演習問題8

NO.

DATE

問題1.

20111083-7 荒木 広夢

(1). $R : \vec{r} \mapsto \vec{r}' = R\vec{r}$

長さを変えない: $|\vec{r}| = |\vec{r}'|$

$|\vec{r}'|^2 = \vec{r}'\vec{r}' = (\widetilde{R\vec{r}})R\vec{r}$

$= \vec{r}\tilde{R}R\vec{r} = \vec{r}\vec{r} = |\vec{r}|^2$

$\to \tilde{R}R = E_3$

$\to R^{-1} = \tilde{R}$

$\det \tilde{R}R = \det \tilde{R} \det R = \det R \cdot \det R = (\det R)^2$

$\det E_3 = 1$

$\to \det R = \pm 1$

恒等変換 E_3 ($\det E_3 = 1$) と連続 → 微小回転 R について,

$\det(RE_2) = \det E_2$ となるはずである (R は微小変換).

$\to \det R \cdot \det E_2 = \det E_2$

$\to \det R = 1$

(2). $\det(R - E_3) = \det(\widetilde{R - E_3}) = \det(\tilde{R} - E_3)$

$= \det(R^{-1} - E_3)$

$= \det R^{-1}(E_3 - R)$

$= \det R^{-1} \cdot \det(E_3 - R)$

$= 1$

一方, $\det(R - E_3) = (-)^3 \det(-(R - E_3))$

$= -\det(E_3 - R)$

$\to \det(E_3 - R) = 0$

一般に, 行列 A, $\det A = 0 \Rightarrow A\vec{v} = 0$ となる $\vec{v} \neq 0$ が存在

$\to (E_3 - R)\vec{v} = 0$ なる $\vec{v} \neq 0$ が存在

$\to R\vec{v} = \vec{v}$

$\vec{v}$: 回転で不変 → 回転軸

NO.

DATE

(3). Q：回転 → $\tilde{Q}Q = E_3$

$R' = QRQ^{-1}$

$\tilde{R}'R' = \widetilde{QRQ^{-1}}\,QRQ^{-1}$

$= \tilde{Q}^{-1}\tilde{R}\underbrace{\tilde{Q}Q}_{=E_3}RQ^{-1}$

$= \tilde{Q}^{-1}\tilde{R}RQ^{-1}$

$\because Q$

$= QQ^{-1}$

$= E_3$

→ $|R'\vec{r}|^2 = \vec{r}\tilde{R}'R\vec{r} = \vec{r}\vec{r} = |\vec{r}|^2$

→ R' は回転

$R'Q\vec{v} = QRQ^{-1}Q\vec{v}$

$= QR\vec{v}$

$= Q\vec{v}$ （$\vec{v}$ は R の回転軸）

$= \theta\vec{v}$

→ R' の回転軸は $Q\vec{v}$

(4). $R(\alpha,\beta,\gamma) = R_\gamma(\hat{z}_2)R_\beta(y_1)R_\alpha(z)$

(1) $R_\alpha(z)$：$(x,y,z) \to (x_1,y_1,z_1=z)$

$R_\beta(y_1) = R_\alpha(z)R_\beta(y)R_\alpha^{-1}(z)$ （(3) $R(\theta\vec{v}) = QR(\vec{v})Q^{-1}$ より）

$R_\gamma(z_1) = R_\alpha(z)R_\gamma(z)R_\alpha^{-1}(z)$

(2). $R_\beta(y_1)$：$(x_1,y_1,z_1) \to (x_2,y_2=y_1,z_2)$

$R_\gamma(z_2) = R_\beta(y_1)R_\gamma(z_1)R_\beta^{-1}(y_1)$

以上の結果を代入すると，

$R(\alpha\beta,\gamma) = R_\gamma(z_2)R_\beta(y_1)R_\alpha(z)$

$= R_\beta(y_1)R_\gamma(z_1)R_\alpha(z)$

$= R_\alpha(z)R_\beta(y)\underbrace{R_\alpha^{-1}(z)R_\alpha(z)}_{=1}R_\gamma(z)\underbrace{R_\alpha^{-1}(z)R_\alpha(z)}_{=1}$

$= R_\alpha(z)R_\beta(y)R_\gamma(z)$

問題2.

$H|\psi_i\rangle = |\psi_i\rangle E \quad i = 1, \cdots, d$

(1) $[H, R] = 0$ から,

$RH|\psi_i\rangle = HR|\psi_i\rangle$

$R|\psi_i\rangle E$

$\therefore H(R|\psi_i\rangle) = (R|\psi_i\rangle)E$

$R|\psi_i\rangle$ も H のエネルギー E の固有状態.

H のエネルギー E の固有状態は $|\psi_1\rangle, \cdots, |\psi_d\rangle$ の d コの固有状態でかける

$\rightarrow R|\psi_i\rangle$ は $(|\psi_1\rangle, \cdots, |\psi_d\rangle)$ で張る.

$\rightarrow R|\psi_i\rangle = |\psi_j\rangle D_{ji}(R)$

D: 行列, $(D)_{ij} = D_{ij}$

(2). $R|\psi_1\rangle = |\psi_i\rangle D_{i1}(R)$

$R|\psi_2\rangle = |\psi_i\rangle D_{i2}(R)$

$\vdots$

$R|\psi_d\rangle = |\psi_i\rangle D_{id}(R)$

$\psi = (|\psi_1\rangle, \cdots, |\psi_d\rangle)$ とすると,

$$R\psi = \psi \begin{pmatrix} D_{11} & D_{12} & \cdots & D_{1d} \\ D_{21} & & \ddots & \\ \vdots & & & \\ D_{d1} & & & D_{dd} \end{pmatrix} = \psi D(R)$$

となることがわかる. ここで, $\{|\psi_i\rangle\}$ は規格直交系なので,

$R|\psi_j\rangle = |\psi_i\rangle D_{ij}(R)$

$\langle\psi_i|R|\psi_j\rangle = D_{ij}(R)$

$\therefore D_{ij}(R) = \langle\psi_i|R|\psi_i\rangle$

である.

NO.

DATE

(3). $R_1\psi = \psi D(R_1)$

$R_2(R_1\psi) = R_2\psi D(R_1)$

$\rightarrow (R_2R_1)\psi = \psi D(R_2)D(R_1)$

(4). (3)から,

$(R_2R_1)\psi = \psi D(R_2R_1) = \psi D(R_2)D(R_1)$

もいえる. したがって,

$D(R_2R_1) = D(R_2)D(R_1)$

である. ユニタリ変換の単位元をeとすると,

- $D(e)D(R) = D(eR) = D(R)$

  $D(R)D(e) = D(Re) = D(R)$

  $\rightarrow D(e)$は$\{D(R)\}$の単位元. $\rightarrow D(e) = Ed$
- $D(R^{-1})D(R) = D(R^{-1}R) = D(e) = Ed$

  $\rightarrow D(R^{-1}) = [D(R)]^{-1}$

$\rightarrow (R^{-1})\psi = \psi D(R^{-1})$

$= \psi [D(R)]^{-1}$

NO

DATE

問題3.

$H(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi$ の固有関数を $\psi_k(x)$

boundary condition: $\psi(x+L/2) = \psi(x-L/2)$ の下で,

$\psi_k = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$, $k = \frac{2\pi}{L}n$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$

パリティ変換 P

$P\psi(x) = \psi(-x)$

に対して, $H(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi$ は不変

(1). $\{P, P^2 = 1\}$ は積について群をつくる.

(i) $P \cdot P\psi(x) = P\psi(-x)$

$= \psi(x)$

$\rightarrow P \cdot P = 1$

$P \cdot P^2\psi(x) = P \cdot 1 \cdot \psi(x)$

$= P\psi(x)$

$\rightarrow P \cdot P^2 = P$

$P^2 \cdot P\psi(x) = 1 \cdot P\psi(x)$

$= P\psi(x)$

$\rightarrow P^2 \cdot P = P$

$P^2 \cdot P^2\psi(x) = 1 \cdot 1\psi(x)$

$= \psi(x)$

$\rightarrow P^2 \cdot P^2 = 1$

以上より $\{P, P^2\}$ は積について閉じている.

(ii) $\forall A, B, C \in \{P, P^2\}$ について. $A = P^a$, $B = P^b$, $C = P^c$

$a, b, c = 1$ or 2

とおいて,

$P^i\psi(x) = \psi((-)^i x)$ $i = 1, 2, \cdots$

であるから,

$P^i P^j\psi(x) = P^i\psi((-)^j x)$

$= \psi((-)^{i+j} x)$

したがって,

$(AB)C\psi(x) = P^{a+b} P^c\psi(x) = P^{a+b}\psi((-)^c x)$

$= \psi((-)^{a+b+c} x)$

$= P^a\psi((-)^{b+c} x) = P^a P^{b+c}\psi(x)$

$= A(BC)\psi(x)$

$\therefore (AB)C = A(BC)$

KOKUYO

NO.

DATE

(iii) $P \cdot P^2 = P$, $P^2 \cdot P = P$

→ P^2 は単位元

(iv) $P \cdot P = P^2$, $P^2 \cdot P^2 = P^2$

→ $(P)^{-1} = P$ 逆元の存在

$(P^2)^{-1} = P^2$

以上のことから、$\{P, P^2\}$ は積について群をつくる。

(2). $k>0$ $\psi = (\psi_k, \psi_{-k})$

$R = P$ or 1

$R\psi = \psi D(R)$

$R\psi_k = \psi_k D_{11}(R) + \psi_{-k} D_{21}(R)$

$R\psi_{-k} = \psi_k D_{12}(R) + \psi_{-k} D_{22}(R)$

・$R = P$ のとき

$P\psi_k = P\frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-ikx} = \psi_{-k}$

$P\psi_{-k} = P\frac{1}{\sqrt{L}} e^{-ikx} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} = \psi_k$

→ $D(P) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

・$R = 1$ のとき,

$P\psi_k = \psi_k$

$P\psi_{-k} = \psi_{-k}$

→ $D(1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

(3) $\psi_\pm = (\psi_k \pm \psi_{-k})/\sqrt{2}$

$P\psi_+ = (\underbrace{P\psi_k}_{\vdash\psi_{-k}} + \underbrace{P\psi_{-k}}_{\vdash\psi_k})/\sqrt{2}$

$= (\psi_{-k} + \psi_k)/\sqrt{2}$

$= \psi_+$

$P\psi_- = (P\psi_k - P\psi_{-k})/\sqrt{2}$

$= (\psi_{-k} - \psi_k)/\sqrt{2}$

$= -(\psi_k - \psi_{-k})/\sqrt{2}$

$= -\psi_+$

NO

DATE

(4). $\psi' = (\psi_+, \psi_-)$

$= ((\psi_k + \psi_{-k})/\sqrt{2}, (\psi_k - \psi_{-k})/\sqrt{2})$

$= (\psi_k \ \psi_{-k}) \underbrace{\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}}$

逆行列は $\frac{1}{-(1/\sqrt{2})^2 - (1/\sqrt{2})^2} \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$

$= \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$

$\Rightarrow (\psi_k \ \psi_{-k}) = \psi' \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$

$\therefore U = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$

(5). $R\psi' = \psi' D'(R)$, $R = 1, P$

$R\psi_+ = \psi_+ D'_{11} + \psi_- D'_{21}$

$R\psi_- = \psi_+ D'_{12} + \psi_- D'_{22}$

- $R = 1$ のとき、

$R\psi_+ = \psi_+$

$R\psi_- = \psi_-$

$D'(1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

- $R = P$ のとき、(3)の結果より、

$P\psi_+ = \psi_+$

$P\psi_- = -\psi_-$

$D'(P) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

(6). $\psi = \psi' U$ から、

$R\psi = R\psi' U = \psi D'(R) U = \psi U^{-1} D'(R) U$

$\parallel$

$\psi D(R)$

$\Rightarrow D(R) = U^{-1} D'(R) U$

$\Rightarrow U D(R) = D'(R) U$

KOKUYO

NO.

DATE

問題4.

z軸方向 Euler角 α, β, γ 回転：$R(\alpha,\beta,\gamma)$

z方向波動関数 $\psi(R(\alpha,\beta,\gamma)\hat{z})$ に対して、

$$Q\psi(R(\alpha,\beta,\gamma)\hat{z}) = \psi(Q^{-1}R(\alpha,\beta,\gamma)\hat{z}) \quad \cdots(*)$$

($\because$ Q : unitary)

整数 l に対してスピン l 表現 $D^l_{MN}(R)$, $M=-l,\cdots,l$, N: 任意

$$\psi_M(R(\alpha,\beta,\gamma)\hat{z}) = [D^l_{MN}(R(\alpha,\beta,\gamma))]^*$$

このとき

$$\begin{aligned}
Q\psi_M(R(\alpha,\beta,\gamma)\hat{z}) &= \psi_M(Q^{-1}R(\alpha,\beta,\gamma)\hat{z}) \\
&\quad ((*)\text{から}) \\
&= [D^l_{MN}(Q^{-1}R(\alpha\beta,\gamma))]^* \\
&\quad (\psi_M\text{の定義}) \\
&= [D^l_{MK}(Q^{-1})D^l_{KN}(R(\alpha,\beta,\gamma))]^*, \quad K=-l,\cdots,l \\
&\quad (D(Q^{-1}R)=D(Q^{-1})D(R)\text{より}) \\
&= [D^l_{MK}(Q^{-1})]^*[D^l_{KN}(R(\alpha,\beta,\gamma))]^* \\
&\quad (\text{それぞれの行列成分について複素共役をとった}) \\
&= [[D^l(Q)]^{-1}]^*_{MK}[D^l_{KN}(R(\alpha,\beta,\gamma))]^* \\
&\quad (D^+(Q)=[D(Q)]^{-1} \\
&\qquad = D(Q^{-1}) \text{ を使った}) \\
&= [D^l_{KN}(R(\alpha\beta,\gamma))]^* D^l_{KM}(Q) \\
&\quad ((D^+)^*_{MK} = (\bar{D}^*)^*_{MK} = \bar{D}_{MK} = D_{KM}) \\
&= \psi_K(R(\alpha,\beta,\gamma)\hat{z})\, D^l_{KM}(Q) \\
&\quad (\psi_M\text{の定義}) \\
\end{aligned}$$

したがって、$\psi = (\psi_l, \cdots, \psi_{-l})$ とすると、

$$Q\psi = \psi D^l(Q)$$

したがって、ψ_M $(M=-l,\cdots,l)$ は表現 $D^l(Q)$ の基底となっている。

(Q は何か unitary 行列)

KOKUYO