Diagnosztikai képalkotó eljárások fizikai alapjai GEFIT303B

4. előadás: Az iránykvantálás

Ismétlő kérdések

Válasszuk ki a hamis állítást!

a) Adott fémből a kisebb hullámhosszú sugárzás nagyobb energiájú elektront vált ki
b) Adott hullámhosszúságú foton minden fémből ugyanakkora energiájú elektront vált ki
c) Adott szögben Compton szóródott foton hullámhossz változása független az anyagi minőségtől
d) Adott szögben Compton szóródott foton hullámhossz változása független a foton eredeti hullámhosszától

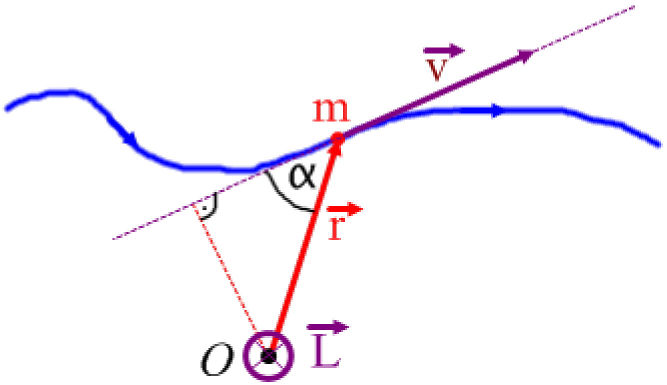
Válasszuk ki a hamis állítást!

a) Adott méretű csapdában a kisebb tömegű részecske nagyobb zérusponti energiával rendelkezik
b) Helyhez kötött részecskének abszolút zérus fokon is marad mozgási energiája
c) Adott tömegű részecske kisebb méretű csapdában a kisebb zérusponti energiával rendelkezik
d) Szabad részecske a kvantum-elmélet szerint is megáll zérus kelvin hőmérsékleten

A perdület klasszikusan

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
$S = \Theta\omega$
(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 inerciarendszerben megmarad. A tengely körüli forgásához pedig megmaradó sajátperdület tartozik.

A perdület a kvantummechanikában

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

$$L = mvr = \frac{nh}{2\pi} = n\hbar$$ (n=1, 2, 3, …). há vonás!

(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 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 perdület a kvantummechanikában/2

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:

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1) \quad ; \; l = 0,1,2,...$$

$$L_z = \hbar m \quad ; \; m = -l, -l+1, ..., l$$

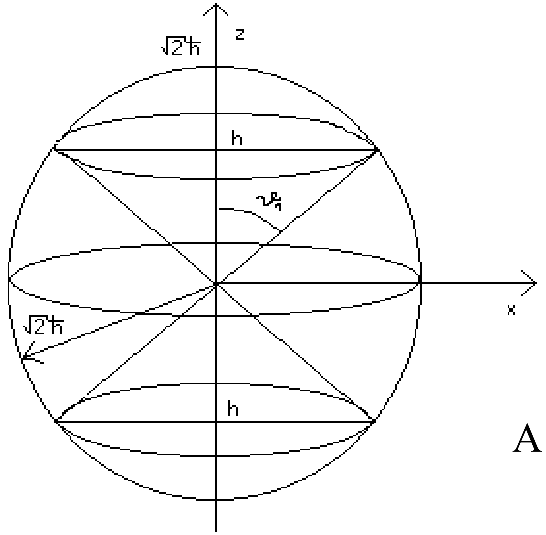
A fenti egész számokat **kvantumszám**oknak nevezzük: *l* mellékkvantumszám, *m* mágneses kvantumszám

IRÁNYKVANTÁLÁS : tetszőlegesen felvett iránnyal a rendszer perdület (impulzusmomentum) vektora 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. **Azaz a perdület vektor nem határozható meg teljes pontossággal!**

A perdület a kvantummechanikában/3

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.

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

hasonlóan elvégezve a többi esetben is

$\vartheta = 45°$ $m = 1$

$\vartheta = 90°$ $m = 0$

$\vartheta = 135°$ $m = -1$

A sajátperdület (a spin)

1925. Goudsmit és Uhlenbeck: *az elektron rendelkezik saját impulzusmomentummal*. *Ez a SPIN.* Jele: $\vec{S}$

(Kezdetben úgy gondolták, hogy a pörgése miatt. Ma már inkább úgy gondoljuk, hogy a spin egy relativisztikus effektus (mert a relativisztikus számításokból vezethető le).)

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

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

A perdületre vonatkozó összefüggések a spinre is igazak, de a kvantumszámok itt feles értékűek lesznek.

$$S^2 = \hbar^2 s \cdot (s+1) \qquad s = \frac{1}{2}$$

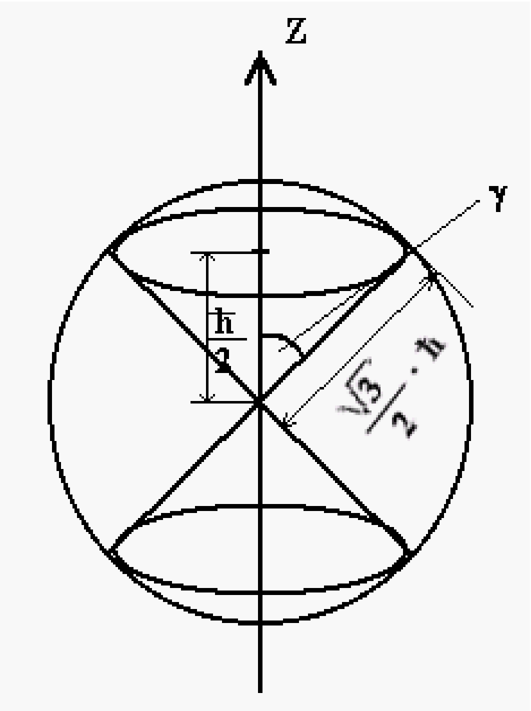
$$S^2 = \hbar^2 \cdot \frac{1}{2} \cdot (\frac{1}{2}+1) = \frac{3}{4}\hbar^2$$

$$\boxed{S_z = \hbar \cdot m_S \qquad m_S = \pm\frac{1}{2}}$$

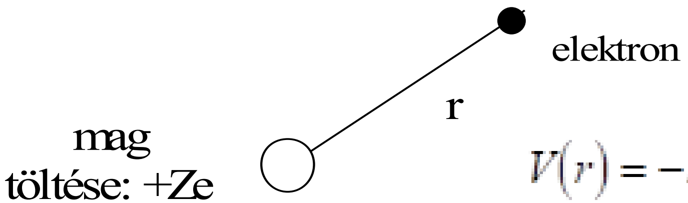
$$S = |\vec{S}| = \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \hbar$$

$$\cos\gamma = \frac{S_z}{S} = (\hbar \cdot \frac{1}{2}) \div (\frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \hbar) = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

$$\gamma = \cos^{-1}\frac{\sqrt{3}}{3} = 54{,}7^{\circ}$$



Az egyelektronos atom



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

$$V(r) = -k\frac{Ze^2}{r}$$

(Vonzó kölcsönhatás esetén a Coulomb-potenciál negatív).

Konzervatív mezőben a teljes energia megmaradó mennyiség. Az eddig elmondottak alapján a megmaradó mennyiségek: energia, pályaperdület (nagyság és z komponens), sajátperdület. **Ezt a négy fizikai mennyiséget négy kvantumszám határozza meg.**

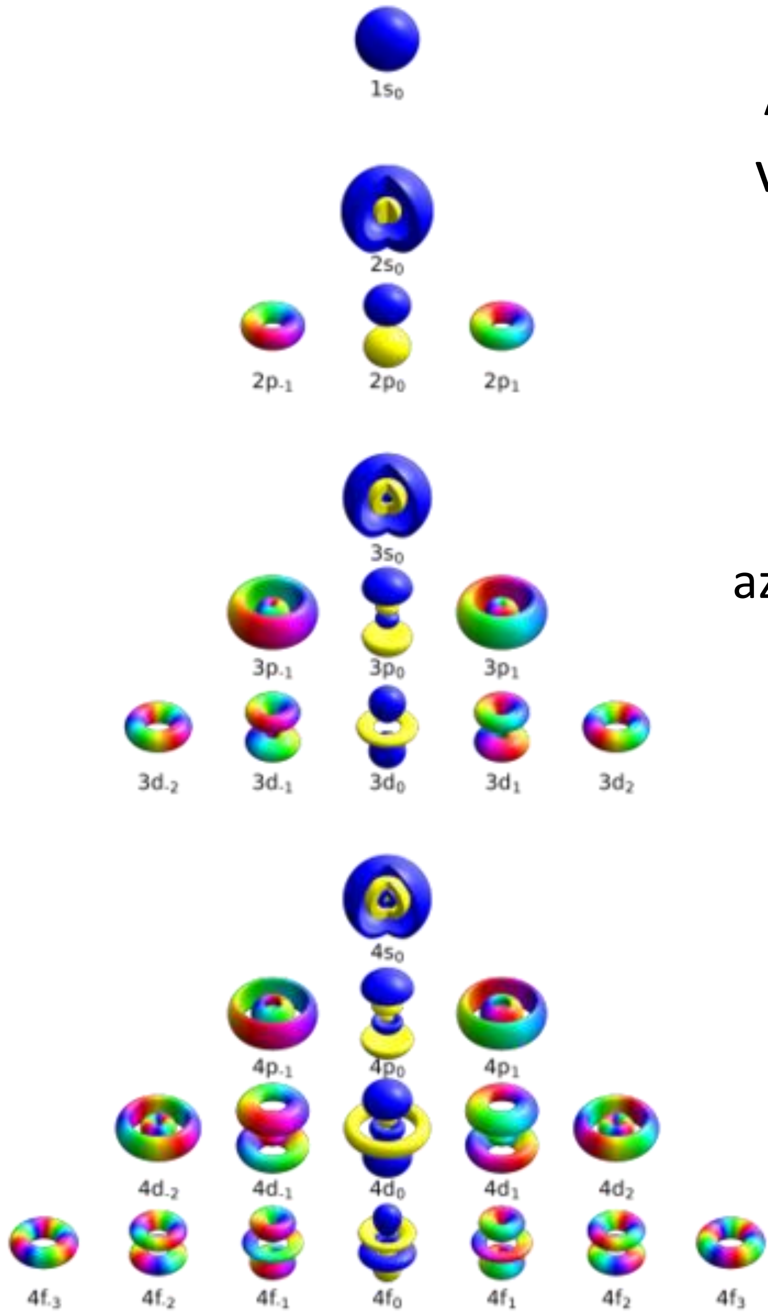
n: **Főkvantumszám**: meghatározza az energiát. $E = -Z^2\frac{E^*}{n^2}; n = 1, 2, \ldots$

l: **Mellékkvantumszám**: 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_s: **Spinkvantumszám**: meghatározza S_z-t $S_z = \hbar \cdot m_S \quad m_S = \pm\frac{1}{2}$

Megjegyzés: a spin nagyságának meghatározására nem kell kvantumszám, az mindig ugyanaz az érték.



Az atomi elektron pályák alakja: valójában az elektron állóhullám módusok alakja

Az első szám a főkvantumszám,
a betű a mellékkvantumszám
(s (l=0), p (l=1), d (l=2), f (l=3)),
az index pedig a mágneses kvantumszám

A Pauli-elv

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.

Ellenőrző kérdések

Az egyelektronos atomban az elektron pályaperdületének z-komponenséről elmondhatjuk, hogy

a) Értékét a mellékkvantumszám határozza meg
b) Értékét a mágneses kvantumszám határozza meg
c) Értéke mindig $\hbar/2$
d) Értéke mindig határozatlan

Az egyelektronos atomban az elektron az n=2 főkvantumszámú állapotban van. Jelöljük meg, hogy milyen értéket <u>nem</u> vehet fel a pályaperdület (L) és annak z-komponense (L_z)!

a) $L=0$; $L_z=0$
b) $L=\sqrt{2}\hbar$; $L_z=0$
c) $L=\sqrt{2}\hbar$; $L_z=\hbar$
d) $L=\sqrt{2}\hbar$; $L_z=2\hbar$

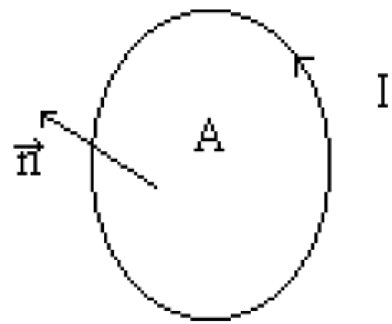
A mágneses momentum

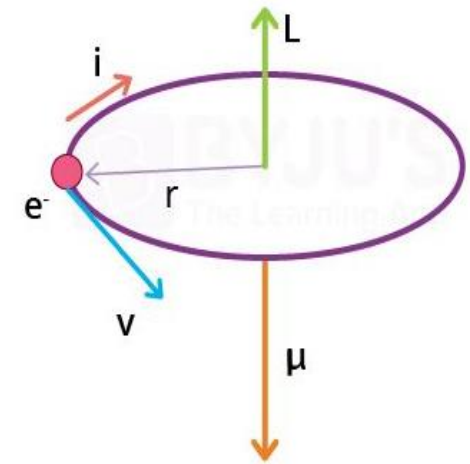
Köráram mágneses momentuma:

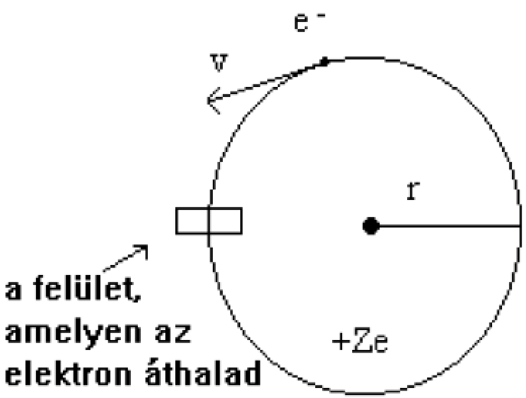
$\vec{m} = IA\vec{n}$ ($\vec{n}$ normálisú A területű hurokban I áram folyik

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

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







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

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

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

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

A klasszikus kép helyes eredményre vezet, bár – mint tudjuk – az elektron nem kering az atomban.

$$M_z = \frac{e\hbar}{2m_e} m; \quad m = 0; \pm 1; \pm 2 \ldots$$

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

A mágneses momentum/2

A spinhez tartozó mágneses momentum
A mérések szerint

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

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

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

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

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 spinhez tartozó mágneses momentum vetület is Bohr-magneton nagyságú (bár a spinvetület csak fele a pályaperdület vetület minimumának

$\mu_B = 9{,}27\cdot 10^{-24}$ J·T^{-1}
egészen pontosan
$9{,}274009994(57)\cdot 10^{-24}$
J·T^{-1}

$g_e = 2{,}0023$
a szabad elektron g faktora

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

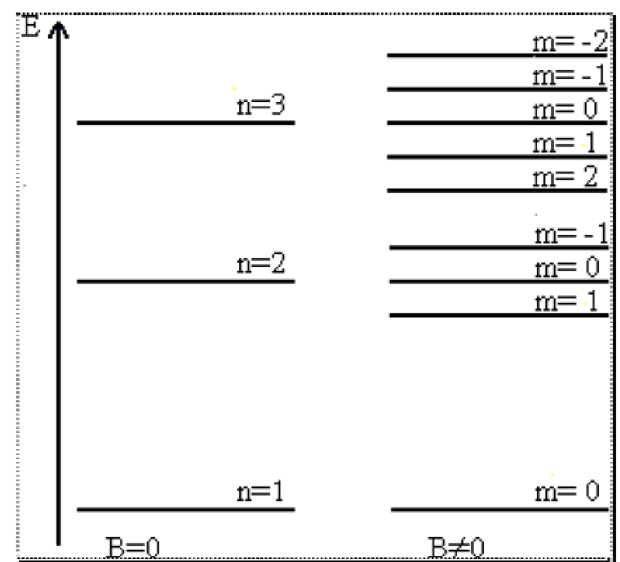
$$W_m = -\vec{B} \cdot \vec{M}$$

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

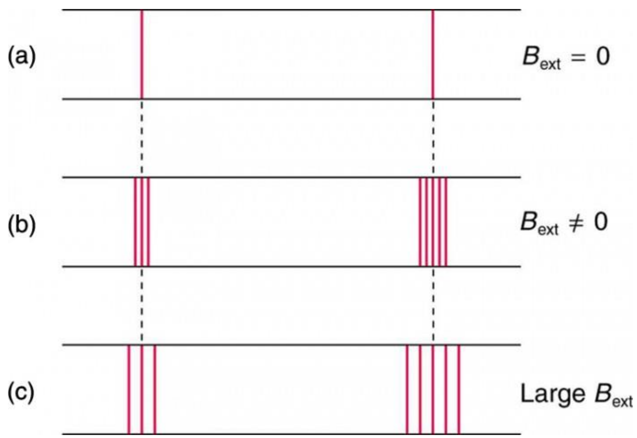
$$W_m = -B \times M_z = -B \cdot \mu_B \cdot m$$

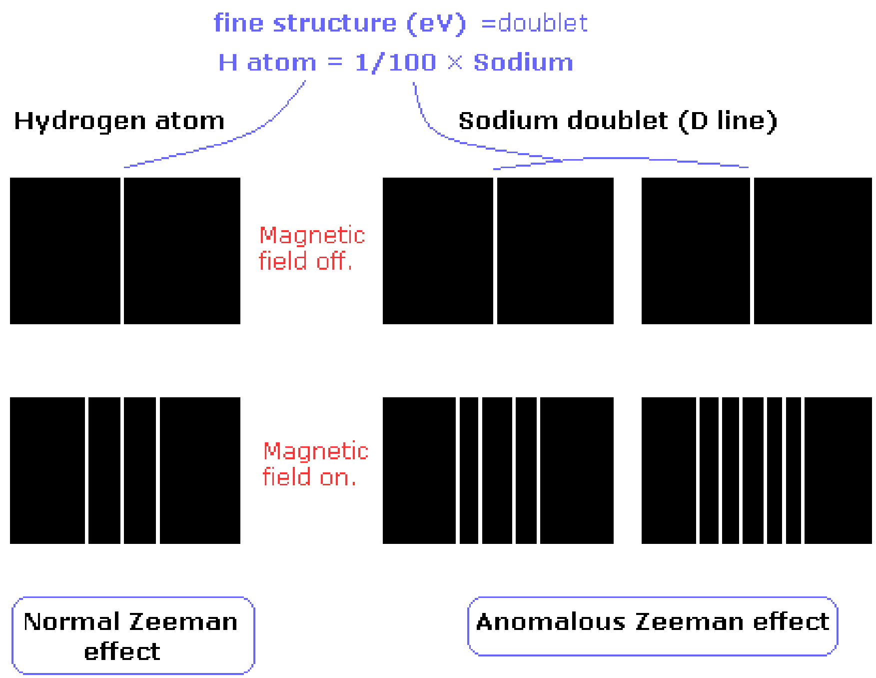
Ez az energia hozzáadódik a többi energiához

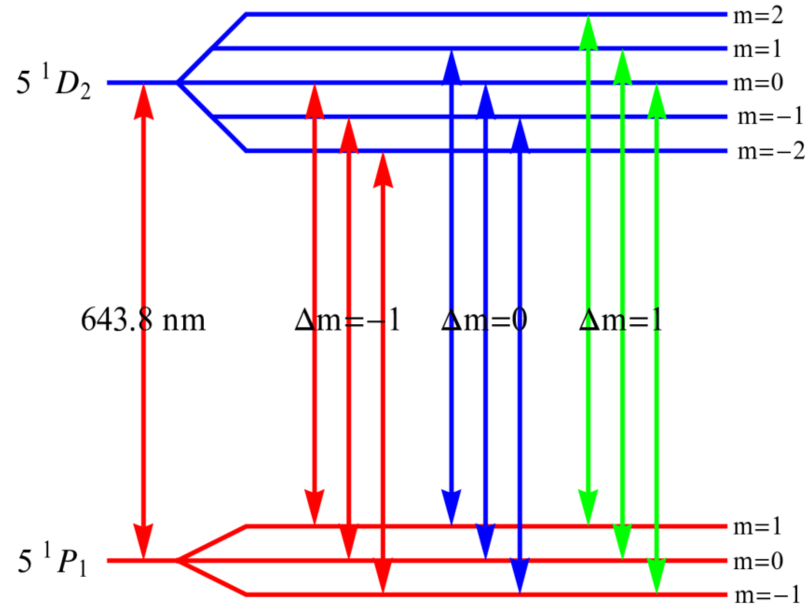
Az ábrá az energiaszintek láthatóak B=0 és B≠0 esetekben. Ezeket a fenti képlet alapján kaphatjuk.



A Zeeman-effektus/2

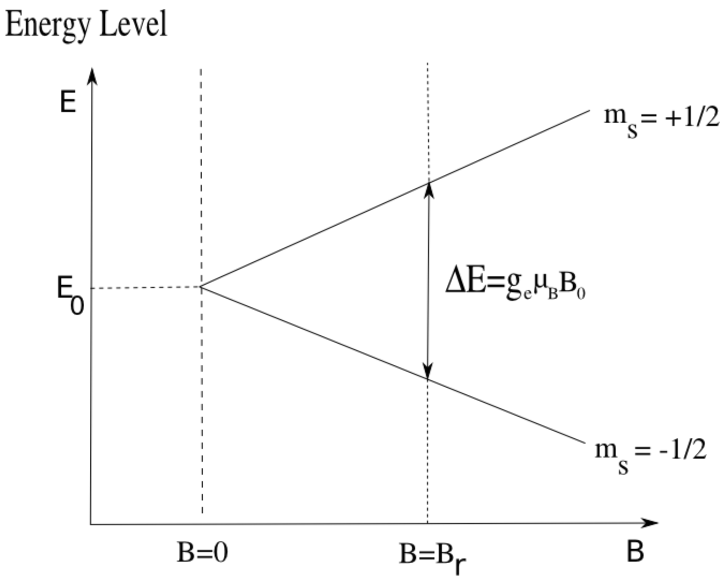


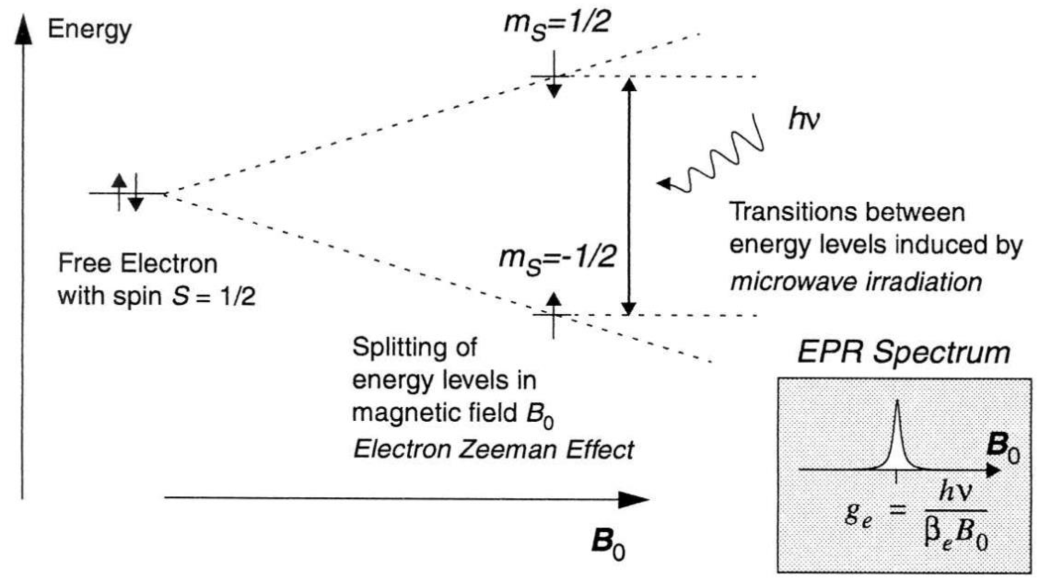




Normális Zeeman-effektusnál 3-felé hasad a spektrumvonal.
Anomális Zeeman-effektusnál még többfelé, mert a spin is bezavarhat.

A Zeeman-effektus/3





A kétféle spinálláshoz tartozó energiaszintek a mágneses tér növelésével eltávolodnak. A két állapot közötti átmenet során kibocsájtott foton az anyagi összetételről ad információt.
Electron paramagnetic resonance (EPR)
Electron spin resonance (ESR)

Ellenőrző kérdések

Válasszuk ki a hamis állítást!

a) A spinhez tartozó mágneses momentum vetület Bohr-magneton nagyságú
b) A spinvetület fele a pályaperdület vetület minimumának
c) Mágneses mezőbe helyezett atom energiaszintjei a mellékkvantumszámmal egyenlő számú szintre hasadnak
d) A felhasadás arányos a mágneses indukció nagyságával

Párosítsuk össze a kvantumszámokat az általuk meghatározott fizikai mennyiségekkel!

1) m	a, spinvetület
2) n	b, pályaperdület nagysága
3) m_s	c, teljes energia
4) l	d, pályaperdület vetülete

Megoldás: 1d, 2c, 3a, 4b