Atomfysik - inlämningsuppgifter 1

Anton Ljungdahl,
anton.ljungdahl@fysik.su.se

23 september 2019

1. Uppgift 1

Vi betraktar två elektroner med samma l kvanttal, dvs $l_1 = l_2 = l$. Eftersom partiklarna båda är elektroner har de också samma s-kvanttal, $s_1 = s_2 = 1/2$. Tillståndet för det totala systemet kan vi skriva som $|LM_L l_1 l_2\rangle |SM_S s_1 s_2\rangle$, för att illustrera att vi kopplat l_1, l_2 till L och s_1, s_2 till S. Uttrycker vi det här i basen $\left|l_1 l_2 m_{l_1} m_{l_2}\right\rangle \left|s_1 s_2 m_{s_1} m_{s_2}\right\rangle$ får vi

$$|LM_L l_1 l_2\rangle |SM_S s_1 s_2\rangle = \sum_{m_{l_1} m_{l_2} m_{s_1} m_{s_2}} \left\langle l_1 l_2 m_{l_1} m_{l_2} \middle| LM_L l_1 l_2 \right\rangle \left\langle s_1 s_2 m_{s_1} m_{s_2} \middle| SM_S s_1 s_2 \right\rangle \left|l_1 l_2 m_{l_1} m_{l_2}\right\rangle \left|s_1 s_2 m_{s_1} m_{s_2}\right\rangle . \tag{1.1}$$

Det här tillståndet måste ju vara antisymmetriskt under utbyte av de båda elektronerna. Efter utbytet skulle vi, enligt det givna sambandet för Clebsch-Gordan koefficienter, få koefficienter i summan som ser ut som

$$(-1)^{l_1+l_2-L}(-1)^{s_1+s_2-S} \left\langle l_2 l_1 m_{l_2} m_{l_1} \middle| LM_L l_2 l_1 \right\rangle \left\langle s_2 s_1 m_{s_2} m_{s_1} \middle| SM_S s_2 s_1 \right\rangle . \tag{1.2}$$

För att Pauliprincipen skall stämma behöver vi kräva att fasfaktorn framför är -1. Detta krav kan vi uttrycka som

$$(-1)^{l_1+l_2-L+s_1+s_2-S} = (-1)^{2k+1} \tag{1.3}$$

eller

$$l_1 + l_2 - L + s_1 + s_2 - S = 2k + 1, \tag{1.4}$$

där k är ett heltal. Med $l_1 = l_2 = l$ och $s_1 = s_2 = 1/2$ skriver vi detta som

$$2l + 1 - L - S = 2k + 1 \Leftrightarrow L + S = 2(l - k). \tag{1.5}$$

Eftersom l och k är heltal så är $l - k$ ett heltal eller noll. Det betyder att Pauliprincipen kräver att $L + S$ är noll eller jämnt för två elektroner med samma l-kvanttal.

2. Uppgift 2

Med den valda representationen får vi i första ordningens störningsteori

$$\begin{aligned}\Delta E_{\text{so}} \approx \langle r_1, \ldots, r_N; LM_L SM_S| \, H' \, |r_1, \ldots, r_N; LM_L SM_S\rangle = \\ A \sum_{i=1}^{N} \langle r_1, \ldots, r_N| \, \xi_i(r_i) \, |r_1, \ldots, r_N\rangle \, \langle LM_L SM_S| \, \mathbf{l}_i \cdot \mathbf{s}_i \, |LM_L SM_S\rangle \, .\end{aligned} \tag{2.1}$$

För varje i kan vi definiera väntevärdet för $\xi_i(r_i)$ gånger konstanten A med en ny konstant β_i,

$$A \, \langle \xi_i(r_i)\rangle = A \, \langle r_1, \ldots, r_N|\xi_i(r_i)|r_1, \ldots, r_N\rangle = A \, \langle r_i|\xi_i(r_i)|r_i\rangle =: \beta_i. \tag{2.2}$$

Detta eftersom varje ξ_i bara verkar i integralen för koordinat r_i, och resterande $\left|r_j\right\rangle$ antas vara ortonormala. Detta ger oss alltså vårt sökta uttryck i första ordningens tidsoberoende störningsteori

$$\Delta E_{\text{so}} \approx \sum_{i=1}^{N} \beta_i \, \langle LM_L SM_S|\mathbf{l}_i \cdot \mathbf{s}_i|LM_L SM_S\rangle \, . \tag{2.3}$$

Egentligen är ju orbital angular momentum och spin angular momentum i olika vektorrum, så vi kan lika gärna skriva totala angular momentum-tillståndet som $|LM_L SM_S\rangle$ som en sammansättning $|LM_L\rangle \, |SM_S\rangle$. På samma sätt verkar operatorerna $\mathbf{l}_i$ och $\mathbf{s}_i$ bara i sina motsvarande orbital/spin rum, så vi kan skriva

$$\sum_{i=1}^{N} \beta_i \, \langle LM_L SM_S|\mathbf{l}_i \cdot \mathbf{s}_i|LM_L SM_S\rangle = \sum_{i=1}^{N} \beta_i \, \langle LM_L|\mathbf{l}_i|LM_L\rangle \cdot \, \langle SM_S|\mathbf{s}_i|SM_S\rangle \, . \tag{2.4}$$

Nu kan vi använda Wigner-Eckarts sats! Operatorerna $\mathbf{l}_i$ och $\mathbf{s}_i$ är ju i samma vektorrum som de motsvarande totala angular momenta L och S. Det vill säga, enligt satsen, att väntevärdet för $\mathbf{l}_i$ är proportionellt mot väntevärdet för $\mathbf{L}$,

$$\langle LM_L|\mathbf{l}_i|LM_L\rangle = c_i \, \langle LM_L|\mathbf{L}|LM_L\rangle \, , \tag{2.5}$$

och motsvarande för $\mathbf{s}_i$ och $\mathbf{S}$ med proportionalitetskonstant d_i. Så vi kan skriva ekvation (2.4) som

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{N} \beta_i c_i d_i \, \langle LM_L|\mathbf{L}|LM_L\rangle \cdot \, \langle SM_S|\mathbf{S}|SM_S\rangle = \\ \sum_{i=1}^{N} \beta_i c_i d_i \, \langle LM_L SM_S|\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}|LM_L SM_S\rangle = \\ \sum_{i=1}^{N} \beta_i c_i d_i \, \langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}\rangle = \beta_{\text{LS}} \, \langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}\rangle \, ,\end{aligned} \tag{2.6}$$

där vi i sista likheten definierat summan över i som β_{LS}.

3. Uppgift 5

Uttrycket för första ordningens energiskift som vi är ute efter är

$$\Delta E = g_J \mu_B B_z M_J, \tag{3.1}$$

där g_J är Landé g-faktorn

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}, \tag{3.2}$$

och μ_B är Bohr magnetonen, B_z magnetfältets komponent i z-riktningen (vi antar $\mathbf{B} = B_z \hat{\mathbf{e}}_z$). Vi antar ett svagt magnetfält så är termen proportionell mot $|\mathbf{B}|^2$ i Hamiltonianen inte bidrar nämnvärt. Vår störning är alltså Zeeman-Hamiltonianen $H' = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B}$, och energin är i första ordningen

$$\langle H' \rangle = - \langle \hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B} \rangle . \tag{3.3}$$

Här är $\hat{\boldsymbol{\mu}} = -\mu_B(\mathbf{L} + 2\mathbf{S})$, där vi tagit $g_S = 2$. Vi antar att LS-koppling gäller och vi använder $|JM_J LS\rangle$ som bastillstånd för väntevärdet. Magnetfältsvektorn är ingen operator här, så vi betraktar först bara väntevärdet

$$- \langle \hat{\boldsymbol{\mu}} \rangle = \mu_B(\langle \mathbf{L} \rangle + 2 \langle \mathbf{S} \rangle). \tag{3.4}$$

Nu kan vi använda Wigner-Eckarts sats igen! Både $\mathbf{L}$ och $\mathbf{S}$ är i samma vektorrum som $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, så deras väntevärden är proportionella mot $\mathbf{J}$ (kom ihåg att vi räknar väntevärden mellan $\langle JM_J LS|$ och $|JM_J LS\rangle$):

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \frac{\langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{J} \rangle}{J(J+1)} \langle \mathbf{J} \rangle , \tag{3.5}$$

och motsvarande för $\langle \mathbf{S} \rangle$. Då har vi alltså totalt

$$\langle H' \rangle = \frac{\langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{J} \rangle + 2 \langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{J} \rangle}{J(J+1)} \mu_B \langle \mathbf{J} \rangle \cdot \mathbf{B}. \tag{3.6}$$

Eftersom $\mathbf{J} \cdot \mathbf{B} = J_z B_z$ och $\langle J_z \rangle = M_J$ får vi

$$\langle H' \rangle = \left[\frac{\langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{J} \rangle + 2 \langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{J} \rangle}{J(J+1)} \right] \mu_B B_z M_J. \tag{3.7}$$

Nu återstår det bara att visa att vi kan få Landés g-faktor (3.2) från faktorn i brackets. Det åstadkommer vi med lite algebra utifrån att $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ och $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} =$

$\frac{1}{2}\left(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2\right)$, dvs vi kan beräkna väntevärdena om vi uttrycker dem i termer av $\mathbf{J}^2, \mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2$. Vi får att

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{J} \rangle + 2 \langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{J} \rangle &= \\
\langle \mathbf{L} \cdot (\mathbf{L} + \mathbf{S}) \rangle + 2 \langle \mathbf{S} \cdot (\mathbf{L} + \mathbf{S}) \rangle &= \\
\left\langle \mathbf{L}^2 + \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \right\rangle + 2 \left\langle \mathbf{S}^2 + (\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}) \right\rangle &= \\
\left\langle \mathbf{L}^2 \right\rangle + 2 \left\langle \mathbf{S}^2 \right\rangle + 3 \langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \rangle &= \\
\left\langle \mathbf{L}^2 \right\rangle + 2 \left\langle \mathbf{S}^2 \right\rangle + \frac{3}{2} \left\langle \mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2 \right\rangle &= \\
\frac{3 \left\langle \mathbf{J}^2 \right\rangle - \left\langle \mathbf{L}^2 \right\rangle + \left\langle \mathbf{S}^2 \right\rangle}{2}&.
\end{aligned} \tag{3.8}$$

Med $\left\langle \mathbf{J}^2 \right\rangle = J(J+1)$, $\left\langle \mathbf{L}^2 \right\rangle = L(L+1)$ och $\left\langle \mathbf{S}^2 \right\rangle = S(S+1)$ får vi alltså att

$$\begin{aligned}
\frac{\langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{J} \rangle + 2 \langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{J} \rangle}{J(J+1)} &= \frac{3J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} = \\
1 &+ \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} = g_J.
\end{aligned} \tag{3.9}$$

Då har vi visat att första ordningens energikorrektion från interaktion med magnetfält ges av

$$\Delta E = \langle H' \rangle = g_J \mu_B B_z M_J. \tag{3.10}$$