6　角運動量と物理現象

6.1　目標

磁場中の荷電粒子の量子力学で軌道角運動量とスピンに関する物理現象を理解する

- **正常ゼーマン効果**：軌道角運動量を持った荷電粒子（スピン無し）のエネルギー（§6.2, §6.3）
- **ラーモア歳差運動**：スピンを持った荷電粒子（軌道角運動量無し）のエネルギーと時間発展（§6.4, §6.5）

6.2　外部磁場と軌道角運動量

電磁場中に**電荷 Q**、質量 m_Q の**軌道角運動量を持った**荷電粒子を置いた場合の相互作用。
§6.2, §6.3 では**スピン無し**。
静電場 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})$ と静磁場 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})$：スカラーポテンシャル $\phi(\boldsymbol{r})$ とベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{\nabla}\phi(\boldsymbol{r}), \quad \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) \tag{233}$$

荷電粒子に対するローレンツ力を導く古典電磁気学のハミルトニアンは（HP の補足参照）

$$H = \frac{[\boldsymbol{p} - Q\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})]^2}{2m_Q} + Q\phi(\boldsymbol{r}) \tag{234}$$

よって量子力学のハミルトニアン演算子は

$$\hat{H} = \frac{[\hat{\boldsymbol{p}} - Q\boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{r}})]^2}{2m_Q} + Q\phi(\hat{\boldsymbol{r}}) \tag{235}$$

$$= \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m_Q} - \frac{Q}{2m_Q}(\hat{\boldsymbol{p}} \cdot \boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{r}}) + \boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{r}}) \cdot \hat{\boldsymbol{p}}) + Q\phi(\hat{\boldsymbol{r}}) + \frac{[Q\boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{r}})]^2}{2m_Q} \tag{236}$$

これは形式的に以下のように演算子を置き換えることに対応する。

$$\hat{H} \to \hat{H} - Q\phi(\hat{\boldsymbol{r}}), \quad \hat{\boldsymbol{p}} \to \hat{\boldsymbol{p}} - Q\boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{r}}) \tag{237}$$

以下、**弱い一様磁場**のみがある場合を考える。電場がないので式 (236) のスカラーポテンシャルの項は 0 であり、最後の項（$\boldsymbol{A}^2$）は $\boldsymbol{B}^2$ に比例するので磁場が小さい時は第 2 項に比べて小さい。よって式 (236) 第 2 項のみを考える。

$$\hat{H}_{\text{軌道}} = -\frac{Q}{2m_Q}(\hat{\boldsymbol{p}} \cdot \boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{r}}) + \boldsymbol{A}(\hat{\boldsymbol{r}}) \cdot \hat{\boldsymbol{p}}) \tag{238}$$

座標表示（$\hat{\boldsymbol{p}} \to -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$、$\hat{\boldsymbol{r}} \to \boldsymbol{r}$）して波動関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ に対する作用を見ると

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{\text{軌道}}\psi(\boldsymbol{r}) &= \frac{i\hbar Q}{2m_Q}(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) + \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla})\psi(\boldsymbol{r}) \\
&= \frac{i\hbar Q}{2m_Q}[\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) + \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi(\boldsymbol{r})] \\
&= \frac{i\hbar Q}{2m_Q}[\{\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\}\psi(\boldsymbol{r}) + \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi(\boldsymbol{r}) + \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi(\boldsymbol{r})] \\
&= \frac{i\hbar Q}{m_Q}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi(\boldsymbol{r}) + \frac{i\hbar Q}{2m_Q}\{\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\}\psi(\boldsymbol{r})
\end{aligned}$$

となる。一様磁場 $\boldsymbol{B}$（座標にも時間にも依存しない）のベクトルポテンシャルは（HP の補足参照）

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}, \quad \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{A} = 0 \tag{239}$$

と書けるので、これを代入すると

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{\text{軌道}} &= -\frac{Q}{m_Q}\frac{1}{2}(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r})\cdot(-i\hbar\boldsymbol{\nabla}) \\
&= -\frac{Q}{2m_Q}(\boldsymbol{B}\times\hat{\boldsymbol{r}})\cdot\hat{\boldsymbol{p}} \quad \leftarrow (\text{座標表示から演算子に戻す}) \\
&= -\frac{Q}{2m_Q}\boldsymbol{B}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}}) \quad \leftarrow \boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C}) = (\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{C} \\
&= -\frac{Q}{2m_Q}\boldsymbol{B}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}
\end{aligned} \tag{240}$$

つまり荷電粒子が角運動量を持つと、磁場 $\boldsymbol{B}$ との相互作用からエネルギーが生じる。古典電磁気学で、電荷 Q の荷電粒子が角運動量 $\boldsymbol{L}$ で円運動すると円電流が生じ、微小な円電流の作る磁場は磁気双極子の作る磁場と同じであるため

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{Q\boldsymbol{L}}{2m_Q} \tag{241}$$

の磁気モーメントを持つとみなせる（HP の補足参照)。外部磁場 $\boldsymbol{B}$ の中におくと $E = -\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\mu}$ のエネルギーを持つので（HP の補足参照)、これを量子化したものが相互作用ハミルトニアン (240) に対応している。**磁気回転比** γ_ℓ を量子力学的な軌道角運動量と磁気モーメントの比として定義する：

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \gamma_\ell\hat{\boldsymbol{L}}, \quad \gamma_\ell = \frac{Q}{2m_Q} \tag{242}$$

磁場がある時の相互作用ハミルトニアンは

$$\hat{H}_{\text{軌道}} = -\boldsymbol{B}\cdot\hat{\boldsymbol{\mu}} = -\gamma_\ell\boldsymbol{B}\cdot\hat{\boldsymbol{L}} \tag{243}$$

6.3 正常ゼーマン効果

水素原子を一様な z 方向正の向きで強さ B の磁場（$\boldsymbol{B} = (0, 0, B)$）の中に置く。電子の質量を m_e とすると、電荷は $Q = -e$（$e > 0$）なので、ハミルトニアンは

$$\hat{H}_{\text{磁場}} = \hat{H}_{\text{水素原子}} + \frac{eB}{2m_e}\hat{L}_z \tag{244}$$

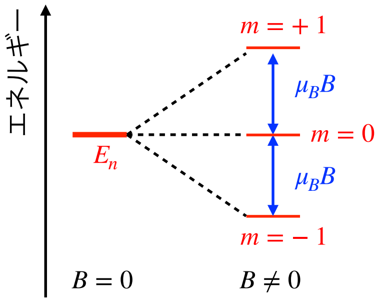

図 7: $\ell=1$ 状態に対する正常ゼーマン効果。

磁場がないとき（$B=0$）の固有関数と固有エネルギーは（m は磁気量子数）

$$\hat{H}_{水素原子}\psi^m_{n,\ell}(\boldsymbol{r}) = E_n\,\psi^m_{n,\ell}(\boldsymbol{r}) \qquad (m\text{ に依らない}) \tag{245}$$

$$\psi^m_{n,\ell}(\boldsymbol{r}) = R_{n,\ell}(r)Y^m_\ell(\theta,\phi) \tag{246}$$

$Y^m_\ell(\theta,\phi)$ は $\hat{L}_z$ の固有関数なので、$\psi^m_{n,\ell}(\boldsymbol{r})$ は磁場があるとき（$B\neq 0$）でも固有関数であり、

$$\hat{H}_{磁場}\psi^m_{n,\ell}(\boldsymbol{r}) = \left[\hat{H}_{水素原子} + \frac{eB}{2m_e}\hat{L}_z\right]\psi^m_{n,\ell}(\boldsymbol{r}) = E_{n,m}\psi^m_{n,\ell}(\boldsymbol{r}) \quad (m\text{ に依る}) \tag{247}$$

$$E_{n,m} = E_n + \frac{eBm\hbar}{2m_e} \tag{248}$$

磁場がなければ m が異なる状態は縮退していたが、磁場を加えると m の値によって異なるエネルギー固有値を持つ。磁場の効果で m の縮退が解けることを**正常ゼーマン効果**という。異なる m の状態のエネルギーが縮退するのは中心力の回転対称性（x,y,z を入れ替えても不変）の帰結で、磁場を z 方向にかけたことで特定の方向が選ばれ**対称性が破れ**、m の縮退が解ける。

例）$n=2$、$\ell=1$ の状態（2p 状態）のエネルギー

$$E_{2,m} = \begin{cases} E_2 + \frac{eB\hbar}{2m_e} & (m=+1) \\ E_2 & (m=0) \\ E_2 - \frac{eB\hbar}{2m_e} & (m=-1) \end{cases} , \quad E_2 = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{4} \tag{249}$$

準位間隔は磁場の強さ B に比例。準位は奇数個（ℓ が整数のとき $2\ell+1$ は奇数）に分離。量子力学での軌道角運動量は $\hbar$ の整数倍なので、磁気モーメントの単位として**ボーア磁子**

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \tag{250}$$

を定義すると、正常ゼーマン効果による準位分裂の間隔は $\mu_B B$ となる（図 7）。

6.4 外部磁場とスピン

電磁場中に電荷 Q、質量 m_Q の**スピンを持った**荷電粒子を置いた場合の相互作用。
§6.4, §6.5 では**軌道角運動量無し**。

スピンには古典的対応物がないので、古典電磁気学からハミルトニアンを決定できない。
ここでは軌道角運動量のハミルトニアン (243) との類推で、

$$\hat{H}_{\text{スピン}} = -\gamma_s \boldsymbol{B} \cdot \hat{\boldsymbol{S}} = -\hbar\gamma_s \boldsymbol{B} \cdot \hat{\boldsymbol{s}} \tag{251}$$

を考える。γ_s は**スピンによる磁気回転比**で、粒子の性質を反映した値になる。軌道による磁気回転比から期待される値 $Q/(2m_Q)$ とのズレとして、g **因子**を導入する：

$$\gamma_s = g\frac{Q}{2m_Q} \tag{252}$$

スピン 1/2 の電子の場合、相対論的なディラック方程式から導出すると、

$$\gamma_s = \frac{-e}{m_e}, \quad g = 2 \tag{253}$$

を得る（さらに場の量子論による補正を加えると 2 から少しずれる）。
式 (251) の相互作用で z 方向の磁場 $\boldsymbol{B} = (0, 0, B)$ の中の電子のエネルギーを考える。相互作用

$$\hat{H}_{\text{スピン}} = -\hbar\gamma_s B \hat{s}_z$$

は $\hat{s}_z$ の固有状態 $|\uparrow\rangle$ の固有エネルギーを $E_\uparrow$、$|\downarrow\rangle$ の固有エネルギーを $E_\downarrow$ とすると

$$\hat{H}_{\text{スピン}}|\uparrow\rangle = -\hbar\gamma_s B\hat{s}_z|\uparrow\rangle = -\frac{\hbar\gamma_s B}{2}|\uparrow\rangle = E_\uparrow|\uparrow\rangle \tag{254}$$

$$E_\uparrow = -\frac{\hbar\gamma_s B}{2}, \quad E_\downarrow = \frac{\hbar\gamma_s B}{2} \tag{255}$$

ゼーマン効果のような準位の分裂と考えると、$m_s = \pm 1/2$ の固有状態 $|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ のエネルギーは磁場がなければ縮退していたが、磁場を加えると m_s の値によって異なるエネルギー固有値を持つ。スピンが半整数の場合、準位は**偶数個**に分裂する。異常ゼーマン効果の起源である。

6.5 ラーモア歳差運動

一様磁場中のスピン 1/2 の粒子の時間発展（時間とともに状態がどう変化するか）を考える。
時間に依存するシュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\sigma(t)\rangle = \hat{H}_{\text{スピン}}|\sigma(t)\rangle \tag{256}$$

時刻 t でのスピンの状態ベクトルは $|\uparrow\rangle$、$|\downarrow\rangle$ の線型結合で

$$|\sigma(t)\rangle = c_\uparrow(t)|\uparrow\rangle + c_\downarrow(t)|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} c_\uparrow(t) \\ c_\downarrow(t) \end{pmatrix} \tag{257}$$

と書ける（この場合状態ベクトル $|\uparrow\rangle$、$|\downarrow\rangle$ は時間に依存しない）。スピンの向きが時刻によって変化すると、2 つの状態の重みも t によって変化する。式 (255) の結果を使うと

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{スピン}}|\sigma(t)\rangle &= c_\uparrow(t)\hat{H}_{\text{スピン}}|\uparrow\rangle + c_\downarrow(t)\hat{H}_{\text{スピン}}|\downarrow\rangle \\ &= c_\uparrow(t)E_\uparrow|\uparrow\rangle + c_\downarrow(t)E_\downarrow|\downarrow\rangle\end{aligned}$$

なので、式 (256) に左から $\langle \uparrow |$ を作用させ、規格直交性を使うと

$$\langle \uparrow | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \sigma(t) \rangle = \langle \uparrow | \hat{H}_{\text{スピン}} | \sigma(t) \rangle$$
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \uparrow | [c_\uparrow(t) | \uparrow \rangle + c_\downarrow(t) | \downarrow \rangle] = \langle \uparrow | [c_\uparrow(t) E_\uparrow | \uparrow \rangle + c_\downarrow(t) E_\downarrow | \downarrow \rangle]$$
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_\uparrow(t) = E_\uparrow c_\uparrow(t)$$

これは $c_\uparrow(t)$ に関する微分方程式であり、解は

$$c_\uparrow(t) = c_\uparrow(0) \exp\left[-i\frac{E_\uparrow}{\hbar} t\right] = c_\uparrow(0) \exp\left[i\frac{\gamma_s B}{2} t\right]$$

となる。ここで積分定数を $t = 0$ の値を用いて表した。同様に

$$c_\downarrow(t) = c_\downarrow(0) \exp\left[-i\frac{E_\downarrow}{\hbar} t\right] = c_\downarrow(0) \exp\left[-i\frac{\gamma_s B}{2} t\right]$$

となる。初期状態として、角度 θ, ϕ を向いたスピン状態

$$| \sigma(0) \rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} \exp\{i\phi\} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_\uparrow(0) \\ c_\downarrow(0) \end{pmatrix} \tag{258}$$

を用いると、一般の時刻での状態は

$$| \sigma(t) \rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \exp\left\{i\frac{\gamma_s B}{2} t\right\} \\ \sin\frac{\theta}{2} \exp\left\{i(\phi - \frac{\gamma_s B}{2} t)\right\} \end{pmatrix} \tag{259}$$

となる。これにより期待値を計算すると

$$\begin{aligned}
&\langle \sigma(t) | \hat{s}_x | \sigma(t) \rangle \\
&= \left(\cos\frac{\theta}{2} \exp\left\{-i\frac{\gamma_s B}{2} t\right\} \quad \sin\frac{\theta}{2} \exp\left\{-i(\phi - \frac{\gamma_s B}{2} t)\right\}\right) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \exp\left\{i\frac{\gamma_s B}{2} t\right\} \\ \sin\frac{\theta}{2} \exp\left\{i(\phi - \frac{\gamma_s B}{2} t)\right\} \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2} \left(\cos\frac{\theta}{2} \exp\left\{-i\frac{\gamma_s B}{2} t\right\} \quad \sin\frac{\theta}{2} \exp\left\{-i(\phi - \frac{\gamma_s B}{2} t)\right\}\right) \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2} \exp\left\{i(\phi - \frac{\gamma_s B}{2} t)\right\} \\ \cos\frac{\theta}{2} \exp\left\{i\frac{\gamma_s B}{2} t\right\} \end{pmatrix} \\
&= \frac{\exp\left\{i(\phi - \frac{\gamma_s B}{2} t - \frac{\gamma_s B}{2} t)\right\} + \exp\left\{-i(\phi - \frac{\gamma_s B}{2} t - \frac{\gamma_s B}{2} t)\right\}}{2} \cos\frac{\theta}{2} \sin\frac{\theta}{2} \\
&= \frac{\exp\{i(\phi - \gamma_s B t)\} + \exp\{-i(\phi - \gamma_s B t)\}}{2} \cos\frac{\theta}{2} \sin\frac{\theta}{2} \\
&= \frac{1}{2} \sin\theta \cos(\phi - \gamma_s B t)
\end{aligned}$$

同様に

$$\langle \sigma(t) | \hat{s}_y | \sigma(t) \rangle = \frac{1}{2} \sin\theta \sin(\phi - \gamma_s B t)$$
$$\langle \sigma(t) | \hat{s}_z | \sigma(t) \rangle = \frac{1}{2} \cos\theta$$

z 方向成分を一定に保ちながら x, y 平面内を歳差運動する（**ラーモア歳差運動**）。スピン状態のエネルギー差から歳差運動が生まれる。