演習問題 4 :パウリ行列と時間反転対称性 (2020) 初貝，吉田 (恒)

問題 1. スピン角運動量の基本 ($S=\frac{1}{2}$) ただし、一般の角運動量 $\boldsymbol{J}$ に対して J^2 と J_z の同時固有状態を $|jm\rangle$ とした時，$\langle jm-1|J_-|jm\rangle = \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}$, $\langle jm+1|J_+|jm\rangle = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}$ である。

(1) $[S_i, S_j] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}S_k$, $i=x,y,z$ を $i=x,y,z$ について具体的に書き下せ。

(2) $j=S=\frac{1}{2}$ の時，$|+\rangle \equiv |j=\frac{1}{2}, m=+\frac{1}{2}\rangle$, $|-\rangle \equiv |j=\frac{1}{2}, m=-\frac{1}{2}\rangle$ と書こう。$\psi = (|+\rangle, |-\rangle)$ として $\psi^\dagger S_z\psi = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$ を導け。ただし $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ である。

(3) $\psi^\dagger S_+\psi$ を求めよ。

(4) $\psi^\dagger S_-\psi$ を求めよ。

(5) $S_\pm = S_x \pm iS_y$ から S_x, S_y を $S_\pm$ で表せ。

(6) $\psi^\dagger S_x\psi = \frac{\hbar}{2}\sigma_x$ を導け。ただし $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ である。

(7) $\psi^\dagger S_y\psi = \frac{\hbar}{2}\sigma_y$ を導け。ただし $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ である。

(8) σ_x, σ_y, σ_z を Pauli 行列と呼ぶ。$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \sigma_0$ を導け。ただし $\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ である。

(9) σ_i, $i=0,1,2,3$ が全てエルミートであることを示せ。

(10) $\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z$, $\sigma_y\sigma_z = i\sigma_x$, $\sigma_z\sigma_x = i\sigma_y$ を示せ。

(11) $i \neq j$ の時 $\sigma_i\sigma_j = -\sigma_j\sigma_i$ を示せ。以上まとめて $i \neq j$ に関して $\sigma_i\sigma_j = i\epsilon_{ijk}\sigma_k$ と書ける。

(12) $\boldsymbol{s} \equiv \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ としたとき s_i が角運動量の交換関係を満たすことを示せ。

(13) $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -i & 1-i \end{pmatrix}$ を $A = \sum_{i=0}^{3} A_i\sigma_i$ と展開したときの A_i, $i=0,1,2,3$ を求めよ。

(14) 任意の 2×2 行列 $A = \sum_{i=0}^{3} A_i\sigma_i$ がエルミート行列となる必要十分条件は $A_i \in \mathbb{R}$ であることを示せ。

(15) つぎの行列の積 AB を（直接）計算せよ。ただし $A = \begin{pmatrix} 1 & 3+4i \\ 3-4i & -1 \end{pmatrix}$, $B = \begin{pmatrix} 2 & 3-2i \\ 2i & -2 \end{pmatrix}$ である。

(16) 2 つの 3 次元ベクトル $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$ に対して $(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}) = (\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})\sigma_0 + i(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\boldsymbol{\sigma}$ を示せ。ただし $\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix}$ である。

(17) 上の具体例に関して $A = \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}$, $B = \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}$, と書いたときの $\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}$ を求めよ。

(18) $\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}$ を求め、行列の積に関する上記の公式の成立を確認せよ。

(19) 磁場 $\boldsymbol{B}$ の中にあるスピン $S = \frac{\hbar}{2}$ のハミルトニアンを $H = -\mu\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{S}$ としたとき、エネルギー固有値を全て求めよ。

(20)* 前問のエネルギーが $|\boldsymbol{B}| = \sqrt{\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{B}}$ にのみ依存するのはなぜか、対称性の観点から述べよ。（スカラー、ベクトルとは何か復習せよ。）

問題 2. 時間反転操作 $\Theta = J\mathcal{K}$ とクラマース縮退。ただし $J = i\sigma_y$ であり $\mathcal{K}$ は複素共役操作である。

(1) 座標演算子 $\boldsymbol{r}$ に関して $\Theta\boldsymbol{r}\Theta = +\boldsymbol{r}$ を導け。

(2) 運動量 $\boldsymbol{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ に関して $\Theta\boldsymbol{p}\Theta = -\boldsymbol{p}$ を導け。

(3) 軌道角運動量 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ に関して $\Theta\boldsymbol{L}\Theta$ を計算せよ。

(4) $S_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x$ に関して $\Theta S_x\Theta = -S_x$ を導け。

(5) $S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y$ に関して $\Theta S_y\Theta = -S_y$ を導け。

(6) $S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$ に関して $\Theta S_z\Theta = -S_z$ を導け。よって、スピン $\boldsymbol{S}$ に関して $\Theta\boldsymbol{S}\Theta = -\boldsymbol{S}$ である。

(7) c を実として $H_{SO} = c\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ は時間反転に関してどのように変換するか？

(8) 実ベクトル $\alpha = \begin{pmatrix} \alpha_x \\ \alpha_y \\ \alpha_z \end{pmatrix}$ を用いて書かれるハミルトニアン
$H = \boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{\alpha}\times\boldsymbol{p})$ は時間反転操作で不変であることを示せ。($\boldsymbol{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$)

(9) $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_+(\boldsymbol{r}) \\ \psi_-(\boldsymbol{r}) \end{pmatrix}$ をエネルギー E の固有状態 $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ とした時、$|\psi\rangle$ の規格化条件を書き下せ。

(10) $|\psi^\Theta\rangle = \Theta|\psi\rangle$ としたとき $|\psi\rangle$ と $|\psi^\Theta\rangle$ は同じエネルギーをもつことを示せ。

(11) 前問の条件のみではこのハミルトニアンに縮退があることを意味しないのはなぜか？

(12) $\langle\psi|\psi^\Theta\rangle = 0$ を具体的に示せ。

(13) よってこの系には縮退が存在する（Kramers 縮退）。この理由を述べよ。

(14) $\Theta^2 = -1$ を示せ。

(15) 2 つの任意の状態 $|\Psi\rangle$, $|\Phi\rangle$ に関して $\langle\Theta\Psi|\Theta\Phi\rangle = (\langle\Phi|\Psi\rangle)^*$ となる。この関係式を導け。

(16) 前問の一般式を $|\Psi\rangle = |\psi\rangle$, $|\Phi\rangle = \Theta|\psi\rangle$ に用いて $\langle\psi|\psi^\Theta\rangle = 0$ を示せ。