量子力学

电子自旋与自旋算符

自旋

$$[\frac{P^2}{2\mu}-\frac{qB}{2\mu c}\hat{L}_z+V(r)]\psi(r)=E\psi(r)$$

- 在较强的磁场下（10^2T），我们发现一些类氢离子或碱金属原子有正常塞曼效应的现象，而轨道磁矩的存在，能很好地解释它。
- 但是，当这些原子或离子置入弱磁场~**1T**的环境中，或光谱分辨率提高后，发现问题并不是那么简单，这就要求人们进一步探索。

电子自旋

电子的基本性质之一。电子内禀运动或电子内禀运动量子数的简称。1925年G.E.乌伦贝克和S.A.古兹密特在分析原子光谱的一些实验结果时，提出电子具有内禀运动——自旋，并且有与电子自旋相联系的自旋磁矩。由此可以解释**原子光谱的精细结构及反常塞曼效应**。

1928年狄拉克提出电子的相对论波动方程，方程中自然地包括了电子自旋和自旋磁矩。电子自旋是量子效应，不能作经典的理解，如果把电子自旋看成绕轴的旋转，则得出与相对论矛盾的结果。

从历史上看，电子自旋先由实验上发现，然后才由狄拉克（Dirac）方程从理论上导出的。进一步研究表明，不但电子存在自旋，中子、质子、光子等所有微观粒子都存在自旋，只不过取值不同。自旋和静质量、电荷等物理量一样，也是描述微观粒子固有属性的物理量。

在电子自旋的学习中，首先要了解电子自旋的实验依据及自旋假设，重点掌握电子自旋的描述，同时能应用电子自旋的理论解释原子光谱现象。

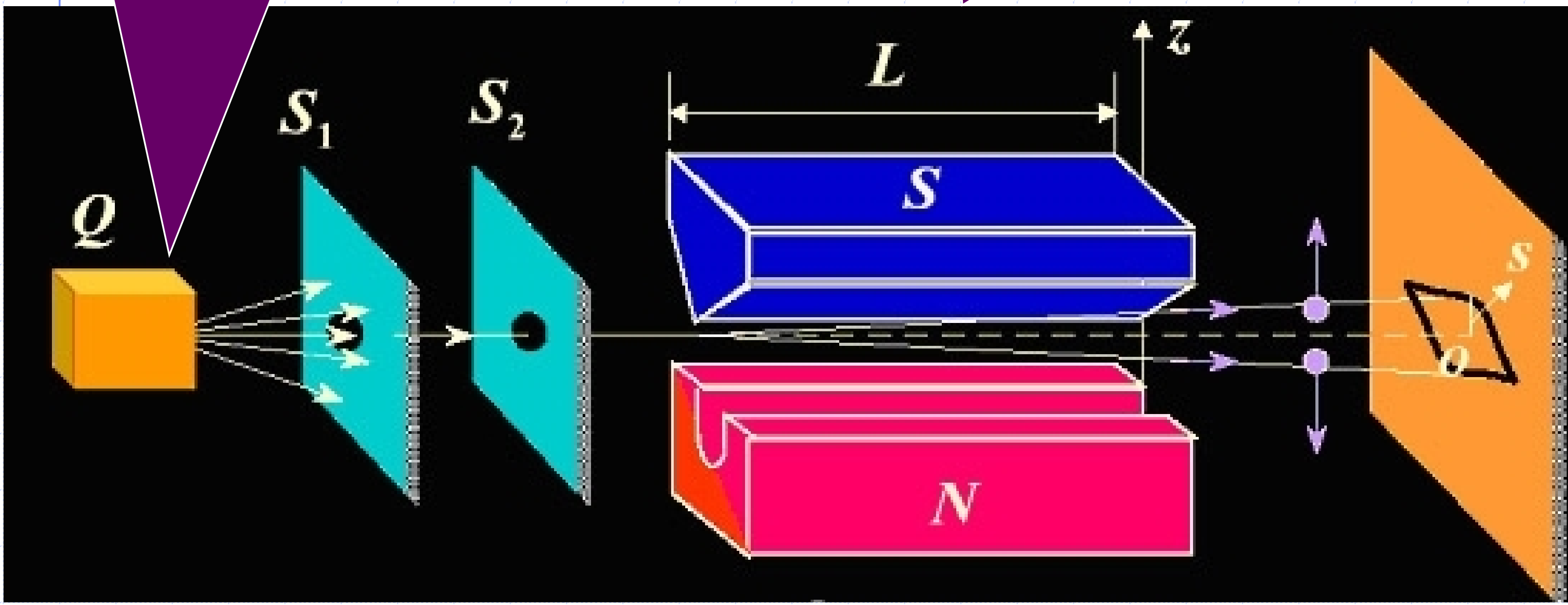
目录

一、电子自旋实验

(1)

氢、银或钠原子炉（只有一个价电子）

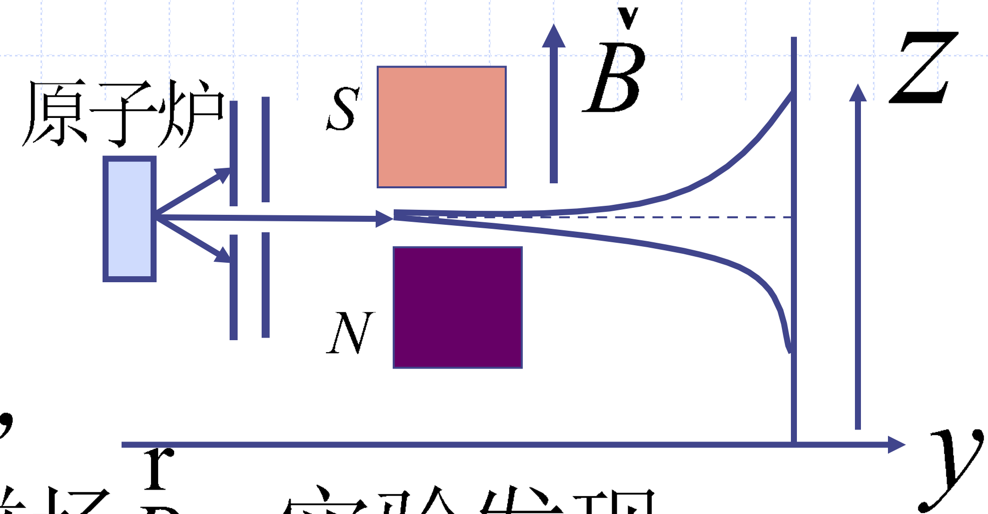
1921－1922年间 史特恩－盖拉赫实验



施特恩(O. Stern，1888-1969)美国实验物理学家，格拉赫(W. Gerlach. 1899-1979)德国实验物理学家，施特恩发现分子射线和质子的磁矩，1943年获得诺贝尔物理学奖。

一、电子自旋实验

(2)



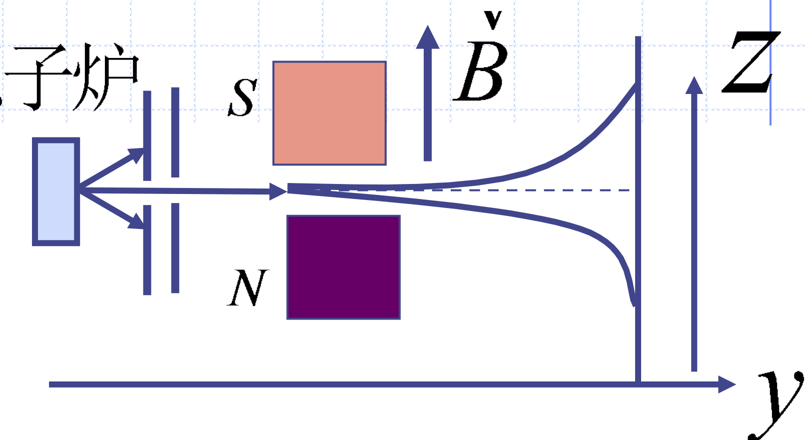
将氢、银、钠等在高温炉里加热，让其从狭缝中出射，沿y方向垂直进入磁场$\vec{B}$。实验发现，原子沿相反的方向，等间距地朝两边偏转。

表明：原子中存在磁矩$\vec{M}$，进而受到了磁场的Lor ent z力，改变了运动轨迹。

所以，可以从受力的角度来分析实验

一、电子自旋实验

(3)



磁场$\vec{B} = B\vec{e}_z$沿z方向

原子在z方向受到的力

$\boxed{F_z = -M_z \dfrac{\partial B}{\partial z}}$，$M_z$是原子磁矩$\vec{M}$的z分量。

实验数据表明$|M_z| = e\hbar/(2\mu c) = \mu_B$，

μ_B是Bohr磁子。∴ $\boxed{M_z = \pm \mu_B}$

(4)

$\boxed{\text{注意}: M_Z = -\mu_B m \neq \pm\mu_B}$

原子的磁矩来自哪里？电子绕核运动，能形成轨道磁矩。统计意义下，

氢原子中电子绕核运动的电流密度为

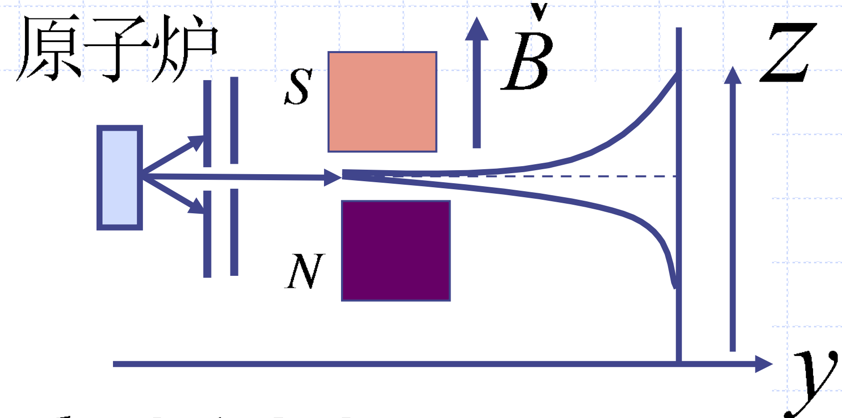
$$j_\varphi = -\frac{ehm}{\mu}\frac{1}{r\sin\theta}|\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)|^2$$

此电流产生的轨道磁矩为：$\boxed{M_Z = -\mu_B m}$

$\mu_B = eh/(2\mu c) \to Bohr$磁子，$m$是磁量子数

一、电子自旋实验

(5)



$$F_z = -M_z \frac{\partial B}{\partial z}$$

如果：$M_Z = -\mu_B m$

$m = l, l-1, \cdots, 0, \cdots, -l, \qquad l = 0,1,2,3,\cdots$

理论上，观察屏上应该存在1、3、5、… 等等奇数个分裂的原子束，而不是两束。

实验上，高温炉中的氢原子处于高压，从炉中出来后气压骤降迅速冷却，使得原子处于基态:$(nl) = (10), \therefore l = 0 \rightarrow m = 0$

$\therefore \rightarrow M_z \rightarrow F_z$=0, 原子似乎不应该偏转。

一、电子自旋实验(6)

实验表明$F_z = -M_z \dfrac{\partial B}{\partial z} \neq 0$, 且$M_z = \pm \mu_B$

分析表明M_z不应该是轨道磁矩($M_z = \mu_B m$)

由此，人们猜测：

(1)除轨道磁矩外，必然存在别的磁矩。

(2)如果存在某种磁矩，它应该只取两个值。

此外，对银原子、钠原子这些多电子原子，该如何解释？

一、电子自旋实验

(7)

$$M_Z = M_{sz} = \pm\mu_B,$$ 与实验一致

为解释上述现象，*Uhlenbeck*和*Goudsmit*

(荷兰物理系学生) 于1925年提出了以下假设

(1) 电子具有自旋，形成自旋角动量$\vec{S}$，在任何方向上的投影只有两个数值：$s_z = \pm\hbar/2$

(2)自旋形成自旋磁矩$\vec{M}_s$，与$\vec{S}$的关系是

$$\vec{M}_s = -e(\mu c)^{-1}\vec{S}$$

基于假设(1)，$\vec{M}_s$在空间任何方向上的投影只能取两个数值，如z方向，

$$M_{sz} = \pm e\hbar(2\mu c)^{-1} = \pm\mu_B \rightarrow Bohr\text{磁子。}$$

乌仑贝克与古兹米特（**1925**年，时年不到**25**岁的荷兰学生）

一、电子自旋实验(8)

在电子自旋假设的基础上发展起来的量子理论，不仅可以解释史特恩—盖拉赫实验，而且可以解释碱金属原子光谱的双线结构和反常塞曼效应等，终为人们所接受。它揭示出电子具有自旋这种内禀属性，是一种量子效应，没有经典对应。就是说，电子的自旋是量子概念，不能同宏观粒子的自旋机械运动简单对应。

一个假设、三个实验

一、电子自旋实验

(9)

银、钠多电子原子如何解释？

令$\boxed{\text{总磁矩}=\sum\text{轨道磁矩}+\sum\text{自旋磁矩}}$

对钠、银等多电子原子

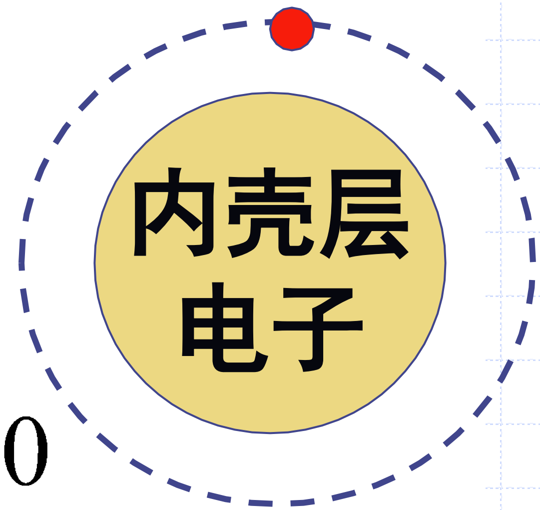
$\boxed{\text{内壳层电子的总磁矩}=0}$

对价电子，从高温炉中射出时迅速冷却，使价电子处于基态，$\therefore m=0$

$\therefore$ 价电子轨道磁矩 $M_z=\mu_B m=0$

$\therefore$ 原子的磁矩＝价电子的自旋磁矩

一个价电子



与氢一样

一、电子自旋实验(10)

电子具有自旋角动量$\vec{S}$ → 引入自旋算符$\hat{\vec{S}}$

考虑自旋后电子的哈密顿：$\hat{H} = \hat{H}_0 + \xi \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{l}}$

$\hat{H}_0 = \hat{p}^2 / 2\mu + V(r)$ → 不考虑自旋的哈密顿

$\xi \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{l}}$ → 自旋与轨道的耦合，ξ → 耦合强度

不考虑自旋，电子波函数$\psi(r)$满足$\hat{H}_0\psi = E_0\psi$

考虑自旋，$\psi(r) \to \psi(r, s_z)$，s_z → 自旋变量

满足$[\hat{p}^2 / 2\mu + V(r) + \xi \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{l}}]\psi(r, s_z) = E\psi(r, s_z)$

一、电子自旋实验(11)

考虑自旋，电子波函数$\psi(r,s_z)$满足

$$[\hat{p}^2/2\mu+V(r)+\xi\vec{S}\cdot\vec{l}\,]\psi(r,s_z)=E\psi(r,s_z)$$

要求解此方程获得$\psi(r,s_z)$和E，须明确

1、$\psi(r,s_z)$具有怎样的特性？

2、自旋算符$\vec{S}$具有怎样的形式？

二、自旋态与自旋波函数(1)

r是空间变量

不考虑自旋，电子的波函数是$\psi=\psi(r)$

考虑自旋后引入自旋变量$s_z \rightarrow \psi=\psi(r,s_z)$

Q $s_z=\pm h/2$，只有两个取值

$\therefore \psi(r,s_z)$可以表示成以下形式：

$$\begin{cases} \psi_1(r)=\psi(r,s_z=h/2)\rightarrow \text{“} \\ \psi_2(r)=\psi(r,s_z=-h/2)\rightarrow \end{cases}$$

它们分别代表电子两种可能的自旋状态。

二、自旋态与自旋波函数(2)

$\therefore \psi(r, s_z)$可用一个列向量来表示

$$\boxed{\psi = \begin{pmatrix} \psi_1(r) \\ \psi_2(r) \end{pmatrix}} \begin{matrix} \rightarrow \\ \rightarrow \end{matrix} \begin{cases} s_z = \hbar/2\text{的自旋态} \\ s_z = -\hbar/2\text{的自旋态} \end{cases}$$

按波函数的统计诠释，电子以一定的概率处于$\psi_1(r)$或$\psi_2(r)$，

二、自旋态与自旋波函数(3)

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \rightarrow \text{转 置 共 轭 } \psi^+ = (\psi_1^* \quad \psi_2^*)$$

则 ψ 的归一化形式为

$$\int d\tau \psi^+ \psi = \int d\tau (\psi_1^* \quad \psi_2^*) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

$$= \underbrace{\int d\tau}_{\text{积分代表对空间归一化}} \underbrace{(|\psi_1(r)|^2 + |\psi_2(r)|^2)}_{\text{求和代表对自旋归一化}} = 1$$

二、自旋态与自旋波函数(4)

特殊情况下，

若$\psi_2(r)=0$,则电子处于$s_z=\hbar/2$的自旋态，

记为
$$\psi=\psi_{\frac{1}{2}}=\begin{pmatrix}\psi_1(r)\\0\end{pmatrix}$$

若$\psi_1(r)=0$,则电子处于$s_z=-\hbar/2$的自旋态，

记为
$$\psi=\psi_{-\frac{1}{2}}=\begin{pmatrix}0\\\psi_2(r)\end{pmatrix}$$

二、自旋态与自旋波函数(5)

$\boxed{\text{自旋算符}\hat{S}\text{具有怎样的形式？分步解决}}$

考虑自旋，电子波函数$\psi(r,s_z)$满足

$$[\hat{p}^2/2\mu+V(r)+\xi\hat{S}\cdot\hat{l}\,]\psi(r,s_z)=E\psi(r,s_z)$$

1、$\psi(r,s_z)$具有怎样的形式？<u>列向量</u>

$$\boxed{\psi(r,s_z)=\begin{pmatrix}\psi_1(r)\\ \psi_2(r)\end{pmatrix}}\begin{array}{l}\rightarrow\ \psi(r,s_z=\hbar/2)\\ \rightarrow\psi(r,s_z=-\hbar/2)\end{array}$$

2、自旋算符$\hat{S}$具有怎样的形式？

三、自旋角动量算符与泡里算符(1)

自旋算符$\hat{\vec{S}}$具有怎样的形式?

已知角动量算符$\hat{\vec{l}}$满足以下对易关系

$$\hat{l}_x\hat{l}_y-\hat{l}_y\hat{l}_x=i\hbar\hat{l}_z,\quad \hat{l}_y\hat{l}_z-\hat{l}_z\hat{l}_y=i\hbar\hat{l}_x,\quad \hat{l}_z\hat{l}_x-\hat{l}_x\hat{l}_z=i\hbar\hat{l}_y\ \rightarrow$$

自旋角动量算符$\hat{\vec{S}}$也应该满足类似的对易关系:

$$\begin{aligned}
\hat{S}_x\hat{S}_y-\hat{S}_y\hat{S}_x&=i\hbar\hat{S}_z\\
\hat{S}_y\hat{S}_z-\hat{S}_z\hat{S}_y&=i\hbar\hat{S}_x\\
\hat{S}_z\hat{S}_x-\hat{S}_x\hat{S}_z&=i\hbar\hat{S}_y
\end{aligned}$$

在此假设的基础上,可寻求$\hat{S}_x,\hat{S}_y,\hat{S}_z$的具体形式