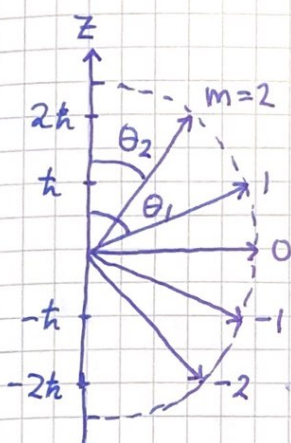


Eks: Anta at $l = 2$. Hva er da de mulige vinklene mellom $\vec{L}$ og L_z ?
(z-aksen)

Løsn: $m = 0, \pm 1, \pm 2$

$$L = \sqrt{2 \cdot 3} \hbar = \sqrt{6} \hbar$$

$$L_z = 0, \pm \hbar, \pm 2\hbar$$



$$L_z/L = \cos \theta$$

$$\Rightarrow \theta = \arccos \left(\frac{m}{\sqrt{l(l+1)}} \right)$$

$$\theta_0 = 90^\circ$$

$$\theta_1 = 66^\circ$$

$$\theta_2 = 35^\circ$$

Notasjon for "skall" og orbitaler:

n	1	2	3	4
skall	K	L	M	N

Skallenes utstrekning:

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle^{-1} = n^2 a_0 \quad (\text{som i Bohrs atommodell})$$

Dreieimpulsnotasjon:

l	0	1	2	3	4	5	...
bokstaver	s	p	d	f	g	h	...

Arv fra 1800-tallets spektroskopister:

sharp, principal, diffuse, fundamental

K-skall: $\psi_{100} = 1s$

L-skall: $\psi_{200} = 2s$

$\psi_{21-1}, \psi_{210}, \psi_{211} = 2p$

M-skall: $\psi_{300} = 3s$

$\psi_{31-1}, \psi_{310}, \psi_{311} = 3p$

$\psi_{32-2}, \psi_{32-1}, \psi_{320}, \psi_{321}, \psi_{322} = 3d$

Degenerasjonsgrad:

$g_n =$ antall ulike ψ_{nlm} med samme energi E_n

$g_1 = 1, g_2 = 4, g_3 = 9, \dots$, dvs $g_n = n^2$

Utvælgsregler for strålingsoverganger [OS 8.5; YF 41.4]

Fotonet har spinn $\pm \hbar$ i bevegelsesretningen.

Total dreieimpuls er bevart når et atom absorberer eller emitterer et foton.

Tillatte strålingsoverganger for atomet oppfyller utvælgsreglene $\Delta l = \pm 1, \Delta m = 0, \pm 1$. Dvs:

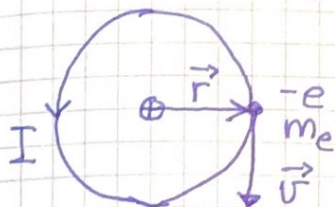
$s \leftrightarrow p, p \leftrightarrow d, d \leftrightarrow f, \dots$ er tillatt.

Lyman-serien: $n > 1 \leftrightarrow n = 1$ (UV)

Balmer - " - : $n > 2 \leftrightarrow n = 2$ (synlig)

Paschen - " - : $n > 3 \leftrightarrow n = 3$ (IR)

Dreieimpuls og magnetfelt. Spinn [OS 8.2, 8.3; YF 41.4, 41.5] 77



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

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

Magnetisk dipolmoment:

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

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

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

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

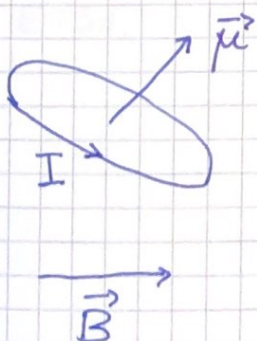
$$\Rightarrow \mu = n \cdot \frac{e\hbar}{2m_e} = n \cdot \mu_B$$

$$\mu_B = e\hbar/2m_e \approx 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ A} \cdot \text{m}^2 = 1 \text{ Bohr-magneton}$$

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

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

Magnetisk dipol i ytre felt $\vec{B}$: (se FY6017)



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

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

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

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

[OS 8.2; YF 41.4]

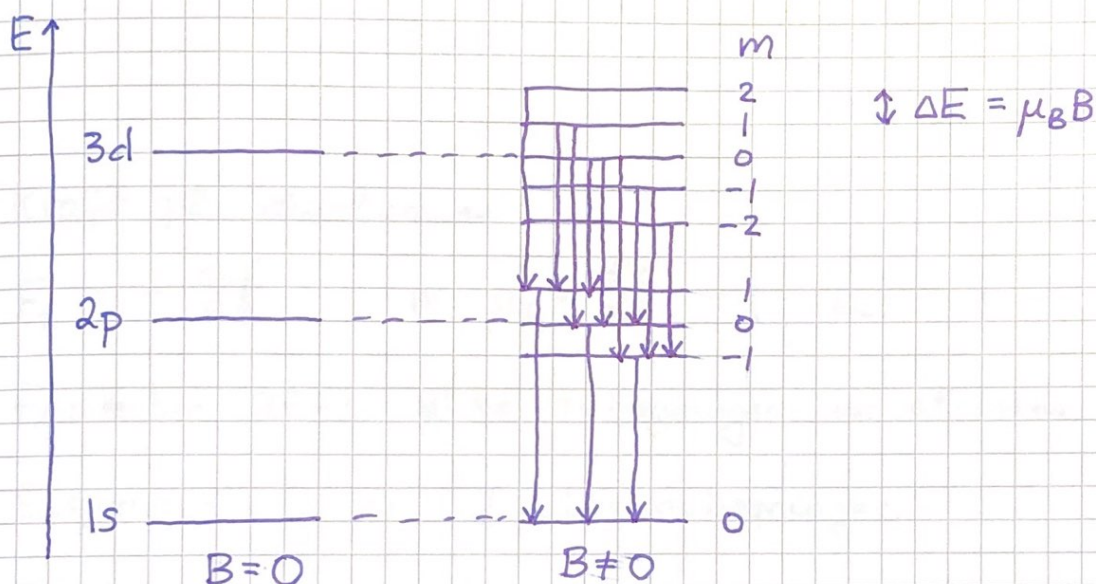
Zeeman-effekt (P. Zeeman 1897, NP 1902)

(78)

H-atom med $l > 0$ i magnetfelt $\vec{B} = B\hat{z}$ får et kvantisert tillegg til pot. energi:

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

Her er $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$. Dermed blir energinivåer med $l > 0$ splittet opp i flere tettliggende nivåer:



Med f.eks $B = 7T$: $\Delta E = 9.27 \cdot 10^{-24} \frac{J}{T} \cdot 7T \approx$

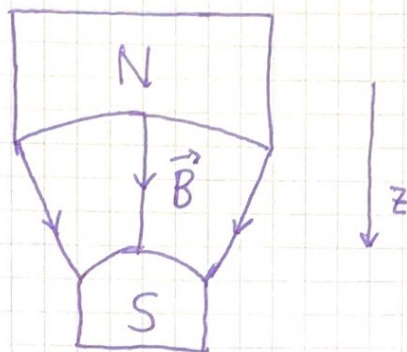
Til sammenligning:

$$E(3d) - E(2p) = 13.6 \text{ eV} \cdot \left(-\frac{1}{9} + \frac{1}{4}\right) \approx 2 \text{ eV}$$

Stern-Gerlach-eksperimentet. Spinn. [OS 8.3; YF 41.5]

(1922 ; O. Stern NP 1943)

Sendte sølvatomer (^{47}Ag) gjennom et inhomogent magnetfelt :



Kraft på sølvatomene :

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

Forventer $2l+1$ ulike avbøyninger av atomene.

Eksperimentet gav 2 ulike avbøyninger.

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 at

$$L = |\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)} \hbar ; L_z = m \hbar ; m = -l, \dots, 0, \dots, l$$

foreslo de at også elektronets spinn er kvantisert, med

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

De 2 avbøyningene i Stern-Gerlach-eksperimentet kan dermed forklares med at m_s bare har de 2 mulige verdiene $m_s = -\frac{1}{2}$ og $m_s = +\frac{1}{2}$; dermed er $s = \frac{1}{2}$.

(80)

I analogi til at $\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$ for dreieimpulsen $\vec{L}$ kunne en forvente at $\vec{\mu}_s = -\frac{e}{2m_e} \vec{S}$ for spinnet $\vec{S}$.
Det stemmer ikke: Eksperimenter gir $\vec{\mu}_s \approx -\frac{e}{m_e} \vec{S}$, i tråd med relativistisk QM (Diracligningen).

Meget nøyaktige eksperimenter gir, med

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

tallverdien

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

i tråd med nøyaktig teori (kvanteelektrodynamikk, QED)

$$g_s = 2.00231930$$

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

Disse partiklenes magnetiske dipolmoment er hhv

$$\vec{\mu}_p = g_p \cdot \frac{e}{2m_p} \cdot \vec{S}_p \quad ; \quad g_p = 5.58$$

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

Men ettersom både m_p og m_n er mye større enn m_e , blir atomenes magnetiske moment i hovedsak bestemt av elektronenes totale spinn og dreieimpuls.

Pauliprinsippet [OS 8.4; YF 41.6]

(81)

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

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

Her representerer 1 og 2 både posisjonsvektoren $\vec{r}$ og spinnkvantetallet m_s for hver elektron nr 1 og 2, dvs $1 = (\vec{r}_1, m_{s1})$; $2 = (\vec{r}_2, m_{s2})$.

Og $\Psi(1,2)$ er en topartikkeltilstand.

Symmetrisk "topartikkeltilstands-sannsynlighetsfordeling" (ved ombytte av partiklene) gir to muligheter:

Bosoner: Symmetrisk Ψ , dvs $\Psi(1,2) = \Psi(2,1)$.
Eks: Fotoner

Fermioner: Antisymmetrisk Ψ , dvs $\Psi(1,2) = -\Psi(2,1)$
Eks: Elektroner, protoner, nøytroner

Et system med 2 elektroner kan da beskrives med bølgefunksjonen

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

Her er ϕ_i og ϕ_j to vilkårlige enpartikkeltilstander, der i og j representerer kvantetallene til elektronene.

Ombytte $1 \leftrightarrow 2$ gir nå

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

Nå ser vi at dersom de to elektronene befinner seg i samme enpartikkeltilstand, dvs hvis $\phi_i = \phi_j$, så blir

$$\Psi(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \phi_i(1) \phi_i(2) - \phi_i(2) \phi_i(1) \} = 0$$

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

Dette er nettopp Pauliprinsippet!

Husk at

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

med romlig orbital $\psi_j(\vec{r})$ og spinntilstand χ_{m_s} .

For elektroner er $m_s = \pm 1/2$, slik at hver orbital $\psi_j(\vec{r})$ kan kombineres med $\chi_{1/2}$ og $\chi_{-1/2}$.

Vi kan dermed ha inntil 2 elektroner i hver orbital $\psi_j(\vec{r})$.