第15回 量子力学

復習

角運動量の合成

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$$

$$[J_{1i}, J_{1j}] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk} J_{1k}$$

$$[J_{2i}, J_{2j}] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk} J_{2k}$$

$$\begin{cases} \mathbf{J}_1^2\,|j_1 m_1\rangle_1 = \hbar^2 j_1(j_1+1)\,|j_1 m_1\rangle_1 \\ J_{1z}\,|j_1 m_1\rangle_1 = \hbar m_1\,|j_1 m_1\rangle_1 \end{cases} \qquad |j_1 m_1\rangle$$

$$\begin{cases} \mathbf{J}_2^2\,|j_2 m_2\rangle_2 = \hbar^2 j_2(j_2+1)\,|j_2 m_2\rangle_2 \\ J_{2z}\,|j_2 m_2\rangle_2 = \hbar m_2\,|j_2 m_2\rangle_2 \end{cases} \qquad |j_2 m_2\rangle_2$$

$$[J_i, J_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk} J_k$$

$$\rightarrow \quad J^2|jm\rangle = \hbar^2 j(j+1)|jm\rangle$$

$$J_z|jm\rangle = \hbar m|jm\rangle$$

$$|jm\rangle \longleftrightarrow |j_1 m_1\rangle_1 \otimes |j_2 m_2\rangle_2 = |j_1 m_1\rangle|j_2 m_2\rangle$$

$$= |j_1 m_1\, j_2 m_2\rangle = |m_1\, m_2\rangle$$

$|jm\rangle \longleftrightarrow |m_1 m_2\rangle$ 線型結合

$$|jm\rangle = |j_1 m_1\, j_2 m_2\rangle\langle j_1 m_1\, j_2 m_2|jm\rangle$$

係数

クレブシュゴルダン係数

CG係数

$$\begin{cases} \langle j_1 m_1\, j_2 m_2|jm\rangle\langle jm|j_1 m_1'\, j_2 m_2'\rangle = \delta_{m_1 m_1'}\,\delta_{m_2 m_2'} \\ \langle jm|j_1 m_1\, j_2 m_2\rangle\langle j_1 m_1\, j_2 m_2|j'm'\rangle = \delta_{jj'}\,\delta_{mm'} \end{cases}$$

j_1 j_2 $\rightarrow j$?

$j = j_{max},\ j_{max}-1,\ \cdots,\ j_{min}$ $\qquad j_{max} = j_1 + j_2$, $\quad j_{min} = |j_1 - j_2|$

全状態数 $|j_1 m_1\rangle_1$: $m_1 = -j_1 \cdots j_1$ $\quad 2j_1+1$ コ

$|j_2 m_2\rangle_2$: $m_2 = -j_1 \cdots j_2$ $\quad 2j_2+1$ コ

$|j_1 m_1\rangle_1 \otimes |j_2 m_2\rangle_2$: $(2j_1+1)(2j_2+1)$ コ

$|jm\rangle$ 何コ？ $\displaystyle\sum_{j=j_{min}}^{j_{max}} (2j+1) = (2j_1+1)(2j_2+1)$

具体例

① $j_1 = 1/2 \quad j_2 = 1/2$

$\rightarrow j_{max} = 1/2 + 1/2 = 1 \qquad j_{min} = j_1 - j_2 = 1/2 - 1/2 = 0$

$j = 1, 0$ $\qquad$ 状態数 $(2\cdot\frac{1}{2}+1)(2\cdot\frac{1}{2}+1) = 2\times 2 = 4$

$\frac{1}{2} \otimes 1/2 = 1 \oplus 0 \qquad (2\cdot 1+1) + (2\cdot 0+1) = 4$

② $j_1 = 1,\ j_2 = 1/2 \qquad j_{max} = 3/2 \qquad j_{min} = 1/2$

$$1 \otimes 1/2 = \frac{3}{2} \oplus \frac{1}{2} \rightarrow \left.\begin{matrix} 2\cdot\frac{3}{2}+1 = 3+1 = 4 \\ 2\cdot\frac{1}{2}+1 = 1+1 = 2 \end{matrix}\right\} \rightarrow 6$$

$(2\cdot 1+1)(2\cdot 1/2+1) = 3\times 2 = 6$

③ $j_1=1,\ j_2=1$ $j_{max}=2$ $j_{min}=0$ $j=2,1,0$

$1\otimes 1 = 2\oplus 1\oplus 0 \longrightarrow (2\cdot 2+1)+(2\cdot 1+1)+(2\cdot 0+1)=9$

$(2\cdot 1+1)(2\cdot 1+1)=9$

既約テンソル演算子

まず、球面調和関数 Y_{lm}, 任意の関数 f として

$$L_z(Y_{lm}f) = (L_z Y_{lm})f + Y_{lm}L_z f$$
$$= \hbar m Y_{lm} f + Y_{lm} L_z f$$
$$L_\pm(Y_{lm}f) = (L_\pm Y_{lm}) + Y_{lm}L_\pm f$$
$$= \hbar\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}\,Y_{l m\pm 1} f + Y_{lm}L_\pm f$$

これを次のように書こう

$$[L_z, Y_{lm}] = \hbar m Y_{lm}$$
$$[L_\pm, Y_{lm}] = \hbar\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}\,Y_{l m\pm 1}$$

よって球面調和関数を一般化して0以上の整数 k に対して、$T_q^{(k)}$, $q=-k,-k+1,\cdots,k-1,k$ という $2k+1$ 個の演算子を以下の関係式を満たすものを k 階の既約テンソル演算子と呼ぶ。

$$[J_z, T_q^{(k)}] = \hbar q T_q^{(k)}$$
$$[J_\pm, T_q^{(k)}] = \hbar\sqrt{(k\mp q)(k\pm q+1)}\,T_{q\pm 1}^{(k)}$$

より一般に前章の議論によればベクトル演算子 $\mathbb{V}=\begin{pmatrix}V_x\\V_y\\V_z\end{pmatrix}$ とは軌道角運動量演算子 $\mathbb{L}$ に対して

$$\boxed{[L_i, V_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}V_k} \qquad [L_i\ \bullet] = \bigcirc\bullet$$

ベクトル演算子

を満たすものであり、座標 $\mathbb{r}$, 運動量 $\mathbb{P}$, 角運動量 $\mathbb{J}$ がこれを満たした。

$$\begin{cases} T_1^{(1)} = -\dfrac{1}{\sqrt{2}}(V_x+iV_y) = -\dfrac{1}{\sqrt{2}}V_+ \\ T_0^{(1)} = V_z \\ T_{-1}^{(1)} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(V_x-iV_y) = \dfrac{1}{\sqrt{2}}V_- \end{cases}$$

とすると、これが1階の既約テンソル演算子となる。

$J_i=L_i$ として繰り返しをいとわず書けば、$k=1$ として

$$[L_z, T_q^{(1)}] = \hbar q T_q^{(1)}$$
$$[L_\pm, T_q^{(1)}] = \hbar\sqrt{(1\mp q)(2\pm q)}\,T_{q\pm 1}^{(1)}$$

具体的に書けば
$$[L_+, T_1^{(1)}] = 0, \quad [L_-, T_1^{(1)}] = \hbar\sqrt{2}T_0^{(1)}$$
$$[L_+, T_0^{(1)}] = \hbar\sqrt{2}T_1^{(1)}, \quad [L_-, T_0^{(1)}] = \hbar\sqrt{2}T_{-1}^{(1)}$$
$$[L_+, T_{-1}^{(1)}] = \hbar\sqrt{2}T_0^{(1)}, \quad [L_-, T_{-1}^{(1)}] = 0$$

念のためここで確認しよう。

$$[L_+, T_1^{(1)}] = -\frac{1}{\sqrt{2}}[L_+, V_x+iV_y] = -\frac{1}{\sqrt{2}}[L_x+iL_y, V_x+iV_y] = -\frac{1}{\sqrt{2}}i\hbar(V_z-V_z)=0$$

$$[L_+, T_0^{(1)}] = [L_+ V_z] = [L_x+iL_y, V_z] = \hbar(-iV_y-V_x) = -\hbar(V_x+iV_y) = \hbar\sqrt{2}T_1^{(1)}$$

$$[L_+, T_{-1}^{(1)}] = \frac{1}{\sqrt{2}}[L_+, V_x-iV_y] = \frac{1}{\sqrt{2}}[L_x+iL_y, V_x-iV_y] = \frac{1}{\sqrt{2}}i\hbar(V_z+V_z) = \hbar\sqrt{2}T_0^{(1)}$$

$$[L_-, T_1^{(1)}] = -\frac{1}{\sqrt{2}}[L_-, V_x+iV_y] = -\frac{1}{\sqrt{2}}[L_x-iL_y, V_x+iV_y] = -\frac{1}{\sqrt{2}}i\hbar(-V_z-V_z) = \hbar\sqrt{2}T_0^{(1)}$$

$$[L_-, T_0^{(1)}] = [L_-, V_z] = [L_x-iL_y, V_z] = \hbar(-iV_y+V_x) = \hbar(V_x-iV_y) = \hbar\sqrt{2}T_{-1}^{(1)}$$

$$[L_-, T_{-1}^{(1)}] = \frac{1}{\sqrt{2}}[L_-, V_x-iV_y] = \frac{1}{\sqrt{2}}[L_x-iL_y, V_x-iV_y] = \frac{1}{\sqrt{2}}i\hbar(V_z-V_z) = 0$$

既約テンソル演算子の積

ここでは次のようなk：階の既約テンソル演算子の積を考えてみよう

$$T_q^{(k)} = T_{q_1}^{(k_1)} T_{q_2}^{(k_2)} \langle k_1 q_1, k_2 q_2 | k q \rangle$$

$T_q^{(k)}$は$k = k_1+k_2$階の既約テンソル演算子となる。

これはClebsh-Gordan係数の対称性も使って以下のようにかける。

$$\underbrace{T_{q_1}^{(k_1)} T_{q_2}^{(k_2)}}_{\text{既約ではない}} = T_q^{(k)} \langle k q | k_1 q_1, k_2 q_2 \rangle = \langle k_1 q_1, k_2 q_2 | k q \rangle T_q^{(k)}$$

実

∴既約テンソルの積は既約テンソルの和に分解できる
可約

例 2つのベクトル演算子の積

2つのベクトル演算子$\mathbb{U}, \mathbb{V}$からテンソル

$$(\mathbb{U}\mathbb{V})_{ii'i''} = U_{ii'} V_{ii''}$$

を構成できるが、一般にこれは既約ではない：既約テンソルの和に分解できる

0階の既約テンソル（スカラー）

$$T_0^{(0)} = -\frac{1}{3}\mathbb{U}\cdot\mathbb{V}$$

1階の既約テンソル（ベクトル）

$$T_q^{(1)} = i/\sqrt{2}\ (\mathbb{U}\times\mathbb{V})_q$$

2階の既約テンソル

$$T_2^{(2)} = U_1 V_1 \qquad T_1^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(U_0V_1 + U_1V_0)$$

$$T_0^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{6}}(U_{-1}V_1 + 2U_0V_0 + U_1V_{-1})$$

$$T_{-1}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(U_0V_{-1} + U_{-1}V_0) \qquad T_{-2}^{(2)} = U_{-1}V_{-1}$$