§ The Pauli matrices

Rotation

$X(Ox)=-\frac{i}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$，$X(Oy)=-\frac{i}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}$，X(Oz)=$-\frac{i}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$

例如 A=$-\frac{i}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$，$e^{\theta A}=e^{-i\frac{\theta}{2}\sigma_z}=R_z(\theta)$是繞 z 軸旋轉$\theta$的酉算符。

其中$\sigma_1=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\sigma_2=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix},\sigma_3=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$ 稱為 Pauli 矩陣。

$$\sigma_1^2=\sigma_2^2=\sigma_3^2=\sigma_0=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$\sigma_i\sigma_j=-\sigma_j\sigma_i \quad \text{for} \quad i\neq j$$

$$\sigma_1\sigma_2=i\sigma_3,\sigma_2\sigma_3=i\sigma_1,\sigma_3\sigma_1=i\sigma_2$$

The Pauli matrices and the unit matrix form a set of linearly independent square matrices。

$$A=\alpha\sigma_0+\beta\sigma_1+\gamma\sigma_2+\delta\sigma_3=\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}$$

$$\alpha=\frac{1}{2}(a+d),\beta=\frac{1}{2}(b+c),\gamma=\frac{1}{2}i(b-c),\delta=\frac{1}{2}(a-d)$$

§

2×2矩陣$X=x\sigma_1+y\sigma_2+z\sigma_3=\begin{pmatrix}z & x-iy\\ x+iy & -z\end{pmatrix}$

由$\begin{cases}x+iy=-2\phi^2\\ x-iy=2\psi^2\end{cases}$，$z=-2\psi\phi$ 可得$\begin{pmatrix}z & x-iy\\ x+iy & -z\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi\\ \phi\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\ 0\end{pmatrix}$

$M=\begin{pmatrix}z & x-iy\\ x+iy & -z\end{pmatrix}$，$M\begin{pmatrix}\psi\\ \phi\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\ 0\end{pmatrix}$表示$\psi,\phi$是 M 的零空間(null space)的非零解。

把三維向量(x,y,z)嵌入 Pauli 矩陣，形成一個 2×2 Hermitian 矩陣

$X=x\sigma_1+y\sigma_2+z\sigma_3=\begin{pmatrix}z & x-iy\\ x+iy & -z\end{pmatrix}$。

解出零模 (null vector) 的旋量，就等於找到一個自旋態，這個態與(x,y,z)有幾何對應關係。

在相對論裡，狄拉克方程也有類似的結構：用 gamma 矩陣把四維動量嵌入矩陣，作用在旋量上等於零。

這裡 Pauli 矩陣的版本，可以看作是三維空間的「縮小版」。

這個式子表示「旋量」是三維向量的平方根（square root-like object）。旋量不直接等於向量，但它能透過 Pauli 矩陣把三維向量重建出來。

§ 旋量↔向量(Bloch 球表示)

把一個規一化的二維旋量寫成

$$\chi = \begin{pmatrix} \psi \\ \phi \end{pmatrix}, \qquad \chi^\dagger \chi = |\psi|^2 + |\phi|^2 = 1,$$

那麼對應的三維單位向量（Bloch 向量）是

$$n_i = \chi^\dagger \sigma_i \chi, \qquad i = x, y, z,$$

即展開：

$$\begin{aligned} n_x &= 2\Re(\psi^* \phi), \\ n_y &= 2\Im(\psi^* \phi), \\ n_z &= |\psi|^2 - |\phi|^2. \end{aligned}$$

反過來，給定球面座標 (θ, φ) 的單位向量

$\mathbf{n} = (\sin\theta\cos\varphi,\ \sin\theta\sin\varphi,\ \cos\theta)$，對應的規一化本徵旋量（取$+1$ 本徵值）可選為

$$\chi_+(\theta, \varphi) = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\theta}{2}) \\ e^{i\varphi}\sin(\frac{\theta}{2}) \end{pmatrix}.$$

（另一個本徵向量 χ_- 則對應相反方向 $-\mathbf{n}$。）

§ 投影的漂亮式子

對規一化旋量 χ 有投影算子 $P = \chi\chi^\dagger$（滿足 $P^2 = P$），可寫出

$$\mathbf{n}\cdot\sigma \ = \ 2P - I.$$

因此

$$X \ = \ r(\mathbf{n}\cdot\sigma) \ = \ r(2\chi\chi^\dagger - I).$$

這公式在構造矩陣、理解譜（eigenvalues）、及把向量「寫回」旋量表示上非常實用。