Løsning til øving 19 for FY1004, våren 2008

a) Når elektronet har banedreieimpuls $\vec{L}$ og spinn $\vec{S}$, så har det total dreieimpulse $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$.

Alle komponentene av $\vec{L}$ kommuterer med alle komponentene av $\vec{S}$, fordi $\vec{L}$ og $\vec{S}$ er uavhengige observable. Både $\vec{L}$ og $\vec{S}$ er dreieimpulsoperatorer, i den forstand at de opppfyller kommutasjonsrelasjonene

$$\begin{array}{lll} [L_x, L_y] = \mathrm{i}\hbar L_z \ , & [L_y, L_z] = \mathrm{i}\hbar L_x \ , & [L_z, L_x] = \mathrm{i}\hbar L_y \ , \\ [S_x, S_y] = \mathrm{i}\hbar S_z \ , & [S_y, S_z] = \mathrm{i}\hbar S_x \ , & [S_z, S_x] = \mathrm{i}\hbar S_y \ . \end{array}$$

Vis at også $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ er en dreieimpulsoperator. Det vil si, vis at komponentene av $\vec{J}$ oppfyller lignende kommutasjonsrelasjoner som komponentene av $\vec{L}$ og $\vec{S}$.

Vi må vise at $[J_x, J_y] = \mathrm{i}\hbar J_z$, $[J_y, J_z] = \mathrm{i}\hbar J_x$ og $[J_z, J_x] = \mathrm{i}\hbar J_y$.
Det er nok å vise den ene relasjonen, de andre to bevises på samme måte. Vi har at

$$\begin{aligned} [J_x, J_y] &= [L_x + S_x, L_y + S_y] = [L_x, L_y] + [L_x, S_y] + [S_x, L_y] + [S_x, S_y] \\ &= \mathrm{i}\hbar L_z + 0 + 0 + \mathrm{i}\hbar S_z = \mathrm{i}\hbar J_z \ . \end{aligned}$$

b) Vi vet (fra teorien for dreieimpulsoperatorer i alminnelighet, eller ved direkte utregning) at operatorene L_z og S_z begge kommuterer med både $\vec{L}^{\,2} = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ og $\vec{S}^{\,2} = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$.

Vis at L_z og S_z hver for seg ikke kommuterer med $\vec{J}^{\,2} = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$, men at summen $J_z = L_z + S_z$ kommuterer med $\vec{J}^{\,2}$.

Hint: Vi har at

$$\vec{J}^{\,2} = \vec{J} \cdot \vec{J} = (\vec{L} + \vec{S}) \cdot (\vec{L} + \vec{S}) = \vec{L}^{\,2} + \vec{L} \cdot \vec{S} + \vec{S} \cdot \vec{L} + \vec{S}^{\,2} = \vec{L}^{\,2} + \vec{S}^{\,2} + 2\vec{L} \cdot \vec{S} \ .$$

Fordi L_z og S_z kommuterer med $\vec{L}^{\,2}$ og $\vec{S}^{\,2}$, behøver vi her bare beregne kommutatorene
$[\vec{L} \cdot \vec{S}, L_z] = [L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z, L_z]$ og $[\vec{L} \cdot \vec{S}, S_z]$.

Fordi S_x, S_y, S_z og L_z alle kommuterer med L_z, har vi at

$$\begin{aligned} [\vec{L} \cdot \vec{S}, L_z] &= [L_x S_x, L_z] + [L_y S_y, L_z] + [L_z S_z, L_z] \\ &= [L_x, L_z]\, S_x + [L_y, L_z]\, S_y + 0 = -\mathrm{i}\hbar L_y S_x + \mathrm{i}\hbar L_x S_y \neq 0 \ . \end{aligned}$$

Tilsvarende har vi at

$$\begin{aligned} [\vec{L} \cdot \vec{S}, S_z] &= [L_x S_x, S_z] + [L_y S_y, S_z] + [L_z S_z, S_z] \\ &= L_x\, [S_x, S_z] + L_y\, [S_y, S_z] + 0 = -\mathrm{i}\hbar L_x S_y + \mathrm{i}\hbar L_y S_x \neq 0 \ . \end{aligned}$$

Vi ser av det at

$$[\vec{L} \cdot \vec{S}, J_z] = [\vec{L} \cdot \vec{S}, L_z + S_z] = [\vec{L} \cdot \vec{S}, L_z] + [\vec{L} \cdot \vec{S}, S_z] = 0 \ .$$

I Dirac-notasjon kan vi la en ≪kett≫ $|\psi\rangle$ representere tilstanden til et elektron i et hydrogenatom. Ettersom operatorene $\vec{L}^{\,2}$, $\vec{S}^{\,2}$, L_z og S_z kommuterer innbyrdes, kan vi for eksempel anta at $|\psi\rangle$ er en egentilstand for alle de fire operatorene, slik at

$$\vec{L}^{\,2}\,|\psi\rangle = \ell(\ell+1)\hbar^2\,|\psi\rangle \ , \quad \vec{S}^{\,2}\,|\psi\rangle = s(s+1)\hbar^2\,|\psi\rangle \ , \quad L_z\,|\psi\rangle = m_\ell \hbar\,|\psi\rangle \ , \quad S_z\,|\psi\rangle = m_s \hbar\,|\psi\rangle \ .$$

Et elektron er alltid i en egentilstand for $\vec{S}^{\,2}$ med $s = 1/2$. Mulige verdier for de andre kvantetallene er, som kjent, $\ell = 0, 1, 2, \ldots$, $m_\ell = -\ell, -\ell+1, \ldots, \ell$ og $m_s = \pm 1/2$. Vi kan bruke kvantetallene ℓ, s, m_ℓ og m_s som merkelapper på tilstanden, og vi skriver da

$$|\psi\rangle = |\ell, s, m_\ell, m_s\rangle \ .$$

Vi kan utelate s som merkelapp, siden vi alltid har $s = 1/2$. I det følgende vil vi også utelate ℓ som merkelapp, og skrive mer kort og konsist

$$|\psi\rangle = |m_\ell, m_s\rangle \ .$$

Ettersom operatorene $\vec{L}^{\,2}$, $\vec{S}^{\,2}$, $\vec{J}^{\,2}$ og J_z også kommuterer innbyrdes, kan vi anta at en annen tilstand $|\phi\rangle$ er en egentilstand for alle disse fire operatorene, slik at

$$\vec{L}^{\,2}\,|\phi\rangle = \ell(\ell+1)\hbar^2\,|\phi\rangle \ , \ \vec{S}^{\,2}\,|\phi\rangle = s(s+1)\hbar^2\,|\phi\rangle \ , \ \vec{J}^{\,2}\,|\phi\rangle = j(j+1)\hbar^2\,|\phi\rangle \ , \ J_z\,|\phi\rangle = m_j\hbar\,|\phi\rangle \ .$$

For en gitt verdi av ℓ kan $j = \ell \pm \frac{1}{2}$ og $m_j = -j, -j+1, \ldots, j$. Hvis $\ell = 0$, er bare $j = \frac{1}{2}$ mulig. Hvis vi bruker enten alle de fire kvantetallene ℓ, s, j og m_j, eller bare de to siste, som merkelapper på tilstanden, kan vi skrive

$$|\phi\rangle = |\ell, s, j, m_j\rangle = |j, m_j\rangle \ .$$

c) I det følgende antar vi en bestemt verdi for kvantetallet ℓ (størrelsen av banedreieimpulsen). Vi vil se på sammenhengen mellom tilstandene $|m_\ell, m_s\rangle$ og $|j, m_j\rangle$.

De maksimale verdiene m_ℓ og m_s kan ha, er ℓ og $1/2$. Vis at tilstanden

$$|\psi_1\rangle = \left| m_\ell = \ell, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle$$

er en egentilstand for $\vec{J}^{\,2}$ og J_z med $j = m_j = \ell + \frac{1}{2}$.

Hint: For å beregne $\vec{J}^{\,2}\,|\psi_1\rangle$ kan du bruke formelen $\vec{J}^{\,2} = J_- J_+ + J_z^{\,2} + \hbar J_z$, der $J_\pm = J_x \pm \mathrm{i} J_y$. Vis at $J_+|\psi_1\rangle = 0$ (husk at $J_+ = L_+ + S_+$).

Repeter formlene for dreieimpuls $\vec{J}$, der $|j, m\rangle$ er felles egentilstand for $\vec{J}^{\,2}$ og J_z:

$$\begin{aligned}
\vec{J}^{\,2}\,|j,m\rangle &= j(j+1)\hbar^2\,|j,m\rangle \ , \\
J_z\,|j,m\rangle &= m\hbar\,|j,m\rangle \ , \\
J_+\,|j,m\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\,\hbar\,|j,m+1\rangle \ , \\
J_-\,|j,m\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\,\hbar\,|j,m-1\rangle \ .
\end{aligned}$$

Tilsvarende formler gjelder for $\vec{L}$ og $\vec{S}$.

Igjen er det bare å regne ut hva vi får ved å operere på tilstanden $|\psi_1\rangle$ med $\vec{J}^{\,2}$ og J_z. For å ta det enkleste først:

$$J_z|\psi_1\rangle \ = \ (L_z + S_z)\left| m_\ell = \ell, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle = \left(\ell + \frac{1}{2}\right)\hbar \left| m_\ell = \ell, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle = m_j\hbar|\psi_1\rangle \ ,$$

med $m_j = \ell + \frac{1}{2}$, som vi skulle vise. Dernest har vi at

$$J_+|\psi_1\rangle = (L_+ + S_+)|\psi_1\rangle = 0 \ ,$$

fordi

$$L_+|\psi_1\rangle = L_+\left| m_\ell = \ell, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\ell(\ell+1) - \ell(\ell+1)}\ \hbar \left| m_\ell = \ell + 1, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle = 0$$

og

$$S_+|\psi_1\rangle = S_+\left| m_\ell = \ell, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)}\ \hbar \left| m_\ell = \ell, m_s = \frac{3}{2} \right\rangle = 0 \ .$$

Det følger da at

$$\begin{aligned}
\vec{J}^{\,2}|\psi_1\rangle \ &= \ (J_- J_+ + J_z^{\,2} + \hbar J_z)|\psi_1\rangle = (J_z^{\,2} + \hbar J_z)|\psi_1\rangle = \left(\left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2 + \left(\ell + \frac{1}{2}\right)\right)\hbar^2\,|\psi_1\rangle \\
&= j(j+1)\hbar^2\,|\psi_1\rangle
\end{aligned}$$

med $j = \ell + \frac{1}{2}$.

d) Vi har nå identifisert den ene av tilstandene $|j, m\rangle$ uttrykt ved tilstandene $|m_\ell, m_s\rangle$, nemlig

$$\left| j = \ell + \frac{1}{2}, m_j = \ell + \frac{1}{2} \right\rangle = \left| m_\ell = \ell, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle .$$

Ved å operere på den med senkeoperatoren $J_- = L_- + S_-$ kan vi finne tilstanden

$$\left| j = \ell + \frac{1}{2}, m_j = \ell - \frac{1}{2} \right\rangle$$

også uttrykt ved tilstandene $|m_\ell, m_s\rangle$.

Gjør det!

Start med ligningen

$$\left| j = \ell + \frac{1}{2}, m_j = \ell + \frac{1}{2} \right\rangle = \left| m_\ell = \ell, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle ,$$

og operer på begge sidene av likhetstegnet med operatoren $J_- = L_- + S_-$.
På venstre side får vi da

$$\begin{aligned}
J_- & \left| j = \ell + \frac{1}{2}, m_j = \ell + \frac{1}{2} \right\rangle \\
&= \sqrt{\left(\ell + \frac{1}{2}\right)\left(\ell + \frac{1}{2} + 1\right) - \left(\ell + \frac{1}{2}\right)\left(\ell + \frac{1}{2} - 1\right)}\,\hbar \left| j = \ell + \frac{1}{2}, m_j = \ell - \frac{1}{2} \right\rangle \\
&= \sqrt{\left(\ell^2 + 2\ell + \frac{3}{4}\right) - \left(\ell^2 - \frac{1}{4}\right)}\,\hbar \left| j = \ell + \frac{1}{2}, m_j = \ell - \frac{1}{2} \right\rangle \\
&= \sqrt{2\ell + 1}\,\hbar \left| j = \ell + \frac{1}{2}, m_j = \ell - \frac{1}{2} \right\rangle .
\end{aligned}$$

På høyre side får vi

$$\begin{aligned}
(L_- + S_-) \left| m_\ell = \ell, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\ell(\ell+1) - \ell(\ell-1)}\,\hbar \left| m_\ell = \ell - 1, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle \\
&\quad + \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} - 1\right)}\,\hbar \left| m_\ell = \ell, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle \\
&= \sqrt{2\ell}\,\hbar \left| m_\ell = \ell - 1, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle + \hbar \left| m_\ell = \ell, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle .
\end{aligned}$$

Tilsammen gir det at

$$\left| j = \ell + \frac{1}{2}, m_j = \ell - \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\sqrt{2\ell}}{\sqrt{2\ell + 1}} \left| m_\ell = \ell - 1, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2\ell + 1}} \left| m_\ell = \ell, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle .$$

Vi skriver gjerne litt mindre omstendelig, dersom det ikke kan misforstås:

$$\left| \ell + \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\sqrt{2\ell}}{\sqrt{2\ell + 1}} \left| \ell - 1, \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2\ell + 1}} \left| \ell, -\frac{1}{2} \right\rangle .$$

Vi ser at absoluttkvadratsummen av koeffisientene er 1, slik at tilstanden er normert.