Лекция №8 (29.10.20)

1 Орто- и пара- гелий

He 2 эл-на с 1s связью.

- l_1 и l_2 образуют полный орбит. момент l

$l = |l_1 - l_2|, |l_1 - l_2 + 1|, \dots |l_1 + l_2|$

- s_1 и $s_2 \Rightarrow s$: $s = 0$ (пара-) и $s = 1$ (орто-)

„Терм" – уровень энергии атома, характеризуемого опред. зн-ми полного орбитального и спинового моментов

$\underline{s=0} \Rightarrow j = l \Rightarrow$ термы синглетны ($\forall$ орб. квант. числу l соотв. нерасщ. уровень с $j = l$)

$\underline{s=1} \Rightarrow j = l-1, j = l, j = l+1 \Rightarrow$ система триплетов (щелочно-зем. Ме Ca, Be, Mg..)

оба эл-на имеют один. квант. числа
$n_1 = n_2 = 1$.
Т.к. $l \leq n-1 \Rightarrow l_1 = l_2 = 0$

$(s_1)_z = (s_2)_z = \frac{1}{2}$ – у ортогелия

(Для того терма ортогелия, кот. должен был быть осн., полные наборы кв. чисел обоих эл-в совпадали б
→ Этого терма в природе $\nexists$ – (!) спектроскоп. исслед-ми

2 Принцип Паули. в природе выпадает терм атомов, у кот. совп. квант. числа (наборы) по крайней мере у 2 эл-в.

1925 ↳ гипотеза:
в 1 квант. сост. не м.б. 2e. (если e с перекр. Ψ)

//это эмпирич. обобщение//.

∄ 2 эл-на в нек. силовом поле:

$\Psi_I(x_1, y_1, z_1)$, $\Psi_{II}(x_2, y_2, z_2)$, Ψ – амплитуда вер-ти найти e^- в окр-ти x, y, z.

Распр-е 2e:

$\Psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2)$.

Пусть эл-ны независ, т.е. НЕ подчин. принципу Паули ↳

↳ $\Psi_{1,2}^{(*)} = \underbrace{\Psi_1(x_1, y_1, z_1)}_{1e-\text{в окр.}(x_1 y_1 z_1)} \cdot \underbrace{\Psi_2(x_2, y_2, z_2)}_{2e-\text{в окр}(x_2 y_2 z_2)}$ – ?! с квант. мех. (т.к. можно устан. какой эл-н 1й, а какой 2й)

Если объекты одинак, но не тождественные

$(a, b) \to (b, a)$ ничего не изм.

$(e, e) - (e, e)$ невозм. отлич. частицы

• ∄ систему 2 тожд. частиц: $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{s}_1, \vec{s}_2)$, $\vec{q} = (\vec{r}, \vec{s})$ – обоб. коорд. (какие-то коорд, не уточн.)

↳ $\Psi(q_1, q_2)$.

$\Psi(q_2, q_1) = e^{i\varphi}\,\Psi(q_1, q_2)$, $|e^{i\varphi}| = 1$.

$\Psi(q_1, q_2) = \underbrace{e^{2i\varphi}}_{=1}\,\Psi(q_1, q_2) \Rightarrow e^{i\varphi} = \pm 1$.

$\Psi(q_2, q_1) = +\Psi(q_1, q_2)$ — бозоны

$\Psi(q_2, q_1) = -\Psi(q_1, q_2)$ — фермионы

бозоны ⟵ Th ⟶ фермионы

бозоны ⇓ спин-целый или 0. из бозонов фермион не сделать

фермионы ⇓ полуцелый спин. частица с чет. числом фермионов – бозон

Т.о. (*) позв. знать об эл-х больше, чем возм. на опыте ↳

↳ (*) неверна.

2 способа записи ВФ системы 2е:

$$\Psi_1(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\frac{1}{\sqrt2}\left[\psi_I(\vec{r}_1)\psi_{II}(\vec{r}_2)+\psi_{II}(\vec{r}_1)\psi_I(\vec{r}_2)\right] \leftarrow 1 \text{ соб.}$$

$$\Psi_2(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\frac{1}{\sqrt2}\left[\psi_I(\vec{r}_1)\psi_{II}(\vec{r}_2)-\psi_{II}(\vec{r}_1)\psi_I(\vec{r}_2)\right] \leftarrow 2 \text{ соб.}$$

Меняем местами $1 \leftrightarrow 2$: Ψ_1 – симм
Ψ_2 – антисимм.

Если ψ_I и ψ_{II} идентичны, то $\Psi_2 \equiv 0 \Rightarrow$
$\Rightarrow$ 2 фермиона не м.б. в 1 квант. состоянии.

3 Таблица Менделеева

n – слой $\leftarrow$ сов-ть эл-в с зад. n
l – оболочка $\leftarrow$ сов-ть е с зад. l.

① Каждый слой n содержит n оболочек $l=0,1,\dots,n-1$
② Число состояний в оболочке $2l+1$
③ При зад. n, l, m $\exists$ только 2е с $s_{1z,2z}=\pm 1/2$. $\Rightarrow$
$\Rightarrow$ оболочка в $\forall$ слое вмещает $N_{nl}=2(2l+1)$ эл-в.

④ Емкость слоя

$$N_n=\sum_{l=0}^{n-1}2(2l+1)=2n^2$$

n	1	2	3	4	5	
Слой	K	L	M	N	O	
наиб. число е	2	8	18	32	50	$(2n^2)$

l	0	1	2	3	4	
обозначение	s	p	d	f	g	
наиб. число е в оболочке	2	6	10	14	18	$2(2l+1)$

$2p^3$ – на оболочке 3е
2 – слой L
p – оболочка

Слои заполн. послед. согласно Паули ↳ конфиг-и эл. оболочек атомо

$_{11}Na: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

$_{18}Ar: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$

С $_{19}K$ дело усложняется: 4s раньше, чем 3d.

$_{19}K: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$

$_{20}Ca: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$

„Соревн. стиль заполнения оболочек" для больших знач L –
– вклад дает центробежная энергия

$$\frac{L^2}{2m_e r^2} = \frac{\hbar^2(l+1)l}{2m_e r^2}$$

$$\Rightarrow 3d(l=2) \xrightarrow[\text{выгоднее}]{} 4s(l=0)$$

$4d(l=2)$ и $4f(l=3)$ – тоже „задержка"

4 Правило Хунда

мультиплетность терма: при $S > L$ ↳ $2L+1$ (число компонент тонкой структуры)

$S < L$ ↳

Терм: $^{2S+1}L_J$ ← J – полный угл. мом-т атома; L – полный орб. момент (s, p, d...)

Пример: $^2D_{3/2}$ → орб. мом-т $L=2$

$3/2 = J$ – полный мом-т

$2S+1 = 2 \Rightarrow S = 1/2$ – спин

Терм осн. сост-я атома м.б. выделен среди прочих термов с помощью след. правила:

1) Наим. энергией обладает терм с наиб. зн-м полного спина S и наиб (при выбр. S) зн-м L

2) В случае, когда заполнено не более половины оболочки L, min энергии отвечает полный момент $J = |L - S|$

Если зап. > половины оболочки ↳ $J = L + S$.

• $_6C: 1s^2 2s^2 2p^2$. p заполн. частично, оба $e^- \to l=1, s=1/2$
$\parallel$
Z

$L = 0, 1, 2$ (т.к. $\underbrace{|l_1 - l_2|}_{0} \leq L \leq \underbrace{|l_1 + l_2|}_{2}$)

$S = 0, 1$ $(2S+1)$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\uparrow$

6 различ. сост-й.

По правилу Хунда осн. сост-е:

max спин $\Rightarrow S = 1$. ($\Rightarrow$ спины $1/2$) $\Rightarrow e^-$ отл. проекц. l:

$m_l = 0, \pm 1, .. \pm l$, $l = 1 \Rightarrow m_l = 0, \pm 1$

$(0, 1), (-1, +1)$

$(l_1, l_2) = (0, 1)$ (l-max по Хунду)

$L = 1 + 0 = 1$

$J = L - S$, об-на заполн. менее чем наполовину

$\Rightarrow$ терм осн. состояния $^3P_0$

Есть и другие термы: $^3P_1$ $^3P_2$ $\leftarrow$ возбужд.

$J = L - S + 1$ $J = L - S + 2$

Эффект Зеемана:

излучающий атом наход. в МП $\hookrightarrow$ спектр. линии расщепл. на ряд компон-т

нужно высок. разрешение приборов. $\Leftarrow$ близко расп. др. к др.

норм $\leftarrow$ Эффект Зеемана $\rightarrow$ аномал
(1896 г)

частный случай

"не было понятия спина

„обычный"

$S = 0$, переход м/у синглет. сост.

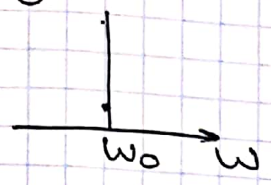
Демонстрация: Cd — норм. эффект.

$1 = 2S+1$

переход $5\,{}^1D_2 - 5\,{}^1P_1$

$S = 0$

$\vec B = 0$



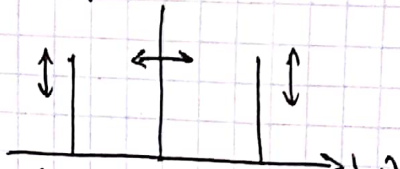
$\vec B \neq 0$ ⊙B

вдоль поля:

поляризованы (в системе есть поляризатор, на нём это видно)

$\vec B \neq 0$ ↑B

поперек поля



$\vec\Omega = -\frac{e}{2mc}\vec B$ — частота Ларморовской прецессии.

Норм. эффект Зеемана ⇐ нет спина ⇐ опис. класс. эл. дин.

$S=0$ (м/у спин.)

$\ddot{\vec r} + \omega_0^2 \vec r = 2[\dot{\vec r}, \vec\Omega]$

Решение: 3 осциллятора:

колеб. вдоль $\vec B$ $\perp\vec B$ $\perp\vec B$

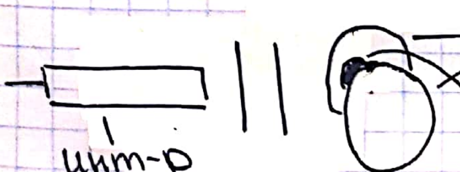
взаимно ⊥

получ. волна — циркул. поляриз-я

вдоль напр-я колебаний излуч-я нет
⇓
вдоль поля ω_0 нет!

Др. объяснение: квазикласс: Th Бора:

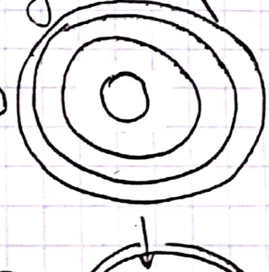
эл-н движ. в-г ядра ⇐ ток ⇐ есть магн. момент ⇒
⇒ прецесс. во внеш. МП с $\vec\Omega$



инт-р Фабри-Перо (для высокого разреш-я — линии близко)

→ видеокамера. На экране

$\bar B = 0$



круг-вые порядки инт-и 1 спектр. линия

$\bar B \neq 0$

— все линии расщ. на 2. (вдоль МП)