VIŠE-ELEKTRONSKI ATOMI

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

Elektroni koji ne čine zatvorenu konfiguraciju nazivaju se valentni ili optički elektroni. Atom karakterišu stanja optičkih elektrona. Ukupni ugaoni moment valentnih elektrona formira se prema vektorskom modelu od $2n$ vektora $\vec{l}_1, \vec{l}_2, \ldots, \vec{l}_n$, $\vec{s}_1, \vec{s}_2, \ldots, \vec{s}_n$. Međutim da li se prvo kombinuju (slažu) 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 ~~sa~~ 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 jača veza zove se Russell-Saundersova veza. Ona pokazuje da Coul. interakcija preovladava nad spin-orbitalnom interakcijom.

Dakle po RS metodi

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

Бенгић стр. 106.

$k=2S+1$	NAZIV TERMA		
1	singlet	7	septet
2	dublet	8	oktet
3	triplet	9	nonet
4	kvartet	10	decitet
5	kvintet	11	undecitet
6	sekstet		

$g = 2J+1$ statistička težina

$(-1)^{l_1+l_2} = +1$ stanje parno $\quad (-1)^{\sum_i l_i} = +1$ parno

$(-1)^{l_1+l_2} = -1$ stanje neparno $\quad (-1)^{\sum_i l_i} = -1$ neparno.

pr. pd $\quad S=0 \rightarrow$ antisim.

$S=1 \rightarrow$ sim.

$l_1 = 1 \quad l_2 = 2$

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

$L = 3, 2, 1$

$S = 0, \quad L = 3 \quad J = 3$

nl - ekvivalentni e.

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

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

j-j-veza $\quad (j_1, j_2)_J$

pr. sp

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

Pravilo Madelunga:

Popunjavanje ide sa porastom n+l, za svaku vrednost sume (n+l) popunjavanje ide sa porastom n-a.

n+l	1	2	3		4		5		6		7		8
elektr. stanja	1s	2s	2p	3s	3p	4s	3d 4p	5s	4d 5p	6s	4f 5d 6p	7s	5f
Periode	1	2		3		4		5		6		7	

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.

Ustaljene su oznake $L = 0, 1, 2, 3 \ldots$
$S, P, D, F \ldots$

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

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

Kada je zadata konfiguracija electrona, 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 onaj 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 i ^1D; Najniži će biti nivo ^3P a onda ^1D pa ^1S.

U odnosu na J
- ako pri porastu J nivoi multipleta se smanjuju kaženo daje reverzibilna struktura
- ako se pri porastu J nivoi multipleta rastu – normalna struktura.

Pravilo kaže da ako je broj e^- u nekom stanju nl 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_{max} – L_{max}
- J_{max} (više od pola)
- J_{min} ($\leq$ od pola)

Sistematu atomskih stan Бехбиб стр. 106.

$1s^2$ $\quad n=1,\ l=0,\ m=0 \quad L=l_1+l_2=0, \quad (-1)^L=0$

prostorna f-ja je simetrična

$\Rightarrow$ spinska mora da je antisim. tj. $S=0$

Moguće stanje je samo $\boxed{{}^1S_0}$

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

$1s2s$ $\quad l_1=l_2=0 \quad L=0, \quad S=0,1$

to su ne-ekvivalentni electroni $n\neq n'$

i sada su moguća singletno stanje $\boxed{{}^1S_0}$

i tripletno $\boxed{{}^3S_1}$.

Tripletno stanje se razlikuje od singletnog ne samo po energiji nego je i paramagnetno i javlja se zemanovsko cepanje.

$1s2p$ $\quad l_1=0,\ l_2=1 \quad L=1, \quad S=0,1$

Moguća stanja ${}^1P_1$ singlet

${}^3P_{2,1,0}$ tripletno, energetski se razlikuju.

Foot Fig. 3.5 p. 53

3.4. p. 50

Pojava simetrične i antisimetrične w.f. ima klasičnog analogona

Foot. Fig. 3.3. p. 49.

Primer iz magnetike ${}^{6}C$ $1s^2 2s^2 2p^2$ $\underline{2p^2}$ (p.114) primena 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 mogućom (za dato S) vrednošću L-a tj. $L=1$. Pošto je ljuska $2p^2$ popunjena manje od pola sledi da će osnovni term imati vrednost za ukupni moment $J = |L - S| = 0$ tj. ${}^3P_0$