Как отмечалось ранее, мы имеем здесь удивительную аналогию между классической и квантовой механикой. Инвариантность уравнений движения классической системы относительно вращений координатных осей приводит к сохранению полного момента импульса системы. Это свойство позволяет получить первые интегралы движения и значительно упростить решение уравнений. Точно так же инвариантность относительно вращений уравнений движения в квантовой механике ведет к сохранению полного момента; однако из-за некоммутативности компонент момента импульса законы сохранения в этом случае выражаются не столь просто.

Раздел IV. СПИН

§ 18. Гипотеза спина электрона

Теория Шредингера, вытекающая из простого применения принципа соответствия, не может объяснить свойств сложных атомов, даже оставляя в стороне релятивистские поправки. Необходимы две важные модификации, причем ни одна из них не имеет каких-либо аналогий в классической механике, которые позволили бы предсказать их существование. Одна из этих модификаций заключается в выборе только тех решений уравнения Шредингера, которые обладают определенными свойствами симметрии относительно перестановки координат электронов. Это требование известно как принцип Паули и будет рассматриваться в главе XIV; при нижеследующем изложении оно может быть опущено. Другая модификация — гипотеза спина электрона.

Основное экспериментальное подтверждение этой гипотезы следует из анализа поведения сложных атомов в магнитном поле (эффект Зеемана, эксперимент Штерна — Герлаха).

Уравнение Шредингера для атома с Z бесспиновыми электронами уже было приведено выше (ур. (II. 30)). Если считать ядро бесконечно тяжелым, а его положение совпадающим с центром масс, то гамильтониан в системе центра масс имеет простой вид

$$H_0=\sum_{i=1}^{Z}\left(\frac{p_i^2}{2m}-\frac{Ze^2}{r_i}\right)+\sum_{i<j}\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|}. \tag{71}$$

Для того чтобы получить гамильтониан того же атома, помещенного в статическое магнитное поле, которое описывается потенциалом $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$, достаточно заменить в выражении (71) каждое $\boldsymbol{p}_i$ на $\boldsymbol{p}_i-e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_i)/c$. В частности, для постоянного магнитного

поля $\mathscr{H}$ $\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}(\mathscr{H}\times\boldsymbol{r})$ и

$$\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2=p^2-\frac{e}{c}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A})+\frac{e^2}{c^2}\boldsymbol{A}^2=$$
$$=p^2-\frac{e}{c}(\mathscr{H}\cdot\boldsymbol{l})+\frac{e^2}{4c^2}\mathscr{H}^2r_\perp^2,$$

где $r_\perp^2$ — квадрат проекции $\boldsymbol{r}$ на плоскость, перпендикулярную полю $\mathscr{H}$. Тогда получаем

$$H=H_0-\frac{e}{2mc}\mathscr{H}\cdot\boldsymbol{L}+\frac{e^2}{8mc^2}\mathscr{H}^2\sum_{i=1}^{Z}r_{i\perp}^2;$$

$\boldsymbol{L}$ — полный момент импульса Z электронов: $\boldsymbol{L}\equiv\sum_i(\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{p}_i)$. Для явлений, которые мы будем рассматривать, вклад третьего члена в этом выражении для гамильтониана пренебрежимо мал [1]). Итак, с очень хорошей точностью имеем

$$H=H_0-\frac{e}{2mc}(\mathscr{H}\boldsymbol{L}). \tag{72}$$

Мы получили такой ответ, как если бы каждый электрон, вращаясь по своей орбите, индуцировал магнитный момент

$$\boldsymbol{\mu}=\frac{e}{2mc}\boldsymbol{l},$$

пропорциональный своему моменту импульса с константой пропорциональности (гиромагнитное отношение), в точности равной величине $e/2mc$, которую дает классическая теория этого эффекта. При такой интерпретации полный магнитный момент атома равен сумме Z индивидуальных магнитных моментов, т. е.

$$\mathscr{M}=\frac{e}{2mc}\boldsymbol{L},$$

и энергия атома в поле $\mathscr{H}$ отличается от его энергии при отсутствии поля на величину магнитной энергии $-(\mathscr{M}\mathscr{H})$.

Ряд замечательных свойств можно получить просто из рассмотрения выражения (72), если принять во внимание, что H_0, будучи инвариантным по отношению к вращениям, коммутирует с каждой из компонент оператора $\boldsymbol{L}$.

---

[1]) Этот член играет основную роль в атомном диамагнетизме. Зная, что $\langle r^2\rangle\approx10^{-16}$ *см*^{2}, можно оценить порядок его величины $(Ze^2/12mc^2)\mathscr{H}^2\langle r^2\rangle$. Отношение этой величины к расстоянию между уровнями $e\hbar\mathscr{H}/2mc$, которое будет получено в дальнейшем, порядка $10^{-9}Z\mathscr{H}$ (*гаусс*), что пренебрежимо мало даже для очень сильных полей и очень тяжелых атомов. Поэтому отбрасывание этого члена не может быть ответственным за приведенные далее расхождения теории и эксперимента.

Направим вектор $\mathscr{H}$ по оси z. Операторы H_0, $\boldsymbol{L}^2$ и L_z имеют общий набор собственных векторов $|nLM\rangle$, а соответствующие собственные значения H_0, E_0^{nL} не зависят от M и $(2L+1)$-кратно вырождены[1]).

Согласно равенству (72) H является функцией H_0 и L_z и, следовательно, имеет тот же набор собственных векторов, а собственное значение оператора H, отвечающее вектору $|nLM\rangle$, равно

$$E^{nLM} = E_0^{nL} - M\mu_B\mathscr{H}, \qquad (73)$$

где мы положили

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \quad \text{(магнетон Бора)}. \qquad (74)$$

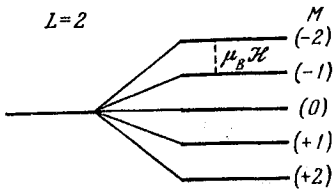

Рис. 2. Эффект Зеемана для D-состояния ($L=2$); слева — уровень энергии при нулевом поле, справа — уровни энергии при $\mathscr{H} \neq 0$.

Так как M может принимать все целые значения от $-L$ до $+L$, то каждый уровень E_0^{nL} под действием магнитного поля $\mathscr{H}$ расщепляется на $(2L+1)$ различных эквидистантных уровней, распределенных по закону (73). Итак, мы можем сделать следующие теоретические предсказания (рис. 2):

(i) каждый уровень E_0^{nL} атомного спектра в постоянном магнитном поле $\mathscr{H}$ расщепляется в «мультиплет» из $(2L+1)$ эквидистантных уровней;

(ii) уровни располагаются по обе стороны от E_0^{nL} таким образом, что их среднее расстояние от E_0^{nL} равно нулю;

(iii) расстояние между двумя соседними уровнями равно $\mu_B\mathscr{H}$ — величина, не зависящая от рассматриваемого атома и пропорциональная $\mathscr{H}$.

Эксперимент лишь частично подтверждает эти теоретические предсказания. Имеется два важных отклонения:

а) в атомах с нечетным Z все мультиплеты четные и дело обстоит так, как если бы $\boldsymbol{L}$ было полуцелым;

б) расстояние между соседними уровнями в одном мультиплете равно $g\mu_B\mathscr{H}$, где множитель g (множитель Ланде) меняется в зависимости от мультиплета в довольно широких пределах.

---

[1]) Кратность вырождения больше, если несколько собственных значений случайно совпадают, как в атоме водорода. Допустим, что $E_0^{nL} = E_0^{n'L'}$, тогда кратность равна $(2L+1)+(2L'+1)$ и необходимо несколько изменить дальнейшие рассуждения. Однако выводы останутся справедливы, если всюду L заменить наибольшей из двух величин L и L'. В частности, утверждение о том, что каждый «мультиплет» Зеемана содержит нечетное число эквидистантных уровней, не меняется.

Существование полуцелого момента импульса непосредственно устанавливается в эксперименте Штерна — Герлаха (§ I. 10). Поскольку почти все атомы, составляющие пучок, находятся в основном состоянии, число наблюдаемых на экране пятен равно кратности вырождения основного состояния. Для атомов серебра мы наблюдаем всего два пятна, следовательно, основное состояние атома серебра двукратно вырождено, что соответствует моменту импульса $^1/_2$. В более общем случае атомы с нечетным Z всегда дают четное число пятен — результат, характеризующий полуцелый момент импульса.

Свойства а) и б) встречаются вместе при изучении аномального эффекта Зеемана; спектральные данные позволяют в общем случае одновременно определить кратность состояний, между которыми происходят оптические переходы, и соответствующие g — множители Ланде.

Чтобы устранить эти затруднения, необходимо ввести полуцелый момент импульса и гиромагнитные отношения, отличные от $e/2mc$. Все это очень просто осуществляется, если принять гипотезу спина электрона (Уленбек и Гоудсмит, 1925):

Каждый электрон обладает внутренним моментом импульса или спином $\mathbf{s}$, *равным* $^1/_2\hbar$ (спин $^1/_2$), *с которым связан магнитный момент*

$$\boldsymbol{\mu}_s = g_s \frac{e}{2mc} \mathbf{s}, \tag{75}$$

где g_s — определенная константа. Согласие теории с экспериментом достигается, если положить

$$g_s \approx 2. \tag{76}$$

Релятивистская теория электрона (гл. XX) позволяет вывести это значение g_s.

Эксперименты показывают, что нуклоны (протоны и нейтроны) также обладают спином $^1/_2$, который можно определить непосредственным измерением связанного с ним магнитного момента [1]).

В оставшейся части этого раздела мы изложим нерелятивистскую теорию частиц спина $^1/_2$ (теорию Паули).

---

[1]) Если обозначить магнитный момент, спин и массу протона $\boldsymbol{\mu}_p$, $\mathbf{s}_p$ и M_p соответственно, то имеем (см. ур. (75))

$$\boldsymbol{\mu}_p = g_p \frac{e}{2M_p c} \mathbf{s}_p.$$

Аналогичная формула справедлива и для нейтрона. Эксперимент дает $g_p = 5{,}59$ и $g_n = -3{,}83$.

§ 19. Спин $^1/_2$ и матрицы Паули

Пусть $\boldsymbol{s}$ — оператор внутреннего момента импульса (или вектор спина) частицы спина $^1/_2$. Согласно гипотезе собственное значение $\boldsymbol{s}^2$ равно $s(s+1)=^3/_4$. Каждая из компонент, например s_z, может принимать одно из двух значений $+^1/_2$ или $-^1/_2$. Будем предполагать эти собственные значения невырожденными. Следовательно, компоненты $\boldsymbol{s}$ будут операторами в пространстве двух измерений, где в качестве базисных векторов можно выбрать два собственных вектора операторов $\boldsymbol{s}^2$ и s_z

$$|+\rangle \equiv \left|\frac{1}{2}\ +\frac{1}{2}\right\rangle, \quad |-\rangle \equiv \left|\frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\right\rangle.$$

В этом базисе легко выписать матрицы, соответствующие операторам s_x, s_y, s_z. Это будут конкретные матрицы J_x, J_y, J_z, матричные элементы которых определяются уравнениями (28).

Кроме коммутационных соотношений для момента импульса, компоненты $\boldsymbol{s}$ удовлетворяют следующим замечательным соотношениям:

$$s_x^2 = s_y^2 = s_z^2 = \frac{1}{4}, \quad s_+^2 = s_-^2 = 0.$$

Поскольку

$$s_+^2 = (s_x + is_y)^2 = (s_x^2 - s_y^2) + i\,(s_x s_y + s_y s_x),$$

получаем

$$s_x s_y + s_y s_x = 0.$$

Следовательно, операторы s_x, s_y, s_z попарно антикоммутируют [1]).

Удобно ввести *матрицы Паули* $\boldsymbol{\sigma} \equiv (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$

$$\boldsymbol{s} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}, \tag{77}$$

явный вид которых следующий:

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

Перечислим основные свойства этих матриц, которые следуют из их определения и легко проверяются, если воспользоваться

---

[1]) Два оператора A и B антикоммутируют, если $AB + BA = 0$.

их явным видом,

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1, \tag{78}$$

$$\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z, \tag{79а}$$

$$\sigma_y\sigma_z = -\sigma_z\sigma_y = i\sigma_x, \tag{79б}$$

$$\sigma_z\sigma_x = -\sigma_x\sigma_z = i\sigma_y, \tag{79в}$$

$$\sigma_x\sigma_y\sigma_z = i, \tag{80}$$

$$\operatorname{Tr}\sigma_x = \operatorname{Tr}\sigma_y = \operatorname{Tr}\sigma_z = 0, \tag{81}$$

$$\det\sigma_x = \det\sigma_y = \det\sigma_z = -1. \tag{82}$$

Справедливо важное тождество (задача 9)

$$(\sigma\boldsymbol{A})(\sigma\boldsymbol{B}) = (\boldsymbol{AB}) + i\sigma(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}), \tag{83}$$

где $\boldsymbol{A}$ и $\boldsymbol{B}$ — два произвольных вектора [1]).

Поскольку $\boldsymbol{s}$ есть момент импульса, то оператор $R_u^{(s)}(\varphi)$, преобразующий векторы данного пространства при вращении $\mathscr{R}_u(\varphi)$, равен, согласно формуле (58),

$$R_u^{(s)}(\varphi) \equiv e^{-\frac{1}{2}i\varphi\sigma_u},$$

где $\sigma_u \equiv (\sigma\boldsymbol{u})$. Раскладывая экспоненту в ряд и суммируя по отдельности члены четные и нечетные по σ_u, а также используя равенства (см. ур. (83))

$$\sigma_u^{2p} = 1, \quad \sigma_u^{2p+1} = \sigma_u,$$

получаем простое выражение

$$R_u^{(s)}(\varphi) = \cos\frac{1}{2}\varphi - i\sigma_u\sin\frac{1}{2}\varphi. \tag{84}$$

Отметим, что оператор вращения на 2π равен -1, в соответствии с результатами § 15.

Оператор, отвечающий вращению $\mathscr{R}(\alpha\beta\gamma)$, в силу формулы (60) равен

$$R^{(s)}(\alpha\beta\gamma) = e^{-\frac{1}{2}i\alpha\sigma_z}e^{-\frac{1}{2}i\beta\sigma_y}e^{-\frac{1}{2}i\gamma\sigma_z}. \tag{85}$$

Его явный вид можно вычислить тем же способом, что и для $\mathscr{R}_u(\varphi)$, ответ приведен в Дополнении В (формула (В. 74)).

Векторы рассматриваемого здесь пространства аналогичны векторам обычного пространства. Последние представляют со-

---

[1]) Они могут быть также векторными операторами, при условии, что их компоненты коммутируют с σ. В этом случае необходимо сохранить порядок следования $\boldsymbol{A}$ и $\boldsymbol{B}$ в правой части тождества. Например,

$$(\sigma\boldsymbol{r})(\sigma\boldsymbol{p}) = (\boldsymbol{rp}) + i\sigma(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}).$$

бой геометрические объекты с тремя компонентами, которые при вращениях преобразуются друг через друга по определенному закону. Такую же ситуацию мы имеем и для рассматриваемых здесь векторов (закон преобразования (85)), за исключением того, что они имеют две компоненты вместо трех. Эти двухкомпонентные объекты называют *спинорами*.

§ 20. Наблюдаемые и волновые функции частицы спина $^1/_2$. Спинорные поля

Рассмотрим частицу спина $^1/_2$. Основные наблюдаемые такой частицы можно разбить на две категории: орбитальные переменные и внутренние, или спиновые, переменные. Первыми являются компоненты координаты $\boldsymbol{r}$ и импульса $\boldsymbol{p}$; они удовлетворяют коммутационным соотношениям ($\hbar = 1$)

$$[r_i, p_j] = i\delta_{ij}.$$

Вторыми являются компоненты спина, удовлетворяющие коммутационным соотношениям

$$[s_i, s_j] = i\varepsilon_{ijk}s_k,$$

и, кроме этого, дополнительному условию $\boldsymbol{s}^2 = {}^3/_4$.

Поскольку орбитальные переменные коммутируют со спиновыми, пространство векторов состояний частицы $\mathscr{E}$ является тензорным произведением

$$\mathscr{E} = \mathscr{E}^{(0)} \otimes \mathscr{E}^{(s)}$$

орбитального пространства $\mathscr{E}^{(0)}$ и спинового пространства $\mathscr{E}^{(s)}$ (ср. § VIII. 7). Здесь $\mathscr{E}^{(0)}$ — пространство состояний бесспиновой частицы, а $\mathscr{E}^{(s)}$ — двумерное пространство, построенное в предыдущем параграфе.

Для описания векторов пространства $\mathscr{E}$ обычно выбирают представление с диагональными $\boldsymbol{r}$ и s_z. Вектор состояния $|\psi\rangle$ в таком представлении задается волновой функцией

$$\psi(\boldsymbol{r}, \mu) \equiv \langle \boldsymbol{r}\mu | \psi \rangle, \tag{86}$$

которая является функцией непрерывной переменной $\boldsymbol{r} \equiv (x, y, z)$ и дискретной переменной μ, представляющей собственные значения s_z и равной $\pm 1/2$.

Полный момент импульса частицы равен

$$\boldsymbol{j} \equiv \boldsymbol{l} + \boldsymbol{s}. \tag{87}$$

Основные наблюдаемые системы — компоненты трех векторов $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{s}$. Ясно, что $\boldsymbol{j}$ удовлетворяет коммутационным соотношениям (57), характеризующим полный момент импульса, так как $\boldsymbol{l} \equiv$

$\equiv \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ удовлетворяет им и коммутирует с $\boldsymbol{s}$, а $\boldsymbol{s}$ тоже удовлетворяет этим соотношениям и коммутирует с $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{p}$.

Теперь можно получить оператор вращения $R(\alpha\beta\gamma)$ (ур. (60)). Коль скоро $\boldsymbol{l}$ и $\boldsymbol{s}$ коммутируют, то он равен произведению двух коммутирующих операторов

$$R(\alpha\beta\gamma) = R^{(s)}(\alpha\beta\gamma)\, R^{(0)}(\alpha\beta\gamma), \tag{88}$$

где $R^{(s)}(\alpha\beta\gamma)$ определено уравнением (85) и *вращает спин*, а $R^{(0)}(\alpha\beta\gamma)$ определено выражением

$$R^{(0)}(\alpha\beta\gamma) = e^{-i\alpha l_z} e^{-i\beta l_y} e^{-i\gamma l_z}$$

и *вращает орбитальные переменные.*

При вращении на 2π, $R^{(0)} = 1$, а $R^{(s)} = -1$ и, следовательно, все кет-векторы при таком вращении меняют знак. Однако все основные наблюдаемые при вращении на 2π не изменяются и, как было показано в § 15, трудностей в их физической интерпретации не возникает.

Часто бывает удобно использовать обозначение

$$\psi\left(\boldsymbol{r}, \pm\frac{1}{2}\right) = \psi_{\pm}(\boldsymbol{r})$$

и записывать волновую функцию $\psi(\boldsymbol{r}, \mu)$ в виде *двухкомпонентной волновой функции*

$$\psi \equiv \begin{pmatrix} \psi_+(\boldsymbol{r}) \\ \psi_-(\boldsymbol{r}) \end{pmatrix}.$$

Для каждого значения $\boldsymbol{r}$ функция ψ определяет кет-вектор в пространстве $\mathscr{E}^{(s)}$, а именно

$$\langle \boldsymbol{r} | \psi \rangle \equiv \psi_+(\boldsymbol{r}) | + \rangle + \psi_-(\boldsymbol{r}) | - \rangle. \tag{89}$$

Другими словами, волновую функцию можно рассматривать как спинорное поле [1]).

Рассмотрение системы Z частиц спина $1/2$ производится совершенно аналогично. Пространством состояний системы является тензорное произведение пространств состояний отдель-

---

[1]) При вращении $\mathscr{R}(\alpha\beta\gamma)$ спинорное поле ψ преобразуется в

$$\mathscr{R}[\psi] = R\psi = R^{\left(\frac{1}{2}\right)} \begin{pmatrix} \psi_+(\mathscr{R}^{-1}\boldsymbol{r}) \\ \psi_-(\mathscr{R}^{-1}\boldsymbol{r}) \end{pmatrix},$$

что является непосредственным следствием (88); $R^{\left(\frac{1}{2}\right)}$ — матрица вращений, соответствующая $J = 1/2$. Можно сравнить этот закон преобразования с формулой (47) для скалярного поля. Существует аналогичная формула для векторного поля с $R^{(1)}$ вместо $R^{\left(\frac{1}{2}\right)}$ (см. § 21).

ных частиц. Так, спиновое пространство есть тензорное произведение Z индивидуальных спиновых пространств и имеет размерность 2^Z. Для каждого спина вводится система матриц Паули $\sigma^{(i)}$. Вращение всех спинов как целое можно выполнить, используя полный спин

$$S = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{Z} \sigma^{(i)}. \tag{90}$$

Вращение на 2π системы спинов задается оператором $(-1)^Z$.

§ 21. Векторные поля и частицы спина 1

Полезно подчеркнуть параллель между понятием спинорного поля и более известным понятием векторного поля.

Пусть $A(r)$ — векторное поле, связанное с физической системой. Им может быть, например, магнитное или электрическое поле или, как мы увидим ниже, волновая функция частицы спина 1.

Рассмотрим как преобразуется $A(r)$ при вращениях. Пусть $A'(r)$ — поле, которое получилось из $A(r)$ в результате вращения $\mathcal{R}$ физической системы

$$A' = \mathcal{R}[A].$$

Поле A' в точке r получается вращением $\mathcal{R}$ вектора $A(r_1)$, задающего поле A в точке $r_1 = \mathcal{R}^{-1}r$, т. е. (см. ур. (43) и (47))

$$A'_i(r) = \mathcal{R}_{ij}A_j(\mathcal{R}^{-1}r) \qquad (i = x,\ y,\ z).$$

Так, для вращения на угол α вокруг Oz находим (см. ур. (44))

$$A' = \mathcal{R}_z(\alpha)[A], \quad r_1 = (x\cos\alpha + y\sin\alpha,\ -x\sin\alpha + y\cos\alpha,\ z),$$

$$A'_x(r) = A_x(r_1)\cos\alpha - A_y(r_1)\sin\alpha,$$

$$A'_y(r) = A_x(r_1)\sin\alpha + A_y(r_1)\cos\alpha,$$

$$A'_z(r) = A_z(r_1).$$

В частности, инфинитезимальное вращение на угол ε вокруг Oz дает

$$\mathcal{R}_z(\varepsilon)[A] = (1 - i\varepsilon(l_z + s_z))A, \tag{91}$$

где l_z — определенный выше дифференциальный оператор, а s_z — оператор, определяемый равенством

$$s_z\begin{pmatrix} A_x(r) \\ A_y(r) \\ A_z(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -iA_y(r) \\ iA_x(r) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Оператор s_z преобразует каждую компоненту поля в данной точке в некоторую линейную комбинацию трех компонент поля в той же точке. Если поле A определяется тремя декартовыми составляющими A_x, A_y и A_z, то s_z задается матрицей

$$s_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Аналогично определяются операторы s_x и s_y, их матрицы имеют вид

$$s_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

Легко показать, что s_x, s_y, s_z удовлетворяют коммутационным соотношениям, характеризующим компоненты момента импульса. Обозначим этот момент через $\boldsymbol{s}$; вычисляя его квадрат, получаем

$$\boldsymbol{s}^2 = 2,$$

что соответствует моменту импульса $s = 1$. По определению, будем называть s — внутренним моментом или спином векторного поля.

Поле $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ может описывать частицу спина 1. Обозначим

$$A_i(\boldsymbol{r}) \equiv A(\boldsymbol{r}, i) \qquad (i = x, y, z),$$

где $A(\boldsymbol{r}, i)$ — волновая функция, зависящая не только от координат частицы, но и от индекса i, который может принимать три значения и представляет внутреннюю переменную, описывающую ориентацию частицы. Скалярное произведение таких волновых функций равно

$$\langle B, A\rangle \equiv \sum_i \int B^*(\boldsymbol{r}, i)\, A(\boldsymbol{r}, i)\, d\boldsymbol{r} = \int (\boldsymbol{B}^* \cdot \boldsymbol{A})\, d\boldsymbol{r}. \tag{92}$$

Оператор $\boldsymbol{l}$ действует только на пространственные координаты, в то же время $\boldsymbol{s}$ действует только на внутренние переменные. Ясно, что операторы $\boldsymbol{l}$ и $\boldsymbol{s}$, действуя на разные переменные, коммутируют. Оператор инфинитезимального вращения вокруг оси z определяется уравнением (91), аналогично получается оператор инфинитезимального вращения вокруг любой другой оси; используя определение (55), находим полный момент импульса частицы (см. ур. (87))

$$\boldsymbol{j} \equiv \boldsymbol{l} + \boldsymbol{s}.$$

Верно и более общее утверждение: любое линейное преобразование векторного поля можно представить как действие некоторого линейного оператора, который выражается в виде функции от трех основных операторов

$$\boldsymbol{r}, \quad \boldsymbol{p} \equiv -i\nabla, \quad \boldsymbol{s}.$$

В частности, справедливо важное тождество

$$\mathrm{rot} \equiv \boldsymbol{sp}, \tag{93}$$

которое легко проверить, пользуясь определением ротора и явным видом матриц s_x, s_y, s_z.

Понятия скалярного произведения, вращения, линейного преобразования, не зависят от выбранного представления. Волновая функция $A(\boldsymbol{r}, i)$ задает динамическое состояние частицы в представлении, где базисные векторы внутренней переменной соответствуют единичным векторам вдоль каждой из трех осей Ox, Oy, Oz; эти базисные векторы $|x\rangle$, $|y\rangle$, $|z\rangle$ являются собственными векторами операторов s_x, s_y, s_z соответственно, с собственным значением 0 (см. задачу 10). Часто удобнее использовать представление, где базисными векторами являются собственные векторы оператора s_z, $|+\rangle$, $|0\rangle$, $|-\rangle$ с собственными значениями $+1$, 0, -1 соответственно; они получаются друг из друга согласно закону, определенному в § 6. В этом представлении s_x, s_y и s_z задаются матрицами, которые удовлетворяют соотношениям (28) (с $j = j' = 1$), а связанный с векторным полем $\boldsymbol{A}$ кет-вектор $|A\rangle$ задается волновой функцией

$$A(\boldsymbol{r}, \mu) \equiv A_\mu(\boldsymbol{r}) \qquad (\mu = +, 0, -).$$

Согласно определению (ср. ур. (89))

$$\langle \boldsymbol{r} \mid A \rangle \equiv A_+(\boldsymbol{r}) \mid + \rangle + A_0(\boldsymbol{r}) \mid 0 \rangle + A_-(\boldsymbol{r}) \mid - \rangle$$

имеем

$$A_+ = -\frac{\sqrt{2}}{2}(A_x - iA_y), \quad A_0 = A_z, \quad A_- = \frac{\sqrt{2}}{2}(A_x + iA_y). \tag{94}$$

§ 22. Зависящие от спина взаимодействия в атомах

Вследствие существования внутреннего магнитного момента гамильтониан *электрона в электромагнитном поле* содержит члены, зависящие от спина.

В частности, в присутствии магнитного поля $\mathscr{H}(\boldsymbol{r})$ в гамильтониане появляется слагаемое, которое описывает *прямое взаимодействие* и получается из принципа соответствия,

$$-\mu\mathscr{H}(\boldsymbol{r}) \equiv -\mu_B \sigma \mathscr{H},$$

где μ — внутренний магнитный момент, определяемый уравнениями (75)—(76).

Это не единственный дополнительный член. Даже в случае чисто электростатического потенциала должны существовать члены *спин-орбитального взаимодействия*, поскольку при движении в таком потенциале в системе, движущейся с электроном, имеется магнитное поле, взаимодействующее с μ. Это классическое рассуждение может служить указанием для эмпирического определения спин-орбитального взаимодействия. Однако поскольку речь идет о релятивистском эффекте (стремящемся к нулю в пределе $v \ll c$), предпочтительнее исходить из релятивистского уравнения для электрона. Вид спин-орбитального взаимодействия из этого уравнения можно получить, выполняя разложение по параметру v/c и сохраняя ненулевые члены низшего порядка. Эта задача будет исследована в главе XX. Спин-орбитальное взаимодействие для сферически-симметричного потенциала, очевидно, инвариантно относительно вращений и, следовательно, коммутирует с тремя компонентами полного момента импульса $\boldsymbol{j}$. Релятивистская теория дает выражение

$$\frac{\hbar^2}{2m^2c^2}(\boldsymbol{ls})\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}. \tag{95}$$

По тем же причинам гамильтониан H_0 для Z электронов сложного атома содержит спин-орбитальные члены в дополнение к кулоновским, приведенным в ур. (71). Дополнительные члены коммутируют с полным моментом импульса

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S},$$

но в отличие от остальных членов H_0 они не коммутируют с $\boldsymbol{L}$ и $\boldsymbol{S}$ по отдельности. Более того, хотя вклад этих членов в полную энергию относительно мал (исключая самые тяжелые

атомы), их присутствие качественно изменяет атомный спектр — устраняет вырождение и, следовательно, ими никогда нельзя пренебрегать [1]).

Гамильтониан H атома в постоянном магнитном поле $\mathscr{H}$ получается из гамильтониана H_0 без внешнего поля тем же способом, что и в § 18, и добавлением членов прямого магнитного взаимодействия — $\sum_i \boldsymbol{\mu}^{(i)}\mathscr{H}$. Если пренебречь, как и в уравнении (72) для теории без спина, «диамагнитным членом» $\sim\mathscr{H}^2$, то получим

$$H = H_0 - \frac{e}{2mc}[\mathscr{H}\cdot(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S})]. \tag{96}$$

§ 23. Зависящие от спина нуклон-нуклонные взаимодействия

В качестве второго примера зависящих от спина взаимодействий рассмотрим взаимодействие двух нуклонов, нейтронов или протонов. Пусть M_0 — масса нуклонов, $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$ — их относительная координата, $\boldsymbol{p}={}^1/_2(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}_2)$ — относительный импульс, ${}^1/_2\boldsymbol{\sigma}_1$ и ${}^1/_2\boldsymbol{\sigma}_2$ — соответствующие спины. Движение центра масс и относительное движение полностью разделяются. Рассматриваемые ниже динамические переменные и динамические состояния относятся исключительно к относительному движению. Орбитальный момент импульса равен

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p},$$

полный спин

$$\boldsymbol{S}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2) \tag{97}$$

и полный момент импульса

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}. \tag{98}$$

Гамильтониан имеет вид

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{M_0}+V.$$

Чаще всего используются четыре типа взаимодействий, которые инвариантны, относительно вращений

$$V_1(r), \tag{99а}$$

$$V_2(r)(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2), \tag{99б}$$

$$V_3(r)(\boldsymbol{LS}), \tag{99в}$$

$$V_4(r)\left[3\frac{(\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{r})}{r^2}-\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2\right]. \tag{99г}$$

---

[1]) Следовало бы также упомянуть об изменениях, вызванных существованием магнитного момента у ядер атомов (сверхтонкая структура).

В трех последних выражениях зависящие от спина операторы записаны в их традиционном виде. Можно записать их и по-другому. Так, возводя обе части (97) в квадрат и используя тождество

$$\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = 3,$$

получаем

$$\sigma_1\sigma_2 = 2\boldsymbol{S}^2 - 3, \tag{100}$$

а возводя в квадрат обе части (98), получаем

$$\boldsymbol{LS} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{L}^2 - \boldsymbol{S}^2). \tag{101}$$

Наконец, из ур. (97) имеем

$$(\boldsymbol{S}\boldsymbol{r})^2 = \frac{1}{4}[(\sigma_1\boldsymbol{r}) + (\sigma_2\boldsymbol{r})]^2 = \frac{1}{4}[(\sigma_1\boldsymbol{r})^2 + (\sigma_2\boldsymbol{r})^2 + 2(\sigma_1\boldsymbol{r})(\sigma_2\boldsymbol{r})] =$$
$$= \frac{1}{2}[(\sigma_1\boldsymbol{r})(\sigma_2\boldsymbol{r}) + \boldsymbol{r}^2].$$

Отсюда

$$(\sigma_1\boldsymbol{r})(\sigma_2\boldsymbol{r}) = 2(\boldsymbol{S}\boldsymbol{r})^2 - \boldsymbol{r}^2,$$

и, следовательно,

$$S_{12} \equiv 3\frac{(\sigma_1\boldsymbol{r})(\sigma_2\boldsymbol{r})}{r^2} - \sigma_1\sigma_2 \tag{102}$$

$$= 2\left[3\frac{(\boldsymbol{S}\boldsymbol{r})^2}{r^2} - \boldsymbol{S}^2\right]. \tag{102'}$$

Оператор S_{12} называется «тензорный оператор», а взаимодействие (99г) — «тензорные силы».

Если V — линейная комбинация взаимодействий типа (99), то гамильтониан будет инвариантен относительно как вращений, так и отражений (при отражении $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{p}$ переходят в $-\boldsymbol{r}$ и $-\boldsymbol{p}$, а операторы спина не меняются). Мы еще вернемся к свойству инвариантности относительно отражений. Отметим только, что если обозначить P — оператор, который, действуя на $\psi(\boldsymbol{r})$, дает $\psi(-\boldsymbol{r})$, то его собственные функции будут обладать определенной четностью. Инвариантность относительно отражений означает, что $[H, P] = 0$. Если гамильтониан обладает указанным свойством, то его собственные функции можно искать среди функций с определенной четностью.

Взаимодействия (99) расположены в порядке уменьшения их симметрии.

Первое не зависит от спина. Второе коммутирует с $\boldsymbol{L}$ и $\boldsymbol{S}$ по отдельности: оно инвариантно не только по отношению к общим вращениям, но и к вращениям только орбитальных переменных или только спинов. Если V содержит лишь члены вида (99а) и (99б), то собственные функции H можно искать среди общих

собственных функций $\boldsymbol{L}^2$, $\boldsymbol{S}^2$, L_z, S_z, и соответствующие собственные значения будут $(2L+1)(2S+1)$-кратно вырождены и не будут зависеть от собственных значений L_z и S_z.

Если же V содержит также член вида (99в), то H будет все еще коммутировать с $\boldsymbol{L}^2$ и $\boldsymbol{S}^2$, но перестанет быть инвариантным относительно независимых вращений пространственных координат и спинов. Собственные функции H в этом случае можно искать среди общих собственных функций $\boldsymbol{L}^2$, $\boldsymbol{S}^2$, $\boldsymbol{J}^2$ и J_z, а его собственные значения будут иметь вращательное вырождение только кратности $(2J+1)$.

Взаимодействие (99г) имеет наименьшую симметрию. Оператор S_{12} не коммутирует с $\boldsymbol{L}^2$. Однако он еще коммутирует с $\boldsymbol{S}^2$ (из выражения (102′) для тензорного оператора видно, что $[\boldsymbol{S}^2, S_{12}]=0$). Если V содержит член вида (99г), то собственные функции H можно искать среди общих собственных функций операторов P, $\boldsymbol{S}^2$, $\boldsymbol{J}^2$ и J_z.

Раздел V. СЛОЖЕНИЕ МОМЕНТОВ ИМПУЛЬСА

§ 24. Задача сложения

Во многих задачах гамильтониан инвариантен относительно вращений и, следовательно, коммутирует с компонентами полного момента импульса. В этом случае мы ищем собственные функции H среди общих собственных функций $\boldsymbol{J}^2$ и J_z. При этом важно уметь перечислять и строить векторы с определенным моментом (JM).

В простом случае бесспиновой частицы в центральном поле (гл. IX) полный момент импульса совпадает с орбитальным моментом $\boldsymbol{l}$ и собственные функции полного момента имеют вид $\chi(r)Y_l^m(\theta, \varphi)$. В общем случае $\boldsymbol{J}$ есть сумма моментов отдельных частиц

$$\boldsymbol{J}=\sum_i \boldsymbol{j}_i,$$

т. е. орбитальных моментов импульса и спинов частиц системы.

Метод построения собственных векторов индивидуальных моментов известен. Так, для системы двух нуклонов, рассмотренной в § 13, имеем

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1+\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_2, \tag{103}$$

а собственные функции индивидуальных моментов импульса имеют вид $\psi(r)Y_l^m(\theta, \varphi)|\mu_1\rangle|\mu_2\rangle$, где μ_1 и μ_2 могут принимать значения $+{}^1/_2$ или $-{}^1/_2$, в зависимости от направления спинов