

VILNIAUS UNIVERSITETAS
Fizikos fakultetas
Mokomoji atomo ir branduolio fizikos laboratorija

Laboratorinis darbas Nr. 3

ELEKTRONŲ SUKININIO REZONANSO TYRIMAS

Parengė A. Poškus

2015-09-01

Turinys

Darbo tikslas.....	2
1. Užduotys.....	2
2. Kontroliniai klausimai.....	2
3. Darbo teorija.....	3
3.1. Atomo elektrono kvantiniai skaičiai	3
3.2. Atomo magnetinės savybės pagal Boro teoriją.....	5
3.3. Daugiaelektronio atomo judesio kiekio momentas ir magnetinis momentas	7
3.4. Elektronų sluoksniai	11
3.5. Kvantiniai šuoliai ir fotonų energijos skirstinys	13
3.6. Elektronų paramagnetinio rezonanso aiškinimas remiantis Larmoro precesijos sąvoka.....	15
4. Tyrimo metodika.....	17
4.1. Bendros žinios apie tyrimo metodą	17
4.2. Darbo priemonės ir matavimo tvarka	20
4.3. Pagrindiniai skaičiavimai analizuojant matavimo duomenis.....	22

Darbo tikslas

Ekspertiškai ištirti nesuporuotojo valentinio elektrono energijos lygmenų skilimą, esant išoriniam magnetiniam laukui, išmatuoti elektrono g faktorių ir sužadintojo energijos lygmenų plotį.

1. Užduotys

1. Išmatuoti aukštųjų dažnių tiltelio, kurio vienoje šakoje yra tiriamasis bandinys, išėjimo signalo amplitudės priklausomybę nuo įtampos, kuri proporcinga išorinio magnetinio lauko kintamajai komponentei („rezonansinę kreivę“).
2. Išmatuoti išorinio magnetinio lauko magnetinę indukciją, kai tiltelio išderinimas yra didžiausias (rezonansinę magnetinę indukciją), ir magnetinės indukcijos kintamąją komponentę.
3. Išmatuoti rezonansinės kreivės plotį pusės smailės aukštyje ir išreikšti jį magnetinės indukcijos matavimo vienetais.
4. Remiantis išmatuotąją rezonansinės magnetinės indukcijos verte, apskaičiuoti elektrono sukininį g faktorių ir jo matavimo paklaidą. Palyginti gautąją vertę su literatūroje pateiktąja verte.
5. Pagal išmatuotąją rezonansinės kreivės plotį apskaičiuoti elektrono sužadintojo energijos lygmenų plotį ir gyvavimo trukmę bei jų matavimo paklaidas. Palyginti gautąsias vertes su literatūroje pateiktomis vertėmis.

2. Kontroliniai klausimai

1. Kas yra energijos lygmenys ir energijos kvantai? Kas yra orbitinis ir sukininis kvantiniai skaičiai? Kam yra lygus vieno elektrono sukininis kvantinis skaičius? Kaip apskaičiuoti elektrono pilnutinio judesio kiekio momento kvantinio skaičiaus galimąsias vertes?
2. Kas yra giromagnetinis santykis ir g faktorius? Kam yra lygus elektrono sukininis g faktorius? Kokia yra Landé g faktoriaus fizikinė prasmė? Kokia yra to faktoriaus vertė, kai atomo orbitinis judesio kiekis lygus nuliui?
3. Kodėl atomo energijos lygmenys skyla, kai yra išorinis magnetinis laukas? Kaip to skilimo didumas priklauso nuo išorinio magnetinio lauko?
4. Kas yra savaiminiai ir priverstiniai kvantiniai šuoliai?
5. Kas yra elektronų paramagnetinis rezonansas ir sukininis rezonansas? Kokiomis sąlygomis jis vyksta? Kodėl rezonanso sąlygomis sustiprėja spinduliuotės energijos sugertis?
6. Kodėl atomo sužadintieji energijos lygmenys yra išplitę? Nuo ko priklauso energijos lygmenų plotis?
7. Paaiškinkite Larmoro precesijos sąvoką, pateikite Larmoro dažnio išraišką. Paaiškinkite, kodėl elektronų paramagnetinio rezonanso sąlygomis pasikeičia kampas tarp įmagnetėjimo vektoriaus ir išorinio magnetinio lauko krypties.
8. Kodėl elektronų sukininio rezonanso tyrimui naudojama medžiaga DPPH?
9. Koku būdu sukuriama fotonai, kurie stimuliuoja kvantinius šuolius tarp atomo energijos lygmenų rezonanso sąlygomis?
10. Paaiškinkite aukšto dažnio tiltelio, kuris naudojamas elektronų sukininio rezonanso tyrimo įrangoje, veikimo principą.
11. Kodėl elektrinio signalo amplitudės priklausomybė nuo pastovaus išorinio magnetinio lauko yra tokio paties pavidalo kaip atomo sužadavimo energijos pasiskirstymas?

Literatūra:

1. Poškus A. Atomo fizika ir branduolio fizikos eksperimentiniai metodai. Vilnius: Vilniaus universiteto leidykla, 2008. 544 p.
2. Матвеев А.Н. Атомная физика. Москва: Высшая школа, 1989. 439 с.
3. Шпольский Э. В. Атомная физика. Т. 2. Москва: Наука, 1984. 438 с.
4. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики. Москва: Высшая школа, 1963. 620 с.
5. Laboratory Experiments. Phywe Systeme GmbH, 2005 (*kompaktinis diskas*).

3. Darbo teorija

3.1. Atomo elektrono kvantiniai skaičiai

Atomai – tai mažiausioji materijos dalelė, kuri turi cheminio elemento būdingąsias savybes. Atomai sudaryti iš branduolio ir aplink jį pasiskirsčiusių elektronų „debesies“. Elektronas – tai viena iš elementariųjų dalelių (t. y. dalelių, kurios neturi vidinės struktūros). Elektrono elektros krūvis yra lygus $-e$; čia e yra vadinamasis elementarusis krūvis ($e = 1,6021765 \cdot 10^{-19}$ C), o masė lygi $9,1093826 \cdot 10^{-31}$ kg. Atomo savybes aprašo kvantinė mechanika. Kvantinė mechanika teigia, kad surištosios dalelių sistemos (pvz., atomo) energija gali būti lygi tik tam tikroms atskiroms vėrtėms. Kitaip sakant, atomo elektrono energija yra *kvantuota*. Taigi, energija negali kisti tolydžiai (kaip teigia klasikinė mechanika), o gali kisti tik tam tikromis baigtinio dydžio „porcijomis“ – *kvantais*. Leistinosios energijos vėrtės vadinamos *energijos lygmenimis*. Jeigu atomo energija atitinka duotąją energijos lygmenį E , dažnai sakoma: „atomas yra energijos lygmenyje E “. Atomų, kurie yra duotajame energijos lygmenyje, skaičius vadinamas to *energijos lygmens užpilda*.

Jeigu nėra išorinių laukų, tada atomo elektronas juda centriniame jėgų lauke, t. y. elektrono potencinė energija priklauso tik nuo atstumo iki branduolio. Kvantinėje mechanikoje įrodoma, kad, norint pilnai nusakyti centriniame jėgų lauke judančios dalelės erdvinio judėjimo būseną, reikia nurodyti trijų fizikinių dydžių vėrtes:

- 1) dalelės energiją,
- 2) dalelės judesio kiekio momento (taip pat vadinamo impulso momentu) modulį,
- 3) dalelės judesio kiekio momento projekciją į laisvai pasirinktą kryptį.

Kvantinėje mechanikoje tų fizikinių dydžių vėrtes įprasta nusakyti vadinamaisiais *kvantiniais skaičiais*. Atomo branduolio ir kitų elektronų Kulono lauke judančio elektrono energijos vėrtę nusako *pagrindinis kvantinis skaičius* n , elektrono judesio kiekio momento modulį nusako *šalutinis kvantinis skaičius* l (jis taip pat vadinamas *orbitiniu kvantiniu skaičiumi*), o to momento projekciją nusako *magnetinis kvantinis skaičius* m_l . Pagrindinis kvantinis skaičius – tai atomo elektronų sluoksnio, kuriam priklauso elektronas, numeris. Mat elektronai atome pasiskirstę erdvėje ne tolygiai, o sudaro vadinamuosius elektronų sluoksnius, kuriuose yra padidėjusi tikimybė aptikti elektroną. Sluoksniai numeruojami pradedant nuo vidinio sluoksnio (t. y. vidinį sluoksnį atitinka $n = 1$). Judesio kiekio momentas – tai vektorinis dydis, kuris klasikinėje mechanikoje apibrėžiamas šitaip:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}; \quad (3.1.1)$$

čia \mathbf{r} yra vektorius, kuris jungia atskaitos tašką ir dalelę, \mathbf{p} yra dalelės judesio kiekio (kitai pat vadinamo dalelės impulsu) vektorius, $\mathbf{r} \times \mathbf{p}$ yra tų dviejų vektorių vektorinė sandauga. Jeigu dalelė juda apskrita orbita, kurios spindulys yra r , o judesio kiekio momentas matuojamas atžvilgiu orbitos centro, tada vektoriai \mathbf{r} ir \mathbf{p} yra statmeni, todėl vektoriaus \mathbf{L} modulis yra lygus vektorių \mathbf{r} ir \mathbf{p} modulių sandagai:

$$|\mathbf{L}| = rp = rmv; \quad (3.1.2)$$

čia $p = mv$ yra dalelės judesio kiekio modulis, m yra jos masė, v yra greitis. Kvantinėje mechanikoje įrodoma, kad atomo elektrono judesio kiekio momento leistinosios vėrtės yra šios:

$$|\mathbf{L}| = \hbar \sqrt{l(l+1)} \quad (l = 0, 1, 2, \dots, n-1), \quad (3.1.3)$$

o vektoriaus \mathbf{L} projekcijos į bet kurią ašį z leistinosios vėrtės yra šios:

$$L_z = m_l \hbar \quad (m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l). \quad (3.1.4)$$

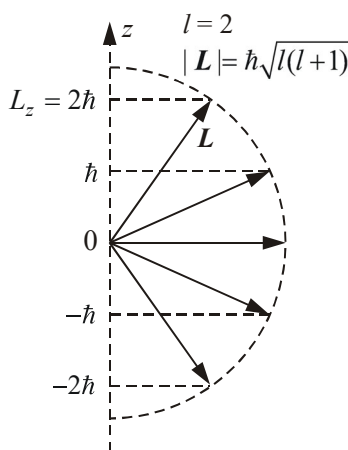
čia \hbar yra *mažoji Planko konstanta*, kuri yra šitaip susijusi su Planko konstanta h : $\hbar \equiv h / 2\pi = 1,0545716 \cdot 10^{-34}$ J·s

Taigi, judesio kiekio momento projekcija į duotąją kryptį Z gali įgyti tik kelias vėrtes, t. y. galimi tik keli kampai tarp judesio kiekio momento vektoriaus \mathbf{L} ir išskirtosios krypties z . Pvz., kai $l = 2$, kampas tarp \mathbf{L} ir z ašies gali būti lygus penkioms vėrtėms. Šie penki kampai tarp vektoriaus \mathbf{L} ir z ašies parodyti 1 pav. Be to, judesio kiekio momento vektoriaus projekcijos modulis visada yra mažesnis už to vektoriaus modulį (3.1.3), išskyrus tą atvejį, kai $|\mathbf{L}| = 0$ (t. y. $l = 0$). Taigi, judesio kiekio momento vektorius visada sudaro tam tikrą nenulinį kampą su išskirtąja kryptimi. Tai galima įsivaizduoti šitaip. Jeigu L_z ir $|\mathbf{L}|$ vėrtės yra tiksliai apibrėžtos, tada judesio kiekio momento vektorius \mathbf{L} precesuoja apie z ašį (žr. 2 pav.). Todėl komponentės L_x ir L_y nuolat kinta (yra neapibrėžtos). Būtent todėl pastarosios dvi komponentės netinka, apibūdinant elektrono judėjimo būseną.

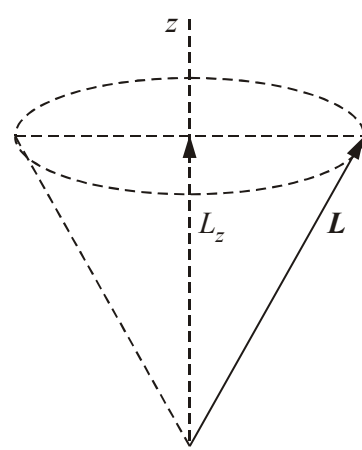
Centriniame jėgų lauke judančios dalelės (pvz., atomo elektrono, kai nėra išorinių laukų ir nepaisoma elektrono sukinių) energija priklauso tik nuo kvantinių skaičių n ir l . T. y., kiekvieną tokios dalelės energijos lygmenį atitinka $2l + 1$ skirtingų judėjimo būsenų, kurių kiekviena atitinka vieną iš galimų magnetinio kvantinio skaičiaus m_l verčių (žr. (3.1.4)).

Apibūdinant elektrono orbitinio judėjimo būseną atome, vietoj l verčių $0, 1, 2, 3, 4, \dots$ vartojamos raidės s, p, d, f, g, \dots Pvz., elektronas, kurio pagrindinis kvantinis skaičius yra $n = 2$, o šalutinis $l = 1$, vadinamas $2p$ elektronu.

Anksčiau apibrėžti kvantiniai skaičiai n, l ir m_l nėra pakankami nusakant elektrono būseną atome, nes elektronas turi ir vidinį judesio kiekio momentą (*sukinį*). Taip pat kaip elektrono orbitinio judesio kiekio momento modulis, kuris apibūdinamas orbitiniu kvantiniu skaičiumi l , elektrono sukinių modulis apibūdinamas *sukinio kvantiniu skaičiumi* s . Elektrono sukinių kvantinis skaičius visada lygus $1/2$:



1 pav. Galimi kampai tarp judesio kiekio momento ir išskirtosios krypties



2 pav. Judesio kiekio momento vektoriaus precesija aplink išskirtąją kryptį

$$s = \frac{1}{2}. \quad (3.1.5)$$

Sukinių modulis $|L_s|$ susijęs su sukinių kvantiniu skaičiumi s taip pat kaip orbitinio judesio kiekio momento modulis $|L|$ susijęs su orbitiniu kvantiniu skaičiumi l (žr. (3.1.3)):

$$|L_s| = \hbar\sqrt{s(s+1)} = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar, \quad (3.1.6)$$

o sukinių projekcija į laisvai pasirinktą koordinačių z ašį išreiškiama sąryšiu, kuris analogiškas (3.1.4):

$$L_{sz} = m_s \hbar \quad (m_s = \pm s = \pm 1/2). \quad (3.1.7)$$

Skaičius m_s vadinamas *sukinio magnetiniu kvantiniu skaičiumi*.

Atomo ir branduolio fizikoje sukinių kvantinis skaičius dažniausiai vadinamas tiesiog sukiniu, o sukinių magnetinis kvantinis skaičius – tiesiog sukinių projekcija. Pvz., sakoma „elektrono sukinytis lygus $1/2$ “ (nors tikroji vertė yra $\hbar\sqrt{3}/2$), „elektrono sukinių projekcija lygi $\pm 1/2$ “ ir kt.

Neatsižvelgiant į palyginti silpnas sąveikas, kurias lemia elektrono sukinytis, atomo elektrono būseną pilnai nusako keturi minėtieji kvantiniai skaičiai

$$n, l, m_l, m_s. \quad (3.1.8)$$

Kvantiniai skaičiai m_l ir m_s nusako orbitinio ir sukinių judesio kiekio momentų vektorių L ir L_s orientacijas atžvilgiu laisvai pasirinktos krypties, tačiau nieko nesako apie kampą tarp tų vektorių. Atsižvelgus į sąveikas, kurias lemia elektrono sukinytis (pvz., į vadinamąją sukinių ir orbitos sąveiką), kampas tarp L ir L_s gali turėti įtaką elektrono energijai. Tokiu atveju kvantiniai skaičiai m_l ir m_s netinka apibrėžtos energijos elektrono būsenų klasifikavimui, ir vietoj jų naudojami kiti du kvantiniai skaičiai – pilnutinio judesio kiekio momento kvantinis skaičius j ir pilnutinio judesio kiekio projekcijos kvantinis skaičius m_j . Pilnutinis judesio kiekio momentas L_j – tai orbitinio ir sukinių judesio kiekio momentų vektorių suma:

$$L_j = L + L_s. \quad (3.1.9)$$

Pilnutinio judesio kiekio momento L_j modulį galima apskaičiuoti pasinaudojus šia bendrąja momentų sudėties taisykle: sudėjus du judesio kiekio momentus L_1 ir L_2 , kurių moduliai lygūs

$$L_1 = \hbar\sqrt{l_1(l_1+1)} \quad \text{ir} \quad L_2 = \hbar\sqrt{l_2(l_2+1)},$$

suminio momento $L_\Sigma = L_1 + L_2$ modulio galimosios vertės yra

$$L_\Sigma = \hbar\sqrt{l_\Sigma(l_\Sigma+1)} \quad (l_\Sigma = |l_1 - l_2|, |l_1 - l_2| + 1, \dots, l_1 + l_2). \quad (3.1.10)$$

Jeigu abu sudedamieji momentai turi apibrėžtas projekcijas į z ašį, tada suminio momento projekcija į z ašį yra lygi jų sumai:

$$L_{\Sigma z} = L_{1z} + L_{2z} = m_\Sigma \hbar \quad (m_\Sigma = m_1 + m_2); \quad (3.1.11)$$

čia kvantiniai skaičiai m_1 ir m_2 nusako momentų L_1 ir L_2 projekcijas ($L_{1z} = m_1\hbar$, $L_{2z} = m_2\hbar$). Sudedant elektrono orbitinį ir sukcinį judesio kiekio momentus pagal šias taisykles, kvantinį skaičių l_1 reikia pakeisti šalutiniu kvantiniu skaičiumi l , o kvantinį skaičių l_2 – sukcinio kvantiniu skaičiumi $s = 1/2$. Šitai pa gauname, kad pilnutinio momento L_j modulio galimosios vertės yra

$$|L_j| = \hbar\sqrt{j(j+1)}, \quad (3.1.12)$$

kur kvantinis skaičius j gali būti lygus tik šioms vertėms:

$$\text{a) jeigu } l > 0, j = l \pm \frac{1}{2}; \quad (3.1.13a)$$

$$\text{b) jeigu } l = 0, j = \frac{1}{2} \quad (3.1.13b)$$

(žr. 3 pav.). Pilnutinio judesio kiekio momento projekcija į laisvai pasirinktą z ašį atitinka tą pačią sąlygą kaip ir bet kurios kitos prigimties judesio kiekio momento projekcija:

$$L_{jz} = m_j\hbar \quad (m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j). \quad (3.1.14)$$

Gali kilti klausimas, kaip galima kalbėti apie apibrėžtą kampą tarp vektorių L ir L_s , jeigu šių vektorių kryptys yra neapibrėžtos (jie precesuoja apie išskirtąją kryptį). Atsakymą į šį klausimą iliustruoja 4 pav. Kai elektronas yra būsenos, kurios l ir j yra apibrėžti, abu vektoriai L ir L_s precesuoja apie pilnutinio judesio kiekio momento vektorių L_j taip, kad kampas tarp jų išlieka pastovus.

Vektorius L_j , kaip ir bet kuris kitas judesio kiekio momentas, precesuoja aplink išskirtąją kryptį Z . Kaip matome 4 pav., vektorių L ir L_s projekcijos į tą kryptį yra neapibrėžtos. Todėl, apibūdinant elektrono būseną atome, dažniausiai vartojami kvantiniai skaičiai

$$n, l, j, m_j \quad (3.1.15)$$

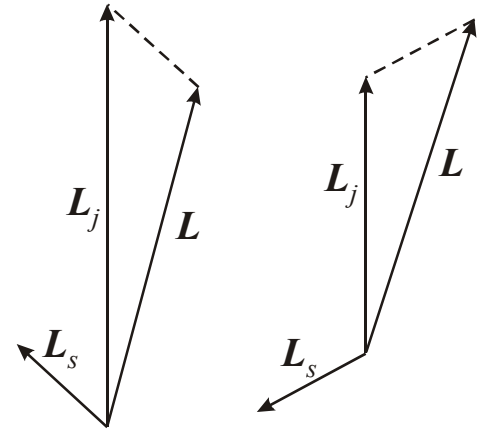
(plg. su (3.1.8)).

Elektrono būsenas, kai elektrono energija, orbitinio judesio kiekio momento modulis, pilnutinio judesio kiekio momento modulis ir šio momento projekcija vienu metu turi tiksliai apibrėžtas vertes, vadinsime elektrono **kvantinėmis būsenomis**. Bendruoju atveju energijos lygmenis negalima tapatinti su kvantine būseną, nes dažnai energija nepriklauso nuo kai kurių kvantinių skaičių. Pvz., jeigu nėra išorinio magnetinio lauko, tada elektrono energija nepriklauso nuo kvantinio skaičiaus m_j . T. y. energijos lygmenį su apibrėžtu kvantiniu skaičiumi j atitinka $2j+1$ kvantinių būsenų, kurios skiriasi tik kvantiniu skaičiumi m_j (žr. (3.1.14)). Todėl, norint apibūdinti elektrono energijos lygmenį, kai išorinis magnetinis laukas lygus nuliui, pakanka nurodyti tik kvantinius skaičius n , l ir j . Kvantinis skaičius j nurodomas apatinio indekso pavidalu. Pvz., elektrono energijos lygmuo, kuris atitinka kvantinių skaičių vertes $n = 2$, $l = 1$ ir $j = 3/2$, žymimas $2p_{3/2}$.

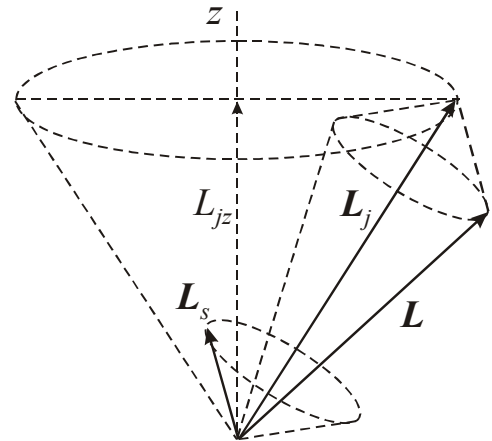
3.2. Atomo magnetinės savybės pagal Boro teoriją

Kad būtų paprasčiau, visų pirma atomo magnetines savybes aprašysime, remdamiesi Boro teorija, pagal kurią atomo elektronai juda apskritomis orbitomis aplink branduolį (ši teorija, kurią 1913 m. suformulavo danų fizikas Nilsas Boras, tapo pereinamuoju etapu tarp klasikinės mechanikos ir kvantinės mechanikos). Boras atsisakė bandymų paaiškinti atomo sandarą klasikinės teorijos metodais. Jis pabandė atrasti kelis esminius principus, kurie yra suderinami su tuo metu žinomais eksperimentiniais faktais (spinduliavimo kvantinis pobūdis, branduolinis atomo modelis ir vandenilio atomo spektro dėsninūmai). Šiuos principus Boras suformulavo trijų postulatų pavidalu. „Postulatas“ – tai teiginys, kuris vartojamas kaip išankstinė prielaida formuluojant teoriją. Taigi, **Boro postulatai** yra šie.

Pirmasis postulatats (nuostoviųjų būsenų postulatats). Elektronas gali skrieti apie branduolį tik tam tikromis orbitomis, nespinduliuodamas energijos. Šios orbitos vadinamos **nuostoviomis**. Kiekvieną orbitą atitinka apibrėžta atomo energija E_n (n – orbitos numeris).



3 pav. Du galimi kampai tarp elektrono sukcinio vektoriaus L_s ir elektrono orbitinio judesio kiekio momento vektoriaus L bei atitinkami elektrono pilnutinio judesio kiekio momento vektoriai L_j

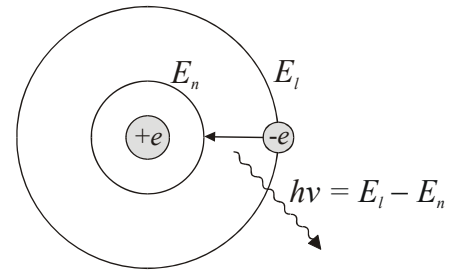


4 pav. Elektrono sukcinio judesio kiekio momento vektoriaus L_s ir orbitinio judesio kiekio momento vektoriaus L precesija aplink pilnutinio judesio kiekio momento vektorių L_j ir pastarojo vektoriaus precesija aplink išskirtąją kryptį Z

Antrasis postulatas (dažnių taisyklė). Peršokant elektronui iš toliau nuo branduolio esančios orbitos l į artimesnę branduoliui orbitą n , atomas išspinduliuoja energiją, kuri lygi atitinkamų nuostoviųjų energijų E_l ir E_n skirtumui (žr. 5 pav.). Šios elektromagnetinės spinduliuotės dažnis ν susijęs su išspinduliuojama energija šitaip:

$$h\nu = E_l - E_n. \quad (3.2.1)$$

Ši energija išspinduliuojama dalelės – **fotono** (elektromagnetinės spinduliuotės kvanto) – pavidalu.



5 pav. Antrasis Boro postulatas

Trečiasis postulatas (orbitų kvantavimo taisyklė) susieja orbitos numerį n su toje orbitoje esančio elektrono judesio kiekio momento modulių $|L|$. Pagal trečiąjį Boro postulatą n -tojoje orbitoje esančio elektrono judesio kiekio momento modulis lygus

$$L_n = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar \quad (n = 1, 2, \dots). \quad (3.2.2)$$

Sveikasis skaičius n vadinamas **pagrindiniu kvantiniu skaičiumi**.

Pagal Boro teoriją apskaičiuojamas vandeniliškojo atomo (t. y. vandenilio atomo arba jono, kuris yra praradęs visus elektronus išskyrus vieną) energijos lygmenis, gaunamos tiksliai tokios pačios energijos vertės kaip ir kvantinėje mechanikoje, t. y.

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot 13,6 \text{ eV} \quad (n = 1, 2, 3, \dots); \quad (3.2.3)$$

čia Z yra atomo branduolio krūvio skaičius (t. y. branduolio krūvis, išreikštas e vienetais), m yra elektrono masė, o ε_0 yra elektrinė konstanta ($\varepsilon_0 = 8,8541878176 \cdot 10^{-12}$ F/m). Boro teorija netinka aprašant kitų atomų ir sudėtingesnių darinių (pvz., molekulių) savybes ir turi kitų esminių trūkumų (pvz., elektrono judesio kiekio momentas (3.2.2), kurį numato Boro teorija, nėra lygus tiksliajam momentui (3.1.3), kurį numato kvantinė mechanika), todėl šiuo metu jau nėra taikoma praktiniuose skaičiavimuose. Tačiau Boro atomo teorija, nors ir blogiau atspindinti tikrovę, yra daug vaizdesnė ir paprastesnė už kvantinę mechaniką, kurios matematinis aparatas yra gana sudėtingas. Be to, atomo energijos lygmenų sąvoka, kuri pirmą kartą pavartota Boro teorijoje, vartojama ir kvantinėje mechanikoje. Todėl, jeigu siekiama vaizdžiai aprašyti kokį nors atominį reiškinį, ir šiuo metu dažnai remiamasi Boro atomo modeliu.

Apskrita orbita judantis elektronas yra tapatus apskritu kontūru tekančiai elektros srovei. Kaip žinoma iš elektrodinamikos, tokia srovė turi magnetinį momentą, kuris lygus

$$\mu = \frac{eS}{T} = \frac{\pi e r^2}{T}; \quad (3.2.4)$$

čia T yra apsisukimo periodas, $S = \pi r^2$ yra orbitos plotas, o r yra orbitos spindulys. Antra vertus, greičiu v apskrita orbita judantis elektronas turi judesio kiekio momentą (3.1.2). Kadangi $v = 2\pi r/T$, tai

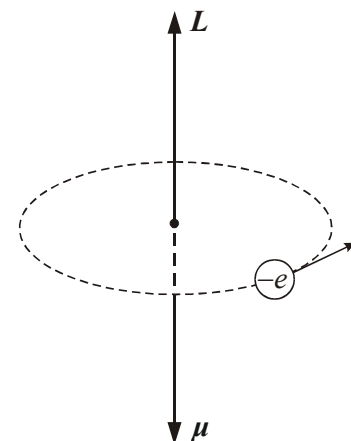
$$|L| = \frac{2\pi m r^2}{T}.$$

Išreiškę r^2/T iš pastarosios formulės ir įrašę į (3.2.4), išvedame elektrono magnetinio ir judesio kiekio momentų sąryšį:

$$\mu = \frac{e}{2m} |L|.$$

Magnetinis ir judesio kiekio momentai yra vektoriniai dydžiai. Magnetinio momento vektorius μ kryptis susijusi su srovės kryptimi pagal dešiniojo sraigto taisyklę, t. y., jeigu vektorius μ pradžia yra srovės kontūro centre, tada, žiūrint iš šio vektoriaus galo, srovė turi tekėti prieš laikrodžio rodyklę. Elektrono judesio kiekio momento L kryptis susijusi su jo judėjimo kryptimi taip pat pagal dešiniojo sraigto taisyklę (žr. 6 pav.). Kadangi elektrono krūvis yra neigiamas, tai jo sukuriamos elektros srovės kryptis yra priešinga judėjimo krypčiai. Todėl elektrono magnetinio ir judesio kiekio momentų kryptys yra priešingos:

$$\mu = -\frac{e}{2m} L \quad (3.2.5)$$



6 pav. Apskrita orbita judančio elektrono mechaninis momentas L ir magnetinis momentas μ

(žr. 6 pav.). Kadangi judesio kiekio momento „natūralusis“ matavimo vienetas yra \hbar (žr. (3.1.3)), tai (3.2.5) patogiau užrašyti šitaip:

$$\boldsymbol{\mu} = -\mu_B \frac{\mathbf{L}}{\hbar}; \quad (3.2.6)$$

čia μ_B yra **Boro magnetonas**:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9,274009 \cdot 10^{-24} \text{ J/T} = 5,78838 \cdot 10^{-5} \text{ eV/T}; \quad (3.2.7)$$

čia „T“ yra teslos (magnetinės indukcijos matavimo vieneto) žymuo. Boro magnetonas yra elektrono magnetinio momento natūralusis matavimo vienetas: pagal Boro teoriją elektrono orbitinio magnetinio momento modulis lygus Boro magnetono ir orbitos numerio n sandaugai.

Esant išoriniam magnetiniam laukui, magnetinį momentą veikia jėga, kuri stengiasi nukreipti magnetinį momentą lauko kryptimi. Kadangi elektronas turi orbitinį mechaninį momentą, tai, esant išorinei jėgai, jis veikia kaip vilkelis: jo mechaninis momentas precesuoja aplink išorinės jėgos (magnetinio lauko) kryptį (žr. 7 pav.). Ši precesija vadinama **Larmoro precesija**, o jos dažnis vadinamas **Larmoro dažniu**. Elektrono Larmoro dažnis lygus

$$\nu_L = \frac{eB}{4\pi m_e} = \frac{\mu_B B}{2\pi\hbar} = \frac{\mu_B B}{h}; \quad (3.2.8)$$

čia B yra magnetinė indukcija. Šis dažnis yra labai didelis, todėl pasireiškia tik magnetinio momento vektoriaus vidurkis, kurio kryptis lygiagreči su išorinio magnetinio lauko kryptimi. Šio vidurkio vertė lygi magnetinio momento (3.2.6) projekcijai į išorinio magnetinio lauko kryptį.

Jeigu medžiagos atomai turi nenulinį magnetinį momentą, šie momentai iš dalies orientuojasi magnetinio lauko kryptimi (tiksliai orientuotis trukdo šiluminis judėjimas). Tada medžiaga įmagnetėja lauko kryptimi. Tokios medžiagos vadinamos **paramagnetikais**. Kai kurių atomų elektronų magnetiniai momentai tiksliai kompensuoja vienas kitą, todėl atomo magnetinis momentas lygus nuliui ir medžiagos įmagnetėjimo mechanizmas yra kitoks. Tokios medžiagos įmagnetėja dėl Larmoro precesijos. Mat ta precesija sukelia papildomą sukamąjį judėjimą aplink lauko kryptį. Larmoro precesijos kryptis susijusi su lauko kryptimi pagal dešiniojo sraigto taisyklę (žr. 7 pav.). Dėl šios precesijos atsiranda papildoma sukurinė elektros srovė, kurios kryptis priešinga precesijos kryptiai (nes elektrono krūvis neigiamas). Šios papildomos srovės magnetinio momento kryptis yra priešinga išorinio magnetinio lauko kryptiai. Todėl medžiagos, kurių atomai neturi pastovaus magnetinio momento, įmagnetėja priešinga laukui kryptimi. Tokios medžiagos vadinamos **diamagnetikais**.

3.3. Daugielektronio atomo judesio kiekio momentas ir magnetinis momentas

Irašę L_z ir $|\mathbf{L}|$ vertes (3.1.4) ir (3.1.3) į orbitinių magnetinio ir judesio kiekio momentų sąryšį (3.2.6), gauname, kad elektrono orbitinio magnetinio momento projekcija į bet kurią laisvai pasirinktą kryptį gali būti lygi tik šioms vertėms:

$$\mu_z = -m_l \mu_B \quad (m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l), \quad (3.3.1a)$$

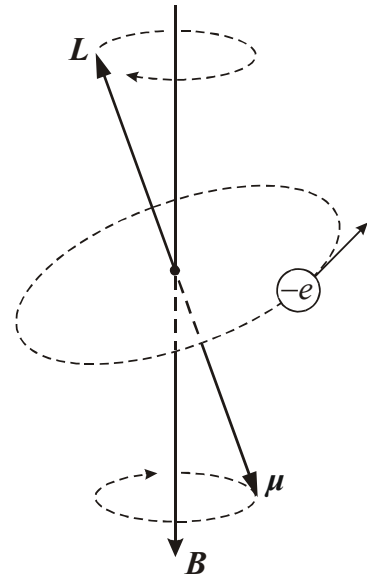
o orbitinio magnetinio momento modulis – tik šioms vertėms:

$$\mu = \mu_B \sqrt{l(l+1)}. \quad (3.3.1b)$$

Su elektrono sukiniu yra susijęs elektrono vidinis (sukininis) magnetinis momentas $\boldsymbol{\mu}_s$. Sukininių magnetinio ir judesio kiekio momentų santykis yra dukart didesnis negu orbitinių:

$$\boldsymbol{\mu}_s = -2\mu_B \frac{\mathbf{L}_s}{\hbar} \quad (3.3.2)$$

(plg. su (3.2.6)). Magnetinio momento ir atitinkamo judesio kiekio momento projekcijų į duotąją kryptį santykis yra vadinamas **giromagnetiniu santykiu**. Dydis, kuris yra priešingas elektrono giromagnetinio santykio vertei, išreikštai μ_B/\hbar vienetais, yra vadinamas elektrono **g faktoriumi**. Pagal (3.2.6) ir (3.3.2) elektrono orbitinis g faktorius lygus 1, o sukininis g faktorius lygus 2. Nereliatyvistinės kvantinės mechanikos požiūriu elektrono sukininis g faktorius turėtų būti tiksliai lygus 2, tačiau kvantinė elektrodinamika įrodo, kad laisvo elektrono sukininis g faktorius yra šiek tiek didesnis už 2 ir lygus 2,0023.



7 pav. Larmoro precesija. Mechaninis momentas \mathbf{L} ir magnetinis momentas $\boldsymbol{\mu}$ precesuoja aplink išorinio magnetinio lauko magnetinės indukcijos vektorių \mathbf{B} . Akivaizdu, kad šios precesijos kryptis yra priešinga elektrono sukimosi kryptiai

Sukininio magnetinio momento projekcijai ir moduliui galioja sąryšiai, kurie analogiški (3.3.1a) ir (3.3.1b), tačiau vietoj orbitinių kvantinių skaičių m_l ir l reikia vartoti atitinkamus sukiniio kvantinius skaičius m_s ir s , o vietoj μ_B reikia vartoti $2\mu_B$:

$$\mu_{sz} = -2m_s\mu_B = \mp\mu_B \quad (m_s = \pm 1/2), \quad (3.3.3a)$$

$$|\boldsymbol{\mu}_s| = 2\mu_B\sqrt{s(s+1)} = \sqrt{3} \cdot \mu_B. \quad (3.3.3b)$$

Atomo elektronų sistemos pilnutinis judesio kiekio momentas – tai atomo elektronų orbitinių ir sukininių judesio kiekio momentų vektorinė suma (kad būtų trumpiau, šį momentą vadinsime „atomo“ momentu, nors iš tikro į atomo pilnutinį momentą įeina ir atomo branduolio momentas). Ši suma gaunama nuosekliai sudedant po du momentus ir taikant bendrąją momentų sudėties taisyklę (3.1.10). Tačiau atomo būseną priklauso nuo atskirų dėmenų sudėties tvarkos. Galima įsivaizduoti du būdus:

I būdas. Kiekvieno elektrono orbitinis judesio kiekio momentas \mathbf{L} vektoriškai sudedamas su jo sukiniu \mathbf{L}_s ir sudaro elektrono pilnutinį momentą \mathbf{L}_j :

$$\mathbf{L}_j = \mathbf{L} + \mathbf{L}_s.$$

Paskui skirtingų elektronų pilnutiniai momentai \mathbf{L}_{jk} (čia k yra elektrono numeris) vektoriškai sudedami ir kartu sudaro atomo pilnutinį judesio kiekio momentą \mathbf{L}_J :

$$\mathbf{L}_J = \sum_k \mathbf{L}_{jk}.$$

Toks atomo elektronų momentų ryšys vadinamas **jj ryšiu**.

II būdas. Visų elektronų orbitinių judesio kiekio momentų vektoriai sudedami ir kartu sudaro atomo orbitinį judesio kiekio momentą \mathbf{L}_L :

$$\mathbf{L}_L = \sum_k \mathbf{L}_k; \quad |\mathbf{L}_L| = \hbar\sqrt{L(L+1)}. \quad (3.3.4)$$

Visų elektronų sukininių judesio kiekio momentų vektoriai sudedami ir sudaro atomo sukininį judesio kiekio momentą \mathbf{L}_S :

$$\mathbf{L}_S = \sum_k \mathbf{L}_{sk}; \quad |\mathbf{L}_S| = \hbar\sqrt{S(S+1)}. \quad (3.3.5)$$

Paskui atomo orbitinis judesio kiekio momentas \mathbf{L}_L vektoriškai sudedamas su atomo sukininiu judesio kiekio momentu \mathbf{L}_S ir sudaro atomo pilnutinį judesio kiekio momentą:

$$\mathbf{L}_J = \mathbf{L}_L + \mathbf{L}_S; \quad |\mathbf{L}_J| = \hbar\sqrt{J(J+1)}. \quad (3.3.6)$$

Toks atomo elektronų momentų ryšys vadinamas **LS ryšiu** arba **Raselo ir Saunderso ryšiu** (angl. *Russell-Saunders coupling*).

Teisingąją elektronų orbitinių ir sukininių judesio kiekio momentų sudėties tvarką lemia įvairių liekamųjų sąveikų (t. y. sąveikų, į kurias neatsižvelgiama centrinio jėgų lauko modelyje) santykinis stiprumas. Tokių sąveikų pavyzdžiai yra elektronų Kulono stūma ir vieno elektrono sukiniio ir orbitos sąveika. Momentų sudėties tvarka turi būti tokia, kad visų pirma būtų atsižvelgiama į stipriausias liekamasias sąveikas. Lengvųjų atomų ($Z < 40$) elektronų Kulono stūma yra svarbiausia liekamoji sąveika. Šiuo atveju labiausiai tinka **LS** ryšys. Sunkiųjų atomų elektronų greičiai yra reliatyvistiniai, o elektrono sukiniio ir orbitos sąveikos energija yra daug didesnė už elektronų Kulono stūmos energiją. Šiuo atveju labiausiai tinka **jj** ryšys. Yra galimas ir „mišrusis“ ryšys, kuris turi ir **LS** ryšio, ir **jj** ryšio savybių (vadinamasis **tarpinis ryšys**). Toliau nagrinėsime tik **LS** ryšio atvejį.

Kaip matome (3.3.4–6) formulėse, kvantiniai skaičiai, kurie nusako atomo orbitinį, sukininį ir pilnutinį judesio kiekio momentus, žymimi didžiosiomis raidėmis L , S ir J (atitinkami elektrono kvantiniai skaičiai žymimi mažosiomis raidėmis l , s ir j). Kvantinių skaičių L , S ir J vertės gaunamos pagal bendrąją judesio kiekio momentų sudėties taisyklę (3.1.10). Kadangi visų elektronų sukiniio kvantiniai skaičiai yra vienodi ir lygūs $1/2$, tai lengviausia apskaičiuoti atomo sukiniio kvantinį skaičių S . Jeigu atomas turi N elektronų, galimos skaičiaus S vertės yra

$$S = \sum_{k=1}^N \left(\pm \frac{1}{2} \right) = \begin{cases} 0, 1, \dots, \frac{1}{2}N-1, \frac{1}{2}N, & \text{jeigu } N \text{ lyginis;} \\ \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, \frac{1}{2}N-1, \frac{1}{2}N, & \text{jeigu } N \text{ nelyginis.} \end{cases} \quad (3.3.7)$$

Didžiausia S vertė gaunama tada, kai visų elektronų sukinių kryptys yra vienodos (tiksliau, kai visų elektronų sukinių projekcijos į pilnutinio sukiniio kryptį yra vienodo ženklo), o vertė $S = 0$ gaunama tada, kai elektronų sukinių kryptys yra poromis priešingos.

Pagal momentų sudėties taisyklę (3.1.10) būsenos su apibrėžtais orbitiniu kvantiniu skaičiumi L ir sukiniio kvantiniu skaičiumi S atomo pilnutinio judesio kiekio momento kvantinis skaičius J gali įgyti tik šias vertes:

$$J = |L - S|, |L - S| + 1, \dots, L + S - 1, L + S. \quad (3.3.8)$$

Kiekviena iš šių verčių atitinka apibrėžtą kampą tarp vektorių L_L ir L_S , taip pat kaip vieno elektrono atveju (žr. 3 pav.). Tačiau daugiaelektroninių atomų sukinys S gali būti didesnis už $1/2$, todėl kampo tarp vektorių L_L ir L_S galimų verčių skaičius gali būti didesnis už 2. Jeigu $S \leq L$, tada pagal (3.3.8) galimų J verčių skaičius yra $2S + 1$, o jeigu $S > L$, tada galimų J verčių skaičius yra $2L + 1$.

Sukinio ir orbitos sąveika daugiaelektroniuose atomuose pasireiškia tuo, kad būsenos su apibrėžtais L ir S energija priklauso nuo kampo tarp atomo orbitinio judesio kiekio momento L_L ir atomo sukininio judesio kiekio momento L_S . Todėl atomo energijos lygmuo, kuris atitinka duotąsias L ir S vertes, skyla į $2S + 1$ artimų lygmenų (jeigu $S \leq L$) arba į $2L + 1$ artimų lygmenų (jeigu $S > L$). Kaip ir vieno elektrono, esant duotiems kvantiniams skaičiams n , L ir S , atomo energija didėja didėjant J .

Iš (3.3.8) išplaukia, kad bendroju atveju, fiksavus L , duotąją J vertę galima gauti esant įvairioms S vėrtėms. Pvz., dviejų elektronų sistemoje (helio atomas) $S = 1/2 \pm 1/2$, t. y. 0 arba 1. Jeigu $L = 1$, tada, pvz., vertė $J = 1$ gali būti gauta ir kai $S = 0$, ir kai $S = 1$. Abu šie atvejai atitinka skirtingus energijos lygmenis. Todėl, nusakant atomo energijos lygmenį, kartu su kvantiniais skaičiais L ir J reikia nurodyti ir atomo sukinio kvantinį skaičių S . Akivaizdu, kad skaičiai L , J ir S nėra pakankami išsamiai nusakant daugiaelektronio atomo kvantinę būseną, nes tie skaičiai nieko nesako apie elektronų pasiskirstymą tarp vienelektroninių būsenų. Tačiau, nagrinėjant atomo kvantinius šuolius tarp energijos lygmenų, dažniausiai galima teigti, kad šuolyje dalyvauja tik vienas elektronas, o visų kitų elektronų būsenos nesikeičia ir yra žinomos. Tada, nusakant duotojo kvantinio šuolio pradinį ir galutinį energijos lygmenis, šalia anksčiau minėtų trijų kvantinių skaičių L , J ir S pakanka nurodyti tik to elektrono pagrindinio kvantinio skaičiaus n pradinę ir galutinę vertes. Be to, vietoj skaičiaus S įprasta nurodyti **multiplietiškumą** $2S + 1$, kuris nusako, kiek yra galimų kampų tarp vektoriaus L_S ir laisvai pasirinktos krypties erdvėje (jeigu $S \leq L$, skaičius $2S + 1$ yra lygus skaičiui lygmenų su skirtingais J , tačiau su vienodais L ir S). Būseną su $S = 0$ vadinama **singuletine būseną** ($2S + 1 = 1$), būseną su $S = 1/2$ – **dubletine būseną** ($2S + 1 = 2$), būseną su $S = 1$ – **tripletine būseną** ($2S + 1 = 3$) ir t. t. Taigi, pilnasis atomo energijos lygmenis žymuo yra tokio pavidalo: $n^{2S+1}L_J$; čia vietoj L verčių 0, 1, 2, ... vartojamos didžiosios raidės S, P, D ir t. t. Pvz., žymuo $3^2P_{3/2}$ reiškia lygmenį, kuris atitinka $n = 3$, $S = 1/2$, $L = 1$ ir $J = 3/2$.

Atomai turi magnetinį momentą, kuris susijęs su atomo judesio kiekio momentu. Atomo pilnutinis magnetinis momentas μ_{piln} lygus atomo orbitinio magnetinio momento μ_L ir sukininio magnetinio momento μ_S vektorinei sumai:

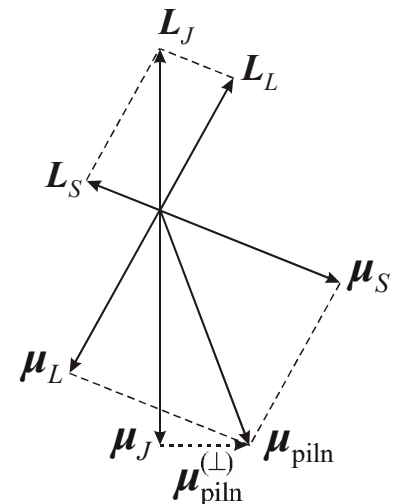
$$\mu_{\text{piln}} = \mu_L + \mu_S. \quad (3.3.9)$$

Kadangi orbitinis ir sukininis magnetiniai momentai susideda iš atskirų elektronų orbitinių ir sukininių magnetinių momentų, o šie susiję su atitinkamais judesio kiekio momentais pagal (3.2.6) ir (3.3.2) formules, tai vektorius μ_L yra susijęs su vektoriumi L_L pagal (3.2.6) formulę, o μ_S susijęs su L_S pagal (3.3.2). Tačiau pilnutinio magnetinio momento (3.3.9) kryptis nėra priešinga pilnutinio judesio kiekio momento L_J kryptčiai, nes orbitinis ir sukininis g faktoriai yra skirtingi (orbitinis lygus 1, o sukininis lygus 2). Tai parodyta 8 pav. Kaip minėta, L_L ir L_S precesuoja apie L_J . Vadinas, μ_{piln} taip pat precesuoja apie L_J . Reiškiniuose, kurie priklauso nuo atomo pilnutinio judesio kiekio momento, pasireiškia tik vektoriaus μ_{piln} vidurkis, kurio kryptis priešinga L_J kryptčiai, o modulis lygus vektoriaus μ_{piln} projekcijos į L_J kryptį moduliu. Todėl toliau, kalbant apie atomo magnetinį momentą, bus turimas omenyje būtent šis vidurkis, o ne tikrasis pilnutinio magnetinio momento vektorius (3.3.9). Taigi, atomo magnetinis momentas μ_J gaunamas atėmus iš pilnutinio magnetinio momento vektoriaus μ_{piln} vektorių $\mu_{\text{piln}}^{(\perp)}$, kuris nusako vektoriaus μ_{piln} statmenąją komponentę (žr. 8 pav.). Taip apibrėžus atomo magnetinį momentą, jo modulis lygus

$$|\mu_J| = |\mu_L| \cos(\angle L_L, L_J) + |\mu_S| \cos(\angle L_S, L_J). \quad (3.3.10)$$

Kampų tarp L_L ir L_J bei tarp L_S ir L_J kosinusus galima išreikšti pakėlus kvadratu sąryšius $L_S = L_J - L_L$ ir $L_L = L_J - L_S$. Tada, atsižvelgę į modulius $|L_L|$, $|L_S|$ ir $|L_J|$ išraiškas (3.3.4–6), matome:

$$|\mu_J| = \mu_B g_J \sqrt{J(J+1)}; \quad g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (3.3.11)$$



8 pav. Atomo orbitinio ir sukininio mechaninio ir magnetinio momentų vektorinė sudėtis

Čia g_J yra atomo elektronų sistemos g faktorius – atomo elektronų pilnutinių magnetinio momento ir judesio kiekio momento projekcijų į duotąją kryptį santykis, išreikštas $-\mu_B/\hbar$ vienetais. g faktoriaus išraišką (3.3.11) 1921 m. išvedė vokiečių fizikas Alfredas Landė (*Landé*), todėl atomo elektronų g faktorius taip pat vadinamas **Landė g faktoriumi**.

Jeigu atomas turi pastovų magnetinį momentą (t. y. jeigu $J > 0$), tada, esant išoriniam magnetiniam laukui, atomo magnetinio momento μ_J skirtingos kryptys nėra lygiavertės. Taip yra dėl to, kad atomas, kurio magnetinis momentas yra μ_J , išoriniame magnetiniame lauke, kurio indukcija yra \mathbf{B} , įgyja papildomą potencinę energiją

$$E_M = -\mu_J \cdot \mathbf{B} = -\mu_J B \cos(\mu_J, \mathbf{B}); \quad (3.3.12)$$

čia $\mu_J \equiv |\mu_J|$, $B \equiv |\mathbf{B}|$. Kadangi ši energija priklauso nuo kampo tarp μ_J ir \mathbf{B} , tai kiekvienas energijos lygmuo skyla į tiek polygmenių, kiek yra galimų kampų tarp vektorių μ_J ir \mathbf{B} . Kaip žinome, atomo pilnutinio judesio kiekio momento ir atomo magnetinio momento projekcijas į laisvai pasirinktą z ašį nusako kvantinis skaičius m_J :

$$L_{Jz} = m_J \hbar, \quad (3.3.13)$$

$$\mu_{Jz} = -m_J g_J \mu_B, \quad (3.3.14)$$

$$m_J = -J, -J + 1, \dots, J - 1, J. \quad (3.3.15)$$

T. y. kiekvienos kvantinės būsenos atomo pilnutinio judesio kiekio momento vektorius precesuoja aplink išorinio lauko kryptį taip, kad projekcija L_{Jz} lieka pastovi. Šiuo atveju z kryptį patogiausia pasirinkti taip, kad ji sutaptų su \mathbf{B} kryptimi, nes tada kiekvieną energijos lygmenį atitinka apibrėžta m_J vertė (jeigu z ašis ir vektorius \mathbf{B} nebūtų lygiagretūs, tada, matuojant L_{Jz} , kai atomas yra apibrėžtos energijos, įvairiuose matavimuose būtų gaunamos visos galimos m_J vertės (3.3.15), o skirtingų m_J verčių pasikartojimo dažniai priklausytų nuo kampo tarp z ašies ir magnetinio lauko krypties). Tokiu atveju atomo sąveikos su išoriniu magnetiniu lauku energija (3.3.12) lygi

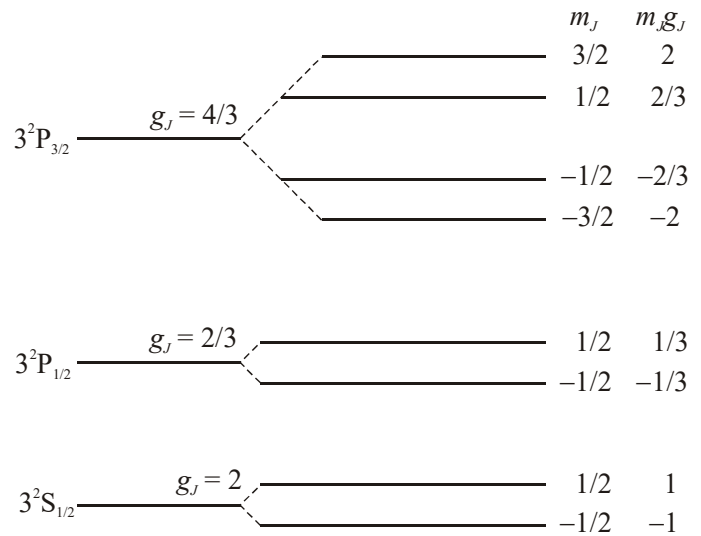
$$E_M = \mu_{Jz} B = -m_J g_J \mu_B B \quad (m_J = -J, \dots, J). \quad (3.3.16)$$

Taigi, išoriniame magnetiniame lauke kiekvienas atomo energijos lygmuo skyla į $2J + 1$ artimų lygmenų (žr. 9 pav.). Atitinkamai skyla ir atomo spektro linijos.

Larmoro precesijos sąvoka, kuri minėta 3.2 skirsnyje aptariant supaprastintą Boro atomo teoriją, lieka galioti ir daugiaelektronų atomų LS ryšio atveju. Tada aplink išorinio lauko kryptį precesuoja pilnutinis atomo magnetinis momentas (o ne vieno elektrono orbitinis magnetinis momentas), todėl reikia apibendrinti Larmoro dažnio išraišką (3.2.8). Joje atsiranda papildomas daugiklis – g faktorius:

$$\nu_L = \frac{g_J \mu_B B}{h}. \quad (3.3.17)$$

Atomo spektro linijų skilimą, esant nuostoviam magnetiniam laukui, 1896 m. pirmasis pastebėjo olandų fizikas Peteris Zėmanas (*Zeeman*), todėl šis reiškinys vadinamas **Zėmano efektu**. Tokio pobūdžio skilimas, kurį nusako (3.3.16) formulė, būna tik palyginti silpnuose magnetiniuose laukuose, t. y. tik tada, kai atomo orbitinio ir sukininio magnetinių momentų sąveikos su išoriniu lauku energija yra mažesnė už sukinio ir orbitos sąveikos energiją. Stipresniuose laukuose sukinio ir orbitos ryšys yra nutraukiamas, ir vektoriai L_L bei L_S pradeda nepriklausomai vienas nuo kito precesuoti aplink išorinio lauko kryptį. Tada, apibūdinant atomo kvantinę būseną, vietoj kvantinių skaičių J ir m_J reikia vartoti kvantinius skaičius m_L ir m_S , kurie nusako atitinkamai atomo orbitinio ir sukininio momento projekcijas į išorinio lauko kryptį (atitinkamas energijos lygmenų ir spinduliuotės spektro linijų skilimas vadinamas Pašeno ir Bako reiškiniumi). Esant dar stipresniems magnetiniams laukams, ryšys tarp skirtingų elektronų orbitinių ir sukininių momentų taip pat nutraukiamas, todėl *kiekvieno* elektrono orbitinis ir sukininis momentai nepriklausomai vienas nuo kito precesuoja aplink išorinio lauko kryptį. Tokiu atveju, nusakant atomo kvantinę būseną, reikia nurodyti visų elektronų orbitinius ir sukininius magnetinius kvantinius skaičius m_l ir m_s .



9 pav. Natrio atomo energijos lygmenų skilimas magnetiniame lauke (skilimo didumo ir intervalų tarp neskilusių lygmenų santykis tikrovėje yra daug mažesnis už tą, kuris parodytas šioje energijos lygmenų diagramoje)

3.4. Elektronų sluoksniai

Daugiaelektroninių atomų savybes galima apytiksliai aprašyti teigiant, kad atomo elektronai yra pasiskirstę tarp vienelektroninių kvantinių būsenų. Jeigu nepaisoma elektronų tarpusavio sąveikos bei sukinio ir orbitos sąveikos, tada kiekvieno elektrono kvantinę būseną galima apibūdinti kvantinių skaičių ketvertu (3.1.8). Vieno elektrono orbitinio judėjimo Kulono lauke būsena, kuri apibūdinama kvantinių skaičių trejetu n, l, m_l , yra vadinama atomo *orbitale*. Pagrindiniai principai, kurie nusako daugiaelektronio atomo vienelektroninių būsenų užpildymą, yra Paulio draudimo principas ir energijos minimumo principas. **Paulio draudimo principas** teigia, kad atomas negali turėti dviejų elektronų, kurių visi atitinkami kvantiniai skaičiai sutampa, t. y. vieną orbitale gali užimti ne daugiau kaip du elektronai su priešingu krypties sukiniais. **Energijos minimumo principas** teigia, kad, esant duotam elektronų skaičiui atome, elektronų pasiskirstymas tarp vienelektroninių kvantinių būsenų yra toks, kad atomo energija būtų mažiausia. Nustatysime elektronų pasiskirstymą tarp orbitalių, kuris išplaukia iš minėtų dviejų principų.

Didėjant pagrindiniam kvantiniam skaičiui n ir šalutiniam kvantiniam skaičiui l , didėja vidutinis atstumas tarp branduolio ir elektrono. Šio atstumo priklausomybė nuo l yra daug silpnesnė negu nuo n . Todėl visos orbitalės, kurių pagrindinis kvantinis skaičius n sutampa, sudaro **elektronų sluoksnį**. Visos orbitalės, kurių pagrindinis ir šalutinis kvantiniai skaičiai n ir l sutampa, sudaro **elektronų posluoksnį**; jis taip pat vadinamas **pograpiu**. Elektronų sluoksniai žymimi raidėmis K, L, M ir t. t. Pvz., pirmasis elektronų sluoksnis ($n = 1$), kuris yra arčiausiai branduolio, vadinamas **K sluoksniu**. Antrasis sluoksnis atitinka $n = 2$ ir vadinamas **L sluoksniu** ir t. t. (žr. 1 lentelę). Elektronų posluoksniai žymimi raidėmis s, p, d, f, g, ... (žr. 2 lentelę).

1 lentelė. Elektronų sluoksnių žymenys

Pagrindinis kvantinis skaičius n	1	2	3	4	5
Elektronų sluoksnis	K	L	M	N	O

2 lentelė. Elektronų posluoksnių žymenys

Šalutinis kvantinis skaičius l	0	1	2	3	4
Elektronų posluoksnis	s	p	d	f	g

Kadangi kiekvieną l vertę atitinka $2l + 1$ galimų skaičiaus m_l verčių (žr. (3.1.4)), tai viename posluoksnyje gali būti ne daugiau kaip $2(2l+1)$ elektronų. Pvz., 1s, 2s ir kituose s posluoksniuose gali būti ne daugiau kaip 2 elektronai, kiekviename p posluoksnyje – ne daugiau kaip 6 elektronai ir t. t. Kadangi kiekvieną n vertę atitinka n galimų skaičiaus l verčių (žr. (3.1.3)), tai didžiausias galimas elektronų skaičius n -tajame sluoksnyje yra lygus

$$2 \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2n^2. \quad (3.4.1)$$

Pagal (3.4.1) pirmajame elektronų sluoksnyje ($n = 1$) gali būti ne daugiau kaip 2 elektronai, antrajame – ne daugiau kaip 8 elektronai (du s elektronai ir šeši p elektronai), trečiajame – ne daugiau kaip 18 elektronų (du s elektronai, šeši p elektronai ir dešimt d elektronų) ir t. t. (žr. 3 lentelę).

Jeigu elektronai nesąveikautų tarpusavyje, tada, didėjant elektronų skaičiui atome, visų pirma būtų užpildomi sluoksniai su mažiausiu n . Tai išplaukia iš energijos minimumo principo (didėjant n , elektrono energija didėja). Didėjant l , didėja vidutinis atstumas tarp branduolio ir elektrono, todėl mažėja efektinis teigiamas krūvis, kuris veikia elektroną (dėl branduolio elektros krūvio dalinio ekranavimo vidinių sluoksnių elektronais). Todėl, didėjant l , elektrono energija taip pat didėja (tačiau daug lėčiau negu didėjant n). Vadinasi, didėjant atomo elektronų skaičiui, visų pirma užpildomi kiekvieno sluoksnio posluoksniai su mažiausiu l . Taigi, **idealiųjų sluoksnių užpildymo tvarka** yra tokia: kiekvienas prisijungęs elektronas užima orbitale su mažiausiais n ir l , kuriuos leidžia Paulio draudimo principas.

3 lentelė. Didžiausi elektronų skaičiai sluoksniuose ir posluoksniuose

Sluoksnis	n	Didžiausias elektronų skaičius posluoksnyje					Iš viso sluoksnyje
		s	p	d	f	g	
K	1	2					2
L	2	2	6				8
M	3	2	6	10			18
N	4	2	6	10	14		32
O	5	2	6	10	14	18	50

Kai elektronų sluoksnis yra pilnai užpildytas, susidaro stabili elektronų konfigūracija, kuri atitinka inertinių dujų elektronų konfigūraciją. Paskui prasideda kito sluoksnio užpildymas (pradedant nuo šarminio metalo).

Vidiniai elektronų sluoksniai normaliomis sąlygomis yra pilnai užpildyti. Iš šių sluoksnių elektroną išlaisvinti sunkiau negu iš išorinio sluoksnio. Be to, pilnai užpildytų elektronų sluoksnių pilnutiniai orbitiniai ir sukininis judesio kiekio momentai yra lygūs nuliui. Norint tuo įsitikinti, pakanka pastebėti, kad pagal (3.1.4) ir (3.1.7) kiekvienam pilnai užpildyto pasluoksnio elektronui su duotais kvantiniais skaičiais m_l ir m_s galima surasti kitą elektroną, kurio atitinkami kvantiniai skaičiai yra priešingi, t. y. tiksliai kompensuoja pirmojo elektrono kvantinius skaičius m_l ir m_s . Taigi, pilnai užpildytame sluoksnyje visus elektronus galima „suporuoti“ taip, kad kiekvienos tokios poros orbitinio ir sukininio judesio kiekio momentų projekcijos į z ašį būtų lygios nuliui. Kadangi šis rezultatas gautas laisvai pasirinkus z ašies kryptį, tai jis reiškia, kad pilnai užpildyto sluoksnio pilnutiniai orbitiniai ir sukininis judesio kiekio momentai lygūs nuliui.

Dėl anksčiau išvardytų priežasčių normaliomis sąlygomis (t. y. kai vidiniai sluoksniai visą laiką lieka pilnai užpildyti) atomo fizikinės ir cheminės savybės lemia išorinių (iš dalies užpildytų) sluoksnių elektronai. Pvz., šie elektronai sąveikauja susidarant cheminiams ryšiams tarp atomų, jie lemia atomo judesio kiekio ir magnetinį momentus, spinduliuotės spektrą ir t. t. Išorinis sluoksnis vadinamas *valentiniu sluoksniu*, o jo elektronai vadinami *valentiniais elektronais*. Jeigu ir išoriniame sluoksnyje visi elektronai yra „suporuoti“, tada cheminis elementas nesudaro cheminių junginių su jokiais kitais elementais, o jo molekulės yra vienas atomas. Tokie cheminiai elementai gamtoje aptinkami inertinių dujų pavidalu (pvz., helis, argonas ir kt.).

Lengvųjų atomų ($Z < 40$), kuriuose galioja LS ryšys, pagrindinės būsenos kvantinius skaičius S , L ir J galima apskaičiuoti remiantis taisyklėmis, kurias suformulavo vokiečių fizikas Fridrichas Hundas (*Hund*). **Pirmoji Hundo taisyklė** nusako pagrindinės būsenos multipletišumą: mažiausia energija yra būsenos, kurią atitinka didžiausias pilnutinio sukinio kvantinis skaičius S . Pirmoji Hundo taisyklė yra elektronų pakaitinės sąveikos pasekmė. Pagal šią taisyklę pirmiausia užpildomos būsenos su skirtingais orbitiniais magnetiniais kvantiniais skaičiais m_l ir vienodu sukinio magnetiniu kvantiniu skaičiumi m_s (pvz., su $m_s = 1/2$); paskui užpildomos būsenos su priešinga sukinio kryptimi ($m_s = -1/2$). **Antroji Hundo taisyklė** teigia, kad iš visų būsenų su vienodu S mažiausia energija yra tos būsenos, kurios pilnutinio orbitinio judesio kiekio momento kvantinis skaičius L yra didžiausias. Antrosios Hundo taisyklės klasikinis aiškinimas yra toks. Kelių elektronų sistemos orbitinis judesio kiekio momentas yra didžiausias tada, kai visi elektronai sukasi aplink branduolį viena kryptimi. Tokiu atveju jie susitinka vienas su kitu rečiau negu tuo atveju, jeigu suktųsi priešingomis kryptimis. Vadinasi, vidutinis atstumas tarp elektronų yra didesnis, todėl ir vidutinė jų Kulono stūmos energija yra mažesnė. **Trečioji Hundo taisyklė** nusako atomo pilnutinio sukinio kvantinio skaičiaus vertę J , kuri atitinka mažiausią atomo energiją: jeigu posluoksnis (n, l) yra užpildytas mažiau negu pusiau, tada mažiausios energijos būsenos $J = |L - S|$, o kitais atvejais mažiausios energijos būsenos $J = L + S$. Taip yra dėl sukinio ir orbitos sąveikos.

1869 m. rusų chemikas Dmitrijus Mendelejevas nustatė, kad, išdėdžius visus tuo metu žinomus elementus atominės masės didėjimo tvarka, elementų savybės kinta periodiškai. Šio periodiško prigimtis buvo nustatyta tik XX a. antrajame dešimtmetyje. Tada paaiškėjo, kad kiekvieno elemento vietą periodinėje sistemoje nusako to elemento atomo elektronų skaičius Z , o ne atomo masė. Kadangi, užpildant kiekvieną elektronų sluoksnį, pasikartoja ankstesniojo sluoksnio užpildymo tvarka, tai elementų cheminės savybės kinta periodiškai: kiekvieno sluoksnio užpildymas prasideda šarminiu metalu ir baigiasi inertinėmis dujomis. Taigi, elementai, kurie gaunami užpildant vieną elektronų sluoksnį, sudaro vieną elementų periodinės sistemos periodą. Iš (3.4.1) formulės išplaukia, kad idealiosios sluoksnių užpildymo tvarkos atveju elementų skaičiai sistemos I–VI perioduose turėtų būti 2, 8, 18, 32, 50, 72. Tačiau tikrovėje šie skaičiai yra 2, 8, 8, 18, 18, 32. Tai reiškia, kad atomų elektronų sluoksnių užpildymo tvarka stipriai skiriasi nuo idealiosios užpildymo tvarkos. Šio skirtumo priežastis – elektronų tarpusavio sąveika.

Atsižvelgus į elektronų tarpusavio sąveiką, galima išsamiai paaiškinti elementų periodinę sistemą. Kiekvieno elektrono būsena apibūdinama keturiais kvantiniais skaičiais – pagrindiniu kvantiniu skaičiumi n , šalutiniu (orbitiniu) kvantiniu skaičiumi l , magnetiniu kvantiniu skaičiumi m_l ir sukinio magnetiniu kvantiniu skaičiumi m_s . Atomo *elektronų konfigūracija* apibūdinama nurodant visas užpildytas vienelektrones būsenas ir kiekvienos būsenos elektronų skaičių. Elektronų konfigūracija simboliškai užrašoma taip. Visų pirma nurodomas pagrindinis kvantinis skaičius, paskui – šalutinio kvantinio skaičiaus simbolis (s, p, d, f ir t. t.), o paskui viršutinio indekso pavidalu nurodomas tos būsenos elektronų skaičius. Pvz., užrašymas $1s^2$ reiškia du s elektronus ($l = 0$), kurių būsena atitinka $n = 1$; $3p^5$ reiškia penkis elektronus, kurių būsena yra $l = 1$, $n = 3$ ir t. t. Bet kuri elektronų konfigūracija gali būti

užrašyta taikant šią taisyklę. Pvz., užrašymas $1s^22s^22p^4$ reiškia, kad yra du elektronai, kurių būseną yra $n = 1, l = 0$; du elektronai, kurių būseną yra $n = 2, l = 0$; keturi elektronai, kurių būseną yra $n = 2, l = 1$. Tai yra pagrindinės būsenos deguonies atomo elektronų konfigūracija. Analogiškai užrašomos ir kitų atomų elektronų konfigūracijos.

3.5. Kvantiniai šuoliai ir fotonų energijos skirstinys

Kvantinės sistemos perėjimas iš vieno energijos lygmens į kitą vadinamas *kvantiniu šuoliu*. Vykstant kvantiniam šuoliui iš aukštesnio energijos lygmens E_2 į žemesnį energijos lygmenį E_1 , emituojamas energijos kiekis, kuris yra lygus tų lygmenų skirtumui. Dažniausiai ta energija išspinduliuojama elektromagnetinės spinduliuotės kvanto – *fotono* – pavidalu. Fotono energija yra lygi fotono dažnio ν ir Planko konstantos h sandaugai ($h\nu$). Vadinasi,

$$h\nu = E_2 - E_1. \quad (3.5.1)$$

Priešingas šuolis gali įvykti tik iš išorės gavus energiją $E_2 - E_1$ (pvz., sugėrus tos pačios energijos fotoną).

Kvantiniai šuoliai būna savaiminiai ir priverstiniai. Kaip matyti iš pavadinimo, *savaiminis šuolis* vyksta be jokio išorinio poveikio (savaimė), o *priverstinis šuolis* vyksta dėl išorinio poveikio (pvz., dėl išorinės elektromagnetinės spinduliuotės). Savaiminis šuolis gali vykti tik į žemesnį energijos lygmenį. Priverstinis šuolis gali vykti ir į žemesnį, ir į aukštesnį energijos lygmenį, tačiau bet kuriuo atveju išorinės elektromagnetinės spinduliuotės fotono energija turi tenkinti (3.5.1) sąlygą. Duotoje energijos lygmenų poroje abiejų krypčių priverstinių šuolių tikimybės yra vienodos. Vadinasi, jeigu abiejų lygmenų užpildos būtų vienodos, tada, paveikus bandinį elektromagnetine spinduliuote, kurios fotonų energija tenkina (3.5.1) sąlygą, abiejų rūšių priverstinių šuolių dažniai būtų vienodi. Tačiau termodinaminės pusiausvyros sąlygomis energijos lygmenų užpildų santykis atitinka Bolcmano skirstinį, t. y.

$$\frac{N_2}{N_1} = \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right); \quad (3.5.2)$$

čia ΔE yra energijos lygmenų skirtumas ($\Delta E \equiv E_2 - E_1$; laikoma, kad $E_2 > E_1$), N_1 yra pirmojo lygmens (E_1) užpilda, N_2 yra antrojo lygmens (E_2) užpilda, k yra Bolcmano konstanta, o T yra absoliučioji temperatūra. Iš (3.5.2) išplaukia, kad žemesniojo lygmens užpilda termodinaminėje pusiausvyroje visada yra didesnė už aukštesniojo lygmens užpildą. Todėl, kai išorinės spinduliuotės fotonų energija prilygsta energijos lygmenų skirtumui ($h\nu = \Delta E$), sustipėja spinduliuotės sugertis. Tokia situacija, kai išorinės elektromagnetinės spinduliuotės fotono energija prilygsta energijos lygmenų skirtumui ir pradeda vykti priverstiniai kvantiniai šuoliai tarp tų lygmenų, yra vadinama *rezonansu*. Atitinkamai, (3.5.1) sąlyga vadinama *rezonanso sąlyga*. Šis rezonansas eksperimentiškai pastebimas pagal minėtąjį spinduliuotės energijos sugerties sustiprėjimą.

Tačiau net ir tada, kai išorinės spinduliuotės fotonų energija tenkina rezonanso sąlygą (3.5.1), įvairioms energijos lygmenų poroms (E_1 ir E_2) šuolių sparta (t. y. skaičius per laiko vienetą) gali būti labai įvairi. Kai kurių šuolių sparta yra tokia maža, kad galima teigti, jog tie šuoliai praktiškai nevyksta net ir galiojant rezonanso sąlygai. Tokie šuoliai vadinami „draudžiamaisiais šuoliais“. Taisyklės, kurios nusako, kurie šuoliai yra draudžiamieji, o kurie – leidžiamieji, vadinamos *kvantinių šuolių atrankos taisyklėmis*. Atomo kvantinių šuolių atrankos taisyklės teigia, kad leidžiamųjų kvantinių šuolių atveju atomo kvantinių skaičių J ir m_J pokyčiai atitinka šias sąlygas:

$$\Delta J = 0, \pm 1 \quad (\text{tačiau šuoliai tarp lygmenų su } J = 0 \text{ yra draudžiamieji}), \quad (3.5.3a)$$

$$\Delta m_J = 0, \pm 1 \quad (\text{tačiau šuoliai tarp lygmenų su } m_J = 0 \text{ ir vienodais } J \text{ yra draudžiamieji}). \quad (3.5.3b)$$

Jeigu išorinė spinduliuotė sukelia šuolius tarp lygmenų, kurie atsirado skilus atomo energijos lygmeniui išoriniame magnetiniame lauke (dėl Zėmano efekto), tada turime vadinamąjį *elektronų paramagnetinį rezonansą*. Šiuo atveju rezonanso sąlygoje (3.5.1) E_2 ir E_1 yra skilusio energijos lygmens du polygmeniai (pvz., jie pavaizduoti 9 pav. dešiniojoje pusėje). Šuoliai gali vykti tik tarp gretimų polygmenų (tai išplaukia iš atrankos taisyklės (3.5.3b)). Pagal (3.3.16) formulę intervalas tarp gretimų polygmenų yra $\Delta E = g_J \mu_B B$. Vadinasi, elektronų paramagnetinio rezonanso sąlyga yra

$$h\nu = g_J \mu_B B. \quad (3.5.4)$$

Jeigu elektronų sistemos orbitinio judesio kiekio momentas lygus nuliui ($L = 0$), tada pilnutinis judesio kiekio momentas lygus sukininiam momentui ($J = S$) ir elektronų paramagnetinis rezonansas vadinamas *elektronų sukininiu rezonansu*.

Elektronų paramagnetinį rezonansą galima panaudoti, matuojant atomo Landė g faktorių g_J . Pagal (3.5.4) tai galima pasiekti dviem būdais: kryptingai keisti fotonų energiją $h\nu$ esant pastoviai išorinio lauko magnetinei indukcijai B arba kryptingai keisti B esant pastoviai $h\nu$ ir matuoti spinduliuotės energijos sugertį (ji būna tiesiog proporcinga matuojamam elektriniam signalui). Dažniausiai taikomas antrasis

metodas, t. y. spinduliuotės dažnis būna pastovus, o keičiama magnetinė indukcija B . Esant tam tikrai rezonansinei magnetinei indukcijai $B = B_r$, pradeda galioti (3.5.4) lygybė ir matuojamasis signalas staigiai padidėja. Tada, išmatavus B_r , pagal (3.5.4) galima apskaičiuoti g_J :

$$g_J = \frac{h\nu}{\mu_B B_r}. \quad (3.5.5)$$

Nors rezonanso sąlyga (3.5.4) tiksliai apibrėžia rezonansinę magnetinę indukciją B_r , tačiau rezonanso požymiai (matuojamojo signalo padidėjimas) yra pastebimi ir nežymiai nukrypus nuo rezonanso sąlygos. T. y., kryptingai keičiant B , signalas padidėja ne akimirksniu, o palaipsniui. Paskui, perėjus rezonanso sąlygą, signalas taip pat palaipsniui sumažėja iki nulio. Taip yra todėl, kad atomo sužadintieji energijos lygmenys nėra absoliučiai tiksliai apibrėžti. Vaizdžiai kalbant, energijos lygmenys yra „išplitę“. Energijos neapibrėžtumą (t. y. energijos lygmens plotį) žymėsime Γ . Yra du veiksniai, kurie sąlygoja šį energijos neapibrėžtumą. Pirmasis veiksnys yra baigtinė sužadintojo lygmens gyvavimo trukmė, kurios vidurkį žymėsime τ . Kvantinėje mechanikoje įrodoma, kad energijos neapibrėžtumas yra atvirkščiai proporcingas lygmens vidutinei gyvavimo trukmei:

$$\tau = \hbar / \Gamma. \quad (3.5.6)$$

Apibrėžtos kvantinės būsenos sistemos energijos skirstinys, kurį sąlygoja energijos lygmenys baigtinė gyvavimo trukmė – tai **Lorenco skirstinys**, taip pat vadinamas **Breito ir Vignerio skirstiniu**. Pagal šį skirstinį tikimybė, kad duotuoju laiko momentu išmatuota sistemos energijos vertė priklausys nykstanto pločio dE intervalui nuo E iki $E + dE$ yra lygi

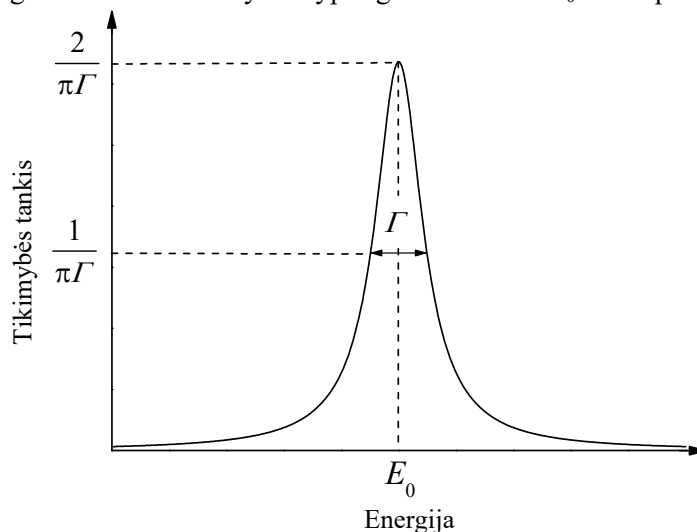
$$P(E)dE = \frac{2\Gamma}{\pi} \cdot \frac{1}{4(E - E_0)^2 + \Gamma^2} dE; \quad (3.5.7)$$

čia $P(E)$ yra sistemos energijos tikimybės tankis, o E_0 yra tikimiausioji energija. Pastovus daugiklis $2\Gamma/\pi$ (3.5.7) lygybės dešiniojoje pusėje – tai normavimo konstanta, kuri užtikrina lygybę $\int_{-\infty}^{\infty} P(E)dE = 1$. Ši

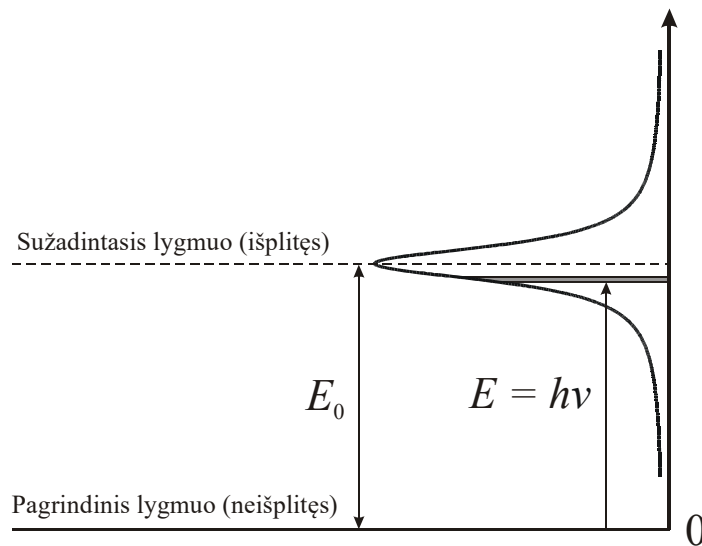
tikimybės tankio funkcija $P(E)$ pavaizduota 10 pav. Kaip matome, anksčiau minėtas dydis Γ matematiškai apibrėžiamas kaip energijos skirstinio plotis pusės maksimumo aukštyje.

Kitas veiksnys, dėl kurio atsiranda atomų arba molekulių energijos lygmenų neapibrėžtumas, yra bandinio nevienalytiškumas, t. y. vienarūšių molekulių, kurios yra skirtingose bandinio vietose, aplinkos skirtumai. Tie skirtumai sąlygoja tų molekulių sąveikas su aplinka energijos skirtumus, todėl atitinkamai skiriasi ir tų molekulių energijos lygmenys. Šiame laboratoriniame darbe šio tipo išplitimas gali pasireikšti, pvz., dėl nevienalyčio magnetinio lauko.

Kadangi fotonai yra sugeriami arba emituojami dėl kvantinių šuolių tarp energijos lygmenų, tai, išplitus tiems energijos lygmenims, išplinta ir fotonų sugerties bei emisijos spektrai. Šį teiginį iliustruoja 11 pav. Kad būtų paprasčiau, šiame pavyzdyje tariame, kad pagrindinės būsenos lygmuo nėra išplitęs. 11 pav. E_0 žymi sužadintojo energijos lygmens statistinį vidurkį, o patamsintos juostelės plotas yra proporcingas fotonų, kurių dažniai priklauso pakankamai siauram intervalui, sugerties spartai. Kaip parodyta 11 pav., jeigu matavimo metu yra kryptingai keičiamas E_0 esant pastoviam krintančiųjų fotonų



10 pav. Energijos pasiskirstymas dėl kvantinių būsenų nenuostovumo



11 pav. Diagrama, kuri iliustruoja teiginį, kad sugeriamų per laiko vienetą fiksuoto dažnio ν fotonų skaičiaus priklausomybė nuo energijos lygmenų skirtumo E_0 yra tokio paties pavidalo kaip sužadintos būsenos atomo energijos pasiskirstymas

dažniui ν , tada sugeriamų per laiko vienetą fotonų skaičiaus priklausomybė nuo E_0 yra tokio paties pavidalo kaip ir fotonų sugerties spektras, kuris būtų gautas, jeigu E_0 būtų pastovus, o fotonų dažnis būtų kryptingai keičiamas. Ta priklausomybė yra apytiksliai tokio paties pavidalo, kaip 10 pav. (kadangi 11 pav. energija yra atidėta ant vertikaliosios ašies, tai ta priklausomybė yra pasukta 90° kampu lyginant su 10 pav.). Jeigu matavimų metu fotonų dažnis ν yra pastovus, o keičiamas tik lygmenų skirtumas E_0 , tada 11 pav. tas maksimumas slenka vertikalia kryptimi (išilgai energijų ašies), t. y. keičiamas energijos intervalas tarp lygmenų (paramagnetinio rezonanso atveju – tarp magnetiniame lauke skilusio energijos lygmens polygmenių).

3.6. Elektronų paramagnetinio rezonanso aiškinimas remiantis Larmoro precesijos sąvoka

3.5 skirsnyje buvo pateikta kvantinė rezonansinės sugerties apibrėžtis. Elektronų paramagnetinio rezonanso reiškinį galima paaiškinti ir naudojant klasikinės elektrodinamikos dėsnius, tiksliau, remiantis bandinio įmagnetėjimo vektoriaus Larmoro precesijos sąvoka. Visų pirma reikia apibrėžti įmagnetėjimo sąvoką. Kaip minėta 3.5 skirsnyje, termodinaminės pusiausvyros sąlygomis (kai sistemos savybės nepriklauso nuo laiko ir kai sistemoje nėra jokių srautų) kiekvienos energijos atomų skaičių nusako Bolcmano pasiskirstymo funkcija, pagal kurią didesniosios energijos atomų yra šiek tiek mažiau, negu mažesniosios energijos atomų, ir šių dviejų skaičių santykis yra lygus $(-\Delta E/kT) < 1$, čia ΔE yra energijos lygmenų skirtumas. Jeigu tie du energijos lygmenys atsirado dėl Zėmano efekto, t. y. skilus atomo energijos lygmeniui išoriniame magnetiniame lauke, tada apatinis lygmuo atitinka tokią atomo būseną, kai kampas θ tarp magnetinio momento ir magnetinės indukcijos tenkina nelygybę $0 \leq \theta < 90^\circ$, $\cos \theta > 0$ (t. y. magnetinio momento projekcija į lauko kryptį $\mu_z > 0$), o viršutinis lygmuo atitinka tokią atomo būseną, kai $90^\circ < \theta \leq 180^\circ$; $\cos \theta < 0$ (t. y. $\mu_z < 0$). Vadinasi, patalpinus bandinį į nuostovųjį magnetinį lauką, kurio magnetinės indukcijos vektorius yra \mathbf{B} , ir nusistovėjęs termodinaminei pusiausvyrai, yra šiek tiek daugiau atomų, kurių magnetiniai momentai nukreipti lauko kryptimi, negu atomų, kurių magnetiniai momentai nukreipti priešinga laukui kryptimi. Tai reiškia, kad sistemos pilnutinis magnetinis momentas yra nelygus nuliui, o jo kryptis sutampa su \mathbf{B} kryptimi. Tūrio vieneto magnetinis momentas yra vadinamas **įmagnetėjimu**. Tai yra vektorinis dydis, kuris žymimas \mathbf{M} .

Išoriniame magnetiniame lauke atomų magnetiniai momentai precesuoja aplink to lauko kryptį. Tai yra vadinamoji **Larmoro precesija**. Jos dažnį nusako (3.3.17) formulė. Kaip matome 7 pav., šios precesijos metu magnetinio momento vektoriaus $\boldsymbol{\mu}$ komponentė, kuri lygiagreti magnetiniam laukui (ją vadinsime „išilginiu magnetiniu momentu“), nekinta, tačiau komponentė, kuri statmena magnetiniam laukui (ją vadinsime „skersiniu magnetiniu momentu“), sukasi aplink magnetinio lauko kryptį Larmoro dažniu (3.3.17). Termodinaminėje pusiausvyroje visos kryptys, kurios statmenos \mathbf{B} kryptims, yra lygiavertės, todėl skirtingų atomų skersiniai magnetiniai momentai tiksliai kompensuoja vienas kitą ir pilnutinis įmagnetėjimas yra lygiagretus magnetiniam laukui ($\theta = 0$). Kadangi šiomis sąlygomis

įmagnetėjimo vektorius (kaip ir visi kiti elektriniai dydžiai) nepriklauso nuo laiko, tai nėra ir jokio elektrinio signalo (pvz., elektromagnetinės spinduliuotės), kuri būtų galima išmatuoti.

Kampą θ tarp įmagnetėjimo vektoriaus \mathbf{M} ir magnetinio lauko \mathbf{B} galima pakeisti, naudojant **elektronų paramagnetinio rezonanso** reiškinį. Jo esmė yra ta, kad, kai egzistuoja kintamas išorinis magnetinis laukas, kurio dažnis lygus Larmoro dažniui, o kryptis statmena pastoviojo magnetinio lauko \mathbf{B} kryptiai, tada atomai (arba molekulės, arba laisvieji elektronai) sugeria to kintamojo lauko energiją ir yra sužadunami į aukštesnįjį energijos lygmenį. Sužadavimo įtaka yra dvejopa:

1) dėl sužadavimo sumažėja įmagnetėjimo išilginė komponentė M_z , t. y. pasikeičia atomų pasiskirstymas tarp minėtų lygmenų (aukštesniųjų lygmenų užpilda padidėja, o žemesniųjų sumažėja);

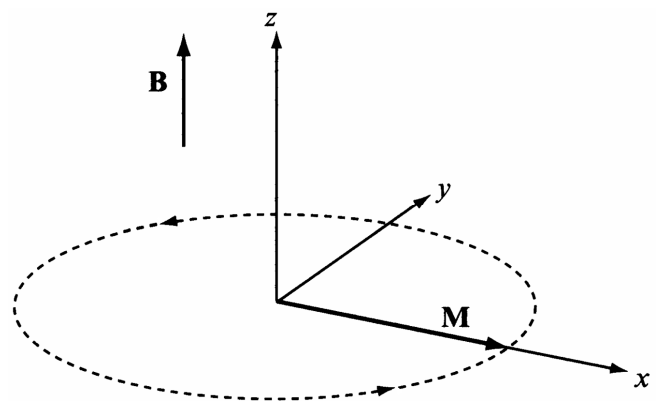
2) skirtingų atomų skersinių magnetinių momentų posūkio apie \mathbf{B} kampai ϕ („azimutiniai kampai“) kiekvienu laiko momentu jau nėra tolygiai pasiskirstę nuo 0 iki 360°, t. y. ne visos to kampo vertės būna vienodai tikėtinos. Tai reiškia, kad atomų, kurių magnetiniai momentai pasisukę apie \mathbf{B} kryptį tam tikru kampu ϕ , yra šiek tiek daugiau, negu atomų, kurių magnetiniai momentai pasisukę kitais kampais. Todėl momentinio įmagnetėjimo skersinė komponentė tampa nelygi nuliui (t. y. kampas tarp vektorių \mathbf{M} ir \mathbf{B} tampa nelygus nuliui).

Abiejų šių veiksnių rezultatas yra tas, kad sužadimas „pasuka“ įmagnetėjimo vektorių \mathbf{M} atžvilgiu \mathbf{B} krypties. Išjungus kintamą skersinį magnetinį lauką, naujasis vektorius \mathbf{M} pradeda precesuoti aplink \mathbf{B} Larmoro dažniu (3.3.17). Šį precesuojantį įmagnetėjimą \mathbf{M} vadinsime „momentiniu įmagnetėjimu“, siekdami pabrėžti, kad tai nėra įmagnetėjimo laikinasis vidurkis (kuris lieka lygiagretus laukui \mathbf{B}). Pvz., 13 pav. atitinka momentinio įmagnetėjimo \mathbf{M} pasukimą 90° kampu atžvilgiu \mathbf{B} krypties. Tada $M_z = 0$. Tai reiškia, kad abiejų poligmenių, į kuriuos skilo elektrono energijos lygmuo, užpildos tampa vienodos.

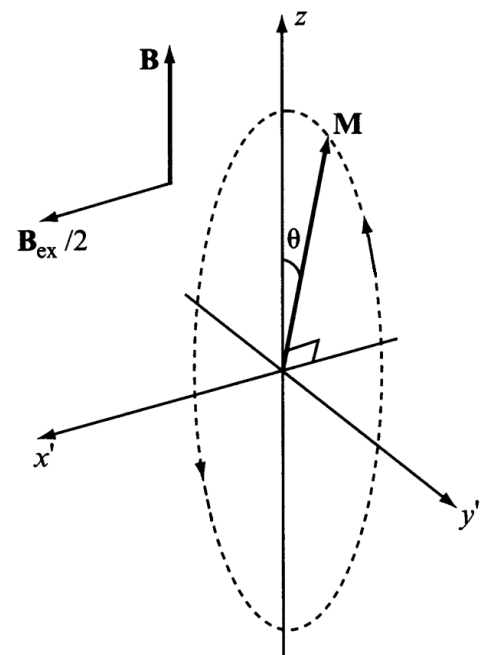
Momentinio įmagnetėjimo \mathbf{M} precesija sukuria papildomą kintamąjį magnetinį lauką bandinio aplinkoje. To lauko dažnis yra lygus precesijos dažniui, t. y. Larmoro dažniui. Jeigu bandinys yra patalpintas į ritę, tada tuo pačiu dažniu keisis ir magnetinio lauko srautas pro tos ritės skerspjūvį, todėl atsiranda kintama elektrovaros jėga ir ta rite pradės tekėti kintama srovė, kurios amplitudė yra proporcinga įmagnetėjimui, t. y. vektoriaus \mathbf{M} moduliui, o dažnis lygus Larmoro dažniui. Ta srovė ir yra tiesiogiai matuojamas signalas elektronų paramagnetinio rezonanso (EPR) matavimuose.

Minėtą kintamąjį magnetinį lauką, kuris pakeičia kampą tarp įmagnetėjimo vektoriaus \mathbf{M} ir magnetinės indukcijos \mathbf{B} , vadinsime „sužadavimo lauku“, o jo magnetinės indukcijos amplitudę žymėsime \mathbf{B}_{ex} . Siekiant šį lauką atskirti nuo pastoviojo lauko \mathbf{B} , pastarąjį vadinsime „pagrindiniu lauku“.

Iš to, kas anksčiau pasakyta, aišku, kad EPR signalui matuoti būtina, kad momentinio įmagnetėjimo \mathbf{M} kryptis skirtųsi nuo magnetinės indukcijos \mathbf{B} krypties. Išsiaiškinsime, kodėl sužadavimo laukas pakeičia momentinio įmagnetėjimo kryptį nekeisdamas jo modulio. Pastovios krypties kintamąjį skersinį magnetinį lauką, kurio amplitudė B_{ex} , o dažnis ν , galima išreikšti suma dviejų besisukančių (kintamos krypties) magnetinių laukų, kurių magnetinės indukcijos vektorių moduliai yra pastovūs ir lygūs $B_{ex}/2$. Jų sukimosi dažnis taip pat yra lygus ν , o sukimosi kryptys yra priešingos. Kadangi šiuo atveju ν yra lygus Larmoro dažniui, kuriuo sukasi įmagnetėjimo vektorius, tai viena iš tų dviejų besisukančių komponentių visą laiką sudaro pastovų



13 pav. Momentinio įmagnetėjimo vektoriaus precesija



14 pav. Vaizdas atskaitos sistemoje, kuri sukasi apie išorinio („pagrindinio“) magnetinio lauko kryptį Larmoro dažniu

kampą su vektoriais \mathbf{M} ir \mathbf{B} . Tas kampas priklauso nuo pasirinktos pradinės fazės. Pvz., pradinę fazę galima pasirinkti taip, kad besisukantis laukas būtų visą laiką statmenas vektoriams \mathbf{M} ir \mathbf{B} (kaip 14 pav.). Taigi, atskaitos sistemoje, kuri sukasi aplink \mathbf{B} kryptį Larmoro dažniu kartu su vektoriumi \mathbf{M} , egzistuoja papildomas nuostovusis magnetinis laukas, kuris statmenas \mathbf{B} ir kurio indukcija lygi $B_{\text{ex}}/2$. Šioje besisukančioje atskaitos sistemoje vektorius \mathbf{M} precesuoja apie to papildomo magnetinio lauko kryptį dažniu, kuris yra proporcingas B_{ex} (pastarosios precesijos dažnio išraiška yra analogiška (3.3.17) formulėi, tačiau vietoj B reikia naudoti $B_{\text{ex}}/2$). Vadinasi, esant Larmoro dažnio statmenajam magnetiniam laukui \mathbf{B}_{ex} , momentinio įmagnetėjimo vektorius vienu metu precesuoja apie \mathbf{B} ir apie kryptį, kuri sukasi aplink \mathbf{B} . 14 pav. parodytas vektoriaus \mathbf{M} sukimasis apie vektorių $\mathbf{B}_{\text{ex}}/2$ atskaitos sistemoje, kurioje pastarasis vektorius yra pastovus. Akivaizdu, kad dėl šio sukimosi keičiasi kampas θ . Panaudojant šį reiškinį, tiriamojo bandinio įmagnetėjimo vektorių galima pasukti bet koku pageidaujama kampu θ atžvilgiu \mathbf{B} krypties. EPR matavimuose tas dažniausiai kampas būna 90° (kaip 13 pav.) arba 180° (pastaruoju atveju \mathbf{M} kryptis tampa priešinga \mathbf{B} kryptčiai). Laikas, per kurį \mathbf{M} pasisuka reikalingu kampu, yra tiesiog proporcingas tam kampui ir atvirkščiai proporcingas B_{ex} .

Šiame laboratoriniame darbe abu minėtieji laukai (\mathbf{B} ir \mathbf{B}_{ex}) visą laiką veikia vienu metu (kitaip, negu įprastiniuose EPR matavimuose). Todėl nusistovi tam tikras pusiausvirasis kampas tarp įmagnetėjimo vektoriaus ir \mathbf{B} . Tas kampas priklauso nuo įvairių relaksacinių procesų, kurie „stengiasi“ padidinti išilginę įmagnetėjimo komponentę, t. y. atkurti nulinį kampą tarp įmagnetėjimo vektoriaus ir išorinio magnetinio lauko. Tie relaksaciniai procesai yra dviejų rūšių: 1) procesai, kurie pasireiškia atomų kvantiniais šuoliais iš aukštesniojo polygmenio į žemesnįjį (tai yra vadinamoji „išilginė relaksacija“); 2) procesai, kurie pasireiškia atomų magnetinių momentų vektorių „išsifazavimu“ dėl to, kad jų Larmoro dažniai nėra tiksliai vienodi (kadangi pastaroji relaksacija nėra susijusi su kvantiniais šuoliais tarp minėtųjų polygmenų, tai ji nekeičia išilginio įmagnetėjimo, o mažina tik skersinį įmagnetėjimą ir todėl vadinama „skersine relaksacija“). Skersinis įmagnetėjimas (ir tuo pačiu – minėtosios evj amplitudė) yra proporcingas skaičiui molekulių, kurių Larmoro dažnis (duotos magnetinės indukcijos B išoriniame lauke) yra artimas kintamojo lauko B_{ex} dažniui.

4. Tyrimo metodika

4.1. Bendros žinios apie tyrimo metodą

Tiriant elektronų paramagnetinį (arba sukininį) rezonansą, fotonai, kurie sukelia kvantinius šuolius, sukuriama talpinant tiriamąjį bandinį į radijo dažnio rezonansinio kontūro ritės vidų. Kai ta rite teka aukšto dažnio (ν) srovė, jos viduje atsiranda to paties dažnio kintamasis magnetinis laukas. Pagal Maksvelo lygtis kintamasis magnetinis laukas indukuoja kintamąjį elektrinį lauką, kuris savo ruožtu indukuoja kintamąjį magnetinį lauką ir t. t., t. y. ritė tampa ν dažnio elektromagnetinių bangų šaltiniu – atsiranda elektromagnetinė spinduliuotė. Kvantiniu požiūriu ta spinduliuotė – tai fotonų, kurių energija $h\nu$, srautas. Taigi, fotonų energiją lemia aukšto dažnio srovės dažnis. Kad pasireikštų elektronų paramagnetinis rezonansas, fotonų energija turi būti artima rezonansinei vertei (3.5.4). Pastaroji vertė – tai anksčiau minėtas energijos lygmenų (tiksliau, polygmenų) skirtumas E_0 . Taigi, minėtasis skirtumas $h\nu - E_0$ keičiamas keičiant pastoviojo (ne aukšto dažnio!) magnetinio lauko, į kurį patalpinta aukšto dažnio ritė, magnetinę indukciją B ir esant pastoviam rite tekančios srovės dažniui ν . Kadangi matuojamojo elektrinio signalo amplitudė (A) yra proporcinga sugeriamų per laiko vienetą aukšto dažnio fotonų skaičiui, o magnetinės indukcijos B nuokrypis nuo rezonansinės vertės

$$B_r = \frac{h\nu}{\mu_B g_J} . \quad (4.1.1)$$

yra proporcingas skirtumui $h\nu - E_0$, tai A priklausomybė nuo $(B - B_r)$ yra tokio paties pavidalo kaip atomo sužadavimo energijos pasiskirstymas (šių dviejų priklausomybių grafikus galima sutapatinti padauginus vieno iš jų X ašies vertes iš konstantos $(B - B_r) / (E_0 - h\nu)$). Ta priklausomybė yra apytikliai tokio pavidalo, kaip 10 pav. To maksimumo plotis ties puse jo aukščio yra lygus

$$\Gamma_B = \frac{\Gamma}{g_J \mu_B} . \quad (4.1.2)$$

Šis dydis – tai fotonų energijos skirstinio plotis, išreikštas magnetinės indukcijos vienetais (todėl vartojamas apatinis indeksas „ B “). Vadinasi, norint nustatyti sužadavimo energijos skirstinio plotį Γ (energijos vienetais), reikia: 1) išmatuoti elektrinio signalo, kurį generuoja elektronų paramagnetinio rezonanso tyrimo įranga, amplitudės priklausomybę nuo išorinio pastoviojo magnetinio lauko indukcijos; 2) nustatyti gautojo maksimumo plotį ties puse jo aukščio, t. y. Γ_B ; 3) apskaičiuoti šį reiškinį:

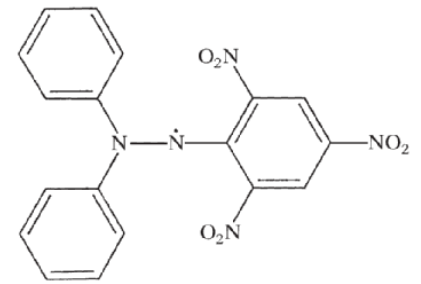
$$\Gamma = g_J \mu_B \Gamma_B. \quad (4.1.3)$$

Minėtojo elektrinio signalo generavimo metodika aprašyta toliau.

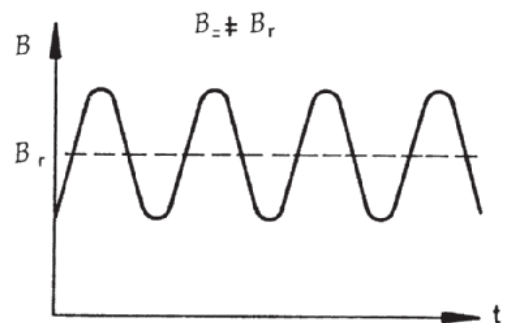
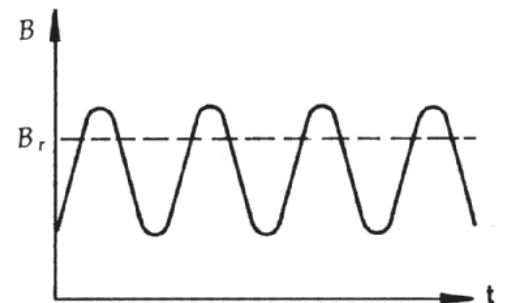
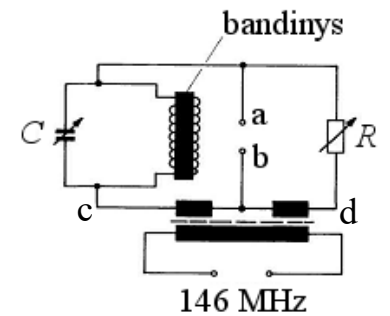
Sukininio rezonanso signalo priklausomybė nuo magnetinės indukcijos B atspindi atomo lygmens energijos skirstinį tik tada, kai visame tiriamajame bandinyje B vertė yra vienoda. Jeigu išorinis laukas nėra tiksliai vienalytis, tada jo vertės skirtinguose erdvės taškuose šiek tiek skiriasi, todėl skiriasi ir lygmenų energijos skirtumas $E_0 = g_J \mu_B B$. Vadinasi, matuojamoji priklausomybė nuo B yra daugelio Lorencio kreivių, kurių centrų padėtys ant energijos ašies šiek tiek skiriasi, sanklota. Pvz., jeigu tarsime, kad 11 pav. pavaizduota Lorencio kreivė, kuri atitinka vidutinį magnetinį lauką, tada kai kurios iš tų kreivių yra šiek tiek aukščiau už tą, kuri pavaizduota 11 pav., o kitos yra šiek tiek žemiau. Sudėjus daug tokių artimų Lorencio kreivių, gaunama funkcija, kuri tik apytiksliai panaši į Lorencio kreivę. Tos „suminės“ kreivės plotis pusės maksimumo aukštyje yra didesnis už tą, kuris būtų gautas, jeigu magnetinis laukas būtų tiksliai vienodas visame bandinio tūryje.

Šiame laboratoriniame darbe tiriamasis bandinys yra organinė paramagnetinė medžiaga DPPH (difenilpikrilhidrazilas). Jis ypatingas tuo, kad jo molekulės turi vieną nesuporuotą elektroną, t. y. elektroną, kuris nedalyvauja cheminiuose ryšiuose (14 pav. tas elektronas pažymėtas tašku). Vadinasi, molekulės sukinių kvantinis skaičius $S = 1/2$. Kadangi to elektrono orbitinis judesio kiekio momentas lygus nuliui ($L = 0$), tai pagal (3.3.8) formulę $J = S = 1/2$. Atitinkamai pagal (3.3.11) formulę $g_J = 2$, t. y. molekulės Landė g faktorius yra artimas laisvo elektrono sukiniui g faktoriui. Literatūroje pateikti DPPH Landė g faktoriaus vertė yra $g_J = 2,0037$, o atitinkamas rezonansinės kreivės plotis, kai magnetinis laukas yra vienalytis, lygus $\Gamma_B = 2,8 \cdot 10^{-4} \text{ T}$ (pagal [5]). Apskaičiavus energijos lygmens plotį pagal (4.1.3) formulę, gaunama vertė $\Gamma = 3,2 \cdot 10^{-8} \text{ eV}$. Pagal (3.5.6) atitinkama sužadintojo lygmens gyvavimo trukmė yra $\tau = 2 \cdot 10^{-8} \text{ s}$. Šis laikas – tai vadinamoji **relaksacijos trukmė**, t. y. laikas, per kurį ESR signalo amplitudė sumažėja $e \approx 2,72$ karto išjungus aukštojo dažnio lauką („ESR signalas“ – tai aukšto dažnio elektrovaros jėga, kurios atsiradimas paaiškintas 3.6 skirsnyje). Šią relaksaciją („sukinio-gardelės relaksaciją“) sąlygoja molekulių tarpusavio sąveika.

Pagrindinis matavimo įrangos elementas yra aukšto dažnio tiltelis, kurio schema pavaizduota 15 pav. Jį sudaro keturios šakos (b-c, c-a, a-d, d-b). Tiltelio įėjimo įtampa prijungta tarp taškų c ir d. Tos įtampos dažnis (ν) yra pastovus ir lygus 146 MHz. Kaip matome 15 pav., tiltelio grandinės maitinimui naudojamas induktyvinis ryšys: ESR generatoriaus išėjimo įtampa jungiama prie transformatoriaus pirminės apvijos, o kiekviena iš tiltelio šakų b-c ir d-b sudaro pusę antrinės apvijos. Todėl antrinė apvija elgiasi kaip du vienodi sinfaziniai (t. y. vienodos fazės) 146 MHz dažnio srovės šaltiniai, kurie sujungti nuosekliai. Kadangi tie du šaltiniai yra vienodi ir sinfaziniai, tai taško b potencialas visą laiką yra pastovus; kad būtų patogiau, galima teigti, jog tas potencialas lygus nuliui (taigi, taškų c ir d potencialai visais laiko momentais yra priešingi). Taško a potencialas priklauso nuo šakų c-a ir a-d impedansų. Tiltelio šakoje a-d yra reguliavimo rezistorius (R), o šakoje c-a yra aukštos kokybės rezonansinis kontūras. DPPH bandinys yra to kontūro ritės viduje. Jeigu tų šakų impedansai yra vienodi, tada visa antrinės apvijos įtampa pasidalija po lygiai tarp abiejų šakų, todėl taško a potencialas yra lygus taškų c ir d potencialų vidurkiui, t. y. taško b potencialui. Kitaip sakant, įtampa tarp taškų a ir b yra lygi nuliui. Tada sakoma, kad tiltelis yra „suderintas“. Šiame laboratoriniame darbe tiltelis turi būti suderintas tada, kai nėra išorinio



14 pav. DPPH molekulės sandara



$$B_{\pm} = B_r$$

16 pav. Magnetinio lauko indukcija B yra sudaryta iš nuolatinės komponentės B_{\pm} ir žemo dažnio (50 Hz) kintamosios komponentės B_{\pm} , t. y. $B = B_{\pm} + B_{\pm}$. Keičiant I_{\pm} , reikia pasiekti, kad galėtų lygybė $B_{\pm} = B_r$.

magnetinio lauko (arba kai to lauko magnetinė indukcija labai skiriasi nuo rezonansinės vertės B_r). Išorinis magnetinis laukas yra statmenas aukštojo dažnio ritės kuriamam magnetiniam laukui. Kai išorinio magnetinio lauko indukcija yra artima rezonansinei vertei (4.1.1), DPPH bandinys pradeda sugerti 146 MHz dažnio fotonus, todėl pasikeičia rezonansinio kontūro impedansas. Tada tiltelis „išsiderina“, t. y. įtampos kritimai šakose c-a ir a-d nustoja būti vienodi. Todėl tarp taškų a ir b atsiranda 146 MHz dažnio įtampa, kurios amplitudė yra apytiksliai proporcinga per laiko vienetą sugeriamų 146 MHz dažnio fotonų skaičiui. Šis aukšto dažnio signalas yra išlyginamas (t. y. paverčiamas nuolatine įtampa, kuri proporcinga aukšto dažnio signalo amplitudei) ir sustiprinamas.

Vartojant klasikinės fizikos terminus, minėtąjį tiltelio išsiderinimą esant rezonansinei magnetinei indukcijai galima paaiškinti remiantis tuo, kad rezonanso sąlygomis rezonansiniame kontūre atsiranda papildoma aukšto dažnio elektrovaros jėga. Šios evj atsiradimas paaiškintas 3.6 skirsnyje. Toliau tas aiškinimas yra trumpai pakartotas. Kintant išorinio lauko magnetinei indukcijai, atitinkamai kinta ir Larmoro dažnis (3.3.17). Kai tas dažnis tampa artimas rezonansinio kontūro srovės dažniui (t. y. 146 MHz), aukštojo dažnio magnetinis laukas „pasuka“ įmagnetėjimo vektorių tam tikru kampu atžvilgiu išorinio lauko krypties. Tai reiškia, kad sumažėja išilginė įmagnetėjimo vektoriaus komponentė (t. y. komponentė, kuri lygiagreti išoriniam magnetiniam laukui). Tuo pačiu metu vyksta to vektoriaus Larmoro precesija aplink išorinio lauko kryptį (kol nebuvo rezonanso, nebuvo ir precesijos, nes įmagnetėjimo vektorių buvo tos pačios krypties kaip išorinis magnetinis laukas). Kadangi įmagnetėjimo vektorių pats kuria magnetinį lauką, tai dėl šios precesijos atsiranda papildomas kintamasis magnetinis laukas, kuris sąlygoja to paties dažnio elektrovaros jėgą ritėje. Ši papildoma evj pakeičia rezonansinio kontūro įtampą ir taip išderina aukšto dažnio tiltelį. Tiltelio išėjimo įtampos amplitudė nusistovi tada, kai minėtąjį laipsnišką įmagnetėjimo vektoriaus nuokrypį nuo išorinio magnetinio lauko krypties pradeda kompensuoti įvairūs relaksaciniai procesai, kurie „stengiasi“ padidinti išilginę įmagnetėjimo komponentę ir atkurti nulinį kampą tarp įmagnetėjimo vektoriaus ir išorinio magnetinio lauko. **Pastaba:** Šiame laboratoriniame darbe laukas B yra statmenas aukštojo dažnio ritės ašiai, o sužadavimo lauką B_{ex} kuria aukštojo dažnio ritė, todėl jis yra lygiagretus jos ašiai.

Kadangi šiame laboratoriniame darbe ESR reiškinys tiriamas matuojant lygiagrečiojo virpesių kontūro įtampos amplitudę, tai atsiranda dar viena papildomo rezonansinės kreivės išplitimo priežastis: į matuojamąjį rezonansinės kreivės plotį įeina ir paties virpesių kontūro (be DPPH bandinio) rezonansinės kreivės (tiksliau, dažninės amplitudės charakteristikos) plotis. Tas plotis priklauso nuo virpesių kontūro kokybės. Radioelektronikoje taip vadinamas dydis, kuris apibūdinamas šitaip:

$$Q = \frac{1}{R} \sqrt{\frac{L}{C}}, \quad (4.1.4)$$

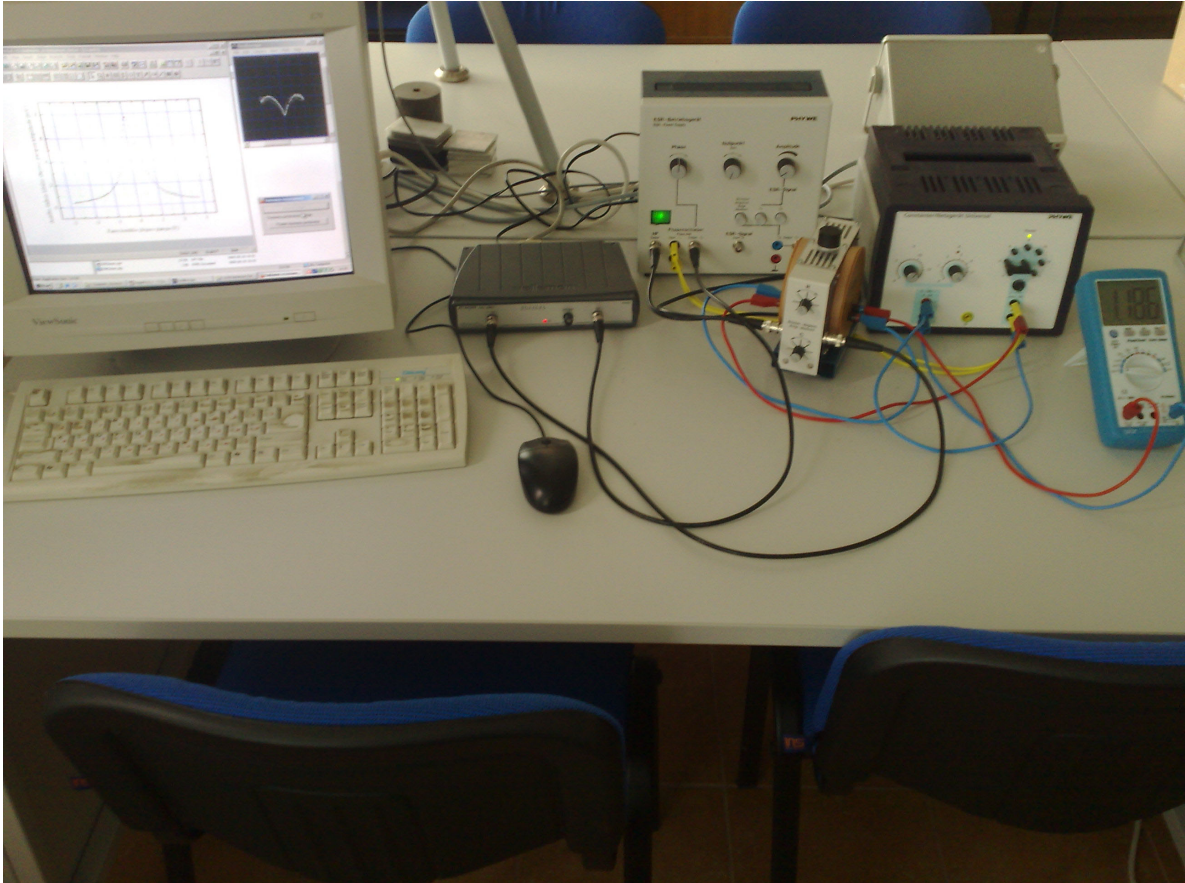
čia R yra virpesių kontūro ritės varža, L yra jos induktyvumas, o C yra virpesių kontūro kondensatoriaus talpa. Kai $Q \gg 1$, virpesių kontūro rezonansinės kreivės pločio (ties puse jos aukščio) ir tos kreivės maksimumo abscisės santykis yra apytiksliai lygus $1,73 / Q$. Jeigu kontūro kokybė yra palyginti žema, tada šis plotis gali būti tos pačios eilės kaip plotis, kurį sąlygoja sukinio-gardelės relaksacija DPPH bandinyje. **Pastaba:** Šio laboratorinio darbo įrangoje esančio virpesių kontūro parametrai yra nežinomi.

Išorinį pastovųjį magnetinį lauką (kurio magnetinė indukcija žymima B) sukuria dvi vienodos ritės, kurios turi bendrą simetrijos ašį ir yra nutolusios viena nuo kitos atstumu, kuris lygus ritės spinduliui. Tos dvi ritės sujungtos nuosekliai. Ritės, kurios atitinka šias sąlygas, yra vadinamos **Helmholco ritėmis**. Naudojant Helmholco rites, galima gauti palyginti vienalytį magnetinį lauką erdvės srityje, kuri yra pusiaukelėje tarp ričių (prie ričių simetrijos ašies). Toje vietoje yra aukštojo dažnio rezonansinio kontūro ritė, kurios viduje yra DPPH bandinys.

Kad būtų galima oscilografo ekrane gauti tiltelio signalo (nuolatinės įtampos) priklausomybę nuo išorinio lauko magnetinės indukcijos B , reikia, kad ta indukcija būtų periodiškai keičiama (moduliuojama). Todėl prie Helmholco ričių prijungiama žemo dažnio (50 Hz) kintamoji įtampa (jos amplitudė – 2 V arba 4 V). Taigi, pilnutinė Helmholco ričių srovė yra sudarytos iš dviejų komponentių – nuolatinės srovės I_0 ir 50 Hz dažnio kintamosios srovės I_1 . Kadangi B yra tiesiog proporcinga elektros srovei, kuri teka Helmholco ritėmis, tai B priklausomybė nuo laiko taip pat yra nuolatinės komponentės ir 50 Hz dažnio sinusoidės suma (žr. 16 pav.). Oscilografo spindulio horizontalųjį nuokrypį valdo kintamoji įtampa, kuri prijungta prie Helmholco ričių. Tačiau yra žinoma, kad magnetinė indukcija yra proporcinga elektros srovei, o ne įtampai. Ritės srovės fazė atsilieka nuo ritės įtampos fazės. Todėl minėtoji kintamoji įtampa nėra tiesiogiai jungiama prie oscilografo „X“ įėjimo, o yra visų pirma praleidžiama pro fazės keitimo įtaisą, kuris pašalina įtampos ir magnetinės indukcijos fazių skirtumą (be to, fazės keitimo įtaisas sumažina kintamosios įtampos amplitudę du kartus).

4.2. Darbo priemonės ir matavimo tvarka

Šiame darbe naudojama Vokietijos kompanijos „Phywe Systeme“ elektronų sukulinio rezonanso (ESR) mokomoji įranga, prie kurios prijungtas Belgijos kompanijos „Velleman“ skaitmeninis oscilografas „PC Scope PCS500“. Matavimo metu oscilograma atvaizduojama monitoriaus ekrane. 17 pav. parodytas matavimo įrangos bendrasis vaizdas.



17 pav. Matavimo įrangos bendras vaizdas

Pagrindiniai ESR įrangos komponentai yra šie:

- 1) ESR maitinimo šaltinis (jis generuoja fiksuoto 146 MHz dažnio įtampą; be to, kartu su juo viename korpuse įmontuotas ir 50 Hz dažnio įtampos fazės keitiklis); 17 pav. jis yra viduryje;
- 2) ESR rezonatorius (į jo sudėtį įeina aukšto dažnio tiltelio grandinė su DPPH bandiniu, tiltelio išėjimo įtampos diodinis lygintuvas ir Helmholco ritės); 17 pav. jis yra prieš ESR maitinimo šaltinį;
- 3) universalusis maitinimo šaltinis (jis generuoja Helmholco ričių srovės nuolatinę komponentę ir 50 Hz dažnio kintamąją komponentę); 17 pav. jis yra ESR maitinimo šaltinio dešinėje;
- 4) skaitmeninis oscilografas (jis suformuoja duomenis, kurie reikalingi rezonansinės kreivės atvaizdavimui, ir tuos duomenis perduoda į kompiuterį); 17 pav. jis yra tarp monitoriaus ir ESR maitinimo šaltinio.
- 5) skaitmeninis multimetras (jis rodo Helmholco ričių srovės nuolatinę komponentę).

Minėtųjų penkių įrenginių sujungimo schema pavaizduota 18 pav. Taškai „b“ ir „r“ žymi dviejų Helmholco ričių kontaktus.

Oscilografas „PC SCOPE“ PCS500 sujungtas su kompiuteriu per lygiagrečiąją sąsają (LPT prievadas). Oscilografą valdo Windows programa „PcLab2000“. Naudojant šią programą, tiriamąjį signalą galima stebėti monitoriaus ekrane arba realiu laiku importuoti į kitas programas. Šiame darbe duomenys perduodami į programą „Origin 6“.

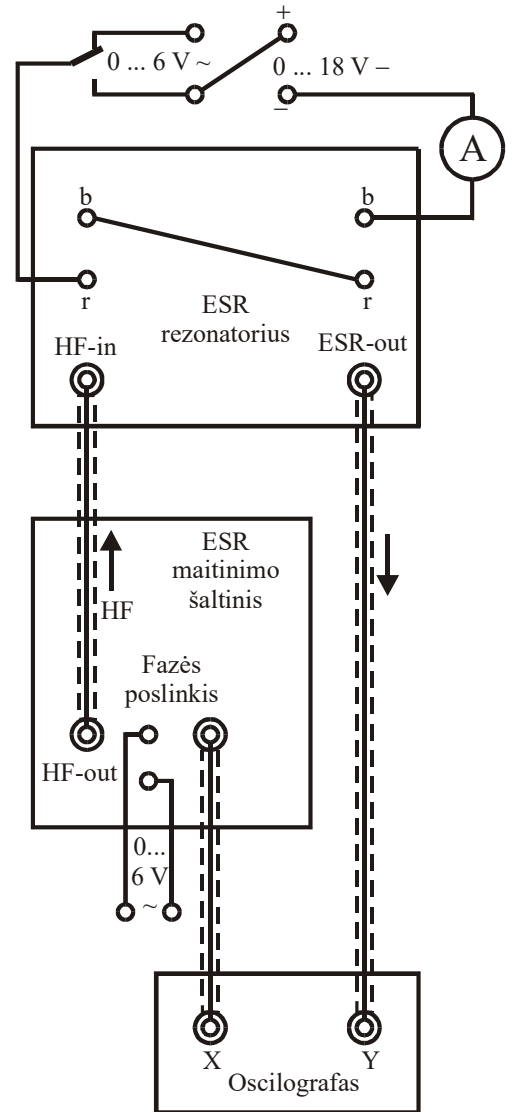
Darbo metu išmatuojama išlygintos aukšto dažnio tiltelio išėjimo įtampos priklausomybė nuo fazės keitiklio išėjimo įtampos, t. y. oscilografo „Y“ įėjimo įtampos priklausomybė nuo oscilografo „X“

įėjimo įtampos (žr. 18 pav.). Ši priklausomybė gaunama programos „Origin“ lentelės ir grafiko pavidalu. Minėtąją lentelę galima atspausdinti spausdintuvu, kuris yra laboratorijoje.

Be to, darbo metu reikia išmatuoti rezonansinę magnetinę indukciją B_r ir magnetinės indukcijos kintamąją (50 Hz dažnio) komponentę bei tos kintamosios komponentės ir fazės keitiklio išėjimo įtampos santykį, t. y. koeficientą, iš kurio reikia padauginti fazės keitiklio išėjimo įtampą, norint gauti magnetinės indukcijos kintamąją komponentę.

Po lentelė su matavimo duomenimis turi pasirašyti darbo vadovas arba laborantas.

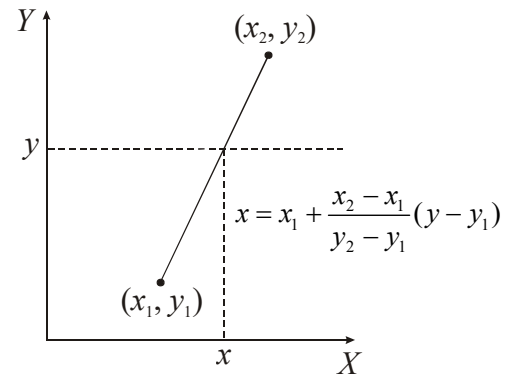
Prie matavimo įrangos yra atskiras matavimo tvarkos aprašas, kuris yra daug smulkesnis, negu tas, kuris pateiktas čia. Tuo aprašu reikia naudotis tik matavimo metu. Baigus matuoti, jį reikia palikti prie matavimo įrangos. Ruošiantis darbui, nebūtina žinoti visų matavimo tvarkos smulkmenų. Jeigu matavimo tvarkos nurodymai, kurie buvo pateikti anksčiau, neatitinka nurodymų, kurie pateikti detaliojame apraše, tada matuojant reikia vadovautis detaliojame apraše.



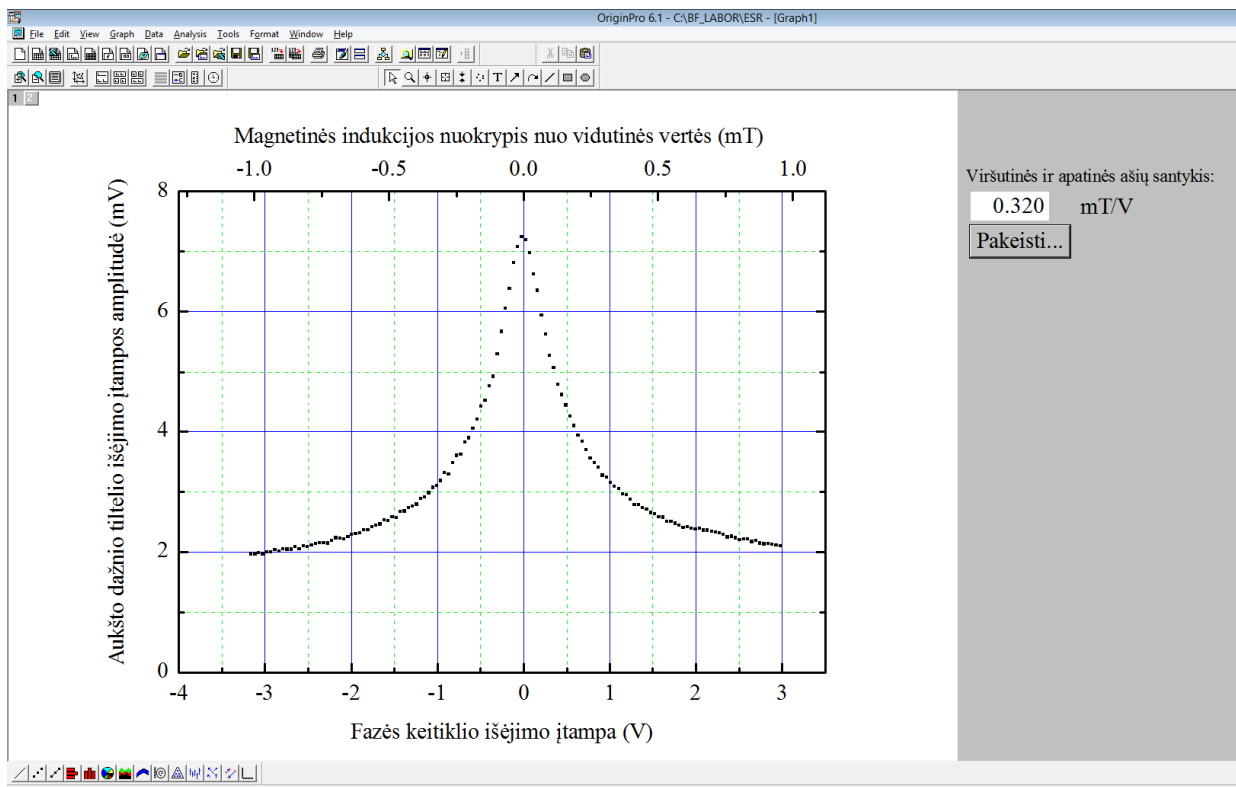
18 pav. ESR įrangos komponentų sujungimo schema

4.3. Pagrindiniai skaičiavimai analizuojant matavimo duomenis

1. Naudojantis išmatuotąją rezonansinės magnetinės indukcijos B_r verte ir jos paklaida, pagal (3.5.5) formulę apskaičiuojami Landè g faktorius (g_r) ir jo matavimo paklaida.
2. Pagal matavimo duomenis nustatomas rezonansinės kreivės maksimumo plotis ties puse jo aukščio. Maksimumo aukštis turi būti atskaitomas nuo mažiausios Y vertės. Pvz., 20 pav. mažiausioji (atskaitos) vertė yra maždaug 2 mV, maksimali vertė yra 7,2 mV, todėl maksimumo plotis turi būti matuojamas ties $(2 + 7,2) / 2 = 4,6$ mV. Kadangi matavimo duomenyse greičiausiai nebus taškų, esančių tiksliai ties puse maksimumo aukščio, tai, norint tiksliai nustatyti maksimumo plotį, reikia taikyti tiesinio interpoliavimo metodą, kurį iliustruoja 19 pav. Jame pateikta formulė, pagal kurią apskaičiuojama taško, kuriame horizontalioji punktyrinė linija kerta atkarpą, jungiančią du taškus, x koordinatė, kai yra žinomos tų dviejų taškų koordinatės (x_1, y_1) ir (x_2, y_2) bei y vertė. **Pastaba:** Skaitmeniškai apdorojant matavimo duomenis, amplitudžių vertėse gali atsirasti pastovus dėmuo (jis gali būti ir teigiamas, ir neigiamas). T. y. tikrosios amplitudžių vertės gali skirtis nuo verčių, kurios atidėtos ant Y ašies (pvz., 20 pav.). Tačiau šiame darbe tai nėra svarbu, nes apskaičiuojant maksimumo aukštį reikia nustatyti dviejų amplitudžių skirtumą, todėl tas pastovus dėmuo susiprastina.
3. Rezonansinės kreivės plotis išreiškiamas magnetinės indukcijos matavimo vienetais (mT), t. y. apskaičiuojami Γ_B ir jo paklaida. Tuo tikslu reikia voltais išreikštą maksimumo plotį, kuris gautas 2 punkte, padauginti iš koeficiento, kuris nustatytas eksperimento metu (žr. 4.2 skirsnį). Apskaičiuojant Γ_B paklaidą, reikia atsižvelgti ir į to koeficiento paklaidą (pastaroji paklaida apskaičiuojama pagal bendrąją dviejų dydžių santykio paklaidos apskaičiavimo formulę).
4. Paaiškinami pastebėtieji dėšningumai ir išmatuotų dydžių nuokrypiai nuo jų tikrųjų verčių.



19 pav. Taško x koordinatės apskaičiavimas tiesinio interpoliavimo metodu



20 pav. „Origin“ grafiko su matavimo duomenimis pavyzdys (tai nėra tikro matavimo rezultatai, todėl gali žymiai skirtis nuo tikro matavimo duomenų)