Κβαντομηχανική ΙΙ

Κωνσταντίνος Σφέτσος,
Καθηγητής Φυσικής

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

Κεφάλαιο 4: Κεντρικά δυναμικά, άτομο υδρογόνου

15 Μαΐου 2021

Περιεχόμενα

Γενική θεώρηση

Χωρισμός μεταβλητών

Εξίσωση του Schrödinger για σωμάτιο 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

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

Ορίζουμε

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

Τότε

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

όπου

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

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 $\mathbb{R}^3$)

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

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

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

με γενική λύση

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

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

- Άρα για κανονικοποιήσιμη κυματοσυνάρτηση απαιτούμε

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

Το ελεύθερο σωμάτιο

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

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

- Η εξίσωση αυτή για γενικό $\ell = 0, 1, 2, \ldots$ 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 ισοτροπικός αρμονικός ταλαντωτής

Σε σφαιρικές συντεταγμένες το δυναμικό είναι

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

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

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

- Η εξίσωση αυτή για γενικό $\ell = 0, 1, 2, \dots$ έχει λύσεις με βάσει 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

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

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

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

- Οι μεταθέτες είναι

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

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

Δυναμικά εξαρτώμενα απ΄ τη σχετική απόσταση

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

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

Είναι δυνατόν με κατάλληλο μετασχηματισμό να αναχθούμε σε ανεξάρτητα υποσυστήματα.

Δύο σωματίδια:

- Ορίζουμε το κέντρο μάζας και τη σχετική συντεταγμένη

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

- Η Χαμιλτονιανή γράφεται

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

όπου

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

και

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

- Σημειώνω ότι

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

Οι σωστές σχέσεις μετάθεσης ικανοποιούνται, δηλαδή

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

Το άτομο του Υδρογόνου

Το δυναμικό είναι

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

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

- Ορίζουμε

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

- 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

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

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 $m \to m+1$.

- 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 αποκλείνουσα συμπεριφορά παρακάμπτεται αν η απειροσειρά τερματίζεται. Αυτό συμβαίνει μόνο όταν

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

- Ώς αποτέλεσμα

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

όπου

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

η ακτίνα Bhor.

- Η κβαντισμένη ενέργεια είναι

$$E \to E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -\frac{e^2}{2a_0}\frac{1}{n^2} \ , \qquad n = 1, 2, \ldots \ .$$

- Η θεμελιώδης κατάσταση έχει $E_1 \simeq -13.6$ 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

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

- Οι ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτονιανής είναι

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

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

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

Η μη εξάρτηση τηε 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 Ι

Γράφουμε

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

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

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

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

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

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

  απ′ την οποία $L_n^k(0) = \dfrac{(n+k)!}{n!k!}$ 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

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

Η ακτινική κυματοσυνάρτηση II

Με βάση τα παραπάνω η ακτινική κυματοσυνάρτηση είναι

$$R_{n,\ell}(r) = N_{n.\ell} e^{-\rho_n} \rho_n^\ell \; L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(2\rho_n) \;, \qquad \rho_n = \frac{r}{n a_0} \;,$$

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

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

και των σταθερών κανονικοποίησης

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

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

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

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

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

$$L = n\hbar \ , \qquad n = 1, 2, \dots \ .$$

- Με χρήση των

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

παίρνουμε τις ακτίνες Bohr και τις επιτρεπτές ταχύτητες

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

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

$$R_{n,n-1} \sim r^{n-1} e^{-\frac{r}{n a_0}} \ .$$

Το μέγιστο είναι

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

- Οπότε στο ημικλασικό όριο 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

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

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

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

Άρα ο λόγος τους είναι

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

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

- Αν $B < 10^4\mathrm{Gauss}$ 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

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

- 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

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

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

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

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

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