

スピン、角運動量合成とその応用

1. スピン自由度とその役割と応用
2. 磁気の起源としてのスピン自由度
3. スピン演算子とその固有ベクトル、固有値.
4. 一般化角運動量と角運動量の合成
5. スピン・軌道相互作用とその効果

参考文献

Made by R.Okamoto (Kyushu Institute of Technology)
Filename=spin-angl-mom-coupling-summary110713.ppt

1. スピン自由度とその役割と応用

原子からのスペクトルの二重線 (doublet) の観測

1925年、ハウシュミット (Goudsmit) とウーレンベック (Uhlenbeck)

スピン自由度の導入

「電子は、その空間座標や運動量など (**外部自由度**) では表現できない、新しい自由度 (**内部自由度**) とそれに付随する角運動量を持っている」。

1932年、ディラック (Dirac) の相対論的電子論 (= 量子力学と特殊相対論の結合)

スピン自由度の起源は相対論にあること。

「マイナス・エネルギーをもつ電子の海」としての「真空」という解釈。

電子の反粒子としての陽電子 (ポジトロン、positron) の予言。

物質構成粒子としてのフェルミ型粒子 (フェルミオン、fermion) と相互作用媒介粒子としてのボース型粒子 (ボソン、boson)、それらを区別する半整数スピン値と整数スピン値

物質の磁性の原因としての電子のスピン自由度

測定技術への応用: 電子スピン共鳴 (ESR, electron-spin resonance)

化学反応へのスピンの影響も研究されつつある! (参考文献参照)

スピン = 自転??

2. 磁氣的性質を担う電子のスピン

電磁気学によると定常的な運動をする電子が角運動量 L (エル)をもつと、磁気モーメントが伴う。

$$\mathbf{L} \equiv \mathbf{r} \times (m\mathbf{v}) \rightarrow \boldsymbol{\mu}_\ell = -\frac{e}{2m} \mathbf{L}$$

量子力学: 角運動量はプランク定数の整数倍のみが許される

(電子の) 磁気モーメントの単位 = ボーア磁子 (Bohr's magneton)

$$\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m} \rightarrow \hat{\boldsymbol{\mu}}_\ell = -\mu_B \hat{\mathbf{L}} \longrightarrow \text{多くの電子の軌道運動の
効果の相殺}$$

電子のスピン自由度に伴う磁気モーメント

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_s \equiv -g_e \mu_B \hat{\mathbf{S}} \longleftarrow \text{重要!!}$$

外部磁場の中の電子(の磁気モーメント) → 相互作用

→ 軌道・スピン結合力 → 原子からの光スペクトルの分岐 → スペクトルの微細構造

電子の g 因子と異常磁気モーメント

$g_e=2.0023$:

(1) g_e の値が1からずれることは古典物理では理解できない謎であったが、1928年、ディラックの相対論的電子論において理解された。

→ 中山正敏「物質中の量子力学」(岩波書店)、1996年。特に、5章。

(2) g_e の値が2からずれることは異常磁気モーメントとして謎であったが、1940年代、シュウィンガー、朝永振一郎、ファインマンによる量子電磁力学により定量的に解明され、実験値と計算値の定量的な一致が継続して確認されている！（人類の最高の理論のひとつ）

→ R.P.ファインマン「光と物質のふしぎな理論—私の量子電磁力学」、岩波書店。1987年。特に1, 3章。

3. スピン演算子の固有値と固有関数(固有状態)

$$\hat{\mathbf{S}} \equiv (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z),$$

$$\hat{\mathbf{S}}^2 \equiv (\hat{S}_x)^2 + (\hat{S}_y)^2 + (\hat{S}_z)^2,$$

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z, [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x, [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y,$$

$$[\hat{S}_x, \hat{\mathbf{S}}^2] = [\hat{S}_y, \hat{\mathbf{S}}^2] = [\hat{S}_z, \hat{\mathbf{S}}^2] = 0.$$

スピン演算子のx、y、z成分はお互いに同時固有状態を持たないこと

スピン演算子の2乗とx、y、z成分のどれかひとつは

お互いに同時固有状態を持つこと

通常はスピン演算子の二乗とz成分の同時固有状態を考える

→ (量子化軸としてz軸に選ぶこと)

スピン演算子の昇降演算子を導入する

$$\hat{s}_{\pm} \equiv \hat{s}_x \pm i\hat{s}_y$$

$$\rightarrow \hat{s}_x = (\hat{s}_+ + \hat{s}_-)/2, \hat{s}_y = (\hat{s}_+ - \hat{s}_-)/2i.$$

$$\rightarrow \hat{S}^2 \equiv \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2$$

$$= \hat{s}_+ \hat{s}_- + \hat{s}_z^2 - \hbar \hat{s}_z$$

$$= \hat{s}_- \hat{s}_+ + \hat{s}_z^2 + \hbar \hat{s}_z.$$

スピン演算子の固有値と固有関数(固有状態)

$$\hat{\mathbf{s}}^2 |s m\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s m\rangle, \quad s = \frac{1}{2}$$

$$\langle sm' | \hat{s}_z |s m\rangle = \hbar m \delta_{mm'},$$

$$\hat{s}_z |s m\rangle = \hbar m |s m\rangle, \quad m = \pm \frac{1}{2}$$

$$\langle sm' | \hat{\mathbf{s}}^2 |s m\rangle = \hbar^2 \frac{1}{2} (\frac{1}{2} + 1) \delta_{mm'},$$

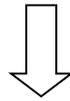
$$\hat{s}_{\pm} |s m\rangle = \hbar \sqrt{\frac{1}{2} (\frac{1}{2} + 1) - m(m \pm 1)} |\ell m \pm 1\rangle,$$

$$= \frac{3}{4} \hbar^2 \delta_{mm'}$$

$$\langle \frac{1}{2} m' | \frac{1}{2} m \rangle = \delta_{mm'}$$

$$\langle sm' | \hat{s}_{\pm} |s m\rangle = \hbar \sqrt{\frac{1}{2} (\frac{1}{2} + 1) - m(m \pm 1)} \delta_{m', m \pm 1}$$

スピン演算子の行列表現



$$\hat{s}_x \equiv \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_x, \quad \hat{s}_y \equiv \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_y, \quad \hat{s}_z \equiv \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z,$$

$$\hat{\sigma}_x \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y \equiv \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \text{パウリのスピン行列}$$

$$\rightarrow \hat{s}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix};$$

$$\rightarrow \hat{\mathbf{s}}^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

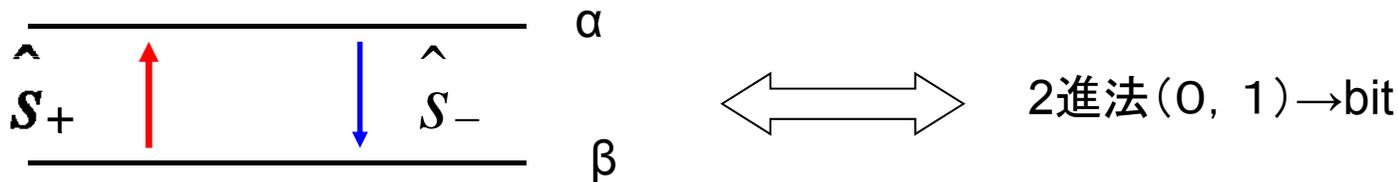
スピン演算子の固有状態とその意味

$$|s, m = +\frac{1}{2}\rangle \equiv |\alpha\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |s, m = -\frac{1}{2}\rangle \equiv |\beta\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\rightarrow \hat{s}_+ |\beta\rangle = \hbar |\alpha\rangle, \quad \hat{s}_+ |\alpha\rangle = 0,$$

$$\hat{s}_- |\alpha\rangle = \hbar |\beta\rangle, \quad \hat{s}_- |\beta\rangle = 0$$

スピン演算子の昇降演算子



おまけ: $|\alpha\rangle\langle\alpha| \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1, 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, |\beta\rangle\langle\beta| \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0, 1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

$\rightarrow |\alpha\rangle\langle\alpha| + |\beta\rangle\langle\beta| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$: 単位行列

これは一体何を意味するのだろうか? ⁸

4.一般化角運動量と角運動量の合成

軌道角運動量演算子の数学的性質は、その間の交換関係により決まる。

軌道角運動量演算子の交換関係を基礎にして、角運動量の概念を一般化できる。

一粒子のスピン軌道結合効果、多粒子系の全角運動量とそれに関連した物理的性質を定量的に議論するには

一般化角運動量を合成する必要がある。

4.1 一般の角運動量とその性質

$$\vec{\hat{j}} \equiv (\hat{j}_x, \hat{j}_y, \hat{j}_z),$$

$$[\hat{j}_x, \hat{j}_y] = i\hbar\hat{j}_z, \quad [\hat{j}_y, \hat{j}_z] = i\hbar\hat{j}_x, \quad [\hat{j}_z, \hat{j}_x] = i\hbar\hat{j}_y,$$

$$\vec{\hat{j}}^2 \equiv (\hat{j}_x)^2 + (\hat{j}_y)^2 + (\hat{j}_z)^2,$$

$$[\vec{\hat{j}}^2, \hat{j}_x] = [\vec{\hat{j}}^2, \hat{j}_y] = [\vec{\hat{j}}^2, \hat{j}_z] = 0,$$

$$\hat{j}_\pm \equiv \hat{j}_x \pm i\hat{j}_y \rightarrow \vec{\hat{j}}^2 = \hat{j}_+\hat{j}_- + (\hat{j}_z)^2 - \hbar\hat{j}_z$$

$$\rightarrow [\hat{j}_z, \hat{j}_\pm] = \pm\hbar\hat{j}_\pm, \quad [\hat{j}_+, \hat{j}_-] = 2\hbar\hat{j}_z$$

一般の角運動量演算子の固有値と固有関数(固有状態)

$$\vec{\hat{j}}^2 |jm\rangle = \hbar^2 j(j+1) |jm\rangle,$$

$$|\ell m\rangle \Leftrightarrow Y_{\ell m}(\theta, \phi): \text{球面調和関数}$$

$$\hat{j}_z |jm\rangle = \hbar m |jm\rangle,$$

$$\hat{j}_\pm |jm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)} |jm\pm 1\rangle,$$

$$\langle j'm' | jm\rangle = \delta_{jj'} \cdot \delta_{mm'}$$

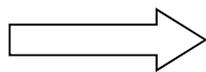
$$\langle \ell'm' | \ell m\rangle \Leftrightarrow \int_{\theta=0}^{\theta=\pi} \int_{\phi=0}^{\phi=2\pi} Y_{\ell'm'}^*(\theta, \phi) Y_{\ell m}(\theta, \phi) \sin\theta d\theta d\phi$$

$$j = 0, 1, 2, \dots (\text{or } 1/2, 3/2, \dots),$$

$$m = -j, -j+1, \dots, j-1, j \quad (j \text{ の各値につき})$$

一般の角運動量演算子の行列表現

$$\langle j'm' | \hat{j}_z | jm\rangle = \hbar m \delta_{jj'} \delta_{mm'},$$



$$\langle j'm' | \vec{\hat{j}}^2 | jm\rangle = \hbar^2 j(j+1) \delta_{jj'} \delta_{mm'},$$

$$\langle j'm' | \hat{j}_\pm | jm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)} \delta_{jj'} \delta_{m', m\pm 1}$$

4.2角運動量の合成(1);ベクトル模型

可換な角運動量演算子 $[\hat{J}_1, \hat{J}_2] = 0$ ($[\hat{j}_a, \hat{j}_b] = 0, \{a, b\} = x, y, z$)

角運動量の和の演算子

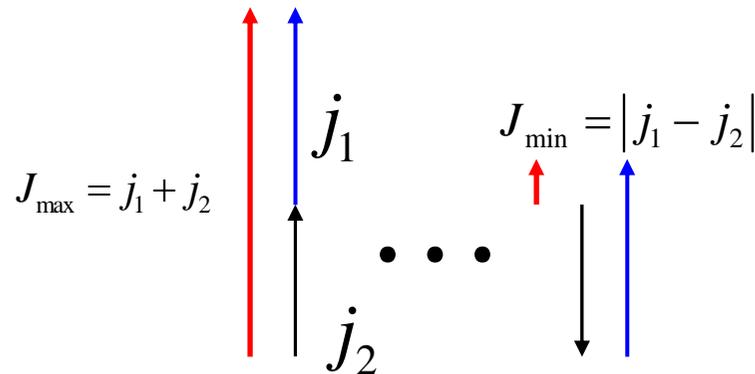
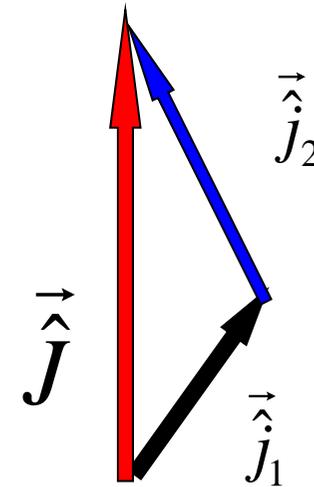
$$\vec{\hat{J}} \equiv \vec{\hat{j}}_1 + \vec{\hat{j}}_2 \Leftrightarrow \vec{\hat{J}} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z) = (\hat{j}_{1x} + \hat{j}_{2x}, \hat{j}_{1y} + \hat{j}_{2y}, \hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z})$$

$\vec{\hat{J}}^2 (\equiv \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2)$ の固有値 $\hbar^2 J(J+1)$

$$J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|$$

\hat{J}_z の固有値 $\hbar M$

$$M = -J, -J + 1, \dots, J - 1, J \quad (J \text{ の各値につき})$$



3.3角運動量の合成(2);Clebsch-Gordan係数

$\vec{\hat{j}}_1, \hat{j}_{1z}$ の同時固有関数(状態): $|j_1 m_1\rangle$

$\vec{\hat{j}}_2, \hat{j}_{2z}$ の同時固有関数(状態): $|j_2 m_2\rangle$

$\vec{\hat{j}}, \hat{j}_z$ の同時固有関数(状態): $|JM\rangle$

$$|JM\rangle = \sum_{m_1, m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$$

$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle$ Clebsch-Gordan係数

→ $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle^2$: 状態 $|JM\rangle$ の中の状態 $|j_1 m_1\rangle$ と $|j_2 m_2\rangle$ の相対的確率

クレブシュ・ゴルダン係数の性質

三角条件 $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle = 0$ for $m_1 + m_2 \neq M$,

$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle = 0$ for $j_1 + j_2 < J, |j_1 - j_2| > J$

直交規格性 $\sum_{m_1, m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | J' M' \rangle = \delta_{JJ'} \cdot \delta_{MM'}$,

$$\sum_J \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle \langle j_1 m_1' j_2 m_2' | JM \rangle = \delta_{m_1 m_1'} \cdot \delta_{m_2 m_2'}$$

対称性 $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM \rangle = (-1)^{j_1 + j_2 - J} \langle j_2 m_2 j_1 m_1 | JM \rangle$

$$= (-1)^{j_1 + j_2 - J} \langle j_1 -m_1 j_2 -m_2 | J - M \rangle$$

$$= (-1)^{j_1 - m_1} \sqrt{\frac{2J+1}{2j_1+1}} \langle j_1 m_1 J - M | j_2 -m_2 \rangle$$

$$= (-1)^{j_2 + m_2} \sqrt{\frac{2J+1}{2j_2+1}} \langle J - M j_2 m_2 | j_1 -m_1 \rangle$$

Clebsch-Gordan係数の具体例

2つのスピン角運動量 ($S=1/2$) の合成の場合

$$\langle 1/2 \ 1/2 \ 1/2 \ 1/2 | 1 \ 1 \rangle = 1,$$

$$\langle 1/2 \ -1/2 \ 1/2 \ -1/2 | 1 \ -1 \rangle = 1,$$

$$\langle 1/2 \ 1/2 \ 1/2 \ -1/2 | 0 \ 0 \rangle = 1/\sqrt{2},$$

$$\langle 1/2 \ -1/2 \ 1/2 \ 1/2 | 0 \ 0 \rangle = -1/\sqrt{2},$$

$$\langle 1/2 \ 1/2 \ 1/2 \ -1/2 | 1 \ 0 \rangle = 1/\sqrt{2},$$

$$\langle 1/2 \ -1/2 \ 1/2 \ 1/2 | 1 \ 0 \rangle = 1/\sqrt{2}$$

スピン角運動量 ($s=1/2$) と軌道角運動量 ℓ の合成

$$\langle \ell m_\ell, 1/2 \ 1/2 | \ell + 1/2, m \rangle = \sqrt{\frac{\ell + m + 1/2}{2\ell + 1}}, (m = m_\ell + 1/2),$$

$$\langle \ell m_\ell, 1/2 \ -1/2 | \ell + 1/2, m \rangle = \sqrt{\frac{\ell - m + 1/2}{2\ell + 1}}, (m = m_\ell - 1/2),$$

$$\langle \ell m_\ell, 1/2 \ 1/2 | \ell - 1/2, m \rangle = -\sqrt{\frac{\ell - m + 1/2}{2\ell + 1}}, (m = m_\ell + 1/2),$$

$$\langle \ell m_\ell, 1/2 \ 1/2 | \ell - 1/2, m \rangle = \sqrt{\frac{\ell + m + 1/2}{2\ell + 1}}, (m = m_\ell - 1/2)$$

5. スピン・軌道相互作用-その起源と実例-

電子に対する相対論的な効果により、
軌道角運動量とスピン角運動量の間には相互作用が働く

外部磁場の下でのゼーマン効果

→ 原子内の電子のエネルギー・スペクトルの微細構造

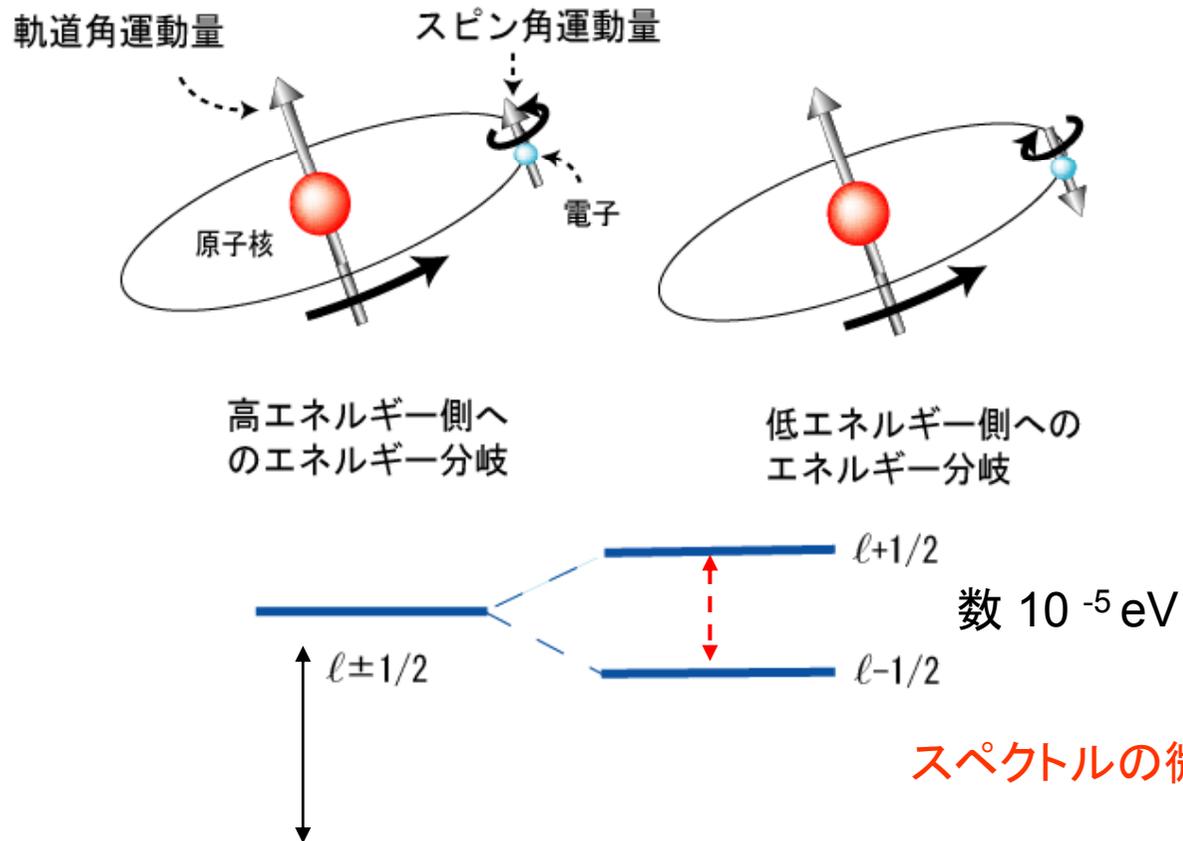
→ 半導体における価電子帯のエネルギー分岐

→ 2次元電子正孔系におけるスピン軌道結合効果

$$\hat{H}_{so} \equiv f(r) \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$$

$$f(r) \equiv \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr}$$

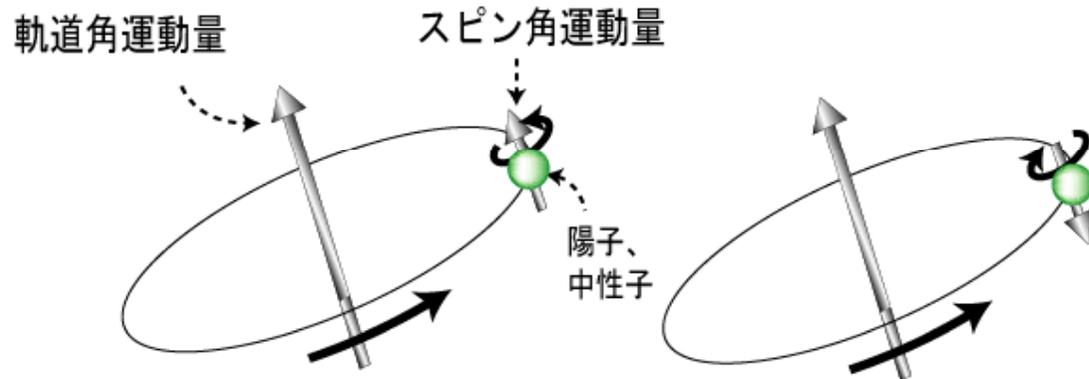
5.1 原子(の軌道電子)におけるスピン軌道結合効果



スペクトルの微細構造など

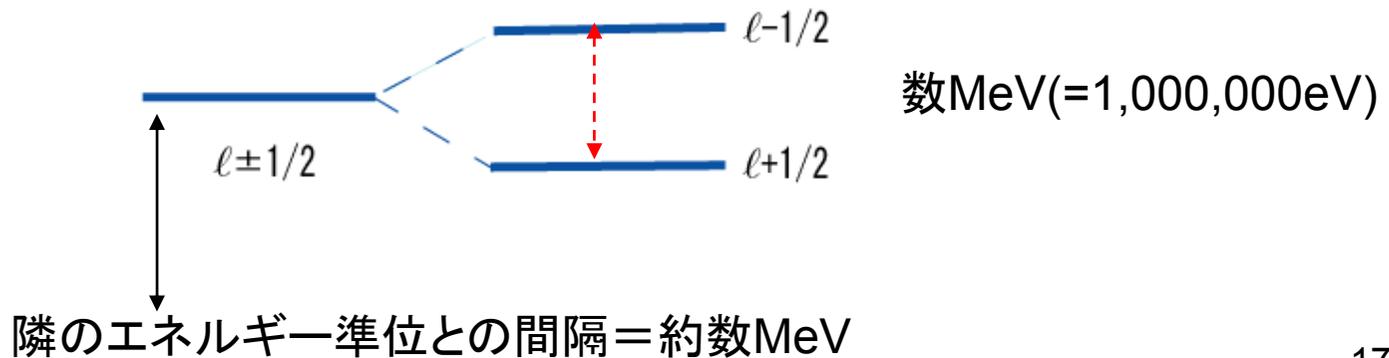
隣のエネルギー準位との間隔 = 約数eV

原子核の一粒子エネルギースペクトル におけるスピン軌道相互作用



低エネルギー側へのエネルギー分岐

高エネルギー側へのエネルギー分岐



5.2 スピン軌道相互作用と軌道角運動量の非保存、 全角運動量の保存

水素原子中の電子のように、球対称ポテンシャル $V(r)$ 内の質量 m の粒子のハミルトニアン(無摂動ハミルトニアン) H_0 は軌道角運動量の2乗演算子を用いて次のように表される。

$$\hat{H}_0 \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{\ell}^2}{r^2 \hbar^2} \right) + V(r).$$

軌道角運動量演算子は角度変数についての微分演算を含むので、 H_0 と軌道角運動量演算子は可換である。この場合、軌道角運動量は保存量となり、量子状態は角運動量を含む量子数の組で指定(識別)される。

$$[\hat{\ell}^2, \hat{\ell}_x] = [\hat{\ell}^2, \hat{\ell}_y] = [\hat{\ell}^2, \hat{\ell}_z] = 0 \rightarrow [\hat{H}_0, \hat{\ell}_x] = [\hat{H}_0, \hat{\ell}_y] = [\hat{H}_0, \hat{\ell}_z] = 0$$

$$\therefore [\hat{H}_0, \hat{\ell}] = 0 \quad (\rightarrow \text{意味、理由については付録1, 2参照})$$

なお、スピンは内部自由度であり、粒子の位置や運動量など外部自由度とは無関係であるので、 H_0 とスピン演算子も可換である。

$$[\hat{H}_0, \hat{s}_x] = 0, [\hat{H}_0, \hat{s}_y] = 0, [\hat{H}_0, \hat{s}_z] = 0 \rightarrow [\hat{H}_0, \hat{s}] = 0 \quad 18$$

スピン・軌道相互作用が働くと、スピン・軌道相互作用ハミルトニアン H_{so} と軌道角運動量とは交換せず、軌道角運動量は保存量ではなくなる。

$$\hat{H}_{so} \equiv f(r)\hat{\ell} \cdot \hat{s} = f(r)(\hat{\ell}_x \hat{s}_x + \hat{\ell}_y \hat{s}_y + \hat{\ell}_z \hat{s}_z),$$

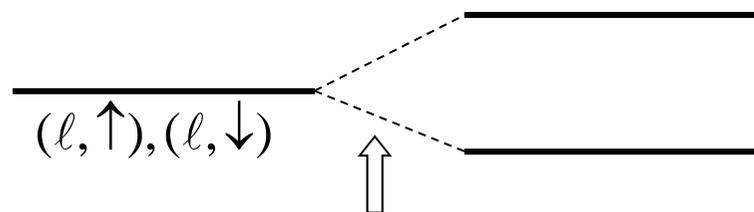
$$[\hat{H}_{so}, \hat{\ell}_x] \neq 0, [\hat{H}_{so}, \hat{\ell}_y] \neq 0, [\hat{H}_{so}, \hat{\ell}_z] \neq 0 \rightarrow [\hat{H}_{so}, \hat{\ell}] \neq 0$$

$$\therefore [\hat{H}_0 + \hat{H}_{so}, \hat{\ell}] \neq 0$$

同様に、スピン軌道相互作用ハミルトニアンとスピン角運動量演算子も非可換である。

$$[\hat{H}_{so}, \hat{s}_x] \neq 0, [\hat{H}_{so}, \hat{s}_y] \neq 0, [\hat{H}_{so}, \hat{s}_z] \neq 0 \rightarrow [\hat{H}_0, \hat{s}] \neq 0$$

実験的には、同じ軌道角運動量をもち、スピンの上向き、下向き状態が同じエネルギーで2重に縮退していた状態がスピン軌道相互作用により、縮退が解ける、すなわちエネルギー的に分岐することに対応する。



スピン軌道相互作用

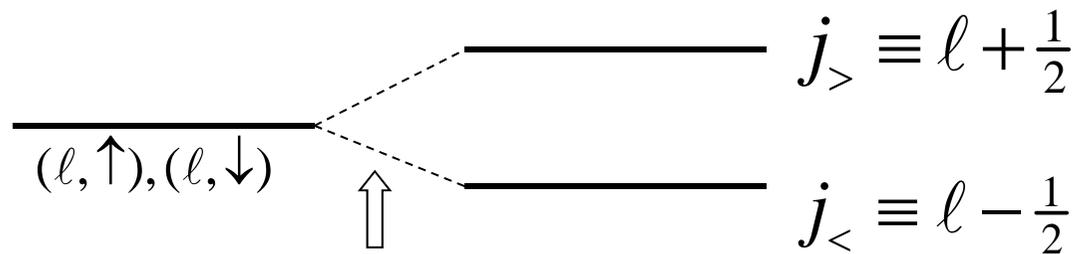
しかし、軌道角運動量演算子とスピン角運動量演算子の和である全角運動量演算子 \hat{J} はスピン軌道相互作用ハミルトニアンと可換である！ すなわち、スピン軌道相互作用が働く場合、全角運動量が保存量となり、量子状態は全角運動量の量子数で指定される。

$$[\hat{H}_{so}, \hat{l}_x] = -[\hat{H}_{so}, \hat{s}_x], [\hat{H}_{so}, \hat{l}_y] = -[\hat{H}_{so}, \hat{s}_y], [\hat{H}_{so}, \hat{l}_z] = -[\hat{H}_{so}, \hat{s}_z]$$

$$\rightarrow [\hat{H}_{so}, \hat{l} + \hat{s}] = 0$$

$$\therefore \hat{l} + \hat{s} \equiv \hat{j}, \quad [\hat{H}_0 + \hat{H}_{so}, \hat{j}] = 0$$

この性質は、2重に縮退していた状態がスピン軌道相互作用により、量子数 $j_> \equiv l + \frac{1}{2}, j_< \equiv l - \frac{1}{2}$ (単位: \hbar) を持つ状態に分岐することの根拠となる。

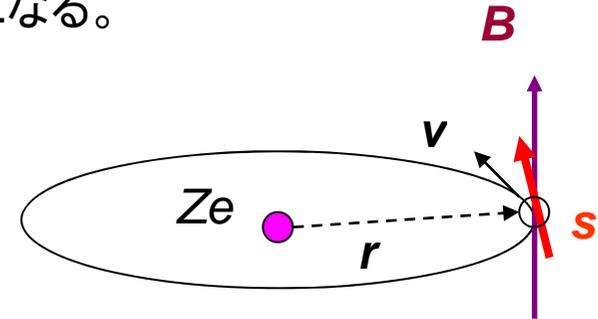


スピン軌道相互作用

4.3 スピン軌道相互作用項の導出

原子核の回りを速度 \mathbf{v} でまわる軌道電子とともに動く座標系からみると、原子核が速度 $(-\mathbf{v})$ で運動していることになり、原子番号 Z とすると、ビオ・サバル法則より原子核が電子の位置 r につくる磁束密度 \mathbf{B} は次のようになる。

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \left(\frac{\mu_0}{4\pi} \right) \frac{Ze(-\mathbf{v}) \times \mathbf{r}}{r^3} = \left(\frac{\mu_0}{4\pi} \right) \frac{Ze\mathbf{r} \times \mathbf{v}}{r^3} \\ &= \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{Ze\mathbf{r} \times \mathbf{v}}{cr^3}, \quad (\mu_0: \text{真空の透磁率}, \epsilon_0\mu_0 = 1/c^2) \end{aligned}$$



この磁束密度(外部磁場)の中の電子(磁気モーメントベクトル)に働くポテンシャル

$$H_{so} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B} = \frac{e}{m} \vec{s} \cdot \vec{B} \quad \left(\vec{\mu}_s = \frac{-e}{m} \vec{s} \right)$$

$$= \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{Ze^2}{mc^3} \frac{1}{r^3} \vec{l} \cdot \vec{s}$$

$$H_{so} = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial V(r)}{\partial r} \vec{l} \cdot \vec{s}$$

一般のポテンシャルに対して

$$H_{so} = \frac{1}{m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial V(r)}{\partial r} \vec{l} \cdot \vec{s} \quad ; V(r) = - \left(\frac{Ze}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{1}{r}$$

← 相対論的効果 (1/2)

付録1：対称性と保存則、ユニタリ変換

物理学において、対称性が存在するとは、考えている対象にある操作に対して行った結果がもとと同じになる場合をいう。

ある波動関数 ψ に変換 U をおこなっても、波動関数の内積(規格化値)は同じでなければならない。

$$\Psi \rightarrow \Psi' \equiv \hat{U}\Psi, \langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \Psi' | \Psi' \rangle = \langle \Psi | \hat{U}^\dagger \hat{U} \Psi \rangle$$

$$\therefore \hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{I} \quad U: \text{ユニタリ変換(演算子)}$$

ユニタリ変換 U により、(時間に依存する)シュレーディンガー方程式は次のように変換される。

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

$$\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi' = \hat{H}' \Psi'; \Psi' \equiv \hat{U} \Psi, \hat{H}' \equiv \hat{U} \hat{H} \hat{U}^\dagger + i\hbar \frac{\partial \hat{U}}{\partial t}$$

特に、しばしばそうであるように、対称性が時間によらないユニタリ変換 U による場合

$$\hat{H} = \hat{U} \hat{H} \hat{U}^\dagger \rightarrow \hat{U} \hat{H} = \hat{H} \hat{U} \quad \therefore [\hat{H}, \hat{U}] = 0$$

ハミルトニアン演算子とユニタリ変換演算子は交換する！

付録2: 座標軸の回転と回転対称性

Z軸まわりの微小角 $d\theta$ の回転による位置ベクトルの変化

\vec{e}_z +Z軸向きの単位ベクトル

$\vec{r} + d\vec{r}$

$d\theta$

\vec{r}

\vec{e}_r ベクトル r 向きの単位ベクトル

$$d\vec{r} = r d\theta \vec{e}_z \times \vec{e}_r = d\theta \vec{e}_z \times (r \vec{e}_r) = d\theta \vec{e}_z \times \vec{r}$$

$$\rightarrow \vec{r} + d\vec{r} = (1 + d\theta \vec{e}_z \times) \vec{r}$$

ベクトル r の関数 $f(r)$ に対する回転操作

$$\begin{aligned} f(\vec{r}) &\rightarrow f(\vec{r} + d\vec{r}) = f(\vec{r}) + \vec{\nabla} f(\vec{r}) \cdot d\vec{r} \\ &= f(\vec{r}) + \vec{\nabla} f(\vec{r}) \cdot (d\theta \vec{e}_z \times \vec{r}) \\ &= f(\vec{r}) + d\theta \vec{e}_z \cdot [\vec{r} \times \vec{\nabla}] f(\vec{r}) \\ &= f(\vec{r}) + \frac{i}{\hbar} d\theta \vec{e}_z \cdot \vec{\ell} f(\vec{r}), \quad \frac{\hbar}{i} \vec{r} \times \vec{\nabla} = \vec{\ell} \end{aligned}$$

$$\therefore f'(\vec{r}) \equiv \hat{U}(\theta) f(\vec{r}) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \theta \hat{\ell}_z\right) f(\vec{r})$$

$$\hat{U}(\theta) \equiv \exp\left(\frac{i}{\hbar} \theta \hat{\ell}_z\right); z\text{軸周りの}\theta\text{回転}$$

$$[\hat{\ell}_z, \hat{U}(\theta)] = 0; \quad \text{if } [\hat{H}, \hat{\ell}_z] = 0, \quad \hat{\ell}_z: \text{保存量}$$

参考文献

M.E.ローズ「角運動量の基礎理論」(みすず書房)、1974年

Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics*

D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev, V. K. Khersonskii,
Quantum Theory of Angular Momentum (World Scientific), 1988

中山正敏「物質中の量子力学」(岩波書店)、1996年。特に、5章。

R.P.ファインマン「光と物質のふしぎな理論—私の量子電磁力学」、
岩波書店。1987年。特に1, 3章。

J.H.ディヴィス「低次元半導体の物理」(シュプリンガー・フェアラーク東京)、
pp.403-407

浜口智尋「半導体の物理」(朝倉書店) pp.31-40

R. Winkler,「Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional
Electron and Hole Systems」(Springer)、2003
pp.403-407

坂口喜生「スピン化学—化学結合再入門—」、裳華房、2005年。