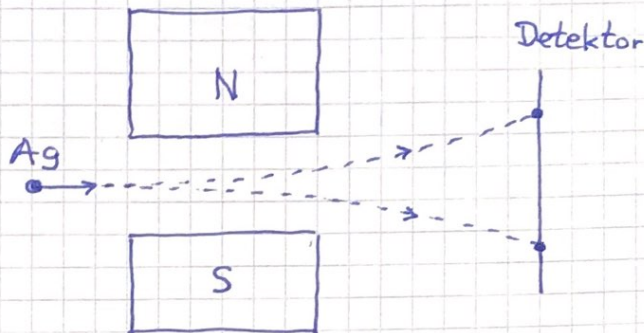
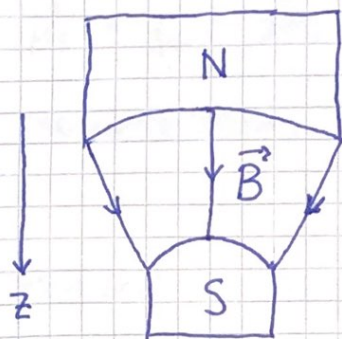


Spinn:

Stern og Gerlach (1922) sendte sølvatomer (Ag , $Z=47$) gjennom et inhomogent magnetfelt:



Kraft på sølvatomene:

$$F_z = -\frac{dV}{dz} = -m \cdot \mu_B \cdot \frac{dB}{dz} ; m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$$

Forventet $2l+1$ ulike avbøyninger, men eksp. gav to.

Goudsmit og Uhlenbeck foreslo i 1925 at elektronet har ~~en~~ indre dreie^{impuls}moment, et spinn $\vec{S}$, med et tilhørende magnetisk moment $\vec{\mu}_s$. Og at $\vec{S}$ er kvantisert på samme måte som $\vec{L}$:

$$L = |\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)} \hbar ; L_z = m \hbar ; m = -l, -l+1, \dots, l$$

$$S = |\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar ; S_z = m_s \hbar ; m_s = -s, -s+1, \dots, s$$

Stern-Gerlach-eksp. viser nå at m_s bare har 2 mulige verdier, $m_s = -\frac{1}{2}$ og $m_s = +\frac{1}{2}$, og dermed $s = \frac{1}{2}$.

[Ag har elektronkonfigurasjon $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^1$, med $\vec{L} = 0$. Totalt spinn er $\frac{1}{2}$ siden de 46 elektronene i orbitalene 1s til 4d inngår parvis med $m_s = \frac{1}{2}$ og $m_s = -\frac{1}{2}$.]

I analogi til at $\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$ kunne en forvente (106)
 at $\vec{\mu}_s = -\frac{e}{2m_e} \vec{S}$, men eksperimenter gir $\vec{\mu}_s \approx -\frac{e}{m_e} \vec{S}$.
 Nøyaktige eksperimenter gir

$$\vec{\mu}_s = g_s \cdot \left(-\frac{e}{2m_e}\right) \cdot \vec{S} \quad \text{med } g_s = 2.002319304374 \pm 8 \cdot 10^{-12}$$

Nøyaktig teori, kvanteelektrodynamikk (QED) gir

$$g_s = 2.00231930 \quad (!)$$

Protonet og nøytronet er også spinn- $\frac{1}{2}$ -partikler,
 med $s = \frac{1}{2}$ og $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Magnetisk moment er:

$$\vec{\mu}_p = g_p \cdot \frac{e}{2m_p} \cdot \vec{S}_p \quad ; \quad g_p = 5.59$$

$$\vec{\mu}_n = g_n \cdot \frac{e}{2m_n} \cdot \vec{S}_n \quad ; \quad g_n = -3.83$$

Siden $m_p, m_n \gg m_e$ er atomers magn. moment
 i hovedsak bestemt av elektronenes spinn og dreieimpuls.

Som vi gjorde for $\vec{L}$ velger vi nå egentilstander
 χ_+ ($m_s = \frac{1}{2}$; spinn opp) og χ_- ($m_s = -\frac{1}{2}$; spinn ned)
 felles for $\hat{S}^2$ og $\hat{S}_z$, og kommuteringsrelasjoner

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar \hat{S}_z \quad \text{osv.} \quad \text{og} \quad [\hat{S}^2, \hat{S}_j] = 0 \quad (j=x, y, z)$$

$$\text{Egenvektorer: } \chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\chi_+^\dagger = (1 \ 0), \quad \chi_-^\dagger = (0 \ 1)$$

$$\text{Normering: } \chi_+^\dagger \chi_+ = (1 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \quad ; \quad \chi_-^\dagger \chi_- = 1$$

$$\text{Ortogonalitet: } \chi_+^\dagger \chi_- = \chi_-^\dagger \chi_+ = 0$$

Spinn-operatorer:

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_z$$

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_x$$

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_y$$

$$\Rightarrow \hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} ; \hat{S}_j^2 = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Paulimatrisene: $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ ($j = x, y, z$)

Eks: Hva er $\langle S_x \rangle$ for elektron i tilstand χ_+ ?

$$\text{Løsn: } \langle S_x \rangle = \chi_+^\dagger \hat{S}_x \chi_+ = \frac{\hbar}{2} (1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \underline{\underline{0}}$$

Som ventet: χ_+ er egentilstand for $\hat{S}_z$.

Da er S_x (og S_y) uskarpe, med sanns. $1/2$ for at en måling av S_x (og S_y) gir $\frac{\hbar}{2}$ og $-\frac{\hbar}{2}$.

Siden $\langle S_x^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}$ (alltid) er

$$\Delta S_x = \sqrt{\langle S_x^2 \rangle - \langle S_x \rangle^2} = \frac{\hbar}{2} \quad (\text{og } \Delta S_y = \frac{\hbar}{2})$$

Atomer. Det periodiske system. MolekylerPauliprinsippet - med begrunnelse

[PCH 8.5 ; DFG 5.1 ; IØ 6.1.1]

(W. Pauli, 1925, NP 1945)

Elektroner (og andre elementærpartikler) er identiske partikler, og ombytte av to elektroner har ingen målbar effekt:

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

Her er $\Psi(1,2)$ en topartikkeltilstand, og
 $1 = (\vec{r}_1, m_{s1})$, $2 = (\vec{r}_2, m_{s2})$.

Bosoner: $\Psi(1,2) = \Psi(2,1)$, symmetrisk ved ombytte $1 \leftrightarrow 2$. Eks: Fotoner, ${}^4_2\text{He}$ (superflytende under 2.172 K, null viskositet), Cooper-par (to elektroner som tiltrekker hverandre via gittervibrasjoner i krystaller ved lave nok temperaturer; gir opphav til superledning, null resistivitet).

Bosoner har heltallig spinn.

Med enpartikkeltilstander ϕ_i og ϕ_j :

$$\Psi_s(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \phi_i(1) \phi_j(2) + \phi_j(1) \phi_i(2) \} = \Psi_s(2,1)$$

Bose-Einstein-kondensasjon: Alle bosonene i systemet kan ved lav nok temperatur befinne seg i samme (enpartikkel-) grunntilstand ϕ_0 .

Fermioner: $\Psi(1,2) = -\Psi(2,1)$, antisymmetrisk ved ombytte $1 \leftrightarrow 2$. Eks: Elektroner, protoner, nøytroner. Fermioner har halvtallig spinn.

$$\Psi_A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \phi_i(1) \phi_j(2) - \phi_j(1) \phi_i(2) \} = -\Psi_A(2,1)$$

Hvis de to elektronene er i samme enpartikkeltilstand, dvs $\phi_i = \phi_j$, ser vi at $\Psi_A(1,2) = 0$. Dermed:

To elektroner kan ikke befinne seg i samme enpartikkeltilstand.

Pauliprinsippet

Anyoner: $\Psi(1,2) = e^{i\theta} \Psi(2,1)$ med $\theta \neq n \cdot \pi$

Beskrevet teoretisk allerede i 1977 av

Jon Magne Leinaas og Jan Myrheim ved UiO.

Ref: JL Nuovo Cimento B, 37, 1-23.

Mulig å realisere slike partikler i 2D.

Påvist eksperimentelt i 2020.

Det periodiske system

Grunntilstand for H-atomet: Elektronet i 1s.

Elektronkonfigurasjon: $1s^1$

Numersk løsning av TUSL for andre atomer gir en lignende struktur, med økende energi

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f < 5d \dots$$

Aufbau-prinsippet: Atomets grunntilstand har inntil 2 elektroner (med motsatt spinn) i orbitaler med lavest mulig energi.

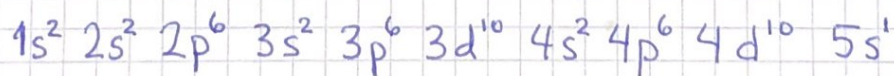
Hund's (første) regel: Atomets totale spinn er størst mulig.

Et par eksempler:

C (karbon, $Z=6$): $1s^2 2s^2 2p^2$



Ag (sølv, $Z=47$):



$$L=0, \quad S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$$

Edelgasser:

He: $1s^2$, Ne: $1s^2 2s^2 2p^6$, Ar: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$...

Betydelig energigap fra høyeste okkuperte til laveste ledige tilstand. Derfor lite reaktive.

Alkalimetaller:

Li: $1s^2 2s^1$, Na: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 = [\text{Ne}] 3s^1$, ...

Har ett forholdsvis løst bundet elektron som kan avgis eller deles med f.eks. halogener.

Halogener:

F: $[\text{He}] 2s^2 2p^5$, Cl: $[\text{Ne}] 3s^2 3p^5$, ...

Mangler ett elektron for å oppnå edelgasskonfigurasjon.

Danner stabile salter med alkalimetallene, f.eks. NaCl.

Innskuddsmetaller:

Cu (kobber, $Z=29$)
Sc (scandium, $Z=21$) - ~~Zn (zink, $Z=30$)~~: Delvis fylt 3d

Y (yttrium, $Z=39$) - Ag (sølv, $Z=47$): Delvis fylt 4d

Kan ha ulike oksidasjonstall (f.eks. Fe^{2+} , Fe^{3+}).

Dermed en "rik kjemi". Inngår ofte i katalyse, dvs reduserer energibarrieren og øker hastigheten for ulike kjemiske reaksjoner.

Molekyler

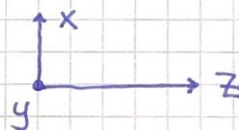
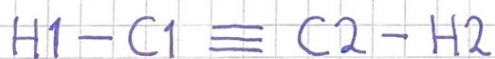
Enpartikkeltilstander, molekylorbitaler (MO), for elektroner i et molekyl kan konstrueres som lineære kombinasjoner (LC) av atomære orbitaler (AO), kjent som LCAO:

$$\underset{\text{MO}}{\psi} = \sum_j c_j \underset{\text{AO}}{\phi_j}$$

Grunntilstanden for molekylet:

- Inntil 2 elektroner i hver MO slik at total energi blir så lav som mulig.
- Atomposisjoner $\{\vec{R}_i\}$, dvs bindingslengder og -vinkler, slik at netto kraft er lik null på alle atomene i molekylet.

Eks: Acetylen (etyn) C_2H_2



Lineært molekyl. 14 elektroner. 2 elektroner i hver av de 7 MO som har lavest mulig energi.

Vi lager ulike MO med utgangspunkt i AO sentrert på de ulike atomene: $1s(H)$, $1s(C)$, $2s(C)$, $2p(C)$.

Potensialet er symmetrisk mhp molekylets massesenter (CM) midt mellom C-atomene. De ulike MO må derfor ha paritet ± 1 mhp CM.

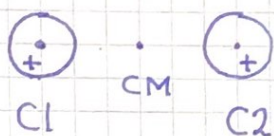
$$\psi_1 = 1s(C1) + 1s(C2) = 1\sigma_g$$

(Notasjon: Greske symboler $\sigma, \pi, \dots$ for MO.)

Tyskspråklig angivelse av paritet:

g = gerade, $p = +1$; u = ungerade, $p = -1$)

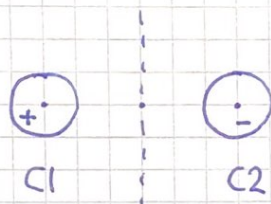
Visualisering ("polaridiagram"):



Ingen nodeplan.

(3D generalisering av nullpunkter i 1D.)

$$\psi_2 = 1s(C1) - 1s(C2) = 1\sigma_u$$

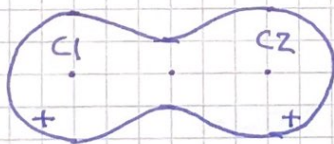


1 nodeplan:

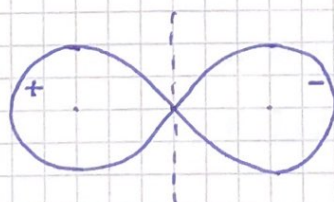
$\psi_2 = 0$ i xy-planet

Vi forventer $E_1 < E_2$ og $E_1 \approx E_2$.

$$\psi_3 = 2s(C1) + 2s(C2) = 2\sigma_g$$



$$\psi_4 = 2s(C1) - 2s(C2) = 2\sigma_u$$



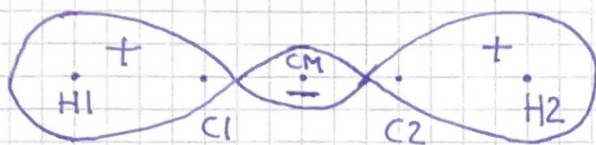
Forventer

$E_3 < E_4$

men ikke

veldig ulike.

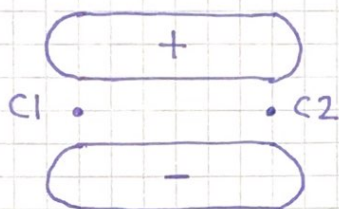
$$\psi_5 = 1s(H1) - 2p_z(C1) + 1s(H2) + 2p_z(C2) = 3\sigma_g$$



$$\psi_6 = 2p_x(C1) + 2p_x(C2) = \pi_{ux}$$

$$\psi_7 = 2p_y(C1) + 2p_y(C2) = \pi_{uy}$$

Nodeplan i hver
yz- og xz-planet.



$$E_6 = E_7$$

Elektronkonfigurasjon: $1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g^2 2\sigma_u^2 3\sigma_g^2 \pi_{ux}^2 \pi_{uy}^2$

Numerisk beregnede energinivåer (Hartree-Fock-metoden)

MO	Energi (eV)	
$1\sigma_g$	-305.7	
$1\sigma_u$	-306.6	
$2\sigma_g$	-28.2	
$2\sigma_u$	-20.8	
$3\sigma_g$	-18.6	
π_{ux}, π_{uy}	-11.3	(Highest Occupied MO)
$3\sigma_u$	+4.1	(Lowest Unoccupied MO)
π_{gx}, π_{gy}	+5.0	