Dodatek k 4. cvičení **Více o spinu**

Dříve než se budeme hlouběji věnovat spinu, musíme se seznámit trochu více s formalismem kvantové mechaniky.

1. Něco více formalismu kvantové mechaniky

Kvantová mechanika, tak jako každá fyzikální teorie, je založena na několika postulátech[1], jež vyplynuly z analýzy experimentálních skutečností a jejichž oprávněnost je ověřena souhlasem předpovědí teorie a experimentu.

Dosud jsme se seznámili se dvěma postuláty

Postulát o stavovém vektoru

Stav systému je vyčerpávajícím způsobem popsán vlnovou funkcí (stavovým vektorem).

Postulát o kvantové kauzalitě

Časový vývoj stavu systému je popsán časovou Schrödingerovou rovnicí.

a na přijmutí dalších jsme se připravili. Víme již[2], že možné hodnoty energie systému jsou vlastní hodnoty operátoru energie – hamiltoniánu. Toto zobecníme v následujícím postulátu:

Postulát o měřitelných veličinách

a) Každé měřitelné[3] fyzikální veličině je přiřazen hermitovský[4] operátor.

b) Jediné hodnoty této veličiny, jež můžeme naměřit, jsou vlastní hodnoty tohoto operátoru.

Tedy, máme-li nějakou fyzikální veličinu A, např. energii, hybnost nebo moment hybnosti, přiřadíme jí operátor **A** a budeme hledat jeho vlastní hodnoty α_n a spolu s nimi samozřejmě i vlastní stavové vektory[5] ψ_n:

$$\mathbf{A}\psi_n = \alpha_n \psi_n . \tag{1}$$

Víme, že nemůžeme naměřit nic jiného než některou z vlastních hodnot operátoru přiřazeného měřené fyzikální veličině A. Bude-li systém, na němž provádíme měření, ve stavu, který je

[1] Formulace postulátů se v různých učebnicích liší. Je to podobné jako s formulací druhého principu termodynamiky. Známe několik jeho formulací, které jsou velmi nepodobné, a přesto lze ukázat (na základě podrobného rozboru, který není vůbec triviální) jejich ekvivalenci.

[2] Viz dodatek k 3. cvičení.

[3] V kvantové mechanice je měření ústřední pojem. A proto se často na místo fyzikální veličina říká jen stručně měřitelná.

[4] Pokud je operátor hermitovský, jsou všechny jeho vlastní hodnoty reálné a navíc vlastní vektory příslušející různým vlastním hodnotím jsou ortogonální. Pojem hermitovský operátor ozřejmíme na hermitovské matici, pro níž platí, že $\mathbf{A} = \mathbf{A}^+$, kde + znamená, že v matici provedeme transpozici a komplexní sdružení. V případě, že všechny prvky matice jsou reálné, hermitovská matice je symetrická (viz dodatek k 3. cvičení).

[5] Připomeňme poznámku č. 3 v dodatku k 3. cvičení: V kvantové mechanice se obecně hovoří o stavovém vektoru z abstraktního Hilbertova prostoru. Zvolíme-li konkrétní representaci, stavový vektor je buď (vlnovou) funkcí, nebo sloupcovým vektorem.

právě roven některému z vlastních stavů ψ_k, naměříme jistě hodnotu α_k. Jaký bude ale výsledek měření, pokud systém, na němž provádíme měření, nebude v některém z vlastních stavů operátoru **A**? Obecný stav ψ můžeme vždy vyjádřit jako superpozici[6] vlastních stavů ψ_n operátoru **A**:

$$\psi = \sum_m c_m \psi_m, \tag{2}$$

kde

$$c_m = \int \psi_m^* \psi \, \mathrm{d}\tau. \tag{3}$$

Protože v superpozici (2) vystupují všechny vlastní funkce ψ_n, můžeme očekávat, že naměříme kteroukoli z vlastních hodnot α_n. Otázka pak zní, s jakou pravděpodobností ji naměříme. Odpověď dává další postulát:

Postulát o měření

a) Měření fyzikální veličiny A s výsledkem α_n převádí systém ze stavu ψ do stavu ψ_n, který je vlastním stavovým vektorem operátoru **A** příslušejícím k vlastní hodnotě α_n, jež se realizovalo při měření.

b) Pravděpodobnost, že naměříme hodnotu α_n, je rovna $|c_n|^2 = \left|\int \psi_n^* \psi \, \mathrm{d}\tau\right|^2$, kde c_n je koeficient v (2)[7].

Uvažujme o měření dvou veličin A a B. Tyto veličiny nemusí být vždy současně měřitelné (nemusí mít současně obě ostré hodnoty). Současně měřitelné mohou být jen veličiny, jejichž operátory mají společný systém vlastních funkcí. Tuto vlastnost mají operátory, které komutují. Proto v kvantové mechanice hraje významnou roli komutátor[8], což je operátor definovaný vztahem

$$[\mathbf{A},\mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA}. \tag{4}$$

Dosud jsme neuvedli pravidlo jak konstruovat operátory fyzikálních veličin. To je obsahem dalšího postulátu, který již nebudeme nyní uvádět. Spokojíme se s tím, že známe tvar hamiltoniánu pro částici v potenciálovém poli (diferenciální operátor, který působí na vektorovém prostoru funkcí)

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})$$

a pro molekulu čpavku (matici, která působí na prostoru sloupcových vektorů)

[6] Jedná se o obecný tvar Fourierovy řady.
[7] To vyžaduje, aby všechny stavové vektory (vlnové funkce) byly normovány k jedničce. To se v kvantové mechanice samozřejmě vyžaduje. Nicméně na některých místech na to opakovaně upozorníme.
[8] Komutátory v kvantové mechanice jsou analogií Poissonových závorek v klasické mechanice.

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} E_0 & A \\ A & E_0 \end{pmatrix}$$

a že v další části uvedeme operátory spinu – veličiny bytostně kvantové, která nemá klasickou analogii.

♠

2. Spin

W. Pauli
(1900–1958)

Postulát o spinu

Elektron má vlastní moment hybnosti neorbitálního původu (spin) $\mathbf{S}$, jehož složky jsou popsány hermitovskými maticemi

$$\mathbf{S}_i = \frac{h}{2}\boldsymbol{\sigma}_i ,$$

(5a)

kde $i = x, y, z$ a

$$\boldsymbol{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(5)

jsou Pauliho matice.

<u>**Úkol 1.**</u> Najděte operátor čtverce spinu $\mathbf{S}^2 = \mathbf{S}_x^2 + \mathbf{S}_y^2 + \mathbf{S}_z^2$.

<u>**Úkol 2.**</u> Dokažte, že pro operátory spinu platí tyto komutační relace[9]

$$[\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_j] = ih\varepsilon_{ijk}\mathbf{S}_k , \quad [\mathbf{S}_i, \mathbf{S}^2] = 0,$$

(6)

kde ε_{ijk} je Levi-Civitův symbol.

Z komutačních relací (6) plyne, že složky spinu nejsou současně měřitelné. Současně měřitelná je vždy jen jedna složka spinu (obvykle se volí z-tová složka) a jeho kvadrát.

[9] Formálně stejné komutační relace platí i pro orbitální moment hybnosti. Stačí jen zaměnit v (6) S za L.

Úkol 3. Najděte vlastní vektory (normované k jedničce) a vlastní hodnoty operátorů spinu.

Průmět spinu do daného směru měříme Sternovým-Gerlachovým přístrojem s nehomogenním magnetickým polem v směru této osy. Má-li magnetické pole směr osy *z*, tento přístroj označíme jako SG(*z*). Podobné přístroje pro měření spinu ve směru osy *x, y,* resp. n, kde n značí obecný směr, budeme označovat jako SG(*x*), SG(*y*), resp. SG(n), přičemž je to vlastně vždy stejné zařízení jen natočené tak, že magnetické pole má směr vyznačený v závorce. Připomeňme, že operátory přiřazené přístrojům SG(*x*), SG(*y*) a SG(*z*) jsou právě operátory spinu (5). Dále lze dokázat, že přístroji SG(n) odpovídá operátor

$$\mathbf{S}\cdot n = \mathbf{S}_x n_x + \mathbf{S}_y n_y + \mathbf{S}_z n_z . \tag{6}$$

Jednotkový vektor n je výhodné vyjádřit ve sférických souřadnicích pomocí úhlů θ a ϕ

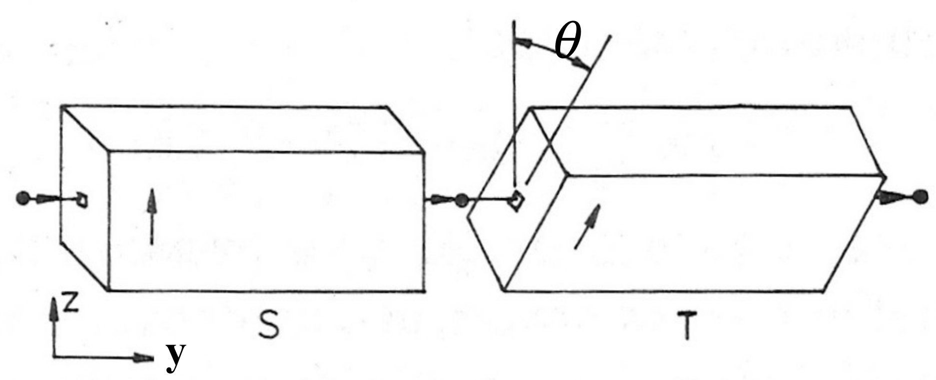
$$n = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta) .$$

Úkol 4. Ukažte, že

$$\begin{pmatrix} e^{-i\phi/2}\cos(\theta/2) \\ e^{i\phi/2}\sin(\theta/2) \end{pmatrix} \text{ a } \begin{pmatrix} -e^{-i\phi/2}\sin(\theta/2) \\ e^{i\phi/2}\cos(\theta/2) \end{pmatrix}$$

jsou vlastní vektory (normované k jedničce) operátoru (6) příslušné pořadě vlastním hodnotám $+\hbar/2$ a $-\hbar/2$.

Uveďme jednoduchý příklad na měření spinu. Předpokládejme, že svazek elektronů[10] projde přístrojem SG(*z*) a přístroj propustí jen elektrony s průmětem spinu do osy *z* rovným $+\hbar/2$. Tyto elektrony necháme dopadat na přístroj SG(*x*) – viz. obr. 1, kde úhel θ je v tomto případě roven $\pi/2$.



Obr. 1. Dva Sternovy-Gerlachovy přístroje za sebou; druhý je vůči prvému pootočený o úhel θ

[10] Sternův-Gerlachův experiment s elektrony vlastně nelze provést. Ve Sternově-Gerlachově experimentu musí být elektron „zavěšen" na těžký atom. Elektrony jsou totiž příliš lehké a rozštěpení svazku nehomogenním magnetickým polem by bylo překryto jeho rozmazáním v důsledku Heisenbergových relací neurčitostí.

<u>Úkol 5.</u> Určete pravděpodobnost, že v uvedeném experimentu bude průmět spinu do osy x roven $+\hbar/2$.

Návod: Vyjádřete vlastní vektor operátoru $\mathbf{S}_z$ odpovídající vlastní hodnotě $+\hbar/2$ jako superpozici vlastních vektorů operátoru $\mathbf{S}_x$.

Zajímavější bude experiment, v němž druhý Sternův-Gerlachův přístroj T bude natočen kolem osy y vzhledem k prvnímu přístroji S o libovolný úhel θ.

<u>Úkol 6.</u> Pro tento experiment určete pravděpodobnost, že na přístroji T naměříme průmět spinu $+\hbar/2$.

Návod: $\boldsymbol{n} = (\sin\theta,\ 0,\ \cos\theta)$.