量子力学２　角運動量の合成

電子のスピン角運動量は、軌道角運動量と異なる量子力学的な内部自由度である。スピンは $(1/2)\hbar$（半奇整数）の大きさを持っていて、その行列要素は角運動量の一般論で与えられるとおりである。$\ell = 1, s = 1/2$ の電子を考えよう。

(1) 適当な基底関数に付いて ℓ^2, ℓ_zおよび s^2, s_zの行列要素を書き下す。

(2) 軌道角運動量、スピン角運動量を同時に考えたい。固有関数の基底としては $|\ell, m_\ell; s, m_s\rangle \equiv |m_\ell; m_s\rangle$ として $|1; 1/2\rangle$, $|1; -1/2\rangle$, $|0; 1/2\rangle$, $|0; -1/2\rangle$, $|-1; 1/2\rangle$, $|-1; -1/2\rangle$ の 6 つがある。この基底に対し$\vec{j} = \vec{\ell} + \vec{s}, j_z = \ell_z + s_z, j_\pm = \ell_\pm + s_\pm$ として、$\vec{l}^2, j_z$の行列要素を計算する。次にこの 2 つの行列を対角にする基底を求め、 $|\ell, m_\ell; s, m_s\rangle$ であらわし、それぞれの $j, m_j, \ell, m_\ell, s, m_s$は何かを考える。

以下問題 (1)(2) を考えよう。基底関数として

$$|m_l, m_s\rangle = |1, \frac{1}{2}\rangle,\ |1, -\frac{1}{2}\rangle,\ |0, \frac{1}{2}\rangle,\ |0, -\frac{1}{2}\rangle,\ |-1, \frac{1}{2}\rangle,\ |-1, -\frac{1}{2}\rangle$$

を考える。(単位として $\hbar = 1$ とする。基底もこの順で並べる。) この基底について行列要素は次のようになる。

$$l^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & & & & & \\ & 2 & & & & \\ & & 2 & & & \\ & & & 2 & & \\ & & & & 2 & \\ & & & & & 2 \end{pmatrix}, \quad l_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & 0 & & & \\ & & & 0 & & \\ & & & & -1 & \\ & & & & & -1 \end{pmatrix}$$

$$s^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & & & & & \\ & \frac{3}{4} & & & & \\ & & \frac{3}{4} & & & \\ & & & \frac{3}{4} & & \\ & & & & \frac{3}{4} & \\ & & & & & \frac{3}{4} \end{pmatrix}, \quad s_z = \hbar \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & & & & & \\ & -\frac{1}{2} & & & & \\ & & \frac{1}{2} & & & \\ & & & -\frac{1}{2} & & \\ & & & & \frac{1}{2} & \\ & & & & & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$\vec{l} \cdot \vec{s} = l_x s_x + l_y s_y + l_z s_z = \frac{1}{2}(l_+ s_- + l_- s_+) + l_z s_z$ を用いると $(l \cdot s)|1\frac{1}{2}\rangle =$

$\frac{\hbar^2}{2}|1\frac{1}{2}\rangle$ などとなり、

$$l\cdot s=\hbar^2\begin{pmatrix}\frac{1}{2}&0&0&0&0&0\\0&-\frac{1}{2}&\frac{1}{\sqrt{2}}&0&0&0\\0&\frac{1}{\sqrt{2}}&0&0&0&0\\0&0&0&0&\frac{1}{\sqrt{2}}&0\\0&0&0&\frac{1}{\sqrt{2}}&-\frac{1}{2}&0\\0&0&0&0&0&\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

を得る。

したがって

$$j^2=(l+s)^2=l^2+s^2+2l\cdot s=\hbar^2(2+\frac{3}{4})\mathbf{1}+\hbar^2\begin{pmatrix}1&0&0&0&0&0\\0&-1&\sqrt{2}&0&0&0\\0&\sqrt{2}&0&0&0&0\\0&0&0&0&\sqrt{2}&0\\0&0&0&\sqrt{2}&-1&0\\0&0&0&0&0&1\end{pmatrix}$$

を得る。右辺第２項の行列を対角化して（第１項は対角行列故変化しない）

j^2の固有値

$$\begin{aligned}(2+\frac{3}{4}-2)\hbar^2 &= \frac{3}{4}\hbar^2 \ :\ (j=\frac{1}{2})\ 2\text{重}\\(2+\frac{3}{4}+1)\hbar^2 &= \frac{15}{4}\hbar^2 \ :\ (j=\frac{3}{2})\ 4\text{重}\end{aligned}$$

固有関数は

$j=\frac{3}{2}$ に対しては

$$|a_1\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\\0\\0\end{pmatrix},|a_2\rangle=\begin{pmatrix}0\\0\\0\\0\\0\\1\end{pmatrix},$$

$$
|a_3\rangle = \cos\theta \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \sin\theta \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \cos\theta|A\rangle + \sin\theta|B\rangle,
$$

$$
|a_4\rangle = -\sin\theta \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \cos\theta \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 \end{pmatrix} \equiv -\sin\theta|A\rangle + \cos\theta|B\rangle
$$

$j = \frac{1}{2}$に対しては

$$
|b_1\rangle = \cos\phi \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \sin\phi \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{2}{\sqrt{3}} \\ 0 \end{pmatrix} = \cos\phi|C\rangle + \sin\phi|D\rangle,
$$

$$
|b_2\rangle = -\sin\phi \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \cos\phi \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{2}{\sqrt{3}} \\ 0 \end{pmatrix} = -\sin\phi|C\rangle + \cos\phi|D\rangle
$$

$$
j_z|a_1\rangle = \frac{3}{2}\hbar|a_1\rangle, j_z|a_2\rangle = -\frac{3}{2}\hbar|a_2\rangle, j_z|A\rangle = \frac{1}{2}\hbar|A\rangle,
$$

$$
j_z|B\rangle = -\frac{1}{2}\hbar|B\rangle, j_z|C\rangle = \frac{1}{2}\hbar|C\rangle, j_z|D\rangle = -\frac{1}{2}\hbar|D\rangle
$$

であるから、j^2 と j_z を同時に対角化する基底として次のものを得る

$$j = \frac{3}{2} : \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \sqrt{2} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \sqrt{2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$j = \frac{1}{2} : \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{2} \\ -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \\ \sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}$$

これらは違う方法を用いているが講義で示した結果と（当然）一致している。