量子力学第２:第3回演習(2001/5)

担当：星　健 夫（物理工学科）

以下の問題の解答を、A4 レポート用紙 (枚数自由) にまとめ、教務室内の専用ポストに提出せよ。締切：6 月 19 日（月）午後５時（厳守)。

1

電磁場中の電子を考える。電子の質量を m、電荷量を $-e$ （$e>0$)、スカラーポテンシャルを $\phi(\boldsymbol{r})$、ベクトルポテンシャルを $\boldsymbol{A}$（$\mathrm{rot}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}$） と書くと、系の Hamiltonian は、次式で書ける。

$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-e\phi$$

(a) 数学公式 $\nabla\cdot(g\boldsymbol{F})=(\nabla g)\cdot\boldsymbol{F}+g\nabla\cdot\boldsymbol{F}$ を示せ。ただし、$\boldsymbol{F}$ は任意のベクトル関数で、g は任意のスカラー関数。

(b) 確率密度を $\rho\equiv|\psi|^2$ とすると、確率密度の流れ (current)$\boldsymbol{j}$ は、次式で定義される。

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\mathrm{div}\boldsymbol{j}=0$$

この意味を説明せよ。なお、$-e\rho$、$-e\boldsymbol{j}$ は、電荷密度分布と電流密度分布にそれぞれ相当する。

(c) (b) で Schrödinger 方程式 ($i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi$) を適用することにより、次式が得られることを示せ。

$$\begin{aligned}\boldsymbol{j} &= \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\,\mathrm{grad}\psi-\psi\mathrm{grad}\psi^*\right)+\frac{e}{mc}\boldsymbol{A}|\psi|^2\\ &= \frac{1}{m}\left\{\hbar\nabla\Theta+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right\}|\psi|^2\end{aligned}$$

最後の式変型では、$\psi\equiv|\psi|e^{i\Theta}$ とおいた。

(d) 上式で、電磁場のゲージ変換

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A} &\rightarrow \boldsymbol{A}'\equiv\boldsymbol{A}-\mathrm{grad}\chi\\ \phi &\rightarrow \phi'\equiv\phi+\frac{1}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}\end{aligned}$$

を行うと、どうなるか。ただし、χ は任意のスカラー関数。得られた結果は、もっともか。

[コメント] 量子力学において波動関数は複素数であり、振幅 $|\psi|$ と位相 Θ の２つの自由度をもつ。この問題から、両者により電荷分布と電流分布とが与えられることが分かる。

(e) 古典論との対応を考えよ。

2

以下の波動関数を考える。ただし、$\alpha(>0), k$ は実定数。

$$\psi(x,t) \equiv \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \left(1+\alpha\frac{\hbar}{m}it\right)^{-1/2} \exp\left[-\frac{\alpha x^2 - 2ikx + k^2\frac{\hbar}{m}it}{2\left(1+\alpha\frac{\hbar}{m}it\right)}\right]$$

(a) 以下の数学公式を証明せよ。

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}\alpha^{-3/2}$$

(b) 題意の波動関数が、規格化条件を満たすことを確認せよ。

(c) 題意の波動関数が、自由空間の Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

を満たしていることを、確認せよ。

(d) $\langle x\rangle$,$\langle x^2\rangle$ $\langle p\rangle$,$\langle p^2\rangle$ を、それぞれ計算せよ。これはもっともな結果か。

(e) 前問の結論を使い、確率密度 ρ, 確率密度の流れ j を計算せよ。

(f)[自由課題]: JAVA などをもちいて、確率密度 ρ, 確率密度の流れ j をグラフにせよ。

3

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。

4

前問の記法を用いる。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 $H_{\mathrm{SO}} = \xi(r)\,\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}$ 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 $\boldsymbol{\mu}_l = -\mu_{\mathrm{B}}\boldsymbol{l}$ となることを示せ。ここで、$\mu_{\mathrm{B}} \equiv e\hbar/2mc$ 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 $\boldsymbol{\mu}_s = -2\mu_{\mathrm{B}}\boldsymbol{s}$ 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 $\boldsymbol{\mathcal{H}}_{\mathrm{eff}}$ を感じる。有効磁場 $\boldsymbol{\mathcal{H}}_{\mathrm{eff}}$ は、Biot-Savart の法則より

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

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 $\boldsymbol{\mu}_s = -2\mu_{\mathrm{B}}\boldsymbol{s}$ をもつ電子は、大きさ $(\boldsymbol{\mu}_s\cdot\boldsymbol{\mathcal{H}}_{\mathrm{eff}})$ の磁気エネルギー（符号は考えてみよ）を持つはずであり、これが H_{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_{SO} の正しい表式が得られる。これが、

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

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。

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

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 $|E_{\mathrm{SO}}/E_0|$ を計算せよ。また、$Z = 1, 26$ の場合の E_{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 $|E_{\mathrm{SO}}/E_0|$ 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。