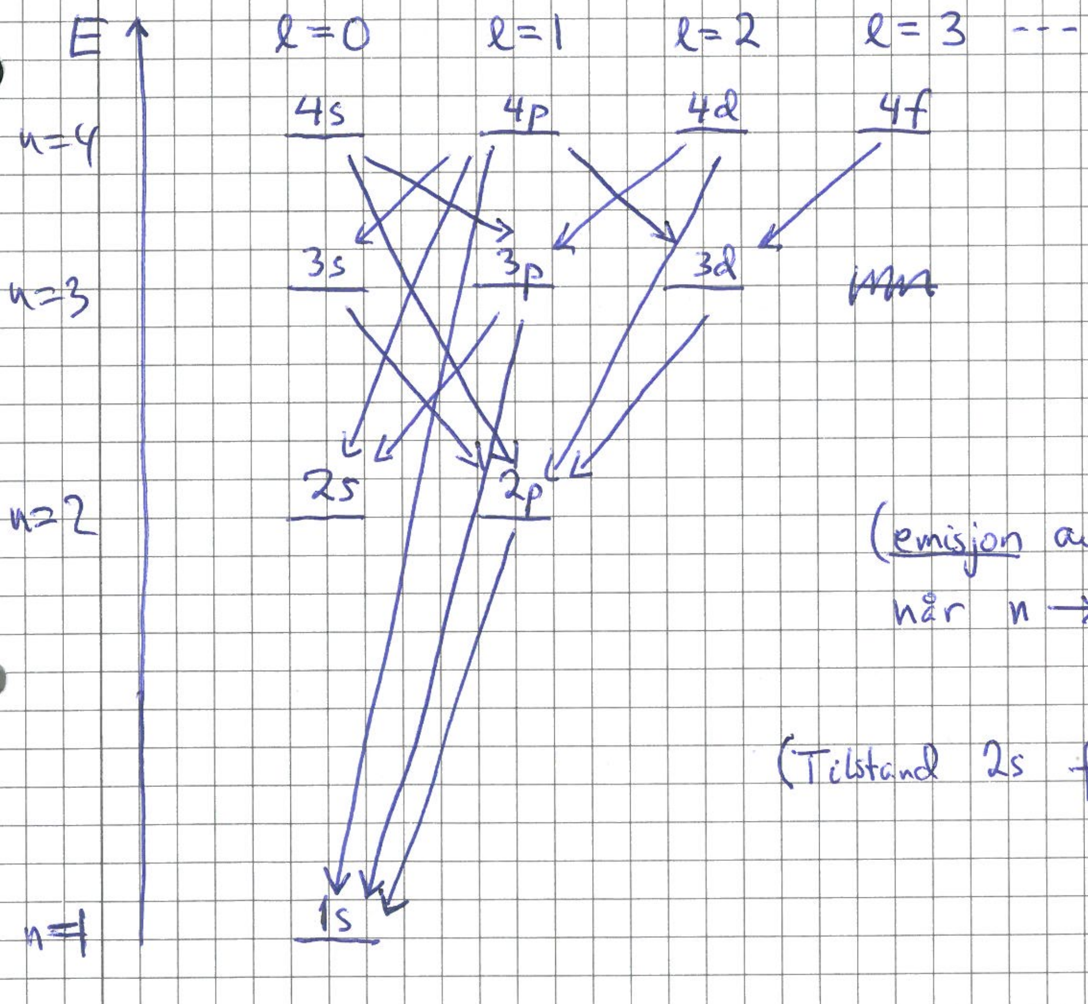
Utvalgsregler, nivåskjema og strålingsoverganger

Overgang av elektron fra tilstand $(n\,l\,m)$ til $(n'\,l'\,m')$ hvis

$$\boxed{\Delta l = \pm 1 \quad ; \quad \Delta m = 0, \pm 1} \quad \text{Utvalgsregler}$$

[Henger sammen med dreieimpulsbevarelse og at absorbert/emittert foton har spinn (indre dreieimpuls) tilsvarende kvantetall lik 1.]

⇒ Nivåskjema m/ tillatte strålingsoverganger:



(emisjon av foton når $n \to n-1$)
$(n-2, n-3)$

(Tilstand 2s får lang levetid

[Strålingsteori ⇒ Tillatte overganger dersom "matriseelementet" $\vec{r}_{fi} = \int \psi_f^*(\vec{r})\, \vec{r}\, \psi_i(\vec{r})\, d^3r$ er forskjellig fra null. Se FY2045, TFY4205, PCH 12, 16 ; IØ "16"]

Atomer og molekyler [PCH 8,9; IØ 6] DJG 5

Identiske partikler, symmetri, Paulliprinsipp og spinn [6.1.1]

Partikler som elektroner er identiske: Ikke mulig å skjelne mellom to elektroner.

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

Dvs: Ingen fysisk konsekvens av å bytte "navn" (nummer) på to identiske partikler.

[1 $\hat{=}$ alle koordinater for elektron nr 1;
2 $\hat{=}$ ——— " ——— 2]

Dermed: $\Psi(1,2) = e^{i\alpha}\,\Psi(2,1)$ (med reell α)

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

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

Fermioner: Antisymmetrisk Ψ når $1 \leftrightarrow 2$

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

Elektroner (og protoner, nøytroner etc) er fermioner.

[Mulig med vilkårlig α i 1D og 2D; anyoner!
Vist av Jon Magne Leinaas (UiO) og Jan Myrheim (NTNU)]

Paulipinsippet: [6.1.1.b]

En direkte følge av antisymmetrikravet

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

for fermioner.

Bevis:

Anta to fermioner uten innbyrdes v.v:

$$\hat{H} = \hat{H}(1) + \hat{H}(2)$$

TUSL: $\hat{H}\Psi(1,2) = E\Psi(1,2)$

Matematisk er produktform

$$\Psi(1,2) = \psi_i(1)\psi_j(2)$$

OK, med

$$\hat{H}(1)\psi_i(1) = E_i\psi_i(1), \qquad \hat{H}(2)\psi_j(2) = E_j\psi_j(2)$$

$$E = E_i + E_j$$

$\psi_i(n)$ = enpartikkeltilstand nr i for partikkel nr n
($i = 1,2,3,\ldots$; $n = 1$ eller 2)

Problem:

$\psi_i(1)\psi_j(2) \neq -\psi_i(2)\psi_j(1)$, dvs $\Psi(1,2) \neq -\Psi(2,1)$,

dvs antisymmetrikravet er ikke oppfylt.

Løsning: Siden $\psi_i(2)\psi_j(1)$ er like bra løsning (matematisk!) som $\psi_i(1)\psi_j(2)$, og med samme energi $E = E_i + E_j$, kan vi godt bruke en linearkomb. av disse to, f. eks.

$$\psi_A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\psi_i(1)\psi_j(2) - \psi_i(2)\psi_j(1)\right\}$$

Nå er

$$\psi_A(2,1) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\psi_i(2)\psi_j(1) - \psi_i(1)\psi_j(2)\right\} = -\psi_A(1,2)$$

som var kravet ved ombytte av to identiske fermioner!

Tilsvarende (Omvendt!) for to bosoner:

$$\psi_S(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\psi_i(1)\psi_j(2) + \psi_i(2)\psi_j(1)\right\} = \psi_S(2,1),$$

dvs symmetrikravet oppfylt ved ombytte av to identiske bosoner!

Anta nå at de to fermionene befinner seg i samme enpartikkeltilstand, dvs at $i = j$.

Da blir $\psi_A(1,2) = 0$! Dette er Pauliprinsippet:

> To fermioner kan ikke være i samme enpartikkeltilstand.

Generalisering til system med N fermioner:

Vi ser at vi kan skrive $\psi_A(1,2)$ som en <u>determinant</u>:

$$\psi_A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_i(1) & \psi_i(2) \\ \psi_j(1) & \psi_j(2) \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\psi_i(1)\psi_j(2) - \psi_i(2)\psi_j(1)\right\}$$

Med N enpartikkeltilstander $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \ldots, \psi_N$ kan en N-partikkeltilstand med riktig antisymmetri skrives som en såkalt <u>Slater-determinant</u> (John C. Slater, 1929):

$$\psi_A(1,2,3,\ldots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \psi_1(2) & \cdots & \psi_1(N) \\ \psi_2(1) & \psi_2(2) & \cdots & \psi_2(N) \\ \vdots & \vdots & & \\ \psi_N(1) & \psi_N(2) & \cdots & \psi_N(N) \end{vmatrix}$$

- Ombytte av to partikkel-koordinater, f.eks. $1 \longleftrightarrow 2$, tilsvarer ombytte av to kolonner, som gir fortegnsskifte: $\psi_A(1,2,\ldots,N) = -\psi_A(2,1,\ldots,N)$. <u>Antisymm. kravet</u> oppfylt!
- To identiske enpartikkeltilstander, f.eks. $\psi_1 = \psi_2$, gir to identiske rader, som gir verdi null for determinanten: Dette er <u>Paulіprinsippet</u>: <u>Ikke</u> to fermioner i samme enpartikkeltilstand!

Spinn: [6.1.1.c]

Jorda har banedreieimpuls $\vec{L}$, relatert til banebevegelsen rundt sola, og "indre dreieimpuls" ("spinn"), $\vec{S}$, relatert til klodens rotasjon om sin egen N-S-akse.

Her er både $\vec{L}$ og $\vec{S}$ et resultat av masse i bevegelse i rommet, dvs $\sum_i \vec{r}_i \times m_i \vec{v}_i$.

Elementærpartikler har også (indre dreieimpuls) $\vec{S}$, med lignende egenskaper som $\vec{L}$.

spinn

Men: For elektroner, protoner, nøytroner etc., er spinnet $\vec{S}$ ikke et resultat av masse i rotasjon om en akse.

Mer om spinn i FY2045.

Her, kun noen "facts" om elektronspinnet:

- Kvantetall s og m_s (i stedet for l og m), med $s = 1/2$, og $m_s = +1/2$ eller $m_s = -1/2$
- Egenverdi for $\vec{S}^2$: $s(s+1)\hbar^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$
- — " — S_z : $m_s \hbar = \pm \frac{1}{2}\hbar$
- Egentilstander : χ_{m_s} ; $m_s = \pm 1/2$
- Ortonormering : $\langle \chi_{m_s}, \chi_{m_s'} \rangle = \delta_{m_s, m_s'}$