# KVANTTIMEKANIIKAN JATKOKURSSI

LUENNOT, VIIKKO 38

Juho Häppölä

26. lokakuuta 2009

# Sisältö

1	Prologi	3
2	Ominaisarvoyhtälön tarpeellisuudesta	3
3	Kaksitasosysteemeistä	4
4	${\bf Spin\text{-}}1/2$ -hiukkanen kaksitasosysteemin malliesimerkkinä	5
5	Sternin ja Gerlachin kokeesta	11

#### 1 Prologi

Luet Teknillisen korkeakoulun kvanttimekaniikan jatkokurssin viikon 38 luentomonistetta. Luentomoniste on kirjoitettu lähinnä minun itseni, haparoivia ensiaskeliaan ottavan sijaisluennoitsijan mielen selkeyttämiseksi, mutta asetettu jokseenkin julkiseen levitykseen siltä varalta, että tästä olisi jotakin hyötyä kurssin opiskelijoille.

Monisteen sisältö on pitkälti omaksuttu jäljempänä eritellystä lähdeluettelosta kunkin lähteen parhaana pitämiäni puolia yhdistellen ja hankalina pitämiäni asioita selventäen. Keskeisimmiltä osiltaan asia on samaa kuin kurssikirjan [2] luvuissa 11.6-11.10. Tahdon kuitenkin rohkaista opiskelijoita tutustumaan aineistoon laajemmin, erityismaininnan ansaitsevat [4] helppolukuisuudellaan sekä [1] ja [3] pilkuntarkalla täsmällisyydellään. Unohtaa ei pidä myöskään varsinaista prujua [5], joka edustaa tentin laativan tahon näkökulmaa kyseisistä asioista.

Kiinnostuksen herätessä kyseistä aineistoa voi kysellä lainaan allekirjoittaneelta.

Muistiinpanoni sisältävät eittämättä huomattavan määrän pienempiä tai suurempia virheitä, joita voi laskuharjoituspisteiden toivossa ilmoittaa osoitteeseen juho.happola@iki.fi

## 2 Ominaisarvoyhtälön tarpeellisuudesta

Yleisön pyynnöstä käsiteltäköön aihetta "Miksi meitä kiinnostaa ominaisarvoyhtälöiden ratkominen?" Ennen ensimmäisenkään esimerkin antamista totean, että Fourier- ja Laplace- muunnosten ohella operaattorien ominaisarvojen laskeminen on matemaattinen suorite, jonka hallintaa edellytetään yhdessä jos toisessa fysiikan probleeman ratkaisemisessa. Tässä suhteessa kvanttimekaniikka ei tee poikkeusta. Luettelen alla muutaman ensimmäisenä mieleeni juolahtaneen esimerkin siitä, miksi viime viikoilla tehty ominaisarvojen laskeskelu ei suinkaan ole turhaa näpertelyä, vaan todella relevanttia materiaalia.

Vetyatomi: mietitäänpä hetki, mistä koko kvanttimekaniikan tarina sai alkunsa. Yksi keskeisimpiä selittämättömiä mysteereitä oli vetyatomin spektriviivat, joita löytyi useampia jänniä sarjoja. Näistä ensimmäiset nimettiin löytäjiensä Lymanin, Balmerin ja Paschenin mukaan. Mistä ilmiössä sitten on pohjimmiltaan kyse? No, spektriviivathan vastaavat vetyatomin tiettyjen energiatilojen erotuksia. Kyseessä ovat siis transitiot Hamiltonin operaattorin ominaistilalta toiselle, transitioissa emittoituvat kvantit vastaavat Planckin kaavan mukaisesti täsmälleen vastaavien ominaisarvojen välistä erotusta.

Matriisin, tai yleisemmin operaattorin eksponenttifunktio: Schrödingerin yhtälö antaa tilan aikakehityksen:

$$i\partial_t |\psi\rangle = H |\psi\rangle, \tag{1}$$

missä, kuten usein jäljempänäkin, on valittu luonnolliset yksiköt ( $k=c=\hbar=1$ ). Schrödingerin yhtälön ratkaisu yksinkertaisen ajasta riippumattoman Hamiltonin funktion tapauksessa saadaan tunnetusti kaavasta

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi_0\rangle = exp(-itH) |\psi_0\rangle.$$
 (2)

Tässä aikakehitysoperaattorin U laskeminen eksponenttifunktion avulla helpottuu huomattavasti, kun osataan similaarimuuntaa Hamiltonin operaattori diagonaaliseen kantaan, kuten matematiikan peruskurssilla L3. Eksponenttifunktiota ei tarvita ainoastaan, jotta voitaisiin määrittää jonkin kvanttisysteemin kehitys ajasta ikuisuuteen, eksponenttifunktio osoittautuu tuikitarpeelliseksi myös tutkittaessa kvanttisysteemien statistiikkaa. Tällöin monesti termisessä tasapainossa olevaa systeemiä kuvaa niinkutsuttu tiheysoperaattori  $\rho$ ,

$$\rho = exp(-\frac{1}{T}H). \tag{3}$$

Tämänkin eksponenttifunktion laskeminen helpottuu diagonaalisessa kannassa huomattavasti.

Niin ikään statistisen fysiikan piirissä saatetaan johtaa systeemeille statistiikkaa, joka kertoo todennäköisyyden, jolla jokin tila on miehitetty. Näiden statistiikkojen johdossa monesti nojataan eri vapausasteiden keskinäiseen vuorovaikuttamattomuuteen. Miten tämä vuorovaikuttamattomuus sitten ilmenee? No diagonaalisena Hamiltonin operaattorina tietenkin.

Yllä vain muutamia esimerkkejä siitä, miksi operaattorien ominaissysteemien ratkaiseminen on kvanttimekaniikankin piirissä varsin kullanarvoinen taito. Toivon, että tämä sai lukijakuntani vakuutetuksi siitä, että kaikista kurssilla opiskeltavista asioista ominaissysteemien ratkaiseminen ei ole turhin.

### 3 Kaksitasosysteemeistä

Seuraavassa perehdytään kenties yksinkertaisimpaan epätriviaaliin kvanttimekaaniseen systeemiin, eli kaksitasosysteemiin. Kaksitasosysteemillä tarkoitetaan mitä tahansa kvanttimekaanista systeemiä, jonka tila-avaruus on kahden kantatilan virittämä:

$$\mathcal{H} = \operatorname{span}(|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle). \tag{4}$$

Tässä tilat  $|\uparrow\rangle$  ja  $|\downarrow\rangle$  ovat vain eräs merkintätapa kahdelle kantatilalle. Monesti voidaan sanoa systeemin olevan ylös-tilassa tai alas-tilassa. Mitä nämä tilat sitten käytännössä ovat? Luonnossa esiintyy monenlaisia systeemejä, joita voidaan mallintaa kaksitasosysteemillä. Esimerkiksi sinunkin kehosi läpi joka sekunti säntäävät neutriinot ovat luonnollinen esimerkki spin-1/2

-hiukkasista, joiden spinillä on kaksi mahdollista tilaa. Niinikään kvanttitietokoneiden sisuksissa lymyävät kvanttibitit, eli kubitit ovat esimerkki kaksitasosysteemistä. Klassinen esimerkki molekyläärisestä kaksitasosysteemistä on ammoniakkimolekyyli, jossa typpimolekyyli voi asettua kolmen vetyatomin määräämän tason kahdelle eri puolelle, joista kumpikin vastaa erään tila-avaruuden kahta kantavektoria.

Kaksitasosysteemejä on siis ympäröivässä maailmassamme viljalti, joten mistään teennäisestä oppikirjaesimerkistä ei ole kyse. Kaksitasosysteemien ilmeinen hyöty kvanttimekaniikan opiskelun kannalta on se, että laskuoperaatiot ovat sangen vaivattomia. Tila-avaruuden operaattoreilla on 2x2-matriisiesitykset ja tilat voidaan esittää niinikään 2-komponenttisina vektoreina, joita joskus spinoreiksikin kutsutaan.

Laskennallisesta vaivattomuudestaan huolimatta useimmat jäljempänä johdetut lainalaisuudet ovat yleistettävissä hankalampiinkin tila-avaruuksiin, joiden kanta saattaa olla suurempi tai jopa ääretön.

### 4 Spin-1/2 -hiukkanen kaksitasosysteemin malliesimerkkinä

Otettakoon lähempäään tarkasteluun muuan kaksitasosysteemi, spin-1/2 -hiukkanen. Mutta ennen erikoistumista spin-1/2 -hiukkasiin sanottakoon muutama sana spinistä yleisesti. Spin on, kuten nimikin viittaa, jollakin tavoin pyörimistä muistuttava kvantti-ilmiö. Ongelmana on kuitenkin se, että puhuttaessa spin 1/2 -hiukkasista viitataan usein hituihin, jotka nykytiedon valossa ovat pistemäisiä eivätkä siten voi mielekkäästi pyöriä pituusakselinsa ympäri. Kyseessä on siis hiukkasen sisäinen ominaisuus, kvanttiluku, joka käyttäytyy kuten kulmaliikemäärän tavoin.

Mitä sitten tarkoittaa käyttäytyminen kulmaliikemäärän tavoin? Käytännössä se tarkoittaa, että hiukkasella on vastaavankaltaisesti käyttäytyvät kvanttiluvut kuin esimerkiksi vetyatomilla kulmaliikemäärän suhteen. Siinä missä ratkaistaessa Schrödingerin yhtälön kulmariippuvaa osaa säteittäissymmetrisessä potentiaalissa (ks. [4] s. 135) vastaan nousevat ratakulmaliikemäärän kvanttiluku l ja vastaava magneettinen kvanttiluku m, on hiukkasella spin-kvanttiluku s ja vastaava magneettinen kvanttiluku  $m_s$ . Kuten ratakulmaliikemääränkin tapauksessa,  $m_s$  saa arvoja väliltä [-s,s]. Niin ikään spiniä vastaavat operaattorit muodostavat algebrallisen rakenteen joka on identtinen ratakulmaliikemääräoperaattorien muodostaman vastaavan rakenteen kanssa, kuten myöhemmin tullaan näkemään.

Erona ratakulmaliikemäärään kuitenkin se, että toisin kuin ratakulmaliikemäärän tapauksessa, spin-kvanttiluku s ei ole rajoitettu kokonaislukuihin, muutoinhan koko spin-1/2-hiukkasia ei voisi olla olemassa!

Spin on pohjimmiltaan relativistinen ilmiö. Spinin olemassaolon postuloi enemmän tai vähemmän heppoisin perustein Wolfgang Pauli 1920-luvulla

pelastaakseen keksimänsä Paulin periaatteen perikadolta. Nyttemmin spiniin liittyvä teoria on kuitenkin vahvemmalla pohjalla, kiitos mm. Diracin relativistiseen kvanttimekaniikkaan ja -kenttäteoriaan liittyvien löydösten.

Tässä annettava käsittely on luonteeltaan klassinen, joten tyydymme Paulin tavoin postuloimaan, että fermioneilla on sisäinen vapausaste, jota kutsumme spiniksi. Fermionien kohdalla tämä spin on puoli, joten spinillä on kaksi mahdollista tilaa, joita merkitään edellisen kappaleen tavoin lyhykäisyydessään spin ylös ja spin alas:  $|\uparrow\rangle$  ja  $|\downarrow\rangle$ .

Spin puoli -hiukkasen kaltaista systeemiä tarkasteltaessa on hyvä pitää muistissa, että monilla systeemeillä on spinin lisäksi muitakin vapausasteita kuin spin. Esimerkikis hiukkasella on usein liikemäärää kuvaava kvanttiluku tai vaikkapa aiemmin mainitulla ammoniakkimolekyylillä molekyläärisiä värähtelyihin ynnä muihin liittyviä kvanttilukuja. Tässä yhteydessä oletamme, että nämä kvanttiluvut eivät vastaa mistään mielenkiinnon arvoisesta vuorovaikutuksesta, joten ne voidaan jättää huomiotta.

Käsiteltäköön spin-1/2 -hiukkasen tapausta esimerkin valossa. Kenties klassisin esimerkki spinin käytös ja sen kytkentä ulkoiseen magneettikenttään. Tässä suhteessa varattu spin-1/2 -hiukkanen, vaikkapa elektroni, käyttäytyy hieman kuten virtasilmukka. Spin kytkeytyy magneettikenttään seuraavasti:

$$H = \frac{e}{m_e} S \cdot B. \tag{5}$$

Näin aluksi meillä on vapaus asettaa koordinaatisto haluamallamme tavalla. Niinpä päätämme asettaa magneettikentän positiivisen z-akselin suuntaan, jolloin tutkittavan systeemin Hamiltonin operaattorin kiusallisesta pistetulosta päästään eroon:

$$H = \frac{Be}{m_e} S_z. (6)$$

Toisin sanoen kenttä kytkeytyy yksinomaan spinin komponenttiin, jota historiallisista syistä kutsumme z-komponentiksi. Valitaan kannaksi edellä esitelty  $|\uparrow\rangle$ ,  $|\downarrow\rangle$ , eli  $S_z$ :n ominaiskanta. Tässä kannassa  $S_z$  on yksinkertainen esittää:

$$\langle \downarrow | S_z | \downarrow \rangle = -\frac{1}{2} \tag{7}$$

$$\langle \uparrow | S_z | \uparrow \rangle = \frac{1}{2},\tag{8}$$

ja muut  $S_z$ :n alkiot luonnollisesti nollia. Luonnollisesti voidaan valita operaattoreille ja tiloille eksplisiittinen matriisiesitys:

$$|\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} 1\\0 \end{bmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{bmatrix} 0\\1 \end{bmatrix}, \tag{9}$$

jolloin operaattorille  $S_z$  saadaan matriisiesitys:

$$S_z = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \tag{10}$$

Vastaavasti systeemin Hamiltonin operaattori saa muodon

$$H = \frac{eB}{2m_e} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \tag{11}$$

tai

$$H = \frac{eB}{2m_e} (|\uparrow\rangle \langle\uparrow| - |\downarrow\rangle \langle\downarrow|). \tag{12}$$

Systeemin aikakehitysoperaattori saadaan tuttuun tapaan Hamiltonin operaattorista eksponentioimalla:

$$U(t) = exp(-itH) = exp(i\omega t) |\uparrow\rangle \langle\uparrow| + exp(-i\omega t) |\downarrow\rangle \langle\downarrow|.$$
 (13)

Oletetaan, että meitä kiinnostaa, millä todennäköisyydellä systeemi on tilassa  $|\uparrow\rangle$  hetkellä t. Tarvitaan hermiittinen operaattori, joka mittaa tämän todennäköisyyden. Hetken pohdinta osoittaa, että kyseinen hermiittinen operaattori on projektio-operaattori tilalle  $|\uparrow\rangle$ :

$$A = |\uparrow\rangle \langle\uparrow| \,. \tag{14}$$

Niinpä kyseinen todennäköisyys  $P_A$  saadaan ratkaistua seuraavasta lausekkeesta:

$$\langle \psi_0 | U^{\dagger}(t) A U(t) | \psi_0 \rangle$$
 (15)

Asetettakoon nyt mielivaltainen alkutila

$$|\psi_0\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\rangle, \tag{16}$$

tällöin

$$P_{A} = (\langle \uparrow | \alpha^{*} + \langle \downarrow | \beta^{*})(exp(-i\omega t) | \uparrow \rangle \langle \uparrow | + exp(i\omega t) | \downarrow \rangle \langle \downarrow |)(| \uparrow \rangle \langle \uparrow |)$$

$$(exp(i\omega t) | \uparrow \rangle \langle \uparrow | + exp(-i\omega t) | \downarrow \rangle \langle \downarrow |)(\alpha | \uparrow \rangle + \beta | \downarrow \rangle). = |\alpha|^{2}.$$
(17)

Toisin sanoen todennäköisyys, että systeemi on mitattaessa tilassa  $|\uparrow\rangle$  ei muutu ajassa ollenkaan. Vastaava lasku voitaisiin suorittaa tilalle  $|\downarrow\rangle$ , jolloin tulos olisi luonnollisesti  $P_B = |\beta|^2$ . Syy tähän mielenkiinnottomaan aikakehitykseen löytyy Hamiltonin operaattorin diagonaalisesta muodosta.

Mutta entäpä spinin muut komponentit? Seuraavaksi perehdyttäköön siihen, mitä mielenkiintoista löytyy tarkasteltaessa oheista esimerkkiä mutta mitattaessa spinin muita komponentteja. Tätä ennen tarvitaan kuitenkin näitä muita komponentteja vastaavat hermiittiset operaattorit. Z-suuntainen spini oli helppo tapaus, sillä valitsimme sopivasti kannan, jossa kaikki on yksinkertaista ja operaattori diagonaalinen. Jäljelle jäävät kaksi spinoperaattoria ovat sen sijaan mutkikkaammat. Sen sijaan, että ojentaisin operaattorit suoraan, kiusaan itseäni ja yleisöäni hetken perustelemalla miksi operaattorit ovat juuri sellaiset kuin ovat.

Yllä todettiin, että spin on kulmaliikemäärän kaltainen asia. Käytännössä tämä tarkoittaa, että kulmaliikemäärä (josta spin on vain erikoistapaus) generoi systeemin rotaatiot. Olkoon meillä jokin alkutila, vaikkapa  $|\psi_0\rangle$ . Kuten fysiikassa yleensäkin, kvanttimekaniikassa voidaan kääntää systeemiä ympäri valitun akselin n suhteen kulman  $\epsilon$  verran. Lopputuloksena on uusi tila  $|\psi_r\rangle$ . Kvanttimekaniikassa tilat muuntuvat toisiksi tiloiksi operaattorien avulla, niinpä

$$|\psi_r\rangle = D(n,\epsilon) |\psi_0\rangle. \tag{18}$$

Hirvittävän monimutkaiselta kuulostava ilmaus "kulmaliikemäärä generoi systeemin rotaatiot" tarkoittaa yksinkertaisesti sitä, että rotaatio-operaattori voidaan muodostaa kulmaliikemääräoperaattorien (spinoperaattorien) avulla seuraavasti:

$$D(n,\epsilon) = \exp\left(-i\epsilon S \cdot n\right). \tag{19}$$

Tämä on siis kulmaliikemäärän ja spinin määritelmä. Olette saattaneet aiemmin lukea jostakin määritelmän  $L = r \times p$ , mutta tämä on enemmän tai vähemmän humpuukia, ainakin spinin tapauksessa. Spinhän on hiukkasen sisäinen vapausaste ja olemassa, vaikka systeemillä ei olisi mielekkäitä paikka- tai liikemääräoperaattoreita. Helpotuksena todettakoon kuitenkin, että tietyin reunaehdoin fysiikka kolmoselta tuttu  $r \times p$ -määritelmä seuraa yllä esitetystä määritelmästä.

Esitysteorian kielellä sanotaan, että operaattori  $D(n,\epsilon)$  on rotaation spin-1/2-esitys. Yritän seuraavassa selventää, mitä tämä käytännössä tarkoittaa väistäen syvimmät matemaattiset muodollisuudet, joihin kiinnostunut lukija voi perehtyä tarkemmin vaikkapa kirjoihin [1] ja [6] tutustumalla.

Kaikille lienee tuttua rotaatio tavallisessa kolmiulotteisessa euklidisessa koordinaatistossa. Kulman  $\epsilon$  suuruiselle rotaatiolle voidaan määritellä matriisiesitykset kunkin euklidisen koordinaattiakselin (numeroitu yhdestä kolmeen) ympäri seuraavasti:

$$R_1(\epsilon) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\epsilon) & -\sin(\epsilon) \\ 0 & \sin(\epsilon) & \cos(\epsilon) \end{bmatrix}$$
 (20)

$$R_{1}(\epsilon) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\epsilon) & -\sin(\epsilon) \\ 0 & \sin(\epsilon) & \cos(\epsilon) \end{bmatrix}$$

$$R_{2}(\epsilon) = \begin{bmatrix} \cos(\epsilon) & 0 & \sin(\epsilon) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\epsilon) & 0 & \cos(\epsilon) \end{bmatrix}$$
(20)

$$R_3(\epsilon) = \begin{bmatrix} \cos(\epsilon) & -\sin(\epsilon) & 0\\ \sin(\epsilon) & \cos(\epsilon) & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{22}$$

Kehittämällä potenssisarjaksi kolmanteen termiin asti, huomataan, että yllä oleville rotaatiomatriiseille pätee

$$R_1(\epsilon)R_2(\epsilon) - R_2(\epsilon)R_1(\epsilon) = R_3(\epsilon^2) - 1 + \mathcal{O}(\epsilon^3). \tag{23}$$

Vaadimme, että rotaatioiden esitykset spinavaruudessa käyttäytyvät samoin, siispä

$$(1 - iS_1\epsilon - \frac{S_1^2\epsilon^2}{2})(1 - iS_2\epsilon - \frac{S_2^2\epsilon^2}{2}) -$$

$$(1 - iS_2\epsilon - \frac{S_2^2\epsilon^2}{2})(1 - iS_1\epsilon - \frac{S_1^2\epsilon^2}{2}) = 1 - iS_3\epsilon^2 - 1$$

$$S_2S_1 - S_1S_2 = -iS_3$$

$$[S_1, S_2] = iS_3,$$
(24)

mistä akselien numerointia syklisesti permutoimalla saadaan

$$[S_i, S_j] = i\epsilon_{ijk}S_k, \tag{25}$$

missä  $\epsilon_{ijk}$  on Levi-Civitan symboli [7] joka käytännössä sanoo, että koordinaatistomme on oikeakätinen.

Saatu tulos spinoperaattorien kommutointisäännöistä on samanlainen kuin kulmaliikemääräoperaattoreilla. Tämä on tietysti luonnollista, koska lähdimme siitä oletuksesta, että spinin tulee minkä tahansa kulmaliikemäärän tavoin generoida systeemin rotaatiot.

Kaavaa 25 soveltamalla ja muistaen, että määrittelimme edellä

$$S_3 = S_z = S_z = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$
 (26)

voidaan ratkaista spinin ensimmäistä ja toista komponenttia (kotoisammin x ja y) vastaavat operaattorit. Algebrallinen näpertely antaa tulokseksi, seuraavaa:

$$S_x = S_1 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$S_y = S_2 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i\\ i & 0 \end{bmatrix}.$$
(27)

Yllä spinmatriisit on esitetty muodossa

$$S_i = \frac{1}{2}\sigma_i,\tag{28}$$

missä  $\sigma_i$  ovat Paulin spin-matriisit. Huomionarvoista on, että olisimme voineet valita operaattorit toisinkin, esimerkiksi permutoimalla koordinaatteja syklisesti. Yllä esitetty on kuitenkin historian saatossa vakiintunut konventio, jonka rikkominen ei mielestäni ole suotavaa.

Nyt kun spinin muitakin avaruudellisia komponentteja kuin z-komponenttia vastaavat hermiittiset operaattorit on ratkaistu, voidaan tutkailla, mitä aiemmin tutkiskellulle systeemille tapahtuu, kun yritetään mittailla spiniä suunnassa joka ei ole yhdensuuntainen magneettikentän kanssa. Mietitäänpä

tilannetta, jossa haluamme ratkaista, millä todennäköisyydellä spin on ylöspäin jos suoritamme mittauksen x-akselin suunnassa. Ilmauksella "ylöspäin x-akselin suunnassa" tarkoitan tilaa, joka tuottaa tuloksen  $\frac{1}{2}$  mitattaessa systeemi operaattorilla  $S_x$ .

Ratkaisemalla operaattorin  $S_x$  ominaissysteemi (tässäkin tapauksessa ominaissysteemien ratkaiseminen osoittautui hyödylliseksi) huomataan että ominaisarvoa puoli vastaa tila  $|\uparrow_x\rangle$ :

$$\sqrt{2} \left| \uparrow_x \right\rangle = \left| \uparrow \right\rangle + \left| \downarrow \right\rangle. \tag{29}$$

Esimerkin vuoksi laskettakoon auki tilanne, jossa hitu on hetkellä t=0kyseisessä tilassa  $|\uparrow_x\rangle$ :

$$|\psi_0\rangle = |\uparrow_x\rangle. \tag{30}$$

tilaa vastaava projektio-operaattori valitussa kannassa on

$$B = \frac{1}{2} (|\uparrow\rangle \langle\uparrow| + |\uparrow\rangle \langle\downarrow| + |\downarrow\rangle \langle\uparrow| + |\downarrow\rangle \langle\downarrow|). \tag{31}$$

$$P_{B} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \uparrow | + \langle \downarrow |) (\exp(-i\omega t) | \uparrow \rangle \langle \uparrow | + \exp(i\omega t) | \downarrow \rangle \langle \downarrow |)$$

$$\frac{1}{2} (|\uparrow\rangle \langle \uparrow | + |\uparrow\rangle \langle \downarrow | + |\downarrow\rangle \langle \uparrow | + |\downarrow\rangle \langle \downarrow |)$$

$$(\exp(i\omega t) |\uparrow\rangle \langle \uparrow | + \exp(-i\omega t) |\downarrow\rangle \langle \downarrow |) \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$$

$$= \frac{1}{4} (2 + \exp(-2i\omega t) + \exp(2i\omega t))$$

$$= \frac{1}{2} (1 + \cos(2\omega t)). \tag{32}$$

Systeemissä siis tapahtuu todella muutoksia, todennäköisyys löytää hitu spin ylös -tilasta x-akselin suunnassa oskilloi ajan suhteen. Yleisenä totuutena tätä ei tule pitää, sillä osaltaan tähän vaikuttaa myös valittu alkutila. Mikäli olisi asetettu  $|\psi_0\rangle = |\uparrow\rangle$ , olisi todennäköisyys pysynyt tasaisesti puolikkaassa maailman ääriin, sillä energian ominaistiloilla ei ole kvanttimekaniikassa tapana kehittyä kovinkaan mielenkiintoisesti.

Yllä johdettiin esimerkin varjolla muutamia allekirjoittaneen mielestä keskeisimpiä seikkoja spinin osalta. Kaksitilasysteemien rikkaus lienee se, että vältyimme suurimmilta sotkuilta, mutta valtaosa tuloksista on tavalla tai toisella yleistettävissä monimutkaisempiinkin systeemeihin kuten esimerkiksi kulmaliikemäärän teoriaan korkeampidimensioisissa esityksissä.

Lopuksi lienee paikallaan listata muutamia seikkoja, jotka saattavat osoittautua käytännön laskuissa hyödyllisiksi. Mikäli ilkeäksi ryhdyn, saatanpa laittaa jonkin seuraavista laskuharjoitustehtäväksikin.

Pauli-spin-matriisien osalta lienee paikallaan muistaa seuraavat relaatiot:

$$\sigma_i^2 = I, (33)$$

$$\operatorname{Tr}\left(\sigma_{i}\right) = 0,\tag{34}$$

$$det (\sigma_i) = 0,$$
(35)

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k, \tag{36}$$

$$[\sigma_i, \sigma_i]_+ = 2\delta_{ii},\tag{37}$$

missä  $[A, B]_+ \equiv AB + BA$ .

Lisäksi johdetuilla spinoperattoreilla on kunnon kulmaliikemääräoperaattorien tapaan mahdollisuus muodostaa nosto- ja laskuoperaattoreita:

$$S_{\pm} \equiv S_x \pm i S_y. \tag{38}$$

Näillä laskuoperaattoreilla on hyödyllinen ominaisuus, että niillä voidaan kasvattaa tai pienentää spiniä vastaavaa magneettista kvanttilukua  $m_s$ :

$$S_{\pm}|s, m_s\rangle = \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)} |s, m_s \pm 1\rangle.$$
 (39)

Lisäksi pätee

$$S_{+} = S_{-}^{\dagger}. \tag{40}$$

#### 5 Sternin ja Gerlachin kokeesta

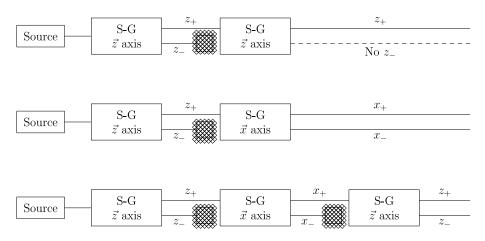
Sternin ja Gerlachin koe on muuan saksalaisten herrasmiesten, Otto Sternin ja Walther Gerlachin 1920-luvulla suorittama koe, joka tuo mielenkiintoisella tavalla esiin kvanttimekaniikan kinkkisen luonteen käyttäen nerokkaasti hyväksi kaksitasosysteemien fysikaalista olemusta. Luonteeltaan koe on, kuten tuon aikakauden koet yleensäkin, varsin yksinkertainen, mikä on varmasti vaikuttanut sen pääsyyn lähestulkoon kaikkiin alan oppikirjoihin.

Sternin ja Gerlachin kokeessa hopea-atomeja kuumennetaan uunissa. Kuumennetut atomit suunnataan kapean raon, jota kollimaattoriksikin kutsutaan, läpi magneettikenttään, joka yllä esitetyn konvention mukaisesti on zsuuntainen. Hopean järjestysluku ja siten myös hopeaydintä kiertävien elektronien määrä on 47. Näistä 47 elektronista 46 voidaan ajatella riittävällä tarkkuudella ympäröivän ydintä pallosymmetrisesti, jäljelle jäävä yksinäinen valenssielektroni siis määrittää hyvin pitkälti atomin käytöksen magneettikentässä. Tuon yksittäisen elektronin spin voi ulkoisessa magneettikentässä, kuten aiemmin on esitelty suuntautua ylös tai alas.

Lienee paikallaan mainita, että tämä, kuten monet muutkin systeemit ei ole ideaalinen kaksitasosysteemi. Hopea-atomien nopeus niiden sännätessä uunista ulos noudattaa termistä jakaumaa ja atomin ytimelläkin on oma magneettinen momenttinsa. Lisäksi elektroniparven käytökseen vaikuttavat perin hankalat kvanttikenttäteoreettiset korjaustermit. Herrojen Stern

ja Gerlach iloksi ytimen magneettinen momentti vaikuttaa elektroniverhon hienorakennetilojen tavoin kertaluokkia vähemmän hopea-atomin käytökseen kuin yksittäinen valenssielektroni. Niin ikään hopea-atomien liiketila on tässä kontekstissa merkityksetön, joten kokeen kannalta ainoat relevantit kvanttiluvut ovat liittyvät valenssielektronin spiniin.

Tilojen mukaan magneettikenttä hajottaa atomisuihkun kahtia erotellen magneettikentän suunnassa spin-ylös ja spin-alas-komponentit. Tämä sinänsä yksinkertainen koe muuttuu varsin mielenkiintoiseksi kun toinen erotelluista hopeasuihkuista ohjataan uuteen SG-laitteeseen ja hajotetaan komponenteiksi magneettikentällä, joka on erisuuntainen SG-laitteen magneettikenttään verrattuna. Kaaviokuva tällaisesta koejärjestelystä on esitetyt kuvassa 1.



Kuva 1: Erilaisia perättäisiä SG-koejärjestelyjä lähde: [8]

Leikitelläänpä hetki ajatuksella, että kuvassa 1 esitetty laitteisto toimisi klassisesti. Ensimäinen SG-laite poimii suihkusta puolet, nimittäin ne hopeaelektronit joiden spin osoittaa ylös z-akselin suhteen. Tämän suihku ohjataan edelleen uuteen SG-laitteeseen, joka poimii siitä puolet, nimittäin sen puolen jonka spin osoittaa x-akselilla ylöspäin. Kolmannessa, z-akselin suuntaisessa SG-koneessa ei siis tapahdu mitään, sillä jo ensimmäinen SG-laite on perannut joukosta pois ne hopea-atomit joiden spin osoittaa alaspäin z-akselin suunnassa.

Väärin! Herrat Stern ja Gerlach huomasivat kuuluisassa kokeessaan, että viimeinen SG-laite jakaa edelleen hopeasuihkun kahtia. Viimeiseen SG-laitteeseen suunnatussa hopeasuihkussa oli kuin olikin siis atomeja, joiden spin osoittaa z-suunnassa alaspäin, vaikka ne jo kertaalleen karsittiin pois ensimmäisessä SG-laitteessa. Nokkela fyysikko aavistaa syyn pian. Ensimmäisen SG-laitteen jälkeen spin-alas -atomeja ei varmasti ollut, mutta toisen jälkeen todistettavasti oli. Syypää ei siis voi olla mikään muu kuin mittalaitteiston toinen SG-laite.

Mistä tässä sitten on kyse? Voidaan ajatella, että identtisiä hopea-atomeja on valtava ( $\sim N_A$ ) määrä ja käyttää hyväksi kvanttimekaniikan todennäköisyystulkintaa. Ajatellaan, että jokaisen atomin kohdalla tehdään erillinen mittaus. Normitetaan ensimmäisen suihkun intensiteetti ykköseksi ja tulkitaan kaksitasosysteemin kantatilojen kertoimien itseisarvojen neliöt todennäköisyyksiksi, että satunnaisesti suihkusta valittu atomi on vastaavassa tilassa.

Matemaattisemmin sanottuna, oletetaan, että suihku on aluksi tilassa  $|\psi_0\rangle$ :

$$|\psi_0\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\rangle. \tag{41}$$

Näin ensimmäisestä SG-laitteesta tulevien suihkujen suhteelliset intensiteetit ovat  $|\alpha|^2$  ja  $|\beta|^2$ . Koska uunista tuleva hopeasuihku on vuorovaikuttanut uunissa ja hakeutunut jokseenkin hallitsemattomaan termiseen tasapainoon, ei kertoimia  $\alpha$  ja  $\beta$  kuitenkaan tunneta, käytännössä kuitenkin  $|\alpha|^2 \approx |\beta|^2 \approx \frac{1}{2}$ . Ensimmäisestä SG-laitteesta toiseen siirtyessään hopea-atomit ovat nyt hyvin määritetyssä tilassa  $|\uparrow\rangle$ .

Toisesta SG-koneesta ulos tulevan suihkun intensiteetti saadaan sisään menevän suihkun intensiteetistä kertomalla todennäköisyydellä, että sisään menevän suihkun satunnainen hopea-atomi projisoituu tilalle, jota SG-laitteessa mitataan, kuvan 1 esimerkissä tämä tila on jo aiemminkin tutuksi tullut

$$\sqrt{2}\left|\uparrow_{x}\right\rangle = \left|\uparrow\right\rangle + \left|\downarrow\right\rangle. \tag{42}$$

Toisesta SG-laitteesta ulos tullessaan suihku on siis tilassa  $|\uparrow_x\rangle$ , jolloin taas mitataan kyseisen tilan projektiokerroin tilaa  $|\uparrow\rangle$  vasten.

Oleellisena erona klassiseen maailmaan on se, että mittaus todella projisoi kvanttimekaanisen tilan jollekin mittausta vastaavan hermiittisen operaattorin ominaistilalle. Mikäli kaikki mittaukset suoritettaisiin saman suuntaisesti, ei tietenkään tapahtuisi mitään jännittävää, sillä hopea-atomit porhaltaisivat jokaisen SG-laitteen läpi tilassa  $|\uparrow\rangle$ . Vaihtamalla toisen SG-laitteen suunta x-suuntaiseksi pakotetaan systeemi "valitsemaan" jokin tila toisen SG-laitteen mittausta vastaavan hermiittisen operaattorin ominaistilojen joukosta. Kun atomi on "valintansa" tehnyt, on se nyt jossakin muussa tilassa ja kaikki edelliseen tilaan liittyvä data on ikuisesti kadotettu. Tämä on ilmiö, johon viitataan, kun kaltaiseni toistaitoinen fyysikko käyttää varomattoman ymmärtämättömästi termiä "aaltofunktion romahdus".

#### Viitteet

- [1] J. J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics, Revised Edition, 1994 Addison-Wesley
- [2] R. Liboff, Introductory Quantum Mechanics, Third Edition, 1998 Addison-Wesley
- [3] L. E. Ballentine, Quantum Mechanics A Modern Development, 1998 World Scientific
- [4] D. J. Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics, 2nd ed, 2005 Pearson Prentice Hall
- [5] J. Kinnunen, luentomoniste, https://noppa.tkk.fi/noppa/kurssi/ tfy-0.3211/luennot
- [6] H. F. Jones, Groups, Representations and Physics, 1998 IoP
- [7] Levi-Civita-symboli Wikipedia, viitattu 13.9.2009 http://fi. wikipedia.org/w/index.php?title=Levi-Civita-symboli&oldid= 7240000
- [8] Stern-Gerlach-experiment, Wikipedia, viitattu 13.9.2009 http://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Stern%E2%80%93Gerlach\_experiment&oldid=308848147