

VIŠE-ELEKTRONSKI ATOMI

Sada imamo posla sa Coul. interakcijama $e-e$, ali i $e-e$ adobe interakcije, osim toga važi Paulijev princip. Elektroni bliži jezgri jače su vezani za zatvorenu konfiguraciju (kao upr. konfiguracije plemenitih gasova) važi da je $L=0, S=0, J=0$.

Elektroni koji ne čine zatvorenu konfiguraciju nazivaju se vanjsci ili optički elektroni. Atom karakteriziraju stanja optičkih elektrona. Ukupni ugaoni moment vanjskih elektrona formira se prema vektorskom modelu od $2n$ vektora $\vec{l}_1, \vec{l}_2, \dots, \vec{l}_n, \vec{s}_1, \vec{s}_2, \dots, \vec{s}_n$. Međutim da li se prvo kombinuju (slazu) orbitalni momenti \vec{l}_i , i spinski momenti \vec{s}_i , a zatim se formira ukupni ugaoni moment $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ ili se prvo nalazi ukupni moment za svaki e^- : $\vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i$ a onda se: $\vec{J} = \sum \vec{j}_i$? Redosled sabiranja ~~se~~ zavisiće od veličine energije veze tj. od toga koja je veza jača da li između \vec{l} -ova i \vec{s} -ova ili veza između \vec{l}_i i \vec{s}_i . Tek izučavanje spektara može da odgovori da li je jača $\vec{l}-\vec{s}$ ili $\vec{s}-\vec{s}$ veza. Pokazuje se da kod atoma sa više optičkih elektrona jača je $\vec{s}-\vec{s}$ veza od $\vec{l}-\vec{s}$ veze. Ta jaća veza zove se Russell-Saundersova veza. Ona pokazuje da Coul. interakcija prevladava nad spin-orbitalnom interakcijom.

Dalje po RS metodi

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^n \vec{l}_i ; \quad \vec{S} = \sum_{i=1}^n \vec{s}_i ; \quad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}.$$

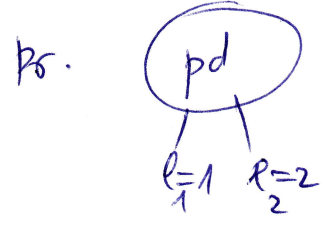
MAZIV TERMA

$k=2S+1$

1	single	7	septet
2	doublet	8	oktet
3	triplet	9	nonet
4	kvartet	10	deset
5	kvintet	11	undecet
6	seksitet		

$g = 2J + 1$ statistička težina

$(-1)^{l_1+l_2} = +1$ su parno $(-1)^{\sum l_i} = +1$ parno
 $(-1)^{l_1+l_2} = -1$ su neparno $(-1)^{\sum l_i} = -1$ neparno.



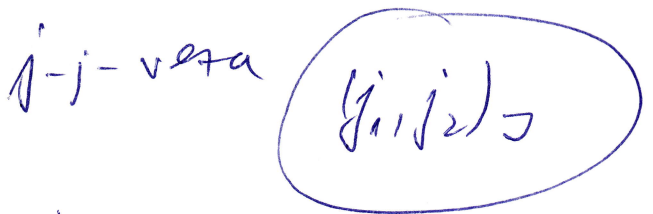
$S=0 \rightarrow$ antisim.
 $S=1 \rightarrow$ sim.

$L = l_1+l_2, l_1+l_2-1, \dots, |l_1-l_2|$

$L = 3, 2, 1$
 $S = 0, L = 3 \rightarrow J = 3$

ul - ekvivalente e.

$p^2 \quad l_1=1, l_2=1 \quad L = 0, 1, 2$



Za dva ekvivalente e-
 važi i pravilo da su
 moguća stanja za
 koje je $L+S =$ paran broj.

Pr. sp

$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})_0; (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})_1; (\frac{1}{2}, \frac{3}{2})_1; (\frac{1}{2}, \frac{3}{2})_2$

Pravilo Madlunga:

Popunjavaj ide sa porastom $n+l$, Za svaku vrednost
 sume ($n+l$) popunjavaj ide za porastu $n-l$.

$n+l$	1	2	3	4	5	6	7	8						
ELECTR. STATE	1s	2s	2p	3s	3p	4s	3d4p	5s	4d5p	6s	4f	5d6p	7s	5f
Pr. broj	1	2	3	4	5	6	7	8						

~~1s~~
~~2s 2p~~
~~3s 3p 3d~~
~~4s 4p 4d 4f~~
~~5s 5p 5d 5f~~
~~6s 6p 6d~~
~~7s~~

Spin-orbitalna interakcija doprinosi finoj strukturi stanja. Ako zanemarimo ovu interakciju tada stanja su okarakterisana sa $2S+1 L_J$

gde su J, L, S - odgovarajući kv. brojevi.

Ustajane su oznake $L = 0, 1, 2, 3, \dots$
 S, P, D, F, \dots

$$S = |\vec{s}_1 + \vec{s}_2 + \dots + \vec{s}_n|_{\text{min}}, (|\vec{s}_1 + \vec{s}_2 + \dots + \vec{s}_n|_{\text{min}+1}), \dots, (s_1 + s_2 + \dots + s_n)$$

$$L = |\vec{l}_1 + \vec{l}_2 + \dots + \vec{l}_n|_{\text{min}}, (|\vec{l}_1$$

Kada je zadata konfiguracija elektrona, može da se odredi redosled mogućih nivoa. Tu važi Hundovo pravilo: Najnižu energiju ima nivo kod kojeg je kvantni broj spina S najveći. Ako termovi imaju isto S , onda najnižu energiju pokazuje ovaj koji ima najveći L .

Pr. dva e^- kod kojih je $n_1 = n_2$; $l_1 = l_2 = 1$ onda mogući termovi su $^1S, ^3P, ^1D$; Najniži će biti nivo 3P a onda 1D pa 1S .

U odnosu na J - ako pri porastu J nivoi multipliciteta se smanjuju kažemo da je reverzibilna struktura
 - ako se pri porastu J nivoi multipliciteta rastu - normalna struktura.

Pravilo kaže da ako je broj e^- u nekom stanju veći od polovine mogućeg broja e^- onda je struktura reverzibilna, a inače je normalna

Pr. u slučaju $n_1 = n_2$; $l_1 = l_2 = 1$ struktura nivoa biće normalna što znači najniži nivo je 3P_0 pa onda 3P_1

$$S_{\text{max}} - L_{\text{max}} \begin{cases} J_{\text{max}} \text{ (više od pola)} \\ J_{\text{min}} \text{ (≤ od pola)} \end{cases}$$

1s2

$$n=1, l=0, m=0 \quad L=l_1+l_2=0, \quad (-1)^L=0$$

prostorna f je je simetrična
 \Rightarrow spinova mera da je antisim. tj. $S=0$

Moguća stanja je samo 1S_0

to potvrđuje i eksperiment, kako je ukupni
 mehanički moment (orbitalni plus spinovi)
 jednak nuli, to je i magnetni moment
 jednak nuli: što znači, atom helijuma
 u normalnom stanju treba da bude
 diamagnetni i nema zemanaevsko
 cepanje. To takođe potvrđuje eksperiment.

1s2s

$$l_1=0, l_2=0 \quad L=0, \quad S=0, 1$$

to su ne-ekvivalentni elektroni $n \neq n'$
 i sada su moguća singletna stanja 1S_0
 i tripletna 3S_1 .

Tripletna stanja se razlikuju od singletnog
 ne samo po energiji nego je i
 paramagnetna i javlja se zemanaevsko
 cepanje.

1s2p

$$l_1=0, l_2=1 \quad L=1, \quad S=0, 1$$

Moguća stanja 1P_1 singlet

$^3P_{2,1,0}$ tripletna, orbitelni
 se razlikuju.

Pojava simetrične i antisimetrične w.f. ima
klasičnog analogona

Fot. Fig. 3.3. p. 49.

Primer iz mehanike $6C$ $1s^2 2s^2 2p^2$ (primenio)
Hundovog pravila

Moguće vrednosti za L i S su: $L = 2, 1, 0$; $S = 1, 0$.

Najnižu energiju ima term sa najvećom vrednošću S -a
tj. $S=1$ i najvećom mozgdom (za dato S) vrednošću L -a
tj. $L=1$. Pošto je gusica $2p^2$ popunjena manje od pola
sledi da će osnovni term imati vrednost za ukupni
moment $J = |L - S| = 0$ tj. 3P_0