

КОНСПЕКТ СЕМИНАРОВ РАЕВСКОГО АЛЕКСАНДРА ОСИПОВИЧА ПО ОБЩЕЙ ФИЗИКЕ

Примак Евгений
Гусева Оля

Содержание

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

2

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 спинного 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 гирмагнитного 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 $\mathbf{v} \uparrow \mathbf{s}_{\text{мех}}$. Пусть такой электрон влетает в однородное магнитное поле, перпендикулярное силовым линиям. Уравнение Ньютона:

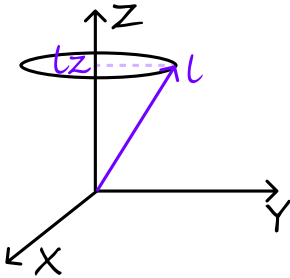
$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{e}{c} [\mathbf{v}, \mathbf{B}] \Rightarrow \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \left[-\frac{e}{mc} \mathbf{B}, \mathbf{v} \right] = [\omega_c, \mathbf{B}],$$

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).

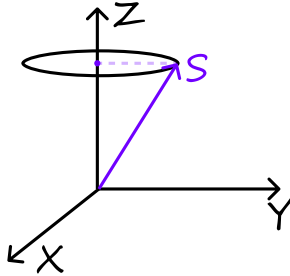
С принятым нам полуклассическим подходом спин похож на орбитальный момент



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

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

$l_z = m\hbar$, $m \in [-l, \dots, 0, \dots, l]$ 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 спинам 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 изменим 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 ($-\uparrow\downarrow$). Следовательно $(S_z)_{\max} = 0$ и поскольку других вариантов нет, то и $S = 0$.

Это антисимметричное по спину состояние, поэтому орбитальное состояние должно быть симметричным

$$\varphi(1, 2) = \frac{\varphi_{1s}(1)\varphi_{1s}(2) + \varphi_{1s}(2)\varphi_{1s}(1)}{\sqrt{2}} = \sqrt{2}\varphi_{1s}(1)\varphi_{1s}(2),$$

где $\varphi_{1s}(\mathbf{r}) = \frac{Z^{3/2}}{\sqrt{\pi a_B^3}} e^{-Zr/a_B}$ – волновая функция электрона в состоянии

1s в поле заряда Ze .

Найдём среднее значение кулоновского отталкивания электронов в этом состоянии

$$\begin{aligned}\langle \hat{V}_{\text{кул}} \rangle &= \iint dv_1 dv_2 \varphi^*(1, 2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \varphi(1, 2) \\ &= \iint dv_1 dv_2 \varphi_{1s}^*(1) \varphi_{1s}^*(2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \varphi_{1s}(1) \varphi_{1s}(2) \\ &= \iint dv_1 dv_2 \frac{e |\varphi_{1s}(1)|^2 \cdot e |\varphi_{1s}(2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \iint \frac{\rho_{1s}(1) \rho_{1s}(2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} dv_1 dv_2,\end{aligned}$$

где $\rho_{1s}(1) = e |\varphi_{1s}(1)|^2$ – плотность заряда электронного облака 1-го электрона в состоянии 1s; $\rho_{1s}(2)$ – аналогично для 2-го электрона. Так как

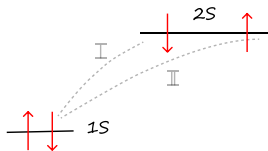
$$\rho_{1s}(1) dv_1 = dq_1, \quad \rho_{1s}(2) dv_2 = dq_2,$$

и мы получаем классическое выражение для энергии кулоновского отталкивания объёмных (не точечных!!!) зарядов. Вычисление интеграла с волновыми функциями 1s-состояния даёт (см. задачу 4.48)

$$E_{\text{кул}} = \langle \hat{V}_{\text{кул}} \rangle = \frac{5}{8} \frac{Ze^2}{a_B} = 34 \text{ эВ}.$$

Причина расхождения с экспериментальными данными ($54.4 - 24.9 = 29.5$ эВ) состоит в том, что находящиеся в состоянии 1s электроны могут подходить близко к ядру и частично "закрывать" своим электронным облаком (экранировать) поле заряда $+2e$. В результате электроны "чувствуют" уменьшенный заряд ядра. Теоретический расчет показывает, что $Z_{\text{эфф}} = Z - \frac{5}{16}$ и $E_{\text{кул}} = 28.7$ эВ, что уже близко к эксперименту.

Теперь рассмотрим возбужденные состояния атома гелия. Для этого нужно перевести один из электронов в состояние 2s (в модели невзаимодействующих электронов есть ещё уровень 2p с той же энергией).



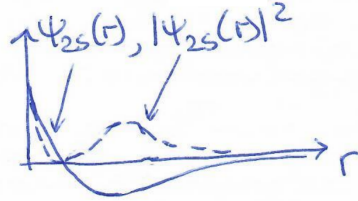
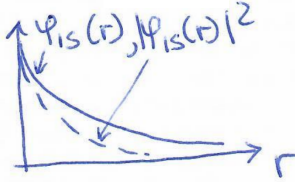
Однако его можно перевести так, чтобы суммарный спин остался равным 0(I) или стал равным 1(II).

Соответственно среднее значение кулоновского отталкивания будет разным.

$$\begin{aligned}\langle \hat{V}_{\text{кул}} \rangle &= \iint dv_1 dv_2 ([\varphi_{1s}^*(1) \psi_{2s}^*(2) \pm \varphi_{1s}^*(2) \psi_{2s}^*(1)] \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ &\quad \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{1s}(1) \psi_{2s}(2) \pm \varphi_{1s}(2) \psi_{2s}(1)]).\end{aligned}$$

Здесь

$$\varphi_{1s}(r) = \frac{Z^{3/2}}{\sqrt{\pi a_B^3}} e^{-Zr/a_B}, \quad \psi_{2s}(r) = \frac{Z^{3/2}}{2\sqrt{\pi a_B^3}} e^{-Zr/a_B} \left(1 - \frac{Zr}{2a_B}\right).$$



$$\begin{aligned} \langle \hat{V}_{\text{кул}} \rangle &= \frac{1}{2} \iint dv_1 dv_2 [|\varphi_{1s}(1)|^2 |\psi_{2s}(2)|^2 + |\varphi_{1s}(2)|^2 |\psi_{2s}(1)|^2] \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \pm \\ &\pm \frac{1}{2} \iint dv_1 dv_2 [\varphi_{1s}^*(1) \varphi_{1s}(2) \psi_{2s}^*(2) \psi_{2s}(1) + \varphi_{1s}^*(2) \varphi_{1s}(1) \psi_{2s}^*(1) \psi_{2s}(2)] \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \end{aligned}$$

Поскольку по координатам обоих электронов идёт интегрирование, то вклады двух слагаемых в верхней и нижней строчках одинаковы. В этом легко убедиться, поменяв индексы местами: $\iint dv_1 dv_2 = \iint dv_1 dv_2$. Тогда

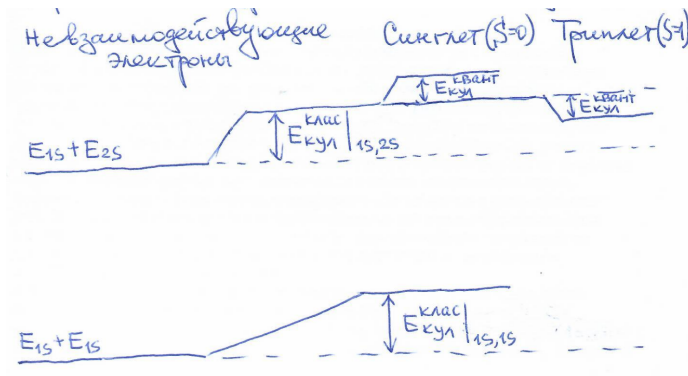
$$\langle \hat{V}_{\text{кул}} \rangle = \iint \frac{e|\varphi_{1s}(1)|^2 e|\psi_{2s}(2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} dv_1 dv_2 \pm \iint \frac{e\varphi_{1s}^*(1) \varphi_{1s}(2) e\psi_{2s}^*(2) \psi_{2s}(1)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} dv_1 dv_2.$$

Первый член – не что иное, как классическое кулоновское отталкивание двух электронных облаков 1s и 2s. А вот второй член – это чисто квантовый эффект отталкивания "обменных" плотностей зарядов $e\varphi_{1s}^*(2)\psi_{2s}(1)$ и $e\psi_{2s}^*(2)\varphi_{1s}(1)$. Электроны как бы меняются "местами точнее состояниями".

При нашем рассмотрении φ_{1s} и ψ_{2s} – действительные величины (поскольку нет зависимости от углов) и написание φ_{1s}^* и ψ_{2s}^* не более чем дань традиции. Для других состояний с $l \neq 0$ второй интеграл так же положителен.

$\langle \hat{V}_{\text{кул}} \rangle = E_{\text{кул}}^{\text{класс}} \pm E_{\text{кул}}^{\text{квант}}$. Знак "плюс" соответствует $S = 0$, знак "минус" соответствует полному спину $S = 1$. В первом случае отталкивание сильнее, так как принцип Паули "не мешает" электронам подойти близко друг к другу (спины антипараллельны). Во втором случае спины параллельны и принцип Паули "мешает" электронам сблизиться и они отталкиваются слабее, чем в первом случае. Картина энергетических уровней атому выглядит так:

Применим это к задаче 6.78, но сначала терминология. Гелий в синглетных состояниях называется парагелий, в триплетных – ортоге-



лий. Синглет – потому что у спина 0 есть только одна проекция (single). Триплет – потому что у спина 1 три проекции (triple).

Если не учитывать экранирование и считать электроны изначально не взаимодействующими, то

$$E_{1s} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} = -54.4 \text{ эВ} \quad \rightsquigarrow \quad E_{1s} + E_{2s} = -68 \text{ эВ}$$

$$E_{2s} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} = -13.6 \text{ эВ}$$

Полная энергия ионизации

$$\begin{cases} W_{\text{орто}} = -(E_{1s} + E_{2s}) - E_{\text{кул}}^{\text{класс}}|_{1s,2s} + E_{\text{кул}}^{\text{квант}} \\ W_{\text{пара}} = -(E_{1s} + E_{2s}) - E_{\text{кул}}^{\text{класс}}|_{1s,2s} - E_{\text{кул}}^{\text{квант}} \end{cases}$$

Откуда

$$E_{\text{кул}}^{\text{квант}} = \frac{W_{\text{орто}} - W_{\text{пара}}}{2} = 0.4 \text{ эВ}$$

$$E_{\text{кул}}^{\text{класс}}|_{1s,2s} = \frac{-2(E_{1s} + E_{2s}) - W_{\text{орто}} - W_{\text{пара}}}{2} = 9.2 \text{ эВ}$$

Для дальнейшего следует отметить, что полученный результат отнюдь не мал и не содержит релятивистской малости (не содержит $1/c$ и $1/c^2$).

Для всех остальных возбужденных состояний $1s^1np^1, 1s^1nd^1$ и т.д. картина будет аналогичной: "триплет лежит ниже синглета". Правда $E_{\text{кул}}^{\text{квант}}$ будет уменьшаться. Причина очевидна: "обмен" состояниям электроны могут только, если их волновые функции перекрываются в пространстве – обмен идет через область перекрытия.

Учёт релятивистских поправок (см. другую часть семинара) приведет к тонкой структуре триплета.

Разобранная задача впервые была решена Гейзенбергом, который

объяснил наблюдавшиеся особенности в спектре гелия: он состоит из двух серий, отличающихся по длине волны. Одна из серий переходы между синглетными подуровнями, а другая – между триплетными. Дело в том, что при электромагнитных переходах спин состояния не меняется. Практически в в спектре гелия есть только одна линия перехода между синглетом и триплетом (так называемая интеркомбинационная линия).

До работы Гейзенберга думали, что в природе есть два разных гелия. Но оказалось, что все таки один!

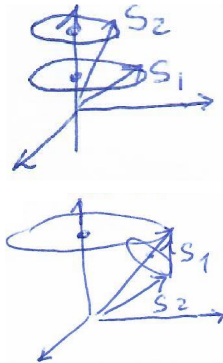
Впоследствии Дирак предложил записывать синглетно-триплетное расщепление, как среднее значение оператора обменного взаимодействия

$$\hat{V}_{\text{обм}} = -\frac{A}{2}(1 + 4\hat{\mathbf{S}}_1\hat{\mathbf{S}}_2).$$

Тогда энергия обменного взаимодействия для случая синглета ($\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$) есть

$$\langle \hat{V}_{\text{обм}} \rangle = -\frac{A}{2}(1 + 4\langle \hat{\mathbf{S}}_1\hat{\mathbf{S}}_2 \rangle) = -\frac{A}{2} \left(1 + 4 \left\langle \frac{\mathbf{S}^2 - \mathbf{S}_1^2 - \mathbf{S}_2^2}{2} \right\rangle \right),$$

раньше \mathbf{S}_1 и \mathbf{S}_2 – прецессировали независимо относительно оси квантовая и интегралами движения были $S_1^2 S_{1z} S_2^2 S_{2z}$. После включения взаимодействия интегралами движения станут $S^2 S_z S_1^2 S_2^2$, и \mathbf{S}_1 и \mathbf{S}_2 будет прецессировать вокруг \mathbf{S} , а \mathbf{S} – вокруг оси квантования. Тогда



$$\langle \mathbf{S}^2 - \mathbf{S}_1^2 - \mathbf{S}_2^2 \rangle = S(S+1) - S_1(S_1+1) - S_2(S_2+1)$$

$$= \begin{cases} 1 \cdot 2 - \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} = \frac{1}{2}, & S = 1 \\ 0 \cdot 1 - \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} = -\frac{3}{2}, & S = 0 \end{cases}$$

$$\langle \hat{V}_{\text{обм}} \rangle = -\frac{A}{2} \begin{cases} 1 + \frac{4}{2} \cdot \frac{1}{2} = -A, & S = 1 \\ 1 - \frac{4}{2} \cdot \frac{3}{2} = +A, & S = 0 \end{cases}$$

Сравнивая с решением задачи про спектр получаем $A = E_{\text{квант}}^{\text{кул}} > 0$.

Величина A носит название обменной константы (обменного интеграла) и при $A > 0$ энергетически выгоднее триплет, то есть параллельное расположение спинов. При $A < 0$ будет выгоднее антипараллельное расположение. Такой подход используется в теории магнетизма, где оператор $\hat{V}_{\text{обм}}$ носит название гамильтониана Гейзенберга.

Ещё раз подчеркнём, что никакого особого взаимодействия под на-

званием "обменное" в природе нет!!! Просто это обозначение квантовой добавки к среднему значению кулоновского (то есть электромагнитного) взаимодействия. Эта добавка есть следствие учета правильной перестановочной симметрии полных волновых функций.

Вторая часть "марлезонского балета" по обменному взаимодействию: молекула водорода.

что-то