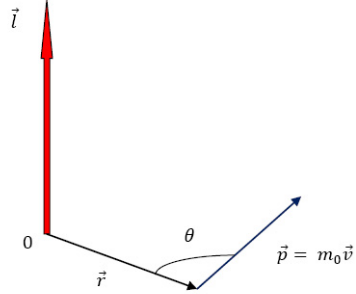


VI.
ORBITALNY DIPOL MAGNETYCZNY



Rysunek 1: Cząstka o masie m_0 poruszająca się z prędkością \vec{v} po torze o wektorze wodzącym \vec{r} posiada względem punktu 0 moment pędu $\vec{l} = m_0\vec{r} \times \vec{v}$.

1 Definicja momentu pędu

W mechanice klasycznej moment pędu cząstki definiujemy jako

$$\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} , \quad (1)$$

gdzie \mathbf{r} jest wektorem położenia cząstki, a \mathbf{p} jest jej pędem.

Cząstka posiada niezerowy moment pędu, jeżeli iloczyn wektorowy we wzorze (1) nie znika.

Moment pędu jest wektorem o składowych

$$l_x = yp_z - zp_y , \quad (2)$$

$$l_y = zp_x - xp_z , \quad (3)$$

$$l_z = xp_y - yp_x , \quad (4)$$

przy czym $\mathbf{r} = (x, y, z)$ i $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$.

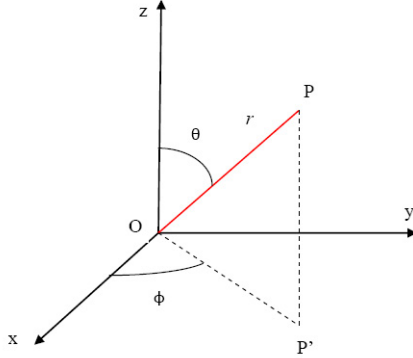
W mechanice kwantowej posługujemy się **operatorem momentu pędu** zdefiniowanym jako

$$\hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} , \quad (5)$$

gdzie $\hat{\mathbf{r}}$ i $\hat{\mathbf{p}}$ są odpowiednio operatorami położenia i pędu.

Operator położenia jest operatorem mnożenia przez składowe wektora \mathbf{r} , czyli

$$\hat{\mathbf{r}} \equiv \mathbf{r} = (x, y, z) . \quad (6)$$



Rysunek 2: Współrzędne sferyczne punktu P .

Operator pędu jest operatorem różniczkowania wyrażonym za pomocą operatora ∇

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla . \quad (7)$$

Równoważna postać operatora momentu pędu

$$\hat{\mathbf{l}} = -i\hbar\mathbf{r} \times \nabla . \quad (8)$$

Operatory składowych operatora momentu pędu (8)

$$\hat{l}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) , \quad (9)$$

$$\hat{l}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) , \quad (10)$$

$$\hat{l}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) . \quad (11)$$

2 Współrzędne sferyczne

Wyrazimy teraz operatory momentu pędu we współrzędnych sferycznych. Współrzędne kartezjańskie (x, y, z) można wyrazić we współrzędnych sferycznych (r, θ, φ) następująco:

$$x = r \sin \theta \cos \varphi ,$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi ,$$

$$z = r \cos \theta ,$$

przy czym $0 \leq r < \infty$, $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \varphi < 2\pi$.

Dokonyamy transformacji do współrzędnych sferycznych operatora z -owej składowej momentu pędu, czyli operatora \hat{l}_z . Przekształcamy pierwszą pochodną względem φ zgodnie z przepisem na obliczanie pochodnej funkcji złożonej $f(\varphi(x, y))$.

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} = \frac{\partial x}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial y} = -y \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial y} . \quad (12)$$

Z porównania (11) i (12) wynika, że

$$\hat{l}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} . \quad (13)$$

3 Równanie własne składowej momentu pędu

Ze względu na izotropowość przestrzeni wybór składowej momentu pędu jest dowolny[†]. Tradycyjnie wybieramy składową z -ową. A zatem będziemy rozwiązywać problem własny dla operatora \hat{l}_z .

[†]Jeżeli w przestrzeni działa jednorodne pole magnetyczne $\mathbf{B} = (0, 0, B)$, to jego kierunek wyznacza oś z .

Równanie własne operatora \hat{l}_z ma postać

$$\hat{l}_z \Phi = \mu \Phi , \quad (14)$$

gdzie μ jest wartością własną operatora \hat{l}_z , a $\Phi = \Phi(\varphi)$ jest jego funkcją własną.

Korzystając z wyrażenia operatora \hat{l}_z we współrzędnych sferycznych otrzymujemy

$$-i\hbar \frac{d}{d\varphi} \Phi(\varphi) = \mu \Phi(\varphi) . \quad (15)$$

Rozwiązaniem równania (15) jest funkcja własna

$$\Phi(\varphi) = C e^{i \frac{\mu}{\hbar} \varphi} , \quad (16)$$

gdzie C jest stałą normalizacji.

Żądamy, aby funkcja własna (16) była jednoznaczna, czyli

$$\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi) \quad (17)$$

Z warunku (17) wynika, że

$$\Phi(\varphi + 2\pi) = C e^{i \frac{\mu}{\hbar} (\varphi + 2\pi)} = C e^{i \frac{\mu}{\hbar} 2\pi} e^{i \frac{\mu}{\hbar} \varphi} = \Phi(\varphi) . \quad (18)$$

Z własności (18) wynika, że

$$e^{i \frac{\mu}{\hbar} 2\pi} = 1 ,$$

czyli

$$\cos \frac{2\pi\mu}{\hbar} + i \sin \frac{2\pi\mu}{\hbar} = 1 ,$$

a zatem

$$\frac{\mu}{\hbar} 2\pi = m \times 2\pi .$$

Ostatecznie

$$\frac{\mu}{\hbar} = m , \quad (19)$$

gdzie m jest liczbą całkowitą przyjmującą wartości $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Zgodnie z własnością (19) wartości własne operatora z -owej składowej momentu pędu są określone przez

$$\mu = m\hbar , \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (20)$$

Liczba m jest **magnetyczną liczbą kwantową**.

Uwaga:

- Dla cząstki w przestrzeni nie istnieje górne ograniczenie liczby kwantowej m .
- Dla elektronu w atomie istnieje maksymalna liczba kwantowa $m = m_{max}$

$$m_{max} = l ,$$

gdzie $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ jest **azymutalną liczbą kwantową**, która określa całkowity moment pędu elektronu, natomiast n jest **główną liczbą kwantową**, przyjmującą wartości $n = 1, 2, \dots$

Stałą normalizacji C obliczamy z warunku unormowania funkcji falowej (16)

$$\int_0^{2\pi} d\varphi |\Phi_m(\varphi)|^2 = 1 . \quad (21)$$

Warunek ten oznacza, że cząstka o liczbie kwantowej m na pewno znajduje się gdziekolwiek w przestrzeni.

$$|C|^2 \times 2\pi = 1 \quad \implies \quad C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

Unormowana funkcja własna operatora \hat{l}_z ma postać

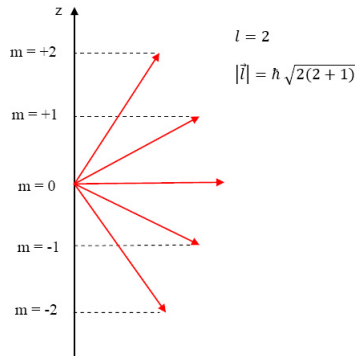
$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} . \quad (22)$$

Dla elektronu w atomie dla danej azymutalnej liczby kwantowej l magnetyczna liczba kwantowa m przyjmuje $2l + 1$ różnych wartości

$$m = -l, -l + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l - 1, l .$$

Inaczej

$$|m| \leq l .$$



Rysunek 3: Model wektorowy orbitalnego momentu pędu dla $l = 2$.

Kwantowanie przestrzenne orbitalnego momentu pędu

Dla układu kwantowego można zmierzyć równocześnie wartości własne operatorów kwadratu momentu pędu \hat{I}^2 oraz jego rzutu \hat{l}_z . W wyniku pomiaru otrzymany następujące liczby:

$$I^2 = l(l+1)\hbar^2$$

dla kwadratu momentu pędu oraz

$$l_z = m\hbar$$

dla rzutu momentu pędu na oś z .

Wyniki te można obrazowo przedstawić za pomocą tzw. **modelu wektorowego**.

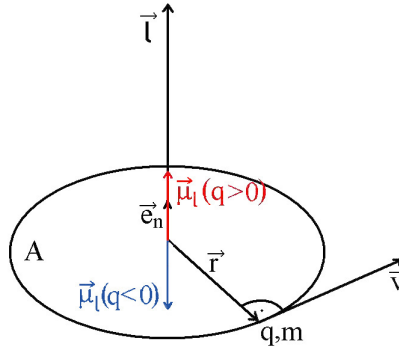
4 Magnetyczny moment dipolowy

Związek pomiędzy orbitalnym momentem pędu a magnetycznym momentem dipolowym

Jeżeli cząstka klasyczna o ładunku elektrycznym q i masie m_0 porusza się po orbicie kołowej o promieniu r , to z ruchem tym związany jest **magnetyczny moment dipolowy** μ_l .

$$\mu_l = IA\mathbf{e}_n, \quad (23)$$

gdzie $I = q/T$ jest natężeniem prądu, T okresem obiegu orbity, $A = \pi r^2$ jest polem powierzchni koła o promieniu r , a \mathbf{e}_n jest wektorem prostopadłym do



Rysunek 4: Cząstka o ładunku q i masie $m = m_0$ poruszająca się po okręgu o promieniu r z prędkością \vec{v} posiada moment pędu $\vec{l} = m_0 v r \vec{e}_n$ i związany z nim magnetyczny moment dipolowy $\vec{\mu}_l = (q/2m_0)\vec{l}$, czyli $\vec{\mu}_l \uparrow\uparrow \vec{l}$ dla $q > 0$ oraz $\vec{\mu}_l \uparrow\downarrow \vec{l}$ dla $q < 0$.

płaszczyzny orbity (zwrot wektora związany jest z obrotem regułą śruby prawoskrętnej).

Wektor μ_l nazywamy **orbitalnym magnetycznym momentem dipolowym**.

Orbitalny magnetyczny moment dipolowy wynika z ruchu cząstki o ładunku q po orbicie o promieniu r . Ruch orbitalny cząstki naładowanej prowadzi do powstania **poła magnetycznego** \mathbf{B}_l o zwrocie zgodnym ze zwrotem wektora μ_l . A zatem

$$\mathbf{B}_l \uparrow\uparrow \mu_l .$$

Obliczmy długość wektora orbitalnego magnetycznego momentu dipolowego

$$\mu_l = \frac{\pi}{T} q r^2 = \frac{1}{2} \omega q r^2 , \quad (24)$$

gdzie $\omega = 2\pi/T$ jest częstością obrotu orbity.

Długość wektora momentu pędu dla ruchu po orbicie kołowej wyraża się wzorem

$$l = p r = m_0 v r = m_0 \omega r^2 . \quad (25)$$

Wyznamy teraz związek pomiędzy momentem pędu i magnetycznym momentem dipolowym.

Ze wzorów (24) oraz (25) wynika, że pomiędzy długościami tych wektorów zachodzi następujący związek:

$$\mu_l = \frac{q}{2m_0} l . \quad (26)$$

Wektor orbitalnego momentu pędu posiada kierunek i zwrot zgodne z wektorem prostopadłym do płaszczyzny wyznaczonej przez orbitę ruchu kołowego

$$\mathbf{l} \uparrow\uparrow \mathbf{e}_n .$$

A zatem

$$\boldsymbol{\mu}_l = \frac{q}{2m_0} \mathbf{1}. \quad (27)$$

Dla elektronu ($q = -e < 0, m_0 = m_e$) otrzymujemy

$$\boldsymbol{\mu}_l^e = -\frac{e}{2m_e} \mathbf{1}. \quad (28)$$

Wzór (28) można zapisać jako

$$\boldsymbol{\mu}_l^e = \gamma_l^e \mathbf{1}, \quad (29)$$

gdzie γ_l^e jest **stosunkiem magnetomechanicznym dla elektronu**

$$\gamma_l^e = -\frac{e}{2m_e}. \quad (30)$$

Inaczej wielkość tę nazywamy **orbitalnym współczynnikiem żyromagnetycznym dla elektronu**.

W mechanice kwantowej zastępujemy wielkości fizyczne operatorami. Na podstawie związków (27) i (28) otrzymujemy odpowiednie związki pomiędzy operatorami

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_l = \frac{q}{2m_0} \hat{\mathbf{1}} \quad (31)$$

dla dowolnej cząstki o ładunku q i masie m_0 oraz

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_l^e = -\frac{e}{2m_e} \hat{\mathbf{1}} \quad (32)$$

dla elektronu.

5 Oddziaływanie z polem magnetycznym

Cząstka o orbitalnym magnetycznym momencie dipolowym $\boldsymbol{\mu}_l$ oddziałuje z zewnętrznym polem magnetycznym \mathbf{B} . Oddziaływanie to prowadzi do skierowania dipola magnetycznego cząstki zgodnie z polem \mathbf{B} .

\Rightarrow **analogia do ustawienia igły magnetycznej kompasu zgodnie z ziemskim polem magnetycznym**

Operator energii potencjalnej oddziaływania orbitalnego momentu magnetycznego z zewnętrznym polem magnetycznym wyraża się wzorem

$$\Delta \hat{U}_l = -\hat{\boldsymbol{\mu}}_l \cdot \mathbf{B}. \quad (33)$$

Inna postać wzoru (33)

$$\Delta \hat{U}_l = -\hat{\mu}_l B \cos \theta, \quad (34)$$

gdzie θ jest kątem pomiędzy wektorami $\hat{\boldsymbol{\mu}}_l$ oraz \mathbf{B} .

Jeżeli $\theta = 0$, to $\cos \theta = +1 \implies$

$\Delta \hat{U}_l = -\hat{\mu}_l B \implies$ minimalna energia oddziaływania.

Jeżeli $\theta = \pi$, to $\cos \theta = -1 \implies$

$\Delta \hat{U}_l = +\hat{\mu}_l B \implies$ maksymalna energia oddziaływania.

Jeżeli wybierzemy oś z zgodnie z kierunkiem jednorodnego pola magnetycznego $\mathbf{B} = (0, 0, B)$, to

$$\Delta \hat{U}_l = -\hat{\mu}_z B, \quad (35)$$

gdzie $\hat{\mu}_z$ jest operatorem z -owej składowej magnetycznego momentu dipolowego.

Rozważmy elektron w stanie o określonej wartości z -owej składowej orbitalnego momentu pędu. Zgodnie ze wzorem (32)

$$\Delta \hat{U}_l = \frac{eB}{2m_e} \hat{l}_z. \quad (36)$$

Wynikiem działania operatora (36) na stan własny operatora \hat{l}_z odpowiadający wartości własnej $m\hbar$ jest energia

$$E_m = \frac{eBm\hbar}{2m_e}. \quad (37)$$

Wielkość

$$\omega_c = \frac{eB}{2m_e}$$

jest **częstotliwością cyklotronową** elektronu. Ostatecznie

$$E_m = m\hbar\omega_c. \quad (38)$$

Wzór (38) wyraża dodatkową energię, jaką posiada elektron w stanie o magnetycznej liczbie kwantowej m w zewnętrznym polu magnetycznym B .

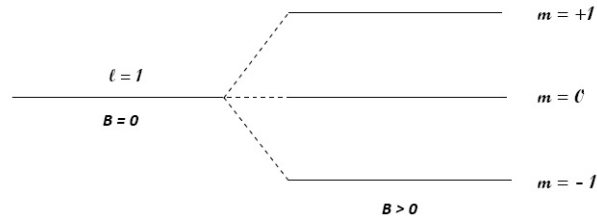
Wnioski

- Energia elektronu w zewnętrznym polu magnetycznym jest **minimalna**, jeżeli wektor orbitalnego momentu pędu ustawiony jest **antyrównolegle** względem zewnętrznego pola magnetycznego (ze względu na ujemny znak ładunku elektronu), natomiast wektor magnetycznego momentu dipolowego ustawiony jest **równolegle** do zewnętrznego pola magnetycznego (tak jak igła magnetyczna).
- Wzór (38) pokazuje, że energia elektronu w polu magnetycznym jest **skwantowana** zgodnie z wartościami magnetycznej liczby kwantowej m , czyli

$$E_m = 0, \pm\hbar\omega_c, \pm 2\hbar\omega_c, \dots$$

Jeżeli rozważymy dwa stany kwantowe odpowiadające wartościom własnym z -owej składowej momentu pędu m_1 i m_2 , czyli

$$\Delta m = m_1 - m_2,$$



Rysunek 5: Rozszczepienie poziomu energetycznego odpowiadającego $l = 1$ w zewnętrznym polu magnetycznym B .

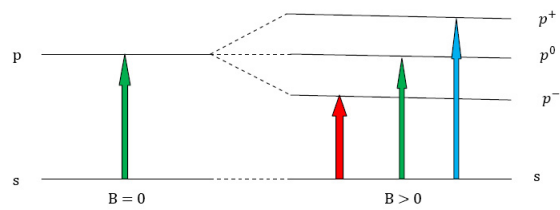
to różnica energii tych stanów

$$\Delta E = \Delta m \hbar \omega_c . \quad (39)$$

Przejścia o energii ΔE obserwowane dla atomów w polu magnetycznym to tzw. **normalny efekt Zeemana**.

6 Zastosowania

- klasyfikacja stanów kwantowych atomu (notacja spektroskopowa): **stany o $l = 0$ nazywamy stanami s, stany o $l = 1$ – stanami p, stany o $l = 2$ – stanami d, a stany o $l = 3$ – stanami f**, ponadto stosujemy następujące oznaczenia: **p^0 dla $m = 0$, p^\pm dla $m = \pm 1$** , itd.
- identyfikacja linii widmowych atomów i molekuł w polu magnetycznym (spektroskopia atomowa i molekularna w polu magnetycznym)
- identyfikacja linii widmowych elektronów w ciałach stałych w polu magnetycznym
- **Elektronowy Paramagnetyczny Rezonans (EPR)**, którego podstawą jest normalny efekt Zeemana



Rysunek 6: Normalny efekt Zeemana: przejścia $s \rightarrow p$.