電子の軌道角運動量演算子 (ベクトル) $\hat{\boldsymbol{\ell}}$ とスピン角運動量演算子 (ベクトル) $\hat{\boldsymbol{s}}$ から合成される全角運動量演算子 (ベクトル) $\hat{\boldsymbol{j}} = \hat{\boldsymbol{\ell}} + \hat{\boldsymbol{s}}$ を考える。

1. $\hat{\boldsymbol{\ell}}^2$ の固有値を $\hbar^2\ell(\ell+1)$、$\hat{\boldsymbol{s}}^2$ の固有値を $\hbar^2 s(s+1)$ と表し、$\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有値を $\hbar^2 j(j+1)$ と表すとき、特に、$\ell = 1$ の場合、j のとりうる値を記せ。
2. ベクトルの 2 乗は同じベクトルの内積であることを用いて、$\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \hat{\mathrm{s}}$ を $j, \ell, \hbar$ で表す式を求めよ。

(解答例)

1. 角運動量の合成則 (ベクトル模型) と角運動量の量子化 (離散性)、電子スピン $s = 1/2$ であることを考慮して、$j = |\ell - 1/2|, \ell + 1/2$ である。ここで、$\ell = 1$ を用いると, $j = 1/2, 3/2$ となる。
2. $\hat{\boldsymbol{j}} = \hat{\boldsymbol{\ell}} + \hat{\boldsymbol{s}}$ の両辺を 2 乗する (同じベクトルの内積をとる) と

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{j}}^2 &= (\hat{\boldsymbol{\ell}} + \hat{\boldsymbol{s}}) \cdot (\hat{\boldsymbol{\ell}} + \hat{\boldsymbol{s}}) \\ \to \hat{\boldsymbol{j}}^2 &= \hat{\boldsymbol{\ell}}^2 + 2\hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \hat{\boldsymbol{s}} + \hat{\boldsymbol{s}}^2. \end{aligned} \tag{1}$$

ここで、軌道角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{\ell}}$ とスピン角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{s}}$ の順序は可換であることを用いた。式 (1) より、

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{\ell}} \cdot \hat{\boldsymbol{s}} &= \frac{1}{2}\left(\hat{\boldsymbol{j}}^2 - \hat{\boldsymbol{\ell}}^2 - \hat{\boldsymbol{s}}^2\right) \\ &= \frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}\right] \end{aligned} \tag{2}$$

となる。