

演習問題

2025 年 7 月 24 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 種類のスピンの演算子を導入する

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

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 $\hat{S}_1^2$ および $\hat{\mathbf{S}}^2$ と $\hat{S}_2^2$ 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、

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

と示される。

(2) $\hat{S}^2$ と $\hat{S}_1^2$ について、

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

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、

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

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

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

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、

$$\hat{S}_- |1, 1\rangle = \sqrt{2}\hbar |1, 0\rangle, \quad (\hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}) |\uparrow\uparrow\rangle = \hbar(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle) \implies |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle),$$

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

$$\hat{S}_- |1, 0\rangle = \sqrt{2}\hbar |1, -1\rangle, \quad (\hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}) \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle) = \hbar|\downarrow\downarrow\rangle \implies |1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle,$$

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

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

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 $\Psi(t, \mathbf{x})$ が荷電粒子の時間に依存する Schrödinger 方程式

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

の解であるとき、

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

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

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

と定義される $\varphi'(t, \mathbf{x})$ および $\mathbf{A}'(t, \mathbf{x})$ 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

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

である。Schrödinger 方程式の左辺は

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

であり、右辺は

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

より

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

であるから、

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

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、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 μ_p, μ_e は

$$\mu_p = g_p \frac{e}{2m_p} S_{1z} \sim g_p \frac{e\hbar}{m_p}, \quad \mu_e = -g_e \frac{e}{2m_e} S_{2z} \sim g_e \frac{e\hbar}{m_e},$$

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 $\mathbf{H}$ 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、 $I\mathbf{A} \sim \mu_p$ および $\bar{R} \sim (\text{電子の位置}) \sim (\text{Bohr 半径}) \sim a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{\hbar}{\alpha m_e c}$ (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、

$$\mathbf{H} \sim \frac{\mu_p}{a^3} \sim \mu_p \left(\frac{\alpha m_e c}{\hbar} \right)^3,$$

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、

$$\Delta E \sim \mu_e \cdot \mathbf{B} \sim \mu_e \cdot \mu_0 \mathbf{H} \sim \mu_e \mu_p \mu_0 \left(\frac{\alpha m_e c}{\hbar} \right)^3 \sim g_p \frac{e\hbar}{m_p} g_e \frac{e\hbar}{m_e} \mu_0 \left(\frac{\alpha m_e c}{\hbar} \right)^3 \stackrel{\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}, c = \frac{1}{\sqrt{\mu_0\epsilon_0}}}{\sim} g_p g_e \alpha^4 \frac{m_e^2}{m_p} c^2,$$

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。