量子力学3　　2011108433 大山侑太　　NO.　DATE May. 21th. 2013

Spin
原子のエネルギー準位を説明するために必要な内部自由度

$\vec{S}^2 = \hbar^2 S(S+1)$ 、$S = 1/2$

$H(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$

$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = H\Psi$

$\Psi(r,t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(r)$

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

2成分の波動関数
スピン軌道関数

$(\vec{r},\sigma) \equiv \tau$, $\psi(\vec{r}) \to \psi(\tau)$

$\sigma = +,-$ (内部自由度)

Spinによる寄与
Zeeman項

$H_p = -\frac{e}{2m}\vec{B}\cdot\vec{L}$ ← 軌道角運動量$\vec{L}$からの寄与

$\to H_p' = -\frac{e}{2m}\vec{B}\cdot(\vec{L}+g\vec{S})$, $g = 2$.

$= H_p - \frac{e}{2m}g\vec{B}\cdot\vec{S}$

$\triangleq H_S = -\underbrace{\frac{e\hbar}{2m}g\vec{S}/\hbar}_{=\vec{\mu}}\cdot\vec{B}$

μ_B (Bohr磁子)

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

電子の磁気モーメント $\vec{\mu} = \mu_B g\vec{S}/\hbar$

NO.

DATE

磁場下のシュレディンガー方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) - \underbrace{\frac{e}{2m}\vec{B}\cdot(\vec{L}+g\vec{S})}\right]|\psi(\vec{r})\rangle = E|\psi(\vec{r})\rangle$$

$$\underline{=} -\frac{e}{2m}\vec{B}\cdot\left(\frac{\hbar}{i}(\vec{r}\times\vec{\nabla})+g\vec{S}\right)$$

$$\vec{B}\cdot\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{B}\cdot\vec{\sigma}$$

$$= \frac{\hbar}{2}(B_x\sigma_x + B_y\sigma_y + B_z\sigma_z)$$

$$= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix}$$

$\vec{B}$ の場合

$|\psi(\vec{r})\rangle = \psi(\vec{r})|\chi\rangle$ と変数分離型にとれる

$$\vec{B}\cdot\vec{S}|\chi_\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\vec{B}||\chi_\pm\rangle$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) - \frac{e}{2m}\vec{B}\cdot\vec{L}\right)\psi_E(\vec{r}) = E\psi_E(\vec{r})$$

となる $\psi_E(\vec{r})$ を求めると。

$$H|\psi\rangle = \left(E \pm \frac{\hbar}{2}\mu_B g|\vec{B}|\right)|\psi\rangle$$

もし $\vec{L}|\psi\rangle = 0$ ($l=0$: S軌道)

$\Rightarrow \vec{B}$ の寄与はスピンのみ

S軌道のエネルギー準位は磁場で2つに分裂する。

$\vec{B}\cdot\vec{S}$ の寄与は Dirac によると E/mc^2 の最低次の近似

$\vec{B} = 0 \Rightarrow$ 分裂しない
2重に縮退

次の次数 $(E/mc^2)^2$ の寄与

$$H_{LS} = f(r)\,\vec{L}\cdot\vec{S}$$

スピン軌道相互作用
↑ 重い原子、原子番号㊧で重要
スピントロニクス
中心力㊨ ⇒ ㊧ トポロジカル相

NO.

DATE . .

$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

$H = H_0 + H_S$

↑ スピンに無関係　↑ $\vec{r}$に依存しない

$|\psi\rangle = \phi(\vec{r})|\chi\rangle$ ：変数分離型

$$H_{LS} = f\vec{L}\cdot\vec{S}$$
$$= f\frac{\hbar}{i}(\vec{r}\times\vec{\nabla})\cdot\vec{S}$$
$$= \frac{f\hbar^2}{2i}\vec{\sigma}(\vec{r}\times\vec{\nabla})$$
$$= \frac{f\hbar^2}{2i}\begin{pmatrix} (\vec{r}\times\vec{\nabla})_k & (\vec{r}\times\vec{\nabla})_x - i(\vec{r}\times\vec{\nabla})_y \\ (\vec{r}\times\vec{\nabla})_x + i(\vec{r}\times\vec{\nabla})_y & -(\vec{r}\times\vec{\nabla})_z \end{pmatrix}$$

$\vec{B}=0$, $H_{LS}=0$ ⇒ 2重縮退

$H_{LS}\neq 0$ ⇒ 2重縮退のまま：クラマース縮退

NO.

DATE

時間反転対称性

対称性 ⇔ 対称操作 ～ユニタリ変換で与えられる。

Spinなしのとき

$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = H\Psi \rightarrow \Psi = e^{-iEt/\hbar}\psi(r)$

$H\psi(r) = E\psi(r)$ ↓

$\Psi^* = e^{+iEt/\hbar}\psi^*(r)$

スピンない時間反転操作 Θ : 複素共役 K

$\Psi \longmapsto \Psi^* = K\Psi$

$K^2 = 1,\ K^{-1} = K$

$\Theta : r \longmapsto KrK = r^t = r$

$\Theta : p \longmapsto KpK = p^* = (-i\hbar\nabla)^* = i\hbar\nabla = -p$

$\Theta : L \longmapsto KLK = (r\times p)^* = r\times(-p) = -L$

→ 時間反転で角運動量は符号を変える。

スピン？

$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\sigma_x\\ \sigma_y\\ \sigma_z\end{pmatrix}$ $\quad \sigma_x = \begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\ \sigma^* = \sigma_x$

$\Theta = K$ ではx

スピンありのとき

$\Theta = i\sigma_z K$ とする.

$= i\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}K$

$= \begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}K$

$\Theta = UK$
U : ユニタリ
K : 複素共役
→ 反ユニタリ演算子

$\Theta : S_x \longmapsto S_x' = \Theta S_x \Theta^{-1}$

$= (i\sigma_2)\frac{\hbar}{2}\sigma_1(-i\sigma_2)$

$= \frac{\hbar}{2}\sigma_2\underbrace{\sigma_1\sigma_2}_{=i\sigma_3}$

$= -\frac{\hbar}{2}\sigma_1$

$= -S_x$

$\Theta = i\sigma_2 K = K i\sigma_2$

$\Theta^{-1} = -i\sigma_2 K$

☺ $\Theta\Theta^{-1} = -i\sigma_2 K\, K i\sigma_2$

$= \sigma_2^2$

$= 1$

NO

DATE . .

$\Theta : S_y \longmapsto S_y' = \frac{\hbar}{2}(i\sigma_2)\sigma_2(-i\sigma_2)$

$= -\frac{\hbar}{2}\sigma_2^3$

$= -\frac{\hbar}{2}\sigma_2$

$= -S_y$

$\Theta : S_z \longmapsto S_z' = \frac{\hbar}{2}(i\sigma_2)\sigma_3(-i\sigma_2)$

$= \frac{\hbar}{2}\sigma_2\sigma_3\sigma_2$

$= \frac{\hbar}{2}\epsilon\sigma_1\sigma_2$

$= -\frac{\hbar}{2}\sigma_3$

$= -S_z$

$\therefore \Theta = i\sigma_2 K$ とおき

$$\begin{cases} \Theta\vec{S}\Theta^{-1} = -\vec{S} \\ \Theta\vec{P}\Theta^{-1} = -\vec{P} \\ \Theta\vec{L}\Theta^{-1} = -\vec{L} \end{cases}$$

$\Theta LS\Theta^{-1} = \Theta L\Theta^{-1}\Theta S\Theta^{-1}$

$= -L\cdot(-S)$

$= LS$

H_{LS}：時間反転で不変

$H = H_0 + H_{LS}$

$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(r) \rightarrow \Theta H_0\Theta^{-1} = H_0$

$\therefore \Theta H\Theta^{-1} = H$ ：ハミルトニアンは時間反転で不変

$\Theta H = H\Theta \rightarrow [H, \Theta] = 0$

NO.

DATE

固有状態? $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

$\Theta H|\psi\rangle = H\Theta|\psi\rangle = E\Theta|\psi\rangle$

$|\psi^\Theta\rangle \equiv \Theta|\psi\rangle$

$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \rightarrow H|\psi^\Theta\rangle = E|\psi^\Theta\rangle$

→ 2重に縮退している…?

$|\psi\rangle$ と $|\psi^\Theta\rangle$ は同じ状態かもしれない。

奇の場合

$\langle\psi|\psi^\Theta\rangle = 0$ → 同じではない

(同じ状態なら $\langle\psi|\psi^\Theta\rangle = \||\psi\rangle\|^2 \neq 0$)

2重に縮退 → クラマース縮退

(ii) $\Theta = i\sigma_2 K$

$|\psi\rangle = \begin{pmatrix}\psi_+\\ \psi_-\end{pmatrix}$ $\psi_+ = \begin{pmatrix}\psi_{+\uparrow}\\ \vdots\end{pmatrix}$, $\psi_- = \begin{pmatrix}\psi_{-\uparrow}\\ \vdots\end{pmatrix}$

$|\psi^\Theta\rangle = i\sigma_2 K\begin{pmatrix}\psi_+\\ \psi_-\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_+^*\\ \psi_-^*\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\psi_-^*\\ -\psi_+^*\end{pmatrix}$

$\langle\psi|\psi^\Theta\rangle = (\psi_+^*)_i|\psi_+^\Theta)_i + (\psi_-^*)_i(\psi_-^\Theta)_i$

$= |\psi_+^*)_i(\psi_-^*)_i - (\psi_-^*)_i(\psi_+^*)_i$

$= 0$

$\Theta^2 = (i\sigma_2 K)^2 = -(\sigma_2)^2 = -1$

一般に反エルミートな Θ に対して $\langle\Theta\phi|\Theta\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle$

$\langle\psi|\psi^\Theta\rangle = \langle\psi|\Theta\psi\rangle$

$= \langle\Theta\cdot\Theta\psi|\Theta\psi\rangle$

$= \langle\Theta^2\psi|\Theta\psi\rangle$

$= -\langle\psi|\Theta\psi\rangle$

$= -\langle\psi|\psi^\Theta\rangle$

N粒子 → $\Theta = (i\sigma_2)_1(i\sigma_2)_2\cdots(i\sigma_2)_N$

$\Theta^2 = (-1)^N = \begin{cases}+1\\ -1\end{cases}$

クラマース縮退は N = 奇のみ