Brillouin-Wigner truflun

Viljum leysa

$$(H_0 + \lambda V)|N\rangle = E_n|N\rangle$$

þekkjum lausnir

$$H_0|n\rangle = E_n^0|n\rangle$$

umritum

$$(E_n - H_0)|N\rangle = \lambda V|N\rangle$$

og innföldum með $\langle m|$

(i) $$(E_n - E_m^0)\langle m|N\rangle = \lambda\langle m|V|N\rangle$$

veljum normun $|N\rangle$ þ.a. $\langle n|N\rangle = 1$

$\langle N|N\rangle \neq 1$ en það má leiðrétta síðar

Notum

n er sleppt úr summu

$$|N\rangle = \sum_m |m\rangle\langle m|N\rangle$$

$$= |n\rangle\langle n|N\rangle + \sum_m{}' |m\rangle\langle m|N\rangle$$

$$\langle m|N\rangle = \lambda\frac{\langle m|V|N\rangle}{(E_n - E_m^0)}$$

notum í $|N\rangle$ þ.a.

(ii) $$\boxed{|N\rangle = |n\rangle + \sum_m{}' |m\rangle \frac{1}{E_n - E_m^0}\lambda\langle m|V|N\rangle}$$

Aðaljafna BW-truflanafræði

Óbein jafna, svipar til heildisjöfnu

þessa jöfnu má rita sem

$$|N\rangle = |n\rangle + \lambda \sum_{m}{}' |m\rangle \frac{1}{E_n - E_m^0} \langle m|V|n\rangle$$

$$+ \lambda^2 \sum_{jm}{}' |j\rangle \frac{1}{E_n - E_j^0} \langle j|V|m\rangle \frac{1}{E_n - E_m^0} \langle m|V|n\rangle$$

$$+ \lambda^3 \sum_{kjm}{}' |k\rangle \frac{1}{E_n - E_k^0} \langle k|V|j\rangle \frac{1}{E_n - E_j^0} \langle j|V|m\rangle \frac{1}{E_n - E_m^0} \langle m|V|n\rangle$$

$$+ \cdots\cdots$$

Ekki veldisröð í λ því $E_n(\lambda)$, en ef liðirnir $\frac{1}{E_n - E_i^0}$ eru liðaðir í λ-röð fæst Rayleigh-Schrödinger röðin

Jafna (i) getur gefið okkur

$$(E_n - E_n^0)\underbrace{\langle n|N\rangle}_{=1} = \lambda\langle n|V|N\rangle$$

eða

$$E_n = E_n^0 + \lambda\langle n|V|N\rangle$$

notum hér (ii) t.d. upp í 1. stig í λ, þá ~~fæst~~

$$E_n = E_n^0 + \lambda\langle n|V|n\rangle + \lambda^2 {\sum_m}' \frac{|\langle m|V|n\rangle|^2}{E_n - E_m^0}$$

óbein jafna f. E_n

Ólínuleg jafna fyrir E_n. Aðferðin gæti búið hvaða sem bitni

Er í raun summa af vissum völdum liðum í öllum veldum af λ

Almennt þarf að huga að og athuga hvort einhver endanleg summa brýtur einhver varðveislu lögmál eða samhverfu. Það gerist ekki sjálfkrafa!

fín~~upp~~bygging vetnis

Fínbyggingarfastinn

er

$$\alpha = \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$$

Víddarlaus mælikvarði á styrk víxlverkunar hleðslu við rafsegulsvið. QED

Orkuróf vetnis

$$E_n = -R_y \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3,$$

$$R_y = \left\{ \frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \right\}$$

$$\rightarrow O(R_y) = \alpha^2 mc^2$$

(enda rafsegulvíxlverkun)

Fínbygging: afstæðiskenning
spunabrautar víxlv.

$$\hookrightarrow \alpha^4 mc^2$$

Hliðrun Lamb's: skömmtun rafsegul-
sviðs

$$\hookrightarrow \alpha^5 mc^2$$

Ofurfínbygging: segulvægi rót og rafeinda

$$\hookrightarrow \left(\frac{m_e}{m_p}\right)\alpha^4 mc^2$$

Afstæðileg leiðrétting

Við sleppum hér leiðréttingunni vegna endanlegs massa róteinda.

Nákvæm lausn á Dirac jöfnunni gefur okkur allar þessar „leiðréttingar", en aukinn skilningur á þeirri lausn fæst með truflanareikningi hér.

Fyrir heildarorkuna fæst

$$E = c\sqrt{p^2 + m^2c^2}$$

$$E = mc^2\sqrt{\frac{p^2}{m^2c^2} + 1}$$

Liðum fyrir $p^2 << m^2c^2$

$$\rightarrow E \approx mc^2\left\{1 + \frac{1}{2}\frac{p^2}{m^2c^2} - \frac{1}{8}\frac{p^4}{m^4c^4}\right\}$$

$$\simeq mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2}$$

Því er lægsta leiðrétting hreyfiorkunnar

$$H_r' = -\frac{p^4}{8m^3c^2}$$

Mörg ástönd vetnisatómsins eru margföld þ.a. við getum búist við að þurfa að nota truflanareikning fyrir margföld ástönd

En H_r' er með kúlusamhverfu og $n, l,$ og m eru því góðar skammtatölur → notum truflanareikning fyrir einföld ástönd

fyrir ótrufluðu ástöndin gildir

$$\left\{ \frac{p^2}{2m} + V \right\} |\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

$$\rightarrow p^2|\psi\rangle = 2m(E-V)|\psi\rangle$$

nýtum það fyrir 1. stigs truflun

$$E_r^1 = \langle nlm | H_r' | nlm \rangle$$

$$= \langle H_r' \rangle$$

$$E_r^1 = -\frac{1}{8m^3c^2}\langle p^4 \rangle$$

$$= -\frac{1}{8m^3c^2}\langle p^2\psi | p^2\psi \rangle$$

$$\rightarrow -\frac{1}{2mc^2}\langle (E-V)^2 \rangle$$

$$= -\frac{1}{2mc^2}\left[E_n^2 - 2E_n\langle V \rangle + \langle V^2 \rangle \right]$$

fyrir vetni er

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

og því

$$E_r^1 = -\frac{1}{2mc^2}\left[E_n^2 + 2E_n\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle + \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle\right]$$

En nú má nota að

$$R_y = \frac{me^4}{8h^2\epsilon_0^2}, \quad a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \;\rightarrow\; R_y\cdot a = \frac{1}{2}\,\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

↑ Rydbergorka ↑ Bohrgeisli

$$E_r^1 = -\frac{1}{2mc^2}\left[E_n^2 + 4E_n R_y\left\langle\frac{a}{r}\right\rangle + 4R_y^2\left\langle\frac{a^2}{r^2}\right\rangle\right]$$

og fyrir vetni

$$\left\langle\frac{a}{r}\right\rangle = \frac{1}{n^2} \qquad \left\langle\frac{a^2}{r^2}\right\rangle = \frac{1}{(\ell+\frac{1}{2})n^3}$$

og því

$$\boxed{\begin{aligned} E_r^1 &= -\frac{1}{2mc^2}\left\{\frac{R_y^2}{n^4} - \frac{4R_y^2}{n^2}\cdot\frac{1}{n^2} + 4R_y^2\frac{1}{(l+\frac{1}{2})n^3}\right\} \\ &= -\frac{R_y^2}{2mc^2}\frac{1}{n^4}\left\{\frac{4n}{(l+\frac{1}{2})} - 3\right\}\end{aligned}}$$ ①

Höfum í huga að $R_y/mc^2 \sim 2.7\cdot 10^{-5}$

En hér sést munur á orku fyrir t.d. $n=2$ $l=0$ og $l=1$
$\to$ margfeldni s og p-ástanda hverfur

Griffiths bendir á að p^4 sé ekki Hermitískur virki fyrir $l=0$ (vandi með jaðarskilyrði þ. $r \to 0$), en niðurstaðan E_r^1 er í samræmi við Dirac-jöfnuna.

Spuna-brautar víxlverkun

Rafeind hefur segulvægi

$$\bar{\mu}_e = -\frac{e}{m}\bar{S}$$

þetta segulvægi víxlverkast við segulsvið

$$H = -\bar{\mu}\cdot\bar{B}$$

Rafeindin sér hlöðnu róteindina í kjarnanum á hreyfingu
-> straumur -> segulsvið

þegar þessu er réttilega lýst með afstæðiskenningu fæst

$$H'_{so} = \frac{1}{2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\frac{1}{m^2c^2r^3}\,\bar{S}\cdot\bar{L}$$

þennan lið má líka finna með því að liða Dirac jöfnuna í $\left(\frac{v}{c}\right)$-röð.

þessi víxlverkun leiðir til þess að $\bar{L}$ og $\bar{S}$ varðveitast ekki lengur heldur heildarhverfiþunginn

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

því

$$[H'_{so}, \bar{L}] \neq 0 \;, \; [H'_{so}, \bar{S}] \neq 0$$

$$H'_{so} = \frac{1}{2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\frac{1}{m^2c^2\,r^3}\,\bar{S}\cdot\bar{L}$$

$$= R_y \cdot a \frac{1}{m^2c^2 r^3}\,\bar{S}\cdot\bar{L}$$

$$= \frac{R_y \cdot a}{mc^2 \cdot a}\underbrace{\frac{\hbar^2}{ma^2}}_{2R_y}\left(\frac{r^3}{a^3}\right)^{-1}\left(\frac{\bar{S}\cdot\bar{L}}{\hbar^2}\right)$$

$$= \frac{R_y}{mc^2}\cdot 2R_y\cdot\left(\frac{a}{r}\right)^3\cdot\left(\frac{\bar{S}\cdot\bar{L}}{\hbar^2}\right)$$

Sjá fast í viðbót

$$[L^2, H'_{so}] = 0$$

$$[S^2, H'_{so}] = 0$$

þessvegna eru eiginástönd L_z og S_z ekki góð ástönd, en eiginástönd L^2, S^2, J^2 og J_z eru það

$$J^2 = (\bar{L}+\bar{S})\cdot(\bar{L}+\bar{S})$$

$$= L^2 + S^2 + 2\bar{L}\cdot\bar{S}$$

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

Eigingildi $\bar{L}\cdot\bar{S}$ eru því

$$\frac{\hbar^2}{2}\left\{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right\}$$

í viðbót fæst

$$\left\langle\left(\frac{a}{r}\right)^3\right\rangle = \frac{1}{l(l+\frac{1}{2})(l+1)\,n^3}$$

og við fáum

$$\boxed{E^1_{so} = \langle H'_{so} \rangle = \left(\frac{R_y}{mc^2}\right)\frac{R_y}{n^3}\left\{\frac{j(j+1)-\ell(\ell+1)-\frac{3}{4}}{\ell(\ell+\frac{1}{2})(\ell+1)}\right\}} \quad (2)$$

notum nú að $j = \ell \pm \frac{1}{2}$ og leggjum saman (1) og (2)

$$\boxed{E^1_{fs} = E^1_r + E^1_{so} = \frac{1}{2}\left(\frac{R_y}{mc^2}\right)\frac{R_y}{n^4}\left[3 - \frac{4n}{j+\frac{1}{2}}\right]}$$

fine structure

eða orkustig vetnis eftir þrí samkvæmt 1. stigs truflun

$$\boxed{E_{nj} = -\frac{R_y}{n^2}\left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2}\left\{\frac{n}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right\}\right]}$$

$\alpha = \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)\hbar c} = 2R_y \cdot a\frac{1}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}, \quad \frac{R_y}{mc^2} = \frac{1}{2}\alpha^2$

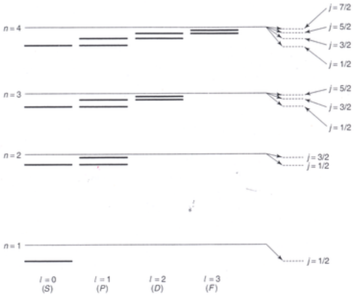

FIGURE 6.9: Energy levels of hydrogen, including fine structure (not to scale).

← klofnun með t.t. j

ástöndin $|j m_j\rangle$ verður að skrifa sem samantekt af $|l m_l\rangle |s m_s\rangle$ með Clebsch-Gordan stuðlum