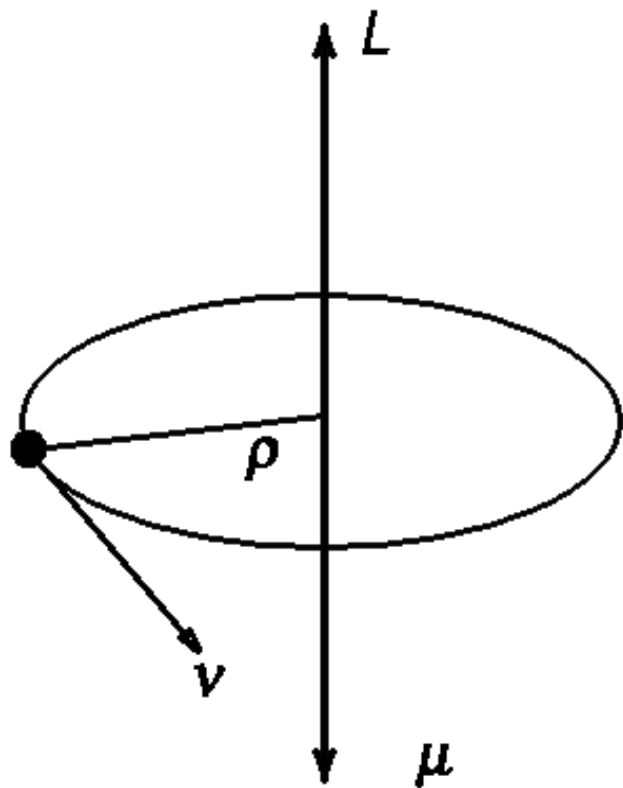


# Атомная физика

Лекция 8

проф. Попов Александр Михайлович

# Орбитальный механический и магнитный моменты электрона. Спин



$$\vec{\mu} = \frac{1}{c} i \vec{S}$$

$$i = -e/T$$

$$S = \pi r^2$$

$$\vec{L} = [\vec{r} \times m\vec{v}]$$

Связь орбитального механического и магнитного моментов

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2mc} \vec{L}$$

Гиромагнитное отношение (g - фактор)

$$g = \frac{\mu/L}{e/2mc} = 1$$

Переход к квантовой механике - операторы

$$\hat{\mu}_\ell = -\frac{e}{2mc} \hat{L}$$

$$\hat{\mu}_{\ell_z} = -\frac{e}{2mc} \hat{L}_z$$

$$[\hat{L}^2, \hat{\mu}_\ell] = 0$$

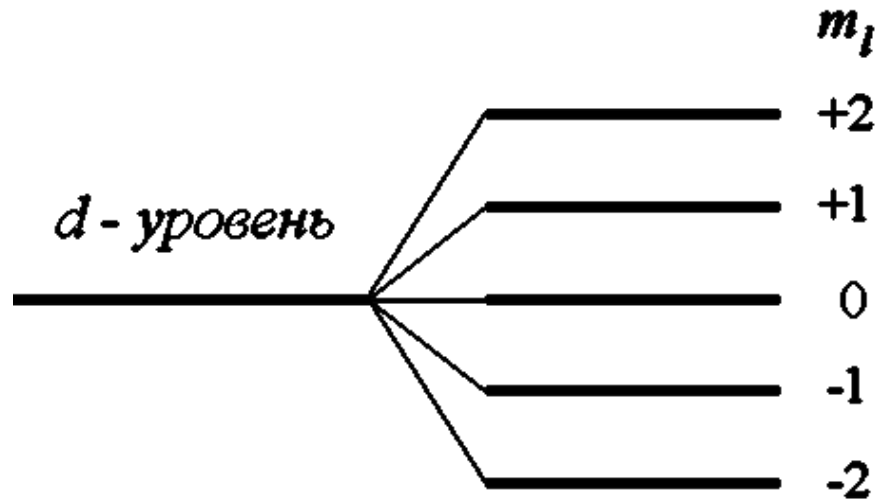
$$\mu_{\ell_z} = -\frac{e\hbar}{2mc} m_\ell$$

$$m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$\mu_B = e\hbar/2mc = 0.927 \times 10^{-20} \text{ эрг} / \text{Э}$$

$$|\mu_\ell| = \mu_B \sqrt{\ell(\ell+1)} \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

# Экспериментальное определение магнитных моментов. Опыты Штерна и Герлаха



Дополнительная энергия электрона в атоме при наличии магнитного поля

$$W = -(\vec{\mu}\vec{H})$$

$$W = -\mu_z H$$

$$\Delta E = -\mu_z H = m_l \mu_B H$$

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm \ell$$

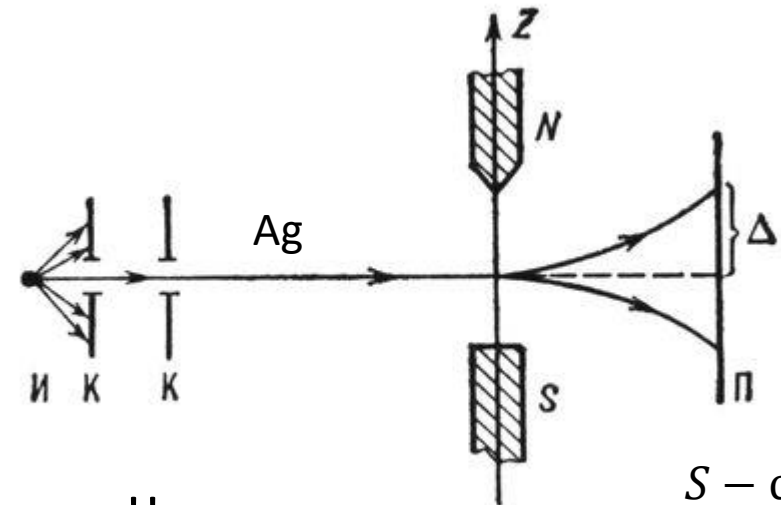
**Всегда нечетное число компонент!!**

Проще увидеть при пролете пучка частиц через область неоднородного магнитного поля

Штерн и Герлах, 1922

$$F = -\mu_z \frac{\partial H}{\partial z}$$

Число компонент расщепления нечетно!!



S – состояние

# Спин - собственный механический момент электрона

Понимание необходимости введения спина и связанного с ним магнитного момента

- 1) Дублетная структура спектров атомов водорода и щелочных металлов
- 2) Опыты Штерна - Герлаха

Уленбек и Гаудсмит (1925) – идея спина

$$s = 1/2$$

$$m_s = \pm 1/2$$

$$2s + 1 = 2$$

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

$$S_z = m_s \hbar = \pm \hbar/2$$

Гиромагнитное отношение: из эксперимента

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{mc} \vec{S} \quad g = \frac{\mu_s / S}{e/2mc} = 2$$

Операторы

$$\hat{\mu}_s = -\frac{e}{mc} \hat{S} \quad \hat{\mu}_{s_z} = -\frac{e}{mc} \hat{S}_z$$

Расщепление в магнитном поле

$$\Delta E = -\mu_{s_z} H = \pm \mu_B H$$

# Математические основы теории спина

Спин – новая степень свободы, причем существует всего два состояния.

$$\chi(m_s = 1/2) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \chi(m_s = -1/2) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Произвольное спиновое состояние частицы  $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$   $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$  Смысл  $|\alpha|^2, |\beta|^2$  ?

Операторы спина  $\hat{\mathbf{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$  - действуют в пространстве двурядных столбцов

$$\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad - \text{ матрицы Паули}$$

*Все соотношения, которые были ранее получены для операторов орбитального момента  $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ , являющихся дифференциальными операторами и действующими в пространстве функций с интегрируемым квадратом модуля, оказываются справедливы и для матричных операторов  $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ , действующих в пространстве двурядных столбцов.*

# Математические основы теории спина II

## Собственные значения

$$\hat{S}_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_z \chi(m_s = \pm 1/2) = \pm \frac{\hbar}{2} \chi(m_s = \pm 1/2)$$

## Коммутация

$$[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y] = \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = 2i\hat{\sigma}_z \quad \begin{matrix} \nearrow \\ \end{matrix} \quad \begin{matrix} [\hat{S}_x, \hat{S}_y] = \frac{\hbar^2}{4} \cdot 2i\hat{\sigma}_z = i\hbar\hat{S}_z \\ [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x \\ [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y \end{matrix}$$

Квадрат спина  $\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \sigma_z^2) = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} \hbar^2 \hat{I}$

$$\hat{S}^2 \chi(m_s = \pm 1/2) = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi(m_s = \pm 1/2) = \hbar^2 s(s+1) \chi(m_s = \pm 1/2)$$

Вычисление средних в произвольном спиновом состоянии  $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad \langle S_i \rangle = (\alpha^* \quad \beta^*) \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_i \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$

# Атом водорода с учетом спина

$$\psi(\vec{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm_\ell}(\theta, \varphi) \quad \longrightarrow \quad \Psi(\vec{r}, \sigma) = R_{nl}(r)Y_{lm_\ell}(\theta, \varphi) \cdot \chi(m_s)$$

Четыре квантовых числа  $n, \ell, m_\ell, m_s$

Кратность вырождения в ц.с. поле  $g = 2(2\ell + 1)$  в кулоновском поле  $g = 2n^2$

Встает вопрос о сложении орбитального и спинового моментов

Вектор и оператор полного момента  $\hat{j} = \hat{\ell} + \hat{s}$

$$[\hat{\ell}^2, \hat{s}^2] = 0 \quad [\hat{\ell}_z, \hat{s}_z] = 0 \quad [\hat{\ell}^2, \hat{s}_z] = 0 \quad [\hat{j}^2, \hat{\ell}^2] = 0$$

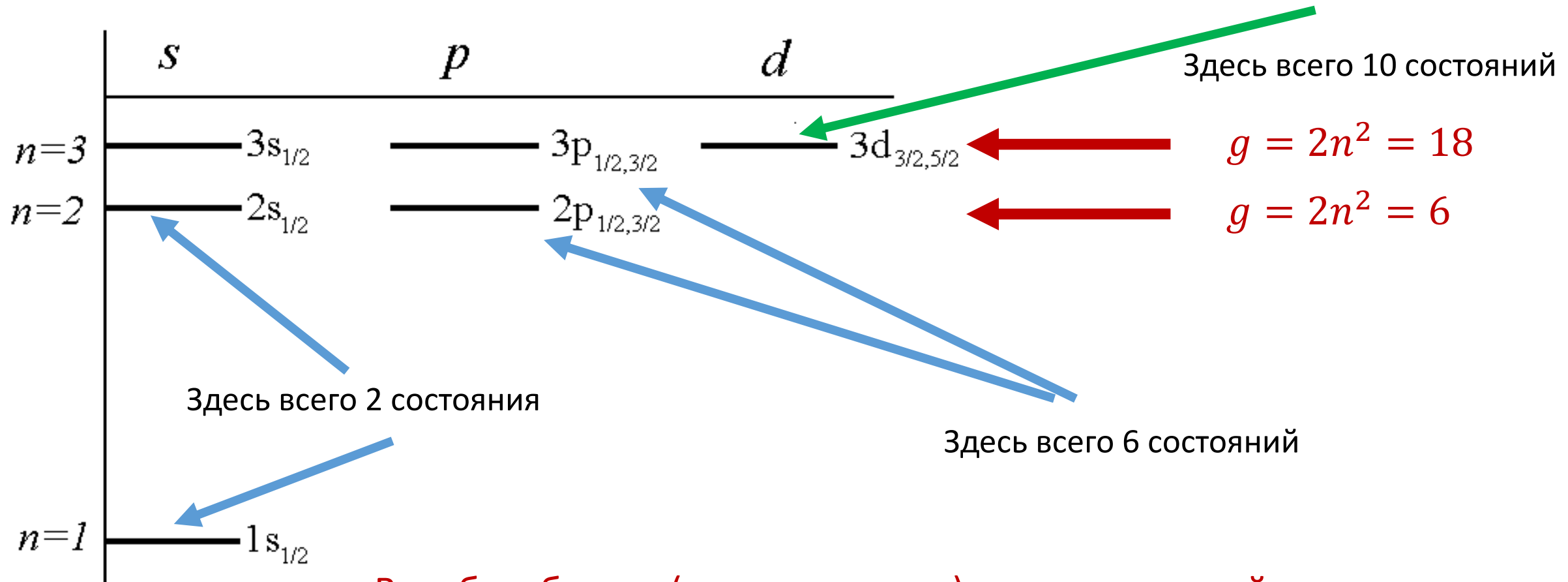
$$[\hat{j}^2, \hat{\ell}_z] \neq 0 \quad [\hat{j}^2, \hat{s}_z] \neq 0$$

Есть и другой набор квантовых чисел, характеризующих состояние электрона в ц.с. поле

$$n, \ell, m_\ell, m_s \Leftrightarrow n, \ell, j, m_j \quad \text{при этом } m_j = m_\ell + m_s, \quad j = \ell \pm 1/2 \quad (\ell > 0)$$

Как обозначают?  $n\ell_j \Rightarrow 1s_{1/2}, 2p_{1/2,3/2}$

# Диаграмма энергетических уровней атома водорода

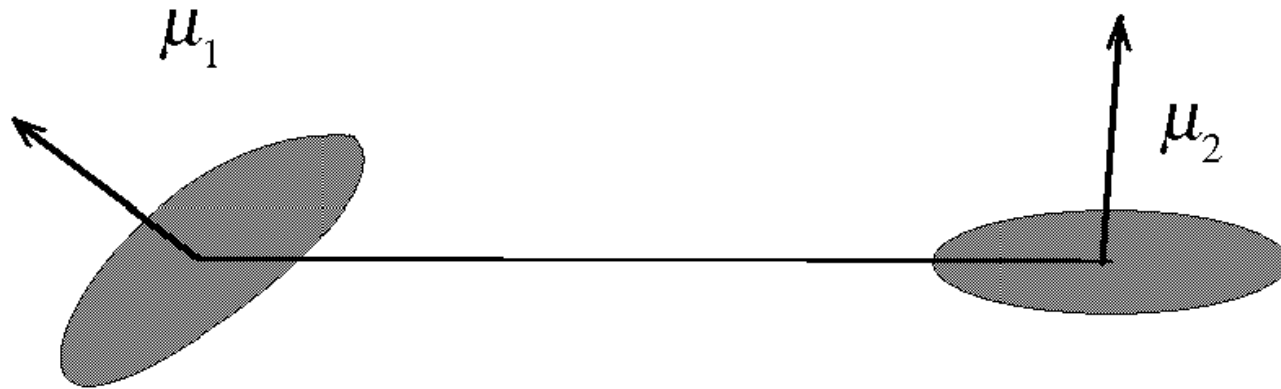


В любом базисе (представлении) число состояний одинаково.  
Каким представлением пользоваться – вопрос удобства, пока все введенные операторы коммутируют с оператором Гамильтона



# Спин-орбитальное взаимодействие, как релятивистский эффект

В результате наличия у электрона магнитных моментов, связанных со спиновым и орбитальным движением возникает специфическое спин-орбитальное взаимодействие. Оценка



$$E_{ls} \sim \frac{\vec{\mu}_l \vec{\mu}_s}{r^3}$$



$$E_{ls} \cong \frac{\mu_B^2}{a_0^3} \cong \frac{1}{2} \alpha^2 Ry$$

$\alpha = v_1/c$  - релятивистский эффект

Релятивистское выражение для кинетической энергии  $T = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2$

$$T = mc^2 \left( \sqrt{1 + (p/mc)^2} - 1 \right) = mc^2 \left( 1 + \frac{1}{2} (p/mc)^2 - \frac{1}{8} (p/mc)^4 + \dots - 1 \right) \approx \frac{p^2}{2m} - \frac{(p^2/2m)^2}{2mc^2} = T_0 - T_0^2 / 2mc^2$$

$$T_0 \cong Ry$$

$$\delta T \approx Ry^2 / 2mc^2 \approx \alpha^2 Ry$$

**Выводы:** 1) надо учитывать сразу два эффекта,  
2) нужен приближенный метод решения УШ (теория возмущений)

# Стационарная теория возмущений

Умеем решать  $\hat{H}_0 \psi_n = E_n \psi_n$       Надо решить  $(\hat{H}_0 + \hat{V}) \tilde{\psi}_n = \varepsilon_n \tilde{\psi}_n$        $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$

Ищем решение в виде  $\varepsilon_n = E_n + \delta E_n$        $\tilde{\psi}_n = \psi_n + \delta \psi_n$

С точностью до малых первого порядка  $\hat{H}_0 \psi_n + \hat{H}_0 \delta \psi_n + \hat{V} \psi_n = E_n \psi_n + \delta E_n \psi_n + E_n \delta \psi_n$

$$\delta E_n = \int \psi_n^* \hat{V} \psi_n d\tau + \int \psi_n^* (\hat{H}_0 - E_n) \delta \psi_n d\tau$$

Ищем в виде  $\delta \psi_n = \sum_m c_m \psi_m$       Учтем, что  $\int \psi_n^* (\hat{H}_0 - E_n) \delta \psi_n d\tau = \sum_m c_m \int \psi_n^* (E_m - E_n) \psi_m d\tau = 0$

$$\delta E_n = \int \psi_n^* \hat{V} \psi_n d\tau$$

$$\delta E_n = \langle \psi_n | \hat{V} | \psi_n \rangle \equiv \langle n | \hat{V} | n \rangle = V_{nn}$$

Для функции

$$\delta \psi_n = \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n - E_k} \psi_k$$

$$\tilde{\psi}_n = \psi_n + \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}}{E_n - E_k} \psi_k + \dots$$

Условия применимости

$$V_{nn} \ll |E_n - E_k|$$

$$V_{kn} \ll |E_n - E_k|$$

Второй порядок ТВ

$$\delta E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} |V_{kn}|^2 / (E_n - E_k)$$