第 1 章

多極子と量子論

1.1 ミクロな多極子の演算子表現

電気多極子演算子の導出

電荷密度演算子 $\hat{\rho}(\boldsymbol{r})$ を周りの位置 $\boldsymbol{r}_j$ にある電子からの寄与として表す。

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r}) = -e\sum_j \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_j) \tag{1.1}$$

これより、電気多極子演算子は

$$\hat{G}_l^m(\boldsymbol{r}) = \int d\boldsymbol{r'}\, O_l^m(\boldsymbol{r'})\hat{(}\boldsymbol{r'}) = -e\sum_j \int d\boldsymbol{r'}\, O_l^m(\boldsymbol{r'})\delta(\boldsymbol{r'}-\boldsymbol{r'}) = -e\sum_j O_l^m(\boldsymbol{r_j}) \tag{1.2}$$

となる。

磁気多極子演算子の導出

次に、磁気多極子の演算子表現を得るため、電流の由来は軌道運動と、スピンによるものの 2 つがあるので、それぞれの電流演算子を $\hat{\boldsymbol{j}}^{(o)}(\boldsymbol{r})$, $\hat{\boldsymbol{j}}^{(s)}(\boldsymbol{r})$ とする。まずは磁化 $\boldsymbol{M}$ を求めいこう。軌道運動による磁化は角運動量にボーア磁子をかけたものであることより位置 $\boldsymbol{r}_j$ における角運動量の作る磁化を足していくと、

$$\hat{\boldsymbol{M}}^{(o)}(\boldsymbol{r}) := -\mu_B\sum_j \hat{\boldsymbol{L}}_j\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_j) \tag{1.3}$$

となる。[*1] 古典電磁気との類推により

$$\hat{\boldsymbol{M}}^{(o)}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2c}\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{j}}^{(o)}(\boldsymbol{r}) \tag{1.4}$$

を満たすと考えられる。この形ならば、磁気多極子の定義の中に現れているのでこれより磁気多極子の軌道成分は

$$\hat{M}_m^{l(o)} = \frac{1}{c(l+1)}\int d\boldsymbol{r'}\,(\boldsymbol{r'}\times\hat{\boldsymbol{j}}^{(o)}(\boldsymbol{r'}))\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r'}) \tag{1.5}$$

$$= \frac{1}{l+1}\int d\boldsymbol{r'}\left(-2\mu_B\sum_j \hat{\boldsymbol{L}}_j\delta(\boldsymbol{r'}-\boldsymbol{r}_j)\right)\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r'}) \tag{1.6}$$

$$= -\mu_B\sum_j \boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}_j)\cdot\frac{2\hat{\boldsymbol{L}}_j}{l+1} \tag{1.7}$$

となる。スピンによる磁化はパウリ演算子を σ として

$$\boldsymbol{M}^{(s)}(\boldsymbol{r}) = -\mu_B\sum_j \sigma_j\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_j) \tag{1.8}$$

でとなる。また、磁化を使うと電流は $\boldsymbol{j} = c\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{M}$ よりスピンの電流は

$$\hat{\boldsymbol{j}}^{(s)}(\boldsymbol{r}) = c\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{M}^{(s)}(\boldsymbol{r}) \tag{1.9}$$

[*1] この文章内では $\hat{\boldsymbol{L}} = -i\boldsymbol{r}\times\nabla$

これより

$$\hat{M}_m^{j(s)} = \int \boldsymbol{r'}\, \boldsymbol{M}^{(s)} \cdot \boldsymbol{\nabla} O_l^m(\boldsymbol{r'}) \tag{1.10}$$

$$= -\mu_B \int d\boldsymbol{r'} \left\{ \sum_j \sigma_j \delta(\boldsymbol{r'} - \boldsymbol{r}_j) \right\} \cdot \boldsymbol{\nabla} O_l^m(\boldsymbol{r'}) \tag{1.11}$$

$$= -\mu_B \sum_j \boldsymbol{\nabla} O_l^m(\boldsymbol{r}_j) \cdot \sigma_j \tag{1.12}$$

なので磁気多極子演算子は

$$\hat{M}_l^m = -\mu_B \sum_j \boldsymbol{\nabla} O_l^m(\boldsymbol{r}_j) \cdot \boldsymbol{m}_l(\boldsymbol{r}_j) \tag{1.13}$$

$$\boldsymbol{m}_l(\boldsymbol{r}) = \frac{2\hat{\boldsymbol{L}}}{l+1} + \sigma \tag{1.14}$$

というように得られる。

1.1.1 磁気トロイダル多極子演算子の導出

同様にして軌道成分とスピン成分にわけて、磁気トロイダル多極子の演算子を導出しよう。$\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{j} = c \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{M} = 0$ のもと成り立つ次の関係式を使う

$$\int d\boldsymbol{r}\, (\boldsymbol{r} \times (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{j})) \cdot \boldsymbol{\nabla} O_l^m(\boldsymbol{r})$$

$$= \int d\boldsymbol{r} \left[\boldsymbol{\nabla} \cdot \Big\{ (\boldsymbol{r} \times (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{j}))\, O_l^m(\boldsymbol{r}) \Big\} - O_l^m(\boldsymbol{r}) \boldsymbol{\nabla} \cdot (\boldsymbol{r} \times (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{j})) \right] = -\int d\boldsymbol{r}\, \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{kpq} \partial_i (x_j x_p j_q) O_l^m \tag{1.15}$$

$$= -\int d\boldsymbol{r}\, \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{kpq} (\delta_{ij} x_p j_q + x_j \delta_{ip} j_q + x_j x_p (\partial_i j_q)) O_l^m \tag{1.16}$$

$$= \int d\boldsymbol{r} \left[-\varepsilon_{pjk} \varepsilon_{kpq} x_j j_q O_l^m(\boldsymbol{r}) - (\delta_{ip}\delta_{jq} - \delta_{iq}\delta_{jp}) x_j x_p (\partial_i j_q) O_l^m(\boldsymbol{r}) \right] \tag{1.17}$$

$$= \int d\boldsymbol{r} \left[-2(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})) O_l^m(\boldsymbol{r}) - x_q x_p (\partial_p j_q) O_l^m(\boldsymbol{r}) + r^2 (\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})) O_l^m(\boldsymbol{r}) \right] \tag{1.18}$$

$$= \int d\boldsymbol{r} \left[-2(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})) O_l^m(\boldsymbol{r}) - \partial_p (x_q x_p j_q O_l^m(\boldsymbol{r})) + \partial_p (x_q x_p) j_q O_l^m(\boldsymbol{r}) + x_q x_p j_q (\partial_q O_l^m(\boldsymbol{r})) \right] \tag{1.19}$$

$$= \int d\boldsymbol{r} \left[-2(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})) O_l^m(\boldsymbol{r}) + 3 x_q j_q O_l^m(\boldsymbol{r}) + \delta_{pq} x_q j_q O_l^m(\boldsymbol{r}) + (\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})) \Big\{ \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{\nabla} O_l^m(\boldsymbol{r}) \Big\} \right] \tag{1.20}$$

$$= \int d\boldsymbol{r} \left[2(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})) O_l^m(\boldsymbol{r}) + (\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})) \Big\{ r \frac{\partial}{\partial r} r^l Z_l^m(\theta, \varphi) \Big\} \right] \tag{1.21}$$

$$= (l+2) \int d\boldsymbol{r}\, (\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})) O_l^m(\boldsymbol{r}) \tag{1.22}$$

これより、

$$\hat{T}_l^{m(o)} = \frac{1}{c(l+1)} \int d\boldsymbol{r}\, (\boldsymbol{r} \cdot \hat{\boldsymbol{j}}^{(o)}(\boldsymbol{r})) O_l^m(\boldsymbol{r}) \tag{1.23}$$

$$= \frac{1}{c(l+1)(l+2)} \int d\boldsymbol{r}\, (\boldsymbol{r} \times (\boldsymbol{r} \times \hat{\boldsymbol{j}}^{(o)})) \cdot \boldsymbol{\nabla} O_l^m(\boldsymbol{r}) \tag{1.24}$$

$$= \frac{-2\mu_B}{(l+1)(l+2)} \sum_j (\boldsymbol{r}_j \times \hat{\boldsymbol{L}}_j) \cdot \boldsymbol{\nabla} O_l^m(\boldsymbol{r}_j) \tag{1.25}$$

スピンについては

$$\boldsymbol{r} \cdot \hat{\boldsymbol{j}}^{(s)}(\boldsymbol{r}) = c \boldsymbol{r} \cdot (\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{M}^{(s)}(\boldsymbol{r})) = -c \boldsymbol{\nabla} \cdot \Big(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{M}^{(s)}(\boldsymbol{r}) \Big) \tag{1.26}$$

を使うと

$$T_l^{m(s)} = -\frac{1}{l+1}\int d\boldsymbol{r}\, O_l^m(\boldsymbol{r})\boldsymbol{\nabla\cdot}\Big(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{M}^{(s)}(\boldsymbol{r})\Big) \tag{1.27}$$

$$= \frac{1}{l+1}\int d\boldsymbol{r}\,(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{M}^{(s)}(\boldsymbol{r}))\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}) \tag{1.28}$$

$$= -\frac{\mu_B}{l+1}\sum_j(\boldsymbol{r}_j\times\sigma_j)\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}_j) \tag{1.29}$$

よって、磁気トロイダル多極子演算子は

$$\hat{T}_l^m = -\mu_B\sum_j \boldsymbol{t}_j(\boldsymbol{r}_j)\cdot\boldsymbol{\nabla}O_l^m(\boldsymbol{r}_j) \tag{1.30}$$

$$\boldsymbol{t}_j(\boldsymbol{r}_j) = \frac{\boldsymbol{r_j}}{l+1}\times\left(\frac{2\hat{\boldsymbol{L}}_j}{l+2}+\sigma_j\right) \tag{1.31}$$

となる。ただ、実際には $\boldsymbol{t}_j$ 内の演算子を対象化してエルミートにすることで、磁気トロイダル多極子演算子の固有値を実数にする必要がある。