

## MECANICA CUANTICA 2

### LECTURA # 3

#### ESTRUCTURA HIPERFINA DEL ATOMO DE HIDROGENO

La estructura hiperfina del Atomo de Hidrogeno emerge del acoplamiento entre los momentos dipolares magneticos del proton y del electron.

$$\vec{\mu}_e = \gamma_e \vec{S}_e \quad \gamma_e = -g/m_e$$

$$\vec{\mu}_p = \gamma_p \vec{S}_p \quad \gamma_p = +2.79 g/m_p$$

$$\text{Dado que } m_e \ll m_p; \quad \gamma_e \gg \gamma_p$$

Vamos a tratar al proton como una partícula puntual, al igual que el electron.

Dado  $\vec{\mu}_p$ , el campo magnetico generado por este dipolo es:

$$\vec{B}(\vec{r}) = -\frac{\mu_0}{4\pi r^3} \left( \vec{\mu}_p - \frac{3(\vec{\mu}_p \cdot \vec{r}) \vec{r}}{r^2} \right) + \frac{2\mu_0}{3} \vec{\mu}_p \delta(\vec{r})$$

El dipolo magnetico del electron se acopla a este campo magnetico como:

$$\hat{W} = -\vec{\mu}_e \cdot \vec{B} = W_{\text{dip}} + W_c$$

↑  
Contacto

$$W_{\text{dip}} = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \left( \vec{\mu}_e \cdot \vec{\mu}_p - \frac{3(\vec{\mu}_e \cdot \vec{r})(\vec{\mu}_p \cdot \vec{r})}{r^2} \right)$$

$$W_c = -\frac{2\mu_0}{3} \vec{\mu}_e \cdot \vec{\mu}_p \delta(\vec{r})$$

Nos vamos a concentrar en el estado base  $n=1, l=0, m=0$

$$\Psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \longrightarrow \Psi_{100}(\vec{r}) = R_{10}(r) Y_{00}(\theta, \phi)$$

$$Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad R_{10}(r) = \frac{2}{(a_0)^{3/2}} e^{-r/a_0} \quad a_0: \text{Radio de Bohr.}$$

$$|\Psi_{100}(\vec{r})|^2 = \rho(r) \leftarrow \text{funcion de } r=|\vec{r}|$$

$$\Rightarrow \langle 100 | \hat{W}_{\text{dip}} | 100 \rangle \sim \int \rho(r) W_{\text{dip}}(\vec{r}) d^3r = \int \rho(r) r^2 \left\{ \int \hat{W}_{\text{dip}}(\vec{r}) d\Omega \right\} dr$$

$$\int W_{\text{dip}}(\vec{r}) d\Omega = 4\pi \vec{\mu}_e \cdot \vec{\mu}_p - 3 \int (\vec{\mu}_e \cdot \vec{r})(\vec{\mu}_p \cdot \vec{r}) d\Omega$$

↑  
 $\int d\Omega$

$$\int (\vec{\mu}_e \cdot \vec{r})(\vec{\mu}_p \cdot \vec{r}) d\Omega = ?$$

$$\hat{r} = \sin\theta \cos\phi \hat{i} + \sin\theta \sin\phi \hat{j} + \cos\theta \hat{k}$$

$$\vec{a} \cdot \hat{r} = a_x \sin\theta \cos\phi + a_y \sin\theta \sin\phi + a_z \cos\theta$$



$$\vec{b} = b_z \hat{n}$$

$$\vec{b} \cdot \hat{r} = b_z \cos \theta$$

$$(\vec{a} \cdot \hat{r})(\vec{b} \cdot \hat{r}) = b_x (a_x \sin \theta \cos \theta \cos \phi + a_y \sin \theta \cos \theta \sin \phi + a_z \cos^2 \theta)$$

$$\int \sin \theta \cos \theta \cos \phi d\Omega = 0 \quad \leftarrow \int_0^{2\pi} \cos \phi d\phi = 0$$

$$\int \sin \theta \cos \theta \sin \phi d\Omega = 0 \quad \leftarrow \int_0^{2\pi} \sin \phi d\phi = 0$$

$$\int \cos^2 \theta \sin \theta d\theta d\phi = ? \quad \rightarrow u = \cos \theta; du = -\sin \theta d\theta \Rightarrow -\int_1^{-1} u^2 du = \frac{1}{3} u^3 \Big|_{-1}^1 = \frac{2}{3}$$

$$\int (\vec{a} \cdot \hat{r})(\vec{b} \cdot \hat{r}) \sin \theta d\theta d\phi = 2\pi \frac{2}{3} a_z b_z = \frac{4\pi}{3} \vec{a} \cdot \vec{b}$$

$$\Rightarrow \int W_{\text{dip}}(\vec{r}) d\Omega = 4\pi \vec{\mu}_e \cdot \vec{\mu}_p - 3 \frac{4\pi}{3} \vec{\mu}_e \cdot \vec{\mu}_p = 0$$

$\Rightarrow$  Para el estado base  $n=1, l=0, m=0$   $\hat{W}_{\text{dip}}(\vec{r})$  no hace ningun aporte.

$$\text{Solo aporta } \hat{W}_c(\vec{r}) = -\frac{2\mu_0}{3} \vec{\mu}_e \cdot \vec{\mu}_p \delta(\vec{r}) = -\frac{2\mu_0}{3} \gamma_e \gamma_p \vec{S}_e \cdot \vec{S}_p$$

Entonces, al momento de describir el estado del electron en el atomo de Hidrogeno debemos, en este caso, incluir su spin en la descripción.

$$|\Psi_{100}\rangle = |\Psi_{100}\rangle |\Sigma\rangle \quad |\Psi_{100}(\vec{r})\rangle = \langle \vec{r} | \Psi_{100}\rangle |\Sigma\rangle = \Psi_{100}(\vec{r}) |\Sigma\rangle$$

Externo  $\uparrow$       Spin  $\uparrow$       Base  $\uparrow$   $|\vec{r}\rangle$

$$\langle \Psi_{100} | \hat{W}_c | \Psi_{100} \rangle = \langle \Sigma | \langle \Psi_{100}(\vec{r}) | \hat{W}_c(\vec{r}) | \Psi_{100}(\vec{r}) \rangle | \Sigma \rangle$$

$$\langle \Psi_{100}(\vec{r}) | \hat{W}_c | \Psi_{100}(\vec{r}) \rangle = \int \Psi_{100}^*(\vec{r}) \hat{W}_c(\vec{r}) \Psi_{100}(\vec{r}) d^3r \equiv \hat{H}_1$$

$$\hat{H}_1 = -\frac{2\mu_0}{3} \vec{\mu}_e \cdot \vec{\mu}_p |\Psi_{100}(0)|^2 \quad |\Psi_{100}(0)|^2 = \frac{1}{\pi a_1^3}$$

$$\hat{H}_1 = -\frac{2\mu_0}{3\pi a_1^3} \gamma_e \gamma_p \hat{S}_e \cdot \hat{S}_p$$

$$A \equiv -\frac{2\mu_0}{3\pi a_1^3} \gamma_e \gamma_p \hbar^2 = 5.87 \times 10^{-6} \text{ eV} \quad \nu = \frac{A}{\hbar} = 1417 \text{ MHz} \rightarrow \lambda = \frac{c}{\nu} \simeq 21 \text{ cm.}$$

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{\hbar^2} A \vec{S}_e \cdot \vec{S}_p \quad \leftarrow \text{Hamiltoniano de estructura hiperfina del estado base del atomo de Hidrogeno.}$$

$$\hat{S}_e: S_e = 1/2; \quad \hat{S}_p: S_p = 1/2 \quad \vec{S} = \vec{S}_e + \vec{S}_p: s = 0, 1 \quad \leftarrow \text{debido a reglas de adición de momentum angular}$$

$$\vec{S}^2 = \vec{S}_e^2 + \vec{S}_p^2 + 2\vec{S}_e \cdot \vec{S}_p \Rightarrow \vec{S}_e \cdot \vec{S}_p = \frac{1}{2} \{ S^2 - S_e^2 - S_p^2 \}$$



$$\hat{S}^2 |S, M\rangle = S(S+1)\hbar^2 |S, M\rangle$$

$$\hat{S}_e^2 |S, M\rangle = \hat{S}_e^2 \sum_{m_e, m_p} C_{m_e, m_p}^{SM} |m_e, m_p\rangle = \frac{3}{2}(\frac{1}{2}+1)\hbar^2 \sum_{m_e, m_p} C_{m_e, m_p}^{SM} |m_e, m_p\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |S, M\rangle$$

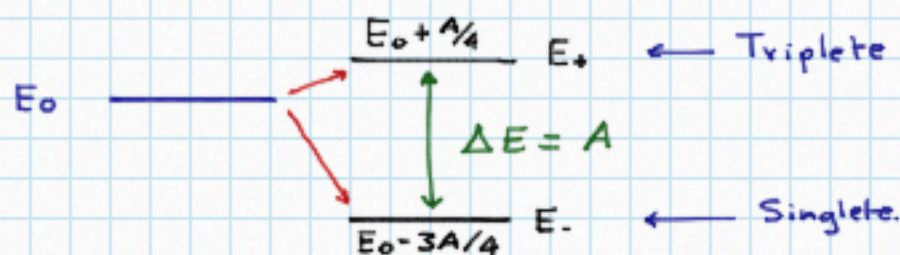
$$\Rightarrow \hat{S}_e^2 |S, M\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |S, M\rangle$$

$$\hat{S}_p^2 |S, M\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |S, M\rangle$$

$$\hat{H}_1 |S, M\rangle = \frac{A}{2\hbar^2} \{S(S+1) - \frac{3}{4} - \frac{3}{4}\} \hbar^2 |S, M\rangle \longrightarrow \hat{H}_1 |S, M\rangle = \frac{A}{2} \{S(S+1) - \frac{3}{2}\} |S, M\rangle \quad S=0,1$$

$$S=0 \rightarrow \text{Singlete } |0,0\rangle \longrightarrow E_- = -\frac{3}{4}A$$

$$S=1 \rightarrow \text{Triplete } \{|1,-1\rangle, |1,0\rangle, |1,+1\rangle\} \longrightarrow E_+ = \frac{A}{4} \leftarrow \text{degeneración} = 3$$



Ahora consideremos el caso en el cual el átomo está sometido a un campo magnético externo.

$$\hat{H}_2 = -\vec{\mu}_e \cdot \vec{B} - \vec{\mu}_p \cdot \vec{B} \Rightarrow \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2$$

$$\vec{B} = B_0 \hat{k} \longrightarrow \hat{H}_1 + \hat{H}_2 = \frac{A}{\hbar^2} \vec{S}_e \cdot \vec{S}_p - \gamma_e B_0 S_{e_z} - \gamma_p B_0 S_{p_z} = \hat{H}_m$$

Trabajemos en la base desacoplada:

$$|1\rangle \equiv |+; +\rangle$$

$$|2\rangle \equiv |+; -\rangle$$

$$|3\rangle \equiv |-; +\rangle$$

$$|4\rangle \equiv |-; -\rangle$$

$$\hat{H}_1 = \frac{A}{\hbar^2} \vec{S}_e \cdot \vec{S}_p = \frac{A}{\hbar^2} \{S_{e_x} S_{p_x} + S_{e_y} S_{p_y} + S_{e_z} S_{p_z}\}$$

Haciendo actuar  $\hat{H}_1$  sobre  $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle$  tenemos:

$$\hat{H}_1 = \begin{pmatrix} A/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -A/4 & A/2 & 0 \\ 0 & A/2 & -A/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A/4 \end{pmatrix}$$

Evalando explícitamente  $\hat{H}_2$  tenemos:

$$\hat{H}_2 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -(\gamma_e + \gamma_p) B_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -(\gamma_e - \gamma_p) B_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (\gamma_e - \gamma_p) B_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (\gamma_e + \gamma_p) B_0 \end{pmatrix}$$



$$H_M = \begin{bmatrix} A/4 - (m_e + m_p) B_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\{A/4 + (m_e - m_p) B_0\} & A/2 & 0 \\ 0 & A/2 & -\{A/4 - (m_e - m_p) B_0\} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \{A/4 + (m_e + m_p) B_0\} \end{bmatrix}$$

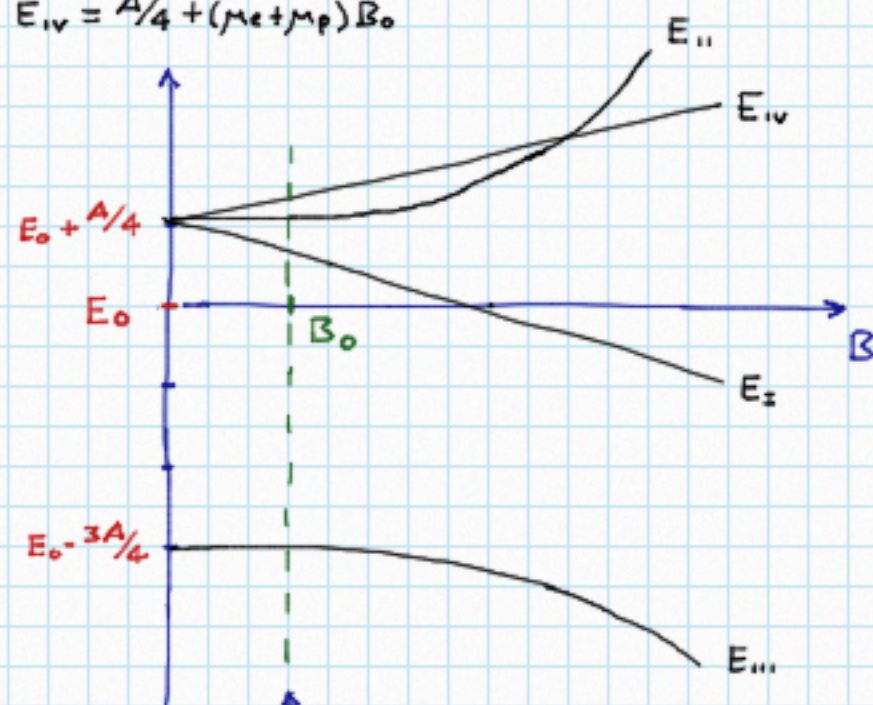
Diagonalizando esta matriz tenemos:

$$E_I = A/4 - (m_e + m_p) B_0$$

$$E_{II} = -A/4 + A/2 \sqrt{1 + \left(\frac{2(m_e - m_p) B_0}{A}\right)^2}$$

$$E_{III} = -A/4 - A/2 \sqrt{1 + \left(\frac{2(m_e - m_p) B_0}{A}\right)^2}$$

$$E_{IV} = A/4 + (m_e + m_p) B_0$$



Desdoblamiento de los niveles de energía del estado base del átomo de Hidrogeno debido al efecto Zeeman.