

Εφαρμογές Θεωρίας Διαταραχών
σε Υδρογόνο:
Λεπτή Υφή,
Φαινόμενο Zeeman,
Υπέρλεπτη Υφή

Δομή Διάλεξης

Λεπτή Υφή: Άρση εκφυλισμού λόγω σύζευξης spin με μαγνητικό πεδίο τροχιακής στροφορμής και λόγω σχετικιστικού όρου κινητικής ενέργειας.

Φαινόμενο Zeeman: Άρση εκφυλισμού λόγω σύζευξης spin με εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.

Υπέρλεπτη Υφή: Άρση εκφυλισμού λόγω σύζευξης spin με μαγνητικό πεδίο από spin πυρήνα.

Λεπτή Υφή: Σχετικιστική Χαμιλτονιανή

Κινητική Ενέργεια Σχετικιστικού Σωματίου:

$$T = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - m c^2.$$

Μη σχετικιστικό όριο ($p \ll mc$):

$$T = \frac{p^2}{2m} \left[1 - \frac{1}{4} \left(\frac{p}{mc} \right)^2 + \mathcal{O} \left(\frac{p}{mc} \right)^4 \right]. \quad +9a$$



$$T \simeq \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2}.$$

Αδιατάραχτη Χαμιλτονιανή Υδρογόνου:

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r},$$

Σχετικιστική Διαταραχή:

$$H_1 = -\frac{p^4}{8m_e^3 c^2}.$$

Διαταραχή ενέργειας σε 1^η τάξη:

$$\Delta E_{nlm} = \langle n, l, m | H_1 | n, l, m \rangle = -\frac{1}{8m_e^3 c^2} \langle n, l, m | p^4 | n, l, m \rangle = -\frac{1}{8m_e^3 c^2} \langle n, l, m | p^2 p^2 | n, l, m \rangle.$$

Διαταραχή 1: Σχετικιστική Χαμιλτονιανή

Διαταραχή ενέργειας σε 1^η τάξη:

$$\Delta E_{nlm} = \langle n, l, m | H_1 | n, l, m \rangle = -\frac{1}{8 m_e^3 c^2} \langle n, l, m | p^4 | n, l, m \rangle = -\frac{1}{8 m_e^3 c^2} \langle n, l, m | p^2 p^2 | n, l, m \rangle.$$

Υπολογισμός ΔE_{nlm} :

Από αδιατάραχτη εξίσωση Schrodinger: $p^2 \psi_{n,l,m} = 2 m_e (E_n - V) \psi_{n,l,m}$

$$p^2 \psi_{n,l,m} = 2 m_e (E_n - V) \psi_{n,l,m}$$

$$V = -e^2 / (4\pi\epsilon_0 r).$$

$$\Delta E_{nlm} = -\frac{1}{8 m_e^3 c^2} \langle n, l, m | p^2 p^2 | n, l, m \rangle.$$



$$\begin{aligned} \Delta E_{nlm} &= -\frac{1}{2 m_e c^2} \langle n, l, m | (E_n - V)^2 | n, l, m \rangle \\ &= -\frac{1}{2 m_e c^2} (E_n^2 - 2 E_n \langle n, l, m | V | n, l, m \rangle + \langle n, l, m | V^2 | n, l, m \rangle) \\ &= -\frac{1}{2 m_e c^2} \left[E_n^2 + 2 E_n \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle + \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle \right] \end{aligned}$$

Διαταραχή 1^{ης} τάξης: Η σταθερά της λεπτής υφής

Διαταραχή ενέργειας σε 1^η τάξη:

$$\Delta E_{nlm} = -\frac{1}{2 m_e c^2} \left[E_n^2 + 2 E_n \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle + \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle \right]$$

$$\Delta E_{nlm} = -\frac{1}{2 m_e c^2} \left[E_n^2 + 2 E_n \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle + \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle \right]$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{n^2 a_0}, \quad \text{+9b}$$

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{1}{(l+1/2) n^3 a_0^2}$$

$$\Rightarrow \Delta E_{nlm} = -\frac{1}{2 m_e c^2} \left[E_n^2 + 2 E_n \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{1}{n^2 a_0} + \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{(l+1/2) n^3 a_0^2} \right]$$

$$\Delta E_{nlm} = -\frac{1}{2 m_e c^2} \left[E_n^2 + 2 E_n \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{1}{n^2 a_0} + \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{(l+1/2) n^3 a_0^2} \right]$$

$$E = \frac{E_0}{n^2}$$

$$E_0 = -\frac{m_e e^4}{2 (4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2}$$

$$\Rightarrow \Delta E_{nlm} = E_n \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{l+1/2} - \frac{3}{4} \right)$$

όπου

+9c

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \simeq \frac{1}{137}$$

Η σταθερά της λεπτής υφής

Διαταραχή 1^{ης} τάξης: Η σταθερά της λεπτής υφής

$$\Delta E_{nlm} = E_n \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{l + 1/2} - \frac{3}{4} \right)$$

όπου

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \simeq \frac{1}{137}$$

Η σταθερά της λεπτής υφής

Ε: Γιατί χρησιμοποιήσαμε μη εκφυλισμένη θεωρία διαταραχών;

+9d

Α: Έχουμε $[L^2, H_1] = [L_z, H_1] = 0$. Άρα οι εκφυλισμένες αδιατάραχτες καταστάσεις είναι ήδη ιδιοκαταστάσεις της H_1 (ορθοκανονικές) και δεν χρειάζεται να δημιουργήσουμε νέα βάση στον εκφυλισμένο υπόχωρο (από την αρχή δεν αναμιγνύονται εκφυλισμένες καταστάσεις).

Διαταραχή 2: Σύζευξη spin με μαγνητικό πεδίο

Το ηλεκτρόνιο στο υδρογόνο κινείται στο ηλεκτρικό πεδίο του πυρήνα:

$$\mathbf{E} = \frac{e \mathbf{r}}{4\pi\epsilon_0 r^3}$$

Από μετασχηματισμό $F^{\mu\nu}$ (ηλεκτρομαγνητικού τανυστή) βρίσκουμε το μαγνητικό πεδίο που 'βλέπει' το κινούμενο ηλεκτρόνιο :

$$\mathbf{B} = -\frac{\mathbf{v} \times \mathbf{E}}{c^2}. \quad +9e$$

Φυσική σημασία: Το ηλεκτρόνιο λόγω κίνησης βλέπει τα φορτία που προκαλούν το ηλεκτρικό πεδίο να κινούνται. Άρα βλέπει ρεύμα. Άρα βλέπει μαγνητικό πεδίο.

Μαγνητική ροπή ηλεκτρονίου λόγω spin:

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{g e}{2 m_e} \mathbf{S},$$

$$g = 2 \left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} + \dots \right) = 2.0023192,$$

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{m_e} \mathbf{S}$$

$$H_1 = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$$

+9f

Νέα διαταραχή

Διαταραχή 2: Σύζευξη spin με μαγνητικό πεδίο

Μαγνητική ροπή ηλεκτρονίου λόγω spin:

$$\mu = -\frac{g e}{2 m_e} \mathbf{S},$$

$$g = 2 \left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} + \dots \right) = 2.0023192,$$

$$\mu = -\frac{e}{m_e} \mathbf{S}$$

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

Νέα διαταραχή

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

$$\mu = -\frac{e}{m_e} \mathbf{S}$$

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

$$\mathbf{E} = \frac{e \mathbf{r}}{4\pi\epsilon_0 r^3}$$

$$H_1 = \overset{+9g}{-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2 r^3}} \mathbf{v} \times \mathbf{r} \cdot \mathbf{S} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2 r^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S},$$

Σύζευξη spin-τροχιάς (spin-orbit)

Μετάπτωση Thomas:
Επιπλέον σχετικιστικό
φαινόμενο που δίνει ένα
παράγοντα 1/2.

$$H_1 = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2 r^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad \overset{+9h}{}$$

Δείτε Griffiths QM

Διαταραχή 2: Σύζευξη spin με μαγνητικό πεδίο

Σύζευξη spin-τροχιάς (spin-orbit):

$$H_1 = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2 r^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}.$$

Εφαρμογή θεωρίας διαταραχών (εκφυλισμένη)

Εύρεση ιδιοκαταστάσεων της διαταραχής:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \Rightarrow J^2 = L^2 + S^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S},$$

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2} (J^2 - L^2 - S^2).$$

Άρα χρειαζόμαστε τις ιδιοκαταστάσεις της ολικής στροφορμής:

Κοινές ιδιοκαταστάσεις των L^2 , S^2 , J^2 αλλά όχι και των S_z , L_z (λόγω σχέσεων μετάθεσης)

Έστω οι ζητούμενες 'νέες' ιδιοκαταστάσεις των H_0 και H_1 : $\psi_{l,s;j,m_j}^{(2)}$

Διαταραχή 2: Σύζευξη spin με μαγνητικό πεδίο

Άρα χρειαζόμαστε τις ιδιοκαταστάσεις της ολικής στροφορμής (διαγωνοποιούν την διαταραχή):

Κοινές ιδιοκαταστάσεις των L^2 , S^2 , J^2 αλλά όχι και των S_z , L_z (λόγω σχέσεων μετάθεσης)

Έστω οι ζητούμενες 'νέες' ιδιοκαταστάσεις των H_0 και H_1 : $\psi_{l,s;j,m_j}^{(2)}$

Όπως έχουμε δει σε προηγούμενη διάλεξη, ισχύει ότι:

$$\begin{aligned} L^2 \psi_{l,s;j,m_j}^{(2)} &= l(l+1) \hbar^2 \psi_{l,s;j,m_j}^{(2)}, & J^2 \psi_{l,s;j,m_j}^{(2)} &= j(j+1) \hbar^2 \psi_{l,s;j,m_j}^{(2)}, \\ S^2 \psi_{l,s;j,m_j}^{(2)} &= s(s+1) \hbar^2 \psi_{l,s;j,m_j}^{(2)}, & J_z \psi_{l,s;j,m_j}^{(2)} &= m_j \hbar \psi_{l,s;j,m_j}^{(2)}. \end{aligned}$$

Άρα για την διαταραχή 1^{ης} τάξης έχουμε:

$$\begin{aligned} L \cdot S &= \frac{1}{2} (J^2 - L^2 - S^2). \\ H_1 &= \frac{e^2}{8\pi \epsilon_0 m_e^2 c^2 r^3} L \cdot S. \end{aligned} \quad \rightarrow \quad \begin{aligned} \Delta E_{l,1/2;j,m_j} &= \langle l, 1/2; j, m_j | H_1 | l, 1/2; j, m_j \rangle \\ &= \frac{e^2}{16\pi \epsilon_0 m_e^2 c^2} \left\langle 1, 1/2; j, m_j \left| \frac{J^2 - L^2 - S^2}{r^3} \right| 1, 1/2; j, m_j \right\rangle \\ &= \frac{e^2 \hbar^2}{16\pi \epsilon_0 m_e^2 c^2} [j(j+1) - l(l+1) - 3/4] \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \end{aligned}$$

$s = 1/2$

Διαταραχή 2: Σύζευξη spin με μαγνητικό πεδίο

$$\Delta E_{l,1/2;j,m_j} = \frac{e^2 \hbar^2}{16\pi \epsilon_0 m_e^2 c^2} [j(j+1) - l(l+1) - 3/4] \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle$$

Χρησιμοποιώντας τις ακτινικές λύσεις για το άτομο υδρογόνου, έχουμε δει ότι: $\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{1}{l(l+1/2)(l+1)n^3 a_0^3}$.

$$\Delta E_{l,1/2;j,m_j} = \frac{e^2 \hbar^2}{16\pi \epsilon_0 m_e^2 c^2} [j(j+1) - l(l+1) - 3/4] \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle$$

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{1}{l(l+1/2)(l+1)n^3 a_0^3}$$

+9i

$$\Delta E_{l,1/2;j,m_j} = \frac{e^2 \hbar^2}{16\pi \epsilon_0 m_e^2 c^2 a_0^3} \left[\frac{j(j+1) - l(l+1) - 3/4}{l(l+1/2)(l+1)n^3} \right],$$

$$\Delta E_{l,1/2;j,m_j} = \frac{e^2 \hbar^2}{16\pi \epsilon_0 m_e^2 c^2 a_0^3} \left[\frac{j(j+1) - l(l+1) - 3/4}{l(l+1/2)(l+1)n^3} \right],$$

$$E = \frac{E_0}{n^2}$$

$$E_0 = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi \epsilon_0)^2 \hbar^2}$$

+9j

$$a_0 = \frac{4\pi \epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = 5.3 \times 10^{-11} \text{ m.} \quad \alpha = \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

$$\Delta E_{l,1/2;j,m_j} = E_n \frac{\alpha^2}{n^2} \left[\frac{n \{3/4 + l(l+1) - j(j+1)\}}{2l(l+1/2)(l+1)} \right],$$

Διαταραχή 1ης τάξης λόγω spin-orbit coupling

Συνδυασμός Διαταραχών: Λεπτή Υφή

Διαταραχή 1^{ης} τάξης λόγω spin-orbit coupling $\Delta E_{l,1/2;j,m_j} = E_n \frac{\alpha^2}{n^2} \left[\frac{n \{3/4 + l(l+1) - j(j+1)\}}{2l(l+1/2)(l+1)} \right],$

Διαταραχή 1^{ης} τάξης λόγω σχετικιστικής κινητικής ενέργειας: $\Delta E_{nlm} = E_n \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{l+1/2} - \frac{3}{4} \right)$

$$\left. \begin{aligned} \Delta E_{l,1/2;j,m_j} &= E_n \frac{\alpha^2}{n^2} \left[\frac{n \{3/4 + l(l+1) - j(j+1)\}}{2l(l+1/2)(l+1)} \right], \\ &+ \\ \Delta E_{nlm} &= E_n \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{l+1/2} - \frac{3}{4} \right) \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} j = l \pm \frac{1}{2} \\ l = j \pm \frac{1}{2} \end{array} \xrightarrow{\text{+9k}} \Delta E_{l,1/2;j,m_j} = E_n \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right)$$

Λεπτή Υφή.

In[4]: de = n (3/4 + l (l + 1) - j (j + 1)) / (2 l (l + 1/2) (l + 1)) + ((n / (l + 1/2) - 3/4))

Out[4]: $-\frac{3}{4} + \frac{n}{\frac{1}{2} + 1} + \frac{\left(\frac{3}{4} - j(1+j) + 1(l+1)\right)n}{2l\left(\frac{1}{2} + 1\right)(l+1)}$

In[6]: de + 3/4 /. 1 -> j + 1/2 // Simplify

Out[6]: $\frac{2n}{1+2j}$

In[7]: de + 3/4 /. 1 -> j - 1/2 // Simplify

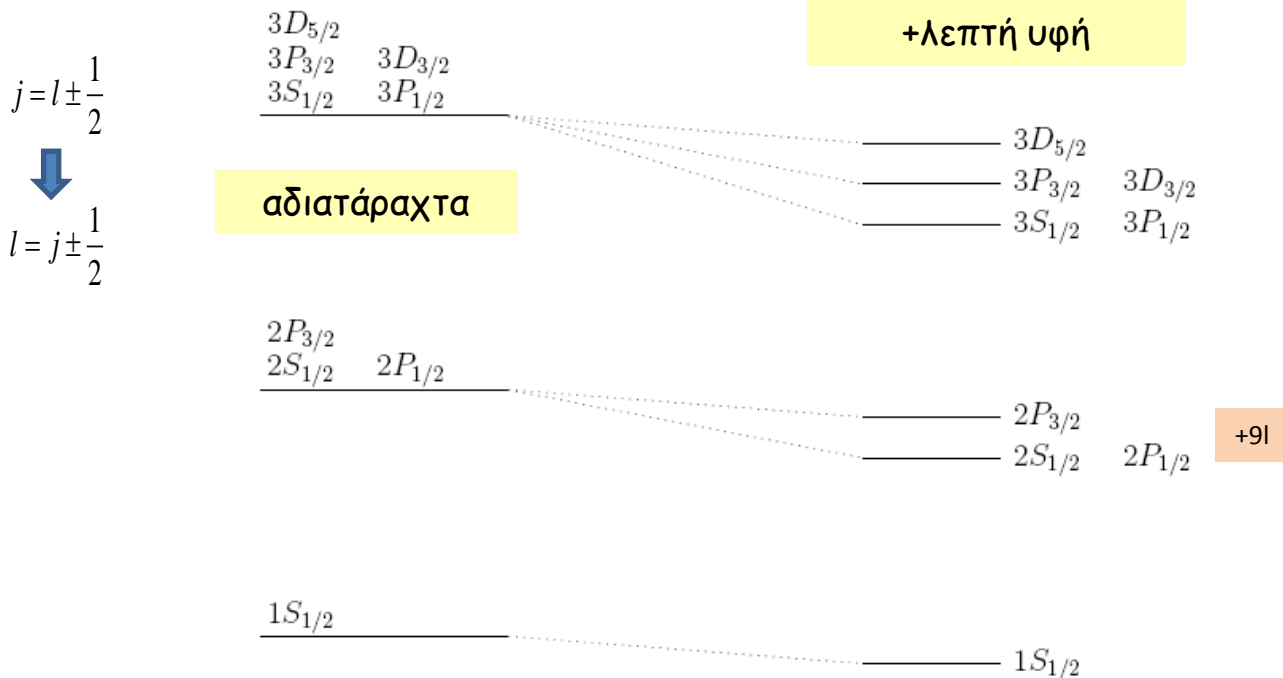
Out[7]: $\frac{2n}{1+2j}$

Συνδυασμός Διαταραχών: Λεπτή Υφή

Λεπτή Υφή: $\Delta E_{l,1/2;j,m_j} = E_n \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + 1/2} - \frac{3}{4} \right)$

Συμβολισμός Ιδιοκαταστάσεων L^2, J^2 ως nL_j $L = (S, P, D, F, \dots) \longleftrightarrow l = (0, 1, 2, 3, \dots)$

πχ (n=1, l=0, j=1/2): $1S_{1/2}$



Φαινόμενο Zeeman

Έστω άτομο υδρογόνου σε ομογενές εξωτερικό μαγνητικό πεδίο \mathbf{B} στην διεύθυνση z :

Η διαταραχή γράφεται:

$$H_1 = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B},$$

όπου:

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e}{2m_e} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S})$$



$$H_1 = \frac{eB}{2m_e} (L_z + 2S_z).$$

Εσωτερικό πεδίο περίπου 25 Tesla



Διαταραχή (εκφυλισμένη)

Άρα για την διαταραχή 1^{ης} τάξης έχουμε:

$$\begin{aligned} \Delta E_{l,1/2;j,m_j} &= \langle l, 1/2; j, m_j | H_1 | l, 1/2; j, m_j \rangle \\ &\quad \downarrow J_z = L_z + S_z \\ &= \frac{eB}{2m_e} (m_j \hbar + \langle l, 1/2; j, m_j | S_z | l, 1/2; j, m_j \rangle). \end{aligned}$$

Φαινόμενο Zeeman

Άρα για την διαταραχή 1ης τάξης έχουμε:

$$\begin{aligned} \Delta E_{l,1/2;j,m_j} &= \langle l, 1/2; j, m_j | H_1 | l, 1/2; j, m_j \rangle \\ &\quad \downarrow J_z = L_z + S_z \\ &= \frac{eB}{2m_e} (m_j \hbar + \langle l, 1/2; j, m_j | S_z | l, 1/2; j, m_j \rangle) \end{aligned}$$

Από συντελεστές Clebsch-Gordon έχουμε:

$$\left. \begin{aligned} \psi_{l+1/2, m+1/2}^{(2)} &= \left(\frac{l+m+1}{2l+1} \right)^{1/2} \psi_{m, 1/2}^{(1)} + \left(\frac{l-m}{2l+1} \right)^{1/2} \psi_{m+1, -1/2}^{(1)}, \\ \psi_{l-1/2, m+1/2}^{(2)} &= \left(\frac{l-m}{2l+1} \right)^{1/2} \psi_{m, 1/2}^{(1)} - \left(\frac{l+m+1}{2l+1} \right)^{1/2} \psi_{m+1, -1/2}^{(1)}. \end{aligned} \right\} \begin{aligned} \psi_{j, m_j}^{(2)} &= \left(\frac{j+m_j}{2l+1} \right)^{1/2} \psi_{m_j-1/2, 1/2}^{(1)} + \left(\frac{j-m_j}{2l+1} \right)^{1/2} \psi_{m_j+1/2, -1/2}^{(1)} \\ &\quad j = l + 1/2, \\ \psi_{j, m_j}^{(2)} &= \left(\frac{j+1-m_j}{2l+1} \right)^{1/2} \psi_{m_j-1/2, 1/2}^{(1)} - \left(\frac{j+1+m_j}{2l+1} \right)^{1/2} \psi_{m_j+1/2, -1/2}^{(1)} \\ &\quad j = l - 1/2. \end{aligned}$$

Φαινόμενο Zeeman

Άρα για την διαταραχή 1^{ης} τάξης έχουμε:

$$\Delta E_{l,1/2;j,m_j} = \frac{eB}{2m_e} (m_j \hbar + \langle l, 1/2; j, m_j | S_z | l, 1/2; j, m_j \rangle)$$

Από συντελεστές Clebsch-Gordon έχουμε:

$$\psi_{j,m_j}^{(2)} = \left(\frac{j+m_j}{2l+1}\right)^{1/2} \psi_{m_j-1/2,1/2}^{(1)} + \left(\frac{j-m_j}{2l+1}\right)^{1/2} \psi_{m_j+1/2,-1/2}^{(1)}$$

$j = l + 1/2,$

$$\psi_{j,m_j}^{(2)} = \left(\frac{j+1-m_j}{2l+1}\right)^{1/2} \psi_{m_j-1/2,1/2}^{(1)} - \left(\frac{j+1+m_j}{2l+1}\right)^{1/2} \psi_{m_j+1/2,-1/2}^{(1)}$$

$j = l - 1/2.$

$$S_z \psi_{m,\pm 1/2}^{(1)} = \pm \frac{\hbar}{2} \psi_{m,\pm 1/2}^{(1)}$$

$$\frac{j+m_j}{2l+1} \frac{\hbar}{2} + \frac{j-m_j}{2l+1} \left(-\frac{\hbar}{2}\right) = \frac{m_j \hbar}{2l+1}$$

$$\langle l, 1/2; j, m_j | S_z | l, 1/2; j, m_j \rangle = \pm \frac{m_j \hbar}{2l+1}$$

$$\frac{j+1-m_j}{2l+1} \frac{\hbar}{2} + \frac{j+1+m_j}{2l+1} \left(-\frac{\hbar}{2}\right) = -\frac{m_j \hbar}{2l+1}$$

+90

Φαινόμενο Zeeman

Άρα για την διαταραχή 1^{ης} τάξης έχουμε:

$$\langle l, 1/2; j, m_j | S_z | l, 1/2; j, m_j \rangle = \pm \frac{m_j \hbar}{2l+1}$$

$$\Delta E_{l,1/2;j,m_j} = \frac{eB}{2m_e} (m_j \hbar + \langle l, 1/2; j, m_j | S_z | l, 1/2; j, m_j \rangle)$$

$$\Delta E_{l,1/2;j,m_j} = \mu_B B m_j \left[1 \pm \frac{1}{2l+1} \right]$$

+9p

$j = l \pm 1/2.$

μαγνητόνη Bohr

όπου

$$\mu_B = \frac{e \hbar}{2 m_e} = 5.788 \times 10^{-5} \text{ eV/T}$$

Ενεργειακή απόσταση διαταραγμένων ενεργειακών σταθμών:

$$\mu_B B \left[1 \pm \frac{1}{2l+1} \right]$$

$$\mu_B B \left[1 \pm \frac{1}{2l+1} \right] \rightarrow \begin{cases} j = l + 1/2 \xrightarrow{+} \mu_B B \frac{2l+2}{2l+1} \\ j = l - 1/2 \xrightarrow{-} \mu_B B \frac{2l}{2l+1} \end{cases}$$

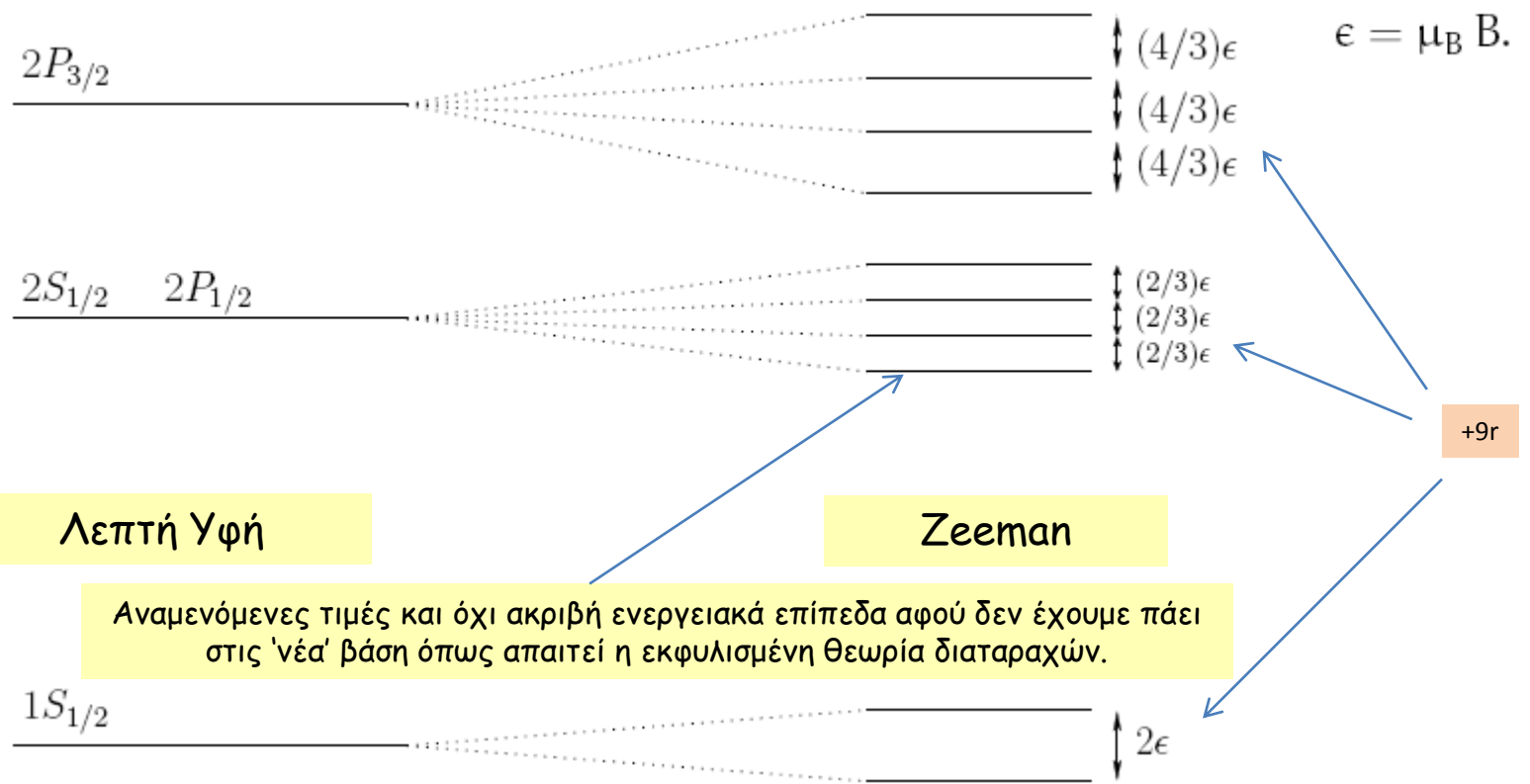
+9q

Φαινόμενο Zeeman

Άρση εκφυλισμού Zeeman:

$$\Delta E_{l,1/2;j,m_j} = \mu_B B m_j \left[1 \pm \frac{1}{2l+1} \right]$$

$$j = l \pm 1/2.$$



Αναμενόμενες τιμές και όχι ακριβή ενεργειακά επίπεδα αφού δεν έχουμε πάει στις 'νέα' βάση όπως απαιτεί η εκφυλισμένη θεωρία διαταραχών.

Υπέρλεπτη Υφή : Σύζευξη spin - μαγνητικού πεδίου πρωτονίου

Μαγνητική Διπολική Ροπή Πρωτονίου (λόγω spin):

$$\mu_p = \frac{g_p e}{2 m_p} \mathbf{S}_p,$$

Πειραματικό δεδομένο: $g_p \approx 5.59$

Ισχύει ότι: $\mu_p \ll \mu_e$ (λόγω μάζας)

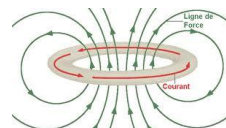
$$\mu_p = \frac{g_p e}{2 m_p} \mathbf{S}_p,$$

Μικρός βρόχος ρεύματος

Πολυπολικό ανάπτυγμα
διανυσματικού δυναμικού
(Griffiths H/M I σελ 308)

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \left[3 (\mu_p \cdot \mathbf{e}_r) \mathbf{e}_r - \mu_p \right] + \frac{2\mu_0}{3} \mu_p \delta^3(\mathbf{r}),$$

+9s



Απειροστός βρόχος δίνει
άπειρη πυκνότητα δυναμικών
γραμμών στο κέντρο.

Διαταραχή Χαμιλτονιανής λόγω σύζευξης με spin ηλεκτρονίου:

$$H_1 = -\mu_e \cdot \mathbf{B}, \quad \text{όπου} \quad \mu_e = -\frac{e}{m_e} \mathbf{S}_e.$$

$$H_1 = -\mu_e \cdot \mathbf{B},$$

$$\mu_e = -\frac{e}{m_e} \mathbf{S}_e.$$

$$\mu_p = \frac{g_p e}{2 m_p} \mathbf{S}_p,$$

+9t

$$H_1 = \frac{\mu_0 g_p e^2}{8\pi m_p m_e} \frac{3 (\mathbf{S}_p \cdot \mathbf{e}_r) (\mathbf{S}_e \cdot \mathbf{e}_r) - \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e}{r^3} + \frac{\mu_0 g_p e^2}{3 m_p m_e} \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e \delta^3(\mathbf{r}).$$

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \left[3 (\mu_p \cdot \mathbf{e}_r) \mathbf{e}_r - \mu_p \right] + \frac{2\mu_0}{3} \mu_p \delta^3(\mathbf{r}),$$

Υπέρλεπτη Υφή : Σύζευξη spin - μαγνητικού πεδίου πρωτονίου

$$H_1 = \frac{\mu_0 g_p e^2}{8\pi m_p m_e} \frac{3 (\mathbf{S}_p \cdot \mathbf{e}_r) (\mathbf{S}_e \cdot \mathbf{e}_r) - \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e}{r^3} + \frac{\mu_0 g_p e^2}{3 m_p m_e} \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e \delta^3(\mathbf{r}).$$

Εφαρμόζουμε 1^{ης} τάξης θεωρία διαταραχών για την βασική κατάσταση (μη εκφυλισμένη):

$$\Delta E = \frac{\mu_0 g_p e^2}{8\pi m_p m_e} \left\langle \frac{3 (\mathbf{S}_p \cdot \mathbf{e}_r) (\mathbf{S}_e \cdot \mathbf{e}_r) - \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e}{r^3} \right\rangle + \frac{\mu_0 g_p e^2}{3 m_p m_e} \langle \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e \rangle |\psi(0)|^2.$$

Ο πρώτος όρος μηδενίζεται για σφαιρικά συμμετρική κατάσταση ($l=0$)
(ναδειχτεί σαν άσκηση με τα εξής βήματα):

+9u

$$\hat{r} = \sin \theta \cos \phi \hat{i} + \sin \theta \sin \phi \hat{j} + \cos \theta \hat{k}. \quad \longrightarrow \quad \int (\mathbf{a} \cdot \hat{r})(\mathbf{b} \cdot \hat{r}) \sin \theta d\theta d\phi = \frac{4\pi}{3} (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}).$$

\mathbf{a}, \mathbf{b} σταθερά διανύσματα

$$0 < \theta < \pi, 0 < \phi < 2\pi \quad \downarrow \quad l = 0.$$

$$\left\langle \frac{3 (\mathbf{S}_p \cdot \mathbf{e}_r) (\mathbf{S}_e \cdot \mathbf{e}_r) - \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e}{r^3} \right\rangle = 0.$$

Υπέρλεπτη Υφή : Σύζευξη spin - μαγνητικού πεδίου πρωτονίου

$$\Delta E = \frac{\mu_0 g_p e^2}{8\pi m_p m_e} \left\langle \frac{3(\mathbf{S}_p \cdot \mathbf{e}_r)(\mathbf{S}_e \cdot \mathbf{e}_r) - \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e}{r^3} \right\rangle + \frac{\mu_0 g_p e^2}{3 m_p m_e} \langle \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e \rangle |\psi(0)|^2.$$

$$\left. \begin{array}{l} |\psi_{100}(0)|^2 = 1/(\pi a_0^3) \\ \left\langle \frac{3(\mathbf{S}_p \cdot \mathbf{e}_r)(\mathbf{S}_e \cdot \mathbf{e}_r) - \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e}{r^3} \right\rangle = 0. \end{array} \right\} \longrightarrow \Delta E = \frac{\mu_0 g_p e^2}{3\pi m_p m_e a_0^3} \langle \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e \rangle.$$

Εκφράζουμε την διαταραχή συναρτήσει του ολικού spin:

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_e + \mathbf{S}_p \Rightarrow \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e = \frac{1}{2} (S^2 - S_e^2 - S_p^2).$$

	$S_e^2 \Rightarrow (3/4) \hbar^2.$	}	$\langle \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e \rangle = \frac{1}{4} \hbar^2$	triplet
	$S_p^2 \Rightarrow (3/4) \hbar^2.$			
singlet	$S^2 \Rightarrow 0$			
triplet	$S^2 \Rightarrow 2 \hbar^2$			
			$\langle \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e \rangle = -\frac{3}{4} \hbar^2$	singlet

Άρση εκφυλισμού της $1S_{1/2}$ χωρίς εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (Υπέρλεπτη Υφή)

Υπέρλεπτη Υφή : Σύζευξη spin - μαγνητικού πεδίου πρωτονίου

$$\langle \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e \rangle = \frac{1}{4} \hbar^2 \quad \text{triplet}$$

$$\langle \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e \rangle = -\frac{3}{4} \hbar^2 \quad \text{singlet}$$

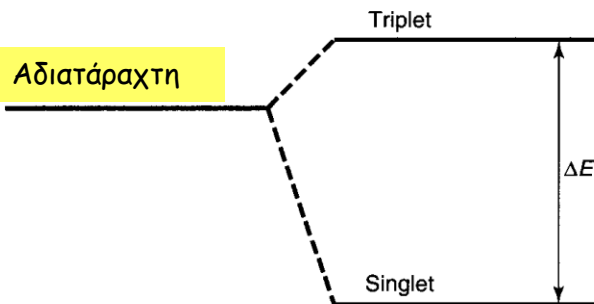
Άρση εκφυλισμού της $1S_{1/2}$ χωρίς εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (Υπέρλεπτη Υφή)

$$\Delta E = \frac{\mu_0 g_p e^2}{3\pi m_p m_e a_0^3} \langle \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e \rangle \quad \begin{array}{c} \text{singlet} \\ \text{triplet} \end{array} \longrightarrow \Delta E = \frac{8}{3} g_p \frac{m_e}{m_p} \alpha^2 E_0 = 5.88 \times 10^{-6} \text{ eV},$$

$E_0 = 13.6 \text{ eV}$ +9v

$\lambda = 21.1 \text{ cm.}$ +9v

Υπέρλεπτη Υφή \ll Λεπτή Υφή ($m_e/m_p \ll 1$)



Εκπεμπόμενη ακτονοβολία από ενδογαλαξιακό υδρογόνο μετά από διέγερση λόγω κρούσεων

Σύνοψη

Η λεπτή υφή οφείλεται στην ενεργειακή διαταραχή που προκαλεί ο **σχετικιστικός κινητικός όρος** και η σύζευξη του **spin** του ηλεκτρονίου του υδρογόνου με το μαγνητικό πεδίο που 'βλέπει' το ηλεκτρόνιο λόγω της κίνησής του (**στροφορμής**) στο ηλεκτρικό πεδίο του πυρήνα (**spin-orbit coupling**). Η λεπτή υφή αίρει τον εκφυλισμό στο άτομο του υδρογόνου ως προς τον κβαντικό αριθμό της ολικής στροφορμής j .

Το φαινόμενο Zeeman οφείλεται στην ενεργειακή διαταραχή που προκαλεί εξωτερικό μαγνητικό πεδίο στο άτομο του υδρογόνου. **Αίρει τον εκφυλισμό ως προς τον κβαντικό αριθμό m_j** .

Η υπέρλεπτη υφή οφείλεται στην ενεργειακή διαταραχή που προκαλεί η **σύζευξη του spin** του ηλεκτρονίου του υδρογόνου με το μαγνητικό πεδίο που προκαλείται από το **spin** του πρωτονίου του πυρήνα (**spin-spin coupling**). Η υπέρλεπτη υφή αίρει τον εκφυλισμό στο άτομο του υδρογόνου ως προς τον κβαντικό αριθμό του ολικού **spin s** . Η ενεργειακή διαταραχή που προκαλείται είναι πολύ μικρότερη από την λεπτή υφή λόγω της μεγάλης διαφοράς μάζας μεταξύ πρωτονίου και ηλεκτρονίου.

Bohr energies:	of order	$\alpha^2 m c^2$
Fine structure:	of order	$\alpha^4 m c^2$
Lamb shift:	of order	$\alpha^5 m c^2$
Hyperfine splitting:	of order	$(m/m_p)\alpha^4 m c^2$

Από D. Griffiths: Introduction to Quantum Mechanics

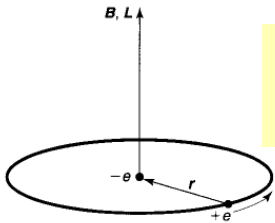
Άλυτες Ασκήσεις

1. Η ακριβής σχέση για την λεπτή υφή που προκύπτει από την εξίσωση Dirac (χωρίς χρήση διαταραχών), έχει την μορφή:

$$E_{nj} = mc^2 \left\{ \left[1 + \left(\frac{\alpha}{n - (j + 1/2) + \sqrt{(j + 1/2)^2 - \alpha^2}} \right)^2 \right]^{-1/2} - 1 \right\}$$

Δείξτε ότι με κατάλληλο ανάπτυγμα ($\alpha \ll 1$) παίρνουμε την σχέση που αποδείξαμε στο μάθημα.

2. Θεωρείστε το σύστημα αναφοράς του ηλεκτρονίου στο οποίο το πρωτόνιο έχει στροφορμή γύρω από το ηλεκτρόνιο



Δείξτε ότι το μαγνητικό πεδίο που βλέπει το ηλεκτρόνιο λόγω του ρεύματος I του 'περιστρεφόμενου πρωτονίου είναι $B = \frac{\mu_0 I}{2r}$,

και μετά δείξτε ότι το παραπάνω μαγνητικό πεδίο συνδέεται με την στροφορμή του ηλεκτρονίου μέσω της σχέσης:

$$\mathbf{B} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e}{mc^2 r^3} \mathbf{L}.$$

Άλυτες Ασκήσεις

3. Εκφράστε τις ενεργειακές στάθμες Bohr συναρτήσει της σταθεράς της λεπτής υφής.

4. α. Αποδείξτε το θεώρημα virial της κλασσικής μηχανικής που συσχετίζει την κινητική με την δυναμική ενέργεια για ορισμένους τύπους δυναμικών.
β. Χρησιμοποιήστε το θεώρημα αυτό και τις ενέργειες Bohr για να αποδείξετε την σχέση

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{n^2 a_0},$$

που ισχύει για το άτομο του υδρογόνου.

5. Βρείτε τις συχνότητες και τα μήκη κύματος που προκύπτουν από όλες τις μεταπτώσεις από $n=3$ σε $n=2$. Θεωρείστε μόνο την άρση εκφυλισμού λόγω λεπτής υφής.

****Problem 6.27** Suppose the Hamiltonian H , for a particular quantum system, is a function of some parameter λ ; let $E_n(\lambda)$ and $\psi_n(\lambda)$ be the eigenvalues and eigenfunctions of $H(\lambda)$. The **Feynman-Hellmann theorem** states that

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \langle \psi_n | \frac{\partial H}{\partial \lambda} | \psi_n \rangle \quad [6.95]$$

(assuming either that E_n is nondegenerate, or—if degenerate—that the ψ_n 's are the “good” linear combinations of the degenerate eigenfunctions).

- (a) Prove the Feynman-Hellmann theorem. *Hint:* Use Equation 6.9.
(b) Apply it to the one-dimensional harmonic oscillator, (i) using $\lambda = \omega$ (this yields a formula for the expectation value of V), (ii) using $\lambda = \hbar$ (this yields $\langle T \rangle$), and (iii) using $\lambda = m$ (this yields a relation between $\langle T \rangle$ and $\langle V \rangle$). Compare your answers to Problem 2.37 and the virial theorem predictions (Problem 3.53).

Άλυτες Ασκήσεις

6. Αποδείξτε τις σχέσεις που δεν αποδείξαμε στην διάλεξη.

$$T = \frac{p^2}{2m} \left[1 - \frac{1}{4} \left(\frac{p}{mc} \right)^2 + \mathcal{O} \left(\frac{p}{mc} \right)^4 \right]. \quad \Delta E_{nlm} = E_n \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{l+1/2} - \frac{3}{4} \right)$$

A: Έχουμε $[L^2, H_1] = [L_z, H_1] = 0$ (λεπτή υφή σχετικιστικός όρος)

$$\mathbf{B} = -\frac{\mathbf{v} \times \mathbf{E}}{c}, \quad \Delta E_{l,1/2;j,m_j} = E_n \frac{\alpha^2}{n^2} \left[\frac{n \{3/4 + l(l+1) - j(j+1)\}}{2l(l+1/2)(l+1)} \right],$$

$$\Delta E_{l,1/2;j,m_j} = E_n \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \quad j = l \pm \frac{1}{2}$$

Εσωτερικό πεδίο περίπου 25 Tesla

$$\psi_{l+1/2,m+1/2}^{(2)} = \left(\frac{l+m+1}{2l+1} \right)^{1/2} \psi_{m,1/2}^{(1)} + \left(\frac{l-m}{2l+1} \right)^{1/2} \psi_{m+1,-1/2}^{(1)},$$

$$\langle l, 1/2; j, m_j | S_z | l, 1/2; j, m_j \rangle = \pm \frac{m_j \hbar}{2l+1}$$

$$\psi_{l-1/2,m+1/2}^{(2)} = \left(\frac{l-m}{2l+1} \right)^{1/2} \psi_{m,1/2}^{(1)} - \left(\frac{l+m+1}{2l+1} \right)^{1/2} \psi_{m+1,-1/2}^{(1)}.$$

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \left[3(\boldsymbol{\mu}_p \cdot \mathbf{e}_r) \mathbf{e}_r - \boldsymbol{\mu}_p \right] + \frac{2\mu_0}{3} \boldsymbol{\mu}_p \delta^3(\mathbf{r}),$$

$$H_1 = \frac{\mu_0 g_p e^2}{8\pi m_p m_e} \frac{3(\mathbf{S}_p \cdot \mathbf{e}_r)(\mathbf{S}_e \cdot \mathbf{e}_r) - \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e}{r^3} + \frac{\mu_0 g_p e^2}{3 m_p m_e} \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e \delta^3(\mathbf{r}). \quad \left\langle \frac{3(\mathbf{S}_p \cdot \mathbf{e}_r)(\mathbf{S}_e \cdot \mathbf{e}_r) - \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e}{r^3} \right\rangle = 0.$$

$$\lambda = 21.1 \text{ cm.}$$