

# 理学総論レポート

g1840624 鷺津 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

### 1.2 解

Dirac が提案した式 (Dirac 方程式) は以下のよう

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

エネルギー演算子が  $4 \times 4$  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  $\phi$  とし,

$$\phi = \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \end{bmatrix} \quad (2)$$

エネルギー演算子の部分を  $\hat{H}_D$  と表記すると,

$$\hat{H}_D \phi = E \phi \quad (3)$$

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

$$\begin{bmatrix} c\hat{p}_z & c(\hat{p}_x - i\hat{p}_y) \\ c(\hat{p}_x + i\hat{p}_y) & -c\hat{p}_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \hat{p}_x + \begin{bmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{bmatrix} \hat{p}_y + \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \hat{p}_z \quad (4)$$

$$= \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \quad (5)$$

次に, Dirac 方程式を以下のように 2 成分にかき分ける

$$\phi = \begin{bmatrix} \phi_L \\ \phi_S \end{bmatrix} \quad (6)$$

$\phi_L$  と  $\phi_S$  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

$$E \begin{bmatrix} \phi_L \\ \phi_S \end{bmatrix} = m_e c^2 \begin{bmatrix} \mathbf{I}_2 & 0_2 \\ 0_2 & -\mathbf{I}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_L \\ \phi_S \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0_2 & c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \\ c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} & 0_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_L \\ \phi_S \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_e c^2 I & c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \\ c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} & -m_e c^2 I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_L \\ \phi_S \end{bmatrix} \quad (7)$$

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.

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

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,

$$E\phi_L = V\phi_L + c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}\phi_S \quad (9)$$

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

(10) より,

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

これを (9) に代入する.

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

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

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

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

(14) をについて

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

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

このように, 相対論効果が小さいと Dirac 方程式の  $\phi_L$  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,

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

近似を用いて簡単に考えると,

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

$$(18)$$

(17) の式は  $\phi_S$  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 ( $\phi_T$  とする.) の形を示している.

$$\phi_T = \left[ 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m_e^2 c^2} \right] \phi_L, \phi_L = \left[ 1 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m_e^2 c^2} \right] \phi_T \quad (19)$$

(12) を, (19) を考慮して  $\phi_T$  の方程式に書き換えると,

$$\left[ 1 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m_e^2 c^2} \right] \left[ (c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \frac{1}{E - V + 2m_e c^2} (c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + V) \right] \left[ 1 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m_e^2 c^2} \right] \phi_T = E \left[ 1 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m_e^2 c^2} \right]^2 \phi_T \quad (20)$$

$E - V \ll 2m_e c^2$  を考慮すると,

$$\left| \frac{E - V}{2m_e c^2} \right| \ll 1 \quad (21)$$

ここからテイラー展開を利用して, 近似すると,

$$\frac{c^2}{E - V + 2m_e c^2} = \frac{c^2}{2m_e c^2 + (E - V)} = \frac{1}{2m_e} \frac{1}{1 + \frac{E - V}{2m_e c^2}} \simeq \frac{1}{2m_e} \left[ 1 - \frac{E - V}{2m_e c^2} \right] \quad (22)$$

となるので,

$$\left[ 1 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m_e^2 c^2} \right] \left[ (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \frac{1}{2m_e} \left[ 1 - \frac{E - V}{2m_e c^2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + V \right] \right] \left[ 1 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{8m_e^2 c^2} \right] \phi_T = E \left[ 1 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{4m_e^2 c^2} \right]^2 \phi_T \quad (23)$$

これより,

$$\left[ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V - \frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m_e^3 c^2} - \frac{\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \cdot V \times \hat{\mathbf{p}})}{4m_e^2 c^2} + \frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \delta V \right] \phi_T = E \phi_T \quad (24)$$

原子を仮定すると,  $V = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$  なので, (24) の第 4 項がスピン軌道相互作用項となる.

$$\hat{H}_{spin-orbit} = -\frac{1}{4m_e^2 c^2} i\boldsymbol{\sigma} [\hat{\mathbf{p}}V] \times \hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{4m_e^2 c^2} i\boldsymbol{\sigma} \left[ \hat{\mathbf{p}} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \times \hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{4m_e^2 c^2} i\boldsymbol{\sigma} \left[ \frac{\hbar}{i} \nabla \cdot \frac{e^2}{4r\pi\epsilon_0} \right] \times \hat{\mathbf{p}} \quad (25)$$

$$= \frac{1}{4m_e^2 c^2} \hbar \boldsymbol{\sigma} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[ \nabla \cdot \frac{1}{r} \right] \times \hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{4m_e^2 c^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \hbar \boldsymbol{\sigma} \left[ \frac{\mathbf{r}}{r^3} \right] \times \hat{\mathbf{p}} \quad (26)$$

$$f = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \left[ \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \hbar \right] \frac{1}{r^3} \hat{\mathbf{L}} \quad (27)$$

ここで,  $\hat{\mathbf{L}}$  はスピン角運動量を表す.

以上で, スピン軌道相互作用を導出できた.