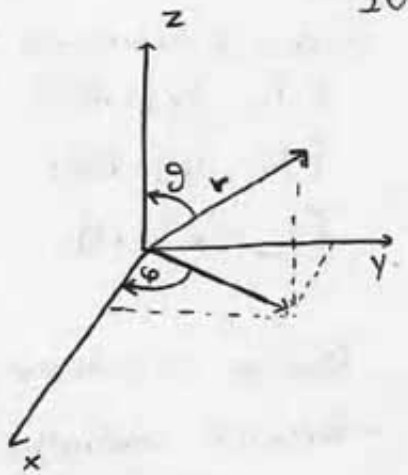
Κβαντομηχανική II

Χρησιμοποιώ τους εξής μετασχηματισμούς:

$$\hat{r} = \hat{x}\cos\vartheta\cos\varphi + \hat{y}\sin\vartheta\sin\varphi + \hat{z}\cos\vartheta$$

$$\hat{\vartheta} = \hat{x}\cos\vartheta\cos\varphi + \hat{y}\cos\vartheta\sin\varphi - \hat{z}\sin\vartheta$$

$$\hat{\varphi} = -\hat{x}\sin\varphi + y\cos\varphi$$



Άρα: $\vec{L} = -i\hbar\left(\hat{\varphi}\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \hat{\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\cdot\frac{1}{\sin\vartheta}\right) \Leftrightarrow$

$$\Leftrightarrow \vec{L} = \hat{x}(\ \dots\ ) + \hat{y}(\ \dots\ ) + \hat{z}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

Βγαίνει εύκολα

Τελικά $\Leftrightarrow L_x = \left[(-i\hbar)\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta}\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right]$

$$L_y = \left[(-i\hbar)\left(-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta}\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right]$$

$$L_z = \left[(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$$

Βρίσκω τα L_x^2, L_y^2, L_z^2 συναρτήσει του L^2

Έχω $L_z^2 = (-i\hbar)^2\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$

$L_x^2 \rightarrow$ Υποθέτω ότι δρα πάνω σε μία κυματοσυνάρτηση Y.

Άρα: $L_x^2 Y = L_x(L_x Y) = L_x\left(\cos\varphi\frac{\partial Y}{\partial\vartheta} - \frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta}\sin\varphi\frac{\partial Y}{\partial\varphi}\right)(-i\hbar) = \dots$

$L_y^2 \rightarrow$ Όμοια με L_x^2.

Τελικά: $L^2 Y = (L_x^2 + L_y^2 + L_z^2)Y = \boxed{-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial Y}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}\right] = L^2 Y}$

Δηλαδή: Το γωνιακό κομμάτι της λαπλασιανής για το άτομο του υδρογόνου

Αν έχω 3-ερμιτιανούς τελεστές, που ικανοποιούν τις σχέσεις:

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z$$

$$[J_y, J_z] = i\hbar J_x$$

$$[J_z, J_x] = i\hbar J_y$$

Τότε οι 3-τελεστές, είναι στροφορμής.

• Από αυτά υπολογίζω το $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$

και αποδείκνύεται ότι $[J^2, J_k] = 0$.

• Θα υπολογίσω το φάσμα (ιδιοτιμές & ιδιοσυναρτήσεις) για τους τελεστές της στροφορμής. Η μέθοδος ονομάζεται αλγεβρική (δεν χρειάζεται να την θυμάμαι).

(1) Ορίζω 2 τελεστές: $\left.\begin{aligned} J_+ &= J_x + i J_y \\ J_- &= J_x - i J_y \end{aligned}\right\}$ Ερμιτιανοί

Τότε $J_+^+ = J_-$ και $J_-^+ = J_+$.

(2) Υπολογίζω τους μεταθέτες:

• $[J_z, J_+] = [J_z, J_x] + i[J_z, J_y] = i\hbar J_y + i(-i\hbar J_x) =$
$= \hbar(J_x + iJ_y) = \hbar J_+$

• $[J_z, J_-] = \dots = -\hbar J_-$

• $[J_+, J_-] = \dots = 2\hbar J_z$

Και ισχύει επίσης: $[J^2, J_+] = [J^2, J_-] = 0$

Δεν μετατίθεται οι 2-τελεστές και άρα δεν κάνει 0.

• $J_- J_+ = (J_x - iJ_y)(J_x + iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 + \boxed{i[J_x, J_y]} = J_x^2 + J_y^2 - \hbar J_z^2 =$
$= J^2 - J_z^2 - \hbar J_z$

• $j_+ j_- = j^2 - j_z^2 + \hbar j_z$

[3] $j^2 Y = \alpha Y$ } Θέλω να βρω τα α, b
και $j_z Y = bY$

*[Δημαίδια j_+, j_- : Παίρνω τις 2-κυματοσυναρτήσεις: (Ομοια και για $j_z Y_-$

$Y_+ = j_+ Y$ και $Y_- = j_- Y$

Για να βρω την ιδιοτιμή: $j_z Y_+ = j_z j_+ Y$ έχω:

• Παίρνω τη σχέση μετάθεσης:

$$j_z j_+ - j_+ j_z = \hbar j_+ \Leftrightarrow j_z j_+ = j_+ j_z + \hbar j_+$$

Άρα: $j_z Y_+ = j_+ (b + \hbar) Y = (b + \hbar) Y_+$
και $j_z Y_- = (b - \hbar) Y$]*

$\boxed{\alpha \geq b^2}$ Απόδειξη

• $\alpha = \langle Y | j^2 | Y \rangle = \alpha \overset{=1 \text{ (Κανονικοποιημένη)}}{\langle Y | Y \rangle} = \alpha$

Ό,τι: • $\langle Y | j^2 | Y \rangle = \langle Y | j_x^2 | Y \rangle + \langle Y | j_y^2 | Y \rangle + \langle Y | j_z^2 | Y \rangle =$

$$= \underbrace{\langle j_x Y | j_x Y \rangle}_{\geq 0} + \underbrace{\langle j_y Y | j_y Y \rangle}_{\geq 0} + \underbrace{\langle j_z Y | j_z Y \rangle}_{= b^2 \langle Y | Y \rangle} \geq b^2$$

Άρα $\boxed{\alpha \geq b^2}$.

Κβαντομηχανική ΙΙ

Ισχύουν:

$$\left.\begin{aligned} J_+ &= J_x + i J_y \\ J_- &= J_x - i J_y \\ J_- &= J_+^{+} \\ [J_z, J_+] &= \hbar J_+ \\ [J_z, J_-] &= -\hbar J_- \\ J_+ J_- &= J^2 - J_z^2 + \hbar J_z \\ J_- J_+ &= J^2 - J_z^2 - \hbar J_z \end{aligned}\right\} \text{Απ' έξω + αποδείξεις.}$$

Επίσης:

$$\left.\begin{aligned} J^2 Y &= a Y \\ J_z Y &= b Y \end{aligned}\right\} \text{Τα } a,b \text{ δεν τα ξέρω, τα βρίσκω κάθε φορά.}$$

Επίσης:

$$\left.\begin{aligned} [J^2, J_+] &= 0 \\ [J^2, J_-] &= 0 \\ J_z J_+ &= J_+ J_z + \hbar J_+ \end{aligned}\right\} \text{Δεν δίνω πρώτα: Μετατίθεται.}$$

Τέλος:

$$\left.\begin{aligned} Y_+ &= J_+ Y \longrightarrow J_z Y_+ = (b+\hbar) Y_+ \\ Y_- &= J_- Y \longrightarrow J_z Y_- = (b-\hbar) Y_- \\ J^2 Y_\pm &= a Y_\pm \end{aligned}\right\} \text{Απ' έξω + αποδείξεις}$$

Τέλος:

$$a \geq b^2$$
$$a \geq (b + k\hbar)^2$$

Απόδειξη της γενικότερης σχέσης: $\boxed{J_z (J_+^k Y) = (b + k\hbar) J_-^k Y}$

- Με βάση τη σχέση αυτή και το $a \geq (b+k\hbar)^2$ βγαίνω ότι το J_z έχει ανώτερη ιδιοτιμή.

[**Απόδειξη**: Η $(J_+^k Y)$ έχει ιδιοτιμή $(b+k\hbar)$ αλλά επειδή $a \geq (b+k\hbar)^2$

Άρα: $J_+^{k+1} Y = 0 \rightarrow b + k\hbar$: μέγιστη ιδιοτιμή.]

Η απόδειξη γίνεται με επαγωγικό τρόπο:

$$\rightarrow J_z(J_+^k Y) = J_z J_+(J_+^{k-1}Y) = (J_+J_z + \hbar J_+)J_+^{k-1}Y =$$
$$= J_+(J_z+\hbar)J_+^{k-1}Y = J_+(J_zJ_+ + \hbar J_+)J_+^{k-2}Y =$$
$$= J_+(J_+J_z + \hbar J_+ + \hbar J_+)J_+^{k-2}Y =$$
$$= J_+^2(J_z+2\hbar)J_+^{k-2}Y = \dots = J_+^k(J_z+k\hbar)\quad Y =$$
$$= J_+^k(b+k\hbar)Y = (b+k\hbar)(J_+^k Y).$$

• Αποδεικνύεται ότι: $J^2(J_+^k Y) = a(J_+^k Y)$

$$\rightarrow J^2(J_+^k Y) = J^2 J_+^k Y = J^2 J_+ J_+^{k-1}Y = J_+ J^2 J_+^{k-1}Y = J_+^2 J^2 J_+^{k-2}Y = \dots = J_+^k J^2 Y = a J_+^k Y.$$

[Θυμηθείτε ότι $J_z Y = \lambda Y$, όπου λ: μέγιστη ιδιοτιμή του J_z αφού $J_+Y=0$
Όταν θέλω να δείξω ότι $\lambda = \lambda_{max}$ πρέπει να δείξω ότι $J_+Y=0$,]

Όμοια: $\boxed{J_z(J_-^k Y) = (\lambda - k\hbar)J_-^k Y}$

<u>Απόδειξη:</u> Ίδια με πριν.

[Όμοια: $J^2(J_-^k Y) = a(J_-^k Y)$]

Αφού $a \geq (\lambda - k\hbar)^2 \Rightarrow \exists\, k=n : J_-^{n+1}Y = 0.$

Έχω: $Y' = J_-^n Y$, $J_z Y' = (\lambda - n\hbar)Y'$

και άρα η Y' είναι η ιδιοσυνάρτηση με τη μικρότερη ιδιοτιμή της J^2.

Βρίσκω ① το λ, Έπειτα ② το a και έπειτα ③ το πεδίο τιμών.

0 Βρίσκω το λ:

Ισχύει $J_- J_+ Y = 0$ αφού $J_+ Y = 0 \rightarrow J_- 0 = 0$ αφου J_- : γραμ. τελεστής.

Αλλά: $J_- J_+ Y = (J^2 - J_z^2 - \hbar J_z) Y = (a - \lambda^2 - \hbar\lambda) Y$

Άρα: $\boxed{a - \lambda^2 - \hbar\lambda = 0} \rightarrow \lambda^2 + \hbar\lambda - a = 0$

Τη λύνω: $a = \lambda(\lambda + \hbar)$ (1)

1 Κάνω το αντίστροφο:

Ισχύει $J_+ J_- Y' = 0$ για τον ίδιο λόγο με πιο πάνω.

Αλλά: $(J^2 - J_z^2 + \hbar J_z) Y' = [a - (\lambda - n\hbar)^2 + \hbar(\lambda - n\hbar)] Y' = 0$

Άρα: $a - (\lambda - n\hbar)^2 + \hbar(\lambda - n\hbar) = 0 \overset{(1)}{\Rightarrow} \lambda = \hbar(n/2)$

3 Τελικά: $\boxed{\begin{aligned} \lambda &= \hbar(n/2) \\ a &= \lambda(\lambda + \hbar) \end{aligned}}$

$a = \hbar^2\left[\frac{n}{2}\left(\frac{n}{2} + 1\right)\right]$

Το λ: λmax ιδιοτιμή του J_z.

Το n: Αν πάρω τη μέγιστη ιδιοτιμή του J_z, μετά από n βήματα (που δεν μπορώ να προσδιορίσω πόσα είναι) θα φτάσω στη μικρότερη ιδιοτιμή.

Αν $n = 0 \rightarrow \lambda = 0$, $a = 0$

$n = 1 \rightarrow \lambda = \frac{\hbar}{2}$, $a = \frac{\hbar}{2}\left(\frac{3\hbar}{2}\right) = \frac{3\hbar^2}{4} \Rightarrow$ Το J_z έχει 2 ιδιοτιμές : $\pm \hbar/2$

[Μπορώ να έχω και ημιακέραιες στροφορμές]

$n = 2 \rightarrow \lambda = \hbar$, $a = \hbar^2(1(1+1)) = 2\hbar^2 \Rightarrow$ Το J_z έχει 3 ιδιοτιμές : $(+1, 0, -1)\hbar$

⋮

(Άρτιο) $n = 2l \rightarrow a = \hbar^2(l(l+1)) \rightarrow$ Το J_z έχει $2l+1$ ιδιοτιμές: $(l, l-1, \ldots, -l+1, -l)\hbar$

(Περιττό) $n = 2l+1 \rightarrow$ Δεν συμπίπτει με αυτά που ξέρω, ενώ το από πάνω το έχω δει σε χωρικές.

Άρα: a: Ακέραιες & ημιακέραιες τιμές. $\rightarrow j = 0, 1/2, 1, \ldots$

$m = j, j-1, \ldots, -j+1, -j$, όπου $j = n/2$

Τώρα θα βρω ιδιοσυναρτήσεις:

- $J_+ Y_{jj} = 0 \qquad J_z Y_{jj} = \hbar j Y_{jj}$

$$-i\hbar \frac{\partial Y_{jj}}{\partial \varphi} = \hbar j Y_{jj} \Rightarrow Y(\vartheta,\varphi) = Q(\vartheta) e^{ij\varphi}$$

- Για το j οι επιτρεπτές τιμές είναι το j να είναι ακέραιο.

Εδώ μιλάω μόνο για τροχιακή στροφορμή. Βρίσκω το J_+

Έχω $J_+ = J_x + i J_y$

Επίσης έχω τις σχέσεις: $J_x = (-i\hbar)\left(-\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} - \frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta}\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$.

και $J_y = (-i\hbar)\left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} - \frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta}\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$.

$$J_+ = J_x + i J_y = \hbar e^{i\varphi}\left[\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta}\cdot\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$$

$$J_+ Y_{jj} = J_+ Q(\vartheta) e^{ij\vartheta} = \hbar e^{i\varphi}\left[\frac{\partial Q}{\partial\vartheta} - j\frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta} Q\right] e^{ij\varphi} = 0$$

Έχω δηλαδή: $\frac{dQ}{d\vartheta} - j\frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta} Q = 0 \Rightarrow \dots \Rightarrow Q(\vartheta) = A(\sin\vartheta)^j$

<u>Απόδειξη</u>: Θέτω $\xi = \sin\vartheta$, $\frac{dQ}{d\vartheta} = \frac{dQ}{d\xi}\cdot\frac{d\xi}{d\vartheta} = \frac{dQ}{d\xi}\cos\vartheta \dots$

Δηλαδή: Βρήκα ότι για j: ακέραιο $\Rightarrow \boxed{Y_{jj} = A e^{ij\varphi}(\sin\vartheta)^j}$.

Το A το υπολογίζω από την κανονικοποίηση.

Κβαντομηχανική II

Δρώντας κάθε φορά με την J_-, βρίσκω:

$$\boxed{J_- Y_{jj} = B Y_{jj-1}}$$

Τώρα θα προσδιορίσω τον συντελεστή B:

* [π.χ. Άσκηση: Δίνεται η Y_{22}, Να υπολογίσω τις άλλες
Βρίσκω τον J_- σε διαφορική μορφή και δρω...
Αν δίνεται η Y_{2-2}, Βρίσκω τον J_+ σε διαφορική μορφή,
και δρω...] *

Έχουμε: $J_+ Y_{j,m} = C_+ Y_{j,m+1}$

$J_- Y_{j,m} = C_- Y_{j,m-1}$

Βρίσκω το C_+: $\langle C_+ Y_{j,m+1} | C_+ Y_{j,m+1} \rangle = C_+^2$

$\bullet \langle J_+ Y_{jm} | J_+ Y_{jm} \rangle =$

$= \langle Y_{jm} | J_- J_+ Y_{jm} \rangle = \langle Y_{jm} | (J^2 - J_z^2 - \hbar J_z) Y_{jm} \rangle =$

$= [\hbar^2 j(j+1) - \hbar^2 m^2 - \hbar^2 m] \langle Y_{jm} | Y_{jm} \rangle = \hbar^2 [j(j+1) - m(m+1)].$

Δηλαδή: $\boxed{C_+ = \hbar [j(j+1) - m(m+1)]^{1/2}}$

Όμοια για C_-.

ΔΕΔΟΜΕΝΑ

$\vec{J}^2 |Y_{jm}\rangle = \hbar^2 j(j+1) |Y_{jm}\rangle$

$\vec{J}_z |Y_{jm}\rangle = \hbar m |Y_{jm}\rangle$

$\vec{J}_+ |Y_{jm}\rangle = C_+ |Y_{j,m+1}\rangle$

$\vec{J}_- |Y_{jm}\rangle = C_- |Y_{j,m-1}\rangle$

$C_+ = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}$

$C_- = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}$

$\vec{J}_+ = \vec{J}_x + i\vec{J}_y$

$\vec{J}_- = \vec{J}_x - i\vec{J}_y$

$\vec{J}_x = \frac{1}{2}(\vec{J}_+ + \vec{J}_-)$

$\vec{J}_y = \frac{1}{2i}(\vec{J}_+ - \vec{J}_-)$

$\vec{J}_x |Y_{jm}\rangle = \frac{C_+}{2} |Y_{j,m+1}\rangle + \frac{C_-}{2} |Y_{j,m-1}\rangle$

$\vec{J}_y = \frac{C_+}{2i} |Y_{j,m+1}\rangle - \frac{C_-}{2i} |Y_{j,m-1}\rangle$

$j = 0, 1/2, 1, 3/2, \ldots$ ▌ $-j \leq m \leq j$

Βρίσκω κυματοσυναρτήσεις.

$\langle k|A|i\rangle = A_{ki}$

- Για $j=0$, $m=0$, Y_{00}
- Για $j=1/2$, $m=\pm 1/2$ $\longrightarrow$ $\chi_1 = Y_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$ και $\chi_2 = Y_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}$

Όταν κάνω θεωρία χρ spin έχω συμβολίσει χ_+ και χ_-.

(1) $\langle Y_{jm}|\vec{J}^2|Y_{j'm'}\rangle = \hbar^2 j(j+1)\delta_{jj'}\delta_{mm'}$

(2) $\langle Y_{jm}|\vec{J}_z|Y_{j'm'}\rangle = \hbar m \delta_{jj'}\delta_{mm'}$

Έχω δηλαδή: $\vec{J}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ και $\vec{J}_z = \hbar \begin{bmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$

(3) $\langle Y_{jm}|\vec{J}_x|Y_{jm'}\rangle = \frac{C_+}{2}\delta_{jj'}\delta_{m,m'+1} + \frac{C_-}{2}\delta_{jj'}\delta_{m,m'-1}$

Έχω δηλαδή: $\vec{J}_x = \begin{bmatrix} 0 & \hbar/2 \\ \hbar/2 & 0 \end{bmatrix}$

Οπότε $\longrightarrow$ $\langle \chi_1|\vec{J}_x|\chi_1\rangle = 0$ και $\langle \chi_2|\vec{J}_x|\chi_2\rangle = 0$

και $\langle \chi_1|\vec{J}_x|\chi_2\rangle = \langle Y_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}|\vec{J}_x|Y_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}\rangle = \frac{C_+^{(m')}}{2}\cdot 1\cdot 1 + \frac{C_-}{2}\cdot 1\cdot 0 = \frac{C_+}{2} =$

$= \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) - (-\frac{1}{2})(-\frac{1}{2}+1)} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{4}{4}} = \frac{\hbar}{2}$

και $\langle \chi_2|\vec{J}_x|\chi_1\rangle = \hbar/2$ αφού βρίσκω $\langle \chi_2|\vec{J}_x|\chi_1\rangle = \frac{C_-(m)}{2} = \frac{\hbar}{2}$

Σημείωση: Βρίσκω τα στοιχεία του πίνακα από το εξής: $\langle \chi_1|\vec{J}_x|\chi_1\rangle \rightarrow$ στοιχείο α_{11}

$\langle \chi_1|\vec{J}_x|\chi_2\rangle \Rightarrow$ στοιχείο α_{12} κλπ.

Όμοια για τους πίνακες: $\vec{J}_z$, $\vec{J}_y = \begin{bmatrix} 0 & \hbar/2i \\ -\frac{\hbar}{2i} & 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$

• Για $j=1$, $m=1,0,-1$

Έχω: $\Phi_1 = Y_{11}$

$\Phi_2 = Y_{10}$

$\Phi_3 = Y_{1,-1}$

• Ο $\vec{j}^2$ είναι διαγώνιος $\Rightarrow$ $\vec{j}^2 = 2\hbar^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

• Ο $\vec{j}_z$ είναι επίσης διαγώνιος $\Rightarrow$ $\vec{j}_z = \hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$

• Επίσης από βιβλιογραφία: $\vec{j}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}$

• Και $\vec{j}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$.

Spin : $\vec{\mu} = -g \frac{\hbar}{2m}$ → Μαγνητική διπολική ροπή του ηλεκτρονίου.

Βρίσκω ιδιοσυναρτήσεις & ιδοτιμές:

Έχω $S_z \chi = \lambda \chi$, $\lambda = \pm\frac{\hbar}{2}$

↳ τελεστής στροφορμής spin

• $S_z \chi_+ = \frac{\hbar}{2} \chi_+ \Rightarrow \chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

• $S_z \chi_- = -\frac{\hbar}{2} \chi_- \Rightarrow \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

• $|\chi\rangle = \chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a|\chi_+\rangle + b|\chi_-\rangle$

Επειδή η συνάρτηση είναι κανονικοποιημένη, $\chi^+\chi = 1$

• $\chi^+\chi = (a^*, b^*)\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = aa^* + bb^* = 1.$

• $\langle \chi_+ | \chi_+ \rangle = 1$, $\langle \chi_- | \chi_- \rangle = 1$, $\langle \chi_+ | \chi_- \rangle = 0$ ορθογώνιες κυματοσυναρτήσεις.

• $\langle \chi | S_x | \chi \rangle = [a^* \ b^*] \cdot \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \hbar/2 = \hbar/2 \, [a^* b + b^* a]$

Σημείωση: Όλοι οι τελεστές στο χώρο του spin είναι πίνακες, δεν έχω παραγώγιση.

$S_x \chi = \lambda \chi$

$(S_x - \lambda \mathbb{1})\chi = 0 \Leftrightarrow |S_x - \lambda \mathbb{1}| = 0 \Leftrightarrow \begin{vmatrix} -\lambda & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Leftrightarrow \lambda^2 - \frac{\hbar^2}{4} = 0 \Leftrightarrow$

$\Leftrightarrow \boxed{\lambda = \pm \hbar/2}$

• Πάω τώρα να βρω τους spinores (Ίδιο συναρτήσεις στον άξονα $-x$).

(1) $\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \Rightarrow a = b$

(2) $\langle \chi | \chi \rangle = 1 \Leftrightarrow a^* a + b^* b = 1 \Leftrightarrow$

Αν $a \in \mathbb{R}$ τότε $\boxed{a = b = 1/\sqrt{2}}$

↳ Δεν υπάρχει κάτι που να λέει ότι πρέπει να είναι $a \in \mathbb{C}$

(3) Βρίσκω $\chi_{+(x)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$

(4) $\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = -\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \Leftrightarrow a = -b = 1/\sqrt{2}$.

$\chi_{-(x)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$

* ——— *

• Αναλύω την κυματοσυνάρτηση του e^- ως προς τις ιδιοσυναρτήσεις, και βρίσκω πιθανότητα (= συντελεστές)

$\boxed{\chi = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \gamma \chi_{+}(x) + \delta \chi_{-}(x)}$ → Επιλύω το σύστημα και βρίσκω τα γ,δ.

$\Rightarrow \chi = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \Rightarrow |\chi\rangle = a|\chi_+\rangle + b|\chi_-\rangle$

$P(\frac{\hbar}{2}) = a^* a$

$P(-\frac{\hbar}{2}) = b^* b$

* ——— *

Κβαντομηχανική II

• $H = H_0 + H_S$ (χωρίς spin, για το spin)

$\vec{B} = B\hat{z}$: Ομογενές Μαγνητικό πεδίο , $m, e, \vec{s}$

Τότε για να βρω ιδιοτιμές της ενέργειας χρησιμοποιώ την: $Y = Y(\vec{r})X$ (για spin)

Τότε $HY = [\underbrace{H_0}_{E_0} Y(\vec{r})]X + (\underbrace{H_S}_{E}X)Y(\vec{r}) = E_0\lambda$.

Ισχύει $E_0\lambda = E_0 + E$, $H_0Y = E_0Y$ και $H_SX = EX$

Τότε εχω $\boxed{H_S = -\vec{\mu}\vec{B}}$, όπου $\vec{\mu} = -g\frac{e}{2m}\vec{s}$ $\Leftrightarrow$

$\Leftrightarrow \vec{\mu} = -g\frac{e\hbar}{4m}\vec{\sigma}$ $\Leftrightarrow$ όπου $\vec{s} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$, $\vec{\sigma}\cdot\vec{B} = B\sigma_z$

Άρα : $H_S = \frac{geB\hbar}{4m}\sigma_z$ [J ή eV] , $\frac{geB\hbar}{4m}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}X = EX$

Τότε ο σπινόρας είναι (=η κυματοσ. στο χώρο του spin):

$$\chi(t) = \sum_{n=1}^{2} C_n \chi_n e^{-iE_nt/\hbar}$$

• Αν $\chi(0)$ = γνωστό, τότε $\chi(0) = \sum^{n} C_n\chi_n$. Δηλαδή: $C_n = \langle \chi_n | \chi(0)\rangle$.

• Για τις ιδιοτιμές έχω τον πίνακα: $\omega = \frac{geB}{4m}$

$$\begin{bmatrix}\omega\hbar - E & 0\\ 0 & -\omega\hbar - E\end{bmatrix}\chi = 0 \Longleftrightarrow \begin{vmatrix}\omega\hbar - E & 0\\ 0 & -\omega\hbar - E\end{vmatrix} = 0$$

$\Rightarrow$ 2-λύσεις για το E : $E_+ = \omega\hbar \Rightarrow \chi_+ = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$

$E_- = -\omega\hbar \Rightarrow \chi_- = \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$

Σημείωση: Βάζω όπου χ το $\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}$ και όπου E τα $\omega\hbar$ ή $-\omega\hbar$ και βρίσκω ιδιοδιανύσματα του χ.

(1) Βγάζω ιδιοτιμές E

(2) Βάζω όπου χ το $\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}$ και όπου E τις ιδιοτιμές, $a^*a + b^*b = 1$ (ορθοκ. & κανονικ).

(3) Βρίσκω τα ιδιοδ. του χ.

<u>πχ</u> Αν $\chi(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$ τότε

$$C_1 = \langle \chi_+ | \chi \rangle = \begin{bmatrix}1 & 0\end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

$$C_2 = \langle \chi_- | \chi \rangle = \begin{bmatrix}0 & 1\end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

<u>Άρα</u>: $\boxed{\chi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}e^{-i\omega t}\\ e^{i\omega t}\end{bmatrix}}$ ⇒ Η κυματοσυνάρτηση στο χώρο του spin κάθε χρονική στιγμή

Για $\omega t = 0 \longrightarrow \chi(0)$

$\omega t = \pi/2 \longrightarrow \chi(\ldots)$

<u>Σημείωση</u>: Αφού $\chi(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$ ⇒ Ιδιοτιμή $1/\sqrt{2}$. Άρα, όταν το πεδίο είναι στο z, το spin είναι ορθόντιο.

• Για να βρω το E_0 λύνω την $H_0 Y = E_0 Y$.

Έχω: $H_0 = \frac{1}{2m}(\vec{p} - e\vec{A}) + V(\vec{r})$

Διανυσματικό δυναμικό

↳ $\vec{p} - e\vec{A}$: γενικευμένη ορμή.

$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$.

⋮

Κβαντομηχανική II

Πρόσθεση 2-spin 1/2

• Έχω 2-σωματίδια με κάποια στροφορμή. Έχει το σύστημα μια κυματοσυνάρτηση $\boxed{Y = \chi_{(1)} \cdot \chi_{(2)}}$. Αν τα 2-σωμ. δεν αλληλεπιδρούν, τότε βρίσκω τη συνολική στροφορμή του συστήματος.

• Το κλασικό ανάλογο αντιστοιχεί μόνο σε 3-είδη: $\xrightarrow{1} \xleftarrow{2}$, $\uparrow\downarrow_2$ ή, $\uparrow\uparrow_2$

• Έχω τους συμβολισμούς: $\vec{S}^{(1)}$, $\vec{S}^{(2)}$ και $\vec{S} = \vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)}$.

• Αν έχω $\chi^{(1)}, \chi^{(2)}$ τις κυματοσυναρτήσεις τότε $Y = \chi^{(1)} \cdot \chi^{(2)}$.

• Τότε: $S_z Y = (S_z^{(1)} + S_z^{(2)}) Y = (S_z^{(1)} + S_z^{(2)}) \chi_{(1)} \chi_{(2)} =$

$$= [S_z^{(1)} \chi_{(1)}] \chi_{(2)} + \chi_{(1)} [S_z^{(2)} \chi_{(2)}] = [S_z^{(1)} \chi_{(1)}] \chi_{(2)} + [S_z^{(2)} \chi_{(2)}] \chi_{(1)}$$

[Αυτά είναι ίσα γιατί ούτως ή άλλως το $S_z^{(2)}$ δεν δρα πάνω στο $\chi_{(1)}$.]

$$= \hbar (m_1 + m_2) \chi_{(1)} \chi_{(2)} =$$

• Τότε: $S_x = S_x^{(1)} + S_x^{(2)}$ και $S_y = S_y^{(1)} + S_y^{(2)}$.

$S_+ = S_+^{(1)} + S_+^{(2)}$ και $S_- = S_-^{(1)} + S_-^{(2)}$.

• Για το σύστημα των 2-spin, μπορώ να φτιάξω 4-κυματοσυναρτήσεις:

$$\Phi_{11} = \chi_+^{(1)} \cdot \chi_+^{(2)} \uparrow\uparrow \longrightarrow S_z \Phi_{11} = \hbar \Phi_{11}$$

$$\Phi_{1,-1} = \chi_-^{(1)} \chi_-^{(2)} \downarrow\downarrow \longrightarrow S_z \Phi_{1,-1} = -\hbar \Phi_{1,-1}$$

$$= \chi_+^{(1)} \chi_-^{(2)} \longrightarrow S_z \chi_+^{(1)} \chi_-^{(2)} = 0 \quad \left((S_z^{(1)} \chi_+^{(1)}) \chi_-^{(2)} + (S_z^{(2)} \chi_-^{(2)}) \chi_+^{(1)} \right) = \frac{\hbar}{2} \chi_+^{(1)} \chi_-^{(2)} - \frac{\hbar}{2} \chi_+^{(1)} \chi_-^{(2)} = 0$$

$$= \chi_-^{(1)} \chi_+^{(2)} \longrightarrow S_z \chi_-^{(1)} \chi_+^{(2)} = 0.$$

$$\hookrightarrow (S_z^{(1)} \chi_-^{(1)}) \chi_+^{(2)} + (S_z^{(2)} \chi_+^{(2)}) \chi_-^{(1)} =$$

$$= -\frac{\hbar}{2} \chi_-^{(1)} \chi_+^{(2)} + \frac{\hbar}{2} \chi_-^{(1)} \chi_+^{(2)} = 0.$$

<u>Παρατήρηση</u>: • Παίρνω του $S_- = S_-^{(1)} + S_-^{(2)}$ πάνω στην Φ_{11}

• Τότε: $S_-\Phi_{11} = (S_-^{(1)} + S_-^{(2)})\chi_+^{(1)}\chi_+^{(2)} =$

$$= (S_-^{(1)}\chi_+^{(1)})\chi_+^{(2)} + S_-^{(2)}\chi_+^{(2)}\chi_+^{(1)} =$$

$$= \hbar\chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)} + \hbar\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)}$$

$\hat{J}\, Y_{jm} = C_-\, Y_{j,m-1}$ όπου $C_- = \hbar\left[j(j+1) - m(m-1)\right]^{1/2} =$

$$= \hbar\left[\frac{3}{4} + \frac{1}{4}\right]^{1/2} = \hbar$$

• Άρα $S_-\Phi_{11} = \hbar\left[\chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)} + \chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)}\right]$

• Ανορίζω $\Phi_{10} = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}}_{\text{για κανονικοποίηση}}\left(\chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)} + \chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)}\right)$

με: $S_z\Phi_{10} = 0$

• Αν δράσω: $\boxed{S_-\Phi_{10} = \Phi_{1,-1}}$

<u>Απόδ</u>: $\frac{1}{\sqrt{2}}\left[(S_-\chi_-^{(1)})\chi_+^{(2)} + (S_-\chi_+^{(1)})\chi_-^{(2)}\right] =$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\underbrace{(S_-^{(1)}\chi_-^{(1)})}_{=0}\chi_+^{(2)} + \chi_-^{(1)}\underbrace{(S_-^{(2)}\chi_+^{(2)})}_{\chi_-} + \underbrace{(S_-^{(1)}\chi_+^{(1)})}_{\chi_-}\chi_-^{(2)} + \underbrace{(S_-^{(2)}\chi_-^{(2)})}_{=0}\chi_+^{(1)}\right] = \Phi_{1,-1} = \frac{2}{\sqrt{2}}\hbar\chi_-^{(1)}\chi_-^{(2)}$$

Εξήγηση του $2/\sqrt{2}$: Έχω $S_-\Phi_{10} = C_-\Phi_{1,-1}$

με $C_- = \hbar\left[1(1+1) - 0\right] = \sqrt{2}$

αφού οι 3- καταστάσεις του συστήματος: $(1, 0, -1)$ ανυστοιχούν σε spin 1.

Η 4η είναι η $\Phi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)} - \chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)}\right)$

$$\left.\begin{aligned} S_z\Phi_{00} &= 0 \\ S_-\Phi_{00} &= 0 \\ S_+\Phi_{00} &= 0 \end{aligned}\right\}$$ Ανυστοιχεί σε σφοφορή spin 0.

Κβαντομηχανική ΙΙ

$$H_{12}\Phi_{00} = 0 - \frac{A}{2}\frac{3}{4}\hbar^2\Phi_{00} - \frac{A}{2}\frac{3}{4}\hbar^2\Phi_{00}$$

$$H_{12}\begin{bmatrix}\Phi_{11}\\ \Phi_{10}\\ \Phi_{1,-1}\end{bmatrix} = \frac{A}{2}\cdot 2\hbar^2\begin{bmatrix}\Phi_{11}\\ \Phi_{10}\\ \Phi_{1,-1}\end{bmatrix} - \frac{A}{2}\cdot\frac{3}{4}\hbar^2\Phi_{11} - \frac{A}{2}\frac{3}{4}\cdot\hbar^2\Phi_{11}$$

$$\begin{cases} \vec{S} = \vec{S}_{(1)} + \vec{S}_{(2)} \\ \vec{S}^2 = (\vec{S}_{(1)} + \vec{S}_{(2)})(\vec{S}_{(1)} + \vec{S}_{(2)}) = \vec{S}^2_{(1)} + \vec{S}^2_{(2)} + 2\vec{S}_{(1)}\cdot\vec{S}_{(2)} \\ \vec{S}^2_{(1)}\Phi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(S^2_{(1)}\chi_+\chi_- - (S^2_{(1)}\chi_-)\chi_+\right) = \frac{3}{4}\hbar^2\frac{1}{\sqrt{2}}\underbrace{(\chi_+\chi_- - \chi_-\chi_+)}_{\Phi_{00}} \end{cases}$$

- $\vec{J}^2 Y_{j,m} = \hbar^2 j(j+1) Y_{j,m}$.

- $2\vec{S}_{(1)}\cdot\vec{S}_{(2)} = 2S_z^{(1)}\cdot S_z^{(2)} + 2S_x^{(1)}S_x^{(2)} + 2S_y^{(1)}S_y^{(2)} = 2S_z^{(1)}S_z^{(2)} + S_-^{(1)}S_+^{(2)} + S_+^{(1)}S_-^{(2)}$.

<u>Απόδειξη</u>

- $S_-^{(1)}S_+^{(2)} + S_+^{(1)}S_-^{(2)} = \overbrace{(S_x^{(1)} - iS_y^{(1)})(S_x^{(2)} + iS_y^{(2)}) + (S_x^{(1)} + iS_y^{(1)})(S_x^{(2)} - iS_y^{(2)})}^{\text{προκύπτουν 8 όροι συνολικά}} =$

$$= 2S_x^{(1)}S_x^{(2)} + 2S_y^{(1)}S_y^{(2)} - iS_y^{(1)}S_x^{(2)} + iS_y^{(1)}S_x^{(2)} + \dots \quad (*)$$

<u>Εφαρμογή</u>

$S^2\Phi_{11} = 2\hbar^2\Phi_{11}$ με S^2 από $(*)$