物理学とディープラーニング (ゼミ)

B4 柳瀬調知

2023 年 5 月 27 日

5.4.1 2 スピンの問題

(5-22) のように $|\psi\rangle$ をおき、$\hat{H}|\psi\rangle = \epsilon|\psi\rangle$ とおくと、

$$c_1\left(\frac{J}{2}|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2 - \frac{J}{4}|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2\right) + c_2\left(\frac{J}{2}|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2 - \frac{J}{4}|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2\right) = c_1\epsilon|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2 + c_2\epsilon|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2$$

$$\left(-\frac{J}{4}c_1 + \frac{J}{2}c_2\right)|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2 + \left(\frac{J}{2}c_1 - \frac{J}{4}c_2\right)|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2 = c_1\epsilon|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2 + c_2\epsilon|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2$$

となる。2 つの状態の係数について連立方程式が 2 つ立ち、式 (5-23) になる。係数 c_1, c_2 が非自明な解をもつには、ϵ が左辺の行列の固有値であればよいので、

$$\begin{vmatrix} \epsilon + \frac{J}{4} & -\frac{J}{2} \\ -\frac{J}{2} & \epsilon + \frac{J}{4} \end{vmatrix} = 0 \tag{1}$$

となる。これを解くと、$\epsilon = \frac{J}{4}, -\frac{3J}{4}$. 規格化された固有ベクトルは

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{2}$$

となる。よって、式 (5-24) が $\hat{H}$ の固有状態だと分かる。固有値が $\frac{J}{4}$ の 3 つの状態 (トリプレット) と $-\frac{3J}{4}$ の 1 つの状態 (シングレット) がある。強磁性的な場合 $(J<0)$ はトリプレットが、反強磁性的な場合 $(J>0)$ はシングレットが基底状態になる。

例題: 対称性と縮退

2 スピンの Heisenberg 模型で、$\epsilon = \frac{J}{4}$ というエネルギーに、3 つの固有状態が縮退していた。このような縮退がある背後には通常、対称性が隠れている。

まず一般論として、$[\hat{H}, \hat{A}] = 0$ となるような $\hat{A}$ が存在すると仮定する。このとき、$\hat{H}(\hat{A}|\psi_\epsilon\rangle) = \epsilon(\hat{A}|\psi_\epsilon\rangle)$ となるので、$\hat{A}|\psi_\epsilon\rangle$ も $|\psi_\epsilon\rangle$ と縮退した別の固有状態になる可能性がある。

具体的に、2 スピンの Heisenberg 模型のハミルトニアンを考えると、これは $\hat{S}^{\alpha}_{tot}$ と交換する。

$$
\begin{aligned}
[\hat{H}, \hat{S_1^{\alpha}}] &= [J\hat{S_1^{\beta}}\hat{S_2^{\beta}}, \hat{S_1^{\alpha}}] && (3)\\
&= J[\hat{S_1^{\beta}}, \hat{S_1^{\alpha}}]\hat{S_2^{\beta}} && (4)\\
&= i\hbar J\epsilon_{\beta\alpha\gamma}\hat{S_1^{\gamma}}\hat{S_2^{\beta}} && (5)\\
&= i\hbar J(\hat{\boldsymbol{S}}_{\boldsymbol{1}} \times \hat{\boldsymbol{S}}_{\boldsymbol{2}})_{\alpha} && (6)
\end{aligned}
$$

となる。同様に、

$$
\begin{aligned}
[\hat{H}, \hat{S_2^{\alpha}}] &= [J\hat{S_1^{\beta}}\hat{S_2^{\beta}}, \hat{S_2^{\alpha}}] && (7)\\
&= J\hat{S_1^{\beta}}[\hat{S_2^{\beta}}, \hat{S_1^{\alpha}}] && (8)\\
&= i\hbar J\epsilon_{\beta\alpha\gamma'}\hat{S_1^{\beta}}\hat{S_2^{\gamma'}} && (9)\\
&= -i\hbar J(\hat{\boldsymbol{S}}_{\boldsymbol{1}} \times \hat{\boldsymbol{S}}_{\boldsymbol{2}})_{\alpha} && (10)
\end{aligned}
$$

式 (10)+ 式 (13) より、$[\hat{H}, \hat{S}^{\alpha}_{tot}] = 0$ となる。よって、$[\hat{H}, \hat{S}^{\pm}_{tot}] = 0$ も成り立つ。

実際に $|\psi_+\rangle$ に $\hat{S}^{-}_{tot}$ を作用させると、

$$
\begin{aligned}
\hat{S}^{-}_{tot}|\psi_+\rangle &\propto |\psi_0\rangle && (11)\\
\hat{S}^{-}_{tot}|\psi_0\rangle &\propto |\psi_-\rangle && (12)\\
\hat{S}^{-}_{tot}|\psi_-\rangle &= 0 && (13)
\end{aligned}
$$

のように順に別の固有状態が得られる。しかし、$|\psi_-\rangle$ に $\hat{S}^{-}_{tot}$ を作用させても、新たな固有状態が得られることはない。このため、「可能性がある」とした。続いて、$\sigma_y^2 = I$ と $e^{\hat{A}} := 1 + \hat{A} + \dfrac{\hat{A}^2}{2!} + \dfrac{\hat{A}^3}{3!} + \dots$ より、

$$
\begin{aligned}
e^{i\theta\sigma_y} &= 1 + i\theta\sigma_y + \frac{(i\theta\sigma_y)^2}{2!} + \frac{(i\theta\sigma_y)^3}{3!} + \dots && (14)\\
&= \cos\theta I + i\sigma_y \sin\theta && (15)
\end{aligned}
$$

となる。$\theta = \frac{\pi}{4}$ とすると、

$$
e^{i\frac{\pi}{4}\sigma_y} = \cos\frac{\pi}{4} I + i\sigma_y \sin\frac{\pi}{4} \tag{16}
$$

となる。式 (5-33) と式 (5-27) より、

$$
\begin{aligned}
|{\rightarrow}\rangle_j &= e^{-i\frac{\pi}{4}\sigma_y}|{\uparrow}\rangle_j && (17)\\
&= e^{-i\frac{\pi}{2}\hat{S}^y_j}|{\uparrow}\rangle_j && (18)
\end{aligned}
$$

となる。よって、(5-32) が導ける。この式は $+z$ 方向を向いたスピンを y 軸まわりに回転させると $+x$ 方向を向くことを表す。これに対して、

$$
\hat{S}^{\alpha}_{tot}|\phi_0\rangle = 0 \tag{19}
$$

となるから、スピン・シングレットはスピン空間での回転に対して不変である。