}} e^{-i\frac{2\pi}{N}} = e^{-i\frac{3\pi}{N}} \quad (\text{C.94})$$

と表される。

付録 C.4 u, v の解析計算

固有ケット $|E\rangle$ は4つの状態の線形結合で

$$|E\rangle = \sum_{s,s'=\pm} a_{s,s'} |z_{s,s'}; \sigma_s\rangle, \quad (\text{C.95})$$

と書かれる。ここで、 σ_s は+または-の符号を取り、サイト n ごとの確率振幅は

$$\psi(n) = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(n) \\ \psi_{\downarrow}(n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle n; \uparrow | E \rangle \\ \langle n; \downarrow | E \rangle \end{pmatrix} \quad (\text{C.96})$$

と表される。この式において $|n; \sigma\rangle = c_{n,o\sigma}^\dagger |0\rangle$ ($o = x, z$) である。4つの係数 $a_{s,s'}$ とエネルギー E は4つの式で表される境界条件と規格化条件 $\langle E | E \rangle = 1$ を満たすように定める。

以下では $\Delta_{s0} = 0$ のときにバンドが交わるエネルギー $E_{0,-} = -2J \cos \frac{\pi}{N}$ からのずれ δE , すなわち

$$E = -2J \cos \frac{\pi}{N} + \delta E \quad (\text{C.97})$$

の形でエネルギーを扱う。式 (84) の ξ_s は δE と Δ_{s0} の2次までの展開で

$$\xi_s = -\frac{E}{2J} \cos \frac{\pi}{N} + s \sqrt{\left(1 - \left(\frac{E}{2J}\right)^2\right) \sin^2 \frac{\pi}{N} + \left(\frac{\Delta_{s0}}{2J}\right)^2} \quad (\text{C.98})$$

$$= -\left(-\cos \frac{\pi}{N} + \frac{\delta E}{2J}\right) \cos \frac{\pi}{N} + s \sqrt{\left(1 - \cos^2 \frac{\pi}{N} + \frac{\delta E}{J} \cos \frac{\pi}{N} - \left(\frac{\delta E}{2J}\right)^2\right) \sin^2 \frac{\pi}{N} + \left(\frac{\Delta_{s0}}{2J}\right)^2} \quad (\text{C.99})$$

$$= \cos^2 \frac{\pi}{N} - \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N} + s \sin^2 \frac{\pi}{N} \sqrt{1 + \frac{\delta E}{J \sin^2(\pi/N)} \cos \frac{\pi}{N} - \frac{\delta E^2}{4J^2 \sin^2(\pi/N)} + \frac{\Delta_{s0}^2}{4J^2 \sin^4(\pi/N)}} \quad (\text{C.100})$$

$$\approx \cos^2 \frac{\pi}{N} - \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N} + s \sin^2 \frac{\pi}{N} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\delta E}{J \sin^2(\pi/N)} \cos \frac{\pi}{N} - \frac{\delta E^2}{4J^2 \sin^2(\pi/N)} + \frac{\Delta_{s0}^2}{4J^2 \sin^4(\pi/N)} \right) - \frac{1}{8} \left(\frac{\delta E}{J \sin^2(\pi/N)} \cos \frac{\pi}{N} \right)^2 \right\} \quad (\text{C.101})$$

$$= \cos^2 \frac{\pi}{N} - \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N} + s \left\{ \sin^2 \frac{\pi}{N} + \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N} - \frac{1}{2} \left(\frac{\delta E}{2J} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta_{s0}}{2J \sin(\pi/N)} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\delta E}{2J} \right)^2 \frac{1}{\sin^2(\pi/N)} \cos^2 \frac{\pi}{N} \right\} \quad (\text{C.102})$$

$$= \cos^2 \frac{\pi}{N} - \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N} + s \left\{ \sin^2 \frac{\pi}{N} + \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N} - \frac{1}{2 \sin^2(\pi/N)} \left(\sin^2 \frac{\pi}{N} + \cos^2 \frac{\pi}{N} \right) \left(\frac{\delta E}{2J} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta_{s0}}{2J \sin(\pi/N)} \right)^2 \right\} \quad (\text{C.103})$$

$$= \cos^2 \frac{\pi}{N} - \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N} + s \left\{ \sin^2 \frac{\pi}{N} + \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N} + \frac{1}{2 \sin^2(\pi/N)} \left(\left(\frac{\Delta_{s0}}{2J} \right)^2 - \left(\frac{\delta E}{2J} \right)^2 \right) \right\} \quad (\text{C.104})$$

$$= 1 + (s-1) \left(\sin^2 \frac{\pi}{N} + \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N} \right) + \frac{s}{2 \sin^2(\pi/N)} \left(\left(\frac{\Delta_{s0}}{2J} \right)^2 - \left(\frac{\delta E}{2J} \right)^2 \right) \quad (\text{C.105})$$

のように近似できる。結局, ξ_s は

$$\xi_s \approx 1 + (s-1) \left(\sin^2 \frac{\pi}{N} + \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N} \right) + \frac{s}{2\lambda^2} \quad (\text{C.106})$$

と書ける。ここで, $\lambda = 2J \sin \frac{\pi}{N} / \sqrt{\Delta_{s0}^2 - \delta E^2}$ は減衰長を意味する。

付録 C.5 右向き・左向きに進行する電子の波動関数の解析計算

$s = -1$ のとき, $z_{-,s'}$ と ξ_- はそれぞれ

$$z_{-,s'} = e^{-i\frac{\pi}{N}} \left(\xi_- - s' \sqrt{\xi_-^2 - 1} \right) \quad (\text{C.107})$$

$$\xi_- = 1 - 2 \left(\sin^2 \frac{\pi}{N} + \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N} \right) - \frac{1}{2\lambda^2} \quad (\text{C.108})$$

となる。ξ₋ を δE と Δ_{so} の 1 次までで近似して、z_{-,s'} は

$$\xi_- \approx 1 - 2 \left(\sin^2 \frac{\pi}{N} + \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N} \right) \quad (\text{C.109})$$

$$z_{-,s'} \approx e^{-i\frac{\pi}{N}} \left(1 - 2 \left(\sin^2 \frac{\pi}{N} + \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N} \right) - s' \sqrt{\left\{ 1 - 2 \left(\sin^2 \frac{\pi}{N} + \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N} \right) \right\}^2 - 1} \right) \quad (\text{C.110})$$

$$\approx e^{-i\frac{\pi}{N}} \left(1 - 2 \left(\sin^2 \frac{\pi}{N} + \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N} \right) - is'2 \left(\sin^2 \frac{\pi}{N} + \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N} \right) \right) \quad (\text{C.111})$$

$$= e^{-i\frac{\pi}{N}} (1 - 2\zeta^2 - is'2\zeta) \quad (\text{C.112})$$

と表すことができる。ここで新たに $\zeta = \sqrt{\sin^2 \frac{\pi}{N} + \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N}}$ を定義した。さらに z_{-,s'} は

$$z_{-,s'} \approx e^{-i\frac{\pi}{N}} (1 - is'2\zeta - 2\zeta^2) \approx e^{-i\frac{\pi}{N}} e^{-is'2\zeta} = e^{-i(\frac{\pi}{N} + s'2\zeta)} \quad (\text{C.113})$$

と近似でき、この z_{-,s'} を用いて E(z_{-,s'}) や E(z_{-,s'} e^{i $\frac{2\pi}{N}$}) はそれぞれ

$$E(z_{-,s'}) = -J(z_{-,s'} + z_{-,s'}^{-1}) = -2J \cdot \text{Re}[(z_{-,s'})] = -2J \cos \left(\frac{\pi}{N} + s'2\zeta \right) \quad (\text{C.114})$$

$$E(z_{-,s'} e^{i\frac{2\pi}{N}}) = -2J \cdot \text{Re}[e^{i(\frac{\pi}{N} - s'2\zeta)}] = -2J \cos \left(\frac{\pi}{N} - s'2\zeta \right) \quad (\text{C.115})$$

と書くことができる。したがって、E_A(z_{-,s'}) は

$$E_A(z_{-,s'}) = \frac{E(z_{-,s'}) - E(z_{-,s'} e^{i\frac{2\pi}{N}})}{2} \quad (\text{C.116})$$

$$= -J \left\{ \cos \left(\frac{\pi}{N} + s'2\zeta \right) - \cos \left(\frac{\pi}{N} - s'2\zeta \right) \right\} \quad (\text{C.117})$$

$$= 2J \sin \frac{\pi}{N} \sin s'2\zeta \quad (\text{C.118})$$

$$= s'2J \sin \frac{\pi}{N} \sin 2\zeta \quad (\text{C.119})$$

となる。ここで、E_A(z_{-,s'}) について s' 以外の部分の符号に関して確認する。まず、ユニットセル内の原子数は N ≥ 3 より sin $\frac{\pi}{N}$ > 0 である。一方で sin 2ζ の項は、δE ≪ 1 であるから

$$0 < \sin^2 \frac{\pi}{N} + \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N} < 2 \quad (\text{C.120})$$

$$0 < \sqrt{\sin^2 \frac{\pi}{N} + \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N}} (= \zeta) < \sqrt{2} \quad (\text{C.121})$$

$$0 < 2\zeta < 2\sqrt{2} < \pi \quad (\text{C.122})$$

$$\therefore \sin 2\zeta > 0 \quad (\text{C.123})$$

のようにして sin 2ζ も正であることが示される。つまり、E_A(z_{-,s'}) の符号は s' のみで決まる。|E_A(z_{-,s'})| ≫ Δ_{so} の場合を仮定すると、式 (73), (74) の u(z_{-,s'}), v(z_{-,s'}) はそれぞれ

$$u(z_{-,s'}) = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{pE_A(z_{-,s'})}{\sqrt{E_A(z_{-,s'})^2 + \Delta_{so}^2}} \right)} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{pE_A(z_{-,s'})}{|E_A(z_{-,s'})|} \right)} \approx \sqrt{\frac{1}{2} (1 - ps')} \quad (\text{C.124})$$

$$v(z_{-,s'}) = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{pE_A(z_{-,s'})}{\sqrt{E_A(z_{-,s'})^2 + \Delta_{so}^2}} \right)} \approx \sqrt{\frac{1}{2} (1 + ps')} \quad (\text{C.125})$$

となる。特に $p = 1$ の場合は,

$$u(z_{-,s'}) \approx \sqrt{\frac{1}{2}(1-s')} = \delta_{s',-} \quad (\text{C.126})$$

$$v(z_{-,s'}) \approx \sqrt{\frac{1}{2}(1+s')} = \delta_{s',+} \quad (\text{C.127})$$

である。位相を表す $z_{-,s'}$ は, ζ を

$$\zeta = \sqrt{\sin^2 \frac{\pi}{N} + \frac{\delta E}{2J} \cos \frac{\pi}{N}} \quad (\text{C.128})$$

$$= \sin \frac{\pi}{N} \sqrt{1 + \frac{\delta E}{2J \sin^2(\pi/N)} \cos \frac{\pi}{N}} \quad (\text{C.129})$$

$$\approx \sin \frac{\pi}{N} \left(1 + \frac{\delta E}{4J \sin^2(\pi/N)} \cos \frac{\pi}{N} \right) \quad (\text{C.130})$$

$$\approx \frac{\pi}{N} + \frac{\delta E}{4J \sin(\pi/N)} \quad (\text{C.131})$$

のように近似できるので,

$$z_{-,s'} = e^{-i(\frac{\pi}{N} + s'2\zeta)} \quad (\text{C.132})$$

$$\approx \exp \left[-i \left\{ \frac{\pi}{N} + s' \left(\frac{2\pi}{N} + \frac{\delta E}{2J \sin(\pi/N)} \right) \right\} \right] \quad (\text{C.133})$$

$$= \exp \left[-i \left\{ \frac{(2s'+1)\pi}{N} + \frac{\delta E}{2J \sin(\pi/N)} \right\} \right] \quad (\text{C.134})$$

$$= e^{-i\frac{\pi}{N}} e^{-is'(\frac{2\pi}{N} + \delta k)}. \quad (\text{C.135})$$

と書くことができる。ここで, $\delta k = \delta E / (2J \sin \frac{\pi}{N})$ は波数である。

以上より, 右向き・左向きに進行する電子の波動関数はそれぞれ

$$\begin{pmatrix} \langle n; \uparrow | z_{-,s'}; + \rangle \\ \langle n; \downarrow | z_{-,s'}; + \rangle \end{pmatrix} = z_{-,s'}^n \begin{pmatrix} v(z_{-,s'}) \\ u(z_{-,s'}) e^{i\phi_n} \end{pmatrix} \quad (\text{C.136})$$

$$= e^{-i\frac{\pi}{N}n} e^{-is'(\frac{2\pi}{N}n + \delta kn)} \begin{pmatrix} \delta_{s',+} \\ \delta_{s',-} \end{pmatrix} = e^{-i\frac{\pi}{N}n\sigma_z} e^{-is'(\frac{2\pi}{N}n + \delta kn)} \begin{pmatrix} \delta_{s',+} \\ \delta_{s',-} \end{pmatrix} \quad (\text{C.137})$$

$$\begin{pmatrix} \langle n; \uparrow | z_{-,s'}; - \rangle \\ \langle n; \downarrow | z_{-,s'}; - \rangle \end{pmatrix} = z_{-,s'}^n \begin{pmatrix} u(z_{-,s'}) \\ -v(z_{-,s'}) e^{i\phi_n} \end{pmatrix} = e^{-i\frac{\pi}{N}n\sigma_z} e^{-is'(\frac{2\pi}{N}n + \delta kn)} \begin{pmatrix} \delta_{s',-} \\ -\delta_{s',+} \end{pmatrix} \quad (\text{C.138})$$

と表すことができる。

付録 C.6 エネルギーギャップ内のエバネッセント状態の解析計算

$s = -1$ の計算と同様にして, エバネッセント波を表す $s = +1$ の状態について考える。 $z_{+,s'}$ と ξ_+ はそれぞれ

$$z_{+,s'} = e^{-i\frac{\pi}{N}} \left(\xi_+ - s' \sqrt{\xi_+^2 - 1} \right) \quad (\text{C.139})$$

$$\xi_+ = 1 + \frac{1}{2\lambda^2} \quad (\text{C.140})$$

と書かれる。ここで、 $z_{+,s'}$ を $1/\lambda$ のオーダーで近似すると

$$z_{+,s'} = e^{-i\frac{\pi}{N}} \left(\left(1 + \frac{1}{2\lambda^2}\right) - s' \sqrt{\left(1 + \frac{1}{2\lambda^2}\right)^2 - 1} \right) \quad (\text{C.141})$$

$$\approx e^{-i\frac{\pi}{N}} \left(1 + \frac{1}{2\lambda^2} - s' \sqrt{\left(1 + \frac{1}{\lambda^2}\right) - 1} \right) \quad (\text{C.142})$$

$$\approx e^{-i\frac{\pi}{N}} \left(1 + \frac{1}{2\lambda^2} - s' \frac{1}{\lambda} \right) \quad (\text{C.143})$$

$$= e^{-i\frac{\pi}{N}} \left(1 - \frac{s'}{\lambda} + \frac{1}{2\lambda^2} \right) \quad (\text{C.144})$$

$$\approx e^{-i\frac{\pi}{N}} e^{-s'/\lambda} \quad (\text{C.145})$$

となり、 $E(z_{+,s'})$ と $E(z_{+,s'} e^{i\frac{\pi}{N}})$ はそれぞれ

$$E(z_{+,s'}) = -J(z_{+,s'} + z_{+,s'}^{-1}) = -J \left(e^{-i\frac{\pi}{N}} e^{-s'/\lambda} + e^{i\frac{\pi}{N}} e^{s'/\lambda} \right), \quad (\text{C.146})$$

$$E(z_{+,s'} e^{i\frac{\pi}{N}}) = -J(z_{+,s'} e^{i\frac{\pi}{N}} + z_{+,s'}^{-1} e^{-i\frac{\pi}{N}}) = -J \left(e^{i\frac{\pi}{N}} e^{-s'/\lambda} + e^{-i\frac{\pi}{N}} e^{s'/\lambda} \right). \quad (\text{C.147})$$

と表される。したがって、 $E_A(z_{+,s'})$ は

$$E_A(z_{+,s'}) = \frac{E(z_{+,s'}) - E(z_{+,s'} e^{i\frac{\pi}{N}})}{2} \quad (\text{C.148})$$

$$= \frac{1}{2} \left\{ -J \left(e^{-i\frac{\pi}{N}} - e^{i\frac{\pi}{N}} \right) e^{-s'/\lambda} - \left(e^{i\frac{\pi}{N}} - e^{-i\frac{\pi}{N}} \right) e^{s'/\lambda} \right\} \quad (\text{C.149})$$

$$= iJ \sin \frac{\pi}{N} \left(e^{-s'/\lambda} - e^{s'/\lambda} \right) \quad (\text{C.150})$$

$$= -i2J \sin \frac{\pi}{N} \sinh(s'/\lambda) \quad (\text{C.151})$$

$$\approx -is'2J \sin \frac{\pi}{N} / \lambda \quad (\text{C.152})$$

$$= -is' \sqrt{\Delta_{\text{so}}^2 - \delta E^2} \quad (\text{C.153})$$

となる。このとき、 $E_A^2(z_{+,s'}) = -(\Delta_{\text{so}}^2 - \delta E^2)$ になることに注意する。結果として、 $u(z_{+,s'})$ と $v(z_{+,s'})$ は

$$u(z_{+,s'}) = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{pE_A(z_{+,s'})}{\sqrt{E_A(z_{+,s'})^2 + \Delta_{\text{so}}^2}} \right)} \approx \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + ips' \frac{\sqrt{\Delta_{\text{so}}^2 - \delta E^2}}{|\delta E|} \right)} \quad (\text{C.154})$$

$$v(z_{+,s'}) = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{pE_A(z_{+,s'})}{\sqrt{E_A(z_{+,s'})^2 + \Delta_{\text{so}}^2}} \right)} \approx \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - ips' \frac{\sqrt{\Delta_{\text{so}}^2 - \delta E^2}}{|\delta E|} \right)} \quad (\text{C.155})$$

であり、 $p = 1$ のエバネッセント波の波動関数は

$$\begin{pmatrix} \langle n; \uparrow | z_{+,s'}; + \rangle \\ \langle n; \downarrow | z_{+,s'}; + \rangle \end{pmatrix} \approx e^{-i\frac{\pi}{N} n \sigma_z} e^{-s'n/\lambda} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - is' \frac{\sqrt{\Delta_{\text{so}}^2 - \delta E^2}}{|\delta E|} \right)} \\ \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + is' \frac{\sqrt{\Delta_{\text{so}}^2 - \delta E^2}}{|\delta E|} \right)} \end{pmatrix} \quad (\text{C.156})$$

$$\begin{pmatrix} \langle n; \uparrow | z_{+,s'}; - \rangle \\ \langle n; \downarrow | z_{+,s'}; - \rangle \end{pmatrix} \approx e^{-i\frac{\pi}{N} n \sigma_z} e^{-s'n/\lambda} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + is' \frac{\sqrt{\Delta_{\text{so}}^2 - \delta E^2}}{|\delta E|} \right)} \\ -\sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - is' \frac{\sqrt{\Delta_{\text{so}}^2 - \delta E^2}}{|\delta E|} \right)} \end{pmatrix} \quad (\text{C.157})$$

と表される。エネルギーが $\Delta_{so} = 0$ でのバンドの交点の近傍の値を取るとき、つまり $|\delta E| \ll \Delta_{so}$ であるとき、波動関数はそれぞれ

$$\begin{pmatrix} \langle n; \uparrow | z_{+,s'}; + \rangle \\ \langle n; \downarrow | z_{+,s'}; + \rangle \end{pmatrix} \approx e^{-i\frac{\pi}{N}n\sigma_z} e^{-s'n/\lambda} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - is' \frac{\Delta_{so}}{|\delta E|}\right)} \\ \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + is' \frac{\Delta_{so}}{|\delta E|}\right)} \end{pmatrix} \quad (\text{C.158})$$

$$= e^{-i\frac{\pi}{N}n\sigma_z} e^{-s'n/\lambda} \sqrt{\frac{\Delta_{so}}{2|\delta E|}} \begin{pmatrix} \sqrt{-is'} \\ \sqrt{is'} \end{pmatrix} \quad (\text{C.159})$$

$$= e^{-i\frac{\pi}{N}n\sigma_z} e^{-s'n/\lambda} \sqrt{\frac{\Delta_{so}}{2|\delta E|}} \begin{pmatrix} e^{-is'\pi/4} \\ e^{is'\pi/4} \end{pmatrix} \quad (\text{C.160})$$

$$= e^{-i\frac{\pi}{N}n\sigma_z} e^{-s'n/\lambda} \sqrt{\frac{\Delta_{so}}{2|\delta E|}} e^{-is'\pi/4} \begin{pmatrix} 1 \\ is' \end{pmatrix} \quad (\text{C.161})$$

$$\begin{pmatrix} \langle n; \uparrow | z_{+,s'}; - \rangle \\ \langle n; \downarrow | z_{+,s'}; - \rangle \end{pmatrix} \approx e^{-i\frac{\pi}{N}n\sigma_z} e^{-s'n/\lambda} \sqrt{\frac{\Delta_{so}}{2|\delta E|}} \begin{pmatrix} e^{is'\pi/4} \\ -e^{-is'\pi/4} \end{pmatrix} \quad (\text{C.162})$$

$$= e^{-i\frac{\pi}{N}n\sigma_z} e^{-s'n/\lambda} \sqrt{\frac{\Delta_{so}}{2|\delta E|}} e^{is'\pi/4} \begin{pmatrix} 1 \\ is' \end{pmatrix} \quad (\text{C.163})$$

と近似できる。

付録 D : 線形応答理論

付録 D.1 久保公式と応答関数

非平衡定常状態において、平衡状態からのずれを外場の一次の量で表したものを線形応答理論と呼ぶ。この比例定数は久保公式によって一般の場合について与えられる。ここで外場 $H_B(t)$ が対応する演算子 \hat{B} を用いて

$$H_B(t) = -\hat{B}e^{-i\omega t} \quad (\text{D.1})$$

と書かれるとき、観測する物理量に対応する演算子 \hat{A} の応答関数は

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = A(\omega)e^{-i\omega t} \quad (\text{D.2})$$

と表される。ただし、ここで

$$A(\omega) = -\frac{1}{i\omega} [\Phi^R(\omega) - \Phi^R(0)] \quad (\text{D.3})$$

$$\Phi^R(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle A(t)\dot{B}(0) - \dot{B}(0)A(t) \rangle \quad (\text{D.4})$$

である。静的な外場や応答の場合も時間依存で考え、 $\omega \rightarrow 0$ とする。また、外場は $t \rightarrow -\infty$ でゼロとなるようにするため最後に $\omega \rightarrow \omega + i\delta$ とする。電気伝導の場合は比例定数 $A(\omega)$ が電気伝導度 σ に対応し、応答関数 $A(t)$ と外場の演算子の時間微分 $\dot{B}(0)$ はどちらも電流 J に対応する。

付録 D.2 電流-電流相関関数

この章では一般的なタイトバインディングの場合の電流-電流相関関数を求める。まず、オンサイト項を除いたタイトバインディングモデルのハミルトニアン

$$H = \sum_n c_{n+1}^\dagger J c_n \quad (\text{D.5})$$

に対して、電流演算子 \hat{J}_n を以下のように定義する。

$$\hat{J}_n \equiv \left. \frac{\partial H}{\partial \psi_n} \right|_{\psi_n=0} \quad (\text{D.6})$$

$$= \left. \frac{\partial}{\partial \psi_n} \sum_n c_{n+1}^\dagger J e^{i\psi_n} c_n \right|_{\psi_n=0} = i c_{n+1}^\dagger J c_n \quad (\text{D.7})$$

この J_n をハミルトニアン H を対角化するユニタリ演算子 U と基底 a_m を使って書くと、

$$\hat{J}_n = i \sum_{m,m'} a_m^\dagger U_{m,n+1}^* J U_{n,m'} a_{m'} \quad (\text{D.8})$$

$$= i \sum_{m,m'} a_m^\dagger \tilde{J}_{n;m,m'} a_{m'} \quad (\text{D.9})$$

となる。ここで、 $\tilde{J}_{n;m,m'} \equiv U_{m,n+1}^* J U_{n,m'}$ とし、

$$H = \sum_{i,j} c_i^\dagger H_{ij} c_j = \sum_m E_m a_m^\dagger a_m \quad (\text{D.10})$$

$$c_n = \sum_m U_{n,m} a_m \quad (\text{D.11})$$

である。これらを用いて $\hat{A}_n(t)$, $\hat{B}_n(t')$ の演算子に対して電流-電流相関関数 $\langle \hat{A}_n(t)\hat{B}_n(t') \rangle$ を求める。ここで期待値は

$$\langle \hat{A}_n(t)\hat{B}_n(t') \rangle = \frac{\text{Tr} [\hat{A}_n(t)\hat{B}_n(t')e^{-\beta H}]}{\text{Tr} [e^{-\beta H}]} \quad (\text{D.12})$$

で定義する。まず、期待値を取る前の積 $\hat{A}_n(t)\hat{B}_n(t')$ の計算から始めると、

$$\hat{A}_n(t)\hat{B}_n(t') = \sum_{k,k'} \sum_{\ell,\ell'} -a_k^\dagger(t) \tilde{A}_{n;k,k'} a_{k'}(t) a_\ell^\dagger(t') \tilde{B}_{n;\ell,\ell'} a_{\ell'}(t') \quad (\text{D.13})$$

となる。このとき、相互作用表示の $a_m(t) = e^{iHt} a_m e^{-iHt}$ に関して、 t での微分をすると

$$\partial_t a_m(t) = e^{iHt} (iH) a_m e^{-iHt} + e^{iHt} a_m (-iH) e^{-iHt} \quad (\text{D.14})$$

$$= ie^{iHt} [H, a_m] e^{-iHt} \quad (\text{D.15})$$

を得る。ここで、

$$[H, a_m] = \left[\sum_q E_q a_q^\dagger a_q, a_m \right] \quad (\text{D.16})$$

$$= \sum_q E_q (a_q^\dagger a_q a_m - a_m a_q^\dagger a_q) \quad (\text{D.17})$$

$$= \sum_q -E_q (a_q^\dagger a_m a_q + a_m a_q^\dagger a_q) = \sum_q -E_q \{a_q^\dagger, a_m\} a_q \quad (\text{D.18})$$

$$= \sum_q -E_q \delta_{q,m} a_q \quad (\text{D.19})$$

$$= -E_m a_m \quad (\text{D.20})$$

である。ただし、式 (D.17) から式 (D.18) の変形ではフェルミオンの反交換関係 $\{a_q, a_m\} = 0$ を用いた。したがって、

$$\partial_t a_m(t) = -iE_m e^{iHt} a_m e^{-iHt} = -iE_m a_m(t) \quad (\text{D.21})$$

より、 $a_m(t)$ は

$$a_m(t) = e^{-iE_m t} a_m \quad (\text{D.22})$$

と書き表せる。 a_m^\dagger についても同様に

$$a_m^\dagger(t) = e^{iE_m t} a_m^\dagger \quad (\text{D.23})$$

と書くことができる。以上を用いると、

$$\hat{A}_n(t)\hat{B}_n(t') = \sum_{k,k'} \sum_{\ell,\ell'} -a_k^\dagger e^{iE_k t} \tilde{A}_{n;k,k'} a_{k'} e^{-iE_{k'} t} a_\ell^\dagger e^{iE_\ell t'} \tilde{B}_{n;\ell,\ell'} a_{\ell'} e^{-iE_{\ell'} t'} \quad (\text{D.24})$$

$$= \sum_{k,k'} \sum_{\ell,\ell'} -e^{i(E_k - E_{k'})t} e^{i(E_\ell - E_{\ell'})t'} \tilde{A}_{n;k,k'} \tilde{B}_{n;\ell,\ell'} a_k^\dagger a_{k'} a_\ell^\dagger a_{\ell'} \quad (\text{D.25})$$

となり、電流-電流相関関数は

$$\langle \hat{A}_n(t)\hat{B}_n(t') \rangle = \sum_{k,k'} \sum_{\ell,\ell'} -e^{i(E_k - E_{k'})t} e^{i(E_\ell - E_{\ell'})t'} \tilde{A}_{n;k,k'} \tilde{B}_{n;\ell,\ell'} \langle a_k^\dagger a_{k'} a_\ell^\dagger a_{\ell'} \rangle \quad (\text{D.26})$$

である。ここで $\langle a_k^\dagger a_{k'} a_\ell^\dagger a_{\ell'} \rangle$ について考える。Bloch-De Dominicis の定理より、

$$\langle a_k^\dagger a_{k'} a_\ell^\dagger a_{\ell'} \rangle = \langle a_k^\dagger a_{k'} \rangle \langle a_\ell^\dagger a_{\ell'} \rangle - \langle a_k^\dagger a_\ell^\dagger \rangle \langle a_{k'} a_{\ell'} \rangle + \langle a_k^\dagger a_{\ell'} \rangle \langle a_{k'} a_\ell^\dagger \rangle \quad (\text{D.27})$$

と書けるので、それぞれに関して以下に計算を行う。はじめに、

$$\langle a_\xi^\dagger a_\zeta \rangle = \text{Tr} \left[e^{\beta H} a_\xi^\dagger a_\zeta \right] \quad (\text{D.28})$$

$$= \text{Tr} \left[e^{\beta H} a_\xi^\dagger e^{-\beta H} e^{\beta H} a_\zeta \right] = \text{Tr} \left[a_\xi^\dagger(\beta) e^{\beta H} a_\zeta \right] \quad (\text{D.29})$$

$$= \text{Tr} \left[e^{\beta E_\xi} a_\xi^\dagger e^{\beta H} a_\zeta \right] = e^{\beta E_\xi} \text{Tr} \left[a_\xi^\dagger e^{\beta H} a_\zeta \right] \quad (\text{D.30})$$

$$= e^{\beta E_\xi} \text{Tr} \left[e^{\beta H} a_\zeta a_\xi^\dagger \right] \quad (\text{D.31})$$

$$= e^{\beta E_\xi} \langle a_\zeta a_\xi^\dagger \rangle \quad (\text{D.32})$$

において、フェルミオンの反交換関係 $\{a_\zeta, a_\xi^\dagger\} = \delta_{\xi, \zeta}$ から

$$\langle a_\xi^\dagger a_\zeta \rangle = e^{\beta E_\xi} \left(\delta_{\xi, \zeta} - \langle a_\xi^\dagger a_\zeta \rangle \right) \quad (\text{D.33})$$

が得られる。すなわち、

$$\langle a_\xi^\dagger a_\zeta \rangle = \frac{e^{\beta E_\xi}}{1 + e^{\beta E_\xi}} \delta_{\xi, \zeta} \quad (\text{D.34})$$

と書き表せる。式 (D.32) と同様にして

$$\langle a_\xi^\dagger a_\zeta^\dagger \rangle = \langle a_\xi a_\zeta \rangle = 0 \quad (\text{D.35})$$

も示すことができる。さらに、同様の計算をすると、

$$\langle a_\mu a_\nu^\dagger \rangle = \text{Tr} \left[e^{\beta H} a_\mu a_\nu^\dagger \right] \quad (\text{D.36})$$

$$= \text{Tr} \left[e^{\beta H} a_\mu e^{-\beta H} e^{\beta H} a_\nu^\dagger \right] = \text{Tr} \left[a_\mu(\beta) e^{\beta H} a_\nu^\dagger \right] \quad (\text{D.37})$$

$$= \text{Tr} \left[e^{-\beta E_\mu} a_\mu e^{\beta H} a_\nu^\dagger \right] = e^{-\beta E_\mu} \text{Tr} \left[a_\mu e^{\beta H} a_\nu^\dagger \right] \quad (\text{D.38})$$

$$= e^{-\beta E_\mu} \text{Tr} \left[e^{\beta H} a_\nu^\dagger a_\mu \right] \quad (\text{D.39})$$

$$= e^{-\beta E_\mu} \langle a_\nu^\dagger a_\mu \rangle \quad (\text{D.40})$$

$$= e^{-\beta E_\mu} (\delta_{\mu, \nu} - \langle a_\mu a_\nu^\dagger \rangle) \quad (\text{D.41})$$

となり、

$$\langle a_\mu a_\nu^\dagger \rangle = \frac{e^{-\beta E_\mu}}{1 + e^{-\beta E_\mu}} \delta_{\mu, \nu} \quad (\text{D.42})$$

を得る。以上より、式 (D.26) の電流-電流相関関数は

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}_n(t) \hat{B}_n(t') \rangle &= \sum_{k, k'} \sum_{\ell, \ell'} -e^{i(E_k - E_{k'})t} e^{i(E_\ell - E_{\ell'})t'} \tilde{A}_{n; k, k'} \tilde{B}_{n; \ell, \ell'} \\ &\quad \times \left(\frac{e^{\beta E_k}}{1 + e^{\beta E_k}} \frac{e^{\beta E_\ell}}{1 + e^{\beta E_\ell}} \delta_{k, k'} \delta_{\ell, \ell'} + \frac{e^{\beta E_k}}{1 + e^{\beta E_k}} \frac{e^{-\beta E_{k'}}}{1 + e^{-\beta E_{k'}}} \delta_{k, \ell'} \delta_{k', \ell} \right) \end{aligned} \quad (\text{D.43})$$

と表される。以下では各項別に計算をする。第一項目は、

$$\sum_{k, k'} \sum_{\ell, \ell'} -e^{i(E_k - E_{k'})t} e^{i(E_\ell - E_{\ell'})t'} \tilde{A}_{n; k, k'} \tilde{B}_{n; \ell, \ell'} \frac{e^{\beta E_k}}{1 + e^{\beta E_k}} \frac{e^{\beta E_\ell}}{1 + e^{\beta E_\ell}} \delta_{k, k'} \delta_{\ell, \ell'} \quad (\text{D.44})$$

$$= \sum_{k, \ell} -\tilde{A}_{n; k, k} \tilde{B}_{n; \ell, \ell} \frac{e^{\beta E_k}}{1 + e^{\beta E_k}} \frac{e^{\beta E_\ell}}{1 + e^{\beta E_\ell}} \quad (\text{D.45})$$

となり、時間に依存しない。第二項目は

$$\sum_{k, k'} \sum_{\ell, \ell'} -e^{i(E_k - E_{k'})t} e^{i(E_\ell - E_{\ell'})t'} \tilde{A}_{n; k, k'} \tilde{B}_{n; \ell, \ell'} \frac{e^{\beta E_k}}{1 + e^{\beta E_k}} \frac{e^{-\beta E_{k'}}}{1 + e^{-\beta E_{k'}}} \delta_{k, \ell'} \delta_{k', \ell} \quad (\text{D.46})$$

$$= \sum_{k, \ell} -e^{i(E_k - E_\ell)t} e^{i(E_\ell - E_k)t'} \tilde{A}_{n; k, \ell} \tilde{B}_{n; \ell, k} \frac{e^{\beta E_k}}{1 + e^{\beta E_k}} \frac{e^{-\beta E_\ell}}{1 + e^{-\beta E_\ell}} \quad (\text{D.47})$$

$$= \sum_{k, \ell} -e^{i(E_k - E_\ell)(t - t')} \tilde{A}_{n; k, \ell} \tilde{B}_{n; \ell, k} \frac{e^{\beta E_k}}{1 + e^{\beta E_k}} \frac{e^{-\beta E_\ell}}{1 + e^{-\beta E_\ell}} \quad (\text{D.48})$$

である。したがって式 (D.43) は,

$$\langle \hat{A}_n(t) \hat{B}_n(t') \rangle = \sum_{k,\ell} - \left(\tilde{A}_{n;k,k} \tilde{B}_{n;\ell,\ell} \frac{e^{\beta(E_k+E_\ell)}}{(1+e^{\beta E_k})(1+e^{\beta E_\ell})} + \tilde{A}_{n;k,\ell} \tilde{B}_{n;\ell,k} \frac{e^{i(E_k-E_\ell)(t-t')} e^{\beta(E_k-E_\ell)}}{(1+e^{\beta E_k})(1+e^{-\beta E_\ell})} \right) \quad (D.49)$$

のように書ける。

時刻 $t=0$ での電流 $A(t)$ と時刻 $t'=0$ での電流 $B(0)$ の電流-電流相関関数は

$$\langle \hat{A}_n(t) \hat{B}_n(0) \rangle = \sum_{k,\ell} - \left(\tilde{A}_{n;k,k} \tilde{B}_{n;\ell,\ell} \frac{e^{\beta(E_k+E_\ell)}}{(1+e^{\beta E_k})(1+e^{\beta E_\ell})} + \tilde{A}_{n;k,\ell} \tilde{B}_{n;\ell,k} \frac{e^{i(E_k-E_\ell)t} e^{\beta(E_k-E_\ell)}}{(1+e^{\beta E_k})(1+e^{-\beta E_\ell})} \right) \quad (D.50)$$

と表される。

付録 D.3 相関関数 $\Phi^R(t)$

式 (D.49) を用いると, $\hat{A}_n(t)$ と $\hat{B}_n(0)$ の交換関係の相関関数は,

$$\langle \hat{A}_n(t) \hat{B}_n(0) - \hat{B}_n(0) \hat{A}_n(t) \rangle \quad (D.51)$$

$$= \langle \hat{A}_n(t) \hat{B}_n(0) \rangle - \langle \hat{B}_n(0) \hat{A}_n(t) \rangle \quad (D.52)$$

$$= \sum_{k,\ell} \left\{ -\tilde{A}_{n;k,\ell} \tilde{B}_{n;\ell,k} \frac{e^{i(E_k-E_\ell)t} e^{\beta(E_k-E_\ell)}}{(1+e^{\beta E_k})(1+e^{-\beta E_\ell})} + \tilde{B}_{n;k,\ell} \tilde{A}_{n;\ell,k} \frac{e^{-i(E_k-E_\ell)t} e^{\beta(E_k-E_\ell)}}{(1+e^{\beta E_k})(1+e^{-\beta E_\ell})} \right\} \quad (D.53)$$

$$= \sum_{k,\ell} \left\{ -\frac{e^{\beta(E_k-E_\ell)}}{(1+e^{\beta E_k})(1+e^{-\beta E_\ell})} \left(\tilde{A}_{n;k,\ell} \tilde{B}_{n;\ell,k} e^{i(E_k-E_\ell)t} - \tilde{B}_{n;k,\ell} \tilde{A}_{n;\ell,k} e^{-i(E_k-E_\ell)t} \right) \right\} \quad (D.54)$$

$$= \sum_{k,\ell} \left\{ -\frac{e^{\beta(E_k-E_\ell)}}{(1+e^{\beta E_k})(1+e^{-\beta E_\ell})} \tilde{A}_{n;k,\ell} \tilde{B}_{n;\ell,k} \left(e^{i(E_k-E_\ell)t} - e^{-i(E_k-E_\ell)t} \right) \right\} \quad (D.55)$$

$$= \sum_{k,\ell} \left\{ -2i \frac{e^{\beta(E_k-E_\ell)}}{(1+e^{\beta E_k})(1+e^{-\beta E_\ell})} \tilde{A}_{n;k,\ell} \tilde{B}_{n;\ell,k} \sin(E_k - E_\ell)t \right\} \quad (D.56)$$

のように時間に依存しない第一項がキャンセルされる。

以上より, 相関関数 $\Phi^R(t)$ は

$$\Phi^R(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle \hat{A}_n(t) \hat{B}_n(0) - \hat{B}_n(0) \hat{A}_n(t) \rangle \quad (D.57)$$

$$= -\frac{2}{\hbar} \theta(t) \sum_{k,\ell} \left\{ \mathcal{C}_{k,\ell} \tilde{A}_{n;k,\ell} \tilde{B}_{n;\ell,k} \sin(E_k - E_\ell)t \right\} \quad (D.58)$$

$$\mathcal{C}_{k,\ell} = \frac{e^{\beta(E_k-E_\ell)}}{(1+e^{\beta E_k})(1+e^{-\beta E_\ell})} \quad (D.59)$$

である。また, 相関関数 $\Phi^R(t)$ の Fourier 変換

$$\Phi^R(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \Phi^R(t) e^{i\omega t} \quad (D.60)$$

から, 久保公式と物理量 \hat{A} の観測量

$$A(\omega) = -\frac{1}{i\omega} [\Phi^R(\omega) - \Phi^R(0)] \quad (D.61)$$

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = A(\omega) e^{-i\omega t} \quad (D.62)$$

を計算することができる。

付録 D.4 分布関数を用いた表記法

電子（ホール）を表す Fermi-Dirac 分布 $f_k^+(f_k^-)$:

$$f_k^\pm = \frac{e^{\pm\beta E_k}}{1 + e^{\pm\beta E_k}} \quad (\text{D.63})$$

$$= \frac{1}{2} \left\{ 1 + \tanh \left(\pm \frac{\beta E_k}{2} \right) \right\} \quad (\text{D.64})$$

を用いた表記で相関関数を書き直す。ここで、

$$1 - f_k^\pm = 1 - \frac{e^{\pm\beta E_k}}{1 + e^{\pm\beta E_k}} = \frac{1}{1 + e^{\pm\beta E_k}} = \frac{e^{\mp\beta E_k}}{e^{\mp\beta E_k} + 1} = f_k^\mp \quad (\text{D.65})$$

であることに注意する。生成消滅演算子の相関関数はそれぞれ

$$\langle a_\xi^\dagger a_\zeta \rangle = f_\xi^+ \delta_{\xi,\zeta} \quad (\text{D.66})$$

$$\langle a_\mu a_\nu^\dagger \rangle = f_\mu^- \delta_{\mu,\nu} \quad (\text{D.67})$$

と書くことができる。したがって、式 (D.49) は

$$\langle \hat{A}_n(t) \hat{B}_n(t') \rangle = \sum_{k,\ell} - \left(\tilde{A}_{n;k,k} \tilde{B}_{n;\ell,\ell} f_k^+ f_\ell^+ + \tilde{A}_{n;k,\ell} \tilde{B}_{n;\ell,k} e^{i(E_k - E_\ell)(t-t')} f_k^+ f_\ell^- \right) \quad (\text{D.68})$$

のように分布関数を用いて書き表せる。この式で k と ℓ を入れ替えると、

$$\langle \hat{A}_n(t) \hat{B}_n(t') \rangle = \sum_{k,\ell} - \left(\tilde{A}_{n;\ell,\ell} \tilde{B}_{n;k,k} f_\ell^+ f_k^+ + \tilde{A}_{n;\ell,k} \tilde{B}_{n;k,\ell} e^{i(E_\ell - E_k)(t-t')} f_\ell^+ f_k^- \right) \quad (\text{D.69})$$

となる。ここで、 $\hat{A}_n(t)$ と $\hat{B}_n(t')$ は任意の物理量であるから、式 (D.68) から $\langle \hat{A}_n(t) \hat{B}_n(0) \rangle$ を、式 (D.69) から $\langle \hat{B}_n(0) \hat{A}_n(t) \rangle$ をそれぞれ求めると

$$\langle \hat{A}_n(t) \hat{B}_n(0) \rangle = \sum_{k,\ell} - \left(\tilde{A}_{n;k,k} \tilde{B}_{n;\ell,\ell} f_k^+ f_\ell^+ + \tilde{A}_{n;k,\ell} \tilde{B}_{n;\ell,k} e^{i(E_k - E_\ell)t} f_k^+ f_\ell^- \right) \quad (\text{D.70})$$

$$\langle \hat{B}_n(0) \hat{A}_n(t) \rangle = \sum_{k,\ell} - \left(\tilde{B}_{n;\ell,\ell} \tilde{A}_{n;k,k} f_\ell^+ f_k^+ + \tilde{B}_{n;\ell,k} \tilde{A}_{n;k,\ell} e^{-i(E_\ell - E_k)t} f_\ell^+ f_k^- \right) \quad (\text{D.71})$$

$$= \sum_{k,\ell} - \left(\tilde{A}_{n;k,k} \tilde{B}_{n;\ell,\ell} f_k^+ f_\ell^+ + \tilde{A}_{n;k,\ell} \tilde{B}_{n;\ell,k} e^{i(E_k - E_\ell)t} f_\ell^+ f_k^- \right) \quad (\text{D.72})$$

のように表される。以上より、 $\hat{A}_n(t)$ と $\hat{B}_n(0)$ の交換関係の相関関数は、

$$\langle \hat{A}_n(t) \hat{B}_n(0) - \hat{B}_n(0) \hat{A}_n(t) \rangle \quad (\text{D.73})$$

$$= \langle \hat{A}_n(t) \hat{B}_n(0) \rangle - \langle \hat{B}_n(0) \hat{A}_n(t) \rangle \quad (\text{D.74})$$

$$= \sum_{k,\ell} \left\{ - \left(\tilde{A}_{n;k,k} \tilde{B}_{n;\ell,\ell} f_k^+ f_\ell^+ + \tilde{A}_{n;k,\ell} \tilde{B}_{n;\ell,k} e^{i(E_k - E_\ell)t} f_k^+ f_\ell^- \right) + \left(\tilde{A}_{n;k,k} \tilde{B}_{n;\ell,\ell} f_k^+ f_\ell^+ + \tilde{A}_{n;k,\ell} \tilde{B}_{n;\ell,k} e^{i(E_k - E_\ell)t} f_\ell^+ f_k^- \right) \right\} \quad (\text{D.75})$$

$$= \sum_{k,\ell} \left\{ \tilde{A}_{n;k,\ell} \tilde{B}_{n;\ell,k} e^{i(E_k - E_\ell)t} (f_\ell^+ f_k^- - f_k^+ f_\ell^-) \right\} \quad (\text{D.76})$$

$$= \sum_{k,\ell} \left\{ \tilde{A}_{n;k,\ell} \tilde{B}_{n;\ell,k} e^{i(E_k - E_\ell)t} (f_\ell^+ - f_k^+) \right\} \quad (\text{D.77})$$

となる。このとき、最後の変形では

$$f_\ell^+ f_k^- - f_k^+ f_\ell^- = f_\ell^+ (1 - f_k^+) - f_k^+ (1 - f_\ell^+) \quad (\text{D.78})$$

$$= f_\ell^+ - f_k^+ \quad (\text{D.79})$$

の関係を用いた。ここで、新たに $e^{iE_k t}$ と f_k^+ を対角成分にもつ行列

$$\mathcal{D}_{e^\pm} = \text{diag} (e^{\pm iE_1 t}, e^{\pm iE_2 t}, e^{\pm iE_3 t}, \dots) \quad (\text{D.80})$$

$$\mathcal{D}_f = \text{diag} (f_1^+, f_2^+, f_3^+, \dots) \quad (\text{D.81})$$

を定義すると、式 (D.77) で表される相関関数は

$$\langle \hat{A}_n(t) \hat{B}_n(0) - \hat{B}_n(0) \hat{A}_n(t) \rangle = \sum_{k,\ell} \left\{ \tilde{A}_{n;k,\ell} \tilde{B}_{n;\ell,k} e^{i(E_k - E_\ell)t} (f_\ell^+ - f_k^+) \right\} \quad (\text{D.82})$$

$$= \sum_{k,\ell} \left\{ (\tilde{A}_{n;k,\ell} e^{-iE_\ell t} f_\ell^+) (\tilde{B}_{n;\ell,k} e^{iE_k t}) - (\tilde{A}_{n;k,\ell} e^{-iE_k t}) (\tilde{B}_{n;\ell,k} e^{iE_\ell t} f_k^+) \right\} \quad (\text{D.83})$$

$$= \text{Tr} (\tilde{A}_n \mathcal{D}_{e^-} \mathcal{D}_f \tilde{B}_n \mathcal{D}_{e^+}) - \text{Tr} (\tilde{A}_n \mathcal{D}_{e^-} \tilde{B}_n \mathcal{D}_{e^+} \mathcal{D}_f) \quad (\text{D.84})$$

と書くことができる。第一項目の複素共役を取ると、

$$\text{Tr} \left([\tilde{A}_n \mathcal{D}_{e^-} \mathcal{D}_f \tilde{B}_n \mathcal{D}_{e^+}]^\dagger \right) = \text{Tr} (\mathcal{D}_{e^-} \tilde{B}_n \mathcal{D}_f \mathcal{D}_{e^+} \tilde{A}_n) \quad (\text{D.85})$$

$$= \text{Tr} (\tilde{A}_n \mathcal{D}_{e^-} \tilde{B}_n \mathcal{D}_f \mathcal{D}_{e^+}) \quad (\text{D.86})$$

$$= \text{Tr} (\tilde{A}_n \mathcal{D}_{e^-} \tilde{B}_n \mathcal{D}_{e^+} \mathcal{D}_f) \quad (\text{D.87})$$

のように第二項が現れる。したがって、

$$\langle \hat{A}_n(t) \hat{B}_n(0) - \hat{B}_n(0) \hat{A}_n(t) \rangle = \text{Tr} (\tilde{A}_n \mathcal{D}_{e^-} \mathcal{D}_f \tilde{B}_n \mathcal{D}_{e^+}) - \text{Tr} (\tilde{A}_n \mathcal{D}_{e^-} \tilde{B}_n \mathcal{D}_{e^+} \mathcal{D}_f) \quad (\text{D.88})$$

$$= 2i \text{Im} [\text{Tr} (\tilde{A}_n \mathcal{D}_{e^-} \mathcal{D}_f \tilde{B}_n \mathcal{D}_{e^+})] \quad (\text{D.89})$$

と書くことができる。以上より、相関関数 $\Phi^R(t)$ は

$$\Phi^R(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle \hat{A}_n(t) \hat{B}_n(0) - \hat{B}_n(0) \hat{A}_n(t) \rangle \quad (\text{D.90})$$

$$= \frac{2}{\hbar} \theta(t) \text{Im} [\text{Tr} (\tilde{A}_n \mathcal{D}_{e^-} \mathcal{D}_f \tilde{B}_n \mathcal{D}_{e^+})] \quad (\text{D.91})$$

となる。

付録 E : スピン軌道相互作用の導出

相対論的量子力学からスピン軌道相互作用を導く。²⁰ Dirac 方程式はベクトルポテンシャル \mathbf{A} とスカラーポテンシャル Φ を用いて

$$\left\{ \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + e\Phi \right) - c \sum_{j=1}^3 \alpha_j \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} + eA_j \right) - \beta mc^2 \right\} \psi = 0 \quad (\text{E.1})$$

と書かれる。ここで α, β は Dirac 行列で

$$\alpha_1 = \sigma_1 \otimes \sigma_1 \quad (\text{E.2})$$

$$\alpha_2 = \sigma_1 \otimes \sigma_2 \quad (\text{E.3})$$

$$\alpha_3 = \sigma_1 \otimes \sigma_3 \quad (\text{E.4})$$

$$\beta = \sigma_3 \otimes \sigma_0 \quad (\text{E.5})$$

である。式 (E.1) に左から

$$\left\{ \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + e\Phi \right) + c \sum_{j=1}^3 \alpha_j \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} + eA_j \right) + \beta mc^2 \right\} \quad (\text{E.6})$$

を作用させると

$$\left\{ \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + e\Phi \right)^2 - c^2 (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - m^2 c^4 + i\hbar c e (\alpha_1 E_x + \alpha_2 E_y + \alpha_3 E_z) \right. \quad (\text{E.7})$$

$$\left. + i\hbar c^2 e (\alpha_1 \alpha_2 B_z + \alpha_2 \alpha_3 B_x + \alpha_3 \alpha_1 B_y) \right\} \psi = 0 \quad (\text{E.8})$$

が得られる。さらに,

$$\alpha_1 \alpha_2 = i\sigma_0 \otimes \sigma_3 \equiv i\sigma_z, \quad \alpha_2 \alpha_3 = i\sigma_0 \otimes \sigma_1 \equiv i\sigma_x, \quad \alpha_3 \alpha_1 = i\sigma_0 \otimes \sigma_2 \equiv i\sigma_y \quad (\text{E.9})$$

を用いて式 (E.7) を書きかえると,

$$\left\{ \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + e\Phi \right)^2 - c^2 (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - m^2 c^4 + i\hbar c e \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{E} - c^2 e \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right\} \psi = 0 \quad (\text{E.10})$$

となる。これは定常解

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\varepsilon t/\hbar} \varphi(\mathbf{r}) \quad (\text{E.11})$$

をもつ。ここで $\varepsilon = \hbar\omega$ はエネルギー固有値であり, $\varphi(\mathbf{r})$ は

$$\left\{ (\varepsilon + e\Phi)^2 - c^2 (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - m^2 c^4 + i\hbar c e \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{E} - c^2 e \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right\} \varphi(\mathbf{r}) = 0 \quad (\text{E.12})$$

の解で, $\varphi(\mathbf{r})$ は 4 成分の関数である。非相対論的な場合を考え,

$$\begin{aligned} (\varepsilon + e\Phi)^2 - m^2 c^4 &= (\varepsilon' + e\Phi + mc^2)^2 - m^2 c^4 \\ &= 2mc^2(\varepsilon' + e\Phi) + (\varepsilon' + e\Phi)^2 \end{aligned} \quad (\text{E.13})$$

の最後の項を落とす。ここで $\varepsilon' = \varepsilon - mc^2$ は電子のエネルギーから静止エネルギーを除いたもので, 非相対論的な場合には十分小さい。これと Dirac 行列を用いることで式 (E.12) は

$$\left\{ 2mc^2(\varepsilon' + e\Phi) - c^2 (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - c^2 e \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right\} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} + i\hbar c e \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E} \begin{pmatrix} \varphi_3 \\ \varphi_4 \end{pmatrix} = 0 \quad (\text{E.14})$$

$$\{2mc^2(\varepsilon' + e\Phi) - c^2(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - c^2 e\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}\} \begin{pmatrix} \varphi_3 \\ \varphi_4 \end{pmatrix} + ic\hbar e \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = 0 \quad (\text{E.15})$$

のように2つの式に書きかえられる。

ここで式 (E.1) にもどり、近似式を求める。まず式 (E.1) を書きかえた

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + e\Phi \right) \psi = \{c \boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) + \beta mc^2\} \psi \quad (\text{E.16})$$

に対して定常解の式 (E.11) を代入した

$$(\varepsilon + e\Phi - \beta mc^2) \varphi(\mathbf{r}) = c \boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \varphi(\mathbf{r}) \quad (\text{E.17})$$

は、Dirac 行列を用いて同様に

$$(\varepsilon + e\Phi - mc^2) \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = c \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \begin{pmatrix} \varphi_3 \\ \varphi_4 \end{pmatrix} \quad (\text{E.18})$$

$$(\varepsilon + e\Phi + mc^2) \begin{pmatrix} \varphi_3 \\ \varphi_4 \end{pmatrix} = c \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \quad (\text{E.19})$$

と表すことができる。非相対論的な場合は $|\varepsilon' + e\Phi| \simeq mv^2 \ll mc^2$ なので、 $\varepsilon + e\Phi + mc^2 \simeq 2mc^2$ として式 (E.19) から近似式を求める。以下、簡単のために磁場はないものとし $\mathbf{A} = 0$ とする。すなわち、式 (E.19) は

$$\begin{pmatrix} \varphi_3 \\ \varphi_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{2mc} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \quad (\text{E.20})$$

と書くことができ、恒等式

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) = (\mathbf{E} \cdot \mathbf{p}) + i(\boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{E} \times \mathbf{p}]) \quad (\text{E.21})$$

を使うと式 (E.14) の第四項は

$$\left\{ \frac{ie\hbar}{4m^2c^2} (\mathbf{E} \cdot \mathbf{p}) - \frac{e\hbar}{4m^2c^2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{E} \times \mathbf{p}]) \right\} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \quad (\text{E.22})$$

となり、この第二項がスピン軌道相互作用を与える。中心力場では

$$\mathbf{E} = -\text{grad}\Phi(r) = -\hat{\mathbf{r}} \left(\frac{d\Phi}{dr} \right) \quad (\text{E.23})$$

であるので、ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_{SL} &= \frac{e\hbar}{4m^2c^2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{E} \times \mathbf{p}]) \\ &= -\frac{e\hbar}{4m^2c^2} \left(\frac{1}{r} \frac{d\Phi}{dr} \right) (\boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{r} \times \mathbf{p}]) \\ &= -\frac{e}{2m^2c^2} \left(\frac{1}{r} \frac{d\Phi}{dr} \right) (\mathbf{s} \cdot \mathbf{L}) \end{aligned} \quad (\text{E.24})$$

となり、これが相対論的量子力学から導かれるスピン軌道相互作用である。

付録 F : 原子軌道

ここでは原子軌道の名前の付け方について述べる。²¹ 極座標表示での時間に依存しない Schrödinger 方程式は

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Lambda \right) + V(r) \right\} \varphi(r, \theta, \phi) = \varepsilon \varphi(r, \theta, \phi) \quad (\text{F.1})$$

である。ここで Λ は

$$\Lambda = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (\text{F.2})$$

を表す。これを解くために $\varphi(r, \theta, \phi)$ を変数分離した

$$\varphi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi) \quad (\text{F.3})$$

を代入して整理すると、

$$\frac{r^2}{R} \left(\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} r^2 (\varepsilon - V(r)) = -\frac{1}{Y} \Lambda Y \quad (\text{F.4})$$

のようになる。左辺は r のみの関数、右辺は θ, ϕ のみの関数なので両辺が定数のとき方程式が成り立つ。定数を λ とおくことで、この式は2つの微分方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{\lambda}{r^2} \right) + V(r)R = \varepsilon R \quad (\text{F.5})$$

$$\Lambda Y(\theta, \phi) + \lambda Y(\theta, \phi) = 0 \quad (\text{F.6})$$

に書き変えることができる。式 (F.6) の固有値は

$$\lambda = l(l+1) \quad (\text{F.7})$$

であり、 l は非負整数をとる。各 l に対して $2l+1$ 個の固有関数（球面調和関数）

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (\text{F.8})$$

をもち、 $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ をとる。 $P_l^{|m|}(\zeta)$ は Legendre 陪関数である。

ここで軌道角運動量演算子を極座標表示すると

$$l_x = i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (\text{F.9})$$

$$l_y = i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\sin \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (\text{F.10})$$

$$l_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (\text{F.11})$$

であり、 $l^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2$ は

$$l^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] = -\hbar^2 \Lambda \quad (\text{F.12})$$

のように表される。すなわち、式 (F.6) は

$$l^2 Y_l^m(\theta, \phi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta, \phi) \quad (\text{F.13})$$

と書くことができる。これは角運動量の二乗の固有値が $l(l+1)\hbar^2$ であることを示している。また、式 (F.11) と式 (F.8) から

$$l_z Y_l^m(\theta, \phi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \phi) \quad (\text{F.14})$$

と表され、角運動量の z 成分の固有値が $m\hbar$ であることを示している。ここで l を方位量子数、 m を磁気量子数と言う。 $l=0$ の状態は s 軌道と呼ばれる。また、 $l=1$ の状態は p 軌道と呼び、それに伴う 3 つの m がそれぞれ p_x , p_y , p_z 軌道を表す。このように $l=0, 1, 2, \dots$ に対して s, p, d, \dots のように軌道の名前が付けられている。

付録 G : Python の計算コード

ソースコード 1 図の設定

```
1 import matplotlib.pyplot as plt
2 from matplotlib import rc
3 import numpy as np
4 from matplotlib.collections import LineCollection
5 from matplotlib.colors import ListedColormap, BoundaryNorm
6 import matplotlib.cm as cm
7 from scipy.linalg import expm
8 import math
9 from matplotlib.backends.backend_pdf import PdfPages
10 import matplotlib as mpl
11 import time
12
13 def setprop():
14     rc('font', **{'family': 'serif', 'serif': ['times_new_roman']})
15     rc('font', weight = 'bold')
16     rc('text', usetex=True)
17     rc('font', size = 10)
18     rc('xtick', labelsizes = 16)
19     rc('ytick', labelsizes = 16)
20     rc('axes', labelsizes = 16)
21     rc('figure', titlesizes = 28)
22     rc('figure', autolayout = False)
23     rc('figure.subplot', hspace=0.3)
24 setprop()
25
26 def cline(x,y,c):
27     points = np.array([x, y]).T.reshape(-1, 1, 2)
28     segments = np.concatenate([points[:-1], points[1:]], axis=1)
29     norm = plt.Normalize(-1,1)
30     lc = LineCollection(segments, cmap=cm.bwr, norm=norm)
31     lc.set_array(c)
32     lc.set_linewidth(2)
33     plt.gca().add_collection(lc)
34     plt.xlim(x.min(), x.max())
35     plt.ylim(y.min(), y.max())
36     return lc
```

ソースコード 2 共通の定数

```
1 Lx = np.array([[0,0,0],[0,0,-1j],[0,1j,0]])
2 Ly = np.array([[0,0,1j],[0,0,0],[-1j,0,0]])
3 Lz = np.array([[0,-1j,0],[1j,0,0],[0,0,0]])
4
5 S0 = np.array([[1,0],[0,1]])
6 Sx = 0.5*np.array([[0,1],[1,0]])
7 Sy = 0.5*np.array([[0,-1j],[1j,0]])
8 Sz = 0.5*np.array([[1,0],[0,-1]])
```

ソースコード 3 局所座標系の基底ベクトル

```
1 def tan(M,N,p,q,kap,tau):
2     A = np.zeros((M*N*6,M*N*6))
3     phi = 2*math.pi*q/N
4     for n in range (M*N) :
5         diag = np.zeros((M*N,M*N))
6         diag[n,n] = 1
7         t_ = -kap*math.sin(phi*(n+1))*Lx + p*kap*math.cos(phi*(n+1))*Ly + tau*Lz
```

```

8     tdot = np.dot(t_,t_)-np.eye(3)
9     tBlock = np.kron( tdot ,np.eye(2) )
10    tmtr = np.kron( diag ,tBlock )
11    A = A + tmtr
12    return A
13
14 def nor(M,N,p,q,kap,tau):
15     B = np.zeros((M*N*6,M*N*6))
16     phi = 2*math.pi*q/N
17     for n in range (M*N) :
18         diag = np.zeros((M*N,M*N))
19         diag[n,n] = 1
20         n_ = -math.cos(phi*(n+1))*Lx - p*math.sin(phi*(n+1))*Ly
21         ndot = np.dot(n_,n_)
22         nBlock = np.kron( ndot ,np.eye(2) )
23         nmtr = np.kron( diag ,nBlock )
24         B = B + nmtr
25     return B
26
27 def bino(M,N,p,q,kap,tau):
28     C = np.zeros((M*N*6,M*N*6))
29     phi = 2*math.pi*q/N
30     for n in range (M*N) :
31         diag = np.zeros((M*N,M*N))
32         diag[n,n] = 1
33         b_ = p*tau*math.sin(phi*(n+1))*Lx - tau*math.cos(phi*(n+1))*Ly + p*kap*Lz
34         bdot = np.dot(b_,b_)
35         bBlock = np.kron( bdot ,np.eye(2) )
36         bmtr = np.kron( diag ,bBlock )
37         C = C + bmtr
38     return C

```

ソースコード 4 ハミルトニアン（無限長さの分子）

```

1 def Aband(M,N,j0,varphi,p,q,ep0,J,Kt,dso,De,t,k):
2
3     energy = []
4     spin = []
5
6     phi = 2*math.pi*q/N
7
8     if t == 0:
9         tau = 0
10        kap = 1
11    else :
12        R = 0.1**9
13        dh = 34*(0.1**10)
14        kap = R /np.sqrt(R**2+(dh/(2*math.pi))**2)
15        tau = p*dh/(2*math.pi) /np.sqrt(R**2+(dh/(2*math.pi))**2)
16        tau = abs(tau)
17
18    aa = j0*math.cos(p*varphi)
19    bb = j0*math.sin(p*varphi)
20    # aa = 1
21    # bb = 1
22    cc = 1
23    JJ = np.array([[aa,-bb,0],[bb,aa,0],[0,0,cc]])
24
25    for m in k:
26        e1 = np.exp(-2j*math.pi*m)
27        nn = np.zeros((M*N,M*N),dtype=np.complex)
28        nn[0,N-1] = e1

```

```

29     H_1 = np.kron(np.eye(M*N), np.kron(np.eye(3),S0))
30     H_2 = np.kron(np.eye(M*N),(np.kron(Lx,Sx)+np.kron(Ly,Sy)+np.kron(Lz,Sz)))
31
32     Hs = ep0*H_1 + 2*dso*J*H_2 + Kt*J*tan(M,N,p,q,kap,tau) + De*( bino(M,N,p,q,kap,tau) - nor(M,N,p,q,kap,
        tau) )
33
34     H_3 = np.kron( np.eye( M*N ,k=-1 ),np.kron( JJ ,S0 ) )
35     H_4 = np.kron( nn ,np.kron( JJ ,S0 ) )
36
37     Hh = -J*( H_3 + np.conjugate(H_3.T) + H_4 + np.conjugate(H_4.T) )
38
39     H = Hs + Hh
40
41     ev, v = np.linalg.eig(H)
42     idx = np.argsort(ev)
43     ev = ev[idx]
44     v = v[:,idx]
45
46     s_=[]
47     for i in range(v.shape[1]):
48         s_.append( np.dot(np.dot(v[:,i].conjugate(),np.kron(np.eye(3*N),2*Sz)),v[:,i]) )
49
50     energy.append(ev)
51
52     spin.append(s_)
53
54     energy = np.array(energy).T
55     spin = np.array(spin).T
56
57     for i in range(6*N):
58         lc = cline( k ,energy[i].real,spin[i].real)
59
60     return lc

```

ソースコード 5 ハミルトニアン (有限長さの分子)

```

1 def fullband(M,N,j0,varphi,p,q,B,theta_,phi_,J,Kt,dso,De,t):
2
3     energy = []
4     spin = []
5
6     phi = 2*math.pi*q/N
7
8     if t == 0:
9         tau = 0
10        kap = 1
11    else :
12        R = 0.1**9
13        dh = 34*(0.1**10)
14        kap = R /np.sqrt(R**2+(dh/(2*math.pi))**2)
15        tau = p*dh/(2*math.pi) /np.sqrt(R**2+(dh/(2*math.pi))**2)
16        tau = abs(tau)
17
18    aa = j0*math.cos(p*varphi)
19    bb = j0*math.sin(p*varphi)
20    cc = 1
21    JJ = np.array([[aa,-bb,0],[bb,aa,0],[0,0,cc]])
22
23    # H_1 = np.kron(np.eye(M*N), np.kron(np.eye(3),Sz))
24
25    H_1 = np.zeros((M*N,M*N),dtype=np.complex)
26    H_1[0,0] = 1

```

```

27
28 # H_1[1,1] = 1
29 # H_1[2,2] = 1
30 # H_1[3,3] = 1
31
32 # H_1 = np.eye( M*N )
33
34 H_1 = np.kron( H_1 , np.kron( np.eye(3), B*math.sin(theta_)*math.cos(phi_)*2*Sx + B*math.sin(theta_)*math.sin(
    phi_)*2*Sy + B*math.cos(theta_)*2*Sz ) )
35 H_2 = np.kron(np.eye(M*N),(np.kron(Lx,Sx)+np.kron(Ly,Sy)+np.kron(Lz,Sz)))
36
37 Hs = H_1 + 2*dso*J*H_2 + Kt*J*tan(M,N,p,q,kap,tau) + De*( bino(M,N,p,q,kap,tau) - nor(M,N,p,q,kap,tau) ) #+
    H_orb
38
39 H_3 = np.kron( np.eye( M*N ,k=-1 ),np.kron( JJ ,S0 ) )
40
41 Hh = -J*( H_3 + np.conjugate(H_3.T) )
42
43 H = Hs + Hh
44
45 # print( H[6:12,0:6] )
46 # print("////////")
47 # print( H[600-6:600,600-6:600] )
48
49 ev, v = np.linalg.eigh(H)
50 idx = np.argsort(ev)
51 ev = ev[idx]
52 v = v[:,idx]
53
54 return ev,v

```

ソースコード 6 各サイトごとのスピンとエネルギーの和

```

1 def sumspin(p,B,theta_,phi_,dso,M,N,j0,varphi,q,J,Kt,De,t,Fe):
2
3 # global v, M, N
4
5 ev,v = fullband(M,N,j0,varphi,p,q,B,theta_,phi_,J,Kt,dso,De,t) #(M,N,j0,varphi,p,q,B,theta_,phi_,J,Kt,dso,De,t)
6
7 sumEne = 0
8 fer_i = ((ev - Fe)**2).argmin()
9 for ii in range(0,fer_i):
10     sumEne = sumEne + ev[ii]
11
12 # print(fer_i)
13 # print("HOMO=",ev[fer_i])
14 # print("LUMO=",ev[fer_i+1])
15 # print(sumEne)
16
17 s_gap=[]
18
19 for ind, en in enumerate(ev):
20     if en <=Fe :
21         s_gap.append(v[:,ind])
22         homo = ev[ind]
23         lumo = ev[ind+1]
24         num = ind
25
26 print("NUMBER=",num+1)
27 print("HOMO=",homo)
28 print("LUMO=",lumo)
29

```

```

30     v_site=np.arange(1,M*N+1)
31
32     s_fe=[]
33
34     v = s_gap
35     for j in v_site:
36         s_fe.append(local_spin_next(v,M,N,j))
37
38     return s_fe,v_site,sumEne

```

ソースコード 7 スピンの期待値

```

1 def local_spin_next(v,M,N,n):
2
3     # global v, M, N
4
5     #print(v)
6
7     if v != []:
8
9         v_=np.array(v).T
10
11        nth = np.zeros((M*N,M*N),dtype=np.complex)
12        nth[n-1,n-1] = 1
13
14        s_0 = np.dot(np.dot(v_.conjugate()).T,np.kron( nth , np.kron( np.eye(3),S0 ) )),v_)
15        s_1 = np.dot(np.dot(v_.conjugate()).T,np.kron( nth , np.kron( np.eye(3),2*Sx ) )),v_)
16        s_2 = np.dot(np.dot(v_.conjugate()).T,np.kron( nth , np.kron( np.eye(3),2*Sy ) )),v_)
17        s_3 = np.dot(np.dot(v_.conjugate()).T,np.kron( nth , np.kron( np.eye(3),2*Sz ) )),v_)
18
19        s = [ np.trace(s_0), np.trace(s_1), np.trace(s_2), np.trace(s_3) ]
20
21    else:
22        s=[0,0,0,0]
23
24    return s

```

ソースコード 8 スピン分極の図

```

1 start=time.time()
2
3 p=1
4 B=0.05
5 theta_ = 2*math.pi/4
6 phi_ = 0*math.pi/4
7 M=25
8 N=4
9 dso=0.4
10 Fe= -math.sqrt(2)
11
12 #global v, M, N
13
14 s_feB,v_site,sumEne = sumspin_(p,B,theta_,phi_,dso,M,N,1,2*math.pi/N,1,1,7,0,0.48,Fe)#(p,B,theta_,phi_,dso,M,N,j0,
    varphi,q,J,Kt,De,t,Fe)
15 s_feBp,v_site,sumEne1 = sumspin_(-p,B,theta_,phi_,dso,M,N,1,2*math.pi/N,1,1,7,0,0.48,Fe)
16 s_feBb,v_site,sumEne2 = sumspin_(p,-B,theta_,phi_,dso,M,N,1,2*math.pi/N,1,1,7,0,0.48,Fe)
17 s_feB0,v_site,sumEne3 = sumspin_(-p,-B,theta_,phi_,dso,M,N,1,2*math.pi/N,1,1,7,0,0.48,Fe)
18
19 lis_ylabel=[ '$\langle \rho_n \rangle$', '$\langle \sigma_{x,n} \rangle$', '$\langle \sigma_{y,n} \rangle$', '$\langle \sigma_{z,n} \rangle$' ]
20
21 #=====

```

```

22
23 fig = plt.figure(figsize=(20,10))
24 plt.subplots_adjust(wspace=0.3)
25
26 #=====
27
28 ax2 = fig.add_subplot(231)
29 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
30 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
31
32 #ax2.plot(v_site, ( np.array(s_feB0).T[1] ), "green", marker='o', label="$p=1,B=0$",ls='dashdot',linewidth=3)
33 ax2.plot(v_site, ( np.array(s_feB).T[1] ), "red", marker='o', label="$p=1$",linewidth=2.5)#,B=\ $"+str(B),linewidth=3)
34 ax2.plot(v_site, ( np.array(s_feBp).T[1] ), "blue", marker='o', label="$p=-1$",ls='dashed',linewidth=2.5)#,B=\ $"+
    str(B),ls='dashed',linewidth=3)
35 #ax2.plot(v_site, ( np.array(s_feBb).T[1] ), "blue", marker='o', label="$p=1,B=-0.1$",ls='dotted',linewidth=3)
36 ax2.set_xlabel('$n$', fontsize=25)
37 ax2.set_ylabel(lis_ylabel[1], fontsize=20)
38 ax2.set_xlim(0,v_site[-1]+1)
39 ax2.legend(frameon=False, fontsize=20, loc='best')
40 #plt.xticks([0,20,40,60,80,100])
41
42 plt.title(" (a--1) ", loc='left', y=1, fontsize=20)
43
44 plt.tick_params(width = 1, length = 5, labelsiz=20)
45
46 #=====
47
48 ax3 = fig.add_subplot(232)
49 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
50 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
51
52 #ax3.plot(v_site, ( np.array(s_feB0).T[2] ), "green", marker='o', label="$p=1,B=0$",ls='dashdot',linewidth=3)
53 ax3.plot(v_site, ( np.array(s_feB).T[2] ), "red", marker='o', label="$p=1$",linewidth=2.5)#,B=\ $"+str(B),linewidth=3)
54 ax3.plot(v_site, ( np.array(s_feBp).T[2] ), "blue", marker='o', label="$p=-1$",ls='dashed',linewidth=2.5)#,B=\ $"+
    str(B),ls='dashed',linewidth=3)
55 #ax3.plot(v_site, ( np.array(s_feBb).T[2] ), "blue", marker='o', label="$p=1,B=-0.1$",ls='dotted',linewidth=3)
56 ax3.set_xlabel('$n$', fontsize=25)
57 ax3.set_ylabel(lis_ylabel[2], fontsize=20)
58 ax3.set_xlim(0,v_site[-1]+1)
59 ax3.legend(frameon=False, fontsize=20, loc='best')
60 #plt.xticks([0,20,40,60,80,100])
61
62 plt.title(" (b--1) ", loc='left', y=1, fontsize=20)
63
64 plt.tick_params(width = 1, length = 5, labelsiz=20)
65
66 #=====
67
68 ax4 = fig.add_subplot(233)
69 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
70 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
71
72 #ax4.plot(v_site, ( np.array(s_feB0).T[3] ), "green", marker='o', label="$p=1,B=0$",ls='dashdot',linewidth=3)
73 ax4.plot(v_site, ( np.array(s_feB).T[3] ), "red", marker='o', label="$p=1$",linewidth=2.5)#,B=\ $"+str(B),linewidth=3)
74 ax4.plot(v_site, ( np.array(s_feBp).T[3] ), "blue", marker='o', label="$p=-1$",ls='dashed',linewidth=2.5)#,B=\ $"+
    str(B),ls='dashed',linewidth=3)
75 #ax4.plot(v_site, ( np.array(s_feBb).T[3] ), "blue", marker='o', label="$p=1,B=-0.1$",ls='dotted',linewidth=3)
76 ax4.set_xlabel('$n$', fontsize=25)
77 ax4.set_ylabel(lis_ylabel[3], fontsize=20)
78 ax4.set_xlim(0,v_site[-1]+1)
79 ax4.legend(frameon=False, fontsize=20, loc='best')
80 #plt.xticks([0,20,40,60,80,100])

```

```

81
82 plt.title(" (c--1)", loc='left', y=1, fontsize=20)
83
84 plt.tick_params(width = 1, length = 5, labels=20)
85
86 #####
87
88 ax2w = fig.add_subplot(234)
89 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
90 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
91
92 #ax2w.plot(v_site, ( np.array(s_feB).T[1] ), "black", marker='o', label="$p=1,B=0.1$",linewidth=3)
93 #ax2w.plot(v_site, ( np.array(s_feBp).T[1] ), "red", marker='o', label="$p=-1,B=0.1$",ls='dashed',linewidth=3)
94 ax2w.plot(v_site, ( np.array(s_feBb).T[1] ), "red", marker='o', label="$p=1$",linewidth=2.5)#,B=\ $"+str(-B),
    linewidth=3)
95 ax2w.plot(v_site, ( np.array(s_feB0).T[1] ), "blue", marker='o', label="$p=-1$",ls='dashed',linewidth=2.5)#,B=\ $"+
    str(-B),ls='dashed',linewidth=3)
96 ax2w.set_xlabel('$n$', fontsize=25)
97 ax2w.set_ylabel(lis_ylabel[1], fontsize=20)
98 ax2w.set_xlim(0,v_site[-1]+1)
99 ax2w.legend(frameon=False, fontsize=20, loc='best')
100 #plt.xticks([0,20,40,60,80,100])
101
102 plt.title(" (a--2)", loc='left', y=1, fontsize=20)
103
104 plt.tick_params(width = 1, length = 5, labels=20)
105
106 #=====
107
108 ax3w = fig.add_subplot(235)
109 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
110 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
111
112 #ax3w.plot(v_site, ( np.array(s_feB).T[2] ), "black", marker='o', label="$p=1,B=0.1$",linewidth=3)
113 #ax3w.plot(v_site, ( np.array(s_feBp).T[2] ), "red", marker='o', label="$p=-1,B=0.1$",ls='dashed',linewidth=3)
114 ax3w.plot(v_site, ( np.array(s_feBb).T[2] ), "red", marker='o', label="$p=1$",linewidth=2.5)#,B=\ $"+str(-B),
    linewidth=3)
115 ax3w.plot(v_site, ( np.array(s_feB0).T[2] ), "blue", marker='o', label="$p=-1$",ls='dashed',linewidth=2.5)#,B=\ $"+
    str(-B),ls='dashed',linewidth=3)
116 ax3w.set_xlabel('$n$', fontsize=25)
117 ax3w.set_ylabel(lis_ylabel[2], fontsize=20)
118 ax3w.set_xlim(0,v_site[-1]+1)
119 ax3w.legend(frameon=False, fontsize=20, loc='best')
120 #plt.xticks([0,20,40,60,80,100])
121
122 plt.title(" (b--2)", loc='left', y=1, fontsize=20)
123
124 plt.tick_params(width = 1, length = 5, labels=20)
125
126 #=====
127
128 ax4w = fig.add_subplot(236)
129 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
130 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
131
132 #ax4w.plot(v_site, ( np.array(s_feB).T[3] ), "black", marker='o', label="$p=1,B=0.1$",linewidth=3)
133 #ax4w.plot(v_site, ( np.array(s_feBp).T[3] ), "red", marker='o', label="$p=-1,B=0.1$",ls='dashed',linewidth=3)
134 ax4w.plot(v_site, ( np.array(s_feBb).T[3] ), "red", marker='o', label="$p=1$",linewidth=2.5)#,B=\ $"+str(-B),
    linewidth=3)
135 ax4w.plot(v_site, ( np.array(s_feB0).T[3] ), "blue", marker='o', label="$p=-1$",ls='dashed',linewidth=2.5)#,B=\ $"+
    str(-B),ls='dashed',linewidth=3)
136 ax4w.set_xlabel('$n$', fontsize=25)

```

```

137 ax4w.set_ylabel(lis_ylabel[3], fontsize=20)
138 ax4w.set_xlim(0,v_site[-1]+1)
139 ax4w.legend(frameon=False, fontsize=20, loc='best')
140 #plt.xticks([0,20,40,60,80,100])
141
142 plt.title(" (c--2)", loc='left', y=1, fontsize=20)
143
144 plt.tick_params(width = 1, length = 5, labels=20)
145
146 #####
147
148 plt.show()
149
150 #pp = PdfPages('2x3_spin_JCP.pdf')
151 pp = PdfPages('2x3_spin_JCP_100_big.pdf')
152 pp.savefig(fig,bbox_inches="tight")
153 pp.close()
154
155 print( (time.time()-start)/60, "\uimin")

```

ソースコード 9 バンド構造と電荷密度

```

1 start=time.time()
2
3 p=1
4 B=0.05
5 theta_ = math.pi/2
6 phi_ = 0
7 M=25
8 N=4
9 Fe= -math.sqrt(2)
10
11 s_dso0,v_site,sumEne0 = sumspin_(p,B,theta_,phi_,M,N,1,-2*math.pi/4,1,1,7,0,0,Fe)
12 s_dso04,v_site,sumEne04 = sumspin_(p,B,theta_,phi_,M,N,1,-2*math.pi/4,1,1,7,0,0,Fe)
13 s_dso0x,v_site,sumEne0x = sumspin_(p,B,theta_,phi_,M,N,np.sqrt(2),math.pi/4,1,1,7,0,0.48,Fe)
14 s_dso04x,v_site,sumEne04x = sumspin_(p,B,theta_,phi_,M,N,np.sqrt(2),math.pi/4,1,1,7,0,0.48,Fe)
15
16
17 fig = plt.figure(figsize=(7,16))
18 #plt.subplots_adjust(wspace=0.25)
19
20 #fig = plt.figure()
21 lis_ylabel=[ '$\langle \rho_n \rangle$', '$\langle \sigma_{x,n} \rangle$', '$\langle \sigma_{y,n} \rangle$', '$\langle \sigma_{z,n} \rangle$']
22
23 ax1 = plt.axes([0.15, 0.3, 0.75, 0.2])
24
25 #ax1 = fig.add_subplot(233)
26 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
27 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
28
29 ax1.plot(v_site, ( np.array(s_dso0).T[0] ), "red", marker='o', label="$\Delta_{\rm{so}}=0$", linewidth=2)
30 ax1.plot(v_site, ( np.array(s_dso04).T[0] ), "black", marker='o', label="$\Delta_{\rm{so}}=0.4J$", ls="dashed",
31           ,linewidth=2)
32 #ax1.set_xlabel('$n$', fontsize=25)
33 ax1.set_ylabel(lis_ylabel[0], fontsize=25)
34 ax1.legend(frameon=False, fontsize=22, loc='best')
35
36 plt.title(" (b--1)", loc='left', y=1.01, fontsize=22)
37
38 plt.tick_params(width = 1, length = 5, labels=20)

```



```

39
40 #=====
41
42 ax2 = plt.axes([0.15, 0.05, 0.75, 0.2])
43
44 #ax2 = fig.add_subplot(236)
45 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
46 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
47
48 ax2.plot(v_site, ( np.array(s_dso0x).T[0] ), "red", marker=' ', label="$\Delta_{\rm{so}}=0$",linewidth=2)
49 ax2.plot(v_site, ( np.array(s_dso04x).T[0] ), "black", marker='o', label="$\Delta_{\rm{so}}=0.4J$", ls="dashed",linewidth=2)
50 ax2.set_xlim(0,v_site[-1]+1)
51 ax2.set_xlabel('$n$', fontsize=25)
52 ax2.set_ylabel(lis_ylabel[0], fontsize=25)
53 ax2.legend(frameon=False, fontsize=22, loc='best')
54
55 plt.title("(b--2)", loc='left', y=1.01, fontsize=22)
56
57 plt.tick_params(width = 1, length = 5, labelsiz=20)
58
59 #=====
60 #plt.subplots_adjust(wspace=0.1)
61
62 ax3 = plt.axes([0.15, 0.57, 0.38, 0.38])
63
64 #ax3 = fig.add_subplot(141)
65 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
66 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
67
68 k = np.linspace(-0.5,0.5,500)
69 ymin = 10
70 ymax = 4
71
72 lc = Aband(1,N,1,-2*math.pi/4,p,1,0,1,7,0.4,0,0,k) #(M,N,j0,varphi,p,q,ep0,J,Kt,dso,De,t,k)
73
74 ax3.set_xlim(-0.5, 0.5)
75 plt.xticks(np.arange(-0.4,0.41,step=0.2))
76 ax3.set_ylim(-ymin, ymax)
77 plt.yticks(np.arange(-ymin,ymax+0.1,step=1))
78
79 ax3.set_xlabel('$k/(2\pi)$', fontsize=25)
80 plt.title("(a--1)", loc='left', y=1.01, fontsize=22)
81 #ax.xaxis.set_major_locator(mpl.ticker.MultipleLocator(0.25))
82 ax3.set_ylabel('$E/J$', fontsize=25)
83
84 color = (200,200,200)
85 html_color = '#%02X%02X%02X' % (color[0],color[1],color[2])
86 plt.axvspan(k.min(),k.max(),color=html_color)
87
88 plt.hlines([-math.sqrt(2)], -0.5, 0.5, "black", linestyle='dashed',linewidth=1)
89
90 plt.tick_params(width = 1, length = 5, labelsiz=20)
91
92 #=====
93
94 ax4 = plt.axes([0.55, 0.57, 0.43, 0.38])
95
96 #ax4 = fig.add_subplot(142)
97 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
98 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
99

```

```

100 lc = Aband(1,N,np.sqrt(2),math.pi/4,p,1,0,1,7,0.4,0,0.48,k) #(M,N,j0,phi,p,q,ep0,J,Kt,dso,De,tau,k)
101
102 ax4.set_xlim(-0.5, 0.5)
103 plt.xticks(np.arange(-0.4,0.41,step=0.2))
104 ax4.set_ylim(-ymin, ymax)
105 plt.yticks(np.arange(-ymin,ymax+0.1,step=1))
106 plt.yticks(color="None")
107
108 ax4.set_xlabel( '$k/(2\pi)$', fontsize=25)
109 plt.title(" (a--2)", loc='left', y=1.01, fontsize=22)
110 #ax3.xaxis.set_major_locator(mpl.ticker.MultipleLocator(0.25))
111
112 color = (200,200,200)
113 html_color = '#%02X%02X%02X' % (color[0],color[1],color[2])
114 plt.axvspan(k.min(),k.max(),color=html_color)
115
116 plt.hlines([-math.sqrt(2)], -0.5, 0.5, "black", linestyle='dashed',linewidth=1)
117
118 plt.tick_params(width = 1, length = 5, labelsz=20)
119
120 #=====
121
122 fig.colorbar(lc,shrink=0.3)
123 plt.show()
124
125 pp = PdfPages('soi_JCP_01.pdf')
126 pp.savefig(fig,bbox_inches="tight")
127 pp.close()
128
129 print( (time.time()-start)/60, "_min")

```

ソースコード 10 H_+ のバンド構造

```

1 def pband(M,N,j0,varphi,p,q,ep0,J,Kt,dso,De,t,k):
2
3     energy_p = []
4     spin_p = []
5
6     phi = 2*math.pi*q/N
7
8     if t == 0:
9         tau = 0
10        kap = 1
11    else :
12        R = 0.1**9
13        dh = 34*(0.1**10)
14        kap = R /np.sqrt(R**2+(dh/(2*math.pi))**2)
15        tau = p*dh/(2*math.pi) /np.sqrt(R**2+(dh/(2*math.pi))**2)
16        tau = abs(tau)
17
18    aa = j0*math.cos(p*varphi)
19    bb = j0*math.sin(p*varphi)
20    cc = 1
21
22    for m in k:
23        H_1 = -2*aa*math.cos(2*math.pi*m/N)
24        H_2 = -2*cc*math.cos(2*math.pi*(m+p*q)/N)
25
26        H_p = np.array([[H_1+ep0,-dso*p*kap],
27                        [-dso*p*kap,H_2-ep0]])
28
29    ev_p, v_p = np.linalg.eig(H_p)

```

```

30     idx = np.argsort(ev_p)
31     ev_p = ev_p[idx]
32     v_p = v_p[:,idx]
33
34     s_p=[]
35     for i in range(2):
36         s_p.append( np.dot(np.dot(v_p[:,i].conjugate(),2*Sz),v_p[:,i]) )
37
38     energy_p.append(ev_p)
39     spin_p.append(s_p)
40
41     energy_p = np.array(energy_p).T
42     spin_p = np.array(spin_p).T
43
44     for i in range(2):
45         lc_p = cline( k ,energy_p[i].real,spin_p[i].real)
46
47     return lc_p

```

ソースコード 11 H_+ のハミルトニアン (有限長さの分子)

```

1 def pHamiltonian(M,N,j0,varphi,p,q,de,Dso,t):
2
3     phi = 2*math.pi/N
4     H_po = np.zeros((M*N*2,M*N*2))
5
6     if t == 0:
7         tau = 0
8         kap = 1
9     else :
10        R = 0.1**9
11        dh = 34*(0.1**10)
12        kap = R /np.sqrt(R**2+(dh/(2*math.pi))**2)
13        tau = p*dh/(2*math.pi) /np.sqrt(R**2+(dh/(2*math.pi))**2)
14        tau = abs(tau)
15
16    for n in range(M*N):
17        one = np.zeros((M*N,M*N))
18        one[n,n] = 1
19        Ho_p = np.array([[de , Dso*p*kap*np.exp(-1j*p*phi*(n+1))],
20                        [Dso*p*kap*np.exp(1j*p*phi*(n+1)) , -de]])
21        H_po = H_po + np.kron( one , Ho_p )
22
23    H_pp = np.array([[ -j0 , 0],
24                    [ 0 , -j0]])
25    H_ps = np.kron( np.eye( M*N ,k=-1 ) , H_pp )
26
27    H_p = H_po + H_ps + H_ps.T
28
29    ev_p, v_p = np.linalg.eigh(H_p)
30
31    return ev_p,v_p

```

ソースコード 12 H_+ でのスピンの期待値 (数値計算・解析計算)

```

1 def edgspin(ev,v,n,M,N):
2
3     s_ = [0,0,0,0]
4     nth = np.zeros((M*N,M*N),dtype=np.complex)
5     nth[n,n] = 1
6
7     s_[0] = np.dot(np.dot(v.conjugate().T,np.kron( nth , S0 )),v)

```

```

8     s_[1] = np.dot(np.dot(v.conjugate().T,np.kron( nth , 2*Sx )),v)
9     s_[2] = np.dot(np.dot(v.conjugate().T,np.kron( nth , 2*Sy )),v)
10    s_[3] = np.dot(np.dot(v.conjugate().T,np.kron( nth , 2*Sz )),v)
11
12    return s_
13
14    def anaedgespin(psi):
15
16        as_ = [0,0,0,0]
17
18        as_[0] = np.dot(np.dot(psi.conjugate().T, S0 ),psi)[0,0]
19        as_[1] = np.dot(np.dot(psi.conjugate().T, 2*Sx ),psi)[0,0]
20        as_[2] = np.dot(np.dot(psi.conjugate().T, 2*Sy ),psi)[0,0]
21        as_[3] = np.dot(np.dot(psi.conjugate().T, 2*Sz ),psi)[0,0]
22
23    return as_

```

ソースコード 13 解析解の波動関数

```

1    def norJCP(M,N,dele,dso,x,norJCP):
2
3        lam = 2*math.sin(math.pi/N)/math.sqrt((dso**2)-(dele**2))
4        kk = 2*math.pi/N + dele/(2*math.sin(math.pi/N))
5        L = M*N+1
6        al = np.exp(L/lam)
7        be = np.exp(1j*math.pi*L/N)
8        ga = np.exp(1j*kk*L)
9        RR = ga*(-1-2*al*(be-ga)-1j*be*(be+(1+1j)*ga)+(al**2)*(-1+1j*(be**2)+(1+1j)*be*ga))
10
11        AA = ((1j-1)*(1j+(al**2))*be+1j*((al**2)-1)*ga+2*al*be*ga+(be**2)*(ga+al*(al*ga-2)))/RR
12        BB = -al*(be+ga)*(-be-1j*ga+al*(1j+be*ga))/RR
13        CC = (be+ga)*(1j+al*(be-1j*ga)-be*ga)/RR
14
15        down = np.array([[0],[1]]) * np.exp(-1j*kk*x)
16        up = np.array([[1],[0]]) * np.exp(1j*kk*x)
17        eup = np.array([[1],[1j]]) * np.exp(-x/lam)
18        edown = np.array([[1],[1j]]) * np.exp(x/lam)
19
20        rot = np.array([[np.exp(-1j*math.pi*x/N),0],[0,np.exp(1j*math.pi*x/N)]])
21
22        psi = np.dot( rot ,( down + AA * up + BB * eup + CC * edown ))
23        norpsi = psi/norJCP
24
25    return norpsi
26
27    def wfJCP(M,N,dele,dso,x):
28
29        lam = 2*math.sin(math.pi/N)/math.sqrt((dso**2)-(dele**2))
30        kk = 2*math.pi/N + dele/(2*math.sin(math.pi/N))
31        L = M*N+1
32        al = np.exp(L/lam)
33        be = np.exp(1j*math.pi*L/N)
34        ga = np.exp(1j*kk*L)
35        RR = ga*(-1-2*al*(be-ga)-1j*be*(be+(1+1j)*ga)+(al**2)*(-1+1j*(be**2)+(1+1j)*be*ga))
36
37        AA = ((1j-1)*(1j+(al**2))*be+1j*((al**2)-1)*ga+2*al*be*ga+(be**2)*(ga+al*(al*ga-2)))/RR
38        BB = -al*(be+ga)*(-be-1j*ga+al*(1j+be*ga))/RR
39        CC = (be+ga)*(1j+al*(be-1j*ga)-be*ga)/RR
40
41        down = np.array([[0],[1]]) * np.exp(-1j*kk*x)
42        up = np.array([[1],[0]]) * np.exp(1j*kk*x)
43        eup = np.array([[1],[1j]]) * np.exp(-x/lam)

```

```

44     edown = np.array([[1],[-1j]])* np.exp(x/lam)
45
46     rot = np.array([[np.exp(-1j*math.pi*x/N),0],[0,np.exp(1j*math.pi*x/N)])]
47
48     psi = np.dot( rot ,( down + AA * up + BB * eup + CC * edown ))
49     psiJCP = np.dot( psi.conjugate().T , psi )[0,0]
50
51     return psiJCP

```

ソースコード 14 H_+ のバンド構造とスピンの数値解・解析解の比較の図

```

1  import time
2  start=time.time()
3
4  M = 25
5  N = 4
6  dso = 0.1
7
8  s=[]
9
10 ev,v = pHamiltonian(M,N,1,2*math.pi/N,1,1,0,dso,0) #(M,N,j0,varphi,p,q,ep0,dso,tau)
11
12 gapi = ((ev - (-math.sqrt(2)))*2).argmin()+1
13 gape = ev[gapi]
14 gapv = v[:,gapi]
15
16 #print(gapi)
17 print(gape)
18 print("-\sqrt{2}=", -math.sqrt(2))
19
20 #plt.hist(ev, bins=100, alpha = 0.5, label='finite')
21 #plt.show()
22
23 for j in range(M*N):
24     s.append( edgespin(gape,gapv,j,M,N) ) #(ev,v,M,N)
25
26 s = np.array(s).T
27
28 #####
29
30 anas3 = []
31 #dele = np.sqrt((gape - (-math.sqrt(2)))*2)
32 dele = gape - (-math.sqrt(2))
33 print("dele=",dele)
34
35 psi3 = 0
36
37 for nnn in range(1,M*N+1):
38     psi3 = psi3 + wfJCP(M,N,dele,dso,nnn) #(M,N,e,dso,x)
39
40 norm3 = np.sqrt(psi3)
41 #print(norm3)
42
43 for nnn in range(1,M*N+1):
44     norpsi3 = norJCP(M,N,dele,dso,nnn,norm3) #(M,N,e,dso,x,nor)
45     anas3.append( anaedgespin(norpsi3) )
46
47 anas3 = np.array(anas3).T
48
49 #=====
50
51 fig = plt.figure(figsize=(25,4.5))

```

```

52 plt.subplots_adjust(wspace=0.3)
53
54 ax = fig.add_subplot(142)
55 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
56 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
57
58 x = np.arange(1,M*N+1)
59
60 plt.plot(x,s[0], "red", marker='o', label="a",linewidth=3)
61 plt.plot(x,anas3[0], color="black", marker='o', label="b", ls="dashed",linewidth=2)
62 ax.set_xlabel('$n$', fontsize=25)
63 ax.set_ylabel('$\langle \rho_n \rangle$', fontsize=23)
64 plt.xlim(0,M*N+1)
65 plt.xticks([0,20,40,60,80,100])
66
67 plt.title(" (b) ", loc='left', y=1.01, fontsize=25)
68
69 plt.tick_params(width = 1, length = 5, labels=20)
70
71 #=====
72
73 ax2 = fig.add_subplot(143)
74 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
75 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
76
77 plt.plot(x,s[1], "red", marker='o', label="a",linewidth=3)
78 plt.plot(x,anas3[1], color="black", marker='o', label="b", ls="dashed",linewidth=2)
79 ax2.set_xlabel('$n$', fontsize=25)
80 ax2.set_ylabel('$\langle \sigma_{x,n} \rangle$', fontsize=23)
81 plt.xlim(0,M*N+1)
82 plt.xticks([0,20,40,60,80,100])
83
84 plt.title(" (c) ", loc='left', y=1.01, fontsize=25)
85
86 plt.tick_params(width = 1, length = 5, labels=20)
87
88 #=====
89
90 ax3 = fig.add_subplot(144)
91 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
92 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
93
94 plt.plot(x,s[2], "red", marker='o', label="a",linewidth=3)
95 plt.plot(x,anas3[2], color="black", marker='o', label="b", ls="dashed",linewidth=2)
96 ax3.set_xlabel('$n$', fontsize=25)
97 ax3.set_ylabel('$\langle \sigma_{y,n} \rangle$', fontsize=23)
98 plt.xlim(0,M*N+1)
99 plt.xticks([0,20,40,60,80,100])
100
101 plt.title(" (d) ", loc='left', y=1.01, fontsize=25)
102
103 plt.tick_params(width = 1, length = 5, labels=20)
104
105 #####
106
107 ax4 = fig.add_subplot(141)
108
109 k = np.linspace(-3,3,500)
110 ymin = 3
111 ymax = 3
112
113 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'

```

```

114 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
115
116 lc = pband(1,4,np.sqrt(2),math.pi/4,1,1,0,1,50,dso,0,0,k) #(M,N,j0,phi,p,q,ep0,J,Kt,dso,De,tau,k)
117
118 ax4.set_xlim(-3, 3)
119 plt.xticks(np.arange(-3,3.1,step=1))
120 ax4.set_ylim(-ymin, ymax)
121 plt.yticks(np.arange(-ymin,ymax+0.1,step=1))
122
123 ax4.set_xlabel( '$k/(2\pi)$', fontsize=25)
124 ax4.set_ylabel( '$E/J$', fontsize=20)
125
126 color = (200,200,200)
127 html_color = '#%02X%02X%02X' % (color[0],color[1],color[2])
128 plt.axvspan(k.min(),k.max(),color=html_color)
129
130 plt.title(" (a) ", loc='left', y=1.01, fontsize=25)
131
132 plt.tick_params(width = 1, length = 5, labelsize=23)
133 plt.hlines([-math.sqrt(2)], -3, 3, "black", linestyle='dotted',linewidth=1)
134 plt.hlines([math.sqrt(2)], -3, 3, "black", linestyle='dotted',linewidth=1)
135 plt.vlines([0.5], -3, 3, "aliceblue", linestyle='dashdot',linewidth=1)
136 plt.vlines([-0.5], -3, 3, "aliceblue", linestyle='dashdot',linewidth=1)
137 plt.show()
138
139 #####
140
141 plt.show()
142
143 pp = PdfPages('1x4_spin_JCP_01.pdf')
144 pp.savefig(fig, bbox_inches="tight")
145 pp.close()
146
147 print(time.time()-start)

```

ソースコード 15 球座標でのスピンの期待値

```

1 def local_spin_sphere(v,M,N,n,e_r,e_th,e_ph):
2
3     if v != []:
4
5         v_=np.array(v).T
6
7         nth = np.zeros( (M*N,M*N) )#,dtype=np.complex)
8         nth[n-1,n-1] = 1
9
10        s_0 = np.dot(np.dot(v_.conjugate()).T,np.kron( nth , np.kron( np.eye(3),S0 ) )),v_)
11        s_1 = np.dot(np.dot(v_.conjugate()).T,np.kron( nth , np.kron( np.eye(3),2*Sx ) )),v_)
12        s_2 = np.dot(np.dot(v_.conjugate()).T,np.kron( nth , np.kron( np.eye(3),2*Sy ) )),v_)
13        s_3 = np.dot(np.dot(v_.conjugate()).T,np.kron( nth , np.kron( np.eye(3),2*Sz ) )),v_)
14
15        # troid = np.dot(np.dot(v_.conjugate()).T,np.kron( nth , np.kron( np.eye(3),2*Sz ) )),v_)
16
17        sp = [ np.trace(s_1), np.trace(s_2), np.trace(s_3) ]
18
19        s_sphere = [ np.trace(s_0), np.dot( sp, e_r ), np.dot( sp, e_th ), np.dot( sp, e_ph ) ]
20
21    else:
22        s_sphere=[0,0,0,0]
23
24    return s_sphere

```

ソースコード 16 各サイトごとのスピン (球座標) とエネルギーの和

```

1 def sumspin_sphere(p,B,theta_,phi_,dso,M,N,j0,varphi,q,J,Kt,De,t,Fe):
2
3     ev,v = fullband(M,N,j0,varphi,p,q,B,theta_,phi_,J,Kt,dso,De,t) #(M,N,j0,varphi,p,q,B,theta_,phi_,J,Kt,dso,De,t)
4
5     sumEne = 0
6     fer_i = ((ev - Fe)**2).argmin()
7     for ii in range(0,fer_i):
8         sumEne = sumEne + ev[ii]
9
10    s_gap=[]
11
12    for ind, en in enumerate(ev):
13        if en <=Fe :
14            s_gap.append(v[:,ind])
15
16    v_site=np.arange(1,M*N+1)
17
18    s_sph=[]
19
20    v = s_gap
21
22    e_r = [ math.sin(theta_)*math.cos(phi_), math.sin(theta_)*math.sin(phi_), math.cos(theta_) ]
23    e_th = [ math.cos(theta_)*math.cos(phi_), math.cos(theta_)*math.sin(phi_), -math.sin(theta_) ]
24    e_ph = [ -math.sin(phi_), math.cos(phi_), 0 ]
25
26    for j in v_site:
27        s_sph.append(local_spin_sphere(v,M,N,j,e_r,e_th,e_ph))
28
29    return s_sph,v_site,sumEne

```

ソースコード 17 エネルギーとスピンの和・差

```

1 def sumpol_sphere(theta,phi):
2
3     s_p,v_site,sumEne_pl = sumspin_sphere(p,B,theta,phi,dso,M,N,1,2*math.pi/N,1,1,7,0,0.48,Fe)#(p,B,theta_,phi_,dso,
4         M,N,j0,varphi,q,J,Kt,De,t,Fe)
5
6     s_m,v_site,sumEne_mi = sumspin_sphere(-p,B,theta,phi,dso,M,N,1,2*math.pi/N,1,1,7,0,0.48,Fe)
7
8     plus = sum( np.array(s_p) )#/2
9     minus = sum( np.array(s_m) )#/2
10
11    return plus, minus,sumEne_pl,sumEne_mi

```

ソースコード 18 密度プロット

```

1 start=time.time()
2
3 p=1
4 B=1
5 M=5
6 N=4
7 dso=0.4
8 Fe= -math.sqrt(2)
9
10 block = 15
11
12 cm = plt.cm.get_cmap('bwr')
13 #plt.figure().add_subplot(facecolor='silver')
14
15 phi = []
16 theta = []

```



```

17 s_plus_sphere = []
18 s_minus_sphere = []
19 ene_pl = []
20 ene_mi = []
21
22 for x in np.arange( 0.0, math.pi, math.pi/block ):
23     for y in np.arange( 0.0, 2*math.pi, math.pi/block ):
24
25         plus_sphere, minus_sphere,sumEne_pl,sumEne_mi = sumpol_sphere(x,y)
26
27         phi.append(y)
28         theta.append(x)
29         s_plus_sphere.append( plus_sphere )
30         s_minus_sphere.append( minus_sphere )
31         ene_pl.append( sumEne_pl )
32         ene_mi.append( sumEne_mi )
33
34     print(x)
35
36 s_def_sphere = list( np.array( s_plus_sphere ) - np.array( s_minus_sphere ) )
37 ene_def = list( np.array( ene_pl ) - np.array( ene_mi ) )
38 s_sphere_sum = list( ( np.array( s_plus_sphere ) + np.array( s_minus_sphere ) )/2 )
39 ene_sum = list( ( np.array( ene_pl ) + np.array( ene_mi ) )/2 )
40
41 #####
42
43 fig = plt.figure(figsize=(21,3))
44 plt.subplots_adjust(wspace=0.37, hspace=0.4)
45
46 #=====
47
48 ax = fig.add_subplot(141,facecolor='silver')
49 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
50 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
51
52 sc = plt.scatter( list(np.array(phi)/math.pi), list(np.array(theta)/math.pi), c = np.array(ene_def), cmap = cm )
53
54 plt.xlabel('$\tilde{\phi}/\pi$', fontsize=18)
55 plt.ylabel('$\tilde{\theta}/\pi$', fontsize=18)
56 plt.xlim( 0, 2 )
57 plt.ylim( 0, 1 )
58 plt.title(" (a) ", loc='left', y=1 , fontsize=20)
59
60 plt.colorbar(sc)
61
62 plt.tick_params(width = 1, length = 5 , labels=15)
63
64 #=====
65
66 ax2 = fig.add_subplot(142,facecolor='silver')
67 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
68 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
69
70 sc1 = plt.scatter( list(np.array(phi)/math.pi), list(np.array(theta)/math.pi), c = np.array(s_def_sphere).T[1], cmap = cm )
71
72 plt.xlabel('$\tilde{\phi}/\pi$', fontsize=18)
73 plt.ylabel('$\tilde{\theta}/\pi$', fontsize=18)
74 plt.xlim( 0, 2 )
75 plt.ylim( 0, 1 )
76 plt.title(" (b) ", loc='left', y=1 , fontsize=20)
77
78 plt.colorbar(sc1)

```

```

79
80 plt.tick_params(width = 1, length = 5 , labelsz=15)
81
82 #=====
83
84
85 ax3 = fig.add_subplot(143,facecolor='silver')
86 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
87 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
88
89 sc2 = plt.scatter( list(np.array(phi)/math.pi), list(np.array(theta)/math.pi), c = np.array(s_def_sphere).T[2], cmap = cm )
90
91 plt.xlabel('$\tilde{\phi}/\pi$', fontsize=18)
92 plt.ylabel('$\tilde{\theta}/\pi$', fontsize=18)
93 plt.xlim( 0, 2 )
94 plt.ylim( 0, 1 )
95 plt.title(" (c) ", loc='left', y=1 , fontsize=20)
96
97 plt.colorbar(sc2)
98
99 plt.tick_params(width = 1, length = 5 , labelsz=15)
100 #=====
101
102 ax4 = fig.add_subplot(144,facecolor='silver')
103 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
104 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
105
106 sc3 = plt.scatter( list(np.array(phi)/math.pi), list(np.array(theta)/math.pi), c = np.array(s_def_sphere).T[3], cmap = cm )
107
108 plt.xlabel('$\tilde{\phi}/\pi$', fontsize=18)
109 plt.ylabel('$\tilde{\theta}/\pi$', fontsize=18)
110 plt.xlim( 0, 2 )
111 plt.ylim( 0, 1 )
112 plt.title(" (d) ", loc='left', y=1 , fontsize=20)
113
114 plt.tick_params(width = 1, length = 5 , labelsz=15)
115
116 plt.colorbar(sc3)
117 plt.show()
118
119 pp = PdfPages('1x4_defer_spin_sphere_JCP_01.pdf')
120 pp.savefig(fig, bbox_inches="tight")
121 pp.close()
122
123 #####
124
125 fig2 = plt.figure(figsize=(21,3))
126 plt.subplots_adjust(wspace=0.37, hspace=0.4)
127
128 #=====
129
130 axv = fig2.add_subplot(141,facecolor='silver')
131 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
132 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
133
134 scv = plt.scatter( list(np.array(phi)/math.pi), list(np.array(theta)/math.pi), c = np.array(ene_sum), cmap = cm )
135
136 plt.xlabel('$\tilde{\phi}/\pi$', fontsize=18)
137 plt.ylabel('$\tilde{\theta}/\pi$', fontsize=18)
138 plt.xlim( 0, 2 )
139 plt.ylim( 0, 1 )
140 plt.title(" (a) ", loc='left', y=1 , fontsize=20)

```

```

141
142 plt.colorbar(scv)
143
144 plt.tick_params(width = 1, length = 5 , labelsz=15)
145
146 #=====
147
148 ax2v = fig2.add_subplot(142,facecolor='silver')
149 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
150 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
151
152 sc1v = plt.scatter( list(np.array(phi)/math.pi), list(np.array(theta)/math.pi), c = np.array(s_sphere_sum).T[1], cmap = cm )
153
154 plt.xlabel('$\tilde{\phi}/\pi$', fontsize=18)
155 plt.ylabel('$\tilde{\theta}/\pi$', fontsize=18)
156 plt.xlim( 0, 2 )
157 plt.ylim( 0, 1 )
158 plt.title(" (b) ", loc='left', y=1 , fontsize=20)
159
160 plt.colorbar(sc1v)
161
162 plt.tick_params(width = 1, length = 5 , labelsz=15)
163
164 #=====
165
166 ax3v = fig2.add_subplot(143,facecolor='silver')
167 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
168 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
169
170 sc2v = plt.scatter( list(np.array(phi)/math.pi), list(np.array(theta)/math.pi), c = np.array(s_sphere_sum).T[2], cmap = cm )
171
172 plt.xlabel('$\tilde{\phi}/\pi$', fontsize=18)
173 plt.ylabel('$\tilde{\theta}/\pi$', fontsize=18)
174 plt.xlim( 0, 2 )
175 plt.ylim( 0, 1 )
176 plt.title(" (c) ", loc='left', y=1 , fontsize=20)
177
178 plt.colorbar(sc2v)
179
180 plt.tick_params(width = 1, length = 5 , labelsz=15)
181 #=====
182
183 ax4v = fig2.add_subplot(144,facecolor='silver')
184 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
185 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
186
187 sc3v = plt.scatter( list(np.array(phi)/math.pi), list(np.array(theta)/math.pi), c = np.array(s_sphere_sum).T[3], cmap = cm )
188
189 plt.xlabel('$\tilde{\phi}/\pi$', fontsize=18)
190 plt.ylabel('$\tilde{\theta}/\pi$', fontsize=18)
191 plt.xlim( 0, 2 )
192 plt.ylim( 0, 1 )
193 plt.title(" (d) ", loc='left', y=1 , fontsize=20)
194
195 plt.tick_params(width = 1, length = 5 , labelsz=15)
196
197 plt.colorbar(sc3v)
198 plt.show()
199
200 pp2 = PdfPages('1x4_ave_spin_sphere_JCP_01.pdf')
201 pp2.savefig(fig2, bbox_inches="tight")
202 pp2.close()

```

```

203
204 print( (time.time()-start)/60, "_min")
205 print( (time.time()-start)/3600, "_h")

```

ソースコード 19 球座標でのスピンの期待値 ($T \neq 0$)

```

1 def local_spin_sphere_Fermi(v,M,N,n,e_r,e_th,e_ph,ff):
2
3     v_ = np.array(v)
4
5     nth = np.zeros( (M*N,M*N) )#,dtype=np.complex)
6     nth[n-1,n-1] = 1
7
8     s_0 = np.dot( np.dot(np.dot(v_.conjugate().T,np.kron( nth , np.kron( np.eye(3),S0 ) )),v_ ) , ff )
9     s_1 = np.dot( np.dot(np.dot(v_.conjugate().T,np.kron( nth , np.kron( np.eye(3),2*Sx ) )),v_ ) , ff )
10    s_2 = np.dot( np.dot(np.dot(v_.conjugate().T,np.kron( nth , np.kron( np.eye(3),2*Sy ) )),v_ ) , ff )
11    s_3 = np.dot( np.dot(np.dot(v_.conjugate().T,np.kron( nth , np.kron( np.eye(3),2*Sz ) )),v_ ) , ff )
12
13    sp = [ np.trace(s_1), np.trace(s_2), np.trace(s_3) ]
14
15    s_sphere = [ np.trace(s_0), np.dot( sp, e_r ), np.dot( sp, e_th ), np.dot( sp, e_ph ) ]
16
17    return s_sphere

```

ソースコード 20 各サイトごとのスピン (球座標) とエネルギーの和 ($T \neq 0$)

```

1 def sumspin_sphere_Fermi(p,B,theta_,phi_,dso,M,N,j0,varphi,q,J,Kt,De,t,Fe,beta):
2
3     ev,v = fullband(M,N,j0,varphi,p,q,B,theta_,phi_,J,Kt,dso,De,t) #(M,N,j0,varphi,p,q,B,theta_,phi_,J,Kt,dso,De,t)
4     ev_dso0,v_dso0 = fullband(M,N,j0,varphi,p,q,B,theta_,phi_,J,Kt,0,De,t)
5
6     #ff = [ 1 / ( np.exp( (eien - Fe) *beta ) +1 ) for eien in ev]
7     ff = [ ( 1 - np.tanh( (eien - Fe) *beta/2 ) )/2 for eien in ev]
8     ff = np.diag(ff)
9
10    ff_0 = [ ( 1 - np.tanh( (eien_0 - Fe) *beta/2 ) )/2 for eien_0 in ev_dso0]
11    ff_0 = np.diag(ff_0)
12
13    sumEne = sum ( np.dot( ev, ff ) )
14    sumEne_0 = sum ( np.dot( ev_dso0, ff_0 ) )
15
16    v_site=np.arange(1,M*N+1)
17
18    s_sph=[]
19
20    e_r = [ math.sin(theta_)*math.cos(phi_), math.sin(theta_)*math.sin(phi_), math.cos(theta_) ]
21    e_th = [ math.cos(theta_)*math.cos(phi_), math.cos(theta_)*math.sin(phi_), -math.sin(theta_) ]
22    e_ph = [ -math.sin(phi_), math.cos(phi_), 0 ]
23
24    for j in v_site:
25        s_sph.append( local_spin_sphere_Fermi(v,M,N,j,e_r,e_th,e_ph,ff) )
26
27    return s_sph,v_site,sumEne,sumEne_0

```

ソースコード 21 エネルギーとスピンの和・差 ($T \neq 0$)

```

1 def sumpol_sphere_Fermi(theta,phi,p,B,dso,M,N,j0,varphi,q,J,Kt,De,t,Fe,beta):
2
3     s_p,v_site,sumEne_pl,sumEne_pl0 = sumspin_sphere_Fermi(p,B,theta,phi,dso,M,N,j0,varphi,1,1,7,0,0.48,Fe,beta)#(p
4     s_m,v_site,sumEne_mi,sumEne_mi0 = sumspin_sphere_Fermi(-p,B,theta,phi,dso,M,N,j0,varphi,1,1,7,0,0.48,Fe,beta)
5     # s_pdso0,v_site,sumEne_pdso0 = sumspin_sphere_Fermi(p,0,theta,phi,0,M,N,j0,varphi,1,1,7,0,0.48,Fe,beta)

```

```

6 # s_mdso0,v_site,sumEne_mdso0 = sumspin_sphere_Fermi(p,0,theta,phi,0,M,N,j0,varphi,1,1,7,0,0.48,Fe,beta)
7
8 plus = sum( np.array(s_p) )#/2
9 minus = sum( np.array(s_m) )#/2
10
11 return plus, minus,sumEne_pl,sumEne_mi,sumEne_pl0,sumEne_mi0

```

ソースコード 22 密度プロット ($T \neq 0$)

```

1 start=time.time()
2
3 p = 1
4 B = 1
5 M = 10
6 N = 4
7 J = 1
8 dso = 0.4
9 Fe = -math.sqrt(2)
10 Temp = 0.1
11 beta = 1/( Temp*J )
12
13 block = 25
14
15 cm = plt.cm.get_cmap( 'bwr' )
16
17 phi = []
18 theta = []
19 s_plus_sphere = []
20 s_minus_sphere = []
21 ene_pl = []
22 ene_mi = []
23 ene_pl0 = []
24 ene_mi0 = []
25
26 for x in np.arange( 0.0, math.pi+math.pi/block, math.pi/block ):
27     for y in np.arange( 0.0, 2*math.pi+math.pi/block, math.pi/block ):
28
29         plus_sphere, minus_sphere,sumEne_pl,sumEne_mi,sumEne_pl0,sumEne_mi0 = sumpol_sphere_Fermi(x,y,p,B,
30             dso,M,N,1,2*math.pi/N,1,J,7,0,0.48,Fe,beta)
31
32         phi.append(y)
33         theta.append(x)
34         s_plus_sphere.append( plus_sphere )
35         s_minus_sphere.append( minus_sphere )
36         ene_pl.append( sumEne_pl )
37         ene_mi.append( sumEne_mi )
38         ene_pl0.append( sumEne_pl0 )
39         ene_mi0.append( sumEne_mi0 )
40
41     print(x)
42
43 s_def_sphere = list( np.array( s_plus_sphere ) - np.array( s_minus_sphere ) )
44 ene_def = list( np.array( ene_pl ) - np.array( ene_mi ) )
45
46 s_sphere_sum = list( ( np.array( s_plus_sphere ) + np.array( s_minus_sphere ) )/2 )
47 ene_pcomp = list( np.array( ene_pl ) - np.array( ene_pl0 ) )
48 ene_mcomp = list( np.array( ene_mi ) - np.array( ene_mi0 ) )
49 ene_ave = list( ( np.array( ene_pcomp ) + np.array( ene_mcomp ) )/2 )
50 #####
51
52 fig = plt.figure(figsize=(21,3))

```

```

53 plt.subplots_adjust(wspace=0.37, hspace=0.4)
54
55 #=====
56
57 ax = fig.add_subplot(141,facecolor='silver')
58 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
59 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
60
61 sc = plt.scatter( list(np.array(phi)/math.pi), list(np.array(theta)/math.pi), c = np.array(ene_def), cmap = cm )
62
63 plt.xlabel('$\tilde{\phi}/\pi$', fontsize=18)
64 plt.ylabel('$\tilde{\theta}/\pi$', fontsize=18)
65 plt.xlim( 0, 2 )
66 plt.ylim( 0, 1 )
67 plt.title(" (a) ", loc='left', y=1 , fontsize=20)
68
69 plt.colorbar(sc)
70
71 plt.tick_params(width = 1, length = 5 , labels=15)
72
73 #=====
74
75 ax2 = fig.add_subplot(142,facecolor='silver')
76 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
77 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
78
79 sc1 = plt.scatter( list(np.array(phi)/math.pi), list(np.array(theta)/math.pi), c = np.array(s_def_sphere).T[1], cmap = cm )
80
81 plt.xlabel('$\tilde{\phi}/\pi$', fontsize=18)
82 plt.ylabel('$\tilde{\theta}/\pi$', fontsize=18)
83 plt.xlim( 0, 2 )
84 plt.ylim( 0, 1 )
85 plt.title(" (b) ", loc='left', y=1 , fontsize=20)
86
87 plt.colorbar(sc1)
88
89 plt.tick_params(width = 1, length = 5 , labels=15)
90
91 #=====
92
93
94 ax3 = fig.add_subplot(143,facecolor='silver')
95 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
96 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
97
98 sc2 = plt.scatter( list(np.array(phi)/math.pi), list(np.array(theta)/math.pi), c = np.array(s_def_sphere).T[2], cmap = cm )
99
100 plt.xlabel('$\tilde{\phi}/\pi$', fontsize=18)
101 plt.ylabel('$\tilde{\theta}/\pi$', fontsize=18)
102 plt.xlim( 0, 2 )
103 plt.ylim( 0, 1 )
104 plt.title(" (c) ", loc='left', y=1 , fontsize=20)
105
106 plt.colorbar(sc2)
107
108 plt.tick_params(width = 1, length = 5 , labels=15)
109 #=====
110
111 ax4 = fig.add_subplot(144,facecolor='silver')
112 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
113 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
114

```

```

115 sc3 = plt.scatter( list(np.array(phi)/math.pi), list(np.array(theta)/math.pi), c = np.array(s_def_sphere).T[3], cmap = cm )
116
117 plt.xlabel('$\tilde{\phi}/\pi$', fontsize=18)
118 plt.ylabel('$\tilde{\theta}/\pi$', fontsize=18)
119 plt.xlim( 0, 2 )
120 plt.ylim( 0, 1 )
121 plt.title(" (d) ", loc='left', y=1 , fontsize=20)
122
123 plt.tick_params(width = 1, length = 5 , labelsize=15)
124
125 plt.colorbar(sc3)
126 plt.show()
127
128 #pp = PdfPages('1x4_deference_sphere.pdf')
129 pp = PdfPages('1x4_deference_sphere_10.pdf')
130 pp.savefig(fig, bbox_inches="tight")
131 pp.close()
132
133 #####
134
135 fig2 = plt.figure(figsize=(21,3))
136 plt.subplots_adjust(wspace=0.37, hspace=0.4)
137
138 #=====
139
140 axv = fig2.add_subplot(141,facecolor='silver')
141 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
142 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
143
144 scv = plt.scatter( list(np.array(phi)/math.pi), list(np.array(theta)/math.pi), c = np.array(ene_ave), cmap = cm )
145
146 plt.xlabel('$\tilde{\phi}/\pi$', fontsize=18)
147 plt.ylabel('$\tilde{\theta}/\pi$', fontsize=18)
148 plt.xlim( 0, 2 )
149 plt.ylim( 0, 1 )
150 plt.title(" (a) ", loc='left', y=1 , fontsize=20)
151
152 plt.colorbar(scv)
153
154 plt.tick_params(width = 1, length = 5 , labelsize=15)
155
156 #=====
157
158 ax2v = fig2.add_subplot(142,facecolor='silver')
159 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
160 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
161
162 sc1v = plt.scatter( list(np.array(phi)/math.pi), list(np.array(theta)/math.pi), c = np.array(s_sphere_sum).T[1], cmap = cm )
163
164 plt.xlabel('$\tilde{\phi}/\pi$', fontsize=18)
165 plt.ylabel('$\tilde{\theta}/\pi$', fontsize=18)
166 plt.xlim( 0, 2 )
167 plt.ylim( 0, 1 )
168 plt.title(" (b) ", loc='left', y=1 , fontsize=20)
169
170 plt.colorbar(sc1v)
171
172 plt.tick_params(width = 1, length = 5 , labelsize=15)
173
174 #=====
175
176 ax3v = fig2.add_subplot(143,facecolor='silver')

```

```

177 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
178 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
179
180 sc2v = plt.scatter( list(np.array(phi)/math.pi), list(np.array(theta)/math.pi), c = np.array(s_sphere_sum).T[2], cmap = cm )
181
182 plt.xlabel('$\\tilde{\phi}/\pi$', fontsize=18)
183 plt.ylabel('$\\tilde{\theta}/\pi$', fontsize=18)
184 plt.xlim( 0, 2 )
185 plt.ylim( 0, 1 )
186 plt.title(" (c) ", loc='left', y=1, fontsize=20)
187
188 plt.colorbar(sc2v)
189
190 plt.tick_params(width = 1, length = 5, labels=15)
191
192 #=====
193
194 ax4v = fig2.add_subplot(144,facecolor='silver')
195 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
196 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
197
198 sc3v = plt.scatter( list(np.array(phi)/math.pi), list(np.array(theta)/math.pi), c = np.array(s_sphere_sum).T[3], cmap = cm )
199
200 plt.xlabel('$\\tilde{\phi}/\pi$', fontsize=18)
201 plt.ylabel('$\\tilde{\theta}/\pi$', fontsize=18)
202 plt.xlim( 0, 2 )
203 plt.ylim( 0, 1 )
204 plt.title(" (d) ", loc='left', y=1, fontsize=20)
205
206 plt.tick_params(width = 1, length = 5, labels=15)
207
208 plt.colorbar(sc3v)
209 plt.show()
210
211 #pp2 = PdfPages('1x4_average_sphere.pdf')
212 pp2 = PdfPages('1x4_average_sphere_10.pdf')
213 pp2.savefig(fig2,bbox_inches="tight")
214 pp2.close()
215
216 print( (time.time()-start)/60, "\uimin")
217 print( (time.time()-start)/3600, "\uh")

```

ソースコード 23 強磁場下での電荷密度の比較

```

1 start=time.time()
2
3 p=1
4 B=1
5 theta_ = 2*math.pi/4
6 phi_ = 0*math.pi/4
7 M=25
8 N=4
9 dso=0.4
10 Fe= -math.sqrt(2)
11
12 #global v, M, N
13
14 s_feB,v_site,sumEne = sumspin_(p,0.05,theta_,phi_,dso,M,N,1,2*math.pi/N,1,1,7,0,0.48,Fe)#(p,B,theta_,phi_,dso,M,N,j0,
    varphi,q,J,Kt,De,t,Fe)
15 s_feBp,v_site,sumEne1 = sumspin_(-p,0.05,theta_,phi_,dso,M,N,1,2*math.pi/N,1,1,7,0,0.48,Fe)
16 s_feBb,v_site,sumEne2 = sumspin_(p,1,theta_,phi_,dso,M,N,1,2*math.pi/N,1,1,7,0,0.48,Fe)
17 s_feB0,v_site,sumEne3 = sumspin_(-p,1,theta_,phi_,dso,M,N,1,2*math.pi/N,1,1,7,0,0.48,Fe)

```



```

18
19 lis_ylabel=['$\langle \rho_n \rangle$', '$\langle \sigma_{x,n} \rangle$', '$\langle \sigma_{y,n} \rangle$', '$\langle \sigma_{z,n} \rangle$']
20
21 #=====
22 fig = plt.figure(figsize=(15,5))
23 plt.subplots_adjust(wspace=0.3)
24
25 #=====
26
27 ax2 = fig.add_subplot(121)
28 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
29 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
30
31 #ax2.plot(v_site, ( np.array(s_feB0).T[1] ), "green", marker='', label="$p=1,B=0$",ls='dashdot',linewidth=3)
32 ax2.plot(v_site, ( np.array(s_feB).T[0] ), "red", marker='', label="$p=1$",linewidth=2.5)#,B=\ $"+str(B),linewidth=3)
33 ax2.plot(v_site, ( np.array(s_feBp).T[0] ), "blue", marker='', label="$p=-1$",ls='dashed',linewidth=2.5)#,B=\ $"+
    str(B),ls='dashed',linewidth=3)
34 #ax2.plot(v_site, ( np.array(s_feBb).T[1] ), "blue", marker='', label="$p=1,B=-0.1$",ls='dotted',linewidth=3)
35 ax2.set_xlabel('$n$', fontsize=25)
36 ax2.set_ylabel(lis_ylabel[0], fontsize=20)
37 ax2.set_xlim(0,v_site[-1]+1)
38 ax2.legend(frameon=False, fontsize=20, loc='best')
39 #plt.xticks([0,20,40,60,80,100])
40
41 plt.title("(s--1)", loc='left', y=1, fontsize=20)
42
43 plt.tick_params(width = 1, length = 5, labels=20)
44
45 #=====
46
47
48 ax2w = fig.add_subplot(122)
49 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
50 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
51
52 #ax2w.plot(v_site, ( np.array(s_feB).T[1] ), "black", marker='', label="$p=1,B=0.1$",linewidth=3)
53 #ax2w.plot(v_site, ( np.array(s_feBp).T[1] ), "red", marker='', label="$p=-1,B=0.1$",ls='dashed',linewidth=3)
54 ax2w.plot(v_site, ( np.array(s_feBb).T[0] ), "red", marker='', label="$p=1$",linewidth=2.5)#,B=\ $"+str(-B),
    linewidth=3)
55 ax2w.plot(v_site, ( np.array(s_feB0).T[0] ), "blue", marker='', label="$p=-1$",ls='dashed',linewidth=2.5)#,B=\ $"+
    str(-B),ls='dashed',linewidth=3)
56 ax2w.set_xlabel('$n$', fontsize=25)
57 ax2w.set_ylabel(lis_ylabel[0], fontsize=20)
58 ax2w.set_xlim(0,v_site[-1]+1)
59 ax2w.legend(frameon=False, fontsize=20, loc='best')
60 #plt.xticks([0,20,40,60,80,100])
61
62 plt.title("(s--2)", loc='left', y=1, fontsize=20)
63
64 plt.tick_params(width = 1, length = 5, labels=20)
65
66
67 plt.show()
68
69
70 pp = PdfPages('1x2_density_JCP_100.pdf')
71 pp.savefig(fig, bbox_inches="tight")
72 pp.close()
73
74 print( (time.time()-start)/60, "\u03bcmin")

```

```

1 import time
2 start=time.time()
3
4 M = 25
5 N = 4
6 dso = 0.1
7
8 s=[]
9
10 ev,v = pHamiltonian(M,N,1,2*math.pi/N,1,1,0,dso,0) #(M,N,j0,varphi,p,q,ep0,dso,tau)
11
12 gapi = ((ev - (-math.sqrt(2)))**2).argmin()+1
13 gape = ev[gapi]
14 gapv = v[:,gapi]
15
16 #print(gapi)
17 print(gape)
18 print("-\sqrt{2}=", -math.sqrt(2))
19
20 #plt.hist(ev, bins=100, alpha = 0.5, label='finite')
21 #plt.show()
22
23 for j in range(M*N):
24     s.append( edgespin(gape,gapv,j,M,N) ) #(ev,v,M,N)
25
26 s = np.array(s).T
27
28 #=====
29 fig = plt.figure(figsize=(15,6))
30 plt.subplots_adjust(wspace=0.3)
31
32 ax3 = fig.add_subplot(121)
33
34 k = np.linspace(-3,3,500)
35 ymin = 3
36 ymax = 3
37
38 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
39 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
40
41 lc = pband(1,4,np.sqrt(2),math.pi/4,1,1,0,1,50,0,0,0,k) #(M,N,j0,phi,p,q,ep0,J,Kt,dso,De,tau,k)
42
43 ax3.set_xlim(-3, 3)
44 plt.xticks(np.arange(-3,3.1,step=1))
45 ax3.set_ylim(-ymin, ymax)
46 plt.yticks(np.arange(-ymin,ymax+0.1,step=1))
47
48 ax3.set_xlabel( '$k/(2\pi)$', fontsize=25)
49 ax3.set_ylabel( '$E/J$', fontsize=20)
50
51 color = (200,200,200)
52 html_color = '#02X%02X%02X' % (color[0],color[1],color[2])
53 plt.axvspan(k.min(),k.max(),color=html_color)
54
55 plt.title(" (a) ", loc='left', y=1.01, fontsize=25)
56
57 plt.tick_params(width = 1, length = 5, labelsiz=23)
58 plt.hlines([-math.sqrt(2)], -3, 3, "black", linestyle='dotted',linewidth=1)
59 plt.hlines([math.sqrt(2)], -3, 3, "black", linestyle='dotted',linewidth=1)
60 plt.vlines([0.5], -3, 3, "aliceblue", linestyle='dashdot',linewidth=1)
61 plt.vlines([-0.5], -3, 3, "aliceblue", linestyle='dashdot',linewidth=1)

```

```

62
63 #####
64
65 ax4 = fig.add_subplot(122)
66
67 k = np.linspace(-3,3,500)
68 ymin = 3
69 ymax = 3
70
71 plt.rcParams['xtick.direction'] = 'in'
72 plt.rcParams['ytick.direction'] = 'in'
73
74 lc = pband(1,4,np.sqrt(2),math.pi/4,1,1,0,1,50,0.1,0,0,k) #(M,N,j0,phi,p,q,ep0,J,Kt,dso,De,tau,k)
75
76 ax4.set_xlim(-3, 3)
77 plt.xticks(np.arange(-3,3.1,step=1))
78 ax4.set_ylim(-ymin, ymax)
79 plt.yticks(np.arange(-ymin,ymax+0.1,step=1))
80
81 ax4.set_xlabel( '$k/(2\pi)$', fontsize=25)
82 ax4.set_ylabel( '$E/J$', fontsize=20)
83
84 color = (200,200,200)
85 html_color = '#%02X%02X%02X' % (color[0],color[1],color[2])
86 plt.axvspan(k.min(),k.max(),color=html_color)
87
88 plt.title(" (b) ", loc='left', y=1.01, fontsize=25)
89
90 plt.tick_params(width = 1, length = 5, labelsize=23)
91 plt.hlines([-math.sqrt(2)], -3, 3, "black", linestyle='dotted',linewidth=1)
92 plt.hlines([math.sqrt(2)], -3, 3, "black", linestyle='dotted',linewidth=1)
93 plt.vlines([0.5], -3, 3, "aliceblue", linestyle='dashdot',linewidth=1)
94 plt.vlines([-0.5], -3, 3, "aliceblue", linestyle='dashdot',linewidth=1)
95 plt.show()
96
97 #####
98
99 plt.show()
100
101 pp = PdfPages('band_soi0vs01.pdf')
102 pp.savefig(fig, bbox_inches="tight")
103 pp.close()
104
105 print(time.time()-start)

```
