16：二维系统的旋转矩阵

#Quantum_Mechanics

我们现在给一个例子，考虑最简单的二能级系统，之前我们已经说过，系统的自旋算符是：

$$S_x = \left(\frac{\hbar}{2}\right)(|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|)$$

$$S_y = \left(\frac{\hbar}{2}\right)(-|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|)$$

$$S_z = \left(\frac{\hbar}{2}\right)(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|)$$

注意：S_i 也满足与角动量算符很相似的对易关系（说白了，一个粒子有自旋，其实我们就是在说它有自旋的角动量）：

$$[S_i, S_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k$$

如果我们把态矢量来一个旋转，也就是作用一个 $\mathscr{D}_z(\phi)$（当然，这里的生成元从角动量算符换成了自旋算符），我们自然会看到：

$$\langle S_x\rangle \to \langle\alpha_R|S_x|\alpha_R\rangle = \langle S_x\rangle\cos\phi - \langle S_y\rangle\sin\phi,\ \langle S_y\rangle \to \langle S_y\rangle\cos\phi + \langle S_x\rangle\sin\phi$$

而由于 S_z 和自身对易，所以 $\langle S_z\rangle$ 不会变化。换言之，我们看到的是自旋的期望（注意这是个矢量！）沿着 z 轴旋转。
现在我们考虑绕着 z 轴的旋转作用在一般态矢上会发生什么。令 $|\alpha\rangle = |+\rangle\langle+|\alpha\rangle + |-\rangle\langle-|\alpha\rangle$，那么我们可以注意到：

$$\exp\left(-\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right)|\alpha\rangle = \exp\left(-\frac{i\phi}{2}\right)|+\rangle\langle+|\alpha\rangle + \exp\left(\frac{i\phi}{2}\right)|-\rangle\langle-|\alpha\rangle$$

我们发现，取 $\phi = 2\pi$ 时，竟然有 $|\alpha\rangle \to -|\alpha\rangle$。

我们再次看看之前提到过的 $\frac{1}{2}$ 原子的自旋进动问题。考虑到粒子的哈密顿量和时间演化算符：

$$H = -\left(\frac{e}{m_e c}\right)S\cdot B = \omega S_z \quad \mathscr{U}(t,0) = \exp\left(-\frac{iS_z\omega t}{\hbar}\right)$$

很容易得到:

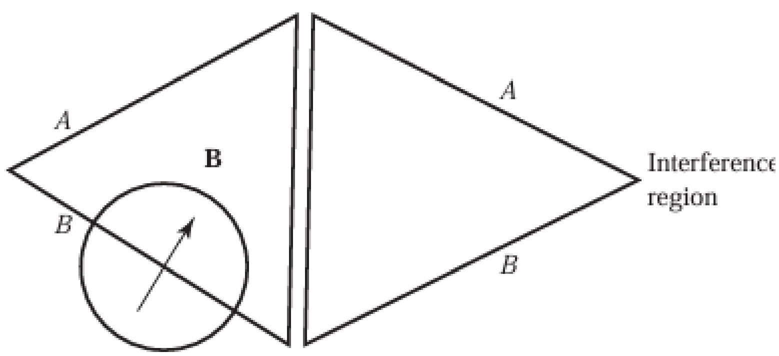
$$\langle S_x\rangle_t=\langle S_x\rangle_0\cos\omega t-\langle S_y\rangle_t\sin\omega t\quad\langle S_y\rangle_t=\langle S_y\rangle_0\cos\omega t+\langle S_x\rangle_t\sin\omega t\quad\langle S_z\rangle_t=\langle S_z\rangle_0$$

以及态矢的演化:

$$|\alpha\rangle=\exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right)|+\rangle\langle+|\alpha\rangle+\exp\left(\frac{i\omega t}{2}\right)|-\rangle\langle-|\alpha\rangle$$

因此可以观察到态矢平均值变化的周期(自旋进动的周期)$T_{precession}=\dfrac{2\pi}{\omega}$,而态矢变化的周期 $T_{stateket}=\dfrac{4\pi}{\omega}$。

众所周知,如果宇宙中的态矢全都乘以一个负号,那么我们其实观测不到任何效应。我们需要检查出这个负号呢?这只能通过干涉来检查。如图,一束粒子分成两份,一份经过磁场,而另一份不通过:



通过控制粒子束通过磁场的时间 T,两束粒子之间存在相位差 $\exp\left(\mp\dfrac{i\omega T}{2}\right)$,检测到的振幅就正比于 $\cos\left(\dfrac{\mp\omega T}{2}+\delta\right)$.

接下来我们要引入所谓泡利矩阵。之前我们说过可以使用具体的矢量来表示态,具体的矩阵来表示算符。对于 $\dfrac{1}{2}$ 自旋系统,基底可以是:

$$|+\rangle=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=\chi_+\quad|-\rangle=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=\chi_-$$

由于 S_x,S_y,S_z 都各有四个元素,那么我们将 $\langle\pm|S_k|\pm\rangle$ 这四个值作为泡利矩阵的元素,这样,自旋的平均值可以写为:

$$\langle S_k\rangle=\langle\alpha|S_k|\alpha\rangle=\sum_{a'=+,-}\sum_{a''=+,-}\langle\alpha|a'\rangle\langle a'|S_k|a''\rangle\langle a''|\alpha\rangle=\left(\frac{\hbar}{2}\right)\chi^\dagger\sigma_k\chi$$

其中 χ 是一个一般态矢的矢量表示。三个泡利矩阵的具体形式是:

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

泡利矩阵有如下性质：

$$\sigma_i^2 = I \quad \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 0 \Rightarrow \{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}$$

另外，泡利矩阵之间也有对易关系：

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k$$

其他性质：

$$\sigma_i^\dagger = \sigma_i \quad \det(\sigma_i) = -1 \quad \mathrm{Tr}(\sigma_i) = 0$$

考虑：

$$\sigma \cdot a = \sum_i \sigma_i a_i = \begin{bmatrix} +a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & -a_3 \end{bmatrix}$$

其中，a 是一个三维的矢量， 注意这里有泡利矩阵的重要性质：

$$(\sigma \cdot a)(\sigma \cdot b) = a \cdot b + i\sigma(a \times b)$$

使用上面的对易关系很容易证明这一点：

$$\begin{aligned}
&\sum_j \sigma_j a_j \sum_k \sigma_k b_k \\
&\qquad = \sum_j \sum_k \left(\frac{1}{2}\{\sigma_j, \sigma_k\} + \frac{1}{2}[\sigma_j, \sigma_k]\right) a_j b_k \\
&\qquad = \sum_j \sum_k (\delta_{jk} + i\epsilon_{jkl}\sigma_l) a_j b_k \\
&\qquad = a \cdot b + i\sigma(a \times b)
\end{aligned}$$

那么，如果 a 的各个分量都是实数，我们很容易得到：

$$(\sigma \cdot a)^2 = |a|^2$$

有了上面的讨论，我们再把目光拉回旋转算符 $\mathscr{D}(\hat{n}, \phi)$：

$$\exp\left(-\frac{S \cdot \hat{n}\phi}{\hbar}\right) = \exp\left(-\frac{i\sigma \cdot \hat{n}\phi}{2}\right)$$

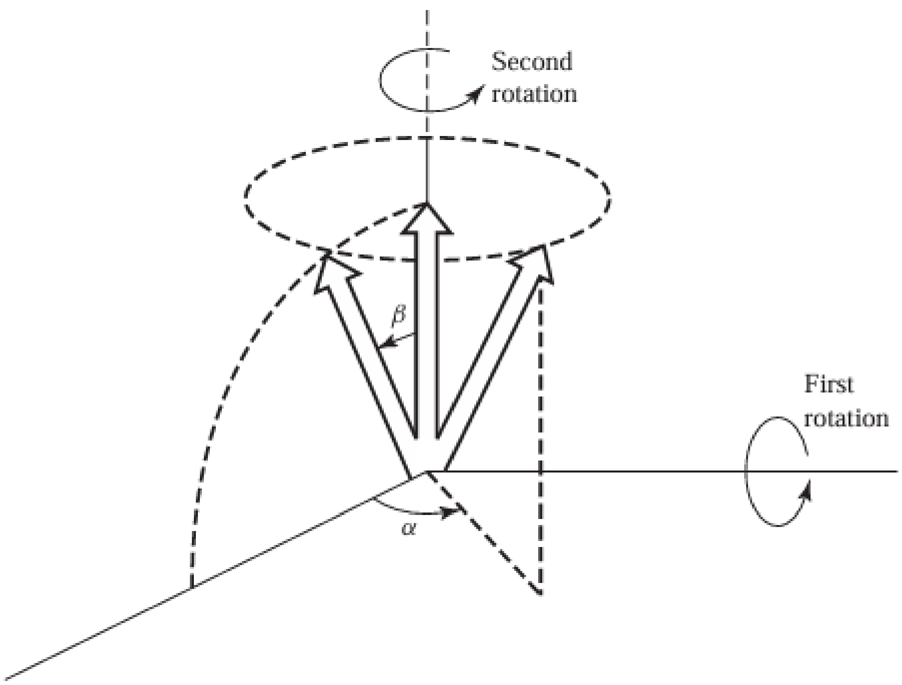
注意到：

$$(\sigma\cdot\hat{n}) = \begin{cases} 1 & \text{n is even} \\ \sigma\cdot n & \text{n is odd} \end{cases}$$

我们还可以将旋转算符写成：

$$\begin{aligned}
&\exp\left(-\frac{i\sigma\cdot\hat{n}\phi}{2}\right) \\
&= \left(1-\frac{(\sigma\cdot\hat{n})^2}{2!}\left(\frac{\phi}{2}\right)^2+\cdots\right) - i\left((\sigma\cdot\hat{n})\frac{\phi}{2}-\cdots\right) \\
&= 1\cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - i\sigma\cdot\hat{n}\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)
\end{aligned}$$

注意：虽然我们之前一直价格三个方向的泡利矩阵合起来当作一个向量看待，而且我们可以使用一个旋转算符 $\mathscr{D}$ 来旋转一个向量，但是不要用它来旋转一个泡利矩阵 σ_i，至少在目前，这没有意义。但是可以证明，$\chi^\dagger\sigma\chi$ 这个东西可以当作一个向量被旋转。我们举一个小例子：如何找到算符 $\sigma\cdot\hat{n}$ 的本征矢量？



如图，我们将 $\hat{n}$ 的方位使用图中的角度 α,β 描述。因为算符 $\sigma\cdot\hat{n}$ 将向量沿着 $\hat{n}$ 轴旋转，因此只要找到 $\hat{n}$ 方向上的向量，我们就找到了其本征矢量。从而：

$$\chi = \left(\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - i\sigma_3\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)\right)\left(\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) - i\sigma_2\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\right)\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)\exp\left(-\frac{i\alpha}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\exp\left(\frac{i\alpha}{2}\right)\end{bmatrix}$$