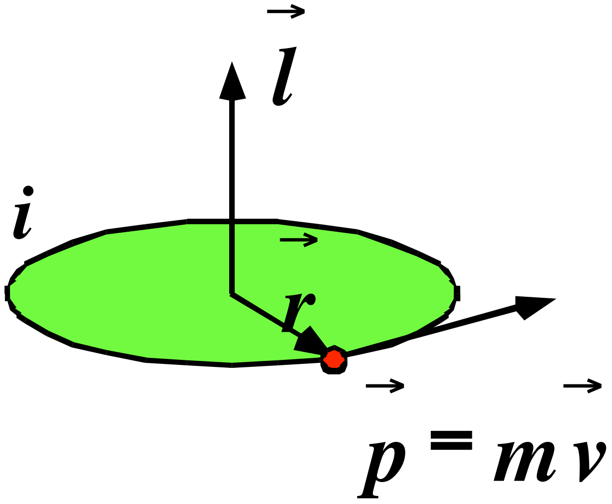
角運動量（1）

古典的角運動量

$$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$$

$$l_x = yp_z - zp_y$$
$$l_y = zp_x - xp_z$$
$$l_z = xp_y - yp_x$$



量子力学的角運動量

$$\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \quad \rightarrow \quad \hat{l}_z = \frac{\hbar}{i}\cdot\frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\hat{l}_z \Psi(r,\theta,\phi)_{n,l,m_l} = m_l \hbar \Psi(r,\theta,\phi)_{n,l,m_l}$$

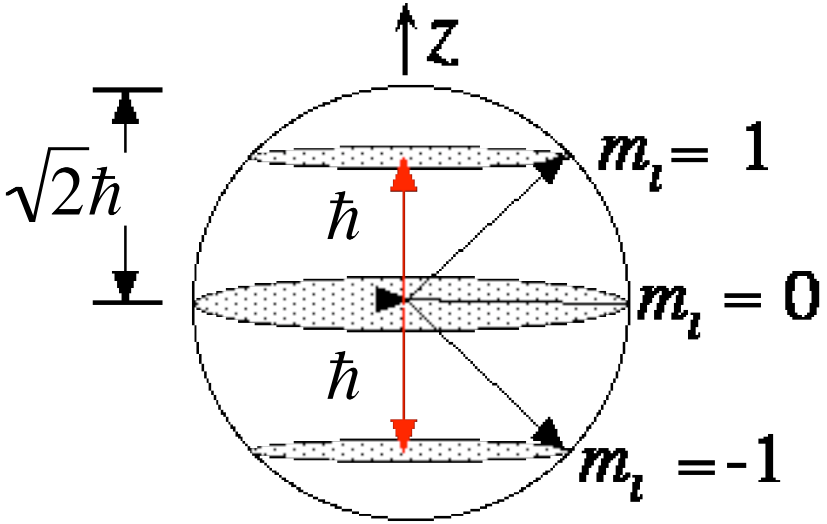
軌道角運動量のz成分 $\hat{l}_z$ を観測→ $m_l\hbar$ なる値が得られる．
例えば，角運動量量子数 l=1 に対して m_lの取りうる値は $0,\pm 1$ であるから $\hat{l}_z$ を観測すると $0\hbar, \pm 1\hbar$ の値が得られることになる．

$$l^2 = l_x^{\ 2} + l_y^{\ 2} + l_z^{\ 2} \quad \rightarrow \quad \hat{l}^{\,2} = \hat{l}_x^{\ 2} + \hat{l}_y^{\ 2} + \hat{l}_z^{\ 2}$$

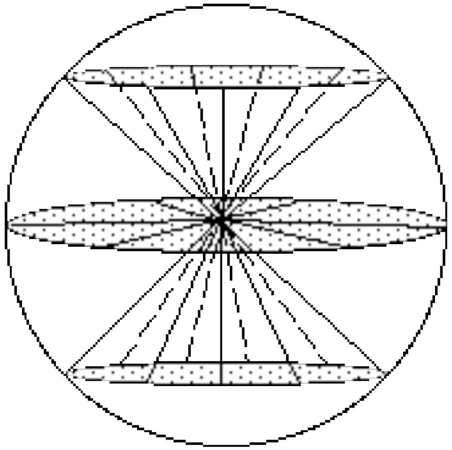
$$\hat{l}^{\,2}\Psi(r,\theta,\phi)_{n,l,m_l} = \lambda^2\Psi(r,\theta,\phi)_{n,l,m_l} = l(l+1)\hbar^2\Psi(r,\theta,\phi)_{n,l,m_l}$$

$$|\lambda| = \hbar\sqrt{l(l+1)} \qquad l = 1 \rightarrow m_l = 0, \pm 1$$

$$\hat{l}_z\Psi(r,\theta,\phi)_{n,l,m_l} = m_l\hbar\Psi(r,\theta,\phi)_{n,l,m_l}$$



$l = 1$

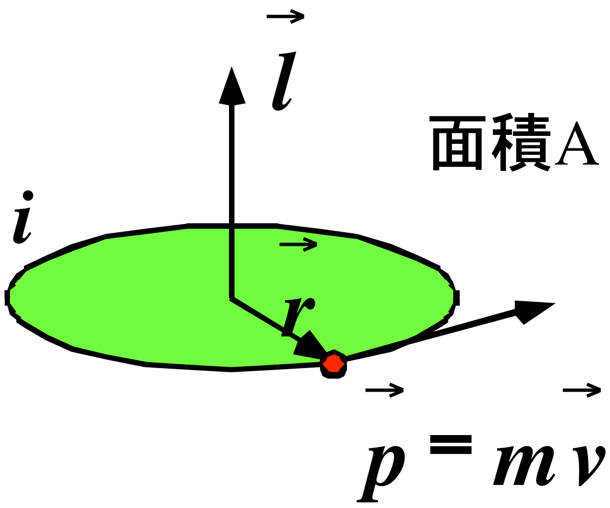


$$\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i}\cdot\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\begin{cases} l_\pm = \hbar e^{\pm i\phi}\left(\pm\dfrac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\,\dfrac{\partial}{\partial\phi}\right) \\ l^2 = -\hbar^2\left(\dfrac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\,\dfrac{\partial}{\partial\theta} + \dfrac{1}{\sin^2\theta}\,\dfrac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) \end{cases}$$

角運動量（2）

軌道角運動量に伴う磁気モーメント



$$\vec{m} = \mu_0 \cdot i \cdot \vec{A}$$

$$T = \frac{2\pi r}{v} = \frac{1}{f}$$

$$i = -ef = -e\frac{\omega}{2\pi} = -e\frac{v/r}{2\pi}$$

（古典電磁気学）

$$\left|\vec{l}\right| = \left|\vec{r} \times \vec{p}\right| = \left|rp \cdot sin\theta\right| = rp$$

$$rp = r(m_e v) = 2\pi f m_e r^2 = 2Am_e f$$

$$\left|\vec{m}\right| = -\frac{\mu_0 ev}{2\pi r}\pi r^2 = -\frac{\mu_0 e}{2m_e}\left|\vec{l}\right| = -\gamma\left|\vec{l}\right|$$

$$\left|\vec{m}(l)\right| = -\frac{\mu_B}{\hbar}\left|\vec{l}\right|$$

$$\left(l_z = \hbar\ell\right)$$ （量子論）

$$\gamma = \frac{\mu_0 e}{2m_e} = 1.105 \times 10^5 mA^{-1}s^{-1}$$

$$\mu_B = \gamma\hbar = \frac{\mu_0 e\hbar}{2m_e} = 1.165 \times 10^{-29} Wbm$$

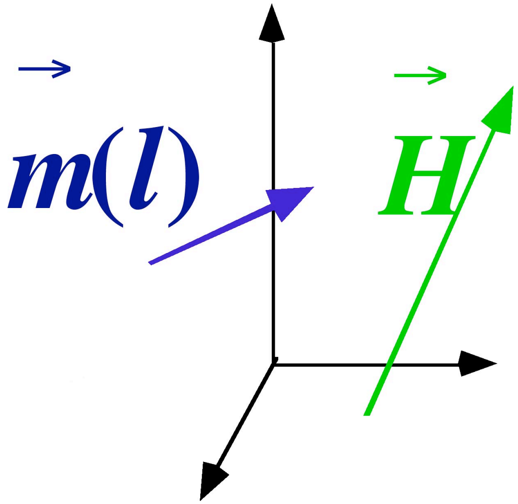
磁気モーメントと磁場の相互作用

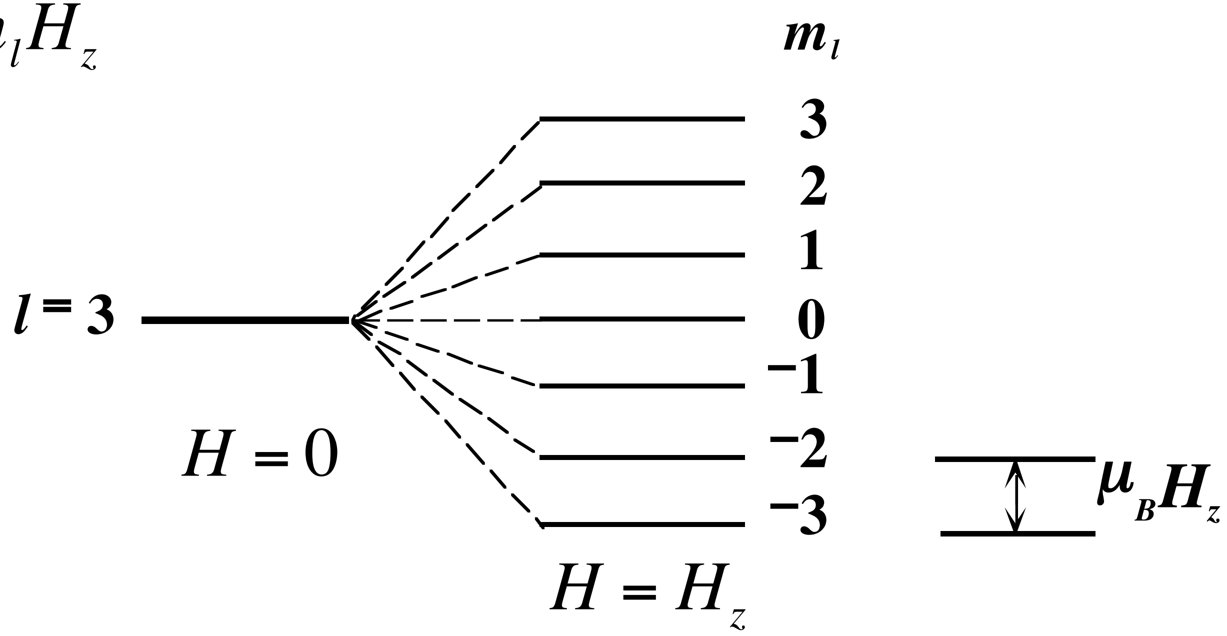
$$\left|m(l)\right| = \mu_B \sqrt{l(l+1)}$$

$$U = -m(l)\cdot H = -m(l)_z H_z$$

$$m(l)_z = -\frac{\mu_B}{\hbar} l_z = -\mu_B m_l$$

$$U = \mu_B m_l H_z$$

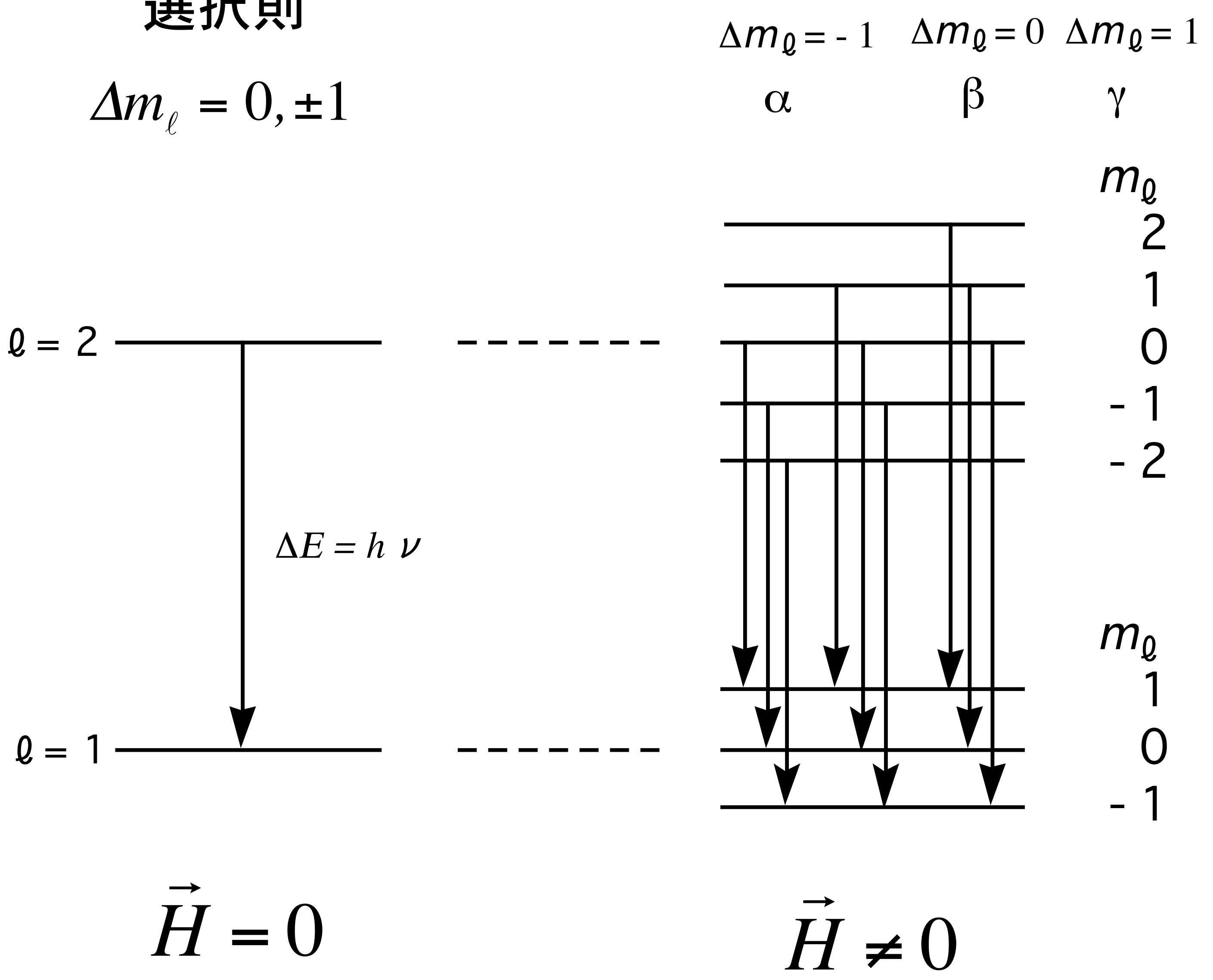




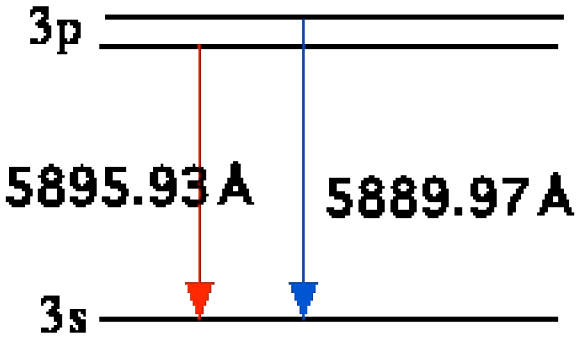
ゼーマン（Zeeman）効果

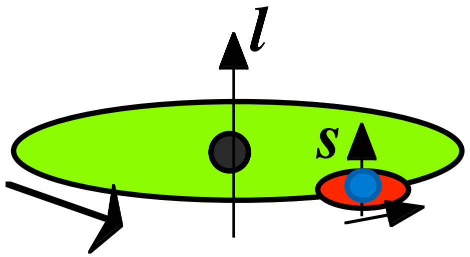
選択則

$$\Delta m_\ell = 0, \pm 1$$



電子の自転による角運動量





電子の公転と自転

Naの原子スペクトルのうちD線と呼ばれている黄色の発光線は、3pから3sに落ちるときに出るものである。今までに述べてきたことから考えれば一本の発光線しか観測されないはずである。しかし、上図のように、わずかに波長の異なる二本の線が観測される。これは古典的描像でいうならば、電子が軌道を回転（公転ーこれによって軌道角運動量lが生ずる）しながら、同時に電子自ら自転していることによっている。後で述べるように、公転により磁場が発生し、自転に伴う磁気モーメント（これを電子スピン磁気モーメントとよぶ）との相互作用で、3p軌道が二つに分裂する。

（スピンー軌道相互作用）

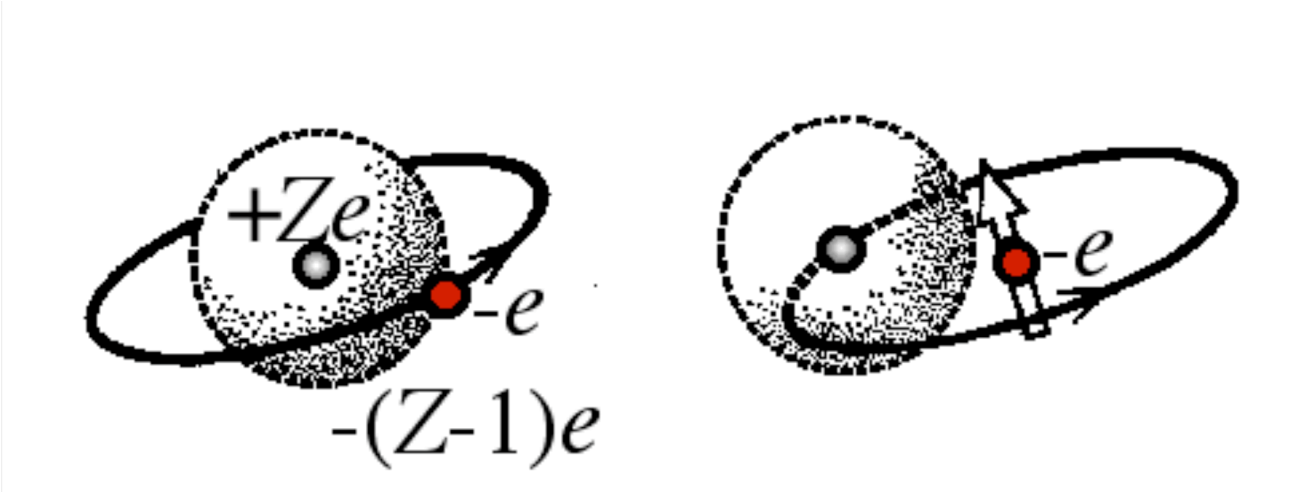
電子の自転に伴う磁気モーメント

古典的イメージでいうならば，電子は自転しながら，原子核の周りを公転している．この自転によって，電子は自らスピン磁気モーメントをもっている．これに伴う量子数は S, m_s（電子の公転に伴う軌道角運動量の量子数 l, m_l に対応する），形式的には次のような対応関係がある．

$\lambda^2 = l(l+1)\hbar^2 \leftarrow \hat{l}^2$	$\sigma^2 = s(s+1)\hbar^2 \leftarrow \hat{s}^2$
$l = 0,1,2,\ldots,(n-1)$	$s = 1/2$
$l_z = m_l\hbar$	$s_z = m_s\hbar$
$m_l = -l,-l+1,\ldots,-1,0,1,\ldots,l-1,l$	$m_s = \pm 1/2$
$m(l)_z = -\dfrac{\mu_B}{\hbar} l_z$	$m(s)_z = -2\dfrac{\mu_B}{\hbar} s_z$
$(H \cdot m(l))_z = -\dfrac{\mu_B}{\hbar} l_z H_z$	$(H \cdot m(s))_z = -2\dfrac{\mu_B}{\hbar} s_z H_z$

$$m = -g\frac{\mu_B}{\hbar}a \qquad \begin{cases} a = l \Rightarrow g = 1 \\ a = s \Rightarrow g = 2 \end{cases}$$

電子の軌道とスピン（１）：スピンー軌道相互作用



上図，左は，原子核とそれに強く束縛された(Z-1)個の電子から構成される原子芯の回りを一個の電子が公転している状態を示している．しかし見方を変えれば，今注目している一個の電子の回りを，原子芯が回転しているとも見なせる．この原子芯の公転により電子の位置に磁場を発生するため，電子の持っている磁気モーメント$2S\mu_B$と相互作用をする．（スピンー軌道相互作用）

電子の軌道とスピン（２）：スピン－軌道相互作用

電子の周りを回転している原子芯により，電子の位置に発生する磁場を $H_{a.c}$ とする．これは、軌道角運動量ベクトル l に比例すると考えられる．この磁場と電子の持つ磁気モーメントとの相互作用をスピン・軌道相互作用とよんでいる．

$$H_{a.c} \propto l$$

$$H_{a.c} \cdot m(s) \propto l \cdot s$$

スピン－軌道相互作用

$$U_{l.s} = \zeta\, l \cdot s \qquad \zeta > 0$$

Appendix

角運動量の量子力学のまとめ

$$\hbar\mathbf{L} = \mathbf{r}\times\mathbf{P} = -i\hbar\mathbf{r}\times\nabla \qquad \left(\nabla = \frac{\partial}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z}\mathbf{k}\right)$$

$$\left.\begin{aligned} L_x &= -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) = i\hbar\left(sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\ L_y &= -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) = i\hbar\left(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\ L_z &= -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} \end{aligned}\right\}$$

$$\left\{\begin{aligned} l_\pm &= \hbar e^{\pm i\phi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\ l^2 &= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) \end{aligned}\right.$$

$$\phi_{nl}^m(\mathbf{r}) = AR_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi) = AR_{nl}(r)P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi}$$

$$(m = -l,\cdots,+l)$$

$$\begin{aligned} L_z\phi_{nl}^m(\mathbf{r}) &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\left[AR_{nl}(r)P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi}\right] \\ &= m\hbar\phi_{nl}^m(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

$$L_+ = L_x + iL_y,\ L_- = L_x - iL_y$$

$$\left.\begin{aligned} L_+\phi_{nl}^m(\mathbf{r}) &= \hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\phi_{nl}^{m+1}(\mathbf{r}) \\ L_-\phi_{nl}^m(\mathbf{r}) &= \hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\phi_{nl}^{m-1}(\mathbf{r}) \\ \mathbf{L}^2\phi_{nl}^m(\mathbf{r}) &= \hbar^2 l(l+1)\phi_{nl}^m(\mathbf{r}) \end{aligned}\right\}$$

$$\mathbf{L}^2 = L_x^{\ 2} + L_y^{\ 2} + L_z^{\ 2} = \frac{L_+L_- + L_-L_+}{2} + L_zL_z$$

$$\left.\begin{aligned} L_xL_y - L_yL_x = \left[L_x, L_y\right] &= i\hbar L_z \\ \left[L_y, L_z\right] &= i\hbar L_x \\ \left[L_z, L_x\right] &= i\hbar L_y \end{aligned}\right)$$

$$\left[J_x, J_y\right] = i\hbar J_z, \left[J_y, J_z\right] = i\hbar J_x, \left[J_z, J_x\right] = i\hbar J_y$$

$$\left[J_z, J_+\right] = \hbar J_+, \left[J_z, J_-\right] = -\hbar J_{-x}, \left[J_+, J_-\right] = 2\hbar J_z$$

$$J_+ = J_x + iJ_y, J_- = J_x - iJ_y$$

$$\left[J_x, \mathbf{J}^2\right] = \left[J_y, \mathbf{J}^2\right] = \left[J_z, \mathbf{J}^2\right] = 0$$

$$\left\{\begin{aligned} &\mathbf{J}^2 = J_x^{\ 2} + J_y^{\ 2} + J_z^{\ 2} \\ &\mathbf{J}^2|j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j,m\rangle \\ &J_z|j,m\rangle = m\hbar|j,m\rangle \end{aligned}\right.$$

$$J_\pm|j,m\rangle = \sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\hbar|j,m\pm 1\rangle$$

$$\langle j', m'|j,m\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'}$$

$$\int Y_{l'}^{m'}(\theta,\varphi)Y_l^m(\theta,\varphi)d\varsigma = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

直交性

習慣的にL: 軌道角運動量，S: スピン角運動量
J=L+S: 全角運動量，I: 核スピン角運動量

＜エネルギー固有値＞

磁場中でのエネルギー

$$\mathrm{H} = -\mathbf{H}\cdot\boldsymbol{\mu} = -\gamma H_z J_z \quad (\mathbf{H}/\!/z, \boldsymbol{\mu} = \gamma\mathbf{J})$$

$$\mathrm{H}|j,m\rangle = -\gamma H J_z|j,m\rangle = -\gamma\hbar m H|j,m\rangle$$

固有状態 $|j,m\rangle$ 固有エネルギー $-\gamma\hbar m H$

一般には $|j,m\rangle$ は H の必ずしも固有状態ではない！

$$\mathrm{H}|j,x\rangle = E_x|j,x\rangle \quad or \quad (\mathrm{H}-E_x)|j,x\rangle = 0$$

を満たす E_x と $|j,x\rangle$ を求める！

$$|j,x\rangle = \sum_{m=-j}^{j} x_m|j,m\rangle$$

軌道角運動量の場合 $\int \phi_l^{m'}(\mathbf{r})^* E\phi_l^m(\mathbf{r})d\tau = E\delta_{m'm}$

$$\langle j,m'|\mathrm{H}-E|\Sigma x_m|j,m\rangle = \sum_{m=-j}^{j} x_m\langle j,m'|\mathrm{H}-E|j,m\rangle = 0$$

$$(\langle -j|\mathrm{H}|-j\rangle - E)x_{-j} + \langle -j|\mathrm{H}|-j+1\rangle x_{-j+1} + \cdots + \langle -j|\mathrm{H}|j\rangle x_j = 0$$

$$\langle -j+1|\mathrm{H}|-j\rangle x_{-j} + (\langle -j+1|\mathrm{H}|-j+1\rangle - E)x_{-j+1} + \cdots + \langle -j+1|\mathrm{H}|j\rangle x_j = 0$$

$$\begin{vmatrix} \langle -j|\mathrm{H}|-j\rangle - E & \langle -j|\mathrm{H}|-j+1\rangle & \cdots & \langle -j|\mathrm{H}|j\rangle \\ \langle -j+1|\mathrm{H}|-j\rangle & \langle -j+1|\mathrm{H}|-j+1\rangle - E & \cdots & \langle -j+1|\mathrm{H}|j\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle j|\mathrm{H}|-j\rangle & \langle j|\mathrm{H}|-j+1\rangle & \cdots & \langle j|\mathrm{H}|j\rangle - E \end{vmatrix} = 0$$

例

$$\mathrm{H} = A(J_+^{\,2} + J_-^{\,2}) \qquad j = 1$$

$$J_+^{\,2}|m\rangle = J_+\cdot J_+|m\rangle = \sqrt{(1-m)(2+m)}\hbar J_+|m+1\rangle$$
$$= \sqrt{(1-m)(2+m)}\sqrt{-m(3+m)}\hbar^2|m+2\rangle$$

$$J_+^{\,2}|1,-1\rangle = 2\hbar^2|1,1\rangle$$

$$J_-^{\,2}|1,1\rangle = 2\hbar^2|1,-1\rangle$$

$$\begin{vmatrix} -E & 0 & 2A\hbar^2 \\ 0 & -E & 0 \\ 2A\hbar^2 & 0 & -E \end{vmatrix} = 0$$

$$-E^3 + 4EA^2\hbar^4 = 0$$

解 $E = 0, \quad E = \pm 2A\hbar^2$