量子力学入門　第14回　電子スピン　　　小山　裕

【ボア磁子】

量子力学入門の最後の講義を始めます。今回は、**電子スピン**ということについてです。これまでの電子の量子力学的な性質は、いわば、電子の軌道運動あるいは、もっと一般的に言えば、クーロン力とか重力などのポテンシャルが無い場合も含めて、ポテンシャルの場での電子の存在についてお話して来ました。材料科学系では、昔から伝統的に磁石の研究が盛んでしたが、今週はこの磁石に関係する、電子のスピンや角運動量と磁石、磁場.についてお話します。

簡単な例として、軌道運動をしている、例えば水素原子の周りにある電子が作る磁場について、少し量子力学的に考えてみます。この量子力学の時間の前に受けている、電磁気学によれば、電流が流れると磁場が発生して、磁石と同じ働きをすることを習っていると思います。**ビオ・サバールの法則**を習いました。ループ状に電流Ｊが流れているとき、その磁気モーメントＭは次の式で求められます。　$M = \mu_0 JS$

ここで、μ_0は真空の透磁率で、Jは電流密度、そしてＳは電流ループの面積です。簡単のために、質量m_eで、電荷量が−qの電子が半径ａの円周上を動いている場合を考えると、量子力学的には電子がこのような軌道を描いて運動しているとは考えられませんが、ここでは磁気について、大雑把な話をするだけであるので、簡単なモデル化をして考えてみます。

この場合、ループの面積は、もちろん　$S = \pi a^2$　です。そして電流は、単位時間当たりに通過する電荷の量ですから、電子の速度をvとすると、　$J = -q\dfrac{v}{2\pi a}$　つまり、軌道の円周（$2\pi a$）上を速度vで電子が動いているのですから、$\dfrac{2\pi a}{v}$は、円周上を一回走るのにかかる時間なので、その逆数は単位時間当たりの通過回数になります。ですから、円の中心軸方向に次の磁気モーメントが発生することになります。

$$M = \mu_0 JS = -\mu_0 \pi a^2 q \frac{v}{2\pi a}$$

$$= -\mu_0 q \frac{av}{2}$$

一方で、この円運動をしている電子の角運動量は、次のようにz成分だけになります。

$$L = r \times p = \begin{vmatrix} i & j & k \\ a\sin\theta & a\cos\theta & 0 \\ p_x & p_y & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} i & j & k \\ a\sin\theta & a\cos\theta & 0 \\ -m_e v\cos\theta & m_e v\sin\theta & 0 \end{vmatrix}$$

$$= i\left(y \times 0 - 0 \times m_e v_y\right) + j\left(0 \times m_e v_x - x \times 0\right) + k\left(am_e v\sin^2\theta + am_e v\cos^2\theta\right)$$

$$= km_e va\left(\sin^2\theta + \cos^2\theta\right) = am_e v$$

つまり、角運動量Ｌはz成分だけになって、　$L_z = am_e v$　となります。

これを使って、磁気モーメントＭの式の中のavをL_zで置き換えると、　$M = -\dfrac{\mu_0 q L_z}{2m_e}$　となります。

一方、前に勉強した量子力学の計算では、角運動量のz成分は量子化されて、つまり連続的な値ではなく、とびとびの値しかとれずに、　$L_z = m\hbar$　でした。ここでmは整数で磁気量子数といいました。$\hbar$はプランク定数でした。これを使うと、電子の磁気モーメントは結局

$$M=-\frac{\mu_0 qL_z}{2m_e}=m\left(-\frac{\mu_0 q\hbar}{2m_e}\right)$$

となって、電子のスピンや原子の周囲にある電子は、角運動量をもっていて、小さな磁石を作ると考えられますが、磁石の強さ、つまり磁気モーメントには、磁気量子数mが整数なので、最小単位があって、不連続的にとびとびの値で変化することがわかります。
この最小単位をボーア磁子といいます。ニルス・ボアのボアです。デンマークの人で、量子力学黎明期の学者です。上の式で、M の括弧の中の値です。とびとびに磁気モーメントが変化する単位で、

$$\mu_B=\frac{\mu_0 q\hbar}{2m_e}\quad (1.165\times10^{-29}Wb\ m)$$

となります。単位は Wb(ウェーバー)・mです。

【電子スピン】

これがいわば、1個の電子でできる一番小さな磁石です。これ以上小さな磁石は出来ないというわけです。この例は、いわば電子の軌道運動による角運動量が量子化されて、磁場を発生することを量子力学的に考えたものですが、電子は古典的な意味では、軌道運動だけでなく、自転運動に相当する運動による角運動量を生じます。これもやはり量子化されて、これを「**スピン角運動量**」といいます。通常sで表されます。これははじめ、ディラックが、相対論的な量子力学、これは時間に依存したシュレジンガーの波動方程式に対応します・・を展開した結果、軌道角運動量のほかに、内部角運動量として必然的に出てきたものですが・・・・、ここでは詳しくは述べません。

電子や陽子、中性子は、スピンの大きさが $\hbar\sqrt{S(S+1)}$ ここで、$S=\frac{1}{2}$ そのz軸方向の成分 S_zが

$S_z=\pm\frac{\hbar}{2}$ の2つの状態が存在するものです。これを**スピン上向き($+\frac{\hbar}{2}$)と下向き($-\frac{\hbar}{2}$)**と呼んでいます。

このように、電子にはスピンという内部自由度がある(つまり異なる状態がある)ので、1個の原子軌道にはスピンが異なる2個の電子まで入ることが出来ます。つまり、スピンによる縮退度は2であるということができます。縮退とは、状態は異なるがエネルギーは同じである事を言います。
これを**パウリの排他律、あるいはパウリの原理**といいます。
他の量子数、つまり主量子数n、磁気量子数m、そして方位量子数エルを含めて、スピン角運動量sの

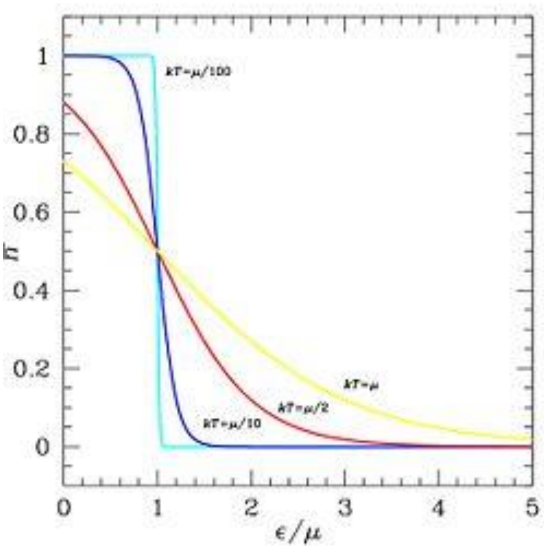
$S_z=\pm\frac{\hbar}{2}$ の全てが同じ状態の電子は、ただ一つのエネルギー準位を占める・・・ということです。これは、

量子力学では、同じ粒子、例えば二つの電子は、それぞれ区別できないことから来ています。人間でしたら、佐藤君と安倍君を区別できて、教室にたくさん学生が入ってきて、ごちゃごちゃになったとしても、佐藤君、安倍君と見分けられますが、電子の場合は、佐藤君の電子とか、安倍君の電子などとは区別できないことから来ています。この二つの電子の状態に対応する波動関数のちょっとした考察で必然的に説明できますが、ここでは詳しい説明はしません。

【フェルミ粒子とボーズ粒子】

また、このようにパウリの排他律が成り立つ、つまり同じエネルギー状態には、スピン量子数を含めてただ1種類の状態しか占めることができない・・・という粒子を、フェルミ粒子といいます。電子はフェルミ粒子です。エネルギー状態は、低い方からエネルギー準位が順々に埋まっていきますから、エネルギーが

下から電子が占めてきます。電子がたくさんあるときには、下のエネルギー準位からだんだんと電子が埋まってきます。これが周期律表の並びと関係してきます。



【フェルミ分布関数】

また、電子がフェルミ粒子であることが、電気抵抗が生まれる原因です。ちょっと飛躍しますが。フェルミ粒子がどのようにエネルギー分布を、エネルギーが低いところから占めていくかを表している・・・電子のようなフェルミ粒子が従う統計分布をフェルミ・ディラック（FD）分布といいます。縦軸にそのエネルギーを占める確率をとって、横軸がエネルギーです。この分布は温度によって変化していて、フェルミエネルギーと呼ばれるエネルギーで、丁度その電子の占有確率が50％になります。絶対零度では、このように直角に折れ曲がっています。温度が上がるに従って、分布がだんだんぼやけてきます。式で示すと、

$f_{FD}(E)=\dfrac{1}{1+e^{\frac{E}{kT}}}$ です。fの下に、FDと書いたのは、フェルミ・ディラックの意味です。

これに対して、同じ一つのエネルギー状態に、いくつでも同じ量子状態の粒子が占めることができるものを、**ボーズ粒子**といいます。いわば縮退度が無限大です。ヘリウム原子などがあります。また、超伝導で電流を運ぶ単位となる、電子と電子の対と格子振動が量子化されたフォノン、これをクーパー対といいます、などがボーズ粒子です。同じエネルギー状態に何個でも粒子がいることができるということが、電気抵抗ゼロで電流が流れる超伝導の原因になっています。
このボーズ粒子が従う分布統計をボース・アインシュタイン分布といって、式で表せば

$f_{BI}(E)=\dfrac{1}{1-e^{\frac{E}{kT}}}$ です。BIはボーズ・アインシュタインの意味です。

また、ヘリウムは軽い気体で、風船や飛行船などにつめるものです。液化ガスに微量含まれるので、そこから採取しますが、貴重なガスです。沸点が4．2Kなので、つまり4．2K以下では液体で、それ以上では気体なので、非常に低い温度で行なう実験には、冷媒としてよく使われます。
液体ヘリウムが極低温の1．9K程度以下では、粘性抵抗がなくなって、どんどん流れ出す、超流動現象が起こりますが、これもヘリウムがこのボーズ粒子であることが原因です。
しかし、ここでは詳しくは述べません。
いずれの分布統計も、温度が高くなると、その分布はぼやけてきて、指数関数項に比べて分母の1は無視できるようになり、このとき、**ボルツマン分布**になります。古典的な熱力学で出てくる、あのボルツマンです。フェルミ分布あるいはボルツマン分布関数の、分母の 1 が指数関数項に較べて省略できる場合に相当します。 $f_B(E)=\dfrac{1}{e^{\frac{E}{kT}}}$

【例題】

位置演算子xの観測値$\hat{x}$と、運動量演算子pの観測値$\hat{p}$の交換関係

$$[\hat{x}, \hat{p}] = (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\psi = \cdots$$

を計算しなさい。

また、この結果から位置と運動量の観測値の不確定性について述べなさい。

但し、波動関数ψは、xについてのみの一次元の関数である。

また、位置演算子xと運動量演算子pはそれぞれ

$$\hat{x} = x$$

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

である。

【解答例】

位置ｘと運動量ｐの交換子の値を計算してみましょう。

ある波動関数ψとして、それに演算子

$$\hat{x} = x$$

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

を順番に作用させる・・・つまりかけてみればよいです。

$$\hat{x}\hat{p}\psi = x\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

逆の場合は

$$\hat{p}\hat{x}\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = -i\hbar\left(\psi + x\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)$$

となりますから、交換子は

$$(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\psi = -i\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x} - \quad -i\hbar\left(\psi + x\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = i\hbar\psi$$

となって、これはゼロになりません。不確定性原理がなりたつ場合です。

そして、交換子の値　$i\hbar$　が不確定性の度合いを示していることになります。