ЛЕКЦИЯ 13

Спин. Матрицы Паули. Уравнение Паули

13.1. Спин частицы. Матрицы Паули

К 1925 году, когда Гайзенбергом была создана квантовая механика, появились данные, свидетельствующие о том, что при описании движения, например, электрона, помимо трех координат существует дополнительная внешняя переменная, которая принимает два значения.

Это следует из:

1) **Дублетной структуры спектральных линий**.
   В курсе оптики рассматривался спектр натрия — две близкие оранжевые линии. Однако, согласно квантовой механике Бора, усовершенстованной Зоммерфельдом, должна была существовать только одна линия.
2) **Аномального эффекта Зеемана**.
   Нормальный эффект Зеемана рассматривался в курсе общей физики: резонансная частота дипольного момента в присутствии магнитного поля расщепляется на три частоты. Зееман проводил эксперимент на атомах серебра, где, по случайности, это явление хорошо наблюдается благодаря структуре атома.
   При проведении опытов на других элементах оказалось, что число линий всегда примерно вдвое больше.
3) **Таблицы Менделеева** Для объяснения периодов таблицы Менделеева необходимо ввести предположение, что существует еще одна характеристика электрона, принимающая два значения.

Паули выдвниул гипотезу — принцип запрета, чтобы объяснить, почему электроны в атоме не «падают» с высоких орбит на низкие.

Прицнип запрета Паули формулируется следующим образом: в атоме два и более электрона не могут находиться в одном квантовом состоянии.

Дальнейшая история открытия спина носит поистине драматический характер. В 1925 году из США в Германию приехал двадцатилетний физик Крониг. Его познакомили с письмом Паули, где разбирался аномальный эффект Зеемана, периодических характер таблицы Менделеева и высказывалось предположение о дополнительном квантовом числе.

Рассмотрим подробнее аномальный эффект Зеемана. Энергия магнитного диполя $\vec{\mu}$ в магнитном поле $\vec{H}$ определяется следующим соотношением:

$$U = -\vec{\mu}\vec{H}, \tag{13.1}$$

В этом выражении магнитный момент равен:

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2c}[\vec{r}, \vec{v}],$$

а в нерелятивистском приближении:

$$\vec{p} = m\vec{v} \quad \Rightarrow \quad \vec{\mu} = \frac{e}{2mc}[\vec{r}, \vec{p}] = \frac{e}{2mc}\vec{L}.$$

Следовательно, энергия окажется равной:

$$U = -\frac{e}{2mc}\vec{L}\vec{H}.$$

В квантовой механике Бора – Зоммерфельда было получено, то если магнитное поле $\vec{H}$ направлено вдоль оси z, то проекция $\vec{L}$ на ось z приобретает $2l+1$ значений.

Следовательно,

$$U = \frac{|e|H}{2mc}\hbar m,$$

где $\frac{e}{2mc}$ — гиромагнитное отношение,

$\hbar m$ — проекция момента количества движения $\vec{L}$ на ось z.

В действительности, для объяснения магнитного момента необходимо, наряду с числом m, приобретающим $2l+1$ значений, ввести переменную

$$\sigma = \pm\frac{1}{2},$$

тогда

$$U = \frac{|e|H}{2mc}\hbar(m + 2\sigma).$$

В этом случае в сильном поле, расщепление которого превышает дублетную структуру, можно объяснить аномальный магнитный момент.

Крониг, прочитав письмо Паули, подумал, что у электрона должен существовать магнитный момент, пропорциональный механическому моменту (гиромагнитному отношению), что позволило объяснить ему дублетную структуру следующим образом.

Пусть есть ядро Z_e, вокруг которого вращается электрон (см. рис. 13.1). Следовательно, существует электрическое поле, создаваемое ядром:

$$\vec{E} = \frac{Z|e|}{r^3}\vec{r}.$$

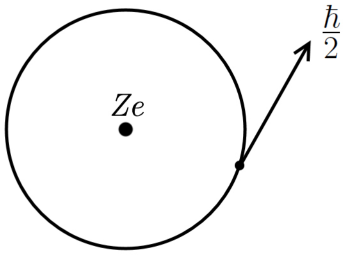

Рис. 13.1.

Магнитное поле в системе, где ядро покоится, отсутствует. Однако в системе, связанной с движушимся электроном, магнитное поле может существовать.

В нерелятивистском пределе:

$$\vec{H} = \frac{1}{c}[\vec{E}, \vec{v}] = \frac{Z|e|}{cr^3m}[\vec{r}, \vec{p}] = \frac{Z|e|}{cr^3m}\vec{L}.$$

Таким образом, магнитное поле, действующее на электрон, варажается через момент количества движения этого электрона. Следовательно, применяя формулу (13.1), получим

$$U = \frac{Z|e|}{cr^3m}\vec{S}\vec{L},$$

Если спин $\vec{S}$ принимает два значения, то для

$$l = 1$$

возникает дополнительная энергия в зависимости от того, направлен спин по или против момента количества движения $\vec{L}$.

Такое рассмотрение хорошо согласуется с дублетным расщеплением.

Паули, узнав о гипотезе Кронига, сказал, что эта гипотеза хоть и интересная, но неприемлемая. Наглядное представление об электроне как о вращающемся шаре противоречит следующему: чтобы электрон с классическим радиусом

$$r_0 = \frac{e^2}{m_e c^2} \approx 2{,}8 \cdot 10^{-12}\text{см}$$

имел момент $\hbar/2$ скорость его вращения должна быть такова, что на окружности она окажется значительно больше скорости света.

Паули также считал, что гиромагнитное отношение, если трактовать σ как значение спина, должно быть в два раза больше для электрона, чем рассчитал Крониг.

Идея Кронига, однако, понравилась Бору и Эйнштейну. Из-за возражений Паули Крониг не опубликовал свою работу. В это же время в Голландии Эренфест, получивший кафедру после Лоренца, совместно с Гаудсмитом и Уленбеком пришли независимо к такой же идее, но не побоялись опубликовать ее.

После их статьи Паули понял, что его рассуждения отвечают наличию магнитного момента. Паули считал, что гиромагнитное отношение вдвое больше

$$\frac{e}{2mc} \to \frac{e}{mc}.$$

Гиромагнитное отношение для электрона действительно вдвое больше. Правдивость идей Кронига была подстверждена после опубликования работы Томаса.

В предыдущем семестре была рассмотрена прецессия Томаса: при ускоренном движении спин поворачивается относительно орбиты.

Прецессия Томаса ровно вдвое уменьшает эффект расщепления, поэтому гиромагнитное отношение делится пополам, что приводит к справедливости формулы Кронига.

Таким образом, за открытие спина — одно из важнейших открытий в физике, никто не получил Нобелевскую премию. С одной стороны, Крониг не опубликовал свое открытие, а с другой — научное сообщество Европы знало, что идея принадлежит Кронигу.

Паули, поняв, что в аппарате квантовой механики существует возможность появления у электрона магнитного момента без наглядного представления о «крутящемся шаре», принял гипотезу спина.

При повороте системы координат существует оператор поворота:

$$\hat{R}_{\delta\vec{\varphi}} = 1 + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi}\,\vec{L}, \qquad \vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}], \tag{13.2}$$

где $\vec{L}$ — орбитальный момент.

Представим, что волновая функция электрона зависит не только от пространственных координат x, y, z, но и от проекции спина:

$$\Psi = \Psi(x, y, z, \sigma).$$

В этом случае при повороте проекция спина также меняется. Следовательно, в соотношение (13.2) надо добавить некоторый оператор $\hat{\vec{S}}$, действующий только на проекцию спина:

$$\hat{R}_{\delta\vec{\varphi}} = 1 + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi}(\hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}).$$

При этом компоненты $\hat{L}_i$ и $\hat{S}_k$ будут коммутировать:

$$[\hat{L}_i, \hat{S}_k] = 0,$$

поскольку они действуют на разные переменные и, следовательно, порядок действия не важен.

Определение 13.1. Оператор **полного момента** определяется следующим образом:

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}.$$

Аналогично тому, как на прошлой лекции были получены коммутационные соотношения для оператора момента количества движения $\hat{\vec{L}}$, можно определить коммутационные соотношения оператора полного момента с любым вектором:

$$[\hat{J}_i, \hat{A}_k] = i\hbar e_{ikl}\hat{A}_l. \tag{13.3}$$

Подставив в это соотношение вместо $\hat{J}_i$ сумму

$$\hat{L}_i + \hat{S}_i,$$

а вместо $\hat{A}_k$ — вектор $\hat{L}_k$, получим:

$$[\hat{L}_i + \hat{S}_i, \hat{L}_k] = [\hat{L}_i, \hat{L}_k] = i\hbar e_{ikl}\hat{L}_l.$$

Из этой формулы на прошлой лекции было получено, что проекции момента орбитального могут иметь как целые, так и полуцелые значения. Однако прямые вчсиления показали, что проекции орбитального момента могут принимать только целые значения. Вычислим коммутатор

$$[\hat{L}_i\hat{S}_i, \hat{S}_k] = [\hat{S}_i, \hat{S}_k] = i\hbar e_{ikl}\hat{S}_l.$$

Это соотношение для спинов может удовлетворяться, когда проекции имеют полуцелые значения. Таким образом, не рассматривая электрон как вращающийся шар, можно получить полуцелые значения спина.

Коммутатор проекций полного момента, согласно (13.3), имеет следующий вид:

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_k] = i\hbar e_{ikl}\hat{J}_l.$$

Ранее было показано, что

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x, \qquad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \qquad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z,$$

где $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ — **матрицы Паули**, определяемые соотношениями:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Легко проверить, что

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{13.4}$$

, например, для σ_x:

$$\sigma_x^2 = \sigma_x\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0\cdot 0 + 1\cdot 1 & 0\cdot 1 + 1\cdot 0 \\ 1\cdot 0 + 0\cdot 1 & 1\cdot 1 + 0\cdot 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I.$$

Легко также показать, что

$$\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z. \tag{13.5}$$

Воспользовавшись в соотношении (13.5) круговой заменой индексов, получим:

$$\sigma_y\sigma_z = i\sigma_x, \qquad \sigma_z\sigma_x = i\sigma_y, \tag{13.6}$$

В кратком виде, используя абсолютно антисисмметричный тензор, можно записать формулы (13.4) – (13.6) следующим образом:

$$\sigma_i\sigma_k = \delta_{ik}I + ie_{ikl}\sigma_l. \tag{13.7}$$

Можно составить комбинацию

$$(a_i\sigma_i) = a_x\sigma_x + a_y\sigma_y + a_z\sigma_z = (\vec{a}\vec{\sigma}).$$

Найдем произведение двух таких комбинаций, воспользовавшись соотношением (13.7):

$$(\vec{a}\vec{\sigma})(\vec{b}\vec{\sigma}) = a_ib_k\sigma_i\sigma_k = a_ib_k(\delta_{ik} + ie_{ikl}\sigma_l) = (\vec{a}\,\vec{b}) + i[\vec{a}\times\vec{b}]\,\vec{\sigma}.$$

В частности,

$$(\vec{a}\vec{\sigma})(\vec{a}\vec{\sigma}) = \vec{a}\vec{a} = |\vec{a}|^2. \tag{13.8}$$

Используя эти формулы, легко получить оператор вращения спина на конечный угол.

Пусть существует некоторая ось, вдоль которой направлен единичный вектор $\vec{n}$, поворот которого происходит на угол $\varphi + \delta\varphi$ (см. рис. 13.2). Тогда

$$\hat{R}_{\vec{n}(\varphi+\delta\varphi)} = \hat{R}_{\vec{n}\delta\varphi}\,\hat{R}_{\vec{n}\varphi},$$

то есть поворот происходит сначала вокруг некоторой оси на угол φ, а затем, вокруг той же оси, на угол $\delta\varphi$ (поскольку вращение вокруг одной и той же оси коммутативно).

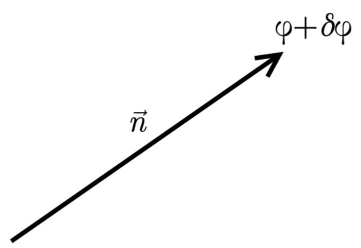

Рис. 13.2.

Вид оператора поворота на бесконечно малый угол для спина известен:

$$\hat{R}_{\vec{n}\varphi} + \frac{d\hat{R}}{d\varphi}\,d\varphi = \left\{1 + \frac{i}{\hbar}\left(\vec{n}\,\delta\varphi\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}\right)\right\}\hat{R}_{\vec{n}\varphi}.$$

Сократив на $\hat{R}_{\vec{n}\varphi}$, получим простое дифференциальное уравнение для $\hat{R}$:

$$\frac{d\hat{R}}{d\varphi} = \frac{i}{2}(\vec{\sigma}\vec{n})\hat{R}.$$

Если бы $\hat{R}$ было числом, то решение этого уравнения имело бы вид:

$$\hat{R} = e^{i(\vec{\sigma}\vec{n})\frac{\varphi}{2}} \tag{13.9}$$

Выпишем предварительно следующие соотношения, воспользовавшись (13.8)

$$
\begin{aligned}
&(\vec{\sigma}\vec{n})^2 = 1\\
&(\vec{\sigma}\vec{n})^3 = (\vec{\sigma}\vec{n})^2(\vec{\sigma}\vec{n}) = (\vec{\sigma}\vec{n})\\
&(\vec{\sigma}\vec{n})^4 = (\vec{\sigma}\vec{n})^2(\vec{\sigma}\vec{n})^2 = 1\\
&\qquad\vdots
\end{aligned}
$$

Тогда, разложив (13.9) в степенной ряд, получим:

$$\hat{R} = 1 + i(\vec{\sigma}\vec{n})\frac{\varphi}{2} - \frac{1}{2!}\left(\frac{\varphi}{2}\right)^2 - i(\vec{\sigma}\vec{n})\frac{1}{3!}\left(\frac{\varphi}{2}\right)^3 + \frac{1}{4!}\left(\frac{\varphi}{2}\right)^4 + i(\vec{\sigma}\vec{n})\frac{1}{5!}\left(\frac{\varphi}{2}\right)^5 + \ldots.$$

Собирая отдельно члены, пропорциональные $(\vec{\sigma}\vec{n})$, получим вид оператора вращения вокруг оси $\vec{n}$ на угол φ:

$$\hat{R} = \left\{1 - \frac{1}{2!}\left(\frac{\varphi}{2}\right)^2 + \frac{1}{4!}\left(\frac{\varphi}{2}\right)^4 - \ldots\right\} + i(\vec{\sigma}\vec{n})\left\{\frac{\varphi}{2} - \frac{1}{3!}\left(\frac{\varphi}{2}\right)^3 + \frac{1}{5!}\left(\frac{\varphi}{2}\right)^5 - \ldots\right\}$$

или, поскольку выражения в фигурных скобках соответствуют разложению в степенной ряд косинуса и синуса $\varphi/2$:

$$\hat{R} = \cos\frac{\varphi}{2} + i(\vec{\sigma}\vec{n})\sin\frac{\varphi}{2} \tag{13.10}$$

Это выражение позволяет получить описание состояния, когда спин направлен под произвольным углом. Существует два различных состояния

$$\alpha = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \qquad \beta = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix},$$

где α отвечает состоянию с проекцией на ось z, равной $+\frac{1}{2}$,
β отвечает состоянию с проекцией спина а ось z, равной $-\frac{1}{2}$.

Из этого, например, следует,, что

$$\frac{1}{2}\sigma_z\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \qquad \frac{1}{2}\sigma_z\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = -\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

Общее выражение, разумеется, является суперпозицией двух состояний:

$$\begin{pmatrix}u\\v\end{pmatrix} = u\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + v\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}, \tag{13.11}$$

где вектор-столбец $(u, v)^T$ называется **спинором**.

Пусть есть система координат $K(x, y, z)$. Возьмем вектор z' такой, чтобы он составлял угол θ с осью z, а проекция единичного вектора $\vec{n}$ на плоскость XY составляла угол φ с осью x (см. рис. 13.3).

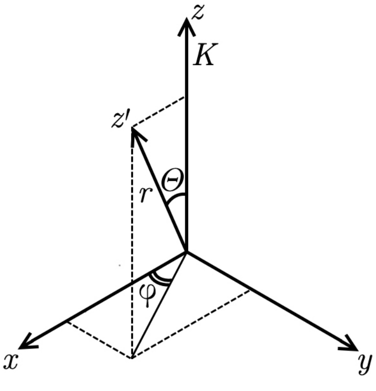

Рис. 13.3.

Пусть в изначальной системе координат K задан спинор

$$\chi = \begin{pmatrix}u\\v\end{pmatrix}$$

Найдем вид этого спинора χ' в повернутой системе координат K'. Ось z можно совместить с осью z' следующим образом: сначала повернуть систему координат на угол φ вокруг оси z, а потом на угол θ вокруг оси y. Таким образом,

$$\chi' = \hat{R}_y(\theta)\hat{R}_z(\varphi)\chi.$$

Найдем матричный вид операторов $\hat{R}_y$ и $\hat{R}_z$. Оператор вращения вокруг оси z, согласно (13.10), имеет следующий вид:

$$\hat{R}_z = \cos\frac{\varphi}{2} + i\sigma_z \sin\frac{\varphi}{2},$$

поскольку вектор $\vec{n}$, совпадающий с осью, вокруг которой происходит вращение, в этом случае направлен вдоль оси z.

Матрица оператора $\hat{R}_z$ будет иметь вид:

$$\hat{R}_z(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\varphi}{2} + i\sin\frac{\varphi}{2} & 0 \\ 0 & \cos\frac{\varphi}{2} - i\sin\frac{\varphi}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\frac{i\varphi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i\varphi}{2}} \end{pmatrix}$$

Найдем теперь вид оператора $\hat{R}_y$. Снова воспользовавшись формулой (13.10), получим:

$$\hat{R}_y = \cos\frac{\theta}{2} I + i\sigma_y \sin\frac{\theta}{2} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2} \\ -\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

В матричном виде выражение для оператора χ' примет вид:

$$\chi' = \hat{R}_y(\theta)\hat{R}_z(\varphi)\chi \qquad (13.12)$$

Существует возможность, наоборот, выразить χ через χ'. Пусть спин направлен по оси z' (см. рис. 13.3).

Чтобы найти вид спинора χ, необходимо умножить матричное выражение (13.12) на обратные операторы:

$$\hat{R}_z^{-1}\hat{R}_y^{-1}\chi' = \chi,$$

где под степенью -1 подразумевается соответствующая замена углов в операторах:

$$\varphi \to -\varphi, \qquad \theta \to -\theta.$$

Таким образом, можно получить выражение для спинора, если спин направлен под углом θ, φ к прежней системе координат. Учитывая, что

$$\chi' = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

то есть χ' направлен по оси z', то

$$\chi = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\varphi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i\varphi}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\varphi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i\varphi}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\varphi}{2}}\cos\frac{\theta}{2} \\ e^{\frac{i\varphi}{2}}\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

Вынесем в этом выражении фазу за скобку и получим:

$$\chi = e^{-\frac{i\varphi}{2}} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \qquad (13.13)$$

Получается, что если спин совпадает по направлению с единичным вектором $\vec{n}$, то состояние по отношению к оси z есть суперпозиция состояний со спином, направленном по и против оси z. Квадрат этой величины, очевидно, нормирован на единицу, поскольку повороты не изменяют нормы.

Попробуем вычислить среднее значение проекции спина, направленного по оси z'. Для этого достаточно вычислить $\overline{\sigma}_x, \overline{\sigma}_y, \overline{\sigma}_z$, поскольку

$$\overline{S}_x = \frac{\hbar}{2}\overline{\sigma}_x, \qquad \overline{S}_y = \frac{\hbar}{2}\overline{\sigma}_y, \qquad \overline{S}_z = \frac{\hbar}{2}\overline{\sigma}_z.$$

Покажем, например, как определить среднее значение $\overline{\sigma}_x$:

$$\overline{\sigma}_x = \chi^* \sigma_x \chi = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & e^{-i\varphi}\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & e^{-i\varphi}\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2} \\ \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} =$$
$$= \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} + \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi} = \frac{\sin\theta}{2}\left(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}\right) = \sin\theta\cos\varphi.$$

Это среднее значение естественно: если спин направлен по оси z', то среднее значение равно проекции спина на ось x. Аналогично можно показать, что

$$\overline{\sigma}_y = \sin\theta\sin\varphi, \qquad \overline{\sigma}_z = \cos\theta.$$

На этом примере, возвращаясь к общим принципам квантовой механики, можно увидеть, какую роль играет разность фаз между состояниями. Из соотношения (13.11) видно, что спинор (13.13) есть суперпозиция двух состояний с проекциями $+\frac{1}{2}$ и $-\frac{1}{2}$ на ось z.

Соотношение фаз между u и v существенно определяет спинор: например, если спин направлен по оси x, то

$$\theta = \frac{\pi}{2}, \qquad \varphi = 0.$$

В этом случае спинор χ примет вид:

$$\chi = e^{-\frac{i\varphi}{2}} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\pi}{4} \\ \sin\frac{\pi}{4} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{13.14}$$

то есть проекция на ось z с равной вероятностью может иметь как положительные, так и отрицательные значения.

Если же спин направлен по оси y, то

$$\theta = \frac{\pi}{2}, \qquad \varphi = \frac{\pi}{2},$$

и, следовательно

$$\chi = \begin{pmatrix} \cos\frac{\pi}{4} \\ i\sin\frac{\pi}{4} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \tag{13.15}$$

В обоих случаях (13.14), (13.15) проекция на ось z с равной вероятностью принимает положительные и отрицательные значения, но отличие в фазе означает, что один спинор представляет состояние со спином, направленным по оси x, а другой — со спином, направленным по оси y.

13.2. Уравнение Паули

Запишем уравнение движения электрона (или любой другой частицы) со спином $\frac{1}{2}$ во внешнем электромагнитном поле. Из курса теории поля известно, что для частицы, не обладающей собственным магнитным моментом

$$s = 0$$

гамильтониан во внешнем поле имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{\left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2}{2m} + e\varphi.$$

Если спин частицы равен $\frac{1}{2}$, то при записи оператора Гамильтона необходимо учесть магнитный момент частицы. В этом случае гамильтониан окажется равным:

$$\hat{H} = \frac{\left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2}{2m} + e\varphi - g\vec{S}\vec{H}, \qquad \chi = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \tag{13.16}$$

где g — гиромагнитное отношение, $\vec{H}$ — напряженность магнитного поля.

Заметим, что выражение (13.16) записано не для однокомпонентной функции, а для спинора, причем матрица, соответствующая бесспиновой части гамильтониана — единичная.

Уравнение Паули имеет вид:

$$\hat{H}\chi = E\chi.$$

Ранее было получено, что уравнение движения частицы в электромагнитном поле обратимо по времени.

В случае, когда спин равен нулю, выполняется равенство

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi,$$

и при замене

$$t \to t' = -t, \qquad \Psi \to \Psi^* \tag{13.17}$$

получим

$$i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t'} = \hat{H}^*\Psi^*. \tag{13.18}$$

В выражении (13.18) комплексно-сопряженный гамильтониан $\hat{H}^*$ получен при учете того, что при обращении времени

$$\vec{A} \to \vec{A}' = -\vec{A}. \tag{13.19}$$

В случае, когда спин не равен нулю, что при обращении времени изменяется собственный магнитный момент:

$$\sigma_y\sigma_i^*\sigma_y = -\sigma_i, \tag{13.20}$$

например

$$\sigma_y\sigma_x^*\sigma_y = -\sigma_x\sigma_y^2 = -\sigma_x.$$

Следовательно, наряду с обращением по времени (13.17) и обращением значения потенциала (**??**) необходимо изменить значение спина на противоположное.

Введем функцию

$$\Psi' = i\sigma_y \Psi^*,$$

аналогичную повороту вокруг оси y на π радиан.

Тогда, умножив в уравнении (13.18) левую и правую часть на $i\sigma_y$, получим

$$i\hbar(i\sigma_y)\frac{\partial}{\partial t}\Psi^* = \frac{\left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2}{2m}(i\sigma_y)\Psi^* - g\, i\sigma_y\, \sigma_i^*\, H_i\, i\sigma_y\,(-i\sigma_y)\Psi^*, \qquad (13.21)$$

в котором, согласно (13.20)

$$i\sigma_y\, \sigma_i\, i\sigma_y = (-1)\cdot(-\sigma_i) = \sigma_i.$$

Следовательно, последнее слагаемое в выражении (13.21) принимает вид:

$$-g\, i\sigma_y\, \sigma_i^*\, H_i\, i\sigma_y\,(-i\sigma_y)\Psi^* = -g\sigma_i H_i(-i\sigma_y)\Psi^* = g\sigma_i H_i \Psi',$$

следовательно, уравнение Паули обратимо по времени.

Таким образом, при обращении по времени у частиц, обладающих ненулевым спином, нужно не только изменить знак $\vec{A}$, но и изменить на π направление спина.

В курсе теоретической механики изучались кватернионы, у которых существует, как известно, четыре единицы: действительная и три мнимых

$$i_0, \quad i_1, \quad i_2, \quad i_3, \qquad (13.22)$$

причем

$$i_0^2 = 1, \qquad i_1^2 = i_2^2 = i_3^2 = -1. \qquad (13.23)$$

Казалось бы, существование четырех мнимых единиц противоречит логике. Возьмем

$$i_i = -i\sigma_i,$$

где нижний индекс i принимает значения $1, 2, 3$.

В этом случае условие (13.23) выпоняется. Действительно, например

$$i_1^2 = (-1)\cdot\sigma_x^2 = -I,$$

то есть мнимые единицы (13.22) надо понимать в смысле единичных матриц.

В общем случае кватернион может быть записан следующим образом:

$$q = a_0 + (\vec{a}\vec{\sigma}).$$

С помощью оператора поворота $\hat{R}$ и кватернионов легко решить, например, следующую задачу: пусть поворот был осуществлен вначале вокруг оси $\vec{n}_1$ на угол φ_1, а затем — вокруг оси $\vec{n}_2$ на угол φ_2 (см. рис. 13.4). Найдем, на какой угол в результате повернется некоторый вектор.

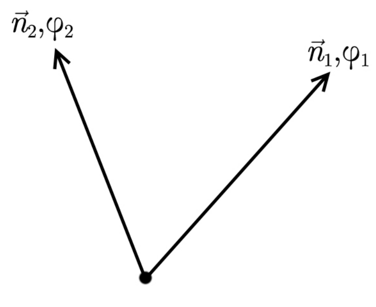

Рис. 13.4.

Результат этих поворотов определяется следующим образом:

$$\left(\cos\frac{\varphi_2}{2} + i\vec{\sigma}\vec{n}_2\sin\frac{\varphi_2}{2}\right)\left(\cos\frac{\varphi_1}{2} + i\vec{\sigma}\vec{n}_1\sin\frac{\varphi_1}{2}\right) =$$
$$= \left(\cos\frac{\varphi_2}{2}\cos\frac{\varphi_1}{2} - \vec{n}_1\vec{n}_2\sin\frac{\varphi_2}{2}\sin\frac{\varphi_1}{2}\right) + i\vec{\sigma}\left(\vec{n}_2\sin\frac{\varphi_2}{2}\cos\frac{\varphi_1}{2} + \vec{n}_1\sin\frac{\varphi_1}{2}\cos\frac{\varphi_2}{2}\right) +$$
$$+ [\vec{n}_1\times\vec{n}_2]\sin\frac{\varphi_1}{2}\sin\frac{\varphi_2}{2}.$$

Следовательно, поскольку общий поворот на некоторый угол φ также может быть представлен с помощью оператора поворота следующим образом:

$$\cos\frac{\varphi}{2} + i\vec{\sigma}\vec{n}\sin\frac{\varphi}{2},$$

то

$$\cos\frac{\varphi}{2} = \cos\frac{\varphi_2}{2}\cos\frac{\varphi_1}{2} - \vec{n}_1\vec{n}_2\sin\frac{\varphi_2}{2}\sin\frac{\varphi_1}{2}.$$

В воспоминаниях профессора Бориса Евсеевича Чертока (заместителя С.П. Королева) описан следующий интересный факт: при решении задачи о стыковке космических аппаратов возникли некоторые трудности. Эти трудности были связаны с тем, что компьютерная техника не была достаточно развита для решения подобного класса задач.

В США для решения этого класса задач применялись мощнейшие по тем временам суперкомпьютеры, в то время как в СССР удалось силами двух выпускников МФТИ, использовавших в расчетах кватернионы, решить задачу о нахождении углов поворота.

Таким образом, матрицы Паули с точностью до $-i$ представляют собой единицы кватернионов.