Částice v E-M poli, spin

Martin Štefaňák

9. listopadu 2020

Přehled

Přehled

1. Částice v E-M poli
2. Spin elektronu

Částice v E-M poli - klasický popis

- Lorentzova síla - závisí na rychlosti

$$\vec{F}(\vec{x}, \vec{v}, t) = q\left(\vec{E}(\vec{x}, t) + \vec{v} \times \vec{B}(\vec{x}, t)\right)$$

- Zobecněný potenciál

$$\begin{aligned} U(\vec{x}, \vec{v}, t) &= q\left(\phi(\vec{x}, t) - \vec{v} \cdot \vec{A}(\vec{x}, t)\right) \\ \vec{B} &= \vec{\nabla} \times \vec{A}, \quad \vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \end{aligned}$$

- Hamiltonova funkce

$$H = \frac{1}{2M}\left(\vec{p} - q\vec{A}\right)^2 + q\phi$$

Částice v E-M poli - kvantový popis

- Hamiltonián kvantové částice v E-M poli

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\left(\hat{\vec{P}} - q\vec{A}\right)^2 + q\phi$$

- Hybnost a vektorový potenciál obecně nekomutují

$$\left[\hat{P}_j, A_j\right] = -i\hbar\frac{\partial A_j}{\partial x_j}$$

- Coloumbova kalibrace — $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$
- Rozepsaný hamiltonián

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} - \frac{q}{M}\vec{A} \cdot \hat{\vec{P}} + \frac{q^2}{2M}A^2 + q\phi$$

Homogenní magnetické pole

- Vektorový potenciál

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{x}, \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$$

- Diamagnetický člen ($\sim A^2$) — lze zanedbat
- Hamiltonián částice v homogenním magnetickém poli

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \hat{\vec{\mu}}_L \cdot \vec{B}, \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M} + q\phi$$

- Orbitální magnetický moment

$$\hat{\vec{\mu}}_L = \frac{q}{2M}\hat{\vec{L}}$$

Narušení sférické symetrie

- Sféricky symetrický potenciál $\phi(r)$
- $\hat{H}_0$ je kompatibilní s $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_3$

$$\begin{aligned} \hat{H}_0|n,l,m\rangle &= E_{n,l}|n,l,m\rangle, \quad \hat{L}^2|n,l,m\rangle = \hbar^2|n,l,m\rangle \\ \hat{L}_3|n,l,m\rangle &= m\hbar|n,l,m\rangle \end{aligned}$$

- Sférická symetrie $\hat{H}_0$ — zvolíme $\vec{B} = (0, 0, B)$
- Celkový hamiltonián

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{q}{2M}B\hat{L}_3$$

- $|n,l,m\rangle$ je vlastní vektor $\hat{H}$, energie závisí na m

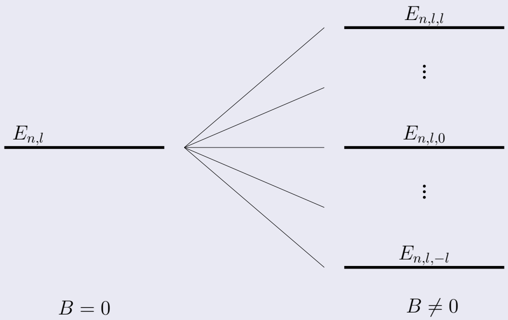
$$\hat{H}|n,l,m\rangle = E_{n,l,m}|n,l,m\rangle, \quad E_{n,l,m} = E_{n,l} - \frac{q\hbar}{2M}Bm$$

Zeemanův jev

- Pro elektron — $q = -e$

$$E_{n,l,m} = E_{n,l} + \mu_0 m B, \quad \mu_0 = \frac{e\hbar}{2m_e} \doteq 9.274 \cdot 10^{-24}\ \mathrm{JT}^{-1}$$

- Vlivem magnetického pole dojde k rozštěpení hladiny $E_{n,l}$ na multiplet $2l + 1$ vzdálených o $\Delta E = \mu_0 B$

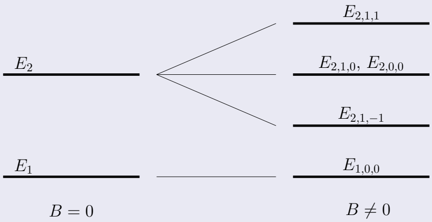


Zeemanův jev na vodíku

- Degenerace hladin je větší než plyne ze sférické symetrie

$$E_N = -\frac{R}{N^2}, \quad N = n + l + 1, \quad D_N = N^2$$

- Hladina E_N by se měla rozdělit na multiplet $2N - 1$ hladin



Nesouhlas s experimentem

- Pro $N \geq 2$ je v multipletu $2N + 1$ hladin
- Základní hladina se rozdělí na dvě

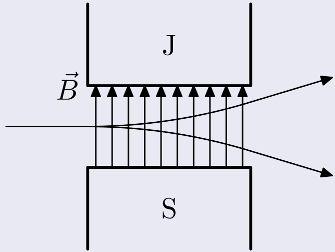
Sternův-Gerlachův experiment

- Svazek částic prochází nehomogenním mag. polem
- Síla působící na částice

$$\vec{F} = \vec{\nabla}\left(\vec{\mu}\cdot\vec{B}(\vec{x})\right)$$

- Atom stříbra v základním stavu — 1 valenční elektron v slupce 5*s*
- Orbitální magnetický moment je nulový — nemělo by se stát nic

- Svazek se rozdělí na dva
- Elektron má vlastní magnetický moment velikosti Bohrova magnetonu μ_0
- Projekce vlastního magnetického momentu může nabývat hodnot $\pm\mu_0$



Přehled

Vlastní moment hybnosti

- Vlastní magnetický moment elektronu je důsledek nenulového vlastního momentu hybnosti — spinu
- Operátory spinu splňují komutační relace pro moment hybnosti

$$\left[\hat{S}_j, \hat{S}_k\right] = i\hbar\varepsilon_{jkl}\hat{S}_l$$

- Projekce spinu do libovolného směru má hodnoty $\pm\frac{\hbar}{2}$
- Hilbertův prostor spinu elektronu má dva bazické stavy

$$\mathscr{H}_S = \mathbb{C}^2$$

- Standardní báze $\mathbb{C}^2 \Longleftrightarrow$ vlastní vektory $\hat{S}_3$

$$|z,+\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |z,-\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Pauliho matice

- Matice operátorů spinu ve standardní bázi

$$S_j = \frac{\hbar}{2}\sigma_j, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \ \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \ \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- Vlastnosti Pauliho matic

$$\begin{aligned} \sigma_j^\dagger &= \sigma_j, \quad \mathrm{Tr}\,\sigma_j = 0, \quad \det\sigma_j = -1 \implies \lambda = \pm 1 \\ [\sigma_j, \sigma_k] &= 2i\varepsilon_{jkl}\sigma_l, \quad \{\sigma_j, \sigma_k\} = \delta_{jk}\mathbb{I} \implies \sigma_j\sigma_k = \delta_{jk}\mathbb{I} + i\varepsilon_{jkl}\sigma_l \end{aligned}$$

- Projekce spinu do libovolného směru může nabývat hodnot $\pm\frac{\hbar}{2}$

$$\hat{S}_{\vec{n}} = \vec{n}\cdot\hat{\vec{S}} = n_j\hat{S}_j \implies \lambda = \pm\frac{\hbar}{2}$$

Spin elektronu

- Velikost spinu elektronu je $s = \frac{1}{2}$

$$S^2 = \hbar^2 \frac{3}{4} \mathbb{I} = \hbar^2 s(s+1)\mathbb{I}$$

- Obecný stav spinu — spinor

$$|\psi\rangle = a|z,+\rangle + b|z,-\rangle \equiv \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad |a|^2 + |b|^2 = 1$$

- Odpovídá kladné projekci spinu do nějakého směru $\vec{n}$

$$\hat{S}_{\vec{n}}|\vec{n},+\rangle = \frac{\hbar}{2}|\vec{n},+\rangle, \quad |\vec{n},+\rangle \equiv \psi_{\vec{n},+} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

Vlastní magnetický moment elektronu

- Vztah mezi spinem a vlastním magnetickým momentem

$$\hat{\vec{\mu}}_S = -g_S \frac{\mu_0}{\hbar} \hat{\vec{S}}, \quad g_S \doteq 2.002319$$

- V přiblížení $g_S = 2$ má vlastní čísla $\pm\mu_0$

$$\vec{\mu}_S = -\mu_0 \vec{\sigma}$$

- Energie vlastního magnetického momentu v magnetickém poli

$$\hat{H}_S = -\hat{\vec{\mu}}_S \cdot \vec{B} = \mu_0 \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$$

Popis stavu elektronu se spinem

- Tenzorový součin Hilbertových prostorů

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_{orb} \otimes \mathscr{H}_S = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x) \otimes \mathbb{C}^2$$

- Možné stavy — $|\psi_{orb}\rangle \otimes |\psi_S\rangle$ + lineární kombinace

$$|\Psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |z,+\rangle + |\psi_2\rangle \otimes |z,-\rangle$$

- Obecný stav v x-reprezentaci — popsaný dvojicí funkcí

$$\Psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{x}) \\ \psi_2(\vec{x}) \end{pmatrix}, \quad \psi_j \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$$

- Skalární součin — indukovaný z $\mathscr{H}_{orb}$ a $\mathscr{H}_S$

$$\langle\Psi|\Phi\rangle = \langle\psi_1|\phi_1\rangle + \langle\psi_2|\phi_2\rangle, \quad (\Psi, \Phi) = \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^\dagger(\vec{x})\Phi(\vec{x})d^3x$$

Pozorovatelné v prostoru $\mathscr{H}_{orb} \otimes \mathscr{H}_S$

- Obecná pozorovatelná — 2×2 matice operátorů na $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} \hat{A}_{11} & \hat{A}_{12} \\ \hat{A}_{21} & \hat{A}_{22} \end{pmatrix}, \quad \hat{A}\Psi = \begin{pmatrix} \hat{A}_{11}\psi_1 + \hat{A}_{12}\psi_2 \\ \hat{A}_{21}\psi_1 + \hat{A}_{22}\psi_2 \end{pmatrix}$$

- Pozorovatelné nezávislé na spinu — poloha, hybnost, ...

$$\hat{C} \equiv \hat{C} \otimes \hat{I}_S = \begin{pmatrix} \hat{C} & 0 \\ 0 & \hat{C} \end{pmatrix}$$

- Pozorovatelné nezávislé na prostorové části - složky spinu, ...

$$\hat{S}_j \equiv \hat{I}_{orb} \otimes \hat{S}_j = \frac{\hbar}{2}\sigma_j$$

Elektron v magnetickém poli

- Pauliho hamiltonián

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{1}{2M}\left(\hat{\vec{P}} + e\vec{A}\right)^2 + e\phi}_{\hat{H}_1} \underbrace{-\vec{B}\cdot\hat{\vec{\mu}}_S}_{\hat{H}_S} = \begin{pmatrix} \hat{H}_1 & 0 \\ 0 & \hat{H}_1 \end{pmatrix} - \hat{H}_S$$

- Bezčasová Pauliho rovnice

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

- Časová Pauliho rovnice

$$\hat{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

Zeemanův jev se spinem

- Homogenní magnetické pole $\vec{B}$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_Z, \quad \hat{H}_Z = -\hat{\vec{\mu}}_L \cdot \vec{B} - \hat{\vec{\mu}}_S \cdot \vec{B}$$

- Speciálně pro elektron

$$\hat{\vec{\mu}}_L = -\frac{\mu_0}{\hbar}\hat{\vec{L}}, \quad \hat{\vec{\mu}}_S = -\frac{2\mu_0}{\hbar}\hat{\vec{S}} \Longrightarrow \hat{H}_Z = \frac{\mu_0}{\hbar}\left(\hat{\vec{L}} + 2\hat{\vec{S}}\right) \cdot \vec{B}$$

- ϕ je sféricky symetrický — $\hat{H}_0$, $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_3$ jsou kompatibilní

$$\hat{H}_0|n,l,m\rangle = E_{n,l}|n,l,m\rangle, \quad \hat{L}_3|n,l,m\rangle = m\hbar|n,l,m\rangle, \ldots$$

- Zvolíme $\vec{B} = (0,0,B)$

$$\hat{H}_Z = \frac{\mu_0 B}{\hbar}\left(\hat{L}_3 + 2\hat{S}_3\right)$$

Zeemanův jev se spinem

- Vlastní vektory $\hat{S}_3$ — $|\pm\rangle$

$$\hat{S}_3|\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\rangle$$

- Kety $|n,l,m\rangle \otimes |\pm\rangle \equiv |n,l,m,\pm\rangle$ jsou vl. vektory $\hat{H}$

$$\hat{H}|n,l,m,\pm\rangle = \underbrace{\left(E_{n,l} + \mu_0 B(m \pm 1)\right)}_{E_{n,l,m,\pm}} |n,l,m,\pm\rangle$$

- Pro $l \geq 1$ se $E_{n,l}$ rozštěpí na multiplet $2l+3$ hladin
- Pro $l = 0$ se $E_{n,0}$ rozdělí na dvě hladiny

Časová Pauliho rovnice v homogenním poli

- Časová Pauliho rovnice, pole nezávislá na čase, $\vec{B} = konst.$

$$\hat{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}, \quad \hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_S, \quad \left[\hat{H}_1, \hat{H}_S\right] = 0$$

- Řešení Pauliho rovnice

$$\Psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\Psi(0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_1 t}\Psi(0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\begin{pmatrix}\psi_1(\vec{x}, t)\\ \psi_2(\vec{x}, t)\end{pmatrix}$$

- Řešení Schrödingerovy rovnice s hamiltoniánem $\hat{H}_1$

$$\hat{H}_1\psi_j = i\hbar\frac{\partial\psi_j}{\partial t} \implies \psi_j(\vec{x}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_1 t}\psi_j(\vec{x}, 0)$$

Časová Pauliho rovnice v homogenním poli

- Evoluční operátor spinu v homogenním poli

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t} = e^{-\frac{i}{\hbar}\mu_0 \vec{B}\cdot\vec{\sigma} t} = \cos\left(\frac{\mu_0}{\hbar}Bt\right)\mathbb{I} - \frac{i}{B}\sin\left(\frac{\mu_0}{\hbar}Bt\right)\vec{B}\cdot\vec{\sigma}$$

- Speciálně - počáteční podmínka v separovaném tvaru

$$\Psi(\vec{x},0) = \psi_{orb}(\vec{x},0)\otimes\psi_S(0) = \psi_{orb}(\vec{x},0)\begin{pmatrix}\psi_{S,1}(0)\\ \psi_{S,2}(0)\end{pmatrix}$$

- Stav zůstane v separovaném tvaru i pro $t > 0$

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{x},t) &= \psi_{orb}(\vec{x},t)\otimes\psi_S(t)\\ \hat{H}_1\psi_{orb} &= i\hbar\frac{\partial\psi_{orb}}{\partial t}, \quad \hat{H}_S\psi_S = i\hbar\frac{\partial\psi_S}{\partial t} \implies \psi_S(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\psi_S(0)\end{aligned}$$