Repetition/sammanfattning av viktiga saker i kapitlen VI-VIII

VI: Rörelsemängdsmomentets kvantisering

1. Den tredimensionella Schrödingerekvationen (SE) kan med fördel skrivas i sfäriska koordinater och innehåller då variablerna r, θ och ϕ.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right)+\Lambda^2\Psi\right)+V(r)\Psi=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=E\Psi \tag{1}$$

   Λ^2 är vinkeldelen av Laplaceoperatorn i sfäriska koordinater:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{2}$$

2. Lösningen, vågfunktionen, till SE kan separeras i olika funktioner som beror på varsin variabel enligt

$$\psi_{nlm_l}=R_{nl}Y_{lm_l}e^{-iE_nt/\hbar}=R_{nl}(r)\Theta_{lm_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\phi)e^{-iE_nt/\hbar} \tag{3}$$

   där Y kallas för klotytfunktioner eller sfäriskt harmoniska funktioner. R och Y finns tabulariserade.

3. Genom att hitta lösningar till de tre olika funktionerna ovan (ej tidsberoendet) infördes tre kvanttal: huvudkvanttalet n, sido- eller bankvanttalet l samt det magnetiska kvanttalet m_l. För dessa gäller

$$\begin{aligned} n &\in \mathbb{N}=\{1,2,3,\ldots\} \quad (4)\\ l &= 0,1,2,\ldots,n-1 \quad (5)\\ m_l &= -l,-l+1,\ldots,0,\ldots,l-1,l \quad (6)\end{aligned}$$

4. Ett viktigt begrepp för våra atomer är rörelsemängsmomentet $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ eftersom dessa är roterande system (en reducerad massa som snurrar runt ett masscentrum i enelektronfallet). $\mathbf{L}$ ändrar inte med tiden (om inte atomen sätts i ett yttre magnetfält), $\frac{d\mathbf{L}}{dt} = 0$, och rotationen sker således i ett plan.

5. Fyra viktiga operatorer:

$$E \to i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tag{7}$$

$$p_r^2 \to \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r}\right) \tag{8}$$

$$L_z \to \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \tag{9}$$

$$L^2 \to \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \Lambda^2 \tag{10}$$

6. Längden på rörelsemängdsmomentet är kvantiserad och antar värdena $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$. z-komponenten är också kvantiserad och antar värdena $L_z = m_l \hbar$.

7. Väntevärdet för en storhet F beräknas enligt

$$\langle F \rangle = \int \Psi^*_{nlm_l} F_{operator} \Psi_{nlm_l} d\tau \tag{11}$$

där

$$d\tau = dV = d^3r = dxdydz = r^2 dr \sin\theta d\theta d\phi = r^2 dr d\Omega \tag{12}$$

8. Normalisering av en vågfunktion beräknas enligt

$$1 \quad = \quad \int_0^\infty ||R_{nl}||^2 r^2 dr \int_{\text{alla rymdvinklar}} ||Y_{lm_l}||^2 d\Omega \tag{13}$$

9. Ortogonalitetskravet (som klotytfunktionerna och den radiella delen av vågfunktionen uppfyller) är

$$\int \Psi^*_{n'l'm'_l} \Psi_{nlm_l} d\tau = 0, \quad \text{om } (n', l', m'_l) \neq (n, l, m_l) \tag{14}$$

10. Genom att spegla vågfunktionen genom origo kan man visa att pariteten hos vågfunktionen är $P = (-1)^l$. Positivt innebär jämn paritet.

VII: Atomer med en elektron

1. Ifall elektronens energi endast beror på huvudkvanttalet

$$E_n = -\frac{\mu}{m} Z^2 \frac{E_0}{n^2} \tag{15}$$

(E_0 är Rydbergenergin) finns det flera tillstånd med samma energi. Detta kallas degeneration. Degenerationen bryts då finstrukturen tas i beaktande eller då atomen sätts i ett magnetfält.

2. Kvanttalen n och l betecknas ofta med bokstäver enligt: Skalen n =1, 2, 3, 4, ... = K, L, M, N, ... och orbitalerna $l = 0$, 1, 2, 3, 4, ... = s, p, d, f, g, ... (**s**ome **p**oor **d**umb **f**ool + alfabetet).

3. Eftersom vågfunktionerna "bara" ger oss olika fördelningar måste vi tolka dem som sannolikheter och koncentrera oss på väntevärden. Det förväntade avståndet mellan elektronen och kärnan i en väteatom beräknas enligt

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty R_{nl}^* r R_{nl} r^2 dr \tag{16}$$

Denna metod tillämpas även på andra storheter som beror på r, exempelvis potentialenergin (a = Bohrradien)

$$\langle V \rangle = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 a n^2} \tag{17}$$

4. Genom att beakta väntevärdet för en oskillerande elektrisk dipol (som atomen kan anses vara då en av dess elektroner gör en transition från ett tillstånd, vågfunktion, till en annan) kan den elektromagnetiska strålningens urvalsregler beräknas. Dessa styr vilka övergångar mellan två tillstånd som är "tillåtna" vid fotonemission och lyder:

$$\Delta m_l = -1, 0, 1 \tag{18}$$
$$\Delta l = -1, 1 \tag{19}$$

VIII: Spinn- och magnetisk växelverkan

1. Det magnetiska dipolmomentet μ för en elektron som roterar kring en kärna definieras som

$$\mu = -g_L \mu_B \frac{\mathbf{L}}{\hbar}, \quad g_L = 1 \tag{20}$$

   μ_B är Bohrmagnetonen $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,274 \cdot 10^{-24}$ Am^2 och g_L kallas den gyromagnetiska faktorn.

2. Ifall atomen sätts i ett magnetfält $\mathbf{B}$ kommer $\mathbf{L}$ att börja precessera med Larmorfrekvensen $\omega = \frac{e}{2m_e}B$ runt fältets axel (definieras vanligen som z-axeln).

3. Vridmomentet $\tau = \mu \times \mathbf{B} = \frac{d\mathbf{L}}{dt}$ som tillkommer innebär att $\mathbf{L}$ inte längre är tidskonstant.

4. Elektronen får en tillskottsenergi i ett magnetfält enligt

$$V_M = -\mu \cdot \mathbf{B} \tag{21}$$

   Den totala energin är nu $E_n + V_M$.

5. **Den normala Zeemaneffekten**: Beaktar inte elektronens spinn. Elektronens tillskottsenergi i ett magnetfält förväntas bli

$$\langle V_M \rangle = -\langle \mu_z \rangle B_z = g_L \mu_B B_z m_l \tag{22}$$

6. Stern-Gerlach experimentet skulle bevisa att atomerna avlänkas i ett ickehomogent fält beroende på sitt kvanttal m_l enligt

$$\langle F_M \rangle = \langle \mu_z \rangle \frac{\partial B_z}{\partial z} = -g_L \mu_B m_l \frac{\partial B_z}{\partial z} \tag{23}$$

   Resultatet var inte det väntade och ledde till att man insåg att elektronen måste ha ett inbyggt magnetiskt moment, “spinn”:

$$\mu_S = -g_S \mu_B \frac{\mathbf{S}}{\hbar}, \quad g_S = 2 \tag{24}$$

   där g_s är den spinngyromagnetiska faktorn. Degenerationen för varje n-tillstånd är nu $2n^2$ om inte finstrukturen beaktas.

7. Spinnet är kvantiserat i likhet med rörelsemängdsmomentet

$$
\begin{aligned}
S^2 &= \hbar^2 s(s+1) = 3/4\hbar^2 && (25)\\
S_z &= \hbar m_s && (26)\\
m_s &= -1/2(\text{ner}), 1/2(\text{upp}) && (27)
\end{aligned}
$$

8. Spinnet är det fjärde kvanttalet och gör att vår totala vågfunktion betecknas

$$\Psi_{nlm_lm_s} = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta,\phi)e^{-iE_nt/\hbar}(\uparrow \text{ eller } \downarrow) \tag{28}$$

9. Elektronens spinn växelverkar med det magnetfält som atomkärnan utvecklar. Detta kallas spinnbankoppling.

10. Det totala rörelsemängdsmomentet definieras som

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \tag{29}$$

och kvantiseras enligt

$$
\begin{aligned}
J^2 &= \hbar^2 j(j+1), \quad j \geq 0 && (30)\\
J_z &= \hbar m_j && (31)\\
m_j &= -j, -j+1, \ldots, 0, \ldots, j-1, j && (32)
\end{aligned}
$$

$m_j = m_l + m_s$ och $j = l \pm 1/2$ då $l > 0$, annars $j = 1/2$.

11. Ett tillstånd med kvanttalen (n, l, j, m_j) betecknas ofta med nL_j.

12. Spinnbankopplingen ger en extra energi som bidrar till den så kallade finstrukturen hos energinivåerna enligt

$$\langle V_{SL}\rangle = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{\langle \mathbf{S}\cdot\mathbf{L}\rangle}{2m_e^2c^2}\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle = \frac{Z^4\alpha^2}{n^3}E_0\frac{j(j+1)-l(l+1)-3/4}{l(l+1)(2l+1)} \tag{33}$$

och åstadkommer den så kallade spinnbansplittringen.

13. Ytterligare bidrag till finstrukturen är den relativistiska korrektionen till spinnbankopplingen K_{rel} så att energin för ett tillstånd är

$$E_{nj} = E_n - \frac{Z^4\alpha^2}{n^3}E_0\left(\frac{2}{2j+1} - \frac{3}{4n}\right) \tag{34}$$

14. Urvalsreglerna för energiövergångar i en atom med spinnbankoppling är

$$\begin{aligned} \Delta l &= \pm 1 && (35) \\ \Delta j &= -1, 0, 1 && (36) \\ \Delta m_j &= -1, 0, 1 && (37) \end{aligned}$$

15. **Den anomala Zeemaneffekten**: Beaktar elektronens spinn samt spinnbankopplingen. Energinivåerna splittras upp i ett yttre magnetfält enligt

$$E_{nljm_j} = E_{nj} + g_J \mu_B B_z m_j \tag{38}$$

där g_J kallas Landes g-faktor och har värdet

$$g_J = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{2j(j+1)} \tag{39}$$