# 量子力学

## 第14回目（7/20）

2TM　前期木曜2限

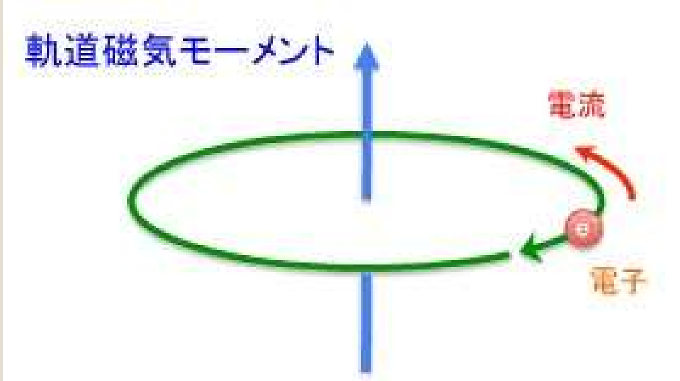
マテリアル創成工学科　田村隆治

# 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。

# 磁気モーメント




## 半径$r$の円電流$I$が作る磁気モーメント

$$\boxed{\mu = IS \ [\mathrm{J/T}]} \qquad S = \pi r^2$$

※$E$-$B$対応にもとづく。$E$-$B$対応では、磁気モーメントは環状電流によって定義される。
※$E$-$H$対応では、（仮想的な）磁荷により磁気モーメントを定義する。

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

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

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

角運動量には磁気モーメントが伴う。

※物質の磁気（磁化、すなわち、磁気モーメント）の起源は角運動量である。
※角運動量には軌道角運動量とスピン角運動量がある。

## 磁場（磁束密度$\boldsymbol{B}$ ）中の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]

# 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軸の正方向を向いているとして、角運動量z成分の固有状態を考える。

※もともと空間には特別な軸は存在しない。しかし、磁束密度がz方向を向くとき、系が角運動量z成分の固有状態になると考える。観測という行為が系の状態を定める。

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

$$\boxed{\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m_e}}$$

ボーア磁子

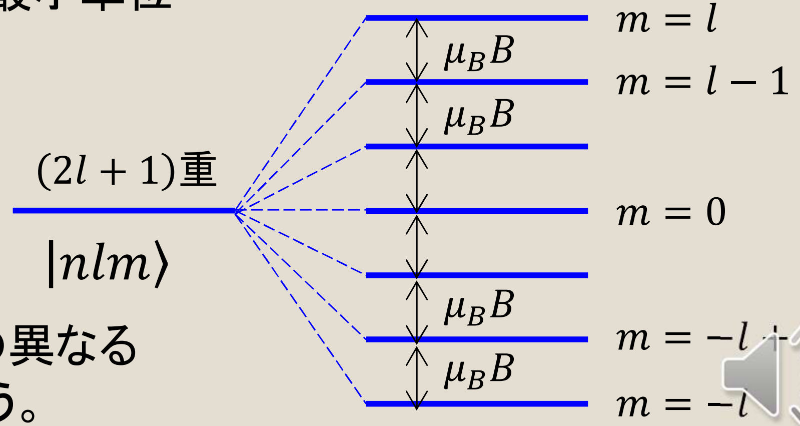
※軌道磁気モーメント(のz成分)はボーア磁子の整数倍となる。

※ボーア磁子が軌道磁気モーメントの最小単位

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。また、分裂数は奇数となる。




※ 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$\mu_B$を求めよ。（10分）

ボーア磁子 $\mu_B = \dfrac{e\hbar}{2m_e}$

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

## 例題：ボーア磁子$\mu_B$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

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

※ T(テスラ)：磁束密度の単位　T=Wb/m$^2$

# 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

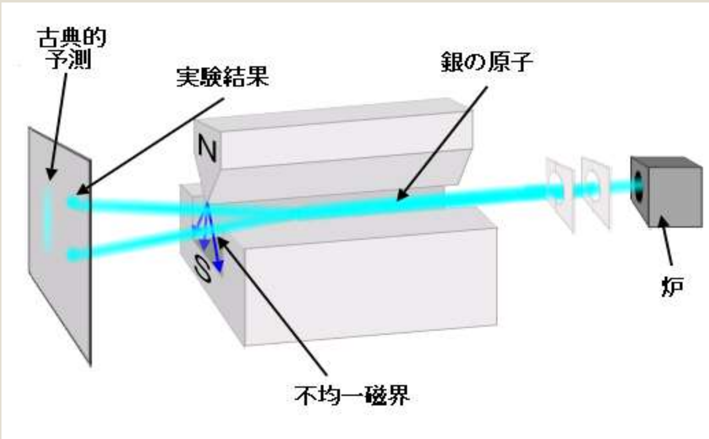
## ウーレンベック、ハウトスミット（1925年）

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

中性原子なので電荷によるものではない。
（ローレンツ力によるものでない）

銀の電子配置：$(4d)^{10}(5s)^{1}$

閉殻は軌道磁気モーメントは（互いに相殺して）ゼロ。
5s電子は軌道磁気モーメントを持たない。

# シュテルン・ゲルラッハの実験（1922年）

z方向に受ける力　$f_z = -\dfrac{dE}{dz} = \mu_z \dfrac{dB}{dz}$　　$\because\ E = -\mu_z B$

磁束密度$B$のz成分に勾配があれば、磁気モーメントには$\mu_z$に比例する力が$z$方向に働く。

※不均一な磁場をかけたことがポイント。

従って、上下に2本に分裂したことは $\mu_z$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。

何らかの電子固有の磁気モーメント$\mu_z$が存在すると考えざるを得ない。

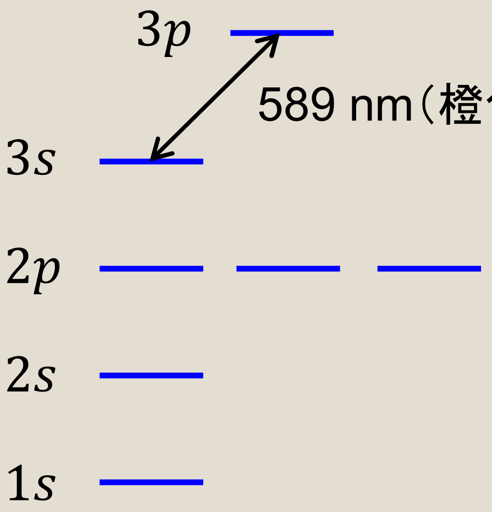
軌道角運動量以外の角運動量が存在することを示す。

※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

## ナトリウムランプ

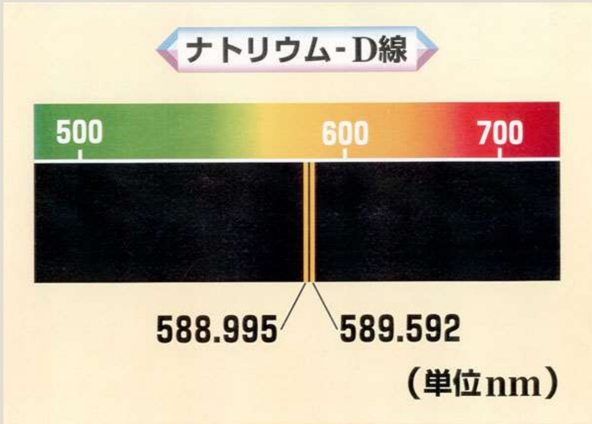
ナトリウムのD線を利用




※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をスピンと名付ける。

# 電子固有の角運動量:スピン

角運動量の交換関係を要請

$$\boxed{\left[\hat{s}_x, \hat{s}_y\right] = i\hbar\hat{s}_z \quad \left[\hat{s}_y, \hat{s}_z\right] = i\hbar\hat{s}_x \quad \left[\hat{s}_z, \hat{s}_x\right] = i\hbar\hat{s}_y}$$

$$\hat{\mathbf{s}}^2 |sm\rangle = s(s+1)\hbar^2 |sm\rangle$$

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

磁場中で2本に分裂することから、$2s+1=2$

$\boxed{\therefore s = \frac{1}{2}}$ 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。

$|sm\rangle$: $\hat{\mathbf{s}}^2$と$\hat{s}_z$の同時固有状態

$$|sm\rangle = \left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle, \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \qquad |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle \text{ と略記}$$

※スピン量子数sはつねに1/2なので省略する。
※「上向き」、「下向き」の意味:角運動量のz成分が$\hbar/2$、$-\hbar/2$

# 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

※軌道磁気モーメントとは係数が2倍異なる。

※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。

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

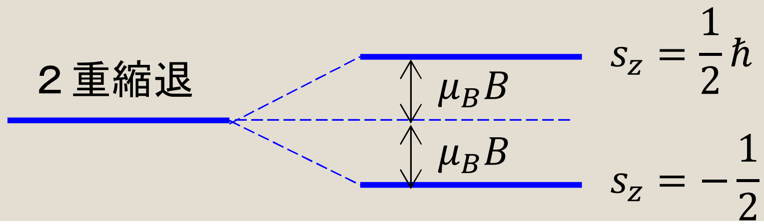
※スピン磁気モーメント（のz成分）の絶対値はボーア磁子$\mu_B$に等しい。

※従って、軌道およびスピン磁気モーメント（のz成分）はボーア磁子の整数倍となる。

※電子スピンがz方向に揃うと一スピンあたり$\mu_B$の磁化が生ずる。

## 磁束密度$\boldsymbol{B}$ が働くときのエネルギー

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



固有値方程式

$$\hat{\mathbf{s}}^2|\uparrow\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\uparrow\rangle \qquad \hat{s}_z|\uparrow\rangle = \frac{1}{2}\hbar|\uparrow\rangle$$
$$\hat{\mathbf{s}}^2|\downarrow\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\downarrow\rangle \qquad \hat{s}_z|\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}\hbar|\downarrow\rangle$$

任意のスピン状態 $|\Psi\rangle = c_1|\uparrow\rangle + c_2|\downarrow\rangle$ 固有関数の完備性

※任意のスピン状態は2次元空間の座標 $(c_1, c_2)$ で表される。

任意のスピン状態 $|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

角運動量演算子

$$\hat{s}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad \hat{s}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

※このように表されることを各自確かめよ。

昇降演算子 $\hat{s}_\pm|sm\rangle = \hbar\sqrt{(s\mp m)(s\pm m+1)}\,|s, m\pm 1\rangle$

$$\hat{s}_+\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = 0 \qquad \hat{s}_+\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$$
$$\hat{s}_-\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle \qquad \hat{s}_-\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = 0$$

$$\hat{s}_+ = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{s}_- = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

※このように表されることを各自確かめよ。

例題：$\hat{s}_x$の固有状態と固有値を求めよ。（20分）

$\hat{s}_x = \frac{1}{2}(\hat{s}_+ + \hat{s}_-)$ より、

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

## 例題：$\hat{s}_x$の固有状態と固有値を求めよ。（20分）

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}x\\ y\end{pmatrix}$$

$$\frac{\hbar}{2}y=\lambda x,\ \frac{\hbar}{2}x=\lambda y,\ \therefore x=\frac{2}{\hbar}\lambda y$$

$$\lambda^2=\frac{\hbar^2}{4},\ \therefore \lambda=\pm\frac{\hbar}{2}$$ 固有値

$\hat{s}_x$の固有状態　　　　　　　　　　　　ベクトル表記

固有値 $\lambda=\frac{\hbar}{2}$　$\therefore x=y$　$\frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\rangle$　$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix}$

固有値 $\lambda=-\frac{\hbar}{2}$　$\therefore x=-y$　$\frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle-\frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\rangle$　$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix}$

この状態でスピン角運動量のz成分を測定したらどんな値が得られるか。

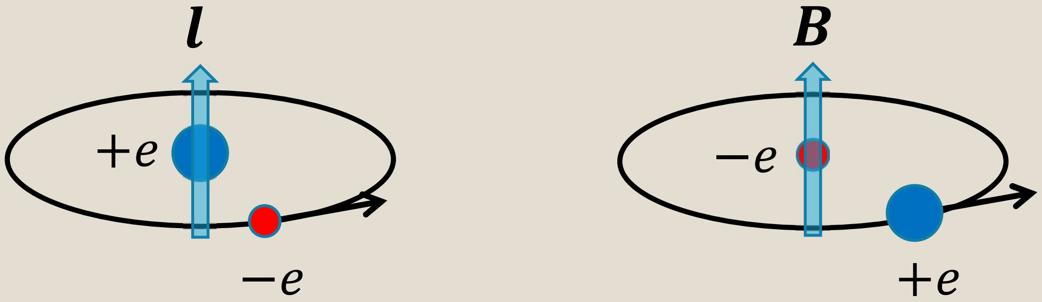
$\pm\frac{\hbar}{2}$　確率はどちらも50%

# スピン軌道相互作用

参考資料

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 $\because \boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{m}\boldsymbol{s}$

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

※正の定数$\zeta$の値は、相対論的量子力学により正確に求められる。

# スピン軌道相互作用

参考資料

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

この軌道角運動量$\boldsymbol{l}$とスピン$\boldsymbol{s}$との相互作用をスピン軌道相互作用とよぶ。

伝導電子のように軌道運動していない場合でも、+Zeの電荷の近くを電子が運動するときは、距離をrとして、以下の有効磁場が電子に働く。

$$B \simeq \frac{\mu_0 I}{2\pi r} = \frac{\mu_0 Zev}{2\pi r} \qquad v：電子の速度$$

※このように、外部磁場が無くても、また、磁性体でなくとも、スピン軌道相互作用により有効磁場が働く。

# 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。

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

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

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

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

※ $\hat{l}_i$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。

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$\hat{l}^2$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

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

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

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

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

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

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

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

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

$\because [\hat{A}^2,\hat{C}] = \hat{A}[\hat{A},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{C}]\,\hat{A}$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。

参考資料

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

$\hat{H}, \hat{j}^2, \hat{j}_z, \hat{l}^2, \hat{s}^2$は互いに交換する。

従って、これら5つの演算子の同時固有状態が存在する。

※$\hat{l}_x$, $\hat{s}_x$はもはや単独では$\hat{H}$と交換しない。

エネルギー固有状態を量子数$n, j, m, l, s$で分類できることが分かる。

同時固有状態　$|njmls\rangle$

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

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

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

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

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

※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がある場合のエネルギー準位の分裂

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

$$H_{SO} = \zeta(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s})$$

同時固有状態 $\left|jmls\right\rangle$

※スピン軌道相互作用エネルギーは主量子数$n$には依らないので$n$は省略する。

期待値 $\langle jmls|H_{SO}|jmls\rangle = \zeta\langle jmls|l\cdot s|jmls\rangle = \zeta\langle jmls|\frac{1}{2}\left(j^2 - l^2 - s^2\right)|jmls\rangle$

$$= \frac{1}{2}\zeta\{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\}\hbar^2 = \frac{1}{2}\zeta\left\{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right\}\hbar^2$$

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

※$\langle H_{SO}\rangle$は$m$によらない。

角運動量の合成　　平行　反平行

$$\hat{\boldsymbol{j}} = \hat{\boldsymbol{l}} + \hat{\boldsymbol{s}} \qquad j = l+\frac{1}{2},\, l-\frac{1}{2}$$

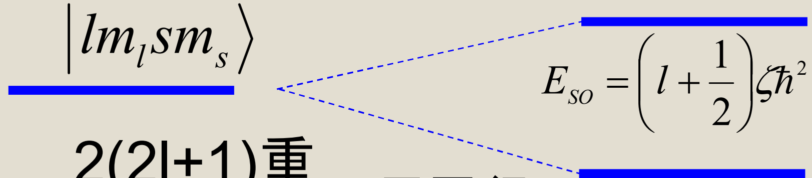
ただし、$l \neq 0$

※ベクトル的に考えると良い。$j^2$の量子数$j$は合成角運動量の大きさを表すので、＋は同じ向き、－は逆向きの結合を表す。

※s準位は軌道角運動量をもたないので分裂しない。

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

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



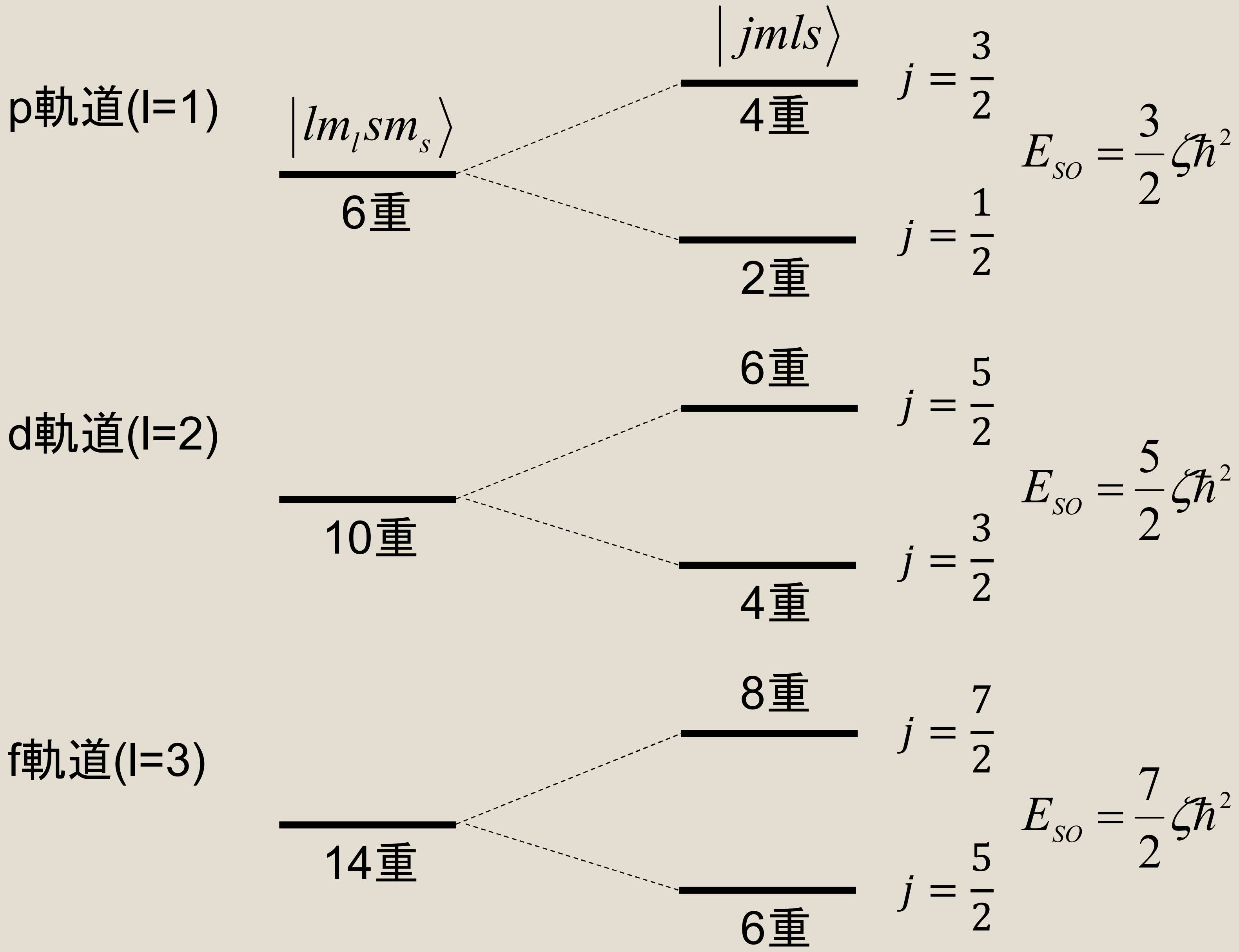
$\left|lm_l sm_s\right\rangle$　2(2l+1)重

$j = l+\frac{1}{2}$　$\left|jmls\right\rangle$　平行　(2l+2)重

$E_{SO} = \left(l+\frac{1}{2}\right)\zeta\hbar^2$

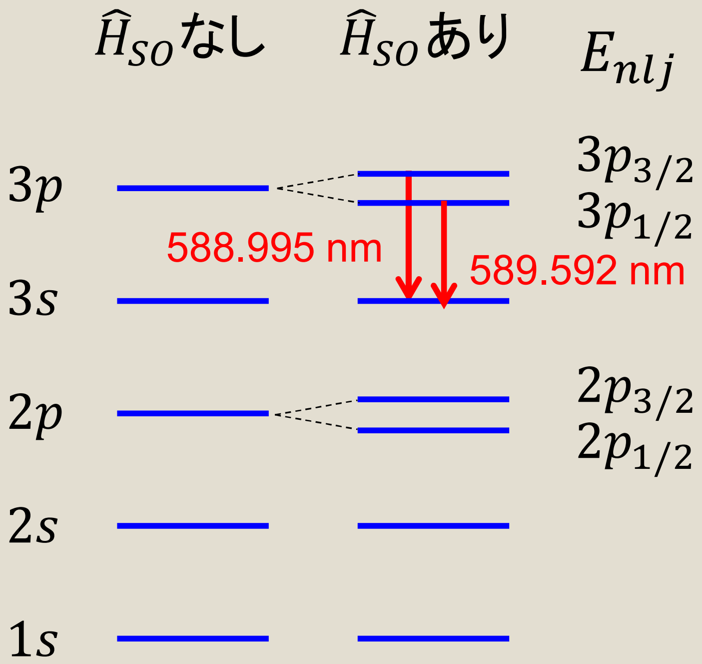
反平行　2l重　$j = l-\frac{1}{2}$

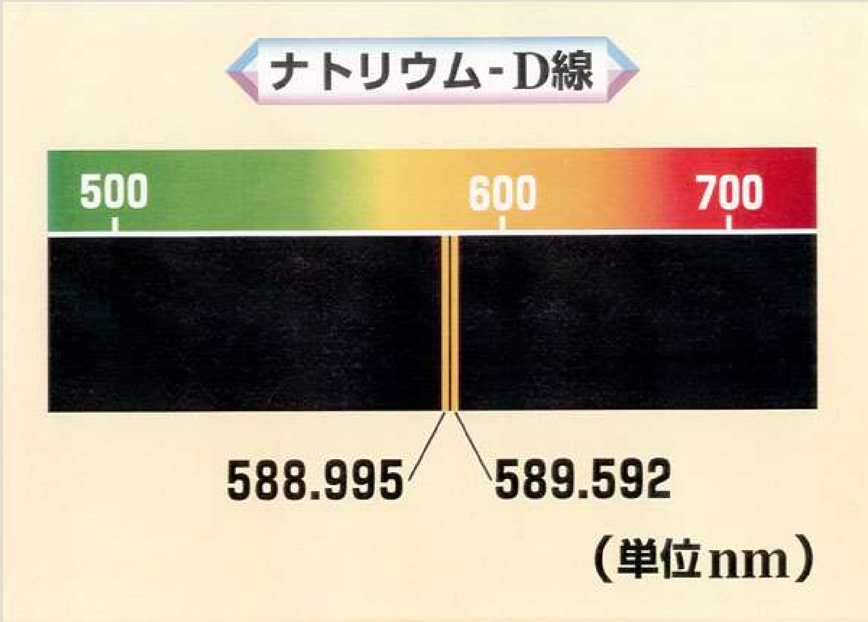
# スピン軌道相互作用によるエネルギー準位の分裂




※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。

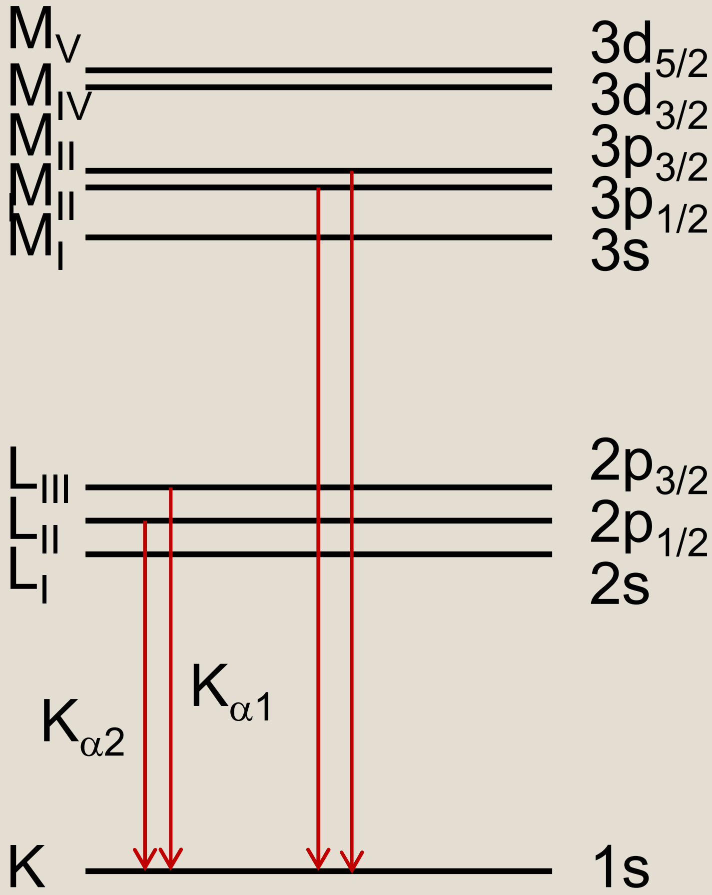
※ $np$準位の分裂は、$np_j$などと表記される。

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。

# 研究室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

$K_{\alpha 1}$=1.540562 Å

$K_{\alpha 2}$=1.544390 Å

$K_{\beta 1}$=1.392218 Å

※$K_\beta$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。

電子は固有の角運動量(スピン)を有する。また、スピンに関して以下の固有値方程式が成り立つ。

$$\hat{\boldsymbol{s}}^2|\uparrow\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\uparrow\rangle \qquad \hat{s}_z|\uparrow\rangle = \frac{1}{2}\hbar|\uparrow\rangle \qquad |\uparrow\rangle = \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\hat{\boldsymbol{s}}^2|\downarrow\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\downarrow\rangle \qquad \hat{s}_z|\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}\hbar|\downarrow\rangle \qquad |\downarrow\rangle = \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$$

スピン軌道相互作用がある場合の一電子状態

全角運動量$\hat{\boldsymbol{j}} \equiv \hat{\boldsymbol{l}} + \hat{\boldsymbol{s}}$はハミルトニアンと交換する。

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

※$\hat{l}_x$(や $\hat{s}_x$)はハミルトニアンと交換しない。従って、エネルギー固有状態においては、確定値を取らない。

※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。

# レポート課題(20分)

$\hat{s}_y$の固有状態と固有値を求めよ。

※ヒント:次の関係式を用いよ。 $\hat{s}_{\pm} = \hat{s}_x \pm i\hat{s}_y$

$$\hat{s}_+ = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{s}_- = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

ヒント>>tamura☺rs.tus.ac.jpまで

※提出方法

〆切:7/26(水)　提出先:LETUS

フォーマット:手書き・ワープロいずれも可

ファイル形式:PDF　ファイル名書式:”82xxxxx材料太郎.pdf”

# 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。