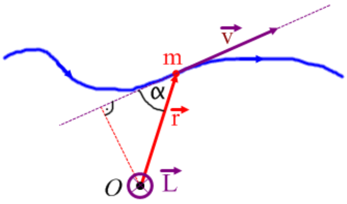
A perdület a kvantummechanikában, iránykvantálás, a kvantumszámok rendszere a H-atomban. A mágneses momentum, a Zeeman-effektus, az elektronspin

Az impulzusmomentum (perdület) fogalmát a klasszikus fizikában is használjuk.

Tömegpont mozgása esetén **a pálya-impulzusmomentum** (pályaperdületet) fogalma használatos: ez a tömegponthoz húzott helyvektor és a tömegpont lendületének vektoriális szorzata: $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \vec{r} \times m\vec{v}$ Az eredményvektor merőleges az $\vec{r}$ és $\vec{p}$ vektorok által kifeszített síkra, a nagysága pedig r·mv·sinα



Kiterjedt test saját tengely körüli pörgése esetén **sajátperdületet** is értelmezhetünk $\vec{S} = \Theta\vec{\omega}$ (tehetetlenségi nyomaték szorozva a szögsebesség vektorral.

Ezek igen hasznos fizikai mennyiségek, mert forgatónyomaték hiányában megmaradnak (az idők végezetéig).
A Nap körül keringő Földnek is van pályaperdülete, amely a Naphoz rögzített inercia-rendszerben megmarad. A tengely körüli forgásához pedig megmaradó sajátperdület tartozik.

A perdület nemcsak a klasszikus fizikában fontos, hanem a kvantummechanikában is. Először a hidrogén atom Bohr-modelljében jött be. Bohr szerint a H-atomban olyan elektronpályák lehetségesek, amelyre L=n·ħ (n=1, 2, 3, …). (Ez ekvivalens azzal az állítással, hogy a körvonalon az elektron hullám egész számszor fér el.) Később kiderült, hogy Bohr elképzelései pontosításra szorulnak, nézzük meg hogyan!

A perdület a kvantummechanikában

A kvantummechanika szerint a perdület vektor 3 komponense L_x , L_y és L_z egyidejűleg nem határozhatók meg, egy komponens föltétlenül határozatlan marad (ez is egyfajta határozatlansági reláció)

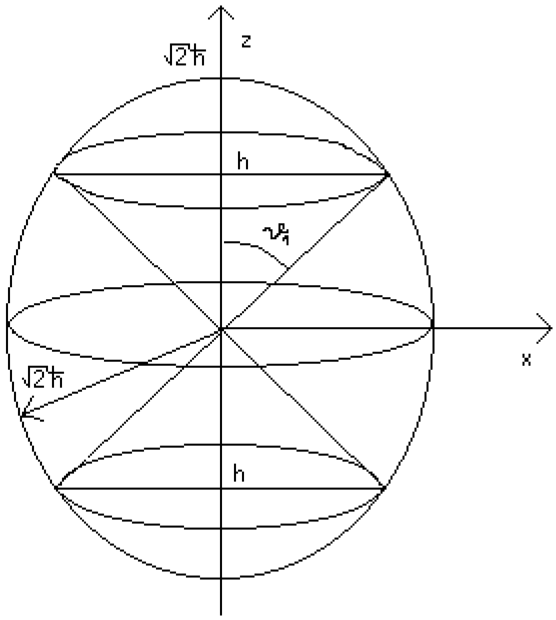
A gyakorlatban az vált be, hogy a perdület nagyságát, illetve annak a négyzetét (L^2) és valamelyik komponensét (pl.: L_z) határozzuk meg egyidejűleg, tudomásul véve, hogy L_x és L_y határozatlanok.

A kvantummechanika módszereivel meghatározhatók az egyidejűleg lehetséges L^2 és L_z sajátértékek. Az igen bonyolult számolások végeredménye:

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1)\,; \qquad l = 0,1,2,\ldots$$
$$L_z = \hbar m\,; \qquad m = -l, -l+1, \ldots, l$$

A fenti egész számokat **kvantumszám**oknak nevezzük: *l* mellékkvantumszám, *m* mágneses kvantumszám

Pl.: a.) legyen $l = 0$ ekkor $L^2 = 0$ és $L_z = 0$ egyáltalán nincs impulzus momentum



b.) legyen $l = 1$ ekkor

$$L^2 = \hbar^2 2$$

és $L_z = -\hbar$,ha $m = -1$

$L_z = 0$,ha $m = 0$

$L_z = \hbar$,ha $m = 1$.

A kapott eredményeket bal oldalt ábrázoltuk

$\sqrt{2}\hbar$ sugarú gömb amelyben

- a felső kúp alkotóvektorainak hossza $\sqrt{2}\hbar$, ennek függőleges vetülete $\hbar$, ez éppen megfelel az $L_z = \hbar$ ha $m = 1$ esetnek
- az alsó kúp alkotóvektorainak hossza $\sqrt{2}\hbar$, függőleges vetülete $-\hbar$, ez megfelel $L_z = -\hbar$ ha $m = -1$ esetnek

a középkör pedig a $L_z = 0$ ha $m = 0$ esetnek felel meg.

Következtetés:

a kitüntetett iránnyal az $\vec{L}$ impulzusvektor nem zárhat be akármilyen szöget.

Pl.: ϑ_1=?

$$\cos\vartheta_1 = \frac{L_z}{L} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{2}}{2} \quad \Rightarrow \quad \vartheta_1 = 45°$$

hasonlóan elvégezve a többi esetben is

$\vartheta = 45°$ $m = 1$

$\vartheta = 90°$ $m = 0$

$\vartheta = 135°$ $m = -1$

IRÁNYKVANTÁLÁS : tetszőlegesen felvett iránnyal a rendszer impulzusvektora nem zárhat be akármilyen szöget. (Nobel-díj a beigazolásáért)

Határozatlanság itt is van! Ha ismert az $\vec{L}$ vektor egy komponense, a többi (a másik kettő) már bizonytalan. A vektort jellemző 3 adatból (x, y, z) vagy (r, ϑ, φ) csak kettő határozható meg egyidejűleg.

Nézzük meg, hogy mi a helyzet a sajátperdülettel!

1925. Goudsmit és Uhlenbeck: *az elektron rendelkezik saját impulzusmomentummal. Ez a SPIN.* (Kezdetben azt gondolták, hogy a pörgése miatt. Ma már inkább azt gondoljuk, hogy a spin egy relativisztikus effektus (mert a relativisztikus számításokból adódik ki)

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

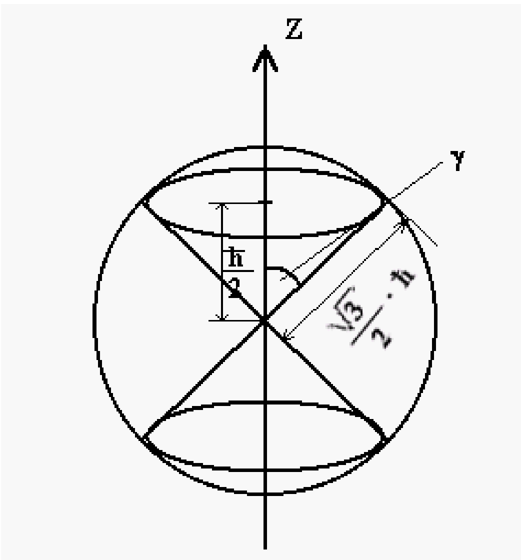
$\vec{J}$: teljes impulzusmomentum
$\vec{L}$: pálya impulzusmomentum
$\vec{S}$: spin

Az impulzusmomentumra vonatkozó összefüggések a spinre is igaznak bizonyultak, de a kvantumszámok itt feles értékűek lesznek:

$S^2 = \hbar^2 \cdot s \cdot (s+1)$; $s = \frac{1}{2}$ $\quad S_z = \hbar \cdot m_S$; $m_S = \pm\frac{1}{2}$ (tehát $m_S = \frac{1}{2}$ és $m_S = -\frac{1}{2}$ lehetséges) **m_S: SPINKVANTUMSZÁM**

$$S^2 = \hbar^2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{1}{2}+1\right) = \frac{3}{4}\hbar^2 \quad ; \qquad S = \left|\vec{S}\right| = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \hbar$$

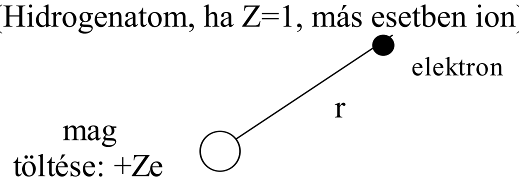
$$\cos\gamma = \frac{S_z}{S} = \left(\hbar \cdot \frac{1}{2}\right) \div \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \hbar\right) = \frac{1}{\sqrt{3}} ; \quad \gamma = \cos^{-1}\frac{\sqrt{3}}{3} = 54{,}7^{\circ}$$



A nemrelativisztikus kvantummechanika nem tud a spinről, de bevehető az elméletbe. A relativisztikus kvantumból kijön a spin léte => a spin egy relativisztikus effektus. Nem az elektron forgásából származik, hanem egy elválaszthatatlan (veleszületett) tulajdonság.

A kvantumszámok rendszere a H-atomban.

(Hidrogenatom, ha Z=1, más esetben ion)



$V(r) = -k\frac{Ze^2}{r}$ A Coulomb-kölcsönhatás konzervatív, tehát van potenciális energia, ami a vonzóerő miatt negatív. Konzervatív mezőben a teljes energia megmaradó mennyiség.
Az eddig elmondottak alapján a megmaradó mennyiségek: energia, pályaperdület (nagyság és komponens, sajátperdület. Ezt a négy fizikai mennyiséget négy kvantumszám határozza meg . n,l,m m_s

n: *Főkvantumszám:* meghatározza az E energiát.

$$E = -Z^2 \frac{E^*}{n^2}; n = 1,2,\ldots E^*=2{,}18 \text{ aJ}$$

l: *Mellékvantumszám:* meghatározza L^2-et.

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1); l = 0,1,\ldots,n-1$$

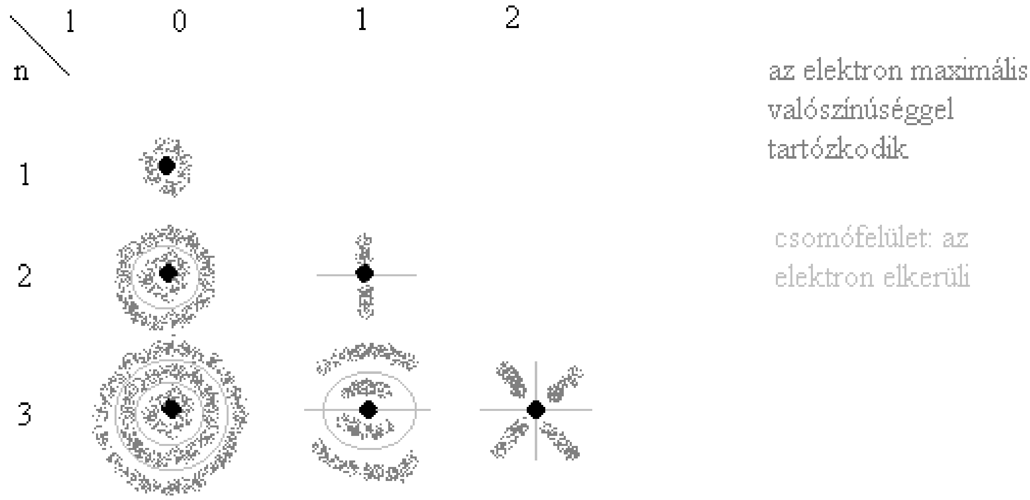
m: *Mágneses kvantumszám:* meghatározza L_z-t.

$$L_z = \hbar m; m = -l, -l+1,\ldots,0,\ldots,l$$

m: *Spinkvantumszám:* meghatározza S_z-t.

$$S_z = \hbar m_s; m_s = \pm 1/2$$

A hullámfüggvény alakja:



pl: n= 1 $\rightarrow$ l= 0 (1s állapot) $\rightarrow$ m= 0 a hidrogén alapállapotban 0 impulzusmomentummal rendelkezik.

n= 2 $\rightarrow$ l= 0 (2s állapot) $\rightarrow$ m= 0

vagy l= 1 (2p állapot) $\rightarrow$ m= -1

vagy m= 0

vagy m= 1 , ez az állapot négyszeresen degenerált!

Több elektronnal rendelkező atomokban is hasonló állapotok (pályák) valósulnak meg. Az elektronok ezeket az állapotokat tölthetik be, de egy állapotot csak egy elektron. Ez a Pauli-elv.

A **Pauli-elv** tehát kimondja, hogy egy atomban egy kvantumszám négyessel (n, l, m, m_s) csak egy elektron rendelkezhet. Tehát, ha egy atomon belül két elektront tekintünk, akkor azoknak legalább egy kvantumszáma eltér. Szokás úgy is fogalmazni, hogy ha egy térbeli állapotban (amelyet az n, l, m kvantumszámok jellemeznek) már van egy elektron, akkor oda a második elektron csak ellentétes spinnel (azaz ellentétes előjelű m_s értékkel) tud beépülni.

A Pauli-elv nemcsak elektronokra, hanem minden feles spinű részecskére is igaz.

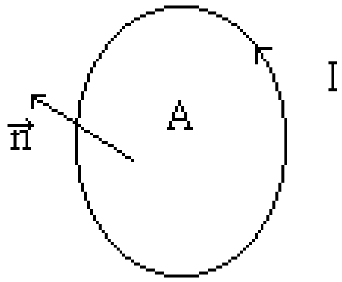
A mágneses momentum

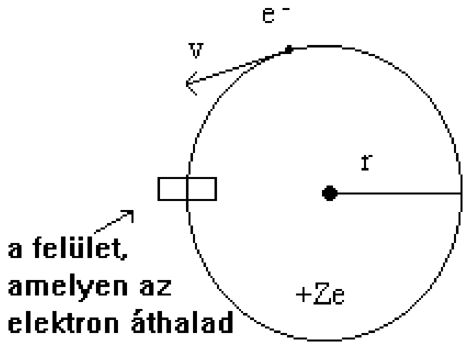
Köráram mágneses momentuma:

$\vec{m} = IA\vec{n}$ ($\vec{n}$ normálisú A területű hurokban I áram folyik

A későbbiekben $\vec{M}$ legyen a jelölés

$$I = \frac{dq}{dt} = \frac{e}{T}$$





$$T = \frac{2r\pi}{V}; A = r^2\pi$$

$$\vec{M} = \frac{eV}{2r\pi} r^2 \pi\vec{n} = \frac{eV}{2} r\vec{n}$$

$$\vec{M} = \frac{e}{2m_e} \cdot m_e V r\vec{n} = \frac{e}{2m_e}\vec{L}$$

$$M_Z = \frac{e}{2m_e} \cdot L_z; \; L_Z = \hbar \cdot m$$

$$M_Z = \frac{e\hbar}{2m_e} m; \quad m = 0;\pm1;\pm2\ldots$$

μ_B : Bohr-magneton $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ a mágneses momentum z komponensének legkisebb egysége.

$$M_Z = \mu_B m \; ; \quad m = 0;\pm1;\pm2; \quad \vec{M} = \frac{e}{2m_e} \cdot \vec{L}; \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$$

A Zeeman-effektus:

A jelenséget Zeeman vizsgálta. Kutatási eredményeiért 1902-ben Nobel-díjat kapott. Az általa elvégzett kísérlet lényege, hogy atomot erős mágneses térbe tesszük, és vizsgáljuk a mágneses mező és az atomi elektron, pontosabban a köráram mágneses momentuma közötti kölcsönhatási energiát. Fontos hogy erős legyen a mágneses mező hiszen csak így kapjuk a zeeman-effektust. Zeeman a klasszikus fizikát használta fel a jelenség vizsgálatára, mi a kvantummechanikát használjuk.

$\vec{M}$:az "atomi köráram" mágneses momentuma

$\vec{B}$:a mágneses indukcióvektor

W_m :kölcsönhatási energia a mágneses mező és a mágneses momentum között

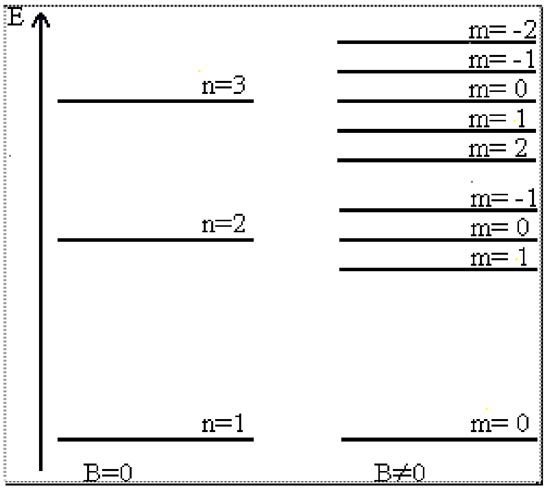
$W_m = -\vec{B}\cdot\vec{M}$

Vegyük fel a koordináta rendszert úgy hogy a z tengely a mágneses indukcióvektorral párhuzamos irányba álljon. Ekkor a következőket kapjuk:

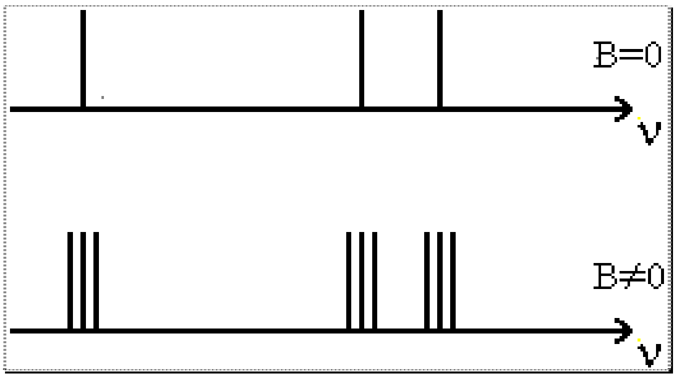
$W_m = -B \times M_z = -B \cdot \mu_B \cdot m$

Ez az energia hozzáadódik a többi energiához

Az ábrá az energiaszintek láthatóak B=0 és B≠0 esetekben. Ezeket a fenti képlet alapján kaphatjuk.



Az energiaszintek m szerint "felhasadnak". Figyeljük meg az atom spektrumát a következő ábrákon:



Ez a kísérlet már bizonyíték volt az iránykvantálásra, de ez csak közvetett bizonyíték erre a jelenségre. A közvetlen bizonyítékot a Stern-Gerlach kísérlettel találták meg.
Kérdés az hogy miért mindíg 3 felé hasad a színkép. Erre a választ a kiválasztási szabály adja,
mert a kiválasztási szabály szerint Δm csak 0 vagy csak ±1 lehet.

A spinhez tartozó mágneses momentum

A mérések szerint

$$M_S^Z = \pm\mu_B = \pm\frac{e}{2\cdot m_e}\cdot\hbar = \frac{e}{2\cdot m_e}\cdot\hbar\cdot 2\cdot m_s = \frac{e}{m_e}\cdot\hbar\cdot m_s = \frac{e}{m_e}\cdot S_z$$

$$(\pm 1 = 2\cdot m_S)$$

$$\vec{M} = \frac{e}{2\cdot m_e}\cdot\vec{L} + \frac{e}{m_e}\cdot\vec{S} \Leftarrow \quad \vec{M} \text{ és } \vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad \text{nem lesz párhuzamos}$$

$$M_Z = \frac{e}{2\cdot m_e}\cdot L_Z + \frac{e}{m_e}\cdot S_Z = \frac{e}{2\cdot m_e}\cdot(L_Z + 2\cdot S_Z)$$

tehát mágneses szempontból a spin "duplán számít".

Érdekesség:
Kvantumelektrodinamikai korrekciók miatt a valóságban az elektron mágneses momentumának Z irányú komponense nem pontosan egyezik a Bohr-magnetonnal.

A pontos érték:
$$M_S^Z = 1{,}001159652193(10)\mu_B$$

A (10) az utolsó számjegy hibáját jelenti.
A kvantumelektrodinamikai számítás a kísérleti értékkel 12 számjegyig, az utolsó előtti 9-esig megegyezik. Arra, hogy az elmélet és a kísérlet ilyen pontosan megegyezzen, valószínűleg nincs más példa.