Спин ½
(продолжение)

Вспомним

Частица в классической гамильтоновой механике

$$\begin{cases} x = x(t), \ \ p_x = p_x(t) \\ y = y(t), \ \ p_y = p_y(t) \\ z = z(t), \ \ p_z = p_z(t) \end{cases} - \text{динамические переменные}$$

$$H\left(p_x, p_y, p_z, x, y, z\right) = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + U(x, y, z) -$$ гамильтониан частицы в классической физике

Уравнения Гамильтона

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = \dfrac{\partial H}{\partial p_x}, \ \ \dot{p}_x(t) = -\dfrac{\partial H}{\partial x} \\ \dot{y}(t) = \dfrac{\partial H}{\partial p_y}, \ \ \dot{p}_y(t) = -\dfrac{\partial H}{\partial y} \\ \dot{z}(t) = \dfrac{\partial H}{\partial p_z}, \ \ \dot{p}_z(t) = -\dfrac{\partial H}{\partial z} \end{cases}$$

Начальные условия

$$\begin{cases} x_0 = x(t = t_0), \ \ p_{x0} = p_x(t = t_0) \\ y_0 = y(t = t_0), \ \ p_{y0} = p_y(t = t_0) \\ z_0 = z(t = t_0), \ \ p_{z0} = p_z(t = t_0) \end{cases}$$

$t_0 -$ начальный момент времени

$$\begin{cases} x = x(t), \ \ p_x = p_x(t) \\ y = y(t), \ \ p_y = p_y(t) - t > t_0 \\ z = z(t), \ \ p_z = p_z(t) \end{cases}$$

Переход к квантовой механике для системы имеющей классический аналог

$$x, y, z, p_x, p_y, p_z \Rightarrow \hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$$

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + U\left(x, y, z\right) \Rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2}{2m} + U\left(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}\right)$$

$$\begin{cases} \hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = i\hbar \\ \hat{y}\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{y} = i\hbar \\ \hat{z}\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{z} = i\hbar \end{cases}$$

$$\begin{cases} \hat{x}\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{x} = 0 \\ \hat{x}\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{x} = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \hat{x}\hat{y} - \hat{y}\hat{x} = 0 \\ \hat{x}\hat{z} - \hat{z}\hat{x} = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \hat{y}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{y} = 0 \\ \hat{y}\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{y} = 0 \end{cases}$$

$$\hat{y}\hat{z} - \hat{z}\hat{y} = 0$$

$$\hat{q}_i\hat{p}_j - \hat{p}_j\hat{q}_i = i\hbar\delta_{ij}$$

$$\hat{q}_i\hat{q}_j - \hat{q}_j\hat{q}_i = 0$$

$$\hat{p}_i\hat{p}_j - \hat{p}_j\hat{p}_i = 0$$

$$\hat{x} = x, \;\; \hat{y} = y, \;\; \hat{z} = z, \;\; \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \;\; \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}$$

Описание частицы в квантовой механике

$\psi = \psi\left(x, y, z, t\right) -$ волновая функция

Уравнение Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\psi\left(x, y, z, t\right)}{\partial t} = \hat{H}\psi\left(x, y, z, t\right)$$

Начальное условие

$$\psi_0 = \psi\left(x, y, z, t_0\right) \Rightarrow \psi = \psi\left(x, y, z, t\right) \;\; \left(t > t_0\right)$$

Момент импульса частицы в классической механике

$\mathbf{L} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}]$ – момент импульса частицы

$$\mathbf{L} = \begin{vmatrix} \mathbf{x}^0 & \mathbf{y}^0 & \mathbf{z}^0 \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}, \text{ где}$$

$\mathbf{r} = \mathbf{x}^0 x + \mathbf{y}^0 y + \mathbf{z}^0 z$ – радиус-вектор частицы,

x, y, z – декартовые компоненты вектора $\mathbf{r}$,

$\mathbf{p} = \mathbf{x}^0 p_x + \mathbf{y}^0 p_y + \mathbf{z}^0 p_z$ – импульс частицы,

p_x, p_y, p_z – декартовые компоненты вектора $\mathbf{p}$,

$$\begin{cases} L_x = yp_z - zp_y \\ L_y = zp_x - xp_z \\ L_z = xp_y - yp_x \end{cases}$$ – декартовые компоненты момента импульса.

Момент импульса частицы в квантовой механике

$$x, y, z, p_x, p_y, p_z \Rightarrow \hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$$

$$\begin{cases} L_x = yp_z - zp_y \\ L_y = zp_x - xp_z \\ L_z = xp_y - yp_x \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{cases}$$

$$\begin{cases} \hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = i\hbar \\ \hat{y}\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{y} = i\hbar \\ \hat{z}\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{z} = i\hbar \end{cases}$$

$$\hat{x} = x,\ \ \hat{y} = y,\ \ \hat{z} = z,\ \ \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x},\ \ \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}$$

$$\hat{z}\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{z} = \hat{z}\left(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\right) - \left(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\right)\hat{z} = 0$$
$$\hat{p}_z\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{p}_z = \hat{p}_z\left(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\right) - \left(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\right)\hat{p}_z = 0$$

$$\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x = ?$$

$$\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x = \left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right)\left(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z\right) - \left(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z\right)\left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right) =$$
$$= \hat{y}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_x - \hat{y}\hat{p}_z\hat{x}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_x + \hat{z}\hat{p}_y\hat{x}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z + \hat{z}\hat{p}_x\hat{z}\hat{p}_y + \hat{x}\hat{p}_z\hat{y}\hat{p}_z - \hat{x}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_y =$$
$$= \hat{y}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_x + \hat{z}\hat{p}_y\hat{x}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z - \hat{x}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_y =$$
$$= \hat{p}_z\hat{z}\hat{y}\hat{p}_x - \hat{p}_z\hat{z}\hat{x}\hat{p}_y + \hat{p}_y\hat{x}\hat{z}\hat{p}_z - \hat{p}_x\hat{y}\hat{z}\hat{p}_z =$$
$$= \hat{p}_z\hat{z}\left(\hat{y}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_y\right) + \hat{x}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_z - \hat{y}\hat{p}_x\hat{z}\hat{p}_z =$$
$$= -\hat{p}_z\hat{z}\hat{L}_Z + \left(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x\right)\hat{z}\hat{p}_z = -\hat{p}_z\hat{z}\hat{L}_Z + \hat{L}_Z\hat{z}\hat{p}_z = \hat{L}_Z\left(\hat{z}\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{z}\right) = \hat{L}_Z i\hbar$$
$$\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x = i\hbar\hat{L}_z$$

ИТОГ

$$\begin{cases} \hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x = i\hbar\hat{L}_z \\ \hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y = i\hbar\hat{L}_x \\ \hat{L}_z\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_z = i\hbar\hat{L}_y \end{cases}$$

Спин-момент количества движения электрона (отсутствие движения электрона)

Операторы спина

$\hat{S}_x,\ \hat{S}_y,\ \hat{S}_z$ – операторы спина электрона

ПОСТУЛАТ

$$1.\ \begin{cases} \hat{S}_x\hat{S}_y - \hat{S}_y\hat{S}_x = i\hbar\hat{S}_z \\ \hat{S}_y\hat{S}_z - \hat{S}_z\hat{S}_y = i\hbar\hat{S}_x \\ \hat{S}_z\hat{S}_x - \hat{S}_x\hat{S}_z = i\hbar\hat{S}_y \end{cases}$$

2. Операторы $\hat{S}_x,\ \hat{S}_y,\ \hat{S}_z$ только по 2 собственных значений $+\frac{\hbar}{2},\ -\frac{\hbar}{2}$

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\ \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Примечание

$$\hat{S}_x^+ = \hat{S}_x,\ \hat{S}_y^+ = \hat{S}_y,\ \hat{S}_z^+ = \hat{S}_z \Rightarrow \hat{S}_x,\ \hat{S}_y,\ \hat{S}_z - \text{эрмитовы}$$

Проверка

$$\hat{S}_x\hat{S}_y - \hat{S}_y\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} =$$

$$= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2\left(\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}\right) = 2\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = 2i\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = i\hbar\hat{S}_z$$

$$\hat{S}_x\hat{S}_y - \hat{S}_y\hat{S}_x = i\hbar\hat{S}_z$$

Матрицы Паули

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\ \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_x,\ \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y,\ \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z$$

Преобразование спиновой волновой функции при переходе от базиса $\left\{ \left| z^{(1)} \right\rangle,\ \left| z^{(2)} \right\rangle \right\}$ к базису $\left\{ \left| y^{(1)} \right\rangle,\ \left| y^{(2)} \right\rangle \right\}$ и обратно

$$\begin{pmatrix} C_{1z}(t) \\ C_{2z}(t) \end{pmatrix} ? \Leftrightarrow ? \begin{pmatrix} C_{1y}(t) \\ C_{2y}(t) \end{pmatrix}$$

$$\left| \psi(t) \right\rangle = \left| z^{(1)} \right\rangle C_{1z}(t) + \left| z^{(2)} \right\rangle C_{2z}(t)$$

$$\left| \psi(t) \right\rangle = \left| y^{(1)} \right\rangle C_{1y}(t) + \left| y^{(2)} \right\rangle C_{2y}(t)$$

$$C_{1z}(t) = ?$$

$$\left\langle z^{(1)} \middle| \psi(t) \right\rangle = \left\langle z^{(1)} \middle| z^{(1)} \right\rangle C_{1z}(t) + \left\langle z^{(1)} \middle| z^{(2)} \right\rangle C_{2z}(t)$$

$$\left\langle z^{(1)} \middle| \psi(t) \right\rangle = C_{1z}(t)$$

$$C_{2z}(t) = ?$$

$$\left\langle z^{(2)} \middle| \psi(t) \right\rangle = \left\langle z^{(2)} \middle| z^{(1)} \right\rangle C_{1z}(t) + \left\langle z^{(2)} \middle| z^{(2)} \right\rangle C_{2z}(t)$$

$$\left\langle z^{(2)} \middle| \psi(t) \right\rangle = C_{2z}(t)$$

$$C_{1z}(t) = \left\langle z^{(1)} \middle| \psi(t) \right\rangle = \left\langle z^{(1)} \right| \left(\left| y^{(1)} \right\rangle C_{1y}(t) + \left| y^{(2)} \right\rangle C_{2y}(t) \right) =$$
$$= \left\langle z^{(1)} \middle| y^{(1)} \right\rangle C_{1y}(t) + \left\langle z^{(1)} \middle| y^{(2)} \right\rangle C_{2y}(t)$$

$$C_{1z}(t) = \left\langle z^{(1)} \middle| y^{(1)} \right\rangle C_{1y}(t) + \left\langle z^{(1)} \middle| y^{(2)} \right\rangle C_{2y}(t)$$

$$C_{2z}(t) = \left\langle z^{(2)} \middle| \psi(t) \right\rangle = \left\langle z^{(2)} \right| \left(\left| y^{(1)} \right\rangle C_{1y}(t) + \left| y^{(2)} \right\rangle C_{2y}(t) \right) =$$
$$= \left\langle z^{(2)} \middle| y^{(1)} \right\rangle C_{1y}(t) + \left\langle z^{(2)} \middle| y^{(2)} \right\rangle C_{2y}(t)$$

$$C_{2z}(t) = \left\langle z^{(2)} \middle| y^{(1)} \right\rangle C_{1y}(t) + \left\langle z^{(2)} \middle| y^{(2)} \right\rangle C_{2y}(t)$$

$$\begin{cases} C_{1z}(t) = \left\langle z^{(1)} \middle| y^{(1)} \right\rangle C_{1y}(t) + \left\langle z^{(1)} \middle| y^{(2)} \right\rangle C_{2y}(t) \\ C_{2z}(t) = \left\langle z^{(2)} \middle| y^{(1)} \right\rangle C_{1y}(t) + \left\langle z^{(2)} \middle| y^{(2)} \right\rangle C_{2y}(t) \end{cases}$$

$$\left\langle z^{(1)} \middle| y^{(1)} \right\rangle = ?,\ \left\langle z^{(1)} \middle| y^{(2)} \right\rangle = ?$$
$$\left\langle z^{(2)} \middle| y^{(1)} \right\rangle = ?,\ \left\langle z^{(2)} \middle| y^{(2)} \right\rangle = ?$$

$$\left| z^{(1)} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},\ \left| z^{(2)} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$
$$\left| y^{(1)} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}},\ \left| y^{(2)} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\left\langle z^{(1)} \middle| y^{(1)} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}},\ \left\langle z^{(1)} \middle| y^{(2)} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\left\langle z^{(2)} \middle| y^{(1)} \right\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}},\ \left\langle z^{(2)} \middle| y^{(2)} \right\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}}$$

$$\begin{cases} C_{1z}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} C_{1y}(t) + \frac{1}{\sqrt{2}} C_{2y}(t) \\ C_{2z}(t) = \frac{i}{\sqrt{2}} C_{1y}(t) - \frac{i}{\sqrt{2}} C_{2y}(t) \end{cases}$$

$$+\begin{cases} iC_{1z}(t) = i\frac{1}{\sqrt{2}} C_{1y}(t) + i\frac{1}{\sqrt{2}} C_{2y}(t) \\ C_{2z}(t) = \frac{i}{\sqrt{2}} C_{1y}(t) - \frac{i}{\sqrt{2}} C_{2y}(t) \end{cases}$$

$$iC_{1z}(t) + C_{2z}(t) = 2\frac{i}{\sqrt{2}} C_{1y}(t) \Rightarrow C_{1y}(t) = \left(C_{1z}(t) - iC_{2z}(t)\right)\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$C_{1y}(t) = \left(C_{1z}(t) - iC_{2z}(t)\right)\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$-\begin{cases} iC_{1z}(t) = i\frac{1}{\sqrt{2}}C_{1y}(t) + i\frac{1}{\sqrt{2}}C_{2y}(t) \\ C_{2z}(t) = \frac{i}{\sqrt{2}}C_{1y}(t) - \frac{i}{\sqrt{2}}C_{2y}(t) \end{cases}$$

$$iC_{1z}(t) - C_{2z}(t) = 2i\frac{1}{\sqrt{2}}C_{2y}(t)$$

$$C_{2y}(t) = \left(C_{1z}(t) + iC_{2z}(t)\right)\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\begin{cases} C_{1y}(t) = \left(C_{1z}(t) - iC_{2z}(t)\right)\frac{1}{\sqrt{2}} \\ C_{2y}(t) = \left(C_{1z}(t) + iC_{2z}(t)\right)\frac{1}{\sqrt{2}} \end{cases}$$

ИТОГ

$$\begin{cases} C_{1z}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}C_{1y}(t) + \frac{1}{\sqrt{2}}C_{2y}(t) \\ C_{2z}(t) = \frac{i}{\sqrt{2}}C_{1y}(t) - \frac{i}{\sqrt{2}}C_{2y}(t) \end{cases}$$

$$\begin{cases} C_{1y}(t) = \left(C_{1z}(t) - iC_{2z}(t)\right)\frac{1}{\sqrt{2}} \\ C_{2y}(t) = \left(C_{1z}(t) + iC_{2z}(t)\right)\frac{1}{\sqrt{2}} \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} C_{1z}(t) \\ C_{2z}(t) \end{pmatrix} ? \Leftrightarrow ? \begin{pmatrix} C_{1y}(t) \\ C_{2y}(t) \end{pmatrix}$$

Преобразование спиновой волновой функции при переходе от базиса $\left\{ \left| x^{(1)} \right\rangle, \left| x^{(2)} \right\rangle \right\}$ к базису $\left\{ \left| y^{(1)} \right\rangle, \left| y^{(2)} \right\rangle \right\}$ и обратно

$$\begin{cases} \left| \psi(t) \right\rangle = \left| x^{(1)} \right\rangle C_{1x}(t) + \left| x^{(2)} \right\rangle C_{2x}(t) \\ \left| \psi(t) \right\rangle = \left| y^{(1)} \right\rangle C_{1y}(t) + \left| y^{(2)} \right\rangle C_{2y}(t) \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} C_{1x}(t) \\ C_{2x}(t) \end{pmatrix} ? \Leftrightarrow ? \begin{pmatrix} C_{1y}(t) \\ C_{2y}(t) \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} C_{1z}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} C_{1y}(t) + \frac{1}{\sqrt{2}} C_{2y}(t) \\ C_{2z}(t) = \frac{i}{\sqrt{2}} C_{1y}(t) - \frac{i}{\sqrt{2}} C_{2y}(t) \end{cases}$$

$$\begin{cases} C_{1z}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} C_{1x}(t) + \frac{1}{\sqrt{2}} C_{2x}(t) \\ C_{2z}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} C_{1x}(t) - \frac{1}{\sqrt{2}} C_{2x}(t) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} C_{1y}(t) + \frac{1}{\sqrt{2}} C_{2y}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} C_{1x}(t) + \frac{1}{\sqrt{2}} C_{2x}(t) \\ \frac{i}{\sqrt{2}} C_{1y}(t) - \frac{i}{\sqrt{2}} C_{2y}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} C_{1x}(t) - \frac{1}{\sqrt{2}} C_{2x}(t) \end{cases}$$

$$+\begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} C_{1y}(t) + \frac{1}{\sqrt{2}} C_{2y}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} C_{1x}(t) + \frac{1}{\sqrt{2}} C_{2x}(t) \\ \frac{i}{\sqrt{2}} C_{1y}(t) - \frac{i}{\sqrt{2}} C_{2y}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} C_{1x}(t) - \frac{1}{\sqrt{2}} C_{2x}(t) \end{cases}$$

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{i}{\sqrt{2}} \right) C_{1y}(t) + \left(\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{i}{\sqrt{2}} \right) C_{2y}(t) = \frac{2}{\sqrt{2}} C_{1x}(t)$$

$$(1+i) C_{1y}(t) + (1-i) C_{2y}(t) = 2 C_{1x}(t)$$

$$C_{1x}(t)=\frac{1}{2}(1+i)C_{1y}(t)+\frac{1}{2}(1-i)C_{2y}(t)$$

$$-\begin{cases}\frac{1}{\sqrt{2}}C_{1y}(t)+\frac{1}{\sqrt{2}}C_{2y}(t)=\frac{1}{\sqrt{2}}C_{1x}(t)+\frac{1}{\sqrt{2}}C_{2x}(t)\\ \frac{i}{\sqrt{2}}C_{1y}(t)-\frac{i}{\sqrt{2}}C_{2y}(t)=\frac{1}{\sqrt{2}}C_{1x}(t)-\frac{1}{\sqrt{2}}C_{2x}(t)\end{cases}$$

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}-\frac{i}{\sqrt{2}}\right)C_{1y}(t)+\left(\frac{1}{\sqrt{2}}+\frac{i}{\sqrt{2}}\right)C_{2y}(t)=2\frac{1}{\sqrt{2}}C_{2x}(t)$$

$$C_{2x}(t)=\frac{1}{2}(1-i)C_{1y}(t)+\frac{1}{2}(1+i)C_{2y}(t)$$

ИТОГ

$$\begin{cases}C_{1x}(t)=\frac{1}{2}(1+i)C_{1y}(t)+\frac{1}{2}(1-i)C_{2y}(t)\\ C_{2x}(t)=\frac{1}{2}(1-i)C_{1y}(t)+\frac{1}{2}(1+i)C_{2y}(t)\end{cases}$$

$$\begin{pmatrix}C_{1x}(t)\\ C_{2x}(t)\end{pmatrix}?\Leftrightarrow ?\begin{pmatrix}C_{1y}(t)\\ C_{2y}(t)\end{pmatrix}$$

Общий итог

Вектор состояния при описании спина и волновая функция при описании спина

Собственные векторы оператора $\hat{S}_z$

$$\left\{ \left| z^{(1)} \right\rangle,\ \left| z^{(2)} \right\rangle \right\},$$

$$\left| \psi(t) \right\rangle = \left| z^{(1)} \right\rangle C_{1z}(t) + \left| z^{(2)} \right\rangle C_{2z}(t)$$

$\begin{pmatrix} C_{1z}(t) \\ C_{2z}(t) \end{pmatrix}$ – спиновая волновая функция (спинор) в базисе $\left\{ \left| z^{(1)} \right\rangle,\ \left| z^{(2)} \right\rangle \right\}$

Собственные векторы оператора $\hat{S}_x$

$$\left\{ \left| x^{(1)} \right\rangle,\ \left| x^{(2)} \right\rangle \right\},$$

$$\left| \psi(t) \right\rangle = \left| x^{(1)} \right\rangle C_{1x}(t) + \left| x^{(2)} \right\rangle C_{2x}(t)$$

$\begin{pmatrix} C_{1x}(t) \\ C_{2x}(t) \end{pmatrix}$ – спиновая волновая функция (спинор) в базисе $\left\{ \left| x^{(1)} \right\rangle,\ \left| x^{(2)} \right\rangle \right\}$

Собственные векторы оператора $\hat{S}_y$

$$\left\{ \left| y^{(1)} \right\rangle,\ \left| y^{(2)} \right\rangle \right\},$$

$$\left| \psi(t) \right\rangle = \left| y^{(1)} \right\rangle C_{1y}(t) + \left| y^{(2)} \right\rangle C_{2y}(t)$$

$\begin{pmatrix} C_{1y}(t) \\ C_{2y}(t) \end{pmatrix}$ – спиновая волновая функция (спинор) в базисе $\left\{ \left| y^{(1)} \right\rangle,\ \left| y^{(2)} \right\rangle \right\}$

$$\begin{cases} C_{1x}(t) = \left(C_{1z}(t) + C_{2z}(t)\right)\dfrac{1}{\sqrt{2}} \\ C_{2x}(t) = \left(C_{1z}(t) - C_{2z}(t)\right)\dfrac{1}{\sqrt{2}} \end{cases}$$

$$\begin{cases} C_{1z}(t) = \dfrac{1}{\sqrt{2}} C_{1x}(t) + \dfrac{1}{\sqrt{2}} C_{2x}(t) \\ C_{2z}(t) = \dfrac{1}{\sqrt{2}} C_{1x}(t) - \dfrac{1}{\sqrt{2}} C_{2x}(t) \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} C_{1z}(t) \\ C_{2z}(t) \end{pmatrix} ? \Leftrightarrow ? \begin{pmatrix} C_{1x}(t) \\ C_{2x}(t) \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} C_{1z}(t) = \dfrac{1}{\sqrt{2}} C_{1y}(t) + \dfrac{1}{\sqrt{2}} C_{2y}(t) \\ C_{2z}(t) = \dfrac{i}{\sqrt{2}} C_{1y}(t) - \dfrac{i}{\sqrt{2}} C_{2y}(t) \end{cases}$$

$$\begin{cases} C_{1y}(t) = \left(C_{1z}(t) - iC_{2z}(t)\right)\dfrac{1}{\sqrt{2}} \\ C_{2y}(t) = \left(C_{1z}(t) + iC_{2z}(t)\right)\dfrac{1}{\sqrt{2}} \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} C_{1z}(t) \\ C_{2z}(t) \end{pmatrix} ? \Leftrightarrow ? \begin{pmatrix} C_{1y}(t) \\ C_{2y}(t) \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} C_{1x}(t) = \dfrac{1}{2}(1+i) C_{1y}(t) + \dfrac{1}{2}(1-i) C_{2y}(t) \\ C_{2x}(t) = \dfrac{1}{2}(1-i) C_{1y}(t) + \dfrac{1}{2}(1+i) C_{2y}(t) \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} C_{1x}(t) \\ C_{2x}(t) \end{pmatrix} ? \Leftrightarrow ? \begin{pmatrix} C_{1y}(t) \\ C_{2y}(t) \end{pmatrix}$$

Расчёт спинорной волновой функции электрона в однородном магнитном поле

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} C_{1x}(t) \\ C_{2x}(t) \end{pmatrix} = ?, \quad |\psi\rangle = \begin{pmatrix} C_{1y}(t) \\ C_{2y}(t) \end{pmatrix} = ?, \quad |\psi\rangle = \begin{pmatrix} C_{1z}(t) \\ C_{2z}(t) \end{pmatrix} = ?$$

Гамильтониан электрона в однородном магнитном поле, когда импульс электрона равен нулю

В этом случае гамильтониан электрона $\hat{H}$ в этом случае имеет вид

$$\hat{H} = -\mu\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{B}\right).$$

Здесь величина $\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{B}\right)$ равна

$$\left(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{B}\right) = \hat{\sigma}_x B_x + \hat{\sigma}_y B_y + \hat{\sigma}_z B_z,$$

где $B_x,\ B_y,\ B_z -$ декартовые компоненты индукции магнитного поля,

$\mu -$ магнитный момент электрона.

Уравнение движения электрона в однородном магнитном поле

Уравнение движения электрона в этом случае имеет вид

$$i\hbar\frac{d}{dt}\left|\psi(t)\right\rangle = \hat{H}\left|\psi(t)\right\rangle.$$

Если магнитное поле направлено вдоль оси z, то уравнение движения принимает вид

$$i\hbar\frac{d}{dt}\left|\psi(t)\right\rangle = -\mu\hat{\sigma}_z B_Z\left|\psi(t)\right\rangle.$$

Выбирая в качестве вектора $\left|\psi(t)\right\rangle$ представление

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} C_{1z}(t) \\ C_{2z}(t) \end{pmatrix}$$

запишем уравнение движения в виде

$$i\hbar\begin{pmatrix} \dot{C}_{1z}(t) \\ \dot{C}_{2z}(t) \end{pmatrix} = -\mu\hat{\sigma}_z B_Z\begin{pmatrix} C_{1z}(t) \\ C_{2z}(t) \end{pmatrix},$$

где $\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$

Это позволяет записать уравнение движения для спинора как

$$i\hbar\begin{pmatrix} \dot{C}_{1z}(t) \\ \dot{C}_{2z}(t) \end{pmatrix} = -\mu B_Z\begin{pmatrix} C_{1z}(t) \\ -C_{2z}(t) \end{pmatrix}.$$

Последнее уравнение движения позволяет получит два уравнения движения для комплексных функций

$$C_{1z}(t),\ C_{2z}(t)$$

$$\begin{cases} i\hbar\dot{C}_{1z}(t) = -\mu B_z C_{1z}(t) \\ i\hbar\dot{C}_{2z}(t) = \mu B_z C_{2z}(t) \end{cases}.$$

Эта система линейных дифференциальных уравнений имеет решение

$$\begin{cases} C_{1z}(t) = C_{1z0} e^{i\frac{\mu B_z t}{\hbar}} \\ C_{2z}(t) = C_{2z0} e^{-i\frac{\mu B_z t}{\hbar}} \end{cases},$$

где C_{1z0} и C_{2z0} есть константы, которые нужно найти из начальных условий.

Для нахождения решения уравнения движения необходимо задать начальное условие

$$|\psi_0\rangle = |\psi(t=0)\rangle.$$

В качестве начального условия выберем спинор

$$\begin{pmatrix} C_{1x}(t=0) \\ C_{2x}(t=0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Такое начальное условие означает, что спин электрона в начальный момент времени направлен вдоль оси x. Чтобы отыскать функции $C_{1x}(t),\ C_{12x}(t)$ для $t > 0$, выразим функции $C_{1x}(t),\ C_{12x}(t)$ через известные функции $C_{1z}(t)$ и $C_{2z}(t)$

$$\begin{cases} C_{1x}(t) = \left(C_{1z}(t) + C_{2z}(t)\right)\dfrac{1}{\sqrt{2}} \\ C_{2x}(t) = \left(C_{1z}(t) - C_{2z}(t)\right)\dfrac{1}{\sqrt{2}} \end{cases},$$

или

$$\begin{cases} C_{1x}(t) = \left(C_{1z0} e^{i\frac{\mu B_z t}{\hbar}} + C_{2z0} e^{-i\frac{\mu B_z t}{\hbar}} \right)\dfrac{1}{\sqrt{2}} \\ C_{2x}(t) = \left(C_{1z0} e^{i\frac{\mu B_z t}{\hbar}} - C_{2z0} e^{-i\frac{\mu B_z t}{\hbar}} \right)\dfrac{1}{\sqrt{2}} \end{cases}.$$

Накладывая на полученные функции $C_{1x}(t),\ C_{12x}(t)$, предложенные начальные условия

$$\begin{cases} 1 = \left(C_{1z0} + C_{2z0}\right)\dfrac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 = \left(C_{1z0} - C_{2z0}\right)\dfrac{1}{\sqrt{2}} \end{cases}$$

можно найти константы C_{1z0} и C_{2z0}

$$C_{1z0} = C_{2z0} = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Теперь амплитуды $C_{1x}(t)$, $C_{12x}(t)$ можно рассчитать по формулам

$$\begin{cases} C_{1x}(t) = cos\left(\dfrac{\mu B_z t}{\hbar}\right) \\ C_{2x}(t) = 2i\sin\left(\dfrac{\mu B_z t}{\hbar}\right) \end{cases}.$$