

Глава 6

36. Спин электрона

Экспериментальные основания введения понятия СПИН

36.1. Опыты Штерна и Герлаха

Рассматриваемые опыты были поставлены в 1921 году. Полуклассическая теория Н.Бора не могла объяснить наблюдаемое явление. Рассмотрим схематически физику того, что обнаружили Штерн и Герлах.

Из длинной трубки тщательно откачивался воздух и затем внутренняя полость заполнялась атомарным газом, например водородом. Через ряд параллельных узких диафрагм атомы газа в виде тонкого пучка попадали в сильное, резко неоднородное магнитное поле, создаваемое особой формы наконечниками магнита (см.рис.10). Пройдя это поле, атомы оседали на пластинку и фиксировались на ней. После прохождения неоднородного магнитного поля пучок атомарного водорода разделялся на две симметрично расположенные составляющие: одна из них смещалась вверх (см.рис.10), другая – вниз относительно неотклоненного следа пучка.

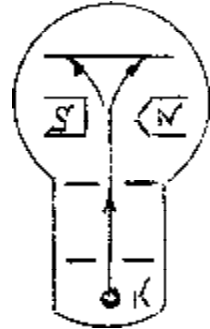


Рис. 10.

Согласно теории Н.Бора электрон в атоме водорода находится в нормальном $1s$ состоянии. Это означает, что орбитальное квантовое число $l=0$, но тогда и магнитное квантовое число $m=0$. Следовательно атом водорода не должен был реагировать на внешнее неоднородное магнитное поле. Наблюдаемое расщепление атомарного пучка не связано с орбитальным движением электрона атома водорода.

Для объяснения результатов опытов Штерна и Герлаха пришлось предположить, что сам электрон обладает магнитным моментом, который не связан с орбитальным движением. В этом случае на собственный магнитный момент электрона в неоднородном магнитном поле будет действовать сила, направленная вдоль градиента магнитного поля :

$$F_z = m_z \frac{\partial H}{\partial z},$$

где первый множитель – это проекция собственного магнитного момента

электрона на направление градиента внешнего неоднородного магнитного поля (на рис.10 градиент направлен вдоль оси Oz). То, что исходный пучок водородных атомов расщепился на две части, свидетельствовало о том, что собственный магнитный момент электрона может иметь лишь две проекции $\pm m_e$. Измерив градиент внешнего магнитного поля и отклонение пучка от первоначального направления, можно было определить величину собственного магнитного момента электрона. Он оказался равным одному магнетону Бора $\frac{eh}{2m_e}$. Ранее, рассматривая орбитальное движение электрона в атоме, было показано, что между механическим и магнитным орбитальными моментами существует связь, определяемая гиромангнитным числом. Обнаружив у электрона собственный магнитный момент, ученые поступили логично, сопоставив ему собственный механический момент, который кратко называли СПИНОМ. Будущее развитие физики показало, что у любой элементарной частицы есть собственный механический момент - спин, и связанный с ним собственный магнитный момент. Очень часто, рассматривая поведение элементарной частицы во внешнем магнитном поле, говорят об ориентации ее спина. Это верно, если иметь ввиду, что магнитное поле непосредственно действует на собственный (будем его называть спиновым) магнитный момент частицы, а спин (собственный механический момент) непосредственно действие магнитного поля не испытывает. Мы отмечаем не столько терминологический момент, сколько правильное физическое словоупотребление (грамотность речи отражает понимание физики).

36.2. Дублетная структура спектров паров щелочных металлов

Спектральные линии щелочных металлов, имеющих всего один оптический электрон, оказываются более сложными, чем это определяется полуклассической теорией Н.Бора при рассмотрении движения электрона в поле центральной симметрии. Например, у атомов натрия вместо одной спектральной линии, соответствующей переходу $2p-1s$, наблюдается расщепление ее на две близко расположенные линии, наблюдается так называемый ду блет. Это можно было бы объяснить, если предположить, что p - терм атома натрия состоит из двух близко расположенных подуровней. Подобная структура обнаруживается в спектрах других атомов и получила название мультиплетной структуры спектров.

Напомним, что по теории Н. Бора, ближайшее к основному состоянию атома, например, натрия является состояние, символическое обозначение которого будет $2p$. При этом орбитальное квантовое число $l=1$, соответственно магнитное квантовое число (речь идет об орбитальном движении электрона и его квантовых характеристиках) $m=-1,0,+1$. А это означает, что состояние $2p$ трижды вырождено по магнитному квантовому числу. Во внешнем магнитном поле вырождение снимается (эффект Зеемана) и в спектре должна появиться тройная спектральная линия.

Однако дублетная структура линий щелочных металлов наблюдается и в отсутствии внешнего магнитного поля.

Для объяснения дублетной структуры спектров щелочных металлов естественно привлечь введенный выше спиновый (собственный) магнитный момент, который может иметь лишь две ориентации относительно какого-либо выделенного направления, что приводит к двум состояниям с несколько различной энергией. Поэтому энергетическое состояние электрона, возбужденного в $2p$ состояние уже дважды вырождено из-за наличия спинового магнитного момента. Переход атома из возбужденного $2p$ состояния в основное $1s$ состояние приводит к появлению двух близко расположенных спектральных линий – к возникновению мультиплетной структуры. Известно, что всякое изменение энергетического состояния связано с взаимодействием. В данном случае речь идет о так называемом спин-орбитальном взаимодействии – о взаимодействии спинового магнитного момента с орбитальным магнитным моментом электрона, что и вызывает дублетное расщепление.

36. 3. Опыты Эйнштейна и де-Гааза

В опытах данных ученых ферромагнитный стержень подвешивался на упругой нити. При изменении направления внешнего магнитного поля вдоль оси цилиндра, изменялось и направление намагничения стержня, то есть изменялся магнитный момент стержня. Но магнитный момент пропорционален механическому моменту. И стержень приходил во вращение, закручивая нить подвеса. При установлении равновесия из равенства крутящего момента и момента закрученной нити, можно было установить гиромагнитное число. Как и должно быть, гиромагнитное число оказалось отрицательным (из-за знака заряда электрона), но в два раза больше чем орбитальное гиромагнитное число. Из опыта следовало, что намагничение ферромагнетика обусловлено электронами, но, очевидно, не связано с их орбитальным движением. Введение спинового магнитного момента дало объяснение и этим историческим опытам.

Итак, для электрона и других элементарных частиц следует ввести новые физические характеристики – их собственные механический (спин) и магнитный моменты, характеризующие их как физические объекты, независимо от того, входят они в более сложные образования или свободны. В рассматриваемой нами нерелятивистской квантовой механике СПИН (и связанный с ним спиновый магнитный момент) вводится как постулат. И только в квантовой электродинамике, соединяющей квантовую механику и специальную теорию относительности, спин появляется естественно. Для иллюстрации можно привести такой пример: в теории Н.Бора квантование состояний электрона в атоме вводится как постулат, в рассматриваемой нами квантовой механике (это было показано при решении задачи о движении частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме) квантование появляется как следствие корпускулярно-волнового дуализма элементарных частиц. Авторами идеи о том, что у электрона есть собственный механический момент-спин, были американские физики Уленбек и Гаудсмит (1925г.), только после этого все рассмотренные нами опыты получили объяснение с единых позиций.

Остановимся на чрезвычайно важном моменте. Как представить себе то, что электрон обладает собственным механическим моментом? Орбитальный механический момент мы представляем как характеристику движения электрона в атоме вокруг ядра. Возникает желание и спин рассматривать как характеристику собственного вращения электрона. Но тогда электрон нужно рассматривать как шарик. Но почему этот “шарик” не взрывается, ведь он заряжен одноименным электричеством? Простые расчеты показывают, что такая “наглядная” модель физически несостоятельна. Действительно, воспользуемся формулой Н.Бора для квантования момента количества движения :

$$mVr = nh,$$

где r - радиус электрона-шарика, V - линейная скорость электрона на его поверхности.

Пусть квантовое число $n = 1$, тогда из приведенной формулы следует, что скорость $V = 1,46 \cdot 10^{12}$ м/с, что противоречит второму постулату специальной теории относительности. Квантовая механика рассматривает электрон как физический объект, который обладает корпускулярно-волновым дуализмом. Никакой наглядной модели для электрона (и других элементарных частиц) квантовая механика не предлагает. Поэтому физически безграмотно толковать электрон как шарик. Отсюда непосредственно следует, что спин – это чисто квантовая характеристика, определяющая внутреннее состояние элементарной частицы.

37. Оператор спина и его волновые функции

В соответствии с общими принципами квантовой механики собственному механическому моменту электрона – спину – должен сопоставляться линейный самосопряженный оператор, не являющийся функцией ни координат, ни проекций импульса. По Гаудсмитцу и Юленбеку проекция спина (а он является вектором) на какое либо направление квантуется и равна $\pm \frac{1}{2} \hbar$. Рассмотренные ранее эксперименты это подтверждают.

Оператор спина обозначается так : \hat{S} , соответственно его проекции : $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$. Эти операторы удовлетворяют тем же перестановочным соотношениям, что и проекции оператора момента импульса, т.е.

$$\hat{S}_x \hat{S}_y - \hat{S}_y \hat{S}_x = i \hbar \hat{S}_z.$$

Аналогично составляются и два других перестановочных соотношения. Так как проекции оператора спина не коммутируют, то независимой величиной может служить лишь одна из них, обычно выбирают проекцию на ось Oz .

Согласно гипотезе о спине, проекция спина на ось Oz соответствует проекция спинового магнитного момента. Используя гиромагнитное соотношение, можем написать :

$$m_z = - \frac{m_o e}{m_e} s_z.$$

Поэтому наряду с оператором спина вводится оператор спинового магнитного момента:

$$\hat{m}_s = - \frac{m_o e}{m_e} \hat{S}.$$

Обладая магнитным моментом, электрон во внешнем магнитном поле индукции \hat{B} , приобретает энергию:

$$u_s = - \left(\hat{m}_s \hat{B} \right).$$

Поэтому гамильтониан электрона с учетом спина имеет вид :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} \hat{p}^2 + U - \frac{\mu_o e}{m_e} (\hat{S} \hat{B}).$$

В этой формуле учтено лишь взаимодействие спина (спинового магнитного момента) с внешним полем. Мы пренебрегаем при этом так называемыми спин-орбитальным и спин-спиновым взаимодействиями.

Оператор спина, который не имеет классического аналога, нельзя построить, используя соответствующие классические выражения. Однако, мы знаем собственные значения проекции спина на какое-либо направление, например, на ось Oz. Их всего два:

$$s_{z1} = \frac{1}{2}\mathbf{h}, \quad s_{z2} = -\frac{1}{2}\mathbf{h}.$$

С другой стороны, в своем собственном представлении матрица оператора диагональна и на главной диагонали расположены собственные значения оператора. Поэтому матрица оператора \mathfrak{E}_z в его собственном представлении будет иметь следующий вид:

$$\mathfrak{E}_z = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\mathbf{h} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\mathbf{h} \end{pmatrix}$$

Выше отмечалось, что операторы \mathfrak{E}_x и \mathfrak{E}_y не коммутируют как между собой, так и с оператором \mathfrak{E}_z , поэтому они не могут иметь диагональный вид в одном и том же представлении. Но используя записанные выше перестановочные соотношения для этих компонент оператора спина, можно получить их представления в представлении оператора \mathfrak{E}_z :

$$\mathfrak{E}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \frac{\mathbf{h}}{2}, \quad \mathfrak{E}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{\mathbf{h}}{2}.$$

Используя правило умножения матриц, можно составить квадраты этих проекций оператора спина. И составляя сумму этих квадратов, то есть составляя квадрат оператора спина в s_z -представлении, получаем:

$$\mathfrak{E}^2 = \mathfrak{E}_x^2 + \mathfrak{E}_y^2 + \mathfrak{E}_z^2 = \frac{\mathbf{h}^2}{4} \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\} = \frac{3}{4}\mathbf{h}^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Полученный результат означает, что оператор \mathfrak{E}^2 в s_z -представлении и сам оператор \mathfrak{E}_z в своем представлении – диагональны, а потому

коммутируют между собой, следовательно, собственные значения этих операторов могут иметь одновременно точные значения.

Оператор \hat{S}_z имеет два собственных значения, им соответствуют две собственные функции. Обозначим собственную функцию этого оператора, соответствующую собственному значению $s_z = \frac{1}{2}\hbar$ через $S_{\frac{1}{2}}$, соответственно вторая собственная функция будет $S_{-\frac{1}{2}}$. Индексы будем называть спиновыми квантовыми числами, т.е. спиновое квантовое число принимает два дискретных значения $\pm \frac{1}{2}$. Такой выбор спиновых квантовых функций удовлетворяет требованию: если электрон имеет проекцию спина $s_z = \frac{1}{2}\hbar$, то вероятность обнаружения при измерении другого значения проекции спина (т.е. $s_z = -\frac{1}{2}\hbar$) равна нулю.

Поскольку спиновые функции позволяют определять вероятность величины проекции спина, то в качестве их аргументов можно взять эти возможные значения. Исходя из содержания предыдущего абзаца, можно записать:

$$S_{\frac{1}{2}}(-\frac{1}{2}\hbar) = 0, \quad S_{-\frac{1}{2}}(\frac{1}{2}\hbar) = 0.$$

Очевидно, что

$$S_{\frac{1}{2}}(\frac{1}{2}\hbar) = 1, \quad S_{-\frac{1}{2}}(-\frac{1}{2}\hbar) = 1.$$

Убедимся, что построенные спиновые функции ортонормированы. Условие нормировки запишется так:

$$\left| S_{\frac{1}{2}}(\frac{1}{2}\hbar) \right|^2 + \left| S_{-\frac{1}{2}}(-\frac{1}{2}\hbar) \right|^2 = 1,$$

а условие ортогональности:

$$S_{\frac{1}{2}}(\frac{1}{2}\hbar) S_{-\frac{1}{2}}(\frac{1}{2}\hbar) + S_{-\frac{1}{2}}(-\frac{1}{2}\hbar) S_{\frac{1}{2}}(-\frac{1}{2}\hbar) = 0.$$

При составлении этих выражений учитывались как дискретные значения проекций спина, так и дискретное число спиновых волновых функций.

38. Полный момент импульса

По определению, спин является характеристикой внутреннего состояния элементарной частицы, по размерности совпадающим с механическим моментом. Если, например электрон, входит в состав атома, то помимо спина, его состояние в атоме определяется орбитальным механическим моментом, поэтому для описания состояния электрона в атоме можно ввести полный момент, оператор которого, с учетом векторного характера его составляющих, запишется так: $\hat{I} = \hat{L} + \hat{S}$.

Операторы \hat{L} и \hat{S} коммутируют, так как они действуют на разные переменные, поэтому можно одновременно знать точные значения соответствующих собственных значений. Естественно ожидать, что оператор \hat{I} , как и его составляющие, имеет собственные значения, которые определяются формулой:

$$I^2 = \hbar^2 j(j+1),$$

где $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$

Аналогично, проекция полного момента электрона в атоме на одну из осей, например ось Oz, равна:

$$I_z = \hbar m_j,$$

где $m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots, \pm j$. При этом квантовое число j составляется в интервале от $j = l + s_z$ до $j = |l - s_z|$, где l - орбитальное, а s_z - спиновое квантовые числа.

39. Волновая функция электрона в атоме с учетом спина

После введения спина, состояние электрона в атоме должно определяться четырьмя квантовыми числами: главным квантовым числом - n , орбитальным квантовым числом - l , магнитным квантовым числом - m , спиновым квантовым числом - s_z .

Однако, эта четверка квантовых чисел правильно отражает состояние электрона в атоме лишь в том случае, когда физические вели-

чины, сопоставляемые этим числам, не изменяются во времени. В случае, когда оператор Гамильтона \hat{H} не содержит оператора спина, волновую функцию частицы можно представить в виде произведения двух функций:

$$\Psi(xyzts_z) = Y(xyz)S_{s_z}(s_z \mathbf{h}).$$

Подставляя эту волновую функцию в уравнение Шредингера, мы получим и для функции Y точно такое же уравнение, сократив обе стороны уравнения на спиновую волновую функцию.

Но в сложных атомах при прочих равных условиях разным значениями спина соответствуют разные энергетические состояния. Может быть, что переход по квантовым числам n, l, m разрешен, но запрещен по спиновому квантовому числу s_z - это так называемый интеркомбинационный запрет, обусловленный ортонормированностью спиновых функций. Если же волновую функцию нельзя представить в виде произведения координатной и спиновой волновых функций, то интеркомбинационный запрет нарушается. Это происходит при сильных спиновых взаимодействиях в многоэлектронных атомах и молекулах.

40. Векторная модель атома

Между орбитальным и спиновым магнитными моментами возникает так называемое спин-орбитальное взаимодействие. Рассмотрим это взаимодействие качественно, используя наглядную векторную модель атома (см. рис.11).

Как было показано выше, полный механический момент электрона в атоме равен:

$$\mathbf{I} = \mathbf{L} + \mathbf{s}.$$

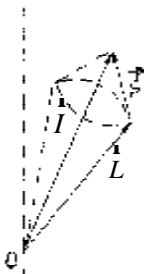


Рис. 11.

Векторы \mathbf{L} и \mathbf{s} связаны через посредство их магнитных моментов, поэтому они будут прецессировать относительно результирующего механического момента \mathbf{I} подобно двум связанным механическим гироскопам, прецессирующих вокруг их полного момента количества движения. Учтем, однако, квантовый характер электронных моментов, что проявляется, во-первых, в том, что между векторами \mathbf{L} и \mathbf{s} могут быть только определенные углы, определяемые пространственным квантованием этих векторов. На-

пример, вектор \hat{L} должен так располагаться относительно некоторого направления, чтобы проекция вектора на это направление квантовалась - $m\hbar$. Соответственно сказанное относится и к проекциям вектора спина на то же направление. Тем самым угол между векторами \hat{L} и \hat{S} может принимать лишь ряд избранных значений. Во-вторых, полный момент импульса также имеет дискретный набор значений:

$$|I| = \sqrt{j(j+1)} \hbar,$$

где $j = l \pm s_z$. Проекция вектора \hat{I} на избранное направление (например, на ось Oz) также принимает лишь ряд дискретных значений:

$$I_z = m_j \hbar,$$

где квантовое число m_j может принимать $2j+1$ значений от $+j$ до $-j$.

Несмотря на кажущуюся простоту модели, векторная модель позволяет объяснить многие детали сложных случаев расщепления спектральных линий, особенно в магнитном поле (сложный эффект Зеемана), причем, получается хорошее совпадение с экспериментом.

41. Эффекты Зеемана

Полная энергия атома, помещенного во внешнее магнитное поле, состоит из двух частей : из внутренней энергии атома, и из энергии взаимодействия магнитного момента атома с внешним магнитным полем .Величина последней , естественно, зависит как от величины внешнего магнитного поля, так и от ориентации и величины магнитного момента атома. Возможны два варианта .Либо преобладает спин-орбитальное взаимодействие, связь между орбитальным и спиновым магнитными моментами не разрывается, т.е. осуществляется Рассел-Саундеровская связь, с внешним магнитным полем взаимодействует полный магнитный момент атома, который прецессирует вокруг направления внешнего магнитного поля. Если же связь между орбитальным и спиновым магнитными моментами разрывается под воздействием внешнего магнитного поля, то они по отдельности взаимодействуют с внешним магнитным полем. Этот случай получил название эффекта Пашена-Бака.

Рассмотрим расщепление энергетических уровней атома, помещенного во внешнее магнитное поле, в случае осуществления Рассел-Саундеровской связи. При данном квантовом числе j полного магнитного момента атома возможно $2j+1$ ориентаций его по отношению к направлению внеш-

него магнитного поля. Каждой ориентации соответствует своя энергия взаимодействия полного магнитного момента атома с внешним магнитным полем. Следовательно, энергетический уровень атома, помещенного во внешнее магнитное поле, должен расщепиться на $2j+1$ подуровней.

Рассмотрим случай Рассел-Саундерсовской связи, когда связь между орбитальным и спиновыми магнитными моментами не разрывается под влиянием внешнего магнитного поля. Поэтому расщепление на $2j+1$ подуровней оказывается менее существенным, чем естественное (без влияния внешнего магнитного поля) мультиплетное расщепление уровней, определяемое спин-орбитальным взаимодействием (см. рис. 12).

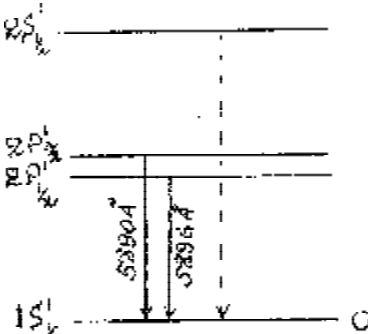


Рис. 12

В качестве примера рассмотрим расщепление уровней атома натрия, приводящее к возникновению главной серии.

Энергетический уровень ${}^2P_{3/2}$ расщепится на четыре подуровня, соответственно четырем возможным ориентациям полного магнитного момента относительно ориентации внешнего магнитного поля:

$$m_j = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}.$$

Энергетические уровни ${}^2P_{1/2}$ и ${}^2S_{1/2}$ с квантовым числом

полного магнитного момента $j = \frac{1}{2}$ расщепляются на два подуровня каждый, которые соответствуют двум возможным ориентациям полного магнитного момента относительно внешнего магнитного поля: $m_j = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$.

Чтобы найти линии излучения, необходимо с помощью правил отбора найти возможные переходы:

1. $\Delta l = \pm 1$, 2. $\Delta j = 0, \pm 1$. 3. $\Delta m_j = 0, \pm 1$. 4. $\Delta s = 0$.

На рис. 12 видно, что всего возможно 10 различных переходов, поэтому во внешнем магнитном поле каждый дублет главной серии излучения атома натрия расщепится на 10 линий. Исторически такое расщепление получило название *аномального эффекта Зеемана*.

Далее кратко рассмотрим такой эффект Зеемана, который получил название *нормального эффекта*. Упростим задачу и предположим, что полный спиновый момент атома равен нулю. В этом случае суммарный механический момент атома совпадает с его суммарным орбитальным моментом: $J=L$. В этом случае каждая линия излучения расщепляется на три линии. Очевидно, что нормальный эффект Зеемана является частным случаем аномального эффекта.

В сильном магнитном поле происходит разрыв спин-орбитального взаимодействия. И орбитальный и спиновый магнитные моменты независимо друг от друга взаимодействуют с внешним магнитным полем. В результате линии излучения расщепляются на три линии с величиной расщепления ν_L , равной нормальному зеемановскому расщеплению. Т.е. наблюдается нормальный эффект Зеемана, но в литературе он получил название эффекта Пашена-Бака: в сильном магнитном поле аномальный эффект превращается в нормальный.