演習問題　第５章

1) 一つのスピンの状態 $|\phi >= c_1| +1/2 > +c_2| -1/2 >$ について，$c_1^2 + c_2^2 = 1$ のときに内積 $< \phi|\phi >= 1$ となることを示せ.

解答例）
例題１と同じ.
あれまぁ）
５１ページの例題１と同じだった！
変更のアイデア）
この問１は削除する．空いたスペースが寂しいというのであれば，新しく以下の問題文を追加する．
p57 の式 $\mathrm{Tr}\{\rho A\} = \mathrm{Tr}\{A\rho\}$ を証明せよ．

2) Pauli 演算子（式（5.2)）で以下の循環的な関係があることを計算で確認せよ．

$$[I_x, I_y] = iI_z$$

$$[I_y, I_z] = iI_x$$

$$[I_z, I_x] = iI_y$$

解答例）
本文 p52 では簡単のために，以降は $\hbar = 1$ としているが，ここでは顕わに書いておく．

$$\begin{aligned}
[I_x, I_y] &= \frac{\hbar^2}{4}\{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\} \\
&= \frac{\hbar^2}{4}\{\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \\
&= \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 2i & 0 \\ 0 & -2i \end{pmatrix} \\
&= i\hbar I_z
\end{aligned}$$

他の２つの式についても同様に計算したら OK.

3) 状態 $|\phi >= c_1| +1/2 > +c_2| -1/2 >$ における X 磁化と Z 磁化の期待値を求めよ.

解答例）

X 磁化は演算子 I_X の期待値なので，

$$
\begin{aligned}
<\phi|I_X|\phi> &= \begin{pmatrix} C_1^* & C_2^* \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \\
&= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} C_2^* & C_1^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \\
&= \frac{\hbar}{2}(C_2^* C_1 + C_1^* C_2)
\end{aligned}
$$

あれまぁ）

Z 磁化の方は５４ページの例題３と同じだった！

変更のアイデア）

問題文を「状態 $|\phi>= c_1|+1/2> + c_2|-1/2>$ における X 磁化と Y 磁化の期待値を求めよ.」に変更する.

4)　２スピン系での $I_Z = I_{1z} + I_{2z}$ の４×４の行列を直積を使った方同で求めよ．さらに，求めた各々の行列要素 ($I_Z(i,j)$ は基底 $|1>=|1/2,1/2>, |2>=|1/2,-1/2>, |3>=|-1/2,1/2>, |4>=|-1/2,-1/2>$ を用いて $<i|I_Z|j>$ を計算しても求められることを確認せよ.

解答例）

行列表示は直積展開を用いて

$$
\begin{aligned}
I_Z &= I_{1z} \otimes \mathbf{E} + \mathbf{E} \otimes I_{2z} \\
&= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

となる．ここで $<m_i|I_{iz}|m_i>= m_i$ を用いて，対角成分を考えると，

$$
<1|I_{1z} + I_{2z}|1> \;=\; <\frac{1}{2},\frac{1}{2}|I_{1z} + I_{2z}|\frac{1}{2},\frac{1}{2}>= 1
$$

$$
\begin{aligned}
<2|I_{1z}+I_{2z}|2> &= <\frac{1}{2},-\frac{1}{2}|I_{1z}+I_{2z}|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}>=0 \\
<3|I_{1z}+I_{2z}|3> &= <-\frac{1}{2},\frac{1}{2}|I_{1z}+I_{2z}|-\frac{1}{2},\frac{1}{2}>=0 \\
<4|I_{1z}+I_{2z}|4> &= <-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}|I_{1z}+I_{2z}|-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}>=-1
\end{aligned}
$$

となる．また，$<m_j|I_{iz}|m_i>=0\ \ (j\neq i)$ であるために，非対角成分は０になる．このように，直接行列要素を計算しても，直積展開と同じ結果が得られる．

コメント）

このように直積展開は便利なのですが，例えば，生成される行列の２番目の基底が $|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}>$ なのか $|-\frac{1}{2},\frac{1}{2}>$ なのかはすぐには判らないという欠点があります．問６のコメント参照

5) ２スピン系のスピン演算子 I_xI_z を直積法を用いて 4×4 の行列で表せ．

解答例）

$$
\begin{aligned}
I_{1x}I_{2z} &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\otimes\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

となる．

コメント）

$(I_{1x}\otimes\mathbf{E})(\mathbf{E}\otimes I_{2z})$ でも同じ結果になるでしょう．

6) 高温近似の条件 $\mathcal{H}_0/kT\ll 1$ は $H_0=10$ T のときに何ケルビン以上の温度で成立するか計算せよ．

解答例）

$\mathcal{H}_0/kT\ll 1$ に $\mathcal{H}_0=-\gamma\hbar B_0I_Z\sim\gamma\hbar B_0$ と $B_0=10$ T を各定数 $\hbar,k,\gamma$ と共に代入する．γ に水素の磁気回転比を考えると

$$
\begin{aligned}
\frac{\gamma\hbar B_0}{k} &= \frac{6.626176\times 10^{-34}[\mathrm{Js}]\times 2.67522\times 10^{8}[\mathrm{S}^{-1}\mathrm{T}^{-1}]\times 10[\mathrm{T}]}{1.380662\times 10^{-20}[\mathrm{JK}^{-1}]} \\
&\sim 10^{-3}[\mathrm{K}]
\end{aligned}
$$

反省）
上では γ として ^{1}H の値を入れているのですが，問題にはっきりと ^{1}H の場合と明記すべきだった．

7) ２スピン系や３スピン系での I_Z を直積法で求めて，どの場合でも非対角成分が０であることを確かめよ．

解答例）
２スピン系の場合は問４でやっているので３スピン系の場合を書くと，

$$\begin{aligned} I_Z &= I_{1z}\otimes\mathbf{E}\otimes\mathbf{E}+\mathbf{E}\otimes I_{2z}\otimes\mathbf{E}+\mathbf{E}\otimes\mathbf{E}\otimes I_{3z} \\ &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 3&0&0&0&0&0&0&0\\ 0&1&0&0&0&0&0&0\\ 0&0&1&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&-1&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&1&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&-1&0&0\\ 0&0&0&0&0&0&-1&0\\ 0&0&0&0&0&0&0&-3 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

コメント）
上の行列で (4,4) で-1，(5,5) が+1 となっている．頭で基底を考えると，$|1>$ は全部+1/2 のもの $|1\ >=\ |+1/2,+1/2,+1/2\ >$，２～４は一つだけ-1/2 になっているもの $|2\ >=\ |-1/2,+1/2,+1/2>$ とするのが自然であろう．そのような基底で書いた行列は例えば，上から，$|+++>,|-++>,|+-+>,|++->,|--+>,|-+->,|+-->,|--->$（1/2 は省略した）を基底として

$$I_Z=\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 3&0&0&0&0&0&0&0\\ 0&1&0&0&0&0&0&0\\ 0&0&1&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&1&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&-1&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&-1&0&0\\ 0&0&0&0&0&0&-1&0\\ 0&0&0&0&0&0&0&-3 \end{pmatrix}$$

となるだろう．直積法で自動的に生成した行列の基底の順番は注意しないといけないことが判る．ちなみに行列の基底も直積法で出すことももちろん可能である．例えば，$|+-+>$ の場合は

$$|+-+>=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\\0\\0\\0\\0\end{pmatrix}$$

と与えられ，３列目に対応することが判る．計算すると３スピン系では上から $|+++>$,$|++->, |+-+>, |+-->, |-++>, |-+->, |--+>, |--->$ になっています．
改良点)
問７を問４に含め，行列要素と基底の対応は別の設問にする．基底の求め方も本文に紹介したら良かったかなぁ．

8) 式（5.8）から式（5.9）を導け．

解答例）

$$\frac{d\rho}{dt}=\frac{i}{\hbar}[\rho,\mathcal{H}]$$

ここで，$f=\exp(\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t)\rho$ とおいて，

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}f &= \exp(\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t)\frac{d\rho}{dt}+\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}\exp(\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t)\rho \\
&= \exp(\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t)\frac{i}{\hbar}\rho\mathcal{H}-\exp(\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t)\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}\rho+\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}\exp(\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t)\rho \\
&= \exp(\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t)\rho\frac{i}{\hbar}\mathcal{H} \\
&= f\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}
\end{aligned}$$

この式から，$f=A\exp(\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t)$，ただし A は定数．つまり，$\exp(\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t)\rho=A\exp(\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t)$ となり，

$$\rho=\exp(-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t)A\exp(\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t)$$

を得る．$t=0$ で $\rho(0)=A$ なので,

$$\rho = \exp(-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t)\rho(0)\exp(\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t)$$

9) H_0 と H_1 が交換する（$[H_0, H_1]=0$）なら

$$\exp\{-i(\mathcal{H}_0+\mathcal{H}_1)t\} = \exp(-iH_0t)\exp(-iH_1t) \tag{1}$$

が成り立つことを示せ.

解答例）
右辺を $f(t)$，左辺を $g(t)$ として，各々時間で微分する．

$$\begin{aligned}
f'(t) &= -i(\mathcal{H}_0+\mathcal{H}_1)\exp\{-i(\mathcal{H}_0+\mathcal{H}_1)\}t \\
&= -i(\mathcal{H}_0+\mathcal{H}_1)f(t) \\
g'(t) &= -i\mathcal{H}_0\exp(-i\mathcal{H}_0t)\exp(-i\mathcal{H}_1t)+\exp(-i\mathcal{H}_0t)(-i\mathcal{H}_1)\exp(-i\mathcal{H}_1t) \\
&= -i(\mathcal{H}_0+\mathcal{H}_1)g(t)
\end{aligned}$$

また，$f(0)=g(0)=1$．１階微分が同じで初期値が一致しているから

$$f(t)=g(t)$$

コメント）
右辺と左辺の指数関数をそれぞれテイラー展開して整理しても証明出来る．