Решение уравнения Шредингера с учетом спина электрона

Якубовский Е.Г.

e-mail yalubovski@rambler.ru

Для решения уравнения Шредингера с учетом спина электрона нужно описание спиновой части волновой функции электрона. Для этого используется телесный угол и аналог азимутального угла. Телесный угол имеет период 4π и описывает полуцелый спин. Угловая часть волновой функции образует сферическую функцию нечетного порядка с соответствующими углами.

Основным свойством телесного угла является равенство см. [1] глава III, раздел 54.

$$grad\Omega = \oint \frac{[d\mathbf{l},\mathbf{r}]}{r^3}.$$

Причем при вращении вершины телесного угла, по замкнутому пути, проходящем через поверхность, натянутой на замкнутый контур телесный угол получает приращение 4π.

$$\oint (grad\Omega, dx) = 4\pi(n+1/2) = \Omega + 4\pi n.$$

Слагаемое ½ является следствием нахождения начальной вершины телесного угла на поверхности, натянутой на заданный контур.

При этом имеем $\psi^1 = \exp(i\Omega/2), \psi^2 = \exp(-i\Omega/2), \psi = \left\| \begin{matrix} \exp(i\Omega/2) \\ \exp(-i\Omega/2) \end{matrix} \right\|$.

Причем справедливо

$$(s_x\psi)^1 = \frac{\psi^2}{2}; (s_y\psi)^1 = -\frac{i\psi^2}{2}; (s_z\psi)^1 = \frac{\psi^1}{2}$$
$$(s_x\psi)^2 = \frac{\psi^1}{2}; (s_y\psi)^2 = \frac{i\psi^1}{2}; (s_z\psi)^2 = -\frac{\psi^2}{2}$$

Где s_x, s_y, s_z это матрицы Паули. Это аналог вращения угла в одной плоскости вокруг заданной точки. При вращении вокруг точки по замкнутому пути угол получает приращение 2π. При вращении вершины телесного угла проходя поверхность, натянутую на заданную кривую, получается приращение 4π. Тогда волновая функция собственного вращения равна $\exp[is\oint (grad\Omega, dx)] = \exp[i(\Omega + 4\pi k)s] = \exp(i\Omega s), s = 1/2$.

При этом телесный угол определяет спиновый оператор поворота вокруг произвольной оси

$$R_n(\Omega) = \exp(i\Omega s_n) = \exp(i\Omega\sigma_n / 2) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\Omega/2)^k}{k!}\sigma_n^k =$$

$$= E\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\Omega/2)^{2k}}{(2k)!} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\Omega/2)^{2k+1}}{(2k+1)!}\sigma_n = E\cos\Omega/2 + i\sigma_n \sin\Omega/2 =$$

$$= \begin{Vmatrix} \cos\Omega/2 + in_z \sin\Omega/2 & in_- \sin\Omega/2 \\ in_+ \sin\Omega/2 & \cos\Omega/2 - in_z \sin\Omega/2 \end{Vmatrix}, \sigma_n = (\sigma_i, n_i) = \begin{Vmatrix} n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & -n_z \end{Vmatrix}$$

А производная по телесному углу определяет собственное значение

$$-i\frac{\partial R_n(\Omega)}{\partial\Omega} = s_n R_n(\Omega) = sR_n(\Omega); R_n(\Omega) = \exp(is_n\Omega)$$

Но как определить азимутальный угол. Для этого продолжим угол θ на величину $\Theta = 2\pi(l + 1/2)$. Тогда половина этого угла определит положительный радиус телесного угла. На следующем периоде координата x_3 изменит свой знак, т.е. будет описана и отрицательная проекция σ_z. Формула преобразования координат

$$\sigma_i x_i = \begin{Vmatrix} x_3 & x_1 - ix_2 \\ x_1 + ix_2 & -x_3 \end{Vmatrix} = r\begin{Vmatrix} \cos\Theta/2 & \sin\Theta/2\exp(-i\Omega/2) \\ \sin\Theta/2\exp(i\Omega/2) & -\cos\Theta/2 \end{Vmatrix}.$$

с центром электрона в точке О, лежащим в центре окружности. и образовать поверхность, натянутую на эту окружность В,С. Причем окружность и натянутая на эту окружность поверхность B,C должны лежать в одной произвольной плоскости, перпендикулярной плоскости рисунка. При этом вершина телесного угла A, начальная точка которого, находящаяся на этой поверхности B,C в центре окружности, будет двигаться перпендикулярно натянутой поверхности вдоль прямой, проходящей через центр электрона и окружности точка O. Телесный угол при возврате в начальную точку в близи поверхности, снизу от нее равен 2π, а сверху от нее равен -2π и испытает скачок 4π проходя через поверхность, как и угол φ сферической системы координат испытает скачок 2π при возврате в начальную точку и его надо продолжить как многозначную функцию. Так же как угол φ лежит в одной плоскости, перпендикуляр, который описывает вершина телесного угла Ω, изменяется снизу на отрезке $[0,2\pi]$, а сверху на отрезке $[-2\pi,0]$. Тогда центр электрона является центром поворота на угол $\varphi = \Omega/2$, в плоскости, перпендикулярной рисунку. Проекция этой окружности отрезок BOC. Образуем угол поворота на $2\theta = \Theta \in [0,2\pi]$, лежащий в произвольной плоскости, ортогональной натянутой на окружность поверхности, и проходящей через центр электрона. Половина этого угла соответствует углу сферической системы координат $\theta = \Theta/2$.

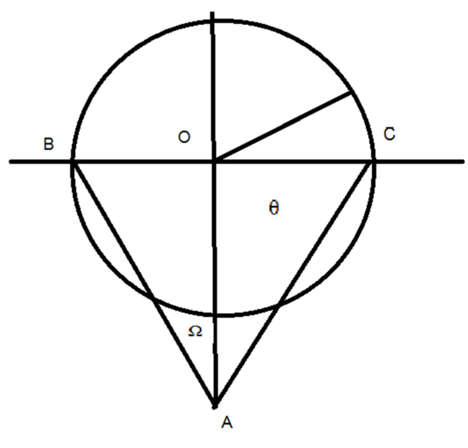

Рис.1 Изображение телесного угла

Точка O центр электрона. Точки B,C проекция окружности, с плоскостью, перпендикулярной плоскости рисунка, на которую натянута поверхность BC.

Точка А вершина телесного угла $\varphi = \Omega/2$. Угол φ описывает окружность, плоскость которой перпендикулярна плоскости рисунка, и проекция которой отрезок BOC. Угол $\theta = \Theta/2$.

В книге [1] глава III, раздел 55 приведена формула

$$\int_{12} \mathbf{B} d\mathbf{s} = \frac{I}{c}(\Omega_2 - \Omega_1).$$

Перепишем эту формулу в виде в случае если изменение координаты происходит в одной плоскости

$$B_\varphi r(\varphi) d\varphi = \frac{I}{c} d\Omega.$$

Полагая все коэффициенты равными константе, получаем

$$d\varphi = K d\Omega, K = const$$

В силу периода угла φ, равного 2π и периода у телесного угла, равного 4π, получаем связь между коэффициентами $\varphi = \Omega/2$.

Уравнение Шредингера имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi.$$

В этом уравнении используются введенные углы спиноров, и оператор Лапласа выглядит таким образом

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}] +$$

$$+ \frac{\alpha}{4r^2}[\frac{1}{\sin\Theta/2}\frac{\partial}{\partial\Theta/2}(\sin\Theta/2\frac{\partial}{\partial\Theta/2}) + \frac{1}{\sin^2\Theta/2}\frac{\partial^2}{\partial(\Omega/2)^2}] =$$

$$= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{L(L+1) + \alpha\frac{\sigma}{2}(\frac{\sigma}{2}+1)}{r^2}, L_{eff}(L_{eff}+1) = L(L+1) + \alpha\frac{\sigma}{2}(\frac{\sigma}{2}+1);$$

$$\alpha = \mp(\frac{e}{\sqrt{\hbar c}})^{L!/2} = \mp\frac{1}{137^{L!/2}}, E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2(n_r + L_{eff} + 1)^2}$$

$$\frac{1}{\sin\Theta/2}\frac{\partial}{\partial\Theta/2}(\sin\Theta/2\frac{\partial}{\partial\Theta/2}) - \frac{(\sigma_z)^2}{\sin^2\Theta/2} + \sigma(\sigma+2) = 0$$

$$\psi(r,\Theta,\Omega) = R_{n_r L_{eff}}(r)Y_{lm}(\theta)Y_{\sigma\sigma_z}(\Theta/2)\exp(im\varphi + i\sigma_z\Omega/2)$$

$$R_{n_r L}(r) = F(-n_r, L_{eff}, r) = \frac{1}{L_{eff}(L_{eff}+1)...(L_{eff}+n_r-1)} z^{1-L_{eff}} \times$$

$$\times\exp(r)\frac{d^{n_r}}{dr^{n_r}}[\exp(-r)r^{n_r+L_{eff}-1}];$$

Где величина σ, σ_z определяют суммарный модуль спина электронов, и его проекцию. Сферические функции полуцелого порядка определяются полиномом Лежандра нечетного порядка $Y_{\sigma\sigma_z}(\Theta/2) \sim P_{\sigma}^{\sigma_z}(\cos\Theta/2)$.

Экспериментально определена и приведена в [2] поправка к возбужденному состоянию атома гелия при условии $L = 0,1,2$ и суммарному спину $S = 0,1$. При условии $S = 0$ поправка равна нулю, поэтому считалась удвоенная поправка при $S = 1/2$.

При суммарном спине электронов равном $S = 0$.

L	0	1	2
Δ_L, *эксперимент*	-0.14	0.012	-0.0022
Δ_L, *теория*	-0.137	0.0428	-0.00219

При суммарном спине электронов равном $S = 1$.

L	0	1	2
Δ_L, *эксперимент*	-0.296	-0.068	-0.0029
Δ_L, *теория*	-0.21	-0.058	-0.00292

При положительной поправки Ридберга наблюдается расхождение с экспериментом. При орбитальном квантовом числе, равном $L = 3$ поправка равна $\Delta_{L=3} = -10^{-7}$.

Литература

1. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Т. III. Электричество Физматлит, 2004, 656стр.

2. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика Нерелятивистская теория т.III, Наука, М.,1969,768с.