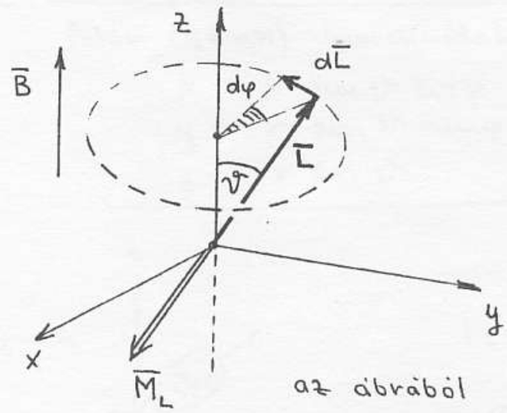
1.4. Atomok mágneses térben

1.4.1. A mágneses tér hatása a pályamozgásból származó mágneses momentumra

Klasszikus mechanika :



$$\overline{M}_L = -\frac{e}{2m}\overline{L}$$

$$\dot{\overline{L}} = \overline{M}_L \times \overline{B} \qquad \text{(forgató nyomaték)}$$

$$\frac{d\overline{L}}{dt} = -\frac{e}{2m}\overline{L}\times\overline{B} \longrightarrow \boxed{d\overline{L} \perp \overline{L}}$$

$\downarrow$

precesszió

az ábrából : $dL = L \sin\vartheta \, d\varphi$

a mozgásegyenletből: $dL = M_L \cdot B \cdot \sin\vartheta \cdot dt$

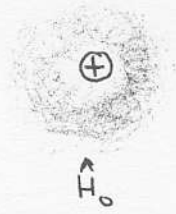
$$L \sin\vartheta \, d\varphi = M_L \cdot B \cdot \sin\vartheta \, dt$$

a precesszió szögsebessége: $\dfrac{d\varphi}{dt} = \dfrac{M_L \cdot B}{L} \equiv \omega_L$

LARMOR körfrekvencia : $\boxed{\omega_L = \dfrac{eB}{2m}}$

Kvantummechanika :

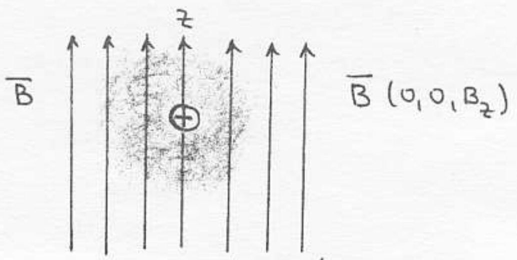
hidrogén atom



$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)$$

$$\hat{H}_0 \Psi_n = E_n \Psi_n$$

$$\left\{ \begin{aligned} \Psi_n &= R\cdot\Theta\cdot e^{jm_e\varphi} \\ E_n &= -\frac{E_0}{n^2} \end{aligned} \right.$$



$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}_m$$

$$\hat{W}_m \equiv -\hat{M}_z B = +\frac{eB}{2m}\hat{L}_z = \omega_L \cdot \hat{L}_z$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \omega_L \hat{L}_z$$

állítás:

$$\hat{H}\Psi_n = \varepsilon_n \Psi_n$$

$\uparrow$

$R\cdot\Theta\cdot e^{jm_e\varphi}$

igazolás:

$$\left(\hat{H}_0 + \omega_L \hat{L}_z\right)\psi_n = \mathcal{E}_n \psi_n$$

$$\underbrace{\hat{H}_0 \psi_n}_{E_n \psi_n} + \underbrace{\omega_L \hat{L}_z \psi_n}_{\downarrow} = \mathcal{E}_n \psi_n$$

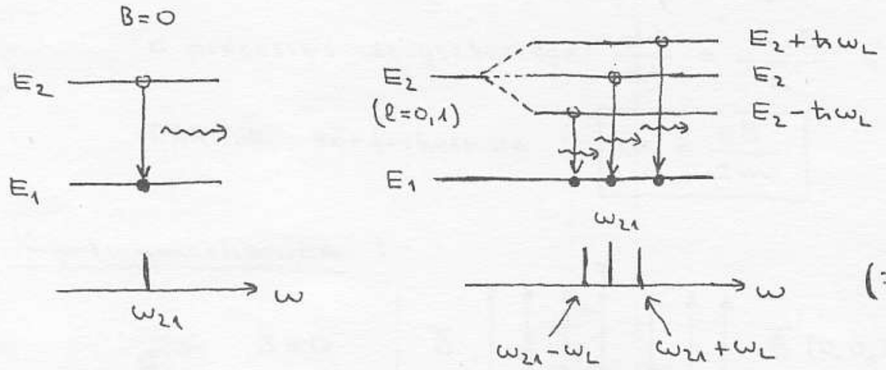
$$\frac{\omega_L \hbar}{j} R\cdot\Theta\cdot \underbrace{\frac{\partial}{\partial\varphi} e^{j m_e \varphi}}_{j m_e \cdot e^{j m_e \varphi}} = \omega_L \hbar m_e \cdot \psi_n$$

azaz

$$\boxed{\mathcal{E}_n = E_n + \hbar\omega_L \cdot m_e} \qquad (m_e = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm \ell)$$

A külső mágneses tér hatására az energiaszintek felhasadnak

Kisérleti ellenőrzés:



(ZEEMAN effektus)

A valóságban a helyzet bonyolultabb, mert még más effektusok is fellépnek.

1.4.2. Az elektron saját mágneses momentuma és az elektronspin

$Z = 47$ Ag atom elektronszerkezete:

$$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(3d)^{10}(4s)^2(4p)^6(4d)^{10}\begin{cases}(4f) & (\ell=3)\ m_e = 0 \pm 1 \pm 2 \pm 3\\ (5s) & (\ell=0)\ m_e = 0\end{cases}$$

(vegyérték elektron)

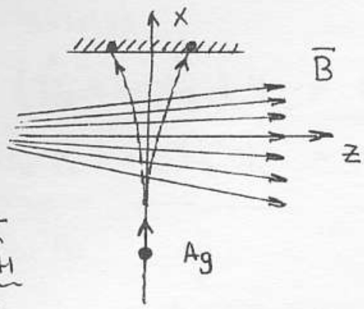
47. elektron

atomtörzs (lezárt héjak)

az atom mágneses momentuma

$$\text{Ag} \qquad M_{Ag} = \underbrace{M_t}_{\substack{\emptyset \\ \text{(atomtörzs)}}} + M_{47} = \mu_m \cdot m_e = \begin{cases} 0 & ,(5s)\\ (0, \pm 1, \pm 2, \pm 3)\cdot\mu_B, & (4f)\end{cases}$$

(68)



STERN-GERLACH kísérlet

Az Ag atom nyaláb két részre hasadt

↓

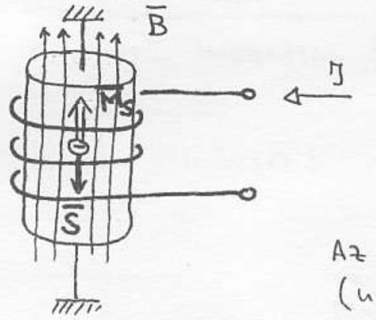
A mérés eredménye:

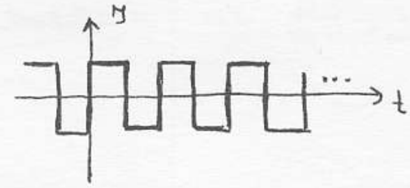
$$M_{Ag} = \pm \mu_B$$

A mérés értelmezése: az elektronnak (a mozgásától függetlenül) van egy u.n. saját mágneses momentuma.

$$\boxed{M_{sz} = \pm \mu_B}$$

EINSTEIN – DE HAAS kísérlet





Az elektronnak van saját perdülete is:
(neve: spin)

$$\boxed{S_z = \mp \frac{\hbar}{2}}$$

A mérésekből adódik tehát:

pályamozgás : $M_z = -\frac{e}{2m} L_z \longrightarrow \frac{M_z}{L_z} = -\frac{e}{2m}$

saját : $\left.\begin{array}{l} M_{sz} = \pm \mu_B \\ S_z = \mp \frac{\hbar}{2} \end{array}\right\} \longrightarrow \frac{M_{sz}}{S_z} = -\frac{e}{m}$ (?)

Következtetés : Az elektron spinje és saját mágneses momentuma nem magyarázható semmiféle klasszikus dinamikával

↓

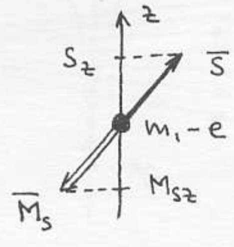
Spin olyan dinamikai változó, amelynek nincsen klasszikus megfelelője
(Axióma 2 → mit kell tenni ?)

↓

elméleti modell(ek)

69

GOUDSMIT – UHLENBECK



Pályamozgásból adódó $\bar{L}, \bar{M}_L$		Saját (belső) $\bar{S}, \bar{M}_S$
$L^2 = \hbar^2 \ell(\ell+1)$	$\ell \longleftrightarrow s$	$S^2 = \hbar^2 s(s+1)$
$L_z = \hbar m_\ell$	$m_\ell \longleftrightarrow m_s$	$S_z = \hbar m_s$
$m_\ell: \underbrace{-\ell \ldots\ldots +\ell}_{(2\ell+1)\text{ db}}$		$m_s: \underbrace{-s \ldots\ldots +s}_{(2s+1)\text{ db}}$
$M_z = \text{áll.} \cdot L_z$		$M_{Sz} = \text{áll.} \cdot S_z$
$M_z = -\frac{e}{2m} g_\ell \cdot L_z$	$g_\ell \longleftrightarrow g_s$	$M_{Sz} = -\frac{e}{2m} g_s \cdot S_z$
$g_\ell = 1$		$g_s = ?$
$M_z = \underbrace{-\frac{e}{2m} g_\ell \cdot \hbar m_\ell}_{-\mu_B \cdot \cancel{g_\ell} \cdot m_\ell}$ ($g_\ell = 1$)		$M_{Sz} = \underbrace{-\frac{e}{2m} g_s \cdot \hbar m_s}_{-\mu_B \cdot g_s \cdot m_s}$

Az elméleti modell "működése"

STERN-GERLACH KÍSÉRLET $(\pm\mu_B)$ ⟶ GOUDSMIT–UHLENBECK ELMÉLET ⟶ STERN-GERLACH $(\pm\mu_B)$; EINSTEIN-DE HAAS $\left(\mp\frac{\hbar}{2}\right)$

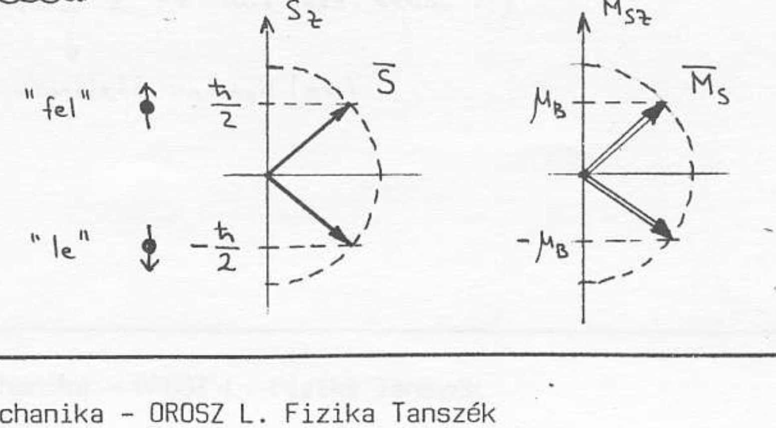
$$
(\text{S.G.})\begin{cases} M_{Sz} = \pm\mu_B \;\rightarrow\; g_s \cdot m_s = \pm 1 \;\rightarrow\; g_s = 2 \\ 2s+1 = 2 \;\rightarrow\; s = \frac{1}{2} \;\rightarrow\; m_s = \pm\frac{1}{2} \;\rightarrow\; S_z = \mp\frac{\hbar}{2} \quad (\text{E.H.}) \end{cases}
$$

A spin "vektor" modellje:

$$S^2 = \hbar^2 \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2}$$

$\downarrow$

$$\begin{cases} S = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar \\ M_s = \sqrt{3}\,\mu_B \end{cases}$$



1.4.3. A spin-pálya kölcsönhatás

$S = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$ (a spin nagysága nem mérhető)

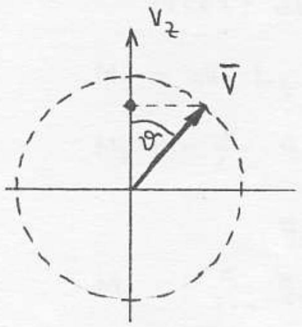
$\hat{S}_z \chi = S_z \chi$ (formális sajátérték egyenlet)

$$\hat{S}_z \alpha = \frac{\hbar}{2}\alpha \qquad \hat{S}_z \beta = -\frac{\hbar}{2}\beta \quad \longrightarrow \text{ azaz } \quad \chi_{m_s} = \begin{cases} \chi_{\frac{1}{2}} \equiv \alpha \\ \chi_{-\frac{1}{2}} \equiv \beta \end{cases}$$

(két sajátfüggvényből álló tér !)

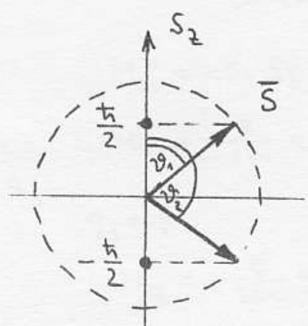
Formálisan bevezethető : ξ u.n. spin változó

$\chi(\xi)$ u.n. spin függvény



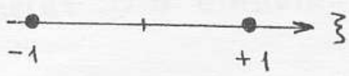
vektor

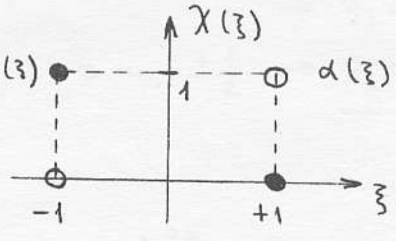
$0 \le \vartheta < \pi$



"spinor"

⇩ ABSZTRAKCIÓ

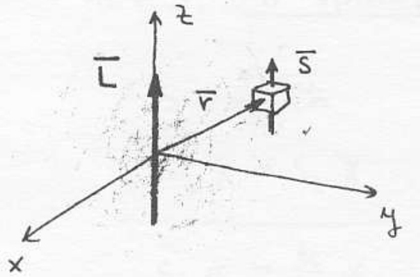




(olyan furcsa, hogy **nem** is fogjuk használni)

71

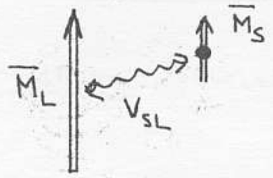
Az elektron-állapotok leírása



pl: $V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}$ (COULOMB tér)

Egy elektronállapot (neve: SPIN-PÁLYA)

$$\underbrace{\Phi_{n,\ell,m_\ell,m_s}}_{\text{kvantum-számok}}\underbrace{(\bar{r},\xi)}_{\text{változók}}$$



$$\Phi_{n,\ell,m_\ell,+\frac{1}{2}}(\bar{r},\xi) \neq \Phi_{n,\ell,m_\ell,-\frac{1}{2}}(\bar{r},\xi)$$

Az "elektronfelhő" függ az elektron spinjétől

↓

SPIN-PÁLYA kölcsönhatás

$$V_{SL} \sim -\bar{M}_L \cdot \bar{M}_S \sim -\bar{L}\bar{S}$$

$$\boxed{V_{SL} = -a\bar{L}\bar{S}}$$

Az elkövetkezőkben a spin-pálya kölcsönhatást elhanyagoljuk

$$\Phi_{n,\ell,m_\ell,m_s}(\bar{r},\xi) = \underbrace{\psi_{n,\ell,m_\ell}(\bar{r})}_{\text{pálya állapot}} \cdot \underbrace{\chi_{m_s}(\xi)}_{\text{spin állapot}}$$

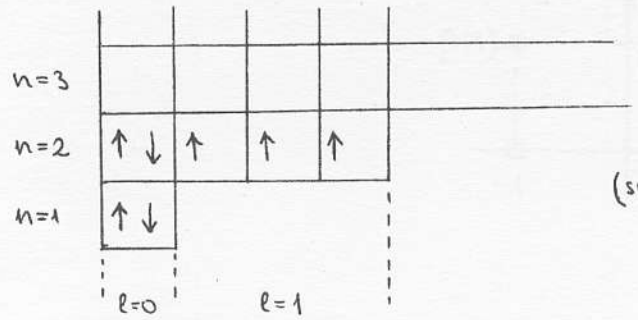
pálya állapot ↓ általában $\psi(\bar{r})$

spin állapot: $\alpha(\xi)$, $\beta(\xi)$

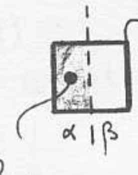
PAULI elv:

Egy spin-pálya állapotban legfeljebb egy elektron lehet

Atomok elektronszerkezete



(Hund szabály)



$\psi_{\underline{n}}$ (= pálya állapot)

$\underline{n}$: pálya állapotot megadó kvantum számok

$\Phi_{\underline{n},m_s}$ (spin-pálya állapot)

Feladat: (Al, Si, P)