

§ 4. ВНУТРЕННИЙ СПИН

Считается, что все физические системы состоят из частиц, таких, как электроны, протоны, нейтроны и т. п. Каждой точечной частице приписываются конечная масса и конечный заряд. Эксперимент же показывает, что такая картина неполна и, в частности, не позволяет объяснить поведение уровней энергии атома водорода при наличии слабого магнитного поля. Как мы увидим ниже, приходится сделать вывод, что точечным частицам нужно приписать еще и внутренний угловой момент (спин) и, следовательно, внутренний магнитный момент. Внутренний спин и магнитный момент считаются столь же фундаментальными характеристиками частиц, как их масса и заряд. Даже в состоянии покоя частица имеет некий спин и отличный от нуля магнитный момент. Более того, магнитный момент может иметь (и имеет) частица, подобная нейтрону и не обладающая зарядом. Можно считать, что этот магнитный момент обусловлен зарядовыми токами внутри частицы, которая обладает отличным от нуля полным магнитным моментом, но равным нулю полным зарядом. Почти все элементарные частицы, такие, как электрон, протон и нейtron, обнаруживают в эксперименте спин, равный $\frac{1}{2}\hbar$, но, например, ρ -мезон имеет спин \hbar , а Ω^- -гиперон — спин $\frac{3}{2}\hbar$. Полукцелые значения углового момента (в единицах \hbar) не встречались при описании орбитального движения частиц, но их появление нельзя считать совершенно неожиданным. Достаточно вспомнить о связи, установленной в § 2, между оператором углового момента и операторами вращений, а также описание (гл. 7, § 4) неприводимых представлений $D^{(J)}$ группы вращений целыми или полуцелыми значениями J . Причина, по которой мы отказались от функций с полуцелыми значениями J при описании орбитального движения частиц, становится несущественной в случае спиновых переменных. Дело в том, что орбитальное движение описывается дифференциальным уравнением Шредингера, решения которого должны быть непрерывными функциями. Волновая же функция, соответствующая полуцелым значениям J , приобретает множитель -1 при повороте на полный угол 2π и, следовательно, не является непрерывной. Спиновая степень

свободы не описывается уравнением Шредингера, но, как будет показано в т. 2 (гл. 15), естественно возникает при релятивистском описании. При решении подобных уравнений появление полуцелого спина не приводит к трудностям, а изменение знака волновой функции не влияет на вероятность $|\Psi|^2$.

Чтобы показать необходимость введения понятия спина для объяснения наблюдаемых явлений, рассмотрим прежде всего влияние однородного внешнего магнитного поля на уровни энергии электрона, движущегося в сферически-симметричном потенциальном поле. Рассмотрим, в частности, $(2l+1)$ -кратно вырожденный уровень энергии E_l , соответствующий значению l углового момента импульса, а также набор волновых функций $\Psi(lm)$, где $m = l, l-1, \dots, -l$. Дополнительное слагаемое в гамильтониане, учитывающее наличие постоянного магнитного поля с напряженностью B , имеет вид

$$\frac{e\hbar Bl_z}{2M_e c}. \quad (8.12)$$

Здесь ось z выбрана в направлении магнитного поля, $-e$ и M_e — заряд и масса электрона, а c — скорость света. Оператор $-e\hbar l_z/2M_e c$ называется оператором магнитного момента, а коэффициент при Bl_z называют магнетоном Бора и обозначают через μ_B :

$$\mu_B = e\hbar/2M_e c. \quad (8.13)$$

Заметим, что вклад (8.12) в гамильтониан пропорционален угловому моменту частицы и напряженности поля. Слагаемое (8.12) коммутирует с исходным гамильтонианом $T + V(r)$, и его влияние на спектр сводится просто к снятию вырождения и расщеплению спектра. Функции $\Psi(lm)$ будут также собственными функциями нового гамильтониана и будут соответствовать энергиям $E_{nl} + \mu_B B m$. Такое расщепление уровней в магнитном поле носит название эффекта Зеемана. С точки зрения теории групп симметрия гамильтониана понизилась с \mathcal{R}_3 до \mathcal{R}_2 , так что $(2l+1)$ -кратно вырожденный уровень расщепляется на $(2l+1)$ подуровней, индицируемых по неприводимым представлениям $T^{(m)}$ группы \mathcal{R}_2 .

Основное состояние атома водорода и почти любой системы со сферически-симметричным потенциалом при-

тяжения соответствует значению $l=0$, а потому является невырожденным и не может быть расщеплено. Однако эксперименты все же обнаруживают его расщепление на два уровня. Этот факт заставляет предположить наличие другой степени свободы, кроме пространственных координат, причем по крайней мере для основного состояния эта дополнительная степень свободы допускает лишь два возможных состояния. Кроме того, взаимодействие с магнитным полем говорит о том, что это расщепление, по-видимому, обусловлено наличием некоего дополнительного углового момента. Тот факт, что состояние с $l=0$ расщепляется на два уровня, указывает на значение спина, равное $\frac{1}{2}\hbar$, поскольку $2J+1=2$ при $J=\frac{1}{2}$. Спиновый угловой момент обычно обозначают символом s . Можно без труда убедиться в том, что расщепление возбужденных состояний с $l\neq 0$ также вполне совместимо с гипотезой $s=\frac{1}{2}\hbar$ для электрона. Посмотрим теперь, как выразить сказанное в строгой математической форме.

Любой частице определенного типа, например электрону, приписывается спин s ; предположим, что возможные спиновые состояния частицы натягиваются на базисный набор $2s+1$ состояний $\chi_{m_s}^{(s)}$ с $m_s=s, s-1, \dots, -s$. Предполагается, что при вращениях эти состояния преобразуются по неприводимому представлению $D^{(s)}$ группы \mathcal{R}_3 :

$$\left(\chi_{m_s}^{(s)}\right)' = T(R(a)) \chi_{m_s}^{(s)} = \sum_{m'_s} D_{m'_s m_s}^{(s)}(a) \chi_{m'_s}^{(s)}, \quad (8.14)$$

где s может быть как целым, так и полуцелым. Иными словами, предполагается, что эти состояния ведут себя подобно собственным функциям углового момента. Поскольку размерность пространства спиновых состояний конечна и равна $2s+1$, операторы бесконечно малых вращений имеют для них ту же форму, что и матрицы инфинитезимальных операторов, полученные в общем виде в гл. 7, § 4, п. Б. Обозначив эти операторы через s_x, s_y, s_z , находим по формуле (7.40) при конкретных значениях s

$$s = \frac{1}{2}, \quad s_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \frac{1}{2} i \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix};$$

$$s=1 \quad \mathbf{s}_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{s}_y = \frac{1}{2} i \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{s}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (8.15)$$

При $s=1/2$ принято обозначение $\sigma=2\mathbf{s}$, причем три оператора σ называются спиновыми матрицами Паули. Согласно формулам (7.36) и (7.39), базисные состояния являются собственными состояниями операторов \mathbf{s}_z и \mathbf{s}^2 :

$$\mathbf{s}_z \chi_{m_s}^{(s)} = m_s \chi_{m_s}^{(s)},$$

$$\mathbf{s}^2 \chi_{m_s}^{(s)} = s(s+1) \chi_{m_s}^{(s)}.$$

Оператор \mathbf{s}_z принято называть z -компонентой спина, а оператор \mathbf{s}^2 — квадратом полного спина. Как справедливо для углового момента вообще, можно составить из линейных комбинаций базисных состояний $\chi_{m_s}^{(s)}$ новый базис, в котором любая другая выбранная компонента спина будет диагональна.

Для системы частиц можно определить операторы полного спина частиц $\mathbf{S}_q = \sum_i \mathbf{s}_q(i)$ точно так же, как был определен в § 2 полный орбитальный угловой момент \mathbf{L}_q . Тогда из результатов § 3 сразу следует правило сложения спинов.

Полная волновая функция частицы со спином s должна описывать как орбитальное, так и спиновое состояние, и ее можно записать в общем виде

$$\Psi = \sum_{m_s=-s}^s \varphi_{m_s}(\mathbf{r}) \chi_{m_s}^{(s)}, \quad (8.16)$$

где коэффициенты $\varphi_{m_s}(\mathbf{r})$ — произвольные функции координат. В каждой точке \mathbf{r} волновая функция Ψ имеет не просто численное значение: ей соответствует также определенное спиновое состояние. Спиновое состояние частицы может быть представлено вектором-столбцом с

$2s+1$ компонентами. Если ввести обозначения

$$\chi_s^{(s)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \chi_{s-1}^{(s)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} \text{ и т. д.,}$$

то произвольную волновую функцию (8.16) можно записать в виде

$$\Psi = \begin{pmatrix} \varphi_s(\mathbf{r}) \\ \varphi_{s-1}(\mathbf{r}) \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (8.17)$$

Считается, что спиновые состояния $\chi_{m_s}^{(s)}$ образуют ортонормированную систему базисных векторов в $(2s+1)$ -мерном векторном пространстве, описывающем спиновое состояние частицы. Иными словами, предполагается существование скалярного произведения, обладающего свойством

$$(\chi_{m_s'}^{(s)}, \chi_{m_s}^{(s)}) = \delta_{m_s, m_s'}.$$

Для двух полных волновых функций $\tilde{\Psi}$ и Ψ , определенных равенством (8.16), скалярное произведение предполагается содержащим две операции: интегрирование по пространству координат \mathbf{r} и скалярное произведение в спиновом пространстве, т. е.

$$\begin{aligned} (\tilde{\Psi}, \Psi) &= \sum_{m_s m_s'} \int \tilde{\varphi}_{m_s'}^*(\mathbf{r}) \varphi_{m_s}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} (\chi_{m_s'}^{(s)}, \chi_{m_s}^{(s)}) = \\ &= \sum_{m_s} \int \tilde{\varphi}_{m_s}^*(\mathbf{r}) \varphi_{m_s}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \end{aligned}$$

Действие вращения на Ψ состоит в изменении как φ , так и χ , а потому на основании формул (3.37) и (8.14) имеем

$$T(R) \Psi = \sum_{m_s} \varphi_{m_s}(R^{-1} \mathbf{r}) (\chi_{m_s}^{(s)})'.$$

При малом вращении вокруг оси z на угол a имеем по определению (7.4) [вводя, как указано перед формулой (7.26), множители i]

$$\begin{aligned} T(R)\Psi &\approx \sum_{m_s} (1 - i a l_z) \varphi_{m_s}(r) (1 - i a s_z) \chi_{m_s}^{(s)} \approx \\ &\approx \sum_{m_s} [1 - i a (l_z + s_z)] \varphi_{m_s}(r) \chi_{m_s}^{(s)} \approx \\ &\approx [1 - i a (l_z + s_z)] \Psi. \end{aligned} \quad (8.18)$$

Таким образом, инфинитезимальным оператором для полной волновой функции Ψ является сумма $l_z + s_z$ орбитального и спинового угловых моментов. Введем обозначение $j_z = l_z + s_z$ и будем далее называть j полным угловым моментом частицы (в единицах \hbar).

Действие конечного вращения $R(a)$ на функцию Ψ таково:

$$\begin{aligned} T(R)\Psi &= \sum_{m_s} \varphi_{m_s}(R^{-1}r) \left(\chi_{m_s}^{(s)} \right)' = \\ &= \sum_{m_s} \varphi_{m_s}(R^{-1}r) \sum_{m'_s} D_{m'_s m_s}^{(s)}(a) \chi_{m'_s}^{(s)} = \\ &= \sum_{m'_s} \left\{ \sum_{m_s} D_{m'_s m_s}^{(s)}(a) \varphi_{m_s}(R^{-1}r) \right\} \chi_{m'_s}^{(s)}. \end{aligned} \quad (8.19)$$

Поэтому если ввести теперь преобразованные функции $\tilde{\varphi}_{m'_s}(r)$, определив их равенством $T(R)\Psi = \sum_{m'_s} \tilde{\varphi}_{m'_s}(r) \chi_{m'_s}^{(s)}$ или с учетом выражения (8.17) равенством

$$T(R)\Psi = \begin{pmatrix} \tilde{\varphi}_s(r) \\ \tilde{\varphi}_{s-1}(r) \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix},$$

то получим

$$\tilde{\varphi}_{m'_s}(r) = \sum_{m_s} D_{m'_s m_s}^{(s)}(a) \varphi_{m_s}(R^{-1}r). \quad (8.20)$$

Заметим, что суммирование здесь проводится по второму индексу матрицы вращения, а не по первому, как было в формуле (8.14). Это объясняется тем, что равен-

ство (8.20) выражает преобразование «координат», а не базисных векторов.

Действие вращения на Ψ [формула (8.19)] выражается в преобразованиях как функций координат, так и спиновых состояний. В ряде случаев удобно рассматривать действие вращения на эти две части волновой функции раздельно. Операторы s_q можно рассматривать как инфинитезимальные операторы группы вращений \mathcal{R}_3^s в спиновом пространстве, тогда как операторы l_q описывают группу вращений \mathcal{R}_3^l в пространстве координат. Набор из шести операторов r_q , l_q описывает прямое произведение групп $\mathcal{R}_3^l \times \mathcal{R}_3^s$, а три оператора $j_q = s_q + l_q$ — подгруппу \mathcal{R}_3 одновременных вращений в обоих пространствах.

Рассмотрим волновую функцию (8.16) в частном случае, когда частица находится в определенном спиновом состоянии m_s , а также в определенном орбитальном состоянии с угловым моментом l и проекцией m_l . В этом случае волновая функция имеет вид простого произведения

$$\Psi(lsm_lm_s) = \psi_{lm_l}(\mathbf{r}) \chi_{m_s}^{(s)}. \quad (8.21)$$

При фиксированных l и s существует всего $(2s+1)(2l+1)$ таких произведений, соответствующих всем возможным различным значениям m_l и m_s . Под действием вращений этот набор будет преобразовываться по произведению представлений $D^{(l)} \otimes D^{(s)}$ группы \mathcal{R}_3 , причем, согласно результатам § 3, для этого произведения справедливо разложение

$$D^{(l)} \otimes D^{(s)} = \sum_{j=|l-s|}^{l+s} D^{(j)}. \quad (8.22)$$

Таким образом, как и в случае двух орбитальных угловых моментов, полный угловой момент определяется правилом векторного сложения:

$$j = (l+s), (l+s-1), \dots, |l-s|. \quad (8.23)$$

Собственные функции полного углового момента $j=l+s$ строятся аналогично из простых произведений (8.21) с коэффициентами векторной связи:

$$\Psi(lsjm) = \sum_{\substack{m_l \\ (m_s=m-m_l)}} C(lsj, m_lm_sm) \psi_{lm_l}(\mathbf{r}) \chi_{m_s}^{(s)}. \quad (8.24)$$

Двузначность представлений с полуцелым индексом не приводит к какой-либо неоднозначности в коэффициентах векторной связи, поскольку последние определяются коммутационными соотношениями между инфинитезимальными операторами. Однако нужно быть осторожным при анализе конечных вращений. Рассмотрим, например, вращение вокруг оси z :

$$R_z(a) \psi_{jm} = \exp(-ima) \psi_{jm},$$

причем, если m — полуцелое, то

$$R_z(2\pi) \psi_{jm} = \exp(-2\pi mi) \psi_{jm} = -\psi_{jm}.$$

Изменение знака волновой функции под действием операции, возвращающей систему в прежнее физическое положение, не приводит к каким-либо противоречиям, поскольку знак волновой функции не имеет никакого физического смысла. Необходимо, однако, внимательно следить за согласованностью различных стадий любого вычисления. (В т. 2, гл. 18, § 13 мы покажем, что полуцелые представления можно рассматривать как однозначные представления несколько более широкой группы, чем \mathcal{R}_3 .)

Теперь мы можем учесть вклад магнитного момента, обусловленного спином частицы, находящейся в магнитном поле. Это достигается путем включения в гамильтониан члена

$$Bg_s \mu_B \mathbf{s}_z, \quad (8.25)$$

по форме совпадающего с (8.12), но содержащего в качестве множителя спиновый g -фактор g_s . Для электрона экспериментально установлено, что величина g_s очень близка к 2, и этот факт можно объяснить теоретически (т. 2, гл. 15, § 8, п. Б).

Кроме взаимодействия между спиновым магнитным моментом и внешним полем имеется также взаимодействие между спиновым магнитным моментом и эффективным магнитным полем, обусловленным орбитальным движением электрона* (или другой заряженной частицы). Это взаимодействие удобнее всего вычислить в рамках релятивистского подхода; результат вычислений — дополнительный член

$$\xi(r) \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} = \xi(r) (l_x s_x + l_y s_y + l_z s_z) \quad (8.26)$$

в гамильтониане. Подчеркнем, что этот член присутствует независимо от наличия или отсутствия внешнего поля; он носит название спин-орбитального взаимодействия. Радиальная функция $\xi(r)$ связана с центральным полем, в котором движется частица.

§ 5 АТОМ ВОДОРОДА

В оставшейся части данной главы мы рассмотрим структуру атомов в качестве иллюстрации следствий инвариантности по отношению к группе \mathcal{R}_3 и введения понятия спина. Начнем с атома водорода в нерелятивистском подходе, когда можно рассматривать движение электрона в поле фиксированного сферически-симметричного кулоновского потенциала $V(r) = -e^2/r$, создаваемого протоном (ядром атома водорода). Без учета спина волновые функции будут иметь вид (гл. 7, § 5)

$$\psi_{nlm_l} = u_{nl}(r) Y_m^{(l)}(\theta, \varphi).$$

Решение дифференциального уравнения задачи на собственные значения [уравнения (7.60)] приводит (см. любой учебник по квантовой механике) к следующему выражению для уровней энергии электрона:

$$E_{nl} = -m_e e^4 / 2\hbar^2 n^2,$$

где $n=1, 2, \dots$, а $l=0, 1, \dots, (n-1)$. Нам не понадобится точная форма радиальной волновой функции $u_{nl}(r)$. Несколько низших уровней энергии показаны на рис. 8.1, a, где использованы общепринятые спектроскопические обозначения, в которых символы s, p, d, f, g и т. д. соответствуют состояниям с $l=0, 1, 2, 3, 4$ в том же порядке. (Вырождение состояний с одинаковыми n , но разными l обусловлено не вращательной симметрией, а наличием весьма абстрактной группы симметрии относительно вращений в четырехмерном пространстве. Кратко об этом будет сказано в т. 2, гл. 19.) Для каждой разрешенной комбинации nl имеется $(2l+1)$ -кратное вырождение, описываемое индексом m_l . Если приписать электрону спин $1/2$, но не учитывать спин-орбитальное взаимодействие, то кратность вырождения возрастет еще вдвое соответственно значениям проекции спина $m_s = \pm 1/2$. Так, например, уровень $2p$ шестикратно вырожден; ему соот-