201810862 髙梨宏介

スピンとパウリ行列

$j=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\cdots$ に対応する角運動量はスピンとよばれる内部座標に対応すると考えられる

特にここでは $j=s=\frac{1}{2}$ に限り議論する．

ここでは $\mathbb{J}=\mathbb{S}$ とかく

$$\mathbb{S}^2|S,m\rangle = S(S+1)|S,m\rangle\ ,\ S=\frac{1}{2}$$

$$S_z|S,\frac{1}{2}\rangle = +\hbar\frac{1}{2}|S,+\frac{1}{2}\rangle$$

$$S_z|S,-\frac{1}{2}\rangle = -\hbar\frac{1}{2}|S,-\frac{1}{2}\rangle$$

ここで $\mathbb{S}=\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}$ $\begin{pmatrix}S_x\\S_y\\S_z\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\hat{\sigma}_x\\\hat{\sigma}_y\\\hat{\sigma}_z\end{pmatrix}$ とすれば

$|S,\pm S\rangle = |\pm\rangle$

$\langle+|\hat{\sigma}_z|+\rangle = 1$

$\langle-|\hat{\sigma}_z|-\rangle = -1$

$\psi=(|+\rangle,|-\rangle)$, $\psi^\dagger=\begin{pmatrix}\langle+|\\\langle-|\end{pmatrix}$ として

$$\psi^\dagger\hat{\sigma}_z\psi=\begin{pmatrix}\langle+|\hat{\sigma}_z|+\rangle & \langle+|\hat{\sigma}_z|-\rangle\\ \langle-|\hat{\sigma}_z|+\rangle & \langle-|\hat{\sigma}_z|-\rangle\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\equiv\sigma_z\ (\because\ \text{パウリ行列})$$

上昇，下降演算子の行列要素は

$$\langle S,+\tfrac{1}{2}|S_+|S,-\tfrac{1}{2}\rangle=\hbar\sqrt{(\tfrac{1}{2}+\tfrac{1}{2})(\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}+1)}=\hbar$$

$$\langle S,-\tfrac{1}{2}|S_-|S,+\tfrac{1}{2}\rangle=\hbar\sqrt{(\tfrac{1}{2}+\tfrac{1}{2})(\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}+1)}=\hbar$$

$$\left(\begin{array}{ll}\because\langle j\,m+1|J_+|j\,m\rangle=\hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\ , & m=-\tfrac{1}{2}\ ,\ j=\tfrac{1}{2}\\ \quad\langle j\,m-1|J_-|j\,m\rangle=\hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\ , & m=\tfrac{1}{2}\ ,\ j=\tfrac{1}{2}\end{array}\right)$$

$\hat{\sigma}_\pm=\hat{\sigma}_x\pm i\hat{\sigma}_y$ として

$$\langle-|\hat{\sigma}_-|+\rangle=2\qquad\langle+|\hat{\sigma}_+|+\rangle=\langle-|\hat{\sigma}_+|-\rangle=0$$

$$\langle+|\hat{\sigma}_+|-\rangle=2\qquad\langle+|\hat{\sigma}_-|+\rangle=\langle-|\hat{\sigma}_-|-\rangle=0$$

$$\psi^\dagger\hat{\sigma}_x\psi=\frac{1}{2}(\psi^\dagger\hat{\sigma}_+\psi+\psi^\dagger\hat{\sigma}_-\psi)=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\equiv\sigma_x$$

$$\psi^\dagger\hat{\sigma}_y\psi=\frac{1}{2i}(\psi^\dagger\hat{\sigma}_+\psi-\psi^\dagger\hat{\sigma}_-\psi)=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\equiv\sigma_y$$

パウリ行列

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

パウリ行列の性質

$$\mathrm{Tr}\,\sigma_i = 0$$

$$\sigma_i \sigma_j = \begin{cases} \sigma_0 & i = j \\ i\,\varepsilon_{ijk}\,\sigma_k & i \neq j \end{cases} \qquad \sigma_0 \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_i^2 = \sigma_0$$

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = \begin{cases} 2\,\delta_{ij}\,\sigma_0 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

一般に 2×2 行列 A は次のように展開できる

$$A = \sum_{i=0}^{3} A_i \sigma_i \qquad A_i = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\,A\,\sigma_i$$

$$(A_0\sigma_0 + A_1\sigma_x + A_2\sigma_y + A_3\sigma_z)$$

$$\left(\begin{array}{l} \because\ \mathrm{Tr}\,A\,\sigma_j = \mathrm{Tr}\sum_{j=1}^{3} A_i\sigma_i\sigma_j = \mathrm{Tr}\,A_j\sigma_j^2 = 2A_j \\ \quad \mathrm{Tr}\,A = \mathrm{Tr}\,A_0\sigma_0 = 2A_0 \end{array}\right)$$

2つの3次元ベクトル $\mathbf{u}, \mathbf{v}$ に対して

$$(\mathbf{u}\cdot\boldsymbol{\sigma})(\mathbf{v}\cdot\boldsymbol{\sigma}) = (\mathbf{u}\cdot\mathbf{v})\sigma_0 + i(\mathbf{u}\times\mathbf{v})\cdot\boldsymbol{\sigma}$$

$$\left(\begin{array}{ll} \because (\mathbf{u}\cdot\boldsymbol{\sigma})(\mathbf{v}\cdot\boldsymbol{\sigma}) & = u_i\sigma_i v_j\sigma_j = \left(\sum_{i=j} + \sum_{i\neq j}\right) u_i v_j \sigma_i \sigma_j \\ & = \sum_i u_i v_i \sigma_i^2 + \sum_{i\neq j} u_i v_j \sigma_i \sigma_j \\ & = (\mathbf{u}\cdot\mathbf{v})\sigma_0 + i\sum_{ijk} u_i v_j \varepsilon_{ijk}\sigma_k \end{array}\right)$$

スピン軌道関数

この内部自由度を考えると原子内の原子の波動関数は次のようにスピノルとよばれる2成分の量となる.

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi(\mathbf{r},+) \\ \psi(\mathbf{r},-) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} |\psi(+)\rangle \\ |\psi(-)\rangle \end{pmatrix}$$

ここで $\tau = (\mathbf{r}, \sigma)$, $\sigma = \pm$ とまとめてかいて

$$\psi(\tau) = \psi(\mathbf{r}, \sigma)$$

なおスピン軌道関数の内積は

$$\langle\psi|\phi\rangle = \sum_\sigma \int d\mathbf{r}\,\psi^*(\mathbf{r},\sigma)\,\phi(\mathbf{r},\sigma) = \sum_\sigma \langle\psi(\sigma)|\phi(\sigma)\rangle$$

規格直交化されたスピン軌道関数 $\psi_J(\tau)$ は

$$\langle\psi_J|\psi_{J'}\rangle = \sum_\sigma \int d\mathbf{r}\,\psi_J^*(\mathbf{r},\sigma)\,\psi_{J'}(\mathbf{r},\sigma) = \delta_{JJ'}$$

$$\sum_J \psi_J(\tau)\,\psi_J^*(\tau') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\,\delta_{\sigma\sigma'}, \quad \tau = (\mathbf{r},\sigma), \quad \tau' = (\mathbf{r}',\sigma')$$

pdf de note | 8.0mm solid Grid, Mono

ゼーマン項がある場合

スピンに依存しない部分のハミルトニアンを $H_0(\mathbb{r})$ としてスピン軌道関数 $|\psi\rangle$ に関する Schrödinger eq. は次のようになる

$$H(\mathbb{r})|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad H(\mathbb{r}) = H_0(\mathbb{r}) - \mu_s \cdot \mathbb{B}$$
$$= H_0(\mathbb{r}) - (g\mu_B/\hbar)\mathbb{B} \cdot \mathbb{S}$$

この場合波動関数を次のような変数分離形に仮定

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi(\mathbb{r},+) \\ \psi(\mathbb{r},-) \end{pmatrix} = \psi(\mathbb{r})|\chi\rangle = \psi(\mathbb{r})\begin{pmatrix} \chi(+) \\ \chi(-) \end{pmatrix}$$

$|\chi\rangle$ を $\mathbb{S} \cdot \mathbb{B}$ の次のような固有状態にとる

$$\mathbb{B} \cdot \mathbb{S}|\chi_\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\mathbb{B}||\chi_\pm\rangle, \quad |\chi_\pm\rangle = \begin{pmatrix} \chi_\pm(+) \\ \chi_\pm(-) \end{pmatrix}$$

以前の計算から $\mu_s \cdot \mathbb{B}|\chi_\pm\rangle = \pm|\chi_\pm\rangle\frac{g\mu_B}{2}$

よって計算部分を $H_0\psi_j(\mathbb{r}) = E_j\psi_j(\mathbb{r})$ の固有状態にとれば

$$H(\mathbb{r})|\psi_{j,\pm}\rangle = E_{j,\pm}|\psi_{j,\pm}\rangle, \quad |\psi_{j,\pm}\rangle = \begin{pmatrix} \psi_j(\mathbb{r})\chi_\pm(+) \\ \psi_j(\mathbb{r})\chi_\pm(-) \end{pmatrix}$$
$$E_{j\pm} = E_j \pm g\mu_B/2$$

スピン軌道相互作用がある場合

スピン軌道相互作用に非相対論的極限をとることでスピン磁気モーメントが得られ、重い原子において重要な役割を果たす

$$H_{so} = f(r)\mathbb{S} \cdot \mathbb{L} \qquad f: 実$$

中心力ポテンシャル $V(r)$ 中

$$f(r) = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\partial V}{\partial r}$$