201810845
鴨居優希

No.
Date

量子力学3 レポート9

電磁場中の荷電粒子の運動 (古典力学)

電磁場 $\mathbb{E}(\mathbb{r},t)$ $\mathbb{B}(\mathbb{r},t)$

ローレンツ力の下での運動

㊀ $m\ddot{\mathbb{r}} = \mathbb{F}$, $\mathbb{F} = e(\mathbb{E} + \mathbb{v}\times\mathbb{B})$, $\mathbb{v} = \dot{\mathbb{r}}$

Newton eq.

$\mathbb{E} = \mathbb{E}(\mathbb{r}(t),t)$
$\mathbb{B} = \mathbb{B}(\mathbb{r}(t),t)$

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

$$\begin{cases} \mathbb{E} = -\frac{\partial \mathbb{A}}{\partial t} - \nabla\phi \\ \mathbb{B} = \mathrm{rot}\,\mathbb{A} \end{cases}$$

運動方程式㊀はポテンシャルを使うと

$$m\ddot{r}_i = e\,(\underbrace{-\partial_t A_i - \partial_i\phi}_{E_i} + \overbrace{\epsilon_{ijk}\dot{r}_j \underbrace{\epsilon_{kab}}_{}\partial_a A_b}^{(\dot{r}\times B)_i})$$

$\epsilon_{ijk}\epsilon_{kab} = \delta_{ia}\delta_{jb} - \delta_{ib}\delta_{ja}$, $(\mathrm{rot}A)_k$

$$= e(-\underset{①}{\partial_t A_i} - \underset{②}{\partial_i\phi} + \dot{r}_j(\underset{③}{\partial_i A_j} - \underset{④}{\partial_j A_i}))$$

一方 Euler方程式は

$$0 = \frac{\delta L}{\delta r_i} = \frac{\partial L}{\partial r_i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i} = -\underset{②}{e\partial_i\phi} + \underset{③}{e\dot{r}_j\partial_i A_j} - \frac{d}{dt}(m\dot{r}_i + eA_i)$$

$$\frac{d}{dt}(m\dot{r}_i + eA_i) = -m\ddot{r}_i - e\partial_t A - e\dot{\mathbb{r}}\cdot\nabla A_i$$
$$= -m\ddot{r}_i - \underset{①}{e\partial_t A} - \underset{④}{e\dot{r}_j\partial_j A_i}$$

したがって Newton eq. を導く

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

まず運動量

$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_i} = m\dot{r}_i + eA_i \Rightarrow \mathbb{p} = m\mathbb{v} + e\mathbb{A}$

$\mathbb{v} = \frac{1}{m}(\mathbb{p} - e\mathbb{A})$: 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 $\mathbb{B}$ 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 $\mathbb{A}$ 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ろう。

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

これを確かめると、

$(\mathrm{rot}A)_i = \epsilon_{ijk}\partial_j A_k$

$= \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}\partial_j\epsilon_{kab}B_a \overbrace{r_b}^{\to \delta_{jb}}$

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

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

ハミルトニアンを展開して

$H = H_0 + H_P + H_D$

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

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

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

H_D と H_P を定性的に比較してみる。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

$$\frac{H_D}{H_P} \sim \frac{\frac{e^2A^2}{m}}{\frac{epA}{m}} = \frac{eA}{p} = \frac{aeBa}{\hbar} \sim \frac{\Phi}{\Phi_0}$$

$(\Phi_0 = \frac{h}{e}, \ \Phi = Ba^2)$

ここで $\Phi_0 = \frac{h}{e}$ は磁束単位で、Φ は典型的な面積を貫く磁束である。a として金属(銅)の格子定数 $3.6\,\text{Å} = 3.6\times10^{-10}\,[\mathrm{m}]$ (ボーア半径 a_B の7倍程度)、磁場として、強磁場とされる $B \sim 10\,[\mathrm{T}]$ を代入すると

$\Phi = 0.0003\,\Phi_0$ であり、$\frac{H_D}{H_P} \sim 0.0003$ は原子スケールの現象では十分に小さいと見積もられるので、しばらく H_D は無視する。

$\mathrm{div}\,\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\partial_i \varepsilon_{ijk} B_j r_k = \frac{1}{2}\varepsilon_{iji} B_j = 0$ だから

通常 $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}$ は可換ではないが、$\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}=0$ という条件があるときのみ可換になる。実際に

$$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}f = -i\hbar\nabla\cdot(\boldsymbol{A}f)$$
$$= -i\hbar\nabla\cdot\boldsymbol{A} - i\hbar\boldsymbol{A}\cdot\nabla f$$
$$= 0 - i\hbar\boldsymbol{A}\cdot\nabla f = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}f$$

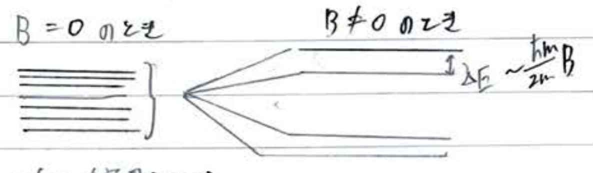
よって

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

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 $\boldsymbol{L}^2 = \hbar^2 l(l+1)$ 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 $\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{L}$ 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、$\boldsymbol{B}$ 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(Zeeman)効果とよぶ。

$$H_p = -\boldsymbol{\mu}_L\cdot\boldsymbol{B},\quad \boldsymbol{\mu}_L = \frac{e\boldsymbol{L}}{2m}$$

$$H_p|m_L\rangle = +E_{m_L}|m_L\rangle,\quad E_m = \frac{e\hbar}{2m}m_L,\quad m_L = l, \cdots, l$$



$2l+1$ 重に縮退している。

・スピン仮説

しかしながら、この H_p 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、

$$H'_p = -\frac{e}{2m}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{L} + g\boldsymbol{S}),\quad g \simeq 2$$
$$= H_p + H_s$$
$$H_s = -\boldsymbol{\mu}_s\cdot\boldsymbol{B}$$
$$\boldsymbol{\mu}_s = g\frac{e}{2m}\boldsymbol{S} = g\,\mu_B\boldsymbol{S}/\hbar$$
$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}\quad (:\text{Bohr磁子})$$

の余分な角運動量 $\boldsymbol{S}$, $\boldsymbol{S}^2 = \hbar^2\frac{1}{2}\frac{\frac{1}{2}+1}{}$, $s = \frac{1}{2}$ を導入することが必要であった。そしてこの仮想的な角運動量をスピンと呼んだ(スピン仮説)。この仮説はのち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

をくくして非相対論的極限で H_s とスピン軌道相互作用が導かれる。