

# Podstawy fizyki kwantowej i budowy materii

prof. dr hab. Aleksander Filip Żarnecki

Zakład Cząstek i Oddziaływań Fundamentalnych  
Instytut Fizyki Doświadczalnej



Wykład 11  
19 grudnia 2016

- 1 Zjawisko Zeemana
- 2 Doświadczenie Sterna-Gerlacha
- 3 Spin elektronu
- 4 Struktura subtelna i nadsubtelna widma

# Atom wodoru (przypomnienie)

## Równanie Schrödingera

Niezależne od czasu równanie dla stanu stacjonarnego (o określonej energii)

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

Rozpatrujemy ruch pod wpływem centralnej siły kulombowskiej ( $Z = 1$ ):

$$V(\vec{r}) = V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}$$

## Separacja zmiennych

Funkcję falową stanu stacjonarnego można zapisać jako

$$\psi(\vec{r}) = \psi(r, \theta, \phi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi)$$

Dodatkowo funkcja  $\psi(\vec{r}) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi)$  powinna być stanem własnym operatorów:  $\hat{H}$  (zachowana energia),  $\hat{L}^2$  (kwadrat momentu pędu) i  $\hat{L}_z$  (rzut momentu pędu) - **te obserwable mogą być zmierzone jednocześnie**

# Atom wodoru (przypomnienie)

Operator rzutu momentu pędu na oś Z:

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

⇒ wartości własne:  $L_z = m \hbar$ , gdzie  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Operator kwadratu momentu pędu:

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

⇒ wartości własne:  $L^2 = l(l+1) \hbar^2$ , gdzie  $l = 0, 1, 2, \dots$

Operator Hamiltona:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2m r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

⇒ wartości własne:  $E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2 n^2} = \frac{E_1}{n^2}$ , gdzie  $n = 1, 2, 3, \dots$

# Atom wodoru (przypomnienie)

## Liczby kwantowe

Funkcja falowa elektronu  $\psi(\vec{r})$  zadana jest przez **trzy liczby kwantowe**:

- główną liczbę kwantową:  $n = 1, 2, 3, \dots$   $R_{nl}(r)$
- orbitalną liczbę kwantową:  $l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$   $R_{nl}(r)$  i  $P_{lm}(\cos \theta)$
- magnetyczną l. kwantową:  $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$   $P_{lm}(\cos \theta)$  i  $\Phi_m(\phi)$

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) \cdot P_{lm}(\cos \theta) \cdot \Phi_m(\phi)$$

**Liczba stanów dla danej wartości  $n$  głównej liczby kwantowej:  $n^2$**

Stany te są "zdegenerowane", wszystkie mają taką samą wartość energii, która zależy tylko od głównej liczby kwantowej (jak w modelu Bohra).

## Linie widmowe

Obserwujemy przejścia pomiędzy dwoma poziomami,  $m \rightarrow n$ :

$$h \nu_{mn} = E_m - E_n = |E_1| \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

- 1 Zjawisko Zeemana
- 2 Doświadczenie Sterna-Gerlacha
- 3 Spin elektronu
- 4 Struktura subtelna i nadsubtelna widma

## Obserwacja

Zeeman badał zjawiska różne zjawiska magneto-optyczne.

Postawił sobie pytanie: czy długości fali linii widmowych emitowanych przez atomy zmienią się po **umieszczeniu atomów w polu magnetycznym?**

Zaobserwował **poszerzenie linii widmowych** sodu (**NaCl w płomieniu H**).

## Obserwacja

Zeeman badał zjawiska różne zjawiska magneto-optyczne.

Postawił sobie pytanie: czy długości fali linii widmowych emitowanych przez atomy zmienią się po **umieszczeniu atomów w polu magnetycznym?**

Zaobserwował **poszerzenie linii widmowych** sodu (**NaCl w płomieniu H**).

Ponieważ nie mógł wykluczyć wpływu pola magnetycznego na zachowanie płomienia, wykonał drugi eksperyment: pomiar linii absorbcyjnych sodu w polu magnetycznym.  $\Rightarrow$  ponownie zaobserwował poszerzenie linii

**Wyniki opublikował w *Nature* w 1897 roku (!)**

Na gruncie elektrodynamiki klasycznej wnioskował, że powodem poszerzenia linii musi być **ruch ładunków elektrycznych w atomach...**



## Obserwacja

Zeeman badał zjawiska różne zjawiska magneto-optyczne.

Postawił sobie pytanie: czy długości fali linii widmowych emitowanych przez atomy zmienią się po **umieszczeniu atomów w polu magnetycznym?**

Zaobserwował **poszerzenie linii widmowych** sodu (**NaCl w płomieniu H**).

Ponieważ nie mógł wykluczyć wpływu pola magnetycznego na zachowanie płomienia, wykonał drugi eksperyment: pomiar linii absorbcyjnych sodu w polu magnetycznym.  $\Rightarrow$  ponownie zaobserwował poszerzenie linii

**Wyniki opublikował w *Nature* w 1897 roku (!)**

Na gruncie elektrodynamiki klasycznej wnioskował, że powodem poszerzenia linii musi być **ruch ładunków elektrycznych w atomach...**

Później odkryto, że “poszerzenie” linii było w istocie ich **rozszczeniem** na kilka składowych...

## Model Bohra-Sommerfelda

Aby wyjaśnić m.in. zjawisko Zeemana, Arnold Sommerfeld zaproponował w 1915 roku rozszerzenie modelu Bohra.

Przyjął, że elektron może poruszać się nie tylko po orbitach kołowych (co odpowiada maksymalnemu momentowi pędu), ale także po eliptycznych.

Moment pędu elektronu w atomie zadany jest przez liczbę kwantową  $l$

$$L = l \hbar \leq n \hbar \quad l = 0, 1, \dots, n$$

## Model Bohra-Sommerfelda

Aby wyjaśnić m.in. zjawisko Zeemana, Arnold Sommerfeld zaproponował w 1915 roku rozszerzenie modelu Bohra.

Przyjął, że elektron może poruszać się nie tylko po orbitach kołowych (co odpowiada maksymalnemu momentowi pędu), ale także po eliptycznych.

Moment pędu elektronu w atomie zadany jest przez liczbę kwantową  $l$

$$L = l \hbar \leq n \hbar \quad l = 0, 1, \dots, n$$

Elektron poruszający się po orbicie wytwarza dipolowe pole magnetyczne.

Moment magnetyczny związany z ruchem orbitalnym:

$$\vec{\mu}_L = \frac{q}{2m} \vec{L}$$

W polu magnetycznym daje on dodatkowy wkład do energii elektronu

$$\Delta E = -\vec{\mu}_L \cdot \vec{B}$$

⇒ rozszczepienie linii widmowych

## Opis Schrödingera

W opisie kwantowym wektor momentu pędu nie jest znany!

Wartość momentu magnetycznego związanego z ruchem orbitalnym:

$$\mu_L = \frac{|q|\hbar}{2m} \sqrt{|L^2|} = \frac{e\hbar}{2m} \sqrt{l(l+1)} = \mu_B \sqrt{l(l+1)}$$

gdzie  $\mu_B$  to tzw. **magneton Bohra**:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} \approx 9.274 \cdot 10^{-24} \text{ J/T} \approx 5,788 \cdot 10^{-5} \text{ eV/T}$$

## Opis Schrödingera

W opisie kwantowym wektor momentu pędu nie jest znany!

Wartość momentu magnetycznego związanego z ruchem orbitalnym:

$$\mu_L = \frac{|q|}{2m} \sqrt{|L^2|} = \frac{e\hbar}{2m} \sqrt{l(l+1)} = \mu_B \sqrt{l(l+1)}$$

gdzie  $\mu_B$  to tzw. **magneton Bohra**:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} \approx 9.274 \cdot 10^{-24} \text{ J/T} \approx 5,788 \cdot 10^{-5} \text{ eV/T}$$

Rzut momentu magnetycznego na kierunek pola magnetycznego ( $B \uparrow \uparrow Z$ )

$$\mu_z = \frac{q}{2m} L_z = -\frac{e\hbar}{2m} \frac{L_z}{\hbar} = -\mu_B m$$

gdzie:  $m$  - **magnetyczna** liczba kwantowa

## Rozszczepienie poziomów

W polu magnetycznym poziom o  $l \neq 0$  ulega rozszczepieniu na  $2l + 1$  poziomów przesuniętych względem pierwotnej wysokości o

$$\Delta E = -\mu_z \cdot B_z = \mu_B B m \quad m = -l, -l + 1, \dots, l$$

⇒ każdy poziom ulega rozszczepieniu na nieparzystą liczbę stanów

## Rozszczepienie poziomów

W polu magnetycznym poziom o  $l \neq 0$  ulega rozszczepieniu na  $2l + 1$  poziomów przesuniętych względem pierwotnej wysokości o

$$\Delta E = -\mu_z \cdot B_z = \mu_B B m \quad m = -l, -l + 1, \dots, l$$

⇒ każdy poziom ulega rozszczepieniu na nieparzystą liczbę stanów

## Reguły wyboru

Polski fizyk Wojciech Rubinowicz odkrył w 1918 roku tzw. reguły wyboru. Potem zostały one doprecyzowane przez Bohra.

Możliwe są tylko takie przejścia między stanami elektronu dla których

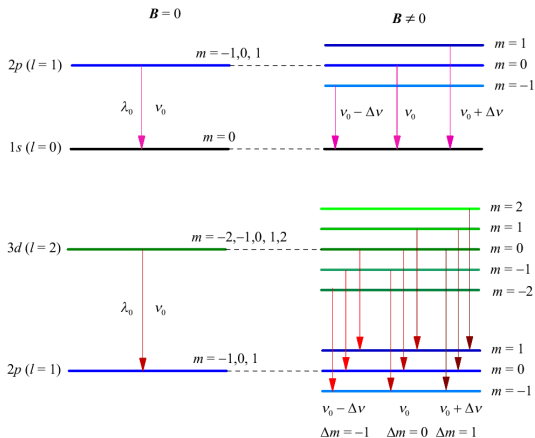
$$\Delta l = \pm 1$$

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

⇒ w polu magnetycznym każda linia powinna rozszczepić się na trzy ( $\Delta m$ )

## Normalne zjawisko Zeemana

Przykłady przejść dla  $\Delta l = -1$



Linia widmowa  $\nu_0$  ulega rozszczepieniu na trzy:  $\nu_0 - \Delta\nu$ ,  $\nu_0$  i  $\nu_0 + \Delta\nu$ ,  
 odpowiednio dla  $\Delta m = -1$ ,  $0$  i  $1 \Rightarrow$  **normalne** zjawisko Zeemana



## Normalne zjawisko Zeemana

Rozszczepienia linii widmowych są bardzo niewielkie!

**Przykład:** Niech długość fali linii emisyjnej odpowiadającej przejściu ze stanu  $l = 1$  do  $l = 0$  wynosi  $\lambda_0 = 600 \text{ nm}$  ( $E = hc/\lambda = 2.07 \text{ eV}$ ).

Jeśli umieścimy atom w polu o indukcji  $B = 2 \text{ T}$  (bardzo silnym!), zamiast jednej linii zaobserwujemy trzy:  $\lambda_-, \lambda_0, \lambda_+$  (przejścia z  $\Delta m = -1, 0, 1$ ).

## Normalne zjawisko Zeemana

Rozszczepienia linii widmowych są bardzo niewielkie!

**Przykład:** Niech długość fali linii emisyjnej odpowiadającej przejściu ze stanu  $l = 1$  do  $l = 0$  wynosi  $\lambda_0 = 600 \text{ nm}$  ( $E = hc/\lambda = 2.07 \text{ eV}$ ).

Jeśli umieścimy atom w polu o indukcji  $B = 2 \text{ T}$  (bardzo silnym!), zamiast jednej linii zaobserwujemy trzy:  $\lambda_-, \lambda_0, \lambda_+$  (przejścia z  $\Delta m = -1, 0, 1$ ).

Wynika to z **rozszczenia poziomu  $l = 1$**  na trzy poziomy odległe o

$$\Delta E = \mu_B B = 5.788 \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{T}} \cdot 2 \text{ T} = 1.1576 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$$

$$\frac{\Delta E}{E} \approx 5.59 \cdot 10^{-5}$$

## Normalne zjawisko Zeemana

Rozszczepienia linii widmowych są bardzo niewielkie!

**Przykład:** Niech długość fali linii emisyjnej odpowiadającej przejściu ze stanu  $l = 1$  do  $l = 0$  wynosi  $\lambda_0 = 600 \text{ nm}$  ( $E = hc/\lambda = 2.07 \text{ eV}$ ).

Jeśli umieścimy atom w polu o indukcji  $B = 2 \text{ T}$  (bardzo silnym!), zamiast jednej linii zaobserwujemy trzy:  $\lambda_-$ ,  $\lambda_0$ ,  $\lambda_+$  (przejścia z  $\Delta m = -1, 0, 1$ ).

Wynika to z rozszczepienia poziomu  $l = 1$  na trzy poziomy odległe o

$$\Delta E = \mu_B B = 5.788 \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{T}} \cdot 2 \text{ T} = 1.1576 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$$

$$\frac{\Delta E}{E} \approx 5.59 \cdot 10^{-5} = \frac{\Delta \lambda}{\lambda}$$

Długości fali obserwowanych linii wyniosą więc ( $\Delta \lambda \approx 0.034 \text{ nm}$ )

$$\lambda_- = 599.966 \text{ nm}$$

$$\lambda_0 = 600 \text{ nm}$$

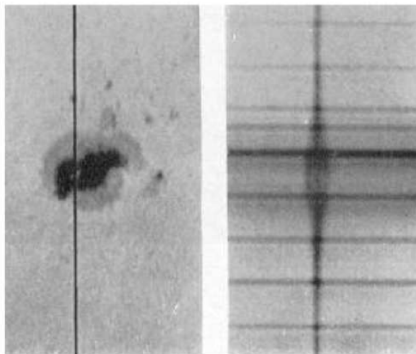
$$\lambda_+ = 600.034 \text{ nm}$$

## Normalne zjawisko Zeemana

Spektroskopia należy do najprecyzyjniejszych metod pomiarowych w fizyce

⇒ mimo bardzo małego efektu można go było mierzyć w laboratoriach.

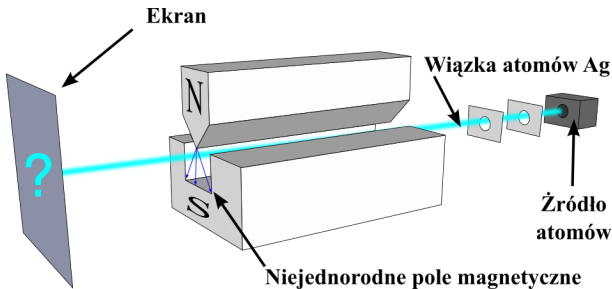
W 1908 roku George Ellery Hale odkrył rozszczepienie linii absorbcyjnych wodoru w polu magnetycznym plam słonecznych



- 1 Zjawisko Zeemana
- 2 Doświadczenie Sterna-Gerlacha
- 3 Spin elektronu
- 4 Struktura subtelna i nadsubtelna widma

## Układ doświadczalny

Aby wytłumaczyć zjawisko Zeemana w modelu Bohra-Sommerfelda należy dodatkowo założyć kwantyzację ustawień momentu magnetycznego. Otto Stern i Walther Gerlach przeprowadzili doświadczenie, w którym chcieli zmierzyć jak ustawione są momenty pędu atomów srebra:

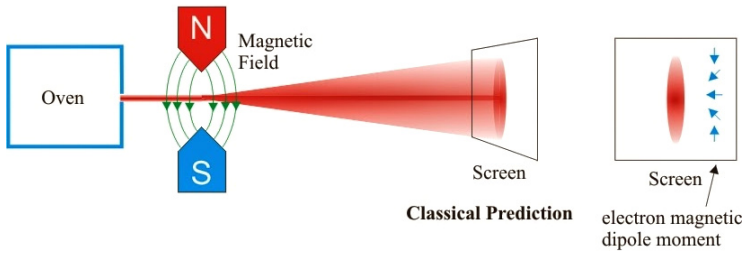


W **niejednorodnym polu magnetycznym** pojawia się siła działająca na moment magnetyczny  $\Rightarrow$  odchylenie atomu wiązki zależy od **orientacji  $\vec{L}$**

# Doświadczenie Sterna-Gerlacha

## Oczekiwany wynik

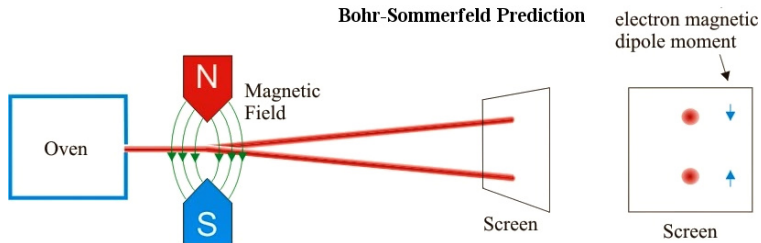
Gdyby przyjąć, że nie ma kwantyzacji moment pędu atomów byłyby losowo ustawiony względem pola magnetycznego  $\Rightarrow$  ciągły rozkład odchyleń



# Doświadczenie Sterna-Gerlacha

## Oczekiwany wynik

Gdyby przyjąć, że nie ma kwantyzacji moment pędu atomów byłby losowo ustawiony względem pola magnetycznego  $\Rightarrow$  ciągły rozkład odchyleń



W modelu Bohra-Sommerfelda, przyjmując, że nie tylko wartości, ale i ustawienia  $\vec{L}$  są skwantowane, oczekiwano wybranych wartości odchyleń

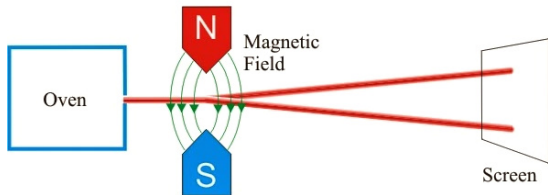


# Doświadczenie Sterna-Gerlacha

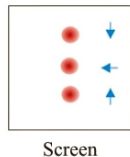
## Oczekiwany wynik

Gdyby przyjąć, że nie ma kwantyzacji moment pędu atomów byłby losowo ustawiony względem pola magnetycznego  $\Rightarrow$  ciągły rozkład odchyleń

Bohr-Sommerfeld Prediction



electron magnetic dipole moment



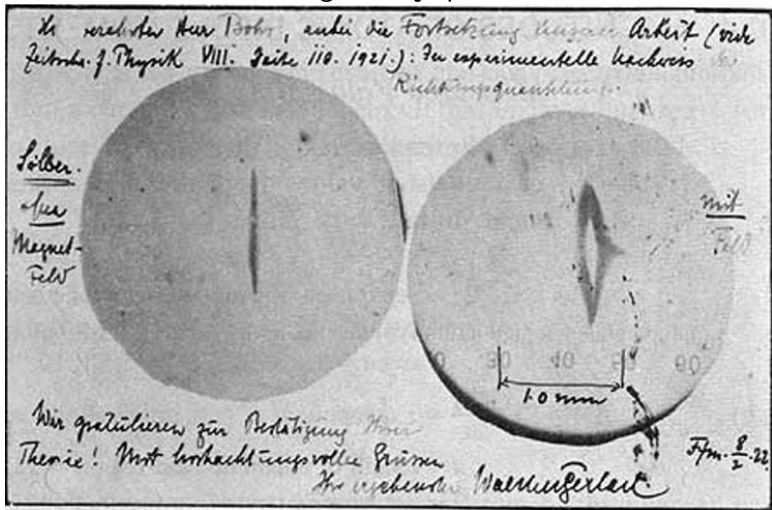
W modelu Bohra-Sommerfelda, przyjmując, że nie tylko wartości, ale i ustawienia  $\vec{L}$  są skwantowane, oczekiwano wybranych wartości odchyleń

Stern i Gerlach nie zastanawiali się ile powinno być prążków...

# Doświadczenie Sterna-Gerlacha

## Wynik pomiaru

Pocztówka Gerlacha do Bohra: gratulacje potwierdzenia słuszności teorii



## Interpretacja

Stern i Gerlach uznali wynik za dowód kwantyzacji przestrzennej  $\vec{L}$ .

Zakładali przy tym, że atomy srebra mają moment pędu  $L = \hbar$  ( $l = 1$ ).

## Interpretacja

Stern i Gerlach uznali wynik za dowód kwantyzacji przestrzennej  $\vec{L}$ .

Zakładali przy tym, że atomy srebra mają moment pędu  $L = \hbar$  ( $l = 1$ ).

Jednak inne pomiary wskazywały, że są raczej w stanie  $L = 0$ , dla którego nie oczekujemy żadnego rozszczepienia (ani klasycznie, ani kwantowo).

## Interpretacja

Stern i Gerlach uznali wynik za dowód kwantyzacji przestrzennej  $\vec{L}$ .

Zakładali przy tym, że atomy srebra mają moment pędu  $L = \hbar (l = 1)$ .

Jednak inne pomiary wskazywały, że są raczej w stanie  $L = 0$ , dla którego nie oczekujemy żadnego rozszczepienia (ani klasycznie, ani kwantowo).

Z kolei nowe teorie Heisenberga i Schrödingera, przewidywały, że poziom  $l = 1$  powinien ulec rozszczepieniu na 3 poziomy ( $m = -1, 0, 1$ )...

⇒ interpretacja doświadczenia Sterna-Gerlacha przestała być oczywista

- 1 Zjawisko Zeemana
- 2 Doświadczenie Sterna-Gerlacha
- 3 Spin elektronu
- 4 Struktura subtelna i nadsubtelna widma

## Zakaz Pauliego

Kwantowy model atomu tłumaczył dobrze długości fali obserwowanych widm atomowych. **Ale nie tłumaczył poprawnie natężeń tych linii!**

Nie tłumaczył dlaczego, dla atomów wieloelektronowych, w stanie podstawowym wszystkie elektrony nie obsadzają powłoki  $n = 1$ .

## Zakaz Pauliego

Kwantowy model atomu tłumaczył dobrze długości fali obserwowanych widm atomowych. **Ale nie tłumaczył poprawnie natężeń tych linii!**

Nie tłumaczył dlaczego, dla atomów wieloelektronowych, w stanie podstawowym wszystkie elektrony nie obsadzają powłoki  $n = 1$ .

Wyjaśnienie tego problemu zaproponował w 1925 roku Wolfgang Pauli. Zapostulował, że dwa elektrony w atomie nie mogą być w stanie opisanym przez **ten sam zestaw liczb kwantowych**.

**dziś wiemy, że zakaz Pauliego dotyczy wszystkich fermiony**



## Zakaz Pauliego

Kwantowy model atomu tłumaczył dobrze długości fali obserwowanych widm atomowych. **Ale nie tłumaczył poprawnie natężeń tych linii!**

Nie tłumaczył dlaczego, dla atomów wieloelektronowych, w stanie podstawowym wszystkie elektrony nie obsadzają powłoki  $n = 1$ .

Wyjaśnienie tego problemu zaproponował w 1925 roku Wolfgang Pauli. Zapostulował, że dwa elektrony w atomie nie mogą być w stanie opisanym przez **ten sam zestaw liczb kwantowych**.

**dziś wiemy, że zakaz Pauliego dotyczy wszystkich fermiony**

Aby ta reguła poprawnie tłumaczyła obsadzenia poziomów elektronowych (i strukturę obserwowanych widm) należało jednak założyć, że jest jeszcze jedna, "ukryta" **liczba kwantowa opisująca stan elektronu**, która może przyjmować tylko dwie wartości...

## Hipoteza

Widma atomowe mierzone były coraz dokładniej i wciąż teoria nie do końca się z nimi zgadzała.

Młody fizyk amerykański Ralph Kronig doszedł do wniosku, że pewne cechy widma można wytłumaczyć przyjmując, że elektron ma swój własny moment pędu (spin).

Niestety Pauli przekonał go, że jego teoria jest bez sensu...

## Hipoteza

Widma atomowe mierzone były coraz dokładniej i wciąż teoria nie do końca się z nimi zgadzała.

Młody fizyk amerykański Ralph Kronig doszedł do wniosku, że pewne cechy widma można wytłumaczyć przyjmując, że elektron ma swój własny moment pędu (spin).

Niestety Pauli przekonał go, że jego teoria jest bez sensu...

Wkrótce potem George Uhlenbeck i Samuel Goudsmit, mający dużo bardziej "tolerancyjnego" opiekuna doszli do podobnych wniosków i opublikowali swoją pracę (1925).

⇒ dziś uważani są za odkrywców spinu elektronu

Orientacja spinu elektronu stanowi dodatkową liczbę kwantową potrzebną, aby zakaz Pauliego dobrze opisywał obserwowane widma

## Atom wodoru

Każdy elektron ma swój **własny moment pędu**  $\vec{S}$ .

Jego wartość jest zawsze taka sama  $S = \sqrt{s(s+1)} \hbar = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$  ( $s = \frac{1}{2}$ )

Rzut spinu na oś Z może przyjmować dwie wartości:

$$S_z = \pm \frac{1}{2} \hbar = m_s \hbar \quad m_s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$$

$\Rightarrow$  nowa liczba kwantowa  $m_s$  (od teraz "stare"  $m \rightarrow m_l$ )

# Spin elektronu

## Atom wodoru

Każdy elektron ma swój **własny moment pędu**  $\vec{S}$ .

Jego wartość jest zawsze taka sama  $S = \sqrt{s(s+1)} \hbar = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$  ( $s = \frac{1}{2}$ )

Rzut spinu na oś Z może przyjmować dwie wartości:

$$S_z = \pm \frac{1}{2} \hbar = m_s \hbar \quad m_s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$$

⇒ nowa liczba kwantowa  $m_s$  (od teraz "stare"  $m \rightarrow m_l$ )

Stan elektronu w atomie opisuje zestaw **czterech liczb kwantowych**:

- główną liczbę kwantową:  $n = 1, 2, 3, \dots$
- orbitalną liczbę kwantową:  $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$
- magnetyczną liczbę kwantową:  $m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l$
- spinową liczbę kwantową:  $m_s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$

⇒ na danej powłoce  $n$  może znajdować się  $2n^2$  elektronów !

## Atom wodoru

Zestawienie możliwych stanów elektronu na pierwszych dwóch powłokach

$n$	$l$	$m_l$	$m_s$	notacja	liczba stanów	powłoka
1	0	0	+1/2	1s	2	K
1	0	0	-1/2			
2	0	0	+1/2	2s	8	L
2	0	0	-1/2			
2	1	-1	+1/2	2p		
2	1	-1	-1/2			
2	1	0	+1/2			
2	1	0	-1/2			
2	1	+1	+1/2			
2	1	+1	-1/2			

## Teoria Diraca

Elektron jest cząstką punktową a jego spin efektem czysto kwantowym. Nie należy interpretować spinu jako ruchu obrotowego elektronu...

W 1928 roku Paul Dirac przedstawił relatywistyczne równanie falowe dla elektronu. Równanie to spełniało relatywistyczny związek między energią i pędem elektronu, a jednocześnie było liniowe.

## Teoria Diraca

Elektron jest cząstką punktową a jego spin efektem czysto kwantowym. Nie należy interpretować spinu jako ruchu obrotowego elektronu...

W 1928 roku Paul Dirac przedstawił relatywistyczne równanie falowe dla elektronu. Równanie to spełniało relatywistyczny związek między energią i pędem elektronu, a jednocześnie było liniowe.

Równanie to nie ma rozwiązań w przestrzeni “zwykłych” funkcji zespolonych  $\Rightarrow$  konieczne wprowadzenie tzw. spinorów Diraca



## Teoria Diraca

Elektron jest cząstką punktową a jego spin efektem czysto kwantowym. Nie należy interpretować spinu jako ruchu obrotowego elektronu...

W 1928 roku Paul Dirac przedstawił relatywistyczne równanie falowe dla elektronu. Równanie to spełniało relatywistyczny związek między energią i pędem elektronu, a jednocześnie było liniowe.

Równanie to nie ma rozwiązań w przestrzeni “zwykłych” funkcji zespolonych  $\Rightarrow$  konieczne wprowadzenie tzw. spinorów Diraca

Równanie Diraca dla cząstki swobodnej ma cztery różne rozwiązania:

- elektron poruszający się z rzutem momentu pędu zgodnym lub przeciwnym do kierunku ruchu (prawoskrętny lub lewoskrętny)
- analogiczne dwa rozwiązania odpowiadają formalnie cząstce o ujemnej masie/energii  $\Rightarrow$  opis pozytonu (antycząstki elektronu)

Istnienie spinu i antycząstek wynika z równania Diraca!

## Magnetyzm spinowy

Ze spinowym momentem pędu także związany jest moment magnetyczny

$$\vec{\mu}_s = g_s \frac{q}{2m} \vec{S}$$

gdzie dodatkowy czynnik  $g_s \approx 2$  wynika z równania Diraca.

⇒ wynik eksperymentu Strena-Gerlacha pokazywał dwa możliwe ustawienia spinu elektronu walencyjnego w atomie srebra ( $m_s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$ )

## Magnetyzm spinowy

Ze spinowym momentem pędu także związany jest moment magnetyczny

$$\vec{\mu}_s = g_s \frac{q}{2m} \vec{S}$$

gdzie dodatkowy czynnik  $g_s \approx 2$  wynika z równania Diraca.

⇒ wynik eksperymentu Strena-Gerlacha pokazywał dwa możliwe ustawienia spinu elektronu walencyjnego w atomie srebra ( $m_s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$ )

## Anomalny efekt Zeemana

W polu magnetycznym każdy poziom ulega dodatkowemu rozszczepieniu na 2 poziomy przesunięte względem pierwotnej wysokości o

$$\Delta E_s = -\mu_z \cdot B_z = g_s \mu_B B m_s \approx \pm \mu_B B$$

⇒ parzysta liczba stanów

- 1 Zjawisko Zeemana
- 2 Doświadczenie Sterna-Gerlacha
- 3 Spin elektronu
- 4 **Struktura subtelna i nadsubtelna widma**

## Sprężenie spin-orbita

Momenty pędu  $\vec{L}$  i  $\vec{S}$  (związane z nimi momenty magnetyczne  $\vec{\mu}_L$  i  $\vec{\mu}_S$ ) oddziałują na siebie nawzajem

⇒ dodatkowy wkład do energii elektronu zależny od ich ustawienia

$$\Delta E_{LS} \sim \vec{L} \cdot \vec{S}$$

powoduje **rozszczenie poziomów** także pod nieobecność pola  $\vec{B}$ !  
Przykładem jest rozszczepienie poziomu 3p sodu (żółtej linii 3p → 3s)

## Sprężenie spin-orbita

Momenty pędu  $\vec{L}$  i  $\vec{S}$  (związane z nimi momenty magnetyczne  $\vec{\mu}_L$  i  $\vec{\mu}_S$ ) oddziałują na siebie nawzajem

⇒ dodatkowy wkład do energii elektronu zależny od ich ustawienia

$$\Delta E_{LS} \sim \vec{L} \cdot \vec{S}$$

powoduje **rozszczenie poziomów** także pod nieobecność pola  $\vec{B}$ !  
Przykładem jest rozszczepienie poziomu  $3p$  sodu (żółtej linii  $3p \rightarrow 3s$ )

Nie możemy dalej traktować  $L_z$  i  $S_z$  jako niezależnych obserwabli, stan elektronu musimy opisywać w oparciu o całkowity moment pędu

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

opisany (wartość i rzut) liczbami kwantowymi  $j$  i  $m_j$ :

$$\begin{aligned} J &= \sqrt{j(j+1)} \hbar & j &= l - \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2} \\ J_z &= m_j \hbar & m_j &= -j, -j + 1, \dots, j \end{aligned}$$

## Poprawki relatywistyczne

Równanie Schrödingera jest równaniem nierelatywistycznym, tylko w takim przybliżeniu energia stanu zależy wyłącznie od  $n$ !

⇒ poprawka relatywistyczna wprowadza dodatkową **zależność od momentu pędu!**

## Poprawki relatywistyczne

Równanie Schrödingera jest równaniem nierelatywistycznym, tylko w takim przybliżeniu energia stanu zależy wyłącznie od  $n$ !

⇒ poprawka relatywistyczna wprowadza dodatkową **zależność od momentu pędu!**

Uwzględniając poprawki relatywistyczne i oddziaływanie spin orbita, przesunięcie energii

$$\Delta E_{LS+rel} = -\frac{mc^2}{2} \left( \frac{Z\alpha}{n} \right)^4 \left( \frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right)$$

⇒ największe poprawki dla wewnętrznych orbit



## Poprawki relatywistyczne

Równanie Schrödingera jest równaniem nierelatywistycznym, tylko w takim przybliżeniu energia stanu zależy wyłącznie od  $n$ !

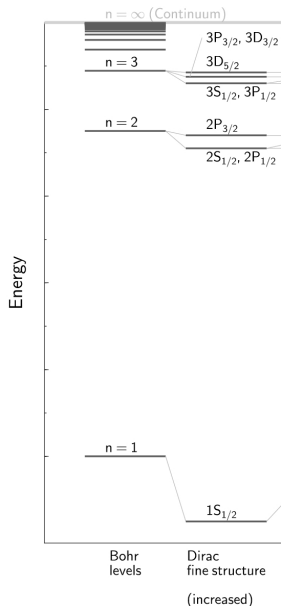
⇒ poprawka relatywistyczna wprowadza dodatkową **zależność od momentu pędu!**

Uwzględniając poprawki relatywistyczne i oddziaływanie spin orbita, przesunięcie energii

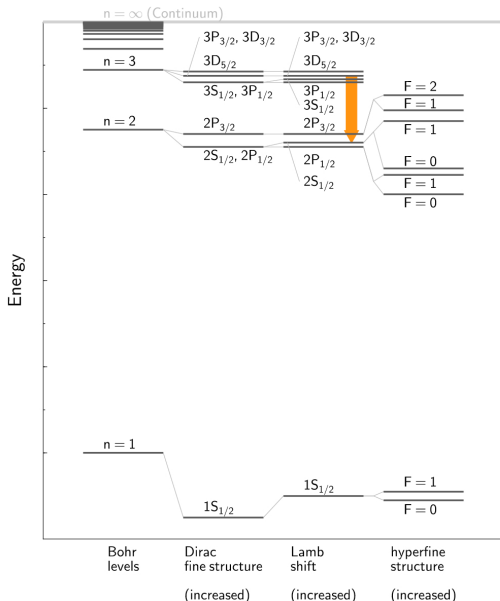
$$\Delta E_{LS+rel} = -\frac{mc^2}{2} \left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^4 \left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right)$$

⇒ największe poprawki dla wewnętrznych orbit

## Struktura subtelna widma



- numer powłoki  $n$  decyduje o wysokości poziomu w skalach eV
- struktura subtelna poprawki relatywistyczne i spin-orbita: rzędu  $10^{-5} - 10^{-4}$  eV
- przesunięcie Lamba wkład od tzw. poprawek wirtualnych QED: rzędu  $10^{-6} - 10^{-5}$  eV
- struktura nadsubtelna oddziaływanie ze spinem jądra: poprawka rzędu  $10^{-8} - 10^{-6}$  eV



## Anomalny efekt Zeemana

Gdy uwzględnimy składanie orbitalnego i spinowego momentu magnetycznego, związek przesunięcia energii w polu magnetycznym z rzutem momentu pędu

$$\Delta E = g_J \mu_B B m_j \quad m_j = -j, -j + 1, \dots, j$$

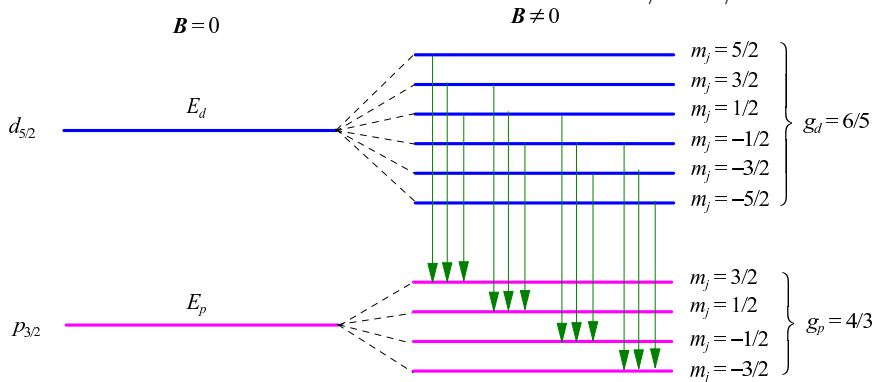
gdzie współczynnik  $g_J$ , ( $\leq g_J \leq 2$ ), może być wyrażony przez liczby kwantowe  $j$ ,  $l$  i  $s$

$$g_J = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}$$

- ⇒ stan początkowy i końcowy mogą mieć inne odległości poziomów
- ⇒ dużo bardziej skomplikowana struktura

## Anomalny efekt Zeemana

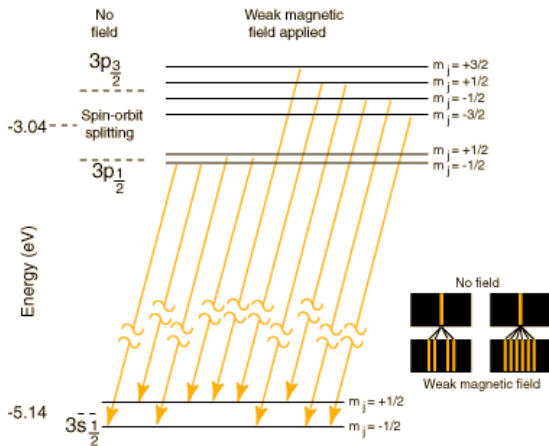
Przykładowy diagram dla przejść między poziomami  $d_{5/2}$  i  $p_{3/2}$



Wciąż obowiązuje reguła  $\Delta m = -1, 0, 1 \Rightarrow$  możliwe 12 przejść ( $B \neq 0$ )  
 Każde z nich odpowiada innej energii przejścia (długości fali) bo  $g_d \neq g_p!$

## Anomalny efekt Zeemana

Przykładowy diagram przejść dla dubletu sodowego



Jedna z linii rozszczepia się na 4, a druga na 6 składowych !

## Konwencja oznaczeń

Przyjęto się oznaczać atomowe poziomy energii w formie

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

Przykładowo:  $2^2d_{3/2}$  oznacza elektron na powłoce  $n = 2$ ,  
w stanie opisanym liczbami kwantowymi  $l = 2, s = \frac{1}{2}, j = \frac{3}{2}$

## Konwencja oznaczeń

Przyjęto się oznaczać atomowe poziomy energii w formie

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

Przykładowo:  $2^2d_{3/2}$  oznacza elektron na powłoce  $n = 2$ ,  
 w stanie opisanym liczbami kwantowymi  $l = 2, s = \frac{1}{2}, j = \frac{3}{2}$

W przypadku gdy opisujemy stan wieloelektronowy stosujemy duże litery!  
 (wtedy  $L, S$  i  $J$  odpowiadają sumarycznym momentom pędu)

Przykładowo: stan podstawowy atomu węgla możemy opisać jako  $2^3P_0$   
 $\Rightarrow$  dwa "zewnątrzne" elektrony na powłoce  $n = 2$   
 są w stanie  $S = 1, L = 1$  i  $J = 0$

(pozostałe 4 elektrony na "zamkniętych" powłokach  $1s$  i  $2s$   
 nie wnoszą wkładu do bilansu momentu pędu)