

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ

Курс лекций
Часть 3

Воронеж
Издательский дом ВГУ
2015

Оглавление

Введение	5
Глава 1. Нерелятивистская теория спина	6
1.1. Собственный механический момент электрона (спин) . .	6
1.2. Оператор спина и матрицы Паули	7
1.3. Спиновая зависимость волновых функций	10
1.4. Уравнение Паули	13
1.5. Эффект Зеемана	16
1.6. Элементы квантовой теории углового момента	20
1.6.1. Общие свойства углового момента	20
1.6.2. Сложение моментов	21
1.6.3. Волновые функции составной системы	22
1.6.4. Спин-орбитальное взаимодействие	26
1.6.5. Аномальный эффект Зеемана	28
Глава 2. Системы тождественных частиц	30
2.1. Оператор перестановки. Принцип тождественности . . .	30
2.2. Симметричные и антисимметричные волновые функции	32
2.3. Системы невзаимодействующих тождественных частиц. Принцип Паули	34
2.4. Теория атома гелия и гелиеподобных ионов	35
2.4.1. Гамильтониан и волновые функции	36
2.4.2. Основное состояние	39
2.4.3. Возбужденные состояния	41
2.5. Сложные атомы. Метод Хартри	44
2.6. Периодическая система элементов Менделеева	48
2.7. Двухатомные молекулы. Химическая связь	53
2.7.1. Ионная (гетерополярная) связь	53
2.7.2. Ковалентная (гомеополярная) связь	53
Глава 3. Релятивистская квантовая теория	57
3.1. Уравнение Клейна – Гордона	57
3.2. Свободное движение бесспиновой частицы	60

Глава 1.

Нерелятивистская теория спина

1.1. Собственный механический момент электрона (спин)

В 1921 г. Штерн и Герлах наблюдали квантование магнитного момента атомов, пропуская атомные пучки через неоднородное магнитное поле. В частности, было обнаружено симметричное расщепление пучка атомов водорода, заведомо находящихся в s -состоянии. В s -состоянии механический, а вместе с ним и магнитный орбитальный моменты равны нулю. Между тем, факт симметричного расщепления пучка атомов в магнитном поле на две компоненты показывает, что атомы обладают магнитным моментом и в s -состояниях, а проекция этого момента на выделенное направление (ось квантования) может принимать только два значения, различающиеся знаком. Результаты измерений показывают, что абсолютная величина такого магнитного момента равна магнетону Бора μ_B . Таким образом, в s -состоянии атома с одним электроном существует магнитный момент μ , проекция которого на направление магнитного поля принимает лишь два значения: $\mu = \pm\mu_B$.

Подобно тому, как существование орбитального магнитного момента электрона объясняется наличием орбитального механического момента, естественным является и предположение о наличии у электрона собственного механического момента, не связанного с орбитальным движением. Обозначим его \mathbf{s} , а соответствующее квантовое число s . Если бы его проекция s_z определялась в соответствии с теорией орбитального момента целым числом постоянных Планка ($s_z = m_s \hbar$), то следовало бы ожидать по крайней мере трех ориентаций спина ($m_s = 0, \pm 1$), а не двух, как в опыте Штерна – Герлаха. Данный парадокс привел в 1925 г. Уленбека и Гаудсмита к гипотезе о полуцелых значениях проекции спина $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Поэтому следует считать, что квадрату собственного момента соответствует квантовое число $s = \frac{1}{2}$ (оно является аналогом орбитального квантового числа l). Удивительным оставалось то, что гиромагнитное отношение для собственных механического и магнитного моментов электрона оказывается вдвое больше гиромагнитного отношения для орбитального движения:

$$\boxed{\mu = \frac{e}{mc} s,} \quad (1.1)$$

где $m \equiv m_e$ — масса электрона ¹. Такое же необычное отношение магнитного M и механического L моментов ферромагнитного образца было получено еще в 1915 г. в эксперименте Эйнштейна – де Гааза.

Если предположить, что электрон представляет собой равномерно заряженный шарик с радиусом $r_0 = e^2/(mc^2) = 2,818 \cdot 10^{-15}$ м («классический радиус электрона»), то для создания магнитного момента μ_B вращением точки на «экваторе» должны двигаться со сверхсветовой скоростью 342,5с! Поэтому для объяснения природы собственного механического момента электрона необходимо *отказаться от классической интерпретации на основе вращения электрона вокруг собственной оси*. Наличие спина следует считать объективной реальностью, свойственной самому электрону как элементарной частице. Собственный механический момент, не связанный с орбитальным движением, принято называть *спином* ². Таким образом, кроме трех пространственных, электрон обладает одной дополнительной степенью свободы — спиновой. Спин — типично квантовая характеристика, исчезающая в классическом пределе (при $\hbar \rightarrow 0$), в то время как орбитальный момент всегда можно сделать сколь угодно большим, увеличивая соответствующее квантовое число l . Ниже мы покажем, что в последовательной релятивистской квантовой теории наличие у электрона спина является естественным следствием уравнения Дирака.

Впоследствии спин был открыт и у многих других элементарных частиц. Оказалось, проекция спина на выделенное направление не обязана принимать значения $\pm \frac{\hbar}{2}$ для всех частиц. Такое значение наблюдается для лептонов и нуклонов. У некоторых элементарных частиц, а также для высоковозбужденных состояний атомных ядер, наблюдаются более высокие полуцелые значения m_s (например, для Ω -гиперона $s = \frac{3}{2}$ и соответственно $m_s = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}$). Для заряженных π -мезонов $s = m_s = 0$. У фотонов спин $s = 1$ и $m_s = \pm 1$ (отсутствие проекции с $m_s = 0$ связано с нулевой массой фотона).

1.2. Оператор спина и матрицы Паули

Рассмотрим теперь, как описывается спин электрона в нерелятивистской квантовой теории. В соответствии с общими принципами

¹ Ниже везде под e понимается *физический заряд электрона*, т. е. $e < 0$.

² От англ. spin — веретено.

квантовой теории, спин любой квантовой частицы должен соответствовать векторный линейный эрмитов оператор $\hat{\mathbf{s}}$: $\hat{\mathbf{s}}^\dagger = \hat{\mathbf{s}}$. Обозначим его декартовы компоненты (операторы проекций спина) $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$. Для операторов \hat{s}_i ($i = x, y, z$) *постулируется*, что они подчиняются тем же коммутационным соотношениям, что и операторы проекций орбитального момента $\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z$:

$$[\hat{s}_k, \hat{s}_l] = i\hbar \sum_m \varepsilon_{klm} \hat{s}_m, \quad k, l, m = x, y, z, \quad (1.2)$$

где ε_{klm} — символ Леви – Чивита (см. [3] из списка основной литературы, приложение Б). Эти соотношения — *основной постулат спинового формализма*, позволяющий, в частности, установить явный вид операторов \hat{s}_i для конкретных значений спинового квантового числа s . Поскольку наличие спина не связано с орбитальным движением, подчеркнем, что на языке теории представлений речь может идти только о *матричном представлении* этих операторов. Размерность матриц равна $(2s + 1) \times (2s + 1)$ и определяется значением s .

В соответствии с гипотезой Уленбека и Гаудсмита для электрона $s = 1/2$, а проекция спина на любое направление может принимать только два значения: $\pm\hbar/2$. Всякий оператор диагонален в своем собственном представлении, поэтому количество собственных значений операторов \hat{s}_i (два) определяет размерность матричного представления этих операторов: 2×2 . Операторы проекций спина электрона удобно представить в виде:

$$\hat{s}_i = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_i, \quad (1.3)$$

где $\{\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\}$ называются *матрицами* (или *операторами*) *Паули* (размерности 2×2) и имеют собственные значения ± 1 . Они составляют векторный оператор $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$, так что $\hat{\mathbf{s}} = \frac{\hbar}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}}$. В соответствии с (1.2), (1.3) матрицы Паули подчиняются перестановочным соотношениям:

$$[\hat{\sigma}_k, \hat{\sigma}_l] = 2i \sum_m \varepsilon_{klm} \hat{\sigma}_m, \quad k, l, m = x, y, z. \quad (1.4)$$

Основные свойства матриц $\hat{\sigma}_i$ (а с ними и операторов \hat{s}_i) можно установить на основе лишь коммутационных соотношений, не используя конкретного матричного представления. Поскольку собственные значения $\hat{\sigma}_i$ равны ± 1 , квадрат $\hat{\sigma}_i$ в своем собственном представлении есть единичная двумерная матрица (или единичный двумерный оператор $\hat{1}$). А поскольку единичный оператор остается таковым в любом представлении, ясно, что справедливы следующие общие соотношения: