

جامعة الطائف
كلية المعلمين
قسم الفيزياء

محاضرات ميكانيكا الكم 2

الدكتور محمد أحمد الجلالي
المحاضرة الخامسة

AL-Jalali
1429/07/21

نظرية الاضطراب Perturbation theory

المحتوى:

- مقدمة
- نظرية الاضطراب المستقلة عن الزمن
- أمثلة ومناقشة

1. المقدمة:

في المحاضرات السابقة عولجت مسائل ميكانيكا الكم البسيطة والتي تعطي حولا دقيقة لمعادلة شرودينجر وذلك لأننا درسنا هاملتوني الطاقة البسيط بدون أي مؤثرات جانبية، ولكن المسألة الحقيقية ليست كذلك وليست بتلك الدقة بل هناك تشويشات صغيرة نسبيا تؤثر على دقة القيم الذاتية وعلى الدالة الموجية وبالتالي سندرس الهاملتوني كمجموع حدين الحد الأول يمثل الحد الدقيق والحد الثاني الحد المشوش.

2. نظرية الاضطراب المستقلة عن الزمن:

وهي طريقة تقريبية لحل معادلة شرودينجر حيث تعطي

معادلة شرودينجر غير المشوشة بالعلاقة التالية:

$$\hat{H}_0 u_m = E_m u_m$$

$$m = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (1)$$

ونعتبر الهاملتوني المشوش كمجموع حدين كما يلي :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'$$

$$\text{where } 1 \geq \lambda > 0$$

$$\hat{H} \psi = (\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}') \psi = w \psi \quad (2)$$

حيث \hat{H}' عامل التشويش أو مقدار الانحراف عن الهاملتوني غير المضطرب، w الطاقة التي تحوي القسم المضطرب والتي يمكن معالجتها مع الدالة الموجية بنشرهما كسلسلة طاقة من الشكل :

$$\psi = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda^i \psi_i^n$$

$$\psi = \psi_0^n + \lambda^1 \psi_1^n + \lambda^2 \psi_2^n + \dots$$

$$w = w_0^n + \lambda^1 w_1^n + \lambda^2 w_2^n + \dots \quad (3)$$

حيث i رتبة التشويش و n الى مستوي الطاقة المدروس ويمكن إسقاط هذا الرمز في المعادلات القادمة للتقليل من الرموز غير الضرورية. وبتعويض العلاقة (3) في العلاقة (2) نجد:

$$\left(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'\right) \left(\psi_0^n + \lambda^1 \psi_1^n + \lambda^2 \psi_2^n + \dots\right) = \left(w_0^n + \lambda^1 w_1^n + \lambda^2 w_2^n + \dots\right) \times \left(\psi_0^n + \lambda^1 \psi_1^n + \lambda^2 \psi_2^n + \dots\right) \quad (5)$$

بفك الأقواس في المعادلة (5) ومساواة معاملات λ المرفوعة لنفس الأس من الطرفين نجد ما يلي:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 \psi_0 &= w_0 \psi_0 \\ \hat{H}_0 \psi_1 + \hat{H}' \psi_0 &= w_0 \psi_1 + w_1 \psi_0 \\ \hat{H}_0 \psi_2 + \hat{H}' \psi_1 &= w_0 \psi_2 + w_1 \psi_1 + w_2 \psi_0 \end{aligned} \quad (6)$$

بمقارنة العلاقة الأولى من (6) مع العلاقة (1) نجد أن :

$$\begin{aligned} \psi_0 &= u_m \\ w_0 &= E_m \end{aligned} \quad (7)$$

والقيم في العلاقة (7) تمثل القيم والدوال الخاصة في حال غياب التشويش (الاضطراب) أو حلول المرتبة صفر.

• نعالج الآن حلول اضطراب المرتبة الأولى:

يمكن كتابة الدالة الموجية ذات الاضطراب من المرتبة الأولى بالشكل التالي:

$$\psi_1 = \sum_n a_n^1 u_n \quad (8)$$

بتعويض العلاقة (8) في العلاقة الثانية من العلاقات (6) نجد:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \sum_n a_n^1 u_n \\ \hat{H}_0 \psi_1 + \hat{H}' \psi_0 &= w_0 \psi_1 + w_1 \psi_0 \\ \hat{H}_0 \sum_n a_n^1 u_n + \hat{H}' u_m &= E_m \sum_n a_n^1 u_n + w_1 u_m \\ \sum_n a_n^1 E_n u_n + \hat{H}' u_m &= E_m \sum_n a_n^1 u_n + w_1 u_m \end{aligned} \quad (9)$$

بضرب العلاقة الأخيرة في (9) بـ u_k^* من الطرفين ومن اليسار ثم تطبيق رموز ديراك نجد:

$$\sum_n a_n^1 E_n u_n + \hat{H}' u_m = E_m \sum_n a_n^1 u_n + w_1 u_m$$

$$\langle u_k | \left| \sum_n a_n^1 E_n u_n \right\rangle + \langle u_k | \hat{H}' | u_m \rangle = \langle u_k | \left| E_m \sum_n a_n^1 u_n \right\rangle + \langle u_k | w_1 u_m \rangle$$

$$\text{if } \langle u_n | u_k \rangle = \delta_{nk} \Rightarrow$$

$$\sum_n a_n^1 E_n \delta_{kn} + \hat{H}'_{km} = E_m \sum_n a_n^1 \delta_{kn} + w_1 \delta_{km}$$

$$\text{when } k = n \Rightarrow$$

$$a_k^1 E_k + \hat{H}'_{km} = E_m a_k^1 + w_1 \delta_{km}$$

$$\text{when } k \neq m$$

$$a_k^1 E_k + \hat{H}'_{km} = E_m a_k^1$$

$$a_k^1 = \frac{\hat{H}'_{km}}{(E_m - E_k)}$$

$$\text{when } k = m \Rightarrow w_1 = H'_{mm}$$

$$a_m^1 E_m + H'_{mm} = E_m a_m^1 + w_1 \delta_{mm}$$

$$a_m^1 (E_m - E_m) = w_1 - H'_{mm} = 0 \Rightarrow a_m^1 = 0 \quad (10)$$

العلاقة الأخيرة من (10) مقدار التصحيح من المرتبة الأولى للطاقة E_m ، أما المعادلة (8) فيمكن معالجتها كما يلي:

$$a_k^1 E_k + \hat{H}'_{km} = E_m a_k^1 + w_1 \delta_{km}$$

$$\text{when } k \neq m \Rightarrow a_k^1 = \frac{\hat{H}'_{km}}{(E_m - E_k)}$$

$$\text{when } k = m \Rightarrow a_m^1 E_m + H'_{mm} = E_m a_m^1 + w_1 \delta_{mm}$$

$$a_m^1 (E_m - E_m) = w_1 - H'_{mm} = 0 \Rightarrow a_m^1 = 0$$

$$\text{if } m = n \Rightarrow \psi_1 = \sum_n a_n^1 u_n$$

$$\psi_1 = a_m^1 u_m + \sum_{k \neq m} \frac{\hat{H}'_{km}}{(E_m - E_k)} u_k = 0 u_m + \sum_{k \neq m} \frac{\hat{H}'_{km}}{(E_m - E_k)} u_k$$

$$\psi_1 = \sum_{k \neq m} \frac{\hat{H}'_{km}}{(E_m - E_k)} u_k$$

$$\text{then } \psi = \psi_0 + \psi_1 \Rightarrow$$

$$\psi = \psi_0 + \sum_{k \neq m} \frac{\hat{H}'_{km}}{(E_m - E_k)} u_k$$

$$\psi = u_m + \sum_{k \neq m} \frac{\hat{H}'_{km}}{(E_m - E_k)} u_k$$

$$\text{and } (\lambda = 1) \quad w = w_0 + w_1 = E_m + H'_{mm} \quad (11)$$

• اضطراب المرتبة الثانية:

الهدف هنا الحصول على w_2 وكذلك ψ_2 وذلك من العلاقة الثالثة من العلاقات (6)

وهي:

$$\hat{H}_0 \psi_2 + \hat{H}' \psi_1 = w_0 \psi_2 + w_1 \psi_1 + w_2 \psi_0$$

كما فعلنا في الإضراب من المرتبة الأولى نكتب الدالة الموجية بشكل سلسلة كالتالي:

$$\psi_2 = \sum_n a_n^2 u_n \quad (12)$$

نعوض العلاقة (12) في العلاقة السابقة أو العلاقة الثالثة من العلاقات (6) فنجد :

$$\psi_2 = \sum_n a_n^2 u_n \quad \psi_1 = \sum_n a_n^1 u_n$$

$$\hat{H}_0 \psi_2 + \hat{H}' \psi_1 = w_0 \psi_2 + w_1 \psi_1 + w_2 \psi_0$$

$$\hat{H}_0 \sum_n a_n^2 u_n + \hat{H}' \sum_n a_n^1 u_n = E_m \sum_n a_n^2 u_n + w_1 \sum_n a_n^1 u_n + w_2 u_m$$

$$\sum_n a_n^2 E_n u_n + \hat{H}' \sum_n a_n^1 u_n = \sum_n a_n^2 E_m u_n + w_1 \sum_n a_n^1 u_n + w_2 u_m \quad (13)$$

بضرب العلاقة الأخيرة في (13) بـ u_k^* من الطرفين ومن اليسار ثم تطبيق رموز ديراك نجد:

$$\sum_n a_n^2 E_n u_n + \hat{H}' \sum_n a_n^1 u_n = \sum_n a_n^2 E_m u_n + w_1 \sum_n a_n^1 u_n + w_2 u_m$$

$$\langle u_k^* | \left| \sum_n a_n^2 E_n u_n \right\rangle + \langle u_k^* | \left| \sum_n a_n^1 \hat{H}' u_n \right\rangle = \langle u_k^* | \left| \sum_n a_n^2 E_m u_n \right\rangle + \langle u_k^* | \left| w_1 \sum_n a_n^1 u_n \right\rangle + \langle u_k^* | \left| w_2 u_m \right\rangle$$

$$E_k a_k^2 + \sum_n a_n^1 \hat{H}'_{kn} = a_k^2 E_m + w_1 a_k^1 + w_2 \delta_{mk}$$

$$\text{wh } \mathbf{e} \quad k = m \Rightarrow w_2 = \sum_n a_n^1 \hat{H}'_{mn} - w_1 a_m^1 = \sum_{n \neq m} a_n^1 \hat{H}'_{mn} + a_m^1 \hat{H}'_{mm} - w_1 a_m^1$$

$$\text{when } (n \neq m) \Rightarrow a_n^1 = \frac{H'_{nm}}{E_m - E_n}$$

$$w_1 = H'_{mm} \Rightarrow$$

$$w_2 = \sum_{n \neq m} \frac{H'_{nm}}{E_m - E_n} \hat{H}'_{mn} + a_m^1 \hat{H}'_{mm} - H'_{mm} a_m^1 = \sum_{n \neq m} \frac{|H'_{nm}|^2}{E_m - E_n}$$

$$w_2 = \sum_{n \neq m} \frac{|H'_{nm}|^2}{E_m - E_n} \quad (14)$$

العلاقة الاخيرة في (14) تعطي حد التصحيح الثاني في مستوي الطاقة المدروس، أما الدالة الموجية فنحصل على المعامل من معالجة العلاقة في السطر الرابع في العلاقة (14) كما يلي :

$$E_k a_k^2 + \sum_n a_n^1 \hat{H}'_{kn} = a_k^2 E_m + w_1 a_k^1 + w_2 \delta_{mk}$$

when $k \neq m$ $a_m^1 = 0 \Rightarrow$

$$\text{and when } (k \neq m) \Rightarrow a_k^1 = \frac{H'_{km}}{E_m - E_k}$$

$$w_1 = H'_{mm}$$

$$E_k a_k^2 + \sum_n a_n^1 \hat{H}'_{kn} = a_k^2 E_m + w_1 a_k^1 + w_2 \delta_{mk}$$

$$a_k^2 E_m - E_k a_k^2 = \sum_n a_n^1 \hat{H}'_{kn} - H'_{mm} a_k^1$$

$$a_k^2 (E_m - E_k) = \sum_n a_n^1 \hat{H}'_{kn} - H'_{mm} \frac{H'_{km}}{E_m - E_k}$$

$$\text{when } n \neq m \Rightarrow a_n^1 = \frac{H'_{nm}}{E_m - E_n} \Rightarrow$$

$$a_k^2 (E_m - E_k) = \sum_{n \neq m} \frac{H'_{nm}}{E_m - E_n} \hat{H}'_{kn} - H'_{mm} \frac{H'_{km}}{E_m - E_k} \Rightarrow$$

$$a_{k \neq m}^2 = \sum_{n \neq m} \frac{H'_{nm}}{(E_m - E_n)(E_m - E_k)} \hat{H}'_{kn} - H'_{mm} \frac{H'_{km}}{(E_m - E_k)(E_m - E_k)}$$

$$a_{k \neq m}^2 = \sum_{n \neq m} \frac{H'_n \hat{H}'_{mkn}}{(E_m - E_n)(E_m - E_k)} - \frac{H'_{mm} H'_{km}}{(E_m - E_k)^2} \quad (15)$$

وفي حال $m=k$ نجد المعامل a_m^2 باعتبار أن $a_m^1 = 0$ من خلال معالجة المعادلة الأولى من (15) فنحصل على :

$$a_m^2 = -\frac{1}{2} \sum_n |a_n^1|^2 = -\frac{1}{2} \sum_{n \neq m} \frac{|H'_{mn}|}{(E_m - E_n)^2}$$

when $\lambda \rightarrow 1$

$$\psi_2 = \sum_n a_n^2 u_n = \sum_{k \neq m} \left[\left(\sum_{n \neq m} \frac{H'_{nm} \hat{H}'_{kn}}{(E_m - E_n)(E_m - E_k)} - \frac{H'_{mm} H'_{km}}{(E_m - E_k)^2} \right) u_k - \frac{1}{2} \sum_{n \neq m} \frac{|H'_{mn}|}{(E_m - E_n)^2} u_m \right] \quad (16)$$

بدمج العلاقات (10) و(11) و(14) و(16) نجد نتيجة حلول الاضطراب الأول والثاني وتصبح الأمور اعقد بمعالجة المراتب الأعلى :

$$\psi_2 = \sum_n a_n^2 u_n \quad \psi_1 = \sum_n a_n^1 u_n$$

$$\psi = \psi_0^n + \lambda^1 \psi_1^n + \lambda^2 \psi_2^n + \dots$$

when $\lambda \rightarrow 1$

$$\psi = u_m + \sum_{k \neq m} \frac{\hat{H}'_{km}}{(E_m - E_k)} u_k + \sum_{k \neq m} \left[\left(\sum_{n \neq m} \frac{H'_{nm} \hat{H}'_{kn}}{(E_m - E_n)(E_m - E_k)} - \frac{H'_{mm} H'_{km}}{(E_m - E_k)^2} \right) u_k - \frac{1}{2} \sum_{n \neq m} \frac{|H'_{mn}|}{(E_m - E_n)^2} u_m \right]$$

$$w = w_0^n + \lambda^1 w_1^n + \lambda^2 w_2^n + \dots$$

$$w = E_m + H'_{mm} + \sum_{n \neq m} \frac{|H'_{nm}|^2}{E_m - E_n} \quad (17)$$

لاحظ أن الحد الثالث في العلاقة الأخيرة من (17) يحاول زيادة فاصل الطاقة وهو ما يعبر عنه في الفيزياء (مستويات الطاقة تتنافر فيما بينها).

3. أمثلة ومناقشة:

مثال:

إلكترون في صندوق مكعب طول حرفه a ، ساط عليه مجال كهربائي في الاتجاه السيني والمطلوب :

- (a) أوجد مقدار التشويش.
 (b) مقدار التصحيح من المرتبة الأولى للطاقة الأرضية للإلكترون.
 (c) مقدار التصحيح من الرتبة الأولى للدالة الموجية الأرضية.

علما أن الطاقة والدالة بدون تشويش هما:

$$\psi_0 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n}{a} x$$

$$E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$$

الحل:

طاقة الجهد للإلكترون في مجال كهربائي والطاقة النهائية بعد التشويش تعطى بالعلاقة التالية:

$$\psi_0 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n}{a} x$$

$$E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$$

$$\vec{F} = q\vec{E}$$

$$V = -\int_0^x \vec{F} d\vec{x} = -\int_0^x -e\vec{E} d\vec{x} = exE$$

$$\langle H' \rangle = \int \psi_0^* \hat{H}' \psi_0 dx = \int \psi_0^* exE \psi_0 dx$$

$$\langle H' \rangle = \int \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n}{a} x (exE) \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n}{a} x dx$$

$$\langle H' \rangle = \frac{2eE}{a} \int_0^x x \sin^2 \frac{\pi n}{a} x dx$$

$$\int x \sin^2 x dx = \frac{x^2}{4} - \frac{x \sin 2bx}{2} - \frac{\cos 2bx}{2}$$

$$\int_0^a x \sin^2 \frac{\pi n}{a} x dx = \frac{a^2}{4}$$

$$\langle H' \rangle = \frac{2eE}{a} \frac{a^2}{4} = \frac{eaE}{2}$$

$$w = w_0 + w_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 + \frac{eaE}{2}$$

أما الدالة الموجية فتعالج كما يلي:

$$\psi_0 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n}{a} x$$

$$E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$$

$$\psi = \psi_0^n + \lambda^1 \psi_1^n$$

$$\psi = u_m + \sum_{k \neq m} \frac{\hat{H}'_{km}}{(E_m - E_k)} u_k$$

$$\psi_1 = \sum_{k \neq m} \frac{\hat{H}'_{km}}{(E_m - E_k)} u_k = \sum_{k \neq m} \frac{\langle u_k | \hat{H}' | u_m \rangle}{(E_m - E_k)} u_k$$

when $m = 1, k = 2, 3, 4, \dots$

$$\langle u_2 | \hat{H}' | u_1 \rangle = \frac{2eE}{a} \int_0^a x \sin \frac{2\pi x}{a} \cdot \sin \frac{\pi x}{a} dx = \frac{2eE}{a} \left(-0.8 \frac{a^2}{\pi^2} \right)$$

$$\psi_1 = \frac{\frac{2eE}{a} \left(-0.8 \frac{a^2}{\pi^2} \right)}{\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} - \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}} u_2 = 0.48eEa \left(\frac{ma^2}{\hbar^2} \right) u_2$$

$$\psi_1 = 0.48eEa \left(\frac{ma^2}{\hbar^2} \right) u_2$$

$$\psi = u_1 + \left(\frac{0.48eEma^3}{\hbar^2} \right) u_2 + \dots$$

$$\psi = u_1 + a_2 u_2 + \dots$$

أمثلة بالانجليزية :

Perturbation Theory

The basic idea of perturbation theory is very simple: we split the Hamiltonian into a piece we know how to solve (the "reference" or "unperturbed" Hamiltonian) and a piece we don't know how to solve (the "perturbation"). As long as the perturbation is small compared to the unperturbed Hamiltonian, perturbation theory tells us how to correct the solutions to the unperturbed problem to approximately account for the influence of the perturbation. For example, perturbation theory can be used to approximately solve an anharmonic oscillator problem with the Hamiltonian

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{6}\gamma x^3. \quad (132)$$

Here, since we know how to solve the harmonic oscillator problem (see [5.2](#)), we make that part the unperturbed Hamiltonian (denoted $\hat{H}^{(0)}$), and the new, anharmonic term is the perturbation (denoted $\hat{H}^{(1)}$):

$$\hat{H}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2, \quad (133)$$

$$\hat{H}^{(1)} = +\frac{1}{6}\gamma x^3. \quad (134)$$

Perturbation theory solves such a problem in two steps. First, obtain the eigenfunctions and eigenvalues of the unperturbed Hamiltonian, $\hat{H}^{(0)}$:

$$\hat{H}^{(0)} \Psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \Psi_n^{(0)}. \quad (135)$$

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots \quad (136)$$

$$\Psi_n = \Psi_n^{(0)} + \Psi_n^{(1)} + \Psi_n^{(2)} + \dots \quad (137)$$

Second, correct these eigenvalues and/or eigenfunctions to account for the perturbation's influence. Perturbation theory gives these corrections as an infinite series of terms, which become smaller and smaller for well-behaved systems:

Quite frequently, the corrections are only taken through first or second order (i.e., superscripts (1) or (2)). According to perturbation theory, the first-order correction to the energy is

$$E_n^{(1)} = \int \Psi_n^{(0)*} \hat{H}^{(1)} \Psi_n^{(0)}, \quad (138)$$

and the second-order correction is

$$E_n^{(2)} = \int \Psi_n^{(0)*} \hat{H}^{(1)} \Psi_n^{(1)}. \quad (139)$$

One can see that the first-order correction to the wavefunction, $\Psi_n^{(1)}$, seems to be needed to compute the second-order energy correction. However, it turns out that the correction $\Psi_n^{(1)}$ can be written in terms of the zeroth-order wavefunction as

$$\Psi_n^{(1)} = \sum_{i \neq n} \Psi_i^{(0)} \frac{\int \Psi_i^{(0)*} \hat{H}^{(1)} \Psi_n^{(0)}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}}. \quad (140)$$

Substituting this in the expression for $E_n^{(2)}$, we obtain

$$E_n^{(2)} = \sum_{i \neq n} \frac{|\int \Psi_n^{(0)*} \hat{H}^{(1)} \Psi_i^{(0)}|^2}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}}. \quad (141)$$

Going back to the anharmonic oscillator example, the ground state wavefunction for the unperturbed problem is just (from section 5.2)

$$E_0^{(0)} = \frac{1}{2} \hbar \omega, \quad (142)$$

$$\Psi_0^{(0)}(x) = N_0 H_0(\alpha^{1/2} x) e^{-\alpha x^2/2} \quad (143)$$

$$= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}. \quad (144)$$

The first-order correction to the ground state energy would be

$$E_0^{(1)} = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{6} \gamma x^3 e^{-\alpha x^2} dx. \quad (145)$$

$$E_0^{(1)} = 0$$

It turns out in this case that $E_0^{(1)} = 0$, since the integrand is odd. Does this mean that the anharmonic energy levels are the same as for the harmonic oscillator? No, because there are higher-order corrections

$$E_0^{(2)}$$

such as $E_0^{(2)}$ which are not necessarily zero.

Atom in a magnetic field

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) + \xi(r)\vec{L}\cdot\vec{S} + \left[-\frac{e}{2mc}\vec{B}\cdot(\vec{L} + 2\vec{S}) + \frac{e^2}{8mc^2}B^2r^2\sin^2\theta\right]$$

- First 3 terms describe the atom (here in L-S coupling). Final terms are linear and quadratic magnetic terms.
- Three regimes: (1) quadratic magnetic term \ll linear term \ll fine structure ($\xi(r)L\cdot S$): Zeeman effect;
- (2) quadratic magnetic term & fine structure term \ll linear magnetic term: Paschen-Back effect;
- (3) quadratic magnetic term \gg linear magnetic term & fine structure term: quadratic Zeeman effect

Zeeman effect

- In Zeeman limit, atomic structure is only slightly changed from $B = 0$ case. Each atomic level is perturbed by the term

$$(e / 2mc) \vec{B} \cdot (\vec{L} + 2\vec{S})$$
- For L-S coupling, J and m_j are good quantum numbers. Magnetic moment of atom is aligned along J , and energy shift depends on dot product of B and J . There are $2J+1$ different magnetic sublevels of energies

$$E_i = E_{i0} + g_i (e / 2mc) B (m_j \hbar)$$

where g_i is the dimensionless Lande factor of the level, given by

$$g_i = 1 + [J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)] / [2J(J+1)]$$

- Then wavelengths of spectral line components are computed as (allowed) differences between energy sublevels.

Example: Zeeman line components

Zeeman components for sodium D lines

green: pi components, red & blue: sigma components

