QM-2-L14-1404-2

Friday, May 15, 2026 4:56 PM

اثر Stark برای $n=2$ اتم هیدروژن (مثال از نظریه اختلال تبهگن):

برای $n=2 \longrightarrow l=0 \quad m=0$

$\qquad\qquad\qquad\quad l=1 \quad m=0,\pm 1$

$E^{(0)}_{n=2} = -\frac{1Ry}{2^2}$ یعنی ۴ حالت داریم که همه انرژی $E^{(0)}_{n=2}$ دارند

$$|nlm\rangle_{(0)} = |200\rangle = |n_1^{(0)}\rangle$$
$$|2,1,0\rangle = |n_2^{(0)}\rangle$$
$$|2,1,+1\rangle = |n_3^{(0)}\rangle$$
$$|2,1,-1\rangle = |n_4^{(0)}\rangle$$

برای تعیین $E^{(1)}_{n=2}$ باید معادله ویژه مقداری زیر را حل کنیم:

$$\langle n_j^{(0)}|H_1|n_i^{(0)}\rangle \alpha_i = E_n^{(1)}\alpha_j \quad \text{یا} \quad \underset{\sim}{M}\vec{\alpha} = E_n^{(1)}\vec{\alpha}$$

که در آن $M_{ji}^{(0)} = \langle n_j^{(0)}|H_1|n_i^{(0)}\rangle$ و $H_1 = e\mathcal{E}z$

قدم اول: ابتدا ماتریس $\underset{\sim}{M}$ را بدست می‌آوریم:

$$\underset{\sim}{M} = e\mathcal{E}\begin{bmatrix} \langle 200|z|200\rangle & \langle 200|z|210\rangle & \langle 200|z|211\rangle & \langle 200|z|21\text{-}1\rangle \\ \langle 210|z|200\rangle & \langle 210|z|210\rangle & \langle 210|z|211\rangle & \langle 210|z|21\text{-}1\rangle \\ \langle 211|z|200\rangle & \langle 211|z|210\rangle & \langle 211|z|211\rangle & \langle 211|z|21\text{-}1\rangle \\ \langle 21\text{-}1|z|200\rangle & \langle 21\text{-}1|z|210\rangle & \langle 21\text{-}1|z|211\rangle & \langle 21\text{-}1|z|21\text{-}1\rangle \end{bmatrix}$$

به دلیل قواعد گزینش $\Delta m=0$ و $\Delta l=\pm 1$ همه عناصر این ماتریس بغیر از دو عنصر $\langle 200|z|210\rangle$ و $\langle 210|z|200\rangle$ صفر می‌شوند

← در همه اعضای سبز رنگ $\Delta m\neq 0$ است.

← در همه اعضای آبی رنگ $\Delta l \neq \pm 1$

ماتریس با تبدیل از یک ماتریس 4×4 کاهش پیدا می‌کند به یک ماتریس 2×2. معادله ویژه مقداری این ماتریس عبارت است از:

$$e\mathcal{E}\begin{bmatrix} 0 & \langle 200|z|210\rangle \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha_1\end{bmatrix} = E_2^{(1)}\begin{bmatrix}\alpha_1\end{bmatrix}$$

$$e\mathcal{E}\begin{bmatrix} 0 & \langle 200|z|210\rangle \\ \langle 210|z|200\rangle & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{bmatrix} = E_2^{(1)}\begin{bmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{bmatrix}$$

می‌توان نشان داد که $\langle 200|z|210\rangle = -3a_0$ که در آن a_0 شعاع اتم Bohr است.

$(Z=1)$

$$\boxed{-3e\mathcal{E}a_0\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{pmatrix} = E_2^{(1)}\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{pmatrix}}$$

برای بدست آوردن ویژه مقدار انرژی $E_2^{(1)}$، داریم

$$\begin{pmatrix} -E_2^{(1)} & -3e\mathcal{E}a_0 \\ -3e\mathcal{E}a_0 & -E_2^{(1)}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\ 0\end{pmatrix}$$

$$\det\begin{pmatrix} -E_2^{(1)} & -3e\mathcal{E}a_0 \\ -3e\mathcal{E}a_0 & -E_2^{(1)}\end{pmatrix} = 0 \longrightarrow (E_2^{(1)})^2 - 9e^2\mathcal{E}^2a_0^2 = 0$$

$$\longrightarrow \boxed{E_2^{(1)} = \pm 3e\mathcal{E}a_0}$$

ویژه مقدار انرژی

تصحیح مرتبه یک اختلال

تعیین ویژه بردارها: به ازای

$$E_2^{(1)+} = +3e\mathcal{E}a_0$$

$$E_2^{(1)-} = -3e\mathcal{E}a_0$$

a) برای $E_2^{(1)+} = +3e\mathcal{E}a_0$

$$-\cancel{3a_0e}\mathcal{E}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{pmatrix} = +\cancel{3a_0e}\mathcal{E}\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{pmatrix} \longrightarrow \alpha_2 = -\alpha_1$$

$$\longrightarrow \boxed{\vec{\alpha}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix}}$$

b) برای $E_2^{(1)-} = -3e\mathcal{E}a_0$

$$-3a_0e\mathcal{E}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{pmatrix} = -3a_0e\mathcal{E}\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{pmatrix} \longrightarrow \alpha_2 = +\alpha_1$$

$$\boxed{\vec{\alpha}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix}}$$

یادآوری: آنجا که $\vec{\alpha}$ وارد بازی شد

$$|n\rangle = N(\lambda)\left\{\underbrace{\sum_{i=1}^{\ell}\alpha_i\,|n_i^{(0)}\rangle}_{} + O(\lambda)\right\}$$

$$|n\rangle = N(\lambda)\left\{ \underbrace{\sum_{i=1} \alpha_i\, |n_i^{(0)}\rangle}_{|\tilde{n}^{(0)}\rangle} + O(\lambda)\right\}$$

$$|\tilde{n}^{(0)}\rangle = \alpha_1 |n_1^{(0)}\rangle + \alpha_2 |n_2^{(0)}\rangle + \alpha_3 |n_3^{(0)}\rangle + \alpha_4 |n_4^{(0)}\rangle$$
$$= \alpha_1 |200\rangle + \alpha_2 |210\rangle + \underbrace{\alpha_3}_{=0} |211\rangle + \underbrace{\alpha_4}_{=0} |21{-1}\rangle$$

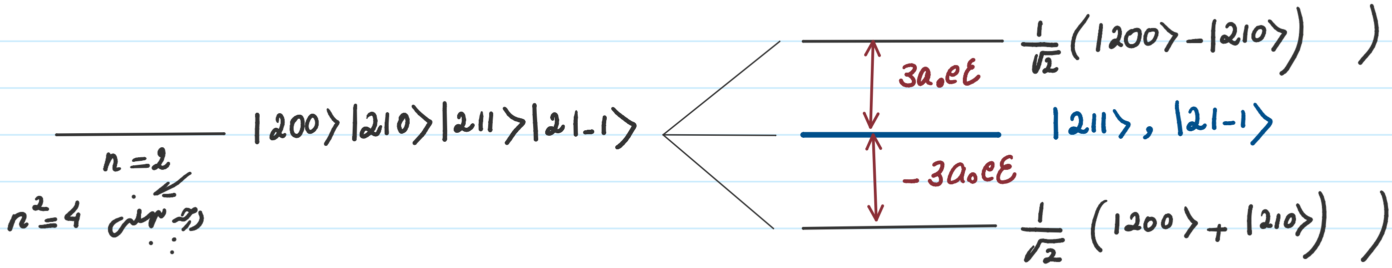
به دلیل ساختار M که از 4×4 کاهش پیدا کرد به 2×2

a) برای $E_2^{(1)+} = +3a_0 e\mathcal{E}$

$$|\tilde{n}_+^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|200\rangle - |210\rangle\right)$$

b) برای $E_2^{(1)-} = -3a_0 e\mathcal{E}$

$$|\tilde{n}_-^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|200\rangle + |210\rangle\right)$$



تبهگنی در حالات $|211\rangle$ و $|21{-1}\rangle$ در نتیجه اثر Stark از بین نرفته است.

ولی تبهگنی در حالات $|200\rangle$ و $|210\rangle$ از بین رفته و دو حالت جدید $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|200\rangle \pm |210\rangle\right)$ مربوط به انرژی $E_2^{(0)} \mp E_2^{(1)}$ دیگر تبهگن نیستند.

این دو حالت از ترکیب خطی دو حالت بوجود آمده، که بدون حضور میدان الکتریکی تبهگن بوده اند.

بحث جدید: اتم هیدروژن واقعی

می‌خواهیم برای هامیلتونی اتم هیدروژن ساده تصحیحاتی در نظر بگیریم. با توجه به اینکه طیف انرژی اتم هیدروژن ساده را قبلاً بدست آورده‌ایم، تصحیحات جدید مانند یک اختلال در نظر گرفته خواهد شد و طیف جدید را می‌توان بدست آورد.

این تصحیحات شامل
1) اثر انرژی جنبشی نسبیتی
2) جفت‌شدگی اسپین مدار
3) ساختار فوق ریز و اثرات آن

۳) ساختار فوق ریز و اثرات آن

خواهد شد .

---

۱) اثر انرژی جنبشی نسبیتی

مقدمه :

رابطه پاشندگی ذره نسبیتی

$$E_{rel} = \sqrt{\vec{p}^{\,2}c^2 + m_e^2c^4} = m_ec^2\sqrt{1+\frac{\vec{p}^{\,2}}{m_e^2c^2}}$$

برای $\frac{\vec{p}^{\,2}}{m_e^2c^2} \ll 1 \longrightarrow E_{rel} \approx m_ec^2\left(1+\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m_e^2c^2}-\frac{(\vec{p}^{\,2})^2}{8m_e^4c^4}\pm\cdots\right)$

$$E_{rel} \approx m_ec^2 + \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m_e} - \frac{(\vec{p}^{\,2})^2}{8m_e^3c^2} + O\left(\left(\frac{\vec{p}^{\,2}}{m_e^2c^2}\right)^3\right)$$

انرژی کل ذره نسبیتی $\approx$ انرژی حالت سکون ذره $+$ $\boxed{\text{انرژی جنبشی غیرنسبیتی} - \text{اولین تصحیح نسبیتی} \pm \text{تصحیحات مراتب بالاتر}}$

انرژی جنبشی نسبیتی

$$\boxed{E_{rel} - m_ec^2 = K_{rel}}$$

انرژی جنبشی ذره نسبیتی

نکته: تصحیحات در مراتب $\frac{\vec{p}^{\,2}}{m_e^2c^2}$ است که مساوی است با

$$\frac{\vec{p}^{\,2}}{m_e^2c^2} = \frac{m_e^2\vec{v}^{\,2}}{m_e^2c^2} = \frac{\vec{v}^{\,2}}{c^2} \ll 1$$

$\vec{v}^{\,2} \ll c^2$ سرعت غیرنسبیتی

سرعتی که بسیار کوچک‌تر از سرعت نور است .

به این ترتیب اگر در نظر بگیریم که الکترون در اطراف هسته در واقع یک ذره نسبیتی است که رابطه پاشندگی آن E_{rel} است

داریم :

همیلتونی مختل شده اتم هیدروژن گونه

$$H = H_0 + H_1$$

$$H_0 = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r}$$

$$H_1 = -\frac{(\vec{p}^{\,2})^2}{8m_e^3c^2}$$

محاسبه تغییرات انرژی در اثر H_1 :

مسیر روش ساده

$$H_1 = -\frac{(\vec{p}^{\,2})^2}{8m_e^3c^2} = -\frac{1}{2m_ec^2}\left(\frac{(\vec{p}^{\,2})^2}{4m_e^2}\right) = -\frac{1}{2m_ec^2}\left(\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m_e}\right)^2$$

$$= -\frac{1}{2m_ec^2}\left(H_0 + \frac{Ze^2}{r}\right)^2$$

در مرتبه اول اختلال تصحیح انرژی از رابطه زیر به دست می‌آید

از رابطه بالا داریم

$$\Delta E_{nlm} = {}_{(0)}\langle nlm | H_1 | nlm\rangle_{(0)} = \frac{-1}{2m_ec^2}\langle nlm|\left(H_0 + \frac{Ze^2}{r}\right)^2|nlm\rangle$$

که این صفرها را در ادامه نمی‌گذاریم (راحت باشی)

$$\left[H_0, \frac{1}{r}\right] = 0$$

$^{(0)}$ این صفرها را دیگر نمی‌گذاریم (جهت راحتی)

$$[H_0, \tfrac{1}{r}] = 0$$

$$= -\frac{1}{2m_ec^2}\langle nlm \,|\, H_0^2 + \frac{Z^2e^4}{r^2} + 2H_0\frac{Ze^2}{r} \,|\, nlm\rangle$$

$$= \frac{-1}{2m_ec^2}\Big(\langle nlm|H_0^2|nlm\rangle + Z^2e^4\langle nlm|\frac{1}{r^2}|nlm\rangle + 2Ze^2\langle nlm|H_0\frac{1}{r}|nlm\rangle\Big)$$

use $\quad \langle nlm|H_0|nlm\rangle = E_n^{(0)}\underbrace{\langle nlm|nlm\rangle}_{=1} = E_n^{(0)}$

$$\Delta E_{nlm} = \frac{-1}{2m_ec^2}\Big\{(E_n^{(0)})^2 + Z^2e^4\langle nlm|\frac{1}{r^2}|nlm\rangle + 2Ze^2E_n^{(0)}\langle nlm|\frac{1}{r}|nlm\rangle\Big\}$$

use $\quad \langle nlm|\frac{1}{r}|nlm\rangle = \frac{Z}{a_0n^2}\quad , \quad \langle nlm|\frac{1}{r^2}|nlm\rangle = \frac{Z^2}{a_0^2n^3(l+\frac{1}{2})}$

$$\longrightarrow \boxed{\Delta E_{nlm} = \frac{-1}{2m_ec^2}\Big\{(E_n^{(0)})^2 + \frac{(Ze)^4}{a_0^2n^3(l+\frac{1}{2})} + 2E_n^{(0)}\frac{(Ze)^2}{a_0n^2}\Big\}}$$

$$E_n^{(0)} = -\frac{1Ry}{n^2} = -\frac{1}{2}m_ec^2(Z\alpha)^2 \quad , \quad a_0 = \frac{\hbar}{m_ec\alpha} \quad , \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$$

$$\boxed{\Delta E_{nlm} = -\frac{m_ec^2(Z\alpha)^4}{2n^4}\left(\frac{n}{l+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right)}$$

توجه: ۱) در محاسبه بالا ما در واقع باید از نظریه اختلال تبهگن استفاده می‌کردیم. چون اتم هیدروژن $\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2$ تبهگنی دارد.

اگر برای هر الکترون ۲ حالت اسپین را در نظر بگیریم، تبهگنی $2n^2$ می‌شود.

اینکه چرا با وجود تبهگنی توانستیم از نظریه اختلال غیرتبهگن استفاده کنیم برمی‌گردد به اینکه H_1 در پایه $|nlm\rangle_{(0)}$ قطری است.

می‌توان نشان داد که همه جملات غیرقطری ماتریس مربوط به H_1 صفر هستند. یعنی

اولاً: $\quad \langle nlm|H_1|nl'm'\rangle = 0 \quad$ for $\quad l \neq l', \; m \neq m'$

اثبات: $\quad$ a) $\;[H_1, L^2] = 0$ $\quad$ استفاده می‌کنیم از

$$\longrightarrow 0 = \langle nlm|[H_1, L^2]|nl'm'\rangle = \langle nlm|H_1L^2|nl'm'\rangle - \langle nlm|L^2H_1|nl'm'\rangle$$

$$= \hbar^2\boxed{\big(l'(l'-1) - l(l-1)\big)}_{=0}\underbrace{\langle nlm|H_1|nl'm'\rangle}_{\text{می‌خواهیم صفر نباشد}} = 0$$

$\longrightarrow \quad l' = l \quad ✓$

$l' = -(1+l) \quad$ غیرقابل قبول

$\longrightarrow \quad l' = l$ ✓

$l' = -(1+l)$ غیرقابل قبول

می‌خواهیم صفر نباشد

b) $[H_1, L_z] = 0$

استفاده می‌کنیم از

$$0 = \langle nlm | [H_1, L_z] | nl'm' \rangle = \langle nlm | H_1 L_z | nl'm' \rangle - \langle nlm | L_z H_1 | nl'm' \rangle$$

$$= \hbar \underbrace{\boxed{(m'-m)}}_{} \underbrace{\langle nlm | H_1 | nl'm' \rangle}_{\text{می‌خواهیم صفر نباشد}} = 0$$

$=0$

$\longrightarrow \quad m' = m$

به این ترتیب فقط $\langle nlm | H_1 | nlm \rangle \neq 0$ هستند و اینها اعضای روی قطر می‌باشند.

(ج