

**МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ имени М.В. ЛОМОНОСОВА**

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

ЗАДАЧА

МАГНИТНЫЙ МОМЕНТ АТОМА

СПЕЦПРАКТИКУМ КАФЕДРЫ МАГНЕТИЗМА

МОСКВА 2022

Составители: Стрелков Н.В.
Андрианов Т.А.
Перов Н. С.
Шапаева Т.Б.

Цель работы – вычислить магнитные моменты атомов ряда элементов, используя их электронные конфигурации, сравнить между собой полученные величины, а также сопоставить между собой табличные значения магнитных восприимчивостей для этих элементов.

1. Модель атома Резерфорда (1911 г.)

Согласно модели Резерфорда, атом состоит из массивного положительно заряженного ядра, находящегося в центре атома, вокруг которого вращаются электроны. Размеры ядра ($\sim 10^{-14}$ - 10^{-15} м) значительно меньше (примерно в 10^4 раз) размеров самого атома (10^{-10} м). Рассмотрим классическую модель атома

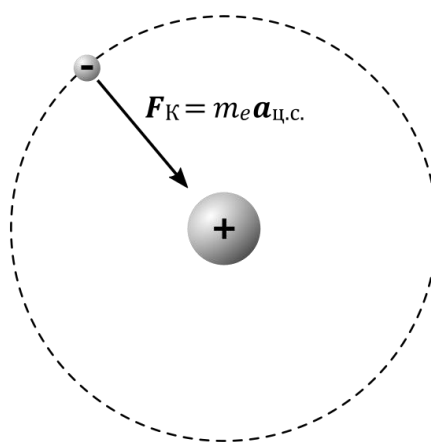


Рис. 1 Модель атома водорода.

водорода. На Рис. 1 показана планетарная модель атома Резерфорда.

Основная сила, действующая на электрон в атоме водорода – это сила кулоновского притяжения между электроном и ядром атома F_K :

$$F_K = m a_{ц.с.}, \quad (1)$$

где $a_{ц.с.}$ – центростремительное ускорение, возникающее при вращении электрона вокруг ядра атома. Используя известные выражения для F_K и $a_{ц.с.}$, можно переписать (1) в единицах СИ в виде:

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e_c^2}{R^2} = \frac{m_e v^2}{R}, \quad (2)$$

где ϵ_0 – диэлектрическая постоянная ($\approx 8.854 \times 10^{-12}$ Ф/м), e_c – заряд электрона ($\approx 1.6 \times 10^{-19}$ Кл), m_e – масса электрона ($\approx 9 \times 10^{-31}$ кг), R и v – радиус орбиты электрона и скорость его движения, соответственно. Выражение (2) можно упростить, и появляется простая связь между скоростью вращения и радиусом орбиты электрона:

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{R} = m_e v^2. \quad (3)$$

2. Модель атома Резерфорда-Бора (1913 г.)

С точки зрения классической электродинамики, электрон в модели Резерфорда, двигаясь вокруг ядра, должен был бы непрерывно излучать энергию и очень быстро потеряв ее, упасть на ядро.

Чтобы преодолеть эту проблему, Бор ввел допущение, суть которого заключается в том, что электроны в атоме могут двигаться только по определенным (стационарным) орбитам, находясь на которых они не излучают энергию, а излучение или поглощение происходит только в момент перехода с одной орбиты на другую. Модель атома Резерфорда-Бора основана на двух постулатах Бора:

1. Атом может находиться только в особенных стационарных или квантовых состояниях, каждому из которых отвечает определенная энергия. Находясь в стационарном состоянии, атом не излучает электромагнитные волны.
2. Излучение и поглощение энергии атомом происходит при переходе из одного стационарного состояния в другое.

3. Волна де Бройля

Объяснить существование стационарных орбит можно с помощью гипотезы де Бройля, согласно которой движение электрона в атоме можно сравнить с поведением электромагнитной волны в пространстве конечного размера. Если частица обладает импульсом с модулем p , то с ней связана волна (волна де Бройля), имеющая длину:

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (4)$$

где h – постоянная Планка ($\approx 6.626 \times 10^{-34}$ Дж·с).

Допущение того, что волны могут быть связаны не только с квантами света, но и массивными частицами, было сделано Луи де Бройлем в 1923-1924 годах. Соотношение де Бройля позволило объяснить существование разрешенных орбит электронов вокруг ядра, по которым они могли бы сколь угодно долго вращаться без потери энергии. Этот факт можно проиллюстрировать с помощью уравнения (4). Если считать электрон частицей, то, для того чтобы он оставался на своей орбите, у него должна быть одна и та же скорость (или импульс) на любом расстоянии от ядра. Если же считать электрон волной, то для того, чтобы он вписался в орбиту заданного

радиуса, надо, чтобы длина окружности этой орбиты была равна целому числу его длин волн:

$$2\pi R_n = n\lambda, \quad (5)$$

где n – целое число, больше нуля.

Иными словами, длина окружности орбиты электрона может равняться только одной, двум, трем (и так далее) длинам его волн (Рис. 2). В случае нецелого числа длины волны электрон просто не попадет на нужную орбиту.

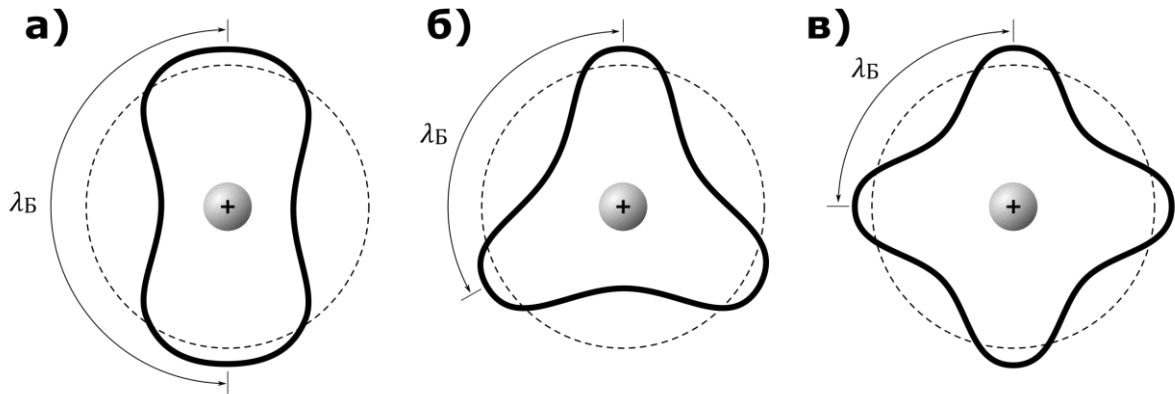


Рис. 2 Волны де Бройля в модели атома водорода для (а) $n=2$ (б) $n=3$ и (в) $n=4$.

Тогда, объединяя выражения (3)-(5), получим:

$$R_n = 4\pi\epsilon_0 \frac{n^2 \hbar^2}{e_c^2 m_e}, \quad (6)$$

где $\hbar = h/2\pi$ – приведенная постоянная Планка ($\approx 1.055 \times 10^{-34}$ Дж·с). Радиус первой Боровской орбиты (при $n=1$) примерно равен 5.3×10^{-11} м. Используя соотношения (4) и (5), можно получить скорость электрона на орбите (уровне) с индексом n :

$$v_n = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e_c^2}{n\hbar}. \quad (7)$$

Используя выражение (7), можно оценить скорость электрона на первой боровской орбите $v_1 \approx 2 \times 10^6$ м/с.

Энергия электрона в атоме – это сумма потенциальной и кинетической энергии. Следовательно, энергия на уровне n имеет вид:

$$E_n = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e_c^2}{R_n} + \frac{m_e v_n^2}{2}. \quad (8)$$

Используя соотношения (7) и (8), выразим энергию электрона на уровне n :

$$E_n = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{e_c^2}{R_n} + \frac{e_c^2}{2R_n} \right) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e_c^2}{2R_n} = -\frac{m_e}{2} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e_c^2}{n\hbar} \right)^2 = -\frac{Ry}{n^2}, \quad (9)$$

где R_y – постоянная Ридберга, равная примерно 13.6 эВ. Как видно, энергия электрона в атоме определяется радиусом его орбиты или номером энергетического уровня n (Рис. 3). При этом выполняется предельное соотношение: $n \rightarrow \infty, E \rightarrow 0$.

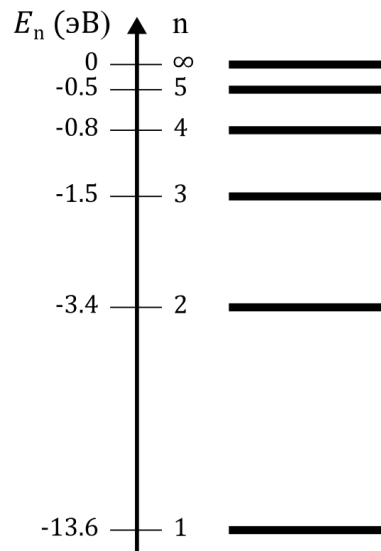


Рис. 3 Энергетические уровни электрона в атоме водорода.

4. Принцип неопределенности

Одно из основных отличий квантовых частиц от классических – отсутствие у них траектории. Отсутствие траектории означает, что квантовая частица не имеет одновременно определенных координат и скорости. Утверждение о том, что частица не может иметь одновременно определенную координату и скорость, называется принципом неопределенности Гейзенберга. Принцип неопределенности имеет количественное выражение в виде неравенства: $\Delta p_i \Delta x_i \geq \hbar/2$, где $i = x, y, z$, Δx и Δp – измеряемое среднеквадратичное отклонение координаты и импульса, соответственно. Формальный переход от квантовой механики к классической можно осуществить, устремив постоянную Планка к нулю.

5. Момент импульса электрона (орбитальный момент)

Модель атома Бора хоть и вводит понятие «квантования», но по сути своей является квазиклассической. Например, мы можем строго определить все три проекции такой величины как момент импульса L электрона:

$$L = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}], \quad (10)$$

где \mathbf{p} – вектор импульса электрона, \mathbf{r} – радиус-вектор электрона. При чисто квантово-механическом рассмотрении задачи о движении отрицательно

заряженного электрона вокруг положительно заряженного ядра она сводится к рассмотрению движения электрона в центрально-симметричном поле, создаваемом ядром одноэлектронного атома. Одним из результатов решения такой задачи также является то, что момент импульса \mathbf{L} и его проекция на одну из выделенных осей, называемой осью квантования (обычно ось z), принимают строго определенные значения, то есть квантуются. При этом две другие проекции остаются неопределенными. Поэтому при чисто квантово-механическом рассмотрении можно говорить об абсолютном значении момента импульса $|\mathbf{L}|$, которое сохраняется и положении \mathbf{L} только относительно одной оси, а полная пространственная ориентация данной физической величины остается неопределенной.

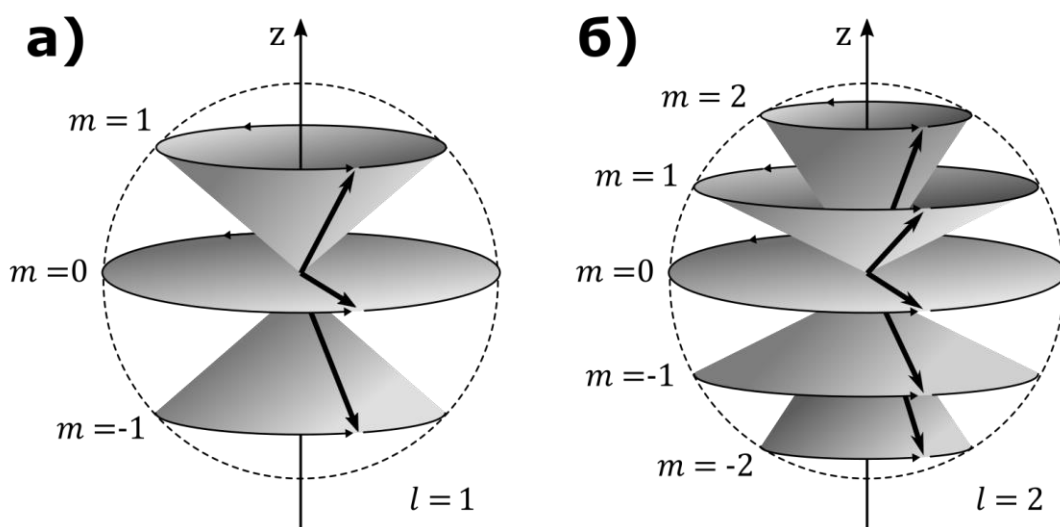


Рис. 4 Проекции m орбитального момента \mathbf{L} на ось квантования z для (а) $l=1$ и (б) $l=2$.

Величина момента импульса в зависимости от квантового числа n (правило квантования) в полуклассической модели Резерфорда-Бора с учетом выражений (6) и (7) имеет вид:

$$L_n = pR_n = m_e v_n R_n = \frac{m_e n \hbar}{m_e R_n} R_n = n \hbar. \quad (11)$$

То есть, в модели атома Резерфорда-Бора стационарные состояния электрона определяются одним квантовым числом n , а энергия и момент импульса определяются выражениями (9) и (11), соответственно. При квантово-механическом подходе к той же самой задаче получается, что стационарные состояния электрона, находящегося в центрально-симметричном поле ядра атома без учета спина определяются тремя квантовыми числами: n – *главное*, l – *орбитальное* и m – *магнитное орбитальное* квантовое число. Главное квантовое число $n > 0$ определяет

уровни энергии атома, орбитальное квантовое число $l=0, 1, 2, \dots, n-1$ определяет абсолютную величину орбитального момента:

$$|\mathbf{L}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}, \quad (12)$$

а проекция орбитального момента на ось квантования z может принимать дискретный набор значений (Рис. 4):

$$L_z = m\hbar, \quad (13)$$

где магнитное орбитальное квантовое число $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$.

Важно отметить, что в квантовой механике вектор физической величины теряет свой смысл, при этом вводится понятие оператора физической величины. Например, при рассмотрении движения электрона в атоме водорода вместо вектора момента импульса \mathbf{L} вводятся оператор квадрата момента импульса \hat{L}^2 и оператор z -проекции момента импульса \hat{L}_z . Квадрат выражения (12) и выражение (13) являются собственными значениями этих операторов, а соответствующие им собственные функции являются волновыми функциями стационарных состояний электрона, в которых точно определяются значения данных физических величин наряду с энергией. Кроме того, стоит отметить, что одному и тому же квантовому числу n может соответствовать несколько квантовых чисел l и m . Это означает, что электрон может иметь одно и то же значение энергии, находясь в нескольких различных (вырожденных) состояниях, которые будут отличаться значениями квантовых чисел l и m , что невозможно в рамках квазиклассической теории Резерфорда-Бора. Помимо этого, в рамках квантовой теории возможно стационарное состояние электрона с нулевым орбитальным моментом ($n=1, l=0$), что, согласно полученному ранее выражению (11), также невозможно в рамках классической задачи о движении электрона в кулоновском поле ядра атома.

6. Орбитальный магнитный момент электрона. Магнетон Бора

Известно, что кольцо площадью S , по которому течет ток I обладает магнитным моментом:

$$\mathbf{M} = IS\mathbf{n}, \quad (14)$$

где \mathbf{n} – вектор нормали к плоскости кольца, зависящий от направления тока. В классической модели атома электрон, вращающийся по орбите, создает ток:

$$I = \frac{e_c}{t} = \frac{e_c}{2\pi R_n/v_n} = \frac{e_c v_n}{2\pi R_n}. \quad (15)$$

Тогда, магнитный момент (14) в зависимости от энергетического уровня n можно легко получить, используя выражения (6) и (7):

$$|M| = IS = \frac{e_c v_n}{2\pi R_n} \pi R_n^2 = \frac{e_c}{2} v_n R_n = n \frac{e_c \hbar}{2m_e},$$

Таким образом, элементарный (минимальный) магнитный момент, создаваемый электроном на первой орбите в атоме водорода, так называемый *магнетон Бора*, имеет вид:

$$\mu_B = \frac{e_c \hbar}{2m_e}, \quad (16)$$

который в единицах СИ примерно равен 9.274×10^{-24} Дж/Тл.

7. Гиромагнитное отношение

Гиромагнитное отношение – это отношение магнитного момента к механическому, которое имеет вид в модели Резерфорда-Бора:

$$\gamma_l = \mu_B / L_n. \quad (17)$$

Используя выражения (11) и (16) для $n=1$, получим:

$$\gamma_l = \frac{e_c}{2m_e}. \quad (18)$$

Иначе говоря, магнитный момент, создаваемый движущимся электроном, определяется его механическим моментом:

$$M_l = \gamma_l L. \quad (19)$$

Очевидно, что проекция магнитного момента на ось квантования z определяется соответствующей проекцией механического момента:

$$M_z = \gamma_l L_z. \quad (20)$$

Рассмотрение задачи о движении электрона с точки зрения квантовой механики имеет более сложный характер, так как приходится рассматривать электрон не как частицу, а иметь дело с функцией плотности состояния электрона. Тем не менее, задача для одноэлектронного атома решается точно, и выражение для магнетона Бора получается аналогичное (16). Проекция орбитального момента L_z квантуется аналогично (13) и связана с магнитным моментом атома как:

$$M_z = \frac{e_c}{2m_e} m \hbar = \mu_B m. \quad (21)$$

Поделив выражение (21) на (13) мы получим выражение аналогичное (18), что говорит о том, что для орбитальных магнитного и механического моментов как в случае квазиклассическом, так и в случае квантово-механическом гиромагнитные отношения совпадают.

8. Спиновый магнитный момент электрона

Гиромагнитное отношение было измерено экспериментально в 1915 г. А. Эйнштейном и В. де Гаазом, однако экспериментальный результат оказался в два раза больше, предсказанного теорией. Это расхождение удалось объяснить только допустив существование у электрона спина.

У квантовой частицы помимо момента импульса, связанного с ее орбитальным движением, может существовать момент количества движения, присущий самой частице. Этот момент называется *собственным механическим моментом* или *спином*. Для электрона спин $s = \hbar/2$, а его проекция на ось квантования $s_z = \pm \hbar/2$. Протоны и нейтроны имеют такое же значение спина. Можно использовать единицы, в которых $\hbar = 1$, тогда говорят, что электрон обладает полуцелым спином.

Спин может принимать как целые значения (спин фотона равен 1), так и полуцелые. Частицы с нулевым и целым спином называются *бозонами*, с полуцелым – *фермионами*. Сам термин «спин» ввели С. Гаудсмит и Д. Уленбек в 1925 г. Они предположили, что электрон обладает собственным механическим и, следовательно, магнитным моментом. Собственный механический момент в этом случае имеет вид:

$$L_s = m_s \hbar, \quad (22)$$

здесь $m_s = \pm 1/2$ – магнитное спиновое число. Спиновое гиромагнитное отношение связывает собственный механический и магнитный моменты:

$$\gamma_s = M_s / L_s, \quad (23)$$

следовательно, спиновый (или собственный) магнитный момент электрона можно записать как:

$$M_s = \gamma_s L_s. \quad (24)$$

По аналогии с орбитальным спиновый магнитный момент электрона можно представить в виде:

$$M_s = \mu_B m_s. \quad (25)$$

Из эксперимента следует, что спиновое гиромагнитное отношение в два раза больше орбитального (18):

$$\gamma_s = \frac{e_c}{m_e}. \quad (26)$$

Необходимо отметить, что введение спина позволяет полностью объяснить эксперименты и получить полностью отвечающие опыту свойства электрона. Поэтому, гиромагнитное отношение записывают в общем виде как:

$$\gamma = g \frac{e_c}{2m_e}. \quad (27)$$

где g – это g -фактор или фактор Ланде, равный 1 для орбитального момента и 2 для спинового.

9. Магнитный момент электрона

Спиновый и орбитальный момент электрона в атоме водорода схематично изображен на Рис. 5.

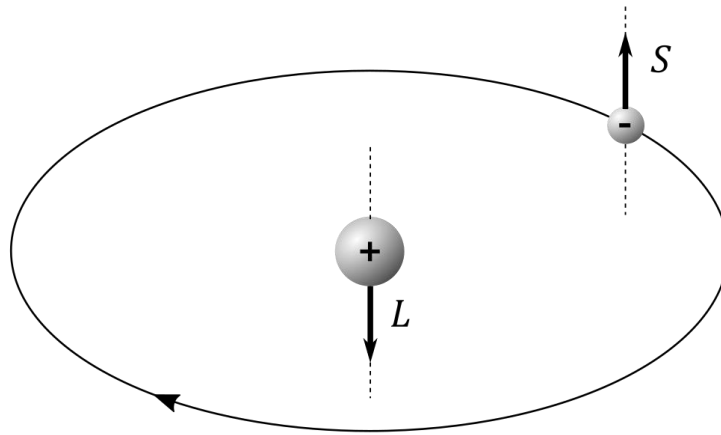


Рис. 5 Спиновый (S) и орбитальный (L) момент электрона в атоме водорода.

Полный магнитный момент электрона равен сумме векторов орбитального магнитного момента и спинового магнитного момента:

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &= \mathbf{M}_l + \mathbf{M}_s, \\ \mathbf{M}_s &= -2 \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L}_s, \\ \mathbf{M}_l &= -\frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L}_z. \end{aligned} \quad (28)$$

Поскольку гиромагнитное отношение для спинового момента не равно гиромагнитному отношению для орбитального момента, вектор полного магнитного момента электрона неколлинеарен вектору полного механического момента (Рис. 6). Таким образом, магнитный момент, которым обладает электрон в атоме, определяется его собственным (спиновым) и орбитальными моментами.

Следует отметить, что магнитный момент ядра атома значительно меньше, чем магнитный момент электронов, поэтому магнитный момент ядра играет важную роль только для тех атомов, в которых электронный магнитный момент равен нулю.

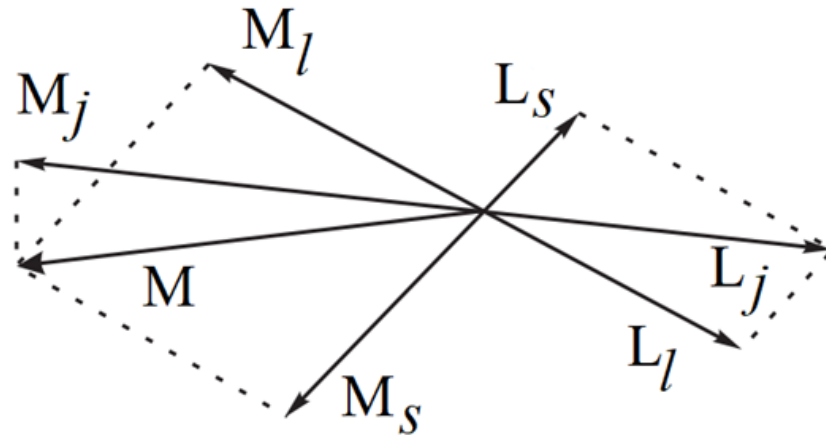


Рис. 6 Сложение спиновых и орбитальных моментов.

10. Магнитный момент во внешнем магнитном поле

Энергия магнитного момента \mathbf{M} в магнитном поле \mathbf{H} определяется соотношением:

$$E = -(\mathbf{M} \cdot \mathbf{H}) = -MH \cos \theta = -M_z H, \quad (29)$$

где θ – угол между магнитным моментом и магнитным полем. Иначе говоря, энергия магнитного момента в магнитном поле – это произведение величины магнитного поля и проекции магнитного момента на это направление. Энергия магнитного момента с учетом пространственного квантования получается из выражений (13), (20), (25), (28) и (29) и имеет вид:

$$E = E_m = -(\mu_B m_s + \gamma_l m \hbar) H. \quad (30)$$

Расстояние между соседними уровнями не зависит от m и равно:

$$\Delta E = E_m - E_{m+1} = \gamma_l \hbar H. \quad (31)$$

Ранее уже было отмечено, что проекция магнитного момента на выделенное направление может принимать строго определенные значения. Экспериментально этот факт подтвержден в опыте Штерна и Герлаха (1922 г.). Известно, что на магнитный момент, помещенный в магнитное поле, в направлении градиента поля действует сила, которая пропорциональна величине этого градиента и параллельна проекции магнитного момента.

Штерн и Герлах пропускали пучок атомов серебра через неоднородное магнитное поле и изучали возникающее в результате отклонение этого пучка

от первоначального направления (Рис. 7). Если атомы не обладают магнитным моментом, то при включении магнитного поля смещения пучка не произойдет, а если обладают, то с классической точки зрения должно наблюдаться размытие пучка, так как возможны любые ориентации магнитного момента относительно поля. При наличии пространственного квантования пучок должен разбиться на несколько пучков, отвечающих возможным значениям проекции магнитного момента. В эксперименте с атомами серебра пучок разделился на два, так как полный магнитный момент электронов в атомах серебра (и связанный с ними спин) имеет ненулевое значение ($1/2$).

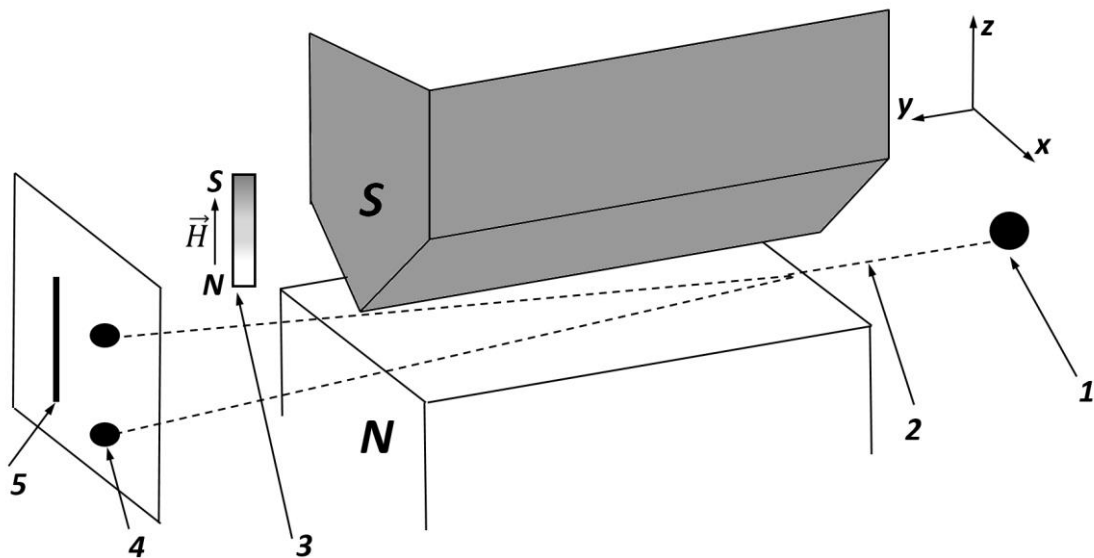


Рис. 7 Схема опыта Штерна и Герлаха. 1 – печь, 2 – пучок атомов серебра, 3 – градиентное магнитное поле, 4 – наблюдаемый результат, 5 – ожидаемый результат в рамках классической теории.

Опыт Штерна и Герлаха был проведен для элементарных частиц и атомов разных химических элементов. Результаты этого опыта подтвердили правильность выводов, сделанных ранее относительно квантования проекции магнитного момента на выделенное направление.

11. Структура многоэлектронного атома

Атом состоит из ядра – неподвижной системы протонов и нейтронов, вокруг которой движутся электроны, обладающие зарядом и спином. Состояние электрона со спином в любом атоме в приближении центрально-симметричного поля характеризуется тем же набором из четырех квантовых чисел, что и в одноэлектронном атоме. Помимо тех квантовых чисел, что описаны в разделе 5 – n , l и m , добавляется еще одно – *спиновое* квантовое число $s = \pm 1/2$.

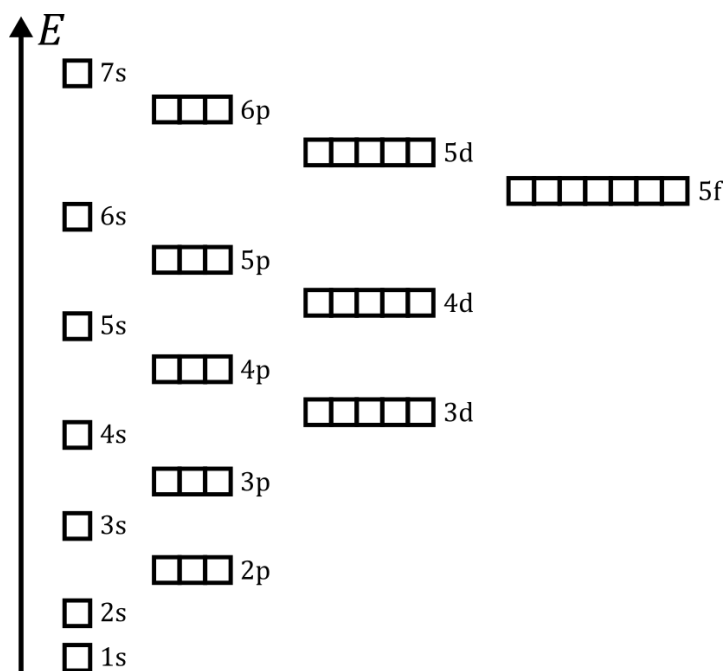


Рис. 9 Энергетические уровни электрона в атоме, соответствующие различным квантовым числам.

Энергия электрона почти не зависит от m , а при увеличении n и l энергия возрастает. Электронные состояния, соответствующие главному квантовому числу, записываются в виде значения n , а орбитальному квантовому числу l в виде буквы $s(l=0)$, $p(l=1)$, $d(l=2)$, $f(l=3)$, $g(l=4)$ и далее по алфавиту. Индекс вверху означает количество электронов в состоянии с числами n и l . Например, $1s^2$ – означает два электрона в состоянии с $n=1$ и $l=0$. На Рис. 9 приведена схема энергетических уровней электрона в атоме, в зависимости от различных квантовых чисел.

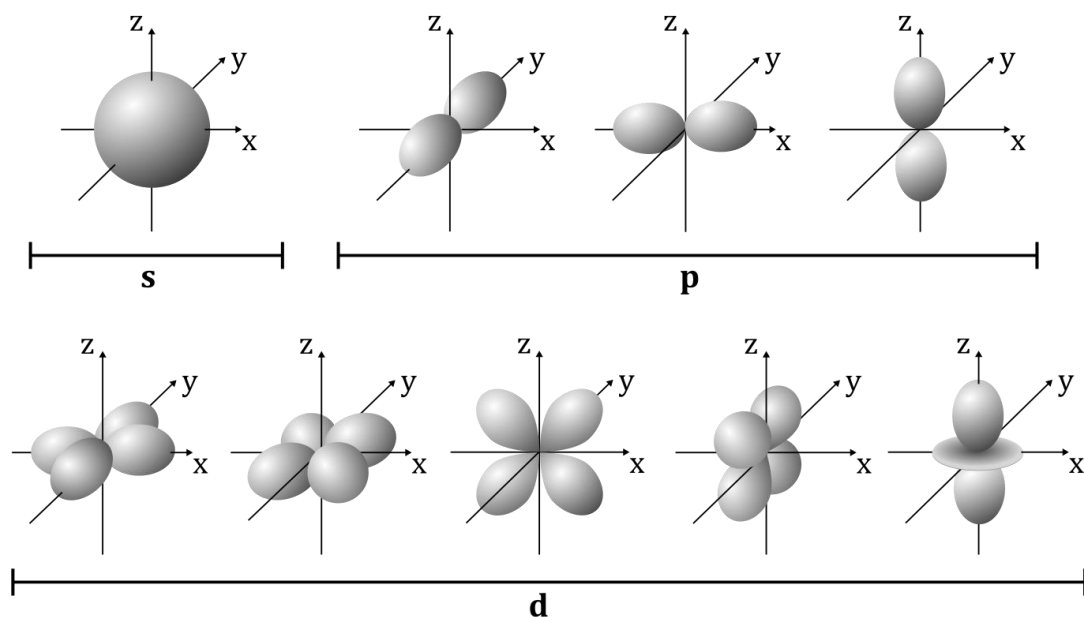


Рис. 8 Строение электронных оболочек атомов.

На Рис. 8 показан вид электронных оболочек для разных значений l . Распределение электронов в атоме определяет его электронную конфигурацию. Так, обозначение $3p^2$ показывает, что в состоянии $n=3, l=1$ находится два электрона. В квантовой механике одинаковые частицы совершенно неразличимы. Согласно принципу запрета Паули, в каждом состоянии может находиться не более одного электрона.

Сначала электроны заполняют состояния с наименьшей энергией (наименьшие n и все возможные l). Но в четвертой строке Периодической системы элементов Д.И. Менделеева (Рис.) этот порядок нарушается. В электронных конфигурациях группы железа идет соревнование между заполнением $4s$ и $3d$ оболочек: марганец, железо и кобальт имеют незаполненную $3d$ оболочку, при этом $4s$ оболочка у них полностью заполнена (Табл. 1).

Элемент	Порядковый номер	Конфигурация
H	1	1s
He	2	1s ²
Li	3	1s ² 2s
Na	11	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ¹
Ar	18	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶
Fe	26	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ⁶ 4s ²

Табл. 1 Электронные конфигурации некоторых химических элементов.

Период	I								VII б		VIII б						
	а	б	а II б	а III б	а IV б	а V б	а VI б	1 Н	2 He	а VII б	а VIII б						
1	H								1,0079 ВОДОРОД	4,00260 ГЕЛИЙ							
2	3 Li 6,941 ЛИТИЙ	4 Be 9,0122 БЕРИЛЛИЙ	5 B 10,81 БОР	6 C 12,011 УГЛЕРОД	7 N 14,0067 АЗОТ	8 O 15,9994 КИСЛОРОД	9 F 18,99840 ФТОР	10 Ne 20,179 НЕОН									
3	11 Na 22,98977 НАТРИЙ	12 Mg 24,305 МАГНИЙ	13 Al 26,98154 АЛЮМИНИЙ	14 Si 28,086 КРЕМНИЙ	15 P 30,97376 ФOSФОР	16 S 32,06 СЕРА	17 Cl 35,453 ХЛОР	18 Ar 39,948 АРГОН									
4	19 K 39,098 КАЛИЙ	20 Ca 40,08 КАЛЬЦИЙ	21 Sc 44,956 СКАНДИЙ	22 Ti 47,88 ТИТАН	23 V 50,9414 ВАНАДИЙ	24 Cr 51,996 ХРОМ	25 Mn 54,9380 МАРГАНЕЦ	26 Fe 55,847 ЖЕЛЕЗО	27 Co 58,9332 КОБАЛЬТ	28 Ni 58,70 НИКЕЛЬ							
	29 Cu 63,546 МЕДЬ	30 Zn 65,38 ЦИНК	31 Ga 69,72 ГАЛЛИЙ	32 Ge 72,59 ГЕРМАНИЙ	33 As 74,9216 МЫШЬЯК	34 Se 78,96 СЕЛЕН	35 Br 79,904 БРОМ	36 Kr 83,80 КРИПТОН									
5	37 Rb 85,4678 РУБИДИЙ	38 Sr 87,62 СТРОНЦИЙ	39 Y 88,9058 ИТРИЙ	40 Zr 91,224 ЦИРКОНИЙ	41 Nb 92,90638 НИОБИЙ	42 Mo 95,94 МОЛИБДЕН	43 Tc 98,9062 ТЕХНЕЦИЙ	44 Ru 101,07 РУТЕНИЙ	45 Rh 102,9055 РОДИЙ	46 Pd 106,4 ПАЛЛАДИЙ							
	47 Ag 107,8682 СЕРЕБРО	48 Cd 112,404 КАДМИЙ	49 In 114,818 ИНДИЙ	50 Sn 118,710 ОЛОВО	51 Sb 121,757 СВУРЬМА	52 Te 127,60 ТЕЛЛУР	53 I 126,9045 ИОД	54 Xe 131,30 КСЕНОН									
6	55 Cs 132,9054 ЦЕЗИЙ	56 Ba 137,344 БАРИЙ	57 La 138,9055 ЛАНТАН	58 Ce 140,12 ЦЕРИЙ	59 Pr 140,9077 ПРАЗМОДИЙ	60 Nd 144,24 НЕОДИМ	61 Pm [145] ПРОМЕТИЙ	62 Sm 150,4 САМАРИЙ	63 Eu 151,96 ЕВРОПИЙ	64 Gd 157,25 ГАДОЛИНИЙ	65 Tb 158,9254 ТЕРБИЙ	66 Dy 162,50 ДИСПРОЗИЙ	67 Ho 164,9304 ГОЛЬМИЙ	68 Er 167,26 ЭРБИЙ	69 Tm 168,9342 ТУЛИЙ	70 Yb 173,04 ИТТЕРБИЙ	71 Lu 174,975 ЛЮТЕЦИЙ
	79 Au 196,9665 ЗОЛОТО	80 Hg 200,59 РУТУТЬ	81 Tl 204,37 ТАЛЛИЙ	82 Pb 207,2 СВИНЕЦ	83 Bi 208,9804 ВИСМУТ	84 Po [209] ПОЛОНИЙ	85 At [210] АСТАТ	86 Rn [222] РАДОН									
7	87 Fr [223] ФРАНЦИЙ	88 Ra 226,0254 РАДИЙ	89 Ac [227] АКТИНИЙ	90 Th 232,0377 ТОРИЙ	91 Pa 231,0368 ПРОТАКТИНИЙ	92 U 238,0289 УРАН	93 Np 237,0482 НЕПУТУНИЙ	94 Pu 244,0642 ПУТОНИЙ	95 Am [243] АМЕРИЦИЙ	96 Cm [247] КУРИТОВИЙ	97 Bk [247] БЕРКЛИЙ	98 Cf [251] КАЛИФОРНИЙ	99 Es [254] ЭЙНШТЕЙНИЙ	100 Fm [257] ФЕРМИЙ	101 Md [258] МЕНДЕЛЕВИЙ	102 No [259] НОБЕЛИЙ	103 Lr [260] ЛОУРЕНСИЙ
ЛАНТАНОИДЫ																	
АКТИНОИДЫ																	

Рис. 10 Периодическая система химических элементов Д.И. Менделеева.

12. Магнитный момент многоэлектронного атома

Структуру многоэлектронного атома можно получить, используя два правила Хунда:

1. Наименьшей энергией обладает терм (электронная конфигурация) с наибольшим (при заданной конфигурации) значением суммарного спина S и наибольшим (при этом значении S) суммарным орбитальным моментом L .
2. Если L и S не равны нулю, то, когда оболочка заполнена менее чем на половину, наименьшую энергию имеет уровень с суммарным квантовым числом полного момента $J = |L - S|$; если оболочка заполнена более чем на половину, то наименьшую энергию имеет уровень с $J = L + S$.

Группа электронов, полностью заполняющих состояния с заданными n и l , обладают суммарным нулевым моментом как спиновым, так и орбитальным.

Магнитный момент атома \mathbf{M} пропорционален полному механическому моменту $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ и записывается в виде $\mathbf{M} = g_J \mu_B \mathbf{J}$. Проекция вектора \mathbf{M} на ось квантования равна $g_J \mu_B m_J$, где квантовое число m_J может принимать значения $-J, -J+1, \dots, J-1, J$. Квантовое число полного момента J принимает следующие значения:

$$J = \begin{cases} L + S, L + S - 1, \dots, L - S & (L \geq S) \\ S + L, S + L - 1, \dots, S - L & (L < S) \end{cases}, \quad (32)$$

а g -фактор определяется формулой:

$$g_J = 1 + \frac{J(J + 1) - L(L + 1) + S(S + 1)}{2J(J + 1)}. \quad (33)$$

Таким образом, максимальное положительное значение проекции магнитного момента на направление магнитного (оси квантования) поля имеет вид:

$$M_z = g_J \mu_B J, \quad (34)$$

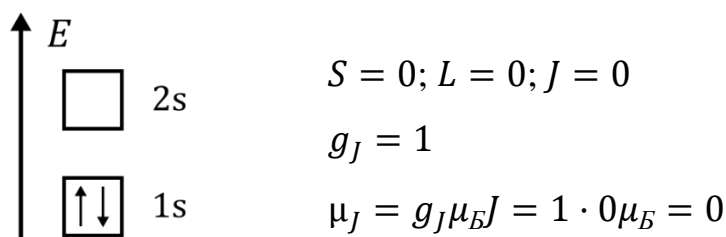
где J – максимальное значение в выражении (32).

Рассмотрим электронные конфигурации и вычислим магнитные моменты атомов различных химических элементов:

Гелий (2)

Электронная конфигурация: He $1s^2$

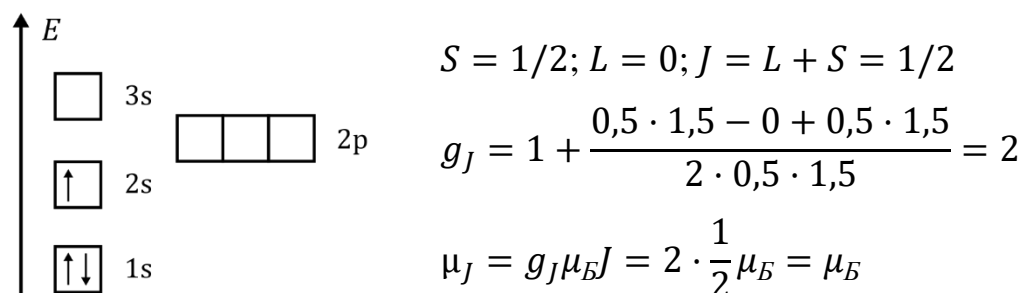
Оболочка полностью заполнена



Литий (3)

Электронная конфигурация: Li $1s^2 2s$

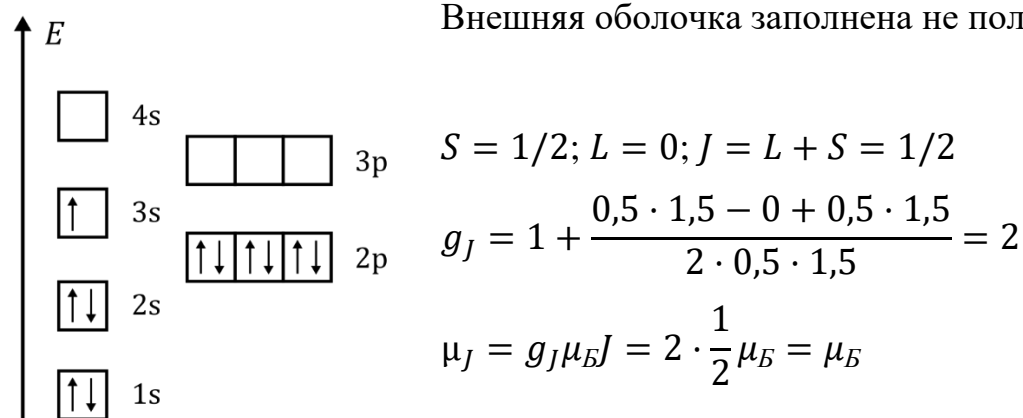
Внешняя оболочка заполнена не полностью



Натрий (11)

Электронная конфигурация: Na $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

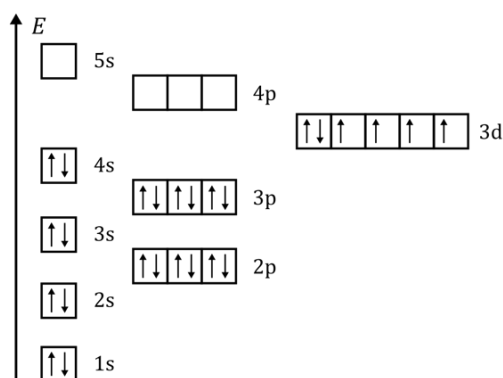
Внешняя оболочка заполнена не полностью



Железо (26)

Электронная конфигурация: $\text{Fe } 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$

Внешняя оболочка заполнена не полностью



$$S = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cdot 4 = 2$$

$$L = 2 + 2 + 1 + 0 - 1 - 2 = 2$$

$$J = L + S = 2 + 2 = 4$$

$$g_J = 1 + \frac{4 \cdot 5 - 2 \cdot 3 + 2 \cdot 3}{2 \cdot 4 \cdot 5} = \frac{3}{2}$$

$$\mu_J = g_J \mu_B J = \frac{3}{2} \cdot 4 \cdot \mu_B = 6 \mu_B$$

Если собственный магнитный момент атомов вещества равен нулю, то материал проявляет диамагнитные свойства (см. Приложение), если магнитные моменты атомов не равны нулю, вещество проявляет парамагнитные свойства.

Согласно классической теории Ланжевена, внешнее магнитное поле стремится ориентировать элементарные магнитные моменты, но тепловое движение расстраивает эту ориентацию. Таким образом, макроскопические парамагнитные свойства определяются статистическим равновесием между этими факторами. На основе классических представлений, согласно которым любые углы ориентации магнитных моментов относительно направления внешнего поля равновероятны, Ланжевен вычислил молярную парамагнитную восприимчивость, определяемую выражением:

$$\chi_M = \frac{C}{T}, \quad (35)$$

в котором T – абсолютная температура, C – постоянная Кюри:

$$C = \frac{1}{3} \cdot \frac{\mu_J^2 N_A^2}{R}, \quad (36)$$

где μ_J – магнитный момент атома, N_A – постоянная Авогадро, R – универсальная газовая постоянная. В квантовой теории магнитное квантовое число m_J принимает только дискретные значения: $m_J = J, J - 1, \dots, -J$, поэтому допущение о равной вероятности различных ориентаций магнитного момента не может быть сохранено, коэффициент $1/3$ в формуле (36) меняется, и выражение для постоянной Кюри имеет измененный вид:

$$C = \frac{J + 1}{3J} \cdot \frac{\mu_J^2 N_A^2}{R}, \quad (37)$$

Материалы с большим магнитным моментом атома ($>2\mu_B$) могут проявлять ферромагнитные или антиферромагнитные свойства. Однако, из сопоставления значений магнитных восприимчивостей и магнитных моментов атомов очевидно, что магнитные свойства разных материалов нельзя объяснить только различием магнитных моментов атомов, поскольку их значения отличаются в разы, а восприимчивости материалов могут отличаться на несколько порядков. Причиной высокой восприимчивости ферромагнетиков и антиферромагнетиков является наличие сильного электростатического взаимодействия между электронами соседних атомов в кристаллической решетке.

Приложение

Молярная магнитная восприимчивость при нормальных условиях (ед. СГС)*

диамагнетики		парамагнетики		ферромагнетики		антиферромагнетики	
вещество	$\chi \cdot 10^6$	вещество	$\chi \cdot 10^6$	вещество	$\chi \cdot 10^6$	вещество	$\chi \cdot 10^6$
Гелий	-2,02	Магний	13,25	Тербий	115000	Церий	2300
Медь	-5,41	Натрий	16,1	Диспрозий	100000	Неодим	5500
Неон	-6,96	Рубидий	18,2	Гадолиний	75000	Самарий	1820
Бериллий	-9,02	Барий	20,4	Гольмий	68200	Европий	30400
Цинк	-11,4	Калий	21,35	Эрбий	44500		
Аргон	-19,23	Литий	24,6	Тулий	25600		
Серебро	-21,5	Цезий	29,9				
Золото	-29,59	Кальций	44,0				
Висмут	-284,0	Вольфрам	55,0				
		Стронций	91,2				
		Титан	161,0				
		Платина	189,0				
		Уран	414,0				
		Плутоний	627,0				

* Дж. Кейб, Т. Лэби. Таблицы физических и химических постоянных, 1962.

Таблицы физических величин. Справочник под редакцией академика И.К. Кикоина, 1976.

Упражнение

Запишите электронную конфигурацию и вычислите максимальное положительное значение проекции магнитного момента.

Вариант 1.

Серебро, калий, диспрозий, самарий

Вариант 2.

Бериллий, платина, тулий, европий.

Вариант 3.

Медь, вольфрам, гадолиний, церий.

Вариант 4.

Золото, титан, тербий, неодим.

Вариант 5.

Неон, уран, гольмий, самарий.

Вариант 6.

Аргон, калий, эрбий, церий.

Список литературы

1. М.И. Каганов, В.М. Цукерник. Природа магнетизма. Наука, 1982.
2. С.В. Вонсовский. Магнетизм. Наука, 1971.
3. Э.В. Шпольский. Атомная физика. Лань, 2010.