科　目　名	学年	番号	学　籍　番　号	氏　　　名
量子力学 I　第 11 回	2			

全問解答し，答え合わせ（自己採点）をして提出せよ。　　　　**授業時間外の学習時間：＿＿＿時間＿＿＿分**

[1] 「詳解　量子化学の基礎」の 9 章の 9.7 節〜9.10 節（105 頁〜114 頁）を読みなさい。また，余裕があれば 9.13 節（121 頁〜134 頁）も読みなさい。

[2] 表は波動関数の角度依存成分を表す。空欄を埋めよ。ただし，(b)，(d)，(e) は波動関数の異方性がわかり易いように，$x/r,\ y/r,\ z/r$ を用いた表現に変形せよ。なお，以下の関係を用いよ。

$$x = r\sin\theta\cos\phi \tag{1}$$

$$y = r\sin\theta\sin\phi \tag{2}$$

$$z = r\cos\theta \tag{3}$$

$$\cos\phi = (e^{i\phi} + e^{-i\phi})/2 \tag{4}$$

$$\sin\phi = (e^{i\phi} - e^{-i\phi})/2i \tag{5}$$

ℓ	m	$\Theta_{\ell,m}(\theta)$	$\Phi_m(\phi)$	$Y_{\ell,m}(\theta,\phi) = \Theta_{\ell,m}(\theta)\Phi_m(\phi)$	
0	0	$\Theta_{0,0} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}$	$\Phi_0 = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$Y_{0,0} =$ (a)	
1	0	$\Theta_{1,0} = \sqrt{\dfrac{3}{2}}\cos\theta$	$\Phi_0 = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$Y_{1,0} =$ (b)	
	±1	$\Theta_{1,\pm1} = \sqrt{\dfrac{3}{4}}\sin\theta$	$\Phi_{\pm1} = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm i\phi}$	$Y_{1\pm1} =$ (c)	$\dfrac{1}{\sqrt{2}}(Y_{1,1} + Y_{1,-1}) =$ (d)
					$\dfrac{1}{\sqrt{2}i}(Y_{1,1} - Y_{1,-1}) =$ (e)

今日の講義でわからないことがあれば，お伝えください。また，講義にたいする要望があればお書きください。感想などでも結構です。もちろん，成績等には一切関係ありません。

✎ **記述欄**

[3] $0 \leq \theta \leq \pi$ で $|Y_{\mathrm{p}_z}| = |\cos\theta|$ を極座標図として表せ。ただし，$0 \leq \theta \leq \pi/2$ の範囲のデータは，次表の値を用いてよい。

θ	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90
$\lvert\cos\theta\rvert$	1.00	0.98	0.94	0.87	0.77	0.64	0.5	0.34	0.17	0.00

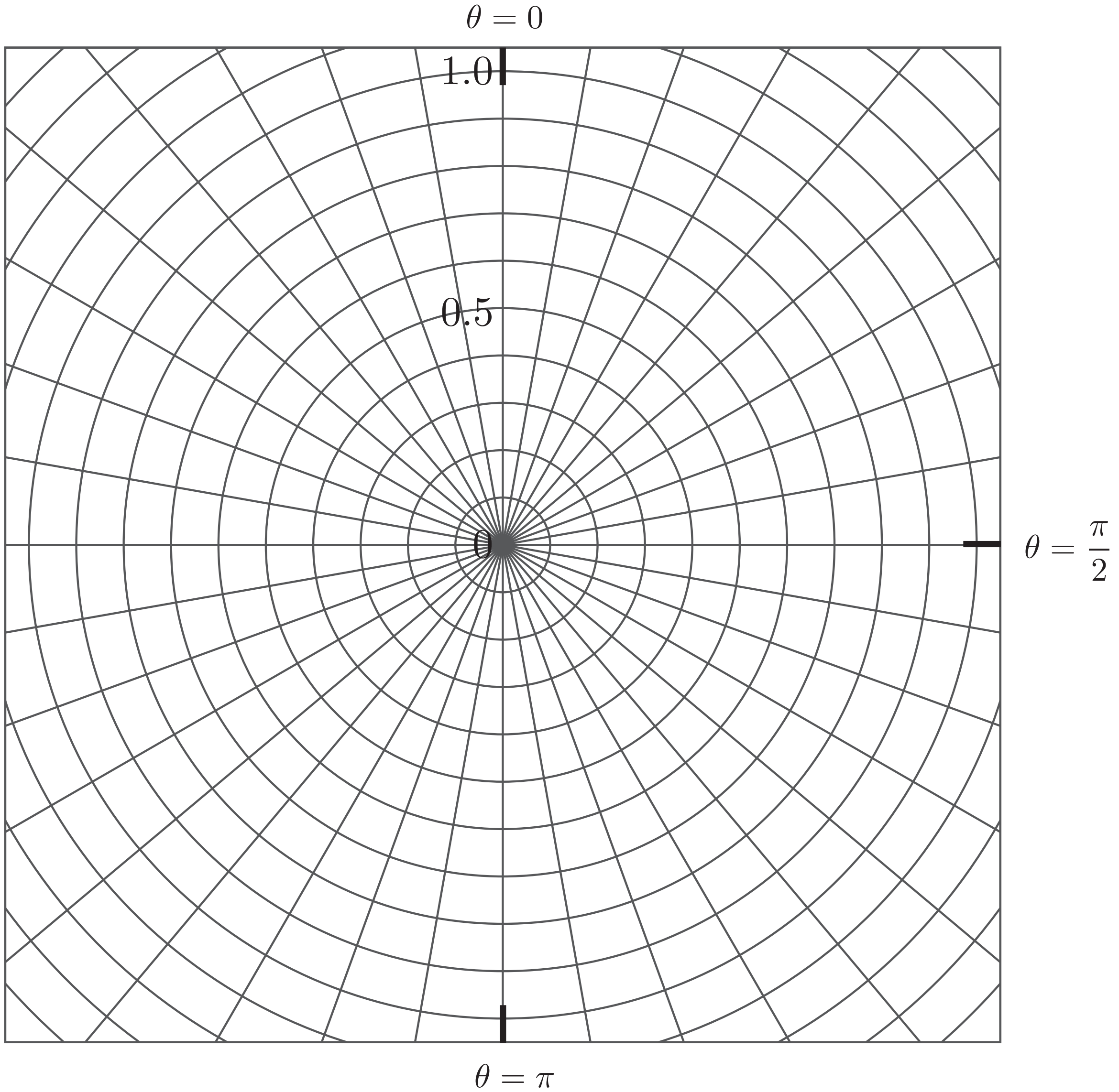


図 1: 極座標図：$|Y_{\mathrm{p}_z}| = |\cos\theta|$ のプロット

[4] $0 \leq \theta \leq \pi$ で $|Y_{\mathrm{d}_{z^2}}| \sim |3\cos^2\theta - 1|$ を極座標図として表せ。ただし，$0 \leq \theta \leq \pi/2$ の範囲のデータは，次表の値を用いてよい。

θ	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90
$\|3\cos^2\theta - 1\|$	2.00	1.91	1.65	1.25	0.76	0.24	0.25	0.65	0.91	1.00

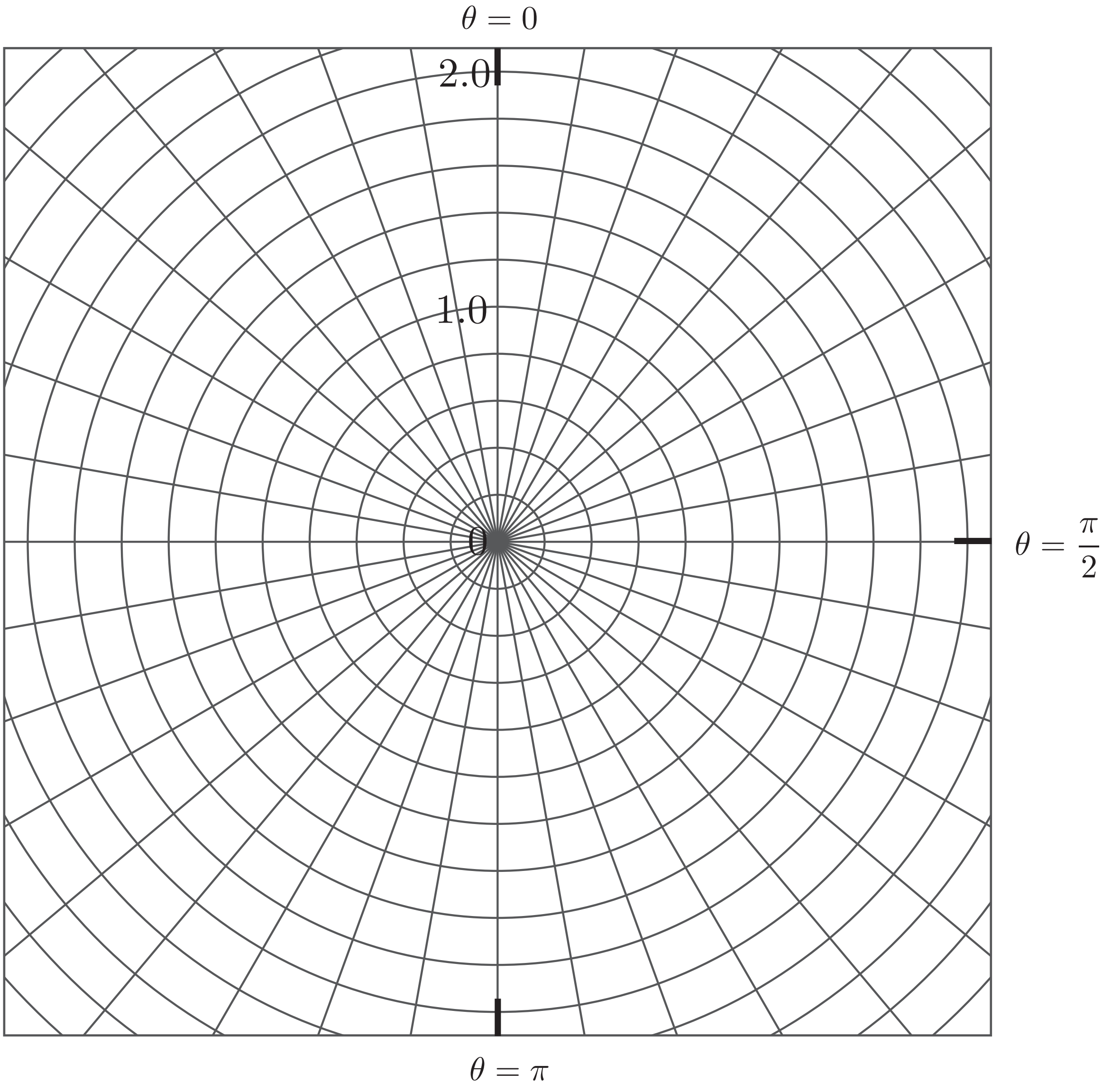
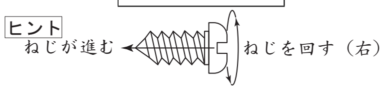
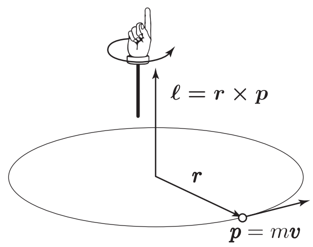


図 2: 極座標図：$|Y_{\mathrm{d}_{z^2}}| \sim |3\cos^2\theta - 1|$ のプロット

[5] $\boxed{\text{予習}}$「詳解　量子化学の基礎」の 2 章（29 頁〜32 頁）を読みなさい。

[6] $\boxed{\text{予習}}$　円運動している粒子の**角運動量**（かくうんどうりょう）は，円の中心から粒子への位置ベクトル $\boldsymbol{r}$ と粒子の運動量ベクトル $\boldsymbol{p} = m\boldsymbol{v}$ の**外積**（がいせき）として定義される（右図参照）。外積は $\boxed{\quad\text{(f)}\quad}$ ともいう。外積 $\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ の大きさは，ベクトル $\boldsymbol{r}$ とベクトル $\boldsymbol{p}$ の作る長方形の面積 $r \times p$ に等しく，向きは $\boxed{\quad\text{(g)}\quad}$ の法則で決定できる。





ベクトル $\boldsymbol{r}$ とベクトル $\boldsymbol{p}$ を x 方向，y 方向，z 方向の単位ベクトル $\boldsymbol{i}$，$\boldsymbol{j}$，$\boldsymbol{k}$ を用いて，次のように表すと，

$$\boldsymbol{r} = x\boldsymbol{i} + y\boldsymbol{j} + z\boldsymbol{k} \tag{6}$$

$$\boldsymbol{p} = p_x\boldsymbol{i} + p_y\boldsymbol{j} + p_z\boldsymbol{k} \tag{7}$$

ベクトル $\boldsymbol{r}$ とベクトル $\boldsymbol{p}$ の外積 $\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$，すなわち角運動量 $\boldsymbol{\ell}$ は次のように表すことができる。

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\ell} &= \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p} \\
&= \begin{vmatrix} \boldsymbol{i} & \boldsymbol{j} & \boldsymbol{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} \\
&= \boldsymbol{i}\begin{vmatrix} y & z \\ p_y & p_z \end{vmatrix} - \boldsymbol{j}\begin{vmatrix} x & z \\ p_x & p_z \end{vmatrix} + \boldsymbol{k}\begin{vmatrix} x & y \\ p_x & p_y \end{vmatrix} \\
&= \underbrace{(yp_z - zp_y)}_{\ell_x}\boldsymbol{i} + \underbrace{(zp_x - xp_z)}_{\ell_y}\boldsymbol{j} + \underbrace{\left(\boxed{\text{(h) 文字式}}\right)}_{\ell_z}\boldsymbol{k} \\
&= \ell_x\boldsymbol{i} + \ell_y\boldsymbol{j} + \ell_z\boldsymbol{k}
\end{aligned} \tag{8}$$

ここで，ℓ_x，ℓ_y，ℓ_z は角運動量の x，y，z 方向成分の大きさを表す。2 行目から 3 行目への式変形では，$\boxed{\quad\text{(i)}\quad}$ 展開を用いた。以上より，角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{\ell}} = (\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y, \hat{\ell}_z)$ の各成分は，

(i)　$\hat{\ell}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y$

(ii)　$\hat{\ell}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z$

(iii)　$\hat{\ell}_z = \boxed{\text{(j) 文字式}}$

と書けることがわかる。ところで，運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$ の各成分は，

(iv)　$\hat{p}_x = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$

(v)　$\hat{p}_y = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial y}$

(vi)　$\hat{p}_z = \boxed{\text{(k) 文字式}}$

と書く約束だから，これを (i)〜(iii) に代入すると，以下の表式を得る。

(vii)　$\hat{\ell}_x = -i\hbar\left(y\dfrac{\partial}{\partial z} - z\dfrac{\partial}{\partial y}\right)$

(viii)　$\hat{\ell}_y = -i\hbar\left(z\dfrac{\partial}{\partial x} - x\dfrac{\partial}{\partial z}\right)$

(ix)　$\hat{\ell}_z = \boxed{(\ell)\text{ 文字式}}$

$\boxed{\text{注意}}$　このように対称性の高い式では，単純に「サイクリックに変数を置き換える」だけで良いことがわかるか。

[7] 予習 角運動量演算子は次のような交換関係を持つ。これらを**角運動量の代数**（かくうんどうりょうのだいすう）とよぶ。

$$\left[\hat{\ell}_x,\ \hat{\ell}_y\right] = i\hbar\,\hat{\ell}_z \qquad \left[\hat{\ell}_y,\ \hat{\ell}_z\right] = i\hbar\,\hat{\ell}_x \qquad \left[\hat{\ell}_z,\ \hat{\ell}_x\right] = i\hbar\,\hat{\ell}_y \tag{9}$$

角運動量の代数を証明せよ。ただし，$\left[\hat{\ell}_y,\ \hat{\ell}_z\right] = i\hbar\,\hat{\ell}_x$ が示せれば，$x \to y,\ y \to z,\ z \to x$ という具合にサイクリックに変数を置き換えると，

$$\left[\hat{\ell}_y,\ \hat{\ell}_z\right] = i\hbar\,\hat{\ell}_x \xrightarrow{x\to y,\ y\to z,\ z\to x} \left[\hat{\ell}_z,\ \hat{\ell}_x\right] = i\hbar\,\hat{\ell}_y \xrightarrow{x\to y,\ y\to z,\ z\to x} \left[\hat{\ell}_x,\ \hat{\ell}_y\right] = i\hbar\,\hat{\ell}_z \tag{10}$$

と他の関係も示すことができるから，まん中の $\left[\hat{\ell}_y,\ \hat{\ell}_z\right] = i\hbar\,\hat{\ell}_x$ だけを証明すれば良い。また，正準交換関係：$[x,\ \hat{p}_x] = i\hbar$（第 5 回問題 [9] 参照）を用いてよい。

証明

[8] $\boxed{\text{予習}}$ 角運動量の自乗の演算子 $\hat{\boldsymbol{\ell}}^2 = \hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2 + \hat{\ell}_z^2$ と角運動量の各成分には，次の関係が成り立つ。

$$\left[\hat{\boldsymbol{\ell}}^2,\ \hat{\ell}_x\right] = 0 \quad \left[\hat{\boldsymbol{\ell}}^2,\ \hat{\ell}_y\right] = 0 \quad \left[\hat{\boldsymbol{\ell}}^2,\ \hat{\ell}_z\right] = 0 \quad \xrightarrow{\text{まとめて書くと}} \quad \left[\hat{\boldsymbol{\ell}}^2,\ \hat{\boldsymbol{\ell}}\right] = 0 \tag{11}$$

これを証明せよ。ただし，$\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y, \hat{\ell}_z$ は同等なので，上式のいずれか 1 つを証明すればよい。なお，以下の関係を用いてよい[1]。

$$\left[\hat{F} + \hat{G},\ \hat{H}\right] = \left[\hat{F},\ \hat{H}\right] + \left[\hat{G},\ \hat{H}\right] \tag{12}$$

$$\left[\hat{F}^2,\ \hat{H}\right] = \hat{F}\left[\hat{F},\ \hat{H}\right] + \left[\hat{F},\ \hat{H}\right]\hat{F} \tag{13}$$

$\boxed{\text{証明}}$

[1] (12) 式は左辺を展開すれば自然と右辺が導かれる。(13) 式は右辺を展開して得られる 4 つの項のうち，2 番目と 3 番目の項がキャンセルして自然と左辺が導かれる。

[9] 予習　1 粒子の円運動で定義した角運動量を，n 粒子の集合体（これ以降「n 粒子系」とよぶ）に拡張する。これを**合成軌道角運動量**（ごうせいきどうかくうんどうりょう）とよび，

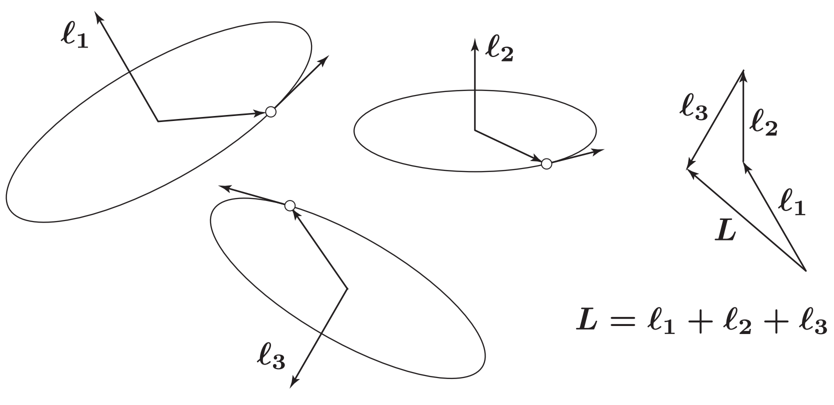
$$\boldsymbol{L} \;:=\; \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{\ell}_i = \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{r}_i \times \boldsymbol{p}_i$$

で定義する。すなわち，n 粒子系の合成軌道角運動量は n 個の角運動量 $\boldsymbol{\ell}_i$ の**ベクトル和**（わ）で定義される。すると，次式が成り立つ。

$$\left[\hat{L}_x,\ \hat{L}_y\right] \;=\; i\hbar\,\hat{L}_z \qquad \left[\hat{L}_y,\ \hat{L}_z\right] = i\hbar\,\hat{L}_x \qquad \left[\hat{L}_z,\ \hat{L}_x\right] = i\hbar\,\hat{L}_y$$

これを証明せよ。

証明



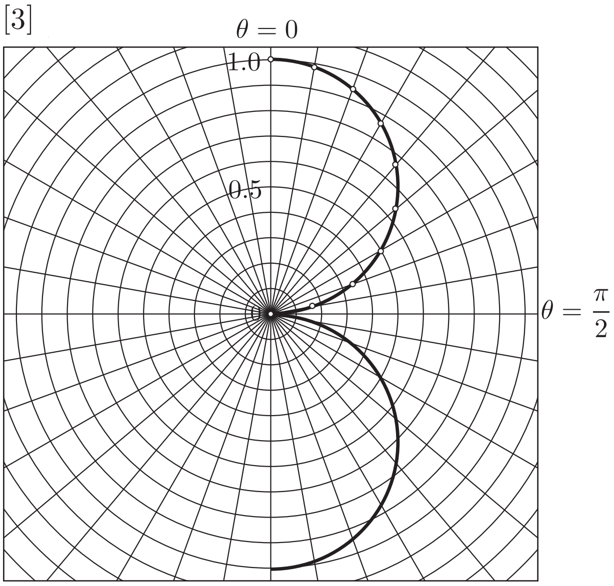
解答

[1]　なし

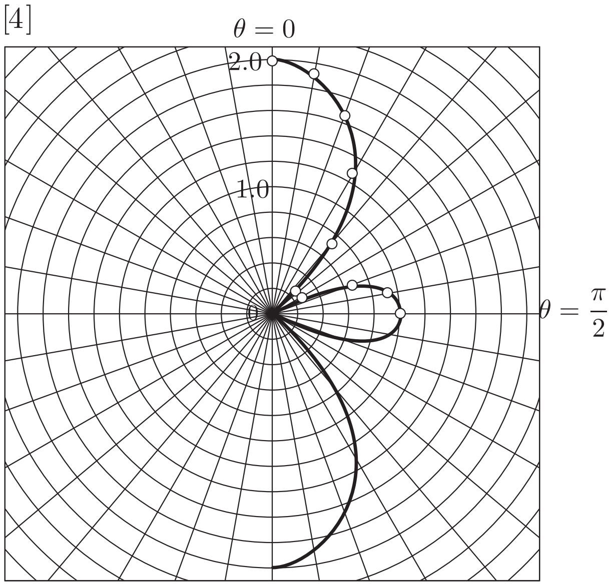
[2]　(a)：$\dfrac{1}{2\sqrt{\pi}}$　(b)：$\dfrac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\cos\theta = \dfrac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\cdot\dfrac{z}{r}$　(c)：$\dfrac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi}$　(d)：$\dfrac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\cdot\dfrac{x}{r}$　(e)：$\dfrac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\cdot\dfrac{y}{r}$

[3], [4]　「詳解　量子化学の基礎」の 107 頁〜110 頁も参照せよ。

[3]



[4]



[5]　なし

[6]　(f)：ベクトル積　(g)：右ねじ　(h)：$xp_y - yp_x$　(i)：余因子　(j)：$x\hat{p}_y - y\hat{p}_x$
(k)：$-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial z}$　(ℓ)：$-i\hbar\left(x\dfrac{\partial}{\partial y} - y\dfrac{\partial}{\partial x}\right)$

[7]

$$\begin{aligned}
\left[\hat{\ell}_y, \hat{\ell}_z\right] &= \hat{\ell}_y\hat{\ell}_z - \hat{\ell}_z\hat{\ell}_y \\
&= (z\hat{p}_x - x\hat{p}_z)(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x) - (x\hat{p}_y - y\hat{p}_x)(z\hat{p}_x - x\hat{p}_z) \\
&= z\hat{p}_x x\hat{p}_y - \underbrace{z\hat{p}_x y\hat{p}_x}_{*1} - \underbrace{x\hat{p}_z x\hat{p}_y}_{*2} + x\hat{p}_z y\hat{p}_x - (x\hat{p}_y z\hat{p}_x - \underbrace{x\hat{p}_y x\hat{p}_z}_{*2} - \underbrace{y\hat{p}_x z\hat{p}_x}_{*1} + y\hat{p}_x x\hat{p}_z)
\end{aligned}$$

$*1$ はおたがいに可換な演算子の積なので（$\hat{p}_x$は y や z に作用しないから。(iv)〜(vi) を参照せよ）順番を任意に変えてよい。よって, $*1$ どうしでキャンセルする。$*2$ も同様。

$$= \underbrace{z\hat{p}_x x\hat{p}_y}_{*3} + \underbrace{x\hat{p}_z y\hat{p}_x}_{*4} - \underbrace{x\hat{p}_y z\hat{p}_x}_{*5} - \underbrace{y\hat{p}_x x\hat{p}_z}_{*6}$$

$\hat{p}_x$と x が可換でないので，この 2 つの順番を保持したまま式を整理する。

$$\begin{aligned}
&= \underbrace{x\hat{p}_x y\hat{p}_z}_{*4} - \underbrace{x\hat{p}_x z\hat{p}_y}_{*5} - \underbrace{\hat{p}_x x y\hat{p}_z}_{*6} + \underbrace{\hat{p}_x x z\hat{p}_y}_{*3} \\
&= x\hat{p}_x(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y) - \hat{p}_x x(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y) \\
&= (x\hat{p}_x - \hat{p}_x x)(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y) \\
&= \left[x, \hat{p}_x\right]\hat{\ell}_x \\
&= i\hbar\,\hat{\ell}_x
\end{aligned}$$

最後の変形は正準交換関係による。

[8] $[\hat{\boldsymbol{\ell}}^2,\ \hat{\ell}_x]=0$ を証明する。$[\hat{\boldsymbol{\ell}}^2,\ \hat{\ell}_x]$ を展開すると，以下の結果を得る。他の 2 つも同様である。

$$
\begin{aligned}
[\hat{\boldsymbol{\ell}}^2,\ \hat{\ell}_x] &= [\hat{\ell}_x^2+\hat{\ell}_y^2+\hat{\ell}_z^2,\ \hat{\ell}_x] \\
&= [\hat{\ell}_x^2,\ \hat{\ell}_x]+[\hat{\ell}_y^2,\ \hat{\ell}_x]+[\hat{\ell}_z^2,\ \hat{\ell}_x] && \text{展開した} \\
&= \left(\hat{\ell}_x\underbrace{[\hat{\ell}_x,\ \hat{\ell}_x]}_{=0}+\underbrace{[\hat{\ell}_x,\ \hat{\ell}_x]}_{=0}\hat{\ell}_x\right)+\left(\hat{\ell}_y[\hat{\ell}_y,\ \hat{\ell}_x]+[\hat{\ell}_y,\ \hat{\ell}_x]\hat{\ell}_y\right) \\
&\qquad +\left(\hat{\ell}_z[\hat{\ell}_z,\ \hat{\ell}_x]+[\hat{\ell}_z,\ \hat{\ell}_x]\hat{\ell}_z\right) \\
&= \hat{\ell}_y[\hat{\ell}_y,\ \hat{\ell}_x]+[\hat{\ell}_y,\ \hat{\ell}_x]\hat{\ell}_y+\hat{\ell}_z[\hat{\ell}_z,\ \hat{\ell}_x]+[\hat{\ell}_z,\ \hat{\ell}_x]\hat{\ell}_z && \text{整理した} \\
&= \hat{\ell}_y\left(-i\hbar\hat{\ell}_z\right)+\left(-i\hbar\hat{\ell}_z\right)\hat{\ell}_y+\hat{\ell}_z\left(i\hbar\hat{\ell}_y\right)+\left(i\hbar\hat{\ell}_y\right)\hat{\ell}_z && \text{問題 [7] より} \\
&= 0 && \text{0 になった}
\end{aligned}
$$

[9]

$$
\begin{aligned}
[\hat{L}_x,\ \hat{L}_y] &= [\sum_i^n \hat{\ell}_{ix},\ \sum_i^n \hat{\ell}_{iy}] \\
&= [\hat{\ell}_{1x}+\hat{\ell}_{2x}+\hat{\ell}_{3x}+\cdots+\hat{\ell}_{nx},\ \ \hat{\ell}_{1y}+\hat{\ell}_{2y}+\hat{\ell}_{3y}+\cdots+\hat{\ell}_{ny}]
\end{aligned}
$$

$(\hat{\ell}_{1x}+\hat{\ell}_{2x}+\hat{\ell}_{3x}+\cdots+\hat{\ell}_{nx}$を展開すると）

$$
\begin{aligned}
&= [\hat{\ell}_{1x},\ \ \hat{\ell}_{1y}+\hat{\ell}_{2y}+\hat{\ell}_{3y}+\cdots+\hat{\ell}_{ny}] \\
&\quad + [\hat{\ell}_{2x},\ \ \hat{\ell}_{1y}+\hat{\ell}_{2y}+\hat{\ell}_{3y}+\cdots+\hat{\ell}_{ny}] \\
&\quad + [\hat{\ell}_{3x},\ \ \hat{\ell}_{1y}+\hat{\ell}_{2y}+\hat{\ell}_{3y}+\cdots+\hat{\ell}_{ny}] \\
&\quad + \ \ \cdots \\
&\quad + [\hat{\ell}_{nx},\ \ \hat{\ell}_{1y}+\hat{\ell}_{2y}+\hat{\ell}_{3y}+\cdots+\hat{\ell}_{ny}]
\end{aligned}
$$

$(\hat{\ell}_{1y}+\hat{\ell}_{2y}+\hat{\ell}_{3y}+\cdots+\hat{\ell}_{ny}$を展開すると）

$$
\begin{aligned}
&= \underbrace{[\hat{\ell}_{1x},\ \ \hat{\ell}_{1y}]}_{=i\hbar\hat{\ell}_{1z}}+\underbrace{[\hat{\ell}_{1x},\ \ \hat{\ell}_{2y}]}_{=0}+\underbrace{[\hat{\ell}_{1x},\ \ \hat{\ell}_{3y}]}_{=0}+\cdots+\underbrace{[\hat{\ell}_{1x},\ \ \hat{\ell}_{ny}]}_{=0} \\
&\quad + \underbrace{[\hat{\ell}_{2x},\ \ \hat{\ell}_{1y}]}_{=0}+\underbrace{[\hat{\ell}_{2x},\ \ \hat{\ell}_{2y}]}_{=i\hbar\hat{\ell}_{2z}}+\underbrace{[\hat{\ell}_{2x},\ \ \hat{\ell}_{3y}]}_{=0}+\cdots+\underbrace{[\hat{\ell}_{2x},\ \ \hat{\ell}_{ny}]}_{=0} \\
&\quad + \underbrace{[\hat{\ell}_{3x},\ \ \hat{\ell}_{1y}]}_{=0}+\underbrace{[\hat{\ell}_{3x},\ \ \hat{\ell}_{2y}]}_{=0}+\underbrace{[\hat{\ell}_{3x},\ \ \hat{\ell}_{3y}]}_{=i\hbar\hat{\ell}_{3z}}+\cdots+\underbrace{[\hat{\ell}_{3x},\ \ \hat{\ell}_{ny}]}_{=0} \\
&\quad + \ \ \cdots \\
&\quad + \underbrace{[\hat{\ell}_{nx},\ \ \hat{\ell}_{1y}]}_{=0}+\underbrace{[\hat{\ell}_{nx},\ \ \hat{\ell}_{2y}]}_{=0}+\underbrace{[\hat{\ell}_{nx},\ \ \hat{\ell}_{3y}]}_{=0}+\cdots+\underbrace{[\hat{\ell}_{nx},\ \ \hat{\ell}_{ny}]}_{=i\hbar\hat{\ell}_{nz}}
\end{aligned}
$$

$[\hat{\ell}_{ix},\ \ \hat{\ell}_{jy}]=i\hbar\hat{\ell}_{iz}\delta_{ij}$を用いた

$$
= i\hbar\hat{\ell}_{1z}+i\hbar\hat{\ell}_{2z}+i\hbar\hat{\ell}_{3z}+\cdots+i\hbar\hat{\ell}_{nz}=i\hbar\hat{L}_z
$$

$[\hat{\ell}_{ix},\ \ \hat{\ell}_{jy}]=i\hbar\hat{\ell}_{iz}\delta_{ij}$ は，異なる粒子（$i\neq j$）の角運動量は可換であるということを意味する。というのも，ある粒子の角運動量を測定することによって，他の粒子の角運動量が乱されることはないから，粒子 i の角運動量を測定した後に粒子 j の角運動量を測定しても，これを逆順で測定しても結果は同じである（という，ほぼあたり前のことを数式で表したに過ぎない）。

角運動量を扱う場合，**Levi·Civita**（レビチビタ）[2] **の記号**（きごう）とよばれる数学の記号を使うと都合が良い場合がある。Levi·Civita の記号 ϵ_{ijk} とは，

$$\epsilon_{ijk} \quad = \quad \begin{cases} 1 & (i,j,k) \text{ が } (1,2,3) \text{ の偶置換のとき} \\ -1 & (i,j,k) \text{ が } (1,2,3) \text{ の奇置換のとき} \\ 0 & \text{それ以外のとき} \end{cases} \tag{14}$$

で定義される。場合分けに，**偶置換**（ぐうちかん）と**奇置換**（きちかん）という言葉がでてくるが，砕いて言えば次のようになる。

- 添え字 が $(1,2,3)$ の順であるときは 1 とする（これが基本）。
- この順をどれか一対だけ入れ替えた $(1,3,2)$ とか $(2,1,3)$ とか $(3,2,1)$ の場合には -1 とする。
- さらにもう一度並びを入れ替え $(2,3,1)$ とか $(3,1,2)$ にすると 1 とする。
- それ以外，例えば $(1,1,2)$ のように添え字に同じ数字が入る場合にはすべて 0 とする。

これを使えば，合成角運動量の交換関係が全て，

$$\left[\hat{L}_i,\ \hat{L}_j\right] = i\hbar \sum_{k=1}^{3} \epsilon_{ijk} \hat{L}_k \tag{15}$$

で表される。ただし，$x \to 1$，$y \to 2$，$z \to 3$ の置き換えをした。すなわち，

$$\left[\hat{L}_1,\ \hat{L}_2\right] \quad = \quad i\hbar\ \hat{L}_3 \qquad \left[\hat{L}_2,\ \hat{L}_3\right] = i\hbar\ \hat{L}_1 \qquad \left[\hat{L}_3,\ \hat{L}_1\right] = i\hbar\ \hat{L}_2 \tag{16}$$

である。(15) 式を展開すると，

$$\begin{aligned} \left[\hat{L}_i,\ \hat{L}_j\right] &= i\hbar \sum_{k=1}^{3} \epsilon_{ijk} \hat{L}_k \\ &= i\hbar \left(\epsilon_{ij1}\hat{L}_1 + \epsilon_{ij2}\hat{L}_2 + \epsilon_{ij3}\hat{L}_3 \right) \end{aligned} \tag{17}$$

であるから，$i = 1, j = 2$ の場合，

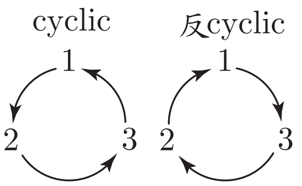
$$\begin{aligned} \left[\hat{L}_1,\ \hat{L}_2\right] &= i\hbar \Big(\underbrace{\epsilon_{121}}_{=0} \hat{L}_1 + \underbrace{\epsilon_{122}}_{=0} \hat{L}_2 + \underbrace{\epsilon_{123}}_{=1} \hat{L}_3 \Big) \\ &= i\hbar \hat{L}_3 \end{aligned} \tag{18}$$

となる。これは (16) 式のはじめの式である。また，$i = 1, j = 3$ とすると，

$$\begin{aligned} \left[\hat{L}_1,\ \hat{L}_3\right] &= i\hbar \Big(\underbrace{\epsilon_{131}}_{=0} \hat{L}_1 + \underbrace{\epsilon_{132}}_{=-1} \hat{L}_2 + \underbrace{\epsilon_{133}}_{=0} \hat{L}_3 \Big) \\ &= -i\hbar \hat{L}_2 \end{aligned} \tag{19}$$

となる。これは (16) 式の最後の式に相当する（$\left[\hat{A},\ \hat{B}\right] = -\left[\hat{B},\ \hat{A}\right]$ は交換子の定義から自明）。

なお，偶置換をサイクリック，奇置換を反サイクリックという場合もある。理由は，上の箇条書きと下図を見れば明らかだろう。



[2] Tullio Levi-Civita (1873−1941)