

КОНСПЕКТ СЕМИНАРОВ РАЕВСКОГО АЛЕКСАНДРА ОСИПОВИЧА ПО ОБЩЕЙ ФИЗИКЕ

Примак Евгений
Гусева Оля

Спин всё такое: обменное взаимодействие, тонкая и сверхтонкая структуры.

Идея спина восходит к экспериментальным фактам – результатам опыта Штерна-Герлаха и спектроскопическому исследованию дублетной структуры спектров щелочных металлов.

В опытах Штерна-Герлаха с атомами серебра было обнаружено, что пучок разбивался на две составляющие. Это противоречит целостности орбитального момента. Действительно, пусть электрон вращается по круговой орбите радиуса r со скоростью v . Тогда он создаёт ток $I = e/T$ (направление тока противоположно направлению скорости, $e > 0$!) Виток с током эквивалентен магнитному моменту

$$\mu = \frac{IS}{c} = \frac{e}{Tc} \pi r^2 = \frac{e \pi \omega r^2}{2\pi c} = \frac{e}{2mc} r m v = \gamma l_{\text{мех}}.$$

Значит наличие заряда и движения по замкнутой траектории приводит к существованию магнитного момента. У электрона $\mu \nparallel l_{\text{мех}}$ из-за отрицательного заряда.

В квантовой механике момент считается безразмерной величиной $l_{\text{мех}} = \hbar l$. Тогда

$$\mu_l = \frac{e\hbar}{2mc} l = g_l \mu_B l,$$

где $g_l = 1$, $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} = 9.3 \cdot 10^{-21}$ эрг/Гс – так называемый магнетон Бора.

Поскольку проекция l на заданную ось квантуется $l_z \in \{-l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l\}$, то вместе с проекцией l_z квантуется и проекция μ_z . Число пятен на экране в опыте Штерна Герлаха равно $2l+1$. Это всегда целое число. Но для серебра получили $2l+1 = 2$. Значит $l = 1/2$? Но это невозможно!!!

Сейчас мы знаем, что валентный электрон вращается вокруг своей оси (отсюда и название вращательного момента – спин). Однако она была почти сразу отвергнута и спиновый механический момент признается признается врождённым свойством любой элементарной частицы. Из опыта Штерна-Герлаха следовало, что есть два пятна на экране, то есть число проекций спинового момента равно 2, то есть сам спин равен $1/2$. Измерение расстояние между пятнами показало, что магнитный спиновый момент электрона равен магнетону Бора: $\mu_s = \mu_B = g_s \mu_B s$. Откуда $g_s = 2$, так как $s = 1/2$. Это получило название аномального гиромагнитного отношения $\mu_l = \frac{e}{2mc} l_{\text{мех}}$, а $\mu_s = \frac{e}{mc} s_{\text{мех}}$.

Можно проверить это экспериментально. "Поляризуем" электрон, то есть с помощью магнитного поля направим спин электрона вдоль скорости $v \uparrow s_{\text{мех}}$. Пусть такой электрон влетает в однородное магнит-

ное поле, перпендикулярное силовым линиям. Уравнение Ньютона:

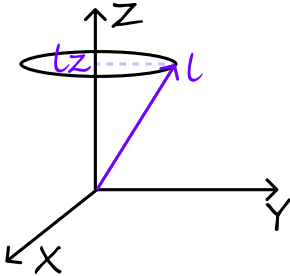
$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{e}{c} [\mathbf{v}, \mathbf{B}] \quad \Rightarrow \quad \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \left[-\frac{e}{mc} \mathbf{B}, \mathbf{v} \right] = [\omega_c, \mathbf{B}],$$

уравнение прецессии с частотой $\omega = \frac{eB}{mc}$ – циклотронная частота. Уравнение для механического момента $\mathbf{s}_{\text{мех}}$

$$\frac{d\mathbf{s}_{\text{мех}}}{dt} = \mathbf{M} = [\boldsymbol{\mu}_s, \mathbf{B}] = g_s \frac{e}{2mc} [\mathbf{s}_{\text{мех}}, \mathbf{B}] = \left[-\frac{g_s e}{2mc} \mathbf{B}, \mathbf{s}_{\text{мех}} \right],$$

то есть спин прецессирует с угловой частотой $\omega = g_s \omega_L$, где $\omega_L = \frac{eB}{2mc}$ – ларморовская частота. Таким образом если $g_s = 2$, то $\omega_2 \omega_L = \omega_c$ – спин и скорость "прецессирует" с одинаковой частотой. То есть через много периодов спин и скорость останутся параллельными. Если нет, то возникнет угол между ними. Конечно в реальной жизни нужно использовать релятивистский подход. Однако ответ правильный. Опыт показала, что $g_s = 2.0044$, причина этого – взаимодействие электрона с виртуальными фотонами (нулевыми колебаниями вакуума).

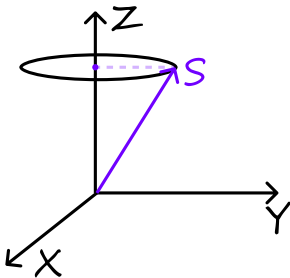
С принятым нам полуклассическим подходом спин похож на орбитальный момент



$$\begin{cases} \hat{l}^2 Y(\theta, \varphi) = l(l+1) Y(\theta, \varphi) \\ \hat{l}_z Y(\theta, \varphi) = m Y(\theta, \varphi) \end{cases}$$

$$l = l_1 + l_2 = \begin{cases} l_1 + l_2 \\ l_1 + l_2 - 1 \\ \vdots \\ |l_1 - l_2| \end{cases}$$

$l_z = m\hbar$, $m \in [-l, \dots, 0, \dots, l]$ момент – наибольшее значение проекции.



$$\begin{cases} \hat{s}^2 \chi(s) = s(s+1) \chi(s) \\ \hat{s}_z \chi(s) = s_z \chi(s) \end{cases}$$

$$s = s_1 + s_2 = \begin{cases} s_1 + s_2 \\ s_1 + s_2 - 1 \\ \vdots \\ |s_1 - s_2| \end{cases}$$

Отличие: момент l – только целый, спин s – целый и полуцелый.

Частицы с полуцелым спином называются фермионы. Примеры: электрон, протон, нейтрон, нейтрино спин $1/2$.

Частицы с целым спином – бозоны. Примеры: пионы, спин 0 , фотон

– спин 1 (условно).

Часто говорят, что спин – это момент количества движения в системе покоя частицы. Это хорошо работает для массивных частиц, но требует уточнения для частиц с нулевой массой (γ -квант, нейтрино).

Но если спин не связан ни с каким реальным вращением в пространстве, то как же выглядит спиновая волновая функция и оператор спина? Фактически у нас появилась некая дополнительная степень свободы: без учета спина у нас была фолновая функция $\psi(x, y, z, t)$. А с учетом спина – $\psi(x, y, z, t, \sigma)$, где σ принимает два значения $+1/2$ и $-1/2$. Тогда имеет смысл ввести волновые функции $\psi_+(x, y, z, t)$ и $\psi_-(x, y, z, t)$ отличающиеся спиновой проекцией. Это можно представить как

$$\psi(x, y, z, t, \sigma) = \psi(x, y, z, t) \chi_\sigma(s), \text{ где } \chi_{\frac{1}{2}}(s) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \text{ а } \chi_{-\frac{1}{2}}(s) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Иногда обозначают спиновую часть волновой функции как

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Комплексно сопряженная $\chi_{\frac{1}{2}}^*(s) = (1 \ 0)$.

Такая волновая функция называется спинором. Мы привыкли, что скаляр – это тензор нулевого ранга, вектор – тензор первого ранга и так далее. Спинор это, грубо говоря, тензор половинного ранга или как их "дразнят" полувекторами или недовекторами. Это проявляется в том, что спинор ранга $1/2$ не переходит сам в себя при повороте на 360° , а только при повороте на 720° .

Как же выглядит оператор спина, переводящий столбец в другой? Ясно, что это матрица 2×2 . Такие матрицы называются матрицами Паули

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2} \hat{\sigma}_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

И ещё одна тонкость. В природе нет большим спинов отдельных частиц $s_{\max} \leq 5/2$. Поэтому при $\hbar \rightarrow 0$, то $\hbar s \rightarrow 0$ и в классике спина нет! Кроме того спин – релятивистский объект, как было показано Дираком. При $1/c \rightarrow 0$ спин "исчезает".

Рассмотрим систему одинаковых частиц. В классике мы можем "пометить" частицы и следить за их движениями по траекториям. Но в квантовой физике траекторий нет и нет возможности "пометить" частицы. Таким образом все одинаковые частицы незримы – так называемый признак тождественности частиц.

Пусть $1 \equiv (\mathbf{r}_1, \mathbf{s}_1)$ – совокупность координат и спинов частицы

1. Аналогично $2 \equiv (\mathbf{r}_2, \mathbf{s}_2)$. $\psi(1, 2)$ – волновая функция системы из двух частиц. Переставим две частицы местами. В силу тождественности $\psi(2, 1) = k\psi(1, 2)$, где $|k|^2 = 1$. Переставим ещё раз – вернемся к исходной системе $\psi(1, 2) = k\psi(2, 1) = k^2\psi(1, 2)$ и $k^2 = 1$, $k = +1$ будет у бозонов, $k = -1$ будет у фермионов.

Обычно волновую функцию системы из двух частиц представляют в виде соответственно орбитальной и спиновой частей:

$$\psi(1, 2) = \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_\sigma(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2).$$

Переставляя частицы, мы переставляем из координаты и спины. Для фермионов полня ψ -функция антисимметрична, следовательно, либо орбитальная симметрична относительно перестановки и спиновая антисимметрична, либо орбитальная антисимметрична, а спиновая симметрична.

Рассмотрим систему из двух электронов. Суммарный спин может равняться или 1 (3 проекции $+1, 0, -1$) или 0 (1 проекция 0). Попробуем построить соответствующие спиновые функции $\chi_\sigma(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2)$ как произведение спиновых функций отдельных электронов.

При $S_z = +1$ означает, что $(s_1)_z = +1/2$ и $(s_2)_z = +1/2$, то есть $\chi_{+1}(s_1, s_2) = |\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2$.

Аналогично, $S_z = -1$, означается, что $(s_1)_z = -1/2$ и $(s_2)_z = -1/2$, то есть $\chi_{-1}(s_1, s_2) = |\downarrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2$.

Что касается $S_z = 0$, то это соответствует либо $\chi_0(s_1, s_2) = |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2$, либо $\chi_0(s_1, s_2) = |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2$.

Переставим местами электроны. Тогда

$$\chi_{+1}(s_2, s_1) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 = \chi_{+1}(s_1, s_2),$$

$$\chi_{-1}(s_2, s_1) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 = \chi_{-1}(s_1, s_2)$$

$$\chi_0(s_2, s_1) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \neq \chi_0(s_1, s_2),$$

$$\chi_0(s_2, s_1) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \neq \chi_0(s_1, s_2).$$

Последние неравенство так же в наших обозначениях означают:

$$|\uparrow\rangle_2 |\downarrow\rangle_1 \neq |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2, \quad |\downarrow\rangle_2 |\uparrow\rangle_1 \neq |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2.$$

Мы видим, что состояния с проекциями суммарного спина ± 1 симметричны относительно перестановки, а состояния с проекциями 0 не имеют никакой симметрии. Поскольку эта две возможности $(|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2$ и $|\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2)$ отвечают одной и той же суммарной проекции 0, то мы не из-

меним это значения, если возьмём линейные комбинации $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 \pm |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2)$ (множитель $\frac{1}{\sqrt{2}}$ введён для нормировки).

Но теперь комбинация со знаком "+" симметрична относительно перестановки $1 \rightarrow 2, 2 \rightarrow 1$

$$|\uparrow\rangle_2 |\downarrow\rangle_1 + |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 = |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 + |\downarrow\rangle_2 |\uparrow\rangle_1.$$

Комбинация же со знаком "-" антисимметрична относительно перестановки $1 \rightarrow 2, 2 \rightarrow 1$

$$|\uparrow\rangle_2 |\downarrow\rangle_1 - |\downarrow\rangle_2 |\uparrow\rangle_1 = -(|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2).$$

Соответственно комбинация со знаком "+" соответствует проекции 0 полного спина 1, а со знаком "-" проекции 0 полного спина 0.

$$s = 1: \begin{cases} \chi_{+1}(s_1, s_2) = |\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 \\ \chi_0(s_1, s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 + |\downarrow\rangle_2 |\uparrow\rangle_1) \\ \chi_{-1}(s_1, s_2) = |\downarrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 \end{cases}$$

$$s = 0: \begin{cases} \chi_0(s_1, s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2) \end{cases}$$

Вывод. При полном спине 1 спиновая часть полной волновой функции симметрична относительно перестановки, а при полном спине 0 – антисимметрична.

Значит при полном спине 1 орбитальная волновая функция должна быть антисимметричной, а при полном спине 0 – симметричной.

Аналогично, если не учитывать взаимодействия (отталкивания) электронов, то орбитальная волновая функция двух электронов может быть представлена в виде произведения

$$\varphi(1, 2) = \varphi_{n_1 l_1}(1) \psi_{n_2 l_2}(2),$$

где $\varphi_{n,l}(1)$ – волновая функция (полная, то есть произведение радиальной на угловую части) 1-го электрона в состоянии с главным квантовым числом n_1 и орбитальным моментом l_1 ; $\psi_{n_2, l_2}(2)$ – аналогично для второго электрона. Однако $\varphi(1, 2)$ не является ни симметричной, ни антисимметричной относительно перестановки электронов. Так как эта функция и "переставленная" $\varphi(2, 1)$ соответствует одной и той же суммарной энергии двух электронов, то из них можно построить две линейные комбинации

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_{n_1, l_1}(1) \psi_{n_2, l_2}(2) \pm \varphi_{n_1, l_1}(2) \psi_{n_2, l_2}(1)].$$

Теперь видно, что комбинация с "+" является симметричной относительно перестановки, а комбинация со знаком "-" является антисимметричной. Значит первая соответствует полному спину 0, а вторая –

полному спину 1.

Обменное взаимодействие на примере атома гелия.

Если бы в атоме гелия электроны взаимодействовали друг с другом, а только с ядром, то мы бы получили водородоподобный атом с $Z = 2$ и энергией отрыва одного электрона (однократная ионизация) была бы равна

$$\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2} \frac{1}{1^2} = 13.6 \cdot 4 = 54.4 \text{ эВ.}$$

Экспериментальное значение 24.9 эВ. Причина расхождения – неучёт кулоновского отталкивания электронов.

Будем считать кулоновское отталкивание "малым". Как видно из вышеприведенного примера это не так. Поэтому дальнейшее надо рассматривать, как в основном качественный подход.

В отсутствии взаимодействия основное состояние есть состояния $1s$ с энергией -54.4 эВ согласно принципу Паули мы можем поместить в это состояние 2 электрона только если их спины будут противоположны

$\uparrow\downarrow$