量子力学3

2018/0850 後藤虎斗

電磁場中の荷電粒子の運動(古典力学)

ローレンツ力の下での運動

※ $m\ddot{\mathbb{r}} = \mathbb{F}$, $\mathbb{F} = e(\mathbb{E} + \mathbb{v}\times\mathbb{B})$ $\quad \mathbb{v}=\dot{\mathbb{r}}$, $\mathbb{E}=\mathbb{E}(\mathbb{r}(t),t)$, $\mathbb{B}=\mathbb{B}(\mathbb{r}(t),t)$

Lagrangian

$L=\frac{1}{2}m\dot{\mathbb{r}}^2 - e\phi + e\dot{\mathbb{r}}\cdot\mathbb{A}$

$=\frac{1}{2}m\dot{\mathbb{r}}^2 - e\phi(\mathbb{r}(t),t) + e\dot{\mathbb{r}}\cdot\mathbb{A}(\mathbb{r}(t),t)$

$\phi, \mathbb{A}$: スカラーポテンシャルとベクトルポテンシャル

$\mathbb{E} = -\frac{\partial\mathbb{A}}{\partial t} - \nabla\phi$

$\mathbb{B} = \mathrm{rot}\,\mathbb{A}$ $\quad (\dot{\mathbb{r}}\times\mathbb{B})_i$

運動方程式※はポテンシャルを使うと $\quad (\mathrm{rot}\,A)_k$

$m\ddot{r}_i = e(\underbrace{-\partial_t A_i - \partial_i\phi}_{E_i} + \underbrace{\varepsilon_{ijk}\dot{r}_j\varepsilon_{kab}}_{\delta_{ia}\delta_{jb}-\delta_{ib}\delta_{ja}}\partial_a A_b)$

$= e(-\partial_t A_i - \partial_i\phi + \dot{r}_j(\partial_i A_j - \partial_j A_i))$

① ② ③ ④

一方Euler方程式は

$0=\frac{\delta L}{\delta r_i} = \frac{\partial L}{\partial r_i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i}$ $\quad A_i(\mathbb{r}(t),t)$

$= -e\partial_i\phi + e\dot{r}_j\partial_i A_j - \frac{d}{dt}(m\dot{r}_i + eA_i)$

② ③

$-m\ddot{r}_i - e\partial_t A - e\dot{\mathbb{r}}\cdot\nabla A_i$ ①

$-e\dot{r}_j\partial_j A_i$ ④

とNewton eq.を導く. OK

ハミルトニアンを導く. $L=\frac{1}{2}m\dot{r}_i^2 - e\phi + e\dot{\mathbb{r}}\cdot\mathbb{A}$ $\quad e\mathbb{v}\cdot\mathbb{A}$

まず運動量

$P_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i} = m\dot{r}_i + eA_i$, $\mathbb{P} = m\mathbb{v} + e\mathbb{A}$

$\mathbb{v} = \frac{1}{m}(\mathbb{P} - e\mathbb{A})$: 速度ベクトル

$H = \dot{\mathbb{r}}\cdot\mathbb{P} - L$

$= \mathbb{v}\cdot(m\mathbb{v} + e\mathbb{A}) - (\frac{1}{2}m\mathbb{v}^2 - e\phi + e\mathbb{v}\cdot\mathbb{A})$

$= \frac{1}{2}m\mathbb{v}^2 + e\phi$

$= \frac{1}{2m}(\mathbb{P} - e\mathbb{A})^2 + e\phi$

ゼーマン効果

一様磁場B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て、

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

とする。ここでベクトルポテンシャルAは

$$\mathrm{rot}\,\mathbb{A} = \mathbb{B}$$

である。

この条件を満たすベクトルポテンシャルとしていわゆる対称ゲージをとる。

$$\mathbb{A} = \frac{1}{2}\mathbb{B}\times\mathbb{r}$$

$(\mathrm{rot}\,\mathbb{A})_i = \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}\partial_j\varepsilon_{kab}B_a r_b \to \delta_{jb}$

$= \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{kaj}B_a$

$= \frac{1}{2}\underbrace{\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ajk}}_{2\delta_{ia}}B_a = \delta_{ia}B_a = B_i$

$\varepsilon_{ijk}\partial_j A_k$, $A_k = \varepsilon_{kab}B_a r_b/2$

展開して

$H = H_0 + H_p + H_D$ $\quad H = \frac{1}{2m}(\mathbb{P} - e\mathbb{A})^2 + e\phi$

$H_0 = \frac{\mathbb{P}^2}{2m} + e\phi$

$H_p = -\frac{e}{2m}(\mathbb{P}\cdot\mathbb{A} + \mathbb{A}\cdot\mathbb{P})$

$H_D = \frac{e^2}{2m}\mathbb{A}^2$

H_DとH_pを定性的に比較する。考えている現象の典型的な長さをaとして$P\sim\frac{\hbar}{a}$; $B\sim\frac{A}{a}$と見積もれば

$H_D/H_p \sim \frac{e^2A^2}{m}\Big/\frac{ePA}{m} = \frac{eA}{P} = \frac{aeBa}{\hbar} \sim \frac{\phi}{\phi_0}$

$\phi_0 = \frac{h}{e}$ flux quantum $\quad \phi = Ba^2$

ここで$\phi_0 = \frac{h}{e}$は磁束単位、ϕは典型的な面積を貫く磁束である。

$\mathbb{P} = -i\hbar\nabla$

$\mathrm{div}\,\mathbb{A} = \frac{1}{2}\partial_i\varepsilon_{ija}B_j r_a = \frac{1}{2}\varepsilon_{iji}B_j = 0$ だから $\quad \mathbb{P}\cdot\mathbb{A}f = -i\hbar\nabla\cdot(\mathbb{A}f)$

$\mathbb{P}\cdot\mathbb{A} = -i\hbar\,\mathrm{div}\,\mathbb{A} + \mathbb{A}\cdot\mathbb{P} = \mathbb{A}\cdot\mathbb{P}$ $\quad = -i\hbar\nabla\cdot\mathbb{A}f - i\hbar\mathbb{A}\cdot\nabla f$, $\mathbb{A}\cdot\mathbb{P}f$

よって $H_p = -\frac{e}{m}\mathbb{A}\cdot\mathbb{P} = -\frac{e}{2m}(\mathbb{B}\times\mathbb{r})\cdot\mathbb{P}$

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

磁場のない場合、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$\mathbb{L}^2 = \hbar^2 l(l+1)$に対応して、エネルギー準位は$2l+1$重に縮退する。磁場下の原子では磁場の効果を$H_p$により取り入れて考える必要がある。ここで$\mathbb{B}\cdot\mathbb{L}$はスカラーであるから任意の方向に座標をとってもよく、$\mathbb{B}$方向にz軸をとれば、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。これをゼーマン効果と呼ぶ

$H_p = -\mu_L\cdot\mathbb{B}$, $\mu_L = \frac{e\mathbb{L}}{2m}$

$H_p|m_L\rangle = E_{m_L}|m_L\rangle$, $E_m = \frac{e\hbar}{2m}m_L$, $m_L = -l,\dots,l$

$2l+1$ $\quad \Delta E \sim \frac{e\hbar}{2m}$

スピン仮説

しかしながら、このHpの項のみ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ず

$$H_p' = -\frac{e}{2m}\mathbf{B}\cdot(\mathbf{L}+g\mathbf{S}),\quad g\approx 2$$

$$= H_p + H_s$$

$$H_s = -\boldsymbol{\mu}_s\cdot\mathbf{B}$$

$$\boldsymbol{\mu}_s = g\frac{e}{2m}\mathbf{S} = g\mu_B\mathbf{S}/\hbar$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} : (\text{Bohr磁子})$$

の余分な角運動量 $\mathbf{S}$, $\mathbf{S}^2 = \hbar^2(1/2+1)/2$,
$S = 1/2$ を導入することが必要であった。この仮想的な角運動量をスピンと呼んだ(スピン仮説)。
この仮説は後にディラックにより特殊相対論と整合的な量子論の導入によって理論的に導かれた。なお、ここで現れた磁化の次元をもつ量 μ_B をボーア磁子とよぶ。

Dirac 方程式

$\frac{v}{c} \ll 1$ の非相対論的極限で

H_s とスピン軌道相互作用が導かれる。