スピノル族の発見

KENZOU

2004 年 5 月 29 日*

表題をご覧になればお解りのように，この小稿は朝永振一郎博士の名著「スピンはめぐる」第 7 話のテーマからいただきました。前回，”$CoffeeBreak$”に「座標回転とスピノール」を載せたが，もう少しスピノールというものに泥臭く迫ってみたいなぁという気分がどこかに残っており，ある日ふと思い出したように朝永先生の「スピンはめぐる」をパラパラめくった。すると随分以前だが，ともかく読んだはずの第 7 話が非常に面白く，ふむふむという感じで。。。これは少し勉強しようかとなった次第。このようなわけで、この小稿は勉強の足跡を綴ったノートで、誤解や過ちも少なからずあると思う。それらをを見つけられれば是非ともご一報をお願いしたい。

「エーレンフェストは，1932 年に書いた小さな論文のなかで，次のように言っています。”･･･ 等方的な三次元空間やミンコウスキの四次元世界のなかに神秘的なスピノル族という種族が棲んでいるという，そういう薄気味悪い報告が，相対論が世に出て（テンソル算法が生まれて）から 20 年たって，パウリやディラックの仕事があらわれるまで，どこのだれからも出されなかったとは，どう考えてもおかしなことだ ”と。」と朝永先生は上記の著書に書かれています。スピノールというものに少しでも興味をお持ちの方は，この小稿を一読され，いろいろご教示していただけると有難い。。。それではぼちぼち参りますか。

1　異常ゼーマン効果

アルカリ原子の一つである Na 原子の電子配列は $(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)$ で最外殻は 3s 電子が 1 個となっており，軌道角運動量はもっていない（軌道角運動量＝０）。しかし磁場の中に入れてゼーマン効果[1]を調べるとなんとスペクトルは 2 つに分裂する（異常ゼーマン効果[2]）。磁場中の Na 原子のハミルトニアンを書くと[3]

$$H=\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2+V(\boldsymbol{r})-\frac{(-e)}{2m}\ell_zB+\frac{e^2B^2}{8m}(x^2+y^2) \tag{1}$$

となる。（1）の右辺第 3 項をゼーマン項，第 4 項を反磁性項と呼んでいるが，ここでは磁場と軌道角運動量の相互作用を表わすゼーマン項が問題となる。つまり，Na 原子の軌道角運動量は０であるから磁場との相互作用はないはずである。この異常ゼーマン効果を説明するために電子の自転（スピン）というモデルが考えられた[4]。電子は原子核の周りを

*04.06.05 更新

[1]均一磁場をかけると磁気量子数に応じてスペクトルが分かれるという効果。磁気量子数は $m=-\ell,-\ell+1,\cdots,0,1,\cdots,1$ で，スペクトルは奇数本の線に分かれる現象。

[2]不均一磁場にかけるとゼーマン効果で分かれた線が、さらにスピンの違いにより 2 本に分かれ、倍の個数の線が見られる現象。

[3]$CoffeeBreak$ の「磁場と中心力ポテンシャル中における荷電粒子の運動について」を参照されたい。

[4]1925 年 Uhlenbeck と Goudsmit は電子は自転していると考え、その結果、電子は $\frac{1}{2}\hbar$ の角運動量を伴う大きさ $\frac{e\hbar}{2m}$ の磁気モーメントを持つと考えた。

回っているが，電子に固定した座標で考えると原子核が電子の周りを回る運動をしていることになる。すると原子核が作る電流が電子の位置に磁場を作り，異常ゼーマン効果はその磁場とスピン角運動量の相互作用の結果であるということで説明される。脚注にも書いたが，角運動量の大きさが $h\ell$ である軌道角運動量の場合には $2\ell+1$ 個の準位に分かれている。このことから考えて 2 つの準位からなるスピン角運動量の場合には角運動量の大きさがちょうど $(1/2)\hbar$ になると考えればよい。

2　パウリのスピン理論

スピンを考慮しない 1 電子のシュレーディンガー方程式は

$$\left\{H_0 - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right\}\psi(\boldsymbol{x}) = 0 \tag{2}$$

ただし，

$$\begin{cases} H_0 = \dfrac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 + V(\boldsymbol{x}) \\ \boldsymbol{p} = (p_x, p_y, p_z) = \left(-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}, -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial y}, -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial z}\right) \\ \boldsymbol{x} = (x, y, z) \end{cases} \tag{3}$$

スピンを考慮した場合の方程式はどうなるか？　これがパウリを悩ました問題であった。スピンを電子の自転と考えると，正準座標（一般化座標）として自転軸の周りの方位角 φ をとることができる。自転角運動量を $\boldsymbol{S}$ とすると，その z 成分 S_z が φ に共役な正準運動量となる。$\boldsymbol{x}$ に共役な運動量 $\boldsymbol{p}$ が（3）の第 2 式で与えられたように，φ に共役な角運動量として

$$S_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{4}$$

と定義[5]してもよいように思われる。しかしこの考えはスピン角運動量 $\boldsymbol{S}$ の大きさが $(1/2)\hbar$ ということから受け入れがたいものとなる。というのは，S_z の固有値は $\pm(1/2)\hbar$ となり，S_z の固有関数は $exp(\pm\frac{i}{2}\varphi)$ にならねばならないが，この関数は φ を 0 から 2π までもってきたとき，もとの値に戻らない 2 価関数となり，そういうものを固有関数として許すには無理がある（←補足参照）。

【補足】（その 1）軌道角運動量 $\boldsymbol{\ell}^2$ と ℓ_z の共通の固有関数を $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ とすると

$$\boldsymbol{\ell}^2 Y_{\ell m} = \hbar^2\ell(\ell+1)Y_{\ell m}$$
$$\ell_z Y_{\ell m} = \hbar m Y_{\ell m}$$

これから $Y_{\ell m} = P_{\ell m}(cos\theta)exp(im\varphi)$ で与えられ，この関数が 1 価関数であるためには

$$Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = Y_{\ell m}(\theta,\varphi+2\pi)$$

でなければならないことから $m = 0, \pm1, \pm2, \pm3, \cdots$ が得られる。したがって，ℓ は $\ell = 0, 1, 2, 3, \cdots$ という整数に限られる。
（その 2）… くどいようだが。極座標表示では書く運動量の z 成分演算子は $\ell_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$ と表されるので ℓ_z の固有関数は $e^{im\varphi}$ と書ける。

$$\ell_z e^{im\varphi} = m\hbar e^{im\varphi}$$

[5]軌道角運動量 $l_z = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$ を思いだそう。

より固有値は $m\hbar$ となる。m のことを磁気量子数と呼ぶ。φ の状態と $\varphi+2\pi$ の状態が物理的に同じ状態であることを要請（波動関数の一価性）

$$e^{im\varphi} = e^{im(\varphi+2\pi)} = e^{im\phi}e^{2\pi i}$$

より m は整数でなければならない。

2.1 パウリのスピン理論

そこでスピン自由度を理論に組み込むのに角度 φ を採用するのをやめ、自転角運動量 S_z の主軸（古典的に考えると自転軸）を採用する。つまりシュレーディンガー関数として $\psi(\boldsymbol{x},\varphi)$ のかわりに $\psi(\boldsymbol{x},S_z)$ を用いることにする。このとき S_z は $+\frac{1}{2}\hbar$ と $-\frac{1}{2}\hbar$ の 2 つの値だけをとる変数である。以後、いちいち角運動量の単位 $\hbar$ を書くのも面倒なのと煩わしいので $\hbar$ 単位ではかったもの $\boldsymbol{s}$ を用いることにする。

$$\boldsymbol{S} = \hbar\boldsymbol{s}, \qquad S_x = \hbar s_x, \qquad S_y = \hbar s_y, \qquad S_z = \hbar s_z \tag{5}$$

ここで改めてシュレーディンガー関数

$$\psi(\boldsymbol{x}, s_z), \qquad s_z = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \tag{6}$$

の意味を確認しておくと

- 電子が $\boldsymbol{x}$ という場所の近傍に存在し、かつそのスピンが上向きである確率密度

$$\left|\psi\left(\boldsymbol{x}, +\frac{1}{2}\right)\right|^2$$

- 電子が $\boldsymbol{x}$ という場所の近傍に存在し、かつそのスピンが下向きである確率密度

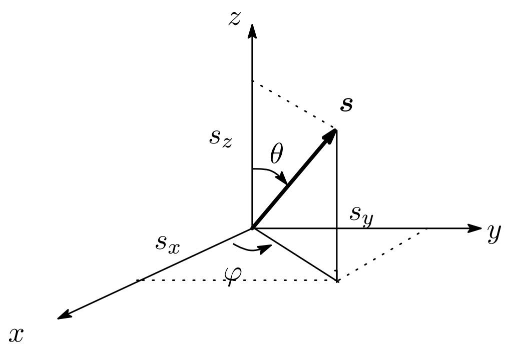
$$\left|\psi\left(\boldsymbol{x}, -\frac{1}{2}\right)\right|^2$$

ということになる。s_z が $\pm 1/2$ の 2 つの値しかとらないということは、スピン自由度の状態空間が二次元のベクトル空間であることを意味する。そうすると $\psi\left(\boldsymbol{x},+\frac{1}{2}\right)$, $\psi\left(\boldsymbol{x},-\frac{1}{2}\right)$ はその状態空間での状態ベクトルの成分[6]であるとみなすことができる。

2.2 パウリの σ マトリクス

$\psi(x,y,z,s_z)$ の形のシュレーディンガー関数の場合、スピン角運動量の z 成分という物理量に対しては $s_z\times$ という演算子を用いればよい（物理量を表す演算子は位置座標 $q(x,y,z)$ の演算子は $\psi(q)$ に q を乗ずる演算子 $q\times$ となるし、また q の共役運動量 p に対しては演

[6] 後ほど明らかになるが二次元空間（u,v であらわされる複素軸をもった uv 空間）での複素ベクトル成分である。なお、この複素ベクトルをスピノールと呼んでいる。



$$s_z = s \cdot cos\theta$$

$$s_x = s \cdot sin\theta cos\varphi$$

$$s_y = s \cdot sin\theta sin\varphi$$

Figure 1: スピン $\boldsymbol{s}$ の座標表記

算子 $-i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\times$ を用いることに相当する)。それなら s_x,s_y はどんな演算子を考えればよいのだろうか？ということで Fig.1 を見ていただきたい。Fig.1 より

$$\begin{aligned} s_z^2 &= s^2 \cdot cos^2\theta \\ s_x^2 &= s^2 \cdot sin^2\theta \cos^2\varphi = (s^2 - s_z^2)\cos^2\varphi \\ s_y^2 &= s^2 \cdot sin^2\theta \sin^2\varphi = (s^2 - s_z^2)\sin^2\varphi \end{aligned}$$

これから

$$s_x = \sqrt{s^2 - s_z^2}\cos\varphi \tag{7}$$

$$s_y = \sqrt{s^2 - s_z^2}\sin\varphi \tag{8}$$

と表すことができる。ここで φ と $\hbar s_z$ は共役だから φ を $i\dfrac{\partial}{\partial s_z}$ と置いた演算子[7]がとりもなおさず求める演算子ではなかろうか？ ただし、このとき $cos\left(i\dfrac{\partial}{\partial s_z}\right)$ や $sin\left(i\dfrac{\partial}{\partial s_z}\right)$ をどう定義するかという厄介な問題が残る。これはあまりにもややこしいいきかただとしてパウリは採用しなかった。そのかわり、軌道角運動量の満たす交換関係はスピン角運動量 (s_x, s_y, s_z) に対しても成り立っていると考えた。角運動量 (ℓ_x, ℓ_y, ℓ_z) は一般に次の交換関係を満たす（$\hbar$ を単位とする)。

$$[\ell_x, \ell_y] = i\ell_z, \qquad [\ell_y, \ell_z] = i\ell_x, \qquad [\ell_z, \ell_x] = i\ell_y \tag{9}$$

さらに

$$|\boldsymbol{\ell}|^2 = \ell(\ell+1), \qquad \ell = 0, 1, 2, \cdots \text{または}\ 1/2, 3/2, \cdots \tag{10}$$

という固有値を持っている。スピン角運動量にも同様の交換関係

$$[s_x, s_y] = is_z, \qquad [s_y, s_z] = is_x, \qquad [s_z, s_x] = is_y \tag{11}$$

[7] q と共役な運動量 p の演算子は $p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q}$。運動量表示では $x = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}$ と書ける。これを s_z と φ の関係に当てはめればよい。

を要請し、かつ

$$|\boldsymbol{s}|^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) = \frac{3}{4} \tag{12}$$

が成り立つと仮定した。そこでいわゆる「パウリのマトリックス」と呼ばれる 2 行 2 列のマトリクス

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{13}$$

を導入し、スピン演算子をこのマトリクスを用いて

$$s_x = \frac{1}{2}\sigma_x, \qquad s_y = \frac{1}{2}\sigma_y, \qquad s_z = \frac{1}{2}\sigma_z \tag{14}$$

とおいた。これは（11）（12）を満たすことはすぐわかる。パウリマトリクスは次の性質を持つことを注意しておく。

$$\begin{cases} \sigma_\mu^2 = 1 & (\mu = x, y, z \text{ に対して}) \\ \sigma_\mu\sigma_\nu + \sigma_\nu\sigma_\mu = 0 & (\mu \neq \nu,\ \mu, \nu = x, y, z \text{ に対して}) \end{cases} \tag{15}$$

2.3　パウリ方程式

シュレーディンガー関数 $\psi(\boldsymbol{x}, s_z)$ の独立変数 s_z は＋1/2 と－1/2 という二つの値しかとらないことに注目すると $\psi(\boldsymbol{x}, s_z)$ は $\psi(\boldsymbol{x}, +\frac{1}{2})$ と $\psi(\boldsymbol{x}, -\frac{1}{2})$ を成分とする 2 成分の関数であると考えることができる。そうすると ψ は次の形に表せる。

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi\left(\boldsymbol{x}, +\frac{1}{2}\right) \\ \psi\left(\boldsymbol{x}, -\frac{1}{2}\right) \end{pmatrix} \tag{16}$$

すると ψ に s_x, s_y, s_z を作用させることはこの縦ベクトルにスピン演算子（14）を掛けることを意味する。これがパウリの提案である。つまり

$$\begin{aligned} \sigma_x\psi &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi\left(\frac{1}{2}\right) \\ \psi\left(-\frac{1}{2}\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi\left(-\frac{1}{2}\right) \\ \psi\left(\frac{1}{2}\right) \end{pmatrix} \\ \sigma_y\psi &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi\left(\frac{1}{2}\right) \\ \psi\left(-\frac{1}{2}\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\psi\left(-\frac{1}{2}\right) \\ i\psi\left(\frac{1}{2}\right) \end{pmatrix} \\ \sigma_z\psi &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi\left(\frac{1}{2}\right) \\ \psi\left(-\frac{1}{2}\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi\left(\frac{1}{2}\right) \\ -\psi\left(-\frac{1}{2}\right) \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{17}$$

となるから、結局、シュレーディンガー関数にスピン演算子を作用させた結果は

$$\begin{aligned} s_x\psi &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\psi\left(-\frac{1}{2}\right) \\ \frac{1}{2}\psi\left(\frac{1}{2}\right) \end{pmatrix} \\ s_y\psi &= \begin{pmatrix} -\frac{i}{2}\psi\left(-\frac{1}{2}\right) \\ \frac{i}{2}\psi\left(\frac{1}{2}\right) \end{pmatrix} \\ s_z\psi &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\psi\left(\frac{1}{2}\right) \\ -\frac{1}{2}\psi\left(-\frac{1}{2}\right) \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{18}$$

ということになる。ここで $\psi(\frac{1}{2})$ に s_z を施したものは、ちゃんと $\frac{1}{2}\psi(\frac{1}{2})$ に、$\psi(-\frac{1}{2})$ に作用させたものはちゃんと $-\frac{1}{2}\psi(-\frac{1}{2})$ にになっている。以上がパウリの考え方であった。こういう考え方をするとシュレーディンガー方程式

$$\left\{H_0 + H_1 - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right\}\psi(\boldsymbol{x}, s_z) = 0 \tag{19}$$

は、 $\psi(\boldsymbol{x}, +\frac{1}{2})$ と $\psi(\boldsymbol{x}, -\frac{1}{2})$ の 2 つの関数に対する連立微分方程式となる。これをパウリ方程式と呼ぶ。

2.4 反対称波動関数

量子力学では同種の粒子はまったく同じ ”顔 ”を持っているため識別することが不可能で、2 個の同種粒子を交換しても状態は変わらない。電子の場合、位置座標 $\boldsymbol{x}$ とスピンをまとめて ξ と略記すれば、2 電子系の波動関数の反対波動関数[8]となることが知られている。

$$\psi(\xi_2, \xi_1) = -\psi(\xi_1, \xi_2)$$

このことをパウリの理論から導いてみよう。

【証明】

２つの電子スピンマトリクスをそれぞれ $\boldsymbol{s_1} = (s_{1x}, s_{1y}, s_{1z})$, $\boldsymbol{s_2} = (s_{2x}, s_{2y}, s_{2z})$ とする。合成スピン $(\boldsymbol{s_1} + \boldsymbol{s_2})$ の大きさの 2 乗は（14）を使って

$$|\boldsymbol{s_1}^2 + \boldsymbol{s_2}^2| = |\boldsymbol{s_1}|^2 + |\boldsymbol{s_2}|^2 + 2(\boldsymbol{s_1}\cdot\boldsymbol{s_2}) \tag{20}$$

$$= \frac{1}{2}\{3 + 4(\boldsymbol{s_1}\cdot\boldsymbol{s_2})\} \tag{21}$$

となる。2 電子系のシュレーディンガー関数 $\psi(s_{1z}, s_{2z})$ を

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \\ \psi\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) \\ \psi\left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \\ \psi\left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) \end{pmatrix} \tag{22}$$

とし、これにマトリクス $(\boldsymbol{s_1}\cdot\boldsymbol{s_2})$ を掛けると

$$(\boldsymbol{s_1}\cdot\boldsymbol{s_2})\psi = \begin{cases} (\boldsymbol{s_1}\cdot\boldsymbol{s_2})\psi\left(\dfrac{1}{2}, \dfrac{1}{2}\right) = \dfrac{1}{4}\psi\left(\dfrac{1}{2}, \dfrac{1}{2}\right) \\ (\boldsymbol{s_1}\cdot\boldsymbol{s_2})\psi\left(\dfrac{1}{2}, \dfrac{1}{2}\right) = \dfrac{1}{2}\psi\left(-\dfrac{1}{2}, \dfrac{1}{2}\right) - \dfrac{1}{4}\psi\left(\dfrac{1}{2}, -\dfrac{1}{2}\right) \\ (\boldsymbol{s_1}\cdot\boldsymbol{s_2})\psi\left(-\dfrac{1}{2}, \dfrac{1}{2}\right) = \dfrac{1}{2}\psi\left(\dfrac{1}{2}, -\dfrac{1}{2}\right) - \dfrac{1}{4}\psi\left(-\dfrac{1}{2}, \dfrac{1}{2}\right) \\ (\boldsymbol{s_1}\cdot\boldsymbol{s_2})\psi\left(-\dfrac{1}{2}, -\dfrac{1}{2}\right) = \dfrac{1}{4}\psi\left(-\dfrac{1}{2}, -\dfrac{1}{2}\right) \end{cases} \tag{23}$$

[8]同種粒子系の波動関数は、座標の交換に対して対称か反対称のいずれかであり、$\hbar$ の整数倍のスピンを持つ粒子（ボーズ粒子：光子、等）は対称的波動関数で記述され、$(1/2)\hbar$ の奇数倍のスピンを持つ粒子（フェルミ粒子：電子、陽子、中性子、等）は反対称波動関数で記述される。

となる。
おまけとして計算プロセスをレビューしておきます。(18) より

$$
\begin{array}{lcl}
s_x\psi(\frac{1}{2}) = \frac{1}{2}\psi(-\frac{1}{2}) & , & s_x\psi(-\frac{1}{2}) = \frac{1}{2}\psi(\frac{1}{2}) \\
s_y\psi(\frac{1}{2}) = -\frac{i}{2}\psi(-\frac{1}{2}) & , & s_y\psi(-\frac{1}{2}) = \frac{i}{2}\psi(\frac{1}{2}) \\
s_z\psi(\frac{1}{2}) = \frac{1}{2}\psi(\frac{1}{2}) & , & s_x\psi(-\frac{1}{2}) = -\frac{1}{2}\psi(-\frac{1}{2})
\end{array}
\tag{24}
$$

$$
\begin{aligned}
(s_{1x}s_{2x}+s_{1y}s_{2y}+s_{1z}s_{2z})\,\psi\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{4}\psi\left(-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right) - \left(\frac{1}{4}\right)\psi\left(-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{4}\psi\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right) \\
&= \frac{1}{4}\psi\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right) \\
(s_{1x}s_{2x}+s_{1y}s_{2y}+s_{1z}s_{2z})\,\psi\left(\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{4}\psi\left(-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right) + \left(\frac{1}{4}\right)\psi\left(-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right) - \frac{1}{4}\psi\left(\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right) \\
&= \frac{1}{2}\psi\left(-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right) - \frac{1}{4}\psi\left(\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right) \\
(s_{1x}s_{2x}+s_{1y}s_{2y}+s_{1z}s_{2z})\,\psi\left(-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{4}\psi\left(\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right) + \left(\frac{1}{4}\right)\psi\left(\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right) - \frac{1}{4}\psi\left(-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right) \\
&= \frac{1}{2}\psi\left(\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right) - \frac{1}{4}\psi\left(-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right) \\
(s_{1x}s_{2x}+s_{1y}s_{2y}+s_{1z}s_{2z})\,\psi\left(-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{4}\psi\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right) - \left(\frac{1}{4}\right)\psi\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{4}\psi\left(-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right) \\
&= \frac{1}{4}\psi\left(-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right)
\end{aligned}
$$

整理すると

$$
(\boldsymbol{s_1}\cdot\boldsymbol{s_2})\psi = \begin{cases}
\frac{1}{4}\psi\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right) \\
\frac{1}{2}\psi\left(-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right) - \frac{1}{4}\psi\left(-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right) \\
\frac{1}{2}\psi\left(\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right) - \frac{1}{4}\psi\left(-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right) \\
\frac{1}{4}\psi\left(-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right)
\end{cases}
\tag{25}
$$

これから

$$
|\boldsymbol{s_1}+\boldsymbol{s_2}|^2\psi = \begin{cases}
2\psi\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right) \\
\psi\left(\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right) + \psi\left(-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right) \\
\psi\left(-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right) + \psi\left(\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right) \\
2\psi\left(-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right)
\end{cases}
\tag{26}
$$

が導かれる。合成スピンが 1 ということは $\boldsymbol{s}=\boldsymbol{s_1}+\boldsymbol{s_2}=1$ であるから

$$
|\boldsymbol{s_1}+\boldsymbol{s_2}|^2\psi = 1(1+1)\psi = 2\psi
$$

これが成り立つための必要十分条件は（22）と（26）より

$$\psi\left(\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right)+\psi\left(-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)=2\psi\left(\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right)$$

である。これは

$$\psi\left(\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right)=\psi\left(-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$$

であるから、結局

$$\psi(s_{1z},s_{2z})=\psi(s_{2z},s_{1z})$$

で、この場合シュレーディンガーの関数はスピンの交換に対して対称であることを意味する。同様にして、合成スピンが 0 の場合は

$$|\boldsymbol{s_1}+\boldsymbol{s_2}|^2\psi=0$$

であるから、（26）より

$$\psi\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)=\psi\left(-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right)=0$$
$$\psi\left(\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right)+\psi\left(-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)=0$$

が成り立つことが必要十分条件である。これから

$$\psi(s_{1z},s_{2z})=-\psi(s_{2z},s_{1z})$$

となり、シュレーディンガーの関数はスピンの交換に対して反対称となることがわかる[9]。

3　ベクトルでもテンソルでもない量ースピノル族の発見

3.1　共変量

今まで何度もでてきたが、パウリ方程式で ψ は次のような 2 成分量で書かれた。

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi_1(x,y,z)\\ \psi_2(x,y,z)\end{pmatrix} \tag{27}$$

このような 2 成分量は 3 次元空間内でのスカラー、ベクトル、テンソルというカテゴリーで考えたとき、いったいどのカテゴリーに属するものかをここで議論する。その前に、ベクトルやテンソルの定義を簡単にレビューしておこう。ベクトルやテンソルは 3 次元直交座標の回転に対する変換の仕方で定義された[10]。

[9] ここの証明は簡潔で非常に分かりやすい証明と感心した。Pauli がこの様な証明をしたのか、あるいは朝永先生がこの本のために書かれたのかよく知らないが。。。

[10] 詳しくは CoffeeBreak の「座標変換とスピノール」を参照されたい。

＜ベクトル＞

$$\left.\begin{aligned} {x_i}' &= \sum_{j=1,2,3} A_{i,j} x_j \qquad i=1,2,3 \\ x_j &= \sum_{i=1,2,3} x_i' A_{i,j} \qquad j=1,2,3 \\ det(A) &= \begin{cases} +1 & \text{回転} \\ -1 & \text{反転} \end{cases} \end{aligned}\right\} \tag{28}$$

3 成分の量 (a_1, a_2, a_3) が座標変換 A によって（28）と同じ変換

$${a_i}' = \sum_{j=1,2,3} A_{i,j} a_j \qquad i=1,2,3 \tag{29}$$

を受けるならば 3 成分量 (a_1, a_2, a_3) をベクトルと呼ぶ（←これがベクトルの定義）。この定義から当然

$$a_j = \sum_{i=1,2,3} a_i' A_{i,j} \qquad i=1,2,3 \tag{30}$$

も成立する。

＜テンソル＞

9 成分の量

$$(a_{ij}) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \qquad i=1,2,3; j=1,2,3 \tag{31}$$

があったとする。このような 9 成分量が座標回転 A によって (a_{ij}) の成分が次のように変換されるならば

$${a_{ij}}' = \sum_{k=1,2,3} \sum_{l=1,2,3} A_{ik} A_{jl} a_{kl} \tag{32}$$

この (a_{ij}) 成分を 2 階テンソルと呼ぶ。また、

$$a_{kl} = \sum_{i=1,2,3} \sum_{j=1,2,3} {a_{ij}}' A_{ik} A_{jl} \tag{33}$$

も成立する。${a_{ij}}'$ を具体的に書くと

$$\begin{aligned} {a_{ij}}' = & A_{i1}A_{j1}a_{11} + A_{i1}A_{j2}a_{12} + A_{i1}A_{j3}a_{13} \\ & +A_{i2}A_{j1}a_{21} + A_{i2}A_{j2}a_{22} + A_{i2}A_{j3}a_{23} \\ & +A_{i3}A_{j1}a_{31} + A_{i3}A_{j2}a_{32} + A_{i3}A_{j3}a_{33} \end{aligned} \tag{34}$$

(35)

係数 $A_{ik}A_{jl}$ を

$$A_{ik}A_{jl} \equiv A_{ij,kl}$$

と書いて 9 行 9 列のマトリクス

$$A^{(2)} \equiv (A_{ij,kl}) \qquad i,j=1,2,3;\ k,l=1,2,3 \tag{36}$$

を定義する。具体的に書くと

$$A^{(2)} = \begin{pmatrix} A_{11,11} & A_{11,12} & A_{11,13} & A_{12,11} & A_{12,12} & A_{12,13} & A_{13,11} & A_{13,12} & A_{13,13} \\ A_{11,21} & A_{11,22} & A_{11,23} & A_{12,21} & A_{12,22} & A_{12,23} & A_{13,21} & A_{13,22} & A_{13,23} \\ A_{11,31} & A_{11,32} & A_{11,33} & A_{12,31} & A_{12,22} & A_{12,33} & A_{13,31} & A_{13,32} & A_{13,33} \\ A_{21,11} & A_{21,12} & A_{21,13} & A_{22,11} & A_{22,12} & A_{22,13} & A_{23,11} & A_{23,12} & A_{23,13} \\ A_{21,21} & A_{21,22} & A_{22,23} & A_{22,21} & A_{22,22} & A_{22,23} & A_{23,21} & A_{23,22} & A_{23,23} \\ A_{21,31} & A_{21,32} & A_{23,33} & A_{23,31} & A_{22,32} & A_{22,33} & A_{23,31} & A_{23,32} & A_{23,33} \\ A_{31,11} & A_{31,12} & A_{31,13} & A_{32,11} & A_{32,12} & A_{32,13} & A_{33,11} & A_{33,12} & A_{33,13} \\ A_{31,21} & A_{31,22} & A_{32,23} & A_{32,21} & A_{32,22} & A_{32,23} & A_{33,21} & A_{33,22} & A_{33,23} \\ A_{31,31} & A_{31,32} & A_{33,33} & A_{32,31} & A_{32,32} & A_{32,33} & A_{33,31} & A_{33,32} & A_{33,33} \end{pmatrix} \tag{37}$$

そうすると（32）（33）は

$$a_{ij}{}' = \sum_{k,l=1,2,3} A_{ij,kl} a_{kl} \tag{38}$$

$$a_{kl} = \sum_{i,j=1,2,3} a_{ij} A_{ij,kl} \tag{39}$$

の形に書くことができる。これがベクトルの場合の（29）（30）に相当する関係である。

＜直積＞

2 つのマトリクス $A = (A_{il})$ と $B = B(_{jm})$ があったとき

$$A_{il} B_{jm} = C_{ij,lm}$$

で $C_{ij,lm}$ を定義し、それを用いて組み立てられるマトリックス

$$C = (C_{ij,lm})$$

を ”A と B の直積[11] ”と名づけ、それを

$$C = A \times B \tag{40}$$

[11] テンソル積とも呼ばれる。

と書く。この状況を具体的に表すと

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{11} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} \\ B_{31} & B_{32} & B_{33} \end{pmatrix} \rightarrow \quad A, B \text{ の直積 } C \text{ は}$$

$$C = \begin{pmatrix} A_{11}B_{11} & A_{11}B_{12} & A_{11}B_{13} & A_{12}B_{11} & A_{12}B_{12} & A_{12}B_{13} & A_{13}B_{11} & A_{13}B_{12} & A_{13}B_{13} \\ A_{11}B_{21} & A_{11}B_{22} & A_{11}B_{23} & A_{12}B_{21} & A_{12}B_{22} & A_{12}B_{23} & A_{13}B_{21} & A_{13}B_{22} & A_{13}B_{23} \\ A_{11}B_{31} & A_{11}B_{32} & A_{11}B_{33} & A_{12}B_{31} & A_{12}B_{32} & A_{12}B_{33} & A_{13}B_{31} & A_{13}B_{32} & A_{13}B_{33} \\ A_{21}B_{11} & A_{21}B_{12} & A_{21}B_{13} & A_{22}B_{11} & A_{22}B_{12} & A_{22}B_{13} & A_{23}B_{11} & A_{23}B_{12} & A_{21}B_{13} \\ A_{21}B_{21} & A_{21}B_{22} & A_{21}B_{23} & A_{22}B_{21} & A_{22}B_{22} & A_{22}B_{23} & A_{23}B_{21} & A_{23}B_{22} & A_{23}B_{23} \\ A_{21}B_{31} & A_{21}B_{32} & A_{21}B_{33} & A_{22}B_{31} & A_{22}B_{32} & A_{22}B_{33} & A_{22}B_{31} & A_{23}B_{32} & A_{23}B_{33} \\ A_{31}B_{11} & A_{31}B_{22} & A_{31}B_{13} & A_{32}B_{11} & A_{32}B_{12} & A_{32}B_{13} & A_{33}B_{11} & A_{33}B_{12} & A_{33}B_{13} \\ A_{31}B_{21} & A_{31}B_{22} & A_{31}B_{23} & A_{32}B_{21} & A_{32}B_{22} & A_{32}B_{23} & A_{33}B_{21} & A_{33}B_{22} & A_{33}B_{23} \\ A_{31}B_{31} & A_{31}B_{32} & A_{31}B_{33} & A_{32}B_{31} & A_{32}B_{32} & A_{32}B_{33} & A_{33}B_{31} & A_{33}B_{32} & A_{33}B_{33} \end{pmatrix}$$

と 9 行 9 列のマトリクスで表すことができる。そうすると（36）の $A^{(2)}$ は A と A の直積

$$A^{(2)} = A \times A \tag{41}$$

だと言ってもよい。したがって ”2 階テンソルとは、座標系の回転 A に応じてその成分が $A^{(2)} = A \times A$ で変換される量である ”と言うことができる。この言い方をすれば例えば 3 階テンソルとは座標系の回転 A に応じてその成分が $A^{(3)} = A \times A \times A$ によって変換される 3^3 成分の量であるということができる。そうするとベクトルは、座標系の回転 A に応じてその成分が $A^{(1)} = A$ によって変換される量であるとなる。この意味でベクトルのことを１階テンソルと呼ぶこともある。さらにスカラーは $A^{(0)} = 1$ で変換されるものと考えると、それは０階のテンソルということになる。

＜共変量＞

- 座標系の回転とテンソル成分（０階テンソル：スカラー、１階テンソル:ベクトル、$\cdots$）は常に１：１に対応する
- 座標系の回転 A, B, C があれば、そのそれぞれにテンソル成分の変換マトリクス $A^{(n)}, B^{(n)}, C^{(n)}$ が対応する
- $C = B \cdot A$ が成り立つなら $C^{(n)} = B^{(n)} \cdot A^{(n)}$ も成り立つ

座標系の回転と任意階テンソル成分の変換マトリクスとの間には常に１：１の対応があり、しかも ”積には積が ”と対応する。このような対応が存在することを、テンソル成分の変換と座標系の回転とは「共変する」という。そしてベクトルやテンソルを共変量と呼んでいる。

<蛇足の補足>

1. スカラー関数
もっとも簡単なポテンシャルを例にとる。R 系においてポテンシャルが $\phi(x_1, x_2, x_3)$ であったとき、R' 系でのポテンシャルは（28）を参照すると

$$\bar{\phi}(x_1{}', x_2{}', x_3{}') \equiv \phi(\sum_k x_k{}' A_{k,1}, \sum_k x_k{}' A_{k,2}, \sum_k x_k{}' A_{k,2}) \tag{42}$$
$$= \phi(x_1, x_2, x_3) \tag{43}$$

となる。ポテンシャルはスカラーだからどちらの系でも同じ値となるので（43）の結果は当たり前といえば当たり前。ただし、ここで左辺の $\bar{\phi}$ と右辺の ϕ の関数形は異なっていることに注意しよう。

2. ベクトル関数[12]
R 系でのベクトル $\boldsymbol{E} = (E_j(x_1, x_2, x_3))$, $j = 1, 2, 3$ は R' 系では変換されて

$$(E_j(x_1, x_2, x_3)) \longrightarrow (\sum_j A_{k,j} \bar{E}_j(x_1{}', x_2{}', x_3{}')) \quad k = 1, 2, 3 \tag{44}$$
$$\bar{E}_j(x'_1, x'_2, x'_3) \ \equiv \ E_j(\sum_k x_k{}' A_{k,1}, \sum_k x_k{}' A_{k,2}, \sum_k x_k{}' A_{k,3}) \tag{45}$$

となる。変換（44）は、いわば最初それぞれの成分 $E_j(x_1, x_2, x_3)$ を互いに無関係なスカラーのように考え、（42）によってそれを変換し、次にそれがベクトル成分であったことを思い出して（29）を用いるという段取りのように考えてもよい。

―――［蛇足の補足終わり］

3.2 スピノル族の登場

いよいよ 2 成分量スピノル族の登場である。このスピノル族の変換性を外部磁場が作用しているパウリ方程式をネタに調べていく。

●パウリ方程式

$$\left\{ H_0 + H_s - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right\} \psi = 0 \qquad \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \tag{46}$$

ハミルトニアン H_0 はスピンに関係しない部分で H_s はスピンに関係する部分。その中身は

$$H_0 = \frac{1}{2m} \sum_k p_k{}^2 - \frac{Ze^2}{r} + \frac{e\hbar}{2mc} \sum_k H_k I_k \tag{47}$$

$$H_s = \frac{e\hbar}{2mc} \sum_k H_k \sigma_k + \frac{e\hbar}{4mc} \sum_k H_k^{(i)} \sigma_k \tag{48}$$

[12] (45) の左辺が落丁していたのを修正。2017.4.11 Thank's sg さん

$$
\begin{cases}
H_0 & \text{：スピンに関係しない部分} \\
H_s & \text{：スピンに関係する部分} \\
\boldsymbol{H} = (H_1, H_2, H_3) & \text{：外部磁場} \\
\boldsymbol{H^{(i)}} = (H_1{}^{(i)}, H_2{}^{(i)}, H_3{}^{(i)}) & \text{：内部磁場} \\
\boldsymbol{\ell} = (\ell_1, \ell_2, \ell_3) & \text{：軌道角運動量} \\
\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} = (\frac{1}{2}\sigma_1, \frac{1}{2}\sigma_2, \frac{1}{2}\sigma_3) & \text{：スピン角運動量} \\
\sum_k H_k \ell_k & \text{：}\boldsymbol{H}\text{と軌道磁気能率との相互作用エネルギー} \\
\sum_k H_k \sigma_k & \text{：}\boldsymbol{H}\text{とスピン磁気能率との相互作用エネルギー} \\
\sum_k H_k{}^{(i)} \sigma_k & \text{：内部磁場とスピン磁気能率との相互作用エネルギー}
\end{cases}
$$

＜パウリ方程式の座標変換に対する変換性＞

パウリ方程式の座標変換に対する変換性を調べてみよう。(46) が成立している座標系を R 系とし、その系を R' 系に変換する。

1. H_0 のすべての項はスカラーであるから R' 系において

$$H_0' = \frac{1}{2m}\sum_k {p_k}'^2 - \frac{Ze^2}{r} + \frac{e\hbar}{2mc}\sum_k {H_k}'{\ell_k}' \tag{49}$$

に変換される。しかし H_0 は関数 $\psi(\boldsymbol{x})$ に作用する演算子であるから、スカラーといっても $H_0' = H_0$ が成り立つのでなく

$$H_0'\bar{\psi}(\boldsymbol{x}') = H_0\psi(\boldsymbol{x}) \tag{50}$$

が成り立つことに注意。これが成り立つことで H_0 に関する限り、R' 系のでパウリの方程式の形は R 系でのそれとまったく同じになる。

2. H_s は 2 つの項をまとめて

$$
\begin{aligned}
H_s &= \frac{e\hbar}{2mc}\sum_k H_k\sigma_k + \frac{e\hbar}{4mc}\sum_k H_k^{(i)}\sigma_k \\
&= \left(\frac{e\hbar}{2mc}\sum_k H_k + \frac{e\hbar}{4mc}\sum_k H_k^{(i)}\right)\sigma_k \\
&= \sum_k V_k\sigma_k
\end{aligned}
$$

という形に書いておく。そうすると H_s は $\boldsymbol{V}$ と $\boldsymbol{\sigma}$ のスカラー積となるから R' 系では

$$H_s' = \sum_k V_k'\sigma_k' \tag{51}$$

となるはずである。ただし、

$$
\begin{aligned}
\sigma'_k &= \sum_j A_{k,j}\sigma_j \\
&= \sum_j A_{k,j}\sigma_j = A_{k,1}\sigma_1 + A_{k,2}\sigma_2 + A_{k,3}\sigma_3 \\
&= A_{k,1}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + A_{k,2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + A_{k,3}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} A_{k,3} & A_{k,1} - iA_{k,2} \\ A_{k,1} + iA_{k,2} & -A_{k,3} \end{pmatrix} \qquad k = 1, 2, 3
\end{aligned} \tag{52}
$$

ということで

$$
H'_s\bar{\psi}(\boldsymbol{x}') = H_s\psi(\boldsymbol{x}) \tag{53}
$$

が成立する。

3. しかし、H_0 の場合とちがって（53）が成り立つからといって、2 成分量に対する方程式が共変形になるとはいえない。というのは、共変形というのは、それを成分間の連立方程式の形に書いたとき、どの座標系でも同じ形のものが得られるということである。この点を以下に調べてみよう。

$$
\begin{aligned}
H_s\psi &= \left(\sum_k V_k\sigma_k\right)\psi = \left(\sum_k V_k\sigma_k\right)\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \\
&= V_1\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} + V_2\begin{pmatrix} -i\psi_2 \\ i\psi_2 \end{pmatrix} + V_3\begin{pmatrix} \psi_1 \\ -\psi_2 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{54}
$$

と書ける。一方、

$$
\begin{aligned}
H'_s\bar{\psi} &= \left(\sum_k V'_k\sigma'_k\right)\bar{\psi} = \left(\sum_k V'_k\sigma'_k\right)\begin{pmatrix} \psi'_1 \\ \psi'_2 \end{pmatrix} \\
&= V'_1\begin{pmatrix} A_{1,3}\psi'_1 + (A_{1,1} - iA_{1,2})\psi'_2 \\ (A_{1,1} + iA_{1,2})\psi_1 - A_{1,3}\psi'_2 \end{pmatrix} + V'_2\begin{pmatrix} A_{2,3}\psi'_1 + (A_{2,1} - iA_{2,2})\psi'_2 \\ (A_{2,1} + iA_{2,2})\psi_1 - A_{2,3}\psi'_2 \end{pmatrix} \\
&\quad + V'_3\begin{pmatrix} A_{3,3}\psi'_1 + (A_{3,1} - iA_{3,2})\psi'_2 \\ (A_{3,1} + iA_{3,2})\psi_1 - A_{3,3}\psi'_2 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{55}
$$

となり、（54）（55）は成分表示で見るとまったくちがう形になっているではないか。共変形となるためには H'_s が $\sum_k V'_k\sigma'_k$ でなく $\sum_k V'_k\sigma_k$ でなければならない。この困難をどうして乗り越えることができるのか？

3.2.1 スピノル登場前夜

今までの議論で、R 系から R' 系に移るとき、ψ の二つの成分 ψ_1 と ψ_2 とをそれぞれ無関係なスカラーと考えて取り扱ってきたところに問題があるのではないか。つまり R' 系での 2 成分量として用いるべきものは、$\begin{pmatrix} \bar{\psi}_1(\boldsymbol{x}') \\ \bar{\psi}_2(\boldsymbol{x}') \end{pmatrix}$ そのものではなくて、なにか

$$\bar{\psi}_\beta(\boldsymbol{x}') = \sum_{\alpha=1,2} U_{\beta,\alpha}\bar{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}') \qquad \beta = 1,2 \tag{56}$$

の形の変換によってえられる $\begin{pmatrix} \bar{\psi}_1(\boldsymbol{x}') \\ \bar{\psi}_2(\boldsymbol{x}') \end{pmatrix}$ ではないだろうか。これをやらないから R 系と R' 系とで方程式の形が食いちがってくるんではないだろうか。パウリの慧眼である。

3.2.2 スピノル族の登場

パウリは、パウリマトリクス $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ と $\sigma'_1, \sigma'_2, \sigma'_3$ とはあるユニタリ・マトリクス[13] U を用いて

$$\sigma'_1 = U^{-1}\sigma_1 U,\ \sigma'_2 = U^{-1}\sigma_2 U,\ \sigma'_3 = U^{-1}\sigma_3 U \tag{57}$$

の関係で結ばれているという事実に着目した。ここでユニタリ・マトリクス U は R 系から R' 系へ移る回転 A に関係するが、x_1, x_2, x_3, t には無関係なマトリクスである[14]。
（57）を（51）の右辺に代入すると

$$H'_s = U^{-1}(\sum_k V'_k \sigma_k)U$$

が得られる。この両辺に $\bar{\psi}(\boldsymbol{x}')$ を作用すると

$$H'_s\bar{\psi}(\boldsymbol{x}') = U^{-1}\left(\sum_k V_k{}'\sigma_k\right)U\bar{\psi}(\boldsymbol{x}')$$

となり、（53）を用い、さらに両辺に U を作用させると

$$\left(\sum_k V_k{}'\sigma_k\right)U\bar{\psi}(\boldsymbol{x}') = UH_s\psi(\boldsymbol{x}) \tag{58}$$

が導かれる。ここで $\bar{\psi}'(\boldsymbol{x}')$ という 2 成分量を

$$\bar{\psi}'(\boldsymbol{x}') \equiv U\bar{\psi}(\boldsymbol{x}') \tag{59}$$

によって導入すると、次の関係式がでてくる。

$$\left(\sum_k V_k{}'\sigma_k\right)\bar{\psi}'(\boldsymbol{x}') = UH_s\psi(\boldsymbol{x}) \tag{60}$$

[13]ユニタリ・マトリクス U とは、その逆 U^{-1} が存在し、かつそれが U のエルミート共役マトリクス $U^\dagger$ に等しいマトリクスのこと。すなわち $U^\dagger = U^{-1}$, $U^\dagger U = UU^\dagger = 1$

[14]あるマトリクス A を U^{-1} と U ではさむことを U でユニタリー変換するという。ユニタリー変換は古典力学における正準変換に対応する。

ここで左辺に注目すると、左辺は $\sum_k V_k{}'\sigma_k'$ でなく、欲しい形の $\sum_k V_k{}'\sigma_k$ となっている。この新たに定義したシュレーディンガー関数 $\bar{\psi}'(\boldsymbol{x'})$ H_0 に作用させ、

$$H_0'\bar{\psi}'(\boldsymbol{x'}) = UH_0\psi(\boldsymbol{x}) \tag{61}$$

が成り立っているかチェックしてみよう。U は x_1, x_2, x_3 には関係しないから U は H_0 とも H_0' とも可換である。(50) に U を作用させた関係は

$$UH_0'\bar{\psi}(\boldsymbol{x}') = UH_0\psi(\boldsymbol{x}) \longrightarrow H_0'U\bar{\psi}(\boldsymbol{x}') = UH_0\psi(\boldsymbol{x}) \tag{62}$$

となり、左辺の $U\bar{\psi}(\boldsymbol{x}')$ に (59) を使うと (61) が得られ、

$$(H_0' + \sum_k V_k'\sigma_k)\bar{\psi}'(\boldsymbol{x}') = U(H_0 + H_s)\psi(\boldsymbol{x}) \tag{63}$$

が成り立つことがわかる。
ここまで分かると

$$(H_0' + \sum_k V_k'\sigma_k - i\hbar\frac{\partial}{\partial t})\bar{\psi}' = (H_0' + \sum_k V_k'\sigma_k)\bar{\psi}' - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U\bar{\psi} \tag{64}$$

が成り立つことは自明となる。U は t に無関係だから $i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}U\bar{\psi}$ は $i\hbar U\dfrac{\partial}{\partial t}\bar{\psi}$ と書け、さらに (43) の関係から、それは $i\hbar U\dfrac{\partial}{\partial t}\psi$ となる。すると (64) の右辺は (63) を使って

$$(H_0' + \sum_k V_k'\sigma_k)\bar{\psi}' - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U\bar{\psi} = U\left(H_0 + \sum_k V_k\sigma_k - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi$$

となる。ところで R 系ではシュレーディンガー方程式

$$\left(H_0 + \sum_k V_k\sigma_k - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi = 0 \tag{65}$$

が成り立つから、結局

$$\left(H_0' + \sum_k V_k{}'\sigma_k - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\bar{\psi}' = 0 \tag{66}$$

が得られる。ψ の成分を用いてちゃんと書くなら

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \qquad \bar{\psi}' = \begin{pmatrix} \bar{\psi_1}' \\ \bar{\psi_2}' \end{pmatrix}$$

R 系のシュレーディンガー方程式 (65) は次の連立方程式となる。

$$\begin{aligned} &H_0\psi_1 + V_3\psi_1 + (V_1 - iV_2)\psi_2 - i\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t} = 0 \\ &H_0\psi_2 + (V_1 + iV_2)\psi_1 - V_3\psi_2 - i\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t} = 0 \end{aligned} \tag{67}$$

一方、 R' 系でのシュレーディンガー方程式（66）は次の連立方程式となる。

$$
\begin{aligned}
&H_0'\bar{\psi}_1{}' + V_3'\bar{\psi}_1{}' + (V_1' - iV_2')\bar{\psi}_2{}' - i\hbar\frac{\partial\bar{\psi}_1{}'}{\partial t} = 0 \\
&H_0'\bar{\psi}_2{}' + (V_1' + iV_2')\bar{\psi}_1{}' - V_3'\bar{\psi}_2{}' - i\hbar\frac{\partial\bar{\psi}_2{}'}{\partial t} = 0
\end{aligned}
\tag{68}
$$

（67）（68）はまったく同じ形をしている。つまり座標系に関係なく方程式は不変形になった。（59）で導入しユニタリ・マトリクス U を

$$
U = \begin{pmatrix} U_{1,1} & U_{1,2} \\ U_{2,1} & U_{2,2} \end{pmatrix} \tag{69}
$$

とすると、ユニタリー性より

$$
U^\dagger = U^{-1} = \begin{pmatrix} U_{1,1}{}^* & U_{2,1}{}^* \\ U_{1,2}{}^* & U_{2,2}{}^* \end{pmatrix} \tag{70}
$$

となるから、（56）より $\bar{\psi}_\alpha$ は

$$
\bar{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}') = \sum_{\beta=1,2} \bar{\psi}_\beta{}'(\boldsymbol{x}')U_{\beta,\alpha}{}^* \qquad \alpha = 1,2 \tag{71}
$$

と得られる。また、（43）より（56）や (71) は

$$
\bar{\psi}_\beta(\boldsymbol{x}') = \sum_{\alpha=1,2} U_{\beta,\alpha}\psi_\alpha(\boldsymbol{x}) \qquad \beta = 1,2 \tag{72}
$$

$$
\bar{\psi}_\alpha(\boldsymbol{x}) = \sum_{\beta=1,2} \bar{\psi}_\beta{}'(\boldsymbol{x}')U_{\beta,\alpha}{}^* \qquad \alpha = 1,2 \tag{73}
$$

このように U によって変換される 2 成分量を**スピノル**と呼ぶ。

3.3　スピノールの座標変換

座標変換に対して ψ の成分を（72）（73）によって変換すれば、シュレーディンガーの方程式は不変であることがわかった。この変換は、**「成分が２個である」**ということに加えて、**「ユニタリ変換で直交変換でない」**という点で**ベクトルやテンソルの共変の仕方と著しく異なっている**という点に留意しよう。

ユニタリ・マトリクス U を（57）で定義したが、その際、σ_1' , σ_2', σ_3' は（52）で示されているように $A_{k,j}$ を含むから、当然 U も $A_{k,j}$ に関係し、A を変えれば U も変化する。この対応は１：１と思えるが、残念ながら U がユニタリ・マトリクスであるため、ことはそう簡単ではない。つまり、U に任意の位相因子 $e^{i\delta}$ をかけた $e^{i\delta}U$ もまた（57）を満たすユニタリ・マトリクスとなってくる。

$$
\sigma_1{}' = U^{-1}e^{-i\delta}\sigma_1 e^{i\delta}U = U^{-1}e^{-i\delta}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}e^{i\delta}U = U^{-1}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}U = U^{-1}\sigma_1 U
$$

量子力学では ψ 自身が位相因子の不定性を持っているが、観測量は確率密度 $\psi\psi^*$ で表されるので格段心配することはなかった。つまり、位相因子に特定の条件をつけても一般性を失うことはないということだから、先ほどのユニタリ・マトリクスの位相因子 $e^{i\delta}$ を

$$
\begin{aligned}
|Det\,U|^2 = 1 \text{ であるから} \\
Det\,U = \pm 1\,, \text{これから} \\
Det\,U = 1
\end{aligned}
\tag{74}
$$

となるように選ぶことができる[15]。しかし、この特定の位相因子を使っても $-U$ は残るから、結局 $A_{j,k}$ を与えたとき、U には $\pm U$ という ”2つの価 ”が許され、そのどちらを用いても目的は達せられるということになる。

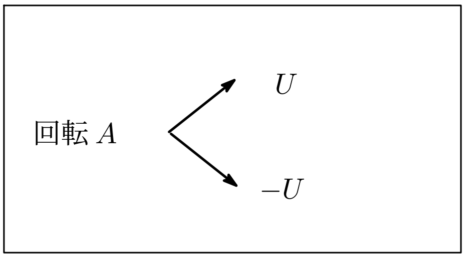


Figure 2: U の 2 価性

3.3.1 ユニタリ・マトリクス

この辺の事情を調べるのに、座標系の回転を第 3 軸のまわりの有限角 α だけの回転を考えてみる。回転のマトリクス $A(\alpha)$ は

$$
A(\alpha) = \begin{pmatrix} cos\alpha & sin\alpha & 0 \\ -sin\alpha & cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{75}
$$

となるから（52）より

$$
\sigma'_k = \begin{pmatrix} A_{k,3} & A_{k,1} - iA_{k,2} \\ A_{k,1} + iA_{k,2} & -A_{k,3} \end{pmatrix} \qquad k = 1, 2, 3
$$

を使って

$$
\sigma_1{}' = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\alpha} \\ e^{i\alpha} & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2{}' = \begin{pmatrix} 0 & -ie^{-i\alpha} \\ ie^{i\alpha} & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3{}' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{76}
$$

[15] $U = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{pmatrix}, U^{-1} = \frac{1}{U_{11}U_{22} - U_{12}U_{21}} \begin{pmatrix} U_{22} & -U_{12} \\ -U_{21} & U_{11} \end{pmatrix}, U_{11}U_{22} - U_{12}U_{21} \equiv DetU \neq 0$
$U^\dagger = \begin{pmatrix} U_{11}{}^* & U_{12}{}^* \\ U_{21}{}^* & U_{22}{}^* \end{pmatrix}, U_{22} = DetU \cdot U_{11}{}^*, U_{12} = -DetU \cdot U_{21}{}^*, U_{21} = -DetU \cdot U_{12}{}^*, U_{11} = DetU \cdot U_{22}{}^*$。これから $|DetU|^2 = 1$

となる。名著「スピンはめぐる」では ”ちょっとした計算で ”求めるユニタリ・マトリクスがすぐ書かれているが、ここではこの辺の計算を以下のようにやってみた。
$\boldsymbol{e}$ 方向に向いたスピン状態を $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ に射影した演算子は

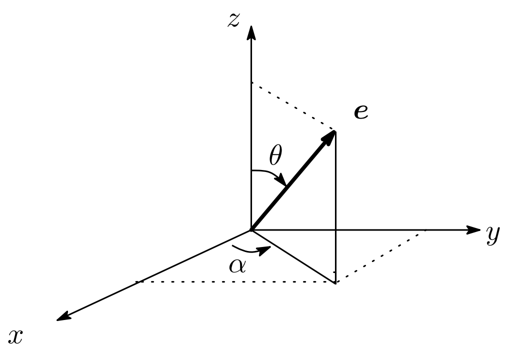
$$\begin{aligned}\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{\sigma} &= sin\theta cos\alpha\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + sin\theta sin\alpha\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + cos\theta\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} cos\theta & sin\theta e^{-i\alpha} \\ sin\theta e^{i\alpha} & -cos\theta \end{pmatrix}\end{aligned}$$

となる。この演算子（$\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{\sigma}$）の固有値、固有関数をそれぞれ $\epsilon, \bar{\psi} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ とすれば、

$$\bar{\psi} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a\xi + b\eta, \quad \xi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \eta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

として、次式を得る。

$$\begin{pmatrix} cos\theta & sin\theta e^{-i\alpha} \\ sin\theta e^{i\alpha} & -cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \epsilon\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \tag{77}$$



（77）を展開すると

$$(cos\theta - \epsilon)a + sin\theta e^{-i\alpha}b = 0 \tag{78}$$

$$sin\theta e^{i\alpha}a + (-cos\theta - \epsilon)b = 0 \tag{79}$$

この同次連立１次方程式が $a = b = 0$ 以外の解を持つためには

$$\begin{vmatrix} cos\theta - \epsilon & sin\theta e^{-i\alpha} \\ sin\theta e^{i\alpha} & -cos\theta - \epsilon \end{vmatrix} = \epsilon^2 - 1 = 0$$

これから $\epsilon = \pm 1$ でなければならない。（78）より

- $\epsilon = 1$ に対して

$$\frac{a}{b} = \frac{sin\theta}{1 - cos\theta}e^{-i\alpha} = cot\frac{\theta}{2}e^{-i\alpha} = \frac{cos\frac{\theta}{2}e^{-i\alpha/2}}{sin\frac{\theta}{2}e^{i\alpha/2}} \tag{80}$$

- $\epsilon = -1$ に対して

$$\frac{a}{b} = -\frac{sin\theta}{1+cos\theta}e^{-i\alpha} = -tan\frac{\theta}{2}e^{-i\alpha} = \frac{-sin\frac{\theta}{2}e^{-i\alpha/2}}{cos\frac{\theta}{2}e^{i\alpha/2}} \tag{81}$$

$|a|^2 + |b|^2 = 1(\rightarrow aa^* + bb^* = 1)$ となるように規格化すると、固有関数は（80）（81）より

- $\epsilon = 1$ に対して

$$\bar{\psi}_+ = \begin{pmatrix} cos\frac{\theta}{2}e^{-i\alpha/2} \\ sin\frac{\theta}{2}e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} = cos\frac{\theta}{2}e^{-i\alpha/2}\xi + sin\frac{\theta}{2}e^{i\alpha/2}\eta \tag{82}$$

- $\epsilon = -1$ に対して

$$\bar{\psi}_- = \begin{pmatrix} -sin\frac{\theta}{2}e^{-i\alpha/2} \\ cos\frac{\theta}{2}e^{-i\alpha/2} \end{pmatrix} = -sin\frac{\theta}{2}e^{-i\alpha/2}\xi + cos\frac{\theta}{2}e^{i\alpha/2}\eta \tag{83}$$

となる。尚、（82）（83）の位相は $\theta = 0$ のとき $\bar{\psi}_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \bar{\psi}_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ と決めた（ただし、α についての位相因子は不定のままである）。
さて、スピンの方向を z 軸にとり、その周りに座標を α 回転させたとすると[16]、ちょうど今までの議論で $\theta = 0,\, \alpha = -\alpha$ と置き換えてやればよいことになる。その結果

$$\begin{pmatrix} \bar{\psi}_+ \\ \bar{\psi}_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix} (\psi_+, \psi_-) \tag{84}$$

となって、結局求めるユニタリ・マトリクス U は

$$U = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix} \tag{85}$$

となる。

3.3.2 スピノルの２価性

さて、ここまできたらいよいよこの U の性質を調べることができる[17]。
• 回転 $A(2\pi)$ を行うと $A(2\pi) = A(0)$ であるにもかかわらず、$U(2\pi) = -U(0)$ である。

[16] 先ほどの絵は z 軸周りにスピンが回転した絵となっているが、今回はスピン軸を固定してその周りに座標を回転させるということ。従って回転方向は逆になる。

[17]

$$\begin{aligned} U(\alpha) &= \begin{pmatrix} e^{i\frac{\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} cos\frac{\alpha}{2} + i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} sin\frac{\alpha}{2} \\ &= \boldsymbol{I} cos\frac{\alpha}{2} + i\sigma_3 sin\frac{\alpha}{2} \end{aligned} \tag{86}$$

と書けることに注意されたい。$\bar{\psi}(\boldsymbol{x'}) = U\psi(\boldsymbol{x})$。ここで $\theta = 2\pi$ とおくと $\bar{\psi}(\boldsymbol{x'}) = -\psi(\boldsymbol{x}), \theta = 4\pi$ で $\bar{\psi}(\boldsymbol{x'}) = \psi(\boldsymbol{x})$。つまり $\psi(\boldsymbol{x})$ は 2 価関数である。

• 回転 $A(\alpha_1), A(\alpha_2)$ を行ったときの U をぞれぞれ $U(\alpha_1), U(\alpha_2)$ とする。すると回転 $A(\alpha_2)\cdot A(\alpha_1)$ を行ったときの U は $U(\alpha_2)\cdot U(\alpha_1)$ になるとはかぎらない。場合によっては、例えば $\alpha_1+\alpha_2$ が 2π と 4π の間の値をとると、それは $-U(\alpha_2)\cdot U(\alpha_1)$ になる。
例えば $\alpha_1=\pi, \alpha_2=2\pi$ とすると

$$U(\alpha_1)=\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}, U(\alpha_2)=\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, U(\alpha_2)U(\alpha_1)=\begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$$

ところで 2π 回転を戻すと $\alpha_1=-\pi, \alpha_2=0$　として

$$U(\alpha_1)=\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}, U(\alpha_2)=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, U(\alpha_2)U(\alpha_1)=-U(\alpha_2)U(\alpha_1)$$

となる。これらのことから回転 A と U との対応を 1 対 1 にすることは不可能であり、また ”積には積が ”という対応も必ずしも成り立たないことが分かる（食い違いは符号だけであるが）。そういうわけで、2 成分量 ψ の成分 ψ_1, ψ_2 は 2 価性をもっていることからこれをベクトルやテンソルの成分と同じ意味で共変量と考えることはできない。しかし幸いにも量子力学で物理的意味を持つのは $|\psi|^2$ であるから ψ 自身が 360 °の回転で $-\psi$ になっても $|\psi|^2$ はちゃんともとの値に戻るから、この 2 価性は物理的結論の中に顔をださない。そういうわけで、ψ を共変量の仲間に入れてもよい。この新しい量をエーレンフェストは「スピノール」と名付けた。

4　おわり

以上、長々とお付き合いいただきお疲れ様でした。朝永先生の本は言葉が非常にていねいで、独特の感触で書かれているため、ざっと目を走らすだけで分かったような気になりやすいが、じっくりと取り組むとこれがなかなか。。。(←尤も、小生だけかも知れないが)。このノートは朝永先生のテキストには書かれていない行間の計算をできるだけフォローしたのでので、ごたごたとわずらわしく感じるかも知れないが、まじめに勉強（？）する方にとっては少しはお役に立つのではないかと思っている。もっとも、小生の浅学による誤りや誤解が結構あると思うので、それらを見つけられれば是非ともご指摘願いたい。この点は一つよろしくお願いする。それでは

See You Later! Good Luck!

[参考書]

1) 朝永振一郎，スピンはめぐる　成熟期の量子力学，中央公論社（1975)
2) 高橋康，量子場を学ぶための場の解析力学入門，講談社（1982)
3) 岡崎誠、藤原毅夫，演習量子力学，サイエンス社（1997）