

VIII. Spinn- och magnetisk växelverkan

För att undvika sammanblandning kommer vi nu att förtydliga beteckningarna från tidigare kapitel. Vi skriver nu elektronmassan m_e (inte m som tidigare) och det magnetiska kvanttalet som m_l (inte m).

VIII.1. Atomer i magnetfält

Ett experiment som P. Zeeman utförde år 1896 visade att spektret från en atom ändrade, då atomerna placerades i ett magnetfält — spektrallinjerna blev tjockare. Lorentz räknade ut att varje spektrallinje skulle splittras i flera linjer, då atomerna utsattes för ett magnetiskt fält. Man kallade denna splittring för den normala Zeemaneffekten. Men senare undersökningar visade att splittringen inte var sådan som Lorentz förutsagt. Man kallade detta för den anomala Zeemaneffekten. Ytterligare undersökningar visade att linjerna splittrades i multipletter även utan inverkan av yttre magnetfält. Detta kallades finstruktur.

VIII.2. Magnetiskt dipolmoment

Det magnetiska dipolmomentet ("magnetiskt moment" i fortsättningen) definieras som

$$\mu = iA\mathbf{n}^\circ \quad (124)$$

där i är en ström som innesluter den plana ytan A och \mathbf{n}° är ytans normalvektor. För en elektron i cirkelbana runt en atomkärna gäller

$$\mu = -\frac{e}{T}\pi r^2\mathbf{n}^\circ = -\frac{e}{2\pi r/v}\pi r^2\mathbf{n}^\circ = -\frac{evr}{2}\mathbf{n}^\circ$$

Coulombkraften är central, vilket gör att \mathbf{L} bevaras.

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = rm_e v \mathbf{n}^\circ$$

Vi erhåller

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

Minustecknet kommer från det att elektronen rör sig åt motsatt håll jämfört med strömmen (som normalt tänkes bestå av positiva partiklar). Vi har här använt m_e för den roterande partikeln, när vi förut använde den reducerade massan μ . Detta är en approximation som vi främst använder för att inte blanda samman det skalära värdet på det magnetiska momentet med den reducerade massan.

Man kan allmänt skriva

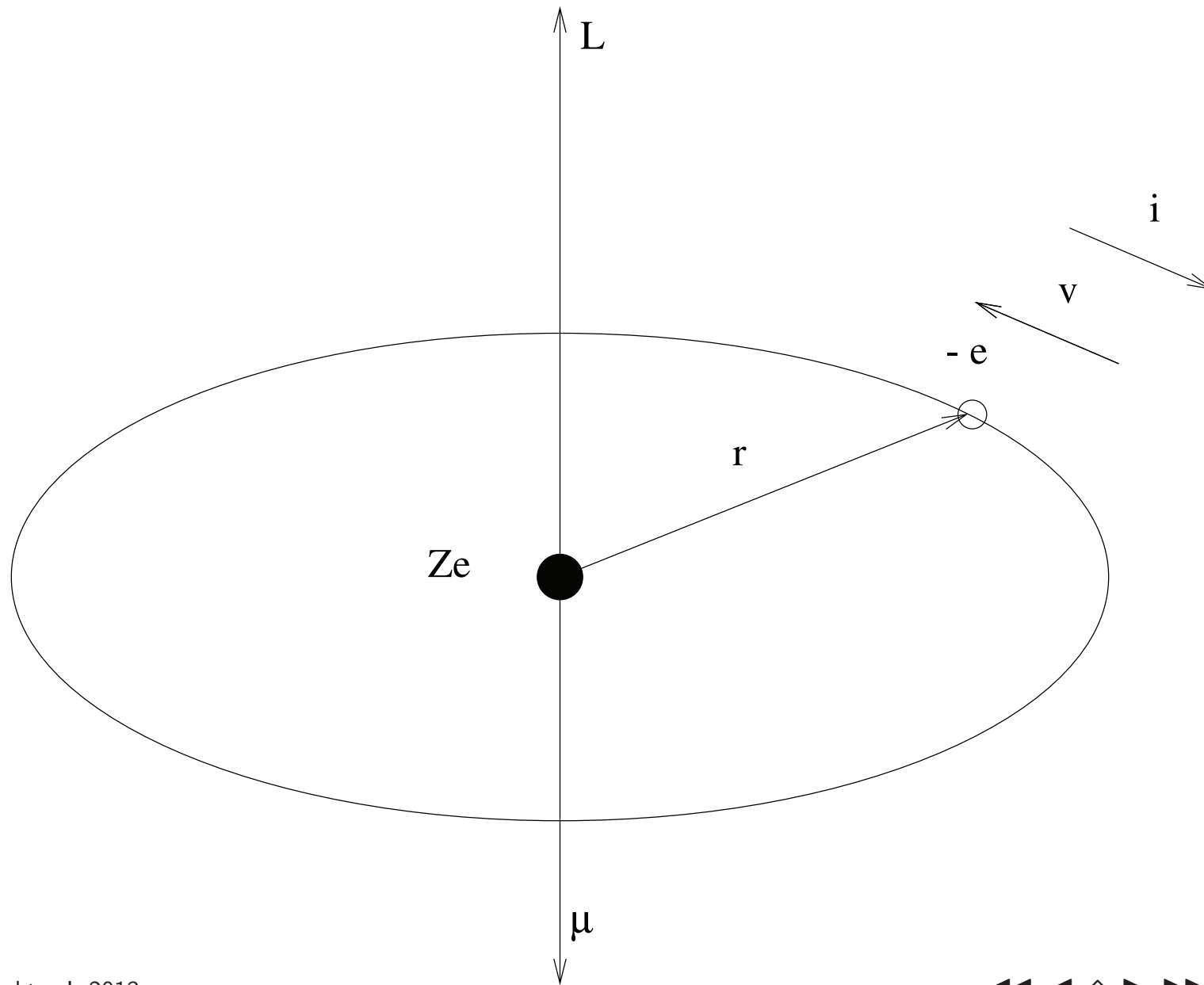
$$\mu = g\frac{Q}{2M}\mathbf{L}$$

för en roterande laddningsfördelning Q med massan M och rörelsemängdsmomentet \mathbf{L} . g -faktorn (eller den *gyromagnetiska faktorn*) bestäms av laddningsfördelningen. I detta fall är $g = 1$. Om man också introducerar *Bohrmagnetonen*

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,274 \cdot 10^{-24} \text{ Am}^2$$

kan det magnetiska momentet för elektronen skrivas som

$$\mu = -g\mu_B\frac{\mathbf{L}}{\hbar}, \quad g = 1 \tag{125}$$

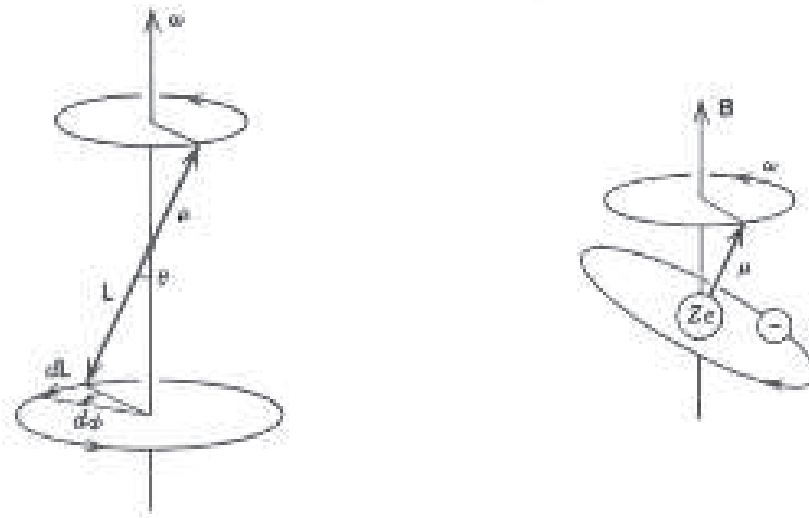


Figur 10: Det magnetiska dipolmomentet.

Emedan μ växelverkar med ett magnetfält \mathbf{B} kommer rörelsemängdsmomentsvektorn \mathbf{L} att börja precessera runt z -axeln med *Larmorfrekvensen*

$$\omega = \frac{e}{2m_e} \mathbf{B} \quad (126)$$

μ och \mathbf{L} är motsatt riktade. I vår matematiska modell ritas vektorn att börja i centrum för elektronens bana. Vi härleder nu uttrycket för Larmorfrekvensen (126) och antar att magnetfältet har styrkan B_0 i banrörelsens centrum. Kraftmomentet $\tau = \mu \times \mathbf{B}_0$ där $\tau \perp \mu$, \mathbf{B}_0 verkar på den magnetiska dipolen. Kraftmomentet τ ger upphov till en förändring $d\mathbf{L}$. Enligt Newtons II lag är $\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \tau$.



Figur 11: Hur μ och L beter sig enligt $\frac{dL}{dt} = \omega \times L$. Dynamiken förorsakar en Larmor precession av det magnetiska momentet runt det pålagda magnetfältets riktning

Ur figur 11 fås

$$dL = (L \sin \theta) d\phi$$

eller $\frac{dL}{dt} = L \sin \theta \frac{d\phi}{dt} = \omega L \sin \theta = |\omega \times \mathbf{L}|$. Vi kombinerar de båda uttryckena $\omega \times \mathbf{L}$ och $\mu \times \mathbf{B}_0$ för kraftmomentet τ och sätter in värdet på μ .

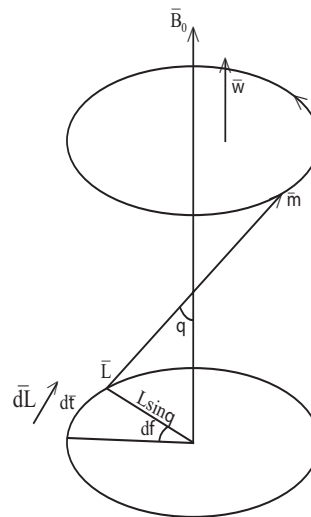
$$\tau = \frac{dL}{dt} = |\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{L}| = |\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}_0| = \left| -\frac{e}{2m_e} \mathbf{L} \times \mathbf{B}_0 \right|$$

Vi löser ut ω

$$\Rightarrow \omega = \frac{e}{2m_e} B_0 \quad (127)$$

som är Larmorfrekvensen. Enligt vår terminologi är ω vinkelhastigheten; frekvensen blir

$$\nu_L = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{e}{4\pi m_e} B_0 \quad (128)$$



Figur 12: Vridmomentet

Man brukar även införa $\gamma = \frac{e}{2m_e} =$ magnetogyriska kvoten.

VIII.3. Den normala Zeemaneffekten (utan elektronspinn)

När man nu kopplar på ett yttre magnetfält så kommer elektronens energi att få ett tillskott

$$V_M = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \quad (129)$$

som är en *magnetisk växelverkningsenergi* eller dipolens potentiella energi i förhållande till magnetfältet. Om magnetfältet är riktat i z -axelns riktning så att $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$ får man

$$V_M = -\mu_z B_z \quad (130)$$

Om atomen befinner sig i ett egentillstånd Ψ_{nlm_l} erhålles väntevärdena

$$\langle \mu_z \rangle = -\frac{g\mu_B}{\hbar} \langle L_z \rangle = -g\mu_B m_l \quad (131)$$

och

$$\langle V_M \rangle = - \langle \mu_z \rangle B_z = g\mu_B B_z m_l \quad (132)$$

Energien för tillståndet (n, l, m_l) som är $E_n = -\frac{\mu}{m_e} Z^2 \frac{E_0}{n^2} \approx -\frac{Z^2 E_0}{n^2}$ (då den reducerade massan μ sätts lika med elektronmassan m_e) kommer alltså att få ett tillskott $\delta E_M = g\mu_B B_z m_l$ och blir

$$E_{\text{Zeeman}} = E_n + \delta E_M \quad (133)$$

Detta upplöser delvis degenerationen från tidigare, där energin bara berodde av n . Antalet degenererade tillstånd är

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2l + 1 = 1 + (2 + 1) + (4 + 1) + \dots + (2(n - 1) + 1) = n^2 \quad (134)$$

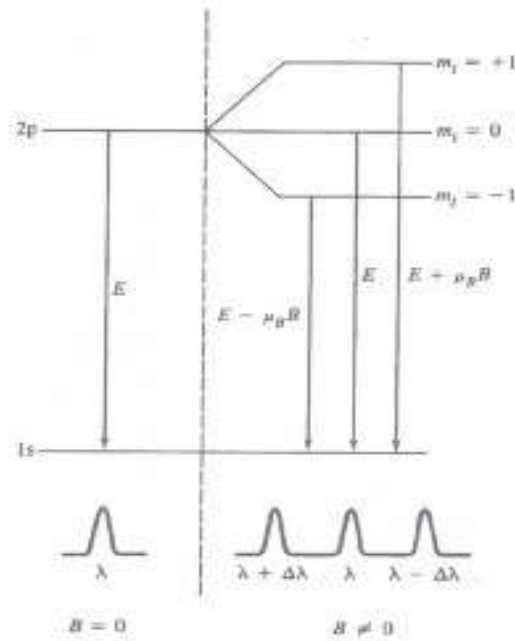
Linjerna i Lyman-, Balmer-, Paschen- och de andra serierna splittras upp på grund av detta. Några exempel i tabellen nedan.

Lyman α	Från $(n', l', m'_l) \dots$	\dots till (n, l, m_l)
	$(2, 1, -1)$	$(1, 0, 0)$
	$(2, 1, 0)$	$(1, 0, 0)$
	$(2, 1, 1)$	$(1, 0, 0)$
Lyman β	Från $(n', l', m'_l) \dots$	\dots till (n, l, m_l)
	$(3, 2, -2)$	$(1, 0, 0)$
	$(3, 2, -1)$	$(1, 0, 0)$
	$(3, 2, 0)$	$(1, 0, 0)$
	$(3, 2, 1)$	$(1, 0, 0)$
	$(3, 2, 2)$	$(1, 0, 0)$
	$(3, 1, -1)$	$(1, 0, 0)$
	$(3, 1, 0)$	$(1, 0, 0)$
	$(3, 1, 1)$	$(1, 0, 0)$

Tabell 4: Lyman α - och Lyman β -övergångar.

Frekvensen för spektrallinjen är nu

$$\nu = \frac{E}{h} = \frac{E_n + \delta E_M}{h} = \frac{E_n + g\mu_B B_z m_l}{h} \quad (135)$$



Figur 13: I ett magnetiskt fält leder övergångar från ett p ($l = 1$) till ett s ($l = 0$) tillstånd, till tre spektrallinjer.

VIII.4. Stern-Gerlach-experimentet

O. Stern och W. Gerlach utförde år 1922 ett experiment för att undersöka atomernas finstruktur (spektrallinjernas splittring då atomens spektrallinjer *inte* inte påverkas av ett magnetiskt fält).

När atomen är i ett variabelt magnetfält $\mathbf{B}(z) = (0, 0, B_z(z))$ så kommer den att känna av en kraft

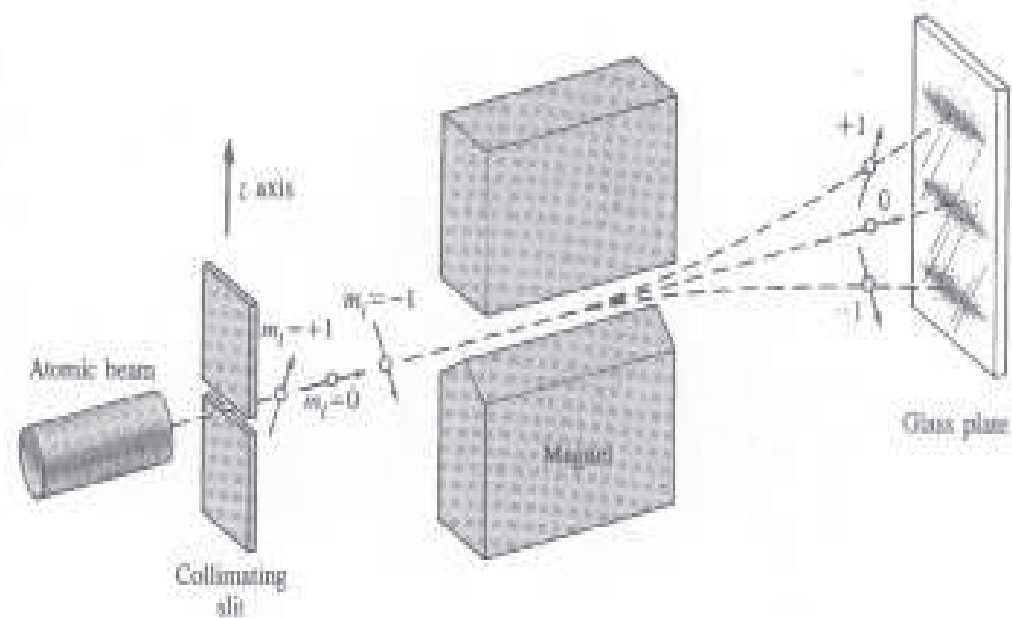
$$F_M = -\nabla V_M = -\nabla(-\mu_z B_z(z)) = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

Väntevärdet är

$$\langle F_M \rangle = \langle \mu_z \rangle \frac{\partial B_z}{\partial z} = -g\mu_B m_l \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

Stern och Gerlach utförde ett experiment med en atomstråle i ett variabelt magnetfält. I ett experiment med en atom med en elektron med kvanttalet l i detta variabla magnetfält, så väntar vi oss $2l + 1$ stycken fläckar på skärmen bakom magnetfältet. Stern och Gerlach erhöll alltid två fläckar

(figur 14). 1925 upprepades experimentet av Phipps och Taylor, och då använde man väteatomer i grundtillståndet $l = 0$ (som ger $m_l = 0$). Även i detta fall såg man två fläckar på skärmen, då man ju enligt ovan borde få $2 \cdot 0 + 1 = 1$ fläck! Man kom fram till att elektronen måste ha ett inbyggt magnetiskt moment μ_S som skiljer sig från det tidigare μ (som nu betecknas μ_L). Då μ_L härrör från elektronens rörelse runt atomkärnan, så kommer μ_S från elektronens rörelse runt sin egen axel. Denna rörelse kallas *spinn*. Man inför nu termerna *banrörelsemängdsmoment* \mathbf{L} och *spinnrörelsemängdsmoment* \mathbf{S} för att beteckna elektronens rörelsemängdsmoment då den roterar runt atomkärnan respektive runt sin egen axel.



Figur 14: Stern-Gerlachs apparatur. Atomerna går från en ugn till ett inhomogent magnetiskt fält vilket splittrar strålen i $(2l + 1)$ komponenter. Det förväntade mönstret för $(l = 1)$ visas på glasplattan.

VIII.5. Elektronspinn

Det magnetiska momentet för banrörelsen skrivs nu

$$\mu_L = -g_L \mu_B \frac{\mathbf{L}}{\hbar}, \quad g_L = 1 \quad (136)$$

och för spinnrörelsen

$$\mu_S = -g_S \mu_B \frac{\mathbf{S}}{\hbar} \quad (137)$$

Vi tar över formalismen från sektionen som behandlade rörelsemängdsmomentets kvantisering och skriver

$$S^2 = \hbar^2 s(s + 1) \quad (138)$$

$$S_z = \hbar m_s \quad (139)$$

$$m_s = -s, -s + 1, \dots, 0, \dots, s - 1, s \quad (140)$$

Det uttryck som Stern-Gerlach-experimentet skulle verifiera var

$$\langle F_M \rangle = \langle \mu_z \rangle \frac{\partial B_z}{\partial z} = -g_L \mu_B m_l \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad (141)$$

Vi korrigerar detta till

$$\langle F_M \rangle = \langle \mu_z \rangle \frac{\partial B_z}{\partial z} = -g_S \mu_B m_s \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad (142)$$

Betyder detta att det resonemang som ledde fram till ekvation (141) är felaktigt? Inte nödvändigtvis. Elektronens spinnmagnetiska moment μ_S växelverkar helt enkelt starkare än dess banmagnetiska moment μ_L med ett yttre magnetfält – åtminstone i de fall som studerades av Stern och Gerlach samt Phipps och Taylor.

Experimentet gav endast två fläckar, d.v.s. m_s har endast två värden. Detta ger

$$s = \frac{1}{2} \quad (143)$$

$$m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \quad (144)$$

$S_z = -1/2 \hbar$ kallas *spinn ner*, och $S_z = 1/2 \hbar$ kallas *spinn upp*.

Spinnet är ett fjärde kvanttal, vilket gör att vi skriver den totala vågfunktionen (för ett stationärt tillstånd) symboliskt som

$$\Psi_{nlm_l m_s} = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi) e^{-iE_n t/\hbar} (\uparrow \text{ eller } \downarrow) \quad (145)$$

Vi återkommer till utseendet hos den spinnberoende delen av vågfunktionen ("spinnfunktionen") i kapitel 9. Varje tillstånd i atomen kan nu beskrivas med (n, l, m_l, m_s) . Vi kommer ihåg att energin bara är beroende av n , så degenerationen är dubbelt så stor då spinnet tas med, nämligen $2n^2$. För den *spinngyromagnetiska faktorn* (spinn g-faktorn) g_S gäller enligt relativistisk kvantteori

$$g_S = 2 \quad (\text{ganska exakt})$$

VIII.6. Addition av spinn- och banrörelsemängdsmomentet

Det totala rörelsemängdsmomentet definieras som

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (146)$$

Enligt vår tidigare formalism skriver vi

$$J^2 = \hbar^2 j(j+1), \quad j \geq 0 \quad (147)$$

$$J_z = \hbar m_j \quad (148)$$

$$m_j = -j, -j+1, \dots, 0, \dots, j-1, j \quad (149)$$

Additionen av \mathbf{L} och \mathbf{S} medför då att

$$m_j = m_l + m_s$$

och att m_j är halvtaligt. En insättning ger

$$j = l \pm 1/2, \quad l > 0 \quad (150)$$

I början betecknade vi tillstånden i atomen med (n, l, m_l) . När spinnet introducerades som ett fjärde kvanttal fick vi uppsättningen (n, l, m_l, m_s) . När vi nu introducerat det totala rörelsemängdsmomentet kan vi lika gärna använda uppsättningen (n, l, j, m_j) när vi betecknar ett tillstånd i atomen. Om vi t.ex. har en spinn upp elektron i L -skalet, ($l = 1$) och med det magnetiska kvanttalet $m_l = -1$, så betecknar vi detta tillstånd $(n, l, m_l, m_s) = (2, 1, -1, 1/2)$. Med den alternativa metoden betecknar vi samma tillstånd $(n, l, j, m_j) = (2, 1, 1 + 1/2, -1 + 1/2) = (2, 1, 3/2, -1/2)$ och refererar till det som $nL_j = 2P_{3/2}$. Än så länge är det ingen skillnad vilken metod vi använder för att identifiera tillstånden, men vi skall senare se att det har en betydelse.

VIII.7. Spinnbankoppling

Vi skall nu räkna oss fram till finstrukturen och lägga grunden för beskrivningen av den anomala Zeemaneffekten. Det visar sig att vi måste beakta den växelverkan som elektronens magnetiska moment åstadkommer tillsammans med det magnetfält som atomkärnan utvecklar. I det system där kärnan är i vila rör sig elektronen med hastigheten \mathbf{v} . I det system där elektronen momentant är i vila rör sig då kärnan med hastigheten $-\mathbf{v}$. Enligt Biot och Savarts lag utvecklar kärnan då (relativt till elektronen) magnetfältet

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \frac{\mu_0 \mathbf{j} \times (-\mathbf{r})}{4\pi ||-\mathbf{r}||^3} \\ &= \frac{\mu_0 -Ze\mathbf{v} \times (-\mathbf{r})}{4\pi ||-\mathbf{r}||^3} \\ &= -\frac{\mu_0 Ze\mathbf{v} \times \mathbf{r}}{4\pi ||\mathbf{r}||^3} \end{aligned} \tag{151}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\mu_0 Z e \mathbf{v} \times \mathbf{r}}{4\pi r^3} \\
&= -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z e \mathbf{v} \times \mathbf{r}}{c^2 r^3}
\end{aligned} \tag{152}$$

där vi använde $\mu_0\epsilon_0 = 1/c^2$. \mathbf{j} betecknar strömtätheten som ger upphov till magnetfältet (relativt elektronen). Då vi utnyttjar definitionen på elektronens rörelsemängdsmoment

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = m_e \mathbf{r} \times \mathbf{v} = -m_e \mathbf{v} \times \mathbf{r}$$

får vi kärnans magnetfält som

$$\mathbf{B} = \frac{Z e}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2 r^3} \mathbf{L} \tag{153}$$

Elektronens spinnmagnetiska moment μ_S kommer att växelverka med detta interna fält i atomen. Växelverkningsenergin skriver vi som

$$\begin{aligned}
V_{SL} &= -\boldsymbol{\mu}_S \cdot \mathbf{B} \\
&= \left(+g_S \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{S} \right) \cdot \left(\frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2 r^3} \mathbf{L} \right) \\
&= \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2 r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}
\end{aligned}$$

Där vi beaktat att $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ och $g_s = 2$. En noggrannare analys (Thomas precession, som beaktar den relativistiska energin) visar att vi måste införa en extra faktor på 1/2:

$$V_{SL} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}}{2m_e^2 c^2 r^3} \quad (154)$$

Vi kan nu införa finstrukturkonstanten $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c}$ och får

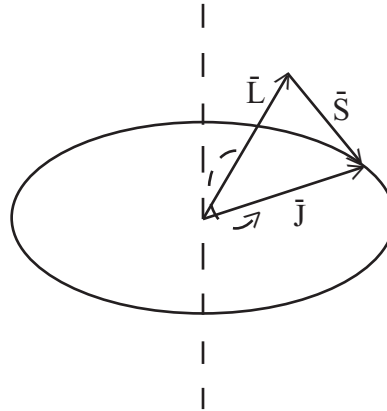
$$V_{SL} = Z\alpha \frac{\hbar}{2m_e^2 c} \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}}{r^3}$$

Vi kan ytterligare utnyttja relationen $J^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 = L^2 + S^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ och får

$$V_{SL} = Z\alpha \frac{\hbar}{4m_e^2 c} \frac{J^2 - L^2 - S^2}{r^3} \quad (155)$$

Detta är det tillskott i energi som elektronen får p.g.a. att elektronens spinn växelverkar med atomkärnans magnetfält. Eftersom atomens energitillstånd är tidskonstanta, betyder det att V_{SL} och indirekt $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ måste vara konstanta. Detta inträffar om vinkeln mellan \mathbf{S} och \mathbf{L} är fixerad. De bildar tillsammans vektorsumman \mathbf{J} och precesserar samordnat kring vektorn \mathbf{J} .

Vektorn \mathbf{J} i sin tur kan precessera kring en godtycklig kvantiseringssaxel, se figur (15). I detta fall är j och m_j goda kvanttal. Om vektorerna \mathbf{L} och \mathbf{S} kan röra sig oberoende av varandra är l , s samt m_l och m_s i sin tur goda kvanttal.



Figur 15: Spinnbankopplingen kopplar vektorerna \mathbf{L} och \mathbf{S} . De kopplade vektorerna \mathbf{L} och \mathbf{S} precesserar kring summavektorn \mathbf{J} , som i sin tur har en godtycklig position i förhållande till kvantiseringsaxeln.

Vi ser att spinnrörelsemängdsmomentet och banrörelsemängdsmomentet är kopplade till varandra.

Vi beräknar nu väntevärdet av V_{SL} .

$$\langle V_{SL} \rangle = Z\alpha \frac{\hbar^3}{4m_e c} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle$$

$$\begin{aligned}
&= Z\alpha \frac{\hbar^3}{4m_e c} \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) \frac{2}{a^3 n^3 l(l+1)(2l+1)} \\
&= \frac{Z^4 \alpha^2}{n^3} E_0 \frac{j(j+1) - l(l+1) - 3/4}{l(l+1)(2l+1)} \tag{156}
\end{aligned}$$

där vi i det sista räknesteget använt oss av ekvation (110) samt uttrycken för Bohrradien a och Rydbergenergin E_0 . Om vi sätter in $j = l + 1/2$ respektive $j = l - 1/2$ får vi

$$\langle V_{SL} \rangle_{j=l+1/2} = \frac{Z^4 \alpha^2 E_0}{n^3 (l+1)(2l+1)} \tag{157}$$

respektive

$$\langle V_{SL} \rangle_{j=l-1/2} = -\frac{Z^4 \alpha^2 E_0}{n^3 l(2l+1)} \tag{158}$$

Vi söker nu en alternativ skrivning till växelverkningsenergin V_{SL} i ekvation (154) genom att notera elektronernas potentialenergi i kärnans elfält är

$$V = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}$$

som ger

$$\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^3}$$

Vi kan nu skriva växelverkningsenergin som

$$V_{SL} = \frac{1}{2m_e^2 c^2 r} \frac{dV}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = \xi \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \quad (159)$$

$$\langle V_{SL} \rangle = \langle \xi \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \rangle \quad (160)$$

fås

$$\langle V_{SL} \rangle = \langle \xi \rangle \frac{\hbar^2}{2} \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) \quad (161)$$

som ger

$$\langle V_{SL} \rangle = \frac{\hbar^2}{2} \langle \xi \rangle \begin{cases} l & , \text{ då } j = l + 1/2 \\ -l - 1 & , \text{ då } j = l - 1/2 \end{cases} \quad (162)$$

Tidigare (före införandet av spinnbankopplingen) hade vi att energin endast berodde av n , enligt $E_n = -\frac{\mu}{m_e} Z^2 \frac{E_0}{n^2} \approx -\frac{Z^2 E_0}{n^2}$ (då $\mu \approx m_e$). Mot denna energi svarade en degenerering på $2n^2$, d.v.s. så här många vågfunktioner hade samma energi. När vi inkluderar spinnbankopplingen minskar denna degenerering, eftersom energin nu visar sig också bero av l . Mot varje l svarar två j -värden, så varje (n, l) -energitillstånd klyvs i två energitillstånd. Energiskillnaden mellan dessa, som är

$$\langle V_{SL} \rangle_{j=l+1/2} - \langle V_{SL} \rangle_{j=l-1/2} = \frac{Z^4 \alpha^2 E_0}{n^3 l(l+1)}$$

kallas *spinnbansplittringen*.

VIII.8. Relativistisk korrektion till spinnbankopplingen

Elektronens relativistiska rörelseenergi är

$$\begin{aligned} K' &= \sqrt{(pc)^2 + (m_e c^2)^2} - m_e c^2 \\ &= m_e c^2 \sqrt{1 + \frac{p^2}{m_e^2 c^2}} - m_e c^2 \\ &\approx m_e c^2 \left(1 + \frac{1}{2} \frac{p^2}{m_e^2 c^2} - \frac{1}{8} \frac{p^4}{m_e^4 c^4} \right) - m_e c^2 \\ &= \frac{p^2}{2m_e} - \frac{p^4}{8m_e^3 c^2} \end{aligned} \tag{163}$$

$$= K + K_{rel} \tag{164}$$

där vi betecknar den ledande korrektionen till den klassiska rörelseenergin som K_{rel} . Vi tar väntevärdet av denna i tillståndet (n, l, j, m_j) :

$$\begin{aligned}
 \langle K_{rel} \rangle &= -\frac{1}{2m_e c^2} \left\langle \left(\frac{p^2}{2m_e} \right)^2 \right\rangle \\
 &= -\frac{1}{2m_e c^2} \langle (E - V)^2 \rangle \\
 &= -\frac{1}{2m_e c^2} \left(\langle E^2 \rangle - 2 \langle V E \rangle + \langle V^2 \rangle \right)
 \end{aligned}
 \tag{165}$$

I detta räknesteg utnyttjar vi den klassiska definitionen på den totala energin $E = \frac{p^2}{2m} + V$, där E alltså inte innehåller den relativistiska energin mc^2 .

De tre väntevärdena är

$$\langle E^2 \rangle = E_n^2$$

$$\langle VE \rangle = E_n \langle V \rangle = -\frac{Ze^2 E_n}{4\pi\epsilon_0 a n^2}$$

där vi använt ekvation (111), och

$$\begin{aligned}\langle V^2 \rangle &= \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle \\ &= \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{2}{a^2 n^3 (2l + 1)}\end{aligned}$$

där vi använt ekvation (109). Vi förenklar sedan dessa uttryck genom att införa finstrukturkonstanten α , och erhåller slutligen

$$\langle K_{rel} \rangle = -\frac{Z^4 \alpha^4}{n^3} m_e c^2 \left(-\frac{3}{8n} + \frac{1}{2l+1} \right)$$

Det slutliga energitillskottet blir

$$\begin{aligned} \langle V_{SL} \rangle + \langle K_{rel} \rangle &= \frac{Z^4 \alpha^4}{2n^3} m_e c^2 \left(\frac{j(j+1) - l(l+1) - 3/4}{l(l+1)(2l+1)} - \frac{2}{2l+1} + \frac{3}{4n} \right) \\ &= -\frac{Z^4 \alpha^4}{2n^3} m_e c^2 \left(\frac{2}{2j+1} - \frac{3}{4n} \right) \\ &= -\frac{Z^4 \alpha^2}{n^3} E_0 \left(\frac{2}{2j+1} - \frac{3}{4n} \right) \end{aligned} \quad (166)$$

Energien för tillståndet (n, l, j, m_j) i en atom med en elektron är alltså

$$E_{nj} = E_n - \frac{Z^4 \alpha^2}{n^3} E_0 \left(\frac{2}{2j+1} - \frac{3}{4n} \right) \quad (167)$$

Urvalsreglerna för energiövergångar i en atom med spinnbankoppling är då

$$\Delta l = \pm 1 \quad (168)$$

$$\Delta j = -1, 0, 1 \quad (169)$$

$$\Delta m_j = -1, 0, 1 \quad (170)$$

Observera att $j : 0 \rightarrow 0$ är förbjudet.

VIII.9. Zeemaneffekten

Vi skall nu behandla den normala och anomala Zeemaneffekten med hänsyn till spinnbankopplingen. Den tidigare behandlingen av den normala Zeemaneffekten är inte sanningsenlig, eftersom man då varken tog hänsyn till elektronens spinn eller dess möjliga koppling till banspinnet (rörelsemängdsmomentet i förhållande till atomkärnan). Vi kommer att undersöka båda fallen i denna sektion.

Zeemansplittringen av spektrallinjerna uppkommer för att elektronens magnetiska moment växelverkar med ett yttre magnetfält. Växelverkningsenergin är

$$V_M = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$$

Vi är som tidigare intresserade av väntevärdet, som blir

$$\langle V_M \rangle = -\langle \mu_z \rangle B_z$$

då magnetfältet är riktat i z -axelns riktning. Elektronens totala magnetiska moment är vektorsumman av ban- och egenspinndelarna, enligt

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_L + \boldsymbol{\mu}_S = -g_L \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L} - g_S \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{S} = -\frac{\mu_B}{\hbar} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S})$$

Där vi valt $g_l = 1$ och $g_s = 2$. Vi skiljer nu på två fall. I det första är B_z tillräckligt starkt för att det interna magnetfältet i atomen skall kunna negligeras (approximeras till noll), d.v.s. \mathbf{L} och \mathbf{S} kan anses vara okopplade och utför självständiga precessionsrörelser kring den magnetiska axeln (z -axeln i det här fallet). Vi får

$$\langle \mu_z \rangle = -\frac{\mu_B}{\hbar} (\langle L_z \rangle + 2 \langle S_z \rangle) = -\frac{\mu_B}{\hbar} (\hbar m_l + \hbar m_s) = -\mu_B (m_l + 2m_s)$$

Växelverkningsenergin är då

$$\langle V_M \rangle = -\langle \mu_z \rangle B_z = \mu_B B_z (m_l + 2m_s) \quad (171)$$

Energitillstånden för en atom i ett starkt yttre magnetfält är

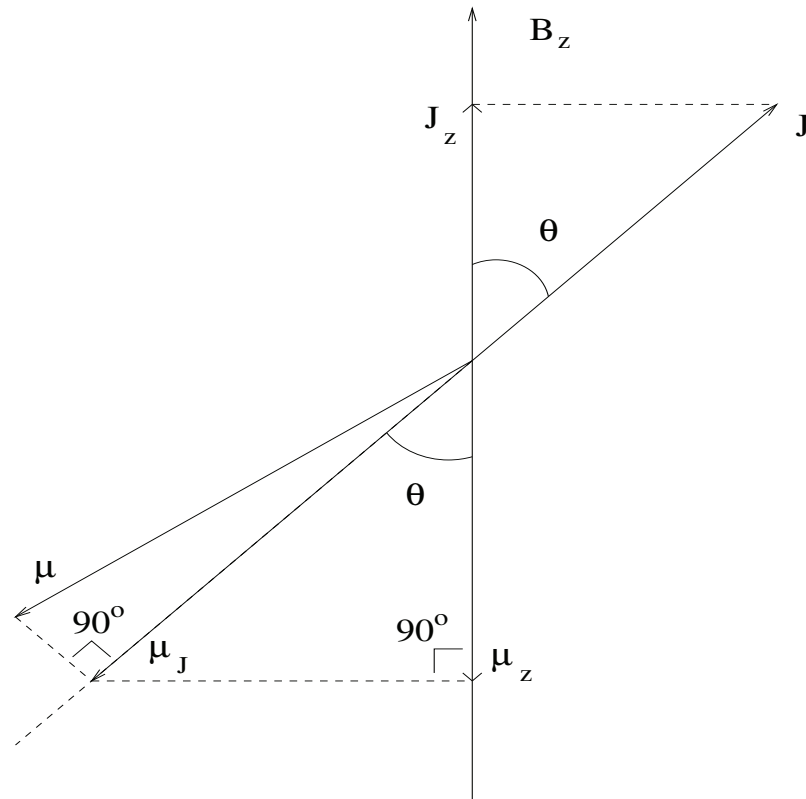
$$E_{nm_l m_s} = E_n + \mu_B B_z (m_l + 2m_s) \quad (172)$$

Vi övergår nu till fallet att *det yttre magnetfältet är relativt svagt*, så att spinnbankopplingen är betydande. Vi såg tidigare att i detta fall är (n, l, j, m_j) *goda kvanttal* och att rörelsemängdsmoment är $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Vi skriver allmänt

$$\mu_J = -g_J \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{J} \quad (173)$$

och förväntar oss att växelverkningsenergin ges av

$$\langle V_M \rangle = - \langle \mu_z \rangle B_z$$



Figur 16: Det magnetiska momentets z -komponent i fallet betydande spinnbanväxelverkan.

Tidigare såg vi att det magnetiska momentet var (anti)parallellt med rörelsemängdsmomentet. Vi kräver att detta skall gälla också här, d.v.s. vi vill ha att $\mu_J \parallel \mathbf{J}$. Se Figur 16.

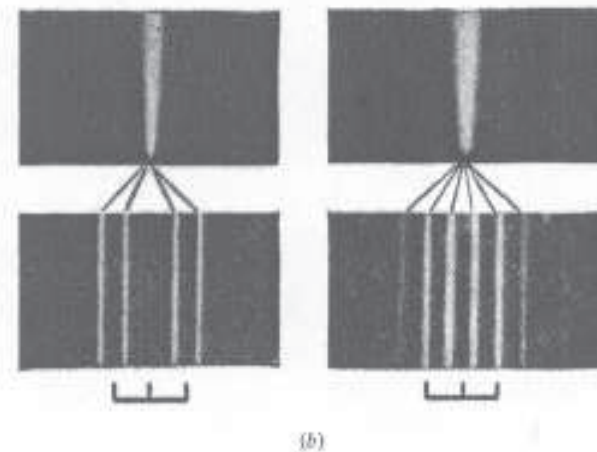
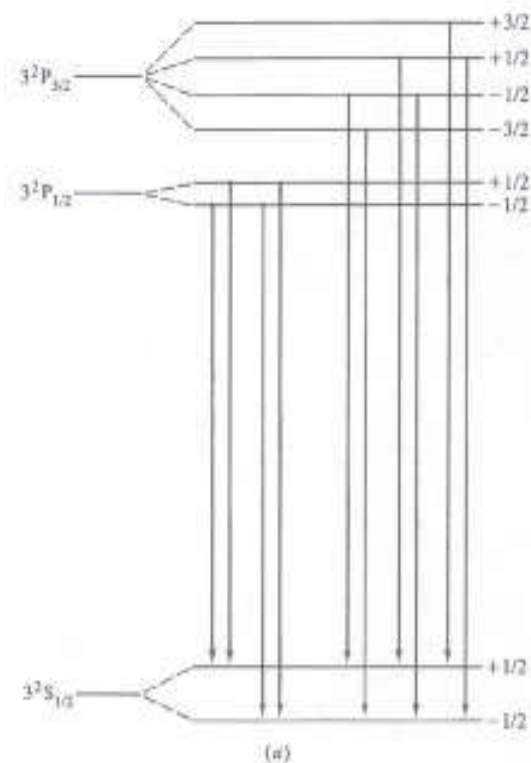


Figure 9.11 (a) Splitting of the $3^2S_{1/2}$, $3^2P_{1/2}$, and $3^2P_{3/2}$ states of sodium by a magnetic field. (b) In a magnetic field the allowed transitions from the $3^2P_{1/2}$ states to the $3^2S_{1/2}$ states result in four lines; the allowed transitions from the $3^2P_{3/2}$ states to the $3^2S_{1/2}$ states result in six lines. (Harvey Elliot White, Introduction to Atomic Spectra, McGraw Hill, New York, 1934, p. 152.)

Figur 17: Uppspjälkningen av $3^2S_{1/2}$, $3^2P_{1/2}$ och $3^2P_{3/2}$ tillstånd i natrium i ett magnetfält. (a) I magnetfältet resulterar de tillåtna övergångarna från $3^2P_{1/2}$ tillstånd till $3^2S_{1/2}$ tillstånd i fyra linjer. (b) De tillåtna övergångarna från $3^2P_{3/2}$ tillstånd till $3^2S_{1/2}$ tillstånd resulterar i sex linjer.

Vi projicerar nu det totala magnetiska momentet på \mathbf{J} och får vektorkomponenten

$$\mu_J = \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{J}}{||\mathbf{J}||^2} \mathbf{J} \quad (174)$$

$$= \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{J}}{||\mathbf{J}||} \mathbf{J}^\circ \quad (175)$$

$$= \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{J}}{J} \mathbf{J}^\circ \quad (176)$$

Skalärkomponenten är

$$\begin{aligned} \mu_J &= \frac{\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{J}}{J} \\ &= \frac{-\frac{\mu_B}{\hbar}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \cdot (\mathbf{L} + \mathbf{S})}{J} \\ &= -\frac{\mu_B}{\hbar J} (L^2 + 2S^2 + 3\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\mu_B}{\hbar J}(L^2 + 2S^2 + \frac{3}{2}(J^2 - L^2 - S^2)) \\
&= -\frac{\mu_B}{2\hbar J}(3J^2 - L^2 + S^2)
\end{aligned} \tag{177}$$

Vi behöver z -komponenten:

$$\mu_z = \mu_J \cos \theta = \mu_J \frac{J_z}{J}$$

Vi multiplicerar med J^2 och tar väntevärdet:

$$\begin{aligned}
\hbar^2 j(j+1) \langle \mu_z \rangle &= \langle \mu_z J^2 \rangle \\
&= \langle J_z J \mu_J \rangle \\
&= -\frac{\mu_B}{2\hbar} \langle J_z (3J^2 - L^2 + S^2) \rangle \\
&= -\frac{\mu_B}{2\hbar} \hbar^2 (3j(j+1) - l(l+1) + 3/4) \langle J_z \rangle
\end{aligned}$$

Förenkling ger

$$\begin{aligned}\langle \mu_z \rangle &= -\frac{\mu_B}{2\hbar} \frac{3j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{j(j+1)} \langle J_z \rangle \\ &= -g_J \frac{\mu_B}{\hbar} \langle J_z \rangle\end{aligned}\quad (178)$$

där g_J kallas *Landes g-faktor* och har värdet

$$g_J = \frac{3j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{2j(j+1)} = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{2j(j+1)} \quad (179)$$

Växelverkningsenergin är

$$\begin{aligned}\langle V_M \rangle &= -\langle \mu_z \rangle B_z \\ &= g_J \frac{\mu_B}{\hbar} B_z \langle J_z \rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= g_J \frac{\mu_B}{\hbar} B_z \hbar m_j \\
&= g_J \mu_B B_z m_j
\end{aligned}
\tag{180}$$

Energitillstånden för en atom i ett svagt yttre magnetfält är då

$$E_{nljm_j} = E_{nj} + g_J \mu_B B_z m_j \tag{181}$$

Uppgifter

- [1]** I ett Stern-Gerlach-experiment får en vätestråle från en ugn med temperaturen 500 K gå en halv meter genom ett magnetfält med fältgradienten 20 T/m. Beräkna avståndet mellan de avlänkade strålarna, då de kommer ut ur magnetfältet. Varför är det acceptabelt att anta att väteatomerna är i sitt grundtillstånd? (B & M 8.8).
- [2]** 3D-nivån i en atom med en elektron består av tio olika tillstånd, som har samma energi i den teoretiska beskrivningen om inte relativistiska effekter beaktas eller om inget yttre magnetfält uppträder. Vi inför ett yttre magnetfält B med en styrka, som betydligt överskrider styrkan för det inre fältet som ger upphov till spinnbankopplingen. Bestäm det energitillskott som varje subttillstånd på energinivån 3D erhåller och rita upp ett energinivådiagram, där de olika nivåerna

är identifierade med sina kvanttal. Är den tiofaldiga degenereringen av 3D-nivån fullständigt bruten i detta fall? (B & M 8.20).