Kvantni magnetni moment

Vrnimo se najprej v klasično mehaniko. Nabiti delec, ki kroži, ima magnetni moment, ki je enak produkt toka in ploščine kroga, ki ga opiše pot delca

$$\vec{\mu} = \mathrm{IS}$$

in ima smer pravokotno na ravnino gibanja delca. Tok je pretečen naboj deljeno s časom, se pravi pri nas naboj delca deljeno z obhodnim časom

$$\mathrm{I} = \frac{de}{dt} = \frac{e}{t_0} = \frac{e}{2\pi r/v}$$

Kjer je r radij, na katerem kroži delec in v obodna hitrost. Če si predstavljamo elektron kot klasični delec, je njegov naboj enak negativnemu osnovnemu naboju in za magnetni moment dobimo

$$\mu = \frac{-e_0 v}{2\pi r}\pi r^2 = -\frac{e_0 v r}{2}$$

Upoštevamo še, da je produkt hitrosti in radija enako vrtilni količini deljeno z maso in imamo za magnetni moment naslednji izraz

$$\mu = -\frac{e_0 L}{2m_e}$$

Če napišemo omenjeni izraz v vektorski obliki dobimo, da je magnetni moment obratno sorazmeren vektorju vrtilne količine za elektron, ker ima le ta negativni naboj

$$\vec{\mu} = -\frac{e_0 \vec{L}}{2m_e}$$

Vidimo, da ima vodikov atom zaradi gibanja elektrona magnetni moment, torej se vodikov atom in seveda tudi ostali atomu obnašajo kot majhni dipolni momenti. Homogeno magnetno polje na magnetni moment deluje z navorom, ki je enak vektorskemu produktu magnetnega momenta in gostote magnetnega polja

$$\vec{M} = \vec{\mu} \times \vec{\mathrm{B}} = -\frac{e_0 \vec{L} \times \vec{B}}{2m_e}$$

Magnetni dipol je v stabilni legi, ko je magnetni navor enak nič, to pa je takrat, ko je magnetni moment vzporeden z vektorjem gostote magnetnega polja. Energija magnetnega dipola v magnetnem polju je sorazmerna skalarnemu produktu vektorja magnetnega momenta in gostote magnetnega polja

$$W_m = -\vec{\mu}\vec{\mathrm{B}}$$

Če si izberemo, da kaže homogeno polje v smeri osi z, je ta energija enaka kar produktu komponente z magnetnega momenta in gostote magnetnega polja

$$W_m = -\mu_z B$$

Na magnetni dipol v homogenem magnetnem polju ne deluje nobena sila, saj je gradient magnetne energije enak nič, ker je le ta neodvisna od koordinat. V primeru, ko imamo magnetni dipol v nehomogenem magnetnem polju, ki ima vzporedne silnice v smeri osi z in se spreminja le v smeri osi z

$$W_m(z) = -\mu_z B(z)$$

izračunamo silo na delec kot negativni gradient magnetne energije

$$\vec{F} = -\vec{\nabla} W_m(z) = \mu_z \vec{\nabla} B(z)$$

Odvoda po koordinatah x in y sta enaka 0, tako da je magnetna sila od nič različna le v smeri osi z in je enaka

$$F_z = \mu_z \frac{\partial \mathrm{B}}{\partial z}$$

Preidimo sedaj v kvantno mehaniko. Tu vsaki količini ustreza operator. Za operator magnetnega momenta imamo tako

$$\hat{\vec{\mu}} = -\frac{e_0 \hat{\vec{L}}}{2m_e}$$

Operator magnetnega momenta je sorazmeren operatorju vrtilne količine. Za operator magnetnega momenta veljajo iste komutacijske zveze med komponentami kot v primeru vrtilne količine. Operator magnetnega momenta komutira z operatorjem vrtilne količine, to pomeni, da imata operatorja enake lastne funkcije, ki so kar krogelne funkcije. Njune lastne vrednosti pa se razlikujejo za faktor $-\frac{e_0}{2m_e}$. Za magnetni moment lahko v kvantni mehaniki določimo kvadrat velikosti in vrednost ene komponente, po navadi kar komponente v smeri osi z. Lastne vrednosti kvadrata vrtilne količine so enake

$$\langle \widehat{\mu^2} \rangle = \frac{{e_0}^2 l(l+1)\hbar^2}{4{m_e}^2} = {\mu_B}^2 l(l+1)$$

in komponenta v smeri osi z

$$\langle \widehat{\mu_z} \rangle = -\frac{e_0 m \hbar}{2m_e} = -\mu_B m$$

$\mu_B = \frac{e_0 \hbar}{2m_e} = 9{,}27400968 \times 10^{-24}\, JT^{-1}$ je Bohrov magneton in ga uporabljamo kot enoto za merjenje magnetnih momentov atomov in molekul.

Poglejmo si sedaj lastnosti vodikovega atoma v homogenem magnetnem polju. Izberimo si koordinatni sistem tako, da kažejo silnice v smeri osi z. Hamiltonov operator ima poleg kinetične energije elektrona in potencialne energije v polju jedra še interakcijo z magnetnim poljem, se pravi magnetno energijo

$$\widehat{\mathrm{H}} = -\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mathrm{m}} - \frac{Ze_0^2}{4\pi\varepsilon_0 r} - \widehat{\mu_z}B = \widehat{\mathrm{H}_0} + \frac{e_0 B}{2m_e}\widehat{L_z}$$

$\widehat{\mathrm{H}_0}$ je Hamiltonov operator za nemoten vodikov atom in $\frac{e_0 B}{2m_e}\widehat{L_z}$ za interakcijo vodikovega atoma z magnetnim poljem. Lastne vrednosti in funkcije operatorja $\widehat{\mathrm{H}_0}$ smo spoznali v poglavju o vodikovem atomu ($\widehat{\mathrm{H}_0}\psi_{nlm}(\mathrm{r},\vartheta,\varphi) = E_n\psi_{nlm}(\mathrm{r},\vartheta,\varphi)$). Operatorja $\widehat{\mathrm{H}_0}$ in $\widehat{L_z}$ komutirata, kot tudi operatorja $\widehat{\mathrm{H}_0}$ in $\widehat{\mathrm{H}}$, torej imajo vsi operatorji iste lastne funkcije. Izračunajmo sedaj še lastne vrednosti za operator $\widehat{\mathrm{H}}$

$$\widehat{\mathrm{H}}\psi_{nlm}(\mathrm{r},\vartheta,\varphi) = \widehat{\mathrm{H}_0}\psi_{nlm}(\mathrm{r},\vartheta,\varphi) + \frac{e_0 B}{2m_e}\widehat{L_z}\psi_{nlm}(\mathrm{r},\vartheta,\varphi) = \left(E_n + \frac{e_0 m\hbar \mathrm{B}}{2m_e}\right)\psi_{nlm}(\mathrm{r},\vartheta,\varphi)$$

$$\widehat{\mathrm{H}}\psi_{nlm}(\mathrm{r},\vartheta,\varphi) = (E_n + \mu_B m B)\psi_{nlm}(\mathrm{r},\vartheta,\varphi)$$

Vidimo, da je energija elektrona za vodikov atom v magnetnem polju odvisna tudi od magnetnega kvantnega števila (od tu izvira ime tega kvantnega števila).V nemotenem vodikovem atomu imamo energijo odvisno le od glavnega kvantnega števila in degeneracija nivoje je enaka kvadratu glavnega kvantnega števila. V magnetnem polju pa del degeneracije izgine. n-to stanje se razcepi na $2l + 1 = 2n - 1$ nivojev. Energija je odvisna od glavnega in magnetnega kvantnega števila. V tabeli 1 imamo prikaz razcepitve nivojev za nivoje z glavnim kvantnim številom $n = 2$.

Tabela 1: Razcep nivojev za nivoje z glavnim kvantnim številom $\mathrm{n} = 2$.

n	l	m	Energija brez polja	Energija s poljem gostote B
2	0	0	E_2	E_2
2	1	-1	E_2	$E_2 - \mu_B B$
2	1	0	E_2	E_2
2	1	1	E_2	$E_2 + \mu_B B$

Dokler atom ni v magnetnem polju ne moremo vedeti, kakšno je magnetno kvantno število. Ko pa postavimo atom v zunanje magnetno polje, lahko ugotovimo, kakšno je magnetno kvantno število, prav tako lahko ugotovimo, koliko je stanj z različnimi magnetnimi števili. Teh je $2l + 1$. Se pravi lahko določimo tudi kvantno število l. Dva sosednja nivoja pri istem glavnem številu se razlikujeta za $\mu_B B$. Če je gostota magnetnega polja enaka $1T$ je ta energija enaka $9{,}27400968 \times 10^{-24}\ J$, to je približno $5{,}8 \times 10^{-5}\ eV$, kar je malo v primerjavi z lastnimi energijami, vendar dovolj veliko, da lahko izmerimo. Spektralne črte atomov v magnetnem polju se razcepijo in razcep lahko izmerimo. Razcepitev spektralnih črt v magnetnem polju imenujemo Zemanov efekt.