Átomo de Hidrógeno.

Estructura fina:

$$W_{mv} = -\frac{P^4}{8c^2} \qquad W_D = \frac{4\pi\delta(\bar{r})}{8c^2} \qquad W_{so} = \frac{g}{4c^2r^3}\,\bar{L}\cdot\bar{S}$$

Queremos ver cómo estos correcciones modifican el nivel $n=2$.

W_{mv}: $\quad W_{mv} = \frac{1}{2}(H_0 - V)^2 = \frac{1}{2}(H_0^2 - H_0V - VH_0 + V^2)$

Sabemos de teoría de perturbaciones que para ver las correcciones a la energía debemos calcular los elementos $\langle n,l,m_l,m_s| W_{mv} |n,l,m_l,m_s\rangle$.

$$\langle n,l,m_l,m_s| H_0^2 |n,l,m_l,m_s\rangle = \epsilon_n^2$$

$$\langle n,l,m_l,m_s| H_0V |n,l,m_l,m_s\rangle = \epsilon_n \langle n,l,m_l,m_s| V |n,l,m_l,m_s\rangle$$

$$\langle n,l,m_l,m_s| VH_0 |n,l,m_l,m_s\rangle = \epsilon_n \langle n,l,m_l,m_s| V |n,l,m_l,m_s\rangle$$

$$\Rightarrow \langle W_{mv}\rangle = \frac{1}{2}\left(\epsilon_n^2 - 2\epsilon_n\langle 1/r\rangle + \langle 1/r^2\rangle\right)$$

$$\langle n,l,m_l,m_s| 1/r |n,l,m_l,m_s\rangle = -\frac{1}{n^2a_0} = 2\epsilon_n \rightarrow \text{Teorema del Virial}$$

$$\langle n,l,m_l,m_s|1/r^2|n,l,m_l,m_s\rangle = \frac{1}{n^3 a_0^2 (l+\frac{1}{2})} = \epsilon_n^2 \frac{4n}{l+1/2}$$

Estos integrales están en el Cohen-Tannoudji

Juntando todo, la corrección queda

$$\langle W_{mv}\rangle_{n,l} = \frac{\epsilon_n^2}{2c^2}\left(3-\frac{4n}{l+1/2}\right) = \frac{\epsilon_0^2}{8c^2n^4}\left(3-\frac{4n}{l+1/2}\right)$$

$\epsilon_0 = \alpha^2 c^2$

$$\boxed{\langle W_{mv}\rangle_{n,l} = \frac{\alpha^4 c^2}{8n^4}\left(3-\frac{4n}{l+1/2}\right)}$$

Vemos que esta corrección depende únicamente de n y l, no de las proyecciones.

W_D:

$$W_D = \frac{4\pi\delta(\bar{r})}{8c^2}$$

Nuevamente queremos $\langle n,l,m_l,m_s|W_D|n,l,m_l,m_s\rangle$

$$\langle W_D\rangle = \int d\bar{r}\, \psi^*_{nlm}(\bar{r}) \frac{4\pi\delta(\bar{r})}{8c^2} \psi_{nlm}(\bar{r})$$

$$= \frac{\pi}{2c^2}|\psi_{nlm}(\bar{0})|^2.$$

Los únicos estados que tienen función de onda no nula en el origen son los "s" ($l=0$)

$$\psi_{n,0,0}(\bar{0}) = \frac{2}{\sqrt{4\pi}}\left(\frac{1}{na_0}\right)^{3/2}$$

$\Rightarrow \langle W_D \rangle = \frac{1}{2c^2}\left(\frac{1}{na_0}\right)^3$ para $l=0$. $\langle W_D \rangle = 0$ para $l \neq 0$.

Usando que $\epsilon_0 = \frac{1}{a_0} \Rightarrow \left(\frac{1}{a_0}\right)^3 = \epsilon_0^3$

$$\langle W_D \rangle = \frac{1}{2c^2n^3}\epsilon_0^3 = \frac{1}{2c^2n^3}\cdot \alpha^6 c^6 = \frac{\alpha^6 c^4}{2n^3} = \frac{\alpha^4 c^2}{2n^3}$$

En unidades atómicas $\alpha = \frac{1}{c}$

$$\Rightarrow \boxed{\langle W_D \rangle = \frac{\alpha^4 c^2}{2n^3} \quad \text{Si } l=0}$$

W_{so}:

$$W_{so} = \frac{g}{4c^2r^3}\bar{L}\cdot\bar{S}$$

$$\bar{J} = \bar{L} + \bar{S} \qquad J^2 = L^2 + S^2 + 2\bar{L}\cdot\bar{S}$$

$$\bar{L}\cdot\bar{S} = \frac{1}{2}\left(J^2 - L^2 - S^2\right)$$

Recordamos que al considerar el acoplamiento spin-órbita m_l y m_s dejan de ser buenos números cuánticos y que debemos usar m_j.

Calculemos entonces

$$\langle n l j m_j | W_{so} | n l j m_j \rangle = \frac{g}{8c^2} \langle n l j m_j | \frac{1}{r^3} (J^2 - L^2 - S^2) | n l j m_j \rangle$$

$$= \frac{g}{8c^2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \langle n l j m_j | \frac{1}{r^3} | n l j m_j \rangle$$

Usamos que: $\langle n l j m_j | r^{-3} | n l j m_j \rangle = \dfrac{1}{n^3 a_0^3 \, l(l+\frac{1}{2})(l+1)}$

$$\boxed{\langle W_{so} \rangle_{nlj} = c^2 \alpha^4 \frac{g}{8n^3} \frac{[j(j+1) - l(l+1) - 3/4]}{l(l+1/2)(l+1)}}$$

Tenemos entonces las tres correcciones:

$$\boxed{\langle W_{mv} \rangle_{n,l} = \frac{\alpha^4 c^2}{8n^4} \left(3 - \frac{4n}{l+1/2} \right)}$$

$$\boxed{\langle W_D \rangle = \frac{\alpha^4 c^2}{2n^3} \qquad \text{si } l = 0}$$

$$\boxed{\langle W_{so} \rangle_{nlj} = c^2 \alpha^4 \frac{g}{8n^3} \frac{[j(j+1) - l(l+1) - 3/4]}{l(l+1/2)(l+1)}}$$

Calculemos ahora cómo se modifican los niveles con $n=2$.

$$\langle W_{mv}\rangle_{2S} = \frac{\alpha^4 c^2}{128}\left(3 - \frac{8}{1/2}\right) = -\frac{13}{128}\alpha^4 c^2$$

$$\langle W_{mv}\rangle_{2P} = \frac{\alpha^4 c^2}{128}\left(3 - \frac{8}{3/2}\right) = -\frac{7/3}{128}\alpha^4 c^2$$

$$\langle W_D\rangle_{2S} = \frac{\alpha^4 c^2}{16} = \frac{8}{128}\alpha^4 c^2 \qquad \langle W_D\rangle_{2P} = 0$$

Para el acoplamiento spin órbita debemos considerar también el valor de j.

$2S \Rightarrow l=0,\ S=1/2 \Rightarrow |l-s| \leq j \leq l+s \rightarrow j = 1/2$

$2P \Rightarrow l=1,\ S=1/2 \Rightarrow \frac{1}{2} \leq j \leq 3/2 \rightarrow j=\frac{1}{2},\ j=3/2$

Los estados que tenemos son entonces: $2S_{1/2}$, $2P_{1/2}$ y $2P_{3/2}$

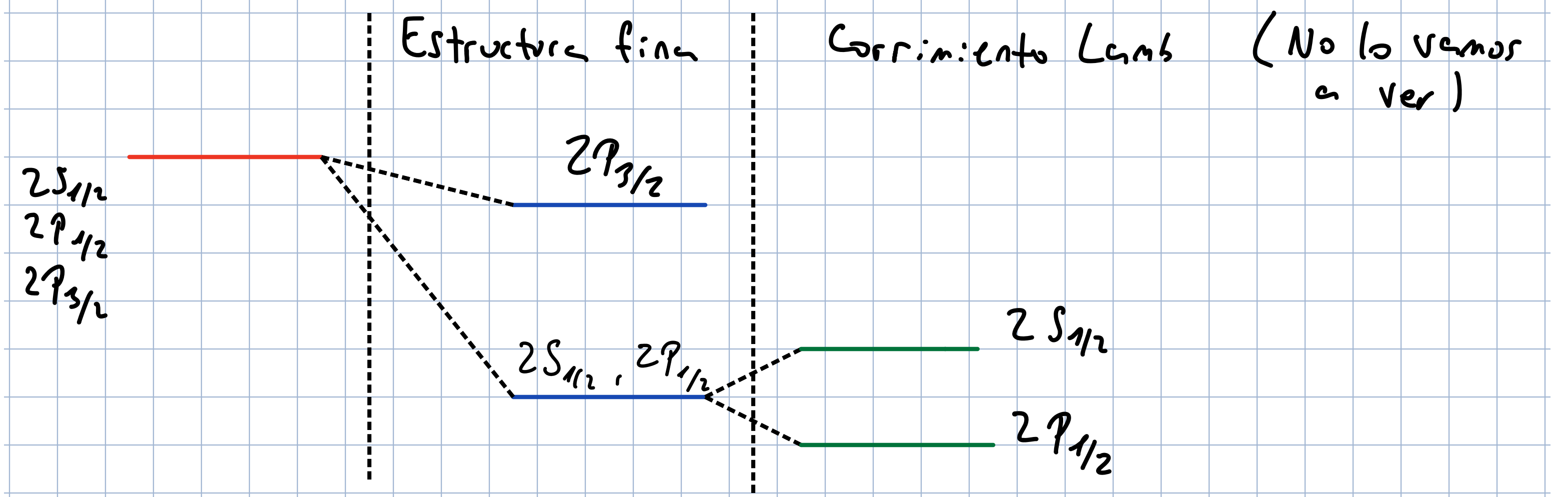
$$\langle W_{SO}\rangle_{2S_{1/2}} = 0 \qquad \langle W_{SO}\rangle_{2P_{1/2}} = -\frac{49}{3}\frac{1}{128}\alpha^4 c^2$$

$$\langle W_{SO}\rangle_{2P_{3/2}} = \frac{29}{3}\frac{1}{128}c^2\alpha^4$$

Juntando todas las correcciones tenemos: $(g=2)$

$$\langle W_f\rangle_{2S_{1/2}} = -\frac{5}{128}\alpha^4 c^2;\ \langle W_f\rangle_{2P_{1/2}} = -\frac{5}{128}\alpha^4 c^2;\ \langle W_f\rangle_{2P_{3/2}} = -\frac{1}{128}\alpha^4 c^2$$

Vemos entonces que las correcciones de estructura fina rompen parcialmente la degeneración.



Estructura hiperfina.

Para la estructura hiperfina consideramos también la interacción entre el momento magnético del electrón con el del protón.

$$H_{HF} = A\,\bar{I}\cdot\bar{J}$$ donde $\bar{I}$ es el spin del núcleo.

Este término es muy parecido al de spin órbita. Para resolverlo vamos a definir el momento angular total

$$\boxed{\bar{F} = \bar{I} + \bar{J}}$$

Usando el mismo truco que para spin órbita, podemos escribir el hamiltoniano de estructura hiperfina como

$$H_{HF} = \frac{A}{2}\left(F^2 - J^2 - I^2\right) = \frac{A}{2}\left(F^2 - J^2 - 3/4\right)$$

Porque el protón tiene spin 1/2.

Como $\bar{F} = \bar{I} + \bar{J}$, tenemos que $|j - \frac{1}{2}| \leq F \leq j + 1/2$

$2S_{1/2}$: $j = 1/2 \Rightarrow F = 0, 1$ $\quad \langle H \rangle_{F=0} = -\frac{3}{4} A \quad \langle H \rangle_{F=1} = \frac{A}{4}$

$2P_{1/2} \Rightarrow$ da lo mismo que el $2S_{1/2}$

$2P_{3/2}$: $j = \frac{3}{2} \Rightarrow F = 1, 2 \quad \langle H \rangle_{F=1} = -\frac{5}{2} A \quad \langle H \rangle_{F=2} = \frac{3}{2} A$