

Wstęp do Optyki i Fizyki Materii Skondensowanej

Część I: Optyka, wykład 4

wykład: Piotr Fita
pokazy: Andrzej Wysmołek
ćwiczenia: Anna Grochola, Barbara Piętka

Wydział Fizyki
Uniwersytet Warszawski

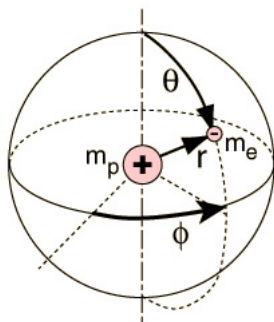
2015/16

Plan

- 1 Struktura atomów
- 2 Struktura subtelná

Atom wodoru

równanie Schroedingera



[<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu>]

- Potencjał:

$$V(\vec{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

- Równanie Schroedingera:

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m_e} + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$

- Rozwiązanie:

- Funkcje własne $\Psi_{n,l,m}$
- Energie własne E_n

Atom wodoru

bez uwzględnienia spinu

Stan elektronu opisują 3 liczby kwantowe:

- n - decyduje o energii

$$E_n = -\frac{m_0 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{Ry}{n^2}$$

- l - decyduje o wartości orbitalnego momentu pędu

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$$

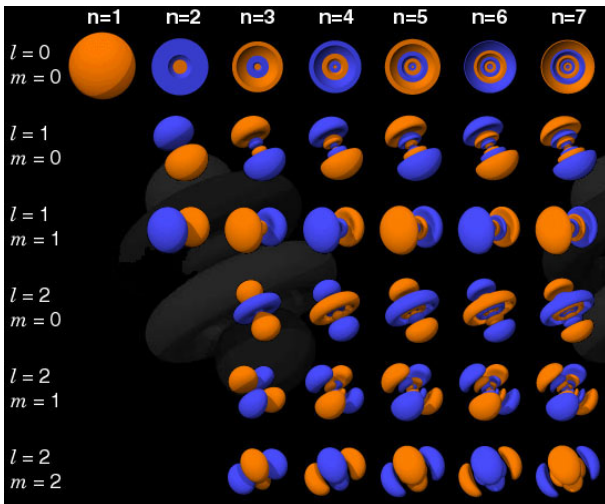
(nie wpływa na energię - degeneracja przypadkowa ze względu na zależność potencjału od r^{-1})

- m - decyduje o rzucie momentu pędu

$$L_z = \hbar m$$

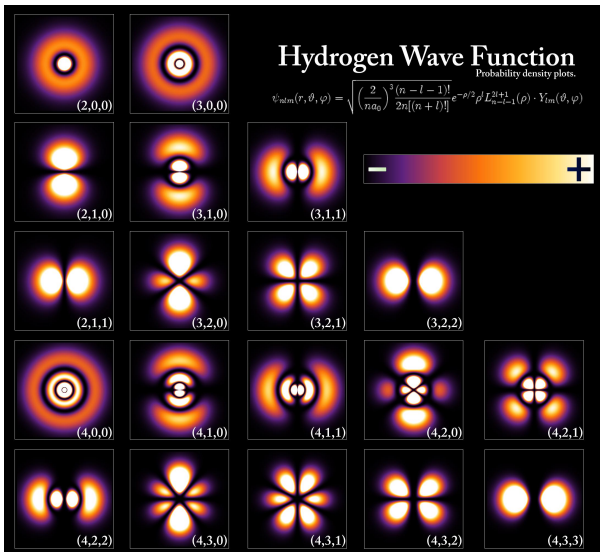
$$-l \leq m \leq l$$

Funkcje falowe atomu wodoru



[<http://chemistry.stackexchange.com>]

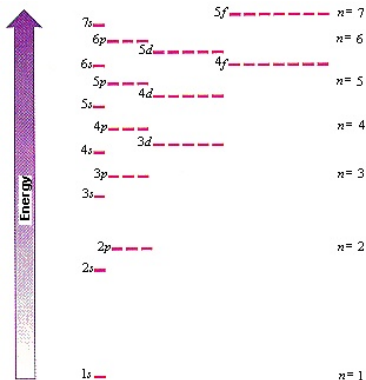
Funkcje falowe atomu wodoru



Atomy wieloelektronowe

Energie poziomów energetycznych

- Zniesienie degeneracji ze względu na l
- $2l + 1$ – krotna degeneracja ze względu na m



- $l = 0$: s
- $l = 1$: p
- $l = 2$: d
- $l = 3$: f

Atomy wieloelektronowe

Kolejność obsadzania poziomów energetycznych

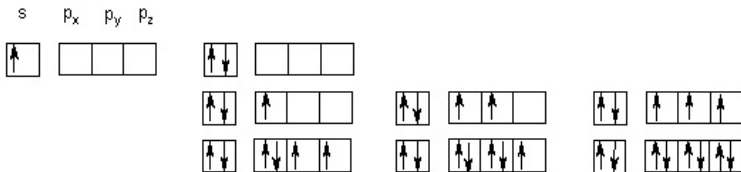
- Reguła Pauliego

Co najwyżej dwa elektrony (o przeciwnym spinie) mogą zajmować stany o tych samych liczbach n , l , m

- Reguła Hunda

- Elektrony o tej samej wartości l są rozmieszczane tak, żeby wypadkowy spin był maksymalny.

Kolejność wypełniania orbitali wg reguły Hunda



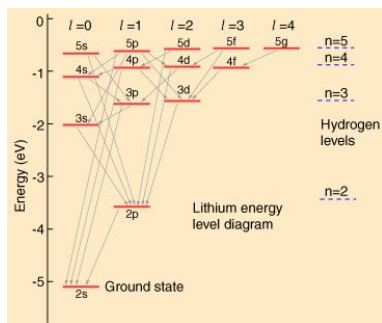
[<http://www.mlyniec.gda.pl>]

Atomy wodoropodobne

Atomy z jednym elektronem na ostatniej powłóce: Li, Na, K, Rb, ...

Zniesienie degeneracji ze względu na l .

- Daleko od jądra elektrony ekranują ładunek jądra - potencjał dla elektronu walencyjnego jak w atomie wodoru
- Rzeczywisty potencjał blisko jądra można opisać przez zaburzenie dodane do potencjału atomu wodoru



[hyperphysics.phy-astr.gsu.edu]

Momenty magnetyczne

Orbitalny moment magnetyczny

- $L \neq 0 \rightarrow$ niezerowy prąd \rightarrow orbitalny moment magnetyczny:

$$\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m_0} \vec{L} = -g_l \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L}$$

- $g_l = 1$ (czynniki "g", Landego, żyromagnetyczny)
- $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0}$ - magneton Bohra
- Wartość momentu magnetycznego:

$$\mu_L = \frac{e}{2m_0} L = \frac{e\hbar}{2m_0} \sqrt{l(l+1)}$$

Momenty magnetyczne

Spinowy moment magnetyczny

- Spinowy moment pędu:

$$S = \hbar\sqrt{s(s+1)} \quad S_z = m_s\hbar \quad m_s = \pm\frac{1}{2}$$

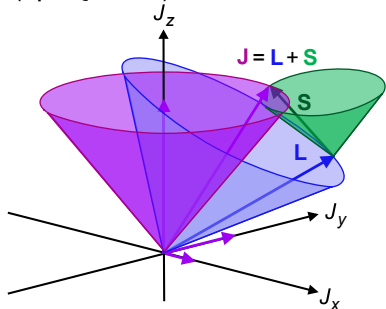
- Spinowy moment magnetyczny

$$\vec{\mu}_S = -g_s \frac{e}{2m_0} \vec{S} = -g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S}$$

- $g_s = 2,0023$

Sprzężenie spin-orbita

Oddziaływanie $\vec{\mu}_S$ i $\vec{\mu}_L$ prowadzi do ich wzajemnej orientacji (sprzężenia)



$$\vec{L} + \vec{S} = \vec{J}$$

$$J = \hbar\sqrt{j(j+1)}$$

$$J_z = m_j\hbar \quad -j \leq m_j \leq j$$

Energia oddziaływania $\vec{\mu}_S$ i $\vec{\mu}_L$:

$$V_{LS} = \frac{e^2\mu_0}{8\pi m_0^2 r^3} \vec{S} \cdot \vec{L}$$

Sprężenie spin-orbita

Rozszczepienie linii

- Energia oddziaływania $\vec{\mu}_S$ i $\vec{\mu}_L$:

$$V_{LS} = \frac{e^2 \mu_0}{8\pi m_0^2 r^3} \vec{S} \cdot \vec{L}$$

- $\frac{1}{r^3}$ - wartość średnia

$$\frac{1}{r^3} \rightarrow \int \frac{1}{r^3} |\psi|^2 dV$$

- $\vec{S} \cdot \vec{L} = SL \cos \alpha$ - z twierdzenia cosinusów

$$V_{LS} = \frac{a}{2} [(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1))]$$

$$a = \frac{e^2 \mu_0 \hbar^2}{8\pi m_0^2 r^3}$$

Atomy wieloelektronowe

Sprzężenie LS

- W lekkich atomach niezależnie sprzęgają się orbitalne i spinowe momenty pędu różnych elektronów:

- $\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2 + \dots$

- $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \dots$

\vec{L} i \vec{S} sprzęgają się dając wypadkowy moment pędu

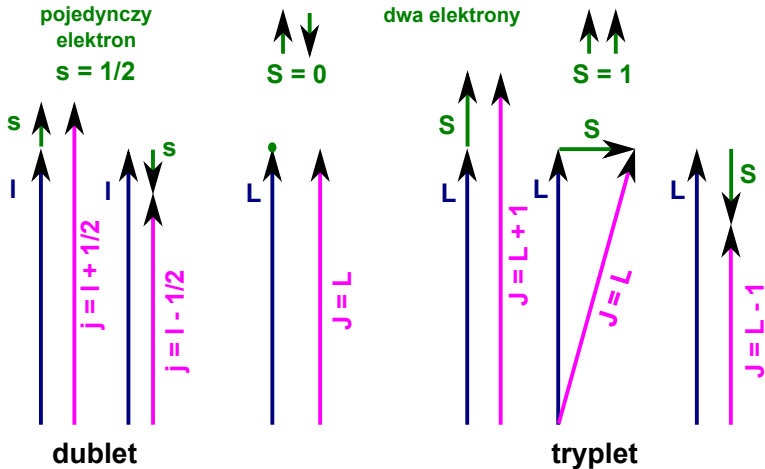
$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

(liczą się tylko elektrony z niezapełnionych powłok)

- Tutaj $\vec{S} > 1/2$, np. dla 3 elektronów $\vec{S} = 3/2$
- Są $2S + 1$ możliwości orientacji \vec{S} i \vec{L}

Sprężenie LS

Lekkie atomy



Tutaj: l, j, s - liczby kwantowe dla pojedynczego elektronu, L, J, S - liczby kwantowe dla układu (nie wartości momentów pędu!)