

1 Spin

Fino ad ora, abbiamo considerato l'elettrone come una particella con tre gradi di libertà associati alle sue tre coordinate x , y e z . La teoria quantistica che abbiamo sviluppato si basa sull'ipotesi che lo stato di una particella, in un dato momento, è caratterizzato da una funzione d'onda $\psi(x, y, z)$ che dipende solo dalle coordinate spaziali. All'interno di questo quadro, abbiamo studiato un certo numero di sistemi fisici: tra gli altri, l'atomo di idrogeno che è particolarmente interessante a causa degli esperimenti molto precisi che possono essere eseguiti su di esso. I risultati trovati descrivono effettivamente l'emissione e spettri di assorbimento dell'idrogeno molto accuratamente. Danno i livelli di energia correttamente e rendono possibile spiegare, utilizzando le funzioni d'onda corrispondenti, le regole di selezione (che indicano quali frequenze, tra tutte le frequenze di Bohr che sono possibili a priori, appaiono nello spettro). Atomi con molti elettroni possono essere trattati in modo analogo (usando però approssimazioni, infatti la complessità dell'equazione di Schroedinger, anche per l'atomo di elio con due elettroni, rende impossibile una soluzione analitica esatta del problema). Anche per atomi a molti elettroni l'accordo tra teoria ed esperimenti è soddisfacente. Tuttavia, quando gli spettri atomici sono studiati in dettaglio, compaiono alcuni fenomeni, come vedremo, che non si può interpretare nel quadro della teoria che abbiamo sviluppato. Questo risultato non è sorprendente. È chiaro che è necessario completare la teoria precedente con un certo numero di correzioni relativistiche: bisogna prendere in considerazione le modifiche apportate dalla cinematica relativistica (variazione di massa con velocità, ecc.) e effetti magnetici che abbiamo trascurato. Sappiamo che queste correzioni sono piccole: tuttavia, esse esistono e possono essere misurate. L'equazione di Dirac fornisce una descrizione relativistica della meccanica quantistica. Rispetto all'equazione di Schroedinger, implica una profonda modifica nella descrizione quantica delle proprietà dell'elettrone; in aggiunta le correzioni già segnalate riguardo alle sue variabili di posizione, una nuova caratteristica dell'elettrone appare: lo spin. Storicamente, lo spin è stato scoperto sperimentalmente prima dell'introduzione dell'equazione di Dirac. Prima di Dirac, Pauli sviluppò una teoria che consentiva allo spin di essere incorporato semplicemente nella meccanica quantistica non relativistica attraverso l'aggiunta di alcuni postulati supplementari. A partire da questi postulati, si ottengono quindi spettri atomici che sono in ottimo accordo con i risultati sperimentali. È la teoria di Pauli, molto più semplice di quella di Dirac, che stiamo per sviluppare in questo capitolo. Inizieremo descrivendo un certo numero di risultati sperimentali che hanno rivelato l'esistenza dello spin elettronico. Poi definiremo i postulati su cui si basa la teoria di Pauli. Successivamente, esamineremo le proprietà del momento angolare $1/2$. Infine, mostreremo, come si possono prendere in considerazione contemporaneamente le variabili di posizione e di spin nella descrizione degli elettroni.

2 Atomi in campi magnetici

Quando un atomo è posto in un campo magnetico uniforme, ciascuna delle sue linee si divide in un certo numero di linee equidistanti, separate da una quantità proporzionale al campo magnetico: questo è l'effetto Zeeman. La spiegazione teorica dell'effetto Zeeman è basata sul fatto che un momento magnetico \mathbf{M} è associato al momento angolare orbitale

$$\mathbf{M} = \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L}$$

dove μ_B è chiamato magnetone di Bohr. Tuttavia, mentre questa teoria è confermata dall'esperimento in alcuni casi (il cosiddetto effetto Zeeman "normale"), in altri casi, (il cosiddetto effetto Zeeman "anomalo") la teoria fallisce. L'anomalia si rivela per gli atomi con numero atomico Z dispari (in particolare, per l'atomo di idrogeno): i loro livelli sono divisi in un numero pari di linee di Zeeman mentre, secondo la teoria, questo numero dovrebbe essere sempre dispari, essendo uguale a $(2l + 1)$ con l intero.

3 Stern-Gerlach

Un altro esperimento storico, eseguito da Stern e Gerlach, segnala la presenza di valori del momento angolare semi-interi. Quando un fascio di atomi di argento viene fatto passare in una zona in cui è presente un gradiente di campo magnetico, il fascio si divide in due sottofasci, suggerendo che il momento angolare associato al momento magnetico ha solo due stati.

3.1 La storia: L' esperimento di Stern e Gerlach

L'esperimento di Stern-Gerlach (1922) ha dimostrato la quantizzazione del momento angolare. L'esperimento consiste nello studio della deflessione di un fascio di atomi di argento che viaggia in un campo magnetico spazialmente inhomogeneo. L'apparato è mostrato nella figura

Atomi di argento contenuti in una fornace E, riscaldata ad alta temperatura, escono attraverso una piccola apertura e si propagano in linea retta nel vuoto che esiste all'interno di tutto l'apparato. Una fenditura collimatrice F seleziona quegli atomi la cui velocità è parallela a una direzione particolare che chiameremo asse Oy. Il fascio di atomi così costruito attraversa lo spazio di un elettromagnete A prima di condensare su un piatto P.

Descriviamo le caratteristiche del campo magnetico B prodotto dall'elettromagnete A. Questo campo magnetico ha un piano di simmetria (piano yOz) che contiene la direzione iniziale Oy del fascio atomico. Il campo magnetico è lo stesso in tutti i punti situati su una qualsiasi linea parallela a Oy (i bordi dell'elettromagnete sono paralleli a Oy e trascuriamo gli effetti di bordo). B non ha componenti lungo Oy. La sua più grande componente è lungo Oz; varia fortemente con z: nella figura 1-b, le linee del campo sono molto più vicine

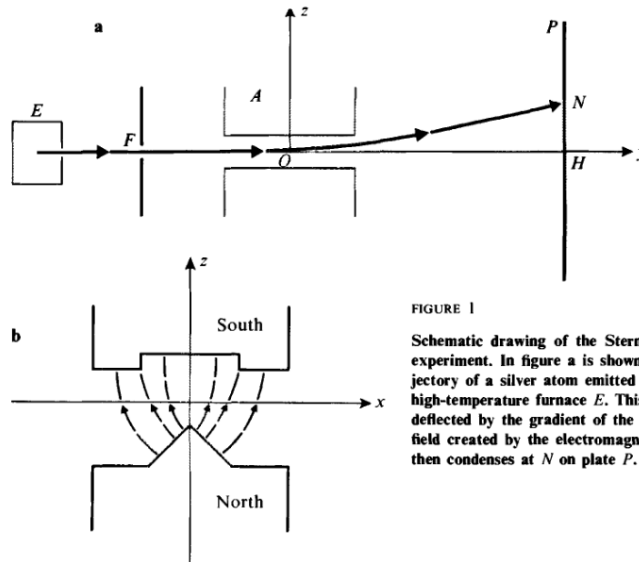


FIGURE 1

Schematic drawing of the Stern-Gerlach experiment. In figure a is shown the trajectory of a silver atom emitted from the high-temperature furnace E. This atom is deflected by the gradient of the magnetic field created by the electromagnet A and then condenses at N on plate P.

Figure b shows a cross section in the xOz plane of the electromagnet A; the lines of force of the magnetic field are shown in dashed lines. B_z has been assumed to be positive and $\partial B_z / \partial z$, negative. Consequently, the trajectory of figure a corresponds to a negative component \mathcal{M}_z of the magnetic moment, that is, to a positive component of \mathcal{S}_z (γ is negative for a silver atom).

vicino al polo nord che vicino al polo sud del magnete. Certo, dal momento che il campo magnetico ha un flusso conservato ($\text{div } \mathbf{B} = 0$), deve anche avere un componente lungo Ox che varia con la distanza x dal piano di simmetria.

Bisogna anche notare, in primo luogo, che gli atomi d'argento, essendo neutri, non sono soggetti al Forza di Lorentz. D'altra parte, possiedono un momento magnetico permanente \mathbf{M} (sono atomi paramagnetici); le forze risultanti derivano dall'energia potenziale

$$W = -\mathbf{M} \cdot \mathbf{B}$$

L'esistenza, per un atomo, di un momento magnetico elettronico \mathbf{M} e' dovuto a due cause: il movimento degli elettroni intorno al nucleo (la corrispondente rotazione delle cariche e' responsabile per l'aspetto di un momento magnetico orbitale) e il momento angolare intrinseco degli elettroni, a cui e' associato uno momento magnetico di spin. Assumiamoci qui senza provarlo che \mathbf{M} e $\mathbf{J} = \mathbf{S} + \mathbf{L}$ sono proporzionali. La costante di proporzionalita' γ e' chiamata rapporto giromagnetico (e dipende del livello energetico in considerazione). Prima che gli atomi attraversino l'elettromagnete, i momenti magnetici degli atomi di argento che compongono il fascio atomico sono orientati casualmente (isotropicamente). Studiamo l'azione del campo magnetico su uno di questi atomi, il cui momento magnetico \mathbf{J} ha una determinata direzione all'ingresso del magnete. Dall'espressione per l'energia potenziale, e' facile dedurre che la risultante delle forze esercitate sull'atomo sono:

$$\mathbf{F} = \nabla(\mathbf{M} \cdot \mathbf{B})$$

(la forza risultante sarebbe uguale a zero se il campo \mathbf{B} fosse uniforme) ed il momento torcente relativo alla posizione dell'atomo e':

$$\mathbf{\Gamma} = \mathbf{M} \times \mathbf{B}$$

Poiche'

$$\frac{d\mathbf{J}}{dt} = \mathbf{\Gamma} = \gamma \mathbf{J} \times \mathbf{B}$$

l'atomo si comporta quindi come un giroscopio. $\frac{d\mathbf{J}}{dt}$ e' perpendicolare a \mathbf{J} ed il momento angolare ruota attorno al campo magnetico mentre l'angolo θ tra \mathbf{J} e \mathbf{B} rimane costante. La velocita' angolare rotazionale e' uguale al prodotto del rapporto giromagnetico γ e il modulo del campo magnetico. Le componenti di \mathbf{M} che sono perpendicolari al campo magnetico quindi oscillano intorno a zero, la componente parallela a \mathbf{B} rimanente costante.

Per calcolare la forza \mathbf{F} , possiamo con una buona approssimazione, trascurare in W i termini proporzionali a M_x e M_y e assumere M_z costante. Cio' e' dovuto alla frequenza di oscillazione dovuta alla rotazione di \mathbf{M} e' cosi' grande che solo i valori mediati nel tempo di M_x e M_y possono avere un ruolo in W , e questi sono entrambi zero. Di conseguenza, e' come se l'atomo fosse sottoposto alla sola forza

$$\mathbf{F} = \nabla(M_z B_z) = M_z \nabla B_z$$

Inoltre, le componenti di ∇B lungo Ox e Oy sono zero: $dB/dy = 0$ perche' il campo magnetico e' indipendente da y e $dB/dx = 0$ in tutti i punti del piano di simmetria yOz . La forza sull'atomo e' quindi parallela a Oz e proporzionale a M_z . Poiche' e' questa forza che produce la deflessione HN dell'atomo, HN e' proporzionale a M_z (e quindi a J_z). Di conseguenza, misurare HN equivale a misurare M_z o J_z .

Poiche' all'ingresso del magnete i momenti dei vari atomi del fascio sono distribuiti in modo isotropico (tutti i valori di M_z sono possibili) ci aspettiamo che il fascio formi un singolo *spot*, simmetrico rispetto a H, sul piatto P. Il limite superiore N_1 e il limite inferiore N_2 di questo schema corrispondono in linea di principio al valore massimo e al valore minimo di M_z . Infatti, la dispersione delle velocita' e la larghezza finita della fenditura F causano la condensazione degli atomi aventi un determinato valore di M_z , non nello stesso punto, ma in un punto centrato sulla deflessione corrispondente alla velocita' media.

I risultati dell'esperimento (eseguiti per la prima volta nel 1922 da Stern e Gerlach) sono in completa contraddizione con le predizioni precedenti. Non si osserva un singolo punto centrato su H, ma due punti centrati nei punti N_1 e N_2 , simmetrici rispetto a H (la larghezza di questi due i punti corrispondono all'effetto della dispersione delle velocita' e della larghezza della fessura F). Le previsioni della meccanica classica sono quindi incapaci di predire il risultato sperimentale.

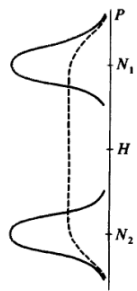


FIGURE 3

Spots observed on the plate P in the Stern-Gerlach experiment. The magnetic moments \mathcal{M} of the atoms emitted from the furnace E are distributed randomly in all directions of space, so classical mechanics predicts that a measurement of \mathcal{M}_z can yield with equal probability all values included between $+\lvert\mathcal{M}\rvert$ and $-\lvert\mathcal{M}\rvert$. One should therefore observe only one spot (dashed lines in the figure). In reality, the result of the experiment is completely different: two spots, centered at N_1 and N_2 , are observed. This means that a measurement of \mathcal{M}_z can yield only two possible results (quantization of the measurement result).

I risultati dell'esperimento portano quindi alla seguente conclusione: se misuriamo la componente L_z del momento angolare dell'atomo di argento (nello stato fondamentale) possiamo trovare solo uno o l'altro dei due valori corrispondente alle deflessioni N_1 e N_2 . Siamo quindi obbligati a rifiutare l'immagine classica di un vettore L_z che può assumere qualsiasi valore. L_z è una quantità fisica quantizzata il cui spettro discreto include solo due autovalori. La rotazione dell'atomo d'argento nel suo stato fondamentale è dunque descritta da un momento angolare (intrinseco) pari a $1/2$.

4 Postulati aggiuntivi (Pauli)

Nel 1925 Ulenbeck and Goudsmit proposero la seguente ipotesi: l'elettrone "gira" e questo gli conferisce un momento angolare intrinseco \mathbf{S} che viene chiamato spin. Per interpretare i risultati sperimentali si deve anche assumere che allo spin sia associato un momento magnetico

$$\mathbf{M}^S = 2 \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{S}$$

Si noti che il coefficiente di proporzionalità tra il momento angolare e il momento magnetico è due volte più grande di quello orbitale: si dice che lo spin abbia un rapporto giromagnetico doppio del rapporto giromagnetico orbitale. Pauli più tardi formulò questa ipotesi più precisamente e diede una descrizione quantistica dello spin che è valido nel limite non relativistico, attraverso una serie di postulati aggiuntivi a quelli precedentemente studiati.

Fino ad ora, abbiamo studiato la quantizzazione delle variabili orbitali. Con la posizione \mathbf{r} e il momento \mathbf{p} di una particella abbiamo associato gli osservabili \mathbf{R} e \mathbf{P} che agiscono nello spazio delle funzioni d'onda. Chiameremo tale spazio adesso \mathcal{F}_r . A queste variabili orbitali aggiungiamo adesso delle ulteriori variabili di spin che soddisfano i postulati seguenti:

- (i) L'operatore di spin \mathbf{S} è un momento angolare. Questo significa che le sue tre componenti sono osservabili che soddisfano i rapporti di commutazione:

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z$$

e le due formule che sono dedotte dalla permutazione ciclica degli indici x , y e z .

- (ii) Gli operatori di spin agiscono in un nuovo spazio, lo "spazio dello spin" \mathcal{F}_s dove \mathbf{S}^2 e S_z costituiscono un C.S.C.O. Lo spazio \mathcal{F}_s è definito dall'insieme di stati $|s, m\rangle$ comuni a S^2 e S_z

$$\mathbf{S}^2|s, m\rangle = s(s+1)\hbar^2|s, m\rangle \quad S_z|s, m\rangle = m\hbar|s, m\rangle$$

Secondo la teoria generale del momento angolare noi sappiamo che s deve essere intero o semi-intero e che m assume tutti i valori inclusi tra $-s$ e $+s$ e che differiscono tra questi due numeri per un intero (che può essere zero). Una determinata particella è caratterizzata da un valore unico di s . Lo spazio \mathcal{F}_s ha dunque dimensione $2s+1$ e tutti gli stati di spin sono autovettori di \mathbf{S}^2 con lo stesso autovalore $(s(s+1)\hbar^2)$.

- (iii) \mathcal{F} è il prodotto tensoriale tra \mathcal{F}_r e \mathcal{F}_s e gli osservabili di spin commutano con gli osservabili orbitali.
- (iv) L'elettrone è una particella di spin $1/2$. Lo spazio \mathcal{F}_s per l'elettrone è uno spazio bidimensionale.

5 Spin 1/2

Ci limiteremo da ora in poi al caso dell'elettrone, che è una particella di spin $1/2$. Dai capitoli precedenti, sappiamo come gestire le sue variabili orbitali. Ora studieremo più dettagliatamente i suoi gradi di libertà di spin. Lo spazio delle variabili di spin è bidimensionale. Prenderemo come base il sistema ortonormale $|+\rangle, |-\rangle$ di autovalori comuni a \mathbf{S}^2 e S_z che soddisfare le equazioni:

$$\mathbf{S}^2|\pm\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\pm\rangle \quad S_z|\pm\rangle = \pm\frac{1}{2}\hbar|\pm\rangle$$

con

$$\langle +|-\rangle = 0 \quad \langle +|+\rangle = \langle -|-\rangle = 1 \quad |+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -| = 1$$

Lo stato di spin più generale è descritto da un vettore arbitrario

$$|\chi\rangle = c_+|+\rangle + c_-|-\rangle$$

dove c_+ e c_- sono numeri complessi. Tutti i kets di \mathcal{F}_s sono autovettori di \mathbf{S}^2 con lo stesso autovalore $3\hbar^2/4$, che fa sì che \mathbf{S}^2 sia proporzionale all'operatore identità (con coefficiente di proporzionalità pari a $3\hbar^2/4$)

Poichè \mathbf{S} è, per definizione, un momento angolare, possiede tutte le proprietà derivate per i momenti angolari. L'azione degli operatori:

$$S_{\pm} = S_x \pm iS_y$$

sui vettori di base $|+>$ e $|->$ è dato dalle formule generali

$$S_+|+>=0 \quad S_+|->=\hbar|+> \quad S_-|+>=\hbar|-> \quad S_-|->=0$$

Qualsiasi operatore che agisca nello spazio \mathcal{F}_s può essere rappresentato, nella base $|\pm>$ da una matrice 2×2 . In particolare, le matrici corrispondenti a S_x , S_y e S_z sono espresse nella forma:

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$$

dove $\boldsymbol{\sigma}$ designa l'insieme delle tre matrici Pauli:

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

Le matrici di Pauli possiedono le seguenti proprietà, che possono essere facilmente verificato dalla loro forma esplicita

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 \quad \sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x = 0 \quad [\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z \quad \sigma_x \sigma_y = i\sigma_z$$

(alle ultime tre formule si devono aggiungere quelle ottenute attraverso la permutazione ciclica degli indici x, y, z). Risulta inoltre che la traccia di tutte le 3 matrici è nulla ed il determinante è sempre -1 .

Inoltre, qualsiasi matrice 2×2 può essere scritta come una combinazione lineare, con coefficienti complessi, delle tre matrici di Pauli e della matrice unitaria. Questo è semplicemente dovuto al fatto che una matrice 2×2 ha solo quattro elementi. Finalmente, è facile derivare la seguente identità:

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{A} \times \mathbf{B})$$

dove \mathbf{A} e \mathbf{B} sono due vettori arbitrari, o due operatori vettoriali le cui tre componenti commutano con quelli dello spin \mathbf{S} . Se \mathbf{A} e \mathbf{B} non commutano a vicenda, l'identità rimane valida se \mathbf{A} e \mathbf{B} appaiono nello stesso ordine sul lato destro come sul lato sinistro. Gli operatori associati allo spin elettronico hanno tutte le proprietà che seguono direttamente dalla teoria generale del momento angolare. Hanno, inoltre, alcune proprietà specifiche relative al loro particolare valore di j che è il più piccolo possibile (a parte lo zero). Queste proprietà specifiche sono

$$S_x^2 = S_y^2 = S_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \quad S_x S_y + S_y S_x = 0 \quad S_x S_y = \frac{i}{2} \hbar S_z \quad S_+^2 = S_-^2 = 0$$

6 Un atomo di idrogeno in un campo magnetico forte (rispetto a spin-orbita)

In presenza di un campo magnetico statico di intensità \mathcal{B} orientato lungo z l'Hamiltoniana del sistema diviene

$$H = H_0 + \frac{\mu_B}{\hbar}(L_z + 2S_z)\mathcal{B}$$

dove H_0 e' l' Hamiltoniana dell' atomo di idrogeno.

In questo caso i nuovi autovalori dell' energia sono calcolabili direttamente, essendo il nuovo termine della Hamiltoniana diagonale nella base originale. I nuovi livelli energetici sono

$$E_{n,l,m_l,m_s} = E_n + \mu_B \mathcal{B}(m_l + 2m_s)$$

con $-l < m_l < l$ e $m_s = \pm 1/2$. All' interno dello stesso n , i livelli energetici sono equispaziati di $\frac{\mu_B}{\hbar}\mathcal{B}$. La figura seguente mostra l'effetto di un campo magnetico forte sui primi livelli dell' atomo di idrogeno

