

24 Spin i efekty relatywistyczne

24.1 Doświadczenie Sterna Gerlacha

Zauważmy, że klasycznie na moment magnetyczny $\vec{\mu}$ w stałym polu magnetycznym \vec{B} działa *moment* siły

$$\vec{N} = \vec{\mu} \times \vec{B}. \quad (24.1)$$

Efektom tego oddziaływania jest obracanie się momentu magnetycznego, aż będzie on równoległy do \vec{B} . Wniosek ten także widać ze wzoru na energię oddziaływania

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}, \quad (24.2)$$

która jest najmniejsza w konfiguracji $\vec{\mu} \parallel \vec{B}$. Jeśli zatem przepuszczać wiązkę momentów magnetycznych przez stałe pole, to wiązka ta przeorientuje kierunek momentów magnetycznych, ale się nie odchyli.

Inaczej rzecz się ma w niejednorodnym polu \vec{B} , gdyż w tym przypadku pojawia się siła, a nie tylko moment siły. Rzeczywiście, wyliczając siłę jako minus gradient energii oddziaływania (energii potencjalnej) i korzystając z tożsamości

$$\vec{\nabla} (\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = (\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}) \vec{B} + (\vec{B} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\mu} + \vec{\mu} \times (\vec{\nabla} \times \vec{B}) + \vec{B} \times (\vec{\nabla} \times \vec{\mu}) \quad (24.3)$$

otrzymujemy

$$\vec{F} = -\vec{\nabla} E = (\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}) \vec{B}, \quad (24.4)$$

ponieważ rotacja z \vec{B} znika, a $\vec{\mu}$ jest stałe. Jeśli przygotować układ doświadczalny w taki sposób, żeby niejednorodne pole \vec{B} było równoległe do osi z to

$$\vec{F} = \mu_z \frac{\partial B}{\partial z} \hat{z}, \quad (24.5)$$

gdzie \hat{z} jest wersorem skierowanym wzdłuż osi z . Zatem wiązka momentów magnetycznych przechodzących przez takie pole będzie się odchyłać w górę lub w dół osi z w zależności od znaku składowej μ_z .

W roku 1922 Stern i Gerlach przeprowadzili eksperyment, w którym przez niejednorodne pole magnetyczne skierowane wzdłuż osi z przepuszczali atomy srebra, które mają zapełnione wszystkie powłoki elektronowe, za wyjątkiem ostatniej, najbardziej zewnętrznej, na której znajduje się elektron w stanie s , czyli o $l = 0$. Atom taki, nie powinien mieć momentu magnetycznego, a jednak wynik doświadczenia wskazywał, że przepuszczane atomy miały moment magnetyczny równy $\pm\mu_B$. Wynik ten zinterpretowano postulując, że elektron posiada *wewnętrzny moment pędu* nazwany *spinem* o wartości $1/2$. Ta interpretacja sformułowana została w 1925 roku przez Goudsmita i Uhlenbecka. Podobny efekt uzyskalibyśmy przepuszczając przez niejednorodne pole magnetyczne atom wodoru w stanie podstawowym.

Dziś wiemy, że spin w sposób naturalny pojawia się w relatywistycznym równaniu falowym, czyli w równaniu Diraka. Jednakże przed sformułowaniem równania Diraka wprowadzone przez Goudsmita i Uhlenbecka pojęcie spinu budziło opory, tym bardziej, że wiąże się z nim pewien problem. Ponieważ spin $s = 1/2$ moment magnetyczny elektronu powinien wynosić $\pm\mu_B/2$ (przypomnijmy, że klasycznie $\vec{\mu} = -\mu_B\vec{L}$), gdy tymczasem doświadczenie wskazywało na wartość $\pm\mu_B$. Paradoks ten wyjaśnia także równanie Diraka, które przewiduje, że dla cząstki o spinie $1/2$ oddziaływanie z polem magnetycznym przyjmuje postać

$$\hat{H}' = g_s\mu_B\frac{1}{\hbar}\hat{S}\cdot\vec{B}, \quad (24.6)$$

gdzie \hat{S} jest operatorem spinu (operator spinu jest wektorem – dla uproszczenia zapisu opuściliśmy strzałkę), a $g_s \approx 2$ nazywa się spinowym czynnikiem giromagnetycznym.

24.2 Efekt Zeemana z uwzględnieniem spinu - silne pola

Przypomnijmy sobie, że rozważając kwantyzację operatorów \hat{J}_i , zauważyliśmy, że dopuszczalne wartości j są zarówno całkowite, jak i połówkowe. Korzystając ze wzorów na działanie operatorów \hat{J}_\pm i \hat{J}_z możemy łatwo wyliczyć postać reprezentacji macierzowej dla $j = 1/2$ (w dalszym ciągu operatory spinu o $j = 1/2$ będziemy oznaczać \hat{S}):

$$\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i \quad (24.7)$$

gdzie σ_i to macierze Pauliego

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (24.8)$$

W tej bazie stany spinowe $|s, s_3\rangle$ mają postać dwuwymiarowych wektorów zwanych spinorami

$$\left|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle = \chi_+ = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \chi_- = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (24.9)$$

Wprowadźmy notację

$$\chi_\pm(s_3) = \begin{cases} \begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} & \text{dla } s_3 = +\frac{1}{2} \\ \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases} & \text{dla } s_3 = -\frac{1}{2} \end{cases}. \quad (24.10)$$

Pełna funkcja falowa z uwzględnieniem spinu będzie miała więc postać

$$\Psi_{\alpha s_3}(\vec{r}, t) = \psi_{\alpha+}(\vec{r}, t) \times \chi_+(s_3) + \psi_{\alpha-}(\vec{r}, t) \times \chi_-(s_3) = \begin{bmatrix} \psi_{\alpha+}(\vec{r}, t) \\ \psi_{\alpha-}(\vec{r}, t) \end{bmatrix}, \quad (24.11)$$

gdzie α oznacza zbiór wszystkich liczb kwantowych poza spinem. Na przykład w przypadku atomu wodoru $\alpha = (n, l, m)$. Norma takiej funkcji rozбивa się na dwa człony

$$\int d^3\vec{r} |\Psi_{\alpha s_3}(\vec{r}, t)|^2 = \int d^3\vec{r} |\psi_{\alpha+}(\vec{r}, t)|^2 + \int d^3\vec{r} |\psi_{\alpha-}(\vec{r}, t)|^2. \quad (24.12)$$

Interpretacja obu składowych jest jasna: $|\psi_{\alpha+}|^2$ jest gęstością prawdopodobieństwa, że układ w stanie $|\alpha\rangle$ ma spin „do góry”, a $|\psi_{\alpha-}|^2$, że „na dół”.

Dyskutowany przez nas Hamiltonian opisujący atom wodoru nie zależał od spinu elektronu. W tym przypadku funkcje

$$\psi_{lm+}^n(\vec{r}, t) \text{ oraz } \psi_{lm-}^n(\vec{r}, t) \quad (24.13)$$

są identyczne, a energia nie zależy od s_3 . Pojawia się więc dodatkowa degeneracja ze względu na rzut spinu na oś z .

Sytuacja się zmienia, gdy atom włożymy w pole magnetyczne \vec{B} . Wówczas Hamiltonian oddziaływania z polem ma postać

$$H' = \mu_B \frac{1}{\hbar} \vec{B} \cdot (\hat{L} + g_s \hat{S}). \quad (24.14)$$

Stany atomu wodoru mają teraz dodatkowy indeks od spinowej liczby kwantowej s_3 (zauważmy, że ponieważ $s = 1/2$ i jest ustalone, więc możemy pominąć go w oznaczeniach)

$$|n, l, m\rangle \rightarrow |n, l, m, s_3\rangle. \quad (24.15)$$

Stąd

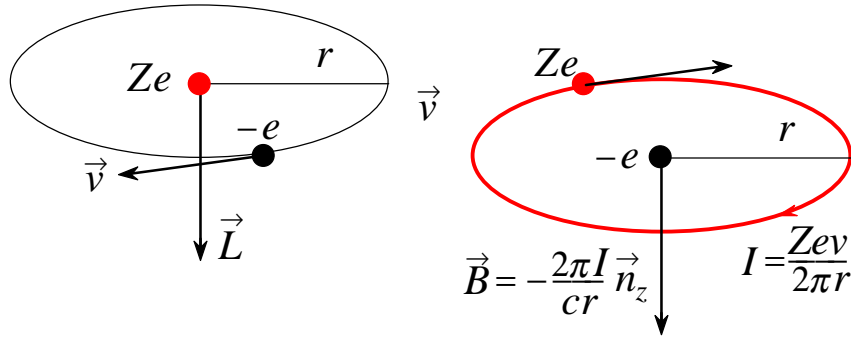
$$\Delta E = \langle n, l, m, s_3 | \hat{H}' | n, l, m, s_3 \rangle = \mu_B (m + g_s s_3) B. \quad (24.16)$$

Jednakże przyjęte przez nas założenie, że Hamiltonian dla atomu wodoru nie zależy od spinu elektronu jest przybliżeniem. W istocie moment magnetyczny elektronu podlega dwojakiemu oddziaływaniu. Po pierwsze, ponieważ elektron się porusza, to jak już mówiliśmy, pojawia się prąd, który generuje orbitalny moment magnetyczny $\vec{\mu} = -\mu_B \vec{L}/\hbar$, który oddziałuje ze spinowym momentem magnetycznym $-g_s \mu_B \vec{S}/\hbar$. Efekt ten nosi nazwę oddziaływania spin-orbita, a generowane przez nie rozszczepienia poziomów energetycznych noszą nazwę *struktury subtelnej* (są one rzędy wielkości mniejsze od odległości między poziomami niezaburzonymi). Drugi efekt to oddziaływanie z momentem magnetycznym jądra. Spowodowane przez to oddziaływanie rozszczepienie poziomów energetycznych nosi nazwę struktury *nadsubtelnej*.

24.3 Oddziaływanie spin-orbita

Hamiltonian oddziaływania spinowego momentu magnetycznego z wewnętrznym polem magnetycznym atomu wyprowadza się ściśle z równania Diraka. Tu podamy proste wyprowadzenie klasyczne. Przejdźmy do układu, w którym elektron spoczywa, a jądro porusza się po orbicie kołowej, tak jak na rysunku ???. Układ taki możemy potraktować jako pętlę z prądem $I = Zev/2\pi r$. W środku pętli mamy do czynienia z polem magnetycznym \vec{B} skierowanym wzdłuż osi z

$$\vec{B} = -\frac{2\pi I}{cr} \vec{n}_z. \quad (24.17)$$



Rysunek 1: Pole magnetyczne od jądra poruszającego się po orbicie kołowej.

Podstawiając wartość prądu I otrzymujemy

$$\vec{B} = -\frac{Zev}{cr^2} \vec{n}_z = -\frac{Ze}{m_e cr^3} m_e v r \vec{n}_z = \frac{Ze}{m_e cr^3} \vec{L}, \quad (24.18)$$

gdzie w ostatnim przekształceniu wykorzystaliśmy fakt, że moment pędu \vec{L} skierowany jest równoległe do pola \vec{B} .

Zauważmy, że

$$\frac{Ze}{m_e cr^3} = -\frac{1}{m_e cr} \frac{dV}{dr}, \quad (24.19)$$

gdzie V jest potencjałem elektrostatycznym, w którym porusza się elektron

$$V = \frac{Ze}{r}. \quad (24.20)$$

Zatem ostatecznie mamy

$$\vec{B} = -\frac{\hbar}{m_e cr} \frac{dV}{dr} \frac{1}{\hbar} \vec{L}. \quad (24.21)$$

Kwantowo, oddziaływanie spinu polem \vec{B} powinno mieć postać

$$-\vec{\mu} \cdot \vec{B} = g_s \mu_B \frac{1}{\hbar} \hat{S} \cdot \vec{B} = -g_s \frac{e\hbar^2}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \frac{1}{\hbar^2} \hat{L} \cdot \hat{S},$$

gdzie

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \quad (24.22)$$

Okazuje się, że w tym przypadku musimy przyjąć $g_s = 1$, a nie 2 jak w przypadku oddziaływania z zewnętrznym polem magnetycznym. Na pierwszy rzut oka załamuje się tu analogia z mechaniką klasyczną (choć musimy jeszcze przetransformować nasz wynik z powrotem do układu spoczynkowego jądra, pojawia się tu dodatkowo precesja, która

redukuje czynnik 2 do 1), a dokładny wynik z równania Diraka potwierdza, że Hamiltonian oddziaływania *spin-orbita* ma postać

$$H_{\text{SO}} = \frac{Ze^2\hbar^2}{2m_e^2c^2} \frac{1}{r^3} \frac{1}{\hbar^2} \hat{L} \cdot \hat{S}. \quad (24.23)$$

Nie będziemy tu wyliczać numerycznie poprawki od (??), lecz tylko pokażemy, jak wpływa ona na widmo atomu wodoru. Dokładne wyniki numeryczne otrzymuje się bezpośrednio z równania Diraka, podczas gdy (??) jest tylko przybliżeniem.

Zauważmy, że zaburzenie (??) nie jest diagonalne w stanach $|n, l, m, s_3\rangle$ gdyż ani \hat{L}_3 ani \hat{S}_3 nie komutują z $\hat{L} \cdot \hat{S}$. Łatwo przekonać się, że całkowity moment pędu $\hat{J}_i = \hat{L}_i + \hat{S}_i$ komutuje z $\hat{L} \cdot \hat{S}$. Zatem zaburzenie H_{SO} będzie diagonalne w bazie całkowitego momentu pędu:

$$|n(s, l)j, j_3\rangle = \sum_{m+s_3=j_3} \begin{pmatrix} l & s = 1/2 \\ m & s_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j \\ j_3 \end{pmatrix} |n, l, m\rangle |s = \frac{1}{2}, s_3\rangle, \quad (24.24)$$

gdzie jawnie zaznaczyliśmy, że stany własne całkowitego momentu pędu \hat{J} są równocześnie stanami \hat{L}^2 i \hat{S}^2 . Ponieważ

$$\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + 2\hat{L} \cdot \hat{S} + \hat{S}^2 \quad (24.25)$$

otrzymujemy

$$\hat{L} \cdot \hat{S} = \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) \quad (24.26)$$

co w bazie (??) wynosi

$$\hat{L} \cdot \hat{S} = \hbar^2 \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2}. \quad (24.27)$$

Dla dokładnego wzoru z równania Diraka rozszczepienie subtelne przyjmuje nieco inną postać gdyż energia zależy tylko od j . Widzimy zatem, że poziomy o różnym j rozszczepiają się. Na przykład dla $n = 2$ stany o $l = 0$ i $l = 1$ były zdegenerowane. Teraz stan o $l = 0$ ma $j = 1/2$ natomiast stan o $l = 1$ może mieć $j = 1/2$ lub $3/2$. Stany te będziemy oznaczać nl_s czyli odpowiednio: $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ oraz $2p_{3/2}$. Stany $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ pozostają zdegenerowane a stan $2p_{3/2}$ ma energię nieco wyższą. Numerycznie

$$\Delta E_{\text{SO}} = E_{j=3/2} - E_{j=1/2} = 0,365 \text{ cm}^{-1} \simeq 5 \times 10^{-5} \text{ eV} \quad (24.28)$$

gdzie

$$1 \text{ eV} \approx 8 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}. \quad (24.29)$$

Widzimy, że rozszczepienie subtelne jest 5 rzędów (!) wielkości mniejsze niż różnice energii między poziomami o różnych n .

24.4 Efekt Zeemana z uwzględnieniem spinu - słabe pola

Widzimy teraz jasno, że jeżeli zewnętrzne pole \vec{B} jest słabe (tzn. porównywalne z polem magnetycznym wewnątrz atomu), to zarówno efekt Zeemana jak i oddziaływanie spin-orbita muszą być rozważane jednocześnie. W przypadku silnych pól oddziaływanie spin-orbita możemy pominąć i stosuje się wzór (??).

Dla słabych pól musimy przejść do bazy (??) i w tej bazie wyliczyć

$$\langle n(s, l) j, j_3 | \hat{L} + 2\hat{S} | n(s, l) j, j_3 \rangle, \quad (24.30)$$

gdzie za g_s przyjęliśmy 2. Rozpiszmy

$$\hat{O} = \hat{L} + 2\hat{S} = \hat{J} + \hat{S}. \quad (24.31)$$

Mnożąc \hat{O} przez \hat{J} otrzymujemy (w bazie (??))

$$\frac{1}{j(j+1)\hbar^2} \hat{J} \cdot \hat{O} = 1 + \frac{\hat{J} \cdot \hat{S}}{j(j+1)\hbar^2}. \quad (24.32)$$

Z kolei

$$\hat{L}^2 = (\hat{J} - \hat{S})^2 = j(j+1)\hbar^2 + s(s+1)\hbar^2 - 2\hat{J} \cdot \hat{S} \quad (24.33)$$

czyli

$$\hat{J} \cdot \hat{S} = \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)). \quad (24.34)$$

Otrzymujemy zatem, że

$$\hat{O} = g\hat{J}, \quad g = 1 + \frac{j(j+1) + 3/4 - l(l+1)}{2j(j+1)}, \quad (24.35)$$

gdzie współczynnik g nosi nazwę *współczynnika Landego*. Ostatecznie dla pola $\vec{B} = (0, 0, B)$ mamy

$$\langle n(s, l) j, j_3 | \vec{B} \cdot (\hat{L} + 2\hat{S}) | n(s, l) j, j_3 \rangle = \hbar g j_3 B. \quad (24.36)$$

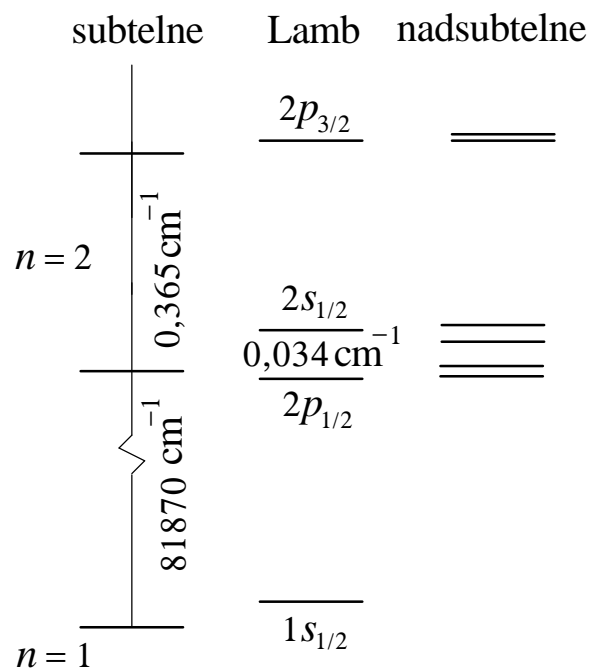
24.5 Efekt Lamba i rozszczepienie nadsubtelne

Efekt Lamba to jeden z najbardziej spektakularnych efektów relatywistycznych polegających na oddziaływaniu ładunku z *fluktuacjami próżni*. Jego pełne zrozumienie jest w zasadzie możliwe dopiero na gruncie kwantowej teorii pola. Oddziaływanie z fluktuacjami próżni powoduje, że zdegenerowane poziomy o tym samym j ulegają rozszczepieniu. Dla dyskutowanego przez nas przypadku $n = 2$

$$\Delta E_{\text{Lamb}} = E[2s_{1/2}] - E[2p_{1/2}] = 0,034 \text{ cm}^{-1} = 1058 \text{ MHz}. \quad (24.37)$$

Jak widzimy jest ono dziesięciokrotnie mniejsze od rozszczepienia subtelnego.

Inny typ zaburzenia, to oddziaływanie elektronu ze spinem jądra. Nie wdając się w szczegóły powiemy tylko, że ten rodzaj oddziaływania zwany *nadsubtelny* daje dla $n = 2$ rozszczepienia 10-krotnie mniejsze niż rozszczepienia Lamba. Struktura rozszczepień jest pokazana na rysunku.



Rysunek 2: Porównanie rozszczepień.