

21 Spin i efekty relatywistyczne

21.1 Doświadczenie Sterna Gerlacha

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

$$\vec{N} = \vec{\mu} \times \vec{B}. \quad (21.1)$$

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

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}, \quad (21.2)$$

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 faktu, że rotacja z \vec{B} znika, a $\vec{\mu}$ jest stałe otrzymujemy

$$\vec{F} = -\vec{\nabla} E = \sum_i \mu_i \vec{\nabla} B_i. \quad (21.3)$$

Jeśli przygotować układ doświadczalny w taki sposób, żeby niejednorodne pole \vec{B} było równoległe do osi z to

$$\vec{F} = \mu_z \frac{\partial B}{\partial z} \hat{z}, \quad (21.4)$$

gdzie \hat{z} jest wektorem 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 . Ten obrazek jest nieco uproszczony, gdyż tak na prawdę atom o momencie magnetycznym μ precesuje wokół osi z częstotliwością Larmora. Dlatego wzór (21.4) należy rozumieć, jako uśrednienie po czasie odpowiadającym okresowi precesji.

Przepuszczając momenty magnetyczne przez niejednorodne pole magnetyczne spodziewamy się odchylenia wiązki. Klasycznie, jeśli momenty magnetyczne mają przypadkowy rozkład, składowa z momentu magnetycznego zmienia się w sposób ciągły od $-\mu$ do μ . Kwantowo rzut momentu magnetycznego na oś z jest albo $-\mu$ albo μ .

W roku 1921-2 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 $l = 0$ (pamiętajmy jednak, że było to przed sformułowaniem mechaniki kwantowej, równanie Schrödingera pochodzi z roku 1926). 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.

Jednak nie wszystkie atomy rozszczepiają się tylko na dwie wiązki; możemy mieć kilka „kropek”, lub w ogóle brak odchylenia (hel).

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

$$\hat{H}' = g_s\mu_B\frac{1}{\hbar}\hat{S} \cdot \vec{B}, \quad (21.5)$$

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.

21.2 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}):

$$\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i \quad (21.6)$$

gdzie σ_i to macierze Pauliego

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (21.7)$$

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

$$\left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle = \chi_+ = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \chi_- = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (21.8)$$

Wprowadźmy notację

$$\chi_\pm(s_3) = \begin{cases} \begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} & \text{dla } s_3 = +\frac{1}{2} \\ \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases} & \text{dla } s_3 = -\frac{1}{2} \end{cases}. \quad (21.9)$$

Pełna funkcja falowa z uwzględnieniem spinu będzie miała więc postać

$$\Psi_{\alpha s_3}(\vec{r}, t) = \psi_{\alpha+}(\vec{r}, t) \times \chi_+(s_3) + \psi_{\alpha-}(\vec{r}, t) \times \chi_-(s_3) = \begin{bmatrix} \psi_{\alpha+}(\vec{r}, t) \\ \psi_{\alpha-}(\vec{r}, t) \end{bmatrix}, \quad (21.10)$$

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

$$\int d^3\vec{r} |\Psi_{\alpha s_3}(\vec{r}, t)|^2 = \int d^3\vec{r} |\psi_{\alpha+}(\vec{r}, t)|^2 + \int d^3\vec{r} |\psi_{\alpha-}(\vec{r}, t)|^2. \quad (21.11)$$

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

$$\psi_{lm+}^n(\vec{r}, t) \text{ oraz } \psi_{lm-}^n(\vec{r}, t) \quad (21.12)$$

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

$$H' = \mu_B \frac{1}{\hbar} \vec{B} \cdot (\hat{L} + g_s \hat{S}). \quad (21.13)$$

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)

$$|n, l, m\rangle \rightarrow |n, l, m, s_3\rangle. \quad (21.14)$$

Stąd

$$\Delta E = \langle n, l, m, s_3 | \hat{H}' | n, l, m, s_3 \rangle = \mu_B (m + g_s s_3) B. \quad (21.15)$$

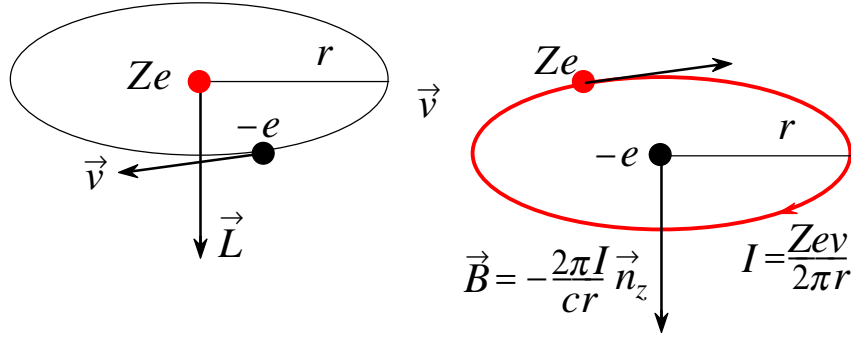
Jednakże przyjęte przez nas założenie, że Hamiltonian dla atomu wodoru nie zależy od spinu elektronu jest przybliżeniem. W istocie moment magnetyczny elektronu podlega dwojakiemu oddziaływaniu. Po pierwsze, ponieważ elektron się porusza, to jak już mówiliśmy, pojawia się prąd, który generuje orbitalny 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*.

21.3 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 1. 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 (znak $-$ ponieważ wektor \vec{n}_z jest skierowany do góry)

$$\vec{B} = -\frac{2\pi I}{cr} \vec{n}_z. \quad (21.16)$$



Rysunek 1: Pole magnetyczne od jądra poruszającego się po orbicie kołowej (znak $-$ ponieważ wektor \vec{n}_z jest skierowany do góry, a moment pędu w dół).

Podstawiając wartość prądu I otrzymujemy

$$\vec{B} = -\frac{Zev}{cr^2} \vec{n}_z = -\frac{Ze}{m_e cr^3} m_e v r \vec{n}_z = \frac{Ze}{m_e cr^3} \vec{L}, \quad (21.17)$$

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

Zauważmy, że

$$\frac{Ze}{m_e cr^3} = -\frac{1}{m_e cr} \frac{dV}{dr}, \quad (21.18)$$

gdzie V jest potencjałem elektrostatycznym, w którym porusza się elektron

$$V = \frac{Ze}{r}. \quad (21.19)$$

Zatem ostatecznie mamy

$$\vec{B} = -\frac{\hbar}{m_e cr} \frac{dV}{dr} \frac{1}{\hbar} \vec{L}. \quad (21.20)$$

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

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \quad (21.21)$$

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

$$H_{SO} = \frac{Ze^2\hbar^2}{2m_e^2c^2} \frac{1}{r^3} \frac{1}{\hbar^2} \hat{L} \cdot \hat{S}. \quad (21.22)$$

Nie będziemy tu wyliczać numerycznie poprawki od (21.22), lecz tylko pokażemy, jak wpływa ona na widmo atomu wodoru. Dokładne wyniki numeryczne otrzymuje się bezpośrednio z równania Diraka, podczas gdy (21.22) jest tylko przybliżeniem.

Zauważmy, że zaburzenie (21.22) 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:

$$|n(s, l) j, j_3\rangle = \sum_{m+s_3=j_3} \begin{pmatrix} l & s = 1/2 \\ m & s_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j \\ j_3 \end{pmatrix} |n, l, m\rangle |s = \frac{1}{2}, s_3\rangle, \quad (21.23)$$

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

$$\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + 2\hat{L} \cdot \hat{S} + \hat{S}^2 \quad (21.24)$$

otrzymujemy

$$\hat{L} \cdot \hat{S} = \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) \quad (21.25)$$

co w bazie (21.23) wynosi

$$\hat{L} \cdot \hat{S} = \hbar^2 \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2}. \quad (21.26)$$

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

$$\Delta E_{SO} = E_{j=3/2} - E_{j=1/2} = 0,365 \text{ cm}^{-1} \simeq 5 \times 10^{-5} \text{ eV} \quad (21.27)$$

gdzie

$$1 \text{ eV} \approx 8 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}. \quad (21.28)$$

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

21.4 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 (21.15).

Dla słabych pól musimy przejść do bazy (21.23) i w tej bazie wyliczyć

$$\langle n(s, l) j, j_3 | \hat{L} + 2\hat{S} | n(s, l) j, j_3 \rangle, \quad (21.29)$$

gdzie za g_s przyjęliśmy 2. Rozpiszmy

$$\hat{O} = \hat{L} + 2\hat{S} = \hat{J} + \hat{S}. \quad (21.30)$$

Zawsze możemy zapisać

$$\hat{O} = \hat{G} \cdot \hat{J}, \quad (21.31)$$

gdzie \hat{G} jest pewnym operatorem, którego elementy macierzowe w bazie (21.23) postaramy się teraz znaleźć. Mnożąc \hat{O} przez \hat{J} z prawej strony, otrzymujemy (w bazie (21.23))

$$\hat{G} = \frac{1}{j(j+1)\hbar^2} \hat{O} \cdot \hat{J} = 1 + \frac{\hat{J} \cdot \hat{S}}{j(j+1)\hbar^2}. \quad (21.32)$$

Z kolei

$$\hat{L}^2 = (\hat{J} - \hat{S})^2 = j(j+1)\hbar^2 + s(s+1)\hbar^2 - 2\hat{J} \cdot \hat{S} \quad (21.33)$$

czyli

$$\hat{J} \cdot \hat{S} = \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)). \quad (21.34)$$

Otrzymujemy zatem, że

$$\hat{G} = 1 + \frac{j(j+1) + 3/4 - l(l+1)}{2j(j+1)} = g. \quad (21.35)$$

Oznacza to, że w bazie (21.23) operator \hat{G} redukuje się do liczby g (jest diagonalny), gdzie współczynnik g nosi nazwę *współczynnika Landego*. Ostatecznie dla pola $\vec{B} = (0, 0, B)$ mamy

$$\langle n(s, l) j, j_3 | \vec{B} \cdot (\hat{L} + 2\hat{S}) | n(s, l) j, j_3 \rangle = \hbar g j_3 B. \quad (21.36)$$

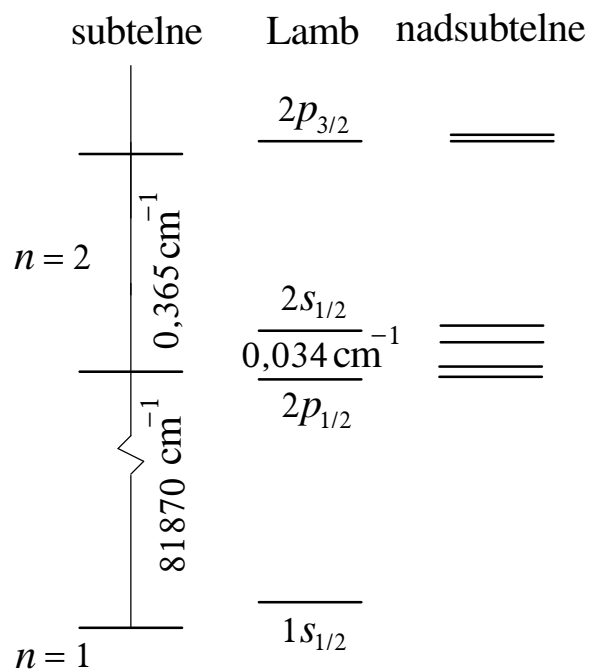
21.5 Efekt Lamba i rozszczepienie nadsubtelne

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 $n = 2$

$$\Delta E_{\text{Lamb}} = E[2s_{1/2}] - E[2p_{1/2}] = 0,034 \text{ cm}^{-1} = 1058 \text{ MHz}. \quad (21.37)$$

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 *nadsubtelnym* daje dla $n = 2$ rozszczepienia 10-krotnie mniejsze niż rozszczepienia Lamba. Struktura rozszczepień jest pokazana na rysunku.



Rysunek 2: Porównanie rozszczepień.