19 Spin i efekty relatywistyczne

19.1 Doświadczenie Sterna Gerlacha

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

$$\vec{N} = \vec{\mu} \times \vec{B}. \tag{19.1}$$

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

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}, \tag{19.2}$$

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

$$\vec{\nabla}\left(\vec{\mu} \cdot \vec{B}\right) = \left(\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}\right)\vec{B} + \left(\vec{B} \cdot \vec{\nabla}\right)\vec{\mu} + \vec{\mu} \times \left(\vec{\nabla} \times \vec{B}\right) + \vec{B} \times \left(\vec{\nabla} \times \vec{\mu}\right) \tag{19.3}$$

otrzymujemy

$$\vec{F} = -\vec{\nabla} E = \left(\vec{\mu} \cdot \vec{\nabla}\right)\vec{B}, \tag{19.4}$$

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

$$\vec{F} = \mu_z \frac{\partial B}{\partial z}\hat{z}, \tag{19.5}$$

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

$$\hat{H}' = g_s\mu_B\frac{1}{\hbar}\hat{S}\cdot\vec{B}, \tag{19.6}$$

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.

19.2 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 $\hat{S}$):

$$\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i \tag{19.7}$$

gdzie σ_i to macierze Pauliego

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{19.8}$$

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

$$\left|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle = \chi_+ = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \chi_- = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{19.9}$$

Wprowadźmy notację

$$\chi_\pm(s_3) = \left\{ \begin{array}{ll} \left\{ \begin{array}{l} 1 \\ 0 \end{array} \right. & \text{dla} \quad s_3 = +\frac{1}{2} \\ \left\{ \begin{array}{l} 0 \\ 1 \end{array} \right. & \text{dla} \quad s_3 = -\frac{1}{2} \end{array} \right. . \tag{19.10}$$

Pełna funkcja falowa z uwzględnieniem spinu będzie miała więc postać

$$\Psi_{\alpha s_3}(\vec{r}, t) = \psi_{\alpha+}(\vec{r}, t) \times \chi_+(s_3) + \psi_{\alpha-}(\vec{r}, t) \times \chi_-(s_3) = \begin{bmatrix} \psi_{\alpha+}(\vec{r}, t) \\ \psi_{\alpha-}(\vec{r}, t) \end{bmatrix}, \tag{19.11}$$

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

$$\int d^3\vec{r}\, |\Psi_{\alpha s_3}(\vec{r}, t)|^2 = \int d^3\vec{r}\, \left|\psi_{\alpha+}(\vec{r}, t)\right|^2 + \int d^3\vec{r}\, \left|\psi_{\alpha-}(\vec{r}, t)\right|^2. \tag{19.12}$$

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

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

$$\psi^n_{lm+}(\vec{r},t) \text{ oraz } \psi^n_{lm-}(\vec{r},t) \tag{19.13}$$

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 włożymu w pole magnetyczne $\vec{B}$. Wówczas Hamiltonian oddziaływania z polem ma postać

$$H' = \mu_B \frac{1}{\hbar}\vec{B}\cdot\left(\hat{L} + g_s\hat{S}\right). \tag{19.14}$$

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)

$$|n,l,m\rangle \to |n,l,m,s_3\rangle . \tag{19.15}$$

Stąd

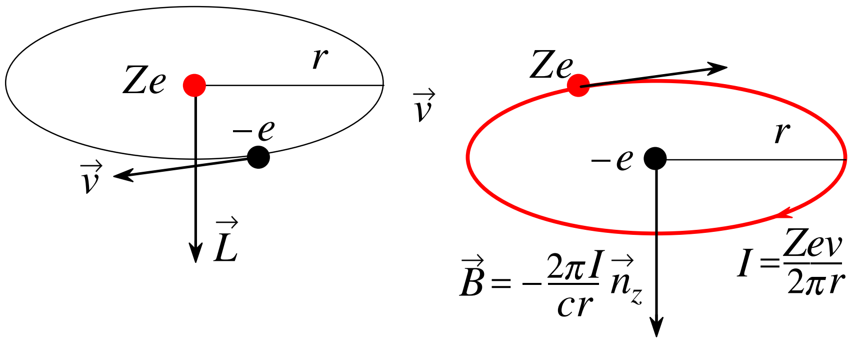
$$\Delta E = \langle n,l,m,s_3|\,\hat{H}'\,|n,l,m,s_3\rangle = \mu_B\,(m + g_s s_3)\,B\,. \tag{19.16}$$

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 oddziaływuje 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 pozimów energetycznych nosi nazwę struktury *nadsubtelnej.*

19.3 Oddziaływanie spin-orbita

Hamiltonian oddziaływania spinowego momentu magnetyczngo 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

$$\vec{B} = -\frac{2\pi I}{cr}\vec{n}_z. \tag{19.17}$$



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

Podstawiając wartość prądu I otrzymujemy

$$\vec{B} = -\frac{Zev}{cr^2}\vec{n}_z = -\frac{Ze}{m_e cr^3} m_e vr\,\vec{n}_z = \frac{Ze}{m_e cr^3}\vec{L}, \tag{19.18}$$

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

Zauważmy, że

$$\frac{Ze}{m_e cr^3} = -\frac{1}{m_e cr}\frac{dV}{dr}, \tag{19.19}$$

gdzie V jest potencjałem elektrostatycznym, w którym porusza się elektron

$$V = \frac{Ze}{r}. \tag{19.20}$$

Zatem ostatecznie mamy

$$\vec{B} = -\frac{\hbar}{m_e cr}\frac{dV}{dr}\frac{1}{\hbar}\vec{L}. \tag{19.21}$$

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

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

gdzie

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \tag{19.22}$$

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

$$H_{\rm SO} = \frac{Ze^2\hbar^2}{2m_e^2c^2}\frac{1}{r^3}\frac{1}{\hbar^2}\hat{L}\cdot\hat{S}. \tag{19.23}$$

Nie będziemy tu wyliczać numerycznie poprawki od (19.23), lecz tylko pokażemy, jak wpływa ona na widmo atomu wodoru. Dokładne wyniki numeryczne otrzymuje się bezpośrednio z równania Diraka, podczas gdy (19.23) jest tylko przybliżeniem.

Zauważmy, że zaburzenie (19.23) 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 $H_{\rm SO}$ będzie diagonalne w bazie całkowitego momentu pędu:

$$|n\,(s,l)\,j,j_3\rangle = \sum_{m+s_3=j_3}\left(\begin{array}{cc|c} l & s=1/2 & j \\ m & s_3 & j_3\end{array}\right)|n,l,m\rangle\,|s=\frac{1}{2},s_3\rangle\,, \tag{19.24}$$

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

$$\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + 2\hat{L}\cdot\hat{S} + \hat{S}^2 \tag{19.25}$$

otrzymujemy

$$\hat{L}\cdot\hat{S} = \frac{1}{2}\left(\hat{J}^2 - \hat{L} - \hat{S}^2\right) \tag{19.26}$$

co w bazie (19.24) wynosi

$$\hat{L}\cdot\hat{S} = \hbar^2\frac{j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)}{2}. \tag{19.27}$$

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

$$\Delta E_{\rm SO} = E_{j=3/2} - E_{j=1/2} = 0,365\ {\rm cm}^{-1} \simeq 5\times10^{-5}{\rm eV} \tag{19.28}$$

gdzie

$$1\ {\rm eV} \approx 8\times10^3\,{\rm cm}^{-1}. \tag{19.29}$$

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

19.4 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 (19.16).

Dla słabych pól musimy przejść do bazy (19.24) i w tej bazie wyliczyć

$$\langle n\,(s,l)\,j,j_3|\,\hat{L}+2\hat{S}\,|n\,(s,l)\,j,j_3\rangle\,, \tag{19.30}$$

gdzie za g_s przyjęliśmy 2. Rozpiszmy

$$\hat{O}=\hat{L}+2\hat{S}=\hat{J}+\hat{S}. \tag{19.31}$$

Mnożąc $\hat{O}$ przez $\hat{J}$ otrzymujemy (w bazie (19.24))

$$\frac{1}{j(j+1)\hbar^2}\hat{J}\cdot\hat{O}=1+\frac{\hat{J}\cdot\hat{S}}{j(j+1)\hbar^2}. \tag{19.32}$$

Z kolei

$$\hat{L}^2=\left(\hat{J}-\hat{S}\right)^2=j(j+1)\hbar^2+s(s+1)\hbar^2-2\hat{J}\cdot\hat{S} \tag{19.33}$$

czyli

$$\hat{J}\cdot\hat{S}=\frac{\hbar^2}{2}\left(j(j+1)+s(s+1)-l(l+1)\right). \tag{19.34}$$

Otrzymujemy zatem, że

$$\hat{O}=g\hat{J},\;\; g=1+\frac{j(j+1)+3/4-l(l+1)}{2j(j+1)}, \tag{19.35}$$

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

$$\langle n\,(s,l)\,j,j_3|\,\vec{B}\cdot(\hat{L}+2\hat{S})\,|n\,(s,l)\,j,j_3\rangle=\hbar g j_3 B. \tag{19.36}$$

19.5 Efekt Lamba i rozszczepienie nadsubtelne

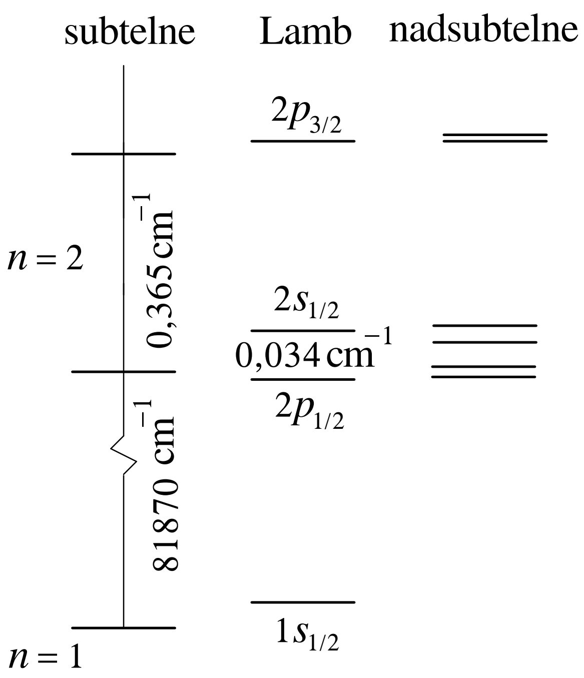
Efekt Lamba to jeden z najbardziej spektakularnych efektów relatywistycznych polegających na oddziaływaniu ładunku z *fluktuacjami próżni.* Jego pełne zrozumienie jest w zasadzie możliwe dobiero na gruncie kwantowej teorii pola. Oddziaływanie z fluktiacjami próżni powoduje, że zdegenerowane poziomy o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

$$\Delta E_{\mathrm{Lamb}}=E[2s_{1/2}]-E[2p_{1/2}]=0,034\,\mathrm{cm}^{-1}=1058\,\mathrm{MHz}. \tag{19.37}$$

Jak widzimy jest ono dziesięciokrotnie mniejsze od rozszczepienia subtelnego.

Inny typ zburzenia, to oddziaływanie elektronu ze spinem jądra. Nie wdając się w szczegóły powiemy tylko, że ten todzaj oddziaływania zwany *nadsubtelnym* daje dla $n=2$

rozszczepienia 10-krotnie mniejsze niż rozszczepienia Lamba. Struktura rozsczepień jest pokazana na rysunku.



Rysunek 2: Porównanie rozszczepień.