

To koblede spin $1/2$ -partikler

– med referencer til vektorer i rummet

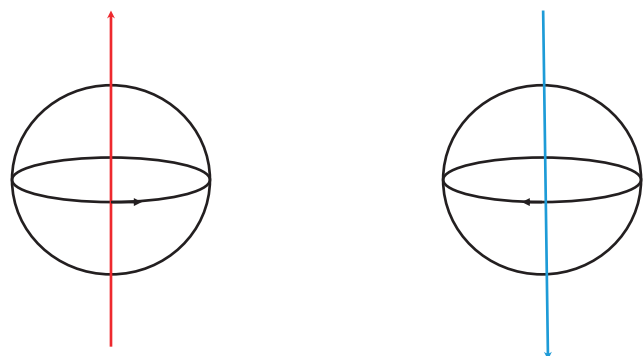
TORSTEN TRANUM RØMER, Frederiksberg Gymnasium

Kvantemekanikkens sælsomme verden er noget som til alle tider har fascineret mennesket, og ønsker man som gymnasieelev at tage hul på et mere dybdegående kendskab til området, fx i forbindelse med en SRP, er *Qbits og entanglement – kvantemekanikkens forunderlige verden*, af Steenstrup og Grøn, [1], et godt sted at starte. Materialet, hvis indledende kapitler danner et godt grundlag for læsning af denne artikel, er et stykke grundigt og dybdegående gymnasial faglitteratur, som efter en gennemgang af de grundlæggende kvantemekaniske principper dykker ned i kvantecomputerens bagvedliggende fysik.

Uanset om man som gymnasieelev ønsker at søge viden om kvantemekanik generelt eller om specifikke anvendelsesområder som fx kvantecomputere, kvantekommunikation eller superledning, er fænomenet *entanglement*, kvantemekanisk sammenfiltrering, ikke til at komme uden om. Entanglement manifesterer sig på forskellige måder, alt afhængig af det fysiske system det foregår i, og kan sågar forekomme mellem to meget kvantemekanisk forskellige objekter¹⁾.

En vigtig brik i at kunne forstå et fysisk indviklet fænomen som entanglement, er at kunne strukturere det matematisk og derved gøre det muligt at regne på ud fra matematiske principper. Ligeledes er det nødvendigt at tage udgangspunkt i et konkret eksempel, så matematikken ikke blot bliver en passiv ramme. I denne artikel ser vi på et system bestående af *to koblede spin $1/2$ -partikler*, fx to elektroner, et system som gør det muligt at stifte bekendtskab med centrale aspekter af entanglement, dog uden at det bliver så kompliceret at forståelsen går tabt.

Når nyt og kompliceret stof skal forstås, er det vigtigt at kunne forankre det nye i noget allerede kendt. I denne artikel, som er rettet mod både gymnasielærere- og elever, er dette didaktiske princip forsøgt indarbejdet ved at trække tråde til stof som elever med matematik på A niveau møder som en del af kernepensum.



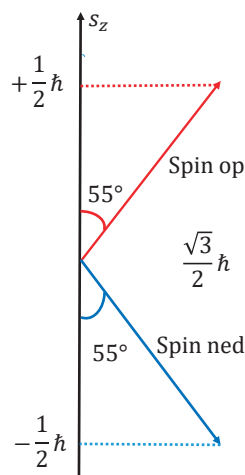
0. Koblede elektronspin

Når man i kvantemekanikken skal beskrive tilstanden af en elektron, har man brug for fire kvantetal, [2] afsnit 6–10. Ud over hovedkvantetallet n , som man i gymnasiet kender fra skalmodellen for atomer, findes bikvantetallet (også kaldet det azimutale kvantetal) l , det magnetiske kvantetal m og spinkvantetallet s . Denne artikel beskæftiger sig med sidstnævnte, og da dette er uafhængigt af de tre andre kvantetal, skal vi ikke her beskæftige os yderligere med disse.

Spinkvantetallets værdier antages altid i ”enheder” af den reducerede Plancks konstant \hbar , hvor $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ og $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ J·s er Plancks konstant, som vi kender den fra fx Plancks formel. For at lette notationen undlader man derfor nogle gange at skrive den reducerede Plancks konstant og skriver fx blot $s = \frac{1}{2}$ i stedet for $s = \frac{1}{2} \hbar$. Vi vil i nedenstående benytte os af denne simplificering.

En elektron tilhører den partikelgruppe man kalder fermioner, og disse er karakteriseret ved at have et halvtalligt spin $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$ osv., underforstået i enheder af \hbar . En af de fysiske egenskaber ved et partikelspin er, at det opfører sig som en lille magnet med nord- og sydpol, hvilket giver anledning til at betragte et spin som en vektor, dog ikke en helt normal vektor, men en vektor der kun kan projiceres ind på en lodret z -akse i diskrete hel-tallige spring. For fx en spin $\frac{3}{2}$ -partikel vil dette give de mulige z -projektioner $+\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ og $-\frac{3}{2}$. En elektron har spin $\frac{1}{2}$, hvilket efter samme logik giver to muligheder for z -projektionen: $+\frac{1}{2}$ (kaldet *spin op*) og $-\frac{1}{2}$ (kaldet *spin ned*).

En af elektronspinnets fysiske egenskaber er, at det opfører sig som en lille magnet, og for at visualisere dette kan man til en vis udstrækning tænke på elektronen som ladning, der hvirvler rundt i et kugleformet område. Bruger man tommelfingerreglen for klassiske magnetfelter skabt af ladning i bevægelse, kan man forstå *spin op* som ladning, der hvirvler mod uret og



Figur 0

Venstre: Spin op (rød pil) kan i et klassisk billede tænkes på som ladning, der hvirvler rundt mod urets retning og derved danner et magnetfelt med nordpol opad i pilens retning. Spin ned (blå pil) kan på tilsvarende vis tænkes på som ladning, der hvirvler med urets retning og derved danner et magnetfelt med nordpol nedad i pilens retning. Højre: I et koordinatsystem med en lodret z -akse dannes en vinkel på 55° mellem spin vektoren og z -aksen. Vinklen er beregnet vha. klassisk trigonometri.

spin ned som ladning, der hvirvler med uret, se figur 0, Venstre. Denne klassiske visualisering, kan dog i nogle henseender være misvisende, idet det kvantemekanisk gælder, [1] s.7, at længden af en spinvektor er givet ved $\sqrt{s \cdot (s+1)} \hbar$, som så for $s = \frac{1}{2}$ betyder, at elektronens spinvektor har længden $\frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$, hvilket er større end projektionsværdierne $\pm \frac{1}{2} \hbar$ ind på z -aksen. Afbildet i et koordinatsystem må de to spinvektorer, som vi kalder *spin op* og *spin ned* derfor danne en vinkel med z -aksen, og de to tilstande *spin op* og *spin ned*, peger derfor set i et koordinatsystem ikke modsat, selvom deres z -projektioner gør, se figur 0, højre.

En af kvantemekanikkens hjørnesteen er en række regler for en elektrons mulige tilstande, og en af disse regler er kendt som Paulis udelukkelsesprincip. Dette princip betyder, at to elektroner ikke kan være i samme kvantetilstand. Fx kan to elektroner i den samme rumlige position ikke have samme spin givet at deres øvrige kvantetal er ens. Flippes det ene spin rundt, er det andet spin nødt til at flippe modsat, så de ikke begge peger i samme retning. De to spin er derfor koblede: Når det ene peger op skal det andet pege ned og vice versa.

1. Noget nyt og noget allerede kendt

1.1 Det euklidiske rum

For at kunne behandle fysikken bag kvantemekaniske spin er det nødvendigt at kunne udtrykke fysikken matematisk. Vi lægger derfor ud med at indføre en måde hvorpå partiklers spin kan repræsenteres som matematiske objekter.

De matematiske objekter, vi skal se på i denne artikel, befinder sig i et matematisk rum kaldet et vektorrum. Lad os starte med at se et eksempel på et matematisk vektorrum som vi allerede kender godt, nemlig det to- og tredimensionale euklidiske rum. Det er det, vi kender fra henholdsvis vektorer i planen (plangeometri) og vektorer i rummet (rumgeometri).

I det todimensionelle tilfælde udspændes vektorrummet af basisvektorerne $\{\vec{e}_x, \vec{e}_y\}$, som har den egenskab, at de er indbyggede orthogonale og begge har længden 1. Vi kalder en sådan basis for en orthonormal basis, og man kalder det en komplet orthonormal basis, hvis enhver vektor i vektorrummet kan beskrives som en såkaldt linearkombination af de to basisvektorer – det betyder, at enhver vektor \vec{v} i planen kan skrives som $\vec{v} = a \cdot \vec{e}_x + b \cdot \vec{e}_y$, hvor a og b er to reelle tal.

Det todimensionelle euklidiske rum er netop et eksempel på det, man kalder for et vektorrum, og til et vektorrum kan man knytte et såkaldt indre produkt. En af de første ting man lærer om vektorer i planen er at udregne prikproduktet (skalarproduktet), og prikproduktet er netop det indre produkt for det todimensionelle euklidiske rum.

Ser vi på det tredimensionelle euklidiske rum, vil det være udspændt af den orthonormale basis $\{\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z\}$, hvis egenskaber vha. prikproduktet (det indre produkt) kan skrives som:

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = \begin{cases} 1 & \text{hvis } i = j \\ 0 & \text{hvis } i \neq j \end{cases} \quad \text{for } i, j = x, y, z \quad (1)$$

Med ligning (1) begynder vi at udvikle den notation, artiklen benytter, og som vil gøre os i stand til at udtrykke kvantemekanik på en præcis og komprimeret måde.

Ligning (1) udtrykker, at de tre vektorer, der peger i hhv. x -, y - og z -aksens retning er indbyrdes ortogonale og alle har længden 1. Vi husker her, at en vektor prikket med sig selv giver kvadratet på vektorens længde, som jo så giver 1, hvis og kun hvis vektoren har længden 1.

Vi skal i det følgende anvende en ny og i kvantemekanikken hyppigt anvendt notation for det indre produkt, nemlig $\langle \cdot | \cdot \rangle$, hvilket for tilfældet med den orthonormale basis udtrykt i (1) ville skrives som

$$\langle i | j \rangle = \begin{cases} 1 & \text{hvis } i = j \\ 0 & \text{hvis } i \neq j \end{cases} \quad \text{for } i, j = \vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$$

For at udvide de matematiske rammer yderligere, introduceres nu det matematiske begreb *Hilbertrum*. Et Hilbertrum er et vektorrum, generelt i n dimensioner, med et tilhørende indre produkt, $\langle \cdot | \cdot \rangle$, og udspændt af en komplet orthonormalbasis bestående af n basisvektorer. En vektor \vec{v} i et Hilbertrum kan udtrykkes som $\vec{v} = \sum_{i=1}^n a_i \cdot \vec{e}_i$, og i det generelle tilfælde kan koefficienterne, a_i , være både komplekse og reelle tal. Vi skal dog i denne artikel begrænse os til reelle koefficienter.

I notationen, hvor det indre produkt skrives som $\langle \cdot | \cdot \rangle$, er $\langle \cdot |$ et element med dimension $1 \times n$ (1 række og n søjler) og kaldes for en *bra*, mens $|\cdot \rangle$ er et element med dimension $n \times 1$ (n rækker og 1 søjle) og kaldes for en *ket*. Logikken i navngivningen stammer fra en deling af ordet *bracket* der på engelsk betyder parentes.

Det indre produkt udført mellem en bra og en ket kan ved at følge de normale regler for matrixmultiplikation skrives som

$$\langle \cdot | \cdot \rangle = \sum_{i=1}^n a_i \cdot b_i$$

hvor $\langle \cdot | = (a_1 \quad \dots \quad a_n)$ og $|\cdot \rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$.

1.2 Vektorrepræsentation af et spin

Spin op og *spin ned* er ortogonale tilstande, i den forstand, at den ene tilstand intet indeholder af den anden.

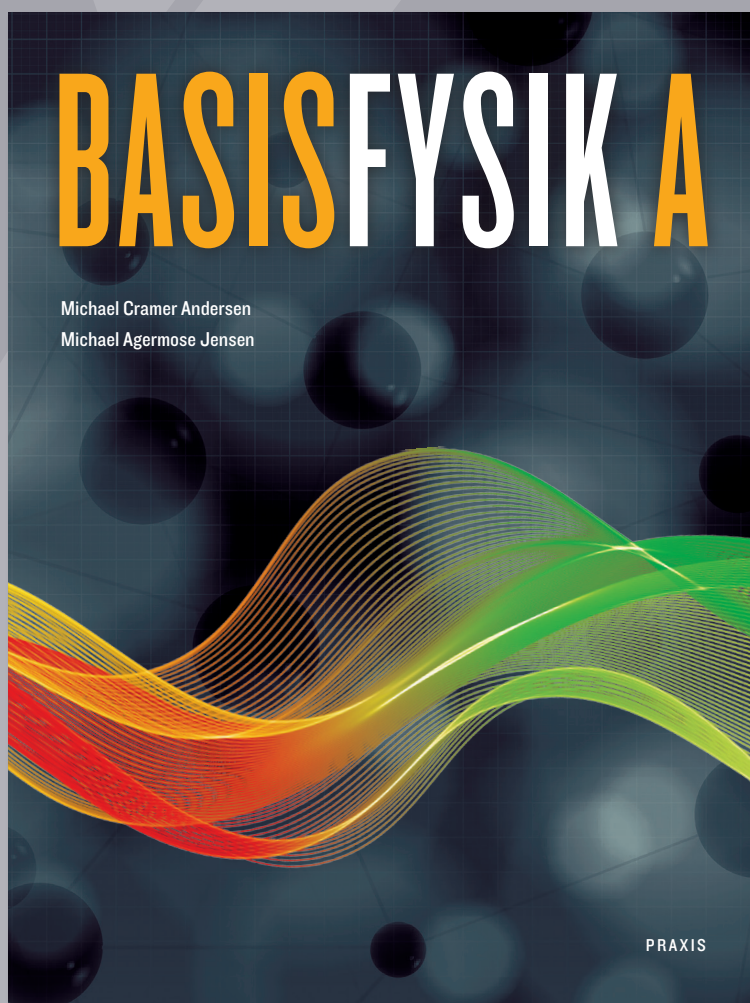
Ortogonaliteten af de to tilstande gør det nærliggende at repræsentere de to spin i den euklidiske plan, se figur 1, repræsenteret ved de orthonormale basisvektorer \vec{e}_x og \vec{e}_y , således at

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \vec{e}_x \quad \text{og} \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \vec{e}_y$$

Her er det dog vigtigt at skelne orthogonaliteten af de to spintilstande fra det visuelle billede af deres repræsentationer i et ko-

BasisFysik A

Med udgivelsen af A-bogen er *BasisFysik* nu komplet



BasisFysik A dækker sammen med *BasisFysik B* kernestoffet på fysik A stx. I tilknytning til bogens otte kapitler og appendiks gives forslag til 22 eksperimenter. Emnerne introduceres kort og præcist og følges op af eksempler, 'tænk selv'- og beregningsopgaver. Hvert kapitel afsluttes med en opsamling.

Serien BasisFysik består desuden af *BasisFysik C*, *BasisFysik C. Kernestoffet* og *BasisFysik B*. Lærebøgerne indgår i fagpakken til fysik, der også indeholder adaptive træningsmoduler og temaforløb. Yderligere info på www.fagpakker.dk.

Michael Cramer Andersen underviser i astronomi og fysik på Christianshavns Gymnasium.

Michael Agermose Jensen underviser i fysik og matematik på HF & VUC FYN, Odense.



Husk, at du med unilogin altid har adgang til bogen på www.online.praxis.dk

Bogen indgår også i fagpakken til fysik, som du kan prøve gratis i 3 måneder. Se mere her www.fagpakker.dk



Af Michael Cramer Andersen og Michael Agermose Jensen

343 sider

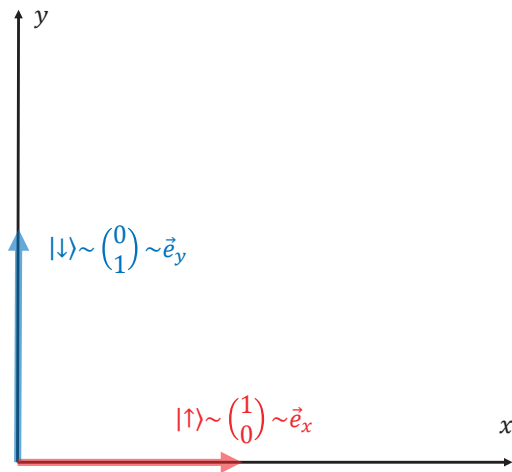
Trykt bog: Kr. 309,00

Ebog+ (1-årigt ab.): Kr. 39,00
ekskl. moms

Køb bogen på www.praxis.dk


Praxis

ordinatsystem hvor \vec{e}_x peger langs x -aksen og \vec{e}_y peger langs y -aksen og dermed er matematisk ortogonale (vinkelrette).



Figur 1
Spin op (rød) og spin ned (blå). For hvert af de to spin er vist tre repræsentationer.

1.3 Vektorrepræsentation af to spin

Vi udvider nu det system, vi ser på, til at bestå af to koblede spin $\frac{1}{2}$ -partikler, igen typisk to elektroner. Kombinatorisk giver to spin, der hver kan pege op eller ned, 4 muligheder, og systemet beskrives derfor generelt i et firedimensionalt Hilbertrum H , altså et 4-dimensionalt vektorrum med tilhørende indre produkt $\langle \cdot | \cdot \rangle$ udspændt af en komplet ortonormal basis bestående af 4 basisvektorer $\{ |\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle \}$. For disse fire basistilstande gælder altså, at

$$\langle i | j \rangle = \begin{cases} 1 & \text{hvis } i = j \\ 0 & \text{hvis } i \neq j \end{cases}$$

Fx er $\langle \uparrow\downarrow | \uparrow\downarrow \rangle = 1$ mens $\langle \uparrow\uparrow | \uparrow\downarrow \rangle = 0$.

Vi skal i denne artikel ikke behandle Hilbertrum i yderligere detalje og henviser til fx [3] definition 4.5.

De fire ortogonale spintilstande repræsenteres i Hilbertrummet ved hver deres basisvektorer således, at

$$\{ |\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle \} = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\} \quad (2)$$

Man kunne også have valgt fire andre basisvektorer, så længe disse blot udgør en komplet ortonormal basis.

Ønsker vi, som i det todimensionale tilfælde, en direkte visualisering af de fire basisvektorer, kommer vi til kort, da vi i så fald skulle visualisere fire rumlige dimensioner på én gang. Dog kan man blot induktivt tænke videre fra to til tre til fire dimensioner ved at overføre de allerede kendte principper. I det kommende afsnit vil vi derfor lægge ud med en firedi-

mensional matematisk behandling, der ikke direkte lader sig visualisere, men som alligevel tillader visualiserbare fysiske tolkninger. Derefter vil vi ud fra en række fysiske argumenter udvikle en notation, hvor vi, selvom vi stadig befinder os i fire dimensioner kan udtrykke os med todimensionale vektorer.

2. To koblede spin $\frac{1}{2}$ -partikler

2.1 Tilstande i Hilbertrummet

I det følgende vil vi bruge begrebet vektor, når vi taler om et element i Hilbertrummet, som er repræsenteret ved en 4×1 vektor, mens vi bruger begrebet tilstand for et element i Hilbertrummet der udtrykker en fysisk tilstand.

En vilkårlig spintilstand $|\Psi\rangle$ i Hilbertrummet opnås som en linearkombination af basisvektorerne.

$$|\Psi\rangle = a |\uparrow\uparrow\rangle + b |\downarrow\downarrow\rangle + c |\uparrow\downarrow\rangle + d |\downarrow\uparrow\rangle \quad (3)$$

For matematisk at kunne udtrykke en fysisk handling på en spintilstand, ligning (3), introduceres operatorbegrebet. En operator benævnes generelt \hat{O} , og når den virker på spintilstanden $|\Psi\rangle$ skrives dette som $\hat{O}|\Psi\rangle$, men man kan naturligvis vælge andre navne til både operatoren og tilstanden.

En operator er ikke et begreb, man så ofte hører i gymnasiet, men det er ikke så kompliceret endda. Fx kan det at differen-

tiere en vektorfunktion $\vec{v}(t) = \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \\ z(t) \end{pmatrix}$ mht. parameteren t be-

skrives ved en operator, \hat{D} :

$$\hat{D} = \begin{pmatrix} \frac{d}{dt} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{d}{dt} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{d}{dt} \end{pmatrix}$$

I dette tilfælde ville \hat{D} virke ind på vektorfunktionen ved at sammensætte elementerne efter samme struktur som ved matrixmultiplikation, således at

$$\hat{D} \vec{v}(t) = \begin{pmatrix} \frac{d}{dt} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{d}{dt} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{d}{dt} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \\ z(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{d}{dt} x(t) \\ \frac{d}{dt} y(t) \\ \frac{d}{dt} z(t) \end{pmatrix}$$

For at behandle kvantemekanikken i vores 4-dimensionelle Hilbertrum ved hjælp af lineær algebra repræsenteres en operator \hat{O} ved en 4×4 matrix \hat{M} . Indgang ij (række-søjle) i denne matrix findes ved en metode fastlagt i definition 1.

Definition 1

I en matrice \widehat{M} benævnes det element, der befinder sig i række i og kolonne j , som \widehat{M}_{ij} . Man kalder også dette for matrixens indgang nummer ij .

Matrixens indgang ij fastlægges ved at lade den tilhørende operator \widehat{O} virke ind på den j 'te basisvektor og derefter tage det indre produkt med den i 'te basisvektor.

$\widehat{M}_{ij} = \langle i | \widehat{O} | j \rangle$, hvor i og j i et firedimensionalt rum kan antage værdierne 1, 2, 3 og 4 svarende til de fire basisvektorer.

En operator virker på en tilstand under opfyldelse af følgende regneregler:

Sætning 1

Lad \widehat{O} være en operator og lad $|\Psi\rangle = a |\uparrow\uparrow\rangle + b |\downarrow\downarrow\rangle + c |\uparrow\downarrow\rangle + d |\downarrow\uparrow\rangle$ være en tilstand i det 4-dimensionelle Hilbertrum. Der gælder da følgende:

$$\begin{aligned} \widehat{O} |\Psi\rangle &= \widehat{O} (a |\uparrow\uparrow\rangle + b |\downarrow\downarrow\rangle + c |\uparrow\downarrow\rangle + d |\downarrow\uparrow\rangle) \\ &= a \widehat{O} |\uparrow\uparrow\rangle + b \widehat{O} |\downarrow\downarrow\rangle + c \widehat{O} |\uparrow\downarrow\rangle + d \widehat{O} |\downarrow\uparrow\rangle \end{aligned}$$

Vi ser altså, at både den distributive lov (operatoren virker ledvist) og "konstantreglen" (konstanter passerer uændrede gennem operationen), begge kendt fra vektorregning, differential- og integralregning, gælder for operatoren og deres matricer.

2.2 Egenverdier, egenvektorer og egentilstande

En af de grundlæggende postulater i kvantemekanikken er, at en måling på systemet vil medføre, at systemet kollapser til (tvinges til at være i) en såkaldt egentilstand for målingen, samt at en målt værdi altid vil være en egenværdi for den givne egentilstand. For at få en fyldestgørende fysisk beskrivelse af dette kvantemekaniske grundvilkår, er det derfor essentielt at kunne udtrykke egentilstande og egenverdier matematisk. Denne udfordring har den lineære algebra et svar på gennem begreberne egenvektor og egenværdi. Disse begreber ses defineret i definition 2.

Definition 2

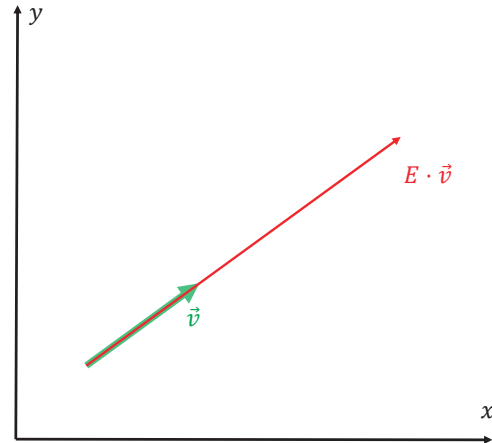
Givet en operator \widehat{O} og dens tilhørende matrice \widehat{M} samt en tilstand $|\Psi\rangle$ repræsenteret ved vektoren \vec{v} defineres følgende:

En tilstand $|\Psi\rangle$ som opfylder, at $\widehat{O} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$ kaldes en egentilstand til \widehat{O} . E kaldes for egenværdien (hørende til egentilstanden).

Udtrykt som lineær algebra vha. vektorer og matricer ser det således ud:

En vektor \vec{v} som opfylder, at $\widehat{M} \vec{v} = E \vec{v}$ kaldes en egenvektor til \widehat{M} . E kaldes for egenværdien (hørende til egenvektoren).

For ved hjælp af allerede kendt matematik, at visualisere, hvad der er så specielt ved en egenvektor, kan vi tænke på vores viden fra vektorer i planen og rummet, hvor det at gange en vektor med et tal t svarer til et forlænge (hvis $t > 1$) eller forkorte (hvis $t < 1$) vektoren. Når en tilstand er egentilstand for en operator (eller alternativt når en vektor er egenvektor for en matrice) svarer det altså til, at operatoren (eller alternativt matricen) har den virkning på tilstanden (vektoren), at den knytter en entydig værdi til vektoren, nemlig den værdi der skalerer vektoren op eller ned med en bestemt faktor, se figur 2.



Figur 2
Vektoren \vec{v} ganges med egenværdien E . Her ses et eksempel, hvor $E > 1$, og altså er $|E \cdot \vec{v}| > |\vec{v}|$.

Vi skal nu se på, hvordan vi med lineær algebra kan udtrykke nogle af de kvantemekaniske målinger og operationer, man kan foretage på et system af to koblede spin $\frac{1}{2}$ -partikler. Med udgangspunkt i et eksempel kaster vi os ud i at opstille matricen for en operator. Vi vælger operatoren \widehat{S}_z^a som for den ene partikel, benævnt partikel a , måler projektionen af dennes spin ind på z -aksen (med andre ord z -komponenten af spinnet).

Ønsker man i vores 4-dimensionale Hilbertrum at opskrive matricen for operatoren \widehat{S}_z^a , skal man udregne hver af de 16 indgange. Vi ser på to eksempler:

$$\begin{aligned} \widehat{S}_{z,11}^a &= \langle \uparrow\uparrow | \widehat{S}_z^a | \uparrow\uparrow \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \uparrow\uparrow | \uparrow\uparrow \rangle = \frac{\hbar}{2} \cdot 1 = \frac{\hbar}{2} \\ \widehat{S}_{z,12}^a &= \langle \uparrow\uparrow | \widehat{S}_z^a | \downarrow\downarrow \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \uparrow\uparrow | \downarrow\downarrow \rangle = \frac{-\hbar}{2} \cdot 0 = 0 \end{aligned}$$

Man indser hurtigt, at grundet den orthonormale basis og det, at operatoren \widehat{S}_z^a ikke ændrer på spinnets af partikel a , som den virker på, vil matricen kun indeholde diagonalelementer og den kommer til at se ud som følger:

$$\widehat{S}_z^a = \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hbar/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Lader vi \hat{S}_z^a virke ind på fx $|\downarrow\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ fås

$$\hat{S}_z^a |\downarrow\uparrow\rangle = \hbar/2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\uparrow\rangle$$

Altså er egenværdien for \hat{S}_z^a virkende på $|\downarrow\uparrow\rangle$ bestemt til $-\frac{\hbar}{2}$, hvilket viser, at partikel a har *spin ned*.

Hvis vi generaliserer tanken ovenfor, indser vi to ting, som gælder for vores system bestående af to spin $\frac{1}{2}$ -partikler:

1. En operator, som ikke ændrer på tilstandene der udspænder Hilbertrummet, altså basisvektorerne, vil være repræsenteret ved en diagonal matrice.
2. En operator, som kun påvirker det ene spin, kan effektivt set repræsenteres ved en 2×2 matrice, idet det andet spin føres uændret videre, mens det spin, der påvirkes, kun har én anden mulighed, hvis det ændrer sig, nemlig at ændres til at pege den modsatte retning af, hvad det pegede inden operatoren virkede.

Denne indsigt leder os frem til at kunne benytte en meget simplere notation, hvor vi regner på hvert spin separat med en 2×2 matrice.

Udtrykt i *bra-ket* notation og som 2-dimensionale vektorer får vi nu følgende repræsentation:

$$|\uparrow\rangle_a = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_a, |\downarrow\rangle_a = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_a, |\uparrow\rangle_b = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_b, |\downarrow\rangle_b = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_b$$

Lader vi operatoren \hat{S}_z^a virke på $|\downarrow\uparrow\rangle$ fås:

$$\begin{aligned} \hat{S}_z^a |\downarrow\uparrow\rangle &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_b \\ &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_b \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_a = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_b \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}_a \\ &= \frac{-\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_b = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\uparrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\uparrow\rangle \end{aligned}$$

Her har vi ladet $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_b$ opføre sig på samme måde som en konstant gør under fx integration, altså sætte den ud foran, idet den går uændret gennem operationen.

Vi ser altså at tilstanden $|\downarrow\uparrow\rangle$ er egentilstand for operatoren \hat{S}_z^a og har egenværdi $-\frac{\hbar}{2}$.

Lad os prøve at se på denne forsimplede notation i en situation, hvor operatorens effekt er at flippe det spin, den virker

på. Vi ser på operatoren \hat{S}_x^a , som måler x -komponenten af partikel a 's spin og lader den virke ind på $|\downarrow\uparrow\rangle$, den samme tilstand som før.

I basen $\left\{ |\uparrow\rangle_a = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_a, |\downarrow\rangle_a = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_a \right\}$ er matricen for \hat{S}_x^a givet

ved $\hat{S}_x^a = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$. I bilag 1 benyttes lejligheden til at tjekke,

at hver af matricens indgange stemmer med definition 1:

Vi lader nu \hat{S}_x^a virke på $|\downarrow\uparrow\rangle$:

$$\begin{aligned} \hat{S}_x^a |\downarrow\uparrow\rangle &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_b = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_b \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_a \\ &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_b \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_a = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_b = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\uparrow\rangle \end{aligned}$$

og altså er $\hat{S}_x^a |\downarrow\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\uparrow\rangle$, hvor det ses at $|\downarrow\uparrow\rangle$ ikke opfylder kravet for en egentilstand, definition 2, og således er $|\downarrow\uparrow\rangle$ ikke egentilstand for \hat{S}_x^a . Vi bemærker også at \hat{S}_x^a flipper retningen rundt på spin a mens spin b er upåvirket. Vores simplere notation fanger altså den fysiske opførsel af den operator, vi har undersøgt.

For at afrunde introduktionen af den simplere 2×2 notation sammenligner vi med det 4-dimensionelle Hilbertrum, hvor \hat{S}_x^a ville have været udtryk som

$$\hat{S}_x^a = \hbar/2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

og hvor det at lade denne virke ind på $|\downarrow\uparrow\rangle$ havde givet

$$\hat{S}_x^a |\downarrow\uparrow\rangle = \hbar/2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar/2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar/2 |\uparrow\uparrow\rangle$$

Fortolket grafisk svarer virkningen af \hat{S}_x^a altså til at rotere den fjerde basisvektor over i den første, uden at ændre dens længde.

Yderligere ses, at matricen $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ genfindes som de to 2×2

delmatricer, der ikke er nul-matricen og som giver 1-tallene i den anti-diagonale matrix (en diagonal matrice har 1-taller i diagonalen fra øverst venstre til nederst højre og nul alle andre steder, mens en anti-diagonal matrice har 1-taller i diagonalen fra nederst venstre til øverst højre og nul alle andre steder), hvilket bekræfter os i, at vi kan undgå den tunge 4×4 notation og i stedet blot arbejde i 2×2 notation, så længe operatorene virker på kun én partikel ad gangen.

Fordelene ved en simplere notation er mange, og én af disse er, at jo mindre teknisk en udregning er, jo mere overskud har man til at koncentrere sig om tolkningen.

Vernier®

Go Direct™ trådløse sensorer



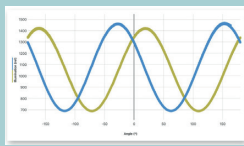
NYHED

Mini GC gaskromatograf

Bærbart gaskromatograf - perfekt til at undervise i kromatografi. Den måler både polære og upolære forbindelser v.h.a en unik carbon-nanorør-detektor. Kolonnetemperatur +80°-160°. Bruger luft som bæregas, ingen trykflasker!

Best.nr. GDX-GC

GODIRECT PRIS kr. 33.544,-



NYHED
Nu med motor!

Polarimeter

Let at bruge - måler den optiske rotation af optiske isomerer såsom sukker, aminosyrer og proteiner. Analysatoren roteres automatisk af en intern motor! - Det giver eleverne mere tid til at forstå eksperimenter som f.eks. reaktionskinetikken for HCl og saccharose. Bølgelængde (nominel): 589 nm Nøjagtighed (optisk rotationsmåling): ± 1°

Best.nr. GDX-POL

GODIRECT PRIS kr. 7.631,-

Cyklisk voltameter

NYHED



Vernier's **HELT NYE** GoDirect-sensor måler elektro-kemiske reaktioner med et indbygget potentiometer og engangs-elektroder. Brug cyklisk voltametri eller bulk-elektrolyse til at udforske antioxidant, bestemme en koncentration af acetaminophen i et lægemiddel eller Faradays lov om elektrolyse!

Pakke med 25 stk. engangs-elektroder og E-bog med eksperimenter medfølger gratis!

Måleområde: - 2000/+ 2000 mV.

±1000 µA/±100 µA/±10 µA/±1 µA

Best.nr. GDX-CVS

GODIRECT PRIS kr. 14.500,-



Fotocelle (DOBBELT)

Fotocelle med 2 indbyggede fotoceller til måling af frit fald, rullende objekter, sammenstød, hastighed og penduler m.v.

Åbning på 77,5mm med en indbyrdes afstand mellem fotoceller på 20mm.

Med LED indikator. Aftagelig stativstang.

GoDirect Fotocelle indeholder desuden en "lasergate" til brug for forsøg med genstande, der passerer udenfor sensorens arme. Brug af "lasergate" kræver en synlig diodelaser (ikke inkluderet).

Best.nr. GDX-VPG

BESTSELLERPRIS kr. 1.331,-



Vernier® Graphical Analysis PRO

Nu kan du oprette eksperimenter og dele dine data med eleverne i realtid. Graphical Analysis PRO fra Vernier synkroniserer video med sensordata og giver eleverne mulighed for at forbinde de abstrakte begreber til oplevelser i den virkelige verden...

Licens gældende til 1.7.2023

Best.nr. GAP-SM-2023 < skoler med MINDRE end 100 elever

BESTSELLERPRIS kr. 800,-

Best.nr. GAP-LG-2023 > skoler med MERE end 100 elever

BESTSELLERPRIS kr. 1.500,-

PÅ DANSK



Vernier® Video Analysis

Vernier's Video Analysis giver dine elever videoanalyse i en dedikeret og strømlet applikation. Med deres mobile enheder i laboratoriet - eller i marken - kan eleven bruge video med optaget bevægelse, markere diverse punkter for at spore objektet i bevægelse via skalaen på videoen - uanset enhed - selv Chromebooks!

Licens er gældende til 1.7.2023

Best.nr. VVA-SM-2023 < skoler med MINDRE end 100 elever

BESTSELLERPRIS kr. 1.500,-

Best.nr. VVA-LG-2023 > skoler med MERE end 100 elever

BESTSELLERPRIS kr. 2.500,-

Alle priser er excl. moms og gældende indtil andet angives

skolebutik.dk

Se mere på vores webshop

www.skolebutik.dk

- eller ring 4470 4000

Familiedrevet siden 1987...



Godkendt af e-handelsfonden

2.3 Spinoperatorer

I et system bestående af to koblede spin $\frac{1}{2}$ -partikler opnås en samlet spin-enheden med spin kvantetal $s = 0$ eller $s = 1$.

Operatoren, som måler systemets totale kvadrerede spin, er

$$(\hat{S}^{\text{tot}})^2 = (\hat{S}_a + \hat{S}_b)^2 = \hat{S}_a^2 + \hat{S}_b^2 + 2\hat{S}_a \cdot \hat{S}_b \quad (4)$$

hvor a og b henviser til den ene hhv. den anden af de to partikler i systemet og sidste lighedstegn i ligning (4) følger ved anvendelse af første kvadratsætning.

Der gælder følgende sætning for $(\hat{S}^{\text{tot}})^2$, [4] s. 13:

Sætning 2

Egenverdierne for $(\hat{S}^{\text{tot}})^2$ er $s(s+1)\hbar^2$, som så bliver 0 eller $2\hbar^2$ for hhv. $s = 0$ og $s = 1$.

Bemærkning: Sætning 2 virker ud fra en klassisk betragtning ulogisk, og udtrykker endnu en af kvantemekanikkens grundlæggende sammenhænge, som vi her ikke skal gå ned i et argument for.

Koblingen af de to spin ligger i operatoren $\hat{S}_a \cdot \hat{S}_b$ og projektionen af det totale spin (det som kan have værdierne 0 og 1) ind på z -aksen benævnes m_s og repræsenteres ved operatoren $\hat{S}_z^{\text{tot}} = \hat{S}_z^a + \hat{S}_z^b$.

Intuitivt kan man tænke på $\hat{S}_a \cdot \hat{S}_b$ som et prikprodukt/indre produkt der i spinrummet, det vektorrum hvor spinvektorerne befinder sig, måler hvor meget af det ene spin, der er i det andet spins retning, og da de to spin jf. Paulis udelukkelsesprincip er koblede vil netop $\hat{S}_a \cdot \hat{S}_b$ indeholde information om denne kobling. Vi vender tilbage til dette i afsnit 2.6.

Egentilstandene for $\hat{S}_a \cdot \hat{S}_b$ og de tilhørende egenverdier, samt de mulige værdier for m_s og s fremgår af nedenstående skema.

Egentilstand	m_s	s	$\hat{S}_a \cdot \hat{S}_b$
$ \uparrow\uparrow\rangle$	$1 \cdot \hbar$	1	$\frac{1}{4} \cdot \hbar^2$
$ \Psi_+\rangle = \frac{ \uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$	0	1	$\frac{1}{4} \cdot \hbar^2$
$ \downarrow\downarrow\rangle$	$-1 \cdot \hbar$	1	$\frac{1}{4} \cdot \hbar^2$
$ \Psi_-\rangle = \frac{ \uparrow\downarrow\rangle - \downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$	0	0	$-\frac{3}{4} \cdot \hbar^2$

Tabel 2.1

Egentilstande og egenverdier for operatoren $\hat{S}_a \cdot \hat{S}_b$, samt kvantetalene s og m_s for en række mulige tilstande af systemet bestående af to koblede spin $\frac{1}{2}$ -partikler.

2.4 Det kvadrerede spin for hver partikel

Ønsker man at måle det kvadrerede spin for hver af partiklerne separat, sker dette med operatorene \hat{S}_a^2 og \hat{S}_b^2 . For det ene spin, det der benævnes a , gælder at

$$\hat{S}_a^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 (\hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2)$$

Her er $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$ og $\hat{\sigma}_z$ Pauli-matricerne

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \text{ og } \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Tilsvarende notation og fremgangsmåde benyttes for \hat{S}_b^2 .

Vi undersøger nu egenverdierne for operatorene \hat{S}_a^2 og \hat{S}_b^2 , og ønsker vha. matrixmultiplikation at vise, at egenverdierne for både \hat{S}_a^2 og \hat{S}_b^2 er $3\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 = \frac{3}{4} \cdot \hbar^2$.

Kvadratet på hver af de tre Pauli-matricer giver enhedsmatricen, $\hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, se bilag 2. Altså kan operatoren \hat{S}_a^2 skrives

som $\hat{S}_a^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 (\hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2) = 3 \cdot \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \hat{I}$.

Lader vi nu \hat{S}_a^2 virke på en tilstand $|\Psi\rangle$ fås egenverdiligningen

$$\hat{S}_a^2 |\Psi\rangle = 3 \cdot \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \hat{I} |\Psi\rangle = \frac{3\hbar^2}{4} |\Psi\rangle \quad (5)$$

idet, at enhedsmatricen virkende på en hvilken som helst tilstand blot giver tilstanden selv og en egenværdi på 1. Konstanterne går uændret gennem matrixmultiplikation jf. sætning 1.

Vi ser altså, at egenværdien for \hat{S}_a^2 er lig $\frac{3\hbar^2}{4}$, og at en vilkårlig tilstand $|\Psi\rangle$ i vores todimensionale Hilbertrum for de to spin $\frac{1}{2}$ -partikler er egentilstand. Da \hat{S}_a^2 måler partikel a 's totale spin uden at påvirke partikel b , er dette måske ikke så overraskende, for det at $\hat{S}_a^2 |\Psi\rangle = \frac{3\hbar^2}{4} |\Psi\rangle$ betyder netop, at partikel a er en spin $\frac{1}{2}$ -partikel. Tilsvarende gælder naturligvis for partikel b .

For at visualisere betydningen af ligning (5), kan man trække på allerede kendt viden. Vi ved fra vektorer i rummet, at det

for en vektor $\vec{v} = \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix}$ gælder, at $|\vec{v}| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}$, hvilket også kan skrives som at $|\vec{v}|^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$.

Ligning (5) kan derfor forstås som, at operatoren \hat{S}_a^2 måler det kvadrerede spin for partikel a , og hvis man tænker på et spin som en vektor, svarer \hat{S}_a^2 til den kvadrerede længde af spinvektoren for partikel a , men målt i enheder af $\frac{\hbar}{2}$. At dette $\frac{\hbar}{2}$ fremkommer er en konsekvens af selve kvantiseringen af spin, hvilket matematisk set blot er at regne i enheder af $\frac{\hbar}{2}$ i stedet for enheder af 1, og som fysisk set minder os om, at den kvadrerede længde af spinnet "lever" i spinrum og ikke det normale euklidiske rum.

2.5 Projektionen af det totale spin ind på z-aksen

Egenværdien for projektionen af det totale spin (det som kan have værdierne 0 og 1) ind på z-aksen benævnes m_s og repræsenteres ved operatoren $\hat{S}_z^{\text{tot}} = \hat{S}_z^a + \hat{S}_z^b$. Vi kan nu vise vha. operatorernes matrixrepræsentation, hvordan 2. kolonne i tabel 2.1 fremkommer.

Operatoren der måler et spins projektion ind på z-aksen benævnes $\hat{S}_z^z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ og i systemet bestående af de to spin $\frac{1}{2}$ -

partikler har vi, at $\hat{S}_z^{\text{tot}} = \hat{S}_z^a + \hat{S}_z^b$. Operatorens form afspejler, at spinprojektionerne er additive, en egenskab der også gælder for normale vektorer i rummet. Det skal bemærkes, at det kvantemekanisk kun er muligt at kende én spinprojektion ad gangen, og man kan således ikke kende hverken x- eller y-projektionen af spinnet, når man allerede kender z-projektionen.

Vi giver nedenstående et eksempel på en gennemregning af en af egentilstandene for \hat{S}_z^{tot} , supplerende beregninger kan findes i bilag 3.

Som besluttet benyttes 2×2 notationen:

$$\begin{aligned} \hat{S}_z^{\text{tot}} |\uparrow\uparrow\rangle &= (\hat{S}_z^a + \hat{S}_z^b) |\uparrow\uparrow\rangle \\ &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_b \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_a + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_a \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_b \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_b \\ &= 2 \cdot \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_b = 2 \cdot \frac{\hbar}{2} |\uparrow\uparrow\rangle = \hbar |\uparrow\uparrow\rangle \end{aligned}$$

Altså er $|\uparrow\uparrow\rangle$ egentilstand for \hat{S}_z^{tot} med egenværdi \hbar . Fra bilag 3 fremgår det, at også $|\downarrow\downarrow\rangle$ er egentilstand for \hat{S}_z^{tot} men med egen-

værdi $-\hbar$, mens egentilstandene $\frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$ og $\frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$ begge har egenværdi 0.

2.6 Kobling af to spin beskrevet vha. operatoren $\hat{S}_a \cdot \hat{S}_b$

Vi skal nu undersøge den tidligere omtalte kobling mellem de to spin, og i den forbindelse får vi brug for et matematisk objekt kaldet en kommutator.

Definition 3

For to fysiske størrelser u og v er kommutatoren $[\cdot, \cdot]$ mellem u og v givet $[u, v] = uv - vu$

Hvis u og v blot var to normale tal, som vi kender dem, ville kommutatoren blive nul, idet faktorerens orden er ligegyldig ved multiplikation af tal. Repræsenterer u og v imidlertid operatorer som er givet ved matricer er kommutatoren i almindelighed forskellig fra nul, idet matrixproduktet $\hat{A}\hat{B}$ i almindelighed ikke er lig $\hat{B}\hat{A}$.

Som omtalt vil en måling af en observerbar størrelse, matematisk udtrykt ved en operator, medføre, at systemet tvinges til at

være i en egentilstand for operatoren samt, at den målte værdi vil være en egenværdi for operatoren. Repræsenteres operatoren ved en matrice, vil egentilstanden altså være egenvektor for matricen, og den målte værdi være egenværdi.

To observerbare størrelser kan derfor kun måles (kendes) samtidig hvis systemet er i en egentilstand for begge operatoren, hvilket vil svare til, at operatorernes matricer kommuterer. Dette er formuleret i sætning 3.

Sætning 3

Lad \hat{A} være en matrice der repræsenterer en kvantemekanisk observerbar størrelse A , og lad \hat{B} være en matrice der repræsenterer en kvantemekanisk observerbar størrelse B . Lad endvidere E_A være en egenværdi for \hat{A} og lad E_B være en egenværdi for \hat{B} .

Det er da muligt at måle (altså at kende) en værdi for de to fysiske observerbare størrelser A og B samtidigt, hvis og kun hvis systemet er i en tilstand $|\Psi_{AB}\rangle$, som både er egentilstand for \hat{A} og \hat{B} , hvilket indtræffer hvis og kun hvis $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

Et bevis for sætning 3 kan findes i bilag 4.

I afsnit 2.4 og 2.5 undersøgte vi det kvadrerede spin for hver partikel samt z-projektionen af både det totale spin og de individuelle spin, og vi så, at disse kunne kendes samtidig. Årsagen er, at $[\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0$, [4], s.12.

Det samlede spin, opnået som summen af de to individuelle spin for partikel a og partikel b er som tidligere nævnt, givet ved $\hat{S}_{\text{tot}} = \hat{S}_a + \hat{S}_b$, men grundet de kvantemekaniske love er hvert spin underlagt kommutationsrelationerne, [4] s. 12,

$$\begin{aligned} [\hat{S}_x, \hat{S}_y] &= i\hbar \hat{S}_z \\ [\hat{S}_x, \hat{S}_z] &= -i\hbar \hat{S}_y \\ [\hat{S}_y, \hat{S}_z] &= i\hbar \hat{S}_x \end{aligned} \quad (6)$$

Da ingen af kommutatorerne i ligning (6) giver nul, kan man ikke samtidigt kende x-, y- og z-komponenterne af hvert af de to spin og dermed ikke blot addere de to spinvektorer for at opnå viden om det samlede spin. Havde der været tale om klassiske tredimensionale vektorer, havde dette ikke været et problem.

Vi kan dog stadig blive klogere på spinkoblingen ved at se på det kvadrerede totale spin $(\hat{S}_{\text{tot}})^2$. Det må gælde at $(\hat{S}_{\text{tot}})^2 = (\hat{S}_a + \hat{S}_b)^2$ og vi kan nu behandle dette som kvadratet på en toleddet størrelse, hvor hvert led er en vektor. Ved at bruge første kvadratsætning, hvor vi erstatter det dobbelte produkt med det dobbelte indre produkt, fås

$$(\hat{S}_{\text{tot}})^2 = (\hat{S}_a + \hat{S}_b)^2 = \hat{S}_a^2 + \hat{S}_b^2 + 2\hat{S}_a \cdot \hat{S}_b$$

Isolerer det sidste led som indeholder både \hat{S}_a og \hat{S}_b fås

$$2\hat{S}_a \cdot \hat{S}_b = (\hat{S}_a + \hat{S}_b)^2 - \hat{S}_a^2 - \hat{S}_b^2$$

Herfra kan vi isolere den såkaldte spinkoblingsoperator $\hat{S}_a \cdot \hat{S}_b$.

$$\hat{S}_a \cdot \hat{S}_b = \frac{1}{2} \left((\hat{S}_a + \hat{S}_b)^2 - \hat{S}_a^2 - \hat{S}_b^2 \right)$$

Vi husker nu, at $(\hat{S}_a + \hat{S}_b)^2$ har egenverdierne $2 \cdot \hbar^2$ og 0 hvis $s = 1$ hhv. $s = 0$, se afsnit 2.3, og at vi i afsnit 2.4 har udregnet egenverdierne for \hat{S}_a^2 og \hat{S}_b^2 .

Egenverdierne for $\hat{S}_a \cdot \hat{S}_b$ kan nu beregnes som

$$\hat{S}_a \cdot \hat{S}_b = \frac{1}{2} \left((\hat{S}_a + \hat{S}_b)^2 - \hat{S}_a^2 - \hat{S}_b^2 \right) \Rightarrow$$

$$\text{egenverdier} \begin{cases} \frac{1}{2} \left(2\hbar^2 - \frac{3}{4}\hbar^2 - \frac{3}{4}\hbar^2 \right) = \frac{1}{4}\hbar^2 & \text{når } s = 1 \\ \frac{1}{2} \left(0\hbar^2 - \frac{3}{4}\hbar^2 - \frac{3}{4}\hbar^2 \right) = -\frac{3}{4}\hbar^2 & \text{når } s = 0 \end{cases} \quad (7)$$

Kombinerer vi denne viden med resultaterne for projektionen af det totale spin ind på z -aksen udregnet i afsnit 2.5, ses det,

at de tre tilstande $|\uparrow\uparrow\rangle$, $|\downarrow\downarrow\rangle$ og $|\Psi_+\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$, som

alle har $s = 1$ og dermed egenværdien $\frac{1}{4}\hbar^2$ for spinkoblingsoperatoren, har hhv. $m_s = 1, -1$ og 0 . Disse tre tilstande kaldes en triplet (tri, fordi der er tre beslægtede tilstande).

Tilstanden $|\Psi_-\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$, som har $s = 0$, og som dermed

kun har en mulighed for projektion af det totale spin ind på z -aksen, $m_s = 0$, kaldes en singlet, da denne ikke i termer af egenverdier har nogle beslægtede tilstande. Singletten har egenværdien $-\frac{3}{4}\hbar^2$ for spinkoblingsoperatoren.

Vi husker nu, at de netop undersøgte egenverdier er målte værdier fremkommet ved måling på en tilstand. For at tolke dette, har vi brug for begrebet forventningsværdi.

Definition 4

Forventningsværdien, eller gennemsnitsværdien, af en målbar fysisk størrelse \hat{A} , over mange ens kvantesystemer med samme tilstand $|\Psi\rangle$, skrives $\langle \hat{A} \rangle$ og beregnes som $\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$.

Forventningsværdien kan tænkes på som et vægtet gennemsnit af målingens mulige udfald, hvilket i almindelighed ikke er det samme som værdien af det mest sandsynlige udfald.

Vi skal i denne artikel ikke beskæftige os dybere med begrebet forventningsværdi, men blot bemærke at hvis $|\Psi\rangle = |\Psi_A\rangle$

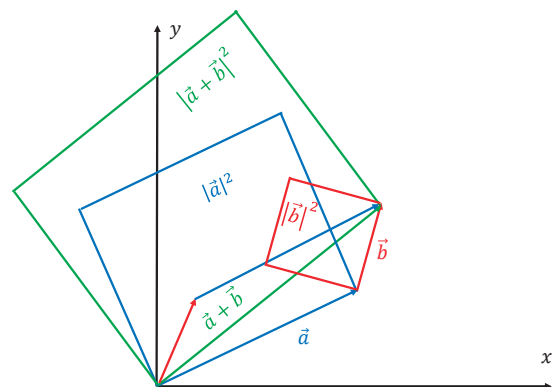
er en normeret egentilstand for \hat{A} med egenværdi E_A så er $\langle A \rangle = \langle \Psi_A | \hat{A} | \Psi_A \rangle = E_A$.

I forbindelse med spinkoblingsoperatoren $\hat{S}_a \cdot \hat{S}_b$ skal man være forsigtig med tolkningerne, idet man nemt kommer til at drage klassiske paralleller, der ikke er korrekte. Vi vil alligevel vove pelsen ved at visualisere nogle egenskaber ved forventningsværdien for $\hat{S}_a \cdot \hat{S}_b$ ved hjælp af vektorprojektion i to dimensioner.

Klassisk gælder det for to reelle vektorer \vec{a} og \vec{b} , at projektionen af \vec{a} ind på \vec{b} er givet ved $\vec{a}_b = \frac{\vec{a} \cdot \vec{b}}{|\vec{a}| \cdot |\vec{b}|} \vec{b}$. Hvis de to

vektorer er normerede, altså har længde 1, er nævneren i projektforsmlen lig 1 og dermed er prikproduktet den faktor, der afgør, hvor meget af \vec{a} der er i \vec{b} 's retning. Sammenligner vi dette med ligning (7), ser vi at forventningsværdien for $\hat{S}_a \cdot \hat{S}_b$ kan tolkes som halvdelen af forskellen mellem forventningsværdien for $(\hat{S}_a + \hat{S}_b)^2$ og $\hat{S}_a^2 + \hat{S}_b^2$ og dermed som den del (dog skalæret med en faktor $\frac{1}{2}$) af forventningsværdien for $(\hat{S}_a + \hat{S}_b)^2$, som ikke stammer fra \hat{S}_a^2 og \hat{S}_b^2 . I figur 3 er dette forsøgt visualiseret ved at drage en parallel til klassiske vektorer, hvor prikproduktet mellem \vec{a} og \vec{b} kan tolkes som halvdelen af det areal der opnås ved at trække det blå og det røde fra det grønne. I tilfældet hvor forventningsværdien for operatoren $\hat{S}_a \cdot \hat{S}_b$ er 0, svarende til det klassiske tilfælde, hvor $\vec{a} \cdot \vec{b} = 0$ (de to vektorer er ortogonale), kan man tale om en tilstand, hvor de to partikler a og b ikke er koblede²⁾. I det klassiske tilfælde ville dette svare til situationen, hvor det røde og blå areal tilsammen er lige så stort som det grønne.

I det modsatte tilfælde, hvor de to partikler er koblede, vil forventningsværdien for $\hat{S}_a \cdot \hat{S}_b$ være forskellig fra nul. Dette kan tænkes på som en situation, hvor arealet af det grønne kvadrat, se figur 3, er enten større eller mindre end summen af det blå og det røde. Eksempelvis vil en triplet tilstand tilsvare situationen, hvor arealforskellen er positiv og singlet tilstanden en situation med negativ arealforskel. Faktisk vil singlet tilstanden, som har spinkvantetal $s = 0$, tilsvare en situation hvor det grønne areal er nul.



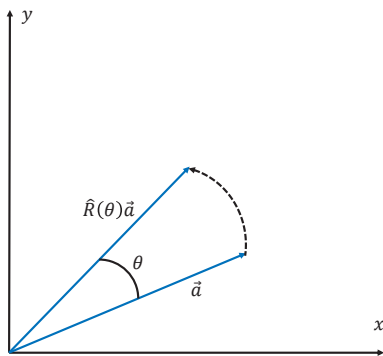
Figur 3

Prikproduktet mellem \vec{a} og \vec{b} kan tolkes som halvdelen af det areal, der opnås ved at trække det blå og det røde areal fra det grønne.

2.7 Rotation og rotationsinvarians

Vi har allerede set, husk på operatoren \hat{S}_x , at nogle kvantemekaniske operatører har at gøre med rotationer. I forbindelse med \hat{S}_x var situationen dog den, at operatoren virkede på et spin, hvilket vi så tolkede som en drejning af en af basisvektorerne.

I dette afsnit skal vi imidlertid se på rotation i sig selv, dvs. indføre den nødvendige matematik til at beskrive operatører og matricer, hvis virkning i sig selv er en rotation. På denne måde kan vi se på hvordan en spintilstand opfører sig under rotation, hvorved vi kan afdække nogle af tilstandens geometriske egenskaber. Vi starter med at introducere operatoren $\hat{R}(\theta)$ der i planen roterer en vektor vinklen θ mod urets retning, se figur 4.



Figur 4
Operatoren $\hat{R}(\theta)$ virker ind på vektoren \vec{a} og drejer den vinklen θ mod urets retning.

Repræsenteret som matrix ser rotationsoperatoren således ud:

$$\hat{R}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix}$$

Vi starter med at se på, hvad der sker når rotationsmatricen virker på et enkelt spin, som kan pege enten op eller ned.

Disse to spin kan som tidligere repræsenteres ved basisvektorerne $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ og $|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Rotationen af $|\uparrow\rangle$ benævnes $|\uparrow'\rangle$ og rotationen af $|\downarrow\rangle$ benævnes $|\downarrow'\rangle$. I denne notation betyder mærket ' ikke noget med differentiering, men er blot en bogholdernotation for at markere at vektoren er roteret.

Ved matrixmultiplikation fås nu:

$$\begin{aligned} |\uparrow'\rangle &= \hat{R}(\theta)|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) \\ \sin(\theta) \end{pmatrix} \\ &= \cos(\theta) \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sin(\theta) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \cos(\theta)|\uparrow\rangle + \sin(\theta)|\downarrow\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |\downarrow'\rangle &= \hat{R}(\theta)|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin(\theta) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix} \\ &= -\sin(\theta) \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \cos(\theta) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\sin(\theta)|\uparrow\rangle + \cos(\theta)|\downarrow\rangle \end{aligned}$$

Ved igen at benytte tricket, hvor de to spin betragtes uafhængigt af hinanden, kan vi ved hjælp af ovenstående undersøge rotationen af tilstande bestående af to spin $\frac{1}{2}$ -partikler. Ved første øjekast virker dette måske som snyd, idet fx $\cos(\theta)|\uparrow\rangle - \sin(\theta)|\downarrow\rangle$ er en linearkombination af to spin, men da det kun er en linearkombination af det ene spins to mulige tilstande, er det alligevel afkoblet fra det andet spin. Vi skal nu se på begrebet rotationsinvarians.

Definition 3

Hvis en tilstand $|\Psi'\rangle$ er opnået som en rotation af en anden tilstand $|\Psi\rangle$ og der gælder, at $|\Psi'\rangle = |\Psi\rangle$, så kaldes tilstanden $|\Psi\rangle$ for rotationsinvariant, hvilket blot vil sige at tilstanden er uændret under rotation.

Helt konkret vil vi undersøge om tilstanden $|\Psi_-\rangle$ er rotationsinvariant, dvs. undersøge om

$$|\uparrow'\downarrow'\rangle - |\downarrow'\uparrow'\rangle = |\uparrow'\downarrow\rangle - |\downarrow'\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle$$

Vi har for overskuelighedens skyld lavet en bogholdernotation, hvor fx $|\uparrow'\downarrow'\rangle = |\uparrow'\rangle|\downarrow'\rangle$ minder os om, at det er spin a , der peger op og spin b , der peger ned.

$$\begin{aligned} |\uparrow'\downarrow'\rangle &= (\cos(\theta)|\uparrow\rangle_a + \sin(\theta)|\downarrow\rangle_a) \cdot (-\sin(\theta)|\uparrow\rangle_b + \cos(\theta)|\downarrow\rangle_b) \\ &= -\sin(\theta) \cdot \cos(\theta)|\uparrow\rangle_a|\uparrow\rangle_b + \sin(\theta) \cdot \cos(\theta)|\downarrow\rangle_a|\downarrow\rangle_b \\ &\quad + \cos^2(\theta)|\uparrow\rangle_a|\downarrow\rangle_b - \sin^2(\theta)|\downarrow\rangle_a|\uparrow\rangle_b \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |\downarrow'\uparrow'\rangle &= (-\sin(\theta)|\uparrow\rangle_a + \cos(\theta)|\downarrow\rangle_a) \cdot (\cos(\theta)|\uparrow\rangle_b + \sin(\theta)|\downarrow\rangle_b) \\ &= -\sin(\theta) \cdot \cos(\theta)|\uparrow\rangle_a|\uparrow\rangle_b + \sin(\theta) \cdot \cos(\theta)|\downarrow\rangle_a|\downarrow\rangle_b \\ &\quad + \cos^2(\theta)|\downarrow\rangle_a|\uparrow\rangle_b - \sin^2(\theta)|\uparrow\rangle_a|\downarrow\rangle_b \end{aligned}$$

Trækkes de to led fra hinanden får man, se bilag 6, at

$$|\uparrow'\downarrow'\rangle - |\downarrow'\uparrow'\rangle = |\uparrow\rangle_a|\downarrow\rangle_b - |\downarrow\rangle_a|\uparrow\rangle_b$$

Samlet set er det nu vist, at

$$\begin{aligned} \hat{R}(\theta)|\Psi_-\rangle &= |\uparrow'\downarrow'\rangle - |\downarrow'\uparrow'\rangle \\ &= |\uparrow\rangle_a|\downarrow\rangle_b - |\downarrow\rangle_a|\uparrow\rangle_b = |\Psi_-\rangle \end{aligned}$$

hvilket netop er egenskaben for en rotationsinvariant tilstand.

Hvis man udfører en lignende rotation på tilstanden $|\Psi_+\rangle$ fås

$$\begin{aligned} |\uparrow'\downarrow'\rangle + |\downarrow'\uparrow'\rangle &= \cos(2\theta)(|\uparrow\rangle_a|\downarrow\rangle_b + |\downarrow\rangle_a|\uparrow\rangle_b) \\ &\quad + \sin(2\theta)(|\downarrow\rangle_a|\downarrow\rangle_b - |\uparrow\rangle_a|\uparrow\rangle_b) \end{aligned}$$

hvor additionsformlerne $2\sin(\theta)\cos(\theta) = \sin(2\theta)$ og $\cos(2\theta) = \cos^2(\theta) - \sin^2(\theta)$ er anvendt.

NYHEDER fra Fysikforlaget



SKATTEKISTEN – fysikopgaver til studentereksamen Bind 1: 1966–1998 – Bind 2: 1998–2016

En ren skattekasse af gamle, gemte, men ikke glemte opgaver, der tegner et meget nuanceret billede af, hvad elever har arbejdet med gennem 50 år. De har systemmæssigt været meget stærkt styrende for undervisningens udvikling, ofte mere end de gældende regler. Fysik er simpelthen et af de mest spændende fag, man kan beskæftige sig med.



Evig Energi? – batterier og brændstof

Fjerde bind i serien Evig Energi? tager udgangspunkt i udfordringen med at gemme elektricitet i genopladelige batterier eller i bæredygtige brændstoffer. Vi gennemgår opbygningen af lithium-ionbatterier og redoxflowbatterier samt beskriver, hvordan fx metanol tænkes fremstillet fra elektrolytisk brint sammen med biogas eller med kuldioxid direkte fra atmosfæren.



Med andre ord er

$$\hat{R}(\theta)|\Psi_+\rangle = |\uparrow\rangle_a|\downarrow\rangle_b + |\downarrow\rangle_a|\uparrow\rangle_b \neq |\Psi_+\rangle$$

og dermed er $|\Psi_+\rangle$ ikke rotationsinvariant.

Denne forskel har en god forklaring, nemlig at $|\Psi_-\rangle$ har $s = 0$, mens $|\Psi_+\rangle$ har $s = 1$. En tilstand med spin kvantetal $s = 0$ betyder, at det samlede spin har egenværdien nul, og dermed har det ingen samlet retning, hvilket gør denne tilstand invariant for rotation. En tilstand med spin kvantetal $s = 1$ har derimod en samlet retning og påvirkes derfor af en rotation.

3. Afrunding

Vi har i artiklen set på en række udvalgte aspekter af et system bestående af to koblede spin $\frac{1}{2}$ -partikler og har undervejs forsøgt at trække paralleller til normalt kendt gymnasie-stof. Didaktisk har balancegangen bestået i at forklare i dybden uden at gøre det unødigt tungt. Derfor er grundlæggende matrixalgebra ikke blevet introduceret, og interesserede kan ud over det allerede nævnte materiale læse fx [5].

Bibliografi

- [1]: *Qbits og entanglement kvantemekanikkens forunderlige verden*, Mads Peter Steenstrup og Bjørn Grøn, L&R uddannelse, 2015
- [2]: *Elementær kvantemekanik*, William W. Hansen og Henrik Parbo, Systime 1981.
- [3]: math.ku.dk/~solovej/MATFYS/MatFys4.pdf
- [4]: *Magnetism in Condensed matter*, Stephen Blundell, Oxford University Press, 2001
- [5]: *Matrixregning med anvendelser*, Bjarne Schmidt, matematiklærerforeningen 2022

Noter

- 1) nbi.ku.dk/nyheder/nyheder_2020/kvantemekanisk-entanglement-af-adskilte-store-objekter
- 2) Konstruktion af en ukoblet tilstand i det givne Hilbertrum ligger dog uden for denne artikels rækkevidde, men et eksempel kan findes i bilag 5.

Bilag

Bilag kan findes på følgende link: torstentranum.dk/fysik