

Спиновая физика Зельдовича

А.Л. Бучаченко

Обсуждены работы Зельдовича, его идеи и находки в физике атомно-молекулярного магнетизма и спектроскопии, в физике угловых моментов электронов и ядер, в спиновой физике, в физике изотопов.

Ключевые слова: ядерный спин, магнитный момент, магнитные изотопы, магнитный изотопный эффект, фракционирование изотопов, химический лазер

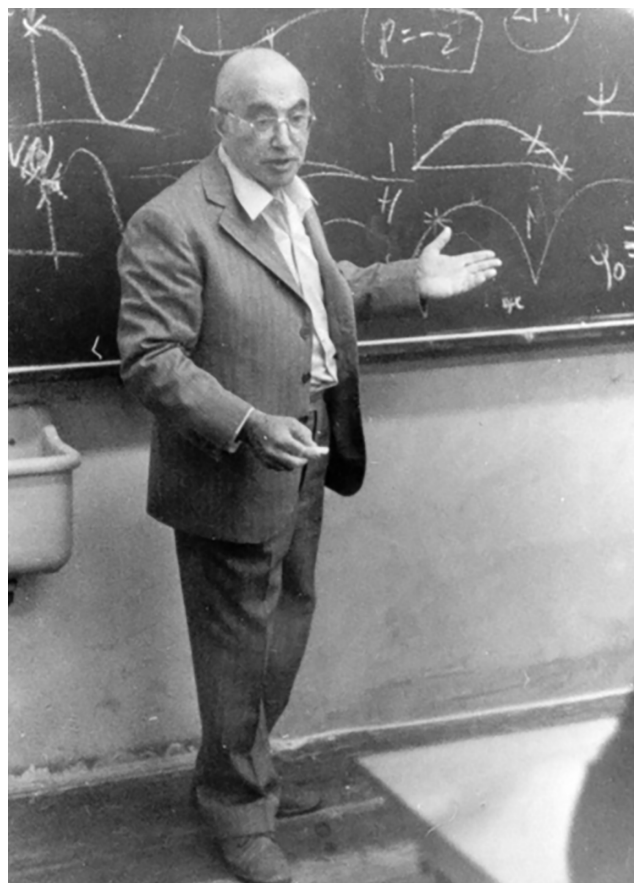
PACS numbers: **01.65.+g**, 72.20.Fr, 75.40.Gb, **82.50.-m**

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2024.04.t138>

Зельдович многогранен. Его мышление универсально. Оно схватывало множество научных областей и привносило всегда и всюду новые, часто неожиданные, непредвиденные идеи, взгляды, мнения. Он держал лидирующие научные позиции в физике горения и взрыва, в теории цепных реакций (и химических, и ядерных), в физике ядра и ядерных технологиях, в физике ударных волн и детонации, в гидродинамике, в астрофизике и космологии. Эти работы Зельдовича не устаревают и имеют мировое признание. Менее известны его идеи и находки в физике атомно-молекулярного магнетизма и спектроскопии, в физике угловых моментов электронов и ядер, то есть в спиновой физике, которая смыкается с физикой изотопов.

Общеизвестна фундаментальная значимость изотопов в познании атомно-молекулярных явлений и в понимании их механизмов. Известны три изотопных эффекта, соответствующие трём фундаментальным свойствам атомных ядер, таким как масса, объём, спин (и связанный с ним магнитный момент). Наиболее заслуженным и популярным, имеющим почти столетнюю историю, является масс-зависимый изотопный эффект; масштаб его определяется разностью кинетической и колебательной энергий изотопных молекул. Величина ядерно-объёмного изотопного эффекта определяется разностью энергий внешних электронов изотопных ядер, различающихся объёмом (из-за отклонений от точечной симметрии потенциала как функции объёма ядра).

Но самые необычные и разнообразные изотопные эффекты индуцирует ядерный спин. Селективное по ядерному спину оптическое возбуждение атомов было



Яков Борисович Зельдович

А.Л. Бучаченко

Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН,
ул. А.Н. Косыгина 4, 119991 Москва, Российская Федерация;
Институт физики твёрдого тела им. Ю.А. Осипяна РАН,
ул. Академика Осипяна 2, 142432 Черноголовка, Московская обл.,
Российская Федерация;
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
Ленинские горы 1, 119991 Москва, Российская Федерация
E-mail: abuchach@chph.ras.ru

Статья поступила 20 декабря 2023 г.

предложено Зельдовичем и Собельманом в 1975 году [1]. Оно восходит к задаче лазерного разделения магнитных и немагнитных изотопов, т.е. изотопов, различающихся ядерными спинами. Простейший, наглядный пример — переход между электронными уровнями в атомах с полным угловым моментом $J = 0$; при ядерном спине $I = 0$ это возбуждение абсолютно запрещено, но при



Яков Борисович Зельдович и Анатолий Леонидович Бучаченко на конференции по горению (Ташкент, сентябрь 1987 г.).

ненулевом спине $I \neq 0$ запрет снимается. Так, в атомах с конфигурацией замкнутой электронной оболочки ns^2 (Ca, Zn, Mg, Hg, Cd и др.) возбуждение $ns^2 - nsp$ ($^1S_0 - ^3P_0$) запрещено в бесспиновых изотопах, но для атомов с ядрами, несущими спин, вероятность электронного перехода (и поглощения, и излучения) не равна нулю, поскольку сверхтонкое электрон-ядерное взаимодействие смешивает состояния 1P_1 и 3P_0 и делает переход $^1S_0 - ^3P_0$ спин-разрешённым. Его вероятность пропорциональна коэффициенту $a[I(I+1)]^{1/2} \Delta E^{-1}$, где a — константа сверхтонкого (Ферми) взаимодействия в состоянии 3P_0 , I — ядерный спин, ΔE — энергетическая щель между возбуждёнными состояниями 1P_1 и 3P_0 . Такие переходы наблюдались экспериментально в спектроскопии ядерно-спиновых атомов $^{199,201}\text{Hg}$ (2655,8 Å), но не бесспиновых атомов $^{300,202}\text{Hg}$. Данный эффект может быть интересен как средство разделения магнитных и немагнитных изотопов; возможно, он действует в космической физике и химии.

Другой спин-физический эффект, предсказанный Зельдовичем и Максимовым [2], относится к диффузии изотопных молекул в газах: они показали, что коэффициенты диффузии при низком давлении зависят от спина ядра. Идея заключается в сохранении вращательного углового момента в молекулах с бесспиновыми ядрами, так что коэффициент диффузии определяется путём усреднения расстояний свободного полёта по поперечным сечениям столкновений. В молекулах с ядерно-спиновыми изотопами вращательный угловой момент не сохраняется во время полёта из-за спин-вращательного взаимодействия $H_{IJ} = ICJ$, где I — ядерный спин, J — вращательный угловой момент, C — тензор спин-вращательного взаимодействия. Этот эффект аналогичен хорошо известному эффекту Зенфтлибена — влиянию внешнего магнитного поля на кинетические коэффициенты молекулярных газов. Суть эффекта связана с

тем фактом, что ядерный спин нарушает сохранение углового момента K молекулы во время её свободного полёта между столкновениями. При отсутствии ядерного спина коэффициент диффузии пропорционален средней длине свободного пробега, усредненной по различным ориентациям углового момента молекулы. При наличии спина летящая молекула кувьркается и её угловой момент не постоянен вдоль свободного пробега. В последнем случае необходимо усреднять сечения столкновений на расстояниях свободного полёта. Поэтому сначала усредняют поперечное сечение рассеяния по направлениям углового момента, а затем вычисляют среднюю длину свободного пробега по этому среднему поперечному сечению. Результаты двух указанных физически различных процедур не идентичны, то есть коэффициенты диффузии молекул со спиновыми и бесспиновыми ядрами различны.

Эту идею Зельдович предложил использовать для фракционирования ядерных изомеров, то есть ядер с одинаковыми массами и магнитными моментами. Сравнивая частоты прецессии ядерного момента (порядка 10^7 Гц) с частотами молекулярных встреч, он сформулировал условия обнаружения и масштаб этого эффекта как функции давления.

Наибольшую значимость ядерный спин обнаруживает в химической физике, в процессах электрон-ядерных преобразований, именуемых химическими, хотя за ними стоит чистая физика квантового электричества атомов и молекул [3]; в этой физике кулоновское отталкивание электронов зависит от их спина (синглет-триплетное расщепление) и они не падают на ядра. Фундаментальным следствием этой физики является спиновый запрет: все химические реакции селективны по электронному спину, они разрешены только для таких спиновых состояний реагентов, суммарный спин которых тождествен спину продуктов; процессы с изменением спина запрещены. Запрет универсален, он вводит в химию магнитные взаимодействия (зеemanовское и сверхтонкое); будучи пренебрежимо малыми по отношению к химической энергии, магнитные взаимодействия являются единственными, способными изменять спин реагентов и переключать реакции между спин-разрешёнными и спин-запрещёнными каналами, контролируя направление и скорость реакций.

Первым замечательным следствием спинового запрета стала химически индуцированная поляризация ядер, то есть создание сверхравновесных населённостей ядерно-зеemanовских уровней. Селекцию молекул с ориентированными ядрами производит ядерный спин через сверхтонкое взаимодействие. Особенный интерес заслуживает отрицательная поляризация; она избыточно заселяет верхний зеemanовский уровень. Когда избыточная поляризация превосходит порог генерации, тогда химически реагирующая система становится химическим мазером — квантовым генератором с химической накачкой [4]. Зельдович предложил считать это явление основой химической радиофизики. Пример радиочастотной эмиссии химического мазера показан на рис. 1; ядерно-поляризованные молекулы создавались фотолитом раствора хинона в датчике ЯМР-спектрометра.

Другое крупномасштабное следствие спинового запрета — магнитный изотопный эффект, первый изотопный эффект, различающий изотопы по ядерному спину и магнитному моменту, а не по массе [5]. Он был обнаружен в 1976 году и назван магнитным изотопным эффектом, поскольку управляется магнитным электрон-ядерным, сверхтонким взаимодействием в парамагнитных частицах, промежуточных продуктах реакций. Вели-

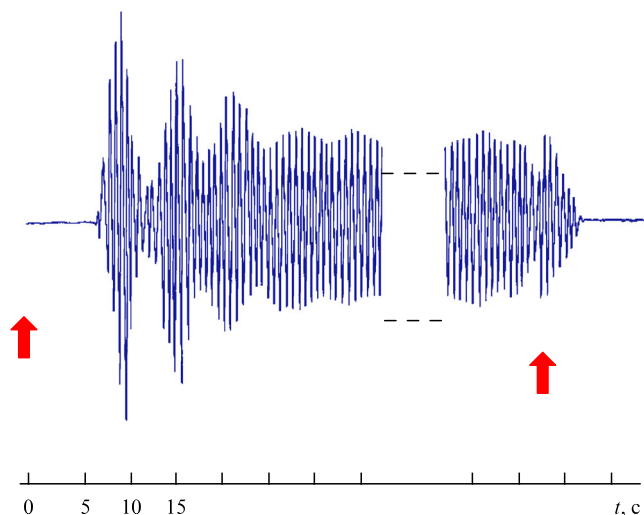


Рис. 1. Химически индуцированное радиочастотное излучение протонов, испускаемое молекулами хинона. Сигнал регистрируется на частоте 100 МГц; стрелки указывают моменты включения и выключения фотохимической накачки.

чина магнитного эффекта на один-два порядка превосходит величину классического масс-зависимого изотопного эффекта; он уже обнаружен для магнитных изотопов углерода, кислорода, кремния, серы, германия, олова, ртути, магния, кальция, цинка и урана (рис. 2) в разнообразных химических и биохимических реакциях, включая те, которые имеют биомедицинское и экологическое значение [6, 7].

Магнитный изотопный эффект — самое яркое явление в спиновой физике. Демонстрируя зависимость скоростей реакций от ядерного спина и ядерного магнитного момента реагентов, он является средством фракционирования магнитных и немагнитных изотопов, намного более эффективным, чем классические, технологически освоенные методы. Зельдович говорил, что если бы магнитный изотопный эффект был открыт раньше, технологии фракционирования урановых изотопов были бы другими.

Магнитный изотопный эффект несёт новые идеи, как управлять химическими и биохимическими реакциями путём селективного манипулирования спином с использованием магнитных полей и микроволновой накачки [6]. Он вторгся даже в медицину: было обнаружено свойство магнитных изотопов магния, кальция и цинка убивать раковые клетки и стимулировать ферментативный синтез АТФ в живых организмах [7].

Zel'dovich's spin physics

A.L. Buchachenko

Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of Sciences,
ul. A.N. Kosygina 4, 119991 Moscow, Russian Federation
Osipyan Institute of Solid State Physics, Russian Academy of Sciences,
ul. Akademika Osipyana 2, 142432 Chernogolovka, Moscow region, Russian Federation
Lomonosov Moscow State University, Leninskie gory 1, 119991 Moscow, Russian Federation
E-mail: abuchach@chph.ras.ru

The works of Zeldovich, his ideas and findings in physics of atomic-molecular magnetism and spectroscopy, in physics of angular momenta of electrons and nuclei, in spin physics, and in isotope physics are discussed.

Keywords: nuclear spin, magnetic moment, magnetic isotopes, magnetic isotope effect, fractionation of isotopes, chemical maser

PACS numbers: **01.65. + g**, 72.20.Fr, 75.40.Gb, **82.50. – m**
Bibliography — 8 references

1	H	He							
2	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	
3	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar	
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	
	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	
	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
6	Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	
	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
7	Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	
6		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd
7		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm

Рис. 2. Фрагмент Периодической таблицы Менделеева с обозначением (жёлтым цветом) элементов, для которых уже найден магнитный изотопный эффект.

Результаты работ Зельдовича в спиновой физике суммированы в статье [8]; она широко цитируется и сейчас. Он составил её план и написал первую часть, но не увидел в печатном формате: она вышла из печати с его именем в чёрной рамке...

Список литературы

1. Зельдович Я Б, Собельман И И *Письма в ЖЭТФ* **21** 368 (1974); Zeldovich Ya B, Sobelman I I *JETP Lett.* **21** 168 (1975)
2. Зельдович Я Б, Максимов Л А *ЖЭТФ* **70** 76 (1976); Zeldovich Ya B, Maksimov L A *Sov. Phys. JETP* **45** 39 (1976)
3. Бучаченко А Л *Квантовое электричество атомов и молекул* (М.: МГУ, Изд-во Книжный Дом Университет (КДУ), 2022)
4. Buchachenko A L, Frankevich E L *Chemical Generation and Reception of Radio- and Microwaves* (New York: VCH Publishers, 1994)
5. Buchachenko A L "Mass-Independent Isotope Effects" *J. Phys. Chem. B* **117** 2231 (2013) DOI: 10.1021/jp308727w
6. Buchachenko A L *Magnetic Isotope Effect in Chemistry and Biochemistry* (New York: Nova Science Publishers, 2009)
7. Buchachenko A L *Magnetic Effects Across Biochemistry, Molecular Biology and Environmental Chemistry. Genes, Brain and Cancer under Magnetic Control* (Elsevier, Academic Press, 2023)
8. Зельдович Я Б, Бучаченко А Л, Франкевич Е Л *УФН* **155** 3 (1988); Zeldovich Ya B, Buchachenko A L, Frankevich E L *Sov. Phys. Usp.* **31** 385 (1988)