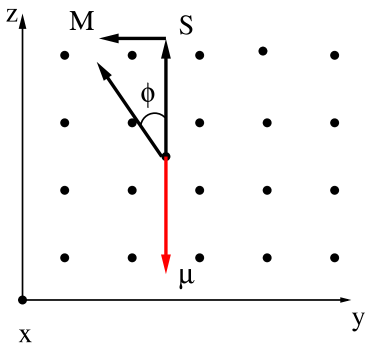

Figure 3.3: 带自旋中性粒子在磁场中的自旋进动.

我们来研究一个带自旋的中性粒子(比如银原子) 在均匀磁场中的运动.

该原子的磁矩为$\vec{\mu}=\frac{-e}{m_e c}\mathbf{S}$. 假设磁场方向为$x$方向. 哈密顿量可以写成

$$H=-\vec{\mu}\cdot\mathbf{B}=\frac{e}{m_e c}\mathbf{S}\cdot\mathbf{B}=\frac{\hbar eB}{2m_e c}\sigma_x=\frac{\hbar\omega_L}{2}\sigma_x. \tag{3.132}$$

其中定义了$\frac{eB}{m_e c}=\omega_L$. 由于粒子没有空间运动，所以略去了动能$p^2/2m$. 又由于角动量的动能$S^2/2I$是常数($S^2=3\hbar^2/4$), 所以有略去了角动能.

从经典力学角度看, 由于磁场均匀, 粒子受力

$$\vec{F}=-\nabla V=\nabla(\vec{\mu}\cdot\mathbf{B})=0. \tag{3.133}$$

即均匀磁场下, 中性粒子不受力, 保持静止或匀速运动. 但是它会受力矩$\mathbf{M}=\vec{\mu}\times\mathbf{B}$作用, 导致角动量变化

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt}=\vec{\mu}\times\mathbf{B}. \tag{3.134}$$

由于力矩方向始终垂直于自旋角动量的方向, 所以角动量大小不变, 只改变方向.

如果自旋方向在0时刻指向z方向, 即$\mathbf{S}=(0,0,\hbar/2)$. 在$y-z$平面内, 角动量矢量会受逆时针力矩而转动, 角速度为ω_L:

$$|S|\frac{d\phi}{dt}=|S|\omega_L \tag{3.135}$$

其中ω_L是磁场强度B的函数. 方程的解为

$$\phi(t)=\omega_L t+\phi(0) \tag{3.136}$$

我们选定z方向为$\phi=0$的方向，则$\phi(0)=0$. 于是

$$S_z(t)=\frac{\hbar}{2}\cos(\omega_L t),\quad S_y(t)=-\frac{\hbar}{2}\sin(\omega_L t),\quad S_x(t)=0. \tag{3.137}$$

下面我们运用量子力学来研究这个问题.

初始条件为: $|\alpha(0)\rangle=|S_z,+\rangle$. 这表示$S_z=\hbar/2$. (但$S_x,S_y$并不确定. 因为不是$S_x,S_y$的本征态. 量子力学也不允许它们同时确定).

设t时刻态演化成$|\alpha(t)\rangle=c_1(t)|+\rangle+c_2(t)|-\rangle$, 满足$S-eq$, 在$S_z$表象下写为以下矩阵方程

$$i\hbar\begin{pmatrix}\dot{c_1}\\ \dot{c_2}\end{pmatrix}=\frac{\hbar\omega_L}{2}\begin{pmatrix}0, & 1\\ 1, & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\end{pmatrix}. \tag{3.138}$$

容易解出

$$c_1 \quad = ae^{\frac{i\omega_L t}{2}} + be^{\frac{-i\omega_L t}{2}} \tag{3.139}$$
$$c_2 \quad = -ae^{\frac{i\omega_L t}{2}} + be^{\frac{-i\omega_L t}{2}} \tag{3.140}$$

其中a, b是待定系数，需要根据初始条件确定:

$$a + b = 1, \qquad b - a = 0. \tag{3.141}$$

因此

$$|\alpha(t)\rangle = \cos(\omega_L t/2)|+\rangle - i\sin(\omega_L t/2)|-\rangle. \tag{3.142}$$

写成S_z表象下列矢量

$$\begin{pmatrix} \cos(\omega_L t/2) \\ -i\sin(\omega_L t/2) \end{pmatrix}. \tag{3.143}$$

我们还可以有**第二种解法**.

先求解H的本征方程,

$$H|E\rangle = E|E\rangle. \tag{3.144}$$

容易知道, $E_{1,2} = \pm\frac{\hbar\omega_L}{2}$, $|E_1\rangle$和$|E_2\rangle$ 分别对应S_x两个本征态$|S_x, +\rangle, |S_x, -\rangle$. （也可以写成$|+, x\rangle, |-, x\rangle$).

将初始状态展开成H本征态的叠加,

$$|+\rangle = c_1|+, x\rangle + c_2|-, x\rangle. \tag{3.145}$$

求出

$$c_1 = \langle +, x|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, c_2 = \langle -, x|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}. \tag{3.146}$$

于是,下面的矢量必然满足薛定谔方程:

$$|\alpha(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-iE_1 t/\hbar}|+, x\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-iE_2 t/\hbar}|-, x\rangle \tag{3.147}$$

在S_z表象下, 就是(3.143).

利用求出的态矢我们可以计算力学量平均值:

$$\langle S_x\rangle = \langle\alpha(t)|S_x|\alpha(t)\rangle = \frac{\hbar}{2}\frac{1}{2} - \frac{\hbar}{2}\frac{1}{2} = 0 \tag{3.148}$$

这个计算也可以利用矩阵在S_z表象里进行

$$\langle S_x\rangle = (\cos(\omega_L t/2), i\sin(\omega_L t/2))\begin{pmatrix} 0, & \hbar/2 \\ \hbar/2, & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos(\omega_L t/2) \\ -i\sin(\omega_L t/2) \end{pmatrix} = 0. \tag{3.149}$$

同样, 利用(3.142)和测量原理

$$\langle S_z\rangle = \frac{\hbar}{2}\cos(\omega_L/2)^2 - \frac{\hbar}{2}\sin(\omega_L/2)^2 = \frac{\hbar}{2}\cos(\omega_L t) \tag{3.150}$$

或者直接利用期望值公式

$$\begin{aligned} \langle S_z\rangle &= \langle\alpha(t)|S_z|\alpha(t)\rangle \\ &= \langle\alpha(t)|(\frac{\hbar}{2}\cos(\omega_L t/2)|+\rangle - \frac{\hbar}{2}(-i\sin(\omega_L t/2))|-\rangle) \\ &= \frac{\hbar}{2}\cos(\omega_L t) \end{aligned} \tag{3.151}$$

类似地我们容易算出

$$\langle S_y \rangle = -\frac{\hbar}{2}\sin(\omega_L t) \tag{3.152}$$

我们看到期望值与经典力学的结果是一致的!

那么我们能得到什么超出经典力学预期的结论呢?

量子力学的测量原理告诉我们, 测量S_z, 我们不会得到$\frac{\hbar}{2}\cos(\omega_L t)$. 我们只能以几率$\cos^2(\omega_L t/2)$得到$\hbar/2$, 以几率$\sin^2(\omega_L t/2)$得到$-\hbar/2$.

如果测量S_x, 测值是$\hbar/2, -\hbar/2$, 相应几率都是$1/2$.

如果测量S_y，同样测值是$\pm\hbar/2$, 几率是多大?

此外我们还有一个发现:

$\langle \mathbf{S} \rangle = (\langle S_x \rangle, \langle S_y \rangle, \langle S_z \rangle)$的周期是$\frac{2\pi}{\omega_L}$. 但是态矢量$|\alpha(t)\rangle$的周期是$\frac{4\pi}{\omega_L}$！即角动量期望值旋转一圈，态矢并没有回到初态。两圈之后，态矢才回到初态！这是另一个可以通过实验观测到的量子力学效应。

3.7 表象变换

我们以自旋为例说明表象变换。

考虑任意一个自旋状态$|\alpha\rangle$, 可以展开成S_z的本征矢的叠加，也可以展开成S_x的本征矢的叠加。

$$|\alpha\rangle = c_1|+\rangle + c_2|-\rangle = c_1'|+,x\rangle + c_2'|-,x\rangle \tag{3.153}$$

可借助图3.4理解这个展开。

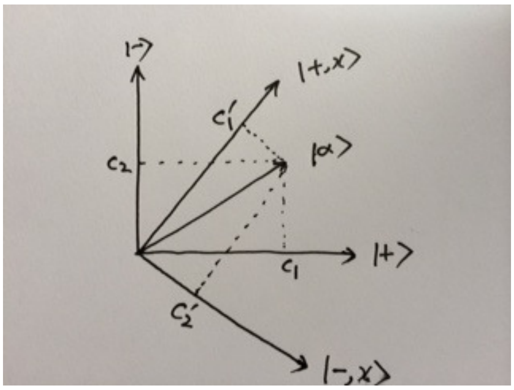

Figure 3.4: 自旋状态的展开

其中

$$\begin{aligned} c_1' &= \langle +,x|\alpha\rangle = \langle +,x|c_1|+\rangle + \langle +,x|c_2|-\rangle \\ c_2' &= \langle -,x|\alpha\rangle = \langle -,x|c_1|+\rangle + \langle -,x|c_2|-\rangle \end{aligned} \tag{3.154}$$

改写为

$$\begin{pmatrix} c_1' \\ c_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle +,x|+\rangle & \langle +,x|-\rangle \\ \langle -,x|+\rangle & \langle -,x|-\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \tag{3.155}$$

这就给出了从S_z**表象到**S_x**表象的变换矩阵**。

利用变换矩阵可以方便地计算。比如一个态矢在S_z表象下的列矢表示为$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, 它在$S_x$表象下的表示是什么?

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{3.156}$$

一般情况：设$|a_i\rangle, i = 1, 2, \cdots$ 是力学量A的本征矢, 作为基矢，即A表象。设$|b_i\rangle, i = 1, 2, \cdots$ 是力学量B的本征矢, 作为基矢，即B表象。

任意一个状态$|\alpha\rangle$

$$|\alpha\rangle = \sum_i c_i^{(A)}|a_i\rangle = \sum_j c_j^{(B)}|b_j\rangle \tag{3.157}$$

插入完备性关系

$$|\alpha\rangle = \sum_i c_i^{(A)}(\sum_j |b_j\rangle\langle b_j|)|a_i\rangle = \sum_j(\sum_i \langle b_j|a_i\rangle c_i^{(A)})|b_j\rangle \tag{3.158}$$

因此

$$c_j^{(B)} = \sum_i \langle b_j|a_i\rangle c_i^{(A)} \tag{3.159}$$

或者

$$c_i^{(B)}=\sum_j\langle b_i|a_j\rangle c_j^{(A)} \tag{3.160}$$

定义矩阵$S_{ij}=\langle b_i|a_j\rangle$为**从表象A到表象B的变换矩阵**. 它的**厄密共轭矩阵**记为$S^\dagger$. 自然满足

$$(S^\dagger)_{ij}=(S_{ji})^*=\langle b_j|a_i\rangle^*=\langle a_i|b_j\rangle \tag{3.161}$$

正是从B表象到A表象的变换矩阵。更严格地

$$S_{ij}^{(A\to B)}=\langle b_i|a_j\rangle \tag{3.162}$$

而

$$S_{ij}^{(B\to A)}=\langle a_i|b_j\rangle=(S^{(A\to B)})_{ij}^\dagger \tag{3.163}$$

关键在于矩阵元的计算中，'新的基矢'取为左矢，'旧'的基矢作为右矢。

特别是，我们注意到$(S^\dagger)_{ij}=\langle a_i|b_j\rangle$是B表象的基矢$|b_j\rangle$在A表象下列矢的第i个元素. 设

$$|b_j\rangle=\begin{pmatrix}c_1(j)\\c_2(j)\\.\\.\\.\\c_N(j)\end{pmatrix} \tag{3.164}$$

所以

$$S^\dagger=\begin{pmatrix}c_1(1)&c_1(2)&\cdots&c_1(N)\\c_2(1)&c_2(2)&\cdots&c_2(N)\\.&&\cdots&.\\.&&\cdots&.\\.&&\cdots&.\\c_N(1)&c_N(2)&\cdots&c_N(N)\end{pmatrix},\qquad S=\begin{pmatrix}c_1^*(1)&c_2^*(1)&\cdots&c_N^*(1)\\c_1^*(2)&c_2^*(2)&\cdots&c_N^*(2)\\.&&\cdots&.\\.&&\cdots&.\\.&&\cdots&.\\c_1^*(N)&c_2^*(N)&\cdots&c_N^*(N)\end{pmatrix} \tag{3.165}$$

容易证明$S^\dagger S=SS^\dagger=1$:

$$(S^\dagger S)_{ik}=\sum_j S_{ij}^\dagger S_{jk}=\sum_j\langle a_i|b_j\rangle\langle b_j|a_k\rangle=\langle a_i|a_j\rangle=\delta_{ik} \tag{3.166}$$

这个性质称为S是**幺正变换**(Unitary)。

一个算符的矩阵也是依赖于表象的。它在两个表象间怎么变换（从A到B）？

Q在B表象的矩阵元$Q_{i,j}^{(B)}=\langle b_i|Q|b_j\rangle$可以写为

$$Q_{i,j}^{(B)}=\langle b_i|Q|b_j\rangle=\sum_{i,j}\langle b_i|a_k\rangle\langle a_k|Q|a_l\rangle\langle a_l|b_j\rangle=\sum_{k,l}S_{ik}Q_{kl}^{(A)}S_{lj}^\dagger \tag{3.167}$$

简写为矩阵形式

$$Q^{(B)}=SQ^{(A)}S^\dagger \tag{3.168}$$

例如：σ_y在S_z表象下的矩阵$\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$.

在S_x 表象下:

$$\sigma_y=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt2}&\frac{1}{\sqrt2}\\\frac{1}{\sqrt2}&-\frac{1}{\sqrt2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt2}&\frac{1}{\sqrt2}\\\frac{1}{\sqrt2}&-\frac{1}{\sqrt2}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&i\\-i&0\end{pmatrix} \tag{3.169}$$

注意在这个变换中，$S=S^\dagger$.