

Frumeinda- og ljósfræði:

Vetnisatómið

Kafli 2

Jón Tómas Guðmundsson

tumi@hi.is

2. vika vor 2021

Inngangur

- Skammtafræði gefur talsvert aðra sýn á formgerð vetnisatómsins en þá sem að líkan Bohr gefur okkur
- Í Bohr líkaninu ferðast rafeindin um róteindina eftir hringlaga brautum
- Skammtafræðin leyfir ekki fastan radía eða sporbraut heldur lýsir rafeindinni með líkindaþéttleika, sem leiðir aftur til óvissu þegar rafeindin skal staðsett
- Til að greina vetnisatómið með skammtafræðilegum aðferðum þá þarf að leysa Schrödinger jöfnuna fyrir Coulomb mætti milli rafeindar og róteindar

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Inngangur - hverfiþungi

- Í sígildri eðlisfræði er hverfiþungi agnar ritaður

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

þar sem \mathbf{r} er stöðuvigurinn og \mathbf{p} er línulegur skriðþungi

- Stefna \mathbf{L} er hornrétt á plan brautarinnar
- Í skammtafræði er litið á þetta á annan veg
- Hverfiþunga þrívíðs bylgjufalls er lýst með tveimur skammtatölum

Inngangur - hverfiþungi

- Sú fyrri er skammtatala hverfiþunga l sem ákvarðar lengd hverfiþungavigursins

$$|\mathbf{L}| = \sqrt{l(l+1)}\hbar \quad (l = 0, 1, 2, \dots)$$

- Atugið að þetta er nokkuð annað en Bohr skilyrðið $|\mathbf{L}| = n\hbar$
- Hin skammtatalan er segulskammtatalan m_l
- Þessi skammtatala segir til um einn þátt hverfiþungans, sem við veljum sem z þáttinn
- Samband z þáttar \mathbf{L} og segulskammtatölunnar er

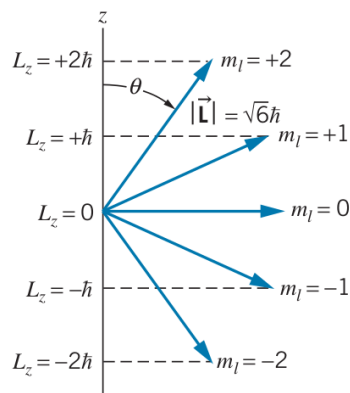
$$L_z = m_l\hbar \quad (m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l)$$

Inngangur - hverfiþungi

- Fyrir sérhvert gildi á l eru $(2l + 1)$ möguleg gildi á m_l
- Ólíkt sígildri lýsingu á hverfiþunga, þar sem nákvæm lýsing er gefin með þremur tölum, er skammtaður hverfiþungi aðeins gefinn með tveimur tölum
- Tvær tölur geta hins vegar ekki gefið fullkomna lýsingu á þrívíðum vigri með tveimur tölum, svo eitthvað vantar
- Það sem upp á vantar kemur til vegna áhrifa óvissulögmálsins á hverfiþunga

⇒ Dæmi 2.1

Inngangur - hverfipungi



Frá Krane (2012)

- Þættir vigursins \mathbf{L} fyrir $l = 2$ eru sýndir á myndinni
- Pólhornið θ milli vigursins \mathbf{L} og z -ássins finnst með $L_z = |\mathbf{L}| \cos \theta$ og þá er

$$\cos \theta = \frac{L_z}{|\mathbf{L}|} = \frac{m_l}{\sqrt{l(l+1)}}$$

\implies Dæmi 2.1

Inngangur - hverfipungi

- Þetta segir að aðeins tiltekna stefnur hverfipunga eru leyfðar
- Fjöldi þessara stefna er $2l + 1$ (fjöldi mögulegra m_l gilda) og lengd z þáttarins breytist sem nemur \hbar
- Hverfipungi með $l = 1$ getur haft m_l gildi $-1, 0$ eða $+1$ sem svarar til $L_z = -\hbar, 0, +\hbar$ og þar með

$$\cos \theta = \frac{+1}{\sqrt{2}}, 0, \frac{-1}{\sqrt{2}}$$

- Vigurinn \mathbf{L} hefur því eina af þremur mögulegum stefnum miðað við z -ás $45^\circ, 90^\circ$ eða 135°
- Þetta er í mótsögn við sígildan hverfipungavigur, sem getur tekið hvaða stefnu sem vera vill og stefna hverfipunga vigurs miðað við z -ás getur tekið hvaða gildi sem er á bilinu 0° til 180°

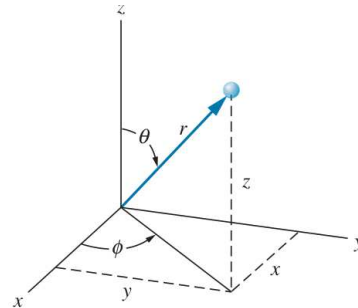
Jafna Schrödinger

- Lausn Schrödinger jöfnunnar fyrir Coulomb mætti má finna í öllum kennslubókum í skammtafræði
- Schrödinger jafnan fyrir rafeind af massa m_e í kúlusamhverfu mætti er

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V(r) \right\} \psi = E\psi$$

sem lýsir varðveislu orkunnar sem summu hreyfiorku og stöðuorku

Jafna Schrödinger



Frá Krane (2012)

- Í kúlunítum er virkinn

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \mathbf{l}^2$$

þar sem virkinn \mathbf{l}^2 inniheldur liðina sem eru háðir θ og ϕ eða

$$\mathbf{l}^2 = - \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\}$$

Jafna Schrödinger

- Hér er $\hbar^2 l^2$ er kvaðrat virkjans fyrir brautarhverfiþunga (e. orbital angular momentum)
- Ef við fylgjum dæmigerðu ferli við lausn hlutafleiðujafna þá leitum við að lausn á forminu

$$\psi = R(r)Y(\theta, \phi)$$

- Þar með höfum við

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \{V(r) - E\} = \frac{1}{Y} l^2 Y$$

- Hvor hlið er háð ólíkum breytum svo að hún er uppfyllt ef báðar hliðar eru jöfn fasta sem við köllum b
- Þar með er

$$l^2 Y = bY$$

Jafna Schrödinger – horn

- Nú stingum við inn

$$Y = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

og fáum

$$\frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + b \sin^2 \theta = -\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = \text{fasti} = m_l^2$$

- Fastinn á hægri hlið hlutafleiðujöfnunnar hefur gildið m_l^2
- Jafnan fyrir $\Phi(\phi)$ er hin sama og fyrir einfaldan hreinan sveifil

$$\Phi = A \exp(jm_l \phi) + B \exp(-jm_l \phi)$$

- Raunveruleg bylgjuföll þurfa að uppfylla $\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi)$, svo að m_l verður að vera rauntala

Jafna Schrödinger – horn

- Fallið $\Phi(\phi)$ er summa eiginfalla virkjans fyrir z -þátt brautarhverfiþungans

$$\hbar l_z = -j\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

- Fallið $\exp(jm_l\phi)$ hefur segulskammtatöluna m_l og samoka fallið $\exp(-jm_l\phi)$ hefur segulskammtatöluna $-m_l$
- Þægileg leið til að finna fallið $Y(\theta, \phi)$ og eigingildin b er að nota stigavirkjana (e. ladder operator)

$$l_+ = l_x + jl_y$$

og

$$l_- = l_x - jl_y$$

Jafna Schrödinger – horn

- Virkjar þessir víxla (e. commute) við l^2 , virkjann fyrir kvaðrat heildar hverfipungans (vegna þess að l_x og l_y víxla við l^2)
- Þar með eru öll föllin Y , $l_+ Y$ og $l_- Y$ eiginföll l^2 með sama eigingildi b
- Stigavirkjarnir í pólhnitum eru

$$l_+ = \exp(j\phi) \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + j \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

og

$$l_- = \exp(-j\phi) \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + j \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

Jafna Schrödinger – horn

- Virkinn l_+ varpar falli með segulskammtatölu m_l í annað hverfipunga eiginfall með segulskammtatölu $m_l + 1$
- Þess vegna er l_+ nefndur hækkunarvirki (e. raising operator)
- Lækkunarvirkinn l_- breytir segulskammtatölunni frá m_l yfir í $m_l - 1$
- Það er ekki hægt að hækka segulskammtatöluna endalaust – fyrir sérhvert eigingildi b er stærsta gildi á segulskammtatölunni sem við nefnum l ($m_{l,\max} = l$)
- Þegar hækkunarvirkjanum er beitt á eiginfall með $m_{l,\max}$ fæst núll þar sem að samkvæmt skilgreiningu eru engin eiginföll með $m_l > m_{l,\max}$

Jafna Schrödinger – horn

- Ef við leysum jöfnuna

$$l_+ Y = 0$$

finnum við eiginföll með $m_{l,\max} = l$ sem hafa formið

$$Y \propto \sin^l \theta \exp(jl\phi)$$

- Sé þessu stungið inn í upphaflegu hlutafleiðujöfnuna sjáum við að þetta eru eiginföll l^2 með eigingildi $b = l(l + 1)$ og l er skammtatala brautarhverfipunga
- Föllin $Y_{l,m_l}(\theta, \phi)$ eru merkt tilsvareandi eigingildum á hefðbundinn hátt

Jafna Schrödinger – horn

- Fyrir $l = 0$ er aðeins $m_l = 0$ og $Y_{0,0}$ er fasti óháður horni
- Fyrir $l = 1$ finnum við eiginföllin og byrjum með $l = m_l = 1$ og svo beitungum við lækkunarvirkjanum

$$Y_{1,1} \propto \sin \theta \exp(j\phi)$$

$$Y_{1,0} \propto l_- Y_{1,1} \propto \cos \theta$$

$$Y_{1,-1} \propto l_- Y_{1,0} \propto \sin \theta \exp(-j\phi)$$

sem eru öll eiginföllin fyrir $l = 1$

Jafna Schrödinger – horn

- Fyrir $l = 2$ verður þetta

$$Y_{2,2} \propto \sin^2 \theta \exp(j2\phi)$$

⋮

$$Y_{2,-2} \propto \sin^2 \theta \exp(-j2\phi)$$

eða fimm eiginföll með $m_l = 2, 1, 0, -1, -2$

- Endurtekin notkun á lækkunarvirkjanum

$$Y_{l,m_l} \propto (l_-)^{l-m_l} \sin^l \theta \exp(jl\phi)$$

Jafna Schrödinger – horn

- Föllin eru

$$Y_{0,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \exp(\pm j\phi)$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta \exp(\pm j\phi)$$

$$Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta \exp(\pm 2j\phi)$$

Jafna Schrödinger – horn

- Hér er normað með

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y_{l,m_l}|^2 \sin \theta d\theta d\phi = 1$$

- Til að skilja eiginleika atómsins er mikilvægt að sjá hvernig bylgjuföllin líta út

$$|\psi(r, \theta, \phi)|^2 = R_{n,l}^2 |Y_{l,m_l}(\theta, \phi)|^2$$

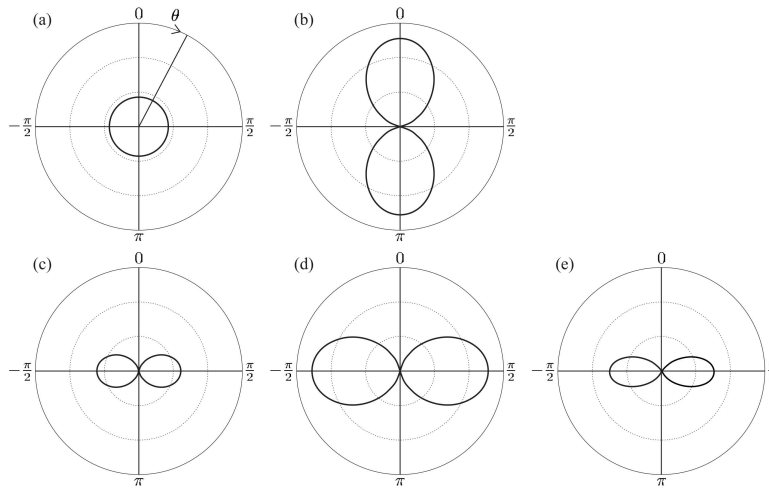
- Þetta er líkindadreifing rafeindar

$$-e|\psi|^2$$

sem má líta á sem dreifingu hleðslu

- Margir eiginleikar atómsins eru í aðalatriðum háðir þessari horndreifingu

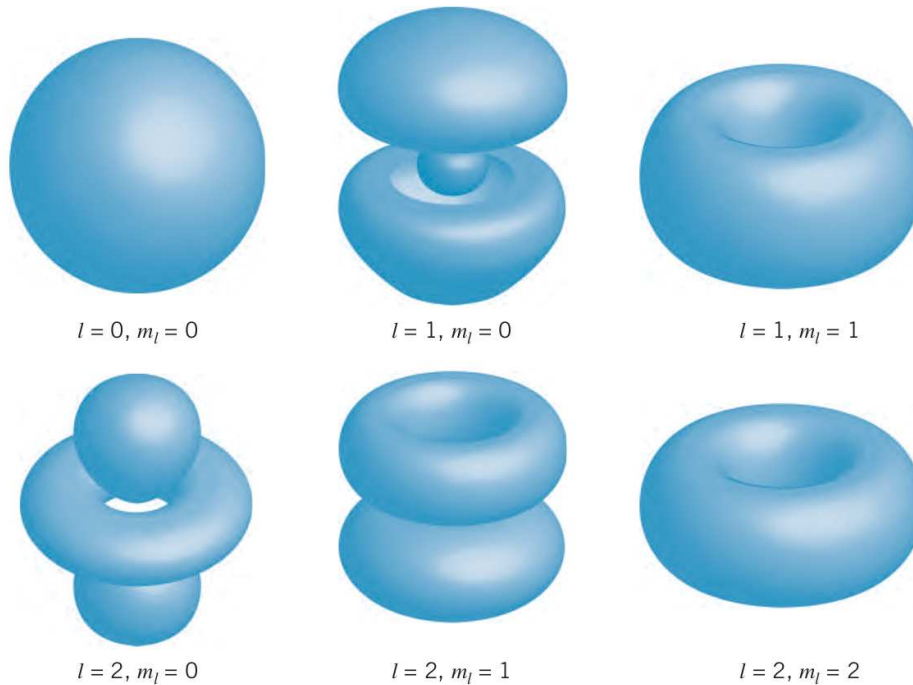
Jafna Schrödinger – horn



Frá Foot (2005)

- Myndin sýnir nokkur gröf af $|Y_{l,m_l}|^2$
- (a) $|Y_{0,0}|^2$ er kúlulaga. (b) $|Y_{1,0}|^2 \propto \cos^2 \theta$ hefur tvo lobes eftir z -ás.
- (c) $|Y_{1,1}|^2 \propto \sin^2 \theta$ er nánast holhringlaga (e. toroidal) og er núll fyrir $\theta = 0$.
- (d) $|Y_{1,1} - Y_{1,-1}|^2 \propto |x/r|^2$ hefur snúningsamhverfu um x -ás teiknað fyrir $\phi = 0$ og lítur út eins og (b) en snúið um horni $\pi/2$.
- (e) $|Y_{2,2}|^2 \propto \sin^4 \theta$.

Jafna Schrödinger – horn



Frá Krane (2012)

- $|\psi(r, \theta, \phi)|^2$ fyrir nokkrar samsetningar af skammtatölum
- z -ásinn er lóðrétt stefna

Jafna Schrödinger – radial

- Til að finna jöfnu fyrir $R(r)$ setjum við jöfnuna

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \{V(r) - E\} = \frac{1}{Y} l^2 Y$$

jafna fasta

$$b = l(l + 1)$$

og með Coulomb mættið

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Jafna Schrödinger – radial

- Með innsetningunni á

$$P(r) = rR(r)$$

fæst

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2 P}{dr^2} + \left\{ \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{e^2/4\pi\epsilon_0}{r} - E \right\} P = 0$$

- Liðurinn sem er í réttu hlutfalli við $l(l+1)/r^2$ er hreyfiorkan sem er vegna frelsisgráða hornhreyfingar – mætti sem heldur bylgjuföllum með $l \neq 0$ frá miðjunni
- Ef deilt er í jöfnuna með $E = -|E|$ (neikvætt þar sem $E \leq 0$ fyrir bundið ástand) og með innsetningu

$$\rho^2 = \frac{2m_e |E| r^2}{\hbar^2}$$

Jafna Schrödinger – radial

- Kemst jöfnan á einingarlausu formið

$$\frac{d^2 P}{d\rho^2} + \left\{ -\frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\lambda}{\rho} - 1 \right\} P = 0$$

- Fastinn λ sem einkennir styrk Coulomb víxlverkunar er gefinn með

$$\lambda = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2 |E|}}$$

- Gjarnan er leitað að lausn sem er röð
- Þessi bylgjuföll hafa eiginorku sem er gefin með

$$E = -\frac{2m_e(e^2/4\pi\epsilon_0)^2}{\hbar^2} \frac{1}{\lambda^2} = -hcR_\infty \frac{1}{n^2}$$

Jafna Schrödinger – radial

- Þetta sýnir að Schrödinger jafnan hefur sístæðar lausnir við orku sem gefin er með jöfnu Bohr
- Orkan er ekki háð l
- Þessi margfeldni bylgjufallanna fyrir mismunandi l er eiginleiki Coulombmættisins
- Margfeldni vegna segulskammtatölunnar m_l stafa af samhverfu kerfisins
- Þrátt fyrir að orkan sé aðeins háð n ræðst lögun bylgjufallsins af bæði n og l og þessar tvær skammtatölur eru merktar á skör á radial bylgjufallið $R_{n,l}(r)$

Jafna Schrödinger – radial

$$R_{1,0} = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \exp(-\rho)$$

$$R_{2,0} = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} 2(1 - \rho) \exp(-\rho)$$

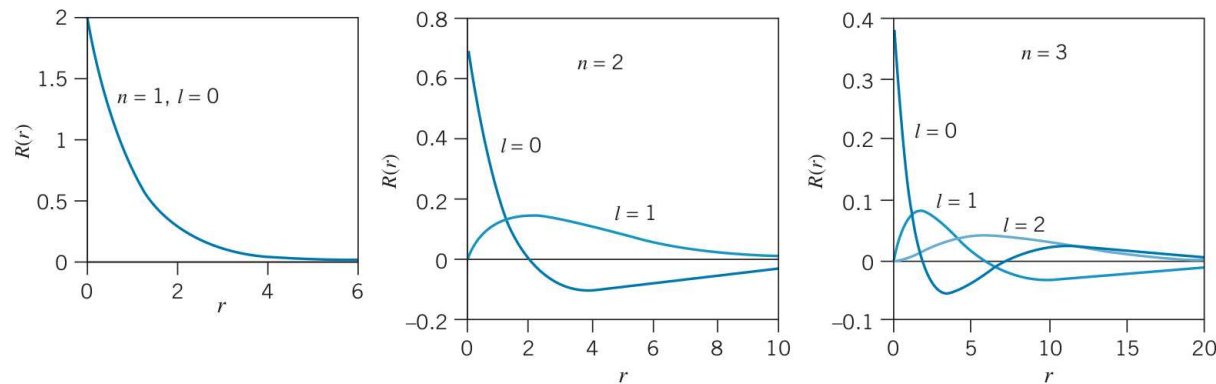
$$R_{2,1} = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{3}} \rho \exp(-\rho)$$

$$R_{3,0} = \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2} 3 \left(1 - 2\rho + \frac{2}{3}\rho^2\right) \exp(-\rho)$$

$$R_{3,1} = \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{4\sqrt{2}}{3} \rho \left(1 - \frac{1}{2}\rho\right) \exp(-\rho)$$

$$R_{3,2} = \left(\frac{Z}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{2\sqrt{2}}{3\sqrt{5}} \rho^2 \exp(-\rho)$$

Jafna Schrödinger – radial



Frá Krane (2012)

- Radíal bylgjuföll fyrir $n = 1, n = 2, \text{ og } n = 3$ ástönd vetnis
- Radíal hnitíð er gefið í a_0

Jafna Schrödinger – radial

- Þessar jöfnur eru normaðar með

$$\int_0^{\infty} R_{n,l}^2 r^2 dr = 1$$

- Fyrir $n = 2$ skammtatala brautarhverfinguna $l = 0$ eða 1 sem gefur

$$R_{2,0} \propto (1 - \rho) \exp(-\rho)$$

$$R_{2,1} \propto \rho \exp(-\rho)$$

- Stingum inn $|E|$ í

$$\rho^2 = \frac{2m_e |E| r^2}{\hbar^2}$$

gefur

$$\rho = \frac{Z}{n} \frac{r}{a_0}$$

Jafna Schrödinger – radial

- Líkindadreifing rafeindanna við $l = 0$ við upphafspunkt hnitakerfisins er

$$|\psi_{n,l=0}(0)|^2 = \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z}{na_0} \right)^3$$

- Fyrir rafeindir er væntigildið

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \int_0^\infty \frac{1}{r^3} R_{n,l}^2(r) r^2 dr = \frac{1}{l(l + \frac{1}{2})(l + 1)} \left(\frac{Z}{na_0} \right)^3$$

Jafna Schrödinger – radial

- Í stað þess að fá alla líkindadreifingu rafeinda gætum við spurt hverjar líkurnar séu að finna rafeind við tiltekna fjarlægð frá kjarnanum óháð θ og ϕ
- Hugsum okkur skel af radía r og þykkt dr
- Hverjar eru líkurnar á að finna rafeind í skel kúlu milli r og $r + dr$
- Við skilgreinum radíal líkindaþéttleika $\mathcal{P}(r)$ og líkurnar á að finna rafeind innan skeljarinnar eru $\mathcal{P}(r)dr$

Jafna Schrödinger – radial

- Það má ákvarða radíal líkurnar úfrá heildarlíkunum með tegrin yfir θ og ϕ hnitin

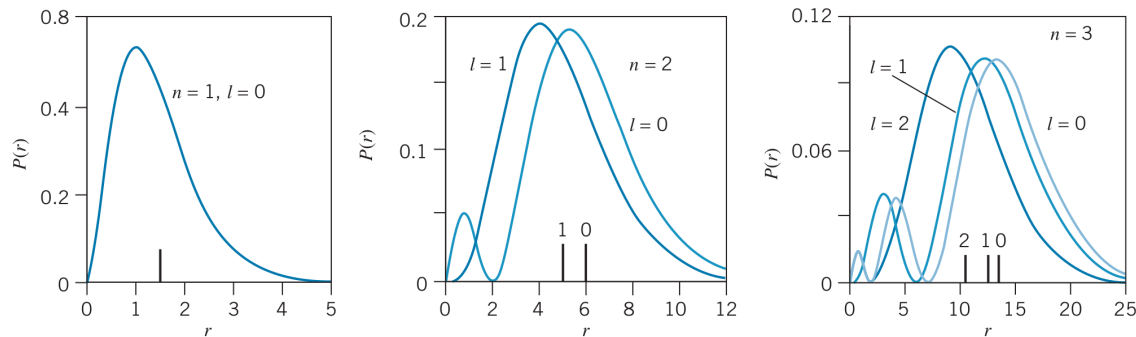
$$\mathcal{P}(r)dr = |R_{n,l}(r)|^2 r^2 dr \int_0^\pi |\Theta_{l,m_l}(\theta)|^2 \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} |\Phi_{m_l}(\phi)|^2 d\phi$$

- Tegrin yfir θ og ϕ eru hvort um sig jöfn einum þar sem föllin R , Θ og Φ eru normuð
- Þar með er radíal líkindaþéttleiki

$$\mathcal{P}(r) = r^2 |R_{n,l}(r)|^2$$

- Athugið að vegna r^2 verður $\mathcal{P}(r)$ núll við $r = 0$ jafnvel þó svo að $R(r)$ sé það ekki

Jafna Schrödinger – radial



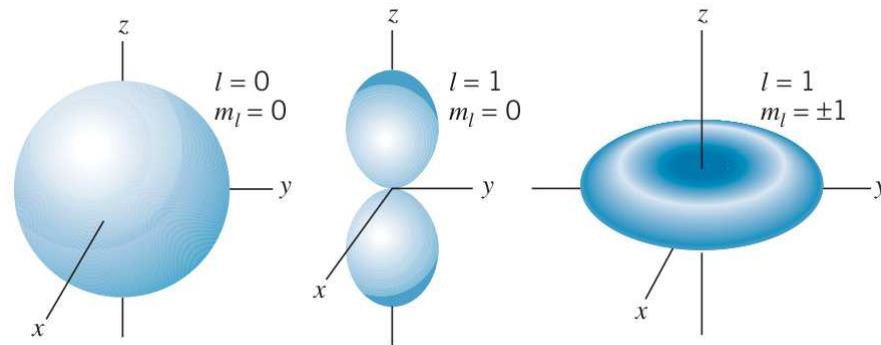
Frá Krane (2012)

- Að auki gefa $\mathcal{P}(r)$ og $|R(r)|^2$ mismunandi upplýsingar um hegðan rafeindar
- Þannig hefur radíal bylgjufallið $R(r)$ fyrir $n = 1, l = 0$ stærsta gildi sitt við $r = 0$, en radíal líkindaþéttleikinn fyrir það ástand hefur stærsta gildið við $r = a_0$

⇒ Dæmi 2.2

⇒ Dæmi 2.3

Jafna Schrödinger – radial



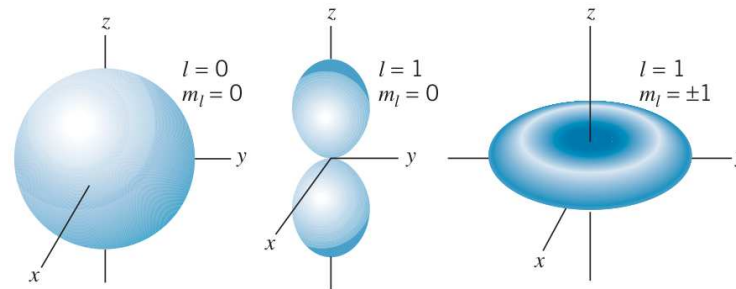
Frá Krane (2012)

- Á sama hátt getum við skoðað hvernig líkindaþéttleikinn er horndreifður með því að skoða hornþátt bylgjufallsins

$$\mathcal{P}_{\text{angle}}(\theta, \phi) = |\Theta_{l,m_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\phi)|^2$$

- Myndin sýnir hornháða líkindaþéttleikann fyrir $l = 0$ og $l = 1$ bylgjuföllin
- Líkindaþéttleikarnir eru sívalningssamhverfir, óháðir ϕ

Jafna Schrödinger – radial



Frá Krane (2012)

- Bylgjufallið fyrir $l = 0$ er einnig kúlusamhverft – líkindaþéttleikinn er óháður stefnu
- Líkindaþéttleikarnir fyrir $l = 0$ hafa tiltekin form
 - Fyrir $m_l = 0$, er líklegast staðsetning rafeindar á tveimur svæðum sem liggja á z -ásnum
 - Fyrir $m_l = \pm 1$ er rafeindin aðallega nærri xy -planinu

⇒ Dæmi 2.4

⇒ Dæmi 2.5

Færslur

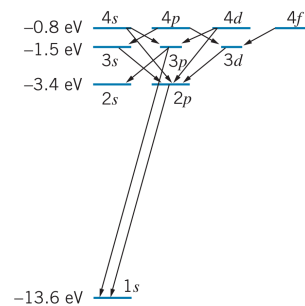
- Við höfum nú séð að hægt er að lýsa öllum ástöndum rafeinda í vetnisatómi með þremur skammtatölum (n, l, m_l)
- Að auki er fjórði eiginleiki rafeindarinnar, innri hverfiþungi eða spuni, sem þarfnast fjórðu skammtatölunnar
- Við þurfum ekki að tilgreina spunann s þar sem hann er alltaf $1/2$
- Þetta er einn af grunneiginleikum rafeindar rétt eins og rafhleðsla eða massi
- Við verðum hins vegar að tilgreina gildi þessarar skammtatölu m_s sem er $(+1/2$ eða $-1/2)$, sem segir til um z þátt spunans

Færslur

- Fullkomin lýsing á ástandi rafeindar krefst þess vegna fjögurra skammtatalna (n, l, m_l, m_s)
- Til dæmis er grunnástand vetnis annað hvort $(1,0,0,+1/2)$ eða $(1,0,0,-1/2)$ og margfeldni grunnástandsins er 2
- Fyrsta örvaða ástandið hefur átta möguleika: $(2, 0, 0, +1/2)$, $(2, 0, 0, -1/2)$, $(2,1,+1,+1/2)$, $(2,1,+1,-1/2)$, $(2,1,0,+1/2)$, $(2,1,0,-1/2)$, $(2,1,-1,+1/2)$, og $(2,1,-1,-1/2)$
- Það er mikilvægt að vita að stefnu (z þáttur) hverfipunga vigurs þegar atóm er í segulsviði en annars eru gildin á m_l og m_s eru ekki mjög mikilvæg
- Þetta hefur samt það í för með sér að það eru tvö stig fyrir hvert sett af n, l, m_l , svo að margfeldni hvers ástands er $2n^2$ í stað n^2

Færslur

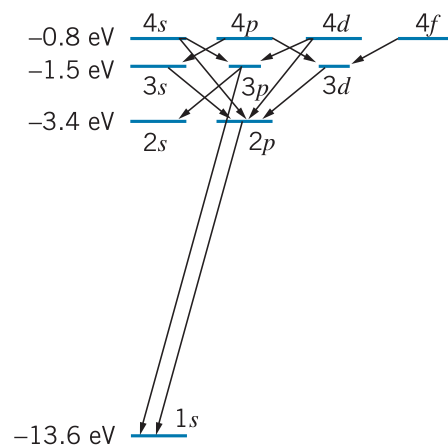
- Það er gjarnan notaður eftirfarandi ritháttur
- Við notum bókstafi fyrir l gildin: $l = 0$ er táknað með s , $l = 1$ er táknað með p , $l = 2$ er táknað með d , $l = 3$ er táknað með f , $l = 4$ er táknað með g o.s.frv.



Frá Krane (2012)

- Myndin sýnir tákun nokkurra lægstu orkustiga vetnisatómsins
- Grunnástand vetnisatómsins er táknað $1s$, þar sem $n = 1$ er táknað framan við s

Færslur



Frá Krane (2012)

- Á myndina eru merktar örvar sem tákna færslur rafeinda á milli orkustiga
- Við sjáum að nokkrar örvar vantar (eins og 4d til 3s), en það eru óleyfilegar færslur

Færslur

- Með því að leysa Schrödinger jöfnuna má finna að þær færslur sem eru líklegastar – það er þegar l breytist um 1
- Þessi krafa á breytingu á skammtatölu er nefnd valregla
- Til dæmis þá getur 3s ástand ekki geislað ljóseind við færslu á 2s ástand ($\Delta l = 0$), en í staðin verður að fara í 2p ($\Delta l = 1$)
- Það eru engar valreglur fyrir n svo 3p getur farið í 2s eða 1s (en ekki 2p)
- Orkustigamynd vetnisatómsins með færslum þar sem valreglan $\Delta l = \pm 1$ er uppfyllt

Færslur

- Bylgjuföllin sem eru lausnir jöfnu Schrödinger fyrir tiltekin orkugildi eru standbylgjur og gefa dreifingu hleðslu rafeindar $-e|\psi(r)|^2$
- Gerum ráð fyrir að atóm víxverki við rafsegulgeislun sem framkallar sveiflandi rafsvið

$$\mathbf{E}(t) = |\mathbf{E}_0| \operatorname{Re}(\exp(-j\omega t)) \hat{\mathbf{e}}_{\text{rad}}$$

þar sem útslagið $|\mathbf{E}_0|$ er fasti og skautunarvigurinn er $\hat{\mathbf{e}}_{\text{rad}}$

- Þegar ω liggur nærri hermitíðni atómsins þá kemur fram sveiflandi tvíþólsvægi á atómið
- Til að reikna hraða örvaðra færslna er þörf á tímaháðum truflanareikningum

Færslur

- Niðurstöður tíma háðra truflanareikninga eru meitlaðar í gullnu reglu Fermi, sem segir að hraði færslna sé í réttu hlutfalli fylkisstak truflunar
- Hamiltonian sem lýsir tímaháðu trufluninni að ofan er

$$H' = e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t)$$

þar sem tvípólsvirkinn er $e\mathbf{r}$

- Víxlverkun við geislun örvar færslu frá ástandi 1 til ástands 2 með hraða

$$\text{Rate} \propto |e\mathbf{E}_0|^2 \left| \int \psi_2^*(\mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\text{rad}})\psi_1 d^3\mathbf{r} \right|^2 \equiv |e\mathbf{E}_0|^2 \times |\langle 2|\mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\text{rad}}|1\rangle|^2$$

- Þessi framsetning byggir á því að styrkur rafsviðsins sé einsleitur yfir atómið svo að það sé hægt að taka það út fyrir tegrið

Færslur

- Tvíþólsstakið má rita

$$\langle 2|\mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\text{rad}}|1\rangle = D_{1,2}\mathcal{I}_{\text{ang}}$$

þar sem radial tegrið er

$$D_{1,2} = \int_0^\infty R_{n_2,l_2}(r)R_{n_1,l_1}(r)r^3 dr$$

og horn tegrið

$$\mathcal{I}_{\text{ang}} = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{l_2,m_2}^* \hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\text{rad}} Y_{l_1,m_1}(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi$$

þar sem $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/r$

- $\mathcal{I}_{\text{ang}} = 0$ nema að ströng skilyrði séu uppfyllt – valreglur

Valreglur

- Valreglurnar sem ákvarða leyfðar færslur koma til vegna horntegursins

$$\mathcal{I}_{\text{ang}} = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{l_2, m_2}^* \hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\text{rad}} Y_{l_1, m_1}(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi$$

sem inniheldur hvernig víxverkun $\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\text{rad}}$ væri háð horni fyrir tiltekna skautun

- Til að reikna \mathcal{I}_{ang} fyrir atóm ritum við

$$\hat{\mathbf{r}} = \frac{1}{r} (x\hat{\mathbf{e}}_x + y\hat{\mathbf{e}}_y + z\hat{\mathbf{e}}_z) = \sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{e}}_x + \sin \theta \sin \phi \hat{\mathbf{e}}_y + \cos \theta \hat{\mathbf{e}}_z$$

Valreglur

- Séu þessi föll rituð

$$\sin \theta \cos \phi = \sqrt{\frac{2\pi}{3}} (Y_{1,-1} - Y_{1,1})$$

$$\sin \theta \sin \phi = j \sqrt{\frac{2\pi}{3}} (Y_{1,-1} + Y_{1,1})$$

$$\cos \theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{1,0}$$

sem gefur

$$\hat{\mathbf{r}} \propto Y_{1,-1} \frac{\hat{\mathbf{e}}_x + j\hat{\mathbf{e}}_y}{\sqrt{2}} + Y_{1,0} \hat{\mathbf{e}}_z + Y_{1,1} \frac{-\hat{\mathbf{e}}_x + j\hat{\mathbf{e}}_y}{\sqrt{2}}$$

Valreglur

- Við ritum almennan skautunarvigur sem

$$\hat{\mathbf{e}}_{\text{rad}} = A_{\sigma-} \frac{\hat{\mathbf{e}}_x - j\hat{\mathbf{e}}_y}{\sqrt{2}} + A_{\pi} \hat{\mathbf{e}}_z + A_{\sigma+} \left(-\frac{\hat{\mathbf{e}}_x + j\hat{\mathbf{e}}_y}{\sqrt{2}} \right)$$

þar sem A_{π} er háð þætti rafsviðsins eftir z -ás

- Þátturinn í xy -planinu er ritaður sem superposition á hringskautun með útslag $A_{\sigma-}$ og $A_{\sigma+}$
- Tvípóllinn sem kemur til er í réttu hlutfalli við

$$\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_{\text{rad}} \propto A_{\sigma-} Y_{1,-1} + A_z Y_{1,0} + A_{\sigma+} Y_{1,+1}$$

Valreglur – π -færslur

- Þáttur rafsviðsins sem liggur á z -ásnum A_z leiðir til tvípólsvægis á atómið sem er í réttu hlutfalli við

$$\hat{\mathbf{e}}_{\text{rad}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_z = \cos \theta$$

og tegrið yfir hornliði bylgjufallsins er

$$\mathcal{I}_{\text{ang}}^\pi = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{l_2, m_2}^*(\theta, \phi) \cos \theta Y_{l_1, m_1}(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi$$

- Til að ákvarða þetta tegur nýtum við samhverfu með tilliti til snúnings um z -ásinn

Valreglur – π -færslur

- Kerfið hefur sívlanings samhverfu svo að tegrið er óbreytt þó að snúið sé um z -ás um horn ϕ_0

$$\mathcal{I}_{\text{ang}}^\pi = \exp(j(m_{l_1} - m_{l_2})\phi_0)\mathcal{I}_{\text{ang}}^\pi$$

- Jafna þessi er uppfyllt þegar annað hvort $\mathcal{I}_{\text{ang}}^\pi = 0$ eða þegar $m_{l_1} = m_{l_2}$
- Fyrir þessa skautun breytist segulskammtatalan ekki $\Delta m_l = 0$

Valreglur – σ -færslur

- Þáttur sveiflandi rafsviðsins í xy -planinu örvar σ -færslur
- Hringskautuð geislun með útslag $A_{\sigma+}$ örvar sveiflur tvíþólsvægis á atómi sem uppfylla

$$Y_{1,1} \propto \sin \theta \exp(j\phi)$$

þar sem horn tegrið er

$$\mathcal{I}_{\text{ang}}^{\sigma+} = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} Y_{l_2, m_2}^*(\theta, \phi) \sin \theta \exp(j\phi) Y_{l_1, m_1}(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi$$

- Aftur með samhverfu og að skoða snúning um z -ás sést að $\mathcal{I}_{\text{ang}}^{\sigma+} = 0$ nema þegar $m_{l_1} - m_{l_2} + 1 = 0$

Valreglur – σ -færslur

- Víxverkun atóms við hringskautaða geislun af andstæðri handedness gefur svipað tegur nema hvað $\exp(j\phi) \longrightarrow \exp(-j\phi)$ og tegrið er $\mathcal{I}_{\text{ang}}^{\sigma^-} = 0$ nema þegar $m_{l_1} - m_{l_2} - 1 = 0$
- Valreglurnar fyrir σ -færslur eru þess vegna $\Delta m_l = \pm 1$
- Ef ljós er óskautað þá er $\Delta m_l = 0, \pm 1$

Tegrun með tilliti til θ

- Horntegur hreintóna kúlu falla með $l = 1$ eru á milli hverfiþunga bylgjufallanna fyrir upphafs- og lokaástand

$$\mathcal{I}_{\text{ang}} \propto \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{l_2, m_2}^*(\theta, \phi) Y_{l, m} Y_{l_1, m_1}(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi$$

- Til að reikna þetta horntegur eru eftirfarandi jöfnur notaðar

$$Y_{l, m} Y_{l, m_1} = AY_{l_1+1, m_1+m} + BY_{l_1-1, m_1+m}$$

þar sem A og B eru fastar

Tegrun með tilliti til θ

- Notum

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{l',m'} Y_{l,m} \sin \theta d\theta d\phi = \delta_{l',l} \delta_{m',m}$$

og við fáum

$$\mathcal{I}_{\text{ang}} \propto A \delta_{l_2, l_1 + 1} \delta_{m_2, m_1 + m} + B \delta_{l_2, l_1 - 1} \delta_{m_2, m_1 + m}$$

- Delta föllin gefa valreglurnar sem fundnar voru áður, eða $\Delta m_l = m$ þar sem $m = 0, \pm 1$ sem ræðst af skautun, sem og $\Delta l = \pm 1$
- Valregluna $\Delta l = \pm 1$ má túlka sem varðveislu hverfipunga ljóseindar sem ber eina einingu hverfipunga \hbar

Speglunartala

- Speglunartala er mikilvægur samhverfueiginleiki í atóm og sameinda eðlisfræði
- Færsla speglunartölu lýsir speglun um upphafspunktinn

$$\mathbf{r} \longrightarrow -\mathbf{r}$$

eða í pólhnitum

$$\theta \longrightarrow \pi - \theta \quad \text{speglun}$$

$$\phi \longrightarrow \phi + \pi \quad \text{snuningur}$$

- Speglunin kemur fram í spegilmynd upphaflega kerfisins
- Spegilmynd vetnisatómsins hefur sömu orkustig og upphaflega atómi vegna þess að Coulomb mættið er hið sama eftir speglunina

Speglunartala

- Til að finna eigingildi fyrir speglunartölu ritum við

$$\hat{P}\psi = P\psi$$

þannig að

$$\hat{P}^2\psi = P^2\psi$$

og þar sem

$$\mathbf{r} \longrightarrow -\mathbf{r} \longrightarrow \mathbf{r}$$

og þess vegna

$$P^2 = 1$$

- Þetta þýðir að speglunarvirkinn hefur eigingildin $P = 1$ og -1 sem svarar til odda og jafnra speglunarbylgjufalla

$$\hat{P}\psi = \psi \quad \text{og} \quad \hat{P}\psi = -\psi$$

Speglunartala

- Bæði eigingildin koma fram sem

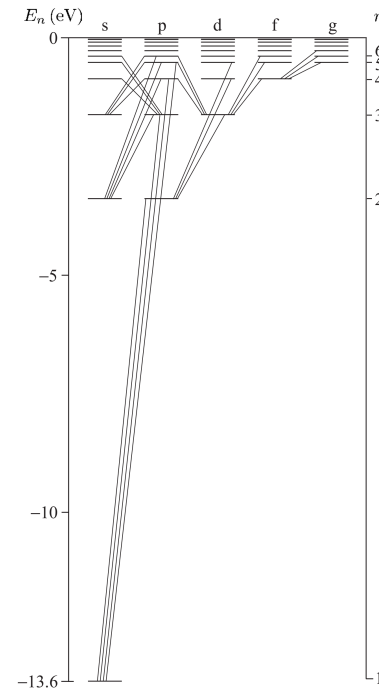
$$\hat{P}Y_{l,m} = (-1)^l Y_{l,m}$$

- Gildi horntegursins breytist ekki við speglunarfærslu

$$\mathcal{I}_{\text{ang}} = (-1)^{l_2+l_1+1} \mathcal{I}_{\text{ang}}$$

- Sem sagt, tegrið er núll nema upphafs og lokaástöndin hafi andstæða speglunartölu

Speglunartala



Frá Foot (2005)

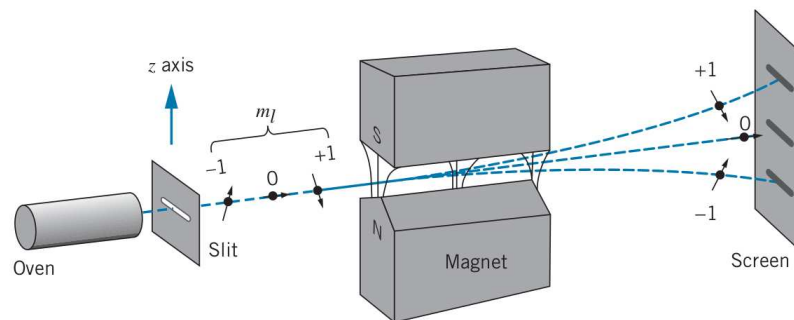
- Leyfðar færslur milli $n = 1, 2$ og 3 hvela vetnisatóms
- $2s$ hefur enga leyfða færslu niður á við, sem gerir það hálfstöðugt (e. metastable), mjög langur líftími 0.125 s

Fíngerð

- Áhrif afstæðis leiða til örlítillar klofnunar á orkustigum atóma, sem nefnd er fíngerð
- Hér skoðum við þessa fíngerð með því að líta á áhrif afstæðis sem truflun á lausnir Schrödinger jöfnunnar
- Til þess að þetta sé mögulegt verður að gera ráð fyrir að rafeindirnar hafi spuna
- Tilraunir sýndu afbrigðileg Zeeman hrif
- Fyrir sum atóm – t.d. vetni og natrín kemur fram klofnun í segulsviði sem ekki fylgir því mynstri sem Zeeman hrif segja til um
- Afbrigðileg Zeeman hrif var hægt að útskýra með spuna rafeindanna

Fíngerð

- Önnur tilraun sem sýndi fram á spuna rafeindanna var Stern-Gerlach tilraunin



Frá Krane (2012)

- Stern-Gerlach tilraunin – Atómgeisli er sendur um misleitt segulsvið
- Atóm sem hafa segul tvíþólsvægi í andstæðar stefnur finna krafta í andstæðar stefnur

Fíngerð

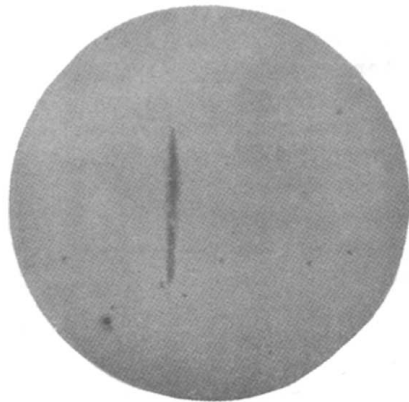


Fig. 2.

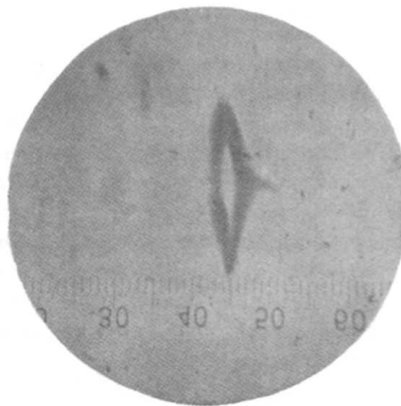


Fig. 3.

Frá Gerlach and Stern (1922)

- Gerlach and Stern (1922) notuðu geisla af silfuratómum
- Silfuratóm hefur $l = 0, 1, 2, 3, \dots$, svo gera má ráð fyrir oddatölu fjölda merkja á skjánum – en í raun sjá þeir tvö þætti á skjánum

⇒ Dæmi 2.6

Fíngerð

- Ólíkt brautarhverfiþunga hefur spuni ekki eiginástönd sem eru föll hornhnita
- Þægilegt er að lýsa spuna með Diracs ket framsetningu sem

$$|sm_s\rangle$$

- Fullt bylgjufall fyrir einnar rafeindar atóm er margfeldi radíal, horn og spunabylgjufallanna

$$\Psi = R_{n,l}Y_{l,m}(\theta, \phi)|sm_s\rangle$$

eða ef við notum ket framsetningu á hverfiþunganum

$$\Psi = R_{n,l}|lm_l sm_s\rangle$$

Fíngerð

- Oft er þetta stytt fyrir spuna upp

$$|s = \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2}\rangle \equiv |\uparrow\rangle$$

og fyrir spuna niður

$$|s = \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2}\rangle \equiv |\downarrow\rangle$$

- Í skammtafræði getur hverfipunginn ekki verið fullkomlega “upp” eða “niður” miðað við z -ásinn
- Stærð s og z þáttar s er tengt skammtölunum s og m_s með

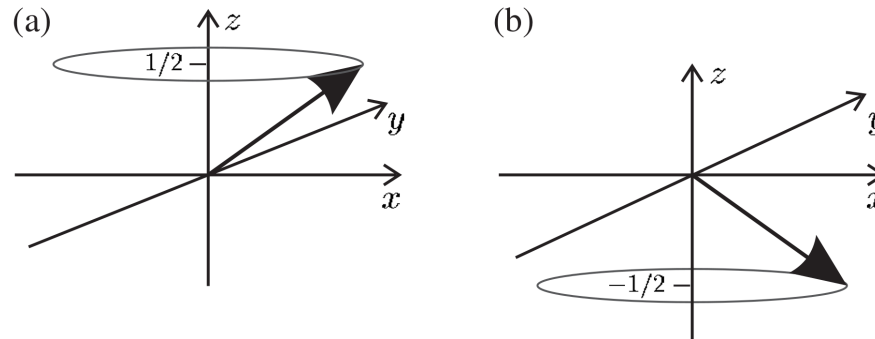
$$|\mathbf{s}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar$$

$$s_z = m_s\hbar$$

Fíngerð

- Vigrar líkja eftir þessum eiginleikum

$$|\mathbf{s}| = \sqrt{s(s+1)} = \sqrt{3}/2$$



Frá Foot (2005)

- Spuni-upp og spuni-niður eru sýndir á myndinni með þætti eftir z -ás $\pm \frac{1}{2}$
- Rafeind sem hreyfist í rafsviði \mathbf{E} finnur fyrir segulsviði \mathbf{B}

$$\mathbf{B} = -\frac{1}{c^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E}$$

Fíngerð – víxlverkun spuna og brautar

- Þetta er afleiðing af því hvernig rafsvið hegðar sér undir Lorentz ummyndun
- Stingum inn fyrir rafsviðið stigli mættisorku V og einingarvigri radíal staðsetningar

$$\mathbf{E} = \frac{1}{c} \frac{\partial V}{\partial r} \frac{\mathbf{r}}{r}$$

og síðan er

$$\mathbf{B} = \frac{1}{m_e c^2} \left(\frac{1}{er} \frac{\partial V}{\partial r} \right) \mathbf{r} \times m_e \mathbf{v} = \frac{\hbar}{ec^2} \left(\frac{1}{er} \frac{\partial V}{\partial r} \right) \mathbf{l}$$

- Brautarhverfipunginn er

$$\hbar \mathbf{l} = \mathbf{r} \times m_e \mathbf{v}$$

Fíngerð – víxlverkun spuna og brautar

- Rafeindin hefur innra segulvægi

$$\mu = -g_s \mu_B \mathbf{S}$$

þar sem spuninn er $s = 1/2$ og $g_s = 2$

- Vægið hefur því styrk sem er nálægt segulvægiseiningu Bohr

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$$

- Við getum þá ritað Hamiltonian

$$H = -\mu \cdot \mathbf{B} = g_s \mu_B \mathbf{S} \cdot \frac{\hbar}{m_e c^2} \left(\frac{1}{er} \frac{\partial V}{\partial r} \right) \mathbf{1}$$

Fíngerð – víxlverkun spuna og brautar

- En þessi jafna gefur klofnun á orkustigum sem er um það bil tvöfalt stærri en það sem sést með tilraunum
- Þetta misræmi stafar af pólveltu Thomas – sem eru afstæðishrif sem koma til vegna þess að segulsviðið er reiknað í viðmiðunarkerfi sem ekki er sístætt heldur snýst með rafeindinni umhverfis kjarnann
- Þessi hrif eru tekin inn með því að setja í stað g_s stærðina $g_s - 1 \simeq 1$
- Að lokum er víxlverkun spuna og brautar, þar sem pólvelta Thomas er tekin með

$$H_{s-o} = (g_s - 1) \frac{\hbar^2}{2m_e^2 c^2} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \right) \mathbf{s} \cdot \mathbf{l}$$

Fíngerð – víxlverkun spuna og brautar

- Fyrir Coulomb mætti í vetni höfum við

$$\frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} = \frac{e^2/4\pi\epsilon_0}{r^3}$$

- Væntigildi þessa Hamiltonian lýsir orkubreytingu

$$E_{s-o} = \frac{\hbar^2}{2m_e^2 c^2} \frac{e^2}{\pi\epsilon_0} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \langle \mathbf{s} \cdot \mathbf{l} \rangle$$

- Við sjáum að fram kemur punktmargfeldi tveggja hverfipunga

⇒ Dæmi 2.7

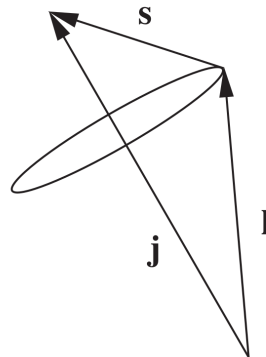
⇒ Dæmi 2.8

Fíngerð – víxlverkun spuna og brautar

- Byrjum á að skilgreina heildar hverfipunga atóms sem summu brautar og spuna hverfipunga

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$$

- Þetta er varðveitt stærð í kerfi þar sem ekkert ytra vægi verkar, eins og atóm í sviðsfríu umhverfi



Frá Foot (2005)

- Víxlverkun spuna og brautar veldur því að vigrarnir breyta um stefnu en summa þeirra er \mathbf{j}

Fíngerð – víxlverkun spuna og brautar

- Við sjáum að

$$2\mathbf{s} \cdot \mathbf{l} = \mathbf{j}^2 - \mathbf{l}^2 - \mathbf{s}^2$$

- Þar með getum við fundið væntigildi fyrir $\langle \mathbf{j}^2 \rangle$, $\langle \mathbf{l}^2 \rangle$ og $\langle \mathbf{s}^2 \rangle$ með

$$\mathbf{s} \cdot \mathbf{l} = \frac{1}{2} \{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\}$$

- Við sjáum að víxlverkun spuna og brautar veldur hliðrun í orku sem nemur

$$E_{s-o} = \frac{\beta}{2} \{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\}$$

þar sem spuna-brautar fastinn β er

$$\beta = \frac{\hbar^2}{2m_e^2 c^2} \frac{e^2}{\pi \epsilon_0} \frac{1}{(na_0)^3 l(l + \frac{1}{2})(l + 1)}$$

Fíngerð – víxlverkun spuna og brautar

- Ein rafeind hefur $s = \frac{1}{2}$, svo að fyrir sérhvert l , er heildar hverfipunga skammtatalan j með tvö möguleg gildi

$$j = l + \frac{1}{2} \quad j = l - \frac{1}{2}$$

- Við sjáum líka að orkubilið milli þessara ástanda

$$\Delta E_{s-o} = E_{j=l+\frac{1}{2}} - E_{j=l-\frac{1}{2}}$$

er

$$\Delta E_{s-o} \beta \left(l + \frac{1}{2} \right) = \frac{\alpha^2 hc R_\infty}{n^3 l(l+1)}$$

eða

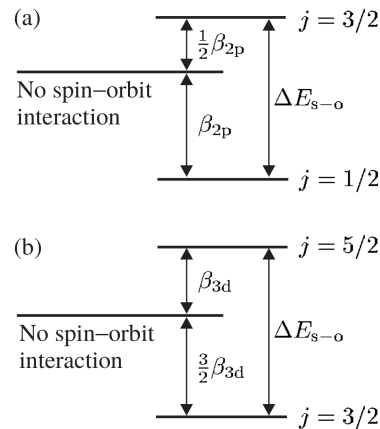
$$\Delta E_{s-o} = \frac{\alpha^2}{nl(l+1)} E(n)$$

Fíngerð – víxlverkun spuna og brautar

- Við sjáum að orkubilin milli ástanda falla þegar n og l stækka
- Stærsta bilið kemur fram í vetnisatóminu þegar $n = 2$ og $l = 1$, þá er kemur víxlverkun spuna og brautar fram sem $j = 1/2$ og $j = 3/2$
- Við táknum þessi orkustig með $2P_{1/2}$ og $2P_{3/2}$, sem svara til nP_j þar sem P stendur fyrir heildar brautarhverfingunni
- Á sama hátt er ritað $2S_{1/2}$ fyrir $2s^2S_{1/2}$ orkustigið; $3D_{3/2}$ og $3D_{5/2}$ fyrir $j = 3/2$ og $5/2$ orkustigin, sem koma til af 3d hvelum

Fíngerð – vetnisatómið

- Sem dæmi um fíngerð skoðum við nú orkustigin sem koma fram vegna $n = 2$ of $n = 3$ hvelanna í vetni



Frá Foot (2005)

- Fyrir 2p hafa fíngerðar orkustigin

$$E_{s-o}(2P_{1/2}) = -\beta_{2p}$$

$$E_{s-o}(2P_{3/2}) = \frac{1}{2}\beta_{2p}$$

Fíngerð – vetnisatómið

- Fyrir 3d er þetta

$$E_{s-o}(3D_{3/2}) = -\frac{3}{2}\beta_{3d}$$

$$E_{s-o}(3D_{5/2}) = \beta_{3d}$$

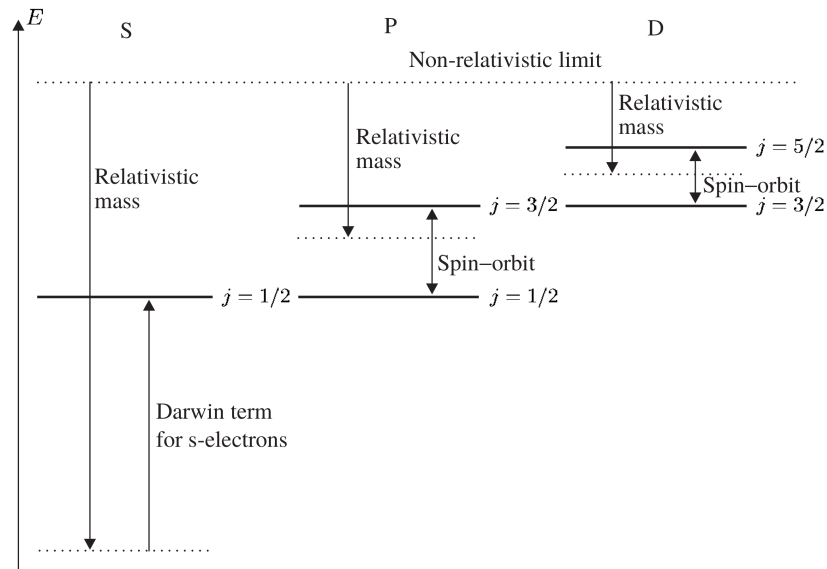
- Fyrir bæði tilfellin er hægt að sýna að víxverlun spuna og brautar hefur ekki áhrif á meðalorkuna

$$\bar{E} = (2j + 1)E_j(n, l) + (2j' + 1)E_{j'}(n, l)$$

þar sem $j' = l - 1/2$ og $j = l + 1/2$ fyrir tvö ástönd

- Víxlverkun spuna og brautar hefur ekki áhrif á $2S_{1/2}$ fyrir $3S_{1/2}$

Fíngerð – vetnisatómið



Frá Foot (2005)

- Myndin sýnir orkustig fyrir $n = 3$ hvelin sem reiknuð eru með því að gera ráð fyrir áhrifum afstæðis
- Við sjáum að tvö önnur hrif hafa svipuð áhrif og víxlverkun spuna og brautar

Fíngerð – vetnisatómið

- Afstæðishrif hliðra orkustigunum nægilega mikið til að $nP_{1/2}$ er margfeldið með $nS_{1/2}$ orkustiginu og $nP_{3/2}$ er margfeldið með $nD_{3/2}$ orkustiginu
- Til að skoða þetta þörfnumst við afstæðilegrar skammtafræði (e. relativistic quantum mechanics) eða lausn Dirac jöfnunnar fyrir rafeind í Coulomb mætti

Fíngerð – vetnisatómið

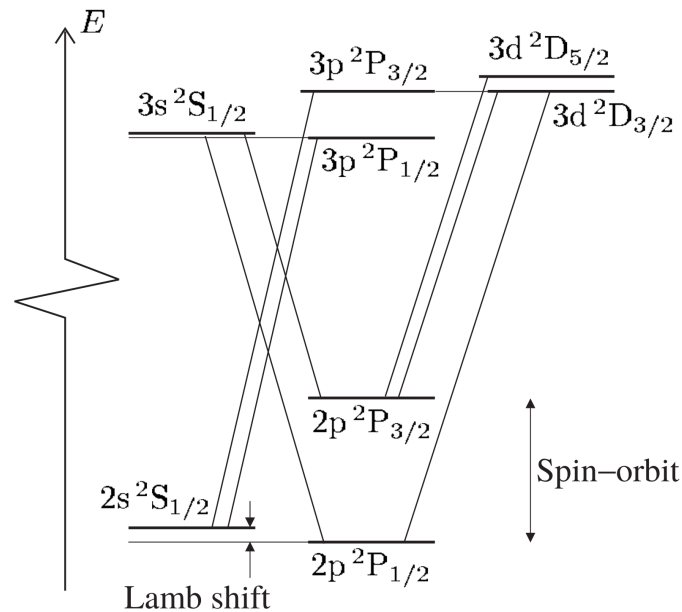
- Þrenn afstæðishirf má sjá
 - Hliðrun kemur fram í orku vegna

$$\gamma = \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2}$$

- Fyrir rafeindir með $l \neq 0$ sýnir samanburður á Dirac og Schrödingerjöfnunum að víxlverkun spuna og brautar er innifalin ásamt með Thomas pólveltu
- Fyrir rafeindir með $l = 0$ kemur fram Darwin liður sem er í réttu hlutfalli við $|\psi(r = 0)|^2$ sem hefur enga sígilda samsvörun

⇒ Dæmi 2.9

Fíngerð – Lamb hliðrun



Frá Foot (2005)

- Myndin sýnir raunveruleg orkustig $n = 2$ og $n = 3$ hvelanna
- Samkvæmt afstæðilegri skammtafræði ætti $2S_{1/2}$ orkustigið að vera nákvæmlega margfeldið með $2P_{1/2}$ orkustiginu þar sem bæði hafa $n = 2$ og $j = 1/2$

Fíngerð – Lamb hliðrun

- Í raun og veru er þó smá orkumunur á milli þeirra

$$E(2S_{1/2}) - E(2P_{1/2}) \simeq 1 \text{ GHz}$$

- Hliðrunin setur $2S_{1/2}$ við hærri orku (lægri bindiorku) en $E_{\text{Dirac}}(n = 2, j = 1/2)$ er um tíundi hluti bilsins milli fíngerðar orkustiganna

$$E(2P_{3/2}) - E(2P_{1/2}) \simeq 11 \text{ GHz}$$

- Þetta er sögulega mikilvægt fyrirbæri þó að hliðrunin sé lítil
- Fyrir þetta einfaldasta tilfelli – ein rafeind í vetnisatómi – gat Dirac ekki sagt fyrir um að $2S_{1/2}$ orkustigið lægi ofan við $2P_{1/2}$ eins og það var seinna mælt af Lamb and Retherford (1947)
- Til að útskýra Lamb hliðrum þarf að leita til skammtasviðsfræði

Fíngerð – færslur

- Færslur í vetnisatóminu milli fíngerðar orkustiga með aðalskammtatölur $n = 2$ og $n = 3$ gefa þætti Balmer- α lína

$$2P_{3/2} - 3S_{1/2}$$

$$2P_{3/2} - 3D_{3/2}$$

$$2P_{3/2} - 3S_{5/2}$$

$$2S_{1/2} - 3P_{1/2}$$

$$2P_{1/2} - 3S_{1/2}$$

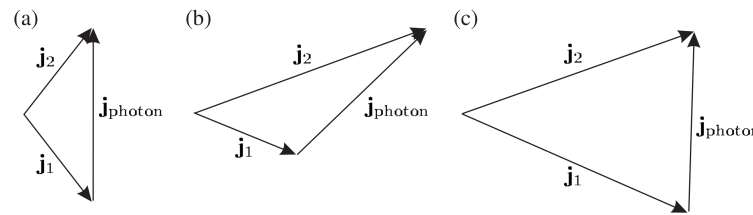
$$2S_{1/2} - 3P_{3/2}$$

$$2P_{1/2} - 3D_{3/2}$$

Fíngerð – færslur

- Þessar færslur uppfylla valreglurnar $\Delta l = \pm 1$ en viðbótar valregla kemur í veg fyrir færsluna $2P_{1/2} - 3D_{5/2}$, sem er að

$$\Delta j = 0, \pm 1$$



Frá Foot (2005)

- Þessa valreglu má útskýra með varðveislu hverfipunga
- Ljóseind hefur eina einingu hverfipunga, svo að til að fara af stigi j_1 til j_2 verða vigrarnir að mynda þríhyrning
- (a) $j_1 = 1/2$ til $j_2 = 1/2$, (b) $j_1 = 1/2$ til $j_2 = 3/2$, og (c) $j_1 = 3/2$ til $j_2 = 3/2$

Frekari upplýsingar

- Þessi kafli er að mestu byggður á kafla 2 hjá Foot (2005) og að einhverju leyti kafla 7 hjá Krane (2012).

Heimildir

Foot, C. J. (2005). *Atomic Physics*. Oxford, United Kingdom: Oxford University Press.

Gerlach, W. and O. Stern (1922). Der experimentelle Nachweis der Richtungsquantelung im Magnetfeld. *Zeitschrift für Physik* 9(1), 349–352.

Krane, K. S. (2012). *Modern Physics* (3 ed.). Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons.

Lamb, W. E. and R. C. Retherford (1947). Fine structure of the hydrogen atom by a microwave method. *Physical Review* 72(3), 241–243.