Atomok mágneses momentuma

Kvantummechanikai pályamomentum: $\boxed{\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}}$

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar \hat{L}_z \,, \quad \left[\hat{L}_y, \hat{L}_z\right] = i\hbar \hat{L}_x \,, \quad \left[\hat{L}_z, \hat{L}_x\right] = i\hbar \hat{L}_y$$

A pályamomentum $\boxed{\hbar}$ egységekben kvantált.

Az abszolút érték kvantumszámai:

$$l \rightarrow 0,\ 1,\ 2\ldots\ (n-1) \qquad \boxed{L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar}$$

A z-komponens kvantumszámai (mágneses kvantumszám): $\boxed{L_z = m_l\,\hbar}$

$$m_l \rightarrow -l,\ (-l+1),\ldots\ 0,\ldots\ (l-1),\ l$$

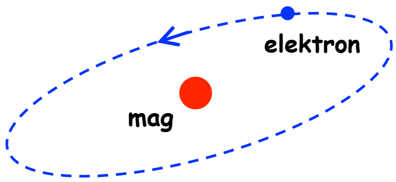
A hozzá tartozó mágneses momentum:

giromágneses tényező $\quad M_z = \gamma\,\mathbf{L}_z = \dfrac{e}{2m}\mathbf{L}_z$

A mágneses momentum kvantuma:

Bohr magneton $\quad \boxed{\mu_B = \dfrac{e\hbar}{2m}}$

Az elektron impulzusmomentuma:



$\boxed{\underline{\mathbf{L}} = \underline{\mathbf{r}} \times \underline{p}}$

Az ehhez tartozó mágneses momentum:

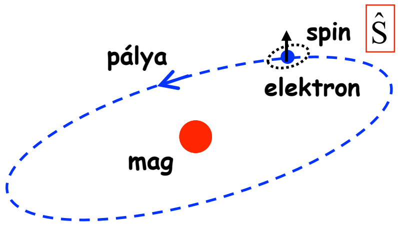
$$\mu = IA = e\frac{\omega}{2\pi}r^2\pi = \frac{e}{2m}mrr\omega = \frac{e}{2m}rm\mathrm{v}$$

$$\mu = \frac{e}{2m}\mathbf{L}$$

Klasszikus leírásmód

Atomok mágneses momentuma

Kvantummechanikai impulzusmomentum: $\boxed{\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}}$



$\boxed{\hat{S}}$

Az abszolút érték kvantumszámai:

$$l \rightarrow 0,\ 1,\ 2\ldots\ (n-1) \qquad \boxed{L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar}$$

A z-komponens kvantumszámai (mágneses kvantumszám): $\boxed{L_z = m_l\,\hbar}$

$$m_l \rightarrow -l,\ (-l+1),\ldots\ 0,\ldots\ (l-1),\ l$$

Spin: elektron saját impulzusmomentuma

Az elektron feles spinű részecske

$$s = \frac{1}{2}$$

A z-komponens kvantumszámai (mágneses kvantumszám): $\boxed{J_z = (m_l + m_s)\hbar}$

$$m_l \rightarrow -l,\ (-l+1),\ldots\ 0,\ldots\ (l-1),\ l \qquad m_s \rightarrow +\frac{1}{2},\ -\frac{1}{2}$$

Bohr magneton $\quad \boxed{\mu_B = \dfrac{e\hbar}{2m}}$

A hozzá tartozó mágneses momentum:

$$M_z = \frac{e\hbar}{2m}(m_l + 2m_s)$$

a spinhez kétszer akkora momentum tartozik, mint a pályamomentumhoz

Sok elektron

n		1	2		3			4
l		0	0	1	0	1	2	0
1	H	1			s	p	d	
2	He	2						
3	Li	2	1					
4	Be	2	2					
5	B	2	2	1				
6	C	2	2	2				
7	N	2	2	3				
8	O	2	2	4				
9	F	2	2	5				
10	Ne	2	2	6				
11	Na	2	2	6	1			
12	Mg	2	2	6	2			
13	Al	2	2	6	2	1		
14	Si	2	2	6	2	2		
15	P	2	2	6	2	3		
16	S	2	2	6	2	4		
17	Cl	2	2	6	2	5		
18	A	2	2	6	2	6		
19	K	2	2	6	2	6	0	1
20	Ca	2	2	6	2	6	0	2
21	Sc	2	2	6	2	6	1	2
22	Ti	2	2	6	2	6	2	2
23	V	2	2	6	2	6	3	2
24	Cr	2	2	6	2	6	4	2
25	Mn	2	2	6	2	6	5	2
26	Fe	2	2	6	2	6	6	2
27	Co	2	2	6	2	6	7	2
28	Ni	2	2	6	2	6	8	2

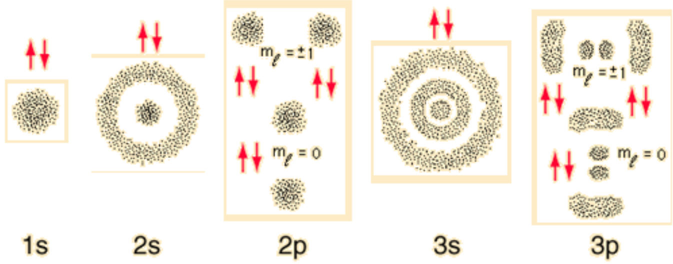
Atomok mágneses momentuma

n = főkvantumszám

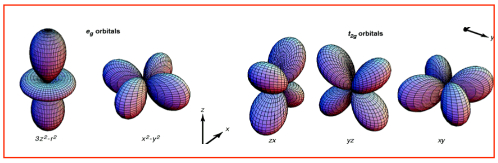
l = mellék-kvantumszám: 0, 1,… (n-1)

m_l = mágneses kvantumszám: -l, (-l+1), .. l

m_s = spin kvantumszám: -1/2, +1/2



3d



A mágneses momentum attól függ, hogy milyen mágneses- és spin-kvantumszámú elektronnal töltjük fel az adott elektronhéjat

Sok elektron

n		1	2		3			4
l		0	0	1	0	1	2	0
1	H	1			s	p	d	
2	He	2						
3	Li	2	1					
13	Al	2	2	6	2	1		
14	Si	2	2	6	2	2		
15	P	2	2	6	2	3		
16	S	2	2	6	2	4		
17	Cl	2	2	6	2	5		
18	A	2	2	6	2	6		
19	K	2	2	6	2	6	0	1
20	Ca	2	2	6	2	6	0	2
21	Sc	2	2	6	2	6	1	2
22	Ti	2	2	6	2	6	2	2
23	V	2	2	6	2	6	3	2
24	Cr	2	2	6	2	6	4	2
25	Mn	2	2	6	2	6	5	2
26	Fe	2	2	6	2	6	6	2
27	Co	2	2	6	2	6	7	2
28	Ni	2	2	6	2	6	8	2

Atomok mágneses momentuma

n = főkvantumszám

l = mellék-kvantumszám: 0, 1,… (n-1)

m_l = mágneses kvantumszám: -l, (-l+1), .. l

m_s = spin kvantumszám: -1/2, +1/2

Hund-szabályok: Pauli-elv + elektrosztatikus kölcsönhatás, spin-pálya csatolás

- maximális $\boxed{S}$ érték
- maximális $\boxed{L}$ érték,
- a teljes momentum $\boxed{J = L - S}$ (félignél kevesebb betöltés) $\boxed{J = L + S}$ (egyébként)

1. Pauli (Fermi-lyuk) + Coulomb

2. „Keringés”+Coulomb

3. Spin-pálya $\quad W = A\,\vec{\mathbf{L}}\vec{\mathbf{S}}$

Relativisztikus jelenség – Dirac egyenlet

$$H_{SO} = -\mu_B \sigma \frac{\vec{\mathbf{p}} \times \nabla V(\vec{\mathbf{r}})}{2mc^2}$$

Sok elektron

Atomok mágneses momentuma

n = főkvantumszám

l = mellék-kvantumszám: 0, 1,… (n-1)

m_l = mágneses kvantumszám: -l, (-l+1), .. l

m_s = spin kvantumszám: -1/2, +1/2

Hund-szabályok: Pauli-elv + elektrosztatikus kölcsönhatás, spin-pálya csatolás

- maximális $\boxed{S}$ érték
- maximális $\boxed{L}$ érték,
- a teljes momentum $\boxed{J = L - S}$ (félignél kevesebb betöltés) $\boxed{J = L + S}$ (egyébként)

n		1	2		3			4
l		0	0	1	0	1	2	0
					s	p	d	
1	H	1						
2	He	2						
3	Li	2	1					
13	Al	2	2	6	2	1		
14	Si	2	2	6	2	2		
15	P	2	2	6	2	3		
16	S	2	2	6	2	4		
17	Cl	2	2	6	2	5		
18	A	2	2	6	2	6		
19	K	2	2	6	2	6	0	1
20	Ca	2	2	6	2	6	0	2
21	Sc	2	2	6	2	6	1	2
22	Ti	2	2	6	2	6	2	2
23	V	2	2	6	2	6	3	2
24	Cr	2	2	6	2	6	4	2
25	Mn	2	2	6	2	6	5	2
26	Fe	2	2	6	2	6	6	2
27	Co	2	2	6	2	6	7	2
28	Ni	2	2	6	2	6	8	2

Példa:

Fe^{3+} vagy Mn^{2+} ion, n=3, l=2 nívón 5 db. elektron:
$3d^5$ héjszerkezet s=5/2, l=0
valamennyi spin egy irányba mutat
(a teljesen betöltött héjak nem adnak járulékot)

m_s	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
m_l	2	1	0	-1	-2	2	1	0	-1	-2

5 db. elektron

Sok elektron

Atomok mágneses momentuma

n = főkvantumszám

l = mellék-kvantumszám: 0, 1,… (n-1)

m_l = mágneses kvantumszám: -l, (-l+1), .. l

m_s = spin kvantumszám: -1/2, +1/2

Hund-szabályok: Pauli-elv + elektrosztatikus kölcsönhatás, spin-pálya csatolás

- maximális $\boxed{S}$ érték
- maximális $\boxed{L}$ érték,
- a teljes momentum $\boxed{J = L - S}$ (félignél kevesebb betöltés) $\boxed{J = L + S}$ (egyébként)

n		1	2		3			4
l		0	0	1	0	1	2	0
					s	p	d	
1	H	1						
2	He	2						
3	Li	2	1					
13	Al	2	2	6	2	1		
14	Si	2	2	6	2	2		
15	P	2	2	6	2	3		
16	S	2	2	6	2	4		
17	Cl	2	2	6	2	5		
18	A	2	2	6	2	6		
19	K	2	2	6	2	6	0	1
20	Ca	2	2	6	2	6	0	2
21	Sc	2	2	6	2	6	1	2
22	Ti	2	2	6	2	6	2	2
23	V	2	2	6	2	6	3	2
24	Cr	2	2	6	2	6	4	2
25	Mn	2	2	6	2	6	5	2
26	Fe	2	2	6	2	6	6	2
27	Co	2	2	6	2	6	7	2
28	Ni	2	2	6	2	6	8	2

Példa:

Co^{2+} ion – 2 db 4s elektron eltávolítása
(a teljesen betöltött héjak nem adnak járulékot)
$3d^7$ elektronszerkezet

n=3

l=2

7 db. elektron

S=3/2; L=3 → $^4F_{9/2}$

m_s	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
m_l	2	1	0	-1	-2	2	1	0	-1	-2

Jelölés: $^{2S+1}L_{L+S}$

szimbólum	S	P	D	F	G	H	…
L	0	1	2	3	4	5	

Hund szabályok eredete: spektroszkópiai megfigyelések

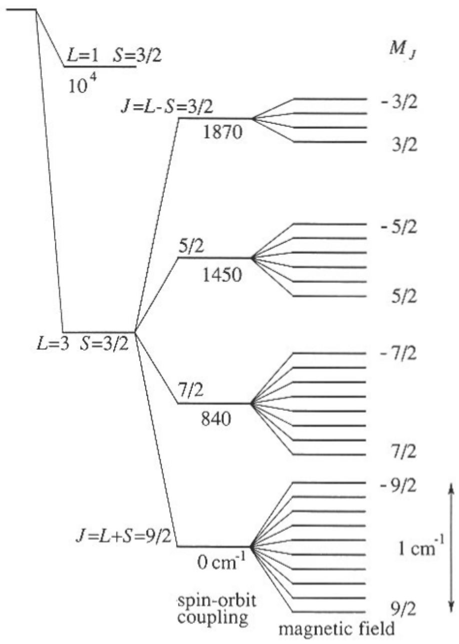


Figure 2.1 Energy levels of the cobalt free ion Co^{2+} (not drawn to scale). Energies are in cm^{-1}, where $8066\ cm^{-1} = 1\ eV$.

Független atomok mágnesezettsége

L és S ismeretében az ion mágneses momentuma:

$$\mu = g\frac{e\hbar}{2m}\mathrm{J} = g\mu_{\mathrm{B}}\mathrm{J}$$

Landé g-faktor

Mágneses térben 2J+1 –szeres felhasadás,
m = -J, -J+1, .. 0, J-1, J
energianívók: $mg\mu_B B$

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

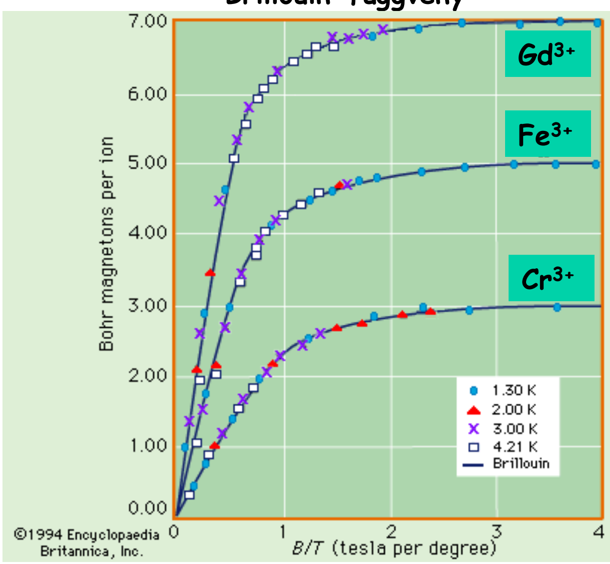
Mágnesezettség (atomok sokaságára):

$$\mathrm{M} = \mathrm{N}\langle\mu\rangle = \mathrm{N}\frac{\sum_{-J}^{J} g\mu_{\mathrm{B}}m\cdot\exp\left\{-\frac{-g\mu_{\mathrm{B}}m\mathrm{B}}{k_{\mathrm{B}}T}\right\}}{\sum_{-J}^{J}\exp\left\{-\frac{-g\mu_{\mathrm{B}}m\mathrm{B}}{k_{\mathrm{B}}T}\right\}}$$

$$\boxed{\mathrm{M} = \mathrm{N}g\mu_{\mathrm{B}}\mathrm{J}\left[\frac{2\mathrm{J}+1}{2\mathrm{J}}\coth\frac{(2\mathrm{J}+1)\alpha}{2\mathrm{J}} - \frac{1}{2\mathrm{J}}\coth\frac{\alpha}{2\mathrm{J}}\right]}$$

$$\boxed{\alpha = \frac{g\mu_{\mathrm{B}}\mathrm{J}\,\mathrm{B}}{k_{\mathrm{B}}T}}$$

Brillouin-függvény



Mágneses szuszceptibilitás:
Curie-szuszceptibilitás

$$\boxed{\chi = \left.\frac{\mathrm{M}}{\mathrm{B}}\right|_{\mathrm{B}\to 0} = \frac{\mathrm{N}g^2\mu_{\mathrm{B}}^2}{3k_{\mathrm{B}}T}\mathrm{J}(\mathrm{J}+1) = \frac{\mathrm{C}}{\mathrm{T}}}$$

Ferromágnesség: Curie-Weiss szuszceptibilitás

$$\boxed{\chi = \frac{C}{T - T_C}}$$

Momentumok közti kölcsönhatás ⟶ belső tér

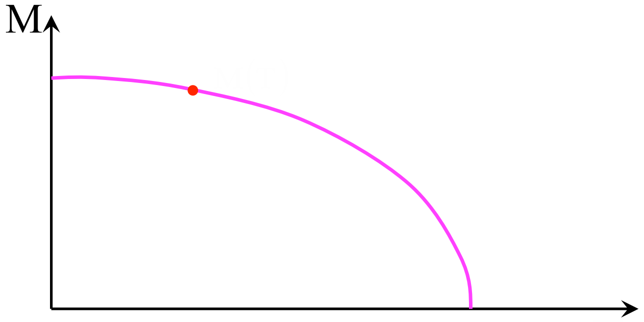
$$B_i = \lambda M \longrightarrow M = \chi(B + B_i) \longrightarrow \chi = \frac{M}{B} = \frac{C}{T - C\lambda}$$

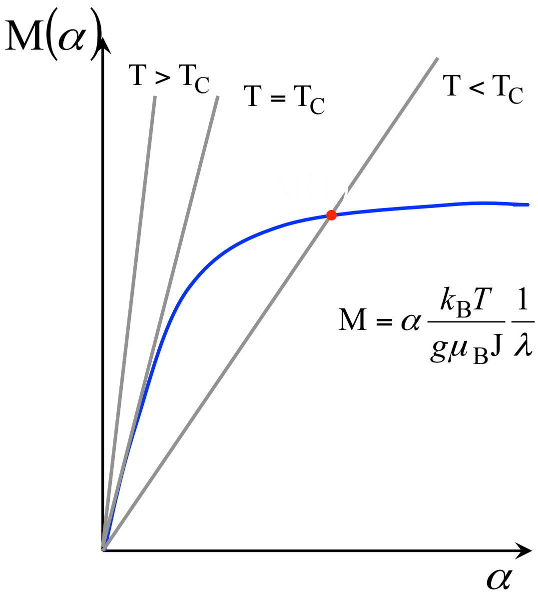
Spontán mágnesezettség: ferromágneses fázis

$$M = Ng\mu_B J\left[\frac{2J+1}{2J}\coth\frac{(2J+1)\alpha}{2J} - \frac{1}{2J}\coth\frac{\alpha}{2J}\right]$$

$$\alpha = \frac{g\mu_B J(B + \lambda M)}{k_B T} \qquad B = 0$$

spontán mágnesezettség





$$M = \alpha \frac{k_B T}{g\mu_B J}\frac{1}{\lambda}$$