

Estructura hiperfina

Hasta ahora vimos cómo a partir de la interacción electrostática entre el electrón y el núcleo podíamos determinar la estructura de niveles para el átomo de hidrógeno. Los efectos relativistas, incluidos en la estructura fina, nos permitieron entender correcciones precisas a estos niveles. En este capítulo mostraremos una descripción que va más allá de la estructura fina, planteando que el núcleo no es sólo una carga puntual, sino que tiene una determinada estructura. El término estructura hiperfina entonces se refiere a la estructura de niveles que adquiere el átomo debido a las propiedades del núcleo. Existen diferentes características que podemos incluir en el análisis, tales como que el núcleo tenga momento dipolar magnético, momento eléctrico cuadrupolar, o efectos debido a que a su tamaño finito. El más importante de ellos, y el que es relevante para el átomo de hidrógeno, corresponde considerar que el núcleo tiene momento dipolar magnético debido al espín del protón, de manera que incluiremos la interacción de este campo magnético nuclear con el electrón. Estas correcciones en los niveles tienen orden $m_e c^2 \frac{m_e}{m_p} \alpha^4$ y además son responsables del desdoblamiento del estado fundamental del átomo de hidrógeno. La estructura hiperfina es fundamental en diversas áreas que van desde la radioastronomía, el estudio de la estructura nuclear de átomos, el desarrollo de relojes atómicos y la computación cuántica que utiliza por ejemplo estados hiperfinos de iones para almacenar qubits.

19.1. Estructura hiperfina del átomo de Hidrógeno

Hasta consideramos al núcleo como un objeto puntual con masa y carga. Pero como sabemos el núcleo del átomo de hidrógeno contiene un protón, que es una partícula de carga positiva y espín $1/2$. De esta manera, el núcleo posee un momento magnético nuclear $\vec{\mu}_p$ y por lo tanto generará un campo magnético. Si llamamos

\vec{I} al operador que representa dicho espín el momento magnético del protón será:

$$\vec{\mu}_p = \frac{g_p e}{2m_p c} \vec{I},$$

y su factor giromagnético medido es de $g_p \simeq 5,59$, mientras que el del electrón es $g_e \simeq 2$. Además, este momento magnético es mucho menor al del electrón por las relaciones entre masas.

En lo que sigue mostraremos cómo obtener el Hamiltoniano que utilizaremos para describir la interacción del electrón con el campo magnético generado por el núcleo. Dado que las correcciones hiperfinas son muy pequeñas, nos restringiremos a un análisis no relativista.

Interacción del electrón con el campo electromagnético generado por el núcleo

Como vimos, el electrón interactúa mediante el potencial Coulombiano con el núcleo, y esta es la mayor contribución al Hamiltoniano. Pero al considerar que el núcleo tiene además momento dipolar magnético, este también generará un campo magnético que afectará, en menor medida, a la energía. El campo electromagnético con el cual interactúa el electrón tendrá derivará entonces de un potencial escalar $V_p(\vec{r}) = Ze/r$ (que para nuestro caso $Z = 1$) y un potencial vector $\vec{A}_p(\vec{r})$. De esta manera, el Hamiltoniano del electrón en este campo puede escribirse como:

$$H = \frac{1}{2m_e} \left[\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}_p(\vec{r}) \right]^2 - eV_p(\vec{r}) - \vec{\mu}_e \cdot \vec{B}_p,$$

donde el último término representa la interacción de su momento magnético con el campo magnético generado por el núcleo. El campo fuera del núcleo lo podremos obtener a partir de considerar que $\vec{B}_p = \nabla \times \vec{A}_p(\vec{r})$ y el potencial corresponde a un momento dipolar $\vec{\mu}_p$ situado en el núcleo $\vec{A}_p(\vec{r}) = \vec{\mu}_p \times \vec{r}/r^3$. Dentro del núcleo asumiremos que el campo es uniforme y su tamaño infinitesimal, por lo tanto el campo magnético resulta ser:

$$\vec{B}_p(\vec{r}) = \frac{[3(\vec{\mu}_p \cdot \hat{r})\hat{r} - \vec{\mu}_p]}{r^3} + \frac{8\pi}{3} \vec{\mu}_p \delta(\vec{r}).$$

podemos ver entonces que el primer término corresponde al campo fuera del núcleo, mientras que el primer término contiene la contribución del campo dentro del núcleo Fig. [19.1](#).

De esta manera, el Hamiltoniano se encuentra escrito en término de diferentes operadores, y ahora trabajaremos sobre cada uno de ellos para derivar a una expresión más sencilla. Comencemos por expandir el primer término a orden lineal en $\vec{A}_p(\vec{r})$ teniendo en cuenta que son operadores que no conmutan (despreciando el orden $\vec{A}_p(\vec{r})^2$). Por lo tanto, $\left[\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}_p(\vec{r}) \right]^2 \simeq p^2 + \frac{e}{c} \{ \vec{p}, \vec{A}_p(\vec{r}) \}$. Luego, reemplazando la expresión del potencial vector en cada uno de los términos de la expresión anterior llegamos a que $\frac{1}{r^3} (\vec{\mu}_p \times \vec{r}) \cdot \vec{p} = \frac{1}{r^3} \vec{\mu}_p \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) = \frac{1}{r^3} \vec{\mu}_p \cdot \vec{L} = \vec{\mu}_p \cdot \vec{L}/r^3$, y en forma

similar podemos obtener la misma expresión para el otro término. Finalmente, el Hamiltoniano que consideraremos resulta ser:

$$H \simeq \frac{\vec{p}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{r} + \frac{e}{m_e c} \frac{\vec{L} \cdot \vec{\mu}_p}{r^3} - \frac{[3(\vec{\mu}_p \cdot \hat{r})(\vec{\mu}_e \cdot \hat{r}) - \vec{\mu}_e \cdot \vec{\mu}_p]}{r^3} - \frac{8\pi}{3} \vec{\mu}_e \cdot \vec{\mu}_p \delta(\vec{r}),$$

donde los tres últimos términos dan cuenta de la estructura hiperfina. Podemos notar además que el tercer término podemos pensarlo como la interacción entre el momento magnético $\vec{\mu}_p$ con un campo $\vec{B}_L = -(e/m_e c r^3)\vec{L}$ debido al momento angular del electrón.

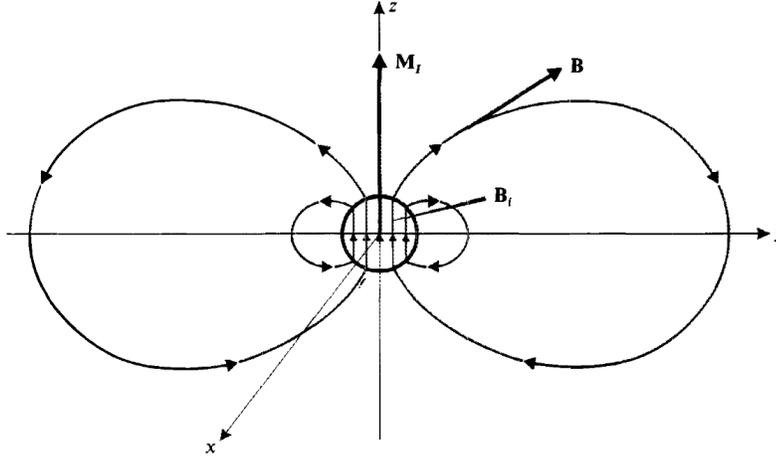


Figura 19.1: Campo magnético generado por el protón. Fuera del núcleo es el campo de un dipolo, pero dentro depende de la estructura del mismo. En primera aproximación suponemos que es uniforme. El término de contacto da cuenta de la interacción entre el momento magnético del electrón y el campo dentro del núcleo.

Hamiltoniano de la estructura hiperfina

Reemplazando $\vec{\mu}_e = -\frac{g_e e}{2m_e c} \vec{S}$ y la expresión para el momento magnético del protón, el Hamiltoniano de la estructura hiperfina puede expresarse como:

$$H_{EH} = \frac{g_p e^2}{2m_p m_e c^2} \frac{\vec{I} \cdot \vec{L}}{r^3} + \frac{g_e g_p e^2}{4m_p m_e c^2} \frac{[3(\vec{I} \cdot \hat{r})(\vec{S} \cdot \hat{r}) - \vec{S} \cdot \vec{I}]}{r^3} + \frac{2\pi g_e g_p e^2}{3m_p m_e c^2} \delta(\vec{r}) \vec{S} \cdot \vec{I} \quad (19.1)$$

De esta ecuación podemos distinguir tres términos. El primero correspondiente a la interacción *espín del protón-órbita* entre el electrón en movimiento con el campo magnético generado por el protón. El segundo término corresponde a la interacción entre los *momentos dipolares*. Y el tercer término se conoce como *término de contacto* porque corresponde a la interacción con el campo dentro del núcleo. El Hamiltoniano en cuestión entonces actúa sobre un espacio de Hilbert:

$$\mathcal{H}_{\text{atomo}} = \mathcal{H}_{\text{electron}} \otimes \mathcal{H}_{\text{nucleo}}$$

el espacio $\mathcal{H}_{\text{electron}}$ contiene parte espacial y de espín del electrón, mientras que H_{nucleo} corresponde a la parte de espín del núcleo. En principio podemos definir una base “desacoplada” para describir al sistema, donde $|n, l, j, m_j\rangle \otimes |m_I\rangle \equiv |n, l, j, m_j, m_I\rangle$, aunque veremos que esta no será conveniente para describir la estructura hiperfina.

Momento angular total atómico

El Hamiltoniano que definimos anteriormente involucra interacciones entre tres momentos angulares: el de cada uno de los espines del protón y el electrón, y uno correspondiente al momento angular orbital del electrón. Será fundamental, entonces, definir el *momento angular total atómico* que se obtiene como la suma de los momentos angulares involucrados:

$$\vec{F} = \vec{I} + \vec{S} + \vec{L}.$$

Como veremos al estudiar perturbaciones debidas al Hamiltoniano de la estructura hiperfina, su acción efectiva puede entenderse mediante el acoplamiento del momento angular de espín del núcleo al momento angular total electrónico $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. De manera que resultará útil pensar al momento angular atómico total como la suma del momento total electrónico y el momento angular de espín nuclear:

$$\vec{F} = \vec{I} + \vec{J}.$$

Es fácil ver entonces que este operador cumple con las relaciones de conmutación usuales de momento angular. Además podemos definir los operadores \vec{F}^2 y F_z tales que

$$\begin{aligned}\vec{F}^2|F, m_F\rangle &= F(F+1)\hbar^2|F, m_F\rangle \\ F_z|F, m_F\rangle &= m_F\hbar|F, m_F\rangle\end{aligned}$$

donde $|I-j| \leq F \leq |I+j|$ (en este caso $I = 1/2$). En ausencia de interacciones externas, el momento angular atómico se conserva, de manera que F será un buen número cuántico.

19.1.1. Estructura hiperfina para niveles s ($l = 0$)

Una vez definido el Hamiltoniano y los operadores relevantes, comenzaremos a calcular las correcciones para los estados de momento angular $l = 0$, en particular esto incluye el estado fundamental. Como vimos en la estructura fina, para subespacios determinados por (n, j, l) existe degeneración. Utilizaremos entonces teoría de perturbaciones a primer orden para evaluar estas correcciones. En este sentido deberemos diagonalizar la matriz H_{EH} restringida a los subespacios de energía degenerados. Al incluir el espín del electrón, la degeneración que ya existía en estos niveles se duplica. Para evaluar estos elementos de matriz entonces podemos considerar que las funciones de onda para $l = 0$ y $j = 1/2$ pueden ser escritas en forma

general como una componente espacial y otra de espín $|n, l = 0\rangle \otimes |m_s, m_l\rangle$. Es decir, evaluaremos términos de la forma $\langle m'_s, m'_l | (\langle n, l = 0 | H_{EH} | n, l = 0 \rangle) | m_s, m_l \rangle \equiv \langle H_{EH} \rangle$.

En primer lugar, mostraremos que el único término que contribuye a estos niveles es el de *contacto*. Para convencernos de ellos, será necesario sólo evaluar el valor medio de la parte espacial de los términos del Hamiltoniano. En primer lugar, es fácil ver que el término proporcional a $\vec{I} \cdot \vec{L}/r^3$ tiene valor medio nulo para estados con $l = 0$. Asimismo, mostraremos que el valor medio del segundo término también es cero por la simetría de estas funciones de onda. Primero, sabemos que las funciones de onda con $l = 0$ no tienen dependencia angular. Por lo tanto, para calcular $\langle [3(\vec{I} \cdot \hat{r})(\vec{S} \cdot \hat{r}) - \vec{S} \cdot \vec{I}]/r^3 \rangle$ podemos separarlo en una parte angular y otra radial. Al efectuar la integral angular sobre el término $\vec{S} \cdot \vec{I}/r^3$, como no hay dependencia angular, sólo aparece factor igual a 4π . La integral angular sobre el primer término es tal que sólo aparece dependencia angular por el versor \hat{r} y podemos utilizar la siguiente identidad $\int (\vec{a} \cdot \hat{r})(\vec{b} \cdot \hat{r}) \sin\theta d\theta d\phi = 4\pi(\vec{a} \cdot \vec{b})/3$ para obtener su resultado, es decir resulta ser igual a $3(\vec{I} \cdot \vec{S})4\pi/3r^3$. Por lo tanto la suma de ambas integrales es igual a cero.

Evaluemos entonces la corrección a estas energías:

$$\begin{aligned} \langle H_{EH} \rangle &= \frac{2\pi g_e g_p e^2}{3m_p m_e c^2} \langle \delta(\vec{r}) \vec{I} \cdot \vec{S} \rangle \\ &= \frac{2g_e g_p e^2}{3m_p m_e c^2} \frac{1}{n^3 a_0^3} \langle \vec{I} \cdot \vec{S} \rangle \\ &= \frac{2g_e g_p}{3n^3 \hbar^2} m_e c^2 \alpha^4 \frac{m_e}{m_p} \langle \vec{I} \cdot \vec{S} \rangle \end{aligned}$$

donde hemos usado que $|\Psi_{n,0,0}(0)|^2 = 1/(\pi n^3 a_0^3)$ y que $a_0 = \hbar^2/m_e e^2$, y recordemos que esta es una matriz de 4×4 . El término que sobrevive, nos indica que el espín del electrón ya no es un buen número cuántico porque no se conserva, mientras sí lo es el momento angular total atómico F . Para el caso que estamos considerando, $l = 0$, este momento angular puede tomar valores $F = \{0, 1\}$. Por lo tanto, como habíamos hecho antes con el acoplamiento espín órbita, para evaluar el producto usaremos:

$$\vec{I} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} (\vec{F}^2 - \vec{S}^2 - \vec{I}^2),$$

donde el electrón y el protón tienen espín $1/2$ y $s^2 = I^2 = 3/4$. Este operador resulta ser diagonal en la base de momento angular total atómico definido y sus autoestados son los que vimos en capítulos anteriores: el *singlete* ($F = 0, m_F = 0$) y los tres estados que forman el *triplete* ($F = 1, m_F = -1, 0, 1$). En esta base, el operador se representa simplemente como:

$$\vec{I} \cdot \vec{S} = \frac{\hbar^2}{2} \left(F(F+1) - \frac{3}{2} \right).$$

Es decir, la perturbación entonces resulta ser diagonal en la base que tiene número cuántico F definido, esta es la base acoplada que escribiremos como $|n, l, j, F, m_F\rangle$ y las correcciones a primer orden en energía resultan ser:

$$E_{EF, \{n, l=0, F\}}^{(1)} = \frac{g_e g_p}{3n^3} m_e c^2 \alpha^4 \frac{m_e}{m_p} \left(F(F+1) - \frac{3}{2} \right),$$

mientras que las funciones de onda orden cero para los grados de libertad de espín corresponden al singlete y al triplete. Estas correcciones disminuyen a medida que aumenta la energía del nivel y son de orden $m_e c^2 \alpha^4 \frac{m_e}{m_p}$ donde $\frac{m_e}{m_p} \approx \frac{1}{1800}$.

Estado fundamental

Como vimos en el estudio de la estructura fina, el estado fundamental del átomo de hidrógeno tiene ($n = 1, j = 1/2, l = 0$), y en notación espectroscópica corresponde al $1s_{1/2}$. El Hamiltoniano de la estructura hiperfina dividirá este nivel en dos, debido al acoplamiento entre el espín del electrón y el protón. En efecto, el acoplamiento espín-espín rompe la degeneración en el estado fundamental, aumentando la energía del triplete y disminuyendo la energía del singlete:

$$E_{EF, \{n=1, l=0, F\}}^{(1)} = \frac{g_e g_p}{3} m_e c^2 \alpha^4 \frac{m_e}{m_p} \begin{cases} +1/4, & (F=1, \text{triplete}) \\ -3/4, & (F=0, \text{singlete}) \end{cases}$$

Notemos además que en el nivel fundamental con $F = 0$ el estado de los espines del electrón y el protón se encuentra entrelazado. La diferencia de energía entre estos dos estados es $\Delta E = \mathcal{A} = 5,88 \times 10^{-6} \text{eV}$. De manera que la frecuencia del fotón emitido en el decaimiento del triplete al singlete es:

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = 1420 \text{MHz},$$

y la correspondiente longitud de onda es $c/\nu = 21 \text{cm}$, que cae en el rango de las microondas. Esta es la famosa línea de 21 cm, que juega un papel central en radio-astronomía.

19.1.2. Estructura hiperfina para $l > 0$

Para los niveles con $l > 0$ el término de contacto es nulo ya que, como vimos anteriormente, la función de onda en el origen $\sim r^l$ y por lo tanto $\Psi_{n, l > 0, m_l}(0) = 0$. De manera que los términos de interacción restantes determinan la estructura hiperfina que podemos reescribirlos como:

$$H_{EH} = \frac{g_p e^2}{2m_p m_e c^2} \frac{\left[3(\vec{I} \cdot \hat{r})(\vec{S} \cdot \hat{r}) + (\vec{L} - \vec{S}) \cdot \vec{I} \right]}{r^3}$$

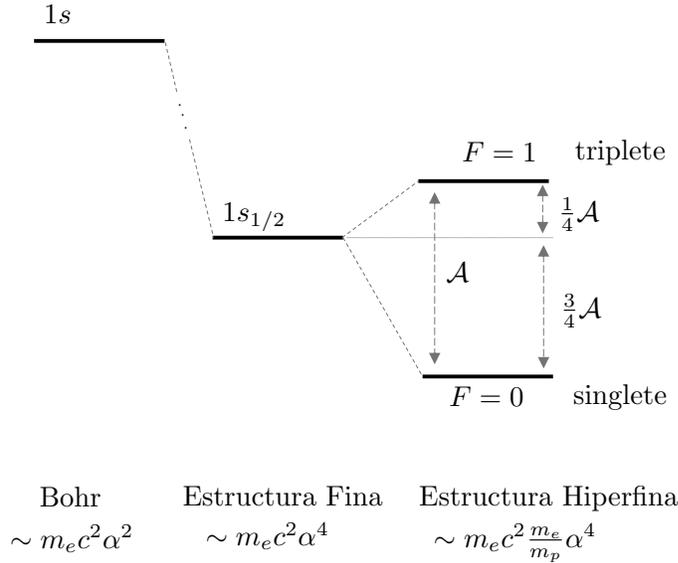


Figura 19.2: Estructura hiperfina para el estado fundamental $n = 1$ del átomo de hidrógeno. El nivel $1s_{1/2}$ se desdobra en el nivel correspondiente al singlete y al triplete (con degeneración 3), $\mathcal{A} = \frac{8e g_p}{3} m_e c^2 \alpha^4 \frac{m_e}{m_p}$.

donde hemos usado que $g_e \simeq 2$ para agrupar los términos de interacción tipo espín-órbita y la interacción entre momentos dipolares. Ahora podemos definir un operador dependiente únicamente de la parte electrónica como:

$$\vec{B}_e = \frac{e}{m_e c} \frac{[3\hat{r}(\vec{S} \cdot \hat{r}) + (\vec{L} - \vec{S})]}{r^3},$$

de forma que el Hamiltoniano anterior lo podemos escribir como $(g_p/2m_p c)\vec{I} \cdot \vec{B}_e$. Al igual que sucedía con el caso anterior, dado que el Hamiltoniano involucra producto de operadores vectoriales electrónicos y nucleares, la perturbación no será diagonal en base desacoplada. Y una base conveniente para escribir la perturbación será la base acoplada $|n, l, j, F, m_F\rangle$. Pero al igual que en el caso anterior, $[H_{EH}, \vec{F}] = 0$ de manera que la perturbación será diagonal en la base acoplada y sólo será suficiente con calcular los elementos diagonales:

$$\langle n, l, j, F, m_F | H_{EH} | n, l, j, F, m_F \rangle.$$

Notemos que a H_{EH} lo separamos en una parte nuclear y otra parte electrónica que conmutan entre sí. Siendo que estamos calculando elementos de matriz con valores de j definidos y \vec{B}_e es un operador vectorial bajo rotaciones generadas por el momento angular total electrónico \vec{J} , podemos mostrar mediante el teorema de proyección (Sec. 19.3) que:

$$\langle n, l, j, F, m_F | \vec{I} \cdot \vec{B}_e | n, l, j, F, m_F \rangle = \frac{\langle n, l, j, F, m_F | (\vec{I} \cdot \vec{J}) (\vec{J} \cdot \vec{B}_e) | n, l, j, F, m_F \rangle}{\hbar^2 j(j+1)}.$$

Es decir, el elemento de matriz permanece invariante luego de la proyección de ambos operadores sobre \vec{J} , este teorema es una consecuencia del teorema de Wigner-Eckart y es de suma utilidad en física atómica. Ahora, el segundo factor resulta ser igual a:

$$\begin{aligned}\vec{J} \cdot \vec{B}_e &= \frac{e}{m_e c} \left[\frac{3((\vec{L} + \vec{S}) \cdot \hat{r})(\vec{S} \cdot \hat{r}) + (\vec{L} + \vec{S}) \cdot (\vec{L} - \vec{S})}{r^3} \right] \\ &= \frac{e}{m_e c} \left[\frac{\vec{L}^2}{r^3} + \frac{3(\vec{S} \cdot \hat{r})^2 - \vec{S}^2}{r^3} \right],\end{aligned}\quad (19.2)$$

donde usamos que $\vec{L} \cdot \hat{r} = 0$. Además, dado que $S_i = \hbar \sigma_i / 2$ y $\sigma_i^2 = 1$ entonces $(\vec{S} \cdot \hat{r})^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \mathbb{1}$ y $\vec{S}^2 = \frac{\hbar^2}{4} \mathbb{1}$, por lo tanto el segundo término se anula. De manera que sólo sobrevive el primer término. Finalmente:

$$\langle n, l, j, F, m_F | \vec{I} \cdot \vec{B}_e | n, l, j, F, m_F \rangle = \frac{e}{m_e c} \frac{l(l+1)}{j(j+1)} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \langle \vec{I} \cdot \vec{J} \rangle \quad (19.3)$$

Es decir, en general, el Hamiltoniano efectivo de la estructura hiperfina lo podemos escribir como:

$$H_{EH} = \frac{A}{\hbar^2} \vec{I} \cdot \vec{J}$$

donde, usando que $\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = (a_0^3 2l(2l+1)(l+1)n^3)^{-1}$, la constante resulta ser $A = \frac{g_p}{2n^3} m_e c^2 \alpha^4 \frac{m_e}{m_p} \frac{1}{j(j+1)(2l+1)}$. Notemos que es el mismo tipo de interacción efectiva que aparecía en el caso $l = 0$, de forma que la expresión anterior H_{EH} resulta ser válida para todos los valores de l . Expresando entonces

$$\vec{I} \cdot \vec{J} = \frac{1}{2} (\vec{F}^2 - \vec{J}^2 - \vec{I}^2),$$

finalmente la corrección a las energías resulta ser:

$$E_{EH, \{n, l, F\}}^{(1)} = \frac{A}{2} \left(F(F+1) - j(j+1) - \frac{3}{4} \right)$$

Recordemos que $|j - 1/2| \leq F \leq |j + 1/2|$ por lo tanto todos los niveles (n, j) se desdoblán en dos niveles más, como muestra la Fig. [19.3](#) para $n = 2$.

19.2. Efecto Zeeman y la estructura hiperfina

El tratamiento del efecto Zeeman en la estructura hiperfina es muy similar al que vimos para la estructura fina. En este caso el momento magnético total del átomo es la suma de la parte electrónica y nuclear.

$$\vec{\mu}_{\text{atomo}} = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_e + \vec{\mu}_p \simeq \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_e$$

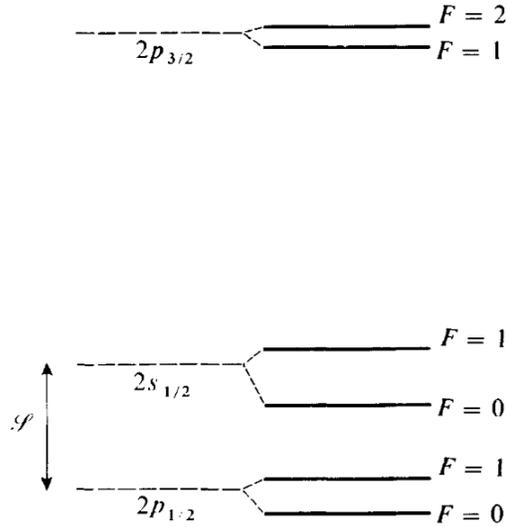


Figura 19.3: Estructura hiperfina para el nivel $n = 2$ del átomo de hidrógeno. Los niveles $2s_{1/2}$ y $2p_{1/2}$ se encuentran separados por el corrimiento Lamb, y cada uno se desdobla en dos niveles adicionales.

como $\mu_N \ll \mu_B$ es despreciamos la contribución nuclear. De esta manera, debido a la interacción con el campo y usando $g_e \simeq 2$ tenemos que el Hamiltoniano que describe la interacción del átomo con el campo es:

$$H_{Zeeman} = \mu_B (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B}$$

Al igual que hicimos con la estructura fina, consideraremos dos regímenes: campo débil y campo fuerte, siempre referido a la relación entre $\mu_B B$ y la escala de energías de la estructura hiperfina que definimos anteriormente como \mathcal{A} .

Campo débil

En este caso, consideraremos a la interacción con el campo como una perturbación, de manera que usaremos la base $|n, l, j, F, m_F\rangle$ para analizar la perturbación. En este caso podemos utilizar nuevamente el teorema de la proyección [19.3](#), ya que los niveles degenerados tienen J definido y por lo tanto será necesario evaluar $\langle n, l, j, F, m'_F | H_{Zeeman} | n, l, j, F, m_F \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle n, l, j, F, m'_F | H_{Zeeman} | n, l, j, F, m_F \rangle &= \mu_B \frac{\langle n, l, j, F, m'_F | ((\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{J}) (\vec{B} \cdot \vec{J}) | n, l, j, F, m_F \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \\ &= \mu_B g_J \langle n, l, j, F, m'_F | \vec{B} \cdot \vec{J} | n, l, j, F, m_F \rangle \end{aligned} \quad (19.4)$$

donde $g_J = \frac{3}{2} + \frac{s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$ es el factor de Landé. Luego podemos usar nuevamente el teorema de la proyección ya que los niveles degenerados también tienen F definido, \vec{J} es un operador vectorial bajo rotaciones de \vec{F} , y entonces es posible proyectar

ahora sobre \vec{F} :

$$\begin{aligned}\langle n, l, j, F, m_F | H_{Zeeman} | n, l, j, F, m'_F \rangle &= \mu_B g_J \frac{\langle n, l, j, F, m_F | (\vec{F} \cdot \vec{J}) (\vec{B} \cdot \vec{F}) | n, l, j, F, m'_F \rangle}{\hbar^2 F(F+1)} \\ &= \mu_B g_F \langle n, l, j, F, m_F | \vec{F} \cdot \vec{B} | n, l, j, F, m'_F \rangle\end{aligned}\quad (19.5)$$

donde $g_F = \frac{F(F+1)+j(j+1)-I(I+1)}{2F(F+1)} g_J$ es el factor que proviene de la proyección de \vec{J} sobre \vec{F} . De manera que el Hamiltoniano efectivo resulta ser:

$$H_{Zeeman} = \mu_B g_F \vec{F} \cdot \vec{B}$$

Eligiendo entonces el campo $\vec{B} = B_0 \vec{z}$:

$$H_{Zeeman} = g_F \mu_B F_z B_0.$$

La perturbación es diagonal en la base de autoestados y la corrección a la energía resulta ser:

$$E_{Zeeman}^{(1)} = g_F \mu_B B_0 m_F.$$

Separando los niveles en los diferentes en los diferentes valores de m_F , y no hay corrección para los niveles con $F = 0$.

Campo fuerte

El límite de campo fuerte es tal que la interacción con el campo magnético es mucho mayor que la escala de energías de la estructura hiperfina, y por lo tanto la estructura fina será la perturbación. En este regimen ahora F no es un buen número cuántico, pero sí lo son I y j . De manera que tenemos que evaluar H_{EH} en la base desacoplada $|n, l, j, m_j, m_I\rangle$. En este caso entonces el campo rompe la degeneración en m_j y la energía resulta:

$$\begin{aligned}E^{(1)} &= g_J \mu_B B_0 m_j + \langle n, l, j, m_j, m_I | \frac{A}{\hbar^2} \vec{I} \cdot \vec{J} | n, l, j, m_j, m_I \rangle. \\ &= g_J \mu_B B_0 m_j + A m_I m_j.\end{aligned}\quad (19.6)$$

donde usamos que para autoestados de J_z , $\langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle = 0$. En la Fig. 19.4 se muestra el efecto Zeeman sobre el nivel $n = 1$ del átomo de hidrógeno.

19.3. Teorema de proyección

El teorema de proyección establece una relación para los elementos de matriz de un operador vectorial en subespacios con j definido. Este teorema es de mucha utilidad en la física atómica y es consecuencia del teorema de Wigner-Eckart. De esta manera, el teorema afirma que dado un operador vectorial \vec{V} entonces:

$$\langle \alpha'; j, m' | \vec{V} | \alpha; j, m \rangle = \frac{\langle \alpha'; j, m' | (\vec{J} \cdot \vec{V}) \cdot \vec{J} | \alpha; j, m \rangle}{\hbar^2 j(j+1)},\quad (19.7)$$

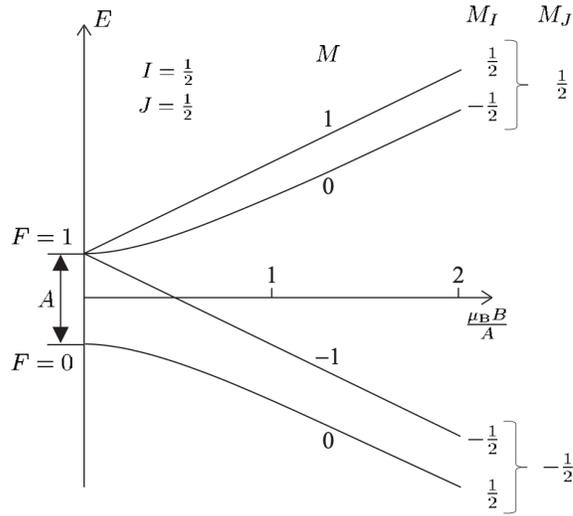


Figura 19.4: Efecto Zeeman en la estructura hiperfina para el estado fundamental del átomo de hidrógeno como función de la intensidad del campo magnético aplicado

donde los elementos de matriz tienen el mismo j . Además, como corolario, es posible mostrar que dado otro conjunto de operadores \vec{O} , tal que $[O_l, J_m] = [O_l, V_m] = 0 \forall l, m$, entonces:

$$\langle \alpha'; j, m' | \vec{O} \cdot \vec{V} | \alpha; j, m \rangle = \frac{\langle \alpha'; j, m' | (\vec{O} \cdot \vec{J}) (\vec{J} \cdot \vec{V}) | \alpha; j, m \rangle}{\hbar^2 j(j+1)}. \quad (19.8)$$

A continuación mostraremos cómo obtener estas identidades a partir del teorema de Wigner-Eckart. Para comenzar, recordemos que es posible escribir cada componente del operador vectorial en función de las componentes del tensor vectorial:

$$V_z = V_0 \quad ; \quad V_x = (V_{-1} - V_{+1})\sqrt{2} \quad ; \quad V_y = (V_{+1} + V_{-1})i\sqrt{2}.$$

Por lo tanto, para cada componente J_l de \vec{J} :

$$\begin{aligned} \langle \alpha'; j, m' | (\vec{J} \cdot \vec{V}) J_l | \alpha; j, m \rangle &= \langle \alpha'; j, m' | (J_0 V_0 - J_{+1} V_{-1} - J_{-1} V_{+1}) J_l | \alpha; j, m \rangle \\ &= m' \hbar \langle \alpha'; j, m' | V_0 J_l | \alpha; j, m \rangle + \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \sqrt{(j+m')(j-m'+1)} \\ &\quad \times \langle \alpha'; j, m' - 1 | V_{-1} J_l | \alpha; j, m \rangle \\ &\quad - \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \sqrt{(j-m')(j+m'+1)} \langle \alpha'; j, m' + 1 | V_{+1} J_l | \alpha; j, m \rangle \\ &= \tilde{C}_{jmm'}^l \langle \alpha'; j | \vec{V} | \alpha; j \rangle \end{aligned} \quad (19.9)$$

Donde para llegar a la última expresión escribimos nuevamente J_l en función de las componentes del tensor vectorial y utilizamos el teorema de Wigner-Eckart. De

esta manera, el elemento de matriz es proporcional a una constante $\tilde{C}_{jmm'}^l$ que no depende de α , α' ni de \vec{V} . Esta última ecuación es válida para cualquier operador vectorial, en particular para \vec{J} ,

$$\langle \alpha'; j, m' | \vec{J}^2 J_l | \alpha, jm \rangle = \tilde{C}_{jmm'}^l \langle \alpha'; j | \vec{J} | \alpha; j \rangle. \quad (19.10)$$

Además, sabemos que cada componente del operador vectorial, por el teorema de Wigner-Eckart, cumple que:

$$\langle \alpha'; j, m' | V_l | \alpha, jm \rangle = C_{jmm'}^l \langle \alpha'; j | \vec{V} | \alpha; j \rangle.$$

Esto también es válido para cualquier operador vectorial, y por lo tanto también lo es para \vec{J} :

$$\langle \alpha'; j, m' | J_l | \alpha, jm \rangle = C_{jmm'}^l \langle \alpha'; j | \vec{J} | \alpha; j \rangle.$$

Entonces la Ec. (19.10) resulta ser igual a:

$$\langle \alpha'; j, m' | \vec{J}^2 J_l | \alpha, jm \rangle = \hbar^2 j(j+1) C_{jmm'}^l \langle \alpha'; j | \vec{J} | \alpha; j \rangle. \quad (19.11)$$

Por lo tanto:

$$\tilde{C}_{jmm'}^l = \hbar^2 j(j+1) C_{jmm'}^l \quad (19.12)$$

Finalmente, combinando esta relación con las Ecs. (19.9) y (19.11), llegamos a la primer identidad

$$\frac{\langle \alpha'; j, m' | V_l | \alpha; j, m \rangle}{\langle \alpha'; j, m' | (\vec{V} \cdot \vec{J}) J_l | \alpha; j, m \rangle} = \frac{1}{\hbar^2 j(j+1)}. \quad (19.13)$$

La segunda identidad se desprende en forma sencilla del razonamiento anterior.