Seštevanje vrtilnih količin Imamo delce s spinom 1/2. Primer: elektron s spinom $s_1 = 1/2$, proton s spinom $s_2 = 1/2$. $l = 0$, torej imamo vodik v osnovnem stanju.

$$\vec{S_i}^2|s_i m_i\rangle = s_i(s_i+1)\hbar^2|s_i m_i\rangle, \quad i = 1,2$$

$$S_{iz}|s_i m_i\rangle = m_i\hbar|s_i m_i\rangle$$

$$[S_{i\alpha}, S_{j\beta}] = i\hbar\delta_{ij}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}S_{i\gamma}$$

$$\vec{S_i} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma_i} = \hbar^2\left(\sigma_{xi}, \sigma_{yi}, \sigma_{zi}\right)$$

Uporabili smo Pavlijevo matriko σ.

Tenzorski produkt. Spin zapišemo v obliki matrike s tenzorskim produktom:

$$\vec{S} = \vec{S_1} + \vec{S_2} \to \vec{S} = \vec{S_1} \otimes I_2 + I_1 \otimes \vec{S_2}$$

Kjer smo z I označili identiteto. Vpeljemo bazo $|m_1\rangle \otimes |m_2\rangle = |m_1 m_2\rangle$. Po tej bazi razvijemo S_z:

$$S_z = S_{1z} \otimes I_2 + I_1 \otimes S_{2z}$$

$$S_z|m_1 m_2\rangle = (S_{1z} \otimes I_2 + I_1 \otimes S_{2z})|m_1\rangle \otimes |m_2\rangle = S_{1z} \otimes I_2|m_1\rangle \otimes |m_2\rangle + I_1 \otimes S_{2z}|m_1\rangle \otimes |m_2\rangle$$

Operatorja z indeksom 1 (S_{1z} in I_1) delujeta na $|m_1\rangle$, operatorja z indeksom 2 (S_{2z} in I_2) pa na $|m_2\rangle$. Vemo, da je $S_{iz}|m_i\rangle = m_i\hbar|m_i\rangle$. Sledi

$$S_z|m_1 m_2\rangle(m_1 + m_2)\hbar|m_1 m_2\rangle$$

Zdaj poglejmo $[S_\alpha, S_\beta]$, torej komutator dveh komponent vsote spinov:

$$[S_\alpha, S_\beta] = [S_{1\alpha} \otimes I_2 + I_1 \otimes S_{2\alpha}, S_{1\beta} \otimes I_2 + I_1 \otimes S_{2\beta}] =$$

$$= [S_{1\alpha}, S_{1\beta}] \otimes I_2 + I_1 \otimes [S_{2\alpha}, S_{2\beta}] = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}S_{1\gamma} + i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}S_{2\gamma}$$

Se pravi je $[S_\alpha, S_\beta] = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}S_\gamma$. Komutator vsote spinov je torej enak, kot bi bil pri posameznih spinih.

Oglejmo si bazo sm:

$$S^2|sm\rangle = s(s+1)\hbar^2|sm\rangle$$

$$S_z|sm\rangle = m\hbar|sm\rangle$$

Še vedno je $S = S_1 \otimes I_2 + I_1 \otimes S_2$.

$$|\frac{1}{2}m_1\rangle \otimes |\frac{1}{2}m_2\rangle = |m_1\rangle \otimes |m_2\rangle = |m_1 m_2\rangle$$

Označimo:

$$|m_1 m_2\rangle = |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$$
$$|\downarrow\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$$
$$|\uparrow\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$$
$$|\downarrow\downarrow\rangle = |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$$

Vektorje $|sm\rangle$ zapišemo v tej bazi:

$$|sm\rangle = \sum_{m_1, m_2} c_{m_1, m_2}|\frac{1}{2}m_1\rangle \otimes |\frac{1}{2}m_2\rangle = \sum_{m_1, m_2} K_{m_1, m_2}|m_1 m_2\rangle$$

Kaj je lahko s?

$$m = m_1 + m_2 = \begin{cases} 1 & s = 1 \quad (\text{označimo } |11\rangle) \\ 0 & s = 0 \text{ ali } 1 \quad (|00\rangle,\ |10\rangle) \\ -1 & s = 1 \quad (|1,-1\rangle) \end{cases}$$

$$-s \leq m \leq s$$

Začeli bomo s stanjem $s = 1$, $m = 1$.

$$S^2|sm\rangle = 1(1+1)\hbar^2|sm\rangle$$

Izračunajmo vrednost $|sm\rangle$. Vemo $s = 1$, $m = 1$

$$|sm\rangle = |11\rangle = |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle \otimes I_2 + I_1 \otimes |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle$$

To je značilna lena notacija fizikov. Prvi $|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle$ predstavlja m_1, drugi pa m_2.

Kaj pomenijo stanja $|11\rangle, |10\rangle$, ipd.?
Očitno je$|11\rangle$ pomeni $|\uparrow\uparrow\rangle$, torej je v tem primeru

$$|sm\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$$

Stanje $|10\rangle$: Poglejmo si, kaj naredi operator S_-, definiran kot:

$$S_-|sm\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m(m-1)}|s, m-1\rangle$$

Operator zniža projekcijo spina, še vedno pa moramo upoštevati $-s \leq m \leq s$. Za naš primer je

$$S_-|11\rangle\sqrt{2}\hbar|10\rangle$$

Hkrati vemo, da je

$$\left(S_{1-} \otimes I_2 + I_1 \otimes S_{2-}\right)|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle = S_{1-} \otimes I_2|\uparrow\uparrow\rangle + I_1 \otimes S_{2-}|\uparrow\uparrow\rangle$$

S_{1-} deluje na prvo projekcijo, S_{2-} pa na drugo. Sledi:

$$S_-|11\rangle = \left(S_{1-} \otimes I_2 + I_1 \otimes S_{2-}\right)|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle = \hbar|\downarrow\uparrow\rangle + \hbar|\uparrow\downarrow\rangle$$

Dobili smo

$$\sqrt{2}\hbar|10\rangle = \hbar|\downarrow\uparrow\rangle + \hbar|\uparrow\downarrow\rangle$$

oziroma

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right)$$

Nato je spet očitno, da je $|1,-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$

Za primer $s = 1$ smo dobili tripletna stanja:

$$\begin{aligned} m = 1: &\quad |\uparrow\uparrow\rangle \\ m = 0: &\quad \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle\right) \\ m = -1: &\quad |\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

Za $s = 0$ mora veljati $S^2|00\rangle = 0$, torej je $|sm\rangle = |00\rangle = c_1|\uparrow\downarrow\rangle + c_2|\downarrow\uparrow\rangle$. Poglejmo $\langle 10|00\rangle$:

$$\langle 10|00\rangle = 0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle\uparrow\downarrow| + \langle\downarrow\uparrow|\right)\left(c_1|\uparrow\downarrow\rangle + c_2|\downarrow\uparrow\rangle\right)$$

Seveda je $\langle\uparrow\downarrow \mid \uparrow\downarrow\rangle = 1$, $\langle\downarrow\uparrow \mid \downarrow\uparrow\rangle = 1$ in $\langle\downarrow\uparrow \mid \uparrow\downarrow\rangle = 0$. Da bo rezultat enak 0, mora veljati:

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right)$$

Heisenbergova sklopitev. Imamo dva dipola z nekima vrtilnima količinama (spinoma) $\overrightarrow{S}$. Heisenbergovo sklopitev označimo s H in velja:

$$H = J_0 \overrightarrow{S_1} \cdot \overrightarrow{S_2}$$

Konstanta J_0 predstavlja "moč" sklopitve. Če označimo $\overrightarrow{S} = \overrightarrow{S_1} + \overrightarrow{S_2}$, lahko računamo:

$$\overrightarrow{S}^2 = \overrightarrow{S_1}^2 + 2\overrightarrow{S_1} \cdot \overrightarrow{S_2} + \overrightarrow{S_2}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 + 2\overrightarrow{S_1} \cdot \overrightarrow{S_2} + \frac{3}{4}\hbar^2 = \frac{3}{2}\hbar^2 + \frac{2H}{J_0}$$

Zdaj lahko H izrazimo lepše, in sicer:

$$H = \frac{J_0}{2}\left(S^2 - \frac{3}{2}\hbar\right)$$

Lahko izračunamo energijo sklopitve:

$$E_s = \begin{cases} J_0\hbar^2 \frac{1}{4} & s = 1 \text{ triplet} \\ -J_0\hbar^2 \frac{3}{4} & s = 0 \text{ singlet} \end{cases}$$

Razlika med E_1 in E_0 je torej ravno $J_0\hbar^2$, kar v primeru vodika pomeni sevanje z valovno dolžino $\sim 21\,\mathrm{cm}$. To je zelo značilna (in natančno izmerjena) valovna dolžina, ki je zelo uporabna pri vsem, kar ima zveze z astronomijo.

Clebsch-Gordanovi koeficienti. Namesto spinov imamo zdaj vrtilni količini $\overrightarrow{J_1}$ in $\overrightarrow{J_2}$, označimo $\overrightarrow{J} = \overrightarrow{J_1} + \overrightarrow{J_2}$. Vsaki vrtilni količini pripišemo še vrednost J_{iz}, ki predstavlja njeno projekcijo na z os.

$$\text{Baza:} \quad |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle = |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$$

Alternativna izbira baze:

$$|j_1 j_2\, jm\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm\rangle$$

Koeficientom $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | jm\rangle$ pravimo Clebsch-Gordanovi koeficienti.

Primer: Imamo atom vodika, katerega jedro na vrtilno količino ne vpliva. Tako je $j_1 = 1$ oziroma $\overrightarrow{J_1} = \overrightarrow{L}$ in $j_2 = s = \frac{1}{2}$ oziroma $\overrightarrow{J_2} = \overrightarrow{S}$. Tako je

$$\overrightarrow{J} = \overrightarrow{L} + \overrightarrow{S}$$

Zanima nas ψ_{jm}.

$$\overrightarrow{J} = \overrightarrow{L} \otimes I_2 + I_l \otimes \overrightarrow{S}$$

Lastne funkcije tega operatorja bodo oblike $Y_l^m \chi_{ml}$.
Če imamo $l = 1$ in $s = \frac{1}{2}$, imamo za lastna stanja sledeče možnosti:

- $j = \frac{3}{2}$, $m = \frac{3}{2}$: $|lsjm\rangle = |1\frac{1}{2}\frac{3}{2}\frac{3}{2}\rangle = |11\rangle|\uparrow\rangle = |\overline{\psi}\rangle$

- Stanje $j = \frac{3}{2}$ $m = \frac{1}{2}$ dobimo tako, da ne stanju $j = \frac{3}{2}$, $m = \frac{3}{2}$ uporabimo operator J_- in primerjamo rezultate. Dobili bomo koeficiente za ta stanja.

Tabela C-G. Obravnavajmo na primer, ko je spinski del enak $l \times s = \frac{1}{2} \times \frac{1}{2}$. Primer dela tabele:

		j	j
		1	0
m_1	m_2	0	0
1/2	-1/2	1/2	1/2
-1/2	1/2	1/2	-1/2

Table 1: Če želimo npr. poiskati koeficiente za bazni vektor $|-\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle$ v stanju $|sm\rangle = |10\rangle$, poiščemo prsesčišče 3. stolpca (10) in 4. vrtice $(-\frac{1}{2}\,\frac{1}{2})$. Ta je $\frac{1}{2}$. Prebrano vrednost nato še korenimo (ko bi bila negativna, bi minus zgolj prepisali in korenili absolutno vrednost.)

Primer $l \times s = 1 \times \frac{1}{2}$.

		j	j
		$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$
m_1	m_2	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
1	-1/2	1/3	2/3
0	1/2	2/3	-1/3

Table 2: Če iščemo na primer koeficiente za stanje $\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}$, iz tabele preberemo:

$$\psi_{jm} = c_1 Y_1^{m_1}|m_2\rangle + c_2 Y_1^{m_1}|m_2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} Y_1^1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \sqrt{\frac{1}{3}} Y_1^0 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Teorija motenj (perturbacij). Perturbirano Hamiltonovo funkcijo zapišemo kot:

$$H = H_0 + H_1$$

Člen H_0 je neperturbiran Hamiltonian z razvojem po lastnih funkcijah

$$H_0|n^0\rangle = E_n^{(0)}|n^0\rangle$$

H_1 zapišemo kot $\lambda\widehat{V}$ in pogledamo limito $\lambda \to 0$. Tako, kot pri majhnih nihanjih v klasični mehaniki. Naredimo še eno predpostavko, in sicer, da je motnja neodvisna od časa (temveč samo od kraja). Tedaj govorimo o Rayleigh-Schrödingerjevi perturbaciji. Iščemo lastne vrednosti $|n\rangle$. Razvijemo:

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + ...$$

Običajno ne vzamemo veliko členov, in sicer iz dveh razlogov. Prvič, ker nam olajša računanje. Drugič, ker je električno polje znotraj atoma veliko močnejše od perturbacij, ki jim lahko izpostavimo dotični atom.
Predpostavka:

$$\langle n^0|n\rangle = \langle n^0|n^0\rangle + \lambda\langle n^0|n^1\rangle + \lambda^2\langle n^0|n^2\rangle + ...$$

Če zahtevamo, da je $\langle n^0|n\rangle \equiv 1$, dobimo zahtevo $\langle n^0|n^i\rangle = 0$ za $i \neq 0$.