

Spin

Videli smo, da lahko uporabimo magnetno polje, da določimo stransko in magnetno kvantno število stanja elektrona v atomu. Če pošljemo curek atomov v nehomogeno magnetno polje, deluje na atome v tem curku magnetna sila

$$F_z = \mu_z \frac{\partial B}{\partial z} = -\mu_B m \frac{\partial B}{\partial z}$$

Na vodikove atome, ki imajo enako glavno kvantno število in različna stranska in magnetna števila, deluje različna magnetna sila. Če imamo v curku zastopana stanja z vsemi kombinacijami stranskih in magnetnih kvantnih števil, se nam curek v magnetnem polju razcepi na $2l + 1$ delnih curkov. Se pravi, če določimo število delnih curkov, sklepamo, kakšno je stransko kvantno število oziroma kakšen je kvadrat vrtilne količine. Z določitvijo položaja delnega curka pa določimo magnetno kvantno število oziroma projekcijo vrtilne količine v smeri osi z .

Sedaj si zamislimo, da pošljemo pravokotno na nehomogeno magnetno polje curek vodikovih atomov v osnovnem stanju, kjer je stransko kvantno število enako nič, prav tako je tudi magnetno kvantno število enako nič. Na curek ne deluje nobena magnetna sila, zato se curek ne bi smel razcepiti. Če poizkus v resnici izvedemo, to ne drži. Curek vodikovih atomov se razcepi na dva delna curka, ker je v nasprotju z našimi pričakovanji.

Prvi takšen poizkus sta naredila W. Gerlach in O. Stern, zato ta poizkus imenujemo Stern-Gerlachov poizkus. V pečici sta segrevala srebro pri $1000\text{ }^\circ\text{C}$. Dobila sta pare srebra, ki so izhajale skozi odprtino v pečici v nehomogeno magnetno polje. Za magnetnim poljem sta imela zaslon. Srebrov atom ima samo en elektron v zunanji lupini. Ta elektron ima se nahaja v s orbitali. Osnovno stanje srebrovega atoma je podobno kot za vodikov atom. Srebro ima en zunanji elektron, ki ima stransko kvantno število enako nič kot vodikov atom. To pomeni, da se srebrov curek ne bi smel razcepiti. Pri poizkusu se je curek presenetljivo razcepil na dva delna curka. Razcep na dva curka nam pravi, da ima stanje magnetni moment različen od nič in, ker je magnetni moment zaradi obhodne vrtilne količine enak nič, mora imeti elektron še neko dodatno vrtilno količino, ki jo imenujemo spin. Spin imenujemo lastna vrtilna količina elektrona. Glede na to, da se curek vodikovih atomov razcepi na dva delna curka sklepamo, da mora imeti spin dve stanji. Število stanj je enako $2s + 1$, se pravi, da mora biti velikost spina enaka $\frac{1}{2}$. To je v nasprotju z do sedaj poznanim. Za vrtilno količino smo rekli, da je kvantno število velikosti vedno celo število. Rezultat Stern-Gerlachovega poizkusa nam pove, da je velikost vrtilne količine lahko tudi polovična, vendar pa ta vrtilna količina ni posledica gibanja elektrona okoli jedra, temveč je to nova vrsta vrtilne količine. Predstavljamo si lahko podobno kot v planetarnem sistemu. Elektron ima dve vrtilni količini, eno zaradi kroženja okoli jedra in drugo zaradi vrtenja okoli lastne osi. Vedeti pa moramo, da je to samo analogija za lažje razumevanje. Poglejmo si sedaj operatorje spina. Ker je spin vrtilna količina, imajo operatorji spina iste relacije kot operatorji obhodne vrtilne količine. Spin ni odvisen od koordinat našega prostora (točneje: deluje v t. i. spinskih koordinatah, ki so diskretne), zato operatorjev spina ne moremo izraziti s koordinatami, zapišemo lahko samo komutacijske zveze

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z$$

$$[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x$$

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y$$

Komponente operatorja vektorja spina ne komutirajo med seboj, kakor ne komutirajo komponente obhodne vrtilne količine. To pomeni, da za spin tudi ne moremo poznati vse komponent istočasno, temveč se moramo zadovoljiti samo z vrednostjo ene komponente. Lahko pa poznamo velikost kvadrata spina, saj operator kvadrata spina, ki je definiran kot

$$\widehat{S^2} = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$$

komutira z operatorji vseh komponent

$$[\widehat{S^2}, \widehat{S}_x] = [\widehat{S^2}, \widehat{S}_y] = [\widehat{S^2}, \widehat{S}_z] = 0$$

Velikost kvadrata spina je enaka $\frac{1}{2}\hbar$ in to označimo s spinskim kvantnim številom s . Projekcija spina v smeri osi z pa ima lahko dve vrednosti. Projekcijo spina označimo s kvantnim številom projekcije spina m_s , ki lahko zavzame vrednosti $-\frac{1}{2}$ ali $\frac{1}{2}$. Polovični spini nimajo klasične analogije. Vrednost spina $\frac{1}{2}$ pomeni, da se mora delec zavrteti za dva polna kota, da pride v isto stanje kot je bil na začetku, kar je v nasprotju z logiko klasične mehanike. Poudariti moramo še, da v kvantni mehaniki spina ne moremo izpeljati, to lahko naredimo šele v relativistični kvantni mehaniki s pomočjo Diracove enačbe. Za spin imamo dve možni stanji, oziroma dve valovni funkciji, ki pa ju ne moremo izraziti s koordinatami, zapišemo lahko samo, kako na omenjeni funkciji delujejo operatorji spina. Označimo stanje s kvantnima številoma $s = \frac{1}{2}$, $m_s = \frac{1}{2}$ kot

$$\alpha = \psi\left(s = \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2}\right) = |\uparrow\rangle$$

in stanje z $s = \frac{1}{2}$, $m_s = -\frac{1}{2}$ kot

$$\beta = \psi\left(s = \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2}\right) = |\downarrow\rangle$$

Velikost spina ima za elektron vedno vrednost $s = \frac{1}{2}$, zato ga po navadi ne navajamo. Omenjeni funkciji sta lastni funkciji operatorja kvadrata velikosti spina in operatorja projekcije spina na os z . To lahko zapišemo kot

$$\hat{S}_z\alpha = \frac{1}{2}\hbar\alpha, \hat{S}_z\beta = -\frac{1}{2}\hbar\beta$$

$$\widehat{S^2}\alpha = s(s+1)\hbar^2\alpha = \frac{3}{4}\hbar^2\alpha, \widehat{S^2}\beta = \frac{3}{4}\hbar^2\beta$$

Spinski funkciji sta med seboj ortogonalni in normirani

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = 1, \langle \beta | \beta \rangle = 1$$

$$\langle \alpha | \beta \rangle = 0$$

Omenjeni integrali so po spinskih koordinatah.

Videli smo, da moramo pri elektronu upoštevati tudi spin in spinska stanja, torej moramo pri stanju elektrona v atomu upoštevati tudi spin. Za elektron v osnovnem stanju vodikovega atoma imamo tako dve možnosti

$$\psi_{100}(r, \vartheta, \varphi) \alpha \text{ in } \psi_{100}(r, \vartheta, \varphi) \beta$$

To pomeni, da imamo dve funkciji za osnovno stanje, se pravi, da je degeneracija osnovnega nivoja enaka 2. Valovna funkcija splošnega stanja je določena s petimi kvantnimi števili

$$|n, l, m, s, m_s\rangle = \psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi)(\alpha \text{ ali } \beta)$$

Ker pa je kvantno število velikosti spina pri elektronu vedno enako $\frac{1}{2}$, ga navadno ne podajamo in valovno funkcijo opišemo s štirimi kvantnimi števili

$$|n, l, m, m_s\rangle$$

Opazimo, da se število stanj v vodikovem atomu z upoštevanjem spina podvoji. Degeneracija n -tega nivoja tako postane $2n^2$. Vsa ta stanja imajo isto energijo, dokler atom ni v magnetnem polju.