$\hat{L}_z = -i\hbar \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \right)$ $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ syklisk $x \to y$, $y \to z$, $z \to x$

$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$

$\hat{L}_z \psi = \hbar m_l \psi$ $\hat{L}_z^2 \psi = \hbar^2 m_l \psi$

$\boxed{\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}}$ $\psi = e^{i m_l \varphi}$

$\hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$ $\hat{L}_z^2 \psi = +\hbar^2 m_l^2 \psi$

Et magnetfelt $\vec{B}$ gir et potensiale

$$V = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}$$

hvor $\vec{\mu}$ er det magnetiske dipolmomentet.

For hydrogen er da

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \vec{\mu}\cdot\vec{B} \quad \text{hvor} \quad \hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\vec{\nabla}^2 - \frac{ke^2}{r}$$

og vi har samme egenfunksjoner ψ_{nlm_l} som uten magnetfelt, men

$$E_{nm_l} = E_n + \frac{eB_z\hbar}{2m_e}m_l \qquad \text{(Zeemaneffekten)}$$

Hva med spin? Det anomale Zeemaneffekten

$$V = -\vec{\mu}_{tot}\cdot\vec{B} = -(\vec{\mu}_L + \vec{\mu}_s)\cdot\vec{B} = -\left(-\frac{e}{2m_e}\vec{L} - g_e\frac{e}{2m_e}\vec{S}\right)\cdot\vec{B}$$

Anta $\vec{B} = (0, 0, B_z)$

$$V = \frac{eB_z}{2m_e}(L_z + g_e S_z)$$

Vi antar nå at $[\hat{S}_z, \hat{L}_z] = 0$ og $[\hat{S}_z, \hat{L}^2] = 0$. $\left([\hat{S}_z, \hat{H}_0] = 0\right)$

Igjen så kommuterer alt i V med $\hat{H}_0$ slik at vi har de samme egenfunksjonene.

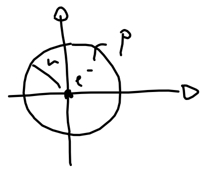
Det som endrer seg er energien:

$$\hat{H}\psi_{nlm_lm_s} = \left(\hat{H}_0 + \frac{eB_z}{2m_e}(\hat{L}_z + g_e\hat{S}_z)\right)\psi_{nlm_lm_s} = \underline{\left[E_n + \frac{eB_z}{2m_e}(\hbar m_l + g_e\hbar m_s)\right]}\psi_{nlm_lm_s}$$

$$E_{n m_l m_s} = E_n + \frac{eB_z}{2m_e}\left(\hbar m_l + g_e \hbar m_s\right)$$

Spinn-bane kobling

Imidlertid vil en vekselvirkning mellom angulærmoment og spinn gi en oppsplitting uten ytre magnetfelt.



La oss se på det fra elektronets ståsted

Ladning i sirkelbevegelse gir magnetfelt gitt ved Biot-Savarts lov

$$B = \frac{\mu_0 I}{2r}$$

hvor I er strømmen og $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}\ \mathrm{NA}^{-2}$ er <u>permeabiliteten</u> til vakuum.

Strømmen kan skrives som

$$I = \frac{q}{T} = \frac{e}{2\pi r / v} = \frac{e}{2\pi r^2 m_e}\, r m_e v = \frac{e}{2\pi r^2 m_e} L$$

slik at

$$\vec{B}_{intern} = \frac{\mu_0 e}{4\pi m_e r^3} \vec{L}$$

Oversatt til operatorer er

$$V = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_{intern} = g_e \frac{e}{2m_e} \frac{\mu_0 e}{4\pi m_e r^3} \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}} = g_e \frac{\mu_0 e^2}{8\pi m_e^2} \frac{1}{r^3} \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}}$$

Konstanten for $\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}$ er liten, denne oppsplittingen kalles <u>finstruktur</u> og er på promillenivå. En viktig effekt er at $\hat{L}_z$ og $\hat{S}_z$ ikke lenger kommuterer med $\hat{H}$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \vec{\mu}_s\cdot\vec{B}_{intern}$$

$$\propto \hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}} = \underline{\hat{L}_x\hat{S}_x} + \underline{\hat{L}_y\hat{S}_y} + \hat{L}_z\hat{S}_z$$

Har ikke lengre $\psi_{n l m_l m_s}$ som egenfunksjon.

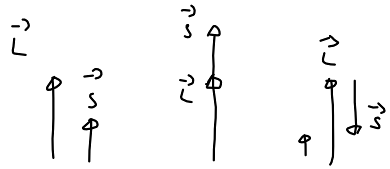
Totalt angulærmoment

Det som er kvantisert i hydrogenatomet med spinn-bane kobling er

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

J har samme struktur som L

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar J_z \text{ osv.}, \quad \text{og} \quad [\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0 \text{ osv.}$$



slik at $\hat{J}^2\chi = \hbar^2 j(j+1)\chi$ og $\hat{J}_z\chi = \hbar m_j\chi$

hvor $j = \underline{|l-s|}, |l-s|+1, \dots, \underline{l+s}$ og $m_j = -j, \dots, j$

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = [\hat{L}_x + \hat{S}_x, \hat{L}_y + \hat{S}_y] = [\hat{L}_x, \hat{L}_y] + [\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar \hat{L}_z + i\hbar \hat{S}_z = i\hbar \hat{J}_z$$

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = [\hat{L}^2 + 2\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}} + \hat{S}^2, \hat{L}_z + \hat{S}_z] = \underbrace{[\hat{L}^2, \hat{L}_z + \hat{S}_z]}_{=0} + 2[\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}, \hat{L}_z + \hat{S}_z] + \underbrace{[\hat{S}^2, \hat{L}_z + \hat{S}_z]}_{=0}$$

$$= 2[\hat{L}_x\hat{S}_x + \hat{L}_y\hat{S}_y + \hat{L}_z\hat{S}_z, \hat{L}_z + \hat{S}_z] \leftarrow 2[\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}, \hat{J}_z]$$

$$= 2\hat{S}_x[\hat{L}_x, \hat{L}_z] + 2\hat{L}_x[\hat{S}_x, \hat{S}_z] + 2\hat{S}_y[\hat{L}_y, \hat{L}_z] + 2\hat{L}_y[\hat{S}_y, \hat{S}_z]$$

$$= \underline{2\hat{S}_x(-i\hbar\hat{L}_y)} + \underline{2\hat{L}_x(-i\hbar\hat{S}_y)} + \underline{2\hat{S}_y\, i\hbar\hat{L}_x} + \underline{2\hat{L}_y\, i\hbar\hat{S}_x} = 0$$

Både $\hat{J}^2$ og $\hat{J}_z$ kommuterer med $\hat{H}$ fordi:

$$[\hat{J}^2, \hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}] = 0 \quad \text{og} \quad [\hat{J}_z, \hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}] = 0$$

Da kan vi samtidige egenfunksjoner for $\hat{H}$, $\hat{L}^2$, $\hat{S}^2$, $\hat{J}^2$ og $\hat{J}_z$ fordi disse operatorene kommuterer. En bølgefunksjon for spinn-bane koblingen kan altså skrives som ψ_{nlsjm_j}.

Addisjon av spinn

Akkurat som for angulormomentum og spinn

$$\vec{J} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \qquad (\vec{S}_1 \text{ og } \vec{S}_2 \text{ er spinnet til to partikler})$$

$$j = |s_1 - s_2|, \ldots, s_1 + s_2, \quad m_j = -j, \ldots, j$$

Vi skal spesielt se på to partikler med $s = \frac{1}{2}$ og $m_s = \pm\frac{1}{2}$

Skriver tilstandene som

$\chi_\uparrow \chi_\uparrow$, $\chi_\uparrow \chi_\downarrow$, $\chi_\downarrow \chi_\uparrow$ og $\chi_\downarrow \chi_\downarrow$

$m_j = 1$, $m_j = 0$, $m_j = 0$, $m_j = -1$

$j = |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}|, \ldots, \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \Rightarrow j = 0, 1$, da er $\underline{j = 0 \text{ og } m_j = 0}$, eller $\underline{j = 1 \text{ og } m_j = 0, \pm 1}$

$\chi_\downarrow \chi_\uparrow - \chi_\uparrow \chi_\downarrow$

<u>singlet</u>

$\chi_\uparrow \chi_\uparrow$

$\chi_\downarrow \chi_\uparrow + \chi_\uparrow \chi_\downarrow$

$\chi_\downarrow \chi_\downarrow$

<u>triplet</u>