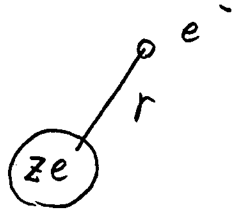
Department of Physics
Tohoku University
Sendai Japan.

○ 復習 + α :

水素原子の問題



$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$$

$$\psi(\mathbf{r}) = R_\ell(r)\,Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{r}})$$

$$R_\ell(r) = \underbrace{\rho^\ell}_{\rho\sim 0}\ \underbrace{e^{-\frac{\rho}{2}}}_{\rho\to\infty}\ \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \qquad \left(\rho = \sqrt{\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}}\, r\right)$$

μ : 換算質量

シュレーディンガー方程式

$$\downarrow \qquad \frac{a_{k+1}}{a_k} = -\frac{\lambda - \ell - 1 - k}{(k+1)(k+2\ell+2)}$$

$$\lambda = \frac{Ze^2}{\hbar}\sqrt{\frac{\mu}{2|E|}}$$

和を途中でとめる

$$\longrightarrow \quad \lambda = \ell + 1 + n_r \equiv n$$

$\downarrow$

$$E = -|E| = -\left(\frac{Ze^2}{\hbar}\right)^2 \cdot \frac{\mu}{2n^2} = -\frac{(Z\alpha)^2}{2n^2}\mu c^2 \qquad \left(\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}\right)$$

$$\rho = \sqrt{\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}}\, r = \sqrt{\frac{8\mu}{\hbar^2}\cdot\frac{(Z\alpha)^2}{2n^2}\cdot \mu c^2}\cdot r$$

$$= \frac{2\mu c}{n\hbar}\cdot Z\alpha\, r = \frac{2Z}{n}\cdot\frac{r}{a_0}$$

$$a_0 \equiv \frac{\hbar}{\mu c \alpha} \quad (\text{ボーア半径})$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai Japan.

$$\sum_{k=0}^{n_r} a_k \rho^k = L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)}(\rho) \quad \text{ラゲール陪多項式}$$

$$n = \ell + 1 + n_r$$

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} = -\frac{\lambda - \ell - 1 - k}{(k+1)(k+2\ell+2)}$$

$$L_m^{(\alpha)}(\rho) = \sum_{k=0}^{m} \binom{m+\alpha}{m-k} \frac{(-\rho)^k}{k!}$$

(note) $b_k \equiv \binom{m+\alpha}{m-k} \dfrac{(-1)^k}{k!}$ として

$\alpha = 2\ell+1, \quad m = n-\ell-1$ のとき

$$\frac{b_{k+1}}{b_k} = \frac{\cancel{(m+\alpha)!}}{(\alpha+k+1)!\,(m-k-1)!} \cdot \frac{(\alpha+k)!\,(m-k)!}{\cancel{(m+\alpha)!}}$$

$$\times \frac{k!}{(k+1)!} \cdot \frac{(-1)^{k+1}}{(-1)^k}$$

$$= -\frac{1}{k+1} \cdot \frac{m-k}{\alpha+k+1}$$

$$= -\frac{n-\ell-1-k}{(k+1)(k+2\ell+2)} = \frac{a_{k+1}}{a_k}$$

$n = n_r + l + 1$ とおくと

- $n \geq l + 1$
- n は整数
- エネルギーは

$$\lambda = \frac{Ze^2}{\hbar c}\sqrt{\frac{\mu c^2}{2|E|}} = n$$

$\frac{e^2}{\hbar c} = \alpha$

$$\Downarrow$$

$$E = -|E| = -\frac{(Z\alpha)^2}{2n^2}\cdot \mu c^2$$

$$\rho = \sqrt{\frac{8\mu}{\hbar^2}\cdot\frac{(Z\alpha)^2}{2n^2}\cdot\mu c^2}\; r = \frac{2\mu c\, Z\alpha}{n\hbar}\cdot r$$

$$= \frac{2Z}{na_0} r \;;\; a_0 = \frac{\hbar}{\mu c\alpha}$$

(ボーア半径)

▨ スペクトル

エネルギーは n にしかよらない。
$\leftrightarrow$ 同じ n を持つ l, m の組は同じエネルギーを持つ。

- 基底状態 ($n = 1$)

$$n_r = l = 0$$

$$E = -\frac{(Z\alpha)^2}{2}\cdot\mu c^2$$

$\mu c^2 = 0.51\ \text{MeV},\ Z = 1$ とすると

$$E = -\frac{1}{2}\cdot\left(\frac{1}{137}\right)^2\cdot 0.51 = 1.36\times10^{-5}\ \text{MeV}$$

$$= 13.6\ \text{eV}$$

波動関数：$\underbrace{R_{10}}_{nl}(r) \propto e^{-\frac{\rho}{2}} = e^{-Zr/a_0}$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

・第1励起状態 $(n=2)$

$$n_r+l+1=2 \quad\rightarrow\quad \begin{array}{l} n_r=1,\ l=0\ ;\quad m=0 \\ n_r=0\ ,\ l=1\ ;\quad m=0,\pm 1 \end{array}$$

4つの状態が同じエネルギーを持つ

$$E=-\frac{(Z\alpha)^2}{8}\cdot\mu c^2=\frac{1}{4}\cdot E_{n=0}$$

波動関数

i) $n_r=1,\ l=0$

$$\begin{cases} \dfrac{a_1}{a_0}=-\dfrac{1}{2} \\ a_n=0\quad(n>2) \end{cases} \rightarrow\quad H(\rho)\propto\left(1-\frac{\rho}{2}\right)$$

$$\psi(\mathbf{r})\propto\left(1-\frac{Zr}{2a_0}\right)e^{-\frac{Zr}{2a_0}}\ Y_{00}(\hat{r})$$

ii) $n_r=0,\ l=1 \quad\rightarrow\quad H(\rho)=\text{const.}$

$$\psi(\mathbf{r})\propto\ r\,e^{-\frac{Zr}{2a_0}}\ Y_{1m}(\hat{r})$$

・第2励起状態 $(n=3)$

$$n_r+l+1=3\ \rightarrow\ \begin{array}{l} n_r=2,\ l=0,\quad m=0 \\ n_r=1,\ l=1,\quad m=0,\pm 1 \\ n_r=0,\ l=2,\quad m=0,\pm 1,\pm 2 \end{array}$$

9つの状態がエネルギー的に「縮退」

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

$E=0$

$n=3$ ——— $(\ell=2, m=0, \pm1, \pm2)$, $(\ell=1, m=0, \pm1)$, $(\ell=0, m=0)$
3D 3P 3S

$n=2$ ——— $(\ell=1, m=0, \pm1)$ $(\ell=0, m=0)$
2P 状態, 2S

$n=1$ ——— $(\ell=0, m=0)$
1S 状態

一般に，与えられた n に対し
$\ell = n-1, n-2, n-3, \cdots, 0$
各 ℓ に対し $-\ell \leq m \leq \ell$
の状態がエネルギー的に縮退．

波動関数は $H(\rho) = L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)}(\rho)$
ラゲール陪多項式

$$L_n^{(\alpha)}(\rho) = \sum_{m=0}^{n} \binom{n+\alpha}{n-m} \frac{(-\rho)^m}{m!}$$

4.3. 磁場中の"水素"原子

(note) 古典的運動方程式(ローレンツ力)

$$m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = -e\left[\mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \frac{1}{c}\mathbf{v}\times\mathbf{B}(\mathbf{r},t)\right]$$

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial A(\mathbf{r},t)}{\partial t} - \nabla\phi(\mathbf{r},t)$$

$$\mathbf{B} = \nabla\times A$$

(note) $A \to A - \nabla f(\mathbf{r},t)$

$\phi \to \phi + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}f(\mathbf{r},t)$

としてもマクスウェル方程式は不変
(ゲージ不変性)

⤳ $\rho(\mathbf{r})$ が時間に依存しない時

$$\nabla\cdot A(\mathbf{r},t) = 0$$

となるようなゲージをとると便利
(クーロン・ゲージ)

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

$$(v \times (-\nabla \times A))_i = \varepsilon_{kji}\, v_k\, (-\nabla \times A)_j$$
$$= \underbrace{\varepsilon_{ikj}\,\varepsilon_{i'k'j}}_{=\,\delta_{ii'}\delta_{kk'} - \delta_{ik'}\delta_{ki'}}\, v_k\, (-\partial_{i'} A_{k'})$$
$$= v_k(-\partial_i A_k + \partial_k A_i)$$

(note)

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

とすると古典的な運動方程式が得られる。

<証明> $$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{1}{m}\left(p_i + \frac{e}{c}A_i\right)$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i} = -\frac{1}{m}\left(p_k + \frac{e}{c}A_k\right)\cdot\frac{e}{c}\frac{\partial A_k}{\partial x_i} + e\frac{\partial \phi}{\partial x_i}$$

$$\downarrow$$

$$m\frac{d^2x_i}{dt^2} = \frac{d}{dt}\left(p_i + \frac{e}{c}A_i\right) = \frac{dp_i}{dt} + \frac{e}{c}\left(\frac{\partial A_i}{\partial t} + \frac{\partial A_i}{\partial x_k}\frac{\partial x_k}{\partial t}\right)$$

$$= -\frac{e}{c}\underbrace{\frac{1}{m}\left(p_k + \frac{e}{c}A_k\right)}_{\frac{dx_k}{dt}}\frac{\partial A_k}{\partial x_i} + e\frac{\partial \phi}{\partial x_i} + \frac{e}{c}\frac{\partial A_i}{\partial t} + \frac{e}{c}\frac{\partial A_i}{\partial x_k}\frac{dx_k}{dt}$$

$$= e\underbrace{\left(\frac{\partial \phi}{\partial x_i} + \frac{1}{c}\frac{\partial A_i}{\partial t}\right)}_{=\,-E_i} + \frac{e}{c}\underbrace{\left(\frac{\partial A_i}{\partial x_k} - \frac{\partial A_k}{\partial x_i}\right)\frac{dx_k}{dt}}_{=\,-(v \times (\nabla \times A))_i\;=\;-(v \times \mathbb{B})_i}$$

$$= -e\left(E_i + (v \times \mathbb{B})_i\right)$$

Department of Physics
Tohoku University

Sendai Japan

⤵

磁場中の水素原子は

$$\boxed{H = \frac{1}{2\mu}\left(\mathbb{P} + \frac{e}{c}\mathbb{A}\right)^2 - \underbrace{\frac{Ze^2}{r}}_{-e\phi}}$$

で記述される。

(note) $\frac{1}{2\mu}\left(\mathbb{P}+\frac{e}{c}\mathbb{A}\right)^2 = \frac{1}{2\mu}\left(\mathbb{P}^2 + \frac{e}{c}\mathbb{P}\cdot\mathbb{A} + \frac{e}{c}\mathbb{A}\cdot\mathbb{P} + \underbrace{\frac{e^2}{c^2}}_{e\text{の2次}(\to\text{小})}\mathbb{A}^2\right)$

$$\underbrace{\mathbb{P}}_{=\frac{\hbar}{i}\nabla}\cdot\mathbb{A}\,\psi = \underbrace{(\mathbb{P}\cdot\mathbb{A})}_{=0}\psi + \mathbb{A}\cdot(\mathbb{P}\psi)$$

(クーロン・ゲージ $\nabla\cdot\mathbb{A}=0$)

⤵

$$\boxed{H \sim \frac{\mathbb{P}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r} + \frac{e}{\mu c}\mathbb{A}\cdot\mathbb{P}}$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan.

- 一様磁場の場合

$\mathbb{A} = -\frac{1}{2}\, \mathbb{r} \times \mathbb{B}$ ととれる。

(note) $\mathbb{A} = -\frac{1}{2}(yB_z - zB_y,\ zB_x - xB_z,\ xB_y - yB_x)$

$$\downarrow$$

$$\nabla \times \mathbb{A} = (\partial_y A_z - \partial_z A_y,\ \partial_z A_x - \partial_x A_z,\ \partial_x A_y - \partial_y A_x)$$
$$= (+\tfrac{1}{2}B_x + \tfrac{1}{2}B_x,\ B_y,\ B_z)$$
$$= (B_x, B_y, B_z) = \mathbb{B}$$

$$\downarrow$$

$$\frac{e}{\mu c}\mathbb{A}\cdot\mathbb{P} = -\frac{e}{2\mu c}(\mathbb{r}\times\mathbb{B})\cdot\mathbb{P} = \frac{e}{2\mu c}(\mathbb{B}\times\mathbb{r})\cdot\mathbb{P}$$

(note) $(\mathbb{A}\times\mathbb{B})\cdot\mathbb{C} = \varepsilon_{ijk}A_i B_j C_k$
$= \varepsilon_{jki}A_i B_j C_k = \mathbb{A}\cdot(\mathbb{B}\times\mathbb{C})$

$$= \frac{e}{2\mu c}\mathbb{B}\cdot(\mathbb{r}\times\mathbb{P}) = \frac{e}{2\mu c}\mathbb{B}\cdot\mathbb{L}$$

$$\downarrow$$

$$\boxed{H = \frac{\mathbb{P}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r} + \frac{e}{2\mu c}\mathbb{B}\cdot\mathbb{L}}$$

$\mathbb{B}$ の向きを z 軸にとると

$$\boxed{H = \frac{\mathbb{P}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r^2} + \frac{e}{2\mu c}BL_z}$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

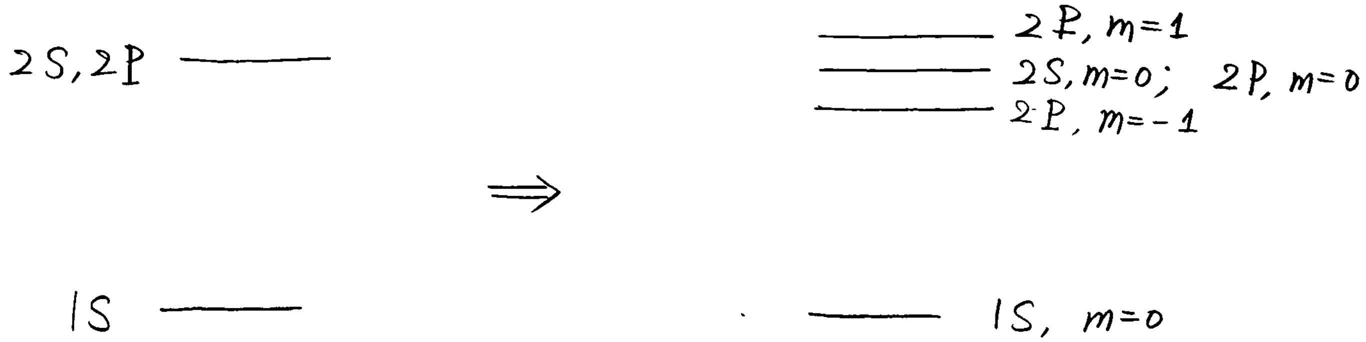
(note)

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r}$$

の固有関数 $\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}})$
は L_z の固有関数

$\Downarrow$

$$H\,R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) = \Big(\underbrace{-\frac{(Z\alpha)^2}{2n^2}\mu c^2}_{H_0} + \overset{\omega_L}{\overset{\equiv}{\frac{e}{2\mu c}B}}\cdot m\hbar\Big) \times R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}})$$



ゼーマン効果

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

[note] ランダウ準位　(ポテンシャルがない場合の荷電粒子)

$\mathbb{B} = B\,\mathbb{e}_z$ は $\mathbb{A} = (0, Bx, 0)$ としても可。

$$\nabla \times \mathbb{A} = (\partial_y A_z - \partial_z A_y,\ \partial_z A_x - \partial_x A_z,\ \partial_x A_y - \partial_y A_x)$$
$$= (0, 0, B)$$

↓

$$H = \frac{1}{2m}\left(\mathbb{P} + \frac{e}{c}\mathbb{A}\right)^2 = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + \left(p_y + \frac{e}{c}Bx\right)^2 + p_z^2\right)$$
$$= \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + \frac{2e}{c}Bx\,p_y + \frac{e^2}{c^2}B^2x^2\right)$$

(note) $[H, p_y] = [H, p_z] = 0$

↓ p_y, p_z, H の同時固有状態

- 簡単のため、p_z の固有値が 0、p_y の固有値が $k\hbar$ の状態を考える

↓

$$\psi(x, y) = e^{iky}\phi(x)$$

↓

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{k^2\hbar^2}{2m} + \frac{eB}{mc}k\hbar\,x + \frac{e^2B^2}{2mc^2}x^2\right)\phi(x) = E\phi(x)$$

$$\frac{eB}{mc}k\hbar\,x + \frac{e^2B^2}{2mc^2}x^2 = \frac{1}{2m}\left(\frac{eB}{c}\right)^2\left(x^2 + 2\cdot\frac{k\hbar c}{eB}\cdot x\right)$$
$$= \frac{1}{2m}\left(\frac{eB}{c}\right)^2\left(x + \frac{k\hbar c}{eB}\right)^2 - \frac{k^2\hbar^2}{2m}$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

$$\rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \underbrace{\frac{e^2B^2}{2mc^2}\left(x+\frac{k\hbar c}{eB}\right)^2}_{\displaystyle \parallel \atop \displaystyle \frac{1}{2}m\omega^2(x+x_0)^2} \right)\phi(x) = E\,\phi(x)$$

$$\omega = \frac{eB}{mc}, \quad x_0 = \frac{k\hbar c}{eB}$$

$\rightarrow$

$$E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \qquad n = 0, 1, 2, \cdots$$

ランダウ準位.
（kには依らない）

波動関数 : $\psi(x,y) = e^{iky}\,\phi_{HO}(x+x_0)$
$= e^{i\cdot\frac{eB}{\hbar c}x_0 y}\,\phi_{HO}(x+x_0)$

cf. 量子ホール効果 $\quad k = \frac{eB}{\hbar c}x_0$