A

量子力学3　第10回講義まとめ

201310851　金杉 翔太

☆ Spin and Pauli matrices

実験との整合性のために、$\vec{L} \to \vec{L} + g\vec{S}$ としてスピン $\vec{S}$ が導入された。ここで g は g 因子である。スピン $\vec{S}$ は以下の性質を持つ。

$$[S_i, S_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} S_k \qquad \text{—①}$$

$$\vec{S}^\dagger = \vec{S} \qquad \text{—②}$$

$$\vec{S}^2 |S, M\rangle = \hbar^2 S(S+1) |S, M\rangle \qquad \text{—③}$$

$$S_z |S, M\rangle = \hbar M |S, M\rangle \qquad \text{—④}$$

ここで、$S = 1/2$, $M = -1/2, 1/2$ である。

以下では $M = 1/2$ を $\uparrow$, $M = -1/2$ を $\downarrow$ で表すものとすると、

$$\langle j, m+1 | J_+ | j, m\rangle = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}$$

$$\langle j, m-1 | J_- | j, m\rangle = \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}$$

を用いれば、

$$\langle \uparrow | S_+ | \downarrow \rangle = \hbar\sqrt{\left(\tfrac{1}{2}+\tfrac{1}{2}\right)\left(\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}+1\right)} = \hbar \qquad \text{—⑤}$$

$$\langle \downarrow | S_- | \uparrow \rangle = \hbar\sqrt{\left(\tfrac{1}{2}+\tfrac{1}{2}\right)\left(\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}+1\right)} = \hbar \qquad \text{—⑥}$$

$$S_+ |\uparrow\rangle = 0 \ , \quad S_- |\downarrow\rangle = 0 \qquad \text{—⑦}$$

となる。但し、$S_\pm = S_x \pm i S_y$ である。また、④より、

$$S_z |\uparrow\rangle = \hbar M |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle \qquad \text{—⑧}$$

$$S_z |\downarrow\rangle = \hbar M |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle \qquad \text{—⑨}$$

⑧、⑨を用いると

$$\begin{pmatrix} \langle\uparrow| \\ \langle\downarrow| \end{pmatrix} S_z \left(|\uparrow\rangle \ |\downarrow\rangle\right) = \begin{pmatrix} \langle\uparrow|S_z|\uparrow\rangle & \langle\uparrow|S_z|\downarrow\rangle \\ \langle\downarrow|S_z|\uparrow\rangle & \langle\downarrow|S_z|\downarrow\rangle \end{pmatrix}$$

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

また、⑤、⑥、⑦を用いると、

$$\begin{pmatrix} \langle\uparrow| \\ \langle\downarrow| \end{pmatrix} S_+ \left(|\uparrow\rangle \ |\downarrow\rangle\right) = \begin{pmatrix} \langle\uparrow|S_+|\uparrow\rangle & \langle\uparrow|S_+|\downarrow\rangle \\ \langle\downarrow|S_+|\uparrow\rangle & \langle\downarrow|S_+|\downarrow\rangle \end{pmatrix}$$

$$= \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \langle\uparrow| \\ \langle\downarrow| \end{pmatrix} S_- \left(|\uparrow\rangle \ |\downarrow\rangle\right) = \begin{pmatrix} \langle\uparrow|S_-|\uparrow\rangle & \langle\uparrow|S_-|\downarrow\rangle \\ \langle\downarrow|S_-|\uparrow\rangle & \langle\downarrow|S_-|\downarrow\rangle \end{pmatrix}$$

$$= \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

となる。以上より、

他の成分についても同じことが成り立つので、

$$\sigma_y\sigma_x = -i\sigma_z,\quad \sigma_z\sigma_y = -i\sigma_x,\quad \sigma_x\sigma_z = -i\sigma_y \quad —— ⑬$$

⑫、⑬をまとめて表せば、

$$\sigma_i\sigma_j = i\,\varepsilon_{ijk}\,\sigma_k \quad (i\neq j) \quad —— ⑭$$

$i=j$のときには、E_2を2×2単位行列として、

$$\sigma_i{}^2 = E_2 \quad — ⑮$$

また、定義より、

$$\mathrm{Tr}\,\sigma_x = \mathrm{Tr}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} = 0+0=0$$

$$\mathrm{Tr}\,\sigma_y = \mathrm{Tr}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} = 0+0=0$$

$$\mathrm{Tr}\,\sigma_z = \mathrm{Tr}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} = 1+(-1)=0$$

$$\therefore\ \mathrm{Tr}\,\vec{\sigma} = \vec{0} \quad — ⑯$$

⑭、⑮を用いると、

$$[\sigma_i,\sigma_j] = \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = \begin{cases} E_2+E_2 = 2E_2 & (i=j)\\ \sigma_i\sigma_j - \sigma_i\sigma_j = 0 & (i\neq j)\end{cases}$$

$$\therefore\ [\sigma_i,\sigma_j] = 2\delta_{ij}E_2 \quad — ⑰$$

次に、一般の2×2行列 $A=\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}$; $a,b,c,d\in\mathbb{R}$について考える。

$$\sigma_0\equiv E_2,\quad \sigma_1\equiv\sigma_x,\quad \sigma_2\equiv\sigma_y,\quad \sigma_3\equiv\sigma_z$$

とし、$A_i\ (i=0,1,2,3)$を任意の複素数として、

$$A = A_0\sigma_0 + A_1\sigma_1 + A_2\sigma_2 + A_3\sigma_3 = \sum_{i=0}^{3} A_i\sigma_i$$

と表せるものとする。これより、

$$\mathrm{Tr}\,A\sigma_0 = \mathrm{Tr}\,A = \sum_{i=0}^{3}\mathrm{Tr}\,(A_0\sigma_0^2 + A_1\sigma_1\sigma_0 + A_2\sigma_2\sigma_0 + A_3\sigma_3\sigma_0) = A_0\,\mathrm{Tr}\,\sigma_0 = 2A_0$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\,A\sigma_1 &= \sum_{i=0}^{3}\mathrm{Tr}\,(A_0\sigma_0\sigma_1 + A_1\sigma_1^2 + A_2\sigma_2\sigma_1 + A_3\sigma_3\sigma_1)\\ &= \sum_{i=0}^{3}\mathrm{Tr}\,(A_0\sigma_1 + A_1\sigma_0 - iA_2\sigma_3 + iA_3\sigma_2)\\ &= A_1\,\mathrm{Tr}\,\sigma_1{}^2 = 2A_1\end{aligned}$$

σ_2,σ_3に対しても同様に計算すれば、

$$A_1 = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\,A\sigma_1,\quad A_2 = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\,A\sigma_2,\quad A_3 = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\,A\sigma_3$$

これより、

$$\vec{A} = \begin{pmatrix}A_1\\ A_2\\ A_3\end{pmatrix},\quad A_i = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\,A\sigma_i \quad (i=1,2,3)$$

とすれば、

$$A = A_0 \sigma_0 + \vec{A}\cdot\vec{\sigma}$$

となり、

$$\begin{aligned}\vec{A}\cdot\vec{\sigma} &= A_1\sigma_1 + A_2\sigma_2 + A_3\sigma_3 \\ &= A_1\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + A_2\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + A_3\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} A_3 & A_1 - iA_2 \\ A_1 + iA_2 & -A_3 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

である。

$$A_0 = \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}\,A$$

であったから、もし $\mathrm{Tr}\,A = 0$ ならば、

$$A = \vec{A}\cdot\vec{\sigma} \quad , \exists\vec{A}, \quad A^\dagger = A$$

となり、$\vec{\sigma}^\dagger = \vec{\sigma}$ より、$\vec{A}$ は実数成分から成ることが分かる。

次に、2×2行列 A・B に対して、

$$A = (\vec{A}\cdot\vec{\sigma}), \quad \vec{B} = (\vec{B}\cdot\vec{\sigma})$$

とすると、

$$\begin{aligned}AB &= (\vec{A}\cdot\vec{\sigma})(\vec{B}\cdot\vec{\sigma}) \\ &= A_i\sigma_i\, B_j\sigma_j \qquad (i=1,2,3\,;\, j=1,2,3) \\ &= A_i B_j\, \sigma_i\sigma_j \\ &= \sum_{i=j} A_i B_i\, \sigma_i^2 + \sum_{i\neq j} A_i B_j\, \sigma_i\sigma_j \\ &= \sum_{i=1}^{3} A_i B_i\, \sigma_0 + \sum_{i\neq j} A_i B_j\, (i\,\varepsilon_{ijk}\,\sigma_k) \\ &= (\vec{A}\cdot\vec{B})\sigma_0 + i\sum_{i\neq j}\varepsilon_{ijk} A_i B_j\, \sigma_k \\ &= (\vec{A}\cdot\vec{B})\sigma_0 + i\sum_{i\neq j}(\vec{A}\times\vec{B})_k\,\sigma_k \\ &= (\vec{A}\cdot\vec{B})\sigma_0 + i\,\vec{\sigma}\cdot(\vec{A}\times\vec{B})\end{aligned}$$

$$\therefore\ AB = (\vec{A}\cdot\vec{B})\sigma_0 + i\,\vec{\sigma}(\vec{A}\times\vec{B}) \quad \text{—— ⑱}$$

以上のことをふまえて、$H = -\mu\vec{S}\cdot\vec{B}$ について考える。
$\vec{B} = (0, 0, B)$ とすれば、

$$H = -\mu S_z B = -\frac{\mu\hbar B}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

と表せる。別の方法では、

$$\mathrm{Tr}\,H = -\mu\,\mathrm{Tr}\,\vec{S}\cdot\vec{B} = -\mu\hbar\,\vec{B}\cdot\mathrm{Tr}\,\vec{\sigma} = 0$$

より、Hの固有値を E_1, E_2 とすれば、

$$\mathrm{Tr}\,H = E_1 + E_2 = 0$$

$$\therefore\ E_2 = -E_1$$

また、

$$H^2 = \left(\frac{\mu\hbar}{2}\vec{B}\cdot\vec{\sigma}\right)^2 = \left(\frac{\mu\hbar}{2}\right)^2(\vec{B}\cdot\vec{\sigma})(\vec{B}\cdot\vec{\sigma})$$

$$= \left(\frac{\mu\hbar}{2}\right)^2\left(\vec{B}\cdot\vec{B}\sigma_0 + i\vec{\sigma}\cdot(\vec{B}\times\vec{B})\right)$$

$$= \left(\frac{\mu\hbar}{2}\right)^2(\vec{B})^2\sigma_0$$

$$\therefore\ E_1 = \frac{\mu\hbar}{2}|\vec{B}|,\quad E_2 = -\frac{\mu\hbar}{2}|\vec{B}|$$

★ Time-reversal symmetry

時間反転対称操作 Θ を以下で定義する。

$$\Theta = i\sigma_2 K = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} K$$

ここで、K は複素共役を表す。これを用いると、

$$\Theta\sigma_1\Theta^{-1} = i\sigma_2(\sigma_1)^*(-i\sigma_2)$$
$$= \sigma_2\sigma_1^*\sigma_2$$
$$= \sigma_2\sigma_1\sigma_2$$
$$= i\sigma_2\sigma_3$$
$$= i(i\sigma_1) = -\sigma_1$$

$$\Theta\sigma_2\Theta^{-1} = i\sigma_2(\sigma_2)^*(-i\sigma_2)$$
$$= \sigma_2\sigma_2^*\sigma_2$$
$$= \sigma_2(-\sigma_2)\sigma_2$$
$$= -\sigma_2^2\sigma_2 = -\sigma_2$$

$$\Theta\sigma_3\Theta^{-1} = i\sigma_2(\sigma_3)^*(-i\sigma_2)$$
$$= \sigma_2\sigma_3^*\sigma_2$$
$$= \sigma_2\sigma_3\sigma_2$$
$$= i\sigma_1\sigma_2 = -\sigma_3$$

$$\therefore\ \Theta\vec{\sigma}\Theta^{-1} = -\vec{\sigma}$$
$$\therefore\ \Theta\vec{S}\Theta^{-1} = -\vec{S}$$

また、

$$\Theta\vec{r}\Theta^{-1} = \vec{r}$$
$$\Theta\vec{p}\Theta^{-1} = -\vec{p}$$

となるので、

$$\Theta\vec{L}\Theta^{-1} = \Theta(\vec{r}\times\vec{p})\Theta^{-1} = -\vec{L}$$

これより、

$$\Theta(\vec{L}\cdot\vec{S})\Theta^{-1} = (-\vec{L})\cdot(-\vec{S}) = \vec{L}\cdot\vec{S}$$

となる。