

## Rozdział 17

# Teoria spinu 1/2

### 17.1 Wprowadzenie – braki dotychczasowej teorii

W dotychczasowych rozważaniach dotyczących różnych układów fizycznych (w tym i atomu wodoropodobnego) wielokrotnie zastrzegaliśmy się, że mówimy o cząstce bezspinowej. Omawiając strukturę atomu opisywaliśmy elektron (w układzie środka masy) jako cząstkę punktową scharakteryzowaną przez funkcję falową  $\psi(\vec{r}) = \psi(x, y, z)$ . Uzyskane wyniki, choć ściśle matematycznie, są niedokładne fizycznie. Brak bowiem, na przykład

- uwzględnienia faktu, że elektron posiada spin.
- poprawek relatywistycznych, (itp., itd.).

Można uniknąć wielu z tych braków jeżeli rozważać będziemy w pełni relatywistyczne równania Diraca. Wtedy też, niejako automatycznie, pojawia się spin. Spin został jednak odkryty doświadczalnie przed opublikowaniem równania Diraca. Pauli zbudował odpowiednią teorię, która jak się okazuje, jest granicznym przypadkiem teorii Diraca. W niniejszym wykładzie nie będziemy posługiwać się równaniem Diraca. Omówimy więc teorię Pauliego, a poprawki relatywistyczne rozważymy później, w ramach rachunku zaburzeń. Przesłanki doświadczalne wskazujące na istnienie spinu są następujące.

- Doświadczenie Sterna–Gerlacha. Wiązka atomów srebra ulega w niejednorodnym polu magnetycznym rozszczepieniu na dwie składowe.
- Linie widmowe atomów są na ogół rozszczepione, czego nie wyjaśnia dotychczas omawiana teoria atomu wodoropodobnego.
- W normalnym efekcie Zeemana linia widmowa jest rozszczepiona na nieparzystą ilość linii. Wielkość rozszczepienia jest wprost proporcjonalna do natężenia pola  $\vec{B}$ . Efekt ten wyjaśnialiśmy wiążąc z ruchem elektronu moment magnetyczny

$$\vec{M} = \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L}, \quad (17.1)$$

gdzie  $\mu_B = e\hbar/2m_e$  – magneton Bohra. Niekiedy jednak występuje tzw. "anomalny" efekt Zeemana, w którym linia widmowa ulega rozszczepieniu na parzystą liczbę składowych. Orbitalna liczba kwantowa  $l$  jest całkowita, magnetyczna liczba kwantowa  $m$  przyjmuje więc  $(2l + 1)$  wartości – ilość nieparzystą. To wyjaśnia normalny efekt Zeemana. W efekcie anomalnym liczba linii jest parzysta, co sugeruje istnienie połówkowych wartości momentu pędu. Ogólna teoria momentu pędu dopuszcza taką możliwość, podczas gdy dla orbitalnego momentu pędu liczba kwantowa  $l$  jest zawsze całkowita.

Fakty te pozwalają domniemywać, że istnieje (w atomach i nie tylko) moment pędu połówkowy. Wymaga to jednak przyjęcia dodatkowych założeń (lub rozbudowania postulatów).

## 17.2 Postulaty teorii Pauliego

Wyjaśnienie omówionych faktów doświadczalnych wymaga postulatu, że elektron posiada wewnętrzny moment pędu (spin) taki, że związany z nim jest moment magnetyczny

$$\vec{\mu}_s = 2 \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S} \quad \text{gdzie} \quad \mu_B = - \frac{|e|\hbar}{2m_e}, \quad (17.2)$$

bowiem elektron ma ujemny ładunek. Zwróćmy tu uwagę na dodatkowy czynnik 2, sprawiający, że spinowy moment magnetyczny jest, formalnie rzecz biorąc, dwukrotnie większy niż orbitalny. Współczynnik ten zwany współczynnikiem giromagnetycznym dla elektronu, daje się wyjaśnić dopiero na gruncie elektrodynamiki kwantowej. Istnienie spinu sprawia, że do dotychczasowych postulatów musimy dodać następne. Niezależnie od zmiennych  $\vec{r}$  i  $\vec{p}$ , które nazwiemy zmiennymi orbitalnymi, musimy jeszcze mieć jakieś zmienne spinowe.

1. Wielkość fizyczna zwana spinem jest momentem pędu. Wobec tego odpowiadająca jej obserwabla ma charakter wektora  $\vec{S} = (S_1, S_2, S_3)$ , którego składowe są operatorami hermitowskimi, tj.  $S_k^\dagger = S_k$ , a także muszą spełniać kanoniczne relacje komutacyjne

$$[S_k, S_m] = i\hbar \varepsilon_{kmn} S_n. \quad (17.3)$$

W świetle ogólnej teorii momentu pędu, stwierdzamy, że istnieją stany spinowe  $|s, m_s\rangle$  spełniające równania własne

$$\vec{S}^2 |s, m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s, m_s\rangle \quad (17.4a)$$

$$S_3 |s, m_s\rangle = \hbar m_s |s, m_s\rangle, \quad (17.4b)$$

gdzie wartości własne  $s$  są całkowite lub połówkowe (nie przesadzamy tego na razie), zaś  $m_s$  zmienia się co 1 od minimalnej wartości  $(m_s)_{\min} = -s$  do  $(m_s)_{\max} = s$ .

2. Cząstka danego typu (np. elektron) ma jednoznacznie określoną liczbę kwantową  $s$ . Mówimy wtedy, że cząstka ta ma spin  $s$ . Przestrzeń stanów spinowych dla tej cząstki jest więc  $(2s+1)$ -wymiarowa, ze względu na dopuszczalne wartości liczby  $m_s$ . Wszystkie stany spinowe cząstki odpowiadają tylko jednej wartości własnej  $\vec{S}^2$  równej  $\hbar^2 s(s+1)$ , zaś różnią się liczbą kwantową  $m_s$ .
3. Istnieją cząstki z  $s = 0$ , wtedy zmienne orbitalne, a więc "zwykła" funkcja falowa, wystarcza do opisu stanu cząstki bezspinowej. Dla cząstki o spinie  $s \neq 0$  pojęcie funkcji falowej (określonej zmiennymi orbitalnymi) trzeba rozszerzyć. Odpowiedni ZZOK musi również zawierać operatory spinowe  $\vec{S}^2$  oraz  $S_3$ . Stan cząstki opisuje więc wektor stanu będący złożeniem stanu orbitalnego (funkcji falowej) i stanu spinowego.
4. Zmienne spinowe charakteryzujące cząstkę działają w przestrzeni spinów, a więc z definicji komutują z obserwablami działającymi w przestrzeni charakteryzowanej zmiennymi orbitalnymi

$$[S_k, \hat{A}(\vec{r}, \vec{p})] = 0, \quad (17.5)$$

dla dowolnego operatora  $\hat{A}(\vec{r}, \vec{p}) = \hat{A}(\vec{r}, -i\hbar\nabla)$ .

5. Elektron ma spin  $s = 1/2$  i moment magnetyczny dany wzorem (17.2).

### Komentarze dodatkowe

Proton i neutron też mają spin  $s = 1/2$ . Ich współczynniki giromagnetyczne są jednak inne. Znamy cząstki zarówno o spinie całkowitym (tzw. bozony) i cząstki o spinie połówkowym (fermiony).

Elektron uważamy za cząstkę punktową. W szkolnych podręcznikach czasami przedstawia się elektron jako cząstkę rozciągłą i tłumaczy istnienie spinu – wewnętrznego momentu pędu jako efekt wirowania. JEST TO BZDURA !! Uzasadnienie jest następujące. Załóżmy, że elektron rzeczywiście jest cząstką rozciągłą, która wiruje wokół własnej osi. Wirowanie to ma być przyczyną powstawania wewnętrznego momentu pędu – spinu. Rodzi to jednak serię problemów. Po pierwsze, cząstka rozciągła wymaga więcej niż 3 zmienne do jej pełnego opisu (np. trzy składowe położenia i trzy kąty Eulera opisujące orientację w przestrzeni). Po drugie, obroty bryły rozciągłej miałyby charakter przestrzenny. Związany z tym moment pędu powinien być opisywany całkowitymi liczbami kwantowymi. Wnioskujemy więc, że spin elektronu nie może być powiązany z obrotami przestrzennymi.

Aby się jeszcze lepiej o tym przekonać, przeprowadzimy proste oszacowanie. Załóżmy, że elektron jest małą kulką o promieniu  $R_e$  i masie  $m_e$ . Kulka taka ma (klasyczny) moment bezwładności  $I_e = 2m_e R_e^2/5$ . Załóżmy dalej, że kulka ta wiruje z pewną prędkością kątową  $\omega_e$  tak, że ma moment pędu równy  $S = I_e \omega_e$ . Z drugiej strony wartość oczekiwaną  $S$  możemy przyjąć za równą  $\hbar \sqrt{\frac{1}{2}(1 + \frac{1}{2})} = \sqrt{3} \hbar/2$  (patrz (17.4a)). Z rozważań tych wynika oszacowanie

$$\frac{\sqrt{3} \hbar}{2} \approx \frac{2}{5} m_e R_e^2 \omega_e. \quad (17.6)$$

Prędkość liniowa (ruchu obrotowego) na równiku kulki wynosi  $v = \omega_e R_e$ , zatem

$$\hbar \approx \frac{4}{5\sqrt{3}} m_e R_e v \quad \implies \quad v \approx \frac{5\sqrt{3}}{4} \frac{\hbar}{m_e R_e}, \quad (17.7)$$

przy czym warto zauważyć, że im mniejszy promień  $R_e$ , tym większa prędkość  $v$ . Dla oszacowania liczbowego  $v$  weźmy  $R_e = 2.82 \cdot 10^{-15} m$  (co jest tzw. klasycznym promieniem elektronu). Wartości liczbowe pozostałych stałych są znane, więc otrzymujemy

$$\begin{aligned} v &\approx \frac{4}{5\sqrt{3}} \cdot \frac{1.05 \cdot 10^{-34}}{9.1 \cdot 10^{-31} \cdot 2.82 \cdot 10^{-15}} \approx 0.089 \cdot 10^{12} \left( \frac{m}{s} \right) \\ &\approx \frac{8.89}{3} \cdot 10^2 \cdot 3 \cdot 10^8 \approx 296 \cdot c. \end{aligned} \quad (17.8)$$

Prędkość równikowa wirującego elektronu zapewniająca właściwą wartość wewnętrznego momentu pędu (tj. spinu) jest więc prawie 300 razy większa od prędkości światła. Jest to oczywista bzdura. Ponownie przekonujemy się, że spin elektronu nie może być związany z wirowaniem czegokolwiek.

**Wniosek :** Spin jest wielkością czysto kwantowo-mechaniczną i nie ma żadnego odpowiednika klasycznego. Możemy powiedzieć, że elektron ma spin, tak samo zresztą jak ma masę i ładunek. Innymi słowy spin elektronu jest jego własnością, w tym samym sensie co masa czy ładunek.

## 17.3 Własności momentu pędu – spinu 1/2

### 17.3.1 Sformułowanie abstrakcyjne

Ograniczymy się teraz do przypadku  $s = 1/2$  (zresztą najczęstszego w praktycznych zastosowaniach). Przestrzeń  $\mathcal{E}_{1/2}$  stanów jest więc  $(2s + 1) = 2$ -wymiarowa. Bazę w tej przestrzeni tworzą dwa stany (wektory)

$$|+\rangle = |s = \frac{1}{2}, m_s = +\frac{1}{2}\rangle, \quad (17.9a)$$

$$|-\rangle = |s = \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2}\rangle. \quad (17.9b)$$

Stany te tworzą bazę w przestrzeni  $\mathcal{E}_{1/2}$ , a zatem spełniają relację zupełności

$$|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-| = \hat{1}. \quad (17.10)$$

Przyjmujemy ponadto, że stany te są unormowane i ortogonalne

$$\langle+|+\rangle = \langle-|-\rangle = 1. \quad (17.11a)$$

$$\langle+|-\rangle = \langle-|+\rangle = 0. \quad (17.11b)$$

Dowolny wektor  $|\chi\rangle \in \mathcal{E}_{1/2}$  ma więc postać kombinacji liniowej

$$|\chi\rangle = C_+|+\rangle + C_-|-\rangle. \quad (17.12)$$

Zgodnie więc z postulowanym przepisem (17.4) możemy napisać

$$\vec{S}^2|\pm\rangle = \frac{1}{2}(1 + \frac{1}{2})\hbar^2|\pm\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\pm\rangle, \quad (17.13a)$$

$$S_3|\pm\rangle = \pm\hbar|\pm\rangle. \quad (17.13b)$$

Mówimy, że stany  $|\pm\rangle$  są stanami własnymi spinu 1/2. Stan  $|+\rangle$  nazywany bywa "spinem w górę", zaś stan  $|-\rangle$  "spinem w dół". Nazwy te wynikają z relacji (17.13b).

Idąc dalej, adaptujemy ogólną teorię momentu pędu do przypadku spinu 1/2. Tworzymy więc operatory podnoszący i obniżający

$$S_{\pm} = S_1 \pm iS_2. \quad (17.14)$$

Korzystając z ogólnych, uprzednio wyprowadzonych relacji, możemy dalej napisać

$$S_+|+\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s+1)}|s = \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}+1\rangle = 0, \quad (17.15a)$$

$$\begin{aligned} S_+|-\rangle &= \hbar\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s+1)}|s = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}+1\rangle \\ &= \hbar\sqrt{\frac{3}{4} - (-\frac{1}{2})(-\frac{1}{2}+1)}|s = \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle \\ &= \hbar\sqrt{\frac{3}{4} + \frac{1}{4}}|+\rangle = \hbar|+\rangle. \end{aligned} \quad (17.15b)$$

Pierwsza z powyższych równości wynika stąd, że w przestrzeni  $\mathcal{E}_{1/2}$  nie ma wektora  $|s = \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}+1\rangle = |s = \frac{1}{2}, m_s = \frac{3}{2}\rangle$ . (ponadto wyrażenie pod pierwiastkiem daje zero). Zupełnie analogicznie, dla operatora obniżającego otrzymamy

$$S_-|+\rangle = \hbar|-\rangle, \quad S_-|-\rangle = 0. \quad (17.16)$$

Z określeń (17.14) wynika oczywiście, że

$$S_1 = \frac{1}{2}(S_+ + S_-), \quad S_2 = \frac{i}{2}(S_- - S_+). \quad (17.17)$$

Korzystając z wzorów (17.15) i (17.16) natychmiast otrzymujemy

$$S_1|+\rangle = \frac{1}{2}(S_+ + S_-)|+\rangle = \frac{\hbar}{2}|-\rangle, \quad (17.18a)$$

$$S_1|-\rangle = \frac{1}{2}(S_+ + S_-)|-\rangle = \frac{\hbar}{2}|+\rangle. \quad (17.18b)$$

Zupełnie tak samo mamy

$$S_2|+\rangle = \frac{i}{2}(S_- - S_+)|+\rangle = \frac{i\hbar}{2}|-\rangle, \quad (17.19a)$$

$$S_2|-\rangle = \frac{i}{2}(S_- - S_+)|-\rangle = -\frac{i\hbar}{2}|+\rangle. \quad (17.19b)$$

$S_2$  jako składowa operatora spinu (momentu pędu) jest z założenia operatorem hermitowskim. Nie powinien jednak niepokoić fakt, że w powyższych wzorach  $S_2$  działając na stany  $|\pm\rangle$  produkuje liczby zespolone. Stany  $|\pm\rangle$  nie są stanami własnymi operatora  $S_2$  więc liczby  $\pm i\hbar/2$  nie są wartościami własnymi i nie muszą być rzeczywiste.

Podkreślimy raz jeszcze, że po prostu adaptujemy ogólną teorię momentu pędu do przypadku szczególnego, w którym (ze względów historycznych) stosujemy nieco inną notację. Oczywiście kluczową rolę odgrywają kanoniczne relacje komutacyjne (17.3), charakterystyczne dla momentu pędu.

### 17.3.2 Macierze Pauliego i operatory spinu 1/2

Wymiar przestrzeni  $\mathcal{E}_{1/2}$  wynosi 2. Przestrzeń ta jest izomorficzna z przestrzenią wektorową  $\mathbb{C}^2$ . Wobec tego dowolny wektor z tej przestrzeni można reprezentować dwuwymiarowym "słupkiem". Dlatego też przyjmujemy odpowiedniość

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (17.20)$$

Oczywiście te dwa wektory tworzą bazę w dwuwymiarowej przestrzeni wektorowej (nad ciałem liczb zespolonych). Dowolny wektor z rozważanej przestrzeni można więc zapisać jako kombinację liniową

$$|\psi\rangle = \alpha_+|+\rangle + \alpha_-|-\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix}. \quad (17.21)$$

Wektor sprzężony do  $|\psi\rangle$  to bra  $\langle\psi|$  o postaci "wiersza"

$$\langle\psi| = \alpha_+\langle+| + \alpha_-\langle-| = (\alpha_+^*, \alpha_-^*). \quad (17.22)$$

Iloczyn skalarny dwóch wektorów zapisujemy (zgodnie z regułami mnożenia macierzy)

$$\langle\varphi|\psi\rangle = (\beta_+^*, \beta_-^*) \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = \beta_+^* \alpha_+ + \beta_-^* \alpha_-. \quad (17.23)$$

I wreszcie, warunek normowania przyjmuje postać

$$1 = \|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = |\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 \quad (17.24)$$

Operatory działające w rozważanej przestrzeni są macierzami  $2 \times 2$ . Przestrzeń operatorów jest więc 4-wymiarowa. Jako bazę w przestrzeni operatorów można wybrać macierz jednostkową oraz trzy macierze (zwane macierzami Pauliego)

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (17.25)$$

gdzie indeksację  $(x, y, z)$  stosujemy wymiennie z  $(1, 2, 3)$ .

Operatorem spinu 1/2 (np. elektronu) jest wówczas

$$\vec{S} = \frac{1}{2} \hbar \vec{\sigma}, \quad (17.26)$$

czyli więc każdej ze składowych spinu odpowiada

$$S_k = \frac{1}{2} \hbar \sigma_k, \quad k = 1, 2, 3. \quad (17.27)$$

Łatwo sprawdzić, że przy tak zadanej reprezentacji: stany spinowe przez (17.20), zaś  $S_k$  przez (17.26) i (17.27) wszystkie, powyżej wprowadzone własności operatora spinu są spełnione.

### Własności macierzy Pauliego

Macierze Pauliego są w sposób jawny zadane wzorami (17.25). Wszystkie podane niżej własności można sprawdzić bezpośrednimi (i bardzo prostymi) rachunkami, dlatego też podamy je tutaj bez dowodów, czy wyprowadzeń.

Macierze Pauliego spełniają relacje komutacyjne

$$[\sigma_j, \sigma_k] = 2i \varepsilon_{jkn} \sigma_n, \quad (17.28)$$

które, wraz z definicją (17.26), zapewniają spełnienie kanonicznych relacji (17.3) dla operatora spinu 1/2. Kwadraty macierzy Pauliego to macierz jednostkowa

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{1}. \quad (17.29)$$

Macierze Pauliego antykomutują, to znaczy

$$\{\sigma_j, \sigma_k\} = \sigma_j \sigma_k + \sigma_k \sigma_j = 0. \quad (17.30)$$

Macierze Pauliego są bezśladowe i unimodularne

$$\text{Tr} \{\sigma_k\} = 0, \quad \det \{\sigma_k\} = -1. \quad (17.31)$$

Wartości własne wszystkich trzech macierzy Pauliego są równe  $\pm 1$ . Dzięki temu, dla wszystkich trzech operatorów  $S_k$  mamy

$$\lambda_{1,2} = \pm \frac{\hbar}{2} \quad - \text{wartości własne operatorów } S_k, \quad (k = x, y, z). \quad (17.32)$$

W zasadzie rezultat ten jest zaskakujący, można by się go jednak spodziewać. Wynika on stąd, że wszystkie kierunki w przestrzeni są równouprawnione. Który z nich umówimy się nazywać osią  $z$  jest właśnie kwestią umowy. Równie dobrze może pełnić tę samą rolę dowolny inny kierunek – stąd rezultat (17.32).

Macierze Pauliego są często spotykane w praktycznych zastosowaniach i mają cały szereg pożytecznych własności. Przedstawimy tu niektóre z nich.

**Lemat 17.1** *Iloczyn dwóch macierzy Pauliego dany jest wzorem*

$$\sigma_j \sigma_k = \delta_{jk} + i \varepsilon_{jkm} \sigma_m. \quad (17.33)$$

**Dowód.** Jeśli  $j = k$  to  $\delta_{jj} = 1$ , zaś  $\varepsilon_{jjm} = 0$  i wtedy teza wynika z (17.29). Jeżeli  $j \neq k$  to  $\delta_{jk} = 0$ , wówczas teza wynika z dodania stronami relacji komutacyjnej (17.28) i antykomutacyjnej (17.30). ■

**Lemat 17.2** *Niech  $\vec{A}$  i  $\vec{B}$  będą dwoma wielkościami wektorowymi, które komutują z macierzami Pauliego. Zachodzi relacja*

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) = \vec{A} \cdot \vec{B} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}) \quad (17.34)$$

Wielkości  $\vec{A}$  i  $\vec{B}$  mogą być operatorami, które nie komutują między sobą. Ich porządek po lewej i prawej stronie równości jest utrzymany.

**Dowód.** W dowodzie korzystamy z relacji (17.33). Otrzymujemy więc

$$\begin{aligned}
 (\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) &= \sigma_k A_k \sigma_m B_m = (\delta_{km} + i \varepsilon_{kmn} \sigma_n) A_k B_m \\
 &= A_k B_k + i \sigma_n \varepsilon_{nkm} A_k B_m \\
 &= \vec{A} \cdot \vec{B} + i \sigma_n (\vec{A} \times \vec{B})_n \\
 &= \vec{A} \cdot \vec{B} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}).
 \end{aligned} \tag{17.35}$$

Zatem lemat jest udowodniony. ■

W wielu zagadnieniach fizycznych opis stanu układu można sprowadzić do dwuwymiarowej przestrzeni wektorowej. Wektory  $|\pm\rangle$  i macierze Pauliego stanowią wówczas bardzo pożyteczne narzędzie badawcze. Podane wyżej relacje, spełniane przez macierze Pauliego są punktem wyjścia do wyprowadzenia całego szeregu innych (bardzo użytecznych) relacji. Podamy dwa przykłady wyrażeń, których dowody są umieszczone w *Uzupełnieniach*:

$$e^{i\beta\sigma_k} = \cos \beta + i \sigma_k \sin \beta \tag{17.36}$$

$$e^{i\beta\sigma_k} \sigma_j e^{-i\beta\sigma_k} = \begin{cases} \sigma_j, & \text{gdy } j = k, \\ \sigma_j \cos(2\beta) + \varepsilon_{jkm} \sigma_m \sin(2\beta), & \text{gdy } j \neq k. \end{cases} \tag{17.37}$$

### 17.3.3 Spin w dowolnym kierunku

Kierunek w przestrzeni jest wyznaczony przez wektor jednostkowy

$$\vec{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta), \tag{17.38}$$

gdzie  $\theta$  i  $\varphi$  są zwykłymi kątami sferycznymi. Operator rzutu spinu na dowolny kierunek, to rzut operatora spinu na tenże kierunek

$$\begin{aligned}
 S_{\vec{n}} &= \vec{n} \cdot \vec{S} = S_x \sin \theta \cos \varphi + S_y \sin \theta \sin \varphi + S_z \cos \theta \\
 &= \frac{\hbar}{2} (\sigma_x \sin \theta \cos \varphi + \sigma_y \sin \theta \sin \varphi + \sigma_z \cos \theta).
 \end{aligned} \tag{17.39}$$

Korzystając z jawnej postaci macierzy Pauliego możemy operator  $S_{\vec{n}}$  zapisać w postaci macierzy

$$S_{\vec{n}} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ e^{i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}, \tag{17.40}$$

#### Wartości własne operatora $S_{\vec{n}}$

Znajdźmy najpierw wartości własne operatora  $S_{\vec{n}}$ . Sprowadza się to do znalezienia wartości własnych macierzy (17.40) (z dokładnością do czynnika  $\hbar/2$ )

$$\det \begin{pmatrix} \cos \theta - \lambda & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ e^{i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta - \lambda \end{pmatrix} = 0. \tag{17.41}$$

Skąd wynika równanie

$$-(\cos \theta + \lambda)(\cos \theta - \lambda) - \sin^2 \theta = 0. \tag{17.42}$$

Trywialne rozwiązanie trójkątnu kwadratowego prowadzi do

$$\lambda_{1,2} = \pm \frac{\hbar}{2} \quad - \text{wartości własne operatora } S_{\vec{n}}. \tag{17.43}$$

Wniosek ten jest zgodny z dyskusją równości (17.32). Kierunek  $\vec{n}$  jest "równie dobry" jak każdy inny.

### Wektory własne operatora $S_{\vec{n}}$

Szukamy teraz wektorów własnych operatora  $S_{\vec{n}}$ . Dla pierwszej wartości własnej  $\lambda_1 = \hbar/2$  mamy równanie

$$S_{\vec{n}} |\phi_1\rangle = \frac{\hbar}{2} |\phi_1\rangle \quad \Rightarrow \quad S_{\vec{n}} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad (17.44)$$

gdzie wektor własny  $|\phi_1\rangle$  przedstawiliśmy w reprezentacji (17.20). Po podstawieniu macierzy (17.40) otrzymujemy równanie

$$\begin{pmatrix} \cos \theta - 1 & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ e^{i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta - 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = 0. \quad (17.45)$$

Powstały układ równań jest zależny, więc bierzemy tylko jedno równanie

$$\alpha (\cos \theta - 1) + \beta e^{-i\varphi} \sin \theta = 0, \quad (17.46)$$

skąd otrzymujemy

$$\beta = \alpha \frac{1 - \cos \theta}{\sin \theta} e^{i\varphi} = \alpha \frac{\sin(\theta/2)}{\cos(\theta/2)} e^{i\varphi}, \quad (17.47)$$

co wynika z elementarnej trygonometrii i gdzie  $\alpha$  jest dowolne. A więc wartości własnej  $\lambda_1 = \hbar/2$  odpowiada wektor własny

$$|\phi_1\rangle = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi} \operatorname{tg}(\theta/2) \end{pmatrix}, \quad (17.48)$$

który trzeba jeszcze unormować (co pozwoli pozbyć się stałej dowolnej  $\alpha$ ). A zatem

$$\begin{aligned} 1 &= \langle \phi_1 | \phi_1 \rangle = |\alpha|^2 (1 + \operatorname{tg}^2(\theta/2)) = |\alpha|^2 \frac{1}{\cos^2(\theta/2)} \\ \Rightarrow \quad |\alpha| &= \cos(\theta/2). \end{aligned} \quad (17.49)$$

Wybieramy czynnik fazowy równy  $e^{-i\varphi/2}$  i pierwszy (unormowany) wektor własny operatora  $S_{\vec{n}}$  zapisujemy w postaci

$$|\phi_1\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \cos(\theta/2) \\ e^{i\varphi/2} \sin(\theta/2) \end{pmatrix}. \quad (17.50)$$

Drugi wektor własny odpowiadający  $\lambda_2 = -\hbar/2$  obliczamy w analogiczny sposób

$$S_{\vec{n}} |\phi_2\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\phi_2\rangle \quad \Rightarrow \quad S_{\vec{n}} \begin{pmatrix} \alpha' \\ \beta' \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \alpha' \\ \beta' \end{pmatrix}, \quad (17.51)$$

skąd wynika równanie macierzowe

$$\begin{pmatrix} \cos \theta + 1 & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ e^{i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta + 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha' \\ \beta' \end{pmatrix} = 0. \quad (17.52)$$

Wobec liniowej zależności równań, bierzemy pierwsze i przekształcamy je korzystając z elementarnej trygonometrii

$$\begin{aligned} \alpha' (\cos \theta + 1) + \beta' e^{-i\varphi} \sin \theta &= 0 \\ \alpha' \cos^2(\theta/2) + \beta' e^{-i\varphi} \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) &= 0, \end{aligned} \quad (17.53)$$



skąd otrzymujemy

$$\alpha' = -\beta' e^{-i\varphi} \operatorname{tg}(\theta/2). \quad (17.54)$$

gdzie  $\beta'$  jest dowolne. Wartości własnej  $\lambda_2 = -\hbar/2$  odpowiada wektor własny

$$|\phi_2\rangle = \beta' \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi} \operatorname{tg}(\theta/2) \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (17.55)$$

Normując, pozbywamy się stałej dowolnej  $\beta'$ . A zatem

$$1 = \langle \phi_2 | \phi_2 \rangle = |\beta'|^2 \frac{1}{\cos^2(\theta/2)} \implies |\beta'| = \cos(\theta/2). \quad (17.56)$$

Znów wybieramy czynnik fazowy  $e^{i\varphi/2}$  i drugi wektor własny operatora  $S_{\vec{n}}$

$$|\phi_2\rangle = \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi/2} \sin(\theta/2) \\ e^{i\varphi/2} \cos(\theta/2) \end{pmatrix}. \quad (17.57)$$

Dla porządku sprawdźmy, czy otrzymane wektory rzeczywiście są wektorami własnymi operatora  $S_{\vec{n}}$ .

$$\begin{aligned} S_{\vec{n}} |\phi_1\rangle &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ e^{i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \cos(\theta/2) \\ e^{i\varphi/2} \sin(\theta/2) \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \cos \theta \cos(\theta/2) + e^{-i\varphi/2} \sin \theta \sin(\theta/2) \\ e^{i\varphi/2} \sin \theta \cos(\theta/2) - e^{i\varphi/2} \cos \theta \sin(\theta/2) \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \cos(\theta - \frac{1}{2}\theta) \\ e^{i\varphi/2} \sin(\theta - \frac{1}{2}\theta) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} |\phi_1\rangle, \end{aligned} \quad (17.58)$$

czyli wszystko jest jak trzeba. Sprawdzenie dla drugiego wektora przebiega identycznie, więc je pominiemy.

Podsumowując stwierdzamy, że operator

$$S_{\vec{n}} = \vec{n} \cdot \vec{S} = \frac{\hbar}{2} (\sigma_x \sin \theta \cos \varphi + \sigma_y \sin \theta \sin \varphi + \sigma_z \cos \theta), \quad (17.59)$$

ma wartości własne  $\lambda_{1,2} = \pm \hbar/2$ , którym odpowiadają wektory własne

$$|+\rangle_{\vec{n}} \equiv |\phi_1\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \cos(\theta/2) \\ e^{i\varphi/2} \sin(\theta/2) \end{pmatrix}, \quad |-\rangle_{\vec{n}} \equiv |\phi_2\rangle = \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi/2} \sin(\theta/2) \\ e^{i\varphi/2} \cos(\theta/2) \end{pmatrix}, \quad (17.60)$$

gdzie znaki wewnątrz ketów wskazują znak wartości własnej, zaś indeks  $\vec{n}$  określa, na jaki kierunek rzutujemy.

Zauważmy tutaj, że iloczyn skalarny

$$z\langle + | + \rangle_{\vec{n}} = (1, 0) \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \cos(\theta/2) \\ e^{i\varphi/2} \sin(\theta/2) \end{pmatrix} = e^{-i\varphi/2} \cos(\theta/2), \quad (17.61)$$

jest amplitudą prawdopodobieństwa tego, że spin 1/2 mający rzut  $+\hbar/2$  na kierunek  $\vec{n}$ , w wyniku pomiaru rzutu na oś  $z$  da wartość  $+\hbar/2$ . Analogiczne interpretacje można przypisać i innym, podobnym iloczynom skalarnym.

### Wartości oczekiwane

Pouczające jest jawne obliczenie wartości oczekiwanych dla operatorów  $S_k$ , gdy cząstka o spinie 1/2 jest przygotowana w jednym ze stanów (17.60). Wykonajmy więc przynajmniej niektóre obliczenia. Zgodnie z omówionymi wyżej regułami mamy

$$\begin{aligned}
 \langle \phi_1 | S_x | \phi_1 \rangle &= (e^{i\varphi/2} \cos(\theta/2), e^{-i\varphi/2} \sin(\theta/2)) \begin{pmatrix} 0 & \hbar/2 \\ \hbar/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \cos(\theta/2) \\ e^{i\varphi/2} \sin(\theta/2) \end{pmatrix} \\
 &= \frac{\hbar}{2} (e^{i\varphi/2} \cos(\theta/2), e^{-i\varphi/2} \sin(\theta/2)) \begin{pmatrix} e^{i\varphi/2} \sin(\theta/2) \\ e^{-i\varphi/2} \cos(\theta/2) \end{pmatrix} \\
 &= \frac{\hbar}{2} (e^{i\varphi} \cos(\theta/2) \sin(\theta/2) + e^{-i\varphi} \sin(\theta/2) \cos(\theta/2)) \\
 &= \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{1}{2} \sin \theta (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) \\
 &= \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos \varphi.
 \end{aligned} \tag{17.62}$$

Zupełnie analogicznie obliczamy wartość oczekiwaną  $S_x$  dla układu w stanie  $|\phi_2\rangle$

$$\begin{aligned}
 \langle \phi_2 | S_x | \phi_2 \rangle &= (-e^{i\varphi/2} \sin(\theta/2), e^{-i\varphi/2} \cos(\theta/2)) \begin{pmatrix} 0 & \hbar/2 \\ \hbar/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi/2} \sin(\theta/2) \\ e^{i\varphi/2} \cos(\theta/2) \end{pmatrix} \\
 &= \frac{\hbar}{2} (-e^{i\varphi/2} \sin(\theta/2), e^{-i\varphi/2} \cos(\theta/2)) \begin{pmatrix} e^{i\varphi/2} \cos(\theta/2) \\ -e^{-i\varphi/2} \sin(\theta/2) \end{pmatrix} \\
 &= \frac{\hbar}{2} (-e^{i\varphi} \cos(\theta/2) \sin(\theta/2) - e^{-i\varphi} \sin(\theta/2) \cos(\theta/2)) \\
 &= -\frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos \varphi.
 \end{aligned} \tag{17.63}$$

Takie same obliczenia przeprowadzamy dla pozostałych składowych operatora spinu. Korzystając z elementarnych wzorów trygonometrycznych dla operatora  $S_y$  otrzymujemy

$$\begin{aligned}
 \langle \phi_1 | S_y | \phi_1 \rangle &= \frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin \varphi, \\
 \langle \phi_2 | S_y | \phi_2 \rangle &= -\frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin \varphi.
 \end{aligned} \tag{17.64}$$

Natomiast dla operatora  $S_z$  łatwo pokazać, że

$$\begin{aligned}
 \langle \phi_1 | S_z | \phi_1 \rangle &= \frac{\hbar}{2} \cos \theta, \\
 \langle \phi_2 | S_z | \phi_2 \rangle &= -\frac{\hbar}{2} \cos \theta.
 \end{aligned} \tag{17.65}$$

Warto tu przypomnieć, że zgodnie z postulatami mechaniki kwantowej, pojedynczy pomiar którejkolwiek z obserwabli  $S_k$ , ( $k = x, y, z$ ) zawsze daje rezultat  $\pm \hbar/2$  – jedną z wartości własnych. Dopiero wielokrotny pomiar w układzie przygotowanym zawsze tak samo, prowadzi do wartości średnich – wartości oczekiwanych podanych w powyższych wzorach.

## 17.4 Nierelatywistyczny opis cząstki o spinie 1/2

### 17.4.1 Wektory stanu – spinory

Fakt, że cząstki mają spin sprawia, że musimy rozszerzyć zbiór obserwabli niezbędnych do pełnego opisu stanu cząstki. Zupełne zbiory obserwabli komutujących (ZZOK) jakimi posługiwaliśmy się

do tej pory muszą zostać powiększone o operatory  $\vec{S}^2$  oraz  $S_3$ . Zazwyczaj (dla cząstki danego typu) liczba kwantowa  $s$  – wartość własna  $\vec{S}^2$ , jest ustalona. Wszystkie kety dla danej cząstki odpowiadają tej jednej wartości  $s$ , więc operator  $\vec{S}^2$ , choć potrzebny do utworzenia ZZOK, służy tylko do ustalenia  $s$ . Operator  $S_3$  określa liczbę kwantową  $m_s$ , która może przyjmować  $(2s + 1)$  różnych wartości. Liczbę  $m_s$  musimy uwzględnić przy opisie stanu cząstki. Przestrzeń zmiennych określających stan cząstki musi zatem "wzrosnąć", aby uwzględnić zmienne spinowe.

W reprezentacji położeniowej zapisujemy to tak

$$|\psi\rangle = \sum_{m_s} \int d^3r |\vec{r}, m_s\rangle \langle \vec{r}, m_s | \psi \rangle. \quad (17.66)$$

Występująca tu wielkość  $\langle \vec{r}, m_s | \psi \rangle$  jest uogólnieniem "zwykłej" funkcji falowej, bowiem jest dodatkowo numerowana wartością  $m_s$  – rzutem spinu na oś  $z$ . Aby scharakteryzować stan układu musimy podać  $(2s + 1)$  funkcji falowych, dodatkowo numerowanych indeksem  $m_s$ .

Mamy więc  $(2s + 1)$  funkcji, które wygodnie jest zapisać w postaci wektora (kolumny)

$$\Psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \psi_{m_s=s}(\vec{r}) &= \langle \vec{r}, m_s = s | \psi \rangle \\ \psi_{m_s=s-1}(\vec{r}) &= \langle \vec{r}, m_s = s - 1 | \psi \rangle \\ \dots &\dots \dots \\ \psi_{m_s=-s+1}(\vec{r}) &= \langle \vec{r}, m_s = -s + 1 | \psi \rangle \\ \psi_{m_s=-s}(\vec{r}) &= \langle \vec{r}, m_s = -s | \psi \rangle \end{pmatrix}, \quad (17.67)$$

który umówimy się nazywać spinorem (spinową funkcją falową) dla cząstki o spinie  $s$ . W szczególnym przypadku  $s = 0$  spinor (jak już wspominaliśmy) redukuje się do kolumny z jednym elementem, a więc pozostaje "zwykłą" funkcją falową.

Spinor (funkcja falowa) sprzężony do  $\Psi(\vec{r})$  to "wiersz" mający  $(2s + 1)$  elementów

$$\begin{aligned} \Psi^\dagger(\vec{r}) &= (\psi_{m_s=s}^*(\vec{r}), \psi_{m_s=s-1}^*(\vec{r}), \dots, \psi_{m_s=-s+1}^*(\vec{r}), \psi_{m_s=-s}^*(\vec{r})) \\ &= (\langle \psi | \vec{r}, m_s = s \rangle, \dots, \langle \psi | \vec{r}, m_s = -s \rangle). \end{aligned} \quad (17.68)$$

Zgodnie z zasadami algebry iloczyn skalarny dwóch spinorów (spinowych funkcji falowych) opisujących cząstkę o spinie  $s$  zapisujemy jako

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \int d^3r \Phi^\dagger(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) = \int d^3r \sum_{m_s} \phi_{m_s}^*(\vec{r}) \psi_{m_s}(\vec{r}). \quad (17.69)$$

Warunek normalizacji przyjmuje więc postać

$$1 = \|\Psi\|^2 = \langle \Psi | \Psi \rangle = \int d^3r \Psi^\dagger(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) = \int d^3r \sum_{m_s} \psi_{m_s}^*(\vec{r}) \psi_{m_s}(\vec{r}). \quad (17.70)$$

Powyższe wyrażenia dotyczą cząstki o spinie  $s$ , gdy spinowa funkcja falowa ma  $(2s + 1)$  składowych. W dalszych rozważaniach ograniczymy się do przypadku cząstki o spinie  $s = \frac{1}{2}$ , bowiem interesować nas będzie przede wszystkim elektron. Uzyskane dalej relacje nie jest jednak trudno uogólnić na przypadek cząstki o dowolnym spinie  $s$ .

Dla elektronu  $s = \frac{1}{2}$ , i odpowiedni spinor ma dwie składowe – jest dwuwymiarowy. Zapisujemy go w postaci

$$\Psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) &= \langle \vec{r}, m_s = +\frac{1}{2} | \psi \rangle \\ \psi_-(\vec{r}) &= \langle \vec{r}, m_s = -\frac{1}{2} | \psi \rangle \end{pmatrix}. \quad (17.71)$$

Postać iloczynu skalarnego i warunku normowania takiego dwuskładnikowego spinora wynikają oczywiście z ogólnych relacji (17.69) i (17.70) i ogranicza się do dwóch składników.

Spinor (17.71) jest zapisany w bardzo ogólnej postaci, bo funkcje  $\psi_+$  i  $\psi_-$  mogą zupełnie różne. W wielu zastosowaniach mamy jednak do czynienia z sytuacją prostszą, gdy część przestrzenna i spinowa rozdzielają się (tzw. iloczyn tensorowy). Wtedy możemy napisać

$$|\Psi\rangle = |\psi\rangle |\chi_s\rangle, \quad (17.72)$$

gdzie  $|\chi_s\rangle$  jest dwuwymiarowym wektorem typu (17.21). W reprezentacji położeniowej otrzymujemy wtedy

$$\Psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix}, \quad (17.73)$$

Porównując powyższe wyrażenie z (17.71) widzimy, że w tym przypadku mamy

$$\begin{aligned} \psi_+(\vec{r}) &= \langle \vec{r}, m_s = +\frac{1}{2} | \psi \rangle = \psi(\vec{r}) \alpha_+ \\ \psi_-(\vec{r}) &= \langle \vec{r}, m_s = -\frac{1}{2} | \psi \rangle = \psi(\vec{r}) \alpha_- \end{aligned} \quad (17.74)$$

Iloczyn skalarny dwóch takich spinorów to

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \Psi \rangle &= \int d^3r \Phi^\dagger(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) = \int d^3r \phi^*(\vec{r}) (\beta_+^*, \beta_-^*) \psi(\vec{r}) \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} \\ &= \int d^3r \phi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) [\beta_+^* \alpha_+ + \beta_-^* \alpha_-] \\ &= \langle \phi | \psi \rangle [\beta_+^* \alpha_+ + \beta_-^* \alpha_-]. \end{aligned} \quad (17.75)$$

Ponieważ zmienne przestrzenne i spinowe są niezależne, więc normując spinor  $\Psi(\vec{r})$  na ogół żądamy, aby

$$|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 = 1 \quad (17.76a)$$

$$\|\psi\|^2 = \langle \psi | \psi \rangle = \int d^3r |\psi(\vec{r})|^2 = 1. \quad (17.76b)$$

to jest aby każda część spinora (17.73) była unormowana oddzielnie.

### 17.4.2 Operatory i ich działanie na spinory

Przestrzeń zmiennych opisujących cząstkę (elektron) o spinie  $\frac{1}{2}$  została rozszerzona. Zamiast "zwykłej" funkcji falowej mamy dwuwymiarowy spinor postaci (17.71). W związku z tym musimy też rozszerzyć koncepcję operatora. Operator działający na spinor złożony jest z części orbitalnej i części spinowej. Niech  $\hat{A}$  oznacza operator orbitalny (w reprezentacji położeniowej). Niech  $\hat{\mathcal{S}}$  będzie operatorem spinowym, który dla cząstki o spinie  $s = \frac{1}{2}$  jest reprezentowany przez hermitowską macierz  $2 \times 2$ , której współczynniki  $\mathcal{S}_{jk}$ , ( $j, k = 1, 2$ ), są liczbami zespolonymi. Złożenie tych dwóch operatorów zapiszemy jako  $(\hat{A} \otimes \hat{\mathcal{S}})$ , czyli jako tak zwany iloczyn tensorowy operatorów. Działanie tego operatora na spinor  $\Psi(\vec{r})$  zdefiniujemy następująco

$$\begin{aligned} (\hat{A} \otimes \hat{\mathcal{S}}) \Psi(\vec{r}) &= (\hat{A} \otimes \hat{\mathcal{S}}) \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} = \hat{A} \begin{pmatrix} \mathcal{S}_{11} & \mathcal{S}_{12} \\ \mathcal{S}_{21} & \mathcal{S}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} \\ &= \hat{A} \begin{pmatrix} \mathcal{S}_{11} \psi_+(\vec{r}) + \mathcal{S}_{12} \psi_-(\vec{r}) \\ \mathcal{S}_{21} \psi_+(\vec{r}) + \mathcal{S}_{22} \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathcal{S}_{11} \hat{A} \psi_+(\vec{r}) + \mathcal{S}_{12} \hat{A} \psi_-(\vec{r}) \\ \mathcal{S}_{21} \hat{A} \psi_+(\vec{r}) + \mathcal{S}_{22} \hat{A} \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} = \Psi'(\vec{r}). \end{aligned} \quad (17.77)$$

Zauważmy, że gdybyśmy w drugim kroku powyższej formuły najpierw podziałali operatorem  $\hat{A}$  na składowe spinora, a potem przemnożyli tak powstały spinor z lewa przez macierz  $\hat{\mathcal{S}}$ , to wynik byłby ten sam, bo współczynniki macierzy to liczby zespolone.

Dwa przypadki szczególne warte są uwagi.

- Na spinor  $\Psi(\vec{r})$  działamy tylko operatorem orbitalnym. Wówczas bierzemy  $\hat{\mathcal{S}} = \hat{\mathbf{1}}$  (macierz jednostkowa, czyli  $\mathcal{S}_{ij} = \delta_{ij}$ ). Wzór (17.26) redukuje się do

$$\hat{A}\Psi(\vec{r}) = (\hat{A} \otimes \hat{\mathbf{1}})\Psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \hat{A}\psi_+(\vec{r}) \\ \hat{A}\psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}. \quad (17.78)$$

- Na spinor  $\Psi(\vec{r})$  działamy tylko operatorem spinowym. W tym wypadku kładziemy  $\hat{A} = \hat{\mathbf{1}}$ . Wzór (17.26) daje wtedy

$$\hat{\mathcal{S}}\Psi(\vec{r}) = (\hat{\mathbf{1}} \otimes \hat{\mathcal{S}})\Psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \mathcal{S}_{11}\psi_+(\vec{r}) + \mathcal{S}_{12}\psi_-(\vec{r}) \\ \mathcal{S}_{21}\psi_+(\vec{r}) + \mathcal{S}_{22}\psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}. \quad (17.79)$$

Zwróćmy uwagę, że po lewych stronach wyrażeń (17.78) i (17.79) pominęliśmy jawny zapis iloczynu tensorowego operatorów (co zresztą zwykle robi się w praktyce).

Jeżeli spinor  $\Psi(\vec{r})$  ma przedstawienie typu (17.73) to ogólna formuła (17.77) upraszcza się, bowiem część przestrzenna spinora jest wspólna dla obu składowych. Gdy więc spinor ma postać (17.73) to wówczas (17.77) możemy zapisać jako

$$(\hat{A} \otimes \hat{\mathcal{S}})\Psi(\vec{r}) = (\hat{A} \otimes \hat{\mathcal{S}})\psi(\vec{r}) \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = (\hat{A}\psi(\vec{r})) \begin{pmatrix} \mathcal{S}_{11}\alpha_+ + \mathcal{S}_{12}\alpha_- \\ \mathcal{S}_{21}\alpha_+ + \mathcal{S}_{22}\alpha_- \end{pmatrix}. \quad (17.80)$$

Oczywiście odpowiednim uproszczeniom ulegają formuły (17.78) i (17.79). Dla spinora postaci (17.73) mamy

$$\begin{aligned} \hat{A}\Psi(\vec{r}) &= \hat{A}\psi(\vec{r}) \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = (\hat{A} \otimes \hat{\mathbf{1}})\psi(\vec{r}) \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} \\ &= (\hat{A}\psi(\vec{r})) \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (17.81a)$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{S}}\Psi(\vec{r}) &= \hat{\mathcal{S}}\psi(\vec{r}) \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = (\hat{\mathbf{1}} \otimes \hat{\mathcal{S}})\psi(\vec{r}) \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} \\ &= \psi(\vec{r}) \begin{pmatrix} \mathcal{S}_{11}\alpha_+ + \mathcal{S}_{12}\alpha_- \\ \mathcal{S}_{21}\alpha_+ + \mathcal{S}_{22}\alpha_- \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (17.81b)$$

Powyższe wzory są dość ogólne dlatego też podamy kilka prostych przykładów. Rozważymy spinory typu (17.73), są one bowiem często spotykane w praktyce.

### Przykład 1. Operator spinowy

Omówimy działanie operatora  $S_+$  (por. wzory (17.14) i następne) na spinor  $\Psi(\vec{r})$  typu (17.73). Na podstawie relacji (17.15) wiemy, że

$$S_+|+\rangle = S_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0, \quad S_+|-\rangle = S_+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (17.82)$$

Operatorowi  $S_+$  odpowiada więc macierz

$$S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (17.83)$$

Odpowiedniość tę łatwo jest sprawdzić posługując się macierzami Pauliego. Istotnie

$$\begin{aligned} S_+ &= S_1 + i S_2 = \frac{1}{2} \hbar (\sigma_x + i \sigma_y) \\ &= \frac{1}{2} \hbar \left[ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right] = \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (17.84)$$

i znów mamy (17.83). Teraz badamy działanie operatora  $S_+$  na spinor  $\Psi(\vec{r})$  dany w (17.73). Otrzymujemy

$$\begin{aligned} S_+ \Psi(\vec{r}) &= (\hat{\mathbf{1}} \otimes S_+) \psi(\vec{r}) \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = \psi(\vec{r}) S_+ \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} \\ &= \hbar \psi(\vec{r}) \begin{pmatrix} \alpha_- \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} \psi(\vec{r}) \alpha_- \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (17.85)$$

Rezultat ten wynika zarówno z (17.81b) po uwzględnieniu postaci (17.83) macierzy operatora  $S_+$ , jak i z bezpośredniego mnożenia macierzy i wektora kolumnowego.

### Przykład 2. Operator orbitalny

Składowej  $x$ -owej pędu w reprezentacji położeniowej odpowiada operator  $\hat{p}_x = -i\hbar\partial_x$ . Podziałmy nim na spinor postaci (17.73). Na mocy wzoru (17.81a) możemy napisać

$$\hat{p}_x \Psi(\vec{r}) = -i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial x} \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = -i\hbar \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(\vec{r}) \alpha_+ \\ \psi(\vec{r}) \alpha_- \end{pmatrix}, \quad (17.86)$$

bowiem liczby  $\alpha_{\pm}$  nie podlegają różniczkowaniu względem współrzędnej  $x$ . Możemy więc macierz o współczynnikach operatorowych

$$\hat{p}_x \otimes \hat{\mathbf{1}} = \begin{pmatrix} -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix}, \quad (17.87)$$

uznać za operator  $x$ -owej składowej pędu, działający na przestrzeni spinorów dwuskładnikowych.

### Przykład 3. Złożenie operatorów orbitalnego i spinowego

W reprezentacji położeniowej  $z$ -owa składowa operatora momentu pędu to  $L_z = -i\hbar\partial/\partial\varphi$  (współrzędne sferyczne). Wobec tego dla spinora postaci (17.73) dostajemy

$$L_z S_z \Psi(\vec{r}) = (L_z \otimes S_z) \psi(\vec{r}) \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix}. \quad (17.88)$$

Operator  $S_z = \frac{1}{2}\hbar\sigma_z$ , a więc odpowiada mu macierz

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (17.89)$$

Biorąc powyższą macierz i stosując regułę (17.80) otrzymujemy dalej

$$L_z S_z \Psi(\vec{r}) = \left( -i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial \varphi} \right) \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ -\alpha_- \end{pmatrix}. \quad (17.90)$$

Relację tę możemy zapisać w formie macierzowej

$$L_z S_z \Psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} -\frac{i\hbar^2}{2} \left( \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) & 0 \\ 0 & \frac{i\hbar^2}{2} \left( \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(\vec{r}) \alpha_+ \\ \psi(\vec{r}) \alpha_- \end{pmatrix}, \quad (17.91)$$

Macierz o współczynnikach operatorowych występującą w powyższym wyrażeniu możemy więc utożsamić z operatorem  $(L_z \otimes S_z)$  działającym na przestrzeni spinorów dwuskładnikowych.

### 17.4.3 Obliczanie prawdopodobieństw i wartości oczekiwanych

Rozważać będziemy spinory postaci (17.73), to jest

$$\Psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} = \psi(\vec{r}) \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix}. \quad (17.92)$$

Normowanie takiego spinora (por. (17.69) i (17.76))

$$1 = \int d^3r \left( |\psi_+(\vec{r})|^2 + |\psi_-(\vec{r})|^2 \right) = \left( |\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 \right) \int d^3r |\psi(\vec{r})|^2, \quad (17.93)$$

wskazuje, że  $|\psi_{\pm}(\vec{r})|^2 = |\alpha_{\pm}|^2 |\psi(\vec{r})|^2$ , jest gęstością prawdopodobieństwa tego, że cząstka znajduje się w punkcie  $\vec{r}$  z rzutem spinu na oś  $z$  równym  $\pm \frac{1}{2}\hbar$ .

Wartość oczekiwaną obserwacji reprezentowanej przez operator  $(\hat{A} \otimes \hat{S})$  (zgodnie z notacją wprowadzoną powyżej) obliczamy w reprezentacji położeniowej w następujący sposób.

$$\langle \Psi | (\hat{A} \otimes \hat{S}) | \Psi \rangle = \int d^3r \Psi^\dagger(\vec{r}) (\hat{A} \otimes \hat{S}) \Psi(\vec{r}). \quad (17.94)$$

Stosując więc regułę (17.68) oraz wyrażenie (17.80) otrzymujemy

$$\begin{aligned} \langle \Psi | (\hat{A} \otimes \hat{S}) | \Psi \rangle &= \int d^3r (\alpha_+^*, \alpha_-^*) \psi^*(\vec{r}) [\hat{A} \psi(\vec{r})] \begin{pmatrix} \mathcal{S}_{11} \alpha_+ + \mathcal{S}_{12} \alpha_- \\ \mathcal{S}_{21} \alpha_+ + \mathcal{S}_{22} \alpha_- \end{pmatrix} \\ &= (\alpha_+^*, \alpha_-^*) \begin{pmatrix} \mathcal{S}_{11} \alpha_+ + \mathcal{S}_{12} \alpha_- \\ \mathcal{S}_{21} \alpha_+ + \mathcal{S}_{22} \alpha_- \end{pmatrix} \int d^3r \psi^*(\vec{r}) \hat{A} \psi(\vec{r}) \\ &= [\alpha_+^* (\mathcal{S}_{11} \alpha_+ + \mathcal{S}_{12} \alpha_-) \\ &\quad + \alpha_-^* (\mathcal{S}_{21} \alpha_+ + \mathcal{S}_{22} \alpha_-)] \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \end{aligned} \quad (17.95)$$

Człon w nawiasie kwadratowym możemy zapisać jako  $\langle \chi_s | \hat{S} | \chi_s \rangle$  gdzie  $|\chi_s\rangle$  jest spinorem

$$|\chi_s\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix}, \quad (17.96)$$

zaś  $\hat{S}$  jest reprezentowane przez (hermitowską) macierz  $2 \times 2$ . Stwierdzamy więc, że dla stanu opisanego spinorem

$$\Psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = \langle \vec{r} | \psi \rangle |\chi_s\rangle, \quad (17.97)$$

wartość oczekiwaną obserwacji ( $\hat{A} \otimes \hat{S}$ ) zapisujemy w postaci

$$\langle \Psi | \hat{A} \otimes \hat{S} | \Psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \langle \chi_s | \hat{S} | \chi_s \rangle. \quad (17.98)$$

Ze wzoru tego w szczególności widzimy, że przy obliczaniu wartości oczekiwanej obserwacji spinowej

$$\langle \Psi | (\hat{\mathbf{1}} \otimes \hat{S}) | \Psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle \langle \chi_s | \hat{S} | \chi_s \rangle, \quad (17.99)$$

lub obserwacji orbitalnej

$$\langle \Psi | (\hat{A} \otimes \hat{\mathbf{1}}) | \Psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \langle \chi_s | \chi_s \rangle, \quad (17.100)$$

wygodnie jest, aby część spinowa i orbitalna były unormowane oddzielnie, to jest aby

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1, \quad \text{oraz} \quad \langle \chi_s | \chi_s \rangle = 1, \quad (17.101)$$

zgodnie z uprzednio podanymi formułami (17.76).

\*\*\*\*\*