

補遺：ひとつのスピンの 禁断の量子力学的表現※

日常感覚での「ありえないもの」を敢えて表現しています。
学生諸氏で禁断の領域に興味を持たれた方は
その無謀さに目をつむって眺めてください。
日常感覚と量子力学の「両方とも」正しいのです。

※MRIでの診断を主体とする視点から、境界を越えて踏み込んでいます。

※MRI関連書籍で少しでも量子力学的なスピンについて触れているものがありますが、
多くの場合、誤解を招きかねない表現になっているようです。

(このPDFにもそういったことが潜んでいるかもしれませんので、ご注意願います)

※量子力学的な表現の本質に近づきたい方への指針となれば、幸いです。

※Microsoft数式3.0を用いていましたが、サポートが終了したためか文字化けが発生しており、officeの数式ツールにて数式関連を含め、書き直しました(2018/01/17)。

スピンを量子力学で考えたいくなる理由

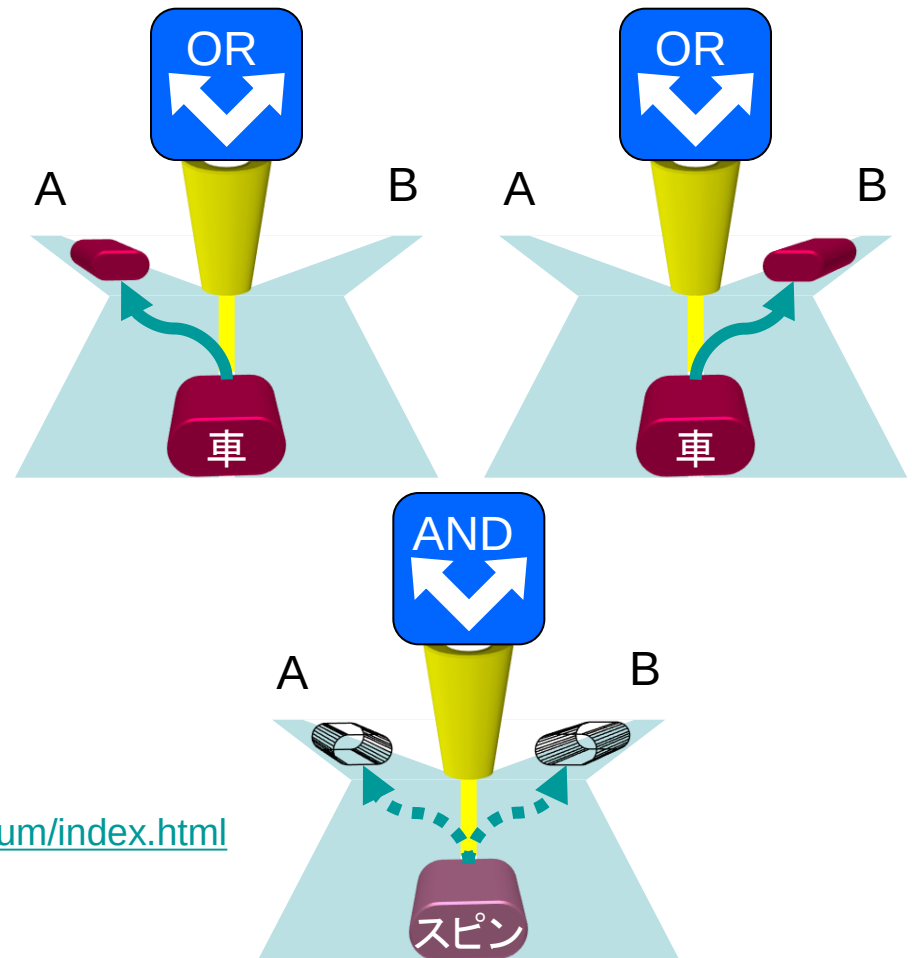
- 古典力学での説明には限界を感じる！
 - 古典力学で粒子(陽子や電子)が自転することで(磁場)が発生していると考ええると、表面の回転速度は光速を越えてしまう？
 - 量子力学では磁場中のスピンの向きは連続的に変化せず、プランク定数分のエネルギー差($h\nu$)で(断続的に)上下のどちらかのみ状態をとるのに、古典力学では連続的な角度で倒れる？
 - 量子力学のスピンを90度パルスで倒したとき向きは特定できるの？「位相を揃える」とかできるの？
 - スピンは「二回転して元に戻る」とはどういうこと？
- 量子暗号でスピンが用いられようとしているのに、MRIで量子力学を応用した診断はできないのか？・・・などなど・・・

量子力学と日常感覚との差異(1)

重ね合わせ(AND)※の視点

- 日常感覚的な世界
 - 「存在するなら、AまたはBのどちらか一方しかありえない。」
- 量子力学的な世界
 - 「存在するなら、AかつBの両方で、ある確率を伴って両方同時に存在する。」もしくは、「Aでの存在とBでの存在を、重ね合わせた状態。」
 - 例: 二重スリット実験(日立)

<https://www.hitachi.co.jp/rd/research/materials/quantum/index.html>



※「重ね合わせ」: 量子もつれ(entanglement)と呼ばれる「非局所的な相関関係」という概念を含みます。

量子力学と日常感覚との差異(2)

不確定性原理

- 日常感覚的な世界

- 真の値が存在し、計測誤差を含むものの、支障のない範囲で正確に計測できる。

- 量子力学的な世界

- 「物理量の特定の組み合わせ(共役な物理量の組)に、不確定性関係がある。組み合わせられた片方の取り得る値の幅※に応じて、他方の取り得る値の幅※が変わる。」(以下、幅を Δ で表す)

- $\Delta\text{位置} \times \Delta\text{運動量} \geq \text{一定値}$
- $\Delta\text{時間} \times \Delta\text{エネルギー} \geq \text{一定値}$
- $\Delta\text{角度} \times \Delta\text{角運動量} \geq \text{一定値}$

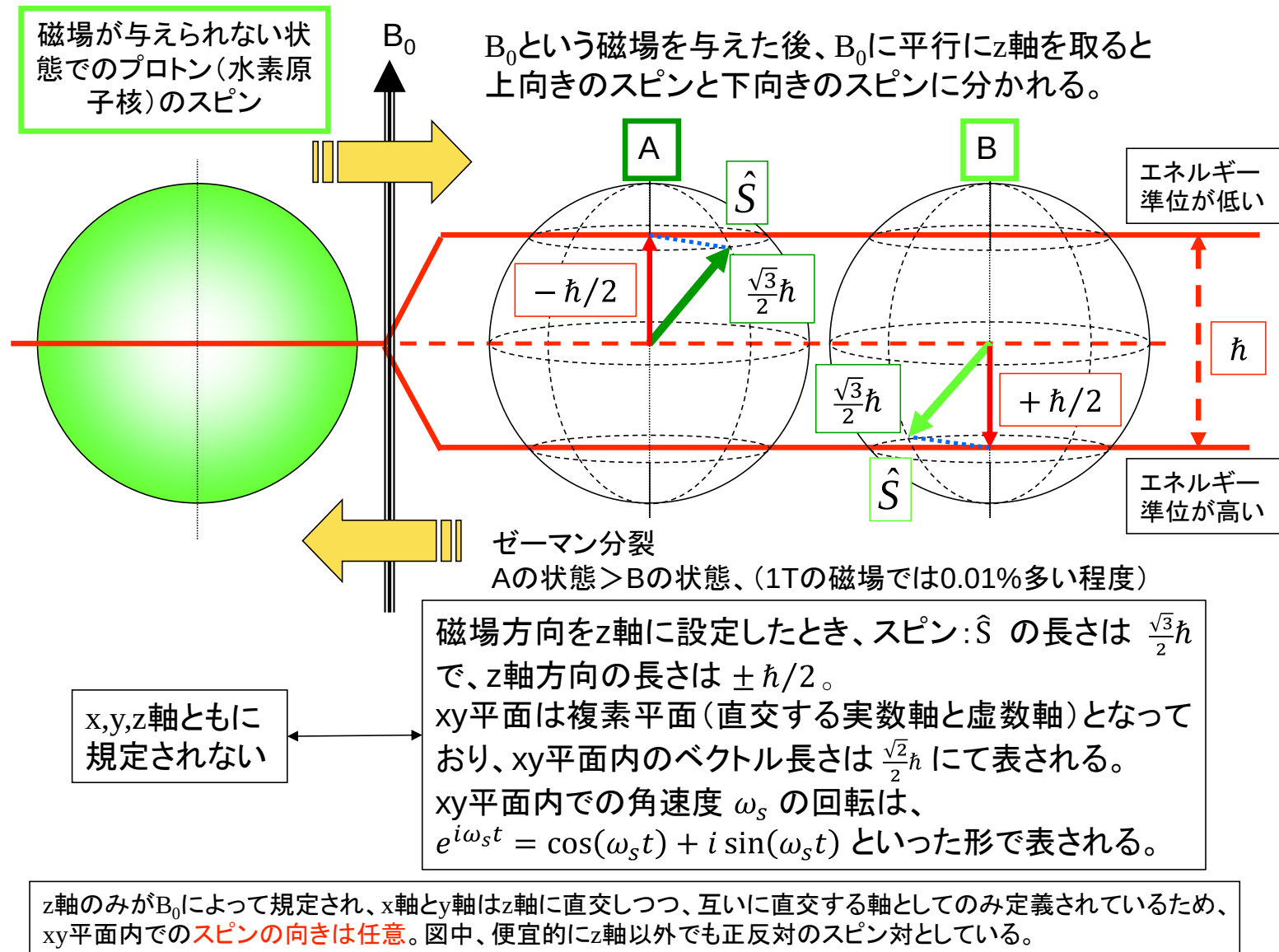
一定値: $\hbar/2$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

h : プランク定数

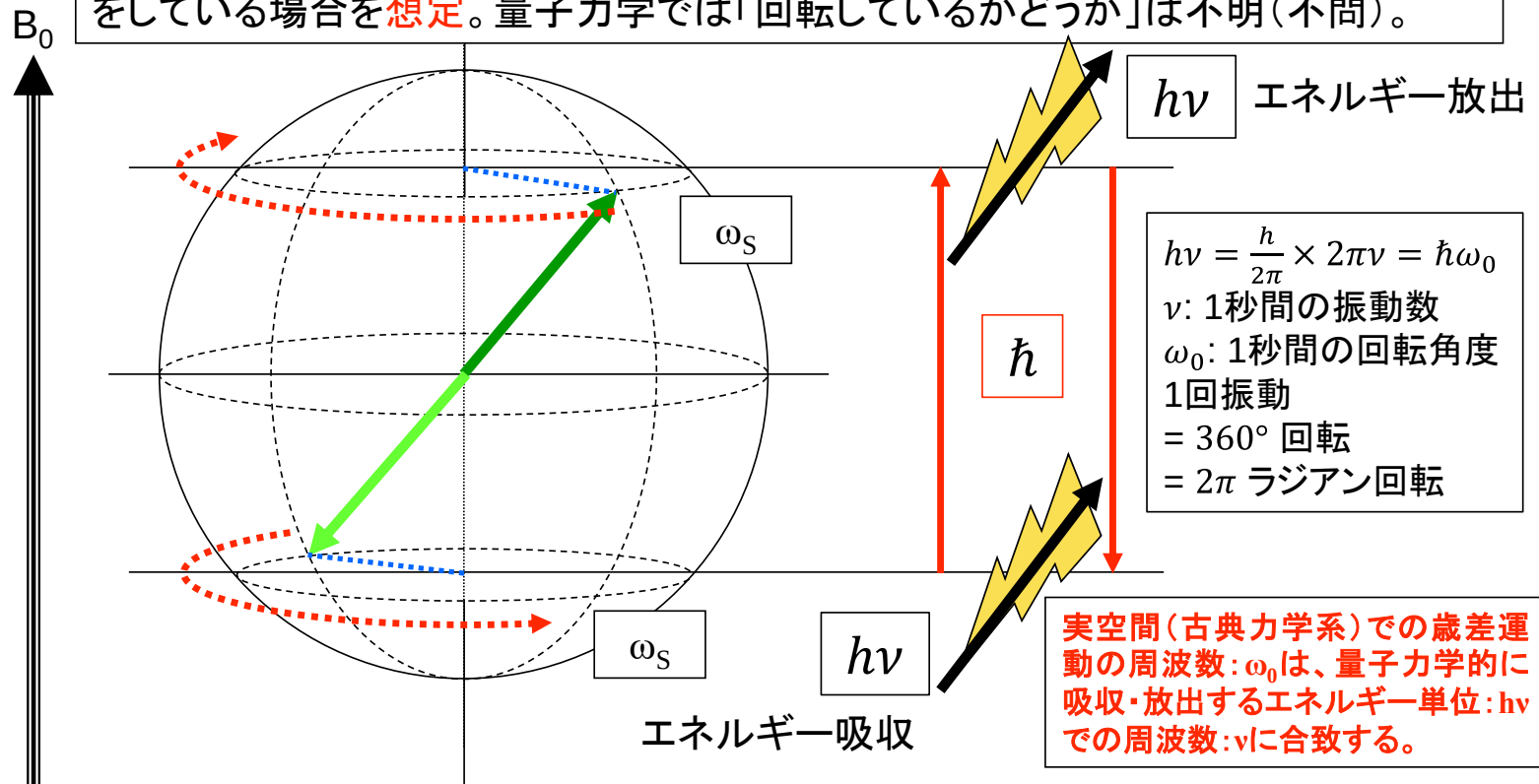
※「値の幅」には直接的には測定に関与しない「標準偏差(σ)」と、測定に関与する「誤差(ε)・擾乱(δ)」があります。上記式は、スピンの数学的な制約から生み出される不確定性関係であり、厳密には「値の幅」は「標準偏差(σ)」です。測定が関係する「誤差・擾乱」の場合、上記式の修正が必要とのことで、近年、小澤の不等式と呼ばれる式などが提唱されています。小澤の不等式では、物理量1の測定誤差(ε_1)による物理量2の擾乱(δ_2)と、それぞれの標準偏差 σ_1 、 σ_2 とを組み合わせ、「 $\varepsilon_1 \times \delta_2 + \varepsilon_1 \times \sigma_2 + \delta_2 \times \sigma_1 \geq \text{一定値}$ 」という関係にあるとしています。詳細は最後にまとめた文献・資料を参照願います。

磁場を与える前後でのスピンの変化



スピンのz軸の向きとエネルギーの関係(1)

古典力学系にて $\omega_0 = \gamma B_0$ で歳差運動し、複素平面内を $\omega_s (= \omega_0/2$ 、後述)で歳差運動をしている場合を**想定**。量子力学では「回転しているかどうか」は不明(不問)。



磁場(z軸)に対し、スピンは「上向き」か「下向き」の状態しかとりえず。両者の差が $h\nu$ であり、角速度 ω_0 分の差となる。量子力学での「上向き」と「下向き」のスピンは ω_0 の1/2の角速度である ω_s で相互に逆方向に回転するのと同様。スピンという概念の起点をz軸のゼロ点にて考えるから1/2なのであり、「上向き」と「下向き」のどちらかを起点にすれば1/2という値は出ないであろう。古典力学的に両者の相対的な角速度差は ω_0 になり、角速度 ω_0 分のエネルギーの授受と等価な概念として扱われる。

補遺：スピンとスピンの状態（スピノール）

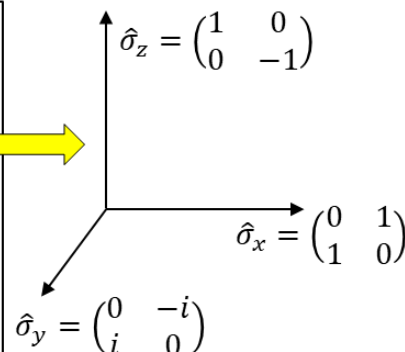
スピンが、ある軸(a)に対して正方向(+)および負方向(-)を向いている状態を、縦ベクトル(ケットベクトル)にてあらわすと、例えばz軸方向の場合、 $|z_+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ および $|z_-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ となる。このベクトル表現をスピノールと呼ぶ。

このとき、 $\hat{S}_a|a_\pm\rangle = \pm\frac{1}{2}\hbar|a_\pm\rangle$ となるような $\hat{S}_a$ (2×2 複素行列) をスピン演算子と呼び、 2×2 複素行列の3次元ベクトル様の表現: $\hat{S} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ を、単にスピン(もしくはスピン角運動量)と呼ぶ。スピンのイメージとしては、右下のように3次元ベクトルの各軸が、複素数を要素とする 2×2 行列になっている状態である。また同様に、スピノールにても 2×1 複素行列の空間をイメージ可能であるが、何れにしても実空間とは異なっていることに注意。
※スピンは具体的には特殊ユニタリ群: $SU(2)$ に相当する。

$$\begin{aligned}\hat{S}_x &= \frac{1}{2}\hbar\hat{\sigma}_x, \quad |x_\pm\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} \\ \hat{S}_y &= \frac{1}{2}\hbar\hat{\sigma}_y, \quad |y_\pm\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix} \\ \hat{S}_z &= \frac{1}{2}\hbar\hat{\sigma}_z, \quad |z_+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |z_-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

$$|\hat{S}| = \sqrt{|\hat{S}_x|^2 + |\hat{S}_y|^2 + |\hat{S}_z|^2} = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$$

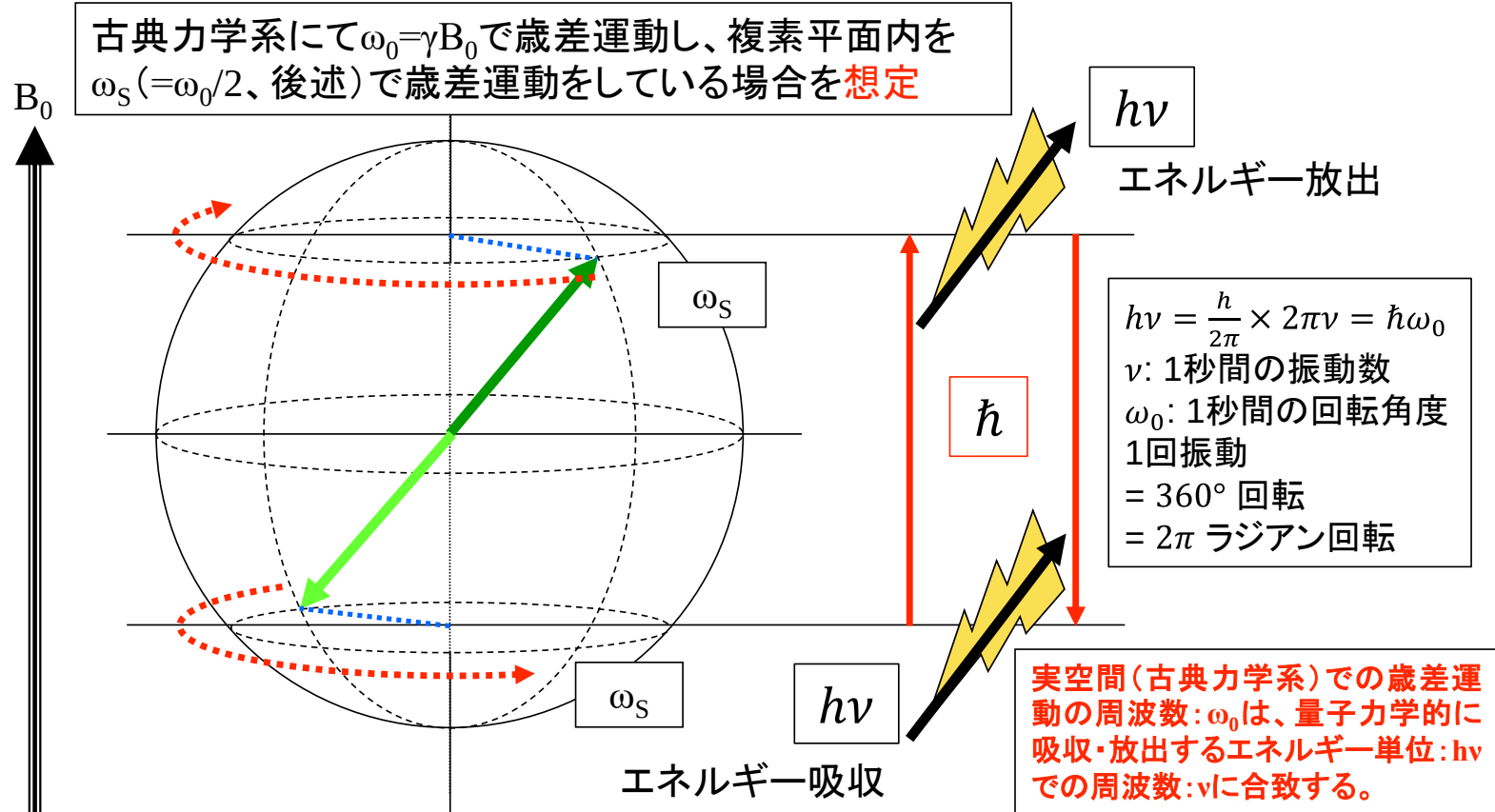
パウリ行列: $\hat{\sigma}_{x,y,z}$ は、 $SU(2)$ 群の基底(単位ベクトル相当)と呼ばれるものに等しい。
※実際にはパウリ行列に単位行列: $I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ を加えた4つが基底とされる。



特殊ユニタリ群: $SU(2) = \left\{ \begin{pmatrix} \xi_0 + \xi_1 i & -\xi_2 - \xi_3 i \\ \xi_2 - \xi_3 i & \xi_0 - \xi_1 i \end{pmatrix}; \sum_{k=0}^3 \xi_k^2 = 1, \xi_i \in \mathbb{R} \right\}$
 $SU(2)$ は4つの基底から、 $\xi_0 \times I + \xi_1 i \times \hat{\sigma}_z + (-\xi_2 i) \times \hat{\sigma}_y + (-\xi_3 i) \times \hat{\sigma}_x$ となる。

特殊ユニタリ群の補足説明: 誤っていたため、修正しました。(2023/1/18)

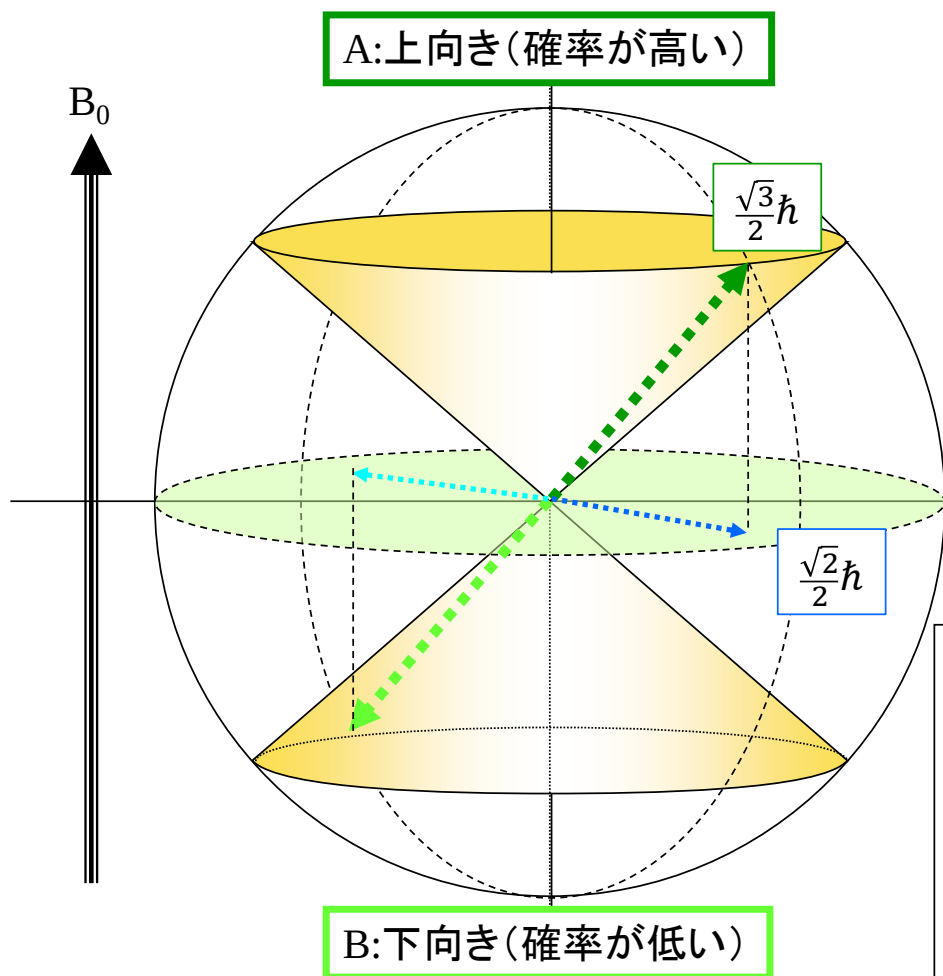
スピンのz軸の向きとエネルギーの関係(2)



スピンは 2×2 複素行列を軸とする空間(以後、「複素空間」とする)で定義されるため、実数軸のみの空間(以後、「実空間」とする)では表現不可能で「内部自由度」と言われる。したがって、複素空間でのスピンの歳差運動は実空間とは異なっている(後述)。これは、水素原子などの軌道電子が、虚数を含む波動関数として確率的に記述されるときに、回転について不問に付されるのと同じ。ただし、**スピン角運動量はマクロ系の角運動量として外部に取り出せる**※ことから、古典力学系での歳差運動に相当する「状態」にあると考えていいだろう。

※アインシュタイン・ド・ハースの実験: 電子レベルでのスピン角運動量をマクロレベルでの回転運動へと相互に変換する実験(1915年)。相互変換可能という事実から、スピン角運動量と(軌道)角運動量との整合性を担保する必要性が生じ、 2×2 複素行列の基底(単位ベクトル相当)に対する制約が要請されることになる。

ひとつのスピンの状態の確率的表現



量子力学的には、上向きの確率が $|\alpha|^2$ 、**かつ**、下向きの確率が $|\beta|^2$ の場合
 $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ (α および β は複素数)で、
 $\Psi = (\psi_z \uparrow, \psi_z \downarrow) = (\pm\alpha, \pm\beta)$ 、
 と表現する。
 たとえば、上向きが100%の場合には
 $\Psi = (1, 0)$ と表現することとなる。
 ※ $\Psi = (-1, 0)$ の場合もあるが後述。
 1Tの場合、統計力学から比率を計算すると、0.001%程上向きが多いので、
 $|\alpha|^2 = 0.50001$, $|\beta|^2 = 0.49999$
 と考えてもいい(3T)。(2020/02/19修正)

統計力学からの計算

$N \uparrow$: 上向きの個数、 $N \downarrow$: 下向きの個数

$$N \downarrow / N \uparrow = \exp\left(-\frac{\gamma \hbar B_0}{kT}\right)$$

$$\frac{N \uparrow - N \downarrow}{N \uparrow + N \downarrow} \cong 0.0002 \sim 0.001\%$$

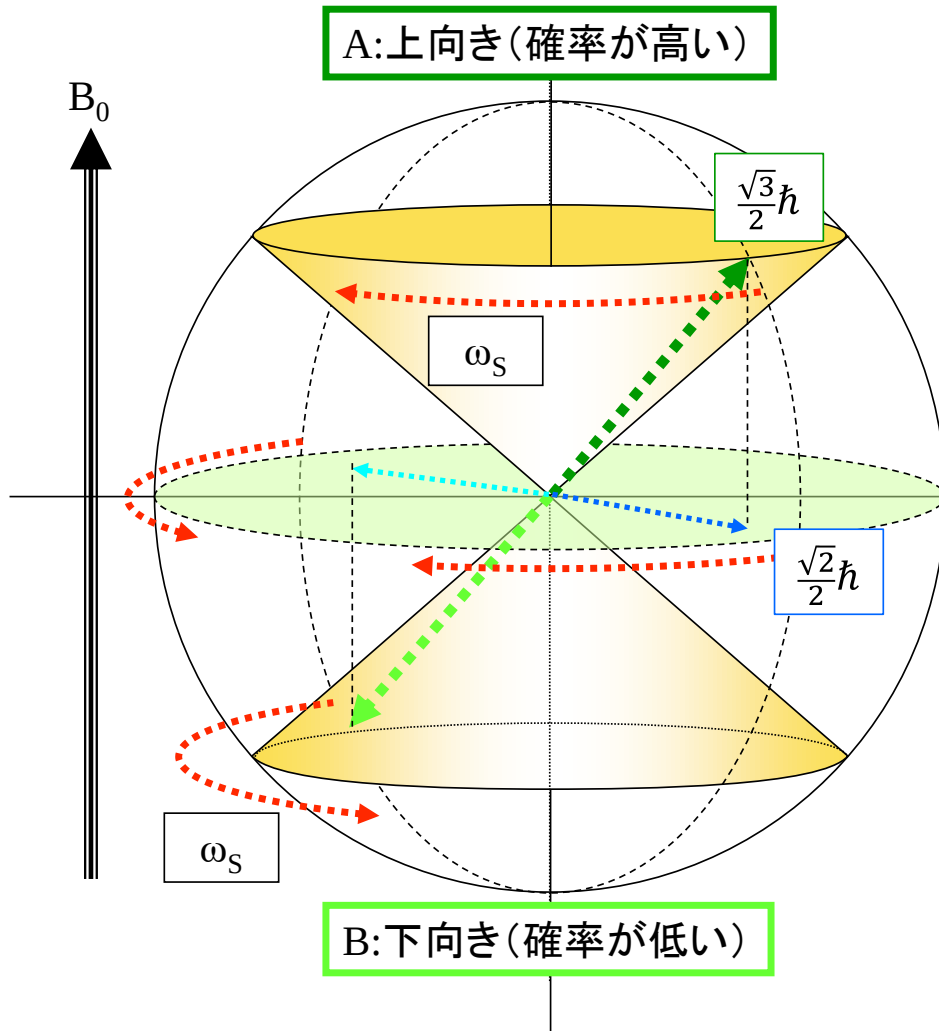
0.5Tから3.0T, 摂氏25度

(2020/02/19修正)

ここでは $\Psi = (\psi_1, \psi_2)$ と、横ベクトルで表現しているが、量子力学では下記のように、一般的には縦ベクトルで表現する。

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \text{特に } |\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \text{ といった表現が良く用いられる。}$$

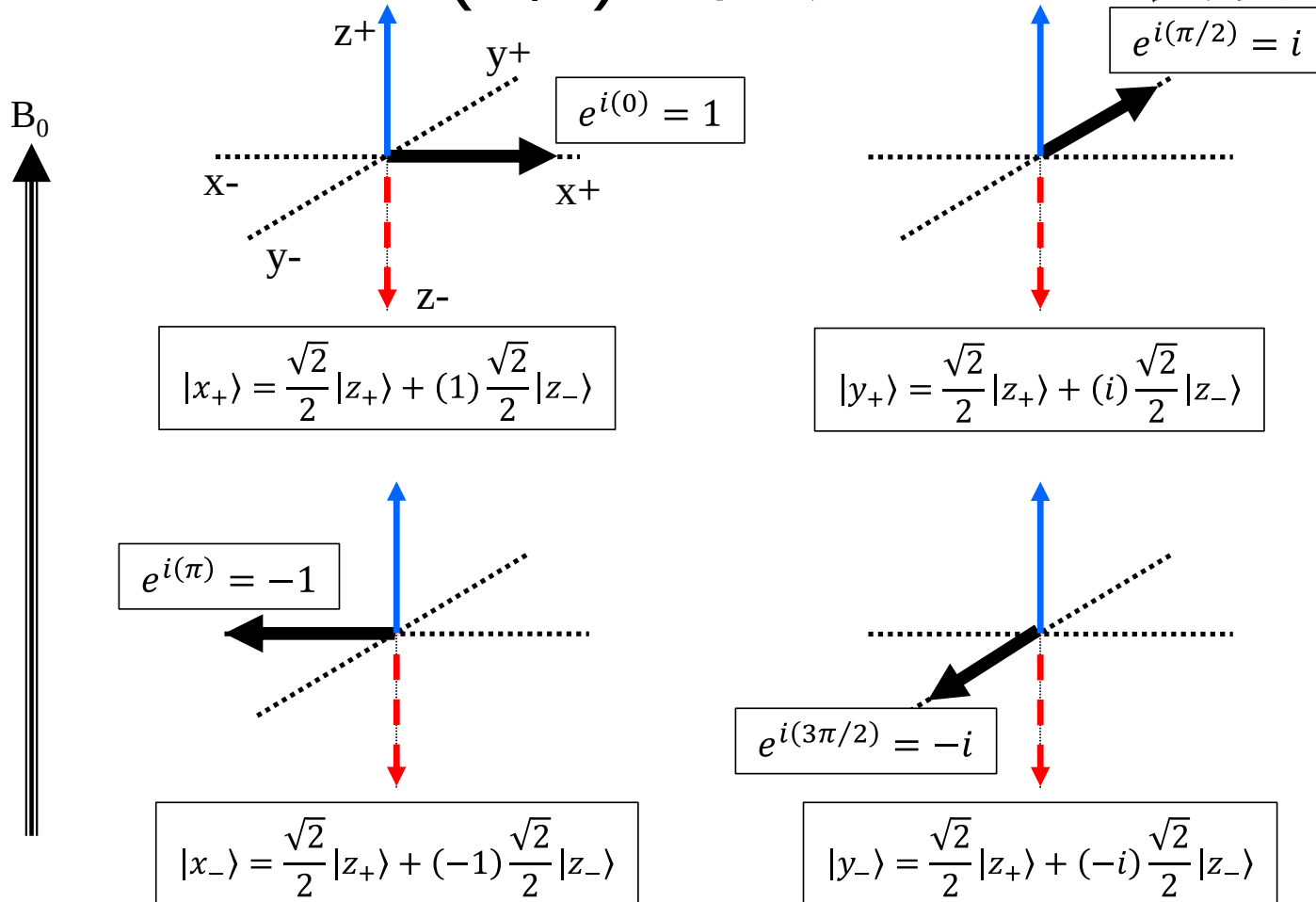
水平面(xy平面、複素平面)について(1)



スピンという複素数を含むベクトルは、円錐内の「どこか」に存在し、実空間ではラーモア歳差運動をしている。すなわち、xy平面(複素平面)内でも、「ある」方向を向き、**一定の角速度 ω_s で回転**しているとすると、**不確定性関係から位置(角度)の取り得る幅は不定となる**。あえて存在を言いたいなら、**円錐内の「どこか(一カ所)」ではなく、「どこにでも(確率的に)」存在している**というべき。なお、上の円錐と下の円錐内のベクトルの対を操作しやすいように正反対に記述しているが、便宜的なものでしかない。

水平面内での回転について

水平面(xy平面、複素平面)について(2) スピノール(z軸)の合成としての表現



z軸に直交する複素平面をx(実軸)y(虚軸)平面として考える。そうすることで、xy平面ないし平面上のベクトルは、z軸に対して回転する座標系として考えることが可能になる。
 スピノールの形式的な表現では、z軸に対する正・負のスピンの位相差が、xy平面内のスピンの方向と密接に関係しているような式であらわされる。

水平面(xy平面、複素平面)について(3)

パウリ行列の定義との関連

スピン演算子に出てくる $\sigma_{x,y,z}$ は「パウリ行列」と呼ばれ、スピンが軌道角運動量の演算子と相同の性質を持つことから、

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

と導き出される値である。

導き方は省略する(量子力学の専門書等を参照願います)が、概略としては、まず $\hat{\sigma}_z$ が、z軸方向(磁場方向)を決定したときに定義される。行列ではあるものの、要素は実数である。

つぎに $\hat{\sigma}_x$ と $\hat{\sigma}_y$ は(電子の)軌道角運動量の演算子との整合性から、すなわち、量子力学的な交換関係の要請から、まず $\pi/2$ だけずれた(すなわち直交する)2軸として、下記のように表される。

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & e^{i(\alpha-\pi/2)} \\ e^{-i(\alpha-\pi/2)} & 0 \end{pmatrix}$$

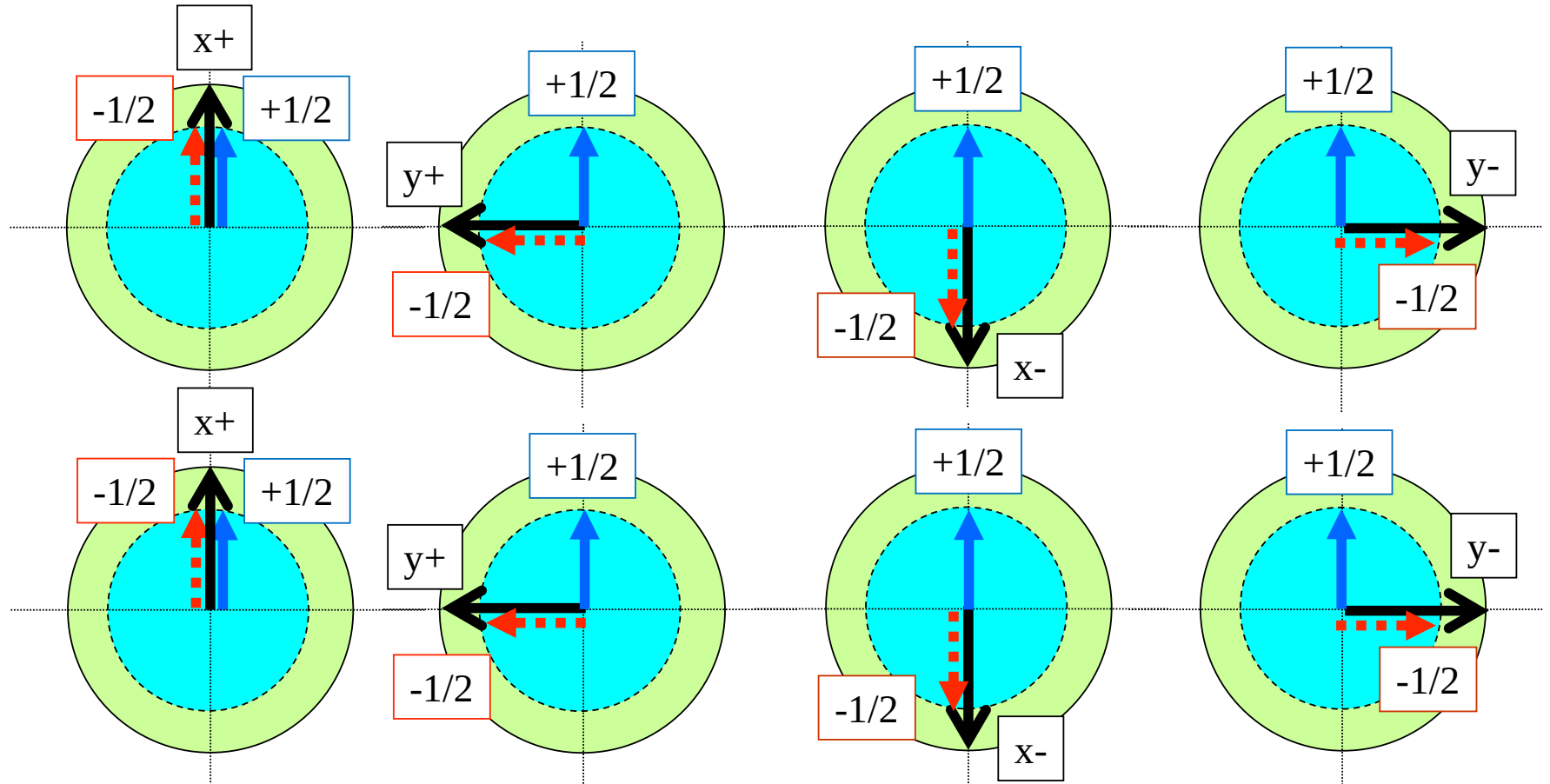
ここで重要なのは α の値は任意だということである。たとえば便宜的に $\alpha = 0$ と置くことで、上述のようにxy軸が決定される。 $\alpha = 0$ のときには x軸の要素は実数になるが、一般的に xy軸は回転を許す複素数を含む形式、すなわち、たとえば $\hat{\sigma}_x$ に置いては $e^{\pm i\alpha} = \cos(\alpha) \pm i \sin(\alpha)$ という形で定義されており、複素平面内での単位ベクトルが角度 α の位置にあることを意味している。言い換えれば、 α を 0 以外にすると、直交する $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ (= xy平面)が角度 α だけ回転している状態となる。

また、後述するが、 $SU(2)$ の複素空間での回転は、 $2\pi = 360^\circ$ で元に戻るのではなく、倍の $4\pi = 720^\circ$ で元に戻るため、 $SU(2)$ の複素空間での xy軸の方向と、実空間における xy軸の方向を無理やり一致させようとすると、どこかに歪みが生じてしまう(※)。

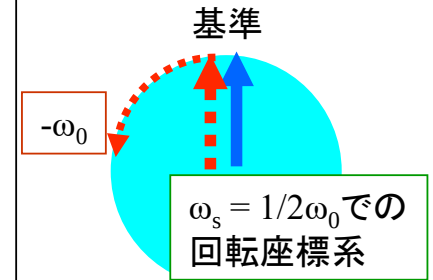
「わかりやすそうな表現」程、無理強いしている場合が多いので、注意が必要だと思われる。

※四元数を用いるシンプレティック群: $Sp(n)$ という概念を介在させると、 $SU(2)$ は4次元数空間内の3次元球面として表されることが(井ノ口順一:「はじめて学ぶリー群」、現代数学社、p.114-123参照)

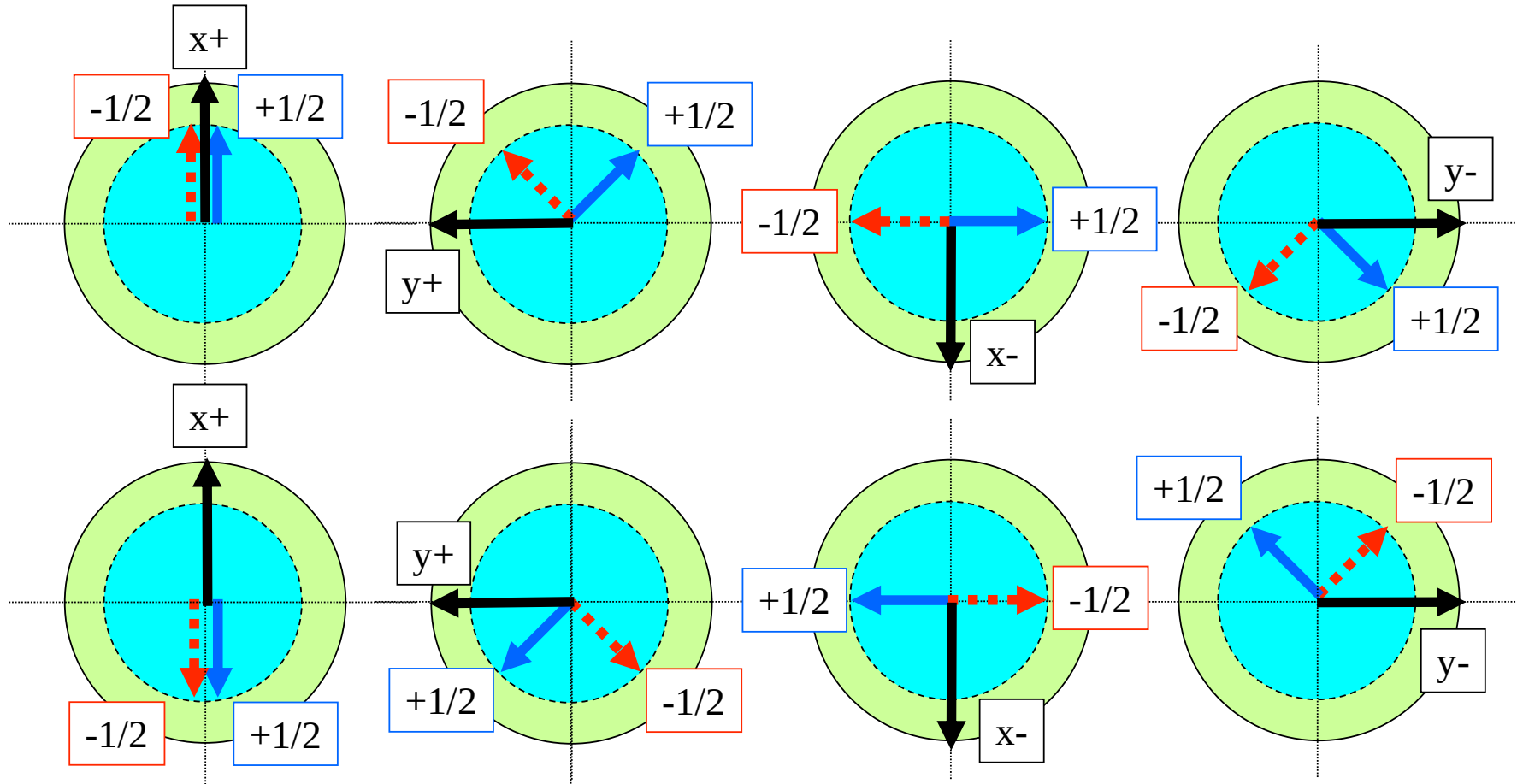
水平面内のスピンの方向を、 z 軸2方向のスピン($\pm 1/2$)の位相差として考えた場合
 その1: $+z$ 軸方向のスピンの水平面内方向を固定し、 xyz 軸を固定した場合



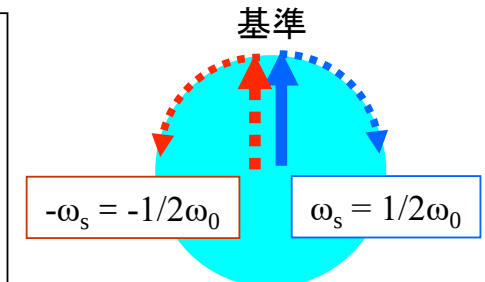
薄緑の円は水平面内のスピン座標系を表現し、黒矢印は水平面内でのスピンの方向になる。水色内部は z 軸での2方向のスピン($z+$ と $z-$)の xy 平面における位相差を表現している。 z 軸での2方向のスピン($z+$ と $z-$)の内、 $z+$ を $x+$ 方向に固定して考えた場合。すなわち、 $+\omega_s = \omega_0/2$ で回転する座標系に乗っていると考えた場合。 $z-$ との位相差が xy 平面におけるスピンの向きと一致するように錯覚するので判りやすいように思える。しかし、水色の円が回転座標系なのだが、薄緑の円は静止座標系であり、判りづらくなってしまふ。「2回転して元に戻る」という概念も隠れてしまふ。(ブロッホ球の考え方に近い)



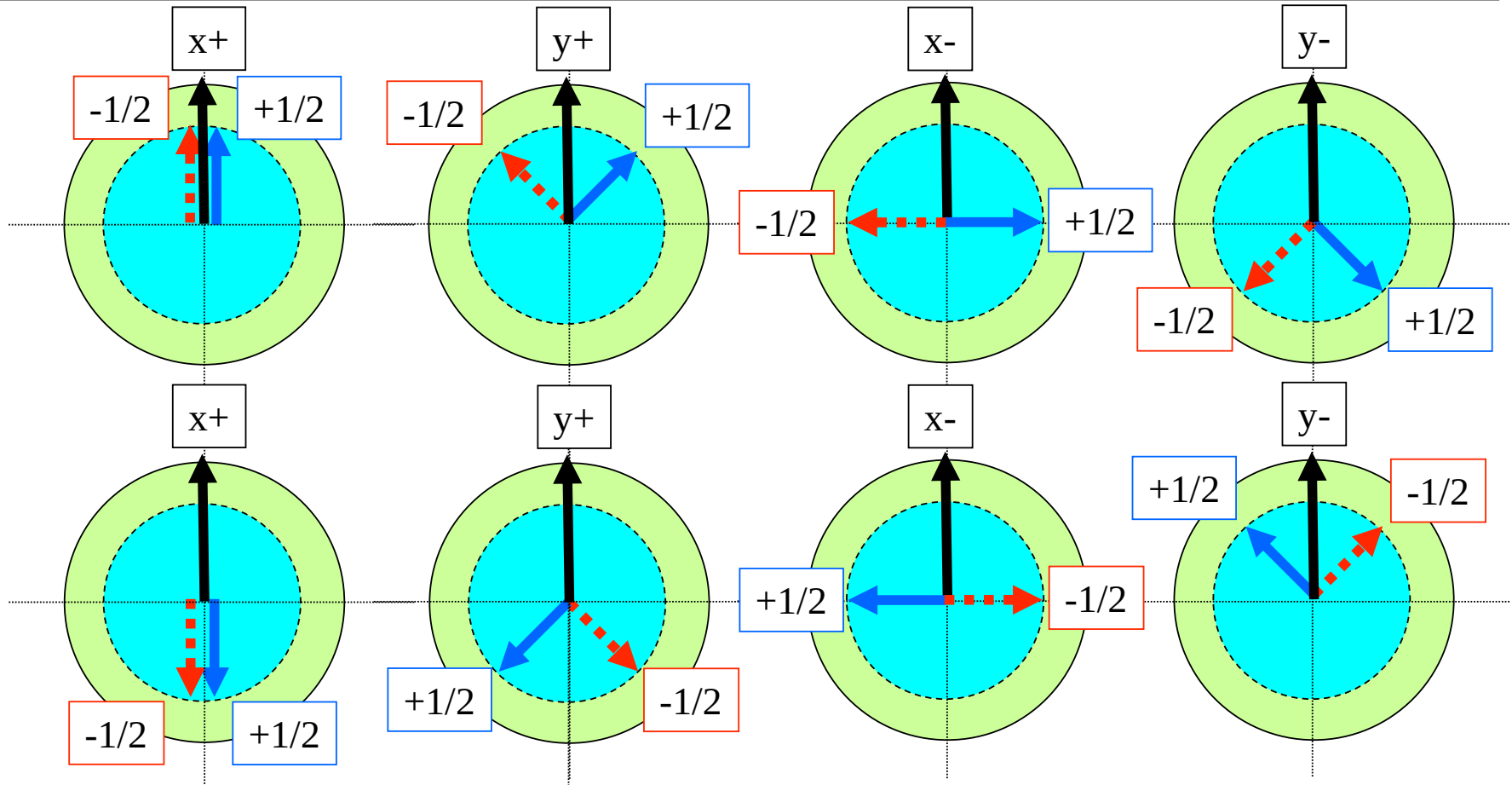
水平面内のスピンの方向を、z軸2方向のスピンの位相差として考えた場合 その2: xyz軸を固定して考えた場合



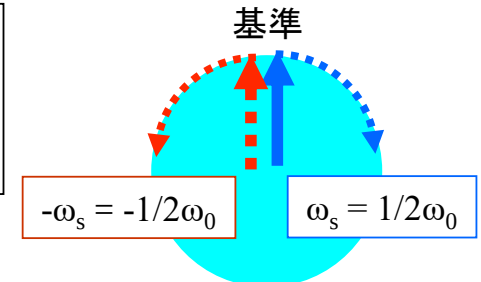
$z+$ と $z-$ が逆方向にそれぞれ $\omega_s = 1/2\omega_0$ の速度で回転していると考えたなら、(二つ前のスライドの式によって)それぞれのスピンの1回転する間に、位相差によって水平面内の向きが $x+$, $y+$, $x-$, $y-$, $x+$, $y+$, $x-$, $y-$ と、2回転しているのと等価。
 xyz の軸を固定して考えることで、「2回転して元に戻る」という関係も表現されているが、「ひとつのスピンの水平面内での方向が3方向に分裂する状態となり、判りずらくなってしまふ。



水平面内のスピンの方向を、 z 軸2方向のスピン($\pm 1/2$)の位相差として考えた場合
 その3: xy 平面の軸を回転させた場合。



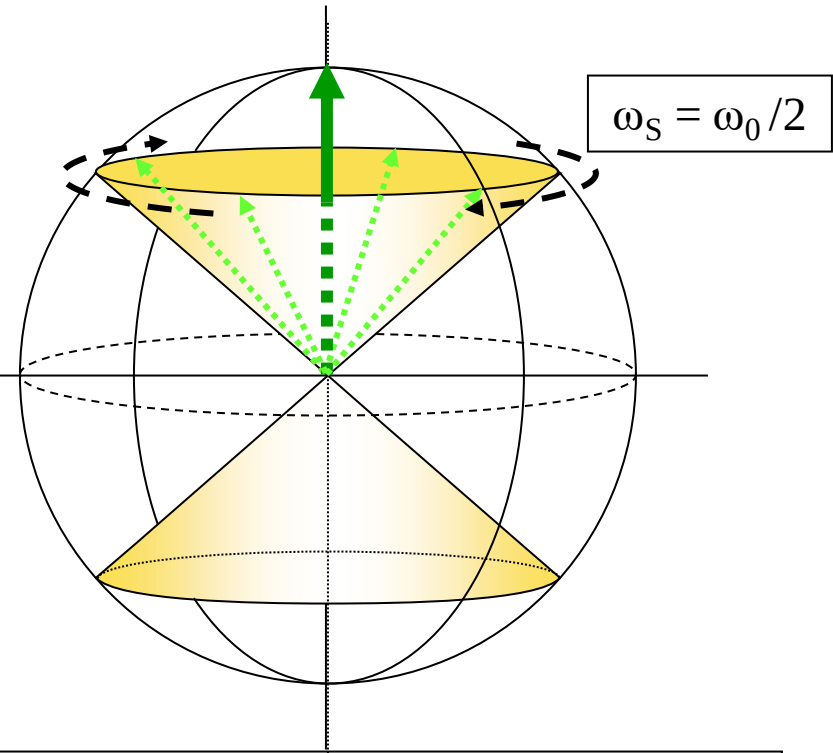
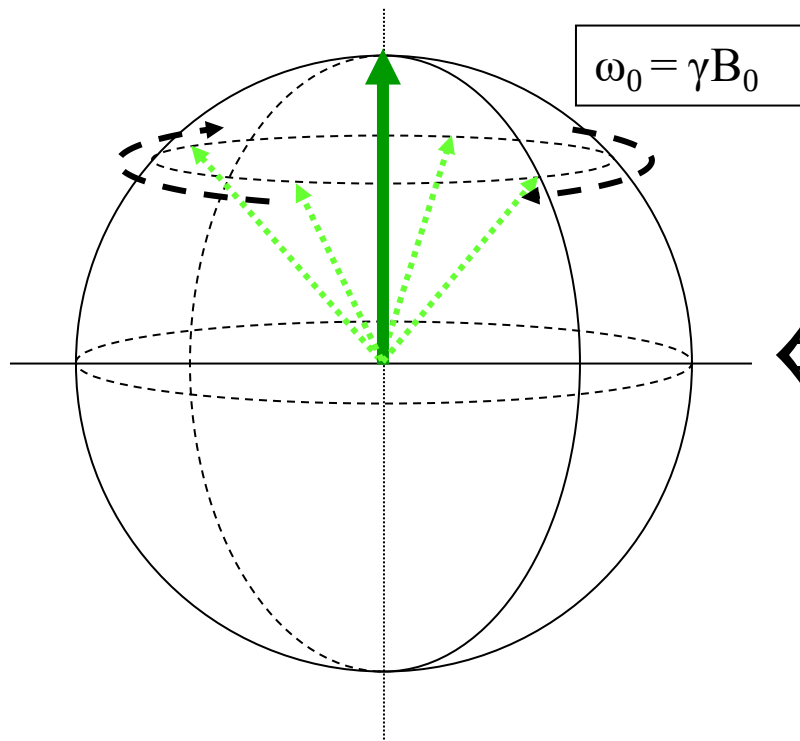
「その2」では、 xyz の軸を固定していたが、 xy 平面を回転させることを許可するなら、それぞれのスピンの1回転する間に、位相差によって座標軸(薄緑の円)が $x+$, $y+$, $x-$, $y-$, $x+$, $y+$, $x-$, $y-$ と、2回転しているのと等価。
 ※便宜的に水色の円と薄緑の円を同一平面内で表記しているが、座標系が異なる。



ひとつのスピンが取り得る状態を 重ね合わせると...

古典力学での巨視的磁化ベクトル

量子力学での重ね合わせ



古典力学系での巨視的磁化ベクトル
量子力学系での重ね合わせと等価な表現になる。

量子力学系での、ひとつのスピンが取りうる状態の重ね合わせ
上向きベクトルが多いので、下向きベクトルは打ち消されて消え、
上向きベクトルが0.001%残ると考えてもいい。

実空間

2x2複素空間

(2020/02/19修正)

補遺：スピンの回転、x軸周りのθ回転（1）

「スピンは1回転して重ならず、2回転して重なる」の図解

上向きの確率:1
下向きの確率:0

スピンの波動関数

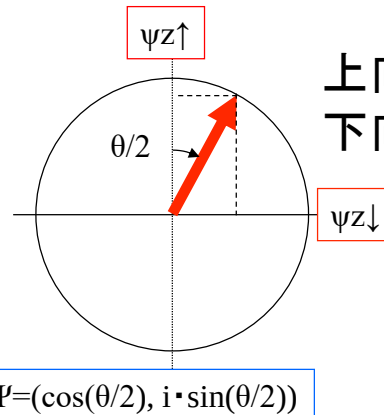
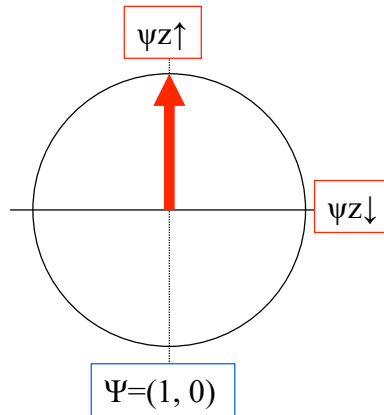
$$\Psi = (\psi_{z\uparrow}, \psi_{z\downarrow})$$

$\psi_{z\uparrow}$: 上向きの波動関数

$\psi_{z\downarrow}$: 下向きの波動関数

$|\psi_{z\uparrow}|^2$: 上向きの確率

$|\psi_{z\downarrow}|^2$: 下向きの確率

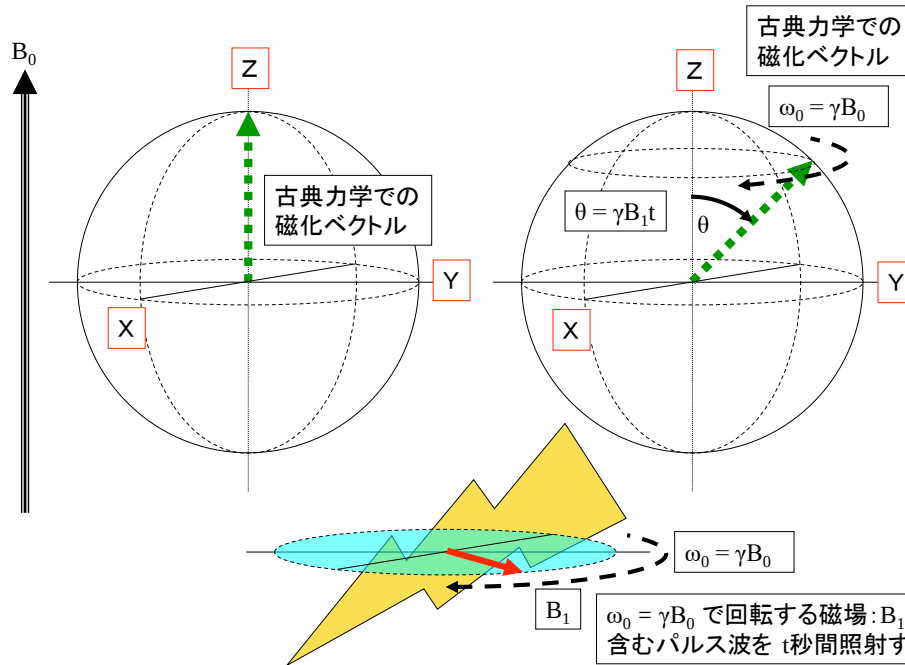


上向きの確率: $\cos^2(\theta/2)$
下向きの確率: $\sin^2(\theta/2)$

量子力学的表現
二つの波動関数の重
ね合わせ (位相空間)



古典力学的表現



x軸周りにθ度回転

補遺：スピンの回転、x軸周りの θ 回転(2)

量子力学での回転(詳細は、専門書を参考のこと)

スピンの状態を表す波動関数(上向きと、下向きの二つのペア)を

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

とすると、実空間でのスピンの向き(期待値・確率)は

$$\langle \hat{S} \rangle = k(\langle \Psi | \hat{\sigma}_x | \Psi \rangle, \langle \Psi | \hat{\sigma}_y | \Psi \rangle, \langle \Psi | \hat{\sigma}_z | \Psi \rangle)$$

$$= k(\psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1, -i(\psi_1^* \psi_2 - \psi_2^* \psi_1), \psi_1^* \psi_1 - \psi_2^* \psi_2) \text{ --- (a)}$$

と表現される。($k = \hbar/2$ とする場合と、 $k = 1$ として表記される場合があるので、注意)

一方、ある方向 (α, β, γ) 、 $(\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1)$ の軸周りの θ 度回転を、

$$R_{(\alpha, \beta, \gamma)}(\theta) = \exp(i\theta[\alpha \hat{S}_x + \beta \hat{S}_y + \gamma \hat{S}_z])$$

として表現すると、x軸周りの θ 回転は、 $\exp(ix)$ のマクローリン展開を行列に適応する形で

$$R_{(1,0,0)}(\theta) = \exp(i\theta \hat{S}_x) = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & i \sin(\theta/2) \\ i \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix}$$

と変換されるため、z軸で上向きの $|z_+\rangle$ を θ 度回転したものを $|\Psi\rangle$ とすると

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = R_{(1,0,0)}(\theta)|z_+\rangle = R_{(1,0,0)}(\theta) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ i \sin(\theta/2) \end{pmatrix} \text{ --- (b)}$$

となる。

※複素空間での回転は、角度が $\theta/2$ となることに注意。

実空間でのスピンの向きを式(a)を用い、半角公式を当てはめて計算すると、

$$\langle \hat{S} \rangle = k(0, 2 \cos(\theta/2) \sin(\theta/2), \cos^2(\theta/2) - \sin^2(\theta/2)) = k(0, \sin \theta, \cos \theta)$$

となり、角度が θ の回転となる。

※パウリ行列表を要素とする複素指数関数のマクローリン展開について
複素指数関数と $\sin$ および $\cos$ のマクローリン展開から

$$e^{ix} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{1}{(2n)!} x^{2n} + i \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{1}{(2n+1)!} x^{2n+1} = \cos(x) + i \sin(x)$$

となるが、特に x がパウリ行列表の時、 $x^0 = I$ (単位行列表)とすることで
行列表の各要素ごとに $\cos$ と $\sin$ を含む式へと変換できる。

※ $\langle \Psi | A | \Psi \rangle$ について

$$\langle \Psi | = \Psi^\dagger = (\psi_1^* \quad \psi_2^*)$$

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \text{ とすると}$$

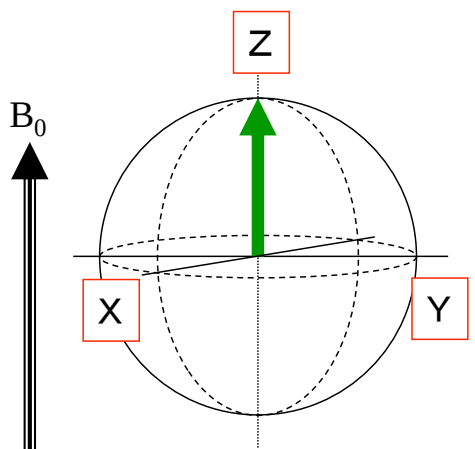
$$\begin{aligned} \langle \Psi | A | \Psi \rangle &= (\psi_1^* \quad \psi_2^*) \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \\ &= \psi_1^* (a\psi_1 + b\psi_2) + \psi_2^* (c\psi_1 + d\psi_2) \end{aligned}$$

※ $\psi = a \pm ib$ とすると、 $\psi^* = a \mp ib$

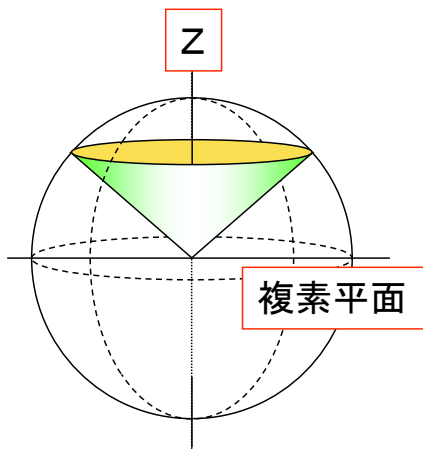
$$\begin{aligned} A &= \begin{pmatrix} a \pm bi \\ c \pm di \end{pmatrix} \text{ のとき、} \\ A^\dagger &= \begin{pmatrix} a \mp bi & c \mp di \end{pmatrix} \\ \dagger &\text{は「ダガー」と読む。} \end{aligned}$$

X軸回りにスピンを $\pi/2$ 単位で回転させた場合の 巨視的磁化、スピンの状態、波動関数の関係(1)

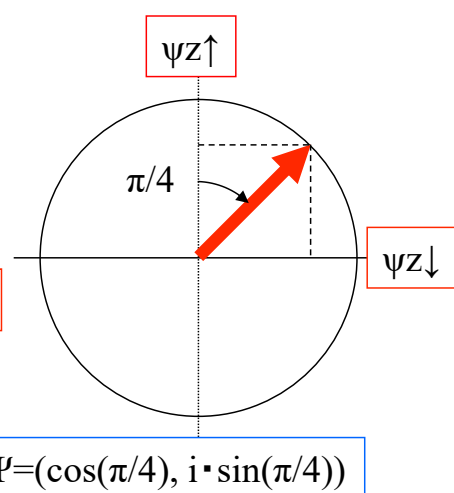
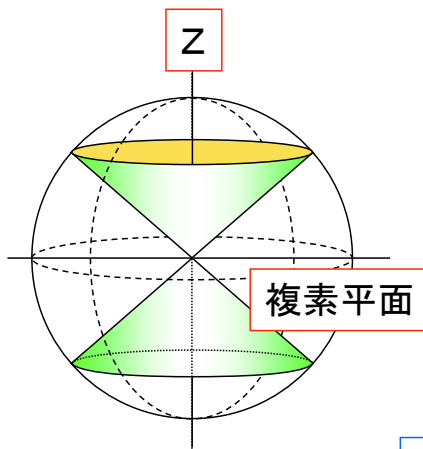
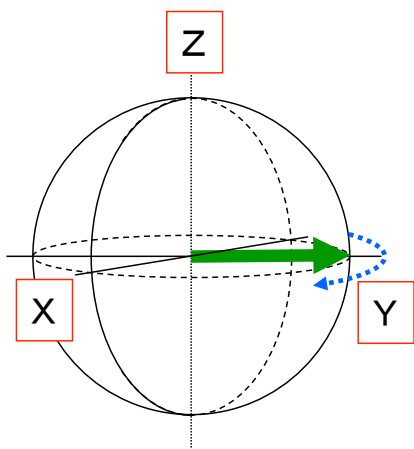
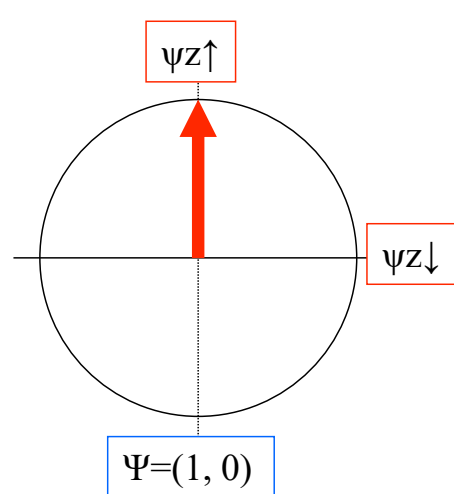
巨視的磁化ベクトル(古典力学)



禁断のスピンの表現

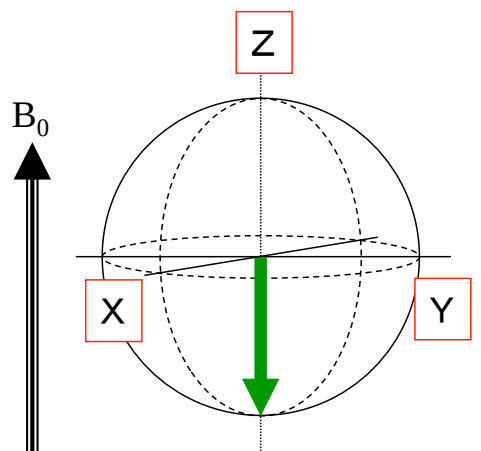


スピンの波動関数

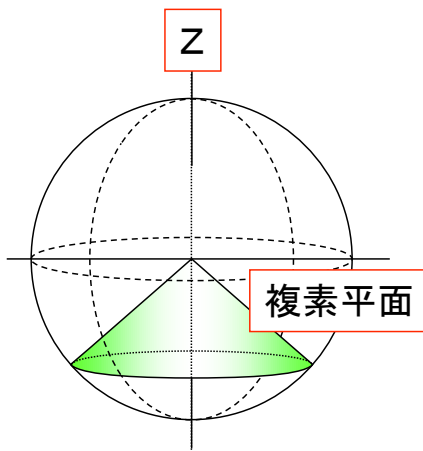


X軸回りにスピンを $\pi/2$ 単位で回転させた場合の 巨視的磁化、スピンの状態、波動関数の関係(2)

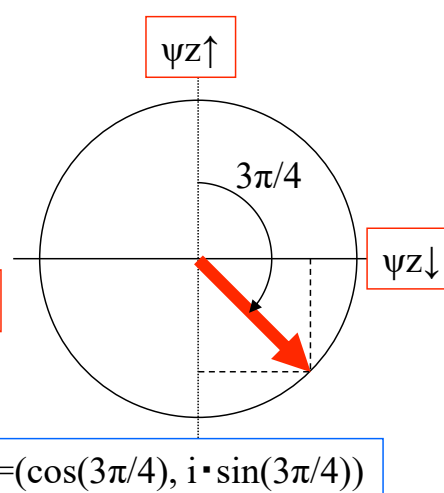
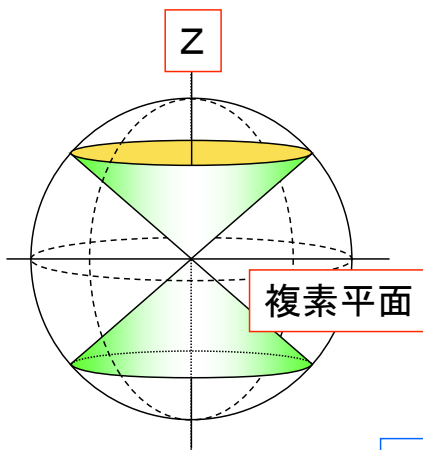
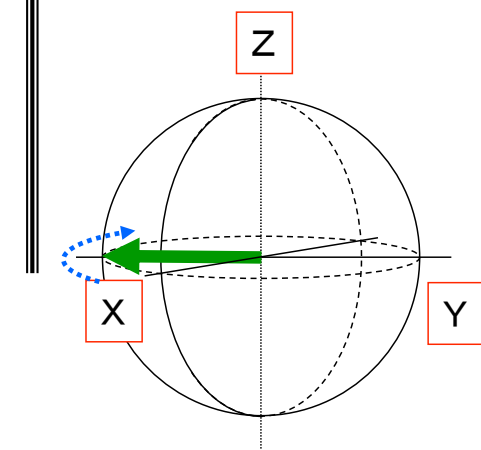
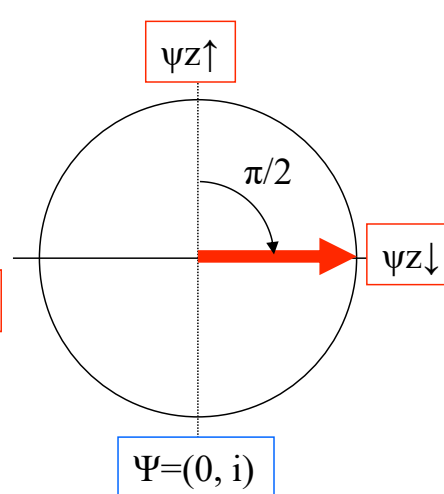
巨視的磁化ベクトル(古典力学)



禁断のスピンの表現

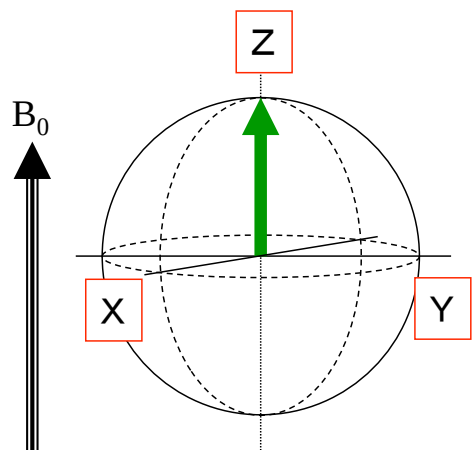


スピンの波動関数

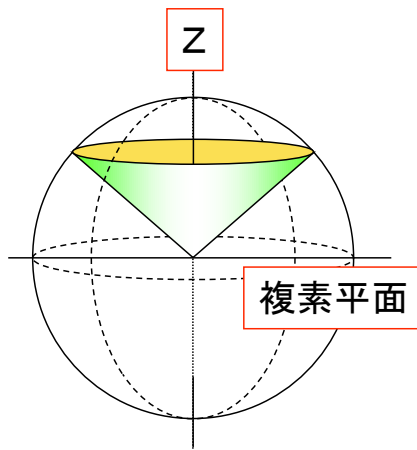


X軸回りにスピンを $\pi/2$ 単位で回転させた場合の 巨視的磁化、スピンの状態、波動関数の関係(3)

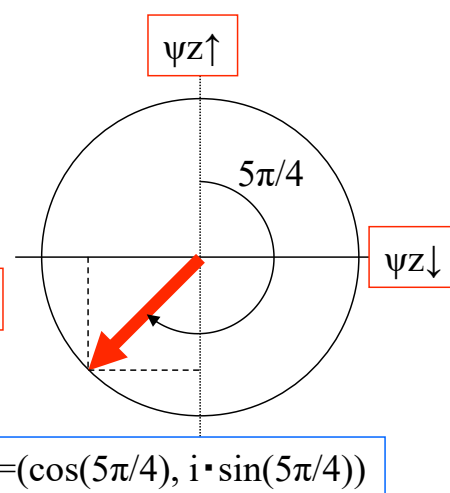
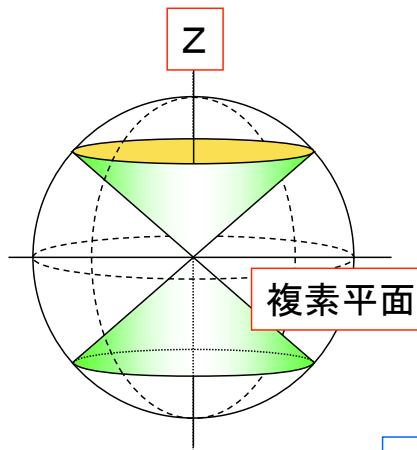
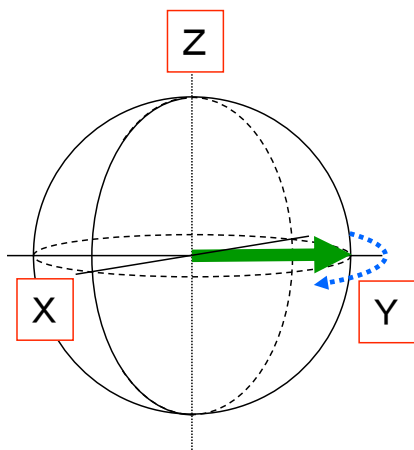
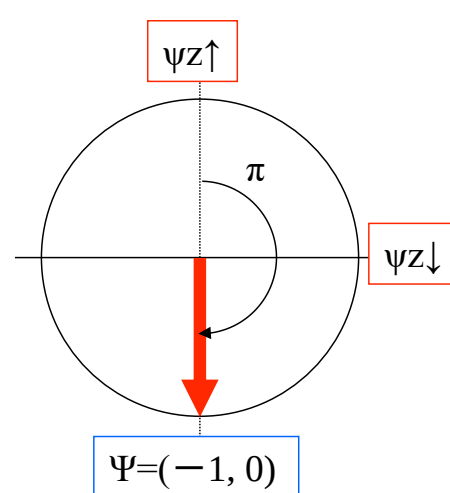
巨視的磁化ベクトル(古典力学)



禁断のスピンの表現

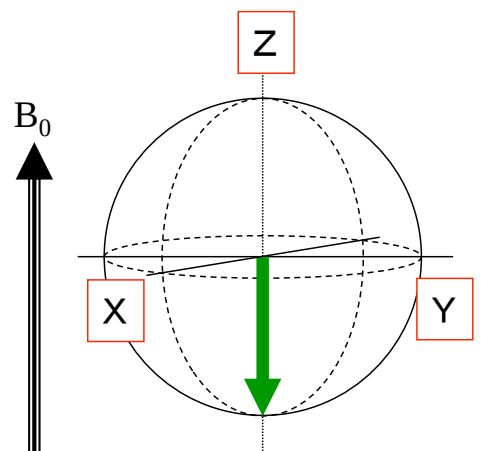


スピンの波動関数

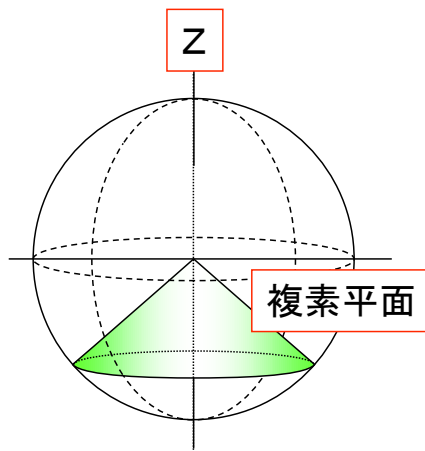


X軸回りにスピンを $\pi/2$ 単位で回転させた場合の 巨視的磁化、スピンの状態、波動関数の関係(4)

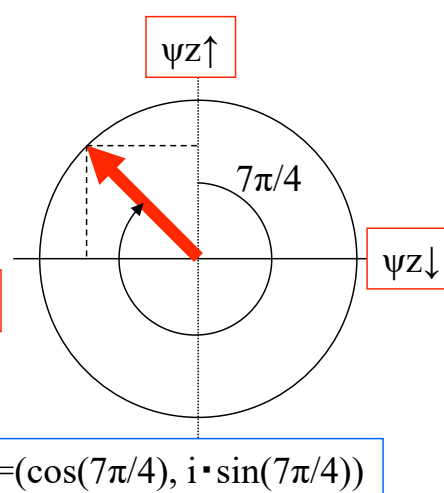
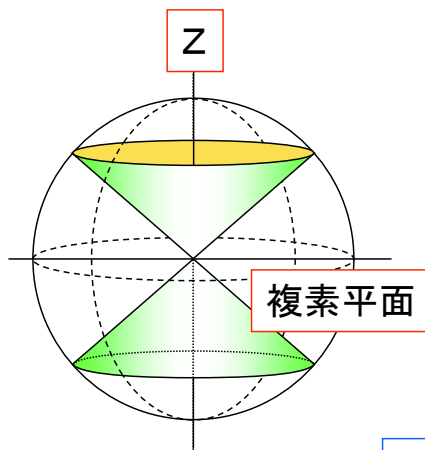
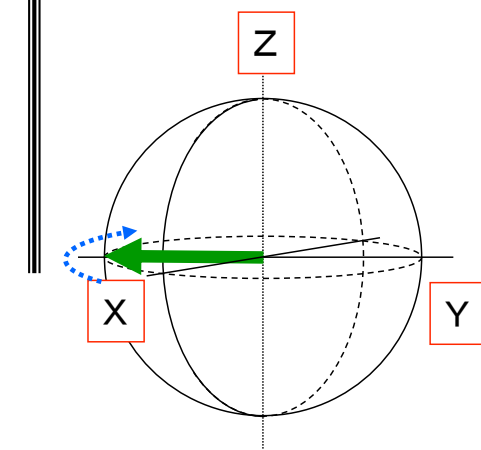
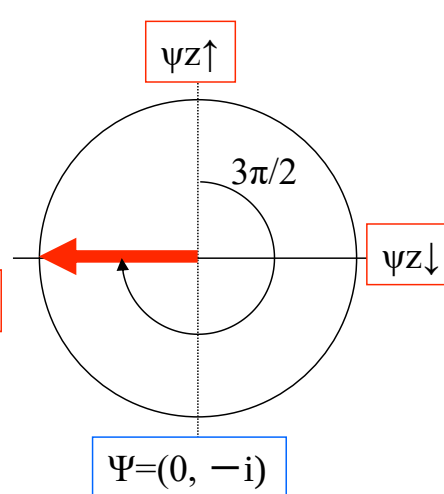
巨視的磁化ベクトル(古典力学)



禁断のスピンの表現



スピンの波動関数



補遺：歳差運動の量子力学的表現

水平面内の軸に対し θ 回転している場合

スピンの、「補遺：スピンの回転、x軸周りの θ 回転(2)」の式(a)にて記述されるような状態にあって、xy平面内を角速度 $\omega_s = a_s B_z$ で回転していたとし、その時のスピンを表す波動関数が、

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \cos(\theta/2) \\ e^{i\beta} \sin(\theta/2) \end{pmatrix} \cdots (c)$$

として表現されたとする。なお、 α および β の値に関わらず $\langle\Psi|\Psi\rangle = \Psi^\dagger\Psi$

$$\begin{aligned} &= (e^{-i\alpha} \cos(\theta/2) \quad e^{-i\beta} \sin(\theta/2)) \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \cos(\theta/2) \\ e^{i\beta} \sin(\theta/2) \end{pmatrix} \\ &= \cos^2(\theta/2) + \sin^2(\theta/2) = 1 \end{aligned}$$

となる。

パウリ方程式にてスピンのみの自由度を考えた場合、波動関数は

$$i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} = \mu \hat{\sigma} \cdot \mathbf{B}\Psi = a_s \hbar \hat{\sigma}_z B_z \Psi = \hbar \omega_s \hat{\sigma}_z \Psi \cdots (d)$$

と記述される。(μは磁気モーメント)

式(c) と式(d) から

$$i \begin{pmatrix} \partial\psi_1/\partial t \\ \partial\psi_2/\partial t \end{pmatrix} = \omega_s \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \omega_s \begin{pmatrix} \psi_1 \\ -\psi_2 \end{pmatrix}$$

となるので、両辺に i を掛けて積分すると

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i(\omega_s t - \gamma)} \cos(\theta/2) \\ e^{i(\omega_s t + \delta)} \sin(\theta/2) \end{pmatrix}$$

となる。ここで、 $\alpha = \omega_s t - \gamma$, $\beta = \omega_s t + \delta$ とした。

スピンの期待値は

$$\langle\hat{S}\rangle = k\langle\hat{\sigma}\rangle = k\Psi^\dagger \hat{\sigma} \Psi = k(\Psi^\dagger \hat{\sigma}_x \Psi, \Psi^\dagger \hat{\sigma}_y \Psi, \Psi^\dagger \hat{\sigma}_z \Psi)$$

なので、式(b) を用い、半角公式を経て

$$\langle\hat{S}\rangle = k[\cos(2\omega_s t + \delta - \gamma) \sin(\theta), \sin(2\omega_s t + \delta - \gamma) \sin(\theta), \cos(\theta)]$$

となり、 ω_s の2倍の角速度で歳差運動をすることになる。

$\sin(\theta) = 0$ の時、 $\langle\hat{S}\rangle = k[0, 0, \pm 1]$ となって、歳差運動の因子は出ないが、少しでも傾斜した状態(※)になるなら、

γ や δ の値に関わらずに歳差運動が生じる。

※スピンの確率的平均 $\langle\hat{S}\rangle$ が固定した方向を向いているとしても、ひとつのスピン $\hat{S}$ は傾斜した状態の重ね合わせとして考えうるので、xy平面内では常に歳差運動をしていると考えられる。

実空間でのスピンの歳差運動： ω_0

2×2 複素空間でのスピンの歳差運動： ω_s

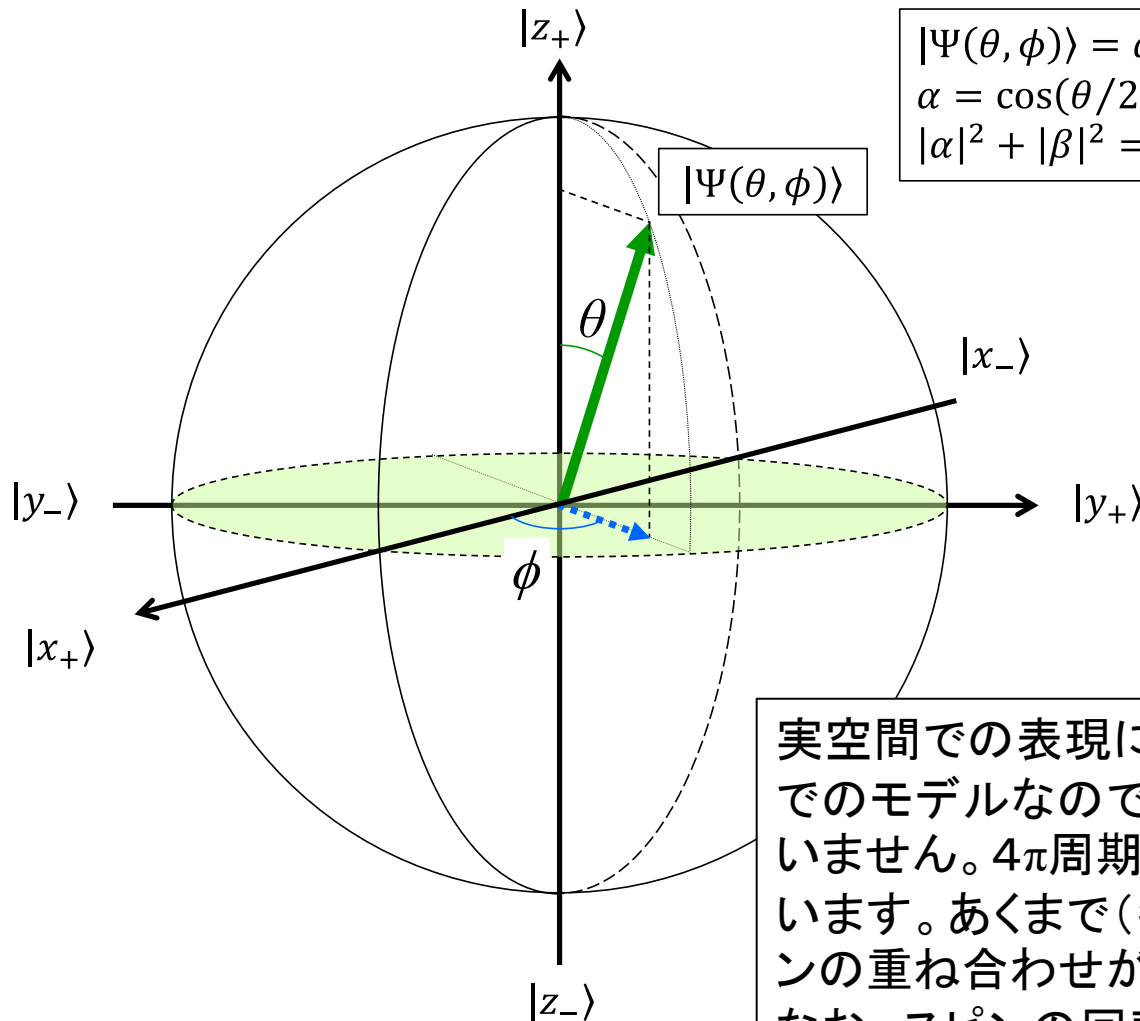
とすると、 $\omega_0 = 2 \times \omega_s$ となって、角度のみならず、角速度も 2×2 複素空間では実空間の半分となる。

参照：「グライナー物理テキストシリーズ・量子力学概論」

ブロッホ球での回転・その1

z軸から θ 、x軸から ϕ 回転した場合

z軸方向のスピン
を基準とした表現



$$\begin{aligned} |\Psi(\theta, \phi)\rangle &= \alpha|z_+\rangle + \beta|z_-\rangle \\ \alpha &= \cos(\theta/2), \beta = e^{i\phi} \sin(\theta/2) \\ |\alpha|^2 + |\beta|^2 &= 1 \end{aligned}$$

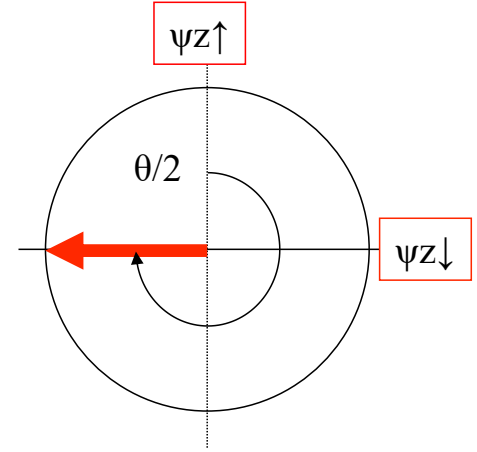
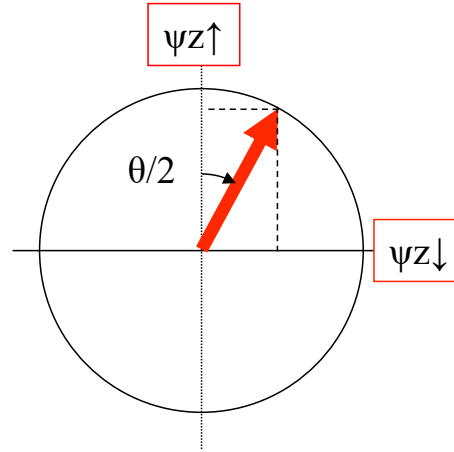
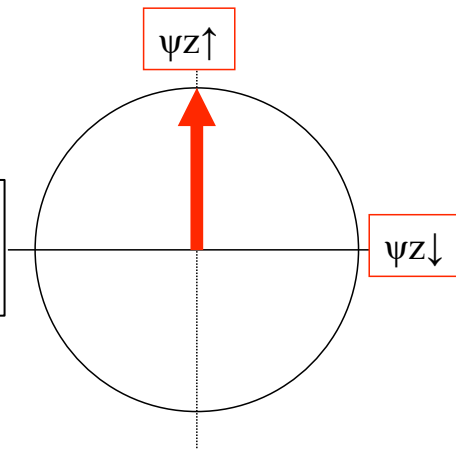
z軸スピノールの合成による水平面内での表現を縦軸方向に拡張した形式と同等。
見た目は判りやすそうだが実は複雑で、一般的な回転操作にすると $(\phi/2)$ が出てきます。

実空間での表現に似ていますが、複素空間; $SU(2)$ でのモデルなので、座標軸を含め実空間と対応していません。4 π 周期性(「2回転して元に戻る」となっています。あくまで(各軸の)上向きスピンと下向きスピンの重ね合わせが本質なので、注意して下さい。
なお、スピンの回転操作直後、水平面への射影ベクトルは $SU(2)$ 内を $\omega_s = \omega_0/2$ で歳差運動するのと等価。

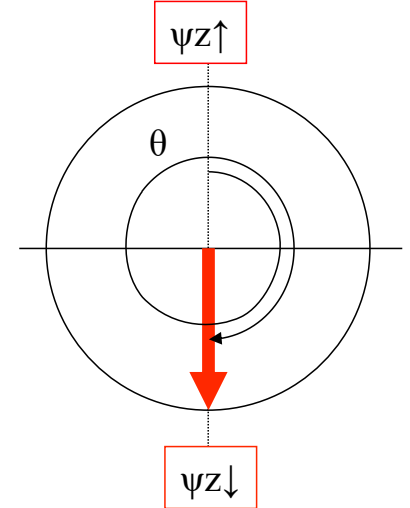
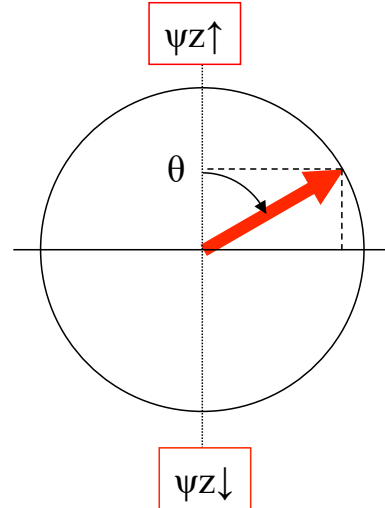
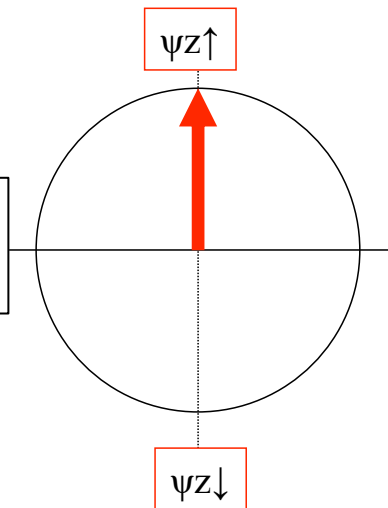
ブロッホ球での回転・その2

4π 周期性が隠される; x, y, z 全ての軸について同等

4π 周期性を表す
波動関数の図



4π 周期性が隠れる
ブロッホ球の図



$$\Psi = (1, 0), \theta = 0$$

$$\Psi = (\cos(\theta/2), i \cdot \sin(\theta/2))$$

$$\Psi = (0, -i), \theta = 3\pi$$

まとめ

- スピンは2x2複素行列を3軸に有する空間にて表現され、実空間では表現不可能。
 - MRIのテキスト関係で、少しだけ量子力学的な表現を採用しているものが散見されますが、元来、実空間での取り扱いが不可能なので、注意が必要です。
- スピンは確率の重ね合わせ (and) で表現される。
 - たとえば、「z軸方向で上向き○○% and 下向き●●%」
 - 量子力学の確率表現は統計力学の確率表現と相同。
 - 実空間での巨視的磁化ベクトルは量子力学での「ひとつのスピンの確率的表現と相同と考えていい。
- 2x2複素行列としてのスピンの回転角・回転速度は、実空間での回転角・回転速度の1/2に相当する。

まとめのつづき

- スピンの「上向き」と「下向き」の差は、周波数 ω_0 の電磁波に相当する差である。
- 実際に回転しているかどうかは不問に付されるべきだが、下向きのスピンに対して上向きのスピンが相対的に ω_0 で回転し、上向きのスピンに対して下向きのスピンが相対的に $-\omega_0$ で回転してると考えるなら、そうして「上向き」と「下向き」の丁度中間の状態（「50%上向き」+「50%下向き」）を基準にするなら、それぞれのスピンの回転速度が ω_0 の1/2であるのは、何ら不思議ではないであろう。

MRI(臨床)における量子力学の必要性

- 現状「**ない**」でしょう。
 - 通常の診断領域では、量子力学的な影響は、ボクセル内の巨視的磁化ベクトルでの統計的な扱いにて既に吸収されている(すなわち、消えている)。
 - 近年、上記の過程は「閉鎖量子系」から「開放量子系(熱浴)」への変化として扱われつつあるようです。
- 強いて言うなら
 - NMRとして量子暗号などのスピンを使った実験にも用いられているので、**関連領域を理解したい場合に有用**。
 - 原理的にスピンを用いている以上、**量子力学的な影響は、「揺らぎ」とか「確率」とかいった統計力学的な範疇に密接に関連しているので、念頭に置いておくべき**。
 - 将来的には、量子力学を応用した診断ができるかもしれないと夢を抱くのも悪くないと思います(2013/09/27)。
 - 近年、畳込みニューラルネットワークを利用した人工知能や量子コンピュータ関連の記事が多数でてきます。また、量子コンピュータを用いた人工知能では、量子アニーリング(旧来のボルツマンマシン相当)とトンネル効果を組み合わせたシステム等が考案されているようです。どうなるか楽しみなところです。(2017/12/18現在)

補遺：量子エンタングルメント(量子もつれ)関連 の2022年度・ノーベル物理学賞 および日本物理学会HP内の関連記事

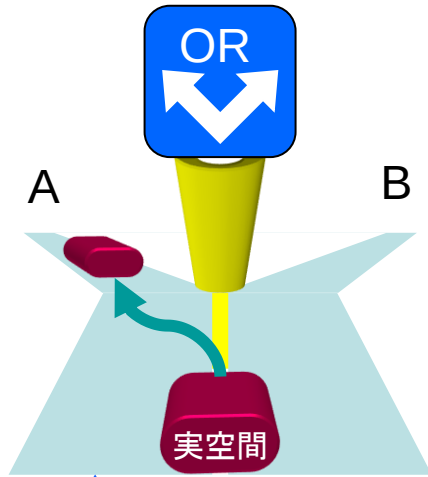
- 「複数光子の量子もつれの実験、それによるベルの不等式の破れの立証、そして量子情報科学を開拓し基礎づけた」として、アラン・アスペ博士、ジョン・クラウザー博士、アントン・ツァイリンガー博士が2022年度・ノーベル物理学賞を受賞された。

<https://www.jps.or.jp/information/2022/10/2022novelprize.php>

- 関連記事(日本物理学会HP)からのリンク
 - 筒井泉「ベル不等式:その物理的意義と近年の展開」(小特集「量子もつれ」)2014年
https://www.jps.or.jp/information/2022/10/04/69-12_836.pdf
 - 井元信之「量子もつれの基礎および量子情報や物理との関係」(小特集「量子もつれ」)2014年
https://www.jps.or.jp/information/2022/10/04/69-12_845.pdf
 - 並木美喜雄「量子力学の観測問題をめぐる最近の話題」1989年
https://www.jps.or.jp/information/2022/10/04/44_19.pdf

・・・最後に・・・

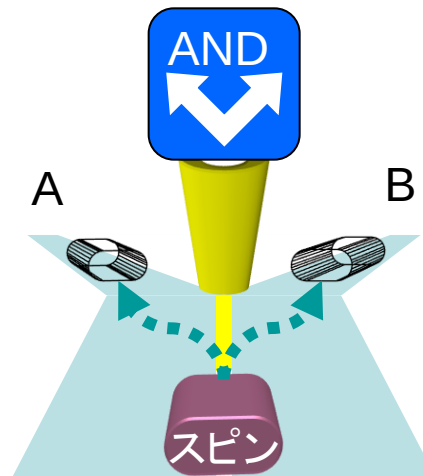
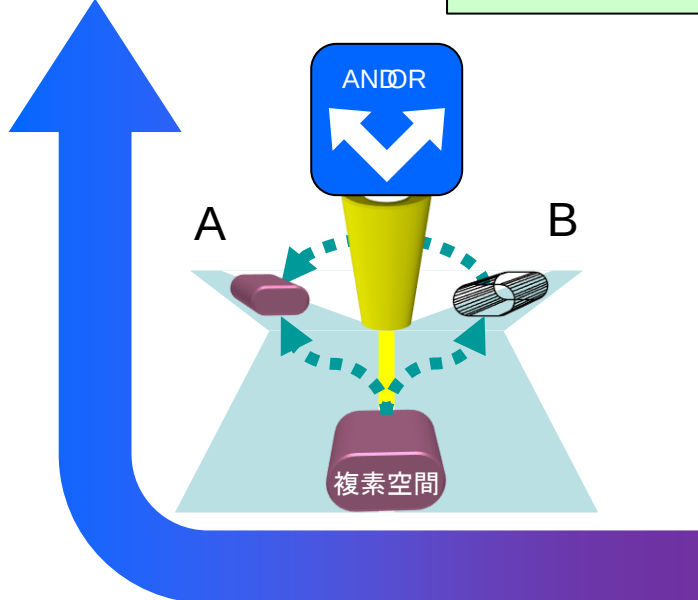
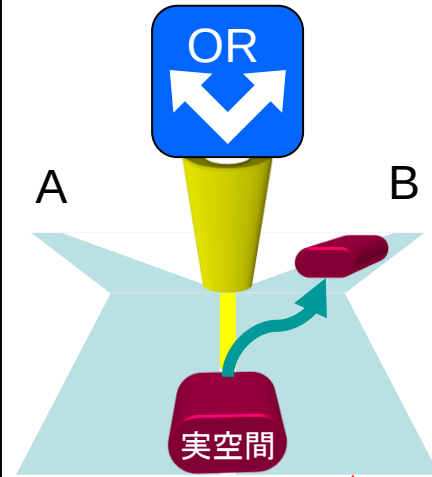
開放量子系(熱浴)
巨視的磁化ベクトル



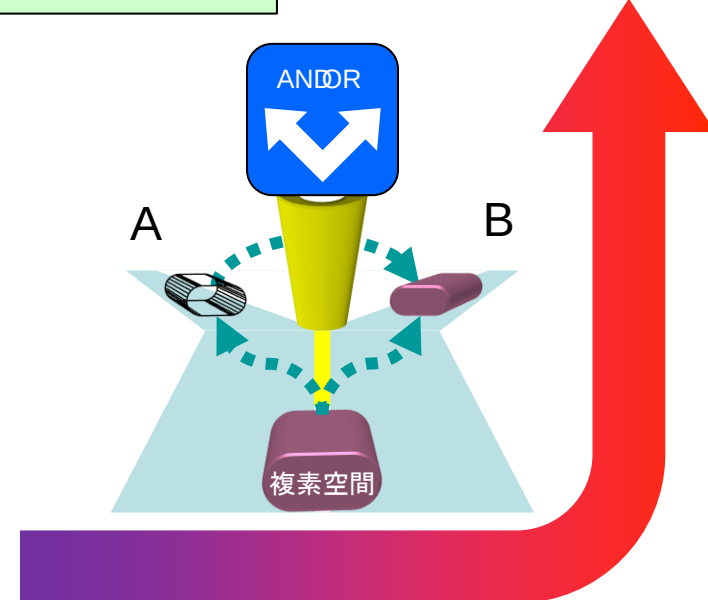
量子力学でのANDとして扱われざるを得ない
スピンは複素空間、 $SU(2)$ にあります。実空間
への影響は「どちらか片方」(OR)へと集約さ
れます。日立の二重スリットの実験でも、最終的
にはスクリーン上の1点として描記されます。

画像診断の世界でも、客観的に所見を収集し、
鑑別診断を行っている段階では複数の診断が
可能性として重なり合っている状態(AND)とも
いえます。しかしながら最終的には「どれか」
(OR)が選択されることになります。

開放量子系(熱浴)
巨視的磁化ベクトル



閉鎖量子系



参考図書:「ひとつのスピン」の回転

- 岡本良治(著)、「スピンと角運動量、電子の世界の回転運動を理解するために」、フロー式・物理演習シリーズ、共立出版、2015年9月20日 (初版、第2刷)
 - 第4章にて「ひとつのスピン」が扱われており、回転操作を含めた演習形式の説明が詳しい。
 - 後半、第6章では「磁気モーメントとラーモア歳差運動」が扱われており、両方を一冊で学ぶには良いかもしれない。ただし、独立した章で「ひとつのスピン」とは切り離されている。
 - 閉鎖量子系・開放量子系(熱浴)等に関する最新の知見に関するコラムも多い。

参考図書: スピンから分子運動・緩和まで (密度行列・巨視的磁化ベクトル中心)

- 竹腰清乃理、「磁気共鳴-NMR 一核スピンの分光学」、新・物理科学ライブラリ16、サイエンス社
 - 「ひとつのスピンの」に関する部分はわずかな記述のみ。
 - NMRにおける多スピン系の概念を経て巨視的磁化ベクトル(多スピン系での密度行列に相当)でのRFパルスによる挙動までの数式を含めた概略が記述されている。
 - 各種相互作用、分子運動、分子拡散、磁化の移動、およびこれらによる緩和機構について詳しく記述されている。
 - MRIの最新の技法についてNMRという基礎的な実験系から伺い知ることができる。

参考図書・資料

- 小澤正直: 不確定性原理の新展開, 「数理科学」 No.508, p.5-17, 2005年10月号, サイエンス社
- 筒井 泉: 量子力学のすがた, 「数理科学」 No.548, p.7-13, 2009年2月号, サイエンス社
- 谷村省吾: 干渉と識別の相補性, 「数理科学」 No.548, p.14-21, 2009年2月号, サイエンス社
- 杉田 歩: 量子エンタングルメントの数理, 「数理科学」 No.548, p.29-34, 2009年2月号, サイエンス社
- W.グライナー 著、伊藤伸泰・早野龍五 監訳: 「量子力学概論」、シュエプリング・フェアーク東京、2000年6月14日
- 宮下精二、 「量子スピン系」、岩波講座・物理の世界・物質化学の展開7、岩波書店、2006年10月25日
- 砂田利一、 「数学から見た量子力学」、岩波講座・物理の世界・物の理 数の理5、岩波書店、2005年6月28日
- 町田 茂、原 康夫、中嶋貞雄、 「いまさら量子力学?」、パリティブックス、丸善、1990年9月10日
- 岡本良治(著)、 「スピンと角運動量、電子の世界の回転運動を理解するために」、フロー式・物理演習シリーズ、共立出版、2015年9月20日 (初版、第2刷)
- 竹腰清乃理、 「磁気共鳴-NMR ー核スピンの分光学ー」、新・物理科学ライブラリ16、サイエンス社、2011年11月10日
- 井ノ口順一、 「はじめて学ぶリー群」、現代数学社、2017年7月20日
- 谷村 省吾、 「量子力学10講」、名古屋大学出版会、2021年11月4日、 (確認日 2024/11/22)
補足ノート: https://www.unp.or.jp/shared/img/1049_supplement_20211111.pdf
- EMANの量子力学(確認日 2024/11/22)
<https://eman-physics.net/quantum/contents.html>
- 量子アニーリング by 西森 秀稔(2015年4月掲載、確認日 2024/11/22)
https://www.titech.ac.jp/research/stories/faces13_nishimori.html
- 量子力学における「時間の矢」、羽田野直道、 「最近の研究から」、Vol.72, No.6, p.408, 2017、日本物理学会誌(確認日 2024/11/22)
<https://www.jps.or.jp/books/gakkaishi/2017/06/72-06researches3.pdf>
- 「私にスピンをわからせて!」 IMSS 物質構造科学研究所(確認日 2024/11/22)
<https://www2.kek.jp/imss/news/wataspi.html>