

12 ATÓM VODÍKA V STATICKOM ELEKTRICKOM A MAGNETICKOM POLI JEMNÁ ŠTRUKTÚRA SPEKTRÁLNYCH ČIAR

12.1 ÚVOD

Štúdium zmien spektrálnych čiar atómov a molekúl spôsobených vonkajšími elektrickými a magnetickými poliami zohralo veľmi dôležitú úlohu v rozvoji atómovej fyziky i kvantovej mechaniky. V tejto kapitole sa budeme zaoberať iba najjednoduchšou sústavou – atómom vodíka. Sústreďme sa pritom najmä na kvalitatívnu a metodickú stránku jednotlivých problémov. Podrobnosti výpočtov a použitie príbuzných metód ku komplikovanejším systémom možno nájsť v literatúre.¹⁹⁷

Zmena energetických hladín atómu vonkajším elektrostatickým poľom sa všeobecne nazýva *Starkovým javom*. Jeho kvalitatívnu analýzu sa budenie zaoberať v nasledujúcom článku a výpočet lineárneho a kvadratického Starkovho javu načrtneme v článku 12.3.

Zmeny energetických hladín atómu spôsobené vonkajším magnetickým poľom nazývame všeobecne *Zeemanovým javom*. Jeho analýza je trocha komplikovaná tým, že pri bežne dosahovaných intenzitách predstavuje vonkajšie magnetické pole naozaj iba malú poruchu. Aby malo zmysel porovnanie výsledkov s experimentom, musíme najprv parametre „neporušených hladín“ určiť presnejšie ako doteraz. Konkrétne musíme pri výpočte spektra atómu vodíka (pri nulových vonkajších poliach) použiť realistickejší hamiltonián, v ktorom budú zahrnuté aj relativistické korekcie a spinovo-orbitálna väzba. Diskusiu týchto otázok začneme tým, že v článku 12.4 urobíme kvalitatívne odhady rádovej veľkosti jednotlivých efektov, v ďalšom sa budeme trocha podrobnejšie zaoberať odvodením výrazov pre spinovo-orbitálnu väzbu a relativistické korekcie a v článku 12.6 prediskutujeme jemnú štruktúru spektrálnych čiar – stále bez vonkajšieho magnetického poľa.

V poslednom článku sa budeme zaoberať Zeemanovým javom.

Poznamenajme ešte nakoniec, že problematika preberaná v tejto kapitole bola pri zrode kvantovej mechaniky jedným zo základných „skúšobných kameňov“ nových ideí. Klasici ako Lorentz, Sommerfeld, Heisenberg, Jordan a mnohí ďalší poznali dokonale experimentálny stav a spektrá mali naozaj „v ruke“. Dnes, keď

¹⁹⁷ Odporúčame na úvod učebnicu Landau a Lifšica [9] a monografie Betheho a Salpetera [12] a Sommerfelda [6].

kvantová mechanika je v podstate uzavretou teóriou, sa hlavný akcent trochu posunul na „teoretickejšie“ problémy. Otázka spektier sa diskutuje iba stručne ako príklad na aplikáciu. Obmedzený rozsah potom núti vynechať na veľa miestach podrobný postup a obmedziť sa iba na náznaky. Je preto prirodzené, že v štruktúre výkladu sa musia objaviť „logické medzery“. Tak napríklad pri diskusii Starkovho javu z uvedených rádových odhadov nijako nevyplýva, že možno zanedbať spinovo-orbitálnu interakciu, a vo všeobecnom prípade to ani možné nie je. Historicky však obdobný výpočet slúžil iba na štúdium charakteru rozštiepenia spektrálnych čiar v takej oblasti spektra, kde spomenuté zanedbanie nebolo na závalu. Preto i my uvádzame „klasický výpočet“. Podobných medzier si čitateľ všimne i viac. Zaujímavosťou o podrobnosti súvisiace s touto historicky významnou problematikou odkazujeme na Sommerfeldovu monografiu [6].

12.2 KVALITATÍVNA DISKUSIA STARKOVHO JAVU

Hamiltonián atómu vodíka bez prítomnosti vonkajšieho elektrostatického poľa je

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1)$$

Vplyv vonkajšieho homogénneho elektrostatického poľa opíšeme jednoducho. Pre určitosť predpokladajme, že pole má intenzitu $E = |\mathbf{E}|$ a smer osi z . Potenciál príslušného elektrostatického poľa je $\varphi(\mathbf{r}) = -Ez$ a potenciálna energia elektrónu s nábojom $(-e)$ v tomto poli je

$$H' = eEz \quad (2)$$

Z hľadiska kvantovej mechaniky je tým úloha v podstate sformulovaná. Máme

$$H = H_0 + H' \quad (3)$$

pričom poznáme vlastné funkcie neporušeného hamiltoniánu H_0 .

$$H_0 \psi_{nlm} = E_n \psi_{nlm} \quad (4)$$

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (5)$$

Ostáva nám už iba použiť poruchové metódy výpočtu korekcií k energetickým hladinám. Predtým ako by sme to urobili je však užitočné odhadnúť výsledky, ktoré očakávame.

Lineárny Starkov jav

Porucha H' je úmerná intenzite E , preto korekcie prvého rádu k energetickým hladinám budú tiež úmerné E . Vtedy hovoríme o *lineárnom Starkovom jave*, ale znamená to presne to isté ako Starkov jav v prvom ráde poruchovej teórie.

Všimnime si najprv základný stav. Korekcia prvého rádu k jeho energii je daná vzt'ahom

$$\Delta E_1 = \int \psi_{100}^*(\mathbf{r}) H' \psi_{100}(\mathbf{r}) dV \quad (6)$$

Okamžite však vidno, že $\Delta E_1 = 0$. Je to tým, že v tomto stave $l = m = 0$ a Y_{00} je konštanta. Preto $\psi_{100}(\mathbf{r})$ závisí iba od absolútnej hodnoty $r = |\mathbf{r}|$. Preto je $\psi_{100}^*(\mathbf{r}) \psi_{100}(\mathbf{r})$ párnou funkciou z , zatiaľ čo H' je nepárna. Podintegrálna funkcia v (6) je teda nepárnou funkciou z a integrál z nej je nulový.

Pri korekciách k vyšším hladinám je situácia podstatne iná. Je to spôsobené tým, že tieto hladiny sú degenerované a pri výpočte korekcií treba použiť príslušnú verziu poruchovej metódy. Napríklad pre hladinu s $n = 2$ máme štyri rôzne, navzájom ortogonálne stavy¹⁹⁸.

$$n = 2, l = 0, m = 0; \quad \begin{array}{l} m = 1 \\ n = 2, l = 1, m = 0 \\ m = -1 \end{array} \quad (7)$$

Pri poruchovej metóde pre degenerované hladiny hľadáme také lineárne kombinácie vlnových funkcií, ktoré diagonalizujú poruchu H' . Takéto lineárne kombinácie vlnových funkcií už vedú k stavom s istým nenulovým dipólovým momentom¹⁹⁹. Typická veličina dipólového momentu p bude daná súčinom náboja elektrónu a typického rozmeru atómu, t. j. Bohrovho polomeru a_1 :

$$p \sim ea_1 \quad (8)$$

Energia (tuhého) dipólu vo vonkajšom elektrickom poli je

$$\delta U = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E} \quad (9)$$

a rádový odhad korekcie k energii degenerovanej hladiny teda bude

$$\delta U \sim ea_1 E \quad (10)$$

Kvôli názornejšej predstave o veľkosti tejto korekcie uveďme, že typické hodnoty rozdielu (neporušených) energetických hladín v atóme vodíka sú rádovo rovné

$$\Delta U \sim 2|E_1| = \frac{m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2$$

¹⁹⁸ Spin elektrónu tu neuvažujeme, lebo hamiltonián (3) nezávisí od spinu a všetky hladiny sú rozdelené na časť so spinom „hore“ a časť so spinom „dolu“, pričom prechody medzi nimi nie sú v rámci (3) možné.

¹⁹⁹ Podrobnejšie to uvidíme v nasledujúcom článku.

čo možno prepísať do tvaru

$$\Delta U \sim e \left(\frac{\hbar^2}{m} \cdot \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} \right)^{-1} \cdot \frac{e}{4\pi\epsilon_0} = e \cdot a_1 \cdot \frac{e}{4\pi\epsilon_0 a_1^2} = e \cdot a_1 \cdot E_{\text{int}} \quad (11)$$

kde $E_{\text{int}} (\approx 5 \cdot 10^{10} \text{ Vm}^{-1})$ má význam intenzity coulombovského poľa v atóme na prvej Bohrovej dráhe.

Pre vyššie excitované stavy môžeme pre orientáciu brať

$$E_{\text{int}} \sim 10^{10} \text{ až } 10^{12} \text{ Vm}^{-1} \quad (12)$$

Pre pomer korekcie za lineárny Starkov jav k energetickému rozdielu hladín takto dostaneme

$$\frac{\delta U}{\Delta U} \sim \frac{E}{E_{\text{int}}} \quad (13)$$

Dĺžka spektrálnych čiar vo viditeľnej oblasti je niekoľko sto nm, a preto pri $E \sim 10^7 \text{ Vm}^{-1}$ (príklad pre orientáciu) očakávame korekcie rádové 0,1 nm.

Kvadratický Starkov jav

Pri *lineárnom* Starkovom jave musíme mať vlnovú funkciu, ktorá už odpovedá vlastnému dipólovému momentu. Súčin tohto dipólového momentu a intenzity vonkajšieho póla E je potom lineárny v E .

O *kvadratickom* Starkovom jave hovoríme vtedy, keď korekcia k energetickej hladine je úmerná E^2 , čo matematicky odpovedá korekciám druhého rádu poruchovej metódy.

Fyzikálne korekcie druhého rádu odpovedajú polarizovateľnosti atómu. Ak totiž má atóm dipólový moment

$$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E} \quad (14)$$

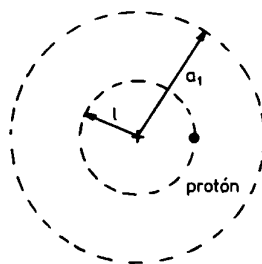
potom jeho energia vo vonkajšom poli je

$$U = -\frac{1}{2} \alpha E^2 \quad (15)$$

O vzťahu (15) sa ešte zmienime na záver článku, teraz sa budeme zaujímať o rádivý odhad veličiny α vystupujúcej vo vzťahu (14).

Predstavme si pre tento účel veľmi zjednodušený model atómu vodíka v základnom stave. Protón je nehybný a je v strede a elektrónový oblak odpovedá náboju rovnomerne rozdelenému v guli s polomerom a_1 . Ak túto sústavu dáme do vonkajšieho poľa s intenzitou E , celá guľa záporného náboja sa posunie o vzdialenosť l voči jadru. Posunutie odhadneme takto. Na protón posunutý o l z centra oblaku pôsobia dve sily: po prvé sila od vonkajšieho poľa rovná eE a po druhé sila od

záporného elektrického náboja atómu. Náboj elektrónového oblaku rozdelíme na dve časti, tak, ako je to ukázané na obr. 12.1. Sila od náboja ležiaceho mimo gule s polomerom l je nulová.



Obr. 12.1

Celkový náboj v guli s polomerom l je $\delta Q = -e(l/a_1)^3$ a tento náboj pôsobí na protón príťažlivou silou tak, ako by bol umiestnený v začiatku. Veľkosť tejto sily je

$$F = \frac{e(l/a_1)^3 e}{4\pi\epsilon_0 l^2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_1^3} l$$

Táto sila ale musí byť rovná vonkajšej sile $F = eE$. Odtiaľ pre posunutie l dostaneme

$$l = E \frac{4\pi\epsilon_0 a_1^3}{e}$$

Indukovaný dipólový moment je $p = el$ a porovnaním so (14) máme odhad

$$\alpha \sim 4\pi\epsilon_0 a_1^3 \quad (16)$$

Použitý model bol veľmi hrubý a v skutočnosti očakávame ako výsledok pravú stranu v (16) násobenú faktorom medzi, povedzme 0,1 a 10. Tento faktor nájdeme až numerickým výpočtom, ktorého postup naznačíme neskôr.

Teraz odhadneme očakávaný výsledok pre korekciu druhého rádu pomocou vzťahu (15) s koeficientom α daným vzťahom (16).

$$\delta U \sim (4\pi\epsilon_0 a_1^3) a_1 E^2 \quad (17)$$

Intenzita vnútorného poľa v atóme je $E_{\text{int}} \sim e/(4\pi\epsilon_0 a_1^2)$. Pomocou tohto upravíme prvý člen na pravej strane (17) a máme odhad

$$\delta U \sim e a_1 E (E/E_{\text{int}}) \quad (18)$$

Výraz $e a_1 E$ je ale odhadom pre lineárny Starkov jav, takže korekcia druhého rádu (18) sa od prvého rádu líši faktorom (E/E_{int}) , ktorý pri $E \sim 10^7 \text{ Vm}^{-1}$ prináša ďalší faktor 10^{-3} až 10^{-4} , pri základnom stave atómu vodíka.

Napokon sa ešte vrátíme k vzťahu (15) pre energiu indukovaného dipólu vo vonkajšom poli. Tento výraz možno písať ako

$$U = -(\alpha E)E + \frac{1}{2} \alpha E^2 \quad (19)$$

a odiaľ vidno fyzikálnu interpretáciu. Prvý člen na pravej je energia tuhého dipólu vo vonkajšom poli, druhý je vnútorná energia dipólu. Najjednoduchšie to vidno z modelu, kde si dipól predstavíme ako dva náboje spojené pružinkou s tuhosťou k . Ak takýto dipól dáme do vonkajšieho poľa, pružinka sa natiahne tak, aby sila eE bola rovná sile pružinky kx :

$$eE = kx$$

Odtiaľ $x = (eE/k)$. Dipólový moment pružinky je $p = ex = e^2El/k$ a jeho energia vo vonkajšom poli je $-pE = -e^2E^2/k$. Energia natiahnutej pružinky je $kx^2/2$ a po dosadení za x máme $e^2E^2/2k$, čo je situácia odpovedajúca presne (19) pri $\alpha = e^2/k$.

Všeobecnejšiu a podrobnejšiu diskusiu čitateľ nájde v učebniciach teórie EM poľa, odporúčame špeciálne Jacksonovu učebnicu²⁰⁰.

12.3 STARKOV JAV

Najprv naznačíme postup výpočtu lineárneho Starkovho javu pre hladinu s $n = 2$ pre atóm vodíka.

Prvou vecou, ktorú potrebujeme sú maticové elementy poruchy pre stavy (2.7).

Výsledok je uvedený v tabuľke 12.1.

Tabuľka 12.1

Maticové elementy poruchy $H' = eEz$ pre funkcie ψ_{2lm}

	2, 0, 0	2, 1, 0	2, 1, 1	2, 1, -1
2, 0, 0	0	$-3a_1eE$	0	0
2, 1, 0	$-3a_1eE$	0	0	0
2, 1, 1	0	0	0	0
2, 1, -1	0	0	0	0

Riadky a stĺpce tabuľky sú číslované trojicou kvantových čísel (n, l, m) a v každom mieste tabuľky uvádzame maticový element

$$\int \psi_{nlm}^* H' \psi_{n'l'm'} dV = \int R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) eE_z R_{n'l'}(r) Y_{l'm'}(\vartheta, \varphi) dV \quad (1)$$

²⁰⁰ Jackson, J. D.: Classical electrodynamics. J. Wiley & Sons, New York 1962.

Pozrime sa teraz na to, prečo sú takmer všetky maticové elementy v *tab. 12.1* nulové. Diagonálne elementy sú podľa (1) rovné

$$\int |R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|^2 eEz dV \quad (2)$$

Funkcia $R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ pri zámene $r \rightarrow -r$ je párna pre párne l a nepárna pre nepárne l , ale v oboch prípadoch je druhá mocnina jej absolútnej hodnoty párna. Faktor z je ale nepárny, a preto podintegrálna funkcia v (2) je nepárna a integrál z nej je nulový.

Pre nediagonálne elementy pridáme rýchlo k tomu, že môžu byť nenulové len pre $m = m'$. Funkcia Y_{lm} v (1) totiž obsahuje faktor $\exp(im\varphi)$ a podobne za $Y_{l'm'}$ dostaneme faktor $\exp(-im'\varphi)$. Ak $m \neq m'$ bude integrál nulový kvôli integrovaniu cez uhol φ . Múdrejšie znejúca reformulácia tohto „výberového pravidla“ vychádza z tvrdenia:

Ak porucha H' komutuje s operátorom L_z , potom výraz

$$\langle nlm|H'|n'l'm' \rangle$$

je nenulový len pre $m = m'$. Dôkaz je jednoduchý. Obložíme výraz

$$0 = [H', L_z]$$

príslušnými stavmi a máme

$$0 = \langle nlm|H'L_z - L_zH'|n'l'm' \rangle = (m' - m)\langle nlm|H'|n'l'm' \rangle$$

Pre $m \neq m'$ musí byť maticový element nulový. Takto vidíme, že nenulovými elementmi v *tab. 12.1* sú skutočne len tie, ktoré môžu byť nenulové na základe uvedených „výberových“ pravidiel. Hodnotu jediného nenulového maticového elementu treba nájsť priamym dosadením vlnových funkcií atómu vodíka do (1).

Podľa všeobecnej schémy poruchovej metódy pre degenerované hladiny preberanej v článku 6.4 potrebujeme už len nájsť lineárne kombinácie vlnových funkcií, ktoré diagonalizujú maticu danú *tab. 12.1*. Jednoducho sa presvedčíme o tom, že hľadanými kombináciami sú

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{210} + \psi_{200}), \quad \Delta E = -3a_1eE \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{210} - \psi_{200}), \quad \Delta E = +3a_1eE \\ \psi_{211}, \quad \Delta E = 0 \\ \psi_{21-1}, \quad \Delta E = 0 \end{aligned} \quad (3)$$

Tým je problém v prvom ráde poruchovej metódy pre hladinu $s n = 2$ vyriešený.

Teraz naznačíme schému výpočtu pre kvadratický Starkov jav v atóme vodíka v základnom stave. Výpočet neurobíme až do konca, uvedieme iba základnú myšlienku postupu, ktorá je skutočne pekná²⁰¹.

Pre zmenu energie základného stavu atómu vodíka v druhom ráde poruchovej metódy platí

$$\delta U_0 = \sum_k \frac{H'_{0k} H'_{k0}}{E_0 - E_k} \quad (4)$$

kde indexom 0 označujeme základný stav a sčítujeme cez všetky $k \neq 0$. V Diracovej symbolike $H'_{k0} \equiv \langle k | H' | 0 \rangle$ a stavy $|k\rangle$ sú vlastnými stavmi neporušeného operátora H_0 , s vlastnými hodnotami E_k . V tejto symbolike predchádzajúca rovnica nadobudne tvar

$$\delta U_0 = \sum_k \frac{\langle 0 | H' | k \rangle \langle k | H' | 0 \rangle}{E_0 - E_k} \quad (5)$$

Predpokladajme, že sa nám nejako podarí – a v tom je vtíp tohto prístupu – nájsť operátor F , pre ktorý platí

$$[F, H_0] | 0 \rangle = H' | 0 \rangle$$

Potom

$$\langle k | H' | 0 \rangle = \langle k | [F, H_0] | 0 \rangle = (E_0 - E_k) \langle k | F | 0 \rangle$$

Ak toto dosadíme do (5), zbavíme sa menovateľov a máme

$$\delta U_0 = \sum_k \langle 0 | H' | k \rangle \langle k | F | 0 \rangle \quad (6)$$

Využijeme teraz známy vzťah

$$1 = \sum_k |k\rangle \langle k| = \sum_k |k\rangle \langle k| + |0\rangle \langle 0|$$

a z rovnice (6) dostaneme

$$\delta U_0 = \langle 0 | H' F | 0 \rangle - \langle 0 | H' | 0 \rangle \langle 0 | F | 0 \rangle \quad (7)$$

²⁰¹ Metóda bola navrhnutá v knihe Kotani, M.: Quantum Mechanics. Tokyo 1951 a je prebraná v 2. vydaní učebnice L. Schiffa [8]. Rozpracovanie metódy bolo uverejnené v prácach Dalgarno, A. – Lewis, T. T.: Proc. Roy. Soc., A 233, 1955, s. 70, Schwartz, C: Ann Phys., 6, 1959, s. 156.

Rovnica (7) je vhodná na numerické alebo analytické výpočty, pretože namiesto nekonečného súčtu v (5) stačí nájsť tri maticové elementy.

Celá vec závisí od toho, či sa podarí nájsť operátor F s požadovanou vlastnosťou. V uvažovanom prípade ho možno nájsť dosť jednoducho (pozri citovanú literatúru), ale nebudeme sa tu s touto otázkou zaoberať a uvedieme iba výsledok

$$F = -\frac{eEma_1}{2\hbar}(r^2 + 2a_1r)\cos\vartheta$$

Po dosadení do (7) a vykonaní príslušných integrácií dostaneme

$$\delta U_0 = -\frac{1}{2}\alpha E^2$$

kde

(8)

$$\alpha = \frac{9}{2}4\pi\epsilon_0 a_1^3$$

Výsledok má očakávaný tvar, ako vidno porovnaním s rovnicami (15) a (16) predchádzajúceho článku.

12.4 KVALITATÍVNA DISKUSIA SPINOVO-ORBITÁLNEJ VÄZBY

Pri diskusii atómu vodíka v článku 11.4 sme brali do úvahy iba elektrostatickú interakciu protónu a elektrónu. V atóme vodíka sú však i ďalšie interakcie, ktoré pri podrobnejšom štúdiu spektrálnych čiar treba vziať do úvahy. Jednou z nich je spinovo-orbitálna väzba, označovaná tiež ako väzba LS . Názorne si túto interakciu môžeme predstaviť nasledovne: Ak sa elektrón pohybuje okolo jadra má istý orbitálny moment hybnosti. Pretože je nabitou časticou, zodpovedá tomuto pohybu aj istý magnetický moment daný výrazom $-eL/2m$. Tento magnetický moment budí magnetické pole, ktoré interaguje so spinovým magnetickým momentom elektrónu.

Pri hrubom kvalitatívnom odhade veľkosti tejto interakcie si môžeme predstaviť vzájomné pôsobenie dvoch magnetických momentov \mathbf{M}_1 , \mathbf{M}_2 , pričom ich veľkosti sú približne

$$\mathbf{M}_i \sim \frac{e\hbar}{2m} \quad (1)$$

kde m je hmotnosť elektrónu a ich vzdialenosť je rádovo rovná Bohrovmu polomeru a_1 . Podľa teórie EM póla je energia ich interakcie daná rádovú výrazom²⁰²

$$\delta U \sim \frac{\mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2}{a_1^3} \cdot \frac{\mu_0}{4\pi} \quad (2)$$

kde μ_0 je permeabilita vákua. Ak za \mathbf{M}_1 , \mathbf{M}_2 dosadíme z (1) do (2) a použijeme vzťah $\mu_0 \epsilon_0 = c^{-2}$, dostaneme

$$\delta U \sim \left(\frac{e\hbar}{2m} \right)^2 \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{a_1^3} \frac{1}{c^2} \quad (3)$$

Elementárnou úpravou dostaneme

$$\delta U \sim \frac{\hbar^2}{2m^2} \frac{1}{a_1^2 c^2} \left[\frac{e^2}{2.4\pi\epsilon_0 a_1} \right] = \frac{\hbar^2}{2m^2} \frac{1}{a_1^2 c^2} |E_1| \quad (4)$$

kde $|E_1| = 13,6$ eV je absolútna hodnota väzbovej energie v základnom stave atómu vodíka.

Do (4) teraz dosadíme vyjadrenie Bohrovho polomeru v tvare

$$a_1 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}$$

a máme

$$\delta U \sim \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \right)^2 |E_1| = \frac{1}{2} \alpha^2 |E_1| \quad (5)$$

kde $\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0 \hbar c) \doteq 1/137$ je konštanta bez rozmeru, nazývaná konštantou jemnej štruktúry.

Vidíme teda, že zahrnutie spinovo-orbitálnej väzby do hamiltoniánu vedie k tomu, že energetické hladiny v atóme vodíka budú posunuté rádovo o 10^{-4} eV oproti hladinám, ktoré by zodpovedali čisto coulombovskej interakcii protónu a elektrónu. Uvidíme, že hladiny, ktoré „v coulombovskom modeli“ boli degenerované sa pritom „rozštiepia“, čo sa v spektre prejaví ako jemná štruktúra spektrálnych čiar so štruktúrou na úrovni 0,1 nm (čiara, javiaca sa pri hrubšom pozorovaní ako jednoduchá, je zložená z niekoľkých tesne pri sebe ležiacich čiar).

²⁰² V klasickej teórii EM póla je interakcia dvoch bodových magnetických dipólov s magnetickými momentmi \mathbf{M}_1 , \mathbf{M}_2 daná vzťahom

$$\frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{\mathbf{M}_1 \cdot \mathbf{M}_2}{r^3} - \frac{(\mathbf{M}_1 \cdot \mathbf{r})(\mathbf{M}_2 \cdot \mathbf{r})}{r^5} \right]$$

Nemôžeme očakávať, že v kvantovej mechanike pre interakciu spinového a orbitálneho momentu hybnosti bude platiť rovnaký vzťah, lebo orbitálny moment určite nezodpovedá bodovému dipólu, ale z rozmerových dôvodov bude aj v kvantovej mechanike pre rádové odhady vhodný výraz (2).

Na výraz (3) sa môžeme pozerat' aj ako na energiu interakcie spinového magnetického momentu s vnútorným poľom v atóme. Pre toto vnútorné pole potom máme (v označení $\delta U \sim \left(\frac{e\hbar}{2m}\right) \cdot B_{\text{int}}$)

$$B_{\text{int}} \sim \frac{e\hbar}{2m} \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{1}{a_1^3} \quad (6)$$

Po dosadení jednotlivých veličín (pozri koniec kap. 1) dostaneme²⁰³

$$B_{\text{int}} \sim 6 \text{ T} \quad (7)$$

pričom odhad treba považovať iba za veľmi približný. Vidno z neho ale dôležitý záver: Ak chceme sledovať správanie sa atómu vo vonkajších poliach, ktoré nie sú podstatne väčšie ako B_{int} , musíme zároveň uvažovať spinovo-orbitálnu väzbu.

V nasledujúcom článku ešte ukážeme, že rádové rovnakú veľkosť ako väzba LS majú aj relativistické korekcie na pohyb elektrónu.

Kvôli úplnosti sa napokon zmienime o interakcii magnetického momentu jadra s magnetickým momentom elektrónu.

Rádový odhad energie interakcie je opäť daný vzťahom (2), ale jeden z magnetických momentov \mathbf{M}_i už bude magnetickým momentom jadra, ktorý má typickú veľkosť rádovo $(e\hbar/2m_j)$, kde m_j je hmotnosť jadra – v našom prípade protónu. Úpravami, ako v predchádzajúcom, prídeme k výsledku

$$\delta U_{\text{HF}} \sim \frac{1}{2} \alpha^2 |E_1| \frac{m_e}{m_j} \quad (8)$$

Korekcie k energetickým hladinám spôsobené touto interakciou nazývame *hyperjemnou štruktúrou*. Z porovnania (8) a (5) vidno, že hyperjemná štruktúra je faktorom $(m_e/m_j) \sim 10^{-3}$ jemnejšia ako jemná štruktúra.

12.5 SPINOVO-ORBITÁLNA VÄZBA A RELATIVISTICKÉ KOREKcie

Korektný postup ako odvodiť časť hamiltoniánu príslušnú k spinovo-orbitálnej väzbe je vyjsť z relativistickej Diracovej rovnice a urobiť v nej nerelativistické priblíženia.

²⁰³ V jednotkách SI máme: $(e\hbar/2m) = 0,927 \cdot 10^{-23} \text{ JT}^{-1}$, $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ kg.m.C}^{-2}$, $a_1 = 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ m}$.

S Diracovou rovnicou sa ale v tejto učebnici nestretáme, a preto napíšeme priamo výsledok a ukážeme, že odpovedá kvalitatívnym predstavám z predchádzajúceho článku. Pre elektrón v atóme vodíka je spinovo-orbitálna interakcia charakterizovaná hamiltoniánom

$$H'_{SL} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r^3} \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{L}} \quad (1)$$

Tento výraz môžeme prepísať aj nasledovne

$$H'_{SL} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{1}{r^3} \left(\frac{e}{m} \hat{\mathbf{s}} \right) \cdot \left(\frac{e\hat{\mathbf{L}}}{2m} \right) \quad (2)$$

pričom sme využili identitu $\epsilon_0\mu_0 = c^{-2}$ a usporiadali sme členy tak, aby sa v okrúhlych zátvorkách objavili práve magnetické momenty spojené so spinovým a orbitálnym magnetickým momentom elektrónu. Výraz (2) je ale práve to, čo sme použili v rovnici (4.2) v predchádzajúcom článku, iba namiesto strednej vzdialenosti, ktorú sme tam odhadli na a_1 , píšeme premennú vzdialenosť r . Poznamenajme však, že samotný tvar skalárneho súčinu v (2) ani znamienko, ktoré pred ním stojí, nevyplývajú z kvalitatívnej diskusie v článku 12.4, ale ich obdržíme z nerelativistickej limity Diracovej rovnice²⁰⁴.

Ďalší príspevok k jemnej štruktúre pochádza z korekcie na relativistický charakter pohybu elektrónu.

V teórii relativity je kinetická energia častice s hmotnosťou m a hybnosťou \mathbf{p} daná vzťahom

$$E_{\text{kin}}^{(R)} = c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2c^2} - mc^2$$

pre $\mathbf{p}^2 \ll m^2c^2$ približne platí

$$E_{\text{kin}}^{(R)} \approx \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{(\mathbf{p}^2)^2}{8m^3c^2} = E_{\text{kin}}^{(NR)} - \frac{1}{mc^2} (E_{\text{kin}}^{(NR)})^2$$

kde $E_{\text{kin}}^{(R)}$ a $E_{\text{kin}}^{(NR)}$ označuje relativistický, resp. nerelativistický výraz pre kinetickú energiu. V druhom korekčnom člene možno pre elektrón s celkovou nerelativistickou energiou E v elektrostatickom poli s potenciálom $\varphi(r)$ použiť vzťah $E = E_{\text{kin}}^{(NR)} - e\varphi(r)$. Korekciu k hamiltoniánu danú posledným členom v (3) možno potom zapísať ako

²⁰⁴ Správny výraz možno dostať aj pomocou podrobnejších intuitívnych úvah, pri ktorých prejdeme do pokojovej sústavy klasického elektrónu pohybujúceho sa v klasickom analógii atómu vodíka a nájdeme magnetické pole pôsobiace na spinový magnetický moment. Náčrt odvodenia je napr. v predchádzajúcom vydaní tejto učebnice. Zdá sa nám ale, že takéto odvodenie nie je veľmi poučné, a preto ho neuvádzame.

$$H'_{\text{rel}} = -\frac{(E + e\varphi(r))^2}{2mc^2}$$

Pravdu povediac, ani toto odvodenie nie je veľmi presvedčivé, ale aj tento člen možno korektne získať z Diracovej rovnice.

12.6 JEMNÁ ŠTRUKTÚRA SPEKTRÁLNYCH ČIAR

Základom pre výpočet korekcií jemnej štruktúry k energetickým hladinám je hamiltonián H' , uvedený v predchádzajúcom článku. Ak zoberieme do úvahy spinovo-orbitálnu väzbu (5.1) a relativistickú korekciu (5.4), máme

$$H = H_0 + H' = H_0 + H'_{SL} + H'_{\text{rel}} \quad (1)$$

kde

$$H'_{SL} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r^3} \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{L}} \quad (2)$$

$$H'_{\text{rel}} = -\frac{1}{2mc^2} \left[E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right]^2 \quad (3)$$

V tejto časti sa budeme zaoberať zmenou energetických hladín atómu vodíka spôsobenou poruchami (2) a (3). Podrobné výpočty nebudeme vykonávať – iba naznačíme postup riešenia a uvedieme konečné výsledky.

Začneme so spinovo-orbitálnou väzbou. Vlnové funkcie vodíkového atómu, zodpovedajúce neporušenému hamiltoniánu H_0 , možno v súradnicovej reprezentácii písať ako

$$\langle r | n l m s_z \rangle = \psi_{nlm}(\mathbf{r}) \chi(s_z) \quad (4)$$

kde $\chi(s_z)$ je spinová vlnová funkcia. Budeme používať označenie $\chi(+)$, $\chi(-)$, pričom prvá z nich odpovedá vlastnej hodnote operátora S_z rovnjej $\hbar/2$ a druhá vlastnej hodnote $-\hbar/2$.

Vlnové funkcie (4) ale nie sú vhodnou bázou pre začiatok použitia poruchovej metódy v našom prípade. Dôvod je v tom, že operátor $\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{L}}$ nekomutuje ani s S_z , ani s L_z a vlnové funkcie (4), ktoré sú vlastnými funkciami S_z a L_z nediagonalizujú poruchu.

Správne vlnové funkcie pre tento degenerovaný prípad uhádneme hneď, ak si všimneme, že platí

$$\mathcal{J}^2 = (\mathbf{L} + \hat{\mathbf{s}})^2 + \mathbf{L}^2 + \hat{\mathbf{s}}^2 + 2\mathbf{L} \cdot \hat{\mathbf{s}}$$

a odtiaľ

$$\mathbf{L} \cdot \hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2} (\mathcal{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \hat{\mathbf{s}}^2) \quad (5)$$

Rýchlo sa dá ukázať, že operátor $\mathbf{L} \cdot \mathbf{s}$ komutuje s operátormi

$$\mathcal{J}^2, J_z, \mathbf{L}^2, \mathbf{s}^2 \quad (6)$$

kde \mathcal{J}^2 je operátor druhej mocniny celkového momentu hybnosti a J_z je priemet celkového momentu hybnosti na os z . Vlastné hodnoty \mathcal{J}^2 sú $\hbar^2 J(J+1)$, kde pri danom l môže J nadobúdať iba dve hodnoty $J = l \pm 1/2$. Vlastné hodnoty J_z budeme označovať symbolom M .

Vlastné funkcie H_0 , ktoré sú súčasne vlastnými funkciami štvorice komutujúcich operátorov, budeme označovať ako

$$|n, J, M, l\rangle \quad (7)$$

kde prvý index označuje hlavné kvantové číslo, druhý vlastnú hodnotu operátora \mathcal{J}^2 tretí vlastnú hodnotu J_z a štvrtý vlastnú hodnotu \mathbf{L}^2 . Orbitálna časť týchto vlnových funkcií je (v súradnicovej reprezentácii) rovná $R_{nl}(r)$. Pomocou (5) okamžite nájdeme

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{s} |n, J, M, l\rangle = \frac{\hbar^2}{2} [J(J+1) - l(l+1) - s(s+1)] |n, J, M, l\rangle$$

a to je všetko, čo vlastne potrebujeme na výpočet maticových elementov poruchy H'_{SL} , i poruchy H'_{rel} . Prirodzene, je ešte treba integrály z radiálnych vlnových funkcií násobených faktorom r^{-1} v (2) a faktormi r^{-1} resp. r^{-2} , ktoré sú prítomné vo výraze (3). Výpočet tu nebudeme podrobne uvádzať, konečný tvar pre energiu hladiny s daným n, J, l je

$$E(n, J, l) = -\frac{|E_1|}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{J + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right] \quad (8)$$

kde $|E_1| = 13,6$ eV je energia základného stavu atómu vodíka, a $\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c)$ je konštanta jemnej štruktúry. Výraz $-|E_1|/n^2$ je energiou danej hladiny bez započítania poruchy a druhý člen v hranatej zátvorke násobený faktorom stojacim pred zátvorkou je rovný príspevku od poruchy. Podstatnou črtou výsledku (8) je nezávislosť energie od kvantového čísla l .

Pri danej hodnote hlavného kvantového čísla n môže l nadobúdať hodnoty $0, 1, \dots, n-1$ a kvantové číslo J prechádza hodnotami $1/2, 3/2, \dots, n-1/2$. Degenerovaná hladina s hlavným kvantovým číslom n sa rozštiepi na n hladín s hodnotami $J = 1/2, 3/2, \dots, n-1/2$. Tieto hladiny budú ešte stále viacnásobne degenerované, jednak preto, že každú hodnotu J možno dostať zo stavu s $l = J - 1/2$ alebo zo stavu s $l = J + 1/2$ (a stavy s l líšiacim sa o jednotku majú opačnú paritu) a jednak preto, že každá hladina s daným J je $(2J+1)$ -krát degenerovaná podľa rôznych hodnôt priemetu celkového momentu hybnosti M na os z . Hladiny atómu vodíka sa najčastejšie označujú stručne tak, že namiesto danej hodnoty l používame písmeno podľa predpisu

$l:$	0	1	2	3	4	5	
Symbol:	S	P	D	F	G	H	19

Hlavné kvantové číslo píšeme dopredu a J pripojíme ako index vpravo dolu. Napríklad $2P_{1/2}$ označuje stav $s\ n = 2, l = 1, J = 1/2$.

Veľkosť rozštiepenia hladiny v efektoch jemnej štruktúry možno posúdiť z nasledujúceho príkladu. Degenerovaná hladina $s\ n = 2$ má bez zahrnutia spinovo-orbitálnej väzby a relativistických korekcií energiu $E_2 = -3,40\text{ eV}$ a rozdiel medzi E_2 a E_1 je $E_2 - E_1 \sim 10,21\text{ eV}$.

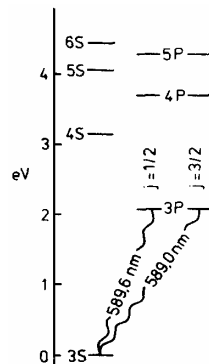
Podľa (8) sa hladina $s\ n = 2$ rozštiepi na dve hladiny s $J = 1/2$ a $J = 3/2$ a rozdiel ich energií bude

$$E(2P_{3/2}) - E(2P_{1/2}) = \frac{\alpha^2}{8} \left(1 - \frac{1}{2}\right) |E_1| \approx \frac{1}{3} 10^{-5} |E_1| \approx 4,53 \cdot 10^{-5}\text{ eV}$$

Ak použijeme približný vzťah $eV/\hbar \approx 1,5 \cdot 10^{15}\text{ s}^{-1}$, dostaneme kruhovú frekvenciu príslušnú k tomuto prechodu $\omega \approx 6,9 \cdot 10^{10}\text{ s}^{-1}$ a obyčajnú frekvenciu $\nu \approx 1,1 \cdot 10^4\text{ MHz}$. Dĺžka elektromagnetickej vlny s takouto frekvenciou je približne $2,7\text{ cm}$.

Rozštiepenie spektrálnych čiar spinovo-orbitálnou väzbou zohralo dôležitú úlohu pri „objave“ spinu elektrónu.

Známy príklad uvádzaný v tomto kontexte je „sodíkový dublet“. Za žlté svetlo sodíka je „zodpovedný“ prechod valenčného elektrónu z hladiny $3P$ na hladinu²⁰⁵ $3S$. Hladina $3P$ je ale rozštiepená spinovo-orbitálnou väzbou na hladiny $3P_{3/2}$ a $3P_{1/2}$. Preto príslušná „spektrálna čiara“ je dubletom s vlnovými dĺžkami $\lambda_1 = 589,0\text{ nm}$ a $\lambda_2 = 589,6\text{ nm}$ (pozri obr. 12.2).



Obr. 12.2

²⁰⁵ Elektróny na vnútorných hladinách spôsobujú, že valenčný elektrón sa nepohybuje v čisto coulombovskom poli. Hladiny s rovnakým hlavným, ale rôznym orbitálnym kvantovým číslom preto nie sú degenerované.

12.7 ZEEMANOV JAV

Ak sa atóm vodíka nachádza vo vonkajšom magnetickom poli, potom hamiltonián príslušný k tomuto problému bude mať tvar:

$$H = H_0 + H_1' + H_2' \quad (1)$$

kde H_0 je „neporušený“ hamiltonián zodpovedajúci kinetickej energii a coulombovskej interakcii,

$$H_1' = \frac{e}{2m} B(L_z + 2s_z) \quad (2)$$

je podľa (8.3.7) hamiltonián interakcie s vonkajším poľom a

$$H_2' = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r^3} \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{L}} - \frac{1}{2mc^2} \left[E_n + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \quad (3)$$

zodpovedá spinovo-orbitálnej interakcii a relativistickým korekciám ku kinetickej energii. Z fyzikálneho hľadiska H_1' predstavuje vonkajšiu poruchu, H_2' má „vnútorné príčiny“. Z hľadiska metodiky riešenia budeme však za „neporušený“ hamiltonián brať H_0 a $H_1' + H_2'$ budeme chápať ako poruchu.

Aby sme zjednodušili zápis nasledujúcich formuliek prepíšeme v zrejmom označení jednotlivé členy ešte raz

$$H_1' = a(L_z + 2s_z) \quad (4)$$

$$H_2' = b\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{J}} + c \quad (5)$$

kde a je konštanta a $b = b(r)$, $c = c(r)$ závisia len od absolútnej hodnoty polohového vektora.

Hladina s daným kvantovým číslom n je degenerovaná, a preto pri výpočte musíme používať poruchovú metódu pre degenerované stavy. Prvou otázkou, ktorú treba rozhodnúť, je výber reprezentácie vlnových funkcií, ktorú budeme používať a predtým si treba všimnúť, aké operátory komutujú s H . Vzhľadom na to, že uvažujeme len jednu degenerovanú hladinu s daným hlavným kvantovým číslom n , budeme uvažovať len takéto funkcie a číslo n nebudeme explicitne vypisovať. Operátor H_2' , daný v (5), určite komutuje so súborom operátorov

$$\mathbf{L}^2, \mathbf{s}^2, \mathbf{J}^2, J_z \quad (6)$$

ako sme sa o tom presvedčili už v predchádzajúcom článku. Operátor H_2' ale nekomutuje ani s L_z ani s priemetom spinu s_z .

Vlnové funkcie, v ktorých je operátor H_2' diagonálny, sú teda vlastnými funkciami štvorice operátorov (6) a tieto funkcie dostaneme štandardným spôsobom pomocou Clebschových-Gordanových koeficientov. Symboly pre vlastné hodnoty L^2 , s^2 nebudeme vypisovať a vlnové funkcie budeme označovať ako $|J, M\rangle$.

Pomocou CG koeficientov máme

$$|JM\rangle = |C(JM|l, m_l, s, m_s)\rangle Y_{lm_l} \chi_{m_s} \quad (7)$$

kde Y_{lm_l} je guľová funkcia s danými kvantovými číslami, χ označuje spinovú vlnovú funkciu a m_s je priemet spinu na os z . V skutočnosti na pravej strane (7) máme vždy len dva členy, pretože m_s môže nadobúdať iba hodnoty $1/2$ alebo $-1/2$.

Príslušné CG koeficienty sú dobre známe a stretli sme sa s nimi už v kapitole 11. Pretože ich budeme potrebovať v ďalšom, vypíšeme ich tu explicitne. Pri danom l môže J nadobúdať iba dve hodnoty, a to $J = l + 1/2$ alebo $J = l - 1/2$. Pre ne máme

$$\begin{aligned} |l + 1/2, M\rangle &= \sqrt{\frac{l - M + 1/2}{2l + 1}} Y_{l, M+1/2} \chi_{-1/2} - \sqrt{\frac{l - M + 1/2}{2l + 1}} Y_{l, M+1/2} \chi_{-1/2} \\ |l - 1/2, M\rangle &= -\sqrt{\frac{l - M + 1/2}{2l + 1}} Y_{l, M-1/2} \chi_{1/2} + \sqrt{\frac{l + M + 1/2}{2l + 1}} Y_{l, M+1/2} \chi_{-1/2} \end{aligned} \quad (8)$$

Teraz prejdeme k členu H'_1 . Problém s ním je v tom, že tento člen nekomutuje s J^2 . Je to tým, že $(L_z + 2S_z)$ môžeme písať ako $J_z + S_z$, pričom J_z samozrejme komutuje s J^2 , ale S_z s J^2 nekomutuje. Vidno to najrýchlejšie zo zápisu $J^2 = L^2 + S^2 + 2\hat{s} \cdot \hat{L}$, kde práve člen $\hat{s} \cdot \hat{L}$ nekomutuje s operátorom S_z . Pre operátor H'_1 je vhodnou sústavou komutujúcich operátorov štvorica

$$L^2, S^2, L_z, S_z \quad (9)$$

Teraz vidno, že už na začiatku sme sa mohli rozhodnúť prirodzene pre dve bázy. Prvou je báza daná operátormi (6) a v nej je diagonálne H'_2 , druhou je báza daná operátormi (9) a v nej je diagonálne H'_1 . V oboch bázach dospejeme k rovnakému výsledku. Pre nás je výhodnejšia báza, v ktorej je diagonálna spinovo-orbitálna väzba, lebo príslušné maticové elementy máme už uvedené v predchádzajúcom článku. Teraz teda ideme v báze (8) spočítať maticové elementy operátora H'_1 . Budeme pritom podstatne využívať to, že funkcie vystupujúce na pravej strane v (8) sú vlastnými funkciami operátora H'_1 . Postupne dostaneme

$$(H'_1)_{ik} = \frac{a\hbar}{2l+1} \begin{pmatrix} 2(l+1)M & -\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 - M^2} \\ -\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 - M^2} & 2lm \end{pmatrix} \quad (10)$$

Indexy i, k tu nadobúdajú dve hodnoty, z nich prvá hodnota zodpovedá stavu $|l + 1/2, M\rangle$ a druhá stavu $|l - 1/2, M\rangle$. Koeficient vystupujúci v (10) je podľa (4) a (2) daný vzťahom

$$a = \frac{eB}{2m} \quad (11)$$

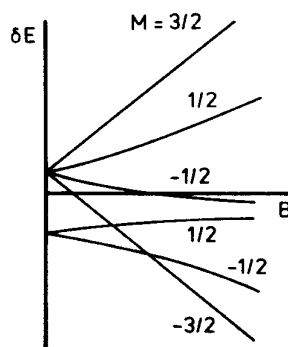
Matica odpovedajúca H'_2 bola už vlastne uvedená v predchádzajúcom článku. Ak totiž z rovnice (6.8) odtrhneme hodnotu neporušenej energie, ostáva nám práve príspevok za spinovo-orbitálnu väzbu a relativistické korekcie. Do (6.8) iba potrebujeme raz dosadiť $J = l + 1/2$ a raz $J = l - 1/2$. Takto máme

$$(H'_2)_{ik} = -\frac{\alpha^2 2|E_1|}{n^3} \begin{pmatrix} \frac{1}{l+1} - \frac{3}{4n} & 0 \\ 0 & \frac{1}{l} - \frac{3}{4n} \end{pmatrix} \quad (12)$$

Teraz už potrebujeme iba spojiť oba výsledky a zostrojiť maticu H' . Korekcie k jednotlivým energetickým hladinám nájdeme riešením kvadratickej rovnice

$$\begin{vmatrix} H'_{11} - \delta E & H'_{12} \\ H'_{21} & H'_{22} - \delta E \end{vmatrix} = 0 \quad (13)$$

Výpočet nebudeme vykonávať explicitne, uspokojíme sa s tým, že na *obr. 12.3* ukážeme veľmi schematicky závislosť rozštiepenia hladín $2p$ stavu v atóme vodíka (t. j. $n=2, l=1$ stavu) od intenzity vonkajšieho poľa.



Obr. 12.3

Zdôraznime ešte to, že rozštiepené hladiny majú ako dobré kvantové čísla iba tie, ktoré sú vlastnými hodnotami operátorov vystupujúcich aj v súbore (6) aj

v súbore (9). Sú to len hodnoty²⁰⁶ (l, M) prísušné k operátorom \mathbf{L}^2, J_z . V tomto zmysle je *obr 12.3* trochu klamný. Mohlo by sa zdať, že krivky naznačujúce závislosť energie rozštiepených hladín od B majú stále tie kvantové čísla, z ktorých vychádzajú pri $B = 0$. To ale nie je pravda, kvantové číslo J je dobré iba v limite $B \rightarrow 0$

Pre malé vonkajšie polia B sú ale vlnové funkcie rozštiepených hladín približne rovné dvom vlnovým funkciám v (8)

12.8 PRÍKLADY A PROBLÉMY

1. Odhadnite radovú intenzitu magnetického poľa potrebnú na to, aby spiny elektrónov v atóme hélia mali rovnaký smer Podľa Pauliho princípu na to treba prehodil jeden z $1s$ elektrónov do stavu $s = 2$.
2. Lineárny harmonicky oscilátor je vo vonkajšom homogénnom elektrostatickom poli s intenzitou \mathbf{E} v smere, v ktorom oscilátor kmitá Aká bude korekcia k energii n -tého stacionárneho stavu v prvom ráde poruchovej teórie (lineárny Starkov jav)?
3. Nájdite polarizovateľnosť lineárneho harmonického oscilátora v n -tom stacionárnom stave (kvadratický Starkov jav)! Riešte poruchovo a porovnajte s presným riešením. Pripomienka: Kreačný a anihilačný operátor je daný vzťahmi (článok 10.6)

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger), \quad p = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} i(a^\dagger - a)$$

4. Urobte predbežnú diskusiu výpočtu lineárneho Starkovho javu v $n = 3$ stave atómu vodíka – zostrojte analóg tabuľky 12.1 a zistite, ktoré maticové elementy budú nenulové.
5. Mame sústavu skladajúcu sa z dvoch častíc so spinom $1/2$, príslušne operátory spinov sú $\mathbf{s}_1 = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}_1$, $\mathbf{s}_2 = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}_2$. Ukážte, že pre operátor celkového spinu $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2)$ platí

$$\mathbf{S}^2 = \frac{\hbar^2}{2} (3 + \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)$$

pričom v singletnom stave je $\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = -3$ a v tripletnom $\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = -1$.

6. Základný stav atómu vodíka je rozštiepený v dôsledku interakcie magnetického momentu jadra s magnetickým momentom elektrónu (hyperjemná štruktúra) Ukážte na základe kvalitatívnej analýzy že poruchový hamiltonián v spinovom priestore (t. j. po preintegrování cez priestorové premenné v príslušnom maticovom elemente) možno vyjadriť v tvare

$$H' = C \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\hat{\boldsymbol{\mu}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}_2}{a_1^3}$$

kde a_1 je Bohrov polomer a C je bezrozmerná konštanta Odhadnite rozdiel energie hladín, na ktoré sa základný stav rozštiepi a určte vlnovú dĺžku elektromagnetického žiarenia emitovaného alebo absorbovaného pri takomto prechode.

²⁰⁶ Operátor J_z síce nevystupuje v súbore (9), ale je súčtom $L_z + s_z$, pričom L_z aj s_z v (9) vystupujú.

Poznámka: Táto čiara s $\lambda = 21$ cm je veľmi dôležitá v astrofyzike. Prečítajte si o tom niečo napr. vo Feynmanových prednáškach o fyzike [17].

7. Odhadnite veľkosť efektu hyperjemnej štruktúry v základnom stave pozitronia.
8. Atóm vodíka v základnom stave sa nachádza vo vonkajšom magnetickom poli. Uvedte dôvody pre to, že hamiltonián v spinovom priestore môžeme písať v tvare

$$H = A + D\boldsymbol{\mu}_e \cdot \boldsymbol{\mu}_p - \boldsymbol{\mu}_e \cdot \mathbf{B} - \boldsymbol{\mu}_p \cdot \mathbf{B}$$

kde index e odpovedá elektrónu a index p protónu. Nájdite fyzikálnu interpretáciu jednotlivých členov, odhadnite ich rádové veľkosti pri vonkajšom poli $B = 1$ T a nájdite vlastné stavy a vlastné hodnoty energie.