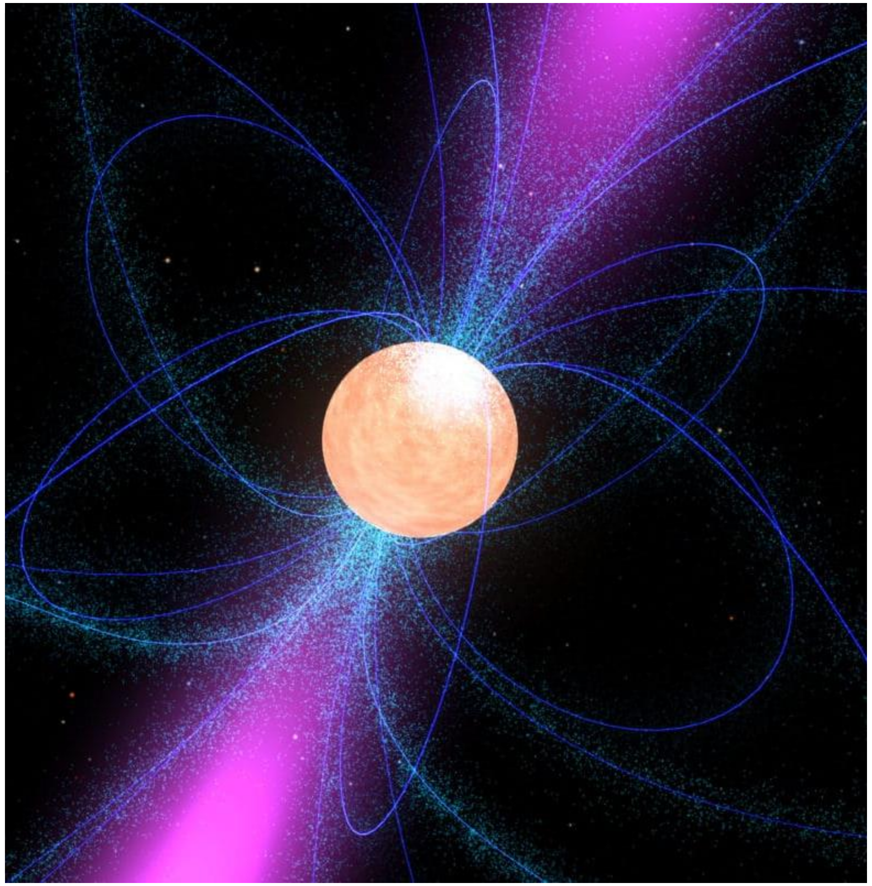


电子的磁矩和自旋

轨道磁矩

电子的自旋

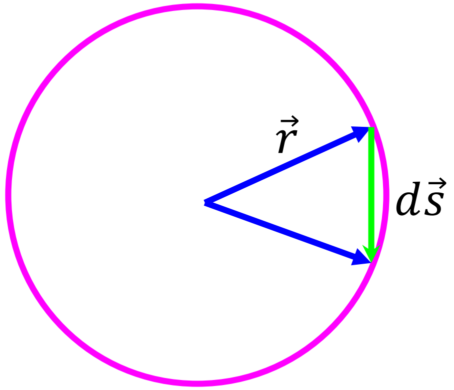
电子的自旋磁矩

电子的轨道磁矩

在电磁学中，电流环的磁矩是

$$\vec{\mu}_l = \oint i \frac{\vec{r}}{2} \times d\vec{s}$$

其中i为电流，$\vec{r}$为位矢，$d\vec{s}$为轨道上的线元



$$\vec{\mu}_l = \oint \frac{dq}{dt} \frac{\vec{r}}{2} \times d\vec{s} = \oint dq \frac{\vec{r}}{2} \times \frac{d\vec{s}}{dt}$$

$$= \oint dq \frac{\vec{r}}{2} \times \frac{\vec{p}}{m_e} = \frac{1}{2m_e} \oint dq \vec{L}$$

$$= -\frac{e}{2m_e} \vec{L} \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{g_l e}{2m_e} \vec{L}$$

轨道g因子$g_l \stackrel{\text{def}}{=} 1$

轨道磁矩算符和本征值

$$\vec{\mu}_l = -g_l \frac{e}{2m_e}\vec{L} \equiv -g_l \frac{\mu_B}{\hbar}\vec{L}$$

玻尔磁子定义为

$$\mu_B \stackrel{\text{def}}{=} \frac{e\hbar}{2m_e}$$

$$\hat{\vec{\mu}}_l^2 = g_l^2 \frac{\mu_B^2}{\hbar^2}\hat{\vec{L}}^2$$

$$\hat{\mu}_{lz} = -g_l \frac{\mu_B}{\hbar}\hat{L}_z$$

$$\vec{\mu}_l^2 = g_l^2 \mu_B^2 l(l+1)$$

$$\mu_{lz} = -g_l \mu_B m_l$$

磁量子数

• 18:01:45

外磁场中的原子能级-对磁量子数简并的解除

- 原子磁矩和磁场的相互作用改变了能级
- 轨道角动量量子化会导致磁矩量子化

静磁场中电子的势能

*电磁场中电子的哈密顿量为

$$H=\frac{1}{2m_e}\left(\vec{p}+e\vec{A}\right)^2-e\phi$$

库伦势

$$V(r)=-e\phi=-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

静磁场

$$\vec{A}=\frac{1}{2}\vec{B}\times\vec{r}$$

$$\vec{B}=\nabla\times\vec{A}$$

满足库伦规范条件

$$\nabla\cdot\vec{A}=0$$

展开得

$$\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m_e}+\frac{e}{2m_e}\left(\hat{\vec{p}}\cdot\vec{A}+\vec{A}\cdot\hat{\vec{p}}\right)+\frac{e^2}{2m_e}\vec{A}^2+V(r)$$

$$\vec{A}^2=\frac{1}{4}\vec{B}^2\vec{r}^2-\frac{1}{4}\left(\vec{B}\cdot\vec{r}\right)^2$$ 与库伦势相比可略去

$$\hat{\vec{p}}\cdot\vec{A}=\vec{A}\cdot\hat{\vec{p}}$$ 利用对易关系和库仑规范可证明

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'\qquad \hat{H}_0=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m_e}+V(r)$$

$$\hat{H}'=\frac{e}{m_e}\vec{A}\cdot\hat{\vec{p}}=\frac{e}{2m_e}\left(\vec{B}\times\vec{r}\right)\cdot\hat{\vec{p}}$$

$$=\frac{e}{2m_e}\left(\vec{r}\times\vec{p}\right)\cdot\vec{B}=\frac{e}{2m_e}\hat{\vec{L}}\cdot\vec{B}$$

电磁学中磁能为$-\hat{\vec{\mu}}\cdot\vec{B}$ $\Rightarrow$磁矩$\hat{\vec{\mu}}\overset{\text{def}}{=}-\frac{e}{2m_e}\hat{\vec{L}}$

- 18:01:45

拉莫进动（Larmor precession）：经典图像*

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt}=[\vec{\mu},H]=\left[\vec{\mu},-\vec{\mu}\cdot\vec{B}+\frac{e^2}{2m_e}\vec{A}^2\right]\approx[\vec{\mu},-\vec{\mu}\cdot\vec{B}]$$

$$=-\left(\frac{e}{2m_e}\right)^2\vec{B}\times\vec{L}=\frac{e}{2m_e}\vec{B}\times\vec{\mu}$$

模长不变

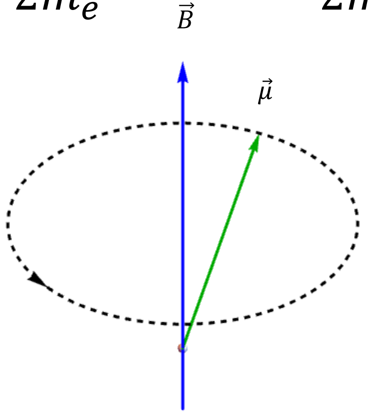
$$\frac{d\vec{\mu}^2}{dt}=2\vec{\mu}\cdot\frac{d\vec{\mu}}{dt}=\frac{e}{2m_e}\vec{\mu}\cdot(\vec{B}\times\vec{\mu})=0$$

磁矩平行于磁场的分量不变（因而垂直分量模长也不变）

$$\vec{\mu}_\parallel\overset{\text{def}}{=}\frac{\vec{\mu}\cdot\vec{B}}{B^2}\vec{B},\qquad\frac{d\vec{\mu}_\parallel}{dt}=\frac{\vec{B}}{B^2}\vec{B}\cdot\frac{e}{2m_e}(\vec{B}\times\vec{\mu})=0$$

磁矩矢端的速率为常数：

$$\frac{|d\vec{\mu}|}{dt}=\frac{e}{2m_e}|\vec{B}\times\vec{\mu}|=\frac{e}{2m_e}B\mu_\perp$$



电子磁矩在外磁场中匀速进动，

$$\vec{\omega}=\frac{e}{2m_e}\vec{B}$$

能级分裂：量子理论

磁矩在磁场中的势能

$$\hat{H}' = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}$$

$$[\hat{H}', \hat{H}_0] = 0$$

原来的解$u_{nlm}(\vec{r})$仍是

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$$

的本征态，即仍是定态

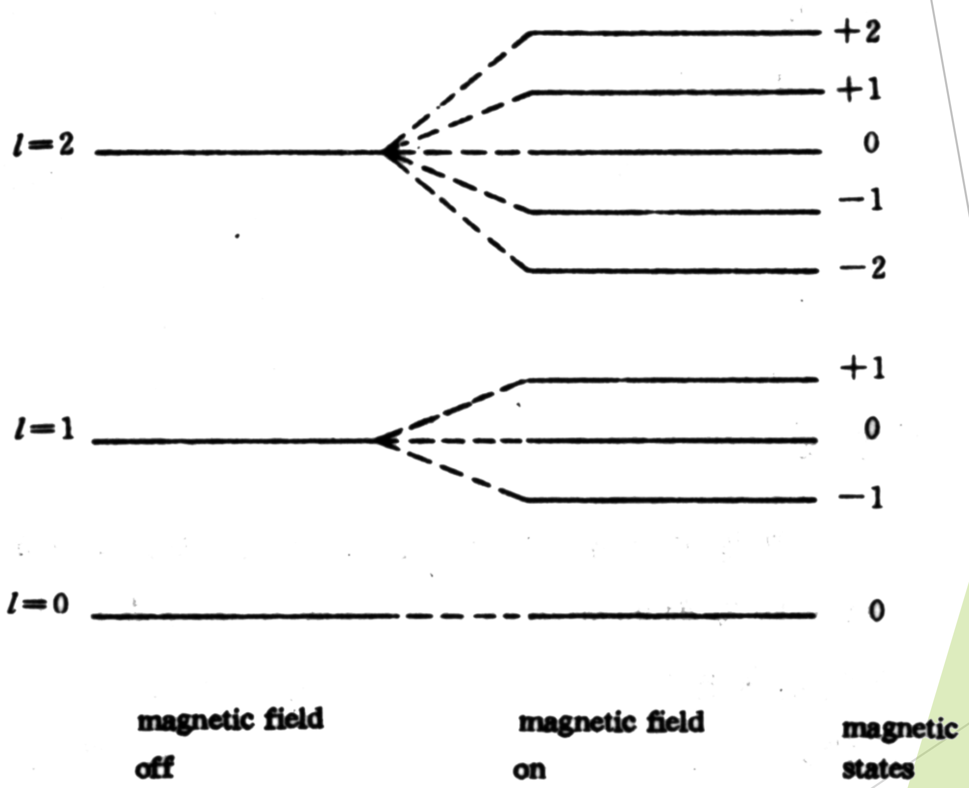
① 波函数不变
② 能级改变

不妨取磁场沿z轴，得能级分裂

$$\hat{H}' = -\hat{\mu}_z B$$

$$\Delta E_{m_l} = m_l\, g_l \mu_B B$$

$$E_{nl} \to E_{nl} + \Delta E_{m_l}$$



谱线的Zeeman分裂(1896年)

未加磁场时：$h\nu = E_2 - E_1$

加磁场时：

$$h\nu' = E_2' - E_1'$$

$$= \left(E_2 + m_{l_2} g_l \mu_B B\right) - \left(E_1 + m_{l_1} g_l \mu_B B\right)$$

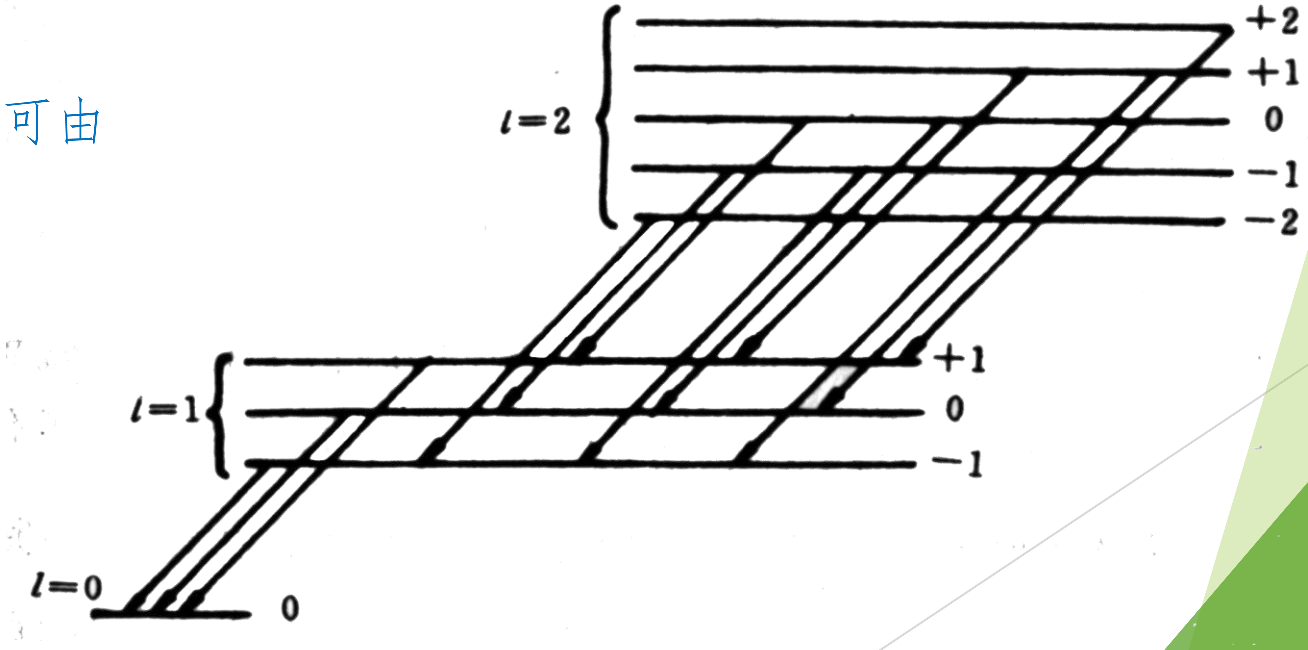
$$= h\nu + \Delta m_l \mu_B B$$

Pieter Zeeman

由偶极跃迁的选择定则（可由角动量守恒推出）

$\Delta m_l = 0, \pm 1,$

每条谱线分裂为三条



- 18:01:46

Stern-Gerlach实验

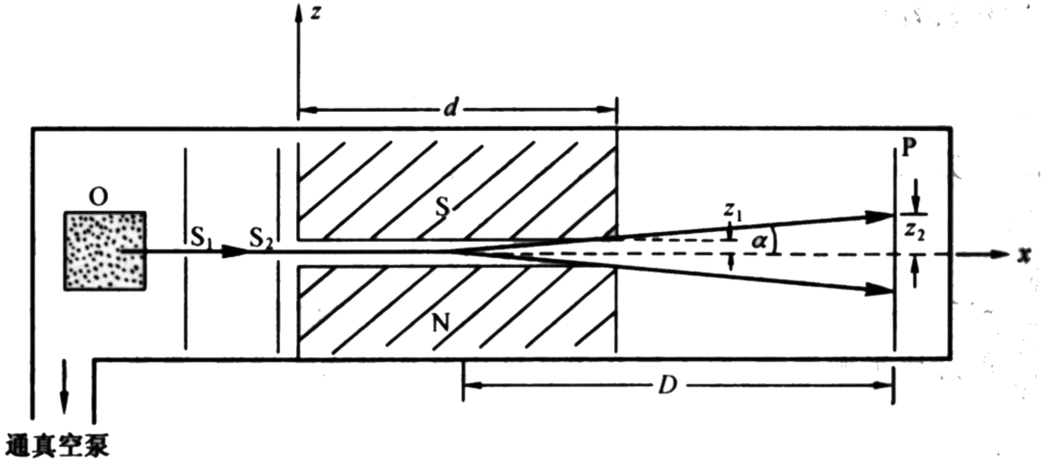
1921年，直接观测到能级的$2l+1$多重结构

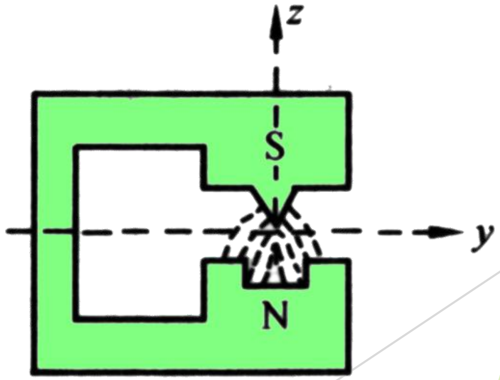
除力矩外，磁矩在磁场中还受到合力

$$\vec{F}=\nabla(\vec{\mu}\cdot\vec{B})$$

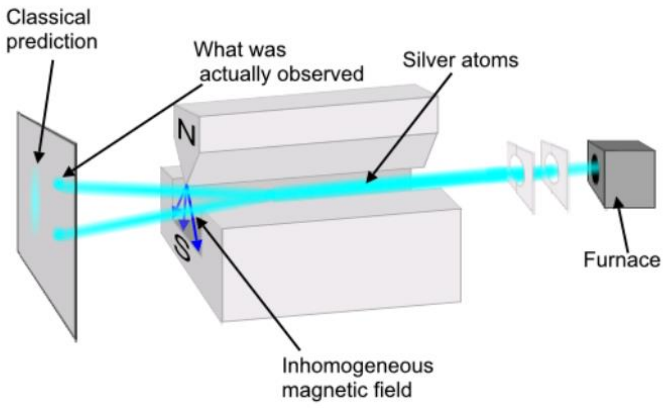
设磁场沿z轴

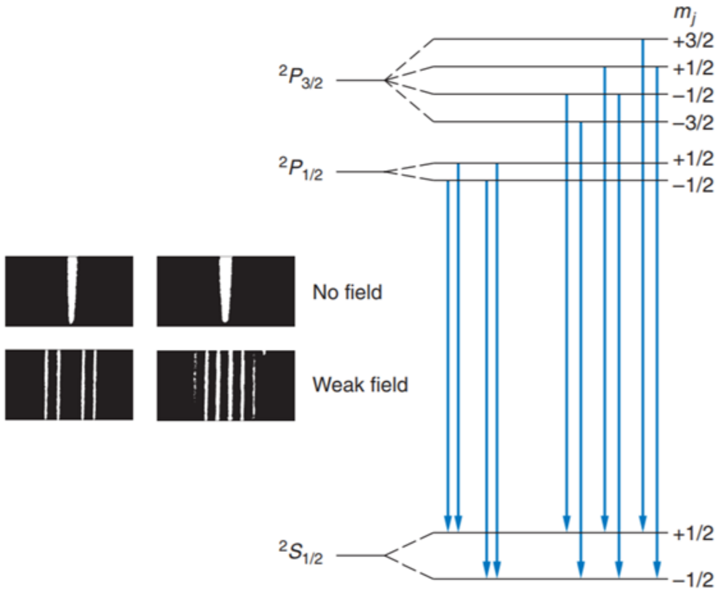
$$F_z=\mu_z\frac{dB}{dz}=-m_l g_l \mu_B\frac{dB}{dz}$$





反常塞曼效应





- $2l+1$为奇数，轨道角动量导致的劈裂只能是奇数
- 但Stern-Gerlach实验对H，Li，Na，K，Cu，Ag，Au等原子都观测到偶数条斑纹

• 18:01:47

电子自旋

- Stern-Gerlach实验中，氢原子的基态观测到两个取向，只能解释为电子具有内部结构
- (1925年)荷兰学生Uhlenbeck和Goudsmit提出电子具有自旋$\hbar/2$

Spinning Electrons and the Structure of Spectra, *Nature*, **117**, p. 264-265, (1926).

G. E. Uhlenbeck

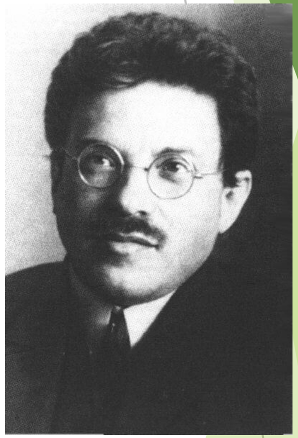
S. Goudsmit

18:01:47

自旋概念在当时很难于被接受

- 自旋的想法并非二人首先有
- 经典物理中陀螺自旋应该是连续取值
- 设电子半径为10^{-14}cm的小球，表面上的切线速度>>光速！
- Pauli:电子自旋有经典力学特征时，一定错了
- 导师埃伦费斯特:

  年轻人犯点荒谬的错误没有关系



Paul Ehrenfest
1880-1933
奥地利数学家、物理学家

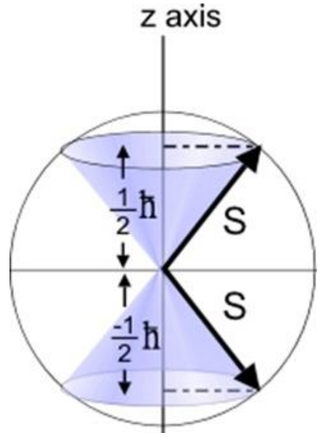
• 18:01:47

电子自旋的描述

- 1925年，Uhlenbeck 和Goudsmith首先提出电子自旋假设
  - ✓ 每个电子都具有内禀角动量，即自旋S，它在空间任何方向上只有两个取值$\pm\frac{\hbar}{2}$
  - ✓ 每个电子均有自旋磁矩μ_s，它与自旋角动量的关系为$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m_e}\vec{S}$，其中e为电子电荷，$m_e$为电子质量

  自旋g-因子：$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{2m_e} g_s \vec{s}$，$g_s = 2$

- 1927年，泡利引入Pauli矩阵描述电子自旋的代数关系
- 1928年，泡利给出经典低速下电子的哈密顿量
- 1928年，狄拉克提出相对论下的Dirac方程
- Dirac方程是相对论波动方程，可自然得出电子自旋结构



自旋波函数和泡利方程*

之前的物质波都用标量波函数$\psi(\vec{r},t)$

旋转只涉及外部空间，

$$\hat{R}\psi(\vec{r},t)=\psi(R^{-1}\vec{r},t)$$

矢量波函数旋转时（比如电磁场）

$$\hat{R}\vec{A}(\vec{r},t)=R\vec{A}(R^{-1}\vec{r},t)$$

同时转动了外部空间和内部空间

$\vec{A}$有三个下标，在三维空间中

电子自旋可以取两个状态，需要两个基矢（两维空间）描述其状态

应该用两分量波函数描述电子

$$\psi(\vec{r},t)=\begin{pmatrix}\psi_1(\vec{r},t)\\ \psi_2(\vec{r},t)\end{pmatrix}$$

原来的薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t)=\left\{\frac{1}{2m_e}\left(\hat{\vec{p}}+e\vec{A}\right)^2-e\phi\right\}\psi(\vec{r},t)$$

Wolfgang Pauli

1900-1958

诺贝尔奖1930年

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t)=\left\{\frac{1}{2m_e}\left(\vec{\sigma}\cdot\left(\hat{\vec{p}}+e\vec{A}\right)\right)^2-e\phi\right\}\psi(\vec{r},t)}$$

$$\sigma_1=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\sigma_2=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\sigma_3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

广义形式的泡利方程*（1927年）

- 18:01:48

泡利矩阵的计算规则

泡利矩阵

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = \mathbf{1}_{2\times 2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \sigma_0$$

$$\sigma_1\sigma_2 = i\sigma_3, \quad \sigma_2\sigma_3 = i\sigma_1, \quad \sigma_3\sigma_1 = i\sigma_2$$

$$\sigma_2\sigma_1 = -i\sigma_3, \quad \sigma_3\sigma_2 = -i\sigma_1, \quad \sigma_1\sigma_3 = -i\sigma_2$$

计算规则

$$\boxed{\sigma_j\sigma_k = \delta_{jk}1_{2\times 2} + i\varepsilon_{jkl}\sigma_l}$$

$$\Leftrightarrow (\vec{\sigma}\cdot\vec{a})\left(\vec{\sigma}\cdot\vec{b}\right) = \vec{a}\cdot\vec{b}\mathbf{1}_{2\times 2} + i\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{a}\times\vec{b}\right)$$

泡利矩阵的对易关系

电子的自旋磁矩和自旋波函数

泡利方程给出的哈密顿量

$$\hat{H}=\frac{1}{2m_e}\left(\vec{\sigma}\cdot(\hat{\vec{p}}+e\vec{A})\right)^2-e\phi=\frac{1}{2m_e}(\hat{\vec{p}}+e\vec{A})^2-e\phi+\frac{e\hbar}{2m_e}\vec{\sigma}\cdot\vec{B}$$

多出的项是电子自旋磁矩的贡献

$$+\frac{e\hbar}{2m_e}\vec{\sigma}\cdot\vec{B}=-\hat{\vec{\mu}}_s\cdot\vec{B} \qquad \hat{\vec{\mu}}_s=-\frac{e\hbar}{2m_e}\vec{\sigma}$$

Uhlenbeck, Goudsmith:

$$\hat{\vec{\mu}}_s=-\frac{e}{m_e}\hat{s} \qquad \Rightarrow\hat{\vec{s}}=\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$$

当没有自旋磁矩与磁场的耦合项时，波函数可以分离为两个因子之积，

$$\begin{pmatrix}\Phi_1(\vec{r})\\ \Phi_2(\vec{r})\end{pmatrix}=\Phi_1(\vec{r})\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+\Phi_2(\vec{r})\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\sim u(\vec{r})\chi, \qquad \chi=\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix}$$

$\Phi(\vec{r})$称为空间波函数，
χ称为自旋波函数（旋量spinor）

自旋算符及其本征态

轨道角动量算符

$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{r} \times \nabla$

轨道角动量的对易关系

$$[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar\varepsilon_{jkl}\hat{L}_l$$

轨道角动量算符的本征态波函数

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

$$\hat{L}_z Y_{lm_l}(\theta,\varphi) = m_l\hbar Y_{lm_l}(\theta,\varphi)$$

群表示论给出SO(3)群的射影表示有

$$s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \cdots$$

$$m_s = -s, -s+1, \cdots, s.$$

整数自旋的粒子是玻色子(Boson)

半整数自旋的粒子是费米子（Fermion）

类似地有

自旋算符$\hat{\vec{s}}$也是转动生成元

自旋角动量也应该对易关系

$$[\hat{s}_j, \hat{s}_k] = i\hbar\varepsilon_{jkl}\hat{s}_l$$

由对易关系知：

自旋算符的本征态波函数满足

$$\hat{\vec{s}}^2 \chi_{sm_s} = s(s+1)\hbar^2 \chi_{sm_s}$$

$$\hat{s}_z \chi_{sm_s} = m_s\hbar\chi_{sm_s}$$

电子的自旋量子数是1/2

$$s = \frac{1}{2}, m_s = \pm\frac{1}{2}$$

$$\hat{\vec{s}} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$$

- 电子自旋在经典物理没有对应的力学量
- 电子自旋是量子+三维空间几何的推论

电子的自旋本征态

- 泡利给出的电子自旋算符满足对易关系

$$[\hat{s}_j,\hat{s}_k]=i\hbar\varepsilon_{jkl}\hat{s}_l$$

- 自旋算符$\{\vec{s}^2,s_z\}$的共同本征态

$$\hat{\vec{s}}^2\left|\frac{1}{2},m_s\right\rangle=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\hbar^2\left|\frac{1}{2},m_s\right\rangle$$

$$=\frac{3}{4}\hbar^2\left|\frac{1}{2},m_s\right\rangle$$

$$\hat{s}_z\left|\frac{1}{2},m_s\right\rangle=m_s\hbar\left|\frac{1}{2},m_s\right\rangle$$

$$\left|\frac{1}{2},+\frac{1}{2}\right\rangle,\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\Leftrightarrow|+\rangle,|-\rangle\Leftrightarrow|\uparrow\rangle,|\downarrow\rangle$$

也称为自旋“朝上”、自旋“朝下”的状态

- 自旋本征态的矢量表示

$$|\uparrow\rangle\to\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\qquad|\downarrow\rangle\to\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

- 自旋算符的矩阵表示

$$\sigma_1=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\qquad\sigma_2=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\qquad\sigma_3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

- 泡利矩阵与单位矩阵$\{\sigma_0,\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3\}$是$\mathbb{C}^{2\times 2}$的完备基
- $\frac{\hbar}{2}\sigma_j$是$\hat{s}_j$的二维不可约表示：

$$\hat{s}_x=\frac{\hbar}{2}\sigma_1,\qquad\hat{s}_y=\frac{\hbar}{2}\sigma_2,\qquad\hat{s}_z=\frac{\hbar}{2}\sigma_3$$

$$[\sigma_j,\sigma_k]=2i\varepsilon_{jkl}\sigma_l\Rightarrow\left[\frac{\hbar}{2}\sigma_j,\frac{\hbar}{2}\sigma_k\right]=\frac{\hbar}{2}2i\varepsilon_{jkl}\frac{\hbar}{2}\sigma_l$$

$$\Rightarrow[\hat{s}_j,\hat{s}_k]=i\hbar\varepsilon_{jkl}\hat{s}_l$$

- 升降算符

$$\hat{s}_\pm\stackrel{\text{def}}{=}\hat{s}_x\pm i\hat{s}_y=\frac{\hbar}{2}(\sigma_1\pm\sigma_2)$$

$$\hat{s}_+|\uparrow\rangle=0,\qquad\hat{s}_-|\downarrow\rangle=0,$$

$$\hat{s}_+|\downarrow\rangle=|\uparrow\rangle,\qquad\hat{s}_-|\uparrow\rangle=|\downarrow\rangle$$

例题 用泡利矩阵展开两维矩阵

- 两维矩阵

$$P = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

- 用Paul i 矩阵展开

$$P \equiv p_0\sigma_0 + p_1\sigma_1 + p_2\sigma_2 + p_3\sigma_3$$

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- 求出展开系数

$$p_0 = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(P\sigma_0) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(a+d)$$

$$p_1 = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(P\sigma_1) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix} b & a \\ d & c \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(b+c)$$

$$p_2 = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(P\sigma_2) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix} ib & -ia \\ id & -ic \end{pmatrix} = \frac{i}{2}(b-c)$$

$$p_3 = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(P\sigma_3) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix} a & -b \\ c & -d \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(a-d)$$

- 18:01:50

例题

- 求σ_y算符的本征态和本征值，并给出状态$\begin{pmatrix}\alpha\\\beta\end{pmatrix}$上测量$s_y$的测量值和相应的几率

（1）s_y的本征值和本征态

$$\sigma_y = \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}, \qquad \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y$$

本征值

$$\det(\sigma_y - \lambda \mathbf{1}) = 0 \Rightarrow \lambda = \pm 1$$

s_y的测量值是$\pm\hbar/2$

本征矢

$$|\uparrow\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}, \qquad |\downarrow\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix}$$

（2）自旋态的展开

$$|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{|\alpha|^2+|\beta|^2}}\begin{pmatrix}\alpha\\\beta\end{pmatrix} \equiv A_1|\uparrow\rangle_y + A_2|\downarrow\rangle_y$$

$$A_1 = \langle\uparrow(y)|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{|\alpha|^2+|\beta|^2}}\begin{pmatrix}1 & -i\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\\beta\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{|\alpha|^2+|\beta|^2}}(\alpha - i\beta)$$

$$A_2 = \langle\downarrow(y)|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{|\alpha|^2+|\beta|^2}}\begin{pmatrix}1 & i\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\\beta\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{|\alpha|^2+|\beta|^2}}(\alpha + i\beta)$$

（3）几率

$$|A_1|^2 = \frac{|\alpha|^2+|\beta|^2-2\,\mathrm{Im}(\alpha\beta^*)}{2(|\alpha|^2+|\beta|^2)}, \qquad |A_2|^2 = \frac{|\alpha|^2+|\beta|^2+2\,\mathrm{Im}(\alpha\beta^*)}{2(|\alpha|^2+|\beta|^2)}$$

例题

- $\vec{n}$为单位向量，求算符$(\vec{\sigma}\cdot\vec{n})$对应的本征值和本征态

球坐标系的单位矢量

$$(n_1, n_2, n_3) = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$$

算符的显式表达式

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_1 n_1 + \sigma_2 n_2 + \sigma_3 n_3 = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\, e^{-i\varphi} \\ \sin\theta\, e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

本征值

$$\det(\vec{\sigma}\cdot\vec{n} - \lambda\mathbf{1}) = 0$$

$$\Rightarrow \lambda^2 - \cos^2\theta - \sin^2\theta = 0 \Rightarrow \lambda = \pm 1$$

本征矢

$$|\uparrow\rangle_n = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\varphi}{2}} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{\frac{i\varphi}{2}} \end{pmatrix}, |\downarrow\rangle_n = \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\varphi}{2}} \\ \cos\frac{\theta}{2} e^{\frac{i\varphi}{2}} \end{pmatrix}$$

厄米算符的分解：

$$(+1)|\uparrow\rangle_n\langle\uparrow|_n + (-1)|\downarrow\rangle_n\langle\downarrow|_n$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\varphi}{2}} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{\frac{i\varphi}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} e^{\frac{i\varphi}{2}} & \sin\frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\varphi}{2}} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\varphi}{2}} \\ \cos\frac{\theta}{2} e^{\frac{i\varphi}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2} e^{\frac{i\varphi}{2}} & \cos\frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\varphi}{2}} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \cos^2\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} \\ \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2} e^{i\varphi} & \sin^2\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\sin^2\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} \\ \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2} e^{i\varphi} & -\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\, e^{-i\varphi} \\ \sin\theta\, e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix} \equiv \vec{\sigma}\cdot\vec{n}$$

自由电子的自旋共振实验

电子在磁场中的磁能

$$\hat{H}' = -\hat{\vec{\mu}}_s \cdot \vec{B} = \frac{g_s e}{2m_e}\hat{\vec{s}} \cdot \vec{B}$$

自旋g因子$g_s = 2$

以磁场为z-轴,

$$E' = g_s \mu_B B_0 m_s, \qquad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$$

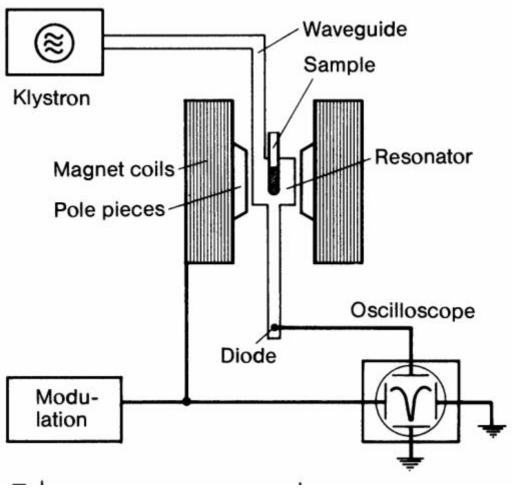
在微波照射下，自旋翻转，（1944年，Zavoisky）

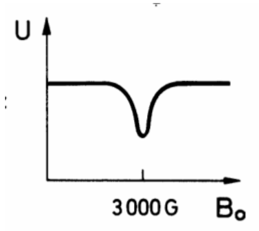
$$\Delta E = g_s \mu_B B_0 \left(\frac{1}{2} - \left(-\frac{1}{2}\right)\right) = g_s \mu_B B_0$$

$$h\nu = \Delta E \Rightarrow \nu \approx 2.8026 \times 10^{10} B_0 \ \mathrm{Hz \cdot T^{-1}}$$

电子自旋共振ESR, electron spin resonance
电子顺磁共振EPR, electron paramagnetic resonance

这个实验直接测量了电子自旋分量





图片来源： Haken H., Wolf H.C. ,The Physics of Atoms and Quanta - Introduction to Experiments and Theory, Chap. 13.

• 18:01:51

例：银原子的Stern-Gerlach实验

- 银原子的Stern-Gerlach实验

加热银蒸汽时的炉温$T = 1320\text{K}$，不均匀磁场区长度$l = 0.1\text{m}$，磁场梯度$dB/dz = 2300\,\text{T/m}$。

冷凝屏紧贴磁场末端，观测到银原子沉积的两条斑纹间隔$\Delta x = 4\text{mm}$。求银原子磁矩μ_z。

- 解：

银原子均方根速度

$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}k_BT\cdot 3 \Rightarrow v = \sqrt{\frac{3k_BT}{m}}$$

磁矩与外场作用的势能

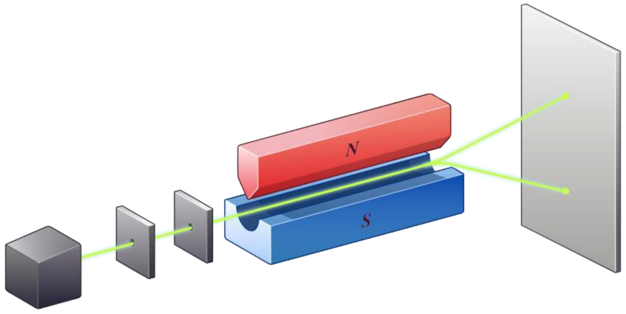
$$W = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = -\mu_z\left(\frac{dB}{dz}z\right)$$

银原子所受的作用力

$$F = -\nabla W = \mu_z\frac{dB}{dz}$$

通过磁场区后的横向偏移

$$x = \frac{1}{2}at^2 = \frac{1}{2}\frac{F}{m}\left(\frac{l}{v}\right)^2 = \frac{1}{2m}\mu_z\frac{dB}{dz}l^2\frac{m}{3k_BT} = \frac{l^2\mu_z}{6k_BT}\frac{dB}{dz}$$



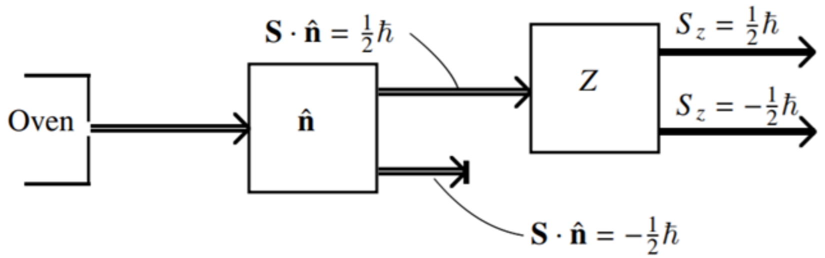
两条斑纹的横向间隔

$$\Delta x = 2x = \frac{l^2\mu_z}{3k_BT}\frac{dB}{dz}$$

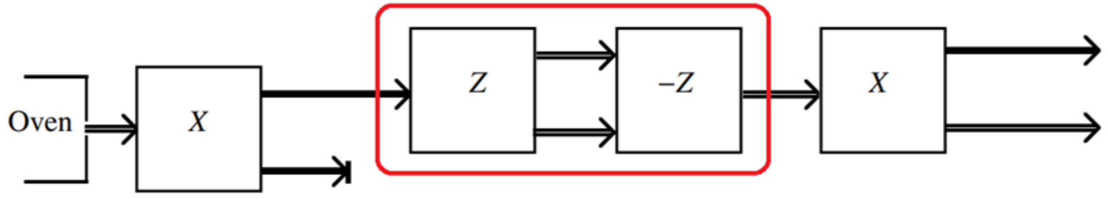
这个实验测得的磁矩是

$$\mu_z = \frac{3k_BT\Delta x}{l^2\frac{dB}{dz}} = \frac{3\times 1.38\times 10^{-23}\times 1320\times 4\times 10^{-3}}{2300\times 0.1^2}\text{J}\cdot\text{s} = 9.5\times 10^{-24}\text{J}\cdot\text{s} \approx \mu_B = 9.274\times 10^{-24}\text{J}\cdot\text{s}$$

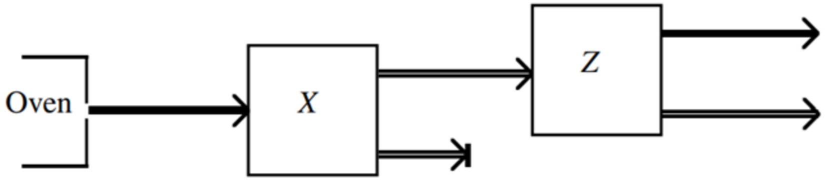
级联Stern-Gerlach装置：叠加原理和测量



沿$\vec{n}$方向选出+1/2分量，
再测z-分量，两个取值都有一定的几率



中间的两个SG，磁场梯度相反
最后一级SG测出的x分量，只会是+1/2



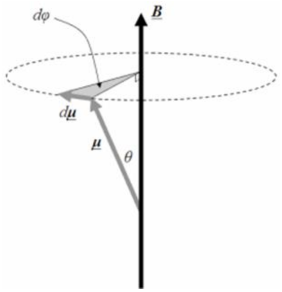
沿x-方向选出+1/2分量，
再测z-分量，两个取值都有0.5几率

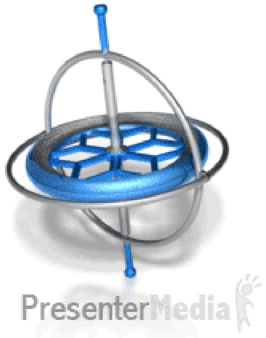
如果在两个z方向SG装置中间
设法检测电子从哪条路径通过，
那么最后一级测出的x分量
两种取值各有0.5的几率

电子自旋的进动

哈密顿算符

$$\hat{H}=-\mu\cdot\vec{B}=\frac{e}{m_e}\hat{\vec{S}}\cdot\vec{B}=\frac{e\hbar}{2m_e}\vec{\sigma}\cdot\vec{B}$$





经典力学：
力矩推动陀螺进动

取磁场方向为z轴

$$\vec{B}=(0,0,B)$$

$$\hat{H}=\frac{e\hbar B}{2m_e}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

设初态是沿着$\vec{n}=(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta)$方向的本征态：

$$\chi(t=0)=|\uparrow\rangle_n=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{-\frac{i}{2}\varphi}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{\frac{i}{2}\varphi}\end{pmatrix},\qquad \vec{\sigma}\cdot\vec{n}|\uparrow\rangle_n=+|\uparrow\rangle_n$$

利用时间演化算符，

$$\chi(t)=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\chi(0)$$

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)=\exp\left[\begin{pmatrix}-i\frac{eBt}{2m_e} & 0\\ 0 & i\frac{eBt}{2m_e}\end{pmatrix}\right]=\begin{pmatrix}e^{-i\frac{eB}{2m_e}t} & 0\\ 0 & e^{i\frac{eB}{2m_e}t}\end{pmatrix}$$

$$\chi(t)=\begin{pmatrix}e^{-i\frac{eB}{2m_e}t} & 0\\ 0 & e^{i\frac{eB}{2m_e}t}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{-\frac{i}{2}\varphi}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{\frac{i}{2}\varphi}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{-\frac{i}{2}\left(\varphi+\frac{eB}{m_e}t\right)}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{\frac{i}{2}\left(\varphi+\frac{eB}{m_e}t\right)}\end{pmatrix}$$

$$\langle s_z\rangle=\chi(t)^\dagger\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\chi(t)$$

$$=\frac{\hbar}{2}\left(\cos^2\frac{\theta}{2}-\sin^2\frac{\theta}{2}\right)=\frac{\hbar}{2}\cos\theta$$

$$\langle s_x\rangle=\chi(t)^\dagger\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\chi(t)=\frac{\hbar}{2}\sin\theta\cos\left(\varphi+\frac{eB}{m_e}t\right)$$

$$\langle s_y\rangle=\chi(t)^\dagger\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\chi(t)=\frac{\hbar}{2}\sin\theta\sin\left(\varphi+\frac{eB}{m_e}t\right)$$

均值绕z轴进动，进动角速度$\frac{eB}{m_e}$；z分量不变。

与经典力学的计算结果相同

矩阵函数

矩阵函数的定义：

$$\boxed{f(A) \overset{\text{def}}{=} f(0)\mathbf{1} + f^{(1)}(0)A + \frac{1}{2!}f^{(2)}(0)A^2 + \cdots}$$

可得

$$\cos^2 A + \sin^2 A = \mathbf{1}_{n\times n}$$
$$\cosh^2 A - \sinh^2 A = \mathbf{1}_{n\times n}$$

Cayley-Hamilton定理：$\forall A \in \mathbb{C}^{2\times 2}$,

$$(A - \lambda_1\mathbf{1})(A - \lambda_2\mathbf{1}) \equiv \mathbf{0}$$
$$A^2 - (\operatorname{Tr} A)A + \det A\, \mathbf{1} \equiv \mathbf{0}$$

例题：如果磁场方向为$\vec{n}$，磁场与电子自旋的耦合为

$$\hat{H} = \frac{eB\hbar}{2m_e}\vec{\sigma}\cdot\vec{n}$$
$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{n})^2 = \vec{n}^2\mathbf{1}_{2\times 2} = \mathbf{1}_{2\times 2}$$

时间演化算符为

$$U(t,0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) = \exp\left[i\frac{eBt}{2m_e}(\vec{\sigma}\cdot\vec{n})\right]$$

$$= \mathbf{1}_{2\times 2} + i\frac{eBt}{2m_e}(\vec{\sigma}\cdot\vec{n}) + \frac{1}{2!}\left(i\frac{eBt}{2m_e}\right)^2\mathbf{1}_{2\times 2} + \frac{1}{3!}\left(i\frac{eBt}{2m_e}\right)^3(\vec{\sigma}\cdot\vec{n}) + \cdots$$

$$U(t,0) = \cos\left(\frac{eB}{2m_e}t\right)\mathbf{1}_{2\times 2} + i\sin\left(\frac{eB}{2m_e}t\right)(\vec{\sigma}\cdot\vec{n})$$

Pauli矩阵与四元数*

- 四元数的乘法

$$q \overset{\text{def}}{=} q_0 + q_1 \boldsymbol{i}_1 + q_2 \boldsymbol{i}_2 + q_3 \boldsymbol{i}_3$$
$$\boldsymbol{i}_j \boldsymbol{i}_k = -\delta_{jk} + \varepsilon_{jkl} \boldsymbol{i}_l$$

- 泡利矩阵的乘法

$$\sigma_j \sigma_k \equiv \delta_{jk} \mathbf{1}_{2\times 2} + i \varepsilon_{jkl} \sigma_l$$

- 对应关系

$$\boldsymbol{i}_j \Leftrightarrow -i\sigma_j$$
$$q \leftrightarrow u = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}, \qquad a = q_0 - q_3 i, \qquad b = -q_2 - q_1 i$$

- 用泡利矩阵表示转动

$$u(\vec{\psi}) = e^{-i\frac{\vec{\sigma}}{2}\cdot\vec{\psi}} = \cos\frac{\psi}{2} \mathbf{1}_{2\times 2} - i(\vec{\sigma}\cdot\vec{n}) \sin\frac{\psi}{2} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\psi}{2} - i n_3 \sin\frac{\psi}{2} & (-i n_1 - n_2)\sin\frac{\psi}{2} \\ (-i n_1 + n_2)\sin\frac{\psi}{2} & \cos\frac{\psi}{2} + i n_3 \sin\frac{\psi}{2} \end{pmatrix} \to R(\vec{\psi})$$

$$u = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}, |a|^2 + |b|^2 = 1 \to R(u) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(a^2 + a^{*2} - b^2 - b^{*2}) & -\frac{i}{2}(a^2 - a^{*2} + b^2 - b^{*2}) & -(ab + a^* b^*) \\ \frac{i}{2}(a^2 - a^{*2} - b^2 + b^{*2}) & \frac{1}{2}(a^2 + a^{*2} + b^2 + b^{*2}) & i(a^* b^* - ab) \\ a^* b + a b^* & i(a^* b - a b^*) & a a^* - b b^* \end{pmatrix}$$