

2024年度 課題演習 A5 理論ゼミ

0500343090 佐藤 暢

2024年12月2日(月)

15 スピンと統計性

15.1 スピン 1/2 の波動関数の合成

スピン全角運動量 \mathbf{J} を粒子 1,2 の角運動量 $\mathbf{S}^{(1)}, \mathbf{S}^{(2)}$ の和で表す.

$$J_j = S_j^{(1)} + S_j^{(2)}, \quad j = 1, 2, 3 \quad (1)$$

$S_z^{(i)}$ について固有値 $\pm \frac{\hbar}{2}$ を持つ波動関数 $u_i(\pm \frac{1}{2})$ とおく.

$$S_z^{(i)} u_i\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2} u_i\left(\frac{1}{2}\right), \quad S_z^{(i)} u_i\left(-\frac{1}{2}\right) = -\frac{1}{2} u_i\left(-\frac{1}{2}\right) \quad (2)$$

\mathbf{J} の大きさが 1 のとき, $J_z = +1, 0, -1$ についての **3 重項** (triplet) となる.

$$J_z u_1\left(\frac{1}{2}\right) u_2\left(\frac{1}{2}\right) = \hbar u_1\left(\frac{1}{2}\right) u_2\left(\frac{1}{2}\right) \quad (3)$$

$$J_z \frac{1}{\sqrt{2}} \left[u_1\left(\frac{1}{2}\right) u_2\left(-\frac{1}{2}\right) + u_1\left(-\frac{1}{2}\right) u_2\left(\frac{1}{2}\right) \right] = 0 \quad (4)$$

$$J_z u_1\left(-\frac{1}{2}\right) u_2\left(-\frac{1}{2}\right) = -\hbar u_1\left(-\frac{1}{2}\right) u_2\left(-\frac{1}{2}\right) \quad (5)$$

\mathbf{J} の大きさが 0 のとき, $J_z = 0$ についての **1 重項** (singlet) となる.

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[u_1\left(\frac{1}{2}\right) u_2\left(-\frac{1}{2}\right) - u_1\left(-\frac{1}{2}\right) u_2\left(\frac{1}{2}\right) \right] \quad (6)$$

入れ替えに対して 3 重項はすべて対称な状態で, 1 重項は反対称な状態になっている.

入れ替え演算子 P_{12} を次のように定義する.

$$P_{12} \mathbf{J} \psi(1, 2) = P_{12} (\mathbf{J}^{(1)} + \mathbf{J}^{(2)}) \psi(1, 2) \quad (7)$$

$$= (\mathbf{J}^{(2)} + \mathbf{J}^{(1)}) P_{12} \psi(1, 2) \quad (8)$$

$$= \mathbf{J} P_{12} \psi(1, 2) \quad (9)$$

\mathbf{J} と P_{12} は可換で, 波動関数 ψ は \mathbf{J} と P_{12} の同時固有状態である. 特に, 全角運動量 \mathbf{J} の波動関数 ψ に縮退がなければ, ψ は入れ替え演算子 P_{12} の固有状態となる. P_{12} を 2 回作用させるともとの状態に戻るはずだから, 固有値は ± 1 . すなわち波動関数は対称, または反対称のいずれかとなる.

15.2 量子力学での同種粒子と対称化仮説

同種粒子 1 と 2 について、ハミルトニアンは入れ替えに対して対称的である。

$$H(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \mathbf{p}^{(2)}) = H(\mathbf{x}^{(2)}, \mathbf{p}^{(2)}, \mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{p}^{(1)}) \quad (10)$$

粒子 1 が状態 α , 粒子 2 が状態 β にあるとき、波動関数は

$$u_{\alpha, \beta}(\mathbf{x}^{(1)}; \mathbf{x}^{(2)}) = u_{\alpha}(\mathbf{x}^{(1)})u_{\beta}(\mathbf{x}^{(2)}) \quad (11)$$

$$u_{\beta, \alpha}(\mathbf{x}^{(1)}; \mathbf{x}^{(2)}) = u_{\beta}(\mathbf{x}^{(1)})u_{\alpha}(\mathbf{x}^{(2)}) \quad (12)$$

この 2 つの状態は区別できない (**交換縮退**)。交換縮退があると、同時観測量の完全な組の固有値を与えても状態を完全に決定することができない。また、同時観測量の完全な組がすべて入れ替えに対称なときを**同種粒子**と定義する。

入れ替えに対して対称な波動関数 $u^{(S)}$ と反対称な波動関数 $u^{(A)}$ を定義する。

$$u^{(S)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_{\alpha, \beta} + u_{\beta, \alpha}), \quad u^{(A)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_{\alpha, \beta} - u_{\beta, \alpha}) \quad (13)$$

確率振幅の中での対称部分と反対称部分の割合をそれぞれ $c^{(S)}, c^{(A)}$ とおき、 $u^{(S)}$ と $u^{(A)}$ の線形結合 u を考える。

$$u = c^{(S)}u^{(S)} + c^{(A)}u^{(A)}, \quad |c^{(S)}|^2 + |c^{(A)}|^2 = 1 \quad (14)$$

u を初期条件として時間発展させた波動関数を ψ とおく。ここで、シュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H\psi(x, t) \quad (15)$$

のハミルトニアンが対称的だから、 ψ の対称部分と反対称部分の割合は $c^{(S)}, c^{(A)}$ に一致する。

$$\psi(\mathbf{x}^{(1)}; \mathbf{x}^{(2)}; t) = c^{(S)}\psi^{(S)}(\mathbf{x}^{(1)}; \mathbf{x}^{(2)}; t) + c^{(A)}\psi^{(A)}(\mathbf{x}^{(1)}; \mathbf{x}^{(2)}; t) \quad (16)$$

$$P(\mathbf{x}^{(1)}; \mathbf{x}^{(2)}; t) = |\psi(\mathbf{x}^{(1)}; \mathbf{x}^{(2)}; t)|^2 + |\psi(\mathbf{x}^{(2)}; \mathbf{x}^{(1)}; t)|^2 \quad (17)$$

$$= 2 \left[|c^{(S)}|^2 |\psi^{(S)}(\mathbf{x}^{(1)}; \mathbf{x}^{(2)}; t)|^2 + |c^{(A)}|^2 |\psi^{(A)}(\mathbf{x}^{(1)}; \mathbf{x}^{(2)}; t)|^2 \right] \quad (18)$$

シュレディンガー方程式に従った時間発展の予測が測定不能な定数 $c^{(S)}, c^{(A)}$ によらないようにするために、2 つの同種粒子はすべて対称か、または反対称な波動関数の状態にあるという仮説を設ける (**対称化仮説**)。この対称性は粒子の統計力学での性質に対応している (**粒子の統計性**)。

対称な波動関数を持つ粒子は**ボーズ粒子**または**ボゾン**と呼び、**ボーズ-アインシュタイン統計**に従う。反対称な波動関数を持つ粒子は**フェルミ粒子**または**フェルミオン**と呼び、**フェルミ-ディラック統計**に従う。ボーズ粒子は整数スピン ($0, 1, 2, \dots$) を持ち、フェルミ粒子は反奇整数スピン ($\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$) を持つ (**スピンと統計性の関係**)。

15.3 同種粒子の波動関数

対称化仮説のもとで、波動関数が1粒子状態の積で与えられているとする.

$$\psi(x_1, x_2) = \phi_\alpha(x_1)\phi_\beta(x_2) \quad (19)$$

入れ替え演算子を作用させると

$$P_{(12)}\psi(x_1, x_2) = \phi_\alpha(x_2)\phi_\beta(x_1) = \psi(x_2, x_1) \quad (20)$$

対称な波動関数は

$$\psi^{(S)}(x_1, x_2) = \psi(x_1, x_2) + \psi(x_2, x_1) = (1 + P_{(12)})\psi(x_1, x_2) \quad (21)$$

反対称な波動関数は

$$\psi^{(A)}(x_1, x_2) = \psi(x_1, x_2) - \psi(x_2, x_1) = (1 - P_{(12)})\psi(x_1, x_2) \quad (22)$$

いずれも確率を求めると、2つの波動関数が独立した項と、2つの波動関数が干渉した項に分かれる.

$$|\psi(x_1, x_2) \pm \psi(x_2, x_1)|^2 = |\psi(x_1, x_2)|^2 + |\psi(x_2, x_1)|^2 \pm 2\text{Re}[\psi(x_1, x_2)\psi^*(x_2, x_1)] \quad (23)$$

また、反対称な波動関数について

$$\psi(x, x) = -\psi(x, x) = 0 \quad (24)$$

なので、2粒子が同一時空点を占めることはできない(パウリの排他律).

以上の操作を n 粒子系に一般化するために、**並べ替え(置換)** を考える. 置換 P に対して、符号 $(-1)^P$ を次のように定義する.

$$(-1)^P = \begin{cases} 1 & P: \text{偶置換} \\ -1 & P: \text{奇置換} \end{cases} \quad (25)$$

完全対称な状態はすべての置換についての和をとったものである.

$$\psi^{(S)}(x_1, \dots, x_n) = \psi(x_1, \dots, x_n) + \dots + \psi(x_n, \dots, x_1) \quad (26)$$

$$= \sum_P P\psi(x_1, \dots, x_n) \quad (27)$$

完全反対称な状態はすべての置換について $(-1)^P$ をつけて和をとったものである.

$$\psi^{(A)}(x_1, \dots, x_n) = \psi(x_1, x_2, \dots, x_n) - \psi(x_2, x_1, \dots, x_n) + \dots \quad (28)$$

$$= \sum_P (-1)^P P\psi(x_1, \dots, x_n) \quad (29)$$

これらの操作により、任意の多粒子系の波動関数に対して完全(反)対称な波動関数は一意に定まる.

特に、粒子間の相互作用が小さい場合には、多粒子系の波動関数は1粒子の波動関数の積で近似される. この場合、完全反対称な波動関数は次の**スレーター行列式(Slater determinant)**で与えられる.

$$\psi^{(A)}(x_1, \dots, x_n) = \sum_P (-1)^P P\psi(x_1, \dots, x_n) \quad (30)$$

$$= \det \begin{bmatrix} \psi_{\alpha 1}(x_1) & \psi_{\alpha 1}(x_2) & \cdots & \psi_{\alpha 1}(x_n) \\ \psi_{\alpha 2}(x_1) & \psi_{\alpha 2}(x_2) & \cdots & \psi_{\alpha 2}(x_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{\alpha n}(x_1) & \psi_{\alpha n}(x_2) & \cdots & \psi_{\alpha n}(x_n) \end{bmatrix} \quad (31)$$

15.4 電子の統計性と周期律

元素の化学的性質は原子番号に従って周期的に変化する (周期律).

電子はスピン $1/2$ を持ち、フェルミ-ディラック統計に従う. 主量子数 n の状態では、軌道角運動量の大きさ $l = 0, 1, \dots, n-1$ をとる. つまり、軌道 (n, l) には $l_z = -l\hbar, (-l+1)\hbar, \dots, l\hbar$ の $2l+1$ 個の状態がある. さらに、スピンには上向きと下向きの 2 種類の状態がある. したがって、軌道 (n, l) には $2(2l+1)$ 個の状態がある. パウリの排他律により、軌道 (n, l) には $2(2l+1)$ 個以上の電子を詰め込むことはできない.

原子番号 Z の水素型原子は、 (n, l) の状態で l の値に関わらず、エネルギー $E_n = -mZ^2(\alpha c)^2/(2n^2)$ ($\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$) を持つ. Z の大きな多電子系では、 l が大きな軌道ほど高いエネルギーを持ち、 n についての縮退が解ける. エネルギー準位に大きな差があるところでグループ分けしたものを表 1 に示す.

表 1 多電子系の電子軌道 (n, l)

| | 電子軌道 | 収容可能電子数 | 累積した収容可能電子数 |
|--------|----------------------|---------|-------------|
| 第 1 周期 | (1,0) | 2 | 2 |
| 第 2 周期 | (2,0)(2,1) | 8 | 10 |
| 第 3 周期 | (3,0)(3,1) | 8 | 18 |
| 第 4 周期 | (3,2)(4,0)(4,1) | 18 | 36 |
| 第 5 周期 | (4,2)(5,0)(5,1) | 18 | 54 |
| 第 6 周期 | (4,3)(5,2)(6,0)(6,1) | 32 | 86 |

また、陽子と中性子がスピン $1/2$ のフェルミ粒子であることから、原子核も原子番号に従って周期的に性質が変化する. 陽子と中性子も、電子同様に軌道 (n, l) に $2(2l+1)$ 個ずつ入るという殻模型で近似される. 特に、陽子や中性子の数が $2, 8, 20, 28, 50, 82, 126, \dots$ (魔法数)^{*1} となると閉殻となり安定な同位元素となる.

一方、ボーズ-アインシュタイン統計に従う粒子は 1 つの状態に無数の粒子が入り込むことができる (ボーズ-アインシュタイン凝縮). 例えば、ヘリウム 4 では 2.17K でボーズ-アインシュタイン凝縮を起こし、粘性がほぼ 0 にまで低下する超流動現象が観測される.

15.5 同種粒子の衝突

いったんスピンを無視する. 2 粒子の重心座標 \mathbf{X} , 相対座標 \mathbf{x} で表す. (反)対称な粒子を入れ替えた波動関数は

$$\psi(\mathbf{X}, -\mathbf{x}) = \pm\psi(\mathbf{X}, \mathbf{x}) \quad (32)$$

空間反転とは異なり、重心座標の符号は変化しない. 以下、重心系において相対座標のみを考える.

シュレディンガー方程式の解の $r \rightarrow \infty$ での漸近形は

$$u(r, \theta, \phi) \rightarrow A \left[e^{ikz} + \frac{e^{ikz}}{r} f(\theta, \phi) \right] \quad (33)$$

^{*1} 魔法数の決定には、原子核の軌道や殻間のエネルギーギャップに関する複雑な相互作用が関わってくる. 1949 年に、メイヤー (米) とイェンゼン (独) は原子核の「殻構造モデル」を提唱することで、魔法数を説明することに成功し、ノーベル賞を受賞した.

散乱断面積は

$$\frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2 \quad (34)$$

(反) 対称化すると、散乱振幅は

$$f^{(S,A)}(\theta, \phi) = f(\theta, \phi) \pm f(\pi - \theta, \phi + \pi) \quad (35)$$

散乱断面積は

$$\frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} = |f^{(S,A)}(\theta, \phi)|^2 \quad (36)$$

$$= |f(\theta, \phi) \pm f(\pi - \theta, \phi + \pi)|^2 \quad (37)$$

$$= |f(\theta, \phi)|^2 + |f(\pi - \theta, \phi + \pi)|^2 \pm 2\text{Re}[f^*(\theta, \phi)f(\pi - \theta, \phi + \pi)] \quad (38)$$

次に、スピンを考慮に入れる。具体的に2つの陽子の散乱を考える。陽子は1/2スピンを持ち、波動関数は反対称にならなければならない。全スピン1(3重項)の散乱振幅 f_t は、スピンについて対称だから、空間依存性が反対称となり

$$f_t^{(A)}(\theta, \phi) = f_t(\theta, \phi) - f_t(\pi - \theta, \phi + \pi) \quad (39)$$

一方、全スピン0(1重項)の散乱振幅 f_s は、スピンの反対称だから、空間依存性は対称となる。

$$f_s^{(S)}(\theta, \phi) = f_s(\theta, \phi) + f_s(\pi - \theta, \phi + \pi) \quad (40)$$

実験では、入射粒子のスピンについて平均をとり、散乱粒子のスピンについて和をとる。このとき散乱断面積は、3重項と1重項の割合 $\frac{3}{4}, \frac{1}{4}$ を用いて

$$\frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} = \frac{3}{4}|f_t^{(A)}(\theta, \phi)|^2 + \frac{1}{4}|f_s^{(S)}(\theta, \phi)|^2 \quad (41)$$

$$= \frac{3}{4}|f_t(\theta, \phi) - f_t(\pi - \theta, \phi + \pi)|^2 + \frac{1}{4}|f_s(\theta, \phi) + f_s(\pi - \theta, \phi + \pi)|^2 \quad (42)$$

散乱振幅が全スピんに依らないとき

$$f_t(\theta, \phi) = f_s(\theta, \phi) = f(\theta, \phi) \quad (43)$$

散乱振幅は

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} &= |f(\theta, \phi)|^2 + |f(\pi - \theta, \phi + \pi)|^2 \\ &\quad - \frac{1}{2}[f^*(\theta, \phi)f(\pi - \theta, \phi + \pi) + f(\theta, \phi)f^*(\pi - \theta, \phi + \pi)] \end{aligned} \quad (44)$$

陽子が低エネルギーで入射したと仮定すると、核力による効果は無視できて、クーロン力による散乱を考えればよい。また、低エネルギーではスピンの変化も無視できる。したがって、クーロン力の散乱振幅の式

$$f_c(\theta) = \frac{\Gamma(1 + i\gamma) \exp[-i\gamma \ln(\sin^2 \frac{\theta}{2})]}{i\Gamma(-i\gamma) 2k \sin^2 \frac{\theta}{2}} \quad (45)$$

$$= \frac{\gamma}{2k \sin^2 \frac{\theta}{2}} \exp\left[-i\gamma \ln\left(\sin^2 \frac{\theta}{2}\right) - i\pi + 2i\eta_0\right] \quad (46)$$

$$\left(\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}, \quad v = \frac{\hbar k}{m}, \quad \gamma = \frac{ZZ'\alpha c}{v}, \quad \eta_0 = \arg \Gamma(1 + i\gamma) \right)$$

を式 (44) に代入すると、**モット (Motto) の公式**が得られる。

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \left(\frac{ZZ'\alpha\hbar c}{2mv^2} \right)^2 \left[\frac{1}{\sin^4 \frac{1}{2}\theta} + \frac{1}{\cos^4 \frac{1}{2}\theta} - \frac{1}{\sin^2 \frac{1}{2}\theta \cos^2 \frac{1}{2}\theta} \cos \left(\frac{mcZZ'\alpha}{\hbar k} \ln \tan^2 \frac{\theta}{2} \right) \right] \quad (47)$$

$$= \left(\frac{ZZ'e^2}{8\pi\epsilon_0mv^2} \right)^2 \left[\frac{1}{\sin^4 \frac{1}{2}\theta} + \frac{1}{\cos^4 \frac{1}{2}\theta} - \frac{1}{\sin^2 \frac{1}{2}\theta \cos^2 \frac{1}{2}\theta} \cos \left(\frac{ZZ'e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar v} \ln \tan^2 \frac{\theta}{2} \right) \right] \quad (48)$$

ただし、入射、散乱粒子の原子番号 Z, Z' 、換算質量 $m = m_p/2$ とおいた。

ここで、**ラザフォード (Rutherford) 散乱**を思い出すと、微分散乱断面積は

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \left(\frac{ZZ'e^2}{8\pi\epsilon_0mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{1}{2}\theta} \quad (49)$$

と表されるが、同種粒子と仮定した散乱においては、入射粒子と散乱粒子が区別できないため入射方向にも粒子が観測される。つまり、式 (49) において $\theta \rightarrow \pi - \theta$ とした項も同時に観測されて

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \left(\frac{ZZ'e^2}{8\pi\epsilon_0mv^2} \right)^2 \left[\frac{1}{\sin^4 \frac{1}{2}\theta} + \frac{1}{\cos^4 \frac{1}{2}\theta} \right] \quad (50)$$

となる。すると、式 (48) の右辺第 3 項を無視した形に一致する。

各散乱モデルにおける $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ と θ の関係を可視化するために、モット散乱の式 (48) とラザフォード散乱の式 (49), (50) について

$$10^{-12} = \frac{ZZ'e^2}{8\pi\epsilon_0mv^2}, \quad 50 = \frac{ZZ'e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar v} \quad (51)$$

としたときのグラフを図 1 に示す。

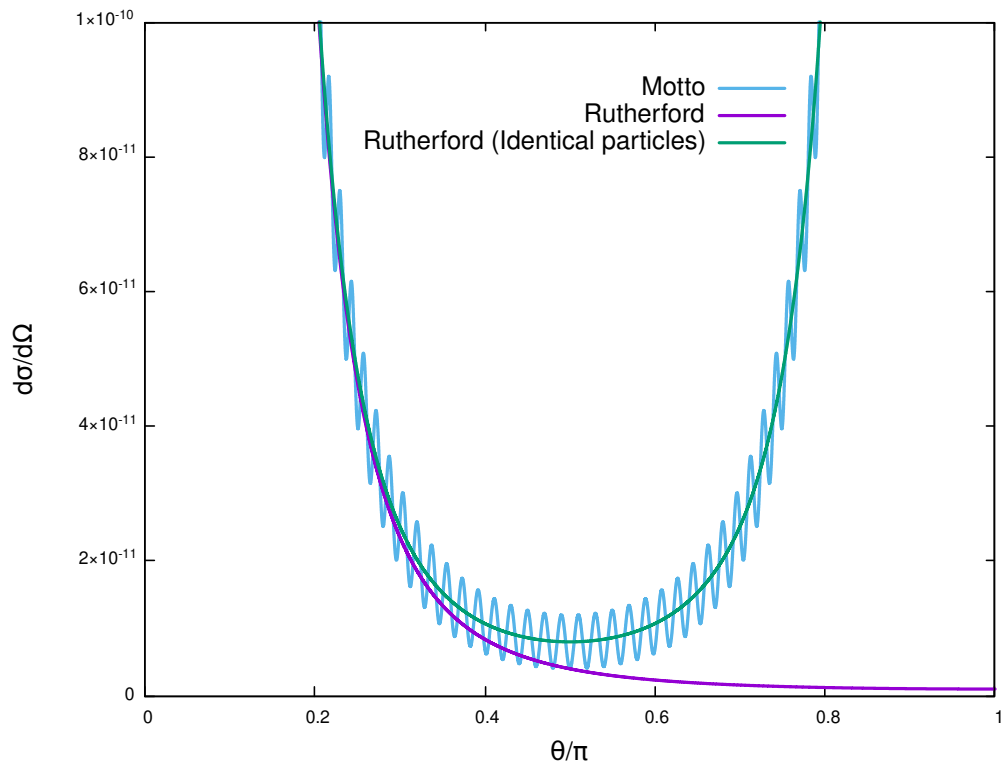


図1 モット散乱の散乱断面積と θ の関係

クーロン散乱の散乱振幅は、短距離力による散乱と異なり、角度に依存して振動する位相が存在する。この位相の振動数は、位相に掛かっている係数 $ZZ'e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar v)$ に比例する。すなわち、衝突粒子の原子番号が大きかったり相対速度が遅かったりする場合、検出角 θ がほんの少し変わるだけで散乱断面積に容易に揺れが生じることになる。