

---

---

## ЛЕКЦИЯ 8

---

# АТОМ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

### 1. Квантовый осциллятор. Правила отбора

Поговорим о колебаниях молекул. Возьмем самую простую молекулу  $H_2$ . Молекула рассматривается как осциллятор. Она показана на рисунке (8.1).

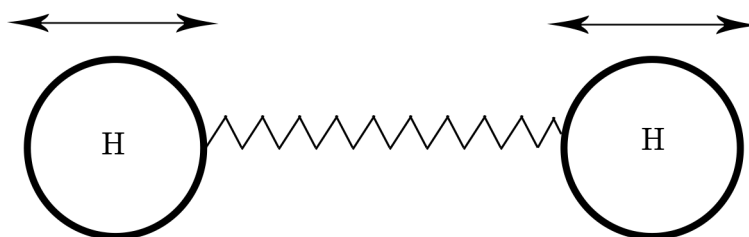


Рис. 8.1

Потенциальная энергия такой одномерной структуры равна:

$$U(x) = \frac{kx^2}{2}.$$

В реальных задачах нужно решать уравнение Шредингера с вышеупомянутым потенциалом. Частица находится в такой квадратичной яме.

Уравнение Шредингера имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi'' + \left(\frac{kx^2}{2} - E\right)\psi = 0.$$

Это уравнение не решается в квадратурах. Решением этого уравнения занимаются в квантовой механике.

Сразу запишем ответ. Оказывается, что здесь тоже есть дискретизация уровней.

Дискретные уровни энергии определяются формулой:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$



Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на [lectoriy.mipt.ru](http://lectoriy.mipt.ru).

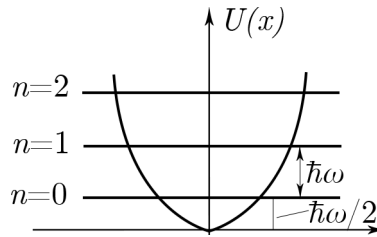


Рис. 8.2

Уровни энергии показаны на рисунке (8.2)

Основное состояние двухатомной молекулы —  $\frac{\hbar\omega}{2}$ , где  $\omega^2 = \frac{k}{\mu}$ . Эта молекула совершает колебания. Такие колебания называются **нулевыми**. Двухатомные молекулы при комнатных условиях практически не колеблются, то есть только какие-то единичные молекулы находятся на высоких уровнях. Последние вносят ничтожно малый вклад в теплоемкость газа. А при увеличении  $t$  теплоемкость увеличивается из-за возбуждения этих колебательных степеней свободы.

Исследуем, как выглядит волновая функция, соответствующая какому-то уровню. На картинке (8.3) показан один из возможных вариантов.

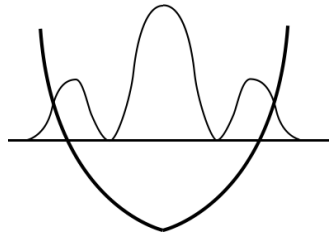


Рис. 8.3

Такие функции называются **полиномами Чебышева**. Они удовлетворяют уравнению Шредингера, и описываются особым образом.

Эти функции немного напоминают те функции, которые получаются в задаче прямоугольной ямы с бесконечно высокими стенками.

В задаче трехмерного осциллятора решения выглядят иначе. В трехмерном осцилляторе 3 независимых степеней свободы, значит, молекула может колебаться по трем независимым направлениям:  $n_x + \frac{1}{2}$ ,  $n_y + \frac{1}{2}$ ,  $n_z + \frac{1}{2}$ .

Тогда для энергии получаем:

$$E = \hbar\omega \left( N + \frac{3}{2} \right), \quad \text{где } N = n_x + n_y + n_z; \quad N = 0, 1, 2, \dots$$

Скажем пару слов о **правилах отбора**.

Во-первых, переходы с уровня на уровень могут быть только последовательными.

Следовательно, в колебательном спектре присутствует только  $\hbar\omega$ . То есть уровней может быть много, а переходы только с этой энергией.

### Задача 5.25. Нулевые колебания

В угарном газе CO из-за возбуждения колебаний молекул наблюдается пик поглощения инфракрасного излучения на длине волны  $\lambda = 4,61$  мкм. Определить амплитуду



Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на [pulsar@phystech.edu](mailto:pulsar@phystech.edu)

**!** Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на [lectoriy.mipt.ru](http://lectoriy.mipt.ru).

$A_0$  нулевых колебаний молекулы CO. Оценить температуру, при которой амплитуда тепловых колебаний превзойдет  $A_0$ .

**Решение.**

Нулевые колебания существуют всегда, независимо от температуры.

$$E = \frac{\hbar\omega}{2},$$

где  $E$  — полная энергия.

Для кинетической и потенциальной энергий можем записать:

$$E = E_{кин} + E_{пот} \Rightarrow \overline{E} = \overline{E_{кин}} + \overline{E_{пот}}.$$

Известно, что если колебания гармонические, то можно воспользоваться теоремой о равенстве кинетической и потенциальной энергий.

$$\Rightarrow \overline{E_{кин}} = \overline{E_{пот}} = \frac{\overline{\mu v^2}}{2} = \frac{\overline{\mu\omega^2 x^2}}{2},$$

$$\Rightarrow \overline{E} = \overline{\mu\omega^2 x^2},$$

$$x^2 = A^2 \cos^2 \omega t \Rightarrow \overline{x^2} = A^2 \overline{\cos^2 \omega t}.$$

Так как колебания нулевые, а  $\overline{\cos^2 x} = \frac{1}{2}$ , то

$$\Rightarrow \overline{x^2} = A_0^2 \overline{\cos^2 \omega t} = \frac{A_0^2}{2},$$

$$E = \overline{E} \Rightarrow \frac{\hbar\omega}{2} = \mu\omega^2 \frac{A_0^2}{2} \Rightarrow \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}},$$

$$\mu = \frac{m_0 m_c}{m_0 + m_c} = 11,45 \cdot 10^{-24} \text{ г},$$

$$\omega = \frac{2\pi c}{\lambda} \Rightarrow A_0 = \sqrt{\frac{\hbar\lambda}{\mu \cdot 2\pi c}} = 4,7 \cdot 10^{-10} \text{ см},$$

$$kT \geq \hbar\omega \Rightarrow T \geq \frac{\hbar\omega}{k} = \frac{2\pi\hbar c}{k\lambda} = 3100 \text{ К}.$$

Следовательно, область колебаний (возбужденных колебаний) молекулы лежит при достаточно высоких температурах.

### Задача 5.32. Нулевые колебания. Потенциал Леннарда – Джонса

Поле, в котором движется атом жидкого гелия, хорошо описывается потенциалом Леннарда – Джонса:

$$U(r) = \phi \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right],$$

где  $\phi = 232 \text{ К}$ , а  $r_0 = 3 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ .

Оценить энергию нулевых колебаний.

**Решение.**

**!** Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на [pulsar@phystech.edu](mailto:pulsar@phystech.edu)



Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на [lectoriy.mipt.ru](http://lectoriy.mipt.ru).

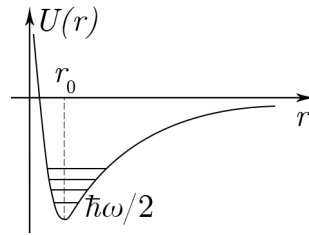


Рис. 8.4

Атом колеблется, при этом колебания длятся не долго. Атомы переходят в свободное состояние, как и у всякой жидкости. Тем не менее, эти колебания описываются неким потенциалом. Этот потенциал показан на (8.4).

Потенциальная энергия имеет минимум, и в области этой ямы можно наблюдать параболу. Значит, в этой яме есть колебательные уровни, соответственно, происходит квантование. Этот минимум смещен вниз и вправо.

Частота этих колебаний будет:

$$\omega^2 = \frac{k}{\mu},$$

$$U = \frac{kx^2}{2} \Rightarrow U'' = k,$$

т. е. вторая производная этого потенциала — жесткость этой связи.

Требуется найти энергию нулевых колебаний:

$$\frac{dU}{dr} = 0 \Rightarrow r = r_0,$$

$$U(r) = U(r_0) + \frac{1}{2}U''(r - r_0)^2,$$

$$U'' = 12\phi r_0^2 \left[ \frac{13r^2}{r^{14}} - \frac{7}{r^8} \right] = \frac{72\phi}{r_0^2},$$

$$\omega^2 = \frac{U''}{M} \Rightarrow E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega = 3\hbar \frac{18\phi}{Mr_0^2} = 19,4 \cdot 10^{-3} \text{ эВ} = 226 \text{ К}.$$

## 2. Типы энергии

Итак, для молекулы (атома) получают три вида энергий:

1) Энергия, которая получается при переходе атомов от одного дискретного уровня на другой.

2) **Вращательная.**

3) **Колебательная.**

Нужно сделать оценку, выяснить, как они соотносятся.

Рассматривается водород —  $\text{H}_2$ .

1) Энергия переходов водорода порядка Ридберга.

2) Нарисуем еще раз этот потенциал. Он продемонстрирован на рисунке (8.5).



Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на [pulsar@phystech.edu](mailto:pulsar@phystech.edu)

**!** Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на [lectoriy.mipt.ru](http://lectoriy.mipt.ru).

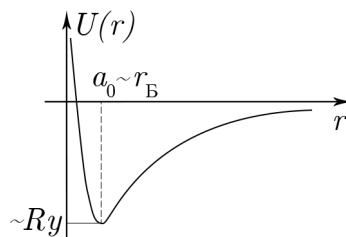


Рис. 8.5

$$\frac{kx^2}{2} \approx R_y,$$

где  $\omega = \sqrt{\frac{k}{M_p}}$ .

$$\Rightarrow k = \frac{2R_y}{r_B^2} \text{ (Оценка жесткости).}$$

Известно, что

$$R_y = \frac{mc^2}{2}\alpha^2, \quad r_B = \frac{A_e}{\alpha}, \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}, \quad A_e = \frac{\hbar}{mc}.$$

Вернемся к оценке жесткости:

$$k = \frac{2R_y}{r_B^2} = \frac{mc^2\alpha^2\alpha^2}{A_e^2} = \frac{\alpha^4 m^3 c^4}{\hbar^2},$$

$$\omega_{\text{кол}} = \sqrt{\frac{k}{M}} \sim \sqrt{\frac{\alpha^4 m^3 c^4}{M_p \hbar^2}} \Rightarrow \hbar\omega_{\text{кол}} = \alpha^2 mc^2 \sqrt{\frac{m_e}{M_p}} \sim R_y \sqrt{\frac{m_e}{M}} \approx \frac{1}{10} R_y.$$

Значит, между внутриатомными переходами может быть 10 колебательных переходов.

3) Теперь оценим вращательные уровни. Вращательная энергия вычисляется таким образом:

$$E_{\text{вр}} = \hbar\omega_{\text{вр}} \sim \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2Mr_B^2} = \frac{\hbar^2}{2M} \left( \frac{me^2}{\hbar^2} \right)^2 = \frac{m}{M} \cdot \frac{me^2}{2\hbar^2} = \frac{m}{M} R_y = \frac{1}{1000} R_y.$$

Покажем уровни энергии в атоме водорода. Они продемонстрированы на рисунке (8.6).

**!** Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на [pulsar@phystech.edu](mailto:pulsar@phystech.edu)



Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на [lectoriy.mipt.ru](http://lectoriy.mipt.ru).

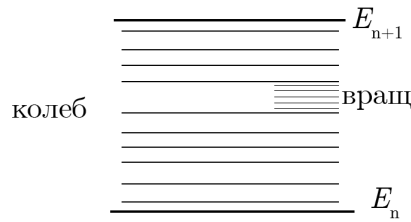


Рис. 8.6

### 3. Спин-орбитальное взаимодействие

Электрон в атоме водорода совершает свое орбитальное вращение. В его системе отсчета вокруг него вращается протон. Тогда электрон находится в магнитном поле, связанным с орбитальным движением протона. И в магнитном поле оказывается собственный магнитный момент этого электрона. В результате происходит расщепление этого уровня из-за того, что спин электрона может быть направлен по полю, или против поля. То есть возникает дополнительная энергия, смещающая его относительно уровня. Эта дополнительная энергия называется **спин – орбитальным взаимодействием**. За счет этого взаимодействия энергия уровня немного смещается. Значение этого смещения равно примерно  $10^{-5} R_y$ . Это не очень много, но измеряемо.

Запишем формулу, полученную Дираком, учитывающую спин электрона:

$$E = -Az^2 \frac{1}{n^2} - \alpha^2 \frac{Az^4}{n^3} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right),$$

где  $\alpha$  — **постоянная тонкой структуры**.

Следовательно, когда  $n$  и  $j$  совпадают, снимается вырождение по  $l$  (орбитальному квантовому числу).

### 4. Расщепление тонкой структуры

Рассмотрим атом натрия. Он показан на рисунке (8.7).

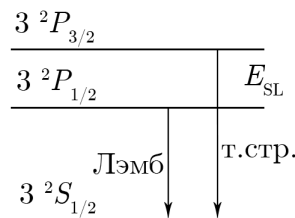


Рис. 8.7

Поскольку этот атом одноэлектронный, у него  $n = 3$ . Уровни оказались разными. Но по теории Дирака должны были совпасть уровни  $3^2P_{\frac{1}{2}}$  и  $3^2S_{\frac{1}{2}}$ , поскольку  $n$  и  $j$  совпадают.

Переход с  $3^2P_{\frac{3}{2}}$  на  $3^2S_{\frac{1}{2}}$  называется тонкой структурой. Переход с  $3^2P_{\frac{1}{2}}$  на  $3^2S_{\frac{1}{2}}$  тоже существует. Он называется лэмбовский сдвиг.



Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на [pulsar@phystech.edu](mailto:pulsar@phystech.edu)

**!** Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на [lectoriy.mipt.ru](http://lectoriy.mipt.ru).

Оказывается, электрон, находящийся в  $S$ -состоянии, имеет сферически симметричную конфигурацию, и в  $S$ -состоянии  $l = 0$ . Это может быть только в случае, когда электрон размазан сферически симметрично по оболочке. У  $P$ -электрона, находящегося выше, другая конфигурация в виде вытянутой восьмерки. Тогда электрон по-другому распределен в пространстве.  $S$ -электрон распределен по сфере и к ядру не приближается. А  $P$ -электрон меняет свое положение.

Найдем  $E_{SL}$ :

$$E_{SL} = A \langle \vec{L} \vec{S} \rangle = \frac{A}{2} (\overline{J^2} - \overline{L^2} - \overline{S^2}) = \frac{A}{2} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)],$$

$$\Rightarrow E(3^2P_{\frac{3}{2}}) = E(3^2P_{\frac{1}{2}}) + E_{SL}.$$

## 5. Сложные атомы

В легких атомах общий спин равен:

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \dots$$

Суммарный орбитальный момент:

$$\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2 + \dots$$

Полный момент:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}.$$

Тогда терм многоэлектронного атома можно записать так:

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

### Задача 4.50. Тонкая структура

Атом водорода находится в состоянии с энергией  $\epsilon = -1,51$  эВ и при этом радиальная часть волновой функции один раз обращается в ноль на интервале  $0 < r < \infty$ . Что это за состояние?

**Решение.**

Найдем квантовое число  $n$ :

$$n = \sqrt{\frac{R_y}{E}} = 2.$$

Радиальное квантовое число  $n_r$  равно:

$$n_r = n - l - 1.$$

Волновая функция обращается в ноль ровно столько раз, чему равно радиальное квантовое число.

Так как  $n_r = 1$ , то

$$n_r = n - l - 1 = 1 \quad \Rightarrow \quad l = 0.$$

**!** Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на [pulsar@phystech.edu](mailto:pulsar@phystech.edu)



Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на [lectoriy.mipt.ru](http://lectoriy.mipt.ru).

Значит, соответствующее состояние есть  $2S$ .

#### Задача 6.14. Пучок атомов в сильном неоднородном магнитном поле

Пучок атомов ванадия ( $A = 50$ ), находящихся в состоянии  $4F_{3/2}$ , пропускается через сильное неоднородное магнитное поле. На сколько компонент разобьется такой пучок? На какой угол разойдутся соседние компоненты пучка, если участок с неоднородным полем имеет протяженность  $l = 25$  см, градиент поля в нем  $\frac{dB}{dx} = 5 \cdot 10^4 \frac{\Gammaс}{см}$ , а скорость атомов  $v = 500 \frac{м}{с}$ ?

**Решение.**

$$2S + 1 = 4,$$

$$S = \frac{3}{2}; \quad L = 3; \quad J = \frac{3}{2}.$$

Подсчитаем  $g$ -фактор:

$$g = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} = \frac{2}{5}.$$

Магнитный момент равен:

$$\mu_B = m_J g \mu_B \quad \Rightarrow \quad m_J = \pm \frac{3}{2}; \pm \frac{1}{2}.$$

#### Задача 6.20. Тонкая структура

Желтый дублет Na возникает при переходе электронов  $3^2P \rightarrow 3^2S$  и соответствует длинам волн  $\lambda_1 = 5896 \text{ \AA}$  и  $\lambda_2 = 5890 \text{ \AA}$ . Найти энергетическое расстояние  $\Delta\epsilon$  между соответствующими подуровнями терма  $3^2P$  (мультиплетное расщепление). Оценить среднюю величину магнитного поля  $B$ , действующего на оптический электрон.

**Решение.**

Посмотрим, какие переходы возможны. Есть самопроизвольные переходы. Также существуют поглощательные переходы.

$$\Delta\epsilon = hc \left( \frac{1}{\lambda_2} - \frac{1}{\lambda_1} \right) = 2 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}.$$

На рисунке (8.8) показано заполнение электронами подуровней натрия.

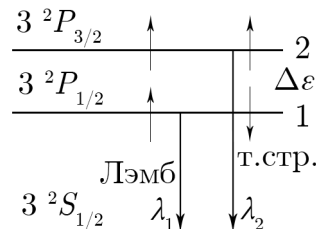


Рис. 8.8

$$\Delta\epsilon = 2\mu_B B,$$



Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на [pulsar@phystech.edu](mailto:pulsar@phystech.edu)



**!** Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на [lectoriy.mipt.ru](http://lectoriy.mipt.ru).

где  $\mu_B$  — это магнитный момент, а  $B$  — искомое внутреннее поле.

$$B = \frac{\Delta\epsilon}{2\mu_B} = 1,8 \cdot 10^5 \text{ Гс.}$$

### Задача 6.50. Сверхтонкая структура

Хорошо известно, что космическое излучение на длине волны  $\lambda = 21$  см обусловлено сверхтонким расщеплением основного состояния атомарного водорода. Оценить на основе этих данных величину энергетического расщепления (в эВ)  $2P$ -состояния позитрония.

**Решение.**

**Сверхтонкое расщепление** — это расщепление, обусловленное взаимодействием спинового магнитного момента и магнитного момента протона. В атоме водорода ядром является протон, и в поле протона вращается электрон. Но протон имеет собственный магнитный момент. В магнитном поле протона находится электрон, и из-за этого поля электрон меняет свою энергию.

Сравниваются атом водорода и атом **позитрония** (протон и позитрон). Они показаны на рисунке (8.9).

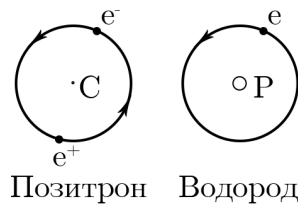


Рис. 8.9

Итак, сверхтонкое расщепление обусловлено взаимодействием собственных магнитных моментов.

Водород:

$$\mu_{e^-} = \mu_{e^+} = \mu_B,$$

$$\mu_p = 2,79\mu_B \frac{m_e}{m_p},$$

$$\Delta E = 2U_{\text{сверхтонк}} = \frac{2\mu_{\text{эл}}\mu_p}{r^3} = \hbar\omega = \frac{hc}{\lambda} = 0,59 \cdot 10^{-5} \text{ эВ.}$$

Позитроний:

$$r_{\text{ноз}} \stackrel{n=2}{=} \frac{\hbar^2}{\mu_e^2} \cdot 2^2 = 8r_B,$$

где  $r_B = 0,53 \text{ \AA}$ .

$$\Delta E_{\text{ноз}} = 2 \frac{\mu_e^2}{r_{\text{ноз}}^3} = 2 \frac{\mu_B^2}{r_{\text{ноз}}^3},$$

$$\Rightarrow \frac{\omega_{\text{ноз}}}{\omega_{\text{год}}} = \frac{\nu_{\text{ноз}}}{\nu_{\text{год}}} = 1,285 \Rightarrow \nu_{\text{ноз}} = 1,285 \nu_{\text{год}} \Rightarrow \Delta E_{\text{ноз}} = 0,76 \cdot 10^{-5} \text{ эВ.}$$

**!** Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на [pulsar@phystech.edu](mailto:pulsar@phystech.edu)