8.

Спински угаони момент

8.1. Увођење спина

Постоје експериментални резултати који се не могу објаснити само таласном функцијом која зависи од просторних координата, нпр. фино цепање спектралних линија атома водоника, алкалних и земноалкалних метала (у спектрима високе резолуције). *Уленбек и Гоудсмит* (1925) су објаснили цепање атомских спектралних линија постулирајући да електрон поседује *унутрашњи угаони момент*, који је назван *спин*. Компонента спинског угаоног момента дуж било ког правца има само вредности $\hbar/2$ и $-\hbar/2$. Спински угаони момент је додатак на орбитни угаони момент електронског кретања око језгра. Они су даље претпоставили да спин доприноси електронском магнетном моменту величином μ_B (Боров магнетон). Интеракцијом електронског сопственог угаоног момента и орбитног момента објашњава се цепање спектралних линија. Данас знамо да се фина структура спектара објашњава релативистичким ефектима. Овај концепт спина се може применити на *Штерн-Герлахов оглед* (1922). Да би се објаснило цепање снопа атома сребра (са 47 електрона) на два одвојена снопа помоћу спољашњег нехомогеног магнетног поља, неопходно је увести додатни параметар за понашање неспареног електрона. Према томе, неспарени електрон који је у s стању (нема орбитни угаони момент) има магнетни момент услед постојања унутрашњег угаоног момента који има две дозвољене вредности пројекције (μ_B и $-\mu_B$).

Дирак (1928) је развио квантну механику која се заснива на теорији релативности, а не на Њутновој механици, и применио је на електрон. Нашао је да се спински угаони момент и спински магнетни момент електрона аутоматски добијају из решења његове релативистичке квантне механике без додатних постулата. Према томе, спински угаони момент је *унутрашње својство електрона* (и других елементарних честица) као што су то маса мировања и наелектрисање.

Покушано је спин електрона објаснити кретањем „сфере“ електрона око своје осе. Међутим, како је показала Диракова релативистичка квантна механика, спински угаони момент је унутрашње својство електрона, а *није особина која проистиче из било које врсте кретања*. Електрон је тачкаста честица без структуре неспособна да „спинује“ око своје осе. У том смислу, термин „спин“ у квантној механици може наводити на погрешне закључке, али је термин добро установљен и универзалан.

Пре Дираковe релативистичке квантне теорије, Паули (1927) је показао како се спин може једноставно инкорпорисати у нерелативистичку квантну механику преко додатног постулата. С обзиром на то да је садржај релативистичке квантне механике далеко ван домашаја ове књиге, ми ћемо представити Паулијеву модификацију описа таласне функције тако да се укључи спин. Резултати Паулијеве теорије су еквивалентни Дираковој теорији у лимиту малих брзина електрона ($v/c \to 0$).

Спин, према томе, уводимо као додатни ***постулат*** унутар нерелативистичке квантне механике:

Честица поседује сопствени угаони момент $\vec{S}$ и њему придружени магнетни момент $\vec{\mu}_S$. Спински угаони момент се представља ермитским оператором $\hat{\vec{S}}$ за чије компоненте важе комутационе релације: $\left[\hat{S}_x,\hat{S}_y\right]=i\hbar\hat{S}_z$, $\left[\hat{S}_y,\hat{S}_z\right]=i\hbar\hat{S}_x$ и $\left[\hat{S}_z,\hat{S}_x\right]=i\hbar\hat{S}_y$. Сваки тип честице има фиксни спински квантни број или *спин* s из скупа могућих вредности $s=0,\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},2,...$ Спин s за електрон, протон или неутрон има вредност $\frac{1}{2}$. Спински магнетни момент *за електрон* једнак је $\vec{\mu}_S=-\frac{e}{m_e}\vec{S}$.

Према аналогији са орбитним угаоним моментима, *постулирали* смо, дакле, да је спински магнетни момент електрона пропорционалан спинском угаоном моменту:

$$\vec{\mu}_S=-g_S\frac{e}{2m_e}\vec{S}=-g_S\frac{\mu_B}{\hbar}\vec{S}, \tag{8.1}$$

где је електронски спински жиромагнетни однос g_S уведен да би означио колико је пута $\vec{\mu}_S$ већи од орбитног магнетног момента, којег ћемо означавати са $\vec{\mu}_L$. Диракова релативистичка теорија предвиђа да је спински магнетни момент тачно два пута већи. Међутим, експериментална вредност је 2,002 319... . Ова разлика се укида када се примени квантна електродинамика. Ми ћемо усвојити вредност $g_S=2$ (g_S за протон и неутрон се разликују од g_S за електрон). Услед тога ће израз за потенцијалну енергију која настаје интеракцијом магнетног момента са магнетним пољем (одељак **7.5.**, једначина (7.110)) бити једнак:

$$U=2m_S\mu_B B. \tag{8.2}$$

Због две могуће вредности m_S за електрон, $+1/2$ и $-1/2$, следи

$$U=\pm\mu_B B. \tag{8.3}$$

8.2. Оператори спинског угаоног момента

8.2.1. Дефиниције

Квантно-механички третман општег угаоног момента $\hat{\vec{J}}$ се може применити на спински угаони момент. Оператор спинског угаоног момента, $\hat{\vec{S}}$, који је придружен спинском угаоном моменту $\vec{S}$ има три компоненте $\hat{S}_x,\hat{S}_y,\hat{S}_z$ тако да $\hat{\vec{S}}^2=\hat{S}_x^2+\hat{S}_y^2+\hat{S}_z^2$. Ове компоненте следе комутационе релације:

$$\left[\hat{S}_x,\hat{S}_y\right]=i\hbar\hat{S}_z,\quad \left[\hat{S}_y,\hat{S}_z\right]=i\hbar\hat{S}_x,\quad \left[\hat{S}_z,\hat{S}_x\right]=i\hbar\hat{S}_y. \tag{8.4}$$

Пошто три компоненте међусобно не комутирају, оне немају заједничка својствена стања. Оператор $\hat{\vec{S}}^2$ комутира са $\hat{S}_x,\hat{S}_y,\hat{S}_z$: $\left[\hat{\vec{S}}^2,\hat{S}_k\right]=0$, $k=x,y,z$. Будући да $\vec{S}^2$ комутира са сваком од компоненти, свака компонента $\hat{\vec{S}}$ се може одвојено дијагонализовати са $\hat{\vec{S}}^2$; према конвенцији, бира се компонента $\hat{S}_z$.

Лествичасти оператори, тј. оператор подизања $\hat{S}_+$ и оператор спуштања $\hat{S}_-$ за спински угаони момент су једнаки:

$$\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y \tag{8.5}$$

Из дефиниције (8.5) произилазе релације (потпуно исте као код општег формализма):

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2}\left(\hat{S}_+ + \hat{S}_-\right), \quad \hat{S}_y = \frac{1}{2i}\left(\hat{S}_+ - \hat{S}_-\right),$$

$$\hat{S}_x{}^2 = \frac{1}{4}\left(\hat{S}_+{}^2 + \hat{S}_+\hat{S}_- + \hat{S}_-\hat{S}_+ + \hat{S}_-{}^2\right), \quad \hat{S}_y{}^2 = -\frac{1}{4}\left(\hat{S}_+{}^2 - \hat{S}_+\hat{S}_- - \hat{S}_-\hat{S}_+ + \hat{S}_-{}^2\right),$$

$$\hat{S}_x{}^2 + \hat{S}_y{}^2 = \frac{1}{2}\left(\hat{S}_+\hat{S}_- + \hat{S}_-\hat{S}_+\right), \quad \hat{\vec{S}}^2 = \frac{1}{2}\left(\hat{S}_+\hat{S}_- + \hat{S}_-\hat{S}_+\right) + \hat{S}_z{}^2.$$

$$\hat{S}_+\hat{S}_- = \hat{S}_x{}^2 + \hat{S}_y{}^2 + \hbar\hat{S}_z = \hat{\vec{S}}^2 - \hat{S}_z{}^2 + \hbar\hat{S}_z, \quad \hat{S}_-\hat{S}_+ = \hat{S}_x{}^2 + \hat{S}_y{}^2 - \hbar\hat{S}_z = \hat{\vec{S}}^2 - \hat{S}_z{}^2 - \hbar\hat{S}_z.$$

Важе и следеће комутационе релације:

$$\left[\hat{S}_+, \hat{S}_-\right] = 2\hbar\hat{S}_z$$

$$\left[\hat{\vec{S}}^2, \hat{S}_+\right] = 0, \quad \left[\hat{\vec{S}}^2, \hat{S}_-\right] = 0$$

$$\left[\hat{S}_z, \hat{S}_+\right] = \hbar\hat{S}_+, \quad \left[\hat{S}_z, \hat{S}_-\right] = -\hbar\hat{S}_-.$$

8.2.2. Својствена стања и својствене вредности оператора спинског угаоног момента

Једначине својствених вредности оператора $\hat{\vec{S}}^2$ и $\hat{S}_z$, који имају симултане својствене векторе $\left|s, m_S\right\rangle$ су:

$$\hat{\vec{S}}^2\left|s, m_S\right\rangle = \hbar^2 s\left(s+1\right)\left|s, m_S\right\rangle \tag{8.6}$$

$$\hat{S}_z\left|s, m_S\right\rangle = \hbar m_S\left|s, m_S\right\rangle \tag{8.7}$$

где је $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, ...$ (цео или полу-цео број), а $m_s = -s, -s+1, ..., s-1, s$. За свако s постоје $2s+1$ вредности за m_S. Својствена стања $\left|s, m_s\right\rangle$ су нормирана и међусобно ортогонална:

$$\left\langle s', m_s' \middle| s, m_s\right\rangle = \delta_{s's}\delta_{m_s' m_s} \tag{8.8}$$

и представљају тзв. *стандардну базу* за спинске угаоне моменте. Деловање осталих оператора на стандардну базу је следеће:

$$\hat{S}_+\left|s, m_s\right\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s+1)}\left|s, m_s+1\right\rangle$$

$$\hat{S}_-\left|s, m_s\right\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s-1)}\left|s, m_s-1\right\rangle$$

$$\hat{S}_x\left|s, m_s\right\rangle = \frac{\hbar}{2}\left[\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s+1)}\left|s, m_s+1\right\rangle + \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s-1)}\left|s, m_s-1\right\rangle\right]$$

$$\hat{S}_y\left|s, m_s\right\rangle = \frac{\hbar}{2i}\left[\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s+1)}\left|s, m_s+1\right\rangle - \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s-1)}\left|s, m_s-1\right\rangle\right].$$

Када је систем у стању $\left|s, m_s\right\rangle$: $\left\langle \hat{S}_x{}^2\right\rangle = \left\langle \hat{S}_y{}^2\right\rangle = \frac{\hbar^2}{2}\left[s(s+1) - m_s{}^2\right]$, $\left\langle \hat{S}_x\right\rangle = \left\langle \hat{S}_y\right\rangle = 0$.

8.2.3. Геометријско представљање

За фиксирану вредност s, $\vec{S}$ се може представити вектором чија је дужина дата са $\hbar\sqrt{s(s+1)}$. Пројекција вектора $\vec{S}$ на z осу је увек $S_z = \hbar m_s$. $S_x^{\ 2} + S_y^{\ 2} = \vec{S}^2 - S_z^{\ 2}$ је добро дефинисан, а $\left\langle \hat{S}_x \right\rangle = \left\langle \hat{S}_y \right\rangle = 0$. Размишљајући геометријски, можемо замислити да се $\vec{S}$ графички репрезентује вектором дужине $\hbar\sqrt{s(s+1)}$ који се налази на површини конуса са полу-углом $\theta = \arccos\left(\frac{m_s}{\sqrt{s(s+1)}}\right)$. Све оријентације $\vec{S}$ на површини конуса су једнако вероватне јер $\left\langle \hat{S}_x \right\rangle = \left\langle \hat{S}_y \right\rangle = 0$.

8.3. Спин $1/2$

8.3.1. Својствена стања $|\alpha\rangle$ и $|\beta\rangle$

Будући да су електрони, протони и неутрони основни конституенти атома и молекула, а све три честице имају спин $\frac{1}{2}$, случај $s = \frac{1}{2}$ је најважнији при проучавању хемијских система. За $s = \frac{1}{2}$ где $m_s = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ постоје само две својствене функције оператора $\hat{\vec{S}}^2$ и $\hat{S}_z$: $\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$ и $\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$. Ради погодности, стање $\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$ се обично зове *спин-горе* (енгл. *spin up*), а кет $\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$ се пише као $|\uparrow\rangle$ или као $|\alpha\rangle$. Слично, стање $\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$ се зове *спин-доле* (енгл. *spin down*), при чему се кет $\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$ обично означава са $|\downarrow\rangle$ или кетом $|\beta\rangle$. Својствена стања $|\alpha\rangle$ и $|\beta\rangle$ су нормирана и међусобно ортогонална:

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = 1, \quad \langle\beta|\beta\rangle = 1, \quad \langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle = 0 \tag{8.9}$$

и представљају *стандардну базу* за спинске угаоне моменте (спински простор стања је дводимензион).

Најопштије спинско стање $|\chi\rangle$ честице са $s = \frac{1}{2}$ је линеарна комбинација $|\alpha\rangle$ и $|\beta\rangle$:

$$|\chi\rangle = c_\alpha|\alpha\rangle + c_\beta|\beta\rangle \tag{8.10}$$

где су c_α и c_β у општем случају комплексне константе. Ако је кет $|\chi\rangle$ нормиран, тада

$$\langle\chi|\chi\rangle = |c_\alpha|^2 + |c_\beta|^2 = 1$$

што произилази из (8.9). Кет $|\chi\rangle$ се може репрезентовати *матрицом колоном*, познатом као *спинор*:

$$|\chi\rangle = \begin{pmatrix} c_\alpha \\ c_\beta \end{pmatrix} = c_\alpha\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_\beta\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{8.11}$$

где су својствене функције $|\alpha\rangle$ и $|\beta\rangle$ у спинорској нотацији једнаке:

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad |\beta\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{8.12}$$

Једначине својствених вредности оператора $\hat{\vec{S}}^2$ и $\hat{S}_z$ су:

$$\hat{\vec{S}}^2|\alpha\rangle=\frac{3}{4}\hbar^2|\alpha\rangle \quad \hat{\vec{S}}^2|\beta\rangle=\frac{3}{4}\hbar^2|\beta\rangle \tag{8.13}$$

$$\hat{S}_z|\alpha\rangle=\frac{\hbar}{2}|\alpha\rangle \quad \hat{S}_z|\beta\rangle=-\frac{\hbar}{2}|\beta\rangle. \tag{8.14}$$

Деловање осталих оператора на стандардну базу је следеће (из општих формула):

$$\hat{S}_+|\alpha\rangle=0 \quad \hat{S}_+|\beta\rangle=\hbar|\alpha\rangle \tag{8.15}$$

$$\hat{S}_-|\alpha\rangle=\hbar|\beta\rangle \quad \hat{S}_-|\beta\rangle=0 \tag{8.16}$$

$$\hat{S}_x|\alpha\rangle=\frac{\hbar}{2}|\beta\rangle \quad \hat{S}_x|\beta\rangle=\frac{\hbar}{2}|\alpha\rangle \tag{8.17}$$

$$\hat{S}_y|\alpha\rangle=\frac{i\hbar}{2}|\beta\rangle \quad \hat{S}_y|\beta\rangle=-\frac{i\hbar}{2}|\alpha\rangle. \tag{8.18}$$

Оператор $\hat{S}_+$ „подиже“ стање $|\beta\rangle$ у стање $|\alpha\rangle$, али не може даље подићи $|\alpha\rangle$, док $\hat{S}_-$ „спушта“ $|\alpha\rangle$ у $|\beta\rangle$, али не може спустити $|\beta\rangle$.

У оба стања $|\alpha\rangle$ и $|\beta\rangle$, средње вредности су: $\langle \hat{S}_x{}^2\rangle=\langle \hat{S}_y{}^2\rangle=\frac{\hbar^2}{4}$, $\langle \hat{S}_x\rangle=\langle \hat{S}_y\rangle=0$.

8.3.2. Матричне репрезентације $\hat{\vec{S}}^2$, $\hat{S}_+$, $\hat{S}_-$, $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ и $\hat{S}_z$ оператора у стандардној бази

Стандардна база се састоји од кетова $|\alpha\rangle$ и $|\beta\rangle$ који се репрезентују матрицама $|\alpha\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ и $|\beta\rangle=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$. Као што смо већ рекли, свако опште спинско стање $|\chi\rangle$ се тада представља линеарном комбинацијом вектора базе: $|\chi\rangle=\begin{pmatrix}c_\alpha\\c_\beta\end{pmatrix}=c_\alpha\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+c_\beta\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$. Ове матрице димензије 2×1 се зову спинори. У датој бази можемо представити спинске операторе на уобичајени начин, користећи наведено деловање датих оператора на кетове $|\alpha\rangle$ и $|\beta\rangle$:

$$\hat{\vec{S}}^2=\begin{pmatrix}\langle\alpha|\hat{\vec{S}}^2|\alpha\rangle & \langle\alpha|\hat{\vec{S}}^2|\beta\rangle\\ \langle\beta|\hat{\vec{S}}^2|\alpha\rangle & \langle\beta|\hat{\vec{S}}^2|\beta\rangle\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{3}{4}\hbar^2 & 0\\ 0 & \frac{3}{4}\hbar^2\end{pmatrix}=\frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_z=\begin{pmatrix}\langle\alpha|\hat{S}_z|\alpha\rangle & \langle\alpha|\hat{S}_z|\beta\rangle\\ \langle\beta|\hat{S}_z|\alpha\rangle & \langle\beta|\hat{S}_z|\beta\rangle\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{\hbar}{2} & 0\\ 0 & -\frac{\hbar}{2}\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix},$$

$$\hat{S}_+=\begin{pmatrix}\langle\alpha|\hat{S}_+|\alpha\rangle & \langle\alpha|\hat{S}_+|\beta\rangle\\ \langle\beta|\hat{S}_+|\alpha\rangle & \langle\beta|\hat{S}_+|\beta\rangle\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&\hbar\\0&0\end{pmatrix}=\hbar\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix},\quad \hat{S}_-=\begin{pmatrix}\langle\alpha|\hat{S}_-|\alpha\rangle & \langle\alpha|\hat{S}_-|\beta\rangle\\ \langle\beta|\hat{S}_-|\alpha\rangle & \langle\beta|\hat{S}_-|\beta\rangle\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&0\\\hbar&0\end{pmatrix}=\hbar\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix},$$

$$\hat{S}_x=\begin{pmatrix}\langle\alpha|\hat{S}_x|\alpha\rangle & \langle\alpha|\hat{S}_x|\beta\rangle\\ \langle\beta|\hat{S}_x|\alpha\rangle & \langle\beta|\hat{S}_x|\beta\rangle\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&\frac{\hbar}{2}\\\frac{\hbar}{2}&0\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad \hat{S}_y=\begin{pmatrix}\langle\alpha|\hat{S}_y|\alpha\rangle & \langle\alpha|\hat{S}_y|\beta\rangle\\ \langle\beta|\hat{S}_y|\alpha\rangle & \langle\beta|\hat{S}_y|\beta\rangle\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&-\frac{i\hbar}{2}\\\frac{i\hbar}{2}&0\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$$

Видимо да су, наравно, оператори $\hat{\vec{S}}^2$ и $\hat{S}_z$ дијагонални у својственој бази, при чему се на дијагоналама налазе њихове својствене вредности, док су остали оператори недијагонални јер ово није њихова својствена база.

Бездимензионе *Паулијеве матрице* $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ су дефинисане на следећи начин:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{8.19}$$

Паулијеве матрице са јединичном матрицом $I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ чине базу у простору матрица типа 2×2, $\mathbb{C}^{22}$. Паулијеве матрице задовољавају релације:

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I$$

$$\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z \qquad \sigma_y\sigma_z = -\sigma_z\sigma_y = i\sigma_x \qquad \sigma_z\sigma_x = -\sigma_x\sigma_z = i\sigma_y$$

$$\sigma_x\sigma_y\sigma_z = iI$$

$$Tr\sigma_x = Tr\sigma_y = Tr\sigma_z = 0$$

$$\det\sigma_x = \det\sigma_y = \det\sigma_z = -1$$

Ако их упоредимо са матричним репрезентацијама оператора $\hat{S}_x, \hat{S}_y$ и $\hat{S}_z$, видимо да је веза једноставна:

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x \qquad S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y \qquad S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z \tag{8.20}$$

8.3.3. Решавање једначина својствених вредности оператора $\hat{S}_x$ и $\hat{S}_y$

Својствене вредности оператора $\hat{S}_z$ су $\hbar/2$ и $-\hbar/2$. Својствени вектори су $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Својствена вредност оператора $\hat{\vec{S}}^2$ је $\frac{3}{4}\hbar^2$, двапут је дегенерисана. Својствени кетови $\hat{\vec{S}}^2$ су такође $|\alpha\rangle$ и $|\beta\rangle$, тј. матрице $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Својствени проблем оператора $\hat{S}_x$ у матричној репрезентацији изгледа овако: $\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_\alpha \\ c_\beta \end{pmatrix} = s_x\begin{pmatrix} c_\alpha \\ c_\beta \end{pmatrix}$. Добијене својствене вредности су $\hbar/2$ и $-\hbar/2$. Својствени вектори су:

$$\left|+\frac{\hbar}{2}\right\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left|+\frac{\hbar}{2}\right\rangle_z + \left|-\frac{\hbar}{2}\right\rangle_z\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\alpha\rangle + |\beta\rangle\right] \text{ и}$$

$$\left|-\frac{\hbar}{2}\right\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left|+\frac{\hbar}{2}\right\rangle_z - \left|-\frac{\hbar}{2}\right\rangle_z\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\alpha\rangle - |\beta\rangle\right].$$

Једначина својствених вредности оператора $\hat{S}_y$ преко матрица је $\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_\alpha \\ c_\beta \end{pmatrix} = s_y\begin{pmatrix} c_\alpha \\ c_\beta \end{pmatrix}$. Својствене вредности су $\hbar/2$ и $-\hbar/2$, а својствени вектори, редом,

$$\left|+\frac{\hbar}{2}\right\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\alpha\rangle + i|\beta\rangle\right]$$

$$\left|-\frac{\hbar}{2}\right\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\alpha\rangle - i|\beta\rangle\right].$$

8.4. Укупан простор стања честице

Комплетан скуп променљивих једне честице дели се на групу просторних (орбитних) и групу спинских променљивих. С обзиром на то да спински угаони момент *не зависи од просторних степени слободе*, јер је спин унутрашњи степен слободе, он се не може описивати диференцијалним оператором као орбитни угаони моменти. Из истог разлога $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ и $\hat{S}_z$ комутирају са свим просторним операторима: $\left[\hat{S}_j, \hat{L}_k\right] = 0$, $\left[\hat{S}_j, \hat{\vec{R}}_k\right] = 0$, $\left[\hat{S}_j, \hat{\vec{P}}_k\right] = 0$ $(j,k = x,y,z)$. Другим речима, спински оператори делују у тзв. *спинском простору стања* ε_s где $\hat{\vec{S}}^2$ и $\hat{S}_z$ чине комплетан скуп комутирајућих опсервабли, док просторни оператори делују у тзв. *орбитном простору стања* ε_r који је изоморфан простору таласних функција. Укупан простор стања честице ε је тензорски производ

$$\varepsilon = \varepsilon_r \otimes \varepsilon_s$$

и стога све спинске опсервабле комутирају са орбитним опсерваблама. К.С.К.О. у ε се добија збиром К.С.К.О. из ε_r и К.С.К.О. из ε_s. Могући примери за К.С.К.О. у ε су: $\left\{\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}, \hat{\vec{S}}^2, \hat{S}_z\right\}$, $\left\{\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z, \hat{\vec{S}}^2, \hat{S}_z\right\}$ или $\left\{\hat{H}, \hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_z, \hat{\vec{S}}^2, \hat{S}_z\right\}$, итд. Будући да су сви кетови из ε својствени вектори од $\hat{\vec{S}}^2$ са истом својственом вредности, из овог скупа опсервабли можемо изоставити $\hat{\vec{S}}^2$.

Ако за К.С.К.О. користимо $\left\{\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}, \hat{\vec{S}}^2, \hat{S}_z\right\}$, као базу у простору ε узимамо скуп вектора који се добијају тензорским производом кетова $\left|\vec{r}\right\rangle \equiv \left|x,y,z\right\rangle$ из ε_r и кетова $\left|\varepsilon\right\rangle$ из ε_s, где $\left|\varepsilon\right\rangle$ може да буде или $\left|\alpha\right\rangle$ или $\left|\beta\right\rangle$: $\left|\vec{r},\varepsilon\right\rangle \equiv \left|x,y,z,\varepsilon\right\rangle = \left|\vec{r}\right\rangle \otimes \left|\varepsilon\right\rangle$. $\left|\vec{r},\varepsilon\right\rangle$ је својствени вектор заједнички за опсервабле $\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}, \hat{\vec{S}}^2, \hat{S}_z$:

$$\begin{aligned} &\hat{X}\left|\vec{r},\varepsilon\right\rangle = x\left|\vec{r},\varepsilon\right\rangle, \quad \hat{Y}\left|\vec{r},\varepsilon\right\rangle = y\left|\vec{r},\varepsilon\right\rangle, \quad \hat{Z}\left|\vec{r},\varepsilon\right\rangle = z\left|\vec{r},\varepsilon\right\rangle, \\ &\hat{\vec{S}}^2\left|\vec{r},\varepsilon\right\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2\left|\vec{r},\varepsilon\right\rangle, \quad \hat{S}_z\left|\vec{r},\varepsilon\right\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}\left|\vec{r},\varepsilon\right\rangle \end{aligned} \tag{8.21}$$

Сваки кет $\left|\vec{r},\varepsilon\right\rangle$ је јединствен до на константни фактор, јер ове опсервабле чине К.С.К.О. Скуп стања $\left\{\left|\vec{r},\varepsilon\right\rangle\right\}$ је ортонормиран (у проширеном смислу) , јер су скупови $\left\{\left|\vec{r}\right\rangle\right\}$ и $\left\{\left|\alpha\right\rangle, \left|\beta\right\rangle\right\}$ ортонормирани у просторима ε_r и ε_s, редом:

$$\left\langle \vec{r}', \varepsilon' \middle| \vec{r}, \varepsilon \right\rangle = \delta_{\varepsilon'\varepsilon}\delta(\vec{r}' - \vec{r}). \tag{8.22}$$

Ова база задовољава и релацију затварања:

$$\sum_{\varepsilon}\int d^3r \left|\vec{r},\varepsilon\right\rangle\left\langle\vec{r},\varepsilon\right| = \hat{I}. \tag{8.23}$$

Репрезентација $\left\{\left|\vec{r},\varepsilon\right\rangle\right\}$

Било које стање $\left|\psi\right\rangle$ простора ε се може развити у $\left\{\left|\vec{r},\varepsilon\right\rangle\right\}$ бази. Да бисмо видели како, довољно је применити релацију затварања (8.23):

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \left[\sum_{\varepsilon}\int d^3r\,|\vec{r},\varepsilon\rangle\langle\vec{r},\varepsilon|\right]|\psi\rangle = \sum_{\varepsilon}\int d^3r\,|\vec{r},\varepsilon\rangle\langle\vec{r},\varepsilon|\psi\rangle = \sum_{\varepsilon}\int d^3r\,|\vec{r},\varepsilon\rangle\psi_{\varepsilon}(\vec{r}) = \\ &= \int d^3r\psi_{\alpha}(\vec{r})|\vec{r},\alpha\rangle + \int d^3r\psi_{\beta}(\vec{r})|\vec{r},\beta\rangle\end{aligned} \tag{8.24}$$

Према томе, вектор $|\psi\rangle$ се може репрезентовати скупом његових координата у бази $\{|\vec{r},\varepsilon\rangle\}$, тј. бројевима $\psi_{\alpha}(\vec{r})$ и $\psi_{\beta}(\vec{r})$, који зависе од три континуална индекса x, y, z и дискретног индекса α или β. Према томе, да би се комплетно окарактерисало стање електрона, неопходно је да се специфицирају ДВЕ функције просторних променљивих $\psi_{\alpha}(\vec{r})$ и $\psi_{\beta}(\vec{r})$, које се често пишу у форми спинора:

$$[\psi](r) = \begin{pmatrix}\psi_{\alpha}(r) \\ \psi_{\beta}(r)\end{pmatrix}. \tag{8.25}$$

Будући да је бра $\langle\psi| = \sum_{\varepsilon}\int d^3r\psi_{\varepsilon}^{*}(\vec{r})\langle\vec{r},\varepsilon|$, и да се може репрезентовати у форми спинора који је адјунгован (8.25), тј. са $[\psi]^{\dagger}(r) = \begin{pmatrix}\psi_{\alpha}^{*}(r) & \psi_{\beta}^{*}(r)\end{pmatrix}$, скаларни производ два вектора $|\psi\rangle$ и $|\varphi\rangle$ је једнак:

$$\begin{aligned}\langle\psi|\varphi\rangle &= \langle\psi|\hat{I}|\varphi\rangle = \sum_{\varepsilon}\int d^3r\,\langle\psi|\vec{r},\varepsilon\rangle\langle\vec{r},\varepsilon|\varphi\rangle = \sum_{\varepsilon}\int d^3r\psi_{\varepsilon}^{*}(\vec{r})\varphi_{\varepsilon}(\vec{r}) = \\ &= \int d^3r\left[\psi_{\alpha}^{*}(\vec{r})\varphi_{\alpha}(\vec{r}) + \psi_{\beta}^{*}(\vec{r})\varphi_{\beta}(\vec{r})\right] = \int d^3r[\psi]^{\dagger}(r)[\varphi](r)\end{aligned} \tag{8.26}$$

Ако је вектор стања типа $|\psi\rangle = |\varphi\rangle\otimes|\chi\rangle$, што је нпр. случај код вектора базе, где је $|\varphi\rangle = \int d^3r\varphi(\vec{r})|\vec{r}\rangle$ из ε_r, а $|\chi\rangle = c_{\alpha}|\alpha\rangle + c_{\beta}|\beta\rangle$ из ε_s, тада њему придружени спинор има једноставнији облик:

$$[\psi](r) = \begin{pmatrix}\varphi(r)c_{\alpha} \\ \varphi(r)c_{\beta}\end{pmatrix} = \varphi(r)\begin{pmatrix}c_{\alpha} \\ c_{\beta}\end{pmatrix}. \tag{8.27}$$

(Једноставнији) резиме

Стање честице са нултим спином ($s=0$) се може *репрезентовати* (просторна репрезентација) функцијом стања $\psi(\vec{r},t)$ просторних координата $\vec{r}$ и времена t. Међутим, стање честице која има $s\neq 0$ мора зависити и од неке спинске променљиве. За ту *спинску променљиву* бирамо компоненту спинског угаоног момента дуж z осе ($\hat{S}_z$) и користимо квантни број m_s да означимо то стање. Према томе, за честицу у специфичном (својственом) спинском стању, функцију стања можемо означити са $\boxed{\psi(\vec{r},m_s,t)}$, где m_s има само $2s+1$ могућих вредности. Док $\vec{r}$ и t имају континуалан опсег вредности, спинска променљива m_s има коначан број дискретних вредности.

За честицу која није у својственом спинском стању (за оператор $\hat{S}_z$), спинску променљиву означавамо са χ. Општа функција стања $\boxed{\psi(\vec{r},\chi,t)}$ честице са спином s се може развити преко спинских својствених функција $|s,m_S\rangle$:

$$\psi(\vec{r},\chi,t) = \sum_{m_s=-s}^{s}\psi(\vec{r},m_s,t)|s,m_s\rangle. \tag{8.28}$$

Када је $\psi(\vec{r},\chi,t)$ нормирана, то значи да је квадрат норме једнак:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{m_s=-s}^{s}\int|\psi(\vec{r},m_s,t)|^2 d^3r = 1 \tag{8.29}$$

Величина $|\psi(\vec{r}, m_s, t)|^2$ је густина вероватноће налажења честице на месту $\vec{r}$ у тренутку t са z компонентом спина једнакој $m_s\hbar$.

За честицу са спином ½ укупна функција стања (8.28) је линеарна комбинација $|\alpha\rangle$ и $|\beta\rangle$:

$$\psi(\vec{r}, \chi, t) = \psi(\vec{r}, +\frac{1}{2}, t)|\alpha\rangle + \psi(\vec{r}, -\frac{1}{2}, t)|\beta\rangle. \tag{8.30}$$

$\psi(\vec{r}, \chi, t)$ се може представити матрицом колоном у бази коју чине $|\alpha\rangle$ и $|\beta\rangle$:

$$\psi(\vec{r}, \chi, t) = \begin{pmatrix} \psi(\vec{r}, \frac{1}{2}, t) \\ \psi(\vec{r}, -\frac{1}{2}, t) \end{pmatrix}.$$

8.5. Задаци

Задатак 1. На неком квантном систему смо измерили вредности $\hat{\vec{S}}^2$ и $\hat{S}_z$ и добили, редом, $\frac{3}{4}\hbar^2$ и $\hbar/2$. Након тога се мери $\hat{S}_x$. Који су могући резултати мерења и са којом вероватноћом се они добијају? Решење. Можемо измерити његове својствене вредности $\hbar/2$ и $-\hbar/2$. Непосредно пре мерења $\hat{S}_x$ систем је у стању $|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ које се може написати у својственој бази $\hat{S}_x$ као линеарна комбинација: $|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \lambda_1 \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \lambda_2 \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$. Вероватноћа $P(\hbar/2) = |\lambda_1|^2$ је $1/2$, а вероватноћа $P(-\hbar/2) = |\lambda_2|^2$ је исто $1/2$. Видимо да би средња вредност великог броја мерења била 0. Исти резултат би се добио да смо мерили $\hat{S}_y$.

Задатак 2. Израчунати комутационе релације за Паулијеве матрице. Решење: $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$, $[\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x$ и $[\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y$.

Задатак 3. Одредити енергетске нивое спина $s = \frac{3}{2}$ честице чији је хамилтонијан дат са: $\hat{H} = \frac{\alpha}{\hbar^2}\left(\hat{S}_x{}^2 + \hat{S}_y{}^2 - 2\hat{S}_z{}^2\right) - \frac{\beta}{\hbar}\hat{S}_z$; α и β су константе. Да ли су нивои дегенерисани?

Решење. Хамилтонијан комутира са $\hat{\vec{S}}^2$ и $\hat{S}_z$, па имају симултане својствене кетове. У стандардној бази хамилтонијан је дијагоналан и по дијагонали су његове својствене вредности. Стандардна база се састоји од 4 кета: $\left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle$, $\left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle$, $\left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle$ и $\left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle$. На дијагонали су матрични елементи:

$$\left\langle\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right|\hat{H}\left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle = -3\alpha - \frac{3}{2}\beta, \quad \left\langle\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right|\hat{H}\left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = 3\alpha - \frac{1}{2}\beta,$$

$$\left\langle\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right|\hat{H}\left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = 3\alpha + \frac{1}{2}\beta, \quad \left\langle\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right|\hat{H}\left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle = -3\alpha + \frac{3}{2}\beta.$$

Остали матрични елементи хамилтонијана су једнаки нули. Добили смо четири различите енергије, тако да нивои нису дегенерисани.

Задатак 4. У тренутку $t = 0$ честица је у својственом стању $\hat{S}_x$ које одговара $\hbar/2$ својственој вредности. Честица је у магнетном пољу и хамилтонијан се може писати као $\hat{H} = \frac{eB}{m}\hat{S}_z$. *а*) Наћи стање за $t>0$. *б*) Ако меримо $\hat{S}_x$ у тренутку $t=t_1$ који се добија резултат? *в*) Колики је резултат мерења $\hat{S}_z$ за $t=t_1$? *г*) Израчунати средње вредности $\langle \hat{S}_x \rangle$ и $\langle \hat{S}_z \rangle$ за $t=t_1$.

Решавање. *а*) У тренутку $t=0$ честица се налази у стању $\frac{1}{\sqrt{2}}[|\alpha\rangle+|\beta\rangle]$. Треба нам временска еволуција система коју ћемо добити помоћу једначине $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$. Нека је $\psi(\vec{r},\vec{s},t)=\psi(\vec{r},\vec{s})\varphi(t)$. Тада се могу раздвојити промењљиве и добија се $\varphi(t)=e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$ и $\hat{H}\psi(\vec{r},\vec{s})=E\psi(\vec{r},\vec{s})$. С обзиром на то да је хамилтонијан $\hat{H}=\frac{eB}{m}\hat{S}_z$, а да имамо решење својственог проблема $\hat{S}_z$, закључујемо да су својствене функције оба оператора иста, а да ће својствене вредности хамилтонијана бити својствене вредности од $\hat{S}_z$ помножене са $\frac{eB}{m}$. Према томе, када $|\psi_1(\vec{r},\vec{s})\rangle=|\alpha\rangle$, $E_1=\frac{eB}{m}\frac{\hbar}{2}$; за $|\psi_2(\vec{r},\vec{s})\rangle=|\beta\rangle$, $E_2=-\frac{eB}{m}\frac{\hbar}{2}$. Напишимо сад својствене кетове и у функцији времена:

$|\psi_1(\vec{r},\vec{s},t)\rangle=e^{-\frac{iE_1t}{\hbar}}|\alpha\rangle=e^{-\frac{ieBt}{2m}}|\alpha\rangle$ и $|\psi_2(\vec{r},\vec{s},t)\rangle=e^{-\frac{iE_2t}{\hbar}}|\beta\rangle=e^{\frac{ieBt}{2m}}|\beta\rangle$.

Свако стање честице се може написати као линеарна комбинација ова два својствена кета:

$|\psi(\vec{r},\vec{s},t)\rangle=\lambda_1|\psi_1(\vec{r},\vec{s},t)\rangle+\lambda_2|\psi_2(\vec{r},\vec{s},t)\rangle=\lambda_1 e^{-\frac{ieBt}{2m}}|\alpha\rangle+\lambda_2 e^{\frac{ieBt}{2m}}|\beta\rangle$.

Ако добијено опште решење за $t=0$, тј. $|\psi(\vec{r},\vec{s},0)\rangle=\lambda_1|\alpha\rangle+\lambda_2|\beta\rangle$ поредимо са почетним стањем $|\psi(\vec{r},\vec{s},0)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}|\alpha\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|\beta\rangle$, следи $\lambda_1=\lambda_2=\frac{1}{\sqrt{2}}$, па је опште решење у неком тренутку t:

$$|\psi(\vec{r},\vec{s},t)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{ieBt}{2m}}|\alpha\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}e^{\frac{ieBt}{2m}}|\beta\rangle.$$

б) У тренутку $t=t_1$ стање је $|\psi(\vec{r},\vec{s},t_1)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{ieBt_1}{2m}}|\alpha\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}e^{\frac{ieBt_1}{2m}}|\beta\rangle$. Ако желимо видети резултат мерења опсервабле $\hat{S}_x$, треба добијени кет представити преко својствених кетова $\hat{S}_x$. Својствене кетове од $\hat{S}_x$ смо већ добили раније: $\left|+\frac{\hbar}{2}\right\rangle_x=\frac{1}{\sqrt{2}}[|\alpha\rangle+|\beta\rangle]$ и $\left|-\frac{\hbar}{2}\right\rangle_x=\frac{1}{\sqrt{2}}[|\alpha\rangle-|\beta\rangle]$. Из ове две једначине следи $|\alpha\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left|+\frac{\hbar}{2}\right\rangle_x+\frac{1}{\sqrt{2}}\left|-\frac{\hbar}{2}\right\rangle_x$ и $|\beta\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left|+\frac{\hbar}{2}\right\rangle_x-\frac{1}{\sqrt{2}}\left|-\frac{\hbar}{2}\right\rangle_x$. Ако сад ове две релације за $|\alpha\rangle$ и $|\beta\rangle$ убацимо у опште решење за $t=t_1$, добија се:

$$|\psi(\vec{r},\vec{s},t_1)\rangle=\left|+\frac{\hbar}{2}\right\rangle_x\left[\cos\frac{eBt_1}{2m}\right]+\left|-\frac{\hbar}{2}\right\rangle_x\left[-i\sin\frac{eBt_1}{2m}\right].$$

На основу постулата, вероватноћа да ће се мерењем $\hat{S}_x$ добити $\hbar/2$ је $P(\hbar/2)=\cos^2\frac{eBt_1}{2m}$, а да ће се добити $-\hbar/2$ је $P(-\hbar/2)=\sin^2\frac{eBt_1}{2m}$. *в*) Из општег решења $|\psi(\vec{r},\vec{s},t)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{ieBt}{2m}}|\alpha\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}e^{\frac{ieBt}{2m}}|\beta\rangle$ директно следи да су вероватноће резултата мерења $\hat{S}_z$ једнаке $P(\hbar/2)=\frac{1}{2}$ и $P(-\hbar/2)=\frac{1}{2}$.

г) Средње вредности мерења $\hat{S}_x$ и $\hat{S}_z$ су: $\langle\hat{S}_x\rangle=\frac{\hbar}{2}\left[\cos^2\frac{eBt_1}{2m}-\sin^2\frac{eBt_1}{2m}\right]=\frac{\hbar}{2}\cos\frac{eBt_1}{m}$; $\langle\hat{S}_z\rangle=0$.