演習問題

2024 年 7 月 18 日　　学籍番号 ____________　　氏名 ____________

[問 1]　スピン角運動量の合成について、交換する演算子の組を理解しよう。以下のように、粒子 1, 粒子 2 に対応した 2 種類のスピン演算子を導入する

$$\text{粒子 1：}\ \hat{\mathbf{S}}_1 = \begin{pmatrix} \hat{S}_{1x} \\ \hat{S}_{1y} \\ \hat{S}_{1z} \end{pmatrix}, \qquad \text{粒子 2：}\ \hat{\mathbf{S}}_2 = \begin{pmatrix} \hat{S}_{2x} \\ \hat{S}_{2y} \\ \hat{S}_{2z} \end{pmatrix}.$$

粒子 1 と粒子 2 のスピン演算子は $[\hat{S}_{1i}, \hat{S}_{2j}] = 0\ (i, j = x, y, z)$ および $[\hat{S}_{1i}, \hat{S}_{1j}] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{S}_{1k}$, $[\hat{S}_{2i}, \hat{S}_{2j}] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{S}_{2k}\ (i, j, k = x, y, z)$ を満たす。また、それぞれについて昇降演算子は $\hat{S}_{1\pm} := \hat{S}_{1x} \pm i\hat{S}_{1y}$, $\hat{S}_{2\pm} = \hat{S}_{2x} \pm i\hat{S}_{2y}$ で定義される。このとき、粒子 1, 2 を合わせたスピン演算子

$$\hat{\mathbf{S}} = \begin{pmatrix} \hat{S}_x \\ \hat{S}_y \\ \hat{S}_z \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} \hat{S}_{1x} + \hat{S}_{2x} \\ \hat{S}_{1y} + \hat{S}_{2y} \\ \hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z} \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2,$$

について、以下の問いに答えよ。

(1)　全スピン角運動量の二乗が

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = \hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 + \hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-} + \hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+} + 2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z},$$

と書けることを示せ。

(2)　$\hat{\mathbf{S}}^2$ と $\hat{\mathbf{S}}_1^2$ および $\hat{\mathbf{S}}^2$ と $\hat{\mathbf{S}}_2^2$ が交換することを示せ。

(3)　$\hat{\mathbf{S}}^2$ と $\hat{S}_{1z}$ および $\hat{\mathbf{S}}^2$ と $\hat{S}_{2z}$ が交換しないことを示せ。

[解 1]

(1)　定義を代入し、

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{S}}^2 &= (\hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2)^2 \\
&\overset{[\hat{S}_{1i}, \hat{S}_{2j}]=0}{=} \hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 \\
&= \hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 + 2(\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y} + \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}) \\
&= \hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 + \hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-} + \hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+} + 2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z},
\end{aligned}$$

と示される。

(2)　$\hat{S}^2$ と $\hat{S}_1^2$ について、

$$
\begin{aligned}
[\hat{S}^2, \hat{\boldsymbol{S}}_1^2] &= [\hat{\boldsymbol{S}}_1^2 + \hat{\boldsymbol{S}}_2^2 + 2\hat{\boldsymbol{S}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_2, \hat{\boldsymbol{S}}_1^2] \\
&\overset{[\hat{S}_1^2,\hat{S}_1^2]=0,\ [\hat{S}_2^2,\hat{S}_1^2]=0}{=} 2[\hat{\boldsymbol{S}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_2, \hat{\boldsymbol{S}}_1^2] \\
&= 2[\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y} + \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}, \hat{\boldsymbol{S}}_1^2] \\
&\overset{[\hat{S}_{2j},\hat{S}_1^2]=0}{=} 2\left([\hat{S}_{1x}, \hat{\boldsymbol{S}}_1^2]\hat{S}_{2x} + [\hat{S}_{1y}, \hat{\boldsymbol{S}}_1^2]\hat{S}_{2y} + [\hat{S}_{1z}, \hat{\boldsymbol{S}}_1^2]\hat{S}_{2z}\right) \\
&\overset{[\hat{S}_{1i},\hat{S}_1^2]=0}{=} 0,
\end{aligned}
$$

と示される。$\hat{S}^2$ と $\hat{S}_2^2$ についても同様である。

(3)　$\hat{S}^2$ と $\hat{S}_{1z}$ について、

$$
\begin{aligned}
[\hat{S}^2, \hat{S}_{1z}] &= [\hat{\boldsymbol{S}}_1^2 + \hat{\boldsymbol{S}}_2^2 + 2\hat{\boldsymbol{S}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_2, \hat{S}_{1z}] \\
&\overset{[\hat{S}_1^2,\hat{S}_{1z}]=0,\ [\hat{S}_2^2,\hat{S}_{1z}]=0}{=} 2[\hat{\boldsymbol{S}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_2, \hat{S}_{1z}] \\
&= 2[\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y} + \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}, \hat{S}_{1z}] \\
&= 2\left([\hat{S}_{1x}, \hat{S}_{1z}]\hat{S}_{2x} + [\hat{S}_{1y}, \hat{S}_{1z}]\hat{S}_{2y}\right) \\
&= 2i\hbar\left(-\hat{S}_{1y}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1x}\hat{S}_{2y}\right) \\
&\neq 0,
\end{aligned}
$$

と示される。$\hat{S}^2$ と $\hat{S}_{2z}$ についても同様である。

[問 2]　スピン $\frac{1}{2}$ の合成を復習しよう。

(1)　まず

$$
|1,1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle,
$$

から始めて、$\hat{S}_- = \hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}$ を作用させることにより $|1,0\rangle$ および $|1,-1\rangle$ を合成前の状態 $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$ で表せ。ここで $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$ は略記

$$
|\uparrow\uparrow\rangle := \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle, \qquad |\uparrow\downarrow\rangle := \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle, \qquad |\downarrow\uparrow\rangle := \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle, \qquad |\downarrow\downarrow\rangle := \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle,
$$

であり、また昇降演算子の作用は

$$
\hat{S}_\pm |s, m\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m(m \pm 1)}\,|s, m \pm 1\rangle,
$$

である。

(2)　次に、残りの状態

$$
|0,0\rangle,
$$

が $|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle$ のいずれとも直交していることを利用し、$|0,0\rangle$ を合成前の状態 $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$ で表せ。

[解 2]

(1) 与式

$$|1,1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle,$$

に $\hat{S}_- = \hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}$ を作用させると、

$$\hat{S}_-|1,1\rangle = \sqrt{2}\hbar|1,0\rangle, \qquad \left(\hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}\right)|\uparrow\uparrow\rangle = \hbar\left(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle\right) \qquad \Longrightarrow \qquad |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right),$$

を得る。ここにさらに $\hat{S}_- = \hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}$ を作用させると、

$$\hat{S}_-|1,0\rangle = \sqrt{2}\hbar|1,-1\rangle, \qquad \left(\hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right) = \hbar|\downarrow\downarrow\rangle \qquad \Longrightarrow \qquad |1,-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle,$$

を得る。

(2) $|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle$ のいずれとも直交する状態は

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right),$$

となる。絶対値 1 の複素定数倍の不定性がある。

[問 3] 波動関数 $\Psi(t,\boldsymbol{x})$ が荷電粒子の時間に依存する Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t,\boldsymbol{x}) = H\Psi(t,\boldsymbol{x}), \qquad H = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\boldsymbol{\nabla} - q\boldsymbol{A}(t,\boldsymbol{x})\right)^2 + q\varphi(t,\boldsymbol{x}),$$

の解であるとき、

$$\Psi'(t,\boldsymbol{x}) := e^{\frac{iq\Lambda(t,\boldsymbol{x})}{\hbar}}\Psi(t,\boldsymbol{x}),$$

で定義される $\Psi'(t,\boldsymbol{x})$ は、実関数 $\Lambda(t,\boldsymbol{x})$ を用いて

$$\varphi'(t,\boldsymbol{x}) := \varphi(t,\boldsymbol{x}) - \frac{\partial}{\partial t}\Lambda(t,\boldsymbol{x}), \qquad \boldsymbol{A}'(t,\boldsymbol{x}) := \boldsymbol{A}(t,\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\nabla}\Lambda(t,\boldsymbol{x})$$

と定義される $\varphi'(t,\boldsymbol{x})$ および $\boldsymbol{A}'(t,\boldsymbol{x})$ の下での荷電粒子の Schrödinger 方程式を満たしていることを示せ。

[解 3] 定義より

$$\Psi(t,\boldsymbol{x}) = e^{-\frac{iq\Lambda(t,\boldsymbol{x})}{\hbar}}\Psi'(t,\boldsymbol{x}),$$

である。Schrödinger 方程式の左辺は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{-\frac{iq\Lambda(t,\boldsymbol{x})}{\hbar}}\Psi'(t,\boldsymbol{x})\right) = e^{-\frac{iq\Lambda(t,\boldsymbol{x})}{\hbar}}\left[q\Psi'(t,\boldsymbol{x})\frac{\partial}{\partial t}\Lambda(t,\boldsymbol{x}) + i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi'(t,\boldsymbol{x})\right],$$

であり、右辺は

$$\begin{aligned}
\left(-i\hbar\boldsymbol{\nabla} - q\boldsymbol{A}(t,\boldsymbol{x})\right)\left(e^{-iq\Lambda(t,\boldsymbol{x})}\Psi'(t,\boldsymbol{x})\right) &= e^{-iq\Lambda(t,\boldsymbol{x})}\left(-i\hbar\boldsymbol{\nabla} - q\left(\boldsymbol{A}(t,\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\nabla}\Lambda(t,\boldsymbol{x})\right)\right)\Psi'(t,\boldsymbol{x}),\\
\left(-i\hbar\boldsymbol{\nabla} - q\boldsymbol{A}(t,\boldsymbol{x})\right)^2\left(e^{-iq\Lambda(t,\boldsymbol{x})}\Psi'(t,\boldsymbol{x})\right) &= e^{-iq\Lambda(t,\boldsymbol{x})}\left(-i\hbar\boldsymbol{\nabla} - q\left(\boldsymbol{A}(t,\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\nabla}\Lambda(t,\boldsymbol{x})\right)\right)^2\Psi'(t,\boldsymbol{x}),
\end{aligned}$$

より

$$H\left(e^{-iq\Lambda(t,x)}\Psi'(t,\boldsymbol{x})\right) = e^{-iq\Lambda(t,x)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(-i\hbar\nabla - q(\boldsymbol{A}(t,\boldsymbol{x}) + \nabla\Lambda(t,\boldsymbol{x})))^2 + q\varphi(t,\boldsymbol{x})\right]\Psi'(t,\boldsymbol{x}),$$

であるから、

$$\begin{aligned}
&q\Psi'(t,\boldsymbol{x})\frac{\partial}{\partial t}\Lambda(t,\boldsymbol{x}) + i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi'(t,\boldsymbol{x}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}(-i\hbar\nabla - q(\boldsymbol{A}(t,\boldsymbol{x}) + \nabla\Lambda(t,\boldsymbol{x})))^2 + q\varphi(t,\boldsymbol{x})\right]\Psi'(t,\boldsymbol{x}) \\
\Longrightarrow\quad &i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi'(t,\boldsymbol{x}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}(-i\hbar\nabla - q(\boldsymbol{A}(t,\boldsymbol{x}) + \nabla\Lambda(t,\boldsymbol{x})))^2 + q\left(\varphi(t,\boldsymbol{x}) - \frac{\partial}{\partial t}\Lambda(t,\boldsymbol{x})\right)\right]\Psi'(t,\boldsymbol{x}), \\
\Longrightarrow\quad &i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi'(t,\boldsymbol{x}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}(-i\hbar\nabla - q\boldsymbol{A}'(t,\boldsymbol{x}))^2 + q\varphi'(t,\boldsymbol{x})\right]\Psi'(t,\boldsymbol{x}),
\end{aligned}$$

となるので示された。

[問 4]　実際の水素原子では、陽子も電子もスピン $\frac{1}{2}$ の粒子なので、それぞれの $\hat{S}_z$ の固有値 $\pm\frac{\hbar}{2}$ に対応する $2\times 2 = 4$ つのエネルギー準位が基底状態 $(n,l,m) = (1,0,0)$ に存在している。しかし実際には、陽子の磁気モーメントと電子の磁気モーメントの相互作用により、この 4 つのエネルギー準位はスピン一重項と三重項の間で分裂している。このエネルギー準位の分裂を超微細構造と言う。磁気モーメント間の相互作用によるエネルギーを考えることにより、超微細構造が

$$\Delta E \sim \alpha^4 \frac{m_e^2}{m_p}c^2,$$

程度のオーダーになることを示せ。

[解 4]　陽子と電子のスピンによる磁気モーメント $\boldsymbol{\mu}_p, \boldsymbol{\mu}_e$ は

$$\boldsymbol{\mu}_p = g_p\frac{e}{2m_p}S_{1z} \sim g_p\frac{e\hbar}{m_p}, \qquad \boldsymbol{\mu}_e = -g_e\frac{e}{2m_e}S_{2z} \sim g_e\frac{e\hbar}{m_e}\hbar,$$

程度である。ここに現れる g 因子は $\mathcal{O}(1)$ 程度の値である。陽子の磁気モーメントが作り出す磁場 $\boldsymbol{H}$ を電子の磁気モーメントが感じることでエネルギーが生じると考えると、陽子の磁気モーメントにより生成される磁場を、$I\boldsymbol{A} \sim \boldsymbol{\mu}_p$ および $\bar{R} \sim$(電子の位置)$\sim$(Bohr 半径)$\sim a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{\hbar}{\alpha m_e c}$ (ただし $\alpha := \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$ は微細構造定数) で評価すればよいから、

$$\boldsymbol{H} \sim \frac{\boldsymbol{\mu}_p}{a^3} \sim \boldsymbol{\mu}_p\left(\frac{\alpha m_e c}{\hbar}\right)^3,$$

を得る。この磁場により電子の磁気モーメントが持つエネルギー ΔE は、

$$\Delta E \sim \boldsymbol{\mu}_e\cdot\boldsymbol{B} \sim \boldsymbol{\mu}_e\cdot\mu_0\boldsymbol{H} \sim \boldsymbol{\mu}_e\boldsymbol{\mu}_p\mu_0\left(\frac{\alpha m_e c}{\hbar}\right)^3 \sim g_p\frac{e\hbar}{m_p}g_e\frac{e\hbar}{m_e}\mu_0\left(\frac{\alpha m_e c}{\hbar}\right)^3 \overset{\alpha=\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c},\ c=\frac{1}{\sqrt{\mu_0\epsilon_0}}}{\sim} g_p g_e\alpha^4\frac{m_e^2}{m_p}c^2,$$

程度とわかる。ΔE は Bohr エネルギー $\alpha^2 m_e c^2$ に比べて $\mathcal{O}(10)\times\alpha^2\frac{m_e}{m_p} \sim 10^{-6}$ 倍も小さな分裂であるため、**超微細構造 (hyperfine structure)** あるいは**超微細分裂 (hyperfine splitting)** と呼ばれる。