

## Атомның магниттік қасиеттері.

### Атомның магниттік моменті

• **Орбиталық магниттік момент.** Атомның  $L$  механикалық моментімен  $\mu$  магниттік момент байланысқан болады. Сонда  $L$  және  $\mu$  шамалары бір-бірінен тұрақты көбейткішпен ғана өзгеше болатындықтан, бұлардың қасиеттері ұқсас: магниттік және механикалық моменттер бірдей ережелер бойынша квантталады.

Стационарлық күйде тек  $\mu_L$  магниттік моменті модулінің және оның проекцияларының біреуінің кезкелген  $z$  өсіне проекциясының нақты мәндері болады. Атомның  $L_L$  орбиталық механикалық моменті және оның  $z$  өсіне  $L_{Lz}$  проекциясы

$$L_L = \hbar\sqrt{L(L+1)}, L_{Lz} = \hbar m_L, \quad (1.4.1)$$

Атомның орбиталық магниттік моменті және оның  $z$  өсіне проекциясы

$$\mu_L = -\mu_B \sqrt{L(L+1)}, L = 0, 1, 2, \dots \quad (1.4.2)$$

$$\mu_{Lz} = \mu_B m_L, m_L = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm L \quad (1.4.3)$$

• Спиндік магниттік момент және оның  $z$  өсіне проекциясы былай анықталады:

$$\mu_S = -2\mu_B \sqrt{S(S+1)}, \quad (1.4.4)$$

$$\mu_{Sz} = -2\mu_B m_S, m_S = S, S-1, \dots, -S, \quad (1.4.5)$$

мұндағы  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$  - Бор магнетоны.

$S=1/2$  болғанда (бір электрон жағдайы)  $m_S = +1/2$  және  $-1/2$ .

• Атомның толық магниттік моменті және оның  $z$  өсіне проекциясы

$$\mu = -\mu_A g \sqrt{J(J+1)}, J = L+S, L+S-1, \dots, |L-S| \quad (1.4.6)$$

$$\mu_z = -\mu_B g m_J, m_J = J, J-1, \dots, -J \quad (1.4.7)$$

мұндағы  $g$ -Ланде факторы (көбейткіші)

$$g = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} \quad (1.4.8)$$

### Магнит өрісінің атомға әсері

• **Зееман эффекті:** Магнит өрісінде атомдардың энергетикалық деңгейлерінің жіктелуінен спектрлік сызықтардың жіктелуі.

Сызықтардың жіктелуі энергетикалық деңгейлерлердің жіктелуімен байланысты, өйткені магниттік моменті бар атом магнит өрісінде мынадай қосымша энергия қабылдайды

$$\Delta E = -(\vec{\mu}\vec{B}) = -\mu_z B = \mu_B g B m_J, \quad (1.4.9)$$

мұндағы  $\mu_z \equiv \mu_B$ -атомның толық магниттік моментінің  $\vec{B}$  өріс бағытына проекциясы.

(1.4.7) формуланы ескеріп, әрбір деңгейшенің энергиясы үшін өрнекті жазамыз

$$E = E_0 + \Delta E = E_0 + \mu_A g B m_J, m_J = J, J-1, \dots, -J, \quad (1.4.10)$$

мұндағы  $E_0$ -магнит өрісі жоқ жағдайдағы деңгейдің энергиясы.

Осыдан кванттық саны  $J$  деңгейдің магнит өрісінде бір-бірінен бірдей қашықтықта орналасқан  $2J+1$  деңгейшелерге жіктелетіндігі келіп шығады; және жіктелу шамасы  $g$  Ланде көбейткішінен тәуелді болады, яғни көрші деңгейшелердің  $\delta E$  аралығы  $g$ -ға пропорционал:  $\delta E \sim g$  болады. Сонымен, магнит өрісі деңгейлерді жіктеу нәтижесінде  $m_J$  бойынша азғындалуды жояды.

Әр түрлі деңгейлерге жататын деңгейшелер арасында  $m_J$  кванттық саны үшін мына сұрыптау ережелері

$$\Delta m_J = 0, \pm 1 \quad (1.4.11)$$

орындалатын кванттық ауысулар ғана мүмкін болады.  $\Delta m_j = 0$ -ге сәйкес құраушылар  $\pi$ -, ал  $\Delta m_j = \pm 1$ -ге сәйкес құраушылар  $\sigma$ -құраушылар деп аталады. Магнит өрісіне перпендикуляр бақылағанда  $\pi$ -де  $\sigma$ -да құраушылар көрінеді. Магнит өрісі бойымен бақылағанда  $\sigma$ -құраушылар ғана көрінеді.

Жиілігі  $\omega_0$  спектрлік сызықтың зеемандық құраушыларының  $\omega$  жиілігі мына формуламен анықталады

$$\omega = \frac{E_2 + \Delta E_2}{\hbar} - \frac{E_1 + \Delta E_1}{\hbar} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} + \frac{\Delta E_2 - \Delta E_1}{\hbar} = \omega_0 + \Delta\omega.$$

(1.4.10) өрнегіне сәйкес, ығыспаған сызыққа қатысты магнит өрісінде  $\Delta\omega$ -зеемандық ығысу:

$$\Delta\omega = (m_{j2}g_2 - m_{j1}g_1)\delta\omega_0, \quad (1.4.12)$$

мұндағы  $\delta\omega_0 = \mu_B B / \hbar$  шамасын Лоренцтік ығысу деп атайды.

- **Қарапайым Зеeman эффекті** жағдайында спектрлік сызық магнит өрісінде үш құраушыға жіктеледі. Қарапайым эффект нәзік түзілісі жоқ спектрлік сызықтарға тән. Осындай сызықтар синглеттік деңгейлер ( $S=0, J=1, m_j=m_L, g=1$ ) арасындағы кванттық ауысулардан пайда болады. Сондықтан (1.4.12) формула мына түрге келеді

$$\Delta\omega = \delta\omega_0 \cdot \Delta m_L, \quad (1.4.13)$$

мұндағы  $\Delta m_L = 0, \pm 1$ , яни шынында үш құраушы пайда болады, бұлардың зеемандық ығысуы

$$\Delta\omega = \delta\omega_0, 0, -\delta\omega_0. \quad (1.4.14)$$

- **Күрделі Зеeman эффекті** жағдайында магнит өрісіне орналастырылған жарық көзінен шығарылатын спектрлік сызық үштен артық құраушыларға жіктеледі. Бұл (1.4.10) өрнегінен көрініп тұрғандай, деңгейлердің өздерінің жіктелуінің  $g$  Ланде көбейткішіне тәуелділігіне байланысты, яғни ақыр аяғында электронның спині және оның екі еселенген магнетизмі болуымен байланысты.

Күрделі Зеeman эффекті спектрлік сызықтардың зеемандық жіктелуі нәзік түзіліс құраушылары аралығымен салыстырғанда кіші болатын әлсіз магнит өрісінде байқалады.

Берілген спектрлік сызық әлсіз магнит өрісінде қандай Зеeman эффектісіне (қарапайым, әлде күрделі) душар болатынына бірден жауап беру әрқашан мүмкін бола бермейді. Мысалы, а)  ${}^2D_{5/2} \rightarrow {}^2P_{3/2}$ ; б)  ${}^5I_5 \rightarrow {}^5H_4$  ауысуларында пайда болатын сызықтарды алайық. Бәрінен бұрын кванттық ауысу болатын күйлерде  $g$  Ланде факторы бірдей бола ма, әлде болмай ма, соны тексеру керек. Бұған (1.4.8) көмегімен көз жеткізуге болады. Сонда а)  $g_1 \neq g_2$ , сондықтан Зеeman эффекті күрделі; б)  $g_1 = g_2$ , демек- Зеeman эффекті қарапайым болады екен.

- **Пашен-Бак эффекті.** Күшті магнит өрісінде  $\vec{L}_L$  және  $\vec{L}_S$  моменттері арасындағы байланыс үзіледі де, олар өздерін магнит өрісімен бір-бірінен тәуелсіз әсерлеседі. Осы жағдайда бұлардың магнит моменттерімен байланысты қосымша энергия былай анықталады

$$\Delta E = \mu_B B m_L + 2\mu_B B m_S = \mu_B B (m_L + 2m_S). \quad (1.4.15)$$

Рұқсат етілген кванттық ауысулар мына сұрыптау ережелеріне бағынады:

$$\Delta m_L = 0, \pm 1, \Delta m_S = 0. \quad (1.4.16)$$

Осының нәтижесінде қарапайым Зеeman эффекті байқалатын болады.

### Магниттік резонанс құбылысы

Парамагниттік атомның кванттық саны  $J$  деңгейі магнит өрісінде  $m_j$  кванттық санының мүмкін мәндері бойынша  $2J+1$  деңгейшеге жіктеледі. Осы жағдайда көрші деңгейшелер арасындағы аралық (1.4.10)-ға сәйкес мынаған тең болады:

$$\delta E = \mu_B g B, \text{ өйткені } |\Delta m_j| = 1.$$

Егер осындай күйдегі атома

$$\hbar\omega = \delta E = \mu_B g B \quad (1.4.17)$$

шартын қанағаттандыратын жиілігі  $\omega$  электромагниттік толқын баытталса, онда толқынның магниттік құраушысының әрекеті нәтижесінде (1.4.10)  $\Delta m_j = 0, \pm 1$  сұрыптау ережесіне сәйкес атомның бір деңгейіне жататын көрші деңгейшелері арасында кванттық ауысулар іске асады. Осы құбылыс **электрондық парамагниттік резонанс (ЭПР)** деп аталады.