



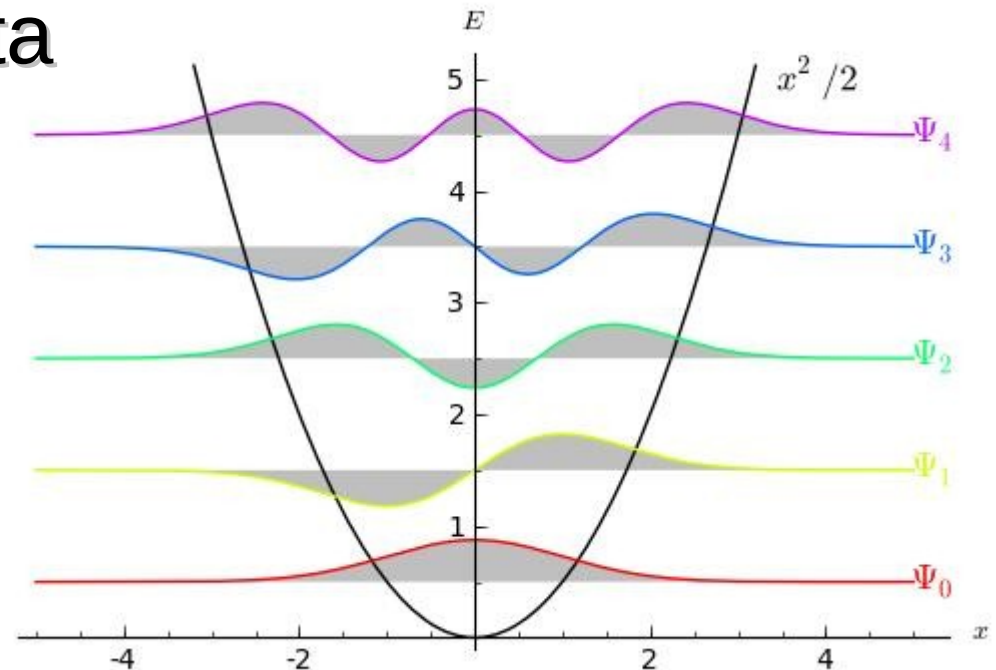
Universidade Federal do ABC

Mecânica Quântica

Aula 15: Momento Angular Total, Interação Spin-Órbita e os Níveis de Energia do Hidrogênio

Pieter Westera

pieter.westera@ufabc.edu.br



<http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/MQ.html>

O Momento Angular Total

Para um elétron num átomo pode-se definir o **momento angular total \mathbf{J}** , **composto** pelo **momento orbital** e o **spin**, usando regras bastante similares às regras para o módulo e a componente z na adição de vetores:

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

$$J = \sqrt{j(j+1)} \cdot \hbar, \text{ onde } j = |l-s|, \dots, l+s$$

$$J_z = L_z + S_z = m_j \cdot \hbar, \text{ onde } m_j = m_l + m_s = -j, \dots, j$$

No caso do **elétron** num **átomo** ($s = 1/2$):

$$j = |l-1/2| \text{ ou } l+1/2, \quad m_j = m_l + m_s = m_l \pm 1/2$$

Regras de seleção: $\Delta l = \pm 1,$
 $\Delta m_l = 0, \pm 1,$
 $\Delta j = 0, \pm 1$

Acoplamento Spin-Órbita

Voltando à **energia** associada ao **alinhamento** do **spin** com um **campo externo \mathbf{B}** :

$$\Delta E = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B} = -m_s \cdot g_s \mu_B B$$

No **referencial** do **elétron** num **átomo**, o **núcleo** está “girando” em torno dele, com **momento angular oposto** a \mathbf{L} (o momento do elétron no referencial do núcleo).

Este **movimento aparente** do **núcleo** causa um **campo magnético** (no referencial do elétron), e a **energia** devido ao **alinhamento** do **spin** do **elétron** com este **campo** é:

$$\Delta E = \frac{g_s \mu_B}{2em_e c^2 \hbar} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \vec{S} \cdot \vec{L} = \frac{1}{2m_e^2 c^2 \hbar} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \vec{S} \cdot \vec{L}$$

onde $V(r)$ é o potencial elétrico que “sente” o elétron devido ao resto do átomo, no caso do átomo de hidrogênio, $V(r) = -e^2/4\pi\epsilon_0 r$.

Acoplamento Spin-Órbita

Espresso em termos de l , s e j isto dá

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{4m_e^2 c^2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr}$$

com valor esperado

$$\langle \Delta E \rangle = \frac{\hbar^2}{4m_e^2 c^2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \right\rangle$$

Assim há um pequeno **desdobramento** dos **níveis de energia** dos **átomos**, difíceis de calcular e necessitando de um **tratamento relativístico**, mas o **Dirac** conseguiu.

Pro **átomo de hidrogênio**, a energia em função de n e j vira:

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

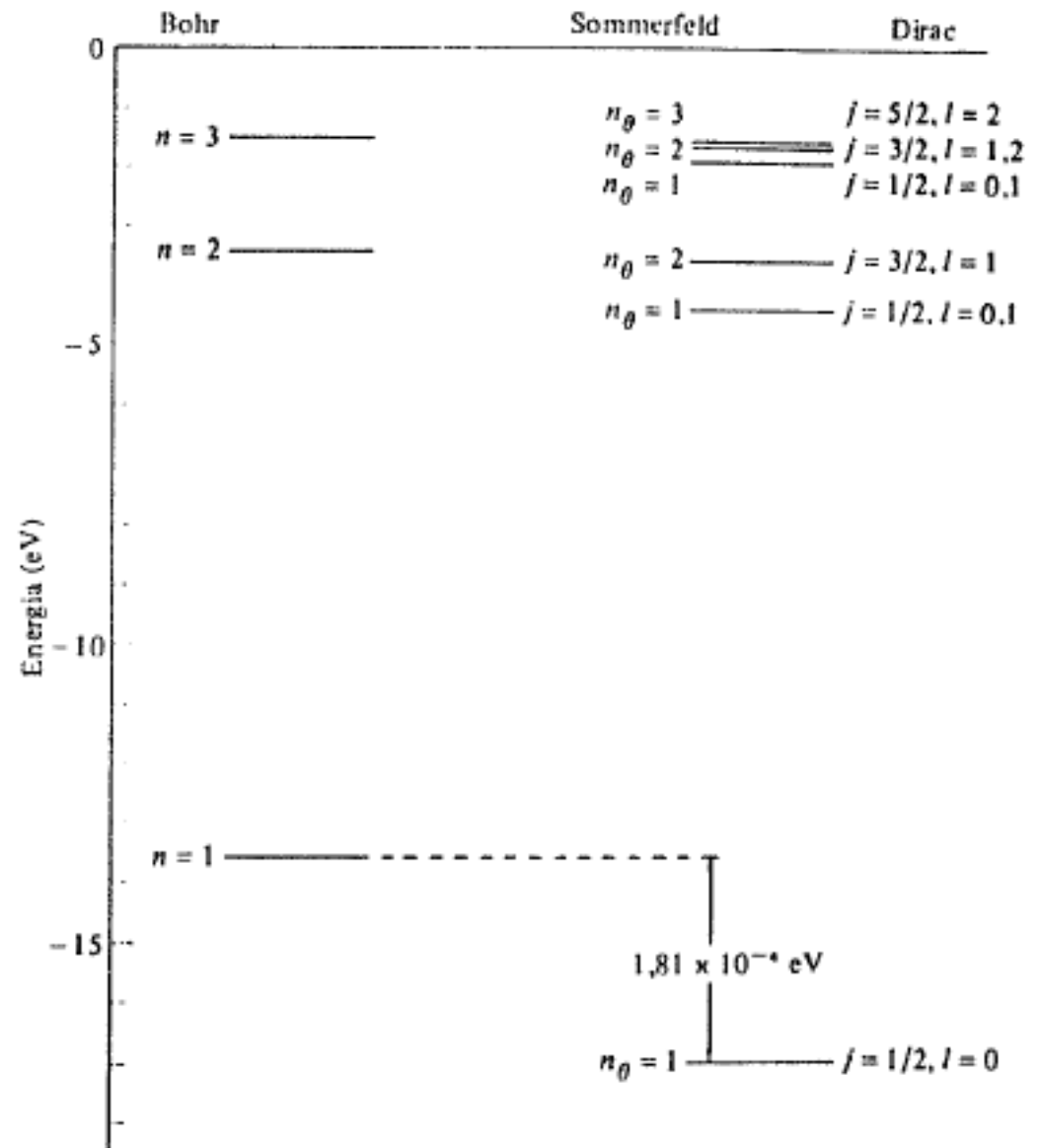
Praticamente os valores do modelo de Sommerfeld!

(Mas com motivo e números quânticos totalmente diferentes)

Acoplamento Spin-Órbita

Este fenômeno é chamado **efeito** - ou **acoplamento spin-órbita**, e o **desdobramento** dos **níveis de energia** dos átomos, de **estrutura fina**. Ele é da ordem de 10^{-5} eV (H) a 10^{-3} eV (Na).

O **desdobramento** de **linhas espectrais** envolvendo estes níveis é **detectável** através de um espectroscópio de boa resolução.



Estrutura Hiperfina

Já que o **núcleo** de um átomo também tem **spin**, ele também tem um **momento magnético**. Se os **spins** do **núcleo** e do(s) **elétron**(s) são **alinhados**, os dois momentos são **anti-alinhados**, e a **energia** do átomo é ligeiramente **mais alta**.

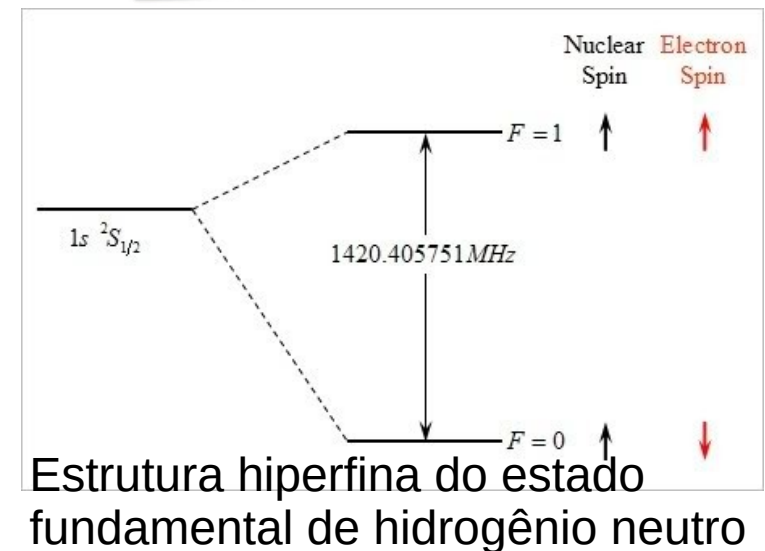
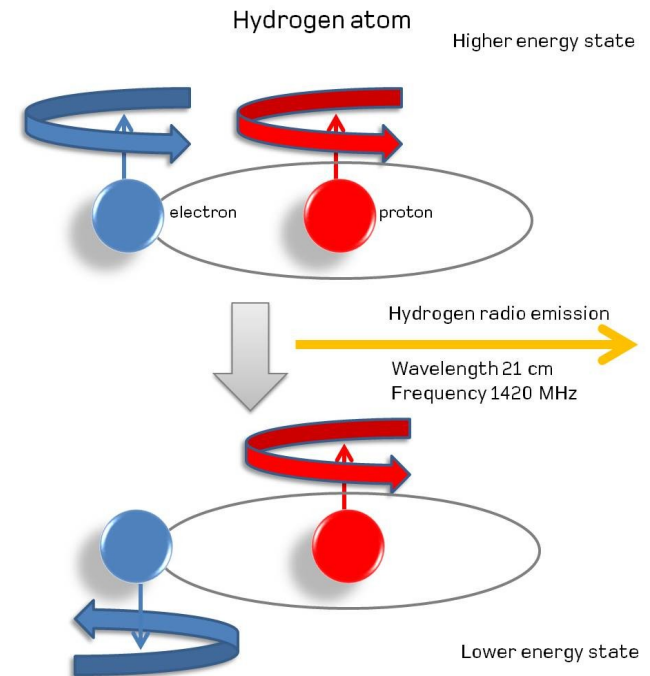
Este desdobramento de níveis de energia se chama **estrutura hiperfina**.

No caso de hidrogênio atômico, quando os spins se **desalinham**, o átomo **emite** um **fóton** de

$$h\nu = 5.9 \cdot 10^{-6} \text{ eV} = 9.45 \cdot 10^{-25} \text{ J},$$

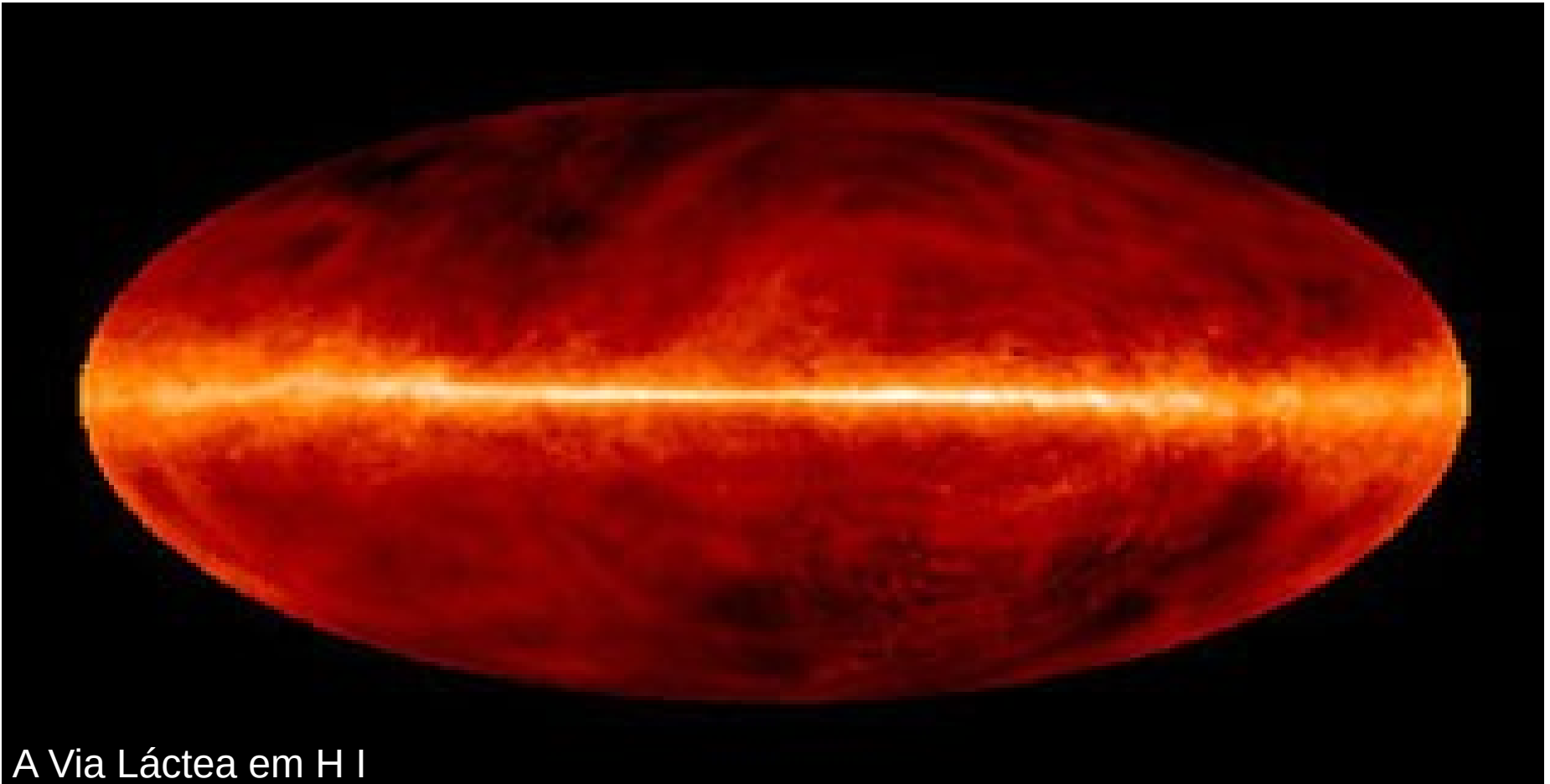
ou $\nu = 1420 \text{ MHz}$, ou $\lambda = 21 \text{ cm}$.

gerando uma **linha espectral** que astrônomos chamam de linha de 21 cm.



Estrutura Hiperfina

A linha de 21 cm é usada na astronomia para detectar e mapear **hidrogênio atômico** no meio interestelar.



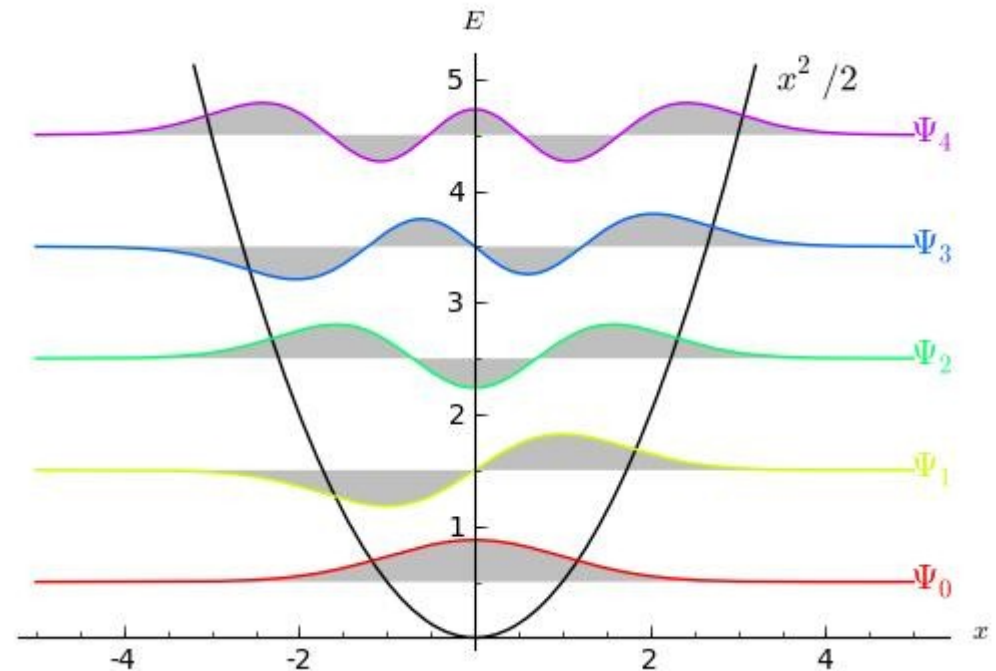
A Via Láctea em H I

Física Quântica

FIM PARA HOJE



Universidade Federal do ABC



<http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/MQ.html>