角动量算符

$$x = r\sin\theta\cos\varphi,\quad y = r\sin\theta\sin\varphi,\quad z = r\cos\theta;$$
$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2,\quad \cos\theta = \frac{z}{r},\quad \tan\varphi = \frac{y}{x}.$$

球坐标系

$$\left.\begin{aligned}
\hat{L}_x &= y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right),\\
\hat{L}_y &= z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right),\\
\hat{L}_z &= x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right).
\end{aligned}\right\}$$

$$\left.\begin{aligned}
\hat{L}_x &= \mathrm{i}\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),\\
\hat{L}_y &= -\mathrm{i}\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),\\
\hat{L}_z &= -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi};
\end{aligned}\right\}$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2\left[\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + \left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)^2 + \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\right].$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right].$$

课本P55-58

角动量算符

角动量算符的各分量互相不对易！

Lx Ly Lz不可同时观测

但$\hat{L}^2$和$\hat{L}_z$可以同时观测（注意z的选取是任意的）

课本P55-58

角动量算符

$\hat{L}^2$和$\hat{L}_z$的共同本征值与本征函数：

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta,\varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$Y_{lm}(\theta,\varphi)= Ne^{im\varphi}P_\ell^m(\cos\theta)$ 球谐函数

下面列出前面几个球谐函数：

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}},$$

$$Y_{1,1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\varphi} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x+iy}{r},$$

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r},$$

$$Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{-i\varphi} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x-iy}{r},$$

$$Y_{2,2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{2i\varphi} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\left(\frac{x+iy}{r}\right)^2,$$

$$Y_{2,1} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{i\varphi} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\frac{(x+iy)z}{r^2},$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\frac{(2z^2-x^2-y^2)}{r^2},$$

$$Y_{2,-1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{-i\varphi} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\frac{(x-iy)z}{r^2},$$

$$Y_{2,-2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{-2i\varphi} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\left(\frac{x-iy}{r}\right)^2.$$

角动量的量子化（离散化）

$$l = 0,1,2,\ldots$$
$$m = -l, -(l-1), \ldots, (l-1), l$$

$\hat{L}^2$算符与本征值$l(l+1)\hbar^2$对应的本征态的的简并度： $2l+1$

课本P55-58

2.6 自旋与二能级体系

1. 电子自旋

   自旋表征了电子的内部状态，是独立于位置的运动变量

   $[S_x, S_y] = i\hbar S_z$， $[S_y, S_z] = i\hbar S_x$， $[S_z, S_x] = i\hbar S_y$， $[S_z, S^2] = 0$

   对于电子： $S^2 = \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)\hbar^2$， $S_z = \pm\frac{1}{2}\hbar$， $\hat{S}^2$和S_z的共同本征态是电子内部状态的一组基矢

   如果只考虑自旋，电子状态是一个二维矢量空间（Hilbert空间）

2.6 自旋与二能级体系

2. 泡利矩阵
   ① 给定维度的厄米矩阵构成一个实矢量空间
   ② 2*2厄米矩阵空间的基： $I=\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{bmatrix}$, $\sigma_x=\begin{bmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{bmatrix}$, $\sigma_y=\begin{bmatrix}0 & -i\\i & 0\end{bmatrix}$, $\sigma_z=\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{bmatrix}$
   ③ $\sigma_x^2=\sigma_y^2=\sigma_z^2=-i\sigma_x\sigma_y\sigma_z=I$
   ④ $[\sigma_x,\sigma_y]=2i\sigma_z$，$[\sigma_y,\sigma_z]=2i\sigma_x$，$[\sigma_z,\sigma_x]=2i\sigma_y$，$\{\sigma_x,\sigma_y\}=\{\sigma_y,\sigma_z\}=\{\sigma_z,\sigma_x\}=0$
   ⑤ $S_x=\frac{\hbar}{2}\sigma_x$，$S_y=\frac{\hbar}{2}\sigma_y$，$S_z=\frac{\hbar}{2}\sigma_z$
   ⑥ 验证：σ_x，σ_y，σ_z的本征值是± 1，对应于S_x，S_y，S_z只能取$\pm\hbar/2$两个本征值
   ⑦ 本征态：$\psi_x^+=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$, $\psi_x^-=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix}$, $\psi_y^+=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\i\end{bmatrix}$, $\psi_y^-=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\-i\end{bmatrix}$, $\psi_z^+=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$, $\psi_z^-=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$
   ⑧ $\vec{\sigma}$矢量

2.6 自旋与二能级体系

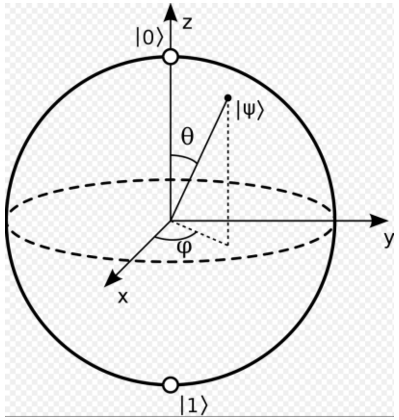
3. Bloch球面

① 自旋算符（矢量）：$\boldsymbol{S}=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}=\frac{\hbar}{2}\left(\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z\right)$

② 任意方向矢量：$\boldsymbol{n}=\left(n_x,n_y,n_z\right)=(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta)$

③ 自旋在该方向的投影：$S_n=\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n}$

④ 本征值$\pm\hbar/2$，其中$\hbar/2$对应的本征态为$\begin{bmatrix} e^{-i\frac{\varphi}{2}}\cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\frac{\varphi}{2}}\sin\frac{\theta}{2} \end{bmatrix}$



4. 拉莫进动

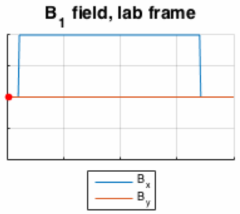
① 自旋与磁矩的关系：$\boldsymbol{\mu}=-g_s\mu_B\frac{\boldsymbol{S}}{\hbar}=-g_s\mu_B\frac{\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}}{\hbar}=-\frac{1}{2}g_s\mu_B\boldsymbol{\sigma}$

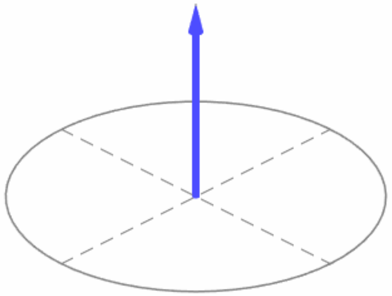
② 外磁场下的哈密顿量：

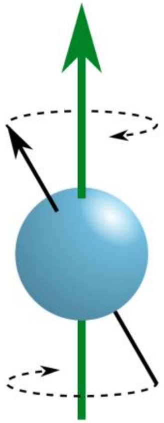
$\hat{H}=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=\frac{1}{2}g_s\mu_B\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\sigma}=\frac{1}{2}g_s\mu_B B\sigma_z\equiv\frac{1}{2}\hbar\omega\sigma_z$ (磁场方向为z)

③ 解薛定谔方程：任意方向的自旋状态$\begin{bmatrix} e^{-i\frac{\varphi+\omega t}{2}}\cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\frac{\varphi+\omega t}{2}}\sin\frac{\theta}{2} \end{bmatrix}$，$\omega=\frac{g_s\mu_B}{\hbar}B$

④ 经典理解；与陀螺进动的类比







2.6 自旋与二能级体系

5. 自旋的历史
   ① 泡利：电子的能态数应该乘以2，与某种隐藏的旋转有关
   ② 1925 乌伦贝克、古兹密特：这种隐藏的旋转可以认为对应于电子的自转
   ③ 1928 狄拉克：狄拉克方程
      a. 相对论质能关系：
      $E^2 = m^2c^4 + p^2c^2$，$E = mc^2(1+\frac{p^2}{m^2c^2})^{1/2} \cong mc^2\left(1+\frac{p^2}{2m^2c^2}\right) = mc^2 + \frac{p^2}{2m} \sim \frac{p^2}{2m}$
      b. 薛定谔方程：$\hat{H} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$，$\hat{p}_j = -i\hbar\frac{\partial}{\partial r_j}$ 加上相对论质能关系
      c. 强行要求一阶方程的形式关于时间和空间对称：方程的系数成为矩阵，态矢空间具有内部维度

2.6 自旋与二能级体系

6. 包含自旋的量子态

① 态矢空间维度加倍，算符对应的矩阵阶数也加倍

位置表象下：波函数：$\psi'(x,s_z)=\begin{bmatrix}\psi_1(x)\\ \psi_2(x)\end{bmatrix}$

② 自旋与位置没有耦合（自旋轨道耦合）时：哈密顿算符对应的矩阵是直积（克罗内克积）

$$\hat{H}'=\begin{bmatrix}\hat{H}'_{11} & \hat{H}'_{12}\\ \hat{H}'_{21} & \widehat{H}'_{22}\end{bmatrix}=\left(aI+b\sigma_x+c\sigma_y+d\sigma_z\right)\otimes\hat{H}$$

从而波函数也可以表达成直积的形式$\psi'(x,s_z)=\begin{bmatrix}s_1\\ s_2\end{bmatrix}\psi(x)$

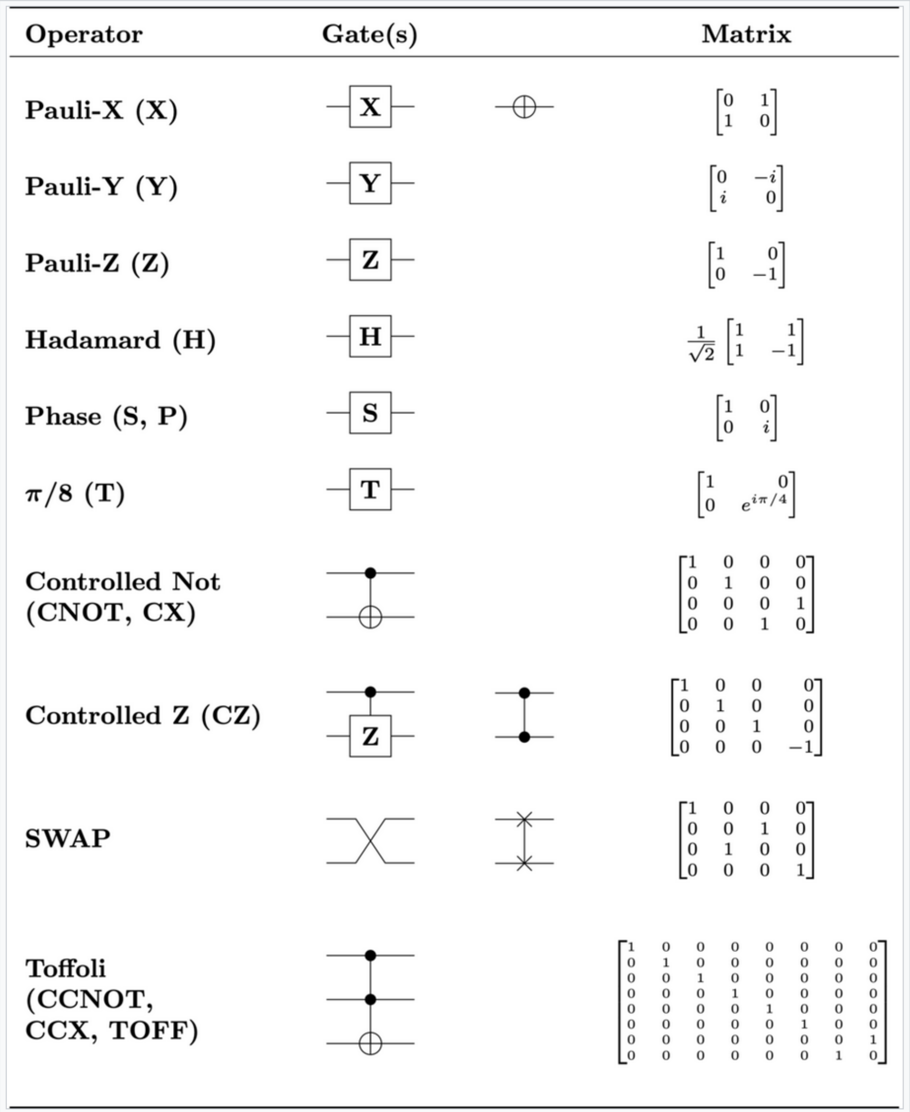
③ 自旋轨道耦合简介

④ 存在自旋轨道耦合的情况：例如Rashba Hamiltonian

$$\hat{H}_R=\alpha(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{p})\cdot\hat{\boldsymbol{z}}$$

2.6 自旋与二能级体系

7. 量子计算简介
   ① 经典比特与逻辑
   ② n qubit ~ 2^n 经典比特
      代价：结果是几率的
   ③ 量子逻辑门
   ④ 量子纠缠与测量
   ⑤ 消相干



Operator	Gate(s)	Matrix
Pauli-X (X)	X	$\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}$
Pauli-Y (Y)	Y	$\begin{bmatrix}0&-i\\i&0\end{bmatrix}$
Pauli-Z (Z)	Z	$\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}$
Hadamard (H)	H	$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1&1\\1&-1\end{bmatrix}$
Phase (S, P)	S	$\begin{bmatrix}1&0\\0&i\end{bmatrix}$
$\pi/8$ (T)	T	$\begin{bmatrix}1&0\\0&e^{i\pi/4}\end{bmatrix}$
Controlled Not (CNOT, CX)		$\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\end{bmatrix}$
Controlled Z (CZ)	Z	$\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&-1\end{bmatrix}$
SWAP		$\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\0&0&0&1\end{bmatrix}$
Toffoli (CCNOT, CCX, TOFF)		$\begin{bmatrix}1&0&0&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0&0&0\\0&0&0&1&0&0&0&0\\0&0&0&0&1&0&0&0\\0&0&0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&1\\0&0&0&0&0&0&1&0\end{bmatrix}$

Common quantum logic gates by name (including abbreviation), circuit form(s) and the corresponding unitary matrices.

2.6 自旋与二能级体系

8. 自旋电子学简介
   ① 电子自旋导致宏观磁矩
   ② 宏观磁矩的交换相互作用导致磁性
   ③ 各向异性与剩磁——非易失特性

2.6 自旋与二能级体系

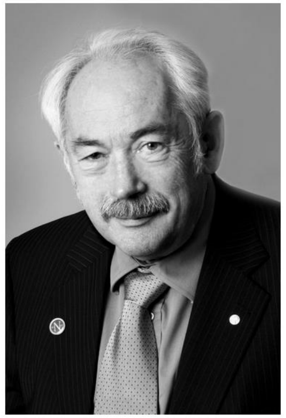
8. 自旋电子学简介

① 电子自旋导致宏观磁矩
② 宏观磁矩的交换相互作用导致磁性
③ 各向异性与剩磁——非易失特性
④ 巨磁电阻：Fert & Grunberg 1988

铁磁层1
铁磁层2

The Nobel Prize in Physics 2007

Albert Fert
Prize share: 1/2

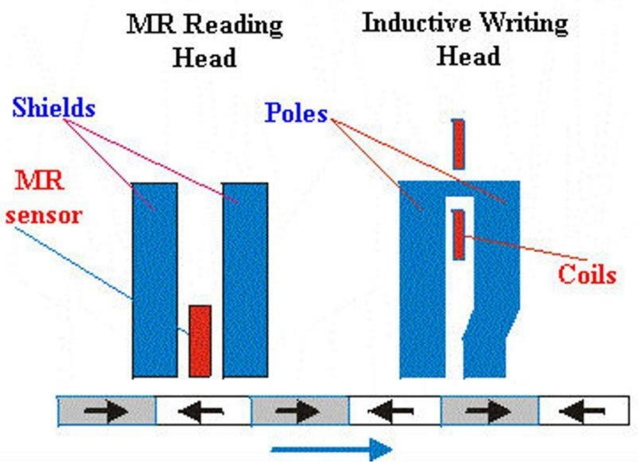


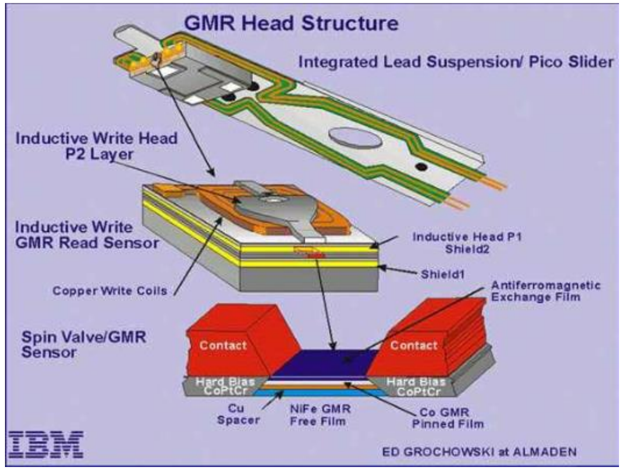
Peter Grünberg
Prize share: 1/2

2.6 自旋与二能级体系

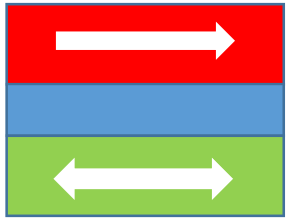
8. 自旋电子学简介

高密度机械硬盘





2019全球硬盘市值约600亿美元

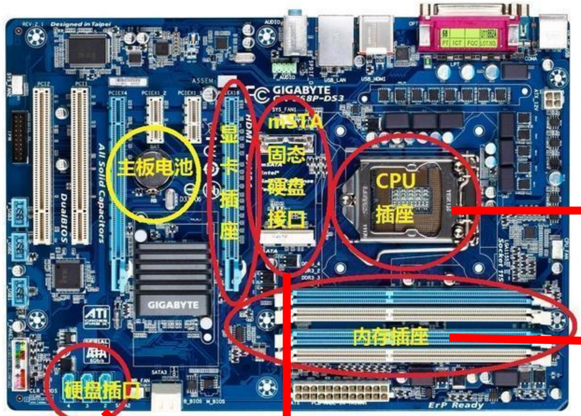


2.6 自旋与二能级体系

8. 自旋电子学简介
   ① 电子自旋导致宏观磁矩
   ② 宏观磁矩的交换相互作用导致磁性
   ③ 各向异性与剩磁——非易失特性
   ④ 巨磁电阻：Fert & Grunberg 1988
   ⑤ STT & SOT
   ⑥ MRAM

2.6 自旋与二能级体系

8. 自旋电子学简介



SRAM 静态随机存储器

DRAM 动态随机存储器

读写速度快

SSD：浮栅存储器

数据断电保持：非易失

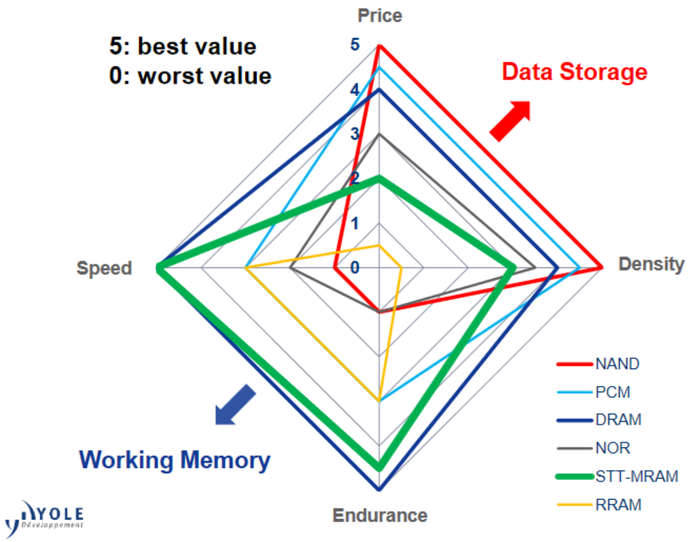
HDD：机械硬盘

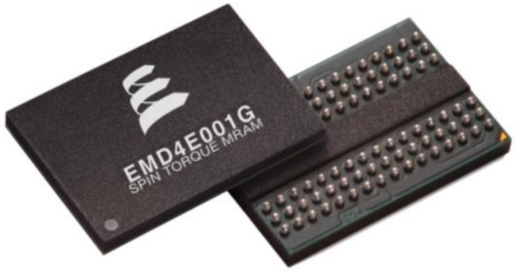
自旋电子器件

MRAM

2.6 自旋与二能级体系

8. 自旋电子学简介





STT-MRAM

预期到2029年全球市值达到200亿美元