

**SPIN****Stern-Gerlachov pokus (Otto Stern & Walther Gerlach)**

Nabijene čestice u gibanju proizvode električnu struju. Vanjsko *statičko* magnetsko polje  $\vec{B}(\vec{r})$  na česticu naboja  $q$ , djeluje silom

$$\vec{F} = q \vec{v} \times \vec{B}(\vec{r})$$

gdje je  $\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt}$  brzina čestice. No, kad imamo razdiobu naboja,

onda ukupnu silu na sustav naboja moramo izraziti pomoću gustoće naboja  $\rho(\vec{r})$ , tako da imamo:

$$\vec{F} = \int \rho(\vec{r}) \vec{v}(\vec{r}) \times \vec{B}(\vec{r}) d^3 r$$

Umnožak brzine i gustoće naboja jednak je gustoći struje:

$$\vec{j}(\vec{r}) = \rho(\vec{r}) \vec{v}(\vec{r})$$

tako da za ukupnu silu dobijemo:

$$\vec{F} = \int \vec{j}(\vec{r}) \times \vec{B}(\vec{r}) d^3 r$$

U atomima i molekulama očekujemo stacionarne gustoće naboja i struje. K tomu, te gustoće su jako lokalizirane, tj. postoje samo u malom dijelu prostora koje "pripadaju" atomu ili molekuli--izvan toga prostora te su gustoće jednake 0.

Ako je magnetsko polje *homogeno*, onda ga u izrazu za ukupnu silu možemo izvući izvan operatora integriranja, tako da nam ostaje integral gustoće struje po cijelom prostoru. Taj integral iščezava, zato što je struja lokalizirana—jedan atom, ili molekula, ne daje nikakvu konačnu struju u prostoru.

Dakle, u homogenom magnetskom polju neutralni atom ili molekula, kao cjelina, ne će "osjećati" nikakvu silu. Da bi sila postojala, mora magnetsko polje biti **nehomogeno**. Moramo očekivati da će sila, u najnižem redu u razvoju po derivacijama magnetskog polja, biti razmjerna prvoj derivaciji magnetskog polja. Veličina koja se "veže" na prvu derivaciju magnetskog polja je **magnetski moment** sustava. Ta veličina je određena izrazom

$$\vec{\mu} = \frac{1}{2} \int \vec{r} \times \vec{j}(\vec{r}) d^3 r$$

i može se shvatiti kao umnožak jakosti struje i površine zatvorene petljom kojom teče struja. Naprimjer, pri jednoliko kružnom gibanju elektrona oko jezgre, magnetski moment takve struje je jednak:

$$\mu = I \cdot S = -\frac{e}{T} \cdot \pi \cdot r^2 = -\frac{e}{2} \cdot \omega \cdot r^2 = -\frac{e}{2m} L$$

gdje je  $L$  kutna količina gibanja elektrona oko jezgre. Ovu jednadžbu možemo napisati u obliku

$$\vec{\mu} = -\frac{e \hbar}{2m} \frac{\vec{L}}{\hbar} = -\mu_B \cdot \frac{\vec{L}}{\hbar}$$

gdje je  $\mu_B$  **Bohrov magneton**.

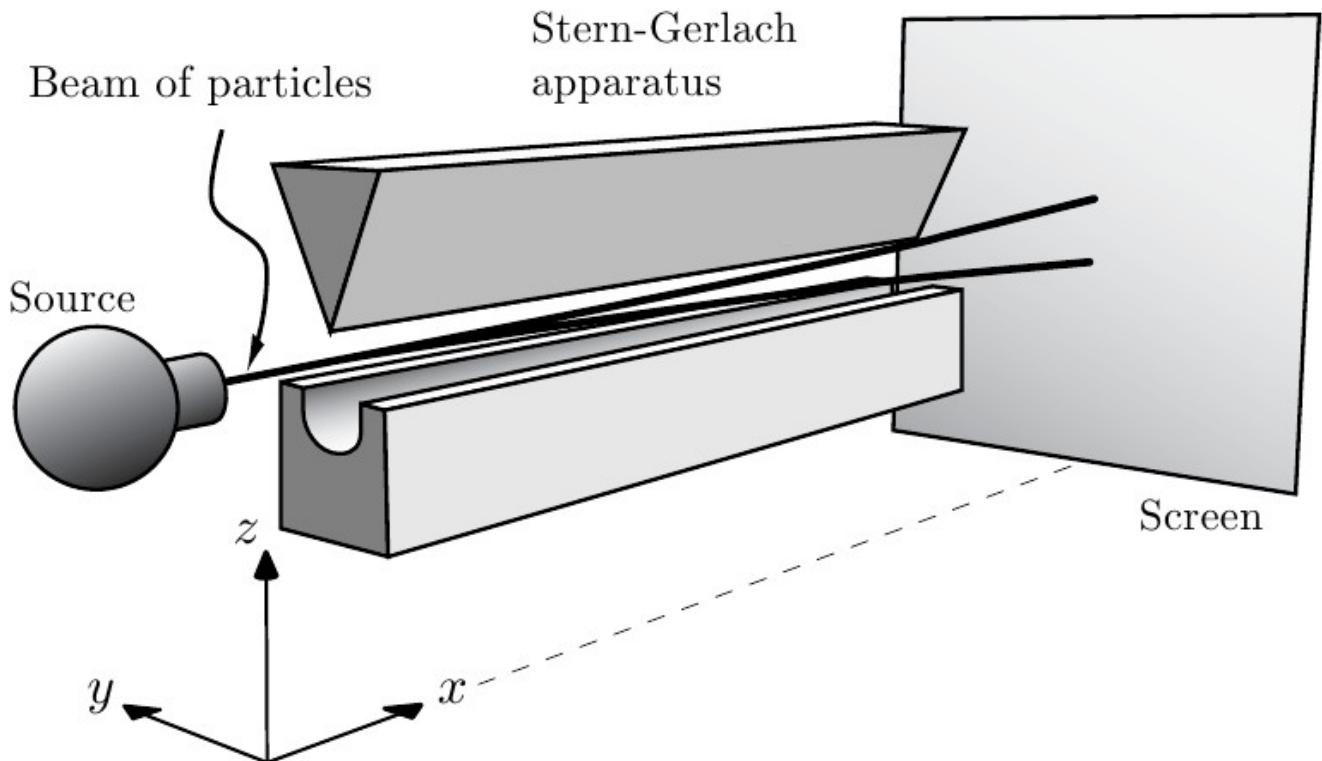
Potencijalna energija magnetskog momenta u magnetskom polju jednaka je

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

Dakle, magnetski (dipolni) momenti, da bi smanjili energiju sustava u magnetskom polju, nastojat će se orijentirati kao i magnetsko polje---u smjeru magnetskog polja. Ali, jedino će nehomogeno magnetsko polje djelovati na stazu gibanja magnetskog momenta.

Vidimo da je magnetski moment razmjeran ukupnoj kutnoj količini gibanja sustava. Ako sustav pustimo kroz područje nehomogenog magnetskog polja, staza čestica će se zakrenuti u smjeru porasta magnetskog polja, ili suprotno od toga, ovisno o orijentaciji magnetskog momenta. Na izlazu iz područja magnetskog polja možemo očekivati rasipanje snopa čestica. To rasipanje bi trebalo biti ograničeno veličinom kutne količine gibanja, i kontinuirano raspodijeljeno unutar određenog intervala.

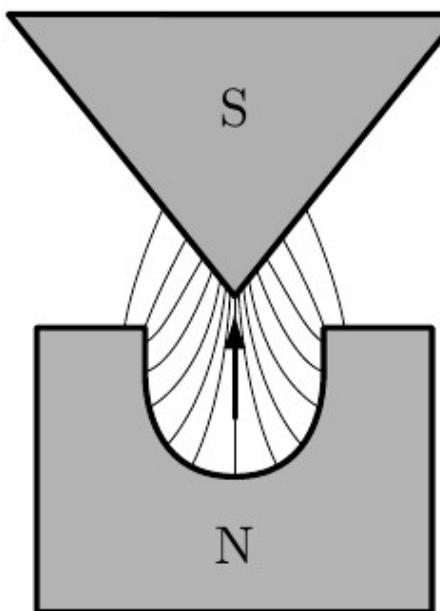
U SG pokusu se snop atoma srebra pušta kroz nehomogeno magnetsko polje. Atom srebra ima 47 elektrona, od kojih 46 elektrona čine nekakvu sferičnu razdiobu naboja oko jezgre, a 47-i elektron ostaje "nesparen", i kao takav zapravo određuje ukupnu kutnu količinu gibanja atoma. Jezgra atoma također posjeduje magnetski moment, ali je on znatno manji od magnetskog momenta nesparenog elektrona, i možemo ga zanemariti.



Budući da su na samom izlasku iz izvora magnetski momenti kaotično raspodijeljeni, rasipanje snopa bi trebalo biti kontinuirano, ili, ako je kutna količina gibanja kvantizirana onda bismo trebali imati **neparan** broj razdvojenih snopova pri izlasku iz područja magnetskog polja.

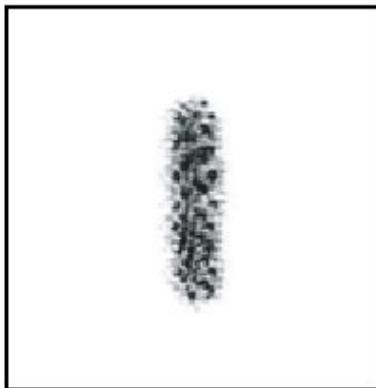
**Ali, to se ne događa!**

Na izlasku imamo **dva odijeljena snopa**.  
**Dakle, niti imamo kontinuiranu razdiobu, niti imamo kvantizaciju kao da je riječ o kutnoj količini gibanja.**



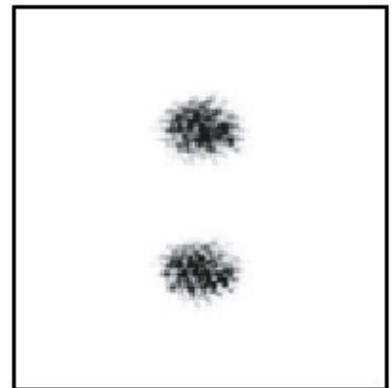
(a)

Magnetsko polje i njegov gradijent



(b)

Klasični rezultat

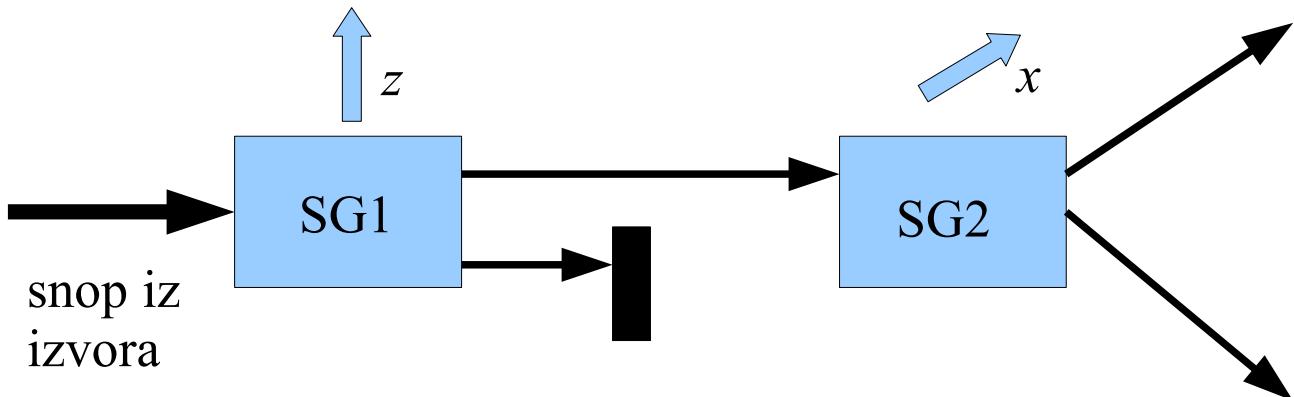


(c)

Rezultat stvarnog pokusa

Naravno da nema ništa posebno u smjeru  $z$ -osi, tj. izbor osi  $z$  za smjer magnetskog polja je jednako valjan kao i da smo izabrali bilo koju drugu os. Zato je dobro provesti pokus s dva magnetska polja—jedno u smjeru osi  $z$ , a drugo u smjeru osi  $x$ . Na izlasku iz prvog magneta, zaustavit ćemo jedan snop, a u drugi magnet ćemo propustiti samo drugi snop. Što će se dogoditi? Budući da je os drugog magnetskog polja okomita na os prvoga polja, i budući da su dipoli, što su izišli iz prvoga polja sada svi usmjereni u smjeru osi  $z$ , možemo očekivati da takav snop, kojemu su dipoli okomiti na os drugog polja, proći nesmetano.

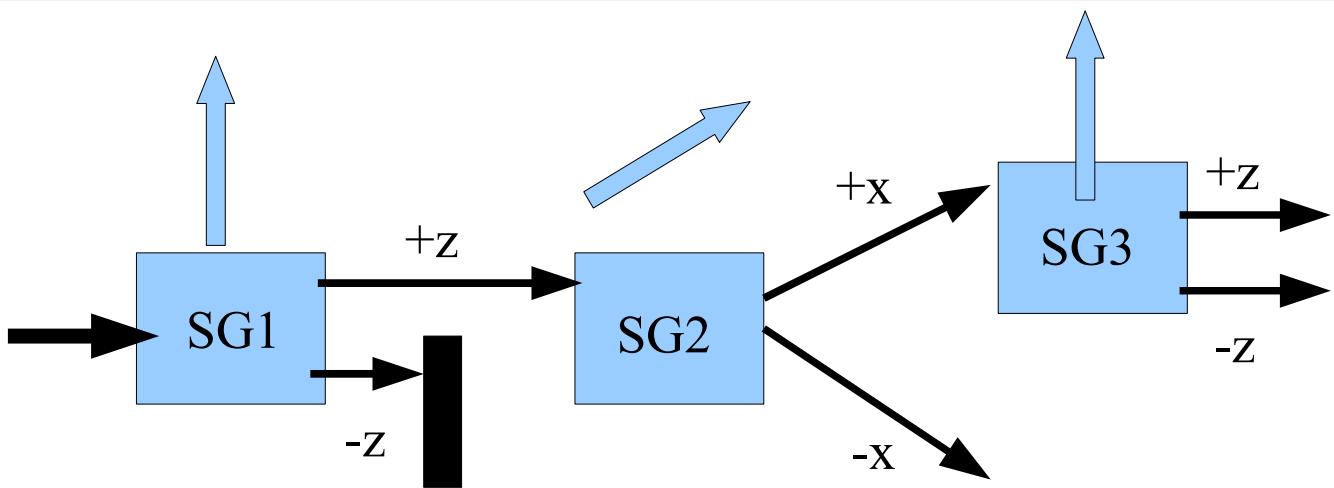
**I opet pogrješno očekivanje!**



Kako ovo objasniti?

Možda ovako: svi dipoli koji su iz prve aparature izašli s orijentacijom  $+z$ , također su imali 50:50 orijentacije  $+x$  - $x$ ? Ali isto bi bilo da smo drugi magnet stavili na  $y$  os. Znači, osim što su svi dipoli iz prvoga magneta izašli s orijentacijom  $+z$ , oni su svi imali podjednake orijentacije u smjeru obje vodoravne osi— $x$  i  $y$ ? Nije baš uvjerljivo objašnjenje. No, idemo se uvjeriti što će se dogoditi ako nakon drugog magneta stavim i treći magnet, s jednakom osi kao i prvi. Budući da u snopu iz drugog magneta ne trebalo biti dipola s  $-z$  orijentacijom (taj snop smo blokirali) onda bi na izlasku iz trećeg magneta morao biti samo jedan snop.

**Ali nije jedan, nego su opet dva !**



Otkuda  $-z$  snop na kraju priče? Zar njega nismo posve ubili između SG1 i SG2? Očito nismo.

Kako to opisati matematičkim jednadžbama?

Očite su ove stvari:

- 1.) Na izlasku iz SG1, snop  $+z$  sadrži "linearni spoj" snopova  $+x$  i  $-x$ , a isto tako i "linearni spoj" od  $+y$  i  $-y$   
(po čemu bi  $x$  bio "bolji" od  $y$ ?)
- 2.) Na izlasku iz SG2 snop  $+x$  (ali isto tako i  $-x$ ) sadrži "linearni spoj" od  $+z$  i  $-z$ .
- 3.) Izbor jednoga od snopova iz SG2 ( $+x$  na prikazanoj slici)  
**potpuno uništava prethodnu informaciju o z-komponenti snopa.**

Pokušajmo to opisati ovakvim jednadžbama:

$$\text{Snop}(+z) = a \text{ Snop}(+x) + b \text{ Snop}(-x)$$

$$\text{Snop}(-z) = c \text{ Snop}(+x) + d \text{ Snop}(-x) \quad (+z \text{ nije ni "bolji" ni "gori" od } -z)$$

Ali, ne smijemo zaboraviti ni  $y$  snop:

$$\text{Snop}(+z) = e \text{ Snop}(+y) + f \text{ Snop}(-y)$$

$$\text{Snop}(-z) = g \text{ Snop}(+y) + h \text{ Snop}(-y)$$

Uveli smo u prikaz osam skalara— $a, b, c, d, e, f, g$  i  $h$ . Kakvi to brojevi moraju biti?

- 1.) Moraju biti izabrani tako da neki navedeni spojevi budu međusobno nezavisni, jer su nezavisni Snop(+z) i Snop(-z).
- 2.) Po nekakvom iznosu, svi navedeni skalari moraju imati jednaku "težinu", jer nijedna orijentacija nije vrjednija od svih drugih ostalih.

Jedina mogućnost da gore navedena dva uvjeta budu zadovoljena je da među osam navedenih skalara imamo imaginarnе jedinice.  
**Bez imaginarnih jedinica ne ide!**

Ovo je zaista zanimljiva posljedica SG pokusa: prostor u kojem opisujemo stanje sustava (tj. snopove) mora biti nekakav apstraktни kompleksni prostor.

Na kraju, što je s magnetskim momentom?

Zaključujemo da se u prikazanom pokusu s atomima srebra taj magnetski moment tiče samo onog jednog, "nesparenog", elektrona, i da taj magnetski moment nije razmjeran ni klasičnoj ni kvantnoj kutnoj količini gibanja, nego je razmjeran "nečemu sličnom" kutnoj količini gibanja, koje je unutarnje svojstvo elektrona. To unutarnje (intrinsično) svojstvo elektrona se zove **spin**.

A sada ćemo "raspaliti" po apstrakciji, nakon što smo se uvjerili da bez nje ne ide.

## KETOVI, BRAOVI, OPERATORI....

### Čime ćemo se baviti ?

Baviti ćemo se kompleksnim vektorskim prostorom, čija je dimenzionalnost određena nekim konkretnim problemom.  
Vektor u tom prostoru ćemo označavati zgodnom oznakom—ket.  
Elementi toga prostora su zapravo **vektori stanja**.  
Dakle, neki vektor u tom prostoru ima oznaku

$$|\alpha\rangle$$

To je ket-vektor  $\alpha$ .

Dva keta daju neki treći ket (sjetite se zbrajanja "običnih" vektora)

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle$$

Množenje keta kompleksim brojem  $c$  (tj. skalarom) daje također ket, koji u biti opisuje isto stanje kao i polazni ket (vektor stanja).

$$c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c$$

To da množenje vektora skalarom, različitim od 0, daje u biti isto stanje, znači da nas zanimaju samo "smjerovi" u apstraktnom kompleksnom prostoru.

Fizička veličina, iliti **opservabla**, poput količine gibanja ili spina, je operator nad vektorima u tom prostoru, a rezultat djelovanja određenog operatora je opet vektor u istom prostoru. Dakle, djelovanjem operatora ne možemo "izaći" iz vektorskog prostora.

Operator  $A$  djeluje na ket s lijeva, odnosno ket je nadesno od operatora, i rezultat djelovanja je, općenito, neki drugi ket u istom prostoru:

$$A|\alpha\rangle = |\beta\rangle$$

Ali, postoje i ketovi koji su **svojstveni ketovi (vektori)** operatora  $A$ , i koji su nam najzanimljiviji. Na te, i samo na te i takve, vektore, operator djeluje kao da smo vektor množili skalarom:

$$A|a\rangle = a|a\rangle$$

Ket  $|a\rangle$  i vlastitu vrijednost  $a$  označili smo istim slovom, jer ne može biti zabune. Takvih  $a$ -ova može biti više, zapravo može ih biti onoliko kolika je dimenzionalnost prostora.

Naprimjer, već spomenute Snop(+z) i Snop(-z) (a slično i druge) možemo shvatiti kao **vlastite vektore** operatora  $z$ -komponente spina:

$$\begin{aligned} S_z \text{Snop}(\pm z) &\equiv S_z |S_z; \pm z\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |S_z; \pm z\rangle \\ S_x \text{Snop}(\pm x) &\equiv S_x |S_x; \pm x\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |S_x; \pm x\rangle \\ S_y \text{Snop}(\pm y) &\equiv S_y |S_y; \pm y\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |S_y; \pm y\rangle \end{aligned}$$

Prostor spina elektrona je dvodimenzionalan. Ketovi koji su vlastiti ketovi određene komponente operatora spina, mogu biti uzeti kao baza toga prostora. Ali, tada djelovanje ostalih komponenata operatora spina više nije jednostavno broj puta isti vektor.

## Bra vektori

Bra vektori su **dualni** vektori ketova, kao nekakva zrcalna slika ketova. Što će nam to?

Recimo da od keta želimo napraviti broj (skalar). Takva operacija, ako se može definirati, očito nije isto što i operator, jer djelovanje operatora na vektor je opet vektor, a nije broj. Ako postoji preslikavanje (funkcija) kojoj je domena vektorski prostor, a kodomena prostor skala (kompleksni brojevi), onda ćemo takve posebne "operatore" zvati **funkcionalima**.

Posebno, ako je preslikavanje linearno, onda ćemo govoriti o linearnim funkcionalima. No, sve takve funkcije možemo shvatiti kao elemente nekog drugog prostora, kojeg zovemo dualnim prostorom. Naprimjer, linearni funkcional  $f$ , koji ketu  $a$  pridružuje skalar, zvat ćemo "bra od a" i označavati kao:

$$f(|a\rangle) = \text{skalar} \Rightarrow f \equiv \langle a|$$

Jasno je da isti funkcional može djelovati i na neki drugi ket, ali ket  $a$  je poseban za taj funkcional tako što je rezultat funkcionala na taj ket **realan broj**.

Taj realni broj se zove još i unutrašnji umnožak, iliti **skalarni umnožak**. Dakle, skalarni umnožak ćemo definirati kao bra-ket (tj.  $\langle a | b \rangle$ ). Ovakvo intuitivno označavanje potječe od P. A. M. Diraca, jednoga od utemeljitelja moderne kvantne mehanike.

Dakle, skalarni umnožak dvaju vektora  $|a\rangle$  i  $|b\rangle$  definirat ćemo kao

$$\langle a | b \rangle$$

Međutim, taj skalarni umnožak općenito nije realan broj, osim ako je  $a=b$ . Ali vrijedi sljedeće:

$$\langle b | a \rangle = \langle a | b \rangle^*$$

Sjetite se kako smo definirali skalarni umnožak dviju funkcija.

## **KVANTNA KEMIJA 3. predavanje**

## **KVANTNA KEMIJA 3. predavanje**

## **KVANTNA KEMIJA 3. predavanje**