فصل سوم جلسه سوم

قبل از بررسی ذره دیراک در یک پتانسیل کولنی، لازم است که تصحیحات نسبیتی در رابطه (۵) صفحه ضمیمه شده به جلسه قبل (جلسه دوم از فصل سوم) را برای موردی که در آن $A=0$ و $q\phi=V(r)$ نماینده یک پتانسیل مرکزگرا است را دوباره بازآرایی نماییم. پس با جاگذاری رابطه (۴) در (۵) و استفاده از تعریف انرژی کل (ε_i') داریم (مشق)

$$(1)\quad \left\{\left[\frac{\hat{p}\cdot\hat{\sigma}\left[1-\frac{\varepsilon_i'-V(r)}{2mc^2}\right]\hat{p}\cdot\sigma}{2m}\right]+V(r)\right\}\psi_i^{(A)}=\varepsilon_i'\,\psi_i^{(A)}$$

که در آن $T=\varepsilon_i'-V(r)=\frac{\hat{p}^2}{2m}$ (انرژی جنبشی غیرنسبیتی ذره است). با استفاده از اتحادهای همگنی معرفی شده در رابطه (۸) صفحات ضمیمه و خواص عملگر $\hat{\sigma}$ و ∇ و $\hat{p}=\frac{\hbar}{i}\nabla$ به جای جمله درون کروشه در رابطه بالا خواهیم داشت (مشق را انجام دهید)

$$(2)\quad \text{جمله درون کروشه}=\frac{\hat{p}^2}{2m}-\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2}-\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\nabla V(r)\cdot\nabla+\frac{\hbar}{4m^2c^2}\hat{\sigma}\cdot\nabla V\times\hat{p}$$

بنابراین با جاگذاری رابطه (۲) در رابطه (۱) و توجه به اینکه برای میدان‌های مرکزگرا داریم $\nabla V=\frac{dV}{dr}\frac{\vec{r}}{r}$ در نهایت با بازآرایی و مرتب کردن جملات خواهیم داشت

$$(3)\quad \left\{\underbrace{\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(r)\right)}_{\text{هامیلتونی غیرنسبیتی}}-\underbrace{\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2}}_{\text{مربوط به تغییر جرم}}+\underbrace{\frac{\hbar}{4m^2c^2}\times\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\hat{\sigma}\cdot(\vec{r}\times\hat{p})}_{\text{انرژی اسپین-مدار}}-\underbrace{\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\frac{dV(r)}{dr}\frac{\partial}{\partial r}}_{\text{جمله داروین}}\right\}\psi_i^{(A)}=\varepsilon_i'\,\psi_i^{(A)}$$

انرژی اسپین-مدار را می‌باشد

$$\Delta E=\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\hat{s}\cdot\hat{l}$$

که برای هیدروژن می‌شود

$$\Delta E(\text{اسپین-مدار})=\frac{1}{2m^2c^2}\frac{e^2}{r^3}\hat{s}\cdot\hat{l}$$

که در مورد اتم هیدروژن در میدان الکترومغناطیسی با ورود ضریب تقدیمی ($\frac{e}{2mc}$) (در کوانتوم ۲ لیسانس) برای هیدروژن هامیلتونی کل می‌شود

$$\hat{H}=\hat{H}_{cl}+\frac{e^2}{2m^2c^2}\frac{1}{r^3}\hat{s}\cdot\hat{l}+\underbrace{\frac{e}{2mc}\hat{l}\cdot\vec{B}+\frac{e}{mc}\hat{s}\cdot\vec{B}}_{\text{به دلیل حضور میدان } B_0 \text{ ظاهر می‌شوند}}$$

معروف به جمله داروین که در بحث الکترون در میدان مغناطیسی (کوانتوم ۲ لیسانس) به آن اشاره شده است. که در اتم هیدروژن جمله داروین تصحیحات مرتبه اول انرژی را فقط در حالت‌های s ($L=0$) ایجاد می‌کند.

$$\Delta E(\text{داروین})\propto\langle n,l|\frac{dV(r)}{dr}\frac{\partial}{\partial r}|n,l\rangle$$

که برای اتم هیدروژن که $V(r)=-\frac{e^2}{r}$ بود ΔE می‌شود

$$\Delta E=\frac{e^2}{2}|R_{n0}(r)|$$

بررسی کنید جمله داروین برای اتم هیدروژن فقط در حالت‌های s ($L=0$) ایجاد می‌شود؟ (مشق)
بنابراین اثرات ساختار ریز در هیدروژن‌ها تا آثار نسبیتی مرتبه اول معادله دیراک هستند، بنابراین می‌توانیم یک ذره دیراک را یک الکترون نسبیتی در نظر بگیریم.

جلسه هشتم ۹۸/۲/۷

$A = 0$

$q\Phi = V(r)$

رابطه‌ی III را ادامه می‌دهیم

$$T = \varepsilon_i' - V(r) = \frac{\hat{p}^2}{2m} \qquad p = \frac{\hbar}{i}\nabla$$

به جای جمله

$$\frac{1}{2m}(\hat{p}\cdot\sigma)\left[1 - \frac{\varepsilon_i' - V}{2mc^2}\right](\hat{p}\cdot\hat{\sigma}) =$$

مشق

با استفاده از اتحادهای عملگری گفته شده، خواص $\hat{\sigma}$ (عادی) . $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla$

به جمله‌ی پایین می‌رسیم

جملات ۲ و ۳ $\hbar$ دارد ولی $\nabla V\cdot\nabla$ معلوم نیست دارای ۱ جواب دارد

مانند جمع اتحاد

$$= \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\nabla V\cdot\nabla + \frac{\hbar}{4m^2c^2}\hat{\sigma}\cdot\nabla V\times\hat{p} \qquad \text{IV}$$

داریم با پتانسیل مرکزی کار می‌کنیم که منجر به میدان مرکزگرا می‌شود و در میدان مرکزی رابطه‌ی زیر برقرار است

$$\nabla V = \frac{dV}{dr}\frac{\vec{r}}{r}$$

پس چون با میدان مرکزی سروکار داریم در معادله بالا IV به جای ∇V مقدارش را می‌گذاریم و در معادله I می‌گذاریم

$$\left\{\left(\frac{p^2}{2m} + V\right) - \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} - \frac{\hbar}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\,\sigma\cdot\underbrace{(\vec{r}\times\vec{p})}_{\hat{L}} - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\frac{dV}{dr}\frac{\partial}{\partial r}\right\}\psi_i^{(A)} = \varepsilon_i'\psi_i^{(A)}$$

(۴) (۵)

مربوط به هامیلتونی غیرنسبیتی هست — مربوط به تغییر جرم — جمله داروین

معادله ویژه مقدار دیراکی برای ذره

جمله (۴) که به صورت تغییرات انرژی (ΔE) اسپین مدار است به صورت

$$= \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\hat{S}\cdot\hat{L}$$

می‌باشد

$V = -\frac{e^2}{r}$ برای e هیدروژن آن گاه ΔE اسپین مدار به چه صورت می‌شود؟

$$\Delta E\,(\text{اسپین مدار}) = \frac{1}{2m^2c^2}\,\frac{1}{r}\,\frac{dV}{dr}\,\hat{S}\cdot\hat{L}$$

$$V = -\frac{e^2}{r} \Rightarrow \Delta E\,(\text{اسپین مدار}) = \frac{1}{2m^2c^2}\,\frac{e^2}{r^3}\,\hat{S}\cdot\hat{L}$$

پس جمله ۴ مانند جمله ای است که در غیاب اثر میدان مغناطیسی برای e هیدروژنی به نام جمله‌ی برهم کنش اسپین مدار است که در مقطع لیپاسن حرکت تقدیمی توماس $\frac{1}{2}$ به طور طبیعی ظاهر نمی‌شد اما در این جا ظاهر می‌شود.

جمله ۵ هم مطالعه و نیز مقداری در دیراکی بالا معروف به جمله داروین بوده که در یک گوانتوم ۲ لیپاسن مجبور بودیم برای نوشتن هامیلتونی بجای به اثرات آن اشاره کنیم

هامیلتونی غیرنسبیتی

$$H = \hat{H}_{c\varphi} + \frac{e^2}{2m^2c^2}\,\frac{1}{r^3}\,\hat{S}\cdot\hat{L} + \frac{e}{2mc}\,\hat{L}\cdot\hat{B} + \frac{e}{mc}\,\hat{S}\cdot\hat{B}$$

H هامیلتونی مرکزی های موکزی — جمله اسپین مدار — برهم کنش اندازه حرکت زاویه‌ای با میدان مغناطیسی — اثر اسپین مدار

نکته: حواسمان باشد که در اتم هیدروژن جمله ۵ (داروین) تصحیحات مرتبه اول انرژی را فقط در حالت های S $(L=0)$ ایجاد می‌کند چرا؟

برای پیدا کردن طیف هامیلتونی آن را بس

دانوی حالت های مجموعه‌ها را ساعدیوی کنیم

برای پیدا کردن وقتی عملگر H آن را اعمال وقتیه حالات مربوطه بسازند ویژه می‌بینیم

$$\Delta E\ (\text{داروین}) \propto \langle n,L|\ \frac{dV}{dr}\frac{\partial}{\partial r}\ |n,L\rangle$$

$$\rightarrow \int R_{nL}\frac{dV}{dr}\frac{dR_{nL}}{dr}\, r^2\, dr$$

حال اگر بخواهیم برای e هیدروژنی خاص بحث کنیم :

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

(از آن در رابطه‌ای استفاده می‌کنیم)

$$\Rightarrow \Delta E \propto e^2\int_0^\infty R_{nL}\frac{1}{\cancel{r^2}}\frac{dR_{nL}}{dr}\cancel{r^2}\, dr$$

$$\propto e^2\int_0^\infty R_{nL}\, dR_{nL} = -\frac{e^2}{2}\left(R_{nL}^2(r)\right)\Big]_0^\infty$$

جواب معادله شرودینگر برای R_{nL} مقید در سمت شعاعی در ∞ صفر می‌شود

$$= -\frac{e^2}{2}\left(\cancel{R_{nL}(\infty)} - R_{nL}(0)\right)$$

برای یک حالت مقید تابع در ∞ صفر می‌شود

از طرفی با شناختی که از R_{nL} داریم تابع مورد نظر باید باز هم در مبدأ برای تمامی حالات به جز حالت s صفر بشود. به همین دلیل جمله داروین تصحیحات مرتبه اول انرژی فقط برای حالت s $(l=0)$ وجود دارد.

بنابراین اثرات ساختار ریزی که قبلاً برای e هیدروژنی بحث می‌کردیم همان آثار نسبیتی مرتبه اول معادله دیراک هستند

پس می‌توانیم یک ذره دیراک را هم چون یک e نسبیتی بدانیم (در شرط مسئله اول)

ذره دیراک در پتانسیل کولنی : (ساختار ریز تصحیح دوم)

با اعمال scattering شکافتگی مرتبه اول را اعمال آن - به مرحله آخر انرژی مربوط به ساختار ریز را بحث می‌کنیم (و تغییرات در انرژی ساختار ریز از بحث پراکندگی قابل حصول است

اما می‌توانیم برای یک حالت حل پتانسیل کولنی ساختار ریز تصحیح دوم را حل می‌کنیم ⇐

مراحل تفکیک $\Rightarrow$ ① $\left\{ c\hat{\alpha}\cdot\hat{p} + \hat{\beta} mc^2 - \frac{e^2}{r} \right\} \psi_i = \varepsilon_i \psi_i$

دیگر نمی‌توانیم تابع موج را برابر $\psi = R_{nl} Y_{lm}(\theta,\varphi)$ انتخاب کنیم و این معادله را تفکیک کنیم چرا؟

زیرا خود معادله (به صورت کلی) جفت‌شدگی اسپین - مدار را در بر دارد و به همین دلیل دیگر L_z پایسته نیست

به همین دلیل و اما این جا که L_z پایسته نیست m عدد کوانتومی خوبی نمی‌شود (تحت تقارن...) اگر پایسته باشد m عدد کوانتومی می‌شود

برای تفکیک این معادله کار سختی نیاز است که انرژی به گفتن آن در این جا نیست به دلیل پیچیده بودن محاسبات اما می‌توانیم یک راه رفته را باز گو کنیم

برای انجام تفکیک دو دسته معادله (شامل) به صورت زیر می‌توانیم داشته باشیم

$$\psi_{\varepsilon l j, \pm m_j} = \begin{pmatrix} U(r)\left[\frac{L \pm m_j + 1/2}{2L+1}\right]^{1/2} Y_{L, m_j - 1/2} \\ \mp U(r)\left[\frac{L \mp m_j + 1/2}{2L+1}\right]^{1/2} Y_{L, m_j + 1/2} \\ -iV(r)\left[\frac{(L \pm 1) \mp (m_j \mp \frac{1}{2})}{(2L \mp 1) \pm 2}\right]^{1/2} Y_{L \pm 1, m_j + 1/2} \\ \mp iV(r)\left[\frac{(L \pm 1) \pm (m_j \pm \frac{1}{2})}{(2L+1) \pm 2}\right]^{1/2} Y_{L \pm 1, m_j + \frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

اندیس شاخص کوانتومی را دارد

$$j^{\pm} = L \pm \frac{1}{2}$$

$$|m_j| \leq j$$

$$p = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \longrightarrow \text{در مختصات کروی}$$

تحقیق

پس با وارد کردن این $\psi_{\varepsilon, L, j, \pm m_j}$ در رابطه (+) و نوشتن رابطه ① در مختصات کروی

به رابطه زیر می‌رسیم به جفت معادله زیر می‌رسیم

$$\begin{cases} \frac{1}{\hbar c}\left\{\varepsilon_i + \frac{e^2}{r} + mc^2\right\} V(r) = \frac{dU(r)}{dr} + \frac{(1+K)}{r} U(r) \\ \frac{1}{\hbar c}\left\{\varepsilon_i + \frac{e^2}{r} - mc^2\right\} U(r) = \frac{-dU(r)}{dr} + \frac{(1-K)}{r} V(r) \end{cases}$$

جفت معادله کوپل شده

حل می‌شود

K برای ψ_{j^+} می‌شود $K = -(L+1)$

K برای ψ_{j^-} می‌شود $K = L$

Subject:
Year: Month: Date:

حال حلی که برای تحت سطاعی معادله شرودینگر بدست می آوردیم این حالت ها را نام گذاریم و به جواب می دهیم

(۲)۱۷ و (۲)۱۷ که به عنوان تحت سطاعی که مربوط به حالتی مقید هستند باید فقط و فقط ویژه مقدار انرژی آن ها به مقادیر زیر محدود شود

$$\varepsilon_i = \varepsilon_{n'k} = mc^2 \left\{ 1 + \frac{\gamma^2}{\left[\left(\sqrt{k^2 - \gamma^2} \right) + n' \right]^2} \right\}^{-\frac{1}{2}}$$

$$\gamma = \frac{e^2}{\hbar c} \qquad , n' = 0, 1, 2, \dots$$

پس این نتیجه بدست آمده برای ε_i دقیق بود، و انرژی های کوانتیده شده یک e نسبیتی هیدروژنی را بدست می دهد

$$\gamma^2 \simeq \left(\frac{1}{137} \right)^2 = 10^{-4}$$

پس γ که از مرتبه ی 10^{-4} است در mc^2 ضرب شده که عدد مثبت به mc^2 خیلی کوچک است

پس می توانیم بسط دو جمله ای دقیق را حول γ^2 بسط دهیم

$$\varepsilon_i \simeq mc^2 \left[1 - \frac{\gamma^2}{2n^2} - \frac{\gamma^4}{2n^4} \left(\frac{n}{|k|} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right]$$

$$\Rightarrow \quad \underline{n = n' + |k|} = 1, 2, 3, \dots$$

$$\left.\begin{aligned} j^+ &= l + \tfrac{1}{2} \Rightarrow |k| = l + 1 \\ j^- &= l - \tfrac{1}{2} \Rightarrow |k| = l \end{aligned}\right\} \Rightarrow \boxed{|k| = j + \tfrac{1}{2}}$$

حال برای هر دو مورد از این حالت ها به یک رابطه واحد بین j و K می رسیم مثل بالا

$$\mathcal{E}_i = \mathcal{E}_{nj} = \underset{①}{mc^2} - \underset{②}{\frac{me^4}{2n^2\hbar^2}} - \underset{③}{\frac{\gamma^2 me^4}{2n^3\hbar^2}}\left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right)$$

$$= mc^2 + \mathcal{E}_n + \frac{\gamma^2\mathcal{E}_n}{n}\left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right)$$

انرژی بوهر

$$\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} = \frac{-13.6}{n^2}$$

جملات مربوط به ترتیب مقدار $\mathcal{E}_n$ عبارتند از انرژی سکون، انرژی بوهر برای H $\left(\frac{-13.6}{n^2}\right)$

و جمله آخر مربوط به انرژی ساختار ریز است.