

CAPITOLO X

LO SPIN

Si è già visto nel Capitolo VIII che, da un punto di vista generale, è possibile avere degli operatori di momento angolare i cui autovalori siano multipli seminteri di \hbar ; e che questo risultato non è ottenibile dall'analogia classica. Tuttavia l'esperienza ha dimostrato che momenti angolari di tal tipo esistono: in particolare, gli elettroni hanno un momento angolare intrinseco corrispondente a un valore di l uguale a $1/2$. Si tratta di un effetto puramente quantistico, non rapportabile in alcun modo al moto degli elettroni nello spazio ordinario. Un momento angolare intrinseco di questo tipo prende il nome di spin.^(*) Tale nome deriva dal fatto che si può immaginare un modello puramente descrittivo con cui si genera tale effetto, rappresentando l'elettrone come una sferetta carica che ruota su se stessa intorno a un asse.

A causa della relazione di proporzionalità trovata nel Capitolo IX tra momento angolare e momento magnetico, allo spin dell'elettrone è associato un momento magnetico intrinseco dell'elettrone stesso; solo che, in questo caso, il rapporto giromagnetico vale 2, in modo che il momento magnetico in questione vale 1 magnetone di Bohr (e non mezzo magnetone di Bohr, come si otterrebbe applicando la (IX.20)). Anche questo fatto dimostra la natura non classica dello spin.

L'esistenza dello spin e il corretto valore del rapporto giromagnetico sono predetti esattamente dalla teoria relativistica dell'elettrone dovuta a Dirac; tuttavia tale argomento non potrà essere trattato in questo corso.

Tuttavia gli effetti dello spin possono essere facilmente introdotti anche nella Meccanica Quantistica non relativistica. E' sufficiente definire un opportuno operatore $\underline{S} \equiv (s_x, s_y, s_z)$ [le cui componenti soddisfino le regole di commutazione dei momenti angolari di tipo (VIII.3)], che rappresenta lo spin di un dato elettrone. Ciò significa che, p.es., supponendo che l'elettrone si trovi in un autostato di s_z (e quindi per esso non siano determinabili esattamente i valori di s_x e s_y), la sua funzione d'onda ψ deve soddisfare le relazioni:

(*) Oltre alle particelle con spin semintero, si possono avere particelle con spin intero (in particolare nullo).

$$S_z^2 \psi = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \hbar^2 \psi = \frac{3}{4} \hbar^2 \psi$$

$$S_z \psi = \pm \frac{1}{2} \hbar \psi$$

Poichè l'asse z può essere orientato in modo qualsiasi, ne risulta che le componenti della proiezione dello spin dell'elettrone lungo una direzione qualsiasi possono dare solo i valori $\pm \hbar/2$; in termini descrittivi, lo spin di un elettrone risulta sempre parallelo o antiparallelo alla direzione lungo cui lo si misura. Dato che lo spin non ha niente a che fare con i gradi di libertà spaziali, gli operatori di spin commutano con tutti gli operatori che agiscono sulle coordinate spaziali, quali \vec{x} , \vec{p} , \vec{L} , ecc. Si può dire che gli operatori descriventi lo spin di una particella di valore s operano in uno spazio astratto avente $2s+1$ dimensioni (infatti, fissato l'autovalore $s(s+1)\hbar^2$ dell'operatore s^2 , si possono avere $2s+1$ stati di spin indipendenti, corrispondenti agli autovalori di s_z da $-s\hbar$ a $+s\hbar$). Per l'elettrone, lo spazio delle variabili di spin è bidimensionale.

Per vedere come si "lavora" in tale spazio, consideriamo a un certo istante t un elettrone, e supponiamo di conoscere la sua funzione d'onda $\psi(x,y,z)$, che si può supporre normalizzata. Ma ora la conoscenza della ψ non è più sufficiente a descrivere lo stato del sistema, perchè con essa non si può rispondere alla domanda: qual'è la probabilità di trovare lo spin dell'elettrone orientato lungo la direzione positiva (o negativa) dell'asse z? Per poter rispondere a tali domande, è necessario dare due funzioni, $\psi_+(x,y,z)$ e $\psi_-(x,y,z)$, che danno, in ogni punto dello spazio, le due probabilità suddette. In questo caso la condizione di normalizzazione va formulata nella maniera seguente:

$$\int (|\psi_+|^2 + |\psi_-|^2) d^3x = 1 \quad (X.1)$$

Ma tutto ciò equivale a dire che lo stato di una particella con spin 1/2 è descritto da un vettore a due componenti, ciascuna delle quali è una funzione delle coordinate dello spazio ordinario:

$$\Psi \equiv \begin{pmatrix} \psi_+(x,y,z) \\ \psi_-(x,y,z) \end{pmatrix}$$

Per stati aventi un effettivo significato fisico, la funzione d'onda (a due componenti) deve essere normalizzabile attraverso la (X.1).

Vogliamo ora considerare il caso particolare in cui lo

(*) È chiaro che la scelta dell'asse z in tutto questo discorso è puramente convenzionale, e qualunque altra direzione avrebbe potuto essere presa al suo posto.

stato dell'elettrone sia un autostato di s_z con autovalore $+\hbar/2$ (cioè uno stato in cui lo spin dell'elettrone risulti parallelo all'asse z in tutti i punti dello spazio). In tale caso si dovrà avere $\psi_- = 0$ (e, applicando la (X.1), ψ_+ risulterà normalizzata nel senso corrente del termine). Si potrà quindi scrivere:

$$\psi_{s_z = +\hbar/2} = \psi_-(x, y, z) \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix}$$

Si vede dunque che in questo caso la funzione d'onda risulta espressa dal prodotto di una funzione normalizzata del solito tipo, e di una "funzione di spin" rappresentata dal vettore $\begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix}$, il quale ha un preciso significato fisico in quanto

garantisce che lo spin della particella, indipendentemente dal punto dello spazio, è orientato parallelamente all'asse z . Tale vettore può essere scelto come un vettore base nello spazio a due dimensioni dello spin. Considerando ora il caso opposto (autostato di s_z con autovalore $-\hbar/2$) si trova:

$$\psi_{s_z = -\hbar/2} = \psi_-(x, y, z) \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix}$$

(con ψ_- normalizzata); e il vettore $\begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix}$ rappresenta la "funzione di spin" corrispondente allo spin orientato antiparallela- mente all'asse z , e può essere scelto come secondo vettore base nello spazio a due dimensioni. Il caso generale si riduce quindi a

$$\psi = \psi_+ \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix} + \psi_- \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix} \quad (X.2)$$

A questo punto l'interpretazione della (X.2) è immediata; le funzioni ψ_+ e ψ_- assumono il significato di coefficienti di probabilità (ovviamente dipendenti dal punto) nello sviluppo della funzione d'onda in termini degli autostati di s_z . Si potrebbe dire che c'è analogia tra le ψ_+, ψ_- e i coefficienti c_n introdotti attraverso lo sviluppo in serie di uno stato in termini delle autofunzioni di un operatore hermitiano; in questo caso però la situazione è molto più semplice, perchè la "serie" si riduce a due soli termini. Oltre che dal significato probabilistico dei coefficienti, l'analogia tra i due casi si vede anche dalla considerazione che i due vettori base scelti, $\chi_+ = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix}$ e $\chi_- = \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix}$, sono ortogonali; solo che in questo caso il prodotto scalare $\chi_i^+ \chi_j$ ($i, j = +, -$) non è scritto in forma integrale, ma si calcola secondo le regole della moltiplicazione fra matrici (righe per colonne, con $\chi_+^+ = \begin{vmatrix} 1 & 0 \end{vmatrix}$ e $\chi_-^+ = \begin{vmatrix} 0 & 1 \end{vmatrix}$).

I vettori che rappresentano stati di spin (inclusi quelli a due componenti trattati in questo Capitolo) vengono generalmente chiamati col nome di spinori.

Una situazione interessante si verifica quando è possibile scrivere, a un certo istante di tempo t , la funzione d'onda di una particella con spin $1/2$ sotto la forma

$$\Psi = \varphi(x, y, z) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (X.3)$$

ove α, β sono numeri complessi soddisfacenti la condizione $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. (e φ è normalizzata). Ciò si verifica quando nella (X.2) il rapporto Ψ_+/Ψ_- è costante. In tale situazione, le variabili di spin sono disaccoppiate da quelle spaziali, e le probabilità di trovare lo spin della particella orientato lungo l'asse z (o una qualsiasi direzione) sono indipendenti dal punto. In generale, l'evoluzione dello stato (X.3) sarà controllata da un'hamiltoniana che conterrà anche gli operatori di spin; tuttavia, se l'hamiltoniana è separabile, cioè è costituita dalla somma di un termine contenente solo gli operatori che agiscono sulle variabili spaziali e di un termine contenente solo gli operatori di spin (senza termini misti), allora lo stato della particella manterrà sempre l'aspetto (X.3), con la funzione φ e lo spinore $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ che si evolveranno nel tempo in maniera indipendente.

Quanto ora affermato si può dimostrare nella seguente maniera. Sia

$$H = H_1(x, y, z) + H_2(s_x, s_y, s_z) \quad (X.4)$$

e, visto che all'istante (poniamo) $t=0$ la funzione d'onda è del tipo (X.3), cerchiamo una soluzione dell'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo della stessa forma:

$$\Psi(t) = \varphi(x, y, z, t) \chi(t)$$

con $\chi(t) = \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix}$. Inserendo la (X.4), e facendo i passaggi si ottiene

$$\left[i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} - H_1 \varphi \right] \chi + \left[i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} - H_2 \chi \right] \varphi = 0 \quad (X.5)$$

e si può immediatamente controllare che l'equazione è soddisfatta se si prendono per φ e χ le soluzioni delle due equazioni di Schrödinger seguenti:

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = H_1 \varphi$$

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = H_2 \chi$$

(con le condizioni iniziali date dalle componenti della (X.3)).

Dal punto di vista matematico, si potrebbero trovare anche altre soluzioni per la (X.5), ma esse non si prestano a una soddisfacente interpretazione fisica.

Nella situazione descritta, se si è interessati al comportamento dello spin della particella, si possono ignorare completamente le variabili spaziali, e considerare solamente il problema di Schrödinger relativo alle variabili di spin, governato dall'hamiltoniana H_2 , ottenendo così una notevole semplificazione.

LE MATRICI DI PAULI

Come già detto, gli operatori di spin devono soddisfare le regole di commutazione dei momenti angolari:

$$\begin{aligned} [S_x, S_y] &= i\hbar S_z \\ [S_y, S_z] &= i\hbar S_x \\ [S_z, S_x] &= i\hbar S_y \end{aligned} \quad (X.6)$$

E' conveniente porre $S_{x,y,z} = \frac{\hbar}{2} \sigma_{x,y,z}$, da cui discende

$$\begin{aligned} [\sigma_x, \sigma_y] &= 2i\sigma_z \\ [\sigma_y, \sigma_z] &= 2i\sigma_x \\ [\sigma_z, \sigma_x] &= 2i\sigma_y \end{aligned} \quad (X.7)$$

Gli autovalori di ciascuno degli operatori σ sono soltanto +1 e -1; si deve quindi avere

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 \quad (X.8)$$

Queste relazioni implicano l'identità $S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$, che già conosciamo.

Visto che gli operatori σ operano nello spazio degli spinori a due dimensioni, essi devono essere rappresentabili mediante matrici 2×2 . Esistono infiniti modi di scegliere tre matrici linearmente indipendenti che soddisfino le (X.7) e (X.8); tuttavia generalmente si fa la scelta convenzionale che gli spinori base $\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ siano autostati di σ_z . In questo caso σ_z risulta diagonale, e si ha la seguente scelta (a meno di un segno) per l'espressione esplicita delle σ :

$$\sigma_x = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} \quad \sigma_y = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix} \quad \sigma_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} \quad (X.9)$$

Le matrici (X.9) sono chiamate matrici di Pauli, e in generale tutto il formalismo qui sviluppato si chiama "teoria dello spin di Pauli". Essa può essere ottenuta come limite

non relativistico della teoria rigorosa di Dirac.

Oltre alle regole di commutazione (X.7) le matrici ϵ soddisfano a delle regole di anticommutazione, del tipo

$$\begin{aligned} \epsilon_x \epsilon_y + \epsilon_y \epsilon_x &= \epsilon_y \epsilon_z + \epsilon_z \epsilon_y = \\ &= \epsilon_x \epsilon_z + \epsilon_z \epsilon_x = 0 \end{aligned} \quad (X.10)$$

Le (X.10) si possono verificare direttamente dalle espressioni (X.9), oppure manipolando in modo opportuno le relazioni di commutazione (X.7). (Per esempio, moltiplicando la prima delle (X.7) per ϵ_x , una volta a destra e una volta a sinistra, sommando membro a membro le due uguaglianze ottenute, e tenendo conto delle (X.8), si ottiene l'ultima delle (X.10)). Le (X.10) inserite a loro volta nelle (X.7) danno luogo alle relazioni

$$\begin{aligned} \epsilon_x \epsilon_y &= i \epsilon_z \\ \epsilon_y \epsilon_z &= i \epsilon_x \\ \epsilon_z \epsilon_x &= i \epsilon_y \end{aligned} \quad (X.11)$$

Inoltre le (X.10) e le (X.8) possono essere sintetizzate nell'unica formula

$$\epsilon_i \epsilon_k + \epsilon_k \epsilon_i = 2 \delta_{ik}$$

valida per qualunque scelta dei suffissi x, y, z per i e k .

E' bene far notare che il formalismo di rappresentare gli stati e gli operatori di spin mediante, rispettivamente, spinori e matrici è applicabile a qualunque valore dello spin, in particolare anche ai valori interi; e, analogamente, esso è applicabile anche alla teoria dei momenti angolari orbitali, trattata (con formalismo diverso) nel Capitolo VIII. Poichè le dimensioni delle matrici corrispondenti variano se varia l'autovalore di L^2 , tale rappresentazione degli operatori e degli stati di momento angolare è di utilità pratica soprattutto nei problemi in cui il numero quantico ℓ è mantenuto costante. Ad esempio, gli stati con $\ell = 1$ invece che con le opportune armoniche sferiche possono essere rappresentati dagli spinori a tre componenti $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$; l'operatore $\frac{L_x}{\hbar}$ è dato dalla matrice diagonale degli autovalori

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$$

e, in modo analogo, si possono ricavare l matrici corrispon-

denza agli altri operatori della teoria, quali $L_x, L_y, L_z, L^2, \dots$ (generalmente espressi tutti in unità \hbar). Alternativamente, per gli spin interi potrebbe essere usata (volendo) il formalismo delle armoniche sferiche (naturalmente, in uno spazio diverso da quello fisico); invece per gli spin seminteri ciò non è possibile, e la rappresentazione mediante matrici resta la sola a disposizione. In pratica per gli spin si usa sempre il formalismo degli spinori; mentre per i momenti angolari orbitali si usa il formalismo delle armoniche sferiche per tutti i problemi in cui il valore di ℓ non è fissato a priori.

L'esistenza dello spin (più esattamente, di un momento magnetico intrinseco quantizzato) può essere provata sperimentalmente anche in maniera diretta rivelando la presenza di un momento magnetico in un fascio di particelle libere. La prima esperienza di questo genere fu fatta da Stern e Gerlach con un fascio di atomi neutri, nel 1922. Il principio dell'esperimento di Stern e Gerlach consiste nel far passare un fascio di particelle attraverso un campo magnetico fortemente disomogeneo, che esercita un'azione su un eventuale momento magnetico, il cui valore può essere dedotto dalla deflessione prodotta sulle particelle. Lo schema dell'esperimento è mostrato nella Figura X-1, in cui l'asse x è orientato lungo la direzione del moto delle particelle, mentre la particolare sagomatura dei poli (indicata schematicamente in figura) produce un forte gradiente del campo magnetico diretto lungo l'asse z .

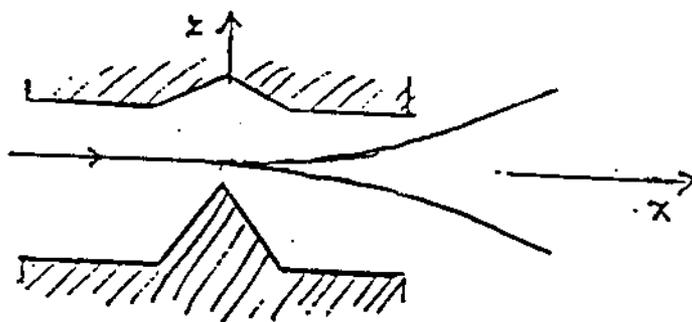


Fig. X-1

Se le particelle che attraversano il campo magnetico possiedono un momento magnetico $\vec{\mu}$, la loro energia potenziale sarà data da

$$V = -\vec{\mu} \cdot \vec{H}$$

ove \vec{H} indica il campo magnetico.

La forza agente sulle particelle del fascio sarà data da $\vec{F} = -\text{grad } V = \text{grad}(\vec{\mu} \cdot \vec{H})$. (N.B. Se le particelle sono neutre, non c'è forza di Lorentz.) Poichè nel dispositivo sperimentale sia il campo magnetico che il suo gradiente sono sostanzialmente diretti lungo l'asse z, è importante solo la componente z della forza, che ha il valore $\mu_z \frac{\partial H}{\partial z}$. Supponiamo che le particelle osservate abbiano spin 1/2. In questo caso μ_z può assumere soltanto due valori, uguali e opposti. Ne segue che le particelle del fascio, a seconda dell'orientazione del loro spin, vengono deflesse dello stesso angolo o nella direzione positiva dell'asse z o in quella negativa. Come risultato, il fascetto si divide simmetricamente in due componenti, come mostrato in Fig. X-1. I due fascetti uscenti hanno la stessa intensità, perchè la probabilità di trovare lo spin di una particella orientato in un verso o nell'altro lungo l'asse z sono evidentemente uguali.

Nel loro esperimento, Stern e Gerlach usarono un fascetto di atomi di argento. Nonostante la complessità di tale sistema, il suo momento angolare si riduce allo spin dell'unico elettrone di valenza (il cui momento angolare orbitale, nello stato fondamentale, è zero). Si ottiene quindi il risultato sopra descritto; e la stima del momento magnetico, dedotto dalla misura della deviazione prodotta, fornisce con buona approssimazione il valore di un magnetone di Bohr.

Si potrebbe pensare di fare l'esperimento con un fascetto di elettroni liberi, in modo da avere una prova ancor più diretta dell'esistenza dello spin dell'elettrone. Tuttavia in tale caso non si potrebbe avere un risultato soddisfacente, sia per la presenza della forza di Lorentz che introduce un'ulteriore deviazione, sia per il fatto che il trattamento puramente classico fatto in precedenza non sarebbe più adeguato. (Invece per un atomo che, a causa della massa elevata, si muove con velocità assai piccola, il trattamento classico è applicabile.)

Se si dispone un secondo apparato di Stern e Gerlach lungo la direzione di uno dei fascetti deflessi, visto che in esso le particelle hanno lo spin orientato tutte nella stesso modo, ci si deve aspettare che il fascetto non si divida, ma le particelle vengano deflesse tutte nella stessa direzione. In realtà anche in questo caso si osserva una divisione; ma le particelle che vanno nella direzione "sbagliata" sono molto poche, e la loro presenza si può agevolmente spiegare attraverso effetti spuri (imperfetta efficienza dell'apparato; cambiamento dell'orientazione dello spin nel passaggio tra il primo e il secondo apparato, a causa di collisioni con le

molecole di gas residuo, o per azione del campo magnetico terrestre).(*)

Nell'atomo di idrogeno, la presenza di un momento magnetico intrinseco dell'elettrone porta a una modificazione dei livelli energetici, attraverso l'interazione fra tale momento magnetico e il momento magnetico orbitale. L'esistenza di tale interazione può essere spiegata anche attraverso un modello classico: infatti l'elettrone "vede" il nucleo di carica Ze girargli attorno, e questo moto genera un campo magnetico \vec{H}' nella posizione occupata dall'elettrone. All'hamiltoniana andrà quindi aggiunto un termine $-\vec{\mu} \cdot \vec{H}'$, in cui $\vec{\mu}$ rappresenta il momento magnetico intrinseco (associato allo spin) dell'elettrone. L'espressione di $\vec{\mu}$ è data da una formula del tipo (IX.20), con \vec{s} al posto di \vec{L} e moltiplicata per il fattore giromagnetico 2:

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{mc} \vec{s} \quad (X.12)$$

L'espressione di \vec{H}' può essere calcolata servendosi del teorema di equivalenza di Ampère, secondo cui lo stesso campo magnetico è generato dal momento magnetico $\vec{\mu}'$ associato alla traiettoria del nucleo attorno all'elettrone (trattata come una spira percorsa da corrente). Applicando nuovamente la (IX.20) adattata alla situazione considerata, si ottiene (r = raggio dell'orbita = coordinata radiale dell'elettrone):

$$\vec{H}' = \frac{\vec{\mu}'}{r^3} ; \quad \vec{\mu}' = \frac{Ze}{2mc} \vec{L} \quad (X.13)$$

Infatti il momento angolare del nucleo rispetto all'elettrone è uguale a quello dell'elettrone rispetto al nucleo, e per m (massa ridotta) si può praticamente prendere la massa dell'elettrone. Mettendo insieme la (X.12) e la (X.13) si ottiene, per il termine aggiuntivo nell'hamiltoniana, chiamato termine di interazione spin-orbita, la seguente espressione:

$$H_{\text{spin-orbita}} = -\vec{\mu} \cdot \vec{H}' = \frac{Ze^2}{2m^2c^2} \frac{\vec{L} \cdot \vec{s}}{r^3} \quad (X.14)$$

Come è immediato vedere, questo termine non è separabile (nel senso spiegato in precedenza in questo Capitolo); quindi gli stati dell'atomo di idrogeno non saranno generalmente dati dal prodotto di una funzione delle coordinate spa-

(*) Questi ultimi effetti spuri possono essere ridotti migliorando rispettivamente il vuoto e la schermatura magnetica dell'esperimento.

ziali per una funzione d'onda di spin, evolvendosi separatamente nel tempo. Inoltre il termine (X.14), pur continuando a commutare con L^2 (infatti l'operatore L^2 non opera sulla coordinata r , e commuta con le componenti L_x, L_y, L_z che entrano nel prodotto scalare $\vec{L} \cdot \vec{s}$), non commuta più né con L_z né con s_z . Le autofunzioni della nuova hamiltoniana, includente il termine di spin-orbita, non possono quindi essere autofunzioni di questi operatori (come sarebbe stato se il termine di spin-orbita fosse stato assente).

Vediamo dunque di cercare altri due operatori, che commutino sia tra loro che con H e L^2 , in modo da poter ottenere le autofunzioni del problema in presenza del termine di spin-orbita di nuovo come autofunzioni simultanee di un sistema completo di operatori commutanti (che in questo caso devono essere quattro, perchè lo spin ha introdotto un nuovo grado di libertà in aggiunta ai tre gradi di libertà spaziali incontrati nei problemi precedenti). Il risultato voluto si ottiene introducendo un nuovo momento angolare, chiamato "momento angolare totale", e definito da

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{s} \quad (\text{X.15})$$

Dato che le componenti di \vec{L} commutano con le componenti di \vec{s} , è chiaro che le componenti di \vec{J} soddisfano le regole di commutazione dei momenti angolari (VIII.3), e che, come diretta conseguenza di questo fatto, l'operatore J^2 e una qualsiasi delle sue componenti (di solito si sceglie J_z) commutano. E' anche immediato verificare che J^2 e J_z commutano con L^2 . Ma tali operatori commutano anche con H , incluso il termine di spin-orbita. Per convincersi di ciò è sufficiente scrivere l'identità

$$\vec{L} \cdot \vec{s} = \frac{1}{2} (J^2 - L^2 - s^2) \quad (\text{X.16})$$

e ora tutti i termini a secondo membro della (X.16) commutano separatamente con J^2 e J_z . Nel risolvere l'equazione di Schrödinger con il termine di spin-orbita si dovranno quindi cercare le autofunzioni simultanee di H, L^2, J^2 e J_z .

La soluzione esatta dell'equazione di Schrödinger sarebbe piuttosto complicata; tuttavia si può ottenere una notevole semplificazione notando che il termine di spin-orbita costituisce una piccola correzione all'interazione dominante (data dal potenziale coulombiano). Infatti l'operatore $\vec{L} \cdot \vec{s}$

(*) Sia il termine di spin-orbita che gli operatori (X.15) commutano formalmente anche con l'operatore s^2 . In questo caso la cosa è banale, perchè per una particella s^2 si riduce a una costante; invece tale proprietà acquista importanza per i sistemi di più elettroni, per i quali lo spin totale assume valori diversi.

può essere scritto come il prodotto di $\frac{1}{\hbar^2}$ per un operatore adimensionale, i cui autovalori sono dell'ordine dell'unità. Quindi l'ordine di grandezza del termine (X.14) è determinato dalla quantità

$$\frac{Ze^2\hbar^2}{2\pi^2c^2r^3} = \frac{Ze^2}{r} \frac{\alpha^2}{2} \left(\frac{a_0}{r}\right)^2 \quad (\text{X.17})$$

ove α è la costante adimensionale $e^2/\hbar c$ (chiamata anche costante di struttura fine, e il cui valore numerico è circa $1/137$), e $a_0 = \hbar^2/me^2$ è il raggio di Bohr dell'idrogeno, già introdotto nel Capitolo IX. Ora non è pensabile che, introducendo il termine di spin-orbita, la distribuzione spaziale dell'elettrone intorno al nucleo venga alterata in modo radicale: dunque, in media r resterà ancora dell'ordine di a_0/Z (v. Capitolo IX). Ne segue che il rapporto tra l'intensità del termine di spin-orbita e quella del termine coulombiano è di ordine $(Z\alpha)^2$, cioè $\sim 10^{-4}$ per l'idrogeno e $\sim 10^{-3}$ per gli atomi idrogenoidi più leggeri: viene quindi confermato che il termine di spin-orbita costituisce una piccola correzione dell'hamiltoniana, come è già stato affermato in precedenza.

Un calcolo piuttosto preciso degli spostamenti dei livelli energetici causati dal termine di spin-orbita si può ottenere con la teoria delle perturbazioni (che sarà descritta nel Capitolo XI); tuttavia anche qui può essere data una stima approssimata di tali spostamenti, sostituendo nella (X.17) la grandezza r che figura nel rapporto a_0/r con il valore "più probabile" a_0/Z . Inserendo la (X.17) così modificata nella (X.14), e sommando il termine di spin-orbita al termine coulombiano, il potenziale che appare nell'hamiltoniana risulta del tipo:

$$-\frac{Ze^2}{r} \left[1 - \frac{(Z\alpha)^2}{4} \left(\frac{J^2 - L^2 - S^2}{\hbar^2} \right) \right] = -\frac{Ze^2}{r} \left\{ 1 - \frac{(Z\alpha)^2}{4} [j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}] \right\} \quad (\text{X.18})$$

L'ultimo passaggio nella (X.18) è giustificato dal fatto che le autofunzioni dell'energia sono anche autofunzioni simultanee di J^2 e L^2 , e quindi agli operatori si possono sostituire i rispettivi autovalori (si è indicato con j il numero quantico associato all'operatore J^2). L'equazione radiale, in cui venga inserito il potenziale (X.18), è esattamente dello stesso tipo di quella già incontrata nel Capitolo IX, e che può essere posta sotto la forma (IX.11); si ha solo una formale "ridefinizione" del valore di Z , che va moltiplicato per il termine in parentesi graffa che figura nella (X.18). Ne segue

che i livelli energetici sono ancora dati dall'espressione già trovata nel Capitolo IX, in cui si inserisce il valore di Z "ridefinito", e cioè (*)

$$E_{n,\ell,j} = -Z^2 \frac{mc^2}{2h^2} \frac{1}{n^2} \left\{ 1 - \frac{(Z\alpha)^2}{4} [j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}] \right\}^2$$

$$\approx -Z^2 \frac{mc^2}{2h^2} \frac{1}{n^2} \left\{ 1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2} [j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}] \right\} = E_n + \Delta E_{n,\ell,j}$$

(Il termine proporzionale a α^4 nell'espressione in parentesi può essere trascurato data la sua piccolezza.) Si vede che la correzione ai livelli energetici

$$\Delta E_{n,\ell,j} = \frac{mc^2}{4n^2} (Z\alpha)^4 [j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}] \quad (X.19)$$

dipende sia da ℓ che da j ; inoltre ognuno dei nuovi livelli è degenere $2j+1$ volte, in corrispondenza dei diversi mutovariabili che può avere l'operatore J_z (il quale, a causa dell'assenza di una direzione privilegiata nello spazio, non può influire sul valore dell'energia).

Per potere capire meglio il meccanismo di spostamento dei livelli, è bene anticipare un risultato che sarà dimostrato alla fine di questo Capitolo: e cioè che, fissato ℓ , j può assumere soltanto i due valori $\ell+1/2$ e $\ell-1/2$, eccetto che nel caso $\ell=0$, in cui è permesso solo il valore $j=1/2$. Se si rifà il conto dei livelli corrispondenti a un dato valore di n , si trova il valore $2n^2$, che è esattamente quanto ci si aspetta (infatti a ciascuno degli n^2 stati già conosciuti vanno associate le due possibili orientazioni dello spin). E' anche da notare che, per gli stati con $\ell=0$ (e quindi $j=1/2$) la correzione (X.19) è nulla; mentre, per $\ell \neq 0$, la correzione è positiva quando $j = \ell + \frac{1}{2}$, ed è negativa quando $j = \ell - \frac{1}{2}$.

Osservando l'espressione del termine (X.19), non ci si aspetta di trovare uno schema dei livelli sul tipo di quello mostrato nella Fig. IX-2, in cui si ha uno spostamento anche dei livelli con $\ell=0$, e non si osserva lo sdoppiamento dei livelli con $\ell \neq 0$. Il fatto è che, come già accennato nel Capitolo IX, insieme alle correzioni dovute all'effetto dello spin, discusse qui sopra, devono essere prese in considerazione anche le correzioni relativistiche, che sono dello stesso ordi-

(*) Si è indicata esplicitamente la dipendenza di E da n, ℓ, j .
 (X*) La cosa è ovvia, se si tiene presente che j non può mai essere un numero negativo.

ne di grandezza. L'effetto delle correzioni relativistiche porta sempre ad un abbassamento dei livelli, e la grandezza della correzione è tale che, una volta combinata con l'effetto dell'interazione spin-orbita, produce una degenerazione tra i livelli che hanno lo stesso n , lo stesso j e diversi ℓ . In questo modo si riproduce lo schema di Fig. IX-2, che viene ripetuto nella Fig. X-2 con l'adeguamento della notazione dei numeri quantici. Trascurando sempre di indicare la degenerazione dovuta a j , in corrispondenza di ogni livello sono indicati i diversi valori di ℓ attraverso l'uso della cosiddetta "notazione spettroscopica", che designa il valore di ℓ con una lettera convenzionale, indicata nello specchio seguente:

$\ell =$	0	1	2	3	4	5	6	...
Simbolo:	s	p	d	f	g	h	i	...

e, quando è necessario, associa alla lettera rappresentativa un suffisso, indicante il valore di j . Questa notazione permette una notevole concisione nella descrizione delle situazioni fisiche: p. es. uno stato con $\ell = 1$ e momento angolare totale $j = 3/2$ è chiamato uno stato $P_{3/2}$.

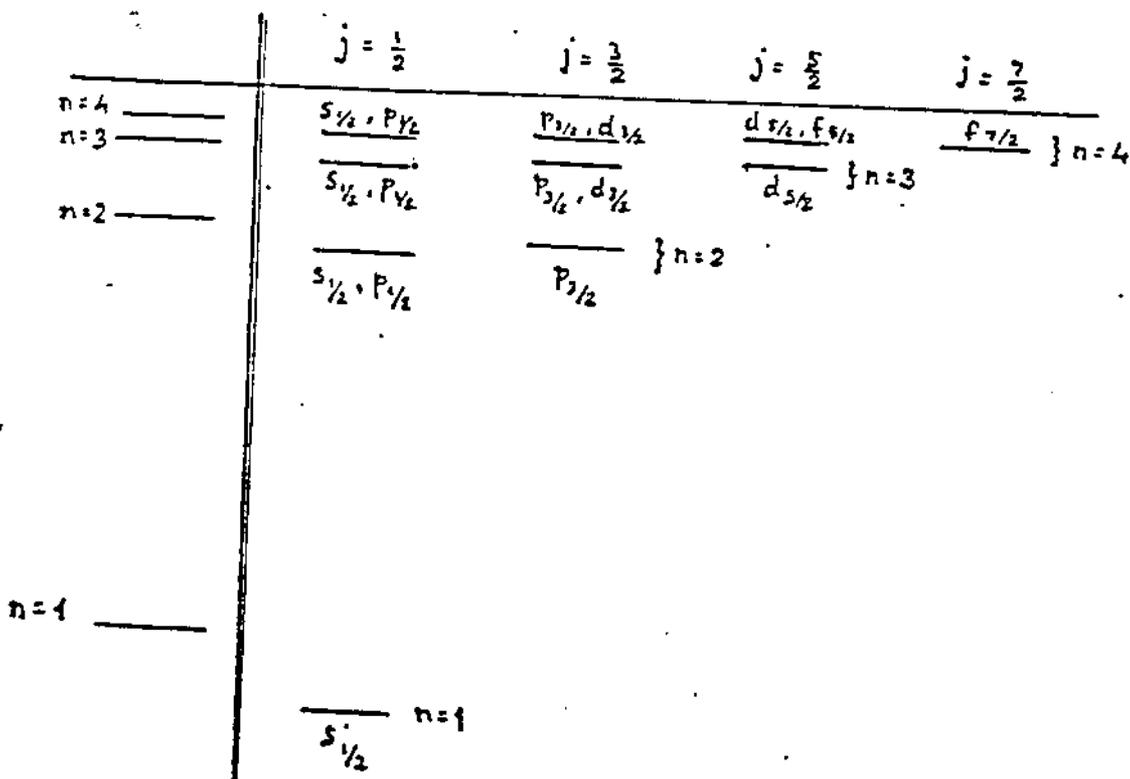


Fig. X-2

Nello schema di Fig. X-2 si potrebbe pensare che qualunque transizione da un livello ad un altro di energia inferiore dia luogo a una corrispondente riga spettrale. Invece il processo di emissione è soggetto a restrizioni: infatti esso avviene solo se i due livelli interessati hanno numeri quantici la cui variazione soddisfa le seguenti regole di selezione: (*)

$$\Delta l = \pm 1 ; \Delta m = 0, \pm 1 \quad (X.20)$$

Si può vedere subito, per esempio, che non è permessa una transizione diretta fra uno stato avente $j > 3/2$ e lo stato fondamentale.

Un'ultima osservazione da fare è che anche i livelli che appaiono come degeneri in Fig. X-2 in realtà hanno una piccolissima separazione, dovuta a effetti quantistici più complicati. Il modo migliore di mettere in luce l'esistenza di questa separazione è misurare direttamente la radiazione emessa nella transizione diretta tra i livelli in questione; essa ha la frequenza compresa nella regione delle microonde. La differenza di energia trovata è chiamata "Lamb shift", da Lamb e Retherford, che per primi rivelarono tale effetto nella transizione tra i livelli $D_{1/2}$ e $S_{1/2}$ corrispondenti a $n = 2$. (**)

L'EFFETTO ZEEMAN ANOMALO

Vediamo ora che cosa succede se si immerge un atomo idrogenoide in un campo magnetico esterno (supposto sempre uniforme e costante). Tale campo agirà sia sul momento magnetico orbitale, che su quello di spin. Il termine da aggiungere all'hamiltoniana risulta quindi il seguente:

$$H' = -(\vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S) \cdot \vec{H} = \frac{e\hbar}{2mc} [g_L L_z + g_S S_z] \quad (X.21)$$

(*) Anche queste regole si dimostrano con la teoria delle perturbazioni: ma la dimostrazione non verrà svolta in questo corso. E' da notare che, se le regole di selezione non sono rispettate, l'emissione di radiazione non è rigorosamente proibita, ma l'intensità della radiazione emessa risulta di parecchi ordini di grandezza inferiore a quella ottenuta quando le regole di selezione sono soddisfatte.

(**) Un'altra suddivisione dei livelli di valore comparabile si ottiene considerando l'accoppiamento con il momento magnetico intrinseco del nucleo, che è molto piccolo [in quanto, in una formula del tipo (IX.20), la massa che figura a denominatore è, nel caso più favorevole (idrogeno), quella del protone, circa 2000 volte maggiore di quella dell'elettrone]. Tale effetto è chiamato "struttura iperfina".