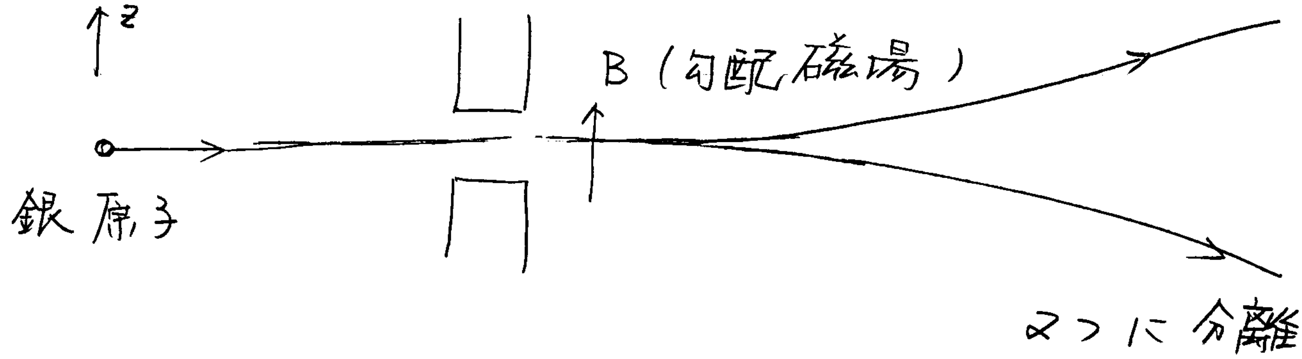
Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

5. スピン

5.1 スピンの存在

■ シュテルン－ゲルラッハの実験

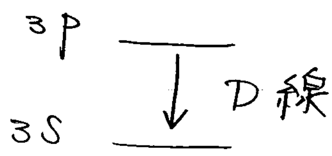


$$H' = \frac{e}{2\mu c} \mathbb{B}\cdot\mathbb{L}$$

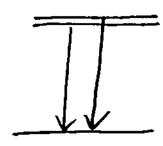
$$\rightarrow \quad \mathbb{F} = -\frac{e}{2\mu c} \nabla(\mathbb{B}\cdot\mathbb{L})$$

$\leftrightarrow$ 角運動量の大きさが $|\mathbb{L}| = \frac{\hbar}{2}$ で
$L_z = \frac{\hbar}{2}$ と $L_z = -\frac{\hbar}{2}$ の成分が反対
向きの力を受けて2つに分離

■ ナトリウムD線の多重構造



よく見ると2本のD線



他のアルカリ金属でも同様の多重構造

$\longrightarrow$ $\boxed{\text{電子は固有の角運動量 } \hbar/2 \text{ を持つ}}$

スピン角運動量 $\mathbb{S}$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan

スピン角運動量は大きさが半整数なだけで、
性質は軌道角運動量 $\mathbb{L}$ と同じ：

$$[S_i, S_j] = i\hbar\, \varepsilon_{ijk} S_k$$
$$[S_i, \mathbb{S}^2] = 0$$

5.2. スピン 1/2 の量子論

軌道角運動量オペレーターの固有状態
→ 球面調和関数 $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$

$$\hat{\ell}^2 Y_{\ell m} = \ell(\ell+1) Y_{\ell m}$$
$$\hat{\ell}_z Y_{\ell m} = m \quad Y_{\ell m}$$

スピン角運動量 ⟶ 軌道の概念がない
→ 座標の関数として状態を表わせない
→ ブラ・ケット表示が必要

スピンの大きさが $\frac{\hbar}{2}$
↔ z 成分は $\frac{\hbar}{2}$ か $-\frac{\hbar}{2}$ の2通り

$$|\uparrow\rangle = |S = \tfrac{\hbar}{2}, S_z = \tfrac{\hbar}{2}\rangle$$
$$|\downarrow\rangle = |S = \tfrac{\hbar}{2}, S_z = -\tfrac{\hbar}{2}\rangle$$

Department of Physics
Tohoku University

Sendai Japan

$$\mathbf{S}^2 |\uparrow\rangle = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\hbar^2 |\uparrow\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |\uparrow\rangle$$
$$S_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle$$

$$\mathbf{S}^2 |\downarrow\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |\downarrow\rangle$$
$$S_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle$$

一般のスピン状態は $|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ の線形結合で表わされる（$|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ は完全系を張る）：

$$|u\rangle = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle$$

(note) $\langle\uparrow|u\rangle = a$
$\langle\downarrow|u\rangle = b$

$\downarrow$

$|u\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ とベクトルの形で書くこともできる。

(note) $\langle\uparrow|\uparrow\rangle = 1, \quad \langle\downarrow|\uparrow\rangle = 0$

$\Downarrow \quad |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

同様に $|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a\underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}} + b\underbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}}$$

スピノル

Department of Physics
Tohoku University

Sendai, Japan

↓

スピン角運動量オペレーターも行列の形で
表わすことができる

$$\hat{S}_z = \begin{pmatrix} \langle\uparrow|\hat{S}_z|\uparrow\rangle & \langle\uparrow|\hat{S}_z|\downarrow\rangle \\ \langle\downarrow|S_z|\uparrow\rangle & \langle\downarrow|\hat{S}_z|\downarrow\rangle \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(note) $\hat{S}_z|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = +\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

$\hat{S}_z|\downarrow\rangle = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z$$
$$[S_y, S_z] = i\hbar S_x$$
$$[S_z, S_x] = i\hbar S_y$$

を満たすように $\hat{S}_x$ と $\hat{S}_y$ を決めると

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

(note) $\hat{S}_x^2 = \hat{S}_y^2 = \hat{S}_z^2 = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4}\cdot \mathbb{1}$

↓ $\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \cdot \mathbb{1}$

(note) $\hat{S}_x\hat{S}_y - \hat{S}_y\hat{S}_x = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

$= \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} - \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = i\cdot\frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = i\hbar\hat{S}_z$

$$L_\pm |Y_{lm}\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)}\,|Y_{l\,m\pm 1}\rangle$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan.

◦ 昇降演算子

$$\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$$

$$S_+ = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + i\cdot\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_+|\uparrow\rangle = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$$

$$\hat{S}_+|\downarrow\rangle = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar|\uparrow\rangle$$

$$\hat{S}_-|\uparrow\rangle = \hbar|\downarrow\rangle$$

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

$S_+|\downarrow\rangle = \left[\frac{1}{2}\cdot\left(\frac{1}{2}+1\right) - \left(-\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{1}{2}+1\right)\right]^{1/2}\hbar|\uparrow\rangle$

$= \sqrt{\frac{3}{4}+\frac{1}{4}}\,\hbar|\uparrow\rangle = \hbar|\uparrow\rangle$

ともコンシステント

◦ パウリ行列

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

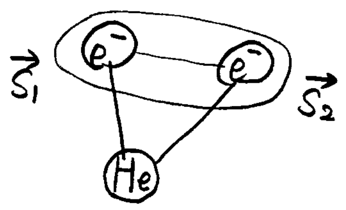
$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\,\varepsilon_{ijk}\,\sigma_k$$

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^2 = 3$$

Department of Physics
Tohoku University
Sendai Japan

5.3. 2スピン系

例) ヘリウム原子



2電子系
それぞれの電子のスピン角運動量を $\mathbb{S}_1$, $\mathbb{S}_2$ とする。

$\mathbb{S}_1$ と $\mathbb{S}_2$ はお互いに独立:

$$[S_{1i}, S_{1j}] = i\hbar\varepsilon_{ijk}S_{1k}$$
$$[S_{2i}, S_{2j}] = i\hbar\varepsilon_{ijk}S_{2k}$$
$$[S_{1i}, S_{2j}] = 0$$

2電子系の状態:

$$|\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 = |\uparrow\uparrow\rangle$$
$$|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 = |\uparrow\downarrow\rangle$$
$$|\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 = |\downarrow\uparrow\rangle$$
$$|\downarrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 = |\downarrow\downarrow\rangle$$

$S_z = S_{1z} + S_{2z}$ を作用させると、

$$(S_{1z} + S_{2z})|\uparrow\uparrow\rangle = \left(\frac{\hbar}{2} + \frac{\hbar}{2}\right)|\uparrow\uparrow\rangle$$
$$= \hbar|\uparrow\uparrow\rangle$$
$$(\equiv m\hbar|\uparrow\uparrow\rangle)$$

など。

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan.

↓

$$\begin{cases} m=1 : & |\uparrow\uparrow\rangle \\ m=0 : & |\uparrow\downarrow\rangle,\ |\downarrow\uparrow\rangle \\ m=-1 : & |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases}$$

$m=\pm 1$ の状態は 2つのスピンの入れかえに対して対称

→ $m=0$ でも 対称な状態を作ってみる。

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right)$$

同様に反対称な状態も作れる：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right)$$

↓

$$\begin{cases} m=1 : & |\uparrow\uparrow\rangle \\ m=0 : & \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right),\quad \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right) \\ m=-1 : & |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases}$$

これらはどのような状態なのか？

→ $S^2 = (S_1 + S_2)^2$ を作用させてみる。

Department of Physics
Tohoku University

Sendai, Japan.

(note) $\mathbb{S}^2 = \mathbb{S}_1^2 + \mathbb{S}_2^2 + 2\,\mathbb{S}_1 \cdot \mathbb{S}_2$

$= \mathbb{S}_1^2 + \mathbb{S}_2^2 + 2 S_{1z} S_{2z} + (S_{1x} + i S_{1y})(S_{2x} - i S_{2y}) + (S_{1x} - i S_{1y})(S_{2x} + i S_{2y})$

$= \mathbb{S}_1^2 + \mathbb{S}_2^2 + 2 S_{1z} S_{2z} + S_{1+} S_{2-} + S_{1-} S_{2+}$

↓

$$\mathbb{S}^2 |\uparrow\uparrow\rangle = \left(\frac{3}{4}\hbar^2 \times 2 + 2 \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\hbar}{2}\right) |\uparrow\uparrow\rangle$$
$$= 2\hbar^2 |\uparrow\uparrow\rangle = 1 \cdot (1+1)\hbar^2 |\uparrow\uparrow\rangle$$

$\mathbb{S}_1^2 |\uparrow\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |\uparrow\rangle$

$S_{1z} |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle$

$S_{1+} |\uparrow\rangle = 0$

同様に $\mathbb{S}^2 |\downarrow\downarrow\rangle = 1 \cdot (1+1)\hbar^2 |\downarrow\downarrow\rangle$

$$\mathbb{S}^2 \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$
$$= \left(2 \times \frac{3}{4}\hbar^2 + 2 \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot \left(-\frac{\hbar}{2}\right) + \hbar^2\right) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$S_{1-} S_{2+} |\uparrow\downarrow\rangle = \hbar^2 |\downarrow\uparrow\rangle$

$S_{1+} S_{2-} |\downarrow\uparrow\rangle = \hbar^2 |\uparrow\downarrow\rangle$

$$= 2\hbar^2 \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

↓

入れかえに対し対称な状態

$|\uparrow\uparrow\rangle,\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle),\ |\downarrow\downarrow\rangle$

は $S = 1,\ S_z = +1, 0, -1$ の 3 つの状態

(スピン三重項)。

Department of Physics
Tohoku University
Sendai, Japan.

$$\mathbf{S}^2 \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \right)$$

$$= \left(2\times\frac{3}{4}\hbar^2 + 2\cdot\frac{\hbar}{2}\cdot\left(-\frac{\hbar}{2}\right) \right)\cdot\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \right)$$

$$+ \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}} |\downarrow\uparrow\rangle - \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}} |\uparrow\downarrow\rangle$$

$$= \hbar^2 \left(2\cdot\frac{3}{4} - 2\cdot\frac{1}{4} - 1 \right)\cdot\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \right)$$

$$= 0$$

↳

$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \right)$ は $S=0$, $S_z=0$ の状態（スピン1重項）。

まとめ：

	$S=1$	$S=0$
$m=1$	$\|\uparrow\uparrow\rangle$	
$m=0$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\uparrow\downarrow\rangle + \|\downarrow\uparrow\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\uparrow\downarrow\rangle - \|\downarrow\uparrow\rangle)$
$m=-1$	$\|\downarrow\downarrow\rangle$	
	↑ 3重項（トリプレット）	↑ 1重項（シングレット）