Cvičení KT1 22. 11. 2022 (8. cvičení)

Témata:

- skládání dvou spinů 1/2
- skládání momentů hybnosti $l = 1$ a $s = 1/2$
- direktní (tenzorový) součin, působení operátorů na složený stav

Skládání momentů hybnosti

Na posledních pár cvičeních jsme se věnovali atomům vodíku a sodíku a jejich spektrální struktuře. Setkávali jsme se různými momenty hybnosti: orbitálním $\hat{\vec{L}}$, spinem elektronu $\hat{\vec{S}}$, spinem jádra $\hat{\vec{I}}$. Bez hlubšího vysvětlení jsme občas pracovali se tzv. složenými momenty hybnosti $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$ a $\hat{\vec{F}} = \hat{\vec{I}} + \hat{\vec{J}}$. V tomto cvičení se zaměříme právě na toto skládání momentů hybnosti.
(Můžete také kouknout na http://quantum.karlov.mff.cuni.cz/∼uhlirovat/UDKM/UDKM2022_cv3.pdf.)

Skládání dvou spinů 1/2

V DÚ bylo za úkol se podívat na složení dvou spinů 1/2 a stavy získané při výpočtu hyperjemného štěpení pro základní stav atomu vodíku charakterizovat pomocí tohoto celkového spinu a kvantových čísel S a M_S.

(I) Co vám vyšlo v domácím úkolu?

Na minulém cvičení jsme uvažovali systém skládájící se ze dvou částic se spinem 1/2. Každá z těchto části se může nacházet ve stavu $|\uparrow\rangle$ nebo $|\downarrow\rangle$, takže celý systém se může nacházet v jednom ze čtyř stavů

$$|\uparrow\uparrow\rangle \equiv |\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 \,, \quad |\uparrow\downarrow\rangle \equiv |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 \,, \quad |\downarrow\uparrow\rangle \equiv |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 \,, \quad |\downarrow\downarrow\rangle \equiv |\downarrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 \,, \tag{1}$$

resp. jejich lineárních kombinací (které jsem získali)

$$|\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 \,, \quad \tfrac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 + |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2\right) \,, \quad \tfrac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2\right) \,, \quad |\downarrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 \,. \tag{2}$$

Pro popis celkového, složeného, stavu je tedy výhodné zavést operátor celkové spinu jako součet jednočásticových operátorů spinu

$$\hat{\vec{S}} = \hat{\vec{S}}_1 + \hat{\vec{S}}_2 = \hat{\vec{S}}_1 \otimes \hat{1}_2 + \hat{1}_1 \otimes \hat{\vec{S}}_2 \,. \tag{3}$$

Každý z těchto jednočásticových operátorů spinu však působí jen v daném prostoru stavů, tj. $\hat{\vec{S}}_1$ působí jen na stav první částice a $\hat{\vec{S}}_2$ jen na stav té druhé. Matematicky správně (druhý řádek) se to vyjádří pomocí tenzorového součinu a jednotkového operátoru (jednotkový operátor nechá daný stav tak, jak je). Tenzorový součin $\hat{\vec{S}}_1 \otimes \hat{1}_2$ tedy znamená, že na první částici působí operátor $\hat{\vec{S}}_1$ a na druhou jednotkový operátor $\hat{1}_2$ a podobně pro druhý člen. V praxi se však často používá (i když poněkud matematicky nepřesný) zápis bez jednotkových operátorů (první řádek).

Pro operátor $\hat{S}_z = \hat{S}_{1z} \otimes \hat{1}_2 + \hat{1}_1 \otimes \hat{S}_{2z}$ tedy dostaneme:

$$\begin{aligned}
\hat{S}_z |\uparrow\uparrow\rangle &= \hat{S}_{1z} |\uparrow\rangle_1 \otimes \hat{1}_2 |\uparrow\rangle_2 + \hat{1}_1 |\uparrow\rangle_1 \otimes \hat{S}_{2z} |\uparrow\rangle_2 = && (4)\\
&= \frac{1}{2} |\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2 + |\uparrow\rangle_1 \otimes \frac{1}{2} |\uparrow\rangle_2 = && (5)\\
&= 1 |\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2 = 1 |\uparrow\uparrow\rangle \,. && (6)
\end{aligned}$$

Vidíme tedy, že stav $|\uparrow\uparrow\rangle$ je vlastním stavem operátoru $\hat{S}_z$ s vlastním číslem 1.

(II) Proveďte podobný výpočet pro zbylé tři stavy (2). Mělo by vám vyjít

$$\hat{S}_z \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right) = 0 \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right) \,, \tag{7}$$

$$\hat{S}_z \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right) = 0 \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right) \,, \tag{8}$$

$$\hat{S}_z |\downarrow\downarrow\rangle = -1 |\downarrow\downarrow\rangle \,. \tag{9}$$

Při zavádění operátoru celkového spinu $\hat{S}^2$ musíme být o něco opatrnější

$$\hat{S}^2 = \left(\hat{\vec{S}}_1 + \hat{\vec{S}}_2\right)^2 = \hat{S}_1^2 + 2\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2 + \hat{S}_2^2 \,, \tag{10}$$

kde jsme pro jednoduchost vypustili jednotkové operátory. Působení operátorů $\hat{S}_1^2$ a $\hat{S}_2^2$ na stavy $|\uparrow\rangle$ a $|\downarrow\rangle$ známe. Nevíme však, jak působí $\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2$. Pro součin dvou vektorových operátorů $\hat{\vec{A}}$ a $\hat{\vec{B}}$ obecně platí

$$\hat{\vec{A}} \cdot \hat{\vec{B}} = \hat{A}_1\hat{B}_1 + \hat{A}_2\hat{B}_2 + \hat{A}_3\hat{B}_3 = \frac{1}{2}\left(\hat{A}_+\hat{B}_- + \hat{A}_-\hat{B}_+\right) + \hat{A}_3\hat{B}_3\,, \tag{11}$$

kde $\hat{A}_\pm = \hat{A}_1 \pm i\hat{A}_2$ a podobně pro $\hat{\vec{B}}$.

(III) Dokažte tuto rovnost (dosazením).

(IV) Pro operátor spinu tedy dostaneme

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + \left(\hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-} + \hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+}\right) + 2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}\,. \tag{12}$$

Operátor $\hat{S}^2$ tedy působí na stav $|\uparrow\uparrow\rangle$:

$$\begin{aligned}\hat{S}^2\,|\uparrow\uparrow\rangle = {} & \hat{S}_1^2\,|\uparrow\rangle_1\,|\uparrow\rangle_2 + |\uparrow\rangle_1\,\hat{S}_2^2\,|\uparrow\rangle_2 \\ & + \left(\hat{S}_{1+}\,|\uparrow\rangle_1\,\hat{S}_{2-}\,|\uparrow\rangle_2 + \hat{S}_{1-}\,|\uparrow\rangle_1\,\hat{S}_{2+}\,|\uparrow\rangle_2\right) \\ & + 2\hat{S}_{1z}\,|\uparrow\rangle_1\,\hat{S}_{2z}\,|\uparrow\rangle_2 = \\ = {} & \frac{3}{4}\,|\uparrow\rangle_1\,|\uparrow\rangle_2 + |\uparrow\rangle_1\,\frac{3}{4}\,|\uparrow\rangle_2 + (0+0) + 2\cdot\frac{1}{2}\,|\uparrow\rangle_1\,\frac{1}{2}\,|\uparrow\rangle_2 = \\ = {} & 2\,|\uparrow\uparrow\rangle\ .\end{aligned} \tag{13}$$

Stav $|\uparrow\uparrow\rangle$ je tedy vlastním stavem operátoru $\hat{S}^2$ s vlastním číslem $S = 1$ (protože $S(S+1) = 1(1+1) = 2$).

(V) Spočtěte, jak působí operátor $\hat{S}^2$ na zbylé stavy (2). Mělo by vyjít

$$\hat{S}^2\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right) = 2\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right)\ , \tag{14}$$

$$\hat{S}^2\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right) = 0\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right)\ , \tag{15}$$

$$\hat{S}^2\,|\downarrow\downarrow\rangle = 2\,|\downarrow\downarrow\rangle\ . \tag{16}$$

Vidíme tedy, že stavy (2) můžeme popsat pomocí kvantových čísel S a M_S náležícím operátoru celkového spinu $\hat{\vec{S}}$. Tři z nich odpovídají systému se spinem $S = 1$ a třemi projekcemi $M_S = -1, 0, +1$ (jak má být)

$$|1,+1\rangle = |\uparrow\rangle_1\,|\uparrow\rangle_2\ , \tag{17}$$

$$|1,0\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle_1\,|\downarrow\rangle_2 + |\downarrow\rangle_1\,|\uparrow\rangle_2\right)\ , \tag{18}$$

$$|1,-1\rangle = |\downarrow\rangle_1\,|\downarrow\rangle_2 \tag{19}$$

a jeden z nich odpovídá systému se spinem $S = 0$ a projekcí $M_S = 0$ (jak má být)

$$|0,0\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle_1\,|\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1\,|\uparrow\rangle_2\right)\ . \tag{20}$$

Skládání momentů hybnosti j_1 a j_2 obecně

V knize doc. Zamastila je sepsaný obecný návod, jak složit dva momenty hybnosti. Podívejme se na tento alternativní "kuchařkový" postup pro skládání dvou momentů hybnosti j_1 a j_2.

Zavedeme celkový moment hybnosti $\hat{\vec{J}}$, který vznikne složením dvou momentů hybnosti $\hat{\vec{J}}_1$ a $\hat{\vec{J}}_2$

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{J}}_1 + \hat{\vec{J}}_2\,. \tag{21}$$

(I) Snadno se můžeme přesvědčit, že $\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2$ tvoří množinu komutujících operátorů. Proč je to důležité?

Naším cílem je najít takové lineární kombinace stavů $|j_1, m_1\rangle$ a $|j_2, m_2\rangle$, aby tyto lineární kombinace, označme je $|j, m(j_1, j_2)\rangle$, byly vlastními stavy operátorů $\hat{J}^2$, $\hat{J}_z$, $\hat{J}_1^2$ a $\hat{J}_2^2$ současně, tj. aby

$$\hat{J}^2\,|j, m(j_1,j_2)\rangle = j(j+1)\,|j, m(j_1,j_2)\rangle\ , \tag{22}$$

$$\hat{J}_z\,|j, m(j_1,j_2)\rangle = m\,|j, m(j_1,j_2)\rangle\ , \tag{23}$$

$$\hat{J}^2 1\,|j, m(j_1,j_2)\rangle = j_1(j_1+1)\,|j, m(j_1,j_2)\rangle\ , \tag{24}$$

$$\hat{J}^2 2\,|j, m(j_1,j_2)\rangle = j_2(j_2+1)\,|j, m(j_1,j_2)\rangle\ . \tag{25}$$

Hledáme tedy (normalizované) rozvojové koeficienty c_i

$$|j, m(j_1, j_2)\rangle = \sum_i c_i |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \ . \tag{26}$$

Tyto koeficienty se nazývají Clebschovy-Gordonovy a existuje obecný předpis, jak je spočítat. Více se o nich dočtete v knize doc. Zamastila, kap. 4.2 Skládání momentů hybnosti. Tam je také ukázano (uvidíte na přednášce), že obecně j nabývá hodnot $|j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, ..., j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2$ a že složením dvou stavů s projekcemi m_{j1} a m_{j2} získáme celkový stav s projekcí momentu hybnosti $m = m_{j1} + m_{j2}$.

My se zde spokojíme se znalostí, že pro dané j, m, j_1 a j_2 získáme použitím rovnice

$$\begin{aligned} 0 =& [j_1(j_1+1) + j_2(j_2+1) - j(j+1) + 2i(m-i)]c_i + \\ &+ \alpha_+(j_1, i-1)\alpha_-(j_2, m-i+1)c_{i-1} + \\ &+ \alpha_-(j_1, i+1)\alpha_+(j_2, m-i-1)c_{i+1} \, , \end{aligned} \tag{27}$$

kde

$$\alpha_\pm(j, m) = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \, , \tag{28}$$

a normalizační podmínky $\sum_i |c_i|^2 = 1$ soustavu rovnic pro koeficienty c_i. Jejím vyřešením získáme získáme kýžené lineární kombinace stavů $|j_1, m_1\rangle$ a $|j_2, m_2\rangle$.

Postup lze sepsat do pár kroků:

1. Najdi j_{min} a j_{max}.
2. Napiš možné stavy pro možná m.
3. Napiš triviální kombinace.
4. Urči i a rovnice pro zbylá m.
5. Vyřeš soustavy rovnic pro c_i.
6. Napiš získáné lineární kombinace.

Prakticky si tento postup ukážeme na $j_1 = 1/2$ a $j_2 = 1/2$, tj. měli bychom dostat stejný výsledek jako v první části cvičení.

(II) Proveďte.

Vidíte souvislost tohoto obecného postupu podle "receptu" s "intuitivním" postupem výše?

Elektron v p-stavu (skládání $s = 1/2$ a $l = 1$)

V třetí části dnešního cvičení se podíváme na skládání momentů hybnosti $l = 1$ a $s = 1/2$, což odpovídá interakci spinu elektronu v p-orbitalu s jeho orbitálním momentem hybnosti (což, jak už víme, vede na tzv. jemnou strukturu). Půjdeme na to však trochu jinak, než v části první.

(I) Jaké jsou možné kombinace stavů $|l, m_l\rangle$ a $|s, m_s\rangle$?

Celkem máme 6 možných kombinací, tj. učeně řečeno dimenze Hilbertova prostoru je $d = (2l+1)(2s+1) = 6$.

Orbitální moment hybnosti $\hat{\vec{L}}$ a spin $\hat{\vec{S}}$ složíme na celkový moment hybnosti $\hat{\vec{J}}$:

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}} \, . \tag{29}$$

Pro odpovídající kvantová čísla j, l a s platí:

$$j = |l - s|, |l - s| + 1, \dots, l + s \, . \tag{30}$$

Každý z těchto stavů s daným j má $(2j+1)$ možných projekcí $m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j$. V našem případě tedy získáme 4 stavy s $j = 3/2$ ($m_{j=3/2} = -3/2, -1/2, +1/2, +3/2$) a dva stavy s $j = 1/2$ ($m_{j=1/2} = -1/2, +1/2$). Celkem tedy máme opět 6 možných kombinací.

Jak zjistíme, jaké stavy původní báze (resp. jejich lineární kombinace) $|l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle$, tj. $\{|1, +1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle\} \otimes \{|1/2, +1/2\rangle, |1/2, -1/2\rangle\}$, odpovídají stavům nové (složené) báze $\{|j, m_j\rangle\}$?

Stavy naší "staré" báze jsou vlastními stavy operátorů $\hat{L}^2$ a $\hat{L}_z$, resp. $\hat{S}^2$ a $\hat{S}_z$. Stavy naší "nové" báze jsou vlastními stavy operátoru celkového momentu hybnosti $\hat{J}^2$ a $\hat{J}_z$.

(II) Připomeňte si, jak působí tyto zmíněné operátory na své vlastní stavy, tj. jaké vlastní hodnoty nám dávají.

Mohli bychom, stejně jako v první části tohoto cvičení, spočítat působení operátorů $\hat{J}^2$ a $\hat{J}_z$ na jednotlivé stavy staré báze a pak hledat vhodné lineární kombinace těchto stavů tak, aby byly vlastními stavy operátorů $\hat{J}^2$ a $\hat{J}_z$.

(III) Proveďte takový výpočet.

Dále bychom mohli použít návod z knihy doc. Zamastila.

(IV) Proveďte.

Alternativně můžeme najít vyjádření nějakého jednoho stavu $|j, m_j\rangle$ pomocí $|l, m_l\rangle |s, m_s\rangle$ a pak použít zvyšovací a snižovací operátory $\hat{J}_\pm$ a vygenerovat zbylé stavy. Nejjednodušší je si vybrat jeden z krajních stavů - ten s nejvyšší nebo nejnižší projekcí m_j, protože takový stav můžeme získat jen jednou kombinací stavů $|l, m_l\rangle |s, m_s\rangle$. Platí totiž $m_j = m_l + m_s$. To vidíme z rozepsání operátoru $\hat{J}_z$:

$$\hat{J}_z = \hat{L}_z \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{S}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z \, . \tag{31}$$

V našem případě je nejvyšším možným stavem stav $|j = 3/2, m_j = +3/2\rangle$, který zjevně získáme kombinací

$$|j = 3/2, m_j = +3/2\rangle = |l = 1, m_l = +1\rangle \otimes |s = 1/2, m_s = +1/2\rangle \equiv |l = 1, m_l = +1\rangle |s = 1/2, m_s = +1/2\rangle \, . \tag{32}$$

Působením operátoru $\hat{J}_-$ na tento stav - připomeňme si, že platí

$$\hat{J}_\pm |j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \, |j, m \pm 1\rangle \, , \tag{33}$$

pak dostaneme stav $|j = 3/2, m_j = +1/2\rangle$. Jednak platí

$$\hat{J}_- |3/2, +3/2\rangle = \sqrt{3} \, |3/2, +1/2\rangle \tag{34}$$

a jednak platí (pro názornost zde píšeme $\otimes$)

$$\begin{aligned} \hat{J}_- |3/2, +3/2\rangle &= \left(\hat{L}_- \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{S}_-\right) |1, +1\rangle \otimes |1/2, +1/2\rangle = \\ &= \hat{L}_- |1, +1\rangle \otimes \hat{1} \, |1/2, +1/2\rangle + \hat{1} \, |1, +1\rangle \otimes \hat{S}_- |1/2, +1/2\rangle = \\ &= \sqrt{2} \, |1, 0\rangle \otimes |1/2, +1/2\rangle + |1, 1\rangle \otimes |1/2, -1/2\rangle \, . \end{aligned} \tag{35}$$

Odtud dostaneme

$$|3/2, +1/2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \, |1, 0\rangle \, |1/2, +1/2\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} \, |1, 1\rangle \, |1/2, -1/2\rangle \, . \tag{36}$$

Opakovaným působením $\hat{J}_-$ dostaneme další dva stavy $|j = 3/2, m_j = -1/2\rangle$ a $|j = 3/2, m_j = -3/2\rangle$:

$$|3/2, -1/2\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} \, |1, -1\rangle \, |1/2, +1/2\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \, |1, 0\rangle \, |1/2, -1/2\rangle \, , \tag{37}$$

$$|3/2, -3/2\rangle = |1, -1\rangle \, |1/2, -1/2\rangle \, . \tag{38}$$

(V) Spočtěte.

Jak získáme chybějící dva stavy $|j = 1/2, m_j = +1/2\rangle$ a $|j = 1/2, m_j = -1/2\rangle$? Projekci celkového momentu hybnosti $m_j = +1/2$ získáme jako součet $m_l + m_s$, tj. jako lineární kombinaci stavů s $m_l = 0$ a $m_s = +1/2$ a $m_l = +$ a $m_s = -1/2$. Jednotlivé stavy $|j, m_j\rangle$ na sebe musí být kolmé, takže chybějící stavy $|j = 1/2, m_j = +1/2\rangle$ a $|j = 1/2, m_j = -1/2\rangle$ získáme z podmínky orthogonality k $|j = 3/2, m_j = +1/2\rangle$, resp. $|j = 3/2, m_j = -1/2\rangle$:

$$|1/2, +1/2\rangle = -\sqrt{\frac{1}{3}} \, |1, 0\rangle \, |1/2, +1/2\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \, |1, +1\rangle \, |1/2, -1/2\rangle \, , \tag{39}$$

$$|1/2, -1/2\rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}} \, |1, -1\rangle \, |1/2, +1/2\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} \, |1, 0\rangle \, |1/2, -1/2\rangle \, . \tag{40}$$

(VI) Spočtěte.

Ať zvolíme kterýkoliv postup, vždy bychom měli dojít ke stejnému výsledku.

Povinné úlohy na příště

(1 b.) Uvažujme elektron se spinem v p stavu, tj. $s = 1/2$ a $l = 1$. Použitím návodu z knihy doc. Zamastila tyto dva momenty hybnosti složte a napište možné stavy.

Bonusová úloha

(1 b.) Uvažujme dva elektrony se spinem v p orbitalu. Složte tyto čtyři momenty hybnosti $l_1 = 1$, $s_1 = 1/2$, l_2 a $s_2 = 1/2$.