9.3 Atom i ytre elektrisk eller magnetisk felt

I forrige avsnitt:
Perturbasjoner som skyldes elektromagnetisk vekselvirkning innen atomet.

Nå:
Vekselvirkning pga. ytre felt.

Atom i et elektrisk felt: Stark-effekten

Anta et H-atom i grunntilstand (ψ_{100}) i elektrisk felt $\vec{\mathcal{E}} = \mathcal{E}\hat{z}$:

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$$

$$H_1 = e\mathcal{E}z \qquad \text{(z-retning valgt)}$$

$$z = r\cos\theta$$

Grunntilstanden er ikke degenerert:

$$E^{(1)} = \langle \psi_{100} | e\mathcal{E}z | \psi_{100} \rangle$$

I sfæriske koordinater:

$$E^{(1)} = \int \left(\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}\right) e\mathcal{E} r\cos\theta \left(\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}\right) r^2 dr \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

$$= \frac{e\mathcal{E}}{\pi a_0^3} \underbrace{\int_0^\pi \cos\theta \sin\theta\, d\theta}_{=0\,!} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty r^3 dr\, e^{-2r/a_0}$$

$$E^{(1)} = 0$$

Annen ordens bidrag må beregnes:

$$E^{(2)} = \sum_{n,l,m_l} \frac{|\langle \psi_{100} | e\mathcal{E}z | \psi_{nlm_l} \rangle|^2}{E_1 - E_n}$$

Det indre produktet:

$$\langle \psi_{100} | e\mathcal{E}z | \psi_{nlm_l} \rangle = e\mathcal{E} \int R_{10}^*(r) Y_0^{0*}(\theta,\phi) r\cos\theta\, R_{nl}(r) Y_l^m(\theta,\phi)\, d^3\vec{r}$$

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \Rightarrow Y_0^0 \cos\theta = \frac{1}{\sqrt{3}} Y_1^0$$

Dvs. (et "notasjonstriks"):

$$\langle \psi_{100} | e\mathcal{E}z | \psi_{nlm_l} \rangle = \frac{e\mathcal{E}}{\sqrt{3}} \int R_{10}^* R_{nl} r^3 dr \underbrace{\int Y_1^{0*}(\theta,\phi)\, Y_l^{m}(\theta,\phi) \sin\theta\, d\theta\, d\phi}_{\text{dette er: } \begin{cases} 1 & l=1,\ m=0 \\ 0 & l\neq 1 \text{ eller } m\neq 0 \end{cases}}$$

Og da:

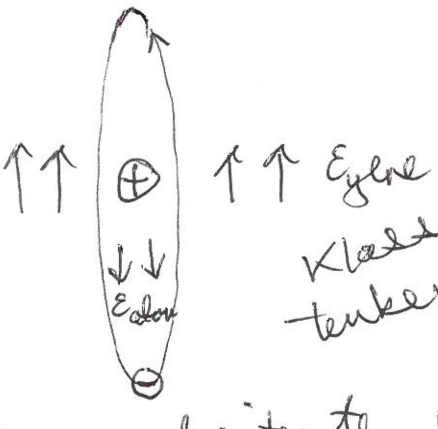
$$E^{(2)} = \sum_n \frac{\left| e\mathcal{E}/\sqrt{3} \int R_{10}^*(r) R_{n1}(r) r^3 dr \right|^2}{E_1 - E_n}$$

Kan beregnes eksakt til å gi:

$$\boxed{\begin{aligned} E^{(2)} &= -\frac{9}{4}(4\pi\varepsilon_0)a_0^3\mathcal{E}^2 \\ &= -(4\pi\varepsilon_0)a_0^3\mathcal{E}^2(1.48 + 0.20 + 0.066 + \dots) \end{aligned}}$$

Bidraget er negativt; fysisk forståelse av det:

[H-atomet blir polarisert på en slik måte at det delvis kansellerer det ytre feltet.]



Klassisk tenkemåte!

Annen potens i $\mathcal{E}$ opptrer — kalles derfor kvadratisk Stark-effekt

For eksiterte H-tilstander:

Degenerasjon opptrer — kan vise med degenerert perturbasjonsteori at vi får proporsjonalitet med $\mathcal{E}$; derfor lineær Stark-effekt.

Atom i et magnetisk felt: Zeeman-effekten

Som før:

$$\vec{B} = B\hat{z}$$

$$H_1 = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}$$

Nå:

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_\ell + \vec{\mu}_s = -\frac{\overbrace{g_\ell}^{=1}\mu_B}{\hbar}\vec{L} - \frac{\overbrace{g_s}^{\approx 2}\mu_B}{\hbar}\vec{S}$$

$$= -\frac{\mu_B}{\hbar}(\vec{L} + 2\vec{S})$$

$\Rightarrow$

$$H_1 = B\frac{\mu_B}{\hbar}[L_z + 2S_z]$$

Full Hamiltonfunksjon:

$$H = H_0 + \underbrace{\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 m_e^2 c^2 r^3}\vec{S}\cdot\vec{L}}_{\text{dominerer ved svake felt } (B \ll 1\,\mathrm{T})} + \underbrace{B\frac{\mu_B}{\hbar}[L_z + 2S_z]}_{\text{dominerer ved sterke felt } (B \gg 1\,\mathrm{T})}$$

Ignorer i så fall spinn-bane-kopling

dvs.

$$\boxed{E^{(1)} = B\mu_B(m_\ell + 2m_s)}$$

Sterk-~~magn~~-felt Zeeman-effekt, Paschen-Back-effekt

Hvis spinn-bane kopling dominerer: etter tekniske forenklinger, fann

$$\boxed{E^{(1)} = gB\mu_B m_j, \quad g = \frac{2j+1}{2\ell+1}}$$

Landé's g-faktor