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。

$$\hat{\boldsymbol{j}}^2|\,j,m\,\rangle = j(j+1)|\,j,m\,\rangle, \quad \hat{j}_z|\,j,m\,\rangle = m|\,j,m\,\rangle \tag{203}$$

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

$$\hat{j}_+|\,j,m\,\rangle = N_+|\,j,m+1\,\rangle \tag{204}$$

と書ける。$|\,j,m\,\rangle$、$|\,j,m+1\,\rangle$ 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 (192) から

$$\hat{\boldsymbol{j}}^2 - \hat{j}_z - \hat{j}_z^2 = \hat{j}_-\hat{j}_+ = \hat{j}_+^\dagger\hat{j}_+ \tag{205}$$

であるので、式 (204) の左辺のノルムの 2 乗は

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

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）

$$N_+ = \sqrt{j^2-m^2+j-m} = \sqrt{(j-m)(j+m)+j-m} = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}$$

$$\hat{j}_+|\,j,m\,\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}|\,j,m+1\,\rangle \tag{206}$$

同様に

$$\hat{j}_-|\,j,m\,\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}|\,j,m-1\,\rangle \tag{207}$$

ここまでのまとめ

交換関係

$$[\hat{j}_i, \hat{j}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{j}_k \tag{208}$$

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

$$\hat{\boldsymbol{j}}^2|\,j,m\,\rangle = j(j+1)|\,j,m\,\rangle, \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots \tag{209}$$

$$\hat{j}_z|\,j,m\,\rangle = m|\,j,m\,\rangle, \quad m = j, j-1, \cdots, -j \tag{210}$$

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（HP の補足の説明も参照）。

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（$0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots$）

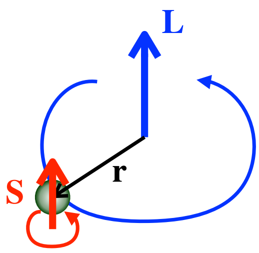

図 6: 軌道角運動量 $\boldsymbol{L}$ とスピン $\boldsymbol{S}$ の模式図。

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

$$\hat{\boldsymbol{s}} = (\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z) \tag{211}$$

固有状態 $|\, s, m_s \,\rangle$ に対する作用

$$\hat{\boldsymbol{s}}^2 |\, s, m_s \,\rangle = s(s+1) |\, s, m_s \,\rangle, \quad \hat{s}_z |\, s, m_s \,\rangle = m_s |\, s, m_s \,\rangle \tag{212}$$

交換関係などは $\hat{\boldsymbol{j}}$ と同じ：($[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{s}_k$)

$$[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = i\hat{s}_z, \quad [\hat{s}_y, \hat{s}_z] = i\hat{s}_x, \quad [\hat{s}_z, \hat{s}_x] = i\hat{s}_y \tag{213}$$

$$\hat{s}_+ = \hat{s}_x + i\hat{s}_y, \quad \hat{s}_- = \hat{s}_x - i\hat{s}_y, \quad \hat{\boldsymbol{s}}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2 \tag{214}$$

$$\hat{s}_+ |\, s, m_s \,\rangle = \sqrt{(s - m_s)(s + m_s + 1)} |\, s, m_s + 1 \,\rangle \tag{215}$$

$$\hat{s}_- |\, s, m_s \,\rangle = \sqrt{(s + m_s)(s - m_s + 1)} |\, s, m_s - 1 \,\rangle \tag{216}$$

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

$$[\hat{\boldsymbol{r}}, \hat{\boldsymbol{s}}] = 0, \quad [\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{s}}] = 0, \quad [\hat{\boldsymbol{L}}, \hat{\boldsymbol{s}}] = 0 \tag{217}$$

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 $\hat{\boldsymbol{S}} = \hbar\hat{\boldsymbol{s}}$ とすると、軌道とスピンを合わせた全角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{J}}$ は（角運動量の合成）

$$\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{L}} + \hat{\boldsymbol{S}} \tag{218}$$

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

$$|\uparrow\rangle = |\,s = \tfrac{1}{2}, m_s = +\tfrac{1}{2}\,\rangle \tag{219}$$
$$|\downarrow\rangle = |\,s = \tfrac{1}{2}, m_s = -\tfrac{1}{2}\,\rangle \tag{220}$$

式 (212) より、

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

つまり $\hat{\boldsymbol{s}}^2$ 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 (215) より

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

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：

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{221}$$

演算子は 2×2 行列で表現：

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{222}$$

$$\hat{s}_+ = \hat{s}_x + i\hat{s}_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + i\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1-(-1) \\ 1-1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{223}$$

$$\hat{s}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{224}$$

$$\hat{\boldsymbol{s}}^2 = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{225}$$

演算子の固有値

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

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

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

パウリ行列 $\boldsymbol{\sigma}$：エルミートでトレースが 0 の行列

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{226}$$

$$\sigma_i^\dagger = \sigma_i, \quad \mathrm{Tr}\ \sigma_i = 0 \tag{227}$$

パウリ行列の交換関係、反交換関係は（因子 2 に注意）

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k, \quad \{\sigma_i, \sigma_j\} = \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{228}$$

これより

$$\hat{\boldsymbol{s}} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} \tag{229}$$

がスピン演算子の交換関係 $[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{s}_k$ 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 $c_\uparrow, c_\downarrow$ を用いた線型結合で

$$|\sigma\rangle = c_\uparrow|\uparrow\rangle + c_\downarrow|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} c_\uparrow \\ c_\downarrow \end{pmatrix}, \quad c_\uparrow, c_\downarrow \in \mathbb{C} \tag{230}$$

となる。状態の規格化より

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

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

$$
|\,\sigma\,\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi}|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi} \end{pmatrix} \tag{231}
$$

$$
\langle\,\sigma\,| = |\,\sigma\,\rangle^\dagger = \cos\frac{\theta}{2}\langle\uparrow| + \sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi}\langle\downarrow| = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2}e^{-i\phi} \end{pmatrix} \tag{232}
$$

と書ける。実際に、スピン演算子の期待値を計算すると

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

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