

Spin, orbitalny i spinowy moment magnetyczny

- 1) Spin cząstki , zagadnienie własne dla spinu, reprezentacja macierzowa operatorów związanych ze spinem elektronu i wektorów własnych operatorów rzutu spinu na oś O_z i kwadratu spinu. Przedstawienie funkcji własnych operatora Hamiltona w obecności spinu
- 2) Orbitalny moment magnetyczny związany z orbitalnym momentem pędu elektronu. Moment magnetyczny w polu zewnętrznym, normalny efekt Zeemana
- 3) Moment magnetyczny związany ze spinem elektronu. Doświadczenie Sterna-Gerlacha
- 4) Rezonans magnetyczny (materiał fakultatywny)

Spin

Spin

Spin to własny moment pędu cząstki, którego odpowiada operator spinu

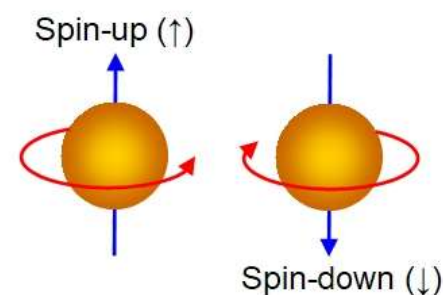
$$\vec{S} = \hat{S}_x \vec{i} + \hat{S}_y \vec{j} + \hat{S}_z \vec{k}$$

Pojęcie wprowadzili S.A. Goudst i G.E. Uhlenbeck (1925) dla wyjaśnienia subtelnego rozszczepienia linii widmowych promieniowania emitowanego przez atomy.

Uwzględnienie spinu umożliwia też pełne wyjaśnienie rozszczepienia tych linii po umieszczeniu atomu w polu magnetycznym.

S.A. Goudst i G.E. Uhlenbeck traktowali spin jako moment pędu związany z ruchem obrotowym elektronu wokół własnej osi, co jest interpretacją obrazową ale niepoprawną.

Naprawdę spin jest wielkością czysto kwantową nie mającą odpowiednika klasycznego. Jego istnienie w przypadku elektronu można uzasadnić w oparciu o równanie Diraca, opisujące elektron relatywistyczny w ramach teorii kwantowej. Spin odgrywa też istotną rolę przy opisie innych obiektów.



Związki komutacyjne dla składowych operatora spinu

$$\begin{aligned} [\hat{S}_x, \hat{S}_y] &= i\hbar \hat{S}_z & [\hat{S}_y, \hat{S}_z] &= i\hbar \hat{S}_x & [\hat{S}_z, \hat{S}_x] &= i\hbar \hat{S}_y \\ [\hat{S}_x, \hat{S}^2] &= [\hat{S}_y, \hat{S}^2] = [\hat{S}_z, \hat{S}^2] &= 0 & \hat{S}^2 &= \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 \end{aligned}$$

Mają one jednakową postać jak w przypadku orbitalnego momentu pędu. Nie można dokonać jednoczesnego pomiaru rzutu spinu na dwie różne osie. Można jednocześnie wyznaczyć tylko długość (kwadrat długości) wektora spinu oraz jego rzut na jedną oś.

Równania własne dla operatora spinu

$$\hat{S}^2 \chi_{s,m_s} = \hbar^2 s(s+1) \chi_{s,m_s} \quad s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$$

$$\hat{S}_z \chi_{s,m_s} = \hbar m_s \chi_{s,m_s} \quad m_s = -s, -s+1, \dots, s-1, s$$

Komentarz

1) Wartości własne operatora kwadratu spinu zależą od liczby kwantowej s i wyrażają się wzorem $\hbar^2 s(s+1)$, zaś wartości własne operatora rzutu spinu na oś Oz zależą od liczby kwantowej m_s , i wyrażają się wzorem $\hbar m_s$ przy czym dopuszczalne wartości liczby m_s zależą od liczby s

2) Liczba s określająca wartość kwadratu spinu nie musi być liczbą całkowitą, jak miało to miejsce w przypadku liczby l wprowadzonej dla orbitalnego momentu pędu lecz może być równa wielokrotności $\frac{1}{2}$ lub 0.

3) χ_{s,m_s} oznaczają wspólne funkcje własne operatorów $\hat{S}_z$ oraz $\hat{S}^2$.

Funkcji tych nie można reprezentować poprzez funkcje falowe zależne od zmiennych przestrzennych, w tym szczególności kątów w sferycznym układzie współrzędnych.

Wynika z tego to iż w przypadku spinu nie obowiązuje warunek iż liczba określająca wartości własne operatora kwadratu spinu jest liczbą całkowitą, który wynikał w przypadku orbitalnego momentu pędu z warunku jednoznaczności funkcji falowej przy zmianie kąta azymutalnego φ o 2π .

Operatora spinu nie można wyrazić także przy pomocy formuł zależnych od zmiennych przestrzennych.

4) Liczba s dla cząstek występujących w przyrodzie zależy od ich typu.

Dla elektronu, protonu i neutronu $s=1/2$, fotonu $s=1$, mezonu π $s=0$

W przypadku obiektów złożonych z kilku cząstek występują również ograniczenia na liczbę s zależne od ilości i rodzaju cząstek z jakich obiekt ten się składa.

5) Cząstki, dla których liczba s przyjmuje wartości całkowite są określane jako bozony, zaś cząstki dla których liczba ta jest nieparzystą wielokrotnością $1/2$ to fermiony

6) Istnienie spinu powoduje że do opisu stanów elektronowych w atomie jednoelektronowym oprócz liczb n, l, m wykorzystujemy liczbę m_s przyjmującą dwie wartości $m_s=1/2$ i $m_s=-1/2$. Od wartości tej liczby nie zależy (przy zaniedbaniu relatywistycznego efektu zwanego sprzężeniem spinowo–orbitalnym oraz braku zewnętrznego pola magnetycznego) energia elektronu, co powoduje wzrost degeneracji stanów własnych operatora Hamiltona dwukrotnie do wartości $2n^2$ (n - główna liczba kwantowa)

Równania własne dla operatora spinu dla elektronu (cząstki o $s=1/2$, $m_s=\pm 1/2$)

$$\hat{S}_z \chi_{\frac{1}{2}} = \frac{\hbar}{2} \chi_{\frac{1}{2}}$$

$$\hat{S}_z \chi_{-\frac{1}{2}} = -\frac{\hbar}{2} \chi_{-\frac{1}{2}}$$

$$\hat{S}^2 \chi_{\frac{1}{2}} = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_{\frac{1}{2}}$$

$$\hat{S}^2 \chi_{-\frac{1}{2}} = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_{-\frac{1}{2}}$$

Istnieją tylko dwie wspólne funkcje własne (wektory własne) operatorów $\hat{S}^2$ oraz $\hat{S}_z$ dla elektronu różniące się znakiem (kierunkiem) rzutu spinu na oś OZ:

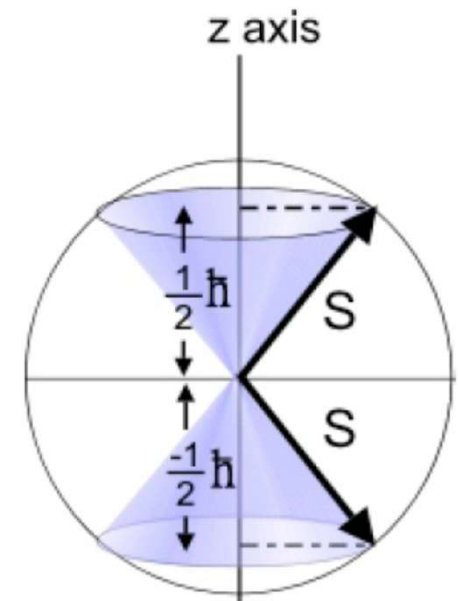
$$\chi_{\frac{1}{2}} = \chi_{\frac{1}{2}}(m_s) = \begin{cases} 1 & \text{dla } m_s = \frac{1}{2} \\ 0 & \text{dla } m_s = -\frac{1}{2} \end{cases} \begin{matrix} \text{ozn.} \\ = |+\rangle \end{matrix}$$

dla której rzut ten jest dodatni (spin zwrócony do góry)

$$2) \chi_{-\frac{1}{2}} = \chi_{-\frac{1}{2}}(m_s) = \begin{cases} 0 & \text{dla } m_s = \frac{1}{2} \\ 1 & \text{dla } m_s = -\frac{1}{2} \end{cases} \begin{matrix} \text{ozn.} \\ = |-\rangle \end{matrix}$$

dla której rzut ten jest ujemny (spin zwrócony do dołu)

Funkcje te odpowiadają wektorom stanu $|+\rangle, |-\rangle$ z 2-wymiarowej podprzestrzeni przestrzeni Hilberta



Reprezentacja macierzowa wielkości związanych ze spinem cząstki o $s=1/2$ (np. elektronu) w reprezentacji utworzonej na bazie wspólnych wektorów własnych operatorów $\hat{S}_z$ oraz $\hat{S}^2$ (materiał fakultatywny, wybrane dowody w dodatku)

a) operatorów kwadratu oraz rzutów spinu na osie układu kartezjańskiego

$$\hat{S}^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Widać iż macierze reprezentujące operatory $\hat{S}_z$ oraz $\hat{S}^2$ są diagonalne

b) wektorów stanu z podprzestrzeni Hilberta będących wektorami własnymi operatorów $\hat{S}_z$ oraz $\hat{S}^2$ opisujących stany tej cząstki w których określony jest kwadrat spinu oraz rzut spinu na oś Oz

$$|+\rangle = \chi_{\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\chi_{-\frac{1}{2}} = |-\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Do reprezentowania wektorów z przestrzeni dualnej (funkcji $\chi_{\frac{1}{2}}^*, \chi_{-\frac{1}{2}}^*$) wykorzystujemy macierze wierszowe

$$\langle +| = \chi_{\frac{1}{2}}^* = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\langle -| = \chi_{-\frac{1}{2}}^* = \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Zapis równania własnego $\hat{S}_z|+\rangle = \frac{\hbar}{2}|+\rangle$ w reprezentacji macierzowej

$$\frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Stan (bra) $\langle +|$ przestrzeni dualnej reprezentujemy przez $\langle +| = [1 \ 0]$
Łatwo można sprawdzić iż

$$\langle +|+\rangle = [1 \ 0] \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = 1 \qquad \langle +|-\rangle = [1 \ 0] \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 0$$

Określenie wartości oczekiwanej operatorów $\hat{S}_x$ oraz $\hat{S}_y$ w stanie opisanym wektorem $|+\rangle$

$$\langle +|\hat{S}_x|+\rangle = [1 \ 0] \cdot \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} [1 \ 0] \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 0$$

$$\langle +|\hat{S}_y|+\rangle = [1 \ 0] \cdot \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} [1 \ 0] \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ i \end{bmatrix} = 0$$

Zagadnienie własne dla operatora Hamiltona dla pojedynczej cząstki w obecności spinu –uogólnienie

$$\hat{H}|\psi_\alpha\rangle = E_\alpha|\psi_\alpha\rangle$$

$$\hat{H}\psi_\alpha(x) = E_\alpha\psi_\alpha(x)$$

Argument x funkcji własnej $\psi_\alpha(x)$ oznacza zespół $x = (\vec{r}, m_s)$ złożony ze współrzędnych przestrzennych opisujących położenie $\vec{r} = (x, y, z)$ oraz zmiennej spinowej m_s określającej rzut spinu cząstki na oś Oz . α oznacza zespół liczb kwantowych (w tym związanych z operatorem spinu) określających stan cząstki.

Funkcje $\psi_\alpha(x)$ (wektory $|\psi_\alpha\rangle$) indeksowane przez α stanowią układ funkcji (wektorów) ortonormalnych.

$$\langle\psi_{\alpha'}|\psi_\alpha\rangle = \int \psi_{\alpha'}^*(x)\psi_\alpha(x)dx = \sum_{m_s} \int d^3r \psi_{\alpha'}^*(x)\psi_\alpha(x) = \delta_{\alpha'\alpha}$$

W dalszych rozważaniach będziemy zakładać iż operator Hamiltona $\hat{H}$ nie zależy od operatorów związanych ze spinem (czyli np. pomijamy oddziaływanie spinowo-orbitalne)

Wówczas funkcje własne operatora Hamiltona tworzące układ ortonormalny zależne od zmiennych przestrzennych i spinowych można zapisać w postaci iloczynu funkcji zależnej od zmiennych przestrzennych i funkcji zależnej od zmiennych spinowych przyjmując ją jako funkcje będącą funkcją własną operatorów $\hat{S}_z$ i $\hat{S}^2$. W szczególności dla elektronu otrzymujemy

$$\psi_{\alpha}(x) = \psi_{\tilde{\alpha}}(\vec{r}) \chi_{m_s} = \begin{cases} \psi_{\tilde{\alpha}}(\vec{r}) \chi_{\frac{1}{2}} = \psi_{\tilde{\alpha}}(\vec{r}) |+\rangle & \text{gdy } m_s = \frac{1}{2} \\ \psi_{\tilde{\alpha}}(\vec{r}) \chi_{-\frac{1}{2}} = \psi_{\tilde{\alpha}}(\vec{r}) |-\rangle & \text{gdy } m_s = -\frac{1}{2} \end{cases}$$

$$\psi_{\alpha}^*(x) = \psi_{\tilde{\alpha}}^*(\vec{r}) \chi_{m_s}^* = \begin{cases} \psi_{\tilde{\alpha}}^*(\vec{r}) \langle +| & \text{gdy } m_s = \frac{1}{2} \\ \psi_{\tilde{\alpha}}^*(\vec{r}) \langle -| & \text{gdy } m_s = -\frac{1}{2} \end{cases}$$

Postać funkcji χ_{m_s} zależy od liczby m_s opisującej rzut spinu elektronu na oś Oz.

Do reprezentowania tych funkcji często wykorzystujemy reprezentacje macierzową

$$|+\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |-\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \langle +| = [1 \quad 0] \quad \langle -| = [0 \quad 1]$$

Postać czynnika zależnego od zmiennych przestrzennych czyli funkcji falowej $\psi_{\tilde{\alpha}}(\vec{r})$ wynika z rozwiązania odpowiedniego równania Schrödingera z operatorem Hamiltona zależnym od zmiennych przestrzennych. $\tilde{\alpha}$ oznacza zespół liczb kwantowych (nie związanych z operatorem spinu) określających stan tego elektronu

Funkcję własną operatora Hamiltona (również w przypadku gdy $\hat{H}$ zależy od operatorów związanych ze spinem) można zapisać w ogólnej postaci jako spinor

$$\psi_{\alpha}(x) = \begin{bmatrix} \tilde{\psi}_{\tilde{\alpha}\uparrow}(\vec{r}) \\ \tilde{\psi}_{\tilde{\alpha}\downarrow}(\vec{r}) \end{bmatrix}$$

Orbitalny i spinowy moment magnetyczny i jego oddziaływanie z polem magnetycznym

Orbitalny moment magnetyczny elektronu –rozważania klasyczne

Z elektronem o masie m_e i ładunku e poruszającym się po zamkniętej orbicie można związać prąd elektryczny o natężeniu

$$I = \frac{|e|}{T} = \frac{|e|V}{2\pi r}$$

r -promień orbity, V -prędkość elektronu .

Z prądem płynącym w zamkniętym obwodzie w kształcie ramki o polu powierzchni A wiążemy (orbitalny) moment magnetyczny o wartości

$$|\vec{\mu}_l| = IA$$

Kierunek wektora momentu magnetycznego jest prostopadły do płaszczyzny ramki.

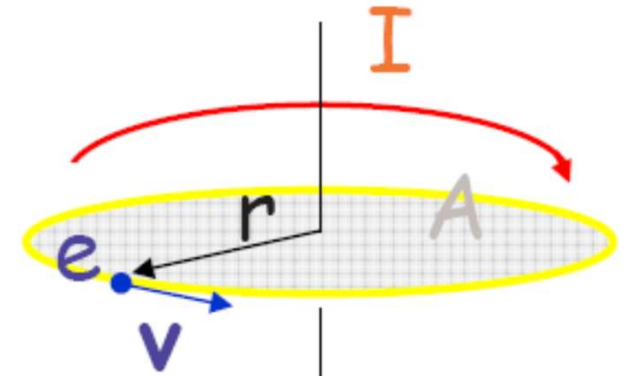
Widać iż wartość orbitalnego momentu magnetycznego wytwarzanego przez elektron poruszający się po orbicie jest równy

$$|\vec{\mu}_l| = IA = \frac{|e|V}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{|e|Vr}{2} = \frac{|e|}{2m_e} m_e Vr = \frac{|e|}{2m_e} |\vec{L}|$$

$\vec{L}$ –moment pędu elektronu

Przyjmuje się iż

$$\vec{\mu}_l = -\frac{|e|}{2m_e} \vec{L}$$



Energia momentu magnetycznego w polu magnetycznym

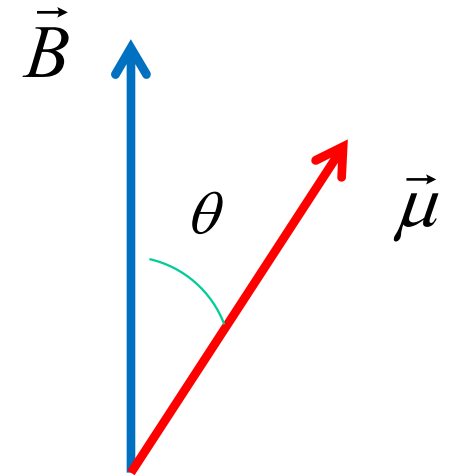
Z momentem magnetycznym $\vec{\mu}$ umieszczonym w zewnętrznym polu magnetycznym opisanym przez wektor indukcji magnetycznej $\vec{B}$ związana jest energia równa

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

Przy polu skierowanym wzdłuż osi Oz jest ona równa

$$E = -\mu_z B_z$$

Konfiguracją o najniższej energii tego momentu jest konfiguracja w którym moment ten jest skierowany równoległe do wektora indukcji pola magnetycznego (czyli rzut momentu magnetycznego μ_z na oś Oz jest dodatni) .



Na moment magnetyczny w polu magnetycznym o indukcji $\vec{B}$ działa moment siły równy

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$$

Moment magnetyczny elektronu ulega precesji poruszając się po pobocznicy stożka o osi symetrii pokrywającej się z kierunkiem wektora indukcji pola magnetycznego z częstością zależną liniowo od indukcji pola

Siła działająca na moment magnetyczny w polu niejednorodnym

W polu magnetycznym niejednorodnym o indukcji skierowanej wzdłuż osi Oz na moment magnetyczny działa siła w kierunku wyznaczonym przez zwrot osi Oz układu współrzędnych, której zwrot i wartość zależy od składowej z-owej gradientu indukcji pola magnetycznego dB/dz i rzutu momentu magnetycznego na oś Oz μ_z

$$F = \mu_z \frac{dB}{dz}$$

Orbitalny moment magnetyczny elektronu –rozważania kwantowe

Orbitalny moment magnetyczny elektronu jest operatorem związanym z operatorem orbitalnego momentu pędu relacją wyprowadzoną w ujęciu klasycznym

$$\hat{\vec{\mu}}_l = -\frac{|e|\hbar}{2m_e} \hat{\vec{L}} = -\frac{\mu_B}{\hbar} \hat{\vec{L}}$$

Wartości własne operatora kwadratu momentu pędu

$$|\vec{L}|^2 = \hbar^2 l(l+1) \quad \text{gdzie } l=0,1,2,\dots$$

czyli długość wektora momentu pędu może być równa $|\vec{L}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}$

W wyniku określenia długości momentu magnetycznego można otrzymać jedynie następujące wartości

$$|\vec{\mu}_l| = \left(\frac{|e|\hbar}{2m_e} |\vec{L}| \right) = \left(\frac{|e|\hbar}{2m_e} \right) \sqrt{l(l+1)} = \mu_B \sqrt{l(l+1)}$$

gdzie $\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e} = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ A} \cdot \text{m}^2$ -magneton Bohra (elementarna jednostka momentu magnetycznego elektronu)

W wyniku pomiaru rzutu momentu pędu elektronu na oś Oz można otrzymać jedynie wartości równe

$$L_z = \hbar m \quad \text{gdzie } m = -l, -l+1, \dots, l-1, l \text{ – magnetyczna liczba kwantowa}$$

W wyniku pomiaru rzutu momentu magnetycznego elektronu na oś OZ można otrzymać jedynie $2l+1$ następujących wartości

$$\mu_{lz} = -\frac{|e|\hbar}{2m_e} L_z = -\left(\frac{|e|\hbar}{2m_e}\right) m = -\mu_B m$$

gdzie $\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e} = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ A} \cdot \text{m}^2$ -magneton Bohra

Liczba różnych wartości rzutu momentu magnetycznego związanego z orbitalnym momentem pędu na os Oz jest liczbą nieparzystą

Zapisane relacje obowiązują również przy analizie momentu orbitalnego magnetycznego całego atomu wieloelektronowego (o niezbyt dużej liczbie atomowej Z), przy czym wówczas liczby l i m dotyczą operatorów $\hat{L}^2$ i $\hat{L}_z$ związanych z orbitalnym momentem pędu całego atomu do którego wnoszą wkład elektrony z całkowicie niezapełnionych podpowłok elektronowych.

Czasami liczby l , m oznacza się w tym przypadku dużymi literami L, M .

Efekt Zeemana

Rozszczepienie linii widmowych promieniowania emitowanego przez atom umieszczony w polu magnetycznym wynikające z rozszczepienia poziomów energetycznych atomu wywołanego oddziaływaniem momentu magnetycznego atomu z zewnętrznym polem magnetycznym. W polu o indukcji B skierowanym wzdłuż osi Oz z momentem magnetycznym związana jest energia

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_z \cdot B_z$$

Energia ta zależy od wartości rzutu momentu magnetycznego atomu na kierunek pola. Ponieważ rzut ten jest skwantowany to energia rozważana jest skwantowana (może ona przyjmować dyskretne wartości).

Przy określeniu energii fotonów promieniowania emitowanego przy przechodzeniu atomu (elektronu) pomiędzy stanami o różnych energiach należy uwzględnić wkład do energii poziomów energetycznych pochodzący od energii momentu magnetycznego atomu w polu magnetycznym. Istnienie kilku dozwolonych wartości tej energii w danym atomie powoduje rozczepienie linii widmowych emitowanego promieniowania

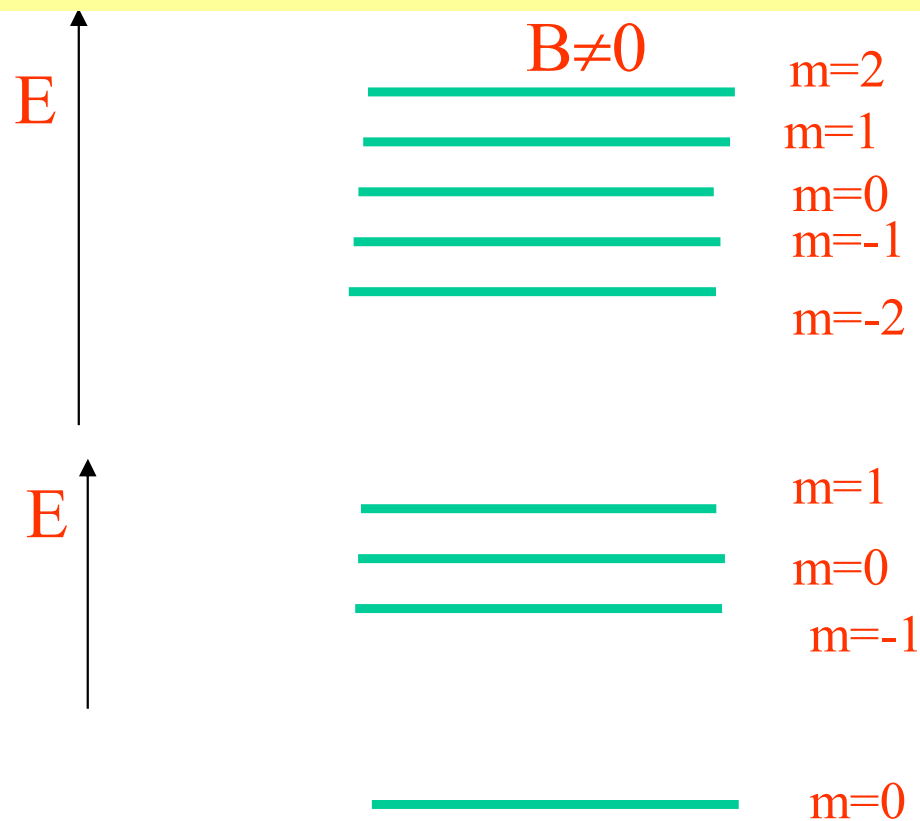
Rozszczepienie poziomów energetycznych w polu magnetycznym bez uwzględnienia spinu (normalny efekt Zeemana) dla atomu znajdującego się stanach o $l=0$, $l=1$ i $l=2$

$$E = -\mu_{zl} \cdot B_z = \frac{|e|\hbar}{2m_e} L_z B = \mu_B m B$$

$l=2$ $B=0$
 $m=2, 1, 0, -1, -2$

$l=1$
 $m=1, 0, -1$

$l=0$
 $m=0$



Analiza wyników eksperymentalnych wskazuje na to iż liczba poziomów na jakie poziom energetyczny ulega rozczepieniu może być wyższa, w szczególności można obserwować rozczepienie gdy $l=0$, co związane jest z wkładem do momentu magnetycznego atomu pochodzącym od spinu

Spinowy moment magnetyczny elektronu

Analiza wyników doświadczalnych związanych m.in. ze strukturą subtelną linii widmowych emitowanego promieniowania i rozszczepieniem tych linii w polu magnetycznym a także tzw. efektu Sterna-Gerlacha wskazuje na to iż elektrony mogą posiadać moment magnetyczny związany nie tylko z orbitalnym momentem pędu ale i ze spinem (własnym momentem pędu).

Spinowy moment magnetyczny elektronu jest operatorem związanym ze spinem elektronu przybliżonym wzorem

$$\hat{\vec{\mu}}_s = -\frac{|e|\hbar}{m_e} \hat{\vec{S}} = -\frac{2\mu_B}{\hbar} \hat{\vec{S}} \quad \mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e}$$

Stosunek spinowego momentu magnetycznego do spinu jest w przybliżeniu dwukrotnie większy od stosunku orbitalnego momentu magnetycznego do orbitalnego momentu pędu (anomalia magnetomechaniczna)

Długość spinowego momentu magnetycznego elektronu jest równa

$$|\vec{\mu}_s| = \frac{|e|\hbar}{m_e} |\vec{S}| = \frac{|e|\hbar}{m_e} \sqrt{s(s+1)} = 2 \frac{|e|\hbar}{2m_e} \sqrt{s(s+1)} = 2\mu_B \sqrt{s(s+1)} \stackrel{s=1/2}{=} \sqrt{3}\mu_B$$

gdzie $\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e}$ -magneton Bohra

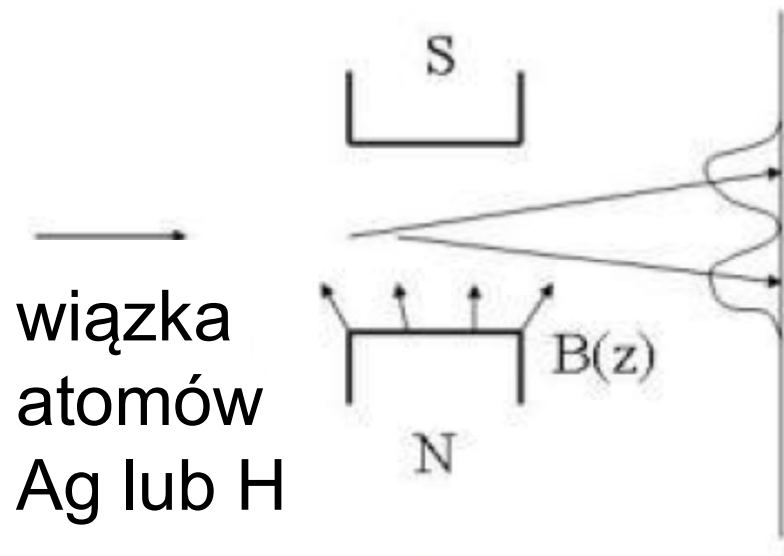
Rzut spinowego momentu magnetycznego elektronu na dowolnie wybraną oś Oz jest równa

$$\mu_{sz} = -\frac{|e|\hbar}{m_e} S_z = -\frac{|e|\hbar}{m_e} m_s = -2 \frac{|e|\hbar}{2m_e} m_s = -2\mu_B m_s \stackrel{m_s=\pm 1/2}{=} \mp \mu_B$$

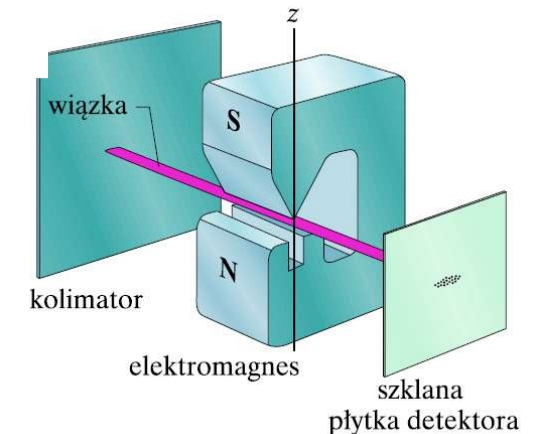
Wzory $|\vec{\mu}_s| = 2\mu_B \sqrt{s(s+1)}$ $\mu_{sz} = -2\mu_B m_s$ można stosować także dla momentu magnetycznego atomu, przy czym liczby s, m przyjmujące w ogólności wartości $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$ $m_s = -s, -s+1, \dots, s-1, s$

służą do opisu momentu magnetycznego układu wszystkich elektronów atomu. Wkład do tego momentu pochodzi jednak tylko od elektronów zajmujących częściowo zapełnioną podpowłokę elektronową.

Doświadczenie Sterna-Gerlacha - potwierdzenie istnienia spinowego momentu magnetycznego i jego kwantowania przestrzennego



$$F_z = \mu_z \frac{dB}{dz}$$



Po przepuszczeniu przez obszar niejednorodnego pola magnetycznego wiązki atomów srebra rozdziela się ona na dwie wiązki, czyli siła działająca na atomy w polu może przyjmować dwie wartości .

Na podstawie wzoru $F_z = \mu_z \frac{dB}{dz}$ opisującego tę siłę można wnosić iż atomy srebra posiadają niezerowy moment magnetyczny $\vec{\mu}$, którego rzut na oś Oz może przyjmować także tylko dwie wartości (według klasycznej mechaniki siła

winna przyjmować dowolne wartości z zakresu : $F_z = \left(-\mu \frac{dB}{dz}, \mu \frac{dB}{dz} \right)$ gdzie $\mu = |\vec{\mu}|$ a wiązka winna ulec poszerzeniu a nie rozszczepieniu

Ponieważ rzut na oś Oz momentu magnetycznego pochodzącego od orbitalnego momentu pędu może przyjmować tylko nieparzystą liczbę wartości, moment magnetyczny odpowiedzialny za rozszczepienie wiązki atomów w polu niejednorodnym nie może pochodzić tylko od momentu magnetycznego związanego z orbitalnym momentem pędu ale musi pochodzić od spinu elektronu z niecałkowicie zapełnionej podpowłoki

W rzeczywistości w przypadku atomów (takich jak atomy srebra, wodoru), w których na takiej podpowłoce 5s znajduje się jeden elektron w stanie o $l=0$ (czyli i $m=0$) można przyjąć iż $\mu_{lz}=0$, co znaczy iż atom taki nie posiada momentu magnetycznego orbitalnego na który w zewnętrznym niejednorodnym polu magnetycznym działa siła. W polu takim siła działa na moment magnetyczny spinowy pochodzący od spinu elektronu z tej podpowłoki i jest dana wzorem

$$F_z = \mu_{sz} \frac{dB_z}{dz} = \pm \mu_B \frac{dB_z}{dz}$$

Spinowy moment magnetyczny protonu i neutronu

Spinowym momentem magnetycznym obdarzone są także m.in. cząstki tworzące jądro atomowe

a) proton $\hat{\mu}_{sp} = 5,58 \frac{|e|\hbar}{2m_p} \hat{S}$ $\vec{S} = \text{spin protonu}$

b) neutron $\hat{\mu}_{sn} = -3,82 \frac{|e|\hbar}{2m_p} \hat{S}$ $\vec{S} = \text{spin neutronu}$

gdzie $m_p = 1,67 \cdot 10^{-27}$ kg-masa protonu

(Neutron posiada spinowy moment magnetyczny pomimo tego iż jego ładunek elektryczny jest równy zero).

Z uwagi na fakt iż masa protonu i neutronu jest około 1836 razy większa od masy elektronu to moment magnetyczny protonu i neutronu jest znacznie mniejszy od momentu magnetycznego elektronu.

Momentem magnetycznym obdarzone jest także jądro atomowe złożone z protonów i neutronów

Elementarną jednostką momentu magnetycznego protonu, neutronu (jak i jądra) jest

magneton jądrowy $\mu_N = \frac{|e|\hbar}{2m_p} \approx 5,05 \cdot 10^{-27} \frac{J}{T}$

Całkowity moment magnetyczny układu elektronów w atomie (materiał fakultatywny)

Wkład do momentu magnetycznego układu złożonego z elektronów w ogólnym przypadku pochodzi zarówno ich od orbitalnego momentu pędu jak i spinu co utrudnia opis zjawiska Zeemana. Operator momentu magnetycznego takiego układu wyraża się więc wzorem:

$$\hat{\mu} = \hat{\mu}_l + \hat{\mu}_s = -\frac{|e|\hbar}{2m_e} \hat{L} - \frac{|e|\hbar}{m_e} \hat{S}$$

$\xrightarrow{\quad}$ L -orbitalny moment pędu układu
 $\xrightarrow{\quad}$ S -spin układu

W przypadku atomu wkład do orbitalnego momentu pędu i spinu całego atomu wnoszą tylko elektrony z całkowicie niezapełnionych podpowłok elektronowych

Rozszczepienie poziomów energetycznych w silnym polu magnetycznym przy jednoczesnej obecności orbitalnego i spinowego momentu magnetycznego - efekt Paschena-Backa).

Gdy moment magnetyczny pochodzi jednocześnie od orbitalnego momentu pędu jak i od spinu to w przypadku silnego pola gdy można zaniedbać istnienie sprzężenia spinowo-orbitalnego wkład do energii atomu związany z obecnością pola można wyrazić wzorem:

$$E = \mu_B B (m + 2m_s) \quad m = -l, -l+1, \dots, l-1, l; \quad m_s = -s, -s+1, \dots, s-1, s$$

W tym przybliżeniu sumujemy oddzielnie wkłady do energii atomu związane z oddziaływaniem orbitalnego i spinowego momentu magnetycznego z polem magnetycznym.

Anomalny efekt Zeemana

W przypadku słabego pola magnetycznego i obecności jednocześnie spinowego i orbitalnego momentu magnetycznego opis efektu staje się znacznie bardziej złożony z uwagi na istniejące oddziaływanie tych momentów (oddziaływanie spinowo-orbitalne), silniejsze od ich oddziaływania z polem magnetycznym. W obecności tego oddziaływania nie można określić jednocześnie energii układu i rzutów orbitalnego oraz spinowego momentu magnetycznego na oś Oz , gdyż operatory związane z tymi wielkościami nie komutują ze sobą.

Oddziaływanie (sprzężenie) spinowo-orbitalne, rozszczepienie subtelne

$$\hat{H}_{so} = \lambda \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}$$

Dla atomu wodoru

$$\lambda = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr}$$

$V(r)$ -energia potencjalna elektronu znajdującego się w odległości r od jądra

Oddziaływanie spinowo-orbitalne - efekt relatywistyczny przewidziany przez równanie Diraca który można powiązać z oddziaływaniem spinowego momentu magnetycznego elektronów z polem magnetycznym powstałym na skutek ruchu względnego elektronów i jądra zależnym od orbitalnego momentu pędu $\vec{L}$.

Oddziaływanie spinowo-orbitalne prowadzi do rozszczepienia poziomów energetycznych nawet przy braku zewnętrznego pola magnetycznego (rozszczipienie subtelne). W przybliżeniu gdy $\lambda > 0$ (podpowłoki obsadzone mniej do połowy) stany w którym wektory $\hat{\vec{L}}$ oraz $\vec{S}$ są równoległe mają wyższą energię niż stany w którym są one antyrównoległe.

Oddziaływanie to jest najsilniejsze w przypadku powłok wewnętrznych (o małym n) w atomach ciężkich pierwiastków (o dużym Z) (dla wodoru jest rzędu 10^{-5} - 10^{-4} eV, dla sodu 10^{-3} eV).

Ilościowy opis efektu utrudnia fakt iż nie można jednocześnie wyznaczyć energii oraz rzutu wektorów $\hat{\vec{L}}$ oraz $\hat{\vec{S}}$ na oś Oz. Opis ten wymaga wprowadzenia operatora całkowitego momentu pędu $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$ którego kwadrat i rzut na oś Oz można określić jednocześnie wraz z energią układu .

Przykładowe pytania testowe

- 1) Wiadomo iż związek pomiędzy operatorami orbitalnego momentu pędu $\hat{L}$ oraz momentu magnetycznego $\hat{\mu}_L$ związanego z orbitalnym momentem pędu w przypadku elektronu ma postać: $\hat{\mu}_L = -\frac{|e|\hbar}{2m_e}\hat{L}$ (m_e -masa elektronu). Który z poniższych związków określa związek pomiędzy operatorem spinu elektronu $\hat{S}$ a operatorem momentu magnetycznego elektronu $\hat{\mu}_S$ wynikającego z istnienia spinu?

a) $\hat{\mu}_S = -\frac{|e|\hbar}{2m_e}\hat{S}$

b) $\hat{\mu}_S = -\frac{|e|\hbar}{m_e}\hat{S}$

c) $\hat{\mu}_S = -|e|\hbar\hat{S}$

d) $\hat{\mu}_S = -\frac{1}{2m_e}\hat{S}$

Jakie wartości można otrzymać w wyniku pomiaru rzutu momentu magnetycznego związanego ze spinem elektronu na dowolną oś?

- 2) Czy wynik doświadczenia Sterna-Gerlacha przeprowadzonego z wykorzystaniem atomów srebra przechodzących przez obszar niejednorodnego pola magnetycznego wskazuje na to iż
- a) rzut momentu magnetycznego atomu na kierunek indukcji pola magnetycznego przyjmować może tylko dyskretne wartości
 - b) moment magnetyczny atomu srebra pochodzi od orbitalnego momentu pędu tego atomu
 - c) rzut spinu układu elektronów atomu srebra na oś wyróżnioną przez pole magnetyczne może przyjmować 2 różne wartości
 - d) rzut orbitalnego momentu pędu układu elektronów atomu srebra na oś wyróżnioną przez pole magnetyczne może przyjmować 4 różne wartości

Zaznaczyć wszystkie poprawne stwierdzenia.

3) Ile różnych wartości można otrzymać w wyniku pomiaru rzutu spinu elektronu na oś Oz? **Wybrać poprawną odpowiedź spośród podanych poniżej.**

- a) 1 wartość
- b) 2 wartości
- c) 3 wartości
- d) Wynik może być określony przez dowolną liczbę rzeczywistą

4) Ile różnych wartości można otrzymać w wyniku pomiaru rzutu orbitalnego momentu magnetycznego elektronu w atomie wodoru na oś Oz przy założeniu iż elektron znajduje się w stanie określonym przez wartość orbitalnej liczby kwantowej $l=2$? **Wybrać poprawną odpowiedź spośród podanych poniżej.**

- a) 2 wartości
- b) 3 wartości
- c) 5 wartości
- d) Wynik może być określony przez dowolną liczbę rzeczywistą

5) Które z powyższych wielkości związane ze spinem można jednocześnie wyznaczyć

- a) Rzut spinu na dwie różne osie układu współrzędnych
- b) Rzut spinu na oś OZ oraz kwadrat spinu
- c) Rzut spinowego momentu magnetycznego na dwie różne osie układu współrzędnych
- d) Rzut spinowego momentu magnetycznego na oś OZ oraz kwadrat spinowego momentu magnetycznego

6) W wyniku pomiaru rzutu **spinu elektronu** na oś Oz można otrzymać jedną z poniższych wartości

- a) $-\frac{\hbar}{2}, 0, \frac{\hbar}{2}$
- b) $-\frac{\hbar}{2}, \frac{\hbar}{2}$
- c) $0, \frac{\hbar}{2}, \hbar, \frac{3}{2}\hbar, \dots$
- d) $\frac{\hbar}{2}, \hbar, \frac{3}{2}\hbar, 2\hbar, \frac{5}{2}\hbar, \dots$

gdzie $\hbar = \frac{h}{2}$, h -stała Plancka

Zaznaczyć wszystkie prawdziwe stwierdzenia.

7) Które z poniższych stwierdzeń są stwierdzeniami prawdziwymi?

- a) Kwadrat spinu cząstki będącej fermionem dany jest wzorem $\hbar^2 s(s+1)$, przy czym liczba s może przyjmować tylko wartość zależną od rodzaju cząstki będącą liczbą całkowitą nieujemną $s=0,1,2,3,\dots$
- b) Kwadrat spinu cząstki będącej fermionem dany jest wzorem $\hbar^2 s(s+1)$, przy czym liczba s może przyjmować tylko wartość zależną od rodzaju cząstki będącą liczbą połówkową dodatnią $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$
- c) Rzut spinu cząstki będącej fermionem na oś Oz jest zawsze równy $\frac{\hbar}{2}$.
- d) Elektron jest cząstką będącą fermionem.

7) Które z poniższych stwierdzeń są stwierdzeniami prawdziwymi?

- a) Kwadrat spinu cząstki będącej bozonem dany jest wzorem $\hbar^2 s(s+1)$, przy czym liczba s może przyjmować tylko wartość zależną od rodzaju cząstki będącą liczbą całkowitą nieujemną $s=0,1,2,3,\dots$
- b) Kwadrat spinu cząstki będącej bozonem dany jest wzorem $\hbar^2 s(s+1)$, przy czym liczba s może przyjmować tylko wartość zależną od rodzaju cząstki będącą liczbą połówkową dodatnią
- c) W wyniku pomiaru rzutu spinu bozonu na oś Oz można otrzymać wartość równą 0.
- d) Elektron jest cząstką będącą bozonem.

Zaznaczyć wszystkie poprawne stwierdzenia.

8) Które z poniższych stwierdzeń są stwierdzeniami prawdziwymi?

- a) Efekt Zeemana jest związany z rozszczepieniem linii widmowych promieniowania emitowanego przez atom po umieszczeniu atomu w polu magnetycznym.
- b) Efekt Zeemana jest związany rozszczepieniem linii widmowych promieniowania emitowanego przez atom po umieszczeniu atomu w polu elektrycznym.
- c) W doświadczeniu Sterna Gerlacha obserwowane jest rozszczepienie wiązki atomów srebra przy ich przechodzeniu przez obszar niejednorodnego pola magnetycznego.
- d) W doświadczeniu Sterna Gerlacha obserwowane jest poszerzenie wiązki atomów srebra przy ich przechodzeniu przez obszar jednorodnego pola magnetycznego.

Zaznaczyć wszystkie poprawne stwierdzenia.

Materiał uzupełniający fakultatywny

rezonans magnetyczny

Ruch momentu magnetycznego w polu magnetycznym- rozważanie półklasyczne

Na moment magnetyczny w polu magnetycznym działa moment siły równy

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$$

Powoduje on zmianę momentu pędu cząstki obdarzonej momentem magnetycznym zgodnie z równaniem

$$\frac{d\vec{J}}{dt} = \vec{\mu} \times \vec{B}$$

Po pomnożeniu obu stron równania przez czynnik żyromagnetyczny $\gamma = \frac{\vec{\mu}}{\vec{J}}$

($\gamma = \frac{\vec{\mu}}{\vec{S}} = -\frac{|e|\hbar}{2m_e}$ w przypadku spinowego momentu magnetycznego elektronu i $\gamma = \frac{\vec{\mu}}{\vec{L}} = -\frac{|e|\hbar}{2m_e}$ w przypadku orbitalnego momentu magnetycznego elektronu)

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} = \gamma \vec{\mu} \times \vec{B}$$

Moment magnetyczny cząstki ulega precesji poruszając się po poboczniczy stożka o osi symetrii pokrywającej się z kierunkiem wektora indukcji pola magnetycznego

Wyznaczenie częstości precesji w polu magnetycznym

$$\Delta \vec{\mu} = \vec{\mu}(t + \Delta t) - \vec{\mu}(t)$$

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} = \gamma \vec{\mu} \times \vec{B} \quad \Delta t \rightarrow 0$$

$$|\Delta \vec{\mu}| = |(\gamma \vec{\mu} \times \vec{B}) \Delta t| = |\gamma| |\vec{\mu}| B \sin(\alpha) \Delta t$$

$\Delta \vec{\mu} \perp \vec{B}; \Delta \vec{\mu} \perp \vec{\mu} \Rightarrow$ Moment magnetyczny nie zmienia długości a tylko kierunek, jego koniec zakreśla okrąg w płaszczyźnie $\perp \vec{B}$

Z rozważań geometrycznych wynika iż

$$|\Delta \vec{\mu}| = |\vec{\mu}| \sin(\alpha) \Delta \varphi = |\vec{\mu}| \sin(\alpha) \omega_0 \Delta t$$

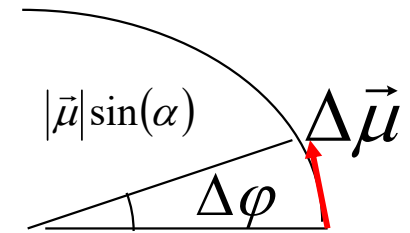
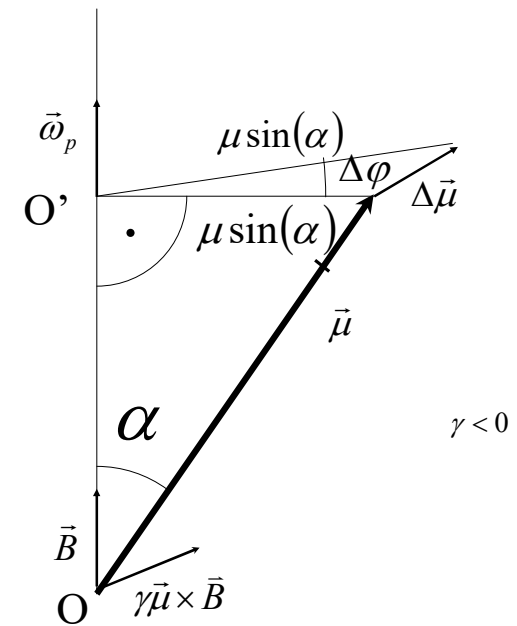
Z porównania obu wyrażeń wynika iż

$$|\gamma| |\vec{\mu}| B \sin(\alpha) \Delta t = |\vec{\mu}| \sin(\alpha) \omega_0 \Delta t \longrightarrow |\vec{\omega}_0| = |\gamma| B$$

Częstość z jaką odbywa się precesja nazywamy częstością Larmora

Uwaga. Mechanika kwantowa w tym modelowym obrazie narzuca m.in. ograniczenie na kąt α jaki tworzy moment magnetyczny $\vec{\mu}$ z osią wyznaczoną przez wektor indukcji pola $\cos(\alpha) = \frac{\mu_z}{|\vec{\mu}|} = \frac{m_j}{\sqrt{j(j+1)}}$ $m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j$

Powyższy modelowy obraz pozwala na określenie zależności od czasu wartości oczekiwanych rzutów momentu magnetycznego na różne osie w stanie o ustalonej długości wektora $\vec{\mu}$ i jego rzutu na kierunek pola



Równanie określające zmiany w czasie magnetyzacji w polu zewnętrznym

Pojęcie momentu magnetycznego można wprowadzić również dla jąder, atomów a także układów złożonych z wielu atomów.

W układzie złożonym z wielu jednakowych momentów magnetycznych można wprowadzić pojęcie magnetyzacji (namagnesowania) $\vec{M}$ równej momentowi magnetycznemu jednostki objętości ciała podzielonemu przez o tą objętość

Równanie opisujące zmiany w czasie magnetyzacji:

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma \vec{M} \times \vec{B}$$

gdzie γ -stosunek żyromagnetyczny

Równanie to można fenomenologicznie uzupełnić o wyrazy opisujące oddziaływanie obiektów obdarzonych momentem magnetycznym z otoczeniem prowadzących do zmniejszenia kąta jaki wektor magnetyzacji tworzy z kierunkiem pola, co prowadzi do minimalizacji energii układu danej wzorem

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

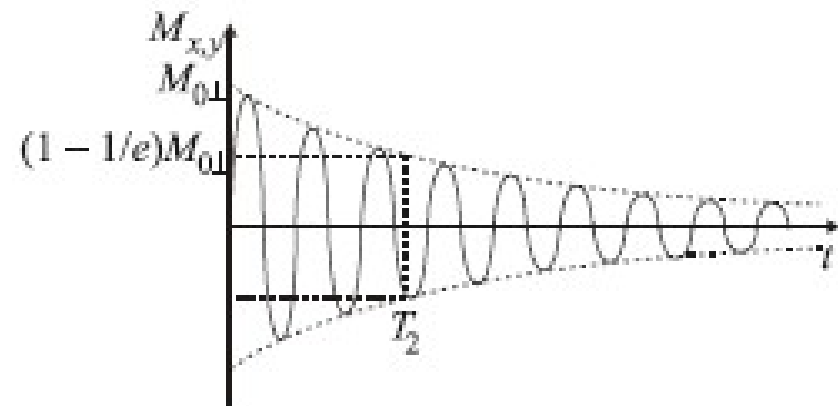
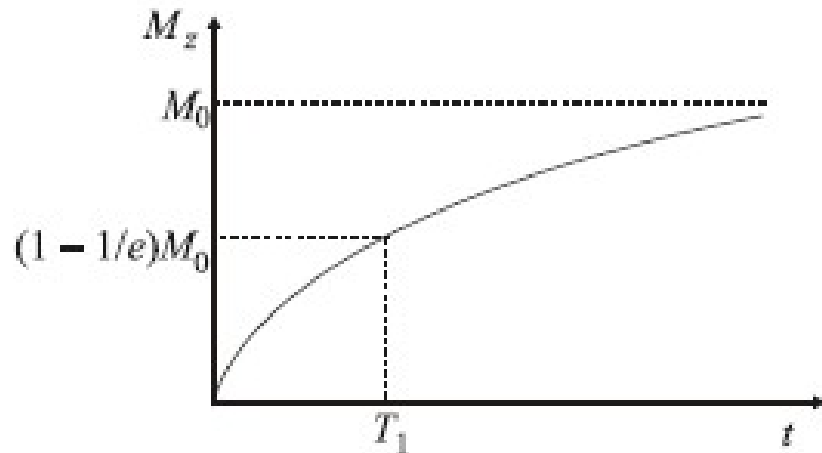
Równanie w ten sposób otrzymane nosi nazwę równania Blocha.

Równanie Blocha

Dla pola magnetycznego o indukcji $\vec{B}$ skierowanego wzdłuż osi OZ

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma \vec{M} \times \vec{B} - \vec{i} \frac{M_x}{T_2} - \vec{j} \frac{M_y}{T_2} - \vec{k} \frac{M_z - M_0}{T_1}$$

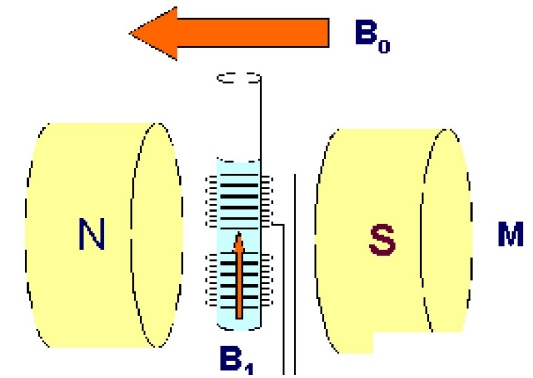
T_1 , T_2 - czasy relaksacji podłużnej i poprzecznej opisujące w sposób fenomenologiczny wpływ procesów oddziaływania momentów magnetycznych ze sobą (T_2) oraz ich niemagnetycznym otoczeniem (T_1) prowadzących do ustalenia kierunku magnetyzacji w kierunku najbliższym osi Oz czyli minimalizacji energii układu. Procesy te prowadzą do zmniejszenia składowych magnetyzacji M_x , M_y leżących w płaszczyźnie prostopadłej do osi Oz (które dążą do zera ze względu na zanik korelacji fazowej w ruchu precesyjnym różnych momentów) i wzrostu z-towej składowej magnetyzacji. M_0 - wartość rzutu magnetyzacji na oś Oz uzyskana po odpowiednio długim czasie od chwili ustalenia stałej wartości i kierunku wypadkowej indukcji pola skierowanej wzdłuż osi OZ.



Rezonans magnetyczny

Polega on na selektywnej rezonansowej absorpcji lub wymuszonej emisji fali elektromagnetycznej przez substancję poddaną jednocześnie działaniu

- 1) stałego pola o dużej indukcji B_0 skierowanego wzdłuż osi Oz
- 2) Znacznie słabszego pola oscylującego, wirującego w płaszczyźnie prostopadłej do osi wyznaczonej przez pole B_0 z częstością rezonansową bliską częstości Larmora $\omega_0 = \gamma B_0$



W praktyce zamiast pola wirującego można przyłożyć dodatkowe niewielkie pole magnetyczne B_1 w płaszczyźnie prostopadłej do osi Oz zmieniające się w czasie z częstością rezonansową bliską częstości Larmora które można traktować jako także jako złożenie dwóch pól wirujących w tej płaszczyźnie w przeciwnych kierunkach.

Pole B_1 można powiązać także z padającą na układ falą elektromagnetyczną.

Pod wpływem pola wirującego następuje obrót magnetyzacji wokół kierunku wirującego pola magnetycznego co prowadzi do zmiany składowej z-owej magnetyzacji kosztem absorbowanej energii padającej fali (której odpowiada wzrost energii magnetyzacji w stałym polu magnetycznym określonej wzorem $E = -\vec{M} \cdot \vec{B}_0 = -M_z B_0$).

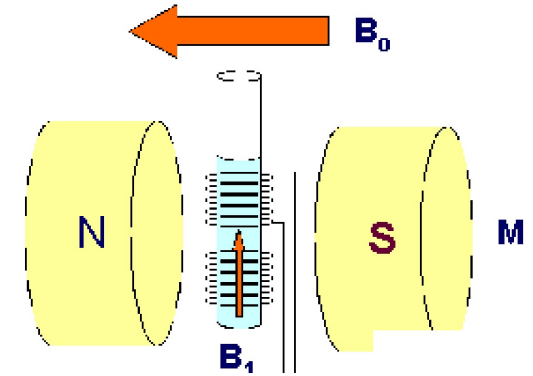
Określenie częstości fali przy której absorpcja energii fali jest maksymalna pozwala na określenie częstości rezonansowej zależnej od pola B_0 .

W celu ograniczenia warunków rezonansu do małego obszaru stosuje się niejednorodne stałe pole magnetyczne B_0 o pewnym stałym gradiencie wzdłuż wybranej osi Oz.

Rezonans magnetyczny-opis półklasyczny

W obecności silnego stałego pola $\vec{B}_0 = B_0 \vec{k}$ i słabego pola $\vec{B}_1$ rotującego wokół kierunku pola $\vec{B}_0$ układzie nieruchomym

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma(\vec{M} \times \vec{B} + \vec{M} \times \vec{B}_1) = -\omega_0(\vec{M} \times \vec{k}) + \gamma\vec{M} \times \vec{B}_1$$



W układzie obracającym się z prędkością kątową ω wokół kierunku pola B_0

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = -\omega_0(\vec{M} \times \vec{k}) + \gamma\vec{M} \times \vec{B}_1 - \omega\vec{k} \times \vec{M} = (\omega - \omega_0)(\vec{M} \times \vec{k}) + \gamma\vec{M} \times \vec{B}_1$$

Gdy prędkość kątowa ω jest równa częstości Larmora ω_0 to równanie powyższe przyjmie postać
$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma\vec{M} \times \vec{B}_1$$

(gdyż działanie silniejszego pola $\vec{B}_0$ jest skompensowane przez rotacyjny ruch układu). Dodatkowo pole $\vec{B}_1$ staje się polem stałym

Z otrzymanego równania wynika iż w układzie rotującym z częstością Larmora magnetyzacja będzie podlegać obrotowi wokół kierunku stałego w tym układzie pola $\vec{B}_1$, co prowadzi do odchylenia jej kierunku wyraźnie od osi OZ. Gdy $\omega_1 \neq \omega_0$ wpływ pola $\vec{B}_1$ na ruch namagnesowania można w pierwszym przybliżeniu zaniedbać

Kwantowy opis wyjaśnienia wystąpienia rezonansu

Występowanie maksimum pochłaniania dla energii fotonów promieniowania równej

$E = \hbar\omega_0$ gdyż energia ta odpowiada różnicy dozwolonych energii układu

Dowód. Dozwolone rzuty momentu magnetycznego na kierunek pola

$$\mu_z = \gamma m_j \hbar \quad m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j; \quad j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$$

Wartość liczby j zależy od pochodzenia momentu magnetycznego

Dozwolone energie momentu magnetycznego w polu magnetycznym

$$E = -\gamma m_j \hbar B_0$$

Obraz dla $j=1/2$

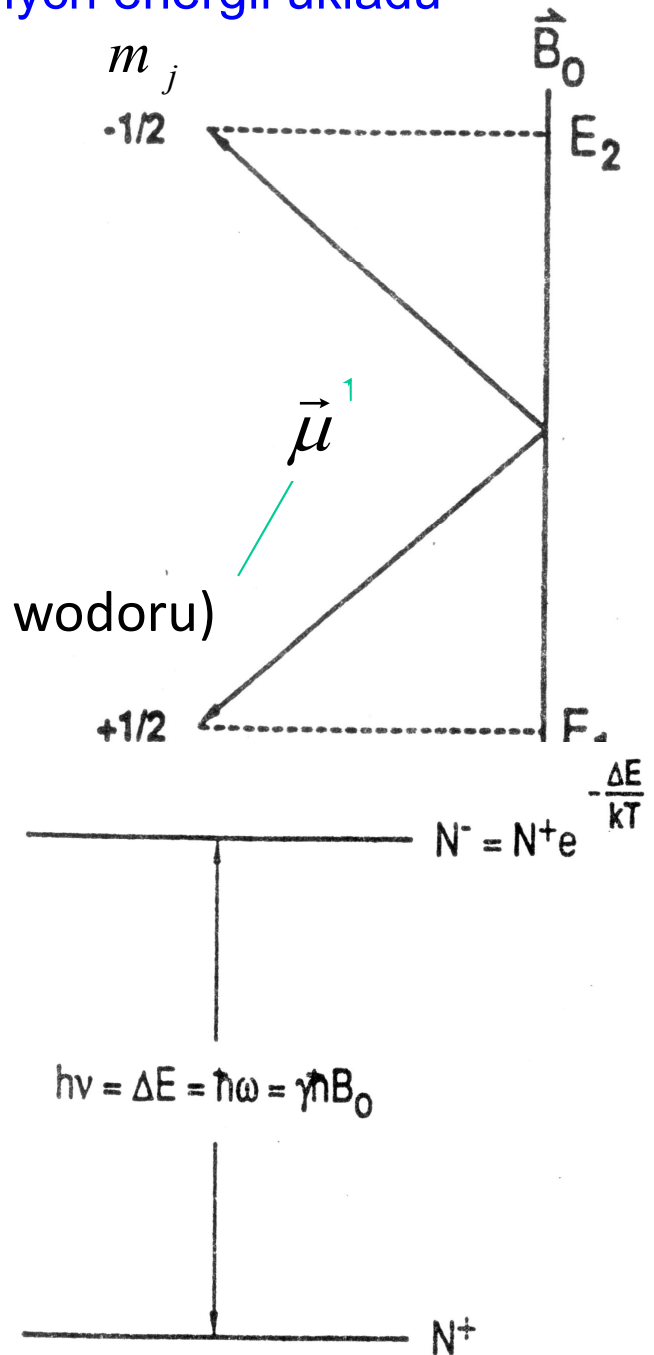
(np. proton tworzący jądro wodoru)

Najmniejsza zmiana energii momentu magnetycznego związana ze zmianą orientacji momentu pędu (zwykle spinu) jest równa $|\Delta E| = \hbar\gamma B_0 = \hbar\omega_0$

ω_0 -częstość Larmora

Jest ona więc równa energii fotonu promieniowania elektromagnetycznego o częstości Larmora. Fotony takie mogą być pochłaniane przez układ, co prowadzi do rezonansu.

Energia jest pochłaniana przez gdyż w stanie równowagi więcej obiektów z momentem magnetycznym znajduje się w stanie o niższej energii niż o wyższej



Rezonans magnetyczny dla spinowego momentu magnetycznego cząstki o spinie $s=1/2$ (np. elektron) – opis kwantowy

Stan spinowy elektronu opisujemy przez macierz

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$$

Zmiany w czasie tego stanu opisuje równanie analogiczne do równania Schrödingera zależnego od czasu

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle$$

Cześć operatora Hamiltona opisująca oddziaływanie momentu magnetycznego z polem ma postać

$$\hat{H} = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \hat{\vec{B}} = -(\hat{\mu}_x \cdot B_x + \hat{\mu}_y \cdot B_y + \hat{\mu}_z \cdot B_z) = -\gamma(\hat{S}_x \cdot B_x + \hat{S}_y \cdot B_y + \hat{S}_z \cdot B_z)$$

Zakładamy iż

$$B_z = B_0 \quad B_x = B_1 \cos(\omega t) \quad B_y = -B_1 \sin(\omega t)$$

$$B_z = B_0 \quad B_x = B_1 \cos(\omega t) \quad B_y = -B_1 \sin(\omega t)$$

Równanie $i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle$ przyjmuje postać

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = -\frac{\gamma\hbar}{2} \left\{ \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} B_x + \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} B_y + \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} B_z \right\} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$$

i można je zapisać w postaci dwóch równań sprzężonych

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \frac{\gamma}{2} (B_1 \cos(\omega t)b + iB_1 \sin(\omega t)b + B_0 a) \quad \frac{\partial b}{\partial t} = \frac{\gamma}{2} (B_1 \cos(\omega t)a - iB_1 \sin(\omega t)a - B_0 b)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} = i(\Omega_{\perp} b e^{i\omega t} + \Omega_{\parallel} a)$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} = i(\Omega_{\perp} a e^{-i\omega t} - \Omega_{\parallel} b)$$

gdzie $\Omega_{\perp} = \frac{\gamma B_1}{2}$

$$\Omega_{\parallel} = \frac{\gamma B_0}{2}$$

$$\cos(\omega t) + i \sin(\omega t) = e^{i\omega t}$$

$$\cos(\omega t) - i \sin(\omega t) = e^{-i\omega t}$$

Układ równań rozwiązujemy przy warunku początkowym
(spin skierowany do góry; $m_s=1/2$) czyli

$$|\psi(t=0)\rangle = \begin{bmatrix} a(t=0) \\ b(t=0) \end{bmatrix} = |+\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Po rozwiązaniu otrzymujemy

$$|\psi(t)\rangle = \begin{bmatrix} a(t) \\ b(t) \end{bmatrix} = \frac{\sin(\tilde{\omega}t)}{\tilde{\omega}} \begin{bmatrix} \exp\left(\frac{i\omega}{2}t\right) \left[i\left(\Omega_{\parallel} - \frac{\omega}{2}\right) + \tilde{\omega} \operatorname{ctg}(\tilde{\omega}t) \right] \\ i \exp\left(-\frac{i\omega}{2}t\right) \Omega_{\parallel} \end{bmatrix}$$

gdzie

$$\tilde{\omega} = \sqrt{\left(\Omega_{\parallel} - \frac{\omega}{2}\right)^2 + \Omega_{\perp}^2}$$

Wielkość określająca prawdopodobieństwo uzyskania w pomiarze zmiany rzutu spinu na oś OZ z $s_z = \frac{\hbar}{2}$ na $s_z = -\frac{\hbar}{2}$ to

$$P(t) = |\langle - | \psi(t) \rangle|^2 = |b(t)|^2 = \frac{\Omega_{\perp}^2 \sin^2(\tilde{\omega}t)}{\tilde{\omega}^2}$$

Osiąga ono maksimum gdy

$$\tilde{\omega} = \sqrt{\left(\Omega_{\parallel} - \frac{\omega}{2}\right)^2 + \Omega_{\perp}^2} = 0$$

czyli uwzględniając to iż $\Omega_{\perp} \ll \Omega_{\parallel}$ wówczas gdy $\omega = 2\Omega_{\parallel} = \gamma B_0 = \omega_0$

Przypadkowi temu odpowiada pochłonięcie przez elektron energii fotonu padającego promieniowania równej różnicy energii stanów elektronu z dodatnim i ujemnym rzutem momentu magnetycznego elektronu $\vec{\mu}$ na oś Oz (kierunek zewnętrznego pola magnetycznego B_0)

$$E = \hbar\omega_0 = \hbar\gamma B_0 = 2\frac{\hbar|e|}{2m}B_0 = 2|\mu_z|B_0 = 2\mu_B B_0$$

Rodzaje rezonansu magnetycznego

W zależności od typu obiektów będących źródłem magnetyzacji wprowadza się różne nazwy obserwowanego efektu rezonansu magnetycznego

a) Elektronowy rezonans magnetyczny –EPR

Źródłem magnetyzacji są momenty magnetyczne elektronów wchodzące w skład atomów (częstotliwości rezonansowe z zakresu mikrofal)

b) Jądrowy rezonans magnetyczny -NMR

Źródłem magnetyzacji są momenty magnetyczne jąder w tym zwłaszcza protonów (częstotliwości rezonansowe z zakresu fal radiowych, częstość rezonansowa dla magnetyzacji związanej z jądrami wodoru w polu o indukcji $B=1\text{ T}$ wynosi ona $267,52 \cdot 10^6 \text{ rad/s}$)

Efekt NMR stosujemy w medycynie do obrazowania tkanek i narządów (tomografia magnetyczno-rezonansowa) Momenty magnetyczne są związane głównie z jądrami atomów wodoru (protonami) wchodzącymi w skład wody wchodzącej w skład tkanek człowieka .

Efekty NMR i EPR stosujemy w chemii do badania składu chemicznego i własności strukturalnych różnych substancji.

Rezonans magnetyczny-opis półklasyczny kontynuacja

Gdy zależność pola poprzecznego od czasu ma postać

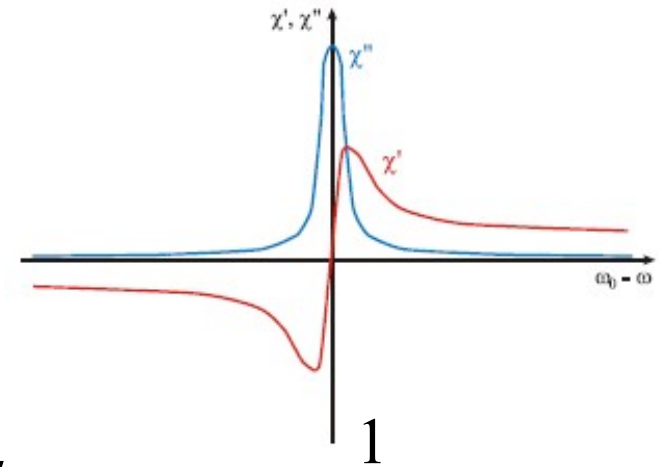
$$B_x(t) = B_1 \cos(\omega t) \quad B_y(t) = -B_1 \sin(\omega t)$$

to z rozwiązania fenomenologicznego równania Blocha w stanie ustalonym wynika iż

$$M_x(t) = B_1 [\chi' \cos(\omega t) - \chi'' \sin(\omega t)]$$

gdzie

$$\chi' = \omega_0 \frac{M_0}{B_0} T_2 \frac{(\omega_0 - \omega) T_2}{1 + (\omega_0 - \omega)^2 T_2^2 + \gamma^2 B_1^2 T_1 T_2} \quad \chi'' = \omega_0 \frac{M_0}{B_0} T_2 \frac{1}{1 + (\omega_0 - \omega)^2 T_2^2 + \gamma^2 B_1^2 T_1 T_2}$$



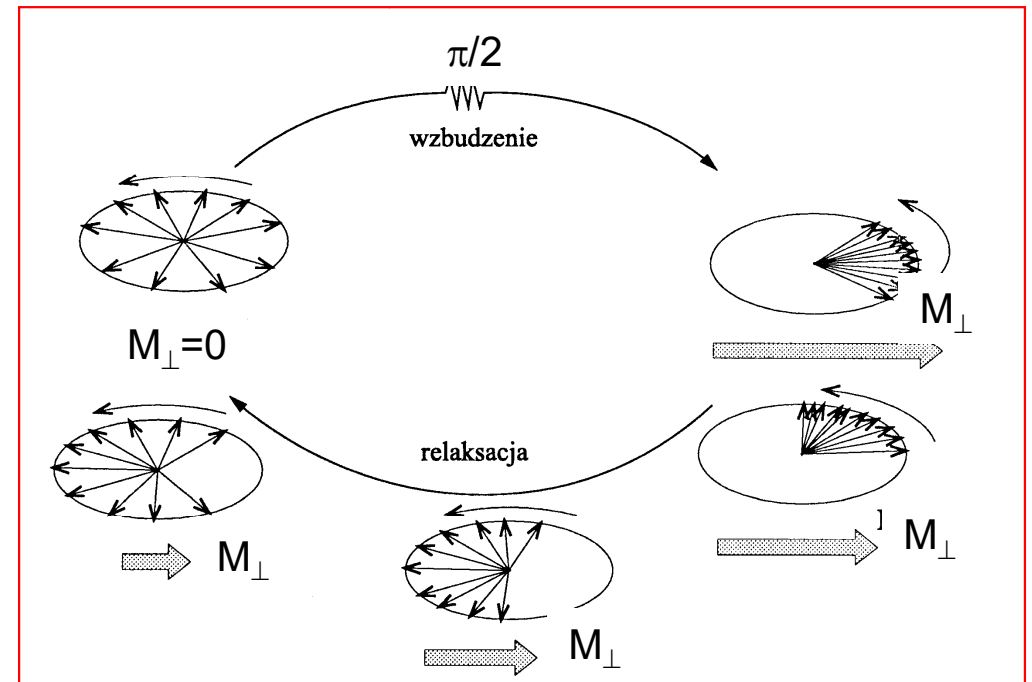
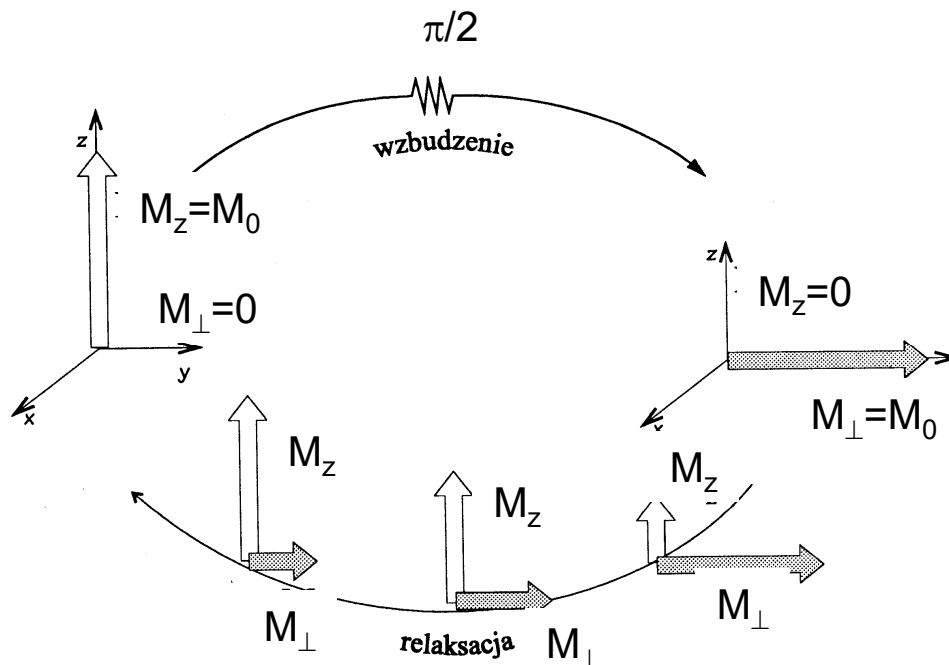
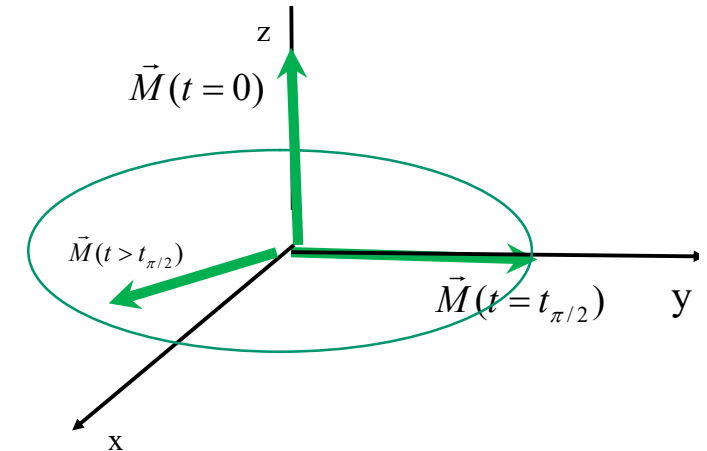
Zależność składowej χ'' podatności magnetycznej od ω wykazuje wyraźne maksimum dla częstości rezonansowej $\omega = \omega_0 = \gamma B_0$

Wyznaczenie częstości rezonansowej pozwala przy znanej wartości B_0 na określenie stosunku żyromagnetycznego γ lub określenia przy znanym γ wartości pola B_0 . W rzeczywistości wartość pola B_0 w którym znajduje się jądro (atom) ulega niewielkim zmianom w stosunku do pola zewnętrznego pod wpływem lokalnego otoczenia w którym jądro (atom) się znajduje. Określenie zmiany pola pozwala na uzyskanie cennych informacji o otoczeniu jądra i atomu.

Analiza zależności składowej x-owej magnetyzacji od częstości zmian przyłożonego pola B_1 pozwala na określenie czasów relaksacji T_1 , T_2 stanowiących istotne źródło informacji o badanej substancji. Często do ich dokładniejszego wyznaczenia stosuje się także impulsowe pola prostopadłe do osi Oz wyprowadzające magnetyzacje ze stanu równowagi i bada się odpowiedź układu na te pola.

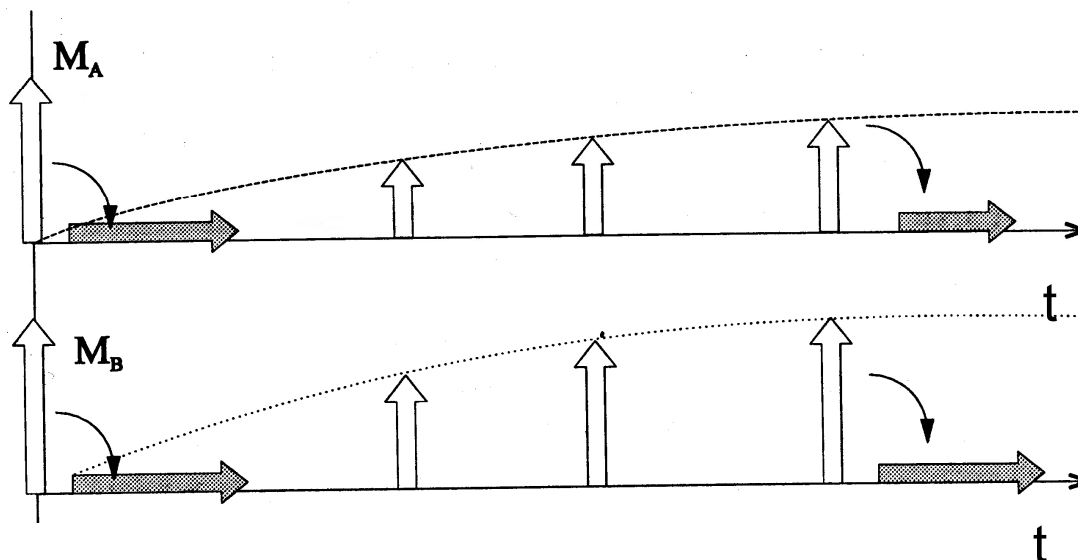
Wyznaczanie czasu relaksacji T_1 przy pomocy metod impulsowych

- 1) Przykładamy zmienne pole magnetyczne o częstości rezonansowej i indukcji B_1 skierowanej wzdłuż osi Ox (lub $-Ox$ dla $\gamma < 0$) przez czas $t_{\pi/2} = \frac{\pi}{2|\gamma|B_1}$ po którym wektor magnetyzacji jest skierowany wzdłuż osi Oy (impuls $\pi/2$).
- 2) Badamy wielkość sygnału proporcjonalnego do amplitudy wektora magnetyzacji rotującego w płaszczyźnie xOy



Wyznaczanie czasu relaksacji T_1 przy pomocy metod impulsowych

- 3) Pomiary wykonujemy kilkakrotnie. Po to aby uzyskany sygnał istotnie zależał od czasu T_1 kolejne pomiary wykonujemy po czasie na tyle krótkim żeby wielkość magnetyzacji M_Z w chwili przyłożenia impulsu $\pi / 2$ w obszarze o dużym T_1 była znacząco mniejsza. Powoduje to zróżnicowanie również wielkości składowej magnetyzacji rotującej w płaszczyźnie poziomej po przyłożeniu impulsu $\pi / 2$ mającej bezpośredni wpływ na wielkość sygnału wyjściowego
- 4) Po to aby uzyskany sygnał istotnie zależał od czasu T_1 można też przed wykonaniem każdego pomiaru przyłożyć impuls π odwracający kierunek namagnesowania a następnie pomiary wykonywać po czasie po którym namagnesowanie obszarów o różnym T_1 znacząco się różniło.



$$T_{1B} < T_{1A}$$

Metoda echa spinowego

Może służyć do dokładnego pomiaru czasu relaksacji T_2 .

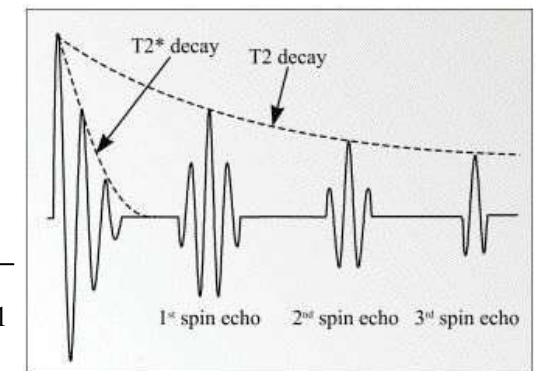
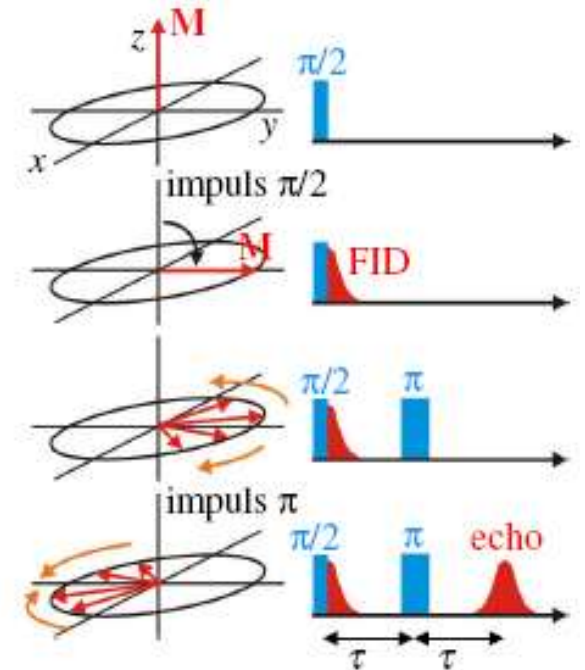
1) Przykładamy zmienne pole magnetyczne o częstości rezonansowej i indukcji B_1 skierowane wzdłuż osi Ox (lub $-Ox$ dla $\gamma < 0$) przez czas $t_{\pi/2} = \frac{\pi}{2|\gamma|B_1}$ po którym

wektor magnetyzacji jest skierowany wzdłuż osi Oy.

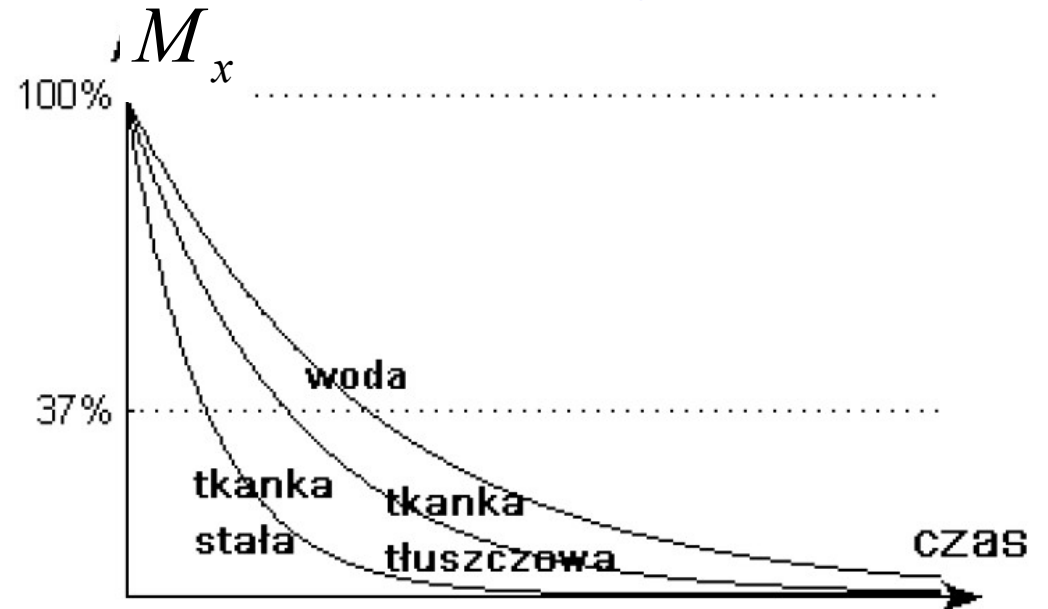
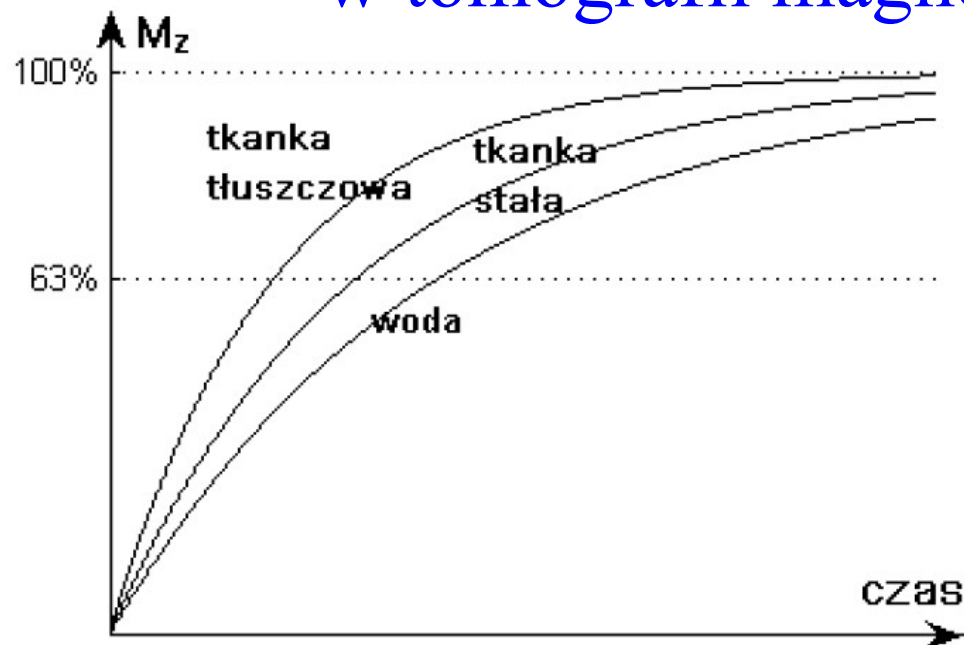
2) Następnie wektor magnetyzacji precesuje wokół osi Oz w płaszczyźnie $z=\text{const}$ przy czym ze względu na utratę koherencji w ruchu różnych momentów długość składowej wektora magnetyzacji w płaszczyźnie $z=\text{const}$ maleje. Proces zaniku jest silnie przyspieszony przez różną częstotliwość precesji różnych momentów w badanym obszarze wynikającą z niejednorodności pola magnetycznego działającego wzdłuż osi Oz.

3) Przyłożenie po czasie τ pola działającego w czasie $t_\pi = \frac{\pi}{|\gamma|B_1}$ powoduje iż po czasie 2τ następuje kompensacja efektu związanego z niejednorodnością pola (momenty które wyprzedzały inne dla $t < \tau$ są w chwili $t = \tau$ względem nich opóźnione i po czasie 2τ je doganiają co prowadzi do wzrostu składowej magnetyzacji w płaszczyźnie $z=0$. Jednak magnetyzacja jest mniejsza niż w chwili początkowej o czynnik rzędu $\exp\left(-\frac{2\tau}{T_2}\right)$

4) Podaną sekwencję sygnałów można stosować wielokrotnie.



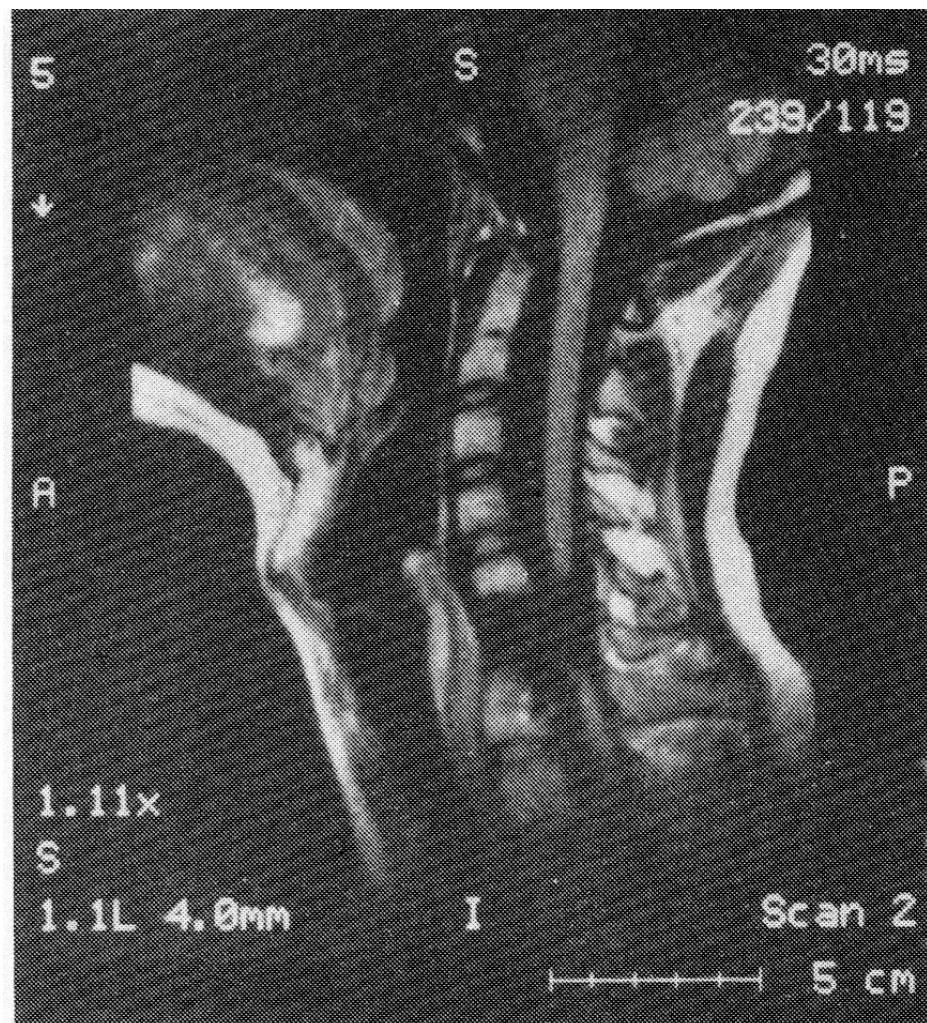
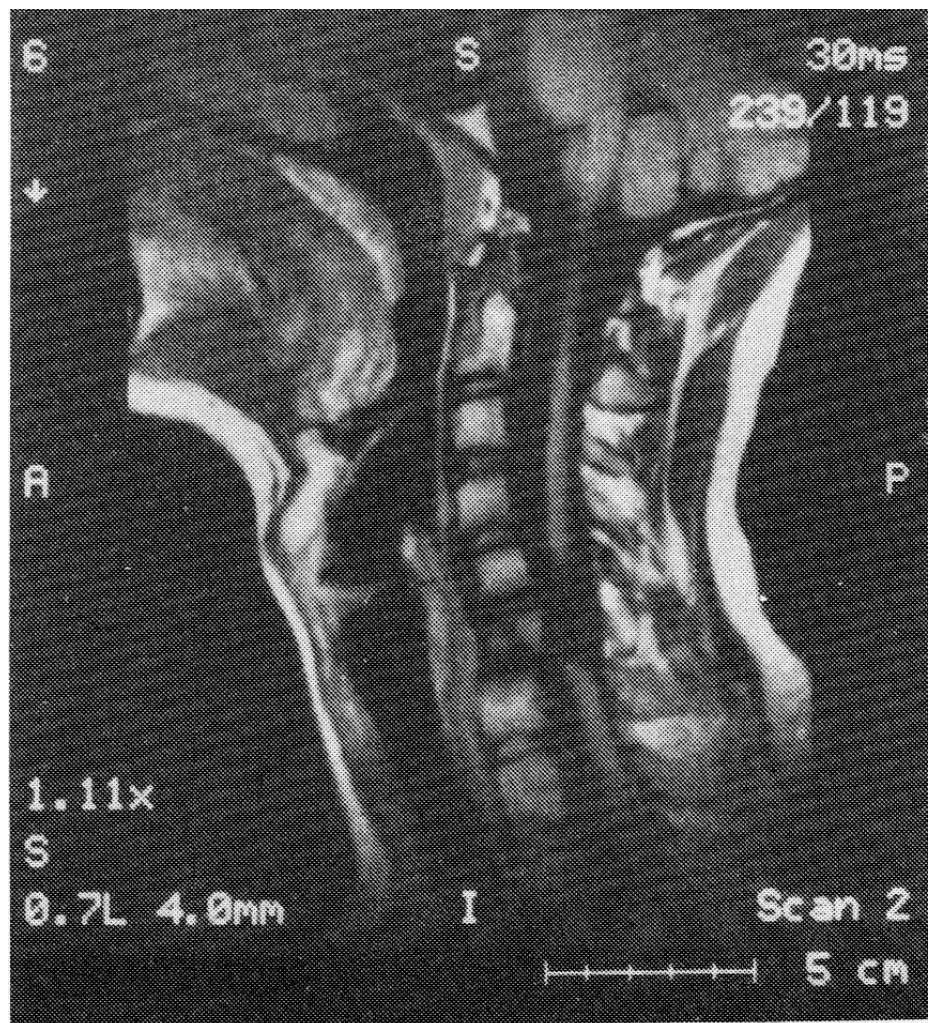
Wykorzystanie różnicy czasów relaksacji w tomografii magnetyczno-rezonansowej



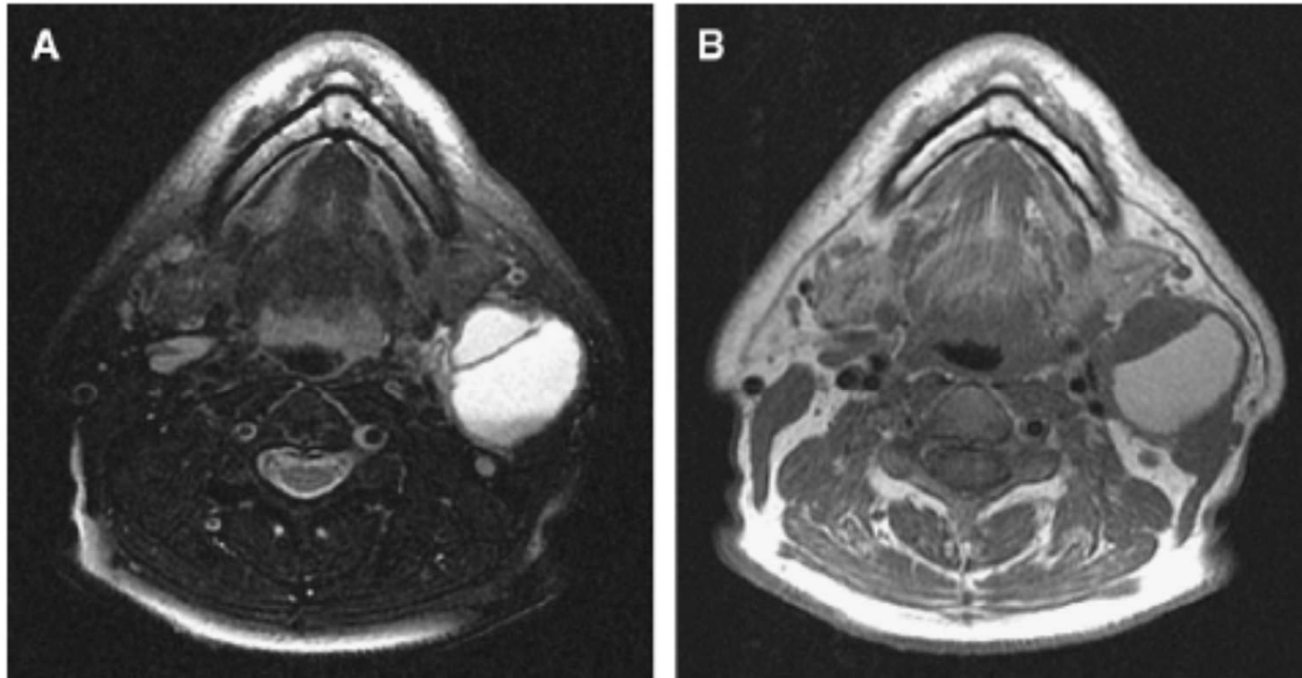
	Mięsień sercowy	Tkanka tłuszczowa	Wątroba	Istota biała mózgu	Istota szara mózgu	Krew tętnicza	Płyn mózgowo-rdzeniowy
■ T1 [ms]	800	250	575	560	1100	1200	2000
■ T2 [ms]	30	60	50	82	92	250	1000

Czas relaksacji [ms]

- Występowanie różnic między czasami relaksacji dla różnych tkanek pozwala na ich rozróżnienie na obrazie badanej części organizmu. Czasy relaksacji tkanek złożonych z wody są dłuższe od czasu relaksacji tkanek w skład których wchodzi większa liczba makrocząsteczek biologicznych. Zmiany patologiczne w obrębie danej tkanki zwykle także znacząco wpływają na czasy relaksacji



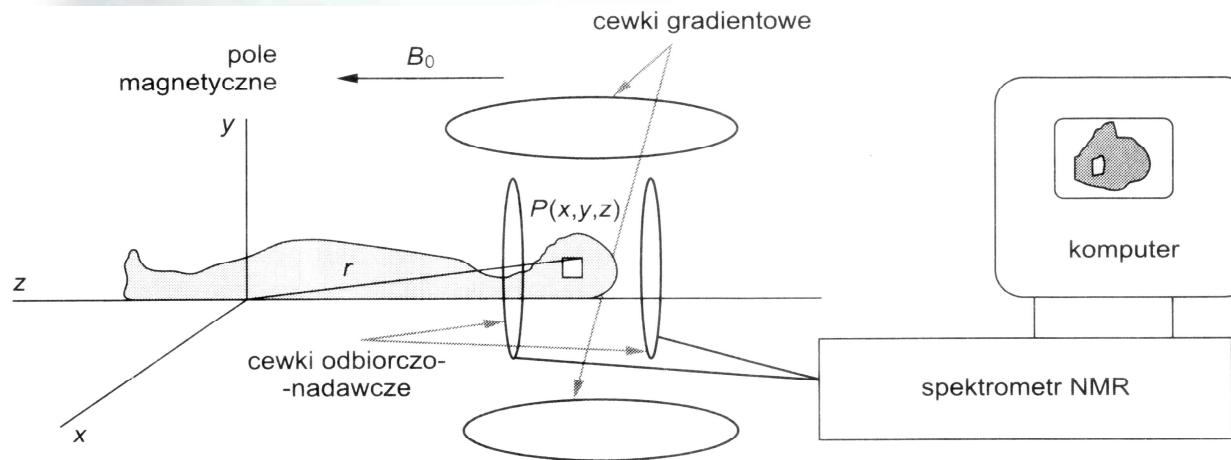
Obraz kręgosłupa szyjnego w płaszczyźnie strzałkowej. Widoczne jest złamanie trzonu T6 i przemieszczenie w kierunku kanału kręgowego. Obraz uzyskano wykorzystując zależność uzyskiwanego sygnału od czasu relaksacji T_1 .



Nowotwór języka

- A obraz uzyskany przy wykorzystaniu zależności sygnału od czasu T_2
- B obraz uzyskany przy wykorzystaniu zależności sygnału od czasu T_1

Tomograf

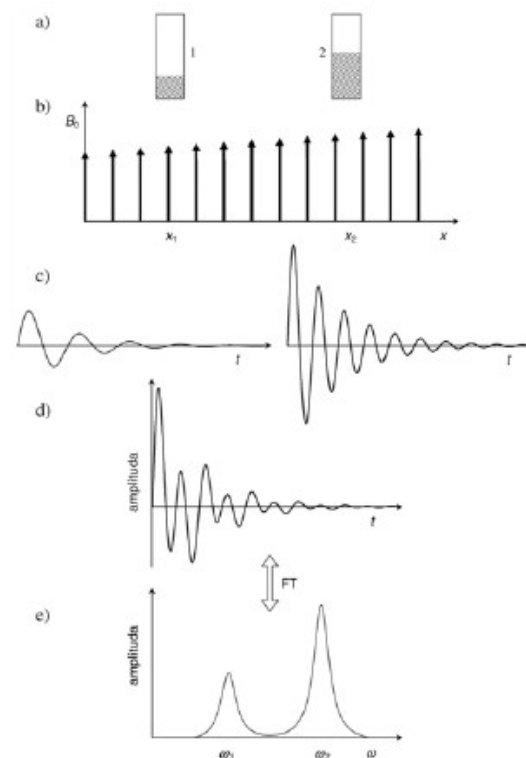
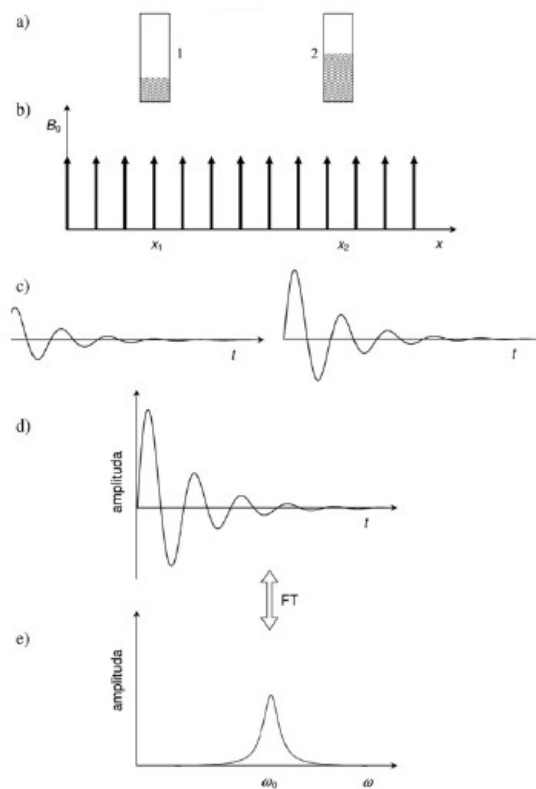


Do wytwarzania silnego stałego jednorodnego pola magnetycznego o indukcji z zakresu 0,5-3T (7T) wykorzystuje się zwykle magnesy nadprzewodzące w kształcie cewki wykonanej z żyłek nadprzewodzących wykonanych np. ze stopu niobu z tytanem wprasowanych do miedzianego drutu zapewniającego kontakt stopu z utrzymywany w temperaturze $T=4K$ helem otaczającym cewkę. Cała cewka umieszczona jest też w kriostacie zawierającym kilka przegród pomiędzy którymi znajduje się próżnia i ciekły azot. Obszar w którym leży pacjent może być utrzymywany w temperaturze pokojowej

Do wytwarzania stałego pola rzędu 0,1T-0,5 T wykorzystuje się też elektromagnesy z cewką nienadprzewodzącą wypełnioną w znacznej części (z wyjątkiem szczeliny w której leży pacjent) metalowym rdzeniem. Do wytwarzania gradientów pola stosuje się cewki gradientowe zaś do wytwarzania pola zmiennego cewki odbiorczo-nadawcze. Cewki te służą także do rejestrowania zmian pola magnetycznego wywołanych przez zmiany magnetyzacji na drodze zjawiska indukcji elektromagnetycznej

Wykorzystanie gradientów pola do rozróżnienia sygnałów pochodzących od różnych części badanego ciała

Pole w obrębie obrazowanego obszaru jest niejednorodne i charakteryzuje się występowaniem liniowych gradientów indukcji pola wzdłuż różnych kierunków w przestrzeni włączanych w trakcie badania, co pozwala na dokonanie oddzielnie analizy wybranych części ciała. Gradient stałego pola magnetycznego włączany w czasie podania impulsu $\pi/2$ pozwala na ograniczenie obszaru dla którego są spełnione warunki rezonansowe. Przyłączanie gradientów pola w trakcie rotacji wektora namagnesowania pozwala na zmianę częstości oscylacji namagnesowania w płaszczyźnie prostopadłej do osi Oz w różnych obszarach badanego ciała. Rozdzielenie sygnałów uzyskanych przy pomocy metod impulsowych pochodzących z różnych obszarów ciała dokonuje się częściowo przy pomocy metod opartych na transformacji Fouriera



Spin –uzupełniające dowody dla
zainteresowanych

Wartości własne i reprezentacja macierzowa operatorów związanych ze spinem

Operator $\hat{A}^+$ nazywamy operatorem hermitowsko sprzężonym do operatora $\hat{A}$ jeżeli zachodzi równość

$$\langle \psi_1 | \hat{A}^+ | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \hat{A} | \psi_1 \rangle^*$$

W przypadku gdy $\hat{A}$ jest operatorem hermitowskim to $\hat{A}^+ = \hat{A}$

Definiujemy tzw. operatory drabinkowe

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y$$

$$\hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y$$

Operatory te nie są operatorami hermitowskimi. Natomiast zachodzą relacje

$$(\hat{S}_+)^+ = \hat{S}_- \quad , \quad (\hat{S}_-)^+ = \hat{S}_+ \quad \text{gdyż}$$

$$(\hat{S}_+)^+ = (\hat{S}_x + i\hat{S}_y)^+ = (\hat{S}_x)^+ - i(\hat{S}_y)^+ = \hat{S}_x - i\hat{S}_y = \hat{S}_- \quad (\hat{S}_-)^+ = (\hat{S}_x - i\hat{S}_y)^+ = (\hat{S}_x)^+ + i(\hat{S}_y)^+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y = \hat{S}_+$$

W dowodzie wykorzystaliśmy fakt iż operatory składowych spinu są operatorami hermitowskimi

$$(\hat{S}_x)^+ = \hat{S}_x \quad (\hat{S}_y)^+ = \hat{S}_y \quad (\hat{S}_z)^+ = \hat{S}_z$$

Relacje spełnione przez operatory $\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y$ oraz $\hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y$

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_+] = \hbar \hat{S}_+$$

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_-] = -\hbar \hat{S}_-$$

$$\begin{aligned} [\hat{S}_z, \hat{S}_+] &= [\hat{S}_z, \hat{S}_x] + i[\hat{S}_z, \hat{S}_y] = [\hat{S}_z, \hat{S}_x] - i[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = \\ &= i\hbar \hat{S}_y - i(i\hbar \hat{S}_x) = i\hbar \hat{S}_y + \hbar \hat{S}_x = \hbar(\hat{S}_x + i\hat{S}_y) = \hbar \hat{S}_+ \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\hat{S}_z, \hat{S}_-] &= [\hat{S}_z, \hat{S}_x] - i[\hat{S}_z, \hat{S}_y] = [\hat{S}_z, \hat{S}_x] + i[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = \\ &= i\hbar \hat{S}_y + i(i\hbar \hat{S}_x) = i\hbar \hat{S}_y - \hbar \hat{S}_x = -\hbar(\hat{S}_x - i\hat{S}_y) = -\hbar \hat{S}_- \end{aligned}$$

$$[\hat{S}_+, \hat{S}_-] = 2\hbar \hat{S}_z$$

$$\begin{aligned} [\hat{S}_+, \hat{S}_-] &= [\hat{S}_x + i\hat{S}_y, \hat{S}_x - i\hat{S}_y] = [\hat{S}_x, \hat{S}_x] - i[\hat{S}_x, \hat{S}_y] + i[\hat{S}_y, \hat{S}_x] + [\hat{S}_y, \hat{S}_y] \\ &= 0 - i[\hat{S}_x, \hat{S}_y] - i[\hat{S}_x, \hat{S}_y] + 0 = -i(i\hbar \hat{S}_z) - i(i\hbar \hat{S}_z) = 2\hbar \hat{S}_z \end{aligned}$$

Relacje spełnione przez operatory $\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y$ oraz $\hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y$

$$[\hat{S}^2, \hat{S}_+] = 0$$

$$[\hat{S}^2, \hat{S}_-] = 0$$

$$[\hat{S}^2, \hat{S}_\pm] = [\hat{S}^2, \hat{S}_x] \pm [\hat{S}^2, \hat{S}_y] = 0$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_z^2 + \frac{1}{2}(\hat{S}_+\hat{S}_- + \hat{S}_-\hat{S}_+)$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_z^2 + \frac{1}{2}((\hat{S}_x + i\hat{S}_y)(\hat{S}_x - i\hat{S}_y) + (\hat{S}_x - i\hat{S}_y)(\hat{S}_x + i\hat{S}_y))$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_z^2 + \frac{1}{2}(\hat{S}_x^2 - i\hat{S}_x\hat{S}_y + i\hat{S}_y\hat{S}_x + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_x^2 + i\hat{S}_x\hat{S}_y - i\hat{S}_y\hat{S}_x + \hat{S}_y^2)$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_z^2 + \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_z^2 - \hbar \hat{S}_z + \hat{S}_+ \hat{S}_-$$

$$[\hat{S}_+, \hat{S}_-] = \hat{S}_+ \hat{S}_- - \hat{S}_- \hat{S}_+ = 2\hbar \hat{S}_z \longrightarrow \hat{S}_- \hat{S}_+ = \hat{S}_+ \hat{S}_- - 2\hbar \hat{S}_z$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_z^2 + \frac{1}{2}(\hat{S}_+ \hat{S}_- + \hat{S}_- \hat{S}_+) \xleftarrow{\quad} \hat{S}_z^2 + \frac{1}{2}(\hat{S}_+ \hat{S}_- + \hat{S}_+ \hat{S}_- - 2\hbar \hat{S}_z) = \hat{S}_z^2 - \hbar \hat{S}_z + \hat{S}_+ \hat{S}_-$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_z^2 + \hbar \hat{S}_z + \hat{S}_- \hat{S}_+$$

$$[\hat{S}_+, \hat{S}_-] = \hat{S}_+ \hat{S}_- - \hat{S}_- \hat{S}_+ = 2\hbar \hat{S}_z \longrightarrow \hat{S}_+ \hat{S}_- = \hat{S}_- \hat{S}_+ + 2\hbar \hat{S}_z$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_z^2 + \frac{1}{2}(\hat{S}_+ \hat{S}_- + \hat{S}_- \hat{S}_+) \xleftarrow{\quad} \hat{S}_z^2 + \frac{1}{2}(\hat{S}_- \hat{S}_+ + 2\hbar \hat{S}_z + \hat{S}_- \hat{S}_+) = \hat{S}_z^2 + \hbar \hat{S}_z + \hat{S}_- \hat{S}_+$$

Ponieważ $[\hat{S}_z, \hat{S}^2] = 0$ to operatory $\hat{S}_z$ oraz $\hat{S}^2$ mają wspólny układ wektorów własnych.

Oznaczmy te wektory przez $|\chi_{sm_s}\rangle$

Zapiszmy równania własne dla tych wektorów w postaci

$$\hat{S}_z |\chi_{sm_s}\rangle = \hbar m_s |\chi_{sm_s}\rangle \quad \hat{S}^2 |\chi_{sm_s}\rangle = \hbar^2 f(s) |\chi_{sm_s}\rangle$$

$f(s)$ – funkcja zmiennej s

Określmy nowy wektor stanu $|\gamma\rangle = \hat{S}_+ |\chi_{sm_s}\rangle$

Podziałajmy na ten wektor stanu operatorem $\hat{S}_z$

$$\begin{aligned} \hat{S}_z |\gamma\rangle &= \hat{S}_z \hat{S}_+ |\chi_{sm_s}\rangle = (\hat{S}_+ \hat{S}_z + \hbar \hat{S}_+) |\chi_{sm_s}\rangle = \\ &= (\hat{S}_+ \hbar m_s + \hbar \hat{S}_+) |\chi_{sm_s}\rangle = \hbar(m_s + 1) \hat{S}_+ |\chi_{sm_s}\rangle = \hbar(m_s + 1) |\gamma\rangle \end{aligned}$$

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_+] = \hat{S}_z \hat{S}_+ - \hat{S}_+ \hat{S}_z = \hbar \hat{S}_+$$

$$\hat{S}_z |\gamma\rangle = \hat{S}_z \hat{S}_+ |\chi_{s,m_s}\rangle = \hbar(m_s + 1) |\gamma\rangle$$

Stan opisany wektorem stanu $|\gamma\rangle = \hat{S}_+ |\chi_{sm_s}\rangle$ jest stanem własnym operatora $\hat{S}_z$ odpowiadającym wartości własnej podwyższonej o $\hbar$ w porównaniu z wartością własną odpowiadającą stanowi opisanemu przez $|\chi_{sm_s}\rangle$ a zatem można zapisać $|\gamma\rangle = \hat{S}_+ |\chi_{sm_s}\rangle = C_{s,m_s} |\chi_{s,m_s+1}\rangle$ (C_{s,m_s} - stała normująca)

Określmy nowy wektor stanu $|\delta\rangle = \hat{S}_- |\chi_{sm_s}\rangle$

Podziałajmy na ten wektor stanu operatorem $\hat{S}_z$

$$\begin{aligned} \hat{S}_z |\delta\rangle &= \hat{S}_z \hat{S}_- |\chi_{sm_s}\rangle = (\hat{S}_- \hat{S}_z - \hbar \hat{S}_-) |\chi_{sm_s}\rangle = \\ &= (\hat{S}_- \hbar m_s - \hbar \hat{S}_-) |\chi_{sm_s}\rangle = \hbar(m_s - 1) \hat{S}_- |\chi_{sm_s}\rangle = \hbar(m_s - 1) |\delta\rangle \end{aligned}$$

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_-] = \hat{S}_z \hat{S}_- - \hat{S}_- \hat{S}_z = -\hbar \hat{S}_-$$

$$\hat{S}_z |\delta\rangle = \hat{S}_z \hat{S}_- |\chi_{sm_s}\rangle = \hbar(m_s - 1) |\delta\rangle$$

Stan opisany wektorem stanu $|\delta\rangle = \hat{S}_- |\chi_{sm_s}\rangle$ jest stanem własnym operatora $\hat{S}_z$ odpowiadającym wartości własnej obniżonej o $\hbar$ w porównaniu z wartością własną odpowiadającą stanowi opisanemu przez $|\psi_{sm_s}\rangle$ a zatem można zapisać $|\delta\rangle = \hat{S}_- |\chi_{sm_s}\rangle = D_{s,m_s} |\chi_{s,m_s-1}\rangle$ (D_{s,m_s} - stała normująca)

Wartości własne operatora $\hat{S}_z$ tworzą ciąg w którym kolejne wartości własne różnią się o $\hbar$

Podziałajmy na wektory stanu $|\gamma\rangle = \hat{S}_+ |\chi_{sm_s}\rangle$ oraz $|\delta\rangle = \hat{S}_- |\chi_{sm_s}\rangle$ operatorem $\hat{S}^2$

$$\hat{S}^2 |\gamma\rangle = \hat{S}^2 \hat{S}_+ |\chi_{sm_s}\rangle = \hat{S}_+ \hat{S}^2 |\chi_{sm_s}\rangle = \hat{S}_+ \hbar^2 f(s) |\chi_{sm_s}\rangle = \hbar^2 f(s) \hat{S}_+ |\chi_{sm_s}\rangle = \hbar^2 f(s) |\gamma\rangle$$

$$\hat{S}^2 |\delta\rangle = \hat{S}^2 \hat{S}_- |\chi_{sm_s}\rangle = \hat{S}_- \hat{S}^2 |\chi_{sm_s}\rangle = \hat{S}_- \hbar^2 f(s) |\chi_{sm_s}\rangle = \hbar^2 f(s) \hat{S}_- |\chi_{sm_s}\rangle = \hbar^2 f(s) |\delta\rangle$$

Oba wektory stanu są wektorami własnymi operatora $\hat{S}^2$ należącymi do tej samej wartości własnej $\hbar^2 f(s)$

Wektory powstałe przez działanie operatorów $\hat{S}_+$ lub $\hat{S}_-$ na wspólne wektory własne operatorów $\hat{S}^2$ i $\hat{S}_z$ są wektorami własnymi operatora $\hat{S}^2$ należącymi do tej samej wartości własnej

Z definicji wynika iż $\hat{S}^2 - \hat{S}_z^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2$

W stanie własnym $|\chi_{sm_s}\rangle$ wartość oczekiwana

$$\langle \hat{S}^2 - \hat{S}_z^2 \rangle = \langle \hat{S}^2 \rangle - \langle \hat{S}_z^2 \rangle = \hbar^2 f(s) - \hbar^2 m_s^2$$

$$\text{Ponadto } \langle \hat{S}^2 - \hat{S}_z^2 \rangle = \langle \hat{S}_x^2 \rangle + \langle \hat{S}_y^2 \rangle \geq 0$$

A zatem $\hbar f(s) - \hbar m_s^2 \geq 0$ czyli $|m_s| \leq \sqrt{f(s)}$

Dla ustalonej liczby s od której zależy wartość własna operatora kwadratu spinu (długość wektora spinu) mamy ograniczenie na maksymalną i minimalną wartość liczby m_s określającej rzut spinu na oś OZ.

Długość rzutu spinu na oś OZ nie może być dłuższa od długości wektora spinu

Oznaczmy stany o maksymalnej i minimalnej wartości liczby m_s jako $\left| \chi_{sm_{s,\max}} \right\rangle$ oraz $\left| \chi_{sm_{s,\min}} \right\rangle$

$$\text{Musi zachodzić } \hat{S}_+ \left| \chi_{sm_{s,\max}} \right\rangle = 0 \quad \hat{S}_- \left| \chi_{sm_{s,\min}} \right\rangle = 0$$

Możemy podzielać na stany $\left| \chi_{sm_{s,\max}} \right\rangle$ oraz $\left| \chi_{sm_{s,\min}} \right\rangle$ operatorem $\hat{S}^2$

zapisanym w postaci $\hat{S}^2 = \hat{S}_z^2 + \hbar \hat{S}_z + \hat{S}_- \hat{S}_+$ oraz $\hat{S}^2 = \hat{S}_z^2 - \hbar \hat{S}_z + \hat{S}_+ \hat{S}_-$ odpowiednio

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 \left| \chi_{s,m_{s,\max}} \right\rangle &= \hat{S}_z^2 \left| \chi_{s,m_{s,\max}} \right\rangle + \hbar \hat{S}_z \left| \chi_{s,m_{s,\max}} \right\rangle + \hat{S}_- \hat{S}_+ \left| \chi_{s,m_{s,\max}} \right\rangle = \\ &= \hbar^2 m_{s,\max}^2 \left| \chi_{s,m_{s,\max}} \right\rangle + \hbar^2 m_{s,\max} \left| \chi_{s,m_{s,\max}} \right\rangle + 0 = \hbar^2 m_{s,\max} (m_{s,\max} + 1) \left| \chi_{s,m_{s,\max}} \right\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 \left| \chi_{s,m_{s,\min}} \right\rangle &= \hat{S}_z^2 \left| \chi_{s,m_{s,\min}} \right\rangle - \hbar \hat{S}_z \left| \chi_{s,m_{s,\min}} \right\rangle + \hat{S}_+ \hat{S}_- \left| \chi_{s,m_{s,\min}} \right\rangle = \\ &= \hbar^2 m_{s,\min}^2 \left| \chi_{s,m_{s,\min}} \right\rangle - \hbar^2 m_{s,\min} \left| \chi_{s,m_{s,\min}} \right\rangle + 0 = \hbar^2 m_{s,\min} (m_{s,\min} - 1) \left| \chi_{s,m_{s,\min}} \right\rangle \end{aligned}$$

Otrzymaliśmy relacje:

$$\hat{S}^2 \left| \chi_{sm_{s,\max}} \right\rangle = \hbar^2 f(s) \left| \chi_{sm_{s,\max}} \right\rangle \qquad \hat{S}^2 \left| \chi_{sm_{s,\min}} \right\rangle = \hbar^2 f(s) \left| \chi_{sm_{s,\min}} \right\rangle$$

$$\hat{S}^2 \left| \chi_{s,m_{s,\max}} \right\rangle = \hbar^2 m_{s,\max} (m_{s,\max} + 1) \left| \chi_{s,m_{s,\max}} \right\rangle$$

$$\hat{S}^2 \left| \chi_{s,m_{s,\min}} \right\rangle = \hbar^2 m_{s,\min} (m_{s,\min} - 1) \left| \chi_{s,m_{s,\min}} \right\rangle$$

Z relacji tych wynika iż $m_{s,\max} (m_{s,\max} + 1) = m_{s,\min} (m_{s,\min} - 1) = f(s)$

Równanie $m_{s,\max} (m_{s,\max} + 1) = m_{s,\min} (m_{s,\min} - 1)$ wymaga by $m_{s,\min} = -m_{s,\max}$

Z równania $m_{s,\max} (m_{s,\max} + 1) = f(s)$ po określeniu liczby s jako $s = m_{s,\max}$ otrzymujemy $f(s) = s(s + 1)$

Widać iż spełniona jest relacja $|m_s| \leq \sqrt{f(s)} = \sqrt{m_{s,\max} (m_{s,\max} + 1)}$ gdyż $|m_s| < m_{s,\max}$

Ponieważ $|m_{s,\max}| = |m_{s,\min}| = s$ oraz kolejne liczby m_s mogą się różnić tylko o 1 to liczba s musi być liczbą będącą wielokrotnością liczby $1/2$

A więc z poczynionych rozważań wynikają następujące warunki na dozwolone wartości jakie mogą przyjmować liczby s i m_s od których zależą wartości własne operatorów kwadratu spinu oraz rzutu spinu na oś OZ

$$s=0, 1/2, 1, 3/2, 2, 5/2, \dots$$

$$m_s = -s, -s+1, -s+2, \dots, s-2, s-1, s$$

Warunki te dopuszczają połówkowe wartości liczby s , które były zabronione w przypadku orbitalnego momentu pędu z uwagi na warunek jednoznaczności funkcji falowej, z którego to warunku wynikało iż $l=0, 1, 2, 3, \dots$

Warunek jednoznaczności funkcji falowej nie wpływa na dozwolone wartości własne operatorów związanych ze spinem (własnym momentem pędu cząstki), którego wektory własne nie można reprezentować przez funkcje zależne od zmiennych przestrzennych.

Dowód relacji

$$\hat{S}_+ |\chi_{s,m_s}\rangle = \hbar \sqrt{(s-m_s)(s+m_s+1)} |\chi_{s,m_s+1}\rangle \quad \hat{S}_- |\chi_{s,m_s}\rangle = \hbar \sqrt{(s+m_s)(s-m_s+1)} |\chi_{s,m_s-1}\rangle$$

Wcześniej pokazano

$$|\gamma\rangle = \hat{S}_+ |\chi_{s,m_s}\rangle = C_{s,m_s} |\chi_{s,m_s+1}\rangle \quad |\delta\rangle = \hat{S}_- |\chi_{s,m_s}\rangle = D_{s,m_s} |\chi_{s,m_s-1}\rangle$$

Wyznaczenie współczynników C_{s,m_s} oraz D_{s,m_s} dla których

$$\langle \chi_{s,m_s+1} | \chi_{s,m_s+1} \rangle = \langle \chi_{s,m_s-1} | \chi_{s,m_s-1} \rangle = 1 \quad \text{gdy} \quad \langle \chi_{s,m_s} | \chi_{s,m_s} \rangle = 1$$

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 |\chi_{s,m_s}\rangle &= \hat{S}_z^2 |\chi_{s,m_s}\rangle + \hbar \hat{S}_z |\chi_{s,m_s}\rangle + \hat{S}_- \hat{S}_+ |\chi_{s,m_s}\rangle = \\ &= \hbar^2 m_s^2 |\chi_{s,m_s}\rangle + \hbar^2 m_s |\chi_{s,m_s}\rangle + C_{s,m_s} D_{s,m_s+1} |\chi_{s,m_s}\rangle = [\hbar^2 m_s (m_s + 1) + C_{s,m_s} D_{s,m_s+1}] |\chi_{s,m_s}\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 |\chi_{s,m_s}\rangle &= \hat{S}_z^2 |\chi_{s,m_s}\rangle - \hbar \hat{S}_z |\chi_{s,m_s}\rangle + \hat{S}_+ \hat{S}_- |\chi_{s,m_s}\rangle = \\ &= \hbar^2 m_s^2 |\chi_{s,m_s}\rangle - \hbar^2 m_s |\chi_{s,m_s}\rangle + D_{s,m_s} C_{s,m_s-1} |\chi_{s,m_s}\rangle = [\hbar^2 m_s (m_s - 1) + D_{s,m_s} C_{s,m_s-1}] |\chi_{s,m_s}\rangle \end{aligned}$$

$$S^2 |\chi_{s,m_s}\rangle = h^2 s(s+1) |\chi_{s,m_s}\rangle$$

Z porównania powyższych wzorów wynika iż

$$h^2 s(s+1) = \hbar^2 m_s (m_s + 1) + C_{s,m_s} D_{s,m_s+1} = \hbar^2 m_s (m_s - 1) + C_{s,m_s-1} D_{s,m_s}$$

$$\left\langle \chi_{s,m_s+1} \left| \hat{S}_+ \right| \chi_{s,m_s} \right\rangle = C_{s,m_s} \left\langle \chi_{s,m_s+1} \left| \chi_{s,m_s+1} \right\rangle = C_{s,m_s}$$

$$\begin{aligned} \left\langle \chi_{s,m_s+1} \left| \hat{S}_+ \right| \chi_{s,m_s} \right\rangle &= \left\langle \chi_{s,m_s+1} \left| \left(\hat{S}_- \right)^+ \right| \chi_{s,m_s} \right\rangle = \left\langle \chi_{s,m_s} \left| \hat{S}_- \right| \chi_{s,m_s+1} \right\rangle^* = \\ &= D_{s,m_s+1}^* \left\langle \chi_{s,m_s} \left| \chi_{s,m_s} \right\rangle^* = D_{s,m_s+1}^* \end{aligned}$$

Z porównania powyższych wzorów wynika iż $C_{s,m_s} = D_{s,m_s+1}^*$ a zatem

$$\begin{aligned} \hbar^2 s(s+1) &= \hbar^2 m_s(m_s+1) + C_{s,m_s} D_{s,m_s+1} = \hbar^2 m_s(m_s-1) + C_{s,m_s-1} D_{s,m_s} = \\ &= \hbar^2 m_s(m_s+1) + |C_{s,m_s}|^2 = \hbar^2 m_s(m_s-1) + |D_{s,m_s}|^2 \end{aligned}$$

Z powyższej równości wynika iż

$$\begin{aligned} |C_{s,m_s}|^2 &= \hbar^2 [s(s+1) - m_s(m_s+1)] = \hbar^2 [(s-m_s)(s+m_s+1)] \\ |D_{s,m_s}|^2 &= \hbar^2 [s(s+1) - m_s(m_s-1)] = \hbar^2 [(s+m_s)(s-m_s+1)] \end{aligned}$$

Z przeprowadzonych rozważań wynikają relacje:

$$\hat{S}_+ \left| \chi_{s,m_s} \right\rangle = \hbar \sqrt{(s - m_s)(s + m_s + 1)} \left| \chi_{s,m_s+1} \right\rangle$$

$$\hat{S}_- \left| \chi_{s,m_s} \right\rangle = \hbar \sqrt{(s + m_s)(s - m_s + 1)} \left| \chi_{s,m_s-1} \right\rangle$$

W szczególności dla elektronu mamy $s=1/2, m_s=\pm\frac{1}{2}$

$$\left| \chi_{s=\frac{1}{2}, m_s=\frac{1}{2}} \right\rangle = |+\rangle \quad \left| \chi_{s=\frac{1}{2}, m_s=-\frac{1}{2}} \right\rangle = |-\rangle \quad \langle +|+\rangle = \langle -|-\rangle = 1 \quad \langle +|-\rangle = \langle -|+\rangle = 0$$

$$\hat{S}_+ |-\rangle = \hbar |+\rangle \quad \hat{S}_+ |+\rangle = 0 \quad \hat{S}_- |+\rangle = \hbar |-\rangle \quad \hat{S}_- |-\rangle = 0$$

Wyznaczenie reprezentacji macierzowej operatorów $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z, \hat{S}^2$ gdy $s=1/2$

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y$$

$$\hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y$$



$$\hat{S}_x = \frac{\hat{S}_+ + \hat{S}_-}{2}$$

$$\hat{S}_y = \frac{\hat{S}_+ - \hat{S}_-}{2i} = i \frac{\hat{S}_- - \hat{S}_+}{2}$$

$$\langle + | \hat{S}_x | + \rangle = \frac{1}{2} [\langle + | \hat{S}_+ | + \rangle + \langle + | \hat{S}_- | + \rangle] = \frac{1}{2} [0 + \hbar \langle + | - \rangle] = 0$$

$$\langle - | \hat{S}_x | - \rangle = \frac{1}{2} [\langle - | \hat{S}_+ | - \rangle + \langle - | \hat{S}_- | - \rangle] = \frac{1}{2} [\hbar \langle - | + \rangle + 0] = 0$$

$$\langle + | \hat{S}_x | - \rangle = \frac{1}{2} [\langle + | \hat{S}_+ | - \rangle + \langle + | \hat{S}_- | - \rangle] = \frac{1}{2} [\hbar \langle + | + \rangle + 0] = \frac{\hbar}{2}$$

$$\langle - | \hat{S}_x | + \rangle = \frac{1}{2} [\langle - | \hat{S}_+ | + \rangle + \langle - | \hat{S}_- | + \rangle] = \frac{1}{2} [0 + \hbar \langle - | - \rangle] = \frac{\hbar}{2}$$

$$\hat{S}_x = \begin{bmatrix} \langle + | \hat{S}_x | + \rangle & \langle + | \hat{S}_x | - \rangle \\ \langle - | \hat{S}_x | + \rangle & \langle - | \hat{S}_x | - \rangle \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\langle + | \hat{S}_y | + \rangle = \frac{i}{2} [\langle + | \hat{S}_- | + \rangle - \langle + | \hat{S}_+ | + \rangle] = \frac{i}{2} [\hbar \langle + | - \rangle - 0] = 0$$

$$\langle - | \hat{S}_y | - \rangle = \frac{i}{2} [\langle - | \hat{S}_- | - \rangle - \langle - | \hat{S}_+ | - \rangle] = \frac{i}{2} [0 - \hbar \langle - | + \rangle] = 0$$

$$\langle + | \hat{S}_y | - \rangle = \frac{i}{2} [\langle + | \hat{S}_- | - \rangle - \langle + | \hat{S}_+ | - \rangle] = \frac{i}{2} [0 - \hbar \langle + | + \rangle] = \frac{-i\hbar}{2}$$

$$\langle - | \hat{S}_y | + \rangle = \frac{i}{2} [\langle - | \hat{S}_- | + \rangle - \langle - | \hat{S}_+ | + \rangle] = \frac{i}{2} [\hbar \langle - | - \rangle - 0] = \frac{i\hbar}{2}$$

$$\hat{S}_y = \begin{bmatrix} \langle + | \hat{S}_y | + \rangle & \langle + | \hat{S}_y | - \rangle \\ \langle - | \hat{S}_y | + \rangle & \langle - | \hat{S}_y | - \rangle \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

$$\langle + | \hat{S}_z | + \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle + | + \rangle = \frac{\hbar}{2}$$

$$\langle - | \hat{S}_z | - \rangle = -\frac{\hbar}{2} \langle - | - \rangle = -\frac{\hbar}{2}$$

$$\langle + | \hat{S}_z | - \rangle = -\frac{\hbar}{2} \langle + | - \rangle = 0$$

$$\langle - | \hat{S}_z | + \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle - | + \rangle = 0$$

$$\hat{S}_z = \begin{bmatrix} \langle + | \hat{S}_z | + \rangle & \langle + | \hat{S}_z | - \rangle \\ \langle - | \hat{S}_z | + \rangle & \langle - | \hat{S}_z | - \rangle \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\langle + | \hat{S}^2 | + \rangle = \frac{3\hbar^2}{4} \langle + | + \rangle = \frac{3\hbar^2}{4}$$

$$\langle - | \hat{S}^2 | - \rangle = \frac{3\hbar^2}{4} \langle - | - \rangle = \frac{3\hbar^2}{4}$$

$$\langle + | \hat{S}^2 | - \rangle = \frac{3\hbar^2}{4} \langle + | - \rangle = 0$$

$$\langle - | \hat{S}^2 | + \rangle = \frac{3\hbar^2}{4} \langle - | + \rangle = 0$$

$$\hat{S}^2 = \begin{bmatrix} \langle + | \hat{S}^2 | + \rangle & \langle + | \hat{S}^2 | - \rangle \\ \langle - | \hat{S}^2 | + \rangle & \langle - | \hat{S}^2 | - \rangle \end{bmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Wyznaczenie rozszczepiania poziomów energetycznych
atomu na skutek sprzężenia spinowo orbitalnego
(dla osób zainteresowanych)

Całkowity moment pędu $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$

Całkowity moment pędu $\hat{J}$ spełnia te same reguły komutacyjne co orbitalny moment pędu $\hat{L}$ i spin $\hat{S}$

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar \hat{J}_z \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar \hat{J}_x \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar \hat{J}_y$$

$$[\hat{J}_x, \hat{J}^2] = [\hat{J}_y, \hat{J}^2] = [\hat{J}_z, \hat{J}^2] = 0 \quad \hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$$

Równania własne dla operatorów $\hat{J}_z$ oraz $\hat{J}^2$

$$\hat{J}^2 \chi(j, m_j) = \hbar^2 j(j+1) \chi(j, m_j) \quad j = |l-s|, |l-s|+1, \dots, l+s-1, l+s$$

Dla $s=1/2$ mamy $j=l+1/2$ lub $j=l-1/2$ (gdy $l \neq 0$)

$$\hat{J}_z \chi(j, m_j) = \hbar m_j \chi(j, m_j) \quad m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j$$

Liczba kwantowa j określająca dozwolone wartości (kwadratu) długości wektora całkowitego momentu pędu w stanie własnym tego operatora zależy od liczb l i s określających długości wektorów orbitalnego momentu pędu i spinu.

Istnieje możliwość jednoczesnego wyznaczenia długości wektorów $\vec{J}, \vec{L}, \vec{S}$ oraz rzutu całkowitego momentu pędu na oś Oz nawet w obecności oddziaływania spinowo-orbitalnego.

Gdy uwzględniamy sprzężenie spinowo-orbitalne do opisu stanu kwantowego atomu zamiast liczb m, m_s wykorzystujemy liczby j, m_j określające wartości własne operatorów

- 1) $\hat{J}^2$ które są równe $\hbar^2 j(j+1)$ przy czym $j = |l-s|, |l-s|+1, \dots, l+s-1, l+s$
- 2) $\hat{J}_z$ które są równe $\hbar m_j$ przy czym $m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j$

Nadal do ich opisu stosujemy także liczby n, l, s

Wynika to z faktu iż

$$[\hat{H}, \hat{J}_z] = 0; [\hat{H}, \hat{J}^2] = 0; [\hat{H}, \hat{L}^2] = 0; [\hat{H}, \hat{S}^2] = 0 \quad \hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$$

Można pokazać bowiem iż
$$\hat{J} \cdot \hat{J} = \hat{L} \cdot \hat{L} + \hat{S} \cdot \hat{S} + 2\hat{L} \cdot \hat{S}$$

$$\hat{H}_{so} = \lambda \hat{S} \cdot \hat{L} = \frac{\lambda}{2} \left(\hat{J} \cdot \hat{J} - \hat{L} \cdot \hat{L} - \hat{S} \cdot \hat{S} \right) = \frac{\lambda}{2} \left(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2 \right)$$

We wspólnym stanie własnym operatorów $\hat{H}, \hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{L}^2, \hat{S}^2$ wkład do energii elektronu w atomie związany z oddziaływaniem spinowo-orbitalnym jest równy
$$E_{so} = \frac{\tilde{\lambda}}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \quad \tilde{\lambda} = \langle \lambda \rangle \hbar^2$$

$\langle \lambda \rangle$ -wartość oczekiwana λ W atomie wodoru
$$\lambda = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr}$$

Przykład: elektron w atomie jednoelektronowym (lub atomie o jednym elektronie walencyjnym) w stanie o $l=0$ oraz $l=1$ ($s=1/2$ dla elektronu zawsze)

$$E_{so} = \frac{\tilde{\lambda}}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$$

Dla $l=0, j=1/2$ brak rozszczepienia poziomów energetycznych

$$E_{so}(l=0, j=\frac{1}{2}) = \frac{\tilde{\lambda}}{2} \left[\frac{3}{4} - 0 - \frac{3}{4} \right] = 0$$

Zaś gdy $l=1, j=3/2$ lub $j=1/2$ występuje rozszczepienie

$$E_{so}(l=1, j=\frac{3}{2}) = \frac{\tilde{\lambda}}{2} \left[\frac{15}{4} - 2 - \frac{3}{4} \right] = \frac{\tilde{\lambda}}{2} \quad E_{so}(l=1, j=\frac{1}{2}) = \frac{\tilde{\lambda}}{2} \left[\frac{3}{4} - 2 - \frac{3}{4} \right] = -\tilde{\lambda}$$

$l=1, j=3/2$

$l=1, j=1/2$

$l=0, j=1/2$

$$\hat{H}_{s0} = 0$$

E

$l=1, j=3/2$

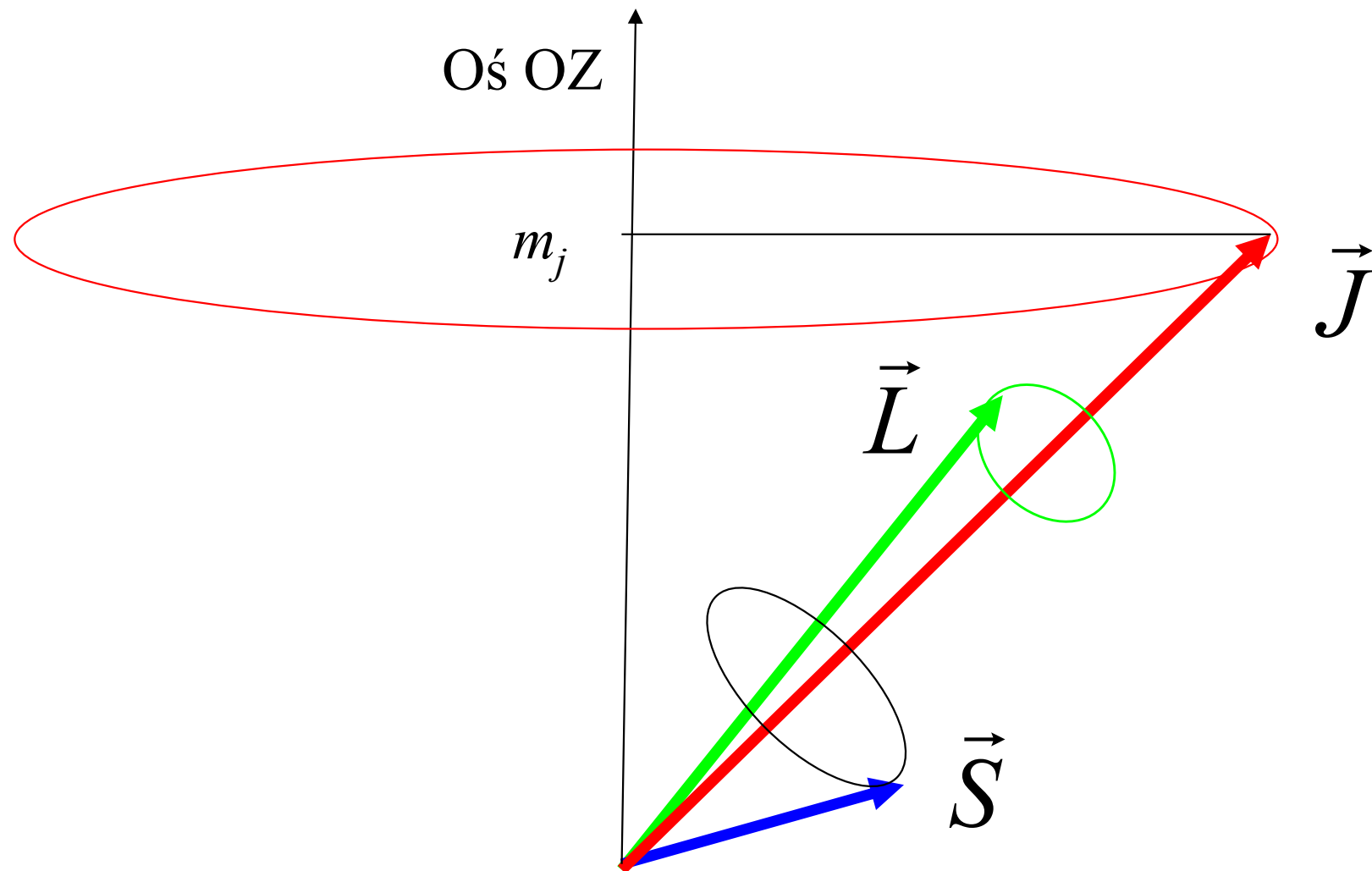
$l=1, j=1/2$

$$\hat{H}_{s0} \neq 0$$

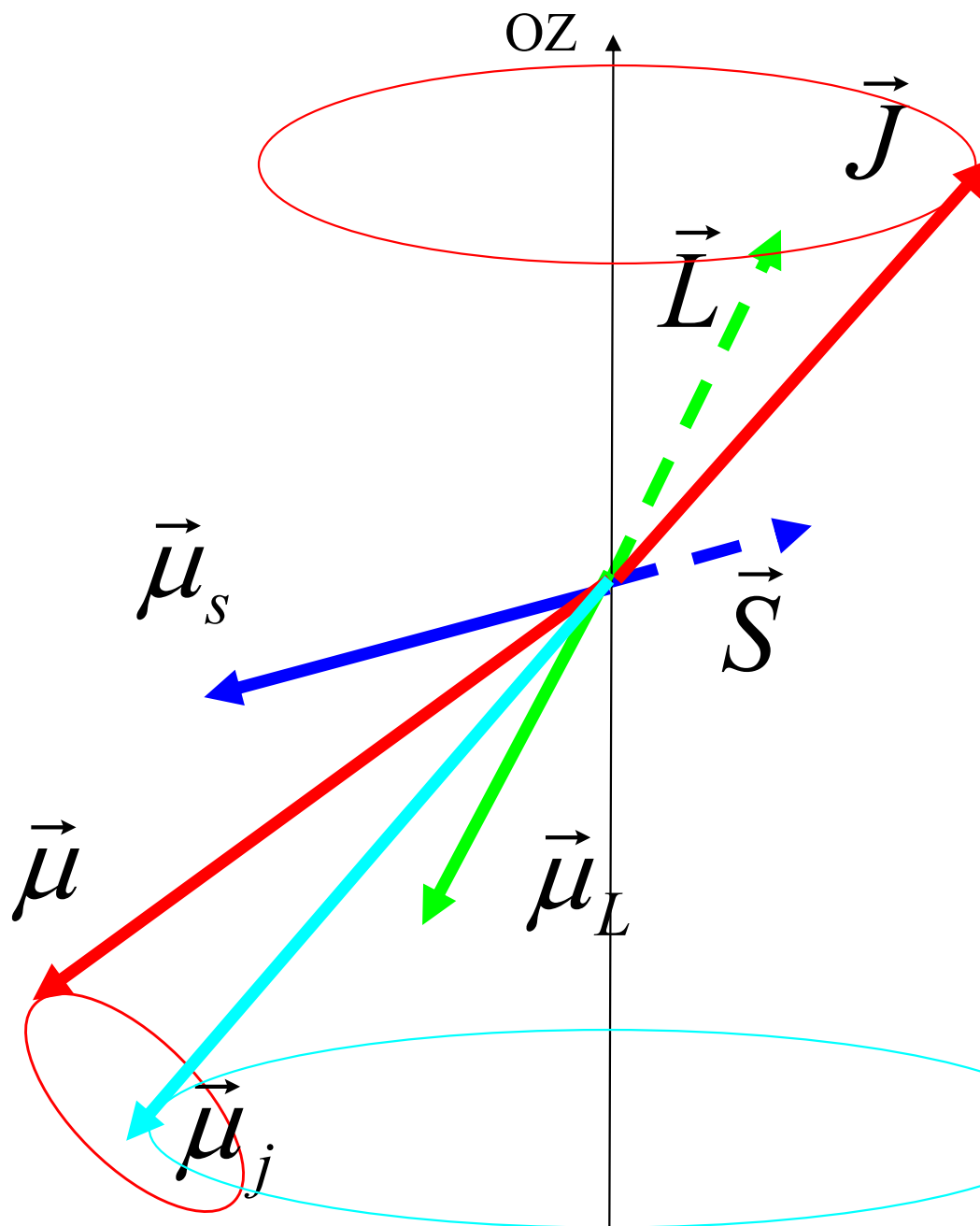
$$\lambda > 0$$

Przybliżone wyznaczenie rozszczepiania poziomów
energetycznych atomu w polu magnetycznym
zewnętrznym przy uwzględnieniu sprzężenia spinowo
orbitalnego
(dla osób zainteresowanych)

W ujęciu półklasycznym można przyjąć iż w przypadku uwzględnienia oddziaływania spinowo-orbitalnego wektory orbitalnego momentu pędu i spinu wykonują precesje wokół kierunku wektora całkowitego momentu pędu, tak iż długość wszystkich wektorów pozostaje stała. Z kolei całkowity moment pędu wykonuje precesje wokół osi Oz z zachowaniem stałego rzutu na oś Oz .



Efekt Zeemana w obecności oddziaływania spinowo-orbitalnego



Ze względu na anomalie magnetomechaniczną wektor całkowitego momentu magnetycznego $\vec{\mu}$ nie jest równoległy do długości całkowitego momentu pędu $\vec{J}$.

W półklasycznym obrazie jeżeli pole magnetyczne nie jest zbyt silne to wektor $\vec{\mu}$ wykonuje szybką precesję wokół kierunku wyznaczonego przez całkowity moment pędu $\vec{J}$. Z kolei całkowity moment pędu $\vec{J}$ wykonuje wolną precesję wokół kierunku osi OZ wyznaczonej przez zewnętrzne pole magnetyczne.

Do przybliżonego wyznaczenia energii układu w obecności takiego pola niezbędna jest znajomość z-owej składowej wektora $\vec{\mu}_J$. Wektor $\vec{\mu}_J$ jest rzutem całkowitego momentu magnetycznego $\vec{\mu}$ na kierunek wektora $\vec{J}$ i jego długość jest równa pierwiastkowi z wartości oczekiwanej kwadratu operatora momentu magnetycznego w stanie własnym operatora Hamiltona bez uwzględnienia pola

Związek całkowitego momentu magnetycznego elektronu w atomie z jego całkowitym momentem pędu

Długość rzutu całkowitego momentu magnetycznego elektronu (lub układu elektronów) na kierunek wyznaczony przez całkowity moment pędu, znajdującego się we wspólnym stanie własnym operatorów kwadratu

- 1) całkowitego momentu pędu określonego przez liczbę j ,
- 2) orbitalnego momentu pędu określonego przez liczbę l ,
- 3) spinu określonego przez liczbę s

$$\begin{aligned}
 |\vec{\mu}_j| &= |\vec{\mu}_l| \cos(\vec{L}, \vec{J}) + |\vec{\mu}_s| \cos(\vec{S}, \vec{J}) = \left| \frac{\mu_B |\vec{L}|}{\hbar} \frac{\vec{L} \cdot (\vec{L} + \vec{S})}{|\vec{L}| |\vec{J}|} + \frac{2\mu_B |\vec{S}|}{\hbar} \frac{\vec{S} \cdot (\vec{L} + \vec{S})}{|\vec{S}| |\vec{J}|} \right| = \left| \frac{\mu_B}{\hbar} \frac{|\vec{L}|^2 + 2|\vec{S}|^2 + 3\vec{L} \cdot \vec{S}}{|\vec{J}|} \right| = \\
 &= \left| \frac{\mu_B}{\hbar} \frac{|\vec{L}|^2 + 2|\vec{S}|^2 + 3(|\vec{J}|^2 - |\vec{L}|^2 - |\vec{S}|^2)/2}{|\vec{J}|} \right| = \left| \frac{\mu_B}{\hbar} \frac{3|\vec{J}|^2 + |\vec{S}|^2 - |\vec{L}|^2}{2\sqrt{|\vec{J}|^2}} \right| = \\
 &= \left| \frac{\mu_B}{\hbar} \frac{[3\hbar^2 j(j+1) + \hbar^2 s(s+1) - \hbar^2 l(l+1)]}{2\sqrt{\hbar^2 j(j+1)}} \right| = \left| \mu_B \frac{[3j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)]}{2j(j+1)} \sqrt{j(j+1)} \right| = g\mu_B \sqrt{j(j+1)} \quad \text{gdzie}
 \end{aligned}$$

$$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e} \text{ -magneton Bohra, } g = \frac{3j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \text{ -czynnik Landego}$$

Dla $l=0$ mamy $g=2$, zaś dla $s=0$ mamy $j=l$ czyli $g=1$. Wielkość czynnika Landego informuje nas o tym w jakiej części moment magnetyczny ma pochodzenie orbitalne, a w jakim spinowe.

Przybliżony opis efektu Zeemana w przypadku występowania oddziaływania spinowo-orbitalnego

Długość wektora będącego rzutem całkowitego momentu magnetycznego

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_l + \vec{\mu}_s \quad \text{na kierunek wektora } \vec{J} \text{ opisuje wzór}$$

$$|\vec{\mu}_j| = g\mu_B \sqrt{j(j+1)}$$

gdzie

$$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e} \quad \text{-magneton Bohra} \quad j = |l-s|, |l-s|+1, \dots, l+s-1, l+s$$

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \quad \text{-czynniki Lande'a} \quad \begin{matrix} g=1 \text{ gdy } s=0 \\ g=2 \text{ gdy } l=0 \end{matrix}$$

Możliwe wartości rzutu tego wektora na oś Oz wyznaczoną przez kierunek zewnętrznego pola magnetycznego określa wzór

$$\mu_{zj} = -g\mu_B m_j \quad m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j$$

Energia całkowitego momentu magnetycznego w polu magnetycznym

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \approx -\mu_{zj} B = g\mu_B m_j B$$

W przypadku gdy rozważamy atom zawierający kilka elektronów na niecałkowicie zapełnionej powłoce to liczby l, s, j w powyższych wzorach odnoszą się do momentów pędu całego atomu. W atomie o jednym elektronie $s=1/2, j=l-1/2$ lub $j=l+1/2$ (gdy $l=0$ to $j=1/2$).