ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΔΗΜΟΚΡΑΤΙΑ
Εθνικόν και Καποδιστριακόν
Πανεπιστήμιον Αθηνών

Κβαντική Μηχανική ΙΙ

Ενότητα 4: Στροφορμή

Αθανάσιος Λαχανάς
Σχολή Θετικών Επιστημών
Τμήμα Φυσικής

Περιεχόμενα 4ης ενότητας

Η Στροφορμή στην Κβαντική Μηχανική

Η Τροχιακή Στροφορμή

$$\hat{\mathbb{L}} = \hat{\mathbb{r}} \times \hat{\mathbb{p}} \qquad \textit{Τροχιακη} \quad \textit{Στροφορμη}$$

- $\hat{\mathbb{r}}$ οι συνιστώσες του τελεστή της θέσης

$$\hat{\mathbb{r}} = (\hat{x}, \quad \hat{y}, \quad \hat{z})$$

- $\hat{\mathbb{p}}$ οι συνιστώσες του τελεστή της ορμής

$$\hat{\mathbb{p}} = (\hat{p}_x, \quad \hat{p}_y, \quad \hat{p}_z)$$

Οι συνιστώσες της τροχιακής στροφορμής είναι

$$\hat{L}_x = \hat{y}\,\hat{p}_z - \hat{z}\,\hat{p}_y \quad , \quad \hat{L}_y = \hat{z}\,\hat{p}_x - \hat{x}\,\hat{p}_z \quad , \quad \hat{L}_z = \hat{x}\,\hat{p}_y - \hat{y}\,\hat{p}_x$$

Η Τροχιακή Στροφορμή

$$\hat{\mathbb{L}} = \hat{\mathbb{r}} \times \hat{\mathbb{p}} \qquad \textit{Τροχιακη} \quad \textit{Στροφορμη}$$

- $\hat{\mathbb{r}}$ οι συνιστώσες του τελεστή της θέσης

$$\hat{\mathbb{r}} = (\hat{x}\,, \quad \hat{y}\,, \quad \hat{z})$$

- $\hat{\mathbb{p}}$ οι συνιστώσες του τελεστή της ορμής

$$\hat{\mathbb{p}} = (\hat{p}_x\,, \quad \hat{p}_y\,, \quad \hat{p}_z)$$

Οι συνιστώσες της τροχιακής στροφορμής είναι

$$\hat{L}_x = \hat{y}\,\hat{p}_z - \hat{z}\,\hat{p}_y \quad , \quad \hat{L}_y = \hat{z}\,\hat{p}_x - \hat{x}\,\hat{p}_z \quad , \quad \hat{L}_z = \hat{x}\,\hat{p}_y - \hat{y}\,\hat{p}_x$$

Η Τροχιακή Στροφορμή

$$\hat{\mathbb{L}} = \hat{\mathbb{r}} \times \hat{\mathbb{p}} \qquad \mathit{Τροχιακη} \quad \mathit{Στροφορμη}$$

- $\hat{\mathbb{r}}$ οι συνιστώσες του τελεστή της θέσης

$$\hat{\mathbb{r}} = (\hat{x}\,, \quad \hat{y}\,, \quad \hat{z})$$

- $\hat{\mathbb{p}}$ οι συνιστώσες του τελεστή της ορμής

$$\hat{\mathbb{p}} = (\hat{p}_x\,, \quad \hat{p}_y\,, \quad \hat{p}_z)$$

Οι συνιστώσες της τροχιακής στροφορμής είναι

$$\hat{L}_x = \hat{y}\,\hat{p}_z - \hat{z}\,\hat{p}_y \quad , \quad \hat{L}_y = \hat{z}\,\hat{p}_x - \hat{x}\,\hat{p}_z \quad , \quad \hat{L}_z = \hat{x}\,\hat{p}_y - \hat{y}\,\hat{p}_x$$

Το τετράγωνο του μέτρου της τροχιακής στροφορμής :

$$\hat{\mathbb{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

Η "Αλγεβρα" της στροφορμής :

$$\left[\hat{L}_x , \hat{L}_y\right] = i\hbar\hat{L}_z \quad , \quad \left[\hat{L}_y , \hat{L}_z\right] = i\hbar\hat{L}_x \quad , \quad \left[\hat{L}_z , \hat{L}_x\right] = i\hbar\hat{L}_y$$

$$\left[\hat{\mathbb{L}}^2 , \hat{L}_k\right] = 0 \quad , \quad k = x, y, z$$

- Η Αλγεβρα της στροφορμής είναι η ίδια ανεξαρτήτως του είδους αυτής (τροχιακής η ιδιοστροφορμής = σπιν)

Το τετράγωνο του μέτρου της τροχιακής στροφορμής :

$$\hat{\mathbb{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

Η "Αλγεβρα" της στροφορμής :

$$[\hat{L}_x , \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z \quad , \quad [\hat{L}_y , \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x \quad , \quad [\hat{L}_z , \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y$$

$$\left[\hat{\mathbb{L}}^2 , \hat{L}_k\right] = 0 \quad , \quad k = x, y, z$$

- Η Αλγεβρα της στροφορμής είναι η ίδια ανεξαρτήτως του είδους αυτής
  (τροχιακής η ιδιοστροφορμής = σπιν)

Το τετράγωνο του μέτρου της τροχιακής στροφορμής :

$$\hat{\mathbb{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

Η "Αλγεβρα" της στροφορμής :

$$[\hat{L}_x , \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z \quad , \quad [\hat{L}_y , \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x \quad , \quad [\hat{L}_z , \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y$$

$$\left[\hat{\mathbb{L}}^2 , \hat{L}_k\right] = 0 \quad , \quad k = x, y, z$$

- **Η Αλγεβρα της στροφορμής είναι η ίδια ανεξαρτήτως του είδους αυτής**

  (τροχιακής η ιδιοστροφορμής = σπιν)

Η ¨ Ιδιοστροφορμή ¨ (spin)

Εκτός της τροχιακής στροφορμής ορισμένα κβαντικά συστήματα έχουν και εσωτερική στροφορμή (ιδιοστροφορμή η σπιν) που δεν συνδέεται με την θέση και την ορμή τους !

- Κλασικό σωματίδιο με φορτίο e μάζα m και στροφορμή $\vec{J}$ έχει μαγνητική ροπή

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2mc}\vec{J}$$

- Η δυναμική ενέργεια και η δύναμη που ασκείται σε αυτό όταν βρεθεί σε μαγνητικό πεδίο είναι

$$U_B = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} \quad \Longrightarrow \quad \vec{F} = -\vec{\nabla}\, U_B$$

- Σε ανομοιογενές μαγνητικό πεδίο η δύναμη είναι ανάλογη της στροφορμής του συστήματος.

Οι **O. Stern - W. Gerlach, 1922** έδειξαν ότι η στροφορμή είναι κβαντισμένη και επίσης ότι το ηλεκτρόνιο διαθέτει εσωτερική στροφορμή (σπιν) !

- Δέσμη ατόμων αργύρου (**Ag**) διέρχεται από ανομοιογενές μαγνητικό πεδίο κατά την κατεύθυνση - z

$$\vec{B} = \hat{z}\, B_z(z)$$

- Τα άτομα **Ag** είναι ουδέτερα και δεν υφίστανται δύναμη (**Lorentz**) $\vec{F} = q\, \vec{u} \times \vec{B}$. Η μοναδική δύναμη είναι λόγω της μαγνητικής ροπής και για το συγκεκριμένο πεδίο μόνο κατά την διεύθυνση - z

$$F_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

- Τα 46 από τα 47 ηλεκτρόνια του **Ag** βρίσκονται σε κατάσταση μηδενικής ολικής στροφορμής και το μοναδικό εξωτερικό ηλεκτρόνιο βρίσκεται σε κατάσταση με μηδενική τροχιακή στροφορμή.

  Η μαγνητική ροπή του συστήματος οφείλεται στο σπιν αυτού του ηλεκτρονίου !

Η δύναμη που ασκείται στα άτομα **Ag** είναι ανάλογη του σπιν του ηλεκτρονίου στην κατεύθυνση - *z* :

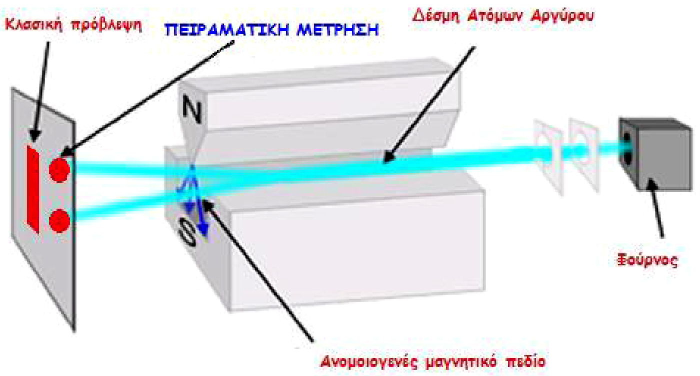
$$F_z = \frac{e}{2\, m_e\, c} \frac{\partial B_z}{\partial z} \, S_z$$

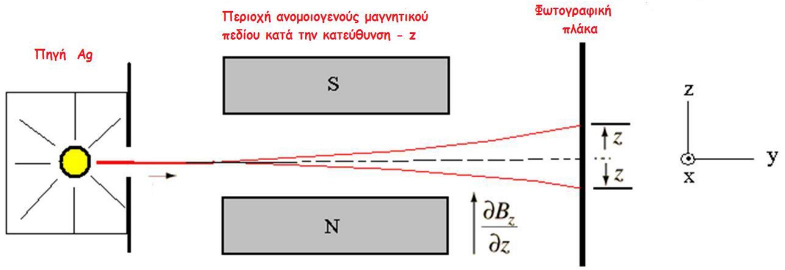
- Δεν αναμένεται διαχωρισμός της δέσμης αν το ηλεκτρόνιο δεν διαθέτει σπιν, $S_z = 0$.
- Αν $S_z \neq 0$ και παίρνει συνεχείς τιμές $-S \leq S_z \leq S$ αναμένεται διαχωρισμός της δέσμης με συνεχή τρόπο !
- Αν $S_z \neq 0$ και παίρνει διακριτές τιμές αναμένεται διαχωρισμός της δέσμης σε υποδέσμες τόσες όσες οι τιμές που παίρνει η S_z !

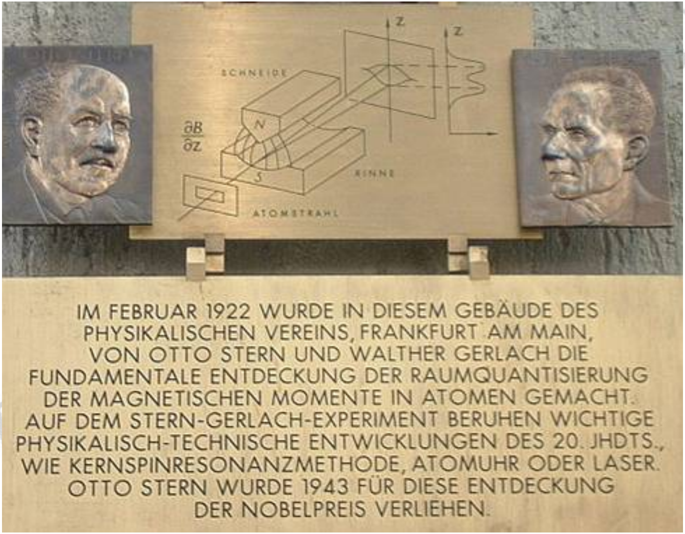
Η δύναμη που ασκείται στα άτομα **Ag** είναι ανάλογη του σπιν του ηλεκτρονίου στην κατεύθυνση - z :

$$F_z = \frac{e}{2\, m_e\, c} \, \frac{\partial B_z}{\partial z} \, S_z$$

- Δεν αναμένεται διαχωρισμός της δέσμης αν το ηλεκτρόνιο δεν διαθέτει σπιν, $S_z = 0$.
- Αν $S_z \neq 0$ και παίρνει συνεχείς τιμές $-S \leq S_z \leq S$ αναμένεται διαχωρισμός της δέσμης με συνεχή τρόπο !
- Αν $S_z \neq 0$ και παίρνει διακριτές τιμές αναμένεται διαχωρισμός της δέσμης σε υποδέσμες τόσες όσες οι τιμές που παίρνει η S_z !


Κλασική πρόβλεψη
ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΜΕΤΡΗΣΗ
Δέσμη Ατόμων Αργύρου
N
S
Φούρνος
Ανομοιογενές μαγνητικό πεδίο


Περιοχή ανομοιογενούς μαγνητικού πεδίου κατά την κατεύθυνση - z
Φωτογραφική πλάκα
Πηγή Ag
S
N
$\frac{\partial B_z}{\partial z}$
z
z
z
y
x


SCHNEIDE
$\frac{\partial B}{\partial z}$
N
S
Z
Z
RINNE
ATOMSTRAHL
IM FEBRUAR 1922 WURDE IN DIESEM GEBÄUDE DES PHYSIKALISCHEN VEREINS, FRANKFURT AM MAIN, VON OTTO STERN UND WALTHER GERLACH DIE FUNDAMENTALE ENTDECKUNG DER RAUMQUANTISIERUNG DER MAGNETISCHEN MOMENTE IN ATOMEN GEMACHT. AUF DEM STERN-GERLACH-EXPERIMENT BERUHEN WICHTIGE PHYSIKALISCH-TECHNISCHE ENTWICKLUNGEN DES 20. JHDTS., WIE KERNSPINRESONANZMETHODE, ATOMUHR ODER LASER. OTTO STERN WURDE 1943 FÜR DIESE ENTDECKUNG DER NOBELPREIS VERLIEHEN.

Ο τελεστής του σπιν

- Το σπιν κβαντικού συστήματος είναι (ψευδο -) ανυσματικό μέγεθος όπως η τροχιακή στροφορμή

$$\hat{\mathbb{S}} = (\hat{S}_x\,,\quad \hat{S}_y\,,\quad \hat{S}_z)$$

- οι συνιστώσες του ικανοποιούν τις ίδιες σχέσεις μετάθεσης με την τροχιακή στροφορμή

$$\left[\,\hat{S}_x\,,\,\hat{S}_y\,\right] = i\,\hbar\hat{S}_z \quad , \quad \left[\,\hat{S}_y\,,\,\hat{S}_z\,\right] = i\,\hbar\hat{S}_x \quad , \quad \left[\,\hat{S}_z\,,\,\hat{S}_x\,\right] = i\,\hbar\hat{S}_y$$

$$\left[\hat{\mathbb{S}}^2\,,\,\hat{S}_k\right] = 0 \quad , \quad k = x, y, z$$

Ο τελεστής του σπιν

- **Το σπιν κβαντικού συστήματος είναι (ψευδο -) ανυσματικό μέγεθος όπως η τροχιακή στροφορμή**

$$\hat{\mathbb{S}} = (\hat{S}_x \,, \quad \hat{S}_y \,, \quad \hat{S}_z)$$

- **οι συνιστώσες του ικανοποιούν τις ίδιες σχέσεις μετάθεσης με την τροχιακή στροφορμή**

$$\left[\, \hat{S}_x \,, \, \hat{S}_y \,\right] = i\,\hbar \hat{S}_z \quad , \quad \left[\, \hat{S}_y \,, \, \hat{S}_z \,\right] = i\,\hbar \hat{S}_x \quad , \quad \left[\, \hat{S}_z \,, \, \hat{S}_x \,\right] = i\,\hbar \hat{S}_y$$

$$\left[\, \hat{\mathbb{S}}^2 \,, \, \hat{S}_k \,\right] = 0 \quad , \quad k = x, y, z$$

Η Αλγεβρα και η Κβάντωση της Στροφορμής

- $\hat{J}_1$, $\hat{J}_2$, $\hat{J}_3$ αυτοσυζυγείς τελεστές που ικανοποιούν τις σχέσεις μετάθεσης

$$[\hat{J}_1 , \hat{J}_2] = i\hbar \hat{J}_3 \quad , \quad [\hat{J}_2 , \hat{J}_3] = i\hbar \hat{J}_1 \quad , \quad [\hat{J}_3 , \hat{J}_1] = i\hbar \hat{J}_2$$

$$[\hat{\mathbb{J}}^2 , \hat{J}_k] = 0 \quad , \quad k = 1, 2, 3$$

όπου $\hat{\mathbb{J}}^2 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2$

- Από την " Αλγεβρα " καθορίζονται οι ιδιοτιμές των $\hat{\mathbb{J}}^2$ και $\hat{J}_k$!

$$\hat{\mathbb{J}}^2 \Longrightarrow \hbar^2 j(j+1) \qquad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots$$

$$\hat{J}_k \Longrightarrow \hbar m \qquad m = -j, -j+1, \cdots j$$

$|\, j,\ m\ >$ κοινά ιδιοανύσματα του $\hat{\mathbb{J}}^2$ και ενός μόνο απο τους $\hat{J}_k$, π.χ. του $\hat{J}_3$

$$\boxed{\hat{\mathbb{J}}^2\,|\, j,\ m\ > = \hbar^2 j(j+1)\,|\, j,\ m\ > \ ,\quad \hat{J}_3\,|\, j,\ m\ > = \hbar m\,|\, j,\ m\ >}$$

- Τα ιδιοανύσματα $|\, j,\ m\ >$ **ΔΕΝ** είναι ιδιοανύσματα των $\hat{J}_{1,2}$ γιατί οι τελεστές αυτοί δεν μετατίθενται με τον $\hat{J}_3$!
- Τα ιδιοανύσματα των $\hat{J}_{1,2}$ είναι γραμμικοί συνδυασμοί των $|\, j,\ m\ >$.

j	m	αρ. κατ. $2j+1$	Καταστάσεις
0	0	1	$\|\,0\,,\ 0\ >$
1/2	- 1/2 , 1/2	2	$\|\,1/2,\ +1/2\ >$ $\|\,1/2,\ -1/2\ >$
1	-1 , 0 , 1	3	$\|\,1,\ +1\ >$ $\|\,1,\ \ 0\ >$ $\|\,1,\ -1\ >$
...	...	...	...

$|\, j,\ m >$ κοινά ιδιοανύσματα του $\hat{\mathbb{J}}^2$ και ενός μόνο απο τους $\hat{J}_k$, π.χ. του $\hat{J}_3$

$$\hat{\mathbb{J}}^2 \,|\, j,\ m > = \hbar^2 j(j+1)\,|\, j,\ m > \ , \quad \hat{J}_3\,|\, j,\ m > = \hbar m\,|\, j,\ m >$$

- Τα ιδιοανύσματα $|\, j,\ m >$ **ΔΕΝ** είναι ιδιοανύσματα των $\hat{J}_{1,2}$ γιατί οι τελεστές αυτοί δεν μετατίθενται με τον $\hat{J}_3$!
- Τα ιδιοανύσματα των $\hat{J}_{1,2}$ είναι γραμμικοί συνδυασμοί των $|\, j,\ m >$.

j	m	αρ. κατ. $2j+1$	Καταστάσεις
0	0	1	$\|\, 0\,,\, 0 >$
1/2	- 1/2 , 1/2	2	$\|\, 1/2,\, +1/2 >$ $\|\, 1/2,\, -1/2 >$
1	-1 , 0 , 1	3	$\|\, 1,\, +1 >$ $\|\, 1,\ \ 0 >$ $\|\, 1,\, -1 >$
. . .	. . .	. . .	. . .

$\hat{J}_+$, $\hat{J}_-$ ορίζονται ως γραμμικοί συνδυασμοί των $\hat{J}_1$, $\hat{J}_2$

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_1 + i\,\hat{J}_2 \quad , \quad \hat{J}_- = \hat{J}_1 - i\,\hat{J}_2$$

Ενεργούν ως τελεστές που ανεβάζουν και κατεβάζουν την τιμή του κβαντικού αριθμού "m"

$$\begin{aligned} \hat{J}_+\,|\,j,\ m > &= C_+\,|\,j,\ m+1\ > \\ \hat{J}_-\,|\,j,\ m > &= C_-\,|\,j,\ m-1\ > \end{aligned}$$

Αν οι καταστάσεις $|\,j, m >$ είναι κανονικοποιημένες στην μονάδα τότε οι συντελεστές $C_\pm$ προσδιορίζονται εκτός από έναν πολλαπλασιαστικό παράγοντα μέτρου = 1 (φάση). Η συνήθης σύμβαση είναι ο παράγοντας αυτός να λαμβάνεται μονάδα οπότε

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

Απόδειξη

....

....

Τα συμπεράσματα είναι εφαρμόσιμα στην στροφορμή

ΣΠΙΝ

$$\hat{J}_1 \,,\, \hat{J}_2 \,,\, \hat{J}_3 \quad \Longrightarrow \quad \hat{S}_x \,,\, \hat{S}_y \,,\, \hat{S}_z$$

Τιμές του κβαντικού αριθμού του σπιν :

$$s = 0 \,,\, \frac{1}{2} \,,\, 1 \,,\, \frac{3}{2} \,,\, 2 \,,\, \cdots$$

ΤΡΟΧΙΑΚΗ ΣΤΡΟΦΟΡΜΗ

$$\hat{J}_1 \,,\, \hat{J}_2 \,,\, \hat{J}_3 \quad \Longrightarrow \quad \hat{L}_x \,,\, \hat{L}_y \,,\, \hat{L}_z$$

Τιμές του κβαντικού αριθμού της τροχιακής στροφορμής :

$$\ell = 0 \,,\, \cancel{\frac{1}{2}} \,,\, 1 \,,\, \cancel{\frac{3}{2}} \,,\, 2 \,,\, \cdots$$

Μόνο ακέραιες τιμές είναι επιτρεπτές όπως θα αναλυθεί !

Τα συμπεράσματα είναι εφαρμόσιμα στην στροφορμή

ΣΠΙΝ

$$\hat{J}_1 \, , \, \hat{J}_2 \, , \, \hat{J}_3 \implies \hat{S}_x \, , \, \hat{S}_y \, , \, \hat{S}_z$$

Τιμές του κβαντικού αριθμού του σπιν :

$$s = 0 \, , \, \frac{1}{2} \, , \, 1 \, , \, \frac{3}{2} \, , \, 2 \, , \, \cdots$$

ΤΡΟΧΙΑΚΗ ΣΤΡΟΦΟΡΜΗ

$$\hat{J}_1 \, , \, \hat{J}_2 \, , \, \hat{J}_3 \implies \hat{L}_x \, , \, \hat{L}_y \, , \, \hat{L}_z$$

Τιμές του κβαντικού αριθμού της τροχιακής στροφορμής :

$$\ell = 0 \, , \, \cancel{\frac{1}{2}} \, , \, 1 \, , \, \cancel{\frac{3}{2}} \, , \, 2 \, , \, \cdots$$

Μόνο ακέραιες τιμές είναι επιτρεπτές όπως θα αναλυθεί !

Τα συμπεράσματα είναι εφαρμόσιμα στην στροφορμή

ΣΠΙΝ

$$\hat{J}_1 \, , \, \hat{J}_2 \, , \, \hat{J}_3 \implies \hat{S}_x \, , \, \hat{S}_y \, , \, \hat{S}_z$$

Τιμές του κβαντικού αριθμού του σπιν :

$$s = 0 \, , \, \frac{1}{2} \, , \, 1 \, , \, \frac{3}{2} \, , \, 2 \, , \, \cdots$$

ΤΡΟΧΙΑΚΗ ΣΤΡΟΦΟΡΜΗ

$$\hat{J}_1 \, , \, \hat{J}_2 \, , \, \hat{J}_3 \implies \hat{L}_x \, , \, \hat{L}_y \, , \, \hat{L}_z$$

Τιμές του κβαντικού αριθμού της τροχιακής στροφορμής :

$$\ell = 0 \, , \cancel{\frac{1}{2}} \, , \, 1 \, , \cancel{\frac{3}{2}} \, , \, 2 \, , \, \cdots$$

Μόνο ακέραιες τιμές είναι επιτρεπτές όπως θα αναλυθεί !

Τα συμπεράσματα είναι εφαρμόσιμα στην στροφορμή

ΣΠΙΝ

$$\hat{J}_1 \,,\, \hat{J}_2 \,,\, \hat{J}_3 \quad \Longrightarrow \quad \hat{S}_x \,,\, \hat{S}_y \,,\, \hat{S}_z$$

Τιμές του κβαντικού αριθμού του σπιν :

$$s = 0 \,,\, \frac{1}{2} \,,\, 1 \,,\, \frac{3}{2} \,,\, 2 \,,\, \cdots$$

ΤΡΟΧΙΑΚΗ ΣΤΡΟΦΟΡΜΗ

$$\hat{J}_1 \,,\, \hat{J}_2 \,,\, \hat{J}_3 \quad \Longrightarrow \quad \hat{L}_x \,,\, \hat{L}_y \,,\, \hat{L}_z$$

Τιμές του κβαντικού αριθμού της τροχιακής στροφορμής :

$$\ell = 0 \,,\, \cancel{\frac{1}{2}} \,,\, 1 \,,\, \cancel{\frac{3}{2}} \,,\, 2 \,,\, \cdots$$

Μόνο ακέραιες τιμές είναι επιτρεπτές όπως θα αναλυθεί !

$s = 1/2 \quad , \quad m_s = -1/2\,,\ +1/2$

- Ιδιοτιμή του $\hat{S}^2$:

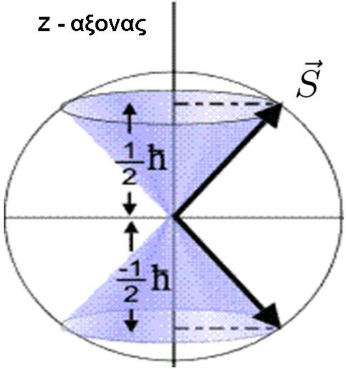
$$\hbar^2\, s\,(s+1) = \frac{3}{4}\,\hbar^2$$

- Ιδιοτιμές του $\hat{S}_z$:

$$\hbar\, m_s = -\,\frac{\hbar}{2}\,,\ +\,\frac{\hbar}{2}$$

- Καταστάσεις :

$$|\,1/2\,,\ +1/2\rangle$$
$$|\,1/2\,,\ -1/2\rangle$$



Αναπαράσταση του σπιν $s = 1/2$ με τους πίνακες Pauli

- Η περίπτωση $s = \frac{1}{2}$ μπορεί να αναπαρασταθεί με πίνακες 2×2 :

$$S_k = \frac{\hbar}{2}\sigma_k \quad , \quad k = x, y, z$$

όπου σ_k είναι οι πίνακες Pauli

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

- Οι ιδιοκαταστάσεις του s_z με ιδιοτιμές $+\hbar/2$ και $-\hbar/2$:

$$|1/2, +1/2\rangle \Longrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad |1/2, -1/2\rangle \Longrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Η Τροχιακή στροφορμή στην αναπαράσταση θέσης

Στην αναπαράσταση θέσης

$$\hat{\mathbb{L}} = \vec{r} \times (-i\hbar\vec{\nabla})$$

και σε σφαιρικές συντεταγμένες

$$\hat{L}_{\pm} = \hbar\, e^{\pm i\phi} \left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\,\cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\phi} \right)$$

$$\hat{L}_z = -i\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial\phi}$$

$$\hat{\mathbb{L}}^2 = -\hbar^2\,\frac{1}{\sin^2\theta}\left[\sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$$

Η Τροχιακή στροφορμή στην αναπαράσταση θέσης

Στην αναπαράσταση θέσης

$$\hat{\mathbb{L}} = \vec{r} \times (-i\hbar\vec{\nabla})$$

και σε σφαιρικές συντεταγμένες

$$\begin{aligned}
\hat{L}_{\pm} &= \hbar\, e^{\pm i\phi} \left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \\
\hat{L}_z &= -i\,\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} \\
\hat{\mathbb{L}}^2 &= -\hbar^2 \frac{1}{\sin^2\theta} \left[\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right]
\end{aligned}$$

- Οι ιδιοσυναρτήσεις της τροχιακής στροφορμής $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ είναι συναρτήσεις των μεταβλητών θ , ϕ

$$\begin{aligned} \hat{\mathbb{L}}^2 \, Y_{\ell m}(\theta, \phi) &= \hbar^2 \, \ell\,(\,\ell\,+1\,)\, Y_{\ell m}(\theta, \phi) \\ \hat{L}_z \, Y_{\ell m}(\theta, \phi) &= \hbar \, m \, Y_{\ell m}(\theta, \phi) \end{aligned}$$

$m = -\ell , -\ell+1 , -\ell+2 , \cdots \ell-1 , \ell$

- Από την δεύτερη $\Longrightarrow$

$$-i\,\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \hbar \, m \, Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

της οποίας η γενική λύση είναι

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = e^{i\,m\,\phi} \, P(\theta)$$

Οι ιδιοσυναρτήσεις της τροχιακής στροφορμής $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ είναι συναρτήσεις των μεταβλητών θ , ϕ

$$\begin{aligned} \hat{\mathbb{L}}^2 \, Y_{\ell m}(\theta, \phi) &= \hbar^2 \, \ell(\ell+1) \, Y_{\ell m}(\theta, \phi) \\ \hat{L}_z \, Y_{\ell m}(\theta, \phi) &= \hbar \, m \, Y_{\ell m}(\theta, \phi) \end{aligned}$$

$m = -\ell, -\ell+1, -\ell+2, \cdots \ell-1, \ell$

Από την δεύτερη $\Longrightarrow$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \hbar \, m \, Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

της οποίας η γενική λύση είναι

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = e^{i m \phi} P(\theta)$$

Οι $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ είναι περιοδικές ως προς την μεταβλητή ϕ

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi + 2\pi) = Y_{\ell m}(\theta, \phi) \implies e^{i\, m(\phi + 2\pi)} = e^{i\, m\phi}$$

$$m = \alpha\kappa\epsilon\varrho\alpha\iota o\varsigma$$

και επειδή $m = -\ell \cdots \ell$ θα πρέπει $\implies$

$$\ell = \alpha\kappa\epsilon\varrho\alpha\iota o\varsigma$$

- Η συνάρτηση $P(\theta)$ προσδιορίζεται από την εξίσωση ιδιοτιμών του $\mathbb{L}^2$

$$-\frac{1}{\sin^2\theta}\left[\sin\theta \frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta \frac{dP}{d\theta}\right) - m^2 P\right] = \ell(\ell+1) P$$

Οι $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ είναι περιοδικές ως προς την μεταβλητή ϕ

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi + 2\pi) = Y_{\ell m}(\theta, \phi) \implies e^{i\,m(\phi+2\pi)} = e^{i\,m\phi}$$

$$\boxed{m = \text{ακεραιος}}$$

και επειδή $m = -\ell \cdots \ell$ θα πρέπει $\Longrightarrow$

$$\boxed{\ell = \text{ακεραιος}}$$

- Η συνάρτηση $P(\theta)$ προσδιορίζεται από την εξίσωση ιδιοτιμών του $\hat{\mathbb{L}}^2$

$$-\frac{1}{\sin^2\theta}\left[\sin\theta \frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta \frac{dP}{d\theta}\right) - m^2 P\right] = \ell(\ell+1)P$$

- Οι δύο ανεξάρτητες λύσεις μπορούν να εκφρασθούν ως συναρτήσεις της μεταβλητής $\cos\theta$ και είναι γνωστές από την μαθηματική βιβλιογραφία ως συναρτήσεις **Legendre**.

- Για ακέραιες τιμές του κβαντικού αριθμού της τροχιακής στροφορμής ℓ μόνο η μία λύση είναι αναλυτική (= χωρίς ανωμαλία) σε όλο διάστημα $-1 \leq \cos\theta \leq 1$.

$$P_\ell^m(\cos\theta) \qquad \textit{Legendre}$$

- Οι ιδιοσυναρτήσεις της τροχιακής στροφορμής γράφονται επομένως ως :

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = N_{\ell m}\, P_\ell^m(\cos\theta)\, e^{i m \phi}$$

και ονομάζονται **Σφαιρικές Αρμονικές** (Spherical Harmonics) . Η $N_{\ell m}$ είναι σταθερά κανονικοποίησης και η τιμή της είναι τέτοια ώστε το τετράγωνο του μέτρου της $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ να δίνει μονάδα όταν αυτό ολοκληρωθεί σε όλη την στερεά γωνία !

- Οι δύο ανεξάρτητες λύσεις μπορούν να εκφρασθούν ως συναρτήσεις της μεταβλητής $\cos\theta$ και είναι γνωστές από την μαθηματική βιβλιογραφία ως συναρτήσεις **Legendre**.

- Για ακέραιες τιμές του κβαντικού αριθμού της τροχιακής στροφορμής ℓ μόνο η μία λύση είναι αναλυτική (= χωρίς ανωμαλία) σε όλο διάστημα $-1 \leq \cos\theta \leq 1$.

$$P_\ell^m(\cos\theta) \qquad \textit{Legendre}$$

- Οι ιδιοσυναρτήσεις της τροχιακής στροφορμής γράφονται επομένως ως :

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = N_{\ell m}\, P_\ell^m(\cos\theta)\, e^{i m \phi}$$

και ονομάζονται **Σφαιρικές Αρμονικές (Spherical Harmonics)** . Η $N_{\ell m}$ είναι σταθερά κανονικοποίησης και η τιμή της είναι τέτοια ώστε το τετράγωνο του μέτρου της $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ να δίνει μονάδα όταν αυτό ολοκληρωθεί σε όλη την στερεά γωνία !

- Οι δύο ανεξάρτητες λύσεις μπορούν να εκφρασθούν ως συναρτήσεις της μεταβλητής $\cos\theta$ και είναι γνωστές από την μαθηματική βιβλιογραφία ως συναρτήσεις **Legendre**.

- Για ακέραιες τιμές του κβαντικού αριθμού της τροχιακής στροφορμής ℓ μόνο η μία λύση είναι αναλυτική (= χωρίς ανωμαλία) σε όλο διάστημα $-1 \leq \cos\theta \leq 1$.

$$P_\ell^m(\cos\theta) \qquad \textit{Legendre}$$

- Οι ιδιοσυναρτήσεις της τροχιακής στροφορμής γράφονται επομένως ως :

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = N_{\ell m}\; P_\ell^m(\cos\theta)\; e^{i m \phi}$$

και ονομάζονται **Σφαιρικές Αρμονικές (Spherical Harmonics)** . Η $N_{\ell m}$ είναι σταθερά κανονικοποίησης και η τιμή της είναι τέτοια ώστε το τετράγωνο του μέτρου της $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ να δίνει μονάδα όταν αυτό ολοκληρωθεί σε όλη την στερεά γωνία !

Ορθοκανονικότητα των Σφαιρικών Αρμονικών :

$$\int Y^{*}_{\ell m}(\theta,\phi)\, Y_{\ell' m'}(\theta,\phi)\, d\Omega \;=\; \delta_{\ell \ell'}\, \delta_{m m'}$$

$d\Omega$ είναι η στερεά γωνία :

$$d\Omega \;=\; \sin\theta \, d\theta \, d\phi$$

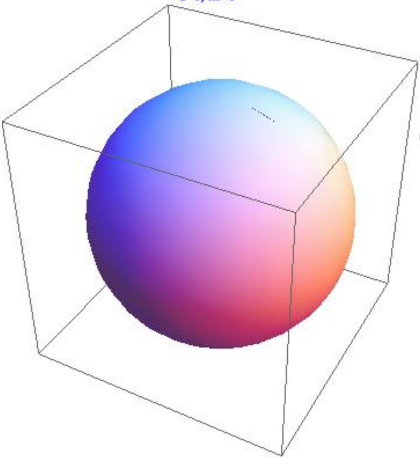
$\ell = 0,\; m = 0$:

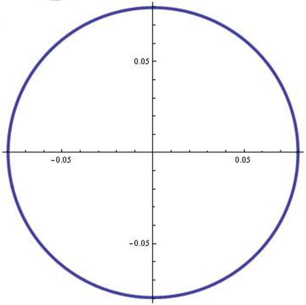
$$Y_{00} \;=\; \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

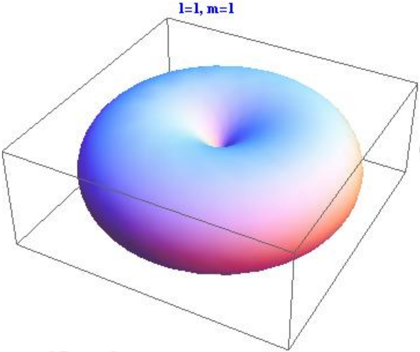
$\ell = 1,\; m = \pm 1, 0$:

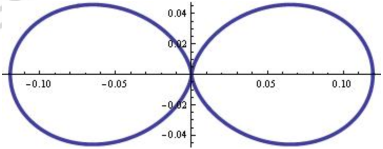
$$Y_{11} \;=\; -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\, \sin\theta \; e^{i\phi} \quad , \quad Y_{10} \;=\; +\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\, \cos\theta \quad , \quad Y_{1\,-1} \;=\; -Y^{*}_{11}$$

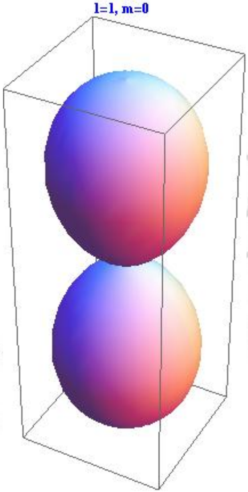
Σφαιρική απεικόνιση των $|Y_{\ell m}(\theta,\phi)|^2$

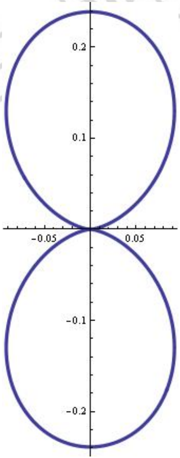


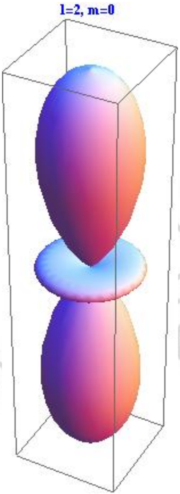


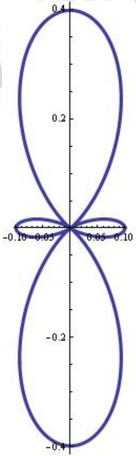

l=1, m=1

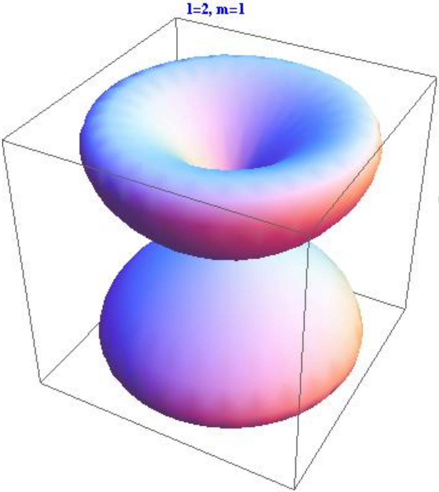

0.04
0.02
-0.10
-0.05
0.05
0.10
-0.02
-0.04

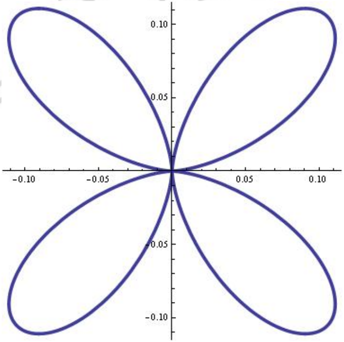

l=1, m=0

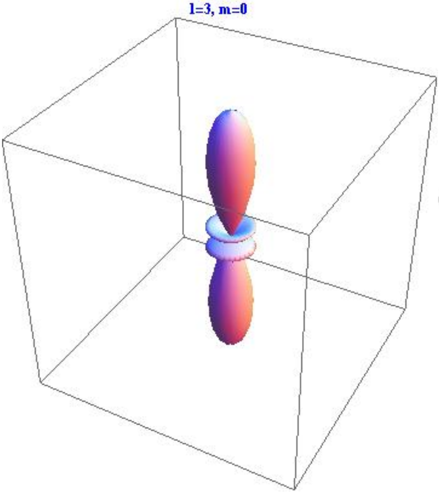

0.2
0.1
-0.05
0.05
-0.1
-0.2

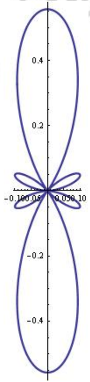

l=2, m=0


0.4
0.2
-0.10
-0.05
0.05
0.10
-0.2
-0.4

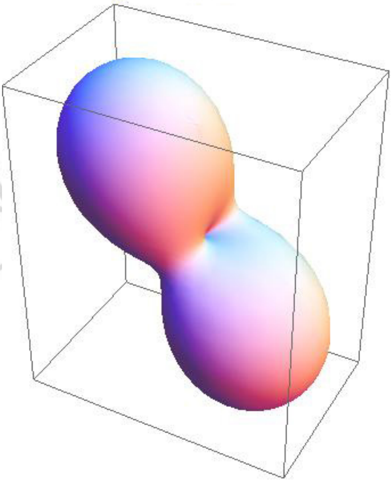

l=2, m=1


0.10
0.05
-0.05
-0.10
-0.10
-0.05
0.05
0.10

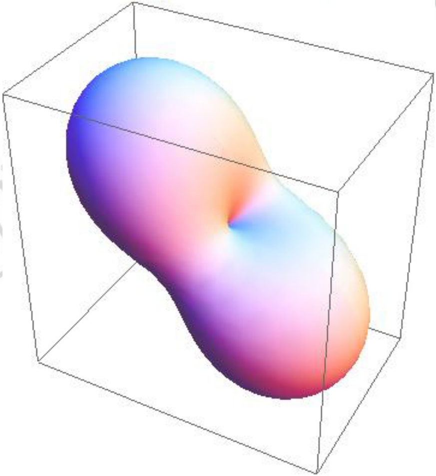

l=3, m=0


0.4
0.2
-0.2
-0.4

Η σφαιρική απεικόνιση της $\left| \frac{1}{\sqrt{2}} Y_{1\,1} + \frac{1}{\sqrt{2}} Y_{1\,-1} \right|^2$



Η σφαιρική απεικόνιση της $\left| \sqrt{\frac{1}{3}}\, Y_{10} + \sqrt{\frac{2}{3}}\, Y_{1\,-1} \right|^2$



Ανάπτυγμα σε σφαιρικές αρμονικές

Οποιαδήποτε συνάρτηση των θ,ϕ και επομένως και οποιαδήποτε κυματική συνάρτηση, μπορεί να αναπτυχθεί ως άθροισμα σφαιρικών αρμονικών

$$\Psi(r,\theta,\phi) = \sum_{\ell,m} g_{\ell m}(r)\, Y_{\ell m}(\theta,\phi) \iff g_{\ell m}(r) = \int Y^*_{\ell m}(\theta,\phi)\, \Psi(r,\theta,\phi)\, d\Omega$$

- Για να είναι αυτή κανονικοποιημένη στην μονάδα θα πρέπει (να επιβεβαιωθεί !)

$$\sum_{\ell,m} P_{\ell m} = 1 \quad \mu\epsilon \quad P_{\ell m} \equiv \int_0^\infty |g_{\ell m}(r)|^2\, r^2\, dr$$

- Τότε η μέση τιμή του $\hat{\mathbb{L}}^2$ και της τρίτης συνιστώσας αυτής $\hat{L}_z$ είναι (να επιβεβαιωθεί !)

$$\langle \hat{\mathbb{L}}^2 \rangle = \sum_{\ell,m} \hbar^2 \ell(\ell+1)\, P_{\ell m} \quad , \quad \langle \hat{L}_z \rangle = \sum_{\ell,m} (\hbar m)\, P_{\ell m}$$

- $P_{\ell m}$ είναι η πιθανότητα σε μέτρηση της στροφορμής να βρούμε τιμές, για το μέτρο της στροφορμής και της τρίτης συνιστώσας αυτής, ίσες με $\sqrt{\hbar^2 \ell(\ell+1)}$ και $\hbar m$ αντίστοιχα.

- Οι κυματικές συναρτήσεις με καθορισμένη τροχιακή στροφορμή ℓ , m είναι της μορφής

$$\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)\, Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

διότι τότε μόνον η $\Psi(r,\theta,\phi)$ είναι ιδιοσυνάρτηση της τροχιακής στροφορμής ! Η $R(r)$ ονομάζεται ακτινικό μέρος της κυματικής συνάρτησης για προφανείς λόγους.

- Τέτοιες κυματικές συναρτήσεις μπορούν να είναι ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτωνιανής του συστήματος αν η Χαμιλτωνιανή είναι **συμμετρική σε περιστροφές** ! Για κίνηση σωματιδίου σε δυναμικό $V(\vec{r})$ πλήρης στροφική συμμετρία συνεπάγεται ότι το δυναμικό δεν έχει εξάρτηση από τις γωνίες θ , ϕ, είναι δηλαδή της μορφής $V(r)$ (**κεντρικό δυναμικό**).

- Αν το σύστημα βρεθεί σε μια τέτοια κατάσταση η πυκνότητα πιθανότητας να βρεθεί στο σημείο r , θ , ϕ είναι ανάλογη του τετραγώνου $|R(r)|^2\, |Y_{\ell m}(\theta,\phi)|^2$

Παράδειγμα αναπτύγματος σε $Y_{\ell m}$

- Η κυματική συνάρτηση

$$\psi(\vec{r}) \;=\; f(r)\,(\,x^2 + y^2 + \lambda\, z^2\,)$$

μπορεί να γραφεί ως ανάπτυγμα (επιβεβαιώστε το !)

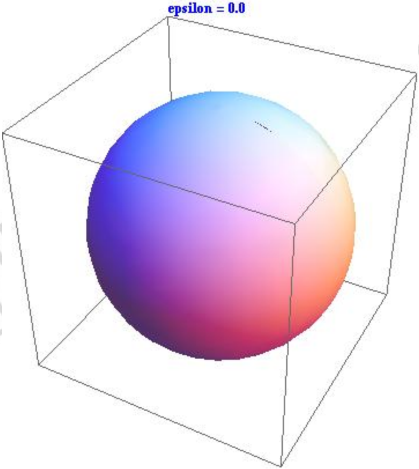
$$\boxed{\psi(\vec{r}) \;=\; F(r)\,\left[\left(1 + \frac{\epsilon}{3}\right)\,Y_{00} \;+\; \left(\frac{2\,\epsilon}{3\,\sqrt{5}}\right)\,Y_{20}\right]}$$

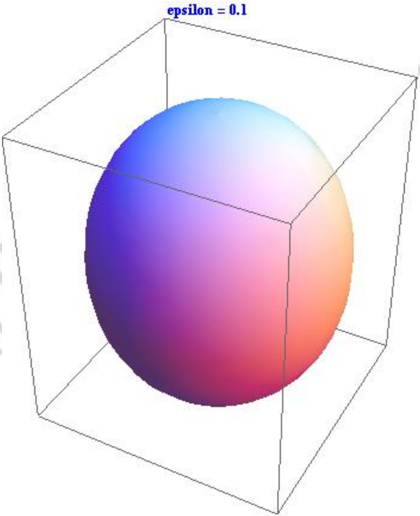
όπου $F(r) \;=\; \sqrt{4\,\pi}\;r^2\,f(r)$ και $\lambda = 1 + \epsilon$

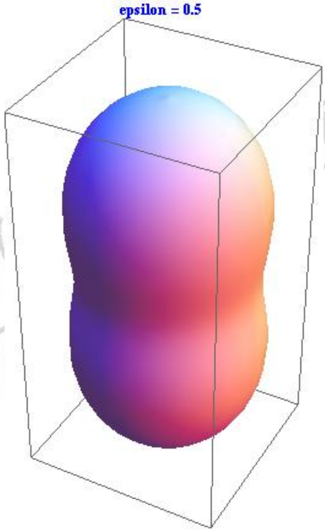
- Οι πιθανότητες $P_{l,\,m}$ να μετρηθεί στροφορμή με κβαντικούς αριθμούς $\ell,\ m$ είναι

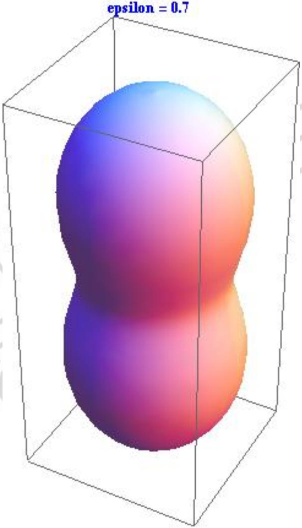
$$P_{2,\,0} \;=\; \frac{4\,\epsilon^2}{45 \;+\; 30\,\epsilon \;+\; 9\,\epsilon^2} \quad , \quad P_{0,\,0} \;=\; 1 \;-\; P_{2,\,0}$$

- Οι πιθανότητες να βρεθεί το σωματίδιο στις κατευθύνσεις με γωνίες $\theta,\ \phi$ για διαφορετικές τιμές της ϵ απεικονίζονται στις επόμενες διαφάνειες


epsilon = 0.0


epsilon = 0.1


epsilon = 0.5


epsilon = 0.7

Σφαιρική απεικόνιση της $|\psi(\vec{r})|^2$, για σταθερή ακτίνα, για τιμές του ϵ από **0** (πλήρης σφαιρική συμμετρία) έως **2** .

Κίνηση σωματιδίου σε κεντρικό δυναμικό

Ο τελεστής του τετραγώνου της ορμής στην αναπαράσταση θέσης είναι $\hat{\mathbb{p}}^2 \equiv -\hbar^2 \nabla^2$ και σε σφαιρικές συντεταγμένες παίρνει την μορφή

$$\hat{\mathbb{p}}^2 \equiv -\hbar^2 \nabla^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \right) + \frac{\hat{\mathbb{L}}^2}{r^2}$$

- Ο τελεστής της κινητικής ενέργειας $\hat{\mathbb{T}} = \hat{\mathbb{p}}^2 / 2\mu$ είναι επομένως

$$\hat{\mathbb{T}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \right) + \frac{\hat{\mathbb{L}}^2}{2\mu r^2}$$

και μετατίθεται προφανώς με όλες τις συνιστώσες της τροχιακής στροφορμής!

- Αν το δυναμικό είναι σφαιρικά συμμετρικό (**κεντρικό δυναμικό**) $V(\vec{r}) = V(r)$ τότε μετατίθεται με όλες τις συνιστώσες της τροχιακής στροφορμής !
- **Για κίνηση σε κεντρικά δυναμικά η Χαμιλτωνιανή μετατίθεται με την στροφορμή και επομένως υπάρχουν κοινές ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας και της στροφορμής !**

- Για κίνηση σε κεντρικό δυναμικό η Χαμιλτωνιανή μπορεί να γραφεί ως

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r\right) + \frac{\hat{\mathbb{L}}^2}{2\mu r^2} + V(r)$$

και μετατίθεται με όλες τις συνιστώσες της τροχιακής στροφορμής!

- Επομένως μπορούν να βρεθούν κοινές ιδιοσυναρτήσεις της τροχιακής στροφορμής και της ενέργειας που έχουν την μορφή $\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)\, Y_{\ell m}(\theta,\phi)$, όπως έχει ήδη αναφερθεί, οπότε το πρόβλημα ιδιοτιμών της ενέργειας

$$\hat{H}\,\Psi = E\,\Psi$$

ανάγεται σε μια διαφορική εξίσωση για την ακτινική συνάρτηση $R(r)$.

- Ορίζοντας την $u(r) \equiv r\,R(r)$ η εξίσωση αυτή είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2 u(r)}{d r^2} + \left(\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} + V(r)\right) u(r) = E\,u(r)$$

Για να είναι η $R(r)$ ομαλή στο σημείο $r = 0$ θα πρέπει η $u(r)$ να μηδενίζεται στο σημείο αυτό $u(0) = 0$. (Πιο διεξοδική ανάλυση θα γίνει στο επόμενο κεφάλαιο)

- Για κίνηση σε κεντρικό δυναμικό η Χαμιλτωνιανή μπορεί να γραφεί ως

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\,r\right) + \frac{\hat{\mathbb{L}}^2}{2\mu r^2} + V(r)$$

και μετατίθεται με όλες τις συνιστώσες της τροχιακής στροφορμής!

- Επομένως μπορούν να βρεθούν κοινές ιδιοσυναρτήσεις της τροχιακής στροφορμής και της ενέργειας που έχουν την μορφή $\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)\,Y_{\ell m}(\theta,\phi)$, όπως έχει ήδη αναφερθεί, οπότε το πρόβλημα ιδιοτιμών της ενέργειας

$$\hat{H}\,\Psi = E\,\Psi$$

ανάγεται σε μιά διαφορική εξίσωση για την ακτινική συνάρτηση $R(r)$.

- Ορίζοντας την $u(r) \equiv r\,R(r)$ η εξίσωση αυτή είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \left(\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2} + V(r)\right)u(r) = E\,u(r)$$

Για να είναι η $R(r)$ ομαλή στο σημείο $r = 0$ θα πρέπει η $u(r)$ να μηδενίζεται στο σημείο αυτό $u(0) = 0$. (Πιο διεξοδική ανάλυση θα γίνει στο επόμενο κεφάλαιο)

- Για κίνηση σε κεντρικό δυναμικό η Χαμιλτωνιανή μπορεί να γραφεί ως

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r\right) + \frac{\hat{\mathbb{L}}^2}{2\mu r^2} + V(r)$$

και μετατίθεται με όλες τις συνιστώσες της τροχιακής στροφορμής!

- Επομένως μπορούν να βρεθούν κοινές ιδιοσυναρτήσεις της τροχιακής στροφορμής και της ενέργειας που έχουν την μορφή $\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)\,Y_{\ell m}(\theta,\phi)$, όπως έχει ήδη αναφερθεί, οπότε το πρόβλημα ιδιοτιμών της ενέργειας

$$\hat{H}\,\Psi = E\,\Psi$$

ανάγεται σε μιά διαφορική εξίσωση για την ακτινική συνάρτηση $R(r)$.

- Ορίζοντας την $u(r) \equiv r\,R(r)$ η εξίσωση αυτή είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \left(\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2} + V(r)\right)u(r) = E\,u(r)$$

Για να είναι η $R(r)$ ομαλή στο σημείο $r = 0$ θα πρέπει η $u(r)$ να μηδενίζεται στο σημείο αυτό $u(0) = 0$. (Πιο διεξοδική ανάλυση θα γίνει στο επόμενο κεφάλαιο)

- Αλληλεπίδραση σπιν - σπιν των δύο ηλεκτρονίων

$$\hat{H} = g\,\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

- Κάθε ηλεκτρόνιο σε δύο καταστάσεις - Δύο προσανατολισμοί του σπιν !

- Αλληλεπίδραση σπιν - σπιν των δύο ηλεκτρονίων

$$\hat{H} = g\,\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

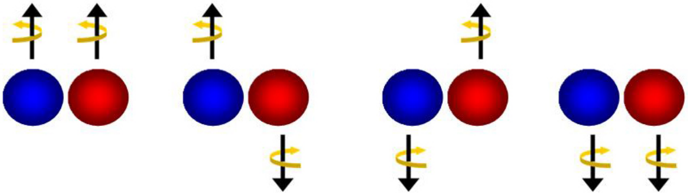
- Κάθε ηλεκτρόνιο σε δύο καταστάσεις - Δύο προσανατολισμοί του σπιν !

Ηλεκτρόνιο 1 **Ηλεκτρόνιο 2**

4 καταστάσεις για τα 2 ηλεκτρόνια

Ηλεκτρόνιο 1 Ηλεκτρόνιο 2

4 καταστάσεις για τα 2 ηλεκτρόνια



- Αλληλεπίδραση σπιν - σπιν των δύο ηλεκτρονίων

$$\hat{H} = g\,\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

- Κάθε ηλεκτρόνιο σε δύο καταστάσεις - Δύο προσανατολισμοί του σπιν !

- Πως από τις 4 καταστάσεις προκύπτουν οι ιδιοκαταστάσεις της $\hat{H}$;

Ποιές είναι οι δυνατές τιμές της ενέργειας ;

- Αλληλεπίδραση σπιν - σπιν των δύο ηλεκτρονίων

$$\hat{H} = g\,\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

- Κάθε ηλεκτρόνιο σε δύο καταστάσεις - Δύο προσανατολισμοί του σπιν !

- Πως από τις 4 καταστάσεις προκύπτουν οι ιδιοκαταστάσεις της $\hat{H}$;

Ποιές είναι οι δυνατές τιμές της ενέργειας ;

- Αλληλεπίδραση σπιν - σπιν των δύο ηλεκτρονίων

$$\hat{H} = g\, \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

- Κάθε ηλεκτρόνιο σε δύο καταστάσεις - Δύο προσανατολισμοί του σπιν !

- Πως από τις 4 καταστάσεις προκύπτουν οι ιδιοκαταστάσεις της $\hat{H}$;

Ποιές είναι οι δυνατές τιμές της ενέργειας ;

- Το ολικό σπιν του συστήματος είναι

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$$

- Οι τελεστές $\vec{S}_1$ και $\vec{S}_2$ μετατίθενται και οι συνιστώσες του ολικού σπιν ικανοποιούν την άλγεβρα της στροφορμής

$$[\hat{S}_i , \hat{S}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{S}_k$$

- Οι τελεστές $\vec{S}^2$, $\hat{S}_z$ και $\vec{S}_1^2$, $\vec{S}_2^2$ μετατίθενται και έχουν κοινά ιδιο - ανύσματα που είναι γραμμικοί συνδυασμοί των καταστάσεων των επι μέρους σπιν !

- Η εύρεση των ιδιοκαταστάσεων και των ιδιοτιμών αυτών είναι αντικείμενο της "αθροισης" η "σύνθεσης" των στροφορμών

- Το ολικό σπιν του συστήματος είναι

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$$

- Οι τελεστές $\vec{S}_1$ και $\vec{S}_2$ μετατίθενται και οι συνιστώσες του ολικού σπιν ικανοποιούν την άλγεβρα της στροφορμής

$$[\,\hat{S}_i\,,\,\hat{S}_j\,] = i\,\hbar\,\epsilon_{ijk}\,\hat{S}_k$$

- Οι τελεστές $\vec{S}^2$, $\hat{S}_z$ και $\vec{S}_1^2$, $\vec{S}_2^2$ μετατίθενται και έχουν κοινά ιδιο - ανύσματα που είναι γραμμικοί συνδυασμοί των 4 καταστάσεων των επι μέρους σπιν !

- Η εύρεση των ιδιοκαταστάσεων και των ιδιοτιμών αυτών είναι αντικείμενο της ‘‘αθροισης’’ η ‘‘σύνθεσης’’ των στροφορμών

- Το ολικό σπιν του συστήματος είναι

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$$

- Οι τελεστές $\vec{S}_1$ και $\vec{S}_2$ μετατίθενται και οι συνιστώσες του ολικού σπιν ικανοποιούν την άλγεβρα της στροφορμής

$$[\, \hat{S}_i \, , \, \hat{S}_j \,] = i\, \hbar \epsilon_{ijk} \, \hat{S}_k$$

- Οι τελεστές $\vec{S}^2$, $\hat{S}_z$ και $\vec{S}_1^2$, $\vec{S}_2^2$ μετατίθενται και έχουν κοινά ιδιο - ανύσματα που είναι γραμμικοί συνδιασμοί των 4 καταστάσεων των επι μέρους σπιν !

- Η εύρεση των ιδιοκαταστάσεων και των ιδιοτιμών αυτών είναι αντικείμενο της "αθροισης" η "σύνθεσης" των στροφορμών

- Το ολικό σπιν του συστήματος είναι

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$$

- Οι τελεστές $\vec{S}_1$ και $\vec{S}_2$ μετατίθενται και οι συνιστώσες του ολικού σπιν ικανοποιούν την άλγεβρα της στροφορμής

$$[\, \hat{S}_i \, , \, \hat{S}_j \,] = i\,\hbar\,\epsilon_{ijk}\,\hat{S}_k$$

- Οι τελεστές $\vec{S}^2$, $\hat{S}_z$ και $\vec{S}_1^2$, $\vec{S}_2^2$ μετατίθενται και έχουν κοινά ιδιο - ανύσματα που είναι γραμμικοί συνδιασμοί των 4 καταστάσεων των επι μέρους σπιν !
- Η εύρεση των ιδιοκαταστάσεων και των ιδιοτιμών αυτών είναι αντικείμενο της "αθροισης" η "σύνθεσης" των στροφορμών

- Η Χαμιλτωνιανή γράφεται

$$\hat{H} = \frac{g}{2}\left(\vec{S}^2 - \vec{S}_1^2 - \vec{S}_2^2\right)$$

- Τα κοινά ιδιανύσματα των $\vec{S}^2$, $\vec{S}_1^2$ και $\vec{S}_2^2$ είναι και ιδιοανύσματα της Χαμιλτωνιανής με ιδιοτιμές ενέργειας

$$E_s = \frac{g\,\hbar^2}{2}\left[\,s(s+1) - s_1(s_1+1) - s_2(s_2+1)\,\right]$$

- Ποιές οι τιμές του s και πόσες καταστάσεις υπάρχουν ;

- Η Χαμιλτωνιανή γράφεται

$$\hat{H} = \frac{g}{2}\left(\vec{S}^2 - \vec{S}_1^2 - \vec{S}_2^2\right)$$

- Τα κοινά ιδιανύσματα των $\vec{S}^2$, $\vec{S}_1^2$ και $\vec{S}_2^2$ είναι και ιδιοανύσματα της Χαμιλτωνιανής με ιδιοτιμές ενέργειας

$$E_s = \frac{g\,\hbar^2}{2}\left[\,s(s+1) - s_1(s_1+1) - s_2(s_2+1)\,\right]$$

- Ποιές οι τιμές του s και πόσες καταστάσεις υπάρχουν ;

- Η Χαμιλτωνιανή γράφεται

$$\hat{H} = \frac{g}{2}\left(\vec{S}^2 - \vec{S}_1^2 - \vec{S}_2^2\right)$$

- Τα κοινά ιδιανύσματα των $\vec{S}^2$, $\vec{S}_1^2$ και $\vec{S}_2^2$ είναι και ιδιοανύσματα της Χαμιλτωνιανής με ιδιοτιμές ενέργειας

$$E_s = \frac{g\,\hbar^2}{2}\left[\,s(s+1) - s_1(s_1+1) - s_2(s_2+1)\,\right]$$

- Ποιές οι τιμές του s και πόσες καταστάσεις υπάρχουν ;

Αθροιση των σπιν των ηλεκτρονίων

- Οι 4 καταστάσεις των 2 ηλεκτρονίων περιγράφονται από τα **"γινόμενα"**

$$|s_1\, m_1\rangle \otimes |s_2\, m_2\rangle \qquad m_1 = \pm\frac{1}{2} \quad m_2 = \pm\frac{1}{2}$$

- Οι τρίτες συνιστώσες $\hat{S}_{1,z}$ και $\hat{S}_{2,z}$ μετατίθενται επομένως το άθροισμά τους έχει ιδιοτιμές το άθροισμα των ιδιοτιμών ! $\Longrightarrow$

- Ο τελεστής της τρίτης συνιστώσας του ολικού σπιν $\hat{S}_z = \hat{S}_{1,z} + \hat{S}_{2,z}$ έχει ιδιοτιμές $\hbar\, M$ όπου

$$\boxed{M = m_1 + m_2}$$

$m_2 \backslash m_1$	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
$+\frac{1}{2}$	1	0
$-\frac{1}{2}$	0	-1

- Η μεγαλύτερη τιμή της συνιστώσας $\hat{S}_z$ είναι $+1$ και επομένως η αντίστοιχη κατάσταση στην οποίαν ανήκει έχει ολικό σπιν με τιμή $S \geq 1$. Ομως ο συνολικός αριθμός των ανεξαρτήτων καταστάσεων πρέπει να είναι 4 άρα υποχρεωτικά $S = 1$ αλλοιώς θα είχαμε περισσότερες από 4 καταστάσεις !
- Οι καταστάσεις με ολικό σπιν $S = 1$ έχουν τρίτες συνιστώσες $M = -1, 0, +1$, άρα έχουμε 3 καταστάσεις με $S = 1$
- Από τις συνολικά 4 ανεξάρτητες καταστάσεις οι 3 είναι αυτές με $S = 1$ που θεωρήθηκαν προηγουμένως και επομένως απομένει μία ανεξάρτητη κατάσταση που πρέπει να βρεθεί. Αυτή πρέπει να έχει υποχρεωτικά $S = 0$ γιατί τότε μόνο ο αριθμός των καταστάσεων $2S + 1$ ισούται με ένα ! Αυτό συνεπάγεται με την σειρά του ότι αυτή η κατάσταση χαρακτηρίζεται από $M = 0$.
  Να σημειωθεί ότι υπάρχουν δύο καταστάσεις με $M = 0$, η μία έχει $S = 1$ και η άλλη $S = 0$.

$$S = 0\,,\ 1$$

$m_2 \backslash m_1$	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
$+\frac{1}{2}$	1	0
$-\frac{1}{2}$	0	-1

- Η μεγαλύτερη τιμή της συνιστώσας $\hat{S}_z$ είναι $+1$ και επομένως η αντίστοιχη κατάσταση στην οποίαν ανήκει έχει ολικό σπιν με τιμή $S \geq 1$. Ομως ο συνολικός αριθμός των ανεξαρτήτων καταστάσεων πρέπει να είναι 4 άρα υποχρεωτικά $S = 1$ αλλοιώς θα είχαμε περισσότερες από 4 καταστάσεις !
- Οι καταστάσεις με ολικό σπιν $S = 1$ έχουν τρίτες συνιστώσες $M = -1, 0, +1$, άρα έχουμε 3 καταστάσεις με $S = 1$
- Από τις συνολικά 4 ανεξάρτητες καταστάσεις οι 3 είναι αυτές με $S = 1$ που θεωρήθηκαν προηγουμένως και επομένως απομένει μία ανεξάρτητη κατάσταση που πρέπει να βρεθεί. Αυτή πρέπει να έχει υποχρεωτικά $S = 0$ γιατί τότε μόνο ο αριθμός των καταστάσεων $2S + 1$ ισούται με ένα ! Αυτό συνεπάγεται με την σειρά του ότι αυτή η κατάσταση χαρακτηρίζεται από $M = 0$.
  Να σημειωθεί ότι υπάρχουν δύο καταστάσεις με $M = 0$, η μία έχει $S = 1$ και η άλλη $S = 0$.

$$S = 0\,,\ 1$$

$m_2 \backslash m_1$	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
$+\frac{1}{2}$	1	0
$-\frac{1}{2}$	0	-1

- Η μεγαλύτερη τιμή της συνιστώσας $\hat{S}_z$ είναι $+1$ και επομένως η αντίστοιχη κατάσταση στην οποίαν ανήκει έχει ολικό σπιν με τιμή $S \geq 1$. Ομως ο συνολικός αριθμός των ανεξαρτήτων καταστάσεων πρέπει να είναι 4 άρα υποχρεωτικά $S = 1$ αλλοιώς θα είχαμε περισσότερες από 4 καταστάσεις !
- Οι καταστάσεις με ολικό σπιν $S = 1$ έχουν τρίτες συνιστώσες $M = -1, 0, +1$, άρα έχουμε 3 καταστάσεις με $S = 1$
- Από τις συνολικά 4 ανεξάρτητες καταστάσεις οι 3 είναι αυτές με $S = 1$ που θεωρήθηκαν προηγουμένως και επομένως απομένει μία ανεξάρτητη κατάσταση που πρέπει να βρεθεί. Αυτή πρέπει να έχει υποχρεωτικά $S = 0$ γιατί τότε μόνο ο αριθμός των καταστάσεων $2S + 1$ ισούται με ένα ! Αυτό συνεπάγεται με την σειρά του ότι αυτή η κατάσταση χαρακτηρίζεται από $M = 0$.
  Να σημειωθεί ότι υπάρχουν δύο καταστάσεις με $M = 0$, η μία έχει $S = 1$ και η άλλη $S = 0$.

$$S = 0\,,\ 1$$

$m_2 \backslash m_1$	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
$+\frac{1}{2}$	1	0
$-\frac{1}{2}$	0	-1

- Η μεγαλύτερη τιμή της συνιστώσας $\hat{S}_z$ είναι $+1$ και επομένως η αντίστοιχη κατάσταση στην οποίαν ανήκει έχει ολικό σπιν με τιμή $S \geq 1$. Ομως ο συνολικός αριθμός των ανεξαρτήτων καταστάσεων πρέπει να είναι 4 άρα υποχρεωτικά $S = 1$ αλλοιώς θα είχαμε περισσότερες από 4 καταστάσεις !
- Οι καταστάσεις με ολικό σπιν $S = 1$ έχουν τρίτες συνιστώσες $M = -1, 0, +1$, άρα έχουμε 3 καταστάσεις με $S = 1$
- Από τις συνολικά 4 ανεξάρτητες καταστάσεις οι 3 είναι αυτές με $S = 1$ που θεωρήθηκαν προηγουμένως και επομένως απομένει μία ανεξάρτητη κατάσταση που πρέπει να βρεθεί. Αυτή πρέπει να έχει υποχρεωτικά $S = 0$ γιατί τότε μόνο ο αριθμός των καταστάσεων $2S + 1$ ισούται με ένα ! Αυτό συνεπάγεται με την σειρά του ότι αυτή η κατάσταση χαρακτηρίζεται από $M = 0$.
  Να σημειωθεί ότι υπάρχουν δύο καταστάσεις με $M = 0$, η μία έχει $S = 1$ και η άλλη $S = 0$.

$$S = 0\,,\ 1$$

Καταστάσεις $S = 1$:

$$\begin{aligned} M &= 1 : & & |++\rangle \\ M &= 0 : & & \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+-\rangle + |-+\rangle\right) \\ M &= -1 : & & |--\rangle \end{aligned}$$

Καταστάσεις $S = 0$:

$$M = 0 : \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+-\rangle - |-+\rangle\right)$$

Αθροιση στροφορμών j_1 , j_2

- ✓ $(2j_1+1)(2j_2+1)$ καταστάσεις με **q.n.** j_1 , m_1 και j_2 , m_2

$$|\, j_1 j_2 \,;\, m_1 m_2 \,\rangle \;\equiv\; |\, j_1 m_1 \,\rangle \otimes |\, j_2 m_2 \,\rangle$$

- ✓ Οι καταστάσεις του αθροίσματος με κβαντικούς αριθμους J , M είναι

$$|\, J M ; j_1 j_2 \,\rangle \;=\; \sum_{m_1\,,\,m_2} C(\, J M ; j_1 j_2\, m_1 m_2 \,)\; |\, j_1 j_2 \,;\, m_1 m_2 \,\rangle$$

$C(\,...\,) = 0$ όταν $M \neq m_1 + m_2$ - Συντελεστές **Clebsch - Gordan**

- ✓ Οι κβαντικοί αριθμοί J , M δίνονται από

$$J \;=\; |\, j_1 \;-\; j_2 \,| \;,\; \cdots (\, j_1 \;+\; j_2 \,) \quad , \quad M \;=\; -J, -J+1, \cdots J$$

Αθροιση στροφορμών j_1 , j_2

✓ $(2j_1+1)(2j_2+1)$ καταστάσεις με **q.n.** j_1, m_1 και j_2, m_2

$$|j_1 j_2 ; m_1 m_2\rangle \equiv |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle$$

✓ Οι καταστάσεις του αθροίσματος με κβαντικούς αριθμους J, M είναι

$$|JM; j_1 j_2\rangle = \sum_{m_1, m_2} C(JM; j_1 j_2 m_1 m_2)\, |j_1 j_2 ; m_1 m_2\rangle$$

$C(\dots) = 0$ όταν $M \neq m_1 + m_2$ - Συντελεστές **Clebsch - Gordan**

✓ Οι κβαντικοί αριθμοί J, M δίνονται από

$$J = |j_1 - j_2|, \cdots (j_1 + j_2) \quad , \quad M = -J, -J+1, \cdots J$$

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στο πλαίσιο του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Αθηνών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο την αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σημειώματα

Σημείωμα Ιστορικού Εκδόσεων Έργου

Το παρόν έργο αποτελεί την έκδοση 1.1

Η έκδοση 1.0 είναι διαθέσιμη εδώ.

Σημείωμα Αναφοράς

Σημείωμα Αδειοδότησης

Διατήρηση Σημειωμάτων

Οποιαδήποτε αναπαραγωγή ή διασκευή του υλικού θα πρέπει να συμπεριλαμβάνει:

- το Σημείωμα Αναφοράς
- το Σημείωμα Αδειοδότησης
- τη δήλωση Διατήρησης Σημειωμάτων

μαζί με τους συνοδευόμενους υπερσυνδέσμους.