5 SPIN. SÚSTAVY S DVOMA HLADINAMI

5.1 ÚVOD

Spin elektrónu je najjednoduchší kvantovomechanický objekt a jeho opis je najčistejšou ukážkou formalizmu kvantovej mechaniky. Na prvý pohľad by sa mohlo zdať, že opis spinových stavov elektrónu je celkom iný ako napríklad opis stavov lineárneho harmonického oscilátora, alebo stavov elektrónu v atóme vodíka. Neskôr sa ale ukáže, že opis spinu je veľmi blízky všeobecnému kvantovo-mechanickému formalizmu a to je aj dôvod, pre ktorý sa so spinom budeme zaoberať podrobnejšie.

V tejto kapitole začneme s opisom spinových stavov a operátorov, ktoré na tento stav pôsobia. Potom si všimneme správanie spinu v magnetickom poli a v ďalšom ukážeme, že ľubovoľná „dvojhladinová" sústava, t. j. sústava, ktorá má (presne, alebo v istom priblížení) iba dva lineárne nezávislé stavy, je opísaná tým istým formalizmom ako spin elektrónu. Napokon si ukážeme zovšeobecnenia „dvojhladinového" formalizmu na prípad sústav s N-hladinami a pri tej príležitosti sa naučíme o vlastnostiach matíc typu $N \times N$ to, čo v kvantovej mechanike často potrebujeme.

5.2 STAVY SPINU

Najkrajšie na kvantovomechanickom opise spinu je to, že tento opis je priamym dôsledkom všeobecného formalizmu kvantovej mechaniky (najmä princípu superpozície) a experimentálnych výsledkov. Podľa toho, čo sme už hovorili v článku 1.8, o prechode zväzku elektrónov[86] cez Sternov-Gerlachov prístroj s nehomogenitou poľa v smere osi z, vieme, že zväzok sa rozštiepi na dve časti. V jednej z nich budú elektróny, ktoré majú priemet spinu na os z rovnú $+\hbar/2$ a priemet magnetického momentu $-e\hbar/2m$ a v druhom budú elektróny s priemetom spinu na os z rovným $-\hbar/2$ a s priemetom magnetického momentu $e\hbar/2m$ (v našej konvencii $e > 0$ a náboj elektrónu je $-e$).

[86] Pripomeňme, že experiment sa nedá uskutočniť s elektrónmi a preto si môžeme predstaviť prechod atómov Na alebo Ag v základnom stave cez SG prístroj. V tejto situácii sú v atóme Na skompenzované všetky magnetické momenty, okrem príspevku od jediného valenčného elektrónu a atóm ako celok je neutrálny. Druhou možnosťou je predstaviť si prechod zväzku neutrónov cez prístroj. Neutróny majú tiež spin 1/2 ako elektróny, majú tiež magnetický moment úmerný spinu, a ich elektrický náboj je nulový.

Experiment takto jednoznačne ukazuje na to, že existujú dva *lineárne nezávislé spinové stavy elektrónu,* môžeme ich zatiaľ označiť celkom ľubovoľne, napríklad ako ψ_1, ψ_2.

Upozornime tu výslovne, že pod ψ_1 a ψ_2 tu nemáme na mysli vlnové funkcie, ani zatiaľ bližšie nešpecifikujeme, o aký druh matematických objektov ide. Prosto ψ_1 a ψ_2 sú označenia stavov. Ich význam je zrejmý: ak spinový stav elektrónu je ψ_1 potom priemet jeho spinu na os z je $+\hbar/2$ a elektrón sa s určitosťou vychýli „nahor“, ak je v spinovom stave ψ_2, potom tento priemet spinu je $-\hbar/2$ a elektrón sa určite vychýli „nadol“.

Podľa analógie s vlnovými funkciami očakávame, že i pre spinové stavy platí princíp superpozície. Všeobecný spinový stav preto zapíšeme v tvare

$$\psi = \alpha_1 \psi_1 + \alpha_2 \psi_2 \tag{1}$$

kde α_1 a α_2 sú komplexné čísla. Výraz (1) je zatiaľ len symbolický, pretože charakter ψ_1 a ψ_2 nie je definovaný. Napriek tomu zápis (1) má celkom určitý fyzikálny význam. Hodláme totiž koeficienty α_1 a α_2 interpretovať podobne ako v prípade superpozície vlnových funkcií. Koeficient α_1 by mal mať význam amplitúdy pravdepodobnosti pre nájdenie spinu v stave „hore“. Presnejšie: pravdepodobnosť toho, že pri prechode elektrónu nachádzajúceho sa v stave ψ prístrojom SG sa elektrón vychýli „nahor“ by mala byť $P_1 = |\alpha_1|^2$. A podobne pre koeficient α_2.

Aby takáto interpretácia bola možná, musia byť – podľa analógie s vlnovými funkciami – stavy ψ_1 a ψ_2 „normované“ a „navzájom ortogonálne“. Pre vlnové funkcie bol pojem ortogonality definovaný vzťahom typu

$$\int \Phi_1^*(x)\Phi_2(x)\mathrm{d}x = 0 \tag{2}$$

Obdobný vzťah pre stavy ψ_1 a ψ_2 zatiaľ definovaný nemáme, ale fyzikálne tieto stavy majú všetky vlastnosti, ktoré prislúchajú ortogonálnym stavom.

Napríklad ak prepustíme zväzok elektrónov (v ľubovoľnom stave) cez SG prístroj a do zväzku odchýleného „hore“ postavíme ďalší rovnako orientovaný SG prístroj, potom tento druhý prístroj nájde vždy stav ψ_1. Stavom ψ_1 a ψ_2 prislúchajú dva rôzne (makroskopické) údaje SG prístroja (vychýlenie nahor alebo nadol). Podľa našej diskusie o meraní v kvantovej mechanike teda sú to dva vlastné stavy veličiny, ktorú SG prístroj meria (priemet spinu), pritom stavy prislúchajúce rôznym vlastným hodnotám, a teda (fyzikálne) ortogonálne. Zavedieme preto aj formálny symbol tejto ortogonálnosti[87]

$$(\psi_1|\psi_2) = 0 \tag{2'}$$

čo je analóg vzťahu (2).

[87] Graficky sa tento symbol podobá na v matematike používaný symbol označujúci skalárny súčin. Označenie nie je zvolené náhodne; ako uvidíme neskôr, výraz na ľavej strane je naozaj skalarnym súčinom.

Stavy ψ_1 a ψ_2 tvoria úplný systém spinových stavov, ľubovoľný stav sa dá vyjadriť ako ich lineárna kombinácia (1). Ak by vo vzťahu (1) išlo o vlnové funkcie, potom by sme mohli koeficient α_1 (resp. α_2) vyjadriť v tvare (pozri (2.13.9))

$$\alpha_1 = \int \psi_1^*(x)\, \psi_2(x) \mathrm{d}x$$

Na pravej strane stojí výraz rovnakého typu ako v podmienke ortogonality. Preto i pre spinové stavy je užitočné definovať formálne

$$\alpha_1 = (\psi_1 | \psi_2) \qquad i = 1, 2 \tag{3}$$

resp.

$$\alpha_1 = (\psi_i | \alpha_1 \psi_1 + \alpha_2 \psi_2) \qquad i = 1, 2 \tag{3'}$$

Odtiaľ v špeciálnom prípade dostaneme

$$(\psi_i | \psi_i) = 1 \tag{3''}$$

čo je analóg podmienky normovanosti vlnových funkcií.

Domnievame sa, že v tomto štádiu je už motivovaná definícia[88] formálneho výrazu $(\Phi|\psi)$ pre ľubovoľné spinové stavy

$$\begin{aligned} \psi &= \alpha_1 \psi_1 + \alpha_2 \psi_2 \\ \Phi &= \beta_1 \psi_1 + \beta_2 \psi_2 \end{aligned} \tag{4}$$

v tvare[89]

$$(\Phi|\psi) = \beta_1^* \alpha_1 + \beta_2^* \alpha_2 \tag{5}$$

Vzťahy (2'), (3), (3'), (3“) sú špeciálnym prípadom všeobecnej definície (5).

Všimnime si, že ľubovoľný stav ψ je plne určený zadaním koeficientov α_1, α_2 v rozvoji (1). Každému stavu ψ je takto priradený dvojkomponentný výraz

$$\psi \to \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$$

špeciálne

$$\psi_1 \to \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \psi_2 \to \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

[88] Výraz $(\Phi|\psi)$ má všetky vlastnosti skalárneho súčinu a nazývame ho skutočne skalárny súčin stavov ψ a Φ.
[89] Užitočnosť komplexného združenia koeficientov β vo vzťahu (5) bude zrejmá až neskôr.

Dvojkomponentné výrazy tohto typu nazývame spinormi[90]. Ľubovoľný spinový stav možno teda reprezentovať dvojkomponentným spinorom. Pre takto spinormi reprezentované stavy naše doterajšie úvahy prestávajú mať iba formálny význam a nadobúdajú matematicky dobre definovaný zmysel.

Tak napríklad lineárnej kombinácii $\psi = \alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2$ priradíme dvojkomponentnú veličinu

$$\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2 \equiv \psi \to \alpha_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \alpha_2\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\alpha_1\\\alpha_2\end{pmatrix} \tag{6}$$

Zavedieme tiež spinor Φ^+ združený so spinorom Φ a označíme ho nasledovne

$$\text{ak } \Phi \to \begin{pmatrix}\beta_1\\\beta_2\end{pmatrix}, \quad \text{tak} \quad \Phi^+ \to (\beta_1^*, \beta_2^*) \tag{7}$$

Súčin $\Phi^+\psi$ potom definujeme tak, ako súčin dvoch matíc typu (l, 2) a (2, 1), pričom prvé číslo v zátvorke udáva počet riadkov a druhé počet stĺpcov. Máme teda

$$(\Phi \mid \psi) \equiv \Phi^+\psi = (\beta_1^*, \beta_2^*)\begin{pmatrix}\alpha_1\\\alpha_2\end{pmatrix} = (\beta_1^*\alpha_1 + \beta_2^*\alpha_2) \tag{8}$$

a tento symbol je práve rovný skalárnemu súčinu $(\Phi|\psi)$ zavedenému vyššie. Poznamenajme, že pre tento skalárny súčin platí

$$(\Phi|\psi)^* = (\psi|\Phi)$$

ako ľahko vidno zo vzťahu (8). Predchádzajúce môžeme zhrnúť nasledovne:

Stavom spinu elektrónu sú priradené dvojkomponentné veličiny

$$\psi = \begin{pmatrix}\alpha_1\\\alpha_2\end{pmatrix} = \alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2 = \alpha_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \alpha_2\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

kde

$$\psi_1 = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \qquad \psi_2 = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

sú dva stavy dané experimentálne tým, že v prvom z nich v SG prístroji (s nehomogenitou poľa v smere osi z) nájdeme s určitosťou spin v smere „hore“ a v druhom nájdeme s určitosťou spin „dolu“.

[90] Poznamenajme, že nie každá dvojkomponentná matica typu (2,1) sa nazýva spinorom. V pojme spinoru je zahrnutý aj predpis, podľa ktorého sa zložky spinoru transformujú pri rotáciách súradnicovej sústavy. Tento predpis uvedieme podrobne v kap. 11.

Skalárny súčin dvoch spinových stavov je definovaný rovnicami (4) a (5) a amplitúdy pravdepodobnosti pre nájdenie spinu „hore“ resp. „dolu“ v stave ψ sú dané skalárnymi súčinmi $(\psi_1|\psi)$ resp. $(\psi_2|\psi)$.

5.3 OPERÁTORY PÔSOBIACE NA SPINOVÉ STAVY A ICH ZÁKLADNÉ VLASTNOSTI

V kvantovej mechanike fyzikálnym veličinám priraďujeme lineárne hermitovské operátory.

Pozrime sa teraz na to, ako vyzerajú všeobecné lineárne a hermitovské operátory pôsobiace na spinové stavy. Každý spinový stav je charakterizovaný dvoma komplexnými číslami α_1, α_2 zapísanými v tvare spinora. Najvšeobecnejšia lineárna transformácia má zrejme tvar

$$\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{pmatrix} \to \begin{pmatrix}\alpha_1'\\ \alpha_2'\end{pmatrix}, \qquad \begin{aligned}\alpha_1' &= A_{11}\alpha_1 + A_{12}\alpha_2\\ \alpha_2' &= A_{21}\alpha_1 + A_{22}\alpha_2\end{aligned} \tag{1}$$

kde čísla A_{11}, A_{12}, A_{21}, A_{22} charakterizujú danú lineárnu transformáciu, t. j. daný lineárny operátor a nezávisia od α_1, α_2. Operátor definovaný v (1) môžeme zapísať aj takto

$$\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{pmatrix} \to \begin{pmatrix}\alpha_1'\\ \alpha_2'\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}A_{11} & A_{12}\\ A_{21} & A_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{pmatrix}$$

kde na pravej strane v (2) máme násobenie matice 2 × 2 a dvojkomponentného spinora. Lineárnemu operátoru pôsobiacemu na spinové stavy je teda jednoznačne priradená istá matica 2 × 2.

Strednú hodnotu daného operátora definujeme ako skalárny súčin $(\psi|\mathbf{A}\psi)$, kde ψ je spinor, $\mathbf{A}$ je 2 × 2 matica, $\mathbf{A}\psi$ je spinor, ktorý dostaneme po pôsobení operátora $\mathbf{A}$ na spinor ψ a skalárny súčin je definovaný v (2.8). Ak strednú hodnotu označíme $\bar{A}$ a vykonáme naznačený skalárny súčin, dostaneme

$$\begin{aligned}\bar{A} &= (\psi|\mathbf{A}\psi) \equiv \psi^{+}\mathbf{A}\psi =\\ &= \alpha_1^{*}A_{11}\alpha_1 + \alpha_1^{*}A_{12}\alpha_2 + \alpha_2^{*}A_{21}\alpha_1 + \alpha_2^{*}A_{22}\alpha_2\end{aligned} \tag{3}$$

Hermitovskými operátormi, alebo hermitovskými maticami nazveme také 2 × 2 matice, pre ktoré je stredná hodnota v (3) reálna pri každej dvojici α_1, α_2. Z podmienky $\bar{A} = (\bar{A})^{*}$ dostaneme po dosadení z (3)

$$\begin{aligned}&\alpha_1^{*}A_{11}\alpha_1 + \alpha_1^{*}A_{12}\alpha_2 + \alpha_2^{*}A_{21}\alpha_1 + \alpha_2^{*}A_{22}\alpha_2 =\\ &= \alpha_1 A_{11}^{*}\alpha_1^{*} + \alpha_1 A_{12}^{*}\alpha_2^{*} + \alpha_2 A_{21}^{*}\alpha_1^{*} + \alpha_2 A_{22}^{*}\alpha_2^{*}\end{aligned} \tag{4}$$

Ak vyberieme $\alpha_1 \neq 0$, $\alpha_2 = 0$ dostaneme odtiaľ $A_{11} = A_{11}^*$, podobne pre $\alpha_1 = 0$, $\alpha_2 \neq 0$ obdržíme $A_{22} = A_{22}^*$ a z rovnice (4) ostane podmienka

$$\alpha_1^*(A_{12} - A_{21}^*)\alpha_2 + \alpha_2^*(A_{21} - A_{12}^*)\alpha_1 = 0$$

Táto bude splnená pri ľubovoľnom α_1, α_2 len vtedy, ak platí $A_{12} = A_{21}^*$.

Ak má teda matica

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$$

opisovať hermitovský operátor, potom musí platiť $A_{11} = A_{11}^*$, $A_{22} = A_{22}^*$, $A_{12} = A_{21}^*$ a môžeme ju zapísať ako

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & b + \mathrm{i}c \\ b - \mathrm{i}c & d \end{pmatrix} \tag{5}$$

kde a, b, c, d sú reálne čísla.

Maticou hermitovsky združenou k matici

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$$

nazývame maticu

$$\mathbf{A}^+ = \begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{21}^* \\ A_{12}^* & A_{22}^* \end{pmatrix}$$

a pre elementy matíc $\mathbf{A}$, $\mathbf{A}^+$ teda platí

$$(\mathbf{A}^+)_{ik} = \mathbf{A}_{ki}^* \qquad i, k = 1, 2 \tag{6}$$

Ľahko sa presvedčíme o tom, že pre dva ľubovoľné spinory platí

$$(\Phi|\mathbf{A}\psi)^* = (\psi|\mathbf{A}^+\Phi) \tag{7}$$

Z podmienky (6) vidíme tiež, že matica je hermitovská ak

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^+$$

Dôkaz rovnice (7) dostaneme najjednoduchšie tak, že ľavú i pravú stranu explicitne rozpíšeme

$$(\Phi|\mathbf{A}\psi) = \sum_{i,\,k=1,\,2} \Phi_i^* \mathbf{A}_{ik} \psi_k$$

$$(\psi|\mathbf{A}^+\Phi) = \sum_{i,\,k=1,\,2} \psi_k^* (\mathbf{A}^+)_{ki} \Phi_i$$

a využijeme vlastnosť (6).

Vlastným spinorom, alebo vlastným stavom matice $\mathbf{A}$ nazývame spinor ψ, pre ktorý platí

$$\mathbf{A}\psi = \lambda\psi \tag{8}$$

kde λ je číslo. Ľahko možno ukázať, že pre hermitovskú maticu musí byť λ reálne. Stačí totiž urobiť skalárny súčin

$$(\psi|\mathbf{A}\psi) = \lambda(\psi|\psi)$$

kde naľavo máme strednú hodnotu hermitovskej matice a tá je vždy reálnym číslom, ako sme ukázali už vyššie, a na pravej strane je $(\psi|\psi)$ tiež reálnym číslom, lebo pre

$$\psi = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$$

máme

$$(\psi|\psi) = \alpha_1^*\alpha_1 + \alpha_2^*\alpha_2 = |\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2$$

Podobne ľahko možno ukázať, že spinory príslušné k dvom rôznym vlastným hodnotám sú navzájom ortogonálne. Presnejšie, nech pre hermitovskú maticu $\mathbf{A}$ a spinory ψ, Φ platí

$$\mathbf{A}\psi = \lambda\psi, \quad \mathbf{A}\Phi = \lambda'\psi, \quad \lambda \neq \lambda' \tag{9}$$

potom

$$(\psi|\Phi)^* = (\Phi|\psi) = 0$$

Z rovníc (9) najprv vytvoríme výrazy

$$(\Phi|\mathbf{A}\psi) = \lambda(\Phi|\psi) \tag{10}$$

$$(\psi|\mathbf{A}\Phi) = \lambda'(\psi|\Phi) \tag{10'}$$

V druhej z týchto rovníc prevedieme komplexné združenie a využijeme

$$(\psi|\Phi)^* = (\Phi|\psi), \quad (\psi|\mathbf{A}\Phi)^* = (\Phi|\mathbf{A}\psi)$$

pričom prvá z rovníc platí všeobecne a druhá podľa (7) platí pre hermitovské matice. Z rovníc (10) a (10') tak dostaneme

$$(\Phi|\mathbf{A}\psi) = \lambda(\Phi|\psi)$$

$$(\Phi|\mathbf{A}\psi) = \lambda'(\Phi|\psi)$$

Ak odrátame prvú od druhej máme a

$$0 = (\lambda - \lambda')(\Phi|\psi)$$

a pretože $\lambda \neq \lambda'$ dostávame $(\Phi|\psi) = 0$

Dôkazy tvrdení o reálnosti vlastných hodnôt a o ortogonálnosti vlastných funkcií príslušných k rôznym vlastným hodnotám, ktoré sme práve urobili sú presne analogické dôkazom v článku 2.13. Urobili sme ich tu znova jednak ako opakovanie, jednak ako zdôraznenie toho, že s maticami možno pracovať presne tak ako s operátormi a napokon aj preto, že abstraktne vyzerajúce tvrdenie použité pre matice 2 × 2 a dvojkomponentné stavy je sympatické tým, že si každý krok môžeme overiť „na prstoch". Navyše ak si raz takúto vec na maticiach 2 × 2 uvedomíme podrobne, potom budú analogické tvrdenia vyzerať prirodzene aj pre matice $N \times N$, s ktorými sa ešte bližšie stretneme.

Poďme si teda spočítať explicitne vlastné hodnoty všeobecnej 2 × 2 hermitovskej matice (5). Pre vlastný spinor so zložkami α_1, α_2 musí platiť

$$\begin{pmatrix} a & b+\mathrm{i}c \\ b-\mathrm{i}c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} \tag{11}$$

kde λ je vlastná hodnota. Rovnicu (11) môžeme hneď prepísať na tvar

$$\begin{pmatrix} a-\lambda & b+\mathrm{i}c \\ b-\mathrm{i}c & d-\lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = 0 \tag{12}$$

Toto je homogénna sústava rovníc, ktorá má riešenie len vtedy, ak jedna z rovníc je dôsledkom druhej a teda ak determinant sústavy je nulový. Nulovosť determinantu ale znamená

$$(a-\lambda)(d-\lambda) - (b+\mathrm{i}c)(b-\mathrm{i}c) = 0$$

t. j.

$$(a-\lambda)(d-\lambda) - (b^2 + c^2)$$

Úpravou máme

$$\lambda^2 - (a+d)\lambda + ad - b^2 - c^2 = 0$$

a dostávame dva korene

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2}\{a + d \pm \sqrt{D}\} \tag{13}$$

kde

$$D = (a-d)^2 + 4(b^2 - c^2) \geq 0$$

Pritom λ_1, λ_2 sú vlastnými hodnotami hermitovskej matice (11) a ako vidno obidve sú reálne. Príslušné vlastné spinory matice (11) sú určené podmienkami (12) až na multiplikačný (komplexný) faktor a pri tejto voľnosti ich môžeme vybrať napríklad takto

$$\Phi_1 = N_1 \begin{pmatrix} -\dfrac{2(b^2+c^2)}{a-d-\sqrt{D}} \\ b-ic \end{pmatrix} \qquad \Phi_2 = N_2 \begin{pmatrix} -\dfrac{2(b^2+c^2)}{a-d+\sqrt{D}} \\ b-ic \end{pmatrix} \tag{14}$$

kde N_1, N_2 sú zatiaľ ľubovoľné konštanty.

Ľahko vidno, že $(\Phi_1|\Phi_2) = 0$ a bez ťažkosti by sme našli aj konštanty N_1, N_2, pre ktoré $(\Phi_1|\Phi_1) = 1$, $(\Phi_2|\Phi_2) = 1$. Výber týchto konštánt, prirodzene, nemení platnosť vzťahu $(\Phi_1|\Phi_2) = 0$.

Vzhľadom na to, že každý operátor pôsobiaci na spinové stavy musí byť opísaný hermitovskou maticou typu (5), jednoduchý výpočet, ktorý viedol k (13) a (14) je vlastne univerzálnou schémou pre nájdenie vlastných hodnôt a vlastných spinorov operátora pôsobiaceho na spinové stavy. Ak teda meriame veličinu, ktorej odpovedá matica (5), potom ako výsledok merania môžeme dostať iba hodnoty λ_1, λ_2 dané vzťahmi (13) a po nameraní λ_1, resp. λ_2 bude sústava v stave ψ_1, resp. ψ_2 danom rovnicami (14). Pravdepodobnosť namerať hodnotu λ_i v stave opísanom spinorom Φ je daná výrazom

$$P_i = |(\psi_i|\Phi)|^2 \tag{15}$$

5.4 PAULIHO MATICE

V tomto článku nájdeme operátory odpovedajúce priemetu spinu do súradnicových osí x, y, z a potom nájdenie aj operátor odpovedajúci priemetu spinu do smeru daného jednotkovým vektorom $\boldsymbol{n}$. Pri diskusii je veľmi užitočné mať aj konkrétnu predstavu o nejakom prístroji, ktorým tieto priemety meriame a budeme si teda predstavovať, že priemet do osi z meriame Sternovým a Gerlachovým prístrojom s nehomogenitou magnetického poľa v smere osi z. Takýto prístroj označíme ako SG(z). Podobne prístroje na meranie priemetu spinu na osi x, y, resp. $\boldsymbol{n}$ budeme označovať ako SG(x), SG(y), resp. SG($\boldsymbol{n}$), pričom je to vlastne vždy to isté zariadenie natočené tak, aby nehomogenita poľa mala smer naznačený v zátvorke. Najprv nájdeme operátor priemeru spinu na os z. Ak sú spinovým stavom priradené dvojkomponentné spinory podľa konvencie z článku 5.2, potom hľadaným operátorom je matica 2 × 2 s vlastnými hodnotami $\pm\hbar/2$ a vlastnými spinormi $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ resp. $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Takáto matica má tvar

$$\mathbf{s}_z = \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Teraz potrebujeme nájsť matice s_x, s_y odpovedajúce priemetom spinu na os x, resp. y. Vzhľadom na to, že tieto veličiny nemajú klasický analóg, treba ich v istom zmysle „uhádnuť". Ak však žiadame, aby tieto matice spĺňali isté fyzikálne nevyhnutné podmienky, je ich „uhádnutie" prakticky jednoznačné. Podmienky, ktoré majú s_x, s_y, s_z spĺňať, sú tieto[91]:

– každá z nich musí byť hermitovskou maticou (lebo len takéto matice môžu opisovať fyzikálne veličiny),
– každá z nich musí mať vlastné hodnoty $+\hbar/2$, $-\hbar/2$ (ako ukazuje experiment, priemet spinu do ľubovoľného smeru môže nadobúdať iba tieto dve hodnoty),
– musia spĺňať komutačné vzťahy typické pre moment hybnosti (pozri článok 4.9), t. j.

$$\begin{aligned} [\mathbf{s}_x, \mathbf{s}_y] &= \mathrm{i}\hbar\mathbf{s}_z \\ [\mathbf{s}_y, \mathbf{s}_z] &= \mathrm{i}\hbar\mathbf{s}_x \\ [\mathbf{s}_z, \mathbf{s}_x] &= \mathrm{i}\hbar\mathbf{s}_y \end{aligned} \tag{1}$$

Táto posledná požiadavka vlastne hovorí, že spinové matice $\mathbf{s}_x$, $\mathbf{s}_y$, $\mathbf{s}_z$ majú spĺňať presne tie isté komutačné vzťahy ako operátory priemetov momentu hybnosti $\mathbf{L}_x$, $\mathbf{L}_y$, $\mathbf{L}_z$. Na tomto štádiu[92] je to intuitívna fyzikálna požiadavka a jej správnosť sa – ako vždy v takýchto prípadoch – potvrdzuje súhlasom dôsledkov s experimentom.

Pri hľadaní matíc, ktoré spĺňajú tieto požiadavky je užitočné zaviesť najprv matice $\boldsymbol{\sigma}_x$, $\boldsymbol{\sigma}_y$, $\boldsymbol{\sigma}_z$ vzťahmi

$$\mathbf{s}_x = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}_x, \qquad \mathbf{s}_y = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}_y, \qquad \mathbf{s}_z = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}_z \tag{2}$$

Sú to opäť hermitovské matice, ich vlastné hodnoty sú ±1, a spĺňajú komutačné vzťahy

$$[\boldsymbol{\sigma}_x, \boldsymbol{\sigma}_y] = 2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_z \quad \text{a cykl. ďalej} \tag{3}$$

Nebudeme sa tu pokúšať ukázať, že spomínané požiadavky určujú matice $\boldsymbol{\sigma}_x$, $\boldsymbol{\sigma}_y$, $\boldsymbol{\sigma}_z$ prakticky jednoznačne, ale napíšeme rovno konečný výsledok (W. Pauli, 1925)

$$\boldsymbol{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{4}$$

Všimnime si, že z matíc $\boldsymbol{\sigma}_x$, $\boldsymbol{\sigma}_y$, $\boldsymbol{\sigma}_z$ je matica $\boldsymbol{\sigma}_z$ význačná: je diagonálna. Je to tak preto, že už pri preradení spinorov spinovým stavom sme vybrali os z ako význačnú. Presnejšie: spinory sme konštruovali pomocou vyjadrenia typu $\psi = \alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2$, kde ψ_1 a ψ_2 sú (konvenciou vybraté) vlastné stavy priemetu spinu

[91] V skutočnosti tieto podmienky nie sú nezávislé.

[92] Neskôr, v kapitole venovanej momentu hybnosti ukážeme, že táto požiadavka vyplýva zo všeobecných vlastností transformácie stavov pri priestorových rotáciách.

na os z. Ak by sme boli vybrali ako význačnú inú os – napríklad x – bola by diagonálna matica $\boldsymbol{\sigma}_x$ a spinové stavy by boli reprezentované inými spinormi. Fyzikálne výsledky by však boli od zvolenej konvencie nezávislé.

Odporúčame tiež čitateľovi, aby sa postupom z predchádzajúceho odseku presvedčil explicitne o tom, že vlastné hodnoty každej z týchto matíc sú naozaj ± 1 a našiel príslušné vlastné spinory. Uvedieme tu iba výsledné vlastné spinory, pričom prvý vždy odpovedá vlastnej hodnote +1, druhý vlastnej hodnote −1.

$$\boldsymbol{\sigma}_x : \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}, \qquad \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-1\\1\end{pmatrix} \tag{5a}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_y : \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1-\mathrm{i}\\1+\mathrm{i}\end{pmatrix}, \qquad \frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1+\mathrm{i}\\1+\mathrm{i}\end{pmatrix} \tag{5b}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_z : \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{5c}$$

Ostáva nám ešte odpovedať na otázku, aký operátor odpovedá priemetu spinu do smeru $\boldsymbol{n}$; inak formulované: akú fyzikálnu veličinu meria prístroj SG($\boldsymbol{n}$) (pozri začiatok tohto článku). Odpoveď sa zase pokúsime „uhádnuť“. Všimnime si najprv, že každú z matíc $\boldsymbol{\sigma}_x$, $\boldsymbol{\sigma}_y$, $\boldsymbol{\sigma}_z$ môžeme vlastne zapísať ako

$$\vec{\boldsymbol{\sigma}}\,.\,\boldsymbol{n} = \boldsymbol{\sigma}_x n_x + \boldsymbol{\sigma}_y n_y + \boldsymbol{\sigma}_z n_z \tag{6}$$

kde $\boldsymbol{n}$ je určitý vhodne vybraný jednotkový vektor. V označení $\boldsymbol{n}(n_x, n_y, n_z)$ dostaneme zo (6), maticu $\boldsymbol{\sigma}_x$ ak vyberieme $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{n}(1, 0, 0)$, maticu $\boldsymbol{\sigma}_y$ pre $\boldsymbol{n} = -\,\boldsymbol{n}_2(0, 1, 0)$ a napokon maticu $\boldsymbol{\sigma}_z$ pre $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{n}_3(0, 0, 1)$. Takto môžeme očakávať, že matica pre priemet spinu na os $\boldsymbol{n}$ sa rovná práve $\vec{\boldsymbol{\sigma}}\,.\,\boldsymbol{n}$. Jednotkový vektor $\boldsymbol{n}$ je najvhodnejšie zapísať tak, že je zadaný uhlami ϑ a φ vo sférických súradniciach. Zložky $\boldsymbol{n}$ v takomto zápise sú

$$\boldsymbol{n}(\sin\vartheta\cos\varphi,\ \sin\vartheta\sin\varphi,\ \cos\vartheta)$$

o čom sa môžeme rýchlo presvedčiť ak si nakreslíme príslušný obrázok. Pre súčin $\vec{\boldsymbol{\sigma}}\,.\,\boldsymbol{n}$ potom po jednoduchých úpravách dostaneme

$$\vec{\boldsymbol{\sigma}}.\boldsymbol{n} = \begin{pmatrix}\cos\vartheta & \sin\vartheta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ \sin\vartheta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & -\cos\vartheta\end{pmatrix} \tag{7}$$

V tomto prípade sa tiež rýchlo presvedčíme o tom, že vlastné spinory odpovedajúce vlastným hodnotám +1, −1 tejto matice sú:

$$\vec{\boldsymbol{\sigma}}.\boldsymbol{n} = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2} \\ e^{i\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi/2}\sin\frac{\vartheta}{2} \\ e^{i\varphi/2}\cos\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} \tag{8}$$

Pri výpočte stačí použiť trigonometrické vzťahy $\cos\alpha\cos\beta - \sin\alpha\sin\beta =$ $= \cos(a + \beta)$, $\sin\alpha\cos\beta + \sin\beta\cos\alpha = \sin(\alpha + \beta)$. Vidno tiež, že výrazy v (5) sú len špeciálnymi prípadmi (8), pričom kladnému smeru osi x odpovedajú uhly $\varphi = 0$, $\vartheta = \pi/2$ a kladnému smeru osi y uhly $\varphi = \pi/2$, $\vartheta = \pi/2$.

Poznamenajme, že niekedy za vlastné spinory matice $\boldsymbol{\sigma}_y$ vyberáme

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \qquad \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

ktoré sa od uvedených v (5b) líšia iba multiplikatívnymi faktormi, s absolútnou hodnotou rovnou jednej.

V predchádzajúcom článku sme ukázali explicitným výpočtom ako možno nájsť vlastné hodnoty a vlastné vektory ľubovoľnej hermitovskej matice typu 2 × 2, t. j. matice

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a & b + ic \\ b - ic & d \end{pmatrix}$$

Naznačíme tu ešte druhý prístup. Maticu môžeme totiž zapísať ako lineárnu kombináciu jednotkovej matice, označenej ako **1** a Pauliho matíc. Pre maticu $\boldsymbol{A}$ máme

$$\boldsymbol{A} = \frac{a+d}{2}\mathbf{1} + b\boldsymbol{\sigma}_x - c\boldsymbol{\sigma}_y + \frac{a-d}{2}\boldsymbol{\sigma}_z$$

Tento výraz ale môžeme zapísať aj ako

$$\boldsymbol{A} = \alpha\mathbf{1} + \beta\boldsymbol{n}\,.\,\vec{\boldsymbol{\sigma}} \tag{9}$$

kde α, β sú reálne čísla a $\boldsymbol{n}$ je jednotkový vektor

$$\alpha = \frac{a+d}{2}, \qquad \beta = \left[b^2 + c^2 + \frac{(a-d)^2}{4}\right]^{1/2}$$

$$\boldsymbol{n} = \beta^{-1}\left(b, -c, \frac{a-d}{2}\right) \tag{10}$$

Vlastné hodnoty matice $\boldsymbol{n}\,.\,\vec{\boldsymbol{\sigma}}$ sú ± 1, a preto vlastné hodnoty matice $\boldsymbol{A}$ budú $\alpha \pm \beta$ a vlastné spinory matice A sú vlastnými spinormi matice $\vec{\boldsymbol{\sigma}}.\boldsymbol{n}$, pričom uhly ϑ, φ vystupujúce v (8) musíme určiť zo zložiek vektora $\boldsymbol{n}$ daných v (10).

Ak poznáme vlastné hodnoty a vlastné spinory Pauliho matíc a tým aj operátorov spinu, vieme odpovedať na veľa otázok týkajúcich sa merania priemetov spinu. Otázky tohto typu sú pritom najvhodnejším spôsobom na ujasnenie si kvantovomechanického opisu merania fyzikálnych veličín.

Uvedieme tu iba jeden veľmi jednoduchý príklad. Predpokladajme, že zväzok elektrónov prechádza cez prístroj SG(z) a prístroj prepustí iba elektróny s priemetom spinu na os z rovným $+\hbar/2$. Tieto elektróny necháme dopadať na prístroj SG(x) a pýtame sa na to, s akou pravdepodobnosťou nájdeme pri tomto meraní priemet spinu na os x rovný $+\hbar/2$. Odpoveď je jednoduchá. Elektróny, ktoré prešli cez SG(z) sú všetky v stave opísanom spinorom

$$\psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Pri meraní v SG(x) nájdeme priemet spinu na os x, rovný $\hbar/2$ s pravdepodobnosťou

$$\mathrm{P} = |(\Phi|\psi)|^2 = 1/2$$

kde Φ je prvý zo spinorov v riadku (5a).

Pri tomto meraní nastáva zmena stavu a spinový stav, ktorý bol pred meraním opísaný spinorom ψ bude po meraní opísaný uvedeným spinorom Φ.

Pauliho matice $\boldsymbol{\sigma}_x$, $\boldsymbol{\sigma}_y$, $\boldsymbol{\sigma}_z$ (ďalej označované ako $\boldsymbol{\sigma}_1$, $\boldsymbol{\sigma}_2$, $\boldsymbol{\sigma}_3$) spĺňajú viacero dôležitých vzťahov, často používaných pri riešení praktických úloh. Niektoré z nich tu uvedieme a dôkazy prenecháme čitateľovi.

$$[\boldsymbol{\sigma}_i, \boldsymbol{\sigma}_j] \equiv \boldsymbol{\sigma}_i\boldsymbol{\sigma}_j - \boldsymbol{\sigma}_j\boldsymbol{\sigma}_i = 2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k \qquad (11)$$

kde symbol ε_{ijk} označuje úplne antisymetrický tenzor, $\varepsilon_{123} = 1$ a používame (tzv. Einsteinovu) konvenciu, podľa ktorej cez index vyskytujúci sa dvakrát automaticky sčitujeme.

$$\{\boldsymbol{\sigma}_i, \boldsymbol{\sigma}_j\} \equiv \boldsymbol{\sigma}_i\boldsymbol{\sigma}_j + \boldsymbol{\sigma}_j\boldsymbol{\sigma}_i = 2\delta_{ij}\mathbf{1} \qquad (12)$$

Z predchádzajúceho

$$\boldsymbol{\sigma}_i\boldsymbol{\sigma}_j = \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k + \delta_{ij}\mathbf{1} \qquad (13)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3 = \mathrm{i}\mathbf{1} \qquad (14)$$

$$Sp\,\boldsymbol{\sigma}_i = 0 \qquad (15)$$

pričom symbol Sp označuje stopu matice, t. j. súčet jej diagonálnych elementov.

$$\mathrm{Det}\,\boldsymbol{\sigma}_i = -1 \qquad (16)$$

Ak $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$ sú dva trojrozmerné vektory (nie matice), platí

$$(\vec{\boldsymbol{\sigma}}.\boldsymbol{a})(\vec{\boldsymbol{\sigma}}.\boldsymbol{b}) = (\boldsymbol{a}.\boldsymbol{b})\mathbf{1} + \mathrm{i}\vec{\boldsymbol{\sigma}}.(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}) \qquad (17)$$

Ak $\boldsymbol{n}$ je jednotkový vektor a k celé číslo, platí

$$(\vec{\boldsymbol{\sigma}}\,.\,\boldsymbol{n})^{2k} = \mathbf{1}$$
$$(\vec{\boldsymbol{\sigma}}\,.\,\boldsymbol{n})^{2k+1} = \vec{\boldsymbol{\sigma}}\,.\,\boldsymbol{n} \qquad (18)$$

Symbol exp($\boldsymbol{A}$), kde $\boldsymbol{A}$ je matica, chápeme ako

$$\exp(\boldsymbol{A}) = 1 + \boldsymbol{A} + \frac{1}{2!}\boldsymbol{A}^2 + \frac{1}{3!}\boldsymbol{A}^3 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\boldsymbol{A}^n$$

Pomocou vzťahov (18) možno potom ukázať, že pre jednotkový vektor $\boldsymbol{n}$ a reálne φ platí

$$\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi(\vec{\boldsymbol{\sigma}}\,.\,\boldsymbol{n})\right\} = \mathbf{1}\cos(\varphi/2) - \mathrm{i}(\vec{\boldsymbol{\sigma}}\,.\,\boldsymbol{n})\sin(\varphi/2) \qquad (19)$$

a s využitím tohto vzťahu a komutačných vzťahov pre $\boldsymbol{\sigma}_i$, prídeme k vzťahom ako

$$\exp\left\{\mathrm{i}\frac{\vartheta}{2}\boldsymbol{\sigma}_z\right\}\boldsymbol{\sigma}_x \exp\left\{-\mathrm{i}\frac{\vartheta}{2}\boldsymbol{\sigma}_z\right\} = \boldsymbol{\sigma}_x \cos\vartheta - \boldsymbol{\sigma}_y \sin\vartheta \qquad (20)$$

$$\exp\left\{\mathrm{i}\frac{\vartheta}{2}\boldsymbol{\sigma}_z\right\}\boldsymbol{\sigma}_y \exp\left\{-\mathrm{i}\frac{\vartheta}{2}\boldsymbol{\sigma}_z\right\} = \boldsymbol{\sigma}_x \sin\vartheta + \boldsymbol{\sigma}_y \cos\vartheta \qquad (21)$$

So vzťahmi tohto typu sa ešte stretneme v kapitole venovanej momentu hybnosti.

5.5 VLNOVÉ FUNKCIE ČASTICE SO SPINOM

Doteraz, pri skúmaní pohybu elektrónu v atóme vodíka, alebo v situácii keď je elektrón viazaný na úsečku, sme nehovorili o spine elektrónu. Bolo to možné vďaka tomu, že uvažované interakcie nezáviseli od spinoveho stavu elektrónu. Pri podrobnejšom zisťovaní štruktúry spektrálnych čiar, alebo pri štúdiu atómu vo vonkajšom magnetickom poli budeme musieť brať spinové stavy elektrónu explicitne do úvahy.

Vyjadrenie stavu elektrónu musí teda zohľadniť tak priestorovú závislosť vlnovej funkcie ako aj spinový stav. Je preto prirodzené použiť na zobrazenie stavu dvojkomponentnú (spinovú) vlnovú funkciu.

$$\chi(\boldsymbol{r},t) = \begin{pmatrix}\psi_+(\boldsymbol{r},t)\\ \psi_-(\boldsymbol{r},t)\end{pmatrix} \qquad (1)$$

Fyzikálny význam ψ_+ a ψ_- je jednoduchý: $|\psi_+(\boldsymbol{r}, t)|^2$ udáva hustotu pravdepodobnosti pre nájdenie elektrónu s priemetom spinu na os z rovným $+\hbar/2$ v okolí bodu $\boldsymbol{r}$ v čase t a podobne $|\psi_-(\boldsymbol{r}, t)|^2$ má význam hustoty pravdepodobnosti nájdenia elektrónu s priemetom spinu na os z rovným $-\hbar/2$ v čase t v okolí miesta $\boldsymbol{r}$.

Pre dobudovanie formalizmu je ešte potrebné priradiť fyzikálnym veličinám operátory. V prípade spinorových vlnových funkcií operátory sú zrejme 2×2 matice, ktorých prvky sú operátory (pôsobiace už aj na obyčajné jednokomponentné funkcie).

Tak napríklad ak hľadáme hamiltonián voľnej častice so spinom, potom vzhľadom na to, že spinové stavy sú v takomto prípade nezávislé od polohy elektrónu, je prirodzené vyjadrenie[93]

$$\mathsf{H} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar}{2m}\Delta & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2m}\Delta \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2m}\Delta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Ak interakcia s poľom, v ktorom sa elektrón nachádza, nezávisí od spinu, je hamiltonián opäť úmerný jednotkovej matici a vlnové funkcie $\psi_+(\boldsymbol{r}, t)$ a $\psi_-(\boldsymbol{r}, t)$ sú navzájom nezávislé. Ak je začiatočný spinový stav elektrónu rovnaký v celom priestore, čo odpovedá zápisu vlnovej funkcie (1) v tvare

$$\chi(\boldsymbol{r}, t_0) = \Phi(\boldsymbol{r}, t_0) \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix}$$

potom v riešení príslušnej SchR sa komponenty spinora α_+, α_- s časom nebudú meniť. V takejto situácii si môžeme úlohu zjednodušiť a zabudnúť na spin pri hľadaní riešení SchR – čo sme aj doteraz robili.

Po skončení výpočtov si ale treba uvedomiť, že všetky nájdené stavy budú ešte navyše dvakrát degenerované, pričom príslušné stavy elektrónu sa líšia priemetom spinu na určitú os.

Pre elektrón v magnetickom poli už takéto priblíženie nie je možné, spinové stavy elektrónu treba explicitne uvážiť a SchR treba už písať pre vlnovú funkciu v tvare (1).

5.6 SPIN ELEKTRÓNU V MAGNETICKOM POLI

V tomto článku sa budeme zaoberať časovou závislosťou spinového stavu elektrónu v statickom homogénnom magnetickom poli. Uvažujme pre určitosť

[93] Diagonálna matica totiž „nemieša“ komponenty spinoru.

atóm vodíka v základnom stave vložený do vonkajšieho homogénneho magnetického poľa. V tomto prípade sa hamiltonián elektrónu dá zapísať v tvare[94]

$$\mathsf{H} = \mathsf{H}_1(\hat{\boldsymbol{r}}, \hat{\boldsymbol{p}}) + \mathsf{H}_2(\vec{\boldsymbol{\sigma}}) \tag{1}$$

kde $\hat{\boldsymbol{r}}$, $\hat{\boldsymbol{p}}$ sú operátory súradnice a hybnosti elektrónu a $\boldsymbol{\sigma}$ sú Paulino matice. Operátor H_1 je dobre známy

$$\mathsf{H}_1 = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

Operátor H_2 uhádneme jednoducho. Energia klasickej častice s magnetickým momentom $\boldsymbol{\mu}$ vo vonkajšom magnetickom poli s indukciou $\boldsymbol{B}$ je rovná

$$-\boldsymbol{\mu}\,.\,\boldsymbol{B} = -\mu_x B_x - \mu_y B_y - \mu_z B_z \tag{2}$$

Pre elektrón sú podľa článku 1.8 operátory priemetu magnetického momentu do smeru súradnicových osí dané vzťahmi

$$\mu_x = -\frac{e}{m} s_x = -\frac{e\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma}_x \qquad \text{atď.} \tag{3}$$

Po dosadení týchto výrazov do (2) dostaneme

$$H_2 = \frac{e\hbar}{2m} \vec{\boldsymbol{\sigma}}\,.\boldsymbol{B} = \frac{e\hbar}{2m} (\boldsymbol{\sigma}_x B_x + \boldsymbol{\sigma}_y B_y + \boldsymbol{\sigma}_z B_z) \tag{4}$$

Schrödingerova rovnica pre dvojkomponentný spinor $\chi(\boldsymbol{r}, t)$

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \chi(\boldsymbol{r}, t)}{\partial t} = (\mathsf{H}_1 + \mathsf{H}_2)\chi(\boldsymbol{r}, t) \tag{4}$$

sa dá separovať ak položíme

$$\chi(\boldsymbol{r}, t) = \xi(\boldsymbol{r})\Phi(t) \tag{6}$$

kde $\Phi(t)$ je dvojkomponentný spinor a $\xi(\boldsymbol{r})$ závisí iba od súradnice elektrónu. Po dosadení (6) do (5) dostaneme

$$\mathrm{i}\hbar\xi(\boldsymbol{r}) \frac{\partial \Phi(t)}{\partial t} = \Phi(t)\mathsf{H}_1\xi(\boldsymbol{r}) + \xi(\boldsymbol{r})\mathsf{H}_2\Phi(t)$$

[94] Zanedbávame tu tzv. hyperjemnú interakciu medzi magnetickými momentmi jadra a elektrónu (pozri kap. 12).

a odtiaľ

$$\frac{1}{\Phi(t)}\left[\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Phi(t)}{\partial t}-\mathsf{H}_2\Phi(t)\right]=\frac{1}{\xi(\boldsymbol{r})}\mathsf{H}_1\xi(\boldsymbol{r})$$

Ľavá strana závisí iba od spinových premenných, pravá iba od súradníc elektrónu a preto sa obe musia rovnať určitej konštante E_0. Takto dostaneme dve rovnice

$$\mathsf{H}_1\xi(\boldsymbol{r}) = E_0\xi(\boldsymbol{r}) \tag{7a}$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Phi(t)}{\partial t}=(\mathsf{H}_2+E_0)\Phi(t) \tag{7b}$$

Rovnica (7a) je bezčasovou SchR pre elektrón v atóme vodíka. Pretože uvažujeme elektrón v základnom stave atómu vodíka bude E_0 rovné energii tohto základného stavu. V rovnici (7b) je užitočné položiť

$$\Phi(t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_0t/\hbar}\psi(t)\equiv\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_0t/\hbar}\begin{pmatrix}\psi_+(t)\\ \psi_-(t)\end{pmatrix}$$

Pre dvojkomponentný spinor takto dostaneme rovnicu

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(t)}{\partial t}=\mathsf{H}_2\psi(t)$$

ktorá má v úplnejšom rozpise tvar

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_+(t)\\ \psi_-(t)\end{pmatrix}=\frac{e\hbar B}{2m}\vec{\boldsymbol{\sigma}}\,.\,\boldsymbol{B}\begin{pmatrix}\psi_+(t)\\ \psi_-(t)\end{pmatrix} \tag{8}$$

Teraz sa budeme zaoberať riešeniami rovnice (8). Poznamenajme, že pre separáciu premenných bola podstatná homogénnosť poľa $\boldsymbol{B}$. V ďalšom sa zaoberáme iba týmto prípadom.[95]

Začnime s jednoduchým prípadom magnetického poľa v smere osi z a označme $|\boldsymbol{B}| = B_z = B$. Rovnica (8) sa potom zjednoduší na

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_+(t)\\ \psi_-(t)\end{pmatrix}=\frac{e\hbar B}{2m}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_+(t)\\ \psi_-(t)\end{pmatrix} \tag{9}$$

[95] V prípade nehomogénneho magnetického poľa je situácia komplikovanejšia. Vtedy $\boldsymbol{B}$ závisí od $\boldsymbol{r}$ a separácia premenných sa nedá naznačeným spôsobom vykonať. Fyzikálne to odpovedá napríklad SG experimentom, kde magnetické pole priestorovo rozdelí spin „hore“ a „dolu“. Vzniká tak korelácia medzi spinom a súradnicou a riešenie nemožno písať v separovanom tvare.

a rozpadne sa na dve nezávislé rovnice pre komponenty $\psi_+(0)$, $\psi_-(0)$. Príslušné riešenie je

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} \psi_+(t) \\ \psi_-(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_+(0)\exp(-\mathrm{i}E_+t/\hbar) \\ \psi_-(0)\exp(-\mathrm{i}E_-t/\hbar) \end{pmatrix} \tag{10}$$

$$E_\pm = \pm\frac{e\hbar B}{2m} \tag{11}$$

Hodnoty $\psi_+(0)$, $\psi_-(0)$ sú dané začiatočnými podmienkami v čase $t = 0$. Výrazy $P_+ = |\psi_+(t)|^2$, $P_- = |\psi_-(t)|^2$ určujú pravdepodobnosti toho, že pri meraní priemetu spinu na os z nájdeme hodnoty $+\hbar/2$ resp. $-\hbar/2$. Hodnoty E_+, E_- sú energie stacionárnych stavov, čo vidíme ľahko z toho, že hamiltonián

$$\mathsf{H}_2 = \frac{e\hbar B}{2m}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{12}$$

má dve vlastné hodnoty rovné práve E_+, E_- a príslušné vlastné spinory sú rovné vlastným spinorom matice $\boldsymbol{\sigma}_z$ (pozri 4.5c)). Teraz budeme hľadať fyzikálnu interpretáciu riešenia $\psi(t)$ daného rovnicou (10). Vzhľadom na to, že platí

$$|\psi_+(0)|^2 + |\psi_-(0)|^2 = 1$$

môžeme vždy nájsť taký uhol ϑ a vybrať reálne α, β tak, že platí

$$\psi_+(0) = \cos\frac{\vartheta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\alpha-\beta)} \qquad \psi_-(0) = \cos\frac{\vartheta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\alpha+\beta)}$$

V ďalšom budeme predpokladať, že $\alpha = \beta = 0$, a prenecháme čitateľovi diskusiu všeobecného prípadu. Riešenie $\psi(t)$ dané rovnicou (10) potom môžeme zapísať v tvare

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\vartheta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2} \\ \cos\frac{\vartheta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t/2} \end{pmatrix}, \qquad \omega = \frac{eB}{m} \tag{13}$$

Ak toto porovnáme s výsledkom (4.8) vidíme, že $\psi(t)$ opisuje spinor, ktorý má priemet spinu $+\hbar/2$ na os danú vektorom určeným uhlami

$$\boldsymbol{n} = \boldsymbol{n}(\vartheta, \varphi = \omega t) \tag{14}$$

Pri nepresnom[96], ale názornom vyjadrovaní by sme povedali, že spinor $\psi(t)$ má v čase t „smer“ daný jednotkovým vektorom $\boldsymbol{n}$ v (14). V tomto zmysle hovoríme,

[96] Nepresnosť je v tom, že o smere spinoru by sme mohli hovoriť iba vtedy, keby všetky tri priemety spinu na jednotlivé osi mali „ostré“ hodnoty. Ale to nie je možné, lebo $\mathbf{s}_x$, $\mathbf{s}_y$, $\mathbf{s}_z$, navzájom nekomutujú.

že spin elektrónu vykonáva precesný pohyb okolo osi z, pričom uhlová rýchlosť tohto pohybu je daná vzťahom

$$\omega = \frac{e}{m} B, \qquad \frac{e}{m} = 1{,}759.10^{11} \mathrm{s}^{-1} \mathrm{T}^{-1} \tag{15}$$

V prípade, že smer poľa $\boldsymbol{B}$ je všeobecný, je riešenie s využitím spinorového formalizmu opäť jednoduché a, samozrejme, má opäť charakter precesie okolo smeru vektora $\boldsymbol{B}$. Podrobnosti prenechávame čitateľovi.

5.7 SÚSTAVY S DVOMA HLADINAMI

Matematika použitá pri opise správania sa spinu v homogénnom magnetickom poli je všeobecným opisom sústav s dvoma hladinami. S takýmito sústavami sa stretávame pomerne často. Sú to (zriedkavo) sústavy, ktoré skutočne majú iba dva stavy a jednak (oveľa častejšie) sústavy, ktoré majú síce veľa hladín (stacionárnych stavov), ale v istom kontexte sa môžeme obmedziť iba na dva stavy. Typickou situáciou je sústava, ktorá má veľa energetických hladín, ale dve z nich, povedzme E_1, E_2 sú blízko pri sebe a ďaleko od všetkých ostatných, t. j.

$$|E_1 - E_2| \ll |E_1 - E_n|, |E_2 - E_n| \qquad n = 3, 4, 5, \ldots$$

Navyše musíme mať fyzikálnu situáciu, v ktorej prechody z hladín E_1, E_2 na ostatné vzdialenejšie hladiny nehrajú podstatnú úlohu. Ukážeme teraz, v akom zmysle je táto úloha ekvivalentná problému spinu vo vonkajšom magnetickom poli.

Nech $\mathbf{A}$ je určitý lineárny operátor. Pri pôsobení $\mathbf{A}$ na stav ψ_1 dostaneme lineárnu kombináciu všetkých možných stavov ψ_n:

$$\mathbf{A}\psi_1 = A_{11}\psi_1 + A_{21}\psi_2 + A_{31}\psi_3 + \ldots \tag{la}$$

a podobne

$$\mathbf{A}\psi_2 = A_{12}\psi_1 + A_{22}\psi_2 + A_{32}\psi_3 + \ldots \tag{lb}$$

Ako sme už povedali, uvažujeme iba úlohy, v ktorých majú dôležitú úlohu iba stavy ψ_1, ψ_2 a preto na pravých stranách zanedbáme všetky stavy okrem ψ_1, ψ_2. Takto máme

$$\begin{aligned} \mathbf{A}\psi_1 &= A_{11}\psi_1 + A_{21}\psi_2 \\ \mathbf{A}\psi_2 &= A_{12}\psi_1 + A_{22}\psi_2 \end{aligned} \tag{2}$$

kde A_{ik} sú čísla. Všeobecný stav dvojhladinovej sústavy je daný lineárnou kombináciou

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \tag{3}$$

Pretože A je lineárny operátor pôsobením na takýto stav dostaneme nový stav ψ', pričom

$$\psi' = \mathsf{A}\psi = \mathsf{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\mathsf{A}\psi_1 + c_2\mathsf{A}\psi_2 =$$

$$= c_1(\boldsymbol{A}_{11}\psi_1 + \boldsymbol{A}_{21}\psi_2) + c_2(\boldsymbol{A}_{12}\psi_1 + \boldsymbol{A}_{22}\psi_2) =$$

$$= (\boldsymbol{A}_{11}c_1 + \boldsymbol{A}_{12}c_2)\psi_1 + (\boldsymbol{A}_{21}c_1 + \boldsymbol{A}_{22}c_2)\psi_2$$

Výsledok môžeme zase zapísať ako lineárnu kombináciu stavov ψ_1, a ψ_2, ale s inými koeficientmi

$$\psi' = c_1'\psi_1 + c_2'\psi_2 \tag{3'}$$

Z predchádzajúcich vzťahov vidíme, že transformácia

$$\psi \to \psi' = \mathsf{A}\psi$$

je plne opísaná zmenou koeficientov

$$(c_1, c_2) \to (c_1', c_2')$$

pričom platí v maticovom označení

$$\begin{pmatrix} c_1' \\ c_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_{11} & \boldsymbol{A}_{12} \\ \boldsymbol{A}_{21} & \boldsymbol{A}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \tag{4}$$

V dvojhladinovej sústave je teda úplná informácia o stave obsiahnutá v dvojici koeficientov c_1, c_2 a každému operátoru A je priradená istá matica $\boldsymbol{A}_{ik}$, ktorá nám priamo udáva prechod $\psi \to \psi' = \mathsf{A}\psi$ pomocou vzťahov (4) platných pre koeficienty (c_1, c_2) a (c_1', c_2') určujúce stavy ψ_1, a ψ_2 pomocou (3) a (3').

Pre úplnosť ešte poznamenajme, že podľa (2) koeficienty $\boldsymbol{A}_{ik}$ môžeme pri ortonormovanej sústave funkcií ψ_i dostať zo vzťahov

$$\boldsymbol{A}_{ik} = \int \psi_i^*(\boldsymbol{r})\, \mathsf{A}\, \psi_k(\boldsymbol{r})\, \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{5}$$

Opis stavu pomocou dvojice koeficientov c_1, c_2 a opis operátorov pomocou 2×2 matíc je presne rovnaký ako opis spinu a spinových operátorov.

Čitateľ sa ľahko presvedčí o tom, že hermitovskému operátoru je vzťahmi (5) priradená hermitovská matica. Ak si ďalej uvedomíme, že každá 2×2 hermitovská matica sa dá písať ako lineárna kombinácia jednotkovej matice a Pauliho matíc (pozri diskusiu okolo rovnice (4.9)) vidíme, že dostaneme pre ľubovoľný operátor energie zapísaný ako 2×2 matica vyjadrenie

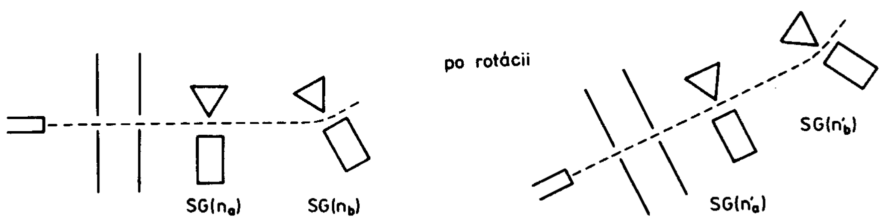
$$\mathsf{H} = \alpha\mathbf{1} + \beta\boldsymbol{n}.\vec{\boldsymbol{\sigma}} \tag{6}$$

Pritom výraz $\alpha\mathbf{1}$ je len aditívna konštanta pridávaná k energii všetkých stavov a druhý člen sa dá písať pri zavedení vhodného $\boldsymbol{B}$ podľa $\beta = e\hbar B/2m$ presne ako (6.4).

Veľmi pekné a fyzikálne relevantné príklady na dvojhladinové sústavy možno nájsť vo Feynmanových prednáškach z fyziky. Odporúčame čitateľovi, aby si túto časť Feynmanových prednášok podrobne prečítal (a dobre urobí, ak si z nich prečíta aj všetko ostatné).

5.8 ĎALŠIE VLASTNOSTI MATÍC TYPU 2 × 2. UNITÁRNE TRANSFORMÁCIE. DIAGONALIZÁCIA

O hermitovských maticiach typu 2 × 2 už vieme dve dôležité veci
– *každá takáto matica má dve vlastné reálne hodnoty*,
– *príslušné vlastné spinory sú navzájom ortogonálne v zmysle skalámeho súčinu, zavedeného v rovnici* (2.5).



Obr. 5.1

V tomto článku sa budeme zaoberať s ďalšími vlastnosťami matíc typu 2 × 2. Začneme ale s jednoduchou fyzikálnou úlohou, znázornenou na *obr. 5.1*. Na *obr. 5.1a* máme zdroj elektrónov, t. j. rozžhavené vlákno, dve mriežky urýchľujúce elektróny a systém tienidiel. Zväzok elektrónov potom prechádza cez SG($\boldsymbol{n}_a$), pričom elektróny so spinom „pozdĺž“ $\boldsymbol{n}_a$ sú prepustené a elektróny so spinom „proti“ $\boldsymbol{n}_a$ sú pohltené. Elektrón, ktorý prejde týmto SG($\boldsymbol{n}_a$) je v spinovom stave ψ_a. Takýto zväzok elektrónov prechádza druhým prístrojom SG($\boldsymbol{n}_b$) a v ňom meriame pravdepodobnosť toho, že nájdeme spin v smere $\boldsymbol{n}_b$. Amplitúda tejto pravdepodobnosti je daná výrazom

$$\boldsymbol{A}_{ba} = (\psi_b|\psi_a) \tag{1}$$

kde ψ_b je spinor odpovedajúci spinu v smere $\boldsymbol{n}_b$.

Na *obr. 5.1b* je tá istá situácia, len všetky zariadenia sú otočené o istý uhol v priestore. Elektróny, ktoré prejdú cez prístroj SG($\boldsymbol{n}'_a$) budú v stave ψ'_a a amplitúda pravdepodobnosti pre nájdenie spinu v smere $\boldsymbol{n}'_b$ bude

$$\boldsymbol{A}'_{ba} = (\psi'_b|\psi'_a) \tag{2}$$

Ak je sústava izolovaná, potom jej otočenie nemôže meniť experimentálne výsledky a očakávame, že bude platiť $\boldsymbol{A}_{ba} = \boldsymbol{A}'_{ba}$, t. j.

$$(\psi'_b|\psi'_a) = (\psi_b|\psi_a) \tag{3}$$

Pri danom stave ψ a danom pootočení bude i stav ψ' pootočenej sústavy daný jednoznačne a teda bude funkciou stavu ψ a pootočenia. Formálne možno písať

$$\psi' = \mathbf{U}\psi$$

kde $\mathbf{U}$ je lineárny operátor závislý od charakteru otočenia.

Označme teraz zložky spinora ψ ako a_1, a_2, zložky spinora ψ' ako a'_1, a'_2. Vzťah medzi ψ a ψ' potom píšeme pomocou matice $\mathbf{U}$ priradenej danému pootočeniu ako

$$\psi \to \psi' = \mathbf{U}\psi \qquad \begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{U}_{11} & \boldsymbol{U}_{12} \\ \boldsymbol{U}_{21} & \boldsymbol{U}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \tag{4}$$

Matica $\mathbf{U}$ ale musí byť podľa (3) taká, aby nemenila skalárny súčin.

Príslušné podmienky ľahko nájdeme. Zložky spinoru označíme nasledovne

$$\psi_a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \qquad \psi_b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$$

$$\psi'_a = \begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \end{pmatrix}, \qquad \psi'_b = \begin{pmatrix} b'_1 \\ b'_2 \end{pmatrix}$$

Pritom platí

$$b'_i = U_{ik}b_k, \qquad a'_i = U_{ik}a_k \tag{5}$$

kde cez opakované indexy sčitujeme. Pre skalárne súčiny vystupujúce v (3) máme

$$(\psi'_b|\psi'_a) = b'^*_i a'_i = b^*_k (U_{ik})^* \, U_{il} a_l \tag{6a}$$

$$(\psi_b|\psi_a) = b^*_k a_k \tag{6b}$$

Ak má byť pravá strana v (6a) rovná pravej strane v (6b) pre ľubovoľné a_1, a_2, b_1, b_2, musí platiť

$$(U_{ik})^* U_{il} = \delta_{kl} \tag{7}$$

Rovnica (7) je teda nutnou podmienkou pre to, aby lineárna transformácia daná maticou $\mathbf{U}$ nemenila skalárny súčin.

Podmienku (7) môžeme prepísať aj do uzavretejšieho tvaru, ak zavedieme maticu $\mathbf{U}^+$ hermitovsky združenú k $\mathbf{U}$. Pre maticu $\mathbf{U}^+$ platí podľa definície

$$(\mathbf{U}^+)_{ik} = \mathbf{U}^*_{ki}$$

a podmienku (7) prepisujeme ako

$$(\mathbf{U}^{+})_{ik}U_{il} = (\mathbf{U}^{+}\mathbf{U})_{kl} = \delta_{kl} \tag{8}$$

ale to je práve

$$\mathbf{U}^{+}\mathbf{U} = \mathbf{1} \tag{9}$$

kde na pravej strane máme jednotkovú maticu. Ľahko sa dá ukázať, že zároveň s (9) bude platiť aj

$$\mathbf{U}\mathbf{U}^{+} = \mathbf{1} \tag{9'}$$

Matice $\mathbf{U}$, ktoré majú vlastnosť (9) sa nazývajú unitárne.

Doteraz sme uvažovali ako vyzerajú stavy pootočenej fyzikálnej sústavy. Predpokladajme teraz, že spolu so sústavou rovnako pootočíme i meracie prístroje. Nech prístroju je priradený operátor $\mathbf{A}$, otočenému prístroju operátor $\mathbf{A}'$. To, aký bude operátor $\mathbf{A}'$ pri známom operátore $\mathbf{A}$ zistíme ľahko pomocou jednoduchej úvahy. Ak totiž otočíme meranú sústavu aj merací prístroj, potom výsledky merania musia byť štatisticky rovnaké. Značí to napríklad, že stredná hodnota veličiny A v stave ψ musí byť rovnaká ako stredná hodnota veličiny A' v stave ψ'.

Stredná hodnota veličiny A je rovná skalárnemu súčinu $(\psi|\mathbf{A}\psi)$, kde $\mathbf{A}$ je príslušný operátor (matica 2×2). Ľahko sa možno presvedčiť o tom, že tento skalárny súčin možno zapísať v tvare[97] (pozri 2.8)

$$\psi^{+}\mathbf{A}\psi \tag{10}$$

Stavu otočenej sústavy odpovedá spinor

$$\psi' = \mathbf{U}\psi$$

pričom platí

$$\psi'^{+} = \psi^{+}\mathbf{U}^{+}$$

V pootočenej sústave na prístroji A' nameriame strednú hodnotu

$$\psi'^{+}\mathbf{A}'\psi' = \psi^{+}\mathbf{U}^{+}\mathbf{A}'\mathbf{U}\psi \tag{11}$$

Podľa toho, čo sme uviedli vyššie však musí platiť rovnosť

$$\psi'^{+}\mathbf{A}'\psi' = \psi^{+}\mathbf{A}\psi$$

Táto rovnosť musí platiť pre ľubovoľný stav ψ. Po dosadení z(10)a(11)už ľahko dostaneme

$$\mathbf{U}^{+}\mathbf{A}'\mathbf{U} = \mathbf{A}$$

[97] Pripomeňme si, že v nasledujúcich vzťahoch ide o násobenie matíc typov (1, 2), (2, 2) a (2, 1).

a ak využijeme unitárnosť matice $\mathbf{U}$

$$\mathbf{A}' = \mathbf{U}\mathbf{A}\mathbf{U}^{+} \tag{12}$$

Načrtnime si teraz jednoduchý príklad. Skúsime nájsť maticu $\mathbf{U}$, ktorá odpovedá rotácii fyzikálnej sústavy okolo osi y o 90°. Aby nedošlo k nedorozumeniu, zdôrazníme, že ide o otočenie v aktívnom zmysle, t. j. otočíme fyzikálny systém (napríklad elektrónové delo), pričom súradnicová sústava (osi x, y, z) ostane nehybná. Znamená to, že ak v pôvodnom systéme bol spinový stav $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ (priemet $\hbar/2$ na os z), potom po pootočení dostaneme stav, v ktorom priemet na os x je $\hbar/2$, teda stav (pozri (4.5a)) $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$. Podobne stavu $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ bude odpovedať stav $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-1\\1\end{pmatrix}$

Ľahko vidíme, že matica $\mathbf{U}$, ktorá prislúcha takejto rotácii musí mať tvar

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \tag{13}$$

Platí totiž

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = \mathbf{U}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}; \qquad \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-1\\1\end{pmatrix} = \mathbf{U}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

Pozrime sa teraz, aký operátor bude prislúchať otočenému SG prístroju, ktorý v pôvodnom systéme meral priemet spinu v smere osi z. Pôjde vlastne o jednoduché dosadenie do (12), pričom pôvodný operátor je

$$\mathbf{A} = \mathbf{s}_z = \frac{\hbar}{2}\cdot\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}$$

Dostaneme tak

$$\mathbf{A}' = \mathbf{U}\mathbf{A}\mathbf{U}^{+} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}_x = \mathbf{s}_x$$

Dostali sme výsledok, ktorý sme očakávali. Ak totiž SG(z) prístroj otočíme o 90° okolo osi y, potom z neho vlastne dostaneme prístroj SG(x), ktorému prislúcha operátor $\mathbf{s}_x$.

Na záver si uveďme ešte jedno tvrdenie, ktoré má hlboké fyzikálne dôsledky.[98] Pre ľubovoľnú hermitovskú maticu $\mathbf{A}$ možno nájsť takú unitárnu maticu $\mathbf{U}$, že matica

$$\mathbf{A}' = \mathbf{UAU}^+ \tag{14}$$

je diagonálna.

Matica $\mathbf{A}'$ bude mať tvar

$$\mathbf{A}' = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$$

Zrejme λ_1 a λ_2 sú vlastné hodnoty matice $\mathbf{A}'$ prislúchajúce spinorom

$$\psi_1' = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \text{a} \qquad \psi_2' = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Ľahko však možno ukázať, že λ_1 a λ_2 sú aj vlastnými hodnotami matice $\mathbf{A}$, prislúchajúce spinorom $\psi_1 = \mathbf{U}^+\psi_1'$ a $\psi_2 = \mathbf{U}^+\psi_2'$. Úloha nájsť vlastné hodnoty a vlastné spinory matice $\mathbf{A}$ je teda ekvivalentná diagonalizácii v zmysle (14) a (15). Ak totiž poznáme tieto vlastné stavy

$$\mathbf{A}\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \lambda_1 \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{A}\begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \lambda_1 \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix}$$

potom matica

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \alpha_1^* & \alpha_2^* \\ \beta_1^* & \beta_2^* \end{pmatrix}$$

diagonalizuje maticu $\mathbf{A}$ v zmysle (14).

Overenie týchto tvrdení prenechávame čitateľovi.[99]

---

[98] Plný dosah takéhoto tvrdenia si čitateľ uvedomí pravdepodobne až v kapitole o všeobecnom formalizme kvantovej mechaniky.

[99] Pri dôkazoch treba využiť, že rôzne vlastné spinory sú ortogonálne.

5.9 SÚSTAVY S N HLADINAMI. VLASTNOSTI HERMITOVSKÝCH MATÍC TYPU $N \times N$

V predchádzajúcich článkoch sme sa podrobne zaoberali s dvojhladinovou sústavou a s vlastnosťami matíc typu 2 × 2. V tomto článku zovšeobecníme úvahy o dvojhladinovej sústave na sústavu s N-hladinami a potom uvedieme niektoré základné vlastnosti hermitovských matíc typu $N \times N$. Dôkazy nebudeme robiť, pretože sú vždy jednoduchým zovšeobecnením postupov, ktoré možno urobiť „na prstoch" v prípade matíc typu 2 × 2.

Predstavme si teda, že máme sústavu, v ktorej je N-hladín relatívne blízko seba a ostatné sú od týchto pomerne ďaleko a predpokladajme tiež, že sa zaoberáme iba s problémami, kde možno vo veľmi dobrom priblížení brať do úvahy iba týchto N-hladín. Vlnové funkcie príslušné k N uvažovaným ortonormovaným stavom označíme ako $\psi_1(\boldsymbol{r})$, $\psi_2(\boldsymbol{r})$, …, $\psi_N(\boldsymbol{r})$. Ľubovoľný stav z uvažovanej množiny stavov je lineárnou kombináciou[100]

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{i=1}^{N} c_i \psi_i(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

Operátor A pôsobiaci na jednotlivé stavy ψ dá

$$\mathsf{A}\psi_i = \boldsymbol{A}_{ki}\psi_k \tag{2}$$

pričom koeficienty A_{mi} môžeme „vylúpnuť" násobením rovnice (2) funkciou $\psi_m^*(\boldsymbol{r})$ a integrovaním cez celý priestor. Dostaneme tak

$$\boldsymbol{A}_{mi} \equiv (\psi_m|\mathsf{A}\psi_i) = \int \psi_m^*(\boldsymbol{r})\mathsf{A}\psi_{ik}(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{3}$$

kde sme v druhom člene použili označenie typické pre skalárny súčin, pretože integrál v (3) má vlastne tú istú úlohu ako skalárny súčin v prípade spinorov.

Pôsobením operátora A na lineárnu kombináciu (1) dostaneme

$$\begin{gathered} \mathsf{A}\psi_i = c_k'\psi_k \\ c_k' = \boldsymbol{A}_{ki}c_i \end{gathered} \tag{4}$$

Z uvedeného vidieť, že každý stav z uvažovanej množiny stavov možno jednoznačne zapísať pomocou stĺpca obsahujúceho koeficienty c_i a každému operátoru môžeme priradiť maticu $\boldsymbol{A}_{ik}$

[100] Cez dvakrát sa vyskytujúci index sumujeme v ďalšom od l po N.

$$\psi \to \begin{pmatrix} c_1' \\ c_2' \\ \vdots \\ c_n' \end{pmatrix}, \qquad \mathsf{A} \to \begin{pmatrix} A_{11} \dots A_{1N} \\ \vdots \quad \vdots \\ A_{N1} \cdots A_{NN} \end{pmatrix} \tag{5}$$

Toto priradenie má nasledujúcu vlastnosť. Ak je stavu ψ' priradený stĺpec čísel obsahujúci c_1', c_2', ..., c_N', stavu ψ stĺpec obsahujúci c_1, c_2, ..., c_N a ak platí $\psi' = \mathsf{A}\psi$, potom

$$\begin{pmatrix} c_1' \\ c_2' \\ \vdots \\ c_N' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11}, A_{12}, \dots, & A_{1N} \\ A_{11}, \dots & \\ \vdots & \\ A_{N1}, \dots & A_{NN} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} \tag{6}$$

Môžeme sa tiež presvedčiť o tom, že pre „skalárny“ súčin dvoch stavov

$$\psi \leftrightarrow \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} \qquad \Phi \leftrightarrow \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix}$$

platí

$$\int \Phi^*(\boldsymbol{r})\,\psi(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \equiv (\Phi|\psi) = b_i^* a_i \tag{7}$$

Presvedčíme sa o tom rýchlo, ak za Φ, ψ do (7) dosadíme rozklady

$$\Phi(\boldsymbol{r}) = a_j \psi_j(\boldsymbol{r}), \qquad \psi(\boldsymbol{r}) = a_k \psi_k(\boldsymbol{r})$$

a využijeme ortonormovanosť systému $\{\psi_k\}$.

V tomto štádiu môžeme zabudnúť na systém funkcií $\{\psi_i(\boldsymbol{r})\}$ a pracovať už iba so stĺpcami a maticami podľa týchto pravidiel:

– každému stavu je priradený stĺpec čísel nazývaný vektorom
– skalárnym súčinom dvoch vektorov $\psi(c_1, \dots, c_N)$ a $\Phi(b_1, \dots, b_N)$ nazývame výraz

$$(\Phi|\psi) = b_i^* c_i \tag{8}$$

– každej fyzikálnej veličine A je priradená hermitovská matica s prvkami $\boldsymbol{A}_{ik}$; $i, k = 1, 2, \dots, N$
– pôsobením matice $\mathbf{A}$ na vektor s prvkami $(c_1', \dots, c_N')$ vzniká nový vektor s prvkami $(c_1, \dots, c_N)$ pričom vzťah medzi pôvodným a novým vektorom je daný rovnicou (6)
– stredná hodnota fyzikálnej veličiny, ktorej odpovedá matica $\mathbf{A}$ v stave danom vektorom $(c_1, \dots, c_N)$ sa rovná

$$(\psi|\mathbf{A}\psi) = c_i^* \boldsymbol{A}_{ik} c_k \tag{9}$$

– pri meraní fyzikálnej veličiny, ktorej odpovedá matica **A**, môžeme v jednotlivých meraniach nájsť iba vlastné hodnoty matice **A** dané podmienkami

$$\mathbf{A}\chi^{(i)} = \lambda_i \chi^{(i)} \tag{10}$$

kde **A** je matica typu $N \times N$, $\chi^{(i)}$ je vektor s prvkami $(c_1^{(i)}, c_2^{(i)}, ..., c_N^{(i)})$

– amplitúda pravdepodobnosti pre nameranie hodnoty λ_i v stave Φ sa rovná skalárnemu súčinu $(\chi^{(i)}|\Phi)$, kde $\chi^{(i)}$ je vlastný vektor matice **A** normovaný tak, že $(\chi^{(i)}|\chi^{(i)}) = 1$
– po nájdení hodnoty λ_i pri meraní veličiny A v stave Φ nastáva zmena stavu a tesne po meraní bude sústava v stave $\chi^{(i)}$
– časová závislosť stavu je daná časovou závislosťou koeficientov $c_i(t)$ opisujúcich tento stav.

Túto časovú závislosť dostaneme riešením Schrödingerovej rovnice, ktorá má tvar

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \\ c_N(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & \dots & H_{1N} \\ \vdots & & \vdots \\ H_{N1} & \dots & H_{NN} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1(t) \\ \vdots \\ c_N(t) \end{pmatrix} \tag{11}$$

Toto je zhruba celá schéma kvantovej mechaniky pre N-hladinovú sústavu. Jednotlivé body sú zovšeobecnením výsledkov, ktoré sme podrobne prediskutovali pre prípad spinu. Implicitne sme však predpokladali, že matice typu $N \times N$ majú niektoré vlastnosti, ktoré sú priamym zovšeobecnením vlastností 2×2. Teraz si tieto vlastnosti uvedieme podrobnejšie.

Vlastností hermitovských matíc typu *N* × *N*

Matica s prvkami A_{ik} je hermitovská ak platí

$$A_{ik} = A_{ki}^* \qquad i, k = 1, 2, ..., N \tag{12}$$

Maticu $\mathbf{B}^+$ nazývame hermitovsky združenou k matici **B**, ak

$$(\mathbf{B}^+)_{ik} = B_{ki}^* \tag{13}$$

Matica **A** je hermitovská práve vtedy, keď $\mathbf{A} = \mathbf{A}^+$.

Číslo λ nazývame vlastnou hodnotou matice, ak existuje vektor χ taký, že

$$\mathbf{A}\chi = \lambda\chi \tag{14}$$

Všetky vlastné hodnoty hermitovskej matice sú reálne čísla. Vlastné vektory matice **A** príslušné k dvom rôznym vlastným hodnotám sú navzájom ortogonálne v zmysle skalárneho súčinu (8). Presnejšie: ak

$$\mathbf{A}\chi = \lambda\chi, \qquad \mathbf{A}\chi' = \lambda'\chi' \qquad \lambda' \neq \lambda'$$

potom

$$(\chi|\chi') = 0$$

Vychádzajúc z rovníc (14) zistíme, že vlastné hodnoty matice **A** sú koreňmi rovnice

$$\det\begin{pmatrix} A_{11}-\lambda & A_{12} & \dots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22}-\lambda & \dots & A_{2N} \\ \vdots & & & \\ A_{N1} & A_{N2} & \dots & A_{NN}-\lambda \end{pmatrix} = 0 \qquad (15)$$

Táto rovnica je N-tého stupňa a má N koreňov, ktoré sú podľa predchádzajúceho reálne.

Ak sústavu vlastných vektorov matice **A** ortonormujeme, prvky týchto vektorov označíme nasledovne

$$\chi^{(i)} = \begin{pmatrix} \chi_1^{(i)} \\ \chi_2^{(i)} \\ \vdots \\ \chi_N^{(i)} \end{pmatrix}$$

a zostrojíme maticu

$$\mathbf{U}^+ = \begin{pmatrix} \chi_1^{(1)} & \chi_1^{(2)} & \cdots & \chi_1^{(N)} \\ \chi_2^{(1)} & \chi_2^{(2)} & \cdots & \chi_2^{(N)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \chi_N^{(1)} & \chi_N^{(2)} & \cdots & \chi_N^{(N)} \end{pmatrix}$$

potom matica

$$\mathbf{A}' = \mathbf{UAU}^+ \qquad (16)$$

bude diagonálna a v diagonále budú vlastné hodnoty $\lambda^{(i)}$ v tom istom poradí, v akom idú vlastné vektory ako stĺpce v (16).

5.10 ZHRNUTIE

Zopakujeme na záver základné myšlienky opisu spinu 1/2, závislosť od priestorových premenných si nebudeme všímať.

1. Spinovému stavu častice je priradený dvojkomponentný spinor

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$$

α_1 (α_2) má význam amplitúdy pravdepodobnosti, že v stave $\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{pmatrix}$ má častica priemet vnútorného momentu hybnosti na os z rovný $+\frac{1}{2}\hbar\left(-\frac{1}{2}\hbar\right)$.

2. Fyzikálnym veličinám sú v tomto formalizme priradené 2 × 2 hermitovské matice, spĺňajúce vzťah $A_{ik} = A^*_{ki}$.

3. Operátor spinu $\mathbf{\hat{s}} = (\mathrm{s}_1, \mathrm{s}_2, \mathrm{s}_3)$ má tvar $\mathbf{\hat{s}} = \frac{\hbar}{2}\vec{\boldsymbol{\sigma}}$ a kde $\vec{\boldsymbol{\sigma}}$ sú Pauliho matice

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix} \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

4. Pauliho matice spĺňajú dôležitý komutačný zákon

$$[\boldsymbol{\sigma}_i, \boldsymbol{\sigma}_j] = 2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\boldsymbol{\sigma}_k \qquad \text{(sumácia cez opakovaný index)}$$

Ďalšie užitočné algebraické vzťahy pre σ-matice sú uvedené na str. 195.

5. Operátor magnetického momentu elektrónu je

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e\hbar}{2m}\vec{\boldsymbol{\sigma}} \qquad e = -|e|$$

Operátor energie dipólu v magnetickom poli je $\mathbf{H} = -\boldsymbol{\mu}.\boldsymbol{B}$. Hodnota $e\hbar/(2m) = 0{,}9274\,.\,10^{-23}\ \mathrm{JT}^{-1} = 5{,}7884\,.\,10^{-23}\ \mathrm{eV\,T}^{-1}$ sa nazýva Bohrov magnetón. Pre kvalitatívne odhady je dobré zapamätať si, že na „preklopenie“ spinu elektrónu v magnetickom poli s indukciou 1 T je potrebná energia $\approx 10^{-4}$ eV.

6. Nech stav $\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{pmatrix}$ je pripravený istým prístrojom (napr. typu SG) a stav $\begin{pmatrix}\alpha'_1\\ \alpha'_2\end{pmatrix}$ je pripravovaný rovnakým, ibaže otočeným prístrojom. Potom platí

$$\alpha'_i = \boldsymbol{U}_{ik}\alpha_k$$

kde $\boldsymbol{U}_{ik}$ je unitárna matica (ktorá je priradená uvažovanej rotácii). Platí

$$\boldsymbol{U}_{ik}\,.\,\boldsymbol{U}^*_{jk} = \delta_{ik}$$

Ak určitému meraciemu prístroju (veličine) odpovedá matica $\boldsymbol{A}_{ij}$, potom tomuto prístroju otočenému uvažovaným spôsobom prislúcha matica s prvkami

$$\boldsymbol{A}'_{ij} = \boldsymbol{U}_{ik}\boldsymbol{A}_{ki}\boldsymbol{U}^*_{ji}$$

5.11 PRÍKLADY A PROBLÉMY

1. Kolimovaný zväzok atómov sodíka prechádza Sternovým-Gerlachovým magnetom. Nehomogénne magnetické pole má smer osi z a

$$\frac{\mathrm{d}B}{\mathrm{d}z} = 5\frac{\mathrm{T}}{\mathrm{m}}$$

Dĺžka magnetu je 0,5 m a rýchlosť atómov odpovedá tepelnému pohybu pri 500 K. Odhadnite výchylku atómov s projekciami $s_z = \hbar/2$, $s_z = -\hbar/2$ od pôvodného smeru.

2. Priemet spinu elektrónu do smeru daného uhlami (ϑ_1, φ_1) je $\hbar/2$. Nájdite pravdepodobnosť toho, že v tomto stave nájdeme elektrón s priemetom spinu $\hbar/2$ do smeru daného uhlami (ϑ_2, φ_2). Opíšte fyzikálne usporiadanie experimentu.

3. Priemet spinu elektrónu na smer vonkajšieho magnetického poľa môže nadobúdať dve hodnoty a tomu odpovedajú dve energetické hladiny. Ak na elektrón, povedzme na nižšej hladine dopadá časovo premenné elektromagnetické pole s vhodnou kruhovou frekvenciou, môže „prehodiť“ elektrón na vyššiu hladinu. Vypočítajte túto kruhovú frekvenciu pre elektrón v poli 5 T.

4. Protón sa pohybuje rýchlosťou rovnou jednej stotine rýchlosti svetla v smere osi x a jeho spin „má smer“ osi x. Tento protón prejde homogénnym magnetickým pórom s intenzitou 0,1 T. Pole má smer osi z. Aký smer bude mať spin protónu po prechode poľom, ak dĺžka jeho dráhy v poli je 0,1 m? Magnetický moment protónu je $\mu_p = 2{,}79\ e\hbar/2M$, kde M je hmotnosť protónu. Sformulujte korektné tvrdenie odpovedajúce nášmu názornému „spin má smer osi x“.

5. Dokážte pre Pauliho matice platnosť vzťahov (11), (12), (17), (19) uvedených v článku 5.4.

6. Nájdite vlastné hodnoty a vlastné spinory matice

$$\begin{pmatrix} 1 & \mathrm{i} \\ -\mathrm{i} & -1 \end{pmatrix}$$

7. Nájdite maticu, ktorá má vlastné spinory $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ a $\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ prislúchajúce vlastným hodnotám +1 a −1.

8. Nájdite spinory, ktoré sú lineárnymi kombináciami spinorov $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ a $\begin{pmatrix} 1 \\ \mathrm{i} \end{pmatrix}$ tak, aby nové spinory boli ortonormálne.

9. Uvažujme dvojhladinový systém. Označme dva jeho nezávislé (nie nevyhnutne stacionárne) stavy ako ψ_1 a ψ_2. Hamiltonián systému nech je v zmysle rovnice (7.4) reprezentovaný maticou

$$\begin{pmatrix} E_1 & A \\ A & E_2 \end{pmatrix}$$

kde E_1, E_2 a A sú reálne čísla. Riešte Schrödingerovu (časovú) rovnicu so začiatočnou podmienkou $\psi(t = 0) = \psi_1$. Z nájdeného riešenia určte pravdepodobnosť toho, že v čase $t = \tau$ sa sústava bude nachádzať v stave ψ_2. Nájdite túto pravdepodobnosť pre limitný prípad malého τ a všimnite si význam nediagonálnych maticových elementov v hamiltoniáne.

10. Nájdite stacionárne stavy pre sústavu z predchádzajúceho príkladu a určte ich energie.