第9章：自旋

2017年6月11日　　9:31

- 自旋算符与Pauli矩阵
- 总角动量，角动量的代数解法
- 角动量的耦合
- 碱金属双线，反常塞曼效应
- 二电子体系的自旋态

? 为什么要用矩阵力学

波动力学：已知势函数，求解能量本征问题。定态薛定谔方程，边界条件+连续性条件，驻波条件，能量量子化，能量本征值，能量本征函数

矩阵力学：已知力学量（包括能量）在某一表象下矩阵形式，求矩阵特征值问题。久期方程（特征值方程），力学量本征值，本征态矢

矩阵力学的典型问题：角动量的矩阵形式

$$j_+ = j_x + \mathrm{i} j_y$$

$$j_- = j_x - \mathrm{i} j_y$$

$$j_+ |jm\rangle = \sqrt{(j+m+1)(j-m)}\,|jm+1\rangle$$

$$j_- |jm\rangle = \sqrt{(j-m+1)(j+m)}\,|jm-1\rangle$$

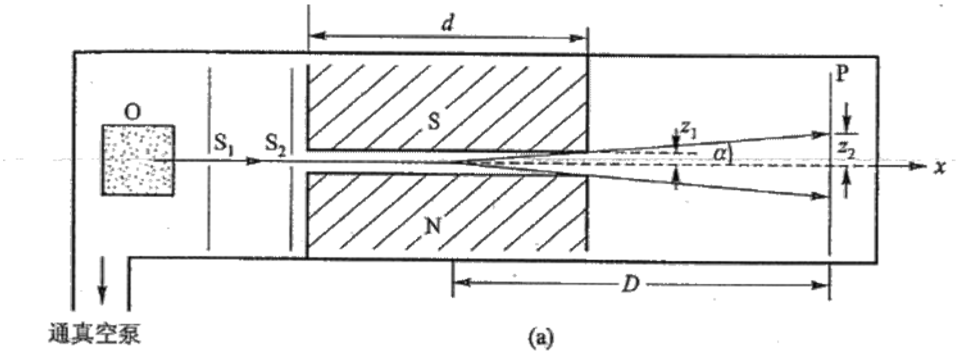
$j=1$时 $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$的矩阵形式　及其本征态，本征值

m' \ m	1	0	-1
1	0	$1/\sqrt{2}$	0
0	$1/\sqrt{2}$	0	$1/\sqrt{2}$
-1	0	$1/\sqrt{2}$	0

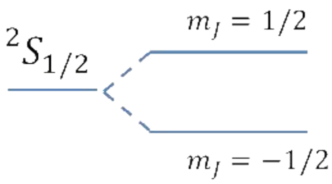
m' \ m	1	0	-1
1	0	$-\mathrm{i}/\sqrt{2}$	0
0	$\mathrm{i}/\sqrt{2}$	0	$-\mathrm{i}/\sqrt{2}$
-1	0	$\mathrm{i}/\sqrt{2}$	0

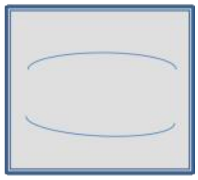
m' \ m	1	0	-1
1	1	0	0
0	0	0	0
-1	0	0	-1

Stern-Gerlach 实验：电子的自旋



$$z_2 = -m_J g_J \mu_B \frac{\partial B_z}{\partial z} \frac{dD}{3kT}$$





两个取向: $s = \frac{1}{2}$?

Uhlenbeck and Goudsmit : “That is spin. "

自旋（Spin）：既然有公转，自转也可以有

自旋不是自转！

- 角动量，内禀属性
- 没有经典对应
- 半整数（费米子，如电子，质子）
- 整数（玻色子，如光子，π介子）

s = 1/2时 $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$的矩阵形式 及其本征态，本征值

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i\varepsilon\hat{s}_j, \hat{\boldsymbol{s}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}},$$

Pauli算符：$\hat{\boldsymbol{\sigma}}$，无量纲算符。因为$\hat{s}_j$本征值为$\pm\hbar/2$,所以 Pauli 算符本征值为$\pm 1$

性质：

- [ ] $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \hat{\boldsymbol{\sigma}} = 2i\hat{\boldsymbol{\sigma}}$
- [ ] $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1$
- [ ] 对易关系 $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$
- [ ] 反对易 $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 0$
- [ ] $\sigma_i\sigma_j = i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$
- [ ] P290练习1-5需要掌握

Pauli 矩阵

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

假设$\hat{s}_z$本征态为 $\chi_{m_s}(s_z)$, 即

$$\chi_{1/2}(s_z) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \chi_{-1/2}(s_z) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

则任意一个自旋波函数可以写成

$$\chi(s_z) = \alpha\chi_{1/2}(s_z) + \beta\chi_{-1/2}(s_z) = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

考虑自旋以后的力学量完全集

$\{\hat{H}, \hat{\boldsymbol{l}}^2, \hat{l}_z\} \to \{\hat{H}, \hat{\boldsymbol{l}}^2, \hat{l}_z, \hat{s}_z\}$

$|\psi\rangle = \alpha\psi(\boldsymbol{r},\uparrow) + \beta\psi(\boldsymbol{r},\downarrow) = \alpha\psi(\boldsymbol{r})\chi_{1/2}(s_z) + \beta\psi(\boldsymbol{r})\chi_{-1/2}(s_z) = \psi(\boldsymbol{r})\chi(s_z)$

$\uparrow,\downarrow$分别表示自旋“向上（$\hbar/2$）”和“向下（$-\hbar/2$）”

总角动量

如果考虑自旋，得考虑相对论性波动方程（Dirac方程），在非相对论近似下，Hamiltonian会多出一项

自旋轨道耦合

$$\xi(r)\hat{\boldsymbol{s}}\cdot\hat{\boldsymbol{l}}, \qquad \xi(r) = \frac{1}{2\mu^2c^2}\frac{dV}{dr}$$

既然自旋和轨道角动量都是角动量，那么可以定义电子的总角动量为

$\hat{j} = \hat{\boldsymbol{l}} + \hat{\boldsymbol{s}}$

此时的守恒量完全集

$(\hat{H}, \hat{\boldsymbol{l}}^2, \hat{\boldsymbol{j}}^2, \hat{j}_z)$

共同本征函数

$\psi(r,\theta,\varphi,s_z) = R(r)\phi_{ljm_j}(\theta,\varphi,s_z)$

由自旋轨道耦合引起的能级分裂

$$\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l}\phi_{ljm_j} = \frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) - l(l+1) - 3/4]\phi_{ljm_j}$$
$$= \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2}l\phi_{ljm_j}, & j = l + 1/2 \\ -\frac{\hbar^2}{2}(l+1)\phi_{ljm_j}, & j = l - 1/2\ (l \geqslant 1) \end{cases}$$

自旋的实验验证，碱金属双线和反常塞曼效应