SKLOPITEV LS

Imamo vodikov atom in gledamo, kako vpliva sklopitev tir-spin na 1. vzbujeno stanje.

Motnjo zapišemo kot:

$$H' = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\partial V(r)}{\partial r}\vec{L}\vec{S}$$

Za 1. vzbujeno stanje pa velja:

$n = 2$

$l = 0;1$

$m_l = 0;-1,0,1$

$s = \pm\frac{1}{2}$

Sklopitev LS obravnavamo z metodo perturbacij, in sicer delamo samo 1. red perturbacije. Izračunati moramo matrične elemente:

$< 2\ l\ m_l\ s \mid H' \mid 2\ l'\ m_l'\ s' >$

kjer stanja s črtico pomenijo vse možne kombinacije stanj, ki so napisana zgoraj.

To je matrika 8×8.

Zanima nas še, kakšen je potencial *V(r)*. Ker gledamo vodikov atom, je ta potencial coulombski:

$$V = -\frac{e_0}{4pe_0 r}$$

Motnja je torej:

$$H' = \frac{1}{8pm^2c^2e_0}\frac{1}{r^3}\vec{L}\vec{S}$$

Prvi ulomek v izrazu je konstanta, ki jo označimo z *A*. Vidimo, da v izrazu nastopata tako tirna vrtilna količina kot spin, zato moramo zamenjati bazo, da bomo lahko računali. Iz baze za tirno vrtilno količino ($\mid n\ l\ m_l\ m_s>$) moramo preiti na bazo za celotno vrtilno količino ($\mid n\ l\ j\ m_j >$). Velikost spina je vedno $\frac{1}{2}$, zato je ne bomo posebej pisali.

Najprej zapišemo produkt $\vec{L}\vec{S}$ s celotno vrtilno količino:

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

$$J^2 = L^2 + S^2 + 2\vec{L}\vec{S}$$

$$\vec{L}\vec{S} = \frac{J^2 - L^2 - S^2}{2}$$

Sedaj zamenjamo še bazo.

stara baza:

$\mid n\ l\ m_l\ m_s>$

$\mid 2\ 0\ 0\ \frac{1}{2} >$ $\qquad$ $\mid 2\ 0\ 0\ -\frac{1}{2} >$

$\mid 2\ 1\ -1\ \frac{1}{2} >$ $\qquad$ $\mid 2\ 1\ -1\ -\frac{1}{2} >$

$| 2\ 1\ 0\ \frac{1}{2} >$ $\qquad$ $| 2\ 1\ 0\ -\frac{1}{2} >$

$| 2\ 1\ 1\ \frac{1}{2} >$ $\qquad$ $| 2\ 1\ 1\ -\frac{1}{2} >$

nova baza (Clebsch-Gordonove koeficiente dobimo iz tabel):
$| n\ l\ j\ m_j >=| n\ l\ m_l\ m_s>$

$$| 2\ 0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2} > = | 2\ 0\ 0\ \frac{1}{2} >$$

$$| 2\ 0\ \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2} > = | 2\ 0\ 0\ -\frac{1}{2} >$$

$$| 2\ 1\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2} > = \sqrt{\frac{2}{3}}\ | 2\ 1\ 1\ -\frac{1}{2} > -\sqrt{\frac{1}{3}}\ | 2\ 1\ 0\ \frac{1}{2} >$$

$$| 2\ 1\ \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2} > = \sqrt{\frac{1}{3}}\ | 2\ 1\ 0\ -\frac{1}{2} > -\sqrt{\frac{2}{3}}\ | 2\ 1\ -1\ \frac{1}{2} >$$

$$| 2\ 1\ \frac{3}{2}\ \frac{1}{2} > = \sqrt{\frac{1}{3}}\ | 2\ 1\ 1\ -\frac{1}{2} > + \sqrt{\frac{2}{3}}\ | 2\ 1\ 0\ \frac{1}{2} >$$

$$| 2\ 1\ \frac{3}{2}\ -\frac{1}{2} > = \sqrt{\frac{2}{3}}\ | 2\ 1\ 0\ -\frac{1}{2} > + \sqrt{\frac{1}{3}}\ | 2\ 1\ -1\ \frac{1}{2} >$$

$$| 2\ 1\ \frac{3}{2}\ \frac{3}{2} > = | 2\ 1\ 1\ \frac{1}{2} >$$

$$| 2\ 1\ \frac{3}{2}\ -\frac{3}{2} > = | 2\ 1\ -1\ -\frac{1}{2} >$$

Zdaj ko imamo novo bazo, lahko v njej izračunamo matrične elemente
$< 2\ l\ j\ m_j\ |\ H'\ |\ 2\ l'\ j'\ m_j' >$
kjer stanja s črtico spet pomenijo vse možne kombinacije kvantnih števil l, j, m_j, ki določajo 1. vzbujeno stanje vodikovega atoma.

$$< 2\ l\ j\ m_j\ |\ H'\ |\ 2\ l'\ j'\ m_j' > =$$
$$= A < 2\ l\ j\ m_j\ |\ \frac{1}{r^3} [\ J^2 - L^2 - S^2]\ |\ 2\ l'\ j'\ m_j' > =$$
$$= A < 2\ l\ j\ m_j\ |\ \frac{1}{r^3} [\ \hbar^2\ j'(j'+1) - \hbar^2\ l'(l'+1) - \hbar^2\ \frac{3}{4}]\ |\ 2\ l'\ j'\ m_j' >$$

Valovno funkcijo elektrona v vodikovem atomu zapišemo v reprezentaciji x kot produkt radialnega in kotnega dela:

$$\Psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) F(q, j)$$

Ko računamo matrične elemente moramo izračunati integral

$$\int \Psi^* H' \Psi dV$$

Integral kotnega dela valovne funkcije smo že izračunali, saj je $F(q, j)$ lastno stanje operatorjev J^2, L^2, in S^2. Izračunati moramo le še integral radialnega dela valovne funkcije. Matrični elementi so torej:

$$< 2\ l\ j\ m_j\ |\ H'\ |\ 2\ l'\ j'\ m_j' > =$$

$= A\,\hbar^2\,[\,j'(j'+1) - \hbar^2\, l'(l'+1) - \hbar^2\, \frac{3}{4}\,]\, \int |R_{nl}(r)|^2 \frac{1}{r^3} r^2 dr\;\; \delta_{jj'}\, \delta_{ll'}\, \delta_{mm'}$

Integral, ki nastopa v tem izrazu je neka konstanta, ki jo označimo z I_{nl}. Lahko jo izračunamo:

$$I_{21} = \int_0^\infty |R_{21}|^2 \frac{1}{r} dr =$$

$$= \int_0^\infty \left(\frac{2}{\sqrt{3}}(2r_B)^{-\frac{3}{2}} \frac{r}{2r_B} e^{-\frac{r}{2r_B}}\right)^2 \frac{1}{r} dr =$$

$$= \frac{1}{24 r_B^5} \int_0^\infty r e^{-\frac{r}{r_B}} dr$$

Uvedemo novo spremenljivko: $x = \frac{r}{r_B}$ in dobimo:

$$I_{21} = \frac{1}{24 r_B^3} \int_0^\infty x e^{-x} =$$

$$= \frac{1}{24 r_B^3} \Gamma(2) = \frac{1}{12 r_B^3}$$

$$I_{20} = \int_0^\infty |R_{20}|^2 \frac{1}{r} dr =$$

$$= \int_0^\infty \left(2(2r_B)^{-\frac{3}{2}} (1 - \frac{r}{2r_B}) e^{-\frac{r}{2r_B}}\right)^2 \frac{1}{r} dr =$$

$$= \frac{1}{2 r_B^3} \int_0^\infty (1 - \frac{r}{r_B} + \frac{r^2}{4 r_B^2}) e^{-\frac{r}{r_B}} \frac{1}{r} dr =$$

$$= \frac{1}{2 r_B^3} \int_0^\infty (\frac{e^{-x}}{x} - e^{-x} + \frac{1}{4} x e^{-x}) dx =$$

$$= \frac{1}{2 r_B^3} \left(\int_0^\infty \frac{e^{-x}}{x} dx - \Gamma(1) + \frac{1}{4}\Gamma(2)\right) =$$

$$= -\frac{1}{4 r_B^3} + \frac{1}{2 r_B^3} \int_0^\infty \frac{e^{-x}}{x} dx$$

Zadnji integral divergira in ga ne moremo izračunati, vendar nas to ne skrbi preveč, ker ugotovimo, da kotni del valovne funkcije prinese popravek k energiji 0. Integral torej množimo z 0 in dobimo 0.

Popravek k energiji 1. vzbujenega stanja vodikovega atoma zaradi LS sklopitve, ki ga dobimo z metodo perturbacije (1. red), je torej:

l	j	
0	$\frac{1}{2}$	à $\Delta E = 0$
1	$\frac{1}{2}$	à $\Delta E = -\frac{1}{96 p m^2 c^2 e_0 r_B^3} \mathbf{h}^2 \cdot 2$

$1 \qquad \frac{3}{2}$ **à** $_{\Delta}E = \frac{1}{96pm^2c^2e_0r_B^3}\mathbf{h}^2 \cdot 1$