14-1

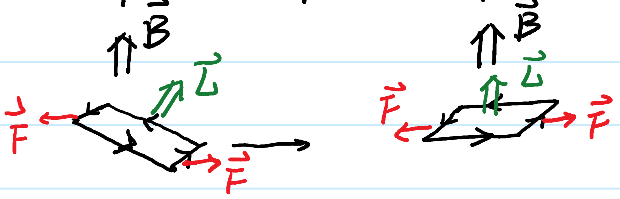
2023年12月7日 20:01

CH14 自旋 (Spin)

§14.1 自旋空间 V_S

注意这里 S 代表 spin，不要和第10章的对称态空间混淆

有角动量的带电粒子和磁场有相互作用



有角动量的带电粒子相当于电流环，会产生感应磁场，在外磁场的作用下，感应磁场会倾向于和外磁场有相同的方向，即 $\vec{L}$ 和 $\vec{B}$ 有相同的方向.

即 $\hat{H}$ 中有正比于 $\hat{\vec{L}}\cdot\vec{B}$ 的项，若取 $\vec{B}=B\vec{e}_z$，则

$$\hat{\vec{L}}\cdot\vec{B}\,|l,m\rangle = BL_3\,|l,m\rangle = m\hbar B\,|l,m\rangle$$

所以有 $m=-l\ldots l$ 共 $2l+1$ 种可能的取值，因为 l 为整数，所以 m 也为整数

14-2

2023年12月10日 14:57

§14.1 轨道角动量与磁场耦合

考虑动能项 $\hat{H}_{kin}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}$

Ex 14.1 推导出一个带电粒子在沿 z 方向均强电场中的动能项，并在分标表象中得到 $\vec{L}\cdot\vec{B}$ 的贡献

Ex 14.2 考虑弱磁场的情况，只保留 $\vec{B}$ 的线性项，取 $\vec{B}$ 沿 $\hat{z}$ 方向

证明 $[\hat{H}_{kin},\hat{L}^2]=0$

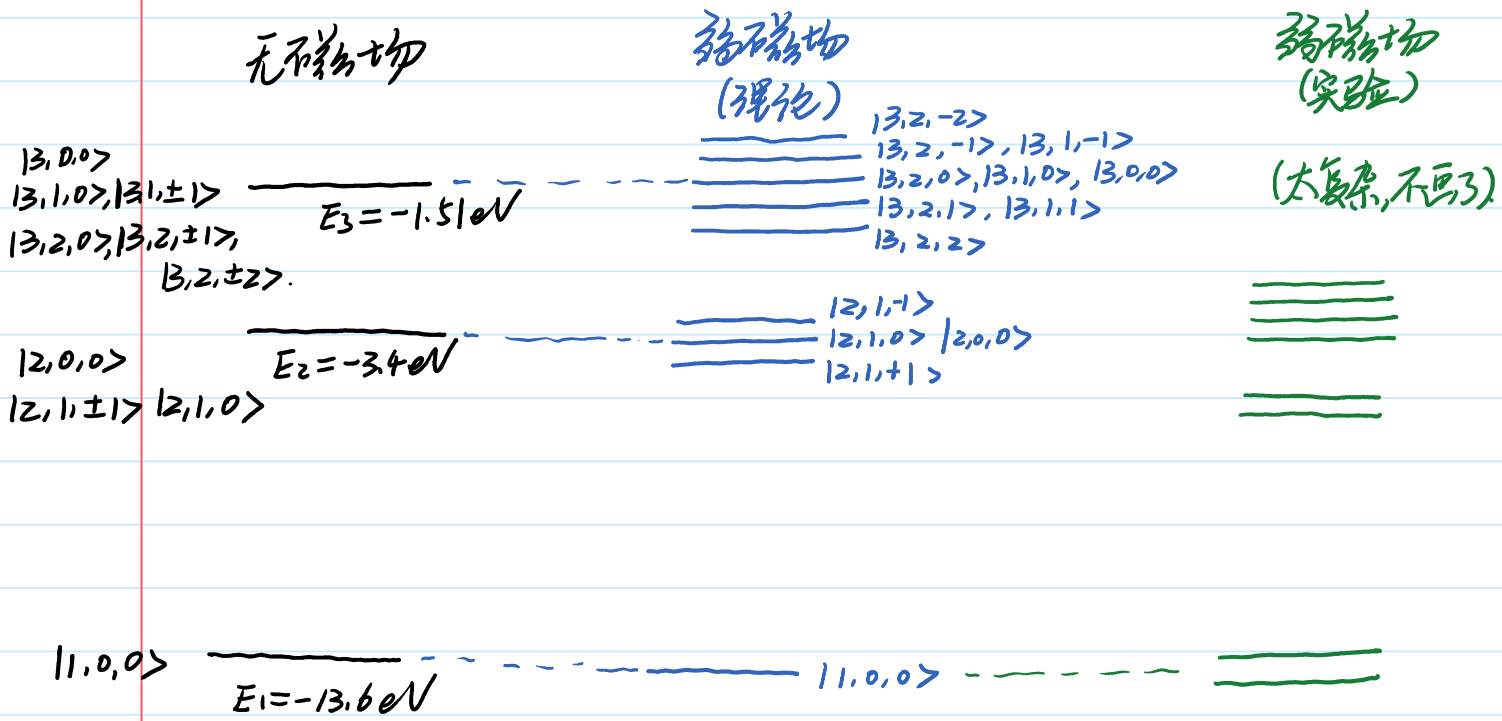
$[\hat{H}_{kin},\hat{L}_3]=0$

Ex 14.3 考虑均匀弱磁场中的氢原子，磁场 $\vec{B}$ 沿 $\hat{z}$ 方向

(1) 对 $l_3\neq 0$ 的态，若要忽略 B^2 项，那么对 B 场大小有何要求

(2) 对 $l_3=0$ 的态，磁场对能级的影响如何

(3) 画出此时氢原子电子的能谱（没有磁场时 vs 有磁场时）



14-3

2023年12月11日 9:46

和预期结果不一致。先从最简单的 $|1,0,0\rangle$ 态入手，理论上预言这个态没有简并，但实验数据显示其有至少二重简并。

该两重简并在磁场中解除简并，其行为与 $\vec{L}\cdot\vec{B}$ 的行为很类似。

⇒ 我们前面的讨论中忽略了某些类似角动量的贡献！

回顾已学到的

$$e^{i\theta\Omega_3}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\theta & -\sin\theta & 0\\ \sin\theta & \cos\theta & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x\cos\theta-y\sin\theta\\ x\sin\theta+y\cos\theta\\ z\end{pmatrix}$$

$$e^{i\varphi\hat{L}_3}\psi(r,\theta,\phi)=\psi(r,\theta,\phi+\varphi)$$

是否可以把两者结合起来：$e^{i\varphi\hat{L}_3}\begin{pmatrix}\psi_1(r,\theta,\phi)\\ \psi_2(r,\theta,\phi)\\ \vdots\end{pmatrix}$?

§14.2 自旋空间 V_s

注意这里 V_s 代表自旋(spin)空间，不要和第10章中的对称态空间混淆

先考虑两个分量的情况

$$\begin{pmatrix} \psi_1(r,\theta,\phi) \\ \psi_2(r,\theta,\phi) \end{pmatrix} = \psi_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

这相当于在原本的 $V_x \otimes V_y \otimes V_z$ 的 Hilbert 空间上再直积一个2维空间 V_s

$e^{i\varphi \hat{L}_j}$ $(j=1,2,3)$ 是作用在 $V_x \otimes V_y \otimes V_z$ 上，对于 $|1,0,0\rangle$ 电子，其在 $V_x \otimes V_y \otimes V_z$ 上的态为 $|l=0, m=0\rangle$，此时

$$e^{i\varphi \hat{L}_j} |1,0,0\rangle = 1 * |1,0,0\rangle$$

因为 $|1,0,0\rangle$ 电子仍与磁场有相互作用，且作用方式和 $\hat{L}_i$ 类似，一个可能的解释方法是在 V_s 空间中也有类似 $\hat{L}_i$ 的算符，记为 $\hat{S}_i$

Ex 14.1 以 $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 和 $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ 为基，构建 $\hat{S}_i$ 的矩阵形式

总结：$\hat{S}_1 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$，$\hat{S}_2 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$，$\hat{S}_3 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

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

$$\Rightarrow \hat{S}_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$$

矩阵 $\hat{S}_i$ 被称为 $s=\frac{1}{2}$ 的自旋算符（自旋矩阵），相应的自由度为自旋自由度

Ex 14.2 验证 $[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{S}_k$

Ex 14.3 计算 $\hat{S}^2 \equiv \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + \hat{S}_3^2$

Ex 14.3 研究有限旋转 $e^{\frac{i}{\hbar}\varphi(\hat{L}_3+\hat{S}_3)}$ 作用在 $|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} |\psi_1\rangle \\ |\psi_2\rangle \end{pmatrix}$ 的效果。

14-5

2023年12月8日　20:26

讨论

- V_s 为二维空间，两个基矢可选为 $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ 和 $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$

$$e^{\frac{i}{\hbar}\varphi\hat{S}_3}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=e^{i\frac{\varphi}{2}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$e^{\frac{i}{\hbar}\varphi\hat{S}_3}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=e^{-i\frac{\varphi}{2}}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

两个基矢获得的相位相反.

- 当 $\varphi=2\pi$ 时，$\langle xyz|\Psi\rangle=\begin{pmatrix}\psi_1(r,\theta,\phi)\\ \psi_2(r,\theta,\phi)\end{pmatrix}$

$$\Rightarrow \langle xyz|e^{\frac{i}{\hbar}\varphi(\hat{L}_3+\hat{S}_3)}|\Psi\rangle=\begin{pmatrix}e^{i\pi}\psi_1(r,\theta,\phi+2\pi)\\ e^{-i\pi}\psi_2(r,\theta,\phi+2\pi)\end{pmatrix}$$

$$=-\langle xyz|\Psi\rangle$$

所以绕z轴转 2π 角度会出现个(-1)的因子

- $\hat{L}_i$ 称为轨道角动量，$\hat{S}_i$ 称为自旋角动量

- 当轨道角动量为0时，即 $\hat{L}_i|\Psi\rangle=0$，由于 $\hat{S}_i|\Psi\rangle\neq0$，所以仍然有角动量 $\hat{S}_i$

14-6

2023年12月8日　20:51

至此我们得到了自旋的数学结构

- 自旋角动量和轨道角动量不同 $\hat{L}_i$ 来源于粒子运动，其期望值可以从 $-\infty$ 大变化到 $+\infty$ 大。$\hat{S}_i$ 来源于"内禀"空间，是粒子自身的性质。对于上述的 $|\Psi\rangle$，$\hat{S}_i$ 的期望值只能在 $-\frac{\hbar}{2}$ 到 $\frac{\hbar}{2}$ 之间变化.

- 为了数学记号上的统一，我们定义 $\mathcal{V}_S$ 空间中的态矢为

$$|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_S=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\ ,\ |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_S=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

这里下标 S 表示自旋
不要和第10章的对称态
混淆!!

则前面的 $|\Psi\rangle=\begin{pmatrix}|\psi_1\rangle\\|\psi_2\rangle\end{pmatrix}$ 可写成

$$|\Psi\rangle=|\psi_1\rangle|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_S+|\psi_2\rangle|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_S$$

- 根据直积空间波函数的内积定义，我们只需定义 $\mathcal{V}_S$ 上的内积
$\mathcal{V}_S$ 上的矢量都可写成

$$|\chi_S\rangle=\alpha|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_S+\beta|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_S=\begin{pmatrix}\alpha\\\beta\end{pmatrix}$$

其模平方为

$$\langle\chi_S|\chi_S\rangle=(\alpha^*{}_S\langle\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}|+\beta^*{}_S\langle\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}|)(\alpha|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_S+\beta|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_S)=|\alpha|^2+|\beta|^2$$

或 $$(\alpha^*,\beta^*)\begin{pmatrix}\alpha\\\beta\end{pmatrix}=|\alpha|^2+|\beta|^2$$

- 若 $\hat{H}$ 可以写成 $\mathcal{V}_x\otimes\mathcal{V}_y\otimes\mathcal{V}_z$ 上的 $\hat{H}_{xyz}$ 与 $\mathcal{V}_S$ 上的 $\hat{H}_S$ 的和

$$\hat{H}=\hat{H}_{xyz}+\hat{H}_S$$

则 $\mathcal{V}_x\otimes\mathcal{V}_y\otimes\mathcal{V}_z$ 和 $\mathcal{V}_S$ 空间中的波函数独立演化，此时问题被极大简化。可惜大部分时候 $\hat{H}$ 不能写成这种形式

14-7

2023年12月8日 21:39

- V_S上的算符

由于V_S上没有坐标的定义，也无法定义求导，所以V_S上的算符相对简单，均可表示成2x2的矩阵

由Ex 1.9可知，所有2x2复矩阵都可以用$\mathbb{1}_{2\times2}$和Pauli矩阵σ_i表示

Ex 14.4 证明Pauli矩阵的如下性质

(1) $Tr[\sigma_i]=0$

(2) $\sigma_i\sigma_j=\delta_{ij}+i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$

(3) $Tr[\sigma_i\sigma_j]=2\delta_{ij}$

(4) $[\sigma_i,\sigma_j]=2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$

(5) $\{\sigma_i,\sigma_j\}\equiv\sigma_i\sigma_j+\sigma_j\sigma_i=2\delta_{ij}$

Ex 14.5 将矩阵 $M=\begin{pmatrix}\alpha & \beta\\ \gamma & \tau\end{pmatrix}$ 用$\mathbb{1}_{2\times2}$和σ_i展开

Ex 14.6 利用Ex 14.4 (2)，求绕$\hat{n}=(\sin\theta\cos\phi,\sin\theta\sin\phi,\cos\theta)$转动$\varphi$角的操作$e^{\frac{i}{\hbar}\varphi\hat{n}\cdot\vec{S}}$在自旋空间上的矩阵表示

Ex 14.7 定义$|\hat{n},+\rangle$和$|\hat{n},-\rangle$为自旋空间中$\hat{n}\cdot\hat{S}$的本征态，$|\hat{n},+\rangle$对应的本征值为正值，$|\hat{n}-\rangle$对应的本征值为负值，

求$|\hat{n},\pm\rangle$的矩阵表示和相应的本征值.

14-8

2023年12月8日 21:47

§14.3 自旋与外磁场的相互作用

由 Ex 14.1 的结果，在"弱"匀强磁场中，

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} - \frac{q}{2M} \vec{B}\cdot\hat{\vec{L}}$$

因为 $\vec{S}$ 也有角动量 $\vec{L}$ 的性质，猜测

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} - \frac{q}{2M} \vec{B}\cdot\hat{\vec{L}} - \frac{q}{2M} g \vec{B}\cdot\hat{\vec{S}}$$

其中 g 为常数.

实验值 $g_{\text{exp}} = 2[1.0011596521884(\pm 43)]$

注：在非相对论量子力学框架中，$\vec{B}\cdot\vec{S}$ 项是手加上的.

这一项可以从 Dirac 方程得到

Dirac 方程给出 $g=2$

理论值 $g_{\text{theory}} = 2[1.001159652140(\pm 28)]$

g 和 2 的偏离可以通过量子场论进行计算

下面我们取 $g=2$

Ex 14.8 有静止电子处于量子态 $|\hat{n},+\rangle$，在 $t=0$ 时刻在该电子周围产生匀强磁场 $\vec{B}=B\hat{e}_z$，求该电子的态矢随时间变化

2023年12月14日 18:36

Ex 14.9 $\hat{n}=(\sin\theta\cos\phi,\ \sin\theta\sin\phi,\ \cos\theta)$

$\hat{n}\cdot\vec{S}$ 的本征态

$$|\hat{n},+\rangle=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi}\end{pmatrix}$$

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

(1) 写出 $|\hat{e}_x,\pm\rangle$，$|\hat{e}_z,\pm\rangle$ 的列向量表示

(2) 若电子处于 $|\hat{e}_x,+\rangle$ 的态上，对其测量 S_1，计算可能的测量值、概率、测后的态

(3) 若电子处于 $|\hat{e}_x,+\rangle$ 的态上，对其测量 S_3，计算可能的测量值、概率、测后的态

(4) 取(3)中测量值为正数的态，测量 S_1，计算可能的测量值、概率、测后的态

- Stern-Gerlach实验再认识

考虑一束电子，动量为 $p\hat{e}_y$，飞入沿 x 方向的磁场，磁场沿 x 方向有个小的梯度

$$\vec{B}_1=B_1(x)\hat{e}_x\approx(C_1+C_2x)\hat{e}_x$$

其中 $C_1=B_1(0)$，$C_2=\frac{\partial B_1}{\partial x}\Big|_{x=0}$

哈密顿量为 $$\hat{H}_1=\frac{\hat{p}^2}{2M}+\frac{e}{2M}(C_1+C_2x)\hat{S}_1$$

和本实验相关的 $\hat{H}_1$ 的本征态为 $|p\hat{e}_y\rangle\otimes|\hat{e}_x,+\rangle$

和 $|p\hat{e}_y\rangle\otimes|\hat{e}_x,-\rangle$

14-10

2023年12月14日 19:21

射入前电子的态矢为

$$|\psi_1\rangle = a|p\hat{e}_y\rangle \otimes |\hat{e}_x,+\rangle + b|p\hat{e}_y\rangle \otimes |\hat{e}_x,-\rangle$$

$$= |p\hat{e}_y\rangle \otimes (a|\hat{e}_x,+\rangle + b|\hat{e}_x,-\rangle)$$ 其中 $|a|^2+|b|^2=1$

将 $\frac{e}{2M}(C_1+C_2x)\hat{S}_1$ 当成等效势能，则相应的"力算符"为

$$-\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{e}{2M}(C_1+C_2x)\hat{S}_1\right) = -\frac{e}{2M}C_2\hat{S}_1$$

该"力算符"对于 $|\hat{e}_x,+\rangle$ 和 $|\hat{e}_x,-\rangle$ 的期望值不同

$$\langle\hat{e}_x,+|\left(-\frac{eC_2}{2M}\hat{S}_1\right)|\hat{e}_x,+\rangle = -\frac{eC_2}{2M}\frac{\hbar}{2}$$ $-\hat{e}_x$ 方向

$$\langle\hat{e}_x,-|\left(-\frac{eC_2}{2M}\hat{S}_1\right)|\hat{e}_x,-\rangle = \frac{eC_2}{2M}\frac{\hbar}{2}$$ $\hat{e}_x$ 方向

所以 $|\psi_1\rangle$ 在磁场作用下会分成两束，相当于对 $\hat{S}_1$ 进行测量

$\Rightarrow$ 一束电子分为2束，$|a|^2$ 概率向 $-\hat{e}_x$ 方向偏离

$|b|^2$ - - - - $\hat{e}_x$ - - - - - - -

若取向 $-\hat{e}_x$ 偏离的一束，其电子的态为

$$|\psi_2\rangle = |p\hat{e}_y\rangle \otimes |\hat{e}_x,+\rangle$$

因为沿着 $\hat{e}_x$ 方向动量太小，近似取 0

再让 $|\psi_2\rangle$ 飞入沿 z 方向的磁场

$$\vec{B}_2 = B_2(z)\hat{e}_z \approx (d_1+d_2z)\hat{e}_z$$

其中 $d_1 = B_2(0)$

$d_2 = \frac{\partial B_2}{\partial z}\Big|_{z=0}$

哈密顿量为

$$\hat{H}_2 = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{e}{2M}(d_1+d_2z)\hat{S}_3$$

14-11

2023年12月14日 19:36

和本实验相关的 $\hat{H}_2$ 本征态为 $|p\hat{e}_y\rangle\otimes|\hat{e}_z,+\rangle$

和 $|p\hat{e}_y\rangle\otimes|\hat{e}_z,-\rangle$

和上面类似，一束电子分成两束，相当于测量 $\hat{S}_3$.

由 Ex 14.9. $\frac{1}{2}$ 概率偏向z的正方向，态为 $|p\hat{e}_y\rangle\otimes|\hat{e}_z,-\rangle$

$\frac{1}{2}$ —— —— —— 负 ······ $|p\hat{e}_y\rangle\otimes|\hat{e}_z,+\rangle$

Ex 14.10 在氢原子中考虑电子自旋，哈密顿量为

$$\hat{H}=\frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M}+\frac{e}{2M}\vec{B}\cdot\hat{\vec{L}}+\frac{e}{M}\vec{B}\cdot\hat{\vec{S}}+V(|\hat{\vec{x}}|)$$

分析氢原子在匀强磁场 $\vec{B}=B\hat{e}_z$ 的电子能谱.