Atomfysik inlämning 1

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

22 september 2019

1 Uppgift 1

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

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

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