QM-2-L16-1404-2

Tuesday, May 19, 2026 2:50 PM

اثر اسپین - مدار (II)

نکته ۱

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

دیدیم هامیلتونی H_2 شامل برهمکنش اسپین و تکانه مداری است. منشا این جمله در مکانیک کوانتومی نسبیتی است. جایی که برای توصیف دینامیک الکترون (ذره باردار با اسپین $\frac{1}{2}$) از معادله دیراک به جای معادله شرودینگر غیرنسبیتی استفاده می‌شود. در آنجا می‌توان نشان داد که جمله‌ای به شکل زیر از حد غیرنسبیتی معادله دیراک در حضور میدان الکترومغناطیس بدست می‌آید:

$$(A)\quad \boxed{U = \frac{-ie}{4m^2}(\vec{\sigma}\cdot\vec{E})(\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}) - \frac{e}{2m}\vec{\sigma}\cdot\vec{B}}$$

$\vec{\pi} \equiv \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$

$\vec{\sigma} = 2\vec{S} \longleftrightarrow$ ماتریس‌های Pauli

$\boxed{\hbar = c = 1}$

جمله اول $= U_1 \equiv \dfrac{-ie}{4m^2}(\vec{\sigma}\cdot\vec{E})(\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi})$

$$= \frac{-ie}{4m^2}\sigma_i\sigma_j\, E_i\pi_j$$

use:
$$\sigma_i\sigma_j = \frac{1}{2}\{\sigma_i,\sigma_j\} + \frac{1}{2}[\sigma_i,\sigma_j] = \frac{1}{2}\,2\delta_{ij} + \frac{1}{2}\,2i\epsilon_{ijk}\sigma_k = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k$$

$$U_1 = \frac{-ie}{4m^2}\left(\delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k\right)E_i\pi_j$$

$$= \cancel{\frac{-ie}{4m^2}(\vec{E}\cdot\vec{\pi})} + \frac{e}{4m^2}\epsilon_{ijk}E_i\pi_j\sigma_k =$$

این جمله را می‌اندازیم چون هرمیتی نیست (مختلط است)

$$\sim \frac{e}{4m^2}(\vec{E}\times\vec{\pi})\cdot\vec{\sigma}$$

$$= -\frac{e}{4m^2}(\vec{\nabla}\varphi\times\vec{p})\cdot\vec{\sigma} = \frac{-e}{4m^2}\left(\frac{\vec{r}}{r}\frac{d}{dr}\varphi(r)\times\vec{p}\right)\cdot\vec{\sigma}$$

$\vec{E} = -\vec{\nabla}\varphi$

$\vec{A} = \vec{0} \rightsquigarrow \vec{\pi} = \vec{p}$

$$= \frac{-e}{4m^2}\underbrace{(\vec{r}\times\vec{p})}_{\vec{L}}\cdot\underbrace{\vec{\sigma}}_{2\vec{S}}\ \frac{1}{r}\frac{d}{dr}\varphi(r)$$

$$= -\frac{e}{4m^2}\,\underbrace{2}_{=g}\,(\vec{L}\cdot\vec{S})\ \frac{1}{r}\frac{d}{dr}\varphi(r)$$

ضریب ژیرومغناطیس

$$U_1 = -\frac{eg}{4m^2}(\vec{L}\cdot\vec{S})\ \frac{1}{r}\frac{d}{dr}\varphi(r) \underset{g=2}{=} \frac{-e}{2m^2}(\vec{L}\cdot\vec{S})\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\varphi(r)$$

توجه کنید که در اینجا تصحیح اثر حرکت تقدمی توماس خودکار بدست میاید
Thomas Precession

حال اگر $\varphi = \frac{Ze}{r}$

$$\boxed{U_1 = \frac{1}{2m^2c^2}\ \vec{S}\cdot\vec{L}\ \frac{Ze^2}{r^3}}$$

که همان تصحیح اسپین-مدار است.

جمله دوم $\quad U_2 = \frac{-e}{2m} \vec{\sigma}.\vec{B} \longrightarrow$ این جمله منجر می‌شود به anomalous Zeeman effect

بعداً به آن می‌پردازیم.

قبل از این اثر نکته دیگری در مورد اثر اسپین ـ مدار:

نکته ۲: در محاسبه تغییر طیف انرژی در رتبه اول باید رابطه زیر را محاسبه می‌کردیم:

$$\Delta E^{(1)}_{nlm} = \langle s, m_s | \langle n l m_l | H_2 | n l m_l \rangle | s, m_s \rangle$$

برای محاسبه بخش اسپینی تغییر پایه لازم است

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

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \longrightarrow \vec{S}.\vec{L} = \frac{1}{2} (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2)$$

در این پایه قطری است $\curvearrowright$

$$\vec{S}.\vec{L} \, | j, m_j ; l, s \rangle = \frac{\hbar^2}{2} \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) | j, m_j ; l, s = \tfrac{1}{2} \rangle$$

که در آن $j = l \pm \frac{1}{2}$

$$\text{(B)} \quad \Rightarrow \boxed{\vec{S}.\vec{L} \, | j, m_j ; l, s \rangle = \frac{\hbar^2}{2} \begin{cases} l \\ -l-1 \end{cases} | j, m_j ; l, s \rangle}$$

برای محاسبه بخش مکانی

$$\langle n, j, m_j ; l, s | \frac{1}{r^3} | n, j, m_j ; l, s \rangle$$

استفاده می‌کنیم از:

$$| n, j, m_j ; l, s \rangle = \alpha_\pm | n, l, m_l \rangle \otimes | \uparrow \rangle + \beta_\pm | n, l, m_l \rangle \otimes | \downarrow \rangle$$

که در آن

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

رسیدیم به

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

نتیجه نهایی حاصلضرب C و B است.

$$\langle H_2 \rangle = \frac{mc^2 (Z\alpha)^4}{4n^3 \, l \, (l+1)(l+\frac{1}{2})} \begin{cases} l & \text{for } j = l + \frac{1}{2} \\ -l-1 & \text{for } j = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

در مورد $j = l + \frac{1}{2}$ حذف l از صورت و مخرج فقط وقتی درست است که $l \neq 0$ باشد. لذا رابطه بالا فقط برای $l \neq 0$ (یعنی اربیتالهای P, ...) درست است

سؤال: برای $l = 0$ چه اتفاقی می‌افتد. $\longleftarrow$ جمله دیگری از معادله دیراک می‌آید به نام جمله داروین
Darwin – Term

سوال : برای $\ell = 0$ چه اتفاقی می‌افتد. ← جمله دیگر از معادله دیراک باید به یاد داشته باشیم جمله داروین

Darwin - Term

Charles Galton Darwin (1887-1962) نوه چارلز داروین بوده

ادعا :

$$\boxed{H_3 = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\,\Delta V = \frac{\pi\hbar^2 Ze^2}{2m^2c^2}\,\delta^3(\vec{x})}$$

توجیه شهودی : Zitterbewegung حرکت لرزشی الکترون‌ها

$$V(\vec{x}) = -\frac{Ze^2}{r}$$

Taylor بسط

$$V(\vec{x}+\delta\vec{x}) = V(\vec{x}) + \delta\vec{x}\cdot\vec{\nabla}V(\vec{x}) + \frac{1}{2}\sum_{ij}\delta x_i\,\delta x_j\,\frac{\partial^2 V(\vec{x})}{\partial x_i\,\partial x_j} + \cdots$$

$$\langle V(\vec{x}+\delta\vec{x})\rangle = V(\vec{x}) + \langle\delta\vec{x}\rangle\cdot\vec{\nabla}V(\vec{x}) + \frac{1}{2}\sum_{ij}\langle\delta x_i\,\delta x_j\rangle\frac{\partial^2 V(\vec{x})}{\partial x_i\,\partial x_j} + \cdots$$

a) $\langle\delta\vec{x}\rangle = 0$ میانگین جابجایی الکترون‌ها در نتیجه حرکت لرزشی صفر است. (افت و خیزها isotropic هستند)

b) $\langle\delta x_i\,\delta x_j\rangle = \underbrace{\langle\delta x_i^2\rangle\,\delta_{ij}}_{\text{در اینجا جمع روی i نیست}} = \frac{1}{3}\langle\delta\vec{x}^2\rangle\,\delta_{ij}$

$i=j$ باید باشد در غیر اینصورت جواب صفر است.

پس خواهیم داشت

$$\langle V(\vec{x}+\delta\vec{x})\rangle = V(\vec{x}) + \frac{1}{2}\times\frac{1}{3}\sum_{ij}\langle\delta\vec{x}^2\rangle\,\delta_{ij}\,\frac{\partial^2 V(\vec{x})}{\partial x_i\,\partial x_j} + \cdots$$

$$= V(\vec{x}) + \frac{1}{6}\boxed{\langle\delta\vec{x}^2\rangle}\,\Delta V(\vec{x})$$

انحراف معیار را تخمین می‌زنیم ← طول موج کامپتون به توان ۲

Characteristic length طول مشخصه در ابعاد اتمی

طول موج Compton

$$\sqrt{\langle\delta\vec{x}^2\rangle} = \frac{\lambda_c}{2\pi} = \frac{\hbar}{mc}$$

$$\Rightarrow \quad \langle V(\vec{x}+\delta\vec{x})\rangle = V(\vec{x}) + \boxed{\frac{1}{6}}\,\frac{\hbar^2}{m^2c^2}\,\Delta V(\vec{x}) + \cdots$$

که از ملاحظات دیگر این ضریب به $\frac{1}{8}$ تصحیح می‌شود.

حالا باید $V(\vec{x}) = \frac{-Ze^2}{r}$ گرفت و روی جمله $\Delta V(\vec{x})$ تمرکز کرد.

جمله اول قبلاً در H_0 در نظر گرفته شده است.

$$\Delta V(\vec{x}) = \frac{\hbar^2 Ze^2}{8m^2c^2}\,\Delta\frac{1}{r} =$$

$$= \frac{Ze^2\hbar^2}{8m^2c^2}\,4\pi\,\delta(\vec{x}) = \frac{Ze^2\hbar^2\pi}{2m^2c^2}\,\delta(\vec{x}) = H_3 \quad \text{Darwin Term}$$

همانطور که ادعا شده بود

$$\Delta E^{(1)}_{nlm} = \langle nlm_\ell|\,H_3\,|nlm_\ell\rangle = \frac{\pi Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2}\int d^3x\,|\psi_{nlm_\ell}(\vec{x})|^2\,\delta(\vec{x})$$

$$\Delta E^{(1)}_{nlm} = \langle n l m_l \,|\, H_3 \,|\, n l m_l \rangle = \frac{\pi Z e^2 \hbar^2}{2m^2c^2} \int d^3x \, |\psi_{nlm_l}(\vec{x})|^2 \, \delta(\vec{x})$$

$$= \frac{\pi Z e^2 \hbar^2}{2m^2c^2} \, |\psi_{nlm_l}(\vec{0})|^2$$

نقطه $\vec{x}=\vec{0}$ داخل هسته اتم است!

دقت کنید به حالت احتمال حضور

الکترون در داخل هسته برای همه nlm ها صفر بوده به غیر از $l=0$ (S - orbital)

Schwabl ـ کتاب ۴.۳ — شکل سمت چپ

لذا استفاده می‌کنیم از $|\psi_{nlm_l}(\vec{0})|^2 = \frac{Z^3}{\pi a_0^3 n^3} \delta_{l0} \, \delta_{m_l 0}$

نتیجه

$$\boxed{\Delta E^{(1)}_{nlm_l} = \langle H_3 \rangle = \frac{mc^2 (Z\alpha)^4}{2n^3} \delta_{l0} \, \delta_{m_l 0}}$$

$$a_0 = \frac{\hbar}{mc\alpha}, \qquad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$$

در اینجا اگر برگردیم به $\langle H_2 \rangle$ (تصحیح اسپین-مدار) برای $j = l + \frac{1}{2}$ (آیا در مسئله $l=0$ پیش می‌آید)

داشتیم:

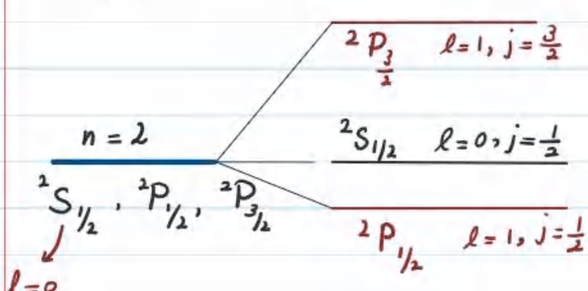
$$\langle H_2 \rangle_{n,\, j=l+\frac{1}{2},\, m_j,\, l,\, s} = \frac{mc^2 (Z\alpha)^4}{4n^3 \, l \, (l+\frac{1}{2})(l+1)} \, l$$

جالب است که: اگر در این رابطه صورت و مخرج را ساده کنیم و به جای l در رابطه باقی‌مانده $l=0$ بگذاریم می‌رسیم به

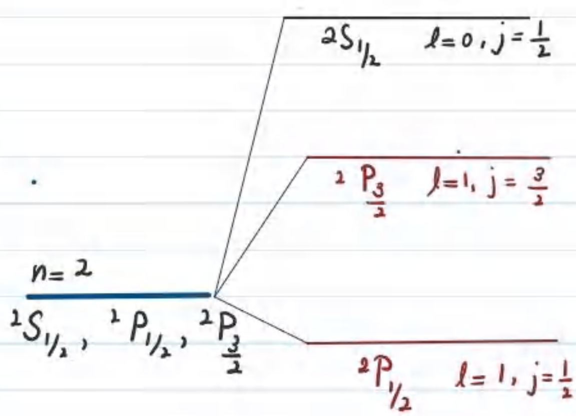
$$\langle H_2 \rangle_{n,\, j=\frac{1}{2},\, m_j,\, 0,\, s} = \frac{mc^2 (Z\alpha)^4}{2n^3} = \langle H_3 \rangle_{n,j,l}$$

$^{2S+1}L_j$ نمادگذاری

در ادامه مثال $(n=2)$ را بازنگری می‌کنیم:



$\langle H_2 \rangle$



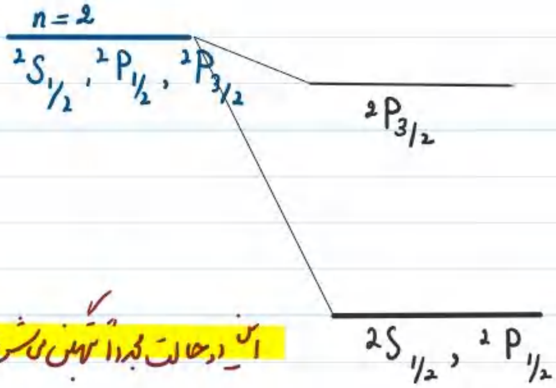
$\langle H_2 + H_3 \rangle$

$\vec{L}\cdot\vec{S}$ coupling + Darwin term

$^2P_{1/2}$ $\quad l=1,\ j=\frac{1}{2}$

در جلسه درس قبلی داشتیم

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



$$j = \frac{3}{2} \rightarrow \left(\frac{3}{4} - \frac{2}{\frac{3}{2}+\frac{1}{2}}\right) = -\frac{1}{4} \qquad n=2$$

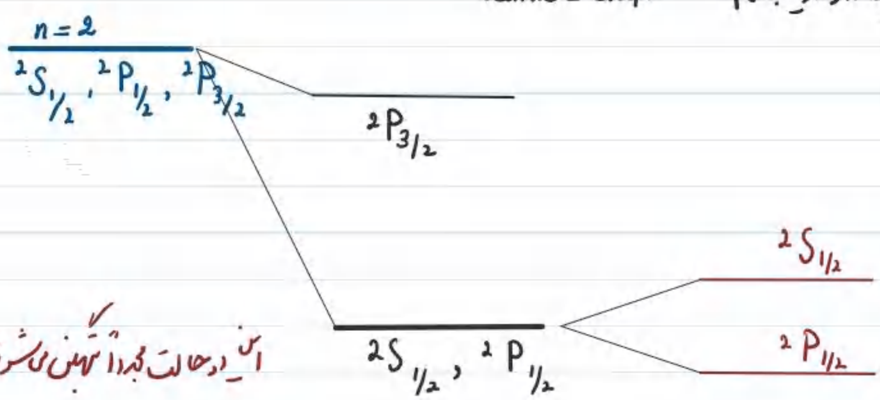
$$j = \frac{1}{2} \rightarrow \left(\frac{3}{4} - \frac{2}{\frac{1}{2}+\frac{1}{2}}\right) = -\frac{5}{4}$$

این دو حالت مجدداً تبهگن می‌شوند

$\langle H_1 + H_2 + H_3 \rangle$ تصحیحات ساختار ریز
Fine structure corrections.

نکته ۳: جهت تکمیل نکات فوق است، و می‌بینیم به اینکه تبهگنی فوق بین $^2S_{1/2}$, $^2P_{1/2}$

این تبهگنی در نتیجه اثراتی به نام Lamb-shift

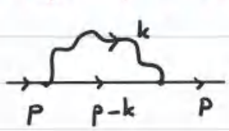


این دو حالت مجدداً تبهگن می‌شوند

fine structure $\quad \langle H_1 + H_2 + H_3 \rangle \sim (Z\alpha)^4$ $\qquad$ Lamb-shift $\quad (Z\alpha)^2 \alpha \ln \alpha$

تصحیحاتی از جنس $\ln\alpha$ از لحاظ اختلالی که شامل بسط توانی برحسب α است بدست نمی‌آید.

محاسبه دقیق در نظریه میدان کوانتومی در نتیجه تصحیحی که به آن خودانرژی الکترون می‌گویند ←



خودانرژی الکترون