MOMENTO MAGNETICO ORBITAL (m.m.o.)

El momento angular del electrón le confiere al átomo un m.m.o:

$$\vec{\mu}_m = \frac{\mu_B}{\hbar}\vec{L}$$

Donde $\mu_B = \dfrac{e\hbar}{2m_0}$ es una cte. llamada magnetón de Bohr.

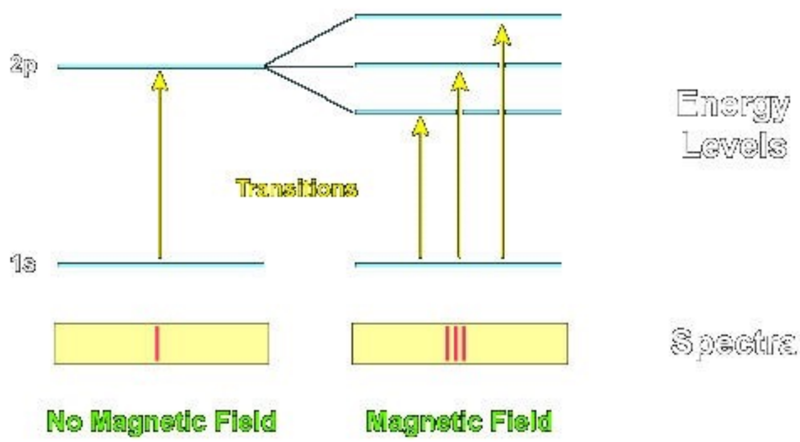
Si se aplica un campo B al átomo se tendrá un término extra en la energía potencial:

$$V_m = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = -\frac{\mu_B}{\hbar}L_z B$$

Y los valores propios del hamiltoniano del átomo serán:

$$E'_{nm} = E_n - m\mu_B B$$

Se quita la degeneración debido a la inducción magnética.



ESPIN ELECTRÓNICO

En ausencia de una perturbación exterior (como un B) el espectro del H obtenido con una gran resolución revela una estructura fina.

$$\vec{\mu}_e = \gamma_e \vec{S} = g_e \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{S}$$

Donde g_e es el factor de Landé, γ es la relación giromagnética del electrón.

Se in tiene entonces una energía potencial :

$$V = \frac{ze^2}{8\pi\varepsilon_0 c^2 m_0 r^3} \vec{L} \cdot \vec{S}$$

Lo cual implica rehacer completamente la ecuación de Schrödinger, ello implica dos orientaciones de S en relación a la dirección O_z de referencia.

Proyecciones :

$$S_z = \pm \frac{1}{2} \hbar = m_s \hbar$$

Donde $m_s = \pm 1/2$

En un estado 2p el acoplamiento espín-órbita provoca la separación en dos niveles : uno de multiplicidad 4 y otro de multiplicidad 2 y los estados pasan de 3 a 6.

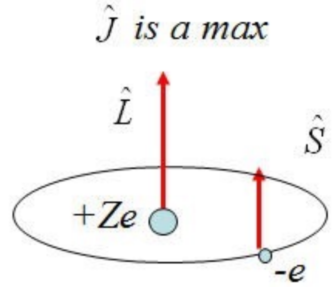
En el caso del H, la H_α que se observa a 1215.68 Å (ν= 82300 cm^{-1}) tiene un desdoblamiento del orden de 0.3 cm^{-1}.

Spin-orbit coupling in H-atom

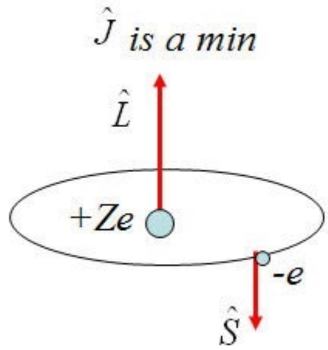
- Fine structure of H-atom is due to spin-orbit interaction:

$$\Delta E_{so} = \alpha \frac{Z\hbar}{2m^2cr^3} \hat{S} \cdot \hat{L}$$

- If L is parallel to S => J is a maximum => high energy configuration.



- Angular momenta are described in terms of quantum numbers, s, l and j:



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

$$\hat{J}^2 = (\hat{L} + \hat{S})(\hat{L} + \hat{S}) = \hat{L}\hat{L} + \hat{S}\hat{S} + 2\hat{S} \cdot \hat{L}$$

$$\hat{S} \cdot \hat{L} = \frac{1}{2}(\hat{J} \cdot \hat{J} - \hat{L} \cdot \hat{L} - \hat{S} \cdot \hat{S})$$

$$=> \hat{S} \cdot \hat{L} = \frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$$

$$\therefore \Delta E_{so} = \alpha \frac{Z\hbar^3}{4m^2c} \frac{1}{r^3}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$$

Spin-orbit effects in H fine structure

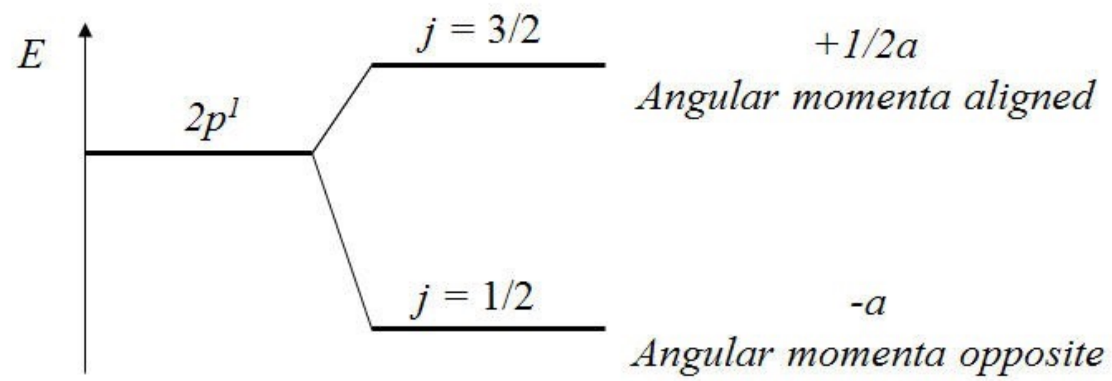
- For practical purposes, convenient to express spin-orbit coupling as

$$\Delta E_{so} = \frac{a}{2}\left[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right]$$

where $a = Ze^2\mu_0\hbar^2/8\pi m^2 r^3$ is the *spin-orbit coupling constant*. Therefore, for the *2p* electron:

$$\Delta E_{so} = \frac{a}{2}\left[\frac{3}{2}\left(\frac{3}{2}+1\right) - 1(1+1) - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\right] = +\frac{1}{2}a$$

$$\Delta E_{so} = \frac{a}{2}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) - 1(1+1) - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\right] = -a$$



Hydrogen fine structure

- Spectral lines of H found to be composed of closely spaced *doublets.* Splitting is due to interactions between electron spin S and the orbital angular momentum L => *spin-orbit coupling.*

- Hα line is single line according to the Bohr or Schrödinger theory. Occurs at 656.47 nm for H and 656.29 nm for D (isotope shift, $\Delta\lambda$~0.2 nm).

- Spin-orbit coupling produces fine-structure splitting of ~0.016 nm. Corresponds to an internal magnetic field on the electron of about 0.4 Tesla.