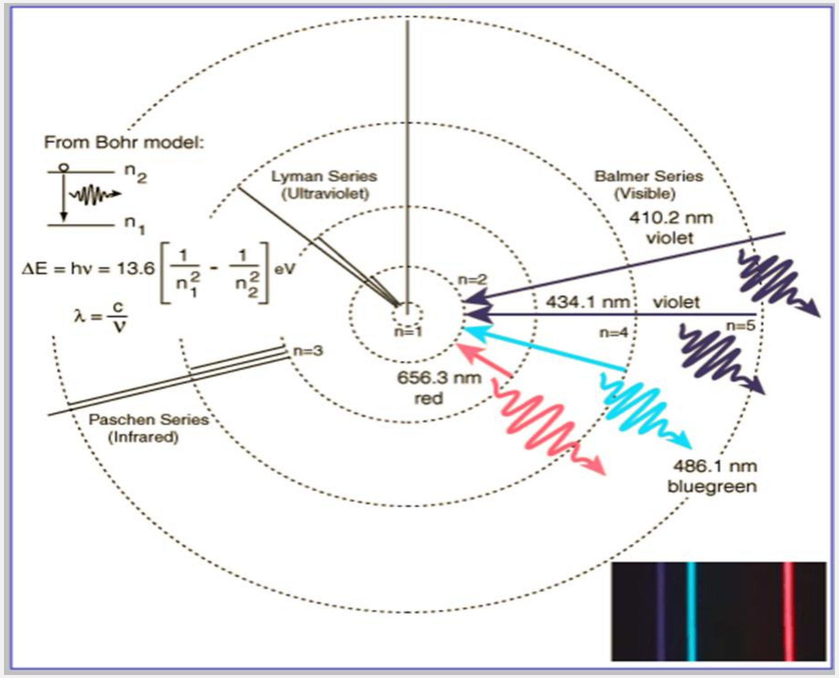
Лекція 7(2)

Тема: ***Квантові числа***

План.

1. Кутові моменти атома.
2. Орбітальне квантове число.
3. Магнітне квантове число.
4. Спін електрона.



Кутові моменти атома

В декартових координатах:

$$p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

$$L_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \quad L_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \quad L_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

В сферичних координатах:

$$L_x = -\frac{\hbar}{i}\left(\sin(\phi)\frac{\partial}{\partial \theta} + \cos(\phi)\cot(\theta)\frac{\partial}{\partial \phi}\right),$$

$$L_y = \frac{\hbar}{i}\left(\cos(\phi)\frac{\partial}{\partial \theta} - \sin(\phi)\cot(\theta)\frac{\partial}{\partial \phi}\right), \qquad L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

$$\frac{1}{\hbar^2}L^2\Psi = -\frac{1}{\sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin(\theta)\frac{\partial}{\partial \theta}\Psi\right) - \frac{1}{\sin^2(\theta)}\frac{\partial^2\Psi}{\partial \phi^2}$$

Комутація операторів

Співвідношення засвідчують, що одночасне вимірювання двох компонент кутового моменту неможливе, тоді як можна виміряти одну із компонент кутового моменту і величину його квадрату, тобто поряд зі значенням однієї з проекцій можна з будь-яким ступенем точності виміряти і скалярну величину кутового моменту.

$$\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x = i\hbar\hat{L}_z;\ \hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y = i\hbar\hat{L}_x;\ \hat{L}_z\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_z = i\hbar\hat{L}_y;$$

$$\hat{L}^2\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}^2 = 0; \qquad \hat{L}^2\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}^2 = 0; \qquad \hat{L}^2\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}^2 = 0.$$

Принцип невизначеності Гейзенберга

$$\boxed{[L_y, L_z] \neq 0,\ [L_z, L_x] \neq 0 \rightarrow \sqrt{\langle\Psi|L^2|\Psi\rangle} \geq \langle\Psi|L_z|\Psi\rangle}$$

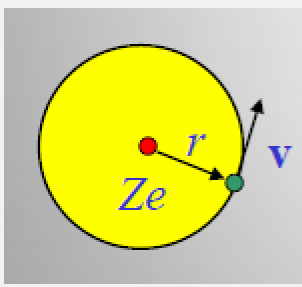
Власні значення операторів Lz, L^2

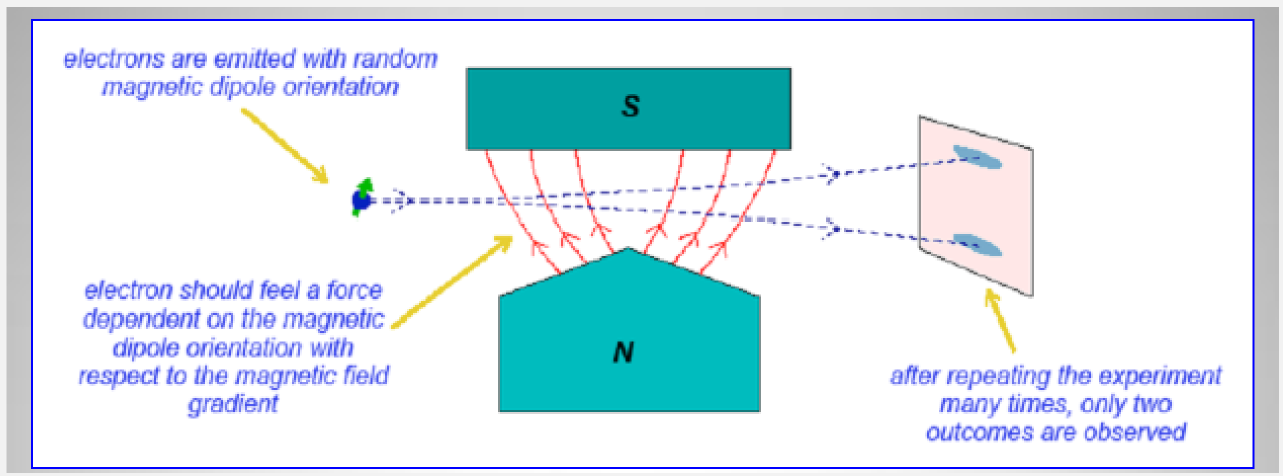
$$\boxed{L^2\Psi = \hbar^2 l(l+1)\Psi, \quad l = m_{max}}$$

Спін електрона

Досліди, що підтвердили існування спіну:

1. У 1922 р. Штерн і Герлах пропускали пучок атомів Н через сильно неоднорідне магнітне поле, пучок розділився на два (в s-стані $l=0$, $m=0$).





2. Спектр ліній атомів металів, що мають 1 *e* виявляються складнішими, ніж це випливає з теорії руху електрону в полі відцентрових сил.

Спіновий магнітний момент

Для коректного опису руху електрона необхідне введення поняття про *власний магнітний момент* – S (спін).

І повний момент запишемо:

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

Функціональні співвідношення:

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 .$$

Кумутаційні співвідношення:

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z; \quad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x; \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y;$$

$$[\hat{S}^2, \hat{S}_x] = [\hat{S}^2, \hat{S}_y] = [\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0$$

Спінове магнітне число m_s приймає значення тільки *±1/2(↓↑).*

Квантові числа

Хвильова функція повністю визначається чотирма квантовими числами *n, l, m, m_s* і називається *спін-орбіталлю*.

Комбінації квантових чисел визначають можливе розміщення електрона навколо ядра.

За принципом Паулі, *в атомі не може бути двох електронів з однаковим набором всіх чотирьох квантових чисел.*

Правила Хунда

Спіновий момент повинен бути *max:*

$$S=\Sigma_{ms} \quad – max$$

При *max* спіновому моменті повинен бути *max* орбітальний.

$$L=\Sigma_{ml} \quad – max.$$

Повний момент обчислюється:

а) якщо кількість *е* менша половини квантових станів, то повний момент:

$$I=|L-S|$$

б) якщо кількість *е* більша, рівна половині квантових станів, то повний момент:

$$I=|L+S|$$

Повний момент кількості руху

Величина вектора дається загальним для всіх моментів виразом:

$$|\mathbf{j}| = \sqrt{j(j+1)}\hbar$$

для квантового числа можливі тільки два значення при даному l :

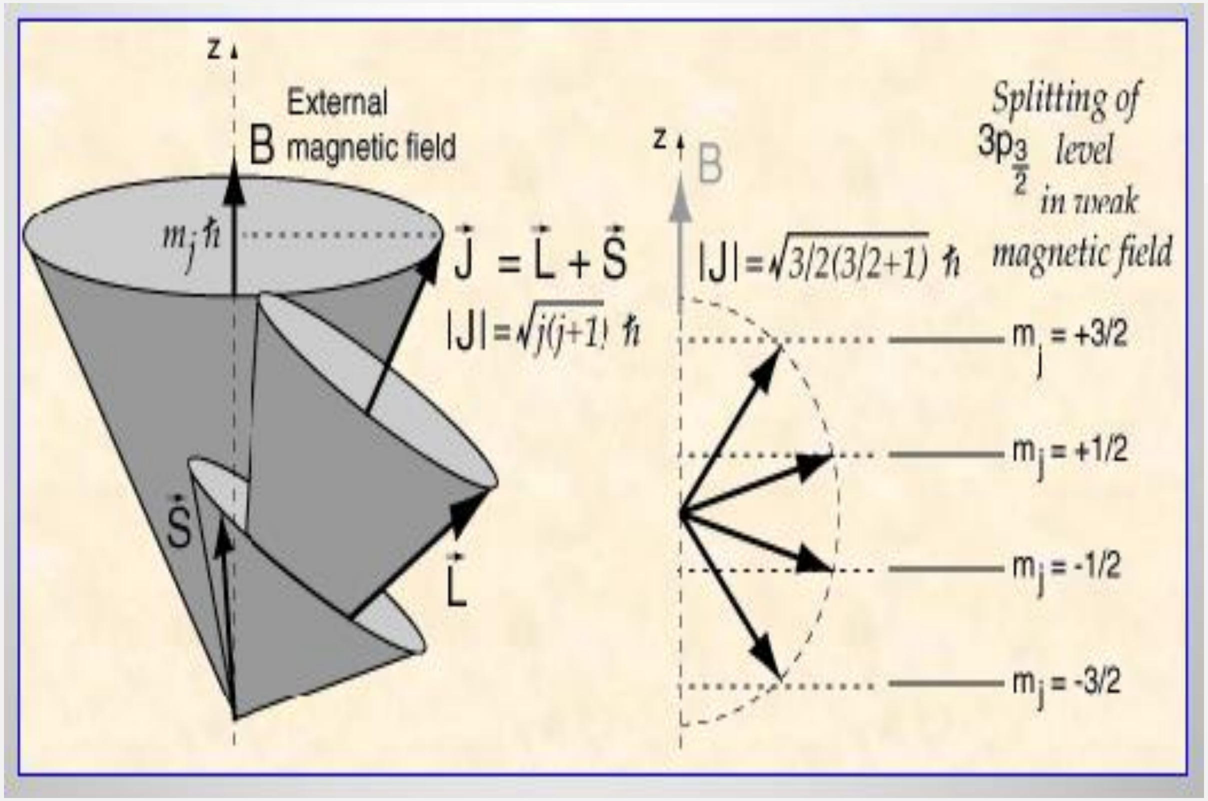
$$j_1 = (l + 1/2) \qquad j_2 = (l - 1/2)$$

У зовнішньому магнітному полі виникає просторове квантування вектора j, тобто (2j+1) дозволених орієнтацій. А проекція вектора виражається:

$$j_z = m_j \hbar$$

Ефект Зеємана

Розщеплення енергетичних рівнів атома в зовнішньому магнітному полі:



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

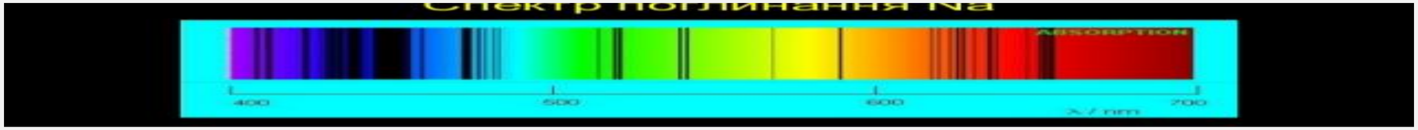
$$N = 2J + 1$$

Таким чином наявність спіна і його магнетизму пояснює і аномальний ефект Зеємана, який має місце при дуже сильних магнітних полях, коли дія зовнішнього поля слабша за - орбітальну взаємодію. В сильних магнітних полях зв’язок між орбітальним і власним моментом розривається і вони проектуються на напрям магнітного поля окремо, незалежно. В цьому випадку зміна енергетичних рівнів (терма) буде причому для m_J і m_s є правило відбору:

$$\Delta m_J=0;\pm \quad \Delta m_s=0$$

тобто у випадку сильного магнітного поля отримаємо *нормальний ефект Зеємана* (триплет). Цей ефект називається ефектом Пашена-Бака.

Якщо розщеплення на більше, як три компоненти, то це відповідає *складному ефекту Зеємана*.



Дякую за увагу!