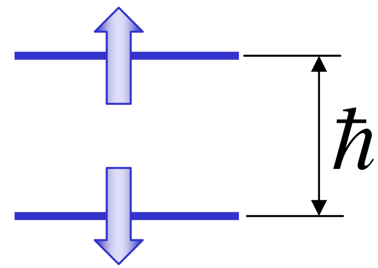
スピン
相対論的量子論

スピンの性質

ディラックの相対論的方程式

→ 符号の異なる二準位 →

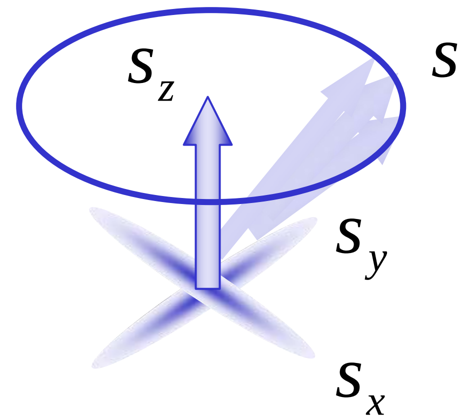


角運動量における準位差

☆ 正準な交換関係

$$\hat{\mathbf{s}} \times \hat{\mathbf{s}} = i\hbar \hat{\mathbf{s}}$$

$$\left[\hat{s}_x, \hat{s}_y\right] = i\hbar \hat{s}_z, \quad \left[\hat{s}_y, \hat{s}_z\right] = i\hbar \hat{s}_x, \quad \left[\hat{s}_z, \hat{s}_x\right] = i\hbar \hat{s}_y$$



固有値: $m_s \hbar = \pm \frac{1}{2} \hbar$ （2つのみ）

固有関数: $\psi\left(\frac{1}{2}\right) = \left|+1\right\rangle = \left|\Uparrow\right\rangle, \quad \psi\left(-\frac{1}{2}\right) = \left|-1\right\rangle = \left|\Downarrow\right\rangle$

スピンの状態関数: $\left|\psi\right\rangle = C_{+1}\left|\Uparrow\right\rangle + C_{-1}\left|\Downarrow\right\rangle$

シュレーディンガー方程式：

$$i\hbar \frac{d}{dt}\left|\psi\right\rangle = \hat{H}\left|\psi\right\rangle$$

２状態系：　$\left|\psi\right\rangle = C_1\left|1\right\rangle + C_2\left|2\right\rangle$

$\Rightarrow$ ２状態系のシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\left(\left|1\right\rangle \frac{dC_1}{dt} + \left|2\right\rangle \frac{dC_2}{dt}\right) = \hat{H}\left(\left|1\right\rangle C_1 + \left|2\right\rangle C_2\right)$$

$\left\langle 1\right| \times, \left\langle 2\right| \times$　により

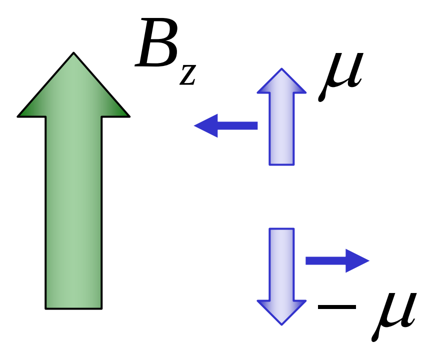
$$i\hbar \frac{dC_1}{dt} = H_{11}C_1 + H_{12}C_2$$

$$i\hbar \frac{dC_2}{dt} = H_{21}C_1 + H_{22}C_2$$

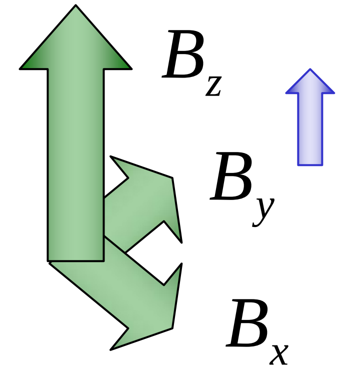
$$\Rightarrow \quad i\hbar \frac{d}{dt}\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}$$

$\left\langle 2\right|\hat{H}\left|1\right\rangle$　　また　$\left\langle 1|1\right\rangle = 1, \left\langle 2|2\right\rangle = 1, \left\langle 1|2\right\rangle = 0$

$$\begin{pmatrix} H_{++} & H_{+-} \\ H_{-+} & H_{--} \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} \mu B_z & 0 \\ 0 & -\mu B_z \end{pmatrix} = -\mu B_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$



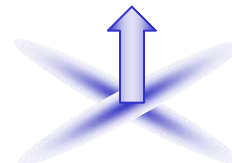
外磁場 $\left(B_x, B_y, B_z\right)$ に対するハミルトニアン



(1) 正準な交換関係を用いる方法

スピンに関する上昇，下降演算子

$$\hat{s}_+ = \hat{s}_x + i\hat{s}_y, \quad \hat{s}_- = \hat{s}_x - i\hat{s}_y$$



固有状態間で

$$\hat{s}_+\left|\Uparrow\right\rangle = 0, \quad \hat{s}_-\left|\Uparrow\right\rangle = \hbar\left|\Downarrow\right\rangle, \quad \hat{s}_z\left|\Uparrow\right\rangle = \frac{1}{2}\hbar\left|\Uparrow\right\rangle$$

$$\hat{s}_+\left|\Downarrow\right\rangle = \hbar\left|\Uparrow\right\rangle, \quad \hat{s}_-\left|\Downarrow\right\rangle = 0, \quad \hat{s}_z\left|\Downarrow\right\rangle = -\frac{1}{2}\hbar\left|\Downarrow\right\rangle$$

$$\mathbf{s}_+ = \begin{pmatrix} \left\langle\Uparrow\right|\hat{s}_+\left|\Uparrow\right\rangle & \left\langle\Uparrow\right|\hat{s}_+\left|\Downarrow\right\rangle \\ \left\langle\Downarrow\right|\hat{s}_+\left|\Uparrow\right\rangle & \left\langle\Downarrow\right|\hat{s}_+\left|\Downarrow\right\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \hbar \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{s}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \hbar & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{s}_z = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\hbar & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\hbar \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{s} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{\sigma}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_x = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_+ + \boldsymbol{\sigma}_-), \quad \boldsymbol{\sigma}_y = -\frac{i}{2}(\boldsymbol{\sigma}_+ - \boldsymbol{\sigma}_-)$$

$$\Rightarrow \quad \boldsymbol{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

パウリのスピン行列

外磁場 (B_x, B_y, B_z) のハミルトニアン

$$\mathbf{H} = -\mu(\boldsymbol{\sigma}_x B_x + \boldsymbol{\sigma}_y B_y + \boldsymbol{\sigma}_z B_z) = -\mu \begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix}, \quad \mu = \frac{1}{2}\hbar$$

シュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{dC_\Uparrow}{dt} = -\mu \left\{ B_z C_\Uparrow + (B_x - iB_y) C_\Downarrow \right\}$$

$$i\hbar \frac{dC_\Downarrow}{dt} = -\mu \left\{ (B_x + iB_y) C_\Uparrow - B_z C_\Downarrow \right\}$$

（２）磁場との相互作用エネルギーの考察に基づく

外磁場 $\left(B_x, B_y, B_z\right)$ によるエネルギー：$E_{\pm} = -\left(\pm \mu \sqrt{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2}\right)$

ハミルトニアン行列の固有値：

$$\begin{vmatrix} H_{\Uparrow\Uparrow} - E & H_{\Uparrow\Downarrow} \\ H_{\Downarrow\Uparrow} & H_{\Downarrow\Downarrow} - E \end{vmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \quad E_{\pm} = \frac{H_{\Uparrow\Uparrow} + H_{\Downarrow\Downarrow}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{H_{\Uparrow\Uparrow} - H_{\Downarrow\Downarrow}}{2}\right)^2 + H_{\Uparrow\Downarrow} H_{\Downarrow\Uparrow}}$$

$$\Rightarrow \quad \left(E_+ - E_-\right)^2 = \left(\frac{H_{\Uparrow\Uparrow} - H_{\Downarrow\Downarrow}}{2}\right)^2 + H_{\Uparrow\Downarrow} H_{\Downarrow\Uparrow} = \mu^2 \left(B_x^2 + B_y^2 + B_z^2\right)$$

$$H_{\Uparrow\Uparrow} = \mu B_z, \quad H_{\Downarrow\Downarrow} = -\mu B_z \quad \Rightarrow \quad \left|H_{\Uparrow\Downarrow}\right|^2 = \mu^2 \left(B_x^2 + B_y^2\right)$$

$$\therefore H_{\Uparrow\Downarrow} = -\mu\left(B_x - iB_y\right), \quad H_{\Downarrow\Uparrow} = -\mu\left(B_x + iB_y\right)$$

(3)スピン演算子と固有ベクトルの関係

$$\boldsymbol{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \Uparrow | \hat{\sigma}_x | \Uparrow \rangle & \langle \Uparrow | \hat{\sigma}_x | \Downarrow \rangle \\ \langle \Downarrow | \hat{\sigma}_x | \Uparrow \rangle & \langle \Downarrow | \hat{\sigma}_x | \Downarrow \rangle \end{pmatrix}$$

第1行第2列の項

$$1 = \langle \Uparrow | \hat{\sigma}_x | \Downarrow \rangle \xrightarrow{|\Uparrow\rangle \times} |\Uparrow\rangle = \underbrace{|\Uparrow\rangle\langle\Uparrow|}_{1} \hat{\sigma}_x |\Downarrow\rangle = \hat{\sigma}_x |\Downarrow\rangle$$

$$\overbrace{\hat{\sigma}_x \qquad\qquad \hat{\sigma}_y}^{\text{スピン反転演算子}} \qquad\qquad \overset{\text{固有ベクトル}}{\hat{\sigma}_z}$$

$$\begin{cases} \hat{\sigma}_x |\Uparrow\rangle = |\Downarrow\rangle \\ \hat{\sigma}_x |\Downarrow\rangle = |\Uparrow\rangle \end{cases} \qquad \begin{cases} \hat{\sigma}_y |\Uparrow\rangle = i|\Downarrow\rangle \\ \hat{\sigma}_y |\Downarrow\rangle = -i|\Uparrow\rangle \end{cases} \qquad \begin{cases} \hat{\sigma}_z |\Uparrow\rangle = |\Uparrow\rangle \\ \hat{\sigma}_z |\Downarrow\rangle = -|\Downarrow\rangle \end{cases}$$

スピン相互作用の例

（1）水素原子の超微細構造

スピン相互作用によるハミルトニアン： $\hat{H} = A\left(\hat{\sigma}_x^e\hat{\sigma}_x^p + \hat{\sigma}_y^e\hat{\sigma}_y^p + \hat{\sigma}_z^e\hat{\sigma}_z^p\right)$

$$\hat{\sigma}_x^e\hat{\sigma}_x^p\left(|\Uparrow\uparrow\rangle \quad |\Uparrow\downarrow\rangle \quad |\Downarrow\uparrow\rangle \quad |\Downarrow\downarrow\rangle\right) = \left(|\Downarrow\downarrow\rangle \quad |\Downarrow\uparrow\rangle \quad |\Uparrow\downarrow\rangle \quad |\Uparrow\uparrow\rangle\right)$$

$$\hat{\sigma}_y^e\hat{\sigma}_y^p\left(|\Uparrow\uparrow\rangle \quad |\Uparrow\downarrow\rangle \quad |\Downarrow\uparrow\rangle \quad |\Downarrow\downarrow\rangle\right) = \left(-|\Downarrow\downarrow\rangle \quad |\Downarrow\uparrow\rangle \quad |\Uparrow\downarrow\rangle \quad -|\Uparrow\uparrow\rangle\right)$$

$$+ \qquad \hat{\sigma}_z^e\hat{\sigma}_z^p\left(|\Uparrow\uparrow\rangle \quad |\Uparrow\downarrow\rangle \quad |\Downarrow\uparrow\rangle \quad |\Downarrow\downarrow\rangle\right) = \left(|\Uparrow\uparrow\rangle \quad -|\Uparrow\downarrow\rangle \quad -|\Downarrow\uparrow\rangle \quad |\Downarrow\downarrow\rangle\right)$$

$$\left(\hat{\sigma}_x^e\hat{\sigma}_x^p + \hat{\sigma}_y^e\hat{\sigma}_y^p + \hat{\sigma}_z^e\hat{\sigma}_z^p\right)\left(|\Uparrow\uparrow\rangle \quad |\Uparrow\downarrow\rangle \quad |\Downarrow\uparrow\rangle \quad |\Downarrow\downarrow\rangle\right)$$

$$= \left(|\Uparrow\uparrow\rangle \quad -|\Uparrow\downarrow\rangle + 2|\Downarrow\uparrow\rangle \quad 2|\Uparrow\downarrow\rangle - |\Downarrow\uparrow\rangle \quad |\Downarrow\downarrow\rangle\right)$$

行列表示のハミルトニアン

$$\begin{pmatrix} \langle 1|\hat{H}|1\rangle & \langle 1|\hat{H}|2\rangle \\ \langle 2|\hat{H}|1\rangle & \langle 2|\hat{H}|2\rangle \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} \langle 1| \\ \langle 2| \end{pmatrix} \hat{H} \begin{pmatrix} |1\rangle & |2\rangle \end{pmatrix}$$ と表示

$$\begin{pmatrix} \langle \Uparrow\uparrow| \\ \langle \Uparrow\downarrow| \\ \langle \Downarrow\uparrow| \\ \langle \Downarrow\downarrow| \end{pmatrix} \hat{H} \begin{pmatrix} |\Uparrow\uparrow\rangle & |\Uparrow\downarrow\rangle & |\Downarrow\uparrow\rangle & |\Downarrow\downarrow\rangle \end{pmatrix}$$

$$= A \begin{pmatrix} \langle \Uparrow\uparrow| \\ \langle \Uparrow\downarrow| \\ \langle \Downarrow\uparrow| \\ \langle \Downarrow\downarrow| \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\Uparrow\uparrow\rangle & -|\Uparrow\downarrow\rangle + 2|\Downarrow\uparrow\rangle & 2|\Uparrow\downarrow\rangle - |\Downarrow\uparrow\rangle & |\Downarrow\downarrow\rangle \end{pmatrix}$$

$$= A \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

定常状態のエネルギー（固有値），固有ベクトル

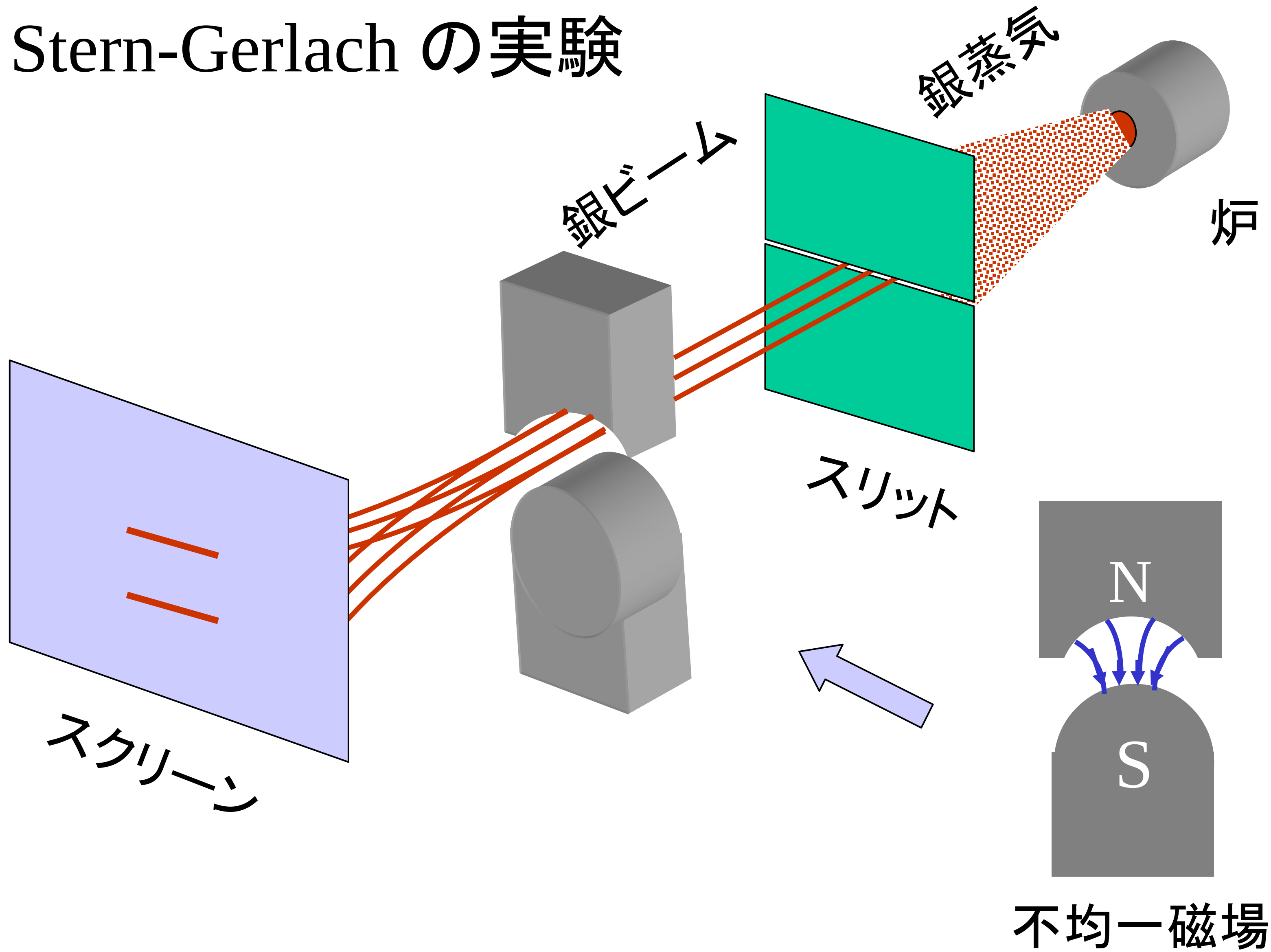
$$\begin{vmatrix} A-E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -A-E & 2A & 0 \\ 0 & 2A & -A-E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A-E \end{vmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \begin{cases} E_{\mathrm{I}},\, E_{\mathrm{II}},\, E_{\mathrm{III}} = A, \quad E_{\mathrm{IV}} = -3A \\ \underbrace{|\mathrm{I}\rangle = |\Uparrow\uparrow\rangle, \quad |\mathrm{II}\rangle = |\Downarrow\downarrow\rangle, \quad |\mathrm{III}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\Uparrow\downarrow\rangle + |\Downarrow\uparrow\rangle\right)}_{\text{スピン1の粒子}}, \quad \underbrace{|\mathrm{IV}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\Uparrow\downarrow\rangle - |\Downarrow\uparrow\rangle\right)}_{\text{スピン0の粒子}} \end{cases}$$

エネルギー $4A$ の電磁波：　波長 21cm，振動数 1420MHz

ゼーマン効果

Stern-Gerlach の実験

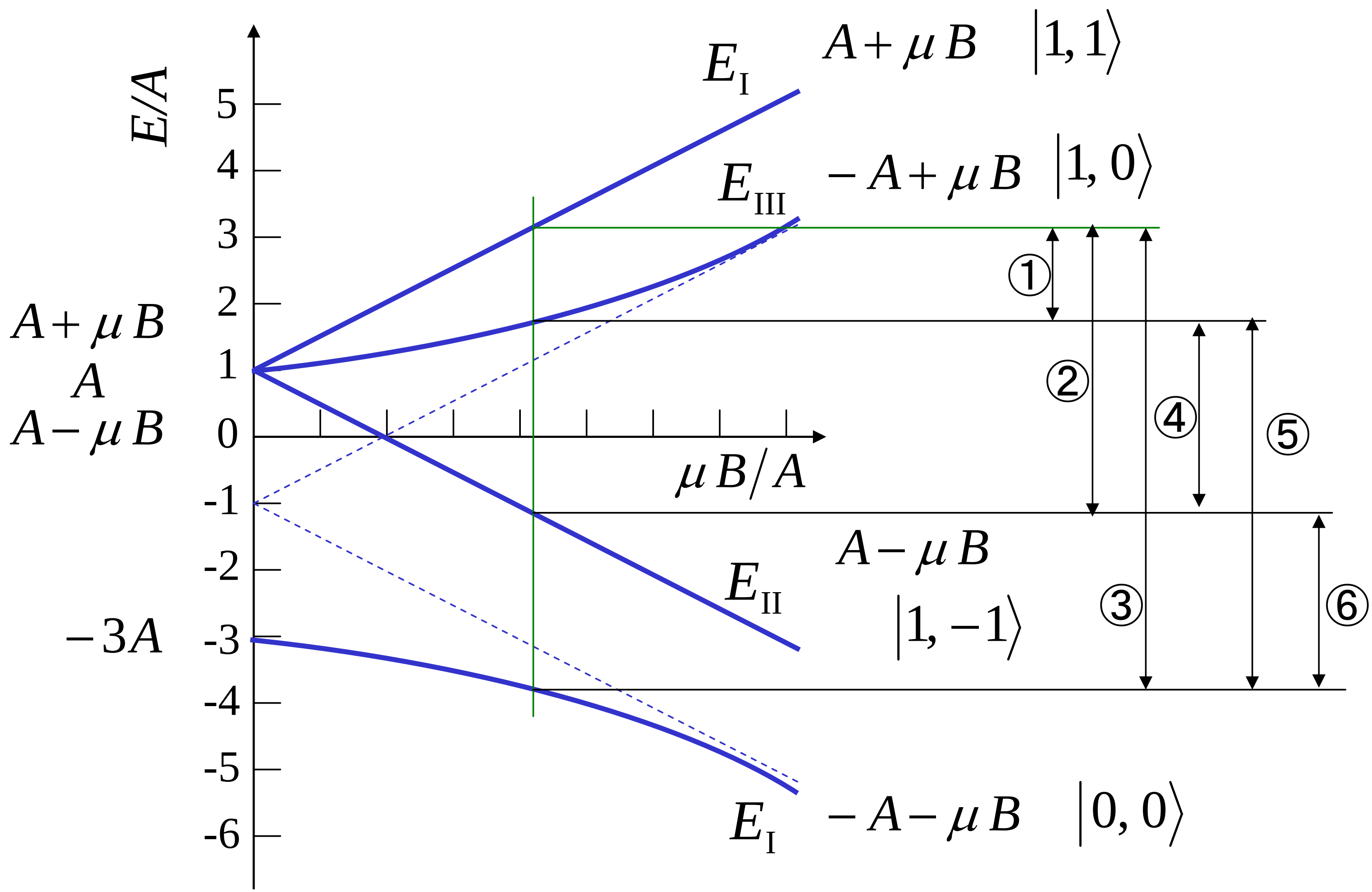


$$\hat{H} = A\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}^e \hat{\boldsymbol{\sigma}}^p\right) - \left(\mu_e \hat{\sigma}_z^e + \mu_p \hat{\sigma}_z^p\right) B$$
$$= A\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}^e \hat{\boldsymbol{\sigma}}^p\right) - \mu\, \hat{\sigma}_z^e\, B$$

$$H = \begin{pmatrix} A - \mu B & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -A - \mu B & 2A & 0 \\ 0 & 2A & -A + \mu B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A + \mu B \end{pmatrix}$$

固有値

$$E_{\mathrm{I,II}} = A \pm \mu\, B$$
$$E_{\mathrm{III,\,IV}} = -A \pm 2\sqrt{A^2 + \left(\mu\, B\right)^2}$$



E/A
5
4
3
2
1
0
-1
-2
-3
-4
-5
-6
$A+\mu B$
A
$A-\mu B$
$-3A$
$\mu B/A$
E_{I}
$A+\mu B$ $|1,1\rangle$
E_{III}
$-A+\mu B$ $|1,0\rangle$
E_{II}
$A-\mu B$
$|1,-1\rangle$
E_{I}
$-A-\mu B$ $|0,0\rangle$
①
②
③
④
⑤
⑥

Dirac の方程式（相対論的量子論）

［基本的考え方］

4次元時空：　$\left(ict, x, y, z\right)$

$$\left(iE/c\right)\times\left(ict\right) = -Et$$

⇕

4次元運動量：　$\left(iE/c, p_x, p_y, p_z\right)$

☆　4次元運動量のノルム：　$\dfrac{E^2}{c^2} - \left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) = m^2c^2$

“状態関数＝関数の重ね合せ　⇒　演算子は線形”

（注）　$A^2 + B^2$　の因数分解

複素数範囲（二元数）に広げ　⟶　$A + iB$　：線形

実数範囲（一元数）のみでは　⟶　$\sqrt{A^2 + B^2}$　：非線形

$A^2 + B^2 + C^2 + D^2$　⇒　四元数　？

“複素数　⇒　二元数　⇒　２成分のベクトル”

“四元数　⇒　４成分のベクトル”

☆　運動量のノルムを用いて量子化

$$\left[\hat{E}^2 - c^2\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right) - m^2c^4\right]\psi(\mathbf{r}) = 0$$

因数分解して線形化

$$\left[\hat{E} - c\left(\alpha_x \hat{p}_x + \alpha_y \hat{p}_y + \alpha_z \hat{p}_z\right) + \beta mc^2\right]\left[\hat{E} - c\left(\alpha_x \hat{p}_x + \alpha_y \hat{p}_y + \alpha_z \hat{p}_z\right) - \beta mc^2\right]\psi(\mathbf{r}) = 0$$

両式の係数を比較して

$$\alpha_x^2 = \alpha_x^2 = \alpha_x^2 = \beta^2 = 1$$

$$\alpha_x\alpha_y + \alpha_y\alpha_x = \alpha_y\alpha_z + \alpha_z\alpha_y = \alpha_z\alpha_x + \alpha_x\alpha_z = \alpha_x\beta + \beta\alpha_x = \alpha_y\beta + \beta\alpha_y = \alpha_z\beta + \beta\alpha_z = 0$$

$$\boldsymbol{\alpha}_x = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma}_x \\ \boldsymbol{\sigma}_x & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha}_y = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma}_y \\ \boldsymbol{\sigma}_y & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha}_z = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma}_z \\ \boldsymbol{\sigma}_z & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{1} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{\alpha}_x^2 = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_x^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma}_x^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha}_y^2 = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_y^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma}_y^2 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha}_z^2 = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_z^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma}_z^2 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta}^2 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{\alpha}_x\boldsymbol{\alpha}_y + \boldsymbol{\alpha}_y\boldsymbol{\alpha}_x = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_x\boldsymbol{\sigma}_y & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma}_x\boldsymbol{\sigma}_y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_y\boldsymbol{\sigma}_x & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma}_y\boldsymbol{\sigma}_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_x\boldsymbol{\sigma}_y + \boldsymbol{\sigma}_y\boldsymbol{\sigma}_x & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma}_x\boldsymbol{\sigma}_y + \boldsymbol{\sigma}_y\boldsymbol{\sigma}_x \end{pmatrix} = \mathbf{0}$$

$$\boldsymbol{\alpha}_x\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\alpha}_x = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\boldsymbol{\sigma}_x \\ \boldsymbol{\sigma}_x & \mathbf{0} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma}_x \\ -\boldsymbol{\sigma}_x & \mathbf{0} \end{pmatrix} = \mathbf{0}$$

$$\because \qquad \boldsymbol{\sigma}_x^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{1}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_x\boldsymbol{\sigma}_y + \boldsymbol{\sigma}_y\boldsymbol{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = \mathbf{0}$$

$$\left[\hat{E} - c\left(\alpha_x \hat{p}_x + \alpha_y \hat{p}_y + \alpha_z \hat{p}_z\right) - \beta mc^2\right]\psi(\mathbf{r}) = 0$$

$$\hat{H}\psi = \hat{E}\psi$$

$$\hat{H} = -i\hbar\left(\boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{x}}\frac{\partial}{\partial x} + \boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{y}}\frac{\partial}{\partial y} + \boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{z}}\frac{\partial}{\partial z}\right) + \boldsymbol{\beta} mc^2, \quad \hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_3 & a_4 \end{pmatrix}^T |u\rangle, \quad |u\rangle = e^{i(\mathbf{kr} - \omega t)}$$

$$\omega\hbar\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} = \hbar\left\{k_1\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} + k_2\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} + k_3\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix}\right\}$$

$$-mc^2\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix}$$

$$\omega\hbar\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\\a_4\end{pmatrix}=\hbar\left\{k_1\begin{pmatrix}a_4\\a_3\\a_2\\a_1\end{pmatrix}+ik_2\begin{pmatrix}-a_4\\a_3\\-a_2\\a_1\end{pmatrix}+k_3\begin{pmatrix}a_3\\-a_4\\a_1\\-a_2\end{pmatrix}\right\}-mc^2\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\-a_3\\-a_4\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix}^T,\quad \begin{pmatrix}0 & 1 & 0 & 0\end{pmatrix}^T$$

新しいスピン演算子: $\hat{s}_x=\dfrac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}'_{\mathbf{x}},\quad \boldsymbol{\sigma}'_{\mathbf{x}}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{x}} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{x}}\end{pmatrix}$

$$\hat{s}_z\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}\left|u\right\rangle=\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}'_{\mathbf{z}}\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}\left|u\right\rangle=\frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}\left|u\right\rangle$$

$$\hat{s}_z\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix}\left|u\right\rangle=\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}'_{\mathbf{z}}\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix}\left|u\right\rangle=-\frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix}\left|u\right\rangle$$

電磁場のある場合

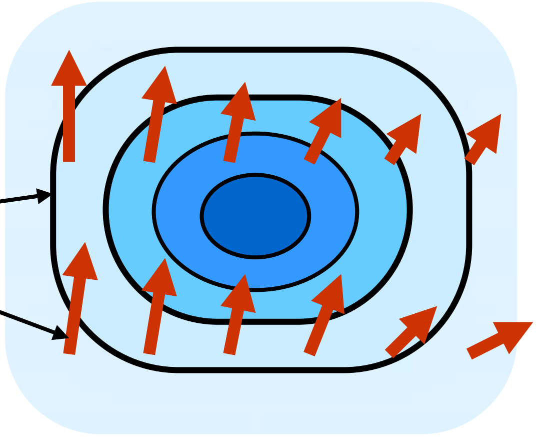
$$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi, \quad \hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} - \frac{eA_x}{c} \quad etc.$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + e\varphi + \frac{ie\hbar}{mc}\mathbf{A}\,\mathrm{grad} - \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}'\cdot\mathbf{H} - \frac{ie\hbar}{2mc}\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{E}\right]\psi$$

$$\mathbf{E} = -\,\mathrm{grad}\,\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{H} = \mathrm{rot}\,\mathbf{A}$$

φ： スカラーポテンシャル

$\mathbf{A}$： ベクトルポテンシャル



磁気モーメント $\mathbf{M}$ のエネルギー＝ $(\mathbf{M}\cdot\mathbf{H})$

$\boldsymbol{\sigma}'_z$ の固有値＝±1

$$\mathbf{M}_{\mathbf{z}}\psi = \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}'_z\psi = \pm\underbrace{\frac{e\hbar}{2mc}}_{\text{1ボーア磁子}}\psi$$

球対称ポテンシャルのディラック方程式

$$\hat{H} = c\boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{r}}\hat{p}_r + (i\hbar c/r)\boldsymbol{\alpha}_{\mathbf{r}}\boldsymbol{\beta}\hat{k} + \boldsymbol{\beta}mc^2 + U(r)$$

$$\hat{p}_r = \hat{\mathbf{p}}\frac{\mathbf{r}}{r} = \frac{1}{r}(\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}} - i\hbar) = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) = -\frac{i\hbar}{r}\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial r}$$

$$\alpha_r = \frac{\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{r}}{r} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hbar\hat{k} = (\sigma'\cdot\hat{L}) + \hbar; \qquad \hat{k}:$$ 全角運動量

$$\psi = \phi\cdot R; \qquad \phi = (\phi_A, \phi_B), \quad R = \left(\frac{F(r)}{r}, \frac{G(r)}{r}\right)$$

全角運動量成分の固有方程式: $\hbar\hat{k}\phi = \beta\left\{(\sigma'\cdot\hat{L}) + \hbar\right\}\phi$

動径成分の固有方程式

$$(E-U)\begin{pmatrix} F(r) \\ G(r) \end{pmatrix} - mc^2\begin{pmatrix} F(r) \\ -G(r) \end{pmatrix} = c\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{r}\right)\begin{pmatrix} -G(r) \\ F(r) \end{pmatrix} - \frac{\hbar ck}{r}\begin{pmatrix} G(r) \\ F(r) \end{pmatrix}$$

水素原子の電子エネルギー

$$\left.\begin{array}{l}\beta^2 = 1, \quad \hat{J}^2 = \left(\hat{L} + \dfrac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}'\right) \\[2ex] j(j+1)\hbar^2; \quad j = l \pm \dfrac{1}{2}\end{array}\right\} \Rightarrow$$

全運動量の固有値

$$|k| = j + \frac{1}{2}$$

パラメーター

$$\alpha_\pm = \frac{mc^2 - E}{\hbar c}, \quad \alpha = \sqrt{\alpha_+ \alpha_-} = \frac{\sqrt{m^2c^4 - E^2}}{\hbar c}, \quad \rho = \alpha r, \quad \gamma = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c}$$

$$F(\rho) = f(\rho)e^{-\rho}, \quad G(\rho) = g(\rho)e^{-\rho}$$

$$g' - g + \frac{kg}{\rho} - \left(\frac{\alpha_+}{\alpha} - \frac{\gamma}{\rho}\right) f = 0, \quad f' - f + \frac{kf}{\rho} - \left(\frac{\alpha_-}{\alpha} - \frac{\gamma}{\rho}\right) g = 0,$$

$$f = \sum_{v=1}^{\infty} a_v \rho^{s+v}, \quad g = \sum_{v=1}^{\infty} b_v \rho^{s+v}$$

係数比較，$r=0$ の境界条件，$a_0 \neq 0, b_0 \neq 0$ の条件

$\Longrightarrow \quad s=\sqrt{k^2-r^2}$

$v=n'$ での項打切り条件

$$E=\frac{mc^2}{\sqrt{1+\left\{\gamma^2/(s+n')^2\right\}}}=mc^2\left[1-\frac{\gamma^2}{2n^2}-\frac{\gamma^4}{2n^4}\left(\frac{n}{j+(1/2)}\right)-\frac{3}{4}\right]$$

$s=\sqrt{k^2-r^2}$ $\quad$ $n'=n-|k|=n-(j+1/2)$

エネルギー微細構造の式

$$\left(E_{relative}-mc^2\right)-E_{unrelative}=-\frac{mc^2\gamma^4}{2n^4}\left(\frac{n}{j+1/2}-\frac{3}{4}\right)$$

相対論的質量補正　＋　$L\cdot S$ 相互作用のエネルギー補正