

Κβαντομηχανική II

Κωνσταντίνος Σφέτσος,
Καθηγητής Φυσικής

Τομέας Πυρηνικής και Στοιχειωδών Σωματιδίων,
Τμήμα Φυσικής,
Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών

Κεφάλαιο 4: Κεντρικά δυναμικά, άτομο υδρογόνου

25 Απριλίου 2020

Περιεχόμενα

- ▶ Γενική θεώρηση
- ▶ Συστήματα αλληλεπιδρώντων σωματιδίων
- ▶ Άτομο υδρογόνου

Γενική θεώρηση

Χωρισμός μεταβλητών

Εξίσωση του Schrödinger για σωματίο σε **κεντρικό δυναμικό**

$$\hat{H}\Psi = \left(\frac{p_r^2}{2m} + \frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2} + V(r) \right) \Psi = E\Psi .$$

όπου

$$p_r = \frac{1}{r} \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{p}r = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \quad \Longrightarrow \quad p_r^2 = -\hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r .$$

Είναι προφανές ότι

$$[\hat{H}, \mathbf{L}^2] = [\hat{H}, L_z] = [\mathbf{L}^2, L_z] = 0 .$$

Άρα μπορούμε να διαγωνοποιήσουμε τους \hat{H} , \mathbf{L}^2 και L_z .

Εφαρμόζοντας τη μέθοδο **χωριζομένων μεταβλητών** έχουμε

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R_{E,\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \phi) .$$

Τότε η **ακτινική συνάρτηση** $R_{E,\ell}(r)$ ικανοποιεί την

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r) \right) R_{E,\ell} = ER_{E,\ell} .$$

Ορίζουμε

$$u_{E,\ell}(r) = rR_{E,\ell}(r) .$$

Τότε

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_{E,\ell}}{dr^2} + V_{\text{eff}}(r) u_{E,\ell} = E u_{E,\ell}} .$$

όπου

$$\boxed{V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2}} ,$$

είναι το **ενεργό δυναμικό**.

- ▶ Λόγω του ότι

$$\int dV \Psi_{E,\ell,m}^* \Psi_{E',\ell',m'} = \delta_{E,E'} \delta_{\ell,\ell'} \delta_{m,m'} ,$$

για την ακτινική κυματοσυνάρτηση (υποθέτοντας τον \mathbb{R}^3)

$$\int_0^\infty dr r^2 R_{E,\ell} R_{E',\ell} = \int_0^\infty dr u_{E,\ell} u_{E',\ell} = \delta_{E,E'} .$$

- ▶ Θεωρούμε δυναμικά τέτοια ώστε $\lim_{r \rightarrow 0} r^2 V(r) = 0$. Τότε

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_{E,\ell}}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} \simeq 0 .$$

με γενική λύση

$$u_{E,\ell} = a_\ell r^{\ell+1} + b_\ell r^{-\ell} , \quad \ell = 0, 1, 2, \dots .$$

Για $\ell \geq 1$, για κανονικοποιήσιμη $u_{E,\ell}$ στο $r = 0$, $b_\ell = 0$.

- ▶ Άρα για **κανονικοποιήσιμη** κυματοσυνάρτηση απαιτούμε

$$u_{E,\ell}(0) = 0 . \quad \ell = 1, 2, \dots , \quad u_{E,0} = \text{σταθερά} .$$

Το ελεύθερο σωματίο

Όταν το δυναμικό $V(r) = 0$ τότε

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_{E,\ell}}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} u_{E,\ell} = E u_{E,\ell} .$$

- ▶ Για $\ell = 0$ η πεπερασμένη λύση είναι

$$u_{E,0}(r) = \sin kr , \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} , \quad \Psi_E(r) = \frac{u_{E,0}(r)}{r} . \quad (1)$$

- ▶ Η εξίσωση αυτή για γενικό $\ell = 0, 1, 2, \dots$ έχει ως λύσεις τις σφαιρικές αρμονικές.
- ▶ Οι λύσεις $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, δηλαδή επίπεδα κύματα, εκφράζονται ως γραμμικός συνδυασμός σφαιρικών αρμονικών.

Ο 3-διάστατος ιστροπικός αρμονικός ταλαντωτής

Σε σφαιρικές συντεταγμένες το δυναμικό είναι

$$V(r) = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 . \quad (2)$$

- ▶ Για $\ell = 0$ η πεπερασμένη λύση είναι η

$$\Psi_E(r) = A e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2} , \quad A = \dots . \quad (3)$$

- ▶ Η εξίσωση αυτή για γενικό $\ell = 0, 1, 2, \dots$ έχει λύσεις με βάση τις συναρτήσεις Laguerre.
- ▶ Οι λύσεις σε Καρτεσιανές συντεταγμένες με βάση τα πολυώνυμα Hermite εκφράζονται ως γραμμικός συνδυασμός των συναρτήσεων Laguerre.

Συστήματα αλληλεπιδρώντων σωματιδίων

Έστω N σωματίδια:

- ▶ Αλληλεπιδρούν μεταξύ τους με δυναμικό

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) .$$

- ▶ Επίσης βρίσκονται σε εξωτερικό πεδίο με δυναμικό $V_0(\mathbf{r})$.
- ▶ Η Χαμιλτονιανή του συστήματος είναι

$$\hat{H} = \sum_{a=1}^N \left[\frac{\mathbf{p}_a^2}{2m_a} + V_0(\mathbf{r}_a) \right] + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) .$$

- ▶ Οι μεταθέτες είναι

$$[x_{ai}, x_{bj}] = [p_{ai}, p_{bj}] = 0 , \quad [x_{ai}, p_{bj}] = i\hbar\delta_{ab}\delta_{ij} ,$$

όπου $a, b = 1, 2, \dots, N$ και $i, j = 1, 2, 3$.

Δυναμικά εξαρτώμενα απ' τη σχετική απόσταση

Ας θεωρήσουμε δυναμικά που εξαρτώνται μόνο απ' τη σχετική απόσταση των σωματιδίων

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{i>j=1}^N V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) .$$

Είναι δυνατόν με κατάλληλο μετασχηματισμό να αναχθούμε σε ανεξάρτητα υποσυστήματα.

Δύο σωματίδια:

- ▶ Ορίζουμε το κέντρο μάζας και τη σχετική συντεταγμένη

$$\mathbf{r}_{\text{cm}} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} , \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 .$$

- ▶ Η Χαμιλτονιανή γράφεται

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{cm}} + \hat{H}_{\text{rel}} ,$$

όπου

$$\hat{H}_{\text{cm}} = \frac{\mathbf{p}_{\text{cm}}^2}{2M} , \quad M = m_1 + m_2 , \quad \mathbf{p}_{\text{cm}} = -i\hbar\nabla_{\text{cm}} .$$

και

$$H_{\text{rel}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r}) , \quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} , \quad \mathbf{p} = -i\hbar\nabla .$$

- ▶ Σημειώνω ότι

$$\mathbf{p}_{\text{cm}} = M\mathbf{v}_{\text{cm}} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 , \quad \mathbf{p} = \mu\mathbf{v} = \frac{m_2\mathbf{p}_1 - m_1\mathbf{p}_2}{M} .$$

Οι **σωστές** σχέσεις **μετάθεσης** ικανοποιούνται, δηλαδή

$$[x_{\text{cm},i}, p_{\text{cm},j}] = i\hbar\delta_{ij} , \quad [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} , \quad \text{κλπ} .$$

Το άτομο του Υδρογόνου

Το δυναμικό είναι

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} .$$

Ενδιαφερόμαστε για δέσμιες καταστάσεις, δηλαδή με $E < 0$.

- ▶ Ορίζουμε

$$k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} , \quad \rho = kr , \quad \lambda^2 = \frac{2me^2}{\hbar^2 k} ,$$

- ▶ Η εξίσωση για την ακτινική κυματοσυνάρτηση γράφεται

$$\frac{d^2 u_{k,\ell}}{d\rho^2} - \left(1 - \frac{\lambda^2}{\rho} + \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right) u_{k,\ell} = 0 .$$

- ▶ Έχουμε τη συμπεριφορά

$$u_{k,\ell} \simeq \left\{ \begin{array}{ll} \rho^{\ell+1} , & \rho \rightarrow 0 \\ e^{-\rho} , & \rho \rightarrow \infty \end{array} \right\}$$

Επιχειρούμε να επιλύσουμε την εξίσωση αλλάζοντας μεταβλητή

$$u_{E,\ell}(\rho) = e^{-\rho} v_{E,\ell}(\rho) .$$

- ▶ Η εξίσωση για την $v_{E,\ell}(\rho)$ είναι

$$\frac{d^2 v_{k,\ell}}{d\rho^2} - 2 \frac{dv_{k,\ell}}{d\rho} + \left(\frac{\lambda^2}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right) v_{k,\ell} = 0 .$$

- ▶ Δοκιμάζουμε λύσεις της δυναμοσειρά

$$v_{E,\ell} = \rho^{\ell+1} \sum_{m=0}^{\infty} c_m \rho^m .$$

- ▶ Αντικαθιστώντας και διαιρώντας με ρ^ℓ παίρνουμε

$$0 = \underbrace{\sum_{m=0}^{\infty} c_m [(\ell+m+1)(\ell+m) - \ell(\ell+1)] \rho^{m-1}}_{\sum_{m=0}^{\infty} c_{m+1} [(\ell+m+2)(\ell+m+1) - \ell(\ell+1)] \rho^m} + \sum_{m=0}^{\infty} c_m [\lambda^2 - 2(\ell+m+1)] \rho^m ,$$

όπου στο 1ο άθροισμα $m \rightarrow m+1$.

- Εξισώνοντας δυνάμεις του ρ έχουμε την αναδρομική σχέση

$$\frac{c_{m+1}}{c_m} = \frac{2(\ell + m + 1) - \lambda^2}{(\ell + m + 2)(\ell + m + 1) - \ell(\ell + 1)} .$$

- Για $m \gg 1$, έχουμε

$$c_{m+1} \simeq \frac{2}{m} c_m \implies c_m \simeq \frac{2^m}{m!} .$$

Οι όροι αυτοί είναι σημαντικοί για $\rho \gg 1$. Άρα έχουμε

$$v_{E,\ell} \simeq \rho^{\ell+1} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(2\rho)^m}{m!} = \rho^{\ell+1} e^{2\rho} ,$$

όπου επέκτεινα την άθροιση και για μικρές τιμές του m .

Ως εκ τούτου είναι $u_{E,\ell} \simeq \rho^{\ell+1} e^\rho$, για $\rho \gg 1$.

- ▶ Η παραπάνω αποκλείουσα συμπεριφορά παρακάμπτεται αν η απειροσειρά **τερματίζεται**. Αυτό συμβαίνει όταν

$$\lambda^2 = 2(\ell + m + 1) \equiv 2n, \quad \text{για κάποιο } n = 1, 2, \dots$$

- ▶ Ός αποτέλεσμα

$$k \rightarrow k_n = \frac{1}{n} \frac{1}{a_0},$$

όπου

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \simeq 0.53 \times 10^{-10} \text{ m} = 0.53 \text{ \AA} \text{ (Angstrom)},$$

η **ακτίνα Bohr**.

- ▶ Η **κβαντισμένη ενέργεια** είναι

$$E \rightarrow E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{e^2}{2a_0} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

- ▶ Η **θεμελιώδης** κατάσταση έχει $E_1 \simeq -13.6 \text{ ev}$.

- ▶ Είναι ενδιαφέρον να γράψουμε την ενέργεια ως

$$E_n = -\frac{\alpha^2}{2n^2} mc^2 ,$$

όπου c η ταχύτητα του φωτός και η σταθερά λεπτής υφής

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137} ,$$

Για το ηλεκτρόνιο $mc^2 \simeq 0.511$ Mev.

- ▶ Λόγω της αρχής απροσδιοριστίας $\mathbf{p}^2 \sim \hbar^2/r^2$.
Τότε η ολική ενέργεια είναι

$$E \sim \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r} .$$

Με ελαχιστοποίηση

$$\frac{dE}{dr} = 0 \implies r = a_0 \implies E_{\min} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} = E_1 .$$

- ▶ Οι **ιδιοκαταστάσεις** της Χαμιλτονιανής είναι

$$\Psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \phi) ,$$
$$n = 1, 2, \dots , \quad \ell = 0, 1, \dots, n-1 , \quad m = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell ,$$

- ▶ Είναι **εκφυλισμένες** με βαθμό (επί 2 λαμβάνοντας υπόψιν το σπίν του ηλεκτρονίου)

$$\text{Deg}_n = 2 \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = 2n^2 .$$

Η μη εξάρτηση της ενέργειας απ' το ℓ είναι χαρακτηριστικό του **δυναμικού Coulomb**.

- ▶ Κάτω από **μετασχηματισμό αρτιότητας**

$$\Psi_{n,\ell,m}(r, \pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^\ell \Psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \phi) .$$

Η ακτινική κυματοσυνάρτηση I

Γράφουμε

$$v_{n,\ell} = \rho^{\ell+1} F_{n,\ell} \implies R_{n,\ell} = \rho^\ell e^{-\rho} F_{n,\ell} ,$$

όπου ξέρουμε ότι η $F_{n,\ell}(\rho)$ είναι πολυώνυμο. Ικανοποιεί την

$$\rho \frac{d^2 F_{n,\ell}}{d\rho^2} + 2(\ell + 1 - \rho) \frac{dF_{n,\ell}}{d\rho} + 2(n - \ell - 1)F_{n,\ell} = 0 .$$

Σχετίζεται με τα **πολυώνυμα Laguerre**.

Πολυώνυμα Laguerre

Η ΔΕ του Laguerre είναι

$$xy'' + (\alpha + 1 - x)y' + ny = 0, \quad 0 \leq x < \infty.$$

Για να έχουμε πολυωνυμικές λύσεις πρέπει $\alpha > -1$ καθώς και $n = 0, 1, \dots$

- ▶ Τύπος του Rodrigues που ορίζει τα πολυώνυμα (n -οστού βαθμού) Laguerre είναι

$$L_n^\alpha(x) = \frac{1}{n!} e^x x^{-\alpha} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+\alpha}),$$

απ' την οποία $L_n^k(0) = \frac{(n+k)!}{n!k!}$ και $L_0^\alpha(x) = 1$.

- ▶ Σχέση ορθοκανονικότητας

$$\int_0^\infty dx x^\alpha e^{-x} L_n^\alpha(x) L_m^\alpha(x) = \frac{\Gamma(\alpha + n + 1)}{\Gamma(n + 1)} \delta_{n,m}$$

- ▶ Σχέση **πληρότητας**

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(\alpha+n+1)} L_n^\alpha(x) L_n^\alpha(y) = x^{-\alpha} e^x \delta(x-y).$$

- ▶ Μιά συνάρτηση θα αναπτύσσεται ως

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n L_n^\alpha(x),$$

με τους συντελεστές να δίνονται απ' την

$$a_n = \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(\alpha+n+1)} \int_0^\infty dx x^\alpha e^{-x} f(x) L_n^\alpha(x).$$

- ▶ Σημειώνω επίσης το χρήσιμο ολοκλήρωμα

$$\int_0^\infty dx x^{a+1} e^{-x} [L_n^\alpha(x)]^2 = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{\Gamma(n+1)} (2n+a+1).$$

Η ακτινική κυματοσυνάρτηση II

Με βάση τα παραπάνω η ακτινική κυματοσυνάρτηση είναι

$$R_{n,\ell}(r) = N_{n,\ell} e^{-\rho_n} \rho_n^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(2\rho_n), \quad \rho_n = \frac{r}{na_0},$$

όπου η σταθερά κανονικοποίησης

$$N_{n,\ell} = \frac{2^{\ell+1}}{n^2 a_0^{3/2}} \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{(n+\ell)!}}.$$

Αυτή υπολογίζεται από την

$$1 = \int_0^\infty dr r^2 R_{n,\ell}(r)^2 = N_{n,\ell}^2 \frac{n^3 a_0^3}{2^{2\ell+3}} \underbrace{\int_0^\infty dx x^{2\ell+2} e^{-x} [L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(x)]^2}_{2n(n+\ell)!/(n-\ell-1)!}.$$

Ιδιοκαταστάσεις για $n = 0, 1$

Κάνοντας χρήση των πολυωνύμων Laguerre

$$L_0^1(x) = 1, \quad L_1^1(x) = 2 - x, \quad L_0^3(x) = 1$$

και των σταθερών κανονικοποίησης

$$N_{1,0} = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}}, \quad N_{2,0} = \frac{1}{2\sqrt{2a_0^3}}, \quad N_{2,1} = \frac{1}{\sqrt{6a_0^3}}.$$

έχουμε

$$R_{1,0}(r) = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-r/a_0},$$
$$R_{2,0}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2a_0^3}} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-\frac{r}{2a_0}}, \quad R_{2,1}(r) = \frac{r/a_0}{2\sqrt{6a_0^3}} e^{-\frac{r}{2a_0}}.$$

Επίσης έχουμε τις σφαιρικές αρμονικές

$$Y_{0,0}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} ,$$

$$Y_{1,0}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta , \quad Y_{1,\pm}(\theta, \phi) = \mp \frac{1}{2} e^{\pm i\phi} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta .$$

Άρα βρίσκουμε ότι

► Για $n = 1$

$$\Psi_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}} .$$

► Για $n = 2$

$$\Psi_{2,0,0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-\frac{r}{2a_0}} ,$$

$$\Psi_{2,1,0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \cos \theta ,$$

$$\Psi_{2,1,\pm 1} = \mp \frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} e^{\pm i\phi} \sin \theta .$$

Η ακτινική πυκνότητα πιθανότητας $R_{n,\ell}^2(r)$ έχει $n - \ell$ μέγιστα.

Αντιστοιχία με την θεωρία Bohr

- ▶ Επιτρέπονται κυκλικές τροχιές με κβαντισμένη στροφορμή

$$L = n\hbar, \quad n = 1, 2, \dots$$

- ▶ Με χρήση των

$$mvr = n\hbar, \quad m \frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2},$$

παίρνουμε τις ακτίνες Bohr και τις επιτρεπτές ταχύτητες

$$r_n = n^2 a_0, \quad v_n = \frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{n},$$

οπότε

$$E_n = m \frac{v_n^2}{r_n} - \frac{e^2}{r_n} = -\frac{e^2}{2a_0} \frac{1}{n^2},$$

ίδια με την ενέργεια όπως απ' την εξίσωση του Schrödinger.

- ▶ Η ακτινική πυκνότητα πιθανότητας

$$R_{n,n-1} \sim r^{n-1} e^{-\frac{r}{na_0}} .$$

Το μέγιστο είναι

$$\frac{dR_{n,n-1}}{dr} = 0 \implies r = n(n-1)a_0 .$$

- ▶ Οπότε για $n \gg 1$ παίρνουμε τις δυνατές ακτίνες Bohr.

Το φαινόμενο Zeeman

Φορτίο e σε εξωτερικό μαγνητικό και ηλεκτρικό πεδίο \mathbf{B} και \mathbf{E} που αντιστοιχούν σε δυναμικά Φ και \mathbf{A} .

- ▶ Η Χαμιλτονιανή είναι

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + e\Phi - \frac{e}{2mc}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2 .$$

- ▶ Όμως

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = 2\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} - i\hbar\nabla \cdot \mathbf{A} .$$

- ▶ Για σταθερό μαγνητικό πεδίο $\mathbf{A} = -\frac{1}{2}\mathbf{r} \times \mathbf{B}$, οπότε $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$.

- ▶ Τότε

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = -(\mathbf{r} \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{p} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{L} ,$$

όπου $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$.

- ▶ Οι όροι $\mathcal{O}(B)$ και $\mathcal{O}(B^2)$ είναι της τάξης μεγέθους

$$\frac{e\hbar B}{mc} \sim \alpha^3 \left(\frac{B}{e/a_0^2} \right) mc^2, \quad \frac{e^2 a_0^2 B^2}{mc^2} \sim \alpha^4 \left(\frac{B}{e/a_0^2} \right)^2 mc^2.$$

- ▶ Επίσης επειδή $e \simeq 4.8 \times 10^{-10}$ esu έχουμε ότι

$$\frac{e}{a_0^2} \simeq 10^6 \text{ Gauss}.$$

Άρα ο λόγος τους είναι

$$\alpha \frac{B}{e/a_0^2} \simeq \frac{B}{10^9 \text{ Gauss}}.$$

Για μικρά μαγνητικά πεδία αμελούμε τον όρο $\mathcal{O}(B^2)$.

- ▶ Αν $B < 10^4 \text{ Gauss}$ το φαινόμενο της λεπτής υφής υπερτερεί.
- ▶ Το μέρος του φαινομένου που οφείλεται στο σπιν ονομάζεται ανώμαλο φαινόμενο Zeeman.

- ▶ Με αυτές τις συνθήκες ο επιπλέον όρος είναι: $-\frac{e}{2mc} \mathbf{B} \cdot \mathbf{L}$.
- ▶ Για το ηλεκτρόνιο με γυρομαγνητικό λόγο $g \simeq 2$ και με σταθερό $\mathbf{B} = (0, 0, B)$, έχουμε

$$H = H_{\text{Hydrogen}} - \frac{\omega_B}{2} (L_z + 2S_z), \quad \omega_B = \frac{eB}{mc}.$$

- ▶ Άρα οι ενεργειακές στάθμες είναι

$$E_{n,m,\pm} = E_n - \frac{\omega_B \hbar}{2} (m \pm 1).$$

- ▶ Άρση του εκφυλισμού: Κάθε στάθμη διαχωρίζεται σε $2(2\ell + 1)$ στάθμες.
- ▶ Οι ιδιοκαταστάσεις είναι

$$\Psi_{n,\ell,m,\pm} = \Psi_{n,\ell,m} \chi_{\pm}, \quad \chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Θεωρήματα

Θεώρημα Feynman-Hellmann: Μέσες τιμές δυνάμεων του r

Αν η Χαμιλτονιανή και οι ιδιοτιμές της εξαρτώνται από μια συνεχή παράμετρο λ τότε

$$\frac{dE_\lambda}{d\lambda} = \langle \Psi_\lambda | \frac{dH_\lambda}{d\lambda} | \Psi_\lambda \rangle .$$

Στην απόδειξη χρησιμοποιούμε ότι $\langle \Psi_\lambda | \Psi_\lambda \rangle = 1$.

- Γενικά για $\lambda = m$

$$\frac{\partial E}{\partial m} = -\frac{1}{m} \langle T \rangle < 0 .$$

η ιδιοτιμή είναι φθίνουσα συνάρτηση της μάζας.

- Για το άτομο του υδρογόνου με $\lambda = e^2$ και $E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{n,\ell,m} = \frac{1}{n^2 a_0} \implies \langle V \rangle_{n,\ell,m} = 2E_n, \langle T \rangle_{n,\ell,m} = -E_n .$$

Θεώρημα Virial

Απ' την ταυτότητα

$$\mathbf{F} \cdot \mathbf{r} = m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} \cdot \mathbf{r} = m \frac{d}{dt} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{r}) - m \mathbf{v}^2 ,$$

και $\mathbf{F} = -\nabla V$, έχουμε

$$\langle T \rangle = \frac{1}{2} \langle \mathbf{r} \cdot \nabla V \rangle .$$