

Семинар 7. Магнитный момент. Спин. Сложные атомы

Клименок Кирилл Леонидович

13.06.2021

1 Теоретическая часть

1.1 Связь магнитного и орбитального момента

Перед тем, как вводить понятие спина, надо начать со связи магнитного и механического моментов. Для это рассмотрим классическое представление об электроне как о заряженном шарике, вращающемся вокруг ядра.

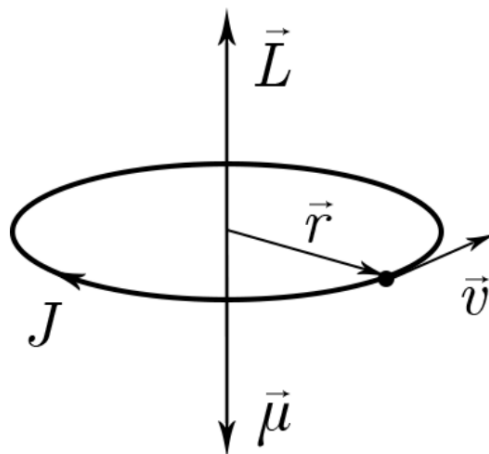


Рис. 1. Демонстрация связи механического и магнитного моментов в классической модели для электрона в атоме. J — сила тока, μ — магнитный момент

Мы можем записать механический и магнитный моменты для такого электрона:

$$\mathbf{L} = [\mathbf{r} \times m\mathbf{v}] = r m v \mathbf{n}$$
$$\mu = \frac{JS}{c} = \frac{1}{c} \frac{ev}{2\pi r} \pi r^2 \mathbf{n} = -\frac{e}{2c} r v \mathbf{n} \frac{m}{m} = -\frac{e}{2mc} \mathbf{L}$$

Видно, что в рамках такой классической модели есть четкая связь механического и магнитного моментов. Скорее всего, и в квантовом мире эта связь должна сохраниться, а поскольку проекция

момента импульса на выбранную ось квантуется $L_z = m_z \hbar, m_z = 0, \pm 1, \dots, \pm l$, l — максимальное значение орбитального момента, то, получается, что и проекция магнитного момента должна квантоваться. Единственное, что дополнительно должно появиться — это какой-то неочевидный коэффициент, который мы будем обозначать g и называть далее g -фактором или фактором Ланде:

$$\mu = -g \cdot \frac{e\hbar}{2mc} m_z = -g\mu_B m_z \quad (1)$$

$\mu_B = 927 \cdot 10^{-26} \frac{\text{Дж}}{\text{Тл}} = 0.927 \cdot 10^{-20} \frac{\text{эрг}}{\text{Гс}}$ — магнетон Бора.

1.2 Экспериментальное подтверждение связи магнитного и орбитального момента. Спин.

Понятно, что теорию мы можем написать какую угодно, но мы на общей физике, поэтому надо бы как-то проверить, что описанное выше имеет смысл. Поэтому рассмотрим 2 эксперимента, которые действительно подтверждают ее.

Опыт Эйнштейна и да Гааза Опыт предельно прост по своей сути — мы помещаем цилиндр из ферромагнетика во внешнее поле и подвешиваем его на нитке. Далее, резко изменим магнитное поле на противоположное. Тогда все магнитные моменты атомов поменяют ориентацию, что повлечет за собой изменение момента импульса, и наш цилиндр начнет вращаться. Оценить этот эффект можно, если приравнять приобретенный момент импульса всего тела ($I\omega$) к моментам импульса всех электронов в нем ($N \cdot 2L_e$). Из характерных оценок для цилиндра массой 100 грамм и радиусом 1 см характерная угловая скорость получается около 10^{-3} Гц, что довольно сложно детектировать. В оригинальном опыте исследовали не полученную угловую скорость, а крутильные колебания. Сначала получали все параметры колебательной системы без внешнего поля, а потом измеряли амплитудно-частотную характеристику в зависимости от частоты перемagnetивания. По полученной кривой и была найдена связь магнитного и механического момента, а g -фактор для электрона оказался равен 2 с хорошей степенью точности.¹

Опыт Штерна-Герлаха Суть опыта также предельно проста. У нас есть источник нейтральных атомов серебра с одним электроном на внешней орбитали (это позволяет говорить, что атом водородоподобный). Пучок этих атомов проходит через специальный магнит с сильно неоднородным магнитным полем. Так как в неоднородном поле на магнитный диполь действует сила (привет 3 семестру), то такой атом должен отклониться от своей траектории (при этом это не сила Лоренца — атом нейтрален). В классическом случае, если бы механический, а значит и магнитный, моменты атома были непрерывны, то на экране мы бы видели четкую полосу в зоне попадания атомов. Однако, еще в прошлом семинаре мы видели, как механический момент электрона в атоме квантуется и может иметь различное значение проекций на выделенную ось. Одна проблема — проекций всегда нечетное число, а в эксперименте явно наблюдается расщепление на 2 точки. Это может означать только одно: у электрона есть собственный магнитный момент, который мы будем называть спином. Он также квантуется и может принимать значения $\pm \frac{1}{2} \hbar$. Это является следствием более ранней договоренности считать расщепление как $2S + 1 = 2$.

¹Примечание: вообще-то, о g -факторе изначально не говорили, и реальный результат примерно соответствовал соотношению $\mu = -\mu_B m_z$, что было связано с ошибками в эксперименте. Только дальнейшие более точные эксперименты открыли реальное положение дел.

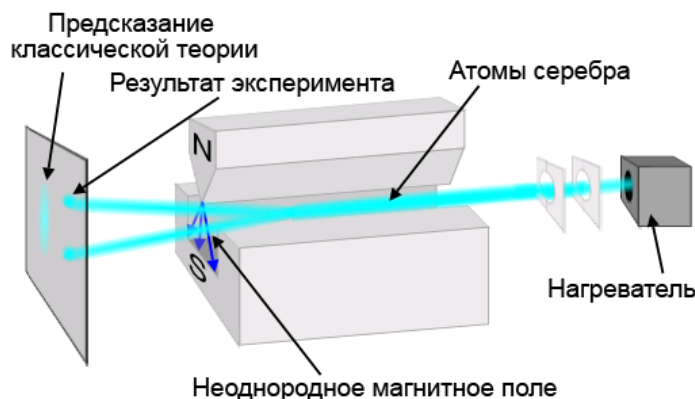


Рис. 2. Установка для опыта Штерна-Герлаха

Спин Подводя итоги по этим 2 экспериментам, мы видим, что у электрона в атоме появился собственный магнитный момент — спин, который не имеет классической аналогии и квантуется как $\pm \frac{1}{2} \hbar$. При этом мы в рамках нашего курса просто его постулируем. Более честный вывод наличия спина представлен в релятивистской квантовой теории на теорфизике. И вот теперь мы можем полностью описать состояние электрона в атоме. Для этого нам нужно 4 квантовых числа, а именно: n — главное квантовое число (описывает уровень энергии), l — орбитальное квантовое число (момент импульса), m — магнитное (проекция момента импульса на выделенную ось), s — спиновое (какую проекцию имеет спин). И теперь имеет смысл комментарий к таблице из 6 семинара о степенях вырождения уровней энергии как $2n^2$. На самом деле, это очень хорошо видно в таблице Менделеева. В первом периоде только 2 элемента: водород и гелий, заполнено состояние с $\{n = 1; l = 0; m = 0; s = \pm 1/2\}$. Во втором периоде 8 элементов с состояниями с $\{n = 2; l = 0, 1; m = 0, \pm 1; s = \pm 1/2\}$ и так далее.

1.3 Сложение моментов. Полный момент атома.

Естественным продолжением разговора о моментах является разговор об их сумме, так как атом это замкнутая система, и при взаимодействии с внешним полем получается, что надо рассматривать и орбитальный и спиновый моменты электронов.

Начнем с простого: пусть у нас есть 2 момента: L_1, L_2 , и мы хотим их сложить. Поскольку мы работаем с квантовой механикой, то нам надо перейти к операторам моментов и решить задачу на собственные числа суммарного оператора. Но, естественно, честно я решать это не буду, а просто вспомню, что у нас моменты квантуются, и максимальные значения проекций на выбранную ось для этих операторов будут $l_1, l_2; l_1 > l_2$ соответственно. Тогда максимально возможная проекция момента будет их суммой $l_1 + l_2$ когда направления операторов совпадут, а минимально возможная проекция будет равна их разности $l_1 - l_2$, когда моменты направлены в разные стороны. При этом все значения между ними также возможны. Тогда количество всевозможных состояний для этих моментов:

$$N_{tot} = \sum_{l=l_1-l_2}^{l_1+l_2} 2l + 1 = (2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$$

Теперь давайте разберемся с более сложной вещью, а именно с суммированием полного магнит-

ного момента. Для определенности будем рассматривать электрон с орбитальным моментом L и спиновым моментом S . Для них магнитные моменты:

$$\begin{aligned}\mu_l &= -g_l \mu_B l \\ \mu_s &= -g_s \mu_B s\end{aligned}$$

При этом, вообще-то, у них разные факторы Ланде. Введем полный момент импульса $J = L + S$, и для сохранения единообразия запишем полный момент аналогично:

$$\mu_j = -g_j \mu_B j$$

Строго выводить формулу для g-фактора в этом случае я не буду, просто ограничусь тем, что скажу, что полный магнитный момент не сонаправлен с полным механическим моментом и из геометрии его проекцию на \mathbf{J} вполне можно получить. Сам ответ для суммарного g-фактора:

$$g_j = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

Терм Вот теперь, когда мы ввели все квантовые числа для атома и даже научились складывать моменты, можно поговорить о том, как в физике принято записывать состояния атома. Но для начала вспомним, что мы делали в рамках школьной химии, и поймем, почему нам это не подходит. Там мы заполняли все орбитали последовательно, так что в результате получали полную электронную конфигурацию. Например, для атома натрия электронная конфигурация: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$. Она дает представление об общем количестве электронов и о том, что последний электрон расположен на орбитали $3S$ и участвует в валентных связях, но не дает представление об орбитальном, спиновом и полном моментах атома, а ведь именно расщепления по ним и наблюдают в физических экспериментах. Здесь нам на помощь приходит другая форма записи, а именно терм. Ее общий вид:

$$n^{2S+1} L_J$$

Здесь обозначения совпадают с введенными нами ранее. Единственное, что L обозначается буквой в соответствии с таблицей:

	S	P	D	F	G
L	0	1	2	3	4

При этом в наших задачах может отсутствовать какая-то из частей записи терма, которая не нужна в решении.

Заполнение орбиталей. Принцип запрета Паули и правила Хунда. Теперь мы научились записывать состояния электронов в сложном атоме, но как их надо заполнять? Понятно, что основное состояние будет с минимальной энергией, но как это определить? Тут работает 2 базовых правила.

Принцип запрета Паули. Электроны, как частицы с полуцелым спином, фермионы, не могут существовать в одном энергетическом состоянии со всеми одинаковыми квантовыми числами. Это означает, что даже если у 2 электронов в атоме одинаковые n , l и m , то проекции спина у них должны быть направлены в разные стороны.

Правила Хунда. Это эмпирический набор правил заполнения энергетических оболочек атомов, схожий с тем, что было в школьной химии. Ниже по энергии лежит тот атомный терм, для которого выполняются два условия:

1. Мультиплетность $(2S + 1)$ максимальна
2. При совпадении мультиплетностей суммарный орбитальный момент L максимален

1.4 Тонкое и сверхтонкое расщепление

Перед тем как двигаться к задачам, нужно упомянуть еще о паре вещей, а именно о расщеплении уровней энергии из-за всей вот этой нагроможденной выше теории. Я не буду сильно грузить вас этим, а попробую рассказать это максимально понятно из имеющегося у вас опыта.

Тонкое расщепление. LS-связь Чтобы понять, что происходит, нам поможет классическое представление. Конечно это не комильфо, но так реально понятнее. Вернемся к нашей самой первой модели из этого семинара и сядем на электрон. Он неподвижен и имеет магнитный момент, заряженное ядро вращается вокруг него и создает внешнее поле, в котором магнитный момент будет ориентироваться по или против поля, тем самым меняя свою энергию. Это и есть тонкое расщепление. Если же мы будем рассматривать это со стороны стороннего наблюдателя, то получится что-то типа барона Мюнхгаузена, вытягивающего себя за волосы из болота. То есть электрон летает по орбите и взаимодействует сам с собой. Вот именно поэтому классическое представление понятнее.

Оценим, от чего зависит энергия этого расщепления. Тут все очень просто — от орбитального момента зависит то, как вращается вокруг нас ядро и, соответственно, внешнее поле, а также от спина электрона. Итого получаем:

$$\Delta U_{LS} \sim (\mu_S B_L) \sim (\hat{L} \hat{S})$$

Осталось научиться оценивать такие скалярные произведения. Для этого воспользуемся следующим выводом:

$$\begin{aligned} \hat{J} &= \hat{S} + \hat{L} \\ \hat{J}^2 &= \hat{S}^2 + \hat{L}^2 + 2(\hat{L} \hat{S}) \\ (\hat{L} \hat{S}) &= \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{S}^2 - \hat{L}^2) = \frac{1}{2} (J(J+1) - S(S+1) - L(L+1)) \end{aligned}$$

Сверхтонкое расщепление. Тут все существенно проще. У ядра тоже может быть спин, который создает магнитное поле вокруг себя, которое, в свою очередь, будет взаимодействовать со спином электрона.

2 Практическая часть

2.1 Задача 6.9

Условие С какой угловой скоростью ω и в каком направлении должен начать вращаться цилиндр, подвешенный в магнитном поле B , направленном параллельно его оси вертикально вверх,

если изменить направление поля на обратное? Считать, что цилиндр намагничивается до насыщения. Момент импульса электрона в атоме равен k , число атомов в цилиндре N , момент инерции цилиндра I .

Решение Тут, как и в теоретической части, нужно приравнять момент импульса цилиндра как целого и момент импульса каждого отдельного атома:

$$I\omega = 2kN \Rightarrow \omega = \frac{2kN}{I}$$

2.2 Задача 6.15

Условие Параллельный пучок нейтронов с энергией $T = 0.025$ эВ проходит через коллимирующую щель шириной $d = 0.1$ мм и затем через зазор в магните Штерна–Герлаха длиной $L = 1$ м. Оценить значение градиента поля $\frac{dB}{dz}$, при котором угол магнитного отклонения компонент пучка равен углу дифракционного уширения. Магнитный момент нейтрона $\mu_n = 9.66 \cdot 10^{-24}$ эрг/Гс.

Решение У нас тут 2 процесса, которые отклоняют наш пучок нейтронов. Первый — дифракционное уширение на щели, так как нейтроны, все-таки, квантовые частицы. Второй — отклонение в неоднородном магнитном поле за счет спина. Вопрос, откуда он там взялся у нейтральной частицы, оставим за границами этой задачи. При этом первый процесс может пересилить второй, и тогда вместо расщепления мы увидим сплошную полосу.

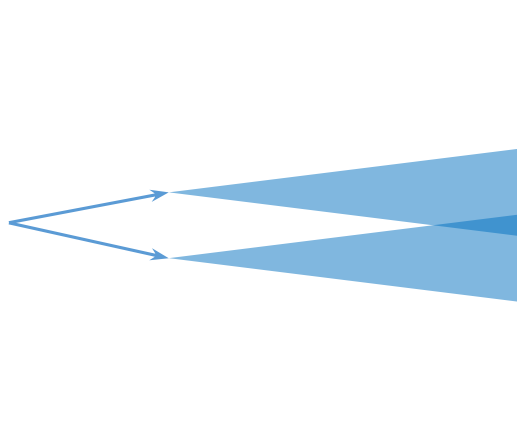


Рис. 3. Расщепление пучка нейтронов в задаче 6.15

Оценим дифракционное уширение:

$$\alpha_{\text{диф}} = \frac{\lambda}{d} = \frac{h}{d\sqrt{2mT}}$$

Рассчитаем отклонение под действием силы со стороны магнитного поля. Для этого разделим скорость на 2 компоненты: продольную v_{\parallel} и поперечную v_{\perp} , и свяжем их между собой. По сути это кинематическая задача:

$$\begin{aligned}
f_{\perp} &= ma_{\perp} = \mu_n \frac{dB}{dz} \Rightarrow a_{\perp} = \frac{\mu_n}{m} \frac{dB}{dz} \\
v_{\perp} &= a_{\perp} \tau, L = v_{\parallel} \tau \Rightarrow v_{\perp} = \frac{\mu_n}{m} \frac{dB}{dz} \frac{L}{v_{\parallel}} \\
\alpha_{\text{маг}} &= \frac{v_{\perp}}{v_{\parallel}} = \frac{\mu_n \frac{dB}{dz} L}{mv_{\parallel}^2} \approx \frac{\mu_n \frac{dB}{dz} L}{2T}
\end{aligned}$$

По условию приравниваем углы отклонения между собой и получаем:

$$\frac{dB}{dz} = \frac{2Th}{L\mu_n d\sqrt{2mT}} \approx 150 \frac{\text{Гс}}{\text{см}}$$

2.3 Задача 6.76

Условие В спектрах газовых туманностей наблюдаются линии, которые долгое время не могли приписать ни одному из известных элементов. В последствии выяснилось, что это линии ионов кислорода и азота. Наиболее интенсивные линии соответствуют переходам $^1D_2 \rightarrow ^3P_2$, $\lambda_1 = 5007 \text{ \AA}$ и $^1D_2 \rightarrow ^3P_1$, $\lambda_2 = 4959 \text{ \AA}$ для иона кислорода $^{++}$. Найти длину перехода $^3P_1 \rightarrow ^3P_0$ с использованием схемы Рассела-Саундерса (LS-схема).

Указание. В этой схеме энергия спин-орбитального взаимодействия равна $A(\hat{L}\hat{S})$

Решение Задача выглядит максимально сложно, но, все-таки, давайте ее раскрутим. Для того чтобы понять ее для такого иона, нарисуете все возможные термы и посмотрим, что за переходы между ними нам даны, и что от нас хотят найти. Для того чтобы понять, какие термы возможны, нужно, во-первых, записать все возможные значения проекции момента импульса для 2 электронов на 2p-орбитали ($\pm 2, \pm 1, 0$) и все возможные значения проекций суммарного спина ($\pm 1, 0$). Во-вторых, воспользоваться правилами запрета Паули и правилами Хунда. В результате перебора всех вариантов получится 15 всевозможных комбинаций, которые по энергиям представлены на рисунке. Также из него сразу видно, что нам дано, а именно длины волн (по сути разность энергий) для 2 зеленых стрелочек, и надо найти разность энергий для красной стрелки. При этом тонкая структура терма 3P определяется как раз таки известной нам формулой (схема Рассела-Саундерса).

$$E_{LS} = A(\hat{L}\hat{S}) = \frac{A}{2} (J(J+1) - S(S+1) - L(L+1))$$

Давайте с ее помощью запишем разность энергий этих уровней:

$$\begin{aligned}
E(^3P_2) - E(^3P_1) &= [E(^3P) + E_{LS}(J=2)] - [E(^3P) + E_{LS}(J=1)] = \frac{A}{2} (2 \cdot 3 - 1 \cdot 2) = 2A \\
E(^3P_1) - E(^3P_0) &= [E(^3P) + E_{LS}(J=1)] - [E(^3P) + E_{LS}(J=0)] = A
\end{aligned}$$

Теперь реализуем данные о переходах из условия:

$$\begin{cases} E(^1D_2) - E(^3P_2) = \frac{hc}{\lambda_1} \\ E(^1D_2) - E(^3P_1) = \frac{hc}{\lambda_2} \end{cases} \Rightarrow E(^3P_2) - E(^3P_1) = hc \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\lambda_1 \lambda_2} = 2A$$

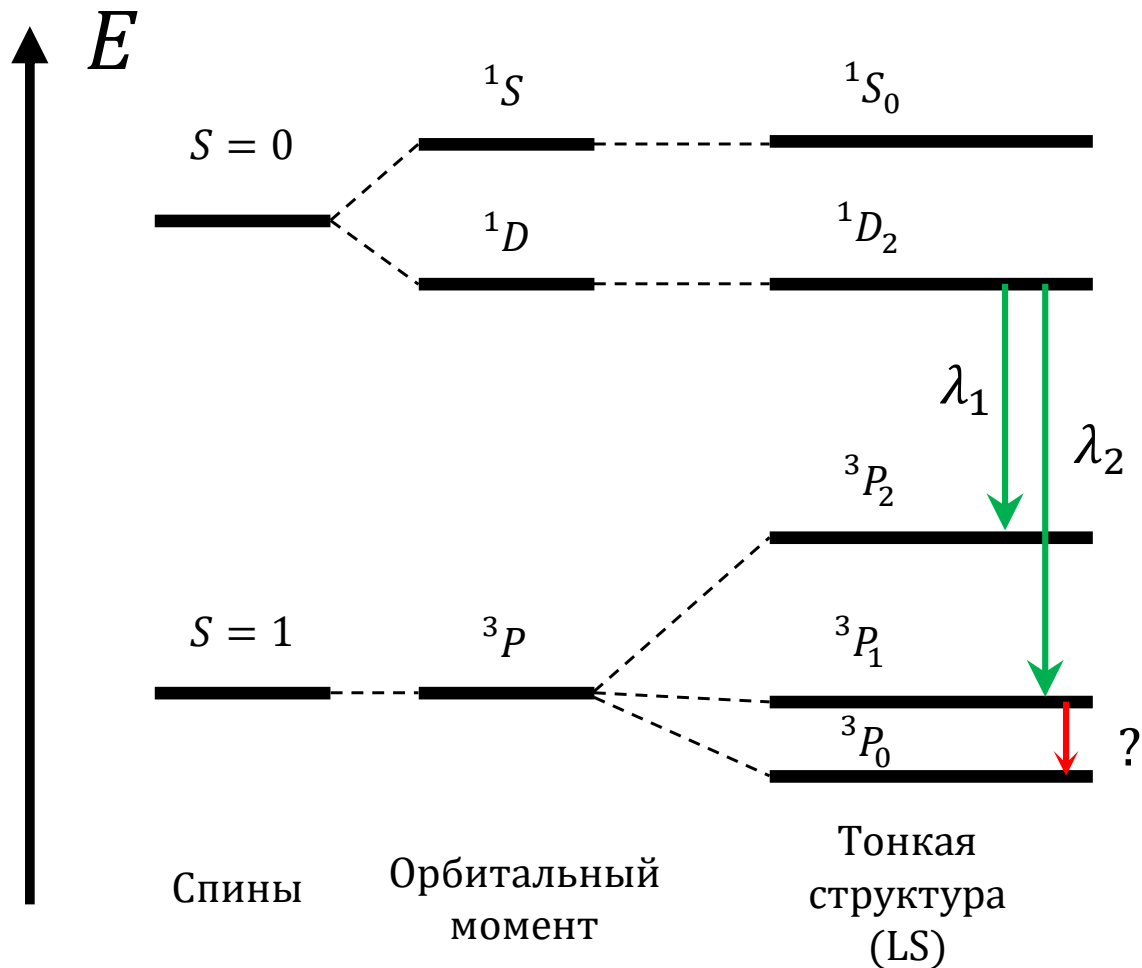


Рис. 4. Структура уровней энергии для задачи 6.76

Далее, аналогично

$$E(^3P_1) - E(^3P_0) = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1}{2}(E(^3P_2) - E(^3P_1)) = \frac{hc}{2} \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\lambda_1 \lambda_2}$$

$$\lambda = \frac{2\lambda_1 \lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} \approx 0.01 \text{ см}$$

2.4 Комментарии к задачам из задания

Нулевки Первая — зная n , надо найти l, m (привет табличке из прошлого семинара), вторая — по известной конфигурации найти l и s .

Задача 6.10 Продолжение 6.9.

Задача 6.15 Решена.

Задача 6.20 Построить аналогичные 6.76 уровни энергии и учесть расщепление состояния 2P . Далее, найти их разницу энергий, а эффективное поле из энергии выражается. Вспомните формулу из 3 семестра сами =)

Задача 6.48 Можно рассмотреть взаимодействие спинов как взаимодействие магнитных диполей, поле от которых известно.

Задача 6.77 Повторяет 6.76.

Задача 6.78 Тут нужно заметить, что это обменное взаимодействие идет с разными знаками в зависимости от того, орто- это или паргелий.

Задача Т2 Это задачка про перебор вариантов из решения 6.76.