（スピン軌道相互作用によるエネルギー分岐:perturbation-spinorbit-qa20160721.tex）

一般に, 原子の中の電子は軌道角運動量とスピンをもっている. それらの間には相互作用があることが知られている. この相互作用のハミルトニアン $\hat{H}_{\rm so}$ は, $k_{\rm so}$ を適当な定数, 軌道角運動量とスピン角運動量を $\vec{\ell}, \vec{s}$ として, 近似的に $\hat{H}_{\rm so} = (k_{\rm so}/\hbar^2)\vec{\ell}\cdot\vec{s}$ と表される.

1. 電子の全角運動量 $\vec{j}$ は軌道角運動量 $\vec{\ell}$ とスピン $\vec{s}$ のベクトル和である. このとき, $\vec{\ell}\cdot\vec{s}$ を求めよ. （ただし, $\vec{\ell}$ と $\vec{s}$ は交換することを用いよ.)
2. 一般に, $\vec{j}^2$ の固有状態 $\psi_j^{(0)}$ は $\psi_{j=\ell+1/2}^{(0)}, \psi_{j=\ell-1/2}^{(0)}$ の二つがある. これらの固有状態は、無摂動状態として，$\vec{\ell}^2$ の固有状態と $\vec{s}^2$ の固有状態の積の一次結合であるから, 同時に $\vec{\ell}^2, \vec{s}^2$ の固有状態でもある. この固有状態に対して、$\vec{\ell}\cdot\vec{s}$ を作用させた値を全角運動量の量子数 j, 軌道角運動量の量子数 ℓ, および $\hbar$(ディラック定数）を用いて表せ.
3. スピン軌道相互作用を摂動と考えて, その 1 次の摂動エネルギーの差としてスピン軌道分岐 ΔE を求めよ (=数式で表現せよ).
4. Na 原子の（電子の）p 状態（$\ell = 1$）は二つのエネルギー準位に分かれている. そのエネルギー差 ΔE は基底状態への状態遷移にともなう光のスペクトルが 589.592 nm, 588.995 nm, $(1\mathrm{nm} \equiv 10^{-9}\mathrm{m} = 10\mathrm{Å})$ の 2 本に分かれるという形で観測されている. 2 つのエネルギー準位のエネルギー差を eV 単位で求め, 定数 $k_{\rm so}$ の値を計算せよ. ただし，定数の値として $c\hbar = 1.97\times10^3\mathrm{eV}\cdot\mathrm{Å}$, $\pi = 3.1415$ を用いよ．

(解答例)

1. 粒子の全角運動量は軌道角運動量と固有スピンの和であるから

$$\begin{aligned} \vec{j}^2 &= (\vec{\ell}+\vec{s})^2 = \vec{\ell}^2 + \vec{s}^2 + 2\vec{\ell}\cdot\vec{s} \\ \to \vec{\ell}\cdot\vec{s} &= \frac{1}{2}(\vec{j}^2 - \vec{\ell}^2 - \vec{s}^2) \qquad (1) \end{aligned}$$

2. 演算子の作用を受ける状態としては，$\vec{j}^2$, $\vec{\ell}^2$, $\vec{s}^2$ それぞれの固有状態を考えて

$$\begin{aligned} \vec{\ell}\cdot\vec{s}\psi_j^{(0)} &= \frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)\right]\psi_j^{(0)} \\ &= \frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}\right]\psi_j^{(0)}, (j = \ell \pm 1/2,\ s = 1/2) \qquad (2) \end{aligned}$$

が得られる．

3. 題意より

$$\begin{aligned}
\Delta E &= E^{(1)}_{j=\ell+1/2} - E^{(1)}_{j=\ell-1/2} \\
&= <\psi^{(0)}_{j=\ell+1/2}|\hat{H}_{so}|\psi^{(0)}_{j=\ell+1/2}> - <\psi^{(0)}_{j=\ell-1/2}|\hat{H}_{so}|\psi^{(0)}_{j=\ell-1/2}> \\
&= \frac{k_{\mathrm{so}}}{\hbar^2} \times \frac{\hbar^2}{2}\left[(\ell+\frac{1}{2})(\ell+\frac{1}{2}+1) - (\ell-\frac{1}{2})(\ell-\frac{1}{2}+1)\right] \\
&= \frac{k_{\mathrm{so}}}{2}\left[(\ell+\frac{1}{2})^2 + (\ell+\frac{1}{2}) - (\ell-\frac{1}{2})^2 - (\ell-\frac{1}{2})\right] \\
&= \frac{k_{\mathrm{so}}}{2}(2\ell+1). \qquad (3)
\end{aligned}$$

4. まず，振動数 f，波長 λ の光子のエネルギー $\varepsilon = hf = ch/\lambda$(アインシュタインの関係）を想起する．

   次に，スピン軌道分岐の大きさ ΔE を, $c\hbar$ と 2 つの波長 $\lambda_1, \lambda_2(\lambda_1 < \lambda_2)$ によって表した後，具体的な値を代入すると

$$\begin{aligned}
\Delta E &= \frac{ch}{\lambda_1} - \frac{ch}{\lambda_2} = 2\pi c\hbar\left(\frac{\lambda_2-\lambda_1}{\lambda_1\lambda_2}\right) \\
&= 2 \times 3.1415926 \times 1.97 \times 10^3 \mathrm{eV}\cdot\text{Å}\left(\frac{0.597}{589.592\times588.995}\right)\frac{1}{10\text{Å}} \\
&= \left(\frac{2\times3.1415926\times1.97\times0.597}{589.592\times588.995}\right)\times10^{3-1}\mathrm{eV} \\
&= 0.0021279\mathrm{eV}. \qquad (4)
\end{aligned}$$

   が得られる．一方，式 (3) の $\ell = 1$ の場合を用いて

$$\begin{aligned}
\Delta E &= \frac{3k_{\mathrm{so}}}{2} \\
\to k_{\mathrm{so}} &= 0.0014136\mathrm{eV} \qquad (5)
\end{aligned}$$

   となる.