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

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

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

（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 ^ をつける

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

- 行列とベクトル、行列と行列の掛け算

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

- **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 $|x\rangle$

$$\hat{A}\,|x\rangle = \lambda\,|x\rangle \tag{13}$$

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

- 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

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

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）

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

- 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

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

- 同じベクトルの内積は正の実数

$$\langle a|a\rangle = a_1^* a_1 + a_2^* a_2 = |a_1|^2 + |a_2|^2 \geq 0 \tag{17}$$

$\sqrt{\langle a|a\rangle}$ 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

3.3 波動関数、物理量、測定

- $s = 1/2$ 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

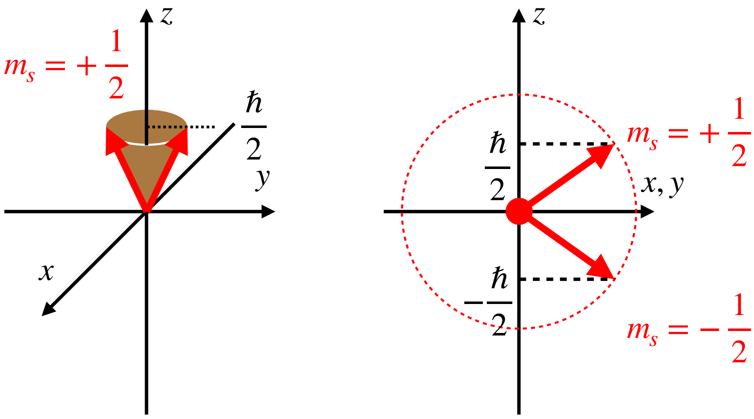

図 4: スピン 1/2 状態。左：$m_s = +1/2$（スピン上向き）の状態、右：z 軸成分と大きさ

- 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）

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \tag{18}$$

(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**

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

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

$$\langle A\rangle = \langle a|\hat{A}|a\rangle \tag{20}$$

- 物理量の**ゆらぎ**

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

- $|x\rangle$ が $\hat{A}$ の**固有状態**（$\hat{A}|x\rangle = \lambda|x\rangle$）の場合

$$\langle A\rangle = \langle x|\hat{A}|x\rangle = \langle x|\lambda|x\rangle = \lambda\langle x|x\rangle = \lambda \tag{22}$$

$$\langle A^2\rangle = \langle x|\hat{A}\hat{A}|x\rangle = \langle x|\hat{A}\lambda|x\rangle = \lambda\langle x|\hat{A}|x\rangle = \lambda^2 \tag{23}$$

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2} = \sqrt{\lambda^2 - \lambda^2} = 0 \tag{24}$$

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

$$\hat{\boldsymbol{s}} = \frac{\hat{\boldsymbol{S}}}{\hbar} \tag{25}$$

第 2 回で紹介した状態は、$\hat{\boldsymbol{s}}^2$ 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 $\boldsymbol{s}$ のベクトル成分は x, y, z、各成分が 2×2 行列

- **パウリ行列 $\boldsymbol{\sigma}$**

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{26}$$

を用いてスピン演算子は

$$\hat{\boldsymbol{s}} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}, \quad \hat{s}_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{27}$$

- 演算子 $\boldsymbol{s}^2$ は単位行列に比例

$$\hat{\boldsymbol{s}}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2 = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{28}$$

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**

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{29}$$

- $m_s = -1/2$ の規格化された固有状態：スピン**下向き**

$$|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{30}$$

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

$$\hat{s}_z |\uparrow\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle \tag{31}$$

$$\hat{\boldsymbol{s}}^2 |\uparrow\rangle = \frac{3}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}|\uparrow\rangle \tag{32}$$

$\hat{s}_z$ の固有値が $m_s = \frac{1}{2}$、$\hat{\boldsymbol{s}}^2$ 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

$$\langle s_x\rangle = \langle\uparrow|\,\hat{s}_x\,|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 \tag{33}$$

$$\langle s_x^2\rangle = \langle\uparrow|\,\hat{s}_x^2\,|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}\frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \tag{34}$$

$$\Delta s_x = \sqrt{\langle s_x^2\rangle - \langle s_x\rangle^2} = \sqrt{\frac{1}{4} - 0} = \frac{1}{2} \tag{35}$$

$\hat{s}_x$ 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
  - $\boldsymbol{s}^2$（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