

任意の方向を向いたスピンの x y z 方向固有状態での展開

クロメル@物理のかぎプロジェクト

2010-06-05

この記事は、スピン一重項と三重項の x y 方向固有状態での展開という記事の姉妹編です。どちらを先に読んでも構いません。ちなみにこの記事は、J.J. サクライの「現代の量子力学」を意識して書いてあります。

パウリ行列

まず、天下り的ですが、パウリ行列を次の様に定めます。

$$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \quad (1)$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4)$$

スピノール

スピンの状態は、二成分のスピノール^{*1}（ケット）

$$\chi \equiv \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \quad (5)$$

^{*1} スピノールといっても、計算は普通の行列と変わらないので安心してください。

また，その共役転置（プラ），

$$\chi^\dagger \equiv \begin{pmatrix} c_+^* & c_-^* \end{pmatrix} \quad (6)$$

で表わされます。共役転置なので，虚数成分にはマイナスがつくことに注意してください。

スピンの方向 n を次のようにオイラー角で定めます。

$$\begin{aligned} n &= \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix} \\ &\equiv \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (7)$$

今，任意の方向 n を向いたスピンは，固有値を λ として，固有スピノール χ

$$(\sigma \cdot n)\chi = \lambda \chi \quad (8)$$

で表わされます。

つまり，

$$\begin{aligned} (\sigma \cdot n)\chi &= (\alpha \sigma_x + \beta \sigma_y + \gamma \sigma_z)\chi \\ &= \begin{pmatrix} \gamma & \alpha - i\beta \\ \alpha + i\beta & -\gamma \end{pmatrix} \chi \\ &= \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta(\cos \phi - i \sin \phi) \\ \sin \theta(\cos \phi + i \sin \phi) & -\cos \theta \end{pmatrix} \chi \\ &= \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (9)$$

より， χ は，

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \quad (10)$$

と求められます。

この固有値問題を解くと，

$$\begin{aligned} \lambda &= \pm \sqrt{\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2} \\ &= \pm 1 \end{aligned} \quad (11)$$

ですから， $\lambda = 1$ に対して，

$$\begin{pmatrix} 1 - \cos \theta & -\sin \theta e^{-i\phi} \\ -\sin \theta e^{i\phi} & 1 + \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} = 0 \quad (12)$$

$$(1 - \cos \theta)c_+ - \sin \theta e^{-i\phi}c_- = 0 \quad (13)$$

より、この固有スビノール (χ_1 とする) は、規格化因子を A として、

$$\begin{aligned}\chi_1 &= \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \\ &= A \begin{pmatrix} \sin \theta \\ (1 - \cos \theta) e^{i\phi} \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (14)$$

なので、規格化因子 A を求めると、

$$\begin{aligned}\chi_1^\dagger \chi_1 &= A^2 \begin{pmatrix} \sin \theta & (1 - \cos \theta) e^{-i\phi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin \theta \\ (1 - \cos \theta) e^{i\phi} \end{pmatrix} \\ &= A^2 (\sin^2 \theta + (1 - \cos \theta)^2 e^{i\phi - i\phi}) \\ &= A^2 2(1 - \cos \theta) \\ &= A^2 4 \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right) \\ &= 1\end{aligned}\quad (15)$$

よって、

$$A = \frac{e^{i\delta}}{2 \sin \frac{\theta}{2}} \quad (16)$$

ここで、 δ は任意の実数で位相因子と言います。よって、 χ_1 が求まりました。

$$\begin{aligned}\chi_1 &= A \begin{pmatrix} \sin \theta \\ (1 - \cos \theta) e^{i\phi} \end{pmatrix} \\ &= \frac{e^{i\delta}}{2 \sin \frac{\theta}{2}} \begin{pmatrix} 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \\ 2 \sin^2 \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix} \\ &= e^{i\delta} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (17)$$

ここで、 $\delta = -\frac{\phi}{2} - \frac{\psi}{2}$ と置くと、

$$\chi_1 = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i(\phi+\psi)/2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i(\phi-\psi)/2} \end{pmatrix}\quad (18)$$

同様に、 $\lambda = -1$ の時の固有スビノールは、

$$\chi_{-1} = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i(\phi-\psi)/2} \\ \cos \frac{\theta}{2} e^{i(\phi+\psi)/2} \end{pmatrix}\quad (19)$$

となります。

スピンの向きの期待値

今まで求めてきた、固有スビノールが本当に任意の方向を向いてるか、確認してみましょう。

まず、 z 方向の成分の期待値を求めてみます。 χ_1 について、

$$\begin{aligned}\chi_1^\dagger \sigma_z \chi_1 &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{i(\phi+\psi)/2} & \sin \frac{\theta}{2} e^{-i(\phi-\psi)/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i(\phi+\psi)/2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i(\phi-\psi)/2} \end{pmatrix} \\ &= \cos^2 \frac{\theta}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2} \\ &= \cos \theta\end{aligned}\tag{20}$$

次に x 成分です。

$$\begin{aligned}\chi_1^\dagger \sigma_x \chi_1 &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{i(\phi+\psi)/2} & \sin \frac{\theta}{2} e^{-i(\phi-\psi)/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i(\phi+\psi)/2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i(\phi-\psi)/2} \end{pmatrix} \\ &= \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \\ &\quad + \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ &= 2 \sin \theta \frac{e^{i\phi} + e^{-i\phi}}{2} \\ &= \sin \theta \cos \phi\end{aligned}\tag{21}$$

同様にして計算は省略しますが、 y 成分も同様に、

$$\chi_1^\dagger \sigma_y \chi_1 = \sin \theta \sin \phi\tag{22}$$

よって、確かに期待値としては、スピンはオイラー角で表わされる方向を向いていることが、分かりました。 z 方向成分を観測する（磁場をかけてやる：シュテルン・ゲルラッハの実験）と、確率 $\cos^2 \frac{\theta}{2}$ で、 z 軸正方向を、確率 $\sin^2 \frac{\theta}{2}$ で z 軸負方向を向くことが分かります。

それでは、 x 方向成分を観測すると、どんな確率で x 軸正方向と x 軸負方向を向くのでしょうか？ それには、ちょっと工夫が必要です。どの軸方向でも原理は同じですから、 x 軸とスピンのなす角を ω と置くのです。すると、

$$\begin{aligned}\cos \omega &= \mathbf{n} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \sin \theta \cos \phi\end{aligned}\tag{23}$$

より， x 軸の正の方向を向く確率は，

$$\begin{aligned}\cos^2 \frac{\omega}{2} &= \frac{1 + \cos \omega}{2} \\ &= \frac{1 + \sin \theta \cos \phi}{2}\end{aligned}\quad (24)$$

負の方向を向く確率は，

$$\sin^2 \frac{\omega}{2} = \frac{1 - \sin \theta \cos \phi}{2} \quad (25)$$

と成ります。

この結果は，式 (21)，

$$\begin{aligned}\chi_1^\dagger \sigma_x \chi_1 &= \cos^2 \frac{\omega}{2} - \sin^2 \frac{\omega}{2} \\ &= \sin \theta \cos \phi\end{aligned}\quad (26)$$

と一致し，つじつまが合っていることが分かります。

最後に y 方向について書いておくと， y 軸の正の方向を向く確率は，

$$\begin{aligned}\cos^2 \frac{\omega}{2} &= \frac{1 + \cos \omega}{2} \\ &= \frac{1 + \sin \theta \sin \phi}{2}\end{aligned}\quad (27)$$

負の方向を向く確率は，

$$\sin^2 \frac{\omega}{2} = \frac{1 - \sin \theta \sin \phi}{2} \quad (28)$$

と成ります。

ちなみに，パウリ行列を χ_{-1} で挟んでやると，

$$\chi_{-1}^\dagger \sigma_x \chi_{-1} = -\sin \theta \cos \phi \quad (29)$$

$$\chi_{-1}^\dagger \sigma_y \chi_{-1} = -\sin \theta \sin \phi \quad (30)$$

$$\chi_{-1}^\dagger \sigma_z \chi_{-1} = -\cos \theta \quad (31)$$

となり， $\lambda = 1$ の時とは逆の方向を向いていることが分かります。

z 方向の固有スピノール

ここで話の進む向きを変えて， z 方向のスピノールについて考えます。今考えてきた二成分のスピノールは，実は z 方向の固有関数 $|j = 1/2, m = 1/2\rangle$ ， $|j = 1/2, m = -1/2\rangle$ で展開してきたことにあたります。

$$\begin{aligned}\sigma_z \chi_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \chi_z \\ &= \lambda \chi_z\end{aligned}\quad (32)$$

の固有スビノール ,

$$|j = 1/2, m = 1/2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (33)$$

$$|j = 1/2, m = -1/2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (34)$$

つまり , z 方向での展開であることを明示すると ,

$$\begin{aligned} \chi_1 &= \begin{pmatrix} \cos(\theta/2)e^{-i(\phi+\psi)/2} \\ \sin(\theta/2)e^{i(\phi-\psi)/2} \end{pmatrix} \\ &= \cos(\theta/2)e^{-i(\phi+\psi)/2}|j = 1/2, m = 1/2\rangle + \sin(\theta/2)e^{i(\phi-\psi)/2}|j = 1/2, m = -1/2\rangle \end{aligned} \quad (35)$$

$$\begin{aligned} \chi_{-1} &= \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2}e^{-i(\phi-\psi)/2} \\ \cos\frac{\theta}{2}e^{i(\phi+\psi)/2} \end{pmatrix} \\ &= -\sin\frac{\theta}{2}e^{-i(\phi-\psi)/2}|j = 1/2, m = 1/2\rangle + \cos\frac{\theta}{2}e^{i(\phi+\psi)/2}|j = 1/2, m = -1/2\rangle \end{aligned} \quad (36)$$

です . これを x 方向での固有スビノールで展開してみましょう . x 方向の固有スビノールは ,

$$\begin{aligned} \sigma_x \chi_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \chi_x \\ &= \lambda \chi_x \end{aligned} \quad (37)$$

の固有状態ですから , $\lambda = 1$ の時 ,

$$|j = 1/2, m_x = 1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (38)$$

同様に $\lambda = -1$ の時 ,

$$|j = 1/2, m_x = -1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (39)$$

ですので , x 方向のスビノールを

$$\chi_x = \begin{pmatrix} c_{+x} \\ c_{-x} \end{pmatrix}$$

と置くと ,

$$\begin{aligned} \chi_1 &= \begin{pmatrix} c_{+z} \\ c_{-z} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{+x} \\ c_{-x} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2}e^{-i(\phi+\psi)/2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i(\phi-\psi)/2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (40)$$

より、

$$\begin{pmatrix} c_{+x} \\ c_{-x} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i(\phi+\psi)/2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i(\phi-\psi)/2} \end{pmatrix}$$

ただ冗長になるだけなので、最後の展開はしません。ここで、特別な場合を考えてみましょう。 $\theta = 0$ の時、 ψ が任意なので、 $\phi + \psi = 0$ と置けて、

$$\begin{aligned} \chi_1 &= \cos(0)e^{-i(\phi+\psi)/2}|j=1/2, m=1/2\rangle + \sin(0)e^{i(\phi-\psi)/2}|j=1/2, m=-1/2\rangle \\ &= e^{-i(\phi+\psi)/2}|j=1/2, m=1/2\rangle \\ &= \begin{pmatrix} e^0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} c_{+x} \\ c_{-x} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|j=1/2, m_x=1/2\rangle + |j=1/2, m_x=-1/2\rangle) \end{aligned} \tag{41}$$

と、こういう風に z 軸を向いているスピンは、 x 方向で見ると、角運動量ベクトルが x 軸の正方向の状態と、負方向の状態が同じ重みで重ね合わさっていることが分かりましたね。姉妹編で見た、三重項の内の $S = 1, S_z = 0$ と同じような結果になりました。これも古典論でのイメージができない状態です。

それでは、今日はここまで。お疲れ様でした。