ЛЕКЦИЯ 6

Квантовая физика

На прошлой лекции мы выяснили, что момент импульса квантуется:

$$M_z = m\hbar,$$

а максимальное значение m обозначили через l. Получается, что вектор в пространстве не может быть произвольным, а занимает лишь определенные положения. Это называется **пространственным квантованием**. Также

$$M^2 = \hbar^2 l(l+1),$$

т. е. сам момент тоже квантуется. Момент не может быть расположенным строго вдоль выбранной оси из соотношения неопределенностей.

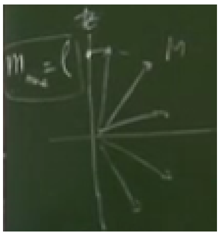

Рис. 6.1.

Для вращательного движения

$$T_{\text{вр}} \frac{L^2}{2j} = \frac{\hbar^2}{2j} l(l+1).$$

Здесь j — момент инерции.

Колебательный спектр:

$$T_{\text{кол}} = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad \text{— эквидистантный.}$$

Кулоновский потенциал:

$$E_{\text{Бор}} = \frac{mc^2}{2}\alpha^2 = Ry \propto \frac{1}{n^2} \quad \text{— для первого уровня.}$$

В общем случае

$$E_n \propto \frac{1}{n^2}.$$

Получается, что в спектре молекулы громадное число линий. В него входят:

1. **Электронное возбуждение** $E \simeq Ry$.
2. **Колебательное движение**. Величина колебательного кванта:

$$\hbar\omega_{\text{кол}} = Ry\sqrt{\frac{m}{M}}.$$

Получаются эквидистантные уровни энергии между основными

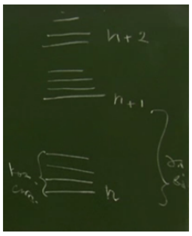

Рис. 6.2.

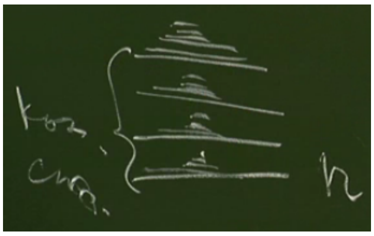

Рис. 6.3.

3. **Вращательное движение**

$$T_{\text{вр}} = Ry\frac{m}{M}.$$

Эта энергия еще меньше, поэтому уровни находятся между колебательными

$$\omega_{\text{эл}} : \omega_{\text{кол}} : \omega_{\text{вр}} \approx 1 : \sqrt{\frac{m}{M}} : \frac{m}{M} \simeq 10\,\text{эВ} : 0{,}5\,\text{эВ} : 0{,}025\,\text{эВ}$$

Если электрон вращается, то угловой момент не может быть равен нулю.

$$l_z = m_l\hbar, \qquad (m_l = 0, \pm1, \pm2, \dots \pm l),$$

где m — магнитное квантовое число.

Получается, что помимо главного квантового числа, нам еще нужно орбитальное квантовое число

$$l = 0s(\text{sharp})\; 1p(\text{principal})\; 2d(\text{diffuse})\; 3f(\text{fundamental}).$$

Получается, что в уравнении Шредингера, на самом деле

$$\psi = \psi(r) \Rightarrow \psi(r, \theta, \varphi) = R(r) * Y(\theta, \varphi).$$

Первая функция отвечает за нахождение электрона при данном радиусе, а вторая — при данном угле.

$$R(r) \to n_r \quad \text{— орбитальное квантовое число,}$$

$$Y(\theta, \varphi) \to l \quad \text{— радиальное квантовое число.}$$

Энергия должна зависеть не только от радиального квантового числа, но и орбитального. Но, оказывается, что в кулоновском поле энергия зависит только от главного квантового числа

$$n = n_r + l, \quad n = 1, 2, 3\dots, \quad n_r = 1, 2, 3\dots, \quad l = 0, 1, 2, 3\dots, \qquad E \propto \frac{1}{n^2}.$$

Уровень энергии и состояние — это разные вещи. Состояние — это те квантовые числа, которыми реализуется состояние. Одной и той же энергии может соответствовать много разных состояний. Если задано главное квантовое число n:

$$0 \leqslant l \leqslant n-1.$$

Но при заданном l, может быть $2l+1$ состояние с различными проекциями момента импульса.

Посмотрим, как вырожден уровень энергии, то есть сколько различных состояний соответствует одной и той же энергии:

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

То есть уровень энергии с главным квантовым числом n вырожден n^2 раз. На самом деле это число удвоится ($2n^2$) в связи с наличием спина, но об этом позже.

Рассмотрим состояние $l = 0$. Это значит, что углового момента нет, как будто электрон проходит через ядро. В случае классики, электрон может крутиться либо по часовой стрелке, либо против. Состояние с нулевым угловым моментом невозможно. В квантовой механике s-состояние соответствует сферически-симметричному распределению плотности электронного заряда. В случае модели атома Бора, электрон

Рис. 6.4.

занимает фиксированную орбиту и находится там с вероятностью 1. А в квантовом случае на эту орбиту просто приходится максимум ψ-функции.

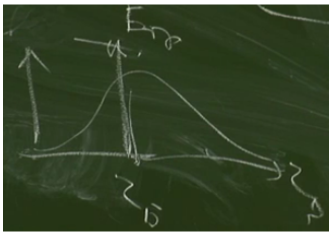

Рис. 6.5.

Если $l = 1$, то это диполь. Это соответствует p-состоянию.

Если $l = 2$, то квадруполь. Это соответствует d-состоянию.

Но как только появляется ненулевой орбитальный момент у электрона, то электрон, движущийся по орбите, создает ненулевое магнитное поле. У атома есть магнитный момент. Ясно, что если l=0, то магнитный момент отсутствует.

Если электрон движется по орбите, то $M = m[rv]$ — угловой момент.

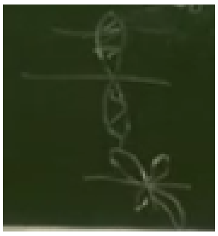

Рис. 6.6.

$$\mu = \frac{1}{c} iS, \qquad S = \pi r^2, \qquad i = -e\frac{v}{2\pi r} \quad \text{— заряд на число оборотов} \quad \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \quad \mu = \frac{e}{2c} rv = -\frac{e}{2c}\frac{\bar{M}}{m} = -\frac{e}{2mc} M.$$

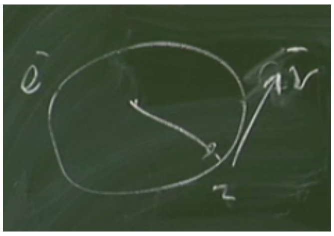

Рис. 6.7.

Это значит, что магнетизм атома складывается из магнетизма электронов, имеющих разные моменты. Гиромагнитное соотношение:

$$\frac{\mu}{M} = g\frac{e}{2mc},$$

где g — g-фактор.

Для орбитального движения g-фактор равен единице $g_l = 1$

Как квантуется магнитный момент:

$$\bar{\mu}_z = -\frac{l}{2me}\bar{M}_z, \qquad \bar{\mu}_{l_z} = -\frac{l}{2me}\hat{l}_z.$$

Поскольку $\hat{l}_z = \hbar l_z$, то

$$\mu_{l_z} = \frac{e\hbar}{2mc} m_l \quad \text{— собственные значения,}$$

$$\frac{e\hbar}{2mc} = \mu_{\text{Б}} \quad \text{— магнетон Бора,}$$

$$\mu_{l_z} = -\mu_{\text{Б}} m_l.$$

Квантовое число m называется **магнитным квантовым числом**. Оно показывает квантование проекции магнитного момента на ось.

Но на самом деле существует и **ядерный магнетон Бора**

$$\mu_{\text{яБ}} = \frac{e\hbar}{2M_N c},$$

где M_N — масса нуклона. Он в 2000 раз меньше, чем атомный, но все равно заметен.

6.1. Ядерный Магнитный Резонанс

Пусть летит пучок частиц, с орбитальным моментом $l \neq 0$. При заданном значении энергии, она будет $2l+1$ раз вырождена. Но если мы сможет определить орбитальное квантовое число, то одной и той же энергии соответствует $2l+1$ состояние. Но есть магнитная энергия $E_M = \mu B$. То есть мы можем определить μ и магнитное квантовое число. При одной и той же кулоновской энергии, будет расщепление на $2l+1$ уровней из-за магнитной энергии.

В атомных спектрах наблюдалось много аномалий. Одна из них — желтый дублет натрия. Оказалось, что желтая линия натрия обладает дублетной структурой. Этот дублет есть отражение того факта, что есть магнитный момент. Но раз дублет, то получается

$$2l+1 = 2 \quad \Rightarrow \quad l = \frac{1}{2}.$$

Но число l должно быть целым!

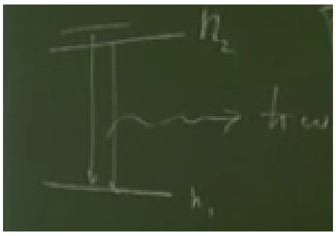

Рис. 6.8.

Появилось предположение, что есть еще какой-то магнитный момент, равный половине магнитного момента атома. Появиться он мог только из за того, что у электрона есть собственный момент количества движения. Спин равен $\frac{\hbar}{2}$, а его проекция

$$m_s = \pm\frac{1}{2}.$$

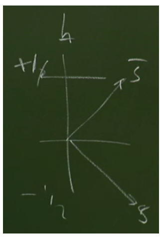

Рис. 6.9.

Но, посчитали, с какой скоростью должен вращаться электрон, и получилось, что она должна быть больше скорости света.

6.1.1. Опыт Штерна – Герлаха

Штерн и Герлах решили померять магнитный момент атома. На частицу будет действовать магнитное поле с силой

$$F_m = \mu \frac{\partial B}{\partial z}.$$

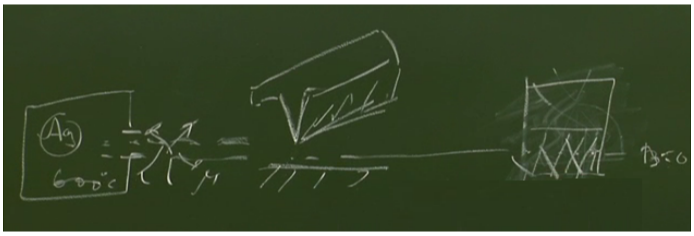

Рис. 6.10.

Атомы серебра разогревали, а затем они попадали в переменное магнитное поле, в котором должны были пространственно расщепиться в соответствии с атомными магнитными моментами. Эти моменты могут быть направлены хаотически, тогда на фотопластинке должна была появиться непрерывная полоса, по ширине которой, можно определить магнитный момент атома.

Но вместо этой полосы, они получили две узкие линии. И эта картина соответствует модели Бора, когда электрон вращается либо по часовой, либо против часовой стрелки. В действительности, после расчета все оказалось не так.

Результаты, которые они получили из эксперимента:

1. **Дискретность линий**. То есть магнитный момент в пространстве не может занимать произвольное положение, а существует пространственное квантование.

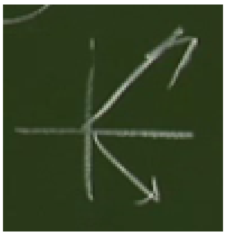

Рис. 6.11.

2.
$$2l + 1 = 2 \Rightarrow s_z \pm \frac{1}{2}, \qquad m_s = \pm\frac{1}{2}.$$

Спин электрона равен единице — это жаргон. На самом деле надо говорить, что *проекция механического момента электрона на заданную ось может принимать только значение* $\frac{1}{2}$. И соответственно магнитное квантовое число тоже принимает только два значения, т. к. оно квантуется так же.

Теперь можно посчитать величину расщепления, то есть величину магнитного момента

$$\mu_{s_z} = -2\frac{l}{2mc}s_z = -2\mu_{\text{Б}} m_s.$$

Получается, что гиромагнитное отношение

$$\frac{\mu_s}{s_z} = -2\mu_Б = -g\mu_Б.$$

То есть спиновый g-фактор $g_s = 2$.

Говорят, что спиновый g-фактор — **аномальный**. Потом провели эксперименты, определяющие этот g-фактор с точностью до семи знаков. Он не точно равен двойке. В дальнейшем, расчет с такой же точностью подтвердили экспериментальные данные.

Когда нашли спин электрона, то вспомнили **опыт Эйнштейна де-Гааза**. Они смотрели магнитный момент атома железа. В итоге у них получился g-фактор, равный двойке. То есть возникновение магнетизма в ферромагнетиках обусловлен спинами электронов.

В чем проблема посчитать магнитный момент атома? Есть собственный магнитный момент, есть орбитальный. Как их правильно складывать? Векторная модель атома.

В центрально-симметричном поле полный момент сохраняется. Полный момент состоит из орбитального и спинового:

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}, \qquad \mu = \mu_l + 2\mu_s,$$

так как спиновый g-фактор равен двум. Получается, что полный магнитный момент не параллелен полному угловому моменту.

Но полный угловой момент сохраняется, а для магнитного момента — это будет его проекция на угловой момент.

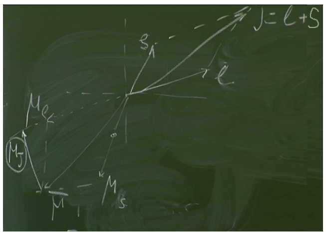

Рис. 6.12.

Магнитным моментом атома называется проекция μ на j, т. е. μ_j.

Мы сделали только для электрона. Теперь надо научиться складывать. Векторная модель заключается в том, что сумму векторов мы делаем как в классике, а затем накладываем квантовые условия.

$$\mu_l = g_l l \mu_Б = l\mu_Б, \qquad \mu_s = g_s s \mu_Б = 2s\mu_Б, \qquad \mu = M_j$$

— угловой момент, это проекция полного магнитного момента на полный угловой.

$$\mu = M_j = \mu_l \cos(\vec{l}\,\vec{j}) + \mu_s \cos(\vec{s}\,\vec{j}) = \mu_Б[l\cos(\vec{l}\,\vec{j}) + s\cos(\vec{2s}\,\vec{j})]$$

Теперь нужно найти косинусы:

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s},$$

$$(j-l)^2 = s^2 \Rightarrow s^2 - 2jl\cos(\vec{l}\,\vec{j}) + l^2 = s^2,$$

$$\cos(\vec{l}\,\vec{j}) = \frac{j^2 + l^2 - s^2}{2j^2},$$

$$(j - s)^2 = l^2 \Rightarrow \cos(\vec{s}\,\vec{j}) = \frac{j^2 + s^2 - l^2}{2j^2}.$$

Правила квантования:

$$j^2 = j(j+1),$$
$$l^2 = l(l+1),$$
$$s^2 = s(s+1).$$

Тогда получается, что магнитный момент:

$$\mu(M_j) = \mu_Б \left[\frac{j^2 + l^2 - s^2}{2j} + 2\frac{j^2 + s^2 - l^2}{2j}\right],$$

$$\mu = g_\Lambda \mu_Б, \quad \text{где } g_\Lambda = 1 + \frac{j^2 + s^2 - l^2}{2j^2}$$ — **фактор Ланде**.

Получается, что магнитный момент не выражается из магнетона Бора с помощью целого числа.

Нуклоны тоже обладают магнитным моментом, в том числе нейтрон, который незаряженный. Их g-факторы довольно сложные.

Семенов и Капица тоже хотели провести опыт как Штерн и Герлах, но ограничились только теоретическими выкладками.