3.4 Schrödinger equation & Bloch equation

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{U}(t) = H\,\mathcal{U}(t)$$

右から $t=0$ での状態 $|\alpha\rangle$ をかける。 $|\alpha,t\rangle = \mathcal{U}(t)|\alpha\rangle$ として、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,t\rangle = H|\alpha,t\rangle$$

ここで基底として $|+\rangle = |1\rangle$, $|-\rangle = |2\rangle$ ととると、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\langle 1|\alpha,t\rangle \\ \langle 2|\alpha,t\rangle\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\langle 1|H|1\rangle & \langle 1|H|2\rangle \\ \langle 2|H|1\rangle & \langle 2|H|2\rangle\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\langle 1|\alpha,t\rangle \\ \langle 2|\alpha,t\rangle\end{pmatrix}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}C_1 \\ C_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}C_1 \\ C_2\end{pmatrix}$$

ハミルトニアンはエルミートなので、

$$H_{11}^* = H_{11} \quad , \; H_{22}^* = H_{22} \quad , \; H_{12}^* = H_{21}$$

Density operator の導入

$$\rho = |\alpha, t\rangle\langle\alpha, t| \doteq \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1^* & C_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_1 C_1^* & C_1 C_2^* \\ C_2 C_1^* & C_2 C_2^* \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix}$$

- $\rho_{12}^* = \rho_{21} = C_2 C_1^*$
- $\rho_{11} + \rho_{12} = |C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$ → ρの成分4つのうち、この条件のために、独立な数は3つ。
- $\rho_{11} = |C_1|^2 > 0$ … $\langle 1|$の状態をとる確率
  $\rho_{22} = |C_2|^2 > 0$ … $\langle 2|$ 〃

もともと C_1, C_2は複素数なので4成分。
この条件をつけて3つが独立

このoperatorの運動方程式は、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\rho = -[\rho, H]$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} -\rho_{11}H_{11} - \rho_{12}H_{21} + \rho_{11}H_{11} + \rho_{21}H_{12} & -\rho_{11}H_{12} - \rho_{12}H_{22} + \rho_{12}H_{11} + \rho_{22}H_{12} \\ -\rho_{21}H_{11} - \rho_{22}H_{21} + \rho_{11}H_{21} + \rho_{21}H_{22} & -\rho_{21}H_{12} - \rho_{22}H_{22} + \rho_{12}H_{21} + \rho_{22}H_{22} \end{pmatrix}$$

これは線形の微分方程式に書き直すことができる。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} \rho_{11} \\ \rho_{22} \\ \rho_{12} \\ \rho_{21} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -H_{21} & H_{12} \\ 0 & 0 & H_{21} & -H_{12} \\ -H_{12} & H_{12} & H_{11}-H_{22} & 0 \\ H_{21} & -H_{21} & 0 & H_{22}-H_{11} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \rho_{11} \\ \rho_{22} \\ \rho_{12} \\ \rho_{21} \end{pmatrix}$$

また、

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \rho_{22}}{\partial t} = -\dfrac{\partial \rho_{11}}{\partial t} = \dfrac{H_{21}}{i\hbar}\rho_{12} - \dfrac{H_{12}}{i\hbar}\rho_{21} \\[2ex] \dfrac{\partial \rho_{12}}{\partial t} = \dfrac{\partial \rho_{21}^*}{\partial t} = -\dfrac{H_{12}}{i\hbar}(\rho_{11} - \rho_{22}) + \dfrac{(H_{11}-H_{22})}{i\hbar}\rho_{12} \end{cases}$$

密度行列は2×2の行列なので、パウリ行列で展開してみる。すなわち、

$$\rho = \rho_0 + \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\rho}$$

$$\begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} = \rho_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \rho_x \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \rho_y \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \rho_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_0 + \rho_z & \rho_x - i\rho_y \\ \rho_x + i\rho_y & \rho_0 - \rho_z \end{pmatrix}$$

したがって、

$$\left.\begin{aligned} \rho_0 + \rho_z &= \rho_{11} \\ \rho_0 - \rho_z &= \rho_{22} \end{aligned}\right\} \qquad \rho_0 = \frac{\rho_{11}+\rho_{22}}{2} = \frac{1}{2} \quad , \quad \rho_z = \frac{\rho_{11}-\rho_{22}}{2}$$

$$\left.\begin{aligned} \rho_x - i\rho_y &= \rho_{12} \\ \rho_x + i\rho_y &= \rho_{21} \end{aligned}\right\} \qquad \rho_x = \frac{\rho_{12}+\rho_{21}}{2} \quad , \quad \rho_y = \frac{\rho_{21}-\rho_{12}}{2i}$$

すると、これらの時間微分は、

$$\dot{\rho}_0 = \frac{\dot{\rho}_{11}+\dot{\rho}_{22}}{2} = \frac{1}{2i\hbar}\left(-H_{21}\rho_{12} + H_{12}\rho_{21} + H_{21}\rho_{12} - H_{12}\rho_{21}\right) = 0$$

当り前！ ⟶ 独立なものは (ρ_x, ρ_y, ρ_z) の3つである。

$$\dot{\rho}_x = \frac{\dot{\rho}_{12}+\dot{\rho}_{21}}{2} = \frac{1}{2i\hbar}\left\{-H_{12}\rho_{11} + H_{12}\rho_{22} + (H_{11}-H_{22})\rho_{12} + H_{21}\rho_{11} - H_{21}\rho_{22} + (H_{22}-H_{11})\rho_{21}\right\}$$

$$= \frac{1}{2i\hbar}\left\{(H_{21}-H_{12})(\rho_{11}-\rho_{22}) + (H_{22}-H_{11})(\rho_{21}-\rho_{12})\right\}$$

$$= \frac{H_{21}-H_{12}}{i\hbar}\rho_z + \frac{H_{22}-H_{11}}{\hbar}\rho_y$$

$$\dot{\rho}_y = \frac{\dot{\rho}_{21}-\dot{\rho}_{12}}{2i} = \frac{1}{2i\,i\hbar}\left\{H_{21}\rho_{11} - H_{21}\rho_{22} + (H_{22}-H_{11})\rho_{21} + H_{12}\rho_{11} - H_{12}\rho_{22} - (H_{11}-H_{22})\rho_{12}\right\}$$

$$= -\frac{1}{2\hbar}\left\{(H_{21}+H_{12})(\rho_{11}-\rho_{22}) + (H_{22}-H_{11})(\rho_{21}+\rho_{12})\right\}$$

$$= -\frac{H_{21}+H_{12}}{\hbar}\rho_z - \frac{H_{22}-H_{11}}{\hbar}\rho_x$$

$$\dot{\rho}_z = \frac{\dot{\rho}_{11}-\dot{\rho}_{22}}{2} = \frac{1}{2i\hbar}\left\{-H_{21}\rho_{12} + H_{12}\rho_{21} - H_{21}\rho_{12} + H_{12}\rho_{21}\right\}$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left\{H_{12}\rho_{21} - H_{21}\rho_{12}\right\}$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left\{H_{12}(\rho_x + i\rho_y) - H_{21}(\rho_x - i\rho_y)\right\}$$

$$= \frac{H_{12}-H_{21}}{i\hbar}\rho_x + \frac{H_{12}+H_{21}}{\hbar}\rho_y$$

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\rho_x\\ \rho_y\\ \rho_z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & -\frac{H_{11}-H_{22}}{\hbar} & \frac{H_{21}-H_{12}}{i\hbar}\\ \frac{H_{11}-H_{22}}{\hbar} & 0 & -\frac{H_{12}+H_{21}}{\hbar}\\ -\frac{H_{21}-H_{12}}{i\hbar} & \frac{H_{12}+H_{21}}{\hbar} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\rho_x\\ \rho_y\\ \rho_z\end{pmatrix}$$

反対称行列なので、

$$\frac{d}{dt}\vec{\rho}=\vec{\omega}\times\vec{\rho}$$

ここで $\vec{\omega}=\left(\frac{H_{12}+H_{21}}{\hbar},\ \frac{H_{21}-H_{12}}{i\hbar},\ \frac{H_{11}-H_{22}}{\hbar}\right)$

これは剛体の運動方程式と同じである。

この中で物理的意味のあるのは ρ_z である。

$$\rho_z=\frac{\rho_{11}-\rho_{22}}{2}=\frac{|c_1|^2-|c_2|^2}{2}$$ …… $|+\rangle$にいる確率から$|-\rangle$にいる確率を引いたものである。

Bloch equationを解く

$$\begin{cases} \dfrac{d\rho_y}{dt} = -\omega_0 \rho_z \\ \dfrac{d\rho_z}{dt} = \omega_0 \rho_y \end{cases}$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{cases} \cancel{\lim_{\epsilon \to 0}} \dfrac{\rho_y(t+\epsilon) - \rho_y(t)}{\epsilon} = -\omega_0 \rho_z(t) \\ \cancel{\lim_{\epsilon \to 0}} \dfrac{\rho_z(t+\epsilon) - \rho_z(t)}{\epsilon} = \omega_0 \rho_y(t) \end{cases}$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{cases} \rho_y(t+\epsilon) = \rho_y(t) - \epsilon \omega_0 \rho_z(t) \\ \rho_z(t+\epsilon) = \rho_z(t) + \epsilon \omega_0 \rho_y(t) \end{cases}$$

……振動運動と同じ差分方程式!!

$$\Downarrow$$

$$\begin{cases} \rho_y(t+\frac{\epsilon}{2}) = \rho_y(t-\frac{\epsilon}{2}) - \epsilon \omega_0 \rho_z(t) \\ \rho_z(t+\epsilon) = \rho_z(t) + \epsilon \omega_0 \rho_y(t+\frac{\epsilon}{2}) \end{cases}$$

番号　　　　　　　　　氏名

量子力学 No.13 Schrödinger equation and Bloch equation

1. $\boldsymbol{B} = (B_0, 0, 0)$ のとき，

(a) ハミルトニアン $H = \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{B}$ を書き下しなさい．$\hbar\omega_0 = 2\mu_B B_0$ としなさい．

$$H = \mu_B \sigma_x B_0 = \begin{pmatrix} 0 & \mu_B B_0 \\ \mu_B B_0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar\omega_0}{2} \\ \frac{\hbar\omega_0}{2} & 0 \end{pmatrix}$$

(b) ブロッホ方程式を書き下しなさい．

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} \rho_x \\ \rho_y \\ \rho_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\omega_0 \\ 0 & \omega_0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \rho_x \\ \rho_y \\ \rho_z \end{pmatrix}$$

2. 上の方程式を差分化する．

$$\begin{cases} \rho_y\left(t+\dfrac{\epsilon}{2}\right) & = \rho_y\left(t-\dfrac{\epsilon}{2}\right) - \epsilon\omega_0\rho_z(t) \\ \rho_z(t+\epsilon) & = \rho_z(t) + \epsilon\omega_0\rho_y\left(t+\dfrac{\epsilon}{2}\right). \end{cases}$$

ここで，$\epsilon = 0.50$ s，$\omega_0 = 1.0$ Hz として裏面の表を完成させなさい．なお，小数第 4 位を四捨五入しなさい．

3. 横軸に時刻 t，縦軸に ρ_z をとった $\rho_z - t$ グラフを描きなさい．

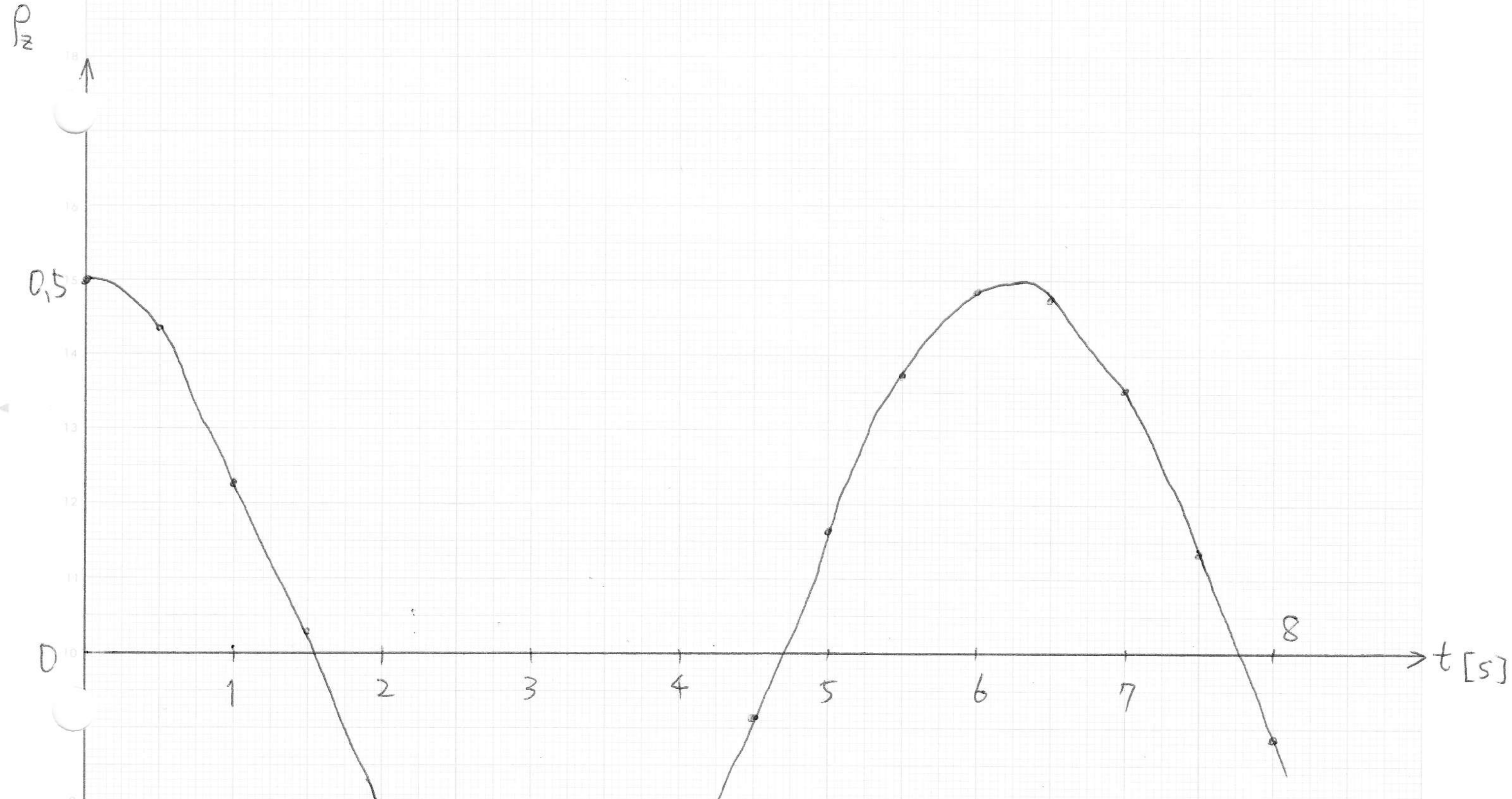
時刻 t〔s〕	$\rho_x(t)$	$\rho_y(t)$	$\rho_z(t)$
0	0.000	0.000	0.500
		$\rho_y(\frac{\epsilon}{2}) = \rho_y(0) - \frac{\epsilon}{2}\omega_0\rho_z(0)$ $= -0.125$	
ϵ	0.000		0,5 − 0,5×0,125 = 0,438
		−0.344	
2ϵ	0.000		0,438 − 0,5×0,344 = 0,266
		−0.477	
3ϵ	0.000		0,266 − 0,5×0,477 = 0,028
		−0.490	
4ϵ	0.000		0,028 − 0,5×0,490 = −0,217
		−0.381	
5ϵ	0.000		−0,217 − 0,5×0,381 = −0,408
		−0.177	
6ϵ	0.000		−0,408 − 0,5×0,177 = −0,497
		0.071	
7ϵ	0.000		−0,497 + 0,5×0,071 = −0,462
		0.302	
8ϵ	0.000		−0,462 + 0,5×0,302 = −0,311
		0.457	
9ϵ	0.000		−0,311 + 0,5×0,457 = −0,083
		0.498	
10ϵ	0.000		−0,083 + 0,5×0,498 = 0,166
		0.414	
11ϵ	0.000		0,166 + 0,5×0,414 = 0,373
		0.227	
12ϵ	0.000		0,373 + 0,5×0,227 = 0,487
		−0.017	
13ϵ	0.000		0,487 − 0,5×0,017 = 0,479
		−0.257	
14ϵ	0.000		0,479 − 0,5×0,257 = 0,351
		−0.432	
15ϵ	0.000		0,351 − 0,5×0,432 = 0,135
		−0.500	
16ϵ	0.000		0,135 − 0,5×0,5 = −0,115
		*****	

4. 描いたグラフから周期を求めなさい.

$T = 2\pi = 6,28$s

5. 描いたグラフを量子力学 No.11 と比較しなさい.

6. 今日の講義でわかったこと・わからなかったこと・感想などを書きなさい. (自由記載)


ρz
0,5
0
-0,5
1
2
3
4
5
6
7
8
t [s]