14. ATOMI U MAGNETNOM POLJU: KVANTNO MEHANIČKI TRETMAN

14.1 Kvantna teorija normalnog Zeemanovog efekta

Normalni Zeemanov efekat je divan primer činjenice da ja čak i sa klasičnom fizikom moguće dobiti rezultate slične onim iz stroge kvantne teorije. S ciljem da ranije rezultate postavimo na čvršćoj osnovi, medjutim, ićićemo sada kroz strog kvantnomehanički tretman.

Ova glava je nešto zahtevnija, jer se koristi nešto od osnovne teorije elektromagnetizma. Kao što je pokazano u ovoj teoriji, magnetno polje **B** se može izraziti kao rotor (curl u engleskoj terminologiji, prim. prev) vektorskog potencijala **A**:

$$\vec{B} = curl\,\vec{A} \qquad (14.1)$$

Jačina električnog polja **F** [1] se na sličan način može dobiti iz električnog potencijala $\tilde{V}$ i vektorskog potencijala $\vec{A}$ prema pravilu

$$\vec{F} = -grad\,\tilde{V} - \frac{d\vec{A}}{dt} \qquad (14.2)$$

Podsetimo se da je jednačina kretanja čestice sa naelektrisanjem –e (mislimo pre svega na elektron) i mase m_0

$$m_0\,\ddot{\vec{r}} = (-e)\vec{F} + (-e)(\vec{v}\,x\,\vec{B}) \qquad (14.3)$$

Drugi član na desnoj strani je tzv. Lorencova sila, v je brzina čestice. Može se pokazati da se ova jednačina može dobiti korišćenjem Hamiltonove jednačine

$$\dot{\vec{p}} = -grad_r H(p,r) \qquad (14.4)$$

$$\dot{\vec{r}} = -grad_p H(p,r) \qquad (14.5)$$

iz Hamiltonove funkcije

$$H = \frac{1}{2m_0}(\vec{p} + e\vec{A})^2 + V \qquad (14.6)$$

Potencijalna energija elektrona je povezana sa električnim potencijalom $\tilde{V} : V = -e\tilde{V}$.

Na ovom mestu je jedino važno podsetiti se da u kvantnoj teoriji uvek startujemo od Hamiltonove funkcije. Kao što smo videli u poglavlju 9.3.4

[1] Da bi se izbegla konfuzija sa energijom E, jačina električnog polja se označava sa F

Hamiltonova funkcija se konvertuje u operator u kvantnoj mehanici korišćenjem Jordan ovog pravila zamenom impulsa u skladu sa

$$p \to \frac{\hbar}{i} grad \tag{14.7}$$

Primenjujući ovu tehniku ovde, dolazimo do Hamiltonovog operatora

$$\aleph = \frac{1}{2m_0}\left[\frac{\hbar}{i} grad + e\vec{A}\right]^2 + V \tag{14.8}$$

Posle kvadriranja i vodeći računa o redu faktora dobija se

$$\aleph = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + \frac{\hbar e}{2m_0 i}\vec{A}\, grad + \frac{\hbar e}{2m_0 i} grad\,\vec{A} + \frac{\hbar^2 \vec{A}^2}{2m_0} + V \tag{14.9}$$

Pri primeni različitih diferencijalnih operatora, medjutim mora se biti pažljiv, jer znamo da operator $\aleph$ deluje na talasnu funkciju ψ. Tako

$$\text{grad}\,\vec{A} \tag{14.10}$$

se može interpretirati kao

$$\text{grad}(\vec{A}\psi) \tag{14.11}$$

Diferencirajući proizvod u (14.11) i ponovo primenjujući (14.7) dobija se da je Hamiltonijan

$$\aleph = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + \frac{e}{m_0}\vec{A}\cdot\vec{p} + \frac{\hbar e}{2m_0 i} div\,\vec{A} + \frac{e^2 \vec{A}^2}{2m_0} + V \tag{14.12}$$

(Operatori gradijenta, divergencije i rotora (curl) koji se koriste ovde su vektorski diferencijalni operatori koji se često pišu u skraćenoj formi koristeći "Nabla" simbol ∇, sa $\nabla f \equiv gradf$, $\nabla\cdot\vec{F} \equiv div\vec{F}$, $\nabla x\vec{F} \equiv curl\vec{F}$, $\nabla\cdot\nabla f = \nabla^2 f = Laplasijan$ f, gde je f skalarna funkcija i $\vec{F}$ vektorska funkcija.

Kao i uvek u ovoj knjizi izaberimo konstantno magnetno polje **B** u z pravcu:

$$\vec{B} = (0,0,B_z). \tag{14.13}$$

Može se demonstrirati da se vektorski potencijal $\vec{A}$ u (14.1) ne može jednoznačno odrediti. Jedna moguća reprezentacija koja je pogodna za ovdašnje računanje je:

$$A_x = -\frac{B_z}{2}y,\;\; A_y = -\frac{B_z}{2}x,\;\; A_z = 0 \tag{14.14}$$

Sa ovim, Šredingerova jednačina sa Hamiltonijanim (14.12) postaje

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + B_z\frac{e}{2m_0}\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) + \frac{e^2 B_z^{\ 2}}{8m_0}\left(x^2+y^2\right) + V(r)\right]\psi = E\psi \qquad (14.15)$$

Na dalje pretpostavljamo sferno simetrični potencijal za V. Pozvaćemo se na formulu iz Sekcije 10.2

$$\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \hat{l}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi} \qquad (14.16)$$

gde je $\hat{l}_z$ operator momenta impulsa u z pravcu. U opšte, izraz koji u (14.15) sadrzi (x^2+y^2) se može zanemariti u poredjenju sa prethodnim izrazom sa $\hat{l}_z$ ako magnetno polje nije previše veliko, i sve dok je magnetni kvanti broj m≠0. Odbacujući član sa (x^2+y^2) i koristeći uobičajenu formulu za talasnu funkciju

$$\psi(r) = R_{n,l}(r)e^{im\phi}P_l^m(\cos\theta) \qquad (14.17)$$

prepoznajemo da je (14.15) identički zadovoljeno. Energija je sada

$$E = E_n^0 + B_z\frac{e\hbar}{2m_0}\cdot m, \qquad -l \le m \le l \qquad (14.18)$$

Energija je tako shiftovana u odnosu na neperturbovanu energiju E_n^0 za iznos koji zavisi od magnetnog kvantnog broja *m*, i energetski nivo se cepa. Faktor $\mu_B = e\hbar/(2m_0)$ je Bohr ov magneton koji je uveden ranije. Uz dodatna selekciona pravila za optičke prelaze

Δm=0 ili ±1

gornje izvodjenje dovodi do cepanja spektralnih linija poznatog kao obični Zeeman-ov efekat (poglavlje 13.3).

14.2. Kvanto teorijski tretman elektronskog i protonskog spina

14.2.1. Spin kao momenat impulsa

Kao što smo videli u sekciji 12.4 elektron ima tri stepena slobode pri translatornom kretanju i četvrti je njegov spin. Kao što znamo i ostale elementarne čestice, uključujući i proton, takodje imaju spin. Naš kvantno mehanički račun do ovog mesta, naročito naše izvodjenje Šredingerove jednačine i njena primena na vodonikov atom, nije uključivalo i spin. Na dalje ćemo pokazati kako se spin uključuje u kvantno mehanički tretman atomskih stanja. Ovo je neophodno, na primer, u spin-orbit sprezanju, u anomalnom Zeeman-ovom efektu, u spin rezonanci i u adekvantnoj formulaciji Paulijevog principa, što će biti diskutovano kasnije. Kao i svaki momenat impulsa i spin elektrona kao vektor ima tri prostorne komponente s_x, s_y i s_z:

$$s=(s_x,s_y,s_z). \qquad (14.9)$$

U daljem razvoju formalizma spina, mora se uzeti u obzir eksperimentalno opažanje da spin ima samo dve moguće orijentacije tako da komponenta spina u izabranom pravcu, tj. z pravcu može da ima samo dve vrednosti $\hbar/2$ ili $-\hbar/2$. U ovom smislu to je zaista sistem sa dva nivoa.

14.2.2 Operatori spina, spinske matrice i spinske talasne funkcije

Kako se intiutivno podrazumeva da su dva spinska stanja, "spin gore" i "spin dole" prvo ćemo uvesti na čisto fromalan način dve "talasne" funkcije koje odgovaraju ovim pravcima spina, tj, $\Phi_\uparrow$ i $\Phi_\downarrow$. Ako striktno nastavimo prema kvantnom formalizmu, merenje z komponente spina odgovara primeni operatora $\hat{s}_z$ na talasnu funkciju. (Kao i kod momenta impulsa $\vec{l}$ razlikovaćemo operator spina od odgovarajućeg klasičnog parametara koristeći znak ^). Možemo da izaberemo talasne funkcije na takav način da primena operatora daje opažene vrednosti. Kako postoje samo dve opažene vrednosti $\hbar/2$ ili $-\hbar/2$ očekujemo da je

$$\hat{s}_z\Phi_\uparrow = \frac{\hbar}{2}\Phi_\uparrow \qquad \text{i} \qquad (14.20a)$$

$$\hat{s}_z\Phi_\downarrow = -\frac{\hbar}{2}\Phi_\downarrow \qquad (14.20b)$$

Ovo se može sumirati kao

$$\hat{s}_z\Phi_{m_s} = \hbar m_s \Phi_{m_s} \qquad (14.21)$$

gde je m_s=1/2 (što odgovara $\uparrow$) ili
m_s=-1/2 (odgovara $\downarrow$).

m_s je kvantni broj z komponente spina.

Tražimo formalizam koji će više/manje automatski dati relacije (14.20a,b). Nadjeno je da se ovo najlakše postiže koristeći matrice. Matrica u matematici je kvadratni niz (struktura), na primer

$$M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \qquad (14.22)$$

Postoji pravilo množenja za ove matrice (nizovi). Na primer, zamislimo vektor v sa komponentama x i y u ravni, ili $v = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$. Možemo da stvorimo novi vektor x',y', množenjem $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ sa M. Ovo se obavlja prema pravilu:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = M\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ax+by \\ cx+dy \end{pmatrix} \tag{14.23}$$

Tako, tražimo vektor Φ i matricu M tako da $M\Phi$ daje tačno $\frac{\hbar}{2}\Phi$ ilil $-\frac{\hbar}{2}\Phi$.
Ovde ćemo dati rezultat i nakon toga ćemo ga proveriti. Biramo $\hat{s}_z$ u formi

$$\hat{s}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{14.24}$$

a spinske funkcije u obliku

$$\Phi_\uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad i \quad \Phi_\downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{14.25}$$

Pomoću (14.23) može se neposredno pokazati da zamena (14.24 i 25) u (14.20a i b) zaista daje relacije $M\Phi_\downarrow = -(\hbar/2)\Phi_\downarrow$, $M\Phi_\uparrow = (\hbar/2)\Phi_\uparrow$. Opšta spinska funkcija se dobija superpozicijom $\Phi_\uparrow$ i $\Phi_\downarrow$ sa koeficijentima a i b, kao što smo ranije radili za talasni paket.

$$\Phi = a\Phi_\uparrow + b\Phi_\downarrow = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \tag{14.26}$$

Da bi se ostvario uslov normiranosti mora se prvo uvesti skalarni proizvod funkcija Φ_1 i Φ_2. Opšta oblik Φ_1 je

$$\Phi_1 = \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} \tag{14.27}$$

$$\Phi_2 = \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} \tag{14.28}$$

skalarni proizvod se definiše kao

$$\bar{\Phi}_1 \Phi_2 = (a_1^*, b_1^*)\begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = (a_1^* a_2 + b_1^* b_2) \tag{14.29}$$

Ovo su pravila računanja sa kojima čitaoc treba da je upoznat iz vektorskog računa.

Zamenimo u (14.29) $\bar{\Phi}_1 = \bar{\Phi}_\uparrow$ i $\Phi_2 = \Phi_\uparrow$, dobiće se

$$\bar{\Phi}_\uparrow \Phi_\uparrow = 1 \tag{14.30}$$

isto tako

$$\bar{\Phi}_\downarrow \Phi_\downarrow = 1 \tag{14.31}$$

Tako su funkcije normalizovane. Sa $\bar{\Phi}_1 = \bar{\Phi}_\downarrow \quad i \quad \Phi_2 = \Phi_\uparrow$ imamo

$$\bar{\Phi}_\downarrow \Phi_\uparrow = 0 \tag{14.32}$$

tj, talasne funkcije su ortogonalne.

Tako, uz (14.24) imamo rešenje prvog dela celokupnog problema. Reprezentacija operatora za x i y pravce momenta impulsa je još uvek otvorena. Kako govorimo o momentu impulas, čini se razumnim da se zahteva relacija komutacije izmedju momenta impulsa (10.14). Ne želimo da idemo dublje u matematiku problema. U ovoj knjizi se ograničavamo da je jednostavno dovoljno izabrati $\hat{s}_x$ i $\hat{s}_y$ na odgovarajući način. Ovo nas dovodi do

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{14.33a}$$

i

$$\hat{s}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{14.33b}$$

Ako izračunamo $\hat{s}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2$ pomoću matrica (14.24,33a i 33b) , posle kratkog računanja dobija se

$$\hat{s}^2 = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4} \cdot \textit{jedinicna matrica}$$

Tako ako se primeni $\hat{s}^2$ na bilo koju spinsku funkciju Φ, naročito na Φ_{ms} onda se uvek dobija

$$\hat{s}^2\Phi_{m_s} = \frac{3}{4}\hbar^2\Phi_{m_s}$$

Analogija izmedju ove jednačine i svojstvene jednačine orbitalnog momenta impulsa $\vec{l}^{\,2}$ sa svojstvenim vrednostima $\hbar^2 l(l+1)$ (10.6) je jasna ako se zapiše

$$\hbar^2 \frac{3}{4}$$

u formi

$$\hbar^2 s(s+1)$$

sa s=1/2;

$$\hat{s}^2\Phi_{m_s} = \hbar^2 s(s+1)\Phi_{m_s} \tag{14.34}$$

14.2.3. Šredingerova jednačina spina u magnetnom polju.

Sada ćemo nastaviti sa formulacijom Šredingerove jednačine spina u magnetnom polju. Magnetni momenat

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0} \tag{14.35}$$

je pridružen elektronskom spinu $\hbar/2$. Ovde je m_0 masa mirovanja elektrona i e je pozitivna jedinica naelektrisanja. Ovaj magnetni momenat, "Borov magneton", je opisan u poglavlju 12.2. Pošto je vektor magnetnog momenta orijentisan antiparalelno elektronskom spinu, možemo da pišemo

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{m_0}\vec{s} \tag{14.36}$$

gde je faktor $\hbar/2$ prirodno uključen u momenat impulsa. Sledeće računanje se može direktno primeniti i za spin protona, ako se Borov magneton zameni sa tzv. nuklearnim magnetonom $-\mu_N$ i $-e/m_0$ sa e/m_p. μ_N se definiše kao $-(m_0/m_P)\mu_B$, i m_P je masa protona. Negativni znak dolazi iz činjenice da je naelektrisanje protona suprotnog znaka od elektrona.

Energija spina u prostorno homogenom magnetnom polju **B** je, kao što je pokazano u elektrodinamici

$$V_S = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} \tag{14.37}$$

Pokušavamo da nadjemo jednačinu analognu Šredingerovoj jednačini; podsetimo se iz prethodnih diskusija u kvantnoj mehanici da je Šredingerova jednačina dobijena iz izraza za energiju (poglavlje 9.2). Ovde je energetski izraz Hamiltonova funkcija, koja je onda konvertovana u Hamiltonov operator. Na sličan način sada energetski izraz (14.37) transformišemo u operator i pišemo

$$\frac{e}{m_0}\vec{B}\cdot\vec{s}\,\Phi = E\Phi \tag{14.38}$$

Ako magnetno polje ima komponente B_x,B_y i B_z , leva strana jednačine (14.38) je

$$\frac{e}{m_0}(B_x \hat{s}_x + B_y \hat{s}_y + B_z \hat{s}_z)\Phi \tag{14.39}$$

Operatori komponenti spina su matrice (14.33 *a,b* i 24, resp). Zato je (14.39) takodje matrica. Prema pravilima za sabiranje matrica dobija se

$$\frac{e\hbar}{2m_0}\begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix} \tag{14.40}$$

Ako izaberemo polje B u z pravcu kao i gore

$$\vec{B} = (0,0,B_z) \tag{14.41}$$

leva strana (14.38) ostaje ista, osim numeričkog faktora eB_Z/m_0, kao i leva strana (14.20 a ili b), što nam pokazuje da funkcija uvedena gore (14.25) jeste takodje svojstvena funkcija operatora (14.38) sa odgovarajućim svojstvenim vrednostima

$$E = \pm\mu_B B_z \tag{14.42}$$

Energija spina u konstantnom magnetnom polju u z pravcu je tako upravo data izrazom koji bi se mogao očekivati na osnovu klasične teorije za interakciju antiparalelnih spinskih momenata sa magnetnim poljem. Naravno, umesto (14.38) možemo da formulišemo odgovarajuću vremenski zavisnu Šredingerovu jednačinu.

$$\frac{e}{m_0}\vec{B}\cdot\vec{s}\,\Phi = i\hbar\frac{d\Phi}{dt} \tag{14.43}$$

Ova jednačina se mora koristiti, naročito ako se radi sa vremenski zavisnim magnetnim poljem.

14.2.4 Opis precesije spina preko očekivanih vrednosti

Vrlo je interesantno odrediti vremenski zavisno rešenje (14.43) za konstantno magnetno polje. Ako izaberemo magnetno polje u z pravcu, Šredingerova jednačina je data sa

$$\mu_B B_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \Phi = i\hbar \frac{d\Phi}{dt} \tag{14.44}$$

Opšte rešenje se nalazi kao superpozicija Φ↑ i Φ↓ (14.26). Pošto Šredingerova jednačina sadrži izvode po vremenu na desnoj strani, treba da u Φ↑ i Φ↓ uključimo vremenske funkcije

exp(-E↑ t / $\hbar$) i exp(-E↓ t / $\hbar$),

gde se E↑ i E↓ mogu pisati u obliku

$$E_{\uparrow} = (\hbar/2)\omega_0 \quad \text{i} \quad E_{\downarrow} = -(\hbar/2)\omega_0 \quad \text{i} \quad \omega_0 = \frac{e}{m_0} B_z \tag{14.45}$$

Kako linearna kombinacija takodje sadrži konstantne koeficijente može se koristiti opštije rešenje za (14.44)

$$\Phi(t) = a \exp(-i\omega_0 t/2)\Phi_{\uparrow} + b \exp(i\omega_0 t/2)\Phi_{\downarrow} \tag{14.46}$$

Potrebno je, kao i uvek u kvantnoj mehanici, normalizovati Φ, tj da skalarni proizvod $\bar{\Phi}\Phi$ (14.29) bude jednak jedinici. Ovo znači da je

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 \tag{14.47}$$

Fizičko značenje (14.46) će postati jasnije kada formiramo očekivane vrednosti operatora spina $\widehat{S}$ sa ovom talasnom funkcijom. Da bi se ovo obavilo, moramo se podsetiti kako se očekivane vrednosti računaju, i upućujemo na Sekciju 9.3. “Recept” dat za to glasi

1) uzmi talasnu funkciju ψ,
2) dozvoli da operator merljive veličine Ω čija se očekivana vrednost traži deluje na nju,
3) rezultat delovanja pomnoži sa ψ* i onda integrali

$$\int \psi^*(x)\Omega\psi(x)dx$$

Koraci (1-3) se mogu lako transformisati u tri analogna pravila za računanje u spinskom formalizmu:

1) Uzeti spinsku talasnu funkciju Φ, tj. (14.46),
2) Neka spinski operatori $\widehat{s}_x, \widehat{s}_y, \widehat{s}_z$ deluju na (14.46) u obliku $\widehat{s}_x\Phi$;
3) množenje sa $\overline{\Phi}$ i integracija se zamenjuju pravilom računanja skalarnog proizvoda: množimo $\widehat{s}_x\Phi$ sa leva sa $\overline{\Phi}$.

Kao skraćenice koristimo

$$\begin{aligned} ae^{-i\omega_0 t/2} &= \alpha \\ be^{i\omega_0 t/2} &= \beta \end{aligned} \tag{14.48}$$

Pojedinačni koraci 1-3) su sada kao što sledi:

1) $\Phi = \alpha\Phi_{\uparrow} + \beta\Phi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ (14.49)

2) $\hat{S}_z\Phi = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ (14.50)

Koristeći pravilo (14.23) ovo je jednako

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \alpha \\ -\beta \end{pmatrix} \quad (14.51)$$

3) $\overline{\Phi}\hat{S}_z\Phi = \overline{\Phi}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \alpha \\ -\beta \end{pmatrix}$ (14.52)

Prema pravilu (14.29) desna strana je jednaka

$$\frac{\hbar}{2}\left(|\alpha|^2 - |\beta|^2\right) \quad (14.53)$$

Pišući očekivanu vrednost $\hat{S}_z$ kao $\langle \hat{S}_z \rangle$ dobijamo

$$\langle \hat{S}_z \rangle = \frac{\hbar}{2}\left(|\alpha|^2 - |\beta|^2\right) \quad (14.54)$$

Ostavljamo čitaocu za vežbu da dokaže da je

$$\langle \hat{S}_x \rangle = \frac{\hbar}{2}\left(\alpha^*\beta + \alpha\beta^*\right), \quad (14.54)$$

i

$$\langle \hat{S}_y \rangle = \frac{\hbar}{2} i\left(\alpha\beta^* - \alpha^*\beta\right) \quad (14.55)$$

Zamenimo (14.48) u (14.53-55) i ovo daje

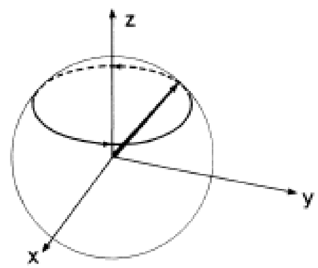
$$\langle \hat{S}_z \rangle = \frac{\hbar}{2}\left(a^2 - b^2\right) = const\ w.r.t.time. \quad (14.56)$$

Očekivana vrednost z komponente spina, tako, ostaje konstanta u toku vremena

$$\langle \hat{S}_x \rangle = ab\hbar\cos\omega_0 t \quad (14.57)$$

$$\left\langle \widehat{S}_y \right\rangle = ab\hbar \sin \omega_0 t \tag{14.58}$$

Komponente spina u x-y ravni rotiraju sa ugaonom brzinom ω_0. Očekivane vrednosti (14.56-58) se mogu interpretirati kao precesiono kretanje spina (Slika 14.41). Tako je model korišćen u Glavi 13 opravdan kvantnom teorijom.



Slika 14.1 Precesiono kretanje spina.

14.3 Kvantno mehanički tretman Anomalnog Zemanovog efekta sa spin orbit sprezanjem.

U ovom poglavlju nastavićemo kompletno kvantno mehaničko tretiranje spin orbit sprezanja. Namera je tačno opravdanje vektorskog modela spin-orbit sprezanja koje je uvedeno u Glavi 12. Specifično razmatramo LS sprezanje i želimo da pokažemo opravdanje za pravilo da se l^2, s^2 i j^2 mogu zameniti sa l,(l+1), s(s+1) i j(j+1). Ako za momenat zanemarimo spin-orbit sprezanje, tada su energije orbitalnog i spinskog kretanja u magnetnom polju aditivne. Ovo znači da je ukupni Hamiltonijan, jednostavno suma Hamiltonijana orbitalnog kretanja (14.8) i spina (14.38). Tako imamo Šredingerovu jednačinu

$$\left[\frac{1}{2m_0} \left(\frac{\hbar}{i} grad + e\vec{A} \right)^2 + V + \frac{e}{m_0} \hat{\vec{s}} \cdot \vec{B} \right] \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \tag{14.57}$$

Ovo je u literaturi poznato kao Paulijeva jednačina.

Kako su Hamiltonijani (14.8) i (14.38) aditivni i primenjuju se na potpuno različite stepene slobode, talasna funkcija se može pisati kao proizvod talasne funkcije orbitalnog kretanja i spinskog kretanja. Konačno, možemo takodje, tretirati spin orbit sprezanje uvedeno u 12.8 poglavlju, kvantno mehanički. Za ovo nam je jedino potrebno da uvedemo prethodno izvedeni izraz (12.27) koji predstavlja energiju interakcije, u kvantnu mehaniku. Ovo se obavlja, kao i obično, pridruživanjem operatora $\hat{\vec{l}}$ momentu količine kretanja $\vec{l}$ i operatora spina $\hat{\vec{S}}$, spinu $\vec{S}$. Rezultujući izraz

$$W(\hat{\vec{l}}, \hat{\vec{s}}) = \frac{\mu_0 Z e^2}{8\pi m_0^2} \frac{1}{r^3} (\hat{\vec{l}}, \hat{\vec{s}}) = \frac{\mu_0 Z}{8\pi} \frac{1}{r^3} \left(\hat{\vec{\mu}}_{orbit} \cdot \hat{\vec{\mu}}_{spin} \right)$$

se zamenjuje u Šredingerovu jednačinu i dobija se Šredingeorva jednačina elektrona sa spinom u magnetnom polju, pri čemu je spin orbit interakcija uzeta u obzir. Vremenski nezavisna forma ove jednačine je

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2+\frac{e\hbar}{m_0 i}\vec{A}\,grad+\frac{e\hbar}{2m_0 i}div\vec{A}+\frac{e^2\vec{A}}{2m_0}+V+\frac{e}{m_0}\hat{\vec{s}}\cdot\vec{B}+\frac{\mu_0 Ze^2}{8\pi m_0^2}\frac{1}{r^3}(\hat{\vec{l}},\hat{\vec{s}})\right]\psi=E\psi \tag{14.61}$$

Kao što smo videli u poglavlju 13.3, spin orbit sprezanje dominira u slabim magnetskim poljima. Zato ćemo prvo proučiti Šredingerovu jednačinu u odsustvu magnetskog polja:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}+\frac{\mu_0 Ze^2}{8\pi m_0^2}\frac{1}{r^3}(\hat{\vec{l}},\hat{\vec{s}})\right]\psi(r)=E\psi(r) \tag{14.62}$$

Jednačina (14.62) uključuje operator spina $\hat{\vec{s}}$ koji je, kao što znamo, matrica. Zato talasna funkcija ψ(r) ima dve komponente:

$$\psi(r)=\begin{pmatrix}\psi_1(r)\\ \psi_2(r)\end{pmatrix},$$

koje odgovaraju, ψ_1 spinu ↑ i ψ_2 spinu ↓ .

Spin-orbit interakcija meša orbitalna i spinska stanja i dovodi do potrebe uvodjenja novih kvantnih brojeva. Bez spin-orbit interakcije, talasna funkcija ima oblik

$$\psi_{n,l,m,m_s}=\underbrace{R_{n,l}(r)F_{l,m}(\theta,\varphi)}_{Orbit}\underbrace{\Phi_{m_s}(\varphi)}_{Spin} \tag{14.63}$$

Ona je okarakterisana glavnim kvantnim brojem n, kvantim brojem orbitalnog momenta impulsa l, (orbitalni kvantni broj), magnetnim kvantim brojem m ($\equiv m_l$), i spinskim kvantnim brojem m_s. U cilju odredjivanja kvantnih brojeva primenljivih na spin orbit interakciju, moramo proširiti razmatranje orbitalnog ugaonog momenta datog u poglavlju 10.2, i proučiti parametre koji odlučuju šta se može opaziti istovremeno. Kao što znamo, ovo se može obaviti pomoću relacija komutacije (poglavlje 9.3). Ako, kao u poglavlju 12.7 uvedemo operator ukupnog spina $\hat{\vec{j}}=\hat{\vec{l}}+\hat{\vec{s}}$ i operator njegove komponente u z pravcu $\hat{j}_z$ sledeći parametri se mogu opaziti istovremeno sa bilo kojom željenom preciznošću

Kvadrat orbitalnog momenta količine kretanja l^2

Kvadrat spina s^2

Kvadrat ukupnog momenta količine kretanja (angularni momenat) j^2

Komponenta j_z

$\vec{l}\cdot\vec{s}$ i $\vec{j}\cdot\vec{s}$

Kako se $\vec{l}\cdot\vec{s}$ pojavljuje u (14.62), možemo okarakterisati talasne funkcije biranjem kvantnih brojeva, koji su svojstvene vrednosti operatora $\hat{\vec{j}}^2, \hat{\vec{l}}^2, \hat{\vec{s}}^2$ i $\hat{\vec{j}}_z$. Tako, dobijamo sledeće veze izmedju operatora i kvantnih brojeva

$$\begin{aligned} &\hat{\vec{j}}^2; \textit{kvanti broj } j \quad \hat{j}_z; \textit{kvanti broj } m_j \\ &\hat{\vec{s}}^2; \textit{kvanti broj } s \quad \hat{\vec{l}}^2; \textit{kvanti broj } l \end{aligned} \tag{14.64}$$

Kako je spin orbit interakcija mnogo manja nego rastojanje izmedju termova, glavni kvantni broj n je još uvek dobar kvantni broj, tj., on još uvek karakteriše svojstvenu talasnu funkciju u dobroj aproksimaciji. Talasna funkcija je sada okarakterisana sa

$$\psi_{n,j,m_j,l,s} = R(r)\cdot(\textit{funkcije ugla i spina}) \tag{14.65}$$

Spin orbit interakcija dovodi do relativne orijentacije spina i orbitalnog momenta, što je bilo diskutovano u detaljima u poglavlju 12.8.

Sada možemo da proučimo efekat magnetskog polja na elektron, uzimajući u obzir spin orbit interakciju. Može se pokazati da je u Šredingerovoj jednačini (14.59) izraz $\mathbf{A}^2$ mnogo manji od ostalih članova, ako magnetno polje nije previše veliko, i može se zanemariti. Izaberimo sada ponovo magnetno polje **B** u z pravcu i

$$A_x = -\frac{1}{2}B_y,\ A_y = \frac{1}{2}B_x,\ A_z = 0$$

div**A=0.** Šredingerova jednačina je sada

$$\left[\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}}_{\aleph^0} + \underbrace{\frac{e}{2m_0}\vec{B}\cdot\hat{l}_z + \frac{e}{m_0}s_z\vec{B}}_{W_{magn}} + \underbrace{\frac{\mu_0 Ze^2}{8\pi m_0^2}\frac{1}{r^3}(\hat{\vec{l}},\hat{\vec{s}})}_{Wspin-orbit}\right]\psi = E\psi \tag{14.66}$$

Prva dva člana su $\aleph^0$; druga dva člana su W_{magn} i zadnji član na levoj strani jednačine je spin orbit interakcija $W_{spin\text{-}orbit}$. Tretiramo slučaj slabog magnetnog polja, u kome je spin orbit interakcija veća od interakcije sa spoljašnjim magnetskim poljem. Sada smo u poziciji da kvantno mehanički opravdamo vektorski model uveden u Glavi 13. Razmotrimo operator koji se pojavljuje u (14.66).

$$W_{magn} \equiv \frac{e}{2m_0}B(\hat{l}_z + 2\hat{s}_z) \tag{14.67}$$

(koji dovodi do dodatne magnetne energije, koju smo nazvali V_m u poglavljima 13.3,4,5). Ako bi u prethodnoj jednačini bilo $(\hat{l}_z + \hat{s}_z)$ rešenje bi bilo vrlo jednostavno, i analogno tretmanu elektrona bez spina u magnetnom polju. (sekcija 14.1). U tom slučaju talasna funkcija ψ koja je već okarakterisana kvantim brojem m_J, bi bila takodje svojstvena funkcija operatora $(\hat{j} = \hat{l}_z + \hat{s}_z)$.Zato moramo da vidimo kako da tretiramo dodatno $\hat{s}_z$ u (14.67). Razmotrimo

$$\hat{s}_z\hat{j}^2 = \hat{s}_z(\hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2) \tag{14.68}$$

koji se može zapisati i kao

$$\hat{j}_z(\hat{s}\cdot\hat{j}) + \underbrace{(\hat{s}_z\hat{j}_x - \hat{j}_z\hat{s}_x)\hat{j}_x + (\hat{s}_z\hat{j}_y - \hat{j}_z\hat{s}_y)\hat{j}_y}_{q} = \hat{j}_z(\hat{s}\cdot\hat{j}) + \hat{q} \tag{14.69}$$

Može se pokazati da se matrični elementi operatora q anuliraju kada se primene na talasnu funkciju sa kvantnim brojem j, ili drugim rečima, operator q može da deluje samo na talasne funkcije sa različitim j. Ako je primenjeno polje ekstremno malo, možemo očekivati da takvi prelaze čine samo mali doprinos i mogu se zanemariti. Na dalje, zanemarićemo operator q. Uz ovu aproksimacuju (14.68) se može napisati kao

$$\hat{s}_z\hat{j}^2 = \hat{j}_z\frac{1}{2}(\hat{j}^2 - \hat{l}^2 + \hat{s}^2). \tag{14.70}$$

gde smo zamenili $\hat{s}\cdot\hat{j}$ odgovarajućim izrazom na desnoj strani (14.70). Važno je zapaziti da su svi parametri u (14.70) *operatori*. Sada primenimo obe strane (14.70) na talasnu funkciju ψ koju karakterišu kvantni brojevi j, m_J , l i s. Tako dobijamo

$$\underbrace{\hat{s}_z\hat{j}^2}_{Operators}\psi = \underbrace{\hat{s}_z}_{Operator}\cdot\hbar^2\underbrace{j(j}_{Brojevi}+1)\psi = \hbar^2\underbrace{\hat{j}_z}_{Operator}\frac{1}{2}\left[\underbrace{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}_{Brojevi}\right] = \tag{14.71}$$

Ako podelimo prethodnu jednačinu sa $\hbar^2 j(j+1)$ dobijamo

$$\hat{s}_z\psi = \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}\hat{j}_z\psi, \qquad s = 1/2 \tag{14.72}$$

Ako pišemo W_{magn} u obliku

$$W_{magn} = \frac{eB}{2m_0}(\underbrace{\hat{j}_z + \hat{s}_z}_{Operators}) \tag{14.73}$$

konačno dobijamo

$$W_{magn}\psi = \frac{eB}{2m_0}\underbrace{\hat{j}_z}_{Operator}(\underbrace{1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}}_{Brojevi})\psi \tag{14.74}$$

Dodatna energija koja potiče od orijentacije ukupnog momenta j u magnetnom polju je predstavljena u (14.74).

Ako se promena energije kvantnog stanja, n,j,l,m_j zapiše u obliku

$$\Delta E_{j,l,m_j} = \frac{e\hbar}{2m_0} Bgm_j \tag{14.75}$$

gde uveden tzv. Landeov faktor koji je jednak

$$g = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \tag{14.76}$$

Landeov g faktor je izveden i ranije na osnovu intuitivnih predstava pomoću vektorskog modela, ali je bilo potrebno da se koristi kosinusna teorema i *ad hoc* pristup kada smo zamenili j^2 sa $j(j+1)\hbar^2$, l^2 sa $l(l+1)\hbar^2$ i s^2 sa $s(s+1)\hbar^2$. Kvantno mehaničko računanje predstavljeno ovde daje tačnu osnovu za ove zamene.

14.4. Kvantna teorija spina u medjusobno normalnim magnetskim poljima, jedno konstanto i jedno vremenski zavisno.

Veliki broj značajnih eksperimenata je obavljen sa spinom u sledećim konfiguracijama: primenjuju se dva konstantna prostorno homogena magnetska polja u z pravcu i jedno oscilatorno polje u ravni x-y. Videćemo da je ovo dovelo do interesantnog fenomena preokretanja spina. Ovi eksperimenti su, izmedju ostalog omogućili, tačno merenje magnetnih momenata, detaljnu analizu strukture i relaksacionih procesa u tečnostima i čvrstim telima.

Videćemo da se ovaj problem može rešiti jedino korišćenjem formalizma spina koji je uveden u poglavlju 14.2. Pišemo magnetno polje kao vremenski zavisan deo i vremenski nezavisan deo:

$$\vec{B} = \vec{B}_0 + \vec{B}^s(t) \tag{14.77}$$

gde su vektori magnetnog polja definisani kao

$$\vec{B}_0 = (0, 0, B_z^0) \tag{14.78}$$

$$\vec{B}^s(t) = (B_x^s(t), B_y^s(t), 0) \tag{14.79}$$

Prirodno ne možemo očekivati da se spin uvek usmeri gore ili dole u vremenski promenljivom magnetskom polju. Možemo očekivati vremenski zavisne prelaze. Ovo uzimamo u obzir u talasnoj funkciji koja treba da predstavlja rešenje Šredingerove jednačine (14.43) u opštoj formi

$$\Phi(t) = c_1(t)\Phi_\uparrow + c_2(t)\Phi_\downarrow \equiv \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} \tag{14.80}$$

Da bi smo dobili jednačine za još uvek nepoznate koeficijente c_1 i c_2, zamenimo (14.80) u (14.43) uz dekompoziciju (14.77-79). Ako pomnožimo (14.39) kao normalni skalarni proizvod, i iskoristimo matričnu formu $\hat{s}_x, \hat{s}_y$ *i* $\hat{s}_z$ - vidi (14.40), dobijamo Šredingerovu jednačinu (14.43) u obliku

$$\mu_B \begin{pmatrix} B_z^0 & B_x^s - iB_y^s \\ B_x^s + iB_y^s & -B_z^0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \end{pmatrix}. \qquad (14.81)$$

Pomnožimo matrice prema pravilu (14.23) i dobijemo ove jednačine umesto (14.81)

$$\left(\frac{1}{2}\hbar\omega_0\right)c_1 + \mu_B(B_x^s - iB_y^s)c_2 = i\hbar\dot{c}_1, \qquad (14.82)$$

$$\mu_B(B_x^s + iB_y^s)c_1 - \left(\frac{1}{2}\hbar\omega_0\right)c_2 = i\hbar\dot{c}_2, \qquad (14.83)$$

Ovde uvodimo frekvenciju

$$\hbar\omega_0 = 2\mu_B B_z^0 \qquad (14.84)$$

kao skrećenicu. U cilju uprošćavanja prethodnog računa, uzmimo u obzir transverzalno magnetsko polje kao rotirajuće sa vrekvencijom ω. Drugim rečima magnetsko polje ima oblik

$$B_x^s = F\cos\omega t, \qquad (14.85)$$
$$B_y^s = F\sin\omega t,$$

Pošto se B_x^s *i* B_y^s pojavljuju u (14.82, 83) u kombinovanoj formi, prvo razmotrimo ove izraze. Možemo ih izraziti kao eksponencijalne funkcije, preko elementarnih relacija izmedju sinusa i kosinusa

$$B_x^s \pm iB_y^s = F(\cos\omega t \pm i\sin\omega t) = Fe^{\pm i\omega t} \qquad (14.86)$$

Onda se (14.82,83) uprošćavaju u

$$(\hbar\omega_0/2)c_1 + \mu_B F e^{-i\omega t}c_2 = i\hbar\dot{c}_1, \qquad (14.87)$$

$$\mu_B F e^{i\omega t}c_1 - (\hbar\omega_0/2)c_2 = i\hbar\dot{c}_2. \qquad (14.88)$$

Ove dve jednačine ćemo rešiti u dva koraka. U prvom, zamenićemo konstante $c_j(t)$ u obliku

$$c_1(t) = d_1(t)e^{-i\omega_0 t/2}; \quad c_2(t) = d_2(t)e^{i\omega_0 t/2}. \qquad (14.89)$$

Ako diferenciramo (14.89) po vremenu i preuredimo dobija se:

$$i\hbar\dot{c}_1 = (\hbar\omega_0/2)c_1 + i\hbar\dot{d}_1 e^{-i\omega_0 t/2} \qquad (14.90)$$

Ako ovo zamenimo u (14.87) onda se izraz $(\hbar\omega_0/2)c_1$ krati. Ista stvar se dogadja sa c_2 u (14.88) , tako da se (14.87) i (14.88) uprošćavaju u

$$\mu_B F e^{-i(\omega-\omega_0)t} d_2 = i\hbar\dot{d}_1 \tag{14.91}$$

$$\mu_B F e^{i(\omega-\omega_0)t} d_1 = i\hbar\dot{d}_2 . \tag{14.92}$$

Ove jednačine postaju vrlo jednostavne kada je rotaciona frekvencija magnetnog polja ω jednaka frekvenciji spina ω_0:

$$\omega = \omega_0 \tag{14.93}$$

Onda se dobija

$$\mu_B F d_2 = i\hbar\dot{d}_1 . \tag{14.94}$$

$$\mu_B F d_1 = i\hbar\dot{d}_2 . \tag{14.95}$$

Da bi rešili ove jednačine, nadjimo izvod (14.94)

$$\mu_B F \dot{d}_2 = i\hbar\ddot{d}_1 . \tag{14.96}$$

i zatim, u skladu sa (14.95) zamenimo $\dot{d}_2$ sa $(\mu_B F d_1)/(i\hbar)$ i tako dobijamo

$$\ddot{d}_1 + \frac{\mu_B^2 F^2}{\hbar^2} d_1 = 0. \tag{14.97}$$

Ako uprostimo izraz zamenjujući $\frac{\mu F}{\hbar} = \Omega.$ onda (14.97) prepoznajemo kao tipičnu oscilatornu jednačinu sa opštim rešenjem

$$d_1 = a\sin(\Omega t + \Phi), \tag{14.98}$$

gde se amplituda *a* i faza *Φ* mogu menjati (po volji). Koristeći (14.98) i (14.94) dobijamo

$$d_2 = ia\cos(\Omega t + \Phi) \tag{14.99}$$

Uz odgovarajući izbor početnog momenta, može se dobiti Φ=0. Uslovi normalizacije za spinske talasne funkcije zahtevaju *a*=1. Ako zamenimo (14.99) u (14. 89) i ovo u (14.80), i učinimo isto sa (14.98) dobijamo željenu spinsku talasnu funkciju

$$\Phi(t) = \sin(\Omega t) e^{-i\omega_0 t/2}\Phi_{\uparrow} + i\cos(\Omega t) e^{i\omega_0 t/2}\Phi_{\downarrow} \tag{14.100}$$

Spinska funkcija kao i spinski formalizam čine se veoma ne-intuitivnim. U cilju da vidimo značenje gornjih jednačina podsetimo se da se predvidjanje kvantne mehanike može očitati iz odgovarajućih očekivanih vrednosti. Prvo ćemo razviti očekivane vrednosti operatora spina u z pravcu. Poredjenje (14.49) sa (14.100) pokazuje da možemo da sada izrazimo α i β iz (14.49) u obliku

$$\alpha = \sin(\Omega t)e^{-i\omega_0 t/2}$$

$$\beta = i\cos(\Omega t)e^{i\omega_0 t/2} \tag{14.101}$$

Ovo se odmah može zameniti u krajnji rezultat (14.53-55)

$$\langle \hat{s}_z \rangle = \frac{\hbar}{2}\sin^2(2\Omega t) - \cos^2(\Omega t) = -\frac{\hbar}{2}\cos(2\Omega t). \tag{14.102}$$

Prema (14.102) z komponenta spina oscilira sa frekvencijom 2Ω. Ako je spin originalno, tj u počtku t=0 bio na dole on se preokreće, i tako dalje. Za druge komponente

$$\langle \hat{s}_x \rangle = -\frac{\hbar}{2}\sin(2\Omega t)\sin(\omega_0 t), \tag{14.103}$$

$$\langle \hat{s}_y \rangle = \frac{\hbar}{2}\sin(2\Omega t)\cos(\omega_0 t). \tag{14.104}$$

Ove jednačine indiciraju da je spinsko kretanje u x-y ravni superpozicija dva kretanja, brzo rotaciono kretanje sa frekvencijom ω_0 i modulisano sa frekvencijom 2Ω. Celokupni rezultat (14.102-104) se može lako interpretirati ako spin razmatramo očekivane vrednosti spina kao vektor sa komponentama $\langle \hat{s}_x \rangle, \langle \hat{s}_y \rangle\, i\, \langle \hat{s}_z \rangle$. Očigledno, projekcija vektora za z osu je $(-\hbar/2)\cos(2\Omega t)$, dok su projekcije na x i- y ravan $(\hbar/2)\sin(2\Omega t)$. Kao što se može videti iz formule, spin tip lagano klizi od - Z ose ka horizontali, i onda dalje ka +Z pravcu, istovremeno precesujući. Tako, spin se ponaša tačno kao čigra pod uticajem spoljašnjih sila, kao što je naznačeno u prethodnim poglavljima.

Razmotrićemo ovaj proces još jednom sa više detalja. U trenutku t=0,

$$\langle \hat{s}_z \rangle = -\hbar/2. \tag{14.105}$$

Sada se pitamo, razmatrajući intiutivno, kada je spin u horizontalnom položaju, tj.

$$\langle \hat{s}_z \rangle = 0. \tag{145.106}$$

Ovo je jasno slučaj kada je kosinusna funkcija jednaka nuli, tj. kada je

$$2\Omega t = \pi / 2 \tag{14.107}$$

ili posle isteka vremena

$$t = \pi / 4\Omega = \pi\hbar /(4\mu_B F) \tag{14.108}$$

Ako dozvolimo da transverzalno magnetno polje deluje na spin za ovo vreme, oni će se usmeriti u horizontalnom položaju (slika 14.2). Drugim rečima, oni su se zarotirali za ugao π/2. Zato govorimo i π/2 ili 90^0 impulsu. Prirodno, možemo da dozvolimo da magnetno polje deluje duže vreme, dok se spin ne usmeri nagore, to jest da je

$$\langle \widehat{s}_z \rangle = \hbar / 2. \tag{14.109}$$

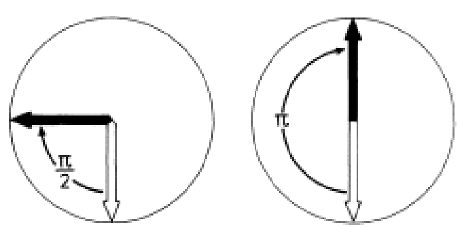
Ovo se dogadja kada je ispunjeno

$$\cos(2\Omega t) = -1 \tag{14.110}$$

tj. posle vremena

$$t = \pi / 4\Omega = \pi\hbar /(2\mu_B F) \tag{14.111}$$

U ovom slučaju govorimo o π ili 180^0 impulsu (Slika 14.2)



Slika 14.2. Levo: Spin se zaokrenuo za π/2. Desno: spin se zaokrenuo za π.

Ova razmatranja objašnjavaju najvažnije osobine spin rezonance. Primenjujući rotaciono magnetno polje možemo da izazovemo da se spin preokreće iz jednog u drugi pravac. U praksi, naravno, ne primenjuju se magnetno polje koje rotira sa frekvencijom spina, već linearno oscilujuće magnetno polje. Ovo se može predstaviti kao superpozicija dva polja koja rotiraju u suprotnim pravcima. Onda jedno od polja rotira sa spinom, kao i ranije, dok drugo rotira sa dvostrukom frekvencijom kako izgleda sa tačke gledišta sistema vezanog za rotirajući spin.

Odgovarajuće jednačine imaju, praktično isti oblik kao i gore, osim dodatno, brzo oscilujućeg člana, koji dolazi od "suprotno oscilujućeg" magnetnog polja. Sa dobrom aproksimacijom, ovo se može ignorisati: rezultat je "aproksimacija rotirajućeg talasa".

14.5. Bloch ova jednačina

Kao što smo upravo videli, ponašanje očekivanih vrednosti operatora spina se može vrlo jednostavno interpretirati. Razumno je onda postaviti pitanje da li je moguće izvesti jednačine za ove očekivane vrednosti. Ovo u stvari i jeste slučaj. Da bi izveli ove jednačine, koristimo eksplicitnu formu koja je upravo izvedena za očekivane vrednosti operatora spina. Diferenciramo $\langle \hat{s}_x \rangle$ po vremenu i koristimo (14.103) da bi dobili

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{s}_x \rangle = -(\hbar/2)2\Omega\cos(2\Omega t)\sin(\omega_0 t) - (\hbar/2)\omega_0 \sin(2\Omega t)\cos(\omega_0 t) \tag{14.112}$$

Ova jednačina na desnoj strani sadrži $-(\hbar/2)\cos(2\Omega t)$, što nije ništa drugo do očekivana vrednost z komponente spina. Takodje prepoznajemo da drugi član na desnoj strani sadrži očekivanu vrednost *y* komponente spina. Jednačina (14.112) se može zapisati u obliku

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{s}_x \rangle = (1/\hbar)2\mu_B F\sin(\omega_0 t)\langle \hat{s}_z \rangle - \omega_0 \langle \hat{s}_y \rangle \tag{14.113}$$

Vidimo da postoje faktori ispred očekivanih vrednosti spina na desnoj strani jednačine. $F\sin\omega_0 t$, je upravo B_y, dok je ω_0 proporcionalno sa B_z. Ako, takodje uzmemo u obzir relacije (14.84) i (14.85), (14.112) postaje

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{s}_x \rangle = \frac{e}{m_0}\langle \hat{s}_z \rangle B_y - \frac{e}{m_0}B_z\langle \hat{s}_y \rangle \tag{14.114}$$

Na sličan način, nalazimo da je izvod po y komponenti spina :

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{s}_y \rangle = -\frac{e}{m_0}\langle \hat{s}_z \rangle B_x + \frac{e}{m_0}B_z\langle \hat{s}_x \rangle \tag{14.115}$$

Ako diferenciramo izraz (14.102) za $\langle \hat{S}_z \rangle$ neposredno se dobije

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{s}_z \rangle = \frac{\hbar}{2}2\Omega\sin(2\Omega t) \tag{14.116}$$

Pošto očekujemo da se desna strana (14.116) može izraziti u obliku očekivanih vrednosti komponenti spina kao (14.114) i (14.115), koristimo relaciju

$$\sin^2\omega_0 t + \cos^2\omega_0 t = 1 \tag{14.117}$$

da bi smo desnu stranu 914.116) napisali u obliku

$$\hbar\Omega\sin(2\Omega t)\left[\sin(\omega_0 t)\sin(\omega_0 t)+\cos(\omega_0 t)\cos(\omega_0 t)\right] \tag{14.118}$$

Sada je lako pokazati da se (14.116) može napisati u obliku

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{s}_z\rangle = -\frac{e}{m_0}\langle\hat{s}_x\rangle B_y + \frac{e}{m_0}\langle\hat{s}_y\rangle B_x \tag{14.119}$$

Jednačine (14.114, , 115 i 119) se mogu pisati u obliku

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{\vec{s}}\rangle = \vec{\mu}x\vec{B} \tag{14.120}$$

što se lako može videti iz pravila vektorskog množenja. Ovde smo "skupili" očekivane vrednosti triju komponenti operatora spina u vektor

$$\langle\hat{\vec{s}}\rangle = \begin{bmatrix}\langle\hat{s}_x\rangle\\ \langle\hat{s}_y\rangle\\ \langle\hat{s}_z\rangle\end{bmatrix} \tag{14.121}$$

Ovo jako podseća na jednačinu sprega čigre, ako **s** identifikujemo kao momenat impulsa i uzmemo u obzir da je

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{m_0}\langle\hat{\vec{s}}\rangle \tag{14.122}$$

Jednačina (14.12)) nije najpogodnija za interpretaciju mnogih eksperimenata, jer, u mnogim slučajevima, spin čestice interaguje sa okolinom. Na primer, orbitalno kretanje spina je neprekidno perturbovano oscilacijama rešetke. Ovo rezultuje u stalnom faznom pomeraju precesije spina. U ovom slučaju, nije više dovoljno smatrati jednačinu jednog spina kao reprezentativnu za sve spinove, kao što smo implicitno 'činili do ovog mesta. Umesto toga, mora se razmatrati "skup" ili "ansambl" spinova, i na neki način moramo čiste kvantno mehaničke očekivane vrednosti koje smo koristili do sada podvrgnuti drugom procesu usrednjavanja. Potrebno je da uzmemo u račun, na primer, da x komponenta spina, nema više definisanu vrednost u datom momentu, već pre raspodelu vrednosti. Sa tokom vremena, raspodela se širi tako da je verovatnoća da je vrednost $\langle\hat{s}_x\rangle$ pozitivna se približava istoj vrednosti kao i verovatnoća da je negativna. Ovo znači, medjutim, da u toku vremena, s_x postaje jednako nuli. Da bi smo ovo uzeli u obzir, dodamo više članova u (14.120) koji reflektuju nekoherentno kretanje spina.

Ovo kvalitativno razmatranje se reflektuje u fenomenološkom pravilu

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{s}_x\rangle_{incoh} = -\frac{1}{T_2}\langle\hat{s}_x\rangle \tag{14.123}$$

Kako $\langle \hat{s}_x \rangle$ i $\langle \hat{s}_y \rangle$ imaju istu ulogu moramo prirodno pretpostaviti odgovarajuće pravilo i za $\langle \hat{s}_y \rangle$

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{s}_y \rangle_{incoh} = -\frac{1}{T_2}\langle \hat{s}_y \rangle \qquad (14.124)$$

Kako spin precesuje oko z ose, (14.123) i (14.124) indiciraju kako brzo komponente seku s_z pravac. T_2 se zato često naziva transverzalno relaksaciono vreme. To je mera brzine sa kojom individualno precesiono kretanje spina odlazi iz faze.

Kako je z komponenta spina usmerena duž konstantnog magnetnog polja, mora se tretirati različito u odnosu na druge dve. U ovom slučaju, takodje, možemo da očekujemo relaksaciju koja potiče od interakcije spina sa njegovom okolinom. Ona će prirodno, zavisiti od orijentacije spina u odnosu na spoljašnje magnetno polje- da li se polje prostire u pozitivnom ili negativnom smeru z ose. Spin može da predaje energiju preko sprezanja sa okolinom i pokušavaće da dostigne najniže stanje ako je okolina na temperaturi apsolutne nule, T=0. S druge strane ako je okolina na konačnoj temperaturi, sistem spinovi i njihova okolina će težiti dostizanju termalne ravnoteže. U termalnoj ravnoteži, neki spinovi će biti u višem stanju, a drugi u nižem. Ako se sistem spinova poremeti iz termalne ravnoteže, on će prirodno težiti da se vrati u nju u toku nekog intervala vremena T_1. T_1 se često naziva longitudalno relaksaciono vreme. Ovo što je upravo rečeno se može zapisati u matematičkoj formi, ako uzmemo

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{s}_z \rangle_{incoh} = \frac{s_0 - \langle \hat{s}_z \rangle}{T_1} \qquad (14.125)$$

za nekoherentnu relaksaciju $\langle \hat{s}_z \rangle$. Ovde je s_0 vrednost koju će komponenta spina $\langle \hat{s}_z \rangle$ imati u termodinamičkoj ravnoteži. Dolazimo do Blochove jednačine dodavanjem nekoherentnog člana (14.123-125) jednačini (14.120) koja opisuje nekoherentno kretanje spina.

Tako Blohova jednačina ima oblik

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{s}_z \rangle = -\frac{e}{m_0}\langle \hat{s} \rangle x\vec{B} + \begin{bmatrix} -\frac{1}{T_2}\langle \hat{s}_x \rangle \\ -\frac{1}{T_2}\langle \hat{s}_y \rangle \\ \frac{s_0 - \langle \hat{s}_z \rangle}{T_1} \end{bmatrix} \qquad (14.126)$$

Relaksaciona vremena T_1 i T_2 su mera jačine kuplovanja elektronskog (ili protonskog) spina sa okolinom. Merenje T_1 i T_2 često obezbedjuje važne informacije o procesima interakcije spina i okoline, tj kretanje tečnosti i čvrstih tela. Razmatraćemo tipičan i elegantan primer u poglavlju 15.4.

14.6. Relativistička teorija elektrona. Dirakova jednačina

Da bi smo korektno opisali interakciju elektrona i magnetskog polja, uveli smo operator spina, koji predstavlja unutrašnji stepen slobode elektrona. Dirak je pokazao da unutrašnji stepen slobode sledi iz relativističke kvantne teorije. U ovom poglavlju tretiraćemo Dirakovu jednačinu. Da bi smo došli do relativističke talasne jednačine, čini se pogodnim slično razmatranje kao i slučaju nerelativističke Šredingerove jednačine.

Izvodjenje dato ovde se može sumirati u sledećem "receptu" (vidi takodje sekciju 9.3): početi sa klasičnom relacijom izmedju energije i impulsa za česticu na koju ne deluju nikakve sile

$$E = \frac{p^2}{2m_0} \tag{14.127}$$

i zameniti energiju i komponente impulsa **p** operatorima prema

$$E \to i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tag{14.128}$$

i

$$p_x \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} \tag{14.129}$$

Poslednja jednačina se može skratiti kao

$$\vec{p} \to \frac{\hbar}{i}\nabla \tag{14.130}$$

Sledeći pravila računanja u kvantnoj mehanici (poglavlja 9.2,3) ovi operatori deluju na talasne funkcije ψ, te (14.127) postaje dobro poznata Šredingeorva jednačina

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2\psi \tag{14.131}$$

Sada ćemo probati da primenimo ovaj recept na relativističku relaciju izmedju energije i impulsa. Ona je u obliku

$$E = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4} \tag{14.132}$$

Ako izrazimo E i **p** preko operatora u skladu sa (14.128) i (14.130) i dozvolimo da rezultujući izrazi na obe strane (14.132) deluju na talasnu funkciju ψ dobijamo jednačinu

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \sqrt{-\hbar^2c^2\nabla^2 + m_0^2c^4}\,\psi \tag{14.133}$$

Ova jednačina sadrži Laplasov operator ∇^2 pod kvadratnm korenom što se može u prvom momentu činiti kao neki kozmetički defekt. Medjutim, ovaj pristup je potpuno neuspešan kada se pokuša da se uključe efekti električnog i magnetnskog polja na elektron u takvoj talasnoj jednačini. Teorija je došla u ćor-sokak. Fizičari su izabrali dva puta da izadju iz ove situacije.

Put 1. Klajn Gordonova jednačina

Kako se čini da sva poteškoća dolazi od kvadratnog korena u (14.133), potrebno je razmisliti kako ga izbeći. Mogu se kvadrirati obe strane jednačine (14.132) i dobija se

$$E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4, \tag{14.134}$$

koja, se naravno neposredno transformiše u talasnu jednačinu

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi = -(c^2\hbar^2 + m_0^2c^4)\psi\ , \tag{14.135}$$

koja se naziva Klajn Gordonova jednačina. Ona se može preurediti u elegantniju formu deleći obe strane sa $c^2\hbar^2$ i uvodeći operator

$$\Box^2 = \nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t} \tag{14.136}$$

Klajn Gordonova jednačina je onda data kao

$$\Box^2\psi = \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\psi \tag{14.137}$$

Istražimo sada njena rešenja. Pošto se za česticu na koju ne deluju nikakve sile očekuje de Broljev talas, probamo funkciju

$$\psi = e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} \tag{14.138}$$

u kojoj je kao i obično,

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \quad \text{i} \quad \vec{p} = \hbar\vec{k} \tag{14.139}$$

Da bi smo odredili energiju, E, normalo, potrebno je odrediti kvadratni koren. Tako dobijamo, ne samo pozitivnu, energiju

$$E = +\sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4} \tag{14.140}$$

već, takodje i negativnu energiju

$$E = -\sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4} \tag{14.141}$$

Kako slobodna čestica može da ima samo pozitivne energije, ovde se opet srećemo sa teškoćom. Štaviše, dalja analiza rešenja otkriva da gustina čestica takodje može da postane negativna, što je takodje nefizički rezultat. Klajn Gordonova jednačina je reinterpretirana od strane Paulija i Weiskopfa, koji su koristili gustinu naelektrisanja umesto gustine mase, i tako našli da je primenljiva u kvantnoj teoriji polja čestica sa nultim spinom. Medjutim, dalji razvoj ove teme je izvan okvira ove knjige.

Put 2. Dirakova jednačina

Dirak je razmatrao sledeće pitanje; da li se koren u (14.132) može ekstrakovati na neki jednostavniji način. U graničnom slučaju p=0, nalazimo

$$\sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4} \to m_0c^2;$$

i za m_0=0 (14.142)

$$\sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4} \to pc.$$

Da bi smo razumeli Dirakov pristup, razmotrimo prvo jednodimenzionalni slučaj i generališimo (14.142) u

$$\sqrt{p_x{}^2c^2 + m_0^2c^4} = \alpha c p_x + \beta m_0 c^2. \tag{14.143}$$

Ova jednačina se ne može ispuniti u opštem slučaju $p_x \neq 0, m_0 \neq 0$ sa običnim brojevima α i β; medjutim, može se ispuniti kada su α i β matrice što ćemo demonstrirati. Kvadriramo obe strane (14.143), vodeći računa da matrice u opštem slučaju nisu komutativne, tako da moramo da se pridržavamo redosleda α i β pri množenju desne strane jednačine (14.143). Dobijamo

$$p_x^2c^2 + m_0^2c^4 = \alpha^2c^2p_x^2 + (\alpha\beta + \beta\alpha)m_0c^3p_x + \beta^2m_0^2c^4. \tag{14.144}$$

Da bi leva strana jednačine bila jednaka desnoj, jasno je da mora biti zadovoljen uslov

$$\alpha^2 = 1; \quad \alpha\beta + \beta\alpha = 0; \quad \beta^2 = 1. \tag{14.145}$$

Ove relacije su poznate ili slične Paulijevim spinskim matricama (vidi problem 14.2). Na žalost, ne možemo ih koristiti direktno (Paulijeve matrice) jer želimo da opišemo tri dimenzionalno, a ne jednodimenzionalno kretanje. Tako, zahtevamo da je

$$\sqrt{\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)c^2+m_0^2c^4}=\alpha_1cp_x+\alpha_2cp_y+\alpha_3cp_z+\beta m_0c^2. \tag{14.146}$$

Kvadriranje (14.146) dovodi, analogno jednodimenzionalnom slučaju do

$\alpha_j{}^2=1; \quad \alpha_j\beta+\beta\alpha_j=0; \quad \beta^2=1. \qquad$ i

$$\alpha_j\alpha_k+\alpha_k\alpha_j=0 \quad za \quad j\neq k; \quad j=1,2,3 \quad i \quad k=1,l,3 \tag{14.147}$$

Pored svega, kao i uvek u kvantnoj mehanici, operatori su Hermitski. Ove relacije se mogu ispuniti na razne (fizički ekvivalentne) načine, na primer

$$\alpha_j=\begin{bmatrix}0 & \sigma_j\\ \sigma_j & 0\end{bmatrix}, \quad \beta=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} \tag{14.148}$$

gde su σ_j Paulijeve spinske matrice (14.24 ali bez $h/2\pi$). Broj "1" u β predstavlja 2x2 matricu, tako da se β može zapisati kao

$$\beta=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1\end{bmatrix} \tag{14.149}$$

Nakon ovih medju-koraka, možemo ponovo da napadenemo Dirakovu jednačinu, koristeći pravila (14.128) i (14.130) i primenjujući ih na jednačinu

$$E=\alpha_1cp_x+\alpha_2cp_y+\alpha_3cp_z+\beta m_0c^2. \tag{14.150}$$

Ovo dovodi do

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=(\alpha_1cp_x+\alpha_2cp_y+\alpha_3cp_z+\beta m_0c^2)\psi. \tag{14.151}$$

što je Dirakova jednačina.

Kako su α_j i β matrice 4x4, radi se sa vektorima sa četiri komponenti, tj., ψ se mora pisati kao

$$\psi = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{bmatrix} \qquad (14.125)$$

Radeći sa elektronskim spinom u prethodnim poglavljima upoznali smo se sa talasnim funkcijama koje imaju dve komponente; u Dirakovoj teoriji, one imaju 4 komponenti. Ovo je rezultat činjenice da Dirakova jednačina dozvoljava obe, i pozitivna i negativna energetska rešenjaza slobodne čestice.

Kao što se čitaoc može ubediti u jednom od problema u ovoj Glavi, Dirakova jednačina daje isti energetski spektar kao i Klajn Gordonova jednačina; to je dato u (14.140, 141) i na slici 14.3. Možemo se lako ubediti da rešenje Dirakove jednačine za slobodnu česticu ima oblik

$$\psi(r,t) = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{bmatrix} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} \qquad (14.153)$$

gde su konstante $\psi_1,..,\psi_4$ izračunate u problemu 14.6.

U Dirakovoj jednačini u obliku (14.151) izvod po vremenu ima specijalnu ulogu u odnosu na izvod po prostornim koordinatama. Medjutim, u relativističkoj teoriji, vremenska i prostorne koordinate imaju simetričan položaj kao komponente vektora prostor-verme; tako u litearaturi, često se koristi simetrizovana forma Dirakove jednačine. Ona se dobija množenjem obe strane (14.151) s leva sa $\gamma^0=\beta$ i uvodeći nove matrice

$$y^j = \beta\alpha_j \quad \text{sa j=1,2,3.} \qquad (14.154)$$

Može se pokazati da su resultujuće jednačine kovarijantne u odnosu na “Lorenzove transformacije”

$$i\hbar\left(y^0 \frac{\partial}{\partial x^0} + y^1 \frac{\partial}{\partial x^1} + y^2 \frac{\partial}{\partial x^2} + y^3 \frac{\partial}{\partial x^3} \right)\psi = m_0 c\psi \qquad (14.155)$$

sa x^0=ct; x_1=x, x_2=y, x_3=z.

Eksplicitna forma matrica y^0 i y^j je

$$y^0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad y^1 = \begin{bmatrix} 0 & \sigma^j \\ -\sigma^j & 0 \end{bmatrix} \tag{14.156}$$

gde su σ^j ponovo Paulijeve matrice.

Na kraju diskutujemo posledicu dejstva električnog i magnetskog polja na elektron u Dirakovoj jednačini. Za ovu svrhu ponovo koristimo proceduru Šredingerove teorije:

1) Potencijalna energija $V(r) = -e\overline{V}$ koja rezultuje iz elektrostatičkog potencijala $\overline{V}$ se dodaje po analogiji sa (9.32). Ovo se takodje može izraziti prihvatanjem sledećih izraza:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\overline{V} \tag{14.157}$$

2) Magnetno polje se uzima u račun zamenjujući operator impulsa

$$\frac{i}{\hbar}\nabla \rightarrow \frac{i}{\hbar}\nabla + e\vec{A} \tag{14.158}$$

gde je **A** vektorski potencijal.

Rezultujuća Dirakova jednačina je rešena za nekoliko slučajeva, posebno za vodonikov atom. Rezultati su u vrlo dobrom slaganju sa experimentima, uz korekciju koja potiče od kvantne elektrodinamike (Lambov pomeraj).

Uprkos uspehu Dirakove teorije, pitanje značenja negativnih vrednosti energije slobodne čestice je ostalo otvoreno. Ono bi dozvolilo da elektron sa pozitivnom energijom emituje svetlost i da padne u dublje ležeće stanje, tj. negativni energetski nivo, i tako bi na kraju sve čestice sa pozitivnom energijom upalu u ovaj energetski ponor.

Dirak je imao ingenioznu ideju pretpostavljajući da su sva stanja negativne energije već zauzeta elektronima, sledeći Paulijev princip, prema kome svako stanje može da sadrži najviše dva elektrona sa antiparalelnim spinovima. Beskonačno veliko negativno naelektrisanje ovog tzv. Dirakovog mora, se može kompenzovati pozitivnim naelektrisanjem protona, koji takodje zadovoljavaju Dirakovu jednačinu i moraju da ispunjavaju odgovarajuće pozitivno naelektrisano Dirakovo more. Vakum, bi se prema ovoj interpretaciji sastojao od dva ispunjena Dirakova mora.

Ako sada dodamo dovoljno energije elektronu u Dirakovom moru, on može preći energetski jaz od $2m_0c^2$ i elektron sa pozitivnom energijom će se pojaviti, ostavljajući iza sebe šupljinu u Dirakovom moru. Kako je ova šupljina nedostajuće negativno naelektrisanje, a Dirakovo more je prethodno bilo neutralno, šupljina deluje kao pozitivno naelektrisanje (+e). Štaviše, ona ima neke osobine čestice i ona se pojavljuje kao takva. Kreiranje elektron šupljinskog para se zaista i može opaziti: pozitivno naelektrisana čestica je eksperimentalno poznata kao pozitron.

U modernoj kvantnoj teoriji polja, kreacija pozitrona se može direktno opisati na formalan način, bez pozivanja beskonačnog Dirakovog polja. Na drugoj strani, ova ideja Dirakovog mora daje intiutivnu sliku pojave pozitivno naelektrisanog elektrona, tj. pozitrona.

Problemi

14.1. *Landauovi nivoi*

Ako se slobodan elektron nadje u magnetskom polju, primoran je da se kre}e po kru`noj putanju u ravni normalnoj na magnetsko polje. Tako, on ima periodi~no kretanje koje se mo`e kvantovati ~ak i u Sommerfeldovoj formulaciji. Ova kvantizacija vodi do diskretnih nivoa, tzv Landauovih nivoa. Ovo se takodje dobija i iz strogoh kvantno mehani~kog tretmana.

Problem: Re{iti vremenski nezavisnu Schrodingerovu jedna~inu ~estice sa naelektrisanjem (-e) koja se kre}e u x-y ravni normalnoj na konstantno magnetsko polje **B**. Ne uzimati u obzir spin elektrona u obzir.

Napomena. Koristiti vektorski potencijal **A**, u obliku **A**=(0,B_x0) i probno re{enje $\psi(x,y,z)=e^{ikx}\Phi(x)$

Pored toga, da Φ(x) zadovoljava Schrodingerovu jedna~inu harmonijskog oscilatora.

14.2. Poka`i da spinske operatore $\hat{s}_x, \hat{s}_y$ (14.33a,b) va`e slede}e relacije:

$$\hat{s}_x\hat{s}_y + \hat{s}_y\hat{s}_x = 0, \qquad \left(\frac{2}{\hbar}\hat{s}_x\right)^2 = 1, \quad \left(\frac{2}{\hbar}\hat{s}_y\right)^2 = 1$$

Napomena: koristiti eksplicitnu matri~nu formu.

14.3. Demonstrirati da se relativisti~ki izraz za energiju (14.132) mo`e zapisati u obliku

$$E \approx m_0c^2 + \frac{p^2}{2m_0}$$

pod uslovom da je

$$\frac{p^2}{2m_0} << \frac{m_0c^2}{2}$$

Uputstvo: Razvi kvadratni koren u red.

14.4. Pokazati da se zakon odr`anja (naelektrisanja) u formi

$$\frac{d\rho}{dt} + div\vec{j} = 0$$

mo`e izvesti iz Klein-Gordonove jedna~ine.

Uputstvo: Pomno`i Klein-Gordonovu jenda~inu (napisanu pomo}u $\Box^2$) sa ψ* i oduzeti od njegove kompleksno konjugovane. Koristi

$$\rho = \frac{i\hbar}{2m_0c^2}(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t})$$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2im_0}(\psi^* grad\,\psi - \psi grad\,\psi^*).$$

14.5 Pokazati da svaka komponenta (14.153) zadovoljava Klein-Gordonovu jedna~inu.
Uputstvo: napisati Diracovu jedna~inu (14.151) u obliku

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \aleph\, \psi \qquad (1)$$

i zatim primeni $i\hbar \dfrac{\partial}{\partial t}$ na obe strane jedna~ine; koristi (1) ponovo i preuredi $\aleph$ koriste}i Diracove matrice.

14.6. Re{i Diracovu jedna~inu za ~esticu koja se kre}e u z pravcu bez dejstva ikakvih sila.
Uputstvo. Zameni probno re{enje

$$\psi(\vec{r},t) = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{bmatrix} e^{(ikz - i\omega t)}$$

u (14.151) i re{i algebarsku jedna~inu.
Koje energije odgovaraju raznim re{enjima?