บทที่ 7
เมทริกซ์ความหนาแน่นกับระบบที่มีสองระดับ
(The Density Matrix and the Dynamics of Two-Level Systems)

สมมุติว่า $\chi(t)$ เป็นสถานะของระบบสองระดับ (เช่น สปิน $\frac{1}{2}$) H เป็นแฮมมิลโทเนียนของระบบ (เช่น $-\bar{\mu}\cdot\bar{B}$) สมการการเคลื่อนที่ของระบบอาจจะเขียนได้ว่า

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi(t) = H\chi(t) \tag{7-1}$$

สมมติว่า γ_1 และ γ_2 เป็นค่าจริง สปินนอร์ (ฟังก์ชันคลื่นของระบบที่มีสองระดับ) อาจจะเขียนได้ดังนี้

$$\underset{\sim}{\chi} = \begin{vmatrix} C_1 \\ C_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} |C_1|e^{i\gamma_1} \\ |C_2|e^{i\gamma_2} \end{vmatrix} \tag{7-2}$$

$\underset{\sim}{\chi}$ แทนสถานะของระบบที่เรากำลังพิจารณา $\underset{\sim}{\chi}$ ขึ้นอยู่กับค่าจริงสี่ค่า คือ $|C_1|$, $|C_2|$, γ_1 และ γ_2 แต่การวัดเชิงควอนตัมให้ค่าจริงเพียงสองค่า คือ อัตราส่วนระหว่าง $|C_1|^2$ กับ $|C_2|^2$ และเฟสเชิงสัมพัทธ์ (relative phase) $\gamma_1-\gamma_2$ แต่ถ้าหากจัดค่าของ χ ให้

$$|C_1|^2+|C_2|^2 = 1 \tag{7-3}$$

ทำให้มีค่าที่ไม่รู้อยู่เพียงค่าเดียว คือค่าเฟสของสถานะ

เราอาจจะเขียนเมทริกซ์ความหนาแน่นของระบบได้ดังนี้

$$\underset{\sim}{\varrho} = \begin{vmatrix} C_1 \\ C_2 \end{vmatrix} (C_1^* C_2^*) = \begin{vmatrix} |C_1|^2 & C_1C_2^* \\ C_2C_1^* & |C_2|^2 \end{vmatrix} \tag{7-4}$$

เทรซของ $\underset{\sim}{\varrho}$ คือ $$t_r\underset{\sim}{\varrho} = |C_1|^2+|C_2|^2 = 1 \tag{7-5}$$

สมมุติว่า $\underline{A}$ เป็นตัวดำเนินการในสเปซของระบบสองระดับนี้

$$\text{ค่าคาดหมายของ } \underline{\underline{A}} = \langle\underline{\underline{A}}\rangle = \underline{\chi}^{+}\cdot\underline{\underline{A}}\cdot\underline{\chi}$$

$$= (C_1^* C_2^*)\begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{vmatrix}\begin{vmatrix} C_1 \\ C_2 \end{vmatrix}$$

$$= t_r \begin{vmatrix} |C_1|^2 & C_1C_2^* \\ C_2C_1^* & |C_2|^2 \end{vmatrix}\begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{vmatrix}$$

$$= t_r\underline{\underline{\varrho}}\cdot\underline{\underline{A}} \quad \text{ซึ่งเท่ากับ} \quad t_r\underline{\underline{A}}\cdot\underline{\underline{\varrho}} \quad \text{ด้วย}$$

$$\langle\underline{\underline{A}}\rangle = t_r\,\underline{\underline{\varrho}}\cdot\underline{\underline{A}} \tag{7-6}$$

กำหนดให้

$$P_x = 2R_e(C_1^*C_2) \tag{7-7}$$

$$P_x\underline{\underline{\sigma}}_x = \begin{vmatrix} 0 & 2R_e(C_1^*C_2) \\ 2R_e(C_1^*C_2) & 0 \end{vmatrix} \tag{7-8}$$

$$P_y = 2I_m(C_1^*C_2) \tag{7-9}$$

$$P_y\underline{\underline{\sigma}}_y = \begin{vmatrix} 0 & -2iI_m(C_1^*C_2) \\ 2iI_m(C_1^*C_2) & 0 \end{vmatrix} \tag{7-10}$$

$$P_z = |C_1|^2 - |C_2|^2 \tag{7-11}$$

$$P_z\underline{\underline{\sigma}}_z = \begin{vmatrix} |C_1|^2 - |C^2|^2 & 0 \\ 0 & -|C_1|^2 + |C_2|^2 \end{vmatrix} \tag{7-12}$$

$$\underline{\underline{I}} + \bar{P}\cdot\underline{\sigma} = \begin{vmatrix} 1 + |C_1|^2 - |C_2|^2 & +2R_e(C_1^*C_2) - 2iI_m(C_1^*C_2) \\ +2R_e(C_1^*C_2) + 2iI_m(C_1^*C_2) & 1 - |C_1|^2 + |C_2|^2 \end{vmatrix} \tag{7-13}$$

$$= 2\begin{vmatrix} |C_1|^2 & C_1C_2^* \\ C_2C_1^* & |C_2|^2 \end{vmatrix} \tag{7-14}$$

เปรียบเทียบสมการที่ (7-4) และ (7-14)

$$\underline{\underline{\varrho}} = \frac{1}{2}\left(\underline{\underline{I}} + \bar{P}\cdot\underline{\sigma}\right) \tag{7-15}$$

เมื่อ $\underline{\sigma}_x, \underline{\sigma}_y, \underline{\sigma}_x$ เป็นสปินเมทริกซ์ของพอลลี $\underline{I}$ เป็น 2×2 เมทริกซ์เอกลักษณ์

นำตัวดำเนินการเมทริกซ์ความหนาแน่นกระทำบนไอเกนสปินนอร์ χ ได้ผลลัพธ์ดังนี้

$$
\begin{aligned}
\underline{\rho}\cdot\underline{\chi} &= \begin{vmatrix} |C_1|^2 & C_1C_2^* \\ C_2C_1^* & |C_2|^2 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} C_1 \\ C_2 \end{vmatrix} \\
&= \begin{vmatrix} |C_1|^2C_1 + C_1|C_2|^2 \\ |C_1|^2C_2 + C_2|C_2|^2 \end{vmatrix} \\
&= \begin{vmatrix} C_1 \\ C_2 \end{vmatrix} \qquad \underline{\chi}
\end{aligned} \tag{7-16}
$$

แสดงว่าค่าไอเกนของไอเกนสปินเนอร์ χ คือ 1 ค่าไอเกนอีกค่าหนึ่งอาจจะสังเกตได้จากสมการต่อไปนี้ สมมติว่า $\underline{\phi}$ เป็นสปินนอร์ใด ๆ

$$\underline{\rho}\cdot\underline{\phi} = \underline{\chi}\,(\underline{\chi}^{+}\cdot\underline{\phi}) \tag{7-17}$$

สมการ (7-17) แสดงว่า $\underline{\rho}$ ฉาย $\underline{\phi}$ ลงบนทิศ χ ดังนั้น

$$\underline{\rho}^2\cdot\underline{\phi} = \underline{\chi}\,(\underline{\chi}^{+}\cdot\underline{\chi})\,(\underline{\chi}^{+}\cdot\underline{\phi}) = \underline{\chi}\cdot(\,\underline{I}\,)\,(\underline{\chi}^{+}\cdot\underline{\phi}) = \underline{\rho}\cdot\underline{\phi}$$

$\underline{\rho}^2 - \underline{\rho} = 0$ ค่าไอเกนของ $\underline{\rho}$ คือ 0 อีกค่าหนึ่ง

เวกเตอร์ $\bar{P}$ เป็นเวกเตอร์ที่สำคัญตัวหนึ่งในระบบสองระดับ จะเห็นว่า

$$\underline{\rho}^2 = \frac{1}{4}(\underline{I} + \bar{P}\cdot\underline{\sigma})^2 = \frac{1}{4}\left(\underline{I} + 2(\bar{P}\cdot\underline{\sigma})\,(\bar{P}\cdot\underline{\sigma})\right) \tag{7-18}$$

แต่เนื่องจาก $(\underline{\sigma}\cdot\bar{A})\,(\underline{\sigma}\cdot\bar{B}) = \bar{A}\cdot\bar{B} + i\underline{\sigma}\cdot(\bar{A}\times\bar{B})$

แทนค่าเอกลักษณ์นี้ลงในสมการ (7-18)

$$\rho^2 = \underline{\rho} = \frac{1}{4}(\underline{I} + 2P^2)$$

$$t_r\underline{\rho} = 1 = \frac{1}{4}t_r(\underline{I} + 2P^2)$$

$$= \frac{1}{4}(2 + 2P^2)$$ แสดงว่า

$$P^2 = P_x^2 + P_y^2 + P_z^2 = P\cdot P = 1 \tag{7-19}$$

คุณสมบัติอันดับต่อไปของ $\bar{P}$ หาได้ดังต่อไปนี้

$$\langle \chi | \underline{\sigma}_x | \chi \rangle = t_r(\underline{\rho} \cdot \underline{\sigma}_x) = \frac{1}{2} t_r (\underline{I} + \bar{P} \cdot \underline{\sigma}) \cdot \underline{\sigma}_x$$

$$= \frac{1}{2} t_r \underline{\sigma}_x + \frac{P_x}{2} t_r \underline{\sigma}_x^2$$

$$\langle \underline{\sigma}_x \rangle = P_x \tag{7-20}$$

โดยทำนองเดียวกัน

$$\langle \underline{\sigma}_y \rangle = P_y \tag{7-21}$$

$$\langle \underline{\sigma}_z \rangle = P_z \tag{7-22}$$

จากสมการ (7-20), (7-21) และ (7-22)

$$\bar{P} = \langle \underline{\sigma} \rangle \tag{7-23}$$

แสดงว่า $\bar{P}$ มีลักษณะคล้ายเวกเตอร์ซึ่งเป็นตัวดำเนินการ

และเนื่องจากว่า $\underline{\rho}\underline{\chi} = \underline{\chi}$

$$\frac{1}{2}(\underline{I} + \bar{P} \cdot \underline{\sigma})\underline{\chi} = \underline{\chi} \quad \text{ทำให้}$$

$$\bar{P} \cdot \underline{\sigma}\underline{\chi} = \underline{\chi} \quad \text{ด้วย} \tag{7-24}$$

แสดงว่า $\bar{P}$ มีทิศเดียวกับสปิน เพราะ $\bar{P} \cdot \underline{\sigma} = \underline{I}$, $\bar{P}$ จึงมีชื่อเรียกว่า โพลาไรเซชันเวกเตอร์ (polarization vector) ของสถานะนั้น นอกจาก $\bar{P}$ จะบอกทิศของสปินและการหมุนในสเปซธรรมดาแล้ว ยังเป็นเวกเตอร์ในสเปซนามธรรม (abstract space) ด้วย โดยตัวดำเนินการ $\exp\left(-\frac{i}{2}\theta \hat{n} \cdot \underline{\sigma}\right)$ เป็นตัวดำเนินการการหมุนในสเปซนามธรรมนี้ด้วย

วิวัฒนาการของ ρ เมื่อเวลาผ่านไป อาจจะหาได้ดังนี้

$$i\hbar \frac{d}{dt} \underline{\chi} = \underline{\underline{H}} \cdot \underline{\chi} \tag{7-25}$$

เมื่อ H เป็นตัวดำเนินการเฮอร์มีเชียน และเป็น 2×2 เมทริกซ์ และเนื่องจากว่า

$$\frac{d}{dt}\underline{\underline{\varrho}} = \left(\frac{\partial}{\partial t}\underline{\chi}\right)\underline{\chi}^{+} + \underline{\chi}\frac{\partial}{\partial t}\underline{\chi}^{+} = \frac{1}{i\hbar} H\chi\chi^{+} - \frac{1}{i\hbar}\underline{\chi}\,\underline{\chi}^{+}\underline{\underline{H}}$$

นั่นคือ
$$i\hbar\frac{d}{dt}\underline{\underline{\varrho}} = \underline{\underline{H}}\,\underline{\underline{\varrho}} - \underline{\underline{\varrho}}\,\underline{\underline{H}} = \left[\underline{\underline{H}}, \underline{\underline{\varrho}}\right] \tag{7-26}$$

และถ้า ρ เป็นเมทริกซ์ความหนาแน่นของสถานะถาวร (stationary states) แล้ว

$$\frac{d}{dt}\underline{\underline{\varrho}} = 0 = \left[\underline{\underline{H}}, \underline{\underline{\varrho}}\right] \tag{7-27}$$

และเราอาจจะหาสมการการเคลื่อนที่ของค่าคาดหมาย $\langle\underline{\underline{A}}\rangle$ ใด ๆ ได้ดังนี้

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}\langle\underline{\underline{A}}\rangle &= i\hbar\, t_r\left(\frac{\partial}{\partial t}\underline{\underline{\varrho}}\,\underline{\underline{A}}\right) + i\hbar\, t_r\left(\underline{\underline{\varrho}}\frac{\partial}{\partial t}\underline{\underline{A}}\right) \\ &= t_r\left[(\underline{\underline{H}}\,\underline{\underline{\varrho}} - \underline{\underline{\varrho}}\,\underline{\underline{H}})\underline{\underline{A}}\right] + i\hbar\langle|\frac{\partial}{\partial t}\underline{\underline{A}}|\rangle \\ &= t_r\left[\underline{\underline{\varrho}}(\underline{\underline{A}}\,\underline{\underline{H}} - \underline{\underline{H}}\,\underline{\underline{A}})\right] + i\hbar\langle|\frac{\partial}{\partial t}\underline{\underline{A}}|\rangle \\ &= \langle|[\underline{\underline{A}}, \underline{\underline{H}}]|\rangle + i\hbar\langle|\frac{\partial}{\partial t}\underline{\underline{A}}|\rangle \end{aligned} \tag{7-28}$$

ลำดับต่อไปเราอาจจะดูสมการการเคลื่อนที่ของ $\bar{P} = \langle\underline{\sigma}\rangle$ สมมุติว่าตัวดำเนินการแฮมมิลโทเนียนมีลักษณะดังนี้

$$H = \frac{1}{2}(Q_0\underline{\underline{I}} + \bar{Q}\cdot\underline{\sigma}) \tag{7-29}$$

เทอมแรกในสมการ (7-29) แทนแฮมมิลโทเนียนมาตรฐาน เช่น แฮมมิลโทเนียนของสนามคูลอมบ์ ส่วน $\bar{Q}$ แทนเวกเตอร์ เช่น

$$\bar{Q} \propto \bar{B} \qquad \text{เมื่อ } \bar{B} \text{ เป็นสนามแม่เหล็ก}$$

จากสมการที่ (7.28) และ (7.29) จะเห็นว่า

$$\frac{d}{dt}\bar{P} = \frac{d}{dt}\langle\underline{\sigma}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle|\underline{\sigma}\,\underline{\underline{H}} - \underline{\underline{H}}\,\underline{\sigma}|\rangle$$

$$= \frac{1}{2i\hbar}\langle|\underline{\sigma}(\bar{Q}\cdot\underline{\sigma}) - (\bar{Q}\cdot\underline{\sigma})\underline{\sigma}|\rangle$$

$$= \frac{1}{2i\hbar}\langle|\bar{Q}\times\underline{\sigma}\times\underline{\sigma}|\rangle = \frac{1}{\hbar}\bar{Q}\times\langle\underline{\sigma}\rangle$$

$$\therefore \quad \hbar\frac{d}{dt}\bar{P} = \bar{Q}\times\bar{P} \tag{7-30}$$

จาก (7-19) และ (7-30)

$$\frac{d}{dt}P^2 = \frac{d}{dt}\bar{P}\cdot\bar{P} = 2\bar{P}\cdot\frac{d}{dt}\bar{P}$$

$$= \frac{2}{\hbar}\bar{P}\cdot(\bar{Q}\times\bar{P}) = 0 \tag{7-31}$$

สมการ (7-31) แสดงว่า $\bar{P}$ มีขนาดคงที่ หรือพูดอีกนัยหนึ่งว่า นอร์มอลไลซ์เซชันของ χ ยังคงขนาดเท่าเดิม

ถ้า $\bar{Q}$ เป็นเวกเตอร์ที่มีขนาดคงที่ สมการ (7-30) แสดงว่า $\bar{P}$ หมุนควงรอบ $\bar{Q}$ ด้วยความถี่เชิงมุมคงที่

$$\bar{\omega} = \frac{\bar{Q}}{\hbar} \tag{7-32}$$

ให้ $\bar{P}(0) = \bar{P}_0$ และ $\frac{\bar{Q}}{Q} = \hat{Q}$ เมื่อเวลาพ้นไป t $\bar{P}$ จะเป็น $\bar{P}(t)$ เวกเตอร์ $\bar{P}$ จะหมุนควงไปเป็นมุม $\theta \cong \omega_Q t$ การหมุนของ $\bar{P}$ ทำให้เราหา $\bar{P}(t)$ ในยูนิทารีสเปซได้ดังนี้ ถ้า

$$\underline{U}_R = \exp\left(-\frac{i}{2}\theta\hat{n}\cdot\underline{\sigma}\right) = \underline{I}\cos\frac{\theta}{2} - i(\hat{n}\cdot\underline{\sigma})\sin\frac{\theta}{2} \tag{7-33}$$

$\underline{U}_R$ เป็นตัวดำเนินการซึ่งจะหมุน $\bar{P}_0$ ไปเป็นมุม $\theta = \omega_\theta t$ จะเห็นว่า

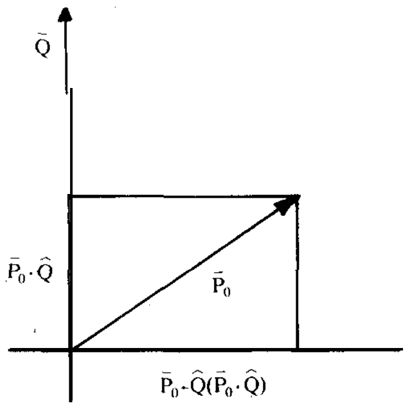
$$\underline{U}_R^{+}\underline{\sigma}\,\underline{U}_R = \hat{n}(\hat{n}\cdot\underline{\sigma}) - \hat{n}\times(\hat{n}\times\underline{\sigma})\cos\theta - \hat{n}\times\underline{\sigma}\sin\theta \tag{7-34}$$

เมื่อ $\hat{i}\times\underline{\sigma}_y = \underline{\sigma}_z$, $\hat{j}\times\underline{\sigma}_z = \underline{\sigma}_x$ และ $\hat{k}\times\underline{\sigma}_x = \underline{\sigma}_y$ สมการ (7-34) ทำให้เราสามารถหา $\bar{P}(t)$ ได้ดังนี้

$$\bar{P}(t) = \langle | \underline{U}_R^{+} \underline{\sigma} \underline{U}_R | \rangle$$

$$= \hat{Q}(\hat{Q}\cdot\bar{P}_0) + (\bar{P}_0 - \hat{Q}(\hat{Q}\cdot\bar{P}_0))\cos\omega_\theta t - \hat{Q}\times\bar{P}_0 \sin\omega_\theta t \qquad (7\text{-}35)$$

ถ้า $\bar{Q}$ เป็นค่าคงที่ และ $\bar{P}_0$ ขนานกับ $\bar{Q}$ จะทำให้ $\bar{P}(t)$ เป็นค่าคงที่ด้วย



รูปที่ 9 การหมุนควงของสปิน โพลาไรเซชันเวกเตอร์

จากรูปที่ 9 และสมการ (7-35) $\bar{P}(t)$ จะเท่ากับ $\hat{Q}$ หรือ $-\hat{Q}$ (ค่าทางกลศาสตร์ควอนตัม) ค่าทั้งสองนี้แทนสถานะถาวรของระบบสองสถานะ พลังงานของระบบนี้เป็นไปตามแฮมมิลโทเนียน ความแตกต่างของระดับพลังงานเท่านั้นซึ่งเราจะสังเกตเห็นได้ $\hat{Q}\cdot\underline{\sigma}$ จะมีค่าไอเกน ± 1 ทำให้ค่าไอเกนมีค่าเป็น $\frac{1}{2}(Q_0 \pm Q)$ ทำให้

$$\Delta E = Q = \hbar\omega_Q \qquad (7\text{-}36)$$

แสดงว่าถ้าเราให้พลังงานที่พอดี จะทำให้สปินของอีเล็กตรอนรับและถ่ายทอดพลังงาน สำหรับอีเล็กตรอน จากสมการที่ (6-88)

$$\underline{\omega}_Q = \frac{q_e}{m_0}\bar{B} \qquad (7\text{-}37)$$

นั่นคือ ค่าสนามที่คงที่ $\bar{B}$ ทำให้ $\bar{P}$ หมุนควงด้วยความเร็วเชิงมุม $\underline{\omega}_Q = \frac{q_e}{m_0}\bar{B}$ ดังนั้น เมื่อให้พลังงานเป็นสนามแม่เหล็กซึ่งเป็นคลื่นมีความถี่ใกล้ ๆ กับ $\underline{\omega}_Q$ ระบบควอนตัมนี้จะดูดหรือคายพลังงาน การหมุนควงของ $\bar{P}$ จะเปลี่ยนไป นี้เป็นหลักการของเรโซแนนซ์แม่เหล็ก (magnetic resonance)