20111 0878　　平尾 高麿

Spin … 原子のエネルギー準位を説明する為に必要な内部自由度

∘ $\vec{S}^2 = \hbar^2 S(S+1)$, $S = \frac{1}{2}$

Schrodinger eq より、 $H(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$

$\left(\because\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = H\Psi \Rightarrow \Psi(t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(\vec{r})\right)$

これを解くと解が得られる。

Spin を考慮すると、 $\psi(\vec{r}) \rightarrow |\psi(r)\rangle = \begin{pmatrix}\psi(r,+)\\ \psi(r,-)\end{pmatrix}$

1成分 → 2成分 の波動関数

スピン軌道関数

∘ $(\vec{r},\sigma) \equiv \tau$ とすると、 $\psi(\vec{r}) = \psi(\tau)$

($\sigma = +$ or $-$: 内部自由度)

◎ Spin による寄与

Zeeman 項　$H_p = -\frac{e}{2m}\vec{B}\cdot\vec{L}$: 角運動量 $\vec{L}$ からの寄与

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

$\therefore H_p' = H_p - \frac{e}{2m}g\vec{B}\cdot\vec{S}$ $(= H_p + H_s)$

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

$\equiv \mu_B$: Bohr 磁子

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

$H = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) - \frac{e}{2m}\vec{B}\cdot(\vec{L}+\vec{S})\right]$ とするとき、

磁場のSchrödinger方程式は、

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

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

○ $\vec{B}\cdot\vec{S} = \frac{1}{2}\vec{B}\cdot\vec{\sigma} = \frac{\hbar}{2}(B_x\sigma_x + B_y\sigma_y + B_z\sigma_z)$

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

特に、今の場合は $|\psi(r)\rangle = \psi(r)|\chi\rangle$ と変数分離型にとれる。

つまり、$\vec{B}\cdot\vec{S}|\chi_\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\vec{B}||\chi_\pm\rangle$ である。

よって、$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) - \frac{e}{2m}\vec{B}\cdot\vec{L}\right)\psi_E(r) = E'\psi_E(r)$ となる ψ_E を求めると、

$$H|\psi\rangle = \left(E' \pm \frac{\hbar}{2}\mu_0 g|B|\right)|\psi\rangle$$ である。

○ もし、$\vec{L}\psi = 0$, $l = 0$ (s軌道) ならば、

B の寄与はスピンのみである。

○ 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：Diracによると、$\frac{E}{mc^2}$ の最低次の近似である。

$\vec{B} = 0 \Rightarrow 0$ ：分裂しない (2重に縮退している)

○ 次の次数 $\left(\frac{E}{mc}\right)^2$ の寄与

$H_{LS} = f(\vec{r})\,\vec{L}\cdot\vec{S}$ ：<u>スピン軌道相互作用</u>

($\vec{B} = 0$ でも存在する)

$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ ：磁場のSchrödinger方程式

$$H = \underbrace{H_0}_{\text{スピンに無関係}} + \underbrace{H_\sigma}_{\vec{r}\text{に依存しない}}$$

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

$$H_{LS} = f\,\vec{L}\cdot\vec{s} = f\,\frac{\hbar}{2}(\vec{r}\times\vec{p})\cdot\vec{\sigma}$$

$$= \frac{f\hbar}{2}\,\vec{\sigma}\cdot(\vec{r}\times\vec{p})$$

$$= \frac{f\hbar}{2}\begin{pmatrix} (\vec{r}\times\vec{p})_z & (\vec{r}\times\vec{p})_x - i(\vec{r}\times\vec{p})_y \\ (\vec{r}\times\vec{p})_x + i(\vec{r}\times\vec{p})_y & -(\vec{r}\times\vec{p})_z \end{pmatrix}$$

○ $\vec{B} = 0$, $H_{LS} = 0 \Rightarrow$ 2重に縮退

しかし、$H_{LS} \neq 0 \Rightarrow$ 2重縮退のまま（クラマース縮退）

時間反転対称性

○ 対称性 $\longrightarrow$ 対称操作 ～ ユニタリ変換で与えられる。

スピンなしの時

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = H\Psi \xrightarrow[\text{変数分離}]{H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})} \Psi(\vec{r}) = e^{-iEt/\hbar}\psi(\vec{r})$$

$$\xrightarrow{\text{時間反転}} \Psi^*(\vec{r}) = e^{iEt/\hbar}\psi^*(\vec{r})$$

$\Rightarrow$ 時間反転操作：複素共役 K （スピンなし）

$$\Psi = \Psi = K\Psi \qquad (K^2 = 1,\ K^{-1} = K)$$

$\Theta : \vec{r} \longmapsto K\vec{r}K = \vec{r}^* = \underline{\vec{r}}$ //

$\Theta : \vec{p} \longmapsto K\vec{p}K = \vec{p}^* = (-i\hbar\vec{\nabla})^* = i\hbar\vec{\nabla} = \underline{-\vec{p}}$ //

$\therefore \Theta : \vec{L} \longmapsto (\vec{r}\times\vec{p})^* = \vec{r}\times(-\vec{p}) = \underline{-\vec{L}}$ //

時間反転操作で角運動量は符号を変える。

○ スピンがある時

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

$\rightarrow \Theta = K$ では駄目

$\Rightarrow \Theta = i\sigma_2 K$ とすると良い。 $(\sigma_2 = \sigma_y)$

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

$\Theta = UK$ 　 U : ユニタリ行列, K : 複素共役

$\Rightarrow$ 反ユニタリ変換 (Anti-unitary)

(○ $\Theta = \underbrace{i\sigma_2}_{\text{実数行列}} K = K i\sigma_2$

○ $\Theta^{-1} = -i\sigma_2 K$ 　 $(\because \Theta\Theta^{-1} = i\sigma_2(-i\sigma_2)\underbrace{K^2}_{1} = \sigma_2^2 = 1)$)

○ $\Theta : S_x \longmapsto S_x' = \Theta S_x \Theta^{-1} = (i\sigma_2)\frac{\hbar}{2}\sigma_x^*(-i\sigma_2) = \frac{\hbar}{2}\sigma_2\sigma_1\sigma_2 \rightarrow$

$\rightarrow = \frac{\hbar}{2}\sigma_2 i\sigma_3 = \frac{\hbar}{2} i\cdot i\sigma_1 = -\frac{\hbar}{2}\sigma_1 = \underline{-S_x}$ //

○ $\Theta : S_y \longmapsto S_y' = \frac{\hbar}{2}(i\sigma_2)\underbrace{\sigma_2^*}_{-\sigma_2}(-i\sigma_2) = -\frac{\hbar}{2}\sigma_2^3 = -\frac{\hbar}{2}\sigma_2 = \underline{-S_y}$ //

○ $\Theta : S_z \longmapsto S_z' = \frac{\hbar}{2}(i\sigma_2)\underbrace{\sigma_3^*}_{\sigma_3}(-i\sigma_2) = \frac{\hbar}{2}\underbrace{\sigma_2\underbrace{\sigma_3\sigma_2}_{i\sigma_1}}_{i\sigma_3} = \frac{\hbar}{2}i^2\sigma_3 = -\frac{\hbar}{2}\sigma_3 = \underline{-S_z}$ //

∘ $\Theta = i\sigma_y K$ とすると、

・$\Theta \vec{S} \Theta^{-1} = -\vec{S}$, $\Theta \vec{p} \Theta^{-1} = -\vec{p}$, $\Theta \vec{L} \Theta^{-1} = -\vec{L}$

$$\therefore \Theta \vec{L}\cdot\vec{S}\Theta^{-1} = \underbrace{\Theta L \Theta^{-1}}_{=-\vec{L}} \cdot \underbrace{\Theta \vec{S} \Theta^{-1}}_{=-\vec{S}} = \vec{L}\cdot\vec{S}$$

$\Rightarrow$ H_{LS} : 時間反転で不変

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

$\Rightarrow$ H も時間反転不変

・$\Theta H \Theta^{-1} = H$

右から Θ を掛けて、

$\Theta H = H \Theta$ $\Rightarrow$ $[H, \Theta] = 0$ $\rightarrow$ 同時固有状態を作る…?

∘ Schrödinger eq より、 $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

左から Θ を掛ける $\underbrace{\Theta H|\psi\rangle}_{=H\Theta|\psi\rangle} = E\Theta|\psi\rangle$

$|\psi^\Theta\rangle \equiv \Theta|\psi\rangle$ とすると、

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

$\therefore$ $|\psi\rangle$ と $|\psi^\Theta\rangle$ は同じエネルギー

$\Rightarrow$ 2重に縮退している…?（もしかして、$|\psi\rangle$ と $|\psi^\Theta\rangle$ は同じ状態かもしれない）

今の場合、$\langle\psi|\psi^\theta\rangle = 0$ ：直交する。

$\Longrightarrow$ 同じではない（同じ状態ならば $\langle\psi|\psi^\theta\rangle = \||\psi\rangle\|^2 \neq 0$）

$\longrightarrow$ 2重に縮退 ：Kramors 縮退

（証明）$\Theta = i\sigma_y \mathcal{K} = U\mathcal{K}$ （U : unitary）

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

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

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

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

$$= 0$$

$$\Theta^2 = (i\sigma_y)^2\mathcal{K}^2 = -(\sigma_y)^2\cdot 1 = -\hat{1}$$

一般に反ユニタリ行列な Θ に対して、

$$\langle\Theta\Psi|\Theta\Phi\rangle = \langle\Phi|\Psi\rangle$$

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

$$= \langle\underbrace{\Theta^2}_{-1}\psi|\Theta\psi\rangle$$

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

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