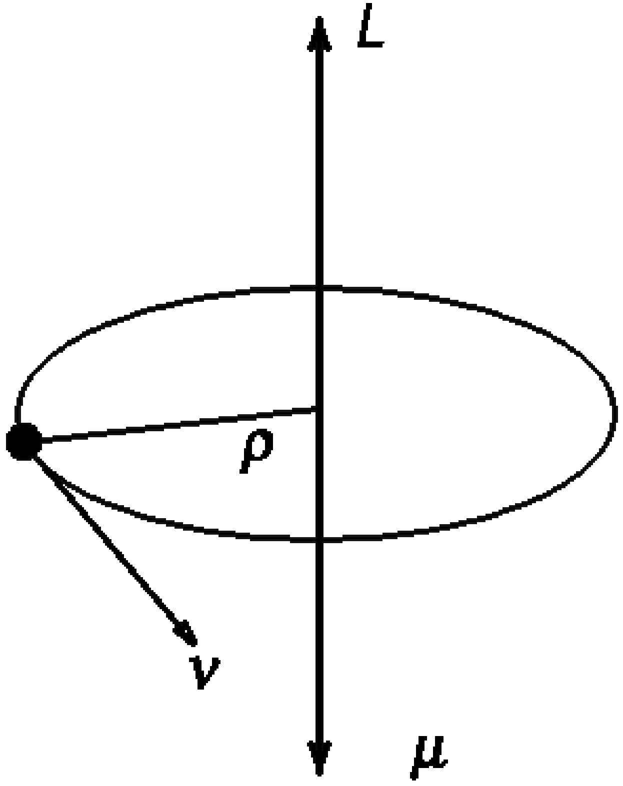
Атомная физика

Лекция 8

проф. Попов Александр Михайлович

Орбитальный механический и магнитный моменты электрона. Спин



$$\vec{\mu} = \frac{1}{c} i \vec{S} \qquad i = -e/T \qquad S = \pi r^2 \qquad \vec{L} = [\vec{r} \times m\vec{v}]$$

Связь орбитального механического и магнитного моментов $\qquad \vec{\mu} = -\frac{e}{2mc}\vec{L}$

Гиромагнитное отношение (g - фактор) $\qquad g = \frac{\mu/L}{e/2mc} = 1$

Переход к квантовой механике - операторы

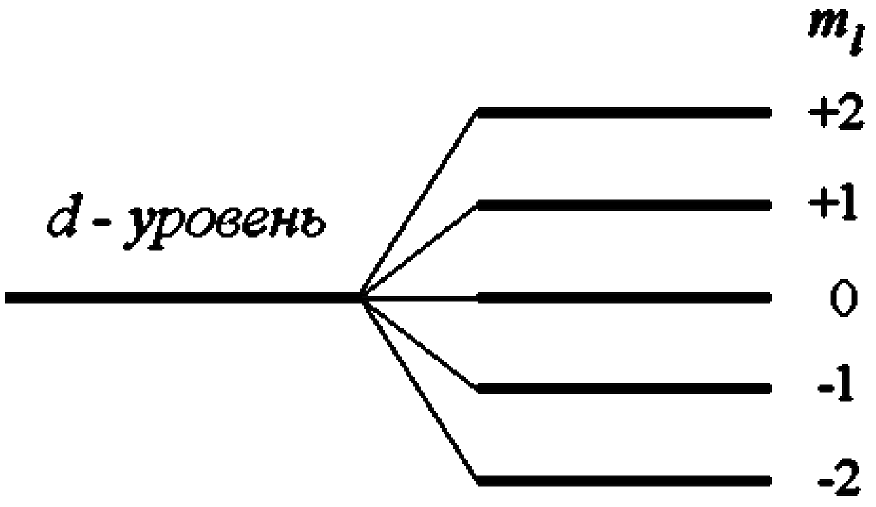
$$\hat{\vec{\mu}}_\ell = -\frac{e}{2mc}\hat{\vec{L}} \qquad \hat{\mu}_{\ell_z} = -\frac{e}{2mc}\hat{L}_z$$

$$[\widehat{L^2}, \widehat{\overrightarrow{\mu_\ell}}] = 0$$

$$\mu_{\ell_z} = -\frac{e\hbar}{2mc} m_\ell \qquad m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \qquad \mu_B = e\hbar/2mc = 0.927 \times 10^{-20} \text{ эрг/Э}$$

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

Экспериментальное определение магнитных моментов. Опыты Штерна и Герлаха



Дополнительная энергия электрона в атоме при наличии магнитного поля

$$W = -\left(\vec{\mu}\vec{H}\right) \qquad W = -\mu_z H$$

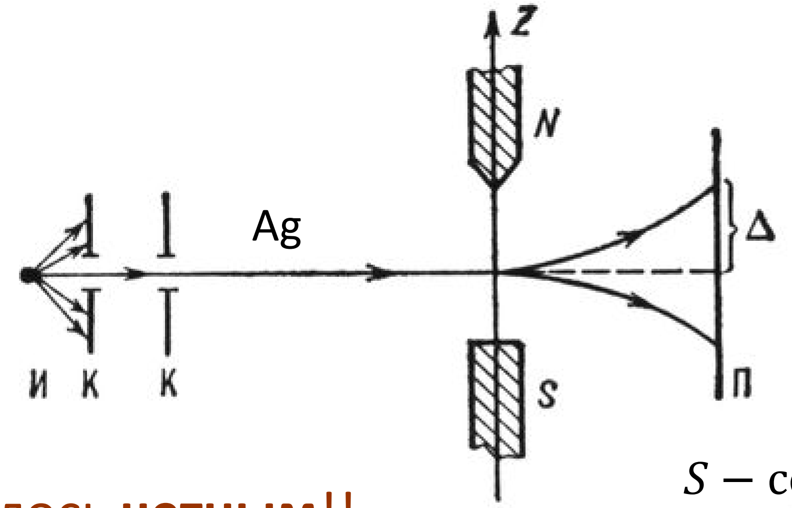
$$\Delta E = -\mu_z H = m_\ell \mu_B H \qquad m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \pm \ell$$

Всегда нечетное число компонент!!

Проще увидеть при пролете пучка частиц через область неоднородного магнитного поля

Штерн и Герлах, 1922

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



S – состояние

Число компонент расщепления оказалось **четным**!!

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

<u>Уленбек и Гаудсмит (1925) – идея спина</u>

$s = 1/2$ $\qquad m_s = \pm 1/2 \qquad 2s+1=2$

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

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

Гиромагнитное отношение: из эксперимента

$$\vec{\mu}_S = -\frac{e}{mc}\vec{S} \qquad g = \frac{\mu_S/S}{e/2mc} = 2$$

Операторы

$$\hat{\vec{\mu}}_S = -\frac{e}{mc}\hat{\vec{S}} \qquad \hat{\mu}_{S_z} = -\frac{e}{mc}\hat{S}_z$$

Расщепление в магнитном поле $\quad \Delta E = -\mu_{S_z} H = \pm\mu_B H$

Математические основы теории спина

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

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

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

<u>Операторы спина</u> $\hat{\vec{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ - действуют в пространстве двурядных столбцов

$$\hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}} \qquad \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$ - 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

$$\hat{S}_z\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\qquad \hat{S}_z\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=-\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\qquad \hat{S}_z\chi(m_s=\pm1/2)=\pm\frac{\hbar}{2}\chi(m_s=\pm1/2)$$

Коммутация

$$\left[\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_y\right]=\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y-\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}=2\begin{pmatrix}i&0\\0&-i\end{pmatrix}=2i\hat{\sigma}_z$$

$$\left[\hat{S}_x,\hat{S}_y\right]=\frac{\hbar^2}{4}\cdot 2i\hat{\sigma}_z=i\hbar\hat{S}_z$$

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

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

Квадрат спина

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

$$\hat{S}^2\chi(m_s=\pm1/2)=\frac{3}{4}\hbar^2\chi(m_s=\pm1/2)=\hbar^2 s(s+1)\chi(m_s=\pm1/2)$$

Вычисление средних в произвольном спиновом состоянии $\begin{pmatrix}\alpha\\\beta\end{pmatrix}$

$$\left\langle S_i\right\rangle=\left(\alpha^*\ \ \beta^*\right)\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_i\begin{pmatrix}\alpha\\\beta\end{pmatrix}$$

Атом водорода с учетом спина

$$\psi(\vec{r}) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m_\ell}(\theta,\varphi) \quad \Rightarrow \quad \Psi(\vec{r},\sigma) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m_\ell}(\theta,\varphi)\cdot\chi(m_s)$$

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

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

<u>Встает вопрос о сложении орбитального и спинового моментов</u>

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

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

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

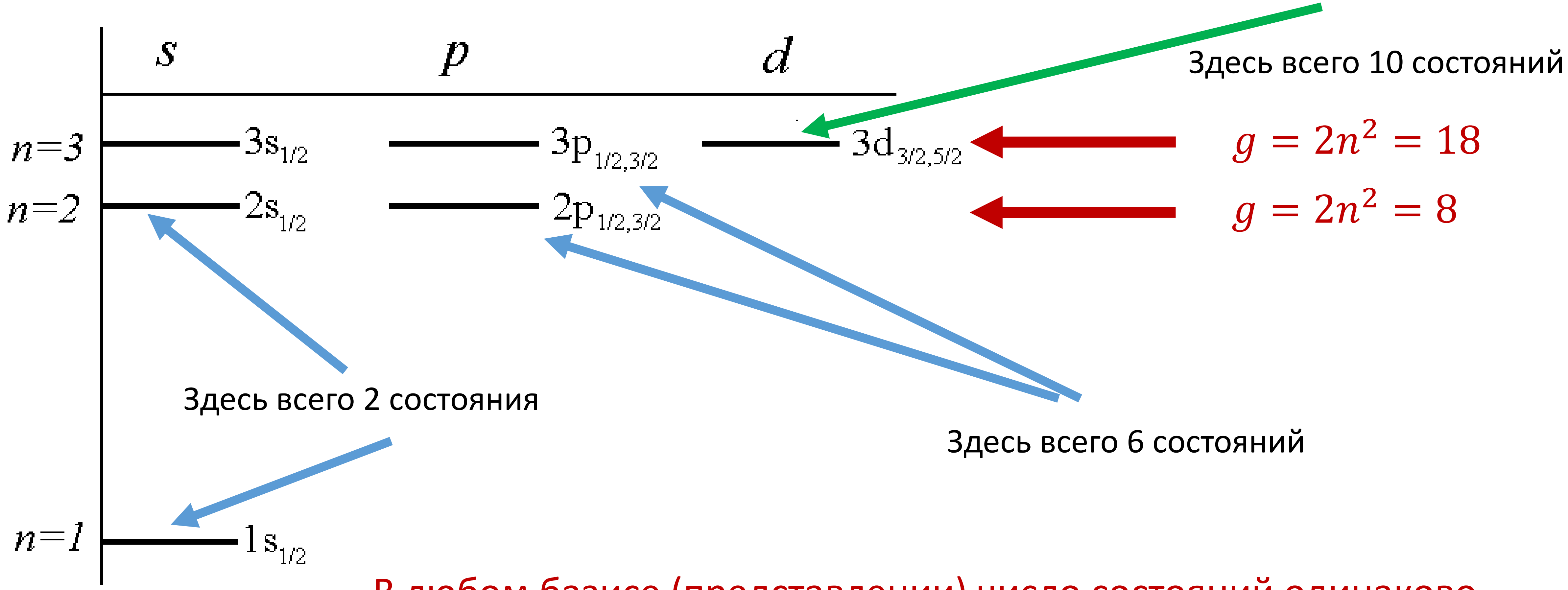
Есть и другой набор квантовых чисел, характеризующих состояние электрона в ц.с. поле

$$n,\ \ell,\ m_\ell, m_s \ \Leftrightarrow n,, \ell, j, m_j$$

при этом $m_j = m_\ell + m_s,\ j = \ell \pm {}^1/_2\ (\ell > 0)$

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

Диаграмма энергетических уровней атома водорода

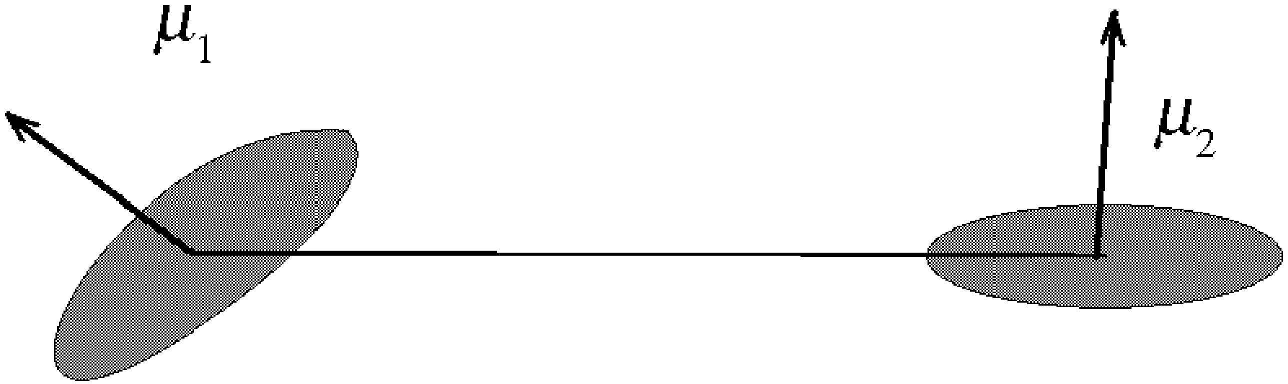


В любом базисе (представлении) число состояний одинаково.

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



$$E_{\ell s} \sim \frac{\vec{\mu}_\ell \vec{\mu}_s}{r^3} \Rightarrow \boxed{E_{\ell s} \cong \frac{\mu_B^2}{a_0^3} \cong \frac{1}{2}\alpha^2 Ry}$$

$\alpha = v_1/c$ - релятивистский эффект

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

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

$T_0 \cong Ry$ $\quad \boxed{\delta T \approx Ry^2/2mc^2 \approx \alpha^2 Ry}$

<u>Выводы:</u> 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 $\left(\hat{H}_0 + \hat{V}\right)\tilde{\psi}_n = \varepsilon_n\tilde{\psi}_n$ $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$

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 $\hat{H}_0\psi_n + \hat{H}_0\delta\psi_n + \hat{V}\psi_n = E_n\psi_n + \delta E_n\psi_n + E_n\delta\psi_n$

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

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

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

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

Для функции

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

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

Условия применимости

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

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

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