Kapitola 6

Spin

6.1 Zavedení spinu do QM

Ze Sternova–Gerlachova experimentu víme, že při měření průmětu vlastního momentu hybnosti elektronu – tzv. spinu – do vybrané osy můžeme naměřit jen dvě hodnoty, a to $+\hbar/2$ a $-\hbar/2$. Z dalších experimentů a měření víme, že se skutečně jedná o moment hybnosti, protože se skládá stejně jako orbitální moment hybnosti a lze jej skládat i s tímto orbitálním. Einsteinův – de Haasův pokus ale ukázal, že spin elektronu není dán nějakou kvantovou analogií jeho pohybu jako nabitého tělesa – např. otáčením kolem osy, vzájemným pohybem jeho komponent apod. K tomuto závěru nás vede fakt, že poměr mezi vnitřním magnetickým momentem elektronu a jeho vnitřním momentem hybnosti, tzv. **gyromagnetický poměr**, je dvojnásobný v porovnání s poměrem, který vychází pro pohyby elektronu v klasické i kvantové mechanice.

6.1.1 Popis spinového stavu a operátory spinu

Uvedených experimentálních výsledků nyní využijeme k tomu, abychom si vybudovali formalismus popisující spin matematicky. Skutečnost, že existují jen dvě naměřitelné hodnoty spinu ukazuje, že Hilbertův prostor všech jeho stavů bude dvoudimenzionální. Zvolme si tedy jako prvky báze tohoto prostoru stavy příslušející vlastním hodnotám $\pm\hbar/2$ při měření průmětu spinu do osy z a označme je $|z+\rangle$ a $|z-\rangle$. Vzhledem k tomu, že se jedná o dvoudimenzionální vektorový prostor[1], jistě ho lze ztotožnit s prostorem dvousložkových

[1]Raději i na tomto místě znovu připomeňme, že se jedná o vektorový prostor nad tělesem komplexních čísel $\mathbb{C}$. A dále ještě by bylo možné namítnout, že prostor může být vícedimenzionální, protože jedno nebo obě

vektorů a jako prvky báze uvažovat prvky kanonické báze:

$$|z+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |z-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{6.1}$$

Pokud bude systém v nějakém stavu $|\psi\rangle$, který bude dán lineární kombinací obou bázových stavů, pak to zapíšeme jako

$$|\psi\rangle = c_1|z+\rangle + c_2|z-\rangle \equiv c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}, \tag{6.2}$$

tedy stav bude opravdu popsán dvoudimenzionálním vektorem.

Tyto dvouprvkové vektory budou „hrát stejnou roli“, jakou měly vlnové funkce v předchozích kapitolách. Tvoří Hilbertův prostor – skalární součin dvou vektorů budeme definovat tak, že první vektor transponujeme („uděláme ze sloupečku řádek“), komplexně sdružíme (důvody jsou vysvětleny u zavádění skalárního součinu pro vlnové funkce) a potom maticově vynásobíme s druhým vektorem, tj.

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \ |b\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \langle a \,|\, b\rangle = \begin{pmatrix} a_1^* & a_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = a_1^* b_1 + a_2^* b_2.$$

Odtud plyne i definice normovaného vektoru

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \langle a \,|\, a\rangle = |a_1|^2 + |a_2|^2 = 1.$$

Úkol 6.1 Určete pravděpodobnost naměření obou možných hodnot průmětu spinu do osy z, tj. veličiny S_z, jestliže je stav dané částice popsán vektorem

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1+\mathrm{i} \\ 1-\mathrm{i} \end{pmatrix}.$$

Popis spinového stavu částice jsme tedy vytvořili, nyní ale musíme najít vhodný matematický objekt, který by reprezentoval spin jako fyzikální veličinu. Jinými slovy, pokud jsme vlnové funkce nahradili vektory, je otázkou, co bude hrát roli operátorů. Operátor příslušející jakékoli měřitelné fyzikální veličině musí být lineární zobrazení na Hilbertově

vlastní čísla (odpovídající naměřitelným hodnotám) mohou být degenerovaná. Zkusme teď ale budovat teorii popisující spinový stav elektronu co možná nejjednodušší, tj. bez uvedené degenerace. Pokud by náš pokus selhal (teoretický popis neodpovídal experimentálním výsledkům), víme, že zde je možnost, jak teorii upravit.

prostoru a jako takové ho na vektorovém prostoru konečné dimenze můžeme reprezentovat maticí; v našem případě se bude jednat o matici 2×2.

Matici, která by měla reprezentovat operátor průmětu spinu do osy z, označíme $\hat{S}_z$. Známe její vlastní čísla a víme, že její vlastní vektory tvoří bázi. Z toho plyne, že tato matice je diagonální a na diagonále jsou její vlastní čísla, tj.

$$\hat{S}_z = \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{6.3}$$

Úkol 6.2 Úvahy v této kapitole lze pěkně ilustrovat pomocí apletu https://phet.colorado.edu/sims/stern-gerlach/stern-gerlach_en.html

Ovládání: V horní části se nastavuje počet magnetů a jejich natočení. V levé části se posílají částice do magnetů a lze upravit, jaké částice bude zdroj posílat. Koláčové grafy pod magnety ukazují relativní četnosti obou možných výsledků.

1. Zapněte si aplet, nastavte zdroj na náhodný směr spinu částic a ukažte, že v takovém případě je pravděpodobnost naměření obou hodnot průmětu spinu do libovolné osy stejná.
2. Nastavte si dva magnety za sebou.
   - Nejprve nechte oba magnety směřovat do osy z a vysvětlete získané výsledky.
   - Poté první magnet ponechte nastavený na 0° a změňte úhel druhého magnetu na 90° (měření průmětu spinu do směru x). Popište, co se stalo.
   - Poté první magnet nastavte na 180° (bude propouštět atomy se záporným průmětem spinu do osy z. Úhel druhého magnetu ponechte na 90°. Popište, co se stalo teď.
   - Poté zopakujte poslední dvě pozorování, ale prohoďte vždy nastavení prvního a druhého magnetu. Získali jste výsledky, které jste očekávali?

V předchozím úkolu jsme zjistili, že pokud je částice v některém ze stavů s ostrou hodnotu S_x, pak pravděpodobnosti naměření obou možných hodnot průmětů spinu do osy z jsou stejné. To znamená, že vektory $|x+\rangle$ a $|x-\rangle$ jsou takovou lineární kombinací vektorů $|z+\rangle$ a $|z-\rangle$, kdy oba koeficienty mají stejnou velikost. Zapišme to matematicky pro vlastní vektor $|x+\rangle$, kterému přísluší vlastní číslo $\hbar/2$:

$$|x+\rangle = A_1|z+\rangle + A_2|z-\rangle = A_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + A_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix}, \text{ kde} |A_1| = |A_2|.$$

Vidíme, že $|x+\rangle$ má v obou složkách čísla se stejnou velikostí. Zvolme[2]

$$|x+\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}, \tag{6.4}$$

kde výraz $\frac{\sqrt{2}}{2}$ zajišťuje normovanost (jednotkovost) vektoru.

Obecné řešení je $A_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\eta}$ a $A_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$, kde η je libovolné reálné číslo, tzv. fáze komplexního čísla A_1, protože stejný stav je popsán libovolným násobkem daného vektoru mohu A_2 volit jako reálné kladné a fázi psát jen ke koeficientu A_1.

Vlastní vektor $|x-\rangle$ příslušející vlastnímu číslu $-\hbar/2$ musí být na vektor $|x+\rangle$ kolmý. To znamená, že to musí být vektor

$$|x-\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}$$

nebo nějaký jeho násobek.

I toto mohu spočítat pečlivěji. Označme

$$|x-\rangle = B_1|z+\rangle + B_2|z-\rangle$$

a z pravděpodobnostní interpretace koeficientů B_1 a B_2 víme, že platí

$$|B_1|^2 = |B_2|^2 = \frac{1}{2}$$

, což má obecné řešení

$$B_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\eta}, \qquad B_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Pokud vektory $|z+\rangle$ a $|z-\rangle$ popisující stavy s ostrou hodnotou do osy z tvoří (ortonormální) bázi, musí takovou bázi tvořit i vektory $|x+\rangle$ a $|x-\rangle$ (osy z a x jsou fyzikálně rovnocenné). Jednoduše ověříme, že $\langle x+ \mid x+\rangle = 1$ a $\langle x- \mid x-\rangle = 1$. Z požadavku kolmosti obou vektorů dostáváme

$$0 = \langle x+ \mid x-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\eta} \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left(1\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}\eta} + 1\cdot 1\right),$$

odkud je již patrné, že $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\eta} = -1$.

Protože známe vlastní čísla a vlastní vektory matice $\hat{S}_x$ a dále víme, že matice $\hat{S}_x$ musí být hermitovská, je již jednoznačně dána:

$$\hat{S}_x = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{6.5}$$

[2] Nemáme žádný další požadavek na tvar $|x+\rangle$, proto je přirozené si zvolit co možná nejjednodušší tvar.

Úkol 6.3 Napište si matici $\hat{S}_x$ jako

$$\hat{S}_x = \begin{pmatrix} a & b+\mathrm{i}c \\ b-\mathrm{i}c & d \end{pmatrix}, \tag{6.6}$$

kde a, b, c a d jsou reálná čísla (tvar matice zaručuje její hermitovost). Určete a, b, c a d tak, aby výše uvedený vektor $|x+\rangle$ byl vlastním vektorem odpovídající vlastnímu číslu $\hbar/2$ a vektor $|x-\rangle$ byl vlastním vektorem odpovídající vlastnímu číslu $-\hbar/2$.

Podobně bychom mohli postupovat i při hledání matice $\hat{S}_y$ pro průmět spinu do osy y, ale protože matice $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ a $\hat{S}_z$ už nejsou na sobě zcela nezávislé, najdeme matici $\hat{S}_y$ rychleji. Spin je momentem hybnosti, a proto musí jeho složky splňovat stejné komutační relace, jaké jsme odvodili pro moment hybnosti dříve (viz 2.29):

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_z] = -\mathrm{i}\hbar\hat{S}_y \quad \Rightarrow \quad \hat{S}_y = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\hat{S}_z, \hat{S}_x] = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}. \tag{6.7}$$

Úkol 6.4 Spočítejte vlastní čísla a vlastní vektory matice $\hat{S}_y$. Bylo možné některou část z výsledku určit předem? Ověřte i vzájemnou kolmost vlastních vektorů.

Úkol 6.5 Spočítejte matici $\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$ a její vlastní čísla a vektory. Jsou výsledky překvapivé, nebo se daly odhadnout předem?

Ověřte komutační relace mezi maticemi pro jednotlivé složky spinu a pro kvadrát jeho velikosti.

Shrnutí výsledků

Shrňme si výsledky této kapitoly. Pro částice, které mají spin 1/2, což jsou například elektron, proton, neutron, neutrina či kvarky (ale nikoli např. foton či piony), můžeme jejich spinový stav popisovat pomocí dvoudimenzionálních vektorů a veličiny reprezentovat pomocí hermitovských matic 2×2. Tyto matice se nejčastěji vyjadřují v bázi vlastních vektorů průmětu spinu do osy z. Operátor[3] spinu $\hat{\vec{S}}$ tedy je

$$\hat{\vec{S}} = \left(\begin{pmatrix} 0 & \hbar/2 \\ \hbar/2 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i}\hbar/2 \\ \mathrm{i}\hbar/2 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix} \right) = \tag{6.8}$$

[3]Pokud vás „vylekalo“, že najednou píšeme vektorový operátor, tak si klidně pro začátek, než si na to zvyknete, říkejte, že je to jen takový rychlejší způsob zápisu $\hat{\vec{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$. Časem se ukáže, že je to užitečný způsob jak na ty tři operátory nahlížet.

$$= \frac{\hbar}{2}\left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right) = \frac{\hbar}{2}\,\hat{\vec{\sigma}},$$

kde jsme symbolem $\hat{\vec{\sigma}}$ označili tzv. **Pauliho matice**.

Všechny tři matice mají vlastní čísla $+\hbar/2$ a $-\hbar/2$. Vlastní vektory, tj. vektory popisující vlastní stavy pro jednotlivé složky spinu jsou

$$\begin{aligned}
|x+\rangle &= \tfrac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}, \quad & |x-\rangle &= \tfrac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} \\
|y+\rangle &= \tfrac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ \mathrm{i} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \mathrm{i}\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}, \quad & |y-\rangle &= \tfrac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} \mathrm{i} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathrm{i}\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} \\
|z+\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad & |z-\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{6.9}$$

Kvadrát velikosti spinu $\hat{S}^2$ je reprezentován maticí

$$\hat{S}^2 = \frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{6.10}$$

která má dvojnásobné (dvakrát degenerované) vlastní číslo $\frac{3\hbar^2}{4} = \hbar^2 \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)$ (zápis je ve stejném tvaru jako pro moment hybnosti odvozený dříve) a všechny vektory jsou jejími vlastními vektory.

Uvedené vyvození tvaru matic pro jednotlivé složky operátoru spinu může u matematičtěji založených čtenářů budit nedůvěru. Uveďme tedy ještě jiný postup. Vyjdeme z těchto poznatků:

- Hledané operátory musí být lineární a hermitovské, to znamená, že je lze reprezentovat hermitovskou maticí (jistě by to šlo i jinak, ale každá taková reprezentace půjde homomorfně ztotožnit s maticovou reprezentací).
- Dále z experimentu víme, že spin je moment hybnosti, takže hledané matice musí splňovat stejné komutační relace jako operátory momentu hybnosti:

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z,\ [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x,\ [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y.$$

- Z experimentu také víme, že průmět spinu do jakéhokoli směru může nabývat právě dvou hodnot, a to $+\hbar/2$ a $-\hbar/2$, to znamená, že Hilbertův (stavový) prostor je dvoudimenzionální. Budeme tedy tři hledat matice 2×2 přičemž všechny tři musejí mít vlastní čísla $\pm\hbar/2$.

Hledáme tři komplexní matice 2×2, to je $3 \cdot 4 \cdot 2 = 24$ reálných neznámých. Požadavek hermitovosti matic počet reálných neznámých redukuje na 12. Znalost vlastních čísel nám dává 6 rovnic (dvě pro každou matici) a znalost komutačních relací také dá 6 nezávislých rovnic. Máme tedy dost rovnic pro nalezení matic operátoru spinu.

Pokud bychom se pustili do řešení, tak uvidíme, že Pauliho matice nejsou jediným řešením výše uvedených požadavků, ale všechna ostatní řešení jsou fyzikálně plně ekvivalentní. Nejednoznačnost je dána např. volbou báze, vůči které budeme matice vyjadřovat (řešení jsou tzv. podobné matice). Proto je možné se omezit na Pauliho matice, aniž by teorie ztratila na své obecnosti.

Výpočtová úloha 6.1
Spočítejte matici $\hat{S}_\vartheta$ průmětu spinu do libovolného směru v rovině xz. (Směr charakterizujte úhlem ϑ, který udává odklon tohoto směru od osy z a nabývá hodnot od $-\pi$ do π.)
Dále určete vlastní čísla a vlastní vektory matice $\hat{S}_\vartheta$.
Najděte i matici průmětu spinu do zcela obecného směru daného úhlem ϑ odklonu od osy z a úhlem φ otočení kolem osy z. Určete i její vlastní čísla a vlastní vektory.

Řešení:
Nejprve musíme sestavit operátor průmětu spinu do zadaného směru $\vec{n}$, který má v rovině xz obecné vyjádření $\vec{n} = (\sin\vartheta, 0, \cos\vartheta)$. Pokud bychom pracovali s vektorem, získali bychom jeho průmět do tohoto směru pomocí běžného skalárního součinu (v našem třídimenzionálním prostoru), a pro operátor průmětu spinu $\hat{S}_\vartheta$ použijeme skalární součin zcela analogicky:

$$\hat{S}_\vartheta = \hat{\vec{S}} \cdot \vec{n} = \hat{S}_x \sin\vartheta + \hat{S}_z \cos\vartheta = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\vartheta & \sin\vartheta \\ \sin\vartheta & -\cos\vartheta \end{pmatrix}.$$

Vlastní čísla λ budeme hledat pomocí rovnice

$$\det\left(\hat{S}_\vartheta - \lambda\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\right) = 0.$$

Po dosazení dostaneme

$$\left(\frac{\hbar}{2}\cos\vartheta - \lambda\right)\left(-\frac{\hbar}{2}\cos\vartheta - \lambda\right) - \frac{\hbar^2}{4}\sin^2\vartheta = -\frac{\hbar^2}{4}\cos^2\vartheta + \lambda^2 - \frac{\hbar^2}{4}\sin^2\vartheta = 0.$$

Rovnice má dvě řešení $\lambda = \pm\hbar/2$, což nás nijak nepřekvapuje, protože víme, že průmět spinu do libovolného směru může nabývat pouze těchto dvou hodnot. Vlastní vektor příslušející vlastnímu číslu $\lambda = \hbar/2$ označme $|\vartheta+\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ a napišme rovnici pro jeho nalezení:

$$\hat{S}_\vartheta|\vartheta+\rangle = \frac{\hbar}{2}|\vartheta+\rangle.$$

Po dosazení

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\vartheta & \sin\vartheta \\ \sin\vartheta & -\cos\vartheta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

a úpravě dostáváme homogenní soustavu dvou rovnic

$$\begin{array}{lcll} a\,(\cos\vartheta - 1) & + & b\sin\vartheta & = 0, \\ a\sin\vartheta & + & b\,(-\cos\vartheta - 1) & = 0. \end{array}$$

Řešením je například $a = \sin\vartheta$, $b = 1 - \cos\vartheta$, ale také libovolný násobek této dvojice čísel. Výhodné by bylo najít takový násobek, aby daný vektor byl jednotkový, proto s využitím vzorců pro goniometrické funkce dvojnásobného úhlu ($\sin 2x = 2\sin x\cos x$ a $\cos 2x = \cos^2 x - \sin^2 x$) určíme:

$$\begin{aligned} |a|^2 + |b|^2 &= \sin^2\vartheta + 1 - 2\cos\vartheta + \cos^2\vartheta = 2(1-\cos\vartheta) \\ &= 2\left(1 - \cos^2\tfrac{\vartheta}{2} + \sin^2\tfrac{\vartheta}{2}\right) = 4\sin^2\tfrac{\vartheta}{2}. \end{aligned}$$

Jednotkový vlastní vektor pak získává podobu

$$\begin{aligned} |\vartheta+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{|a|^2+|b|^2}}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{2\sin\frac{\vartheta}{2}}\begin{pmatrix} 2\sin\frac{\vartheta}{2}\cos\frac{\vartheta}{2} \\ 1 - \cos^2\frac{\vartheta}{2} + \sin^2\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2\sin\frac{\vartheta}{2}}\begin{pmatrix} 2\sin\frac{\vartheta}{2}\cos\frac{\vartheta}{2} \\ 2\sin^2\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\vartheta}{2} \\ \sin\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{6.11}$$

Poznámka: Symbolem $|\vartheta+\rangle$ označujeme vlastní stav a k němu přiřazená vlnová funkce, resp. vektor jsou určeny až na multiplikativní konstantu, tj. přidáním normovací konstanty jsme sice zde změnili vektor, ale ten popisuje pořád stejný stav. Proto si ho dovolujeme označovat stále stejně.

Druhý vlastní vektor $|\vartheta-\rangle$ můžeme spočítat obdobně. Nebo si stačí uvědomit, že oba vektory musí být na sebe kolmé (jedná se o vlastní vektory příslušející různým vlastním číslům) a pak lze rovnou psát

$$|\vartheta-\rangle = \begin{pmatrix} -\sin\frac{\vartheta}{2} \\ \cos\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}.$$

Jako kontrolu můžeme dosadit hodnoty úhlu ϑ pro osu z a x a zkontrolovat, že dostaneme stejné výsledky jako dříve:

$$\begin{aligned}
\vartheta = 0 \quad & \Rightarrow |\vartheta+\rangle = |z+\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\vartheta}{2} \\ \sin\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\
& \Rightarrow |\vartheta-\rangle = |z-\rangle = \begin{pmatrix} -\sin\frac{\vartheta}{2} \\ \cos\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\
\vartheta = \pi/2 \quad & \Rightarrow |\vartheta+\rangle = |x+\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\vartheta}{2} \\ \sin\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\
& \Rightarrow |\vartheta-\rangle = |x-\rangle = \begin{pmatrix} -\sin\frac{\vartheta}{2} \\ \cos\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Výpočet matice průmětu spinu do **obecného směru** by byl obdobný. Směr je dán jednotkovým vektorem $\vec{n} = (\sin\vartheta\cos\varphi, \sin\vartheta\sin\varphi, \cos\vartheta)$. Odpovídající operátor průmětu spinu do tohoto směru má tvar

$$\hat{S}_{(\vec{n})} = \hat{\vec{S}} \cdot \vec{n} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\vartheta & \sin\vartheta e^{-i\varphi} \\ \sin\vartheta e^{i\varphi} & -\cos\vartheta \end{pmatrix}.$$

Na první pohled je patrné, že se jedná o hermitovskou matici. Stejným postupem jako výše zjistíme, že má dvě vlastní čísla $\pm\hbar/2$ a její vlastní vektory jsou

$$|\vec{n}+\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\vartheta}{2} \\ \sin\frac{\vartheta}{2}e^{i\varphi} \end{pmatrix}, \qquad |\vec{n}-\rangle = \begin{pmatrix} -\sin\frac{\vartheta}{2}e^{-i\varphi} \\ \cos\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}.$$

Dosazením příslušných úhlů můžeme zkontrolovat, že dostaneme dříve určené vlastní vektory pro průměty spinu do souřadnicových os.

6.1.2 Spinový magnetický moment

Vše, co jsme doposud odvodili a s čím budeme i nadále pracovat, je vnitřní moment hybnosti, který nazýváme spinem. S ním ale úzce souvisí spinový (vnitřní) magnetický moment. Z Einsteinova – de Haasova pokusu víme, že jsou si úměrné[4] a konstanta úměrnosti je dvojnásobná než u orbitálního momentu hybnosti, tj.

$$\hat{\vec{M}}^{sp} = -\frac{e}{m_e}\hat{\vec{S}} = -\frac{e}{m_e}\frac{\hbar}{2}\,\hat{\vec{\sigma}}.$$

[4]Připomeňme, že záporné znaménko je zde dáno záporným elektrickým nábojem elektronu.

Protože vlastní čísla všech tří Pauliho matic jsou ± 1, nabývají vlastní čísla magnetického spinového momentu hodnot $\pm \frac{e\hbar}{2m_e}$; tento výraz označíme jako tzv. Bohrův magneton μ_B:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \doteq 9{,}3 \cdot 10^{-24}\,\mathrm{J\,T^{-1}} = 5{,}8 \cdot 10^{-5}\,\mathrm{eV\,T^{-1}}.$$

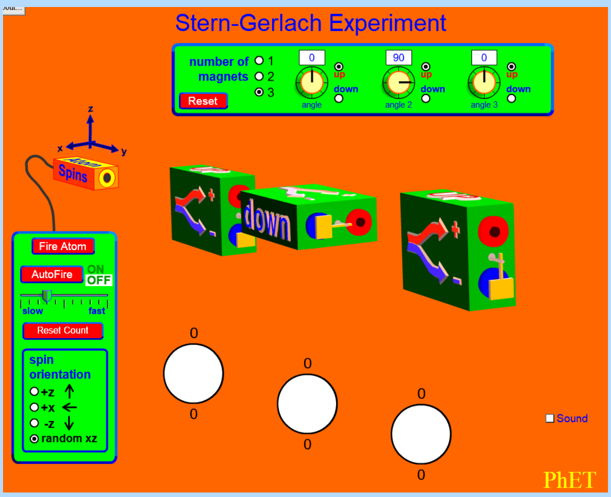
6.1.3 Spin a postulát o měření

Než budete číst tento oddíl, je dobré si připomenout obsah kapitoly 2.3.

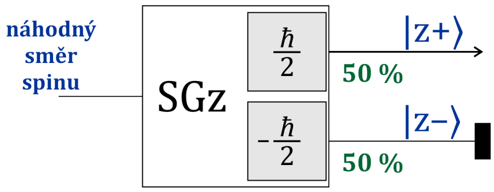
Na měření spinu lze velmi pěkně ilustrovat, jak funguje postulát o měření v kvantové mechanice, protože skalární součin pro vektory se počítá pohodlněji než pro funkce. Veškeré úvahy i úlohy v tomto oddíle si můžete modelovat i pomocí apletu
https://phet.colorado.edu/sims/stern-gerlach/stern-gerlach_en.html,
se kterým jste se již seznámili v úkolu 6.2.

Úkol 6.6 Vraťte se k úkolu 2, připomeňte si získané výsledky a interpretujte je pomocí postulátu o měření.

Zdroj záření nastavte na náhodný směr v rovině xz. Použijte v apletu tři magnety – první nastavte do směru z (úhel 0°), druhý do směru x (úhel 90°) a třetí do směru z (úhel 0°). Pozorujte a popište chování částic. Jak je možné, že se ve výsledném svazku znovu objevily částice se záporným průmětem spinu do osy z, když byly za prvním magnetem odfiltrovány?



Pojďme si teď situaci popsanou v úkolu výše propočítat. Pokud do prvního magnetu vstupují atomy s náhodnou orientací spinu, bude za ním stejná pravděpodobnost naměření obou možných hodnot průmětu spinu do osy z. Navíc už budeme znát vektory, které popisují stav atomu v obou případech. Zachyťme si to i graficky:



Nyní určíme pravděpodobnosti naměření obou hodnot průmětu spinu do osy x. Axiom o měření říká, že nejprve musíme stav, který do měření vstupuje, vyjádřit jako lineární kombinaci vlastních funkcí operátorů měřené veličiny. Hledáme tedy komplexní konstanty A a B tak, aby platilo:

$$|z+\rangle = A|x+\rangle + B|x-\rangle.$$

Dosadíme tedy vektory

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} + B \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}$$

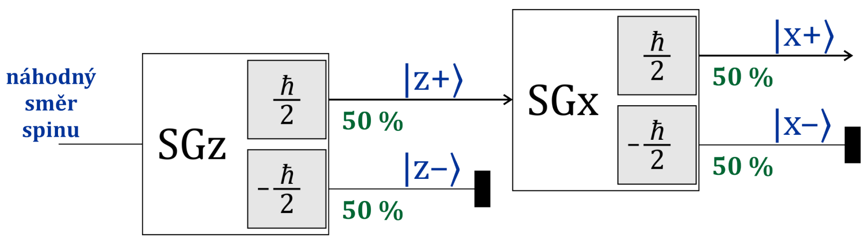
a vidíme, že musí platit

$$A = -B = \frac{\sqrt{2}}{2}.$$

Pravděpodobnosti naměření hodnot jsou rovny druhé mocnině velikosti příslušného koeficientu, tj.

$$P_+ = |A|^2 = \frac{1}{2}, P_- = |B|^2 = \frac{1}{2}.$$

Vidíme, že obě hodnoty mají stejnou pravděpodobnost naměření.



Nyní zbývá určit pravděpodobnosti naměření obou hodnot na třetím magnetu. Nebudeme se snažit určit výsledek nějakou „spekulací“ („když už jsme záporný průmět do osy z odfiltrovali, tak by se neměl objevit“), ale provedeme výpočet striktně podle axiomu o měření.

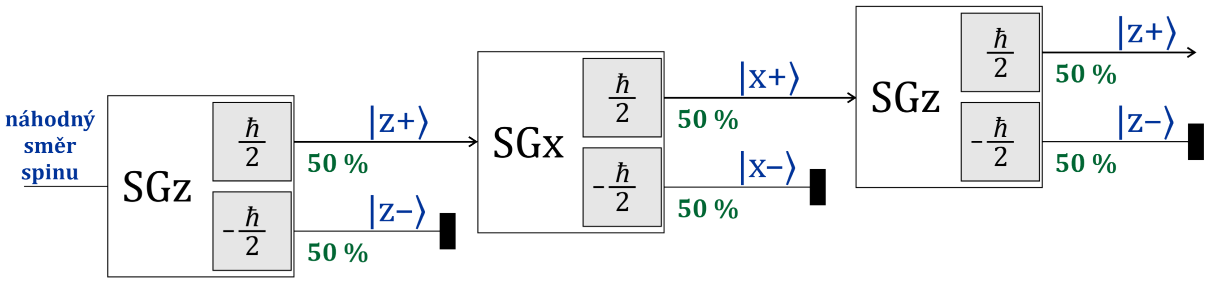
Opět rozložíme vstupní stav na vlastní stavy operátoru měřené veličiny:

$$|x+\rangle = C|z+\rangle + D|z-\rangle \quad \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} = C \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + D \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Odtud dostáváme

$$C = D = \frac{\sqrt{2}}{2} \quad \Rightarrow \quad P_+ = |C|^2 = \frac{1}{2}, P_- = |D|^2 = \frac{1}{2}.$$

Naměření obou možných hodnot průmětu spinu je tedy opět stejně pravděpodobné. Jde o názorný příklad toho, jak změření hodnoty průmětu spinu do osy x druhým magnetem „zničilo informaci“ o průmětu spinu do osy z. (Připomeňme, že příslušné operátory spolu nekomutují.) Právě zachycený výpočet je schématicky zachycen na obrázku:



Výpočtová úloha 6.2
Uvažujme, že jsme změřili průmět spinu do nějakého konkrétního směru v rovině xz a výsledkem měření byla hodnota $+\hbar/2$. Určete, jaké hodnoty a s jakou pravděpodobností naměříme při následném měření průmětu spinu do směru, který také leží v rovině xz, ale je vůči původnímu směru pootočen o úhel α.

Řešení:
Nejprve si uvědomíme, že konkrétní úhly pro měření si můžeme zvolit. Velmi dobře se rozkládají vektory do báze vlastních vektorů $\hat{S}_z$, takže budeme uvažovat, že do experimentu vstupují atomy, u kterých víme, že mají kladný průmět spinu do směru, který je od osy z odkloněn o úhel ϑ, a následné měření provedeme do osy z.

Atomy vstupující do experimentu jsou tedy popsány vektorem $|\vartheta+\rangle$, který jsme určili v předchozí úloze. Teď ho budeme rozkládat do báze $|z+\rangle$ a $|z-\rangle$. Zapíšeme si to rovnicí:

$$|\vartheta+\rangle = A|z+\rangle + B|z-\rangle \quad \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} \cos\frac{\vartheta}{2} \\ \sin\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + B \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

ze které dostáváme

$$A = \cos\frac{\vartheta}{2},\ B = \sin\frac{\vartheta}{2} \quad \Rightarrow \quad P_+ = |A|^2 = \cos^2\frac{\vartheta}{2},\ P_- = |B|^2 = \sin^2\frac{\vartheta}{2}.$$

Správnost výsledku si můžeme ověřit tím, že pokud budou obě měření prováděna ve stejném směru, tj. $\vartheta = 0$, dostaneme $P_+ = 1$ a $P_- = 0$. Dále pokud jsou oba směry na sebe kolmé, tj. $\vartheta = \pi/2$, dostaneme $P_+ = 0{,}5$ a $P_- = 0{,}5$, což také odpovídá předchozím výsledkům.

Úkol 6.7 Ověřte výsledek předchozí výpočtové úlohy pomocí apletu.

6.1.4 Spinová vlnová funkce

V předchozím oddíle jsme vybudovali popis spinového stavu částice se spinem 1/2, vůbec jsme se ale nevěnovali tomu, že taková částice je také popsána vlnovou funkcí s proměnnými $\vec{r}, t$, která nám určuje pravděpodobnost nalezení částice. Pojďme tedy hledat cestu, jak spojit popis spinu částice pomocí dvouprvkových vektorů a popis jejího výskytu pomocí vlnových funkcí.

Spin lze chápat jako další stupeň volnosti v popisu stavu částice a zařadit ho k souřadnicím jako další proměnnou χ do vlnové funkce, dostaneme pak $\Psi = \Psi(\vec{r},\chi,t)$. Tato nová proměnná χ má diskrétní charakter, tj. nabývá pouze dvou hodnot $\pm\hbar/2$, které se nejčastěji odlišují znaky $\uparrow$ a $\downarrow$[5]; nejedná se tedy o takovou proměnnou, na které jsme zvyklí. Funkci $\Psi(\vec{r},\chi,t)$ bychom tedy mohli chápat jako dvě funkce, každou pro jednu možnou hodnotu χ, tj. $\Psi_\uparrow(\vec{r},\chi=\uparrow,t)$ a $\Psi_\downarrow(\vec{r},\chi=\downarrow,t)$. Prostorovou i spinovou část známe, takže je stačí dát dohromady:[6]

$$\Psi_\uparrow(\vec{r},\chi=\uparrow,t) = \psi_\uparrow(\vec{r},t)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},$$

$$\Psi_\downarrow(\vec{r},\chi=\downarrow,t) = \psi_\downarrow(\vec{r},t)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix},$$

což pro obecný stav můžeme psát jako

$$\Psi = c_1\psi_\uparrow(\vec{r},t)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + c_2\psi_\downarrow(\vec{r},t)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}c_1\psi_\uparrow(\vec{r},t)\\c_2\psi_\downarrow(\vec{r},t)\end{pmatrix}. \tag{6.12}$$

[5] Často se pro stručnost též užívají hodnoty $\pm 1/2$ nebo dokonce jen $\pm$. Označení obou hodnot není důležité, ale je třeba si vždy uvědomovat, co přesně se označením myslí.

[6] Uvědomme si, že šipka nahoru $\uparrow$ označuje stav s ostrou hodnotou spinu do vybrané osy, a tou volíme osu z.

Vidíme, že pro popis částice se spinem 1/2 je vhodné si zavézt dvoukomponentní vlnovou funkci, kde horní komponenta obsahuje informaci o tom, kde částici najdeme, pokud má mít průmět spinu kladný, a spodní komponenta stejnou informaci pro průmět spinu záporný. Tato funkce se nazývá **spinová vlnová funkce**, stručněji spinová funkce či **spinor**.

Pokud máte pochybnosti o tom, zda je předchozí postup – tj. složení obou popisů – korektní, můžete ho porovnat s tím, jak jsme „skládali“ jednotlivé části vlnové funkce v případě vícedimenzionálních, ale separabilních problémů (viz kapitola 3.10). Pokud je hamiltonián separabilní, znamená to, že neobsahuje členy, kde by se navzájem „míchaly“ souřadnice.

Případně lze mít zcela pragmatický postoj – uvedený popis se osvědčil, což je podstatné, a výše uvedený postup lze vzít jen jako náznak toho, jak lze na něco takového přijít.

Fyzikální interpretace spinové funkce je – podobně jako u vlnové funkce nezahrnující spin – opět statistická. Veličiny

$$\rho_\uparrow(\vec{r},t) = |\Psi(\vec{r},\uparrow,t)|^2 = |\psi_\uparrow(\vec{r},t)|^2 \quad \text{a} \quad \rho_\downarrow(\vec{r},t) = |\Psi(\vec{r},\downarrow,t)|^2 = |\psi_\downarrow(\vec{r},t)|^2 \tag{6.13}$$

interpretujeme jako hustoty pravděpodobnosti nalezení částice s průmětem spinu $\uparrow$ a $\downarrow$ v místě $\vec{r}$. Nespinová hustota pravděpodobnosti nalezení částice (tj. hustota pravděpodobnosti nalezení částice bez ohledu na průmět spinu) v místě $\vec{r}$ je potom dána vztahem

$$\rho(\vec{r},t) = \rho_\uparrow(\vec{r},t) + \rho_\downarrow(\vec{r},t) = |\psi_\uparrow(\vec{r},t)|^2 + |\psi_\downarrow(\vec{r},t)|^2$$

a počítáme ji zejména v situacích, kdy se nezajímáme o spinové vlastnosti částice, ale jen o její prostorové chování. Naproti tomu v případech, kdy je důležitý průmět spinu částice bez ohledu na jeho polohu, můžeme vyjádřit pravděpodobnosti, že spin částice má průmět $\uparrow$ nebo $\downarrow$, takto:

$$P_\uparrow = \int_{c.p.} |\psi_\uparrow(\vec{r},t)|^2 \, \mathrm{d}V, \quad P_\downarrow = \int_{c.p.} |\psi_\downarrow(\vec{r},t)|^2 \, \mathrm{d}V.$$

Na základě předchozích vztahů můžeme snadno zformulovat i normovací podmínku pro spinovou funkci v podobě

$$\int_{c.p.} \left(|\psi_\uparrow(\vec{r},t)|^2 + |\psi_\downarrow(\vec{r},t)|^2\right) \mathrm{d}V = 1. \tag{6.14}$$

Pokud využijeme zavedený zápis Ψ v podobě jednosloupcové dvouřádkové matice, tj.

$$\Psi(\vec{r},t) \equiv \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\vec{r},t) \\ \psi_\downarrow(\vec{r},t) \end{pmatrix}, \tag{6.15}$$

můžeme normovací podmínku zapsat jako

$$\int_{c.p.} (|\psi_\uparrow(\vec{r},t)|^2 + |\psi_\downarrow(\vec{r},t)|^2) \, \mathrm{d}V = \int_{c.p.} (\psi_\uparrow^*(\vec{r},t)\psi_\uparrow(\vec{r},t) + \psi_\downarrow^*(\vec{r},t)\psi_\downarrow(\vec{r},t)) \, \mathrm{d}V =$$

$$= \int_{c.p.} \Psi^+(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)\,\mathrm{d}V = 1,$$

kde

$$\Psi^+(\vec{r},t) = (\psi_\uparrow^*(\vec{r},t), \psi_\downarrow^*(\vec{r},t))$$

je matice hermitovsky sdružená (transponovaná a komplexně sdružená) s maticí $\Psi(\vec{r},t)$.

To nám ukazuje cestu, jak na prostoru všech spinových vlnových funkcí definovat skalární součin dvou spinových vlnových funkcí Ψ_1 a Ψ_2

$$\langle \Psi_1 \mid \Psi_2 \rangle = \int_{c.p.} \Psi_1^+ \Psi_2 \,\mathrm{d}V$$

nebo podrobněji

$$\langle \Psi_1 \mid \Psi_2 \rangle = \int_{c.p.} (\psi_{1\uparrow}^*(\vec{r},t)\psi_{2\uparrow}(\vec{r},t) + \psi_{1\downarrow}^*(\vec{r},,t)\psi_{2\downarrow}(\vec{r},t))\,\mathrm{d}V = \langle \psi_{1\uparrow} \mid \psi_{2\uparrow} \rangle + \langle \psi_{1\downarrow} \mid \psi_{2\downarrow} \rangle\,.$$

Uvědomte si, že jde o přímočaré rozšíření, integrál zajišťuje „sčítání“ přes všechny možnosti prostorové souřadnice a skutečnost, že sčítáme příspěvky pro spin nahoru a pro spin dolů, má význam sčítání přes všechny možnosti spinové souřadnice.

6.1.5 Pauliho rovnice

Již víme (viz vztah 2.18), že pokud vložíme nabitou částici s nábojem q a hmotností m_c do konzervativního pole s potenciální energií V a zároveň do elektromagnetického pole charakterizovaného vektorovým potenciálem $\vec{A}$ a skalárním potenciálem φ, má hamiltonián této částice tvar

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_c}(\hat{\vec{p}} - q\vec{A})^2 + q\varphi + V. \tag{6.16}$$

Připomeňme, že V, $\vec{A}$ a φ jsou pouze funkce souřadnic a času.

V tomto oddíle se zaměříme na to, jak upravit tento hamiltonián, resp. následně Schrödingerovu rovnici tak, aby zahrnovala také spin. Existence spinu a s ním spojeného spinového magnetického momentu se musí projevit úpravou hamiltoniánu, neboť magnetický moment částice má v magnetickém poli dodatečnou energii závislou na jeho prostorové orientaci; navíc musíme od vlnové funkce přejít ke dvoukomponentní spinové funkci.

Z teorie elektromagnetického pole víme, že energie elementárního magnetického momentu $\vec{M}$ v magnetickém poli s indukcí $\vec{B}$ je $E = -\vec{M} \cdot \vec{B}$; za magnetický moment přitom dosadíme operátor spinového magnetického momentu $\hat{\vec{M}}^{sp} = \frac{q}{m_c}\hat{\vec{S}}$. Příspěvek $\hat{H}_B$ k operátoru celkové energie (k hamiltoniánu) daný tím, že se částice s magnetickým spinovým momentem nachází ve vnějším magnetickém poli, je tedy:

$$\hat{H}_B = -\hat{\vec{M}}^{sp} \cdot \vec{B} = -\frac{q}{m_c}\hat{\vec{S}} \cdot \vec{B}. \tag{6.17}$$

Ještě poznamenejme, že magnetická indukce $\vec{B}$ v této rovnici popisuje stejné vnější magnetické pole jako potenciál $\vec{A}$ a platí $\vec{B} = \mathrm{rot}\vec{A}$.

Kromě vnějšího magnetického pole $\vec{B}$, do kterého jsme nabitou částici vložili a které můžeme měnit, si nabitá částice svým „pohybem“ vytváří magnetické pole, které interaguje s jeho magnetickým momentem. Toto magnetické pole vzniká jako pole buzené „elektrickými proudy způsobenými orbitálním pohybem prostorového záporného náboje“.[7] Energie nabité částice související s vzájemným působením jejího spinového magnetického momentu a interního magnetického pole se nazývá **spin-orbitální interakce** a příslušný člen v hamiltoniánu označíme jako $\hat{H}_{SO}$.

Při zápisu výsledného hamiltoniánu si musíme ještě uvědomit, že zatímco členy odpovídající nabité částici v elektromagnetickém poli (tj. 6.16) jsou skalární, zbývající členy obsahují operátor spinu, tj. jsou maticové. Výsledný, tzv. **Pauliho hamiltonián** pro částici s nábojem q, hmotností m_c a spinem $\pm\hbar/2$ v konzervativním poli s potenciální energií $V(\vec{r})$ a v elektromagnetickém poli s potenciály $\vec{A}$ a φ má tedy tvar

$$\hat{H}^{\mathrm{P}} = \left[\frac{1}{2m_c}(\hat{\vec{p}} - q\vec{A})^2 + q\varphi + V\right]\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{q}{m_c}\hat{\vec{S}} \cdot \vec{B} + \hat{H}_{SO}. \tag{6.18}$$

Úkol 6.8 Napište Pauliho hamiltonián $\hat{H}^{\mathrm{P}}$ speciálně pro elektron a rozepište jeho jednotlivé složky do jedné matice 2×2.

Základní rovnici, z níž se počítají spinové funkce, získáme tak, že do Schrödingerovy rovnice dosadíme Pauliho hamiltonián a dvousložkovou vlnovou funkci, čímž dostaneme tzv. **nestacionární Pauliho rovnici**

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = \hat{H}^{\mathrm{P}}\Psi(\vec{r},t), \tag{6.19}$$

která umožňuje po zadání počáteční podmínky $\Psi = \Psi(\vec{r},t_0)$ spočítat spinovou funkci $\Psi(\vec{r},t > t_0)$ v každém pozdějším časovém okamžiku.

[7] Toto je takové dosti „klasické vyjádření“. Vše lze ale zdůvodnit i mnohem striktněji. Mezi momentem hybnosti částice $\vec{L}$ a jejím magnetickým momentem $\vec{M}$ platí vztah $\vec{M} = \frac{q}{2m_c}\vec{L}$. Díky principu korespondence bude platit stejný vztah i mezi operátory $\hat{\vec{M}}$ a $\hat{\vec{L}}$. Z toho například plyne to, že oba operátory mají stejné vlastní stavy a vlastní čísla $\hat{\vec{M}}$ jsou jen násobkem vlastních čísel $\hat{\vec{L}}$.

V případech, kdy je Pauliho hamiltonián $\hat{H}^{\mathrm{P}}$ nezávislý na čase (tj. kdy na čase nezávisí potenciály vnějších polí $\vec{A}$, φ a V), je možné odvodit stejným způsobem jako v případě Schrödingerovy rovnice **stacionární Pauliho rovnici**

$$\hat{H}^{\mathrm{P}}\Phi(\vec{r}) = E\Phi(\vec{r}). \tag{6.20}$$

Spinovou funkci potom dostaneme jako $\Psi(\vec{r},t) = \Phi(\vec{r})\mathrm{e}^{\frac{Et}{i\hbar}}$.

Úkol 6.9 Jako přípravu na další výpočty ověřte, že pro vektorový potenciál $\vec{A} = (\vec{B} \times \vec{r})/2$ platí $\vec{B} = \mathrm{rot}\vec{A}$, kde $\vec{B}$ je konstantní vektor.

Výpočtová úloha 6.3

Pokud jsou mikroskopické systémy (elektrony, atomy, molekuly) studovány ve vnějším magnetickém poli, které má (díky svému makroskopickému charakteru) nehomogenity měřitelné teprve na vzdálenostech o mnoho řádů převyšujících rozměry systému, můžeme předpokládat, že se systém bude chovat jako v poli homogenním.

Najděte Pauliho hamiltonián elektronu ve slabém homogenním magnetickém poli.

Řešení:

Hamiltonián 6.18 upravíme tak, že dosadíme parametry elektronu (zejména si pohlídáme znaménko náboje, neboť $q = -e$) a potenciály φ a V jsou nulové (uvažujeme pouze magnetické pole). Dále roznásobíme první člen

$$\hat{H}^{\mathrm{P}} = \left[\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m_e} + \frac{e}{2m_e}\left(\vec{A}\cdot\hat{\vec{p}} + \hat{\vec{p}}\cdot\vec{A}\right) + \frac{e^2}{2m_e}\vec{A}^2\right]\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{e}{m_e}\hat{\vec{S}}\cdot\vec{B} + \hat{H}_{SO}.$$

Nyní provedeme tři dílčí úvahy:

- Pro homogenní magnetické pole můžeme potenciál $\vec{A}$ psát jako $\vec{A} = (\vec{B} \times \vec{r})/2$, což splňuje vztah $\vec{B} = \mathrm{rot}\vec{A}$, kde $\vec{B}$ je konstantní vektor. Toto vyjádření $\vec{A}$ dosadíme do výrazů v kulatých závorkách (využijeme cyklickou záměnu ve smíšeném součinu):

$$\vec{A}\cdot\hat{\vec{p}} = \frac{(\vec{B}\times\vec{r})}{2}\cdot\hat{\vec{p}} = \frac{1}{2}(\vec{r}\times\hat{\vec{p}})\cdot\vec{B} = \frac{1}{2}\hat{\vec{L}}\cdot\vec{B},$$

$$\hat{\vec{p}}\cdot\vec{A} = \hat{\vec{p}}\cdot\frac{(\vec{B}\times\vec{r})}{2} = \frac{1}{2}\vec{B}\cdot(\vec{r}\times\hat{\vec{p}}) = \frac{1}{2}\vec{B}\cdot\hat{\vec{L}}.$$

  Protože vektor $\vec{B}$ je v tomto případě konstantní, komutuje s operátorem $\hat{\vec{L}}$ a oba jsou výrazy shodné.

- Vzhledem k tomu, že máme uvažovat slabé pole, zanedbáme člen s $\vec{A}^2$, protože pro slabé pole bude kvadratický člen velmi malý.
- Operátor spinu $\hat{\vec{S}}$ rozepíšeme pomocí vektoru Pauliho matic $\hat{\vec{\sigma}}$.

Těmito úvahami jsme tvar Pauliho hamiltoniánu zjednodušili na

$$\hat{H}^{\mathrm{P}} = \left[\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m_e} + \frac{e}{2m_e}\vec{B}\cdot\hat{\vec{L}}\right]\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{e\hbar}{2m_e}\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{B} + \hat{H}_{SO}. \tag{6.21}$$

Dále rozepíšeme člen odpovídající interakci spinu a vnějšího pole $\vec{B} = (B_x, B_y, B_z)$:

$$\frac{e\hbar}{2m_e}\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{B} = \frac{e\hbar}{2m_e}\begin{pmatrix} B_z & B_x - \mathrm{i}B_y \\ B_x + \mathrm{i}B_y & -B_z \end{pmatrix}.$$

Je vidět, že vhodnou volbou souřadného systému tak, aby magnetické pole mířilo ve směru osy z, tj. $\vec{B} = (0{,}0{,}B)$, můžeme dosáhnout toho, že tento člen bude diagonální. Tím se vztah 6.21 pro magnetické pole směřující do osy z dále zjednodušuje na

$$\hat{H}^{\mathrm{P}} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m_e}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{eB}{2m_e}\left[\hat{L}_z\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right] + \hat{H}_{SO}, \tag{6.22}$$

kde zavádíme tzv. *Larmorovu frekvenci* Ω_L, $\Omega_L = \frac{eB}{2m_e}$.

6.2 Zeemanův jev

Na přelomu 19. a 20. století byl experimentálně prokázán vliv slabého vnějšího magnetického pole na emisní spektra atomů – spektroskopická pozorování ukázala, že pole způsobuje rozštěpení původně jednoduchých spektrálních čar na několik velmi blízkých čar. Poprvé pozoroval tento jev roku 1896 holandský fyzik Pieter Zeeman, o rok později učinil další významná měření irský vědec Thomas Preston. Ukázalo se ovšem, že ačkoliv se oba pánové věnovali vlivu magnetického pole na spektrální čáry atomu, objevili dva různé efekty s principiálně odlišným vysvětlením. V následujícím textu zmíníme rozdílnost těchto efektů a dále se budeme podrobněji věnovat jevu objevenému Pieterem Zeemanem, který označujeme jako tzv. **normální Zeemanův jev**.

Pro naše úvahy využijeme výsledky, které jsme získali ve výpočtové úloze 6.3, a to konkrétně Pauliho hamiltonián elektronu ve slabém homogenním magnetickém poli $\vec{B}$ mířícím do osy z 6.22:

$$\hat{H}^{\mathrm{P}} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m_e}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \Omega_L\left[\hat{L}_z\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right] + \hat{H}_{SO}.$$

Tento vztah nyní upravíme tak, aby popisoval naši situaci:

1. Na rozdíl od výpočtové úlohy nám nyní nejde o chování osamoceného elektronu, ale elektronu v atomu. Zde je ale elektron vystaven coulombickému působení jádra, a proto do hamiltoniánu musíme znovu zahrnout elektrostatickou energii elektronu v poli jádra $q\varphi = -e\varphi$, kterou jsme při řešení úlohy ze vztahu 6.18 vyškrtli.

2. Budeme předpokládat, že naše vnější magnetické pole je sice slabé, ale na druhou stranu dostatečně silné na to, abychom mohli zanedbat spin-orbitální interakci (tedy člen $\hat{H}_{SO}$) ve srovnání s energií, kterou má elektron v našem vnějším poli.

Právě druhý předpoklad je zásadní pro pozorování normálního Zeemanova jevu. Pokud je vnější pole tak slabé, že spin-orbitální interakci zanedbat nelze, dochází k tzv. anomálnímu Zeemanovu jevu, a právě tento jev (který je paradoxně častější než normální Zeemanův jev) pozoroval r. 1897 Thomas Preston.

Tyto dvě úpravy nám dávají hamiltonián ve tvaru:

$$\hat{H}^{\mathrm{P}} = \left[\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m_e} - e\varphi\right]\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \Omega_L\left[\hat{L}_z\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right],$$

kde část v první hranaté závorce důvěrně známe – jde o hamiltonián (označme ho $\hat{H}^{\mathrm{at}}$) pro záporně nabitý elektron (bez zahrnutí spinu) v atomu „podobném vodíku“, tj. uvažujeme pouze tento jeden elektron v elektrostatickém poli jádra[8]

$$\hat{H}^{\mathrm{P}} = \hat{H}^{\mathrm{at}}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \Omega_L\left[\hat{L}_z\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right].$$

Řešením Schrödingerovy rovnice takového elektronu jsme se zabývali v kapitole 5. Stacionární stavy elektronu jsme popsali vlnovou funkcí ψ_{nlm} s kvantovými čísly n, l a m. Jednalo se o společné vlastní stavy operátorů $\hat{H}^{\mathrm{at}}$, $\hat{\vec{L}}^2$ a $\hat{L}_z$. Teď budeme chtít tato řešení rozšířit ještě o spinovou část. Přidáme tedy další, tzv. spinové kvantové číslo m_s a doplníme ho i

[8] Buď to znamená, že je daný atom ionizovaný do takové míry, že v jeho obale zbyl jediný elektron. Druhým možným výkladem uvedeného vztahu je, že popisuje elektron v obalu za předpokladu, že zanedbáváme vzájemné působení elektronů, pak popisujeme každý elektron zvlášť a lze psát hamiltonián jen pro jeden z nich. K tomuto zanedbání nás může opravňovat fakt, že náboj jádra je větší než náboj elektronů. Na druhou stranu je to velké zjednodušení, kterého se na tomto místě dopouštíme.

jako index do vlnové funkce ψ_{nlmm_s}. Budeme tedy vlastně hledat takové stacionární stavy, aby kromě výše uvedených operátorů byly i vlastními stavy operátoru $\hat{S}_z$ průmětu spinu do osy z. To je možné, protože operátor $\hat{S}_z$ působí jenom na spinovou část vlnové funkce a operátory $\hat{H}^{\mathrm{at}}$, $\hat{\vec{L}}^2$ a $\hat{L}_z$ jen na prostorovou část vlnové funkce. Určitě tedy $\hat{S}_z$ s nimi komutuje. Skutečnost, že se jedná o vlastní funkce uvedených operátorů můžeme matematicky zapsat pomocí rovností

$$\begin{aligned} \hat{H}^{\mathrm{at}}\,\psi_{nlmm_s} &= E_{nl}^{\mathrm{at}}\,\psi_{nlmm_s}, \\ \hat{\vec{L}}^2\,\psi_{nlmm_s} &= \hbar^2 l(l+1)\,\psi_{nlmm_s}, \\ \hat{L}_z\,\psi_{nlmm_s} &= \hbar m\,\psi_{nlmm_s}, \\ \hat{S}_z\,\psi_{nlmm_s} &= \hbar m_s\,\psi_{nlmm_s}. \end{aligned} \tag{6.23}$$

Povšimněte si, že v kapitole 5 jsme odvodili, že pro vodík závisí energie (vlastní čísla hamiltoniánu $\hat{H}^{\mathrm{at}}$) pouze na hlavním kvantovém čísle n, ale zde připouštíme závislost energie i na na vedlejším kvantovém čísle l. To odpovídá výsledkům měření a souvisí to s tím, že vzájemné působení elektronů není až tak zanedbatelné, jak jsme se tvářili při sestavování hamiltoniánu.

Jak jsme zjistili v předchozí části 6.1.4 pro elektron spinové kvantové číslo nabývá pouze dvou hodnot $m_s = \pm\frac{1}{2}$ a spinovou vlnovou funkci můžeme psát jako dvoukomponentní vektor, kde první složkou je vlnová funkce v proměnných $\vec{r}$ a t pro průmět spinu $\hbar/2$ (symbolicky $\uparrow$) a druhou složkou vlnová funkce v proměnných $\vec{r}$ a t pro průmět spinu $-\hbar/2$ (symbolicky $\downarrow$):

$$\psi_{nlmm_s} = \begin{pmatrix} \psi_{nlm\uparrow} \\ \psi_{nlm\downarrow} \end{pmatrix}.$$

Funkce ψ_{nlmm_s} splňuje stacionární Schrödingerovu rovnici, což ověříme dosazením a uvážením působení jednotlivých operátorů na ψ_{nlmm_s} 6.23

$$\hat{H}^{\mathrm{P}}\psi_{nlmm_s} = \left[E_{nl}^{\mathrm{at}} + \Omega_L\hbar(m+2m_s)\right]\psi_{nlmm_s}.$$

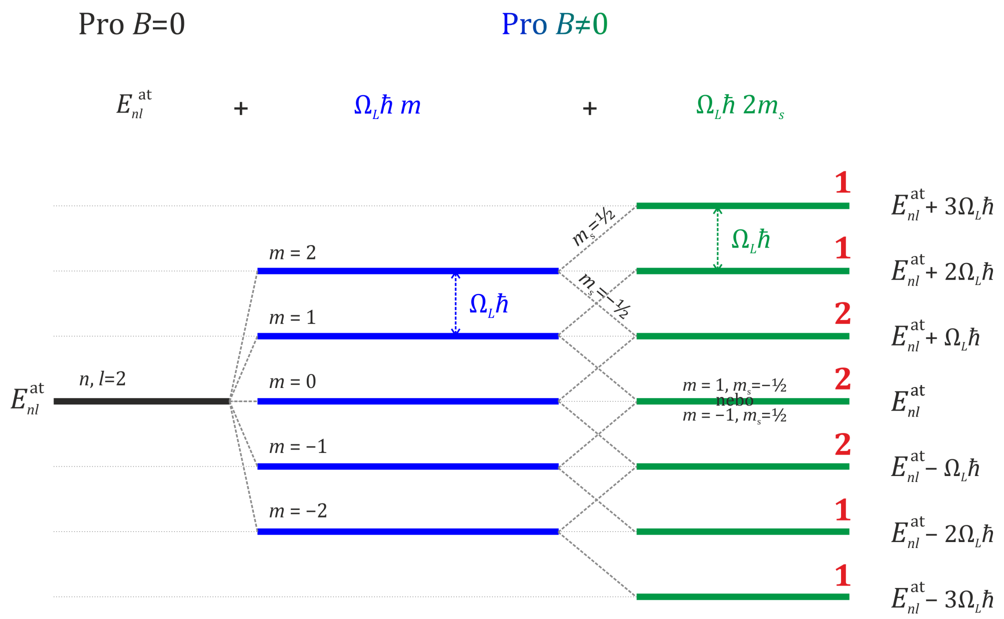
Tuto maticovou rovnici můžeme přepsat jako dvě obyčejné rovnice

$$\hat{H}^{\mathrm{P}}\psi_{nlm\uparrow} = \left[\hat{H}^{\mathrm{at}} + \Omega_L\left(\hat{L}_z + \hbar\right)\right]\psi_{nlm\uparrow} = \left[E_{nl}^{\mathrm{at}} + \Omega_L\left(\hbar m + \hbar\right)\right]\psi_{nlm\uparrow},$$

$$\hat{H}^{\mathrm{P}}\psi_{nlm\downarrow} = \left[\hat{H}^{\mathrm{at}} + \Omega_L\left(\hat{L}_z - \hbar\right)\right]\psi_{nlm\downarrow} = \left[E_{nl}^{\mathrm{at}} + \Omega_L\left(\hbar m - \hbar\right)\right]\psi_{nlm\downarrow}.$$

Vidíme, že vlastní čísla Pauliho hamiltoniánu, tj. hodnoty energie elektronu, které můžeme naměřit, jsou v tomto případě rovny

$$E_{nlmm_s} = E_{nl}^{\mathrm{at}} + \Omega_L\hbar(m+2m_s).$$



Obrázek 6.1: Naznačení štěpení hladin pro $l = 2$. Červená čísla označují stupeň degenerace výsledných hladin.

Zatímco bez přítomnosti magnetického pole byla tedy vlastní čísla energie E_{nl}^{at} degenerovaná vůči m a m_s (závisela pouze na n a l), dostáváme po „zapnutí“ magnetického pole i pro pevně dané n a l více možných naměřitelných energií v závislosti na m a m_s – původně jedna energetická hladina se rozštěpí na více hladin. Vidíme, že „vzdálenosti“ nově vzniklých energií od sebe i od původní energie je přímo úměrná $\Omega_L = \frac{eB}{2m_e}$, tedy je přímo úměrná velikosti vnějšího magnetického pole B.

Výše popsaný vliv magnetického pole na hodnotu energie názorně ukažme na obr. 6.1. Zde jsme pro nějaké $n > 2$ zvolili $l = 2$ a uvažujeme možná rozštěpení původního hladiny podle hodnoty m ($2l$+1 možných hodnot) a m_s (dvě různé hodnoty). Členy úměrné magnetickému poli přičítáme k základní energii postupně, aby bylo vidět, že některé hodnoty výsledné energie mohou vzniknout dvěma různými kombinacemi hodnot kvantových čísel m a m_s. Některé výsledné energie zůstávají stále degenerované – nedošlo tedy k úplnému sejmutí degenerace. Ve vzorovém příkladu pro $l = 2$ na obrázku 6.1 došlo k rozštěpení původních hladiny na sedm hladin nových, přičemž tři z nich zůstaly degenerované.

Rozdíl energií dvou sousedních nově vzniklých energetických hladin je roven $\Omega_L \hbar$. Dosaďme hodnoty konstant

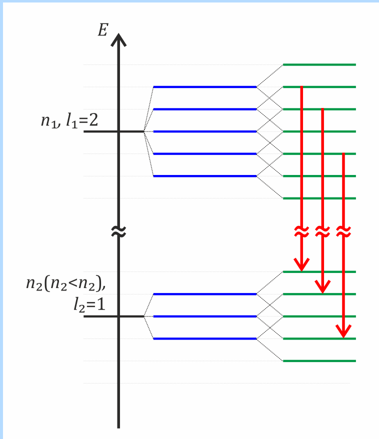
$$\Omega_L \hbar = \frac{e\hbar}{2m_e} B \approx \left(10^{-24}\,\mathrm{J\,T^{-1}}\right) B \approx \left(10^{-5}\,\mathrm{eV\,T^{-1}}\right) B.$$

Povolené energie elektronu v atomech mají hodnoty řádově elektronvolty či jejich násobky, což odpovídá i energiím fotonů viditelného světla, které ve spektru pozorujeme. Magnetické pole B má být relativně slabé, takže z předchozího výpočtu je patrné, že vzdálenosti nově vzniklých hladin jsou o několik řádu menší v porovnání se vzdálenostmi původních nerozštěpených hladin. Ve spektru tedy pozorujeme opravdu velmi blízké čáry a nelze očekávat, že by vlivem magnetického pole došlo k „pomíchání“ hladin s různým l.

Úkol 6.10 Na kolik hladin se rozštěpí hladina s $l = 3$? Nakreslete obrázek. Dále dokažte, že počet výsledných hladin je obecně roven $2l + 3$.

Úkol 6.11

Na obrázku jsou červenými šipkami zachyceny tři možné přeskoky mezi dvěma energetickými hladinami v atomu. Rozmyslete si, že všechny odpovídají stejné čáře ve spektru.



Poznámka: Všimněte si, že na obrázku je přerušena svislá energetická osa. To odráží již dříve spočítanou skutečnost, že rozdíly energií hladin, které před zapnutím magnetického pole splývaly v jednu hladinu, jsou o několik řádů menší, než vzdálenost obou systému hladin (či původně nerozštěpených hladin).

Pojďme se zamyslet, jak se rozštěpení jednotlivých energetických hladin v atomu projeví v jeho spektru. Vlnová délka spektrální čáry je dána přeskokem mezi dvěma hladinami, jinými slovy energie vyzářeného fotonu je rovna rozdílu energií elektronu před a po vyzáření. Zapnutí magnetického pole se projeví rozštěpením energetických hladin, takže se zdá, že tak získám docela velký počet možnosti.

Elektron ovšem nemůže přeskočit mezi libovolnými dvěma hladinami, ale musí dodržovat tzv. *výběrová pravidla*[9]

- Hlavní kvantové číslo se může změnit libovolně. Při spektroskopických měření se musí zmenšit alespoň o jedničku, protože energie příslušející stejnému n jsou tak blízké, že bychom tyto fotony stejně ve spektru nezachytili.

[9] Tato pravidla byla původně odvozena z experimentu lze precizně odvodit. a zjednodušeně řečeno jsou důsledkem zákona zachování momentu hybnosti. Např. foton, který „odlétá“ má spin (vnitřní moment hybnosti) roven jedné, proto se kvantové číslo příslušející hodnotě celkového momentu hybnosti l mění právě o jedničku.

- Vedlejší kvantové číslo se musí změnit o jedna, tj. $\Delta l = \pm 1$.
- Magnetické kvantové číslo m se při přeskoku změní nejvýše o 1, tj. $\Delta m = -1, 0, 1$.
- Průmět spinu elektronu se nezmění, tj. $\Delta m_s = 0$.

Pokud se tedy podíváme na energii ΔE příslušející přeskoku mezi dvěma hladinami E_i a E_f po zapnutí magnetického pole, dostáváme:

$$\Delta E = E_i - E_f = E^{\mathrm{at}}_{n_1 l_1} - E^{\mathrm{at}}_{n_2 l_2} + \Omega_L \hbar (m_1 - m_2 + 2m_{s1} - 2m_{s2}] = \Delta E^{\mathrm{at}} + \Omega_L \hbar \Delta m.$$

Symbolem ΔE^{at} jsme označili rozdíl energií těchto hladin před zapnutím magnetického pole, tj. původní hodnotu. Protože změna magnetického kvantového čísla Δm může nabývat pouze tří hodnot, rozštěpí se původní spektrální čára na právě tři čáry. Prostřední čára zůstane na stejné místě a po jejích stranách se objeví po jedné další čáře, příslušné fotony mají energie větší/menší o $\Omega_L \hbar$ a tato změna je přímo úměrná velikosti vnějšího magnetického pole.

Poznámka: Jak jsme již zmiňovali, pokud je vnější magnetické pole příliš slabé, takže v porovnání s energií elektronu ve vnějším poli nelze zanedbat spin-orbitální interakci, hovoříme o **anomálním Zeemanově jevu**. Problém je pak matematicky mnohem složitější a rozštěpené hladiny nejsou ekvidistantní a tím i rozštěpení spektrálních čar bohatší. Naopak, pokud by bylo magnetické pole příliš silné, není možné zanedbat kvadratický člen $\frac{e^2}{2m_e}\vec{A}^2 = \frac{e^2}{2m_e}\left(\frac{\vec{B}\times\vec{r}}{2}\right)^2$ (jak jsme to udělali ve vztahu 6.21) a řešení je opět složitější – rozštěpení hladiny již není úměrné velikosti magnetického pole B. Tento efekt se označuje jako **Paschenův-Bachův jev**.

Řešení úkolů z podkapitoly 6

Řešení 6.1 Abychom mohli určit pravděpodobnost naměření hodnoty $\hbar/2$, resp. $-\hbar/2$, musíme zadaný stav rozložit do báze dané vektory $|z+\rangle$ a $|z-\rangle$, což je v tomto případě triviální, neboť zjevně platí:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1+\mathrm{i} \\ 1-\mathrm{i} \end{pmatrix} = (1+\mathrm{i})\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + (1-\mathrm{i})\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = (1+\mathrm{i})|z+\rangle + (1-\mathrm{i})|z-\rangle.$$

Druhou možností je využít obecný vztah pro výpočet koeficientu c_k rozkladu do vlastních funkci 2.46

$$c_+ = \langle z + \mid \psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1+\mathrm{i} \\ 1-\mathrm{i} \end{pmatrix} = 1+\mathrm{i},$$

$$c_- = \langle z - \mid \psi\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1+\mathrm{i} \\ 1-\mathrm{i} \end{pmatrix} = 1-\mathrm{i}.$$

Odtud je zřejmě pravděpodobnost naměření průměru spinu $\hbar/2$ rovna

$$p\left(\frac{\hbar}{2}\right) = \frac{|c_+|^2}{|c_+|^2+|c_-|^2} = \frac{|1+\mathrm{i}|^2}{|1+\mathrm{i}|^2+|1-\mathrm{i}|^2} = \frac{1}{2}$$

a pravděpodobnost naměření průměru spinu $-\hbar/2$ rovna

$$p\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = \frac{|c_-|^2}{|c_+|^2+|c_-|^2} = \frac{|1-\mathrm{i}|^2}{|1+\mathrm{i}|^2+|1-\mathrm{i}|^2} = \frac{1}{2}.$$

Řešení 6.3 Budeme postupovat striktně matematicky na základě definice vlastních čísel a vlastních vektorů, které nám poskytují následující dvě maticové rovnice:

$$\hat{S}_x|x+\rangle = \frac{\hbar}{2}|x+\rangle,$$

$$\hat{S}_x|x-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|x-\rangle.$$

Po dosazení dostáváme:

$$\begin{pmatrix} a & b+\mathrm{i}c \\ b-\mathrm{i}c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} a & b+\mathrm{i}c \\ b-\mathrm{i}c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}.$$

Zjednodušením této soustavy přejdeme ke čtyřem jednoduchým lineárním rovnicím

$$\begin{array}{rr} a+b+\mathrm{i}c=\frac{\hbar}{2} & b-\mathrm{i}c+d=\frac{\hbar}{2} \\ -a+b+\mathrm{i}c=\frac{\hbar}{2} & -b+\mathrm{i}c+d=-\frac{\hbar}{2}, \end{array}$$

které dávají řešení $a=c=d=0, b=\frac{\hbar}{2}$. Získáváme tak matici

$$\hat{S}_x=\begin{pmatrix} 0 & b \\ b & 0 \end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Řešení 6.4 Hledané vlastní číslo označíme λ, složky vlastního vektoru pak $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$. Řešíme rovnici:

$$\hat{S}_y\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}.$$

Dosadíme vyjádření operátoru $\hat{S}_y$ a upravíme:

$$\left(\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}-\lambda\right)\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Netriviální řešení této soustavy dostáváme pro:

$$\det\begin{pmatrix} -\lambda & -\mathrm{i}\frac{\hbar}{2} \\ \mathrm{i}\frac{\hbar}{2} & -\lambda \end{pmatrix}=\lambda^2-\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2=0 \Rightarrow \lambda=\pm\frac{\hbar}{2}.$$

Tento výsledek jsme mohli snadno očekávat – průmět spinu do libovolného směru nabývá těchto dvou hodnot. Když nyní dosadíme $\lambda=\frac{\hbar}{2}$, resp. $\lambda=-\frac{\hbar}{2}$ do matice soustavy, získáme snadným výpočtem vlastní vektory:

$$\text{Pro}\,\lambda=\frac{\hbar}{2}: \qquad \begin{pmatrix} -1 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow a=1, b=\mathrm{i} \Rightarrow |y+\rangle=\begin{pmatrix} 1 \\ \mathrm{i} \end{pmatrix},$$

$$\text{Pro}\,\lambda=-\frac{\hbar}{2}: \qquad \begin{pmatrix} 1 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow a=\mathrm{i}, b=1 \Rightarrow |y-\rangle=\begin{pmatrix} \mathrm{i} \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Pokud mezi sebou budeme získané vektory skalárně násobit, je třeba první z nich převést na řádek a komplexně jej sdružit – výsledný skalární součin je pak nulový a ukazuje kolmost vektorů.

Řešení 6.5 Operátor kvadrátu velikosti momentu hybnosti dostaneme jednoduchým dosazením do rovnice $\hat{S}^2=\hat{S}_x^2+\hat{S}_y^2+\hat{S}_z^2$:

$$\hat{S}^2=\frac{\hbar^2}{4}\left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^2+\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}^2+\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}^2\right)=\frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Vidíme, že operátor $\hat{S}^2$ je až na konstantu vyjádřen jednotkovou maticí, a má tedy dvakrát degenerované vlastní číslo $\frac{3\hbar^2}{4}$, přičemž všechny vektory jsou vlastními vektory tohoto operátoru.

Řešení 6.8 Pro elektron je $q = -e$, $m_c = m_e$ a $\hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}$, takže Pauliho hamiltonián dostává tvar

$$\hat{H}^{\mathrm{P}} = \left[\frac{1}{2m_e}(\hat{\vec{p}} + e\vec{A})^2 - e\varphi + V\right]\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{e\hbar}{2m_e}\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{B} + \hat{H}_{SO},$$

kde $\frac{e\hbar}{2m_e}$ jsme zavedli jako tzv. Bohrův magneton μ_B. Pro ověření srozumitelnosti tohoto vztahu upravený Pauliho hamiltonián ještě přepišme v podobě jedné matice 2×2:

$$\hat{H}^{\mathrm{P}} = \begin{pmatrix} [\dots] + \mu_B B_z + (\hat{H}_{SO})_{11} & \mu_B(B_x - iB_y) + (\hat{H}_{SO})_{12} \\ \mu_B(B_x + iB_y) + (\hat{H}_{SO})_{21} & [\dots] - \mu_B B_z + (\hat{H}_{SO})_{22} \end{pmatrix},$$

kde $[\dots] = \left[\frac{1}{2m_e}(\hat{\vec{p}} + e\vec{A})^2 - e\varphi + V\right]$ a $(\hat{H}_{SO})_{kl}$ jsou složky matice popisující spin-orbitální vazbu.