

Acoplamientos L-S con campo magnético aplicado para un átomo de configuración electrónica (nd)⁵

Rodríguez Medina, Adrián

Grado en Física (2015-16), Física Atómica y Molecular. Universidad Autónoma de Madrid,

Abstract

En este trabajo se pretenden calcular los distintos niveles de energía que surgen al aplicar los acoplamientos L-S con campo magnético aplicado a una configuración (nd)⁵. En particular trataremos con el átomo de Manganese, cuya configuración electrónica es [Ar](3d)⁵(4s)².

Introducción

Para calcular los niveles de energía del átomo de Manganese se divide el Hamiltoniano completo en 3 partes: $H = H_C + H_1 + H_{SO}$. Se toma H_C como el Hamiltoniano principal ($H_C \gg H_1, H_{SO}$). Para ver los desdoblamientos al aplicar los Hamiltonianos H_1 y H_{SO} , usaremos teoría de perturbaciones, y nos encontraremos con dos tipos de acoplamientos: L-S si $H_1 \gg H_{SO}$ o j-j si $H_{SO} \gg H_1$. De estos dos solo trataremos el acoplamiento L-S.

En el acoplamiento de Russel-Saunders (L-S), la ordenación de los niveles satisface las reglas de Hund, y los términos están caracterizados por $\gamma(L, M_L, S, M_S)$, donde γ es la configuración electrónica, que viene dada por $\gamma \equiv \prod_i (n_i l_i)^{v_i}$.

Al aplicar el Hamiltoniano H_{SO} , la corrección a los niveles energéticos vendrá dada por:

$$\Delta E_{SO} = \frac{A(\gamma LS)\hbar^2}{2} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]$$

Donde ahora los niveles están caracterizados por $\gamma(L, S, J, M_J)$.

Si se le añade un campo magnético poco intenso ($H_{SO} \gg H_P$) los términos están caracterizados por $\gamma(L, S, J, M_J)$. Al aplicar el Hamiltoniano H_P , la corrección a los niveles energéticos vendrá dada por:

$$\Delta E_P = \mu_B B M_J g_L \text{ con } g_L = \left[1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \right] \equiv \text{factor de Landeau}$$

A esto se le denomina Efecto Zeeman anómalo.

Acoplamiento L-S

Para una configuración (3d)⁵, tenemos:

$$\begin{cases} l_i = 2 \\ s_i = 1/2 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} m l_i = 0, \pm 1, \pm 2 \\ m s_i = \pm 1/2 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} M_L = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm 10 \\ M_S = \pm 1/2, \pm 3/2, \pm 5/2 \end{cases}$$

La degeneración total va a ser:

$$g = C_{2(2l+1)}^5 = C_{10}^5 = \frac{10!}{5! \cdot 5!} = 252$$

Empezamos aplicando el Hamiltoniano H_1 , para ello, hacemos una tabla con todos los microestados¹ posibles, para saber qué términos y con qué multiplicidades vamos a tener. En la tabla se omiten los M_L y M_S negativos por que se obtienen cambiando todos los signos. De ahí podemos extraer los términos que aparecen y su multiplicidad, teniendo en cuenta que para que un término esté presente, tiene que tener todas las proyecciones posibles. Así, obtenemos (usando notación espectroscópica ^{2S+1}L) con la degeneración de cada término, dada por $g = (2L + 1)(2S + 1)$, escrita entre corchetes:

$${}^6S [6], {}^4G [36], {}^4F [28], {}^4D [20], {}^4P [12], {}^2I [26], {}^2H [22]$$

$${}^2G (x2) [36], {}^2F (x2) [28], {}^2D (x3) [30], {}^2P [6], {}^2S [2]$$

Donde entre paréntesis se indica la multiplicidad de cada término, y 6S es el término fundamental.

Para aplicar el Hamiltoniano H_{SO} , simplemente calculamos los posibles J acoplando los L y S de cada nivel, y luego calculamos la degeneración de los nuevos niveles obtenidos. Así, podemos dibujar directamente el esquema de acoplamiento:

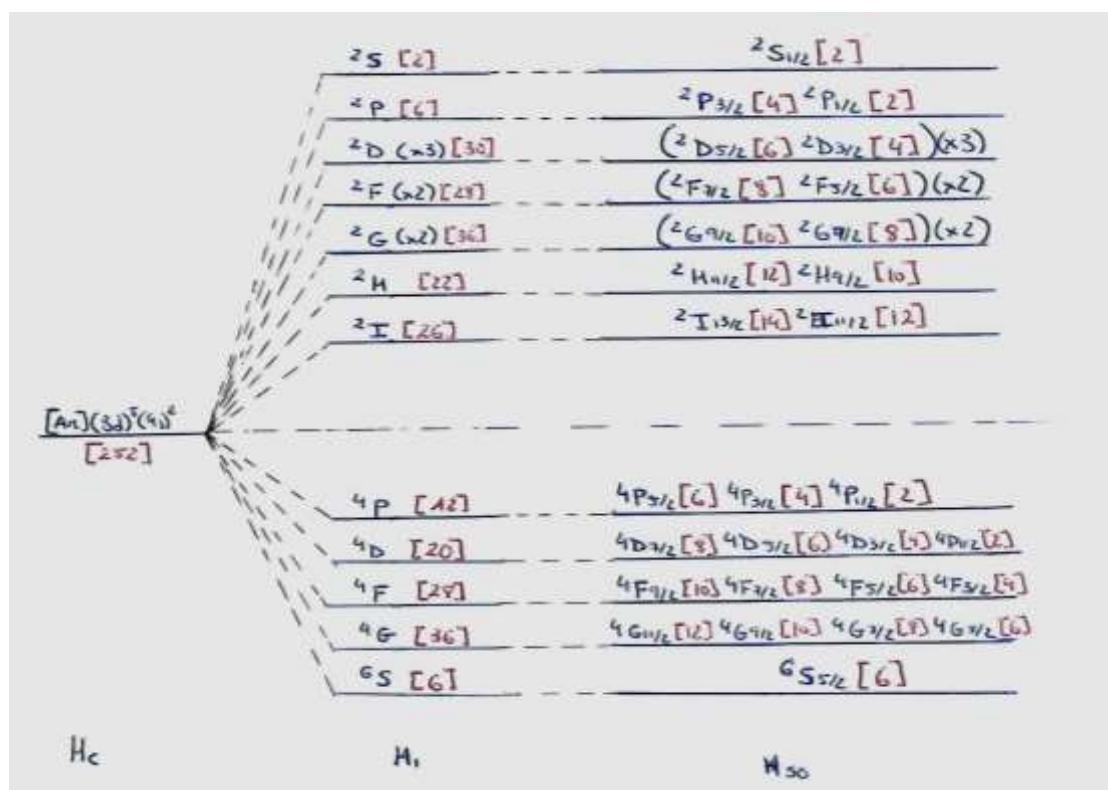


Fig.1 - Esquema de acoplamiento L-S

Hemos hecho la aproximación de que no hay corrección a los niveles de energía ya que el nivel $(3d)^5$ está semilleno.

¹ Adjuntada en el anexo.

Campo magnético aplicado

Para aplicar el Hamiltoniano H_P , simplemente desdoblamos cada nivel del H_{SO} en sus correspondientes M_J . Se ha realizado este desdoblamiento para los niveles 6S [6] y 2F ($x2$) [28] como ejemplo, los demás niveles se hacen igual. Así, podemos dibujar directamente el esquema de acoplamiento:

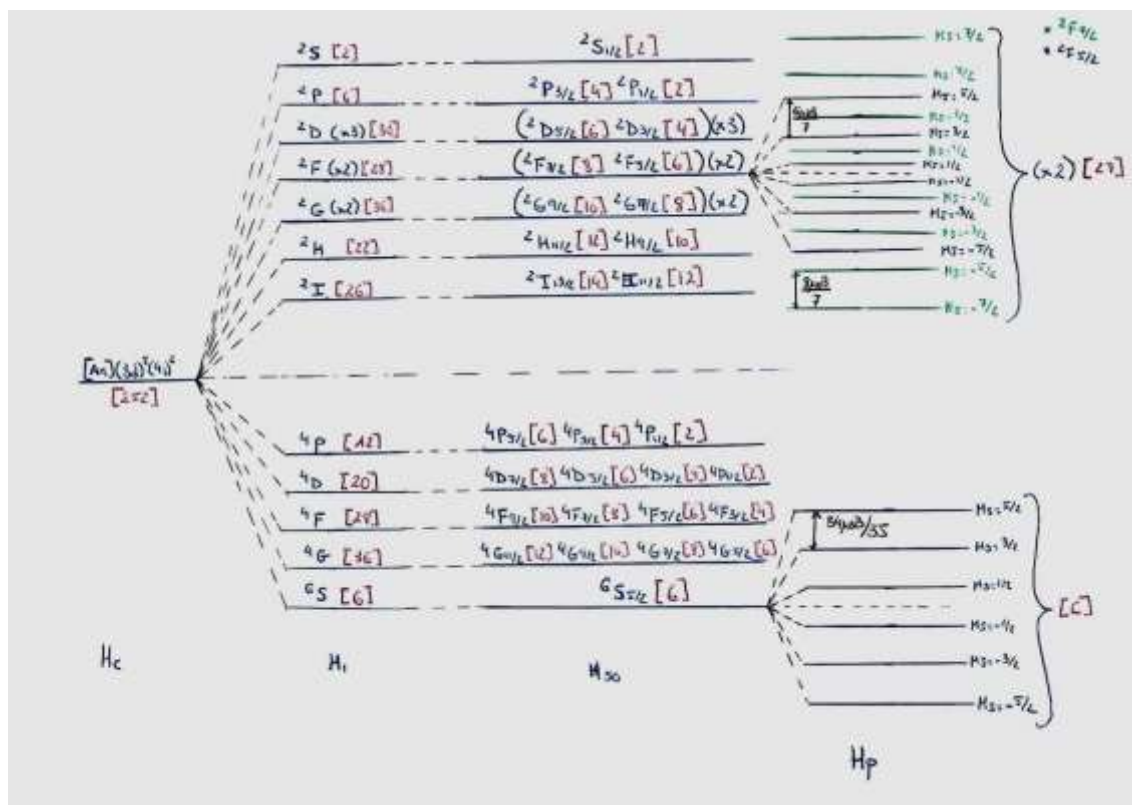


Fig.2 - Esquema de acoplamiento L-S con campo magnético aplicado

Conclusiones

En este trabajo, hemos sido capaces de calcular los distintos niveles de energía que salen al aplicar los distintos acoplamientos discutidos en las clases teóricas con un campo magnético aplicado.

Hemos podido profundizar en los métodos aprendidos para poder aproximar la estructura de niveles del Manganese, con 5 electrones en el nivel 3d, y el resto de niveles llenos.

Podemos concluir con que el trabajo se ha llevado a cabo de forma satisfactoria al obtener resultados coherentes a lo largo de todo el estudio.

Anexo: Tabla de microestados del acoplamiento L-S

		MS		
		5/2	3/2	1/2
10				
9				
8				
7				
6				$2^+ 2^- 1^+ 1^- 0^+$
5				$2^+ 2^- 1^+ 0^+ 0^-$; $2^+ 2^- 1^+ 1^- -1^+$
4			$2^+ 2^- 1^+ 0^+ -1^+$	$2^+ 1^+ 1^- 0^+ 0^-$; $2^+ 2^- 1^+ 1^- -2^+$ $2^+ 2^- 1^+ 0^+ -1^-$; $2^+ 2^- 1^+ 0^- -1^+$ $2^+ 2^- 1^- 0^+ -1^+$
3			$2^+ 2^- 1^+ 0^+ -2^+$ $2^+ 1^+ 1^- 0^+ -1^+$	$2^+ 2^- 1^+ 0^+ -2^-$; $2^+ 2^- 1^+ 0^- -2^+$ $2^+ 2^- 1^- 0^+ -2^+$; $2^+ 1^+ 1^- 0^+ -1^-$ $2^+ 1^+ 1^- 0^- -1^+$; $2^- 1^+ 1^- 0^+ -1^+$ $2^+ 2^- 1^+ 0^+ 0^-$; $2^+ 2^- 1^+ -1^+ -1^-$
2			$2^+ 2^- 1^+ -1^+ -2^+$ $2^+ 1^+ 1^- 0^+ -2^+$ $2^+ 1^+ 0^+ 0^- -1^+$	$2^+ 1^+ 0^+ 0^- -1^-$; $2^+ 1^- 0^+ 0^- -1^+$ $2^- 1^+ 0^+ 0^- -1^+$; $2^+ 2^- 1^+ -1^+ -2^-$ $2^+ 2^- 1^+ -1^- -2^+$; $2^+ 2^- 1^- -1^+ -2^+$ $2^+ 1^+ 1^- 0^+ -2^-$; $2^+ 1^+ 1^- 0^- -2^+$ $2^- 1^+ 1^- 0^+ -2^+$; $2^+ 2^- 0^+ 0^- -2^+$ $2^+ 1^+ 1^- -1^+ -1^-$; $2^+ 2^- 0^+ 0^- -1^+$
1			$2^+ 2^- 1^+ 0^+ -1^+$ $2^+ 1^+ 0^+ 0^- -1^+$ $2^+ 1^+ 0^+ -1^+ -1^-$ $2^+ 1^+ -1^+ -2^- -2^+$	$2^+ 1^+ 0^+ 0^- -2^-$ $2^+ 1^- 0^+ 0^- -2^+$; $2^- 1^+ 0^+ 0^- -2^+$ $2^+ 1^+ 1^- -1^+ -2^-$; $2^+ 1^+ 1^- -1^- -2^+$ $2^- 1^+ 1^- -1^+ -2^+$; $2^+ 2^- 0^+ -1^+ -2^-$ $2^+ 2^- 0^+ -1^- -2^+$; $2^+ 2^- 0^- -1^+ -2^+$ $2^+ 1^+ 0^- -1^+ -1^-$; $2^+ 1^- 0^+ -1^+ -1^-$ $2^- 1^+ 0^+ -1^+ -1^-$; $2^+ 1^+ 1^- -1^+ -1^-$ $1^+ 1^- 0^+ 0^- -1^+$
0	$2^+ 1^+ 0^+ -1^+ -2^+$		$2^+ 1^+ 0^+ -1^+ -2^-$ $2^+ 1^+ 0^+ -1^- -2^+$ $2^+ 1^+ 0^- -1^+ -2^+$ $2^+ 1^- 0^+ -1^+ -2^+$ $2^- 1^+ 0^+ -1^+ -2^+$	$2^+ 1^+ 0^+ -1^- -2^-$; $2^+ 1^+ 0^- -1^+ -2^-$ $2^+ 1^- 0^+ -1^+ -2^-$; $2^- 1^+ 0^+ -1^+ -2^-$ $2^+ 1^+ 0^- -1^- -2^+$; $2^+ 1^- 0^+ -1^- -2^+$ $2^- 1^+ 0^+ -1^- -2^+$; $2^+ 1^- 0^- -1^+ -2^+$ $2^- 1^+ 0^- -1^+ -2^+$; $2^- 1^- 0^+ -1^+ -2^+$ $2^+ 2^- -1^+ -1^+ -2^-$; $2^+ 2^- 0^+ -2^+ -2^-$ $2^+ 1^+ 1^- -2^+ -2^-$; $2^+ 0^+ 0^- -1^+ -1^-$ $1^+ 1^- 0^+ -1^+ -1^-$; $1^+ 1^- 0^+ 0^- -2^+$