

Momento Angular Orbital \vec{J}

1

- ✓ En el ejemplo 8.3 se menciona que no hay interacción spin-orbita en el caso del estado $n=1, l=0$ del átomo de hidrógeno. Esto ocurre porque $L=0$.
- ✓ Resulta entonces que el estado $n=1, l=0$, y en realidad cualquier estado del átomo de hidrógeno que tenga $l=0$, no es "afectado" por la interacción spin-órbita.
- ✓ Sin embargo, en el caso del hidrógeno y de unos pocos átomos cuyo valor de Z es muy pequeño, otros efectos relativistas (distintos a la interacción spin-orbita) son importantes para poder describir dichos átomos.
- ✓ Un tratamiento completo de los efectos relativistas sobre los niveles de energía del átomo de hidrógeno puede solo ser dado en términos de la teoría de Dirac.

✓ Sin embargo, se pueden obtener resultados (consistentes con los de la Teoría de Dirac) a partir de la Teoría de Schrödinger, añadiendo a la fórmula $E_n = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$, el valor esperado de la corrección a dicha fórmula debida a la interacción spin-orbita y el valor esperado de la corrección a la fórmula debida a la dependencia de la masa del electrón en función de su velocidad. 2

✓ El procedimiento anterior no se realiza en el libro de Eisberg - Resnick por considerar que implica un cálculo muy largo y además porque realmente la interacción spin-orbita (excepto para pocos átomos de bajo Z incluyendo el hidrógeno) es el único efecto que generalmente es importante en un átomo típico (átomo con valores medianos y grandes de Z).

✓ Cuando se considera la interacción spin-órbita lo que ocurre es que el campo magnético interno (del orden de 1 Tesla), $\vec{B} = \frac{1}{emc^2} \cdot \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \vec{L}$, actúa sobre el electrón del átomo de hidrógeno produciendo un torque $\vec{\tau} = \vec{\mu}_s \times \vec{B}$ similar al que experimenta un dipolo magnético o diminuto imán (con momento dipolar magnético $\vec{\mu}_s$) que se encuentra en el campo \vec{B} . Ya que $\vec{\mu}_s = -\frac{g_s \mu_B}{\hbar} \vec{S}$, al cambiar la orientación de $\vec{\mu}_s$ por la acción de \vec{B} , cambia la orientación de \vec{S} y, al igual que en el caso de la Precesión de Larmor (Sección 8.2), sin cambiar la magnitud de \vec{S} .

✓ Es importante notar que la orientación del electrón atómico está especificada por el momento angular orbital \vec{L} como se concluyó en el Cap. 7 del Eisberg - Resnick. Es igualmente importante darse cuenta que el campo magnético interno \vec{B} tiene también la misma dirección que \vec{L} .

✓ Además, se observa que el átomo tiene dos momentos angulares, el \vec{L} y el \vec{S} , y que por lo dicho anteriormente, el momento angular de Spin cambia su orientación (sin cambiar su magnitud) debido al torque $\frac{d\vec{S}}{dt}$.

Por lo tanto, \vec{S} constantemente varía.

✓ Debido a que la suma de los torques internos de un sistema como el átomo debe ser cero, entonces, si representamos al torque que cambia al momento angular \vec{L} como $\frac{d\vec{L}}{dt}$, podemos escribir

$$\frac{d\vec{S}}{dt} + \frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{0} \quad (1)$$

por lo que $\frac{d}{dt}(\vec{S} + \vec{L}) = \vec{0} \quad (2)$

$$\vec{S} + \vec{L} = \vec{J} = \text{constante} \quad (3)$$

y \vec{J} es el momento angular total.

✓ Al igual que lo que ocurre con \vec{S} , el torque que cambia a \vec{L} ($\frac{d\vec{L}}{dt}$) solo varía su orientación sin cambiar su magnitud.

✓ Sin embargo la conexión entre los torques mencionados aquí dada en la ecuación (1) hace que la orientación de \vec{S} dependa de la orientación de \vec{L} y viceversa.

✓ Si no existiera la interacción spin-órbita, los vectores \vec{L} y \vec{S} serían independientes.

✓ La interacción spin-órbita se dice que produce un acoplamiento entre los vectores \vec{L} y \vec{S} : Estos vectores precesan uniformemente alrededor de su suma \vec{J} , manteniendo constantes no solamente \vec{L} y \vec{S} sus respectivas magnitudes sino además las componentes de ellos ($\vec{L} \cdot \frac{\vec{J}}{|\vec{J}|}$ y $\vec{S} \cdot \frac{\vec{J}}{|\vec{J}|}$) a lo largo del vector suma \vec{J} . La figura 8-8 es una excelente representación (Eisberg - Resnick)

gráfica del cambio de orientación acoplado de los vectores \vec{L} y \vec{S} tratados en este documento.

- ✓ Es importante recalcar que \vec{L} y \vec{S} precesan uniformemente alrededor de su suma $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ y que las componentes $\vec{L} \cdot \frac{\vec{J}}{|\vec{J}|}$ y $\vec{S} \cdot \frac{\vec{J}}{|\vec{J}|}$ (de \vec{L} y \vec{S} respectivamente a lo largo de \vec{J}) son constantes.
- ✓ Si no existiera la interacción spin-orbita y si tampoco hubiese un campo magnético externo aplicado al átomo, \vec{L} y \vec{S} serían independientes y además ambos serían constantes.
- ✓ Hay que recordar que la conservación del momento angular en mecánica cuántica implicaría en este caso que la magnitud de \vec{L} (L), la

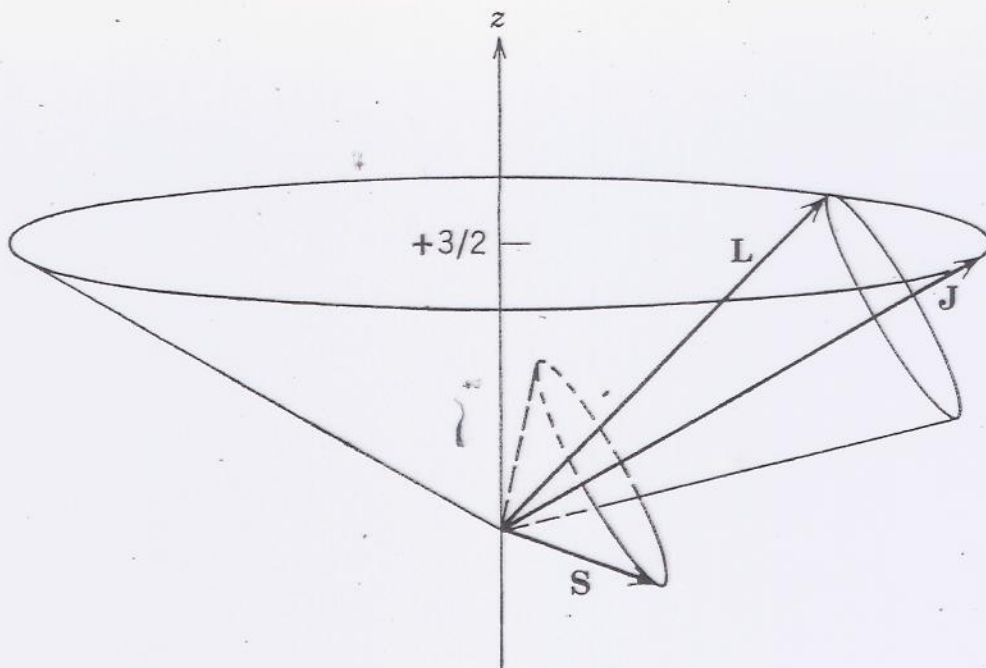


FIGURE 8-8

The angular momentum vectors L , S , and J for a typical case of a state with $l = 2, j = 5/2, m_j = 3/2$. The vectors L and S precess uniformly about the sum J , as J precesses randomly about the z axis. *(si no hay \vec{B} externo)*

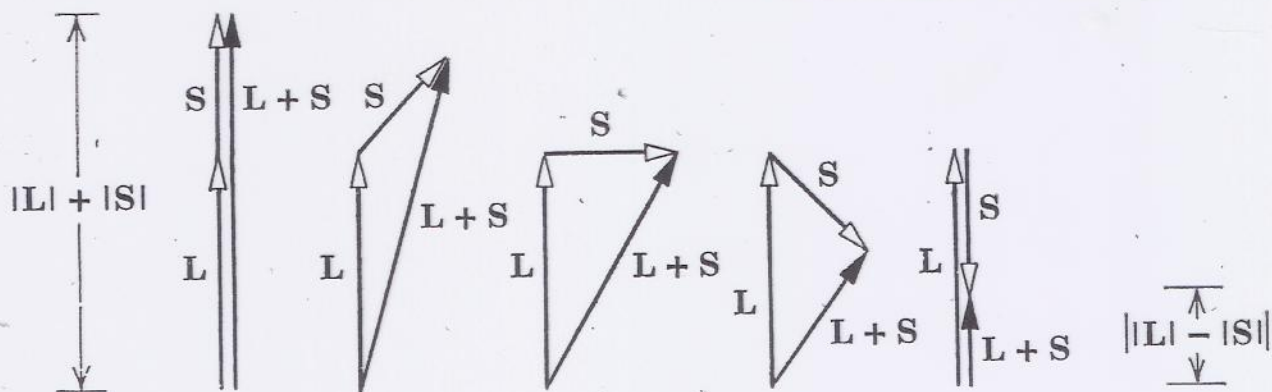


FIGURE 8-9

Vector diagrams which show that for any two vectors L and S the magnitude $|L + S|$ of their sum is always at least as large as the magnitude of the difference in their magnitudes, $||L| - |S||$. The case for which $|L| > |S|$ is shown; the student can show in his own diagram that the conclusion is unaltered if $|L| < |S|$.

componente z de \vec{L} (L_z), la magnitud de \vec{S} (S) y la magnitud de la componente z de \vec{S} (S_z) serían constantes. La otra cosa que hay que recordar es que en este caso tanto \vec{L} como \vec{S} precesarían alrededor del eje z aleatoriamente; y como dijimos anteriormente, serían independientes.

✓ Volvamos a cuando existe la interacción spin-órbita: La ecuación (2) quiere decir, como vimos, que los torques internos del sistema tienen una resultante igual a cero. Si además, no existen torques externos, entonces la conservación de \vec{J} es tal que no solamente la magnitud de \vec{J} (J) y su componente z (J_z) son constantes sino que además \vec{J} precesa alrededor de z aleatoriamente. Las componentes J_x y J_y en este caso fluctúan alrededor del valor cero cada una.

Así como en el Cap. 7, Sección 7.8 del libro de Eisberg - Resnick se demostró que la conservación del momento angular orbital \vec{L} en mecánica cuántica implica que la magnitud de \vec{L} es constante e igual a $\sqrt{l(l+1)} \hbar$ y su componente Z L_z es constante e igual a $m_l \hbar$ con $m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l,$

se puede similarmente demostrar que la conservación del momento angular total $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ implica que la magnitud de \vec{J} es constante e igual

$$a \quad J = \sqrt{j(j+1)} \hbar \quad (4)$$

y su componente Z , J_z , es constante e igual a

$$J_z = m_j \hbar \quad (5),$$

donde $m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j \quad (6)$

¿Cuáles son los valores del número cuántico j ? ⁹

✓ Veamos cuál es el mayor valor posible de j :

$$J_z = L_z + S_z \quad (7)$$

$$m_j \hbar = m_l \hbar + m_s \hbar \quad (8)$$

$$m_j = m_l + m_s \quad (9)$$

Ya que el mayor valor de m_l es l y el mayor valor de m_s es $1/2$, entonces el mayor valor de m_j es $l + 1/2$.

Por otro lado, según (6), el mayor valor de m_j es $j \Rightarrow j = l + 1/2$ es el mayor valor posible de j .

✓ Siguiendo la misma regla de que los números cuánticos asociados a cualquier momento angular difieren en valores enteros, entonces los valores de j debiesen pertenecer a la serie decreciente

$$j = l + 1/2, l - 1/2, l - 3/2, l - 5/2, \dots \quad (10)$$

Usando la inecuación vectorial

$$|\vec{L} + \vec{S}| \geq \left| |\vec{L}| - |\vec{S}| \right| \quad (11)$$

y el hecho de que

$$|\vec{L} + \vec{S}| = |\vec{J}| = \sqrt{j(j+1)} \hbar \quad (12),$$

$$|\vec{L}| = \sqrt{l(l+1)} \hbar \quad (13),$$

$$|\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)} \hbar \quad (14),$$

con $s = 1/2$ en este caso (Ver problema 8.8 resuelto en el solucionario) se concluye que los posibles valores de j son

$$\begin{cases} j = l + 1/2, l - 1/2 & \text{para } l \neq 0 & (15) \\ j = 1/2 & \text{para } l = 0 & (16) \end{cases}$$

Es importante recordar que las ecuaciones (15) y (16) dan los valores del número cuántico j en función de los números cuánticos l y s (con $s = 1/2$). Esta relación entre números cuánticos es

una consecuencia de la interacción
spín-órbita que acopla \vec{L} y \vec{S} .

11

El resultado es que se produce un vector
momento angular total \vec{J} que tiene
una magnitud igual a $\sqrt{j(j+1)}\hbar$, donde
 j tiene los valores $j = l + 1/2, l - 1/2$; además,
la componente z de \vec{J} (J_z) es igual a
 $J_z = m_j \hbar$, donde $m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j$.

Retomemos la expresión de la energía U_{mag}
asociada a la interacción spín-órbita

$$U_{\text{mag}} = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dU(r)}{dr} \vec{S} \cdot \vec{L} \quad (17)$$

$$\text{Como } \vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \Rightarrow J^2 = \vec{J} \cdot \vec{J} = (\vec{L} + \vec{S}) \cdot (\vec{L} + \vec{S})$$

$$\Rightarrow J^2 = \vec{L} \cdot \vec{L} + \vec{S} \cdot \vec{S} + 2 \vec{S} \cdot \vec{L} = L^2 + S^2 + 2 \vec{S} \cdot \vec{L}$$

$$\Rightarrow \vec{S} \cdot \vec{L} = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2) \quad (18)$$

$$(17) \text{ y } (18) \Rightarrow U_{\text{mag}} = \frac{1}{4m^2c^2} (J^2 - L^2 - S^2) \frac{1}{r} \frac{dU(r)}{dr} \quad (19)$$

✓ Para un estado cuántico cuyos números cuánticos son l , s y j

$$J^2 = j(j+1)\hbar^2 ; \quad L^2 = l(l+1)\hbar^2 ; \quad S^2 = s(s+1)\hbar^2 \quad (20)$$

$$\Rightarrow U_{\text{mag}} = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \frac{1}{r} \frac{dU(r)}{dr} \quad (21)$$

La energía spin-órbita asociada a ese estado cuántico es el valor esperado de la ecuación (21)

$$\overline{U_{\text{mag}}} = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \overline{\frac{1}{r} \frac{dU(r)}{dr}} \quad (22)$$

donde

$$\overline{\frac{1}{r} \frac{dU(r)}{dr}} = \int_0^{\infty} dr \, r^2 R_{nl}^*(r) R_{nl}(r) \frac{1}{r} \left(\frac{dU(r)}{dr} \right) \quad (23)$$

✓ Para obtener un resultado numérico de la ecuación (22) hay que usar (en la ecuación (23)) la energía potencial Coulombiana $U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$, calcular el valor esperado de $\frac{1}{r} \frac{dU(r)}{dr}$ usando la autofunción

$R_{nl}(r)$ del átomo de hidrógeno discutida en el capítulo 7 del libro de Eisberg-Resnick, y finalmente sustituir el resultado de la ecuación (23) en la ecuación (22) para obtener el valor esperado de la energía asociada a la interacción spin-orbita para el estado particular definido por los números cuánticos n, l y j .

Como se sabe, el número cuántico s en el caso del átomo de hidrógeno es igual a $1/2$.

- ✓ Como se mencionó en el ejemplo 8.3, el corrimiento típico de la energía de un estado del átomo de hidrógeno debido a la interacción spin-orbita es de 1 en 10^4 .
- ✓ Se puede probar que el efecto de la velocidad del electrón en su masa sobre la energía de los estados del átomo de hidrógeno tiene aproximadamente la misma magnitud que el efecto causado por la interacción spin-orbita (1 en 10^4).

- ✓ Para ser estos efectos relativamente pequeños, se dice que ellos producen la "estructura fina" del átomo de hidrógeno.
- ✓ Ambos efectos son relativistas.
- ✓ El tratamiento cuántico - relativista del átomo de hidrógeno basado en la teoría de Dirac predice que las energías del hidrógeno vienen dadas por

$$E_{nj} = - \frac{\mu e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right] \quad (24),$$

donde μ es la masa reducida y α es la constante de estructura fina, $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137}$ (25).

- ✓ La Fig. 8.11 (Eisberg - Resnick) muestra los niveles de energía del átomo de hidrógeno de acuerdo a las predicciones de Bohr, Sommerfeld y Dirac. Es sumamente instructivo visualizar la "estructura

finas" representada por las líneas (niveles) obtenidas a partir de la Teoría de Dirac.

- ✓ Es importante decir en este punto del curso que la igualdad mostrada en la figura entre los resultados de Sommerfeld y los de Dirac es una coincidencia que se debe a un doble error cometido por Sommerfeld: el error de no considerar o incluir la interacción spin-orbita en su tratamiento se canceló con el error de utilizar la mecánica clásica para evaluar el corrimiento promedio de la energía debido a la dependencia relativista de la masa en la velocidad del electrón en el átomo de hidrógeno.
- ✓ La fórmula de Dirac (ecuación (24)) depende de los números cuánticos n y j . Como no depende del número cuántico l predice una degeneración asociada a ese número cuántico. Ya que en general hay 2 valores de l que corresponden al mismo valor de j , la teoría de Dirac predice que la mayoría de los

niveles que contiene la Fig. 8-11 son realmente dobles. Además de la degeneración en l , la fórmula de Dirac predice la degeneración asociada a la orientación espacial cuando no hay campos magnéticos externos, es decir, la degeneración en el número cuántico m_j .

- ✓ Con respecto a los niveles dobles, en la Fig. 8-11 se observa que la Teoría de Dirac predice un nivel doble con números cuánticos: $n=2$ $j=1/2$ $l=0$ y $n=2$ $j=1/2$ $l=1$. En 1947, Lamb y Retherford pudieron "separar" estos dos estados usando ^{una} frecuencia en el rango de las microondas. La leyenda de la Fig. 8-12 explica el montaje experimental y resultado obtenido por Lamb y Retherford. La diferencia obtenida entre los niveles mencionados aquí es $4.4 \times 10^{-6} \text{ eV}$.

✓ Existe lo que se denomina "estructura hiperfina" que es un "splitting" adicional mucho más "fino" que el splitting de niveles de energía ocasionado por la interacción spin-orbita.

La estructura hiperfina de los niveles de energía del átomo de hidrógeno se debe a la interacción entre el campo magnético interno producido por el movimiento del electrón y el momento dipolar magnético del núcleo del átomo.

Ya que el momento dipolar magnético del núcleo es aproximadamente mil veces menor que el momento dipolar magnético del electrón, entonces el "splitting" de energía hiperfino es mil veces menor (aprox.) que el "splitting" fino debido a la interacción spin-orbita que como hemos visto es del orden de 10^{-4} eV.