Sklopitev spin-tir

Marko Kolar

1 Naloga

Izračunaj razcep prvega vzbujenega stanja vodikovega atoma zaradi interakcije spin-tir, $H' = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$.

2 Rešitev

Problem rešujemo z metodo perturbacij (1. red). Brez motnje H' je prvo vzbujeno stanje vodikovega atoma degenerirano. Imamo 8 lastnih stanj z isto energijo

$$n = 2$$

$$l = 0, 1$$

$$m_l = -l, \dots, l$$

$$m_s = \pm\frac{1}{2}.$$

Ker v izrazu za motnjo nastopa produkt operatorjev vrtilne količine in spina, baza $|n\,l\,m_l\,m_s\rangle$ ni primerna. Lažje bomo računali v bazi za celotno vrtilno količino $|n\,l\,j\,m_j\rangle$. Upoštevamo pravilo $j = |l_1 - l_2|, \dots, |l_1 + l_2|$ in dobimo nove bazne vektorje

$$n = 2$$

$$l = 0, 1$$

$$j = \frac{1}{2}, \dots, l + \frac{1}{2}$$

$$m_j = -j, \dots, j.$$

Operator $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$ prepišemo v novo obliko

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

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

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

(operatorja $\mathbf{L}$ in $\mathbf{S}$ komutirata).
Potencial je coulombski

$$V = -\frac{e}{4\pi\varepsilon_0 r},$$

zato

$$H' = \alpha \frac{1}{r^3}\left(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2\right), \quad \alpha = \frac{1}{16\pi\varepsilon_0 m^2 c^2}.$$

Izračunati moramo matrične elemente $\langle l\, j\, m_j|H'|l'\, j'\, m_j'\rangle$ (kvantno število n je povsod 2). Funkcije $|l\, j\, m_j\rangle$ se v sferičnih koordinatah zapišejo kot $R_{nl}(r)F_{ljm_j}(\vartheta,\varphi)$. Radialni del se s prehodom v novo bazo ne spremeni, funkcije F pa so med seboj ortogonalne. $|l\, j\, m_j\rangle$ so lastne funkcije operatorjev $\mathbf{J}^2$, $\mathbf{L}^2$, $\mathbf{S}^2$, zato lahko zapišemo

$$\langle l\, j\, m_j|H'|l'\, j'\, m_j'\rangle = \alpha\langle l\, j\, m_j|\frac{1}{r^3}\left(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2\right)|l'\, j'\, m_j'\rangle =$$

$$= \alpha\hbar^2\langle l\, j\, m_j|\frac{1}{r^3}[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}]|l'\, j'\, m_j'\rangle =$$

$$= \alpha\hbar^2\delta_{ll'}\delta_{jj'}\delta_{m_j m_j'}[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}]\int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2\frac{1}{r^3}r^2 dr.$$

Zgornji izraz je za $l = 0$ enak 0, zato nam preostane le še integracija radialnega dela valovne funkcije $R_{21}(r)$.

$$\int_0^\infty |R_{21}(r)|^2\frac{1}{r^3}r^2\, dr = \int_0^\infty \frac{1}{3(2r_B)^3}\frac{r^2}{r_B^2}\exp(-r/r_B)\frac{1}{r}\, dr =$$

$$\frac{1}{24r_B^5}\int_0^\infty \exp(-r/r_B)r\, dr = \frac{1}{24r_B^3}\int_0^\infty \exp(-x)x\, dx = \frac{1}{24r_B^3}\Gamma(2) =$$

$$= \frac{1}{24r_B^3}$$

(zgoraj smo definirali $x = r/r_B$)

Prispevek k energiji zaradi sklopitve spin-tir je torej

$$\Delta E = \tilde{E}[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}], \quad \tilde{E} = \frac{\alpha\hbar^2}{24r_B^3}$$

Zapišimo razcep stanj še s tabelo

stanje	ΔE	degeneriranost
$l = 1, j = \frac{3}{2}$	$+\tilde{E}$	$4\times$
$l = 0, j = \frac{1}{2}$	0	$2\times$
$l = 1, j = \frac{1}{2}$	$-2\tilde{E}$	$2\times$