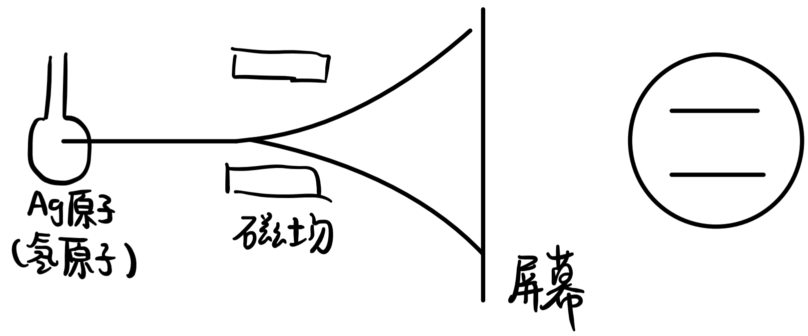
第六章 矩阵力学Ⅱ — 自旋体系

§6.1 自旋

(1) Stern - Gerlach 实验

实验内容 自旋的基本现象

实验装置



实验结果 基态原子在屏幕上呈两条缝

理论解释

基态原子 → 原子波函数 ψ_{nlm} → 基态波函数 ψ_{100}

→ 能量 E_1

角动量 $l(l+1)\hbar^2 = 0$

角动量Z分量 $m\hbar$

任意原子 → 原子波函数 ψ_{nlm}

→ 能量 E_n

角动量 $l(l+1)\hbar^2$

角动量Z分量 $m\hbar$

① 任意状态 角动量 $\vec{L}$ ⊕ → "分子电流" → 角动量磁矩 $\vec{M_L}$

→ 在外磁场下会发生偏转

② 基态 角动量 $\vec{L}$ 为0 → 无"分子电流" → 角动量磁矩 $\vec{M_L}=0$

→ 在外磁场下不会发生偏转

Unlenbech — Goudsmit 提出:

电子除了角动量 $\vec{L}$（绕着原子核转），

还有自旋角动量 $\vec{S}$（绕自己转）→ 有自旋电流 → 有自旋磁矩 $\vec{M_s}$

→ 在外磁场下会发生偏转

(2) Pauli 矩阵力学 描述 自旋

基本表象	矩阵	Dirac 符号	
	$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$	$\vert\uparrow\rangle$	$\chi_{\frac{1}{2}}$
	$\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$	$\vert\downarrow\rangle$	$\chi_{-\frac{1}{2}}$

任意自旋波函数 $|\psi\rangle = \begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix} = c_1|\uparrow\rangle + c_2|\downarrow\rangle$

任意力学量算符 $\hat{F} = \begin{pmatrix}F_{11} & F_{12}\\ F_{22} & F_{22}\end{pmatrix}$

① 自旋角动量 $\hat{\vec{S}}$ 和轨道角动量 $\vec{L}$ 应该有同样的性质

② 自旋角动量 有两个本征值 $\pm\frac{\hbar}{2}$

$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ (Pauli 矩阵)

轨道角动量对易关系 → 自旋角动量应满足的类似关系

$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$ $\qquad$ $[S_x, S_y] = i\hbar S_z$

$[L_y, L_z] = i\hbar L_x$ $\qquad$ $[S_y, S_z] = i\hbar S_x$

$[L_z, L_x] = i\hbar L_y$ $\qquad$ $[S_z, S_x] = i\hbar S_y$

$$\Rightarrow \begin{cases}[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y] = 2i\hat{\sigma}_z\\ [\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z] = 2i\hat{\sigma}_x\\ [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] = 2i\hat{\sigma}_y\end{cases}$$

Pauli 构造了个矩阵 满足对易关系

$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$ $\quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}$ $\quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$

自旋角动量： $\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ $\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ $\hat{S}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

(3) 自旋角动量 $\hat{S}$ 的本征矢问题

① 自旋角动量 $\hat{S}_x$ 的本征问题 $\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_x$

即求 $\hat{\sigma}_x$ 的本征问题

本征方程 $\hat{\sigma}_x \phi = \lambda \phi$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \lambda\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0$$

→ 有解充要条件 $\begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda^2 - 1 = 0$

本征值 $\lambda_1 = 1$ $\lambda_2 = -1$

本征函数 $|\phi_1\rangle^x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

$|\phi_2\rangle^x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

② 自旋角动量 $\hat{S}_y$ 的本征问题 $\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_y$

即求 $\hat{\sigma}_y$ 的本征问题

本征方程 $\hat{\sigma}_y \phi = \lambda \phi$

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \lambda\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -\lambda & -i \\ i & -\lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0$$

有解充要条件 $\begin{vmatrix} -\lambda & -i \\ i & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda^2 - 1 = 0$

本征值 $\lambda_1=1 \quad \lambda_2=-1$

本征函数 $|\phi_1\rangle^y=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}$

$|\phi_2\rangle^y=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix}$

③ 自旋角动量 $\hat{S}_z$ 的本征问题 $\hat{S}_z=\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z$

即求 $\hat{\sigma}_z$ 的本征问题

本征方程 $\hat{\sigma}_z\phi=\lambda\phi$

$$\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}1-\lambda & 0\\ 0 & -1-\lambda\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\end{pmatrix}=0$$

有解充要条件 $\begin{vmatrix}1-\lambda & 0\\ 0 & -1-\lambda\end{vmatrix}=0 \Rightarrow -(\lambda+1)(1-\lambda)=0$

本征值 $\lambda_1=1 \quad \lambda_2=-1$

本征函数 $|\phi_1\rangle^z=\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}$

$|\phi_2\rangle^z=\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}$

* 自旋角动量 $\hat{S}_z$ 本征函数就是空间的基矢 $\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}$

因此表象称之为 $\hat{S}_z$ 表象 $\hat{\sigma}_z$ 表象 自旋z分量表象

(4) 讨论 $\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{n}}=\hat{\sigma}_n$ 力学量算符的本征问题

$\vec{\sigma}=(\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z)$ 自旋 Pauli 矩阵

$\vec{n}=(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta)$ 单位矢量

讨论自旋绕任意"一个"轴旋转

Bloch矢量 $\hat{\sigma}_n=\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{n}}$

$= (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \cdot (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$

$= \sigma_x \sin\theta\cos\varphi + \sigma_y \sin\theta\sin\varphi + \sigma_z \cos\theta$

$= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \sin\theta\sin\varphi + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cos\theta$

$= \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\, e^{-i\varphi} \\ \sin\theta\, e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}$

本征方程 $\hat{\sigma}_n \phi = \lambda \phi$

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\, e^{-i\varphi} \\ \sin\theta\, e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \cos\theta - \lambda & \sin\theta\, e^{-i\varphi} \\ \sin\theta\, e^{i\varphi} & -\cos\theta - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0$$

$\rightarrow$ 有解充要条件 $\begin{vmatrix} \cos\theta - \lambda & \sin\theta\, e^{-i\varphi} \\ \sin\theta\, e^{i\varphi} & -\cos\theta - \lambda \end{vmatrix} = 0$

$$-(\cos^2\theta - \lambda^2) - \sin^2\theta = 0$$

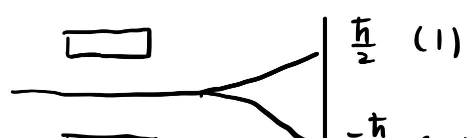
$$\lambda^2 = 1$$

本征值 $\lambda_1 = 1 \qquad \lambda_2 = -1$

本征函数 $|\phi_1\rangle^n = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix}$

$|\phi_2\rangle^n = \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2} \\ -\cos\frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix}$

讨论 $\Phi \quad \hat{S}$



自旋电子

⇒ 自旋磁矩

屏幕

初始态 $|\psi\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$

作用 $\hat\sigma_x$ 算符　　$\hat\sigma_x \psi = \begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$　　非门操作

$$\hat\sigma_n = \begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\, e^{-i\varphi}\\ \sin\theta\, e^{i\varphi} & -\cos\theta\end{pmatrix}$$　　任意门操作

作用 $\hat\sigma_z$ 算符　　$\hat\sigma_z \psi = \begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$

§6.2 自旋动力学

(1) 自旋状态随时间变化

一个固定不动的电子，在外磁场沿 x 方向下

磁势能 $\vec{M_s}\cdot\vec{B} = \frac{e}{m}\vec{S}\cdot\vec{B}$　　（磁矩=荷质比·自旋角动量）

初始时自旋处在沿 z 轴向上的状态，问 t 时刻的自旋状态

自旋 $\hat S_z$ 表象　　$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$　$\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$

任意波函数　　$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix} = c_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + c_2\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$

初始状态　　$|\psi(t=0)\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$

薛定谔方程　　$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat H\psi$

哈密顿量　　$\hat H = \vec{M_s}\cdot\vec B = \frac{e}{m}\vec S\cdot\vec B$

$\vec S\cdot\vec B = \hat S_x\cdot B_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x B_x$　　$(\vec B = B_x\cdot\vec{e_x})$

$\hat H = \frac{e}{m}\vec S\cdot\vec B = \frac{e\hbar B_x}{2m}\hat\sigma_x = \frac{eB_x\hbar}{2m}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$

令 $\omega = \frac{eB_x}{2m}$　则　$\hat H = \hbar\omega\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0&\hbar\omega\\\hbar\omega&0\end{pmatrix}$

代入薛定谔方程　$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}c_1\\ \end{pmatrix} = \hbar\omega\begin{pmatrix}0&1\\ & \end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\ \end{pmatrix}$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix}=\hbar\omega\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix}$$

(矩阵微分方程组)

$$\Rightarrow\begin{cases} i\dfrac{dc_1}{dt}=\omega c_2\\ i\dfrac{dc_2}{dt}=\omega c_1\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}\dfrac{d}{dt}(c_1+c_2)=-i\omega(c_1+c_2)\\ \dfrac{d}{dt}(c_1-c_2)=i\omega(c_1-c_2)\end{cases}$$

令 $\begin{cases}X=c_1+c_2\\Y=c_1-c_2\end{cases}$ 得: $\begin{cases}X=X(0)e^{-i\omega t}\\Y=Y(0)e^{i\omega t}\end{cases}$

$$\therefore\begin{cases}c_1(t)=\dfrac{X(0)e^{-i\omega t}+Y(0)e^{i\omega t}}{2}\\ c_2(t)=\dfrac{X(0)e^{-i\omega t}-Y(0)e^{i\omega t}}{2}\end{cases}\qquad\begin{cases}c_1(0)=1\\c_2(0)=0\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}X(0)=1\\Y(0)=1\end{cases}$$

$$\therefore\begin{cases}c_1(t)=\dfrac{e^{-i\omega t}+e^{i\omega t}}{2}=\cos\omega t\\ c_2(t)=\dfrac{e^{-i\omega t}-e^{i\omega t}}{2}=i\sin\omega t\end{cases}$$

$\therefore$ t时刻波函数 $|\psi\rangle=\begin{pmatrix}\cos\omega t\\-i\sin\omega t\end{pmatrix}=\cos\omega t\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+(-i\sin\omega t)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$

$\hat{S}_z$ 表象

测量 t时刻状态 有2种结果

状态		本征值	几率
$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$	$\|\uparrow\rangle$	$\frac{\hbar}{2}$	$\cos^2\omega t$
$\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$	$\|\downarrow\rangle$	$-\frac{\hbar}{2}$	$\sin^2\omega t$

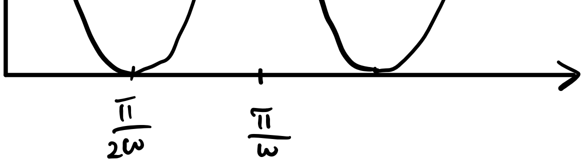
自旋状态处在 $|\uparrow\rangle$ 的概率

Rabi振荡

磁共振

频率 $\omega=\frac{eB_x}{2m}$

周期 $T=$ ...



周期 $T=\frac{\pi}{\omega}$

(2) 第2种方法 自旋哈密顿 $\hat{H}=\hbar\omega\hat{\sigma}_x=\hbar\omega\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$

求解哈密顿量的本征问题

$$\hbar\omega\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix}=E\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}-E&\hbar\omega\\\hbar\omega&-E\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix}=0$$

上述方程有解充要条件 $\begin{vmatrix}-E&\hbar\omega\\\hbar\omega&-E\end{vmatrix}=0$

能量本征值 能量本征函数

$E_1=\hbar\omega$ $|\phi_1\rangle^H=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$

$E_2=-\hbar\omega$ $|\phi_2\rangle^H=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$

能量表象

哈密顿量的本征函数 也满足正交归一性、完备性

即 $|\phi_1\rangle^H$ 和 $|\phi_2\rangle^H$ 也构成空间中的一组基矢,可以展开空间中任意波函数

初始状态 $|\psi(0)\rangle=a_1|\phi_1\rangle^H+a_2|\phi_2\rangle^H$

展开系数 $a_1={}^H\langle\phi_1|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(1\ \ 1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}$

$$a_2={}^H\langle\phi_2|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(1\ \ -1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\therefore|\psi(0)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_1\rangle^H+\frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_2\rangle^H$$

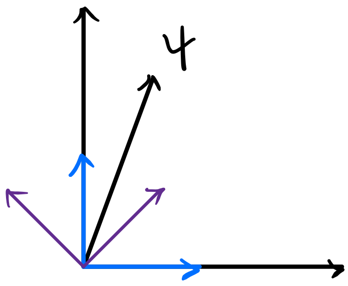
t时刻波函数

$$|\psi(t)\rangle=e^{-\frac{iE_1t}{\hbar}}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_1\rangle^H+e^{-\frac{iE_2t}{\hbar}}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_2\rangle^H$$

$\begin{cases}E_1=\hbar\omega\\E_2=-\hbar\omega\end{cases}$

$$=\frac{1}{2}e^{-i\omega t}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}+\frac{1}{2}e^{i\omega t}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\omega t \\ -i\sin\omega t \end{pmatrix}$$



$|\phi_1\rangle^{z} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ $|\phi_2\rangle^{z} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$

$|\phi_1\rangle^{H} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$ $|\phi_2\rangle^{H} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$

§6.3 两自旋体系

(1) 物理体系 “1”号 “2”号

(2) 基本表象

	单自旋	双自旋
	$\lvert\uparrow\rangle$	$\lvert\uparrow\uparrow\rangle$
		$\lvert\uparrow\downarrow\rangle$
	$\lvert\downarrow\rangle$	$\lvert\downarrow\uparrow\rangle$
		$\lvert\downarrow\downarrow\rangle$

(3) 主要物理量

	单自旋	双自旋
自旋角动量	$\hat{S} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}$	$\hat{S}_1$ $\hat{S}_2$ $\hat{S}_{1z}$ $\hat{S}_{2z}$
		总自旋角动量 $\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$
自旋角动量z分量	$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z$	总自旋角动量z分量 $\hat{S}_z = \hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z}$

自旋角动量 $\hat{S}$ 和轨道角动量 $\hat{L}$ 类似

之前研究 $\hat{L}^2 Y_{lm} = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}$ 轨道角动量平方的本征问题

关注：总自旋角动量平方 $\hat{S}^2=(\hat{S}_1+\hat{S}_2)^2$

总自旋角动量 z 分量 $\hat{S}_z=\hat{S}_{1z}+\hat{S}_{2z}$

(4) 运算规则　　单个自旋算符

① 单个自旋分量的定义

$$\hat{S}=\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}$$

$$\hat{S}_x=\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_x=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_y=\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_y=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_z=\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

② 单个自旋分量的运算结果

$$\hat{\sigma}_x|\uparrow\rangle=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=|\downarrow\rangle$$

$$\hat{\sigma}_x|\downarrow\rangle=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=|\uparrow\rangle$$

$$\hat{\sigma}_y|\uparrow\rangle=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\i\end{pmatrix}=i|\downarrow\rangle$$

$$\hat{\sigma}_y|\downarrow\rangle=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-i\\0\end{pmatrix}=-i|\uparrow\rangle$$

$$\hat{\sigma}_z|\uparrow\rangle=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=|\uparrow\rangle$$

$$\hat{\sigma}_z|\downarrow\rangle=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\-1\end{pmatrix}=-|\downarrow\rangle$$

③ 实际自旋算符

$\hat{\sigma}_{ix}$　　$\hat{\sigma}_{iy}$　　$\hat{\sigma}_{iz}$　表示只作用在第 i 个自旋

④ 两个自旋的矩阵满足直积

$$\hat{\sigma}_{1x}\hat{\sigma}_{2x} = \hat{\sigma}_{1x} \otimes \hat{\sigma}_{2x}$$

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

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

(4) 讨论 $\hat{\vec{S}}^2$ 总角动量平方的本征问题

$$\hat{\vec{S}}^2 \psi = \lambda \psi \qquad \text{算符本征方程}$$

法1 两自旋 $|\uparrow\uparrow\rangle$ $|\uparrow\downarrow\rangle$ $|\downarrow\uparrow\rangle$ $|\downarrow\downarrow\rangle$

Pauli 猜测 $\hat{\vec{S}}^2$ 的本征函数

本征矢 $|\uparrow\uparrow\rangle$ $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$

$|\downarrow\downarrow\rangle$ $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$

$$\hat{\vec{S}}^2 = (\hat{\vec{S}}_1 + \hat{\vec{S}}_2)^2 = \hat{\vec{S}}_1^2 + \hat{\vec{S}}_2^2 + 2\hat{\vec{S}}_1 \hat{\vec{S}}_2$$

$$= \hat{\vec{S}}_1^2 + \hat{\vec{S}}_2^2 + 2\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + 2\hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y} + 2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}$$

第1项 $\hat{\vec{S}}_1^2 = (\frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}_1)^2$

$$= (\frac{\hbar}{2})^2(\hat{\sigma}_{1x}\hat{\sigma}_{1x} + \hat{\sigma}_{1y}\hat{\sigma}_{1y} + \hat{\sigma}_{1z}\hat{\sigma}_{1z})$$

$$\hat{\sigma}_{1x}\hat{\sigma}_{1x} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{I}$$

$$\hat{\sigma}_{1y}\hat{\sigma}_{1y}=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}=\hat{I}$$

$$\hat{\sigma}_{1z}\hat{\sigma}_{2z}=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}=\hat{I}$$

$$\hat{S}_1^2=\frac{\hbar^2}{4}\hat{\sigma}_1^2=\frac{3}{4}\hbar^2\hat{I}$$

同理 $\hat{S}_2^2=\frac{\hbar^2}{4}\hat{\sigma}_2^2=\frac{3}{4}\hbar^2\hat{I}$

第3项 $2\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x}$

第4项 $2\hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y}$

第5项 $2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}$

各项作用于 Pauli 猜测的本征矢（以 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle$ 为例）

第1项 $\hat{S}_1^2\left(\frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\downarrow\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\uparrow\rangle\right)=\frac{3}{4}\hbar^2\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)$

第2项 $\hat{S}_2^2\left(\frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\downarrow\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\uparrow\rangle\right)=\frac{3}{4}\hbar^2\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)$

第3项 $2\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x}\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)$

$$=2\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2\frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow_1\uparrow_2\rangle+|\uparrow_1\downarrow_2\rangle)=2\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)$$

第4项 $2\hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y}\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)$

$$=2\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2\frac{1}{\sqrt{2}}\left(i(-i)|\downarrow_1\uparrow_2\rangle+(-i)i|\uparrow_1\downarrow_2\rangle\right)$$

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

第5项 $2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)$

$$=2\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2\frac{1}{\sqrt{2}}(-|\uparrow_1\downarrow_2\rangle-|\downarrow_1\uparrow_2\rangle)$$

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

因此 $\hat{S}^2\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)$

$$=\frac{3}{4}\hbar^2\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)$$
$$+\frac{3}{4}\hbar^2\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)$$
$$+\frac{1}{2}\hbar^2\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)$$
$$+\frac{1}{2}\hbar^2\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)$$
$$-\frac{1}{2}\hbar^2\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)$$
$$=2\hbar^2\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)$$

同理论证：

$$\hat{S}^2|\uparrow\uparrow\rangle=2\hbar^2|\uparrow\uparrow\rangle$$

$$\hat{S}^2|\downarrow\downarrow\rangle=2\hbar^2|\downarrow\downarrow\rangle$$

$$\hat{S}^2\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle)=0\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle)$$

同时 Pauli 猜测这4个本征矢也为总自旋角动量z分量的本征函数

$$\hat{S}_z\psi=m\psi \qquad (\hat{S}_z=\hat{S}_{1z}+\hat{S}_{2z})$$

可验证：

$$\hat{S}_z|\uparrow\uparrow\rangle=\hbar|\uparrow\uparrow\rangle$$
$$\hat{S}_z|\downarrow\downarrow\rangle=-\hbar|\downarrow\downarrow\rangle$$
$$\hat{S}_z\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)=0\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)$$
$$\hat{S}_z\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle)=0\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle)$$

小结　①基本表象　$|\uparrow\uparrow\rangle$

$|\uparrow\downarrow\rangle$

$|\downarrow\uparrow\rangle$

$|\downarrow\downarrow\rangle$

② 4个运算规则
- 自旋分量
- 自旋分量作用在基矢
- 单个自旋只作用自身空间
- 2个自旋直积

③ 总自旋角动量　$\hat{\vec{S}}^2\psi=\lambda\psi$

总自旋角动量z分量　$\hat{S}_z\psi=m\psi$

4个本征函数	$\hat{\vec{S}}^2$的本征值	$\hat{S}_z$的本征值
$\|\uparrow\uparrow\rangle$	$2\hbar^2$	$\hbar$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\uparrow\downarrow\rangle+\|\downarrow\uparrow\rangle)$	$2\hbar^2$	$0\hbar$
$\|\downarrow\downarrow\rangle$	$2\hbar^2$	$-\hbar$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\uparrow\downarrow\rangle-\|\downarrow\uparrow\rangle)$	$0\hbar^2$	$0\hbar$

法 2

①基本表象　$|\uparrow\uparrow\rangle$　$|\uparrow\downarrow\rangle$　$|\downarrow\uparrow\rangle$　$|\downarrow\downarrow\rangle$

4个基矢　$\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}$　$\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix}$　$\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix}$　$\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}$

② $\hat{\vec{S}}^2$　$\hat{S}_z$ 都是4维空间中的4维矩阵

③　$\hat{\vec{S}}^2\psi=\lambda\psi$　本征方程

$\hat{S}_z\psi = m\psi$ 本征方程

都是 4×4 矩阵的本征方程

4个本征矢

$|\uparrow\uparrow\rangle$ $\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}$ $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$ $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\\1\\0\end{pmatrix}$

$|\downarrow\downarrow\rangle$ $\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}$ $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\\-1\\0\end{pmatrix}$

§ 6.4 量子计算

(1) 量子比特 $|0\rangle$ $|1\rangle$ Dirac 符号

$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ 矩阵力学

$$|\psi\rangle = c_1|0\rangle + c_2|1\rangle$$

(2) 门操作 $\sigma_x = \begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}$

NOT门操作 $\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$

单比特门操作

$$\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \rightarrow \boxed{X} \rightarrow \alpha|1\rangle + \beta|0\rangle$$

$$\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \rightarrow \boxed{} \rightarrow \alpha|0\rangle - \beta|1\rangle$$

$$\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \to \boxed{} \to \alpha\frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}} + \beta\frac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}}$$

双比特门操作

单位矩阵

CNOT
$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

NOT门

当第1个量子比特为|0>时，第2个量子比特执行单位门操作

当第1个量子比特为|1>时，第2个量子比特执行NOT门操作

输入　　　　操作　　　　输出

$$\begin{pmatrix} \end{pmatrix}_N \begin{pmatrix} \end{pmatrix}_{N\times N} = \begin{pmatrix} \end{pmatrix}_N$$

多比特门操作一定可以分解为 单比特门操作和双比特CNOT门操作

(N×N)　　　　(2×2)　　　　(4×4)

(3) 硬件指标

相干时间　　寿命只有ms量级

保真度　　达到理想目标态几率　(最好99%)

电路集成度　　几十个

(4) 程序设计语言

(5) 量子算法

量子物理 小结

德布罗意公式　$E=h\nu$　$P=\frac{h}{\lambda}$

波动力学　$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$

1 写下薛定谔方程
2 变换
3 得到目标函数

无限深方势阱　定态薛定谔方程

$\hat{H}\phi=E\phi$

$\phi_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\pi x}{a})$

1 分区域写下定态薛定谔方程
2 通解
3 边条定系数

$\psi=\sum_n C_n\phi_n$

势垒隧穿　$\hat{H}\phi=E\phi$

1. 分区域
2. 通解（入射、反射、透射）
3. 边条 $\rightarrow\psi\rightarrow$ R.T

谐振子　$\hat{H}\phi=E\phi$

ϕ_n

$E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$

1. 分区域
2. 通解
3. 边条

角动量z分量　$\hat{L}_z\phi=\lambda\phi$

$\lambda_n=m\hbar$

$\phi_n=e^{im\varphi}$

1. 写下本征方程
2. 通解
3. 边条（周期）

角动量平方　$\hat{L}^2Y=EY$

$E_n=l(l+1)\hbar^2$

$Y_{lm}=Y_{lm}(\theta,\varphi)$

1. 写下本征方程
2. 通解　（分离变量）
3. 边条（周期）

氢原子 $\hat{H}\psi = E\psi$

E_n

ψ_{nlm}

1. 写下本征方程
2. 通解 (分离变量)
3. 边条(周期)

矩阵力学 波函数 $\psi = (\quad)$

力学量算符 $\hat{F} = (\quad)$

自旋体系 $\vec{S}\phi = \lambda\phi$

1 写下本征方程
2 本征矢
3 特征值—ψ

自旋动力学 $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$

1 写下薛方程
2 通件
3 初条 → 振荡

两自旋体系 $\vec{S} = \vec{S_1} + \vec{S_2}$

$\hat{S}_z$

本征函数 4个