תרגול מספר 10

ספין

תוכן עניינים

1 חזרה

בעזרת מטריצות פאולי (Pauli) אפשר להגדיר את האופרטורים המתארים את רכיבי וקטור הספין של ספין $\frac{1}{2}$, בייצוג הווקטורי $\psi = \begin{pmatrix} \chi_\uparrow(\mathbf{r}) \\ \chi_\downarrow(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{S}} &= \frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{\hbar}{2}\left(\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\right) = \left(\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z\right), \\ \hat{\sigma}_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{\sigma}_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{\sigma}_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

הייצוג שמופיע למעלה נכון באופן כללי, אך אם יש לנו המילטוניאן שהתלות שלו בספין פריקה מהתלות המרחבית ניתן לכתוב

$$\hat{H} = \hat{H}_0\left(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}\right) + \hat{V}\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) \Rightarrow \psi = \psi\left(\mathbf{r}\right)\chi\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right) = \psi\left(\mathbf{r}\right)\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix},$$

כאשר α ו־β אינם תלויים בקואורדינטות. אפשר להפעיל את האופרטורים השונים על פונקציית הגל באופן הבא:

$$\hat{S}_z\psi\left(\mathbf{r}\right)\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \psi\left(\mathbf{r}\right)\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \psi\left(\mathbf{r}\right)\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\psi\left(\mathbf{r}\right)\begin{pmatrix} \alpha \\ -\beta \end{pmatrix}.$$

אופרטורי הספין מקיימים יחסי חילוף של תנע זוויתי (מבחינה פיזיקלית, ספין דומה מאוד לתנע זוויתי בהתנהגות שלו, ומכאן נובע שמו), כיוון שמטריצות פאולי מקיימות את התכונה

$$\left[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y\right] = 2i\hat{\sigma}_z,\ \left[\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\right] = 2i\hat{\sigma}_x,\ \left[\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x\right] = 2i\hat{\sigma}_y.$$

נשתמש גם בזהות

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = -i\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \equiv \hat{I}.$$

2 אופרטורי ספין וסיבובים במרחב

אנחנו יודעים כי התנע הזוויתי הקלאסי, $\mathbf{L}=\mathbf{r}\times\mathbf{p}$, קשור הדוקות לסיבובים של המערכת. למשל, ניתן להראות באופן כללי על סמך יחסי החילוף בין רכיבי התנע הזוויתי בלבד כי האופרטור $\hat{\mathcal{D}}_z(\phi)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\phi}$ הוא אופרטור המסובב פונקציית גל סביב ציר $\hat{\mathbf{z}}$, במובן הבא (לא נוכיח זאת):

$$\hat{\mathcal{D}}_z(\phi')\psi(r,\vartheta,\phi)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\phi'}\psi(r,\vartheta,\phi)=\psi(r,\vartheta,\phi-\phi').$$

כיוון שספין מקיים את אותם יחסי החילוף, מתקיים קשר דומה עבור האופרטור $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}$. נראה זאת עבור ספין $\frac{1}{2}$.

תרגיל: הראו כי האופרטור $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}$ מסובב את ערך התצפית של וקטור הספין סביב ציר $\hat{\mathbf{z}}$.

פיתרון: כיוון שאנחנו מעוניינים אך ורק בספין, אין צורך להתייחס לחלק המרחבי של המערכת. נניח כי התחלנו עם פונקציית ספין $|\chi\rangle$. לאחר הפעלת האופרטור, נישאר עם הפונקציה $|\chi\rangle_\phi=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}|\chi\rangle$. ה־bra המתאים לה יהיה $\langle\chi|_\phi=\langle\chi|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}$, וערך התצפית של וקטור הספין יהיה:

$$\left\langle\hat{\mathbf{S}}\right\rangle_\phi=\left(\left\langle\hat{S}_x\right\rangle_\phi,\left\langle\hat{S}_y\right\rangle_\phi,\left\langle\hat{S}_z\right\rangle_\phi\right)=\langle\chi|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}\left(\hat{S}_x,\hat{S}_y,\hat{S}_z\right)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}|\chi\rangle.$$

נביט על הרכיבים בנפרד. עבור $\left\langle\hat{S}_z\right\rangle$, כיוון שהוא מתחלף עם האופרטור שלנו,

$$\langle S_z\rangle_\phi=\langle\chi|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}\hat{S}_ze^{-\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}|\chi\rangle=\langle\chi|\hat{S}_z\overbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}}^{=1}|\chi\rangle=\langle\chi|\hat{S}_z|\chi\rangle=\langle S_z\rangle.$$

כלומר, לאופרטור אין השפעה על רכיב $\hat{\mathbf{z}}$ של הספין, באופן המתאים לאופרטור האמור לסובב אותו סביב ציר זה.

עבור רכיב $\langle S_x\rangle$, נפתח את האקספוננט לטור:

$$\begin{aligned}\langle S_x\rangle_\phi&=\langle\chi|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}\hat{S}_xe^{-\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}|\chi\rangle\\&=\langle\chi|\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{i}{\hbar}\overbrace{\hat{S}_z}^{\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z}\phi\right)^n\overbrace{\hat{S}_x}^{\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_x}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}|\chi\rangle\\&=\frac{\hbar}{2}\langle\chi|\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{i}{\hbar}\phi\frac{\hbar}{2}\right)^n\hat{\sigma}_z^n\hat{\sigma}_xe^{-\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}|\chi\rangle.\end{aligned}$$

כעת, נשתמש בתכונה $\hat{\sigma}_z^2=\hat{I}$: עבור n זוגי $\hat{\sigma}_z^n=I^{n/2}=I$. עבור n אי־זוגי, $n-1$ יהיה זוגי ואז $\hat{\sigma}_z^n=\hat{\sigma}_z^{(n-1)}\hat{\sigma}_z=I\hat{\sigma}_z=\hat{\sigma}_z$. מכאן, תוך שימוש בעובדה כי החזקות הזוגיות בטור של e^{ix} הן טור של $\cos x$ והחזקות האי־זוגיות טור של $i\sin x$,

$$\begin{aligned}\langle S_x\rangle_\phi&=\frac{\hbar}{2}\langle\chi|\sum_{n\in\mathrm{even}}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{i\phi}{2}\right)^n\hat{\sigma}_xe^{-\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}|\chi\rangle+\frac{\hbar}{2}\langle\chi|\sum_{n\in\mathrm{odd}}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{i\phi}{2}\right)^n\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_xe^{-\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}|\chi\rangle\\&=\frac{\hbar}{2}\langle\chi|\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)\hat{\sigma}_xe^{-\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}|\chi\rangle+i\frac{\hbar}{2}\langle\chi|\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_xe^{-\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}|\chi\rangle\\&=\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)\frac{\hbar}{2}\langle\chi|\hat{\sigma}_xe^{-\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}|\chi\rangle+i\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\frac{\hbar}{2}\langle\chi|\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_ze^{-\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}|\chi\rangle\\&\quad+i\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\frac{\hbar}{2}\langle\chi|\overbrace{[\hat{\sigma}_z,\hat{\sigma}_x]}^{=2i\hat{\sigma}_y}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}|\chi\rangle\\&=\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)\frac{\hbar}{2}\langle\chi|\hat{\sigma}_xe^{-\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}|\chi\rangle+i\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\frac{\hbar}{2}\langle\chi|\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_ze^{-\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}|\chi\rangle\\&\quad-2\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\frac{\hbar}{2}\langle\chi|\hat{\sigma}_ye^{-\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}|\chi\rangle.\end{aligned}$$

בשיוויון האחרון השתמשנו ביחס החילוף $[\hat{\sigma}_z,\hat{\sigma}_x]=2i\hat{\sigma}_y$. נותר לנו לטפל באקספוננטים הימניים באופן בו טיפלנו בשמאלי, אך יש לשים לב שבאחד מהם נוספה לנו חזקה של $\hat{\sigma}_z$ ושיש סימן שלילי בארגומנט:

$$
\begin{aligned}
e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi} &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i\phi}{2}\right)^n\sigma_z^n = \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - i\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\sigma_z, \\
\hat{\sigma}_z e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi} &= \hat{\sigma}_z\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i\phi}{2}\right)^n\sigma_z^n = \sigma_z\cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - i\sin\left(\frac{\phi}{2}\right).
\end{aligned}
$$

נציב זאת בביטוי הקודם, כדי לקבל

$$
\begin{aligned}
\langle S_x\rangle_\phi &= \cos^2\left(\frac{\phi}{2}\right)\frac{\hbar}{2}\langle\chi|\,\hat{\sigma}_x\,|\chi\rangle - i\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)\frac{\hbar}{2}\langle\chi|\,\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z\,|\chi\rangle \\
&\quad + i\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)\frac{\hbar}{2}\langle\chi|\,\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z\,|\chi\rangle + \sin^2\left(\frac{\phi}{2}\right)\frac{\hbar}{2}\langle\chi|\,\hat{\sigma}_x\,|\chi\rangle \\
&\quad + 2i\sin^2\left(\frac{\phi}{2}\right)\frac{\hbar}{2}\langle\chi|\,\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z\,|\chi\rangle - \overbrace{2\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)\cos\left(\frac{\phi}{2}\right)}^{=\sin\phi}\frac{\hbar}{2}\langle\chi|\,\hat{\sigma}_y\,|\chi\rangle \\
&= \overbrace{\left[\cos^2\left(\frac{\phi}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\phi}{2}\right)\right]}^{=1}\left\langle\hat{S}_x\right\rangle + 2i\sin^2\left(\frac{\phi}{2}\right)\frac{\hbar}{2}\langle\chi|\,\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z\,|\chi\rangle - \left\langle\hat{S}_y\right\rangle\sin\phi.
\end{aligned}
$$

עדיין לא סיימנו: נותרו לנו מכפלה של שתי מטריצות פאולי, אותה נוכל לחשב במפורש.

$$
\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} = i\hat{\sigma}_x.
$$

כלומר,

$$
\begin{aligned}
\langle S_x\rangle_\phi &= \left\langle\hat{S}_x\right\rangle - 2\left\langle\hat{S}_x\right\rangle\sin^2\frac{\phi}{2} - \left\langle\hat{S}_y\right\rangle\sin(\phi) = \left\langle\hat{S}_x\right\rangle - 2\left\langle\hat{S}_x\right\rangle\frac{1}{2}(1-\cos\phi) - \left\langle\hat{S}_y\right\rangle\sin(\phi) \\
&= \boxed{\left\langle\hat{S}_x\right\rangle\cos\phi - \left\langle\hat{S}_y\right\rangle\sin(\phi)}.
\end{aligned}
$$

זוהי בדיוק הצורה בה מסתובב רכיב $\hat{\mathbf{x}}$ של ווקטור רגיל. אפשר לחזור על אותו תהליך גם עבור רכיב $\hat{\mathbf{y}}$ ולקבל $\boxed{\left\langle\hat{S}_y\right\rangle_\phi = \left\langle\hat{S}_y\right\rangle\cos\phi + \left\langle\hat{S}_x\right\rangle\sin(\phi)}$.

בהנחה שהשתכנענו כי האופרטור $e^{\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z\phi}$ אכן מסובב את פונקציית הגל הספינורית כפי ש-$e^{-i\hat{L}_z\phi}$ מסובב פונקציית גל מרחבית, במה היא כה שונה מפונקציות הגל הזוויתיות שראינו כד כה? למעשה, היא לא עד כדי כך שונה, אך הערכים העצמיים החצי־שלמים של אופרטור הספין (המתבטא בפקטור $\frac{\hbar}{2}$ שכופל את מטריצות פאולי) הופכים אותו למשהו ללא אנלוגיה קלאסית. כדי לראות זאת, נבחן מה קורה לספינור לאחר סיבוב שלם סביב עצמו:

תרגיל: מה השפעת סיבוב של $360°$ מעלות על הספינור $\begin{pmatrix}\alpha \\ \beta\end{pmatrix}$?

פיתרון: נפעיל את אופרטור הסיבוב שלנו עבור $\phi = 2\pi$. בעזרת השיטה לפתיחת האקספוננט שראינו בתרגיל הקודם,

$$
e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{S}_z 2\pi}\begin{pmatrix}\alpha \\ \beta\end{pmatrix} = e^{-\frac{i}{\hbar}2\pi\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z}\begin{pmatrix}\alpha \\ \beta\end{pmatrix} = \left[\overbrace{\cos(i\pi)}^{=-1} + i\overbrace{\sin(i\pi)}^{=0}\hat{\sigma}_z\right]\begin{pmatrix}\alpha \\ \beta\end{pmatrix} = -\begin{pmatrix}\alpha \\ \beta\end{pmatrix}.
$$

אבל, אובייקט קלאסי חייב לחזור למצבו ההתחלתי לאחר סיבוב של $360°$! ספינור עם ספין חצי־שלם יחזור למצבו הראשוני רק לאחר שני סיבובים שלמים, ולכן אין לו תיאור קלאסי.