Física Atómica

Clase 16

Estructura fina

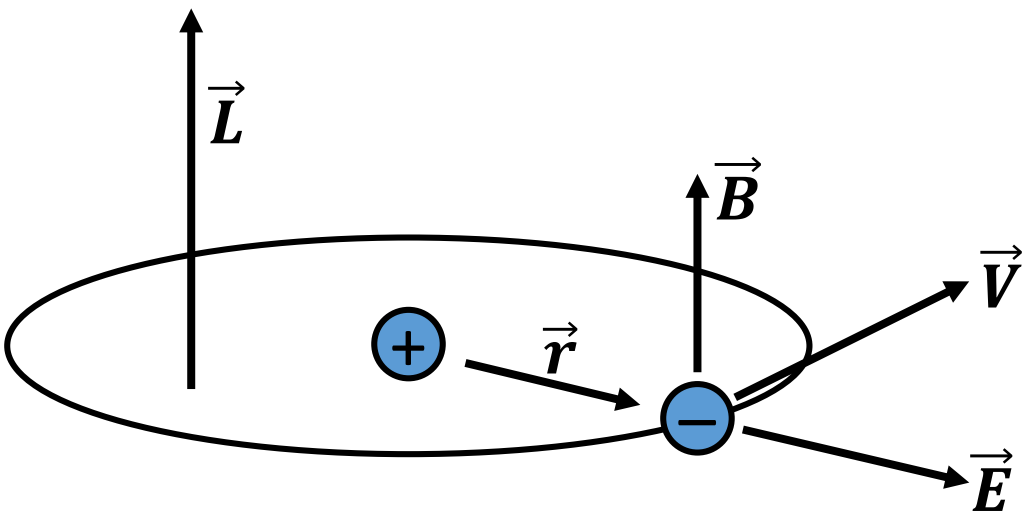
- Líneas dobles
- Se parece al “spin”: 2 opciones

- Explicación:

  spin $\leftrightarrow$ campo magnético interno del átomo

Interacción spin - órbita

- El electrón “siente” un campo magnético
- Es la transformación de Lorentz del campo eléctrico:



$$\vec{B} = \frac{\vec{E} \times \vec{V}}{c^2}$$

Interacción spin – órbita

- El electrón siente un campo magnético $\vec{B} = \vec{E} \times \vec{v}/c^2$
- El campo eléctrico producido por el núcleo es

$$\vec{E} = \left(\frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 r^3}\right)\vec{r}$$

- El campo magnético vale

$$\vec{B} = \left(\frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 c^2 r^3}\right)\vec{r} \times \vec{v} = \left(\frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 r^3 m_e c^2}\right)\vec{L}$$

Interacción spin – órbita

Energía magnética del electrón:

$$\Delta U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

$$\overrightarrow{\mu_s} = -g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S} \qquad\qquad \vec{B} = \left(\frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 r^3 m_e c^2} \right) \vec{L}$$

$$\Delta U = g_s \frac{\mu_B}{\hbar} \left(\frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 r^3 m_e c^2} \right) \vec{S} \cdot \vec{L}$$

$$\Delta U = g_s \frac{G}{2r^3 {m_e}^2 c^2} \vec{S} \cdot \vec{L}$$

¿ Y cuánto es S.L ?

Momento angular total

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

Como J se conserva,

debe ser característico de cada estado.

Deben existir <u>números cuánticos</u> "j" y "m_j" tales que

$$|J| = \hbar\sqrt{j(j+1)}$$

$$J_z = \hbar\, m_j$$

¿Cuánto pueden valer "j" y "m_j" ?

Momento angular total

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

$$\left|\,|\vec{L}| - |\vec{S}|\,\right| \quad \leq \quad |\vec{J}| \quad \leq \quad \left|\,|\vec{L}| + |\vec{S}|\,\right|$$

$$|\,\ell(\ell+1) - s(s+1)\,| \quad \leq j(j+1) \leq \quad |\,\ell(\ell+1) + s(s+1)\,|$$

- Si $\ell = 0$ queda j = s = ½
- Si $\ell > 0$ queda j = ℓ ± ½

Estructura fina

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

$$\vec{L}\cdot\vec{S} = \frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)]$$

Si $\ell = 0$ no hay estructura fina

Si $\ell = 1$ hay 2 opciones:

- j = 1 – ½ j = 1/2 L·S = $-\hbar^2$
- j = 1 + ½ j = 3/2 L·S = $+\tfrac{1}{2}\hbar^2$

Ejercicio: Calcular los ángulos. Hacer el caso $\ell = 2$.

Valores de j

Ver ejemplos en NIST

Hidrógeno:

Estados "s" tienen $j = ½$

Estados "p" tienen $j = ½ \quad 3/2$

Estados "d" tienen $j = 3/2, \; 5/2$

Estructura fina de H

- Estado 1s no tiene estructura fina.
- Estado 2s tampoco.
- Estado 2p sí tiene: $\Delta U = g_s \dfrac{G}{2r^3 {m_e}^2 c^2} \vec{S} \cdot \vec{L}$

- S·L = $-\hbar^2$ $+ ½ \hbar^2$
- Separación entre los dos niveles = 3/2 $\hbar^2$
- Conocemos todo excepto r^3
- Calcular el valor esperado $\left\langle \dfrac{1}{r^3} \right\rangle$ en el estado 2p

Estructura fina de H

- En el estado 2p: $\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{1}{24\, {a_0}^3}$ (verificar!)

- Resumiendo:

$$\Delta U \;=\; g_s \;\frac{G}{48\, {a_0}^3 {m_e}^2 c^2} \frac{3\hbar^2}{2}$$

$$\Delta U \;=\; \frac{G\hbar^2}{16\, {a_0}^3 {m_e}^2 c^2} \qquad a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e G} \qquad 1\, Ry = \frac{G}{2 a_0}$$

$$\Delta U \;=\; \frac{1\, Ry^2}{4\, m_e c^2} = \frac{(13{,}6\, eV)^2}{4\,(511000\, eV)} = 9{,}05 \times 10^{-5}\, eV$$

Datos de NIST

$2s \quad = 10{,}19881044$

$2p_{1/2} \quad = 10{,}19880606$

$2p_{3/2} \quad = 10{,}19885143 \qquad \text{diferencia} = 4{,}537 \times 10^{-5}$

$\text{doble} = 9{,}074 \times 10^{-5}$

Nuestro cálculo dio el doble!

¿De dónde aparece el factor de ½ ?

Tarea 6

Solución numérica de Schrödinger para el hidrógeno.

Calcular las energías y las funciones de onda para:

Estados 2p, 3p, 3d, 4p, 4d, 4f.

Recuerden poner las condiciones iniciales adecuadas.