§ 13. СПИН ЭЛЕКТРОНА

13.1. Гипотеза о спине электрона. Многочисленные экспериментальные данные показывают, что магнитный момент атомов не сводится к одним орбитальным магнитным моментам электронов. Необходимо допустить существование собственного момента импульса электрона — спина — и пропорционального ему собственного магнитного момента. (Далее будем применять обозначения $\vec{S}$ и $\vec{M}_S$.)

Уже при изучении атома водорода и водородоподобных систем необходимо учесть взаимодействие между орбитальными и спиновыми магнитными моментами, а для многоэлектронных атомов роль этих взаимодействий очень существенна. Энергия спин-орбитального взаимодействия невелика, и поэтому оно не изменяет общей картины найденных ранее уровней энергии. Небольшие поправки к значениям энергии, возникающие при учете магнитных взаимодействий, зависят от взаимной ориентации магнитных моментов. Если последняя осуществляется несколькими способами, то каждый уровень для состояний с $l \neq 0$ распадается на соответствующее число близких подуровней. Это приводит к расщеплению спектральных линий на несколько компонент. Опыт показывает, что линии серии Лаймана (и аналогичных серий водородоподобных систем: иона He^+, щелочных атомов и др.) распадаются на пары-дублеты, что приводит к выводу о двояко ориентирующемся спиновом магнитном моменте.

В связи с изучением тонкой структуры спектров Уленбек и Гаудсмит выдвинули в 1925 г. гипотезу о существовании у электрона собственного механического и магнитного момента — *спина*. Наличие *спина* подтверждается также результатами известных опытов Штерна и Герлаха (1922). Если пропустить через неоднородное магнитное поле пучок атомов водорода, находящихся в основном ($1s$) состоянии, то он разделяется на два пучка. Поскольку в состоянии $1s$ орбитальный момент равен нулю, то весь магнитный момент атома сводится к спиновому магнитному моменту электрона. (Магнитный спиновый момент протона и других ядер много меньше электронного и не сказывается на результатах эксперимента. Ради точности заметим, что первые опыты Штерна и Герлаха проводились с серебром. В атомах серебра не скомпенсирован спин последнего, оптического, электрона, который находился в s-состоянии.) Эксперименты доказывают, таким образом, и существование спина, и его способность к двойной ориентации по отношению к направлению внешнего магнитного поля.

Измерения в опытах Штерна и Герлаха позволили найти величину проекции спинового магнитного момента. Она оказалась равной магнетону Бора. В других наблюдениях (например, опыты Эйнштейна и де Гааза, которые мы здесь не описываем) было установлено, что гиромагнитное отношение для спина вдвое больше, чем орбитальное (см. § 12, п. 3). Спиновое безразмерное гиромагнитное отношение для электрона равно -2.

Наличие спина не связано с каким-нибудь движением частицы в пространстве. Поэтому о спине нельзя получить сведений из уравнения Шредингера, которое пригодно, строго говоря, для описания только бесспиновых частиц.

В настоящее время как сам спин, так и все его характеристики могут быть получены теоретически из релятивистского квантового уравнения Дирака (см. § 26). Но в рамках нерелятивистской квантовой механики представление о спине вводится как дополнительное положение, поэтому в нашем курсе опора на экспериментальные даныне необходима.

Иногда электрон представляют для наглядности в виде шарика-волчка, вращающегося вокруг оси, проходящей через центр масс. С принципиальной стороны эта модель является неверной. Такие элементарные частицы, как электрон, по современным данным считают бесструктурными и точечными, а поэтому их спиновые свойства не могут иметь наглядного толкования. Появление спина у элементарной частицы — квантово-релятивистский эффект того же плана, как энергия покоя. Спин такой же неотъемлемый атрибут частицы, как ее масса или заряд.

Однако в отличие от массы или заряда понятие о спине является чисто квантовым и не имеет каких-либо классических аналогов. При переходе в классическую область спин исчезает уже потому, что модуль вектора $\vec{S}$ по порядку величины равен $\hbar$, а в классической области следует положить $\hbar=0$. (Орбитальный момент импульса $L \sim l\hbar$. В классическом пределе $\hbar \to 0$, а $l \to \infty$, поэтому произведение $l\hbar$ остается конечным.) Поэтому попытки свести спин электрона к каким-то собственным его вращениям оказались бесплодными.

В настоящее время твердо установлено наличие спина не только у электронов, но и у большинства других элементарных частиц. Величина спина и связанное с ней число различных ориентировок по отношению к некоторой оси могут быть различными.

13.2. Математическое описание спина электрона. В квантовую теорию динамические переменные входят через соответствующие им операторы. Для описания спина используются оператор спина $\hat{\vec{S}}$ и операторы его проекций $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ и $\hat{S}_z$.

Даже не рассматривая явный вид указанных операторов, можно многое узнать о спине из правил их коммутации. Для спинового момента, как и для орбитального момента импульса, выполняются соотношения

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y]=i\hbar\hat{S}_z, \quad [\hat{S}_y, \hat{S}_z]=i\hbar\hat{S}_x, \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x]=i\hbar\hat{S}_y. \tag{13.1}$$

Поэтому не существует состояний с определенным (по модулю и направлению в пространстве) вектором спина. Из соотношений (13.1) следует, что коммутируют операторы $\hat{S}^2$ и $\hat{S}_z$. Следовательно, возможны состояния с заданной величиной модуля спина и его проекции на одну ось —Oz. Из правил коммутации вытекают также условия квантования:

$$S=\hbar\sqrt{s(s+1)}, \tag{13.2}$$

$$S_z=\hbar m_s, \quad m_s=s,\ s-1,\ \ldots,\ -s, \tag{13.3}$$

где s — спиновое квантовое число; m_s — квантовое число проекции спина.

Между значением спинового числа s и числом проекций спина существует то же соотношение, что и для орбитального момента: m_s принимает $2s+1$ значение. Но из опытов Штерна и Герлаха известно, что число проекций равно двум, т. е.

$$2s+1=2,$$

откуда для электрона

$$s=\frac{1}{2}, \tag{13.4}$$

а квантовое число m_s принимает только два значения:

$$m_s=\frac{1}{2},\ -\frac{1}{2}.$$

Итак, для электрона спиновый механический момент в соответствии с выражениями (13.2) и (13.4) выражается формулой

$$S=\hbar\frac{\sqrt{3}}{2}, \tag{13.5}$$

а проекция его на ось Oz:

$$S_z=\frac{\hbar}{2},\ -\frac{\hbar}{2}, \tag{13.6}$$

что соответствует в рамках векторной модели двум возможным ориентациям вектора спина. При $m_s=\frac{1}{2}$ условно говорят, что спин направлен по оси Oz, вверх, а при $m_s=-\frac{1}{2}$ — против оси Oz, вниз (рис. 13.1).

Для нахождения магнитного момента электрона следует считать, что связь между операторами механического и магнитного моментов общая для орбитального движения и спина:

$$\hat{\vec{M}}_s=-2\frac{M_Б}{\hbar}\hat{\vec{S}},\ (\hat{\vec{M}}_s)_z=-2\frac{M_Б}{\hbar}\hat{S}_z. \tag{13.7}$$

Отсюда для проекции спинового магнитного момента электрона имеем формулу

$$(M_s)_z=\pm\frac{e\hbar}{2\mu}=\pm M_Б. \tag{13.8}$$

(Теоретическое значение магнитного момента электрона, рассчитанное в квантовой электродинамике и подтвержденное экспериментом, таково:

$$(M_s)_z=\pm 1{,}00116 M_Б.)$$

Спин, как говорилось выше, присущ не только электронам, но и другим микрочастицам — ядрам, элементарным частицам. Специфическая особенность спина состоит в том, что спиновое число

s для разных микрочастиц принимает как целые, так и полуцелые значения:

$$s=0,\ \frac{1}{2},\ 1,\ \frac{3}{2},\ \ldots$$

Частицы с полуцелым спином — $s=\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$ и т. д.— объединяются в один класс и называются *фермионами*. Частицы с целым спином — $s=0, 1, 2, \ldots$— относятся к *бозонам*. (Как правило, спиновое число невелико по сравнению с единицей.)

Как для целых, так и для полуцелых значений s квантовое число проекции спина m_s изменяется от s до $-s$ с шагом, равным 1.

Для всех микрочастиц справедливы формулы (13.2), (13.3), выражающие механический спиновый момент через спиновые квантовые числа. Что же касается магнитного момента, то гиромагнитные отношения других частиц могут быть иными, нежели для электрона, а магнетон при этом зависит от массы частицы.

Квантовое число проекции спина m_s должно включаться в набор квантовых чисел, задающих состояние электрона. Так, при движении частицы в центрально-симметричном поле для волновых функций при учете спина следует использовать выражение

$$\psi_{nlmm_s}(r,\ \Theta,\ \varphi)=R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\Theta,\ \varphi)\,U_{m_s}, \tag{13.9}$$

где U_{m_s} — так называемая спиновая функция, вид которой при элементарном рассмотрении ряда важных вопросов может оставаться нераскрытым (см. § 13, п. 3).

Функция (13.9) описывает квантовое состояние электрона с определенной энергией E, орбитальным моментом импульса L; его проекцией L_z и проекцией спина S_z (и, конечно, с определенным спином S). Эти величины образуют полный набор для электрона в атоме водорода. Поэтому задание квантовых чисел n, l, m и m_s- полностью определяет квантовое состояние электрона в атоме.

Энергия атома водорода в приближении, когда не учитывается магнитное взаимодействие, от спина не зависит. Поэтому уровни энергии, задаваемые формулой (11.7), имеют дополнительное вырождение по ориентации спина.

Уточняется и число различных состояний атома при заданном n (§ 11, п. 3). Конкретному значению энергии E_n соответствует $2n^2$ различных квантовых состояний электрона, отличающихся квантовыми числами l, m и m_s. При заданных n и l имеется $2(2l+1)$ состояний с различными m и m_s.

* * *

Подводя общий итог решению водородной задачи, можно заметить, что атом водорода уже рассматривался в полуклассической-полуквантовой теории Бора. Но с помощью последовательной теории, основанной на уравнении Шредингера, мы получили более глубокую и исчерпывающую информацию о строении и свойствах атома.

Существенно, что часть положений Бора подтвердилась: о стационарных состояниях, об уровнях энергии и их квантовании. Однако теперь это не постулированные положения, а выводы квантовой механики, результаты решения одной из ее задач.

13.3. Спиновые операторы и функции. До сих пор явный вид оператора спина не использовался. В соответствии с двумя значениями проекции спина на ось Oz, операторы спина могут быть выражены через матрицы Паули:

$$\sigma_0=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\quad \sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad \sigma_y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\quad \sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}. \qquad (13.10)$$

Спиновые операторы связаны с матрицами (13.10) соотношениями

$$\hat{\vec{S}}=\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}=\frac{\hbar}{2}(\sigma_x\vec{i}+\sigma_y\vec{j}+\sigma_z\vec{k}),$$
$$\hat{S}_x=\frac{\hbar}{2}\sigma_x,\quad \hat{S}_y=\frac{\hbar}{2}\sigma_y,\quad \hat{S}_z=\frac{\hbar}{2}\sigma_z,\quad \hat{S}^2=\frac{3\hbar^2}{4}\sigma_0. \qquad (13.11)$$

Нетрудно убедиться, что для операторов (13.11) справедливы формулы (13.1) вместе со всеми вытекающими из них следствиями (13.2) ... (13.6).

Спиновые функции — это математические выражения, описывающие спиновое состояние электрона. Их физический смысл и свойства определяются, с одной стороны, общими положениями квантовой механики о функциях состояния. С другой стороны, они не могут быть обычными функциями от координат частицы, так как спин не связан с движением частиц в пространстве. Спиновые операторы задаются через матрицы. Поэтому и спиновые функции также представляются в виде матриц. В более полных (нежели наш) курсах ([3], [21] и др.) в теории представлений показано, что матричное представление операторов и функции состояния, в сущности, не является чем-то особенным, наоборот, такой математический аппарат удобен для описания многих квантовых систем. При общем подходе спин не выделяется среди других величин. Но сейчас придется о спиновых функциях говорить отдельно. Разъясним только те стороны описания спина, с которыми встретимся в курсе ниже.

Спиновая функция u — матрица-столбец:

$$u=\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix},$$

где c_1 и c_2 — некоторые комплексные числа. Действие операторов (13.10) на такую функцию производится по правилу умножения матриц. В частности, имеем

$$\hat{S}^2u=\frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix}=\frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix}.$$

Таким образом, любая спиновая функция есть собственная функция оператора $\hat{S}^2$, принадлежащая единственному собственному значению $\frac{3\hbar^2}{4}$. Уравнение

$$\hat{S}_zu=S_zu$$

в матричной форме имеет вид

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix}=S_z\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix}.$$

Перемножая матрицы, получаем

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}c_1\\-c_2\end{pmatrix}=S_z\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix}.$$

Отсюда видно, что в общем случае спиновая функция не является собственной для $\hat{S}_z$.

Спиновая функция

$$u=\begin{pmatrix}c_1\\0\end{pmatrix}$$

описывает состояние с $S_z=\frac{\hbar}{2}$, а функция

$$u=\begin{pmatrix}0\\c_2\end{pmatrix}$$

— состояние с $S_z=-\frac{\hbar}{2}$.

Введем функцию u^+, эрмитово сопряженную с функцией u. Это матрица-строка:

$$u^+=(c_1^*c_2^*).$$

Спиновые функции нормируются условием

$$u^+u=1, \tag{13.12}$$

или

$$(c_1^*c_2^*)\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix}=|c_1|^2+|c_2|^2=1.$$

Нормированные спиновые функции, описывающие состояние с положительной и отрицательной ориентациями спина, обозначим через $u(m_s)$:

$$u\left(\frac{1}{2}\right)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\ u\left(-\frac{1}{2}\right)=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}. \tag{13.13}$$

Спиновые операторы являются самосопряженными или эрмитовыми. (В матричном представлении эрмитово сопряженный оператор изображается эрмитово сопряженной — транспонированной и комплексно сопряженной — матрицей.) Поэтому их собственные значения действительны, а собственные функции образуют полную ортонормированную систему.

Функции u_1 и u_2 ортогональны, если

$$u_1^+u_2=0. \tag{13.14}$$

Легко проверить, что функции $u\left(\frac{1}{2}\right)$ и $u\left(-\frac{1}{2}\right)$ удовлетворяют равенству (13.14). Поэтому произвольная спиновая функция может быть разложена по собственным функциям оператора $\hat{S}_z$:

$$\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix}=c_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+c_2\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix},$$

или

$$u=c_1u\left(\frac{1}{2}\right)+c_2u\left(-\frac{1}{2}\right).$$

По общим правилам квантовой механики $|c_1|^2$ и $|c_2|^2$ определяют вероятность обнаружения частицы с той или иной ориентацией спина. Так как возможны только две ориентации, то в соответствии с условием нормировки (13.12) $|c_1|^2+|c_2|^2=1$.

13.4. Описание квантового состояния электрона с учетом его спина. Функция состояния электрона должна быть такой, чтобы с ее помощью можно было найти вероятность обнаружения частицы в данной точке с определенной ориентацией вектора спина. При этом следует учесть, что в общем случае движения в произвольных силовых полях направление спинового момента импульса зависит от положения микрочастицы в пространстве. Задать вероятность положения в пространстве и ориентацию спина можно, если квантовое состояние электрона описывать матрицей-столбцом:

$$\psi(x,\ y,\ z)=\begin{pmatrix}\psi_1(x,\ y,\ z)\\\psi_2(x,\ y,\ z)\end{pmatrix}. \tag{13.15}$$

Эта запись эквивалентна следующей:

$$\psi(x, y, z)=\psi_1(x, y, z)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+\psi_2(x, y, z)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

Теперь видно, что квадраты модулей составляющих ψ_1 и ψ_2 могут интерпретироваться как плотности вероятности для местоположения частицы при положительной или отрицательной проекции спина. На функцию состояния (13.15) накладывается условие нормировки:

$$\int \psi^+\psi dV=\int(\psi_1^*\psi_1+\psi_2^*\psi_2)\,dV=1. \qquad (13.16)$$

В некоторых задачах удобно вместо матрицы-столбца (13.15) использовать одну функцию

$$\psi=\psi(x, y, z, m_s), \qquad (13.17)$$

включив в число ее аргументов так называемую спиновую переменную m_s. Она принимает только два значения: $m_s=\pm\frac{1}{2}$. Очевидно, следует положить

$$\psi\left(x, y, z, \frac{1}{2}\right)=\psi_1(x, y, z),\ \psi\left(x, y, z, -\frac{1}{2}\right)=\psi_2(x, y, z).$$

Тем самым устанавливается физический смысл функции состояния (13.17).

Матрица (13.15) находится из решения релятивистского квантового уравнения Дирака (см. § 26). В нерелятивистском пределе для определения функции состояния (13.15) используется так называемое уравнение Паули. Мы не будем изучать эти уравнения, ограничиваясь вопросами, которые рассматриваются на базе уравнения Шредингера.

Это возможно в тех случаях, когда движение нерелятивистское и ориентация спина не зависит от положеиия электрона в пространстве. В таком случае функция состояния может быть представлена в виде произведения координатной и спиновой функций:

$$\Psi=\varphi(x, y, z)\,u=\varphi(x, y, z)\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix}. \qquad (13.18)$$

Сомножитель, зависящий от координат, находится из решения уравнения Шредингера. Это обычная волновая функция.

Из условия (13.16) следует условие нормировки функций состояиия (13.18):

$$(c_1^*c_1+c_2^*c_2)\int\varphi^*\varphi dV=1.$$

Состояние электрона со спином вверх описывается функцией

$$\Psi=\varphi(x, y, z)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},$$

а со спином вниз —

$$\Psi=\varphi(x,\ y,\ z)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

Оба случая могут быть охвачены одной формулой

$$\psi=\varphi(x,\ y,\ z)\,u\,(m_s),$$

откуда и следует, что квантовое число проекции спина m_s включается в набор квантовых чисел, задающих состояние электрона (так мы поступили ранее, в § 13, п. 2). Например, электрон в центрально-симметричном кулоновском поле описывается функцией (13.9)

$$\Psi_{nlmm_s}(r,\ \theta,\ \varphi)=R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\theta,\ \varphi)\,u\,(m_s).$$

При использоваиии этой функции состояния следует учитывать, что спиновые операторы действуют только на спииовую функцию $u\,(m_s)$, т. е. на один из сомножителей в выражении фуикции. В свою очередь операторы, действующие на пространственные переменные, ие затрагивают спиновой части фуикции состояния. Их следует примеиять только к сомножителям, зависящим от координат. Поэтому $\widehat{S}^2$ и $\widehat{S}_z$ коммутируют с операторами $\widehat{L}^2$, $\widehat{L}_z$ и гамильтонианом (10.14). Волиовая функция (13.17) для электрона в этом атоме водорода является собствениой функцией всех пяти операторов.

Методические указаиия и рекомендации

1. Задача об атоме водорода является для элементарного курса квантовой механики центральной; в процессе ее решения студенты знакомятся с решением научной проблемы, которое всего лишь полвека тому назад было достигнуто в результате работ гениальных ученых, определивших прогресс физической науки. Если многие вопросы из предыдущих глав требуют усвоения на уровне запоминания и применения (операторы, основные положения и т. д.), то здесь речь идет прежде всего о понимании и воспроизведении (при запоминании принципиальных конечных результатов).

Специфичен методический вопрос о выкладках при решении водородной задачи. Так как выполнить их подробно на лекциях невозможно — потеряется логическая нить главного,— то часть выкладки (например, все преобразования радиального уравнения до подстановки степенного ряда) желательно перенести на практические занятия.

При изучении орбитального магнитного момента атома мы ввели в курс соответствующий оператор, так как имеющее место в учебной литературе изложение вопроса на основе классической по существу модели электронного облака не исчерпывающе (см. пример 12.2).

Понятие о спине вводится в элементарном курсе с опорой на эксперимент как дополнительное положение к уравнению Шредингера. Изучение спина может быть выполнено без раскрытия вида его операторов и функций, но предусмотрена возможность и углубленного варианта (см. § 13, п. 3). В любом случае разъяснение единства математического описания моментов импульса используется, т. е. свойства орбитальных моментов переносятся на спиновые.

По спину уместно проведение семинарского занятия с выступлениями студентов.