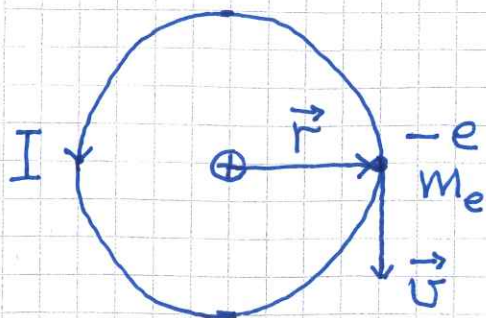


Elektroner i magnetfelt: spinn

$$\text{Strøm: } I = \frac{q}{T} = \frac{e}{\frac{2\pi r}{v}} = \frac{ev}{2\pi r}$$

$$\text{Dreieimpuls: } L = r m_e v$$

Magnetisk dipolmoment:

$$\mu = IA = \frac{ev}{2\pi r} \cdot \pi r^2 = \frac{1}{2} evr$$

$$\Rightarrow \vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$$

$$\text{Gyromagnetisk forhold: } \mu/L = e/2m_e$$

$$\text{Bohr: } L = n\hbar; \quad n=1, 2, 3, \dots$$

$$\Rightarrow \mu = n \cdot \frac{e\hbar}{2m_e} = n \cdot \mu_B$$

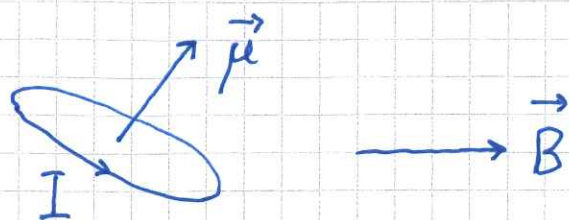
$$\text{med } \mu_B = e\hbar/2m_e = 1 \text{ Bohr-magneton}$$

$$\approx 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ A m}^2$$

$$\text{Schrödinger: } L = \sqrt{l(l+1)} \hbar; \quad l=0, 1, \dots, n-1$$

$$L_z = m_l \hbar; \quad m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l$$

Magnetisk dipol i magnetfelt $\vec{B}$: (FY6017) (74)



$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B} = \text{dreiemoment p\aa dipolen}$$

$$V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \text{dipolens potensielle energi}$$

$$\Rightarrow \text{lavest energi med } \vec{\mu} \parallel \vec{B}$$

$$\vec{F} = -\nabla V = \nabla (\vec{\mu} \cdot \vec{B}) = \text{kraft p\aa dipolen}$$

$$\Rightarrow \vec{F} = 0 \text{ i uniformt } \vec{B}\text{-felt}$$

[OS 8.2; YF 41.4]

Zeeman - effekten (P. Zeeman 1897; NP 1902):

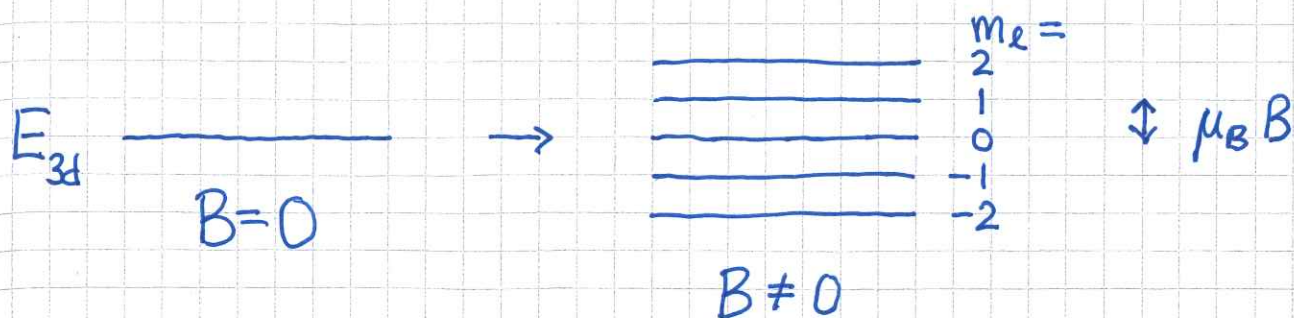
Hvis H-atomer med $\vec{\mu} = (-e/2m_e) \vec{L}$ plasseres i magnetfelt $\vec{B} = B \hat{z}$, har de et bidrag til pot. energi,

$$V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{e}{2m_e} L_z B = m_l \cdot \frac{e\hbar}{2m_e} \cdot B = m_l \mu_B B$$

der $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$. Gir oppsplitting

av energiniv\aaer med $l > 0$, i $2l+1$ niv\aaer.

$E_{ks}: 3d; l=2; m_l = 0, \pm 1, \pm 2$



Liten (men målbar) effekt:

Med $B = 1 \text{ T}$ (et ganske sterkt magnetfelt) er

$$\Delta E = \mu_B B = 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ J} \approx 6 \cdot 10^{-5} \text{ eV}$$

Til sammenligning er f.eks.

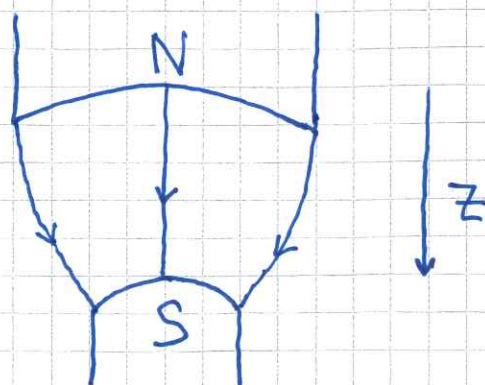
$$E_{3d} - E_{2p} = 13.6 \text{ eV} \cdot \left(-\frac{1}{3^2} + \frac{1}{2^2} \right) \approx 2 \text{ eV}$$

Stern - Gerlach - eksperimentet
(1922; O. Stern NP 1943):

[OS 8.3]

[YF 41.5]

Sendte (sølv-) atomer gjennom område med
inhomogent magnetfelt $\vec{B}(z)$:



Kraft på atomene:

$$F_z = - \frac{dV}{dz} = - m_l \mu_B \frac{dB_z}{dz} \quad ; \quad m_l = -l, \dots, 0, \dots, l$$

⇒ Forventer $2l+1$ ulike avbøyninger av atomene og $2l+1$ ulike treffpunkter på en detektor plassert bak magneten.

Eksperimentene gav 2 treffpunkter (striper)!

Goudsmit og Uhlenbeck foreslo (i 1925) at elektronet har en indre dreieimpuls - et spinn - $\vec{S}$, med et tilhørende magnetisk dipolmoment $\vec{\mu}_s$. I analogi til en kvantisert (bane-)dreieimpuls med $L = |\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)} \hbar$ og $L_z = m_l \hbar$, med $m_l = -l, \dots, 0, \dots, +l$, foreslo de at spinnet også er kvantisert, med

$$S = |\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar \quad \text{og} \quad S_z = m_s \hbar$$

med $m_s = -s, \dots, s$. De 2 avbøyningene i Stern-Gerlach-eksp. antydte at m_s bare har 2 mulige verdier, nemlig $m_s = -1/2$ og $m_s = 1/2$, ders $s = 1/2$. Som stemmer!

Kommentarer :

(77)

- "Klassisk" forventer vi nå at $\vec{\mu}_s = -\frac{e}{2m_e} \vec{S}$
(siden $\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$)
- Eksperimenter gir $\vec{\mu}_s \approx -\frac{e}{m_e} \vec{S}$; meget gode
exp. gir gyromagnetisk faktor

$$g_s = 2.002319304374 \pm 8 \cdot 10^{-12}$$

når vi skriver

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

- Relativistisk QM (dvs Dirac-ligningen)
gir $g_s = 2$.

- Kvanteelektrodynamikk (QED) gir
 $g_s = 2.00231930$

- Også protonet og nøytronet er "spinn- $\frac{1}{2}$ -partikler",
med $s = \frac{1}{2}$ og $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Gyromagnetisk faktor
er hhv $g_p = 5.59$ og $g_n = -3.83$, dvs

$$\vec{\mu}_p = 5.59 \cdot \frac{e}{2m_p} \vec{S}_p ; \quad \vec{\mu}_n = -3.83 \cdot \frac{e}{2m_n} \vec{S}_n$$

- Total dreieimpuls for elektron i tilstand med dreieimpulskvantetall l :

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

med kvantisert $J = |\vec{J}| = \sqrt{j(j+1)} \hbar$

og $J_z = m_j \hbar$; $m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j$

Her kan $\vec{S}$ peke i (mer eller mindre) samme retning som $\vec{L}$ eller (mer eller mindre) motsatt retning av $\vec{L}$, slik at $j = l + 1/2$ eller $j = l - 1/2$. (Bare $j = 1/2$ dersom $l = 0$.)

Eks: H-atom med elektronet i en tilstand med $l = 1$. Da er $j = 1/2$ eller $j = 3/2$.

Hvis derimot atomet er i grunntilstanden, dvs

ψ_{100} , er $l = 0$. Da er $j = 1/2$ og $\vec{J} = \vec{S}$

og $J_z = S_z$, dvs $m_j = m_s = \pm j = \pm s = \pm 1/2$,

som vi typisk betegner hhv "spinn opp" ($m_s = 1/2$)

og "spinn ned" ($m_s = -1/2$).

Pauliprinsippet

[OS 8.4] [YF 41.6]

(79)

Elektroner (og andre typer elementærpartikler) er identiske : Ombytte av to elektroner har ingen målbar konsekvens. Dermed :

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

der 1 og 2 representerer koordinatene til elektron nr 1 og 2, $1 \hat{=} (\vec{r}_1, s_1)$ og $2 \hat{=} (\vec{r}_2, s_2)$.

To muligheter :

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

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

Eks: Fotonet

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

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

Eks: Elektronet, protonet, nøytronet

Et system med to elektroner kan da beskrives med bølgefunksjonen

$$\Psi_A(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Phi_i(1) \Phi_j(2) - \Phi_i(2) \Phi_j(1) \}$$

der Φ_i og Φ_j er to vilkårlige enpartikkeltilstander.

Da ser vi at dersom de to elektronene er i samme enpartikkeltilstand, dvs $\phi_i = \phi_j$, så blir $\Psi_A(1,2) = 0$!!

Konklusjon:

I et system med to (eller flere) elektroner må alle elektronene befinne seg i ulike enpartikkeltilstander.

Dette er Paulis eksklusjonsprinsipp.

Vi må huske at hver enpartikkeltilstand ϕ_j avhenger av både romlige koordinater $\vec{r}$ og spinnkoordinaten s , dvs

$$\phi_j(\vec{r}, s) = \psi(\vec{r}) \cdot \chi_{m_s}(s)$$

med romlig orbital $\psi(\vec{r})$ og spinnfunksjon $\chi_{m_s}(s)$.

For elektroner er $s = 1/2$ og $m_s = \pm 1/2$.

Det innebærer at hver romlige orbital $\psi(\vec{r})$ kan kombineres med $\chi_{1/2}$ og $\chi_{-1/2}$, og dermed okkuperes av inntil 2 elektroner.

Atomer og det periodiske system

[OS 8.4]
[YF 41.6]

(81)

For H-atomet "løste" vi TUSL og fant de romlige orbitalene $\Psi_{nlm_l}(\vec{r})$, dvs Ψ_{100} (1s), Ψ_{200} (2s), Ψ_{21-1} , Ψ_{210} , Ψ_{211} (2p) osv.

For atomer med to eller flere elektroner klarer vi ikke å løse TUSL eksakt, men numeriske løsningsmetoder viser at vi får en lignende "struktur" som i H-atomet, med en kulesymmetrisk 1s-tilstand med lavest energi osv. I følge Pauliprinsippet vil da f.eks He-atomet, med 2 elektroner, ha en grunntilstand med begge elektronene i denne 1s-tilstanden, ett med spinn opp ($\chi_{1/2}$) og ett med spinn ned ($\chi_{-1/2}$). Totalt spinn i He-atomet er derfor null, og siden begge elektronene har $l=0$, blir total dreieimpuls for de to elektronene lik null.

Vi angir elektronkonfigurasjonen til He som $1s^2$.

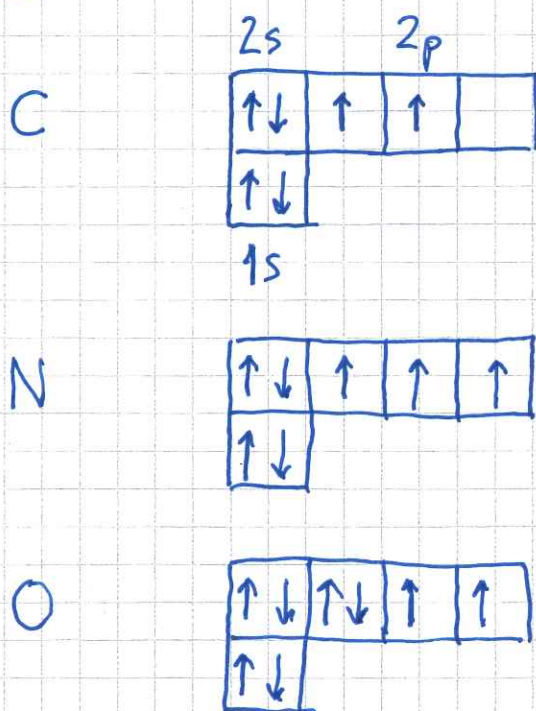
Li har tre elektroner; nr 3 kan ikke være i 1s-orbitalen, men må okkupere orbitalen med nest lavest energi, 2s. Gir elektronkonfig. for Li : $1s^2 2s$

Osu: Be $1s^2 2s^2$
 B $1s^2 2s^2 2p$
 C $1s^2 2s^2 2p^2$

- He (2 el.), Ne (10), Ar (18), Kr (36), Xe (54)
 Har fylte skall, elektronkonfig. hhv $1s^2$,
 $1s^2 2s^2 2p^6$, $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$, $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10}$
 $4s^2 4p^6$
 og $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6$
 Har lite ønske om å dele sine elektroner med andre
 atomer. Er derfor edelgasser; lite reaktive.
- Li, Na, K, ...
 Ett svakt bundet elektron i ytterste skall, som lett
 kan avgis / deles med et annet atom, f.eks. et halogen.
- F, Cl, Br, ...
 Halogener. Mangler ett elektron i ytterste skall, tar
 gjerne i mot et elektron, f.eks. fra Li, Na, K, ...
 (Høy elektronegativitet.)
 ⇒ Danner salter som NaCl, LiF osv

- Tilfeldig at E ikke avhenger av l (bare n) (83)
i H-atomet. I atomer med to eller flere elektroner
er $E_{2s} < E_{2p}$ osv. Ofte er $E_{4s} < E_{3d}$ osv,
men ikke alltid.
- Hund's regel: Grunntilstanden i et atom har
så stort totalspinn som mulig, bare Pauliprinsippet
er oppfylt.

Eks:



Begrunnelse: Lavest totalenergi oppnås med å
minimere frastøtningen mellom elektronene. Oppnås med
så antisymmetrisk romlig (orbital) bølgefunksjon som
mulig. Da må spinn delen være så symmetrisk som mulig,
som oppnås med mest mulig parallelle spinn.

Utvalgsregler for strålingsoverganger

[OS 8.5]
[YF 41.4]

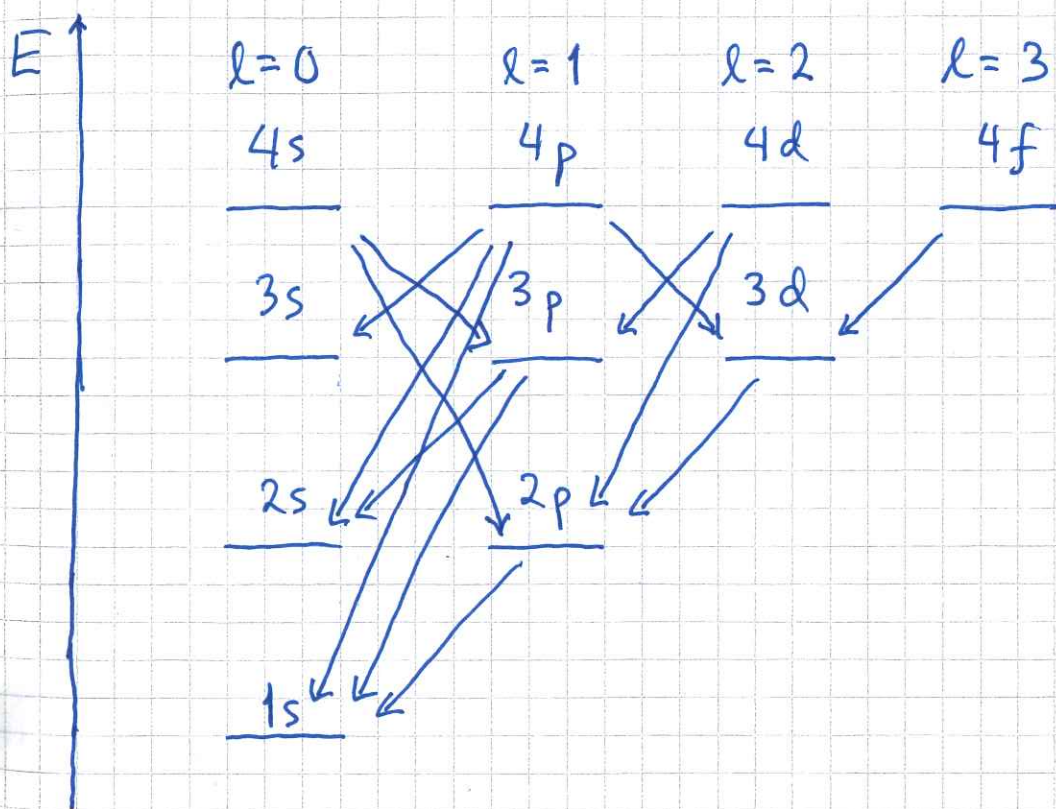
84

Fotonet er en partikkel med heltallig spinn lik 1.

Når et atom absorberer eller emitterer et foton, må systemets totale dreieimpuls være bevart. Tillatte "overganger" oppfyller utvalgsreglene

$$\Delta l = \pm 1 ; \Delta m_l = 0, \pm 1$$

Nivåskjema for H-atomet:



Levetid for elektron i 2p : ca 1 ns

—————"—————" 2s : ca 0.1 s ($\approx \infty$)

Balmer-serien : Fra $n > 2$ til 2

Lyman —"— : Fra $n > 1$ til 1

Paschen —"— : Fra $n > 3$ til 3