

Отсюда и находим модуль дополнительного магнитного момента атома:

$$M_g = \frac{e^2 B}{8\mu} (x^2 + y^2).$$

Направлен же он всегда навстречу вектору \vec{B} . Это означает, что дополнительный момент всегда устанавливается против поля. Таким образом, оператор \vec{M}_g обуславливает диамагнитные свойства атомов вещества.

Добавка к энергии в первом приближении теории возмущений равна среднему от оператора возмущения по невозмущенному состоянию. Диамагнитный член увеличивает энергию атома на величину, равную

$$\frac{e^2 B^2}{8\mu} (x^2 + y^2),$$

где интегрирование при усреднении проведено по объему атома. Понятно, что для многоэлектронного атома диамагнитные моменты отдельных электронов складываются; складываются и соответствующие им энергии.

В слабых магнитных полях увеличение энергии за счет диамагнитного взаимодействия много меньше энергии парамагнитного взаимодействия, не говоря уже о ферромагнитном. Поэтому диамагнитными эффектами в водороде можно пренебречь. Диамагнетизм вещества проявляется в том случае, если полный магнитный момент атома равняется нулю. Это осуществляется, например, у атомов инертных газов, в частности у гелия.

Методические указания и рекомендации

I. Глава посвящена важнейшим приложениям квантовой механики системы частиц в атомной физике. Центральные вопросы главы — атом гелия, теория периодической системы элементов и молекула водорода. В соответствующих параграфах курса на элементарном уровне достаточно полно и подробно изложен нужный материал. По ним необходимы лекционные занятия, сопровождающиеся подробными выкладками и иллюстрацией отдельных положений на практических занятиях.

Кроме этих основных вопросов, рассмотрены и другие приложения квантовой механики к атомной физике. Их можно считать конкретными примерами на применение теории.

Существен для углубленного понимания роли различных взаимодействий в атоме параграф об уровнях энергии многоэлектронного атома (см. § 18, п 4). Полезно привлечь внимание студентов к наглядной интерпретации сил химической связи между атомами (см. § 19, п. 3), организовав выступления на семинаре. Наконец, имеется возможность сравнительно простого объяснения парамагнитных и диамагнитных свойств атомов (см. § 20, п. 3). Соответствующие доклады можно поставить на семинарском занятии.

II. При изучении главы читателю полезно ответить на вопросы и выполнить упражнения:

— Опишите характер силового поля, в котором движется валентный электрон в атоме щелочного элемента. Что означает выражение: «Вырождение уровня энергии по квантовому числу l снимается, если поле имеет некулоновский характер»? Перечислите и обсудите допущения, лежащие в основе теории периодической системы элементов. Составьте краткий конспект ответа по теории периодической системы. Запишите гамильтониан задачи об атоме гелия и истолкуйте все его слагаемые. Объясните природу двух разновидностей состояний атомов гелия. Обсудите возникновение обменных взаимодействий и связь их со спинами частиц. Проследите связь между величиной взаимодействий в атоме с приближениями в анализе атомных уровней энергии. Приведите примеры электронных конфигураций и соответствующих им термов. Разберите этапы решения задачи о молекуле водорода на качественном уровне: постановка задачи, гамильтониан и т. д.

III. При урезанном курсе (на некоторых специальностях) этой главой квантовая механика заканчивается. В таком случае необходимо сделать обзор ее неизученных частей: теории рассеяния и излучения.

Упражнение VI

1. Определите возможные ориентации спинов электронов в слоях и оболочках атома железа. Электронная конфигурация:

$$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6 (3s)^2 (3p)^6 (3d)^6 (4s)^2.$$

Ответ.

В заполненных оболочках четное число электронов, причем имеются пары с одинаковыми квантовыми числами n , l и m . В пару входят электроны с антипараллельными спинами. В оболочке $3d$ из десяти возможных состояний заполнено 6. При $l=2$ имеется пять состояний с различными значениями магнитного квантового числа. Поэтому 5 из 6 электронов могут иметь одинаково направленные спины. За счет этого атомы железа обладают значительным магнитным моментом.

2. Опишите возможные состояния атома углерода ${}_6\text{C}$ (при заполненных оболочках $1s$ и $2s$).

3. Найдите возможные состояния атома ${}_4\text{Be}$ (при заполненной $1s$ -оболочке).

4. Рассмотрите различные схемы образования поправки к уровню энергии атома с двумя внешними электронами, обусловленной магнитными взаимодействиями. Изучите отдельно взаимодействия типа спин — орбита, спин — спин и орбита — орбита, вызывающие различное расщепление уровней нулевого приближения, соответствующих заданной конфигурации.

5. Вычислите энергию основного состояния атома гелия в первом приближении теории возмущений.

У к а з а н и е. Воспользуйтесь формулой

$$\int \frac{e^{-\alpha r_1 - \beta r_2}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} dV_1 dV_2 = 32\pi^2 \frac{\alpha^2 + \beta^2 + 3\alpha\beta}{\alpha^2\beta^2(\alpha + \beta)^3}.$$

6. Рассмотрите расщепление уровней энергии атома водорода на подуровни в слабом магнитном поле с помощью полуклассической векторной модели.

Р е ш е н и е.

Из формул

$$\vec{M}_L = -g_L M_B \frac{1}{\hbar} \vec{L}, \quad \vec{M}_S = -g_S M_B \frac{1}{\hbar} \vec{S}$$

следует

$$\frac{M_L}{L} = \frac{e}{2\mu}, \quad \frac{M_S}{S} = \frac{e}{\mu}$$

Векторы $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ и $\vec{M} = \vec{M}_L + \vec{M}_S$ неколлинеарны, так как гиромагнитные отношения для спина и орбитального момента неодинаковы (см. рис. 20.2).

Векторы \vec{L} и \vec{S} быстро вращаются вокруг вектора \vec{J} . Вместе с ними процессирует и магнитный момент \vec{M} . Разложим его на две составляющие: вдоль и поперек вектора \vec{J} . Они обозначаются \vec{M}_{\parallel} и \vec{M}_{\perp} .

Добавочная энергия, приобретаемая атомом во внешнем магнитном поле, определяется равенством

$$W = -\vec{M}\vec{B}.$$

Ее следует рассматривать как малое возмущение. Под действием поля происходит изменение уровней энергии на величину

$$\Delta E = -\vec{M}\vec{B} = -\vec{M}_z B.$$

(Вектор \vec{B} направлен по оси Oz .) Усреднение производится по невозмущенному состоянию, т. е. в предположении, что поле отсутствует.

При нахождении \vec{M}_z учтем, что

$$\vec{M}_z = \vec{M}_{\parallel z} + \vec{M}_{\perp z}.$$

Второе слагаемое можно считать равным нулю, так как вектор \vec{M} очень быстро вращается вокруг вектора \vec{J} .

Как видно из рисунка 20.2,

$$M_{\parallel} = M_S \cos(\widehat{SJ}) + M_L \cos(\widehat{LJ}) = M_S \frac{J^2 - L^2 + S^2}{2SJ} + M_L \frac{J^2 + L^2 - S^2}{2LJ}.$$

Отсюда получаем

$$M_{\parallel} = g M_B \frac{1}{\hbar} J,$$

где

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

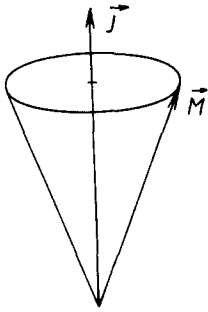


Рис 20.1.

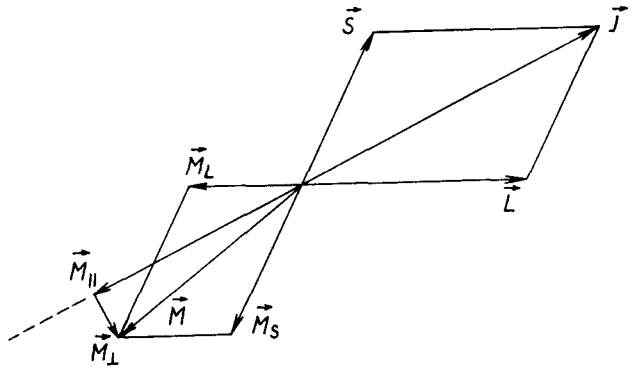


Рис. 20.2.

Вектор \vec{J} прецессирует вокруг оси Oz , причем его величина и угол наклона к оси сохраняются. То же самое будет происходить с вектором \vec{M}_{\parallel} . Поэтому

$$M_{\parallel z} = -gM_B \frac{1}{\hbar} J_z = -gM_B m_j.$$

Для уровней энергии получим поправку:

$$\Delta E = gM_B B m_j.$$

7. Найдите расщепление уровней энергии $1s$, ${}^2S_{1/2}$; $2p$, ${}^2P_{3/2}$; $2p$, ${}^2P_{1/2}$ атома водорода в слабом магнитном поле.

8. Найдите расщепление уровней энергии атома водорода в сильном магнитном поле.

В очень сильных полях разрывается связь спинового и орбитального магнитных моментов, и они взаимодействуют с внешним полем независимо. Это означает, что спин-орбитальным взаимодействием можно пренебречь.

В качестве невозмущенной системы следует выбрать изолированный атом водорода в состояниях, описываемых волновыми функциями (13.9). Эти состояния характеризуются набором величин E , L , L_z , S , S_z . Им соответствуют квантовые числа n , l , m_l , s и m_s . Уровни энергии нулевого приближения (11.7) зависят только от главного квантового числа.

Возмущение, возникающее вследствие магнитного поля, сейчас удобнее представить с помощью (20.1) в виде

$$\vec{V} = -\widehat{M}\widehat{B} = \frac{M_B B}{\hbar} (\widehat{L}_z + 2\widehat{S}_z).$$

Добавка к уровням энергии в первом приближении теории возмущений

$$\Delta E^{(1)} = \frac{M_B B}{\hbar} \int \psi_{nlm_l}^* U_{m_s}^+ (\widehat{L}_z + 2\widehat{S}_z) \psi_{nlm_l} U_{m_s} dV = M_B B (m_l + 2m_s).$$

Таким образом, в сильных магнитных полях вырождение по квантовым числам m_l и m_s частично снимается. Уровень энергии, соответствующий заданным значениям n и l , распадается на столько подуровней, сколько различных значений может иметь сумма $(m_l + 2m_s)$.

ГЛАВА VII. НЕСТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ. ИСПУСКАНИЕ И ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА АТОМАМИ

До сих пор в курсе рассматривались частицы или системы частиц в стационарных полях и основной целью было отыскание стационарных состояний изучаемых объектов, что достигалось с помощью уравнения Шредингера без времени. Однако существенно важны также случаи, когда система находится в переменных полях, испытывает внешнее воздействие, зависящее от времени. Для решения соответствующих задач необходимо использовать полное уравнение Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi, \quad (21.1)$$

где $\hat{H} = \hat{H}(\vec{r}, t)$. Это уравнение и должно дать описание изменения состояния с течением времени в виде зависимости $\psi = \psi(\vec{r}, t)$. В общем случае эта зависимость не сводится к гармонической функции $e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$, известной для стационарных состояний.

В качестве примера укажем на взаимодействие атомов с электромагнитным полем, в результате которого стационарное состояние атома изменяется, и атом излучает или поглощает свет. Тепловое излучение газообразных тел на атомном уровне имеет ту же природу, но несколько иной механизм: атомы в тепловом движении сталкиваются, в результате чего на оптические электроны одного атома краткое время действует внешнее для него электромагнитное поле другого атома, вызывающее излучение.

Точное решение полного уравнения Шредингера в общем случае, т. е. для любых гамильтонианов $\hat{H}(\vec{r}, t)$, неизвестно. Поэтому широкое распространение получили приближенные методы решения уравнения (21.1), и один из них — теория нестационарных возмущений. Далее с ее помощью в курсе рассмотрены переходы между стационарными состояниями изолированной системы, испытывавшей действие переменного внешнего поля. Такие переходы, сопровождающиеся излучением или поглощением квантов энергии, характерны для микромира. Существование квантов и переходы из одного стационарного состояния в другое были предсказаны в работах Планка, Эйнштейна, Бора. Квантовая механика позволяет дать обоснование первоначальным представлениям о «квантовых скачках» как переходах системы между стационарными состояниями под действием переменного поля.