درس شانزدهم: اتم هیدروژن واقعی

۱ مقدمه

آنچه را که تاکنون به عنوان اتم هیدروژن مورد مطالعه قرار داده‌ایم، می توان اتم هیدروژن ایده‌آل نامید زیرا درآن تنها پتانسیل $\frac{e^2}{r}$ را که معرف مهترین برهم کنش بین الکترون و هسته است درنظرگرفته ایم. برای مطالعه کامل تر اتم هیدروژن می بایست اثرات دیگری را نیز درنظربگیریم. درنظرگرفتن این آثار باعث می شود که طیف اتم هیدروژن تفاوت هایی جزیی با اتم هیدروژن ایده‌آل پیدا کند. نخستین این اثرات آثارنسبیتیِ ناشی از سرعت زیاد الکترون است. دومین اثر ناشی از برهم کنش ممان مغناطیسی ذاتی الکترون با ممان مغناطیسی مداری آن است که اصطلاحاً می گوییم باعث شکافتِ ریزِ طیف یاساختارِ ریزِ طیف $Fine\ Structure$ می شود. بالاخره آخرین اثری که درنظرمی گیریم ناشی از برهم کنش ممان مغناطیسی الکترون وممان مغناطیسی هسته است که اصطلاحاً می گوییم باعث شکافتِ فوقِ ریزِ طیف یاساختارِ فوقِ ریزِ طیف $Hyperfine\ Structure$ می شود.
برای مطالعه تمام این آثار از روش اختلال تا مرتبه اول استفاده می کنیم. قبل از پرداختن به محاسبات بهتراست چند رابطه مفید را درباره کمیت های مختلف دراتم هیدروژن به یاد بیاوریم.
انرژی حالت پایه اتم هیدروژن برابراست با

$$E_0 = -\frac{1}{2}mc^2\alpha^2 = -\frac{1}{2}\frac{e^2}{a_0} \tag{1}$$

که درآن $\alpha = \frac{1}{137}$ ثابت ساختار ریز و a_0 شعاع بوهر و حدوداً برابر با نیم آنگستروم است.

انرژی حالت n ام نیز برابراست با $E_n = \frac{E_0}{n^2}$. شعاع بوهر نیز برابراست با

$$a_0 = \frac{1}{\alpha}\frac{\hbar}{mc}. \tag{2}$$

یادآوری می کنیم که $\frac{\hbar}{mc}$ طول موج کامپتونِ الکترون است.

تمرین: اتم هیدروژن ایده آل وقتی که از لایه $n = 2$ به لایه $n = 1$ گذار می کند از خود نور تابش می کند. طول موج این نور چقدراست؟

تمرین: اگر جرم هسته را در نظر بگیریم، این طول موج چقدر خواهد بود؟

تمرین: اگر این گذار در اتم هلیوم یک بار یونیزه صورت بگیرید طول موج نور چقدر خواهد بود؟

۲ اثر نسبیتی

دیدیم که سرعت الکترون ازمرتبه $\frac{1}{137}$ سرعت نوراست و به همین دلیل درتقریب صفرم از اثرات نسبیتی صرف نظرکردیم. برای دقت بیشتر می بایست این اثرات را بحساب بیاوریم. نخست می بایست هامیلتونی را تصحیح کنیم. برای انرژی جنبشی الکترون می بایست بجای $\frac{P^2}{2m}$ عبارت نسبیتی آن را به کارببریم که برابراست با

$$T = \sqrt{m^2c^4 + P^2c^2} - mc^2 = mc^2(1 + (\frac{p}{mc})^2)^{\frac{1}{2}} - mc^2 \tag{3}$$

با استفاده از بسط دو جمله‌ای یعنی $(1+x)^p \sim 1 + px + \frac{1}{2}p(p-1)x^2 + O(x^3)$ عبارت انرژی جنبشی را می توانیم به صورت زیر بسط دهیم

$$T = \frac{P^2}{2m} - \frac{1}{8}(\frac{p^4}{m^3c^2}) \tag{4}$$

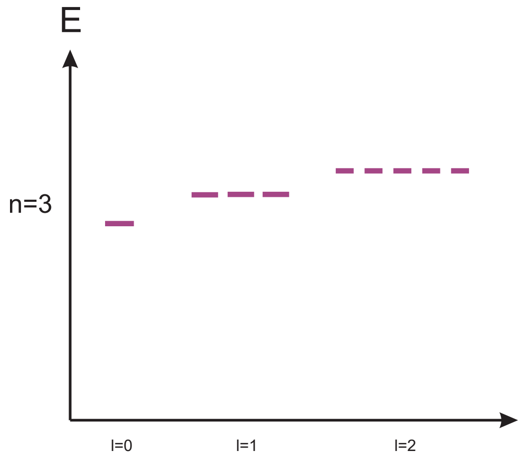
اولین تصحیح به جمله انرژی جنبشی وقتی بدست می آید که تنها دوجمله اول و دوم را نگاه داریم. بنابراین هامیلتونی یک اتم هیدروژن گونه به صورت زیر خواهد بود:

$$H = H_0 - \frac{1}{8}\frac{P^4}{m^3c^2} = H_0 + H_1. \tag{5}$$

بهتراست که نخست مرتبه تصحیح انرژی را تخمین بزنیم. علامت $\approx$ را برای این تخمین بکار خواهیم برد. با این مقدمه می توانیم بنویسیم

$$H_1 \sim \frac{1}{4}\frac{1}{2}mc^2(\frac{P}{mc})^4 \sim \frac{1}{4}\frac{1}{2}mc^2(\frac{v}{c})^4 \sim \frac{1}{4}\frac{1}{2}mc^2\alpha^4 \sim \frac{1}{4}E_0\alpha^2. \tag{6}$$

بنابراین تصحیح انرژی ناشی از اثر نسبیتی حدوداً یک صدهزارم انرژی یک حالت است. بااین وجود این تصحیح را می بایست درنظرگرفت زیرا دقت اندازه گیری ها آنقدر هست که آن را آشکار کند.
حال به محاسبه دقیق این تصحیح درمرتبه اول اختلال می پردازیم. جمله H_1 را به صورت اختلال بررسی می کنیم. می دانیم که ترازهای اتم هیدروژن دریک لایه با $|n,l,m\rangle$ یعنی سه عدد کوانتومی نشان داده می شوند ولی انرژی آنها تنها به عدد



شکل ۱: نمونه ای از تصحیح نسبیتی برای اتم هیدروژن. به دلیل اینکه پتانسیل اختلال یک عملگر اسکالراست واگنی ناشی از تقارن دورانی در اثر این اختلال از بین نمی رود.

کوانتومی n بستگی دارد. بنابراین هرتراز انرژی واگنی دارد. عدم وابستگی انرژی به m ناشی از تفارن دورانی ولی عدم وابستگی آن به l ناشی از یک تقارن بزرگتراست که اصطلاحاً تقارن $SO(4)$ نامیده می شود و مثل تقارن دورانی دلیل ملموس فیزیکی ندارد.

مطابق با آنچه که در درس پیشین دیدیم از آنجا که پتانسیل اختلال یک اسکالر است یعنی با تمام مولدهای دوران جابجا می شود به دو نتیجه خیلی ساده و مهم می رسیم:

یکی اینکه پتانسیل اختلال در لایه های واگن (یعنی l, m های مختلف قطری است.) بنابراین همین لایه ها (بدون نیاز به اینکه ترکیب خطی جدیدی از آنها پیدا کنیم) ویژه حالت هامیلتونی جدید هم هستند. دوم اینکه لایه های واگن مربوط به دوران (یعنی m های مختلف برای یک l خاص) همگی به یک اندازه تصحیح انرژی پیدا می کنند (شکل ۱) .

بنابراین داریم

$$\Delta E_{n,l} = \langle n, l, m | H_1 | n, l, m \rangle. \tag{7}$$

برای محاسبه ازاین مطلب استفاده می کنیم که

$$H_1 = \frac{-1}{8}\frac{P^4}{m^3c^2} = \frac{-1}{2mc^2}(\frac{P^2}{2m})^2 = \frac{-1}{2mc^2}\left(H_0 + \frac{e^2}{r}\right)^2.$$

بنابراین

$$\Delta E_{n,l} \quad = \quad -\frac{1}{2mc^2}\langle n, l, m | H_0^2 + \frac{e^4}{r^2} + H_0\frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{r}H_0 | n, l, m \rangle$$

$$= -\frac{1}{2mc^2}\left(E_n^2 + 2E_ne^2\langle\frac{1}{r}\rangle_{n,l} + e^4\langle\frac{1}{r^4}\rangle_{n,l}\right). \tag{8}$$

اما می دانیم که

$$\langle\frac{1}{r}\rangle_{n,l} = \frac{1}{a_0n^2}, \qquad \langle\frac{1}{r^2}\rangle_{n,l} = \frac{1}{a_0^2n^3(l+\frac{1}{2})}. \tag{9}$$

تمرین: صحت عبارت های بالا را با محاسبه انتگرال های مربوطه برای حالت پایه اتم هیدروژن تایید کنید.

باجایگذاری این مقادیر در رابطه قبلی خواهیم داشت

$$\Delta E_{n,l} = -\frac{1}{2mc^2}\left(E_n^2 + 2E_ne^2\frac{1}{a_0n^2} + e^4\frac{1}{a_0^2n^3(l+\frac{1}{2})}\right). \tag{10}$$

با توجه به رابطه هایی که در مقدمه به آن اشاره کردیم تصحیح انرژی به صورت زیر ساده می شود:

$$\Delta E_{n,l} = \left[\frac{-3}{4n^2} + \frac{1}{n(l+\frac{1}{2})}\right]\alpha^2E_n. \tag{11}$$

این رابطه نشان می دهد که درترازهای بالاتر اثرات نسبیتی کمتر می شود. دلیل این امر آن است که با افزایش n مرتبه سرعت به صورت $\frac{1}{n}$ کم می شود و این امر باعث کاهش اثرات نسبیتی می شود. برای اینکه این کاهش را ببینید کافی است که یک محاسبه ساده با استفاده از مدل اتمی بوهر انجام دهید.

تمرین: دریکی از تمرین های قبلی طول موج نوری را که در گذار اتم هیدروژن از لایه $n = 2$ به لایه $n = 1$ تابش می شود محاسبه کردید. اگر اثر نسبیتی را در نظر بگیرید، طول موج نور تابش شده از لایه $|n = 2, l = 1, m\rangle$ را به لایه‌ی $|n = 1, l = 0, m = 0\rangle$ حساب کنید و تفاوت این طول موج را با وقتی که اثر نسبیتی را در نظر نگرفته اید مشخص کنید.

تمرین: برای نوسانگر هارمونیک دو بعدی همسانگرد تصحیح نسبیتی انرژی را تا مرتبه اول برای حالت پایه و هم چنین برای اولین حالت برانگیخته حساب کنید. دقت کنید که اولین حالت برانگیخته واگنی درجه ۲ دارد. در باره تقارن دورانی و اثر آن در محاسبه این تصحیح بحث کنید.

تمرین: یک ذره به جرم m درون چاه یک بعدی بی نهایت عمیق به پهنای $2a$ قرار گرفته است. تصحیح نسبتی لایه های انرژی این ذره را تا مرتبه اول حساب کنید. هم چنین ویژه حالت های جدید انرژی را تا رتبه اول اختلال بدست آورید.

۳ جفتیدگی اسپین مدار – شکافت ریز

دراین بخش تصحیح ناشی از برهم کنش ممان مغناطیسی الکترون را با میدان مغناطیسی ناشی از حرکت مداری آن بدست می آوریم. می دانیم که الکترون بدلیل تکانه زاویه ای ذاتی یا اسپین خود یک ممان مغناطیسی دارد که آن را با μ_s نشان می دهیم:

$$\mu = -\frac{g_e \epsilon}{2mc} S. \tag{12}$$

دراین رابطه g_e ثابت ژیرو مغناطیسی الکترون نام دارد و مقدار آن به عدد 2 بسیار نزدیک است . به همین جهت ازاین به بعد می نویسیم $\mu = -\frac{\epsilon}{mc}\mathbf{S}$.

از دید ناظری که نسبت به الکترون ساکن است هسته اتم با بار e و سرعت $-\mathbf{v}$ خرکت می کند. چنین ذره ای یک میدان مغناطیسی تولید می کند که اندازه اش از روی میدان الکتریکی تولید شده توسط آن بدست می آید و برابراست با

$$B = \frac{v}{2c} \times E. \tag{13}$$

دقت کنید که ضریب 2 درمخرج در حرکت مستقیم الخط وجود ندارد. بنابراین انرژی برهم کنش ممان مغناطیسی الکترون دراین میدان مغناطیسی برابراست با

$$H_2 \quad = \quad -\mu_s \cdot B = \frac{e}{mc} S \cdot \frac{v}{2c} \times E = \frac{e}{m^2 c} S \cdot \frac{P}{2c} \times \frac{e}{r^3} \vec{r} \tag{14}$$

ویا

$$H_2 = \frac{-e^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r^3} S \cdot L. \tag{15}$$

حال همان مراحلی را که برای تصحیح نسبیتی طی کردیم برای این پتانسیل نیز طی می کنیم یعنی:

الف : مرتبه تصحیح را تخمین می زنیم

ب : نگاه می کنیم که آیا پتانسیل H_2 درپایه $|n, l, m\rangle$ قطری است یا خیر؟ اگر قطری نیست آیا پایه دیگری از حالت های موجود دراین تراز می توانیم انتخاب کنیم بطوری که پتانسیل H_2 درآن قطری باشد؟ برای این کار می بایست به رابطه جابجایی H_2 و L_z و L^2 نگاه کنیم.

ج: آیا این تصحیح واگنی موجود دریک تراز انرژی را از بین می برد؟ برای این کار می بایست به تقارن های H_2 به خصوص به تقارن آن تحت دوران نگاه کنیم. این تقارن با روابط جابجایی H_2 با مولد های دوران یعنی L_z و $L_\pm$ مشخص می

شود.

حال این مراحل را یک به یک طی می کنیم. نخست مرتبه تصحیح:

$$H_2 \sim \frac{-e^2}{2m^2c^2}\frac{1}{a_0^3}\hbar^2 \sim \frac{e^2}{2a_0}\left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2\frac{1}{a_0^2} \sim E_0\alpha^2. \tag{16}$$

که درآن از روابط درج شده در مقدمه استفاده کرده ایم. بنابراین این تصحیح از همان مرتبه تصحیح نسبیتی است.

حال به مرحله دوم می پردازیم. عملگر $\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$ درپایه $|n,l,m\rangle$ قطری نیست. ولی $\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$ را به شکل زیر می نویسیم

$$S\cdot L = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2), \tag{17}$$

که درآن $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ تکانه زاویه ای کل است. این رابطه نشان می دهد که حالت هایی که تکانه زاویه ای کل آنها مشخص باشد، ویژه بردار $\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$ و درنتیجه H_2 هستند. درفصل مربوط به جمع اندازه حرکت زاویه ای دیدیم که این حالت ها را می توان به شکل زیر نمایش داد

$$|j, m_j, l\rangle \tag{18}$$

که ویژه بردارهای مشترک J^2، J_z و L^2 هستند. ضمناً می دانیم که از $(2l+1)\times 2$ حالت $|l,m\rangle|+\rangle$ و $|l,m\rangle|-\rangle$ می توان یک دسته $2l+2$ تایی با $j = l + \frac{1}{2}$ و یک دسته $2l$ تایی دیگر با $j = l - \frac{1}{2}$ ساخت.
ازآنجا که H_2 دراین پایه قطری است می توانیم بنویسیم

$$\Delta E_{n,j,m_j,l} = \langle n, j, m_j, l|H_2|n, j, m_j, l\rangle. \tag{19}$$

ممکن است خواننده سوال کند که چرا با وجود اینکه عملگر $\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$ یک عملگر اسکالراست، در همان حالت های $|n,l,m\rangle$ قطری نشد؟ چه تفاوتی بین این عملگر و عملگر $H_1 \propto P^2$ وجود دارد که باعث این پدیده شده است؟ پاسخ این سوال آن است که عملگر P^2 تحت دوران های فضایی با مولدهای L_a اسکالراست ولی عملگر $\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$ تحت دوران های کلی (یعنی دوران در فضا بعلاوه اسپین که فضای هیلبرت آن $(H_{spin}\otimes H_{space})$ است یک اسکالراست. مولدهای دوران در این فضای بزرگ عبارتند از $J_a = L_a + S_a$. به همین دلیل است که عملگر $\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$ با J_a ها جابجا می شود ولی با L_a ها جابجا نمی شود.

حال می توانیم به مرحله سوم بپردازیم و آن اینکه آیا این تصحیح انرژی به همه اعداد کوانتومی بستگی دارد یا خیر. برای پاسخ به این سوال بازهم به تقارن دورانی توجه می کنیم و اینکه عملگر $\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$ و درنتیجه H_2 درفضای هیلبرت کل (فضایی + اسپینی) یک اسکالر است یعنی

$$[H_2, J_z] = [H_2, J_\pm] = 0. \tag{20}$$

این تقارن نشان می دهد که تصحیح انرژی به m_j بستگی ندارد. بنابراین می نویسیم

$$\Delta E_{n,j,l} = \langle n, j, m_j, l | H_2 | n, j, m_j, l \rangle. \tag{21}$$

حال این عنصر ماتریسی را صریحاً محاسبه می کنیم.

$$\begin{aligned} \Delta E_{n,j,l} &= \langle n, j, m_j, l | \frac{-e^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r^3} \frac{1}{2} (J^2 - L^2 - S^2) | n, j, m_j, l \rangle \\ &= \frac{-e^2}{2m^2c^2} \langle \frac{1}{r^3} \rangle_{n,l} \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right). \end{aligned} \tag{22}$$

با توجه به اینکه

$$\langle \frac{1}{r^3} \rangle_{n,l} = \frac{1}{a_0^3} \frac{1}{n^3 \ l \ (l+1/2)(l+1)} \tag{23}$$

با جایگزینی این مقدار در رابطه قبلی بدست می آوریم

$$\begin{aligned} \Delta E_{n,j,l} &= \langle n, j, m_j, l | \frac{-e^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r^3} \frac{1}{2} (J^2 - L^2 - S^2) | n, j, m_j, l \rangle \\ &= \frac{-e^2}{2m^2c^2} \ \frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{a_0^3 n^3 \ l(l+1/2)(l+1)}. \end{aligned} \tag{24}$$

ویا پس از کمی ساده کردن

$$\begin{aligned} \Delta E_{n,j=l+1/2,l} &= \frac{-1}{2} E_n \alpha^2 \frac{l}{n \ l \ (l+1/2)(l+1)} \\ \Delta E_{n,j=l-1/2,l} &= \frac{-1}{2} E_n \alpha^2 \frac{-l-1}{n \ l \ (l+1/2)(l+1)}. \end{aligned} \tag{25}$$

تمرین: وقتی که اتم هیدروژن از لایه های $|n=2, l=1\rangle$ به لایه‌ی $|n=1, l=0\rangle$ گذار می کند نوری از خود تابش می کند. طول موج این نور بدون در نظر گرفتن اثر جفتیدگی اسپین — مدار حساب کنید. حال جفتیدگی اسپین مدار را در نظر بگیرید. خط طیفی که قبلا می دیدید به چند خط شکافته شده است؟ طول موج خط یا خط های جدید چقدر با طول موج خط قبلی تفاوت دارد؟

تمرین: یک نوسانگر هارمونیک یک بعدی به جرم m و فرکانس ω در نظر بگیرید. جمله انرژی جنبشی را به صورت نسبیتی در نظر گرفته و آن را تا مرتبه P^4 بسط دهید. بنابراین هامیلتونی به صورت زیر خواهد بود:

$$H = H_0 - \frac{1}{8}(\frac{P}{mc})^2 + \frac{3}{16}(\frac{P}{mc})^4 + \cdots \tag{26}$$

الف: حال جمله $V := -\frac{1}{8}(\frac{P}{mc})^2 + \frac{3}{16}(\frac{P}{mc})^4$ را به صورت اختلال در نظر بگیرید و تصحیح انرژی لایه $|n\rangle$ را تا مرتبه یک اختلال محاسبه کنید.

ب: حال جمله $V := -\frac{1}{8}(\frac{P}{mc})^2$ را به صورت اختلال در نظر بگیرید و از جمله متناسب با P^4 صرف نظر کنید. اما این بار تصحیح انرژی لایه $|n\rangle$ را تا مرتبه دوم اختلال محاسبه کنید.
در باره این دو نتیجه چه می توانید بگویید؟

۴ جفتیدگی اسپین اسپین – شکافت فوق ریز

شکافت فوق ریز ناشی از برهم کنش ممان مغناطیسی الکترون با ممان مغناطیسی هسته است. هسته اتم باجرم M_N، بار $+e$، اسپین $\mathbf{I}$ و ضریب ژیرومغناطیسی g_N ممان مغناطیسی زیر را دارد.

$$M = \frac{g_N e}{2M_N c} I \tag{27}$$

این ممان مغناطیسی درنقطه $\mathbf{r}$ یک پتانسیل برداری تولید می کند که با رابطه زیر داده می شود

$$A = -\frac{1}{4\pi}(M \times \nabla)\frac{1}{r} = \frac{1}{4\pi} M \times \frac{r}{r^3}. \tag{28}$$

میدان مغناطیسی ناشی از این پتانسیل برداری برابراست با

$$B = \nabla \times A = \frac{1}{4\pi}\nabla \times (M \times \frac{r}{r^3}). \tag{29}$$

کمی محاسبه و استفاده از اتحاد های برداری نشان می دهد که میدان مغناطیسی برابراست با:

$$B = -\frac{1}{4\pi}\left[(\nabla^2 \frac{1}{r})M - (M \cdot \nabla)\nabla \frac{1}{r}\right]. \tag{30}$$

ازطرفی می دانیم که ممان مغناطیسی الکترون برابراست با

$$\mu = \frac{-e}{mc} S. \tag{31}$$

انرژی برهم کنش ممان مغناطیسی الکترون واین میدان مغناطیسی که آن را با H_3 نشان می دهیم برابر است با:

$$\begin{aligned} H_3 &= \mu \cdot B = \frac{1}{4\pi}(\frac{e}{mc})(\frac{g_N e}{2M_N c}) \left[(\nabla^2 \frac{1}{r}) S \cdot I - (I \cdot \nabla)(S \cdot \nabla)\frac{1}{r}\right] \\ &= -\gamma \left[(\nabla^2 \frac{1}{r}) S \cdot I - (I \cdot \nabla)(S \cdot \nabla)\frac{1}{r}\right] \end{aligned} \tag{32}$$

که درآن γ ضریب پشت کروشه است.

حال که هامیلتونی برهم کنش را بدست آورده ایم می خواهیم تصحیح انرژی را محاسبه کنیم. برای سادگی این تصحیح را فقط برای اربیتال های S یعنی حالت های $|n,0,0\rangle$ محاسبه می کنیم. در نمادی که برای نمایش دادن این اوربیتال بکاربرده ایم هیچ اثری از عدد کوانتومی اسپین الکترون دیده نمی شود. هم چنین اسپین هسته نیز وارد نشده است. می توانیم از نوشتن اعداد کوانتومی $m=0$ و $l=0$ صرف نظر کنیم و درعوض توجه خود را به این اعداد کوانتومی معطوف کنیم و یک حالت را با $|n,\alpha,\beta\rangle$ نمایش دهیم که درآن $\alpha = \pm$ و $\beta = \pm$ به ترتیب نشان دهنده اسپین الکترون و هسته هستند. یادآوری می کنیم که هرگاه اسپین هسته را نیز درنظربگیریم هر تراز $|n,l,m\rangle$ از اتم هیدروژن ایده آل ازجمله تراز $|n,0,0\rangle$ که برای سادگی آن را با $|n\rangle$ نشان می دهیم یک واگنی 4 گانه دارد که این واگنی ناشی از درجات آزادی اسپینی الکترون و هسته است. به عبارت دیگر حالت های $|n,+,+\rangle,\ |n,+,-\rangle,\ |n,-,+\rangle,\ |n,-,-\rangle$ همه یک انرژی دارند. این واگنی دراثر برهم کنش اسپین — اسپین ازبین می رود و ما اکنون درصدد هستیم که این تغییرات را حساب کنیم. نخست انتگرال های فضایی را حساب می کنیم . بنابراین

$$\langle n|H_3|n\rangle = -\gamma \int \psi_{n,0,0} \left[(\nabla^2 \frac{1}{r}) S \cdot I - (I \cdot \nabla)(S \cdot \nabla)\frac{1}{r}\right] \psi_{n,0,0} d^3r \tag{33}$$

برای محاسبه طرف راست دقت می کنیم که جمله دوم داخل کروشه را در طرف راست با توجه به تقارن دورانی توابع موج می توان به شکل زیرنوشت:

$$(I \cdot \nabla)(S \cdot \nabla)\frac{1}{r} = \frac{1}{3}(I \cdot S)\nabla^2 \frac{1}{r}. \tag{34}$$

بنابراین طرف راست برابر است با

$$-\frac{2}{3}\gamma \int \psi_{n,0,0} \left[\nabla^2 \frac{1}{r}\right] \psi_{n,0,0} d^3r \tag{35}$$

باتوجه به اینکه $\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta^3(r)$ و $\psi_{n,0,0}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{n,0,0}(r)$ عبارت بالا برابر است با

$$\frac{2}{3}\gamma |R_{n,0,0}(0)|^2. \tag{36}$$

مقدار $|R_{n,0,0}(0)|^2$ برابراست با $\frac{4}{n^3a_0^3}$. (برای اثبات این می توانید به یک کتاب پیشرفته مکانیک کوانتومی مثل کتاب $Bethe$ و $Salpeter$ نگاه کنید.)

باکنارهم قراردادن این مقادیر بدست می آوریم

$$\langle n|H_3|n\rangle = \frac{8}{3}\gamma\frac{1}{n^3a_0^3}S\cdot I. \tag{37}$$

با توجه به آنچه که درباره واگنی مربوط به اسپین گفتیم این رابطه را می بایست به شکل دقیق تر زیر بنویسیم

$$\langle n,\alpha',\beta'|H_3|n,\alpha,\beta\rangle = \frac{8}{3}\gamma\frac{1}{n^3a_0^3}\langle\alpha',\beta'|S\cdot I|\alpha,\beta\rangle. \tag{38}$$

اما می دانیم که عملگر $\mathbf{S}\cdot\mathbf{I}$ درپایه $|n,\alpha,\beta\rangle$ قطری نیست. اما درست شبیه به کاری که درمورد جفتیدگی اسپین مدار انجام دادیم دراین مورد هم می توانیم به این نکته توجه کنیم که $\mathbf{S}\cdot\mathbf{I}$ را می توان به شکل زیر نوشت

$$S\cdot I = \frac{1}{2}(F^2 - I^2 - S^2) = \frac{1}{2}(F^2 - \frac{3}{2}). \tag{39}$$

که درآن $\mathbf{F}=\mathbf{S}+\mathbf{I}$ اسپین کل هسته و الکترون است. بنابراین درپایه ای که اسپین کل هسته و الکترون درآن مشخص است H_3 قطری است. بنابراین بجای پایه $|\alpha,\beta\rangle$ حالت های $Singlet$ با $F=0$ و $Triplet$ با $F=1$ را درنظرمی گیریم یعنی حالت های

$$Singlet = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle - |-,+\rangle), \tag{40}$$

و

$$Triplet = \begin{cases} |+,+\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle + |-,+\rangle) \\ |-,-\rangle \end{cases} \tag{41}$$

تغییر انرژی حالت $Singlet$ برابر خواهد بود با

$$\Delta E(F=0) = \frac{8}{3}\gamma\frac{1}{n^3a_0^3}\times\frac{-3}{4} = -2\gamma\frac{1}{n^3a_0^3} \tag{42}$$

و تغییر انرژی حالت های $Triplet$ برابر خواهد بود با

$$\Delta E(F=1) = \frac{8}{3}\gamma\frac{1}{n^3a_0^3}\times\frac{1}{4} = \frac{2}{3}\gamma\frac{1}{n^3a_0^3}. \tag{43}$$

تفاوت انرژی این دو لایه برابر است با

$$\Delta E = \Delta E(F=1) - \Delta E(F=0) = \frac{8}{3}\gamma\frac{1}{n^3 a_0^3}. \tag{44}$$

برای لایه $n=1$ تقاوت انرژی این دولایه متناظر با طول موج

$$\lambda \approx 21.1 \ \ cm \tag{45}$$

است.
خط ۲۱ سانتی متر هیدروژن، آنطور که درنجوم و اختر فیزیک نامیده می شود اهمیت فوق العادی ای درمشاهدات اخترفیزیکی دارد. دلیل این امر آن است که درحالت عادی یک اتم هیدروژن درپایین ترین حالت انرژی یعنی $n=1, \ F=0$ است. دراین حالت بخاطر یک قاعده انتخاب که بعداً با آن آشنا خواهیم شد اتم نمی تواند فوتونی را جذب کرده و به حالت بالاتر یعنی $n=1, \ F=1$ تحریک شود. اما برخورد با دیگر اتم های هیدروژن می تواند باعث تحریک آن به این لایه بشود. دربازگشت ازاین لایه اتم می تواند نوری با طول موج 21.1 سانی متر از خود ساطع کند که درطیف نگاری به آن خط ۲۱ سانتی متر هیدروژن گفته می شود. اخترفیزیکدانان با مطالعه این خط می توانند اطلاعات باارزشی از چگالی و دمای گازهای میان ستاره ای که عموماً از هیدروژن تشکیل یافته اند و هم چنین نحوه حرکت آنها بدست آورند. شدت و پهنای این خط به ترتیب به چگالی و دمای گاز هیدروژن مربوط هستند و جابجایی دوپلری این خط نیز سرعت حرکت گاز را تعیین می کند.

۵ اثر زیمان با درنظر گرفتن اسپین

درپایان این فصل می خواهیم اثر زیمان را با درنظرگرفتن اسپین الکترون یک باردیگر مطالعه کنیم. دریک میدان مغناطیسی ثابتِ B درراستای z، برهم کنش میدان مغناطیسی و ممان مغناطیسی مداری و اسپینی الکترون منجر به انرژی برهم کنش زیر می شود:

$$H_B = -(\mu_l + \mu_s)\cdot B = \frac{e}{2\mu c}(2S+L)\cdot B = \frac{e}{2\mu c}(2S_z + L_z)B, \tag{46}$$

که درآن جرم الکترون را برای اشتباه نشدن با عدد کوانتومی m با μ نشان داده ایم.

نخست بهتراست که مرتبه این انرژی را با تصحیح ناشی از برهم کنش اسپین مدار مقایسه کنیم. می دانیم که برهم کنش اسپین مدار از مرتبه $\alpha^2\frac{e^2}{a_0}$ است. باتوجه به اینکه $\frac{\hbar}{\mu c} = \alpha a_0$ ، خواهیم داشت

$$\frac{H_B}{H_{S-O}} \sim \frac{1}{\alpha}\frac{B\ a_0^2}{e} \sim 10^{-4}B. \tag{47}$$

درنتیجه درمیدان های مغناطیسی متعارف که از 10^4 گاووس کوچکترند، اثر زیمان بسیار کوچکتر از اثر جفتیدگی اسپین—مداراست. به همین جهت می بایست اثر زیمان را برای حالت های انرژی اتم هیدروژن واقعی بدست بیاوریم و نه اتم هیدروژن ایده آل. البته از جفتیدگی اسپین —اسپین می توانیم صرف نظرکنیم زیرا می دانیم که اثر آن حدوداً ۲۰۰۰ بار کوچکتراز جفتیدگی اسپین مداراست. ویژه حالت های انرژی برای اتم هیدروژن ایده آل با چهارعدد کوانتومی $|n, j, m_j = m + \frac{1}{2}, l\rangle$ که درآن $j = l \pm \frac{1}{2}$ مشخص می شوند و می دانیم که طیف انرژی نسبت به m_j واگنی دارد. مطابق معمول نخستین سوالی که باید از خود بپرسیم آن است که آیا دراین پایه پتانسیل اختلال قطری است یاخیر؟ پاسخ این سوال مثبت است زیرا پتانسیل اختلال با عملگر J_z جابجا می شود. بنابراین خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}\Delta E_{n,j,m+\frac{1}{2},l} &= \langle n, j, m + \frac{1}{2}, l|H_B|n, j, m + \frac{1}{2}, l\rangle = \frac{e}{2\mu c}\langle n, j, m + \frac{1}{2}l|J_z + S_z|n, j, m + \frac{1}{2}, l\rangle \\ &= \frac{e}{2\mu c}\left(m + \frac{1}{2} + \langle n, j, m + \frac{1}{2}, l|S_z|n, j, m + \frac{1}{2}, l\rangle\right). \end{aligned} \tag{48}$$

اما از درس مربوط به جمع تکانه زاویه ای می دانیم که

$$\begin{aligned}|j = l + \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, l\rangle &= \alpha_{l,m}|l, m\rangle|+\rangle + \beta_{l,m}|l, m + 1\rangle|-\rangle, \\ |j = l - \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, l\rangle &= \beta_{l,m}|l, m\rangle|+\rangle - \alpha_{l,m+1}|l, m + 1\rangle|-\rangle,\end{aligned} \tag{49}$$

که درآن

$$\alpha_{l,m} = \sqrt{\frac{l + m + 1}{2l + 1}}, \qquad \beta_{l,m} = \sqrt{\frac{l - m}{2l + 1}}. \tag{50}$$

با استفاده از این رابطه براحتی معلوم می شود که

$$\begin{aligned}\langle n, j, m + \frac{1}{2}, l|S_z|n, j, m + \frac{1}{2}, l\rangle) &= \alpha^2_{l,m} - \beta^2_{l,m} = \frac{2m + 1}{2l + 1} \qquad & j = l + \frac{1}{2} \\ \langle n, j, m + \frac{1}{2}, l|S_z|n, j, m + \frac{1}{2}, l\rangle) &= \beta^2_{l,m} - \alpha^2_{l,m} = -\frac{2m + 1}{2l + 1} \qquad & j = l - \frac{1}{2}.\end{aligned} \tag{51}$$

درنتیجه بدست می آوریم

$$\Delta E_{n,j=l+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2},l} = \frac{e}{2\mu c}\frac{2l + 2}{2l + 1}(2m + 1), \tag{52}$$

و

$$\Delta E_{n,j=l-\frac{1}{2},m+\frac{1}{2},l} = \frac{e}{2\mu c}\frac{2l}{2l + 1}(2m + 1). \tag{53}$$

هردو رابطه را می توان دررابطه زیر گنجاند که درآن $m_j = m + \frac{1}{2}$:

$$\Delta E_{n,j,m_j,l} = \frac{2e}{\mu c}\frac{j+\frac{1}{2}}{2l+1}m_j. \qquad (54)$$