

Chapter 17 氫原子中的真實作用

氫原子中，除了庫倫作用 $-\frac{e^2}{r}$ 外，還有其較細微的作用，本章將作一簡單的介紹。

加上這些修正後

$$H = H_0 + \underbrace{H_r + H_{so} + H_{hyper} + \dots}_{H'} \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{fine structure } O(\alpha^2): E_n \alpha = e^2/kc \\ E_n = O(\alpha^2) \\ \text{Lamb shift} \\ = E_n \cdot O(\alpha^3) \\ = O(\frac{m_e}{m_p} \alpha^2) \cdot E_n \end{array} \right.$$

\uparrow
 $\frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$

$\therefore H'$ 不大

\therefore 我們將 H' 當 perturbation 處理，因此，對能譜修正為 $\Delta E = \langle H' \rangle$

一旦知道 H' 之型式，剩下的工作 計算 $\langle H' \rangle$ 了！

(i) H_r : 相對論之修正 (動能)

$$K = \sqrt{(pc)^2 + (mc^2)^2} - mc^2$$

$$= mc^2 \sqrt{1 + \left(\frac{p}{mc}\right)^2} - mc^2$$

$$= mc^2 \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{p}{mc}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}\right) \left(\frac{p}{mc}\right)^4 + \dots \right] - mc^2$$

$$= \frac{p^2}{2me} - \frac{1}{8} \frac{p^4}{me^3c^2} + \dots \quad \left(-\frac{1}{8} \right) = \frac{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}-1)}{1 \cdot 2}$$

修正項

$$\therefore \Delta K = -\frac{1}{8} \frac{p^4}{me^3c^2} \quad \text{--- ①}$$

$$\frac{\Delta K}{\frac{p^2}{2me}} \sim \frac{p^2}{me^2c^2} \sim \frac{\frac{p^2}{2me}}{me^2c^2} \sim \frac{\left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2 \frac{1}{2} me^2c^2}{me^2c^2} \sim (Z\alpha)^2$$

$\therefore \Delta K \ll \frac{p^2}{2me} (= E_n)$ 更地， α^2 之 order! (Paper House)
($p \sim m\alpha$)

(iii) Spin-orbit coupling (H_{so})

我們之前談到將 $\vec{S} + \vec{L}$ 得到電子之總角動量了，其實我們並沒有談到背後_先的機制 (mechanism)，事實上，並不是所有的情形，都必須將 \vec{S} 與 \vec{L} 相加，得到 \vec{J} 做！(見最後 Zeeman effect 之討論)

讓 Spin 與 \vec{L} 之相互作用之機制為：

因為電子繞行運動會產生磁場 \vec{B}_{in} ，
而 \vec{S} 與 \vec{B}_{in} 之作用為 $-\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_{in}$ (在電子之磁場) 固定系統中，原子核所產生

最後產生了 $\lambda \vec{S} \cdot \vec{L}$ 之作用項。

即 $\hat{H}_{so} = \lambda \vec{S} \cdot \vec{L}$ — (2)



$\lambda = ?$ 呢，要推出 λ ，中先問 $\vec{B}_{in} = ?$

由電磁學可知，一個運動中的電場 \vec{E} ，

其產生的磁場 = $\frac{1}{c} \vec{E} \times \vec{v}$ ， \vec{v} = 運動的速度

因此， $\vec{B}_{in} = \frac{1}{c} \vec{E} \times \vec{v}$ ，而 $\vec{E} = -\nabla\phi$ 見之後之 discussion
電子所見原子核之磁場 ($\phi = \frac{Ze}{r}$)

$$\begin{aligned} \therefore \hat{H}_{so} &= -\vec{\mu}_s \cdot \frac{1}{c} \vec{v} \times \nabla\phi \quad (= -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_{in}) \\ &= \frac{+|e|\hbar}{mc^2} \vec{S} \cdot \vec{v} \times \nabla\phi = \frac{|e|\hbar}{mc^2} \vec{S} \cdot \vec{p} \times \frac{\vec{r}}{r} \frac{d\phi}{dr} \\ &= -\frac{|e|\hbar}{mc^2} \vec{S} \cdot \vec{L} \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} \quad \text{--- (3)} \end{aligned}$$

由於電子不是作直線運動，除了 $\frac{1}{c} \mathbf{E} \times \mathbf{v}$ 之效應外，

orbiting 會使電子座標也旋轉，此為相對論
固定在

效果之一，稱為 Thomas precession (請參 Eisberg 的書)

最後便 ③ reduced by 2

$$\Rightarrow \hat{H}_{so} = \frac{-1}{2me^2c^2} \vec{S} \cdot \vec{L} \frac{1}{r} \frac{d|\psi|^2}{dr}$$

$$= \frac{1}{2me^2c^2} \vec{S} \cdot \vec{L} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \dots \textcircled{4}$$

此即為 spin-orbit coupling \Rightarrow order $H_{so} \sim -\mu_B \frac{ZV}{c}$
 $\sim \frac{e}{mc} S \cdot \frac{v}{c} \frac{e}{r^2} = \frac{p}{\hbar c^2} \frac{\hbar}{r} \left(\frac{e^2}{a_0} \right)$
 $\frac{H_{so}}{E_n} \sim \frac{p}{\hbar c^2 a_0} \frac{\hbar}{r} \frac{1}{E_n} \sim \alpha^2$
 $\frac{H_{so}}{E_n} \sim \alpha^2$
 $\frac{H_{so}}{E_n} \sim \alpha^2$

(若 $g_s \neq 2$, 則 $\hat{H}_{so} = \frac{g_s}{4me^2c^2} \vec{S} \cdot \vec{L} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr}$)

spin-orbit coupling 為造成 \vec{S} 與 \vec{L} 耦合
的來源，我們在最後會討論其對

Zeeman effect 的影響。

其所造成之新的結構
對能階
與 (ii) 一樣 $= \alpha^2$ \Rightarrow fine structure

(iii) Hyperfine structure (\hat{H}_{hyper})

除了電荷之外，原子核也可帶有磁偶極

page 287

$$\frac{|e|}{2m_p c} \vec{\mu}_N = \frac{Ze|g_N}{2M_N c} \vec{I} \leftarrow \text{原子核之總角動量 (Spin)}$$

此磁偶極所產生之 $\vec{B}_N = \frac{2}{3} \vec{\mu}_N \delta(r) + \frac{1}{4\pi r^3} [3(\vec{\mu}_N \cdot \vec{r}) \vec{r} - \mu_N^2 \vec{1}]$

$$\therefore \hat{H}_{hyper} = \frac{-2\mu_B}{3} \vec{\mu}_N \cdot \vec{\mu}_s \delta(r) - \frac{1}{4\pi r^3} [3(\vec{\mu}_N \cdot \vec{r})(\vec{\mu}_s \cdot \vec{r}) - \vec{\mu}_N \cdot \vec{\mu}_s]$$

\rightarrow nuclear magneton $\equiv \mu_N \approx 10^{-3} \mu_B$

注意：書本 17-28 是錯誤的！

在高斯製下，

$$\nabla \times \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{J} \quad \text{--- ①}$$

$$\Rightarrow \nabla^2 \vec{A} = -\frac{4\pi}{c} \vec{J}$$

$$\therefore \vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{c} \int \frac{\vec{J}(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3r' = \frac{1}{cr} \int \vec{J}(\vec{r}') d^3r' + \frac{r^2}{cr^3} \cdot \int \vec{J}(\vec{r}') \vec{r}' d^3r'$$

$$\vec{m} = \frac{1}{2c} \int \vec{r}' \times \vec{J}(\vec{r}') d^3r'$$

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{\vec{m} \times \vec{r}}{r^3} = -\frac{(\vec{m} \times \nabla)}{r} \frac{1}{r}$$

M.K.S 制下： $\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J}$ --- ②

∴ 在高斯制下 吸收到 \vec{m}

① + ② $\Rightarrow \vec{A}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\vec{m} \times \vec{r}}{r^3} = -\frac{\mu_0}{4\pi} (\vec{m} \times \nabla) \frac{1}{r}$

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} = -\nabla \times (\vec{m} \times \frac{1}{r})$$

$$= -\underbrace{\vec{m} \nabla^2 \frac{1}{r}}_{-4\pi \delta(r)} + \nabla (\vec{m} \cdot \nabla \frac{1}{r})$$

$$= 4\pi \vec{m} \delta(r) + m_j \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{r} \dots$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{1}{r} &= -\frac{x_j}{r^3} \\ \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{r} &= \frac{3x_i x_j}{r^5} - \frac{\delta_{ij}}{r^3} \end{aligned}$$

M.K.S $\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{3\vec{r}(\vec{r} \cdot \vec{m}) - r^2 \vec{m}}{r^5} + \frac{4\pi}{3} \vec{m} \delta(r) \right]$

When $r \neq 0$

$$m_j \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{r} = \frac{3x_i (\vec{m} \cdot \vec{r}) - m_i r^2}{r^5}$$

to get the behavior of $r \rightarrow 0$

one performs

$$I = \int_{V_\epsilon} f_i(\vec{r}) m_j \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{r} d^3r \quad \text{for any } f_i(\vec{r})$$

Take V_ϵ as a sphere of radius ϵ center at $\vec{r} = 0$

as $\epsilon \rightarrow 0$, then $f_i(\vec{r}) \rightarrow f_i(0)$

$$\therefore I \rightarrow \int_{V_\epsilon} f_i(0) m_j \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{r}$$

||

$$f_i(0) m_j \int_{V_\epsilon} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{r} \propto \delta_{ij}$$

$$= f_i(0) m_j \frac{f_{ij}}{3} \int_{V_\epsilon} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{r} = -4\pi \delta_{ij}$$

$$= -\frac{4\pi}{3} \vec{f}(0) \cdot \vec{m} \quad \text{for any } \vec{f}(\vec{r})$$

$$+ 50 (\vec{m} \cdot \vec{r})$$

$$= \frac{3\vec{r}(\vec{m} \cdot \vec{r}) - m_i r^2}{r^5}$$

$$= \frac{4\pi}{3} \vec{m} \delta(\vec{r})$$

$$\text{故 } \vec{B} = \frac{4\pi}{3} \vec{m} \delta(\vec{r})$$

$$+ \frac{3\vec{r}(\vec{m} \cdot \vec{r}) - r^2 \vec{m}}{r^5}$$

由於 $\vec{\mu}_N$ 中有 $\frac{1}{M_N}$ 之 factor, 而原子核

之質量 $M_N \gg m_e$, $\therefore \mu_N \ll \mu_B$

$\therefore \hat{H}_{\text{hyper}}$ 之效果甚小, 於 \hat{H}_{SO} , 所以稱之 hyperfine structure

對 ground state 而言, 如氫原子, $l=0$, 我們只考慮 $l=0$

(1) 式之第二項 $\langle \dots \rangle_{l=0} = 0$ (只有 $l=0$ 之電子較易靠近原子核, $\psi_{l=0} \sim r^0$)

這是因為 $\psi_{l=0}$ 含 θ, ϕ 無關, 所以要作

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} (\vec{\mu}_N \cdot \hat{r}) (\vec{\mu}_S \cdot \hat{r}) \sin\theta d\theta d\phi = \frac{4\pi}{3} \vec{\mu}_N \cdot \vec{\mu}_S \quad (\text{習題})$$

因此 $\langle \text{第二項} \rangle_{l=0} = 0$

$$\therefore \langle \hat{H}_{\text{hyper}} \rangle = - \langle \vec{\mu}_N \cdot \vec{\mu}_S \delta(r) \rangle \frac{2}{3} \times 4\pi$$

$$= \frac{Z e^2 g_N}{2 M_N c} \frac{\mu_B}{m_e c} \underbrace{\langle \vec{I} \cdot \vec{S} \delta(r) \rangle}_{|\psi_{n,l=0}(0)|^2 \langle \vec{I} \cdot \vec{S} \rangle} \frac{2}{3} \times 4\pi$$

$$= \frac{Z e^2 g_N}{3 M_N m_e c^2} \langle \vec{I} \cdot \vec{S} \rangle |\psi_{n,l=0}(0)|^2 \times 4\pi \quad (6)$$

↑
電子 orbital 部分

$$n=1 \text{ 時, } |\psi_{n=1,l=0}(0)|^2 = \left[2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} \right]^2 \frac{1}{4\pi}$$

$$= \frac{Z^3}{\pi a_0^3} = \left(\frac{Z a_0 m_e c^2}{\hbar} \right) \frac{1}{\pi} (R_{n=1, l=0}(r)) = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-2r/a_0}$$

$$\therefore \langle \hat{H}_{\text{hyper}} \rangle_{n=1, l=0} = \frac{4 Z^4 e^2 g_N}{3 M_N m_e c^2} \frac{1}{a_0^3} \langle \vec{I} \cdot \vec{S} \rangle_{I=1/2, S=1/2} \quad (7)$$

以上為氫原子中之真實作用。

其中 Spin-orbit 作用與 hyperfine (①式) 都需要計算 $\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle$ 。對 hyperfine 作用而言，

①式 \rightarrow 要算 $\langle \vec{I} \cdot \vec{S} \rangle$

$\uparrow \quad \uparrow$
 nucleus e^-

在 $n=1, l=0$ 之氫原子, $I=1/2, S=1/2, [\vec{I}, \vec{S}] = 0$

$$\vec{I} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} [(\underbrace{\vec{I} + \vec{S}}_{F})^2 - I^2 - S^2]$$

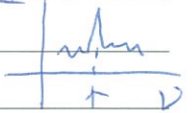
$\therefore F = 0, \text{ 或 } 1$
 singlet triplet

$$\therefore \langle \vec{I} \cdot \vec{S} \rangle_{F=1} = \frac{1}{2} [1 \cdot 2 \hbar^2 - \frac{3}{4} \hbar^2 - \frac{3}{4} \hbar^2] = \frac{1}{4} \hbar^2 \text{ (triplet)}$$

$$\langle \vec{I} \cdot \vec{S} \rangle_{F=0} = \frac{1}{2} [0 \cdot \hbar^2 - \frac{3}{4} \hbar^2 \times 2] = -\frac{3}{4} \hbar^2 \text{ (singlet)}$$

\downarrow 宇態中有足夠的能量足以激發之

$$F=1 \rightarrow F=0 \quad \Delta E = h \frac{c}{\lambda} (\sim 100K) \quad \lambda \approx 21.1 \text{ cm}$$



\leftarrow 見左頁

$$(g_N = 5.58)$$

$$\nu \approx 1420 \text{ MHz} \quad 1.4 \text{ GHz}$$

屬 radio 頻段

此 21 cm 光譜線，為天文學家用以探索宇宙中氫原

即著名的

$\therefore \lambda \gg$ interstellar dust particles
 不易被 scattered

線

子介佈的重要工具。
 (cold)

(如鄰近星系的 spiral arm 等，甚至在 1959 年，Morrison &

Cocconi 建議以 21 cm 波長搜尋外星生命，稱為

Morrison-Cocconi (conjecture)

同理, 要計算 fine structure, 則要算

$$-\frac{1}{8} \frac{1}{me^3 c^2} \langle p^4 \rangle \quad \text{及} \quad \frac{1}{2me^2 c^2} \langle \vec{S} \cdot \vec{L} \frac{1}{r} \frac{dv}{dr} \rangle$$

\uparrow ①式 \uparrow ④式

其中 $\langle p^4 \rangle$ 指的就是 $\langle p^4 \rangle_{n,l}$

$$\begin{aligned} \text{而對於 } \langle \vec{S} \cdot \vec{L} \frac{1}{r} \frac{dv}{dr} \rangle &= \langle \frac{e^2}{r^3} \rangle_{n,l} \langle \vec{S} \cdot \vec{L} \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle J^2 - S^2 - L^2 \rangle \langle \frac{e^2}{r^3} \rangle_{n,l} \end{aligned}$$

$$\therefore \Delta E = -\frac{1}{8me^3 c^2} \langle p^4 \rangle_{n,l} + \frac{e^2 \hbar^2}{4me^2 c^2} [J(J+1) - S(S+1) - L(L+1)] \langle \frac{1}{r^3} \rangle_{n,l}$$

利用 $\left(\frac{p^2}{2m}\right)^2 = (\hat{H}_0 + \frac{e^2}{r})^2$

將 $\langle p^4 \rangle_{n,l}$ 及 $\langle \frac{1}{r^3} \rangle_{n,l}$ 算出後

(eg. 17-8)

\hookrightarrow Ex 12-11 (eg. 17-15)

$$\Delta E_{n,j} = -13.6 \text{ eV} \cdot \left[\frac{\alpha^2}{n^4} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (\text{eg } 13.6 \text{ eV} \rightarrow 0(\alpha^2))$$

$$\text{即 } E_{n,j} = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} \left\{ 1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right\} \quad (12-16)$$

l 之 degeneracy is lifted.

$$\therefore \text{原先的 } E_{n,l} = -\frac{13.6}{n^2} \text{ eV} \left\{ \begin{array}{l} \text{---} \rightarrow \text{---} \begin{array}{l} j=3/2 \\ j=1/2 \end{array} \\ l=1 \\ \text{---} \rightarrow \text{---} \begin{array}{l} j=l+1/2 \\ j=l-1/2 \end{array} \\ l \end{array} \right.$$

Anomalous Zeeman Effect

造成 Spin-orbit \vec{B}_{in} 為 \vec{L} 與 \vec{S} 之

來源. 因此, Zeeman effect 在有 spin 時加入

與只考慮 \vec{L} (如 $S=0$ 時) 之情況不同.

多出之 transition lines 即為 Anomalous Zeeman effect.

其結果與 B_{in}/B_{ext} 大小有關。

↳ Paschen-Back effect

$B_{ext} \gg B_{in}$ 極限 (Strong field Zeeman effect)

在外場下, \hat{H} 會多一項 $\hat{H}_{ext} = -(\vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S) \cdot \vec{B}_{ext}$

$$= \frac{|e|\hbar}{2mc} B_{ext} \left(\frac{L_z}{\hbar} + \frac{2S_z}{\hbar} \right)$$

由 (3) 式 $\hat{H}_{so} = -\vec{\mu}_S \cdot \vec{B}_{in}$ 相比可知

若 $B_{ext} \gg B_{in}$, 由 \hat{H}_{ext} 主導, \hat{H}_{so} 可被忽略

因此 $\hat{H}_0 = \frac{p^2}{2me} - \frac{e^2}{r}$

$$H' = \hat{H}_{ext}$$

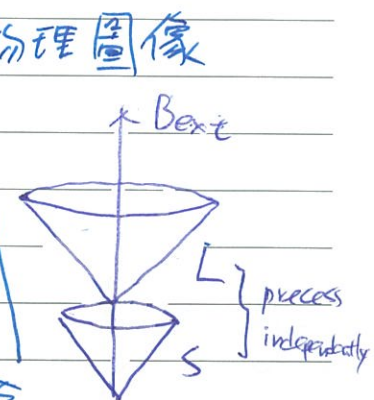
要計算 $\langle \hat{H}_{ext} \rangle$ ← 對 \hat{H}_0 之 eigenstate 求

但在 \hat{H}_0 中, \vec{L} 與 \vec{S} 並沒有任何耦合.

因此 $\Delta E = \langle \hat{H}_{ext} \rangle_{ms, m_l; s, l}$

即 $E_{n, m_l, m_s} = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} + \mu_B B_{ext} (m_l + 2m_s)$ (P)

能量與 n, m_l, m_s 有關



Bin >> Bext 極限 (Weak field Zeeman effect)

此時 \hat{H}_{so} 主導,

因此, 要算 $\langle \hat{H}_{ext} \rangle_{j, m_j}$

$$= \frac{\mu_B B_{ext}}{\hbar} \langle \underbrace{L_z + 2S_z}_{J_z + S_z} \rangle_{j, m_j}$$

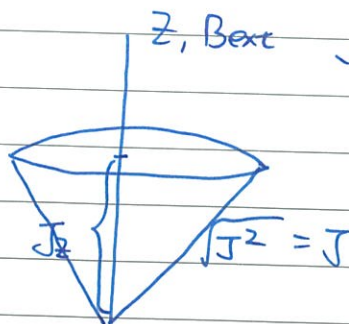
$$= \mu_B B_{ext} m_j + \frac{\mu_B B_{ext}}{\hbar} \langle S_z \rangle_{j, m_j}$$

因此, 問題在於如何在 $\vec{J} = \vec{S} + \vec{L}$ 之角動量之 eigenstate 找出其 spin 的 z 分量平均值?

首先我們知道 \vec{J} 是由 $\vec{S} + \vec{L}$ 得到的.

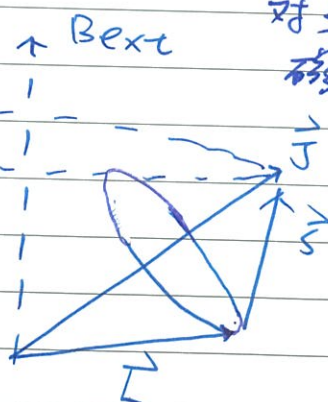
而 $\begin{cases} J^2 \\ S^2 \\ L^2 \end{cases}$ 及 J_z 是固定的, 但 S_z, L_z 並不是.

因此, 其物理圖像為



$$J^2 = \vec{J} \cdot (\vec{S} + \vec{L}) = \text{固定}$$

對於 \vec{S} 及 \vec{L} 來說, \vec{J} 像磁場一樣, \vec{L} 及 \vec{S} 在 \vec{J} 之投影固定



即 S 及 L 並不 在 z 軸 為中心軸之 cone 上變動

(否則 S_z, L_z 即固定了), 而是在 以 \vec{J} 為中心軸之 cone 上變動. $\therefore J$ 一帶帶著 S , L 對 z 軸 動!

因此，這個圖像告訴我們 整個運動之

\vec{S} 的平均值 沿著 \hat{J} 方向

$$A = \underbrace{(\vec{S} \cdot \hat{J})}_{\text{平均值}}$$

$$\vec{S} \text{ 在 } \hat{J} \text{ 方向之投影} = \frac{(\vec{S} \cdot \hat{J})}{J^2} \hat{J}$$

$$\therefore \langle S_z \rangle_{j, m_j} = \left\langle \frac{(\vec{S} \cdot \hat{J})}{J^2} \hat{J} \right\rangle_{j, m_j}$$

$$= \frac{\hbar m_j}{\hbar^2 j(j+1)} \langle \vec{S} \cdot \hat{J} \rangle_{j, m_j}$$

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

$$\therefore \langle S_z \rangle_{j, m_j} = \frac{j(j+1) + \frac{3}{4} - l(l+1)}{2j(j+1)} \cdot \hbar m_j$$

$$\therefore \Delta E = \left[1 + \frac{j(j+1) + \frac{3}{4} - l(l+1)}{2j(j+1)} \right] m_j \mu_B B_{ext} \quad \text{--- (P)}$$

g_j (Landé g factor)

\Rightarrow for $j = l \pm 1/2$
 $\Delta E = m_j \mu_B B_{ext} \cdot (1 \pm \frac{1}{2l+1})$

例 $l=0, s=1/2 \Rightarrow j=1/2, m_j = 1/2, -1/2$

$^2P_{1/2}$

$\Rightarrow j=3/2, m_j = 3/2, +1/2, -1/2, -3/2$

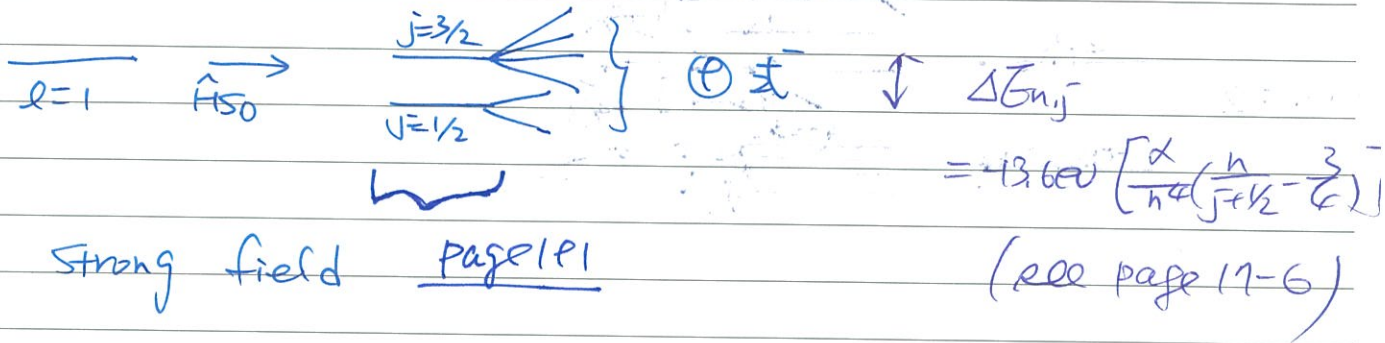
$^2P_{3/2}$

$$\Delta E_{j=1/2} = \frac{2}{3} m_j \mu_B B_{ext}$$

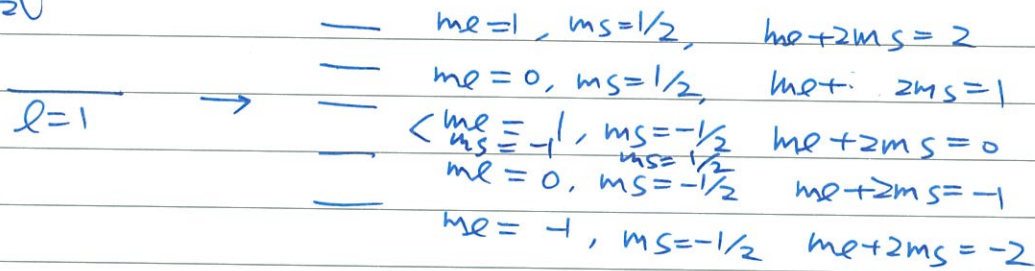
$$\Delta E_{j=3/2} = \frac{4}{3} m_j \mu_B B_{ext}$$

∴ Weak field

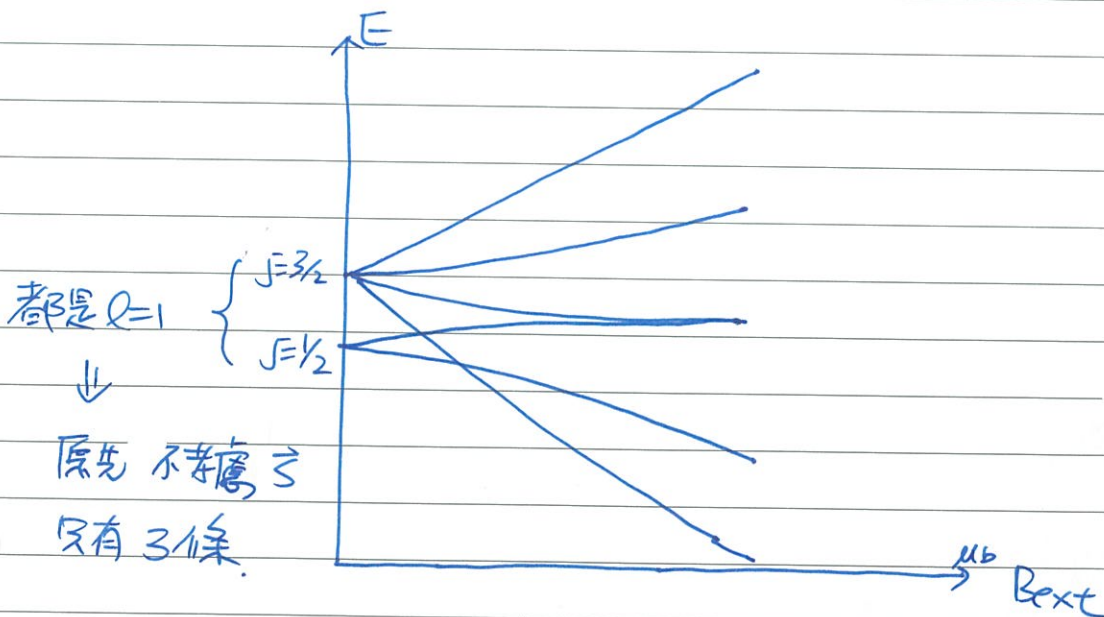
page 17.6



⊗ 式



實際的計算 (intermediate field)



Selection rule

$\Delta m_j = \pm 1, 0$ (weak field, but not
 $\Delta m_l = \pm 1, 0$ (Strong field)
 $\Delta m_s = 0$ (no magnetic dipole transition)

The above only concerns $l=1$. When other l 's are included, it could be more complicated.

例 $n=2$, $l=1$ 或 0

当 $l=1$ $j=3/2$ 只有 $2P_{3/2}$

当 $l=1$ $j=1/2$ 有 $2P_{1/2}$ 及 $2S_{1/2}$

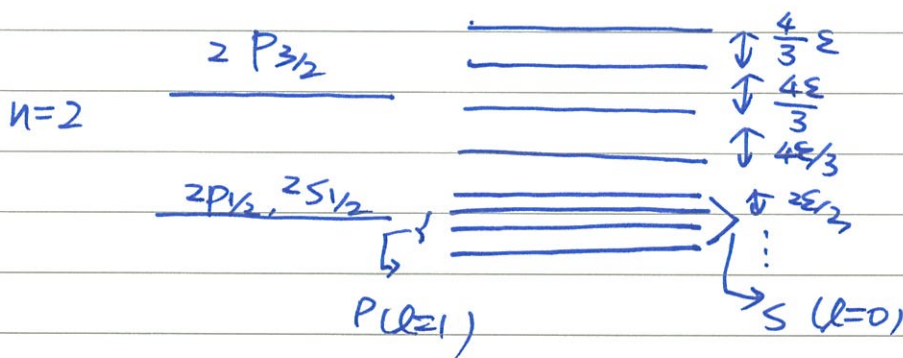
$$\text{当 } l=1 \quad \Delta E_{j=3/2} = \frac{4}{3} \mu_B B_{ext} m_j$$

$$\text{当 } l=1 \quad \Delta E_{j=1/2} = \frac{2}{3} \mu_B B_{ext} m_j \quad \text{when } l=1$$

$$= \pm \frac{1}{3} \mu_B B_{ext}$$

$$\Delta E_{j=1/2} = 2 \mu_B B_{ext} m_j = \pm \mu_B B_{ext}$$

Let $\Sigma = \mu_B B_{ext}$, 则



在 strong field, $\therefore \Delta m_s = 0$

$$\therefore \Delta E = \Delta U_b B_{ext} (m_l + 2m_s)$$

$$= U_b B_{ext} \Delta m_l \quad \text{只与 } \Delta m_l \text{ 有關}$$

因此, transition 之光譜与 normal Zeeman effect 一樣! (習題)

B_{in} 決定了 strong 与 weak fields 之間的分界線, 一般約在 1 Tesla 左右。

它的估計可以用 spin-orbit splitting 之 ΔE_{so} 大致決定。

$$\text{例: } \therefore -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_{ext} = -g_s \frac{U_b}{\hbar} S_z B_{ext}$$

$$= \pm \frac{1}{2} g_s U_b B_{ext} = \pm U_b B_{ext}$$

$$\therefore \Delta E (\text{due to Zeeman splitting}) = 2U_b B_{ext}$$

一般皆以此能量做為量度磁場之大小!

$$U_b = 1.27 \times 10^{-24} \text{ joule/Tesla} = 5.19 \times 10^{-5} \text{ eV/Tesla}$$

$$\therefore \Delta E = 1.16 \times 10^{-4} \text{ eV/Tesla}$$

$$\text{注意 } k_B = 8.6 \times 10^{-5} \text{ eV/T}$$

$$\therefore 10K \sim 1 \text{ meV} \quad (1 \text{ eV} = 10^4 \text{ meV})$$

$$\therefore 1 \text{ Tesla} \approx 10^{-4} \text{ eV} = 0.1 \text{ meV}, \quad 10 \text{ Tesla} = 1 \text{ meV}$$

$$\text{以 } 3L_i \text{ 為例, } \Delta E_{so} (\text{2p 軌道}) = 0.42 \times 10^{-4} \text{ eV} \Rightarrow B_{in} = 0.42 \text{ T}$$

$$H \text{ 之 } n=2 \text{ 為例, } j = \frac{1}{2} \text{ 或 } \frac{3}{2}$$

$$\therefore E_{nj} = -\frac{13.6}{n^2} \text{ eV} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right]$$

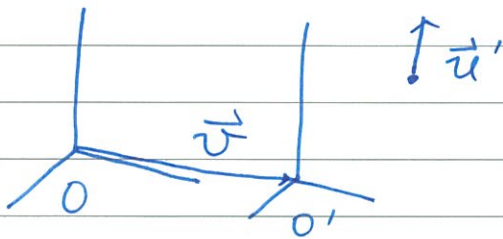
$$\therefore \Delta E_{so} = \frac{13.6}{2^2} \frac{1}{2^2} \frac{1}{(3/2)^2}$$

$$= 4.5 \times 10^{-5} \text{ eV} \approx 0.45 \text{ T}$$

Thomas precession

* Relativistic velocity transformation

要了解 Thomas precession, 必先知道相對論中之速度相加法則



\vec{u}' 為 particle 相對 O' 之速度

又 O' 相對 O 之速度 = $\vec{v} = v\hat{x}$

質點相對 O 之速度為 \vec{u}

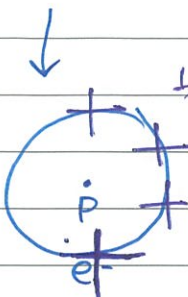
則
$$u_x' = \frac{u_x - v}{1 - \frac{vu_x}{c^2}} \quad u_x = \frac{u_x' + v}{1 + \frac{vu_x'}{c^2}}$$

$$u_y' = \frac{\sqrt{1 - v^2/c^2} u_y}{1 - \frac{vu_x}{c^2}}, \quad u_y = \frac{\sqrt{1 - v^2/c^2} u_y'}{1 + \frac{vu_x'}{c^2}}$$

$$u_z' = \frac{\sqrt{1 - v^2/c^2} u_z}{1 - \frac{vu_x}{c^2}}, \quad u_z = \frac{\sqrt{1 - v^2/c^2} u_z'}{1 + \frac{vu_x'}{c^2}}$$

* 三個座標: ② 在某一瞬間, 讓電子靜止之慣性座標 $O_1(x_1, y_1)$

① 讓原子核靜止之慣性座標 $O(x, y)$



以相對論描述

電子之

圓周運動, 可以用一連串的慣性座標/使

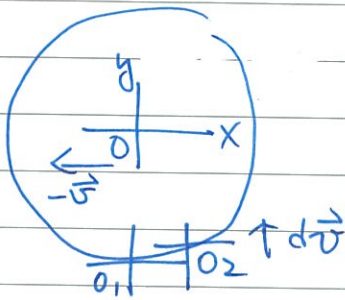
電子之瞬間靜止系與其原來系描述

\therefore 在 t 時, O 相對於 O_1 以 \vec{v} 向右動.

(3) 在 $t+dt$ 時之慣性座標 $O_2(x_2, y_2)$

O_2 相對於 O_1 : $\uparrow d\vec{v} = \vec{a} dt$.

O 與 O_1 之關係 $\Leftrightarrow O \ll O_1'$



算:

O_2 相對於 O :

$$u_{ax} = \frac{0 - (-v)}{1 - \frac{(-v) \cdot 0}{c^2}} = v$$

dt 時: $u_x = 0, u_y = dv$
 $\vec{v} = -v\hat{x}$

$$u_{ay} = \frac{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} dv}{1 - \frac{(-v) \cdot 0}{c^2}} = \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} dv$$

O 相對於 O_2 :

$O, O_2 \Leftrightarrow O \ll O_1'$

dt 時 $\vec{v} = dv\hat{y}$: $\therefore y$ 為 x, x 為 y

$$\text{即 } u_x' = \frac{u_x \sqrt{1 - \frac{dv^2}{c^2}}}{1 - \frac{dv u_y}{c^2}}$$

dt 時 $u_x = -v, u_y = 0$

$$u_y' = \frac{u_y - dv}{1 - \frac{dv u_x}{c^2}}$$

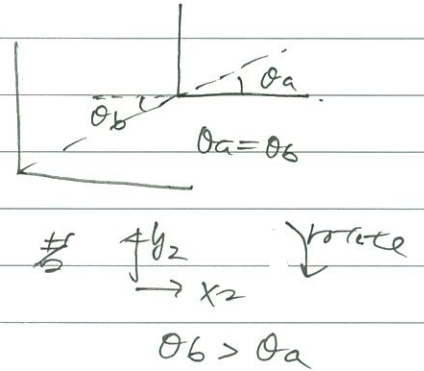
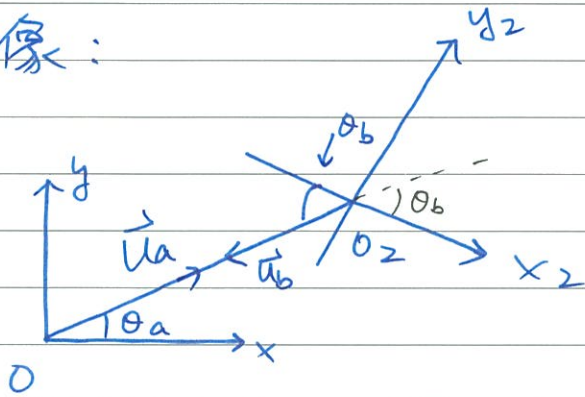
$$\therefore u_{bx} = -v \sqrt{1 - \frac{dv^2}{c^2}}$$

$$u_{by} = -dv$$

顯然易見, $\therefore \vec{u}_a$ 為 O 所見 O_2 之速度
而 \vec{u}_b 為 O_2 所見 O " " "

$\therefore \vec{u}_a = -\vec{u}_b$, 但何以 $u_{ax} \neq -u_{bx}$, $u_{ay} \neq -u_{by}$
呢?

合理的圖像:



$$\theta_a = \frac{u_{ay}}{u_{ax}} = \frac{dv \sqrt{1-v^2/c^2}}{v}$$

$$\theta_b = \frac{u_{by}}{u_{bx}} = \frac{-dv}{-v \sqrt{1-\frac{dv^2}{c^2}}} = \frac{dv}{v \sqrt{1-(\frac{dv}{c})^2}}$$

即 $x_2 y_2$ 相對 $x y$ 轉了 $d\theta = \theta_b - \theta_a$

$$= \frac{dv}{v} \left[\frac{1}{\sqrt{1-(\frac{dv}{c})^2}} - \sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}} \right]$$

$$\approx \frac{dv}{v} \left[1 - \left(1 - \frac{v^2}{2c^2} \right) \right]$$

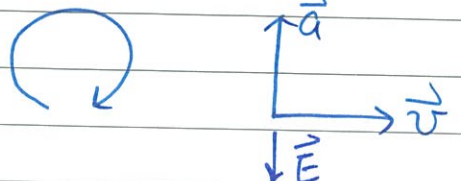
$$= \frac{v dv}{2c^2} = \frac{v adt}{2c^2} > 0 \curvearrowright$$

\therefore 固定在電子上之座標 相對於原子核之 $\omega_f = \frac{va}{2c^2}$

T 代表 Thomas frequency

$$\therefore \vec{\omega}_T = \frac{-1}{2c^2} \vec{v} \times \vec{a} = \frac{|e|\hbar \vec{v} \times \vec{E}}{2mc^2}$$

$\vec{a} = \frac{\hbar \vec{E}}{m}$

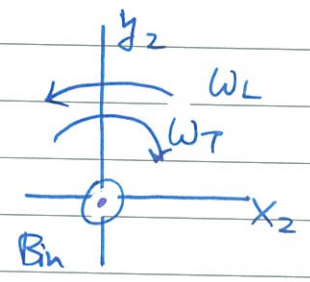


∴ 对 nucleus 而言, 固定在电子上的座標軸本身以

$\vec{\omega}_T$ 旋轉, 而因為电子自旋已經以 Larmor frequency $\vec{\omega}_L$ 对 \vec{B}_{in} (沿著电子上之 z 軸) 旋轉,

∴ 对 nucleus 而言, Spin 之

總旋轉 $\vec{\omega} = \vec{\omega}_L + \vec{\omega}_T$

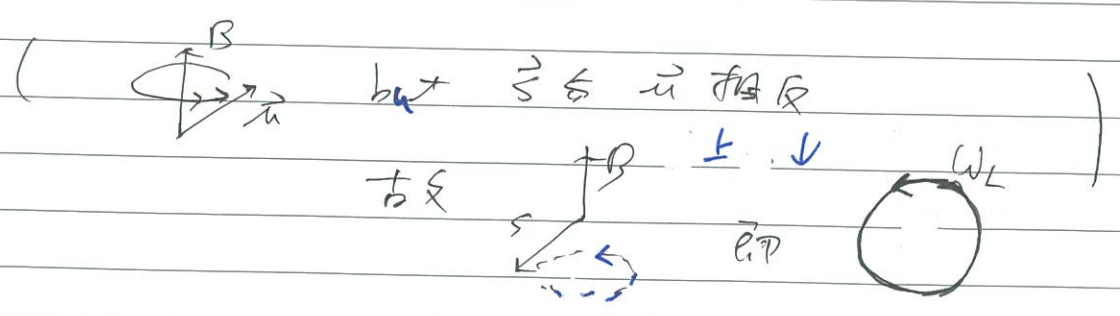


而 ∴ $\omega_L = \mu B_{in} = \frac{g_s |e|\hbar B_{in}}{2mc}$, $B_{in} = \frac{1}{c} E v$, $\vec{B}_{in} = \frac{1}{c} \vec{E} \times \vec{v}$

$$\therefore \vec{\omega}_L = \frac{|e|\hbar}{mc^2} \vec{E} \times \vec{v} \quad \therefore \vec{\omega} = \frac{|e|\hbar}{2mc^2} \vec{E} \times \vec{v}$$

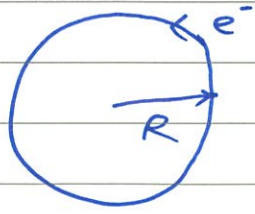
$g_s = 2$

因此, 等效來說, B_{in} 被減一半 $\Rightarrow \frac{1}{2c} \vec{E} \times \vec{v}$



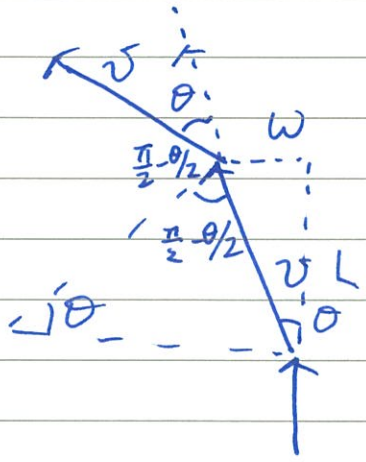
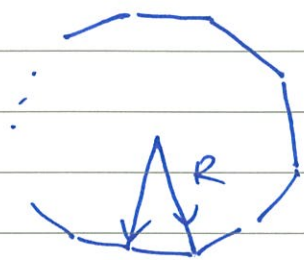
Simple derivation of Thomas precession

G.F. Smoot, UC Berkeley



approximated

N-polygon, $N \rightarrow \infty$



\therefore each time v changes θ .

Lab view, -1 (卷) 2π , $= \frac{2\pi}{N} \times N$

but e^- 's view: 不是轉 θ ($= \frac{2\pi}{N}$)

$\because w \approx$ 垂直 v , $L' = L/\gamma$, $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$
 w 不變, $w' = w$ (Lorentz contraction)

$\therefore \theta' = \frac{w}{L/\gamma} = \gamma \theta$

$\therefore \Delta\theta' = (\gamma - 1)\theta$ 為 e^- 's 所見之 θ 差

Why? 可視為 : 座標軸 \rightarrow 轉了 $\Delta\theta$

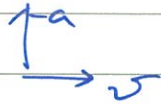
$$\therefore \frac{\omega_p}{\omega} = \frac{\frac{\Delta\theta}{T}}{2\pi/T} = \frac{\Delta\theta}{2\pi} = \gamma - 1$$

$$= \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - 1 \approx \frac{v^2}{2c^2}$$

$$\therefore \omega_p = \frac{v^2}{2c^2} \omega \quad \because a = v\omega$$

$$\therefore \omega_p = \frac{1}{2c^2} v \cdot a \quad \text{A} \therefore \omega_p \downarrow$$

$$\therefore \omega_p = \frac{1}{2c^2} \vec{v} \times \vec{a}$$



接 T4