

ЛЕКЦИЯ 8

Квантовая физика

Мы выяснили, какие законы сохранения есть в квантовой физике и не было в классической.

1. Инверсия

$$\vec{r} \rightarrow -\vec{r}.$$

При такой замене импульс

$$\vec{p} = m\vec{v} \rightarrow -\vec{p}$$

меняется на противоположный, т. к.

$$v = \frac{dr}{dt}.$$

Момент импульса сохраняется:

$$M = mvr \rightarrow +M.$$

Т. е. есть величины, который меняют свой знак, а есть те, которые не меняют. Величина F сохраняется, если она коммутирует с гамильтонианом, т. е. скобки Пуассона равны нулю ($[H, F] = 0$).

Четность состояния, которая определяется как $\pi = (-1)^l$ — сохраняется.

На самом деле закон сохранения четности выполняется только в нерелятивистских случаях.

2. В квантовой физике есть тождественные частицы, которых не может быть в классической физике. Мы не можем пометить частицы. Тождественность частиц приводит к наличию симметричных и антисимметричных функций. В силу того, что ψ^2 определяет вероятность, то минус ее не меняет.

Частицы, у которых спин полуцелый, а ψ -функция антисимметрична, называются фермионы. Частицы, у которых спин целый, а ψ -функция симметрична — бозоны.

Для фермионов существует принцип запрета Паули, который гласит, что в одном и том же квантовом состоянии в одном и том же месте не может находиться более одной частицы. Принцип Паули приводит к так называемому обменному взаимодействию.

Если орбитальное движение не зависит от спинowego, то

$$\Psi(1, 2) = \Psi(r_1, r_2, s_1, s_2) = \psi(r)S(s),$$

т. е. произведение пространственной части на спиновую. Это если спин-орбитальное взаимодействие слабое.

Пусть есть молекула водорода H_2 . Это два протона на достаточно большом расстоянии.

У электронов симметричное состояние, ψ -функции одинаковые. Но суммарная функция должна быть антисимметрична, значит спиновая часть должна быть антисимметрична, т. е. спины направлены в разные стороны.

Лекция 8. Квантовая физика



Рис. 8.1.

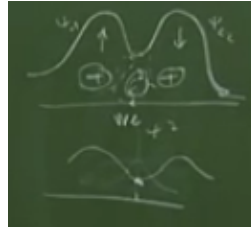


Рис. 8.2.

Теперь, если приблизить атомы, то волновые функции будут перекрываться и появится область, в которой может быть и первый электрон, и второй. Это приводит к тому, что между атомами водорода как бы появляется отрицательный заряд, который притягивает атомы. Это называется **обменным взаимодействием**.

Если же взять частицы с противоположными пространственными функциями, то тогда спиновая часть будет симметрична и вероятность нахождения электрона посередине равна нулю. Протоны расталкиваются.

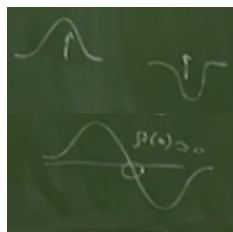


Рис. 8.3.

Потенциал взаимодействия в этих двух случаях будет следующим:

$W = k \pm A$ — энергия равна кулоновской плюс энергии взаимодействия, которая может как повышать, так и понижать кулоновскую.

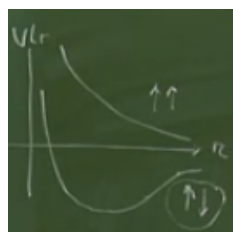


Рис. 8.4.

Именно обменное взаимодействие ответственно за проявление магнетизма, о котором мы будем говорить потом.

Мы научились строить систему энергетических уровней в атоме. При переходе электрона на более низкий уровень, испускается квант света. Но нужно понять, когда электроны могут переходить, а когда нет.

Когда фотон вылетает или, наоборот, поглощается, то нужно еще учесть сохранение углового момента системы. **Спин** — это собственный угловой момент системы в его системе координат. А поскольку, фотон летит со скоростью света, то нельзя говорить о спине фотона. Можно говорить только об угловом моменте фотона, связанном с центром масс системы.

Излучение может возникнуть в двух случаях:

1. Из-за движения зарядов (перестройка электронной системы). В этом случае фотон называется *E*-фотон (электрический фотон). Например обычное колебание зарядов (диполь).
2. Из-за изменения внутренних токов. В этом случае фотон называется *M*-фотоном (магнитным фотоном). Это если, например, меняется орбита электрона.

Но нужно еще характеризовать полный угловой момент фотона.

Для того, чтобы узнать, возможен ли переход электрона нужно:

1. закон сохранения энергии

$$\hbar\omega = \Delta E_{12},$$

2. закон сохранения углового момента J , т. е. какой момент унес с собой фотон,
3. закон сохранения четности. Но для того, чтобы выяснить справедливость закона, нужно знать четность начального состояния, четность конечного, а также $\Delta E, \Delta J$ и тип испускаемого фотона.

8.1. Отражение

Если имеется колеблющийся диполь, то четность должна быть отрицательной ($\pi = -1$). Если же магнитного типа, то при отражении ничего не меняется — четность должна быть положительной.

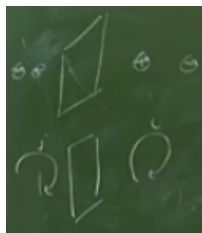


Рис. 8.5.

Тогда для электрических фотонов

$$\pi_E = (-1)^J, \quad E1^-, \quad E2^+, \quad E3^-,$$

для магнитных

$$\pi_E = (-1)^{J+1}, \quad M1^+, \quad M2^-, \quad M3^+.$$

Угловой момент характеризует диаграмму направленности излучения (симметрию излучения). При $J = 1$ — дипольное, при $J = 2$ — квадрупольное, и т. д.

Почему говорят, что спин фотона равен единице?



Рис. 8.6.

Размер атома: $R \sim 10^{-8}$ см.

$$\lambda \sim 5000 \text{ \AA} = 5 * 10^{-5} \text{ см}, \quad \frac{\lambda}{R} \gg 1,$$

т. е. длина волны гораздо больше излучающей системы. Для того, чтобы найти вероятность такого излучения, нужно разложить по мультиполю.

Утверждается, что вероятности переходов связаны с временами испускания:

$$\frac{\text{Вероятность E1}}{\text{Вероятность E2}} = \frac{\tau(E2)}{\tau(E1)} = \left(\frac{\lambda}{2\pi R} \right)^2.$$

Вероятность дипольного излучения на шесть порядков больше, чем квадрупольного. А для дипольного угловой момент — единица. Поэтому фотону как бы приписывают спин единицу.

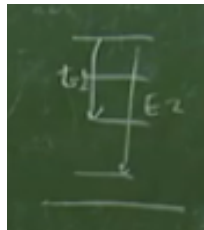


Рис. 8.7.

Пусть есть осциллятор:

$$r = ae^{i\omega t}, \quad \text{где } d = er \text{ — дипольный момент.}$$

Электрическое поле

$$E_{\text{дип}} \propto d = er.$$

Вероятность дипольного излучения

$$W_{\text{дип}} \propto (\ddot{d})^2 \propto \ddot{r}^2 \propto \frac{e^2 \omega^4 a^2}{c^3},$$

т. к. излучение может быть связано только с ускорением.

Вероятность излучения

$$W_{\text{изл}} = \frac{1}{\tau} = \frac{W}{\hbar\omega} = \frac{e^2 \omega^3 a^2}{\hbar c^3} = \omega \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) \left(\frac{a\omega}{c} \right)^2 = \omega * \alpha \left(\frac{a * 2\pi}{\lambda} \right)^2, \quad \text{где } \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}.$$

Вероятность дипольного излучения

$$W_{\text{изл}}^{\text{дип}} \propto \omega^3 (E_\gamma^3)$$

— закон E^3 дипольного излучения.

Поскольку

$$\frac{E_2}{E_1} = 10^{-6}$$

то говорят, что переход с изменением j на два запрещен. Это не так. Он сильно подавлен более вероятным переходом, но в принципе может происходить.

Например, такой переход наблюдают в кобальте.

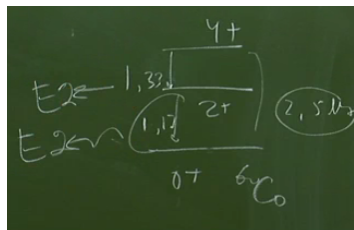


Рис. 8.8.

Можно также сказать:

$$\frac{E_3}{E_2} \frac{M_1}{E_1} = \left(\frac{2\pi R}{\lambda} \right)$$

Т. е. вероятность магнитных порядков на 6 порядков меньше, чем электрических. Отсюда появляются правила отбора. Они показывают, какие возможны переходы из всех энергетических состояний.

$$\Delta J = \pm 1, 0,$$

кроме $0 - 0$ переходов. Например, если вектор J поворачивается, то $\Delta J = 0$.

Теперь квантовые числа: $\Delta m_s = 0$. Если спин меняется, то это значит, что переход магнитный, а он крайне маловероятен. Если есть собственный угловой момент, то в силу отрицательного заряда электрона, спиновый магнитный момент направлен в другую сторону. Спины выстраиваются не по полю, а против поля.

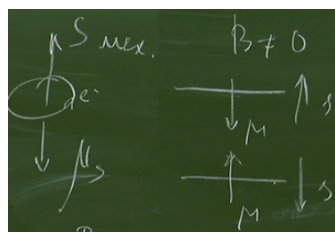


Рис. 8.9.

Поскольку $m_s = \pm \frac{1}{2}$, то возможны два состояния.

$$\mu = \frac{1}{c} JS.$$

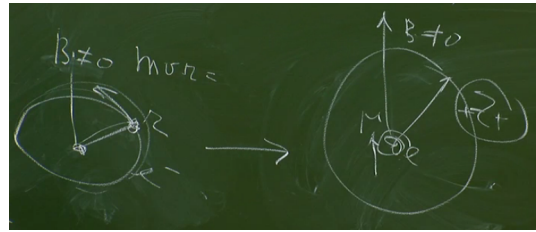


Рис. 8.10.

Если есть электрон, вращающийся по орбите, то в центре витка поле не равно нулю. А если мы перейдем в систему координат электрона, то получится, что уже заряд ядра создает магнитное поле, которое взаимодействует с электроном. Это называется спин-орбитальное взаимодействие.

Но если нет орбитального момента, то нет и взаимодействия.

Пусть $n = 2$, $l = 0$, тогда состояние $2S_{\frac{1}{2}}$. А если $l=1$, то возникнет расщепление на $2P_{\frac{3}{2}}$ и $2P_{\frac{1}{2}}$. Отсюда и появляется дублет натрия. Может еще быть спин-спиновое взаимодействие, но оно ужасно маленькое.

Может быть взаимодействие спина электрона с магнитным моментом ядра. Его энергия

$$W_{\text{ея}} = \frac{\mu_{\text{э}}\mu_{\text{я}}}{r^3}.$$

Но, поскольку ядерный магнитный момент в 2000 раз меньше электронного, то эта энергия мала, а расщепление называется **сверхтонким**.

А взаимодействие спин-орбита называется тонким расщеплением. Мы будем рассматривать тонкое расщепление.

Все эти расщепления мы увидим и без внешнего поля. А теперь поместим атом в магнитное поле:

$$U = U_{SL} + U_{SH} + U_{LH}$$

— суммарное взаимодействие складывается из: спин-орбитального, спин с полем и орбита с полем. Магнитный момент атома

$$\mu = -g_{\text{Л}}\mu_{\text{Б}}\vec{J}$$

Нужно определить, какое поле будет (сильное или слабое), по сравнению с внутренним полем (образованное спин-орбитой).

8.2. Слабое поле $U_{SH} \ll U_{SL}$

$$E = E_0 - \vec{\mu}\vec{B} = E_0 + g_{\text{Л}}\mu_{\text{Б}}\vec{J}\vec{B} = E_0 + g_{\text{Л}}\mu_{\text{Б}}m_jB,$$

где E_0 — энергия, которая была без магнитного поля.

Получается, что мы снимаем вырождение по m_j потому что энергия будет зависеть от того, под каким направлением ориентирован j .

Рассмотрим, как это происходит в атоме натрия. Чтобы возбудить электрон, нужно перевести его в состояние $3P$. Там есть два состояния, которые определяются тонкой структурой. Мы говорили, что энергия зависит только от главного квантового числа, а тут имеем совершенно другую картину. Но для P -оболочки экранирование

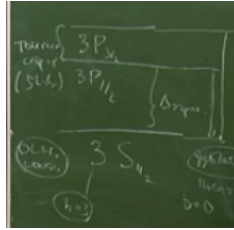


Рис. 8.11.

электронов меньше, чем для s -электронов, поэтому уровни разные по энергии. Если внешнее поле равно нулю, то увидим дублет натрия.

Теперь приложим слабое внешнее поле.

Уровень $3P_{3/2}$ расщепится на $(2J + 1) = 4$ уровня.

Уровень $3P_{1/2}$ расщепится на $(2J + 1) = 2$ уровня.

Уровень $3S_{1/2}$ расщепится на $(2J + 1) = 2$ уровня.

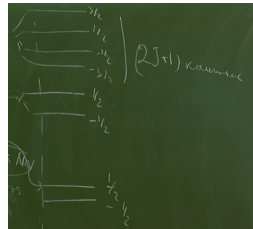


Рис. 8.12.

Теперь разберемся с тем, что мы увидим, когда нагреем пары. Воспользуемся правилами отбора. Возможные переходы приведены на графике. Система уровней сложная. Это называют сложным **эффектом Зеемана**. Проявляется 10 линий. Запрещены только два перехода.

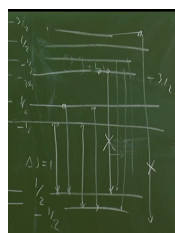


Рис. 8.13.

8.3. Сильное поле $U_{SH} \gg U_{SL}$

В поле расщепление больше, чем спин-орбитальное. Тогда считаем, что есть просто S -уровень и P -уровень. $m_L + 2m_S$ — независимо складываются моменты. В этом случае будет только три линии, т. к. $\Delta m_s = 0$.

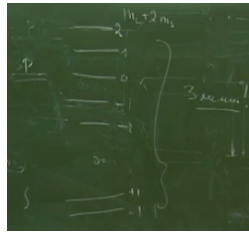


Рис. 8.14.

Если есть излучение, энергия которого совпадает с распределением уровней электронов во внешнем магнитном поле, то появляется резонансное поглощение или ЭПР — **электронно-парамагнитный резонанс**. А если это происходит не во внешнем поле, а просто с внутренним, то это ЯМР — **ядерный магнитный резонанс**.