量子力学第２:第3回演習 (00/5)

担当：星　健 夫（物理工学科）

12

球対称ポテンシャル系に対し、スピン軌道相互作用 (spin-orbit coupling) をいれて考える。対応するハミルトニアンは、次式で与えられる。

$$H = H_0 + H_{\mathrm{SO}}, \quad H_0 = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r), \quad H_{\mathrm{SO}} = \xi(r)\,\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}$$

合成角運動量を $\boldsymbol{j} \equiv \boldsymbol{l} + \boldsymbol{s}$ と定義する。$X = \boldsymbol{l}^2, l_x, l_y, l_z, \boldsymbol{s}^2, s_x, s_y, s_z, \boldsymbol{j}^2, j_x, j_y, j_z$ のそれぞれの場合について、交換関係 $[H, X]$ を計算せよ。

13

前問の記法を用いる。H_0 の固有状態は、$|klms\rangle$ と書ける。ここで k, l, m, s はそれぞれ、動径量子数、軌道角運動量、軌道角運動量の z 成分、スピン角運動量の z 成分、である。これをもちいて、

$$H_0|klms\rangle = \epsilon_{kl}|klms\rangle$$

と書ける。固有エネルギーは (kl) によってのみ決まり、各準位は m, s の自由度 $(m = 0, \pm1, \pm2 \ldots \pm l, s = \pm1/2)$ すなわち $2(2l+1)$ 重に縮退している。そこで同じ (kl) に属する $\{|klms\rangle\}_{ms}$ を重ね合わせて、H の固有関数を求める。以下 $l = 1$ とし、（一定値である k, l を省略して）$|klms\rangle$ を $|ms\rangle$ と書く。$(m = 0, \pm1, s = \uparrow, \downarrow)$

(a)

$$\hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}} = \frac{1}{2}(\hat{l}_+\hat{s}_- + \hat{l}_-\hat{s}_+) + \hat{l}_z\hat{s}_z$$

を示せ。ただし、$l_\pm \equiv l_x \pm il_y$、$s_\pm \equiv s_x \pm is_y$。

(b) (a) を用いて行列 $< ms|\hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}|m's' >$ を求め、対角化せよ。

ヒント：行列は 6×6 であるが、ブロック対角化されていて、実質的には 2×2 の行列を対角化すれば良い。

(c) (b) によって得られた、H の固有関数を求め、それぞれ固有エネルギーを求めよ。H_0 の持っていた $2(2l+1) = 6$ 重の縮退は、いくつの準位に分かれたか。

14

前々問の記法を用いる。原子番号 Z の水素型原子 $(V(r) \equiv -Ze/r)$ に対し、スピン軌道相互作用 $H_{\rm SO} = \xi(r)\,\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}$ の表式と大きさを見積もることにする。ここで、$\boldsymbol{l}, \boldsymbol{s}$ はそれぞれ、$\hbar$ で規格化された、軌道角運動量とスピン角運動量をあらわす。因子 $\xi(r)$ は、これから求める量である。

スピン角運動量の正確な議論には、相対論的量子力学が必要になる。ここではそれをせず非相対論的に考え、必要な時に天下り的に（正確な結論とあわせるための）補正を加えることにする。

(a) H_0 の基底状態に対して、$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle$ を計算せよ。

(b) 電子の運動を古典的円運動と考えて、軌道磁気モーメント $\boldsymbol{\mu}_l$ を計算したい。一般に、磁気モーメント $\boldsymbol{\mu}$ は、電流密度分布 $\boldsymbol{I}(\boldsymbol{r}')$ に対し、

$$\boldsymbol{\mu} \equiv \frac{1}{2c} \int d\boldsymbol{r}'\, \boldsymbol{r}' \times \boldsymbol{I}(\boldsymbol{r}')$$

と与えられる。電子を座標 $\boldsymbol{r}(t)$・速度 $\boldsymbol{v}(t)$ の点電荷と考え、上式に代入することにより、軌道磁気モーメントが $\boldsymbol{\mu}_l = -\mu_{\rm B}\boldsymbol{l}$ となることを示せ。ここで、$\mu_{\rm B} \equiv e\hbar/2mc$ は、Bohr 磁子と呼ばれる量である。一方、スピン磁気モーメント $\boldsymbol{\mu}_s$ は、同様の式を天下り的に 2 倍にすると正しい答え $\boldsymbol{\mu}_s = -2\mu_{\rm B}\boldsymbol{s}$ が得られる。

(c) スピンを電子の自転運動と考え、スピン軌道相互作用を導いてみよう。電子が静止した座標系で考えると、原子核は電子の回りを円運動していることになる。このとき電子は、原子核が作る有効磁場 $\boldsymbol{\mathcal{H}}_{\rm eff}$ を感じる。有効磁場 $\boldsymbol{\mathcal{H}}_{\rm eff}$ は、Biot-Savart の法則より

$$\boldsymbol{\mathcal{H}}_{\rm eff} = \frac{(+Ze)(-\boldsymbol{v}) \times \boldsymbol{r}}{cr^3}$$

となる（この座標系で原子核の速度ベクトルは $-\boldsymbol{v}$ になることに注意せよ）。一方、スピン磁気モーメント $\boldsymbol{\mu}_s = -2\mu_{\rm B}\boldsymbol{s}$ をもつ電子は、磁気エネルギー $\boldsymbol{\mu}_s \cdot \boldsymbol{\mathcal{H}}_{\rm eff}$ を持つはずであり、これが $H_{\rm SO}$ に相当すると考えられる。こうして得られた式を天下り的に 1/2 倍にすると、$H_{\rm SO}$ の正しい表式が得られる。これが、

$$H_{\rm SO} = \frac{Z}{2}\left(\frac{e\hbar}{mc}\right)^2 \frac{1}{r^3}\,\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}$$

となることを確かめよ。

(d) これまでの計算を踏まえ、スピン軌道相互作用の大きさを以下のように見積もる。

$$E_{\rm SO} \approx \frac{Z}{2}\left(\frac{e\hbar}{mc}\right)^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle^3$$

ここで $\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle$ は、(a) の値を使うことにする。H_0 の基底エネルギーを E_0 と書くとき、エネルギー比 $|E_{\rm SO}/E_0|$ を計算せよ。また、$Z = 1, 26$ の場合の $E_{\rm SO}$ の値を計算せよ。

(e) スピン軌道相互作用を相対論的補正効果と考えるのなら、(d) で計算したのエネルギー比 $|E_{\rm SO}/E_0|$ は、電子の速度を v として、$v/c \ll 1$ の極限でゼロになるのがもっともであろう。得られた表式はそうなっているか。