Energinivåene:

$$\lambda = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar}\sqrt{\frac{\mu}{-2E}} = n$$

$$\Rightarrow E_n = -\mu c^2 \cdot \frac{\alpha^2}{2n^2} \approx -\frac{13.6\ \text{eV}}{n^2} \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

der $\alpha = e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar c \approx 1/137$ (finstrukturkonstanten)

(Z protoner i kjernen $\Rightarrow$ α erstattes med $Z\alpha$)

Degenerasjon: $(n = \ell + 1 + n_r)$

Generelt vil E avhenge av både n_r og ℓ i et isotropt potensial $V(r)$.
I Coulombpotensialet ($V \sim -1/r$) er det <u>bare</u> <u>summen</u> av n_r og ℓ som fastlegger energinivåene!

For gitt n kan ℓ være $0, 1, \ldots, n-1$, dvs n mulige ℓ-verdier.

For gitt ℓ kan m være $0, \pm 1, \ldots, \pm \ell$, dvs $2\ell + 1$ mulige m-verdier.

Dermed:

$$g_n = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = 1 + 3 + 5 + \ldots + (2n-1) \qquad [n \text{ ledd}]$$

$$= \{1 + 2n - 1\} + \{3 + 2n - 3\} + \ldots \qquad [\tfrac{n}{2} \text{ ledd}]$$

$$= 2n \cdot \frac{n}{2} = \underline{\underline{n^2}} \qquad \text{(som også gjelder for odde } n\text{)}$$

Radialfunksjonene:

Kan velge å angi de ulike $R(r)$ med kvantetallene n_r $(=0,1,2,\ldots)$ og ℓ $(=0,1,2,\ldots)$, men mer vanlig å bruke hovedkvantetallet

$$n = \ell + 1 + n_r \quad = \quad 1, 2, 3, \ldots$$

sammen med dreieimpulskvantetallet

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

Noen eksplisitte funksjoner $R_{n\ell}(r)$ (uten normering):

n	ℓ	n_r	$R_{n\ell}(r) \sim \ldots$	Betegnelse
1	0	0	$e^{-r/a}$	1s
2	0	1	$(1 - r/2a)\, e^{-r/2a}$	2s
	1	0	$\frac{r}{a}\, e^{-r/2a}$	2p
3	0	2	$(1 - 2r/3a + 2r^2/27a^2)\, e^{-r/3a}$	3s
	1	1	$(r/a - r^2/6a^2)\, e^{-r/3a}$	3p
	2	0	$(r/a)^2\, e^{-r/3a}$	3d

(Vi ser at n_r angir antall nullpunkter i $R_{n\ell}(r)$.)

$$R_{n\ell} = \frac{u_{n\ell}}{r} = \frac{v_{n\ell}}{r} \cdot e^{-\rho_n/2}$$

Med $\rho_n/2 = \sqrt{-8\mu E_n/\hbar^2}\; r/2$ og $E_n = -\mu c^2 \alpha^2/2n^2$ er

$$\rho_n/2 = (\mu c \alpha / n\hbar) \cdot r = r/n \cdot a$$

med $a = \hbar/\mu c \alpha$

Bohr-radien: $a_0 = \hbar/m_e c\alpha \simeq 0.529$ Å

$\Rightarrow$ $a = a_0 \cdot m_e/\mu \approx a_0$ for H-atomet

(Hvis kjerne med Z protoner: $a = \hbar/\mu c Z\alpha = a_0 m_e/\mu Z$)
$\approx a_0/Z$

Normering:

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi) = R_{n\ell}(r)\cdot Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \frac{u_{n\ell}(r)}{r}\cdot Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$$

der $n = 1, 2, 3, \cdots$; $\ell = 0, 1, 2, \cdots, n-1$; $m = 0, \pm 1, \cdots, \pm \ell$

$|\psi_{n\ell m}|^2 d^3r$ = sannsynligheten for å finne partikkelen i volumelementet d^3r når den er i tilstanden $\psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi)$

$$\Rightarrow 1 = \int |\psi_{n\ell m}|^2 d^3r = \int_{r=0}^{\infty} \underbrace{[R_{n\ell}(r)]^2 r^2}_{u_{n\ell}^2} dr \cdot \underbrace{\int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi} |Y_{\ell m}(\theta,\varphi)|^2 \sin\theta \, d\theta \, d\varphi}_{=1 \text{ når } Y_{\ell m} \text{ er normert}}$$

$$\Rightarrow \int_0^{\infty} u_{n\ell}^2 \, dr = 1$$

dvs $u_{n\ell}^2 \, dr$ = sanns. for å finne partikkelen (elektronet!) i avstand mellom r og $r + dr$ fra kjernen $= dP_{n\ell}$

dvs radialtettheten er $dP_{n\ell}/dr = u_{n\ell}^2 = (r R_{n\ell})^2$

Eks: Hvordan avhenger utstrekningen til orbitalen $\psi_{n\ell m}$ av n?

Løsn: Vi kan bruke $\{\langle \frac{1}{r} \rangle_{n\ell m}\}^{-1}$ som mål for orbitalens utstrekning.

Alle integralene blir på formen

$$\int_0^{\infty} r^k e^{-\beta r} dr = \beta^{-(k+1)} \int_0^{\infty} x^k e^{-x} dx = \frac{k!}{\beta^{k+1}}$$

fordi vi har $\langle \frac{1}{r} \rangle_{n\ell m} = \int \frac{1}{r} |\psi_{n\ell m}|^2 d^3r = \int_0^{\infty} r \cdot R_{n\ell}^2(r) \, dr$

Med normerte $R_{n\ell}(r)$ finner en f.eks.

$$\langle \tfrac{1}{r} \rangle_{100} = \frac{1}{a} \quad \text{og} \quad \langle \tfrac{1}{r} \rangle_{200} = \frac{1}{4a} \quad \text{osv}$$

$$\Rightarrow \{\langle \tfrac{1}{r} \rangle_{n\ell m}\}^{-1} = n^2 a \quad \text{(ser det ut til!)}$$

dvs utstrekningen øker med $\underline{n^2}$.

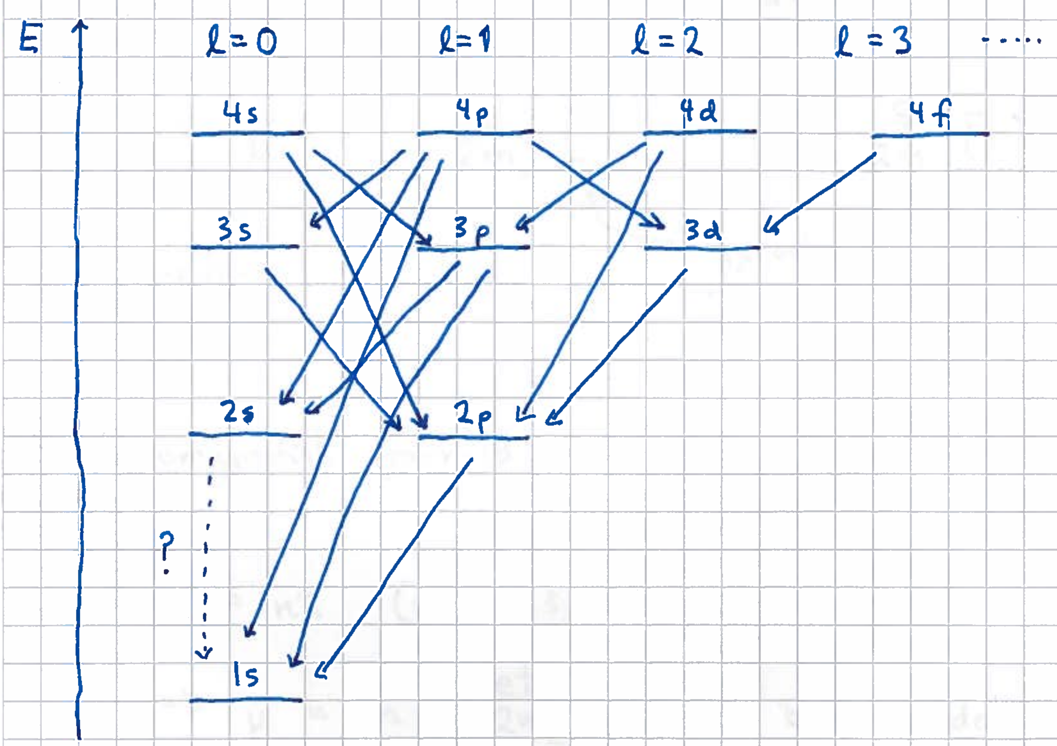
Utvalgsregler for strålingsoverganger

[PCH 9.1; DJG 9.3.3; IØ 5.5.c]

Et foton har spinn (indre dreieimpuls) tilsvarende kvantetall lik 1. Kravet om dreieimpulsbevarelse gir da utvalgsreglene

$$\boxed{\Delta l = \pm 1, \qquad \Delta m = 0, \pm 1}$$

for overgang fra tilstand $(n\,l\,m)$ til $(n'\,l'\,m')$ ved absorpsjon eller emisjon av et foton. Nivåskjema:



Balmer-serien (1885): Fra n til 2 $(n > 2)$

Lyman-serien (1906): Fra n til 1 $(n > 1)$

Paschen-serien (1908): Fra n til 3 $(n > 3)$

Naturlig levetid for 2p er 1.6 ns.

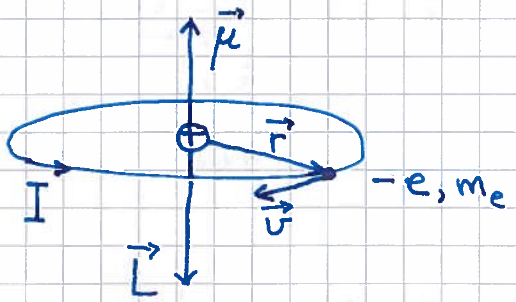
For 2s: ca 0.1 s. "Høyere ordens" 2-foton emisjonsprosess gir overgang til 1s. [Se f.eks. Phys Rev Lett 107, 203001 (2011)]

Mer om perturbasjonsteori og strålingsteori i FY2045 og TFY4205.

Spinn

Elektroner i magnetfelt
[PCH 8.3 ; DJG 4.4 ; IØ 6.1.1.c, 12.1]

Klassisk elektrodynamikk for elektron i atom:



Strøm: $I = \frac{q}{T} = \frac{-e}{(2\pi r/v)} = -\frac{ev}{2\pi r}$

Dreieimpuls: $L = |\vec{L}| = |\vec{r} \times m_e \vec{v}| = r m_e v$

Magnetisk moment: $\mu = I \cdot A = \frac{ev}{2\pi r} \cdot \pi r^2 = \frac{1}{2} e v r$

$$\Rightarrow \quad \vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L} \qquad \left(= \frac{q}{2m} \vec{L} \right)$$

"magnetisk størrelse" "gyroskopisk størrelse"

$\Rightarrow$ Gyromagnetisk forhold: $\mu / L = q/2m$

Bohr: $L = n\hbar \quad (n = 1, 2, 3, \ldots)$

$\Rightarrow \quad \mu = n \cdot \frac{e\hbar}{2m_e}$ i Bohrs modell

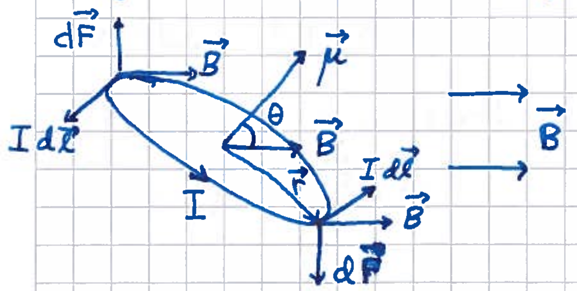
Fundamental "enhet":

$\mu_B = e\hbar/2m_e \approx 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ A} \cdot \text{m}^2$ = ett Bohr magneton

Schrödinger: $L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\,\hbar \quad (\ell = 0, 1, 2, \ldots, n-1)$

$L_z = m\hbar \quad (m = 0, \pm 1, \ldots, \pm \ell)$

Magnetisk dipol i magnetfelt $\vec{B}$:



$$d\vec{F} = I d\vec{\ell} \times \vec{B}$$
$$d\vec{\tau} = \vec{r} \times d\vec{F}$$

Dreiemoment på $\vec{\mu}$: $\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$ $\quad (= -\mu B \sin\theta)$

Potensiell energi : $V = -\int^{\theta} \tau(\alpha)\, d\alpha = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}$ $\quad (= -\mu B \cos\theta)$

Kraft på $\vec{\mu}$: $\vec{F} = -\nabla V = \nabla(\vec{\mu}\cdot\vec{B})$

(Hvis uniformt $\vec{B}$-felt : $\vec{F} = 0$)

Zeeman - effekten :

(P. Zeeman, 1897, NP 1902)

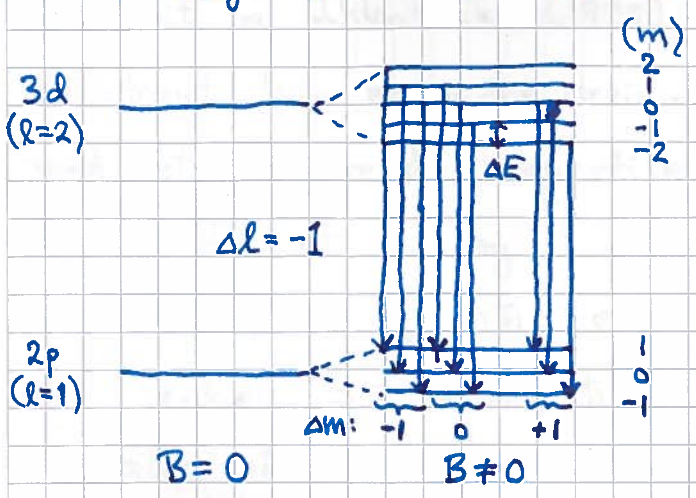
Atom med magnetisk moment $\vec{\mu} = \frac{q}{2m}\vec{L}$ i uniformt magnetfelt $\vec{B} = B\hat{z}$ har potensiell energi

$$V = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = -\frac{q}{2m} L_z \cdot B$$

Med $q = -e$, $m = m_e$ og $L_z = m\hbar$ $\quad (m = 0, \pm 1, \dots, \pm \ell)$ fås

$$V = m \cdot \frac{e\hbar}{2m_e} \cdot B = m \cdot \mu_B \cdot B,$$

slik at energinivåer med $\ell > 0$ splittes opp i $2\ell + 1$ nivåer:



$$\Delta E = \mu_B B$$

Med f.eks. $B = 1\,T$ (et ganske sterkt magnetfelt) er

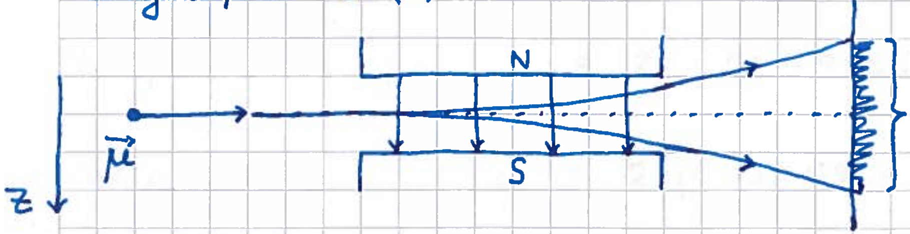
$\Delta E = 9.27 \cdot 10^{-24}\, J \approx 0.06\, meV$

Dvs, en liten oppsplitting!

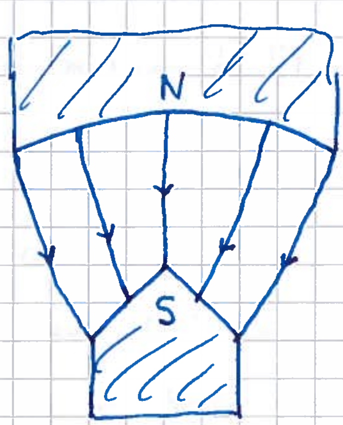
[$E(3d) - E(2p) = 1.89$ eV i hydrogenatomet]

Stern - Gerlach - eksperimentet : (Frankfurt 1921/22. O. Stern NP 1943)

Sendte en tynn stråle med sølvatomer gjennom et <u>inhomogent</u> magnetfelt $\vec{B}(z)$:



Forventet treff-område hvis atomene er <u>klassiske</u>, med alle mulige retninger på $\vec{\mu}$, og dermed μ_z mellom $-|\vec{\mu}|$ og $+|\vec{\mu}|$.



Nettokraft på atomene; i z-retning:

$$F_z = \mu_z \cdot dB_z/dz$$

Etter 1925 vet vi at L_z og L er <u>krantisert</u>, med heltallig kvantetall ℓ og $2\ell+1$ mulige orienteringer av $\vec{L}$, dvs $2\ell+1$ mulige verdier av L_z. Med andre ord, et <u>odde antall</u> striper på skjermen, dersom μ_z tilsvarer L_z.

Eksperimentene gav <u>to striper</u> på skjermen !
(Også med H-atomer; Phipps og Taylor, 1927.)

Goudsmit og Uhlenbeck (1925) :
Elektronet har en indre dreieimpuls, et <u>spinn</u>, $\vec{S}$, med et tilhørende magnetisk moment $\vec{\mu}_S$.
Analogt til at L og L_z er kvantisert, med verdier hhv $\sqrt{\ell(\ell+1)}\,\hbar$ og $m\hbar$, er $S = |\vec{S}|$ (og S_z) tilsvarende kvantisert, med verdier $S = \sqrt{s(s+1)}\,\hbar$ (og $S_z = m_s\hbar$). De <u>to</u> stripene i Stern-Gerlach-exp. tilsier nå et magnetisk kvantetall $m_s = -s, \ldots, s$ med kun <u>to</u> mulige verdier : $m_s = -\frac{1}{2}$ og $m_s = -\frac{1}{2}+1 = +\frac{1}{2}$

Analogt til $\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e}\vec{L}$ forventes klassisk $\vec{\mu}_s = -\frac{e}{2m_e}\vec{S}$.

Relativistisk kvantemekanikk (Dirac) gir

$$\vec{\mu}_s = g_s \cdot \left(-\frac{e}{2m_e}\right)\vec{S} \quad \text{med} \quad g_s = 2$$

Mer presis teori gir $g_s = 2 \cdot 1.00115965$ (QED)

Presise målinger gir $g_s = 2 \cdot (1.00115965\,2187 \pm 4 \cdot 10^{-12})$

Mer om spinn i FY2045; her noen kommentarer:

- For elektroner, protoner, nøytroner etc kan $\vec{S}$ ikke tilskrives rotasjon av masse om en akse. Også for p og n er $s = 1/2$ og $m_s = \pm 1/2$, med $\vec{\mu}_p = 5.59 \frac{e}{2m_p}\vec{S}_p$ og $\vec{\mu}_n = -3.83 \frac{e}{2m_n}\vec{S}_n$. (Både p og n består av 3 kvarker.)
- Total dreieimpuls (for et elektron): $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, $J = |\vec{J}| = \sqrt{j(j+1)}\,\hbar$, $j = |l \pm 1/2|$
- Egentilstander for "spinn-frihetsgraden": χ_{m_s} ; $m_s = \pm 1/2$

  Ortonormering: $\langle \chi_{m_s}, \chi_{m_s'} \rangle = \delta_{m_s m_s'}$
- I atomer med flere elektroner inngår ofte to og to elektroner i samme romlige tilstand, med hhv $m_s = +1/2$ og $m_s = -1/2$. Atomets totale elektronspinn blir dermed null hvis antall elektroner er et partall, og $S = \sqrt{3/4}\,\hbar$ hvis oddetall. Tilsvarende gjelder for atomets totale banedreieimpuls.

  Eks: Sølv, Ag, 47 elektroner (jf Stern-Gerlach-exp.)

  $$\underbrace{1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^{10}\ 4s^2\ 4p^6\ 4d^{10}}_{46 \text{ elektroner med total } S=0 \text{ og } L=0}\ \ \underbrace{5s}_{l=0}$$

  $\Rightarrow \vec{\mu}_{Ag} = \vec{\mu}_s$ for det ene elektronet i 5s-orbitalen, med kun to mulige orienteringer av $\vec{S}$ i $\vec{B}$-feltet; $S_z = \pm \hbar/2$
- Kjernepartiklene har $m_p, m_n \gg m_e \Rightarrow \vec{\mu}_p$ og $\vec{\mu}_n$ kan som regel neglisjeres. (Viktig unntak: NMR, MRI; kjernemagnetisk resonans)

Pauliprinsippet [PCH 8.5; DJG 5.1; IØ 6.1.1]

To elektroner (og to protoner etc) er identiske: Det har ingen fysisk konsekvens å bytte navn (nummer) på to elektroner.

$$\Rightarrow \quad |\Psi(1,2)|^2 = |\Psi(2,1)|^2$$

der

$1 \; \hat{=}$ alle koordinater for elektron nr 1: $(\overset{\text{posisjon}}{\vec{r}_1}, \overset{\text{spinn}}{s_1})$

$2 \; \hat{=}$ ——— " ——— 2: $(\vec{r}_2, s_2)$

To typer partikler i naturen:

Bosoner: Symmetrisk Ψ ved ombytte $1 \leftrightarrow 2$

dvs $\Psi(1,2) = + \Psi(2,1)$

Fermioner: Antisymmetrisk Ψ ved ombytte $1 \leftrightarrow 2$

dvs $\Psi(1,2) = - \Psi(2,1)$

Elektroner, protoner og nøytroner (m.fl.) er fermioner.

Fotoner (m.fl.) er bosoner.

[Anyoner: $\Psi(1,2) = e^{i\alpha} \Psi(2,1)$ med vilkårlig reell α !?

Mulig i 1D og 2D. Leinaas og Myrheim, Il Nuovo Cimento B, 37, 1-23 (1977)]

Av antisymmetrikravet følger Paulis "eksklusjonsprinsipp":

$$\boxed{\text{To fermioner kan ikke være i samme enpartikkeltilstand}}$$