Kvantna mehanika 1 – domača naloga

Spin IV

Rešitev

1. $\vec{\sigma}^n = \frac{2}{\hbar}\vec{S}^n$ za $n = 1,2$ (prvi in drugi delec)

(opomba: Desni zgornji indeks nad simbolom spina *S* torej pomeni, za kateri delec gre, in ne potence!)

$\vec{r} = \frac{\vec{R}}{R} = \frac{(x,y,z)}{R}$, kjer je $\vec{R}$ vektor med delcema

Pokazati želimo $[H', J_i] = 0$, kjer indeks *i* označuje vsako komponento (*x, y, z*).

$$H' = \frac{4\lambda}{\hbar^2}\left(3\left(\vec{S}^1\cdot\vec{r}\right)\left(\vec{S}^2\cdot\vec{r}\right) - \vec{S}^1\cdot\vec{S}^2\right)$$

Ob upoštevanju naslednjih enakosti:

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$$

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

$$A = \frac{4\lambda}{\hbar^2}$$

lahko izraz $[H', J_i]$ prevedemo na:

$$[H', J_i] = 3A\left[\left(\vec{S}^1\cdot\vec{r}\right)\left(\vec{S}^2\cdot\vec{r}\right), L_i\right] + 3A\left[\left(\vec{S}^1\cdot\vec{r}\right)\left(\vec{S}^2\cdot\vec{r}\right), S_i^1\right] + 3A\left[\left(\vec{S}^1\cdot\vec{r}\right)\left(\vec{S}^2\cdot\vec{r}\right), S_i^2\right] -$$
$$- A\left[\vec{S}^1\cdot\vec{S}^2, L_i\right] - A\left[\vec{S}^1\cdot\vec{S}^2, S_i^1\right] - A\left[\vec{S}^1\cdot\vec{S}^2, S_i^2\right]$$

Oglejmo si druge tri člene:
Prvi člen je trivialen:

$$\left[\vec{S}^1\cdot\vec{S}^2, L_i\right] = \left[\vec{S}^1, L_i\right]\vec{S}^2 + \vec{S}^1\left[\vec{S}^2, L_i\right] = 0$$

Drugi in tretji sta analogna. Oglejmo si drugega in *z* komponento spina:

$$\left[\vec{S}^1\cdot\vec{S}^2,S_z^1\right]=\left[\vec{S}^1,S_z^1\right]\vec{S}^2+\underbrace{\vec{S}^1\left[\vec{S}^2,S_z^1\right]}_{=0}=\left[S_x^1,S_z^1\right]S_x^2+\left[S_y^1,S_z^1\right]S_y^2+\underbrace{\left[S_z^1,S_z^1\right]S_z^2}_{=0}=$$

$$=-i\hbar S_y^1S_x^2+i\hbar S_x^1S_y^2$$

Tretji člen analogno:

$$\left[\vec{S}^1\cdot\vec{S}^2,S_z^2\right]=-i\hbar S_y^2S_x^1+i\hbar S_x^2S_y^1$$

Veseli opazimo, da se drugi in tretji člen odštejeta. Zadnji trije členi nam torej prinesejo 0.

Ostanejo nam še nekoliko težji prvi trije členi:

1. $\left[\left(\vec{S}^1\cdot\vec{r}\right)\left(\vec{S}^2\cdot\vec{r}\right),L_i\right]=\left[\left(\vec{S}^1\cdot\vec{r}\right),L_i\right]\left(\vec{S}^2\cdot\vec{r}\right)+\left(\vec{S}^1\cdot\vec{r}\right)\left[\left(\vec{S}^2\cdot\vec{r}\right),L_i\right]$

Spet si oglejmo komponento z: $\left[\left(\vec{S}^1\cdot\vec{r}\right),L_z\right]=\left[S_x^1\frac{x}{R}+S_y^1\frac{y}{R}+S_z^1\frac{z}{R},L_z\right]$

Upoštevajoč, da R komutira z L_z, in zvezo $\left[x,L_y\right]=-i\hbar z$, hitro uvidimo, da zgornji izraz preide v:

$$\left[S_x^1\frac{x}{R}+S_y^1\frac{y}{R}+S_z^1\frac{z}{R},L_z\right]=i\hbar yS_x^1-i\hbar xS_y^1 \qquad (1)$$

Podobno $\left[\left(\vec{S}^2\cdot\vec{r}\right),L_z\right]=\left[S_x^2\frac{x}{R}+S_y^2\frac{y}{R}+S_z^2\frac{z}{R},L_z\right]=i\hbar yS_x^2-i\hbar xS_y^2$ (2)

Prvi člen nam da torej vrednost:

$$\left(\vec{S}^1\cdot\vec{r}\right)\cdot\left(i\hbar yS_x^2-i\hbar xS_y^2\right)+\left(i\hbar yS_x^1-i\hbar xS_y^1\right)\cdot\left(\vec{S}^2\cdot\vec{r}\right)$$

2. Drugi in tretji člen sta si analogna. Oglejmo si drugega (in spet komponento z):

$$\left[\left(\vec{S}^1\cdot\vec{r}\right)\left(\vec{S}^2\cdot\vec{r}\right),S_z^1\right]=\left[\left(\vec{S}^1\cdot\vec{r}\right),S_z^1\right]\left(\vec{S}^2\cdot\vec{r}\right)+\left(\vec{S}^1\cdot\vec{r}\right)\left[\left(\vec{S}^2\cdot\vec{r}\right),S_z^1\right]$$

V tem izrazu je desni člen enak 0 (spina različnih delcev komutirata), zato si oglejmo levi člen:

$$\left[\left(\vec{S}^1\cdot\vec{r}\right),S_z^1\right]=\left[S_x^1\frac{x}{R}+S_y^1\frac{y}{R}+S_z^1\frac{z}{R},S_z^1\right]=\left(i\hbar xS_y^1-i\hbar yS_x^1\right)$$

Podobno lahko zapišem tretji člen:

$$\left[\left(\vec{S}^1\cdot\vec{r}\right)\left(\vec{S}^2\cdot\vec{r}\right),S_z^2\right]=\left(\vec{S}^1\cdot\vec{r}\right)\left(i\hbar xS_y^2-i\hbar yS_x^2\right)$$

Vsota drugega in tretjega člena je torej:

$$\left(\vec{S}^1\cdot\vec{r}\right)\left(-i\hbar xS_y^2-i\hbar yS_x^2\right)+\left(i\hbar xS_y^1-i\hbar yS_x^1\right)\left(\vec{S}^2\cdot\vec{r}\right)$$

Vidimo, da sta prvi člen in vsota drugega in tretjega nasprotno enaka in se torej odštejeta. Prvi trije členi nam torej prav tako dajo 0.

2. V prejšnji točki smo pokazali $[H',J_i]=0$. Zato lahko zapišemo:

$$\langle JM|[H',J_i]|JM'\rangle=0$$

$$\langle JM|H'J_i-J_iH'|JM'\rangle=0$$

$$(M-M')\langle JM|H'|JM'\rangle=0$$

Od tod vidimo: za vsaki stanji z različnim kvantnim številom M, je zgornji matrični element enak 0. V našem primeru imamo 5 degeneriranih stanj. Spreminja se le kvantno število M: M= -2, -1, 0, 1, 2. V matriki 5×5 so torej vsi nediagonalni členi enaki 0.

Pokažimo sedaj še, da so vsi diagonalni členi enaki. V točki 1. smo pokazali $[H',J_i]=0$, torej velja tudi $[H',J_+]=0$, zato lahko zapišem:

$$\langle M|H'J_+|M'\rangle-\langle M|J_+H'|M'\rangle=0$$

V levem členu dobimo: $|J_+M'\rangle=\hbar\sqrt{L(L+1)-M'(M'+1)}|M'+1\rangle$, v desnem pa:

$\langle J_M|=\hbar\sqrt{L(L+1)-M(M-1)}|M-1\rangle$. Sledi:

$$\sqrt{L(L+1)-M'(M'+1)}\langle M|H'|M'+1\rangle-\sqrt{L(L+1)-M(M-1)}\langle M-1|H'|M'\rangle=0$$

Ta enačba velja v splošnem, za poljubna M in M'. Sedaj pa si oglejmo poseben primer, ko $M'=M-1$:

$$\sqrt{L(L+1)-M(M-1)}\langle M|H'|M\rangle-\sqrt{L(L+1)-M(M-1)}\langle M-1|H'|M-1\rangle=0$$

sledi: $\langle M|H'|M\rangle-\langle M-1|H'|M-1\rangle=0$. Vidimo torej, da so vsi diagonalni matrični elementi enaki.

Za konec nam ostane še izračun diagonalnega matričnega elementa:

$$\langle M|H'|M\rangle = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y_l^{m\,*} H' Y_l^m \sin\vartheta d\vartheta d\varphi ,$$

Izkaže se, da je najlaže izračunati matrični element $\langle 2|H'|2\rangle$, saj lahko $|2\rangle$ zapišemo na en sam način: $|2\rangle = |1\rangle\left|\tfrac{1}{2}\right\rangle\left|\tfrac{1}{2}\right\rangle$ (za l_z, S_z^1, S_z^2). Ker je torej $l_z = 1$, vzamemo funkcijo Y_1^1:

$$Y_1^1 = -e^{i\varphi}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\vartheta ,\; Y_1^{1\,*} = -e^{-i\varphi}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\vartheta \quad \text{in} \quad |Y_1^1| = |Y_1^{1\,*}| = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\vartheta$$

Lotimo se računanja:

$$\langle 2|H'|2\rangle = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y_1^{1\,*} H' Y_1^1 \sin\vartheta d\vartheta d\varphi = \frac{3}{8\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} (\sin^3\vartheta) H' d\vartheta d\varphi$$

Zapišimo H':

$$H' = \frac{4\lambda}{\hbar^2}\left(3S_x^1 S_x^2 x^2 + 3S_y^1 S_y^2 y^2 + 3S_z^1 S_z^2 z^2 - S_x^1 S_x^2 - S_y^1 S_y^2 - S_z^1 S_z^2\right)$$

Upoštevajmo še sferične koordinate:

$$x = r\sin\vartheta\cos\varphi$$
$$y = r\sin\vartheta\sin\varphi$$
$$z = r\cos\vartheta$$
$$r = 1$$

Integral lahko torej razdelimo v štiri: prvi trije vsebujejo kvadrat posamezne koordinate, zadnji pa le vsoto produktov komponent spinov:

$$I_1 = \frac{3}{8\pi}\cdot\frac{12\lambda}{\hbar^2} S_x^1 S_x^2 \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} (\sin^5\vartheta)(\cos^2\varphi) d\vartheta d\varphi$$
$$I_2 = \frac{3}{8\pi}\cdot\frac{12\lambda}{\hbar^2} S_y^1 S_y^2 \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} (\sin^5\vartheta)(\sin^2\varphi) d\vartheta d\varphi$$
$$I_3 = \frac{3}{8\pi}\cdot\frac{12\lambda}{\hbar^2} S_z^1 S_z^2 \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} (\sin^3\vartheta)(\cos^2\vartheta) d\vartheta d\varphi$$
$$I_4 = -\frac{3}{8\pi}\cdot\frac{4\lambda}{\hbar^2}\left(S_x^1 S_x^2 + S_y^1 S_y^2 + S_z^1 S_z^2\right)\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} (\sin^3\vartheta) d\vartheta d\varphi$$

Na srečo nam prvih dveh integralov ni potrebno izračunati, saj jih kasneje uniči spinski del. Zato se lotimo le drugih dveh:

$$I_3 = \frac{3}{8\pi}\cdot\frac{12\lambda}{\hbar^2} S_z^1 S_z^2 \cdot 2\pi \cdot \frac{4}{15} = \frac{12}{5}\cdot\frac{\lambda}{\hbar^2} S_z^1 S_z^2$$

$$I_4 = -\frac{3}{8\pi}\cdot\frac{4\lambda}{\hbar^2}\left(S_x^1 S_x^2 + S_y^1 S_y^2 + S_z^1 S_z^2\right)\cdot 2\pi \cdot \frac{4\lambda}{\hbar^2} = -\frac{4\lambda}{\hbar^2}\left(S_x^1 S_x^2 + S_y^1 S_y^2 + S_z^1 S_z^2\right)$$

Faktor, ki stoji pred produktom $S_z^1 S_z^2$ je torej enak: $-\frac{8}{5}\cdot\frac{\lambda}{\hbar^2}$.

Lotimo se sedaj še spinskega dela:

$$S_x = \frac{S_+ + S_-}{2}, \quad S_y = \frac{S_+ - S_-}{2i}$$

$$\left\langle \tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\middle| S_x^1 S_x^2 \middle|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\right\rangle = \left\langle \tfrac{1}{2}\middle| S_x^1 \middle|\tfrac{1}{2}\right\rangle\left\langle \tfrac{1}{2}\middle| S_x^2 \middle|\tfrac{1}{2}\right\rangle = \left\langle \tfrac{1}{2}\middle| \frac{S_+^1 + S_-^1}{2} \middle|\tfrac{1}{2}\right\rangle\left\langle \tfrac{1}{2}\middle| \frac{S_+^2 + S_-^2}{2} \middle|\tfrac{1}{2}\right\rangle = 0$$

Podobno za *y* komponento spina. Izračunajmo še za *z* komponento:

Ker $S_z\left|\tfrac{1}{2}\right\rangle = \tfrac{\hbar}{2}$ in $S_z\left|-\tfrac{1}{2}\right\rangle = -\tfrac{\hbar}{2}$, sledi:

$$\left\langle \tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\middle| S_z^1 S_z^2 \middle|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\right\rangle = \left\langle \tfrac{1}{2}\middle| S_z^1 \middle|\tfrac{1}{2}\right\rangle\left\langle \tfrac{1}{2}\middle| S_z^2 \middle|\tfrac{1}{2}\right\rangle = \frac{\hbar}{2}\cdot\frac{\hbar}{2} = \frac{\hbar^2}{4}$$

Končno pomnožimo kotni in spinski del in dobimo:

$$M = -\frac{8}{5}\cdot\frac{\lambda}{\hbar^2}\cdot\frac{\hbar^2}{4} = -\frac{2}{5}\lambda$$

(Opomba: M ni kvantno število, temveč konstanta, razvidna iz besedila naloge)

Vsi diagonalni metrični elementi so torej enaki $-\frac{2}{5}\lambda$.

3. Popravek energije v 1. redu perturbacije pa obljubaljam za jesen.

Urban Pompe