Moment hybnosti, spin

Kvantová chemie

Lekce 2

Osnova

1. Orbitální moment hybnosti v klasické a kvantové mechanice
2. Kompatibilita složek vektoru momentu hybnosti
3. Měření momentu hybnosti
4. Skládání momentů hybnosti (v kvantové mechanice)
5. Spin
6. Reprezentace spinu v kvantové mechanice (stavový prostor, operátory)
7. Skládání spinů

Orbitální moment hybnosti

Klasická mechanika

- $\vec{M} = \vec{r} \times \vec{p}\,, \quad \vec{M} = \sum_{k=1}^{N} \vec{r}_k \times \vec{p}_k$
- $M_i = \varepsilon_{ijk} x_j p_k, \quad \varepsilon_{ijk} = \mathrm{sign}[(j-i)(k-j)(k-i)]$, Einsteinova sumační konvence!

Kvantová mechanika

- $\hat{\vec{X}} = [x, y, z], \quad \hat{\vec{P}} = [-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}]$
- $\hat{M}_x = -i\hbar y\frac{\partial}{\partial z} + i\hbar z\frac{\partial}{\partial y}\,, \hat{L}_x = \hat{M}_x/\hbar = -iy\frac{\partial}{\partial z} + iz\frac{\partial}{\partial y}$
- …

[wiki, wiki]

Kompatibilita složek momentu hybnosti

Komutační relace

- $\left[\hat{L}_j, \hat{L}_k\right] = i\varepsilon_{jkl}\hat{L}_l$
- složky vektoru momentu hybnosti nejsou kompatibilní (přesně můžeme v daném měření změřit jen jednu)

Velikost vektoru momentu hybnosti

- $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$
- $\left[\hat{L}^2, \hat{L}_k\right] = 0$

(Ú)MKP pro moment hybnosti

- $\hat{L}^2, \hat{L}_z$

[wiki]

Měření momentu hybnosti

Spektrum $\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{\boldsymbol{L}}_z$

- komutující operátory mají společné vlastní vektory
- $\hat{L}^2|L^2, L_z\rangle = L^2|L^2, L_z\rangle$
- $\hat{L}_z|L^2, L_z\rangle = L_z|L^2, L_z\rangle$

***X*-reprezentace**

- sférické souřadnice ($x = r\sin\theta\cos\phi$, $y = r\sin\theta\sin\phi$, $z = r\cos\theta$)
- $\hat{L}^2 = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial^2\phi}$
- $\hat{L}_z = -i\frac{\partial}{\partial\phi}$
- $\varphi_{L^2L_z} = \varphi_{L^2L_z}(\theta, \phi)$, chybí *r* (interpretace!)

[wiki]

Měření momentu hybnosti

Řešení rovnic pro vlastní hodnoty a čísla

- $L^2 = l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots$
- $L_z = m, \quad m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$

- $\varphi_{L^2 L_z}(\theta, \phi) = Y_{lm}(\theta, \phi)$
  - $Y_{lm}(\theta, \phi) \sim P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi}$ [*kulové funkce, sférické harmoniky, ...*]
  - $P_l^m(x) \sim (1 - x^2)^{m/2} \frac{\mathrm{d}^{m+l}}{\mathrm{d}x^{m+l}} (x^2 - 1)^l$ [*přidružené Legendrovy funkce*]

Skládání (dvou) momentů hybnosti

Dva momenty hybnosti (např. dvě částice) ...

- $\hat{\vec{L}}_1 \;\rightarrow\; \hat{L}_1^2, \hat{L}_{1z} \;\rightarrow\; |l_1, m_1\rangle, \quad Y_{l_1 m_1}(\theta_1, \phi_1)$
- $\hat{\vec{L}}_2 \;\rightarrow\; \hat{L}_2^2, \hat{L}_{2z} \;\rightarrow\; |l_2, m_2\rangle, \quad Y_{l_2 m_2}(\theta_2, \phi_2)$

... a jejich složení

- klasická mechanika: $\vec{L}_1, \vec{L}_2 \rightarrow \vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$
- kvantová mechanika: $\hat{\vec{L}}_1, \hat{\vec{L}}_2 \;\rightarrow\; \hat{\vec{L}} \quad = \hat{\vec{L}}_1 + \hat{\vec{L}}_2$

[wiki]

Skládání (dvou) momentů hybnosti

Reprezentace 1 – dva momenty hybnosti

- $\hat{L}_1^2, \hat{L}_{1z}, \hat{L}_2^2, \hat{L}_{2z} \ \rightarrow \ |l_1, m_1\rangle|l_2, m_2\rangle = |l_1, m_1; l_2, m_2\rangle$ (tenzorový součin prostorů)
- v *X*-reprezentaci: $|l_1, m_1; l_2, m_2\rangle = Y_{l_1 m_1}(\theta_1, \phi_1) Y_{l_2 m_2}(\theta_2, \phi_2)$

Reprezentace 2 – celkový moment hybnosti

- $\hat{L}^2, \hat{L}_z \ \rightarrow \ |l, m\rangle$
- $l = |l_1 - l_2|, \ldots, l_1 + l_2$
- $m = -l, \ldots, +l$ (pro každou hodnotu l)

Spin

Objev spinu (vlastního magnetického momentu elektronu)

- experiment: pohyb atomů stříbra v nehomogenním magnetickém poli (Gerlach, Stern 1922)
- teoretická interpretace: vlastní moment hybnosti elektronu (Uhlenbeck, Goudsmit)

Vlastnosti spinu

- nemá klasický protějšek (problém s použitím principu korespondence)
- moment hybnosti (analogie s orbitálním momentem hybnosti)
- velikost pro danou částici daná (neměnná): $S^2 = s(s+1)$
- jen projekce na vybranou osu se může měnit: $S_z = m_S, \xi = -s, -s+1, \dots, s-1, s$
- pro elektron: $s = 1/2, \xi = \pm 1/2$

[wiki]

Reprezentace spinu v kvantové mechanice

Stav (1 částice)

- $|\mathrm{orbit}\rangle|\xi\rangle$, tenzorový součin orbitálního a spinového stavového prostoru
- $\varphi(\vec{r},\xi) \;\rightarrow\;$ multikomponentní vlnové funkce (spinory): $\mathbf{\Psi}(\vec{r}) = \begin{bmatrix} \varphi(\vec{r},\xi=+s) \\ \vdots \\ \varphi(\vec{r},\xi=-s) \end{bmatrix}$

Operátory

- (hermitovské) matice $(2s+1)\times(2s+1)$ operující na spinorech
- splňující komutační relace pro moment hybnosti
- např. pro elektrony (částice se spinem $s = 1/2$)

$$\hat{s}_x = \begin{bmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{bmatrix},\quad \hat{s}_y = \begin{bmatrix} 0 & -i/2 \\ i/2 & 0 \end{bmatrix},\quad \hat{s}_z = \begin{bmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{bmatrix}$$

[wiki]

Skládání spinů

Obecné pravidlo

- jako momenty hybnosti
- stejným způsobem můžeme skládat i spin s orbitálním momentem hybnosti

Příklad: Dvojice elektronů

- jednotlivé elektrony
  - $s_1 = \frac{1}{2}, \quad \xi_1 = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$
  - $s_2 = \frac{1}{2}, \quad \xi_2 = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$
  - celkem 4 spinové stavy
- celkový spin
  - $s = 0, \quad \xi = 0$
  - $s = 1, \quad \xi = +1, 0, -1$
  - celkem 1+3 = 4 spinové stavy
  - multiplicita (**singlet**, dublet, **triplet**, kvadruplet, ... pro $s = \mathbf{0}, \frac{1}{2}, \mathbf{1}, \frac{3}{2}, ...$)

Konec lekce 2.