Ἡ λεπτὴ ὑφὴ τοῦ ἀτόμου H

Ἡ λεπτὴ ὑφὴ προέρχεται ἀπὸ ἐπὶ πλέον ὅρους στὴν (ἀδιατάρακτη) Χαμιλτωνειανή : $\hat{H}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}$ οἱ ὁποῖοι ὀφείλονται i) στὴν σύζευξη τροχιᾶς-spin (spin-orbit coupling) καὶ ii) σὲ σχετικιστικὲς διορθώσεις.

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}_{so} + \hat{H}_r$$

i) Σύζευξις spin-orbit

Τὸ ἠλεκτρόνιο στὸ ἄτομο H, "βλέπει" τὸν πυρήνα νὰ περιφέρεται γύρω του καὶ ἐπομένως νὰ δημιουργεῖ ἕνα μαγνητικὸ πεδίο $\vec{B}$ μὲ τὸ ὁποῖο ἀλληλεπιδρᾶ μέσω τῆς μαγνητικῆς διπολικῆς ροπῆς του, $\hat{H}'_{so} = -\vec{\mu}_e \cdot \vec{B}$.

Κλασσικῶς ἂν θεωρήσουμε ὅτι τὸ πρωτόνιο διαγράφει κυκλικὴ τροχιὰ τότε τὸ μέτρο τοῦ $\vec{B}$ δίδεται ἀπὸ τὸν νόμο Biot-Savart:

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

Τώρα $I = \frac{e}{T}$ καὶ $L = m \cdot v \cdot r = m \frac{2\pi r}{T} r$

$\rightarrow I = e \frac{L}{2\pi m r^2}$. Επίσης $c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}} \rightarrow \mu_0 = \frac{1}{c^2 \varepsilon_0}$

Τελικῶς:

$$\vec{B} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e}{mc^2 r^3} \vec{L}$$

Ἡ μαγνητικὴ διπολικὴ ροπὴ τοῦ ἠλεκτρονίου εἶναι:

$$\vec{\mu}_e = g_e \frac{-e}{2m} \vec{S} \quad , \quad g_e \simeq 2$$

$$\rightarrow \vec{\mu}_e = \frac{-e}{m} \vec{S}$$

Ὁπότε: $\hat{H}'_{so} = -\hat{\vec{\mu}}_e \cdot \hat{\vec{B}} = -\left(-\frac{e}{m}\hat{\vec{S}}\right) \cdot \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e}{mc^2 r^3} \hat{\vec{L}}$

$$= \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{m^2 c^2} \frac{1}{r^3} \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}$$

Στὸ σημεῖο αὐτὸ ὑπεισέρχεται ἡ διόρθωσις Thomas, λόγω ἀλλαγῆς συστήματος ἀναφορᾶς, ποὺ θέτει ἕνα παράγοντα 2 στὸν παρονομαστὴ καὶ τελικῶς:

$$\hat{H}'_{so} = \left(\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0}\right) \frac{1}{m^2 c^2} \frac{1}{r^3} \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}} = A \frac{1}{r^3} \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}$$

Ἡ συνολικὴ Χαμιλτωνειανὴ $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}'_{so}$ δὲν θα μετατίθεται μὲ τὰ $\hat{L}_z, \hat{S}_z$ λόγω τοῦ ὅρου $\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}$.

Κατ' ἀρχήν:
$$[\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}, \hat{L}^2] = [\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}, \hat{S}^2] = 0$$

Ὅμως: $[\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}, \hat{L}_z] = [\hat{L}_x\hat{S}_x, \hat{L}_z] + [\hat{L}_y\hat{S}_y, \hat{L}_z] + [\hat{L}_z\hat{S}_z, \hat{L}_z]$

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

$$= -i\hbar\hat{L}_y\hat{S}_x + i\hbar\hat{L}_x\hat{S}_y \neq 0$$

Ὁμοίως: $[\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}, \hat{S}_z] \neq 0$

Ἂν ὅμως θεωρήσουμε τὴ συνολικὴ στροφορμή:
$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$$

Τότε θὰ ἔχουμε ὅτι: $[\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}, \hat{J}^2] = [\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}, \hat{J}_z] = 0$

Οἱ ἰδιοσυναρτήσεις ποὺ θὰ χρησιμοποιηθοῦν θὰ εἶναι οἱ συζευγμένες $|n\,l\,s\,j\,m_j\rangle$ ἀντὶ τῶν $|n\,l\,s\,m_l\,m_s\rangle$

Ἡ πρώτης τάξεως διόρθωσις θὰ εἶναι:

$$\langle n\,l\,s\,j\,m_j|\hat{H}'_{so}|n\,l\,s\,j\,m_j\rangle =$$
$$= \langle n\,l\,s\,j\,m_j|A\frac{1}{r^3}\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}|n\,l\,s\,j\,m_j\rangle$$

ὁ ὅρος $\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}} = \dfrac{\hat{J}^2-\hat{L}^2-\hat{S}^2}{2}$

Ἔτσι: $\langle n\,l\,s\,j\,m_j|\,\dfrac{\hat{J}^2-\hat{L}^2-\hat{S}^2}{2}\,|n\,l\,s\,j\,m_j\rangle =$

$$= \frac{1}{2}\hbar^2\left[j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)\right] = \frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right]$$

Ἐπίσης δίδεται:

$$\langle n\,l\,s\,j\,m_j|\,\frac{1}{r^3}\,|n\,l\,s\,j\,m_j\rangle = \frac{1}{l(l+1)(l+\frac{1}{2})n^3 a_0^3}.$$

Ὁπότε τελικῶς:

$$E_{so}^{(1)} = \left(\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0}\right)\frac{1}{m^2c^2}\,\frac{\hbar^2}{2}\,\frac{j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}}{l(l+1)(l+\frac{1}{2})\,n^3 a_0^3}$$

ἤ λαμβάνοντας ὑπ' ὄψιν:

$$E_n^{(0)} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\,\frac{e^2}{a_0}\,\frac{1}{2n^2}\ , \quad a_0 = 4\pi\varepsilon_0\frac{\hbar^2}{me^2}$$

$$\longrightarrow \quad \underline{\underline{E_{so}^{(1)} = \frac{\left(E_n^{(0)}\right)^2}{mc^2}\left\{\frac{n\left[j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right]}{l(l+1)(l+\frac{1}{2})}\right\}}}$$

ii) Σχετικιστικές διορθώσεις.

Η σχετικιστική κινητική ενέργεια εκφράζεται από:

$$T = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} - mc^2$$

όπου m η μάζα ηρεμίας. Θα εκφράσουμε το T συναρτήσει της ορμής:

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$$

$$\rightarrow p^2 = \frac{m^2v^2}{1-\frac{v^2}{c^2}} \rightarrow p^2c^2 = \frac{m^2v^2c^2}{1-\frac{v^2}{c^2}} \rightarrow$$

$$\rightarrow p^2c^2 + m^2c^4 = \frac{m^2v^2c^2 + m^2c^4\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)}{1-\frac{v^2}{c^2}} =$$

$$= \frac{m^2v^2c^2 + m^2c^4 - m^2c^2v^2}{1-\frac{v^2}{c^2}} = \left(\frac{mc^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\right)^2 \rightarrow$$

$$\rightarrow p^2c^2 + m^2c^4 = (T + mc^2)^2 \rightarrow$$

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

τώρα γιὰ νὰ μετατρέψω τὸ p σὲ τελεστὴ $\hat{p}$ ὑπάρχει πρόβλημα λόγω τοῦ ριζικοῦ. Θὰ ἀναπτύξουμε τὸ T σὲ σειρὰ Taylor:

$$T = mc^2 \left[\sqrt{1 + \frac{p^2c^2}{m^2c^4}} - 1 \right] = mc^2 \left[\sqrt{1 + \left(\frac{p}{mc}\right)^2} - 1 \right]$$

$$= mc^2 \left[1 + \frac{1}{2}\left(\frac{p}{mc}\right)^2 - \frac{1}{8}\left(\frac{p}{mc}\right)^4 + \dots - 1 \right] =$$

$$= \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{8}\frac{p^4}{m^3c^2} + \dots$$

Ὁ πρῶτος ὅρος δίδει τὴν κινητικὴ ἐνέργεια κλασσικῶς καὶ κρατώντας μόνο τὸν δεύτερο ὅρο ὡς διόρθωση:

$$\hat{H}'_r \simeq - \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2}$$

Έτσι: $$E_r^{(1)} = \langle \hat{H}_r' \rangle = -\frac{1}{8m^3c^2}\langle \psi_n|\hat{p}^4|\psi_n\rangle =$$

$$= -\frac{1}{8m^3c^2}\langle n\,l\,s\,j\,m_j|\,\hat{p}^4\,|n\,l\,s\,j\,m_j\rangle$$

$$= -\frac{1}{8m^3c^2}\langle \hat{p}^2(n\,l\,s\,j\,m_j)|\hat{p}^2(n\,l\,s\,j\,m_j)\rangle$$

Όμως: $\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi_n = (E_n-\hat{V})\psi_n$ (αδιατάρακτη εξίσωσις)

$$\longrightarrow \quad \hat{p}^2\psi_n = 2m\,(E_n-\hat{V})\psi_n \quad \longrightarrow$$

$$\longrightarrow \quad \langle \hat{p}^2\psi_n|\hat{p}^2\psi_n\rangle = 4m^2\langle\psi_n|(E_n-\hat{V})^2|\psi_n\rangle \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \quad E_r^{(1)} = -\frac{4m^2}{8m^3c^2}\langle\psi_n|(E_n-\hat{V})^2|\psi_n\rangle \Longrightarrow$$

$$\Longrightarrow \quad E_r^{(1)} = -\frac{1}{2mc^2}\left[E_n^2 - 2E_n\langle\psi_n|\hat{V}|\psi_n\rangle + \langle\psi_n|\hat{V}^2|\psi_n\rangle\right]$$

$$= -\frac{1}{2mc^2}\left[E_n^2 + 2E_n\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle_n + \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_n\right]$$

Δίδονται τα αποτελέσματα:

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_n = \frac{1}{n^2 a_0} \quad \left(a_0 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{\hbar^2}{me^2} \right)$$

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

Έτσι:

$$E_r^{(1)} = -\frac{1}{2mc^2} \left[E_n^2 + 2E_n \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \right) \frac{1}{n^2 a_0} + \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \right)^2 \frac{1}{(l+\frac{1}{2}) n^3 a_0^2} \right]$$

και τελικώς:

$$E_r^{(1)} = -\frac{(E_n^{(0)})^2}{2mc^2} \left[\frac{4n}{l+\frac{1}{2}} - 3 \right]$$

όπου ελήφθη υπ' όψιν ότι οι αδιατάρακτες ενέργειες: $E_n^{(0)} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{2a_0} \frac{1}{n^2}$.

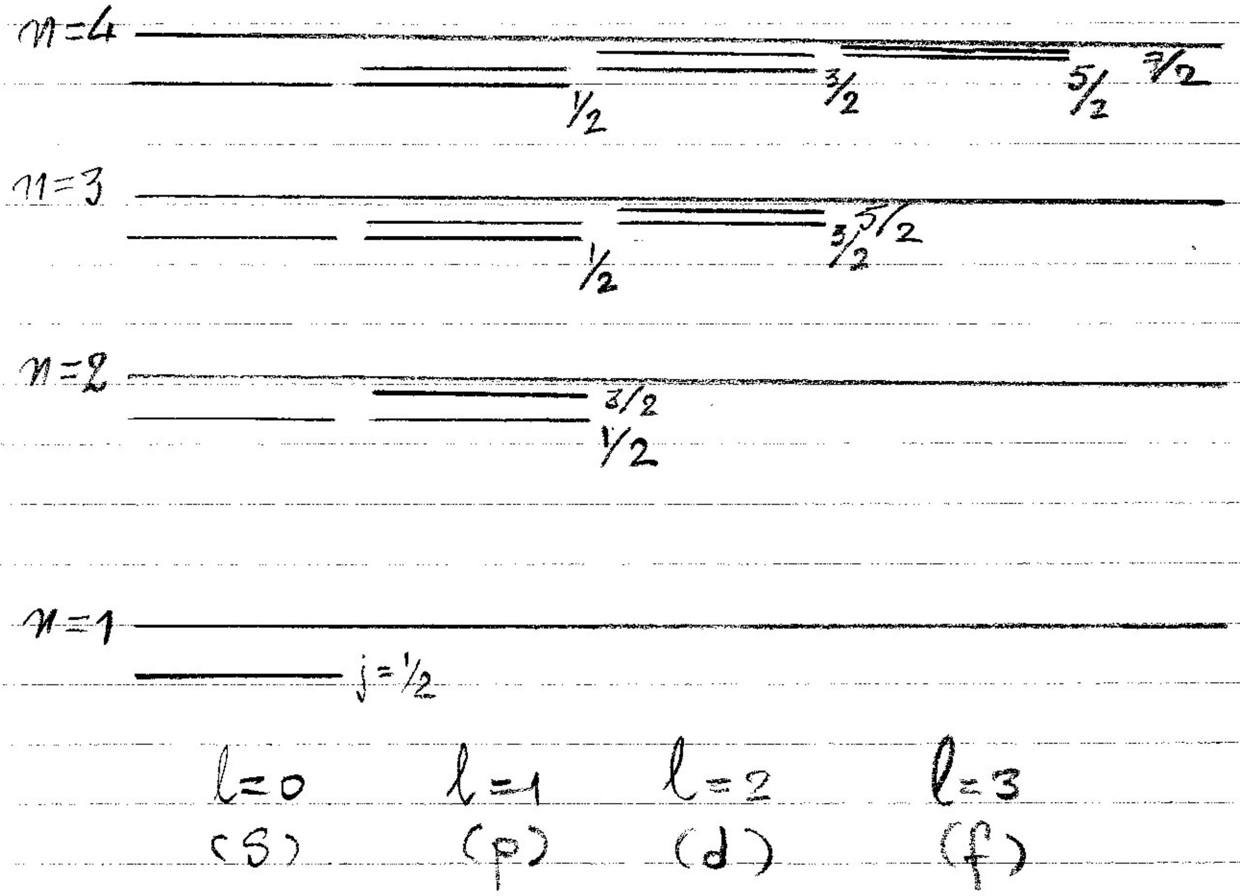
Παρατηρούμε ότι η διόρθωσις $E_r^{(1)}$ είναι μικρότερη του E_n κατά ένα παράγοντα $\frac{E_n^{(0)}}{mc^2} \simeq \frac{13.6\,eV}{511000\,eV} \cong 2\times10^{-5}$

Τελικώς αθροίζοντας $E_{fs}^{(1)} = E_{so}^{(1)} + E_r^{(1)}$ λαμβάνουμε:

$$E_{fs}^{(1)} = \frac{E_n^2}{2mc^2}\left(3 - \frac{4n}{j+\frac{1}{2}}\right)$$

όπου ελήφθη υπ' όψιν ότι: $j = l \pm \frac{1}{2}$.

Η λεπτή υφή αίρει τον εκφυλισμό ως προς l αλλά διατηρεί εκφυλισμό ως προς j.



Τάξεις μεγέθους

Θα είναι: $a_0 = 4\pi\varepsilon_0 \frac{\hbar^2}{me^2}$ η ακτίνα Bohr

$$\rightarrow \frac{1}{a_0} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{\hbar c}\frac{mc}{\hbar} \rightarrow \frac{1}{a_0} = \alpha\frac{mc}{\hbar}$$

όπου η $\alpha = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{\hbar c}$ η σταθερά λεπτής υφής

η οποία είναι αδιάστατο μέγεθος και είναι:

$$\alpha = \frac{\langle v\rangle_{1s}}{c} \simeq \frac{1}{137}$$

Τώρα: $E_n = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{a_0}\frac{1}{2n^2} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}e^2\alpha\frac{mc}{\hbar}\frac{1}{2n^2}$

$$\rightarrow E_n = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{\hbar c}\alpha mc^2\frac{1}{2n^2} = -\frac{1}{2n^2}\alpha^2\cdot mc^2$$

Επίσης: $\frac{E_n^2}{2mc^2} = \frac{\alpha^4(mc^2)^2}{4n^4\,2mc^2} = \frac{1}{8n^4}\alpha^4\cdot mc^2$

Δηλαδή οι ηλεκτρονιακές ενέργειες είναι τάξεως $\alpha^2 mc^2$

ενώ οι διορθώσεις λεπτής υφής είναι $\alpha^4 mc^2 \sim \alpha^2 E_n$

Για την υπέρλεπτη υφή $\sim\left(\frac{m}{m_p}\right)\alpha^4 mc^2$

Τώρα θα είναι:

$$E_{nj} \simeq E_n + E_{fs}^{(1)}$$

$$\rightarrow E_{nj} = -\frac{1}{n^2}\frac{a^2 mc^2}{2} + \frac{E_n^2}{2mc^2}\left(3 - \frac{4n}{j+1/2}\right) =$$

$$= -\frac{1}{n^2}\frac{a^2 mc^2}{2} + \frac{a^4 (mc^2)^2}{4n^4 \cdot 2mc^2}\left(3 - \frac{4n}{j+\frac{1}{2}}\right) \Longrightarrow$$

$$\Longrightarrow E_{nj} = \frac{E_H}{n^2}\left[1 + \frac{a^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right)\right]$$

Η ακριβής σχέσις όπως προκύπτει από την σχετικιστική εξίσωση Dirac είναι:

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

Η προηγούμενη μπορεί να βρεθεί αναπτύσσοντας την ακριβή σε σειρά μέχρι τάξεως a^4 εφόσον $a \ll 1$.