

## V. SPIN A SOUSTAVY SE DVĚMA STAVY

Hlavním cílem této kapitoly je ukázka použití obecného formalismu kvantové mechaniky z předcházející kapitoly, na jednoduchý případ: soustavu se dvěma stavy. V odst.1 tento záměr současně využijeme k doplnění zavedeného formalismu o základní veličinu v oblasti mikrosvěta - spin. Problematika spinu mikročástic ovšem prolíná většinou aplikací kvantové mechaniky na konkrétní soustavy, takže se s ní budeme seznamovat postupně. Spin elektronu, zavedený v odst.1, není jediným možným příkladem soustavy se dvěma stavy. V určité aproximaci se takové soustavy vyskytují často; s několika jednoduchými příklady se seznámíme v odst.2. Důvod ke studiu těchto soustav netkví jen v jednoduchém matematickém aparátu k jejich řešení, ale má i hluboký fyzikální smysl: objeví se v nich typicky kvantověmechanické chování studovaných soustav, které může být verifikováno experimentálně. Velice pěkný a podrobný rozbor této problematiky můžete nalézt ve Feynmanových přednáškách [7] .

1. Spin elektronu1.1) Experimentální podněty k zavedení spinu

V našich dosavadních úvahách vystupovaly mikročástice vlastně jen jako hmotné body bez vnitřní struktury. Tato skutečnost se odrážela např. v předpokladu, že stav částice lze plně popsat vlnovou funkcí  $\psi$ , která závisí pouze na prostorových souřadnicích částice  $x, y, z$ . Řada experimentálních faktů však vedla postupně k závěru, že tento popis je neúplný. Všimněme si stručně některých z nich.

Sternovy-Gerlachovy experimenty

Na částici, která má vlastní magnetický moment  $\vec{M}$  (např. paramagnetický atom), působí podle klasické fyziky v nehomogenním magnetickém poli s magnetickou indukcí  $\vec{B}$  ( $=\vec{B}(x, y, z)$ ) síla

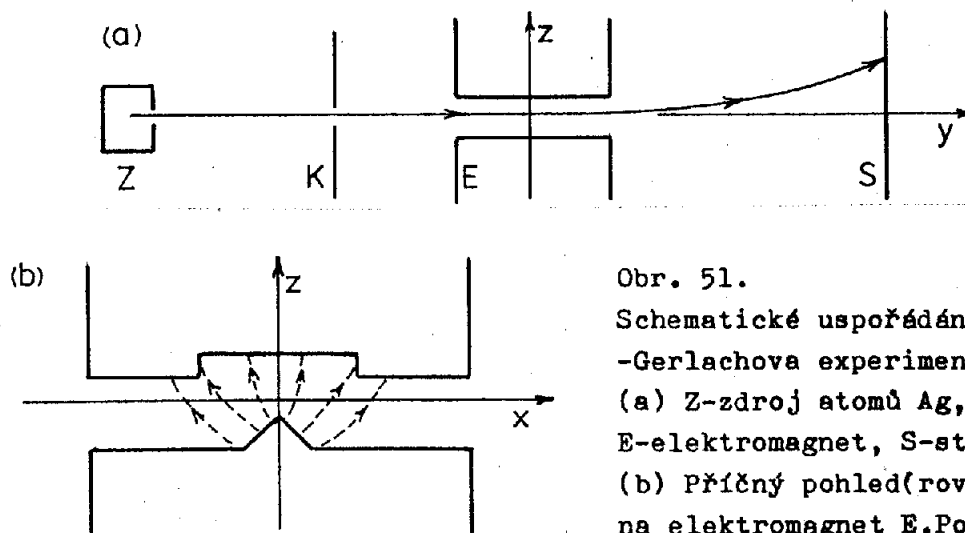
$$\vec{F} = \nabla(\vec{M} \cdot \vec{B}) \quad (1)$$

Jestliže necháme procházet svazek takových částic prostorem, v němž se směr  $\vec{B}$  mění jen málo, ale velikost  $\vec{B}$  je silně závislá na poloze (obr.51), potom můžeme přibližně psát

$$\vec{F} = M_z \nabla B_z \quad (2)$$

kde  $M_z$  je projekce magnetického momentu  $\vec{M}$  do směru  $\vec{B}$  (který jsme položili do osy  $Oz$ ). Z odchylky stopy na stínítku S (obr.51) pak můžeme stanovit složku  $\vec{M}$  ve směru  $\vec{B}$  (tj.  $M_z$ ), neboť síla (2) je paralelní  $Oz$  a úměrná  $M_z$ .

Výsledek takovýchto pokusů, které začátkem dvacátých let realizovali Stern a Gerlach s atomy stříbra, byl překvapující. Protože podle klasické mechaniky může nabývat  $M_z$  libovolných hodnot (moment  $\vec{M}$  může být



Obr. 51.

Schematické uspořádání Sternova-Gerlachova experimentu.

(a) Z-zdroj atomů Ag, K-kolimátor, E-elektromagnet, S-stínítko

(b) Příčný pohled (rovina xOz) na elektromagnet E. Pole B vyznačeno čárkovaně.

v prostoru libovolně orientován), měla by se na stínítku objevit spojitě rozmazaná stopa; její okraje by odpovídaly limitním případům: paralelní ( $\uparrow\uparrow$ ) a antiparalelní ( $\uparrow\downarrow$ ) orientaci  $\vec{M}$  a  $\vec{B}$ .

Experiment však ukázal izolované, ekvidistantně vzdálené, stopy. To bylo jasným důkazem kvantové povahy magnetického momentu. Protože to vypadalo jakoby vektor  $\vec{M}$  mohl mít v prostoru jen některé orientace (vzhledem k  $\vec{B}$ ), stalo se běžným mluvit o prostorovém kvantování.

Od dob Ampérových víme, že magnetický moment  $\vec{M}$  je nerozlučně spojen s mechanickým momentem hybnosti nabitě částice  $\vec{L}$ . Klasická nabitá částice, která se pohybuje po orbitě (např. v Bohrově modelu atomu) tak, že její moment hybnosti je  $\vec{L}$ , představuje vlastně smyčku protékanou proudem. Podle Ampérový hypotézy je tato smyčka ekvivalentní magnetu s momentem  $\vec{M}$ , úměrným  $\vec{L}$  :

$$\vec{M} = \gamma \vec{L} \quad (3)$$

Konstanta úměrnosti  $\gamma$  se nazývá gyromagnetický poměr a podle klasické elektrodynamiky je

$$\gamma = \frac{q}{2m} \quad (4)$$

kde  $q$  je náboj částice a  $m$  je její hmotnost.

V Bohrově modelu atomu vodíku má elektron na nejnižší orbitě ( $n=1$  ve vztahu (I.9)) moment hybnosti  $|\vec{L}| = \hbar$ , takže odpovídající magnetický moment je podle (3)

$$\mu_B = - \frac{e \hbar}{2m_e} \quad (5)$$

(náboj elektronu je  $(-e)$ , jeho hmotnost  $m_e$ ; poznamenejme, že často se Bohrov magneton definuje se znaménkem +).

Veličina  $\mu_B$  se nazývá Bohrův magneton; v soustavě SI

$$\mu_B = -9,2741 \cdot 10^{-24} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1} \text{ (joule/tesla)}$$

Ze vztahu (3) je zřejmé, že kvantování  $\vec{M}$  je vlastně důsledkem kvantování momentu hybnosti  $\vec{L}$ . Z řešení problému vlastních hodnot operátoru  $\mathcal{L}^2$  a  $\mathcal{L}_z$  (přiřazených  $|\vec{L}|^2$  a  $L_z$  z (IV.85)) vyplýne, že vlastní hodnoty  $\mathcal{L}^2$  jsou

$$l(l+1)\hbar^2 \quad (l=0,1,2,\dots) \quad (6)$$

a vlastní hodnoty  $\mathcal{L}_z$  pro dané  $l$  jsou

$$m_l \hbar \quad (m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l) \quad (7)$$

To znamená, že ve Sternově-Gerlachově pokusu bychom měli na stínítku najít vždy lichý počet ekvidistantně vzdálených stop, neboť  $M_z$  v (2) by podle (7) mohlo, pro dané  $l$  (tj. pro danou velikost momentu hybnosti), nabývat hodnot

$$M_z = \gamma m_l \hbar = m_l \mu_B \quad (m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l) \quad (8)$$

Ve Sternově-Gerlachově experimentu s atomy Ag (roku 1924) však byly zaznamenány dvě stopy. Kvantitativní vyhodnocení přitom dalo projekce

$$M_z = \pm \mu_B \quad (9)$$

Význam těchto výsledků nebyl ihned pochopen. Pokusy o vysvětlení byly komplikovány tím, že atomy Ag obsahují mnoho elektronů. Zřejmě správný (protože ve svých důsledcích bezesporný) výklad podali Goudsmit a Uhlenbeck r.1925. Podle jejich hypotézy musíme vzít na vědomí, že elektron má vlastní magnetický moment  $\vec{M}_s$ , jehož projekce do zvoleného směru (směr  $\vec{B}$ ) mohou nabývat pouze dvou hodnot:  $\pm \mu_B$ . Rovněž postulovali, že elektron má vlastní (vnitřní) moment hybnosti  $\vec{S}$  - spin - jehož projekce na zvolenou osu jsou  $\pm \hbar/2$ . Vztah mezi spinovým magnetickým momentem  $\vec{M}_s$  a spinem  $\vec{S}$  pak může být, analogicky k (3), psán

$$\vec{M}_s = g_s \gamma \vec{S} \quad (10)$$

kde

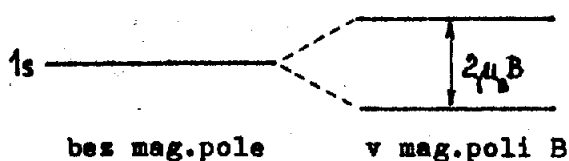
$$g_s = 2 \quad (11)$$

je tzv. Landého faktor (faktor spektroskopického rozštěpení). Pro úplnost uveďme, že hodnota (11) je přibližná; s korekcemi, které vyplývají z relativistické kvantové elektrodynamiky, je  $g_s = 2,002319$ .

Bez podrobnějšího rozboru jen uveďme, že byla i další experimentální fakta, k jejichž objasnění hypotéza o existenci spinu a spinového magnetického momentu úspěšně přispěla. Z nich uveďme jmenovitě jen

#### Zeemanův jev

spočívající ve štěpení spektrálních čar v magnetickém poli. Toto štěpení je z hlediska kvantové mechaniky důsledkem rozštěpení energiových hladin. Z řešení příslušné Schrödingerovy rovnice opět vyplýne, že např. v atomu vodíku by se každá hladina měla rozštěpit na lichý počet -  $(2l+1)$  - podhladin. Nejnižší hladina  $1s$  ( $l=0$ ) by tudíž měla zůstat nerozštěpena. Experiment však opět ukázal, že hladina  $1s$  ve vodíku se v magnetickém poli štěpí na dvě hladiny (obr.52). Přitom vzdálenost těchto hladin



Obr. 52

Štěpení základní hladiny 1s  
v atomu vodíku v magnetickém  
poli B.

je  $2\mu_B$ , což je dvojnásobek hodnoty, která odpovídá vazbě  $\vec{M}$  s  $\vec{L}$  podle (3) a (4), ale souhlasí s (10).

## 1.2) Komutační relace pro operátor momentu hybnosti

K nalezení kvantověmechanického operátoru pro spin nemůžeme použít 7. postulát, neboť pro spin nemáme odpovídající klasický definiční vztah. Je proto nutné potřebné operátory definovat přímo a to tak, aby všechny důsledky z těchto definic plynoucí, byly v souladu s experimentem. Protože spin je (vlastní) moment hybnosti, je přirozené požadovat, aby operátory, které budou reprezentovat jeho složky a velikost, splňovaly stejné komutační relace, jako operátory reprezentující orbitální moment hybnosti  $\vec{L}$ . Podle (IV.85)

$$\vec{L} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \quad (12a)$$

kde  $\hat{\vec{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$  a  $\hat{\vec{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$

a jednotlivé složky operátoru  $\vec{L} = (L_x, L_y, L_z)$  jsou

$$\begin{aligned} L_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ L_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ L_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{aligned} \quad (12b)$$

Pro operátory složek  $\hat{\vec{r}}$  a  $\hat{\vec{p}}$  platí postulované komutační relace (IV.90)

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar, \quad [\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar, \quad [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar \quad (13)$$

a všechny ostatní komutátory ze složek  $\hat{\vec{r}}$  a  $\hat{\vec{p}}$  jsou rovny nule.

Vypočteme nyní komutátor  $[L_x, L_y]$ ; s využitím (13):

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z) - (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) = \\ &= \hat{z}\hat{p}_z(\hat{p}_y\hat{x} - \hat{p}_x\hat{y}) - \hat{p}_z\hat{z}(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = [\hat{z}, \hat{p}_z](\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = i\hbar L_z \end{aligned}$$

Stejně spočteme  $[L_y, L_z]$  a  $[L_z, L_x]$ , takže souhrnně dostaneme

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x, \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y \quad (14a)$$

což můžeme symbolicky zapsat (vektorový součin operátorů)

$$\vec{L} \times \vec{L} = i\hbar \vec{L} \quad (14b)$$

Podle závěrů odstavce IV.3.3 plyne z (14), že změříme-li jednu ze složek - např.  $L_z$  - nelze již přesně určit zbyvající dvě. Je však možné současně s jednou složkou změřit přesně ještě alespoň velikost  $\vec{L}$ ? Abychom na otázku odpověděli, musíme vypočítat komutátor  $[\mathcal{L}^2, L_z]$ ; pro jednoduchost je zvykem počítat s kvadrátem  $L^2 = \vec{L} \cdot \vec{L}$ , jemuž přísluší operátor kvadrátu velikosti momentu hybnosti

$$\mathcal{L}^2 = \mathcal{L}_x^2 + \mathcal{L}_y^2 + \mathcal{L}_z^2 \quad (15)$$

Platí

$$\begin{aligned} [\mathcal{L}^2, L_z] &= [\mathcal{L}_x^2 + \mathcal{L}_y^2 + \mathcal{L}_z^2, L_z] = [\mathcal{L}_x^2 + \mathcal{L}_y^2, L_z] = \\ &= L_x [L_x, L_z] + [L_x, L_z] L_x + L_y [L_y, L_z] + [L_y, L_z] L_y = \\ &= L_x (-i\hbar L_y) + (-i\hbar L_y) L_x + L_y (i\hbar L_x) + (i\hbar L_x) L_y = 0 \end{aligned}$$

takže

$$[\mathcal{L}^2, L_z] = 0 \quad (16)$$

Odpověď na otázku je tedy kladná:  $L_z$  a  $|\vec{L}|$  lze současně přesně změřit.

Komutační relace (14), (16) nyní budeme považovat za definiční vztahy pro operátor momentu hybnosti obecně (tzn nejen pro orbitální moment hybnosti, ale také např. pro spin).

### 1.3) Prostor spinových stavových vektorů a Pauliho matice

Zvolme za směr, do nějž budeme promítat spin, osu  $Oz$ . Hledaný operátor spinu  $\vec{\mathcal{J}}$  nechť má složky  $\mathcal{J}_x, \mathcal{J}_y, \mathcal{J}_z$ , tj  $\vec{\mathcal{J}} = (\mathcal{J}_x, \mathcal{J}_y, \mathcal{J}_z)$ .

Operátor  $\mathcal{J}_z$  musí mít vlastní hodnoty rovny experimentálně zjištěným hodnotám  $\pm \hbar/2$ . Označíme-li vlastní vektor k hodnotě  $+\hbar/2$  jako  $|\frac{1}{2}\rangle$

a k hodnotě  $-\hbar/2$  jako  $|\frac{-1}{2}\rangle$ , musí platit

$$\mathcal{J}_z |\frac{1}{2}\rangle = \frac{\hbar}{2} |\frac{1}{2}\rangle ; \quad \mathcal{J}_z |\frac{-1}{2}\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\frac{-1}{2}\rangle \quad (17)$$

Poznámka: vektory  $|\frac{1}{2}\rangle, |\frac{-1}{2}\rangle$  se často značí stručněji  $|+\rangle, |-\rangle$  nebo  $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ .

Předpokládáme-li, že obě vlastní hodnoty jsou nedegenerované a vektory  $|\frac{1}{2}\rangle, |\frac{-1}{2}\rangle$  normalizované, potom

$$\langle \frac{1}{2} | \frac{1}{2} \rangle = \langle -\frac{1}{2} | -\frac{1}{2} \rangle = 1, \quad \langle \frac{1}{2} | -\frac{1}{2} \rangle = 0 \quad (18)$$

Vektory  $|\frac{1}{2}\rangle, |\frac{-1}{2}\rangle$  můžeme použít za bázi dvourozměrného prostoru  $E_s$ , který obsahuje všechny vektory

$$|\psi\rangle = \alpha \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \beta \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (19)$$

Aby byl i  $|\psi\rangle$  normalizovaný, musí být

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (20)$$

Skutečnost, že vektory  $\left| \frac{1}{2} \right\rangle$ ,  $\left| -\frac{1}{2} \right\rangle$  tvoří bázi, je vyjádřena podmínkou úplnosti (IV.50)

$$\left| \frac{1}{2} \right\rangle \left\langle \frac{1}{2} \right| + \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \left\langle -\frac{1}{2} \right| = \mathbb{1} \quad (21)$$

V bázi tvořené vektory  $\left| \frac{1}{2} \right\rangle, \left| -\frac{1}{2} \right\rangle$  musí být operátor  $\mathcal{J}_z$  vyjádřen diagonální maticí (viz (IV.69))

$$\mathcal{J}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (22)$$

s normovanými vlastními vektory

$$\left| \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (23)$$

Obecný stav (19) je pak vyjádřen vektorem

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (24)$$

s normalizační podmínkou (20), neboť (viz (IV.35))

$$\langle \psi | \psi \rangle = (\alpha^* \quad \beta^*) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = |\alpha|^2 + |\beta|^2 \quad (25)$$

U elektronu ve stavu (spinovém)  $|\psi\rangle$ , je pravděpodobnost naměření  $S_z = \frac{\hbar}{2}$  rovna  $|\alpha|^2$ , zatímco pro  $S_z = -\frac{\hbar}{2}$  je to  $|\beta|^2$ .

Operátory pro  $\mathcal{J}_x$ ,  $\mathcal{J}_y$  určíme tak, aby byly splněny komutační relace (14)

$$[\mathcal{J}_x, \mathcal{J}_y] = i\hbar \mathcal{J}_z, \quad [\mathcal{J}_y, \mathcal{J}_z] = i\hbar \mathcal{J}_x, \quad [\mathcal{J}_z, \mathcal{J}_x] = i\hbar \mathcal{J}_y \quad (26)$$

Přímým výpočtem si můžete ověřit, že v bázi (23) vyhovují těmto relacím hermitovské matice (spolu s  $\mathcal{J}_z$  podle (22))

$$\mathcal{J}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{J}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (27)$$

Operátor  $\varphi^2$  pak je:

$$\varphi^2 = \varphi_x^2 + \varphi_y^2 + \varphi_z^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (28)$$

Protože jde o jednotkovou matici násobenou číslem, je splnění komutační relace (16), tj

$$[\varphi^2, \varphi_z] = 0, \quad (29)$$

evidentní.

Operátory  $\varphi^2, \varphi_z$  musí mít proto společný soubor vlastních vektorů; jsou to opět vektory (23), neboť

$$\varphi^2 \left| \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 \left| \frac{1}{2} \right\rangle; \quad \varphi^2 \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (30)$$

Vlastní hodnota  $\varphi^2$  je tedy v obou případech  $3\hbar^2/4$ . Můžeme ji zapsat analogicky k (6)

$$s(s+1)\hbar^2 \quad \text{kde } s = \frac{1}{2} \quad (31a)$$

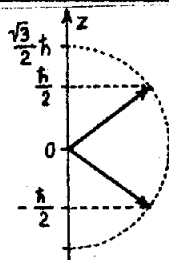
takže

$$\varphi^2 \left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle = s(s+1)\hbar^2 \left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle \quad (31b)$$

K tomuto kvantovému číslu  $s = \frac{1}{2}$ , které určuje velikost spinu (obdoba kvantového čísla  $l$ , které určuje velikost orbitálního momentu hybnosti), pak přísluší spinové kvantové číslo

$$m_s = \pm \frac{1}{2} \quad (32)$$

určující průmět spinu do zvolené osy (zde  $Oz$ ); číslo  $m_s$  je obdobou  $m_l$  v (7). K danému  $l$  z (6) jsme měli  $(2l+1)$  možných průmětů (hodnot  $m_l$ ) orbitálního momentu hybnosti do zvolené osy; k danému  $s$ , které nabývá jen hodnoty  $s = \frac{1}{2}$ , máme obdobně  $2s+1 = 2$  možných průmětů spinu do zvolené osy (obr.53). Z toho všeho je zřejmé, že se nám skutečně podařilo



Obr. 53.

Znázornění celkové velikosti spinu  $\frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$   
a dvou možných průmětů  $\pm \frac{\hbar}{2}$  do osy  $Oz$ .

zkonstruovat spinové operátory tak, že po formální stránce splňují tytéž relace jako orbitální moment hybnosti a z druhé strany, dávají výsledky ve shodě s experimentem.

#### Pauliho matice.

V kvantové mechanice se často pracuje s bezrozměrným operátorem  $\hat{\sigma}$ , který se definuje vztahem

$$\vec{\varphi} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma} \quad (33)$$

Matice, které reprezentují tři složky  $\hat{\sigma}$  v bázi tvořené vektory  $|\frac{1}{2}\rangle$ ,  $|\frac{1}{2}\rangle$ , se nazývají Pauliho matice. Porovnáním (33) s (22) a (27) zřejmě

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (34)$$

Charakteristická rovnice pro všechny tři tyto matice je

$$\lambda^2 - 1 = 0, \quad (35)$$

takže vlastní hodnoty operátorů  $\hat{\sigma}_x$ ,  $\hat{\sigma}_y$ ,  $\hat{\sigma}_z$  jsou

$$\lambda = \pm 1 \quad (36)$$

Skutečnost, že vlastní hodnoty všech tří operátorů -  $\mathcal{J}_x$ ,  $\mathcal{J}_y$ ,  $\mathcal{J}_z$  - jsou  $\pm \frac{\hbar}{2}$  odráží to, že žádná z os není preferovaná; experimentálně naměřené hodnoty průmětů  $\vec{J}$  ve Sternově-Gerlachově pokusu, nemohou záviset na tom, jak si orientujeme souřadnou soustavu vzhledem k aparatuře.

#### 1.4) Spinové vlnové funkce

V tomto odstavci zavedeme pro spin a s ním spojené vlnové funkce značení, které se běžně užívá především ve spojení se souřadnicovou reprezentací.

K dynamickým proměnným  $x, y, z$ , určujícím polohu elektronu, přidáme čtvrtou proměnnou: spinovou proměnnou (souřadnici)  $\sigma$ . Definujeme ji tak, že (srov.(10), resp.(32)) :

$$\begin{aligned} \sigma = +1 \quad \text{pro stav s} \quad M_s &= -\frac{e\hbar}{2m_e} \quad (m_s = \frac{1}{2}) \\ \sigma = -1 \quad \text{pro stav s} \quad M_s &= \frac{e\hbar}{2m_e} \quad (m_s = -\frac{1}{2}) \end{aligned} \quad (37)$$

(poznámka: někdy se setkáte též s definicí  $\sigma = \pm 1/2$ ).

Vlnová funkce v souřadnicové reprezentaci pak je

$$\psi(x, y, z, \sigma) \quad (38)$$

Na její interpretaci to nic nemění; tak

$$|\psi(x, y, z, +1)|^2 dx dy dz \quad (39a)$$

udává pravděpodobnost, že v objemu  $dx dy dz$ , opsaném bodu  $(x, y, z)$ , bude nalezen elektron se spinem orientovaným "nahoru" (tj. ve stavu  $|\uparrow\rangle$  nebo  $|\frac{1}{2}\rangle$ , resp. s  $M_s = +\mu_B$ ); podobně se interpretuje

$$|\psi(x, y, z, -1)|^2 dx dy dz \quad (39b)$$

Výraz

$$\sum_{\sigma=\pm 1} |\psi(x, y, z, \sigma)|^2 dx dy dz \quad (39c)$$



pak udává pravděpodobnost, že částice s libovolným spinem bude nalezena v elementu objemu  $dx dy dz$  v okolí bodu  $(x, y, z)$ .

Do normalizační podmínky (II.20) musíme nyní ovšem kromě integrace přes  $x, y, z$  přidat i sumaci přes  $\sigma$ , takže norma je

$$N = \int |\psi(x, y, z, +1)|^2 dx dy dz + \int |\psi(x, y, z, -1)|^2 dx dy dz \quad (40)$$

Funkce  $\psi(x, y, z, \sigma)$  je normalizována, je-li  $N = 1$ .

Mezi všemi vlnovými funkcemi  $\psi(x, y, z, \sigma)$  má důležité postavení třída funkcí se separovanými prostorovými a spinovou proměnnou:

$$\psi(x, y, z, \sigma) = \varphi(x, y, z) \chi(\sigma) \quad (41)$$

Takováto separace proměnných je možná tehdy, když orientace spinu nezávisí na poloze částice v  $(x, y, z)$ -prostoru; jinými slovy: je možná tehdy, když lze zanedbat tzv. spin-orbitální interakci, takže hamiltonián soustavy má strukturu

$$\mathcal{H}(x, y, z, \sigma) = \mathcal{H}_1(x, y, z) + \mathcal{H}_2(\sigma) \quad (42)$$

Spinové vlnové funkce  $\chi(\sigma)$  jsou vlastními funkcemi operátoru  $\mathcal{J}_z$ , takže vyhovují rovnici

$$\mathcal{J}_z \chi_{m_s}(\sigma) = m_s \hbar \chi_{m_s}(\sigma) \quad (m_s = \pm \frac{1}{2}) \quad (43)$$

Definujeme-li je takto

$$\begin{aligned} \chi_{\frac{1}{2}}(1) &= 1, & \chi_{\frac{1}{2}}(-1) &= 0 \\ \chi_{-\frac{1}{2}}(1) &= 0, & \chi_{-\frac{1}{2}}(-1) &= 1 \end{aligned} \quad (44)$$

jsou vzájemně ortonormální, tj. platí

$$\sum_{\sigma=\pm 1} \chi_{m_s}^*(\sigma) \chi_{m'_s}(\sigma) = \delta_{m_s, m'_s} \quad (45)$$

V literatuře často najdete též definované dvě spinové vlnové funkce  $\alpha(\sigma)$ ,  $\beta(\sigma)$ :

$$\begin{aligned} \chi(\sigma) &= \alpha(\sigma) \text{ jestliže } \chi(+1)=1, \chi(-1)=0 \\ \chi(\sigma) &= \beta(\sigma) \quad \quad \quad \chi(+1)=0, \chi(-1)=1 \end{aligned} \quad (46a)$$

nebo

$$\alpha(1) = 1, \alpha(-1) = 0, \beta(1) = 0, \beta(-1) = 1 \quad (46b)$$

Funkce  $\alpha$  odpovídá  $m_s = \frac{1}{2}$  (spin "nahoru" nebo  $|\frac{1}{2}\rangle$  nebo  $|\uparrow\rangle$ ) a  $\beta$  pak  $m_s = -\frac{1}{2}$  (spin "dolů" nebo  $|\frac{1}{2}\rangle$  nebo  $|\downarrow\rangle$ ).

Závěrem odstavce ještě uvedme, že častá je též reprezentace funkce (41) sloupcovým vektorem

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(x,y,z) \\ \psi_{\downarrow}(x,y,z) \end{pmatrix}, \quad (47)$$

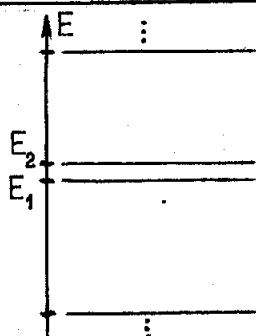
která je kombinací souřadnicové reprezentace s maticovým aparátem rozvínutým v odst. 1.3. Dostaneme ji, jestliže položíme

$$|\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} \chi_{\frac{1}{2}}^{(1)} \\ \chi_{\frac{1}{2}}^{(-1)} \end{pmatrix} \quad |-\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} \chi_{-\frac{1}{2}}^{(1)} \\ \chi_{-\frac{1}{2}}^{(-1)} \end{pmatrix} \quad (48)$$

## 2. Soustavy se dvěma stavy

### 2.1) Obecná úvaha o soustavách se dvěma stavy

Ve fyzice mikrosvěta existuje (vedle spinu 1/2) celá řada situací, které alespoň aproximativně mohou být traktovány jako problém kvantové soustavy se dvěma stavy. Mějme např. soustavu, v jejímž energiovém spektru jsou dvě hladiny blízko sebe a přitom jsou velice vzdálené od všech ostatních energiových hladin soustavy (obr.54)



Obr. 54.

Schematické znázornění energiového spektra, které dovoluje v 1. aproximaci traktovat soustavu jako soustavu se dvěma možnými stavy  $E_1, E_2$  (hladiny  $E_1, E_2$  jsou značně vzdálené od ostatních hladin v porovnání s hodnotou  $(E_2 - E_1)$ ).

Předpokládejme dále, že chceme vypočítat vliv vnějšího pole (nebo vnitřní interakce, která byla předtím zanedbaná) na tyto dva stavy. Je-li tato porucha dostatečně slabá, lze ukázat (viz kapitolu o poruchovém počtu v II. dílu nebo [11 - 13]), že výsledný vliv na zmíněné dvě blízké hladiny je možné v 1. aproximaci vypočítat tak, že ignorujeme existenci ostatních energiových hladin soustavy; všechny výpočty lze pak provést v dvourozměrném podprostoru  $\mathcal{E}_2$  celého prostoru stavových vektorů  $\mathcal{E}$ .

Pro další úvahy si zavedeme toto značení: uvažujme soustavu, jejíž stavy lze reprezentovat stavovými vektory z dvoudimenzionálního prostoru  $\mathcal{E}_2$ . Za bázi v něm vybereme vlastní vektory  $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle$  hamiltoniánu soustavy  $\mathcal{H}_0$ ; odpovídající vlastní hodnoty energie označíme  $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ , takže platí

$$\mathcal{H}_0 |\varphi_1\rangle = \varepsilon_1 |\varphi_1\rangle, \quad \mathcal{H}_0 |\varphi_2\rangle = \varepsilon_2 |\varphi_2\rangle \quad (49)$$