量子力学

第14回目（7/18）

2TM　前期木曜2限

マテリアル創成工学科　田村隆治

今回の授業で身に付くこと

スピンとは角運動量であることを理解する。また、
そのz成分は2つしかとり得ないことを学ぶ。

物質の磁化は電子の角運動量に由来することを理
解する。また、電子の角運動量には、軌道角運動量
とスピン角運動量があることを学ぶ。

スピン角運動量と軌道角運動量の相互作用により、
各エネルギー準位が2本に分裂することを理解する。

第14回目で学ぶ内容

スピン角運動量およびスピン磁気モーメントについて学ぶ。また、スピン軌道相互作用の意味について理解する。

※スピンは古典力学に対応物が存在しない。量子力学で初めて現れる概念であるが、正確には、Diracの相対論的量子力学によって導かれる。

電子固有の角運動量：スピン

シュテルン・ゲルラッハの実験（1922年）

スピンに由来する現象

ウーレンベック、ハウトスミット（1925年）

スピン角運動量の概念

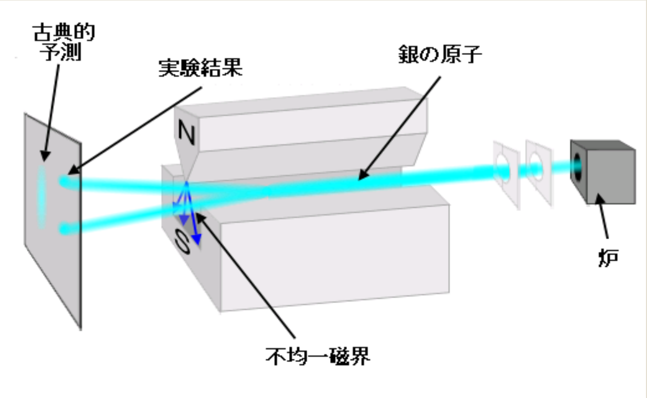
パウリの原理（1925年）

４つの量子数（n,l,m,s）　　排他律

シュテルン・ゲルラッハの実験

中性の銀原子線が磁場中で2本に分裂

中性原子なのでローレンツ力によるものではない。



※銀の電子配置：$(4d)^{10}(5s)^{1}$

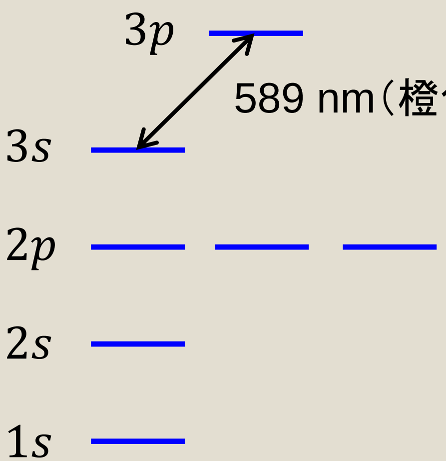
閉殻は軌道磁気モーメントの総和はゼロ。

5s電子は軌道磁気モーメントを持たない。

電子固有の角運動量：スピン

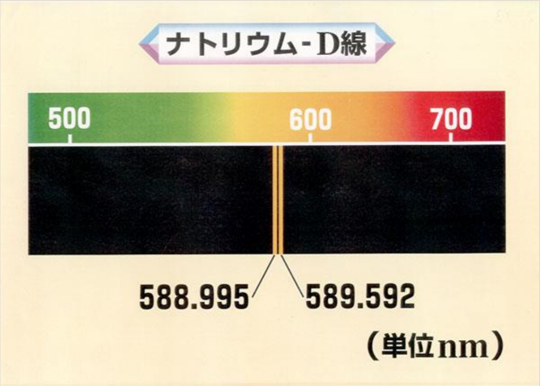
ナトリウムランプ

ナトリウムのD線を利用



※食塩あるいは汗を火であぶると橙色の光を発するが、これはナトリウムのD線の色である。

※ナトリウムのD線は空の3p準位に励起された電子が3s準位に落ちるときに発する光である。



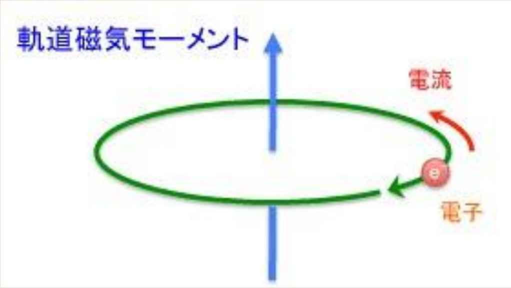
NaのD線がわずかに分裂していることが判明

ウーレンベック、ハウトスミット（1925年）

電子が固有の角運動量をもつとして、
この分裂を説明。

この電子固有の角運動量はスピンと名付けられた。

磁気モーメント



電磁気学によれば、円運動する荷電粒子は磁気モーメントをつくる。半径rの円電流Iがつくる磁気モーメントは以下の式で与えられる。

$$\boxed{\mu = IS\ [\mathrm{A \cdot m^2}]} \qquad S = \pi r^2$$

※$[\mathrm{A \cdot m^2}] = [\mathrm{J/T}]$である。各自確認せよ。

$$I = (-e)f = -\frac{e\omega}{2\pi} \qquad \because \omega = 2\pi f$$

$$\mu = -\frac{e\omega}{2\pi}\pi r^2 = -\frac{e}{2m}l \qquad \because l = rp = r(mr\omega) = mr^2\omega$$

$$\boxed{\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{2m}\boldsymbol{l}}$$

磁気モーメントの起源は角運動量

※物質の磁化の起源は角運動量である。

軌道磁気モーメント

$$\boxed{\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{2m_e}\boldsymbol{l}}$$

$\boldsymbol{l}$:電子の軌道角運動量

磁束密度$\boldsymbol{B}$ がz軸の正方向を向くとき、軌道磁気モーメントのz成分は、

$$\mu_z = -\frac{e}{2m_e} l_z = -\frac{e}{2m_e} m\hbar = -m\mu_B \quad (m = -l, \cdots, l)$$

$$\boxed{\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m_e}}$$ ボーア磁子

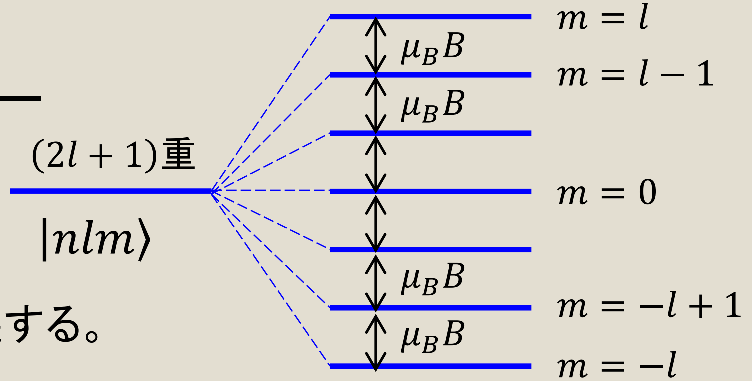
※軌道磁気モーメント（のz成分）の最小単位はボーア磁子。

磁場（磁束密度$\boldsymbol{B}$ ）中に置かれた磁気モーメントのエネルギー

$$\boxed{E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B}}$$ $\boldsymbol{B}$: 磁束密度[T]

磁場（磁束密度$\boldsymbol{B}$ ）が働くときのエネルギー

$$E = -\mu_z B = m\mu_B B$$



※ $(2l + 1)$重に縮退していた準位が磁場下で分裂する。

※ 磁場が無いときに縮退していた磁気量子数mの異なる状態の縮退が解けることを正常ゼーマン効果という。

例題:ボーア磁子μ_Bを求めよ。（10分）

ボーア磁子　$\mu_B = \dfrac{e\hbar}{2m_e}$

電気素量$e = 1.602176634\times10^{-19}\ \mathrm{C}$

ディラック定数$\hbar = 1.054571817\times10^{-34}\ \mathrm{Js}$

電子質量$m_e = 9.10938356 \times 10^{-31}\ \mathrm{kg}$

例題：ボーア磁子μ_Bを求めよ。

ボーア磁子　$\mu_B = \dfrac{e\hbar}{2m_e}$

電気素量$e = 1.602176634 \times 10^{-19}$ C

ディラック定数$\hbar = 1.054571817 \times 10^{-34}$ Js

電子質量$m_e = 9.10938356 \times 10^{-31}$ kg

$$\boxed{\mu_B = 9.27401 \times 10^{-24}\ \mathrm{J/T}}$$

磁場が磁気モーメントに及ぼす力

$$E = -\mu_z B_z \qquad f_z = -\frac{dE}{dz} = \mu_z \frac{dB_z}{dz}$$

一様磁場下では粒子に力は働かない。しかし、B_zに勾配があれば、磁気モーメントにはμ_zに比例する力がz方向に働く。

※従って、不均一な磁場を必要とする。

上下に2本に分裂したことは μ_zの値が正負2つあることを示す。

軌道磁気モーメントの場合

$$\boxed{\mu_z = -m\mu_B \qquad (m = -l, \cdots, l)}$$

mは$(2l+1)$個の奇数個の値をとるので、軌道磁気モーメントでは説明できない。

電子には何らかの磁気モーメントμ_zが付随すると考えざるを得ない。

軌道角運動量以外の角運動量が存在することを示す。

※シュテルン・ゲルラッハの実験:
歴史的に電子固有の角運動量(スピン)の存在を示唆する最初の実験

電子固有の角運動量:スピン

角運動量を仮定

$$\hat{\boldsymbol{l}}^2|lm\rangle = l(l+1)\hbar^2|lm\rangle$$

$$\hat{l}_z|lm\rangle = m\hbar|lm\rangle \qquad \therefore m = -l, \cdots, l \qquad 2l+1 \text{ 個}$$

磁場中で2本に分裂することから、$2l+1=2$

$\boxed{\therefore l = \frac{1}{2}}$ スピン量子数 $\boxed{m = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}$ スピン磁気量子数

※このように電子スピンはl が半整数のときに対応する。
※陽子や中性子もスピン1/2をもつ。

スピン角運動量

角運動量二乗$\hat{\boldsymbol{s}}^2$:$\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\hbar^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$

角運動量z成分$\hat{s}_z$:$-\frac{1}{2}\hbar, \frac{1}{2}\hbar$

※スピン角運動量には、l でなく sが用いられる。

軌道磁気モーメントとスピン磁気モーメント

軌道磁気モーメント $\boxed{\boldsymbol{\mu} = -\dfrac{e}{2m_e}\boldsymbol{l}}$

スピン磁気モーメント $\boxed{\boldsymbol{\mu} = -g\dfrac{e}{2m_e}\boldsymbol{s}}$ $g = 2$

※係数gのことをg因子とよぶ。正確には g =2.002319

※スピン磁気モーメントのg因子（g=2）はディラックの相対論的量子力学から導かれる。

※陽子もスピン磁気モーメントをもつが、質量mが大きいため、通常無視できる。

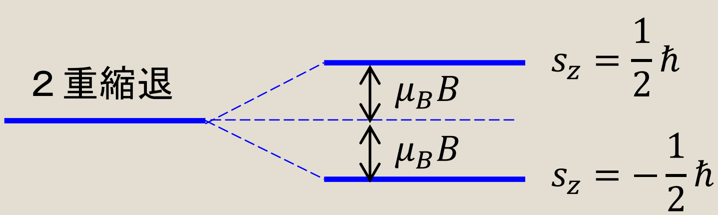
$$\mu_z = -g\frac{e}{2m_e}s_z = \mp\frac{e\hbar}{2m_e} = \mp\mu_B \qquad \because \mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m_e} \quad \text{ボーア磁子}$$

※スピン磁気モーメント（のz成分）の単位もボーア磁子となる。

※一スピンあたりμ_Bの磁化が生ずる。

磁束密度$\boldsymbol{B}$ が働くときのエネルギー

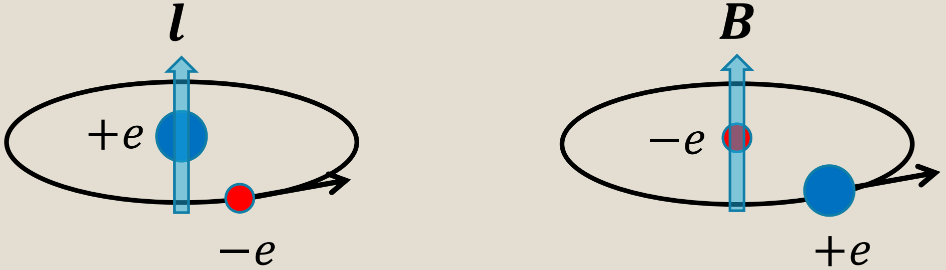
$$E = -\mu_z B = \pm\mu_B B$$



スピン軌道相互作用

電子の軌道運動は、電子に固定した座標系で見ると、$+e$の電荷をもつ原子芯が電子の周りを同じ半径、同じ周波数で同じ向きに回転しているとみなすことができる。

※Naを例に挙げると、電子配置は$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)$であり、原子核と内側の10個の電子を合わせて原子芯とよぶ。



原子芯がつくる円電流により、電子に磁場がかかることになる。
磁場の向きは$\boldsymbol{l}$の向きと同じで、磁束密度の大きさは、

$$B = \frac{\mu_0 I}{2r} = \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{e}{m}\frac{l}{r^3} \qquad \because l = mr^2\omega \quad \because I = ef = \frac{e\omega}{2\pi} = \frac{el}{2\pi m r^2}$$

磁場（磁束密度$\boldsymbol{B}$）中のスピン磁気モーメントのエネルギー $\because \boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{m}\boldsymbol{s}$

$$E_{SO} = -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B} = \frac{e}{m}\boldsymbol{s}\cdot\frac{\mu_0}{4\pi}\frac{e}{m}\frac{\boldsymbol{l}}{r^3} = \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{e^2}{m^2}\frac{1}{r^3}(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}) \equiv \lambda(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}) \quad \boxed{\lambda > 0}$$

スピン軌道相互作用

$$\boxed{H' = \lambda(\boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{s})}$$

これは、軌道角運動量$\boldsymbol{l}$とスピン角運動量$\boldsymbol{s}$の間の相互作用とみることができる。この相互作用を**スピン軌道相互作用**とよぶ。

この結果、軌道角運動量$\boldsymbol{l}$とスピン角運動量$\boldsymbol{s}$が結合して、新たな角運動量（全角運動量$\boldsymbol{j}$）をつくる。固有状態・固有エネルギーは全角運動量で指定されることになる。

λは$\frac{1}{r^3}$を含むため、軌道角運動量$\boldsymbol{l}$に依存する。

$$\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) + \lambda(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}) = \hat{H}_0 + \hat{H}_{SO}} \qquad \because \hat{H}_{SO} = \lambda(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s})$$

$\hat{l}_x, \hat{s}_x$は$\hat{H}_0$と可換であるが、$\hat{H}_{SO}$と可換ではない。従って、$\hat{l}_x, \hat{s}_x$は固有状態を指定できる量子数ではない。

全角運動量の導入 $\boxed{\hat{\boldsymbol{j}} = \hat{\boldsymbol{l}} + \hat{\boldsymbol{s}}}$

※ $\hat{\boldsymbol{j}}$は角運動量の交換関係を満足する。

※$\hat{\boldsymbol{j}}$は$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{SO}$と可換。$\hat{j}^2$も$\hat{H}$と可換。

※$\hat{H}, \hat{j}^2, \hat{j}_z, \hat{l}^2, \hat{s}^2$は互いに交換するので、同時固有状態が存在する。

同時固有状態 $|njmls\rangle$

$$\hat{H}|njmls\rangle = E_{nlj}|njmls\rangle$$

$$\hat{\boldsymbol{l}}^2|njmls\rangle = l(l+1)\hbar^2|njmls\rangle \qquad l = 0,1,2,3,\cdots$$

$$\hat{\boldsymbol{s}}^2|njmls\rangle = s(s+1)\hbar^2|njmls\rangle \qquad s = \frac{1}{2}$$

$$\hat{\boldsymbol{j}}^2|njmls\rangle = j(j+1)\hbar^2|njmls\rangle \qquad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots$$

$$\hat{j}_z|njmls\rangle = m\hbar|njmls\rangle \qquad m = -j, \cdots, j$$

※固有エネルギーは後で見るようにmによらない。また、sはつねに1/2なので省略した。

※最後の２式は$\hat{j}$が一般化された角運動量演算子であることの直接の帰結である。

参考資料

スピン軌道相互作用によるエネルギー準位の分裂

$$\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) + \lambda(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}) = \hat{H}_0 + \hat{H}_{SO}} \qquad \hat{H}_{SO} = \lambda(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s})$$

同時固有状態 $\left|njm_j ls\right\rangle \longrightarrow \left|njm_j l\right\rangle$

$$m_j = -j, \cdots, j$$

※ sの値はつねに1/2なので省略しても構わない。
もちろん、$\hat{s}^2\left|njm_j l\right\rangle = s(s+1)\hbar^2\left|njm_j l\right\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2\left|njm_j l\right\rangle$である。

H_{SO}の期待値

$$\langle njml|H_{SO}|njml\rangle = \langle njml|\lambda(l\cdot s)|njml\rangle = \langle njml|\frac{1}{2}\lambda(j^2 - l^2 - s^2)|njml\rangle$$

$$= \frac{1}{2}\{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\}\hbar^2\langle njml|\lambda|njml\rangle$$

$$= \frac{1}{2}\left\{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right\}\zeta\hbar^2 \qquad \because \zeta \equiv \langle njml|\lambda|njml\rangle$$

$$\because j^2 = (l+s)^2 = l^2 + s^2 + 2l\cdot s$$

角運動量の合成

参考資料

$$\boxed{\hat{\boldsymbol{j}} = \hat{\boldsymbol{l}} + \hat{\boldsymbol{s}} \qquad \hat{j}_z = \hat{l}_z + \hat{s}_z}$$

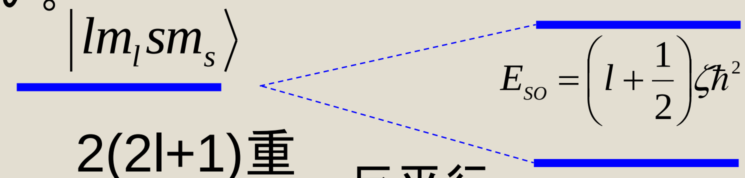
※$\hat{l}_z$と$\hat{s}_z$の同時固有状態$|m_l m_s\rangle$を考える。$|m_l m_s\rangle$は以下に示すように、$\hat{j}_z$の固有状態でもある。また、固有値は$(m_l + m_s)$である。

$$\hat{j}_z|m_l m_s\rangle = \hat{l}_z|m_l m_s\rangle + \hat{s}_z|m_l m_s\rangle = m_l\hbar|m_l m_s\rangle + m_s\hbar|m_l m_s\rangle = (m_l + m_s)\hbar|m_l m_s\rangle$$

※$\hat{j}_z$の固有値の最大値を考えよう。それは $l + \frac{1}{2}$である。これから、$j = l + \frac{1}{2}$ の状態が作られることがわかる。また、これがjの最大値である。jは1ずつ変化するが、$j = l - \frac{1}{2}$の状態も作られる。直感的には、2つの角運動量が並行に結合した場合と反平行に結合した場合に対応する。ここで、両者の縮重度を計算しよう。$j = l + \frac{1}{2}$ は$(2l + 2)$重、$j = l - \frac{1}{2}$は$2l$重に縮退しており、計$(4l + 2)$個の状態がある。一方、$|m_l m_s\rangle$の縮重度は、$(2l + 1) \times 2 = (4l + 2)$重で等しく、つじつまがあっている。

$j = l + \dfrac{1}{2}$ 平行 $\quad j = l - \dfrac{1}{2}$ 反平行 $\quad$ ただし、$j \geq 0$

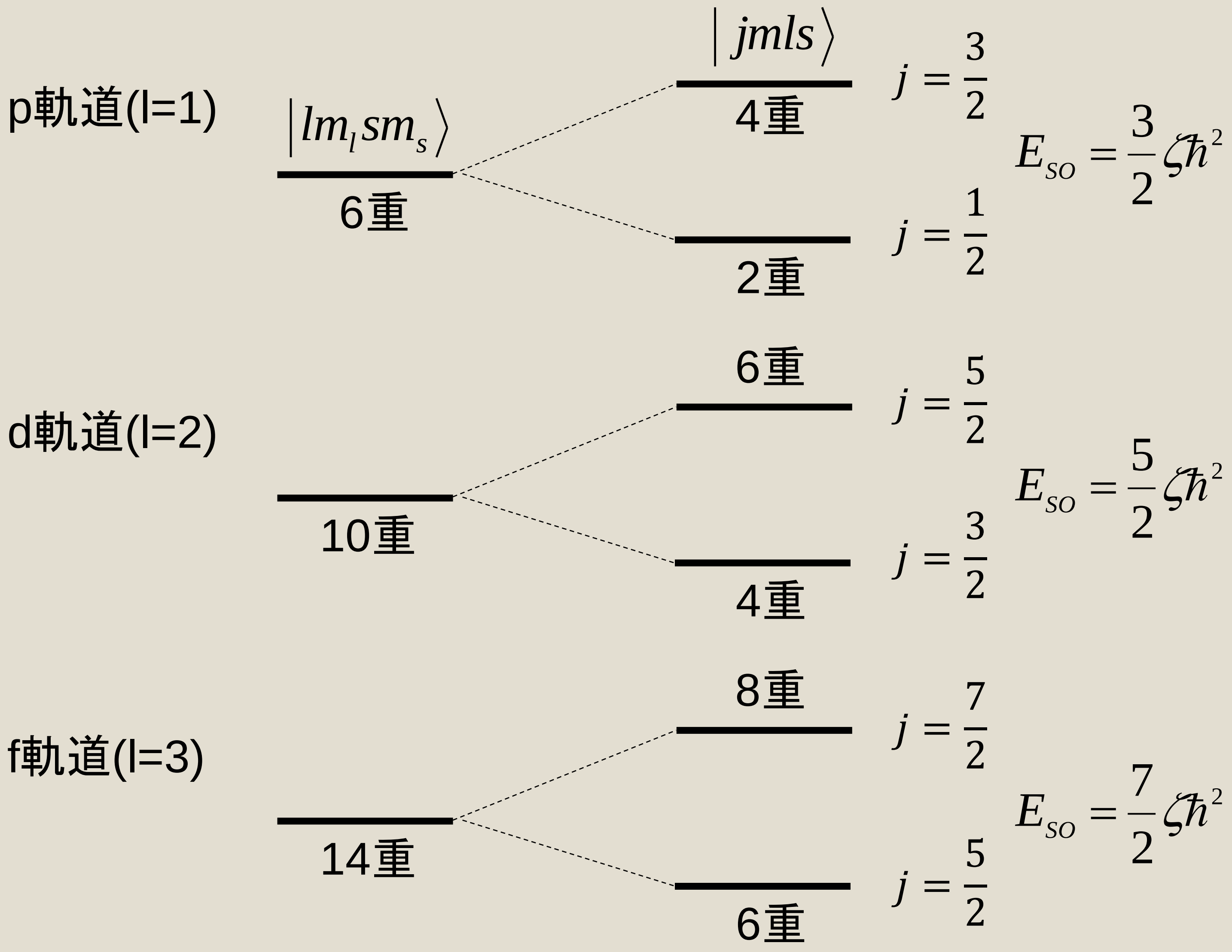
※s準位は軌道角運動量をもたないので分裂しない。



$$j = l + \frac{1}{2} \quad \langle H_{SO}\rangle = \frac{1}{2}\zeta\left\{\left(l + \frac{1}{2}\right)\left(l + \frac{3}{2}\right) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right\}\hbar^2 = \frac{1}{2}\zeta\hbar^2 l$$

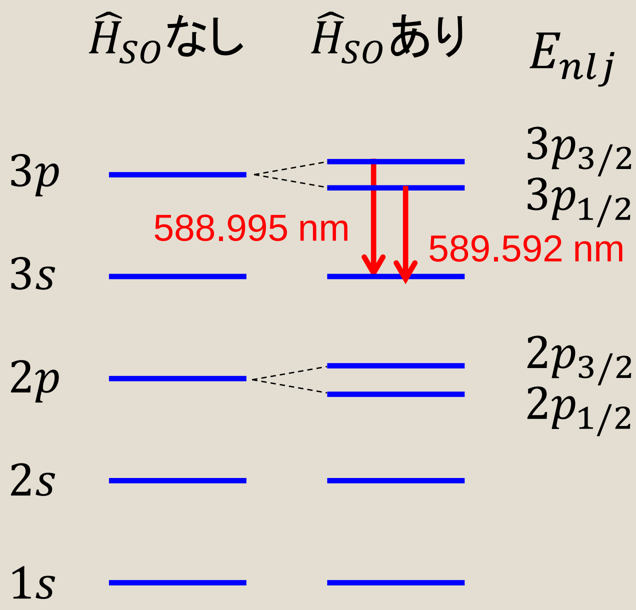
$$j = l - \frac{1}{2} \quad \langle H_{SO}\rangle = \frac{1}{2}\zeta\left\{\left(l - \frac{1}{2}\right)\left(l + \frac{1}{2}\right) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right\}\hbar^2 = -\frac{1}{2}\zeta\hbar^2(l+1)$$

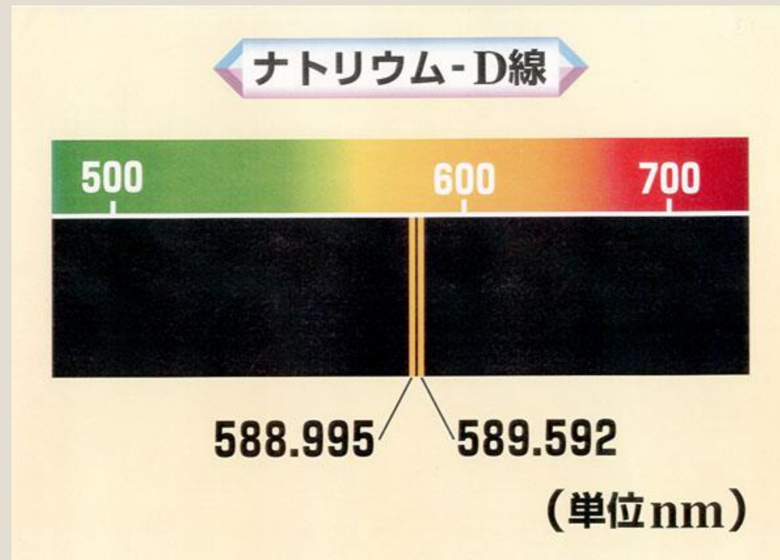
スピン軌道相互作用によるエネルギー準位の分裂



※スピン軌道結合は並行か反平行の2通りなので、各準位の分裂は2つとなる。

ナトリウムのD線（再考）





※ s準位は分裂しない。

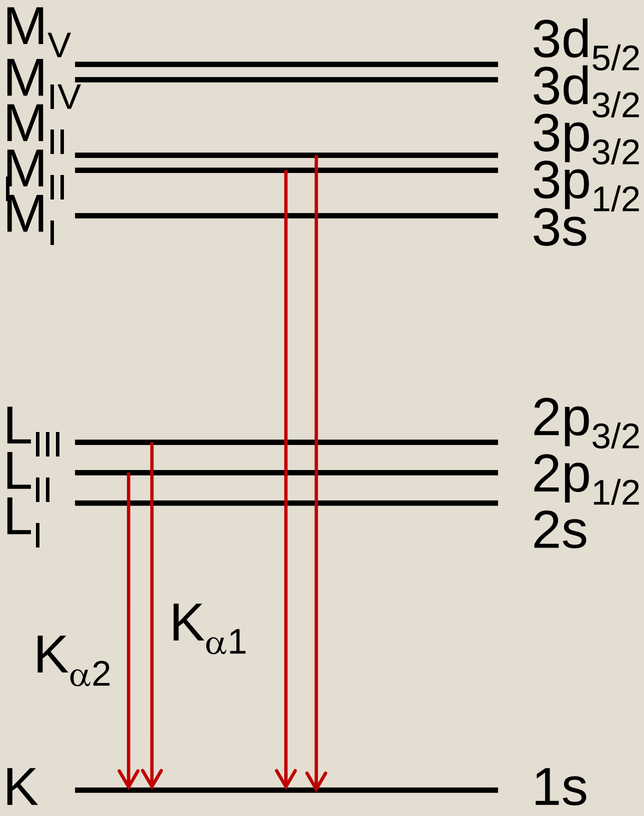
※ np準位の分裂は、np_jなどと表記される。

ナトリウムのD線の分裂は、スピン軌道相互作用により$3p$準位が$3p_{3/2}$と$3p_{1/2}$の2つに分裂することにより説明される。

X線の発生原理

※X線源としてはCuが頻繁に使われる。

※電子を加速してCuに当て、1s軌道にいる電子を叩き出す。この結果、上のエネルギー準位から電子が落ちてくるときにX線（特性X線という）が放出される。



遷移の選択則　$\Delta l = \pm 1$

Cuの特性X線

$K_{\alpha 1}$=1.540562Å

$K_{\alpha 2}$=1.544390Å

$K_{\beta 1}$=1.392218Å

※K_β線はフィルター等により除去される。

Braggの式

$$\boxed{2d\sin\theta = \lambda}$$

結晶の面間隔dを決定できる。

第14回目のまとめ

以下の内容を良く消化して、説明できるようにしましょう。

スピン角運動量

角運動量二乗$\hat{\boldsymbol{s}}^2$:$\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\hbar^2=\frac{3}{4}\hbar^2$

角運動量z成分$\hat{s}_z$:$-\frac{1}{2}\hbar,\frac{1}{2}\hbar$

軌道磁気モーメント　$\boldsymbol{\mu}=-\frac{e}{2m_e}\boldsymbol{l}$

スピン磁気モーメント　$\boldsymbol{\mu}=-\frac{e}{m_e}\boldsymbol{s}$

スピン軌道相互作用がある場合の一電子状態

エネルギー固有状態はn,l,sおよび全角運動量量子数j,mの5つの量子数で指定される。同時固有状態: $|njmls\rangle$

※ sの値はつねに1/2なので省略しても構わない。$|njml\rangle$

※原子内のエネルギー準位は、s準位を除いて、スピン軌道相互作用により2つに分裂する。

到達度評価試験について

持込可：関数電卓のみ

出題内容に関して：

3割程度を課題・例題から少し改変して出題する予定

参考資料、補助資料からは出題しない。

スピン軌道相互作用

参考資料

$$\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) + \zeta(l\cdot s) = \hat{H}_0 + \hat{H}_{SO}} \qquad \because \hat{H}_{SO} = \zeta(l\cdot s)$$

$\hat{H}_0$は$\hat{l}_x$, $\hat{s}_x$と可換であるが、以下に示す通り、$\hat{H}_{SO}$は$\hat{l}_x$, $\hat{s}_x$と可換ではない。

$$\left[\hat{l}_x, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right] = \left[\hat{l}_x, \hat{l}_x\hat{s}_x + \hat{l}_y\hat{s}_y + \hat{l}_z\hat{s}_z\right] = \left[\hat{l}_x, \hat{l}_x\hat{s}_x\right] + \left[\hat{l}_x, \hat{l}_y\hat{s}_y\right] + \left[\hat{l}_x, \hat{l}_z\hat{s}_z\right]$$

$$= \left[\hat{l}_x, \hat{l}_x\right]\hat{s}_x + \left[\hat{l}_x, \hat{l}_y\right]\hat{s}_y + \left[\hat{l}_x, \hat{l}_z\right]\hat{s}_z = i\hbar\hat{l}_z\hat{s}_y - i\hbar\hat{l}_y\hat{s}_z$$ 非可換

$$\left[\hat{s}_x, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right] = \left[\hat{s}_x, \hat{l}_x\hat{s}_x + \hat{l}_y\hat{s}_y + \hat{l}_z\hat{s}_z\right] = \left[\hat{s}_x, \hat{l}_x\hat{s}_x\right] + \left[\hat{s}_x, \hat{l}_y\hat{s}_y\right] + \left[\hat{s}_x, \hat{l}_z\hat{s}_z\right]$$

$$= \left[\hat{s}_x, \hat{s}_x\right]\hat{l}_x + \left[\hat{s}_x, \hat{s}_y\right]\hat{l}_y + \left[\hat{s}_x, \hat{s}_z\right]\hat{l}_z = i\hbar\hat{s}_z\hat{l}_y - i\hbar\hat{s}_y\hat{l}_z$$ 非可換

※ $\hat{l}_i$と$\hat{s}_i$が交換することを用いた。一般に異なる座標に作用する演算子は互いに可換である。 $\hat{l}_i$は位置$\boldsymbol{r}$に作用するが、$\hat{s}_i$は位置$\boldsymbol{r}$に作用しない。

ここで後々のために、上の2式を加えておく。

$$\left[\hat{l}_x, \hat{l}\cdot\hat{s}\right] + \left[\hat{s}_x, \hat{l}\cdot\hat{s}\right] = 0$$

この結果は、$\hat{l}_x + \hat{s}_x$が$\hat{H}_{SO}$と交換することを示している。

全角運動量の導入 $\boxed{\hat{\boldsymbol{j}} = \hat{\boldsymbol{l}} + \hat{\boldsymbol{s}}}$

※上の結果は $\left[\hat{j}_x, \hat{l}\cdot\hat{s}\right] = 0$と表される。

全角運動量の導入 $\boxed{\hat{\boldsymbol{j}} = \hat{\boldsymbol{l}} + \hat{\boldsymbol{s}}}$

参考資料

まず、角運動量であることを示す。

$$[\hat{j}_x, \hat{j}_y] = [\hat{l}_x + \hat{s}_x, \hat{l}_y + \hat{s}_y] = [\hat{l}_x, \hat{l}_y + \hat{s}_y] + [\hat{s}_x, \hat{l}_y + \hat{s}_y]$$
$$= [\hat{l}_x, \hat{l}_y] + [\hat{s}_x, \hat{s}_y] = i\hbar\hat{l}_z + i\hbar\hat{s}_z = i\hbar\hat{j}_z$$

同様にして、$[\hat{j}_y, \hat{j}_z] = i\hbar\hat{j}_x$, $[\hat{j}_z, \hat{j}_x] = i\hbar\hat{j}_y$

従って、$\hat{\boldsymbol{j}}$は角運動量演算子である。

また、すでに見たように、$[\hat{j}_x, \hat{\boldsymbol{l}} \cdot \hat{\boldsymbol{s}}] = 0$

同様にして、$[\hat{j}_y, \hat{\boldsymbol{l}} \cdot \hat{\boldsymbol{s}}] = [\hat{j}_z, \hat{\boldsymbol{l}} \cdot \hat{\boldsymbol{s}}] = 0$ $\quad \because \hat{H}_{SO} = \zeta(\hat{\boldsymbol{l}} \cdot \hat{\boldsymbol{s}})$

従って、全角運動量$\hat{\boldsymbol{j}}$は$\hat{H}_{SO}$と可換である。 $\boxed{[\hat{\boldsymbol{j}}, \hat{H}_{SO}] = 0}$

$\hat{l}_x$, $\hat{s}_x$は$\hat{H}_0$と可換、従って、$\hat{j}_x = \hat{l}_x + \hat{s}_x$ も$\hat{H}_0$と可換。
$\hat{j}_y$、$\hat{j}_z$についても同様。従って、$\hat{\boldsymbol{j}}$は$\hat{H}_0$とも可換。

従って、$\hat{\boldsymbol{j}}$は$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{SO}$と可換。

$$[\hat{H}, \hat{j}^2] = [\hat{H}, \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2] = [\hat{H}, \hat{j}_x^2] + [\hat{H}, \hat{j}_y^2] + [\hat{H}, \hat{j}_z^2] = 0$$

$\because [\hat{A}^2, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{A}$より、$\hat{A}$と$\hat{C}$が可換であれば$\hat{A}^2$と$\hat{C}$が可換

全角運動量二乗$\hat{j}^2$も$\hat{H}$と可換。

$\hat{l}^2$および$\hat{s}^2$と$\hat{H}_{SO}$の交換関係

補助資料

$$\boxed{\left[\hat{l}_x, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right] = i\hbar\hat{l}_z\hat{s}_y - i\hbar\hat{l}_y\hat{s}_z \qquad \left[\hat{s}_x, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right] = i\hbar\hat{s}_z\hat{l}_y - i\hbar\hat{s}_y\hat{l}_z}$$

$$\left[\hat{l}^2, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right] = \left[\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right] = \left[\hat{l}_x^2, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right] + \left[\hat{l}_y^2, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right] + \left[\hat{l}_z^2, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right]$$

$$\left[\hat{l}_x^2, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right] = \hat{l}_x\left[\hat{l}_x, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right] + \left[\hat{l}_x, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right]\hat{l}_x = \hat{l}_x\left(i\hbar\hat{l}_z\hat{s}_y - i\hbar\hat{l}_y\hat{s}_z\right) + \left(i\hbar\hat{l}_z\hat{s}_y - i\hbar\hat{l}_y\hat{s}_z\right)\hat{l}_x$$

$$= i\hbar\hat{l}_x\hat{l}_z\hat{s}_y - i\hbar\hat{l}_x\hat{l}_y\hat{s}_z + i\hbar\hat{l}_z\hat{s}_y\hat{l}_x - i\hbar\hat{l}_y\hat{s}_z\hat{l}_x$$

$$\left[\hat{l}_y^2, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right] = i\hbar\hat{l}_y\hat{l}_x\hat{s}_z - i\hbar\hat{l}_y\hat{l}_z\hat{s}_x + i\hbar\hat{l}_x\hat{s}_z\hat{l}_y - i\hbar\hat{l}_z\hat{s}_x\hat{l}_y$$

$$\left[\hat{l}_z^2, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right] = i\hbar\hat{l}_z\hat{l}_y\hat{s}_x - i\hbar\hat{l}_z\hat{l}_x\hat{s}_y + i\hbar\hat{l}_y\hat{s}_x\hat{l}_z - i\hbar\hat{l}_x\hat{s}_y\hat{l}_z$$

$$\boxed{\therefore\ [\hat{l}^2, \hat{H}_{SO}] = 0}$$

$$\left[\hat{s}^2, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right] = \left[\hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right] = \left[\hat{s}_x^2, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right] + \left[\hat{s}_y^2, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right] + \left[\hat{s}_z^2, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right]$$

$$\left[\hat{s}_x^2, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right] = \hat{s}_x\left[\hat{s}_x, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right] + \left[\hat{s}_x, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right]\hat{s}_x = \hat{s}_x\left(i\hbar\hat{s}_z\hat{l}_y - i\hbar\hat{s}_y\hat{l}_z\right) + \left(i\hbar\hat{s}_z\hat{l}_y - i\hbar\hat{s}_y\hat{l}_z\right)\hat{s}_x$$

$$= i\hbar\hat{s}_x\hat{s}_z\hat{l}_y - i\hbar\hat{s}_x\hat{s}_y\hat{l}_z + i\hbar\hat{s}_z\hat{l}_y\hat{s}_x - i\hbar\hat{s}_y\hat{l}_z\hat{s}_x$$

$$\left[\hat{s}_x^2, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right] = i\hbar\hat{s}_y\hat{s}_x\hat{l}_z - i\hbar\hat{s}_y\hat{s}_z\hat{l}_x + i\hbar\hat{s}_x\hat{l}_z\hat{s}_y - i\hbar\hat{s}_z\hat{l}_x\hat{s}_y$$

$$\left[\hat{s}_y^2, \hat{\boldsymbol{l}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right] = i\hbar\hat{s}_z\hat{s}_y\hat{l}_x - i\hbar\hat{s}_z\hat{s}_x\hat{l}_y + i\hbar\hat{s}_y\hat{l}_x\hat{s}_z - i\hbar\hat{s}_x\hat{l}_y\hat{s}_z$$

$$\boxed{\therefore\ [\hat{s}^2, \hat{H}_{SO}] = 0}$$

$\hat{l}^2$および$\hat{s}^2$は$\hat{H}_{SO}$と交換する。従って、$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{SO}$とも交換する。

$\hat{l}^2$と$\hat{\boldsymbol{j}}$の交換関係

補助資料

$$[\hat{l}^2, \hat{j}_z] = [\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2, \hat{j}_z] = [\hat{l}_x^2, \hat{j}_z] + [\hat{l}_y^2, \hat{j}_z] + [\hat{l}_z^2, \hat{j}_z]$$

$$[\hat{l}_x^2, \hat{j}_z] = \hat{l}_x[\hat{l}_x, \hat{j}_z] + [\hat{l}_x, \hat{j}_z]\hat{l}_x = \hat{l}_x[\hat{l}_x, \hat{l}_z + \hat{s}_z] + [\hat{l}_x, \hat{l}_z + \hat{s}_z]\hat{l}_x \qquad \because [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$$

$$= \hat{l}_x[\hat{l}_x, \hat{l}_z] + [\hat{l}_x, \hat{l}_z]\hat{l}_x = \hat{l}_x(-i\hbar\hat{l}_y) + (-i\hbar\hat{l}_y)\hat{l}_x = -i\hbar\hat{l}_x\hat{l}_y + -i\hbar\hat{l}_y\hat{l}_x$$

$$[\hat{l}_y^2, \hat{j}_z] = \hat{l}_y[\hat{l}_y, \hat{j}_z] + [\hat{l}_y, \hat{j}_z]\hat{l}_y = \hat{l}_y[\hat{l}_y, \hat{l}_z + \hat{s}_z] + [\hat{l}_y, \hat{l}_z + \hat{s}_z]\hat{l}_y$$

$$= \hat{l}_y[\hat{l}_y, \hat{l}_z] + [\hat{l}_y, \hat{l}_z]\hat{l}_y = \hat{l}_y(i\hbar\hat{l}_x) + (i\hbar\hat{l}_x)\hat{l}_y = i\hbar\hat{l}_y\hat{l}_x + i\hbar\hat{l}_x\hat{l}_y$$

$$[\hat{l}_z^2, \hat{j}_z] = \hat{l}_z[\hat{l}_z, \hat{j}_z] + [\hat{l}_z, \hat{j}_z]\hat{l}_z = \hat{l}_z[\hat{l}_z, \hat{l}_z + \hat{s}_z] + [\hat{l}_z, \hat{l}_z + \hat{s}_z]\hat{l}_z$$

$$= \hat{l}_z[\hat{l}_z, \hat{l}_z] + [\hat{l}_z, \hat{l}_z]\hat{l}_z = 0$$

$$\boxed{\therefore [\hat{l}^2, \hat{j}_z] = 0} \qquad \therefore [\hat{l}^2, \hat{j}_z^2] = 0 \qquad \boxed{\therefore [\hat{l}^2, \hat{\boldsymbol{j}}] = 0}$$

$\because [\hat{A}^2, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{A}$より、$\hat{A}$と$\hat{C}$が可換であれば$\hat{A}^2$と$\hat{C}$が可換

$$\boxed{\therefore [\hat{l}^2, \hat{j}^2] = 0}$$

※ $\hat{s}^2$と$\hat{\boldsymbol{j}}$の交換関係も全く同様に証明できるので省略。