Данная серия методичек посвящается лучшему семинаристу по квантовой теории Толоконникову Андрею Владимировичу

Толоконников: Так что нам остаётся лишь оставаться в своей стране и верить…
Пьющий студент: А как же распитие того, что горит?
Толоконников: Да ваше поколение уже не особо… Зато вот наше! УУУХ. Недавно был в центре Москвы – всего двоих пьяных видел. ВООО. А вот в 2003… АХАХАХА. Вот на наше поколение… В девяностых был кабсздец, конечно.

1. Матричный вектор Паули.

В мире людей есть как красивые девушки, так и уроды-Квазимодо. В мире квантовой теории тоже есть свой Квазимодо.

Как-то математикам пришла в голову интересная идея: записать три матрицы Паули друг на друга:

$$\begin{bmatrix} \hat{\sigma}_1 \\ \hat{\sigma}_2 \\ \hat{\sigma}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{bmatrix}$$

Получился вот такой вот вектор из матриц (или, как мы будем говорить, матричный вектор). Общепринятого названия у него нет, я буду его называть матричным вектором Паули.

Обозначается он как $\vec{\hat{\sigma}}$. Да, и крышечка, и стрелочка – потому что это не простой вектор, а матричный, он из матриц состоит!

Его иногда путают со спиновым вектором-столбцом $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$. Не путайте. $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ - очень полезный вектор всего из двух чисел (правда, комплексных), полностью описывающих спин фермиона. Из двух, а не двенадцати, как $\vec{\hat{\sigma}}$ ☺

В чём отличия? $\vec{\hat{\sigma}}$ же, во-первых, уродлив донельзя (сравните $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ и монструозный вид $\vec{\hat{\sigma}}$), а во-вторых, не может описывать спин никакой системы по той простой причине, что **он константа**. Матрицы Паули же постоянны, и $\vec{\hat{\sigma}}$ вместе с ними.

Тогда нафиг он нам нужен?

1) Он всплывает в гамильтониане и помогает в нестационарных процессах (это будет дальше).
2) Его обожают пихать в условия задач на зачёте. Например,

33. Доказать формулу: $(\vec{a}\,\vec{\hat{\sigma}})\cdot(\vec{b}\,\vec{\hat{\sigma}}) = (\vec{a}\,\vec{b}) + i\,\vec{\hat{\sigma}}\cdot[\vec{a}\times\vec{b}]$

Это задача типа **V: доказательство тождеств с матрицами Паули и матричным вектором Паули.**

Давайте, кстати, её решим, чтобы вы знали, как решать задачи такого типа. Векторность будем обозначать жирным шрифтом)

$$(\boldsymbol{a}\hat{\boldsymbol{\sigma}}) * (\boldsymbol{b}\hat{\boldsymbol{\sigma}}) = \left(a_x\hat{\sigma}_x + a_y\hat{\sigma}_y + a_z\hat{\sigma}_z\right) * \left(b_x\hat{\sigma}_x + b_y\hat{\sigma}_y + b_z\hat{\sigma}_z\right)$$

Раскроем скобки, получим 9 слагаемых. Разобьём их на две группы:
вот эти три

$$a_x b_x \hat{\sigma}_x^2 + a_y b_y \hat{\sigma}_y^2 + a_z b_z \hat{\sigma}_z^2$$

и смешанные произведения:

$$a_x b_y \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y + a_y b_x \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x + a_x b_z \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z + a_z b_x \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x + a_y b_z \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z + a_z b_y \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y$$

Воспользуемся тем, что

$$\hat{\sigma}_i^2 = \text{единичная матрица}$$
$$\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j = i\hat{\sigma}_k$$

Вот и получаем, что

$$a_x b_x \hat{\sigma}_x^2 + a_y b_y \hat{\sigma}_y^2 + a_z b_z \hat{\sigma}_z^2 = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z = \boldsymbol{ab}$$

$$a_x b_y \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y + a_y b_x \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x + a_x b_z \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z + a_z b_x \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x + a_y b_z \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z + a_z b_y \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y = i\hat{\boldsymbol{\sigma}}[\boldsymbol{a}\mathrm{x}\boldsymbol{b}]$$

Ч.т.д.

Ещё есть очень похожий матричный вектор $\hat{\boldsymbol{s}}$, который равен $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ с точностью до константы: $\hat{\boldsymbol{s}} = \frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}}}{2}$. Соответственно, $\widehat{s_x} = \frac{\widehat{\sigma_x}}{2}$, $\widehat{s_y} = \frac{\widehat{\sigma_y}}{2}$, $\widehat{s_z} = \frac{\widehat{\sigma_z}}{2}$.

2. Эволюция спинового столбца в магнитном поле.

Теперь давайте наконец-то (я не вижу вашей радости!) рассмотрим нестационарные процессы – будем решать задачи типа 3,

III: нестационарное чистое состояние

$$i\hbar \frac{\partial \vec{S}}{\partial t} = \hat{H} \vec{S}$$

Это то же самое, что

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \hat{H} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Гамильтониан $\hat{H}$ должен иметь вид матрицы 2x2. Вот только вот чтобы её найти, придётся попотеть.

Причина, почему спиновый столбец меняется – магнитное поле (B_x, B_y, B_z). Тогда гамильтониан имеет смысл энергии спина в этом магнитном поле. Считается он по формуле:

$$\hat{H} = -\mu \vec{\sigma} \vec{B} = -\mu \sum_{i=1}^{3} B_i \hat{\sigma}_i$$

Где:

μ – магнетон Бора – такая размерная физическая постоянная,

$\hat{\sigma}_i$ - матрицы Паули

$\vec{\hat{\sigma}}$ - наш знакомый, матричный вектор Паули – вот он где используется!

Напомню, что это $\begin{bmatrix} \hat{\sigma}_1 \\ \hat{\sigma}_2 \\ \hat{\sigma}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{bmatrix}$

Обратите внимание – я дал две формулы для вычисления матрицы гамильтониана: с матричным вектором Паули и со знаком суммы. Для вычислений гораздо удобнее вторая, однако ваш семер мог вам писать только первую. Знайте, что вторая лучше ☺

Её, кстати, можно записать ещё наглядней, расписав знак суммы:

$$\hat{H} = \mu\left(B_x \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + B_y \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} + B_z \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\right) \quad (2)$$

Давайте потренируемся и решим задачу с Парфёновского зачёта.

37. Электрон находится в магнитном поле

$$\vec{B} = B_1[\vec{e}_x \cos(\omega t) + \vec{e}_y \sin(\omega t)] + B_0 \vec{e}_z$$

и при $t=0$ его спин ориентирован вдоль оси z. Найти вероятность переворота спина к моменту времени t, исследовать резонансы.

Итак, нам дано магнитное поле. Его, кстати, обозначают то **B**, то **H**. Я вам настоятельно рекомендую именно букву **B** – так как буква B не путается с гамильтонианом, который у нас тоже H.

Наша цель намбер ван – получить матрицу гамильтониана.

Мы знаем все три проекции магнитного поля:

$B_x = B_1 \cos\omega t$, $B_y = B_1 \sin\omega t$, $B_z = B_0$

Подставляем их в (2):

$$\hat{H} = \mu\left(B_1 \cos\omega t \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + B_1 \sin\omega t \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} + B_0 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\right)$$

Ну а далее упрощаем, и в итоге получим

$$\hat{H} = -\mu \begin{bmatrix} B_0 & B_1 e^{-i\omega t} \\ B_1 e^{i\omega t} & B_0 \end{bmatrix}$$

Ништяк.

Подставляем матрицу гамильтониана в нестационарное уравнение Шрёдингера:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \hat{H}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \to i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = -\mu \begin{bmatrix} B_0 & B_1 e^{-i\omega t} \\ B_1 e^{i\omega t} & B_0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a(t) \\ b(t) \end{bmatrix}$$

Выполним матричное умножение, также для краткости обозначим производную по времени точкой:

$$i\hbar\begin{bmatrix}\dot a(t)\\ \dot b(t)\end{bmatrix}=-\mu\begin{bmatrix}B_0\,a(t)+B_1e^{-i\omega t}b(t)\\ B_1e^{i\omega t}b(t)+B_0\,b(t)\end{bmatrix}$$

Получаем систему линейных ДУ:

$$\begin{cases} i\hbar\,\dot a(t)= \\ i\hbar\,\dot b(t)= \end{cases} -\mu\begin{cases} B_0\,a(t)+B_1e^{-i\omega t}b(t) \\ B_1e^{i\omega t}a(t)+B_0\,b(t)\end{cases}$$

Слишком много констант. Сделаем замену:

$\omega_0=\mu B_0/h$

$\omega_2=\mu B_1/h$

Тогда получим систему

$$\begin{cases} i\dot a=-\omega_0 a-\omega_2 b e^{-i\omega t} \\ i\dot b=-\omega_2 a e^{-i\omega t}-\omega_0 b\end{cases}$$

Ну-ка, кто шарит в дифурах, ответьте: в чём главная проблема этой системы, мешающая нам её решить? Правильно: коэффициенты зависят от времени, вот мнимые экспоненты. К счастью, от этой зависимости можно избавиться правильной заменой. НЕТРУДНО ЗАМЕТИТЬ, ЧТО если сделать замену

$A(t)=\exp(\frac{-i\omega t}{2})*a(t)$

$B(t)=\exp(\frac{i\omega t}{2})*b(t)$

А потом ещё одну

$\omega_1=\omega_0+\omega/2$

То мы получим систему с постоянными коэффициентами:

$$\begin{cases} i\dot A=-\omega_1 A-\omega_2 B \\ i\dot B=-\omega_2 A-\omega_1 B\end{cases}$$

Как додуматься до такой замены? Есть три варианта:

1) Родиться Лукьяненко (или Кравцовым, который у меня вёл семинары по дифурам).
2) Придти на семинар по квантам к Толоконникову
3) Бумажно подумать. Давайте посмотрим:

$$\begin{cases} i\dot{a} = -\omega_0 a - \omega_2 b e^{-i\omega t} \\ i\dot{b} = -\omega_2 a e^{-i\omega t} - \omega_0 b \end{cases}$$

В на $e^{-i\omega t}$ домножается, ему не хватает $e^{i\omega t}$, разумно искать В в виде $e^{i\omega t}$*что-то. Напротив, А в виде $e^{-i\omega t}$*что-то. Ну, в общем, подогнать так, чтобы было бумажно!

В общем, получили простую систему дифуров. Далее ищите второкура, даёте ему систему на решение, взамен обещаете рассказать про свою кафедру.

Наконец, возможен и самый упоротый случай: эволюциниорующее смешанное состояние. **IV: нестационарное смешанное состояние**
Тогда его матрица плотности будет меняться по закону – уравнению фон Неймана:

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{H}_s, \hat{\rho}\right]$$

Где $\hat{H}_s$, напомню, спиновая составляющая гамильтониана.
Предположим, что у нас есть магнитное поле, тогда она распишется как

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \frac{-\mu}{i\hbar}\sum_{j=1}^{3} B_j\left[\hat{\sigma}_j, \hat{\rho}\right]$$

Решение этого матричного ДУ очень «весёлое»: всё сведётся к системе из 4 ДУ (для каждого из четырёх ячеек матрицы плотности), которая, конечно же, решится аналитически (нет). Вспомните, какая возня была в системе ДУ из двух уравнений в прошлой задаче, а теперь представьте, когда их четыре. Поэтому таких задач быть не должно, но на всякий случай я вам формулу дал.