理学総論レポート

g1840624 鷲津 優維

2018/11/05

1

1.1 問い

スピン-軌道相互作用を Dirac 方程式から導出する．

1.2 解

Dirac が提案した式（Dirac 方程式）は以下のよう

$$E\begin{bmatrix}\phi_1\\\phi_2\\\phi_3\\\phi_4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}m_ec^2 & 0 & c\hat{p}_z & c(\hat{p}_x-i\hat{p}_y)\\0 & m_ec^2 & c(\hat{p}_x+i\hat{p}_y) & -c\hat{p}_z\\c\hat{p}_z & c(\hat{p}_x-i\hat{p}_y & -m_ec^2 & 0\\c(\hat{p}_x+i\hat{p}_y) & -c\hat{p}_z & 0 & -m_ec^2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\phi_1\\\phi_2\\\phi_3\\\phi_4\end{bmatrix}\tag{1}$$

エネルギー演算子が 4×4 行列であり，波動関数が 4 成分を持っている．4 つの関数 $\phi_1,\phi_2,\phi_3,\phi_4$ がセットになって 1 つの電子状態が決まることが Dirac 方程式の特徴である．4 成分の波動関数を $\boldsymbol{\phi}$ とし，

$$\boldsymbol{\phi}=\begin{bmatrix}\phi_1\\\phi_2\\\phi_3\\\phi_4\end{bmatrix}\tag{2}$$

エネルギー演算子の部分を $\hat{H}_D$ と表記すると，

$$\hat{H}_D\boldsymbol{\phi}=E\boldsymbol{\phi}\tag{3}$$

$\hat{H}_D$ の右上の 4 成分はパウリのスピン行列で表現できる．

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix}c\hat{p}_z & c(\hat{p}_x-i\hat{p}_y)\\c(\hat{p}_x+i\hat{p}_z) & -c\hat{p}_z\end{bmatrix} &= \begin{bmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{bmatrix}\hat{p}_x+\begin{bmatrix}0 & -i\\-i & 0\end{bmatrix}\hat{p}_y+\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{bmatrix}\hat{p}_z &(4)\\ &= \boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} &(5)\end{aligned}$$

次に，Dirac 方程式を以下のように 2 成分にかき分ける

$$\boldsymbol{\phi}=\begin{bmatrix}\phi_L\\\phi_S\end{bmatrix}\tag{6}$$

ϕ_L と ϕ_S はそれぞれ右巻き，左巻きのスピンを表している．これらを用いて Dirac 方程式は

$$E\begin{bmatrix}\phi_L\\\phi_S\end{bmatrix}=m_ec^2\begin{bmatrix}\boldsymbol{I_2} & 0_2\\0_2 & -\boldsymbol{I}_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\phi_L\\\phi_S\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}0_2 & c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\\c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} & 0_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\phi_L\\\phi_S\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}m_ec^2I & c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\\c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} & -m_ec^2I\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\phi_L\\\phi_S\end{bmatrix}\tag{7}$$

と表せる．

エネルギー基準を定義し直して，$E - m_e c^2$ を新たな E とする．

$$E \begin{bmatrix} \phi_L \\ \phi_S \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0_2 & c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} \\ c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} & -2m_e c - 2\boldsymbol{I}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_L \\ \phi_S \end{bmatrix} \tag{8}$$

さらにポテンシャルエネルギー V を含めて考えると，運動エネルギーは $E - V$ となるので，行列を分解して書くと，

$$E\phi_L = V\phi_L + c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}\phi_S \tag{9}$$

$$E\phi_S = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}\phi_L + (V - 2m_e c^2)\phi_S \tag{10}$$

(10) より，

$$\phi_S = \frac{1}{E - V + 2m_e c^2}(c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}})\phi_L \tag{11}$$

これを (9) に代入する．

$$E\phi_L = V\phi_L + (c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}\frac{1}{E - V + 2m_e c^2}(c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}})\phi_L \tag{12}$$

となる．ここで，$E - V << 2m_e c^2$ つまり，$E - V + 2m_e c^2 \simeq 2m_e c^2$ とすると，

$$\phi_S \simeq \frac{1}{2m_e c^2}(c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}})\phi_L = \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}}{2m_e c^2}\phi_L \tag{13}$$

$$\begin{aligned} E\phi_L &= V\phi_L + (c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}})\frac{1}{E - V + 2m_e c^2}(c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}})\phi_L \\ &\simeq V\phi_L + (c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}})\frac{1}{2m_e c^2}(c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{p}})\phi_L \\ &= \left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{2m_e} + V\right)\phi_L \end{aligned} \tag{14}$$

(14) をについて

$$E\phi_1 = \left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m_e} + V\right)\phi_1 \tag{15}$$

$$E\phi_2 = \left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m_e} + V\right)\phi_2 \tag{16}$$

このように，相対論効果が小さいと Dirac 方程式の ϕ_L はシュレディンガー方程式の解と同じになる．波動関数を規格化すると，

$$\int \boldsymbol{\phi}^* \boldsymbol{\phi} dv = \int \phi_L^* \phi_L dv + \int \phi_S^* \phi_S dv = 1$$

近似を用いて簡単に考えると，

$$\begin{aligned} \int \phi_L^* \phi_L dv + \int \phi_S^* \phi_S dv &= \int \phi_L^* \phi_L dv + \int \left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m_e}\phi_L\right)^* \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m_e}\phi_L dv \\ &= \int \phi_L^* \left[1 + \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{4m_e^2 c^2}\right] \phi_L dv \\ &= \int \phi_L^* \left[1 + \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{8m_e^2 c^2}\right] \left[1 + \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{8m_e^2 c^2}\right] \phi_L dv \\ &= 1 \end{aligned} \tag{17}$$

(17) の式は ϕ_S の効果も取り込んで規格化された 2 成分の波動関数として機能する波動関数 (ϕ_T とする．) の形を示している．

$$\phi_T = \left[1 + \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{8m_e^2c^2}\right]\phi_L, \phi_L = \left[1 - \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{8m_e^2c^2}\right]\phi_L \tag{18}$$

(12) を，(18) を考慮して ϕ_T の方程式に書き換えると，

$$\left[1 - \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{8m_e^2c^2}\right]\left[(c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\frac{1}{E - V + 2m_ec^2}(c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}) + V\right]\left[1 - \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{8m_e^2c^2}\right]\phi_T = E\left[1 - \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{8m_e^2c^2}\right]^2\phi_T \tag{19}$$

$E - V << 2m_ec^2$ を考慮すると，

$$\left|\frac{E-V}{2m_ec^2}\right| << 1 \tag{20}$$

ここからテイラー展開を利用して，近似すると，

$$\frac{c^2}{E - V + 2m_ec^2} = \frac{c^2}{2m_ec^2 + (E - V)} = \frac{1}{2m_e}\frac{1}{1 + \frac{E-V}{2m_ec^2}} \simeq \frac{1}{2m_e}\left[1 - \frac{E-V}{2m_ec^2}\right] \tag{21}$$

となるので，

$$\left[1 - \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{8m_e^2c^2}\right]\left[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\frac{1}{2m_e}\left[1 - \frac{E-V}{2m_ec^2}\right](\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}) + V\right]\left[1 - \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{8m_e^2c^2}\right]\phi_T = E\left[1 + \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{4m_e^2c^2}\right]^2\phi_T \tag{22}$$

これより，

$$\left[\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + V - \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^4}{8m_e^3c^2} - \frac{\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot(\nabla\cdot V\times\hat{\boldsymbol{p}})}{4m_e^2c^2} + \frac{\hbar^2}{8m_e^2c^2}\delta V\right]\phi_T = E\phi_T \tag{23}$$

原子を仮定すると，$V = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ なので，(23) の第 4 項がスピン軌道相互作用項となる．

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{\mathrm{spin-orbit}} &= -\frac{1}{4m_e^2c^2}i\sigma\left[\hat{\boldsymbol{p}}V\right]\times\hat{\boldsymbol{p}} = \frac{1}{4m_e^2c^2}i\sigma\left[\hat{\boldsymbol{p}}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right]\times\hat{\boldsymbol{p}} = \frac{1}{4m_e^2c^2}i\sigma\left[\frac{\hbar}{i}\nabla\cdot\frac{e^2}{4r\pi\epsilon_0}\right]\times\hat{\boldsymbol{p}} && (24)\\
&= \frac{1}{4m_e^2c^2}\hbar\boldsymbol{\sigma}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left[\nabla\cdot\frac{1}{r}\right]\times\hat{\boldsymbol{p}} = \frac{1}{4m_e^2c^2}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\hbar\boldsymbol{\sigma}\left[\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}\right]\times\hat{\boldsymbol{p}} && (25)\\
&= \frac{1}{2m_e^2c^2}\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\left[\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\hbar\right]\frac{1}{r^3}\hat{\boldsymbol{L}} && (26)
\end{aligned}$$

ここで，$\hat{\boldsymbol{L}}$ はスピン角運動量を表す．
以上で，Dirac 方程式からスピン軌道相互作用を導出することができた．