Løsning til øving 17 for FY1004, våren 2008

Her skal vi se på hvordan spinnet (egenspinnet) til et elektron påvirkes av et (konstant) magnetfelt $\vec{B}$. Merk: Det korrekte navnet på $\vec{B}$ er *magnetisk flukstetthet*, og når vi har et magnetfelt i vakuum, er det strengt tatt $\vec{H} = \vec{B}/\mu_0$ som er *magnetfeltet*. Men vi bruker ofte språket litt upresist, og sier at vi har et magnetfelt $\vec{B}$.

Spinnet til elektronet kan vi representere i kvantemekanikken som en vektor

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\,\vec{\sigma}\ ,$$

der de tre komponentene av vektoren $\vec{\sigma}$ er de tre Pauli-matrisene

$$\sigma_x = \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Fordi elektronet har elektrisk ladning $q = -e$ og roterer (spinner) om sin egen akse, har det et magnetisk moment

$$\vec{\mu} = g\,\frac{q}{2m}\,\vec{S} = -g\,\frac{e}{2m}\,\vec{S} = -g\,\frac{e\hbar}{4m}\,\vec{\sigma}\ .$$

Her er m elektronmassen, $q/(2m)$ kalles det gyromagnetiske forholdet, og tallet $g = 2{,}00233$ er den gyromagnetiske faktoren for elektronet.

Det magnetiske momentet $\vec{\mu}$ i magnetfeltet $\vec{B}$ har en potensiell energi $-\vec{\mu}\cdot\vec{B}$. Hvis vi bare ser på spinnet til elektronet, så er Hamilton-operatoren H lik den potensielle energien,

$$H = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = g\,\frac{e\hbar}{4m}\,\vec{\sigma}\cdot\vec{B} = \hbar\omega\,\vec{u}\cdot\vec{\sigma}\ ,$$

der $\vec{u}$ er enhetsvektoren i retning langs $\vec{B}$, det vil si at $\vec{B} = B\vec{u}$ med $B = |\vec{B}|$, og der

$$\omega = \frac{geB}{4m}\ .$$

Tilstanden til elektronspinnet beskrives av en spinor

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix},$$

som er tidsavhengig og oppfyller Schrödingerligningen

$$\mathrm{i}\hbar\,\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}t} = H\psi\ .$$

a) Vis at løsningen av Schrödingerligningen er

$$\psi(t) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,tH}\,\psi(0)\ .$$

Eksponensialfunksjonen av en matrise A defineres ved den vanlige rekkeutviklingen (I er identitetsmatrisen),

$$\mathrm{e}^{A} = I + A + \frac{1}{2!}\,A^2 + \cdots + \frac{1}{n!}\,A^n + \cdots\ .$$

Skriv opp rekkeutviklingen

$$\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,tH} = I - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,tH + \frac{1}{2!}\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,tH\right)^2 + \cdots + \frac{1}{n!}\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,tH\right)^n + \cdots\ .$$

og deriver med hensyn på tiden t, det gir

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,tH} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,H + t\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,H\right)^2 + \cdots + \frac{t^{n-1}}{(n-1)!}\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,H\right)^n + \cdots = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,H\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,tH}\ .$$

Dermed er det bare å sette inn

$$\psi(t) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,tH}\,\psi(0)$$

i Schrödingerligningen for å se at den er oppfylt:

$$\mathrm{i}\hbar\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\psi(t) = \mathrm{i}\hbar\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,tH}\,\psi(0) = H\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\,tH}\,\psi(0) = H\,\psi(t)\ .$$

b) Vis at

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t\,\vec{u}\cdot\vec{\sigma}} = \cos(\omega t)\,I - \mathrm{i}\sin(\omega t)\,\vec{u}\cdot\vec{\sigma}\ .$$

Hint: Bruk rekkeutviklingene av eksponensialfunksjonen og av cosinus og sinus.
Bruk også at $(\vec{u}\cdot\vec{\sigma})^2 = I$ (fordi $\vec{u}$ er en enhetsvektor).

Først beviset for at $(\vec{u}\cdot\vec{\sigma})^2 = I$:

$$\begin{aligned}(\vec{u}\cdot\vec{\sigma})^2 \;&=\; (u_x\sigma_x + u_y\sigma_y + u_z\sigma_z)^2 = \begin{pmatrix} u_z & u_x - \mathrm{i}u_y \\ u_x + \mathrm{i}u_y & -u_z \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_z & u_x - \mathrm{i}u_y \\ u_x + \mathrm{i}u_y & -u_z \end{pmatrix} \\ &=\; \begin{pmatrix} u_z^2 + u_x^2 + u_y^2 & 0 \\ 0 & u_x^2 + u_y^2 + u_z^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I\ .\end{aligned}$$

Setter vi $A = -\mathrm{i}\omega t\,\vec{u}\cdot\vec{\sigma}$, så har vi at

$$\begin{aligned} A^2 \;&=\; (-\mathrm{i}\omega t\,\vec{u}\cdot\vec{\sigma})^2 = -(\omega t)^2\,(\vec{u}\cdot\vec{\sigma})^2 = -(\omega t)^2\,I\ , \\ A^3 \;&=\; AA^2 = \mathrm{i}\,(\omega t)^3\,\vec{u}\cdot\vec{\sigma}\ , \\ A^4 \;&=\; AA^3 = (\omega t)^4\,(\vec{u}\cdot\vec{\sigma})^2 = (\omega t)^4\,I\ , \end{aligned}$$

og så videre, følgelig

$$\begin{aligned} \mathrm{e}^A \;&=\; I + A + \frac{1}{2!}\,A^2 + \cdots + \frac{1}{n!}\,A^n + \cdots \\ &=\; \left(1 - \frac{(\omega t)^2}{2!} + \frac{(\omega t)^4}{4!} + \cdots\right) I - \mathrm{i}\left(\omega t - \frac{(\omega t)^3}{3!} + \frac{(\omega t)^5}{5!} + \cdots\right)\vec{u}\cdot\vec{\sigma} \\ &=\; \cos(\omega t)\,I - \mathrm{i}\sin(\omega t)\,\vec{u}\cdot\vec{\sigma}\ . \end{aligned}$$

Beviset er forøvrig helt parallelt med beviset for at

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} = \cos(\omega t) - \mathrm{i}\sin(\omega t)\ .$$

c) Vis at når spinoren $\psi(t)$ er normert ved $t = 0$, dvs. at $(\psi(0))^\dagger\psi(0) = 1$,
og når $\psi(t) = U\psi(0)$ med

$$U = U(t) = \cos(\omega t)\,I - \mathrm{i}\sin(\omega t)\,\vec{u}\cdot\vec{\sigma}\ ,$$

så er $\psi(t)$ er normert ved et vilkårlig tidspunkt t, dvs. at $(\psi(t))^\dagger\psi(t) = 1$.

Hint: For en vilkårlig $m\times n$-matrise A og en vilkårlig $n\times p$-matrise B gjelder at $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$.
Det følger at $(\psi(t))^\dagger\psi(t) = (U(t)\psi(0))^\dagger(U(t)\psi(0)) = (\psi(0))^\dagger(U(t))^\dagger U(t)\psi(0)$.
Det gjelder derfor å vise at $U^\dagger U = I$, dvs. at 2×2-matrisen $U = U(t)$ er *unitær*.

For å bevise at

$$U = \cos(\omega t)\, I - \mathrm{i}\sin(\omega t)\, \vec{u}\cdot\vec{\sigma}$$

er unitær, merker vi oss først at matrisen

$$\vec{u}\cdot\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} u_z & u_x - \mathrm{i}u_y \\ u_x + \mathrm{i}u_y & -u_z \end{pmatrix}$$

er Hermitesk, at $(\vec{u}\cdot\vec{\sigma})^\dagger = \vec{u}\cdot\vec{\sigma}$, når komponentene u_x, u_y, u_z av $\vec{u}$ er reelle. Derfor er

$$U^\dagger = \cos(\omega t)\, I + \mathrm{i}\sin(\omega t)\, (\vec{u}\cdot\vec{\sigma})^\dagger = \cos(\omega t)\, I + \mathrm{i}\sin(\omega t)\, \vec{u}\cdot\vec{\sigma}\ ,$$

og

$$\begin{aligned} U^\dagger U &= [\cos(\omega t)\, I + \mathrm{i}\sin(\omega t)\, \vec{u}\cdot\vec{\sigma}]\, [\cos(\omega t)\, I - \mathrm{i}\sin(\omega t)\, \vec{u}\cdot\vec{\sigma}] \\ &= (\cos(\omega t)\, I)^2 - (\mathrm{i}\sin(\omega t)\, \vec{u}\cdot\vec{\sigma})^2 = \cos^2(\omega t)\, I + \sin^2(\omega t)\, I = I\ . \end{aligned}$$

På samme måten finner vi at $UU^\dagger = I$.

Her kan det være verdt å minne om en matematisk spissfindighet som gjelder uendeligdimensjonale matriser. Vi definerer at en matrise U er unitær dersom den er invertibel og $U^{-1} = U^\dagger$. Vi definerer dessuten at U er invertibel dersom den har både en venstreinvers V slik at $VU = I$ og en høyreinvers W slik at $UW = I$. Det er lett å vise at hvis U har en venstreinvers V og en høyreinvers W, så er $V = W$. Bevis: $V = VI = V(UW) = (VU)W = IW = W$. Det viser at når U har både en venstreinvers og en høyreinvers, så finnes det en entydig matrise som er samtidig venstreinvers og høyreinvers til U, og den matrisen kaller vi da U^{-1}. Betingelsen for at en endeligdimensjonal matrise U skal ha en venstreinvers, er at $\det U \neq 0$, og betingelsen for at den skal ha en høyreinvers, er den samme, at $\det U \neq 0$. Med andre ord: en endeligdimensjonal matrise U er invertibel og har en entydig venstre- og høyreinvers U^{-1} hvis og bare hvis $\det U \neq 0$. Hvis $\det U = 0$, så har U hverken venstre- eller høyreinvers.

For en uendeligdimensjonal matrise U, derimot, gjelder ikke determinantbetingelsen for invertibilitet, simpelthen fordi det ikke er mulig å definere determinanten $\det U$. Her er et eksempel til ettertanke. La U og V være de uendeligdimensjonale matrisene

$$U = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \qquad V = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Vi ser at $U^\dagger = V$ og $V^\dagger = U$. Vi ser også at $VU = U^\dagger U = VV^\dagger = I$. Men

$$UV = UU^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \neq I\ .$$

Problemet her er at hverken U eller V er invertibel, fordi U har venstreinvers men ingen høyreinvers, mens V har høyreinvers men ingen venstreinvers. Følgelig er hverken U eller V unitær.

Vi viste i forrige oppgave at til en vilkårlig spinor ψ som er normert slik at $\psi^\dagger\psi = 1$, svarer det en enhetsvektor $\vec{n} = \psi^\dagger\vec{\sigma}\psi$ slik at $(\vec{n}\cdot\vec{\sigma})\psi = \psi$. Det betyr at hvis spinntilstanden er ψ og vi måler spinnkomponenten langs enhetsvektoren $\vec{n}$, måler vi helt sikkert verdien $+\hbar/2$. En naturlig tolkning er derfor at i spinntilstanden ψ er spinnet kvantisert i retningen $\vec{n}$.

Når spinoren ψ er tidsavhengig, $\psi = \psi(t)$, så er også enhetsvektoren $\vec{n} = \psi^\dagger\vec{\sigma}\psi$ tidsavhengig:

$$\vec{n}(t) = (\psi(t))^\dagger\,\vec{\sigma}\,\psi(t) = (\psi(0))^\dagger\,(U(t))^\dagger\,\vec{\sigma}\,U(t)\,\psi(0)\ .$$

d) For å forenkle antar vi nå at magnetfeltet $\vec{B}$ peker i z-retningen (eller vi velger rett og slett z-aksen langs $\vec{B}$). Da er

$$U = U(t) = \cos(\omega t)\,I - \mathrm{i}\sin(\omega t)\,\sigma_z\ .$$

Finn spinnretningen $\vec{n}(t)$ ved tiden t som funksjon av spinnretningen $\vec{n}(0)$ ved tiden $t = 0$.

Hint: Utled først multiplikasjonstabellen for Pauli-matrisene: $\sigma_x\sigma_y = \mathrm{i}\sigma_z$, osv.,

og se så på komponentene $n_x(t)$, $n_y(t)$ og $n_z(t)$ etter tur.

Her er multiplikasjonstabellen for Pauli-matrisene:

$$\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x = \mathrm{i}\sigma_z\ ,\quad \sigma_y\sigma_z = -\sigma_z\sigma_y = \mathrm{i}\sigma_x\ ,\quad \sigma_z\sigma_x = -\sigma_x\sigma_z = \mathrm{i}\sigma_y\ ,$$
$$\sigma_x^{\,2} = \sigma_y^{\,2} = \sigma_z^{\,2} = I\ .$$

Legg spesielt merke til at de antikommuterer: $\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x$, osv..

Vi har at

$$\begin{aligned}
(U(t))^\dagger\,\sigma_x\,U(t) &= [\cos(\omega t)\,I + \mathrm{i}\sin(\omega t)\,\sigma_z]\,\sigma_x\,[\cos(\omega t)\,I - \mathrm{i}\sin(\omega t)\,\sigma_z] \\
&= \cos^2(\omega t)\,\sigma_x + \mathrm{i}\sin(\omega t)\cos(\omega t)\,(\sigma_z\sigma_x - \sigma_x\sigma_z) + \sin^2(\omega t)\,\sigma_z\sigma_x\sigma_z \\
&= (\cos^2(\omega t) - \sin^2(\omega t))\,\sigma_x - 2\sin(\omega t)\cos(\omega t)\,\sigma_y \\
&= \cos(2\omega t)\,\sigma_x - \sin(2\omega t)\,\sigma_y\ .
\end{aligned}$$

For eksempel er $\sigma_z\sigma_x\sigma_z = -\sigma_x\sigma_z\sigma_z = -\sigma_x$. På samme måte er

$$\begin{aligned}
(U(t))^\dagger\,\sigma_y\,U(t) &= [\cos(\omega t)\,I + \mathrm{i}\sin(\omega t)\,\sigma_z]\,\sigma_y\,[\cos(\omega t)\,I - \mathrm{i}\sin(\omega t)\,\sigma_z] \\
&= \cos^2(\omega t)\,\sigma_y + \mathrm{i}\sin(\omega t)\cos(\omega t)\,(\sigma_z\sigma_y - \sigma_y\sigma_z) + \sin^2(\omega t)\,\sigma_z\sigma_y\sigma_z \\
&= (\cos^2(\omega t) - \sin^2(\omega t))\,\sigma_y + 2\sin(\omega t)\cos(\omega t)\,\sigma_x \\
&= \cos(2\omega t)\,\sigma_y + \sin(2\omega t)\,\sigma_x\ .
\end{aligned}$$

Og

$$(U(t))^\dagger\,\sigma_z\,U(t) = \sigma_z\,(U(t))^\dagger\,U(t) = \sigma_z\ .$$

Vi får dermed at

$$\begin{aligned}
n_x(t) &= (\psi(t))^\dagger\,\sigma_x\,\psi(t) = (\psi(0))^\dagger\,(U(t))^\dagger\,\sigma_x\,U(t)\,\psi(0) \\
&= (\psi(0))^\dagger\,(\cos(2\omega t)\,\sigma_x - \sin(2\omega t)\,\sigma_y)\,\psi(0) \\
&= \cos(2\omega t)\,n_x(0) - \sin(2\omega t)\,n_y(0)\ ,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
n_y(t) &= (\psi(t))^\dagger\,\sigma_y\,\psi(t) = (\psi(0))^\dagger\,(U(t))^\dagger\,\sigma_y\,U(t)\,\psi(0) \\
&= (\psi(0))^\dagger\,(\cos(2\omega t)\,\sigma_y + \sin(2\omega t)\,\sigma_x)\,\psi(0) \\
&= \cos(2\omega t)\,n_y(0) + \sin(2\omega t)\,n_x(0)\ ,
\end{aligned}$$

$$n_z(t) = (\psi(t))^\dagger\,\sigma_z\,\psi(t) = (\psi(0))^\dagger\,(U(t))^\dagger\,\sigma_z\,U(t)\,\psi(0) = (\psi(0))^\dagger\,\sigma_z\,\psi(0) = n_z(0)\ .$$

e) Beskriv med ord bevegelsen av spinnretningen $\vec{n}$.

Finnes det stasjonære tilstander, dvs. tilstander der spinnretningen er konstant?

z-komponenten av $\vec{n}$ er konstant i tiden, $n_z(t) = n_z(0)$, og bevegelsen til $\vec{n}$ er en presesjon om z-aksen i positiv omløpsretning (som er mot urviseren), med konstant vinkelhastighet 2ω. Kanskje den enkleste måten å se det på, er å regne med komplekse tall:

$$\begin{aligned} n_x(t) + \mathrm{i}\, n_y(t) &= \cos(2\omega t)\, n_x(0) - \sin(2\omega t)\, n_y(0) + \mathrm{i}\,(\cos(2\omega t)\, n_y(0) + \sin(2\omega t)\, n_x(0)) \\ &= (\cos(2\omega t) + \mathrm{i}\, \sin(2\omega t))\,(n_x(0) + \mathrm{i}\, n_y(0)) = \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega t}\,(n_x(0) + \mathrm{i}\, n_y(0)) \;. \end{aligned}$$

Den eneste måten å lage en stasjonær tilstand på, altså slik at $\vec{n}$ er tidsuavhengig, er at $n_x = n_y = 0$. Siden ${n_x}^2 + {n_y}^2 + {n_z}^2 = 1$, må da $n_z = \pm 1$, og $\vec{n} \cdot \vec{\sigma} = \pm\sigma_z$.

Siden spinoren ψ generelt er en egenfunksjon for $\vec{n} \cdot \vec{\sigma}$ med egenverdi $+1$, ser vi at de stasjonære tilstandene er egntilstandene for Hamilton-operatoren $H = \hbar\omega\sigma_z$. Og det visste vi jo fra før!