

## **Wykład 2**

# **Cząsteczki w polu elektrycznym i magnetycznym**

# W2. Własności elektryczne

Każda molekula jest podatna na działanie zewnętrznego pola elektrycznego.

Oddziaływanie cząsteczek z polem elektrycznym prowadzi do:

- powstania indukowanego momentu dipolowego,
- uporządkowania położenia molekuł w zewnętrznym polu elektrycznym
- jonizacji molekuly w dostatecznie wysokim polu elektrycznym,
- przemieszczania naładowanych molekuł w polu elektrycznym,
- zmiany poziomów energetycznych molekuł.

## Cząsteczki w stanie gazowym

wpływ pola na zachowanie się molekuł jest cechą charakterystyczną dla pojedynczej molekuly, wynik obserwacji jest pozbawiony elementu oddziaływania molekuł pomiędzy sobą.

## Cząsteczki cieczy i ciała stałym

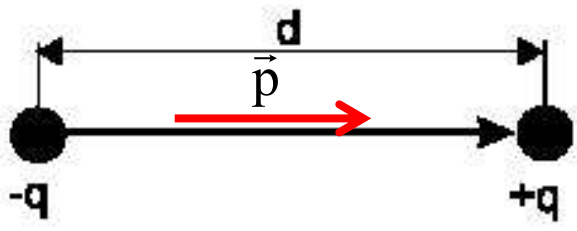
zmiana parametrów pojedynczej molekuly przez pole elektryczne rzutuje na zachowanie się całego zbioru molekuł tworzących ciecz lub ciało stałe.

# W2. Moment dipolowy

## Moment dipolowy

- wielkość charakteryzująca atomy lub molekuły
- miara dążności cząsteczki do przyjęcia określonej orientacji w polu elektrycznym

$$\vec{p} = q \cdot \vec{d}$$



gdzie q jest ładunkiem elektrycznym rozdzielonym na odległość d wewnątrz atomu lub molekuły

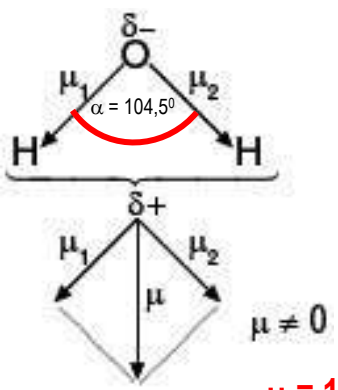
Jednostka momentu dipolowego jest debaj – [D]      1D = 3.336 · 10<sup>-30</sup> [C · m]

Dwa ładunki elementarne w odległości 1 Å, p = 1,6x10<sup>-19</sup>C · 10<sup>-10</sup> m = 4.8 D

**CZĄSTECZKA POLARNA** – posiada trwały moment dipolowy

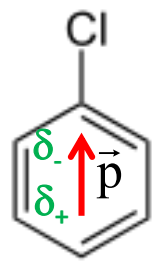
**CZĄSTECZKA NIEPOLARNA** – nie posiada trwałego momentu dipolowego

Cząsteczka H<sub>2</sub>O



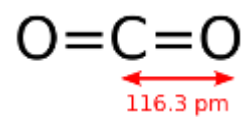
$\mu = 1,85 \text{ D}$

Cząsteczka C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>Cl (chlorobenzen)

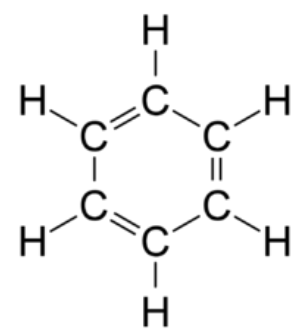


$p = 1,6 \text{ D}$

Cząsteczka CO<sub>2</sub>

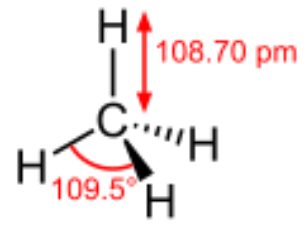


Cząsteczka C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>



$p = 0$

Cząsteczka CH<sub>4</sub>



Cząsteczki symetryczne są niepolarne

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_1 + \vec{\mu}_2$$

$$\mu = 2\mu_1 \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)$$

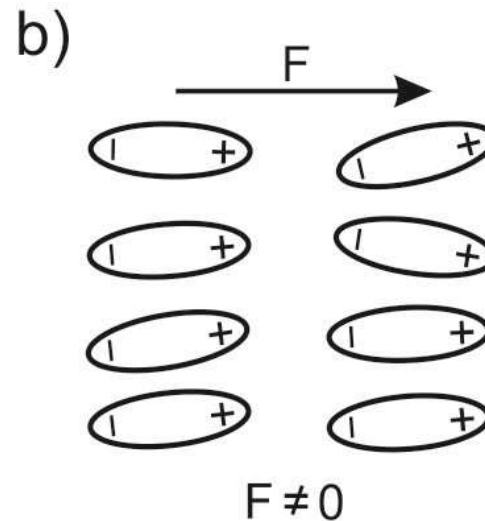
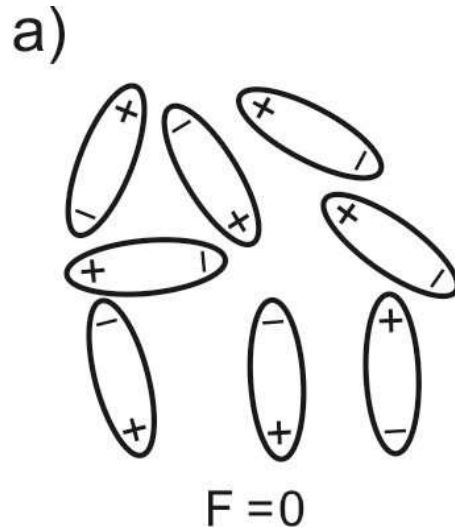
# W2. Molekuły polarne w zewnętrznym polu elektrycznym

Cząsteczki niesymetryczne mogą posiadać trwały moment dipolowy (rzędu  $10^{-30}$  Cm) są **POLARNE**

Molekuła	HF	HCl	HBr	$CO_2$	$H_2$	$CH_3OH$	KF	KCl	$NH_3$	$C_6H_6$	KBr
Moment dipolowy	6,0	3,44	2,64	0	0	5,71	24,4	34,7	4,77	0	35,1

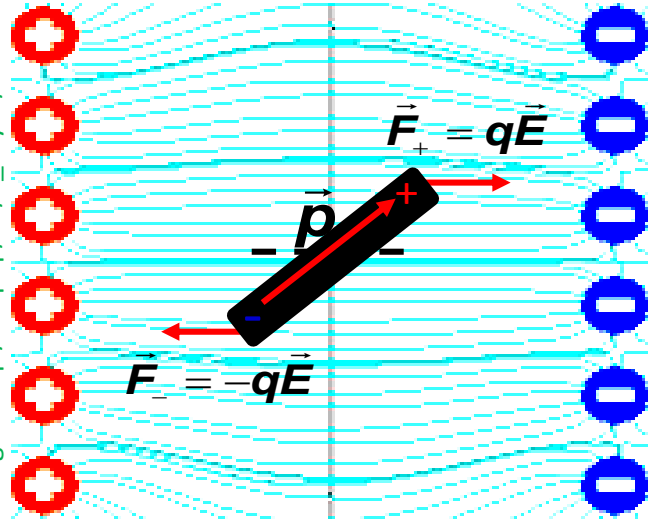
Wartosci trwałych momentów dipolowych wybranych molekuł (podane w jednostkach  $10^{-30} C \cdot m$ )

Pole elektryczne prowadzi do uporządkowania położenia cząsteczek polarnych



# W2. Trwały dipol w zewnętrznym polu elektrycznym

Jaka siła działa na dipol o momencie dipolowym  $p = qL$  w jednorodnym polu elektrycznym?



Na bieguny dipola działają siły  $F_-$  i  $F_+$ .  $\vec{F}_{\pm} = \pm q\vec{E}$   
próbując ustawić go równoległe do linii sił pola  $\rightarrow$  obrót.  
Obie siły działają w odległości  $r = \frac{1}{2}L$  od środka masy dipola  
Powstaje moment pary sił:

$$\vec{M} = \vec{M}_1 + \vec{M}_2$$
$$\vec{M}_1 = \vec{r} \times \vec{F}_+ \quad \vec{M}_2 = \vec{r} \times \vec{F}_-$$

Wartość wypadkowego momentu sił:

$$M = M_1 + M_2 = \frac{1}{2}L \cdot qE \cdot \sin \alpha + (-\frac{1}{2}L) \cdot (-q)E \cdot \sin \alpha$$

Wartość momentu pary sił:

$$M = LqE \cdot \sin \alpha$$

Wektor momentu pary sił:

$$\vec{M} = \vec{p} \times \vec{E}$$

Energia potencjalna dipola:

$$W_{\text{pot}} = -\vec{p} \cdot \vec{E}$$

# W2. Indukowany moment dipolowy

Molekuły symetryczne sa niepolarne, tzn. nie posiadaja trwałego momentu dipolowego.

Jezeli molekula symetryczna znajdzie sie w zewnetrznym polu elektrycznym F, wówczas powstaje **indukowany moment dipolowy** zwiazany z przesuniecie wzgledem siebie „srodka ciezkosci” nosników ładunku dodatnich i ujemnych.

$$\vec{p}_{ind} = \alpha \cdot \vec{E}_{lok} = q \cdot \vec{d}$$

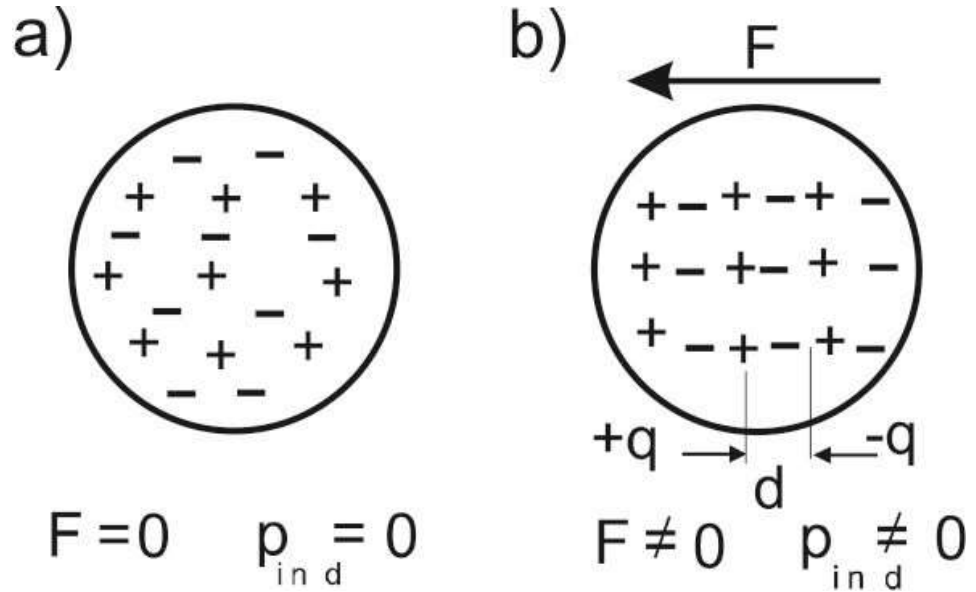
$\alpha$  - parametr charakteryzujący daną molekułę (POLARYZOWALNOŚĆ),  
 $E_{lok}$  - pole lokalne, w jakim znajduje sie molekula.

$$\alpha = [Fm^2]$$

**Objętość polaryzowalnościowa**

$$\alpha_{obj} = \frac{\alpha}{4\pi\epsilon_0}$$

$$\alpha_{obj} = [m^3]$$



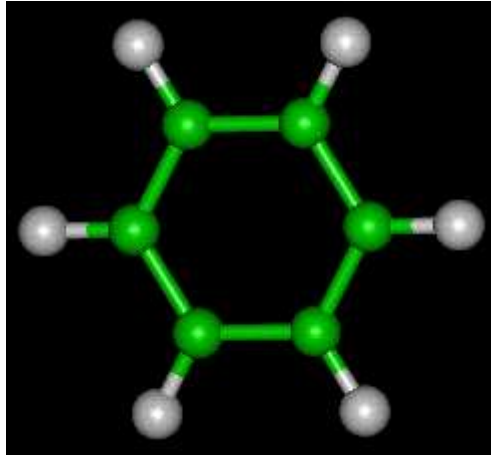
cząsteczka	$\alpha$ [ $10^{-40} Fm^2$ ]
He	0,23
H <sub>2</sub>	0,90
CO <sub>2</sub>	2,93
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	11,6

Dla fazy gazowej pole lokalne jest równe polu przyłożonemu do osrodka gazowego, natomiast dla cieczy i ciał stałych zalezy ono od otoczenia molekuly.

## W2. Indukowany moment dipolowy

**Indukowany moment dipolowy** jest związany z kierunkiem działania pola elektrycznego względem wyróżnionych kierunków molekuly.

### Benzen $C_6H_6$



Polaryzowalność benzenu w płaszczyźnie molekuly

$$\alpha / \varepsilon_0 = 12,8 \cdot 10^{-10} \text{ m}^3$$

Polaryzowalność benzenu w płaszczyźnie  $\perp$  do płaszczyzny molekuly

$$\alpha / \varepsilon_0 = 6,7 \cdot 10^{-10} \text{ m}^3$$

**Polaryzowalność czasteczek** jest wielkością tensorową, wykazującą różną wartość w zależności od analizowanego kierunku molekuly.

**Hiperpolaryzacja** - w wysokich polach elektrycznych, moment dipolowy przestaje być liniową zależnością E i pojawiają się nieliniowe człony określające moment dipolowy w funkcji natężenia pola elektrycznego.

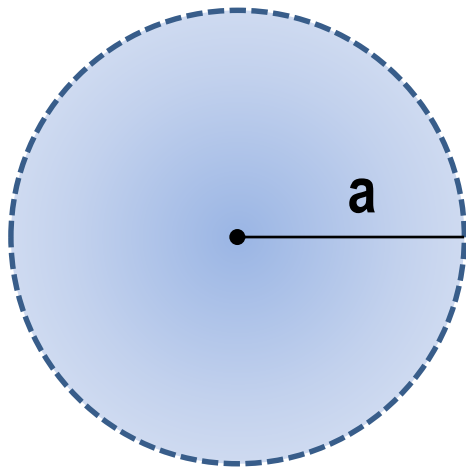
$$p(\mathbf{E}) = p_0 + \alpha \cdot \mathbf{E} + \frac{1}{2!} \beta : \mathbf{E}\mathbf{E} + \frac{1}{3!} \gamma : \mathbf{E}\mathbf{E}\mathbf{E} + \dots$$

$p_0$  – trwały moment dipolowy czasteczki,  $\alpha$  - polaryzowalność,  $\beta$ ,  $\gamma$  - tensor pierwszego i drugiego rzędu polaryzowalności

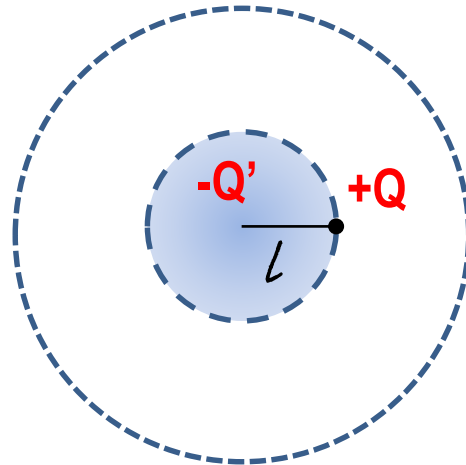
**Polaryzacja indukowana dotyczy nie tylko molekuł niepolarnych.**

Jezeli molekula ma własny moment dipolowy, to w tej molekule takze mozna indukowac poprzez pole elektryczne dodatkowy moment dipolowy.

## W2. Polaryzowalność elektronowa atomu



$$\vec{E} = 0$$



$$\vec{E} \neq 0$$

Gęstość objętościowa ładunku  $\rho = \text{const}$   
stąd

$$\rho = \frac{Q'}{\frac{4}{3}\pi l^3} = \frac{Q}{\frac{4}{3}\pi a^3}$$

Ładunek w kuli o promieniu  $l$   
(ujemny):  $Q' = \frac{Q l^3}{a^3}$

Równowaga sił:  $Q \cdot E = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q \cdot Q \frac{l^3}{a^3}}{l^2}$



$$Q \cdot l = 4\pi\epsilon_0 \cdot a^3 E$$

Indukowany moment dipolowy:

$$p_{\text{ind}} = Q \cdot l = \alpha \cdot E \quad \text{gdzie} \quad \alpha = 4\pi\epsilon_0 \cdot a^3$$

Objętość polaryzowalnościowa:  $\alpha_{\text{obj}} = a^3$



### W3. Energia potencjalna dipola indukowanego

$$W_{\text{pot}} = -\int_0^E p_{\text{ind}} dE = -\int_0^E \alpha E dE = -\frac{1}{2} \alpha E^2$$

**Energia potencjalna cząsteczki** w zewnętrznym polu elektrycznym E

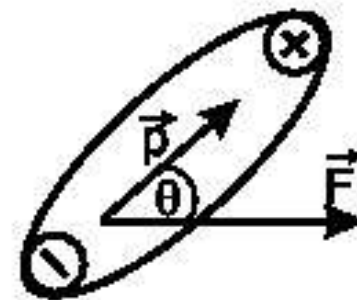
$$W_{\text{pot}} = -\vec{p}_0 \cdot \vec{E}_{\text{lok}} - \frac{1}{2} \alpha E_{\text{lok}}^2 \quad \text{gdzie } p_0 \text{ to trwały moment dipolowy cząsteczki}$$

### Średnie odległości między cząsteczkami

GAZ DOSKONAŁY	WODA (CIECZ)	ANTRACEN (CIAŁO STAŁE)
Objętość 1 mola $V_m = 22,4 \text{ dm}^3$ Średnia odległość między cząsteczkami $d = 33 \text{ \AA}$	Objętość 1 mola $V_m = 18 \text{ dm}^3$ Średnia odległość między cząsteczkami $d = 3 \text{ \AA}$	Objętość 1 mola $V_m = 140 \text{ cm}^3$ Średnia odległość między cząsteczkami $d = 6 \text{ \AA}$

# W2. Polaryzacja orientacyjna (dipolowa)

## Orientowanie trwałych dipoli polem elektrycznym



### Założenia:

- Zanedbujemy wzajemne oddziaływania molekuł pomiędzy sobą
- Zanedbujemy polaryzowalność indukowaną.

**Energia dipola** w zewnętrznym polu elektrycznym (F):  $U = -\vec{p} \cdot \vec{F}$

Jeżeli moment dipolowy (p) tworzy z kierunkiem pola elektrycznego (F) kąt  $\theta$ :  $U = -p \cdot F \cdot \cos \theta$

Rozkład energetyczny molekuł o energii U w zewnętrznym polu elektrycznym F podlega **statystyce Boltzmana**.

**Liczba drobin dN o momentach dipolowych p** ustawionych pod kątem  $\theta$  do kierunku pola elektrycznego F, leżąca wewnątrz kąta bryłowego  $d\Omega$ , na podstawie o rozkładu Boltzmana:

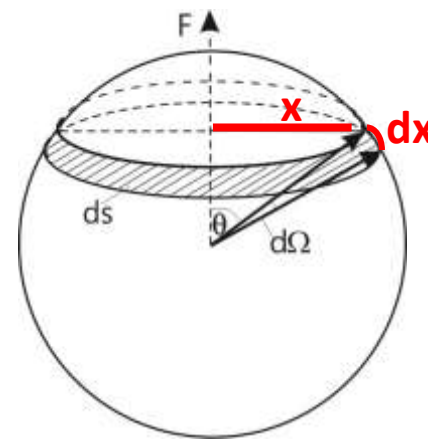
$$dN = A \cdot \exp\left(-\frac{U}{kT}\right) d\Omega$$

A - stała związana z liczbą molekuł,  
k- stała Boltzmana,  
T- temperatura w skali bezwzględnej.

**Całkowita liczba molekuł N o momentach dipolowych p** skierowanych pod wszystkimi kątami  $\theta$  w zakresie wartości od 0 do  $\pi$ :

$$N = \int_0^\pi A \exp\left(\frac{pF \cos \theta}{kT}\right) 2\pi \sin \theta d\theta$$

$$\left. \begin{array}{l} d\Omega = \frac{dS}{r^2} \\ dS = 2\pi x \cdot dx \\ dx = r \cdot d\theta \quad x = r \cdot \sin \theta \end{array} \right\} d\Omega = \frac{2\pi r^2 \sin \theta d\theta}{r^2} = 2\pi \sin \theta d\theta$$



## W2. Molekuły polarne w zewnętrznym polu elektrycznym

Średnia wartość  $\langle \cos \theta \rangle_F$  określająca wypadkowe nachylenie momentów dipolowych względem pola elektrycznego F:

$$\langle \cos \theta \rangle_F = \frac{\int_0^\pi \cos \theta A \exp\left(\frac{pF \cos \theta}{kT}\right) 2\pi \sin \theta d\theta}{\int_0^\pi A \exp\left(\frac{pF \cos \theta}{kT}\right) 2\pi \sin \theta d\theta}$$

Wprowadzamy zmienne:  $y = \frac{pF}{kT}$  oraz  $x = \cos \theta$

$$\langle \cos \theta \rangle_F = \frac{\int_{-1}^{+1} x e^{y \cdot x} dx}{\int_{-1}^{+1} e^{y \cdot x} dx}$$

Rozwiązanie przedstawia funkcję Langevina L(y)

$$\langle \cos \theta \rangle_F = \operatorname{ctgh} y - \frac{1}{y} = L(y)$$

$$\operatorname{ctgh}(y) = \frac{e^y + e^{-y}}{e^y - e^{-y}}$$

Funkcja Langevina przedstawia średnią wartość  $\langle \cos \theta \rangle_F$  określającą wypadkowe nachylenie momentów dipolowych względem pola elektrycznego F.

### SZCZEGÓLNE PRZYPADKI

Wysokie pole tzn.  $F \rightarrow \infty$  czyli  $y \rightarrow \infty$

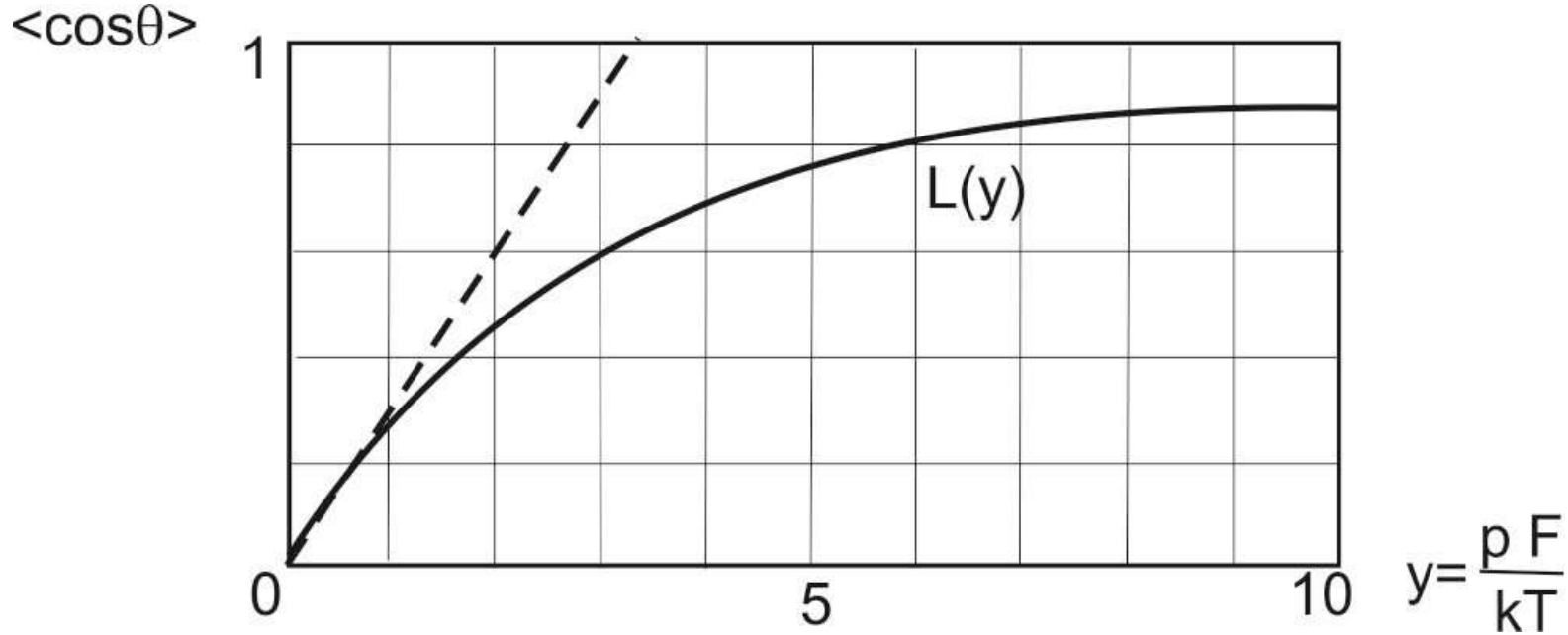
$$\lim_{y \rightarrow \infty} L(y) = 1$$

Niskie pole tzn.  $F \rightarrow 0$  czyli  $y \rightarrow 0$

$$\lim_{y \rightarrow 0} L(y) = \frac{1}{3} y$$

## W2. Molekuły polarne w zewnętrznym polu elektrycznym

Zależność średniego cosinusa kąta nachylenia momentów dipolowych molekuł względem przyłożonego pola elektrycznego  $F$  czyli  $L(y)$ :



- Dla niskich pól elektrycznych nachylenie momentów dipolowych względem pola elektrycznego jest wprost proporcjonalne do cosinusa kąta.
- Dla wysokich pól elektrycznych, orientacja dipoli elektrycznych zbliża się do kierunku równoległego względem kierunku natężenia pola elektrycznego.

# W2. Molekuły polarne w zewnętrznym polu elektrycznym

## Niskie pola elektryczne

$$y = \frac{pF}{kT} \ll 1$$

Stąd po rozwinięciu funkcji  $\text{ctgh} y$  w szereg potęgowy

$$L(y) \cong \frac{y}{3} \cong \frac{pF}{3kT}$$

Średnia wartość rzutu momentu dipolowego na kierunek wektora elektrycznego:

$$\langle p \rangle_F = \frac{y}{3} p = \frac{p^2 F}{3kT}$$

W kierunku pola elektrycznego pojawia się polaryzowalność związana z uporządkowaniem dipoli polarnych w polu elektrycznym – **polaryzowalność dipolowa (orientacyjna)**

$$\langle p \rangle_F = \alpha_d \cdot F$$

**Wartość polaryzowalności dipolowej**

$$\alpha_d = \frac{p^2}{3kT}$$

## W2. Molekuły polarne w zewnętrznym polu elektrycznym

### Całkowity moment dipolowy

w kierunku pola elektrycznego:

$$\langle p \rangle_F = (\alpha_i + \alpha_d)F = \left( \alpha_e + \frac{p^2}{3kT} \right) F$$

Gdzie  $\alpha_i$  – **polaryzowalność indukowana (deformacyjna) molekuły**

$$\alpha_i = \alpha_e + \alpha_a$$

$\alpha_e$  – polaryzacja elektronowa związana z zaburzeniem rozkładu gęstości elektronowej wokół jąder atomowych

$\alpha_a$  – polaryzacja atomowa (odkształceniowa) wynikająca ze zmiany odległości między jądrami atomów oraz kątów walencyjnych

$\alpha_d$  – **polaryzowalność dipolowa (orientacyjna) molekuły**

**Całkowita polaryzowalność cząsteczki** jest tym większa im większy jest przestrzenny rozmiar cząsteczki i im większa jest liczba elektronów w cząsteczce.

**Dla wszystkich pól powyżej  $10^7$  V/m** w temperaturze zbliżonej do pokojowej, kierunek momentu dipolowego jest bliski kierunkowi pola elektrycznego.

**Dla pól powyżej  $10^9$  V/m** indukowany moment dipolowy może być porównywalny z trwałym momentem dipolowym cząsteczki.

Jest to pole zwykle znacznie przekraczające pole przebicia elektrycznego w większości materiałów molekularnych i stąd rzadko osiąganego. Tak wysokie pole elektryczne jest możliwe do osiągnięcia w strukturach cienkowarstwowych, rzędu nanometra.

# W2. Wektor polaryzacji elektrycznej

## A) DEFINICJA MIKROSKOPOWA

**Wektor polaryzacji**, czyli całkowity moment dipolowy jednostki objętości cieczy lub gazu

$$\vec{P} = \frac{\sum_i^N \vec{p}_i}{V}$$

**GĘSTOŚĆ OBJĘTOŚCIOWA MOMENTÓW DIPOLOWYCH**

- Jeżeli moment dipolowy pojedynczej molekuly jest wynikiem tylko polaryzowalności indukowanej (elektronowej)

$$\vec{P} = N \cdot \alpha_e \vec{E}$$

- Gdy wypadkowy moment dipolowy jest wynikiem orientacji polarnych molekuł wzdłuż kierunku pola elektrycznego  $E$

$$\vec{P} = N \langle p \rangle_F \vec{E} = \frac{Np^2}{3kT} \vec{E}$$

## A) DEFINICJA MAKROSKOPOWA

**Wektor polaryzacji**

$$\vec{P} = \chi \epsilon_0 \vec{E}$$

$\chi$  - podatność dielektryczna

$\epsilon_0$  - przenikalność dielektryczna próżni

Wektor polaryzacji dielektryka jest wprost proporcjonalny do wektora natężenia pola  $E$ , współczynnik proporcjonalności to **podatność dielektryczna  $\chi$**

Związek podatności dielektrycznej ze względną przenikalnością elektryczną dielektryka

$$\chi = \epsilon - 1$$

**Wektor polaryzacji**

$$\vec{P} = (\epsilon - 1) \epsilon_0 \vec{E}$$

## W2. Pole lokalne

### A) POLE LOKALNE – ROZRZEDZONE GAZY

$$\vec{E}_{\text{lok}} = \vec{E}$$

### B) POLE LOKALNE – POLE LORENTZA

$$\vec{E}_{\text{lok}} = \vec{E} + \vec{E}_1$$

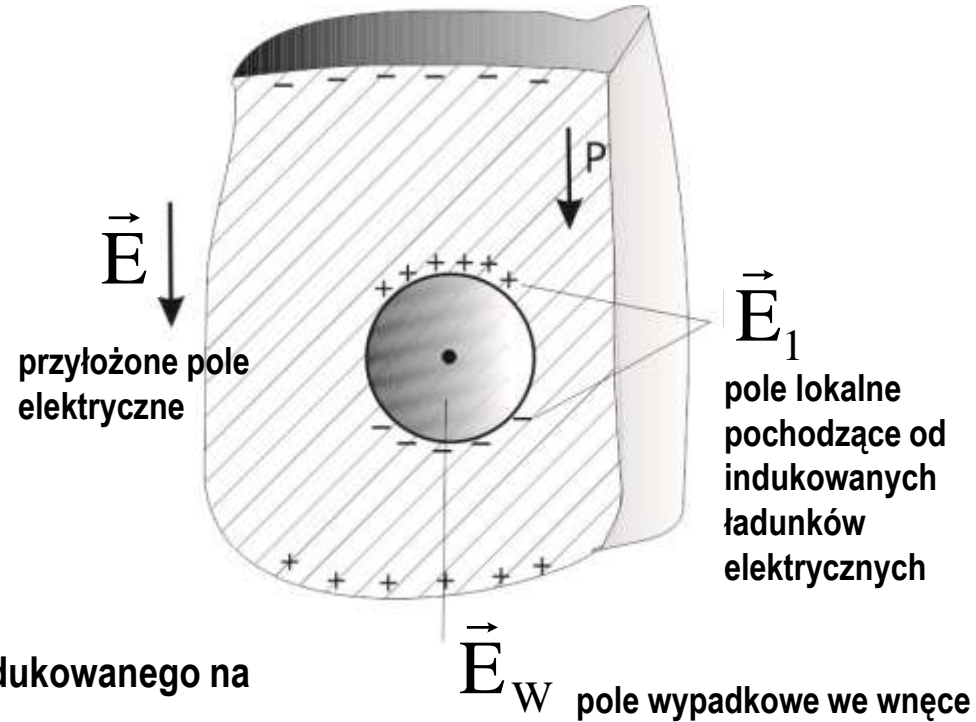
Całkowite pole elektryczne pochodzące od ładunku indukowanego na powierzchni wnęki

$$E_1 = \int_0^\pi \frac{P \cos^2 \theta}{4\pi\epsilon_0 r^2} 2\pi r^2 \sin \theta d\theta = \frac{P}{3\epsilon_0}$$

Wypadkowe pole elektryczne działające na cząsteczkę znajdującą się we wnęce

$$\vec{E}_{\text{lok}} = \vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0} = \vec{E} + \frac{\epsilon_0(\epsilon - 1)}{3\epsilon_0} \vec{E} = \frac{\epsilon + 2}{3} \vec{E}$$

Dielektryk z molekułą w środku wnęki



**POLE LORENTZA**

$$\vec{E}_{\text{lok}} = \frac{\epsilon + 2}{3} \vec{E}$$



# W2. Polaryzacja indukowana (elektronowa+atomowa)

## WEKTOR POLARYZACJI

$$\vec{P} = \frac{N}{V} \alpha \vec{E}_{\text{lok}} = \chi \epsilon_0 \vec{E}$$

## INDUKOWANY MOMENT DIPOLOWY

$$\vec{p}_i = \alpha \vec{E}_{\text{lok}} \quad i = 1, 2, 3, \dots, N$$

## A) ROZRZEDZONE GAZY

$$\vec{E}_{\text{lok}} = \vec{E} \quad \longrightarrow \quad \chi = \frac{N}{V} \frac{\alpha}{\epsilon_0} = \epsilon - 1 \quad \text{Uwzględniając wzór Lorentza}$$
$$\epsilon = n^2$$

Pomiar współczynnika załamania  $n$  umożliwia wyznaczenie polaryzowalności elektronowej  $\alpha$

$$n = \left( 1 + \frac{N\alpha}{\epsilon_0 V} \right)^{1/2} \approx 1 + \frac{N\alpha}{2V\epsilon_0}$$

## B) CIAŁO STAŁE

$$\vec{E}_{\text{lok}} = \frac{\epsilon + 2}{3} \vec{E} \quad \longrightarrow \quad \frac{N}{V} \alpha \frac{\epsilon + 2}{3} \vec{E} = \epsilon_0 (\epsilon - 1) \vec{E}$$

**Wzór Lorenza-Lorentza**

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{N\alpha}{3V\epsilon_0}$$

**Wzór Clausiusa-Mossottiego**

$$\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} = \frac{N\alpha}{3V\epsilon_0}$$

DLA MOLEKUŁ  
NIEPOLARNYCH ( $\alpha = \alpha_i$ )

## W2. Refrakcja molowa

Liczba molekuł (N) w jednostce objętości (V):

$$\frac{N}{V} = \frac{N_A \rho}{M}$$

$N_A$  – liczba Avogadro,  $\rho$  – gęstość masowa,  
 $M$  – masa molowa cząsteczki

**Wzór Lorenza - Lorentza**

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{N\alpha}{3V\epsilon_0}$$



$$\frac{M}{\rho} \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{N_A \alpha}{3\epsilon_0} \equiv R_M$$

**$R_M$  – REFRAKCJA MOŁOWA**

- zależy jedynie od polaryzowalności cząsteczki i uniwersalnych stałych ( $N_A$  i  $\epsilon_0$ )

cząsteczka	n-C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	cyklo – C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>
$R_M$ [cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> ]	29,8	27,7
atom	C	H
$R_M$ [cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> ]	2,4	1,1

## W2. Polaryzacja orientacyjna (dipolowa)

### A) ROZRZEDZONE GAZY

$$\vec{E}_{\text{lok}} = \vec{E}$$

$$\chi = \frac{N}{V\epsilon_0} \left( \alpha + \frac{p_0^2}{3kT} \right)$$

$$\vec{P} = \frac{N}{V} \left( \alpha + \frac{p_0^2}{3kT} \right) \vec{E}$$

### B) CIAŁO STAŁE

$$\vec{E}_{\text{lok}} = \frac{\epsilon + 2}{3} \vec{E}$$

$$\vec{P} = \frac{N}{V} \left( \alpha + \frac{p_0^2}{3kT} \right) \frac{\epsilon + 2}{3} \vec{E}$$

## Równanie Debye'a

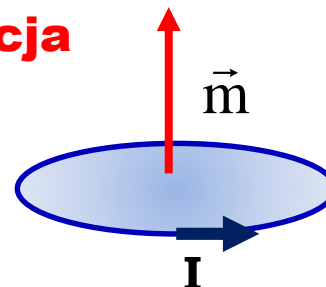
$$\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} \cdot \frac{M}{\rho} = \frac{N_A}{3\epsilon_0} \left( \alpha + \frac{p_0^2}{3kT} \right)$$

DLA MOLEKUŁ POLARNYCH ( $\alpha = \alpha_i$ )

## W2. Rodzaje dipoli magnetycznych

### A) MOMENT MAGNETYCZNY - definicja

$$\vec{m} = I \cdot \vec{A} \quad \vec{m} = [A \cdot m^2] = \left[ \frac{J}{T} \right]$$



I – natężenie prądu,

A – pole powierzchni obwodu

### B) MAGNETYCZNE DIPOLE ELEKTRONOWE TRWAŁE

#### B1) ORBITALNE (ruch po orbicie)

$$\vec{m}_l = \frac{-e}{2m} \vec{L}_l = \gamma_l \vec{L}_l$$

$\vec{L}_l$  - orbitalny moment pędu

$\gamma_l$  - czynnik magnetogiryczny ( $\approx -8,794 \times 10^{10} \text{ HzT}^{-1}$ )

Moment pędu elektronu w ruchu wokół jądra jest skwantowany stąd moment magnetyczny jest też wielkością kwantową:

$$m_l = \frac{e\hbar}{2m_e} \sqrt{l(l+1)} = \mu_B \sqrt{l(l+1)}$$

$\mu_B$  – magneton Bohra (kwant momentu magnetycznego)  $\approx 9,274 \times 10^{-24} \text{ JT}^{-1}$

**UWAGA:** W większości cząsteczek udział magnetycznych momentów orbitalnych jest zerowy.

# W2. Rodzaje dipoli magnetycznych

## B2) SPINOWE (ruch wirowy)

$$|\vec{m}_S| = g_e \sqrt{s(s+1)} \mu_B$$

s – spinowa liczba kwantowa

$g_e$  – czynnik o wartości 2,0023

Dla układu n elektronów, gdy n jest liczbą nieparzystą:  $s = \frac{n}{2}, \frac{n}{2} - 1, \dots, \frac{1}{2}$

Dla układu n elektronów, gdy n jest liczbą parzystą:  $s = 0$

## C) MAGNETYCZNE DIPOLE JĄDROWE

$$|\vec{m}| = g_N \mu_N \sqrt{I(I+1)}$$

I – jądrowa spinowa liczba kwantowa

$g_N$  – jądrowy czynnik g

$\mu_N$  – magneton jądrowy

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p}$$

$$\mu_N = 5,051 \cdot 10^{-27} \text{ JT}^{-1}$$

Magneton jądrowy jest około 1800 razy mniejszy od magnetonu Bohra.

### UWAGA

Jądra mają większe masy od elektronów ale mniejsze momenty magnetyczne stąd jądrowy magnetyzm jest zaniedbywalny w porównaniu z magnetyzmem elektronów.

## W2. Własności magnetyczne

Czasteczki mogą mieć również własny **moment magnetyczny** ( $\vec{m}$ ), wynikający z istnienia niesparowanych spinów, elektronów lub nukleonów w jądrze.

Istnienie molekularnych momentów magnetycznych dowolnego pochodzenia prowadzi do namagnesowania materii.

**Wektor namagnesowania**  $\vec{J} = \mu_0 \vec{m} \cdot \frac{n}{V} = \mu_0 \vec{m} \cdot N$

$\mu_0$  – przenikalność magnetyczna próżni

$n$  – liczba cząsteczek w objętości próbki -  $V$

$N$  – liczba cząsteczek na jednostkę objętości

**Wektor namagnesowania**  $\vec{J} = (\mu - 1) \cdot \vec{B}$

$\mu$  – względna przenikalność magnetyczna

$B$  – wektor indukcji magnetycznej

**Moment magnetyczny pojedynczej cząsteczki**  $\vec{m} = \frac{\vec{J}}{\mu_0 N} = \frac{(\mu - 1)\vec{B}}{\mu_0 N}$

**Polaryzowalność magnetyczna pojedynczej cząsteczki**

$$\beta = \frac{\vec{m}}{\vec{B}} = \frac{\mu - 1}{\mu_0 N}$$

Jednostka polaryzowalności magnetycznej [J/T<sup>2</sup>].

# W2. Własności magnetyczne

## Magnetyczne dipole elektronowe indukowane w cząsteczce

- deformacja prądów elektronowych w cząsteczce

$$\vec{m}_{\text{ind}} = \beta \cdot \vec{B}$$

$\beta$  - polaryzowalność magnetyczna pojedynczej cząsteczki, magnetyzowalność  
jednostka polaryzowalności magnetycznej [J/T<sup>2</sup>].

$$\beta = \beta_p + \beta_d$$

$\beta_p > 0$      **PARAMAGNETYZM** (odpowiednik polaryzowalności elektronowej  $\alpha$ )

$\beta_d < 0$      **DIAMAGNETYZM**

zwykle  $|\beta_d| \gg \beta_p$

Cząsteczki o sparowanych spinach mają własności **DIAMAGNETYCZNE**

cząsteczka	$\beta$ [J/T <sup>2</sup> ]
H <sub>2</sub>	-7x10 <sup>-29</sup>
H <sub>2</sub> O	-21x10 <sup>-29</sup>
antracen	-220x10 <sup>-29</sup>

Cząsteczki o sparowanych spinach w zewnętrznym polu B uzyskują moment magnetyczny.

Cząsteczka antracenu w polu magnetycznym o B = 1 T

$$m_{\text{ind}} = \beta \cdot B = 2,2 \cdot 10^{-27} \text{ J / T}^2$$

$$\frac{m_{\text{ind}}}{\mu_B} = 2 \cdot 10^{-4}$$

# W2. Własności magnetyczne

**DIAMAGNETYKI**  $\mu < 1$  molekuly nie maja stałego momentu magnetycznego

**PARAMAGNETYKI**  $\mu > 1$  molekuly maja trwały moment magnetyczny

Cząsteczki **diamagnetyczne** w zewnętrznym polu magnetycznym  $\vec{B}$  uzyskują indukowany moment magnetyczny:

$$\vec{m}_{\text{ind}} = \frac{\vec{B}(\mu - 1)}{\mu_0 N}$$

Cząsteczki **paramagnetyczne** w zewnętrznym polu magnetycznym  $\vec{B}$  orientują swoje momenty magnetyczne wzdłuż kierunku  $\vec{B}$

Energia dipola magnetycznego w polu o indukcji  $\vec{B}$   $U = \vec{m}_p \cdot \vec{B}$

Średni rzut momentu magnetycznego na kierunek wektora indukcji dla nizszych wartosci wektora indukcji:

$$\langle \vec{m} \rangle_B = \frac{1}{3} \cdot \frac{\vec{m}_p \cdot \vec{B}}{kT}$$

**Wektor namagnesowania (niskie pola)**

$$\vec{J} = \mu_0 \frac{\sum \langle \vec{m} \rangle_B}{V} \cong \frac{1}{3} \cdot \frac{m_p^2 \mu_0 N \vec{B}}{kT}$$

**Podatność magnetyczna próbki**

$$\mu - 1 = \kappa = \frac{1}{3} \frac{m_p^2 \mu_0 N}{kT}$$

**Prawo Curie** opisujące temperaturową zależność paramagnetyzmu

**Całkowita podatność magnetyczna substancji**

$$\mu = \mu_d + \mu_p = 1 + N \left( \beta_d + \frac{\mu_0 m_p^2}{3kT} \right)$$

- suma wkładów **diamagnetycznego** i **paramagnetycznego**