3.6. 電子スピン

- 量子数

$$\begin{cases}\hat{S}^2\Gamma = s(s+1)\hbar^2\Gamma \\ \hat{S}_z\Gamma = m_s\hbar\Gamma\end{cases} \Rightarrow \begin{cases} s & \text{:スピン量子数} \\ m_s & \text{:スピン磁気量子数}\end{cases}$$

$$(m_s = s, s-1, \ldots -s)$$

→ m_sには2通りの値しか許されない

$$2s+1=2$$

$$\to \begin{cases} s = 1/2 \\ m_s = \pm 1/2 \end{cases}$$ （半整数角運動量）

sは大きな値を取れないので、スピン角運動量は決して古典的に振る舞うことはない。

3.6. 電子スピン

- 固有関数

$$\Gamma \begin{cases} \alpha \text{ for } m_s = +1/2 & \alpha\text{スピン状態(上向きスピン)} \\ \beta \text{ for } m_s = -1/2 & \beta\text{スピン状態(下向きスピン)} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \hat{S}_z\alpha = +\hbar/2\alpha \\ \hat{S}_z\beta = -\hbar/2\beta \end{cases}$$

3.6. 電子スピン

- 電子の波動関数の拡張
  - これまでの電子座標 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ に加えて、スピン座標σを導入する。

$$(x,y,z) \to (x,y,z,\underbrace{\sigma}_{\text{4番目の座標}})$$

  - σとは？
    - 古典的に対応する量がない。
    - 2つの値しか取りえない。

$$\sigma = \uparrow \text{ or } \downarrow$$

$$\begin{cases} \alpha(\uparrow) = 1, \alpha(\downarrow) = 0 \\ \beta(\uparrow) = 0, \beta(\downarrow) = 1 \end{cases} \xrightarrow{\text{行列で表示}} \begin{cases} \alpha \to \begin{pmatrix}\alpha(\uparrow) \\ \alpha(\downarrow)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 \\ 0\end{pmatrix} \\ \beta \to \begin{pmatrix}\beta(\uparrow) \\ \beta(\downarrow)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 \\ 1\end{pmatrix} \end{cases}$$

$\hat{S}_z \to \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0 \\ 0 & -1\end{pmatrix}$ と書ける

3.6. 電子スピン

- 電子の波動関数の拡張(続き)
  - これまでの波動関数

$$\psi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r})$$

  - これから

$$\psi(\mathbf{r},\sigma) = \underbrace{\phi(\mathbf{r})}_{\text{空間部分}}\underbrace{\Gamma(\sigma)}_{\text{スピン部分}}$$

$S_z = 1/2$ or $S_z = -1/2$ の固有状態なら

$$\psi(\mathbf{r},\sigma) = \begin{cases} \phi(\mathbf{r})\alpha(\sigma) \\ \phi(\mathbf{r})\beta(\sigma) \end{cases}$$

  - 以降、

$\psi(\mathbf{r},\sigma) \equiv \psi(q)$ と表す（qは一般座標）。

3.7. Pauliの排他原理

- Pauli（パウリ）
  - “1つのオービタル（n,l,mで規定）にはαスピン及びβスピンの電子各一個ずつ収容可能であるが、同種のスピンの電子2個以上を収容することができない”

O.K. × ×

オービタル

1945年
ノーベル物理学賞

3.7. Pauliの排他原理

- 波動関数の対称性*（粒子の交換）と関係する

例） 二つの粒子1,2の波動関数：$\Psi(q_1, q_2)$
粒子の入れ替えについて、

$\Psi(q_2, q_1) = \Psi(q_1, q_2)$ ：対称

$\Psi(q_2, q_1) = -\Psi(q_1, q_2)$ ：反対称

*スピン量子数Sが整数か、半整数か、による（相対論的量子力学）