量子力学　第5回演習解答

スピン1/2の2準位系を考える．スピン角運動量のz成分を表す演算子$\hat{S}_z$に対する固有ベクトルを$|\alpha\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},|\beta\rangle=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$とおくと，固有ベクトル$|\alpha\rangle,|\beta\rangle$に対する固有値が$\frac{\hbar}{2},-\frac{\hbar}{2}$であることから，$\hat{S}_z|\alpha\rangle=\frac{\hbar}{2}|\alpha\rangle,\hat{S}_z|\beta\rangle=-\frac{\hbar}{2}|\beta\rangle$の関係が成り立つことがわかる．またパウリ行列を$\hat{S}_i=\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_i\ (i=x,y,z)$と定義すると，上記の関係式は$\hat{\sigma}_z|\alpha\rangle=|\alpha\rangle,\hat{\sigma}_z|\beta\rangle=-|\beta\rangle$と表される．以下の問題に答えよ．ただし答えだけでなく，導出過程も明記すること．

1. 固有ベクトル$|\alpha\rangle,|\beta\rangle$は完全規格直交系をなすことから，$|\alpha\rangle,|\beta\rangle$を基底ベクトルとして，任意の状態ベクトル$|\Psi\rangle$を$|\alpha\rangle,|\beta\rangle$の重ね合わせ状態$|\Psi\rangle=a|\alpha\rangle+b|\beta\rangle$で表すことができる． $|\Psi\rangle$のノルムの2乗が1（規格化条件）となるために，a,bが満たすべき関係式を求めなさい．この結果から，$|a|^2,|b|^2$の示す物理的意味を答えなさい．

【解答】

状態ベクトル$|\Psi\rangle=a|\alpha\rangle+b|\beta\rangle$と双対関係にあるブラは，$\langle\Psi|=a^*\langle\alpha|+b^*\langle\beta|$である．

ノルム2乗が1となるには，$\langle\Psi|\Psi\rangle=1$を満たせば良い（規格化条件）．

$$\begin{aligned}\langle\Psi|\Psi\rangle&=\left\{a^*\langle\alpha|+b^*\langle\beta|\right\}\left\{a|\alpha\rangle+b|\beta\rangle\right\}\\&=a^*a\langle\alpha|\alpha\rangle+a^*b\langle\alpha|\beta\rangle+b^*a\langle\beta|\alpha\rangle+b^*b\langle\beta|\beta\rangle\\&=|a|^2+|b|^2\end{aligned}$$

（$\because$ 基底$|i\rangle\,(i=\alpha,\beta)$の規格直交性$\langle i|j\rangle=\delta_{ij}$）

これより規格化条件は，$|a|^2+|b|^2=1$となる．$|a|^2,|b|^2$は，それぞれ状態$|\alpha\rangle,|\beta\rangle$を取り得る確率を表す．

（以下の問題では$|\Psi\rangle$は規格化されているとする）

2. $|\alpha'\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},|\beta'\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$が完全規格直交系をなすことを示せ（ヒント：規格化⇒$\langle\alpha'|\alpha'\rangle=\langle\beta'|\beta'\rangle=1$，直交系⇒$\langle\alpha'|\beta'\rangle=0$，完全系⇒$|\alpha'\rangle\langle\alpha'|+|\beta'\rangle\langle\beta'|=\hat{1}$（恒等演算子）をそれぞれ示せば良い．）
（補足：完全規格直交系をなすベクトルであれば基底ベクトルになり得ることから，

$|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ でなく，$|\alpha'\rangle, |\beta'\rangle$ を基底ベクトルに用いても良い．ただし一般的には，基底ベクトルが $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ となるように，座標変換（基底変換）を行なう）

【解答】

$$\langle\alpha'|\alpha'\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = 1, \langle\beta'|\beta'\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} = 1$$

であることから，$|\alpha'\rangle, |\beta'\rangle$ は規格化されている．

$$\langle\alpha'|\beta'\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} = 0, \langle\beta'|\alpha'\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = 0$$

であることから，$|\alpha'\rangle, |\beta'\rangle$ は直交している．

$$|\alpha'\rangle\langle\alpha'| + |\beta'\rangle\langle\beta'| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & 1\end{pmatrix} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & -1\\-1 & 1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} = \hat{1}$$

であることから，$|\alpha'\rangle, |\beta'\rangle$ は完全系をなす．

以上まとめると，$|\alpha'\rangle, |\beta'\rangle$ は完全規格直交系をなすことがわかる．

3. $\hat{\sigma}_z$ の行列表現（2 行 2 列の行列）$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix}\langle\alpha|\hat{\sigma}_z|\alpha\rangle & \langle\alpha|\hat{\sigma}_z|\beta\rangle\\ \langle\beta|\hat{\sigma}_z|\alpha\rangle & \langle\beta|\hat{\sigma}_z|\beta\rangle\end{pmatrix}$ を求めなさい．この結果から，$\hat{\sigma}_z\left(\hat{S}_z\right)$ の対角成分のもつ物理的意味を言葉で説明せよ．

【解答】

$$\langle\alpha|\hat{\sigma}_z|\alpha\rangle = \langle\alpha|\alpha\rangle = 1, \langle\alpha|\hat{\sigma}_z|\beta\rangle = -\langle\alpha|\beta\rangle = 0$$
$$\langle\beta|\hat{\sigma}_z|\alpha\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle = 0, \langle\beta|\hat{\sigma}_z|\beta\rangle = -\langle\beta|\beta\rangle = -1$$

であることから，

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}$$

となる．$\hat{\sigma}_z$ の対角成分は，固有ベクトル $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ に対する $\hat{\sigma}_z$ の固有値を表す．$\hat{\sigma}_z$ に $\dfrac{\hbar}{2}$ を掛

け合わせたものは，スピンの z 成分を表すことから，$\hat{\sigma}_z$ の対角成分に $\dfrac{\hbar}{2}$ を掛けた $\dfrac{\hbar}{2}, -\dfrac{\hbar}{2}$ は，それぞれ固有ベクトル $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ に対するスピンの z 成分を表している．固有ベクトル $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ を基底ベクトルに用いた場合には，$\hat{S}_z$ の対角成分 $\dfrac{\hbar}{2}, -\dfrac{\hbar}{2}$ は各基底ベクトルに対するスピンの z 成分を表している．

4. 問 1・3 の結果から，任意の状態ベクトル $|\Psi\rangle$ に対する σ_z および S_z の期待値 $\langle\sigma_z\rangle = \langle\Psi|\hat{\sigma}_z|\Psi\rangle$ および $\langle S_z\rangle = \dfrac{\hbar}{2}\langle\sigma_z\rangle$ を求めなさい．またその結果から，$\langle S_z\rangle$ を数式で表した時の各項のもつ物理的意味を説明しなさい．

【解答】

任意の状態ベクトルを $|\Psi\rangle = a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle$ と表し，$|\Psi\rangle$ に対する σ_z の期待値 $\langle\sigma_z\rangle$ を計算すると，

$$\langle\sigma_z\rangle = \langle\Psi|\hat{\sigma}_z|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} a^* & b^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = |a|^2 - |b|^2$$

$$\langle S_z\rangle = \frac{\hbar}{2}\langle\sigma_z\rangle = \frac{\hbar}{2}|a|^2 - \frac{\hbar}{2}|b|^2$$

となる．$\langle S_z\rangle$ はスピンの z 成分の期待値を表す．$\langle S_z\rangle$ に含まれる各項はそれぞれ

$\dfrac{\hbar}{2}$ …状態 $|\alpha\rangle$ に対するスピンの z 成分の測定値，$|a|^2$ …状態 $|\alpha\rangle$ を取り得る確率

$-\dfrac{\hbar}{2}$ …状態 $|\beta\rangle$ に対するスピンの z 成分の測定値，$|b|^2$ …状態 $|\beta\rangle$ を取り得る確率

を意味する．すなわち $\langle S_z\rangle$ の値は，状態 $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ に対する S_z の測定値を，それぞれの状態を取り得る確率で重みづけをして平均した値となっている．

5. パウリ行列 $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$ を用いて昇降演算子 $\hat{\sigma}^{\pm} = \hat{\sigma}_x \pm i\hat{\sigma}_y$ を定義すると，$\hat{\sigma}^-|\alpha\rangle = 2|\beta\rangle, \hat{\sigma}^+|\beta\rangle = 2|\alpha\rangle, \hat{\sigma}^+|\alpha\rangle = \hat{\sigma}^-|\beta\rangle = 0$ の関係が成り立つことがわかっている．これより，$\hat{\sigma}^+, \hat{\sigma}^-$ の行列表現（2 行 2 列の行列）を求めよ．この結果から，$\hat{\sigma}^+, \hat{\sigma}^-\left(\hat{S}_z^+, \hat{S}_z^-\right)$ の非対角成分のもつ物理的意味を言葉で説明せよ．

【解答】

$$\begin{aligned}&\langle\alpha|\hat{\sigma}^+|\alpha\rangle=0,\langle\alpha|\hat{\sigma}^+|\beta\rangle=2\langle\alpha|\alpha\rangle=2,\langle\beta|\hat{\sigma}^+|\alpha\rangle=0,\langle\beta|\hat{\sigma}^+|\beta\rangle=2\langle\beta|\alpha\rangle=0\\&\langle\alpha|\hat{\sigma}^-|\alpha\rangle=2\langle\alpha|\beta\rangle=0,\langle\alpha|\hat{\sigma}^-|\beta\rangle=0,\langle\beta|\hat{\sigma}^-|\alpha\rangle=2\langle\beta|\beta\rangle=2,\langle\beta|\hat{\sigma}^-|\beta\rangle=0\end{aligned}$$ であ

ることから，$\hat{\sigma}^+,\hat{\sigma}^-$の行列表現は次のように求められる．

$$\hat{\sigma}^+=\begin{pmatrix}\langle\alpha|\hat{\sigma}^+|\alpha\rangle & \langle\alpha|\hat{\sigma}^+|\beta\rangle\\ \langle\beta|\hat{\sigma}^+|\alpha\rangle & \langle\beta|\hat{\sigma}^+|\beta\rangle\end{pmatrix}=2\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}$$

$$\hat{\sigma}^-=\begin{pmatrix}\langle\alpha|\hat{\sigma}^-|\alpha\rangle & \langle\alpha|\hat{\sigma}^-|\beta\rangle\\ \langle\beta|\hat{\sigma}^-|\alpha\rangle & \langle\beta|\hat{\sigma}^-|\beta\rangle\end{pmatrix}=2\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}$$

これより，

$$\hat{\sigma}^+|\beta\rangle=2\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=2\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=2|\alpha\rangle$$

$$\hat{\sigma}^-|\alpha\rangle=2\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=2\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=2|\beta\rangle$$

であることから，$\hat{\sigma}^+,\hat{\sigma}^-$の非対角成分はそれぞれ基底ベクトル間$|\beta\rangle\Rightarrow|\alpha\rangle,|\alpha\rangle\Rightarrow|\beta\rangle$の状態遷移を表している．

またスピンのz成分に対する昇降演算子は，$\hat{S}_z^+=\dfrac{\hbar}{2}\hat{\sigma}^+$, $\hat{S}_z^-=\dfrac{\hbar}{2}\hat{\sigma}^-$で表されることから，$\hat{S}_z^+|\beta\rangle=\hbar|\alpha\rangle,\hat{S}_z^-|\alpha\rangle=\hbar|\beta\rangle$の関係を満たす．すなわち，$\hat{S}_z^+,\hat{S}_z^-$の非対角成分はそれぞれ基底ベクトル間$|\beta\rangle\Rightarrow|\alpha\rangle,|\alpha\rangle\Rightarrow|\beta\rangle$の状態遷移を表し，遷移に伴ってのスピンの$z$成分が$\hbar$だけ変化することを表している．

（補足：スピンのz成分を変化させるには，一般的には外部からスピンに磁場をかけて変化させる．$\hbar$はスピンと外部磁場の相互作用の大きさに対応しており，相互作用によって角運動量$\hbar$をやり取りすると解釈できる）

6. 問 5 の結果から，$\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_y$の行列表現を求めよ．（ヒント：$\hat{\sigma}_x=\dfrac{1}{2}(\hat{\sigma}^++\hat{\sigma}^-)$, $\hat{\sigma}_y=\dfrac{1}{2i}(\hat{\sigma}^+-\hat{\sigma}^-)$を用いる．）また，パウリ行列に関して，$\hat{\sigma}_x^2=\hat{\sigma}_y^2=\hat{\sigma}_z^2=\hat{1},\langle\sigma_x^2\rangle=\langle\sigma_y^2\rangle=\langle\sigma_z^2\rangle=1$が成り立つことを示せ．

【解答】

$$\hat{\sigma}_x=\frac{1}{2}(\hat{\sigma}^++\hat{\sigma}^-),\ \hat{\sigma}_y=\frac{1}{2i}(\hat{\sigma}^+-\hat{\sigma}^-)$$

を用いると，

$$\hat{\sigma}_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\hat{\sigma}_y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$$

と求められる．したがって，

$$\hat{\sigma}_x^2=\hat{\sigma}_y^2=\hat{\sigma}_z^2=\hat{1}$$
$$\left\langle\sigma_x^2\right\rangle=\left\langle\sigma_y^2\right\rangle=\left\langle\sigma_z^2\right\rangle=\left\langle\Psi\middle|\hat{1}\middle|\Psi\right\rangle=\left\langle\Psi\middle|\Psi\right\rangle=1$$

が成り立つ（途中計算省略）．

7.　問３・６の結果から，パウリ行列の交換関係が$\left[\hat{\sigma}_y,\hat{\sigma}_z\right]=2i\hat{\sigma}_x$となることを示せ．またこの結果が示す物理的意味を説明しなさい．測定可能か否か説明しなさい．

【解答】

交換関係を計算すると，

$$\left[\hat{\sigma}_y,\hat{\sigma}_z\right]=\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z-\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}=2i\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}=2i\hat{\sigma}_x$$

となり，0 にならない．すなわち，$\hat{\sigma}_y,\hat{\sigma}_z$は互いに交換不可であり，$\hat{\sigma}_y,\hat{\sigma}_z$をそれぞれ用いて表される物理量は同時測定不可能である．$\hat{\sigma}_y,\hat{\sigma}_z$に$\dfrac{\hbar}{2}$を掛け合わせたものは，それぞれスピンの$y,z$成分を表すことから，スピンの$y,z$成分は同時に確定することができない（不確定性原理）．

（補足：スピンの１つの成分が確定すると，他の２成分は確定することができない）

8.　$\left|\Psi\right\rangle$に対する$\hat{\sigma}_y,\hat{\sigma}_z$の期待値$\left\langle\sigma_y\right\rangle,\left\langle\sigma_z\right\rangle$およびばらつき（標準偏差）$\left\langle\Delta\sigma_y\right\rangle,\left\langle\Delta\sigma_z\right\rangle$を (i) $a=1,b=0$，　(ii) $a=\dfrac{1}{\sqrt{2}},b=\dfrac{i}{\sqrt{2}}$の場合についてそれぞれ求めなさい．この結果から，(i),(ii)で表される状態ベクトルは，どのような状態を表したものか，言葉で説明しなさい．

（ヒント：$\left\langle\sigma_i\right\rangle=\left\langle\Psi\middle|\hat{\sigma}_i\middle|\Psi\right\rangle,\left\langle\sigma_i^2\right\rangle=\left\langle\Psi\middle|\hat{\sigma}_i^2\middle|\Psi\right\rangle,\left\langle\Delta\sigma_i\right\rangle=\sqrt{\left\langle\sigma_i^2\right\rangle-\left\langle\sigma_i\right\rangle^2}=\sqrt{1-\left\langle\sigma_i\right\rangle^2}$）

【解答】

(i) $a=1,b=0$の場合：

期待値は,

$$\left\langle\sigma_y\right\rangle=\left\langle\Psi\left|\hat{\sigma}_y\right|\Psi\right\rangle=\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}=0$$

$$\left\langle\sigma_z\right\rangle=\left\langle\Psi\left|\hat{\sigma}_z\right|\Psi\right\rangle=\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}=1$$

となる．また，問 6 の結果から，

$$\left\langle\sigma_x^2\right\rangle=\left\langle\sigma_y^2\right\rangle=\left\langle\sigma_z^2\right\rangle=1$$

が常に成り立つことから，ばらつき$\left\langle\Delta\sigma_x\right\rangle,\left\langle\Delta\sigma_z\right\rangle$は，

$$\left\langle\Delta\sigma_y\right\rangle=\sqrt{\left\langle\sigma_y^2\right\rangle-\left\langle\sigma_y\right\rangle^2}=1$$

$$\left\langle\Delta\sigma_z\right\rangle=\sqrt{\left\langle\sigma_z^2\right\rangle-\left\langle\sigma_z\right\rangle^2}=0$$

となる．したがって，σ_zの測定値のばらつきは 0 であり，測定値は常に 1 である．言い換えれば，S_zの測定値は常に$\frac{\hbar}{2}$と確定している．一方，σ_yの測定値は揺らいでおり，期待値は 0 になる．言い換えれば，S_yの測定値は不確定である．これはスピンの各成分は同時に確定できない不確定性原理によるものである．まとめると，$a=1,b=0$で表される状態ベクトルは，スピンの z 成分が$\frac{\hbar}{2}$に確定した状態を表している．これは$\left|\Psi\right\rangle=\left|\alpha\right\rangle$であることからも明らかである． これはスピンが$+z$方向に向いている状態であるとイメージできる．

(ii) $a=\frac{1}{\sqrt{2}},b=\frac{i}{\sqrt{2}}$の場合：

期待値は，

$$\left\langle\sigma_y\right\rangle=\left\langle\Psi\left|\hat{\sigma}_y\right|\Psi\right\rangle=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & -i\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}=1$$

$$\left\langle\sigma_z\right\rangle=\left\langle\Psi\left|\hat{\sigma}_z\right|\Psi\right\rangle=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & -i\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}=0$$

となる．また，問 6 の結果から，

$$\left\langle\sigma_x^2\right\rangle=\left\langle\sigma_y^2\right\rangle=\left\langle\sigma_z^2\right\rangle=1$$

が常に成り立つことから，ばらつき$\left\langle \Delta\sigma_y \right\rangle, \left\langle \Delta\sigma_z \right\rangle$は，

$$\left\langle \Delta\sigma_y \right\rangle = \sqrt{\left\langle \sigma_y^2 \right\rangle - \left\langle \sigma_y \right\rangle^2} = 0$$
$$\left\langle \Delta\sigma_z \right\rangle = \sqrt{\left\langle \sigma_z^2 \right\rangle - \left\langle \sigma_z \right\rangle^2} = 1$$

となる．したがって，σ_yの測定値のばらつきは 0 であり，測定値は常に 1 である．言い換えれば，S_yの測定値は常に$\frac{\hbar}{2}$と確定している．一方，σ_zの測定値は揺らいでおり，期待値は 0 になる．言い換えれば，S_zの測定値は不確定である．これはスピンの各成分は同時に確定できない不確定性原理によるものである．まとめると，$a = \frac{1}{\sqrt{2}}, b = \frac{i}{\sqrt{2}}$で表される状態ベクトルは，$\hat{\sigma}_y$に対する固有ベクトルとなっており，スピンの$y$成分が$\frac{\hbar}{2}$に確定した状態を表している．これはスピンが$+y$方向に向いている状態であるとイメージできる．$a = \frac{1}{\sqrt{2}}, b = \frac{i}{\sqrt{2}}$の場合，$\left|\Psi\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left|\alpha\right\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}\left|\beta\right\rangle$であり，スピンの$z$成分が$\frac{\hbar}{2}, -\frac{\hbar}{2}$に確定した状態$\left|\alpha\right\rangle, \left|\beta\right\rangle$（$\hat{S}_z$の固有ベクトル）を$\frac{1}{2}$の確率で重ね合わせた状態となっている．したがって，S_zの測定値は$\frac{\hbar}{2}, -\frac{\hbar}{2}$の 2 通りの値を確率的にとるため，不確定となる．

【補足】

スピンの 1 成分が確定した状態は，他のスピン成分が確定した状態の重ね合わせ状態（すなわちそのスピン成分は確定していない）として表すことができる．