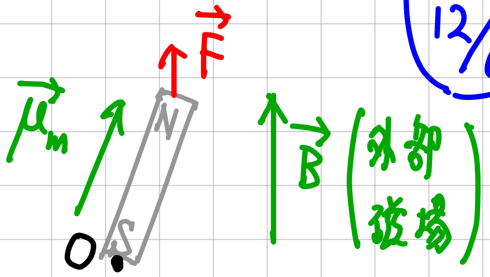
4.7 スピン角運動量

'21 12/6

スピン自由度 = 粒子の「自転」に相当する粒子固有の自由度

cf. 磁石の磁気モーメント $\vec{\mu}_m$



$$V_m = -\vec{\mu}_m \cdot \vec{B}$$

Pauli : $\vec{\mu}_m \propto \hbar \vec{J} =: \vec{S}$ と考えた。(磁性の起源)

↖ 一般角運動量 ($j=\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ も含む)

電子では $\vec{\mu}_m = \frac{e}{2m}\left(\vec{L} + g\vec{S}\right)$ $g \fallingdotseq 2$ (g因子) ← 起源は相対論的考察が必要

⟶ 磁場中の電子のふるまいを説明 (Zeeman効果など)

状態空間は拡張される：

$$\mathcal{H} = \overset{\hat{H}_0,\, \vec{L}}{\mathcal{H}_0} \otimes \overset{\vec{S}}{\mathcal{H}_s}$$

← これだけに着目すれば有限次元 (これを調べよう)

(これまでの状態空間) ⊗ (スピンop.の作用する空間)

$$\qquad \cup \qquad\qquad\qquad \cup$$

$$|n, l, m'\rangle \otimes |j, m\rangle$$

違うエム ($m' \in \{-l, -l+1, \cdots, l\}$)

〈4.5節のまとめ〉

$$[\hat{J}_j, \hat{J}_k] \overset{4.5}{=} i\epsilon_{jkl}\hat{J}_l, \quad [\hat{\vec{J}}^2, J_k] \overset{4.6}{=} 0,$$

$$\hat{\vec{J}}^2 |j, m\rangle \overset{③}{\underset{4.9}{=}} j(j+1)|j, m\rangle, \quad \hat{J}_3 |j, m\rangle \overset{④}{=} m|j, m\rangle,$$

$$\underbrace{\hat{J}^{(\pm)}}_{\hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2} |j, m\rangle \overset{4.11}{=} \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}\, |j, m \pm 1\rangle \qquad m \in \underbrace{\{-j, -j+1, \cdots, j\}}_{(2j+1)\text{コ}}$$

以下すべて複号同順

例 4.12 スピン$\frac{1}{2}$ $(j=\frac{1}{2})$ $\hat{\vec{S}}=\hbar\hat{\vec{J}}$

$m=-\frac{1}{2}$ or $\frac{1}{2}$ (2準位系) $\Rightarrow$ $|\pm\rangle := |j=\frac{1}{2}, m=\pm\frac{1}{2}\rangle$

この基底による $\hat{\vec{J}}$ の行列表示：

$$\left(\hat{J}_z|+\rangle, \hat{J}_z|-\rangle\right) = \left(|+\rangle, |-\rangle\right)\underbrace{\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}}_{J_z\,(\text{スピン表示})}$$

$$J_z = \begin{pmatrix}\langle +|\hat{J}_z|+\rangle & \langle +|\hat{J}_z|-\rangle \\ \langle -|\hat{J}_z|+\rangle & \langle -|\hat{J}_z|-\rangle\end{pmatrix}$$ とも書ける

同様に $\hat{J}_x = (1/2)(\hat{J}^{(+)}+\hat{J}^{(-)})$ 等より

$$J_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & 1 \\ 1 & 0\end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & -i \\ i & 0\end{pmatrix}$$

宿題1 $\hat{J}_y$ のスピン表示を求めよ.
($\hat{J}^{(+)}, \hat{J}^{(-)}$ との関係を求めるとよい)

$$\vec{J}^2 = \frac{3}{4}\begin{pmatrix}1 & 0 \\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$J^{(+)} = \begin{pmatrix}0 & 1 \\ 0 & 0\end{pmatrix}, \quad J^{(-)} = \begin{pmatrix}0 & 0 \\ 1 & 0\end{pmatrix} \quad \left(|+\rangle \equiv \begin{pmatrix}1 \\ 0\end{pmatrix}, |-\rangle \equiv \begin{pmatrix}0 \\ 1\end{pmatrix}\right)$$

定義 4.13 以下を Pauli (のスピン)行列という

$$\sigma_x = \begin{pmatrix}0 & 1 \\ 1 & 0\end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix}0 & -i \\ i & 0\end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix}1 & 0 \\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

命題 4.14

(i) $\sigma_k^2 = 0 \quad (^\forall k)$

(ii) $\sigma_j\sigma_k = i\epsilon_{jkl}\sigma_l \Rightarrow [\sigma_j, \sigma_k] = 2i\epsilon_{jkl}\sigma_l$

(iii) $\sigma_j\sigma_k + \sigma_k\sigma_j = 0 \quad (^\forall k \neq j)$

注 4.15 $\mathcal{H}_s$ の元 $= |\psi_s\rangle = |+\rangle\underbrace{\langle +|\psi_s\rangle}_{C_+} + |-\rangle\underbrace{\langle -|\psi_s\rangle}_{C_-}$

法則1より. 連比 $[C_+ : C_-]$ が状態を定める

$S^2 \simeq \mathbb{C}P_1$

スピン軌道相互作用

水素原子内の電子の(スピンを考慮した)ハミルトニアン:

相対論的考察から決まる

$$H = H_0 + f(r)\,\underbrace{\vec{L}\cdot\vec{S}}_{} \quad \cdots \text{⑫}$$

$\vec{S} \propto \vec{\mu}_m,\ \vec{L} \propto \vec{B}$ "電子から見ると陽子が$\vec{L}$を持ち$\vec{B}$を生じる"

正確には $H_0 \equiv H_0 \otimes 1_S$, $\vec{L}\cdot\vec{S} \equiv \sum_k L_k \otimes S_k$

命題4.16 ⑫において、$\vec{L}+\vec{S}$ は保存量

($\vec{L}, \vec{S}$ それぞれは保存しない)

☺ $\vec{L}+\vec{S} = \vec{L}\otimes 1_S + 1_L \otimes \vec{S}$ に注意.　※ $L_k\otimes S_k \cdot L_l \otimes 1_S = L_kL_l \otimes S_k 1_S$

$[H_0, \vec{L}] = 0$, $[H_0, \vec{S}] = 0$ はOK. 一方

$$[f(r)\vec{L}\cdot\vec{S}, \vec{L}] = f(r)[\vec{L}\cdot\vec{S}, \vec{L}] = +i\hbar f(r)\vec{L}\times\vec{S} \neq \vec{0}$$

$$[f(r)\vec{L}\cdot\vec{S}, \vec{S}] = f(r)[\vec{L}\cdot\vec{S}, \vec{S}] = -i\hbar f(r)\vec{L}\times\vec{S} \quad 〃$$

$$\therefore\ [f(r)\vec{L}\cdot\vec{S}, \vec{L}+\vec{S}] = 0 \Rightarrow [H, \vec{L}+\vec{S}] = 0$$

$$\left([\quad 〃 \quad, \vec{L} \text{ or } \vec{S}] \neq 0 \Rightarrow [H, \vec{L} \text{ or } \vec{S}] \neq 0\right) \quad ▨$$

宿題2 これを示せ
(テンソル積⊗を書いて正確に計算
1つの成分だけでよい)

⑫に対する Sch. eq. (位置・スピン表示)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi(\vec{r},+)\\ \psi(\vec{r},-)\end{pmatrix} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_c(r)\right)\begin{pmatrix}\psi(\vec{r},+)\\ \psi(\vec{r},-)\end{pmatrix}$$

$$+\frac{\hbar}{2}f(r)\left[\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}L_x + \begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}L_y + \begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}L_z\right]\begin{pmatrix}\psi(\vec{r},+)\\ \psi(\vec{r},-)\end{pmatrix}$$

⇝ 微細構造分裂を説明: $l \neq 0$ エネルギー準位の分裂

4.8 水素原子のSO(4)対称性

Pauliによる解法(1926年) (詳しくはレポート)

4.4節の議論に戻る$(E<0)$:

$$\hat H = \frac{1}{2m}\hat{\vec p}^{\,2} + V(r), \quad V(r) = -\frac{\kappa}{r} \quad \left(\kappa := \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)$$

以下のop.を導入:

$$\hat{\vec A} := \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec L}\times\hat{\vec p} - \hat{\vec p}\times\hat{\vec L}\right) + \kappa\frac{\hat{\vec r}}{r}$$

$\hat{\vec A}$は保存量$([\hat H,\hat A]=0)$であり、Runge-Lenz-Pauliベクトルという

$$\hat{\vec A}^{\,2} = \frac{2}{m}\left(\hat{\vec L}^{\,2}+\hbar^2\right)\hat H + \kappa^2 = \frac{2E}{m}\left(\hat{\vec L}^{\,2}+\hbar^2\right)+\kappa^2 \quad \cdots ⑬$$

<u>命題4.17</u> $\hat{\vec K} := \sqrt{\dfrac{m}{2|E|}}\,\hat{\vec A}$ とすると

↑固有状態に作用していると思い $\hat H\to E$ とした(以下同様)

以下の交換関係式が得られる:

$$[\hat L_j, \hat L_k] = i\hbar\,\epsilon_{jkl}\hat L_l, \quad [\hat K_j, \hat K_k] = i\,\epsilon_{jkl}\hat K_l$$

$$[\hat L_j, \hat K_k] = i\hbar\,\epsilon_{jkl}\hat K_l$$

(これはSO(4)のLie環の生成子をなす)

<u>命題4.18</u> $\hat{\vec S}^{\pm} := \frac{1}{2}(\hat{\vec L}\pm\hat{\vec K})$ とすると

$$[S^\pm_j, S^\pm_k] = i\hbar\,\epsilon_{jkl}S^\pm_l, \quad [S^+_j, S^-_k] = 0 \quad \leftarrow \left(\mathfrak{so}(4)\simeq \mathfrak{su}(2)\oplus\mathfrak{su}(2)\right)$$

—一般角運動量ops.!

$(\hat{\vec S}^{\pm})^2 = \frac{1}{4}\left(\hat{\vec L}^{\,2}+\hat{\vec K}^{\,2}\right)$ より、±どちらの場合も固有値は $s(s+1)\hbar^2$

$$s(s+1)\hbar^2 \overset{⑬}{=} \frac{1}{4}\left(-\hbar^2+\frac{m\kappa^2}{2|E|}\right) \qquad \therefore E = -\frac{m\kappa^2}{2\hbar^2 n^2} \quad \left(n:=2s+1,\ 2s\in\{0,1,2,\cdots\}\right)$$