

Fizyka Materii Skondensowanej

Jacek.Szczytko@fuw.edu.pl

Konrad.Dziatkowski@fuw.edu.pl

<http://www.fuw.edu.pl/~szczytko/FMS>

 **inżynieria**
nanostruktur



Fizyka Materii Skondensowanej

Zasady zaliczania:

2 kolokwia (po 3 zadania) – $2 \times 30p = 60p$

Testy z wykładu (2 pytania, 10 testów) – 20p

Prace domowe (5 serii 3 zadania) – 10p


Zaliczenie ćwiczeń – 40p / 90p

Egzamin (4 zadania) – 40p

Należy uzyskać min. 50p / 130p żeby odpowiadać

Ćwiczenia są obowiązkowe – dr Konrad Działkowski

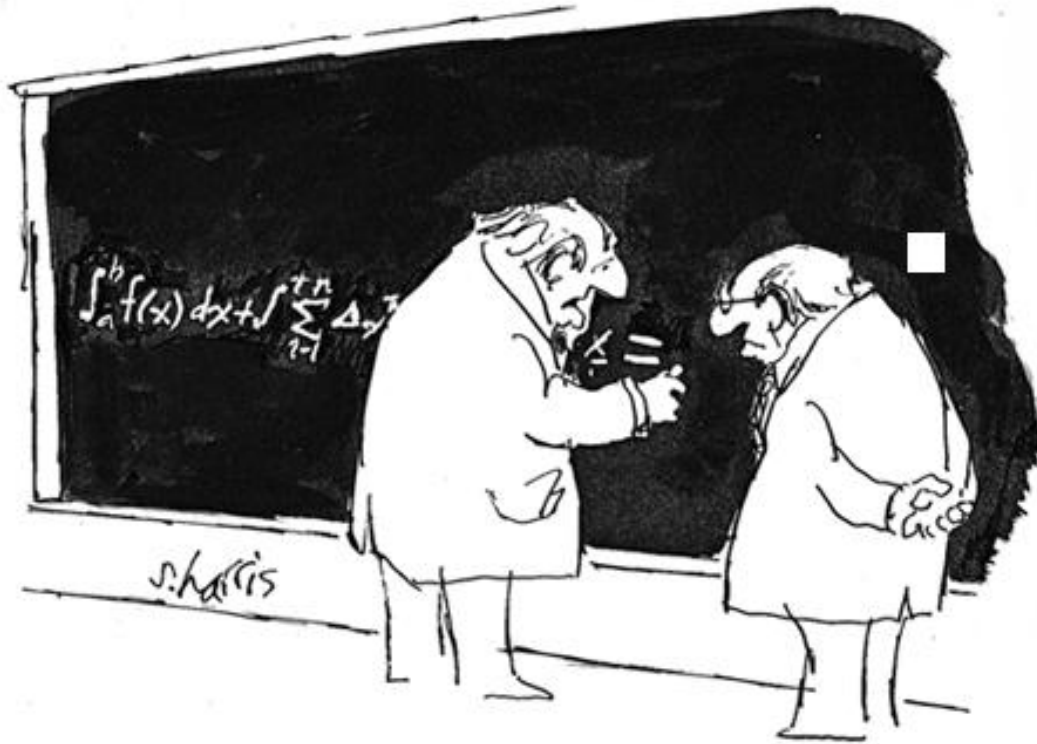
GryPlan

- 4.10 Mechanika kwantowa. Stany. Studnia kwantowa, Stany atomu wodoru. Symetrie stanów.
 - 11.10 Pole magnetyczne, sprzężenie spin orbita, J, L, S
 - 18.10 Dipolowe przejścia optyczne. Reguły wyboru, czas życia
 - 25.10 Lasery – współczynniki Einsteina
 - 8.11 Optyka – powtórzenie, klasyczny współczynnik załamania
 - 14.11 **PONIEDZIAŁEK RANO - KOLOKWIUM**
 - 15.11 Wiązania chemiczne i cząsteczki, hybrydyzacje
 - 22.11 Przejścia optyczne w cząsteczkach, widma oscylacyjno-rotacyjne
 - 29.11 Ciało stałe, kryształy, krystalografia, sieci Bravais
 - 6.12 Pasma, tw. Blocha, masa efektywna, przybliżenie kp
 - 13.12 **KOLOKWIUM**
 - 20.12 Elektrony i dziury cz. 1
 - 3.01 Elektrony i dziury cz. 2 Nanotechnologia
 - 10.01 Urządzenia półprzewodnikowe. Diody, tranzystory, komputery
 - 17.01 Fizyka subatomowa
- 

Rachunek zaburzeń

Pole magnetyczne, sprzężenie spin orbita, J, L, S

S. Harris

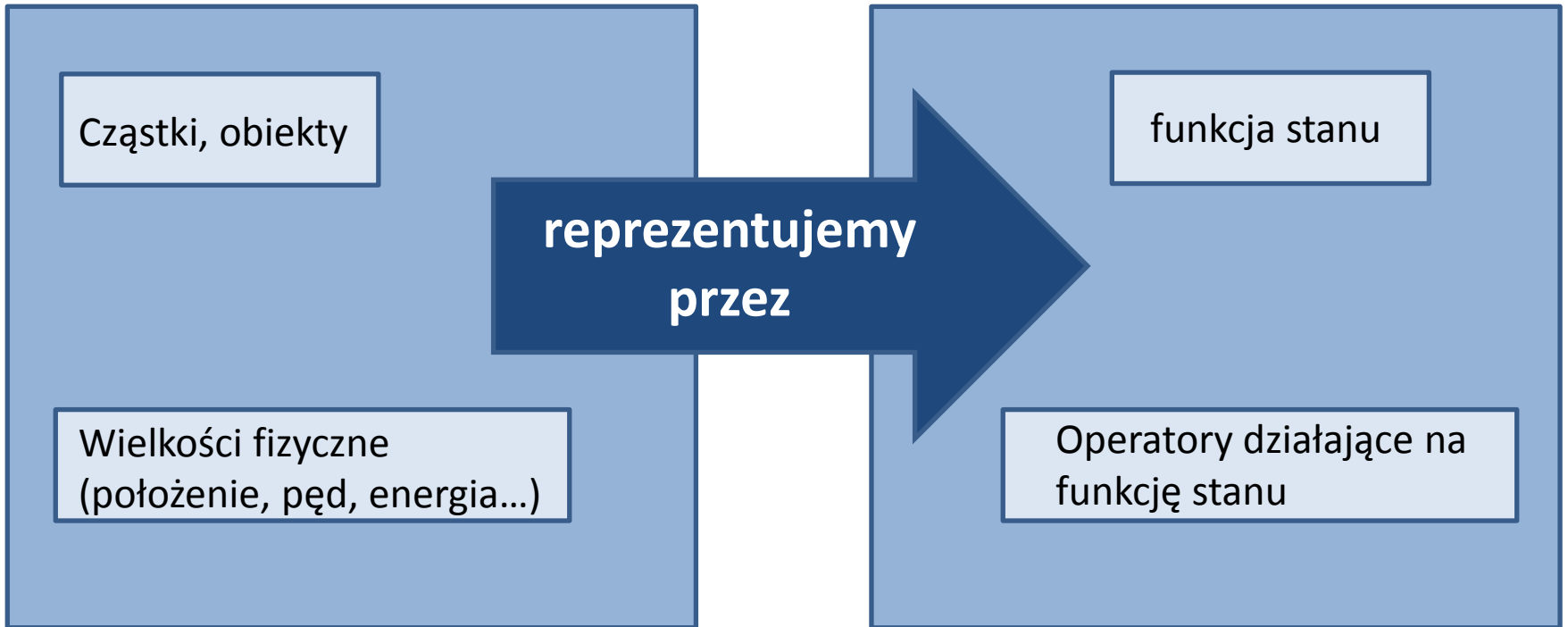


"THIS IS THE PART I ALWAYS HATE."

Świat klasyczny i kwantowy

Uwaga 1: funkcję falową określają m.in LICZBY KWANTOWE:

$$\Psi_n(\vec{r}, t)$$



Co to jest OPERATOR?

Świat klasyczny i kwantowy

Uwaga 1: funkcję falową określają m.in LICZBY KWANTOWE: $\Psi_n(\vec{r}, t)$

Co to jest OPERATOR?

Operator położenia (r)

Operator pędu (p)

Operator momentu pędu ($L = r \times p$)

Operator energii całkowitej $E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}}$

Świat klasyczny i kwantowy

Szczególne rozwiązania równania Schrödingera

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)$$

iloczyn skalarny funkcji (falowych)
normalizacja
rzut funkcji falowej
wartość średnia operatora

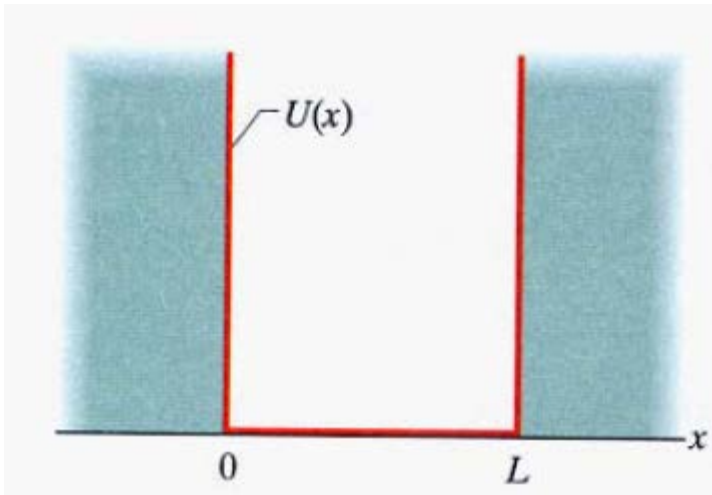
potencjał niezależny od czasu
cząstka swobodna
potencjał harmoniczny – na ćwiczeniach!
potencjał w studni
potencjał centralny (atom wodoru) – ważne!

Świat klasyczny i kwantowy

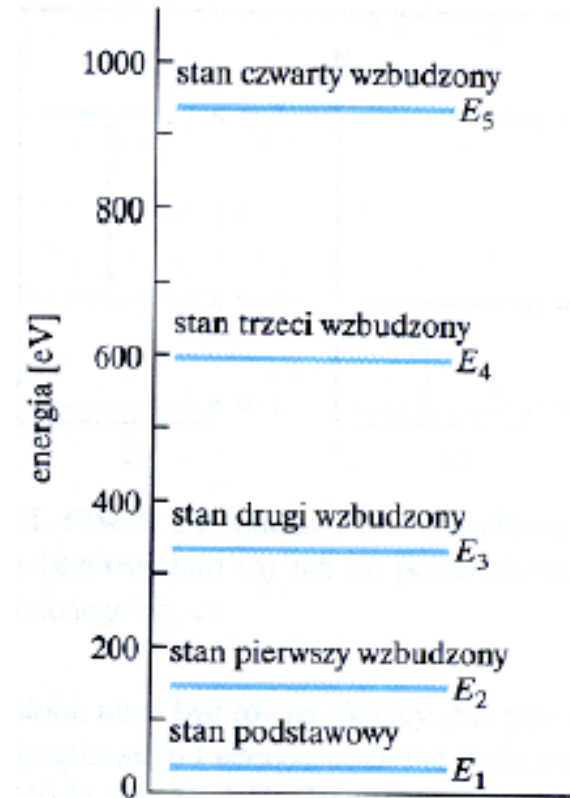
Ewolucja funkcji falowej jest DETERMINISTYCZNA.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)$$

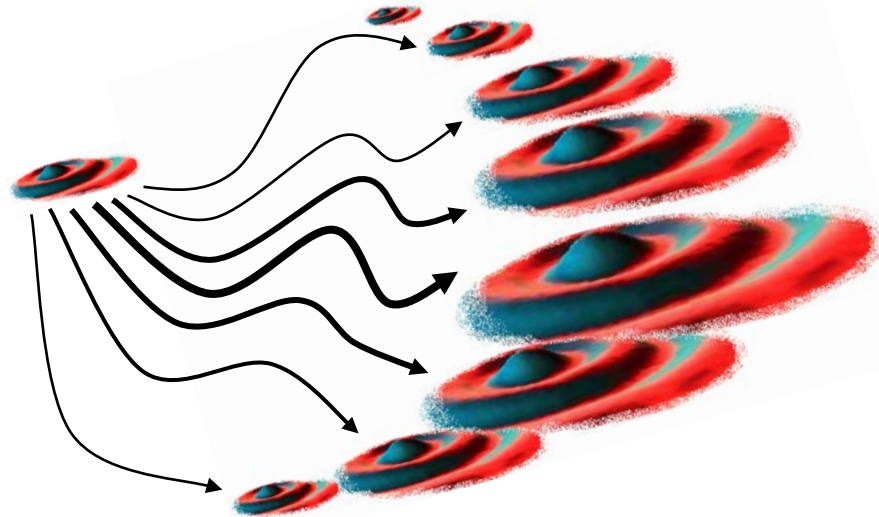
Przykład: cząstka w nieskończonej studni:



$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \right) n^2$$



Świat klasyczny i kwantowy



Stan cząstki musi być określony w CAŁEJ przestrzeni

□ FUNKCJA FALOWA

$$\Psi_n(\vec{r}, t)$$

n – liczby kwantowe

Uwaga 1: funkcję falową określają m.in LICZBY KWANTOWE:

Uwaga 2: liniowa kombinacja funkcji falowych też jest funkcją falową (zasada superpozycji)

Uwaga 3: funkcja falowa jest określona w całej przestrzeni, w tym sensie jej ewolucja opisuje wszystkie możliwe historie cząstki:

Uwaga 4: ewolucja funkcji falowej jest DETERMINISTYCZNA. Jednak w momencie pomiaru „dowiadujemy” się w jakim stanie jest funkcja (tzw. *redukcja f. falowej*)

Uwaga 5: cząstki kwantowe są NIEROZRÓŻNIALNE

Atom wodoru

DYGRESJA

Stan pojedynczej cząstki:

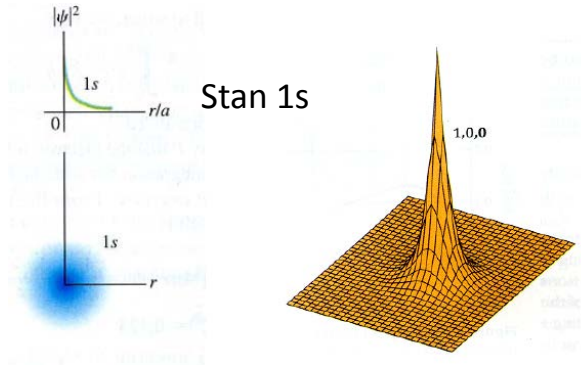
Np.: funkcja falowa atomu wodoru

$$\Psi = R_{n,l}(r)\Theta_{l,m}(\theta)\Phi_m(\phi)$$

$$R_{n,l}(r) = \sqrt{\frac{(n-l+1)!}{2n(n+l)!}} \left(\frac{2Z}{na_0}\right)^{3/2} e^{-\rho/2} \rho^l G_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$$

$$\Theta_{l,m}(\theta) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{2\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta)$$

$$\Phi_m(\phi) = C e^{im\phi}$$



Liczby kwantowe!

$$\Psi = R_{n,l}(r)\Theta_{l,m}(\theta)\Phi_m(\phi) = |n, l, m\rangle$$

Atom wodoru

DYGRESJA

(czyli tak naprawdę)

$$\Psi_{n,l,m}(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | n, l, m \rangle = |n, l, m\rangle$$

Reprezentacja położeniowa

Zapis skrócony

Atomy wodoropodobne

Atomy metali alkalicznych (wodoropodobne):

Rachunek zaburzeń: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$

$$\hat{H}_0 \psi_i = E_i \psi_i$$

Zaburzenie $\hat{H}'_{ij} = \langle \psi_i \hat{H}' \psi_j \rangle$

Sposób:

$$\det |\hat{H}' - E\hat{I}| = 0$$

$$\text{a) } V(r) = -\frac{3e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + A\delta(r-a)$$

$$\text{b) } V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}; & r \leq b \\ -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}; & r > b \end{cases}$$

Atomy wodoropodobne

Atomy metali alkalicznych (wodoropodobne):

Rachunek zaburzeń: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$

$$\hat{H}_0 \psi_i = E_i \psi_i$$

Zaburzenie $\hat{H}'_{ij} = \langle \psi_i \hat{H}' \psi_j \rangle$

Sposób:

$$\det |\hat{H}' - E\hat{I}| = 0$$

a) $V(r) = -\frac{3e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + A\delta(r-a)$

b) $V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}; r \leq b \\ -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}; r > b \end{cases}$

a) $V'(r) = A\delta(r-a)$

b) $V'(r) = \begin{cases} 0; r \leq b \\ -\frac{(Z-1)e^2}{4\pi\epsilon_0 r}; r > b \end{cases}$

Rachunek zaburzeń

Rachunek zaburzeń (niezależny od czasu)

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}' \leftarrow \text{Zaburzenie}$$

Hamiltonian niezaburzony, znamy rozwiązania: $\hat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}$

Szukamy takiej funkcji ψ_n , że: $(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}') \psi_n = E_n \psi_n$

Rozwijamy w szereg względem λ i funkcję falową i energię:

$$\begin{aligned}\psi_n &= \psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \dots \\ E_n &= E_n^0 + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots\end{aligned}$$

Stąd:

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}') (\psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \dots) = (E_n^0 + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots) (\psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \dots)$$

Następnie grupujemy względem λ i voila!:

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 \psi_n^{(0)} &= E_n^{(0)} \psi_n^{(0)} \\ \hat{H}_0 \psi_n^{(1)} + \hat{H}' \psi_n^{(0)} &= E_n^{(0)} \psi_n^{(1)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(0)} \\ \hat{H}_0 \psi_n^{(2)} + \hat{H}' \psi_n^{(1)} &= E_n^{(0)} \psi_n^{(2)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(1)} + E_n^{(2)} \psi_n^{(0)}\end{aligned}$$

Rachunek zaburzeń

Rachunek zaburzeń (niezależny od czasu)

Dalsze wyprowadzenia prowadzą do równania własnego

$$E_n = E_0 + \lambda E'_n = E_0 + \lambda H'_{nn}$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} = \psi_n^{(0)} + \lambda \sum_{k, k \neq n} \frac{\hat{H}'_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \psi_k^{(0)}$$

Co daje równanie własne: $\det(\lambda H' - IE) = 0$

Liczymy:

$$\hat{H}'_{ij} = \langle \psi_i | \hat{H}' | \psi_j \rangle$$

$$\begin{vmatrix} \lambda H'_{11} - E' & \lambda H'_{12} & \cdots & \lambda H'_{1k} \\ \lambda H'_{21} & \lambda H'_{22} - E' & \cdots & \lambda H'_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda H'_{k1} & \lambda H'_{k2} & \cdots & \lambda H'_{kk} - E' \end{vmatrix} = 0$$

Pole elektryczne

Efekt Starka dla atomu wodoru

Pole elektryczne E

$$H' = \vec{p}\vec{E} = ezE_z$$

Moment dipolowy p

Funkcje własne atomu wodoru dla stanu 2p:

$$\Psi_{200}, \Psi_{21-1}, \Psi_{210}, \Psi_{211}$$

Liczmy:

$$\hat{H}'_{ij} = \langle \psi_i | \hat{H}' | \psi_j \rangle$$

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$R_{20}(r) = \left(\frac{Z}{2a}\right)^{3/2} 2 \left(1 - \frac{Zr}{2a}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{2a}\right)$$

$$R_{21}(r) = \left(\frac{Z}{2a}\right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{Zr}{2a}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{2a}\right)$$

$$Y_{00}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$Y_{10}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\theta)$$

$$Y_{1\pm 1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\theta) \exp(\pm i\varphi)$$

Pole elektryczne

Efekt Starka dla atomu wodoru

Pole elektryczne E

$$H' = \vec{p}\vec{E} = ezE_z$$

Moment dipolowy p

Funkcje własne atomu wodoru dla stanu 2p:

$$\psi_{200}, \psi_{21-1}, \psi_{210}, \psi_{211}$$

Na ćwiczeniach za tydzień!

Liczymy:

$$\hat{H}'_{ij} = \langle \psi_i | \hat{H}' | \psi_j \rangle$$

$$R_{nl}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$$
$$R_{20}(r) = \left(\frac{Z}{2a}\right)^{3/2} 2 \left(1 - \frac{Zr}{2a}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{2a}\right)$$

$$R_{21}(r) = \left(\frac{Z}{2a}\right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{Zr}{2a}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{2a}\right)$$

$$Y_{00}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$Y_{10}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\theta)$$

$$Y_{1\pm 1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\theta) \exp(\pm i\varphi)$$

Pole elektryczne

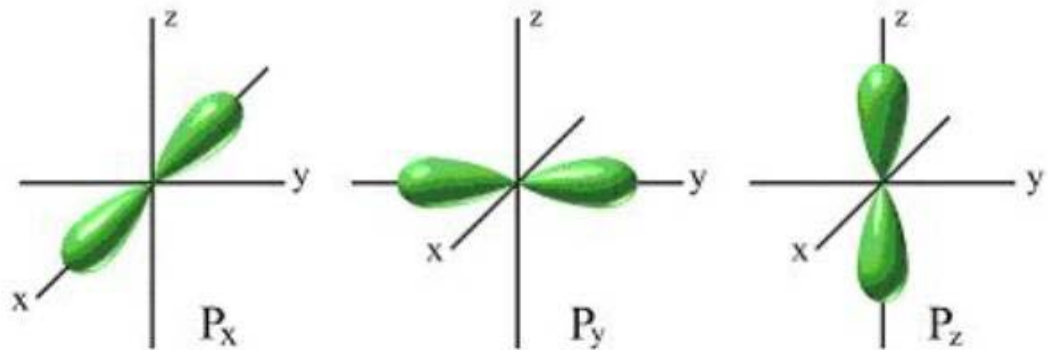
Efekt Starka dla atomu wodoru

Pole elektryczne E

$$H' = \vec{p}\vec{E} = ezE_z$$

Moment dipolowy p

Atom w polu ligandów:



Pole elektryczne

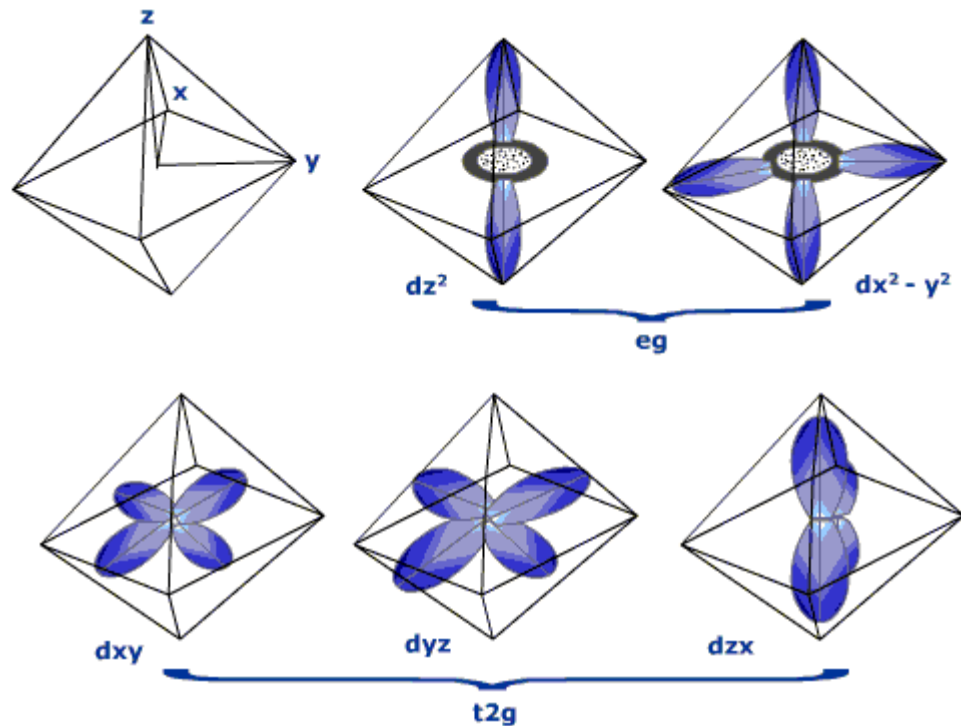
Efekt Starka dla atomu wodoru

Pole elektryczne E

$$H' = \vec{p}\vec{E} = ezE_z$$

Moment dipolowy p

Atom w polu ligandów:
(symetria oktaedryczna)



Pole magnetyczne i spin

Pole magnetyczne:

$$H' = -\vec{m}\vec{B}$$

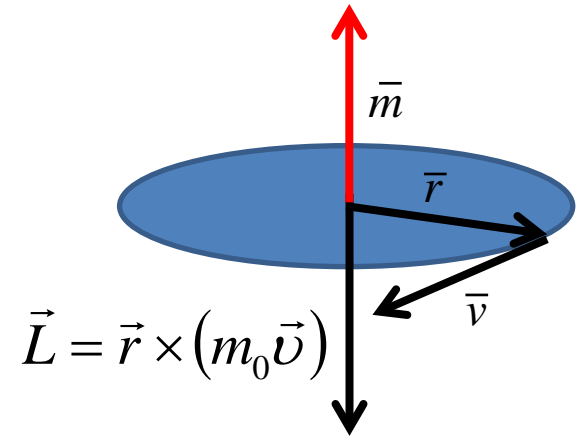
Klasycznie:

Moment magnetyczny

$$|\vec{m}| = |I\vec{S}| = \frac{e}{T} \pi r^2 = \frac{e}{2\pi r / v} \pi r^2 = \frac{1}{2} r v \quad [\text{Am}^2]$$

stąd:

$$\vec{m} = -\frac{e}{2m_0} \vec{L} = -\frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L}$$



magneton Bohra $\mu_B = \frac{\hbar e}{2m_0}$

$$H' = -\vec{m}\vec{B} = \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{L}\vec{B}$$

$$\hat{L} = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$$

Pole magnetyczne i spin

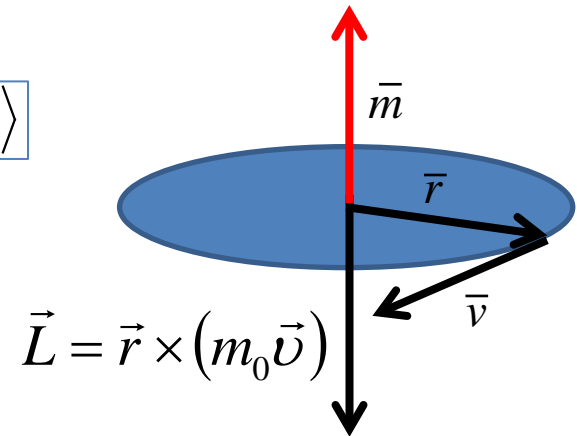
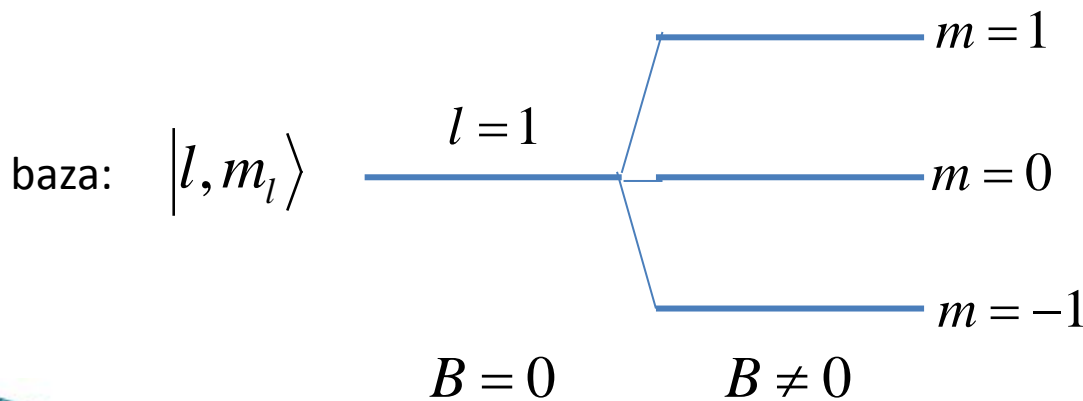
Pole magnetyczne:

$$H' = -\vec{m}\vec{B} = \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{L}\vec{B}$$

dla $\vec{B} = (0, 0, B_z)$

mamy: $H' = \frac{\mu_B}{\hbar} B_z \hat{L}_z = \mu_B B_z m$ gdzie: $m = -l, -l+1, \dots, l$

Tym razem to liczba kwantowa $|n, l, m\rangle$



Pole magnetyczne i spin

Pole magnetyczne:

$$H' = -\vec{m}\vec{B} = \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{L}\vec{B}$$

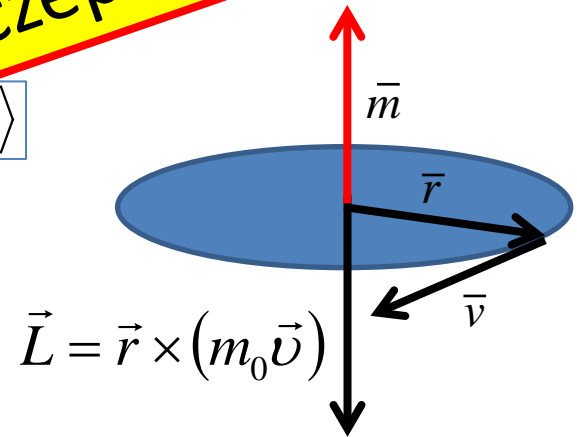
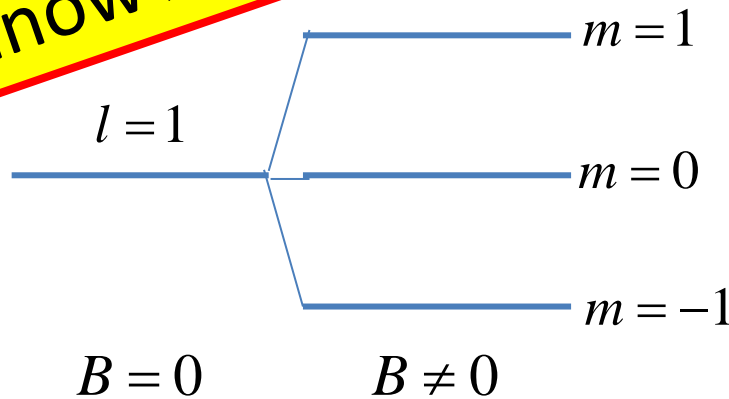
dla $\vec{B} = (0, 0, B_z)$

mamy: $H' = \frac{\mu_B}{\hbar} B_z \hat{L}_z = \mu_B B_z m$ gdzie: $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$

Tym razem to

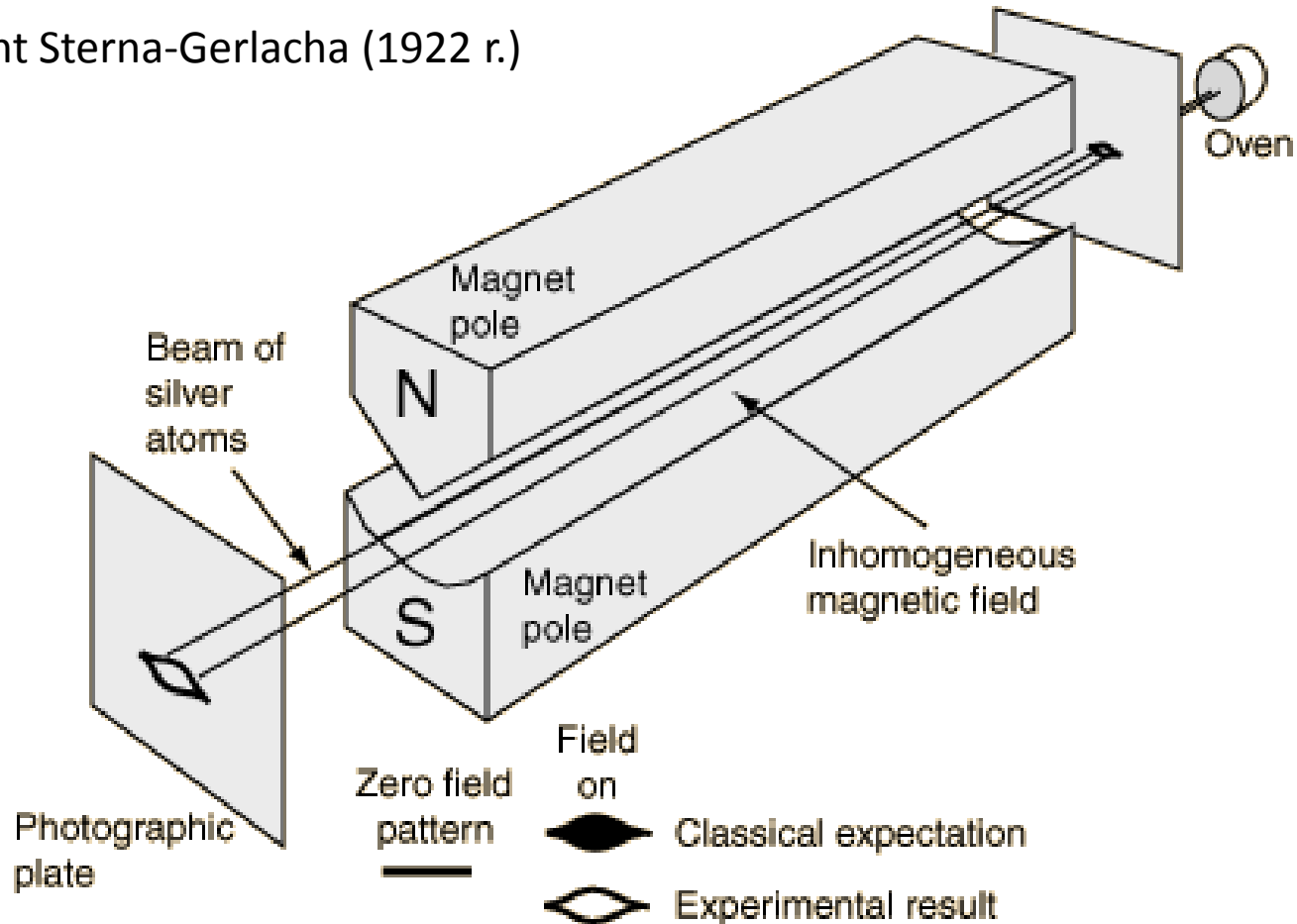
$|n, l, m\rangle$

Czy dla stanów s ($l=0$) nie ma rozszczepienia w polu B ?



Pole magnetyczne i spin

Eksperyment Sterna-Gerlacha (1922 r.)



Pole magnetyczne i spin

Spin, oddziaływanie spin-orbita

$$\psi(\vec{r}, S_z) = \psi(\vec{r})\chi(S_z)$$

Operator spinu $\hat{\vec{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$

Spinor

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z \text{ etc.}$$

macierze Pauliego: $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$

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

$$\hat{S}_y = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

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

rzuty spinu na oś z: $\chi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

Pole magnetyczne i spin

Spin, oddziaływanie spin-orbita

Sprawdzić działanie operatorów $\hat{S}_z, \hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}^2$

$$H' = \frac{\mu_B}{\hbar} (\hat{L} + g\hat{S}) \vec{B}$$

g-czynnik, zapewnia zgodność z eksperymentem

macierze Pauliego:

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

$$\hat{S}_y = \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

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

rzuty spinu na oś z: $\chi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

Pole magnetyczne i spin

Spin, oddziaływanie spin-orbita

Sprawdzić działanie operatorów $\hat{S}_z, \hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}^2$

$$H' = \frac{\mu_B}{\hbar} (\hat{L} + g\hat{S}) \vec{B}$$

g-czynnik, zapewnia zgodność z eksperymentem

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

Całkowity moment magnetyczny: $\hat{M} = \hat{M}_L + \hat{M}_S = -g_L \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{L} - g_S \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{S}$
₌₁ ₌₂

$$\hat{M} \nparallel \hat{J}$$

magnetyczna anomalia spinu

Spintronika

No dobra, ale...

- **Co to jest spin?**

Co to jest spin?

- Co to jest masa?

$$\vec{F} = m \vec{a}$$

$$F = G \frac{m_1 m_2}{r^2}$$



Co to jest spin?

- Co to jest ładunek?

$$F = k \frac{q_1 q_2}{r^2}$$



<http://www.chaseday.com>

Co to jest spin?

- Co to jest pęd?

$$\vec{p} = m \vec{v}$$



Marco Materazzi Zinedine Zidane

Co to jest spin?

- Co to jest moment pędu?

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$



Co to jest spin?

- Spin?



Sebastian Münster, *Cosmographia* in 1544

Trochę historii

<1000 r. p.n.e. Mezopotamia: niektóre rudy żelaza to „żyjące kamienie”.

600 r. p.n.e. Tales z Miletu: „magnetyt ma duszę”, bo przyciąga żelazo.

98-55 r. p.n.e. Lukrecjusz (Titus Lucretius Carus) w poemacie *De Rerum Natura* użył słowa *magnes* jako nazwy dla kamienia pochodzącego z Magnezji na północy Grecji.

23-72 r. Plinusz Drugi (Gaius Plinius Secundus) napisał w *Historia Naturalis*, że według Nikadera (poety greckiego) nazwa *magnes* pochodzi od odkrywcy, niejakiego *Magnesa*, który wspinając się na górę Ida zauważył, że gwoździe jego sandałów przyczepiają się do skały.

...

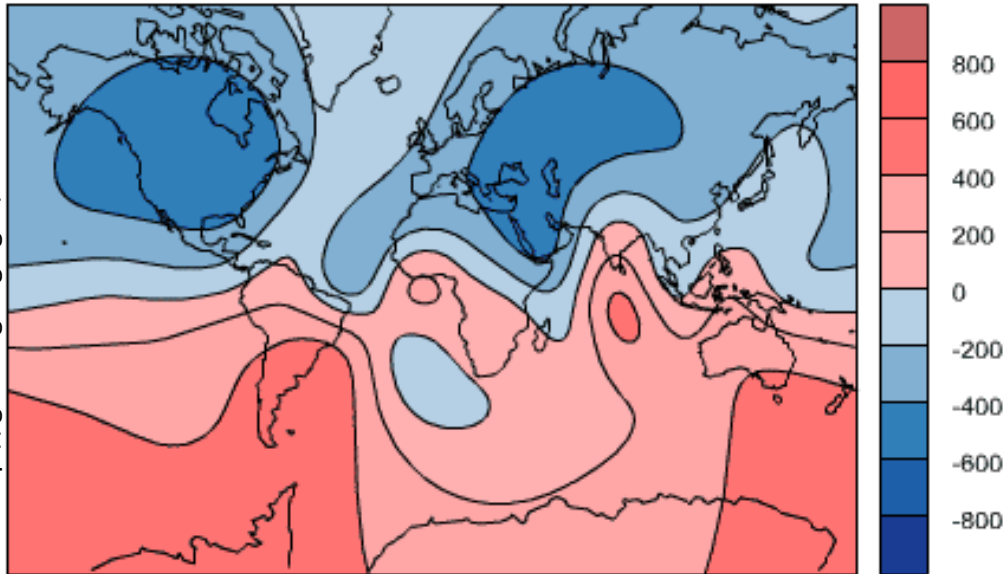
ok. 1080 r. pierwszy opis magnezu w Chinach

1175 - 1183 r. pierwsze odniesienie do kompasu – Alexander Neckem, angielski mnich z St. Albans, opisuje działający kompas w dziele *De Nominibus Utensilium* (O nazwach rzeczy).

1269 – pierwszy szczegółowy opis do kompasu – Petrus Peregrinus de Marincourt, francuski krzyżowiec opisuje jak zbudowany jest kompas

Trochę historii

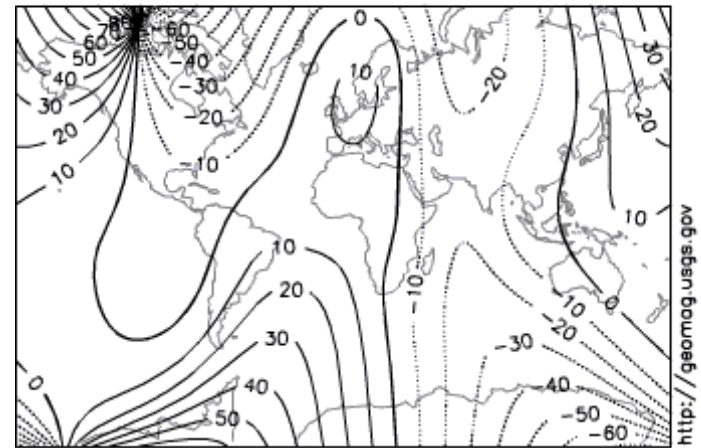
1590
Radial Core Field (relative values)



Model by A. Jackson, A. R. T. Jonkers, M. R. Walker,
Phil. Trans. R. Soc. London A (2000), 358, 957-990.

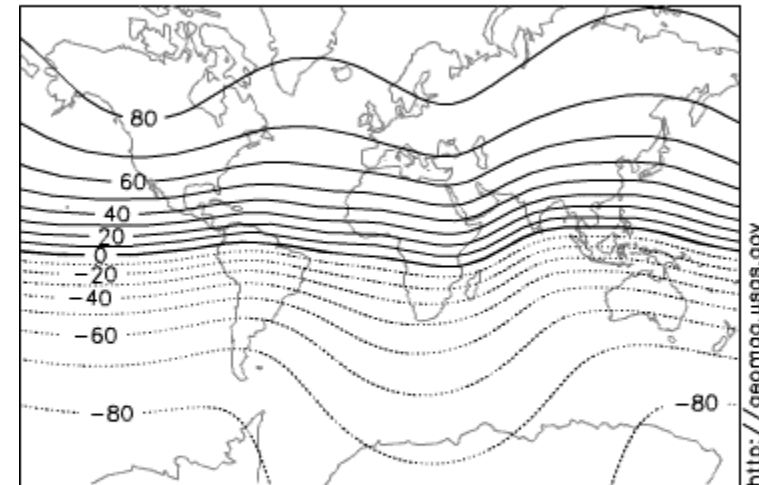
<http://geomag.usgs.gov>

1590
Declination (degrees east)



Model by A. Jackson, A. R. T. Jonkers, M. R. Walker,
Phil. Trans. R. Soc. London A (2000), 358, 957-990.

1590
Inclination (degrees down)



Model by A. Jackson, A. R. T. Jonkers, M. R. Walker,
Phil. Trans. R. Soc. London A (2000), 358, 957-990.

<http://geomag.usgs.gov/>

<http://geomag.usgs.gov>

<http://geomag.usgs.gov>

Trochę historii

William Gilbert (1544-1603) w dziele "De magnete" zajął się magnetyzmem i m.in. napisał, że sama Ziemia jest magnesem.

1740 r. pierwszy komercyjny magnes - Gowen Knight oferuje naturalne magnesy naukowcom i navigatorom. Magnesowanie przez pocieranie.

1820 r. Hans Christian Oersted odkrył pole magnetyczne wokół przewodnika w którym płynie prąd.

1823 r. William Sturgeon zbudował pierwszy elektromagnes. Ok. 1825 solenoidy (cewki) budował także Andre Marie Ampere. M.in. odkrył, że poprzez namagnesowanie w cewce można uzyskać magnesy mocniejsze od naturalnych

1855 r. prawa indukcji Michaela Faradaya

1860 r. pierwszy silnik stałoprądowy Zenobe Theophile Gramme. Wcześniej prototypowe silniki budowali Oersted (1820), Faraday (1821), Jacobi (1834), Elias (1842), Froment (1844) oraz Pacinotti (1860)

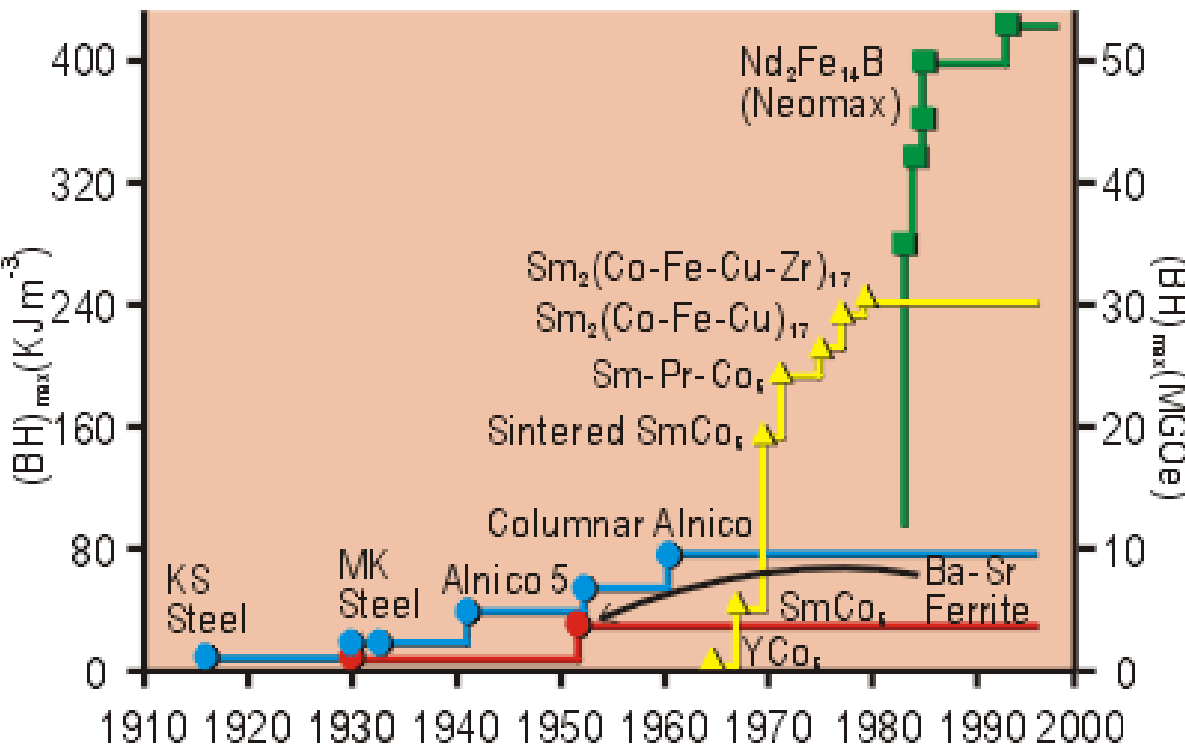
1871 r. generator prądu stałego Z.T Gramme udoskonalony w 1872 r. przez Niemców Wernera von Siemens'a i Johanna Georga Halskego.

1873 - Maxwell publikuje *Treatise on Electricity and Magnetism*

Trochę historii

- 1895 r. Pierre Curie odkrywa, że ferromagnetyki tracą swoje własności po przekroczeniu pewnej temperatury.
- 1917 r. magnesy kobaltowe: K. Honda and T. Takai
- 1919 r. komercyjne magnesy stalowe
- 1930 r. magnesy Alnico: I. Mishima tworzy stop Al, Ni, Fe
- 1952 r. magnesy ceramiczne Phillipsa (J.J. Went, G.W.Rathenan, E.W. Gorter, G.W. Van Oosterhout) Ba, Sr, Fe,Pb i O.
- 1966 r. magnesy z ziem rzadkich dr Karl J. Strnat z U.S. Air Force Materials Laboratory w bazie sił powietrznych Wright-Patterson odkrywa silny magnes 18 MGOe) Samar-Cobalt (SmCo_5)
- 1972 r. Zaawansowane magnesy ziem rzadkich Karl J. Strnat oraz Alden Ray (30 MGOe) Samar-Cobalt ($\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$).
- 1983 – magnesy żelazo-neodym-bor $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ Magnets General Motors, Sumitomo Special Metals oraz Chińska Akademia Nauk odkrywają rekordowy stop $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ (35 MGOe).
- rekord z 2002 r. naukowcy z Vacuumschmelze GmbH uzyskali w laboratorium 55.6 MGOe Nd-Fe-B (limit teoretyczny ok. 144 MGOe)

Trochę historii



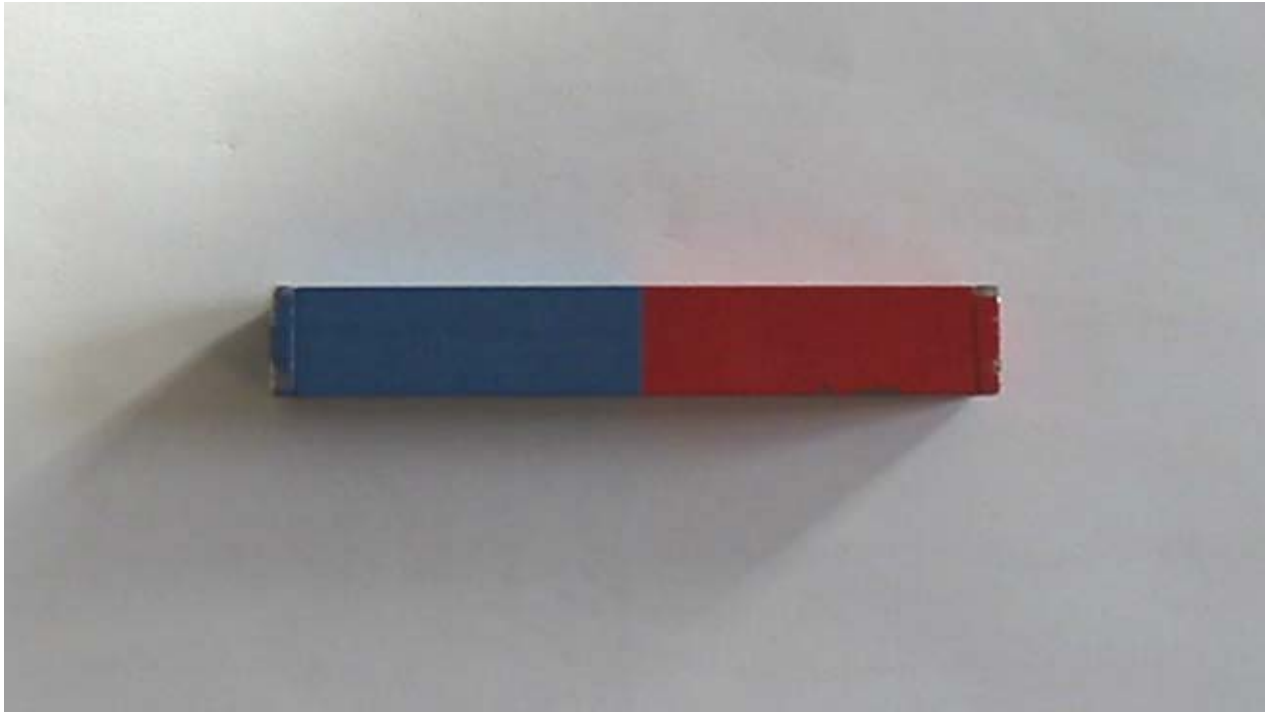
Magnetyt (z 1750 r.) typowy ferryt i magnes z ziem rzadkich. Każdy z nich o gęstości energii 1J.

<http://www.azom.com/details.asp?ArticleID=637>

<http://www.tcd.ie/Physics/Schools/what/materials/magnetism/seven.html>
 A lodestone magnet from the 1750's and typical ferrite and rare earth used in modern appliances. Each of these produce about 1J of energy.

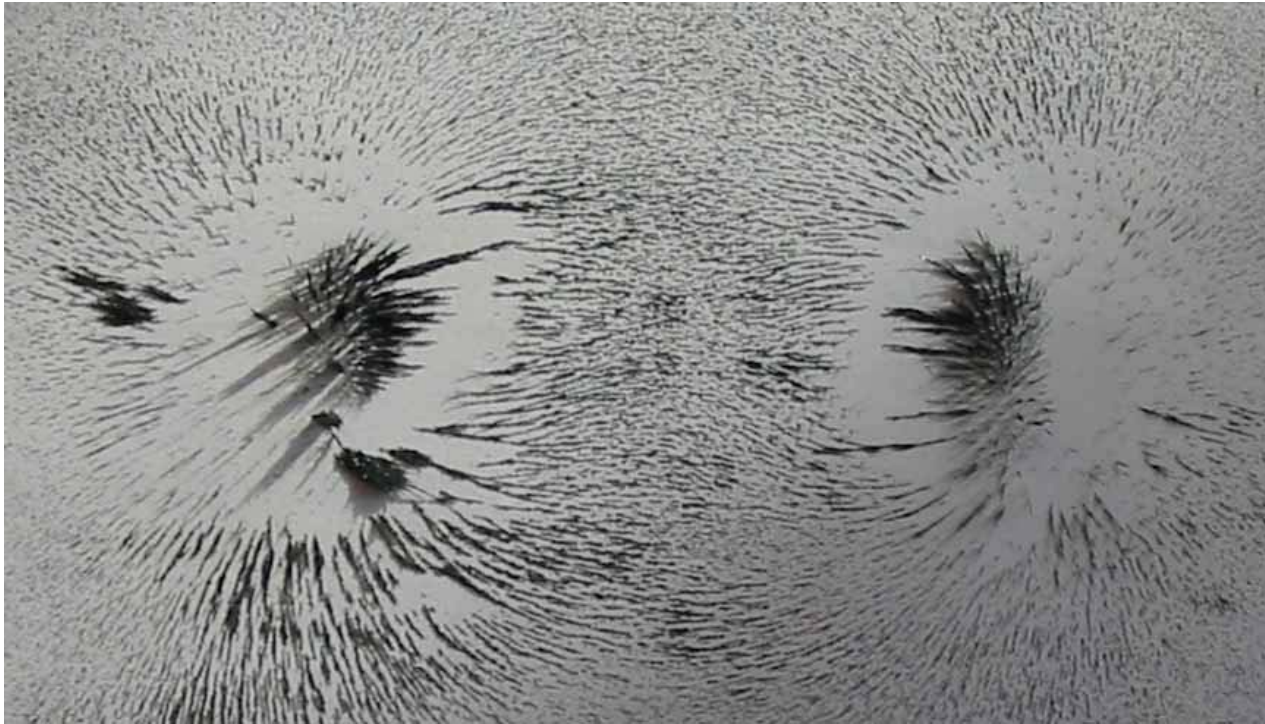
Co to jest spin?

Skąd się biorą magnesy?



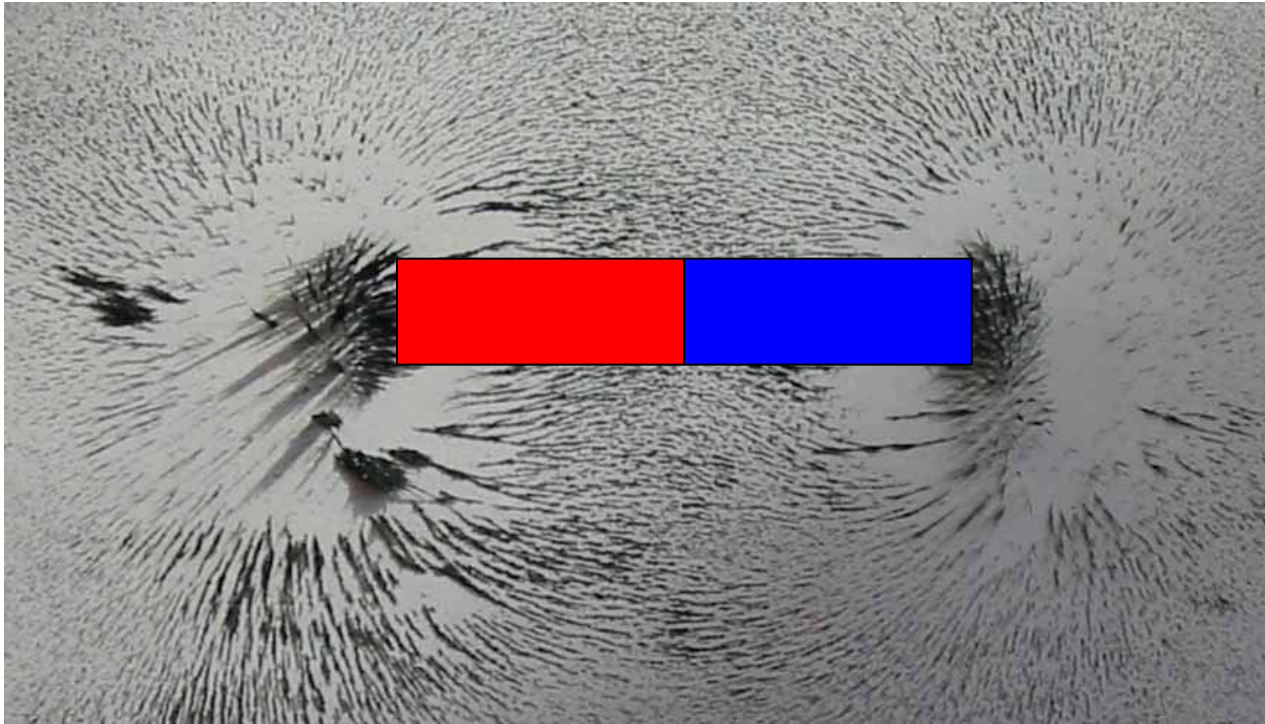
Co to jest spin?

Skąd się biorą magnesy?



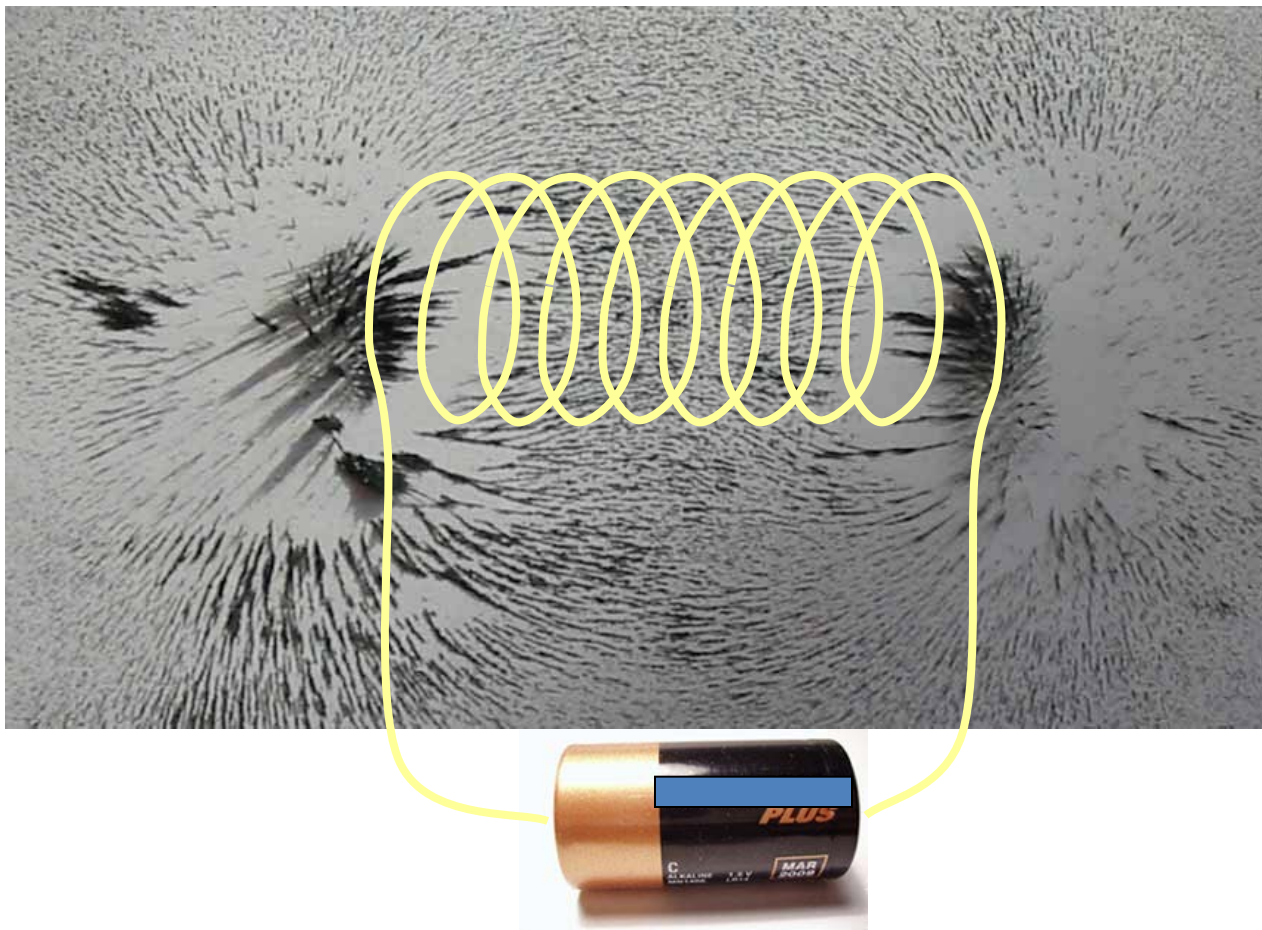
Co to jest spin?

Skąd się biorą magnesy?



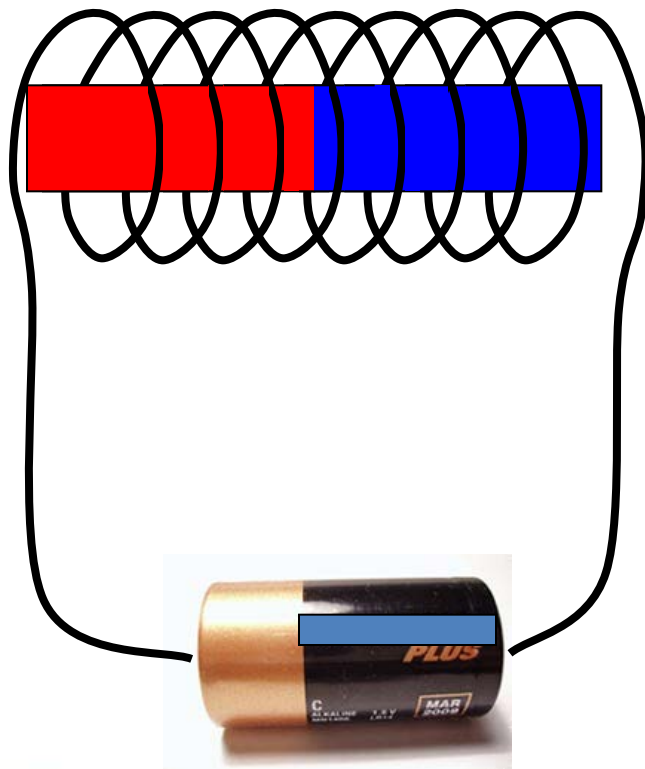
Co to jest spin?

Skąd się biorą magnesy?



Co to jest spin?

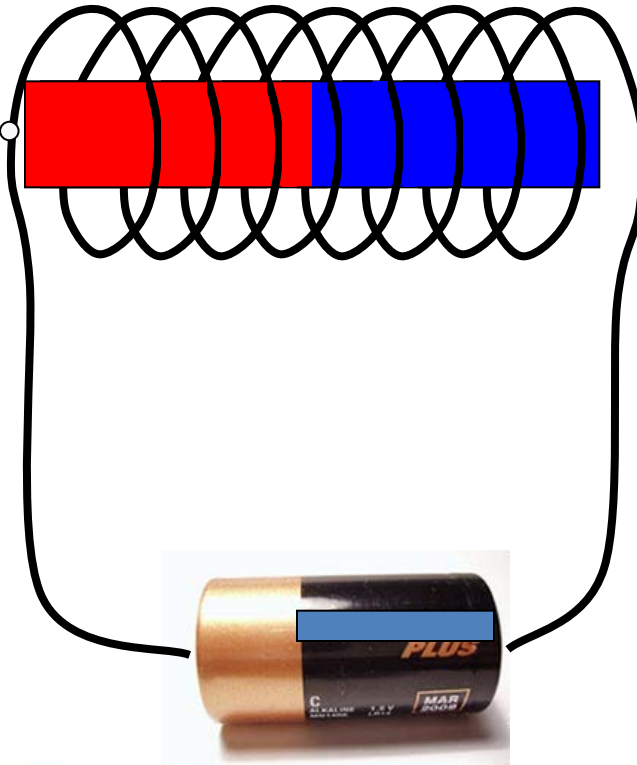
Skąd się biorą magnesy?



Co to jest spin?

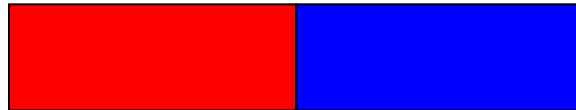
Skąd się biorą magnesy?

Poruszające się ładunki
wywołują pole
magnetyczne...



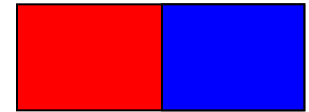
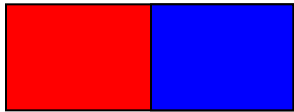
Co to jest spin?

Skąd się biorą magnesy?



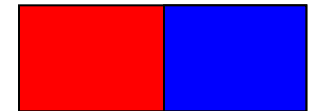
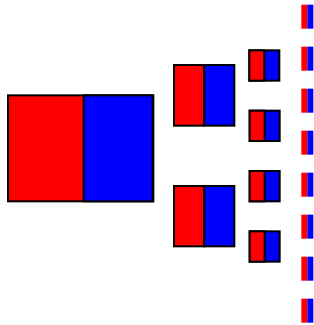
Co to jest spin?

Skąd się biorą magnesy?



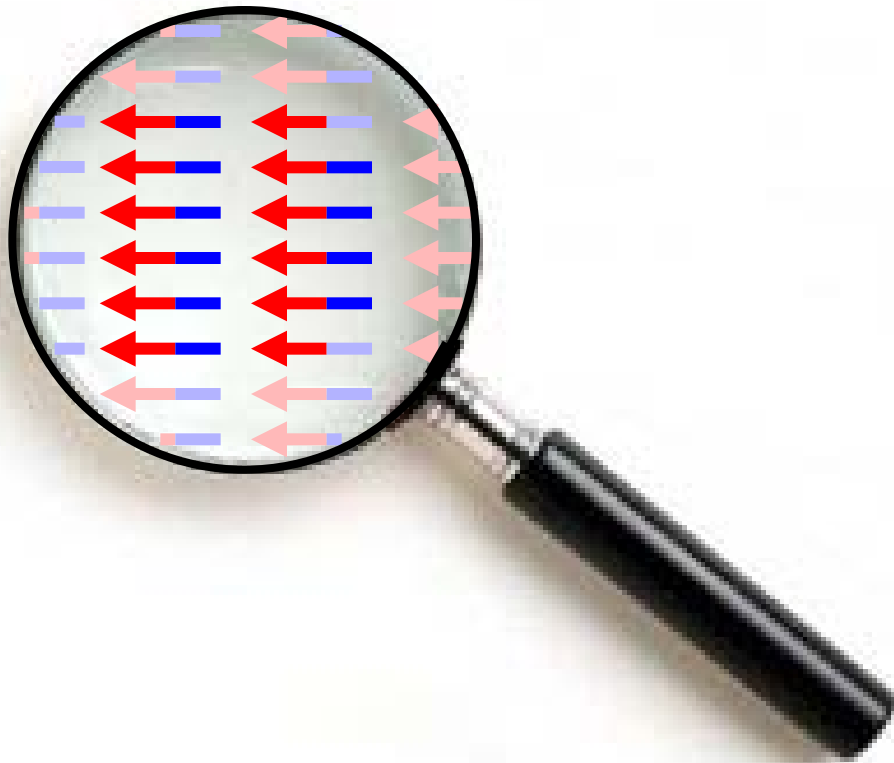
Co to jest spin?

Skąd się biorą magnesy?



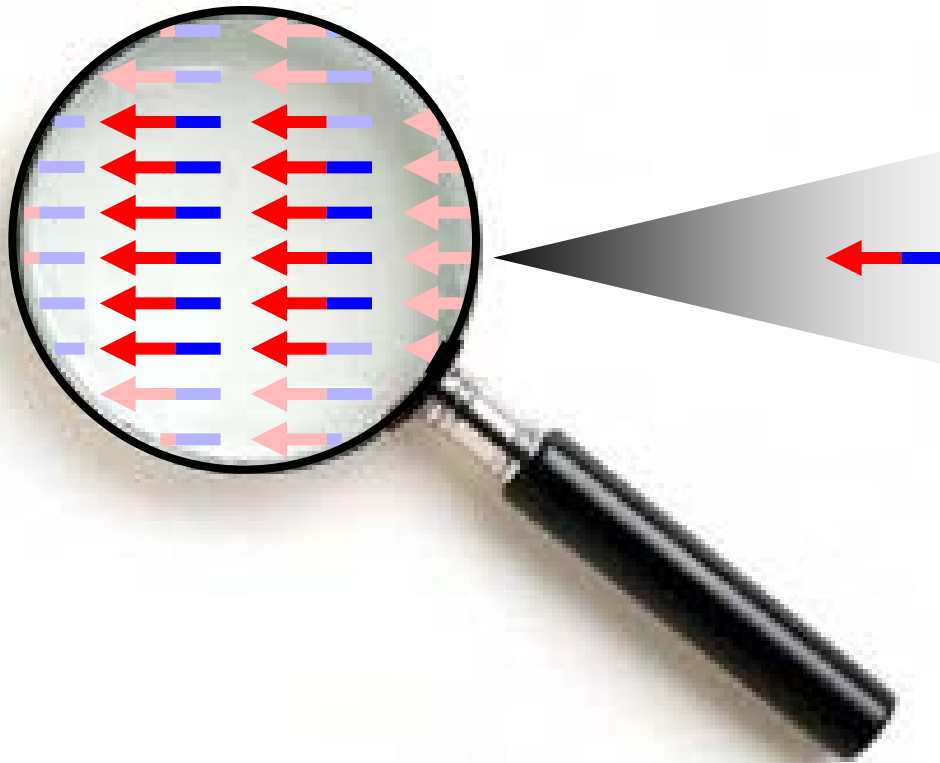
Co to jest spin?

Skąd się biorą magnesy?



Co to jest spin?

Skąd się biorą magnesy?



Te małe magnesiki to elektrony

Co to jest spin?

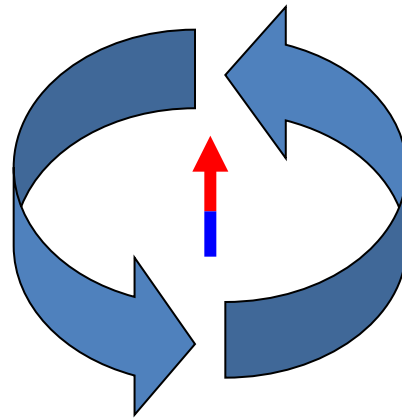
Skąd się biorą magnesy?



Te małe magnesiki to elektrony

Co to jest spin?

Skąd się biorą magnesy?



A więc płynie jakiś prąd?

Co to jest spin?

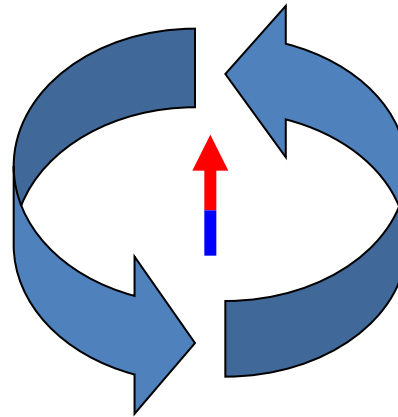
Skąd się biorą magnesy?

Ruch elektronów
wokół jąder
atomowych?

Ruch elektronów
wokół osi?

A więc płynie jakiś prąd?

Wewnętrzna własność
elektronów?

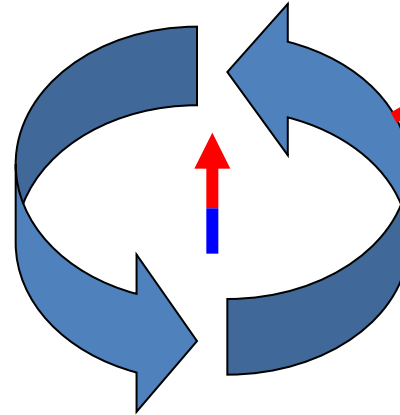


Co to jest spin?

Skąd się biorą magnesy?

~~Ruch elektronów
wokół jąder
atomowych?~~

~~Ruch elektronów
wokół osi?~~



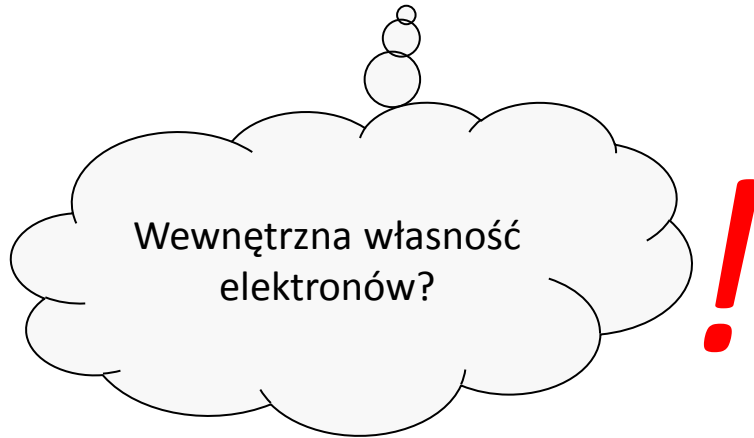
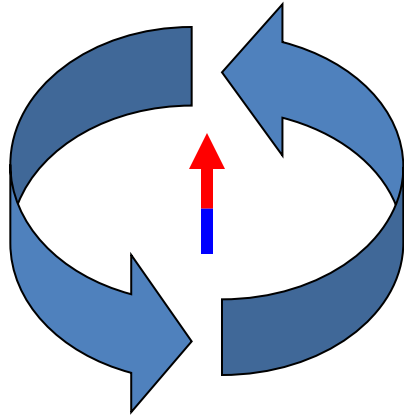
Wewnętrzna własność
elektronów?
!

tzw: **Wewnętrzny moment pędu**
czyli **SPIN**

tak samo jak **masa** albo **ładunek**

Co to jest spin?

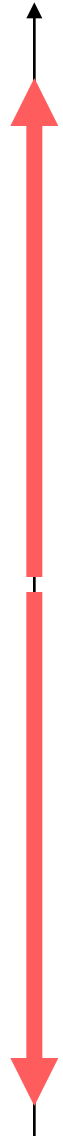
Kwantowy moment pędu



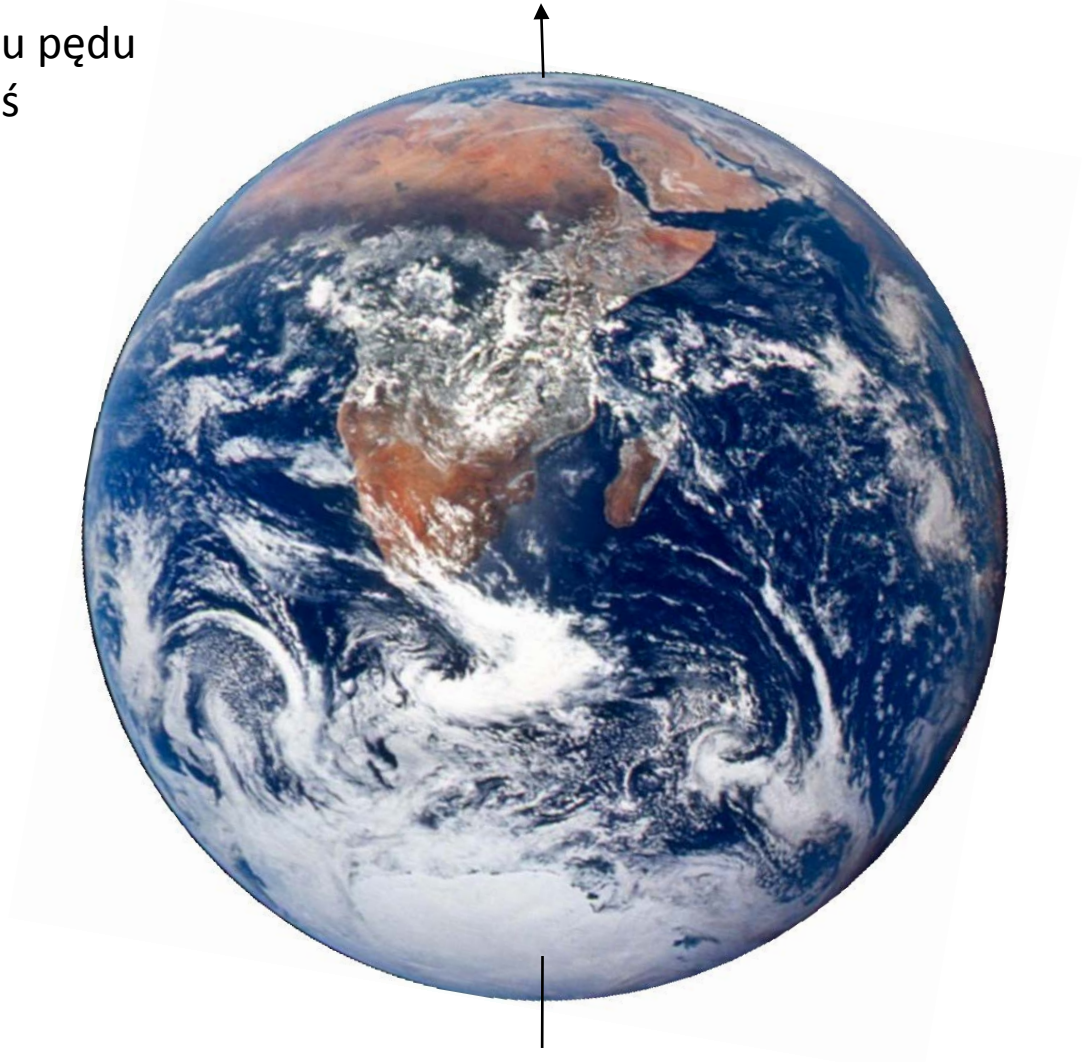
Albert **Einstein** - Johannes Wander **de Haas**,
Berlin 1914,



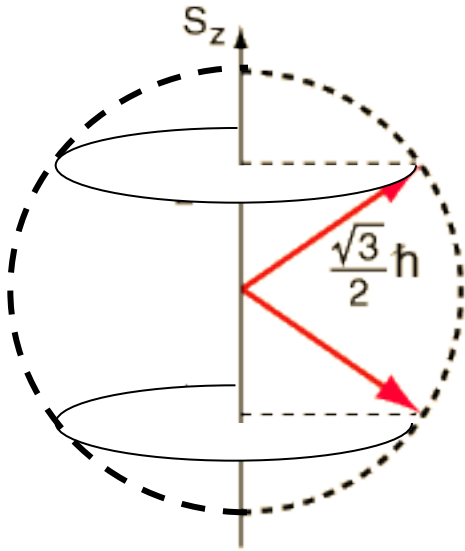
Co to jest spin?



Rzut momentu pędu
na wybraną oś



Co to jest spin?



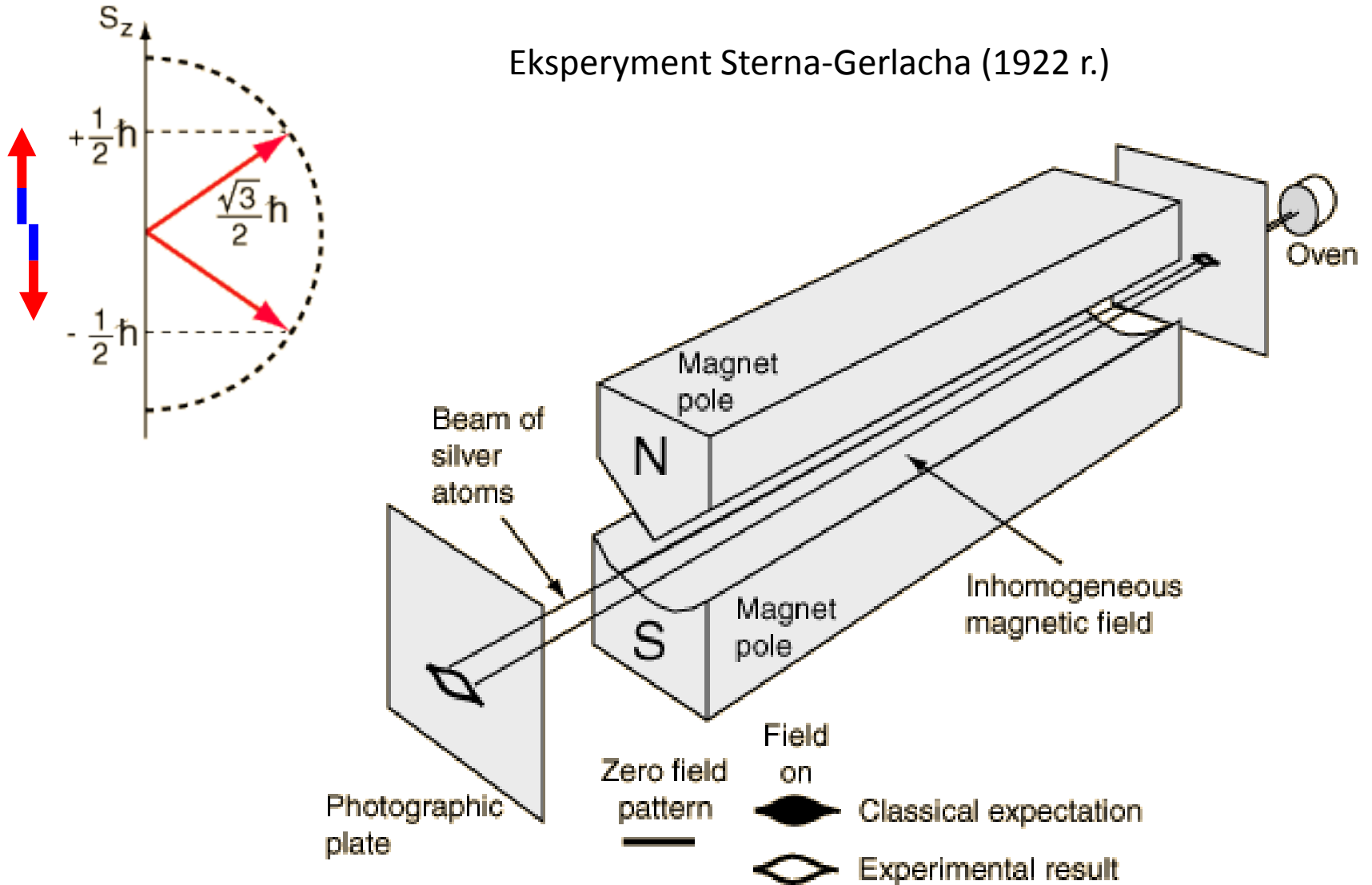
Rzut momentu pędu elektronu na **dowolną** oś ma tylko dwie możliwe wartości:

$$+\frac{1}{2}\hbar \uparrow \quad -\frac{1}{2}\hbar \downarrow$$

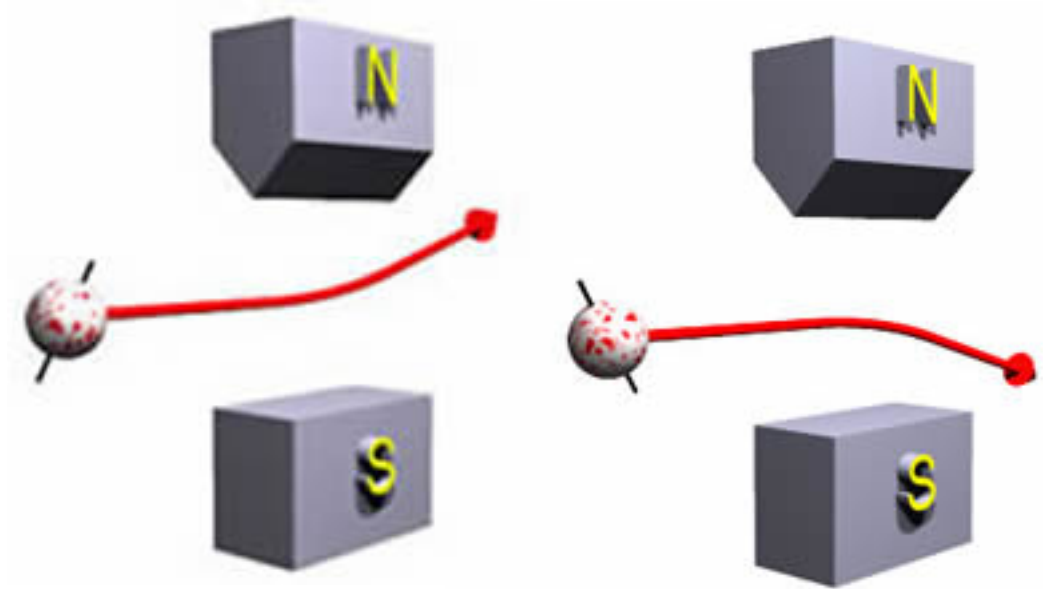
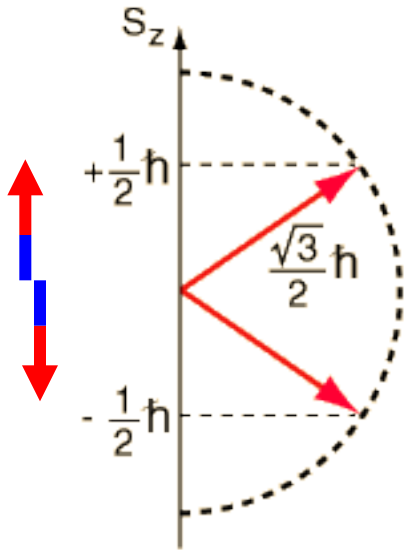


Co to jest spin?

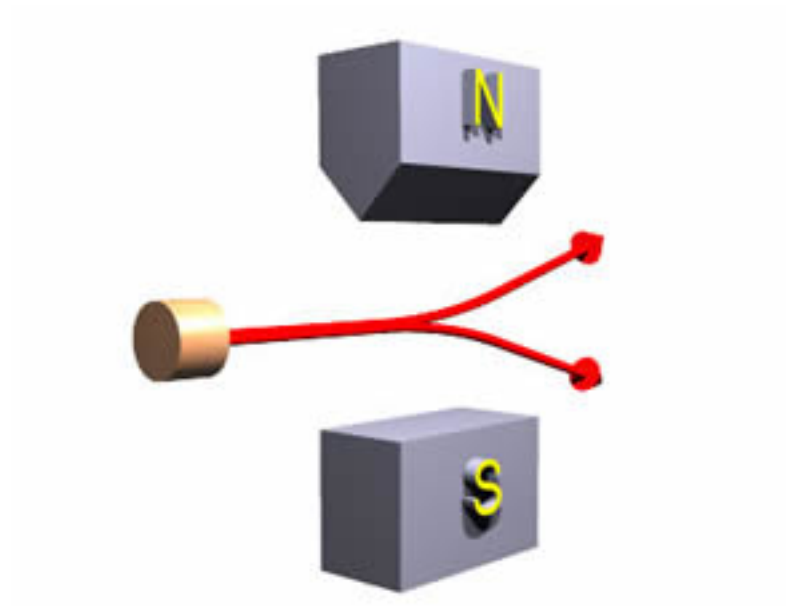
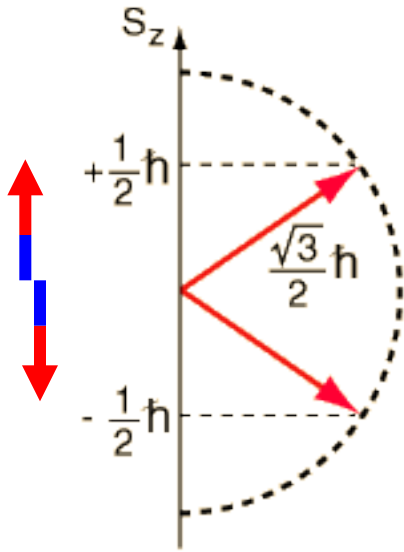
Eksperyment Sterna-Gerlacha (1922 r.)



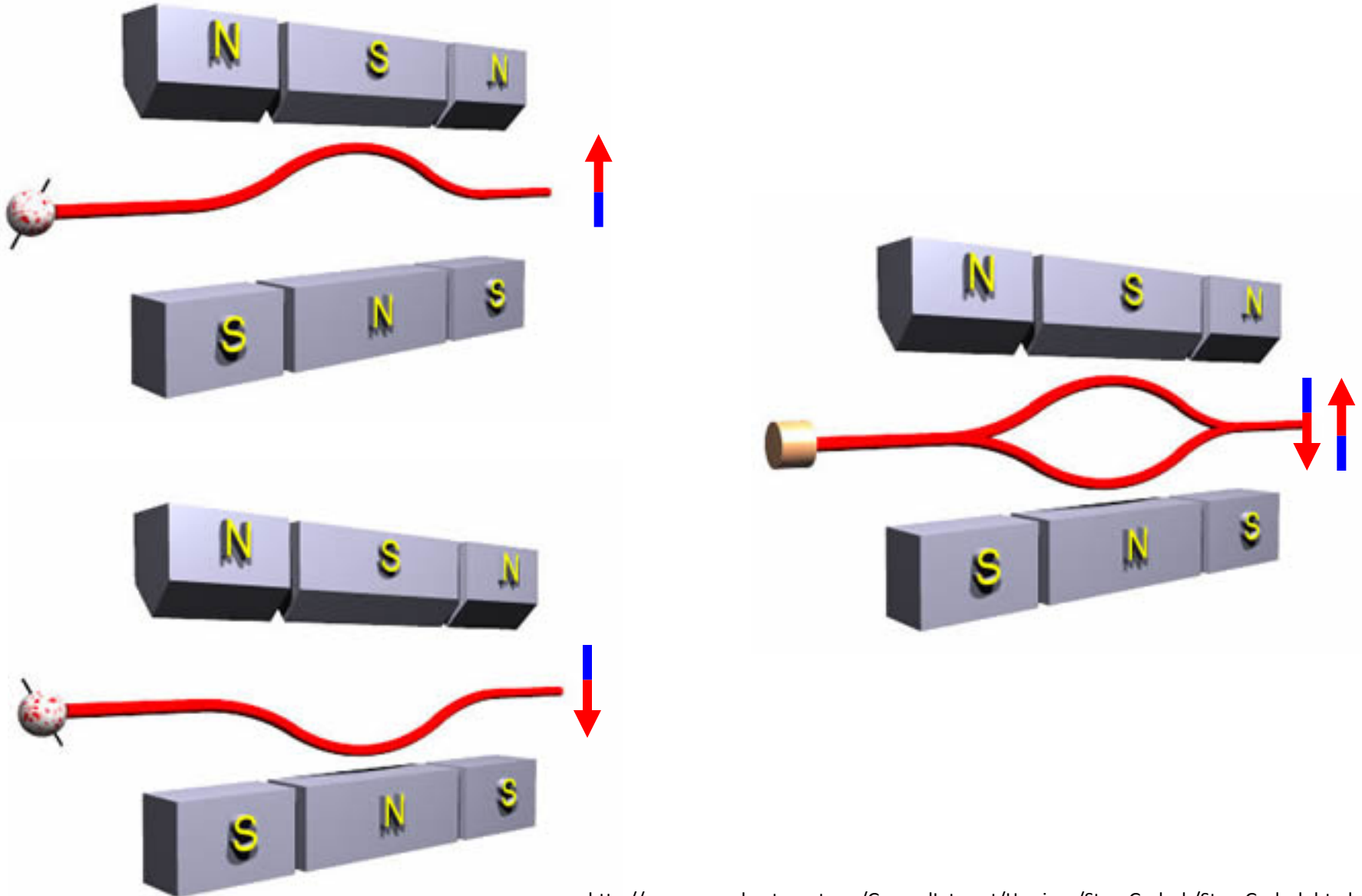
Co to jest spin?



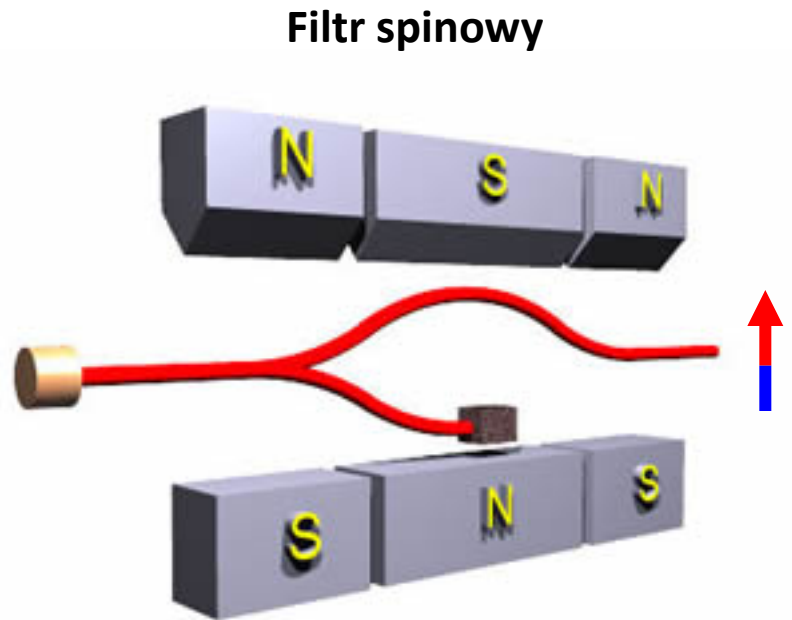
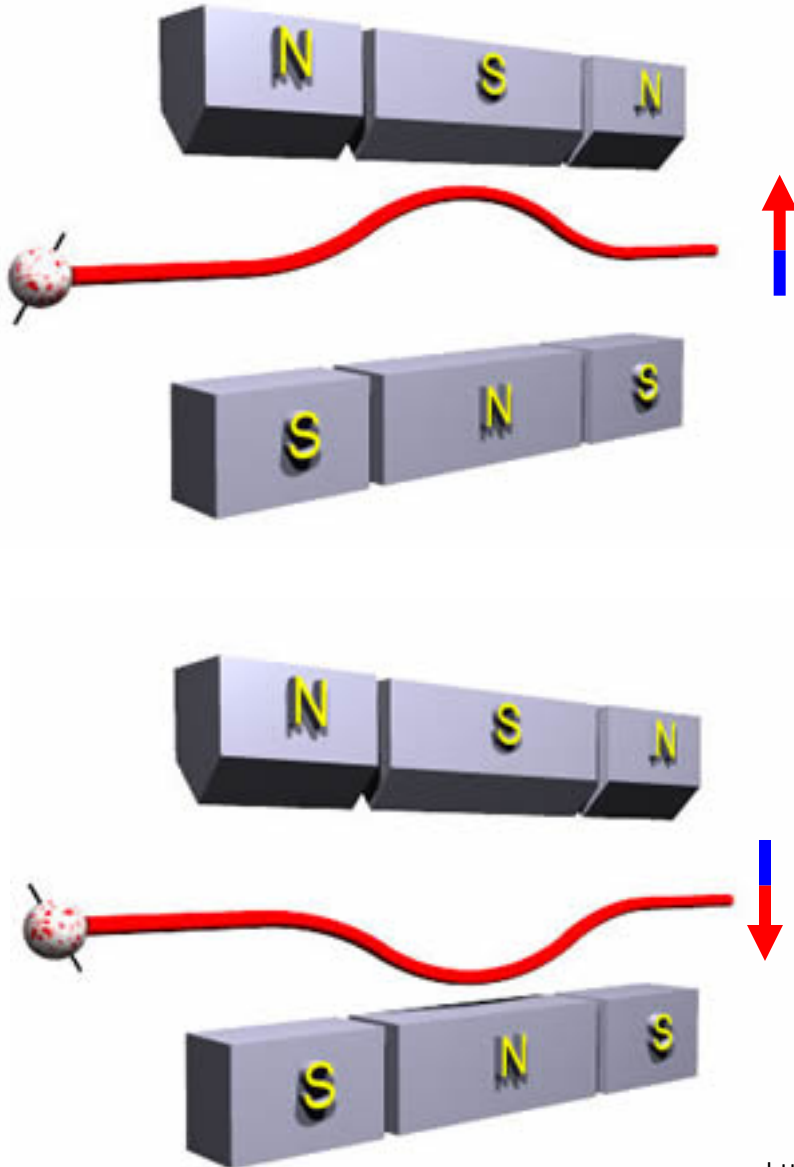
Co to jest spin?



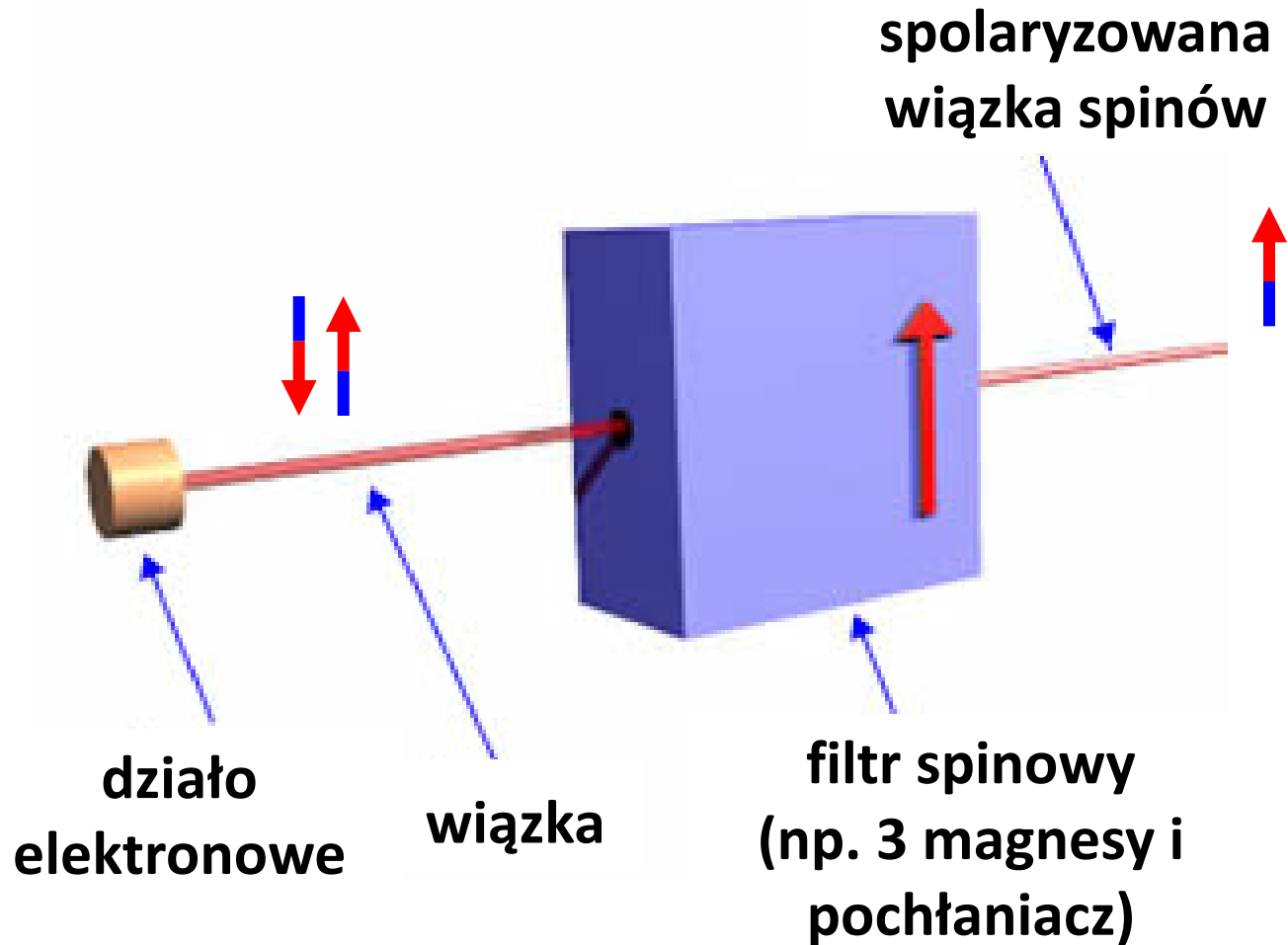
Co to jest spin?



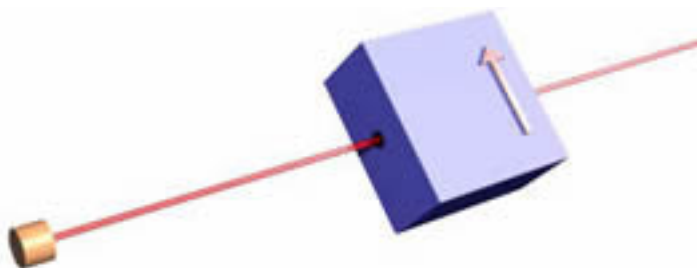
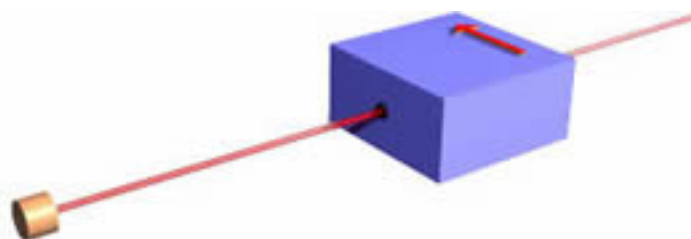
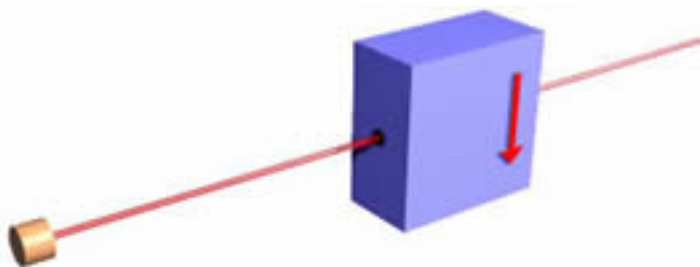
Co to jest spin?



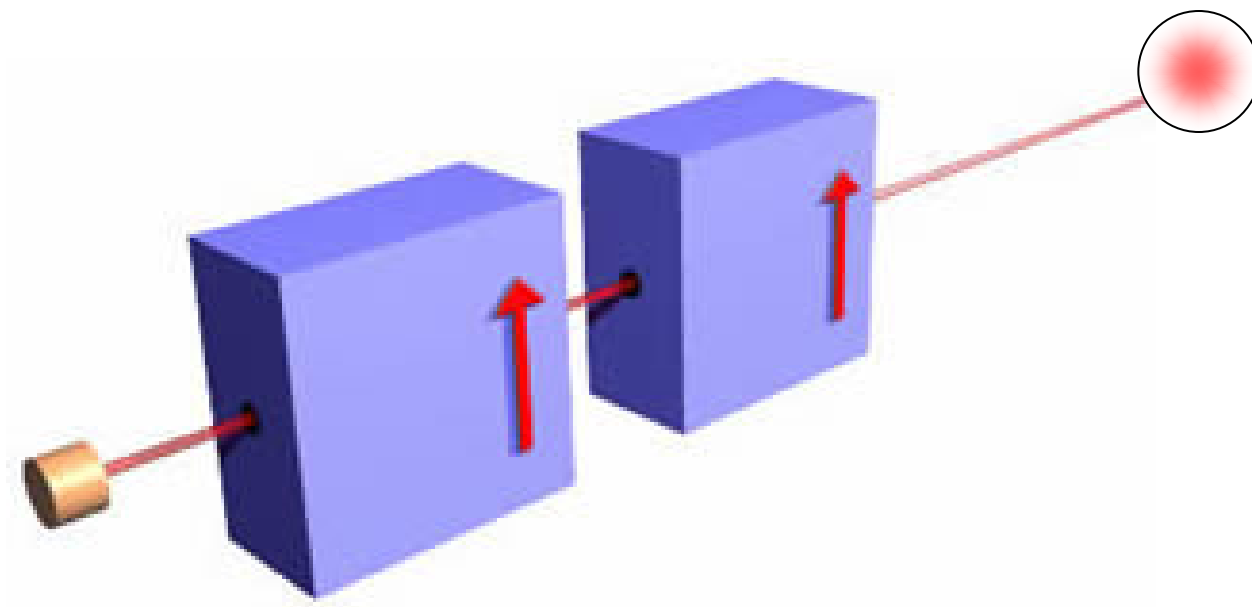
Filtr spinowy



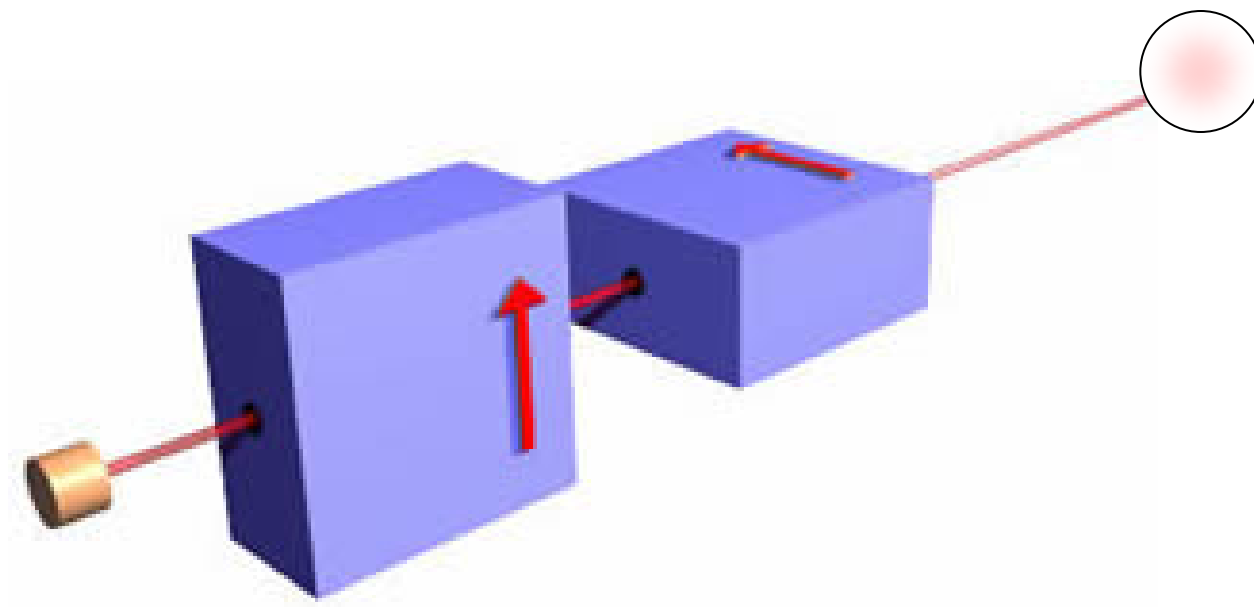
Filtr spinowy



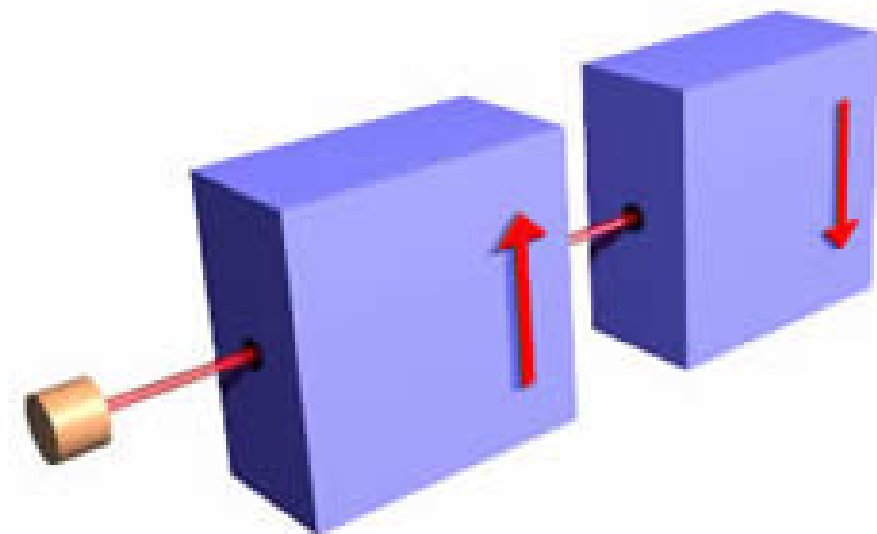
Filtr spinowy



Filtr spinowy



Filtr spinowy



Pole magnetyczne i spin

Spin, oddziaływanie spin-orbita $\psi(\vec{r}, S_z) = \psi(\vec{r})\chi(S_z)$

Operator spinu

$$\hat{\vec{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$$

$$H' = \frac{\mu_B}{\hbar} (\hat{L} + g\hat{S})\vec{B}$$

g-czynnik, zapewnia zgodność z eksperymentem

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

Całkowity moment magnetyczny: $\hat{M} = \hat{M}_L + \hat{M}_S = \underset{=1}{-g_L \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{L}} - \underset{=2}{g_S \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{S}}$

$$\hat{M} \nparallel \hat{J}$$

magnetyczna anomalia spinu

Pole magnetyczne i spin

Spin, oddziaływanie spin-orbita

$$H_{SO} = \lambda \hat{L}\hat{S}$$

baza: $|n, l, s, m_l, m_s\rangle$

dla stanów s $\hat{L} = 0 \Rightarrow \hat{L}\hat{S} = 0$

dla stanów p $\hat{L} \neq 0 \Rightarrow \hat{L}\hat{S} \neq 0$

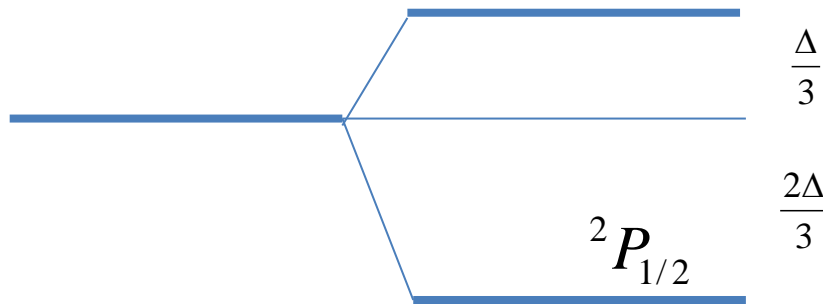
g-czynnik, zapewnia zgodność z eksperymentem

Całkowity moment pędu: $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ baza: $|j, m_j\rangle$

$$\lambda = \frac{1}{24} R_\infty \alpha$$

$$Ry = hcR_\infty$$

$$\hat{L} = 1, \hat{S} = \frac{1}{2}$$



baza: $|n, l, s, j, m_j\rangle$

w skrócie: $|j, m_j\rangle$

Pole magnetyczne i spin

Termy elektronowe

$$2s+1 L_j$$

Sposób opisu układu **wielu elektronów**

Funkcja falowa MUSI być antysymetryczna (ze względu na przestawienia cząsteczek)

$$\psi(\vec{r}, S_z) = \psi(\vec{r})\chi(S_z)$$

część orbitalna

część spinowa

$$\hat{L} = 1, \hat{S} = \frac{1}{2}$$

$${}^2P_{3/2}$$

$$\frac{\Delta}{3}$$

$${}^2P_{1/2}$$

$$\frac{2\Delta}{3}$$

baza: $|n, l, s, j, m_j\rangle$

w skrócie: $|j, m_j\rangle$

Pole magnetyczne i spin

Termy elektronowe

$$2s+1 L_j$$

Sposób opisu układu **wielu elektronów**

Funkcja falowa **MUSI** być antysymetryczna (ze względu na przestawienia cząsteczek)

$$\psi(\vec{r}, S_z) = \psi(\vec{r})\chi(S_z)$$

część orbitalna

część spinowa

Uogólnienie:

$$\psi_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, S_1, \dots, S_N) = \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)\chi(S_1, \dots, S_N)$$

Antysymetryczna funkcja falowa
+ zasada Pauliego
+ oddziaływanie kulombowski
= ODDZIAŁYWANIA WYMIENNE

Pole magnetyczne i spin

Termy elektronowe

$$2s+1 L_j$$

Sposób opisu układu **wielu elektronów**

Funkcja falowa **MUSI** być antysymetryczna (ze względu na przestawienia cząsteczek)

$$\psi(\vec{r}, S_z) = \psi(\vec{r})\chi(S_z)$$

część orbitalna

część spinowa

Uogólnienie:

$$\psi_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, S_1, \dots, S_N) = \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)\chi(S_1, \dots, S_N)$$

Reguły Hunda (wkrótce!)

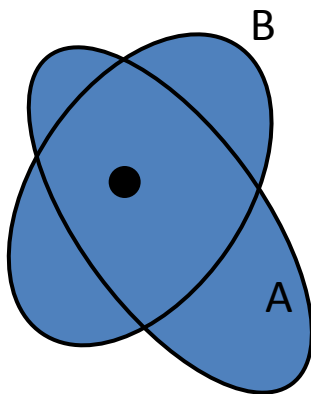
Antysymetryczna funkcja falowa
+ zasada Pauliego
+ oddziaływanie kulombowski
= ODDZIAŁYWANIA WYMIENNE

Rodzaje oddziaływań wymiennych

Oddziaływanie wymienne = Oddziaływanie kulombowskie + Zasada Pauliego

$$\Psi = \Psi_{\text{orbitalna}} \times \Psi_{\text{spinowa}} \quad \underline{\text{Antysymetryczna!}}$$

Przykład:



Dwa elektrony zlokalizowane na jednym centrum

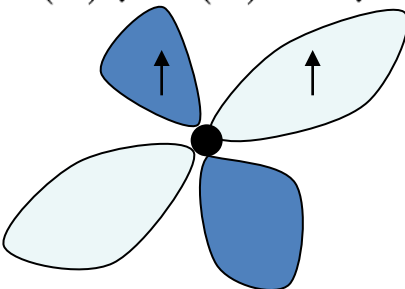
$$\mathcal{H}(1, 2) = H_0(1) + H_0(2) + \frac{e^2}{r_{12}}$$

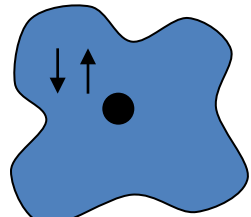
Rodzaje oddziaływań wymiennych

Oddziaływanie wymienne = Oddziaływanie kulombowskie + Zasada Pauliego

$$\Psi = \Psi_{\text{orbitalna}} \times \Psi_{\text{spinowa}} \quad \underline{\text{Antysymetryczna!}}$$

Reguły Hunda, $E_T < E_S$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_A(1)\varphi_B(2) - \varphi_A(2)\varphi_B(1)] \times \left[\begin{array}{c} \chi_{\uparrow}(1)\chi_{\uparrow}(2) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_{\uparrow}(1)\chi_{\downarrow}(2) + \chi_{\downarrow}(1)\chi_{\uparrow}(2)] \\ \chi_{\downarrow}(1)\chi_{\downarrow}(2) \end{array} \right]$$


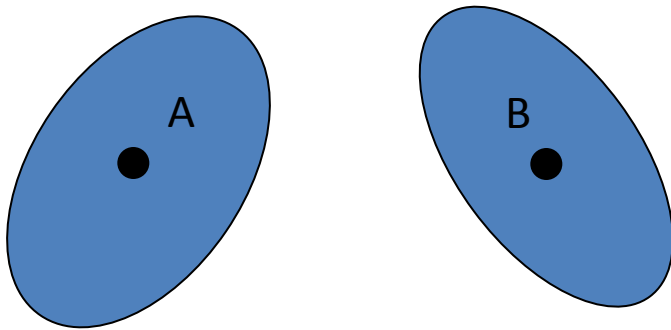
$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_A(1)\varphi_B(2) + \varphi_A(2)\varphi_B(1)] \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_{\uparrow}(1)\chi_{\downarrow}(2) - \chi_{\downarrow}(1)\chi_{\uparrow}(2)]$$


Rodzaje oddziaływań wymiennych

Oddziaływanie wymienne = Oddziaływanie kulombowskie + Zasada Pauliego

$$\Psi = \Psi_{\text{orbitalna}} \times \Psi_{\text{spinowa}} \quad \underline{\text{Antysymetryczna!}}$$

Przykład:



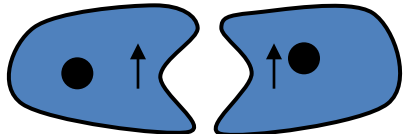
Dwa elektrony na dwóch różnych centrach

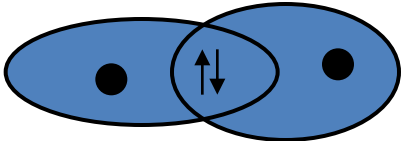
$$\mathcal{H}(1, 2) = H_0^A(1) + H_0^B(2) + \frac{e^2}{r_{12}}$$

Rodzaje oddziaływań wymiennych

Oddziaływanie wymienne = Oddziaływanie kulombowskie + Zasada Pauliego

$$\Psi = \Psi_{\text{orbitalna}} \times \Psi_{\text{spinowa}} \quad \underline{\text{Antysymetryczna!}}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_A(1)\varphi_B(2) - \varphi_A(2)\varphi_B(1)] \times \begin{bmatrix} \chi_{\uparrow}(1)\chi_{\uparrow}(2) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_{\uparrow}(1)\chi_{\downarrow}(2) + \chi_{\downarrow}(1)\chi_{\uparrow}(2)] \\ \chi_{\downarrow}(1)\chi_{\downarrow}(2) \end{bmatrix}$$


$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_A(1)\varphi_B(2) + \varphi_A(2)\varphi_B(1)] \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_{\uparrow}(1)\chi_{\downarrow}(2) - \chi_{\downarrow}(1)\chi_{\uparrow}(2)]$$


Wiązania chemiczne, $E_S < E_T$