

第2章 スピン(その2)

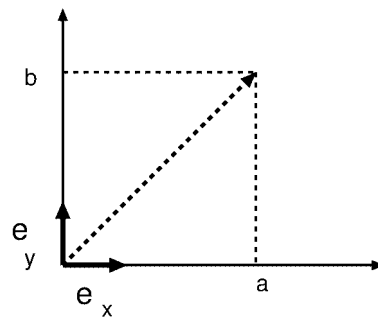
2-3 スピンの波動関数

2-3-1 正規直交系を用いた波動関数の展開

正規直交系

例) 二次元ベクトル

$r = a\hat{e}_x + b\hat{e}_y$ のとき r を座標 (a, b) であらわす。



正規直交系

$$(\hat{e}_x, \hat{e}_x) = (\hat{e}_y, \hat{e}_y) = (\hat{e}_z, \hat{e}_z) = 1$$

$$(\hat{e}_x, \hat{e}_y) = 0$$

をもちいると、

$$(\hat{e}_x, r) = (\hat{e}_x, a\hat{e}_x + b\hat{e}_y) = (\hat{e}_x, a\hat{e}_x) + (\hat{e}_x, b\hat{e}_y)$$

$$= a \times 1 + b \times 0 = a$$

$$(\hat{e}_y, r) = b$$

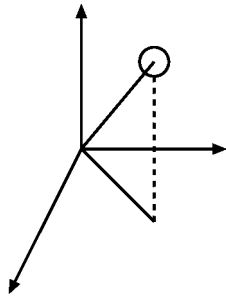
これによって

【A】 (a, b) から r に、

【B】 r から (a, b) に、

一意的に変換可

軌道の波動関数

軌道 : $Y(\theta, \phi)$ 意味 : $|Y(\theta, \phi)|^2 =$ この方向 (θ, ϕ) に粒子が存在する確率密度

球面調和関数による展開

一般の波動関数 $Y(\theta, \phi)$ を球面調和関数で展開

$$Y(\theta, \phi) = \sum_{lm} c_{lm} Y_{lm}(\theta, \phi)$$

このとき、関数 $Y(\theta, \phi)$ は展開係数 $\{c_{lm}\}$ で表すことができる

【A】展開係数 $\{c_{lm}\}$ から関数 $Y(\theta, \phi)$ に変換可能

例) $l = 1$ の状態 (P 波) に限定 $m = -1, 0, 1$ だけ考える $Y_{1,1}, Y_{1,0}, Y_{1,-1}$ の 3 通りこれらは、 \hat{L}^2 と \hat{L}_z の固有状態 $l = 1$ に属する一般の状態 (\hat{L}_z の固有状態とは限らないもの): 重ね合わせ

$$\Phi = c_1 Y_{1,1} + c_0 Y_{1,0} + c_{-1} Y_{1,-1}$$

で表される。このとき、成分を並べて

$$\Phi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_0 \\ c_{-1} \end{pmatrix}$$

と表してもよい。

正規直交系

球面調和関数は正規直交系をなす。

$$\int d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

ただし $\int d\Omega = \int \sin \theta d\theta \int d\phi$

これを用いると、

$$c_{lm} = \int d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y(\theta, \phi)$$

とすれば、

【B】関数 $Y(\theta, \phi)$ から展開係数 $\{c_{lm}\}$ に変換可能

規格化

波動関数 $Y(\theta, \phi)$ が規格化されている：

$$1 = \int d\Omega |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2$$

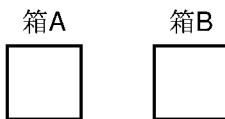
意味： (θ, ϕ) 方向の存在確率密度を全角度方向について和を取る 確率 1

このとき、展開係数について：

$$1 = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l |c_{lm}|^2$$

意味：観測によって l, m 状態が測定される確率 $|c_{lm}|^2$ をすべての場合について和を取る 確率 1

別の例)



箱 A に粒子が存在する状態の波動関数 Φ_A

箱 B に粒子が存在する状態の波動関数 Φ_B

状態 $\Phi = c_1\Phi_A + c_2\Phi_B$ は

確率 $|c_1|^2$ で A に存在する状態

確率 $|c_2|^2$ で B に存在する状態

この状態を、

$$\Phi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

と表してもよい。

スピンの波動関数

スピンの場合、波動関数の関数としての振舞 \rightarrow ?

スピン：大きさのない質点の自転

- 回転の『角度』 (θ, ϕ) が観測できない
- 波動関数を (θ, ϕ) の関数として表せない
- 関数 Y_l^m とは異なる性質を持つ

軌道角運動量とは異なる取り扱いが必要

\rightarrow スピンには $s_z = \frac{1}{2}$ と $-\frac{1}{2}$ の状態があることしかわからない

スピンの波動関数 χ を重ね合わせであらわす：

$$\chi = c_1\chi_{\uparrow} + c_2\chi_{\downarrow}$$

と表す。ただし、 c_1, c_2 は定数 (複素数)、

$$\chi_{\uparrow} : s_z = +\frac{1}{2} \text{の状態 (上向き) の波動関数}$$

$$\chi_{\downarrow} : s_z = -\frac{1}{2} \text{の状態 (下向き) の波動関数}$$

波動関数を正規直交系で展開する方法

(スピンの状態を利用して 2 状態を取る量子系を表現できる)

$\chi_{\uparrow}, \chi_{\downarrow}$ の具体的な形を知らなくても状態は指定

2 つの波動関数の内積を取る \rightarrow 成分がわかる

$$\chi = c_1\chi_{\uparrow} + c_2\chi_{\downarrow}$$

の重ね合わせの意味

\Rightarrow 確率 $|c_1|^2$ で \uparrow の状態、 確率 $|c_2|^2$ で \downarrow の状態

(注 ; 規格化条件 $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$)

注) χ_{\uparrow} を α , χ_{\downarrow} を β と表す場合もある

2-3-2 スピノル表記

スピンの波動関数が

$$\chi = c_1\chi_{\uparrow} + c_2\chi_{\downarrow}$$

と書けるとき: \rightarrow 複素数の”座標”で表す。

$$\chi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

これをスピノル表記という。

波動関数で表す	スピノルで表す
χ_{\uparrow}	$\longleftrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$
χ_{\downarrow}	$\longleftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
$\chi = c_1\chi_{\uparrow} + c_2\chi_{\downarrow}$	$\longleftrightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$

スピノルの内積

複素ベクトルの内積

$$\boldsymbol{\chi} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{\chi}^* = \begin{pmatrix} c_1^* \\ c_2^* \end{pmatrix} \quad \text{内積 } (\boldsymbol{\chi}, \boldsymbol{\chi}') = \boldsymbol{\chi}^\dagger \boldsymbol{\chi}'$$

ただし、

$$\begin{aligned} \text{転置: } \quad {}^t\boldsymbol{\chi} &= (c_1, c_2), & \text{複素共役: } \boldsymbol{\chi}^* &= \begin{pmatrix} c_1^* \\ c_2^* \end{pmatrix} \\ \text{エルミート共役: } \quad {}^t(\boldsymbol{\chi})^* &= \boldsymbol{\chi}^\dagger = (c_1^*, c_2^*) \end{aligned}$$

したがって

$$\boldsymbol{\chi}^\dagger \boldsymbol{\chi}' = (c_1^*, c_2^*) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = c_1^* c_1 + c_2^* c_2$$

特に、“自分自身との内積” → “長さの二乗”

$$(\boldsymbol{\chi}, \boldsymbol{\chi}) = (c_1^*, c_2^*) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = c_1^* c_1 + c_2^* c_2 = |c_1|^2 + |c_2|^2$$

(左側のベクトルは複素共役を取る　絶対値二乗の和になる)

規格化条件　　 $(\boldsymbol{\chi}, \boldsymbol{\chi}) = 1$

正規直交性

$$(\boldsymbol{\chi}_\uparrow, \boldsymbol{\chi}_\uparrow) = (1^*, 0^*) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1$$

$$(\boldsymbol{\chi}_\downarrow, \boldsymbol{\chi}_\downarrow) = (0^*, 1^*) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 1$$

$$(\boldsymbol{\chi}_\uparrow, \boldsymbol{\chi}_\downarrow) = (\boldsymbol{\chi}_\downarrow, \boldsymbol{\chi}_\uparrow) = 0$$

波動関数のかわりに、スピノルで表す

確認： 2成分複素ベクトルについての実際の計算が、波動関数の取り扱いをちゃんと具体的に表していることを確認しよう：

波動関数 $\chi = c_1 \chi_\uparrow + c_2 \chi_\downarrow$ に対するスピノルは、

$$c_1 \boldsymbol{\chi}_\uparrow + c_2 \boldsymbol{\chi}_\downarrow = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

と、つじつまが合っている。

また、スピノル $\chi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ に対して、内積の計算を実際に用いて成分を抜き出す：

$$(\chi_{\uparrow}, \chi) = (1^*, 0^*) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = c_1, \quad (\chi_{\downarrow}, \chi) = (0^*, 1^*) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = c_2$$

これによって

【A】スピノルから χ に、

【B】 χ からスピノルに、

一意的に変換可

- スピンの波動関数に対する計算：抽象的
- スピノルに対する計算：具体的に行える

2-4 パウリ行列

波動関数と演算子

量子力学では波動関数と演算子が用いられる。

スピンの波動関数と量子数：

$$\begin{aligned} \chi_{\uparrow} : s_z &= \frac{1}{2} \\ \chi_{\downarrow} : s_z &= -\frac{1}{2} \end{aligned}$$

スピン演算子：

$$\begin{aligned} \hat{S}_z \chi_{\uparrow} &= \frac{\hbar}{2} \chi_{\uparrow} \\ \hat{S}_z \chi_{\downarrow} &= -\frac{\hbar}{2} \chi_{\downarrow} \end{aligned}$$

ここで、 $\chi_{\uparrow}, \chi_{\downarrow}$ は \hat{S}_z の固有状態、固有値は順に $\frac{\hbar}{2}$ 、 $-\frac{\hbar}{2}$ ：
意味：

χ_{\uparrow} は \hat{S}_z の値として、 $\frac{\hbar}{2}$ を持つ状態を表す。

χ_{\downarrow} は \hat{S}_z の値 = $-\frac{\hbar}{2}$ を持つ

スピノルで表しても、同様な式が成り立つようにする：

『スピノル = 縦ベクトル に演算作用するもの = 行列』

演算子を行列 M を用いて表現：

$$M\chi_{\uparrow} = M \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$M\chi_{\downarrow} = M \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

これを満たす行列 M は

$$\Rightarrow M = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

とすればよい。

スピノル表記では、演算子 \hat{S}_z は具体的に 2×2 行列を用いて

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

で表すことができる。

(注： \hat{S}_z は演算子で、 σ_z はその行列表示)

では \hat{S}_x, \hat{S}_y は?

パウリ行列によるスピン演算子の表し方

スピノル：2成分ベクトル 演算子： 2×2 行列となるはず

$$\hat{S}_x \rightarrow \frac{\hbar}{2}\sigma_x$$

$$\hat{S}_y \rightarrow \frac{\hbar}{2}\sigma_y$$

$$\hat{S}_z \rightarrow \frac{\hbar}{2}\sigma_z$$

を満たす 2×2 行列 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ をパウリ行列と呼ぶ。

パウリ行列の決め方：角運動量演算子の交換関係

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$$

\Rightarrow スピン演算子も同様な交換関係

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z \quad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y$$

を満たすような、 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ を探す：

答え：

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

とすればよい。

check)

行列の交換積

$$\begin{aligned} [\sigma_x, \sigma_y] &= \sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2i & 0 \\ 0 & -2i \end{pmatrix} \\ &= 2i\sigma_z \end{aligned}$$

スピン演算子は：

$$\begin{aligned} [\hat{S}_x, \hat{S}_y] &= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 [\sigma_x, \sigma_y] \\ &= \frac{i\hbar^2}{2} \sigma_z = i\hbar \hat{S}_z \end{aligned}$$

パウリ行列を用いることの利点：

演算子 × 波動関数の計算：(行列) × (ベクトル) の計算をすればよい

→ 具体的に計算することが可能に。

例)

$$\hat{S}^2 \chi = \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \chi = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi$$

が χ によらず成立することを確かめたい。

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 &= \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^2 + \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}^2 + \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}^2 \\ &= \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

したがって、任意の

$$\chi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

に対して

$$\hat{S}^2 \chi = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi$$

2-5 固有状態

$\chi_{\uparrow}, \chi_{\downarrow}$ は \hat{S}_z の固有状態。

では、 \hat{S}_x, \hat{S}_y の固有状態は?

\hat{S}_x の固有値・固有ベクトル

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \tau \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \text{ を満たす } \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \text{ と } \tau \text{ は?}$$

$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ の固有値 λ とその固有ベクトルを求める。

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \Rightarrow \underbrace{\begin{pmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{pmatrix}}_{\text{行列} \times} \underbrace{\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}}_{\text{ベクトル} \mathbf{x}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

行列 X に逆行列があると: $X\mathbf{x} = \mathbf{0}$ $X^{-1}X\mathbf{x} = X^{-1}\mathbf{0} \rightarrow \mathbf{x} = \mathbf{0}$

$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \neq \mathbf{0}$ の解がほしい \Rightarrow 逆行列が有ってはならぬ $\det X = 0$

今の場合、 $\det X = \lambda^2 - 1 = 0$, $\lambda = \pm 1$

- $\lambda = 1$ のとき

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \rightarrow \begin{aligned} b &= a \\ a &= b \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = (\text{定数}) \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

- $\lambda = -1$ のとき

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \rightarrow \begin{aligned} b &= -a \\ a &= -b \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = (\text{定数}) \times \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

したがって、 $\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x$ の 2 つの固有値・固有ベクトルを以下のように決める

- 固有値 $S_x = \frac{\hbar}{2}$ に対して固有ベクトル $\chi_{x+} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$\hat{S}_x \chi_{x+} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \chi_{x+}$$

意味： χ_{x+} で表される状態は、スピンの x 成分 \hat{S}_x が正である
 $= x$ 軸正の方向にスピンの向きが向いている

- 固有値 $S_x = -\frac{\hbar}{2}$ に対して固有ベクトル $\chi_{x-} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

$$\text{確認： } \hat{S}_x \chi_{x-} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \chi_{x-}$$

意味： χ_{x-} で表される状態は、スピンの x 成分 \hat{S}_x が負である
 $= x$ 軸負の方向にスピンの向きが向いている

ただし、ここでは規格化条件 $(\chi, \chi) = 1$ となるように定数を選んだ

\hat{S}_y の固有値・固有ベクトル

同様に \hat{S}_y の固有状態を求める

$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ に対して、

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = x \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

を満たすもの:

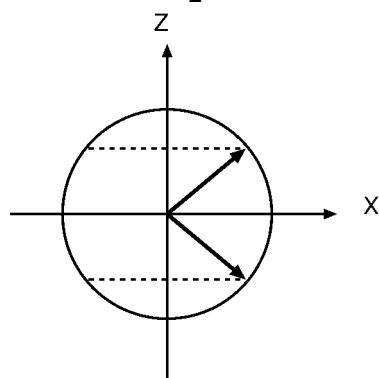
$$\begin{aligned} \Rightarrow \lambda &= +1 & \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} &= (\text{定数}) \times \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \\ \lambda &= -1 & \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} &= (\text{定数}) \times \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \end{aligned}$$

したがって、 \hat{S}_y の固有値・固有ベクトル:

$$\begin{aligned} \chi_{y+} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, & \hat{S}_y \chi_{y+} &= \frac{\hbar}{2} \chi_{y+} \\ \chi_{y-} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}, & \hat{S}_y \chi_{y-} &= -\frac{\hbar}{2} \chi_{y+} \end{aligned}$$

固有ベクトルの意味

χ_{x+} は S_x が $\frac{\hbar}{2}$ の値を取るような状態を表す波動関数。



このとき、 $\chi_{x+} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ と書ける

$$\chi_{x+} = \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_{\uparrow} + \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_{\downarrow}$$

上向き と下向き の重ね合わせから、
横向き のスピンの生成される

$\chi_{\uparrow}, \chi_{\downarrow}$ の S_x 成分は元々0ではない(不確定であっただけ)

スピンの不確定性原理

S_x が $+\frac{\hbar}{2}$ の状態： \uparrow と \downarrow の重ね合わせ

$\Rightarrow \hat{S}_z$ を観測したときに、 \uparrow の確率が $\left| \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2}$ 、 \downarrow の確率も $\frac{1}{2}$ 、そのため期待値 $\langle \hat{S}_z \rangle = 0$

\uparrow と \downarrow の重ね合わせ = S_z の固有状態ではない

確かに

$$\begin{aligned} \hat{S}_z \chi_{x+} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \\ &\neq (\text{定数}) \times \chi_{x+} \end{aligned}$$

\hat{S}_z と \hat{S}_x の同時固有関数 = \hat{S}_z と \hat{S}_x の両方の値が確定しているような状態は存在しない

\Rightarrow 不確定性原理

なぜなら $[\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y \neq 0$

2-6 演算子の期待値

演算子： \hat{S}_z の固有値 = $\pm \frac{\hbar}{2}$

$$\left. \begin{aligned} \chi_{\uparrow} \text{は } \hat{S}_z \text{ の値} &= \frac{\hbar}{2} \text{ を持つ} \\ \chi_{\downarrow} \text{は } \hat{S}_z \text{ の値} &= -\frac{\hbar}{2} \text{ を持つ} \end{aligned} \right\} \text{状態を表す}$$

波動関数 $\chi = c_1\chi_{\uparrow} + c_2\chi_{\downarrow}$ で表される状態： \hat{S}_z を測定すると

$$\left. \begin{aligned} \text{確率 } |c_1|^2 \text{ で } S_z &= \frac{\hbar}{2} \text{ が} \\ \text{確率 } |c_2|^2 \text{ で } S_z &= -\frac{\hbar}{2} \text{ が} \end{aligned} \right\} \text{観測される}$$

ため、 \hat{S}_z の期待値は

$$\begin{aligned}\langle \hat{S}_z \rangle &= |c_1|^2 \times \frac{\hbar}{2} + |c_2|^2 \times \left(-\frac{\hbar}{2}\right) \\ &= \frac{\hbar}{2} (|c_1|^2 - |c_2|^2)\end{aligned}$$

これをスピノルで表すと

$$\begin{aligned}\langle \hat{S}_z \rangle &= (\chi, \hat{S}_z \chi) = (\chi, \frac{\hbar}{2} \sigma_z \chi) \\ &= (c_1^*, c_2^*) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} (c_1^*, c_2^*) \begin{pmatrix} c_1 \\ -c_2 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} (c_1^* c_1 - c_2^* c_2) = \frac{\hbar}{2} (|c_1|^2 - |c_2|^2)\end{aligned}$$

例) x 軸正の方向にスピンの向いている状態: $\chi_{x+} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{\uparrow} + \chi_{\downarrow})$ $c_1 = c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$

この状態について、 $\langle \hat{S}_z \rangle = 0$

$$\text{これを計算で確認: } (\chi_{x+}, \hat{S}_z \chi_{x+}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1) \cdot \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = 0$$

一般に、演算子 \hat{A} の期待値:

$$\langle \hat{A} \rangle = (\chi, \hat{A} \chi)$$

とすればよい。

例) z 軸正の方向にスピンの向いている状態: χ_{\uparrow} について、 $\langle \hat{S}_x \rangle$ を求める:

$$\langle \hat{S}_x \rangle = (\chi_{\uparrow}, \hat{S}_x \chi_{\uparrow}) = (1, 0) \cdot \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = (1, 0) \cdot \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

実は、

$$\chi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right\} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \chi_{x+} + \chi_{x-} \}$$

と書けることから明らか

利点: スピノルで表すと具体的な計算がすぐできる。

補足

2-A 様々な内積

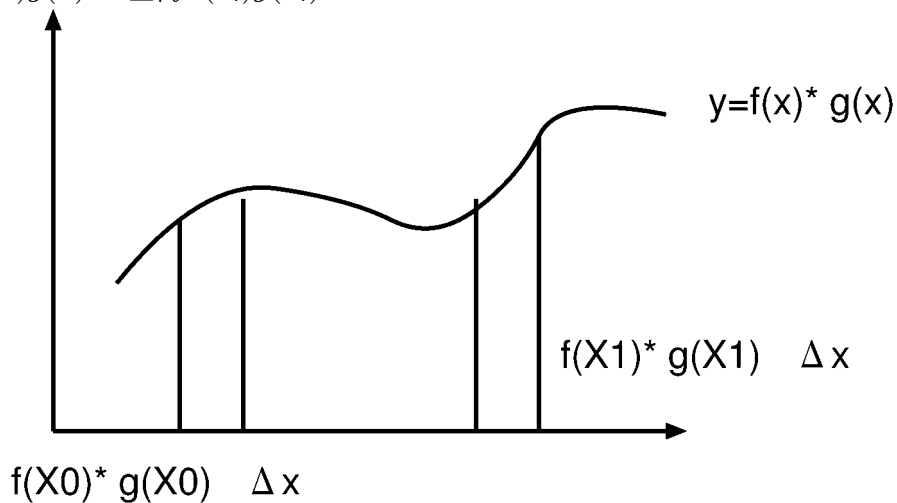
$$\int f^*(x)g(x)dx \simeq \sum_i f^*(x_i)g(x_i)\Delta x = \Delta x \sum_i f_i^* g_i$$

これを関数の内積 (f, g) と考える
波動関数 $\Phi(x)$ の規格化：

$$\int dx \Phi^*(x)\Phi(x) = 1$$

は、 $(\Phi, \Phi) = 1$ と見なすことができる

$$\int dx f^*(x)g(x) \quad \sum_i f^*(x_i)g(x_i)\Delta$$



注)

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x} &= \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} & \hat{A}\boldsymbol{x} &= \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} \\ \rightarrow \langle \hat{A} \rangle &= \boldsymbol{x}^\dagger \hat{A} \boldsymbol{x} = (c_1^*, c_2^*) \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} \\ &= c_1^* d_1 + c_2^* d_2 \end{aligned}$$

波動関数

$$\begin{aligned} \Phi &= f(x), & \hat{A}\Phi &= g(x) \\ \rightarrow \langle \hat{A} \rangle &= \int dx \Phi^* \hat{A} \Phi = \int dx f^*(x) g(x) \end{aligned}$$

注)

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\chi} &= \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} & \hat{A}\boldsymbol{\chi} &= \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} \\ \rightarrow \langle \hat{A} \rangle &= \boldsymbol{\chi}^\dagger \hat{A} \boldsymbol{\chi} = (c_1^*, c_2^*) \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} \\ &= c_1^* d_1 + c_2^* d_2 \end{aligned}$$