

Энергия деңгейлерінің және спектрлік сызықтардың нәзік түзілісі

- *Электрон спині. Штерн және Герлах тәжірибелері*
- *Спин-орбиталық әсерлесу*
- *Энергетикалық деңгейлердің негізгі құрылымына*

*релятив-
тік түзету*

- *Деңгейлердің ләмбтік ығысуы*

1. Электрон спині. Сілтілік металл атомдарының спектрін ажыратқыштық қабілеті жоғары құралдармен зерттегенде бұлардың сызықтары күрделі екендігі, әрқайсысы қос сызықтан (дублеттер) тұратындығы, яғни бұлардың **нәзік түзілісі** анықталды. Спектрлік сызықтардың нәзік түзілісі, яғни бұлардың жіктелуі энергетикалық деңгейлердің жіктелу салдарынан болады. Осы құбылысты түсіндіру үшін Уленбек және Гаудсмит (1925 ж.) электронның **спин** деп аталған меншікті импульс моменті және онымен байланысқан магниттік моменті болады деген гипотеза ұсынды. Кейіннен бұл гипотеза басқа да бір қатар эксперимент деректерімен сенімді расталды.

Спин - маңызды кванттық шама, оның классикалық бейнесі жоқ. Алғашында ұйғарылғандай, спин электронның өз өсінен айналуынан пайда болмайды. Спин - электронның заряды, массасы сияқты, оның ішкі қасиетін сипаттайды. Электрон спині кванттық теорияның жалпы заңдары бойынша анықталады. Электронның спиндік импульс моментінің шамасы спиндік S кванттық сан арқылы мына формуламен өрнектеледі:

$$L_s = \hbar\sqrt{s(s+1)}, \quad (s=1/2). \quad (1)$$

Z өсі бойымен бағытталған магнит өрісі бағытына электронның спиндік моментінің L_{sz} проекциясы m_s спиндік кванттық санымен анықталады:

$$L_{sz} = \hbar m_s = \pm \frac{1}{2} \hbar. \quad (s=1/2, m_s = +\frac{1}{2} \text{ және } -\frac{1}{2}). \quad (2)$$

Электронның спиніне байланысты гиромангниттік қатынас оның орбиталық қозғалысымен байланысты гиромангниттік қатынастан 2 есе үлкен. Осыдан электронның μ_s спиндік магниттік моменті мен оның L_s спиндік импульс моменті арасындағы байланыс алынады:

$$\mu_s = \frac{e}{m} L_s. \quad (3)$$

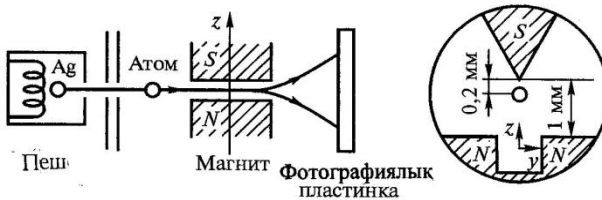
Сонымен μ_s -тің z өсіне мүмкін болатын проекция мәндері

$$\mu_{sz} = \pm \frac{e\hbar}{2m} = \pm \mu_A \quad (4)$$

Бор магнетонына тең болады.

Штерн және Герлах тәжірибелері. Атомдардың магниттік моменттерінің болатындығы және олардың квантталуы Штерн және Герлах тәжірибелерінде дәлелденген (1922 ж.). Бұлардың тәжірибелерінде вакуумдық пештен алынған бейтарап күміс атомдарының жіңішке шоғы күшті, аса бертекті емес магнит өрісі арқылы өткізілген (1-сурет). Өрістің аса біртекті еместігі электромагниттің N және S полюстік ұштықтарының арнайы пішіні жәрдемімен алынған. Магнит өрісінен өткеннен кейін атомдар шоғы фотопластинкаға түсіп онда із қалдырған. Егер атомдардың магниттік моменті болса, онда оларға магнит өрісінде әрекет ететін күштің негізгі құраушысы

$$F_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad (5)$$



1-сурет

магниттік моменттің z-құраушысына және магнит өрісінің $\frac{\partial B_z}{\partial z}$ біртекті еместігіне пропорционал болады (B - магнит өрісінің индукциясы).

Магнит өрісі жоқта фотопластинкадағы шоқтың ізі бір жолақ түрінде болған ($Z=0$). Магнит өрісі қосылғанда шоқтың жіктелуі байқалған. Бұл (5) формуладағы магниттік моменттің μ_z проекциясының квантталу салдары: μ_z тек бірнеше дискретті мәндер қабылдай алады. Ал сутегі немесе күміс атомдарының шоғы екі құраушыға жіктелген. Мұны валенттік электронның

магниттік моменті өріс қосылғанда модулі бойынша бірдей, ал таңбалары бойынша қарама – қарсы екі мән қабылдай алатынымен ғана түсіндіруге болады [(2) формула].

Осы нәтиженің «ақылға сыймайтындығы» күмістің, сілтілік металдардың және сутегінің қоздырылмаған атомдары S – күйде ($l=0$) болатындығымен байланысты. Осы күйде L_l импульс моменті нөлге тең. Электронның орбиталық қозғалысымен байланысты магниттік моменті механикалық моментке пропорционал, сондықтан ол да нөлге тең болады да, магнит өрісі негізгі күйде тұрған атомдардың қозғалысына ешқандай ықпал етпеуі тиіс, яғни жіктелу болмауы тиіс.

Сонымен, Штерн-Герлах тәжірибелерінің нәтижелерінен мынадай қорытынды шығады: Периодтық жүйенің s -күйде ($l=0$) тұрған бірінші топ атомдары шоғының магнит өрісінде екі құраушыға жіктелуі валенттік электронның спиндік магниттік моментінің екі мүмкін бағдарлануымен түсіндіріледі. Бұл спектроскопиялық деректерден спин жайындағы қорытындымен жақсы үйлеседі [(2) және (4) өрнектерін қараңыз].

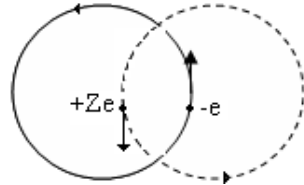
2. Спин-орбиталық әсерлесу. Бұған дейін атом энергиясына электрон спинінің ықпалы ескерілмеді. Спиннің болуы бірэлектронды атомдар үшін энергия деңгейлерінің нәзік түзілісін және осы деңгейлер арасында

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\hbar^2\epsilon_0^2} \left(\frac{z}{n}\right)^2 = 2\pi\hbar cR \left(\frac{z}{n}\right)^2 \quad (6)$$

негізгі формулаға сәйкес кванттық ауысулар болғанда алынатын спектрлік сызықтардың нәзік түзілісін туғызады.

Спин-орбиталық әсерлесудің мәнісін атомның модельдік көріністері негізінде түсіндіруге болады. Электронның ядроны айнала қозғалысынан электронның \vec{L}_e орбиталық импульс моменті және онымен байланысқан $\vec{\mu}_e$ орбиталық магниттік моменті пайда болатындығы белгілі. Екінші жағынан электрон \vec{L}_s спиндік моментке және онымен байланысқан $\vec{\mu}_s$ спиндік магниттік моментке ие. $\vec{\mu}_e$ мен $\vec{\mu}_s$ моменттері арасында магниттік әсерлесу пайда болады және ол \vec{L}_e және \vec{L}_s векторларының өзара бағдарлануына тәуелді. Осы әсерлесу **спин-орбиталық әсерлесу** деп аталады.

Электронның орбиталық қозғалысы атом ішіндегі орбиталық магнит өрістің пайда болуына себепші болады. Шынында да, электрон тыныштықта болатын, ал ядро электронды айнала дөңгелек орбита бойымен қозғалатын координаттар жүйесіне көшейік (2-сурет).



2-сурет

$\vec{\mu}$ магниттік моменті бар бөлшекті \vec{B} магнит өрісіне орналастырғанда, ол $\Delta E = -(\vec{\mu}\vec{B})$ қосымша энергия қабылдайтындығы электродинамика курсынан белгілі. ΔE энергияны $\vec{\mu}_s$ магниттік моментке ие және $\vec{B}_{эф}$ магнит өрісінде тұрған электрон үшін есептейік:

$$\Delta E = -(\vec{\mu}_s \vec{B}_{эф}) = -\mu_{sZ} B_{эф} = \pm \mu_B B_{эф}. \quad (7)$$

Электронның спиндік магниттік моментінің орбиталық магнит өрісіндегі бағдарлануы мынандай: оның осы өріс бағытына μ_{sZ} проекциясы $+\mu_B$ және $-\mu_B$ екі мән қабылдайды. Демек, \vec{L}_s спиннің $\vec{B}_{эф}$ өріс бағытына L_{sZ} проекциясы да $+1/2$ және $-1/2$ екі мән қабылдайды (өйткені $L_{sZ} = \hbar m_s = \pm \frac{1}{2} \hbar$, $m_s = \pm \frac{1}{2}$). Спиннің осы екі бағдарлануына ΔE қосымша энергияның әр түрлі екі мәні сәйкес келеді.

Спин-орбиталық әсерлесу нәтижесінде \vec{L}_ℓ және \vec{L}_s моменттер қосылып импульстың толық моментін құрайды:

$$\vec{L}_j = \vec{L}_\ell + \vec{L}_s.$$

\vec{L}_j моментінің квадраты және оның \vec{L}_{jZ} проекциясы былай квантталады

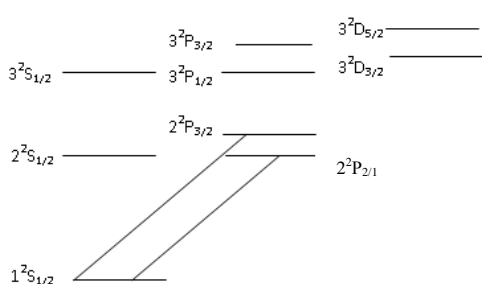
$$L_j^2 = \hbar^2 j(j+1), \quad L_{jZ} = \hbar m_j \quad (m_j = j, j-1, \dots, -j), \quad (8)$$

мұндағы j және m_j - ішкі және толық магниттік кванттық сандар.

Ішкі кванттық сан, $l \geq 1$ болғанда, $j_1 = l + 1/2$ және $j_2 = l - 1/2$

екі мән, ал $l = 0$ тең болғанда $j = s = \frac{1}{2}$ бір мән қабылдайды.

Демек, сутегі атомы және сутегі тәрізді иондардың s -деңгейлерінен басқа барлық энергия деңгейлері, спин-орбиталық әсерлесу нәтижесінде екі деңгейге жіктелуі тиіс (дублеттік жіктелу). Спин-орбиталық әсерлесу салдарынан берілген n энергия деңгейлерінің деңгей-шелерге жіктелуі **деңгейлердің нәзік**



3-сурет

түзілісі деп аталады (3-сурет). s -деңгейлердің жіктелмеуі физикалық тұрғыдан түсінікті: $l=0$ болғанда орбиталық магнит өрісі түзілмейді. Бірэлектронды атомның энергетикалық деңгейлерінің белгіленуі:

$$1^2S_{1/2} \quad (n=1, l=0, j=1/2), \quad 2^2S_{1/2} \quad (n=2, l=0,$$

$j=1/2),$

$$2^2P_{1/2} \quad (n=2, l=1, j=1/2), \quad 2^2P_{3/2} \quad (n=2, l=1, j=3/2) \text{ және т.т.}$$

3. Энергетикалық деңгейлердің негізгі құрылымына релятивтік түзету

Бірэлектронды атомның энергиясы релятивтік теорияда мына формуламен өрнектеледі

$$E = -2\pi\hbar cR \left(\frac{Z}{n}\right)^2 \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right]. \quad (9)$$

Бұл қатынас заряды Ze ядроның кулондық өрісіндегі электрон үшін жазылған Дирак теңдеуін шешкенде алынған. (9) формула Шредингер теңдеуі шешімінен шығатын осыған ұқсас (6) формуладан екінші мүшесімен өзгеше:

$$\Delta E_{nj} = -2\pi\hbar cR \left(\frac{Z}{n}\right)^2 \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right). \quad (10)$$

(10) формула релятивтік болып табылады. Сонымен, ΔE_{nj} - энергия энергетикалық деңгейлердің негізгі құрылымына релятивтік түзету болып табылады.

(10) өрнектен ΔE_{nj} -дің n және j кванттық сандарына тәуелді, бірақ l кванттық санына тәуелсіз екендігі көрінеді.

Сонымен, Дирак теориясы бойынша бірэлектронды атомның n және j -лері бірдей, бірақ l -дің айырмашылығы бірге тең деңгейлері дәлдеседі.

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = \frac{1}{137} \text{ - нәзік түзіліс тұрақтысы.}$$

$n = const$ болғанда $j+1$ және j энергия деңгейлерінің арақашықтығы (9)–ға сәйкес мынаған тең (см^{-1}):

$$\Delta E_{j,j+1} = \frac{E_{n,j+1} - E_{n,j}}{\hbar c} = \frac{R\alpha^2 Z^4}{n^3} \frac{1}{(j+1/2)(j+3/2)}. \quad (11)$$

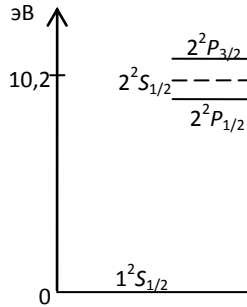
Деңгейлердің нәзік түзілісі бұларға сәйкес спектрлік сызықтардың нәзік түзілісіне себепші болады.

(11) формулаға сәйкес $\Delta E_{j,j+1} \sim \frac{1}{n^3}$, сондықтан тиісті нәзік

жіктелген деңгейлерінің аралықтары n өскенде тез кемиді. Екінші жағынан $\Delta E \sim Z^4$, сондықтан осы аралықтар Z артқанда тез өседі. Мысалы, бірдей n жағдайында жіктелген деңгейлердің арақашықтығы Н-қа қарағанда He^+ -де 16 есе, ал Be^{3+} -де 256 есе үлкен.

4. Лэмбтік ығысу. Лэмб және Ризерфорд Дирак теориясы бойынша сутегі атомындағы дәлдесетін j -лері бірдей энергия деңгейлері [3-сурет, (9) формула] шындығында бір-біріне қатысты ығысқан, яғни $2^2S_{1/2}$ және $2^2P_{1/2}$ күйлеріне әр түрлі энергия мәндері сәйкес келетіндігін тәжірибеде көрсетті (4-сурет). $2^2S_{1/2}$ деңгейінің $2^2P_{1/2}$ деңгейіне қатысты ығысуын **лэмбтік ығысу** деп атайды. $2^2P_{3/2}$ және $2^2P_{1/2}$ деңгейшелері арасындағы айырмаға $11 \cdot 10^9 \text{ Гц} = 11 \text{ ГГц}$ жиілік сәйкес келеді (энергия-шамамен $4,5 \cdot 10^{-5} \text{ эВ}$, толқын ұзындық – $2,74 \text{ см}$). Бұл – радиожілік ауқымы. Лэмбтік ығысу 1 ГГц жиілікке ($0,0359 \text{ см}^{-1}$ толқындық санға) сәйкес келеді.

Лэмбтік ығысудың себебі электронның флукуациялық электромагниттік өріспен (кванттық электродинамикада вакуумның флукуациясы деп аталады) әсерлесуі болып табылады.



4-сурет

Сұрақтар

1. Спин деген не? Спин неге бөлшектің классикалық қасиеті емес? s және m_s кванттық сандары нені анықтайды?
2. Спин-орбиталық әсерлесу деген не? Әсерлесу энергиясы қандай формуламен өрнектеледі?
3. Спин-орбиталық әсерлесуді ескергенде спектрлік сызықтардың нәзік түзілісі қалай пайда болады?
4. Сутегі атомының энергетикалық деңгейлер схемасын нәзік түзілісін ескеріп сызыңыз.
5. Спин-орбиталық әсерлесу себебінен сутегі атомында нәзік жіктелу энергиясының реттік шамасын бағалаңыз.
6. Сутегі тәрізді атом үшін $j_1 = \ell + 1/2$ және $j_2 = \ell - 1/2$ энергия деңгейлерінің ара қашықтығын анықтаңыз.