

量子力学 II 第 1 回レポート問題

Masato USUI

2023 年 5 月 4 日

1. 1) $d = 2$ の時

$$|j = 1/2, m = 1/2\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |j = 1, m = -1/2\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1)$$

とする. 明らかに

$$M_z \doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

である. また $M_{\pm} = M_x \pm iM_y$ と置くと角運動量演算子の定義から

$$\begin{aligned} [M_z, M_{\pm}] &= [M_z, M_x \pm iM_y] \\ &= i\hbar(M_y \mp iM_x) \\ &= \pm\hbar(M_x \pm iM_y) \\ &= \pm\hbar M_{\pm} \end{aligned}$$

であるから

$$\begin{aligned} M_z M_{\pm} |j = 1/2, m = \pm 1/2\rangle &= M_{\pm} M_z |j = 1/2, m = \pm 1/2\rangle \pm \hbar M_{\pm} |j = 1/2, m = \pm 1/2\rangle \\ &= M_{\pm} (m \pm \hbar) |j = 1/2, m = \pm 1/2\rangle \end{aligned}$$

つまり $M_{\pm} |j, m\rangle$ は M_z の固有状態または 0 ベクトルである

$$\begin{aligned} M_+ |j, m\rangle &\propto \begin{cases} |0\rangle & m=1/2 \\ |j = 1/2, m = 1/2\rangle & m = -1/2 \end{cases} \\ M_- |j, m\rangle &\propto \begin{cases} |j = 1/2, m = -1/2\rangle & m = 1/2 \\ |0\rangle & m = -1/2 \end{cases} \end{aligned}$$

さらにこの比例係数は $M_{\pm}^{\dagger} M_{\pm} = M^2 - M_z^2 \mp \hbar M_z$ であることを用いると

$$\begin{aligned} |c_+|^2 &= \langle j = 1/2, m = -1/2 | M_+^{\dagger} M_+ | j = 1/2, m = -1/2 \rangle \\ &= \left(\frac{\hbar}{2} \frac{3\hbar}{2} - \frac{\hbar^2}{4} + \frac{1}{2} \hbar^2 \right) \\ &= \hbar^2 \\ |c_-|^2 &= \langle j = 1/2, m = 1/2 | M_-^{\dagger} M_- | j = 1/2, m = 1/2 \rangle \\ &= \left(\frac{\hbar}{2} \frac{3\hbar}{2} - \frac{\hbar^2}{4} + \frac{\hbar^2}{2} \right) \\ &= \hbar^2 \end{aligned}$$

であるから $c_+ = c_- = \hbar$ とする. すると結局

$$M_+ \doteq \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad M_- \doteq \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

$M_x = 1/2(M_+ + M_-)$, $M_y = 1/2i(M_+ - M_-)$ であることから

$$M_x \doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad M_y \doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (4)$$

$$(M_x, M_y, M_z) \doteq \frac{\hbar}{2} \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right) \quad (5)$$

これは定数倍を除いてパウリ行列と一致する.

$d = 3$ の時

$$|j = 1, m = 1\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |j = 1, m = 0\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |j = 1, m = -1\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6)$$

とする. こちらも明らかに

$$M_z \doteq \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (7)$$

である. 先ほどと同様に M_{\pm} を定義すると上と同様の議論によって

$$M_+ |j, m\rangle \propto \begin{cases} |0\rangle & m = 1 \\ |j = 1, m = 1\rangle & m = 0 \\ |j = 1, m = 0\rangle & m = -1 \end{cases}$$

$$M_- |j, m\rangle \propto \begin{cases} |j = 1, m = 0\rangle & m = 1 \\ |j = 1, m = -1\rangle & m = 0 \\ |0\rangle & m = -1 \end{cases}$$

である. 各係数は $M_{\pm}^{\dagger} M_{\pm}$ の演算子をかけることで

$$\begin{aligned} |c_{+m=0}|^2 &= \langle j = 1, m = 0 | M_+^{\dagger} M_+ | j = 1, m = 0 \rangle \\ &= (\hbar \cdot 2\hbar) \\ &= 2\hbar^2 \\ |c_{+m=-1}|^2 &= \langle j = 1, m = -1 | M_+^{\dagger} M_+ | j = 1, m = -1 \rangle \\ &= (\hbar \cdot 2\hbar - \hbar^2 + \hbar^2) \\ &= 2\hbar^2 \\ |c_{-m=1}|^2 &= \langle j = 1, m = 1 | M_-^{\dagger} M_- | j = 1, m = 1 \rangle \\ &= (2\hbar^2 - \hbar^2 + \hbar^2) \\ &= 2\hbar^2 \\ |c_{m=0}|^2 &= \langle j = 1, m = 0 | M_-^{\dagger} M_- | j = 1, m = 0 \rangle \\ &= 2\hbar^2 \end{aligned}$$

であるから全て $c = \sqrt{2}\hbar$ とする. すると M_+, M_- の行列表現は

$$M_+ \doteq \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad M_- \doteq \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (8)$$

である. これから M_x, M_y を求めると

$$M_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad M_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad (9)$$

となる.

$$(M_x, M_y, M_z) \doteq \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{2} \end{pmatrix} \right) \quad (10)$$

- 2) 角運動量の合成によって得られる j は $j_{max} = j_A + j_B = 1$, $j_{min} = |j_A - j_B| = 0$ であるから合成後の角運動量はこの2つ.

(a) $j = 1$ の時とりうる m は $m = 1, 0, -1$ のいずれか. まずは $|j_A = 1/2, j_B = 1/2, j = 1, m = 1\rangle$ について. $m = m_A + m_B$ より

$$|j_A = 1/2, j_B = 1/2; j = 1, m = 1\rangle = |j_A = 1/2, m_A = 1/2\rangle \otimes |j_B = 1/2, m_B = 1/2\rangle \quad (11)$$

である. J^- をかけることで $m = 0$ の場合は

$$\begin{aligned} \sqrt{2}\hbar |j_A = 1/2, j_B = 1/2, j = 1, m = 0\rangle &= \sqrt{\frac{3}{4} + \frac{1}{4}}\hbar |j_A = 1/2, m_B = -1/2\rangle \otimes |j_B = 1/2, m_B = 1/2\rangle \\ &+ \sqrt{\frac{3}{4} + \frac{1}{4}}\hbar |j_A = 1/2, m_A = 1/2\rangle \otimes |j_B = 1/2, m = -1/2\rangle \end{aligned}$$

であるからこれを整理することで

$$|1/2, 1/2; 1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1/2, -1/2\rangle \otimes |1/2, 1/2\rangle + |1/2, 1/2\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle) \quad (12)$$

$m = -1$ にも場合も J^- をかけると

$$\begin{aligned} \sqrt{2}\hbar |1/2, 1/2, 1, -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{3}{4} + \frac{1}{4}}\hbar |1/2, -1/2\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle \\ &+ \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{3}{4} + \frac{1}{4}}\hbar |1/2, -1/2\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle \end{aligned}$$

これを整理して

$$|1/2, 1/2, 1, -1\rangle = |1/2, -1/2\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle \quad (13)$$

(b) $j = 0$ の時とりうる m は $m = 0$ のみである. よって $|1/2, 1/2; 0, 0\rangle$ は $\alpha |1/2, 1/2\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle$ と $\beta |1/2, -1/2\rangle \otimes |1/2, 1/2\rangle$ の和でかける. $j = 1$ の状態と直交しなければならないから特に $|1/2, -1/2\rangle \otimes |1/2, 1/2\rangle + |1/2, 1/2\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle$ との内積を考えることで $\alpha + \beta = 0$, これと正規化条件 $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ を考慮すると全体の位相を除いて $\alpha = 1/\sqrt{2}, \beta = -1/\sqrt{2}$ と定まる. すなわち

$$|1/2, 1/2; 1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1/2, 1/2\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle - |1/2, -1/2\rangle \otimes |1/2, 1/2\rangle) \quad (14)$$

である.

3) $s^A \otimes I + I \otimes s^B$ は

$$s^A \otimes I + I \otimes s^B \doteq \left(\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0I_B & 1I_B \\ 1I_B & 0I_B \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0I_B & -iI_B \\ iI_B & 0 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1I_B & 0I_B \\ 0I_B & -1I_B \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1s^B & 0s^B \\ 0s^B & 1s^B \end{pmatrix} \right)$$

これを2乗すると

$$(s^A \otimes I + I \otimes s^B)^2 \doteq \frac{\hbar^2}{4} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}^2 + \begin{pmatrix} 0 & -i & -i & 0 \\ i & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & -i \\ 0 & i & i & 0 \end{pmatrix}^2 + \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}^2 \right\} \equiv X$$

これを計算すると

$$X = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad (15)$$

ただし基底は

$$\begin{aligned} |1/2, 1/2\rangle \otimes |1/2, 1/2\rangle &\doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & |1/2, 1/2\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle &\doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |1/2, -1/2\rangle \otimes |1/2, 1/2\rangle &\doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} & |1/2, -1/2\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle &\doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

である。ここで基底の変換行列 P を

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (16)$$

で定める。これ 2) における j に対する固有ベクトルを与える基底に変換する行列である。また $P^{-1} = P$ であることは容易に確かめられる。

$$\begin{aligned} PXP^{-1} &= \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

これは 2) で求めた基底での行列表現であり、2) のベクトルが固有ベクトルになっていることが分かる。

2. 1) 軌道角運動量は 3 階完全反対称テンソル ε_{ijk} を用いて

$$L_i = -i\hbar \sum_{j,k} \varepsilon_{ijk} x^j \frac{\partial}{\partial x^k} \quad (17)$$

でかける。 L_i, L_j の交換関係は

$$\begin{aligned} [L_i, L_j] &= (L_i L_j - L_j L_i) \\ &= -\hbar^2 \sum_{klmn} \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} \left(x^k \frac{\partial}{\partial x^l} \left(x^m \frac{\partial}{\partial x^n} \right) - x^m \frac{\partial}{\partial x^n} \left(x^k \frac{\partial}{\partial x^l} \right) \right) \\ &= -\hbar^2 \sum_{klmn} \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} \left(x^k \delta_{ml} \frac{\partial}{\partial x^n} - x^m \delta_{kn} \frac{\partial}{\partial x^l} \right) \\ &= -\hbar^2 \left\{ \sum_{kln} \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jln} x^k \frac{\partial}{\partial x^n} - \sum_{klm} \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmk} x^m \frac{\partial}{\partial x^l} \right\} \\ &= -\hbar^2 \left\{ - \sum_{kn} (\delta_{ij} \delta_{kn} - \delta_{in} \delta_{kj}) x^k \frac{\partial}{\partial x^n} + \sum_{lm} (\delta_{ij} \delta_{lm} - \delta_{im} \delta_{jl}) x^m \frac{\partial}{\partial x^l} \right\} \\ &= -\hbar^2 \left\{ \delta_{ij} \sum_l x^l \frac{\partial}{\partial x^l} - x^i \frac{\partial}{\partial x^j} - \delta_{ij} \sum_k x^k \frac{\partial}{\partial x^k} + x^j \frac{\partial}{\partial x^i} \right\} \\ &= i\hbar \cdot \left\{ i\hbar \left(x^j \frac{\partial}{\partial x^i} - x^i \frac{\partial}{\partial x^j} \right) \right\} \\ &= i\hbar \left(i\hbar \sum_{mn} (\delta_{in} \delta_{jm} - \delta_{jn} \delta_{im}) x^m \frac{\partial}{\partial x^n} \right) \\ &= i\hbar \left(i\hbar \sum_{k,m,n} \varepsilon_{kij} \varepsilon_{knm} x^m \frac{\partial}{\partial x^n} \right) \\ &= i\hbar \sum_k \varepsilon_{kij} L_k \end{aligned}$$

- 2) v_i, v_j を (x, y, z) で表示する:

$$\mathbf{v}^x = \begin{pmatrix} n_{x1} \\ n_{y1} \\ n_{z1} \end{pmatrix} \mathbf{v}^y = \begin{pmatrix} n_{x2} \\ n_{y2} \\ n_{z2} \end{pmatrix} \mathbf{v}^z = \begin{pmatrix} n_{x3} \\ n_{y3} \\ n_{z3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_{y1}n_{z2} - n_{z1}n_{y2} \\ n_{z1}n_{x2} - n_{x1}n_{z2} \\ n_{x1}n_{y2} - n_{y1}n_{x2} \end{pmatrix}$$

である。定義から明らかに

$$\mathbf{v}^i \times \mathbf{v}^j = \varepsilon_{ijk} \mathbf{v}^k \quad (18)$$

$$\begin{aligned}
[L'_i, L'_j] &= [n_{xi}L_x + n_{yi}L_y + n_{zi}L_z, n_{xj}L_x + n_{yj}L_y + n_{zj}L_z] \\
&= i\hbar\{(n_{xi}n_{yj} - n_{yi}n_{xj})L_z + (n_{zi}n_{xj} - n_{xi}n_{zj})L_y + (n_{yi}n_{zj} - n_{zi}n_{yj})L_x\} \\
&= i\hbar(\mathbf{v}^i \times \mathbf{v}^j) \cdot \mathbf{L} \\
&= i\hbar\varepsilon_{ijk}\mathbf{v} \cdot \mathbf{L} \\
&= i\hbar\varepsilon_{ijk}L'_k
\end{aligned}$$

3) 実際に計算すると

$$(L'_x)^2 + (L'_y)^2 + (L'_z)^2 = (n_{x1}^2 + n_{x2}^2 + n_{x3}^2)L_x^2 + (n_{y1}^2 + n_{y2}^2 + n_{y3}^2)L_y^2 + (n_{z1}^2 + n_{z2}^2 + n_{z3}^2)L_z^2$$

ここで

$$\begin{aligned}
n_{x1}^2 + n_{x2}^2 + n_{x3}^2 &= n_{x1}^2 + n_{x2}^2 + (n_{y1}n_{z2} - n_{z1}n_{y2})^2 \\
&= n_{x1}^2 + n_{x2}^2 + n_{y1}^2n_{z2}^2 + n_{z1}^2n_{y2}^2 - 2n_{y1}n_{y2}n_{z1}n_{z2}
\end{aligned}$$

さらに $\mathbf{v}^x, \mathbf{v}^y$ の直交性から

$$\begin{aligned}
n_{x1}n_{x2} + n_{y1}n_{y2} + n_{z1}n_{z2} &= 0 \\
-2n_{y1}n_{y2}n_{z1}n_{z2} &= -n_{x1}^2n_{x2}^2 + n_{y1}^2n_{y2}^2 + n_{z1}^2n_{z2}^2
\end{aligned}$$

であるから

$$\begin{aligned}
n_{x1}^2 + n_{x2}^2 + n_{x3}^2 &= n_{x1}^2 + n_{x2}^2 - n_{x1}^2n_{x2}^2 + n_{y1}^2(n_{z2}^2 + n_{y2}^2) + n_{z1}^2(n_{y2}^2 + n_{z2}^2) \\
&= n_{x1}^2 + n_{x2}^2(n_{y1}^2 + n_{z1}^2) + n_{y1}^2(1 - n_{x2}^2) + n_{z1}^2(1 - n_{x2}^2) \\
&= n_{x1}^2 + n_{y1}^2 + n_{z1}^2 = 1
\end{aligned}$$

他の成分も同様だから

$$(L'_x)^2 + (L'_y)^2 + (L'_z)^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = L^2 \quad (19)$$