

Wykład 5

Spin

5.1. Operatory spinowe

Niezależnie od orbitalnego momentu pędu, elementarne cząstki materii (elektrony, protony, neutrony) mają również pewien własny, wewnętrzny moment pędu, nazywany spinowym momentem pędu. O istnieniu spinowego momentu pędu świadczą liczne doświadczenia i zjawiska (również z dziedziny magnetycznego rezonansu jądrowego). Istnienie spinu wynika w sposób bezpośredni z równania Diraca, będącego relatywistycznym uogólnieniem równania Schrödingera.

Spinowy moment pędu jest wektorem $\vec{I}\hbar$ o trzech składowych I_x, I_y, I_z . (Tu stałą Plancka wprowadziliśmy jedynie dla dalszej wygody.) W mechanice kwantowej spinowemu momentowi pędu odpowiada wektorowy operator $\hat{I}\hbar$, przy czym między składowymi spinowego momentu pędu $\hat{I}_x\hbar, \hat{I}_y\hbar$ i $\hat{I}_z\hbar$ istnieją związki komutacyjne takie same, jak dla składowych operatora orbitalnego momentu pędu

$$\begin{aligned} [\hat{I}_x, \hat{I}_y] &= i\hat{I}_z, \\ [\hat{I}_y, \hat{I}_z] &= i\hat{I}_x, \\ [\hat{I}_z, \hat{I}_x] &= i\hat{I}_y. \end{aligned} \quad (5.1)$$

Operatory spinowego momentu pędu mają więc wiele cech wspólnych z operatorami orbitalnego momentu pędu. Jednak, w odróżnieniu od operatorów orbitalnego momentu pędu, dla operatorów spinowego momentu pędu w równaniach

$$\hat{I}^2 |I, m\rangle = I(I+1) |I, m\rangle, \quad (5.2)$$

$$\hat{I}_z |I, m\rangle = m |I, m\rangle, \quad (5.3)$$

liczby kwantowe I i m mogą być połówkowymi.

Z doświadczeń wynika, że dla elektronu, protonu, neutronu spinowa liczba I jest równa $1/2$. Wektorowy operator \hat{I} będziemy nazywali krótko *spinem*.

5.2. Spin jądra

Jądra atomowe składają się z neutronów i protonów (nukleonów). Neutrony nie mają ładunku elektrycznego, natomiast ładunek protonu ma znak przeciwny do ładunku elektronu i taką samą wartość. Oprócz spinowego momentu pędu nukleony mogą posiadać orbitalne momenty pędu, wskutek orbitalnego ruchu nukleonów w jądrze. Wypadkowy moment pędu jądra tworzą więc spinowe i orbitalne momenty pędu nukleonów. Jądra atomów mają średnice $\sim 10^{-14}m$ i w wielu praktycznych zagadnieniach możemy rozpatrywać jądro atomowe jako „punktową” cząsteczkę o wypadkowym momencie pędu $\vec{I}\hbar$. Ten wypadkowy moment pędu będziemy nazywali spinowym momentem pędu jądra, a odpowiedni operator \hat{I} - spinem jądra.

5.3. Funkcje własne spinu

Spinowy moment pędu punktowej cząsteczki nie jest związany w sensie mechaniki klasycznej z ruchem orbitalnym, a zatem nie możemy zapisać dla odpowiedniego mu operatora wyrażenia (4.3). W tym przypadku funkcje własne spinu $|I, m\rangle$ ((4.60), (4.61)) nie są funkcjami współrzędnych przestrzennych r, θ, φ (4.17) i opisują tylko stany, w których składowe spinowego momentu pędu są równe $m\hbar$ ($m = -I, \dots, I$). Na przykład jeżeli spin cząsteczki jest równy $1/2$ ($I = 1/2$), to istnieją dwa własne stany tej cząsteczki: $|+1/2\rangle$ i $|-1/2\rangle$. W stanie $|+1/2\rangle$ rzut wektora spinowego momentu na oś Z jest równy $+1/2\hbar$ („spin do góry”), natomiast w stanie $|-1/2\rangle$ rzut wektora spinowego momentu na oś Z jest równy $-1/2\hbar$ („spin do dół”).

Dla operatorów spinowych słusznych jest wiele wyników otrzymanych dla operatora orbitalnego momentu pędu, a mianowicie:

$$\hat{I}^2|m\rangle = I(I+1)|m\rangle, \quad (5.4)$$

$$\hat{I}_z|m\rangle = m|m\rangle, \quad (5.5)$$

$$\langle m|\hat{I}_x|m\pm 1\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{I(I+1)-m(m\pm 1)}, \quad (5.6)$$

$$\langle m|\hat{I}_y|j, m\pm 1\rangle = \pm \frac{i}{2}\sqrt{I(I+1)-m(m\pm 1)}, \quad (5.7)$$

$$\langle m | \hat{I}_+ | m-1 \rangle = \sqrt{I(I+1) - m(m-1)} , \quad (5.8)$$

$$\langle m | \hat{I}_- | m+1 \rangle = \sqrt{I(I+1) - m(m+1)} . \quad (5.9)$$

Słuszność wzorów (5.4) – (5.9) dla operatorów spinowego momentu pędu jest wynikiem identyczności reguł komutacyjnych składowych operatora spinu $\hat{I}_x, \hat{I}_y, \hat{I}_z$ (5.1) z regułami komutacyjnymi dla składowych orbitalnego momentu pędu $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ (4.4). Z teorii grup wynika, że właśnie związki komutacyjne określają rodzaj symetrii, z jakim wiążą się dane operatory. Na wykładzie 4 widzieliśmy, że operator momentu pędu jest ściśle związany z obrotem układu współrzędnych. W związku z tym okazuje się, że orbitalny moment pędu wiąże się z symetrią sferyczną. Operator spinowy również wiąże się z symetrią sferyczną względem obrotów osi układu odniesienia w spinowej przestrzeni Hilberta.

5.4. Rotacje w spinowej przestrzeni Hilberta

Podobnie do wzorów (4.51) – (4.53) obroty układu odniesienia w przestrzeni Hilberta możemy opisać za pomocą operatorów obrotu \hat{R}_j ($j = x, y, z$):

1. Obrót wokół osi x

$$\hat{R}_x(\alpha) = \exp(-i\alpha\hat{I}_x) , \quad (5.10)$$

2. Obrót wokół osi y

$$\hat{R}_y(\alpha) = \exp(-i\beta\hat{I}_y) , \quad (5.11)$$

3. Obrót wokół osi z

$$\hat{R}_z(\alpha) = \exp(-i\gamma\hat{I}_z) . \quad (5.12)$$

Przy obrocie dookoła osi i ($i = x, y, z$) operator \hat{A} , zgodnie z (4.58), przekształca się w operator \hat{A}_i równy

$$\hat{A}_i = \hat{R}\hat{A}\hat{R}^{-1} . \quad (5.13)$$

Korzystając z (5.10) – (5.13), obliczymy przekształcenia operatorów \hat{I}_x, \hat{I}_y i \hat{I}_z .

Rozpatrzmy najpierw obrót wokół osi z . Jeżeli operator \hat{A} we wzorze (5.13) jest równy \hat{I}_z , to otrzymujemy oczekiwany wynik

$$\exp(-i\gamma\hat{I}_z)\hat{I}_z\exp(i\gamma\hat{I}_z) = \hat{I}_z . \quad (5.14)$$

Jeżeli $\hat{A} = \hat{I}_x$, to obrót wokół osi z przekształca operator \hat{I}_x w operator

$$\exp(-i\gamma\hat{I}_z)I_x\exp(i\gamma\hat{I}_z). \quad (5.15)$$

Dla obliczenia (5.15) skorzystamy z twierdzenia Banwella-Primasa (wzory (1.55)-(1.58)). Uwzględniając komutacyjne związki (5.1) otrzymujemy, że we wzorach (1.55) – (1.58)

$$\xi = \delta = \rho = 0; \quad \beta = -\gamma = -i; \quad \lambda = 1,$$

skąd

$$\begin{aligned} \exp(-i\gamma\hat{I}_z)I_x\exp(i\gamma\hat{I}_z) &= \\ &= I_x \cos \gamma + I_y \sin \gamma \end{aligned} \quad (5.16)$$

W podobny sposób znajdujemy, że

$$\begin{aligned} \exp(-i\gamma\hat{I}_z)I_y\exp(i\gamma\hat{I}_z) &= \\ &= -I_x \sin \gamma + I_y \cos \gamma \end{aligned} \quad (5.17)$$

i

$$\exp(-i\gamma\hat{I}_z)I_{\pm}\exp(i\gamma\hat{I}_z) = I_{\pm}e^{\mp i\gamma}.$$

Z porównania (5.16), (5.17) i (4.46) widzimy, że przy obrocie układu odniesienia w przestrzeni Hilberta wokół osi z o kąt γ składowe operatora spinowego \hat{J} przekształcają się podobnie do przekształcania składowych wektora \vec{r} przy obrocie układu odniesienia w przestrzeni euklidesowej.

Dla obrotów dookoła osi x i y łatwo znaleźć, że

$$\exp(-ia\hat{I}_x)\begin{bmatrix} \hat{I}_x \\ \hat{I}_y \\ \hat{I}_z \end{bmatrix}\exp(ia\hat{I}_x) = \begin{bmatrix} \hat{I}_x \\ \hat{I}_y \cos \alpha + \hat{I}_z \sin \alpha \\ \hat{I}_z \cos \alpha - \hat{I}_y \sin \alpha \end{bmatrix}, \quad (5.18)$$

$$\begin{aligned} \exp(-ia\hat{I}_x)\hat{I}_{\pm}\exp(ia\hat{I}_x) &= \\ &= -\frac{i}{\sqrt{2}}\hat{I}_z \sin \alpha + \hat{I}_{\pm} \cos^2 \frac{\alpha}{2} - \hat{I}_{\mp} \sin^2 \frac{\alpha}{2}, \end{aligned}$$

$$\exp(-i\beta\hat{I}_y)\begin{bmatrix} \hat{I}_x \\ \hat{I}_y \\ \hat{I}_z \end{bmatrix}\exp(i\beta\hat{I}_y) = \begin{bmatrix} \hat{I}_x \cos \beta - \hat{I}_z \sin \beta \\ \hat{I}_y \\ \hat{I}_z \cos \beta + \hat{I}_x \sin \beta \end{bmatrix}, \quad (5.19)$$

$$\begin{aligned} & \exp(-i\beta\hat{I}_y)\hat{I}_\pm\exp(i\beta\hat{I}_y) = \\ & = \pm \frac{i}{\sqrt{2}}\hat{I}_z\sin\beta + \hat{I}_\pm\cos^2\frac{\beta}{2} + \hat{I}_\mp\sin^2\frac{\beta}{2}. \end{aligned}$$

5.5. Elementy macierzowe operatorów obrotu

Rozpatrzmy elementy macierzowe operatorów obrotu \hat{R}_z i \hat{R}_y , w przypadku $I = 1/2$. Dla operatora obrotu wokół osi z otrzymujemy oczywisty wynik

$$\langle m|\exp(-i\gamma\hat{I}_z)|m_1\rangle = \exp(-i\gamma m)\delta_{mm_1} \quad (5.20)$$

albo w postaci macierzy

$$\langle m|\exp(-i\gamma\hat{I}_z)|m_1\rangle = \begin{bmatrix} \exp\left(-\frac{i\gamma}{2}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(\frac{i\gamma}{2}\right) \end{bmatrix}.$$

Łatwo sprawdzić, że takie same elementy macierzowe co i operator $\hat{R}_z(\gamma)$ ma operator

$$\hat{R}_z(\gamma) = \cos\frac{\gamma}{2} - 2i\hat{I}_z\sin\frac{\gamma}{2}. \quad (5.21)$$

Dla operatora obrotu dookoła osi y musimy obliczyć elementy macierzowe

$$d_{mm_1}^{\frac{1}{2}} = \langle m|\exp(-i\beta\hat{I}_y)|m_1\rangle. \quad (5.22)$$

Z definicji eksponencjalnego operatora (1.49) wzór (5.22) możemy zapisać w postaci

$$\langle m|\exp(-i\beta\hat{I}_y)|m_1\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\beta)^n}{n!} \langle m|\hat{I}_y^n|m_1\rangle. \quad (5.23)$$

Niech $m = m_1 = \pm 1/2$. Korzystając z (5.7) łatwo znaleźć, że

$$\begin{aligned} \left\langle \pm \frac{1}{2} \left| \hat{I}_y^{2n} \right| \pm \frac{1}{2} \right\rangle &= \left(\left\langle \pm \frac{1}{2} \left| \hat{I}_y \right| \mp \frac{1}{2} \right\rangle^2 \right)^n = \left(\frac{1}{2} \right)^{2n}, \\ \left\langle \pm \frac{1}{2} \left| \hat{I}_y^{2n+1} \right| \pm \frac{1}{2} \right\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (5.24)$$

Podstawiając (5.24) do (5.23) otrzymujemy

$$\left\langle \pm \frac{1}{2} \left| \exp(-i\beta \hat{I}_y) \right| \pm \frac{1}{2} \right\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta/2)^{2n}}{(2n)!} = \cos \frac{\beta}{2}. \quad (5.25)$$

Niech $m = -m_1 = \pm 1/2$. Biorąc pod uwagę (5.7) znajdujemy

$$\begin{aligned} \left\langle \pm \frac{1}{2} \left| \hat{I}_y^{2n} \right| \pm \frac{1}{2} \right\rangle &= 0, \\ \left\langle \pm \frac{1}{2} \left| \hat{I}_y^{2n+1} \right| \mp \frac{1}{2} \right\rangle &= \mp i \left(\frac{1}{2} \right)^{2n+1}. \end{aligned} \quad (5.26)$$

Po podstawieniu (5.26) do (5.23) otrzymujemy

$$\left\langle \pm \frac{1}{2} \left| \exp(-i\beta \hat{I}_y) \right| \mp \frac{1}{2} \right\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta/2)^{2n+1}}{(2n+1)!} = \mp \sin \frac{\beta}{2}. \quad (5.27)$$

Więc operator obrotu wokół osi Y dla $I = 1/2$ ma następujące elementy macierzowe

$$d_{mm_1}^{1/2}(\beta) = \langle m | \exp(-i\beta \hat{I}_y) | m_1 \rangle = \begin{bmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{bmatrix}. \quad (5.28)$$

W podobny sposób możemy wykazać, że macierz skończonego obrotu dla $I = 1$ ma postać

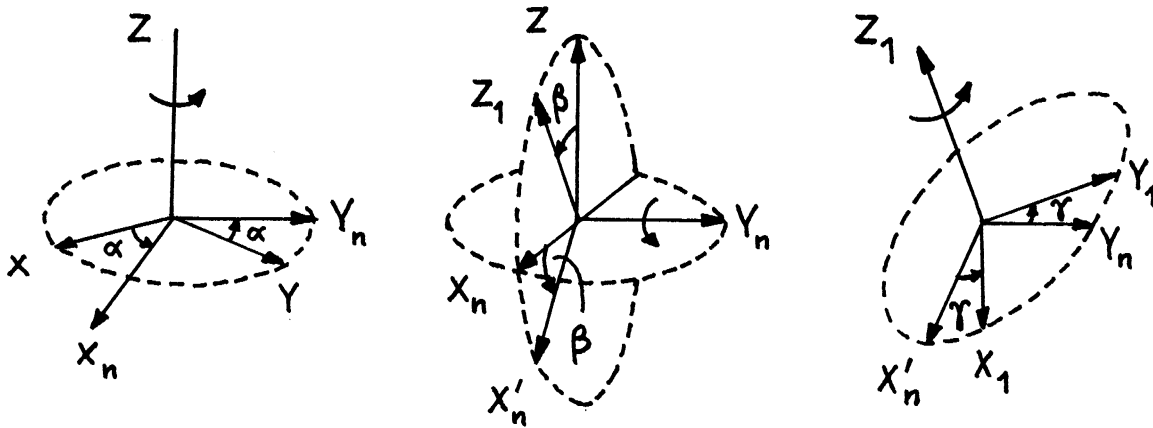
$$d_{mm_1}^1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \cos \beta & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \beta) & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta & \frac{1}{2}(1 + \cos \beta) \end{bmatrix}. \quad (5.29)$$

5.6. Dowolny obrót układu odniesienia. Kąty Eulera

Dowolny obrót układu odniesienia można jednoznacznie opisać za pomocą trzech kolejnych obrotów o trzy kąty Eulera (α, β, γ) . Kąty Eulera określają trzy następujących po sobie obroty, za pomocą których układ osi XYZ przechodzi z położenia początkowego w położenie końcowe $X_1Y_1Z_1$. Tych trzech obrotów dokonujemy w następujący sposób (rys. 5.2): 1) najpierw wykonujemy obrót o kąt α ($360^\circ \geq \alpha \geq 0$) wokół osi Z (operacja $\hat{R}_z(\alpha)$); 2) następnie dokonujemy obrotu o kąt β ($180^\circ \geq \alpha \geq 0$) dookoła nowej osi Y_n (operacja $\hat{R}_y(\beta)$); 3) wreszcie wykonujemy obrót o kąt γ ($360^\circ \geq \gamma \geq 0$) wokół nowej osi Z_1 (operacja

$\hat{R}_z(\gamma)$). Końcowe położenie układu współrzędnych pokrywa się z układem $X_1Y_1Z_1$. Z definicji operacji przekształcenia układów odniesienia wynika, że dowolny obrót układu odniesienia możemy opisać za pomocą wypadkowego operatora obrotu.

$$\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) = \hat{R}_z(\gamma)\hat{R}_y(\beta)\hat{R}_z(\alpha) . \quad (5.30)$$



Rys.5.2. Kąty Eulera

Dlatego więc, żeby opisać dowolny obrót układu odniesienia wystarczy znać tylko elementy macierzowe operatorów obrotu wokół osi Z i Y .

Elementy macierzowe operatora (5.30)

$$D_{mm_1}^j(\alpha, \beta, \gamma) = \langle m | \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) | m_1 \rangle \quad (5.31)$$

nazywane są funkcjami Wignera lub uogólnionymi funkcjami kulistymi.

Biorąc pod uwagę, że funkcje stanów $|m\rangle$ są funkcjami własnymi operatora \hat{I}_z , ze wzorów (5.30) i (5.31) znajdujemy, że

$$D_{mm_1}^j(\alpha, \beta, \gamma) = \exp(-im\gamma)d_{mm_1}^j(\beta)\exp(-im_1\alpha) \quad (5.32)$$

gdzie

$$d_{mm_1}^j(\alpha, \beta, \gamma) = D_{mm_1}^j(0, \beta, 0) = \langle m | \exp(-i\beta\hat{I}_y) | m_1 \rangle \quad (5.33)$$

są rzeczywistymi elementami macierzowymi.

5.7. Ślady operatorów spinowych

W wielu zagadnieniach magnetycznego rezonansu jądrowego mamy do czynienia z obliczaniem śladów spinowych operatorów.

Obliczymy ślad operatora \hat{I}_z^2 . Ponieważ, zgodnie z wynikami §1.7, ślad operatora nie zależy od układu funkcji $|n\rangle$, dla którego oblicza się elementy macierzowe operatora, będziemy obliczali ślad operatora \hat{I}_z^2 w układzie własnych funkcji operatora \hat{I}_z . Biorąc pod uwagę (5.5) znajdujemy

$$\text{Tr}\hat{I}_z^2 = \sum_{m=-I}^I \langle m|\hat{I}_z^2|m\rangle = \sum_{m=-I}^I m^2 = \frac{1}{3}I(I+1)(2I+1) .$$

Korzystając ze wzoru

$$\sum_{k=1}^n k^q = \frac{n^{q+1}}{q+1} + \frac{n^q}{2} + \frac{1}{2} \binom{q}{1} B_2 n^{q-1} + \frac{1}{4} \binom{q}{3} B_4 n^{q-3} + \dots ,$$

gdzie B_k są liczbami Bernouilliego

$$B_2 = \frac{1}{6} , \quad B_4 = -\frac{1}{30} , \quad B_6 = -\frac{1}{42} , \quad B_8 = -\frac{1}{30} , \quad B_{10} = \frac{5}{66} , \quad B_{12} = -\frac{691}{2730} ,$$

łatwo wykazać, że

$$\text{Tr}\hat{I}_z^4 = \frac{1}{15}I(I+1)(2I+1)[3I(I+1)-1] ,$$

$$\text{Tr}\hat{I}_z^6 = \frac{1}{21}I(I+1)(2I+1)[3I^2(I+1)^2 - 3I(I+1)+1] ,$$

$$\text{Tr}\hat{I}_z^8 = \frac{1}{45}I(I+1)(2I+1)[5I^3(I+1)^3 - 10I^2(I+1)^2 + 9I(I+1)-3] .$$

Obliczymy teraz ślad operatora \hat{I}_x^2 . Pokażemy, jak można łatwo znaleźć ślad operatora \hat{I}_x^2 . Wykorzystujemy do tego twierdzenie o niezależności śladu operatora od unitarnych przekształceń operatora, tj.

$$\text{Tr}\hat{A} = \text{Tr}\hat{U}\hat{A}\hat{U}^{-1} , \quad (5.34)$$

gdzie \hat{U} - operator unitarny. Twierdzenie (5.34) wynika z własności cykliczności operacji śladu (1.29) i z definicji odwrotnego i unitarnego operatorów (1.43) i (1.44). Jak wiemy, obrót układu odniesienia opisują operatory unitarne obrotów (5.10) – (5.12). Niech

$$\hat{U} = \hat{R}_y(90^0) = \exp\left(-i\frac{\pi}{2}\hat{I}_y\right). \quad (5.35)$$

Biorąc pod uwagę (5.19) i (5.35) otrzymujemy

$$\hat{U}\hat{I}_x^2\hat{U}^{-1} = \hat{R}_y\hat{I}_x\hat{R}_y^{-1}\hat{R}_y\hat{I}_x\hat{R}_y^{-1} = \hat{I}_z^2,$$

a więc

$$\text{Tr}\hat{I}_x^2 = \text{Tr}\hat{I}_z^2.$$

Metodę obrotu układu odniesienia często stosuje się przy obliczaniu śladów operatorów spinowych. Na przykład wykazemy, że

$$\text{Tr}\hat{I}_x^2\hat{I}_y = 0. \quad (5.36)$$

Wykonujemy obrót o kąt 180^0 wokół osi X . Zgodnie z (5.18) przy obrocie układu odniesienia iloczyn operatorów $\hat{I}_x^2\hat{I}_y$ przekształca się w

$$\hat{R}_x(\pi)(\hat{I}_x^2\hat{I}_y)\hat{R}_x^{-1}(\pi) = -\hat{I}_x^2\hat{I}_y.$$

Uwzględniając (5.34) otrzymujemy

$$\text{Tr}(\hat{I}_x^2\hat{I}_y) = -\text{Tr}(\hat{I}_x^2\hat{I}_y). \quad (5.37)$$

Tożsamość (5.37) jest słuszna tylko przy spełnieniu (5.36).