3 角運動量とスピン

角運動量演算子の交換関係

- 軌道運動による角運動量の演算子は $\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{x}} \times \hat{\boldsymbol{p}}$ で定義され、以下の交換関係を持つ。

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y. \tag{3.1}$$

繰り返しの添え字については、$1, 2, 3$ (x, y, z) で和を取ることを了解して、ϵ_{abc} を用いれば、

$$\hat{L}_a = \epsilon_{abc}\hat{x}_b\hat{p}_c, \qquad [\hat{L}_a, \hat{L}_b] = i\hbar\epsilon_{abc}\hat{L}_c. \tag{3.2}$$

- $\hat{\boldsymbol{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ は各成分と交換する。

$$[\hat{\boldsymbol{L}}^2, L_x] = 0, \qquad [\hat{\boldsymbol{L}}^2, L_y] = 0, \qquad [\hat{\boldsymbol{L}}^2, L_z] = 0. \tag{3.3}$$

- $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ と $\hat{L}_z$ は共通の固有状態を持つ（同様に $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ と $\hat{L}_x$ の組と $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ と $\hat{L}_y$ の組も共通の固有状態を持つが、$\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ は交換しないので共通の固有状態は持たない)。

同時対角化

- 二つの演算子 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の交換関係が $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ のとき、$\hat{A}$ と $\hat{B}$ は**交換可能（可換）**であると言う。
- 演算子 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ が可換である場合は、$\hat{A}$ の固有状態であり、同時に $\hat{B}$ の固有状態でもある状態を作ることができる。これを**同時対角化可能**と言う。
- 演算子 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ が可換な場合（つまり、同時対角化可能な場合)、$\hat{A}$ と $\hat{B}$ に共通な固有状態 $|\psi_n\rangle$ があり、それぞれの固有値を a_n、b_n とすると、$\hat{A}$ の期待値 $\langle\psi_n|\hat{A}|\psi_n\rangle$ は固有値 a_n に確定し、$\hat{B}$ の期待値 $\langle\psi_n|\hat{B}|\psi_n\rangle$ は固有値 b_n に確定する。つまり、可換な場合は、$\hat{A}$ と $\hat{B}$ の物理量が同時に確定する。

角運動量代数

- **定義**：$\hat{\boldsymbol{j}}$ を無次元の演算子として、以下の交換関係が成り立つとする。

$$[\hat{j}_a, \hat{j}_b] = i\epsilon_{abc}\hat{j}_c \tag{3.4}$$

- $[\hat{\boldsymbol{j}}^2, \hat{j}_z] = 0$ より $\hat{\boldsymbol{j}}^2$, $\hat{j}_z$ は**同時固有状態**を持つ。
- **昇降演算子**: **上昇演算子** $\hat{j}_+$ と**下降演算子** $\hat{j}_-$ は以下のように定義される。 $(j_+ - j_-)\cdot\frac{1}{2i} = \hat{j}_y$

$$\hat{j}_+ = \hat{j}_x + i\hat{j}_y, \qquad \hat{j}_- = \hat{j}_x - i\hat{j}_y \tag{3.5}$$

$j_x = \frac{1}{2}(j_+ + j_-).$ $j_y = \frac{i}{2}(j_- - j_+)$

- 昇降演算子の交換関係:

$$[\hat{j}_+, \hat{j}_-] = 2\hat{j}_z, \qquad [\hat{j}_z, \hat{j}_+] = \hat{j}_+, \qquad [\hat{j}_z, \hat{j}_-] = -\hat{j}_-, \qquad [\hat{\boldsymbol{j}}^2, \hat{j}_+] = [\hat{\boldsymbol{j}}^2, \hat{j}_-] = 0 \tag{3.6}$$

- 昇降演算子と $\hat{j}_z$ を用いて、$\hat{\boldsymbol{j}}^2$ は 3 通りに書ける。$[\hat{j}_+, \hat{j}_-] = 2\hat{j}_z$ を用いれば等価性が示せる。

$$\hat{\boldsymbol{j}}^2 = \underbrace{\frac{1}{2}(\hat{j}_+\hat{j}_- + \hat{j}_-\hat{j}_+)}_{} + \hat{j}_z^2 = \hat{j}_-\hat{j}_+ + \hat{j}_z + \hat{j}_z^2 = \hat{j}_+\hat{j}_- - \hat{j}_z + \hat{j}_z^2 \tag{3.7}$$

$[j_z, j_x + i j_y] = [j_z, j_x] + i[j_z, j_y]$

$= i j_y + i\cdot(-i) j_x = j_+$

$j^2 = j_x^2 + j_y^2 + j_z^2 = \frac{1}{4}(\cancel{j_+^2} + j_-^2 + j_+j_- + j_-j_+) - \frac{1}{4}(\cancel{j_-^2} + \cancel{j_+^2} - j_-j_+ - j_+j_-)$

$=$

固有状態の構築

- $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ と $\hat{j}_z$ の固有値を λ, m、同時固有状態を $|\lambda, m\rangle$ と書く。$\hat{\boldsymbol{j}}^2|\lambda, m\rangle = \lambda|\lambda, m\rangle$, $\hat{j}_z|\lambda, m\rangle = m|\lambda, m\rangle$。
- $\hat{j}_\pm|\lambda, m\rangle$ は $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有状態であり固有値は λ。つまり、$\hat{j}_\pm$ を演算しても $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有値は変化しない。
  (証明)$[\hat{\boldsymbol{j}}^2, \hat{j}_\pm] = 0$ より、$\hat{\boldsymbol{j}}^2(\hat{j}_\pm|\lambda, m\rangle) = \hat{j}_\pm\hat{\boldsymbol{j}}^2|\lambda, m\rangle = \lambda(\hat{j}_\pm|\lambda, m\rangle)$。
- $\hat{j}_x$, $\hat{j}_y$, $\hat{j}_z$ のどの演算でも λ の異なる状態へ移ることはない(既約表現は $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有値で分類される)。
- $\hat{j}_\pm|\lambda, m\rangle$ は $\hat{j}_z$ の固有状態であり固有値は $m \pm 1$(複号同順)。つまり、上昇演算子 $\hat{j}_+$ を演算させると $\hat{j}_z$ の固有値は一つ上昇し、下降演算子 $\hat{j}_-$ を演算させると $\hat{j}_z$ の固有値が一つ下降する。
  (証明)$[\hat{j}_z, \hat{j}_\pm] = \pm\hat{j}_\pm$ より、$\hat{j}_z(\hat{j}_\pm|\lambda, m\rangle) = (\hat{j}_\pm\hat{j}_z \pm \hat{j}_\pm)|\lambda, m\rangle = (m \pm 1)(\hat{j}_\pm|\lambda, m\rangle)$
- $\hat{j}_z$ の固有値 m には**上限と下限がある**。また、$\lambda \geq 0$ である。
  (証明)$\langle\lambda, m|\hat{\boldsymbol{j}}^2|\lambda, m\rangle = \lambda$ に対して、$\hat{\boldsymbol{j}}^2 = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2$ であるので、$\lambda = \langle\lambda, m|\hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2|\lambda, m\rangle + m^2$。
  $\hat{j}_x$ と $\hat{j}_y$ はエルミート演算子なので、$\langle\lambda, m|\hat{j}_x^2|\lambda, m\rangle \geq 0$, $\langle\lambda, m|\hat{j}_y^2|\lambda, m\rangle \geq 0$ であり、$\lambda \geq m^2 \geq 0$。
  固有値が正である。
- $\hat{j}_z$ の固有値 m の最大値を j とすると、$\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有値 λ は $\lambda = j(j+1)$ と書かれる。
  (証明)j は $\hat{j}_z$ の最大固有値なので $|\lambda, j\rangle$ に $\hat{j}_+$ を作用させても状態を作れない、つまり、$\hat{j}_+|\lambda, j\rangle = 0$。
  $j^2|\lambda, j\rangle =$
  この状態に $\hat{\boldsymbol{j}}^2 = \hat{j}_-\hat{j}_+ + \hat{j}_z^2 + \hat{j}_z$ を作用させると $\lambda|\lambda, j\rangle = (j^2 + j)|\lambda, j\rangle$ より、$\lambda = j(j+1)$ を得る。
- $\hat{j}_z$ の固有値 m には下限が存在する。最大固有値の状態 $|\lambda, j\rangle$ に下降演算子 $\hat{j}_-$ を n 回作用させて、最小固有値の状態に来たとする。この最小固有値の状態 $|\lambda, j-n\rangle$ にさらに $\hat{j}_-$ を作用させても状態を作れない、つまり、$\hat{j}_-|\lambda, j-n\rangle = 0$。この状態 $|\lambda, j-n\rangle$ に $\hat{\boldsymbol{j}}^2 = \hat{j}_+\hat{j}_- + \hat{j}_z^2 - \hat{j}_z$ を作用させると $\lambda|\lambda, j-n\rangle = ((j-n)^2 + (j-n))|\lambda, j-n\rangle$ より、$\lambda = (j-n)(j-n-1)$ を得る。
- $\lambda = j(j+1)$ と $\lambda = (j-n)(j-n-1)$ より、λ を消去すると $2j = n$ を得る。n は $\hat{j}_-$ を演算させる回数だったので非負の整数である。このことにより、j は**非負の整数または半整数**であることがわかる。
- $\hat{j}_z$ の固有値 m の最大値は j で最小値は $j - \overset{2j}{n} = -j$ であり、m は**整数だけでなく半整数も許される**。
  (例)$j = 1$ のときは $m = +1, 0, -1$ と整数で、$\boxed{j = \frac{3}{2} \text{ のときは } m = +\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2} \text{ と半整数。}}$
- 以上より、j を非負の整数または半整数として、$\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有値は $j(j+1)$ であり、それぞれの j に対して、$\hat{j}_z$ の固有値は $m = -j, -j+1, \cdots, j-1, j$ である。固有状態を j と m でラベルすると

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

- 上昇演算子 $\hat{j}_+$ と下降演算子 $\hat{j}_-$ は $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ の固有値は変えず、$\hat{j}_z$ の固有値を $\hat{j}_+$ は 1 上げ、$\hat{j}_-$ は 1 下げる。

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

係数は、$\hat{j}_+|j, m\rangle = c|j, m+1\rangle$ に対して、$\langle j, m|(\hat{j}_+)^\dagger\hat{j}_+|j, m\rangle = |c|^2$ を $(\hat{j}_+)^\dagger\hat{j}_+ = \hat{j}_-\hat{j}_+ = \hat{\boldsymbol{j}}^2 - \hat{j}_z^2 - \hat{j}_z$ を用いて計算することで決定できる。

α [illegible]　　$j^2 + \cancel{mj} + j - \cancel{mj} - m^2 - m$　　$j(j+1) - m^2 - m$

$j^2 + j - m^2 - m$ OK

スピン量子数の存在

- 軌道運動からの角運動量では波動関数の一価性より $\hat{\ell}_z$ の固有値は整数値しか取れないが、一般化された角運動量では $\hat{j}_z$ の固有値として半整数も許された。これは、粒子状態は古典力学のように座標と運動量(位相空間の位置)だけ決められるのではなく、量子力学的粒子には**スピン**という内部自由度があることを示唆し、 この内部自由度が作る角運動量によって $\hat{j}_z$ の固有値が半整数となり得る。
- 全角運動量 $\hat{\boldsymbol{J}}$ は、軌道角運動量 $\hat{\boldsymbol{L}}$ とスピン角運動量 $\hat{\boldsymbol{S}}$ の和で与えられる。

$$\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{L}} + \hat{\boldsymbol{S}} \tag{3.8}$$

スピン

- 量子力学的粒子には**スピン**という内部自由度が存在する。この内部自由度が作る角運動量によって、全角運動量 $\hat{J}_z$ の固有値が半整数となり得る。
- 軌道角運動量には古典力学での対応物があるが、スピンには対応する古典量は存在しない。また、スピンは内部自由度であるので、スピン波動関数は、軌道角運動量の球面調和関数 $Y_\ell^m(\theta,\phi)$ のように具体的な関数形は存在せず、抽象的なベクトル空間上の元で波動関数を考える必要がある。
- スピンを持つ粒子に対しては、状態空間の完全系としては、座標とスピンで指定された状態ベクトル $|\boldsymbol{r}, s_z\rangle$ の形をしたものが取れる。$\hat{\boldsymbol{r}}$ や $\hat{\boldsymbol{p}}$ は第一変数 $\boldsymbol{r}$ に作用し、$\hat{\boldsymbol{s}}$ は第二変数 s_z に作用する。

スピン演算子

- スピンは座標、運動量とは独立であるので、スピン角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{S}}$ は、座標 $\hat{\boldsymbol{x}}$、運動量 $\hat{\boldsymbol{p}}$、角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{L}}$ と交換する。
$$[\hat{x}_a, \hat{S}_b] = 0, \qquad [\hat{p}_a, \hat{S}_b] = 0, \qquad [\hat{L}_a, \hat{S}_b] = 0 \tag{3.9}$$
- 無次元化されたスピン角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{s}}$ は、角運動量演算子と同様に以下の交換関係を満たす。
$$[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = i\hat{s}_z, \qquad [\hat{s}_y, \hat{s}_z] = i\hat{s}_x, \qquad [\hat{s}_z, \hat{s}_x] = i\hat{s}_y \tag{3.10}$$
- スピン演算子の 2 乗 $\hat{\boldsymbol{s}}^2$ や昇降演算子 $\hat{s}_\pm$ を
$$\hat{\boldsymbol{s}}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2, \qquad \hat{s}_\pm = \hat{s}_x \pm i\hat{s}_y \tag{3.11}$$
と定義すれば、全角運動量と同様に次の関係式が成り立つ。
$$[\hat{\boldsymbol{s}}^2, \hat{s}_z] = 0, \qquad [\hat{s}_z, \hat{s}_\pm] = \pm\hat{s}_\pm, \qquad [\hat{s}_+, \hat{s}_-] = 2\hat{s}_z, \qquad [\hat{\boldsymbol{s}}^2, \hat{s}_\pm] = 0 \tag{3.12}$$
$$\hat{\boldsymbol{s}}^2 = \hat{s}_-\hat{s}_+ + \hat{s}_z^2 + \hat{s}_z = \hat{s}_+\hat{s}_- + \hat{s}_z^2 - \hat{s}_z = \frac{1}{2}(\hat{s}_-\hat{s}_+ + \hat{s}_+\hat{s}_-) + \hat{s}_z^2 \tag{3.13}$$
- s を非負の整数または半整数として、$\hat{\boldsymbol{s}}^2$ の固有値は $s(s+1)$ であり、$\hat{s}_z$ の固有値 m_s は $|m_s| \le s$ を満たす整数または半整数である。固有状態は s と m_s で指定することができる。
$$\hat{\boldsymbol{s}}^2|s, m_s\rangle = s(s+1)|s, m_s\rangle, \qquad \hat{s}_z|s, m_s\rangle = m_s|s, m_s\rangle$$
- $\hat{s}_\pm$ は昇降演算子であるので、固有値を一つ上げ下げする。
$$\hat{s}_\pm|s, m_s\rangle = \sqrt{(s \mp m_s)(s \pm m_s + 1)}|s, m_s \pm 1\rangle, \quad \text{（複号同順）} \tag{3.14}$$

行列表示と行列要素

- 線形演算子では、状態空間の基底に対する演算が分かれば、任意の状態に対して演算の規則が分かる。
- n 次元の状態空間に対して正規直交基底を $|1\rangle, |2\rangle, \cdots, |n\rangle$ （$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$） とすると、任意の状態 $|\psi\rangle$ は、複素数 c_k を用いて、$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^n c_k|k\rangle$ と書ける。これに演算子 $\hat{A}$ を作用させても $|k\rangle$ を用いて書ける $\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{k=1}^n c_k\hat{A}|k\rangle = \sum_{k=1}^n c'_k|k\rangle$ 。左から $\langle j|$ を作用させると $\langle j|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{k=1}^n \langle j|\hat{A}|k\rangle c_k = c'$。

- つまり、c' は以下の行列演算で求めることができる。

$$\begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \\ \vdots \\ c'_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle 1|\hat{A}|1\rangle & \langle 1|\hat{A}|2\rangle & \cdots & \langle 1|\hat{A}|n\rangle \\ \langle 2|\hat{A}|1\rangle & \langle 2|\hat{A}|2\rangle & \cdots & \langle 2|\hat{A}|n\rangle \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \langle n|\hat{A}|1\rangle & \langle n|\hat{A}|2\rangle & \cdots & \langle n|\hat{A}|n\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} \tag{3.15}$$

  このように状態空間の基底を用いて、演算子を行列に表すことを**行列表現**（あるいは、行列表示）といい、それぞれの要素 $\langle j|\hat{A}|k\rangle$ のことを**行列要素**と呼ぶ。また、この行列が定義されるベクトル空間を**表現空間**と呼び、ベクトルの次元 n を**表現の次元**と呼ぶ。
- 行列がブロック対角化されるとき**可約な表現**と呼び、可約でない表現を**既約な表現**と呼ぶ。行列は既約表現ごとにブロック対角化されるので、**演算によって異なる既約表現に移ることはない**。

スピン $\frac{1}{2}$

- スピン $s = 1/2$ では、$\hat{s}_z$ の固有状態が 2 つあり、その固有値は $m_s = +1/2$, $m_s = -1/2$ である。
- それぞれを $|\alpha\rangle$ と $|\beta\rangle$ と書くと以下の式を満たす。 $S^2 \to S(S+1)$

$$\hat{s}_z|\alpha\rangle = \frac{1}{2}|\alpha\rangle, \qquad \hat{s}_z|\beta\rangle = -\frac{1}{2}|\beta\rangle, \qquad \hat{\boldsymbol{s}}^2|\alpha\rangle = \frac{3}{4}|\alpha\rangle, \qquad \hat{\boldsymbol{s}}^2|\beta\rangle = \frac{3}{4}|\beta\rangle \tag{3.16}$$

- スピン昇降演算子を用いると、$|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ は互いに入れ替わる。

$$\hat{s}_+|\alpha\rangle = 0, \qquad \hat{s}_+|\beta\rangle = |\alpha\rangle, \qquad \hat{s}_-|\alpha\rangle = |\beta\rangle, \qquad \hat{s}_-|\beta\rangle = 0, \tag{3.17}$$

- $m_s = +1/2$ をもつ状態を z 方向スピン上向きの状態、$m_s = -1/2$ を持つ状態を z 方向スピン下向きの状態と呼ぶこともあり、$|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ と書くこともある。
- $|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |\beta\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ として、演算子を行列で表すと

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{3.18}$$

$$\hat{s}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\boldsymbol{s}}^2 = \frac{3}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{3.19}$$

  スピン演算子 $\hat{s}_a$ はパウリ行列を用いると、$\hat{s}_a = \frac{1}{2}\sigma_a$ と書ける。

パウリ行列

- **定義**： $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
- **性質**：エルミート $\sigma_i^\dagger = \sigma_i$。

$$[\sigma_i, \sigma_j] = \sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k, \qquad \{\sigma_i, \sigma_j\} = \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij}\hat{1}, \qquad \sigma_i\sigma_j = \delta_{ij}\hat{1} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k \tag{3.20}$$

  $\hat{1}$ は 2 行 2 列の単位行列とする。

$$\mathrm{Tr}[\sigma_i] = 0, \qquad \mathrm{Tr}[\sigma_i\sigma_j] = 2\delta_{ij} \tag{3.21}$$

スピン 1/2 状態

- $\hat{s}_z$ の固有状態 $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$ は完全系を張るので、スピン 1/2 を持つ任意の状態 $|\sigma\rangle$ はその線形結合で書ける。（同様に、$\hat{s}_x$ や $\hat{s}_y$ の固有状態を用いて、任意のスピン状態を表すことができる。）

$$|\sigma\rangle = c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle. \tag{3.22}$$

- c_1, c_2 は、スピン状態 $|\sigma\rangle$ 中における $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$ 状態の成分を表し、$c_1 = \langle\alpha|\sigma\rangle$, $c_2 = \langle\beta|\sigma\rangle$ を確率振幅と呼ぶ。確率は確率振幅の 2 乗でなので、$|\sigma\rangle$ 状態の中に $|\alpha\rangle$ 状態を見いだす確率は $|\langle\alpha|\sigma\rangle|^2$ で得られる。
- 固有値 $+1/2, -1/2$ を持つ $\hat{s}_x$ の固有状態をそれぞれ $|\alpha_x\rangle$, $|\beta_x\rangle$ とすると、これらは $\hat{s}_z$ の固有状態では

$$|\alpha_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle + |\beta\rangle), \qquad |\beta_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle - |\beta\rangle). \tag{3.23}$$

  と書ける。$\hat{s}_x$ の固有状態は、z 方向スピン上向きと下向きの線形結合で書け、その成分の大きさはそれぞれ $\frac{1}{\sqrt{2}}$ で等しい。x 方向スピン上向きの状態の中に z 方向スピン上向きを見いだす確率は $\frac{1}{2}$ である。
- $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$ は、$\hat{s}_z$ の固有状態なのでその期待値は固有値と一致する。

$$\langle\alpha|\hat{s}_z|\alpha\rangle = \frac{1}{2}, \qquad \langle\beta|\hat{s}_z|\beta\rangle = -\frac{1}{2} \tag{3.24}$$

- $|\alpha_x\rangle$ と $|\beta_x\rangle$ の $\hat{s}_z$ の期待値はゼロとなる。

$$\langle\alpha_x|\hat{s}_z|\alpha_x\rangle = 0, \qquad \langle\beta_x|\hat{s}_z|\beta_x\rangle = 0 \tag{3.25}$$

  これは、$|\alpha_x\rangle$ と $|\beta_x\rangle$ が同じ大きさで反対符号の固有値を持つ状態が等しい重みで重ね合わせられているので、その平均値はゼロとなるためである。

傾いたスピン状態

- $\hat{s}_z$ の固有状態 $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$ を用いて、$0 \le \theta \le \pi$, $0 \le \delta < 2\pi$ として、

$$|\sigma\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|\alpha\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\delta}|\beta\rangle \tag{3.26}$$

- この状態は大きさ 1/2 のスピンが z 正方向に対して角度 θ だけ傾いている状態に見える。

$$\langle\sigma|\hat{s}_z|\sigma\rangle = \frac{1}{2}\cos\theta, \qquad \langle\sigma|\hat{s}_x|\sigma\rangle = \frac{1}{2}\sin\theta\cos\delta, \qquad \langle\sigma|\hat{s}_y|\sigma\rangle = \frac{1}{2}\sin\theta\sin\delta \tag{3.27}$$

スピン１

- $\hat{\boldsymbol{s}}^2$ の固有値は $1(1+1) = 2$。$\hat{s}_z$ の固有状態は 3 つあり、その固有値は $m_s = +1,\ 0,\ -1$ である。
- 固有値が $+1,\ 0,\ -1$ の $\hat{s}_z$ の固有状態を、それぞれ、$|\mu\rangle$, $|\nu\rangle$, $|\rho\rangle$ と呼ぶと、昇降演算子の演算は

$$\hat{s}_+|\mu\rangle = 0, \qquad \hat{s}_+|\nu\rangle = \sqrt{2}|\mu\rangle, \qquad \hat{s}_+|\rho\rangle = \sqrt{2}|\nu\rangle, \tag{3.28}$$

$$\hat{s}_-|\mu\rangle = \sqrt{2}|\nu\rangle \qquad \hat{s}_-|\nu\rangle = \sqrt{2}|\rho\rangle \qquad \hat{s}_-|\mu\rangle = 0 \tag{3.29}$$

- 基底 $|\mu\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}$, $|\nu\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}$, $|\rho\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$ における行列表示は

$$\hat{s}_z = \begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\0 & 0 & 0\\0 & 0 & -1\end{pmatrix}, \qquad \hat{s}_+ = \begin{pmatrix}0 & \sqrt{2} & 0\\0 & 0 & \sqrt{2}\\0 & 0 & 0\end{pmatrix}, \quad \hat{s}_- = \begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\\sqrt{2} & 0 & 0\\0 & \sqrt{2} & 0\end{pmatrix}, \qquad \hat{\boldsymbol{s}}^2 = \begin{pmatrix}2 & 0 & 0\\0 & 2 & 0\\0 & 0 & 2\end{pmatrix} \tag{3.30}$$

- $\hat{s}_+$ と $\hat{s}_-$ より $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$ を求めると

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2}(\hat{s}_+ + \hat{s}_-) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\1 & 0 & 1\\0 & 1 & 0\end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \frac{1}{2i}(\hat{s}_+ - \hat{s}_-) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & -i & 0\\i & 0 & -i\\0 & i & 0\end{pmatrix} \tag{3.31}$$

- x 方向 $+1$, 0, -1 を持つ状態を、それぞれ、$|\mu_x\rangle$, $|\nu_x\rangle$, $|\rho_x\rangle$ と書くと、$|\mu\rangle$, $|\nu\rangle$, $|\rho\rangle$ を用いて

$$|\mu_x\rangle = \frac{1}{2}|\mu\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\nu\rangle + \frac{1}{2}|\rho\rangle, \qquad |\nu_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\mu\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\rho\rangle, \qquad |\rho_x\rangle = \frac{1}{2}|\mu\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\nu\rangle + \frac{1}{2}|\rho\rangle \tag{3.32}$$

と表される。

角運動量の合成

- 角運動量の合成とは、合成系の角運動量固有状態を部分系の角運動量固有状態で表すことである。
- 2つの角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{j}}_1, \hat{\boldsymbol{j}}_2$ は、それぞれ角運動量代数を満たし、$\hat{\boldsymbol{j}}_1$ と $\hat{\boldsymbol{j}}_2$ は可換である。

$$[\hat{j}_{1,a}, \hat{j}_{1,b}] = i\epsilon_{abc}\hat{j}_{1,c}, \qquad [\hat{j}_{2,a}, \hat{j}_{2,b}] = i\epsilon_{abc}\hat{j}_{2,c}, \qquad [\hat{j}_{1,a}, \hat{j}_{2,b}] = 0. \tag{3.33}$$

- 角運動量の大きさが j_1、j_2 である部分系を考える。それぞれ、$\hat{\boldsymbol{j}}_i^2$ と $\hat{j}_{i,z}$ の同時固有状態を $|j_i, m_i\rangle$ $(i = 1, 2)$ とすると、$2j_i + 1$ 個の状態 $|j_i, j_i\rangle, |j_i, j_i - 1\rangle, \ldots, |j_i, -j_i + 1\rangle, |j_i, -j_i\rangle$ は角運動量状態の基底をなすので、二つの部分系を合わせた状態は、$(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ 個ある $|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle$ の線形結合で表される。
  テンソルの合成
- 合成系の角運動量演算子は、部分系の角運動量演算子の和 $\hat{\boldsymbol{j}} = \hat{\boldsymbol{j}}_1 + \hat{\boldsymbol{j}}_2$ で与えられる。
- $\hat{\boldsymbol{j}}$ も角運動量代数を満たす。昇降演算子 $\hat{j}_\pm = \hat{j}_x \pm i\hat{j}_y$ が定義でき、基本的な交換関係

$$[\hat{j}_a, \hat{j}_b] = i\epsilon_{abc}\hat{j}_c, \quad [\hat{\boldsymbol{j}}^2, \hat{j}_z] = 0, \quad [\hat{j}_z, \hat{j}_\pm] = \pm\hat{j}_\pm, \quad [\hat{j}_+, \hat{j}_-] = 2\hbar\hat{j}_z. \tag{3.34}$$

  （複号同順）を満たし、合成系の固有状態は $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ と $\hat{j}_z$ の同時固有状態 $|j, m\rangle\rangle$ でかける。
- 部分系を合わせた状態は $|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle$ で完全系をなすので、$|j, m\rangle\rangle$ は $|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle$ の線形結合

$$|j, m\rangle\rangle = \sum_{m_1, m_2} C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2} |j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle, \tag{3.35}$$

  でかける。その係数 $C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2}$ は、クレブシュ・ゴルダン（Clebsch-Gordan）係数と呼ばれる。
- $\hat{j}_z = \hat{j}_{1,z} + \hat{j}_{2,z}$ とかけるので、全角運動量の z 成分は $m = m_1 + m_2$ と書ける。
- **状態の構成方法**：最大の m は $j_1 + j_2$ であり、この状態の角運動量の大きさは $j_1 + j_2$ となるので、$|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle\rangle = |j_1, j_1\rangle|j_2, j_2\rangle$ を得る。この状態に下降演算子を作用させることで角運動量の大きさが $j_1 + j_2$ の状態を全て書き出せる。これら状態を除けば、最大の m は $j_1 + j_2 - 1$ であり、この状態は $j = j_1 + j_2 - 1$ を持つので、$|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle\rangle$ と書ける。この状態は $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle\rangle$ と直交する。再び下降演算子を作用させて、$j = j_1 + j_2 - 1$ の全ての状態を書き出す。この操作を状態がなくなるまで繰り返すことで全ての状態を構成できる。
- 合成系の角運動量の大きさ j は、部分系の角運動量の大きさを j_1, j_2 とすれば、

$$j = j_1 + j_2,\ j_1 + j_2 - 1,\ \cdots,\ |j_1 - j_2|, \tag{3.36}$$

  の値が可能。それぞれの j に対して、$m = -j,\ -j + 1,\ \cdots,\ j - 1,\ j$ と $(2j + 1)$ 個の値をとる。
- ある与えられた j_1, j_2 に対して、それぞれの固有状態は $(2j_i + 1)$ 個あるので、直積空間の次元は $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ となる。一方で、合成系の状態数は、$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}(2j + 1) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ となるので、自由度の数が一致し過不足なく表現ができる。

2 電子系のスピン

- スピン 1/2 を持った二つの電子の合成スピン $\hat{\boldsymbol{s}} = \hat{\boldsymbol{s}}_1 + \hat{\boldsymbol{s}}_2$ を考える。電子 1, 2 に対して、$s_{i,z}$ $(i = 1, 2)$ の固有状態を $|\alpha_i\rangle, |\beta_i\rangle$ とし、それぞれの固有値を $+1/2, -1/2$ とすると、合成系の状態は、$|\alpha_1\rangle|\alpha_2\rangle$, $|\alpha_1\rangle|\beta_2\rangle$, $|\beta_1\rangle|\alpha_2\rangle$, $|\beta_1\rangle|\beta_2\rangle$ の4つがあるが、これらは、完全には、$\hat{\boldsymbol{s}}$ の固有状態になっていない。
- 合成系のスピンの z 成分は $m_s = m_{s_1} + m_{s_2}$ と加法的で、$m_s = +1, 0, -1$ である。

- 合成系のスピンの大きさは $s = s_1 + s_2,\ s_1 + s_2 - 1,\ \cdots,\ |s_1 - s_2|$ で得られるので、2 電子系の合成系のスピンの大きさは、$s_1 = s_2 = 1/2$ より、$s = 0,\ 1$ である。
- $s = 1$ の状態は、$m_s = +1,\ 0,\ -1$ があって、合成系の固有状態を $|s, m_s\rangle\rangle$ と書けば、

$$|1,1\rangle\rangle = |\alpha_1\rangle|\alpha_2\rangle, \qquad |1,0\rangle\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha_1\rangle|\beta_2\rangle + |\beta_1\rangle|\alpha_2\rangle), \qquad |1,-1\rangle\rangle = |\beta_1\rangle|\beta_2\rangle. \tag{3.37}$$

この状態は、電子 1,2 のスピンの入れ替えに対して対称である。 p.17 にくわしくのってる

- $s = 0$ の状態は、$m_s = 0$ 一つで、

(スピンが ない ちがいうみ は 対称である)

$$|0,0\rangle\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha_1\rangle|\beta_2\rangle - |\beta_1\rangle|\alpha_2\rangle). \tag{3.38}$$

この状態は、電子 1,2 のスピンの入れ替えに対して反対称である。

スピン・スピン力

- 二つの電子間に以下のハミルトニアンで与えられるスピンに依存する力を考える。

$$\hat{H}_{\rm ss} = \alpha \hat{\boldsymbol{s}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{s}}_2. \tag{3.39}$$

- スピンに依存する力がなければ電子のスピン状態によらずエネルギーは等しい（縮退している）。
- $[\hat{s}_{1,i}, \hat{\boldsymbol{s}_1} \cdot \hat{\boldsymbol{s}_2}] \neq 0$, $[\hat{s}_{2,i}, \hat{\boldsymbol{s}_1} \cdot \hat{\boldsymbol{s}_2}] \neq 0$ より、電子 1 と電子 2 のスピンはハミルトニアンの固有状態でない。
- $[\hat{\boldsymbol{s}}^2, \hat{\boldsymbol{s}_1} \cdot \hat{\boldsymbol{s}_2}] = [\hat{s}_i, \hat{\boldsymbol{s}_1} \cdot \hat{\boldsymbol{s}_2}] = 0$ であるので、全スピンとハミルトニアンは同時固有状態を持つ。
- 全スピンが 0 と 1 の状態を、それぞれ、$|0\rangle, |1\rangle$ と書く（z 成分を省略する）。$\hat{\boldsymbol{s}}^2$ の固有値は $0(0+1) = 0$ と $1(1+1) = 2$。$[\hat{\boldsymbol{s}}_1^2, \hat{\boldsymbol{s}_1} \cdot \hat{\boldsymbol{s}_2}] = [\hat{\boldsymbol{s}}_2^2, \hat{\boldsymbol{s}_1} \cdot \hat{\boldsymbol{s}_2}] = 0$ であるので、$|0\rangle, |1\rangle$ は、$\hat{\boldsymbol{s}}_1^2$, $\hat{\boldsymbol{s}}_2^2$ の固有状態でもある。その固有値は $|0\rangle, |1\rangle$ に含まれる電子のスピンは $\frac{1}{2}$ であるので、どちらも $\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) = \frac{3}{4}$。
- 各状態のエネルギーは、$\hat{\boldsymbol{s}} = \hat{\boldsymbol{s}}_1 + \hat{\boldsymbol{s}}_2$ より、$\hat{\boldsymbol{s}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{s}}_2 = \frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{s}}^2 - \hat{\boldsymbol{s}}_1^2 - \hat{\boldsymbol{s}}_2^2)$ と書き換えることで求まる。$\hat{\boldsymbol{s}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{s}}_2|0\rangle = \frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{s}}^2 - \hat{\boldsymbol{s}}_1^2 - \hat{\boldsymbol{s}}_2^2)|0\rangle = \frac{1}{2}(0 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4})|0\rangle = -\frac{3}{4}|0\rangle$。同様に、$\hat{\boldsymbol{s}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{s}}_2|1\rangle = \frac{1}{2}(2 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4})|1\rangle = \frac{1}{4}|1\rangle$。

$$\hat{H}_{\rm ss}|0\rangle = -\frac{3}{4}\alpha|0\rangle, \qquad \hat{H}_{\rm ss}|1\rangle = +\frac{1}{4}\alpha|1\rangle. \tag{3.40}$$

$\alpha > 0$ とすると、スピン・スピン力は全スピン 0 の状態に対し引力、全スピン 1 の状態に対して斥力。

スピン・軌道角運動量の合成

- 電子が軌道角運動量 $\ell = 1$ を持った場合の全角運動量 $\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{L}} + \hat{\boldsymbol{S}}$ の固有状態を調べる。
- 2 電子系と同様に、全角運動量の z 成分の固有値 m で状態を分類する。$\ell = 1$ より $m_\ell = +1, 0, -1$ であり、$s = 1/2$ より $m_s = +1/2, -1/2$ であるので、合成系 $|1, m_\ell\rangle|\frac{1}{2}, m_s\rangle$ を全角運動量の z 成分 $m = m_\ell + m_s$ で分類すると、

$s = 1/2$, $\ell = 1$　　$S_- = S_- + m_{\ell -}$

$$m = +\tfrac{3}{2} \quad : \quad |1,+1\rangle|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle, \tag{3.41}$$

$$m = +\tfrac{1}{2} \quad : \quad |1,+1\rangle|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle, \quad |1,0\rangle|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle, \tag{3.42}$$

$$m = -\tfrac{1}{2} \quad : \quad |1,0\rangle|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle, \quad |1,-1\rangle|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle, \tag{3.43}$$

$$m = -\tfrac{3}{2} \quad : \quad |1,-1\rangle|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle. \tag{3.44}$$

$\ell = 1$, $s = -1/2$

$\ell = -1$, $s = 1/2$

$\ell = -1$, $-1/2$

- $m=+3/2$ が最大の m となるので、この状態は、$j=3/2$ を持つ。また、$m=-3/2$ は最小の m でこの状態も $j=3/2$ を持つ。

$$|\tfrac{3}{2},+\tfrac{3}{2}\rangle\rangle=|1,+1\rangle|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle,\qquad |\tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2}\rangle\rangle=|1,-1\rangle|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle. \tag{3.45}$$

- $j=3/2$ の他の状態は下降演算子 $\hat{j}_-=\hat{\ell}_-+\hat{s}_-$ を用いれ求まる。

$$\sqrt{(\tfrac{3}{2}+\tfrac{3}{2})(\tfrac{3}{2}-\tfrac{3}{2}+1)}=\sqrt{3}$$

$$\hat{j}_-|\tfrac{3}{2},+\tfrac{3}{2}\rangle\rangle=\sqrt{3}|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\rangle\rangle, \tag{3.46}$$

$$(\hat{\ell}_-+\hat{s}_-)|1,+1\rangle|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle=\hat{\ell}_-|1,+1\rangle|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle+|1,+1\rangle\,\hat{s}_-|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle \tag{3.47}$$

$$=\sqrt{2}|1,0\rangle|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle+|1,+1\rangle|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle. \tag{3.48}$$

$$\sqrt{(1+1)(1-1+1)}\qquad \sqrt{(\tfrac{1}{2}+\tfrac{1}{2})(\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}+1)}$$

したがって、

$$|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\rangle\rangle=\sqrt{\tfrac{2}{3}}|1,0\rangle|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle+\sqrt{\tfrac{1}{3}}|1,+1\rangle|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle. \tag{3.49}$$

それぞれの係数のことをクレプシュ・ゴルダン係数と呼ぶ。さらに、$\hat{j}_-=\hat{\ell}_-+\hat{s}_-$ を作用させれば、

$$|\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle\rangle=\sqrt{\tfrac{1}{3}}|1,-1\rangle|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle+\sqrt{\tfrac{2}{3}}|1,0\rangle|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle. \tag{3.50}$$

これらの 4 つの状態で角運動量 $j=3/2$ を持つ状態を作る。

- 残りはこれらに直交する状態で、角運動量 $1/2$ を持つ。

(a)　(b)

$$|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle\rangle=-\sqrt{\tfrac{1}{3}}|1,0\rangle|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle+\sqrt{\tfrac{2}{3}}|1,+1\rangle|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle, \tag{3.51}$$

$$|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle\rangle=-\sqrt{\tfrac{2}{3}}|1,-1\rangle|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle+\sqrt{\tfrac{1}{3}}|1,0\rangle|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle. \tag{3.52}$$

- 結果として、スピン 1/2 の粒子が角運動量 1 を持つと、全角運動量は 3/2 と 1/2 の状態が作られる。

$$\ell+s \sim |\ell-s|$$
$$\tfrac{3}{2}\qquad\quad \tfrac{1}{2}$$