QM-2-L15-1404-2

Sunday, May 17, 2026 11:47 AM

اتم هیدروژن واقعی:

الف) اثرات انرژی جنبشی نسبیتی:

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

ب) اثر اسپین ـ مدار:

یادآوری: هامیلتونی ذره باردار در حضور میدان الکترومغناطیسی

$$H\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$$

$$\longrightarrow \quad H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + e\varphi + V(\vec{x}) \qquad q = -e$$

$$\vec{A} = -\frac{1}{2}(y, -x, 0) \quad , \quad \varphi = 0$$

$$H_{magn} = \frac{e}{2m_e c}\vec{L}\cdot\vec{B} = \mu_B \frac{\vec{L}}{\hbar}\cdot\vec{B} \quad ; \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}$$

$$\boxed{H_{magn} = \mu_B \frac{1}{\hbar}(\vec{L} + 2\vec{S})\cdot\vec{B}}$$

اسپین ←

$g_s = 2$ & Paschen - Back Effect

به این ترتیب اثر برهمکنش اسپین با میدان مغناطیسی در هامیلتونی وارد شد.

برگردیم به اتم هیدروژن:

ادعا:

$$\boxed{H_2 = \frac{e}{2m^2c^2}\vec{S}\cdot\vec{L}\,\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\varphi(r)}$$

که در آن $\xrightarrow{\text{پتانسیل الکتریکی } \varphi(r)}$ $\vec{E} = -\vec{\nabla}\varphi(r) = -\hat{r}\frac{d\varphi(r)}{dr} = -\frac{\vec{r}}{r}\frac{d\varphi}{dr}$

اثبات: این رابطه در واقع از معادله دیراک می‌آید (معادله نسبیتی برای ذره اسپین $\frac{1}{2}$). در اینجا فقط توجیهی برای درستی این ادعا می‌آوریم.

توجیه: در دستگاه سکون الکترون، پروتون یک حرکت مداری حول الکترون دارد!
الکترون به همین دلیل یک میدان مغناطیسی به علت این حرکت حس می‌کند

$$\vec{B} = -\frac{\vec{v}}{c}\times\vec{E} \quad \text{with} \quad \vec{v} = \frac{\vec{p}}{m}$$

$$U = -\vec{\mu}_s\cdot\vec{B}$$ انرژی برهمکنش اسپین با $\vec{B}$

$$= +\frac{eg}{\cdots}\vec{S}\cdot\vec{B} = -\frac{eg}{\cdots}\vec{S}\cdot\left(\frac{\vec{v}}{c}\times\vec{E}\right)$$

$$= +\frac{eg}{2mc}\ \vec{S}\cdot\vec{B} = \frac{-eg}{2mc}\ \vec{S}\cdot\left(\frac{\vec{v}}{c}\times\vec{E}\right)$$

استفاده می‌کنیم از $\vec{v}=\frac{\vec{P}}{m}$, $\vec{E}=-\vec{\nabla}\varphi$

$$U = \frac{+eg}{2m^2c^2}\ \vec{S}\cdot\left(\vec{P}\times\vec{\nabla}\varphi\right) = \frac{eg}{2m^2c^2}\ \vec{S}\cdot\left(\vec{P}\times\frac{\vec{r}}{r}\frac{d\varphi(r)}{dr}\right)$$

$$= -\frac{eg}{2m^2c^2}\ \vec{S}\cdot\underbrace{(\vec{r}\times\vec{P})}_{\vec{L}}\ \frac{1}{r}\frac{d\varphi(r)}{dr}$$

$$= \frac{-eg}{2m^2c^2}\ \vec{S}\cdot\vec{L}\ \frac{1}{r}\frac{\partial\varphi(r)}{\partial r} \overset{g=2}{=} -\frac{e}{m^2c^2}\ \vec{S}\cdot\vec{L}\ \frac{1}{r}\frac{\partial\varphi(r)}{\partial r}$$

اگر $g=2$ باشد نتیجه نسبت به آنچه ادعا شده یک ضریب $\frac{1}{2}$ کم دارد. نکته این است این ضریب $\frac{1}{2}$ به
آسانی از ترانستوم خاصیت نسبیتی می‌آید (اثر Thomas ← کتاب Jackson الکترودینامیک)

فعلاً می‌پذیریم که ضریب $\frac{1}{2}$ در نتیجه نهایی وجود دارد. یعنی

$$U = -\frac{e}{2m^2c^2}\ \vec{S}\cdot\vec{L}\ \frac{1}{r}\frac{\partial\varphi(r)}{\partial r}$$

q.e.d.

در ادامه: برای پتانسیل کولنی $e\varphi(r)=\frac{Ze}{r}$

$$H_2 \equiv \boxed{U = \frac{1}{2m^2c^2}\ \vec{S}\cdot\vec{L}\ \frac{Ze^2}{r^3}}$$

به این تصحیح، تصحیح اسپین - مدار گویند

برای بدست آوردن تصحیح انرژی ناشی از اثر اسپین مدار باید

$\langle nlm|\ H_2\ |nlm\rangle = E_n^{(1)}$ را حساب کنیم

فقط مشکل اینجاست که H_2 شامل اسپین است درحالیکه در حالت $|nlm\rangle$ اصلاً اسپین را در نظر نمی‌گیرد

پیشنهاد ۱: به جای $|nlm\rangle$ از $|nlm\rangle\otimes|s,m_s\rangle$ استفاده کنیم

پیشنهاد ۲: استفاده از مجموعه عملگرهای جابجاشونده جدید

یادآوری: اگر با $\{\vec{L}^2, L_z; \vec{S}^2, S_z\}$ کار کنیم، در عمل با $|nlm\rangle\otimes|s,m_s\rangle$ کار کرده‌ایم ولی

می‌توانیم بجای استفاده از $\{\vec{L}^2, L_z; \vec{S}^2, S_z\}$ در نظر داشت که

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

$$\{H_0, \vec{L}^2, L_z; \vec{S}^2, S_z\} \rightarrow \{H_0, \vec{J}^2, J_z; \vec{L}^2, \vec{S}^2\}$$

در ادامه از پیشنهاد دوم استفاده می‌شود:

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

در ادامه از پیشنهاد دوم استفاده می‌کنیم:

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

$$\vec{J}^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + \underbrace{\boxed{\vec{S}\cdot\vec{L} + \vec{L}\cdot\vec{S}}}_{= 2\vec{S}\cdot\vec{L}} \Rightarrow \boxed{\vec{S}\cdot\vec{L} = \frac{1}{2}\left(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2\right)}$$

مزیت این انتخاب: عملگر $\vec{S}\cdot\vec{L}$ در پایه جدید قطری است:

یادآوری:

$$\boxed{\begin{aligned} |j = l \pm \tfrac{1}{2}, m_j; l, s = \tfrac{1}{2}\rangle &= \alpha_\pm |l, m_j - \tfrac{1}{2}\rangle |\uparrow\rangle \\ &+ \beta_\pm |l, m_j + \tfrac{1}{2}\rangle |\downarrow\rangle \end{aligned}} \quad (A)$$

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{S}\cdot\vec{L}\, |j, m_j; l, s\rangle &= \frac{1}{2}\left(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2\right) |j, m_j; l, s\rangle \\ &= \frac{1}{2}\hbar^2 \left(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) \right) |j, m_j; l, s\rangle \end{aligned}} \quad (B)$$

این رابطه این معنی است که $\vec{S}\cdot\vec{L}\,|$حالت ویژه$\rangle =$ عدد $|$حالت ویژه$\rangle$ و این یعنی قطری بودن

اگر مقدار چشمداشتی $\vec{S}\cdot\vec{L}$ آن را در حضور حالت $|j\, m_j; l, s\rangle$ محاسبه کنیم

در ادامه باید $j = l \pm \frac{1}{2}$ و $s = \frac{1}{2}$ را در B جایگذاری کنیم

$$\boxed{\vec{S}\cdot\vec{L}\, |j = l \pm \tfrac{1}{2}, m_j; l, s\rangle = \frac{\hbar^2}{2} \begin{cases} l \\ -l - \frac{1}{2} \end{cases} |j = l \pm \tfrac{1}{2}, m_j; l, s\rangle} \quad (C)$$

نتیجه اولیه:

$$E_n^{(1)} = \frac{Ze^2 g}{2m^2c^2} \langle n, j, m_j; l, s = \tfrac{1}{2} | \frac{1}{r^3} \vec{S}\cdot\vec{L} | n\, j\, m_j; l, s = \tfrac{1}{2}\rangle$$

$$= \frac{Ze^2 g}{2m^2c^2} \begin{cases} l & \text{for } j = l + \frac{1}{2} \\ -l - 1 & \text{for } j = l - \frac{1}{2} \end{cases} {}^{(0)}\langle n\, j\, m_j; l, s | \frac{1}{r^3} | n\, j\, m_j; l, s\rangle^{(0)}$$

نکته:

$$\boxed{\begin{aligned} \langle \vec{r}\, | n\, j\, m_j; l, s\rangle &= \alpha_\pm \langle \vec{r}\, | n\, l\, m_l\rangle \otimes |\uparrow\rangle + \beta_\pm \langle \vec{r}\, | n\, l\, m_l\rangle \otimes |\downarrow\rangle \\ &= \alpha_\pm R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\theta, \varphi) |\uparrow\rangle + \beta_\pm R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\theta, \varphi) |\downarrow\rangle \end{aligned}}$$

تمرین کنید:

$$\langle n\, j\, m_j\, l | \frac{1}{r^3} | n\, j\, m_j\, l\rangle = \frac{Z^3}{a_0^3\, l(l+1)(l+\frac{1}{2})} \frac{1}{n^3}$$

و در کل خواهیم داشت

$$\langle n, j = l \pm \tfrac{1}{2}, m_j; l, s = \tfrac{1}{2} | H_2 | n, j = l \pm \tfrac{1}{2}, m_j; l, s = \tfrac{1}{2}\rangle$$

$$= \quad m_e c^2 \quad (Z\alpha)^4 \qquad \Big\{ \; l \quad \text{for} \quad j = l + \tfrac{1}{2}$$

$$\boxed{\begin{aligned}&\langle n, j=l\pm\tfrac{1}{2}, m_j ; l, s=\tfrac{1}{2} \,|\, H_2 \,|\, n, j=l\pm\tfrac{1}{2}, m_j ; l, s=\tfrac{1}{2}\rangle \\ &= \frac{m_e c^2 \,(Z\alpha)^4}{4n^3\, l(l+1)(l+\frac{1}{2})}\begin{cases} l & \text{for } j=l+\frac{1}{2} \\ -l-1 & \text{for } j=l-\frac{1}{2}\end{cases}\end{aligned}}$$

$$= -E_n^{(0)}\frac{(Z\alpha)^2}{2n^2}\,\frac{n}{l+\frac{1}{2}}\begin{cases}\frac{1}{l+1} & \text{for } j=l+\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{l} & \text{for } j=l-\frac{1}{2}\end{cases}$$

این نتیجه فقط برای $l\geq 1$ درست است.

اگر اثر H_1 و H_2 را باهم در نظر بگیریم:

$$E_n^{(1)} = \langle H_1 + H_2\rangle_{n,j=l\pm\frac{1}{2},l} = -\frac{mc^2(Z\alpha)^4}{2n^4}\left(\frac{n}{l+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right)$$
$$+\frac{mc^2(Z\alpha)^4}{4n^3\, l(l+\frac{1}{2})(l+1)}\begin{cases} l \\ -l-1\end{cases}$$

به این ترتیب با ساده سازی جبری برای $j=l+\frac{1}{2}$ داریم

$$E_n^{(1)} = \frac{mc^2(Z\alpha)^4}{4n^4}\left(\frac{-2n}{l+1}\right) \qquad l+1 = j+\tfrac{1}{2} = (l+\tfrac{1}{2})+\tfrac{1}{2} \ \checkmark$$

و برای $j=l-\frac{1}{2}$ داریم

$$E_n^{(1)} = \frac{mc^2(Z\alpha)^4}{4n^4}\left(\frac{-2n}{l}\right) \qquad l = j+\tfrac{1}{2} = (l-\tfrac{1}{2})+\tfrac{1}{2} \ \checkmark$$

به این ترتیب هر دو فرمول را می‌توان به صورت مشترک زیر داد:

$$\boxed{\langle H_1 + H_2\rangle_{n,j=l\pm\frac{1}{2},l,s} = \frac{mc^2(Z\alpha)^4}{2n^4}\left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j+\frac{1}{2}}\right)}$$

نکته: این نتیجه فقط برای $l\geq 1$ درست است.

در ادامه می‌خواهیم ببینیم حالت‌های تبهگنی برای $n=2$ چگونه در نتیجه اثر H_2 (اثر اسپین - مدار) به تنهایی، و اثر H_1+H_2

(اثر تصحیح نسبیتی انرژی + اثر اسپین مدار) split می‌شوند:

$n=2 \curvearrowright \quad l=0 \rightarrow j=|l\pm\frac{1}{2}|=\frac{1}{2}$ (a) حالت‌های تبهگن

$\qquad\qquad l=1 \rightarrow j=l-\frac{1}{2}=\frac{1}{2}$ (b)

$\qquad\qquad\quad\ \ \rightarrow j=l+\frac{1}{2}=\frac{3}{2}$ (c)

$L=S \curvearrowright$ ارتباط $l=0$ با S — که در آن $\boxed{^{2s+1}L_j}$ با نمادگذاری

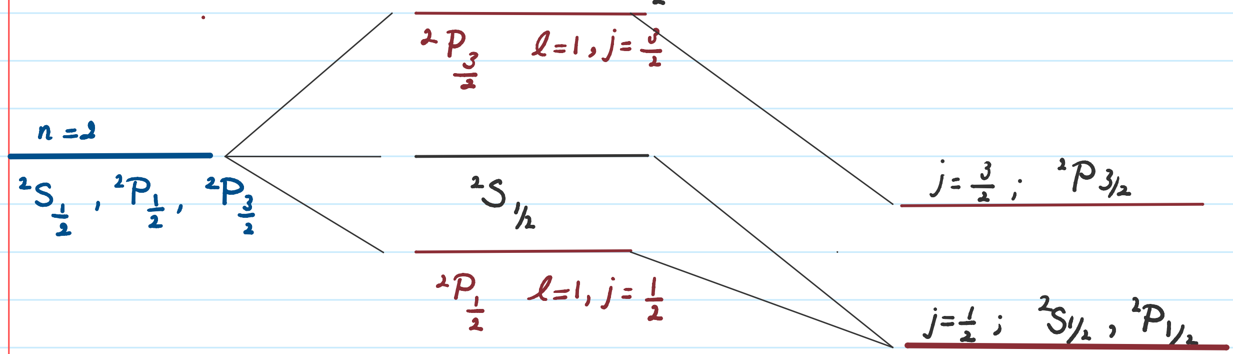
$L=P \curvearrowright$ ارتباط $l=1$ با P

سه حالت داریم $\quad {}^2S \;,\; {}^2P \;,\; {}^2P$

سه حالت داریم $^2S_{\frac{1}{2}}$, $^2P_{\frac{1}{2}}$, $^2P_{\frac{3}{2}}$

با در نظر گرفتن H_2 (اثر اسپین مدار) $^2S_{\frac{1}{2}}$ سر جای خودش می‌ماند چون فرمول بدست آمده برای $l=0$ صادق نیست

ولی $^2P_{\frac{1}{2}}$, $^2P_{\frac{3}{2}}$ تفکیک می‌شوند



$\langle H_2 \rangle$
اثر اسپین مدار

$\langle H_1 + H_2 \rangle$
اثر تصحیح نسبتی + اسپین مدار

در حالت $^2S_{1/2}$ و $^2P_{1/2}$ دوباره تبهگن می‌شوند