FINA STRUKTURA VODONIKOVOG ATOMA

Fina struktura energetskih nivoa nastaje zbog relativističkih efekata. J-na koja uračunava te efekte je Dirac-ova j-na. Tako da bi dobili relativističke korekcije Šredingerovih (Borovih) energ. nivoa jednoelektronskih atoma (jona) treba da rešimo Dirac-ovu j-nu za elektron u centralnom polju $V(r) = -Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 r)$.

Međutim, ova izračunavanja su veoma duga i kako su relativ. korekcije male, pogodno je da se koristi perturbaciona teorija zadržavajući se do sabirke reda $\frac{v^2}{c^2}$ u Diracovom hamiltonijanu.

Taj hamiltonijan ima sledeći oblik:

$$H = \underbrace{\frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}}_{H_0} \underbrace{- \frac{p^4}{8m^3c^2}}_{H_1'} + \underbrace{\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\vec{L}\cdot\vec{S}}_{H_2'} + \underbrace{\frac{\pi\hbar}{2m^2c^2}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)\delta(\vec{r})}_{H_3'}$$

gde je. $V = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$

Sabirak H_1' – predstavlja relativističku korekciju kin. energije

H_2' – reprezentuje spin-orbitalnu interakciju

H_3' – tzv. Darwinov sabirak (term).

Napomena pre izračunavanja:

Schröd. j-na ne uključuje spin elektrona. Da bi izračunali korekcije koje obuhvataju spinski operator (H_2') mi ćemo startovati od 'neperturbovane' j-ne: $H_0 \psi_{nlm_lm_s} = E_n \psi_{nlm_lm_s}$

gde $\psi_{nlm_lm_s}(q) = \psi_{nlm_l}(\vec{r})\,\chi_{1/2,m_s}$

q – zajednička oznaka za prostorne i spinske koordinate.

$\psi_{nlm_l}(\vec{r})$ je jednoel. Šr. tal. f-ja:

$$H_0\psi_{nlm_l}(\vec{r}) = E_n\psi_{nlm_l}(\vec{r})$$

$\chi_{\frac{1}{2},m_s}$ spinska sv. f-ja za spin 1/2, $m_s = \pm\frac{1}{2}$, zato se koriste oznake za "spin gore" i "spin dole"

$$\alpha = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \quad i \quad \beta = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

F/3

① Relativistička korekcija kinetičke energije $H_1' = -\frac{p^4}{8m^3c^2}$

Izraz za ovu korekciju možemo da dobijemo ovako:

$$H = T + V = (E_u - E_0) + V = \left(\sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2} - m_0 c^2\right) + V$$

Uzimajući u obzir da je $v \ll c$, a to znači i da je $p \ll m_0 c$, razlaganjem u Taylorov red po malom parametru $\frac{p^2}{m_0^2c^2}$ imamo:

$$H = m_0c^2\left(\sqrt{1 + \frac{p^2}{m_0^2c^2}} - 1\right) + V = V + \frac{p^2}{2m_0} - \frac{p^4}{8m_0^3c^2} + \dots \qquad \sqrt{1+x} \approx 1 + \frac{x}{2} - \frac{x^2}{8}$$

Treći sabirac je mali u odnosu na prva dva i možemo ga smatrati perturbacijom. [šta više H_1' komutira sa komponentama orbitalnog momenta]

H_1' ne deluje na spinske varijable, tako da će H_1' ~~je~~ ima dijagonalni oblik u l, m_l i m_s. Primenimo pert. teoriju prvog reda

$$\Delta E_1 = \left\langle \psi_{nlm_lm_s} \left| -\frac{p^4}{8m^3c^2} \right| \psi_{nlm_lm_s} \right\rangle = \left\langle \psi_{nlm_l} \left| -\frac{p^4}{8m^3c^2} \right| \psi_{nlm_l} \right\rangle$$

$$= -\frac{1}{2mc^2} \langle \psi_{nlm_l} | T^2 | \psi_{nlm_l} \rangle$$

Kako je $T = H_0 + \frac{Ze^2}{(4\pi\varepsilon_0)r}$

$$\Rightarrow \quad \Delta E_1 = -\frac{1}{2mc^2} \left\langle \psi_{nlm_l} \left| \left(H_0 + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\left(H_0 + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right) \right| \psi_{nlm_l} \right\rangle =$$

$$= -\frac{1}{2mc^2}\left[E_n^2 + 2E_n\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm_l} + \left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nlm_l}\right]$$

$$\langle r^k \rangle = \int \psi^*_{nlm}(\vec{r})\, r^k\, \psi_{nlm}(\vec{r})\, d\vec{r} = \int_0^\infty r^k |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm} = \frac{Z}{an^2} \quad ; \quad \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nlm} = \frac{Z^2}{a^2n^3(l+\frac{1}{2})}$$

$$E_n = -\frac{1}{2n^2}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{m}{\hbar^2} = -\frac{e^2 m}{(4\pi\varepsilon_0)a}\frac{Z^2}{2n^2} = -\frac{1}{2}mc^2\frac{(Z\alpha)^2}{n^2}$$

$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c}$ – konstanta fine strukture; a – Borov radijus $a = 4\pi\varepsilon_0 \frac{\hbar^2}{me^2}$

* Br. Joc p. 197

$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}$ ima dim. ENERGIJA × DUŽINA

$\hbar$ — " — ENERGIJA × VREME $\Big\} \Rightarrow \alpha \to$ BEZ DIMENZIJA

$\alpha = \frac{1}{137}$

Činjenicu da postoji prosta bezdimenziona veza između univerzalnih konstanti koje karakterišu diskretnost naelektrisanja (e), teoriju kvanta ($\hbar$) i teoriju relativnosti prvi su zapazili Ajnštajn i Plank. Postoje više metoda za ~~ta~~ određivanje vrednosti α. Većina je povezano sa izučavanjem fine strukture, ali u poslednje vreme i pomoću efekta Džozefsona

$$\Delta E_1' = -\frac{1}{2mc^2}\left\{\left[\frac{m_0c^2(Z\alpha)^2}{2n^2}\right]^2 - 2\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)\frac{mc^2(Z\alpha)^2}{2n^2}\frac{Z}{a_0 n^2} + \left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\frac{Z^2}{a^2n^3(\ell+\frac{1}{2})}\right\}$$

$$= \frac{1}{2}mc^2\frac{(Z\alpha)^2}{n^2}\frac{(Z\alpha)^2}{n^2}\left[\frac{3}{4} - \frac{n}{\ell+\frac{1}{2}}\right]$$

$$\Delta E_1' = -E_n\frac{(Z\alpha)^2}{n^2}\left[\frac{3}{4} - \frac{n}{\ell+\frac{1}{2}}\right]$$

---

2. Spin orbitalna popravka

$$H_2' = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\vec{L}\cdot\vec{S}$$

prepišimo to u obliku: $H_2' = \xi(r)\vec{L}\cdot\vec{S}$

$$\xi(r) = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr} = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r^3} \qquad \left(V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)$$

F-je $\psi_{n\ell m_\ell m_s}$ koje su istovremeno sv. f-je operatora H_0, L^2, S^2, L_z i S_z nisu adekvatne jer $\vec{L}\cdot\vec{S}$ ne komutira ni sa L_z ni sa S_z.

Uvedimo totalni angularni moment elektrona:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

$$J^2 = L^2 + 2\vec{L}\cdot\vec{S} + S^2$$

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

Razmotrimo stanja $\psi_{n\ell j m_j}$ koja su sv. stanja operatora H_0, L^2, S^2, J^2 i J_z sa odgovarajućim sv. vrednostima E_n, $\ell(\ell+1)\hbar^2$, $s(s+1)\hbar^2$, $j(j+1)\hbar^2$ i $m_j\hbar$

Za slučaj $s = 1/2$

$$j = \ell \pm 1/2, \quad \ell \neq 0$$
$$j = \ell, \quad \ell = 0$$
$$m_j = -j, -j+1, \dots, +j$$

$$\Delta E_2 = \langle\psi_{n\ell j m_j}|\tfrac{1}{2}\xi(r)[J^2 - L^2 - S^2]|\psi_{n\ell j m_j}\rangle$$

$$= \frac{\hbar^2}{2}\langle\xi(r)\rangle\left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}\right]$$

$$\langle\xi(r)\rangle = \frac{1}{2m^2c^2}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle = \frac{1}{2m^2c^2}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)\frac{Z^3}{a_0^2n^3\ell(\ell+\frac{1}{2})(\ell+1)}$$

$$\Delta E_2 = \frac{mc^2(Z\alpha)^4}{4n^3\ell(\ell+1/2)(\ell+1)} \times \begin{cases} \ell & \text{za } j = \ell+1/2 \\ -\ell-1 & \text{za } j = \ell-1/2 \end{cases}$$

$$= -E_n\frac{(Z\alpha)^2}{2n\ell(\ell+1/2)(\ell+1)} \times \begin{cases} \ell & \text{za } j = \ell+1/2 \\ -\ell-1 & \text{za } j = \ell-1/2 \end{cases}, \quad \text{za } \ell = 0, \ \underline{\underline{\Delta E_2 = 0}}$$

3. Darwin-ov član

$$H_3' = \frac{\pi\hbar^2}{2m^2c^2}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)\delta(\vec{r})$$

Ovaj sabirak (korekcija) je različit od nule jedino za slučaj $l=0$

$$\Delta E_3 = \frac{\pi\hbar^2}{2m^2c^2}\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\langle\psi_{n00}|\delta(\vec{r})|\psi_{n00}\rangle = \frac{\pi\hbar^2}{2m^2c^2}\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}|\psi_{n00}(0)|^2$$

$$|\psi_{n00}(0)|^2 = \frac{1}{4\pi}|R_{n0}(0)|^2 = \frac{Z^3}{\pi a^3 n^3} \qquad \left(Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\right)$$

$$\Delta E_3 = \frac{1}{2}mc^2\frac{(Z\alpha)^2}{n^2}\frac{(Z\alpha)^2}{n}$$

$$= -E_n\frac{(Z\alpha)^2}{n}, \qquad l=0.$$

Jedino za s-stanja ($l=0$) radijalna tal. f-ja je različita od nule

---

$$\Delta E = \Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3$$ Ukupna korekcija

$$\Delta E_{nj} = -\frac{1}{2}mc^2\frac{(Z\alpha)^2}{n^2}\frac{(Z\alpha)^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4}\right)$$

$$= E_n\frac{(Z\alpha)^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4}\right)$$

Dodavajući rel. korekciju ΔE_{nj} nerelativističkoj energiji E_n dobijamo konačno za jedno-elektronske atome:

$$E_{nj} = E_n\left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4}\right)\right]$$

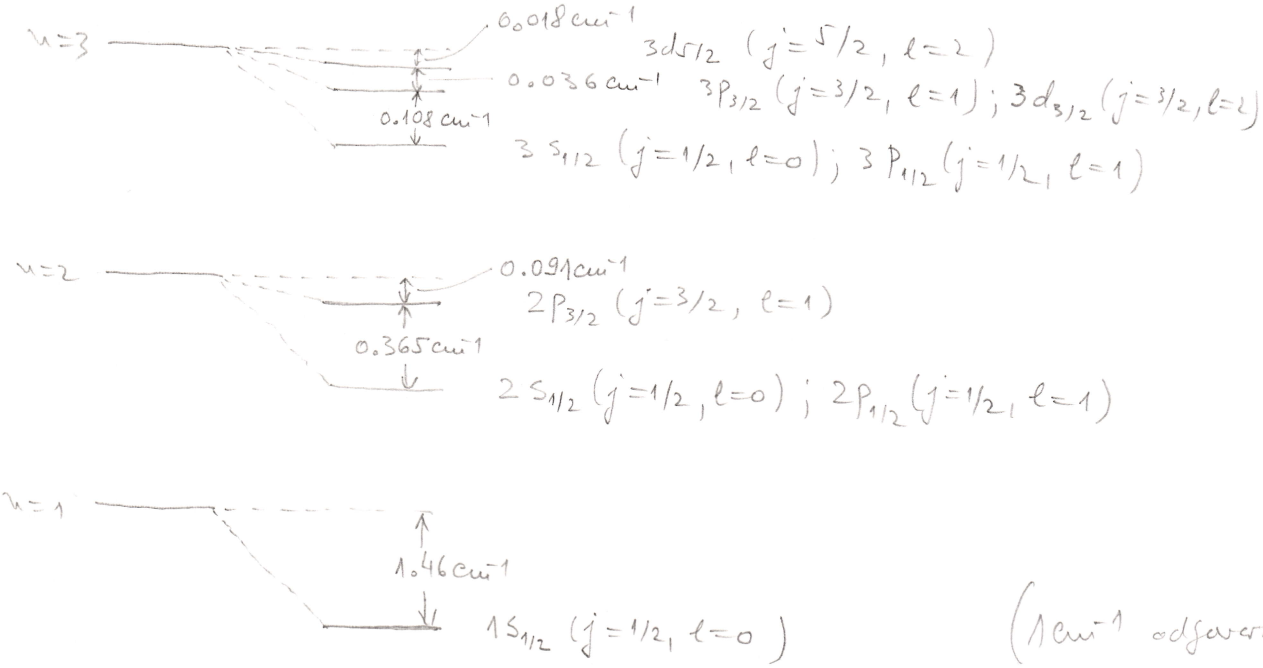
tako da energija veze $|E_{nj}|$ elektrona je blago porasla u odnosu na $|E_n|$, apsolutna vrednost $|\Delta E_{nj}|$ postaje manja kako n ili j raste, a veća porastom Z-a.

Dobijena formula je u saglasnosti do reda $(Z\alpha)^2$ sa egzaktnim rezultatom koji se dobija rešavanjem Diracove j-ne:

$$E_{nj}^{exact} = mc^2\left\{\left[1 + \left(\frac{Z\alpha}{n-j-1/2+[(j+1/2)^2-Z^2\alpha^2]^{1/2}}\right)^2\right]^{-1/2} - 1\right\}$$

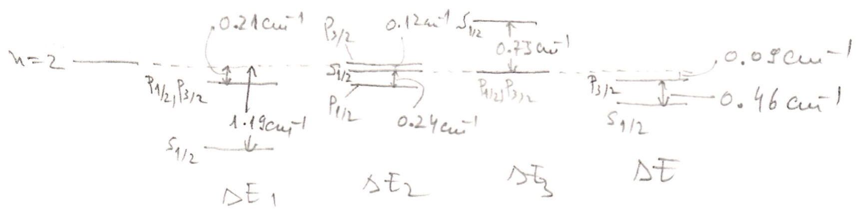
Dakle, energija zavisi od n i od $j = 1/2, 3/2, \dots, n-1/2$

Fina struktura izgleda ovako:



($1\,cm^{-1}$ odgovara $1{,}24 \cdot 10^{-4}\,eV$)

Doprinos pojedinih sabiraka $\Delta E_1, \Delta E_2, \Delta E_3$ za $n=2$ kod vodonika izgleda ovako:



Dalji proračuni u okviru kvantne elektrodinamike pokazuju da se i nivoi kao npr. $2s_{1/2}$ i $2p_{1/2}$ nešto razlikuju to je tzv. Lamb-ov pomeraj.

Fina struktura spektralnih linija

Spektralne linije zbog prelaza $nlj \to n'l'j'$ između komponenata fine strukture nivoa nl i $n'l'$ je poznato kao multiplicitet linije.

Važe selekciona pravila $\Delta l = \pm 1$; $\Delta j = 0, \pm 1$

Pr. $np - n's$ ima dve komponente. Svaka linija Lyman-ove serije cepa se na par tzv. dublet. $np_{1/2} - 1s_{1/2}$ i $np_{3/2} - 1s_{1/2}$

Dok $nd - n'p$ je triplet