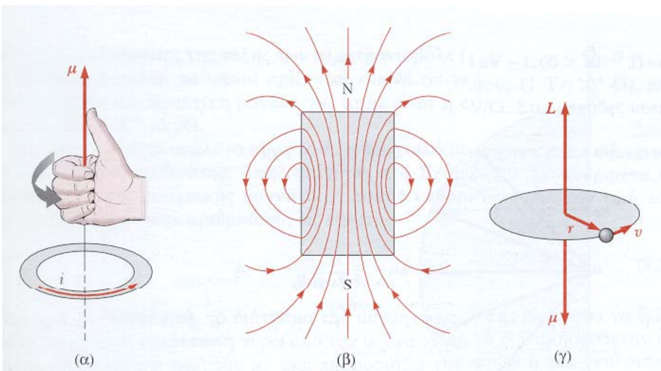
University of Ioannina
Department of Materials Science & Engineering
Computational Materials Science

Κβαντική Θεωρία της Ύλης

Διδάσκων: Λευτέρης Λοιδωρίκης
Π1, 7146, elidorik@cc.uoi.gr
cmsl.materials.uoi.gr/elidorik

Ατομική Δομή

Μαγνητική ροπή



Μαγνητική ροπή ρευματοφόρου βρόγχου

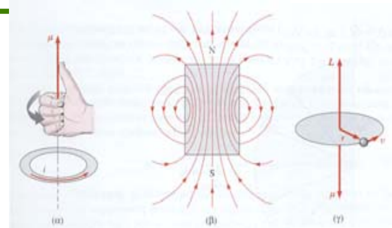
$$\vec{\mu} = i\,\vec{A}$$

Μαγνητική ροπή φορτίου σε τροχιά;

Μαγνητική ροπή φορτίου σε τροχιά

Μαγνητική ροπή ρευματοφόρου βρόγχου

$$\vec{\mu} = i\,\vec{A}$$



Για φορτίο σε τροχιά:
- φορτίο q
- μάζα m
- τροχιά ακτίνας r
- ταχύτητα περιστροφής v

βρίσκουμε:
- εμβαδό τροχιάς $A = \pi r^2$
- περίοδος περιστροφής $T = 2\pi r/v$
- ρεύμα $i = q/T$
- μαγνητική ροπή $\boxed{\mu = i \cdot A = \frac{qv}{2\pi r}\pi r^2 = \frac{qvr}{2}}$

Τι είναι καλά καθορισμένο σε μια ατομική τροχιά;

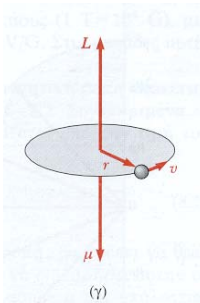
Η στροφορμή. Στην κλασική της έκφραση $L = mvr$

Μαγνητική ροπή φορτίου σε τροχιά $\vec{\mu} = \frac{q}{2m}\vec{L}$

γυρομαγνητικός λόγος $q/2m$

Μαγνητική ροπή λόγω περιστροφής

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



Η σχέση ισχύει και στο κβαντομηχανικό ανάλογο ⇒ κβάντωση της μαγνητικής ροπής

$$|\vec{\mu}| = -\left(\frac{e}{2m}\right)|\vec{L}|$$

$$|\vec{\mu}_z| = -\left(\frac{e}{2m}\right)|\vec{L}_z|$$

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Ατομική Δομή

Μαγνητική ροπή λόγω περιστροφής

Να προσδιορισθεί το μέτρο της μαγνητικής ροπής ενός ηλεκτρονίου λόγω της τροχιακής περιστροφής του.

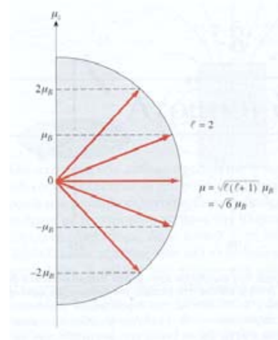
$$|\vec{\mu}_L| = -\frac{e}{2m}\cdot|\vec{L}| = -\frac{e}{2m}\cdot\sqrt{l(l+1)}\,\hbar = -\left(\frac{e\hbar}{2m}\right)\cdot\sqrt{l(l+1)} = \;\Rightarrow\; |\vec{\mu}_L| = -\mu_B\cdot\sqrt{l(l+1)}$$

Μαγνητόνη του Bohr

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9,274\times10^{-24}\frac{J}{T} = 9,274\times10^{-24}\,A\cdot m^2$$

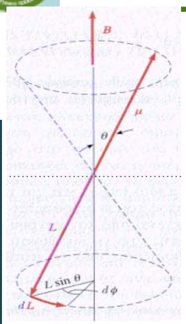
Να προσδιορισθεί η προβολή της μαγνητικής ροπής ενός ηλεκτρονίου λόγω της τροχιακής περιστροφής του στον άξονα z.

$$|\vec{\mu}_{L_z}| = -\frac{e}{2m}\cdot|\vec{L}_z| = -\frac{e}{2m}\cdot(m_l\cdot\hbar) \;\Rightarrow\; |\vec{\mu}_{L_z}| = -\mu_B\cdot m_l$$



Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Ατομική Δομή

Δυναμική ενέργεια σε μαγνητικό πεδίο



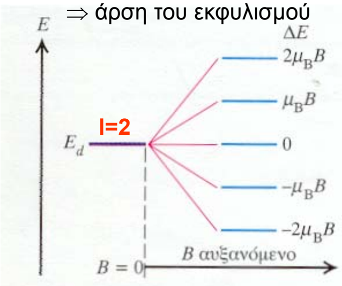
Γωνία μεταξύ $\vec{L}$ και $\vec{B}$ (άξονα z):

$$\cos\vartheta = \frac{L_z}{|\vec{L}|} = \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}}$$

$$U_{\substack{\text{μαγνητικού}\\ \text{πεδίου}}} = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}$$

$$\begin{aligned} U_{\substack{\text{μαγνητικού}\\ \text{πεδίου}}} &= -\mu\cdot B\cdot\cos\theta \\ &= -\mu_z\cdot B \\ &= -(-m_l\cdot\mu_B)\cdot B \Rightarrow \\ U_{\substack{\text{μαγνητικού}\\ \text{πεδίου}}} &= m_l\cdot\mu_B\cdot B \end{aligned}$$

διαφορετική ενέργεια για κάθε προβολή ⇒ άρση του εκφυλισμού



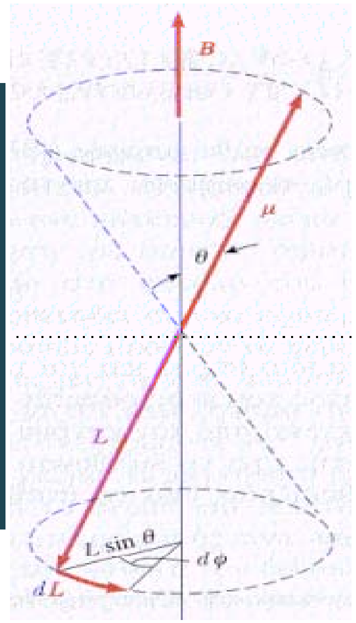
Η ιδεατική μεταπτωτική κίνηση, τώρα γίνεται πραγματική λόγω του Β. Η συχνότητα μετάπτωσης είναι ω_L

Μετάπτωση Larmor

$$\omega_L = \frac{eB}{2m}$$

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Ατομική Δομή

Μετάπτωση Larmor



Η στροφορμή μεταβάλεται λόγω της ροπής

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{\tau} \qquad \vec{\tau} = \vec{\mu}\times\vec{B}$$

Η γωνία θ δεν αλλάζει, η στροφορμή περιστρέφεται στο xy επίπεδο

$$\frac{d|\vec{L}|}{dt} = \frac{|\vec{L}|\sin\theta\cdot d\phi}{dt}$$

Το μέτρο της ροπής

$$|\vec{\tau}| = |\vec{\mu}|\cdot|\vec{B}|\cdot\sin\theta$$

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{|\mu|B}{|L|} \qquad |\mu| = \frac{e}{2m}|L|$$

συχνότητα Larmor $\omega_L = \dfrac{d\phi}{dt} = \dfrac{eB}{2m}$

Άτομο σε μαγνητικό πεδίο

- Μαγνητική ροπή $\mu = m_l \mu_B = m_l \dfrac{e\hbar}{2m}$
- συχνότητα μετάπτωσης Larmor $\omega_L = \dfrac{eB}{2m}$
- ενέργεια λόγω μαγνητικού πεδίου $U_{B,m_l} = -m_l \mu_B B = -m_l \hbar \omega_L$
- Ολική ενέργεια $E = E_n - m_l \hbar \omega_L$

Οι κυνατοσυναρτήσεις του ηλεκτρονίου δεν αλλάζουν. Άλλάζουν:
- οι ιδιοτιμές της ενέργειας: άρση εκφυλισμού
- η μεταπτωτική κίνηση γίνεται πραγματική: μετάπτωση Larmor

Παράδειγμα 8.1, σελίδα 257

Υπολογίστε τη μαγνητική ενέργεια και τη συχνότητα Larmor για ένα ηλεκτρόνιο στη στάθμη n=2 του υδρογόνου, δεχόμενοι ότι το άτομο βρίσκεται σε μαγνητικό πεδίο έντασης B=1.00 T.

$$U^{\mu\alpha\gamma\nu\eta\tau\iota\kappa o\acute{\upsilon}}_{\pi\epsilon\delta\acute{\iota}o\upsilon} = m_l \cdot \mu_B \cdot B$$

Μαγνητόνη του Bohr

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9,274\times10^{-24}\,\frac{J}{T} = 9,274\times10^{-24}\,A\cdot m^2$$

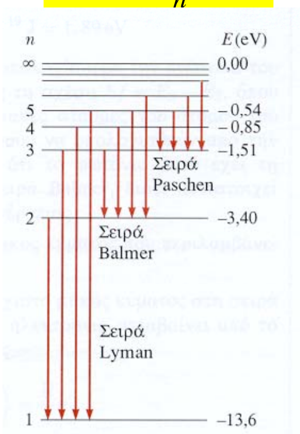
Μετάπτωση Larmor

$$\omega_L = \frac{eB}{2m} = \frac{\mu_B B}{\hbar}$$

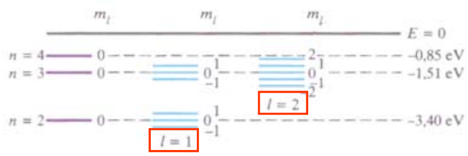
Ενέργεια στο άτομο του υδρογόνου

Χωρίς μαγνητικό πεδίο

$$E_{n,l,m_l} = \mathrm{E}_{Coulomb} = \frac{-13.6}{n^2}eV$$



Εφαρμογή μαγνητικού πεδίου

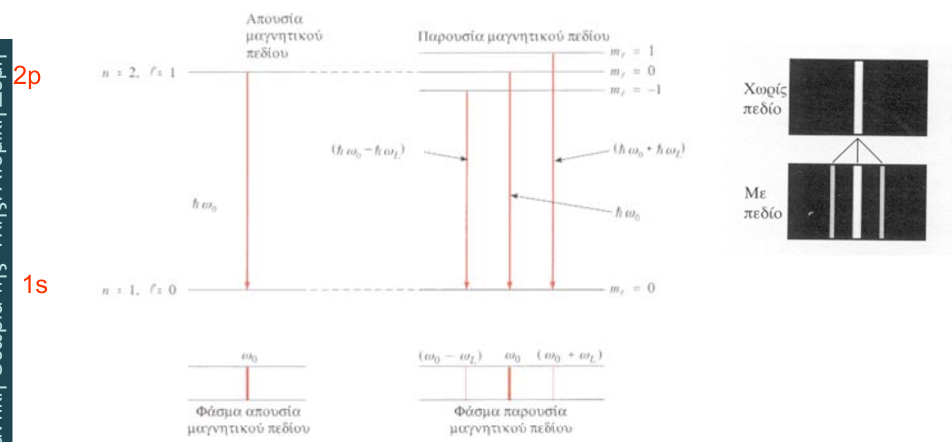


$$E_{n,l,m_l} = \mathrm{E}_{Coulomb} + U^{\mu\alpha\gamma\nu\eta\tau\iota\kappa o\acute{\upsilon}}_{\pi\epsilon\delta\acute{\iota}o\upsilon} = \frac{-13.6}{n^2}eV + m_l \cdot \mu_B \cdot B$$

n = 1 — 0 — −13,6 eV, l = 0

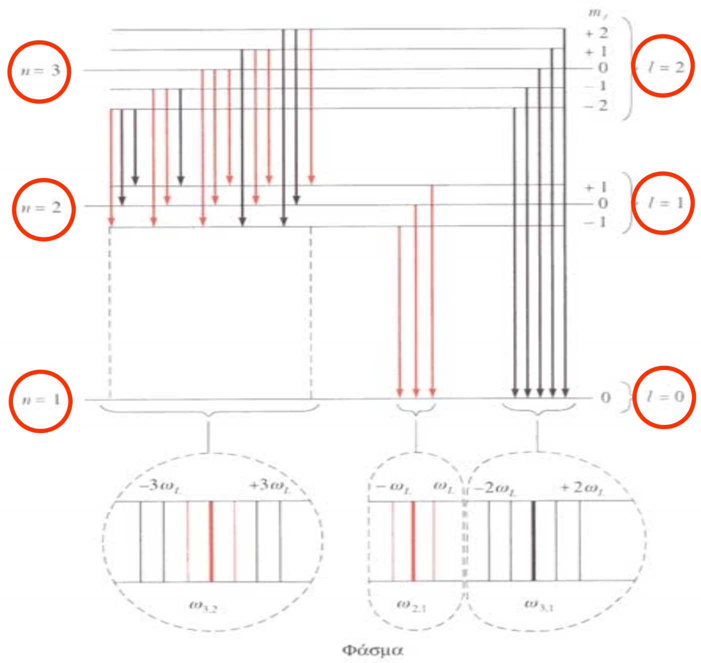
Μερική άρση του εκφυλισμού

Η μετάβαση 2p→1s στο υδρογόνο



Φαινόμενο Zeeman

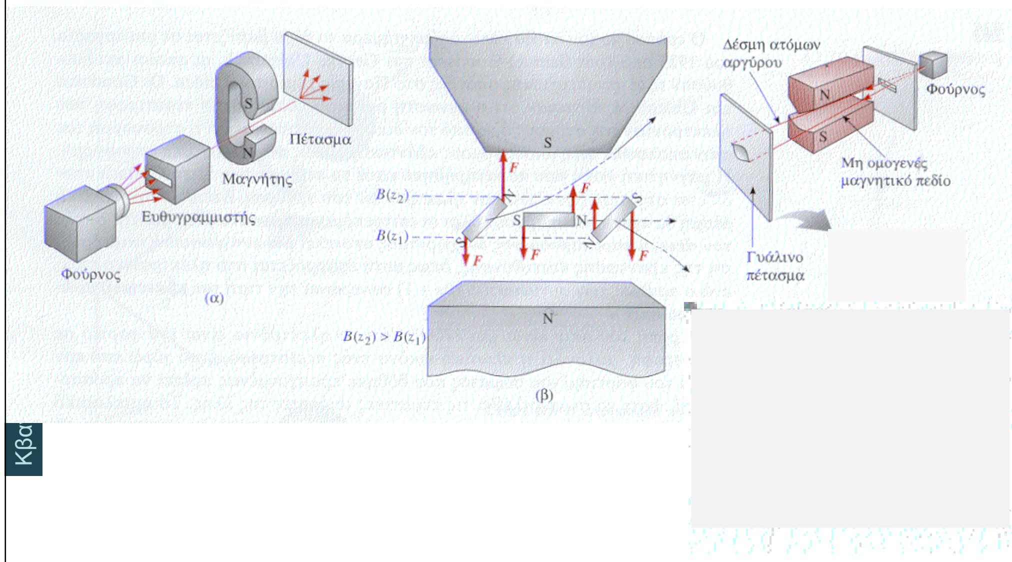
Κανόνες επιλογής



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

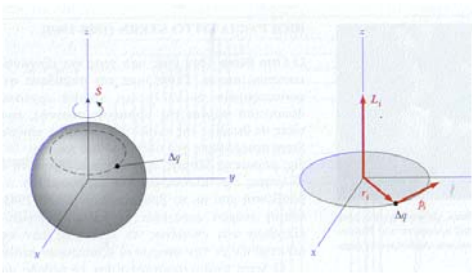
Κβαντική Θεωρία τη... Ατομική Δομή

Πείραμα Stern-Gerlach



Κβα

Στροφορμή λόγω ιδιοπεριστροφής



$$\left|\vec{S}\right| = \sqrt{s(s+1)}\,\hbar$$

$$\acute{o}\pi o \upsilon\ s \text{ ο κβαντικό αριθμός ττο σπιν}$$

Ποιες οι τιμές του κβαντικού αριθμού του σπιν ;

-Έχουμε 2 δυνατές προβολές του σπιν
-Οι δύο προβολές εισαπέχουν κατά ένα
Δηλ m_s=-s, -s+1, …, s-1, s

οι προβολές είναι $m_s = \pm 1/2$ και **s=1/2**

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Ατομική Δομή

Φερμιόνια - Μποζόνια

Σωμάτιο	[redacted]	Σπίν (s)	Στατιστική
Ηλεκτρόνιο	[redacted]	1/2	Φερμιόνιο
Ποζιτρόνιο	[redacted]	»	»
Πρωτόνιο	[redacted]	»	»
Νετρόνιο	[redacted]	»	»
μ-μεσόνιο	[redacted]	»	»
α-σωμάτιο	[redacted]	0	Μποζόνιο
Άτομο Ηλίου (Βασική κατάσταση)	[redacted]	0	»
π-μεσόνιο	[redacted]	0	»
Φωτόνιο	[redacted]	1	»
Δευτέριο	[redacted]	1	»

Ημιακέραιο σπιν ⇨ Φερμιόνια (Fermions)

Ακέραιο σπιν ⇨ Μποζόνια (Bosons)

Φερμιόνια ⇨ Απαγορευτική αρχή του Pauli

Κβαντική Θεωρία της Ύλης: Ατομική Δομή

Τροχιακή στροφορμή – Στροφορμή λόγω σπιν

Μέτρο τροχιακής στροφορμής :

$$\left|\vec{L}\right| = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar,$$

$$l = 0,1,\ldots,n-1$$

Προβολή τροχιακής στροφορμής στον άξονα z :

$$L_z = m_l\,\hbar,$$

$$m_l = -l,-l+1,..,l-1,l$$

Γωνία μεταξύ $\vec{L}$ και άξονα z :

$$\cos\vartheta = \frac{L_z}{\left|\vec{L}\right|} = \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}}$$

Μέτρο στροφορμής λόγω spin :

$$\left|\vec{S}\right| = \sqrt{s(s+1)}\,\hbar,$$

$s = \frac{1}{2}$ *για το ηλεκτρόνιο, πρωτόνιο, νετρόνιο*

$s = 1$ *για το φωτόνιο*

Προβολή στροφορμής spin στον άξονα z :

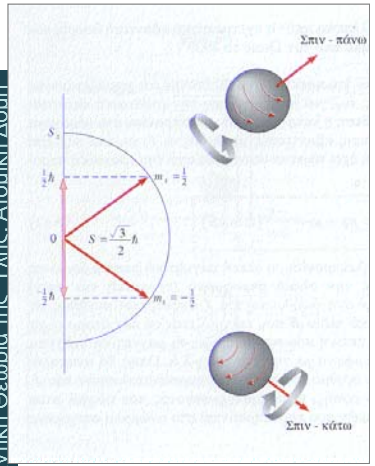
$$S_z = m_s\,\hbar,$$

$$m_s = -s,-s+1,\ldots,s-1,s$$

Γωνία μεταξύ $\vec{S}$ και άξονα z :

$$\cos\vartheta = \frac{S_z}{\left|\vec{S}\right|} = \frac{m_s}{\sqrt{s(s+1)}}$$

Στροφορμή σπιν του ηλεκτρονίου



Κβαντικός αριθμός του σπιν για το ηλεκτρόνιο

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

στροφορμή λόγω ιδιοπεριστροφής του ηλεκτρονίου

$$\left|\vec{S}\right| = \sqrt{s(s+1)}\cdot\hbar = \frac{\sqrt{3}}{2}\,\hbar$$

Προβολή της στροφορμής σπιν

$$S_z = m_s\cdot\hbar,\ \text{όπου}\ m_s = \pm\frac{1}{2}$$

Παράδειγμα 8.2, σελίδα 264: α) Υπολογίστε τις γωνίες ανάμεσα στον άξονα z και στον άξονα περιστροφής για το περιστρεφόμενο ηλεκτρόνιο, στην άνω και στην κάτω κατάσταση του σπιν. **β)** Πως θα μπορούσαμε να αποδώσουμε παραστατικά την εγγενή ασάφεια των συνιστωσών x και y της στροφορμής του σπιν;

Άσκηση 8.1

- Το φωτόνιο είναι σωματίδιο με σπιν 1. Υπολογίστε τις δυνατές γωνίες ανάμεσα στον άξονα z και στον άξονα περιστροφής για το φωτόνιο.

Μαγνητική ροπή ηλεκτρονίου λόγω σπιν

$$\vec{\mu}_s = -\left(\frac{e}{2m}\right)\cdot g\cdot\vec{S},$$

με $g = 2$ για το ηλεκτρόνιο

Να προσδιορισθεί το μέτρο της μαγνητικής ροπής ενός ηλεκτρονίου λόγω της ιδιοπεριστροφής του.

$$\left|\vec{\mu}_S\right| = -\frac{e}{2m}\cdot g\cdot\left|\vec{S}\right| = -\frac{e}{2m}\cdot g\cdot\sqrt{s(s+1)}\,\hbar = -\left(\frac{e\hbar}{2m}\right)\cdot 2\cdot\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)} \quad \Rightarrow \quad \left|\vec{\mu}_S\right| = -\sqrt{3}\cdot\mu_B$$

Μαγνητόνη του Bohr

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9{,}274\times10^{-24}\,\frac{J}{T} = 9{,}274\times10^{-24}\,A\cdot m^2$$

Να προσδιορισθεί η προβολή της μαγνητικής ροπής ενός ηλεκτρονίου λόγω της ιδιοπεριστροφής του στον άξονα z.

$$\left|\vec{\mu}_{S_z}\right| = -\frac{e}{2m}\cdot g\cdot\left|\vec{S}_z\right| = -\frac{e}{2m}\cdot 2\cdot(m_S\cdot\hbar) = -2\cdot\mu_B\cdot m_S \quad \Rightarrow \quad \left|\vec{\mu}_{S_z}\right| = \begin{cases} -\mu_B & \text{για } S_Z = \frac{1}{2} \\ \mu_B & \text{για } S_Z = -\frac{1}{2} \end{cases}$$

Αλληλεπίδραση σπιν - μαγνητικού πεδίου

Υπολογίστε την ενέργεια αλληλεπίδρασης ενός s ηλεκτρονίου σε μαγνητικό πεδίο μέτρου 2.00 T.

$$\boxed{U^{\mu\alpha\gamma\nu\eta\tau\iota\kappa o\acute{\upsilon}}_{\pi\varepsilon\delta\acute{\iota}o\upsilon} = -\vec{\mu}_S \cdot \vec{B}}$$

$$\vec{\mu}_s = -\left(\frac{e}{2m}\right)\cdot g \cdot \vec{S},$$

$$\mu\varepsilon\ g = 2\ \gamma\iota\alpha\ \tau o\ \eta\lambda\varepsilon\kappa\tau\rho\acute{o}\nu\iota o$$

$$\Gamma\omega\nu\acute{\iota}\alpha\ \mu\varepsilon\tau\alpha\xi\acute{\upsilon}\ \vec{S}\ \kappa\alpha\iota\ \acute{\alpha}\xi o\nu\alpha\ z:$$

$$\cos\vartheta = \frac{S_z}{\left|\vec{S}\right|} = \frac{m_s}{\sqrt{s(s+1)}}$$

$$\begin{aligned}
U^{\mu\alpha\gamma\nu\eta\tau\iota\kappa o\acute{\upsilon}}_{\pi\varepsilon\delta\acute{\iota}o\upsilon} &= -\vec{\mu}_S \cdot \vec{B} \\
&= -\left(-\frac{e}{2m}\cdot g \cdot \vec{S}\right)\cdot \vec{B} \\
&= \frac{e}{2m}\cdot g \cdot \left|\vec{S}\right| \cdot \left|\vec{B}\right| \cdot \cos\vartheta \\
&= \frac{e}{2m}\cdot g \cdot \left(\sqrt{s(s+1)}\cdot \hbar\right)\cdot \left|\vec{B}\right| \cdot \frac{m_s}{\sqrt{s(s+1)}} \Rightarrow
\end{aligned}$$

$$U^{\mu\alpha\gamma\nu\eta\tau\iota\kappa o\acute{\upsilon}}_{\pi\varepsilon\delta\acute{\iota}o\upsilon} = \mu_B \cdot 2 \cdot m_s \cdot \left|\vec{B}\right|$$