

3 スピン 1/2 状態

3.1 第3回で紹介すること

- スピン 1/2 状態 ($s = 1/2$ の状態) のベクトルと行列を使った記述
- 状態の期待値とゆらぎの計算方法

3.2 線形代数とブラケット記号

- ブラケット記号

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad a_1, a_2 \in \mathbb{C} \quad \text{ケット: 縦ベクトル、成分は複素数} \quad (10)$$

$$\langle a| = |a\rangle^\dagger = \begin{pmatrix} a_1^* & a_2^* \end{pmatrix} \quad \text{ブラ: ケットのエルミート共役 (転置複素共役)} \quad (11)$$

(今回は2成分を考えるが一般にケットの成分の数は2に限らない)

(成分は x 座標と y 座標という意味ではない)

- 行列: ただの数と区別するため $\hat{}$ をつける

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \quad (12)$$

- 行列とベクトル、行列と行列の掛け算

$$\begin{array}{ccccc} \text{行列} & \text{ベクトル} & \text{ベクトル} & \text{行列} & \text{行列} & \text{行列} \\ \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} & = \begin{pmatrix} A_{11}a_1 + A_{12}a_2 \\ A_{21}a_1 + A_{22}a_2 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix} & = \begin{pmatrix} A_{11}B_{11} + A_{12}B_{21} & A_{11}B_{12} + A_{12}B_{22} \\ A_{21}B_{11} + A_{22}B_{21} & A_{21}B_{12} + A_{22}B_{22} \end{pmatrix} \end{array}$$

- **固有ベクトル**: $\hat{A}$ を作用させる (かける) と自分自身の定数倍になる特別なベクトル $|x\rangle$

$$\hat{A}|x\rangle = \lambda|x\rangle \quad (13)$$

λ を $|x\rangle$ の **固有値** と呼ぶ

固有ベクトルは定数倍しても同じ固有値を持つ (補足参照)

- 2次元 **複素** ベクトル空間 $\mathbb{C}^2$: 2成分複素ベクトル全体の集合

$$\mathbb{C}^2 = \{|a\rangle, |b\rangle, \dots\} = \left\{ \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}, \dots \right\} \quad (14)$$

ベクトルの **線形結合** (重ね合わせ) もまたベクトル (和とスカラー倍で閉じる)

$$c_a |a\rangle + c_b |b\rangle \in \mathbb{C}^2, \quad |a\rangle, |b\rangle \in \mathbb{C}^2 \quad (15)$$

- 複素ベクトルの**内積**：ブラとケットの掛け算（真ん中の棒は一本）、一般に複素数

$$\langle a|b\rangle = \begin{pmatrix} a_1^* & a_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 \in \mathbb{C} \quad (16)$$

- 同じベクトルの内積は正の実数

$$\langle a|a\rangle = a_1^* a_1 + a_2^* a_2 = |a_1|^2 + |a_2|^2 \geq 0 \quad (17)$$

$\sqrt{\langle a|a\rangle}$ をノルムと呼び $\| |a\rangle \|$ と表す

$\langle a|a\rangle = 1$ となるベクトルを**規格化**されたベクトルと呼ぶ（補足参照）

3.3 波動関数、物理量、期待値とゆらぎ

- $s = 1/2$ のスピンを持つ状態 ($m_s = \pm 1/2$) を**スピン 1/2 状態**と呼ぶ
スピンベクトルの大きさ ($\sqrt{s(s+1)}\hbar = (\sqrt{3}/2)\hbar$) と z 成分 $m_s\hbar$ は確定
 x 成分と y 成分は不確定でゆらいでいる

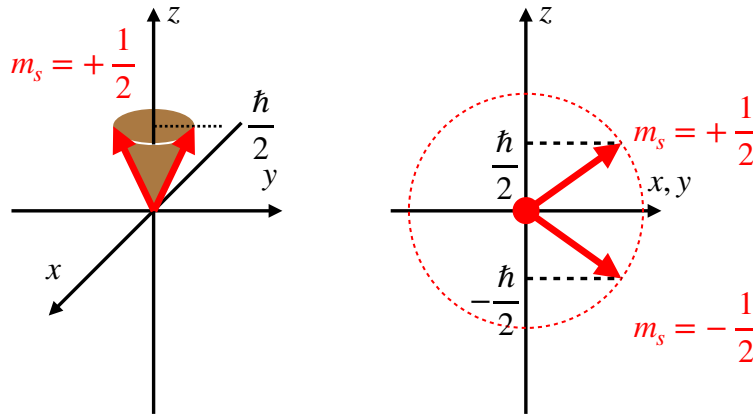


図 4: スピン 1/2 状態。左: $m_s = +1/2$ (スピン上向き) の状態、右: z 軸成分と大きさ

- スピン 1/2 状態の**波動関数**: 2 成分複素ベクトル (パウリスピノル)

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \quad (18)$$

(なぜベクトルが“関数”なのかは第 4 回で)

以下、波動関数に対応するケットは全て規格化されている ($\langle a|a\rangle = 1$) とする

- 物理量**: 複素成分 2×2 行列、**演算子**

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}, \quad A_{ij} \in \mathbb{C} \quad (19)$$

- 物理量の**期待値**： $\langle a|$ と $\hat{A}|a\rangle$ で内積

$$\langle A \rangle = \langle a | \hat{A} | a \rangle \quad (20)$$

- 物理量の**ゆらぎ**

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} = \sqrt{\langle a | \hat{A} \hat{A} | a \rangle - \langle a | \hat{A} | a \rangle^2} \quad (21)$$

- $\hat{A}$ の**固有状態** $|x\rangle$ での期待値 ($\hat{A}|x\rangle = \lambda|x\rangle$ 、補足参照)

$$\langle A \rangle = \lambda, \quad \Delta A = 0 \quad (22)$$

期待値は固有値 λ でゆらぎがゼロ $\Rightarrow$ 物理量 $\hat{A}$ の値は λ に**確定**

3.4 スピン演算子

- 無次元スピン演算子 $\hat{s}$ ：次元を持ったスピン演算子 $\hat{S}$ に対し

$$\hat{s} = \frac{\hat{S}}{\hbar} \quad (23)$$

第2回で紹介した状態は、 $\hat{s}^2$ の期待値が $s(s+1)$ 、 $\hat{s}_z$ の期待値が m_s ($\hbar$ が出てこない)
スピン演算子 s のベクトル成分は x, y, z 、各成分が 2×2 行列

- パウリ行列** σ

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (24)$$

を用いてスピン演算子は

$$\hat{s} = \frac{1}{2}\sigma, \quad \hat{s}_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (25)$$

- 演算子 s^2 は単位行列に比例

$$\hat{s}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (26)$$

3.5 $\hat{s}_z$ の固有状態

- $m_s = +1/2$ の規格化された固有状態：スピン**上向き**

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (27)$$

- $m_s = -1/2$ の規格化された固有状態：スピン下向き

$$|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (28)$$

第2回で z 成分を確定させた状態は $|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ に対応する

- 確認

$$\hat{s}_z |\uparrow\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} |\uparrow\rangle \quad (29)$$

$$\hat{s}^2 |\uparrow\rangle = \frac{3}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} |\uparrow\rangle \quad (30)$$

$\hat{s}_z$ の固有値が $m_s = \frac{1}{2}$ 、 $\hat{s}^2$ の固有値が $s(s+1) = \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) = \frac{3}{4}$
固有状態なので $\hat{s}_z$ の期待値のゆらぎはなし

- $\hat{s}_x$ の期待値とゆらぎ

$$\langle s_x \rangle = \langle \uparrow | \hat{s}_x | \uparrow \rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 \quad (31)$$

$$\langle s_x^2 \rangle = \langle \uparrow | \hat{s}_x^2 | \uparrow \rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \quad (32)$$

$$\Delta s_x = \sqrt{\langle s_x^2 \rangle - \langle s_x \rangle^2} = \sqrt{\frac{1}{4} - 0} = \frac{1}{2} \quad (33)$$

$\hat{s}_x$ の期待値はゼロ（+ と - が等確率）、ゆらぎは有限、つまり不確定

- $|\uparrow\rangle$ 、 $|\downarrow\rangle$ の性質のまとめ

- s^2 （スピンの大きさ2乗）と s_z （ z 方向成分）は同時に確定している
- s_x 、 s_y は平均値0のまわりでゆらぎを持ち不確定