

## 7 Spin a systémy více částic

### 7.1 Rotující spin

Částice se spinem  $1/2$  interaguje s magnetickým polem  $\mathbf{B} = B_0 \mathbf{e}_z$ . Interakce je popsána hamiltoniánem  $\hat{H} = \mu \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B}$ , kde  $\mu$  je magnetický moment a  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$  je vektor Pauliho matic. V čase  $t = 0$  byla změřena hodnota  $S_x = \hbar/2$ . Určete časovou závislost pravděpodobnosti naměření hodnoty  $S_y = -\hbar/2$  pro  $t > 0$ .

### 7.2 Nukleární magnetická rezonance $\star$

Jádro se spinem  $1/2$  je umístěno v silném magnetickém poli  $B_0$  orientovaném ve směru osy  $z$ . Ke statickému poli je přidána složka  $\mathbf{B}_1$  rotující v rovině  $xy$  s frekvencí  $\omega$  v radiovém oboru. Výsledné magnetické pole pak jest  $\mathbf{B} = (B_1 \cos \omega t, B_1 \sin \omega t, B_0)$ . Interakce spinu jádra s magnetickým polem je popsána hamiltoniánem  $\hat{H} = \mu_N \mathbf{B} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ . Použijte značení  $\hbar\Omega_{\parallel} = \mu_N B_0$ ,  $\hbar\Omega_{\perp} = \mu_N B_1$ .

(a) Jestliže spin jádra v okamžiku  $t = 0$  míří ve směru kladné osy  $z$ , jaká je pravděpodobnost, že bude mířit ve směru záporné osy  $z$  v pozdějších okamžicích?

(b) Rozvažte, proč se často v NMR experimentech volí hodnota  $B_0$  tak, aby  $\Omega_{\parallel} \approx \omega/2$ .

### 7.3 Skládání spinů

Uvažujme o dvou částicích, první má spin  $1/2$ , operátor spinu označme  $\hat{\mathbf{S}}_1 = (\hat{S}_{x1}, \hat{S}_{y1}, \hat{S}_{z1})$ , druhá má spin  $1$ , operátor spinu označme  $\hat{\mathbf{S}}_2 = (\hat{S}_{x2}, \hat{S}_{y2}, \hat{S}_{z2})$ , operátor celkového spinu označme symbolem  $\hat{\mathbf{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ ,  $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2$ . Nalezněte společný systém vlastních vektorů operátorů  $\hat{\mathbf{S}}^2$  a  $\hat{S}_z$  (vlastní vektory vyjádřete pomocí společných vlastních vektorů  $\hat{\mathbf{S}}_1^2, \hat{S}_{z1}$  a společných vlastních vektorů  $\hat{\mathbf{S}}_2^2, \hat{S}_{z2}$ ).

K terminologii: Hilbertův prostor patříci ke spinovým stupňům volnosti první (druhé) částice označme symbolem  $H_{S1}$  ( $H_{S2}$ ). Je-li  $|\psi_1\rangle \in H_{S1}$  a  $|\varphi_2\rangle \in H_{S2}$ , pak do Hilbertova prostoru složeného systému  $H_{S1\&S2}$  patří vektor, který značíme symbolem  $|\psi_1\rangle \otimes |\varphi_2\rangle$ , nebo zkráceně  $|\psi_1\rangle|\varphi_2\rangle$ , tzv. tenzorový součin  $|\psi_1\rangle$  a  $|\varphi_2\rangle$ . Jde o vektor odpovídající takovému stavu složeného systému, kdy stav první částice je popsán vektorem  $|\psi_1\rangle$  a stav druhé částice vektorem  $|\varphi_2\rangle$ . Je-li  $\{|u_{i1}\rangle\}$  báze na  $H_{S1}$ ,  $\{|v_{j2}\rangle\}$  báze na  $H_{S2}$ , pak  $\{|u_{i1}\rangle \otimes |v_{j2}\rangle\}$  je báze na  $H_{S1\&S2}$ . O prostoru  $H_{S1\&S2}$  mluvíme jako o tenzorovém součinu prostorů  $H_{S1}$  a  $H_{S2}$ , píšeme  $H_{S1\&S2} = H_{S1} \otimes H_{S2}$ . Uvědomte si, že ne každý vektor z tenzorového součinu Hilbertových prostorů lze zapsat jako tenzorový součin dvou vektorů.

### 7.4 Dipolární interakce

Dvě částice se spinem  $1/2$  mají relativní polohu danou vektorem  $\mathbf{a} = a\mathbf{e}_z$  a interakce jejich magnetických dipólových momentů  $\hat{\boldsymbol{\mu}}_j = \mu_0 \hat{\mathbf{s}}_j$  ( $\hat{\mathbf{s}}_j$  je bezrozměrný spin  $\hat{\mathbf{s}}_j = \hat{\mathbf{S}}_j/\hbar$ ) je popsána hamiltoniánem

$$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{\mu}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}_2}{a^3} - 3 \frac{(\hat{\boldsymbol{\mu}}_1 \cdot \mathbf{a})(\hat{\boldsymbol{\mu}}_2 \cdot \mathbf{a})}{a^5}.$$

Zapište hamiltonián pomocí spinových operátorů celkového spinu  $\hat{\mathbf{s}} = \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2$ , konkrétně pomocí  $\hat{s}^2, \hat{s}_z$ . Najděte vlastní energie systému.

### 7.5 Dvě částice v jámě

Uvažujte o soustavě dvou neinteragujících odlišitelných částic o stejné hmotnosti ( $m$ ) v jedno-rozměrné nekonečně hluboké potenciálové jámě o šířce  $L$ .

- (a) Zapište hamiltonián, nalezněte, s využitím metody separace proměnných, vlastní hodnoty energie a úplný soubor vlastních funkcí.
- (b) Dále uvažujte o stavu, kde se první částice nachází v základním jednočásticovém stavu a druhá částice v prvním excitovaném jednočásticovém stavu. Vyjádřete hustotu pravděpodobnosti současného pozorování částice v místě o souřadnici  $a$  a částice v místě o souřadnici  $b$ , na pořadí nezávisí.
- (c) Navazuje na předchozí. Jaký výsledek bychom dostali pro totožné bosony? Jaký výsledek bychom dostali pro identické fermiony? Na spinové stupně volnosti neberte ohled (lze si představit, že všechny částice mají nastavenou stejnou orientaci spinu, a projeví se jen souřadnice). Diskutujte o souvislosti s úvahami o srážce totožných částic.

## 7.6 Částice ve vyhráté jámě

Uvažujte o soustavě  $N$  neinteragujících částic o hmotnosti  $m$  v jednorozměrné nekonečně hluboké potenciálové jámě o šířce  $L$  při teplotě  $T$ . Stanovte poměr mezi pravděpodobností nalezení soustavy v základním stavu (o energii  $NE_1$ , kde  $E_1$  je energie základního jednočásticového stavu) a pravděpodobností nalezení soustavy ve stavu o energii  $(N-1)E_1 + E_2$  ( $E_2$  je energie prvního excitovaného jednočásticového stavu)

- (a) pro případ, že jde o odlišitelné částice a  
 (b) pro případ, že jde o totožné bosony.

Neberte ohled na spinové stupně volnosti. Pravděpodobnost nalezení soustavy ve stavu popsaném daným vlastním vektorem o energii  $E$  je úměrná  $e^{-E/k_B T}$ .

## 7.7 Pauliho tlak

Uvažujte o soustavě  $N$  neinteragujících fermionů o hmotnosti  $m$  v jednorozměrné nekonečně hluboké potenciálové jámě o šířce  $L$ . Vyjádřete sílu, kterou působí na stěnu jámy. Neberte ohled na spinové stupně volnosti.

## 7.8 Trojrozměrná nekonečně hluboká jáma

Vypočtete energiové hladiny a vlnové funkce vlastních stavů částice o hmotnosti  $m$  uvězněné v trojrozměrné krabici tvaru kvádrů s rozměry  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , jejíž stěny představují nekonečně vysoké potenciálové bariéry. Tato představa je nejjednodušším přiblížením k problému elektronu nacházejícího se v kvantové tečce nebo kovové nanočástici s rozměry několika nanometrů. V takových případech se již výrazně projevuje diskrétní povaha energiových hladin. Poté předpokládejte, že  $a = b = c = L$ , a stanovte energie základního stavu souboru  $N$  elektronů v krabici pro všechna  $N \leq 12$ . Spin elektronů přitom (a) ignorujte (b) do úvah náležitě zakomponujte.

## 7.9 Atom hélia ☆

Variační metodou odhadněte energii elektronového oblaku v atomu hélia. Považujeme-li jádro za nehybné, je hamiltonián dvouelektronového systému elektronů oblaku dán vztahem

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} [\nabla_1^2 + \nabla_2^2] - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}.$$

Jako zkušební stav závislý na parametru  $\alpha$  použijte stav, jehož prostorová část je daná vlnovou funkcí

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\alpha^3}{\pi a_0^3} e^{-\alpha(r_1+r_2)/a_0}$$

a spinová část je singlet  $(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$ . Veličina  $a_0$  je Bohrov poloměr.