فصل ۱۴

عملگرها - ماتریس های اسپین

تشریح مناسب اتم بدون درنظر گرفتن اسپین ممکن نیست. در این فصل هدف اصلی ما بررسی اسپین الکترون است. تمام تعبیرات قبلاً معادل کلاسیکی داشتند ولی این خاصیت الکترون هیچ مشابه کلاسیکی ندارد.

ابتدا یک سری مقدمات ریاضی بیان می‌نماییم. یکی از ابزارهایی که در اسپین با آنها برخورد می‌کنیم اپراتورهای ماتریس است.

قبلاً اکثر اپراتورهای دیفرانسیلی را بکار بردیم. می‌دانیم که: عملگر عامل ریاضی است که روی تابعی اثر می‌کند و آن را به تابع دیگر تبدیل می‌کند.

عملگرهای ماتریسی هم خاصیت عملگرها را دارند (اصولاً رابطه جابجایی ندارند، دارای توابع و مقادیر ویژه هستند)

ماتریس مجموعه‌ای اعداد است. این اعداد باید چه خاصیتی داشته باشند تا مجموعه آنها یک ماتریس تشکیل دهد. عناصر ماتریس ضرایب یک سیستم معادله خطی هستند

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = 0 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = 0 \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = 0 \end{cases}$$

ماتریس: یعنی چیزی در این دو عامل دیگر نداشتن

مجموعه n معادله n مجهولی

مجهولات $x_1, x_2, \dots$ مجموعه ضرایب این مجهولات ماتریس را تشکیل می‌دهند

آیا می‌توانیم $\frac{\partial}{\partial x}$ را بصورت ماتریس نشان دهیم؟ ماتریس عدد است و کار کردن با عدد خیلی راحت است.

عملگرها را چگونه بصورت ماتریسی بنویسیم که خاصیت عملگرها را داشته باشد:

مثال: نوسانگر کننده خطی:

$$u_n = \frac{1}{(n!\,\hbar^n)^{1/2}}(A^+)^n$$

در نوسان کننده خطی داریم که: $\xrightarrow{\text{or}}$ $u_n = \frac{1}{(n!)^{1/2}}(A^+)^n u_0$

$$H u_n = \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right)u_n \xrightarrow{\text{or}} E_n = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega$$ و

وضمناً برای اپراتورهای محو کننده و خلق کننده داشتیم:

افزاینده   کاهنده

$A^{+} U_n = \sqrt{(n+1)\hbar}\, U_{n+1}$ افزاینده

$A^{-} U_n = \sqrt{n\hbar}\, U_{n-1}$ کاهنده

$H|U_n\rangle = E_n|U_n\rangle \xrightarrow{\text{ضرب نرده‌ای در } U_m \text{ با}}$

$\underline{\langle U_m|H|U_n\rangle = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega\, \delta_{mn}}$ importantce

$A^{+}|U_n\rangle = \sqrt{(n+1)\hbar}\, U_{n+1} \xRightarrow{\text{ضرب نرده‌ای}}$

$\underline{\langle U_m|A^{+}|U_n\rangle = \sqrt{(n+1)\hbar}\, \delta_{m,n+1}}$ $\Rightarrow$ خیلی مهم

$A|U_n\rangle = \sqrt{n\hbar}\, U_{n-1} \xRightarrow[U_m]{\text{ضرب نقطه‌ای در}}$

$\underline{\langle U_m|A|U_n\rangle = \sqrt{n\hbar}\, \delta_{m,n-1}}$

H در هامیلتونین نوسان کننده خطی :

$n=0 \Longrightarrow H|U_0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}|U_0\rangle$ * ارتوگونالند $\langle U_m|U_n\rangle = \delta_{mn}$

$\langle U_0|H|U_0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}\underbrace{\langle U_0|U_0\rangle}_{=1} = \frac{\hbar\omega}{2}$ طرفین رابطه را در U_0 ضرب کنیم

$= H_{11}$

$\langle U_1|H|U_0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}\langle U_1|U_0\rangle = 0 = H_{21}$ طرفین رابطه را در U_1 ضرب کنیم

$\langle U_2|H|U_0\rangle = 0 = H_{31}$ همین ترتیب :

$n=1$: $H|U_1\rangle = \frac{3\hbar\omega}{2}|U_1\rangle$ * $\xrightarrow{\text{چرا}}$ $E_n = (\frac{1}{2}+n)\hbar\omega$ $\xleftarrow{\text{می کنیم}}$ با جایگذاری

طرفین رابطه را در U_0 ضرب کرده

$\langle U_0|H|U_1\rangle = 0 = H_{12}$

$\langle U_1|H|U_1\rangle = \frac{3\hbar\omega}{2} = H_{22}$

$\langle U_2|H|U_1\rangle = 0 = H_{32}$

و همین ترتیب :

$$\begin{pmatrix} H_{11}=\frac{\hbar\omega}{2} & H_{12}=0 & H_{13}=0 & \cdots \\ H_{21}=0 & H_{22}=\frac{3\hbar\omega}{2} & H_{23}=0 & \cdots \\ H_{31}=0 & H_{32}=0 & H_{33}=\frac{5\hbar\omega}{2} & \\ H_{n1} & \cdots & & \end{pmatrix} \overset{\wedge}{\underset{\text{نمایش}}{=}} H$$

نمایش ماتریس هامیلتونین نوسان کننده خطی

با توجه به A^t و A^* ماتریس وابسته به X با تقریب یک ضریب، مجموع دو ماتریس هرمیتی است. ماتریس وابسته به P با
تفاضل آنها متناسب است ولی با وجود ضریب i هرمیتی بودن آن را برقرار می‌کند.

نوسان کننده خطی $H \doteq \begin{pmatrix} \frac{\hbar\omega}{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \frac{3\hbar\omega}{2} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$

ماتریس قطری که عناصر قطری مقادیر ویژه هامیلتونین نوسان کننده خطی هستند و باید ثابت کنیم این مجموعه ماتریس است

exam مثال دیگر: اپراتور محو کننده A

هیچ توان x دهد

$AU_n = \sqrt{n\hbar}\; U_{n-1}$

$A|U_0\rangle = 0 \Rightarrow A_{11} = \langle U_0 | AU_0\rangle = 0$ $\qquad U_0 = 0$

طرفین را در U_0 ضرب می کنیم
ضرب نقطه ای می کنیم

$A_{21} = \langle U_1 | AU_0\rangle = 0$ $\qquad = \sqrt{\hbar}\, U_0$

$A_{31} = \langle U_2 | AU_0\rangle = 0$

$A|U_1\rangle = \sqrt{\hbar}\, U_0 \Rightarrow A_{12} = \langle U_0 | \overbrace{A|U_1\rangle}^{\sqrt{\hbar}U_0} = \sqrt{\hbar} = \sqrt{\hbar}\,\langle U_0 | U_0\rangle = \sqrt{\hbar}$

$A_{22} = \langle U_1 | A | U_1\rangle = 0$

$A_{32} = 0$

$A|U_2\rangle = \sqrt{2\hbar}\, U_1 \Rightarrow A_{13} = \langle U_0 | A | U_2\rangle = 0$

$A_{23} = \langle U_1 | A | U_2\rangle = \sqrt{2\hbar}$

$A_{33} = 0$

محو کننده $A \doteq \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\hbar} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2\hbar} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3\hbar} & \cdots \\ \vdots & & & & \end{pmatrix}$

اپراتور خلق کننده:

$A^\dagger U_n = \sqrt{(n+1)\hbar}\; U_{n+1}$

$A^\dagger|U_0\rangle = \sqrt{\hbar}\,|U_1\rangle \Rightarrow A^\dagger_{11} = \langle U_0 | A^\dagger | U_0\rangle = 0$

$A^\dagger_{21} = \langle U_1 | A^\dagger | U_0\rangle = \sqrt{\hbar}$

$A^\dagger_{31} = \langle U_2 | A^\dagger | U_0\rangle = 0$

$$A^{\dagger}|u_1\rangle = \sqrt{2\hbar}\,|u_2\rangle \Rightarrow A_{12} = \langle u_0|A^{\dagger}|u_1\rangle = 0$$

$$A_{22} = \langle u_1|A^{\dagger}|u_1\rangle = 0$$

$$A_{32} = \langle u_2|A^{\dagger}|u_1\rangle = \sqrt{2\hbar}$$

$$A^{\dagger} \doteq \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{\hbar} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2\hbar} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

آنرا $\langle u_m|F|u_n\rangle$ که در آن F عملگر u_n یک مجموعه کامل است را نمایش ماتریسی F در پایه‌ای که با u_n ساخته شده می‌نامیم.

اندازه حرکت زاویه‌ای:

$$L_z\, Y_l^m = \hbar m\, Y_l^m \qquad L^2\, Y_l^m = \hbar^2 l(l+1)\, Y_l^m$$

اگر با l ثابت کار کنیم m متغیر است

$$\langle l = m'|L_z|lm\rangle = \hbar m\, \delta_{mm'} \quad *$$

برای $l=1$: پس

$m = -1, 0, 1$

یک ماتریس 3×3 خواهیم داشت:

$$L_z Y_1^1 = \hbar Y_1^1 \Rightarrow L_{z_{11}} = \langle Y_1^1|L_z|Y_1^1\rangle = \hbar$$

$$L_{z_{21}} = \langle Y_1^0|L_z|Y_1^1\rangle = 0$$

$$L_{z_{31}} = \langle Y_1^{-1}|L_z|Y_1^1\rangle = 0$$

$$L_z Y_1^0 = 0 \qquad L_{z_{12}} = \langle Y_1^1|L_z|Y_1^0\rangle = 0$$

$$L_{z_{22}} = \langle Y_1^0|L_z|Y_1^0\rangle = 0$$

$$L_{z_{32}} = \langle Y_1^{-1}|L_z|Y_1^0\rangle = 0$$

چون $m=0$ است و در * جاگذاری شود جواب صفر است

$$L_z Y_1^{-1} = -\hbar Y_1^{-1} \qquad L_{z_{13}} = \langle Y_1^1|L_z|Y_1^{-1}\rangle = 0$$

$$L_{z_{23}} = \langle Y_1^0|L_z|Y_1^{-1}\rangle = 0$$

$$L_{z_{33}} = \langle Y_{1}^{-1}|L_z|Y_1^{-1}\rangle = -\hbar$$

سطرها و ستون ها به ترتیب از چپ به راست و از بالا به پایین با $m = 1, 0, -1$ برچسب خورده‌اند

$$L_z \doteq \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \Rightarrow L_z = \begin{pmatrix} \hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{pmatrix}$$

اپراتور بالابرنده:

$$L_\pm Y_\ell^m = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)-m(m\pm1)}\; Y_{+\ell}^{m\pm1} = C_\pm Y_\ell^{m\pm1}$$

با فرض $\ell=1$ $\quad m = 1, 0, -1$

$$\langle \underset{\text{ثابت}}{\ell}, \underset{\text{متغیر}}{m'} | L_\pm | \ell, m\rangle = \hbar\,\big(\ell(\ell+1)-m(m\pm1)\big)^{1/2}\,\delta_{m', m\pm1}$$

$L_+Y_1^1 = 0\,Y_1^2 \qquad L_{+11} = \langle Y_1^1|L_+|Y_1^1\rangle = 0$

$L_{+21} = \langle Y_1^0|L_+|Y_1^1\rangle = 0$

$L_{+31} = \langle Y_1^{-1}|L_+|Y_1^1\rangle = 0$

$L_+Y_1^0 = \sqrt{2}\hbar\,Y_1^1 \qquad L_{+12} = \langle Y_1^1|L_+|Y_1^0\rangle = \sqrt{2}\hbar$

$L_{+22} = \langle Y_1^0|L_+|Y_1^0\rangle = 0$

$L_{+32} = \langle Y_1^{-1}|L_+|Y_1^0\rangle = 0$

$$L_+ \doteq \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}\hbar \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$L_+Y_1^{-1} = \sqrt{2}\hbar\,Y_1^0 \qquad L_{+13} = \langle Y_1^1|L_+|Y_1^{-1}\rangle = 0$

$L_{+23} = \langle Y_1^0|L_+|Y_1^{-1}\rangle = \sqrt{2}\hbar$

$L_{+33} = \langle Y_1^{-1}|L_+|Y_{+1}^{-1}\rangle = 0$

اپراتور پایین آورنده: برای $\ell=1$

$L_-Y_1^1 = \sqrt{2}\hbar\,Y_1^0 \qquad L_{-11} = \langle Y_1^1|L_-|Y_1^1\rangle = 0$

$L_{-21} = \langle Y_1^0|L_-|Y_1^1\rangle = \sqrt{2}\hbar$

$L_{-31} = \langle Y_1^{-1}|L_-|Y_1^1\rangle = 0$

$L_-Y_1^0 = \sqrt{2}\hbar\,Y_1^{-1} \qquad L_{-12} = 0 \qquad L_{-22} = 0 \qquad L_{-32} = \sqrt{2}\hbar$

$L_-Y_1^{-1} = \sqrt{2}\hbar\,Y_1^{-2} \qquad L_{-13} = 0 \qquad L_{-23} = 0 \qquad L_{-33} = 0$

$$L_- \doteq \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2}\hbar & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \end{pmatrix}$$

ملاحظه کردیم در H ، U_n تابع ویژه آن بود $HU_n = E_n U_n$ در نتیجه ماتریس آن قطری بود و عناصر قطری هم مقادیر ویژه هامیلتونین بودند.

طرز درست کردن نمایش ماتریسیل بطور عمومی:

ابتدا یک مجموعه کامل از توابع ویژه یک اپراتور هرمیتی را انتخاب کرده این مجموعه لازم نیست حتماً توابع ویژه اپراتور A باشد.

اگر مجموعه کامل توابع ویژه اپراتور A باشند ماتریس قطری و عناصر روی قطر هم مقادیر ویژه این اپراتور خواهند بود ولی اگر مجموعه کامل توابع ویژه اپراتور A نباشد ماتریس غیر قطری.

سپس اپراتور A را بین عناصر مجموعه توابع ویژه ساندویچ می‌کنیم

$$\langle u_n | A | u_m \rangle = A_{nm}$$

عنصر ماتریسیل

برای یک عملگر ثابت چون انتخاب مجموعه کامل اختیاری است برای آن بینهایت نمایش ماتریسیل بدست می‌آوریم:

نمایش = عرضه شکلهای مختلف از یک کمیت واحد.

برای اپراتوری مانند A می‌توان ماتریسهای مختلف ماتریسیل اعمال کرد که یکی از شکلها قطری است. و این وقتی است که مجموعه کامل تابع ویژه اپراتور A باشد و این توابع را پایه‌های ماتریسیل گویند. و در اینصورت عناصر قطری مقادیر ویژه را تشکیل می‌دهند پس می‌توان راه حلی بدست آورد که معادله برای مقادیر ویژه را حل کرد.

در حل معادله برای مقادیر ویژه به دنبال مقادیر ویژه می‌گردیم اگر ماتریسی از یک اپراتور را داشتیم قطری بود مقادیر ویژه را داریم ولی اگر قطری نبود می‌توانستیم آن را قطری کرد. در اینصورت عناصر قطری‌ها مقادیر ویژه را بدست می‌دهد. و در این صورت حل اینکه معادله برای مقادیر ویژه را حل کرده‌ام

اگر اپراتوری را نسبت حالتهای یک مجموعه کامل قرار دهیم:

$$\langle u_n | A | u_m \rangle = A_{nm}$$

که در آن u_m و u_n عناصری از یک مجموعه کامل‌اند.

مجموعه کامل: (مجموعه توابع ویژه اپراتور هرمیتی که از ترکیب خطی آنها بتوان تابع موجی ساخت).
این کمیت را عنصر ماتریسیل اپراتور A گوییم و مجموعه‌ای که به این ترتیب بدست می‌آید هم ماتریس گوییم و آن را نمایش ماتریسیل اپراتور A نام خواهیم گذاشت و اثبات می‌کنیم که این مجموعه یک ماتریس است.

یکی از خواص مهم ماتریس‌ها این است که در قاعده ضرب صدق می‌کنند اگر ماتریس‌های A و B را در هم ضرب کنیم ماتریس C حاصل می‌شود که عناصر آن:

$$C_{ij} = \sum_n A_{in} B_{nj}$$

ببینیم آیا این قاعده در مورد این مجموعه صادق است یا نه؟ اگر صادق باشد این مجموعه یک ماتریس است.

دو اپراتور F و G را در نظر می‌گیریم — شکل اپراتوری $\hat{G}\hat{F} = \hat{C}$

اثبات می‌کنیم که:

$$\underbrace{\langle u_i|C|u_j\rangle}_{C_{ij}} = \sum \underbrace{\langle u_i|G|u_n\rangle}_{G_{in}} \underbrace{\langle u_n|F|u_j\rangle}_{F_{nj}}$$

ضرب ماتریسی را نمایش می‌دهد

عنصر ماتریسیل C — عنصر ماتریسیل G — عنصر ماتریسیل F

نمایش ماتریسی حاصلضرب باید از قاعده بالا پیروی کند

اثبات: → exam

در رابطه اپراتوری طرفین را به صورت زیر می‌نویسیم از طرف چپ به $\langle u_i|$ و از طرف راست به $|u_j\rangle$ ضرب می‌کنیم.

$$\langle u_i|C|u_j\rangle = \langle u_i|GF|u_j\rangle$$

$F|u_j\rangle$: اپراتور روی تابعی اثر کرده و آن را به تابعی دیگر تبدیل می‌کند و مالکیت تابع غیر مشخص را می‌خواهیم برحسب مجموعه کامل بسط دهیم

$$F|u_j\rangle = \sum C_n |u_n\rangle \quad (1) \Rightarrow C_n = \langle u_n|F|u_j\rangle \quad (2)$$

$$\langle u_i|C|u_j\rangle = \langle u_i|GF|u_j\rangle = \langle u_i|G\sum_n C_n|u_n\rangle$$

C_n را بیرون می‌کشیم

$$= \sum_n C_n \langle u_i|G|u_n\rangle = \sum_n \langle u_n|F|u_j\rangle\langle u_i|G|u_n\rangle =$$

$$= \sum_n \langle u_i|G|u_n\rangle\langle u_n|F|u_j\rangle = \langle u_i|C|u_j\rangle$$

اثبات شد.

در اینجا با مقایسه دو طرف اگر $\sum_n |u_n\rangle\langle u_n|$ را بیاوریم خواهیم داشت:

$$\langle u_i|GF|u_j\rangle = \langle u_i|C|u_j\rangle$$

پس نتیجه می‌گیریم:

$$\sum_n |u_n\rangle\langle u_n| = 1$$

و این اپراتور واحد است. و عملگر واحد را هر جا که لازم باشد می‌توان وارد کرد.

$$\langle u_i|C|u_j\rangle = \langle u_i|GF|u_j\rangle = \sum_n \langle u_i|G|u_n\rangle\langle u_n|F|u_j\rangle$$

$|u_n\rangle\langle u_n|$ را اپراتور تصویری u_n گویند که روی هر تابعی اثر کند نتیجه برحسب u_n است.

$$|u_n\rangle\underbrace{\langle u_n|\psi\rangle}_{C_n \text{ ضریب بسط}} = C_n|u_n\rangle$$

توجیه دیگری برای ماتریس بودن این مجموعه:

کمیت زیر را در نظر بگیرید.

$$\underbrace{(F_{ij})^*}_{\text{عنصر ماتریسی}} = (\langle u_i|F|u_j\rangle)^* \longrightarrow \text{طرفین را مزدوج می‌کنیم}$$

$$\langle Fu_j|u_i\rangle = \langle u_j|F^\dagger|u_i\rangle = F^\dagger_{ji} = (F_{ij})^*$$

و این تعریف ماتریس ترانهاده است (عناصر آن مزدوج شده و جای سطرها و ستونها عوض شده) و این اثبات دیگری برای ماتریس بودن این مجموعه است.

روابط کلی بین حالتها را می‌توان برحسب نمایش ماتریسی نوشت. برای مثال رابطه‌ای نظیر:

$A\psi = \varphi$ عملگرها را بصورت ماتریسی نوشتیم برای اینکه این عملگر روی تابعی اثر کند باید تابع را بصورت ماتریسی بنویسیم

طرفین این رابطه را در Ket دیگر یک اپراتور غیر مشخص ضرب می‌کنیم

$$\langle u_i|A|\psi\rangle = \langle u_i|\varphi\rangle$$

اپراتور واحد را وارد می‌کنیم:

$$\sum_n \underbrace{\langle u_i|A|u_n\rangle}_{A_{in} \text{ عنصر ماتریسی اپراتور } A} \underbrace{\langle u_n|\psi\rangle}_{\alpha_n \text{ یک عدد}} = \underbrace{\langle u_i|\varphi\rangle}_{\beta_i \text{ یک عدد}}$$

$$\sum_n A_{in}\alpha_n = \beta_i$$

تمام اینها عددند

ماتریس‌های مربعی معرف عملگرها هستند و ماتریس‌های ستونی حالتها را نشان می‌دهند حاصلضرب نرده‌ای

$\langle \varphi | u_n \rangle = \langle u_n | \varphi \rangle^*$ را باید وارد به صورت یک ماتریس سطری می‌نویسیم

سطری

$$\langle \varphi | u_n \rangle \xrightarrow{\text{ستونی}} (\varphi_1^*,\ \varphi_2^*,\ \varphi_3^*, \dots)$$

$A\psi = \varphi$

اگر این رابطه را برای u های مختلف انجام دهیم رابطه‌ای بصورت زیر بدست می‌آید:

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots \\ & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \overbrace{\langle u_1 | \psi \rangle}^{\alpha_1} \\ \overbrace{\langle u_2 | \psi \rangle}^{\alpha_2} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \overbrace{\langle u_1 | \varphi \rangle}^{\beta_1} \\ \overbrace{\langle u_2 | \varphi \rangle}^{\beta_2} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

از اینرو ماتریس‌ها عملگرها را نشان می‌دهند و بردارهای ستونی حالتها را نشان می‌دهند. یعنی توابع موجی را بصورت ماتریسهای تک بعدی نشان می‌دهیم. یا ماتریس تک بعدی را برابر می‌دانیم.

$$|\psi\rangle \doteq \begin{bmatrix} \langle u_1 | \psi \rangle \\ \langle u_2 | \psi \rangle \\ \vdots \end{bmatrix} \qquad |\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

همزوج این عبارت را به صورت ماتریس سطری می‌نویسیم و اجزای آن را همزوج می‌کنیم

$$\langle \psi | = \left((\langle u_1 | \psi \rangle)^*, (\langle u_2 | \psi \rangle)^*, \dots \right)$$
$$= (\alpha_1^*, \alpha_2^*, \dots)$$

فرض کنید می‌خواهیم دو تابع ψ و φ را در هم ضرب کنیم. بین این دو اپراتور، اپراتور واحدی وارد می‌کنیم

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \sum_n \underbrace{\langle \psi | u_n \rangle}_{\alpha_n^*} \underbrace{\langle u_n | \varphi \rangle}_{\beta_n} = \sum \alpha_n^* \beta_n$$

و بصورت ضرب ماتریسی

$$\left(\langle \psi | u_1 \rangle, \langle \psi | u_2 \rangle, \dots \right) \begin{pmatrix} \langle u_1 | \varphi \rangle \\ \langle u_2 | \varphi \rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$A\psi = a\psi$

imp معادله برای مقادیر ویژه:

اگر بخواهیم معادله برای مقادیر ویژه را بصورت ماتریسی بنویسیم. طرفین را در یک Ket ویژه مانند u_i ضرب کرده و اپراتور واحد را وارد می‌کنیم:

$$\sum_n \underbrace{\langle u_i | A | u_n \rangle}_{A_{in}} \underbrace{\langle u_n | \psi \rangle}_{\alpha_n} = a \underbrace{\langle u_i | \psi \rangle}_{\alpha_i}$$

$$\sum_n A_{in} \alpha_n = a \alpha_i$$

به این ترتیب - حاصل‌ضرب نرده‌ای $\langle \varphi | \psi \rangle$ را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \sum \langle \varphi | v_n \rangle \langle v_n | \psi \rangle = \sum \alpha_n^* \beta_n$$

یک معادله‌ی ویژه مقداری مورد خاصی از رابطه $\psi = A\varphi$ است ← $A\varphi = a\varphi$ که صورت ماتریسی آن عبارت است از

$\sum A_{in} \alpha_n = a\alpha_{in}$ این رابطه معادل است با

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} = a \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \end{bmatrix}$$

و به صورت صریح‌تر

$$\begin{bmatrix} A_{11}-a & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22}-a & \cdots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33}-a \\ \vdots & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \end{bmatrix} = 0$$

و در صورتی جواب وجود خواهد داشت که دترمینان ماتریس مساوی صفر شود و اگر ماتریس N سطر و ستون داشته باشد یک معادله درجه N برحسب a بدست می‌آید. در این صورت برای a ، N مقدار بدست می‌آید و a همان مقادیر ویژه است.

$\det |A_{in} - a\,\delta_{in}| = 0$ مقادیر ویژه

پس یکی از راه‌های دیگر بدست آوردن مقادیر ویژه یک عملگر قطری کردن ماتریس است. اگر نمایش ماتریسی (اپراتور) را داشته باشیم، اگر ماتریس را قطری کنیم عناصر قطری مقادیر ویژه آن اپراتور است.

هدف اصلی ما در بیان نمایش ماتریسی این بود که مسئله اسپین را بیان کنیم بدانیم که اسپین چیست و چگونه می‌توان آن را از نظر ریاضی بیان کرد.

آزمایش اشترن گرلاخ:

در این آزمایش ثابت می‌کنیم که ذرات دارای اسپین هستند.

تجربه نشان داده که الکترون تحت تأثیر میدان مغناطیسی قرار می‌گیرد حتی الکترون ساکن هم تحت تأثیر میدان مغناطیسی قرار می‌گیرد.

هر جسمی وقتی تحت تأثیر میدان مغناطیسی قرار می‌گیرد که در آن یک گشتاور مغناطیسی وجود داشته باشد. گشتاور الکتریکی، بار الکتریکی و گشتاور مغناطیسی، همان مغناطیسی است. به این دو قطبی مغناطیسی است که با میدان مغناطیسی اندرکنش می‌کند.

از نظر ریاضی می‌توان اثبات کرد که ممکن است که تک قطبی مغناطیسی وجود داشته باشد. البته بشر اگر بخواهیم مغناطیس را کوانتیده کنیم ولی می‌دانیم که مغناطیس پیوسته است (و اگر مغناطیس کوانتیده می‌شد آنگاه تک قطبی مغناطیسی وجود داشت).

الکترون اگر حرکت کند میدان مغناطیسی و در نتیجه ممان مغناطیسی ایجاد کرده می‌تواند با میدان مغناطیسی اندرکنش کند. (اگر الکترون حرکت مداری داشته باشد با اندازه حرکت زاویه‌ای مداری L دارای ممان مغناطیسی است.)

$$\mu = \frac{eL}{2mc}$$

اگر الکترون که این نحو حرکت می‌کند را وارد میدان مغناطیسی کنیم اندرکنشی به صورت زیر می‌کند

$$U = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}$$

اندرکنش e در میدان مغناطیسی

ممان دار

اگر الکترون ساکن باشد ممان مغناطیسی آن صفر است.

اگر الکترون در حالت s (یعنی $l=0$) قرار گیرد اندازه حرکت زاویه‌ای آن صفر است اگر اتمی را در نظر بگیریم که الکترون آن در حالت s حرکت کند ممان مغناطیسی نخواهد داشت پس این اتم در میدان مغناطیسی نباید تحت تاثیر قرار گیرد ولی تجربه نشان می‌دهد که بعضی از اتمها که برای آنها ($l=0$) باز هم تحت تاثیر میدان مغناطیسی قرار می‌گیرند پس باید نتیجه گرفت که الکترون دارای اندازه حرکت زاویه‌ای ذاتی است. و در داخل آن ~~سی~~ ممان مغناطیسی ذاتی وجود دارد که به حرکت الکترون وابسته نیست. یعنی اکتسابی نیست بلکه ذاتی است.

این اندازه حرکت زاویه ذاتی را S نام می‌گذاریم و در شباهت با $\mu_{\text{مداری}}$ ممان مغناطیسی مربوط به اندازه حرکت زاویه‌ای ذاتی:

$$\mu_{\text{ذاتی}} = \frac{e}{2mc}S$$

چون اندازه حرکت از چرخش حاصل می‌شود نام اسپین را روی آن گذاشتند.

اسپین یعنی حرکت الکترون حول خودش این نام اسپین را از نظر مقایسه و شباهت گذاشتند، و می‌دانیم که الکترون ذره بنیادی است و هر ذره بنیادی تک نقطه بیش نیست و برای آن نمی‌توان محوری قائل شد زیرا در غیر اینصورت بایستی مرکزی برای الکترون در نظر بگیریم و این نامگذاری بر اساس شباهت و مقایسه است.

الکترون خاصیتی از خود نشان می‌دهد که وقتی آن را با اندازه حرکت زاویه‌ای مداری مقایسه کردند گفتند که این خاصیت از چرخش ناشی شده است.

تنها راهی که هست می‌گوییم این پدیده کوانتومی است و می‌گوییم کمیتی وجود دارد که جنس آن اندازه حرکت زاویه‌ای است ولی علت آن چیست و از کجا ناشی می‌شود نمی‌دانیم

آزمایش اشترن گرلاخ وجود اسپین را بطور تجربی اثبات کرده و مقدار ممان مغناطیسی را بدست می‌آورد.

اتم‌های نقره را در نظر می‌گیریم $Z=47$

$1s^2 \quad 2s^2 \quad 2p^6 \quad 3s^2 \quad 3p^6 \quad 4s^2 \quad 3d^{10} \ldots$

هر یک از اینها را یک لایه بسته گوییم در نقره از ۴۷ الکترون،
۴۶ تای آنها در لایه‌های بسته قرار گرفته. اثبات خواهیم کرد که برای لایه‌های بسته اندازه حرکت زاویه مداری کل صفر است $(l=0)$

الکترون ۴۷ ام در لایه $5s$ قرار گرفته و در $5s$، $l=0$ پس الکترون‌های نقره اندازه حرکت زاویه‌ای مداری ندارند یعنی با این وصف این هم نباید ممان مغناطیسی داشته باشند و نباید تحت تأثیر میدان مغناطیسی قرار بگیرد

اما وقتی اتم‌های نقره را در میدان مغناطیسی قرار دادند
ملاحظه کردند که تحت تأثیر قرار گرفت یعنی
الکترون‌ها دارای ممان مغناطیسی هستند میدان مغناطیسی
روی لایه‌های بسته اثری ندارد روی الکترون آخر $(5s)$ تأثیر می‌گذارد پس این الکترون دارای ممان مغناطیسی ذاتی است.

فرض می‌کنیم الکترون آخر اتم نقره دارای ممان مغناطیسی μ است.

در کوره‌ای اتم‌های نقره را ذوب کرده و سپس بخار می‌کنند اتم‌های نقره هر یک ممان مغناطیسی دارند و این اتم‌ها بطور اتفاقی در داخل بخار قرار گرفته‌اند. جهت ممان مغناطیسی اتم‌ها دائماً تغییر می‌کند و تمامی جهات ممکن را دارند. اگر اتم‌ها بصورت اتفاقی قرار نمی‌گرفتند اینکه همه در یک جهت قرار می‌گرفتند آنگاه میله نقره یک میله مغناطیسی بود در صورتی که می‌دانیم نقره خاصیت مغناطیسی ندارد

بخار نقره را خارج کرده و از داخل میدان مغناطیسی که در جهت z است عبور می‌دهیم این میدان یک میدان ثابت نیست و به z بستگی دارد. صفحه حساسی قرار می‌دهند که اتم‌های نقره پس از خروج از میدان مغناطیسی روی این صفحه قرار می‌گیرند. اتم دارای ممان مغناطیسی در جهات مختلف هستند

$\Gamma = \mu \times B =$ گشتاور

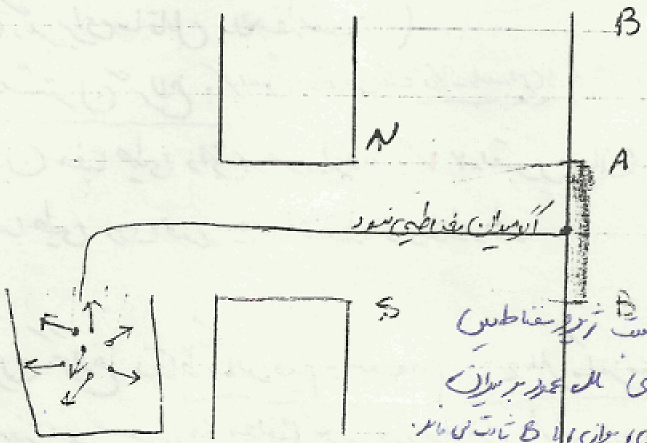
و اگر میدان مغناطیسی نبود این اتمها به وسط صفحه حساس برخورد می کردند.

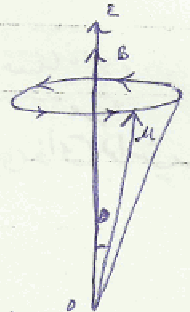
$\frac{dP}{dt} = \Gamma$

$\frac{dP}{dt} = \gamma P \times B$

$\mu = \gamma P$

$\frac{dP}{dt} = \mu \times B$





سرعت زاویه‌ای چرخش برابر است با حاصلضرب نسبت ژیرومغناطیسی در قدر مطلق میدان مغناطیسی بنابراین مولفه‌های μ عمود بر میدان مغناطیسی حول میدان صفر نوسان می کنند در حالی که مولفه موازی با B ثابت می ماند.

ولی با وجود میدان مغناطیسی این میدان با ممان مغناطیسی الکترون اندرکنش کرده که پتانسیل اندرکنش :

پتانسیل ← $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}(z) = -\mu_z B_z$

$$F = -\frac{\partial V}{\partial z} = \mu_z \frac{\partial B}{\partial z}$$

و نیروی ایجاد شده موازی با ∂z است و

متناسب با μ_z

حرکت تقدیمی $\vec{P}$ و μ متناسب هستند

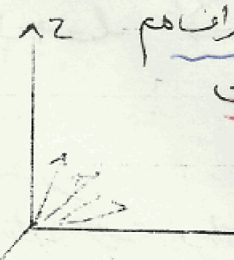
سرعت زاویه‌ای متناسب با نسبت ژیرومغناطیسی که در مورد نظر ما دارد

$\mu = \gamma P$

μ_z: تصویر ممان مغناطیسی در امتداد محور z ها

اکنون تحت تاثیر این نیرو قرار می گیرند و از مسیر اولیه خود منحرف می شوند قبل از آنکه نتیجه آزمایش را ببینیم پیش بینی می کنیم. مولفه‌های ∇B_z در راستای ∂x و ∂y صفرند. زیرا $\frac{\partial B}{\partial x} = \frac{\partial B}{\partial y} = 0$

چون اتمهای نقره به صورت اتفاقی قرار گرفته اند و از مسیر اولیه خود منحرف می شوند. قبل از آنکه نتیجه آزمایش را ببینیم ~~پیش بینی می کنیم~~. قرینه اند تصویر ممان مغناطیسی آنها روی محور z ها متفاوت است و μ در تمامی جهات تصویر دارد و اگر $\frac{\partial B}{\partial z}$ ثابت باشد مقدار نتیجه نیرو فقط به μ_z بستگی دارد. μ_z دارای ماکزیمم و مینیمم است پس نیرو هم دارای ماکزیمم و مینیمم خواهد بود و اتمها تحت تاثیر این نیرو منحرف می شوند که این انحراف هم



دارای ماکزیمم و مینیمم است و روی صفحه حساس ~~[illegible]~~ از ماکزیمم تا مینیمم هم تصویر خواهیم داشت و این پیش بینی ماست.

ولی تجربه خلاف این را نشان می دهد و اتمهای نقره فقط در ماکزیمم و مینیمم تصویر می گذارند (نقاط A و B) چون تغییرات F به μ_z بستگی دارد و μ_z تصویر ممان مغناطیسی روی محور z هاست. این نشان می دهد که ممان مغناطیسی روی محور z ها فقط دو تصویر دارد. پس تصویر ممان مغناطیسی روی محور z ها کوانتیده است.

شدت در لکه‌های N_+ و N_- متناظر با تعداد اتمهاست که به ترتیب با $\cos^2\frac{\theta}{2}$ و $\sin^2\frac{\theta}{2}$ متناسب اند. θ هر چه باشد (در دست 0 و π) ← مقادیر $\pm\frac{\hbar}{2}$ است. اگر θ خیلی کوچک باشد بدست آوردن $-\frac{\hbar}{2}$ مشکل است (اندازه‌ی میانگین) نتایجی که از شمار زیاد آزمایش یکسان بدست می آید برابر $\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2}\cos\theta$ است که شبیه طرح کلاسیک است

(در واقع تصویر های دیگر برای ما قابل ملاحظه است .)

کوانتش جهت‌گیری های یک تکانه زاویه ای را که گاهی کوانتش فضایی نامیده می شود نشان می دهد

نتایج آزمایش اشترن گرلاخ :

۱- در الکترون ممان مغناطیسی ذاتی وجود دارد. ۲- تصویر ممان مغناطیسی ذاتی کوانتیده است.

۳- تصویر ممان مغناطیسی روی محور zها فقط دو مقدار دارد.

در آزمایش اشترن گرلاخ نقاط ماکزیمم و مینیمم B_z ماکزیمم و مینیمم است

فواصل را اندازه گرفتند، نیروها معلوم بود در رابطه قرار دادند و دیدند که تصویر ممان مغناطیسی روی محور zها: مقدار ماکزیمم $+\frac{\hbar}{2}$ و مقدار مینیمم $-\frac{\hbar}{2}$ را داراست.

پس گشتاور مغناطیسی کوانتیده است که طیف آن فقط شامل دو مقدار است. هنگامی که نظریه کوانتومی تکانه زاویه ای را مطالعه کنیم این مقدارها $\pm\frac{\hbar}{2}$ هستند

۴- تصویر ممان مغناطیسی روی محور zها دارای مقادیر $\pm\frac{\hbar}{2}$ است.

پس الکترون‌ها دارای ممان مغناطیسی ذاتی هستند با مقدار نصف صحیح

اسپین اندازه حرکت زاویه ای است پس باید از تمام قوانین در مورد اندازه حرکت زاویه ای تبعیت کند مثلاً رابطه جابجایی

$$[S_x , S_y] = i\hbar S_z$$

قبل از اینکه تمام فرمالیسم اندازه حرکت زاویه ای مداری را برای اسپین بکار ببریم ببینیم آیا این فرمالیسم برای مقادیر نصف صحیح $(\pm\frac{1}{2})$ درست است یا نه؟

قبلاً دیدیم که l مقدار صحیح بود   برای اسپین $l=\frac{1}{2}$

$$\pm\frac{\hbar}{2} \xrightarrow{\text{مقایسه}} m\hbar \Rightarrow m=\pm\frac{1}{2} \xrightarrow{-l\le m\le l} l=+\frac{1}{2}$$

تصویر اندازه حرکت زاویه ای ذاتی روی محور z ها   تصویر اندازه حرکت زاویه ای مداری روی محور z ها

اگر فرمالیسم اندازه حرکت زاویه ای مداری برای اسپین درست نبود باید روش دیگری را برای اسپین بکار ببریم

$$\boxed{Y_l^m = e^{im\varphi} P_l^{|m|}(u)}$$

$$Y_l^l = e^{il\varphi}(\sin\theta)^l$$ برای m ماکزیمم $m=l$

$$Y_{1/2}^{1/2} = e^{\frac{i\varphi}{2}}(\sin\theta)^{1/2}$$ برای : $l=\frac{1}{2}$

$$L_- Y_l^m = C_- Y_l^{m-1} \Rightarrow L_- Y_{1/2}^{1/2} = C_- Y_{1/2}^{-1/2}$$

$$L_- = \hbar e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

L_- را روی $Y_{1/2}^{1/2}$ اثر داده:

$$L_-\left(e^{i\varphi/2}\sqrt{\sin\theta}\right) = C\,\frac{\cos\theta}{\sqrt{\sin\theta}}\,e^{-\frac{i\varphi}{2}}$$

از طرف دیگر:

$$Y_l^m = e^{im\varphi}P_l^{|m|}(u) \quad ① \quad \xrightarrow{P_l^{|m|}\propto(\sin\theta)^l} \quad P_l^l\,Y_{1/2}^{-1/2} = e^{-i\varphi/2}(\sin\theta)^{1/2}$$

$$Y_{1/2}^{\pm 1/2} = e^{\pm\frac{i\varphi}{2}}\sqrt{\sin\theta} \qquad ② \quad P_{1/2}^{1/2} = P_{1/2}^{-1/2} \propto (\sin\theta)^{1/2}$$

ملاحظه می‌کنیم که این دو مقدار نه تنها برابر نیستند بلکه در رابطه ① تابع سومی دارای اختلاف هم هست. نتیجه این خواهد بود که این فرمالیسمی که برای اندازه حرکت زاویه‌ای مداری داشتیم فقط برای مقادیر صحیح l درست است و برای مقادیر نیم صحیح l قابل قبول نیست.

پس تعریف $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$ برای اندازه حرکت زاویه‌ای l را با مقادیر نصف صحیح جور در نمی‌آید ملاحظه می‌کنیم که اسپین از این تعریف چرخش تبعیت نمی‌کند یعنی برای اسپین واقعاً چرخش نداریم.

اسپین اندازه حرکت زاویه‌ای است که از تعریف $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$ تبعیت نمی‌کند.

پس مجبوریم تعریف اندازه حرکت زاویه‌ای را عوض کنیم. برای اندازه حرکت زاویه‌ای تعریف جدیدی می‌کنند که برای هر اندازه حرکت زاویه‌ای صدق کند.

هر کمیت فیزیکی که هر سه مولفه عملگر مربوطه‌اش در رابطه‌های زیر صدق کند آن کمیت فیزیکی اندازه حرکت زاویه‌ای است.

$$[J_i, J_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}J_k$$

این اندازه حرکت زاویه‌ای ممکن است در رابطه چرخش $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$ صدق کند یا صدق نکند ولی در هر حال اندازه حرکت زاویه‌ای است.

از اپراتورهای دیفرانسیلی غیر از L_x و L_y و L_z اپراتور دیگری وجود ندارد که در این رابطه جابجایی صدق کند.

برای محاسبه پیش بینی های که اصول موضوع در این مورد عرضه می کند باید حالت $|\psi\rangle$ را بر حسب حالتهای مشاهده پذیر S_x بسط داد

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|+\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|-\rangle$$

به آسانی نتیجه می گیریم

$$\begin{cases} {}_x\langle +|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\frac{\theta}{2}+\sin\frac{\theta}{2}\right) = \cos\left(\frac{\pi}{4}-\frac{\theta}{2}\right) \\ {}_x\langle -|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\frac{\theta}{2}-\sin\frac{\theta}{2}\right) = \sin\left(\frac{\pi}{4}-\frac{\theta}{2}\right) \end{cases}$$

بنابراین احتمال یافتن اندازه $+\frac{\hbar}{2}$ برای S_x برابر $\cos^2\left(\frac{\pi}{4}-\frac{\theta}{2}\right)$ و برای $-\frac{\hbar}{2}$ برابر $\sin^2\left(\frac{\pi}{4}-\frac{\theta}{2}\right)$

برای اسپین باید اپراتوری تعریف کنیم که هر سه مولفه آن در این رابطه جابجائی صدق کند و مقدار ویژه آن $\pm\frac{1}{2}$ باشد.

در اندازه حرکت زاویه ای مداری داشتیم:

$$L_z Y_l^m = \hbar m Y_l^m$$

$$L^2 Y_l^m = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m$$

اپراتور جدیدی پیدا می کنیم که این خواص را داشته باشد فقط $m=\pm\frac{1}{2}$ در اینصورت $l=\frac{1}{2}$ برای اسپین اپراتوری نظیر اپراتورهای قبلی دیفرانسیلی نمی توانیم پیدا کنیم که در این رابطه جابجائی صدق کند.

اپراتورها می توانند بصورت ماتریس هم باشند اپراتورهای دیفرانسیل را بصورت ماتریس نشان داریم آیا برای اپراتورهای ماتریس می توان معادله دیفرانسیلی پیدا کرد؟

خیر ممکن است یک ماتریس نمایش دیفرانسیلی نداشته باشد و اپراتور اسپین جز دراین اپراتورهاست

به S_z باید یک مشاهده پذیر S_z نسبت داد که دارای ویژه مقدار $\pm\frac{\hbar}{2}$ است و در این دو ویژه مقدار واگن بیشتر یا ویژه بردارهای راست هنجار متناظر با آنها را با $|+\rangle$ و $|-\rangle$ نشان می دهیم

$$\begin{cases} S_z|+\rangle = +\frac{\hbar}{2}|+\rangle \\ S_z|-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|-\rangle \end{cases} \qquad \Rightarrow \begin{cases} \langle +|+\rangle = \langle -|-\rangle = 1 \\ \langle +|-\rangle = 0 \end{cases}$$

معین S_z به تنهایی یک مجموعه کامل مشاهده پذیر جابجایی را تشکیل می دهد و فضای حالتهای اسپین دو بعدی است

ماتریسی را جستجو می کنیم که در رابطه جابجائی $[S_i, S_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk} S_k$ صدق کند در اینصورت

E_s در اینجا $|+\rangle$ و $|-\rangle$ نشان می دهند و این واقعیت که این دو بردار یک پایه را تشکیل می دهند با رابطه $|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -| = I$

سه ماتریس زیر را پیدا می کنیم بنام ماتریسهای پاؤلی:

$$|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle \Rightarrow |\alpha|^2+|\beta|^2=1$$

روشن است که ماتریس S_z در پایه $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ قطری است و چنین نوشته می شود

$$S_x = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad S_y = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad S_z = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

S_x

$|\psi\rangle$ هر چه باشد همواره یک بردار یکه $|+\rangle_x$ وجود دارد که $|\psi\rangle$ با $|+\rangle_x$ هم راستا باشد

این ماتریسها از این رابطه جابجائی تبعیت می کنند بعنوان مثال:

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z \Rightarrow S_x S_y - S_y S_x = i\hbar S_z$$

$$\frac{1}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} =$$

$$\frac{1}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} - \frac{1}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = \frac{1}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 2i & 0 \\ 0 & -2i \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar^2 i\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$= i\hbar S_z$$

ویژه بردارهای عملگرهای S_z و S_y و S_x را به ترتیب با $|\pm\rangle_z$ و $|\pm\rangle_y$ و $|\pm\rangle_x$ نشان می‌دهیم. بسط آنها برحسب پایهٔ ویژه بردارهای $|\pm\rangle$ عملگر S_z چنین تعریف می‌شود.

$$|\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+\rangle \pm |-\rangle\right]$$

$$|\pm\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+\rangle \pm i|-\rangle\right]$$

and

$$\begin{cases} |+\rangle_n = \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |+\rangle + \sin\frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |-\rangle \\ |-\rangle_n = -\sin\frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |+\rangle + \cos\frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |-\rangle \end{cases}$$

اگر اپراتور S^2 را هم در نظر بگیریم S^2 و S_z رابطهٔ جابجایی دارند بنابراین دارای اسپینور مشترک هستند.

در علائم‌گذاری دیراک دیدیم که هر تابع موجی را می‌توان در فضای برداری نشان داد (به وسیلهٔ یک بردار) که توابع ویژه، بردارهای پایه بودند و در حالتی که بعد را نشان می‌دادند بی‌نهایت بود.
سیستم‌هایی که تاکنون دیدیم بُعدشان محدود نبود (حالتها محدود نبودند) مثلاً اتم هیدروژن $\frac{1}{2}$ اسپین و غیره...

اسپین تنها سیستمی است که حالت آن محدود است یعنی بعدش محدود است و دارای دو بعد است.

مجموعهٔ کامل: مجموعهٔ توابع ویژه اپراتور هرمیتی که از ترکیب خطی آنها بتوان تابع موجی ساخت (اسپین یک کمیت فیزیکی است و باید اثبات کرد که این اپراتورها هرمیتی هستند یعنی باید اثبات کنیم میانگین آنها حقیقی است. در این صورت یک مجموعهٔ کامل از توابع ویژه اپراتور هرمیتی اسپین خواهیم داشت که هر اسپینور غیر مشخص را می‌توانیم برحسب اسپینورهای ویژه بسط دهیم و این مجموعهٔ کامل دارای دو عضو است)

اثبات می‌کنیم اپراتور اسپین هرمیتی است یعنی نشان می‌دهیم میانگین S_x و S_y و S_z حقیقی است. → exam

$$\alpha : \begin{pmatrix}\alpha_+ \\ \alpha_-\end{pmatrix}$$

اگر α یک اسپینور غیر مشخص باشد.

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix}\alpha_+ \\ \alpha_-\end{pmatrix} \xrightarrow{\text{مزدوج}} \langle\alpha| = (\alpha_+^*, \alpha_-^*) \qquad \begin{cases} \alpha_+ = a+ib & \alpha_- = c+id \\ \alpha_+^* = a-ib & \alpha_-^* = c-id \end{cases}$$

$$\langle S_x\rangle = \langle\alpha|S_x|\alpha\rangle = (\alpha_+^*, \alpha_-^*)\underbrace{\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}}\begin{pmatrix}\alpha_+ \\ \alpha_-\end{pmatrix} =$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\left(\alpha_+^*\alpha_- + \alpha_-^*\alpha_+\right)$$

اگر α_+ و α_- را از بالا قرار دهیم ملاحظه می‌کنیم که این مقدار حقیقی است پس S_x اپراتور هرمیتی است.

$$\langle S_y\rangle = \langle\alpha|S_y|\alpha\rangle = \frac{\hbar}{2}(\alpha_+^*, \alpha_-^*)\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha_+ \\ \alpha_-\end{pmatrix} =$$

$$= i\left(\alpha_+^* \alpha_- - \alpha_-^* \alpha_+\right)$$

پس اپراتور S_y هم حقیقی است.

$$\langle S_z \rangle = \langle \alpha | S_z | \alpha \rangle = \frac{1}{2}\hbar \left(\alpha_+^*, \alpha_-^*\right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = |\alpha_+^*|^2 - |\alpha_-|^2$$

حقیقی

پس اپراتور S_z هم حقیقی است.

اثبات هرمیتی بودن به روش دیگر:

$$(S_x) = (S_x)^\dagger$$

ابتدا تمام کمیات را مزدوج کرده سپس جای سطرها و ستونها را عوض می‌کنیم ملاحظه می‌کنیم که

$$S_x = (S_x)^\dagger \qquad S_y = (S_y)^\dagger \qquad S_z = (S_z)^\dagger$$

وقتی این اپراتورها هرمیتی شدند می‌توان هر اسپینور غیر مشخص را برحسب مجموعه کامل از اسپینورهای ویژه این اپراتورهای هرمیتی بسط داد

$$\psi = \sum C_n U_n$$

اسپینورهای ویژه S_z $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

$$\begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = \alpha_+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

α_+ و α_- ضرایب بسط هستند.

$|\alpha_+|^2$ احتمال اینکه سیستم غیر مشخص در حالت $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ (اسپین بالا)

$|\alpha_-|^2$ احتمال اینکه سیستم غیر مشخص در حالت $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ (اسپین پایین)

$$|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 = 1$$

الکترون علاوه بر مختصات فضایی دارای اسپین هم هست پس اسپین را باید به نحوی در تابع موجی وارد کرد پس تابع موجی اتم بشید زدن به شکل:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) \; \overbrace{\chi_s}^{\text{تابع موجی مربوط به اسپین}}$$

χ_s: مختصات اسپین دارد که غیر از مختصات فضا است. و فضای اسپین فضای کاملاً خیالی است، باید پارامتر چهارمی را برای اسپین اضافه کنیم یعنی هر حالت کوانتومی بوسیله چهار پارامتر مشخص می‌شود،

$n \quad l \quad m \quad s$

با وجود اسپین یک دژنرسانس اضافی برای سیستم ایجاد می‌شود در اتم هیدروژن درجه دژنرسانس n^2 بود که با در نظر گرفتن اسپین درجه دژنرسانس $2n^2$ می‌شود

اسپین

$n=2$

$\psi_{200}\ (\pm\frac{1}{2})$

$\psi_{210}\ (\pm\frac{1}{2})$

$\psi_{211}\ (\pm\frac{1}{2})$

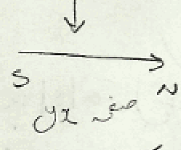
$\psi_{21(-1)}\ (\pm\frac{1}{2})$

هر حالت باید با در نظر گرفتن اسپین دژنره است و در میدان مغناطیسی به دو تراز تفکیک می‌شود.

خواص اسپین

۱- حرکت تقدیمی اسپین الکترون:

اگر یک میله مغناطیسی داشته باشیم و میدان مغناطیسی را در جهت عمود بر آن اعمال کنیم میله مغناطیسی شروع می‌کند به دوران و در حین دوران [illegible] می‌زند یعنی نقطه‌ای که باید به آن روی محور z ها تصویر بدهیم هم روی z- تصویر محوری این تصاویر صفر می‌شود.



میله ضمن چرخش رقص محوری هم می‌کند و این به علت گشتاوری است که به آن وارد می‌شود.

در مورد حرکت تقدیمی الکترون هم، در واقع اسپین حرکت تقدیمی انجام می‌دهد نه الکترون برای اینکه چنین اشتباهی صورت نگیرد سیستم را در نظر می‌گیریم که در آن الکترون ساکن باشد

اگر بخواهیم تأثیر میدانی را روی یک الکترون آزاد بررسی کنیم یک منبع ایجاد الکترون آزاد، کاتدی فرض کرده تا الکترون آزاد شود منتها کنترل و اندازه‌گیری روی این الکترون‌ها مشکل است. فلز سیستمی است که داخل آن الکترون آزاد وجود دارد این الکترون‌ها آزادند در داخل فلز حرکت کنند و آزاد نیستند که از فلز خارج شوند پس سیستم آزاد الکترون را مانند در نظر می‌گیریم

اگر بخواهیم الکترون مقید داشته باشیم در عایق‌ها، الکترون‌ها حول اتم مربوطه شان موضعی شده‌اند و مقیدند. درجه آزادی الکترون صفر است یعنی الکترون در فضا حرکت ندارد. پس برای الکترون

مقید انرژی جنبشی $=0$: $\frac{p^2}{2m}$ در سیستم عایق الکترون ساکن است و تنها پتانسیل آن هم صفر است
زیرا تنها پتانسیل از خارج به آن وارد نمی‌شود و تنها پتانسیل اتم را هم در نظر نمی‌گیریم در نتیجه $H=0$

حال الکترونی را که ساکن در نظر گرفته بودیم، تحت تأثیر میدان مغناطیسی قرار می‌دهیم. میدان مغناطیسی را در جهت محور z ها اعمال می‌کنیم الکترون دارای ممان مغناطیسی است. وقتی تحت تأثیر میدان مغناطیسی قرار می‌گیرد ولی چون الکترون را در اینجا ثابت گرفتیم میدان نمی‌تواند الکترون را به حرکت درآورد. بلکه اسپین را به حرکت در می‌آورد. و اسپین حول محور z حرکت تقدیمی انجام می‌دهد (روی صفحه بالا نوسان می‌کند و روی محور z به یک اندازه بالا و پایین می‌رود بطوری که میانگین تصویرش صفر است.

ممان مغناطیسی اسپین الکترون:

$$\vec{\mu} = -\frac{eg}{2mc}\vec{S}$$

m : جرم الکترون   g : ثابت ژیرومغناطیسی

$g = 2.0023192$ g برای الکترون کاملاً آزاد

این اعشار دقت اندازه‌گیری g را نشان می‌دهد یعنی g با این دقت قابل اندازه‌گیری است.
g نسبت به محیط خیلی حساس است و این پایه تکنولوژی جدید است (تصویربرداری با MRI) بر اساس آن g است

اگر الکترون آزاد باشد مقدار g آن خیلی بالا است الکترون در هر جا که قرار گیرد هیدروژن... تحت محیط اطرافش متفاوت باشد مقدار آن در رقم اعشاری فرق می‌کند و از این فرق برای شناسایی محیط اطراف الکترون استفاده می‌کنیم که آن را در پدیده تشدید مغناطیسی خواهیم دید

برای الکترون مقید $H=0$
پس از اعمال میدان و اسپین الکترون با میدان مغناطیسی اندرکنش کرده و تنها پتانسیل اندرکنش چون؟

$$\text{پتانسیل} \leftarrow V = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = \frac{eg}{2mc}\vec{S}\cdot\vec{B}$$

B در راستای محور z : S_z

که قبلاً برابر صفر بوده حال برابر

$$H = V + 0 = \frac{eg}{2mc} S_z B \quad , \quad H = \frac{eg\hbar}{4mc}\sigma_z \vec{B}$$

انرژی جنبشی الکترون مقید

$$S_z \to \frac{\hbar}{2}\sigma_z$$

$$\vec{S} = \frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma}$$

برای پیدا کردن حرکت معادله شرودینگر را حل می‌کنیم — exam

چون هامیلتونین دارای اپراتور S_z است پس تابع موج باید اسپینور باشد.

و چون هامیلتونین مستقل از زمان است در اسپینور می‌توانیم قسمت مکانی و زمانی را از هم جدا کنیم

$E=\hbar\omega$

$$\psi(x,t)=\begin{pmatrix} x_+(t) \\ x_-(t)\end{pmatrix}=e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \qquad \psi(x)=e^{-i\omega t}\begin{pmatrix}\alpha_+\\ \alpha_-\end{pmatrix}$$

قسمت زمانی

α را در $\psi(x)$ ضرب کرده در معادله‌ی شرودینگر می‌گذاریم

α_+ و α_- مستقل از زمانند

معادله شرودینگر $\quad i\hbar\dfrac{d\psi(x,t)}{dt}=H\psi \Rightarrow$

علامت ضرب

$$i\hbar\,(-i\omega)\,\cancel{e^{-i\omega t}}\cancel{\begin{pmatrix}\alpha_+\\ \alpha_-\end{pmatrix}}=\frac{eg}{2mc}B\cdot\frac{1}{2}\hbar\,\cancel{e^{-i\omega t}}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\cancel{\begin{pmatrix}\alpha_+\\ \alpha_-\end{pmatrix}}$$

$$\Rightarrow \omega\begin{pmatrix}\alpha_+\\ \alpha_-\end{pmatrix}=\frac{eg}{4mc}B\begin{pmatrix}\alpha_+\\ -\alpha_-\end{pmatrix}$$

اگر $\omega=+\dfrac{egB}{4mc}$ آنگاه:

$\alpha_+=1$, $\alpha_-=0 \Longrightarrow$ اسپینور $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$

اگر $\omega=\dfrac{-egB}{4mc}$ آنگاه:

$\alpha_+=0$, $\alpha_-=1 \Longrightarrow$ اسپینور $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$

می‌توان حالت کلی آن را اسپینور در $t=0$ به صورت:

$$\psi(0)=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$$

آنگاه در هر زمان دیگر:

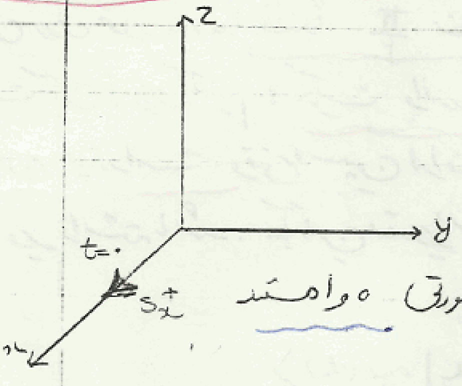
$$\psi(t)=\begin{pmatrix} a\,e^{-i\overset{\text{مثبت}}{\omega}t} \\ b\,e^{i\overset{\text{منفی}}{\omega}t}\end{pmatrix} \to exam$$

$\omega=\pm\dfrac{egB}{4mc}$

اگر $\omega>0$ جمله بالایی وجود دارد و جمله پایینی صفر

اگر $\omega<0$ جمله بالایی صفر و جمله پایینی وجود دارد.

فرض کنیم سیستم بصورت زیر است و میدان مغناطیسی در جهت محور z ها اعمال شده. و بردار اسپین در جهت غیر مشخصی قرار دارد. فرض کنیم در لحظه $t=0$ بردار اسپین در جهت x^+ باشد در اینصورت حداکثر تصویر آن روی محور x ها ($+\frac{\hbar}{2}$)



اگر $t=0$ $\quad \psi(0)=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$

a و b بستگی دارد به اینکه اسپین در کدام جهت قرار بگیرد و فقط در صورتی ۰ و ۱ هستند که s در امتداد محور z قرار بگیرد

چون اسپین در امتداد محور x قرار گرفته ψ باید ویژه Ket S_x باشد. تصویر اسپین روی هر محور مشخصی یا $+\frac{\hbar}{2}$ یا $-\frac{\hbar}{2}$

و چون در این حالت اسپین در جهت مثبت محور x ها است تصویر آن $+\frac{\hbar}{2}$ است ،

$$S_x\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}\Rightarrow \overbrace{\frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}}^{S_x}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix}b\\a\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}\Rightarrow a=b=1 \rightarrow \alpha^2+\beta^2=1 \Rightarrow \alpha^2+\beta^2=1\Rightarrow \alpha=\frac{1}{\sqrt{2}}=\beta$$

$$\chi_x=\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}}_{\text{ضریب نرمالیزاسیون}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$$

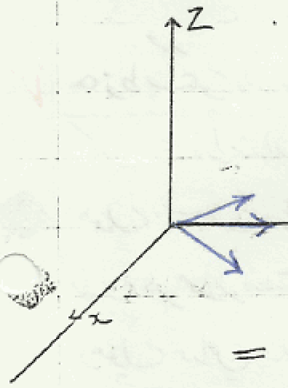
اسپینور ویژه اپراتور S_x

در لحظه $t=0$ اسپین در جهت مثبت محور x ها قرار گرفته تا زمانی که نیرو و میدانی وارد نشود با گذر زمان اسپین آن عوض نشود زیرا هر حرکتی مستلزم اعمال نیرو است پس اگر اسپین را در لحظه $t=0$ در جهت x اندازه گرفته ایم در همین جهت باقی می ماند حال اگر میدان مغناطیسی ثابتی را اعمال کنیم اسپین که در جهت x^+ بود شروع به حرکت میکند.

$$t=0 \xrightarrow{\text{اسپینور}} \chi_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$$

در لحظه $\quad t \xrightarrow{\text{تحول زمانی}} \chi_x(t)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}e^{-i\omega t}\\e^{i\omega t}\end{pmatrix}$

در $t=0$ اسپین در راستای x^+ و تصویر آن روی محور x ها ماکزیمم بود ($+\frac{\hbar}{2}$) ولی وقتی حرکت می‌کند تصویر آن روی محور x ها قطعاً $\frac{\hbar}{2}$ نخواهد بود (بلکه کوچکتر خواهد بود) زمانی که حرکت میکند چطور حرکت آن را بررسی کنیم؟ حرکت را از روی تصویر آن بررسی می‌کنیم. می‌بینیم در زمانهای بعد تصویر اسپین چقدر است. وقتی اسپین از راستای محور x ها خارج شد ممکن است در راستای y ها هم تصویر داشته باشد. میانگین تصویر اسپین روی محور x ها را بدست می‌آوریم.



$$\langle S_x \rangle = \langle \psi(t) | S_x | \psi(t) \rangle$$

$$\langle S_x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\omega t} & e^{-i\omega t} \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{4} \left[e^{2i\omega t} + e^{-2i\omega t} \right] = \frac{\hbar}{2} \cos 2\omega t$$

$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos 2\omega t \quad * \quad (1)$$

ملاحظه می‌کنیم این میانگین مقدار ثابتی نیست و بطور تناوبی تغییر می‌کند

$\cos 2\omega t$: -1 (x^-) $\quad 0$ (y) $\quad 1$ (x^+)

یعنی یک حرکت دورانی دارد.

$$\langle S_y \rangle = \langle \psi(t) | S_y | \psi(t) \rangle =$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\omega t} & e^{-i\omega t} \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} \end{pmatrix}$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \sin 2\omega t \quad * \quad (2)$$

ملاحظه می‌کنیم میانگین تصویر آن روی محور y ها هم مقدار ثابتی نیست و بطور تناوبی تغییر می‌کند (با گذر زمان)

یعنی اسپین روی محور y قرار گرفته باز هرچند تا اسپین آن روی محور x قرار گیرد

$$\cos 2\omega t = 0 \xrightarrow[\text{صفر}]{\text{تصویر روی محور x ها}} \sin 2\omega t = 1$$

همین ترتیب در صفحه xy نوسان میکند

$\sin 2\omega t$: -1 (y^-) $\quad 0$ (x) $\quad 1$ (y^+)

$$2\omega = \frac{egB}{2mc}$$

فرکانس حرکت تقدیمی حول محور z (در راستای میدان مغناطیسی)

46/
ب

خلاصه ای از فصل 14

در بخش قبل ماتریسهای نمایندهٔ 3 مؤلفهٔ S_x و S_y و S_z اسپین S در پایهٔ $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ (ویژه بردارهای S_z) داده شد

اینک مناسب است که، در مکانیک کوانتمی، عملگر بدون بعد σ را که با S متناسب است با رابطهٔ $S = \frac{\hbar}{2}\sigma$

تعریف می شود وارد کنیم. ماتریسهای نمایندهٔ مؤلفه‌های σ در پایهٔ $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ ماتریسهای پائولی نامیده می شوند.

ماتریسهای σ_z و σ_y و σ_x هر 3 دارای یک معادلهٔ سرشتی بصورت $\lambda^2 - 1 = 0$

هستند پس ویژه مقدارهای σ_z و σ_y و σ_x عبارتند از $\lambda = \pm 1$

و ویژه مقدارهای S_z و S_y و S_x " " $\pm\frac{\hbar}{2}$

ویژه بردارهای σ_x و σ_y و σ_z را که بترتیب همان ویژه بردارهای S_x و S_y و S_z هستند بدست می آوریم

$$\sigma_{x,y,z} |\pm\rangle_{x,y,z} = \pm |\pm\rangle_{x,y,z} \quad , \ldots \qquad \text{با} \quad |\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+\rangle \pm |-\rangle\right]$$

$$|\pm\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|+\rangle \pm i|-\rangle\right]$$

خواص ساده

1 نتیجه می آید ماتریسهای پائولی در برابرهای $\mathrm{Det}(\sigma_j) = -1 \quad j = x, y \text{ یا } z$

2 $\mathrm{Tr}(\sigma_j) = 0$

3 (I ماتریس یکهٔ 2×2 است) $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I$

4 $\sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x = i\sigma_z$ $\quad 4 \Rightarrow \sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x = 0$

معادله‌های 3 و 4 گاهی بصورت فشرده‌ی

$$\sigma_j \sigma_k = i\sum_l \epsilon_{jkl}\sigma_l + \delta_{jk} I \qquad 5$$

که در آن ϵ_{jkl} نسبت به تعویض دو شاخص غیر مشخص یا دو شاخص بوده و برابر است با

$$\epsilon_{jkl} = \begin{cases} 0 & \text{اگر اندیسهای } j \text{ و } k \text{ و } l \text{ هر 3 مختلف نباشند} \\ 1 & \text{" " " " یک جایگشت زوج از } x \text{ و } y \text{ و } z \text{ باشند} \\ -1 & \text{" " " " " " فرد " باشند} \end{cases} \qquad 6$$

از 4 بسادگی نتیجه می گیریم

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z \qquad 7$$

و $[S_x, S_y] = i\hbar S_z \quad , \ldots \qquad 8$

پس می گوییم ماتریسهای σ که میان خود **پادجابجا** می شوند و همچنین با در نظر گرفتن 3 داریم $\sigma_x \sigma_y \sigma_z = iI$

– اگر A و B معرف دو برداری باشند که مؤلفه‌های آنها عدد عملگرهای جابجا شونده باشند داریم:

$$(\sigma\cdot A)(\sigma\cdot B) = A\cdot B\, I + i\,\sigma\cdot(A\times B) \qquad \text{و}$$

در واقع با بکار بردن فرمول II و با توجه به اینکه A و B با σ جابجا می شوند، می توان نوشت

$$(\sigma\cdot A)(\sigma\cdot B) = \sum \sigma_j A_j \sigma_k B_k$$

نه 5 عبارت اولی از سطر آخر چیزی جز برداری نیست *

$$= \sum A_j B_k \left[\sum \epsilon_{jkl}\sigma_l + \delta_{jk} I\right]$$

حاصلضرب برداری $A\times B$ نیست اگر A و B جابجا شونده باشند

$$= \sum_l \sigma_l \Big[\underbrace{\sum_{jk} \epsilon_{jkl} A_j B_k}_{*}\Big] + \sum_j A_j B_j\, I$$

حاصل ضرب نرده ای

با یک ترتیب در دو طرف تساوی پدید آید

✓ پایه‌ای مناسب برای فضای ماتریس‌های 2×2 : یک ماتریس 2×2 غیر مشخص $M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}$

را در نظر بگیرید هر چه می‌توان این ماتریس را به صورت یک ترکیب خطی از چهار ماتریس نوشت

$I, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$

می‌توانیم تعیین کنیم M به صورت

$$M = \frac{m_{11}+m_{22}}{2} I + \frac{m_{11}-m_{22}}{2}\sigma_z + \frac{m_{12}+m_{21}}{2}\sigma_x + i\,\frac{m_{12}-m_{21}}{2}\sigma_y$$

پس هر ماتریس 2×2 را می‌توان به شکل $M = a_0 I + a\sigma$

نوشت که در آن ضریب‌های a_0 و a_x و a_y و a_z عددهای مختلطی هستند. M در صورتی هرمیتی است که اگر و فقط اگر ضریب‌های a_0 و a حقیقی باشند. این ضرایب را می‌توان به طور صریح به کمک ماتریس M چنین بیان کرد.

$$a_0 = \frac{1}{2}\,Tr(M)$$

$$a = \frac{1}{2}\,Tr(M\sigma)$$

تفسیر هندسی برای تعیین ویژه مقدارها

ماتریس هرمیتی $H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}$ را که در آن H_{11} و H_{22} حقیقی‌اند و $H_{12} = H_{21}^{*}$ * در نظر بگیرید. بدین ترتیب، ماتریس (H)

در یک پایه راست هنجار $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ یک عملگر هرمیتی H را نمایش می‌دهد. و عملگر H را می‌توان به دو جزء تقسیم کرد

$$H = \frac{1}{2}(H_{11}+H_{22})\mathbb{1} + \frac{1}{2}(H_{11}-H_{22})K \quad ①$$

عملگرهای $\mathbb{1}$ و K، عملگر هرمیتی است که در پایه $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ با ماتریس

$$(K) = \begin{pmatrix} 1 & \dfrac{2H_{12}}{H_{11}-H_{22}} \\ \dfrac{2H_{21}}{H_{11}-H_{22}} & -1 \end{pmatrix} \quad ②$$

از ① آشکار پیداست که H و K دارای ویژه بردارهای یکسانی هستند.

$H_{11} + H_{22} = Tr(H) \rightarrow$ تحت تغییر پایه راست هنجار ناوردا است

محاسبه‌ی ویژه بردارها و ویژه مقدارها: الف) زاویه‌های θ و φ : زاویه‌های θ و φ را به کمک عناصر ماتریس H_{ij} چنین تعریف می‌کنیم

$$\tan\theta = \frac{2|H_{21}|}{H_{11}-H_{22}} \quad ③ \quad , \quad 0 \le \theta < \pi$$

$$H_{21} = |H_{21}|\,e^{i\varphi} \quad ④ \quad , \quad 0 \le \varphi < 2\pi$$

$$H_{12} = |H_{12}|\,e^{-i\varphi} \quad ⑤$$

می‌دانیم که H_{21} عدد مختلط است بنابراین با رابطه‌ی * داریم $|H_{12}| = |H_{21}|$ و

با استفاده از روابط 3 و 4 و 5 داریم برای K

$$(K) = \begin{pmatrix} 1 & \tan\theta\, e^{-i\varphi} \\ \tan\theta\, e^{i\varphi} & -1 \end{pmatrix}$$

ویژه مقدارهای K : معادله‌ی سرشتی ماتریس بالا یعنی

$$Det\,[(K) - kI] = k^2 - 1 - \tan^2\theta = 0$$

ویژه مقدارهای k_+ و k_- ماتریس (K) را به صورت زیر به دست می‌دهد

$$k_+ = +\frac{1}{\cos\theta}$$

$$k_- = -\frac{1}{\cos\theta}$$

می‌بینیم که این ویژه مقدارها کاملاً حقیقی‌اند اگر بخواهیم $\frac{1}{\cos\theta}$ را برحسب H_{ij} بیان کنیم کافیست رابطه‌ی 3 را به کار ببریم و توجه کنیم که $\tan\theta$ و $\cos\theta$ هم علامت هستند زیرا $0 \le \theta \le \pi$ است.

$$\frac{1}{\cos\theta} = \frac{\sqrt{(H_{11}-H_{22})^2 + 4|H_{12}|^2}}{H_{11}-H_{22}}$$

ویژه مقدارهای H : به صورت زیر از معادله‌ی صفحه قبل نتیجه می‌گیریم:

$$E_+ = \frac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) + \frac{1}{2}\sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4|H_{12}|^2}$$

$$E_- = \frac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) - \frac{1}{2}\sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4|H_{12}|^2}$$

به کمک روابط بالا نتیجه می‌شود:

$$E_+ + E_- = H_{11} + H_{22} = Tr(H)$$

$$E_+ E_- = H_{11} H_{22} - |H_{12}|^2 = Det(H)$$

برای آنکه $E_+ = E_-$ شود لازم است که $(H_{11} - H_{22})^2 - 4|H_{12}|^2 = 0$ یعنی $H_{11} = H_{22}$ و $H_{12} = H_{22} = 0$. بنابراین یک ماتریس هرمیتی 2×2 با طیف واگن لزوماً با ماتریس یکه متناسب است.

ویژه بردارهای بهنجار شده‌ی H :

a و b را مؤلفه‌های $|\psi_+\rangle$ روی $|\varphi_1\rangle$ و $|\varphi_2\rangle$ در نظر بگیریم، باید در دستگاه صدق کنند، که از آن نتیجه می‌شود:

$$\begin{pmatrix} 1 & \tan\theta\, e^{-i\varphi} \\ \tan\theta\, e^{i\varphi} & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{\cos\theta}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

$$\left(1 - \frac{1}{\cos\theta}\right)a + \tan\theta\, e^{-i\varphi}\, b = 0$$

$$\left(-\sin\frac{\theta}{2}\, e^{i\varphi/2}\right)a + \left(\cos\frac{\theta}{2}\, e^{-i\varphi/2}\right)b = 0 \Rightarrow$$ ویژه بردار بهنجار شده‌ی $|\psi_+\rangle$ یعنی

$$\Rightarrow |\psi_+\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\, e^{-i\varphi/2}|\varphi_1\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\, e^{i\varphi/2}|\varphi_2\rangle$$

یک محاسبه‌ی مشابه، $|\psi_-\rangle$ را هم به این صورت می‌دهد

$$|\psi_-\rangle = -\sin\frac{\theta}{2}\, e^{-i\varphi/2}|\varphi_1\rangle + \cos\frac{\theta}{2}\, e^{i\varphi/2}|\varphi_2\rangle \Rightarrow$$ به آسانی تحقیق می‌شود که $|\psi_+\rangle$ و $|\psi_-\rangle$ بر هم عمودند.

دستگاه با اسپین $1/2$ ص 65 از کوهن جلد 2

و همچنین ماتریس‌های اسپین $\frac{1}{2}$

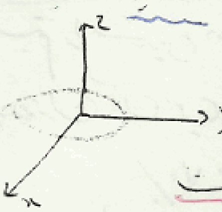
$$\langle S_z \rangle = \langle \psi(t) | S_z | \psi(t) \rangle =$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\omega t} & e^{-i\omega t} \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} \end{pmatrix}$$

روی محور z هیچگاه بطور مشخص تصویر پیدا نمی‌کند

$$\langle S_z \rangle = 0$$

یعنی اسپین حین دوران در صفحه xy روی محور z ها هم تصویر پیدا می‌کند
منتها میانگین تصویرش صفر است. تصویر S_z صفر نیست ولی میانگین تصویر صفر است



(۱) و (۲) و (۳) نشان می‌دهند که اسپین دارای حرکت تقدیمی است. اسپین حرکت دورانی حول z می‌کند شبیه حرکت تقدیمی انجام میدهد. اسپین وقتی می‌چرخد مقدار آن قطعاً کوانتیزه است $(\pm \frac{\hbar}{2})$ یعنی زمان نصف مدت روی محور + و نصف مدت روی محور − است.

میانگین غیر از مقدار ویژه است. میانگین هر عددی می‌تواند باشد ولی مقدار ویژه $\pm \frac{\hbar}{2}$

در هر جامدی، ضریب ژیرومغناطیسی الکترون (g) به نیروهای عمل کننده در جامد بستگی دارد.
هر اطلاعاتی در مورد g، اطلاعاتی را در مورد نیروها در جامد به دست می‌دهد بنابراین مهم است که بتوانیم g را اندازه بگیریم و این کار را با روش تشدید پارامغناطیسی انجام می‌دهند.

از تشدید پارامغناطیسی شیمیدانها استفاده می‌کنند برای تعیین ساختار مولکولهای آلی

MRI : Magnetic Resonans Imaging تصویربرداری تشدید مغناطیسی

$$\vec{\mu} = \frac{-eg}{2mc}\vec{S}$$ ممان مغناطیسی اسپین الکترون

در ترکیبات مختلف الکترون تحت تاثیر نیروهای مختلف قرار میگیرد در نتیجه g آن متفاوت خواهد شد

در فرمول ممان مغناطیسی g برای پروتونها و نوترونها فرق می‌کند (پروتونها و نوترونها هم دارای اسپین هستند) و بسیار حساس است به اینکه جسم ها هسته یا الکترون باشد.
حتی محیط اطراف الکترون را مختصری عوض کنیم یکی از اعداد بعد از اعشار فرق می‌کند

تمامی مولکول‌های آلی دارای هیدروژن هستند - (بنزن CH_2)

در این دستگاه‌ها تشدید هسته را در نظر می‌گیرند چرا تشدید الکترون را در نظر نمی‌گیرند ؟

تمامی این محاسبات برای الکترون ساکن بود در مولکول‌ها الکترون‌ها باعث پیوند اشتراکی هستند این الکترون بین دو اتم مشترک است و حرکت می‌کنند یعنی الکترون‌ها را نمی‌توان ثابت فرض کرد ولی پروتون را می‌توان ثابت فرض کرد.

g پروتون در هر جائی فرق می‌کند در سیستمی که هیدروژن وجود داشته باشد دستگاه MRI می‌تواند شکل فضائی سیستم را تشخیص دهد. با این دستگاه g هیدروژن را در این سیستم مشخص می‌کند اگر سیستمی g هیدروژن آن این مقدار نبود همان سیستم است

در عکس‌برداری : ٪۷۰ بدن انسان آب است و آب دارای هیدروژن است پس بدن انسان به تشدید مغناطیسی جواب می‌دهد. دستگاه g های آب را در نقاط مختلف بدن مشخص می‌کند مثلاً در کبد همه g ها یکسان است. و بنابراین تصویر یکنواختی بدست می‌آید.

اگر در کبد مثلاً زخمی باشد g آن تغییر کرده و تصویر آن تغییر می‌کند

غیر ممکن است که دو ترکیب مختلف g یکسان داشته باشند و اگر شکل فضائی تغییر کند مقدار g فرق می‌کند زیرا اینرسی‌های که عمل می‌کنند تغییر می‌کند

تشدید پارامغناطیسی : (الکترون) و برای هسته هم عین این تشدید صادق است.

یکسری نخوان

می‌خواهیم ببینیم g چطور تعیین می‌شود و چگونه g را با این دقت اندازه می‌گیرند.

درجه آزادی اسپین دارد

سیستمی را انتخاب می‌کنیم که در آن الکترون ثابت باشد یعنی درجه آزادی فضائی آن صفر باشد

یک میدان مغناطیسی قوی و ثابت را در راستای محور z (B_0) و یک میدان مغناطیسی ضعیف و متناوب را در امتداد محور x به آن اعمال می‌کنیم $(B_1 \cos\omega t)$

حرکت تقدیمی وجود دارد ولی در این حالت احتمال اینکه اسپین روی محور z ها تقدیر داشته باشد غیر صفر است. و میدان متناوب باعث می‌شود در لحظه‌ای معین در امتداد محور z ها قرار بگیرد و آن حالت تشدید است.

$$H = -\mu B_0 - \mu B_1 \cos\omega t = \frac{eg}{2mc} S_z B_0 + \frac{eg}{2mc} S_x B_1 \cos\omega t$$

اسپینور $\psi(t) = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$

در یک جسم حامل عامل زیرو مغناطیسی و ... الکترون ← با هست نیروهای فعال دارای حجم تنگی دارد دانش و تود ... رمیدی

۴۷

درای باره که این نیروها چگونه می توانند با شرایط می دهد دارایی و اندازه گیری اهمیت بیرایی کند روش ← تشدید پارامغناطیسی

اگر یک میدان مغناطیسی در راستای z داشته باشیم در راستای ایستا حول این راستا دارای حرکت تقدیمی است. فرکانس این حرکت ؟ ← اگر بتوان

علت اعمال میدان مغناطیسی در امتداد محور ها این است که حالت تشدید اتفاق بیفتد

در اینجا $\psi(x)$ $\psi(x,t)=e^{-i\omega t}$ نمی‌توان تابع موجی را به این صورت نوشت زیرا ها سیلتونین مستقل از زمان نیست.

معادله شرودینگر:

$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}=\left[\frac{eg\hbar}{4mc}\begin{pmatrix}B_0 & \\ & -B_0\end{pmatrix}+\frac{eg\hbar}{4mc}\begin{pmatrix}0 & B_1\cos\omega t\\ B_1\cos\omega t & 0\end{pmatrix}\right]$$

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}=\frac{eg\cancel{\hbar}}{4mc}\begin{pmatrix}B_0 & B_1\cos\omega t\\ B_1\cos\omega t & -B_0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\omega_0 & \omega_1\cos\omega t\\ \omega_1\cos\omega t & -\omega_0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}$$

از این جا i حذف می کنیم (ω ضرب)

داریم:

$$\begin{cases}\dfrac{egB_0}{4mc}=\omega_0\\[2ex] \dfrac{egB_1}{4mc}=\omega_1\end{cases}\Longrightarrow\begin{cases}i\dfrac{da(t)}{dt}=\omega_0 a(t)+\omega_1\cos\omega t\, b(t)\\[2ex] i\dfrac{db(t)}{dt}=\omega_1\cos\omega t\, a(t)-\omega_0 b(t)\end{cases}$$

$***$

$a(t)$ و $b(t)$ از حل این معادلات بدست می آید. این معادلات بطور عددی حل می شوند

$|a(t)|^2$: احتمال اینکه اسپین در جهت مثبت باشد $(+\frac{\hbar}{2})$

$|b(t)|^2$: احتمال اینکه اسپین در جهت منفی باشد $(-\frac{\hbar}{2})$

ω : فرکانس تغییرات میدان مغناطیسی متناوب است.

برای بدست آوردن $a(t)$ و $b(t)$ فرضهای زیر را می کنیم و از اینجا مشتق می گیریم

$$A(t)=a(t)e^{i\omega_0 t}\rightarrow\frac{dA(t)}{dt}=a(t)\,i\omega e^{i\omega t}+\frac{da(t)}{dt}e^{i\omega t}$$

$$B(t)=b(t)e^{-i\omega_0 t}$$

و $\frac{da(t)}{dt}$ را از رابطه $***$ جایگزاری کرده و مرتب می کنیم می رسیم به

و $A(t)$ و $B(t)$ در معادلات زیر صدق میکنند

برای تحقیق: $a(t)e^{i\omega t}$ را بدست آورده و ملاحظه می کنیم که در رابطه صفر بعد صدق می کند همین ترتیب

در رابطه زیر صدق می کند $B(t)=\Delta t\, e^{-i\omega_0 t}$

$$i\frac{dA(t)}{dt}=\omega_1\cos\omega t\,B(t)e^{2i\omega_0 t}\qquad a(t)=\frac{A(t)}{e^{i\omega_0 t}}\qquad \text{البته } b$$

$$i\frac{dB(t)}{dt}=\omega_1\cos\omega t\,A(t)e^{-2i\omega_0 t}$$

می گذاریم برحسب $A(t)$ و $B(t)$ مرتب می آوریم

$$\omega_0=\frac{egB_0}{4mc}$$

فرکانس حرکت تقدیمی حول میدان اعمالی (در امتداد محور z)

ω_0 به B_0 بستگی دارد.

یک میدان مغناطیسی اعمال کرد که بر محور z عمود بود و اسپین بچرخد و آنگاه این میدان را برداشت. اسپین e را یافت که موازی با منفی zy است، ترجیحاً در جهت مخالف میدان مغناطیسی قرار می‌گیرد تا حالت کمترین انرژی به دست آید. میدان eهای که قبلاً در این راستای کمترین انرژی قرار داده شد کمترین انرژی را می‌دهد و دارای بر آمد انرژی به صورت تابش آزاد می‌شود که آن را تابلای شکار سازی کرد.

فرکانس متناوب میدان خیلی زیاد در امتداد محور x است

ω : فرکانس تغییرات میدان مغناطیسی ضعیفی که در جهت محور x اعمال شده بود. قابل تنظیم است با استفاده از جریان متناوب می‌توانیم میدان مغناطیسی متناوب اعمال کنیم.

فرض می‌کنیم $\omega \approx 2\omega_0$

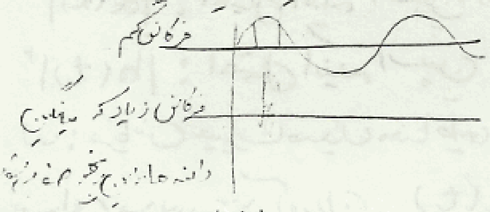
$$\cos\omega t = \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2}$$

$$\cos\omega t\, e^{2i\omega_0 t} = \frac{e^{i(2\omega_0+\omega)t} + e^{i(2\omega_0-\omega)t}}{2} = \frac{e^{i(2\omega_0-\omega)t}}{2}$$

$$\cos\omega t = \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2} \Longrightarrow \cos\omega t\, e^{-2i\omega_0 t} = \frac{e^{i(\omega-2\omega_0)t} + e^{-i(\omega+2\omega_0)t}}{2}$$

$$= \frac{e^{i(\omega-2\omega_0)t}}{2}$$

اگر میدان B_0 را قوی انتخاب کنیم ω_0 هم بزرگ می‌شود ($\omega = 2\omega_0$)، ω هم بزرگ می‌شود پس $2\omega_0+\omega$ هم بزرگ شده و جمله $e^{i(2\omega_0+\omega)}$ و $e^{-i(2\omega_0+\omega)}$ بسیار سریع نوسان می‌کند که سهم آن روی هم رفته صفر می‌شود پس بدین ترتیب این جملات حذف شده‌اند.



میانگین یک تابع نمایی با توان زیاد صفر است.

پس داریم:

$$\begin{cases} i\dfrac{dA(t)}{dt} = \omega_1 \cos\omega t\, B(t)\, e^{2i\omega_0 t} = \frac{1}{2}\omega_1 e^{i(2\omega_0-\omega)t} B(t) \\[2ex] i\dfrac{dB(t)}{dt} = \omega_1 \cos\omega t\, A(t)\, e^{-2i\omega_0 t} = \frac{1}{2}\omega_1 A(t)\, e^{-i(2\omega_0-\omega)t} \end{cases}$$

دو معادله دو مجهولی اگر $A(t)$ و $B(t)$ را پیدا کنیم $a(t)$ و $b(t)$ بدست می‌آید.

$$B(t) = \frac{2i}{\omega_1} e^{-i(2\omega_0-\omega)t} \frac{dA(t)}{dt} \quad (1)$$

$B(t)$ را از معادله اول پیدا کرده

از این رابطه مشتق می‌گیریم در رابطه‌ای که مشتق B دارد، هم قرار داده و جایگذاری کرده بدست می‌آید

و در رابطه دوم جایگزین می‌کنیم که معادله درجه ۲ برحسب $A(t)$ بدست می‌آید که باید آن را حل کرد

$$\frac{d^2A(t)}{dt^2} - i(2\omega_0-\omega)\frac{dA(t)}{dt} + \frac{\omega_1^2}{4}A(t) = 0 \quad (2)$$

معادله دیفرانسیل با ضرایب ثابت