5

Τροχιακή Στροφορμή - spin - Πρόσθεση στροφορμών

5.1 Οι συνιστώσες του Τελεστή της Τροχιακής Στροφορμής σε Σφαιρικές Συντεταγμένες

Η τροχιακή στροφορμή για ένα σωματίδιο δίνεται από τη σχέση:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

όπου $\mathbf{p}$ η ορμή του σωματιδίου, $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$

$$\Rightarrow \mathbf{L} = (-i\hbar)\mathbf{r} \times \nabla = (-i\hbar)\begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ x & y & z \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \end{vmatrix}$$

σε καρτεσιανές συντεταγμένες. Οι συνιστώσες της στροφορμής είναι:

$$\begin{cases} L_x = yp_z - zp_y = (-i\hbar)[y\partial_z - z\partial_y] \\ L_y = zp_x - xp_z = (-i\hbar)[z\partial_x - x\partial_z] \\ L_z = xp_y - yp_x = (-i\hbar)[x\partial_y - y\partial_x] \end{cases}$$

χρησιμοποιώντας τους μεταθέτες των $\mathbf{r}, \mathbf{p}$ βρίσκουμε τους μεταθέτες των L_x, L_y, L_z.

$$\begin{cases} [L_x, L_y] = i\hbar L_z \\ [L_y, L_z] = i\hbar L_x \\ [L_z, L_x] = i\hbar L_y \end{cases}$$

Συνοπτικά παίρνοντας το διάνυσμα $\mathbf{L}$ της στροφορμής και τον αντισυμμετρικό τανυστή ε_{jkl} έχουμε:

$$[L_j, L_k] = i\hbar\varepsilon_{jkl}L_l$$

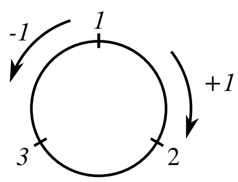
$$j, k, l = 1, 2, 3 \qquad \text{και} \qquad \varepsilon_{123} = 1$$

Με μονάδα ισούνται όλες οι δεξιόστροφες μεταθέσεις των 1,2,3.
Με (-1) ισούνται οι αριστερόστροφες μεταθέσεις.

$$\varepsilon_{123} = \varepsilon_{231} = \varepsilon_{312} = 1$$

$$\varepsilon_{132} = \varepsilon_{321} = \varepsilon_{213} = -1$$

$$\varepsilon_{kk\ell} = 0 \quad \forall k, \ell = 1, 2, 3$$



Ο τελεστής της *Ολικής Στροφορμής* ορίζεται μέσω του τετραγώνου του διανύσματος της στροφορμής

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

Έχει ιδιαίτερο ενδιαφέρον διότι μετατίθεται με το L_x, L_y, L_z και με τη Χαμιλτονιανή εάν $V(\mathbf{r}) = V(r)$, και εμφανίζεται στη Χαμιλτονιανή του ατόμου του Υδρογόνου.

$$\begin{cases} [L^2, L_x] = 0 \\ [L^2, L_y] = 0 \\ [L^2, L_z] = 0 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} [L^2, L_x] &= [L_y^2, L_x] + [L_z^2, L_x] \\ &= L_y[L_y, L_x] + [L_y, L_x]L_y + [L_z, L_x]L_z + L_z[L_z, L_x] \\ &= -i\hbar L_y L_z - i\hbar L_z L_y + i\hbar L_y L_z + i\hbar L_z L_y = 0 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow [L_k, H] = i\hbar(\mathbf{r} \times \mathbf{F})_k$$

εάν

$$V(\mathbf{r}) = V(r) \Rightarrow \mathbf{F} = F(r)\hat{r} \Rightarrow \mathbf{r} \times \mathbf{F} = 0$$

και η στροφορμή διατηρείται, διότι ο μεταθέτης με τη Χαμιλτονιανή μηδενίζεται. Ακόμη έχουμε:

$$\Rightarrow [L_k, r_j] = i\hbar\varepsilon_{kjl} r_l \qquad (r_1 = x, r_2 = y, r_3 = z)$$

και

$$[L_k, p_j] = i\hbar\epsilon_{jkl} p_l$$

Απόδειξη.

$$\begin{aligned} [L_x, y] &= [yp_z - zp_y, y] = [yp_z, y] - [zp_y, y] \\ &= 0 - z[p_y, y] = -z(-i\hbar) = i\hbar z \end{aligned}$$ □

Για τη στροφορμή μπορούμε να γράψουμε γενικά:

$$L_k = \epsilon_{kjl} r_j p_l$$

Εάν

$$V(\mathbf{r}) = V(r) \Rightarrow \text{ σφαιρική συμμετρία στο πρόβλημα}$$

Εκφράζουμε τη στροφορμή σε σφαιρικές συντεταγμένες.

$$\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\phi \\ y &= r\sin\theta\sin\phi \\ z &= r\cos\theta \end{aligned}$$

$$\begin{cases} \hat{r} = \hat{x}\sin\theta\cos\phi + \hat{y}\sin\theta\sin\phi + \hat{z}\cos\theta \\ \hat{\theta} = \hat{x}\cos\theta\cos\phi + \hat{y}\cos\theta\sin\phi - \hat{z}\sin\theta \\ \hat{\phi} = -\hat{x}\sin\phi + \hat{y}\cos\phi \end{cases}$$

Παρατήρηση: τα $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ είναι τα μοναδιαία διανύσματα στους τρεις άξονες x, y, z.
Επίσης ισχύουν

$$\begin{cases} \hat{r} \times \hat{\theta} = \hat{\phi} \\ \hat{r} \times \hat{\phi} = -\hat{\theta} \end{cases}$$

$$\boxed{\boldsymbol{\nabla} = \hat{r}\frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \hat{\phi}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}}$$

$$\Rightarrow \mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = (-i\hbar)\mathbf{r} \times \boldsymbol{\nabla} = (-i\hbar)\left[\hat{\phi}\frac{\partial}{\partial\theta} - \hat{\theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right]$$

Συγχρόνως ισχύει

$$\mathbf{L} = \hat{x}L_x + \hat{y}L_y + \hat{z}L_z$$

άρα εκφράζουμε τα $\hat{\phi}, \hat{\theta}$ ως προς $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ και βρίσκουμε τις καρτεσιανές συνιστώσες της στροφορμής συναρτήσει των θ, ϕ:

$$\Rightarrow \begin{cases} L_z = (-i\hbar)\dfrac{\partial}{\partial\phi} \\ L_y = (-i\hbar)\left[\cos\phi\dfrac{\partial}{\partial\theta} - \dfrac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin\phi\dfrac{\partial}{\partial\phi}\right] \\ L_x = (-i\hbar)\left[-\sin\phi\dfrac{\partial}{\partial\theta} - \dfrac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\phi\dfrac{\partial}{\partial\phi}\right] \end{cases}$$

Υπολογίζουμε τώρα το L^2

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

$$L_z^2 = (-i\hbar)^2\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

Υπολογίζω το L_x^2:

$$\begin{aligned} L_x^2\Psi &= L_x(L_x\Psi) \\ &= (-i\hbar)^2\left\{\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right\}\cdot\left\{\sin\phi\frac{\partial\Psi}{\partial\theta} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\phi\frac{\partial\Psi}{\partial\phi}\right\} \\ &= (-\hbar^2)\left\{\sin^2\phi\frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2} + \sin\phi\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\cancelto{0}{\frac{\cos\theta}{\sin\theta}}\frac{\partial\Psi}{\partial\phi}\right. \\ &+ \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\phi\cos\phi\frac{\partial\Psi}{\partial\theta} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cancelto{0}{\cos\phi\sin\phi}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\Phi\partial\theta} \\ &+ \left(\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right)^2\cancelto{0}{\cos\phi\,(-\sin\phi)}\frac{\partial\Psi}{\partial\phi} + \left(\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right)^2\cos^2\phi\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2} \end{aligned}$$

και το L_y^2:

$$\begin{aligned} L_y^2\Psi &= (-i\hbar)^2\left\{\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right\}\cdot\left\{\cos\phi\frac{\partial\Psi}{\partial\theta} - \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin\phi\frac{\partial\Psi}{\partial\phi}\right\} \\ &= (-\hbar^2)\left\{\cos^2\phi\frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2} - \cos\phi\sin\phi\cancelto{0}{\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right)}\frac{\partial\Psi}{\partial\phi} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin^2\phi\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right. \\ &\left. - \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin\phi\cos\phi\cancelto{0}{\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi\partial\theta}} + \left(\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right)^2\cancelto{0}{\sin\phi\cos\phi}\frac{\partial\Psi}{\partial\phi} + \left(\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right)^2\sin^2\phi\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\right\} \end{aligned}$$

Προσθέτοντας έχουμε:

$$\begin{aligned}(L_x^2 + L_y^2 + L_z^2)\Psi = (-\hbar^2) \Big\{ & \sin^2\phi \frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2} + \cos^2\phi \frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos^2\phi\frac{\partial\Psi}{\partial\theta} \\ & + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin^2\phi\frac{\partial\Psi}{\partial\theta} + \left(\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right)^2 \cos^2\phi\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2} \\ & + \left(\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right)^2 \sin^2\phi\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\Big\} \\ = (-\hbar^2) & \left\{ \frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial\Psi}{\partial\theta} + \frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2} \right\} \\ = (-\hbar^2) & \left\{ \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2} \right\}\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{L^2\Psi = (-\hbar^2)\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}\right]}$$

και όπως είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο, ο διαφορικός τελεστής δεξιά έχει ιδιοσυναρτήσεις τις σφαιρικές αρμονικές $Y_{lm}(\theta,\phi)$ με ιδιοτιμή $\hbar^2 l(l+1)$.

$$L^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}$$

και

$$L_z Y_{lm} = m\hbar Y_{lm}$$

με $m = 0, \pm1, \pm2, \ldots, \pm l$.

Υπενθύμιση: $Y_{lm}(\theta,\phi) = A_{lm}\mathrm{e}^{im\phi}(1-\cos^2\theta)^{|m|/2}\dfrac{\mathrm{d}^{l+|m|}(1-\cos^2\theta)^l}{\mathrm{d}\cos\theta^{l+|m|}}$

5.2 Αλγεβρικός υπολογισμός των ιδιοτιμών του τελεστή της στροφορμής

Θα ονομάσουμε τους ερμιτιανούς τελεστές J_x, J_y, J_z *τελεστές της στροφορμής*, εάν ικανοποιούν τις εξής σχέσεις μετάθεσης:

$$\begin{cases} [J_x, J_y] = i\hbar J_z \\ [J_y, J_z] = i\hbar J_x \\ [J_z, J_x] = i\hbar J_y \end{cases}$$

Ορίζουμε την ολική στροφορμή J^2 ως εξής:

$$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$$

και αποδεικνύεται ότι $[J^2, \mathbf{J}] = 0$, όπου

$$\mathbf{J} = \hat{x}J_x + \hat{y}J_y + \hat{z}J_z$$

Εάν ορίσουμε τους τελεστές

$$\begin{cases} J_+ = J_x + iJ_y \\ J_- = J_x - iJ_y = J_+^\dagger \end{cases}$$

αυτοί ικανοποιούν τις εξής μεταθετικές σχέσεις:

$$\begin{aligned}[J_z, J_+] &= [J_z, J_x + iJ_y] = [J_z, J_x] + i[J_z, J_y] \\ &= i\hbar J_y + i(-i\hbar)J_x = \hbar(J_x + iJ_y) = \hbar J_+\end{aligned}$$

Αντίστοιχα

$$[J_z, J_-] = -\hbar J_-$$

Απόδειξη.

$$([J_z, J_+])^\dagger = (\hbar J_+)^\dagger = \hbar J_+^\dagger = \hbar J_-$$

$$([J_z, J_+])^\dagger = (J_z J_+)^\dagger - (J_+ J_z)^\dagger = J_- J_z - J_z J_- = -[J_z, J_-]$$

$$\Rightarrow \begin{cases} J_z J_+ = J_+ J_z + \hbar J_+ = J_+(J_z + \hbar) \\ J_z J_- = J_- J_z - \hbar J_- = J_-(J_z - \hbar) \end{cases}$$

και

$$[J^2, J_+] = [J^2, J_x] + i[J^2, J_y] = 0 + 0 = 0$$

ομοίως

$$[J^2, J_-] = 0$$

Ακόμη

$$\begin{aligned}[J_+, J_-] &= [J_x + iJ_y, J_x - iJ_y] = -i[J_x, J_y] + i[J_y, J_x] \\ &= (-i)(i\hbar)J_z + i(-i\hbar)J_z = 2\hbar J_z\end{aligned}$$

□

Θέλουμε να βρούμε τις συναρτήσεις Ψ που είναι ιδιοσυναρτήσεις του J^2 και ενός εκ των J_k, έστω του J_z.

$$\Rightarrow \begin{cases} J^2\Psi = a\Psi \\ J_z\Psi = b\Psi \end{cases}$$

Ορίζουμε $\Psi_+ = J_+\Psi$, $\Psi_- = J_-\Psi$. Έχουμε

$$\begin{cases} J_z\Psi_+ = J_z J_+\Psi = J_+(J_z + \hbar)\Psi = (b + \hbar)\Psi_+ \\ J_z\Psi_- = J_z J_-\Psi = J_-(J_z - \hbar)\Psi = (b - \hbar)\Psi_- \end{cases}$$

Ο J_+ ονομάζεται *αυξητικός τελεστής* (raising operator), ανεβάζει την ιδιοτιμή του J_z κατά 1.
Ο J_- ονομάζεται *μειωτικός τελεστής* (lowering operator), κατεβάζει την ιδιοτιμή του J_z κατά 1.
Ακόμη,

$$\begin{cases} J^2\Psi_+ = J^2 J_+\Psi = J_+ J^2\Psi = aJ_+\Psi = a\Psi_+ \\ J^2\Psi_- = J^2 J_-\Psi = J_- J^2\Psi = a\Psi_- \end{cases}$$

Ιδιοσυναρτήσεις του J^2.

Θα δείξουμε ότι $a \geq b^2$:

$$\langle J^2\rangle = \langle\Psi|J^2|\Psi\rangle = a\langle\Psi|\Psi\rangle = a$$

και

$$\begin{aligned}\langle J^2\rangle &= \langle\Psi|J^2|\Psi\rangle = \langle\Psi|J_x^2|\Psi\rangle + \langle\Psi|J_y^2|\Psi\rangle + \langle\Psi|J_z^2|\Psi\rangle \\ &\geq \langle\Psi|J_z^2|\Psi\rangle = b^2\end{aligned}$$

διότι

$$\langle J_x^2\rangle = \int \Psi^* J_x^2\Psi \mathrm{d}^3x = \int (J_x\Psi)^*(J_x\Psi) \geq 0$$

$$\langle J_y^2\rangle = \int \Psi^* J_y^2\Psi \mathrm{d}^3x = \int (J_y\Psi)^*(J_y\Psi) \geq 0$$

Οι τελεστές J_x, J_y, J_z είναι ερμιτιανοί.

$$\begin{aligned}\langle J_z^2\rangle &= \int \Psi^* J_z^2\Psi \mathrm{d}^3x = \int (J_z\Psi)^*(J_z\Psi)\mathrm{d}^3x \\ &= b^*b \int \Psi^*\Psi \mathrm{d}^3x = b^*b = b^2\end{aligned}$$

και $b^* = b \in \mathbb{R}$, ερμιτιανότητα του τελεστή.

Παρατηρήσεις

1.
$$J_z(J_+^2\Psi) = (b+2\hbar)(J_+^2\Psi)$$

Απόδειξη.

$$\begin{aligned} J_z(J_+^2\Psi) &= J_zJ_+(J_+\Psi) = J_+(J_z+\hbar)\Psi_+ \\ &= J_+J_z\Psi_+ + \hbar J_+\Psi_+ = J_+(b+\hbar)\Psi_+ + \hbar J_+\Psi \\ &= (b+2\hbar)J_+\Psi_+ = (b+2\hbar)J_+^2\Psi \end{aligned}$$
□

2. Γενικά έχουμε
$$J_z(J_+^n\Psi) = (b+n\hbar)(J_+^n\Psi)$$

Απόδειξη.

$$\begin{aligned} J_zJ_+^n\Psi &= J_zJ_+(J_+^{n-1}\Psi) \\ &= J_+(J_z+\hbar)J_+^{n-1}\Psi = J_+^2(J_z+\hbar+\hbar)J_+^{n-2}\Psi \\ &= J_+^3(J_z+\hbar+\hbar+\hbar)J_+^{n-3}\Psi = \ldots \\ &= J_+^n(J_z+n\hbar)\Psi = J_+^n(b+n\hbar)\Psi \\ &= (b+n\hbar)J_+^n\Psi \end{aligned}$$
□

3.
$$J^2(J_+^n\Psi) = J_+^n(J^2\Psi) = a(J_+^n\Psi)$$

όπου λαμβάνουμε υπόψιν ότι J_+, J^2 μετατίθενται.

Επειδή η $J_+^n\Psi = \Psi'$ είναι συγχρόνως ιδιοσυνάρτηση του J_z με ιδιοτιμή $(b+n\hbar)$ και ιδιοσυνάρτηση του J^2 με ιδιοτιμή a, έχουμε
$$a \geq (b+n\hbar)^2$$
Αλλά το $b+n\hbar$ αυξάνεται απεριόριστα. Θα πρέπει κάπου να τερματίζει αυτή η ακολουθία ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων. Επομένως υπάρχει n_1 τέτοιο ώστε:
$$J_+^{n1}\Psi = 0$$
Άρα η μεγαλύτερη ιδιοτιμή του J_z είναι $b+(n_1-1)\hbar$. **Δηλαδή το J_z έχει μέγιστη ιδιοτιμή για δεδομένο a.**
Έστω λοιπόν τώρα ότι b είναι η μεγαλύτερη ιδιοτιμή του J_z με Ψ την αντίστοιχη κυματοσυνάρτηση, τότε
$$J_z\Psi = b\Psi \qquad \text{και} \qquad J_+\Psi = 0.$$
Ακόμη έχουμε:
$$J_z(J_-^k\Psi) = (b-k\hbar)J_-^k\Psi$$
και $a \geq (b-k\hbar)^2 \ \ \forall k$, άρα το k δεν μπορεί να γίνει άπειρο· κάπου λοιπόν αυτή η άπειρη ακολουθία ιδιοτιμών σταματάει, έστω για κάποιο $k=n$, επομένως
$$J_-^{n+1}\Psi = 0$$
Άρα η $\Psi'' = J_-^n\Psi$ είναι η κυματοσυνάρτηση με τη μικρότερη ιδιοτιμή του J_z με ιδιοτιμή $(b-n\hbar)$,
$$\Rightarrow J_z\Psi'' = (b-n\hbar)\Psi'' \quad \text{και} \quad J_-\Psi'' = 0.$$

Έχουμε τις σχέσεις:

$$\begin{aligned} J_-J_+ &= (J_x-iJ_y)(J_x+iJ_y) = J_x^2+J_y^2+i[J_x,J_y] \\ &= J_x^2+J_y^2+J_z^2-J_z^2-\hbar J_z = J^2-J_z^2-\hbar J_z \\ J_+J_- &= (J_x+iJ_y)(J_x-iJ_y) = J_x^2+J_y^2-i[J_x,J_y] \\ &= J_x^2+J_y^2+J_z^2-J_z^2+\hbar J_z = J^2-J_z^2+\hbar J_z \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} J_-J_+\Psi = 0 \\ J_-J_+\Psi = (J^2 - J_z^2 - \hbar J_z)\Psi = (a - b^2 - \hbar b)\Psi \end{cases}$$

$$\Rightarrow a - b^2 - \hbar b = 0 \Rightarrow a = b(b + \hbar)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} J_+J_-\Psi'' = 0 \\ J_+J_-\Psi'' = (J^2 - J_z^2 + \hbar J_z)\Psi'' = \Big(a - (b - n\hbar)^2 + \hbar(b - n\hbar)\Big)\Psi'' \end{cases}$$

$$\Rightarrow a - (b - n\hbar)^2 + \hbar(b - n\hbar) = 0$$

Βάζοντας $a = b(b + \hbar)$ βρίσκουμε

$$\boxed{b = \hbar\frac{n}{2}, \quad \text{με } n = 0, 1, 2, \ldots}$$

$$\Rightarrow b = 0, \frac{\hbar}{2}, \hbar, \frac{3\hbar}{2}, 2\hbar, \frac{5\hbar}{2}, \ldots$$

$$\boxed{a = \hbar^2\frac{n}{2}\left(\frac{n}{2} + 1\right)}$$

Για $n =$ άρτιος ακέραιος $= 2l$, έχουμε

$$b = \hbar l, \qquad a = l(l + 1)\hbar^2$$

Αλλιώς το b είναι ημιακέραιος.

$$b = \text{ μεγαλύτερη ιδιοτιμή } = \hbar\frac{n}{2}$$

$$\frac{n}{2}\hbar - n\hbar = \text{ μικρότερη ιδιοτιμή } = -\hbar\frac{n}{2}$$

$$\Rightarrow b = -\hbar\frac{n}{2}, \ -\hbar\left(\frac{n}{2} - 1\right), \ldots, \hbar\frac{n}{2}$$

συνολικά $n + 1$ τιμές.
Για $n = 1 \Rightarrow b = \pm\hbar/2$ (spin$= 1/2$)

5.3 Αναπαράσταση των τελεστών της στροφορμής με πίνακες

Είδαμε λοιπόν ότι μια ιδιοσυνάρτηση των J^2 και J_z χαρακτηρίζεται από δύο αριθμούς ακέραιους ή ημιακέραιους, τους j και m, όπου $m = j, j-1, \ldots, -j$, άρα και η κυματοσυνάρτηση χαρακτηρίζεται ως εξής $\Psi \to \Psi_{jm}$. Οι τελεστές J_z, J^2 είναι ερμιτιανοί, άρα έχουν ένα πλήρες, ορθογώνιο σύστημα κυματοσυναρτήσεων.

$$\boxed{\langle\Psi_{jm}|\Psi_{j'm'}\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'}}$$

$$\boxed{\begin{aligned} J^2\Psi_{jm} &= \hbar^2 J(J + 1)\Psi_{jm} \\ J_z\Psi_{jm} &= \hbar m\Psi_{jm} \end{aligned}}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \langle\Psi_{j'm'}|J^2|\Psi_{jm}\rangle = \hbar^2 J(J + 1)\delta_{jj'}\delta_{mm'} \\ \langle\Psi_{j'm'}|J_z|\Psi_{jm}\rangle = \hbar m\delta_{jj'}\delta_{mm'} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \text{ διαγώνιοι πίνακες διάστασης } (2j + 1) \times (2j + 1) \text{ για δεδομένο } J$$

Ζητάμε τώρα τους πίνακες που παριστάνουν τα J_x και J_y για σταθερό δεδομένο J. Άρα κινούμαστε σε έναν διανυσματικό χώρο διάστασης $2j + 1$. Έχουμε:

$$\begin{aligned} J_+\Psi_{jm} &= C_+\Psi_{j,m+1} \\ J_-\Psi_{jm} &= C_-\Psi_{j,m-1} \end{aligned}$$

διότι ο J_+ αυξάνει την ιδιοτιμή του J_z κατά ένα και ο J_- ελαττώνει την ιδιοτιμή του J_z κατά ένα.

Θέλουμε να βρούμε τα C_+, C_-.

$$\langle C_+\Psi_{j,m+1}|C_+\Psi_{j,m+1}\rangle = C_+^2\langle\Psi|\Psi\rangle = C_+^2$$

$$\begin{aligned}\langle J_+\Psi_{jm}|J_+\Psi_{jm}\rangle &= \langle\Psi_{jm}|J_-J_+\Psi_{jm}\rangle = \\ = \langle\Psi_{jm}|(J^2 - J_z^2 - \hbar J_z)\Psi_{jm}\rangle &= \hbar^2\Big[j(j+1) - m^2 - m\Big] \\ &= \hbar^2\Big[j(j+1) - m(m+1)\Big] \\ &\Rightarrow C_+ = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\end{aligned}$$

Όμοια,

$$C_- = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}$$

$$\begin{cases} J_+ = J_x + iJ_y \\ J_- = J_x - iJ_y \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-) \\ J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-) \end{cases}$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow J_x\Psi_{jm} &= \frac{1}{2}\left(J_+\Psi_{jm} + J_-\Psi_{jm}\right) \\ &= \frac{\hbar}{2}\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\Psi_{j,m+1} + \frac{\hbar}{2}\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\Psi_{j,m-1} \\ J_y\Psi_{jm} &= \frac{1}{2i}\left(J_+\Psi_{jm} - J_-\Psi_{jm}\right) \\ &= \frac{\hbar}{2i}\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\Psi_{j,m+1} - \frac{\hbar}{2i}\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\Psi_{j,m-1}\end{aligned}$$

- $j = 0, m = 0 \to \Psi_{00}$
- $j = \dfrac{1}{2}, m = \pm\dfrac{1}{2} \quad J^2 = \dfrac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}, \quad J_z = \dfrac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$

$$J_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}$$

- $j = 1, \ m = -1, 0, 1$

$$J^2 = 2\hbar^2\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}, \quad J_z = \hbar\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}$$

$$J_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & -i & 0\\ i & 0 & -i\\ 0 & i & 0\end{pmatrix}$$

5.3.1 Υπολογισμός των ιδιοσυναρτήσεων για ακέραια τιμή $j = l$ της στροφορμής

$$\begin{aligned}&L_+ = L_x + iL_y \\ &\begin{cases} L_x = (-i\hbar)\left[-\sin\phi\dfrac{\partial}{\partial\theta} - \dfrac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\phi\dfrac{\partial}{\partial\phi}\right] \\ L_y = (-i\hbar)\left[\cos\phi\dfrac{\partial}{\partial\theta} - \dfrac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin\phi\dfrac{\partial}{\partial\phi}\right] \end{cases} \\ &\Rightarrow L_+ = \hbar e^{i\phi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta} + i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right] \\ &\text{και } L_- = L_+^\dagger = -\hbar e^{-i\phi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta} - i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right] \\ &L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\end{aligned}$$

$$L_z \Psi_{ll} = -i\hbar \frac{\partial \Psi_{ll}}{\partial \phi} = \hbar l \Psi_{ll}$$

$$L_+ \Psi_{ll} = 0 \Rightarrow \frac{\partial \Psi_{ll}}{\partial \theta} + i \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \frac{\partial \Psi_{ll}}{\partial \phi} = 0$$

Εξίσωση χωριζόμενων μεταβλητών

$$\Rightarrow \Psi_{ll} = Q(\theta)\Phi(\phi)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} -i\hbar \dfrac{\partial \Psi_{ll}}{\partial \phi} = -i\hbar Q \dfrac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}\phi} = \hbar l Q \Phi \\ \Rightarrow \Phi(\phi) = \mathrm{e}^{il\phi} \end{cases}$$

περιοδική με περίοδο 2π !!!!

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}\theta} + i \frac{\cos\theta}{\sin\theta}(il)Q = 0$$

$$\Rightarrow \frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}\theta} = l \frac{\cos\theta}{\sin\theta} Q$$

Αλλαγή μεταβλητής $u = \sin\theta \Rightarrow \mathrm{d}u = \cos\theta \mathrm{d}\theta$

$$\Rightarrow \frac{dQ}{\cos\theta \mathrm{d}\theta} = l \frac{Q}{\sin\theta}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}u} = l \frac{Q}{u}}$$

η οποία έχει λύση $Q = Au^l$

$$\Rightarrow \Psi_{ll}(\theta, \phi) = A_{ll}(\sin\theta)^l \mathrm{e}^{il\phi}$$

Κανονικοποίηση:

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} \Psi_{ll}^* \Psi_{ll} \sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\phi = 2\pi A_{ll}^* A_{ll} \int_0^\pi (\sin\theta)^{2l} \sin\theta \mathrm{d}\theta = 2\pi A_{ll}^* A_{ll} \int_{-1}^1 (1 - \xi^2)^l \mathrm{d}\xi = 1$$

όπου

$$\xi = \cos\theta, \mathrm{d}\xi = -\sin\theta \mathrm{d}\theta,\ \sin^2\theta = 1 - \xi^2 \quad \text{και} \quad \int_{-1}^1 (1 - \xi^2)^l \mathrm{d}\xi = 2^{2l+1} \frac{\Gamma^2(l+1)}{\Gamma(2l+2)}$$

$$\Rightarrow 2\pi A_{ll}^* A_{ll} 2^{2l+1} \frac{\Gamma^2(l+1)}{\Gamma(2l+2)} = 1 \Rightarrow A^* A = \frac{\Gamma(2l+2)}{2\pi 2^{2l+1} \Gamma^2(l+1)} = \frac{(2l+1)!}{2\pi 2^{2l+1} (l!)^2}$$

διότι

$$\Gamma(l+1) = l!$$

$$\Rightarrow A_{ll} = \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi 2^{2l} (l!)^2}}$$

Υπολογίζουμε τις άλλες Ψ_{lm} δρώντας με τον τελεστή L_-.

5.4 Spin

Εάν μέσα σε ένα μαγνητικό πεδίο $\mathbf{B}$ βάλουμε ένα μαγνητικό δίπολο, με μαγνητική διπολική ροπή μ, η ενέργεια αλληλεπίδρασης είναι:

$$U = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$$

Εάν

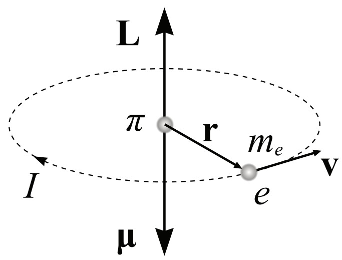
$$\mathbf{B} = B\hat{z} \Rightarrow U = -\mu_z B$$

Η δύναμη που ασκείται στο μαγνητικό δίπολο είναι

$$\mathbf{F} = -\boldsymbol{\nabla} U \Rightarrow F_z = \mu_z \frac{\partial B}{\partial z}$$

εάν το μαγνητικό πεδίο εξαρτάται μόνο από το z.

Τα ουδέτερα άτομα έχουν μαγνητική διπολική ροπή λόγω των περιστρεφόμενων ηλεκτρονίων.



Ηλεκτρόνιο με φορτίο $q_e = -e$ κινούμενο προς τα δεξιά με ταχύτητα $\mathbf{v}$ αντιστοιχεί σε ρεύμα I προς τα αριστερά. Επομένως η μαγνητική διπολική ροπή του βρόχου είναι $\mu = I\pi r^2$ με διεύθυνση προς τα κάτω.
Γενικά

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{2}\int \mathbf{r}\times\mathbf{J}\mathrm{d}^3x$$

$$I = \frac{e}{T}, \quad \omega = \frac{2\pi}{T}, \quad v = \omega r$$

$$\Rightarrow \mu = \frac{e}{T}\pi r^2 = \frac{e}{2}\frac{2\pi}{T}r^2 = \frac{e}{2}\omega r^2$$

Η στροφορμή του σωματιδίου είναι $L = mvr$

$$L = mvr = m\omega r^2$$

$$\Rightarrow \mu = \frac{e}{2m_e}m_e\omega r^2 = \frac{e}{2m_e}L$$

Διανυσματικά λοιπόν έχουμε:

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{2m_e}\mathbf{L}$$

για το ηλεκτρόνιο.
Για ηλεκτρόνιο με στροφορμή l η διπολική ροπή που οφείλεται στην τροχιακή στροφορμή είναι:

$$\mu_{\tau\rho,z} = -\frac{e\hbar}{2m_e}m, \quad -l \le m \le l$$

1922, Stern και Gerlach

Δέσμη από άτομα Αργύρου (Ag) περνά κάθετα μέσα από μαγνητικό πεδίο κατά τον άξονα των z και προσπίπτει σε φωτογραφική πλάκα, όπου αφήνει το ίχνος τους.
Το διάνυσμα $\boldsymbol{\mu}$ της μαγνητικής διπολικής ροπής των ατόμων της δέσμης έχει τυχαίο προσανατολισμό στο χώρο. $Ag \to 47e \to 46e + 1e$, ένα ηλεκτρόνιο μόνο του στην εξώτατη στοιβάδα. Το ίχνος της δέσμης στην πλάκα θα έπρεπε να καλύπτει πλήρως μία περιοχή γύρω από το κέντρο ($z \simeq 0$). Οι Stern και Gerlach παρατήρησαν ότι η δέσμη χωρίστηκε σε δύο συνιστώσες, μία κατά το θετικό άξονα των z και η άλλη κατά τον αρνητικό άξονα των z, ισαπέχοντας από το μηδέν.

1927, Phipps και Taylor

Σε όμοιο πείραμα, χρησιμοποίησαν δέσμη από άτομα υδρογόνου στη θεμελιώδη στάθμη: $l = 0 \Rightarrow \mu_{\text{τροχ}} = 0$. Περιμένουμε η δέσμη να περάσει χωρίς καμία απόκλιση. Η δέσμη και πάλι χωρίζεται στα δύο.
Πιθανή λύση: ο πυρήνας περιστρέφεται γύρω από κάποιο άξονα.

$$\Rightarrow \mu_{\text{π}} \simeq \frac{e\hbar}{2m_{\text{π}}}$$

Βρέθηκε ότι η δέσμη χωρίζεται σε δύο μέρη, έχοντας κατά 1000 φορές μεγαλύτερη απόσταση μεταξύ τους, δηλαδή η μαγνητική διπολική ροπή που παίρνει μέρος είναι εξαρτώμενη από τη μάζα του ηλεκτρονίου.

$$m_{\text{π}} = 1836 m_e$$

Ένα άλλο σοβαρό πρόβλημα

Στα άτομα η πρώτη στοιβάδα με $l = 0$ παίρνει το πολύ 2 ηλεκτρόνια.
Η δεύτερη στοιβάδα με $l = 1$ και εκφυλισμό $2l + 1 = 3$ παίρνει το πολύ 6 ηλεκτρόνια.
Άτομα με 9 η περισσότερα ηλεκτρόνια κατανέμουν το ένατο ηλεκτρόνιο στην τρίτη στοιβάδα.
Ερώτημα: Γιατί δεν πάνε όλα τα ηλεκτρόνια στη θεμελιώδη στάθμη;
Πιθανή απάντηση: Διότι σε κάθε κατάσταση αντιστοιχεί ένα σωματίδιο.
Γιατί τότε για $l = 0$ έχουμε δύο και όχι ένα σωματίδιο;
Απάντηση: Διότι..;;
Ο Pauli εισήγαγε έτσι αυθαίρετα έναν ακόμη (τέταρτο) κβαντικό αριθμό που παίρνει δύο τιμές. Το 1925 και 1926 οι Uhlenbeck και Goudsmit εισήγαγαν το spin και έτσι όλα τα παραπάνω βρήκαν μια φυσιολογική αυτοσυνεπή εξήγηση.

Πληρέστερη και πιο θεμελιώδη εξήγηση έδωσε αργότερα ο Dirac, γράφοντας τη σχετικιστική εξίσωση για το ηλεκτρόνιο.

Το ηλεκτρόνιο λοιπόν έκτος από τροχιακή στροφορμή έχει και "ιδιοστροφορμή" ή "ενδογενή στροφορμή", που την ονομάζουμε *στροφορμή του spin*.

Το spin είναι ένα κβαντομηχανικό μέγεθος και δε μπορεί να περιγραφεί κλασσικά. Είναι μια χαρακτηριστική σταθερά του σωματιδίου, όπως η μάζα και το φορτίο. Το spin δεν οφείλεται σε κάποια περιστροφή του ηλεκτρονίου γύρω από κάποιο άξονα και δε μεταβάλλεται σαν μέγεθος, δε διεγείρεται όπως θα είχαμε σε μια κλασσική περιγραφή (π.χ. περιστροφή).

Το ηλεκτρόνιο έχει μια μαγνητική διπολική ροπή που σχετίζεται με το spin.

$$\boldsymbol{\mu}_s = -g\frac{e}{2m_e}\mathbf{S}$$

όπου g σταθερά, γυρομαγνητικός λόγος του ηλεκτρονίου, και $\mathbf{S}$ είναι το spin του ηλεκτρονίου (ιδιοστροφορμή). Οι συνιστώσες του spin s_x, s_y, s_z ικανοποιούν τις σχέσεις μετάθεσης της στροφορμής. Άρα οι ιδιοτιμές του $\mathbf{S}^2$ και S_z είναι αντίστοιχα:

$$\hbar^2 s(s+1) \quad \text{και} \quad m_s\hbar, \ \ -s \le m_s \le s$$

οπότε η μαγνητική διπολική ροπή κατά τον άξονα z είναι:

$$\boldsymbol{\mu}_{sz} = -g\frac{e\hbar}{2m_e}m_s$$

και επειδή η δέσμη χωρίζεται σε δύο συνιστώσες, το m_s παίρνει δύο μόνο τιμές: $2s+1=2$

$$\Rightarrow \boxed{s=\frac{1}{2}} \Rightarrow \boxed{m_s = \pm\frac{1}{2}}$$

Ο γυρομαγνητικός λόγος g προσδιορίζεται πειραματικά:

$$\boxed{g=2} \qquad \text{«παράγοντας Landé»}$$

Η τιμή αυτή προβλέπεται από την εξίσωση του Dirac για το ηλεκτρόνιο.
Ακριβέστερες μετρήσεις έδωσαν για το γυρομαγνητικό λόγο του ηλεκτρονίου την τιμή $g = 2,00232$ (Lamb, 1947). Η τιμή αυτή υπολογίστηκε ακριβώς από την κβαντική θεωρία πεδίου. Η απόκλιση από την τιμή 2, λέγεται ανώμαλη μαγνητική διπολική ροπή.

Οι τελεστές του spin του ηλεκτρονίου $s = 1/2$ παριστάνονται με διδιάστατους πίνακες:

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

Οι ιδιοσυναρτήσεις του S_z προκύπτουν από την εξίσωση ιδιοτιμών:

$$S_z X_+ = \frac{\hbar}{2}X_+ \Rightarrow X_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

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

Οι κυματοσυναρτήσεις X του ηλεκτρονίου στο χώρο του spin είναι διανύσματα ή αλλιώς πίνακες με μία μόνο στήλη.

$$X = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \alpha X_+ + \beta X_-$$

$$\langle X|X\rangle = X^\dagger X = (\alpha^*, \beta^*)\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \alpha\alpha^* + \beta\beta^*$$

ή

$$|X\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$$
$$\Rightarrow \langle X|X\rangle = \alpha\alpha^*\langle +|+\rangle + \beta\beta^*\langle -|-\rangle + \alpha^*\beta\langle +|-\rangle + \alpha\beta^*\langle -|+\rangle$$
$$\langle +|-\rangle = 0,\ \langle -|+\rangle = 0,\ \langle +|+\rangle = 1,\ \langle -|-\rangle = 1$$

εάν η κυματοσυνάρτηση X είναι κανονικοποιημένη,

$$\Rightarrow \langle X|X\rangle = \alpha\alpha^* + \beta\beta^* = 1$$

Η μέση τιμή ενός τελεστή $\hat{A}$ που δίνεται ως πίνακας A είναι

$$X^\dagger A X = \langle \hat{A}\rangle$$

> **Παράδειγμα**
>
> $$\langle S_x\rangle = X^\dagger S_x X = (\alpha^*, \beta^*)\begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha \\ \beta\end{pmatrix}$$
> $$= (\alpha^*, \beta^*)\begin{pmatrix}\beta\hbar/2 \\ \alpha\hbar/2\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}(\alpha^*\beta + \beta^*\alpha)$$
>
> πραγματικός αριθμός.

Ιδιοτιμές και ιδιοσυναρτήσεις των S_x, S_y

Οι τελεστές S_x, S_y, S_z έχουν τις ίδιες ιδιοτιμές $\pm\hbar/2$.
Ιδιοσυναρτήσεις του $S_x \Rightarrow S_x X_+^{(x)} = \dfrac{\hbar}{2} X_+^{(x)}$

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha \\ \beta\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\alpha \\ \beta\end{pmatrix} \Rightarrow \beta = \alpha$$

Παίρνουμε $\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}$ για κανονικοποίηση.

$$S_x \Rightarrow X_+^{(x)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 \\ 1\end{pmatrix},\quad X_-^{(x)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 \\ -1\end{pmatrix}$$
$$S_y \Rightarrow X_+^{(y)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 \\ i\end{pmatrix},\quad X_-^{(y)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 \\ -i\end{pmatrix}$$

Οι κυματοσυναρτήσεις αυτές ονομάζεται spinors (σπίνορες).

Φυσική ερμηνεία του $X = \begin{pmatrix}\alpha \\ \beta\end{pmatrix}$

$$|X\rangle = \alpha|X_+\rangle + \beta|X_-\rangle$$

$\Rightarrow$ Πιθανότητα $P_\pm$ σε μία μέτρηση του spin κατά τον άξονα z να βρούμε spin $= \pm\hbar/2$.

$$\begin{cases} P_+ = \alpha^*\alpha & \to \text{spin}(z) = \hbar/2 \\ P_- = \beta^*\beta & \to \text{spin}(z) = -\hbar/2 \end{cases}$$

Η κυματοσυνάρτηση λοιπόν του ηλεκτρονίου στο άτομο του υδρογόνου είναι:

$$\Psi(r,\theta,\phi) = R_{nl} Y_{lm} X_{m_s}$$

όπου $X_{m_s} = X_+$ ή X_-.

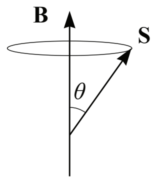
Πίνακες του Pauli:

$$S_k = \frac{\hbar}{2}\sigma_k$$
$$\Rightarrow \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

Ιδιότητες:

- $\sigma_k^2 = 1$
- $\text{trace}\sigma_k = 0$
- $\det \sigma_k = -1$
- $\sigma_x \sigma_y \sigma_z = i$

Ηλεκτρόνιο μέσα σε σταθερό ομογενές μαγνητικό πεδίο



Θεωρούμε την κίνηση ενός φορτισμένου σωματιδίου (ηλεκτρόνιο) μέσα σε σταθερό ομογενές μαγνητικό πεδίο $\mathbf{B} = B\hat{z}$. Επειδή η αλληλεπίδραση του spin με το $\mathbf{B}$ δεν εξαρτάται από τη θέση του σωματιδίου στο χώρο, τότε η χαμιλτονιανή χωρίζεται σε δύο ανεξάρτητα μέρη και η κυματοσυνάρτηση μπορεί να γραφτεί σαν το γινόμενο δύο συναρτήσεων μια που εξαρτάται από το $\mathbf{r}$ και της κυματοσυνάρτησης του spin.

$$\Rightarrow H = H_0 + H_B, \quad H_B = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}$$

$$\mathbf{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A},\ H_0 = \frac{1}{2m}(\mathbf{P} - e\mathbf{A})^2 + U(\mathbf{r}),\ \mathbf{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$$

$$H\Psi = E_{\text{ολ}}\Psi \Rightarrow (H_0 + H_B)\Psi = E_{\text{ολ}}\Psi$$

$$\Psi = \Psi(\mathbf{r})X$$

$$\Rightarrow [H_0\Psi(\mathbf{r})]\,X + \Psi(\mathbf{r})(H_B X) = E_0\Psi X + EX\Psi$$

$$\Rightarrow \begin{cases} H_0\Psi = E_0\Psi \\ H_B X = EX \end{cases}$$

και λύνουμε εδώ τη δεύτερη εξίσωση:

$$\boldsymbol{\mu} = -g\frac{e}{2m_e}\mathbf{S} = -\frac{ge\hbar}{4m_e}\boldsymbol{\sigma}$$

$$H_B = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\left(\frac{-e\hbar Bg}{4m_e}\right)\sigma_z$$

Εξίσωση του Schrödinger χρονικά ανεξάρτητη

$$\Rightarrow H_B X_n = E_n X_n$$

$$\frac{ge\hbar B}{4m_e}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} X_n = E_n X_n, \quad \text{με } n = 1, 2$$

και

$$X_n = \begin{pmatrix} \alpha_n \\ \beta_n \end{pmatrix} \qquad \text{με } |\alpha_n|^2 + |\beta_n|^2 = 1$$

ορίζουμε

$$\boxed{\omega = \frac{egB}{4m_e}}$$

Η γενική **χρονικά εξαρτημένη λύση** του κβαντικού συστήματος θα είναι:

$$X(t) = \sum_n C_n X_n \mathrm{e}^{-iE_n t/\hbar}$$

με $n = 1, 2$. Τα c_n ορίζονται από τις αρχικές συνθήκες.

$$\Rightarrow \omega\hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} X_n = E_n X_n, \quad X_n = \begin{pmatrix} \alpha_n \\ \beta_n \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \omega\hbar\alpha_n = E_n\alpha_n \\ -\omega\hbar\beta_n = E_n\beta_n \end{cases}$$

Μηδενίζουμε την ορίζουσα:

$$\begin{vmatrix} \omega\hbar - E & 0 \\ 0 & -\omega\hbar - E \end{vmatrix} = 0$$

$$\Rightarrow \begin{cases} E_1 = \omega\hbar, & X_1 = \binom{1}{0} = X_+ \\ \alpha_1 = 1, \beta_1 = 0 & \\ E_2 = -\omega\hbar, & X_2 = \binom{0}{1} = X_- \\ \alpha_2 = 0, \beta_2 = 1 & \end{cases}$$

$$X(t) = C_1 \mathrm{e}^{-iE_1 t/\hbar} X_+ + C_2 \mathrm{e}^{-iE_2 t/\hbar} X_-$$

$$X(t) = \begin{pmatrix} C_1 \mathrm{e}^{-i\omega t} \\ C_2 \mathrm{e}^{i\omega t} \end{pmatrix} \qquad |C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$$

Εφαρμογή

Η κυματοσυνάρτηση του spin τη χρονική στιγμή $t = 0$ είναι

$$X(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

δηλαδή το σωματίδιο είχε spin $+\hbar/2$ κατά το θετικό άξονα του x

$$\Rightarrow C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}},\ C_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\Rightarrow X(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-i\omega t} \\ \mathrm{e}^{i\omega t} \end{pmatrix}$$

$$\boxed{X(t) = \frac{\cos\omega t}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} - i \frac{\sin\omega t}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}}$$

$$t = 0 \Rightarrow X(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = X_+(x)$$

$$\omega t = \frac{\pi}{4} \Rightarrow X(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1-i \\ 1+i \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1-i) \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \mathrm{e}^{-i\pi/4} X_+(y)$$

$$\omega t = \frac{\pi}{2} \Rightarrow X(t) = -\frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = -iX_-(x) = \mathrm{e}^{-i\pi/2} X_-(x)$$

$$\omega t = \frac{3\pi}{4} \Rightarrow X(t) = \mathrm{e}^{-i3\pi/4} X_-(y),\ X_-(y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

$$\omega t = \frac{4\pi}{4} = \pi \Rightarrow X(t) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \mathrm{e}^{-i\pi} X_+(x) = \mathrm{e}^{-i\pi} X(0)$$

Δύο συναρτήσεις Ψ_1 και $\mathrm{e}^{i\phi}\Psi_1 = \Psi_2$ που διαφέρουν κατά μία φάση έχουν τις ίδιες πιθανότητες και δίνουν τις ίδιες μετρήσεις. Άρα το s περιστρέφεται γύρω από το $\mathbf{B}$ με γωνιακή ταχύτητα 2ω (*μετάπτωση του spin, συχνότητα Larmor*).

Μπορούμε να λύσουμε τη χρονικά εξαρτημένη εξίσωση του Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}t} = H_B X, \quad H_B = -\boldsymbol{\mu}\mathbf{B}$$

$$\mathbf{B} = B\hat{z} \Rightarrow H_B = \frac{ge\hbar}{4m} B\sigma_z$$

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}t} = \frac{geB}{4m} \hbar\sigma_z X \Rightarrow \boxed{i \frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}t} = \frac{geB}{4m} \sigma_z X}$$

$$X(t) = \begin{pmatrix} C_+(t) \\ C_-(t) \end{pmatrix} \Rightarrow i \begin{pmatrix} \dfrac{\mathrm{d}C_+}{\mathrm{d}t} \\ \dfrac{\mathrm{d}C_-}{\mathrm{d}t} \end{pmatrix} = \omega \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_+ \\ C_- \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} i\dfrac{\mathrm{d}C_+}{\mathrm{d}t} = \omega C_+ \Rightarrow C_+(t) = C_+(0)\mathrm{e}^{-i\omega t} \\ i\dfrac{\mathrm{d}C_-}{\mathrm{d}t} = -\omega C_- \Rightarrow C_-(t) = C_-(0)\mathrm{e}^{i\omega t} \end{cases}$$

$$\Rightarrow X = \begin{pmatrix} C_+(t) \\ C_-(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_+(0)\mathrm{e}^{-i\omega t} \\ C_-(0)\mathrm{e}^{i\omega t} \end{pmatrix}$$

Οριακή συνθήκη $X(0) = X_+(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$\Rightarrow \boxed{X(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-i\omega t} \\ \mathrm{e}^{i\omega t} \end{pmatrix}}$$

$$\omega = \frac{geB}{4m_e} \Rightarrow 2\omega = \frac{eB}{m_e}$$

$$X(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \cos\omega t - i\sin\omega t \\ \cos\omega t + i\sin\omega t \end{pmatrix}$$

$$X(t) = \frac{\cos\omega t}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} - i\frac{\sin\omega t}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$X(t) = \cos\omega t X_+(x) - i\sin\omega t X_-(x)$$

5.5 Πρόσθεση στροφορμών

(α) Υποθέστε ότι έχουμε ένα σύστημα δύο σωματιδίων που οι στροφορμές τους $\mathbf{J}_1$ και $\mathbf{J}_2$ έχουν καθορισμένο μέγεθος, αλλά που ο προσανατολισμός τους μπορεί να παίρνει όλες τις επιτρεπόμενες τιμές.

(β) Υποθέστε (εναλλακτικά) ότι έχουμε ένα ηλεκτρόνιο, το οποίο εκτός από τροχιακή στροφορμή $\mathbf{J}_1$ έχει και στροφορμή του spin $\mathbf{J}_2$ και χρειάζεται να υπολογίσουμε την ολική στροφορμή του.

Και στις δύο προηγούμενες περιπτώσεις έχουμε δύο τελεστές στροφορμής, τους $\mathbf{J}_1$, $\mathbf{J}_2$, που μετατίθενται μεταξύ τους:

$$[J_{1k}, J_{2l}] = 0 \;\forall k, l = 1, 2, 3$$

και ισχύει:

$$[J_{1k}, J_{1l}] = i\hbar\epsilon_{kl\rho}J_{1\rho}$$

$$[J_{2k}, J_{2l}] = i\hbar\epsilon_{kl\rho}J_{2\rho}$$

Το άθροισμα αυτών των δύο τελεστών είναι ένας τελεστής στροφορμής, η ολική στροφορμή του συστήματος. Πράγματι, ορίζουμε

$$J_k = J_{1k} + J_{2k}$$

με ιδιότητες μετάθεσης:

$$[J_k, J_l] = i\hbar J_\rho \epsilon_{kl\rho}$$

$$\Rightarrow \boxed{\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2} \quad \text{Ολική στροφορμή του συστήματος}$$

Έστω ότι $J_1(J_1+1)\hbar^2$, $J_2(J_2+1)\hbar^2$ και $J(J+1)\hbar^2$ είναι οι ιδιοτιμές των τελεστών $\mathbf{J}_1^2$, $\mathbf{J}_2^2$ και $\mathbf{J}^2$ αντίστοιχα. Το πρόβλημά μας είναι να υπολογίσουμε τις δυνατές τιμές του J, με γνωστά τα J_1, J_2.

Οι τελεστές $\mathbf{J}_1^2$ και $\mathbf{J}_2^2$ μετατίθενται μεταξύ τους. Ο τελεστής

$$\mathbf{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = (J_{1x} + J_{2x})^2 + (J_{1y} + J_{2y})^2 + (J_{1z} + J_{2z})^2$$

μετατίθεται με τους $\mathbf{J}_1^2$ και $\mathbf{J}_2^2$.
Έχουμε την ταυτότητα:

$$\mathbf{J}^2 = (\mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2)\cdot(\mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2) = \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + 2\mathbf{J}_1\cdot\mathbf{J}_2, \quad \text{όπου } \mathbf{J}_1\cdot\mathbf{J}_2 = J_{1x}J_{1y} + J_{1y}J_{2y} + J_{1z}J_{2z}$$

διότι τα $\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2$ μετατίθενται μεταξύ τους.

Σημειώνουμε πρώτα ότι:

$$[\mathbf{J}^2, J_x] = 0, \quad [\mathbf{J}^2, J_y] = 0, \quad [\mathbf{J}^2, J_z] = 0$$
$$[J^2, J_{1x}] = 2i\hbar J_{1y}J_{2z} - 2i\hbar J_{1z}J_{2y}$$
$$[J^2, J_{2x}] = -2i\hbar J_{1y}J_{2z} + 2i\hbar J_{1z}J_{2y}$$
$$\Rightarrow [J^2, J_{1x} + J_{2x}] = 0$$

Προσοχή:

$$[\mathbf{J}^2, J_{1x}] \neq 0, \quad [\mathbf{J}^2, J_{2x}] \neq 0$$

Κατά δεύτερον:

$$\begin{aligned}
[\mathbf{J}^2, J_{1x}^2] &= [\mathbf{J}_1^2, J_{1x}^2] + [\mathbf{J}_2^2, J_{1x}^2] + 2[\mathbf{J}_1\cdot\mathbf{J}_2, J_{1x}^2] \\
&= 0 + 0 + 2[\mathbf{J}_2\cdot\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_{1x}^2] \\
\Rightarrow [\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_1^2] &= 2[\mathbf{J}_2\cdot\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_1^2] \\
&= 2[J_{2x}J_{1x}, \mathbf{J}_1^2] + 2[J_{2y}J_{1y}, \mathbf{J}_1^2] + 2[J_{2z}J_{1z}, \mathbf{J}_1^2] = 0
\end{aligned}$$

διότι $[J_{1k}, \mathbf{J}_1^2] = 0, \forall k$. Όμοια, $[\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_2^2] = 0$.
Άρα έχουμε ένα σύνολο 4 μετατιθέμενων τελεστών, $\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, \mathbf{J}^2, J_z$, με κοινό σύστημα ιδιοσυναρτήσεων.
Επίσης αποδεικνύεται εύκολα ότι:

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + 2\mathbf{J}_1\cdot\mathbf{J}_2 = \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + 2J_{1z}J_{2z} + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+}$$

Οι κοινές ιδιοσυναρτήσεις $\Phi_{jj_1j_2m} = \Phi_{jm}$ είναι γραμμικός συνδυασμός των γινομένων $\Psi_{j_1m_1}\Psi_{j_2m_2}$ με $m_1 + m_2 = m$, π.χ.

$$\begin{aligned}
J_z\Phi_{jm} &= (J_{1z} + J_{2z})\Psi_{j_1m_1}\Psi_{j_2m_2} = (J_{1z}\Psi_{j_1m_1})\Psi_{j_2m_2} + \Psi_{j_1m_1}(J_{2z}\Psi_{j_2m_2}) = (m_1 + m_2)\Psi_{j_1m_1}\Psi_{j_2m_2} \\
&= m\Phi_{jm}
\end{aligned}$$

Το σύνολο των συναρτήσεων $\Psi_{j_1m_1}\Psi_{j_2m_2}$ είναι $(2j_1+1)(2j_2+1)$, όσα είναι τα δυνατά ζεύγη (m_1, m_2). Ενώ σε μία ιδιοτιμή του J_z την m αντιστοιχούν πολλοί συνδυασμοί (m_1, m_2) με $m_1 + m_2 = m$. Στόχος είναι να βρούμε τους σωστούς γραμμικούς συνδυασμούς των $\Psi_{j_1m_1}\Psi_{j_2m_2}$ ώστε να αντιστοιχούν στην ίδια ιδιοτιμή j του τελεστή $\mathbf{J}^2$.
Για μια δυνατή τιμή J της ολικής στροφορμής το m παίρνει τις τιμές

$$-j, \ldots, j, \quad \text{σύνολο } 2j+1$$

Γνωρίζοντας λοιπόν το σύνολο των δυνατών τιμών του m, μπορούμε να βρούμε τις τιμές του j που χρειάζονται για να το καλύψουν. Η μέγιστη τιμή του j αντιστοιχεί στη μέγιστη τιμή του $m = j_1 + j_2 = j_{\max}$, με ιδιοσυνάρτηση μόνο την

$$\Phi_{j\max, j\max} = \Psi_{j_1j_1}\Psi_{j_2j_2} \equiv \tilde{\Phi}_{j_{\max}}$$

Την κυματοσυνάρτηση με $m = j_1 + j_2 - 1 = j_{\max} - 1$, αλλά με την ίδια ιδιοτιμή του $\mathbf{J}^2$ την βρίσκουμε δρώντας με τον τελεστή

$$J_- = J_{1-} + J_{2-}, \qquad [J^2, J_-] = 0$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \hbar\sqrt{2J_{\max}}\,\tilde{\Phi}_{J\max-1} &= J_-\tilde{\Phi}_{J\max} = (J_{1-} + J_{2-})\Psi_{j_1j_1}\Psi_{j_2j_2} \\
&= (J_{1-}\Psi_{j_1j_1})\Psi_{j_2j_2} + \Psi_{j_1j_1}(J_{2-}\Psi_{j_2j_2}) \\
&= C_{1-}\Psi_{j_1,j_1-1}\Psi_{j_2j_2} + C_{2-}\Psi_{j_1j_1}\Psi_{j_2,j_2-1}
\end{aligned}$$

$$C_{1-} = \hbar\sqrt{j_1(j_1+1) - j_1(j_1-1)} = \hbar\sqrt{2j_1}$$

$$C_{2-} = \hbar\sqrt{2j_2}$$

με ιδιοτιμή του J_z ίση με $(j_1 + j_2 - 1)\hbar$ και ιδιοτιμή του $\mathbf{J}^2$ ίση με $\hbar^2(j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1)$.

Εφαρμόζοντας την προηγούμενη διαδικασία $2J_{\max}$ φορές, βρίσκουμε όλες τις ιδιοσυναρτήσεις $\Phi_{J\max,\,\mathrm{m}}$. Υπάρχει ένας ακόμα γραμμικά ανεξάρτητος συνδυασμός των

$$\Psi_{j_1,j_1-1}, \Psi_{j_2,j_2} \qquad \text{και} \qquad \Psi_{j_1 j_1}\Psi_{j_2,j_2-1}$$

$$\Phi = \alpha\Psi_{j_1,j_2-1}\Psi_{j_2,j_2} + \beta\Psi_{j_1 j_1}\Psi_{j_2 j_2-1}$$

με ιδιοτιμή του $m = j_1 + j_2 - 1$, αλλά ιδιοτιμή $j = j_1 + j_2 - 1$ για το $\mathbf{J}^2$.

Μπορούμε τώρα να δούμε έναν σχηματικό τρόπο για να βρούμε τις δυνατές τιμές της ολικής στροφορμής. Φτιάχνουμε έναν πίνακα τιμών του $m = m_1 + m_2$ για $j_1 = 1$ και $j_2 = 2$, για παράδειγμα.

m_1/m_2	2	1	0	-1	-2
1	3	2	1	0	-1
0	2	1	0	-1	-2
-1	1	0	-1	-2	-3

Αν ξεκινήσουμε στον πίνακα από την πρώτη του γραμμή, προχωρήσουμε οριζόντια μέχρι το τέλος και κατεβούμε προς τα κάτω, θα συναντήσουμε τις τιμές του m που αντιστοιχούν σε $j = j_1 + j_2 = 3$.
Μετά παίρνουμε τη δεύτερη γραμμή και κάνουμε το ίδιο· οι τιμές του m που συναντούμε αντιστοιχούν σε $j = j_1 + j_2 - 1 = 2$.
Η τρίτη γραμμή θα δώσει τιμές του m για τον κβαντικό αριθμό $j = j_1 + j_2 - 2 = 1 = j_2 - j_1$ σε αυτήν την περίπτωση.
Πράγματι όλες οι δυνατές τιμές που μπορεί να πάρει το j δίνονται από τη σχέση:

$$j_1 + j_2 \geq j \geq j_1 + j_2 - 2j_1 = j_2 - j_1$$

υποθέτοντας ότι $j_2 \geq j_1$.

Απόδειξη. Θα αποδείξουμε ότι

$$j_1 + j_2 \geq j \geq |j_1 - j_2|$$

με βήμα ένα.
Ο αριθμός των γραμμικά ανεξάρτητων ιδιοσυναρτήσεων των τελεστών $(\mathbf{J}^2, J_z)$ είναι $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$. Έστω λοιπόν ότι το j παίρνει τις τιμές

$$j_1 + j_2, j_1 + j_{2-1}, \ldots, j_1 + j_2 - n$$

Έχουμε

$$\Big[2(j_1 + j_2) + 1\Big] + \Big[2(j_1 + j_2 - 1) + 1\Big] + \ldots + \Big[2(j_1 + j_2 - n) + 1\Big]$$

$$\begin{aligned}
&= 2(j_1 + j_2)(n + 1) + (n + 1) - 2(1 + 2 + \ldots + n) \\
&= 2(j_1 + j_2)(n + 1) + n + 1 - 2\frac{(n + 1)n}{2} \\
&= (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow 2(j_1 + j_2)n + 2\cancel{(j_1 + j_2)} + \cancel{n} + \cancel{1} - n^2 - \cancel{n} = 4j_1j_2 + \cancel{2j_1} + \cancel{2j_2} + \cancel{1}$$

$$\Rightarrow n^2 - n(2j_1 + 2j_2) + 4j_1j_2 = 0$$

$$n = \frac{2}{2}(j_1 + j_2) \pm \frac{1}{2}\sqrt{4(j_1 + j_2)^2 - 16j_1j_2}$$

$$n = (j_1 + j_2) \pm \sqrt{(j_1 - j_2)^2} = (j_1 + j_2) \pm |j_1 - j_2|$$

Δεκτή μόνο η λύση

$$n = (j_1 + j_2) - |j_1 - j_2|\,,$$

$$\text{εάν } j_2 > j_1 \;\Rightarrow n = (j_1 + j_2) - (j_2 - j_1) = 2j_1$$

$$\Rightarrow J_{\max} = j_1 + j_2, \quad J_{\min} = j_1 + j_2 - n = j_1 + j_2 - 2j_1 = j_2 - j_1$$
$$J_{\min} = |j_1 - j_2|$$

Εάν

$$j_1 = j_2 = j \Rightarrow \begin{cases} J_{\max} = 2j \\ J_{\min} = 0 \end{cases}$$

Οι καταστάσεις με μέγιστο $j = j_{\max} = 2j$ είναι συμμετρικές στην εναλλαγή των μεταβλητών των δύο σωματιδίων. Το επόμενο σύνολο ιδιοσυναρτήσεων με $j = 2j - 1$ είναι αντισυμμετρικό στην εναλλαγή. Και πάει εναλλάξ καθώς ελαττώνεται το j.

□

Πρόσθεση τροχιακής στροφορμής l και spin $s = 1/2$

$$\mathbf{J}_1 = \mathbf{L}, \qquad \mathbf{J}_2 = \mathbf{S}$$
$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \Rightarrow J_z = L_z + S_z$$
$$\Rightarrow J_{\max} = l + \frac{1}{2}, \quad J_{\min} = l - \frac{1}{2}$$

5.5.1 Πρόσθεση δύο spin $1/2$

Από την πρόσθεση προκύπτουν δύο τιμές της ολικής στροφορμής $s = 1$ και $s = 0$. Έστω $\mathbf{S}^{(1)}$ και $\mathbf{S}^{(2)}$ αντίστοιχα οι δύο τελεστές του spin για τα δύο σωματίδια.

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

και οι ιδιοσυναρτήσεις του spin είναι αντίστοιχα

$$X_{\pm}^{(1)}, \; X_{\pm}^{(2)}.$$

Οι καταστάσεις με συνολικό spin $s = 1$ είναι

$$\begin{cases} \Psi_{11} = X_{+}^{(1)} X_{+}^{(2)} & \mathbf{S}^2 \Psi_{11} = 2\hbar^2 \Psi_{11} \\ \Psi_{1,-1} = X_{-}^{(1)} X_{-}^{(2)} & \mathbf{S}^2 \Psi_{1,-1} = 2\hbar^2 \Psi_{1,-1} \end{cases}$$

Για να πάρουμε την Ψ_{10} δρούμε με τον τελεστή $S_- = S_-^{(1)} + S_-^{(2)}$ στην Ψ_{11}.

$$\begin{aligned} S_- \Psi_{11} = \hbar\sqrt{2}\Psi_{10} &= (S_-^{(1)} + S_-^{(2)}) X_+^{(1)} X_+^{(2)} \\ &= (S_-^{(1)} X_+^{(1)}) X_+^{(2)} + X_+^{(1)} (S_-^{(2)} X_+^{(2)}) \\ &= \hbar X_-^{(1)} X_+^{(2)} + \hbar X_+^{(1)} X_-^{(2)} = \hbar \left(X_-^{(1)} X_+^{(2)} + X_+^{(1)} X_-^{(2)} \right) \end{aligned}$$

$$\mathbf{S}^2 \Psi_{10} = 2\hbar^2 \Psi_{10}$$

Κανονικοποιώντας την Ψ_{10} έχουμε:

$$\Psi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(X_-^{(1)} X_+^{(2)} + X_+^{(1)} X_-^{(2)} \right)$$

συμμετρικός συνδυασμός των $X_-^{(1)} X_+^{(2)}$ και $X_+^{(1)} X_-^{(2)}$.

$$S_z X_-^{(1)} X_+^{(2)} = 0$$

$$S_z X_+^{(1)} X_-^{(2)} = 0$$

$$\Rightarrow S_z \Psi_{10} = 0$$

Εάν $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$, τότε

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}^2 &= (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2) \cdot (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2) \\
&= \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2
\end{aligned}$$

($\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y} + S_{1z}S_{2z}$).

Θα δείξουμε ότι:

$$2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = 2S_{1z}S_{2z} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}$$

$$S_{1+} = S_{1x} + iS_{1y}, \quad S_{2+} = S_{2x} + iS_{2y}$$

$$S_{1-} = S_{1x} - iS_{1y}, \quad S_{2-} = S_{2x} - iS_{2y}$$

$$\begin{aligned}
S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+} &= (S_{1x} + iS_{1y})(S_{2x} - iS_{2y}) + (S_{1x} - iS_{1y})(S_{2x} - iS_{2y}) \\
&= 2S_{1x}S_{2x} + 2S_{1y}S_{2y}
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \mathbf{S}^2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}^2\Psi_{11} &= S_1^2 X_+^{(1)}X_+^{(2)} + \mathbf{S}_2^2 X_+^{(1)}X_+^{(2)} + 2S_{1z}S_{2z}X_+^{(1)}X_+^{(2)} + S_{1+}S_{2-}X_+^{(1)}X_+^{(2)} + S_{1-}S_{2+}X_+^{(1)}X_+^{(2)} \\
&= \hbar^2\frac{3}{4}X_+^{(1)}X_+^{(2)} + \hbar^2\frac{3}{4}X_+^{(1)}X_+^{(2)} + 2\frac{\hbar}{2}\frac{\hbar}{2}X_+^{(1)}X_+^{(2)} + (\cancelto{0}{S_{1+}X_+^{(1)}})(S_{2-}X_+^{(2)}) + (S_{1-}X_+^{(2)})(\cancelto{0}{S_{2+}X_+^{(2)}}) \\
&= \hbar^2\frac{8}{4}X_+^{(1)}X_+^{(2)} = 2\hbar^2 X_+^{(1)}X_+^{(2)}
\end{aligned}$$

Όμοια δουλεύουμε και για τις άλλες καταστάσεις Ψ_{10} και $\Psi_{1,-1}$.
Η ιδιοσυνάρτηση με spin $s = 0$ είναι γραμμικός συνδυασμός των $X_-^{(1)}X_+^{(2)}$, $X_+^{(1)}X_-^{(2)}$ αντισυμμετρική και ορθογώνια στην Ψ_{10}:

$$\Psi_{00} = aX_-^{(1)}X_+^{(2)} + bX_+^{(1)}X_-^{(2)}$$

$$\begin{aligned}
\langle\Psi_{10}|\Psi_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big\{ & a\langle X_-^{(1)}X_+^{(2)}|X_-^{(1)}X_+^{(2)}\rangle \\
&+ a\langle X_+^{(1)}X_-^{(2)}|X_-^{(1)}X_+^{(2)}\rangle + b\langle X_-^{(1)}X_+^{(2)}|X_+^{(1)}X_-^{(2)}\rangle \\
&+ b\langle X_+^{(1)}X_-^{(2)}|X_+^{(1)}X_-^{(2)}\rangle\Big\} = 0 \\
&\Rightarrow a + 0 + 0 + b = 0 \Rightarrow a = -b
\end{aligned}$$

και

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 \Rightarrow 2\,|a|^2 = 1$$

$$\Rightarrow a = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad b = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\Psi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(X_-^{(1)}X_+^{(2)} - X_+^{(1)}X_-^{(2)}\right) \quad S_z\Psi_{00} = 0 \quad \text{και} \quad \mathbf{S}^2\Psi_{00} = 0$$