Hyperjemná struktura vodíku, skládání spinů, singletní stav

Martin Štefaňák

24. listopadu 2020

Přehled

1. Hyperjemná struktura vodíku
2. Skládání spinů
3. Singletní stav

Přehled

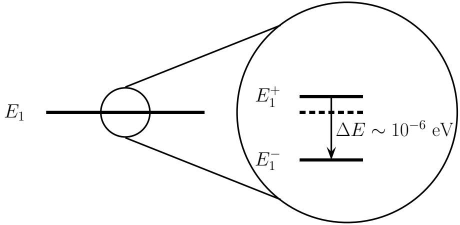
1. Hyperjemná struktura vodíku
2. Skládání spinů
3. Singletní stav

Hyperjemná struktura vodíku

- Energetické hladiny vodíku - $E_N = -\frac{R}{N^2}, \quad N \in \mathbb{N}$
- Základní hladina E_1 je nedegenerovaná
- Při započítání spinu elektronu a spinu protonu má degeneraci 4
- Ve skutečnosti jde o multiplet dvou velmi blízkých hladin

$$\Delta E = E_1^+ - E_1^- \sim 10^{-6}\ \mathrm{eV}$$

- Důsledek interakce spinu elektronu a spinu protonu



Spin elektronu a protonu

- Hilbertovy prostory spinu elektronu a protonu

$$\mathscr{H}^{(e)} = [|+_e\rangle, |-_e\rangle]_\lambda\,, \quad \mathscr{H}^{(p)} = [|+_p\rangle, |-_p\rangle]_\lambda$$

- Hilbertův prostor složeného systému

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}^{(e)} \otimes \mathscr{H}^{(p)} = [|+_e, +_p\rangle, |+_e, -_p\rangle, |-_e, +_p\rangle, |-_e, -_p\rangle]_\lambda$$

- Standardní báze

$$\begin{aligned} |+_e, +_p\rangle &\equiv (1, 0, 0, 0)^T, \qquad |+_e, -_p\rangle \equiv (0, 1, 0, 0)^T, \\ |-_e, +_p\rangle &\equiv (0, 0, 1, 0)^T, \qquad |-_e, -_p\rangle \equiv (0, 0, 0, 1)^T. \end{aligned}$$

Operátory spinu elektronu

$$\hat{S}_j^{(e)} = \hat{S}_j \otimes \hat{I} \implies S_j^{(e)} = \frac{\hbar}{2}\sigma_j \otimes I$$

Matice složek spinu elektronu

$$S_1^{(e)} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_2^{(e)} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_3^{(e)} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Operátory spinu protonu

$$\hat{S}_j^{(p)} = \hat{I} \otimes \hat{S}_j \implies S_j^{(p)} = \frac{\hbar}{2} I \otimes \sigma_j$$

Matice složek spinu protonu

$$S_1^{(p)} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_2^{(p)} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_3^{(p)} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Interakce spinu protonu a elektronu

- Hamiltonián interakce spinů (resp. magnetických momentů)

$$\hat{H} = \tilde{A}\hat{\vec{\mu}}^{(e)} \cdot \hat{\vec{\mu}}^{(p)} = \frac{4}{\hbar^2} A \hat{\vec{S}}^{(e)} \cdot \hat{\vec{S}}^{(p)}, \quad A = \mu_e \mu_p \tilde{A}$$

- Matice hamiltoniánu ve standardní bázi

$$H = A\, \sigma_j \otimes \sigma_j = \begin{pmatrix} A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -A & 2A & 0 \\ 0 & 2A & -A & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A \end{pmatrix}$$

Hyperjemná struktura vodíku

- Vlastní čísla matice jsou $E_+ = A$ a $E_- = -3A$
- Základní hladina vodíku E_1 — multiplet blízkých hladin $E_1^{\pm}$

$$E_1^+ = E_1 + E_+ = -R + A, \quad E_1^- = E_1 + E_- = -R - 3A$$

- Přechod mezi hladinami — vyzáření mikrovlnného fotonu

$$h\nu = \Delta E = 4A$$

- Z experimentálních dat plyne

$$\nu \doteq 1420\ \mathrm{MHz}, \quad \lambda \doteq 21\ \mathrm{cm}, \quad \Delta E \doteq 5.9 \cdot 10^{-6}\ \mathrm{eV}$$

Vlastní vektory hamiltoniánu

Podprostor E_-

$$|\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+_e, -_p\rangle - |-_e, +_p\rangle\right) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(0, 1, -1, 0)^T$$

Podprostor E_+

$$\begin{aligned}
|\psi_1^+\rangle &= |+_e, +_p\rangle = (1, 0, 0, 0)^T \\
|\psi_2^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+_e, -_p\rangle + |-_e, +_p\rangle\right) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(0, 1, 1, 0)^T \\
|\psi_3^+\rangle &= |-_e, -_p\rangle = (0, 0, 0, 1)^T
\end{aligned}$$

Jsou to současně vlastní vektory celkového spinu

Přehled

1. Hyperjemná struktura vodíku
2. Skládání spinů
3. Singletní stav

Celkový spin atomu vodíku

- Operátory celkového spinu atomu vodíku

$$\hat{J}_k = \hat{S}_k^{(e)} + \hat{S}_k^{(p)}$$

- Matice operátorů ve standardní bázi

$$J_1 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_2 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i & -i & 0 \\ i & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & -i \\ 0 & i & i & 0 \end{pmatrix}$$

$$J_3 = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Celkový spin atomu vodíku

- Splňují komutační relace pro moment hybnosti

$$\left[\hat{J}_k, \hat{J}_l\right] = i\hbar\varepsilon_{klm}\hat{J}_m$$

- $\hat{J}_3$ a $\hat{J}^2$ jsou kompatibilní
- Navíc jsou kompatibilní s $\hat{S}^{(e)2}$ a $\hat{S}^{(p)2}$ (oba operátory jsou $\frac{3}{4}\hbar^2\hat{I}$)
- Společné vlastní vektory $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, j, m\rangle$

$$\begin{aligned}
\hat{S}^{(\alpha)2}|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, j, m\rangle &= \frac{3}{4}\hbar^2|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, j, m\rangle, \quad \alpha = e,\ p \\
\hat{J}_3|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, j, m\rangle &= m\hbar|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, j, m\rangle \\
\hat{J}^2|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, j, m\rangle &= \hbar^2 j(j+1)|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, j, m\rangle
\end{aligned}$$

Kvadrát velikosti celkového spinu

- $\hat{J}^2$ není kompatibilní s $\hat{S}_3^{(e)}$ a $\hat{S}_3^{(p)}$, pouze s jejich součtem $\hat{J}_3$

$$
\begin{aligned}
\hat{J}^2 &= \hat{S}^{(e)2} + 2\hat{\vec{S}}^{(e)} \cdot \hat{\vec{S}}^{(p)} + \hat{S}^{(p)2}, \\
\left[\hat{J}^2, \hat{S}_3^{(e)}\right] &= 2\left[\hat{S}_j^{(e)}, \hat{S}_3^{(e)}\right]\hat{S}_j^{(p)} = 2i\hbar\varepsilon_{j3k}\hat{S}_k^{(e)}\hat{S}_j^{(p)} \\
&= 2i\hbar\left(\hat{S}_1^{(e)}\hat{S}_2^{(p)} - \hat{S}_2^{(e)}\hat{S}_1^{(p)}\right)
\end{aligned}
$$

- $\hat{J}^2$ není ve standardní bázi diagonální

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

Vlastní vektory celkového spinu

Vlastní čísla matice J^2 — 0 (prosté) a $2\hbar^2$ (násobnost 3)

Podprostor $j = 0$ — singlet

$$|\frac{1}{2},\frac{1}{2},0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+_e,-_p\rangle - |-_e,+_p\rangle\right) = |\psi^-\rangle$$

Podprostor $j = 1$ — triplet

$$\begin{aligned}
|\frac{1}{2},\frac{1}{2},1,1\rangle &= |+_e,+_p\rangle = |\psi_1^+\rangle \\
|\frac{1}{2},\frac{1}{2},1,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+_e,-_p\rangle + |-_e,+_p\rangle\right) = |\psi_2^+\rangle \\
|\frac{1}{2},\frac{1}{2},1,-1\rangle &= |-_e,-_p\rangle = |\psi_3^+\rangle
\end{aligned}$$

Hyperjemná struktura vodíku

- Interakce spinů pomocí operátorů kvadrátů velikosti spinů

$$\hat{\vec{S}}^{(e)} \cdot \hat{\vec{S}}^{(p)} = \frac{1}{2}\left(\hat{J}^2 - \hat{S}^{(e)2} - \hat{S}^{(p)2}\right)$$

- Kety $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, j, m\rangle$ jsou vlastní vektory interakce spinů

$$\begin{aligned} \hat{\vec{S}}^{(e)} \cdot \hat{\vec{S}}^{(p)}|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0\rangle &= -\frac{3}{4}\hbar^2|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0\rangle \\ \hat{\vec{S}}^{(e)} \cdot \hat{\vec{S}}^{(p)}|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, m\rangle &= \frac{\hbar^2}{4}|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, m\rangle \end{aligned}$$

- Jsou to i vlastní vektory hamiltoniánu hyperjemné struktury

$$\hat{H}|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0\rangle = -3A|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0\rangle, \quad \hat{H}|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, m\rangle = A|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, m\rangle$$

Přehled

1. Hyperjemná struktura vodíku
2. Skládání spinů
3. Singletní stav

Singletní stav

$$|\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+_e\rangle \otimes |-_p\rangle - |-_e\rangle \otimes |+_p\rangle\right)$$

Provázaný stav — nelze faktorizovat

$$|\psi^-\rangle \neq |\psi_e\rangle \otimes |\psi_p\rangle$$

Měření spinu jedné částice

- Projekce spinu e i p do libovolného směru jsou zcela náhodné
- Pravděpodobnost kladné i záporné projekce je $\frac{1}{2}$

Současné měření spinu obou částic

- Projekce spinu e a p do stejného směru jsou perfektně antikorelované
- Naměříme kladnou projekci spinu e do směru $\vec{n}$ — p má zápornou

Projekce spinu elektronu v singletním stavu

- Projekce spinu je zcela náhodná $\Leftrightarrow$ střední hodnota je nulová
- Operátor projekce spinu elektronu do směru $\vec{n}(\theta, \varphi)$

$$\hat{S}^{(e)}_{\vec{n}} = \vec{n} \cdot \hat{\vec{S}} \otimes \hat{I}, \quad \vec{n} \cdot \vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{n} \cdot \vec{\sigma} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

- Střední hodnota projekce spinu elektronu do směru $\vec{n}$

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}^{(e)}_{\vec{n}} \rangle_{\psi^-} &= \langle \psi^- | \hat{S}^{(e)}_{\vec{n}} | \psi^- \rangle = \frac{1}{2} \left(\langle +_e | \vec{n} \cdot \hat{\vec{S}} | +_e \rangle + \langle -_e | \vec{n} \cdot \hat{\vec{S}} | -_e \rangle \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar}{2} \cos\theta - \frac{\hbar}{2} \cos\theta \right) = 0 \end{aligned}$$

- Stejný výsledek platí i pro projekci spinu protonu

Projekce spinu jedné samotné částice

Pro jednu částici ve stavu $|\psi\rangle$ toto nastat nemůže

- Pro každý spinor $|\psi\rangle$ mohu najít směr $\vec{p}$, tak, že $|\psi\rangle = |\vec{p}+\rangle$

$$
\begin{aligned}
\hat{\vec{S}}_{\vec{p}}|\vec{p}+\rangle &= \frac{\hbar}{2}|\vec{p}+\rangle, \quad \vec{p} = (\sin\alpha\cos\beta, \sin\alpha\sin\beta, \cos\alpha) \\
|\vec{p}+\rangle &= \cos\frac{\alpha}{2}|+\rangle + \sin\frac{\alpha}{2}e^{i\beta}|-\rangle
\end{aligned}
$$

- Střední hodnota projekce spinu do směru $\vec{n}$ ve stavu $|\vec{p}+\rangle$

$$
\langle\hat{S}_{\vec{n}}\rangle_{\vec{p}+} = \frac{\hbar}{2}\vec{n}\cdot\vec{p}
$$

Měření projekce spinu e a p do osy z

$$|\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+_e\rangle \otimes |-_p\rangle - |-_e\rangle \otimes |+_p\rangle\right)$$

- Měřím projekci spinu elektronu do osy z, naměřím kladnou
- Stav po měření je popsán ketem

$$|\psi\rangle = |+_e\rangle \otimes |-_p\rangle$$

- Proton má s jistotou zápornou projekci spinu do osy z
- Analogicky pro naměření záporné projekce spinu elektronu má proton s jistotou kladnou projekci spinu do osy z

Projekce spinu do osy z jsou perfektně antikorelovány

Měření projekce spinu e a p do libovolného směru $\vec{n}$

- Vlastní vektory s kladnou a zápornou projekcí spinu do směru $\vec{n}$

$$
\begin{aligned}
|\vec{n}+\rangle &= \cos\frac{\theta}{2}|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|-\rangle \\
|\vec{n}-\rangle &= \sin\frac{\theta}{2}|+\rangle - \cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|-\rangle
\end{aligned}
$$

- Singletní stav lze zapsat ve tvaru

$$
\begin{aligned}
|\psi^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+_e\rangle \otimes |-_p\rangle - |-_e\rangle \otimes |+_p\rangle\right) \\
&= -e^{-i\varphi}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\vec{n}+_e\rangle \otimes |\vec{n}-_p\rangle - |\vec{n}-_e\rangle \otimes |\vec{n}+_p\rangle\right)
\end{aligned}
$$

Perfektní antikorelace platí pro projekce do libovolného směru $\vec{n}$

Provázaný stav

- Singletní stav je příklad maximálně provázaného stavu
- Kvantový stav — soubor informací o možných výsledcích měření
- V singletním stavu e a p nenesou žádné informace
- Jejich individuální stavy nelze popsat vektorem, musí se použít obecnější popis pomocí matice hustoty
- Veškeré informace v singletním stavu jsou v antikorelacích výsledků měření na e a p