量子力学 3 演習 (田中担当クラス) 問題 No.5 (2002/10/31)

1. スピン軌道相互作用を考慮すると、水素原子のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{2m^2c^2}\frac{\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{S}}}{r^3}$$

で与えられる。

   (a) $\hat{\mathbf{J}}^2$、$\hat{J}_z$ が $\hat{H}$ と可換であることを示せ。

   (b) スピン軌道相互作用によりエネルギー準位は $j = \ell \pm 1/2$ に分裂する。(微細構造と呼ばれる。) スピン軌道相互作用を摂動として、$2p$ 電子 $(n = 2, \ell = 1)$ のエネルギー準位の分裂の大きさが $\Delta E/|E_2| = \alpha^2/4$ となることを示せ。($\alpha = e^2/\hbar c \simeq 1/137$ は微細構造定数といわれる。)

2. 外場として与えられた電磁場中の電子について考える。

   (a) スピンの 2 成分波動関数にパウリ行列が作用することを考慮して、自由電子のハミルトニアンを $\hat{H} = (\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{p}})^2/2m$ と書く。これが通常のハミルトニアン $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m$ と等しいことを示せ。(まず、$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}) = \mathbf{A}\cdot\mathbf{B} + i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{A}\times\mathbf{B})$ を示せ。)

   (b) このハミルトニアンで $\hat{\mathbf{p}} \to \hat{\mathbf{p}} - (e/c)\mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}, t)$ と置き換えることにより電磁場中の電子のハミルトニアンが得られる。電子のスピン演算子が $\hat{\mathbf{S}} = \hbar\boldsymbol{\sigma}/2$ となることに注意して、磁場とスピンとの相互作用ハミルトニアンが $\hat{H}_{S\text{-}B} = -(e/mc)\hat{\mathbf{S}}\cdot\mathbf{B}$ となることを示せ。(すなわち、スピン角運動量による磁気双極子能率は軌道角運動量によるものの 2 倍になっている。)

3. 弱い一様な磁場中の水素 (様) 原子を考える。問題 1 で見たように、スピン軌道相互作用によりエネルギー準位は $j = \ell \pm 1/2$ に分裂する。磁場をかけると準位はさらに分裂する。(Zeeman 効果。) スピン軌道相互作用による分裂に比べて磁場による分裂が十分小さいとして、摂動により準位の分裂の様子を調べよう。

   (a) 一様な磁場 $\mathbf{B}$ はベクトルポテンシャル $\mathbf{A} = (\mathbf{B}\times\mathbf{r})/2$ で与えられることを示し、このとき $\nabla\cdot\mathbf{A} = 0$ であることを確かめよ。

   (b) ハミルトニアンの $\mathbf{B}$ の 1 次の部分は、$\hat{H}_B = -\hat{\boldsymbol{\mu}}\cdot\mathbf{B}$、ただし $\hat{\boldsymbol{\mu}} = (e/2mc)(\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}})$ となることを示せ。(スピンの部分は問題 2 の結果である。)

   (c) 問題 1 で見たように非摂動ハミルトニアンの固有状態として $\hat{\mathbf{J}}^2$ の固有状態をとることができる。従って、j の決った状態への射影演算子 $\hat{P}_j$ を導入し、$\hat{P}_j\hat{H}_B\hat{P}_j = -\hat{P}_j\hat{\boldsymbol{\mu}}\hat{P}_j\cdot\mathbf{B}$ という演算子を考えればよいことになる。$\hat{P}_j\hat{\boldsymbol{\mu}}\hat{P}_j = (eg_j/2mc)\hat{P}_j\hat{\mathbf{J}}\hat{P}_j$、ただし

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}$$

となることを示せ。

   (d) 磁場 $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ によるエネルギーのずれを求めよ。

   (e) $j = \ell \pm 1/2$、$s = 1/2$ として、角運動量の合成の Clebsch-Gordan 係数を用いてエネルギーのずれを直接計算し前問の結果と比べよ。