

5.5 固有状態の規格化

角運動量の場合と揃えて固有状態を m の最大値 j を用いて $|j, m\rangle$ と表記し直す。

$$\hat{j}^2 |j, m\rangle = j(j+1) |j, m\rangle, \quad \hat{j}_z |j, m\rangle = m |j, m\rangle \quad (198)$$

$\hat{j}_+ |j, m\rangle$ の $\hat{j}_z$ 固有値は $m+1$ であったので、定数 N_+ を用いて

$$\hat{j}_+ |j, m\rangle = N_+ |j, m+1\rangle \quad (199)$$

と書ける。 $|j, m\rangle$ 、 $|j, m+1\rangle$ とともに規格化されているとして N_+ を求める。

$\hat{j}_+^\dagger = \hat{j}_-$ と式 (187) から

$$\hat{j}^2 - \hat{j}_z - \hat{j}_z^2 = \hat{j}_- \hat{j}_+ = \hat{j}_+^\dagger \hat{j}_+ \quad (200)$$

であるので、式 (199) の左辺のノルムの2乗は

$$\begin{aligned} \|\hat{j}_+ |j, m\rangle\|^2 &= \langle j, m | \hat{j}_+^\dagger \hat{j}_+ |j, m\rangle \\ &= \langle j, m | \hat{j}^2 - \hat{j}_z - \hat{j}_z^2 |j, m\rangle \\ &= \langle j, m | [j(j+1) - m - m^2] |j, m\rangle \\ &= j(j+1) - m - m^2 \quad \leftarrow \text{状態 } |j, m\rangle \text{ の規格化} \end{aligned}$$

一方右辺は

$$\|N_+ |j, m+1\rangle\|^2 = N_+^* \langle j, m+1 | N_+ |j, m+1\rangle = |N_+|^2 \quad \leftarrow \text{状態 } |j, m+1\rangle \text{ の規格化}$$

よって $|N_+|^2 = j(j+1) - m - m^2$ となるが、正符号を選んで (Condon-Shortley の規約)

$$\begin{aligned} N_+ &= \sqrt{j^2 - m^2 + j - m} = \sqrt{(j-m)(j+m) + j - m} = \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \\ \hat{j}_+ |j, m\rangle &= \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |j, m+1\rangle \end{aligned} \quad (201)$$

同様に

$$\hat{j}_- |j, m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle \quad (202)$$

ここまでのまとめ

交換関係

$$[\hat{j}_a, \hat{j}_b] = i\epsilon_{abc} \hat{j}_c \quad (203)$$

を満たす演算子 $\hat{j}_a$ ($a = 1, 2, 3$) は $\hat{j}^2$ と $\hat{j}_z$ の同時固有状態 $|j, m\rangle$ を作ることができ、

$$\hat{j}^2 |j, m\rangle = j(j+1) |j, m\rangle, \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \quad (204)$$

$$\hat{j}_z |j, m\rangle = m |j, m\rangle, \quad m = j, j-1, \dots, -j \quad (205)$$

j が半整数の場合、 $m = 0$ は含まれないことに注意 ($j = \frac{1}{2}$ のとき、 $m = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$)。微分方程式で考えた角運動量は j が整数の場合のみ ($Y_\ell^m(\theta, \phi) \propto e^{im\phi}$)。 $\hat{j}$ は一般化された角運動量演算子で j が半整数の場合はスピン角運動量に対応する (補足 A.17 の説明も参照)。

5.6 スピン

スピン角運動量

- 量子力学的な粒子（電子、核子、原子など）が持つ**固有の角運動量**
- 粒子の回転運動による角運動量（**軌道角運動量**と呼ぶ）と別に存在する**内部自由度**で、軌道角運動量 $\ell = 0$ の（空間的に回転していない）状態でも有限の値を持つ
- 複合粒子（原子 = 電子 + 原子核）だけでなく、素粒子（電子など）もスピンを持つ
- イメージは“自転”（軌道角運動量が公転）、ただし古典的な対応物は**無い**
- 大きさは $\hbar$ の非負整数または正の半整数倍 $(0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots)$

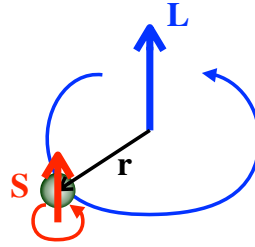


図 8: 軌道角運動量 L とスピン S の模式図。

5.7 スピン演算子

スピンに対応する演算子（無次元）を軌道角運動量と同様に導入

$$\hat{\mathbf{s}} = (\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z) \quad (206)$$

固有状態 $|s, m_s\rangle$ に対する作用

$$\hat{s}^2 |s, m_s\rangle = s(s+1) |s, m_s\rangle, \quad \hat{s}_z |s, m_s\rangle = m_s |s, m_s\rangle \quad (207)$$

交換関係などは $\hat{\mathbf{j}}$ と同じ： $([\hat{s}_a, \hat{s}_b] = i\epsilon_{abc}\hat{s}_c)$

$$[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = i\hat{s}_z, \quad [\hat{s}_y, \hat{s}_z] = i\hat{s}_x, \quad [\hat{s}_z, \hat{s}_x] = i\hat{s}_y \quad (208)$$

$$\hat{s}_+ = \hat{s}_x + i\hat{s}_y, \quad \hat{s}_- = \hat{s}_x - i\hat{s}_y, \quad \hat{s}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2 \quad (209)$$

$$\hat{s}_+ |s, m_s\rangle = \sqrt{(s - m_s)(s + m_s + 1)} |s, m_s + 1\rangle \quad (210)$$

$$\hat{s}_- |s, m_s\rangle = \sqrt{(s + m_s)(s - m_s + 1)} |s, m_s - 1\rangle \quad (211)$$

スピン演算子 $\hat{\mathbf{s}}$ は座標、運動量、軌道角運動量と交換する

$$[\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{s}}] = 0, \quad [\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{s}}] = 0, \quad [\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{s}}] = 0 \quad (212)$$

スピンを持つ粒子（電子など）は、軌道角運動量（大きさ ℓ 、 z 成分 m ）とスピン（大きさ s 、 z 成分 m_s ）を同時に持つ

$$|\psi\rangle = |\ell, m; s, m_s\rangle$$

角運動量の次元を持ったスピン演算子を $\hat{S} = \hbar \hat{s}$ とすると、軌道とスピンを合わせた全角運動量演算子 $\hat{J}$ は（角運動量の合成）

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S} \quad (213)$$

5.8 スピン 1/2 の固有状態

スピン $\frac{1}{2}$ （スピンの大きさ $s = \frac{1}{2}$ ）の状態を考える。 m_s は $+\frac{1}{2}$ または $-\frac{1}{2}$ 。

m_s はベクトルの z 方向成分なので、 $m_s = +1/2$ をスピン上向き $|\uparrow\rangle$ 、 $-1/2$ を下向き $|\downarrow\rangle$ と呼ぶ

$$|\uparrow\rangle = |s = \frac{1}{2}, m_s = +\frac{1}{2}\rangle \quad (214)$$

$$|\downarrow\rangle = |s = \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2}\rangle \quad (215)$$

式 (207) より、

$$\hat{s}^2 |\uparrow\rangle = \hat{s}^2 |s = \frac{1}{2}, m_s = +\frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) |s = \frac{1}{2}, m_s = +\frac{1}{2}\rangle = \frac{3}{4} |\uparrow\rangle$$

$$\hat{s}^2 |\downarrow\rangle = \frac{3}{4} |\downarrow\rangle$$

$$\hat{s}_z |\uparrow\rangle = \hat{s}_z |s = \frac{1}{2}, m_s = +\frac{1}{2}\rangle = +\frac{1}{2} |s = \frac{1}{2}, m_s = +\frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{2} |\uparrow\rangle$$

$$\hat{s}_z |\downarrow\rangle = -\frac{1}{2} |\downarrow\rangle$$

つまり $\hat{s}^2$ の固有値はどちらも $\frac{3}{4}$ 、 $\hat{s}_z$ の固有値は $\pm\frac{1}{2}$ 。式 (210) より

$$\hat{s}_+ |\uparrow\rangle = \hat{s}_+ |s = \frac{1}{2}, m_s = +\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{(\frac{1}{2} - \frac{1}{2})(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} + 1)} |s = \frac{1}{2}, m_s = +\frac{3}{2}\rangle = 0$$

$$\hat{s}_- |\uparrow\rangle = \hat{s}_- |s = \frac{1}{2}, m_s = +\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{(\frac{1}{2} + \frac{1}{2})(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 1)} |s = \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2}\rangle = |\downarrow\rangle$$

$$\hat{s}_+ |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$$

$$\hat{s}_- |\downarrow\rangle = 0$$

s が半整数の状態は球面調和関数では記述できないが、**行列**を用いて記述できる。

スピン $\frac{1}{2}$ 状態は 2 成分複素ベクトル（スピノルと呼ばれる）で表現：

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (216)$$

演算子は 2×2 行列で表現：

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (217)$$

$$\hat{s}_+ = \hat{s}_x + i\hat{s}_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + i\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 - (-1) \\ 1 + 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (218)$$

$$\hat{s}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (219)$$

$$\hat{s}^2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (220)$$

演算子の固有値

$$\hat{s}_z |\uparrow\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} |\uparrow\rangle$$

$$\hat{s}^2 |\uparrow\rangle = \frac{3}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} |\uparrow\rangle$$

$$\hat{s}_- |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle$$

パウリ行列 σ ：エルミートでトレースが 0 の行列

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (221)$$

$$\sigma_i^\dagger = \sigma_i, \quad \text{Tr } \sigma_i = 0 \quad (222)$$

パウリ行列の交換関係、反交換関係は（因子 2 に注意）

$$[\sigma_a, \sigma_b] = 2i\epsilon_{abc}\sigma_c, \quad \{\sigma_a, \sigma_b\} = \sigma_a\sigma_b + \sigma_b\sigma_a = 2\delta_{ab} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (223)$$

これより

$$\hat{s} = \frac{1}{2} \sigma \quad (224)$$

がスピン演算子の交換関係 $[\hat{s}_a, \hat{s}_b] = i\epsilon_{abc}\hat{s}_c$ を満たすことがわかる。

5.9 一般のスピン $1/2$ 状態

状態 $|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ はスピン $\frac{1}{2}$ 状態の完全系を張るので、任意の方向を向いたスピン状態は複素数 $c_\uparrow, c_\downarrow$ を用いた線形結合で

$$|\sigma\rangle = c_\uparrow |\uparrow\rangle + c_\downarrow |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} c_\uparrow \\ c_\downarrow \end{pmatrix}, \quad c_\uparrow, c_\downarrow \in \mathbb{C} \quad (225)$$

となる。状態の規格化より

$$\begin{aligned} 1 = \langle \sigma | \sigma \rangle &= \left(c_{\uparrow}^* \langle \uparrow | + c_{\downarrow}^* \langle \downarrow | \right) \left(c_{\uparrow} | \uparrow \rangle + c_{\downarrow} | \downarrow \rangle \right) = |c_{\uparrow}|^2 \langle \uparrow | \uparrow \rangle + |c_{\downarrow}|^2 \langle \downarrow | \downarrow \rangle \\ &= |c_{\uparrow}|^2 + |c_{\downarrow}|^2 \end{aligned}$$

スピンの向きを極座標で表記すると $|\uparrow\rangle$ は $\theta = 0$ 、 $|\downarrow\rangle$ は $\theta = \pi$ の状態である（どちらも ϕ は任意）。一般の θ, ϕ 方向を向いた状態は

$$|\sigma\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |\uparrow\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix} \quad (226)$$

$$\langle \sigma | = |\sigma\rangle^\dagger = \cos \frac{\theta}{2} \langle \uparrow | + \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \langle \downarrow | = \left(\cos \frac{\theta}{2} \quad \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \right) \quad (227)$$

と書ける。実際に、スピン演算子の期待値を計算すると

$$\begin{aligned} \langle \sigma | \hat{s}_x | \sigma \rangle &= \left(\cos \frac{\theta}{2} \quad \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \right) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \left(\cos \frac{\theta}{2} \quad \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \right) \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{e^{-i\phi} + e^{i\phi}}{2} \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} \\ &= \frac{1}{2} \sin \theta \cos \phi \\ \langle \sigma | \hat{s}_y | \sigma \rangle &= \left(\cos \frac{\theta}{2} \quad \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \right) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix} \\ &= \frac{i}{2} \left(\cos \frac{\theta}{2} \quad \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \right) \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{e^{i\phi} - e^{-i\phi}}{2i} \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} \\ &= \frac{1}{2} \sin \theta \sin \phi \\ \langle \sigma | \hat{s}_z | \sigma \rangle &= \left(\cos \frac{\theta}{2} \quad \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \right) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \left(\cos \frac{\theta}{2} \quad \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \right) \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ -\sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \left(\cos^2 \frac{\theta}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2} \right) \\ &= \frac{1}{2} \cos \theta \end{aligned}$$

各成分は大きさ $r = \frac{1}{2}$ で角度 θ, ϕ の位置ベクトル $\mathbf{r} = (1/2, \theta, \phi)$ の極座標表示になっている（図 2 参照）。