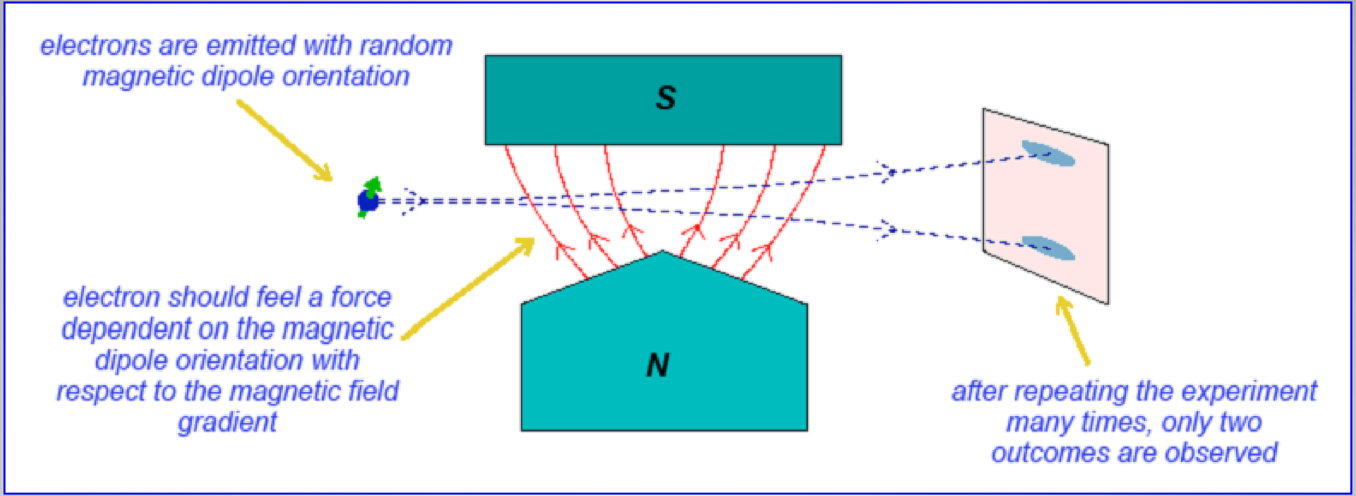
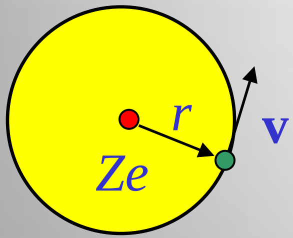
Электронный спин



Магнитный момент электрона в атоме



$$p_m = I \cdot A = \frac{-e\pi r^2}{T}, \quad T = \frac{2\pi r}{v}$$

$$p_m = \frac{-e}{2m} l \rightarrow \mathbf{P}_m = \frac{-e\hbar}{2m}(\mathbf{L}/\hbar) = -\beta_e(\mathbf{L}/\hbar)$$

$$\mathbf{P}_s = -2\mu_B(\mathbf{S}/\hbar), \quad \mu_B \sim 0{,}927 \times 10^{-23}\ J/T$$

Атомные термы

$$\mathbf{H}\Psi = E\Psi$$

$$\mathbf{S}^z\left|\alpha\right\rangle = \frac{\hbar}{2}\left|\alpha\right\rangle, \quad \mathbf{S}^z\left|\beta\right\rangle = -\frac{\hbar}{2}\left|\beta\right\rangle$$

$$\mathbf{S}^2\left|\Psi\left(L, S, M_L, M_S\right)\right\rangle = \hbar^2 S\left(S+1\right)\left|\Psi\left(L, S, M_L, M_S\right)\right\rangle$$

$$\mathbf{S}^z\left|\Psi\left(L, S, M_L, M_S\right)\right\rangle = \hbar M_S\left|\Psi\left(L, S, M_L, M_S\right)\right\rangle$$

Полный момент количества движения электронной оболочки

$$\vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{L}} + \vec{\mathbf{S}}: \; J = L + S, L + S - 1, \ldots, \left|L - S\right|$$

Угловой момент двух электронов

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2 \rightarrow \left[\mathbf{L}_x, \mathbf{L}_y\right] = \left[\mathbf{L}_{1,x} + \mathbf{L}_{2,x}, \mathbf{L}_{1,y} + \mathbf{L}_{2,y}\right]$$

$$\left[\mathbf{L}_x, \mathbf{L}_y\right] = i\hbar\mathbf{L}_{1,z} + i\hbar\mathbf{L}_{2,z} = i\hbar\mathbf{L}_z$$

Ряд Клебша -Гордана

$$\boldsymbol{l} = \boldsymbol{l}_1 + \boldsymbol{l}_2,\ \boldsymbol{l}_1 + \boldsymbol{l}_2 - 1, \ldots \left|\boldsymbol{l}_1 - \boldsymbol{l}_2\right|$$

Оператор L^2 коммутирует со всеми своими компонентами

$$\mathbf{L}^2 = \left(\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2\right)^2 \rightarrow \left[\mathbf{L}^2, \mathbf{L}_1^2\right] = \left[\mathbf{L}^2, \mathbf{L}_2^2\right] \rightarrow \Psi\left(L_1, L_2, L, M\right)$$

$$\left[\mathbf{L}_{1,z}, \mathbf{L}^2\right] = \left[\mathbf{L}_{1,z}, \mathbf{L}_x^2\right] + \left[\mathbf{L}_{1,z}, \mathbf{L}_y^2\right] + \left[\mathbf{L}_{1,z}, \mathbf{L}_z^2\right]$$

$$\left[\mathbf{L}_{1,z}, \mathbf{L}^2\right] = 2i\hbar\left(\mathbf{L}_{1,y}\mathbf{L}_{2,x} - \mathbf{L}_{1,x}\mathbf{L}_{2,y}\right) \neq 0$$

Принцип запрета Паули

Принцип неопределенности Гейзенберга → принцип неразличимости одинаковых частиц

$$\mathbf{P}\Psi(\xi_1,\xi_2)=\Psi(\xi_2,\xi_1)=\exp(i\varphi)\Psi(\xi_1,\xi_2)$$

$$\mathbf{P}\left[\mathbf{P}\Psi(\xi_1,\xi_2)\right]=\Psi(\xi_1,\xi_2)=\exp(2i\varphi)\Psi(\xi_1,\xi_2)$$

$$\mathbf{P}\Psi(\xi_1,\xi_2)=\pm\Psi(\xi_1,\xi_2)$$

Статистика Ферми-Дирака: фермионы (частицы с полуцелым спином)
Статистика Бозе-Эйнштейна: бозоны (частицы с целым спином)

Волновая функция двух не взаимодействующих электронов

$$\Psi(\xi_1,\xi_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi_1(\xi_1)\varphi_2(\xi_2)-\varphi_1(\xi_2)\varphi_2(\xi_1)\right]$$

Принцип запрета Паули: два электрона не могут одновременно находиться в одном квантовом состоянии

Многоэлектронная волновая функция

$$\Psi(\xi_1,\xi_2,\ldots,\xi_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\det\left[\varphi_1(\xi_1)\varphi_2(\xi_2)\ldots\varphi_N(\xi_N)\right]$$

Электрическое взаимодействие не зависит от спина

$$\Psi(\xi_1,\xi_2,\ldots,\xi_N)=\Phi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\ldots,\boldsymbol{r}_N)\Theta(\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_2,\ldots,\boldsymbol{\sigma}_N)$$

$$\Psi(\xi_1,\xi_2)=\begin{cases}\Phi_{s}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\Theta_{a}(\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_2), & \mathbf{S}^2\Theta_{a}=0\\ \Phi_{a}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\Theta_{s}(\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_2), & \mathbf{S}^2\Theta_{s}=2\hbar^2\Theta_{s}\end{cases}$$

Правило Хунда:

Наименьшей энергией обладает терм с наибольшим возможным при данной электронной конфигурации значением *S* и наибольшим возможным при этом *S* значении *L*.

Классификация атомных термов

$$He: 1s^2$$

m_l	0	0
m_s	1/2	- 1/2

$$\mathbf{S}^z = 0,\ L^z = 0 \to \mathbf{S} = 0,\ L = 0$$

$$C: 1s^2 2s^2 2p^2 \to p^2$$

m_l	1	0
m_s	1/2	1/2

$$\mathbf{S} = 1,\ L = 0,1$$

$$\max\left(L^z = 1 + 0\right) = 1 \to \mathbf{S} = 1,\ L = 1$$

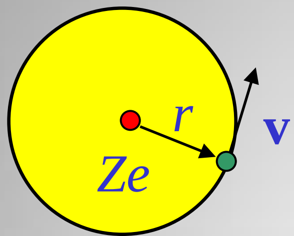
Орбитальный момент и спин основного состояния эквивалентных электронов определяются принципом запрета Паули и правилом Хунда

При слабом спин-орбитальном взаимодействии терм задается тремя квантовыми числами *L*, *S* и *J* (термы Рассела -Саундерса)

$$^{2S+1}L_J:\ {}^1S_0,\ {}^3P_{0,(1,2)}$$

Спин - орбитальное взаимодействие

Тонкая структура атомных спектров



$$\vec{\mathbf{H}} = -\frac{Ze}{cr^3}\left(\vec{\mathbf{v}}_e \times \vec{\mathbf{r}}\right) = \frac{Ze\hbar}{m_e c r^3}\,\vec{\mathbf{l}} = \frac{Z}{r^3}\,2\beta_e\,\vec{\mathbf{l}}$$

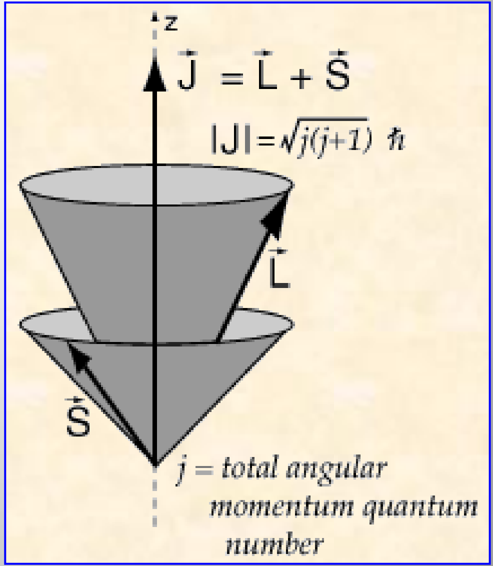
$$E = -\vec{\mathbf{H}}\cdot\vec{\mathbf{p}}_s = \left(2\beta_e\right)^2 \frac{Z}{r^3}\,\vec{\mathbf{s}}\cdot\vec{\mathbf{l}} = a\left(\vec{\mathbf{s}}\cdot\vec{\mathbf{l}}\right), \quad (a > 0)$$

$$r \sim Z^{-1} \to E \sim Z^4$$

Термы Рассела-Саундерса - сохраняются орбитальный и спиновый моменты. (Z=1-31)

$$\mathbf{H} = \sum_{i=1}^{n} a_i\left(\vec{\mathbf{s}}_i\cdot\vec{\mathbf{l}}_i\right) = \frac{a}{n}\left(\vec{\mathbf{S}}\cdot\vec{\mathbf{L}}\right), \quad n \le 2l+1$$

$$\mathbf{J}^2 = \left(\mathbf{L}+\mathbf{S}\right)^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2\left(\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}\right)$$



Нормальные и обращенные мультиплеты

Нормальные мультиплеты: $n \le 2l+1$

$$2\langle\Psi|(\mathbf{L}\cdot\mathbf{S})|\Psi\rangle = \langle\Psi|\mathbf{J}^2-\mathbf{L}^2-\mathbf{S}^2|\Psi\rangle$$

$$E = \frac{a}{2n}\left[J(J+1)-S(S+1)-L(L+1)\right]$$

$$J = |L-S|, \quad n \le 2l+1$$

Обращенные мультиплеты: $n > 2l+1$

$$\mathbf{H} = a\sum_{i=1}^{n}\left(\vec{\mathbf{s}}_i\cdot\vec{\mathbf{l}}_i\right) = a\left[\sum_{i=1}^{4l+2}\left(\vec{\mathbf{s}}_i\cdot\vec{\mathbf{l}}_i\right)-\sum_{i=n+1}^{4l+2}\left(\vec{\mathbf{s}}_i\cdot\vec{\mathbf{l}}_i\right)\right] = -\frac{a}{4l+2-n}\left(\vec{\mathbf{S}}\cdot\vec{\mathbf{L}}\right)$$

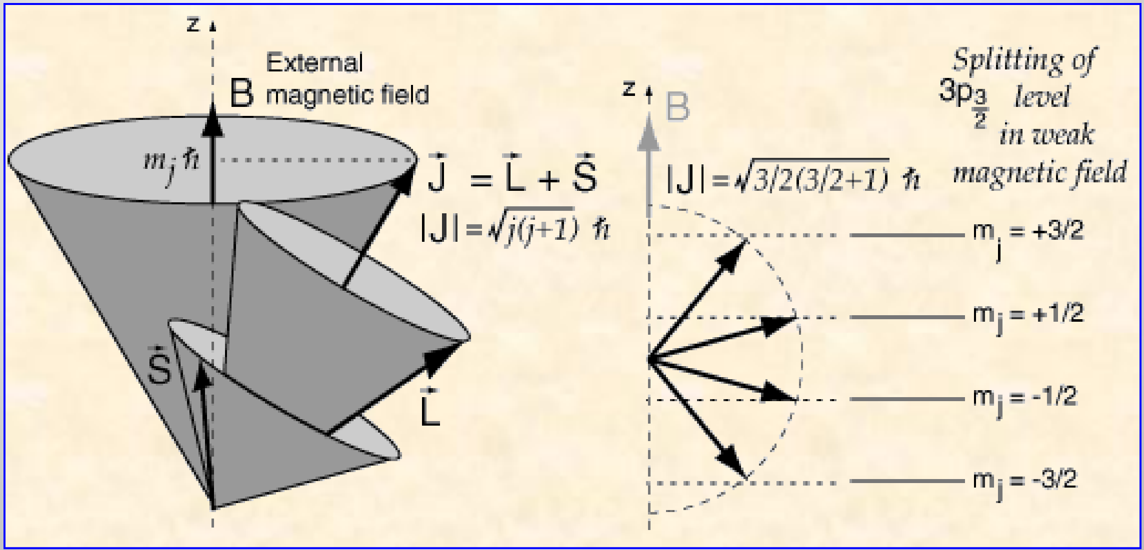
$$E = \frac{a}{2(4l+2-n)}\left[L(L+1)+S(S+1)-J(J+1)\right]$$

$$J = L+S, \quad 4l+2 > n > 2l+1$$

Эффект Зеемана

Расщепление энергетических уровней атома во внешнем магнитном поле

$$\Delta E = -\langle \Psi | \mathbf{p}_m^z \cdot \boldsymbol{H} | \Psi \rangle$$



$$N = 2J + 1$$

Фактор Ланде

$$\Delta E = \beta_e H \left\langle \Psi \left| \vec{\mathbf{L}}^z + 2\vec{\mathbf{S}}^z \right| \Psi \right\rangle = \beta_e H \left\langle \Psi \left| \vec{\mathbf{J}}^z + \vec{\mathbf{S}}^z \right| \Psi \right\rangle$$

$$\vec{\mathbf{S}}_J = \left(\vec{\mathbf{S}} \cdot \vec{\mathbf{n}} \right) \vec{\mathbf{n}} ,$$

$$\vec{\mathbf{n}} = \frac{\vec{\mathbf{J}}}{\sqrt{J\left(J+1\right)}}$$

$$E = \beta_e H^z J^z \left(1 + \frac{\left\langle \Psi \left| \vec{\mathbf{J}} \cdot \vec{\mathbf{S}} \right| \Psi \right\rangle}{J\left(J+1\right)} \right) = g\beta_e H^z J^z$$

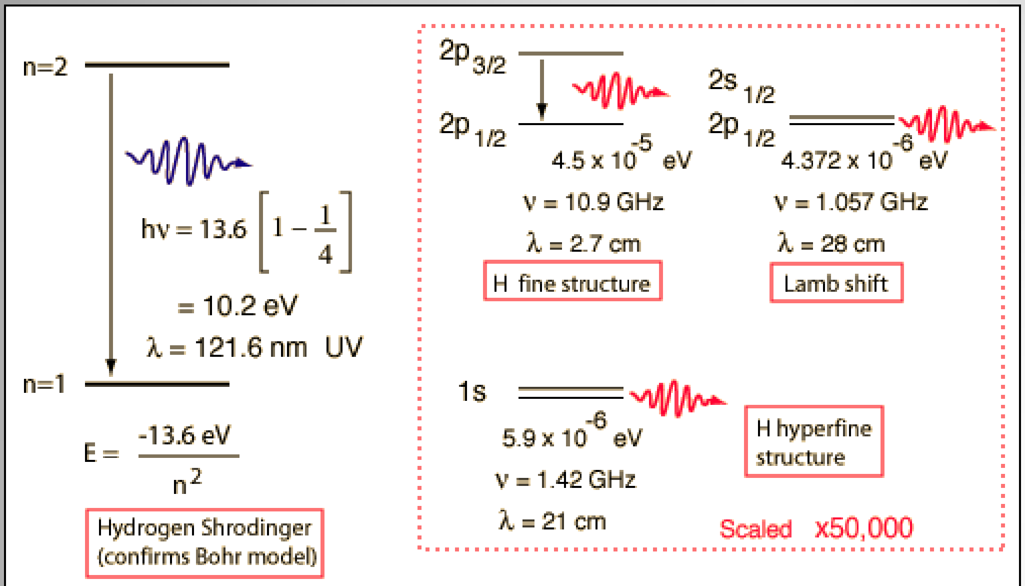
$$\left(\mathbf{J} - \mathbf{S}\right)^2 = \mathbf{L}^2 \rightarrow 2\left(\mathbf{J} \cdot \mathbf{S}\right) = \mathbf{J}^2 + \mathbf{S}^2 - \mathbf{L}^2$$

$$2\left\langle \Psi \left| \left(\vec{\mathbf{J}} \cdot \vec{\mathbf{S}} \right) \right| \Psi \right\rangle = \left\langle \Psi \left| J\left(J+1\right) + S\left(S+1\right) - L\left(L+1\right) \right| \Psi \right\rangle$$

Фактор Ланде:

$$g = \frac{3}{2} + \frac{S\left(S+1\right) - L\left(L+1\right)}{2J\left(J+1\right)}$$

Сверхтонкое расщепление

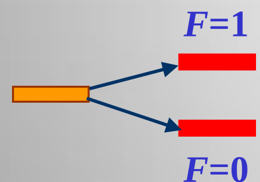


$$\mathbf{P}_m = g_N \beta_N \vec{\mathbf{I}}$$

$$\beta_N = \frac{e\hbar}{2m_p} = 5.05\cdot 10^{-27}\, J/T$$

$g(^1\mathrm{H})=5.585$, $g(^{17}\mathrm{O})=-0.7572$

$$\vec{\mathbf{F}} = \vec{\mathbf{J}} + \vec{\mathbf{I}}$$



$$\mu_B = 1840\beta_N \;\rightarrow\; \Delta_{IJ} \sim 0.001\times\Delta_{SL}$$

^{1}**H: J=1/2, I=1/2 → F=0, 1**

^{1}**H (F=0, 1) : ΔE=5.9×10^{-6} e.V. (λ=21 см)**

Радиоастрономия: атомы водорода в космическом пространстве