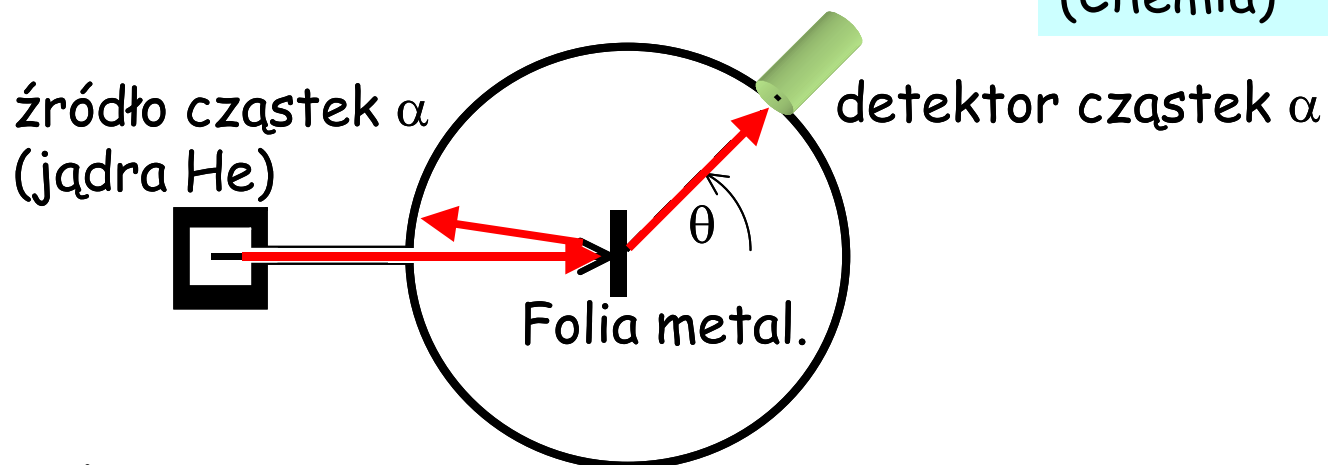
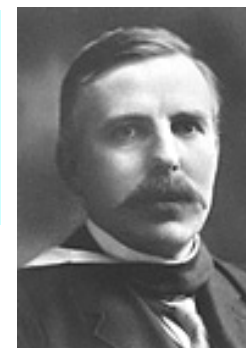


ATOM WODORU

dośw. Ernsta Rutherforda (~1910)

1871-1937
Nobel 1908
(Chemia)



- rozproszenie:
cząstka naładowana \rightarrow odpychające oddziaływanie kulombowskie
- silne wsteczne rozprosz. \rightarrow silne oddz. \rightarrow silne pola \rightarrow ładunek \sim punktowy
- brak odrzutu atomów folii \rightarrow ładunki rozpraszające w ciężkich „obiektych”



\sim cała materia folii skupiona w ciężkim jądrze
atomy = ciężkie jądra naładowane dodatnio o b. małych rozmiarach
($\sim 10^{-14}$ m \ll rozmiar atomu $\sim 10^{-10}$ m)

E. Rutheford (1911 r.) rozpraszanie cząstek α na folii złota:

- dodatnio naładowane jądr rzędu $\approx 10^{-14}$ m,
- rozmiary atomu – rzędu 10^{-10} m
- masa protonu = $1836 m_e$



Postulaty Bohra

Niels Bohr (1885–1967)

Nobel 1922

- I. ***Elektrony poruszają się w atomach nie promieniując energii, po takich orbitach kołowych, że moment pędu elektronu jest równy całkowitej wartości stałej \hbar***

$$mvr = n\hbar \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (12.1)$$

- II. ***Przejścia elektronu z orbity o energii E_n na orbitę, gdzie energia wynosi E_m , towarzyszy emisja lub absorpcja fotonu o częstotliwości ν***

$$|E_n - E_m| = h\nu \quad (12.2)$$

Energia kinetyczna

Z przyrównania siły elektrostatycznej z siłą odśrodkową.

$$K = \frac{mv^2}{2} = \frac{1}{2}m\left(\frac{n\hbar}{mr}\right)^2 = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \quad (12.3)$$

Z wyrażenia (12.3) wyliczymy dozwolone orbity

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}n^2 = r_0n^2 \quad (12.4)$$

gdzie

$$r_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 5.29 \times 10^{-11} \text{ m}$$

jest promieniem Bohra.

Promienie orbit są skwantowane i wynoszą: r_0 , $4r_0$, $9r_0, \dots$, itd.

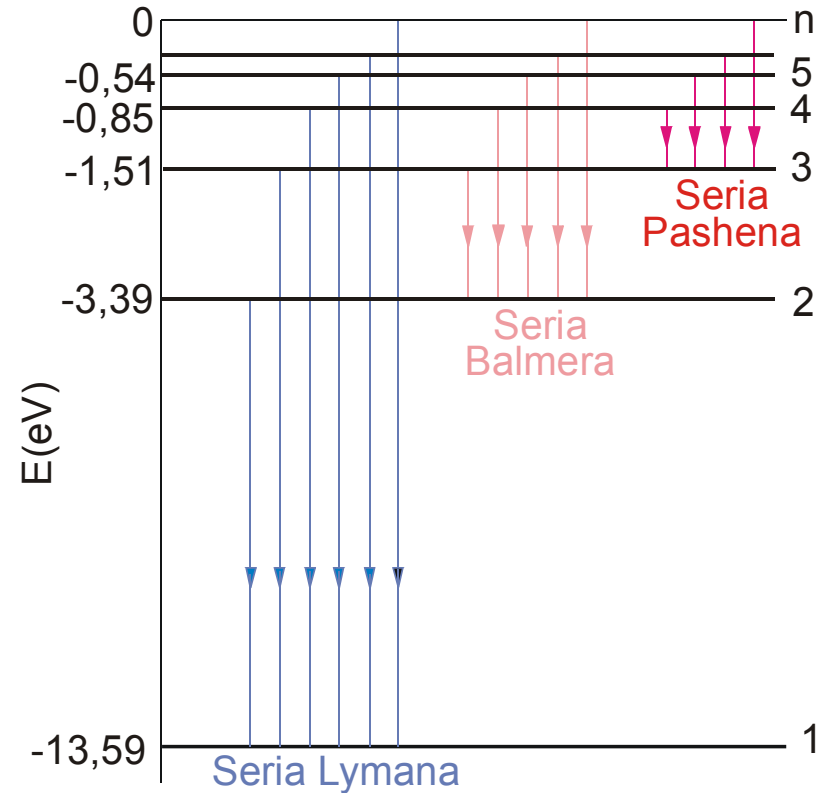
Dopuszczalne **wartości energii wynoszą**

$$E = K + U = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

stąd

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -13,59 \frac{1}{n^2} \text{ eV} \quad (12.5)$$

Gdy n rośnie, poziomy leżą coraz bliżej siebie.



Rys. 12.1. Schemat poziomów energetycznych atomu wodoru

Energia jonizacji atomu wynosi 13,59 eV (przejście ze stanu $n = 1$ do nieskończoności).

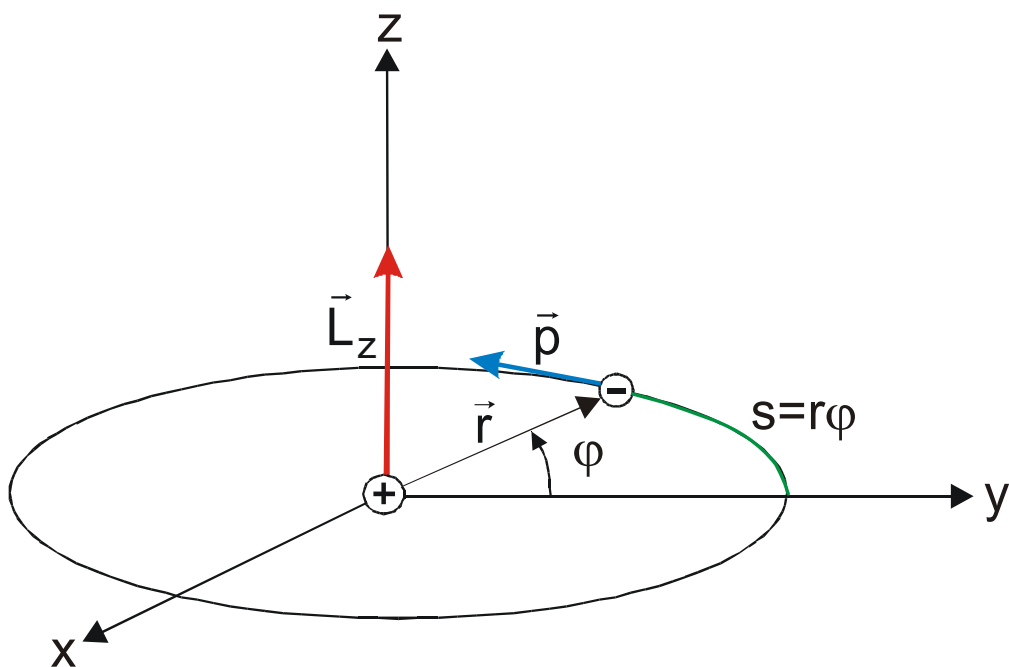
Chociaż teoria Bohra jest przestarzała, jednak jest bardzo prosta. Jej znaczenie historyczne jest duże. Symbole teorii bohrowskiej stosowane są do chwili obecnej.

Współczesny model atomu był zaproponowany w 1926 r., wkrótce po sformułowaniu równania Schrödingera

Orbitalny moment pędu

Wątpliwości odnośnie teorii Bohra:

- dlaczego moment pędu elektronu jest skwantowany?
- dlaczego elektron nie emituje promieniowania i nie spada na jądro?



Rys. 12.2. Paczka falowa poruszająca się po okręgu o promieniu r .

Moment pędu elektronu (paczki falowej)

$$L_z = r \hbar k$$

Ponieważ droga elektronu na orbicie $s = r d\varphi$, to funkcja falowa elektronu

$$\Psi(r) = \Psi_0 e^{iks} = \Psi_0 e^{ikr\varphi}$$

Musi być spełniony warunek

$$\Psi(\varphi) = \Psi(\varphi + 2\pi)$$

lub

$$\Psi_0 e^{ikr\varphi} = \Psi_0 e^{ikr(\varphi + 2\pi)}$$

Równanie to będzie spełnione jeżeli

$$e^{ikr2\pi} = 1 \tag{12.6}$$

Ponieważ

$$\exp(2\pi ikr) = \cos(2\pi kr) + i \sin(2\pi kr),$$

z równania (12.6) wynika, że

$$kr = m_l \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Stąd

$$\hbar kr = m_l \hbar$$

czyli

$$L_z = m_l \hbar \quad (12.7)$$

Wykazaliśmy, że

orbitalny moment pędu względem osi z (lub innego ustalonego kierunku) jest skwantowany i może przyjmować wartości $0, \pm\hbar, \pm 2\hbar, \pm 3\hbar, \dots$ itd.

Ścisły dowód tego twierdzenia wychodzi poza ramy wykładu.

Składowa momentu pędu nie może być większa od całkowitego momentu pędu.

Przy ustalonej wartości całkowitego momentu pędu istnieje pewna maksymalna wartość m_l . Oznaczmy ją przez l . Między l i m_l zachodzi warunek

$$|m_l| \leq l$$

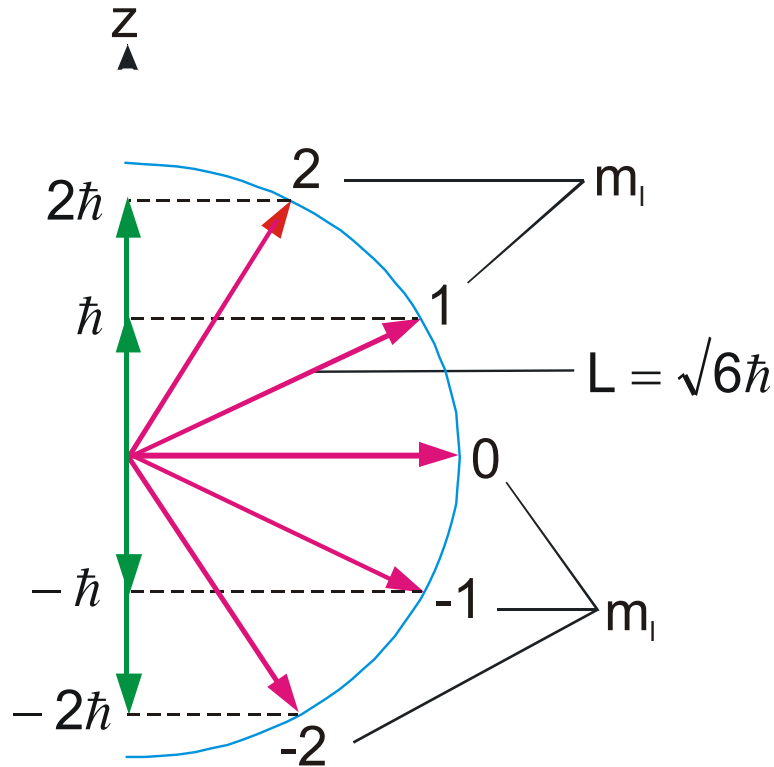
Z powyższego wynika, że liczba m_l może przybierać $2l+1$ wartości:

$$-l, -l+1, \dots, 0, 1, \dots, l-1, l.$$

Orbitalny moment pędu L

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar \quad (12.8)$$

ma różne wartości L_z , gdzie $l = 0, 1, 2, \dots$ itd.



Rys. 12.3. Przestrzenne kwantowanie orbitalnego momentu pędu. W przypadku przedstawionym na rysunku $l = 2$ i $L = \sqrt{6}\hbar$. Rzuty wektora L na wyróżniony kierunek wynoszą: $2\hbar, \hbar, 0, -\hbar, -2\hbar$.

Orbitalny moment pędu i jego rzut na ustalony kierunek są skwantowane.

Ilość możliwych ustaleń wektora L wynosi $2l + 1$, przy czym kąty między L_z i L spełniają warunek

$$\cos \theta = \frac{L_z}{L} = \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}} \quad (12.9)$$

Wektor orbitalnego momentu pędu jest skwantowany w przestrzeni.

Wyróżniony kierunek – kierunek \vec{B} (zewnątrznego lub własnego, wytworzonego przez atom). Przyjmiemy dalej, że ten wyróżniony kierunek pokrywa się z osią z .

- liczba l – orbitalna (azymutalna) liczba kwantowa – określa wartość orbitalnego momentu pędu,
- liczba m_l – magnetyczna liczba kwantowa

Funkcja falowa związana z magnetyczną liczbą falową ma postać

$$\Psi = \Psi_0 e^{im_l \varphi}$$

Stałą Ψ_0 wyznaczymy z warunku normalizacji

$$\int_0^{2\pi} \Psi \Psi^* d\varphi = |\Psi_0|^2 \int_0^{2\pi} e^{im_l \varphi} e^{-im_l \varphi} d\varphi = |\Psi_0|^2 2\pi$$

Zatem $\Psi_0 = (\sqrt{2\pi})^{-1}$. Ostatecznie więc

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l \varphi} \tag{12.10}$$

Równanie Schrödingera dla atomu wodoru



Erwin Schrödinger

(1887–1961)

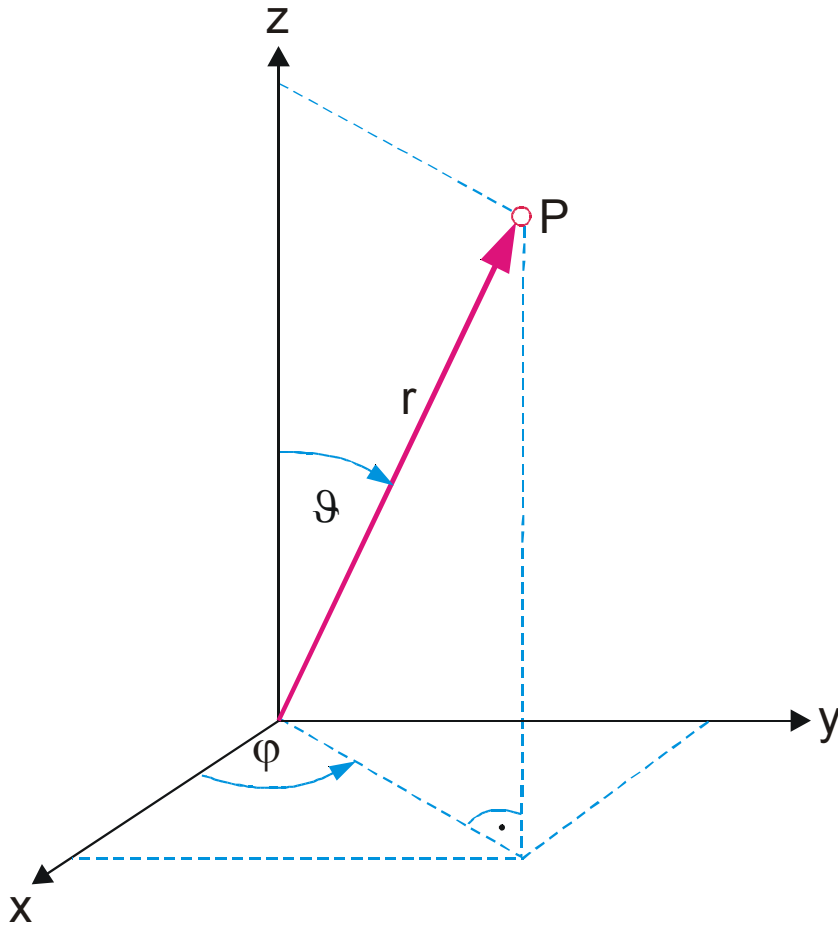
Nobel 1933

Energia potencjalna oddziaływania elektron-jądro

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

Układ sferyczny

Położenie określone jest przez promień wodzący r , kąt biegunowy ϑ i kąt azymutalny φ .



$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \vartheta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \vartheta$$

Jądro znajduje się w początku układu współrzędnych i jest nieruchome (jego masa jest 1836 razy większa od masy elektronu).

Rys. 12.4. Kartezjańskie (x,y,z) i sferyczne (r, ϑ, φ) współrzędne punktu P .

Równanie Schrödingera we współrzędnych kartezyjskich

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \Psi \quad (12.11)$$

W układzie sferycznym

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \Psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \Psi \quad (12.12)$$

Równanie Schrödingera dla atomu wodoru

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \Psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} \right] = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi \quad (12.13)$$

W ogólnym przypadku funkcja falowa $\Psi(r, \vartheta, \varphi)$.

Istnieją pewne sytuacje fizyczne, że Ψ jest tylko funkcją r :

- mamy stan s ,
- żaden kierunek w przestrzeni nie jest wyróżniony ($\vec{L} = 0$),

Dla stanu s równanie Schrödingera

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\Psi}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi = 0 \quad (12.14)$$

Funkcja Ψ musi spełniać następujące warunki:

- $r \rightarrow \infty, \Psi \rightarrow 0$,
- p musi osiągnąć max. w pewnej odległości od jądra i jednocześnie $p = 0$ dla $r = 0$

Warunki te spełnia

$$\Psi(r) = \Psi_0 e^{-r/r_0} \quad (12.15)$$

gdzie $r_0 = \text{const.}$

Prawdopodobieństwo radialne znalezienia elektronu w elemencie objętości $dV = 4\pi r^2 dr$:

$$p = \Psi^2(r)4\pi r^2 dr = 4\pi r^2 e^{-2r/r_0} \Psi_0^2 dr$$

- funkcja ta spełnia warunki: $p(0) = 0$ i $p(\infty) = 0$,
- różniczka funkcji $r^2 \exp(-2r/r_0)$ osiąga max. dla $r = r_0$.

Podstawiając (12.15) do (12.14) i wykonując różniczkowanie

$$\left(\frac{1}{r_0^2} - \frac{2}{r_0 r} + \frac{2m}{\hbar^2} E + \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2} \frac{1}{r} \right) \Psi_0 e^{-r/r_0} = 0$$

Ponieważ $\Psi_0 \exp(-r/r_0) \neq 0$, więc

$$\frac{1}{r_0^2} - \frac{2}{r_0 r} + \frac{2m}{\hbar^2} E + \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2} \frac{1}{r} = 0$$

Równanie to jest spełnione tylko wówczas gdy:

$$-\frac{2}{r_0} + \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2} = 0$$
$$\frac{1}{r_0^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0$$

Z tych równań

$$r_o = \frac{4\pi\epsilon_o\hbar^2}{me^2} = 5.29 \times 10^{-11} m \quad (12.16)$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2mr_o^2} = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_o\hbar^2} = -13.59 eV \quad (12.17)$$

Przyjęta funkcja jest rozwiązaniem równania Schrödingera, jeżeli r_o i E są określone (12.16) i (12.17).

- takimi wzorami wyrażają się promień orbity i najniższy poziom energetyczny elektronu w wg modelu Bohra,
- rozwiązując równanie Schrödingera otrzymaliśmy wzory na r i E bez żadnych założeń,
- r_o będziemy interpretować jako odległość od jądra, przy której prawdopodobieństwo znalezienia elektronu osiągnie wartość maksymalną,
- postulat (12.1) różni się od powyższych wniosków z dwu powodów: przyjęcie klasycznej orbity traci sens, moment pędu równy jest nie $n\hbar$ lecz $l\hbar$ (jak się dalej przekonamy $l < n$)

Fakt, że teoria Bohra prawidłowo opisuje widmo poziomów energetycznych atomu wodoru, jest szczęśliwym zbiegiem okoliczności.

Postępując w sposób analogiczny można wykazać, że funkcja

$$\Psi = \Psi_0 \left(1 - \frac{r}{2r_0} \right) e^{-r/r_0}$$

jest rozwiązaniem równania Schrödingera, jeżeli

$$E = -\frac{1}{4} \frac{me^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} \quad (12.18)$$

Poziomy energetyczne elektronu w atomie wodoru

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

gdzie $n = 1, 2, 3, \dots$ (całkowita liczba dodatnia) zwana główną liczbą kwantową.

Dokładna analiza funkcji falowych wykazuje, że część radialna funkcji zależy od n i l , a część kątowna – od l i m_l . Tak więc możemy zapisać, że

$$\Psi_{nlm_l} = R_{nl}(r)\Theta_{lm_l}(\vartheta)\Phi_{m_l}(\varphi)$$

Podstawiając taką funkcję do równania Schrödingera otrzymujemy:

- **trzy równania zwane odpowiednio radialne, biegunowe, azymutalne,**
- **każde z nich opisuje zachowanie się funkcji falowej w zależności od $r, \vartheta, \varphi,$**
- **z równań tych wyznacza się możliwe wartości energii, momentu pędu i jednej jego składowej; wielkości te są określone przez podanie trzech liczb kwantowych $n, l, m_l.$**

Okazuje się przy tym, że dla danego n , orbitalna liczba kwantowa może przyjmować wartości:

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1.$$

Trzy liczby kwantowe są związane ze sobą w następujący sposób:

główna liczba kwantowa $n = 1, 2, 3, \dots$

orbitalna liczba kwantowa $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$

magnetyczna liczba kwantowa $m_l = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$

Przy określonej n (określonej wartości energii), liczba możliwych wartości l i m_l , czyli liczba niezależnych rozwiązań równania Schrödingera będzie wynosiła

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2 \tag{12.26}$$

Jeżeli elektron jest w takim stanie, że jednej wartości energii odpowiada kilka niezależnych rozwiązań równania Schrödingera, to mówimy, że stan taki jest n^2 -krotnie zwyrodniały.

Dla zadanych wartości liczb kwantowych n, l, m_l ; funkcja falowa ma określoną postać którą oznaczamy symbolem Ψ_{n,l,m_l} i nazywamy orbitalem atomowym.

Każdy orbital oznaczony jest tym samym symbolem co odpowiadający mu stan elektronowy. Istnieją ogólnie przyjęte symbole liczb kwantowych n i l . Tworzy się je z cyfry oznaczającej główną liczbę kwantową i litery przyporządkowanej liczbie l w następujący sposób

$$\begin{array}{cccccc} l = & 0, & 1, & 2, & 3, & 4 \\ & s, & p, & d, & f, & g \end{array}$$

Dla stanu podstawowego atomu wodoru $n = 1$, a zatem $l = m_l = 0$. Stan ten oznaczamy symbolem $1s$.

Dla najniższego stanu wzbudzonego $n = 2$, a zatem $l = 0$ lub $l = 1$:

- dla $l = 0$ (stan $2s$), $m_l = 0$,
- dla $l = 1$ (stany $2p$), $m_l = -1, 0$ lub 1 – celem rozróżnienia stanów $2p$ o różnej wartości liczby m_l stosuje się niekiedy dodatkowy indeks podający wartości tej liczby.

Tabela 12.1. Funkcje falowe atomu wodoru

Stan	n	l	m_l	Funkcje falowe
1s	1	0	0	$\Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{r_0} \right)^{3/2} e^{-r/r_0}$
2s	2	0	0	$\Psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{r_0} \right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{r_0} \right) e^{-r/2r_0}$
2p ₀	2	1	0	$\Psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{r_0} \right)^{3/2} \frac{r}{r_0} e^{-r/2r_0} \cos \vartheta$
2p ₁	2	1	1	$\Psi_{211} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{r_0} \right)^{3/2} \frac{r}{r_0} e^{-r/2r_0} \sin \vartheta e^{i\varphi}$
2p ₋₁	2	1	-1	$\Psi_{21-1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{r_0} \right)^{3/2} \frac{r}{r_0} e^{-r/2r_0} \sin \vartheta e^{-i\varphi}$

Warunek unormowania funkcji

Przykład – rozpatrzmy funkcję $\Psi_{100} = Ae^{-r/r_0}$. Musi być spełniony warunek

$$\int |\Psi_{100}|^2 dV = \int A^2 e^{-2r/r_0} dV = 1$$

Ponieważ

$$dV = r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta d\varphi$$

więc

$$A^2 \int_0^{\infty} r^2 e^{-2r/r_0} dr \int_0^{\pi} \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi = 1$$

Uwzględniając, że

$$\int_0^{\infty} r^2 e^{-2r/r_0} dr = \frac{2}{(2/r_0)^3}$$

mamy

$$A^2 \frac{2}{(2/r_0)^3} 4\pi = 1$$

Stąd

$$A = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{r_0} \right)^{3/2}$$

Znając funkcje falowe można obliczyć prawdopodobieństwo znalezienia elektronu w określonym elemencie objętości.

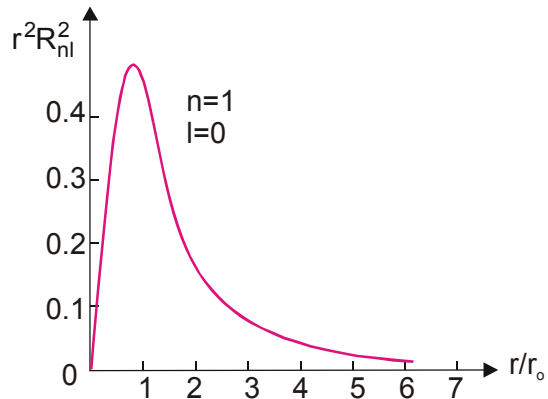
Prawdopodobieństwo radialne (zależne od r) i prawdopodobieństwo kątowe (zależne od ϑ i φ).

Prawdopodobieństwo radialne

$$p(r)dr = R_{nl}^2 r^2 dr$$

Gęstością prawdopodobieństwa

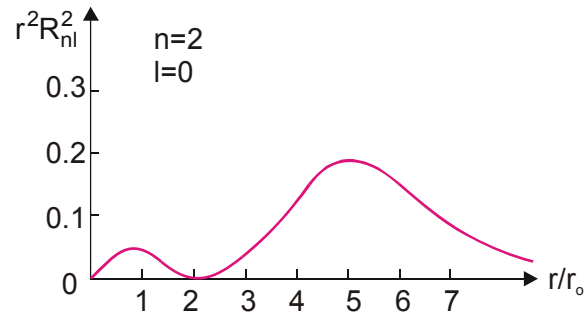
$$p(r) = R_{nl}^2 r^2.$$



W stanie $1s$ – $p(r)$ osiąga maksimum dla $r = r_0$.

W stanie $2s$ – istnieją dwa maksima: dla $r = r_0$ i $r \approx 5r_0$.

W stanie $2p$ – $p(r)$ osiąga maksimum w pobliżu $r = 4r_0$.

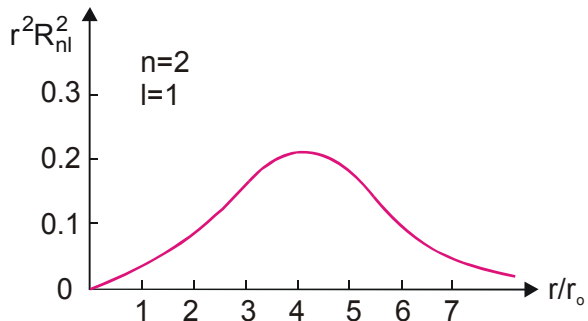


Dla wszystkich stanów zależność $\Psi \propto \exp(im\varphi)$. Zatem gęstość prawdopodobieństwa nie będzie zależała od φ , gdyż

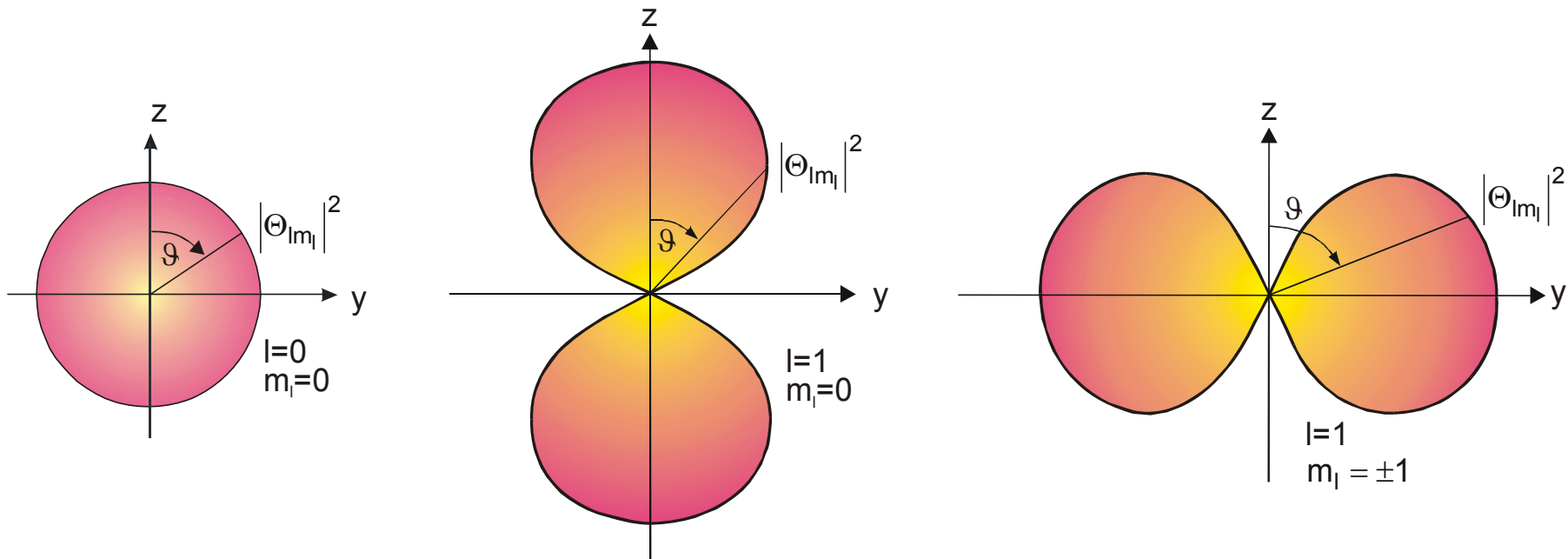
$$\exp(im\varphi)\exp(-im\varphi) = 1$$

Całkowita gęstość prawdopodobieństwa

$$p(r)p(\vartheta).$$



Rys. 12.5. Radialne gęstości prawdopodobieństwa dla atomu wodoru gdy $n = 1$ i 2 .



Rys. 12.6. Wykresy biegunowe kierunkowej zależności gęstości prawdopodobieństwa dla atomu wodoru w przypadku $l = 0$ i $l = 1$.

Miarą prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w danym kierunku jest odległość między początkiem układu współrzędnych i punktem przecięcia prostej poprowadzonej pod danym kątem, z wykresem funkcji $\Theta_{lm_l}^2$.

W stanie s ($l = 0$) $p(r) = \text{const.}$ (chmura elektronowa wykazuje symetrię kulistą)

W stanie $l = 1$ i $m = 0$, $p(\vartheta) \sim \cos^2 \vartheta$

Dla $l = 1$ i $m = \pm 1$, $p(\vartheta) \sim \sin^2 \vartheta$.

W każdym przypadku gęstość prawdopodobieństwa wykazuje symetrię obrotową względem osi z .

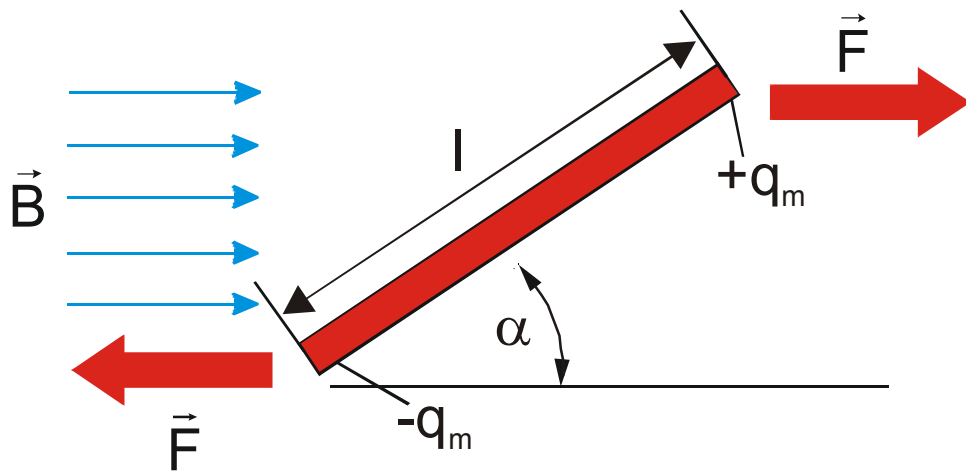
Orbitalny moment magnetyczny

Przypomnienie

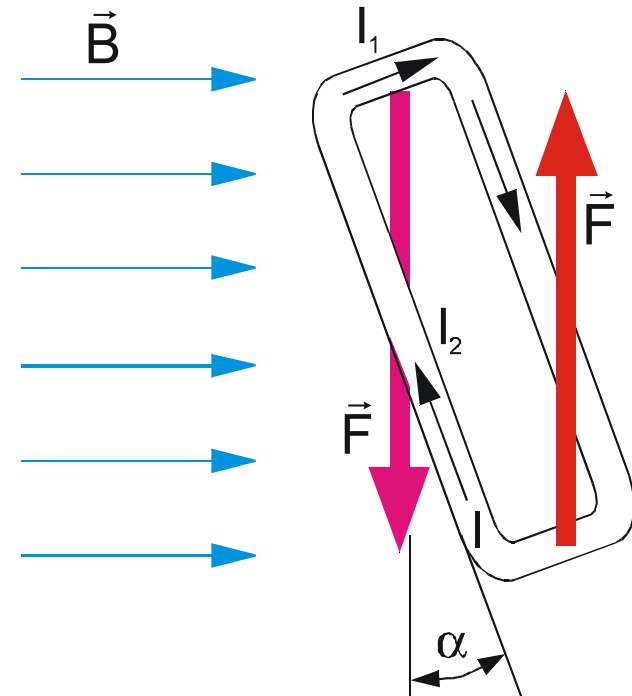
Gdyby istniał ładunek magnetyczny, to w polu magnetycznym działałaby na niego siła

$$\vec{F} = q_m \cdot \vec{B}$$

analogiczna do siły działającej na ładunek elektryczny w polu elektrycznym.



Rys. 6.10. Magnes o długości l położony pod kątem α do linii sił pola magnetycznego \vec{B} .



Rys. 6.11 Prostokątna ramka o powierzchni $I_1 I_2$ w jednorodnym polu magnetycznym.

Moment sił działających na magnes wynosi

$$T = Fl \sin \alpha$$

czyli

$$T = q_m B l \sin \alpha$$

Iloczyn $q_m l = \mu$ określa się jako moment magnetyczny. Wobec tego

$$T = \mu B \sin \alpha$$

a w zapisie wektorowym

$$\vec{T} = \vec{\mu} \times \vec{B}$$

W analogiczny sposób zachowuje się pętla z prądem (rys. 6.11).

Siły magnetyczne przyłożone do dwóch przeciwległych boków o długości l_1 tworzą moment obrotowy

$$T = Fl_2 \sin \alpha$$

Ponieważ $F = Il_1 B$, stąd

$$T = (Il_1 B)(l_2 \sin \alpha) = Il_1 l_2 B \sin \alpha = ISB \sin \alpha$$

Wynika z tego, że **pętla z prądem wytwarza pole magnetyczne identycznie jak magnes**

$$\mu = IS$$

Z ruchem orbitalnym elektronu związany jest moment magnetyczny elektronu.

Moment magnetyczny zamkniętego, płaskiego obwodu z prądem wynosi

$$\vec{\mu} = I \cdot \vec{S}$$

Cząstka o ładunku q poruszająca się po orbicie kołowej z prędkością v , wytwarza prąd o natężeniu

$$I = q \frac{v}{2\pi r}$$

Orbitalny moment magnetyczny

$$\mu_I = \frac{qv}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{qvr}{2}$$

a w zapisie wektorowym

$$\mu_I = \frac{q}{2} \vec{r} \times \vec{v} = \frac{q}{2m} \vec{r} \times \vec{p} = \frac{q}{2m} \vec{L}$$

gdzie $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ jest orbitalnym momentem pędu.

Stosunek μ/L nazywamy stosunkiem giromagnetycznym.

Dla elektronu

$$\mu_l = -\frac{e}{2m}L = -\frac{e}{2m}\sqrt{l(l+1)}\hbar = -\mu_B\sqrt{l(l+1)} \quad (12.28)$$

Znak minus oznacza, że μ_l jest skierowany przeciwnie niż \vec{L} , co spowodowane jest ujemnym ładunkiem elektronu.

μ_B nazywany magnetonem Bohra jest jednostką atomowego momentu magnetycznego

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9.27 \times 10^{-24} \text{ Am}^2 \quad (12.29)$$

Na cząstkę o momencie magnetycznym $\vec{\mu}_l$ w zewnętrznym polu magnetycznym \vec{B} działa moment sił

$$\vec{T} = \vec{\mu}_l \times \vec{B} \quad (12.30)$$

który dąży do ustawienia wektora momentu magnetycznego wzdłuż kierunku pola.

Energia potencjalna momentu w zewnętrznym polu magnetycznym wynosi natomiast

$$U = \vec{\mu}_l \cdot \vec{B} = -\mu_l B \cos \theta \quad (12.31)$$

gdzie θ jest kątem między $\vec{\mu}_l$ i \vec{B} .

- orbitalny moment pędu (\vec{L}) i jego rzut na ustalony kierunek (L_z), są skwantowane,
- kąt między L i L_z jest zawsze różny od zera, więc
- wektor \vec{L} i wektor $\vec{\mu}_l$ nie mogą ustawić się równolegle czy też antyrównolegle do pola \vec{B} .

Składowa orbitalnego momentu magnetycznego w kierunku zewnętrznego pola

$$\mu_{lz} = \mu_l \cos \theta = -\frac{e}{2m} \sqrt{l(l+1)} \cos \theta = -\frac{e\hbar}{2m} m_l \quad (12.32)$$

Widzimy teraz, dlaczego m_l nazywa się magnetyczną liczbą kwantową – określa bowiem rzut momentu magnetycznego na kierunek zewnętrznego pola magnetycznego.

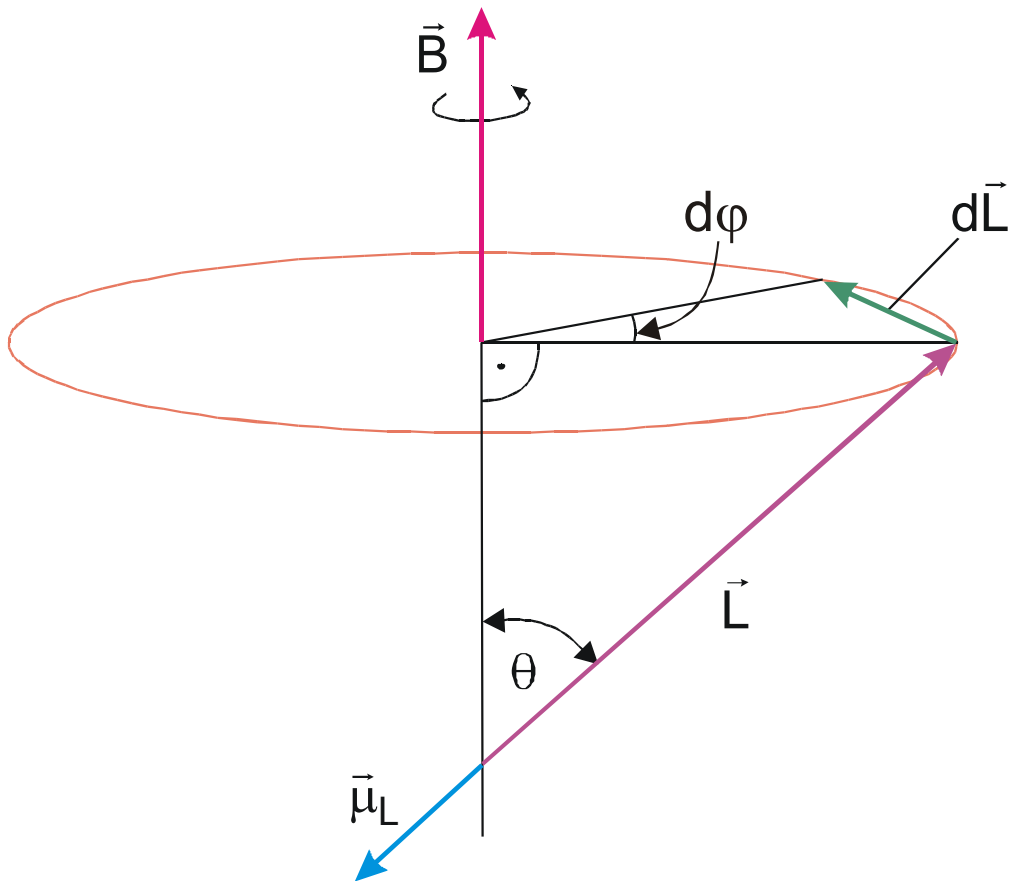
Kąt θ między wektorami $\vec{\mu}_l$ i \vec{B} jest zawsze różny od zera, więc w zewnętrznym polu magnetycznym na moment magnetyczny zawsze będzie działać moment siły

$$\vec{T} = -\left(\frac{e}{2m}\right) \vec{L} \times \vec{B}$$

Moment ten powoduje zmianę momentu pędu $d\vec{L}$ zgodnie z prawem Newtona

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{T}.$$

Zmiana $d\vec{L}$ powoduje precesję \vec{L} o kąt $\omega_L dt$, gdzie $\omega_L dt$ jest prędkością kątową precesji zwanej prędkością Larmora.



Rys. 12.7. Oddziaływanie momentu magnetycznego z zewnętrznym polem magnetycznym.

Z rys. 12.7 widać, że

$$dL = L \sin \theta \omega_L dt$$

czyli

$$\frac{dL}{dt} = L \omega_L \sin \theta = T = \frac{e}{2m} LB \sin \theta$$

Tak więc

$$\omega_L = \frac{eB}{2m} \quad (12.33)$$

i nazywana jest **częstością Larmora**.

Energia potencjalna momentu magnetycznego w polu magnetycznym [wyrażenie (12.31)]

$$U = -\mu_l B \cos \theta = \frac{e\hbar}{2m} B m_l = \mu_B m_l B \quad (12.34)$$

Oznacza to, że pole magnetyczne będzie zmieniało poziomy energetyczne elektronu.

Ponieważ dla ustalonego n i l istnieje $2l+1$ możliwych wartości m_l , więc pierwotny poziom energetyczny zostanie rozszczepiony na $2l+1$ podpoziomów.

Dla elektronu w atomie wodoru w stanie $2p$ ($l = 1$) w polu indukcji $B = 1T$

$$U = \begin{cases} 9,27 \times 10^{-24} \text{ J} & m_l = 1 \\ 0 & m_l = 0 \\ -9,27 \times 10^{-24} \text{ J} & m_l = -1 \end{cases}$$

Rozszczepienie poziomów energetycznych nie jest duże, ale może być z powodzeniem mierzone eksperymentalnie. Pojedyncza linia widmowa ulega rozszczepieniu na trzy blisko siebie położone linie, przy czym odstęp energetyczny między dwoma kolejnymi liniami wynosi $\mu_B B$.

Zjawisko rozszczepienia linii widmowych w zewnętrznym polu magnetycznym nosi nazwę **zjawiska Zeemana**. Zjawisko to potwierdza skwantowanie orbitalnego momentu pędu w atomie.

Spin elektronu

Spinowy moment pędu i spinowy moment magnetyczny

Linie widmowe składają się z blisko siebie położonych linii nawet bez obecności zewnętrznego \vec{B} . Takie rozszczepienie pojedynczej linii widmowej nazywane jest strukturą subtelną linii widmowych. Pewnym przypadkiem struktury subtelnej jest zjawisko Zeemana.

Elektron poza orbitalnym momentem pędu ma **własny moment pędu zwany spinowym lub krótko spinem**:

- jego istnienie jest jego naturalną (wewnętrzną) właściwością,
- jego istnienie zaproponowali w 1925 roku Goudsmit i Uhlenbeck w celu wyjaśnienia struktury subtelnej linii widmowych.

Spinowy moment pędu elektronu

$$L_s = \sqrt{s(s+1)}\hbar \quad (12.35)$$

gdzie s jest spinową liczbą kwantową równą $1/2$.

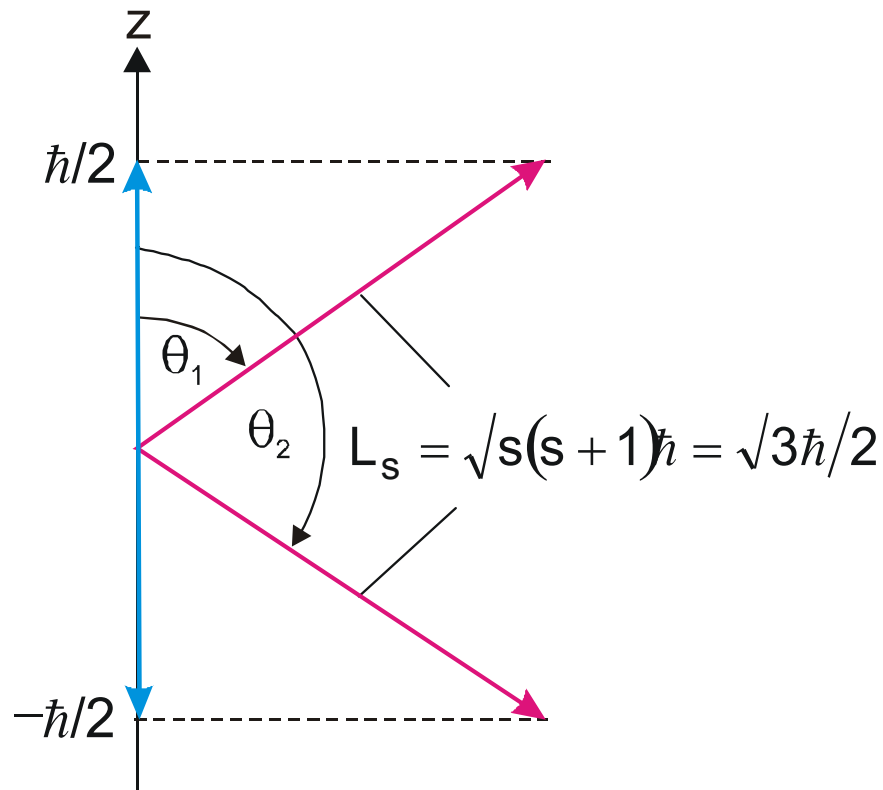
Spin elektronu $L_s = \sqrt{3}\hbar/2$ jest podstawową właściwością elektronu (podobnie jak masa i ładunek).

Rzut spinowego momentu pędu na wyróżniony kierunek jest skwantowany

$$L_{sz} = m_s \hbar \quad (12.36)$$

gdzie m_s przyjmuje dwie wartości, $1/2$ lub $-1/2$; i nosi nazwę magnetycznej spinowej liczby kwantowej.

(rys. 12.8).



Liczba kwantowa:

$m_s = 1/2$ spin skierowany w górę, a

$m_s = -1/2$ spin skierowany w dół

Możliwe kąty między wektorem L_s a wyróżnionym kierunkiem w przestrzeni wynoszą $54,7^\circ$ i $125,3^\circ$.

Stan elektronu w atomie będziemy więc opisywać za pomocą czterech liczb kwantowych: n , l , m_l i m_s .

Rys. 12.8. Spinowy moment pędu elektronu i jego rzut na określony kierunek w przestrzeni.

Liczba niezależnych stanów związanych z główną liczbą kwantową – n^2 .

Po uwzględnieniu spinu całkowita liczba stanów – $2n^2$.

Ze spinowym momentem pędu L_s związany jest **spinowy moment magnetyczny** μ_s

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m} \vec{L}_s = -\frac{e\hbar}{m} \sqrt{s(s+1)} \quad (12.37)$$

Rzut spinowego momentu magnetycznego na wyróżniony kierunek

$$\mu_{sz} = -\frac{e\hbar}{m} \sqrt{s(s+1)} \cos \theta = \pm \frac{e\hbar}{2m} = \pm \mu_B \quad (12.38)$$

może przyjmować dwie, różniące się znakiem wartości, co do modułu równe magnetonowi Bohra.

Anomalią magnetomechaniczna: stosunek giromagnetyczny dla momentu spinowego jest dwukrotnie większy niż dla momentu orbitalnego.

Całkowity moment pędu i całkowity moment magnetyczny

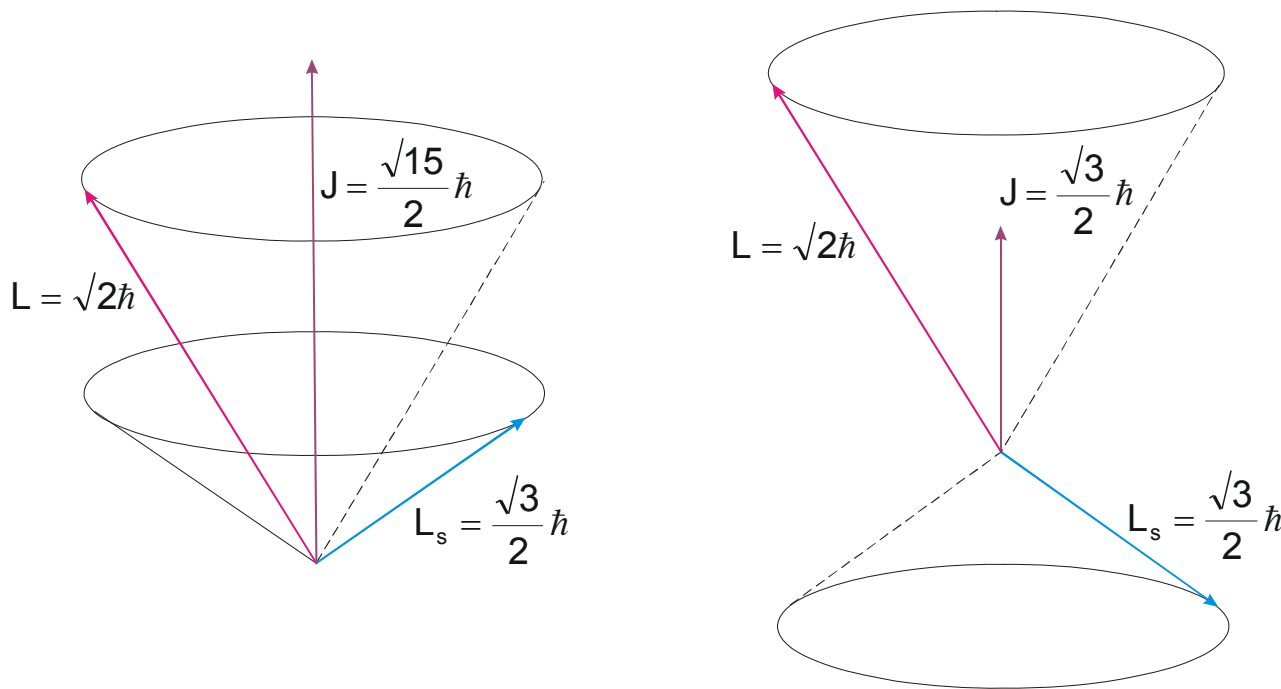
Całkowity moment pędu \vec{J} równy jest sumie wektorów \vec{L} i \vec{L}_s

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{L}_s \quad (12.39)$$

Okazuje się, że całkowity moment pędu, podobnie jak \vec{L} i \vec{L}_s , jest skwantowany i wynosi

$$J = \sqrt{j(j+1)}\hbar \quad (12.40)$$

gdzie j jest liczbą kwantową całkowitego momentu pędu wynoszącą $j = l + s$ lub $j = l - s$.
Ponieważ $s = 1/2$, więc $j = l - 1/2$ lub $j = l + 1/2$.



Ponieważ wektory \vec{L} , \vec{L}_s i \vec{J} są skwantowane, więc istnieją tylko pewne dozwolone orientacje tych wektorów względem siebie.

Rys. 12.9. Możliwe rezultaty dodawania orbitalnego i spinowego momentu pędu elektronu dla $l = 1$ i $s = 1/2$.