Nabitá částice v magnetickém poli

1) Opakování klasické mechaniky:

- Newton. pohyb. rovnice: $m\frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F}$

  kde • Lorentzova síla: $\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v}\times\vec{B})$

- Elektromagnetické pole je popsáno potenciály:

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \partial_t\vec{A} \qquad \vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A}$$

$\boxed{\text{kalibrační invariance}}$: $\vec{A}\to\vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla}\chi$, $\phi\to\phi' = \phi - \partial_t\chi$

nemění pohybovou pohyby částic

- Lagrangeův formalismus:

$$\mathcal{L}(\vec{x},\vec{v},t) = \frac{1}{2}m\vec{v}^2 - q\phi(x,t) + q\,\vec{v}\cdot\vec{A}(x,t)$$

→ generuje Lorenz. sílu:

Lagrange-rovnice: $\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial v_\alpha}\right) = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial x_\alpha} = -q\frac{\partial\phi}{\partial x_\alpha} + q v_\beta\frac{\partial A_\beta}{\partial x_\alpha}$

$\to\ = \frac{d}{dt}(m v_\alpha + qA_\alpha) = m\frac{dv_\alpha}{dt} + q\frac{\partial A_\alpha}{\partial x_\beta}v_\beta + q\frac{\partial A_\alpha}{\partial t}$

$$m\frac{dv_\alpha}{dt} = -q\left(\frac{\partial\phi}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial A_\alpha}{\partial t}\right) + q\left(v_\beta\frac{\partial A_\beta}{\partial x_\alpha} - v_\beta\frac{\partial A_\alpha}{\partial x_\beta}\right)$$

Lorentzova síla: $F_\alpha = q\left(-\frac{\partial\phi}{\partial x_\alpha} + \partial_t A_\alpha\right) + q\,\underbrace{\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}}\, v_\beta\, \underbrace{\varepsilon_{\gamma\mu\nu}}\frac{\partial A_\mu}{\partial x_\nu}$ $\quad = \delta_{\alpha\mu}\delta_{\beta\nu} - \delta_{\alpha\nu}\delta_{\beta\mu}$

$$= q\left[-\left(\frac{\partial\phi}{\partial x_\alpha} + \partial_t A_\alpha\right) + v_\beta\frac{\partial A_\beta}{\partial x_\alpha} - v_\beta\frac{\partial A_\alpha}{\partial x_\beta}\right]$$

- Hamiltonův formalismus

  – kanonická hybnost $\vec{p} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\vec{v}} = m\vec{v} + q\vec{A}$

$$H(\vec{x},\vec{p}) = \vec{v}\cdot\vec{p} - \mathcal{L} = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - q\vec{A}(x)\right)^2 + q\phi(x,t)$$

pozn: $\vec{p}$ není pozorovatelná (závisí na kalibraci!)

ale stále intimně souvisí s transl. invariancí:

$$\frac{d}{dt}(p_\alpha) \equiv \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial v_\alpha}\right) = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial x_\alpha} = 0 \quad \text{pro transl invar ve směru } \vec{e}_\alpha$$

2) Kvantově mechanický popis

$$\boxed{\hat H = \frac{(\hat p_\alpha - q\hat A_\alpha)(\hat p_\alpha - q\hat A_\alpha)}{2m} + q\hat\phi}$$

$\hat{\vec x} \equiv \{\hat x_\alpha\}_{\alpha=1}^{3} \equiv (\hat x, \hat y, \hat z)$

kde operátory: $\hat x_\alpha$ -- násobení nezáv. prom. (v souřad. repr.)

kanon. souř. a kanon. hybn. → $\hat p_\alpha = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_\alpha}$ (generátor posunutí)

→ splňují kanonické komutační relace $[\hat x_\alpha, \hat p_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}$

$\hat\phi \equiv \phi(\hat x, \hat y, \hat z)$ klas. potenc. funkce

$\hat A_\alpha \equiv A_\alpha(\hat x, \hat y, \hat z)$

Další důležité pozorovatelné:

- operátor rychlosti:

obecně operátor změny veličiny $\hat{\dot A} \equiv \frac{i}{\hbar}[\hat H, \hat A]$

zde: $\hat V_\alpha \equiv \frac{i}{\hbar}[\hat H, \hat x_\alpha] = \frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}[(\hat p_\alpha - q\hat A_\alpha)(\hat p_\alpha - q\hat A_\alpha), \hat x_\alpha]$

$$\boxed{\hat V_\alpha = \frac{1}{m}(\hat p_\alpha - q\hat A_\alpha)}$$ (stejné jako klas. vzorec na předch. str.)

tj: $\boxed{\hat H = \frac{1}{2}m\hat V_\alpha\hat V_\alpha + q\hat\phi}$

důležité komut. relace:

- 1) $[\hat x_\alpha, \hat V_\alpha] = \frac{i\hbar}{m}\delta_{\alpha\beta}$ -- zjevné
- 2) $[\hat V_\alpha, \hat V_\beta] = \frac{i\hbar q}{m^2}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat B_\gamma$ $\left(\frac{i\hbar}{m}\omega_c\right)$

Dk druhé relace: .. stačí $[V_x, V_y]$ + cyklická záměna

$$[V_x, V_y] = \frac{1}{m^2}[p_x - qA_x, p_y - qA_y] = \frac{-q}{m^2}\left([p_x, A_y] + [A_x, p_y]\right) = -\frac{q i\hbar}{m^2}\underbrace{\left(\frac{\partial A_x}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial x}\right)}_{-B_z \;..\; \nabla\times A}$$

- operátor Lorentzovy síly:

Heisenbergova pohyb. rovnice (připomínám $\hat V_\alpha^{(H)} \equiv e^{\frac{i}{\hbar}\hat H t}\hat V_\alpha e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H t}$):

$$m\frac{dV_\alpha^{(H)}}{dt} = m\frac{i}{\hbar}[\hat H, \hat V_\alpha^{(H)}] = m\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}m\underbrace{[\hat V_\beta^{(H)}\hat V_\beta^{(H)}, \hat V_\alpha^{(H)}]}_{V_\beta[V_\beta, V_\alpha] + [V_\beta, V_\alpha]V_\beta} + m\frac{i}{\hbar}q\underbrace{[\hat\phi^{(H)}, \hat V_\alpha^{(H)}]}_{\frac{i\hbar}{m}\frac{\partial\phi}{\partial x_\alpha}}$$

pozn: komutátory v Heisenberg repr. stejné!

$$= m\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}m\frac{i\hbar q}{m^2}\varepsilon_{\beta\alpha\gamma}\left(\hat V_\beta^{(H)}\hat B_\gamma^{(H)} + \hat B_\gamma^{(H)}\hat V_\beta^{(H)}\right) - q\frac{\partial\hat\phi}{\partial x_\alpha}$$

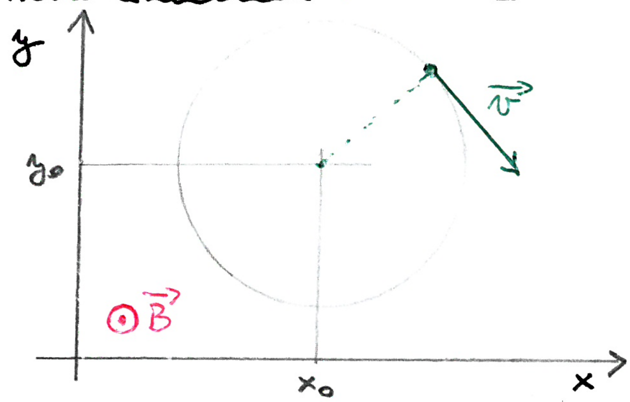
tj $$m\frac{dV_\alpha^{(H)}}{dt} = \boxed{q\frac{1}{2}\left(\hat{\vec V}^{(H)}\times\hat{\vec B}^{(H)} - \hat{\vec B}^{(H)}\times\hat{\vec V}^{(H)}\right) + q\hat{\vec E}^{(H)} \equiv \vec F^{(H)}}$$

jako klasický vzorec až na pořadí operátorů

3) Pohyb částice v homogenním MG poli
(Landauovy hladiny)

volba souřadnic:
... $\vec{B} = B\vec{e}_z$

opak. klas. mechaniky:



.. klasický pohyb $\vec{F} = qvB = m\frac{v^2}{r}$

→ "cyklotronová freq": $\boxed{\omega_c \equiv \frac{v}{r} = \frac{qB}{m}}$

$$(*):\quad \begin{aligned} x &= x_0 + r\cos(\omega_c t + \delta) \\ y &= y_0 - r\sin(\omega_c t + \delta) \\ v_x &= -\omega_c r \sin(\omega_c t + \delta) \\ v_y &= -\omega_c r \cos(\omega_c t + \delta) \end{aligned}$$

Kvantové řešení:

... volba kalibrace: $\vec{A} = (-yB, 0, 0)$ ... $\nabla\cdot\vec{A} = 0$ $\quad \nabla\times\vec{A} = \vec{B}$

• **algebraické řešení:**

$$\hat{H} = \boxed{\tfrac{1}{2}m\left(\hat{V}_x^2 + \hat{V}_y^2\right)} + \tfrac{1}{2}m\hat{V}_z^2 \equiv \hat{H}_{xy} + \hat{H}_z$$

platí: $\left.\begin{aligned} [\hat{V}_y, \hat{V}_z] &= \frac{i\hbar q}{m^2} B_x = 0 \\ [\hat{V}_z, \hat{V}_x] &= \frac{i\hbar q}{m^2} B_y = 0 \end{aligned}\right\} \to [\hat{H}_{xy}, \hat{H}_z] = 0$

→ separabilita

$E = E_{xy} + E_z$: — $\hat{H}_z = \frac{1}{2}m\hat{V}_z^2$ kde $\hat{V}_z \equiv \frac{1}{m}\hat{P}_z$ ... volná částice

— $\hat{H}_{xy} = \frac{1}{2}m\frac{|q|B}{m^2}\left(\hat{Q}^2 + \hat{P}^2\right) = \frac{1}{2}\omega_c\left(\hat{Q}^2 + \hat{P}^2\right)$

kde $\hat{Q} \equiv \frac{m}{\sqrt{|q|B}}\hat{V}_x \qquad \hat{P} \equiv \frac{m}{\sqrt{|q|B}}\hat{V}_y$

přitom: $[\hat{Q}, \hat{P}] = \frac{m^2}{|q|B}[\hat{V}_x, \hat{V}_y] = \frac{m^2}{|q|B}\frac{i\hbar q}{m^2}B = \pm i\hbar$

znaménko náboje $\frac{q}{|q|}$

→ komut. relace jako x, p ; nebo p, x

anihil. oper: $\hat{a} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(Q + iP)$ resp $\hat{a} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(P + iQ)$

⇒ jako LHO $[\hat{a}, \hat{a}^+] = \hbar$ ... $\hat{N} \equiv \hat{a}^+\hat{a}$ ... násob. $\hbar$

→ $E_{xy} = \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right)$

závěr: spektrum $E_n(v_z, \alpha) = \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}m v_z^2$;

kde $n = 0, 1, 2, \ldots$; $v_z \in \langle 0, \infty)$ a α ... dodateč. degenerace později

- **řešení v souřadnic. reprez. (Landau)** QM $\boxed{\text{MP-4}}$

Zeitschrift für Phys. 64 (1930) 629

v naší kalibraci: $\hat{H} = \frac{1}{2m}\left[(\hat{p}_x + \hat{y}qB)^2 + p_y^2 + p_z^2\right]$

kde $\hat{p}_\alpha \equiv -i\hbar\partial_\alpha$ tj $[\hat{p}_x, \hat{H}] = [\hat{p}_z, \hat{H}] = 0$ $[\hat{p}_y, \hat{H}] \neq 0$

tj ÚSKO: $\{\hat{P}_x, \hat{P}_z, \hat{H}\}$

... společné vl. vektory: $\psi(x,y,z) = e^{i(k_x \cdot x + k_z \cdot z)}\phi(y)$

stac. SR: $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - \frac{i\hbar q}{m}By\partial_x\psi + \frac{q^2B^2y^2}{2m}\psi - E\psi = 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi''(y) + \underbrace{\frac{\hbar qBk_x}{m}y}_{-\frac{m}{2}\omega_c^2 2yy_0}\phi(y) + \Big[\underbrace{\frac{q^2B^2}{2m}y^2}_{\frac{m}{2}\omega_c^2y^2} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2+k_z^2)}_{\frac{m}{2}\omega_c^2y_0^2} - E\Big]\phi(y) = 0$$

$\boxed{y_0 = -\frac{\hbar k_x}{qB}}$

$$\Rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\phi''(y) + \frac{m}{2}\omega_c^2(y-y_0)^2 = \epsilon\phi \qquad \dots \boxed{\epsilon \equiv E - \frac{\hbar^2k_z^2}{2m}}$$

posunutý LHO: řešení: $\psi(x,y,z) = N e^{ik_x x + ik_z z} H_n(\alpha(y-y_0)) e^{-\frac{1}{2}(\alpha(y-y_0))^2} \equiv \langle x,y,z | k_x, k_z, n\rangle$

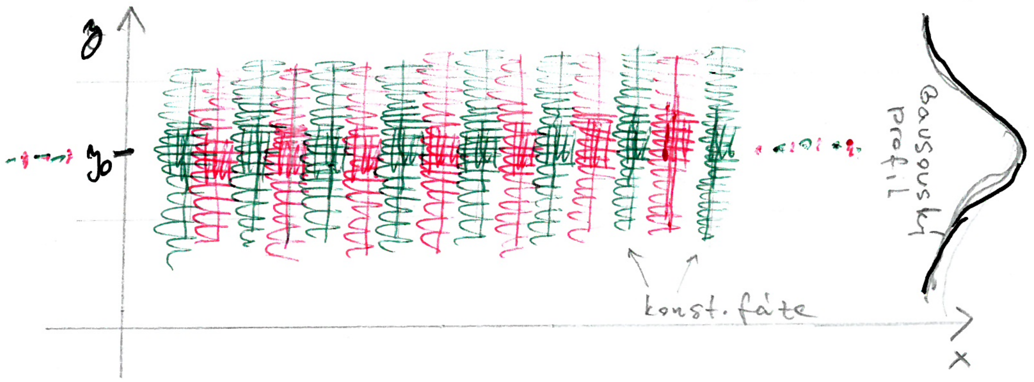
$\alpha \equiv \frac{1}{x_0} \equiv \sqrt{\frac{m|\omega_c|}{\hbar}} \equiv \sqrt{\frac{|q|B}{\hbar}}$

z kapitoly o LHO

spektrum $\boxed{E_n(k_x,k_z) = \hbar\omega_c(n+\tfrac{1}{2}) + \frac{\hbar^2k_z^2}{2m}}$ $n = 0,1,2,\dots$ $k_x, k_z \in \langle 0, \infty)$

Obrázek řešení:

$(n=0)$



interpretace:

další pozorovatelné: $\boxed{\hat{X}_0 \equiv \hat{X} + \frac{\hat{V}_y}{\omega_c}}$ $\boxed{\hat{Y}_0 \equiv \hat{Y} - \frac{\hat{V}_x}{\omega_c}}$ ... souřadnice středu trajektorie

poloměr trajektorie $\boxed{\hat{r}^2 \equiv (\hat{x}-\hat{x}_0)^2 + (\hat{y}-\hat{y}_0)^2 = \frac{1}{\omega_c^2}(\hat{V}_x^2 + \hat{V}_y^2)}$

tj $\hat{H}_{xy} \equiv \frac{1}{2}m\omega_c^2\hat{r}^2$ ... tj $\hat{r}$ je integrál pohybu

a navíc $r = \frac{1}{\alpha}\sqrt{(2n+1)}$ $\left[\equiv \sqrt{\frac{2E_{xy}}{m\omega_c^2}}\right]$

oscilátorové x_0

→ tj n určuje poloměr trajektorie

souřadnice středu: $[\hat H, \hat x_0] = [H, \hat Y_0] = 0$

.. integrály pohybu

DK: $[\hat H_{xy}, \hat X_0] = [\frac{1}{2}m(V_x^2+V_y^2), \hat X + \frac{1}{\omega_c}\hat V_y] = \frac{1}{2}m\underbrace{[V_x^2, x]}_{-\frac{2i\hbar}{m}\hat V_x} + \frac{m}{2\omega_c}\underbrace{[V_x^2, V_y]}_{2\frac{i\hbar q}{m^2}B\hat V_x} = 0$

$[\hat H_{xy}, \hat Y_0] = [\frac{1}{2}m(V_x^2+V_y^2), \hat y - \frac{1}{\omega_c}\hat V_x] = -\frac{1}{2}m\frac{2i\hbar}{m}V_y + \frac{m}{2\omega_c}V_y\frac{2i\hbar qB}{m^2} = 0$

ale $[\hat X_0, \hat Y_0] = -\frac{i\hbar}{m\omega_c} \equiv -i\lambda^2$ ... nekompatibilní proměnné

→ relace neurčitosti $\Delta x_0 \cdot \Delta y_0 \geq \frac{\hbar}{2m\omega_c}$

DK: $[\hat X_0, Y_0] = [\hat x + \frac{1}{\omega_c}\hat V_y, \hat y - \frac{1}{\omega_c}\hat V_x] = -\frac{1}{\omega_c}[\hat x, \hat V_x] + \frac{1}{\omega_c}[\hat V_y, \hat y] - \frac{1}{\omega_c^2}[\hat V_y, \hat V_x]$

$= -\frac{\hbar i}{m\omega_c} - \frac{\hbar i}{m\omega_c} + \frac{1}{\omega_c^2}\frac{i\hbar}{m}\omega_c$ ✓

PŘITOM:

v souřadnicové reprezentaci:

$$\hat y_0 = \hat y - \frac{\hat v_x}{\omega_c} = \hat y - \frac{1}{\omega_c m}(\hat p_x - q\underbrace{A_x}_{-yB}) = \frac{i\hbar}{m\omega_c}\partial_x$$

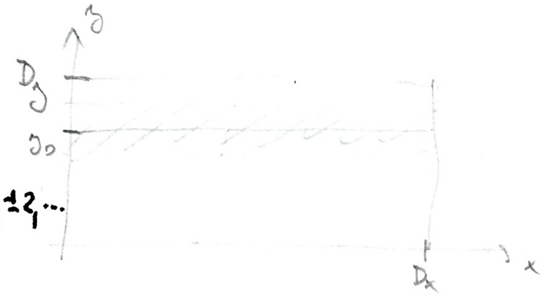
tj nalezený stav $\hat y_0|\psi\rangle = -\frac{\hbar k_x}{m\omega_c}|\psi\rangle = -\frac{\hbar k_x}{qB}|\psi\rangle = y_0|\psi\rangle$

→ je vlastním vektorem operátoru $\hat y_0$ .. $\Delta y_0 = 0$ .. + rel. neurč.

⇒ nekonečná neurčitost $\hat x_0$

pozn: $\hat y_0 = \frac{-\hat p_x}{qB}$ ...!? $\hat p_x$ není hybnost, ale y-složka souř. středu!

pozn k degeneraci: Položení do boxu:



+ period. okr. podm. → $k_x = \frac{2\pi n_x}{D_x}$ $n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

+ řešení je téměř nezávislé pokud $y_0 \in (0, D_y)$ tj. jen $n_x = 0, -1, -2, \dots n_M$

tj. max $y_0 = \frac{-\hbar k_x}{m\omega_c} = \frac{\hbar}{qB}\frac{2\pi n_M}{D_x} \leq D_y$ tj $n_M \simeq \frac{D_x D_y}{2\pi}\cdot\frac{qB}{\hbar} = \frac{D_x D_y}{2\pi\lambda^2}$ *

kde $\lambda^2 \equiv \frac{\hbar}{m\omega_c}$ ... (x_0^2 .. typ rozměr LHO) — dříve v pozn

interpretace: $2\pi\lambda^2$ ... plocha jednoho stavu

4) Kalibrační transformace

Tvrzení: záměna $\vec{A} \to \vec{A}' = \vec{A} + \nabla\chi$

$\Phi \to \Phi' = \phi - \partial_t \chi$

$\psi \to \psi' = e^{\frac{i}{\hbar} q\chi}\psi$

nenaruší platnost (tSR)

pozn: v klas mech stačí první dvě ... neznění sílu

DK: Lemma: $(-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A}')\psi' = e^{\frac{i}{\hbar}q\chi}(-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A})\psi$

DK -- jen dosazení zdej ... dodat člen z $\vec{A}'$ "sežere" $[\vec{\nabla}, e^{\frac{i}{\hbar}q\chi}]$

DK tvrzení: $\frac{1}{2m}(-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A}')^2\psi' + q\phi'\psi' - i\hbar\partial_t\psi'$

$= \frac{1}{2m}e^{\frac{i}{\hbar}q\chi}(-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A})^2\psi + [q\phi\psi - q\partial_t\chi\psi - i\hbar\frac{i}{\hbar}q\partial_t\chi\psi]e^{\frac{i}{\hbar}q\chi}$

$= e^{\frac{i}{\hbar}q\chi}\left\{\frac{1}{2m}(-i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A})^2\psi + q\phi\psi\right\}$ ✓

Další důsledky lemmatu:

- $\langle\psi|\hat{\vec{V}}|\psi\rangle = \langle\psi|\frac{1}{m}(\hat{\vec{p}} - q\vec{A})|\psi\rangle = \langle\psi'|\hat{\vec{V}}|\psi'\rangle$

  $\to$ kalibrační invariance $\langle\vec{V}\rangle$

  (neplatí pro $\langle\vec{p}\rangle$!)

  ... dokonce platí, že spektrum $\vec{V}$ je kalib. invar!

- tok hustoty pravděpodobnosti plyne z tSR: (odvodit nacv.)

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi) - \frac{q}{m}\vec{A}|\psi|^2$$

$$= \frac{1}{2m}\left[(\psi^*\hat{p}\psi - \psi\hat{p}\psi^*) - 2q\hat{A}(\psi)^2\right]$$

$$= \frac{1}{m}\mathrm{Re}\{\psi^*(\hat{\vec{p}} - q\vec{A})\psi\} \quad \text{.. kalibračně invariant.}$$

$$= \mathrm{Re}\{\psi^*\hat{V}\psi\}$$

5) Aharonov – Bohm efekt

(Phys. Rev. 115 (1959) 485 ; Physics Today ; Sept. 2009, 38)

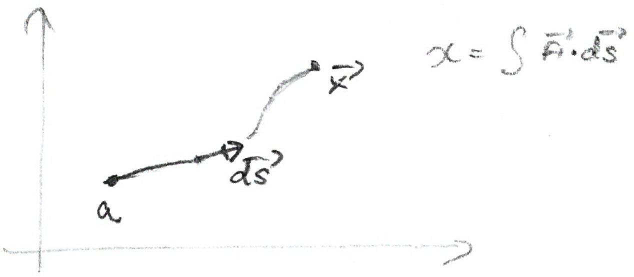
A) volná částice ... řešení $\psi_0(x,t)$

↳ tj $\vec{E}=0$; $\vec{B}=0$ ... lze volit $\vec{A}=0$

kalibrační transformace $0=\vec{B}=\vec{\nabla}\times\vec{A}$ ... $\underbrace{\vec{A}}_{\text{nové } (A')}=+\nabla\chi$

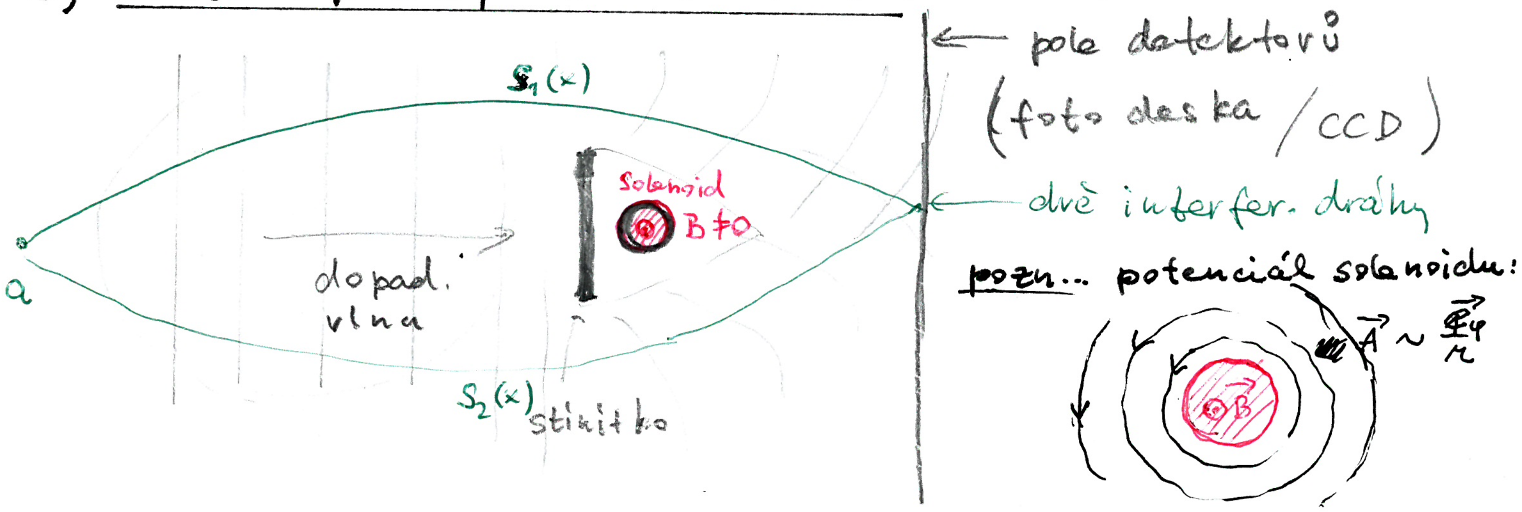
→ v této kalibraci $\psi(x,t)=e^{\frac{i}{\hbar}q\chi}\,\psi_0(x,t)$

přitom $\chi(\vec{x})=\int_a^{\vec{x}}\vec{A}\cdot d\vec{s}$



$\nabla\times\vec{A}=0$ ⟹ χ nezávisí na dráze (v jednoduše souvislé obl.)

B) stále 0 pole $\vec{B}$, ale na oblasti „s dírou":



interferuje $\chi_1=\int_{S_1}\vec{A}\cdot d\vec{s}$ a $\chi_2=\int_{S_2}\vec{A}\cdot d\vec{s}$

podle Stokes. věty: $\chi_1-\chi_2=\oint_{+S_1\cup(-S_2)}\vec{A}\cdot d\vec{s}=\oint \operatorname{rot}\vec{B}\cdot d\vec{S}=\int\vec{B}\cdot d\vec{S}=\Phi$

Magnetický tok

→ interference dána faktorem $\exp\left\{\frac{i}{\hbar}q\Phi\right\}$

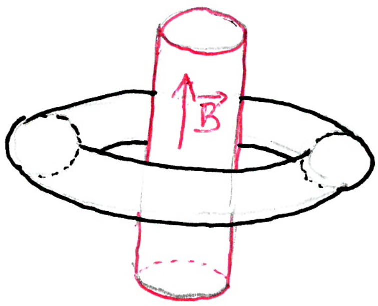
Fyzikální důsledky:

.. pole je sice nenulové, ale v oblasti kam částice nemůže

– buď $\vec{B}$ působí nelokálně nebo

$\vec{A}$ má reálný fyz. význam (ale jen kalibr. invar. veličiny z něj odvozené)

Pozn: AB pro vázané stavy



vlnovod nasunutý na solenoid

SR v cylindrických souř:

$$\Delta = \left(\frac{\partial}{\partial \rho}\right)^2 + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2}\left(\frac{\partial}{\partial \varphi}\right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial z}\right)^2$$

$$\psi \sim \psi(\rho, z)\, e^{im\varphi} \longrightarrow -\frac{m^2}{\rho^2}$$

v mg. poli lze volit $A_\varphi = \dfrac{\Phi}{2\pi\rho}$ $\quad A_\rho = A_z = 0$ $\quad \Phi \ldots$ mg. tok

$\longrightarrow$ záměna $m \to m - F$; kde $F = \dfrac{\Phi q}{2\pi\hbar}$

6 částice se spinem v MG poli – Pauliho rovnice

- stavový prostor pro částici se spinem 1/2:

$$\mathcal{H} = \underset{\text{poloha}}{L^2(\mathbb{R}^3)} \otimes \underset{\text{spin}}{\mathbb{C}^2} \equiv \mathcal{H}_{\vec{r}} \otimes \mathcal{H}_S$$

... tj. $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ lze reprezent. $\begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$

- pozorovatelné

poloha ... $\hat{x}_i \equiv \underset{\text{poloha}}{\hat{x}_i} \otimes \underset{\text{spin}}{I}$ ... $\hat{x}_i \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_i \psi_+(\vec{r}) \\ x_i \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$

hybnost ... $-i\hbar\nabla \otimes I$ ... $\hat{\vec{p}}\,|\psi\rangle = \begin{pmatrix} -i\hbar\nabla\psi_+ \\ -i\hbar\nabla\psi_- \end{pmatrix}$

spin $I \otimes \vec{S}$. $\hat{S}_i |\psi\rangle = \frac{\hbar}{2} \sigma_i \begin{pmatrix} \psi_+(r) \\ \psi_-(r) \end{pmatrix}$

interakční energie magnetického momentu $\vec{\mu}$ v mg poli:

.. $-\vec{\mu}\cdot\vec{B}$

operátor magnetického momentu $\hat{\vec{\mu}} = g\,\mu\,\frac{\hat{\vec{S}}}{\hbar}$

g ... konstanta pro danou částici .. gyromag. poměr
- $g = 2$ elektron
- $g \doteq 5.6$ proton
- $g \doteq -3.82$ neutron

μ ... tzv. Bohr magneton $\mu = \frac{e\hbar}{2m}$ pro elektron

resp. nuclear magneton $\mu = \frac{e\hbar}{2m_p}$ pro proton/neutron

Schrödingerova rovnice ~~...~~ pro

$$\boxed{\hat{H} = \underbrace{\frac{[\hat{\vec{p}} - q\vec{A}(\hat{\vec{x}})]^2}{2m} + qV(\hat{\vec{x}})}_{\text{působí v } \mathcal{H}_{\vec{r}}} - \underset{\text{působí v } \mathcal{H}_S}{\hat{\vec{\mu}}} \cdot \vec{B}}$$

... ≡ Pauliho rovnice

pozn. s použitím relace

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}\cdot\vec{b}) = \vec{a}\cdot\vec{b} + i\,\vec{\sigma}\cdot(\vec{a}\times\vec{b})$$

(*) viz násl. strana

se dá upravit do tvaru

$$\boxed{\left\{\frac{1}{2m}[\vec{\sigma}\cdot(\vec{p} - q\vec{A})]^2 + q\phi\right\}|\psi\rangle = i\hbar\,\partial_t|\psi\rangle}$$

k tomuto tvaru lze rovněž dojít nerelativistickou limitou Diracovy rovnice pro částici se spinem 1/2

$$\textcircled{*}\quad [\vec\sigma\cdot(\vec p - q\vec A)]^2$$

$$= (\vec p - q\vec A)^2 + i\vec\sigma\cdot\underbrace{(\vec p - q\vec A)\times(\vec p - q\vec A)}_{\underbrace{\vec p\times\vec p}_{0} - q\,\underbrace{(\vec p\times\vec A + \vec A\times\vec p)}_{}\, + q^2\underbrace{\vec A\times\vec A}_{0}} = (\vec p - q\vec A)^2 - q\hbar\,\vec\sigma\cdot\vec B$$

není 0 protože nekomutují ... $[p, A] = -i\hbar\nabla A$

$-i\hbar \operatorname{rot} A = -i\hbar\vec B$

---

pozn: vyšší spin $s > 1/2$ ... $\mathcal{H}_s = \mathbb{C}^{2s+1}$

a $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_s(\vec r) \\ \psi_{s-1}(\vec r) \\ \vdots \\ \psi_{-s}(\vec r) \end{pmatrix}$

Aplikace na Zeemanův jev ... Atom v homogenním mg poli

$$\hat H = \frac{(\hat{\vec p} + e\vec A)^2}{2M} + V(\vec r)$$

... pro atom vodíku $-\frac{\alpha}{r}$

BÚNO mg pole ve směru z: $\vec B = B\vec e_z = \operatorname{rot}\vec A$

.. symmetric gage ... $\vec A = \frac{1}{2}\vec B\times\vec r = \frac{B}{2}(-y, x, 0)$ ... $\operatorname{div}\vec A = 0$

$$\hat H = \frac{\hat p^2}{2M} + \frac{e}{2M}(\underbrace{\hat{\vec p}\cdot\hat A + \hat{\vec A}\cdot\hat{\vec p}}_{}) + \underbrace{\frac{e^2\vec A^2}{2M}}_{\sim B^2} + V(\vec r)$$

$-i\hbar[\nabla\cdot\vec A + \vec A\cdot\nabla]$

$-i\hbar[(\operatorname{div}\vec A) + 2\vec A\cdot\nabla]$

$\overset{\shortparallel}{=0}$

$[\nabla, A]$ nekomutují

$\sim B^2$ .. většinou se zanedbává ve slabých mg polích $\simeq 0$

$$\hat H = \frac{\hat p^2}{2M} + \frac{e}{M}\vec A\cdot\vec p + V(\vec r) = H_{atom} + \frac{e}{2M}\vec B\cdot\vec L$$

$$\vec A\cdot\vec p = \frac{1}{2}(\vec B\times\vec r)\cdot\vec p = \frac{1}{2}\vec B\cdot(\vec r\times\vec p) = \frac{1}{2}\vec B\cdot\vec L$$

přidání spinového členu $-\vec\mu\cdot\vec B = +\underset{2}{g}\frac{e\hbar}{2M}\frac{1}{2}\vec\sigma\cdot\vec B$

$$\to \hat H = \hat H_{atom} + \underbrace{\frac{e}{2M}\vec B\cdot(\vec L + g\vec S)}_{} \longrightarrow L_z + 2S_z, \quad \tfrac{1}{2}\sigma$$

$\hat H_{atom}$ → energie E_n pro $|nlm\rangle$

→ energie $\frac{e}{2M}B(m + \underset{\pm 1}{\sigma_z})\hbar$

pro $\psi = \begin{pmatrix}|nlm\rangle \\ 0\end{pmatrix}$ a $\begin{pmatrix}0 \\ |nlm\rangle\end{pmatrix}$