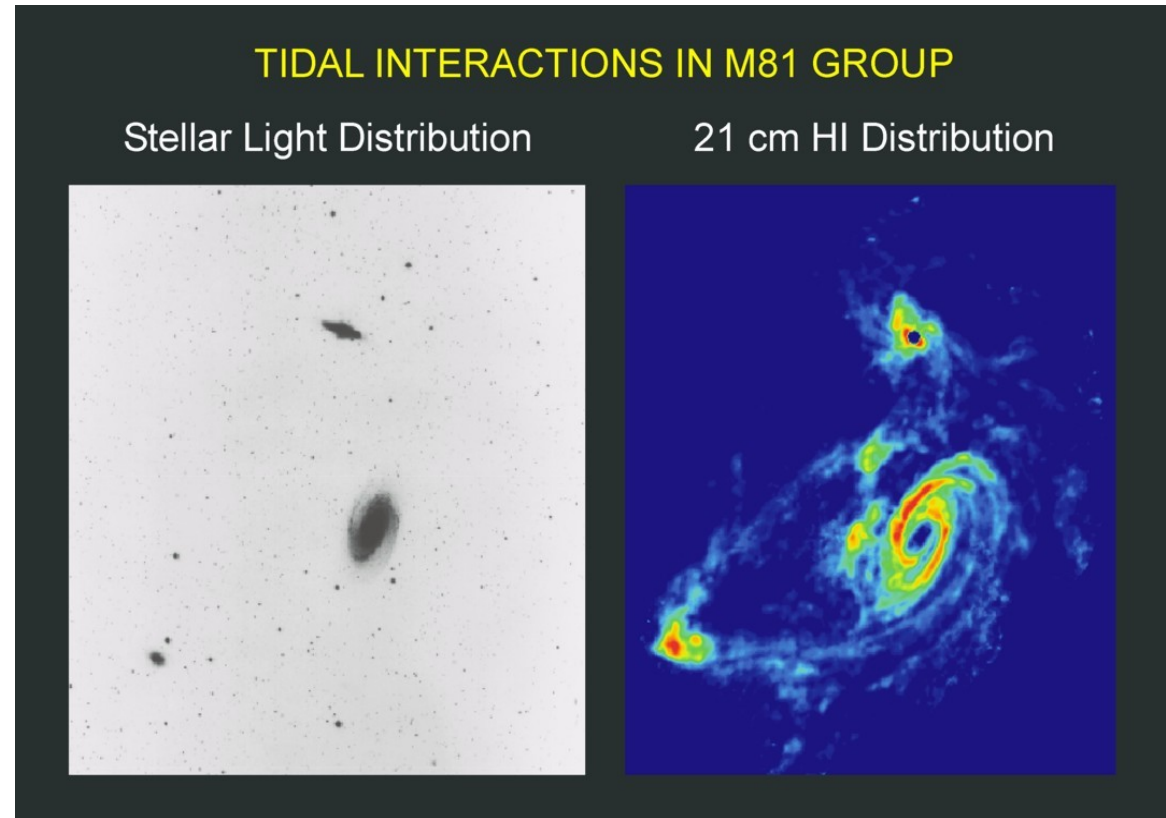
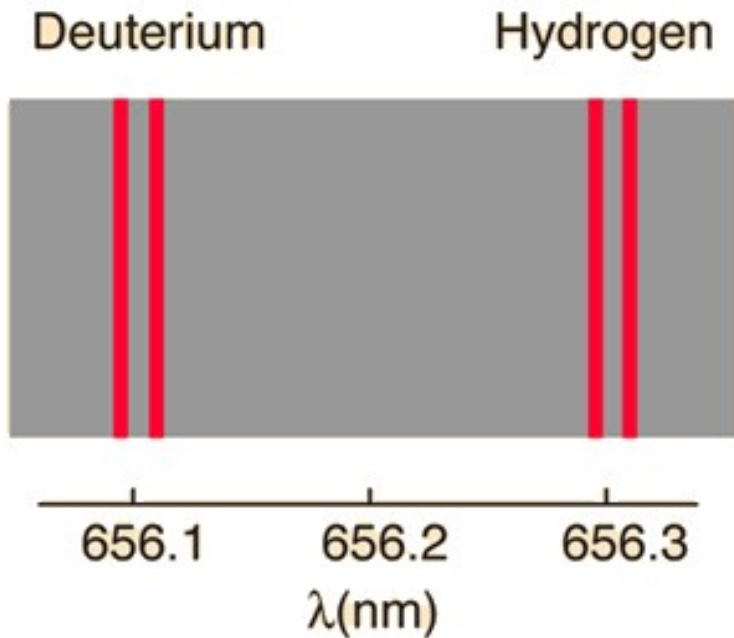
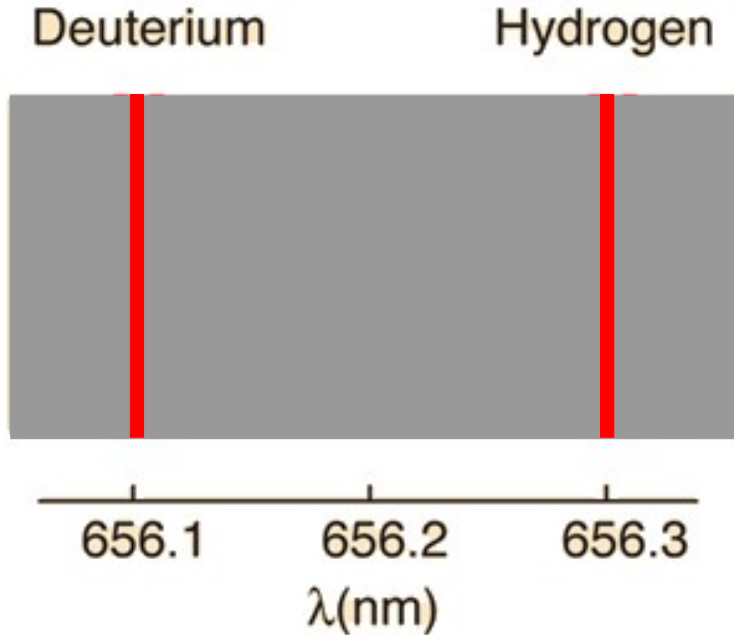


Atomová fyzika a elektronová struktura látek

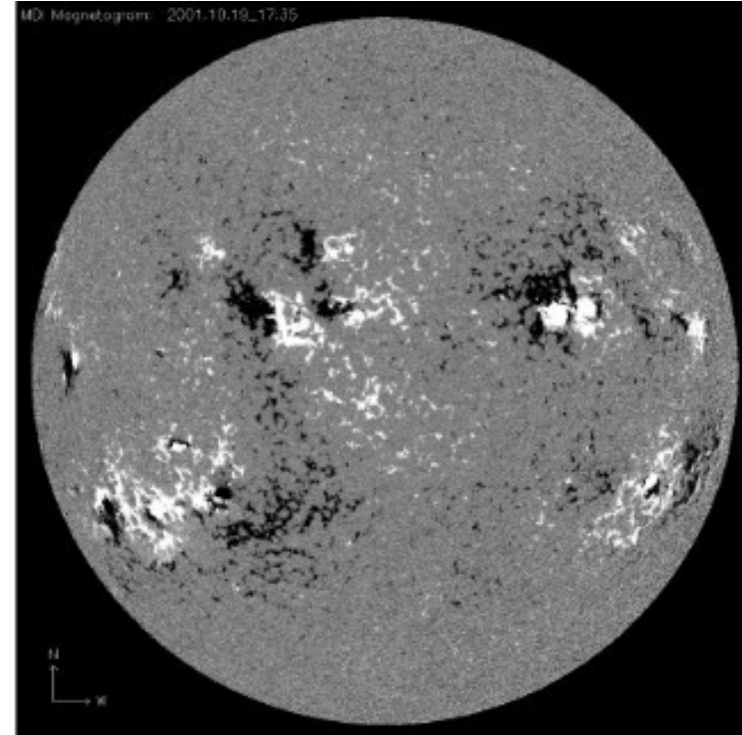
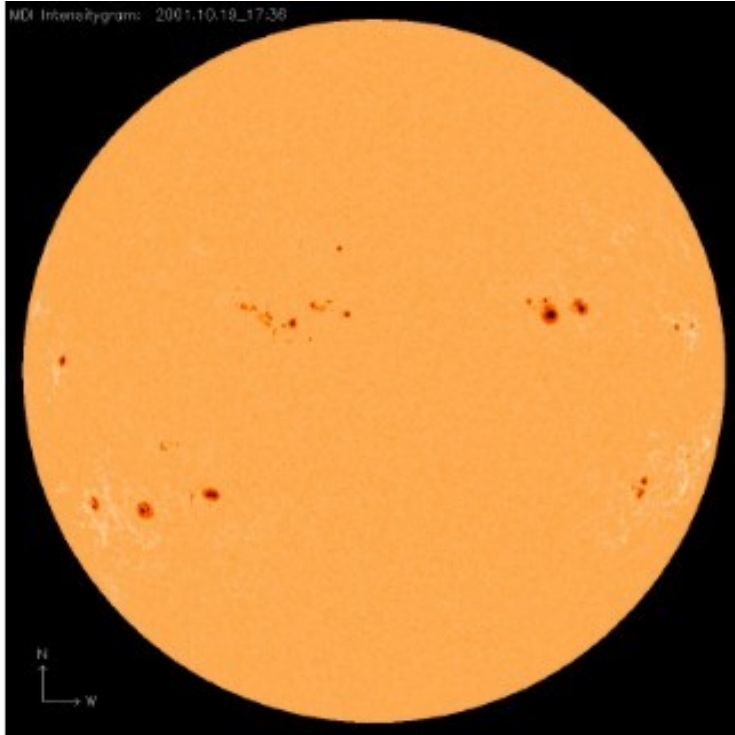


$\lambda=21 \text{ cm}$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Co byste měli po dnešní přednášce umět:

- definovat a ve správných souvislostech použít termíny L-S a j-j vazba
- porovnat normální a anomální Zeemanův jev (z hlediska experimentu i fyzikálního popisu)
- popsat a objasnit princip Sternova-Gerlachova experimentu
- určit změnu výsledku Sternova-Gerlachova experimentu při změně prvku použitého v tomto experimentu
- objasnit a na příkladu ukázat vliv kvantování energie a momentů hybnosti na strukturu atomových spekter (například vliv L-S vazby)



Atomová fyzika a elektronová struktura látek



Michael Faraday
(1871-1867)



28 JANU. 1862.

When the flame was between the poles—the making of the Magnet did not change its form or direction—and there was no appearance of change in the lines when magnet made or broken.

Used Chlo. sodium on the platinum wire—still there was no appearance of change in the luminous lines in any way by the magnetism.

Poles $\frac{1}{3}$ of inch apart. No magnetic effect either with or without the Sodium.

Used Chloride *barium*—no effect.

Chloride Strontium—no effect.

Lithia—nothing.

12 MARCH 1862.

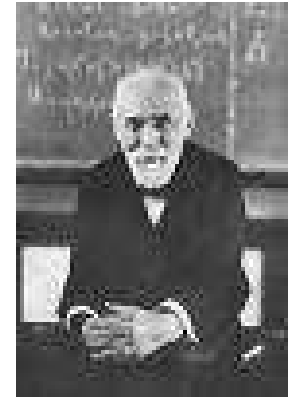
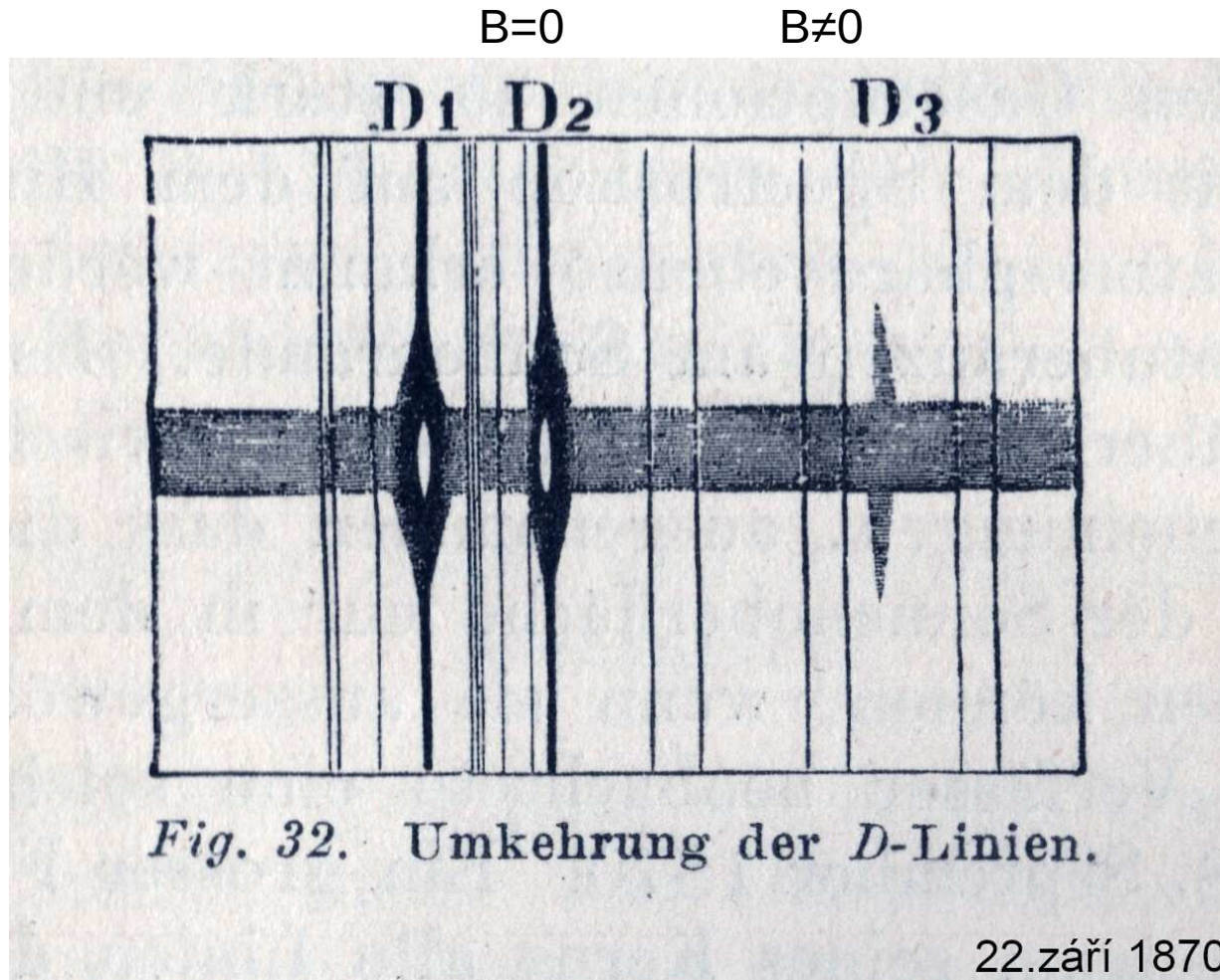
poles, i.e. in the magnetic axis or line of magnetic force. Then the Electro magnet was excited and rendered neutral; but not the slightest effect on the polarized or unpolarized ray was observed.

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

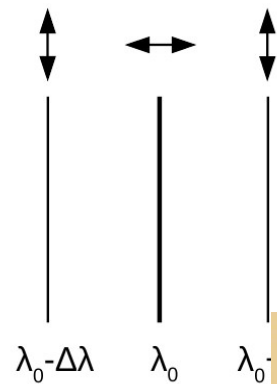
Zeemanův jev - rozštěpení spektrálních čar v magnetickém poli (1896)



Pieter Zeeman
(1865 - 1943)



Hendrik Antoon Lorentz
(1853 - 1928)



pozorování kolmo na s

$$\frac{q}{m} \frac{\lambda_0^2}{4\pi c} B$$

XXXII. *On the Influence of Magnetism on the Nature of the Light emitted by a Substance.* By DR. P. ZEEMAN*.

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Zeemanův jev - rozštěpení spektrálních čar v magnetickém poli (1896)

normální Zeemanův jev

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_z B = m_l \mu_B B$$

$$\Delta m_l = 0, \pm 1$$



$$\begin{aligned} \Delta U &= \Delta U_0 \\ &\Delta U_0 + \mu B \\ &\Delta U_0 - \mu B \end{aligned}$$

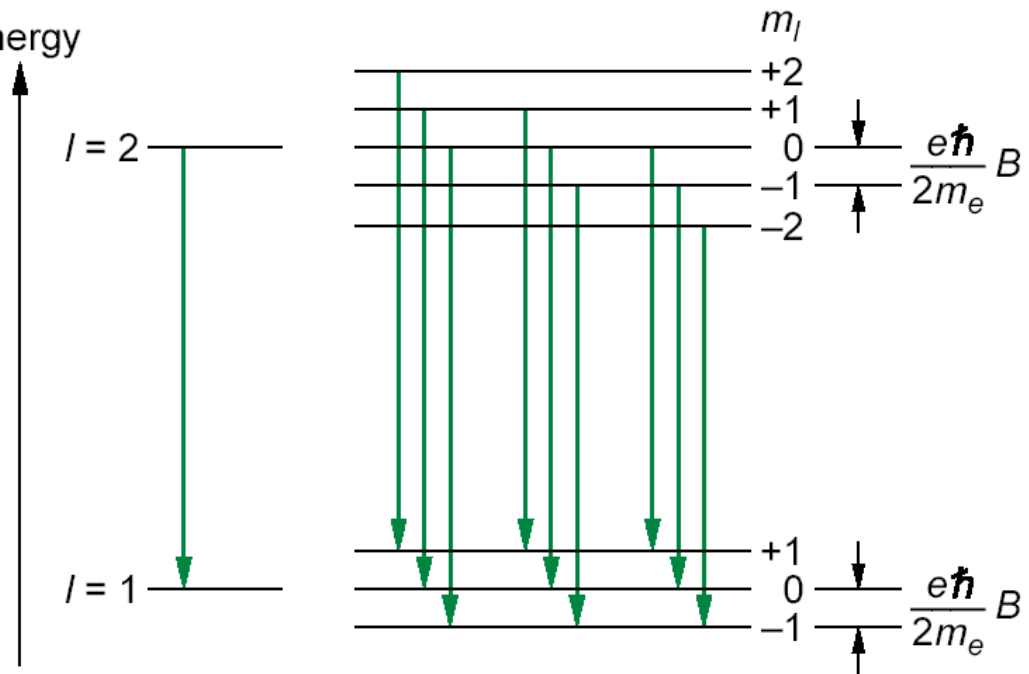


$B = 0$



$B \neq 0$

Energy



Pieter Zeeman
(1865 - 1943)

Cd 635nm

$B=0$ mT

pozorujeme ve směru kolmém na B

Cd 635nm

B=0 mT

Cd 635nm

B=260 mT

Cd 635nm

B=357 mT

Cd 635nm

B=450 mT

Cd 635nm

B=540 mT

Cd 635nm

B=635 mT

Cd 635nm

B=720 mT

Cd 635nm

B=790 mT

Cd 635nm

$B=0$ mT

pozorujeme ve směru podél B

Cd 635nm

B=0 mT

Cd 635nm

B=260 mT

Cd 635nm

B=357 mT

Cd 635nm

B=450 mT

Cd 635nm

B=540 mT

Cd 635nm

B=635 mT

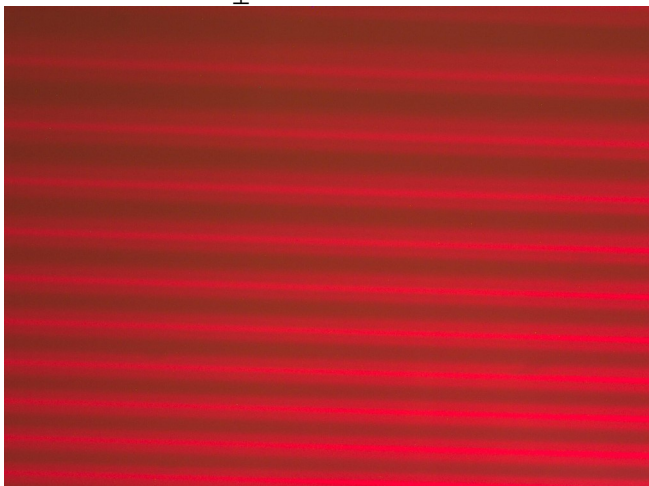
Cd 635nm

B=720 mT

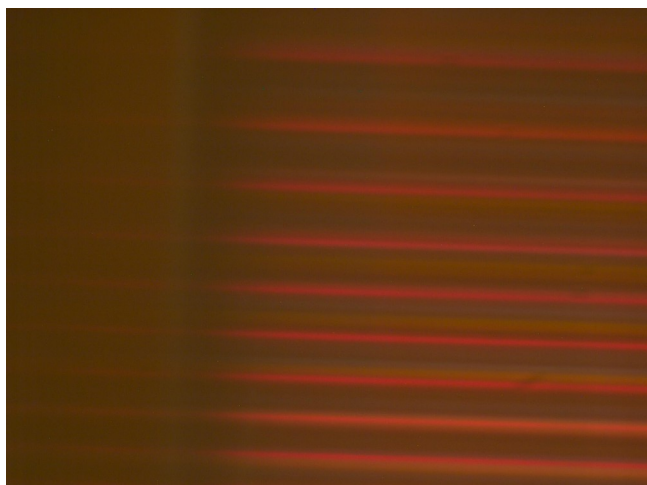
Cd 635nm

B=790 mT

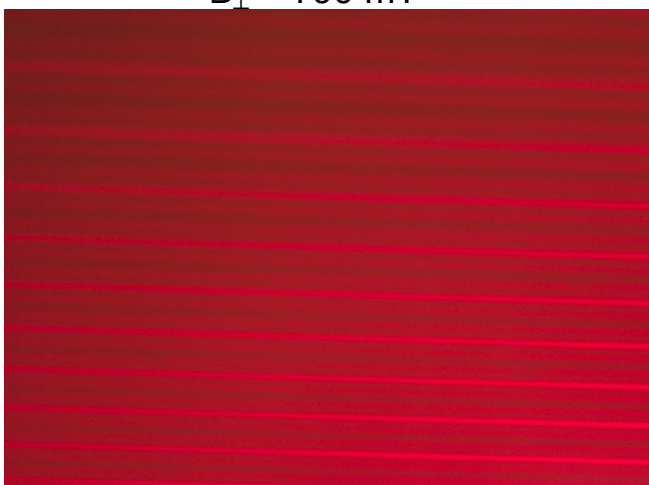
$B_{\perp} = 540 \text{ mT}$



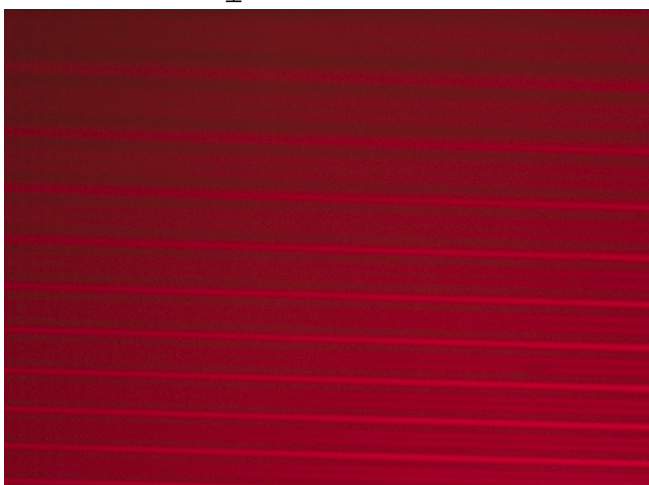
$B = 0 \text{ T}$



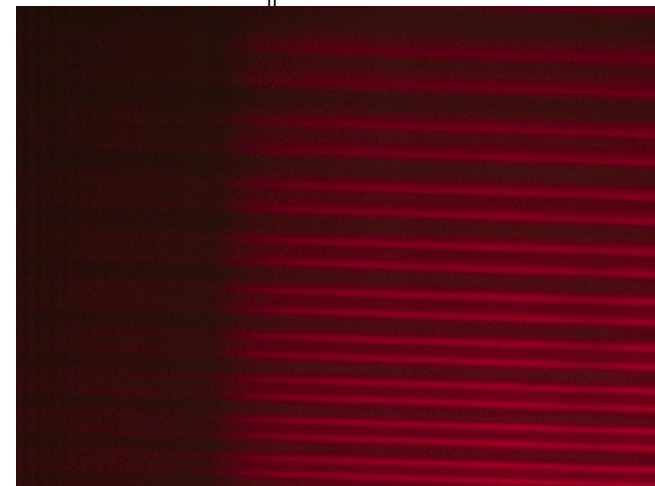
$B_{\perp} = 790 \text{ mT}$



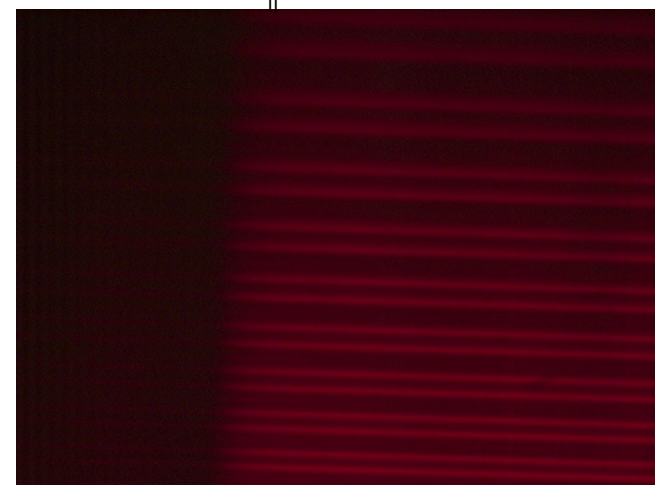
$B_{\perp} = 950 \text{ mT}$



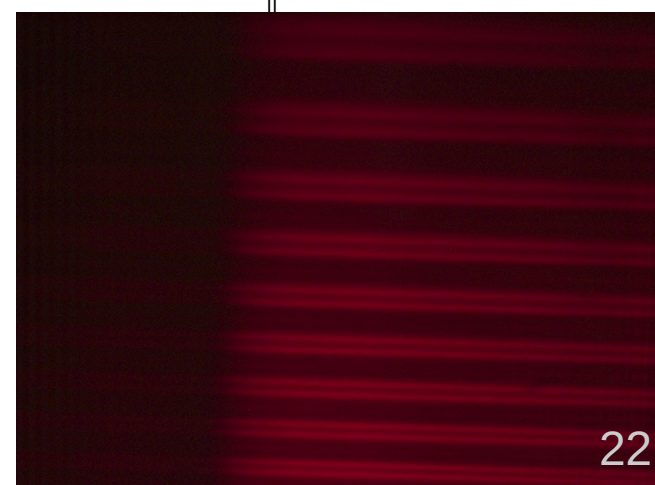
$B_{\parallel} = 540 \text{ mT}$



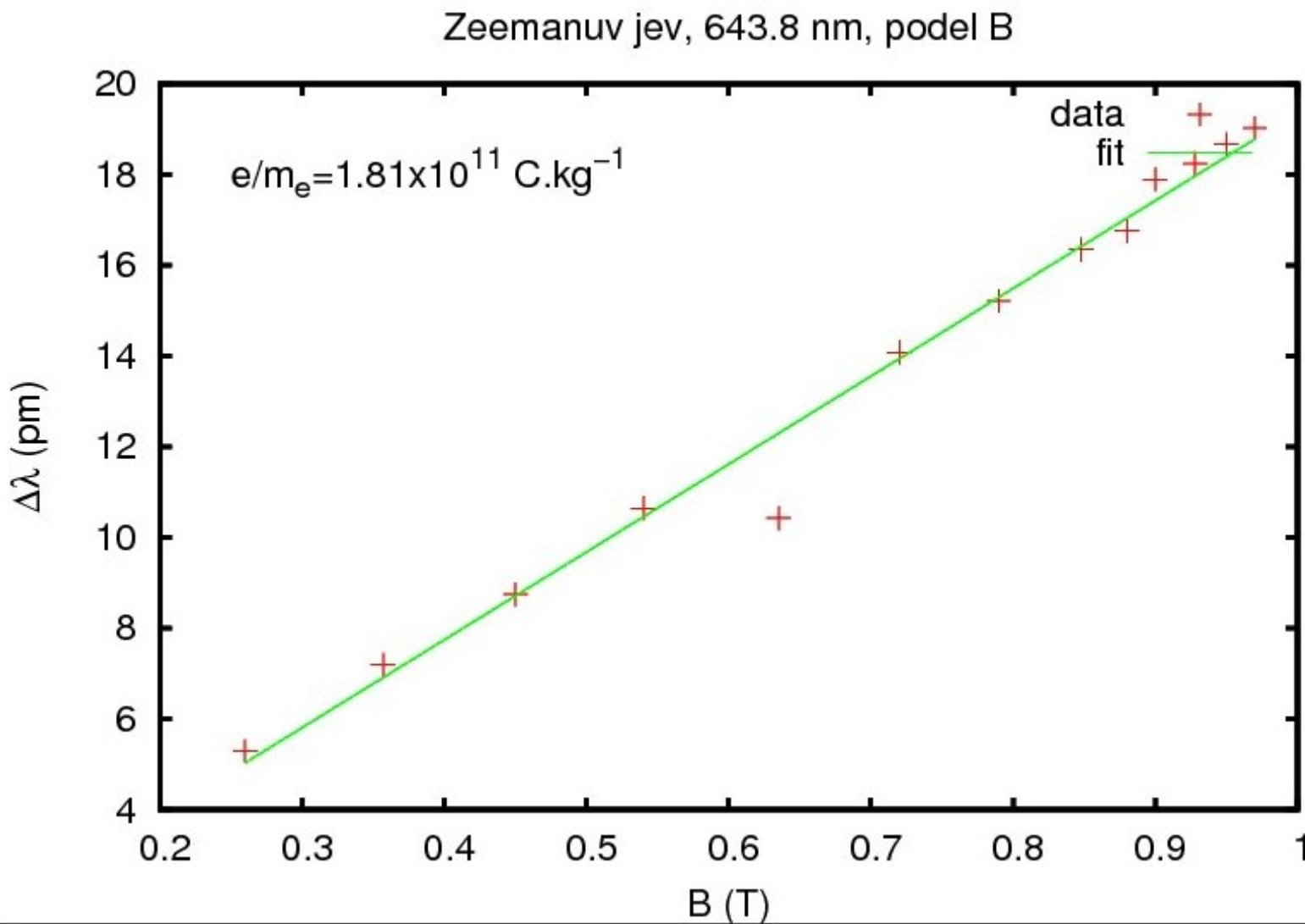
$B_{\parallel} = 790 \text{ mT}$



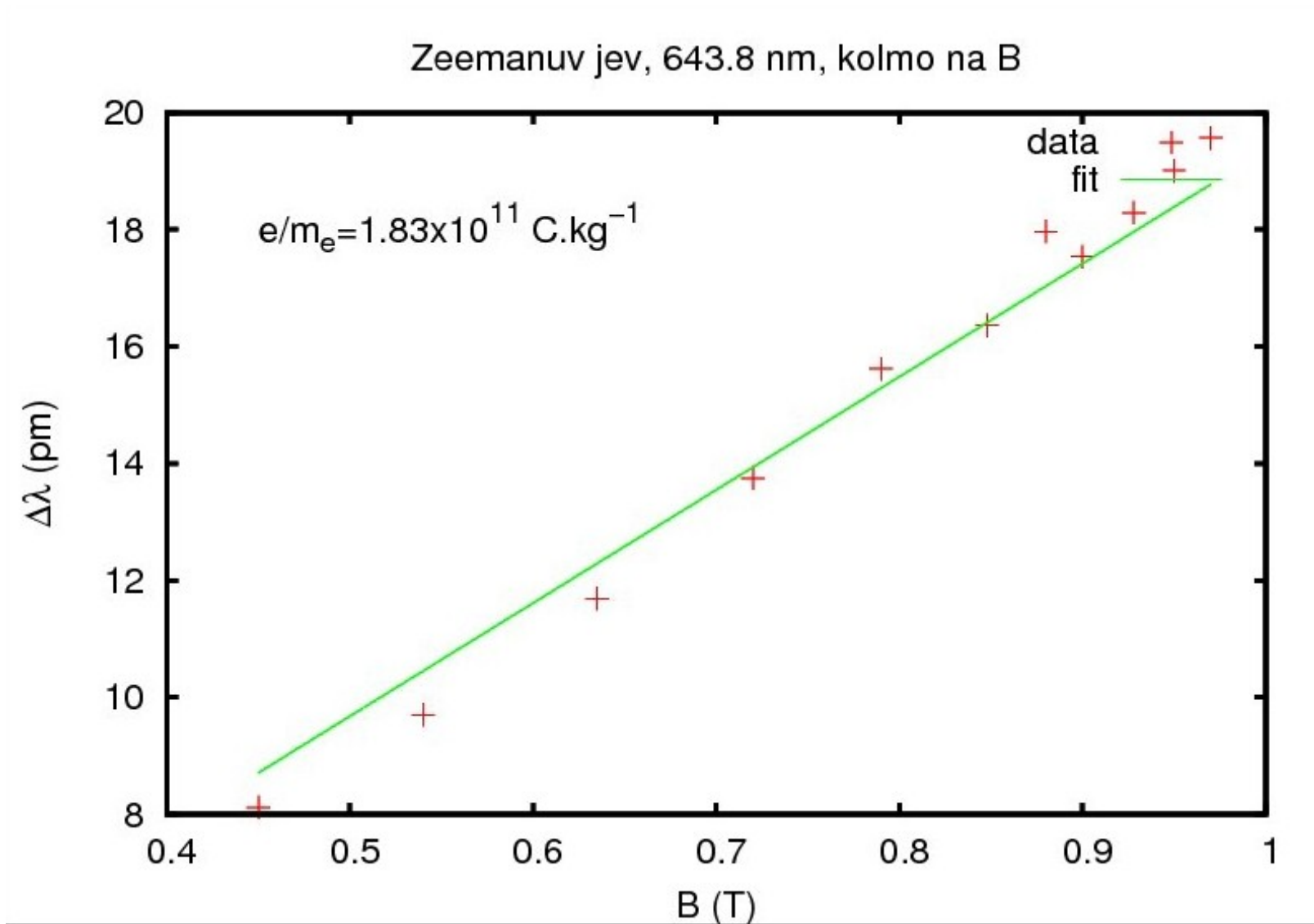
$B_{\parallel} = 950 \text{ mT}$



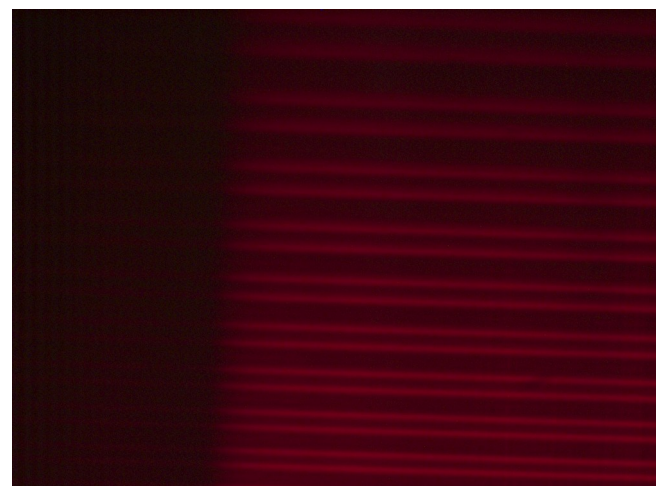
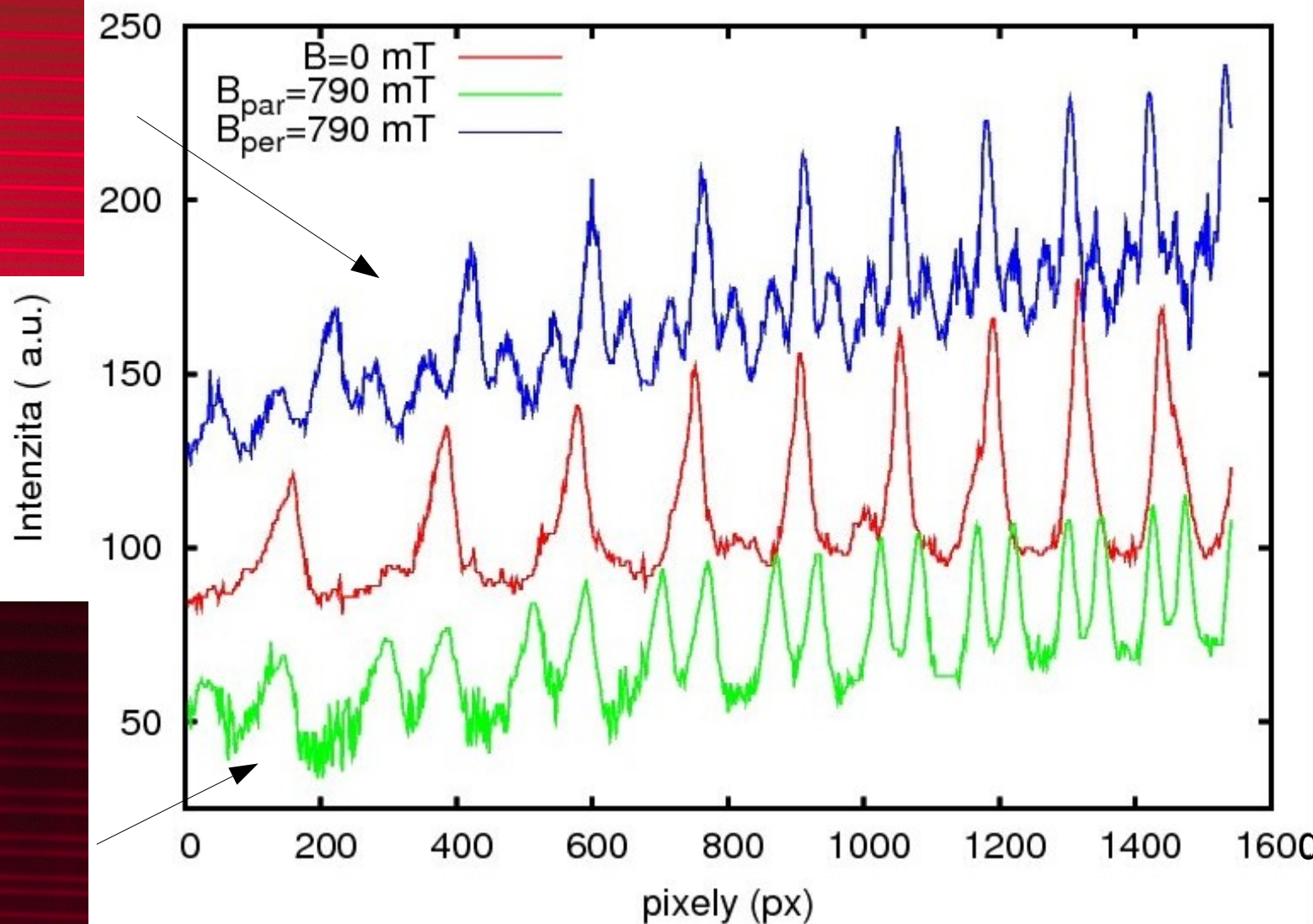
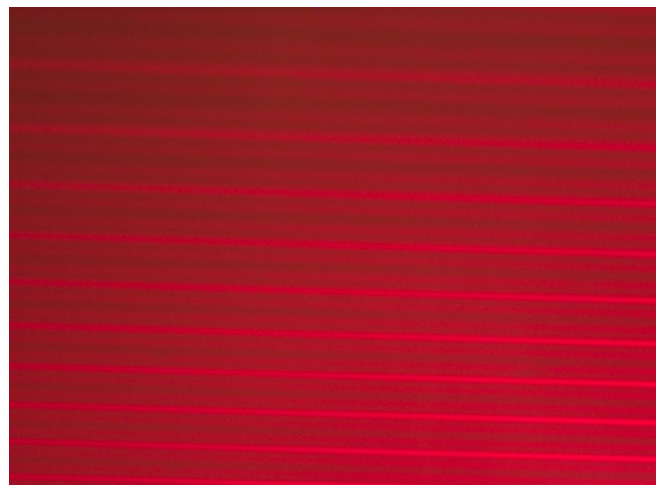
Atomová fyzika a elektronová struktura látek



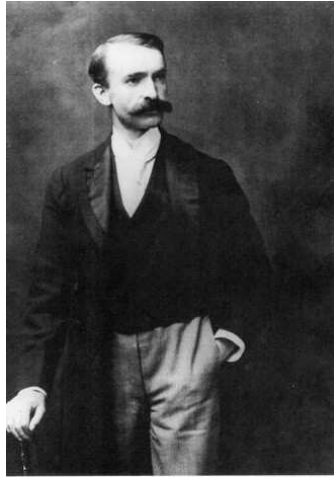
Atomová fyzika a elektronová struktura látek



Atomová fyzika a elektronová struktura látek



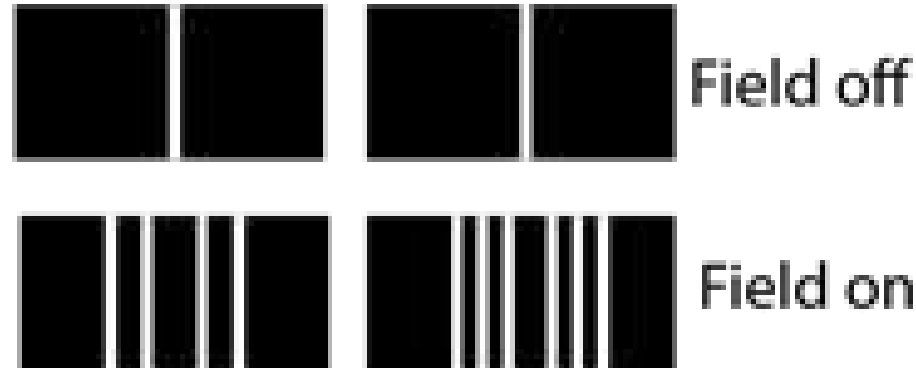
Atomová fyzika a elektronová struktura látek



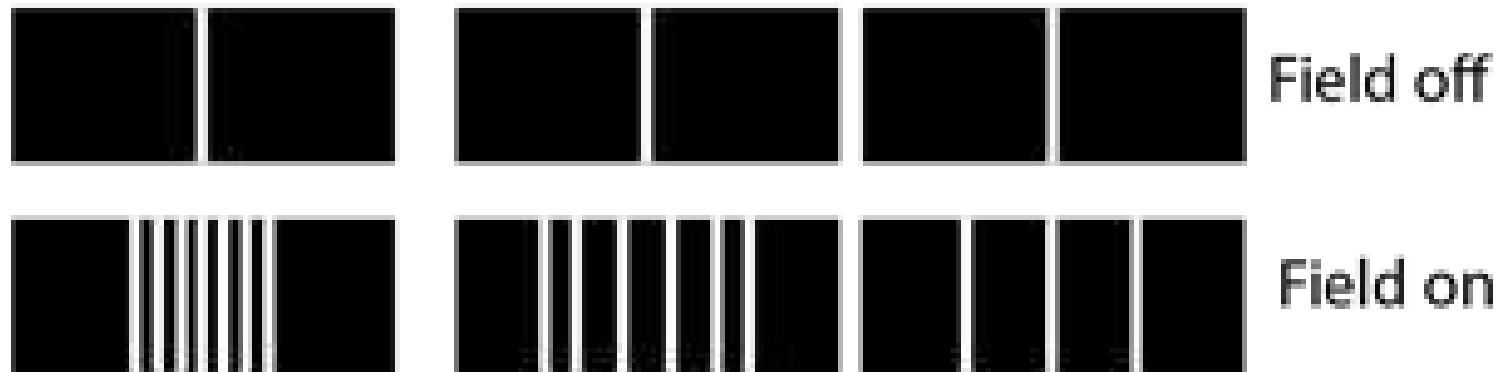
Thomas Preston
(1860-1900)

RADIATION PHENOMENA IN A STRONG MAGNETIC FIELD.

Sodium doublet



Zinc sharp triplet



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Stern-Gerlachův experiment (1921)

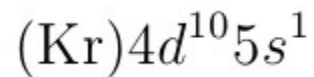
mg.moment ve vnějším mag.poli: $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$

$$\mu_{lz} = -\mu_B m_l$$

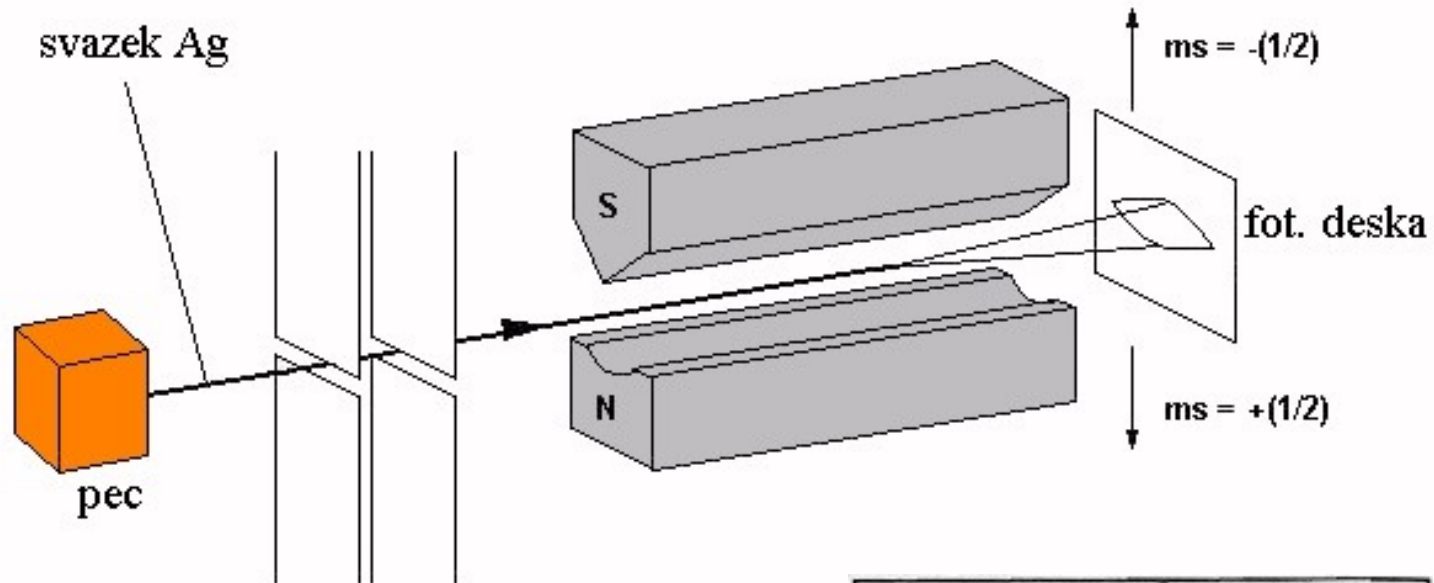
$$\mu_{sz} = -2\mu_B m_s = \pm \mu_B$$

síla působící v nehomogenním poli: $F_z = -\frac{\partial U}{\partial z} = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$

atomy Ag:



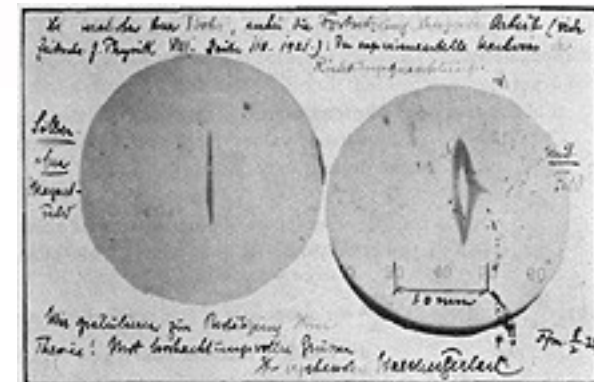
$$l = 0$$



odchylka od přímého směru vlivem síly F_z

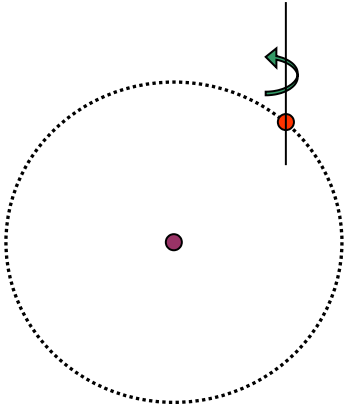
$$z = \frac{1}{2}at^2 = \frac{1}{2} \frac{F}{m} \left(\frac{L}{v}\right)^2 = \frac{1}{2} \frac{\mu_z}{m} \frac{\partial B_z}{\partial z} \left(\frac{L}{v}\right)^2$$

$$z = \pm \frac{1}{2} \frac{\mu_B}{m} \frac{\partial B_z}{\partial z} \left(\frac{L}{v}\right)^2$$



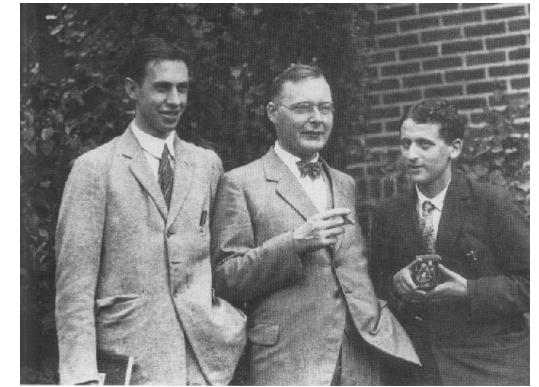
Atomová fyzika a elektronová struktura látek

spinový a orbitální moment



spin – vlastní moment hybnosti elektronu neorbitálního původu
- složky splňují komutační relace momentu hybnosti

$$[\hat{s}_x, \hat{s}_y] = i\hbar \hat{s}_z$$



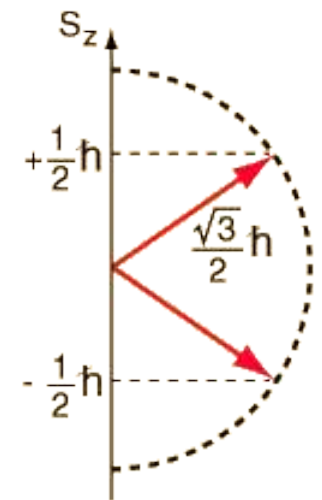
teoretický koncept 1925 Uhlenbeck (vlevo), Goudsmit (vpravo)

spin elektronu je kolmý k rovině “oběžné” dráhy a má vždy stejnou hodnotu $\frac{\hbar}{2}$

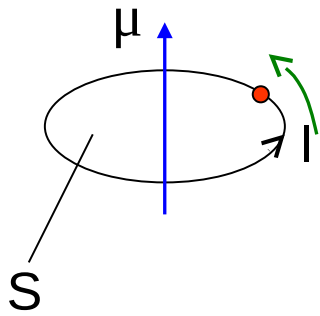
$$\hat{s}^2 = \hbar^2 l_s(l_s + 1) \quad l_s = \frac{1}{2}$$
$$\hat{s}_z = \hbar m_s = \pm \frac{\hbar}{2}$$

je spojen s magnetickým momentem

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m_e} \vec{s}$$



Atomová fyzika a elektronová struktura látek



1) **orbitální** magnetický moment (... moment proudové smyčky)

$$L = m_e r v$$

$$\mu_l = IS = -\frac{ev}{2\pi r} \pi r^2 = -\frac{1}{2} e r v = -\frac{e}{2m_e} m_e r v = -\frac{e}{2m_e} L = \gamma L$$

gyromagnetický poměr: $\gamma = \frac{\mu}{L}$

kvantování: $L^2 = \hbar^2 l(l+1) \quad L_z = \hbar m_l$

$$\mu_l = -\frac{e\hbar}{2m_e} \sqrt{l(l+1)} \quad \mu_{lz} = -\frac{e\hbar}{2m_e} m_l = -\mu_B m_l$$

Bohrův magneton: $\mu_B = 9.274 \times 10^{-24} \text{ A.m}^2 \text{ (JT}^{-1}\text{)}$

2) **spinový** magnetický moment

$$\mu_s = -\frac{e\hbar}{m_e} \sqrt{s(s+1)}$$

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{m_e} \vec{s} \quad \gamma_s = -\frac{\mu_s}{s} = -\frac{e}{m_e}$$

$$\mu_{sz} = -\frac{e\hbar}{m_e} m_s = -2\mu_B m_s = \pm \mu_B$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

skládání orbitálního a spinového momentu hybnosti:

1-elektronová aproximace

$$H = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + \sum_{i=1}^N -\frac{Ze'^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e'^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

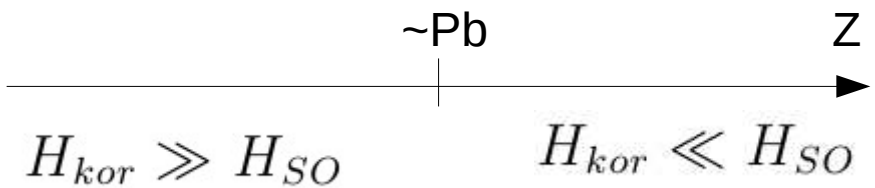
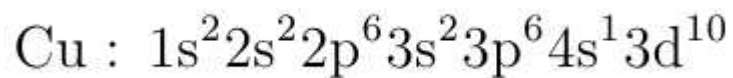
$$H_0 = \sum_i -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + \sum_{i=1}^N -\frac{Ze'^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}|} + \sum_{i=1}^N U^{el}$$

$$H_{kor} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e'^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \sum_i U^{el}$$

$$H_{SO} = \lambda \vec{L} \cdot \vec{S}$$

$$H = H_0 + H_{kor} + H_{SO}$$

elektronová konfigurace



Russel-Saundersova vazba

j-j vazba

n-elektronů v neuzavřené slupce $\binom{4l+2}{n}$ degenerace

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

skládání orbitálního a spinového momentu hybnosti:

$$H_{kor} \gg H_{SO} \quad \text{Russel-Saundersova vazba}$$

1) H_{kor} 1 elektron $\vec{l}, \vec{s}$

slupka n-elektronů $\vec{L} = \sum_{i=1}^n \vec{l}_i \quad \vec{S} = \sum_{i=1}^n \vec{s}_i$

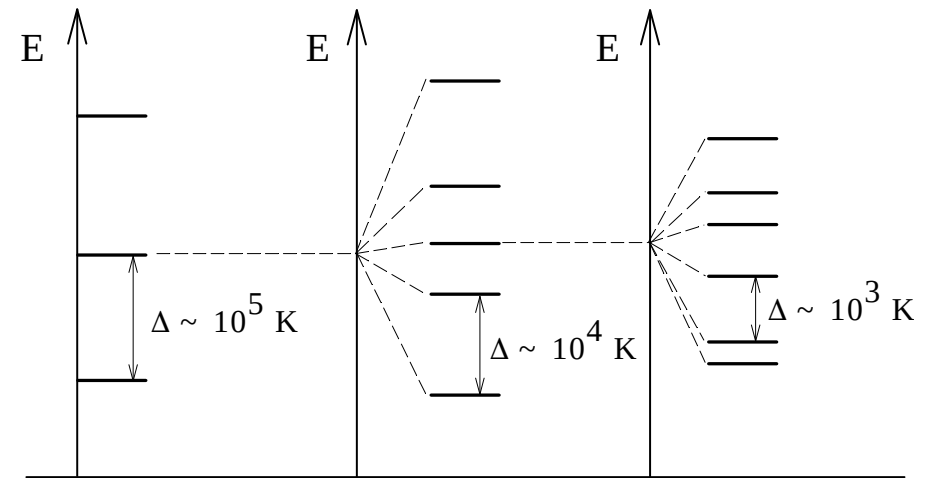
zcela zaplněná slupka $\vec{L} = 0, \vec{S} = 0$

2) H_{SO} celkový moment hybnosti

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad J_z = \hbar M_J$$

j-j vazba

$$\vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i \quad \vec{J} = \sum_{i=1}^n \vec{j}_i$$



elektronová
konfigurace
 H_0

termy
 H_{kor}

multiplety
 H_{SO}

$$|LSL_zS_z\rangle$$

$$|LSJJ_z\rangle$$

$$\binom{4l+2}{n}$$

$$(2L+1)(2S+1)$$

$$(2J+1)$$

jemná struktura

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

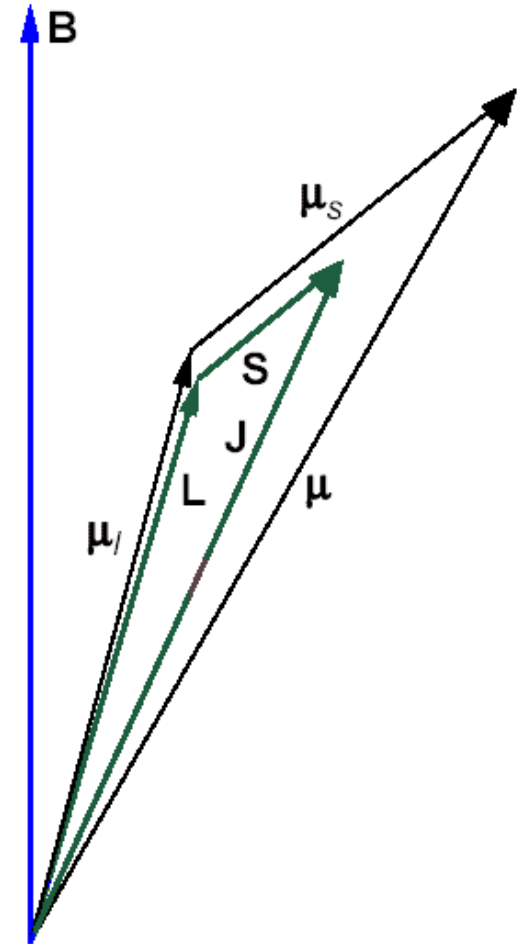
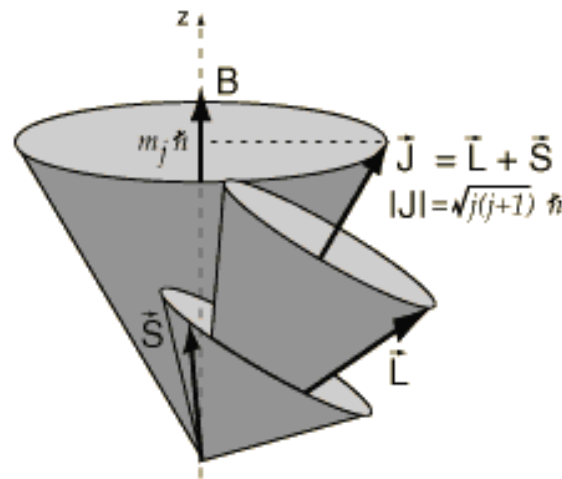
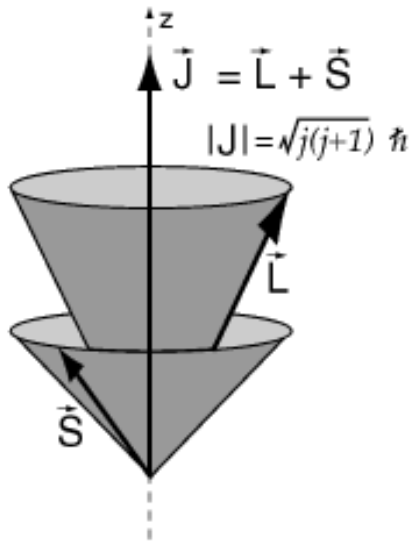
Zeemanův jev - rozštěpení spektrálních čar v magnetickém poli (1896)

anomální Zeemanův jev

spin

celkový moment hybnosti $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S = -\frac{e}{2m_e}\vec{L} + \left(-\frac{e}{m_e}\vec{S}\right) = -\frac{\mu_B}{\hbar}(\vec{L} + 2\vec{S})$$



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Zeemanův jev - rozštěpení spektrálních čar v magnetickém poli (1896)

anomální Zeemanův jev

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_z B$$

$$\mu_J = \frac{\vec{\mu}_J \cdot \vec{J}}{J} = -\frac{\mu_B}{\hbar} \frac{(\vec{L} + 2\vec{S})(\vec{L} + \vec{S})}{J}$$

$$\mu_z = \mu_J \frac{\vec{J} \cdot \vec{B}}{JB} = \mu_J \frac{J_z}{J} = -\frac{\mu_B}{\hbar} \frac{(\vec{L} + 2\vec{S})(\vec{L} + \vec{S})}{J^2} J_z$$

$$\mu_z = -\frac{\mu_B}{\hbar} g_J J_z$$

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

Landéův g-faktor

$$E_{\alpha LSJ J_z} = E_{\alpha LSJ} + \mu_B g_J m_J B$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Zeemanův jev - rozštěpení spektrálních čar v magnetickém poli (1896)

anomální Zeemanův jev

$$\Delta m_J = 0, \pm 1$$

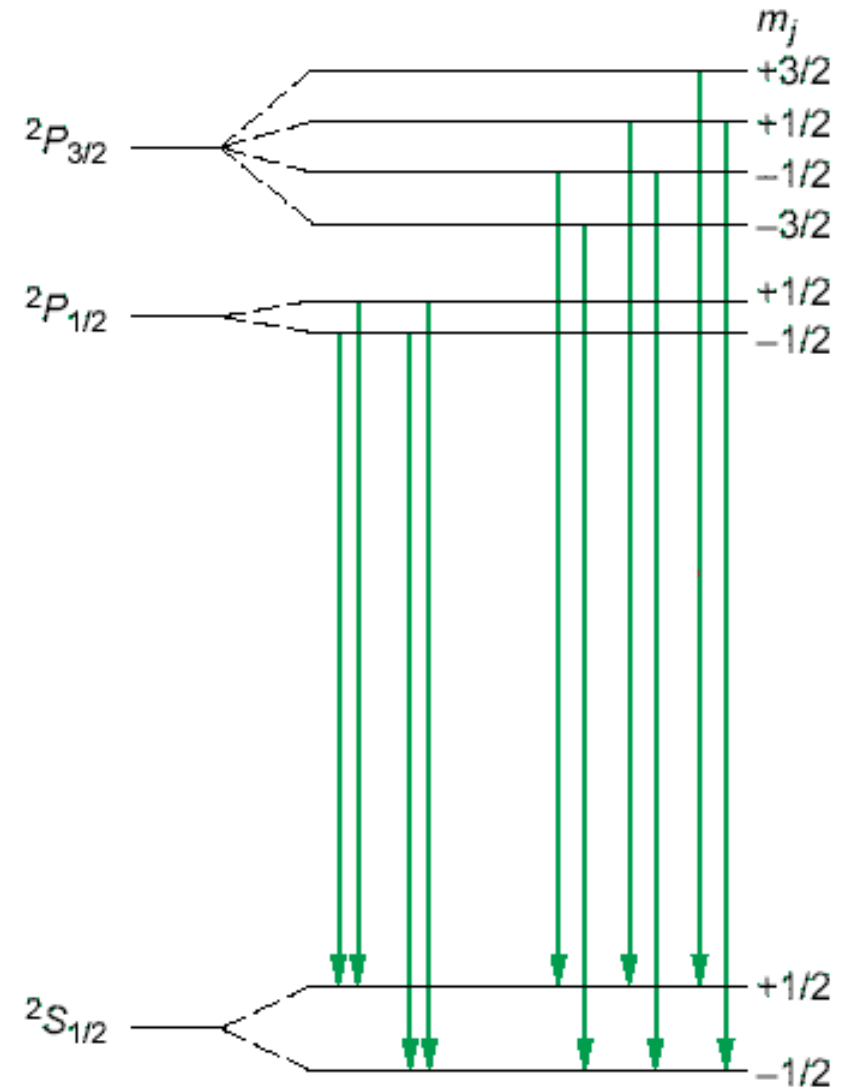
$$E_{\alpha LS J J_z} = E_{\alpha LS J} + \mu_B g_J m_J B$$

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

sodíkový dublet



[Photo from H. E. White, Introduction to Atomic Spectra, New York: McGraw-Hill Book Company, 1934]



➡ např. magnetické pole Slunce

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

skládání orbitálního a spinového momentu hybnosti:

1-elektronová aproximace

$$H = \sum_{i=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + \sum_{i=1}^N -\frac{Ze'^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e'^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

$$H_0 = \sum_i -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + \sum_{i=1}^N -\frac{Ze'^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}|} + \sum_{i=1}^N U^{el}$$

$$H_{kor} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e'^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \sum_i U^{el}$$

$$H_{SO} = \lambda \vec{L} \cdot \vec{S}$$

$$H = H_0 + H_{kor} + H_{SO}$$

elektronová konfigurace

Cu : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^{10}$

~Pb Z

$H_{kor} \gg H_{SO}$

Russel-Saundersova vazba

$H_{kor} \ll H_{SO}$

j-j vazba

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

skládání orbitálního a spinového momentu hybnosti:

$$H_{SO} = \lambda \vec{L} \cdot \vec{S}$$

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{|\vec{J}|^2 - |\vec{L}|^2 - |\vec{S}|^2}{2} \quad \mathbf{J}^2 = \hbar^2 J(J+1) \quad \mathbf{L}^2 = \hbar^2 L(L+1) \quad \mathbf{S}^2 = \hbar^2 S(S+1)$$

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{\hbar^2}{2} (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1))$$

pro $\vec{L} = 0$ nebo $\vec{S} = 0 \rightarrow \vec{L} \cdot \vec{S} = 0$

1 elektron $L=1$, $S=1/2$

$$S = \frac{1}{2} \rightarrow S(S+1) = \frac{3}{4} \quad |L - S| \geq J \geq L + S$$

$$L = 1 \rightarrow \vec{L} \cdot \vec{S} = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2} L & J = L + \frac{1}{2} \\ -\frac{\hbar^2}{2} ((L+1)) & J = L - \frac{1}{2} \end{cases}$$

$$H_{SO} = \lambda \vec{L} \cdot \vec{S}$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Hundova pravidla – postup při obsazení částečně zaplněné slupky:

1. maximální spinový moment S
2. maximální orbitální moment L v souladu s max. S
3. je-li slupka zaplněná méně než z poloviny je $J = |L - S|$
je-li slupka zaplněná více než z poloviny je $J = L + S$

označení termu: $^{2S+1}X_J$

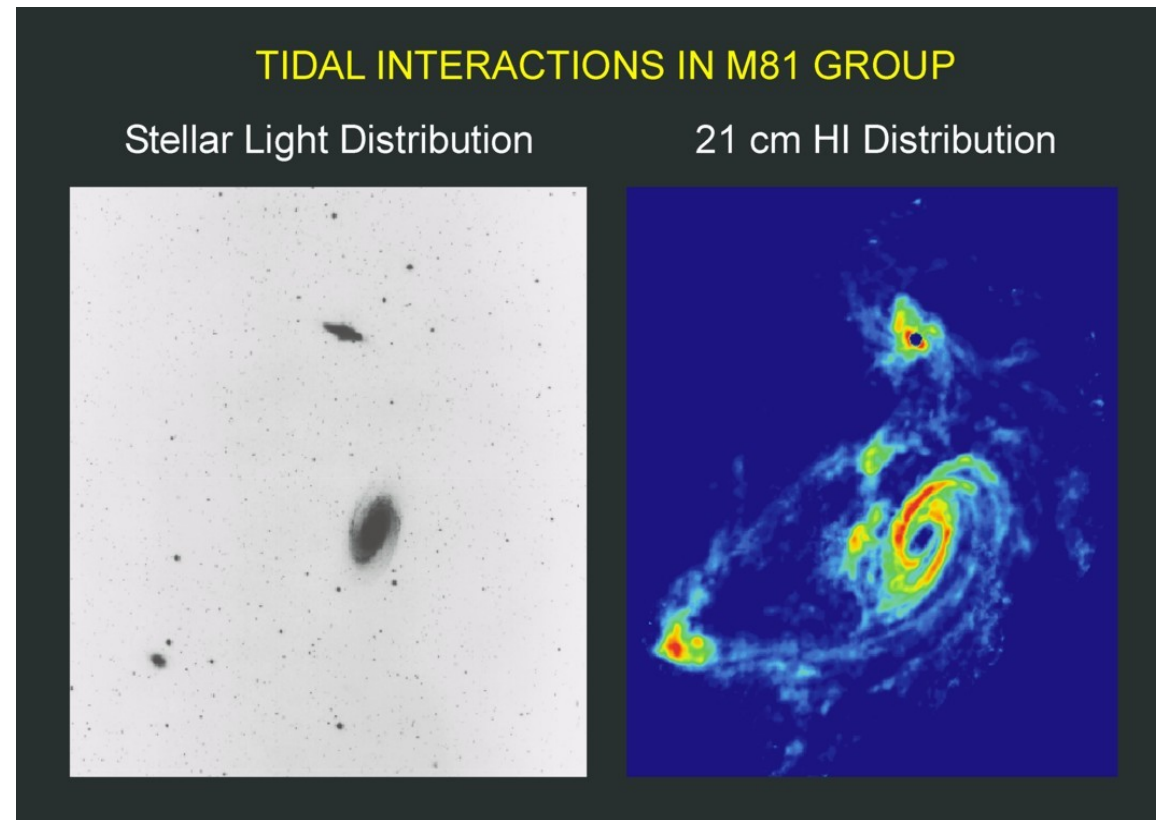
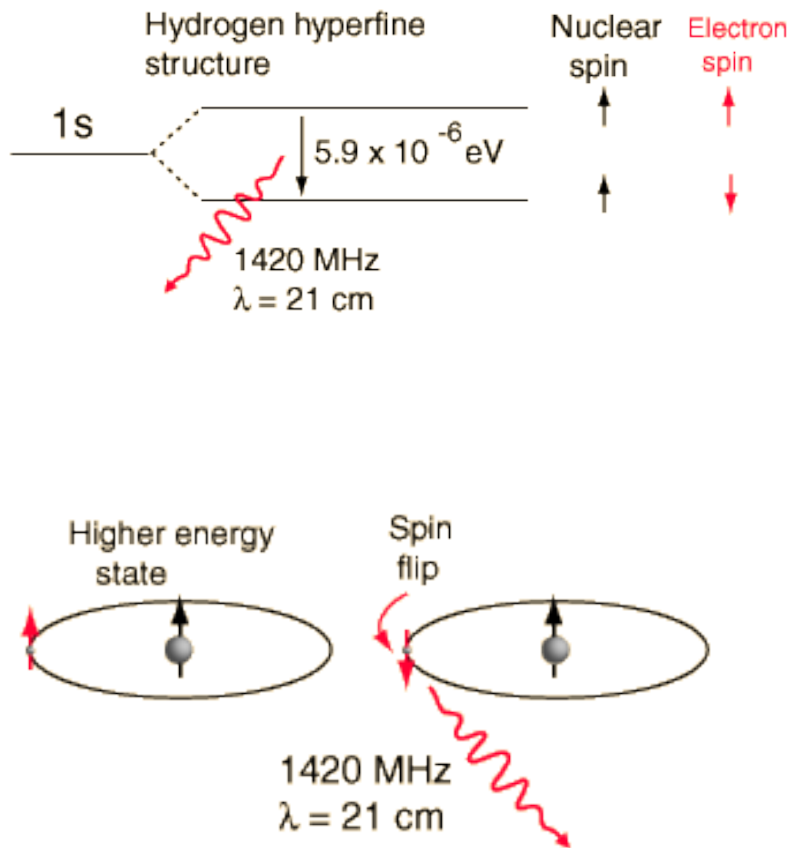
$L = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$
 $X = S, P, D, F, G, H, I$

kyslík O: $1s^2 2s^2 2p^4$

$m_l = 1$	$m_l = 0$	$m_l = -1$
$\uparrow \downarrow$	$\uparrow$	$\uparrow$

základní stav: 3P_2

Atomová fyzika a elektronová struktura látek



$\lambda=21 \text{ cm}$