§ 55. Оператор спина

Ниже, в этой главе, мы не будем интересоваться зависимостью волновых функций от координат. Говоря, например, о поведении функций $\psi(x, y, z; \sigma)$ при повороте системы координат, можно подразумевать, что частица находится в начале координат, так что ее координаты при таком повороте останутся неизменными и полученные результаты будут характерны именно для поведения функции ψ в зависимости от спиновой переменной σ.

Переменная σ отличается от обычных переменных (координат) своей дискретностью. Наиболее общий вид линейного оператора, действующего на функции от дискретной переменной σ, запишем в виде

$$(\hat{f}\psi)(\sigma) = \sum_{\sigma'} f_{\sigma\sigma'}\psi(\sigma'), \tag{55,1}$$

где $f_{\sigma\sigma'}$ — постоянные; заключив $\hat{f}\psi$ в скобки, мы хотим подчеркнуть, что следующий далее спиновый аргумент относится уже не к начальной функции ψ, а к функции, возникшей под действием оператора $\hat{f}$. Легко видеть, что величины $f_{\sigma\sigma'}$ совпадают с матричными элементами оператора, определенными по обычному правилу (11,5) [1]). Интегрирование по координатам в (11,5) заменяется теперь суммированием по дискретной переменной, так что определение матричного элемента принимает вид

$$f_{\sigma_2\sigma_1} = \sum_{\sigma} \psi^*_{\sigma_2}(\sigma)[\hat{f}\psi_{\sigma_1}(\sigma)]. \tag{55,2}$$

Здесь $\psi_{\sigma_1}(\sigma)$ и $\psi_{\sigma_2}(\sigma)$ — собственные функции оператора $\hat{s}_z$, отвечающие собственным значениям $s_z = \sigma_1$ и $s_z = \sigma_2$; каждая такая функция отвечает состоянию, в котором частица обладает определенным значением s_z, т. е. из всех компонент волновой функции отлична от нуля лишь одна [2]):

$$\psi_{\sigma_1}(\sigma) = \delta_{\sigma\sigma_1}, \quad \psi_{\sigma_2}(\sigma) = \delta_{\sigma\sigma_2}. \tag{55,3}$$

Согласно (55,1) имеем

$$(\hat{f}\psi_{\sigma_1})(\sigma) = \sum_{\sigma'} f_{\sigma\sigma'}\psi_{\sigma_1}(\sigma') = \sum_{\sigma'} f_{\sigma\sigma'}\delta_{\sigma'\sigma_1} = f_{\sigma\sigma_1},$$

---

[1]) Обратим внимание на то, что при этом индексы у матричных элементов в правой стороне (55,1) записаны в последовательности, в известном смысле обратной обычной последовательности в (11,11).

[2]) Более точно надо было бы писать: $\psi_{\sigma_1}(\sigma) = \psi(x, y, z)\,\delta_{\sigma_1\sigma}$; в (55,3) опущены несущественные в данной связи координатные множители.

Подчеркнем лишний раз необходимость отличать заданное собственное значение s_z (σ_1 или σ_2) от независимой переменной σ! Именно с этим связано различие записей (11,11) и (55,1).

и после подстановки, вместе с $\psi_{\sigma_2}(\sigma)$, в (55,2) последнее равенство удовлетворяется автоматически, чем и доказывается сделанное утверждение.

Таким образом, операторы, действующие на функции от σ, могут быть представлены в виде $(2s+1)$-рядных матриц. Это относится, в частности, к оператору самого спина, действие которого на волновую функцию выражается, согласно (55,1), формулой

$$(\hat{s}\psi)(\sigma)=\sum_{\sigma'} s_{\sigma\sigma'}\psi(\sigma'). \tag{55,4}$$

Согласно сказанному выше (конец § 54) матрицы $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$, $\hat{s}_z$ совпадают с полученными в § 27 матрицами $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$, в которых надо лишь заменить буквы L и M буквами s и σ:

$$\begin{aligned}
&(s_x)_{\sigma,\,\sigma-1}=(s_x)_{\sigma-1,\,\sigma}=\frac{1}{2}\sqrt{(s+\sigma)(s-\sigma+1)},\\
&(s_y)_{\sigma,\,\sigma-1}=-(s_y)_{\sigma-1,\,\sigma}=-\frac{i}{2}\sqrt{(s+\sigma)(s-\sigma+1)},\\
&(s_z)_{\sigma\sigma}=\sigma.
\end{aligned} \tag{55,5}$$

Тем самым мы определили оператор спина.

В важнейшем случае спина 1/2 ($s=1/2$, $\sigma=\pm 1/2$) эти матрицы двухрядны. Их записывают в виде

$$\hat{s}=\frac{1}{2}\hat{\sigma}, \tag{55,6}$$

где [1])

$$\hat{\sigma}_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad \hat{\sigma}_y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\quad \hat{\sigma}_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}. \tag{55,7}$$

Матрицы (55,7) называют *матрицами Паули*. Матрица $\hat{s}_z=\hat{\sigma}_z/2$ диагональна, как и должно быть для матрицы, определенной по собственным функциям самой величины s_z [2]).

---

[1]) В записи матриц в виде (55,7) строки и столбцы нумеруются значениями σ, причем номер строки соответствует первому, а номер столбца — второму индексу матричного элемента. В данном случае эти номера пробегают значения $+1/2$, $-1/2$. Действие оператора, согласно (55,4), означает перемножение σ-й строки матрицы с компонентами волновой функции, расположенными в столбик

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi(1/2)\\ \psi(-1/2)\end{pmatrix}.$$

[2]) Обозначение проекции спина и матриц Паули одинаковой буквой не может повлечь недоразумения: матрицы Паули снабжены крышечкой над буквой.

Отметим некоторые специфические свойства матриц Паули. Непосредственно перемножая матрицы (55,7), получим равенства

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = 1,$$
$$\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z = i\hat{\sigma}_x,\ \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x = i\hat{\sigma}_y,\ \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y = i\hat{\sigma}_z. \tag{55,8}$$

Комбинируя их с общими правилами коммутации (54,1), найдем, что

$$\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_k + \hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_i = 2\delta_{ik}, \tag{55,9}$$

т. е. матрицы Паули антикоммутативны. С помощью этих равенств легко убедиться в справедливости следующих полезных формул:

$$\hat{\sigma}^2 = 3,\ (\hat{\sigma}\mathbf{a})(\hat{\sigma}\mathbf{b}) = \mathbf{ab} + i\hat{\sigma}[\mathbf{ab}], \tag{55,10}$$

где $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$ — два произвольных вектора[1]). В силу этих соотношений всякое скалярное полиномиальное выражение, составленное из матриц $\hat{\sigma}_i$, сводится к не зависящим от $\hat{\sigma}$ членам и членам первой степени по $\hat{\sigma}$; отсюда следует, что всякая вообще скалярная функция оператора $\hat{\sigma}$ сводится к линейной функции (см. задачу 1). Наконец, отметим значения следов (сумм диагональных компонент) матриц Паули и их произведений:

$$\operatorname{Sp}\hat{\sigma}_i = 0,\quad \operatorname{Sp}\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_k = 2\delta_{ik}. \tag{55,11}$$

Подробному изучению спиновых свойств волновых функций, в том числе их поведения при произвольных вращениях системы координат, посвящены следующие параграфы этой главы. Но уже здесь сразу же отметим важное свойство этих функций — поведение относительно поворотов вокруг оси z.

Произведем бесконечно малый поворот на угол $\delta\varphi$ вокруг оси z. Оператор такого поворота выражается с помощью оператора момента (в данном случае — спина) в виде $1 + i\delta\varphi\hat{s}_z$. Поэтому в результате поворота функции $\psi(\sigma)$ перейдут в $\psi(\sigma) + \delta\psi(\sigma)$, где

$$\delta\psi(\sigma) = i\delta\varphi\hat{s}_z\psi(\sigma) = i\sigma\psi(\sigma)\,\delta\varphi.$$

Переписав это соотношение в виде $d\psi/d\varphi = i\sigma\psi(\sigma)$ и интегрируя, находим, что при повороте на конечный угол φ функции $\psi(\sigma)$ перейдут в функции

$$\psi(\sigma)' = \psi(\sigma)\,e^{i\sigma\varphi}. \tag{55,12}$$

В частности, при повороте на угол 2π они умножаются на множитель $e^{2\pi i\sigma}$, одинаковый для всех σ и равный $(-1)^{2s}$ (число 2σ всегда имеет ту же четность, что и $2s$). Таким образом, при полном повороте системы координат вокруг оси z волновые функции

---

[1]) Не зависящие от $\hat{\sigma}$ члены в правых сторонах равенств (55,8)—(55,10) надо, конечно, понимать как константы, умноженные на единичную двухрядную матрицу.

частицы с целым спином возвращаются к своему первоначальному значению, а волновые функции частиц с полуцелым спином меняют свой знак.

Задачи

1. Свести произвольную функцию линейного по матрицам Паули скаляра $a+\mathbf{b}\hat{\sigma}$ к линейной функции.

Решение. Для определения коэффициентов в искомой формуле

$$f(a+\mathbf{b}\hat{\sigma}) = A + \mathbf{B}\hat{\sigma}$$

замечаем, что при выборе оси z вдоль направления $\mathbf{b}$ собственные значения оператора $a+\mathbf{b}\hat{\sigma}$ равны $a \pm b$, а соответствующие собственные значения оператора $f(a+\mathbf{b}\hat{\sigma})$ равны $f(a \pm b)$. Отсюда находим

$$A = \frac{1}{2}[f(a+b)+f(a-b)], \quad \mathbf{B} = \frac{\mathbf{b}}{2b}[f(a+b)-f(a-b)].$$

2. Определить значения скалярного произведения $\mathbf{s}_1\mathbf{s}_2$ спинов (1/2) двух частиц в состояниях, в которых суммарный спин системы $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$ имеет определенные значения (0 или 1).

Решение. По общей формуле (31,3), справедливой при сложении любых двух моментов, найдем

$$\mathbf{s}_1\mathbf{s}_2 = 1/4 \quad \text{при} \quad S=1, \quad \mathbf{s}_1\mathbf{s}_2 = -3/4 \quad \text{при} \quad S=0.$$

3. Какие степени оператора $\hat{\mathbf{s}}$ произвольного спина s являются независимыми?

Решение. Оператор

$$(\hat{s}_z - s)(\hat{s}_z - s + 1)\ \dots\ (\hat{s}_z + s),$$

составленный из разностей $\hat{s}_z$ и всех возможных собственных значений s_z, дает нуль при воздействии на любую волновую функцию, а потому сам равен нулю. Отсюда следует, что $(\hat{s}_z)^{2s+1}$ выражается через более низкие степени оператора $\hat{s}_z$, так что независимыми являются лишь его степени от 1 до $2s$.

§ 56. Спиноры

При равном нулю спине волновая функция имеет всего одну компоненту: $\psi(0)$. При воздействии оператора спина она обращается в нуль: $\hat{\mathbf{s}}\psi = 0$. Ввиду связи $\hat{\mathbf{s}}$ с оператором бесконечно малых поворотов, это значит, что волновая функция частицы с нулевым спином не меняется при поворотах системы координат, т. е. является скаляром.

Волновая функция частицы со спином 1/2 имеет две компоненты: $\psi(1/2)$ и $\psi(-1/2)$. Для удобства дальнейших обобщений будем отличать эти компоненты соответственно индексами 1 и 2, написанными у буквы сверху; двухкомпонентную величину

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi^1 \\ \psi^2 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \psi(1/2) \\ \psi(-1/2) \end{pmatrix} \tag{56,1}$$

называют *спинором*.