Kvantummechanika XIII.

Spin, Impulzusmomentum összeadás

→ Klasszikus mechanikában egy merev test kétféle impulzusmomentummal rendelkezik: **pálya** ($\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$) és **spin** ($\vec{S} = I\omega$)

→ Elektron hasonlat, figyelembe véve, hogy nincs térbeli struktúra!

Lényeg: Az elemi részecskék rendelkeznek **intrinzikus** (S) és „extrinzikus" (L) imp.-momentummal is.

→ Az algebrai elmélet a pálya impulzusmomentum elméletének másolata.

A kommutációs relációk:

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z \; ; \; [S_y, S_z] = i\hbar S_x \; ; \; [S_z, S_x] = i\hbar S_y$$

→ S^2 és S_z sajátvektoraira teljesül, hogy:

$$S^2|sm\rangle = \hbar^2 s(s+1)|sm\rangle \; ; \quad S_z|sm\rangle = \hbar m|sm\rangle$$

és

$$S_\pm|sm\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m(m\pm1)}\,|s(m\pm1)\rangle \text{, ahol } S_\pm = S_x \pm i S_y$$

/Mivel a spin sajátállapotai nem függvények, a „ket" notációt használjuk. Az impulzusmomentum esetén is írhattuk volna Y_ℓ^m helyett, hogy $|\ell m\rangle$, de ott a függvény jelölés természetesebb./

! Most a sajátvektorok nem gömbi harmonikusok! (egyáltalán nem is függenek θ-tól és ϕ-tól) és a teles s és m értékeket sem zárhatjuk ki!

$$s = 0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, \dots \qquad \text{és} \qquad m = -s, -s+1, \dots s-1, s$$

→ Valójában minden részecske sajátt s értékkel rendelkezik, amit egyszerűen a részecske **spinjének** nevezünk.
(pi mezon: 0, elektron: $\frac{1}{2}$, foton: 1, Δ: $\frac{3}{2}$ ...)

→ A pálya imp. momentum ℓ értékével ellentétben s fix, nem lehet megváltoztatni! Ez a spinek elméletét vizuálisan egyszerűvé teszi.

↳

→ Feles (½) spin

→ A legfontosabb eset, a közönséges anyagot felépítő részecskék $s = 1/2$-a rendelkeznek (proton, neutron, elektron), ahogy az összes kvark és lepton $s = 1/2$

→ Két sajátállapot létezik csak: $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ → fel spin

$|\frac{1}{2}, (-\frac{1}{2})\rangle$ → le spin

→ Ezeket bázisvektorként alkalmazva egy ½-es spinű részecske ált. állapota:

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a\chi_+ + b\chi_- \quad , \text{ahol} \rightarrow \text{spinorok}$$

$$(\text{up}): \chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow (\text{down})$$

→ A spin operátorok 2×2-es mátrixok, melyek úgy kaphatók meg, ha megvizsgáljuk hatásukat χ_+ és χ_--on.

→ Az $S^2|sm\rangle = \hbar^2 s(s+1)|sm\rangle$ -ből:

$$S^2\chi_+ = \frac{3}{4}\hbar^2\chi_+ \quad \text{és} \quad S^2\chi_- = \frac{3}{4}\hbar^2\chi_-$$

→ Ha S^2-et mátrix alakba írjuk, egyelőre meghatározatlan elemekkel:

$$S^2 = \begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix}$$

→ Az első egyenlet:

$$\begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} c \\ e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/4\,\hbar^2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

→ A második:

$$\begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} d \\ f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 3/4\,\hbar^2 \end{pmatrix}$$

→ Tehát:

$$S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$s = 1/2$ és $m_s = \pm 1/2$

Hasonlóan:

$$S_z \chi_+ = \frac{\hbar}{2}\chi_+ \quad \text{és} \quad S_z \chi_- = -\frac{\hbar}{2}\chi_-$$

→ Amiből:

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

→ $S_\pm|sm\rangle$-ből: $\left(=\hbar\sqrt{s(s+1) - m(m\pm 1)}\,|s(m\pm 1)\rangle\right)$

$S_+\chi_+ = S_-\chi_- = 0$ és $S_+\chi_- = \hbar\chi_+$; $S_-\chi_+ = \hbar\chi_-$, tehát:

$$S_+ = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad S_- = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

→ Mivel $S_{+-} = S_x \pm i S_y$, $\cancel{S_x = S_\pm \mp i S_y}$ $S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-)$ és $S_y = \frac{1}{2i}(S_+ - S_-)$

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

→ S_x, S_y és S_z egyaránt hordozzák $\hbar/2$ faktort, így rendesebb/tintább azt írni, hogy: $S = \frac{\hbar}{2}\sigma$, ahol:

$$\boxed{\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}$$

→ Ezek a híres **Pauli spin mátrixok**. Vegyük észre, hogy S_x, S_y és S_z, S^2 valamennyien hermitikus mátrixok, ahogy annak lennie kell.

→ A sajátspinorok: S_z-é: (persze)

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \left(\text{sajátértékük } +\frac{\hbar}{2}\right) \quad ; \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \left(\text{sajátértékük } -\frac{\hbar}{2}\right)$$

→ Ha megmérjük S_z értékét egy χ ált. állapotban lévő részecskén:

$|a|^2$ valószínűséggel $\rightarrow \frac{\hbar}{2}$, $|b|^2$ valószínűséggel $\rightarrow -\frac{\hbar}{2}$ és $|a|^2 + |b|^2 = 1$

Az impulzusmomentum összeadása

→ Tekintsünk két feles spinű részecskét → Pl az electront és protont a hidrogén alapállapotában. Mindkettő rendelkezhet fel és le spinekkel, így a lehetséges állapotok:

$$\uparrow\uparrow,\ \uparrow\downarrow,\ \downarrow\uparrow,\ \downarrow\downarrow$$

(első az elektron, második a proton) Mennyi a teljes impulzus momentum?

$$S = S^{(1)} + S^{(2)}$$

→ Mind a négy kompozit állapot sajátállapota S_z-nek. Az z-komponenseket egyszerűen összeadódnak:

$$S_z \chi_1 \chi_2 = \left(S_z^{(1)} + S_z^{(2)}\right)\chi_1\chi_2 = S_z^{(1)}\chi_1\chi_2 + \chi_1 S_z^{(2)}\chi_2 =$$

$$= \hbar m_1 \chi_1\chi_2 + \hbar m_2 \chi_1\chi_2 = \hbar(m_1+m_2)\chi_1\chi_2$$

Tehát $m = m_1 + m_2$

$\uparrow\uparrow$: $m = 1$

$\uparrow\downarrow$: $m = 0$

$\downarrow\uparrow$: $m = 0$

$\downarrow\downarrow$: $m = -1$

→ Valami nem stimmel. m-nek 1-esével kellene -s-től s-ig mennie, úgy néz ki, hogy s=1, de van egy „extra" m=0 állapotunk. Egy módja a problémára megoldásnak, hogy alkalmazzuk S_- operátort a $\uparrow\uparrow$ állapotra.

$$S_-\uparrow\uparrow = \left(S_-^{(1)} + S_-^{(2)}\right)\uparrow\uparrow = S_-^{(1)}\uparrow\uparrow + \uparrow S_-^{(2)}\uparrow = \hbar\downarrow\uparrow + \uparrow\hbar\downarrow = \hbar\left(\downarrow\uparrow + \uparrow\downarrow\right)$$

→ Tehát a három s=1 állapot: ($|sm\rangle$ jelöléssel)

$$\left.\begin{aligned} |11\rangle &= \uparrow\uparrow \\ |10\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow\right) \\ |1{-1}\rangle &= \downarrow\downarrow \end{aligned}\right\} \quad S=1 \text{ triplet}$$

→ Az ortogonális m=0 állapot s=0-val rendelkezik:

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow\right) \quad S=0 \text{ singlet}$$

→ Ha ez utóbbira alkalmazzuk az S_+ v. S_- operátorokat, mindig 0-t kapunk.

(2 db.)

→ Az ½-es spinű részecskék kombinációja 1 v. 0 ösz. momentummal rendelkezik, függően attól, hogy a triplet v. singlet ~~állapot~~ konfigurációt foglalják el.

→ Ez egy nagyobb probléma legegyszerűbb változata.

<u>Kérdés:</u> Ha egy s_1 és egy s_2 spinű részecskét kombinálunk, milyen totális spin eltéréket kaphatunk?

<u>Válasz:</u> (s_1+s_2)-től $|s_2-s_1|$-ig, egész lépésekben haladva, azaz:

$$\boxed{s = (s_1+s_2),\ (s_1+s_2-1),\ (s_1+s_2-2),\ \dots\ |s_1-s_2|}$$

Példa: - $\frac{3}{2}$ spinű részecskét egy 2-es spinű részecskével kombinálunk. A lehetséges teljes spinek: $\frac{7}{2}, \frac{5}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$

- Hidrogén atom ψ_{nlm} állapotban $l+\frac{1}{2}$ v. $l-\frac{1}{2}$ ösz. imp. momentummal rendelkezik (orbitális + spin). Ha figyelembe vesszük a protont is, a lehetséges eltérések: $l+1,\ l,\ l-1$

A kombinált állapot $|sm\rangle$ valamilyen lineáriskombinációja lesz az alkotórészek: $|s_1m_1\rangle$ és $|s_2m_2\rangle$-nek:

$$|sm\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} C^{s_1 s_2 s}_{m_1 m_2 m}\, |s_1m_1\rangle |s_2m_2\rangle$$

(→ Mivel a z komponenseket összeadódnak, az egyetlen kompozit állapotok azok melyekre $m_1+m_2=m$)

→ A $C^{s_1 s_2 s}_{m_1 m_2 m}$ konstanst Glebsch-Gordan eh-nak nevezzük.