Sklopitev spin-tir

Stanko Manojlovič, 28030341
Mentor: doc.dr. Tomaž Rejec

Izračunaj razcep prvega vzbujenega stanja vodikovega atoma zaradi sklopitve spin-tir
$H' = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\partial V}{\partial r}\vec{L}\cdot\vec{S}$

Vodikov atom vsebuje le proton in elektron. Torej je:
$$V(r) = -\frac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_0 r}.$$
Sedaj lahko prepišemo motnjo v

$$H' = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\partial V}{\partial r}\vec{L}\cdot\vec{S} = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}\vec{L}\cdot\vec{S} = \frac{e_0^2}{8\varepsilon_0\pi m^2c^2}\frac{1}{r^3}\vec{L}\cdot\vec{S}.$$
Prav tako moramo izraziti $\vec{L}\vec{S}$ s operatorjem celotne vrtilne količine.
$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

Množimo ga skalarno s samim seboj, da dobimo
$$J^2 = L^2 + S^2 + 2\vec{L}\cdot\vec{S} \rightarrow \vec{L}\cdot\vec{S} = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2)$$
Ker je vodikov atom v prvem vzbujenem stanju zapišemo bazo za tirno vrtilno količino za $n = 2$:
tirna vrtilna količina $0 \le l \le n$, torej l = 0,1.
magnetno število velja $-l \le m_l \le l$, tore j m_l = 0 (za l = 0), m_l = -1,0,1 (za l = 1),
spin pa $m_s = \pm\frac{1}{2}$.
Baza je:
$\left| n\ l\ m_l\ m_s \right\rangle$
$\left|2\ 0\ 0\ \frac{1}{2}\right\rangle$, $\left|2\ 0\ 0\ -\frac{1}{2}\right\rangle$, $\left|2\ 1\ -1\ \frac{1}{2}\right\rangle$, $\left|2\ 1\ -1\ -\frac{1}{2}\right\rangle$, $\left|2\ 1\ 0\ \frac{1}{2}\right\rangle$, $\left|2\ 1\ 0\ -\frac{1}{2}\right\rangle$, $\left|2\ 1\ 1\ \frac{1}{2}\right\rangle$,
$\left|2\ 1\ 1\ -\frac{1}{2}\right\rangle$

Imamo torej 8 stanj.

Preiti moramo v bazo za celotno tirno vrtilno količino $\left|n\ \ l\ \ j\ \ m_j\right\rangle$ in jo zapisati kot linearno kombinacijo prejšnje:

$$\left|n\ \ l\ \ j\ \ m_j\right\rangle$$

$$\left|2\ 0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle = \left|2\ 0\ 0\ \frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\left|2\ 0\ \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\right\rangle = \left|2\ 0\ 0 -\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\left|2\ 1\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle = c_1\left|2\ 1\ 1\ -\frac{1}{2}\right\rangle - c_2\left|2\ 1\ 0\ \frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\left|2\ 1\ \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\right\rangle = -c_1\left|2\ 1\ -1\ \frac{1}{2}\right\rangle + c_2\left|2\ 1\ 0\ -\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\left|2\ 1\ \frac{3}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle = c_1\left|2\ 1\ 0\ \frac{1}{2}\right\rangle + c_2\left|2\ 1\ 1\ -\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\left|2\ 1\ \frac{3}{2}\ -\frac{1}{2}\right\rangle = c_1\left|2\ 1\ 0\ -\frac{1}{2}\right\rangle + c_2\left|2\ 1\ -1\ \frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\left|2\ 1\ \frac{3}{2}\ \frac{3}{2}\right\rangle = \left|2\ 1\ 1\ \frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\left|2\ 1\ \frac{3}{2}\ -\frac{3}{2}\right\rangle = \left|2\ 1\ -1\ -\frac{1}{2}\right\rangle$$

Lastna stanja energije so stacionarna. Torej so vrednosti ostro določene in se ne spreminjajo. Koeficienta c_1 in c_2 sta Clebsch-Gordanova koaficienta in sta $c_1 = \sqrt{\frac{2}{3}}$ in $c_2 = \sqrt{\frac{1}{3}}$, za vodikov atom. Te najdemo v tabelah na internetu ali drugih virih.

Popravek k energiji zapišemo sedaj kot

$$W_{LS} = \left\langle n\ l\ j\ m_j\right|H'\left|n\ l\ j\ m_j\right\rangle = \left\langle n\ l\ j\ m_j\right|\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 m^2c^2r^3}\vec{L}\cdot\vec{S}\left|n\ l\ j\ m_j\right\rangle$$

Vrednost r je odvisna le do n in l.

$$\vec{L}\vec{S} = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2) = \frac{\hbar^2}{2}\left[j\left(j+1\right) - l\left(l+1\right) - s\left(s+1\right)\right]$$

Vse vrednosti v oklepaju so operatorji, za katere so stanja $\left|n\ l\ j\ m_j\right\rangle$ lastna stanja z znanimi lastnimi vrednostmi. Tako da je

$$W_{LS} = \frac{e^2\hbar^2}{16\pi\varepsilon_0 m^2c^2}\left[j\left(j+1\right) - l\left(l+1\right) - \frac{3}{4}\right]\int \frac{1}{r^3}R_{nl}^2 r^2 dr$$

Kjer je

$$R_{20} = \frac{2}{\left(2r_B\right)^{3/2}}\left(1 - \frac{r}{2r_B}\right)e^{-r/2r_B} \text{ in } R_{21} = \frac{1}{\sqrt{3}\left(2r_B\right)^{3/2}}\frac{r}{r_B}e^{-r/2r_B}$$

Po integraciji dobimo rešitve za j

$$l = 0, \quad j = \frac{1}{2}: \qquad W_{LS} = 0$$

$$l = 1, \quad j = \frac{1}{2}: \qquad W_{LS} = -\frac{e^2\hbar^2}{16\pi\varepsilon_0 m^2 c^2}\frac{1}{24 r_B{}^3}$$

$$l = 1, \quad j = \frac{3}{2}: \qquad W_{LS} = \frac{1}{2}\frac{e^2\hbar^2}{16\pi\varepsilon_0 m^2 c^2}\frac{1}{24 r_B{}^3}$$

Stanja z enakim *n* in različnima *l* in *j,* ki so bila pred upoštevanjem H_{LS} degenerirana, so sedaj jasno razcepljena. Opazimo, da je en faktor med popravkoma negativen, drug pa polovična vrednost prvega in pozitiven. Spodnja skica (v pravem razmerju) predstavlja ta razcep.