Κβαντομηχανική ΙΙ

Κωνσταντίνος Σφέτσος,
Καθηγητής Φυσικής

Τομέας Πυρηνικής και Στοιχειωδών Σωματιδίων,
Τμήμα Φυσικής,
Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών

Κεφάλαιο 5: Σύνθεση στροφορμών

29 Απριλίου 2020

Περιεχόμενα

- Γενική θεώρηση
- Ιδιοτιμές και ιδιοκαταστάσεις ολικής στροφορμής
- Παραδείγματα

Γενική θεώρηση

- Επειδή η στροφορμή είναι κβαντισμένη η πρόσθεση στροφορμών δεν γίνεται όπως με τα κλασικά διανύσματα.
- Ένα σωμάτιο, βλ. το ηλεκτρόνιο, μπορεί να έχει τόσο τροχιακή όσο και ιδιοστροφορμή. Εχει έννοια να γνωρίζουμε την ολική στροφορμή.
- Υπάρχουν Χαμιλτονιανές που δεν εναλλάσονται ξεχωριστά με τις επιμέρους, αλλά με την ολική στροφορμή.

Θεωρούμε δύο φυσικά μεγέθη με ιδιότητες στροφορμής, δηλαδή

$$\{J_{1a}, J_{2b}\}: \quad [J_{1a}, J_{1b}] = i\hbar\epsilon_{abc}J_{1c} \ , \quad [J_{2a}, J_{2b}] = i\hbar\epsilon_{abc}J_{2c} .$$

Τελεστές για διαφορετικά μεγέθη μετατίθεται, $[J_{1a}, J_{2b}] = 0$.

- Συμβολίζουμε τις κοινές ιδιοκαταστάσεις των $\{\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, J_{1z}, J_{2z}\}$ με

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \ , \quad |j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle \ , \quad j_1, j_2 \in \mathbb{Z}/2 \ .$$
$$m_1 = -j_1, -j_1+1, \ldots \ , j_1 \ , \qquad m_2 = -j_2, -j_2+1, \ldots \ , j_2 \ .$$

- Αυτές αποτελούν ένα πλήρες ορθοκανονικό σύνολο

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1' j_2' m_1' m_2' \rangle = \delta_{j_1 j_1'} \delta_{j_2 j_2'} \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'} \ ,$$
$$\sum_{j_1, j_2} \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle\langle j_1 j_2 m_1 m_2| = \mathbb{I} \ .$$

Ιδιοτιμές και ιδιοκαταστάσεις ολικής στροφορμής

- Ο τελεστής
$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 \ ,$$
ικανοποιεί την άλγεβρα της στροφορμής, δηλαδή
$$[J_a, J_b] = i\hbar\epsilon_{abc} J_c \ .$$
- Μπορούμε να διαγωνοποιήσουμε ταυτόχρονα τους τελεστές $\{\mathbf{J^2}, J_3, \mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2\}$. Σημειώνω ότι $[\mathbf{J}^2, J_{1z}] \neq 0$.
- Οι ιδιοκαταστάσεις θα είναι της μορφής $|j_1 j_2 j m\rangle$ και θα είναι ορθοκανονικές
$$\langle j_1 j_2 j m | j_1' j_2' j' m'\rangle = \delta_{j_1 j_1'} \delta_{j_2 j_2'} \delta_{jj'} \delta_{mm'} \ .$$

Υπολογισμός των συντελεστών Clebsch-Gordan:

- Μπορούμε να γράψουμε τη σχέση μεταξύ των δύο βάσεων

$$|j_1 j_2 j m\rangle = \sum_{j_1', j_2', m_1', m_2'} |j_1' j_2' m_1' m_2'\rangle \underbrace{\langle |j_1' j_2' m_1' m_2' | j_1 j_2 j m\rangle}_{\text{Clebsch-Gordan}} \ .$$

- Λόγω της ορθοκανονικότητας

$$m\hbar\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j m\rangle = \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J_z | j_1 j_2 j m\rangle$$
$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J_{1z} + J_{2z} | j_1 j_2 j m\rangle = \hbar(m_1 + m_2)\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j m\rangle$$

Άρα

$$m = m_1 + m_2 \ .$$

- Επίσης

$$\hbar^2 j_1(j_1+1)\langle j_1' j_2' m_1 m_2 | j_1 j_2 j m\rangle = \langle j_1' j_2' m_1 m_2 | \mathbf{J}_1^2 | j_1 j_2 j m\rangle$$
$$= \hbar^2 j_1'(j_1'+1)\langle j_1' j_2' m_1 m_2 | j_1 j_2 j m\rangle \ .$$

Άρα

$$j_1' = j_1 \ , \qquad j_2' = j_2 \ .$$

Άρα οι συντελεστές Clebsch-Gordan έχουν την μορφή

$$\langle j_1' j_2' m_1 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle = \delta_{j_1' j_1} \delta_{j_2' j_2} \delta_{m, m_1+m_2} C^{j,m}_{j_1, m_1; j_2, m_2} \ .$$

Γράφουμε

$$|j_1 j_2 j m\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} C^{j,m}_{j_1, m_1; j_2, m_2} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \ .$$

Δυνατές τιμές των m και j:

- Η μέγιστη τιμή του m είναι $m_{\max} = j_1 + j_2$. Άρα η μέγιστη τιμή του j είναι

  $$\boxed{j_{\max} = j_1 + j_2} \ .$$

  Η τιμή είναι συμβατή και με το γεγονός ότι $m_{\min} = -j_1 - j_2$.

- Η ελάχιστη τιμή $j_{\min}$ βρίσκεται απαιτώντας ότι ο αριθμός καταστάσεων είναι ο ίδιος με όποια βάση.

$$(2j_1+1)(2j_2+1) = \sum_{j=j_{\min}}^{j_1+j_2}(2j+1) = \sum_{n=0}^{j_1+j_2-j_{\min}}(2n+2j_{\min}+1)$$
$$= (j_1+j_2+1)^2 - j_{\min}^2 \ .$$

Άρα

$$\boxed{j_{\min} = |j_1 - j_2|}\ .$$

Γενική κατασκευή καταστάσεων

Με δεδομένα j_1, j_2 ο τρόπος κατασκευής των καταστάσεων είναι:

- Ξεκινούμε απ' την κατάσταση μέγιστων j και m.
  Αυτή σχηματίζεται μοναδικά ώς
  $$|j_1 j_2 j_{\max} j_{\max}\rangle = |j_1 j_2 j_1 j_2\rangle \ .$$
- Δρώντας με τον J_- κατασκευάζουμε όλες τις καταστάσεις
  $$|j_1 j_2 j_{\max} m\rangle \ , \qquad m = j_{\max} \ , j_{\max} - 1 \ , \ldots , j_{\min} \ .$$
- Επιλέγουμε την $|j_1 j_2, j_{\max} - 1, j_{\max} - 1\rangle$ ώστε να είναι ορθογώνια στην $|j_1 j_2, j_{\max}, j_{\max} - 1\rangle$.
- Κατασκευάζουμε τις υπόλοιπες καταστάσεις με $j = j_{\max} - 1$ δρώντας με τον τελεστή J_-.

- Επιλέγουμε την $|j_1 j_2, j_{\rm max}-2, j_{\rm max}-2\rangle$ ώστε να είναι ορθογώνια στην $|j_1 j_2, j_{\rm max}, j_{\rm max}-2\rangle$ και στην $|j_1 j_2, j_{\rm max}-1, j_{\rm max}-2\rangle$. Κατασκευάζουμε τις υπόλοιπες καταστάσεις δρώντας με τον τελεστή J_-.
- Συνεχίζουμε την διαδικασία μέχρι την ελάχιστη τιμή $j_{\rm min}=|j_1-j_2|$.

Παραδείγματα

Σύνθεση στροφορμής δύο ηλεκτρονίων

Σε αυτή την περίπτωση: $j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$. Οι δυνατές τιμές του $j = 0, 1$. Για απλότητα γράφουμε

$$|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{\pm 1}{2}\frac{\pm 1}{2}\rangle = |\pm\rangle|\pm\rangle \ ,$$

για όλους τους 4 συνδιασμούς.

- Με δύο σπιν πάνω έχουμε: $m_1 = m_2 = \frac{1}{2}$ και $j = m = 1$. Άρα

  $$|11\rangle = |+\rangle|+\rangle \ .$$

  Γνωρίζουμε ότι

  $$J_\pm|\mp\rangle = |\pm\rangle \ .$$

- Δρώντας με τον $J_- = J_{1-} + J_{2-}$ παίρνουμε

$$J_-|11\rangle = (J_{1-} + J_{2-})|+\rangle|+\rangle = (J_{1-}|+\rangle)|+\rangle + |+\rangle(J_{2-}|+\rangle) \ ,$$

με αποτέλεσμα

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-\rangle|+\rangle + |+\rangle|-\rangle) \ .$$

- Δρώντας πάλι με τον J_- έχουμε

$$J_-|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-\rangle(J_{2-}|+\rangle) + (J_{1-}|+\rangle)|-\rangle) \ ,$$

με αποτέλεσμα

$$|1,-1\rangle = |-\rangle|-\rangle \ .$$

- Η κατάσταση $|00\rangle$ ορθογώνια στην $|10\rangle$ είναι

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle|-\rangle - |-\rangle|+\rangle) \ .$$

Τελικά, η σύνθεση του σπιν 2 ηλεκτρονίων δίνει:

$$\text{singlet :} \quad |00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle|-\rangle - |-\rangle|+\rangle) \ .$$

και

$$\text{triplet :} \quad \begin{aligned} |11\rangle &= |+\rangle|+\rangle \\ |10\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle|-\rangle + |-\rangle|+\rangle) \ . \\ |1,-1\rangle &= |-\rangle|-\rangle \ . \end{aligned}$$

Σύνθεση τροχιακής και ιδιοστροφορμής

Έχουμε: $j_1 = \ell = 1, 2, \ldots$ και $j_2 = \frac{1}{2}$, οπότε $j = \ell \pm \frac{1}{2}$.

- Έχουμε την κατάσταση

$$|\ell, \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2}\rangle = |\ell\ell\rangle|+\rangle \ .$$

- Δρώντας με τον τελεστή J_- κατασκευάζουμε τις

$$|\ell, \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2}, m\rangle = \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2} + m}{2\ell + 1}}|\ell, m - \frac{1}{2}\rangle|+\rangle + \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2} - m}{2\ell + 1}}|\ell, m + \frac{1}{2}\rangle|-\rangle$$
$$m = -(\ell + \frac{1}{2}), -\ell + \frac{1}{2}, \ldots, \ell + \frac{1}{2} \ .$$

- Απαιτώντας ορθογωνιότητα με την $|\ell, \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2}, m\rangle$, έχουμε

$$|\ell, \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2}, m\rangle = \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2} + m}{2\ell + 1}}|\ell, m - \frac{1}{2}\rangle|+\rangle - \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2} - m}{2\ell + 1}}|\ell, m + \frac{1}{2}\rangle|-\rangle$$
$$m = -(\ell - \frac{1}{2}), -\ell + \frac{3}{2}, \ldots, \ell - \frac{1}{2} \ .$$

Κριτήριο επιλογής βάσης

Η επιλογή της βάσης $|j_1 j_2 j m\rangle$ έναντι της $|j_1 m_1\rangle|j_2 m_2\rangle$ γίνεται με κριτήριο η Χαμιλτονιανή να εναλλάσσεται με την ομάδα τελεστών που διαγωνοποιείται στην αντίστοιχη βάση.

- Για τον τελεστή $[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, L_z] \neq 0$ και $[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, S_z] \neq 0$. αλλά $[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, J_z] = 0$. Έχουμε

$$\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) \ .$$

- Άρα έχουμε

$$\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}|\ell, \frac{1}{2}, j, m\rangle = \frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)\right]|\ell, \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2}, m\rangle \ .$$

- Για την περίπτωση ηλεκτρονίου $s = \frac{1}{2}$ και $j = \ell \pm \frac{1}{2}$, οπότε

$$\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}|\ell, \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2}, m\rangle = \hbar^2 \frac{\ell}{2}|\ell, \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2}, m\rangle \ ,$$
$$\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}|\ell, \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2}, m\rangle = -\hbar^2 \frac{\ell+1}{2}|\ell, \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2}, m\rangle \ .$$