量子力学3第9回授業まとめ 201310860 佐藤耀至

⑩ スピン spin

一様磁場の下の量子系のハミルトニアンは、ローレンツ力を導く古典系のハミルトニアンを考えると、以下のように表わせる。

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{p} - e\vec{A})^2 + e\phi$$

ただし、$\vec{A}$, ϕはそれぞれベクトルポテンシャル、スカラーポテンシャルで、以下の関係をみたす。($\vec{B}$は磁場, $\vec{E}$は電場)

$$\vec{B} = \mathrm{rot}\,\vec{A}, \quad \vec{E} = -\nabla\phi - \frac{d\vec{A}}{dt}$$

ここで、磁場が一様であるとき、ベクトルポテンシャルは一意にな決められない。よって以下のようにとっても問題ない。

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r} \qquad \text{(対称ゲージ)}$$

$$\begin{aligned}
\because\ (\mathrm{rot}\,\vec{A})_i &= \frac{1}{2}\{\mathrm{rot}(\vec{B}\times\vec{r})_k\}_i \\
&= \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}\partial_j(\vec{B}\times\vec{r})_k \\
&= \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}\partial_j(\varepsilon_{klm}B_l r_m) \\
&= \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{klj}B_l \\
&= \frac{1}{2}\varepsilon_{kij}\varepsilon_{klj}B_l \\
&= \frac{1}{2}\times 2\,\varepsilon_{il}B_l \\
&= B_i \quad //
\end{aligned}$$

以上より $\vec{B} = \mathrm{rot}\,\vec{A}$; $\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B}\times\vec{r}$

NO.
DATE

ここで、$H=\frac{1}{2m}(\vec{p}-e\vec{A})^2+e\phi$としていたが、磁場の影響を受けるのは第1項のみより、$\phi=0$としてもよい。すると、

$$H=\frac{1}{2m}(\vec{p}-eA)^2=\frac{\vec{p}^2}{2m}-\frac{e}{2m}(\vec{p}\cdot\vec{A}+\vec{A}\cdot\vec{p})+\frac{1}{2m}(e\vec{A})^2$$

$$\equiv\frac{\vec{p}^2}{2m}+H_p+H_D$$

$$H_p\equiv-\frac{e}{2m}(\vec{p}\cdot\vec{A}+\vec{A}\cdot\vec{p}),\quad H_D=\frac{1}{2m}(e\vec{A})^2$$ とした。

ここで、$H_D=\frac{e^2}{8m}(\vec{B}\times\vec{r})^2=\frac{e^2}{8m}(\vec{B}\times\vec{r})\cdot(\vec{B}\times\vec{r})$

ここで、$(\vec{A}\times\vec{B})\cdot(\vec{C}\times\vec{D})$

$\vec{A}\cdot(\vec{B}\times\vec{C})=\vec{B}\cdot(\vec{C}\times\vec{A})$

$=\vec{C}\cdot(\vec{D}\times(\vec{A}\times\vec{B}))$

〃

$=\vec{D}\cdot((\vec{A}\times\vec{B})\times\vec{C})$

$(\vec{A}\times\vec{B})\vec{C}=(\vec{A}\cdot\vec{C})\vec{B}-(\vec{B}\cdot\vec{C})\vec{A}$

$=\vec{D}\cdot((\vec{A}\cdot\vec{C})\vec{B}-(\vec{B}\cdot\vec{C})\vec{A})$

$=(\vec{A}\cdot\vec{C})(\vec{B}\cdot\vec{D})-(\vec{B}\cdot\vec{C})(\vec{A}\cdot\vec{D})$ より

$$H_D=\frac{e^2}{8m}\{(\vec{B}\cdot\vec{B})(\vec{r}\cdot\vec{r})-(\vec{r}\cdot\vec{B})(\vec{B}\cdot\vec{r})\}$$
$$=\frac{e^2}{8m}\{(\vec{B}^2\vec{r}^2)-(\vec{B}\cdot\vec{r})^2\}$$

ここで、θを$\vec{B}$と$\vec{r}$のなす角とし、$\vec{r}_\perp=\vec{r}\sin\theta$とすると、

$\vec{B}^2\vec{r}_\perp^2=\vec{B}^2\vec{r}^2\sin^2\theta=\vec{B}^2\vec{r}^2(1-\cos^2\theta)=(\vec{B}^2\vec{r}^2)-(\vec{B}\cdot\vec{r})^2$ より、

$$H_D=\frac{e^2}{8m}\vec{B}^2\vec{r}_\perp^2$$ となる。

この項は、普通の原子では第2項のH_pより十分小さいとできるので、

$$H\sim\frac{\vec{p}^2}{2m}+H_p$$ となる。

次に $H_p = \frac{-e}{2m}(\vec{p}\cdot\vec{A}+\vec{A}\cdot\vec{p})$ について考える。∀fに対し、

$$\begin{cases}(\vec{p}\cdot\vec{A})f = -i\hbar\vec{\nabla}\cdot(\vec{A}f) = -i\hbar(\vec{\nabla}\cdot\vec{A})f - i\hbar\vec{A}\cdot(\vec{\nabla}f) & \text{—①}\\ (\vec{A}\cdot\vec{p})f = -i\hbar\vec{A}\cdot(\vec{\nabla}f) & \text{—②}\end{cases}$$

ここで、対称ゲージ $\vec{A}=\frac{1}{2}\vec{B}\times\vec{r}$ に対し、

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{A} = \partial_i A_i = \partial_i\left(\frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}B_j r_k\right) = \frac{1}{2}\varepsilon_{iji}B_j = 0$$

これより①から $(\vec{p}\cdot\vec{A})f = -i\hbar\vec{A}\cdot(\vec{\nabla}f) \underset{②}{=} (\vec{A}\cdot\vec{p})f$

$$\therefore\ H_p = -\frac{e}{2m}(\vec{A}\cdot\vec{p}+\vec{A}\cdot\vec{p}) = -\frac{e}{m}\vec{A}\cdot\vec{p} = -\frac{e}{2m}(\vec{B}\times\vec{r})\cdot\vec{p}$$

$$= -\frac{e}{2m}(\vec{r}\times\vec{p})\cdot\vec{B} = -\frac{e}{2m}\vec{B}\cdot\vec{L}$$

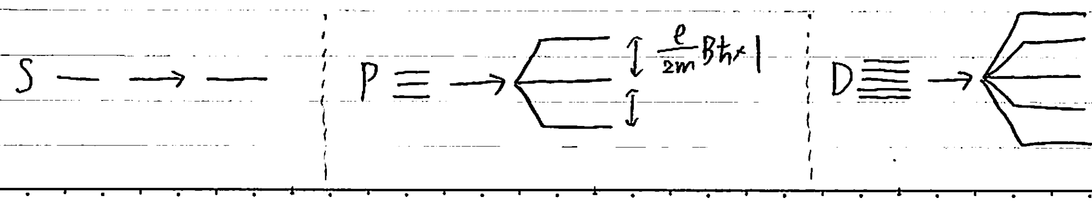
∴以上より、 $H=\frac{\vec{p}^2}{2m}+H_p$; $H_p = -\frac{e}{2m}\vec{B}\cdot\vec{L}$ となる。

ここで、原子内の電子が受ける原子核からのポテンシャルは中心力であり、回転不変であるから、一般に角運動量は保存し、エネルギー準位ごとに定まる $\vec{L}^2=\hbar^2 l(l+1)$ に対応して、エネルギー準位は $(2l-1)$ 重に縮退する。

$$\begin{cases}L=0 \longleftrightarrow S\ (\text{縮退}1)\\ L=1 \longleftrightarrow P\ (\ 〃\ 3)\\ L=2 \longleftrightarrow D\ (\ 〃\ 5)\end{cases}$$

分光学の記法
notation for spectroscopy

また、$\vec{B}\cdot\vec{L}$ はスカラーであり、任意の方向に座標をとってもよい。よって $\vec{B}=(0,0,B)$ とすれば、その固有状態は L_z の固有値ごとに $(2l+1)$ 個に分裂するはずである。(ゼーマン効果 Zeeman effect)



NO.

DATE

しかし、$H_p = -\frac{e}{2m}\vec{B}\cdot\vec{L}$ では、実際の原子の磁場下のスペクトルの実験を説明できなかった。次の変更をする必要がある。

$$H_p \longrightarrow H_p' = -\frac{e}{2m}\vec{B}\cdot(\vec{L}+g\vec{S}) \ ; \ g \sim 2$$

ここで、新たな角運動量 $\vec{S}$ を導した。$\vec{S}$ は $[L_i, S_j]=0$ をみたす。

$$\vec{S} = \hbar s(s+1) \ ; \ s = \frac{1}{2}$$

であり、この $\vec{S}$ をスピンと呼ぶ。(スピン仮説 spin hypothesis)

この仮説の裏づけ

Dirac eq. { 特殊相対論 special relativity / 量子論 quantum mechanics }

$\downarrow$ $|v/c| \ll 1$

spin

$$H_p' = -\frac{e}{2m}\vec{B}\cdot\vec{L} - \underbrace{\frac{e}{2m}g\vec{S}}_{\vec{\mu}}\cdot\vec{B}$$

$$= -\frac{e}{2m}\vec{B}\cdot\vec{L} - \vec{\mu}\cdot\vec{B}$$

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2m}g\vec{S} = \underbrace{\frac{e\hbar}{2m}}_{\mu_B} g\vec{S}/\hbar = \mu_B g\vec{S}/\hbar$$

μ_B: ボーア磁子 Bohr magneton