1.3 Pauli matrices

前節の結果をまとめておこう。

$$S_x = \frac{\hbar}{2}|+\rangle\langle -| + \frac{\hbar}{2}|-\rangle\langle +| = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_y = -\frac{i\hbar}{2}|+\rangle\langle -| + \frac{i\hbar}{2}|-\rangle\langle +| = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_z = \frac{\hbar}{2}|+\rangle\langle +| - \frac{\hbar}{2}|-\rangle\langle -| = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

これらの固有状態として

$$|x\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}, \quad |y\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix}, \quad |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

行列 S の 2×2 行列を，Pauli 行列という。すなわち，

$$\sigma_1 = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

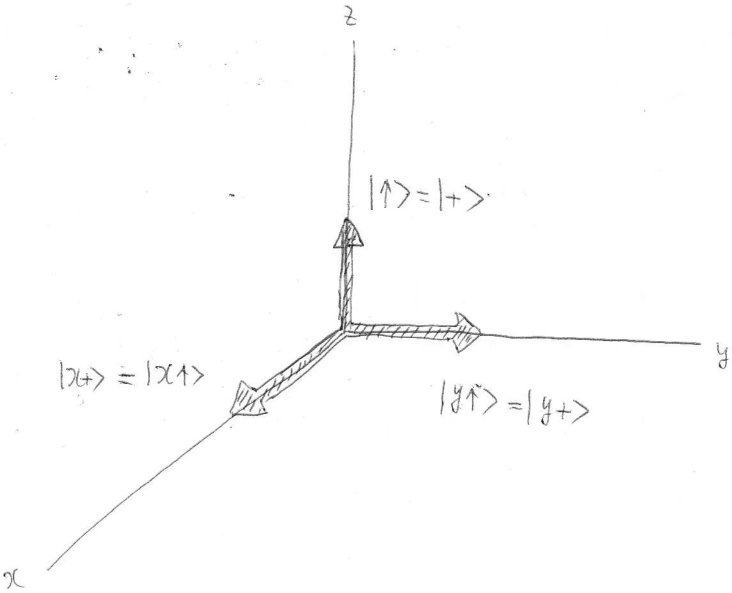
この3つの行列をベクトル表記をまねて

$$\vec{\sigma} = \boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$$

すると，演算子 S も同様にして

$$\vec{S} = \mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$$

と書くことができる。



番号　　　　　　　　氏名

量子力学 No.3 Pauli matrices

1. 演算子の交換関係と反交換関係を以下のように定義する．

$$\text{交換関係}\ [A,B] = AB - BA \tag{1}$$
$$\text{反交換関係}\ \{A,B\} = AB + BA \tag{2}$$

以下の量を計算しなさい．

(a) $[\sigma_1, \sigma_2] = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2i & 0 \\ 0 & -2i \end{pmatrix} = 2i\sigma_3$

(b) $[\sigma_2, \sigma_3] = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 2i \\ 2i & 0 \end{pmatrix} = 2i\sigma_1$

(c) $[\sigma_3, \sigma_1] = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ -2 & 0 \end{pmatrix} = 2i\sigma_2$

(d) $\{\sigma_1, \sigma_2\} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

(e) $\{\sigma_2, \sigma_3\} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

(f) $\{\sigma_3, \sigma_1\} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

(g) $\sigma_1{}^2 = \frac{1}{2}\{\sigma_1, \sigma_1\} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

(h) $\sigma_2{}^2 = \frac{1}{2}\{\sigma_2, \sigma_2\} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

(i) $\sigma_3{}^2 = \frac{1}{2}\{\sigma_3, \sigma_3\} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

(j) $\boldsymbol{\sigma}^2 = \sigma_1{}^2 + \sigma_2{}^2 + \sigma_3{}^2 = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$

2. 次の量を行列で表しなさい．

$$a_0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{a} = a_0 + \vec{\sigma} \cdot \vec{a} = a_0 + \sigma_1 a_1 + \sigma_2 a_2 + \sigma_3 a_3 \tag{3}$$

$$a_0\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + a_1\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + a_2\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + a_3\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} a_0 + a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & a_0 - a_3 \end{pmatrix}$$

3. 任意の 2×2 行列 X は，

$$X = \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} \\ X_{21} & X_{22} \end{pmatrix} = a_0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{a} \tag{4}$$

と展開することができる．a_0 および $\boldsymbol{a}$ を X の成分で表しなさい．

$$\left.\begin{aligned} a_0 + a_3 &= X_{11} \\ a_0 - a_3 &= X_{22} \end{aligned}\right\} \quad a_0 = \frac{X_{11} + X_{22}}{2}, \quad a_3 = \frac{X_{11} - X_{22}}{2}$$

$$\left.\begin{aligned} a_1 - ia_2 &= X_{12} \\ a_1 + ia_2 &= X_{21} \end{aligned}\right\} \quad a_1 = \frac{X_{21} + X_{12}}{2}, \quad a_2 = \frac{X_{21} - X_{12}}{2i}$$

4. 今日の講義でわかったこと・わからなかったこと・感想などを書きなさい．(自由記載)

番号　　　　　　　　氏名

量子力学 No.3-2　Pauli matrices

1. 次の量を計算しなさい.

(a) $[S_x, S_y] = \frac{\hbar^2}{4} \times 2i\sigma_3 = i\hbar \times \frac{\hbar}{2}\sigma_3 = i\hbar S_z$

(b) $[S_y, S_z] = \frac{\hbar^2}{4} \times 2i\sigma_1 = i\hbar \times \frac{\hbar}{2}\sigma_1 = i\hbar S_x$

(c) $[S_z, S_x] = \frac{\hbar^2}{4} \times 2i\sigma_2 = i\hbar \times \frac{\hbar}{2}\sigma_2 = i\hbar S_y$

(d) ${S_x}^2 = \frac{\hbar^2}{4}{\sigma_1}^2 = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

(e) ${S_y}^2 = \frac{\hbar^2}{4}{\sigma_2}^2 = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

(f) ${S_z}^2 = \frac{\hbar^2}{4}{\sigma_3}^2 = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

(g) $\boldsymbol{S}^2 = {S_x}^2 + {S_y}^2 + {S_z}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

(h) $[\boldsymbol{S}^2, S_x] = 0$

(i) $[\boldsymbol{S}^2, S_y] = 0$

(j) $[\boldsymbol{S}^2, S_z] = 0$

2. スピンの行列表示より，次の量を計算しなさい．

(a) $S_+ = S_x + iS_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + i\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

(b) $S_- = S_x - iS_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - i\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

(c) $S_+|\uparrow\rangle = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$

(d) $S_+|\downarrow\rangle = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

(e) $S_-|\uparrow\rangle = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

(f) $S_-|\downarrow\rangle = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0$

3. 交換関係 $[\boldsymbol{S}^2, S_z] = 0$ より，2つの演算子 $\boldsymbol{S}^2$，S_z に同時に固有値 s，m_s を持つことができる状態を作る．今まで出てきたスピンを表す状態を

$$|\uparrow\rangle = \left|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle \tag{5}$$

$$|\downarrow\rangle = \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \tag{6}$$

と表そう．

(a) これらの行列表示より，

$$\boldsymbol{S}^2 |s, m_s\rangle = s(s+1)\hbar^2 |s, m_s\rangle \tag{7}$$

$$S_z |s, m_s\rangle = m_s\hbar |s, m_s\rangle \tag{8}$$

となることを確かめなさい．

$$S^2|\uparrow\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\hbar^2|\uparrow\rangle$$

$$S^2|\downarrow\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\hbar^2|\downarrow\rangle$$

$$S_z|\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle$$

$$S_z|\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle$$

(b) これらの行列表示より，

$$S_\pm|s, m_s\rangle = |s, m_s \pm 1\rangle\sqrt{(s \mp m)(s \pm m + 1)}\hbar \tag{9}$$

となることを確かめなさい．

$$S_+|\uparrow\rangle = S_+\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \left|\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle\sqrt{0\times 3}\,\hbar = 0$$

$$S_+|\downarrow\rangle = S_+\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle\sqrt{\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}+1\right)}\,\hbar = \hbar\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \hbar|\uparrow\rangle$$

$$S_-|\uparrow\rangle = S_-\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle\sqrt{\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}+1\right)}\,\hbar = \hbar\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar|\downarrow\rangle$$

$$S_-|\downarrow\rangle = S_-\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \left|\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle\sqrt{0\times\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}+1\right)}\,\hbar = 0$$

4. 行列 S_x，S_y，S_z がエルミートであることを確かめなさい．

$$S_x^\dagger = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = S_x$$

$$S_y^\dagger = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = S_y$$

$$S_z^\dagger = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = S_z$$

5. エルミート行列の固有値が実数であること，および異なる固有値に属する固有ベクトルは直交することを示しなさい．

エルミート行列を $A^\dagger = A$ とする。固有値方程式は

$$A|j\rangle = a_j|j\rangle \longrightarrow \langle k|A|j\rangle = a_j\langle k|j\rangle \quad \cdots ①$$

$$A|k\rangle = a_k|k\rangle \longrightarrow \langle j|A|k\rangle = a_k\langle j|k\rangle$$

両辺複素共役をとる。

$$\langle j|A|k\rangle^* = a_k^*\langle j|k\rangle^*$$

$$\langle j|A|k\rangle^* = \langle k|A^\dagger|j\rangle = \langle k|A|j\rangle, \quad a_k^*\langle j|k\rangle^* = a_k^*\langle k|j\rangle \quad \cdots ②$$

①②の辺々を引くと、

$$0 = (a_j - a_k^*)\langle k|j\rangle$$

ここで、

$k = j$ のとき、$\langle k|k\rangle = 1$ より $a_k^* = a_k \longrightarrow$ 実数

$k \neq j$ のとき、$\langle k|j\rangle = 0 \longrightarrow$ 直交