Cvičení KT1 8. 11. 2022 (6. cvičení)

Témata:

- jemná struktura = *štěpení spektrálních čar vlivem spin-orbitální interakce + posun vlivem rel. korekcí*

Jemná struktura

Uvažujme atom vodíku (s jedním elektronem),

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2} - \frac{1}{\hat{r}} \,. \tag{1}$$

Vyřešením stacionární (tj. bezčasové) Schrödingerovy rovnice získáme degenerované energetické hladiny, tzv. **hrubou strukturu**,

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \,. \tag{2}$$

(Pro zopakování např. http://quantum.karlov.mff.cuni.cz/∼uhlirovat/UDKM/UDKM2022_cv11.pdf.)

Spin elektronu $\hat{\vec{S}}$ však interaguje s orbitálním momentem hybnosti $\hat{\vec{L}}$. Tyto dva momenty hybnosti se skládají a tím dochází ke snížení degenerace energetických hladin. Jelikož tento efekt je výrazně jemnější než hrubá struktura, postačuje ho započítat pomocí poruchové metody (v prvním řádu).

Kromě *spin-orbitální interakce* se na stejné úrovni přesnosti setkáme ještě s dalšími dvěma členy: s tzv. *kontaktním členem*, který souvisí s nenulovou pravděpodobností výskytu elektronu na jádře (pouze pro s-stavy, pro ostatní stavy je nulový), a s *korekcí ke kinetické energii.* Všechny tyto tři členy, vedoucí na tzv. *jemnou strukturu*, získáme, spojíme-li kvantovou teorii s teorií relativity[1] . V prvním řádu poruchové metody získáme pro jemnou strukturu

$$\epsilon_1 = \frac{1}{2} \langle\psi_0| \left[-\left(\epsilon_0 + \frac{1}{r}\right)^2 + \pi\delta(\vec{r}) + \frac{1}{r^3}\hat{\vec{S}}\cdot\hat{\vec{L}} \right] |\psi_0\rangle \,, \tag{3}$$

kde postupně máme korekci ke kinetické energii, kontaktní člen a konečně spin-orbitální člen. ϵ_1 je první korekce k energii, ψ_0 je neporušená vlnová funkce.

Zde se zaměříme na hladinu $2p$, která se rozštěpí na dvě hladiny.

(I) Kolikrát je degenerovaná hladina $2p$? Uvažujte také spin.

(II) Který ze tří členů v (3) je zodpovědný za rozštěpení hladiny?

Jako neporušenou vlnovou funkci budeme uvažovat vodíkovou funkci $2p$ orbitalu (viz dřívější cvičení),

$$\psi_0(r,\theta,\varphi) = R_{21}(r)Y_{1m}(\theta,\varphi)\xi \,, \tag{4}$$

kde

$$R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}} r e^{-r/2} \tag{5}$$

je radiální část a

$$Y_{1,0}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \,, \tag{6}$$

$$Y_{1,\pm1}(\theta,\varphi) = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\varphi} \,. \tag{7}$$

jsou kulové funkce pro p-stavy a ξ je spinová funkce (tj. spin "nahorů" nebo "dolů"). Úhlové a spinové funkce budeme uvažovat dohromady a zavedeme notaci (protože to tak bude výhodné)

$$|L,S\rangle = |L\rangle\,|S\rangle \tag{8}$$

s $L = -1, 0, +1$ a $S = +, -$ (tj. $\pm 1/2$).

(III) Napište šest možných stavů $|L,S\rangle$.

Spin-orbitální člen v (3) se díky tvaru vlnové funkce (4) rozpadne na výpočet dvou integrálů:

$$\frac{1}{2}\langle\psi_0|\frac{1}{r^3}\hat{\vec{S}}\cdot\hat{\vec{L}}|\psi_0\rangle = \frac{1}{2}\langle R_{12}|\frac{1}{r^3}|R_{12}\rangle\,\langle Y_{1,\pm1}|\hat{\vec{S}}\cdot\hat{\vec{L}}|Y_{1,\pm1}\rangle \,. \tag{9}$$

(IV) Spočtěte radiální integrál $\langle R_{12}|\frac{1}{r^3}|R_{12}\rangle$. Mělo by vyjít 1/24, tj. se započtením faktoru 1/2 by to mělo být 1/48.

[1] Řešíme pak tzv. Diracovu rovnici. Více se můžete dočíst např. v knize doc. Zamastila.

Otázkou je, jak se vypořádat se spin-orbitálním členem $\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}$. Působení součinu dvou operátorů (přičemž každý působí v jiném prostoru) můžeme rozepsat

$$\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}} = \frac{1}{2} \left(\hat{S}_+ \hat{L}_- + \hat{S}_- \hat{L}_+ \right) + \hat{S}_z \hat{L}_z \,. \tag{10}$$

(V) Jak působí jednotlivé operátory na odpovídající stavy? Tj. $\hat{S}_\pm \left|\pm\right\rangle$, $\hat{S}_z \left|\pm\right\rangle$, $\hat{L}_\pm \left|l,m\right\rangle$, $\hat{L}_z \left|l,m\right\rangle$.

(VI) Spočtěte působení operátoru $\vec{S} \cdot \vec{L}$ na šest stavů z (III). Dva stavy by měly být vlastními stavy operátoru $\vec{S} \cdot \vec{L}$ a zbylé čtyři stavy by se měly míchat vždy jen po dvou.

(VII) Najděte lineární kombinace dvou a dvou stavů z (VI) tak, aby byly vlastními stavy operátoru $\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}$.

(VIII) Jakým vlastním číslům jednotlivé stavy odpovídají? Mělo by vyjít -1 a $+1/2$.

Vidíme tedy, že spin-orbitální interakce vede k částečnému snížení 6x degenerované $2p$ hladiny: získáme kvadruplet a dublet.

(IX) Jak velké je rozštěpení hladin? Dosazením do zde používaných výrazů získáme výsledek v Hatreech. Jaká je odpovídající frekvence?

Výpočet jsme také mohli provést zavedením celkového momentu hybnosti $\hat{\vec{J}}$ definovaného

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{S}} + \hat{\vec{L}} \tag{11}$$

a působení operátoru $\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}$ (X) vyjádřit pomocí $\hat{J}^2$, $\hat{S}^2$ a $\hat{L}^2$ a místo stavů $\left|L,S\right\rangle$ uvažovat bázi stavů $\left|j,m_j\right\rangle$, kde stavy $\left|j,m_j\right\rangle$ jsou definované (jak bývá zvykem)

$$\hat{J}^2 \left|j,m\right\rangle = j\,(j+1) \left|j,m\right\rangle \,, \tag{12}$$

$$\hat{J}_z \left|j,m\right\rangle = m \left|j,m\right\rangle \,. \tag{13}$$

(X) Ukažte, že operátor celkového momentu hybnosti komutuje s Hamiltoniánem. Co to znamená?

(XI) Jakým hodnotám j a m_j odpovídají hladiny a stavy získané v (VI)–(VIII)?

(XII) Jak by bylo možné ještě dále sejmout degeneraci hladin?

Povinná úloha na příště

1. (0,5 b.) Ukažte, že hamiltonián vodíku komutuje s $\hat{L}_z$ a $\hat{L}^2$. Tyto tři operátory $\left\{\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z\right\}$ tvoří tzv. úplnou množinu komutujících operátorů. Co to znamená?

2. (0,5 b.) Nakreslete radiální funkce pro $1s$, $2s$ a $2p$ orbitaly. Spočtěte pravděpodobnost pro základní stav (elektron v $1s$ orbitalu), že najdeme elektron ve vzdálenosti do $R = 0,5$, $R = 1$, $R = 2$, $R = 3$, $R = 4$ od jádra.

Bonusová úloha

Spočtěte, jak se změní hladiny pro $3d$ orbital započtením korekcí (3) (tj. skládání spinu elektronu $s = 1/2$ a orbitálního momentu hybnosti $l = 2$).