■12 群（電子情報通信基礎）－ 5 編（量子力学・電子物理・相対論）

4 章 スピン

（執筆者：清水清孝）［　年　月 受領］

■概要■

【本章の構成】

■12 群 - 5 編 - 4 章

4-1 スピン

（執筆者：清水清孝）［2009 年 1 月 受領］

4-1-1 スピンの導入

一般化された角運動量演算子に関する議論より，$\boldsymbol{L}^2$ の固有値は $j(j+1)$，L_0 の固有値は m であり，j は 0，正の整数または正の半整数をとり，m は $-j$ から 1 ずつ増加して j までの $(2j+1)$ 通りの値をとり得ることが分かった．j =0 または整数の場合，角運動量演算子は $\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ と書けるが，j = 半整数の場合は $\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ で表現されるいわゆる軌道角運動量と対応しない．ここでは j = 半整数の一番簡単な場合である $j=1/2$ の場合について詳しく考察してみよう．

L_0 の固有値 m は $m=-1/2, 1/2$ の 2 通りが可能であるから，演算子として 2×2 の行列での表現が可能である．具体的に演算子のかたちを求めてみよう．演算子の記法として軌道角運動量 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ と区別するためにこれからは $\boldsymbol{S}$ を使う．これをスピンまたはスピン角運動量と呼ぶ．まず $S_0(=S_z)$ に対しては，対角化されており固有値が 1/2 と −1/2 だから次のようになる．

$$S_0=\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{4・1}$$

固有関数としては縦ベクトル (1, 0) と (0, 1) が対応する．S_+ 及び S_- に対しても，角運動量の一般的な議論で得られた式 (3·25) 及び (3·27) を使うと次の結果を得る．

$$S_+=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad S_-=\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{4・2}$$

S_x，S_y で表せば次のようになる．

$$S_x=\frac{1}{2}(S_+ + S_-)=\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad S_y=\frac{1}{2\mathrm{i}}(S_+ - S_-)=\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \tag{4・3}$$

通常はスピン $\boldsymbol{S}$ を 2 倍したかたちの行列 $\boldsymbol{\sigma}=2\boldsymbol{S}$ が用いられ，これをパウリ（Pauli）のスピン行列と呼ぶ．角運動量の交換関係から導かれる交換関係及び $\boldsymbol{\sigma}$ に特有な次の反交換関係を満たす．

$$[\sigma_j, \sigma_k]=2\mathrm{i}\varepsilon_{jkl}\sigma_l, \qquad \sigma_j\sigma_k+\sigma_k\sigma_j=2\delta_{jk} \qquad (j,k,l=x,y,z) \tag{4・4}$$

ここで ε_{jkl} は j,k,l が x,y,z の偶置換の場合は 1 で，奇置換の場合は-1，それ以外は 0 と定義された置換記号である．

4-1-2 スピンとは何か

ここで考察したスピン角運動量 $\boldsymbol{S}$ は物理量としては何に対応するのだろうか．実はこれは電子や陽子などの内部自由度である固有角運動量であることが第 10 章で議論するディラッ

クの相対論的波動方程式より導かれる．このことは例えば電子が空間的に同じ状態であっても，更に 2 個の独立な状態が存在することを意味する．それを区別する状態として，$(1, 0)$ と $(0, 1)$ の 2 個の独立な状態をとり，量子数として S_z の固有値を使う．これらは通常，スピン上向き，下向きの状態と呼ばれる．

状態の書き方としては，スピンの固有関数を χ とし，これは 2 成分の縦ベクトルとして，軌道部分の球関数 Y_{lm} とまとめて以下のように書く．

$$Y_{lm}(\theta, \varphi)\chi \tag{4・5}$$

さてスピン演算子 $\boldsymbol{S} = \boldsymbol{\sigma}/2$ として通常の三次元空間でのベクトルを使ったが，単に内部自由度を表すだけならば三次元空間とは無関係でもよさそうに思える．しかしディラック（Dirac）の相対論的波動方程式から導かれる結果より，スピン角運動量は通常の三次元空間の角運動量と関係しており，それらをベクトル的に加えた物理量が全角運動量として意味をもつことが示される．特に系がスピンと軌道空間の同時回転に対して不変である場合，全角運動量がよい量子数となる．軌道角運動量とスピン角運動量の合成については第 5 章で議論する．

■12 群 - 5 編 - 4 章

4-2 磁場との相互作用

（執筆者：清水清孝）［2009 年 1 月 受領］

4-2-1 磁気モーメント

電荷をもった粒子が磁場のなかに置かれると相互作用をする．相互作用の形の導出は第 7 章及び第 10 章に回すとして，ここでは磁場との相互作用による現象について考察しよう．

いま磁束密度を $\boldsymbol{B}$ とし，粒子の磁気モーメントを $\boldsymbol{m}$ とすると，エネルギーの変化は以下のようになる．

$$H' = -\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{B} \tag{4・6}$$

ここで磁気モーメントは，角運動量を $\boldsymbol{L}$，スピン角運動量を $\boldsymbol{S}$ とすると以下のように書ける．

$$\boldsymbol{m} = \frac{q\hbar}{2m}(\boldsymbol{L} + g\boldsymbol{S}) \tag{4・7}$$

ここで q は粒子の電荷で，m は質量である．スピンの部分にかかっている係数 g は g 因子と呼ばれ，電子の場合はほぼ 2 である．この結果は第 10 章の相対論的波動方程式のところで導く．以下で上記の相互作用から導かれるいくつかの現象について考察しよう．

4-2-2 シュテルン・ゲルラッハの実験

シュテルン（Stern）とゲルラッハ（Gerlach）は中性の銀の原子を図 4・1 のように不均一な磁場のなかに入射させ，磁場中を通過した後スクリーン上で銀の原子を観測した．その結果，磁場のないときはまっすぐに進んできた銀の原子線が，不均一な磁場がある場合は図 4・1 に示すように上下の 2 本の線に分かれるのを観測した．

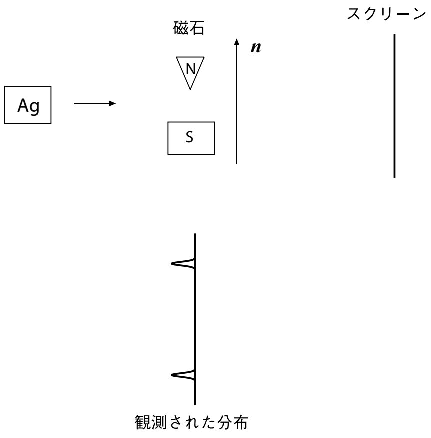

図 4･1　シュテルン・ゲルラッハの実験

まず銀の原子は，47 個の電子が原子核に束縛されているが，その内の 46 個の電子の軌道角運動量とスピン角運動量はお互いに相殺しあって，磁気モーメントに寄与せず最後の 1 個の電子のスピン角運動量による磁気モーメントをもつと考えられる．磁場が不均一であることから，原子には式 (4･6) より以下のような力が働く．

$$\boldsymbol{F} = -\nabla H' = \nabla \boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{B} \tag{4･8}$$

今，磁場が $\boldsymbol{n}$ 方向で，その勾配も同じ方向だとすると，原子に働く力の方向は $\boldsymbol{n}$ と平行で，大きさは以下のように $\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{n}$ に比例する．

$$F = k\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{n} \tag{4･9}$$

この式を「F は $\boldsymbol{S}$ の $\boldsymbol{n}$ 方向の成分（それは連続的に分布しているはずである）に比例する」と解釈すると，F は連続的に分布することになり，図 4･1 の観測結果と矛盾する．それに対し，量子力学では $\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{n}$ は演算子であり，これを観測したと解釈する．すると式 (4･9) のなかの $\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{n}$ は次の式の固有値で置き換えられることになる．

$$\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{n}\chi = s\chi \tag{4･10}$$

固有値 s は方向 $\boldsymbol{n}$ に関係なく，1/2 と $-1/2$ となる．したがって，働く力 F は $k/2$ と $-k/2$ となる．つまり原子線には磁場方向かまたは磁場と反対方向に，入射したときのスピンの向きとは関係なく一定の力が働くことになり 2 本に分かれた解釈できる．もちろん磁場方向かまたは磁場と反対方向のどちら向きに力が働くのかは，その確率が入射したときのスピンの向きに依存する．この実験では Ag の電子のスピンの向きは全くランダムであり，同じ割合で上向きと下向きに力が働いたのである．以上の考察より，スピンが量子化されていること，そしてスピンの大きさが 1/2 であることが理解できる．

4-2-3 ゼーマン効果

光を放出している光源を磁場のなかに置くとスペクトル線が数本以上に分かれる現象がある．この現象はゼーマン（Zeeman）によって発見されたのでゼーマン効果と呼ばれる．第 3 章で議論したように原子中の電子は中心力場中を運動しており，角運動量の大きさが l の状態は角運動量の z 成分の固有値 m_l が違ってもエネルギーは等しい．これは系を回転させてもハミルトニアンが不変であることに起因しており，特定の方向に磁場がある場合はエネルギー固有値は磁気量子数 m_l に依存するようになる．磁場による項は $H' = -\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{B}$ で与えられるとし，磁束密度を一様として z 方向にとると，状態 $| lm_l >$ での H' の期待値は以下のようになる．

$$< H' >= - < lm_l \mid \frac{q\hbar B}{2m} L_z \mid lm_l >= -\frac{q\hbar B}{2m} m_l \tag{4･11}$$

磁気量子数 m_l は，$m_l = l, l-1, ..., -l$ までの $(2l+1)$ 通りとれるのでエネルギー準位は $(2l+1)$ 本に分裂することになる．以上はスピンによる項は考慮しなかったが，スピンまで考慮すると状態は $| lm_l \frac{1}{2} m_s >$ で指定され，エネルギーの変化は以下のようになる．

$$< H' >= -\frac{q\hbar B}{2m}(m_l + gm_s) \tag{4・12}$$

このようにして電子のエネルギー準位が分裂することでゼーマン効果を説明できる．

4-2-4 磁場中でのスピンの運動

空間的に一様な静磁場 $\boldsymbol{B}_0$ をかけたときにスピンがどのような運動をするか考察しよう．スピンの時間変化は以下のようにハイゼンベルグの運動方程式で記述される．

$$\frac{\mathrm{d}S_x(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[H, S_x(t)] = -\frac{\mathrm{i}q}{2m}gB_0[S_z(t), S_x(t)] = \frac{q}{2m}gB_0S_y(t) \tag{4・13}$$

$$\frac{\mathrm{d}S_y(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[H, S_y(t)] = -\frac{\mathrm{i}q}{2m}gB_0[S_z(t), S_y(t)] = -\frac{q}{2m}gB_0S_x(t) \tag{4・14}$$

$$\frac{\mathrm{d}S_z(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[H, S_z(t)] = -\frac{\mathrm{i}q}{2m}gB_0[S_z(t), S_z(t)] = 0 \tag{4・15}$$

ただしハミルトニアンのなかでスピンによる項は $H' = -\frac{q\hbar}{2m}g\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}_0$ のみとし，磁場の方向を z 方向とした．この連立方程式は以下のようにして簡単に解ける．まず S_z は式 (4･15) より時間的に変化しない．また式 (4･13) と (4･14) から次の方程式を得る．

$$\frac{\mathrm{d}S_+(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}S_x(t)}{\mathrm{d}t} + \mathrm{i}\frac{\mathrm{d}S_y(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{q}{2m}gB_0\{S_y(t) - \mathrm{i}S_x(t)\} = -\mathrm{i}\frac{q}{2m}gB_0S_+(t) \tag{4・16}$$

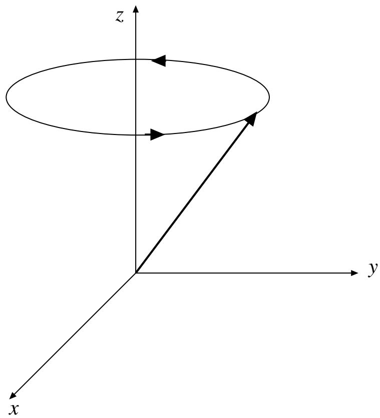

図 4･2　ラーマーの歳差運動

したがって電子の場合は電荷を $q = -e$，$g = 2$ として，ラーマー（Larmor）の角速度を $\omega_0 = eB_0/m$ とすると，スピン S_+ は以下のような運動をする．

$$S_+(t) = S_+(0)\exp(\mathrm{i}\omega_0 t) \tag{4・17}$$

$t = 0$ でのスピンの期待値を $< S_x >= C$，$< S_y >= 0$，$< S_z >= C_0$ とするとスピンの期待値の時間変化は次のようになる．

$$< S_x >= C \cos \omega_0 t, \qquad < S_y >= C \sin \omega_0 t, \qquad < S_z >= C_0 \tag{4・18}$$

以上よりスピンは静磁場の回りを角速度 ω_0 で歳差運動をすることが分かる．

4-2-5 スピン共鳴

前節で考慮した一様な z 方向の静磁場に加えて，それと垂直方向に角速度 ω で時間的に変化する磁場をかけてみよう．この磁場により電子のスピンの向きが変化する遷移が起こるであろう．静磁場 B_0 によるスピン上向きの状態と下向きの状態のエネルギー差は $\frac{e\hbar}{m}B_0 = \hbar\omega_0$ だから，垂直方向にかける磁場の角速度が ω_0 に等しい場合は遷移は大きな確率で起こることが期待される．これをスピン共鳴という．ここではその確率を時間に依存するシュレーディンガー方程式を解いて求めてみよう．

スピンに依存するハミルトニアンは時間的に変化する磁場の強さを B_1 とすると次のように書ける．

$$H = \frac{e\hbar}{m}(B_1 \cos \omega t S_x + B_1 \sin \omega t S_y + B_0 S_z) \tag{4・19}$$

ここでスピン波動関数を χ とし，次のように書く．

$$\chi = \begin{pmatrix} U(t) \\ D(t) \end{pmatrix} \tag{4・20}$$

すると係数 $U(t)$ と $D(t)$ を決める方程式は時間微分を · と略記すると次のようになる．

$$\mathrm{i}\hbar \begin{pmatrix} \dot{U}(t) \\ \dot{D}(t) \end{pmatrix} = \frac{e\hbar}{2m} \begin{pmatrix} B_0 & B_1 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \\ B_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} & -B_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U(t) \\ D(t) \end{pmatrix} \tag{4・21}$$

ここで新たに角速度 $\omega_1 = \frac{eB_1}{m}$ を導入すると方程式は次のようになる．

$$\mathrm{i} \begin{pmatrix} \dot{U}(t) \\ \dot{D}(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \\ \omega_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U(t) \\ D(t) \end{pmatrix} \tag{4・22}$$

ここで $U(t) = u(t)\exp(-\mathrm{i}\omega t/2)$，$D(t) = d(t)\exp(\mathrm{i}\omega t/2)$ とおくと，$u(t)$ と $d(t)$ に対する方程式は次のように書ける．

$$\mathrm{i} \begin{pmatrix} \dot{u}(t) \\ \dot{d}(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 - \omega & \omega_1 \\ \omega_1 & -\omega_0 + \omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(t) \\ d(t) \end{pmatrix} \tag{4・23}$$

ここで右辺の行列の固有値は，$\Omega = \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2}$ とすると，$\pm\Omega$ なので，上記の方程式の独立な解は規格化を除いて以下のようになる．

$$\begin{pmatrix} u(t) \\ d(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Omega - \omega_0 + \omega \\ -\omega_1 \end{pmatrix} \exp\left(\frac{\mathrm{i}\Omega t}{2}\right), \qquad \begin{pmatrix} \Omega + \omega_0 - \omega \\ \omega_1 \end{pmatrix} \exp\left(-\frac{\mathrm{i}\Omega t}{2}\right) \quad (4\cdot 24)$$

ここで初期条件として $t = 0$ でスピンは上向きであるとすると，係数 U と D は上記の独立な解の線形結合で次のようになる．

$$\begin{pmatrix} u(t) \\ d(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{2\Omega} \left\{ \begin{pmatrix} \Omega - \omega_0 + \omega \\ -\omega_1 \end{pmatrix} \exp\left(\frac{\mathrm{i}\Omega t}{2}\right) + \begin{pmatrix} \Omega + \omega_0 - \omega \\ \omega_1 \end{pmatrix} \exp\left(-\frac{\mathrm{i}\Omega t}{2}\right) \right\} \quad (4\cdot 25)$$

ここで $\frac{1}{2\Omega}$ は状態を規格化したための係数である．したがってスピンが時刻 t で反対方向に向く確率は次のようになる．

$$| D(t) |^2 = | d(t) |^2 = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \sin^2 \frac{\Omega t}{2} = \frac{\omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \sin^2 \frac{\Omega t}{2} \quad (4\cdot 26)$$

この式より明らかなように，時間的に変化する磁場の角速度 ω が静磁場によるラーマーの角速度 ω_0 に等しい場合に共鳴が起こる．