

Rozdział 36

(U.15) Spin 1/2

36.1 Spin 1/2 w polu magnetycznym

36.1.1 Wprowadzenie

Będziemy tu rozważać cząstkę obdarzoną spinem 1/2 oddziaływającą z zewnętrznym polem magnetycznym. Cząstką taką może być np. atom srebra używany w doświadczeniu Sterna-Gerlacha. Spin atomu jest związany ze spinem elektronu walencyjnego. Stan takiego układu można opisać funkcją falową – spinorem postaci (17.73). Nie będziemy jednak badać przestrzennej (orbitalnej) części. Skoncentrujemy się na zmiennych spinowych, które są niezależne. Po prostu będziemy mówić o cząstce ze spinem 1/2, nie precyzując przy tym jaką cząstkę mamy na myśli. Dla ustalenia uwagi możemy myśleć o atomie srebra, lub o innej cząstce, której spin związany jest z elektronem.

Cząstka taka posiada spinowy moment magnetyczny

$$\vec{\mu} = g \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S} = -g \frac{|e|\hbar}{2m_e} \vec{S}, \quad (36.1)$$

gdzie g – współczynnik giromagnetyczny (równy 2 dla elektronu, a na ogół zależny od typu badanej cząstki). $\vec{S} = \frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma}$ jest oczywiście operatorem spinu 1/2. Energia oddziaływania momentu magnetycznego z polem o indukcji \vec{B} wynosi

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{g|e|\hbar}{2m_e} \vec{S} \cdot \vec{B}. \quad (36.2)$$

Na tej podstawie określimy hamiltonian spinu 1/2 w polu magnetycznym

$$\hat{H} = \frac{g|e|\hbar}{2m_e} \vec{S} \cdot \vec{B}. \quad (36.3)$$

Rozważania nasze mają (jak i poprzednio) charakter półklasyczny, bowiem pole magnetyczne bierzemy jako zadaną funkcję położenia i czasu. Ponieważ nie badamy tu ruchu cząstki, a tylko jej stan spinowy, więc zależność pola \vec{B} od położenia jest czysto parametryczna i nie ma większego znaczenia. Hamiltonian (36.3) z różnie zadanym polem \vec{B} jest często stosowanym modelem wielu różnorodnych zjawisk. Model ten stosuje się, gdy przestrzeń stanów układu można ograniczyć do przestrzeni dwuwymiarowej (układ o dwóch stanach). Skupimy tu jednak uwagę na spinie 1/2.

36.1.2 Pole statyczne i pole zmienne w czasie

Pole magnetyczne $\vec{B} = \vec{B}(t)$ występujące w hamiltonianie (36.3) można zadawać na różne sposoby. W rozdziale tym rozważymy sytuację, w której

$$\vec{B} = (B_1 \cos \omega t, B_1 \sin \omega t, B_0). \quad (36.4)$$

Pole to jest superpozycją dwóch pól. Wzdłuż osi z mamy pole statyczne o indukcji B_0 , zaś w płaszczyźnie xy pole o amplitudzie B_1 wirujące wokół osi z . To drugie pole można powiązać z polem spolaryzowanej kołowo fali elektromagnetycznej poruszającej się w kierunku osi z . Zwykle częstość takiej fali leży w radiowym zakresie widma. Podstawiając pole (36.4) do (36.3), otrzymujemy hamiltonian

$$\hat{H} = \frac{g|e|\hbar}{2m_e} (S_x B_1 \cos \omega t + S_y B_1 \sin \omega t + S_z B_0). \quad (36.5)$$

Wprowadzamy oznaczenia

$$\omega_0 = \frac{g|e|\hbar}{2m_e} B_0, \quad \omega_1 = \frac{g|e|\hbar}{2m_e} B_1, \quad (36.6)$$

które mają (co łatwo sprawdzić) wymiar częstości (prędkości kołowej), tj. $[\omega_{0,1}] = s^{-1}$. Wobec tego hamiltonian zapisujemy jako

$$\hat{H} = \omega_0 S_z + \omega_1 (S_x \cos \omega t + S_y \sin \omega t). \quad (36.7)$$

Wyrażając operatory spinu przez macierze Pauliego nadajemy hamiltonianowi postać macierzy

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 (\cos \omega t - i \sin \omega t) \\ \omega_1 (\cos \omega t + i \sin \omega t) & -\omega_0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t} \\ \omega_1 e^{i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (36.8)$$

36.1.3 Równanie Schrödingera

Celem naszych rozważań jest zbadanie ewolucji stanu spinowego $|\chi(t)\rangle$ pod wpływem pola magnetycznego (36.4). Szukać więc będziemy rozwiązania równania Schrödingera

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\chi(t)\rangle = \hat{H} |\chi(t)\rangle, \quad (36.9)$$

gdzie \hat{H} jest hamiltonianem (36.8). Rozwiązania mają spełniać warunek początkowy, zadany w ogólny sposób

$$|\chi(t_0)\rangle = \begin{pmatrix} \chi_1(t_0) \\ \chi_2(t_0) \end{pmatrix}, \quad (36.10)$$

gdzie $\chi_j(t_0)$ są liczbami zespolonymi, spełniającymi warunek unormowania, to jest

$$\langle \chi(t_0) | \chi(t_0) \rangle = |\chi_1(t_0)|^2 + |\chi_2(t_0)|^2 = 1. \quad (36.11)$$

Równanie Schrödingera z hamiltonianem (36.8) przybiera postać

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \chi_1(t) \\ \chi_2(t) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t} \\ \omega_1 e^{i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_1(t) \\ \chi_2(t) \end{pmatrix}, \quad (36.12)$$

równoważną następującemu układowi równań

$$\begin{aligned} i \frac{d\chi_1(t)}{dt} &= \frac{\omega_0}{2} \chi_1(t) + \frac{\omega_1}{2} e^{-i\omega t} \chi_2(t) \\ i \frac{d\chi_2(t)}{dt} &= \frac{\omega_1}{2} e^{i\omega t} \chi_1(t) - \frac{\omega_0}{2} \chi_2(t), \end{aligned} \quad (36.13)$$

który będziemy teraz rozwiązywać przy warunku początkowym (36.10). Układ (36.13) jest układem sprzężonych równań różniczkowych pierwszego rzędu z zależnymi od czasu współczynnikami. Pierwszy krok rozwiązania polega na pozbyciu się zależności od czasu we współczynnikach w prawych stronach równań. W tym celu oznaczamy

$$\begin{aligned}\chi_1(t) &= e^{-i\omega t/2} C_1(t) \\ \chi_2(t) &= e^{i\omega t/2} C_2(t),\end{aligned}\tag{36.14}$$

Gdzie $C_j(t)$ są nowymi, poszukiwanymi funkcjami czasu. Zwróćmy uwagę, że warunek początkowy (36.10) możemy zapisać

$$|\chi(t_0)\rangle = \begin{pmatrix} \chi_1(t_0) \\ \chi_2(t_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\omega_0 t_0/2} C_1(0) \\ e^{i\omega_0 t_0/2} C_2(0) \end{pmatrix}.\tag{36.15}$$

a więc innymi słowy mamy

$$\begin{aligned}C_1(t_0) &= \chi_1(t_0) e^{i\omega_0 t_0/2} \\ C_2(t_0) &= \chi_2(t_0) e^{-i\omega_0 t_0/2}.\end{aligned}\tag{36.16}$$

Podstawiając wyrażenia (36.14) do równań (36.13) otrzymujemy

$$\begin{aligned}\frac{\omega}{2} e^{-i\omega t/2} C_1(t) + i e^{-i\omega t/2} \dot{C}_1(t) &= \frac{\omega_0}{2} e^{-i\omega t/2} C_1(t) + \frac{\omega_1}{2} e^{-i\omega t/2} C_2(t) \\ -\frac{\omega}{2} e^{i\omega t/2} C_2(t) + i e^{i\omega t/2} \dot{C}_2(t) &= \frac{\omega_1}{2} e^{i\omega t/2} C_1(t) - \frac{\omega_0}{2} e^{i\omega t/2} C_2(t).\end{aligned}\tag{36.17}$$

Dzięki podstawieniu (36.14) czynniki wykładnicze się skracają, współczynniki po prawych stronach stają się niezależne od czasu. Porządkując, dostajemy

$$\begin{aligned}i \dot{C}_1(t) &= \frac{\omega_0 - \omega}{2} C_1(t) + \frac{\omega_1}{2} C_2(t) \\ i \dot{C}_2(t) &= \frac{\omega_1}{2} C_1(t) - \frac{\omega_0 - \omega}{2} C_2(t).\end{aligned}\tag{36.18}$$

Wprowadzamy teraz pożyteczne oznaczenie

$$\Delta = \omega - \omega_0\tag{36.19}$$

i układ równań (36.18) zapisujemy w postaci

$$\begin{aligned}\dot{C}_1(t) &= \frac{i\Delta}{2} C_1(t) - \frac{i\omega_1}{2} C_2(t) \\ \dot{C}_2(t) &= -\frac{i\omega_1}{2} C_1(t) - \frac{i\Delta}{2} C_2(t).\end{aligned}\tag{36.20}$$

Otrzymane równania są nadal sprzężone, lecz ich współczynniki są już niezależne od czasu. Rozwiązania można poszukiwać na różne sposoby. Można, na przykład, zróżniczkować układ, a następnie wykorzystując wyjściowe równania, doprowadzić go do dwóch równań drugiego rzędu dla każdej z funkcji $C_j(t)$ oddzielnie. Omówimy tu jednak inną metodę, którą można stosować do układów równań różniczkowych pierwszego rzędu o większej liczbie nieznanymi funkcji (i o odpowiednio większej liczbie równań tworzących układ). Wprowadzamy tymczasowe (pomocnicze) oznaczenia

$$|\phi(t)\rangle = \begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{pmatrix}, \quad M = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} i\Delta & -\frac{1}{2} i\omega_1 \\ -\frac{1}{2} i\omega_1 & -\frac{1}{2} i\Delta \end{pmatrix}\tag{36.21}$$

i zapiszmy układ (36.20) w formalnej, macierzowej postaci

$$\frac{d}{dt} |\phi(t)\rangle = M |\phi(t)\rangle\tag{36.22}$$

przy warunku początkowym wynikającym z (36.15).

36.1.4 Dygresja matematyczna

Przypomnimy tu zasadnicze etapy rozwiązania układu $n \geq 2$ równań różniczkowych pierwszego rzędu z niezależnymi od czasu współczynnikami

$$\frac{d}{dt} f_j(t) = \sum_{k=1}^n M_{jk} f_k(t), \quad j = 1, 2, \dots, n, \quad (36.23)$$

gdzie $f_j(t)$ stanowi zbiór n nieznanych funkcji, zaś M_{jk} jest macierzą liczbową $n \times n$ o stałych, i na ogół zespolonych, współczynnikach. Zapisując nieznane funkcje w postaci "słupka", możemy go utożsamiać z wektorem $|f(t)\rangle \in \mathbb{C}^n$. Dzięki temu równania (36.23) zapisujemy w formalnej postaci macierzowej

$$\frac{d}{dt} |f(t)\rangle = M |f(t)\rangle. \quad (36.24)$$

Oczywiście nasz układ (36.22) jest szczególnym przypadkiem $n = 2$. Niech jeszcze $|f(t_0)\rangle$ oznacza wektor, będący warunkiem początkowym dla badanego równania.

- Macierz M jest stała, możemy więc formalnie scałkować równanie (36.24) otrzymując

$$|f(t)\rangle = e^{M(t-t_0)} |f(t_0)\rangle. \quad (36.25)$$

Elementarne różniczkowanie pozwala sprawdzić, że rzeczywiście mamy rozwiązanie równania, spełniające także warunek początkowy. Funkcja macierzy jest zdefiniowana poprzez rozwinięcie w szereg. Obliczenie w ten sposób macierzy e^{Mt} jest wykonalne jedynie w bardzo nielicznych przypadkach. Można jednak tego uniknąć, wybierając zupełnie inny sposób podejścia.

- Znajdujemy wartości i wektory własne macierzy M , tj. rozwiązujemy równanie

$$M|g_j\rangle = \lambda_j|g_j\rangle \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (36.26)$$

Dla prostoty, założymy, że wszystkie wartości własne są różne – brak degeneracji. W rezultacie znamy zbiory liczb $\{\lambda_j\}_{j=1}^n$ i wektorów $\{|g_j\rangle\}_{j=1}^n$, przy czym wektory $|g_j\rangle$ wygodnie jest unormować. W przypadku zdegenerowanych wartości własnych poniższa procedura, przy pewnych modyfikacjach, także może być stosowana.

- Rozkładamy warunek początkowy na wektory własne macierzy M

$$|f(t_0)\rangle = \sum_{j=1}^n a_j |g_j\rangle, \quad (36.27)$$

czyli znajdujemy (rozwiązując liniowy układ równań) zbiór współczynników $\{a_j\}_{j=1}^n$.

- Do formalnego rozwiązania (36.25) podstawiamy rozkład (36.27)

$$|f(t)\rangle = e^{M(t-t_0)} \sum_{j=1}^n a_j |g_j\rangle = \sum_{j=1}^n a_j e^{M(t-t_0)} |g_j\rangle. \quad (36.28)$$

Funkcja macierzy M działa na wektory własne tejże macierzy, zatem

$$|f(t)\rangle = \sum_{j=1}^n a_j e^{\lambda_j(t-t_0)} |g_j\rangle, \quad (36.29)$$

co kończy procedurę rozwiązania równania (36.24), bowiem wszystkie wielkości stojące po prawej stronie są już znane z poprzednich etapów.

Szczegóły (dowody) omówionego sposobu rozwiązywania układu równań różniczkowych pierwszego rzędu (o stałych współczynnikach) można znaleźć w podręcznikach analizy lub teorii równań różniczkowych.

Naszkicowaną tu procedurę zastosujemy do równania Schrödingera (36.22).

36.1.5 Rozwiązanie równania (36.22)

Zastosowanie omówionej metody rozwiązywania układu równań różniczkowych musimy zacząć od zagadnienia własnego dla macierzy układu.

1. Wartości własne

Rozpoczynamy więc od równania na wartości własne macierzy M danej w (36.21)

$$\det \begin{pmatrix} \frac{1}{2} i\Delta - \lambda & -\frac{1}{2} i\omega_1 \\ -\frac{1}{2} i\omega_1 & -\frac{1}{2} i\Delta - \lambda \end{pmatrix} = 0, \quad (36.30)$$

skąd wynika równanie kwadratowe względem niewiadomej λ

$$-\left(\frac{1}{2} i\Delta + \lambda\right) \left(\frac{1}{2} i\Delta - \lambda\right) + \frac{1}{4} \omega_1^2 = 0. \quad (36.31)$$

Rozwiązanie trójmianu jest elementarne, wyniki są następujące

$$\lambda_{1,2} = \pm \frac{1}{2} i\Omega, \quad \text{gdzie} \quad \Omega = \sqrt{\Delta^2 + \omega_1^2}. \quad (36.32)$$

2. Wektory własne

Pierwszy wektor własny

$$|\phi_1\rangle = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad (36.33)$$

macierzy M dla wartości własnej $\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} i\Omega$ obliczamy z równania

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} i\Delta - \frac{1}{2} i\Omega & -\frac{1}{2} i\omega_1 \\ -\frac{1}{2} i\omega_1 & -\frac{1}{2} i\Delta - \frac{1}{2} i\Omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 0. \quad (36.34)$$

Równoważny układ równań jest liniowo zależny, bierzemy tylko jedno równanie, z którego dostajemy

$$y = x \frac{\Delta - \Omega}{\omega_1} \quad \Rightarrow \quad |\phi_1\rangle = x \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\Delta - \Omega}{\omega_1} \end{pmatrix}. \quad (36.35)$$

Normujemy uzyskany wektor własny, (pozbywając się dowolnej liczby x)

$$1 = \langle \phi_1 | \phi_1 \rangle = |x|^2 \frac{2\Omega(\Omega - \Delta)}{\omega_1^2} \quad \Rightarrow \quad |x| = \frac{\omega_1}{\sqrt{2\Omega(\Omega - \Delta)}}, \quad (36.36)$$

gdzie skorzystaliśmy z określenia Ω w (36.32). Wybierając fazę równą zeru otrzymujemy

$$|\phi_1\rangle = \frac{\omega_1}{\sqrt{2\Omega(\Omega - \Delta)}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\Delta - \Omega}{\omega_1} \end{pmatrix}. \quad (36.37)$$

Druga wartość własna macierzy M różni się o pierwszej jedynie znakiem. A zatem drugi wektor własny otrzymamy z pierwszego po prostu dokonując zamiany $\Omega \rightarrow -\Omega$. Wobec tego

$$|\phi_2\rangle = \frac{\omega_1}{\sqrt{2\Omega(\Omega + \Delta)}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\Omega + \Delta}{\omega_1} \end{pmatrix}. \quad (36.38)$$

3. Warunek początkowy i wektory własne

Warunek początkowy dla równań (36.20) musimy rozłożyć na wektory własne macierzy M . Odpowiada to równaniu

$$\begin{pmatrix} C_1(t_0) \\ C_2(t_0) \end{pmatrix} = a_1 |\phi_1\rangle + a_2 |\phi_2\rangle, \quad (36.39)$$

który musimy rozwiązać względem współczynników a_j . Podstawiając wektory własne (36.37) i (36.38) dostajemy układ równań

$$\begin{aligned} C_1(t_0) &= \frac{a_1 \omega_1}{\sqrt{2\Omega(\Omega - \Delta)}} + \frac{a_2 \omega_1}{\sqrt{2\Omega(\Omega + \Delta)}} \\ C_2(t_0) &= -\frac{a_1 (\Omega - \Delta)}{\sqrt{2\Omega(\Omega - \Delta)}} + \frac{a_2 (\Omega + \Delta)}{\sqrt{2\Omega(\Omega + \Delta)}}. \end{aligned} \quad (36.40)$$

Rozwiązanie układu dwóch równań z dwiema niewiadomymi nie stanowi żadnego problemu. Wyniki są następujące

$$\begin{aligned} a_1 &= \sqrt{\frac{\Omega - \Delta}{2\Omega}} \left[\frac{\Omega + \Delta}{\omega_1} C_1(t_0) - C_2(t_0) \right], \\ a_2 &= \sqrt{\frac{\Omega + \Delta}{2\Omega}} \left[\frac{\Omega - \Delta}{\omega_1} C_1(t_0) + C_2(t_0) \right]. \end{aligned} \quad (36.41)$$

4. Ostatni krok rozwiązania

Mamy już wszystkie elementy konieczne do skonstruowania rozwiązania naszego problemu, tj. równania (36.22). Zgodnie z przepisem (36.29) podstawiamy obliczone współczynniki a_1 i a_2 oraz wartości i wektory własne. W ten sposób otrzymujemy

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{pmatrix} &= a_1 e^{i\Omega(t-t_0)/2} |\phi_1\rangle + a_2 e^{-i\Omega(t-t_0)/2} |\phi_2\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\Omega - \Delta}{2\Omega}} \left[C_1(t_0) \frac{\Omega + \Delta}{\omega_1} - C_2(t_0) \right] e^{i\Omega(t-t_0)/2} |\phi_1\rangle \\ &\quad + \sqrt{\frac{\Omega + \Delta}{2\Omega}} \left[C_1(t_0) \frac{\Omega - \Delta}{\omega_1} + C_2(t_0) \right] e^{-i\Omega(t-t_0)/2} |\phi_2\rangle \\ &= \frac{\omega_1}{2\Omega} \left[C_1(t_0) \frac{\Omega + \Delta}{\omega_1} - C_2(t_0) \right] e^{i\Omega(t-t_0)/2} \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{\Omega - \Delta}{\omega_1} \end{pmatrix} \\ &\quad + \frac{\omega_1}{2\Omega} \left[C_1(t_0) \frac{\Omega - \Delta}{\omega_1} + C_2(t_0) \right] e^{-i\Omega(t-t_0)/2} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\Omega + \Delta}{\omega_1} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (36.42)$$

Formuła ta jest dość złożona, jednak wiele składników można pogrupować tak, że funkcje wykładnicze $e^{\pm i\Omega t/2}$ dadzą się wyrazić przez funkcje trygonometryczne. W rezultacie przekształceń otrzymujemy

$$\begin{aligned} C_1(t) &= C_1(t_0) \cos\left(\frac{1}{2}\Omega(t - t_0)\right) \\ &\quad + \frac{i}{\Omega} [\Delta C_1(t_0) - \omega_1 C_2(t_0)] \sin\left(\frac{1}{2}\Omega(t - t_0)\right), \\ C_2(t) &= C_2(t_0) \cos\left(\frac{1}{2}\Omega(t - t_0)\right) \\ &\quad - \frac{i}{\Omega} [\omega_1 C_1(t_0) + \Delta C_2(t_0)] \sin\left(\frac{1}{2}\Omega(t - t_0)\right). \end{aligned} \quad (36.43)$$

5. Zebranie wyników

Rozwiązanie równania Schrödingera (36.9) z hamiltonianem (36.8) dane jest przez spinor

$$|\chi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \chi_1(t) \\ \chi_2(t) \end{pmatrix}, \quad (36.44)$$

o składowych wynikających z równań (36.14), warunków początkowych (36.15), które trzeba wykorzystać w rozwiązaniach (36.43). Otrzymujemy wtedy

$$\begin{aligned} \chi_1(t) &= e^{-i\omega t/2} \left\{ \chi_1(t_0) e^{i\omega t_0/2} \cos\left(\frac{1}{2}\Omega(t-t_0)\right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{i}{\Omega} [\Delta \chi_1(t_0) e^{i\omega t_0/2} - \omega_1 \chi_2(t_0) e^{-i\omega t_0/2}] \sin\left(\frac{1}{2}\Omega(t-t_0)\right) \right\}, \\ \chi_2(t) &= e^{i\omega t/2} \left\{ \chi_2(t_0) e^{-i\omega t_0/2} \cos\left(\frac{1}{2}\Omega(t-t_0)\right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{i}{\Omega} [\omega_1 \chi_1(t_0) e^{i\omega t_0/2} + \Delta \chi_2(t_0) e^{-i\omega t_0/2}] \sin\left(\frac{1}{2}\Omega(t-t_0)\right) \right\}, \end{aligned} \quad (36.45)$$

gdzie obowiązują oznaczenia (36.6), a także

$$\Delta = \omega - \omega_0, \quad \Omega = \sqrt{\Delta^2 + \omega_1^2}. \quad (36.46)$$

Formuły powyższe stanowią ściśle rozwiązanie równania Schrödingera dla spinu 1/2 oddziałującego z polem magnetycznym (36.4). Liczby $\chi_1(0)$ i $\chi_2(0)$ są składowymi dowolnego, unormowanego stanu początkowego spinu. Rozwiązania powyższe wygodnie jest czasem zapisać w postaci

$$\begin{aligned} \chi_1(t) &= \chi_1(t_0) e^{-i\omega(t-t_0)/2} \left[\cos\left(\frac{1}{2}\Omega(t-t_0)\right) + \frac{i\Delta}{\Omega} \sin\left(\frac{1}{2}\Omega(t-t_0)\right) \right] \\ &\quad - \chi_2(t_0) e^{-i\omega(t+t_0)/2} \left(\frac{i\omega_1}{\Omega} \right) \sin\left(\frac{1}{2}\Omega(t-t_0)\right), \\ \chi_2(t) &= -\chi_1(t_0) e^{i\omega(t+t_0)/2} \left(\frac{i\omega_1}{\Omega} \right) \sin\left(\frac{1}{2}\Omega(t-t_0)\right) \\ &\quad + \chi_2(t_0) e^{i\omega(t-t_0)/2} \left[\cos\left(\frac{1}{2}\Omega(t-t_0)\right) - \frac{i\Delta}{\Omega} \sin\left(\frac{1}{2}\Omega(t-t_0)\right) \right] \end{aligned} \quad (36.47)$$

Bezpośrednim rachunkiem (choć jest to dość żmudne) można sprawdzić, że uzyskane rozwiązanie jest unormowane, tzn. że dla dowolnej chwili czasu $t > 0$ mamy

$$\langle \chi(t) | \chi(t) \rangle = |\chi_1(t)|^2 + |\chi_2(t)|^2 = 1. \quad (36.48)$$

Nie jest to stwierdzenie nieoczekiwane, bowiem wiadomo, że równanie Schrödingera nie zmienia normy wektora stanu. Ogólne rozwiązania posłużą nam do dyskusji pewnych przypadków szczególnych.

36.1.6 Pole statyczne. Precesja Larmora

Przypadek pola statycznego odpowiada nieobecności fali elektromagnetycznej, co otrzymamy wybierając w (36.4) $B_1 = 0$ i $\omega = 0$. Zgodnie z oznaczeniami (36.46) mamy wtedy $\Delta = -\omega_0$ oraz $\Omega = \omega_0$. Ogólne rozwiązania (36.45) redukują się wówczas do (dla prostoty kładziemy $t_0 = 0$)

$$\begin{aligned} \chi_1(t) &= \chi_1(0) \cos\left(\frac{1}{2}\omega_0 t\right) - \chi_2(0) \sin\left(\frac{1}{2}\omega_0 t\right) = \chi_1(0) e^{-i\omega_0 t/2}, \\ \chi_2(t) &= \chi_2(0) \cos\left(\frac{1}{2}\omega_0 t\right) + \chi_1(0) \sin\left(\frac{1}{2}\omega_0 t\right) = \chi_2(0) e^{i\omega_0 t/2}. \end{aligned} \quad (36.49)$$

Określmy teraz (do tej pory dowolny) stan początkowy. Przyjmijmy, że odpowiada on spinowi "w górę" wzdłuż osi $\vec{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$, a więc według (17.60) ma postać

$$|\chi(0)\rangle = |+\rangle_{\vec{n}} = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \cos(\theta/2) \\ e^{i\varphi/2} \sin(\theta/2) \end{pmatrix}. \quad (36.50)$$

Wobec tego, z powyższych równań stan spinowy w polu statycznym dany jest jako

$$|\chi(t)\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i(\varphi+\omega_0 t)/2} \cos(\theta/2) \\ e^{i(\varphi+\omega_0 t)/2} \sin(\theta/2) \end{pmatrix}. \quad (36.51)$$

Stan początkowy jest to stan, który (z prawdopodobieństwem 1) odpowiada rzutowi spinu na oś \vec{n} równemu $+\frac{1}{2}\hbar$. Stan $|\chi(t)\rangle$ zaś odpowiada sytuacji, gdy kierunek $\vec{n}(t)$ staje się zależny od czasu poprzez zmienne w czasie kąty

$$\theta(t) = \theta = \text{const.}, \quad \varphi(t) = \varphi + \omega_0 t. \quad (36.52)$$

Możemy więc powiedzieć, że rzut spinu na chwilową oś $\vec{n}(t)$ zawsze (z prawdopodobieństwem 1) wynosi $\frac{1}{2}\hbar$. Oś $\vec{n}(t)$ wiruje wokół osi z po tworzącej stożka o kącie rozwarcia równym 2θ , z prędkością kątową wynoszącą ω_0 . A więc badany spin dokonuje precesji wokół osi z – jest to właśnie kwantowa precesja Larmora. Nietrudno sprawdzić, że w tej sytuacji rzut spinu na oś z jest stałą ruchu

$$\begin{aligned} \langle \chi(t) | S_z | \chi(t) \rangle &= (\chi_1^*(t), \chi_2^*(t)) \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\hbar & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\hbar \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_1(t) \\ \chi_2(t) \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} (|\chi_1(t)|^2 - |\chi_2(t)|^2) \\ &= \frac{\hbar}{2} \left[\cos^2\left(\frac{1}{2}\theta\right) - \sin^2\left(\frac{1}{2}\theta\right) \right] = \frac{\hbar}{2} \cos \theta = \text{const.}, \end{aligned} \quad (36.53)$$

co ewidentnie nie zależy od czasu. Fakt ten wynika także stąd, że w polu statycznym hamiltonian $\hat{H} = \omega_0 S_z$. Operator S_z komutuje z hamiltonianem, czyli rzeczywiście musi być stałą ruchu – jego wartość oczekiwana nie zależy od czasu, tak jak to otrzymaliśmy z bezpośrednich obliczeń. Analogicznie pokażemy, że

$$\begin{aligned} \langle \chi(t) | S_x | \chi(t) \rangle &= \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos(\varphi + \omega_0 t), \\ \langle \chi(t) | S_y | \chi(t) \rangle &= \frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin(\varphi + \omega_0 t). \end{aligned} \quad (36.54)$$

A zatem wartości oczekiwane rzutu spinu na osie x i y są jawnie zależne od czasu. W czasie długotrwałych pomiarów wartości te zwykle uśredniają się do zera.

36.1.7 Oscylacje Rabiego

Wracamy do dyskusji ogólnych rozwiązań (36.45). Dla jej uproszczenia założmy, że w chwili początkowej spin miał kierunek "w dół", tj.

$$|\chi(0)\rangle = \begin{pmatrix} \chi_1(0) \\ \chi_2(0) \end{pmatrix} = |-\rangle_z = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (36.55)$$

wówczas dla czasów późniejszych, z (36.45) mamy

$$\begin{aligned} \chi_1(t) &= -e^{-i\omega t/2} \left(\frac{i\omega_1}{\Omega} \right) \sin\left(\frac{1}{2}\Omega t\right) \\ \chi_2(t) &= e^{i\omega t/2} \left[\cos\left(\frac{1}{2}\Omega t\right) - \frac{i\Delta}{\Omega} \sin\left(\frac{1}{2}\Omega t\right) \right]. \end{aligned} \quad (36.56)$$

Oczywiście $\chi_1(t)$ i $\chi_2(t)$ są to amplitudy prawdopodobieństwa tego, że spin jest "w górę" lub "w dół" (czyli, że zmierzone wartości rzutu spinu na oś z wynoszą odpowiednio $+\frac{1}{2}\hbar$ lub $-\frac{1}{2}\hbar$). Odpowiednie prawdopodobieństwa to

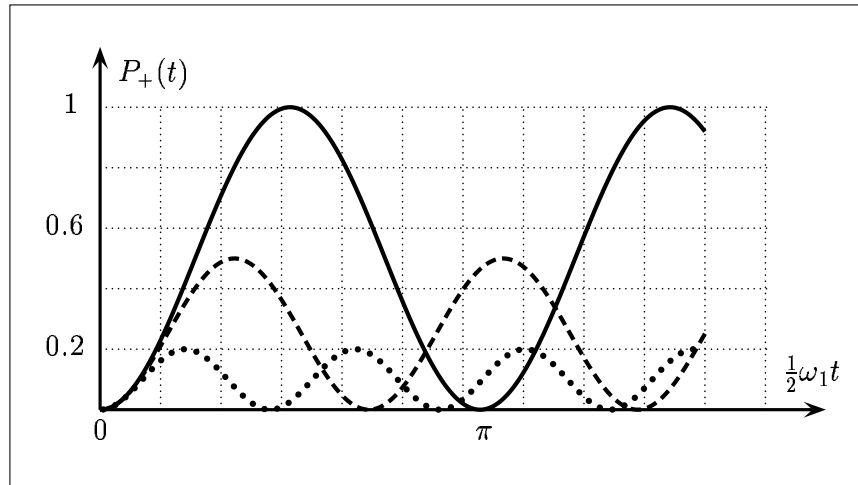
$$\begin{aligned} P_+(t) &= |\chi_1(t)|^2 = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \sin^2\left(\frac{1}{2}\Omega t\right), \\ P_-(t) &= |\chi_2(t)|^2 = \cos^2\left(\frac{1}{2}\Omega t\right) + \frac{\Delta^2}{\Omega^2} \sin^2\left(\frac{1}{2}\Omega t\right). \end{aligned} \quad (36.57)$$

Ze względu na to, że $\Omega^2 = \Delta^2 + \omega_1^2$, prawdopodobieństwa (tak jak to być powinno) sumują się do jedynki. Odwołując się do oznaczeń (36.46) możemy napisać

$$\begin{aligned} P_+(t) &= \frac{\omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \sin^2\left(\frac{t}{2} \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2}\right), \\ P_-(t) &= 1 - P_+(t). \end{aligned} \quad (36.58)$$

Na podstawie tych wzorów możemy łatwo przedyskutować co dzieje się w układzie. Przede wszystkim zauważmy, że statyczne pole $\vec{B}_0 = (0, 0, B_0)$ wyznacza oś z , wzdłuż której ustalamy kierunki "w górę" i "w dół". Pole zmienne $\vec{B}_1 = (B_1 \cos \omega t, B_1 \sin \omega t, 0)$ sprawia, że spin doznaje "przeskoków". Gdy $B_1 = 0$, wówczas także $\omega_1 = 0$, a zatem $P_+(t) = 0$, zaś $P_-(t) = 1$. A więc przy braku pola \vec{B}_1 rzut spinu na oś z nie zmienia się (mamy sytuację precesji Larmora). Pole zmienne jest tu więc kluczowe.

Omówmy to wszystko dokładniej. W chwili początkowej spin był skierowany "w dół", tj. $P_+(t=0) = 0$, zaś $P_-(t=0) = 1$, co zresztą wynika ze wzorów (36.58). Wraz z upływem czasu prawdopodobieństwo znalezienia spinu w stanie "w górę" rośnie. W chwili gdy $\frac{1}{2}\Omega t = \frac{1}{2}\pi$, to jest w chwili $t = \pi/\Omega$ osiąga ono maksymalną wartość, by ponownie w momencie $\frac{1}{2}\Omega t = \pi$, tj. $t = 2\pi/\Omega$ spaść do zera. A więc w chwili $t = 2\pi/\Omega$ spin znów jest z prawdopodobieństwem 1, w stanie "w dół". Dalej proces powtarza się okresowo. Prawdopodobieństwo $P_+(t)$ zmienia się sinusoidalnie w czasie z częstością $\Omega/2$ – zjawisko to nazywamy oscylacjami Rabeiego. Częstość Ω nazywamy zaś częstością Rabeiego.



Rys. 36.1: Przykłady oscylacji Rabeiego – prawdopodobieństwo znalezienia spinu "w górę". Linia kropkowana: $|\Delta| = 2\omega_1$; linia przerywana: $|\Delta| = \omega_1$; linia ciągła – rezonans: $|\Delta| = 0$. Omówienie i dyskusja w tekście.

Badając oscylacje Rabeiego, jakim podlega spin 1/2 w polu magnetycznym mamy do dyspozycji aż trzy parametry:

- $\omega_0 \sim B_0$, kontrolujemy poprzez zmiany wartości indukcji B_0 pola statycznego;
- $\omega_1 \sim B_1$, zmieniamy, dopasowując amplitudę (natężenie) fali elektromagnetycznej;
- ω – częstość fali można dostrajać regulując generator fal.

Zazwyczaj najłatwiej jest kontrolować ω_0 , bowiem pole statyczne jest zwykle wytwarzane za pomocą elektromagnesu. Regulując natężenie prądu możemy łatwo zmieniać wartość indukcji B_0 . Nietrudno jest też zmieniać częstość ω fali elektromagnetycznej (techniki radiowe są dobrze opanowane).

Rysunek 36.1 przedstawia trzy przypadki oscylacji Rabiego. Przypadki te odpowiadają trzem wartościom $\Delta = \omega - \omega_0$, które realizujemy dostrajając częstości ω_0 lub ω . Zwróćmy uwagę, że nasze rezultaty nie zależą od znaku Δ .

- W pierwszym przypadku przyjmujemy $|\Delta| = 2\omega_1$. A zatem z (36.58) mamy wówczas

$$P_+^{(1)}(t) = \frac{1}{5} \sin^2 \left(\frac{\sqrt{5}}{2} \omega_1 t \right). \quad (36.59)$$

Częstość Rabiego $\Omega = \sqrt{5} \omega_1$ jest stosunkowo duża, lecz maksymalna wartość prawdopodobieństwa znalezienia spinu w stanie "w górę" wynosi tylko 0.2.

- Drugi przypadek odpowiada $|\Delta| = \omega_1$. Z (36.58) wynika teraz, że

$$P_+^{(2)}(t) = \frac{1}{2} \sin^2 \left(\frac{\sqrt{2}}{2} \omega_1 t \right). \quad (36.60)$$

Częstość Rabiego $\Omega = \sqrt{2} \omega_1$ jest już mniejsza, ale za to maksymalna wartość prawdopodobieństwa znalezienia spinu w stanie "w górę" wzrosła i wynosi 0.5.

- Trzeci przypadek przedstawiony na rysunku 36.1 jest przypadkiem rezonansowym, to znaczy $\omega_0 = \omega$, więc $\Delta = 0$. W tej sytuacji z (36.58) mamy

$$P_+^{(rez)}(t) = \sin^2 \left(\frac{1}{2} \omega_1 t \right). \quad (36.61)$$

Częstość Rabiego $\Omega = \omega_1$ jest najmniejsza, ale prawdopodobieństwo znalezienia spinu w stanie "w górę" osiąga maksymalną możliwą wartość równą 1.

Pole statyczne, w którym spin ma hamiltonian $\hat{H} = \omega_0 S_z$ sprawia, że spin "w dół" odpowiada energii $E_- = -\frac{1}{2}\hbar\omega_0$, zaś spin "w górę" energii $E_+ = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$. Przeskoki spinu (oscylacje Rabiego) wiążą się ze zmianami energii momentu magnetycznego w polu statycznym \vec{B}_0 . Energia do tego konieczna pochodzi z fali elektromagnetycznej produkującej zmienne pole $\vec{B}_1(t)$. Przeskok $|-\rangle \rightarrow |+\rangle$ (wzrost energii spinu) wymaga pochłonięcia fotonu o energii $\hbar\omega_0$, i odwrotnie, przejście $|+\rangle \rightarrow |-\rangle$ odpowiada emisji fotonu do pola fali. Procesy te są trudne do wykrycia, bowiem obecność fotonu może oznaczać zarówno to, że nastąpiła najpierw absorpcja, a potem emisja, jak i to, że nic nie zaszło (nie było absorpcji i foton przeleciał przez układ bez oddziaływania). W przeciągu dłuższego czasu procesy absorpcji i emisji powodują powstanie stanu dynamicznej równowagi – tyle samo fotonów jest pochłoniętych co wyemitowanych. Bilans jest zerowy. Takie przeskoki spinu, wymuszane odpowiednio dobraną falą elektromagnetyczną (spolaryzowaną kołowo, o częstościach radiowych) leżą u podstaw tak zwanego rezonansu magnetycznego.

Realne zjawisko rezonansu magnetycznego jest bardziej skomplikowane i wymaga bardziej wyrafinowanego opisu. Głównym problemem jest oddziaływanie spinu 1/2 (momentu magnetycznego) z otoczeniem. Oddziaływanie takie zakłóca przebieg oscylacji i wymusza przejścia "spontaniczne", tj. niezależne od wpływu padającej fali $\vec{B}_1(t)$. Zmiany energii z tym związane, prowadzą do emisji fotonów innych niż te z fali. Spontanicznie wyemitowane fotony mają zwykle inny kierunek propagacji i ich detekcja jest stosunkowo łatwa. Dlatego też oddziaływanie z otoczeniem, choć komplikuje opis teoretyczny, jest pożyteczne w praktyce.

36.2 Pewne własności macierzy Pauliego

Lemat 36.1 *Macierze Pauliego spełniają relację*

$$e^{i\beta\sigma_k} = \cos \beta + i \sigma_k \sin \beta, \quad k = 1, 2, 3, \quad \beta \in \mathbb{C}. \quad (36.62)$$

Dowód. Funkcja operatora jest zdefiniowana przez rozwinięcie w szereg

$$e^{i\beta\sigma_k} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\beta\sigma_k)^n}{n!} \quad (36.63)$$

Korzystamy z faktu, że liczba β komutuje z dowolnymi macierzami i rozdzielamy szereg na część parzystą i nieparzystą

$$\begin{aligned} e^{i\beta\sigma_k} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\beta\sigma_k)^{2n}}{(2n)!} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\beta\sigma_k)^{2n+1}}{(2n+1)!} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (\sigma_k^2)^n \frac{(-1)^n \beta^{2n}}{(2n)!} + i \sum_{n=0}^{\infty} \sigma_k (\sigma_k^2)^n \frac{(-1)^n \beta^{2n+1}}{(2n+1)!} \end{aligned} \quad (36.64)$$

bowiem $i^{2n} = (-1)^n$. Ponieważ $\sigma_k^2 = 1$, więc

$$e^{i\beta\sigma_k} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \beta^{2n}}{(2n)!} + i \sigma_k \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \beta^{2n+1}}{(2n+1)!}. \quad (36.65)$$

Rozpoznajemy rozwinięcia cosinusa i sinusa, a więc otrzymujemy

$$e^{i\beta\sigma_k} = \cos \beta + i \sigma_k \sin \beta, \quad (36.66)$$

co było do wykazania. ■

Lemat 36.2 *Dla macierzy Pauliego zachodzi następująca relacja*

$$e^{i\beta\sigma_k} \sigma_j e^{-i\beta\sigma_k} = \begin{cases} \sigma_j, & \text{gdy } j = k, \\ \sigma_j \cos(2\beta) + \varepsilon_{jkm} \sigma_m \sin(2\beta), & \text{gdy } j \neq k, \end{cases} \quad (36.67)$$

gdzie $\beta \in \mathbb{C}$ oraz $j, k = 1, 2, 3$. Zauważmy, że choć indeks k pojawia się po lewej stronie równości, to jednak nie ma tu sumowania względem tego wskaźnika.

Dowód. Posługując się poprzednim lematem lewą stronę tezy zapisujemy w postaci

$$\mathcal{L}_{jk} = (\cos \beta + i\sigma_k \sin \beta) \sigma_j (\cos \beta - i\sigma_k \sin \beta), \quad (36.68)$$

gdzie skorzystaliśmy z parzystości cosinusa i nieparzystości sinusa. Wymnażając prawą stronę pamiętamy, że macierze Pauliego nie komutują, musimy więc przestrzegać ich kolejności. Zatem mamy

$$\mathcal{L}_{jk} = \sigma_j \cos^2 \beta + i\sigma_k \sigma_j \sin \beta \cos \beta - i\sigma_j \sigma_k \sin \beta \cos \beta + \sigma_k \sigma_j \sigma_k \sin^2 \beta. \quad (36.69)$$

Korzystamy z określenia komutatora

$$\mathcal{L}_{jk} = \sigma_j \cos^2 \beta + ([\sigma_k, \sigma_j] + \sigma_j \sigma_k) \sigma_k \sin^2 \beta + i [\sigma_k, \sigma_j] \sin \beta \cos \beta. \quad (36.70)$$

Ponieważ $\sigma_k^2 = 1$, więc dostajemy

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_{jk} &= \sigma_j + [\sigma_k, \sigma_j] \sigma_k \sin^2 \beta + i [\sigma_k, \sigma_j] \sin \beta \cos \beta \\ &= \sigma_j + 2i \varepsilon_{kjp} \sigma_p \sigma_k \sin^2 \beta - 2 \varepsilon_{kjm} \sigma_m \sin \beta \cos \beta \\ &= \sigma_j + 2i \varepsilon_{kjp} \sigma_p \sigma_k \sin^2 \beta + \varepsilon_{jkm} \sigma_m \sin(2\beta).\end{aligned}\quad (36.71)$$

Trzeci człon jest taki jak w tezie. Pozostaje zbadać drugi, przy czym iloczyn $\sigma_p \sigma_k$ wyrażamy za pomocą relacji (17.33):

$$\begin{aligned}2i \varepsilon_{kjp} \sigma_p \sigma_k \sin^2 \beta &= 2i \varepsilon_{kjp} (\delta_{pk} + i \varepsilon_{pkm} \sigma_m) \sin^2 \beta \\ &= 2i (\varepsilon_{kjk} + i \varepsilon_{kjp} \varepsilon_{pkm} \sigma_m) \sin^2 \beta\end{aligned}\quad (36.72)$$

Oczywiście $\varepsilon_{kjk} \equiv 0$, wobec czego mamy dalej dla tego składnika

$$= -2 \varepsilon_{pkj} \varepsilon_{pkm} \sigma_m \sin^2 \beta = -2 (\delta_{kk} \delta_{jm} - \delta_{kj} \delta_{km}) \sigma_m \sin^2 \beta \quad (36.73)$$

Przypominamy teraz, że po lewej stronie tezy (a zatem i po prawej) nie ma sumowania względem indeksu k . Wobec tego w kolejnym kroku

$$= -2 (\delta_{jm} - \delta_{jk} \delta_{km}) \sigma_m \sin^2 \beta = -2 \sigma_j \sin^2 \beta + 2 \delta_{jk} \sigma_k \sin^2 \beta. \quad (36.74)$$

Wyrażenie (36.74) to drugi składnik wzoru (36.71), a więc po podstawieniu mamy

$$\mathcal{L}_{jk} = \sigma_j - 2 \sigma_j \sin^2 \beta + 2 \delta_{jk} \sigma_k \sin^2 \beta + \varepsilon_{jkm} \sigma_m \sin(2\beta). \quad (36.75)$$

Rozważmy teraz dwa przypadki. Najpierw weźmy $j = k$. Wtedy $\delta_{jk} = 1$, drugi i trzeci człon się znoszą. Ponadto $\varepsilon_{kkm} \equiv 0$, więc i czwarty nie daje wkładu. A zatem dla $j = k$ z (36.75) wynika

$$\mathcal{L}_{jk} = \sigma_j, \quad (36.76)$$

co dowodzi pierwszej części tezy. Natomiast dla $j \neq k$ mamy $\delta_{jk} = 0$, więc trzeci człon w (36.75) znika. Z elementarnej trygonometrii wynika więc

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_{jk} &= \sigma_j - 2 \sigma_j \sin^2 \beta + \varepsilon_{jkm} \sigma_m \sin(2\beta) \\ &= \sigma_j \cos(2\beta) + \varepsilon_{jkm} \sigma_m \sin(2\beta),\end{aligned}\quad (36.77)$$

■ co kończy dowód.
