量子力学II　演習問題 6

2018 年 5 月 18 日

1　スピン・軌道相互作用

原子内の電子の軌道角運動量 $\hat{\mathbf{l}}$ とスピン角運動量 $\hat{\mathbf{s}}$ の間には、次の形のハミルトニアンで表されるスピン・軌道相互作用が働く。

$$\hat{H}_{SO} = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}} \equiv \lambda\hat{\mathbf{l}}\cdot\hat{\mathbf{s}}$$

ここで、V は電子が感じるクーロンポテンシャルであり、$\mathrm{d}V/\mathrm{d}r > 0$ である。電子の静止系から見ると原子核が運動しており、それにより生じる電流が作る磁場とスピン角運動量の相互作用がスピン・軌道相互作用である。以下では簡単のために角運動量の自由度のみを考え、λ は定数として扱う。

ここで、全角運動量 $\hat{\mathbf{J}} := \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}$ を導入する。$\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_z, \hat{\mathbf{s}}^2, \hat{s}_z$ の同時固有状態を $|l, m_l; s, m_s\rangle \equiv |m_l, m_s\rangle$ とし、$\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z, \hat{\mathbf{l}}^2, \hat{\mathbf{s}}^2$ の同時固有状態を $|J, M; l, s\rangle \equiv |J, M\rangle\rangle$ とする。但し、これらは以下を満たす。

$$\begin{aligned}
&\hat{\mathbf{l}}^2 |m_l, m_s\rangle = \hbar^2 l(l+1) |m_l, m_s\rangle, \hat{\mathbf{s}}^2 |m_l, m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1) |m_l, m_s\rangle, \\
&\hat{l}_z |m_l, m_s\rangle = \hbar m_l |m_l, m_s\rangle, \hat{s}_z |m_l, m_s\rangle = \hbar m_s |m_l, m_s\rangle \\
&\hat{\mathbf{J}}^2 |J, M\rangle\rangle = \hbar^2 J(J+1) |J, M\rangle\rangle, \hat{\mathbf{J}}_z |J, M\rangle\rangle = \hbar M |J, M\rangle\rangle, \\
&\hat{\mathbf{l}}^2 |J, M\rangle\rangle = \hbar^2 l(l+1) |J, M\rangle\rangle, \hat{\mathbf{s}}^2 |J, M\rangle\rangle = \hbar^2 s(s+1) |J, M\rangle\rangle.
\end{aligned}$$

以下では、$l = 1, s = 1/2$ とする。

(1) 交換関係 $\left[\hat{H}_{SO}, \hat{l}_z\right]$ 及び $\left[\hat{H}_{SO}, \hat{s}_z\right]$ を計算せよ。

(2) 交換関係 $\left[\hat{H}_{SO}, \hat{\mathbf{J}}^2\right]$ 及び $\left[\hat{H}_{SO}, \hat{J}_z\right]$ を計算せよ。

(3) $|J, M\rangle\rangle$ が $\hat{H}_{SO}$ の固有状態になっていることを示し、固有値を求めよ。

(4) $|J, M\rangle\rangle$ を全て求め、$|m_l, m_s\rangle$ の線型結合によって表せ。

(5) $|m_l, m_s\rangle$ を基底に取って $\hat{H}_{SO}$ を行列表示せよ。

2 Clebsch-Gordan 係数

$\hat{\mathbf{J}}_1$ と $\hat{\mathbf{J}}_2$ を独立な角運動量演算子とし、合成角運動量を $\hat{\mathbf{J}} := \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2$ と定義する。$\hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{J}_{1z}, \hat{\mathbf{J}}_2^2, \hat{J}_{2z}$ の同時固有状態を $|J_1, M_1; J_2, M_2\rangle \equiv |M_1, M_2\rangle$ とし、$\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z, \hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{\mathbf{J}}_2^2$ の同時固有状態を $|J, M; J_1, J_2\rangle \equiv |J, M\rangle\rangle$ とする。但し、これらは以下を満たす。

$$\hat{\mathbf{J}}_1^2 |M_1, M_2\rangle = \hbar^2 J_1(J_1+1) |M_1, M_2\rangle, \hat{\mathbf{J}}_2^2 |M_1, M_2\rangle = \hbar^2 J_2(J_2+1) |M_1, M_2\rangle,$$
$$\hat{J}_{1z} |M_1, M_2\rangle = \hbar M_1 |M_1, M_2\rangle, \hat{J}_{2z} |M_1, M_2\rangle = \hbar M_2 |M_1, M_2\rangle$$
$$\hat{\mathbf{J}}^2 |J, M\rangle\rangle = \hbar^2 J(J+1) |J, M\rangle\rangle, \hat{\mathbf{J}}_z |J, M\rangle\rangle = \hbar M |J, M\rangle\rangle,$$
$$\hat{\mathbf{J}}_1^2 |J, M\rangle\rangle = \hbar^2 J_1(J_1+1) |J, M\rangle\rangle, \hat{\mathbf{J}}_2^2 |J, M\rangle\rangle = \hbar^2 J_2(J_2+1) |J, M\rangle\rangle.$$

ここで、Clebsch-Gordan 係数 $C(J_1, J_2, J; M_1, M_2, M) := \langle J_1, M_1; J_2, M_2 | J, M; J_1, J_2\rangle$ について考察する。以下の問いに答えよ。

(1) $M \neq M_1 + M_2$ ならば $C(J_1, J_2, J; M_1, M_2, M) = 0$ であることを、上で与えた $|M_1, M_2\rangle, |J, M\rangle\rangle$ の性質を用いて証明せよ。

(2) $|J_1 - J_2| \leq J \leq J_1 + J_2$ が成立しないならば $C(J_1, J_2, J; M_1, M_2, M) = 0$ となることを説明せよ。

(3) 次の漸化式を示せ。

$$\begin{aligned}
&\sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)}C(J_1, J_2, J; M_1, M_2, M \pm 1) \\
&\quad = \sqrt{(J_1 \mp M_1 + 1)(J_1 \pm M_1)}C(J_1, J_2, J; M_1 \mp 1, M_2, M) \\
&\qquad + \sqrt{(J_2 \mp M_2 + 1)(J_2 \pm M_2)}C(J_1, J_2, J; M_1, M_2 \mp 1, M)
\end{aligned}$$

(4) (1) と (3) の結果を用いることによって、ある固定された J_1, J_2, J に対して $C(J_1, J_2, J; M_1, M_2, M)$ の M_1, M_2, M 依存性が規格化の自由度を除いて決定されることを説明せよ。

3 Wigner-Eckart の定理

$\hat{\mathbf{j}}$ を角運動量演算子とする。ヒルベルト空間における $(2j+1)$ 個の状態ベクトル $|\psi;j,m\rangle\,(m=j,j-1,\cdots,-j)$ が次の関係式を満たすとき、
$\{|\psi;j,m\rangle\,|m=j,j-1,\cdots,-j\}$ は角運動量 j の表現をなしている、という。

$$\hat{j}_z\,|\psi;j,m\rangle=\hbar m\,|\psi;j,m\rangle\,,\quad \hat{j}_\pm\,|\psi;j,m\rangle=\hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,|\psi;j,m\pm 1\rangle$$

(1) 2 組の状態ベクトル $\{|\psi;j,m\rangle\,|m=j,j-1,\cdots,-j\}$ および
$\{|\phi;j',m'\rangle\,|m'=j',j'-1,\cdots,-j'\}$ がそれぞれ角運動量 j および j' の表現をなしているとき、それらの内積が次のような形になることを示せ。

$$\langle\phi;j',m'|\psi;j,m\rangle=A^{j}_{\phi,\psi}\delta_{j',j}\delta_{m',m}$$

ここで、$A^{j}_{\phi,\psi}$ は m,m' に依らない定数である。

$(2k+1)$ 個の演算子 $\hat{O}_{k,q}(q=k,k-1,\cdots,-k)$ が次のような交換関係を満たすとき、これらは階数 k の球面テンソル演算子である、という。

$$\left[\hat{j}_z,\hat{O}_{k,q}\right]=\hbar q\hat{O}_{k,q},\quad \left[\hat{j}_\pm,\hat{O}_{k,q}\right]=\hbar\sqrt{(k\mp q)(k\pm q+1)}\hat{O}_{k,q\pm 1}$$

(2) $\hat{X}_{k_1,q_1}$ と $\hat{Z}_{k_2,q_2}$ がそれぞれ階数 k_1,k_2 の球面テンソル演算子のとき、次のように与えられる演算子 $\hat{T}_{k,q}$ は階数 k の球面テンソル演算子であることを示せ。

$$\hat{T}_{k,q}=\sum_{q_1}\sum_{q_2}C(k_1,k_2,k;q_1,q_2,q)\hat{X}_{k_1,q_1}\hat{Z}_{k_2,q_2}$$

ここで、$C(k_1,k_2,k;q_1,q_2,q)$ は Clebsch-Gordan 係数である。

(3) 2 組の状態ベクトル $\{|\psi;j,m\rangle\,|m=j,j-1,\cdots,-j\}$ および
$\{|\phi;j',m'\rangle\,|m'=j',j'-1,\cdots,-j'\}$ がそれぞれ角運動量 j および j' の表現をなしており、$\hat{T}_{k,q}$ が階数 k の球面テンソル演算子であるとき、次の等式 (Wigner-Eckart の定理) を示せ。

$$\langle\phi;j',m'|\hat{T}_{k,q}|\psi;j,m\rangle=C(j,k,j';m,q,m')\frac{\langle\phi;j'||\hat{T}_k||\psi;j\rangle}{\sqrt{2j+1}}$$

ここで、$\langle\phi;j'||\hat{T}_k||\psi;j\rangle$ は換算行列要素と呼ばれる、m,m',q に依らない定数である。
(ヒント：大問 2 で示した事実に帰着させるように工夫せよ。)