



Interacción espín-órbita

Joseph Panana Vera

Lab2D4
Research Group on Mesoscopic Physics

Facultad de Ciencias Físicas
Universidad Nacional Mayor de San Marcos
Lima - Perú

08/11/2020

Contenido

- 1 Estructura fina del átomo de hidrógeno
- 2 Corrección relativista de la energía cinética
- 3 Interacción espín-órbita
- 4 Interacción espín-órbita en el átomo de carbono

Estructura fina del átomo de hidrógeno

Cuando se observa el espectro de las líneas de emisión con espectrómetros de alta resolución, encontramos que cada línea no es simple sino que está compuesta por varias líneas adicionales bastante próximas, esto significa que existen interacciones secundarias que se agregan a la interacción principal (electrón-núcleo).

Corrección relativista de la energía cinética

Clásicamente la velocidad del electron en el hidrógeno en su estado fundamental es $v \approx 10^6 \text{ m/s}$

$$\frac{v^2}{c^2} \approx 10^{-4}$$

La energía total de una partícula de masa en reposo m_0

$$E = E_c + m_0 c^2 = \sqrt{(pc)^2 + (m_0 c^2)^2} \quad (1)$$

Su energía cinética

$$E_c = E - m_0 c^2 = m_0 c^2 \left(1 + \frac{p^2}{m_0^2 c^2} \right)^{\frac{1}{2}} - m_0 c^2 \quad (2)$$

Por el binomio de Newton

$$(1 + x)^m = 1 + mx + \frac{m(m-1)}{2!}x^2 + \dots$$

$$E_c = m_0 c^2 \left(1 + \frac{p^2}{2m_0^2 c^2} - \frac{p^4}{8m_0^4 c^4} + \dots \right) - m_0 c^2 \quad (3)$$

Resulta

$$E_c = \frac{p^2}{2m_0} - \frac{p^4}{8m_0^3 c^2} \quad (4)$$

El hamiltoniano del Sistema, teniendo en cuenta esta aproximación, será

$$\hat{H} \approx \left(\frac{p^2}{2m_0} - \frac{p^4}{8m_0^3 c^2} \right) + V(r) \quad (5)$$

$$\hat{H} = \left[\frac{p^2}{2m_0} + V(r) \right] - \frac{p^4}{8m_0^3 c^2} \quad (6)$$

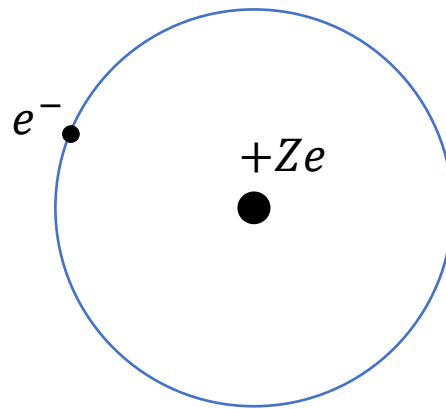


Figura 1

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' \quad (7)$$

$$\hat{H}_0 = \frac{p^2}{2m_0} + V(r) = \frac{p^2}{2m_0} - k \frac{Ze^2}{r} \quad (8)$$

$$\hat{H}' = -\frac{p^4}{8m_0^3 c^2} \quad (9)$$

Entonces la corrección de primer orden de la energía

$$E_n^{(1)} = \left\langle \Psi_{nlm}^{(0)} \left| \hat{H}' \right| \Psi_{nlm}^{(0)} \right\rangle \quad (10)$$

$$E_n^{(1)} = \left\langle \Psi_{nlm}^{(0)} \left| -\frac{p^4}{8m_0^3 c^2} \right| \Psi_{nlm}^{(0)} \right\rangle = -\frac{1}{2m_0 c^2} \left\langle \Psi_{nlm}^{(0)} \left| T^2 \right| \Psi_{nlm}^{(0)} \right\rangle \quad (11)$$

$$T = \frac{p^2}{2m_0} \quad (11)$$

De la ecuación (8)

$$T = \hat{H}_0 + k \frac{Ze^2}{r} \quad (12)$$

Entonces

$$T^2 = \left(\hat{H}_0 + k \frac{Ze^2}{r} \right) \left(\hat{H}_0 + k \frac{Ze^2}{r} \right) = \hat{H}_0^2 + 2\hat{H}_0 \left(k \frac{Ze^2}{r} \right) + \left(k \frac{Ze^2}{r} \right)^2 \quad (13)$$

Reemplazando en la ecuación (11)

$$E_n^{(1)} = -\frac{1}{2m_0c^2} \left[\left\langle \Psi_{nlm}^{(0)} \right| \hat{H}_0^2 \left| \Psi_{nlm}^{(0)} \right\rangle + 2kZe^2 \left\langle \Psi_{nlm}^{(0)} \right| \hat{H}_0 \times \frac{1}{r} \left| \Psi_{nlm}^{(0)} \right\rangle + (kZe^2)^2 \left\langle \Psi_{nlm}^{(0)} \right| \frac{1}{r^2} \left| \Psi_{nlm}^{(0)} \right\rangle \right] \quad (14)$$

Teniendo en cuenta que

$$\hat{H}_0 \left| \Psi_{nlm}^{(0)} \right\rangle = E_n^{(0)} \left| \Psi_{nlm}^{(0)} \right\rangle \quad (15)$$

Obtenemos

$$E_n^{(1)} = -\frac{1}{2m_0c^2} \left[(E_n^{(0)})^2 + 2kZe^2 E_n^{(0)} \left\langle \Psi_{nlm}^{(0)} \left| \frac{1}{r} \right| \Psi_{nlm}^{(0)} \right\rangle + (kZe^2)^2 \left\langle \Psi_{nlm}^{(0)} \left| \frac{1}{r^2} \right| \Psi_{nlm}^{(0)} \right\rangle \right] \quad (16)$$

$$E_n^{(1)} = -\frac{1}{2m_0c^2} \left[(E_n^{(0)})^2 + 2kZe^2 E_n^{(0)} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm} + (kZe^2)^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nlm} \right] \quad (17)$$

Los valores esperados

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm} = \frac{Z}{a_0 n^2} \quad (18)$$

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nlm} = \frac{Z^2}{a_0^2 n^3 \left(l + \frac{1}{2} \right)} \quad (19)$$

Reemplazando en la ecuación (17)

$$E_n^{(1)} = -\frac{1}{2m_0c^2} \left[(E_n^{(0)})^2 + 2kZe^2 E_n^{(0)} \frac{Z}{a_0 n^2} + (kZe^2)^2 \frac{Z^2}{a_0^2 n^3 \left(l + \frac{1}{2}\right)} \right] \quad (20)$$

$$E_n^{(1)} = -\frac{1}{2m_0c^2} \left[(E_n^{(0)})^2 + 2 \frac{kZ^2 e^2}{a_0 n^2} E_n^{(0)} + \left(\frac{kZ^2 e^2}{a_0 n^2} \right)^2 \times \frac{n}{l + \frac{1}{2}} \right] \quad (21)$$

Sabiendo que

$$E_n^{(0)} = -\frac{m_0}{2\hbar^2} \frac{(kZe^2)^2}{n^2} = -\frac{kZ^2 e^2}{2a_0 n^2} = -\frac{1}{2} m_0 c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \quad (22)$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{km_0 e^2} = 0.53 \text{ A} \quad \alpha = k \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

Por lo tanto, reemplazando en la ecuación (21)

$$E_n^{(1)} = -|E_n^{(0)}| \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left[\frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right] \quad (23)$$

Interacción espín-órbita

Es el acoplamiento magnético asociado al espín del electrón y el campo magnético interno del átomo. El campo magnético interno incluye el campo generado por el movimiento orbital de los electrones.

Modelo clásico

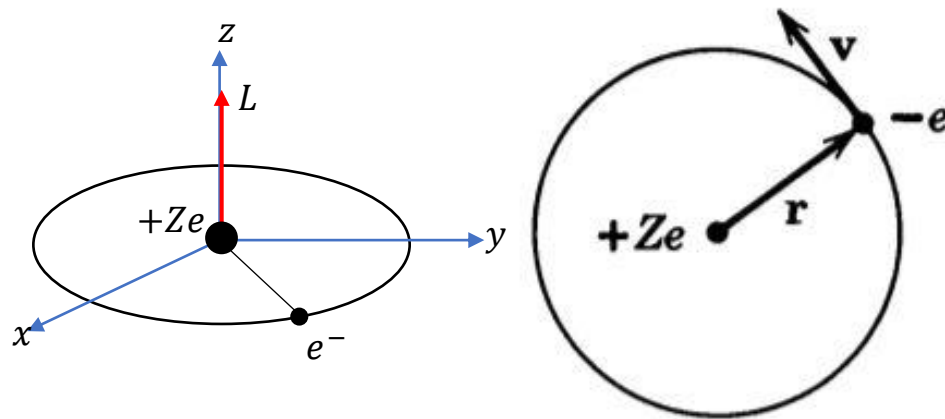


Figura 2. Un electrón moviéndose alrededor del núcleo.

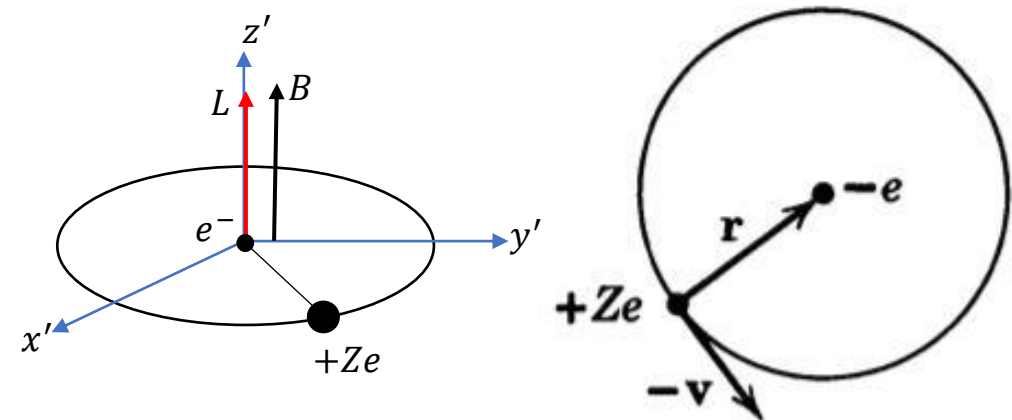


Figura 3. Un núcleo moviéndose alrededor del electrón.

El núcleo se mueve alrededor del electrón fijo con velocidad $-v$ y genera una densidad de corriente

$$j = -Zev \quad (24)$$

El campo magnético en la posición del electrón producido por el movimiento nuclear, de acuerdo a la ley de Biot-Savart, es

$$B = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{j \times r}{r^3} = -\frac{Ze\mu_0}{4\pi} \frac{v \times r}{r^3} \quad (25)$$

Y el campo eléctrico generado por la carga nuclear en la posición del electrón fijo

$$E = k \frac{Ze}{r^3} r \quad (26)$$

Si combinamos las ecuaciones (25) y (26)

$$B = -\frac{1}{c^2} v \times E \quad (27)$$

Considerando que un electrón se mueve en una órbita circular de Bohr. La carga produce una corriente

$$i = \frac{e}{c} \frac{1}{\tau} = \frac{e}{c} \frac{v}{2\pi r} \quad (28)$$

La corriente produce un campo magnético que, a grandes distancias, es igual al producido por un dipolo magnético ubicado en el centro de la órbita. Por tanto el momento magnético

$$\mu_l = iA = \frac{e}{c} \frac{v}{2\pi r} \pi r^2 = \frac{evr}{2c} \quad (29)$$

Como la órbita es circular r y v son perpendiculares

$$L = r \times p = mrv \quad (30)$$

Relación entre el momento magnético y momento angular

$$\frac{\mu_l}{L} = \frac{e}{2mc} \quad (31)$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \rightarrow \frac{\mu_l}{L} = g_l \frac{\mu_B}{\hbar} \quad (g_l = 1) \quad (32)$$

De forma vectorial

$$\mu_l = -g_l \frac{\mu_B}{\hbar} L \quad (33)$$

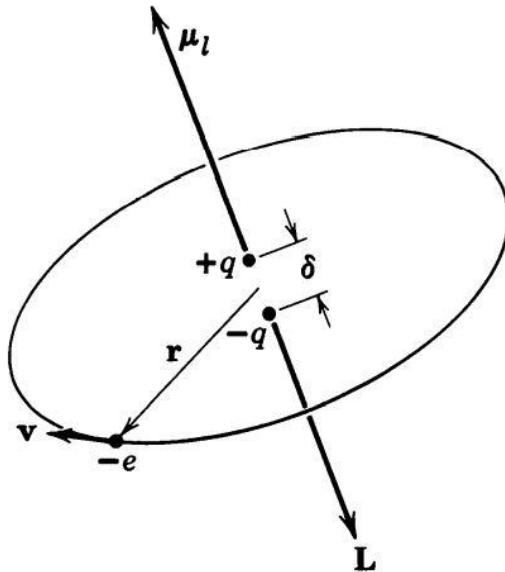


Figura 4

Cuando un sistema cuyo momento magnético μ_l se encuentra en un campo magnético externo B , este tendrá una energía potencial

$$F = -\nabla E \rightarrow F = -\frac{\partial E}{\partial r} \quad (34)$$

$$E = -Fr \quad (35)$$

Entonces en el dipolo magnético

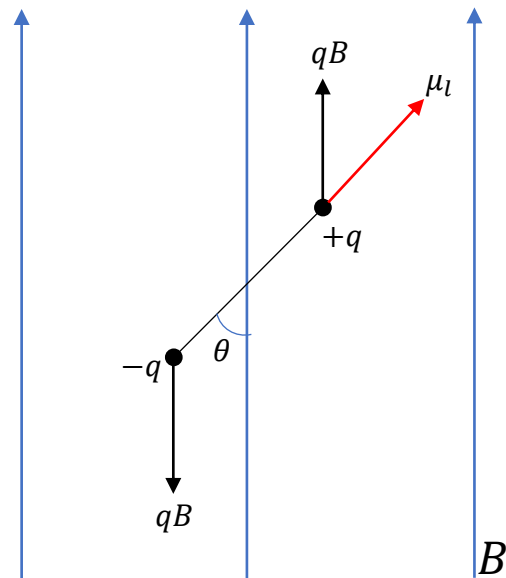


Figura 5

$$E = -(z)qB - (-z)(-q)B = -2\frac{\delta \cos \theta}{2}qB = \mu_l B \cos \theta \quad (36)$$

$$E = -\mu_l \cdot B \quad (37)$$

Análogamente a las ecuaciones (33) y (37) tendremos

$$\mu_s = -g_s \frac{\mu_B}{\hbar} S \quad (38)$$

$$E_{SL}^{(1)} = -\mu_s \cdot B \quad (39)$$

Reemplazando (38) en (39)

$$E_{SL}^{(1)} = \frac{g_s \mu_B}{\hbar} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \quad (40)$$

Esto se ha encontrado en el marco de referencia donde el electrón se encuentra en reposo. Pero lo que realmente nos interesa es conocer en el marco de referencia en donde el núcleo se encuentra en reposo.

Entonces para ello tendremos en cuenta las transformaciones relativistas, consideraremos un observador en el marco de referencia xy donde el núcleo se encuentra en reposo.

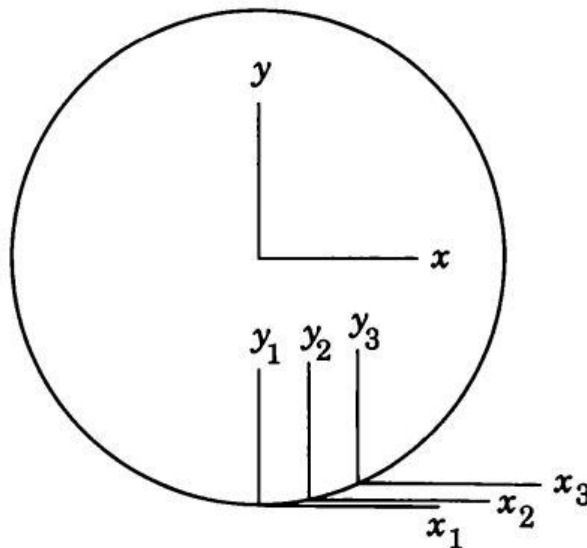


Figura 6

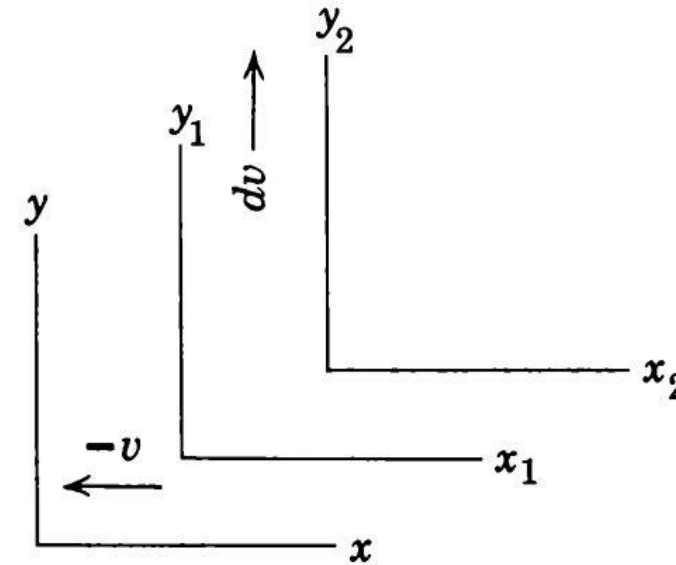


Figura 7

Usaremos las transformaciones de las velocidades

$$V'_x = \frac{V_x - v}{1 - \frac{v}{c^2} V_x} \quad V'_y = \frac{V_y \sqrt{1 - \beta^2}}{1 - \frac{v}{c^2} V_x} \quad (41)$$

$$V_x = \frac{V'_x + v}{1 + \frac{v}{c^2} V'_x} \quad V_y = \frac{V'_y \sqrt{1 - \beta^2}}{1 + \frac{v}{c^2} V'_x} \quad (42)$$

Evaluamos la velocidad V_a , la velocidad de x_2y_2 respecto a xy

$$V_{ax} = \frac{dv_x - v_x}{1 - \frac{v_x}{c^2} dv_x} = \frac{0 - (-v)}{1 - \frac{(-v)}{c^2} \times 0} = v \quad (43)$$

$$V_{ay} = \frac{dv_y \sqrt{1 - \frac{v_x^2}{c^2}}}{1 - \frac{v_x}{c^2} dv_x} = \frac{dv \sqrt{1 - \frac{(-v)^2}{c^2}}}{1 - \frac{(-v)}{c^2} \times 0} = dv \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (44)$$

De la misma manera para la velocidad V_b , la velocidad de xy respecto a x_2y_2

$$V_{bx} = \frac{v_x \sqrt{1 - \frac{(-dv_y)^2}{c^2}}}{1 + \frac{(-dv_y)}{c^2} v_y} = \frac{(-v) \sqrt{1 - \frac{(-dv)^2}{c^2}}}{1 + \frac{(-dv)}{c^2} \times 0} = -v \sqrt{1 - \frac{dv^2}{c^2}} \quad (45)$$

$$V_{by} = \frac{v_y + (-dv_y)}{1 - \frac{(-dv_y)}{c^2} v_y} = \frac{0 - dv}{1 - \frac{dv}{c^2} \times 0} = -dv \quad (46)$$

$$|V_a| = |V_b| \quad (47)$$

Si calculamos el ángulo que forma V_a con el eje x del marco xy y V_b con el eje x del marco x_2y_2

$$\theta_a = \frac{V_{ay}}{V_{ax}} = \frac{dv \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}{v} \quad (48)$$

$$\theta_b = \frac{V_{by}}{V_{bx}} = \frac{-dv}{-v \sqrt{1 - \frac{dv^2}{c^2}}} \quad (49)$$

$$d\theta = \theta_b - \theta_a = \frac{dv}{v \sqrt{1 - \frac{dv^2}{c^2}}} - \frac{dv}{v} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (50)$$

$$d\theta = \frac{dv}{v} - \frac{dv}{v} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} = \frac{dv}{v} \left[1 - \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \right] \quad (51)$$

Haciendo el desarrollo binomial

$$d\theta \approx \frac{dv}{v} \left[1 - \left(1 - \frac{v^2}{2c^2} \right) \right] = \frac{v dv}{2c^2} = \frac{v a dt}{2c^2} \quad (52)$$

La frecuencia angular

$$\omega_T = \frac{d\theta}{dt} = \frac{va}{2c^2} \quad (53)$$

↑
Frecuencia de Thomas

$$\omega_T = -\frac{1}{2c^2} \mathbf{v} \times \mathbf{a} \quad (54)$$

En los marcos en donde el electrón se encuentra en reposo, su momento magnético de espín tiene una precesión ω_L y a su vez tienen una precesión ω_T respecto al marco donde el núcleo se encuentra en reposo.

$$\omega = \omega_L + \omega_T \quad (55)$$

Entonces

$$\omega_L = -\frac{g_s \mu_B}{c \hbar} \mathbf{v} \times \mathbf{E} \quad (56)$$

Reemplazando en la ecuación (32) y $g_s = 2$

$$\omega_L = -\frac{e}{mc^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E} \quad (57)$$

Para ω_T , usamos la ley de Newton

$$\mathbf{a} = -\frac{eE}{m} \quad (58)$$

Reemplazando en la ecuación (54)

$$\omega_T = \frac{e}{2mc^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E} \quad (59)$$

La frecuencia de precesión en el marco normal

$$\omega = -\frac{e}{2mc^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E} \quad (60)$$

De las ecuaciones (57) y (60) observamos que al transformar la frecuencia de precesión del espín en el marco donde el electrón está en reposo al marco normal, su magnitud se reduce a la mitad.

Por tanto debería suceder lo mismo para la energía potencial

$$E_{SL}^{(1)} = \frac{1}{2} \frac{g_s \mu_B}{\hbar} S \cdot B \quad (61)$$

Buscamos expresar en términos de $S \cdot L$, usaremos la ecuación (27) para los cual expresaremos E en función de la fuerza ejercida sobre el electrón.

$$F = -eE \quad (62)$$

El potencial de Coulomb del núcleo

$$F = -\frac{dV(r)}{dr} \frac{\vec{r}}{r} \quad (63)$$

Reemplazando

$$B = -\frac{1}{ec^2 r} \frac{dV(r)}{dr} v \times r \quad (64)$$

$$B = -\frac{1}{emc^2 r} \frac{dV(r)}{dr} L \quad (65)$$

Reemplazando la ecuación (65) en (61)

$$E_{SL}^{(1)} = \frac{1}{2} \frac{g_s \mu_B}{emc^2 r \hbar} \frac{dV(r)}{dr} S \cdot L \quad (66)$$

Sustituyendo la ecuación (32) y $g_s = 2$

$$E_{SL}^{(1)} = \frac{1}{2m^2 c^2 r} \frac{dV(r)}{dr} S \cdot L \quad (67)$$

Para átomos hidrogenoides el potencial sera

$$V(r) = -k \frac{Ze^2}{r} \quad (68)$$

Entonces

$$E_{SL}^{(1)} = \frac{1}{2m^2 c^2} k \frac{Ze^2}{r^3} S \cdot L \quad (69)$$

Donde

$$\xi(r) = \frac{1}{2m^2 c^2} k \frac{Ze^2}{r^3} \quad (70)$$

El hamiltoniano

$$\hat{H}_{SL} = \xi(r)S \cdot L \quad (71)$$

Si consideramos el momento angular total del electrón

$$J = L + S \quad (72)$$

$$J^2 = L^2 + 2L \cdot S + S^2 \quad \rightarrow \quad L \cdot S = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2) \quad (73)$$

Teniendo en cuenta que

$$\hat{H}_0 \Psi_{nljm_j}^{(0)} = E_n^{(0)} \Psi_{nljm_j}^{(0)} \quad L^2 \Psi_{nljm_j}^{(0)} = l(l+1)\hbar^2 \Psi_{nljm_j}^{(0)} \quad (74)$$

$$S^2 \Psi_{nljm_j}^{(0)} = \frac{3}{4}\hbar^2 \Psi_{nljm_j}^{(0)} \quad J^2 \Psi_{nljm_j}^{(0)} = j(j+1)\hbar^2 \Psi_{nljm_j}^{(0)} \quad (75)$$

$$J_z \Psi_{nljm_j}^{(0)} = m_j \hbar \Psi_{nljm_j}^{(0)} \quad (76)$$

Por tanto

$$E_{SL}^{(1)} = \left\langle \Psi_{nljm_j}^{(0)} \left| \frac{1}{2} \xi(r) (J^2 - L^2 - S^2) \right| \Psi_{nljm_j}^{(0)} \right\rangle \quad (77)$$

$$E_{SL}^{(1)} = \frac{\hbar^2}{2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \langle \xi(r) \rangle \quad (78)$$

Donde

$$\langle \xi(r) \rangle = \left\langle \Psi_{nljm_j}^{(0)} \left| \frac{1}{2m^2c^2} k \frac{Ze^2}{r^3} \right| \Psi_{nljm_j}^{(0)} \right\rangle = \frac{kZe^2}{2m^2c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \quad (79)$$

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nlm} = \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 l(l + \frac{1}{2})(l + 1)} \quad (80)$$

Sustituyendo

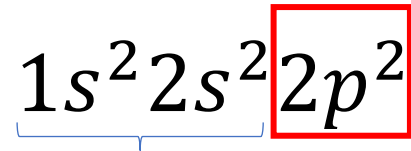
$$\langle \xi(r) \rangle = \frac{kZe^2}{2m^2c^2} \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 l(l + \frac{1}{2})(l + 1)} \quad (81)$$

Por ultimo, para $l \neq 0$ tenemos

$$E_{SL}^{(1)} = |E_n^{(0)}| \frac{(Z\alpha)^2}{2nl(l + \frac{1}{2})(l + 1)} \times \begin{cases} l & , \text{para } j = l + \frac{1}{2} \\ -l - 1 & , \text{para } j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (82)$$

Interacción espín-órbita en el átomo de carbono

Número atómico $z = 6$



$$L = 0, S = 0$$

Las capas llenas no contribuyen

$$2p^2 \rightarrow n = 2 \begin{cases} l_1 = 1 \\ l_2 = 2 \end{cases}$$

Microestados

$$\Omega = \frac{m!}{(m-n)! n!} = \frac{6!}{(6-2)! 2!} = 15$$

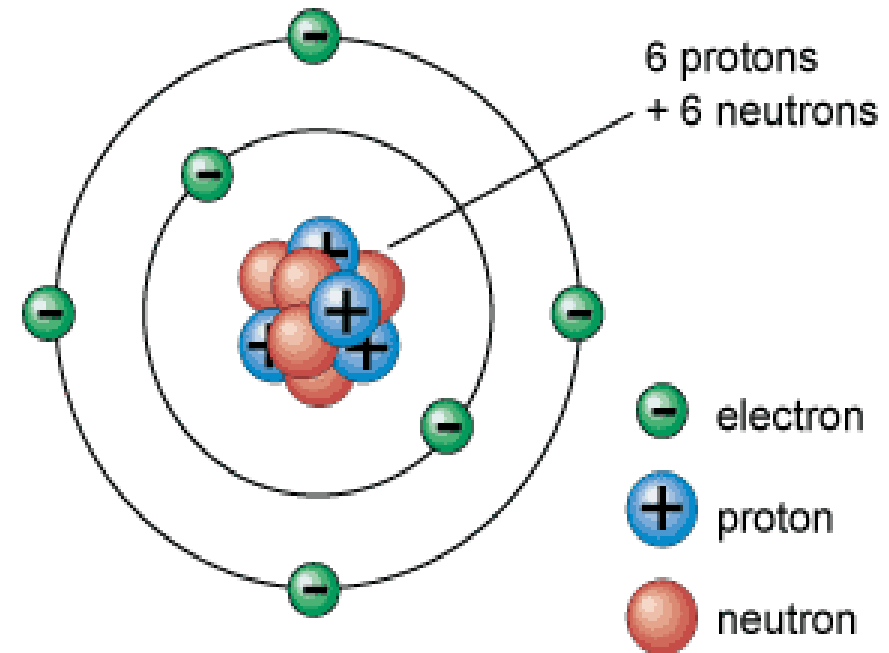


Figura 8

m_l			$M_L = \sum m_l$	$M_S = \sum m_s$
1	0	-1		
1	1		1	1
1		1	0	1
	1	1	-1	1
1↓			2	0
	1↓		0	0
		1↓	-2	0
↓	↓		1	-1
↓		↓	0	-1
	↓	↓	-1	-1
1	↓		1	0
1		↓	0	0
	1	↓	-1	0
↓	1		1	0
↓		1	0	0
	↓	1	-1	0

Considerar

$$^{2S+1}L_J, \quad L = \begin{cases} 0 & 1 & 2 \\ S & P & D \end{cases} \quad (83)$$


 Término espectroscópico

$$|L - S| \leq J \leq (L + S) \quad (84)$$

- 1 microestado $M_S = 0, \quad M_L = 0$
 $S = 0 \wedge L = 0 \rightarrow J = 0$
 1S_0

(85)

- 5 microestado $M_S = 0, \quad M_L = -2, -1, 0, 1, 2$
 $S = 0 \wedge L = 2 \rightarrow J = 2$
 1D_2

(86)

- 9 microestado

$$\left. \begin{array}{l} M_S = 1 \\ M_S = 0 \\ M_S = -1 \end{array} \right\} M_L = -1, 0, 1 \quad \longrightarrow \quad \begin{array}{l} M_S = -1, 0, 1 \\ M_L = -1, 0, 1 \end{array} \quad (87)$$

$$L = 1 \quad \wedge \quad S = 1 \quad \longrightarrow \quad J = 0, 1, 2 \quad (88)$$

$${}^3P_{2,1,0}$$

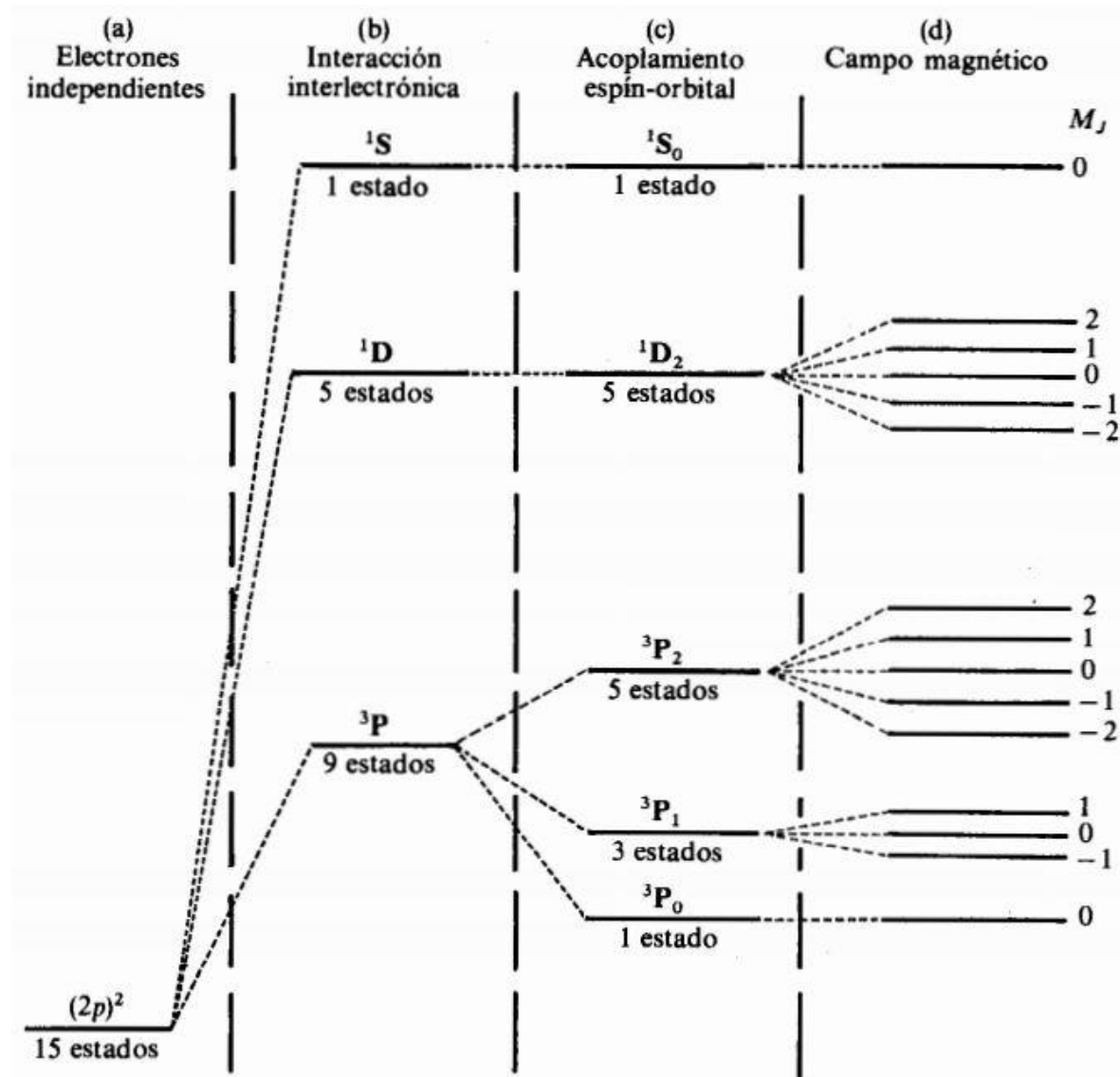


Figura 9

Referencias

- 1 Cohen-Tannoudji,C.(1977).Quantum Mechanics Vol. II. Hermann and John Wiley & Sons.
- 2 Cruz,D., Chamizo,J. y Garritz,A.(1986).Estructura atómica, México D.F.,México: Fondo educativo interamericano.
- 3 Eisberg,R.(1978). *Fundamentos de la física moderna*,México D.F.,México: Editorial Limusa.