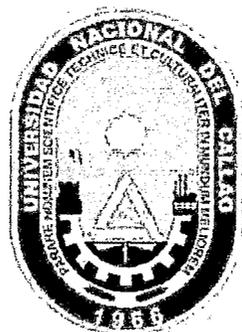


T/530/F18

Universidad Nacional del Callao

Facultad de Ciencias Naturales y Matemática

Escuela Profesional de Física



**CÁLCULO DE LA FRECUENCIA DE TRANSICIÓN ENTRE
LOS NIVELES HIPERFINOS DEL ÁTOMO DE Cs - 133 Y
Rb - 85 EN UN CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO
PEQUEÑO**

**Tesis para Optar el Título Profesional de
Licenciado en Física**

Eder Alan Falcón Tolentino

CALLAO - PERÚ

Agosto - 2013

HOJA DE PRESENTACIÓN

Cálculo de la Frecuencia de Transición entre los Niveles Hiperfinos del átomo de Cs - 133 y Rb - 85 en un Campo Magnético Externo Pequeño

Eder Alan Falcón Tolentino

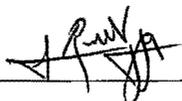
Tesis presentada a consideración del Cuerpo Docente de la Facultad de Ciencias Naturales y Matemática de la Universidad Nacional del Callao, como parte de los requisitos para obtener el Título de Licenciado en Física.

Aprobada por:



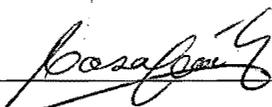
Mg. Roel Mario Vidal Guzmán.

Presidente



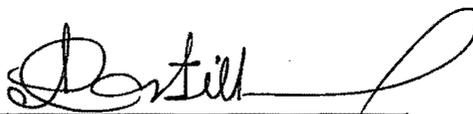
Lic. Rolando Manuel Vega de la Peña.

Secretario



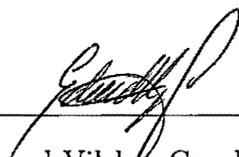
Lic. Eladio Gilberto Casapía Almonte.

Vocal



Lic. Absalón Castillo Valdivieso.

Suplente



Lic. Edward Vilchez Canchucaja.

Asesor

FICHA CATALOGRÁFICA

FALCÓN TOLENTINO, EDER ALAN

Cálculo de la Frecuencia de Transición entre los Niveles Hiperfinos del átomo de Cs - 133 y Rb - 85 en un Campo Magnético Externo, Callao (2013).

VII 70p.29.7 cm (UNAC. Licenciado en Física, 2013).

Tesis, Universidad Nacional del Callao, Facultad de Ciencias Naturales y Matemática.
Física.

1.UNAC/FCNM II. Título (Serie).

AGRADECIMIENTOS

A mis padres por haberme apoyado durante toda mi carrera profesional, mediante sus consejos y motivación que me han permitido crecer como persona y a mis profesores de la universidad por haberme impartido sus grandes conocimientos.

RESUMEN

CÁLCULO DE LA FRECUENCIA DE TRANSICIÓN ENTRE LOS NIVELES HIPERFINOS DEL ÁTOMO DE Cs - 133 Y Rb - 85 EN UN CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO PEQUEÑO

EDER ALAN FALCÓN TOLENTINO

OCTUBRE-2013

Asesor: Lic. Edward Vilchez Canchucaja.

Título obtenido: Licenciado en Física

En este trabajo de investigación hacemos un estudio descriptivo y comparativo de los cálculos de las frecuencias de transición y los cálculos de los corrimientos energéticos entre los niveles hiperfinos ($F = 3$ y $F = 4$) y ($F = 4$ y $F = 5$) del átomo de Cs - 133 con los cálculos de las frecuencias de transición y los cálculos de los corrimientos energéticos entre los niveles hiperfinos ($F = 3$ y $F = 4$) y ($F = 4$ y $F = 5$) del átomo de Rb - 85, en el estado base haciendo uso de una Ecuación Analítica del Cálculo de Frecuencias de Transición entre los Niveles Hiperfinos de Átomos Alcalinos el cual fue deducida de la Ecuación de Breit - Rabi.

PALABRAS CLAVES:

Ecuación de Breit - Rabi

Átomos alcalinos de Cs - 133 y Rb - 85

Frecuencia de transición entre niveles hiperfinos

Corrimientos energéticos entre niveles hiperfinos.

ABSTRACT

CALCULATION OF THE TRANSITION FREQUENCY BETWEEN THE HYPERFINE LEVELS Cs - 133 AND Rb - 85 ATOMS BY EXTERNAL MAGNETIC FIELD

EDER ALAN FALCÓN TOLENTINO

OCTOBER-2013

Advisor: Lic. Edward Vilchez Canchucaja.

Degree obtained: Graduate in Physics

In this investigation work, we study the descriptive and comparative calculations of transition frequencies and the calculations of energetic shifts between hyperfine levels ($F = 3$ y $F = 4$) and ($F = 4$ y $F = 5$) Cs - 133 atom with frequency calculations transition and the calculations of the energetic shifts between hyperfine levels ($F = 3$ y $F = 4$) and ($F = 4$ y $F = 5$) Rb - 85 atom in the ground state using an analytical equation of calculating transition frequency between the hyperfine levels of atoms alkalines which was deduced from the equation of Breit - Rabi

KEYWORDS:

Equation of Breit - Rabi

Cs - 133 and Rb - 85 atoms alkalines

Frequency of transition between hiperfine levels

Energetic shifts between hyperfine levels

Índice general

Hoja de presentación	I
Ficha catalográfica	II
Agradecimientos	III
Resumen	IV
Abstract	V
1. Introducción	1
2. Revisión de la bibliografía	5
3. Marco Teórico	7
3.1. Estructura Fina	7
3.1.1. Corrección Relativista	8
3.1.2. Corrección Espín - Órbita	10
3.1.3. Corrección de Darwin	17
3.2. El átomo en un campo magnético.	23
3.2.1. Efecto Zeeman Normal	23
3.2.2. Efecto Zeeman Anómalo	26
3.3. Estructura Hiperfina del Espectro del átomo de hidrógeno	30
3.4. Frecuencia de transición entre los niveles hiperfinos de los átomos alcalinos en un campo magnético externo pequeño.	34
3.4.1. Átomos Hidrogenoides	34
3.4.2. Deducción de la Ecuación de Breit-Rabi	35

3.4.3. Expresión analítica del cálculo de la frecuencia de transición entre los niveles hiperfinos de los átomos alcalinos en un campo magnético externo pequeño	47
4. Materiales y Métodos	48
4.1. Materiales	48
4.1.1. Latex	48
4.1.2. Matlab	49
4.2. Métodos	49
5. Resultados	50
5.1. Cálculo de los Corrimientos de Energía en los Niveles Hiperfinos para el átomo alcalino del Cs - 133 en un Campo Magnético ($B_0 = 2 \times 10^{-6} \text{Teslas}$)	50
5.2. Cálculo de los Corrimientos de Energía para el átomo alcalino del Rb - 85 en los Niveles Hiperfinos en un Campo Magnético ($B_0 = 2 \times 10^{-6} \text{Teslas}$) .	55
5.3. Cálculo de las Frecuencias de Transición entre los Niveles Hiperfinos para el átomo alcalino del Cs - 133 en un Campo Magnético ($B_0 = 2 \times 10^{-6} \text{Teslas}$)	60
5.4. Cálculo de las Frecuencias de Transición entre los Niveles Hiperfinos para el átomo alcalino del Rb - 85 en un Campo Magnético ($B_0 = 2 \times 10^{-6} \text{Teslas}$)	63
6. Discusión	67
7. Conclusiones	68
Bibliografía	70

Capítulo 1

Introducción

En 1896, Pieter Zeeman realizó un experimento al colocar un átomo de Sodio en un campo magnético externo uniforme para excitarlo, en el cual observó un desdoblamiento en varias componentes de las líneas espectrales emitidas durante el proceso de desexcitación, a este fenómeno se le conocería después como efecto Zeeman anómalo. Posteriormente, en 1897, el propio Zeeman observó que al repetir su experiencia con Cadmio la línea azul de su espectro se desdoblaba en tres líneas equidistantes, coincidiendo la del centro con la original, a este efecto se le denominó efecto Zeeman normal, cuya primera explicación semiclásica tuvo que esperar varios años, hasta el primer cuarto de siglo XX, en que Bohr desarrolló su modelo del átomo de hidrógeno.

Según el modelo atómico de Bohr, consideraba que el cálculo de la energía para el espectro del átomo de hidrógeno, sólo dependía del nivel " n " donde se ubicaba el electrón en movimiento, dicho modelo concordaba bien con los datos experimentales que se habían observado hasta ese momento. Sin embargo, posteriormente a medida que mejoraron los instrumentos y técnicas experimentales de medición, se observaron detalles que no se podían explicar con la teoría desarrollada, a esa estructura más detallada se le denominó estructura fina del átomo de hidrógeno, por el cuál nace la necesidad de justificar teóricamente dicha estructura fina en términos de la mecánica cuántica, introduciendo perturbaciones sobre la estructura obtenida en el modelo atómico de Bohr.

BEISER [1] describe "En un esfuerzo para explicar la estructura fina de las líneas es-

pectrales y el efecto Zeeman anómalo que no se había podido explicar hasta el momento, S.A. Goudsmit y G. E. Uhlenbeck propusieron en 1925 que el electrón posee un momento angular intrínseco independiente de cualquier momento angular orbital que pueda tener y, asociado con este momento angular, un cierto momento magnético. Lo que Goudsmith y Unlenbeck tenían presente era la imagen clásica de un electrón como una esfera cargada sobre un eje. La rotación implica momento angular, y puesto que el electrón está negativamente cargado, tiene un momento magnético $\vec{\mu}_s$ opuesto al vector momento angular \vec{L}_s . La noción de espín del electron resultó ser apropiada no solamente para explicar la estructura fina y el efecto Zeeman anómalo sino también para una amplia variedad de fenómenos atómicos. Por supuesto, la idea de que los electrones son esferas cargadas que están girando, es difícil compaginarla con la mecánica cuántica; no obstante, Dirac, en 1928, pudo demostrar, sobre la base de un tratamiento relativista teórico - cuántico, que las partículas que tienen la carga y masa del electrón deben tener exactamente el momento angular intrínseco y el momento magnético atribuidos a ellos por Goudsmith y Uhlenbeck”.

Pasado algunos años se detectaron líneas muchas más finas que la estructura fina haciendo uso de la espectroscopia óptica (típicamente de gases) o espectroscopia de resonancia magnética nuclear, dichas correcciones de energía se deben a la interacción de los momentos nucleares con el campo magnético producido por el giro del electrón alrededor del núcleo, a dichas líneas se les denominó estructura hiperfina de los espectros atómicos.

En 1945 E.M Purcell y F. Bloch realizaron un experimento en detección de resonancia magnética nuclear en fases condensadas, el primero en términos de señales de voltajes y el segundo en términos ópticos de la susceptibilidad y la absorción mecánico - cuántico. Para posteriormente en 1958, Mc Connell observó el desplazamiento hiperfino en muestras paramagnéticas.

En la actualidad en el Centro Nacional de Metrología (CENAM), se está realizando varios estudios, en el cálculo de frecuencias de transición entre los niveles hiperfinos del átomo de Cs - 133, sometido a un campo magnético externo pequeño del orden de 10^{-6} teslas, dichos estudios estan siendo realizados por Mauricio López e Iván Domínguez del CENAM

y Eduardo de Carlos de la Facultad de Ciencias del UAEM, México en su trabajo “Corrección de efectos sistemáticos por campo magnético en el patrón primario de frecuencia de bombeo óptico del CENAM”, el cual se puede encontrar en la publicación de LÓPEZ, DOMÍNGUEZ y DE CARLOS [4], otros estudios están siendo realizados por LÓPEZ S., LÓPEZ J y DE CARLOS E.[5] en su trabajo “Mejoras al Reloj Atómico de Bombeo Óptico del CENAM”. Dichos estudios realizados son importantes en el mejoramiento de los llamados relojes atómicos, cuya demanda de la exactitud en la medición del tiempo y frecuencia se han ido incrementado debido al gran avance tecnológico en las redes de información, en las redes de telefonía, en los sistemas de posicionamiento global (GPS), en los sistemas de navegación de los barcos y aviones y en la calibración de equipos, lo que a su vez obliga al diseño y construcción de los relojes atómicos de Cs - 133 considerados los relojes más exactos y precisos (los relojes atómicos de Cesio tienen una precisión tan elevada que admite un error únicamente de un segundo cada 30 000 años) y el de los relojes atómicos de Rb - 85, cuya precisión es muy cercana a la del Cesio.

Mi trabajo de investigación toma los estudios anteriores de los átomos hidrogenoides, temas cuya referencia la podemos encontrar en COHEN-TANNOUDJI [2] y DE LA PEÑA [3], debido a la similitud que tienen estos átomos con los átomos alcalinos. Según las descripciones [4] hechas en la bibliografía “los átomos alcalinos tienen un solo electrón de valencia, mientras que el resto de los electrones ocupan los niveles de energía inferiores. Estos electrones interactúan entre sí dando como resultado un efecto de “cancelación mutua”, por lo que la interacción del electrón de valencia con el resto de los electrones se puede despreciar. Por lo tanto, los átomos alcalinos pueden ser tratados como átomos hidrogenoides, es debido a ello a que la estructura energética de un átomo alcalino es similar a la estructura energética de un átomo hidrogenoide”. La estructura energética de un átomo alcalino, se determina debido a cuatro tipos de interacciones: interacción coulombiana (eléctrica), interacción espín - órbita, que da lugar a una estructura energética llamada estructura fina, la interacción espín - espín, la cual tiene lugar entre el electrón más externo y el espín del núcleo del átomo, dando como resultado una estructura energética llamada estructura hiperfina y por último la interacción del átomo con campos magnéticos externos llamada efecto Zeeman, temas cuya referencia la podemos encontrar en COHEN-TANNOUDJI [2] y DE LA PEÑA [3]. Estas dos últimas interacciones dan lugar a la de-

ducción de la Ecuación de Breit - Rabi de los átomos alcalinos, el cual nos determina los corrimientos energéticos entre los niveles hiperfinos de los átomos alcalinos y finalmente dicha ecuación nos lleve a encontrar una expresión analítica que calcule la frecuencia de transición entre los niveles hiperfinos de los átomos alcalinos, que se encuentran sometidos en un campo magnético externo pequeño B_0 , cuya magnitud es del orden de 10^{-6} teslas, desarrollado ampliamente en la publicación de LÓPEZ, DOMÍNGUEZ y DE CARLOS [4].

Mi trabajo de investigación consiste en realizar diversos cálculos de la frecuencia de transición entre los niveles hiperfinos ($F = 4$ y $F = 5$) del átomo de Cs - 133 en el estado base a diferencia del ya realizado por Mauricio López e Iván Domínguez del CENAM y Eduardo de Carlos de la Facultad de Ciencias del UAEM, México en su trabajo "Corrección de efectos sistemáticos por campo magnético en el patrón primario de frecuencia de bombeo óptico del CENAM", los cuales calcularon la frecuencia de transición entre los niveles hiperfinos ($F = 3$ y $F = 4$) sólo para el átomo de Cs - 133. Además mi proyecto de tesis, calcula también la frecuencia de transición entre niveles hiperfinos ($F = 3$ y $F = 4$) y ($F = 4$ y $F = 5$) del átomo de Rb - 85 en el estado base, haciendo uso de la expresión analítica del cálculo de frecuencias de transición entre los niveles hiperfinos de los átomos alcalinos y de los datos proporcionados por el CENAM, relacionado con las frecuencias de separación hiperfina para el átomo de Cs - 133 ($\nu_{HFS} = 9,2 \times 10^9 Hz$) y para el átomo de Rb - 85 ($\nu_{HFS} = 6,8 \times 10^9 Hz$), y luego comparar dichos resultados y ver en cuanto se diferencian, para posteriormente llevar dichos datos calculados al programa MATLAB y realizar diferentes gráficas de los corrimientos energéticos y de las frecuencias de transición entre los niveles hiperfinos ($F = 3$ y $F = 4$) y ($F = 4$ y $F = 5$), en el estado base para el átomo de Cs - 133 y para el átomo de Rb - 85, haciendo variar el campo magnético externo, cuya magnitud es del orden de 10^{-6} teslas.

Capítulo 2

Revisión de la bibliografía

El desarrollo de mi proyecto de tesis toma como referencia bibliográfica los libros de “Introducción a la Mecánica Cuántica” de DE LA PEÑA [3] y “La Mecánica Cuántica” de COHEN-TANNOUDJI [2], de los cuáles sólo tomamos los temas de estructura fina e hiperfina del átomo de hidrógeno. El primer tema está relacionado con líneas espectrales de energía más finas que las líneas espectrales calculadas con el modelo atómico de Bohr. Dichas líneas espectrales de energía de estructura fina son el resultado de los desdoblamientos de las líneas espectrales de energía obtenidos en el modelo atómico de Bohr, los cuales resultan debido a 3 tipos de correcciones: Corrección Relativista, Corrección Espín Órbita y Corrección de Darwin.

El segundo tema trata sobre una estructura aún más fina que la estructura fina, en donde las líneas espectrales de energía de dicha estructura hiperfina se deben a la interacción de los momentos nucleares con el campo magnético producido por el giro del electrón alrededor del núcleo.

Otros temas importantes tomados como referencia son el efecto Zeeman Normal, el cuál consiste en la escisión de una línea espectral de frecuencia ν_0 en tres líneas espectrales y el efecto Zeeman Anómalo que consiste en la escisión de una línea espectral de frecuencia ν_0 en más de tres líneas espectrales estos dos efectos se dan debido a que el átomo que se analiza se encuentra sometido a un campo magnético externo B_0 . Todos estos temas de referencia señalados anteriormente forman sólo el principio básico para el desarrollo

de nuestro proyecto de tesis, pero la esencia fundamental y el total desarrollo de nuestro proyecto de tesis tiene como referencia el trabajo de investigación realizado por Mauricio López e Iván Domínguez del CENAM y Eduardo de Carlos de la Facultad de Ciencias del UAEM, México en la publicación de LÓPEZ, DOMÍNGUEZ y DE CARLOS [4], los cuales dedujeron una ecuación muy importante, el cual describía los corrimientos energéticos entre los niveles hiperfinos para los átomos alcalinos que es la Ecuación de Breit - Rabi para el átomo de Cs - 133, es debido a esta ecuación que posteriormente encontraron una expresión analítica para el cálculo de frecuencias de transición entre los niveles hiperfinos de átomos alcalinos, aplicando una corrección de efecto zeeman cuadrático, y finalmente al desarrollar dicha expresión, calcularon la frecuencia de transición entre los niveles hiperfinos ($F = 3$ y $F = 4$) del átomo de Cs - 133. En donde los cálculos y resultados obtenidos en dicho trabajo de investigación, serán comparados con los cálculos y resultados que obtendremos para la frecuencia de transición entre niveles hiperfinos ($F = 4$ y $F = 5$) del átomo de Cs - 133, junto con los cálculos y resultados que también obtendremos para la frecuencia de transición entre niveles hiperfinos ($F = 3$ y $F = 4$) y ($F = 4$ y $F = 5$) del átomo de Rb - 85.

Capítulo 3

Marco Teórico

3.1. Estructura Fina

Las líneas espectrales de energía calculadas según el modelo atómico de Bohr, no podían explicar la estructura de líneas más finas, que se observaban experimentalmente. Dichas líneas espectrales de energía más finas, son el resultado de los desdoblamientos de las líneas espectrales de energía calculadas según el modelo atómico de Bohr. Estos desdoblamientos resultan del movimiento relativista del electrón, de la interacción del momento magnético de espín con el campo magnético generado por la rotación relativa del núcleo alrededor del electrón y del movimiento aleatorio del electrón respecto a su órbita.

Para ello estudiaremos 3 tipos de correcciones que experimenta la energía:

- Corrección Relativista (\hat{w}_{Rel}).
- Corrección Espín Órbita (\hat{w}_{S-O}).
- Corrección de Darwin (\hat{w}_D).

De esta manera, el hamiltoniano del sistema estará dado por:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{w}_{Rel} + \hat{w}_{S-O} + \hat{w}_D, \quad (3.1)$$

y la energía total del sistema será:

$$E_n = E_n^0 + \Delta E_{Rel} + \Delta E_{S-O} + \Delta E_D. \quad (3.2)$$

3.1.1. Corrección Relativista

Esta corrección se manifiesta debido a que el electrón se comporta como una partícula relativista, debido al cual la masa del electrón sufre variaciones con la velocidad que posee dicha partícula.

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}. \quad (3.3)$$

Luego la energía cinética relativista para el electrón es:

$$T_{Rel} = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2 \quad (3.4)$$

Usando el desarrollo en serie de Taylor cuando $x \approx 0$

$$(1+x)^n = 1 + nx + \frac{n(n-1)x^2}{2!} + \frac{n(n-1)(n-2)x^3}{3!} + \dots \quad (3.5)$$

$$T_{Rel} = (m^2 c^4)^{1/2} \left(1 + \frac{p^2 c^2}{m^2 c^4} \right)^{1/2} - mc^2$$

Considerando $pc \ll mc^2$ se obtiene:

$$T_{Rel} = mc^2 \left(1 + \frac{1}{2} \left(\frac{p^2 c^2}{m^2 c^4} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{-1}{2} \right) \frac{1}{2!} \left(\frac{p^2 c^2}{m^2 c^4} \right)^2 \right) + mc^2 \left(\frac{1}{2} \left(\frac{-1}{2} \right) \left(\frac{-3}{2} \right) \frac{1}{3!} \left(\frac{p^2 c^2}{m^2 c^4} \right)^3 \dots \right) - mc^2,$$

$$T_{Rel} = \frac{1}{2} \frac{p^2}{m} - \frac{1}{8} \frac{p^4}{m^3 c^2} + \frac{1}{16} \frac{p^6}{m^5 c^4}.$$

Dicha expresión de la energía cinética relativista, lo expresamos en términos de operadores, el cual queda:

$$\hat{T}_{Rel} = \frac{1}{2} \frac{\hat{p}^2}{m} - \frac{1}{8} \frac{\hat{p}^4}{m^3 c^2} + \frac{1}{16} \frac{\hat{p}^6}{m^5 c^4}, \quad (3.6)$$

de donde:

$$\hat{w}_{Rel} = -\frac{1}{8} \frac{\hat{p}^4}{m^3 c^2} + \frac{1}{16} \frac{\hat{p}^6}{m^5 c^4} = \frac{-1}{2m c^2} \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} \right)^2 + \frac{1}{2m^2 c^4} \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} \right)^3.$$

$$\hat{w}_{Rel} = \frac{-1}{2m c^2} (\hat{H}_0 - \hat{V})^2 + \frac{1}{2m^2 c^4} (\hat{H}_0 - \hat{V})^3. \quad (3.7)$$

Luego, haciendo actuar el operador \hat{w}_{Rel} sobre estados del tipo no degenerados $|n, l\rangle$; ya que las otras componentes m, j y s no intervienen en el cálculo, se obtiene:

$$\begin{aligned} \langle nl | \hat{w}_{Rel} | nl \rangle &= \frac{-1}{2m c^2} \langle nl | \hat{H}_0^2 - 2\hat{H}_0 \hat{V} + \hat{V}^2 | nl \rangle \\ &+ \frac{1}{2m^2 c^4} \langle nl | \hat{H}_0^3 - 3\hat{H}_0^2 \hat{V} + 3\hat{H}_0 \hat{V}^2 - \hat{V}^3 | nl \rangle, \\ \Delta E_{Rel} &= \frac{-1}{2m c^2} \left(\langle nl | \hat{H}_0 \hat{H}_0 | nl \rangle - 2\langle nl | \hat{H}_0 \hat{V} | nl \rangle + \langle nl | \hat{V} \hat{V} | nl \rangle \right) \\ &+ \frac{1}{2m^2 c^4} \left(\langle nl | \hat{H}_0 \hat{H}_0 \hat{H}_0 | nl \rangle - 3\langle nl | \hat{H}_0 \hat{H}_0 \hat{V} | nl \rangle + 3\langle nl | \hat{H}_0 \hat{V} \hat{V} | nl \rangle \right) \\ &\quad - \frac{1}{2m^2 c^4} \left(\langle nl | \hat{V} \hat{V} \hat{V} | nl \rangle \right), \end{aligned}$$

donde: $V(r) = -\frac{KZe^2}{r}$, $\hat{H}_0 |nl\rangle = E_n^0 |nl\rangle$ y $E_n^0 = \frac{-kZ^2 e^2}{2a_0 n^2}$.

Usando también los valores esperados deducidos de la ecuación radial del átomo de hidrógeno:

$$\begin{aligned} \langle nl | \frac{1}{r} | nl \rangle &= \frac{Z}{a_0 n^2}, \quad \langle nl | \frac{1}{r^2} | nl \rangle = \frac{Z^2}{a_0^2 n^3 (l+1/2)} \text{ y } \langle nl | \frac{1}{r^3} | nl \rangle = \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 l(l+1/2)(l+1)} \\ \Delta E_{Rel} &= \frac{-1}{2m c^2} \left([E_n^0]^2 - 2(2) E_n^0 \left(\frac{-kZ^2 e^2}{2a_0 n^2} \right) + \frac{4k^2 Z^4 e^4 n}{4n \cdot n^3 a_0^2 (l+1/2)} \right) \\ &+ \frac{1}{2m^2 c^4} \left([E_n^0]^3 - 2(3) [E_n^0]^2 \left(\frac{-kZ^2 e^2}{2a_0 n^2} \right) \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2m^2c^4} \left(+3E_n^0 \left(\frac{4k^2 Z^4 e^4 n}{4n \cdot n^3 a_0^2 (l+1/2)} \right) - \frac{8k^3 Z^6 e^6 n^3}{8n^3 a_0^3 n^3 l(l+1/2)(l+1)} \right), \\
\Delta E_{Rel} &= \frac{-1}{2mc^2} \left([E_n^0]^2 - 4[E_n^0]^2 + \frac{4[E_n^0]^2 n}{(l+1/2)} \right) \\
& + \frac{1}{2m^2c^4} \left([E_n^0]^3 - 6[E_n^0]^3 + 12 \frac{[E_n^0]^3 n}{(l+1/2)} + 8 \frac{[E_n^0]^3 n^3}{l(l+1/2)(l+1)} \right), \\
\Delta E_{Rel} &= \frac{-[E_n^0]^2}{2mc^2} \left(-3 + \frac{4n}{(l+1/2)} \right) \\
& + \frac{[E_n^0]^3}{2m^2c^4} \left(-5 + \frac{12n}{(l+1/2)} + 8 \frac{n^3}{l(l+1/2)(l+1)} \right), \tag{3.8}
\end{aligned}$$

donde: $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$

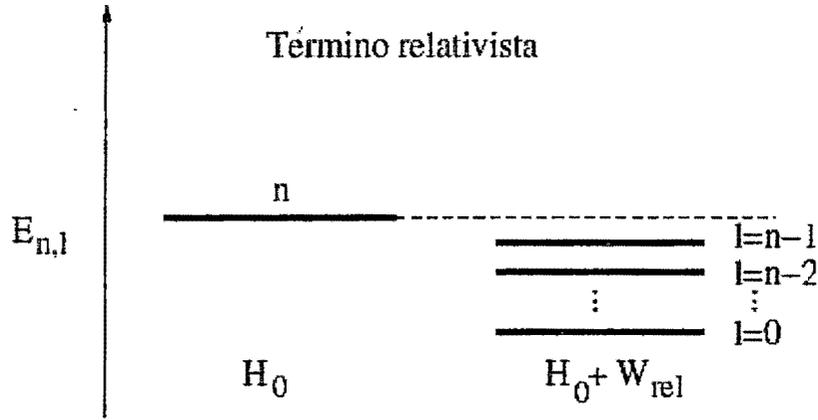


Figura 3.1: Corrección Relativista a un nivel n del átomo de H. La Corrección Relativista es siempre negativa (liga más los niveles) y mayor para los l más pequeños

3.1.2. Corrección Espín - Órbita

La corrección espín - órbita es debido a la interacción, que surge entre el momento magnético de espín $\vec{\mu}_s$ del electrón y el campo magnético externo \vec{B}_{ext} generado por el

movimiento del núcleo (cargas positivas), alrededor del electrón; cuyo sistema de referencia es tomado desde el electrón.

$$U = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B}_{ext}, \quad (3.9)$$

de aquí: U es la energía de interacción entre el momento dipolar de espín y el campo magnético asociado al movimiento del núcleo del alrededor del electrón. Esta expresión no es favorable para los cálculos matemáticos por lo que se debe transformar a operadores de espín \hat{S} y momento angular \hat{L} .

- El $\vec{\mu}_s$ está asociado al espín \hat{S} , mediante: $\vec{\mu}_s = \frac{4\pi\mu_B\hat{S}}{h}$.
- El \vec{B}_{ext} está asociado al momento angular \hat{L} y es paralelo a este, mediante:

$$\vec{B}_{ext} = \frac{Ze\hat{L}}{mcr^3}.$$

Por lo que podemos escribir la energía de interacción de la siguiente manera:

$$U = \xi_{(r)}\hat{S}\hat{L}, \quad (3.10)$$

debemos recordar que los valores del momento magnético son: $m_s = \pm 1/2$.

Luego el hamiltoniano del sistema está dado por:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{w}_{S-O}.$$

Donde:

$$\hat{w}_{S-O} = \xi_{(r)}\hat{S}\hat{L}. \quad (3.11)$$

Este acoplamiento espín - órbita se puede obtener a partir de la corrección relativista.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{1}{8} \frac{\hat{p}^4}{m^3 c^2} + \frac{1}{16} \frac{\hat{p}^6}{m^5 c^4}.$$

Por motivos de simplificación de términos, el tercer término se desprecia por ser muy pequeño en comparación con el segundo término.

Por lo tanto, queda:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{1}{8} \frac{\hat{p}^4}{m^3 c^2}. \quad (3.12)$$

Esta corrección puramente relativista debe ser modificada para incorporar el operador espín \hat{S} y el operador momento angular \hat{L} , el cual lo haremos aplicando la propiedad de operadores de Espín de Pauli:

$$(\hat{\sigma} \cdot \hat{A})(\hat{\sigma} \cdot \hat{B}) = \hat{A} \cdot \hat{B} + i\hat{\sigma}(\hat{A} \times \hat{B}),$$

de aquí si tomamos: $\hat{A} = \hat{B} = \hat{p}$.

Entonces queda de la siguiente manera:

$$(\hat{\sigma} \cdot \hat{p})(\hat{\sigma} \cdot \hat{p}) = \hat{p}^2 + i\hat{\sigma}(\hat{p} \times \hat{p})$$

Donde: $\hat{p} \times \hat{p} = 0$ y teniendo en cuenta que:

$$\hat{p}^2 = 2m(E - V)$$

Ahora hacemos:

$$\hat{p}^4 = \hat{p}^2 \hat{p}^2 = 2m(\hat{\sigma} \cdot \hat{p})(E - V)(\hat{\sigma} \cdot \hat{p}). \quad (3.13)$$

Reemplazando (3.13) en (3.12):

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{2m(\hat{\sigma} \cdot \hat{p})(E - V)(\hat{\sigma} \cdot \hat{p})}{8m^3 c^2}.$$

Luego:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{1}{4m^2 c^2} (\hat{\sigma} \cdot \hat{p})(E - V)(\hat{\sigma} \cdot \hat{p}),$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{1}{4m^2 c^2} [((\hat{\sigma} \cdot \hat{p})(E - V))(\hat{\sigma} \cdot \hat{p}) + ((\hat{\sigma} \cdot \hat{p})(\hat{\sigma} \cdot \hat{p}))(E - V)],$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{1}{4m^2 c^2} [((\hat{\sigma} \cdot \hat{p})E - (\hat{\sigma} \cdot \hat{p})V)(\hat{\sigma} \cdot \hat{p}) + (E - V)\hat{p}^2],$$

donde: $(\hat{\sigma} \cdot \hat{p})E = 0$.

Y dado que E no depende de r y como sabemos el operador $\hat{p} = -i\hbar\nabla$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{1}{4m^2 c^2} [(\hat{\sigma} \cdot i\hbar\nabla V)(\hat{\sigma} \cdot \hat{p}) + (E - V)\hat{p}^2],$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{1}{4m^2c^2} [i\hbar\nabla V \cdot \hat{p} + i\hat{\sigma}(i\hbar\nabla V) \times \hat{p} + (E - V)\hat{p}^2],$$

como sabemos que el potencial es central $V(r)$ sólo depende de r , el operador ∇ se puede expresar como:

$$\nabla V = \hat{u}_r \frac{dV}{dr} = \frac{\hat{r}}{r} \frac{dV}{dr}.$$

Esto es debido a que las otras dos componentes angulares del ∇ se hacen cero al momento de derivar la energía potencial V_r que sólo depende de la componente radial.

Entonces queda:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{1}{4m^2c^2} [i\hbar\nabla V \cdot (-i\hbar\nabla) - \hat{\sigma}\hbar \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \cdot \hat{r} \times \hat{p} + (E - V)\hat{p}^2],$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{1}{4m^2c^2} [\hbar^2\nabla^2 V - \hat{\sigma}\hbar \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \cdot \hat{L} + (E - V)\hat{p}^2],$$

donde: $\hat{\sigma} = \frac{2\hat{S}}{\hbar}$ se relaciona con el operador espín \hat{S} , reemplazando en la ecuación, se obtiene:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{1}{4m^2c^2} [\hbar^2\nabla^2 V - \frac{2}{r} \frac{dV}{dr} \hat{S} \cdot \hat{L} + (E - V)\hat{p}^2],$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} + \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \hat{S} \cdot \hat{L} - \frac{1}{4m^2c^2} \hbar^2\nabla^2 V.$$

De esta igualdad se puede deducir que:

$$\hat{w}_{S-O} = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \hat{S} \cdot \hat{L}. \quad (3.14)$$

$$\hat{w}_D = -\frac{1}{4m^2c^2} \hbar^2\nabla^2 V. \quad (3.15)$$

Considerando el momento angular total:

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

para un átomo multielectrónico:

$$\hat{J} = \Sigma \hat{J}_i = \Sigma (\hat{S}_i + \hat{L}_i),$$

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

Del cual se obtiene: $\hat{S} \cdot \hat{L} = \frac{1}{2}(\hat{J}^2 - \hat{S}^2 - \hat{L}^2)$.

Por último el \hat{w}_{S-O} queda expresado como:

$$\hat{w}_{S-O} = \frac{1}{4m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} [\hat{J}^2 - \hat{S}^2 - \hat{L}^2]. \quad (3.16)$$

Sí a esta expresión lo asociamos con sus respectivos autovalores de $\hat{J}^2 - \hat{S}^2 - \hat{L}^2$, entonces la energía asociada a este término tomando como base un estado no degenerado: $|n, l, m, j, s\rangle$, será expresado como:

$$\Delta E_{S-O} = \langle n, l, m, j, s | \hat{w}_{S-O} | n, l, m, j, s \rangle,$$

$$\Delta E_{S-O} = \frac{1}{4m^2c^2} \langle n, l, m, j, s | \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} | n, l, m, j, s \rangle [j(j+1) - s(s+1) - l(l+1)] \hbar^2.$$

Para el caso del potencial coulumbiano:

$$V(r) = -\frac{KZe^2}{r},$$

$$\frac{dV}{dr} = \frac{KZe^2}{r^2},$$

$$\Delta E_{S-O} = \frac{KZe^2}{4m^2c^2} \langle n, l | \frac{1}{r^3} | n, l \rangle [j(j+1) - s(s+1) - l(l+1)] \hbar^2.$$

En el estado $|n, l, m, j, s\rangle$ sólo se ha tomado en cuenta $|n, l\rangle$ porque el valor que vamos a calcular depende sólo de la parte radial.

$$\Delta E_{S-O} = \frac{KZe^2}{4m^2c^2} \left(\frac{Z^3}{a_0^3 n^3 l(l+1/2)(l+1)} \right) [j(j+1) - s(s+1) - l(l+1)] \hbar^2.$$

Tomando: $S = 1/2$

$$\Delta E_{S-O} = \frac{KZ^4e^2\hbar^2}{4m^2c^2a_0^3n^3} \frac{[j(j+1) - l(l+1) - 3/4]}{l(l+1/2)(l+1)}. \quad (3.17)$$

Para $l = 0$ (niveles S) no se produce la corrección espín - órbita pero si para $l > 0$.
 Donde a la expresión $\frac{KZ^4e^2\hbar^2}{4m^2c^2a_0^3n^3}$ se le puede denotar por una constante C,

$$\Delta E_{S-O} = \frac{C [j(j+1) - l(l+1) - 3/4]}{n^3 l(l+1/2)(l+1)}.$$

De aquí se presentan 2 casos:

$$j = l + 1/2 \dots (\uparrow)$$

$$j = l - 1/2 \dots (\downarrow)$$

Debido a que: $|l - s| \leq j \leq |l + s|$

■ **1er caso:** Para $j = l + 1/2$

$$\Delta E_{S-O} = \frac{C [(l+1/2)(l+3/2) - l(l+1) - 3/4]}{n^3 l(l+1/2)(l+1)},$$

$$\Delta E_{S-O} = \frac{C}{n^3} \frac{1}{(l+1/2)(l+1)}. \quad (3.18)$$

■ **2do caso:** Para $j = l - 1/2$

$$\Delta E_{S-O} = \frac{C [(l-1/2)(l+1/2) - l(l+1) - 3/4]}{n^3 l(l+1/2)(l+1)},$$

$$\Delta E_{S-O} = \frac{C}{n^3} \frac{-1}{l(l+1/2)}. \quad (3.19)$$

Relación entre $\Delta E_{S-O}(\uparrow)$ y $\Delta E_{S-O}(\downarrow)$

$$\frac{|\Delta E_{S-O}(\uparrow)|}{|\Delta E_{S-O}(\downarrow)|} = \frac{l}{l+1}. \quad (3.20)$$

Para subniveles "p" ($l = 1$)

$$\frac{|\Delta E_{S-O}(\uparrow)|}{|\Delta E_{S-O}(\downarrow)|} = \frac{1}{2}.$$

Para subniveles "d" ($l = 2$)

$$\frac{|\Delta E_{S-O}(\uparrow)|}{|\Delta E_{S-O}(\downarrow)|} = \frac{2}{3} = \frac{1}{\frac{3}{2}}.$$

Número de estados degenerados es: $2j + 1$

Para $\Delta E_{S-O}(\uparrow)$ $j = l + 1/2$ Número de estados degenerados = $2l + 2$.

Para $\Delta E_{S-O}(\downarrow)$ $j = l - 1/2$ Número de estados degenerados = $2l$.

Ahora analizamos para cada subnivel:

$$l = 1$$

Número de estados degenerados:

$$\Delta E_{S-O}(\uparrow) = 4 \quad j = 3/2 \quad m_j = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2.$$

Número de estados degenerados:

$$\Delta E_{S-O}(\downarrow) = 2 \quad j = 1/2 \quad m_j = -1/2, 1/2.$$

$$l = 2$$

Número de estados degenerados:

$$\Delta E_{S-O}(\uparrow) = 6 \quad j = 5/2 \quad m_j = -5/2, -3/2, -1/2, 1/2, 3/2, 5/2.$$

Número de estados degenerados:

$$\Delta E_{S-O}(\downarrow) = 4 \quad j = 3/2 \quad m_j = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2.$$

Acoplamiento espín-órbita

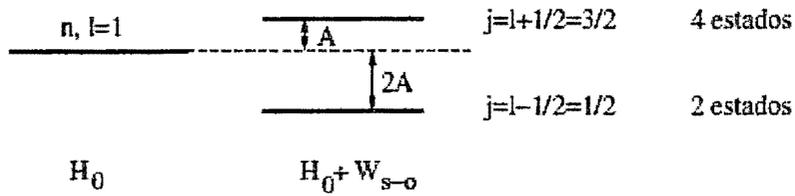


Figura 3.2: Corrección Espín Órbita a un nivel $n, l = 1$ del átomo de H. La Corrección Espín Órbita depende solo de j , liga más al estado $l - 1/2$ y menos al estado $l + 1/2$. El desdoblamiento es tal que mantiene el centroide de la energía.

3.1.3. Corrección de Darwin

Esta corrección se da debido al movimiento aleatorio del electrón respecto a su órbita, es decir, la diferencia relativa entre el electrón y el núcleo tiene una fluctuación del orden de la longitud de onda de compton λ_c .

Donde: $\langle \delta r \rangle^2 = \lambda_c^2$.

De aquí $\langle \delta r \rangle = \lambda_c = 0,0243 \text{ \AA} \approx 0$, de lo obtenido en la ecuación (3.15) se obtendrá:

$$\hat{w}_D = -\frac{1}{4m^2c^2} \hbar^2 \nabla^2 V.$$

Partimos ahora de:

$$\nabla^2 V(r) = \nabla^2 \left(\frac{-KZe^2}{r} \right) = -KZe^2 \nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right).$$

Sabemos por electromagnetismo:

$$\nabla \cdot E = \frac{\rho}{\epsilon_0} \dots \dots \dots (1)$$

$$\nabla \cdot \nabla \varphi = \frac{\rho}{\epsilon_0} \dots \dots \dots (2)$$

$$\nabla^2 \varphi = \frac{\rho}{\epsilon_0} \dots \dots \dots (3)$$

Donde:

$$\varphi = \frac{KZe}{r} \dots \dots \dots (4)$$

Reemplazando (4) en (3)

$$\nabla^2 \varphi = KZe \nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) = \frac{\rho}{\epsilon_0},$$

pero: $\rho = Ze\delta(\bar{r}_2 - \bar{r}_1) = Ze\delta(\bar{r})$,

$$\begin{aligned} \nabla^2 \varphi &= KZe \nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) = \frac{Ze\delta(\bar{r})}{\epsilon_0}, \\ \frac{1}{4\pi\epsilon_0} Ze \nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) &= \frac{Ze\delta(\bar{r})}{\epsilon_0}, \\ \nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) &= 4\pi\delta(\bar{r}). \end{aligned}$$

Luego:

$$\hat{w}_D = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} [KZe^2 \nabla^2 \frac{1}{r}] = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} [KZe^2 (4\pi\delta(\bar{r}))],$$

$$\hat{w}_D = \frac{K\pi\hbar^2 Ze^2 \delta(\bar{r})}{m^2c^2}. \quad (3.21)$$

Teniendo en cuenta que es un término de perturbación, entonces la energía asociada a esta corrección; tomando como base un estado no degenerado $|n, l, m, j, s\rangle$ es:

$$\Delta E_D = \langle n, l, m, j, s | \hat{w}_D | n, l, m, j, s \rangle,$$

debido a que esta corrección es con respecto al radio de su órbita, entonces analizar en j y s está por demás no le afecta, entonces queda:

$$\Delta E_D = \langle n, l | \hat{w}_D | n, l \rangle,$$

$$\Delta E_D = \frac{K\pi\hbar^2 Ze^2}{m^2c^2} \langle n, l, m | \delta(\bar{r}) | n, l, m \rangle.$$

Tomando: $r = 0$, $\delta(0) = 1$ y $(l = 0, m = 0)$

$$\Delta E_D = \frac{K\pi\hbar^2 Ze^2}{m^2c^2} \langle n00 | n00 \rangle,$$

la función de onda sería: $\phi_{n00} = R_{no(r)} Y_0^0(\Omega)$.

Donde la parte radial se comporta del siguiente modo: $R_{nl} \rightarrow r^l$ cuando $r \rightarrow 0$.

La parte radial no se anula en $r = 0$, sólo cuando $l = 0$. Por lo tanto:

$$\langle n00|n00 \rangle = |\phi_{n00(0)}|^2 = R_{n0}^2(r) |Y_0^0|^2,$$

además la función de onda $\phi_{n00(0)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{na_0} \right)^{3/2}$,

entonces:

$$\Delta E_D = \frac{K\pi\hbar^2 Z e^2}{m^2 c^2} |\phi_{n00(0)}|^2 = \frac{K Z^4 e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2 a_0^3 n^3},$$

reemplazando: $a_0 = \frac{\hbar^2}{mK e^2}$ en la expresión:

$$\Delta E_D = \frac{K^2 Z^4 e^4 \hbar^4}{2m c^2 a_0^3 n^3} \left(\frac{\hbar^2}{mK e^2} \right),$$

$$\Delta E_D = \frac{K^2 Z^4 e^4}{2m c^2 a_0^2 n^3}. \quad (3.22)$$

La corrección total será:

$$E_n = E_n^0 + \Delta E_{Rel} + \Delta E_{S-O} + \Delta E_D.$$

De aquí se desprende 2 casos:

- Para $l = 0$ $\Delta E = \Delta E_{Rel} + \Delta E_D$.
- Para $l > 0$ $\Delta E = \Delta E_{Rel} + \Delta E_{S-O}$.

1.- Hallando la ΔE para $l = 0$, $j = l + 1/2$ y $j = 1/2$,

donde:

$$\Delta E_{Rel} = \frac{-[E_n^0]^2}{2m c^2} \left(-3 + \frac{4n}{(l + 1/2)} \right).$$

El segundo término de esta expresión se ha eliminado debido a que es muy pequeño comparado con el primer término y

$$\Delta E_D = \frac{K^2 Z^4 e^4}{2m c^2 a_0^2 n^3},$$

entonces queda:

$$\Delta E = \frac{-[E_n^0]^2}{2mc^2} \left(-3 + \frac{4n}{(l+1/2)} \right) + \frac{K^2 Z^4 e^4 \hbar^4}{2mc^2 a_0^2 n^3}.$$

Usando $E_n^0 = \frac{-kZ^2 e^2}{2a_0 n^2}$

$$\Delta E = -\frac{K^2 Z^4 e^4}{2mc^2 a_0^2 4n^4} \left(-3 + \frac{4n}{(l+1/2)} \right) + \frac{K^2 Z^4 e^4}{2mc^2 a_0^2 n^3},$$

$$\Delta E = \frac{K^2 Z^4 e^4}{2mc^2 a_0^2 n^3} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{(l+1/2)} \right) + \frac{K^2 Z^4 e^4}{2mc^2 a_0^2 n^3},$$

$$\Delta E = \frac{K^2 Z^4 e^4}{2mc^2 a_0^2 n^3} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{(l+1/2)} + 1 \right),$$

$$\Delta E = \frac{K^2 Z^4 e^4}{2mc^2 a_0^2 n^3} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{1/2} + 1 \right),$$

$$\Delta E = \frac{K^2 Z^4 e^4}{2mc^2 a_0^2 n^3} \left(\frac{3}{4n} - 1 \right),$$

$$\Delta E = \frac{K^2 Z^4 e^4}{2mc^2 a_0^2 n^3} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{1/2 + 1/2} \right),$$

$$\Delta E = \frac{K^2 Z^4 e^4}{2mc^2 a_0^2 n^3} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{j+1/2} \right).$$

2.- Hallando la ΔE para $l > 0$ y $j = l + 1/2$,

donde:

$$\Delta E_{Rel} = \frac{-[E_n^0]^2}{2mc^2} \left(-3 + \frac{4n}{(l+1/2)} \right),$$

$$\Delta E_{S-O} = \frac{KZ^4 e^2 \hbar^2}{4m^2 c^2 a_0^3 n^3} \frac{[j(j+1) - l(l+1) - 3/4]}{l(l+1/2)(l+1)},$$

entonces queda:

$$\Delta E = \frac{-[E_n^0]^2}{2mc^2} \left(-3 + \frac{4n}{(l+1/2)} \right) + \frac{KZ^4 e^2 \hbar^2}{4m^2 c^2 a_0^3 n^3} \frac{[j(j+1) - l(l+1) - 3/4]}{l(l+1/2)(l+1)}.$$

Usando $E_n^0 = \frac{-kZ^2 e^2}{2a_0 n^2}$ y $a_0 = \frac{\hbar^2}{mK e^2}$,

$$\Delta E = -\frac{K^2 Z^4 e^4}{2mc^2 a_0^2 4n^4} \left(-3 + \frac{4n}{(l+1/2)} \right) + \frac{K^2 Z^4 e^4}{2mc^2 a_0^2 n^3} \frac{[j(j+1) - l(l+1) - 3/4]}{2l(l+1/2)(l+1)},$$

$$\Delta E = -\frac{K^2 Z^4 e^4}{2mc^2 a_0^2 n^3} \left(-\frac{3}{4n} + \frac{1}{(l+1/2)} \right) + \frac{K^2 Z^4 e^4}{2mc^2 a_0^2 n^3} \frac{[j(j+1) - l(l+1) - 3/4]}{2l(l+1/2)(l+1)},$$

$$\Delta E = \frac{K^2 Z^4 e^4}{2mc^2 a_0^2 n^3} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{(l+1/2)} + \frac{[j(j+1) - l(l+1) - 3/4]}{2l(l+1/2)(l+1)} \right).$$

Reemplazando: $j = l + 1/2$

$$\Delta E = \frac{K^2 Z^4 e^4}{2mc^2 a_0^2 n^3} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{j} + \frac{[j(j+1) - (j-1/2)(j+1/2) - 3/4]}{2(j-1/2)j(j+1/2)} \right),$$

$$\Delta E = \frac{K^2 Z^4 e^4}{2mc^2 a_0^2 n^3} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{j} + \frac{[j^2 + j - j^2 + 1/4 - 3/4]}{2j(j^2 - 1/4)} \right),$$

$$\Delta E = \frac{K^2 Z^4 e^4}{2mc^2 a_0^2 n^3} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{j} + \frac{(j-1/2)}{2j(j-1/2)(j+1/2)} \right),$$

$$\Delta E = \frac{K^2 Z^4 e^4}{2mc^2 a_0^2 n^3} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{j+1/2} \right).$$

Para representar un estado del átomo de hidrógeno, se usa la notación espectroscópica:

$$n^{2s+1}l_j, \tag{3.23}$$

donde:

n = Número cuántico principal y $n = 1, 2, 3, \dots$

s = Número de espín ($s = 1/2$)

l = Número cuántico del momento angular y $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$

j = Número cuántico del momento angular total.

Ejemplo:

- Para $n = 1, l = 0, s = 1/2$

$$|0 - 1/2| \leq j \leq |0 + 1/2|$$

$$j = 1/2$$

Entonces: $n^{2s+1}lj = 1^{2(1/2)+1}S_{1/2} = 1^2S_{1/2}$.

- Para $n = 2, l = 0, s = 1/2$

$$|0 - 1/2| \leq j \leq |0 + 1/2|$$

$$j = 1/2$$

Entonces: $n^{2s+1}lj = 1^{2(1/2)+1}S_{1/2} = 2^2S_{1/2}$.

- Para $n = 2, l = 1, s = 1/2$

$$|1 - 1/2| \leq j \leq |1 + 1/2|$$

$$1/2 \leq j \leq 3/2$$

$$j = 1/2 \text{ y } j = 3/2$$

Entonces: $n^{2s+1}lj = 2^2S_{1/2}, 2^2P_{1/2} \text{ y } 2^2P_{3/2}$.

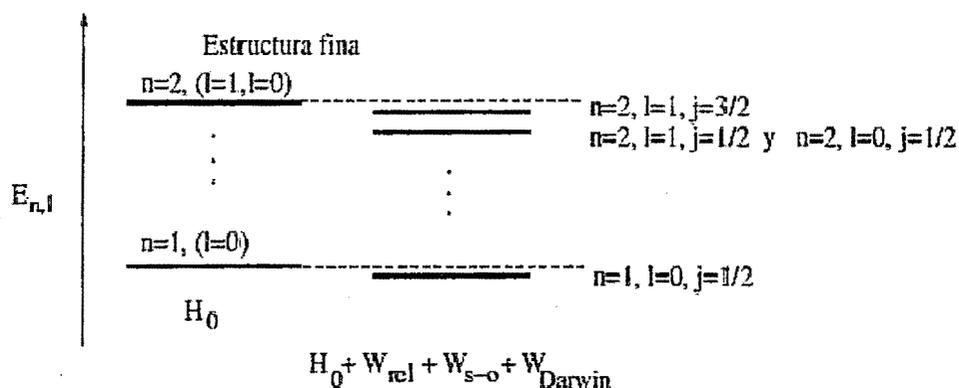


Figura 3.3: Corrección completa de estructura fina para los estados $n = 1$ y $n = 2$ del átomo de H. La corrección incluye las correcciones: Relativistas, de Espín Órbita y la de Darwin. La estructura fina depende sólo de j .

3.2. El átomo en un campo magnético.

3.2.1. Efecto Zeeman Normal

El efecto Zeeman Normal, se presenta en átomos cuyo espín electrónico total es nulo (esto excluye al átomo de hidrógeno cuyo espín electrónico total es diferente de cero), sometidos a un campo magnético externo intenso \vec{B} , el cual provoca la descomposición de una línea espectral de emisión de frecuencia ν_0 en tres líneas espectrales de emisión (tripletes) cuyas frecuencias de dos de ellas dependen de la frecuencia ν_0 de la línea espectral antes de descomponerse aumentada o disminuida en un cierto factor que depende del campo magnético externo y la variación de los números cuánticos magnéticos de dos subniveles continuos.

El efecto Zeeman, desempeñó un papel esencial en el estudio de las propiedades magnéticas del átomo y, en particular, contribuyó al descubrimiento del espín del electrón y de su momento magnético.

Para encontrar las frecuencias de las líneas espectrales de emisión (tripletes), debemos empezar por construir el hamiltoniano del sistema:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{mag}. \quad (3.24)$$

Dicho hamiltoniano lo hacemos actuar sobre el eigenestado $|n, l, m, j, s\rangle$, entonces queda:

$$\hat{H}|n, l, m, j, s\rangle = \hat{H}_0|n, l, m, j, s\rangle + \hat{H}_{mag}|n, l, m, j, s\rangle. \quad (3.25)$$

Donde el \hat{H}_{mag} , es la energía magnética que resulta de acoplarse el momento magnético orbital $\hat{\mu}$ asociado al momento orbital \hat{L} con un campo magnético externo B constante. La energía magnética se expresa como:

$$\hat{H}_{mag} = -\hat{\mu} \cdot \vec{B}. \quad (3.26)$$

Además:

$$\hat{\mu} = \frac{-e}{2m_e c} \hat{L}, \quad (3.27)$$

donde: $-e$ es la carga del electrón y m_e es la masa del electrón

Entonces la ecuación (3.25) queda:

$$\hat{H}|n, l, m, j, s\rangle = \hat{H}_0|n, l, m, j, s\rangle + \frac{e}{2m_e c} \hat{L} \cdot \vec{B}|n, l, m, j, s\rangle. \quad (3.28)$$

La forma más simple de resolver la ecuación se obtiene al elegir el eje Oz en la dirección del vector magnético B, con lo que la ecuación (3.28) se transforma en:

$$\hat{H}|n, l, m, j, s\rangle = \hat{H}_0|n, l, m, j, s\rangle + \frac{e}{2m_e c} B \cdot \hat{L}_z|n, l, m, j, s\rangle. \quad (3.29)$$

De aquí:

$$\mu_0 = \frac{e\hbar}{2m_e c}, \quad (3.30)$$

donde: μ_0 es el llamado magnetón de Borh y

$$\hat{L}_z|n, l, m, j, s\rangle = m_l \hbar|n, l, m, j, s\rangle. \quad (3.31)$$

Entonces la ecuación (3.29) queda:

$$\hat{H}|n, l, m, j, s\rangle = \hat{H}_0|n, l, m, j, s\rangle + \mu_0 m_l B|n, l, m, j, s\rangle. \quad (3.32)$$

Luego a esta ecuación le tomamos $\langle n, l, m, j, s|$, para obtener el valor de energía de un estado atómico:

$$E = E_0 + \mu_0 m_l B.$$

Por lo tanto el valor de energía entre dos estados diferentes será:

$$E_1 = E_{01} + \mu_0 m_1 B,$$

$$E_2 = E_{02} + \mu_0 m_2 B.$$

Ahora determinamos la frecuencia de transición entre un estado y otro:

$$\nu = \frac{E_1 - E_2}{h} = \frac{E_{01} - E_{02}}{h} + \frac{\mu_0 B}{h} \Delta m,$$

de donde queda la siguiente expresión:

$$\nu = \nu_0 + \frac{\mu_0 B}{h} \Delta m. \quad (3.33)$$

Otra expresión que resulta de la ecuación (3.33) es:

$$\nu = \nu_0 + \frac{e}{4\pi m_e c} B \Delta m. \quad (3.34)$$

Tomando en cuenta que:

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}.$$

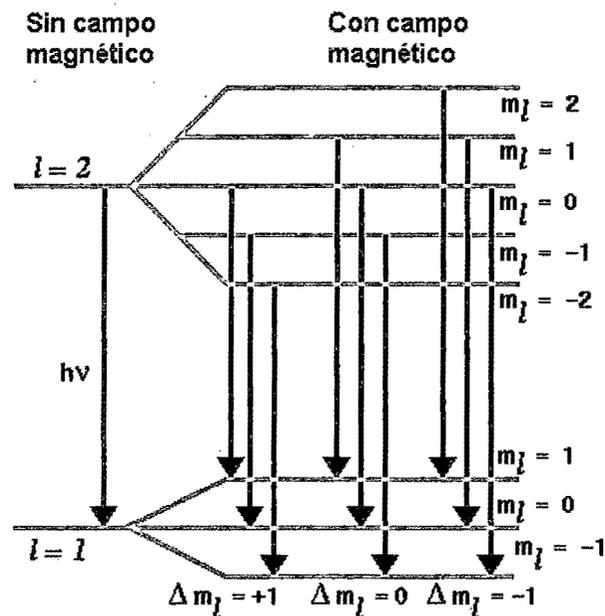


Figura 3.4: Corrección Relativista a un nivel n del átomo de H. La Corrección Relativista es siempre negativa (liga más los niveles) y mayor para los l más pequeños

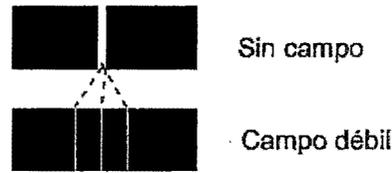


Figura 3.5: Espectro de líneas del Efecto Zeeman Normal

3.2.2. Efecto Zeeman Anómalo

Este fenómeno se presenta en átomos que poseen un espín electrónico diferente de cero ($\hat{S} \neq 0$), dicho espín se acoplará al campo magnético externo aplicado \vec{B} , por el cual las líneas espectrales se descomponen ya no en tripletes, sino en multipletes de estructura más complicada, dando lugar a dicho fenómeno, denominado efecto Zeeman Anómalo

Para encontrar las frecuencias de las líneas espectrales de emisión (multipletes), debemos empezar por construir el hamiltoniano de un átomo inmerso en un campo magnético uniforme y débil con dirección Oz:

$$\hat{H}|j, m_j\rangle = \hat{H}_0|j, m_j\rangle + \frac{\mu_0 B}{\hbar}(\hat{J}_z + \hat{S}_z)|j, m_j\rangle. \quad (3.35)$$

Esta ecuación es muy complicada, pues aquí \hat{S}_z representa el operador de espín electrónico total, cuyo eigenvalor depende de m_s , por el cual posee $(2S + 1)$ valores. Sin embargo, podemos resolver este problema con la ayuda de un teorema de la teoría de operadores tensoriales:

$$\langle j, m'_j | \hat{A}_q | j, m_j \rangle = \frac{\langle j, m'_j | \hat{J} \cdot \hat{A} | j, m_j \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle j, m'_j | \hat{J}_q | j, m_j \rangle. \quad (3.36)$$

Donde: \hat{A} es un operador vectorial, donde sus elementos de matriz están entre los estados $|j, m_j\rangle$ y $|j, m'_j\rangle$ (m_j es la proyección Oz de j), \hat{A}_q y \hat{J}_q son los componentes esféricas de los vectores \hat{A} y \hat{J} , respectivamente, definidas para $q = -1, 0, 1$

$$\hat{A}_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{A}_x - i\hat{A}_y),$$

$$\hat{A}_0 = \hat{A}_z,$$

$$\hat{A}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{A}_x + i\hat{A}_y). \quad (3.37)$$

Entonces en la ecuación (3.35), como el campo magnético B no es excesivamente grande, lo podemos tratar el término magnético como una perturbación. Además como el \hat{H}_0 tiene simetría esférica para un átomo, podemos tomar como eigenfunciones no perturbadas los eigenestados de \hat{J}^2 y \hat{J}_z , con lo que la corrección de energía a primer orden se escribe como:

$$\delta E = \frac{\mu_0 B}{\hbar} \langle j, m_j | (\hat{J}_z + \hat{S}_z) | j, m_j \rangle. \quad (3.38)$$

El elemento de matriz de \hat{J}_z se calcula rápidamente:

$$\langle j, m_j | \hat{J}_z | j, m_j \rangle = \hbar m_j. \quad (3.39)$$

Para calcular el elemento de matriz de $\hat{S}_z = \hat{S}_0$, utilizamos la ecuación (3.36), lo que queda:

$$\langle j, m_j | \hat{S}_z | j, m_j \rangle = \frac{\langle j, m_j | \hat{J} \cdot \hat{S} | j, m_j \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle j, m_j | \hat{J}_z | j, m_j \rangle = \frac{m_j}{\hbar j(j+1)} \langle j, m_j | \hat{J} \cdot \hat{S} | j, m_j \rangle \quad (3.40)$$

A continuación cambiamos la base $|j, m_j\rangle \rightarrow |j, l, s, m_j\rangle$, y haciendo uso de: $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$, obtenemos:

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

$$\hat{L}^2 = \hat{J}^2 + \hat{S}^2 - 2\hat{J} \cdot \hat{S},$$

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

Por lo que queda:

$$\langle j, l, s, m_j | \hat{J} \cdot \hat{S} | j, l, s, m_j \rangle = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)]. \quad (3.41)$$

Al sustituir este valor en la ecuación (3.40), obtenemos para el valor esperado de \hat{S}_z :

$$\langle j, m_j | \hat{S}_z | j, m_j \rangle = \hbar \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} m_j. \quad (3.42)$$

Luego, al sumar la ecuación (3.39) y (3.42) obtenemos la corrección de la energía debida al efecto Zeeman anómalo:

$$\delta E = \mu_0 B g m_j, \quad (3.43)$$

en donde el factor g de Landé está dado por:

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \quad (3.44)$$

Como para los distintos estados atómicos g toma valores diferentes, el corrimiento de los niveles varía de un estado a otro, por lo que cada línea espectral de emisión puede descomponerse en multipletes muy complicados.

Al sustituir los valores de l ($l = j + \frac{1}{2}$ y $l = j - \frac{1}{2}$) y $s = \frac{1}{2}$ en la ecuación (3.44) se comprueba que ambos conducen a la misma expresión final para el factor de Landé,

$$g = \frac{j + \frac{1}{2}}{l + \frac{1}{2}}. \quad (3.45)$$

Finalmente, el valor de energía de cualquier estado atómico será:

$$E = E_0 + \mu_0 B g m_j.$$

Por lo tanto el valor de energía entre dos estados atómicos será:

$$E_1 = E_{01} + \mu_0 B g_0 m_j^0,$$

$$E_2 = E_{02} + \mu_0 B g m_j,$$

donde:

g_0 es el factor de Landé del estado inicial y g es el factor de Landé del estado final.

m_j^0 es el número cuántico magnético del estado inicial y m_j es el número cuántico magnético del estado final.

Ahora determinamos la frecuencia de transición entre un estado y otro:

$$\nu = \frac{E_1 - E_2}{h} = \frac{E_{01} - E_{02}}{h} + \frac{\mu_0 B}{h} (g_0 m_j^0 - g m_j).$$

De donde la frecuencia de la radiación emitida durante transiciones atómicas resulta:

$$\nu = \nu_0 + \frac{\mu_0 B}{h} (g_0 m_j^0 - g m_j). \quad (3.46)$$

Dicha ecuación se puede simplificar si reemplazamos:

$$\frac{\mu_0 B}{h} = \nu_L,$$

donde ν_L es llamada la frecuencia de Larmor.

Entonces la ecuación (3.46) se puede expresar como:

$$\nu = \nu_0 + \nu_L (g_0 m_j^0 - g m_j). \quad (3.47)$$

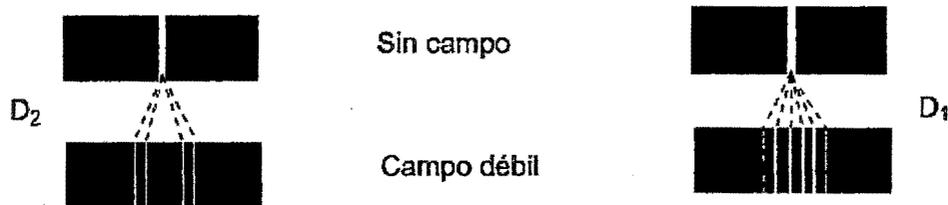


Figura 3.6: Espectro de líneas del Efecto Zeeman Anómalo

3.3. Estructura Hiperfina del Espectro del átomo de hidrógeno

Existen correcciones del espectro atómico aún más finas que las que acabamos de determinar, llamada estructura hiperfina, debidas a causas diversas. Vamos analizar el caso más importante relacionada con el núcleo. El efecto nuclear que proviene del momento magnético asociado al espín del protón nuclear, que genera un campo magnético al que se acopla el momento magnético del electrón.

La relación giromagnética del protón es muy alta, $g_p = 2 \times 2,7928\mu_N$; esto se debe a que el protón posee además de su momento magnético normal de un magnetón nuclear μ_N , un momento magnético anómalo de magnitud comparable igual a 1.7928 magnetones nucleares.

Podemos escribir el momento magnético del núcleo del hidrógeno como:

$$\hat{\mu}_p = \mu_p \hat{\sigma}_p, \quad (3.48)$$

en el cuál debemos tener en cuenta que:

$$\hat{\sigma}_p = \hat{\sigma},$$

donde $\hat{\sigma}_p$ y $\hat{\sigma}$ son las matrices de Pauli del espín nuclear y espín electrónico respectivamente.

Además:

$$\mu_p = g_p \cdot \mu_N$$

y μ_N es el magnetón nuclear y se define como:

$$\mu_N = \left(\frac{\hbar e_p}{2MC} \right),$$

donde:

- M es la masa del nucleón.

- C es la velocidad de la luz
- e_p es la carga del protón

Ahora, definimos el campo magnético que genera el movimiento del protón alrededor del electrón, tomado como sistema de referencia.

$$\vec{B} = \nabla \times A, \quad (3.49)$$

de aquí:

$$A = \nabla \times \frac{\hat{\mu}_p}{r}, \quad (3.50)$$

Por último definamos el hamiltoniano de interacción entre el momento magnético nuclear y electrónico:

$$\hat{H} = -\hat{\mu}_e \cdot \vec{B}. \quad (3.51)$$

Ahora usando la ecuación (3.50) en (3.51) tenemos:

$$\hat{H} = -\hat{\mu}_e \cdot \nabla \times \left(\nabla \times \frac{\hat{\mu}_p}{r} \right),$$

donde: $\hat{\mu}_e = \mu_0 \hat{\sigma}$, reemplazando en la ecuación anterior queda:

$$\hat{H} = -\mu_0 \hat{\sigma} \cdot \nabla \times \left(\nabla \times \frac{(\mu_p \cdot \hat{\sigma}_p)}{r} \right),$$

$$\hat{H} = -\mu_0 \mu_p \hat{\sigma} \cdot \nabla \times \left(\nabla \times \frac{\hat{\sigma}_p}{r} \right),$$

$$\hat{H} = -\mu_0 \mu_p \nabla \times \left(\nabla \times \frac{\hat{\sigma}_p}{r} \right) \cdot \hat{\sigma}$$

Haciendo uso de:

$$\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) = (\vec{A} \cdot \vec{C})\vec{B} - (\vec{A} \cdot \vec{B})\vec{C}.$$

Entonces:

$$\nabla \times \left(\nabla \times \frac{\hat{\sigma}_p}{r} \right) = \left(\nabla \cdot \frac{\hat{\sigma}_p}{r} \right) \nabla - (\nabla \cdot \nabla) \frac{\hat{\sigma}_p}{r} = \left(\nabla \cdot \frac{\hat{\sigma}_p}{r} \right) \nabla - \nabla^2 \left(\frac{\hat{\sigma}_p}{r} \right),$$

por lo tanto:

$$\hat{H} = -\mu_0\mu_p \left[\left(\nabla \cdot \frac{\hat{\sigma}_p}{r} \right) (\nabla \cdot \hat{\sigma}) - \nabla^2 \left(\frac{\hat{\sigma}_p}{r} \right) \cdot \hat{\sigma} \right].$$

De esta manera:

$$\begin{aligned} \nabla^2 \left(\frac{\hat{\sigma}_p}{r} \right) \cdot \hat{\sigma} &= \nabla \cdot \left(\nabla \cdot \frac{\hat{\sigma}_p}{r} \right) = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\hat{\sigma}_p}{r} \right), \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\hat{\sigma}_p}{r} \right), \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\hat{\sigma}_p}{r} \right) \right) \\ &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{\hat{\sigma}_p}{r} \right) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left(\frac{\hat{\sigma}_p}{r} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \left(\frac{\hat{\sigma}_p}{r} \right) \\ &= \hat{\sigma}_p \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{1}{r} \right) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left(\frac{1}{r} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \left(\frac{1}{r} \right) \right] \\ &= \hat{\sigma}_p \nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right). \end{aligned}$$

También tenemos:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \left(\frac{\hat{\sigma}_p}{r} \right) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\hat{\sigma}_{px}}{r} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\hat{\sigma}_{py}}{r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\hat{\sigma}_{pz}}{r} \right) \\ &= \hat{\sigma}_{px} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{r} \right) + \hat{\sigma}_{py} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{r} \right) + \hat{\sigma}_{pz} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{r} \right) \\ &= \sigma_p \cdot \nabla \left(\frac{1}{r} \right). \end{aligned}$$

Por lo tanto el hamiltoniano queda expresado como:

$$\hat{H} = -\mu_0\mu_p \left[(\hat{\sigma} \cdot \nabla) (\hat{\sigma}_p \cdot \nabla) \left(\frac{1}{r} \right) - (\hat{\sigma} \cdot \hat{\sigma}_p) \nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) \right]. \quad (3.52)$$

En adelante prestaremos atención sólo a estados “ S ”; la simetría esférica de estos nos permite escribir:

$$(\hat{\sigma} \cdot \nabla)(\hat{\sigma}_p \cdot \nabla) \left(\frac{1}{r} \right) = \frac{1}{3} (\hat{\sigma} \cdot \hat{\sigma}_p) \nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right)$$

De aquí sabemos que:

$$\nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) = 4\pi \delta(\vec{r}),$$

entonces:

$$\hat{H} = \frac{8\pi}{3} \mu_0 \mu_p (\hat{\sigma} \cdot \hat{\sigma}_p) \delta(\vec{r}) \quad (3.53)$$

Como $l = 0$, el momento angular total del átomo \hat{J} coincide con el espín $\hat{S} = \hat{S}_e + \hat{S}_p$. El cuál puede tomar valores entre 0 y 1.

Donde:

$$\hat{S}_e^2 = S_e(S_e + 1)\hbar^2 \text{ y } S_e = 1/2, \text{ entonces } \hat{S}_e^2 = 3/4\hbar^2.$$

$$\hat{S}_p^2 = S_p(S_p + 1)\hbar^2 \text{ y } S_p = 1/2, \text{ entonces } \hat{S}_p^2 = 3/4\hbar^2.$$

$$\text{Además: } S_e = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma} \text{ y } S_p = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_p$$

Ahora tomamos:

$$\hat{S}^2 = (\hat{S}_e^2 + \hat{S}_p^2 + 2\hat{S}_e\hat{S}_p)$$

De aquí despejamos:

$$\hat{S}_e\hat{S}_p = \frac{1}{2}(\hat{S}^2 - \hat{S}_p^2 - \hat{S}_e^2)$$

Reemplazando se obtiene:

$$2S(S + 1) - 3 = \hat{\sigma} \cdot \hat{\sigma}_p$$

Para $S = 0$; la expresión se reduce a: $\hat{\sigma} \cdot \hat{\sigma}_p = -3$.

Por último el hamiltoniano queda expresado como:

$$\hat{H} = \frac{8\pi}{3} \mu_0 \mu_p [2S(S + 1) - 3] \delta(\vec{r}), \quad (3.54)$$

De esta expresión se calcula la corrección hiperfina:

$$\Delta E_{hf} = \langle n | \hat{H} | n \rangle = \frac{4}{3a_0^3 n^3} \mu_0 \mu_p [2S(S+1) - 3],$$

donde sustituyendo los valores de los momentos magnéticos queda:

$$\Delta E_{hf} = \langle n | \hat{H} | n \rangle = \frac{4}{3a_0^3 n^3} \mu_0 g_p \left(\frac{\hbar e_p}{2MC} \right) [2S(S+1) - 3]. \quad (3.55)$$

3.4. Frecuencia de transición entre los niveles hiperfinos de los átomos alcalinos en un campo magnético externo pequeño.

El cálculo de la frecuencia de transición entre los niveles hiperfinos de los átomos alcalinos, que se encuentran sometidos en un campo magnético externo pequeño B_0 , es muy importante para el desarrollo de nuestro trabajo de investigación, el cual consiste en comparar las frecuencias de transición entre los niveles hiperfinos, para dos átomos alcalinos en particular que son el átomo de Cs - 133 y Rb - 85, para ello debemos encontrar una expresión analítica que calcule en forma inmediata dichas frecuencias de transición entre niveles hiperfinos. Para lo cual debemos tener en cuenta lo siguiente:

3.4.1. Átomos Hidrogenoides

La importancia de los átomos hidrogenoides se debe a la similitud que tienen estos con los átomos alcalinos. Como se sabe los átomos alcalinos tienen un solo electrón de valencia, mientras que el resto de los electrones ocupan los niveles de energía inferiores.

Estos electrones interactúan entre sí dando como resultado un efecto de cancelación mutua por lo que la interacción del electrón de valencia con el resto de los electrones se puede despreciar. Por lo tanto, los átomos alcalinos pueden ser tratados como átomos hidrogenoides.

El operador hamiltoniano total de un átomo hidrogenoide se puede escribir como:

$$\hat{H} = \hat{H}_{ceo} + \hat{V}. \quad (3.56)$$

Donde: \hat{H}_{ceo} representa al operador hamiltoniano que contiene solamente la interacción coulumbiana y de espín-órbita mientras que \hat{V} contiene las interacciones dipolares magnéticas.

La ecuación de eigenvalores del operador hamiltoniano total, en la representación matricial es:

$$HC = EC,$$

$$(H_{ceo} + V)C = (E_{nj} + \delta E)C. \quad (3.57)$$

De aquí H representa la matriz de hamiltoniano total, C matriz columna de su respectivo eigenvector y E su eigenvalor (energía total), H_{ceo} y V son las matrices asociadas a los operadores \hat{H}_{ceo} y \hat{V} con sus respectivos eigenvalores E_{nj} y δE .

3.4.2. Deducción de la Ecuación de Breit-Rabi

Se busca determinar la forma de la dependencia de la energía de los niveles de Zeeman respecto a un campo magnético externo constante, así entonces es necesario resolver la ecuación de eigenvalores.

$$VC = \delta EC,$$

es decir, se tiene que resolver la ecuación secular:

$$\det(V - \delta EI) = 0.$$

Antes de escribir el operador potencial \hat{V} , definiremos algunos operadores de momento angular importantes:

$$\hat{\mathcal{F}} = \hat{\mathcal{I}} + \hat{\mathcal{J}}$$

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

cuyos eigenvalores de dichos operadores de momento angular al cuadrado están dados por:

$$\hat{\mathcal{F}}^2 = F(F + 1)\hbar^2$$

$$\hat{\mathcal{I}}^2 = I(I + 1)\hbar^2$$

$$\hat{\mathcal{J}}^2 = J(J + 1)\hbar^2$$

$$\hat{\mathcal{L}}^2 = L(L + 1)\hbar^2$$

$$\hat{\mathcal{S}}^2 = S(S + 1)\hbar^2$$

Donde:

$\hat{\mathcal{F}}$: Momento Angular Total.

$\hat{\mathcal{I}}$: Momento Angular Nuclear.

$\hat{\mathcal{J}}$: Momento Angular Electrónico.

$\hat{\mathcal{L}}$: Momento Angular Orbital.

$\hat{\mathcal{S}}$: Momento Angular de Espín.

El número cuántico de espín del electrón S toma un único valor numérico de $\frac{1}{2}$, por el cuál la expresión antes dada del eigenvalor del Momento Angular de Espín al cuadrado queda expresada como:

$$\hat{\mathcal{S}}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2.$$

Definimos también los números cuánticos magnéticos de espín para cada momento angular:

$$m_F = -F, -(F - 1) \dots, 0, 1, 2, \dots F - 1, F.$$

$$m_I = -I, -(I - 1) \dots, 0, 1, 2, \dots I - 1, I.$$

$$m_J = -J, -(J - 1) \dots, 0, 1, 2, \dots J - 1, J.$$

$$m_L = -L, -(L - 1) \dots, 0, 1, 2, \dots L - 1, L.$$

$$m_S = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$$

A continuación proseguimos a escribir el operador potencial \hat{V} que contiene las interacciones dipolares magnéticas:

$$\hat{V} = -\hat{\mu}_I \cdot \vec{B}_J - \hat{\mu}_I \vec{B}_0 - \hat{\mu}_J \cdot \vec{B}_0, \quad (3.58)$$

en donde $\hat{\mu}_I$ y $\hat{\mu}_J$ son los operadores correspondientes a los momentos magnéticos del núcleo y del electrón, respectivamente. B_J es la inducción magnética producida por el electrón en el sitio del núcleo, y B_0 es la inducción magnética externa.

Necesitamos escribir a \hat{V} de forma conveniente para encontrar sus elementos de matriz. Los operadores de momento magnético se pueden representar como:

$$\hat{\mu}_I = \frac{g_I \mu_B}{\hbar} \hat{I},$$

$$\hat{\mu}_J = -\frac{g_J \mu_B}{\hbar} \hat{J},$$

donde g_I y g_J son los factores de Landé del núcleo y del electrón, respectivamente y μ_B es el magnetón de Bohr.

Donde:

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}.$$

Por lo tanto, el operador del potencial se puede escribir como:

$$\hat{V} = -\frac{g_I \mu_B}{\hbar} \hat{I} \cdot \vec{B}_J - \frac{g_I \mu_B}{\hbar} \hat{I} \cdot \vec{B}_0 + \frac{g_J \mu_B}{\hbar} \hat{J} \cdot \vec{B}_0. \quad (3.59)$$

El primer sumando de la ecuación anterior se puede expresar en términos de \hat{I} y \hat{J} . Si definimos la constante A como:

$$A = -\frac{g_I \mu_B}{\hbar} \frac{\vec{B}_J \hat{J}}{\hat{J}^2},$$

Para verificar de que la expresión A es correcta, debemos demostrar de que:

$$\hat{J} \cdot (\hat{J}^{-1})^2 = \hat{J}^{-1}.$$

Para esto definimos la matriz \hat{J} :

$$\hat{J} = \hbar\sqrt{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

de aquí determinamos la matriz $\hat{\mathcal{J}}^{-1}$:

$$\hat{\mathcal{J}}^{-1} = \frac{(-1)^{i+j}}{|\hat{\mathcal{J}}|} \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} \end{bmatrix}$$

el cual queda determinada como:

$$\hat{\mathcal{J}}^{-1} = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

A continuación procedemos a demostrar, primero:

$$(\hat{\mathcal{J}}^{-1})^2 = \hat{\mathcal{J}}^{-1} \cdot \hat{\mathcal{J}}^{-1} = \frac{1}{(\hbar\sqrt{2})^2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Luego:

$$\hat{\mathcal{J}} \cdot (\hat{\mathcal{J}}^{-1})^2 = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \hat{\mathcal{J}}^{-1}.$$

Una vez verificado que la expresión A es correcta y si suponemos que \vec{B}_0 apunta en la dirección z , el operador de potencial se convierte en:

$$\hat{V} = A\hat{\mathcal{L}} \cdot \hat{\mathcal{J}} - \frac{g_I\mu_B}{\hbar} B_0 \hat{\mathcal{L}}_z + \frac{g_J\mu_B}{\hbar} B_0 \hat{\mathcal{J}}_z \quad (3.60)$$

El siguiente paso consiste en escribir al producto $\hat{\mathcal{L}} \cdot \hat{\mathcal{J}}$ en función de operadores conocidos de momento angular. Expresamos explícitamente el producto $\hat{\mathcal{L}} \cdot \hat{\mathcal{J}}$:

$$\hat{\mathcal{L}} \cdot \hat{\mathcal{J}} = \hat{\mathcal{L}}_x \cdot \hat{\mathcal{J}}_x + \hat{\mathcal{L}}_y \cdot \hat{\mathcal{J}}_y + \hat{\mathcal{L}}_z \cdot \hat{\mathcal{J}}_z. \quad (3.61)$$

Por otro lado, los operadores de ascenso y descenso están definidos como:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{L}}_+ &= \hat{\mathcal{L}}_x + i\hat{\mathcal{L}}_y \\ \hat{\mathcal{L}}_- &= \hat{\mathcal{L}}_x - i\hat{\mathcal{L}}_y \\ \hat{\mathcal{J}}_+ &= \hat{\mathcal{J}}_x + i\hat{\mathcal{J}}_y \\ \hat{\mathcal{J}}_- &= \hat{\mathcal{J}}_x - i\hat{\mathcal{J}}_y \end{aligned}$$

Ahora como siguiente paso, expresaremos la ecuación (3.61) en función de operadores de ascenso y descenso:

Primer Paso: Multiplicamos el operador de ascenso \hat{L}_+ con el operador de descenso \hat{J}_-

$$\hat{L}_+ \cdot \hat{J}_- = (\hat{L}_x + i\hat{L}_y) \cdot (\hat{J}_x - i\hat{J}_y)$$

$$\hat{L}_+ \cdot \hat{J}_- = \hat{L}_x \cdot \hat{J}_x - i\hat{L}_x \cdot \hat{J}_y + i\hat{L}_y \cdot \hat{J}_x + \hat{L}_y \cdot \hat{J}_y \dots \dots \dots (I)$$

Segundo Paso: Multiplicamos el operador de descenso \hat{L}_- con el operador de ascenso \hat{J}_+

$$\hat{L}_- \cdot \hat{J}_+ = (\hat{L}_x - i\hat{L}_y) \cdot (\hat{J}_x + i\hat{J}_y)$$

$$\hat{L}_- \cdot \hat{J}_+ = \hat{L}_x \cdot \hat{J}_x + i\hat{L}_x \cdot \hat{J}_y - i\hat{L}_y \cdot \hat{J}_x + \hat{L}_y \cdot \hat{J}_y \dots \dots \dots (II)$$

Tercer Paso: Sumamos la expresión (I) y (II) y a esta expresión nueva lo dividimos entre 2

$$\hat{L}_x \cdot \hat{J}_x + \hat{L}_y \cdot \hat{J}_y = \frac{1}{2}(\hat{L}_+ \cdot \hat{J}_- + \hat{L}_- \cdot \hat{J}_+) \dots \dots \dots (III)$$

Entonces, reemplazando esta expresión (III) en la ecuación (3.61), puede ser reescrita como:

$$\hat{L} \cdot \hat{J} = \frac{1}{2}(\hat{L}_+ \cdot \hat{J}_- + \hat{L}_- \cdot \hat{J}_+) + \hat{L}_z \cdot \hat{J}_z.$$

Por lo tanto, la ecuación (3.60) se convierte en:

$$\hat{V} = \frac{A}{2}(\hat{L}_+ \cdot \hat{J}_- + \hat{L}_- \cdot \hat{J}_+) + A\hat{L}_z \cdot \hat{J}_z - \frac{g_I \mu_B}{\hbar} B_0 \hat{L}_z + \frac{g_J \mu_B}{\hbar} B_0 \hat{J}_z. \quad (3.62)$$

Para encontrar los elementos de matriz de (3.62), utilizaremos los vectores de estado $|J, I, m_J, m_I\rangle$ los cuales los abreviamos como $|m_J, m_I\rangle$. Recordemos los efectos que tienen

los operadores de momento angular sobre estos vectores:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{L}}_+|m_J, m_I\rangle &= \hbar\sqrt{(I - m_I)(I + m_I + 1)}|m_J, m_I + 1\rangle \\
\hat{\mathcal{L}}_-|m_J, m_I\rangle &= \hbar\sqrt{(I + m_I)(I - m_I - 1)}|m_J, m_I - 1\rangle \\
\hat{\mathcal{J}}_+|m_J, m_I\rangle &= \hbar\sqrt{(J - m_J)(J + m_J + 1)}|m_J + 1, m_I\rangle \\
\hat{\mathcal{J}}_-|m_J, m_I\rangle &= \hbar\sqrt{(J + m_J)(J - m_J - 1)}|m_J - 1, m_I\rangle \\
\hat{\mathcal{L}}_z|m_J, m_I\rangle &= \hbar m_I|m_J, m_I\rangle \\
\hat{\mathcal{J}}_z|m_J, m_I\rangle &= \hbar m_J|m_J, m_I\rangle
\end{aligned}$$

Utilizando las anteriores ecuaciones, podemos calcular los elementos de matriz de \hat{V} :

$$\begin{aligned}
\langle m'_J, m'_I|\hat{V}|m_J, m_I\rangle &= V_{mn} \\
&= \frac{A}{2}\langle m'_J, m'_I|\hat{\mathcal{L}}_+\hat{\mathcal{J}}_-|m_J, m_I\rangle + \frac{A}{2}\langle m'_J, m'_I|\hat{\mathcal{L}}_-\hat{\mathcal{J}}_+|m_J, m_I\rangle \\
&\quad + A\langle m'_J, m'_I|\hat{\mathcal{L}}_z\hat{\mathcal{J}}_z|m_J, m_I\rangle - \langle m'_J, m'_I|\frac{g_I\mu_B}{\hbar}B_0\hat{\mathcal{L}}_z|m_J, m_I\rangle \\
&\quad\quad\quad + \langle m'_J, m'_I|\frac{g_J\mu_B}{\hbar}B_0\hat{\mathcal{J}}_z|m_J, m_I\rangle \\
&= \frac{\hbar^2 A}{2}\sqrt{(J + m_J)(J - m_J + 1)(I - m_I)(I + m_I + 1)}\langle m'_J, m'_I|m_{J-1}, m_{I+1}\rangle \\
&\quad + \frac{\hbar^2 A}{2}\sqrt{(J - m_J)(J + m_J + 1)(I + m_I)(I - m_I - 1)}\langle m'_J, m'_I|m_{J+1}, m_{I-1}\rangle \\
&\quad\quad\quad + \hbar^2 A m_J m_I \langle m'_J, m'_I|m_J, m_I\rangle - g_I \mu_B B_0 m_I \langle m'_J, m'_I|m_J, m_I\rangle \\
&\quad\quad\quad + g_J \mu_B B_0 m_J \langle m'_J, m'_I|m_J, m_I\rangle. \\
&= \frac{\hbar^2 A}{2}\sqrt{(J + m_J)(J - m_J + 1)(I - m_I)(I + m_I + 1)}\delta_{m'_J, m_{J-1}}\delta_{m'_I, m_{I+1}} \\
&\quad + \frac{\hbar^2 A}{2}\sqrt{(J - m_J)(J + m_J + 1)(I + m_I)(I - m_I - 1)}\delta_{m'_J, m_{J+1}}\delta_{m'_I, m_{I-1}} \\
&\quad\quad\quad + \hbar^2 A m_J m_I \delta_{m'_J, m_J}\delta_{m'_I, m_I} - g_I \mu_B B_0 m_I \delta_{m'_J, m_J}\delta_{m'_I, m_I} \\
&\quad\quad\quad + g_J \mu_B B_0 m_J \delta_{m'_J, m_J}\delta_{m'_I, m_I}.
\end{aligned}$$

Para que la solución de la ecuación secular $\det(V - \delta EI) = 0$ tenga solución analítica exacta, el tamaño de la matriz correspondiente al operador debe ser de 2×2 . Esto se traduce en resolver el problema solamente para los casos en que el valor del número cuántico orbital sea cero ($L = 0$), que es el caso que nos interesa.

Con el valor del número cuántico orbital $L = 0$, el valor numérico del número cuántico J se obtiene de una manera fácil usando una expresión antes vista:

$$|L - S| \leq J \leq |L + S|$$

$$\frac{1}{2} \leq J \leq \frac{1}{2}$$

Por lo que se determina: $J = \frac{1}{2}$, entonces el número cuántico m_J puede tomar únicamente los valores de: $+\frac{1}{2}$, $-\frac{1}{2}$.

A continuación, expresaremos al número cuántico m_I en términos de m_J y m_F :

$$m_I = m_F - m_J = m_F \pm \frac{1}{2}$$

En consecuencia, para un valor dado de m_F , este sistema tiene dos posibles estados:

$$|m_J, m_I\rangle = \left| -\frac{1}{2}, m_F + \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$|m_J, m_I\rangle = \left| +\frac{1}{2}, m_F - \frac{1}{2} \right\rangle$$

Calculamos los elementos de matriz ayudados de los resultados anteriores:

$$V_{11} = \left\langle -\frac{1}{2}, m_F + \frac{1}{2} \left| \hat{V} \right| -\frac{1}{2}, m_F + \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$V_{12} = \left\langle +\frac{1}{2}, m_F - \frac{1}{2} \left| \hat{V} \right| -\frac{1}{2}, m_F + \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$V_{21} = \left\langle -\frac{1}{2}, m_F + \frac{1}{2} \left| \hat{V} \right| +\frac{1}{2}, m_F - \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$V_{22} = \left\langle +\frac{1}{2}, m_F - \frac{1}{2} \left| \hat{V} \right| +\frac{1}{2}, m_F - \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\begin{aligned}
V_{11} = & \frac{\hbar^2 A}{2} \sqrt{(J+m_J)(J-m_J+1)(I-m_I)(I+m_I+1)} \delta_{-\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}} \delta_{m_F+\frac{1}{2}, m_F+\frac{3}{2}} \\
& + \frac{\hbar^2 A}{2} \sqrt{(J-m_J)(J+m_J+1)(I+m_I)(I-m_I+1)} \delta_{-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} \delta_{m_F+\frac{1}{2}, m_F-\frac{1}{2}} \\
& + \hbar^2 A m_J m_I \delta_{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} \delta_{m_F+\frac{1}{2}, m_F+\frac{1}{2}} - g_I \mu_B B_0 m_I \delta_{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} \delta_{m_F+\frac{1}{2}, m_F+\frac{1}{2}} \\
& + g_J \mu_B B_0 m_J \delta_{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} \delta_{m_F+\frac{1}{2}, m_F+\frac{1}{2}}.
\end{aligned}$$

$$V_{11} = -\frac{1}{2} \hbar^2 A \left(m_F + \frac{1}{2} \right) - g_I \mu_B B_0 \left(m_F + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2} g_J \mu_B B_0,$$

$$\begin{aligned}
V_{12} = & \frac{\hbar^2 A}{2} \sqrt{(J+m_J)(J-m_J+1)(I-m_I)(I+m_I+1)} \delta_{+\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}} \delta_{m_F-\frac{1}{2}, m_F+\frac{3}{2}} \\
& + \frac{\hbar^2 A}{2} \sqrt{(J-m_J)(J+m_J+1)(I+m_I)(I-m_I+1)} \delta_{+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} \delta_{m_F-\frac{1}{2}, m_F-\frac{1}{2}} \\
& + \hbar^2 A m_J m_I \delta_{+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} \delta_{m_F-\frac{1}{2}, m_F+\frac{1}{2}} - g_I \mu_B B_0 m_I \delta_{+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} \delta_{m_F-\frac{1}{2}, m_F+\frac{1}{2}} \\
& + g_J \mu_B B_0 m_J \delta_{+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} \delta_{m_F-\frac{1}{2}, m_F+\frac{1}{2}}.
\end{aligned}$$

$$V_{12} = \frac{1}{2} \hbar^2 A \sqrt{\left(I + \frac{1}{2} \right)^2 - m_F^2}$$

$$\begin{aligned}
V_{21} = & \frac{\hbar^2 A}{2} \sqrt{(J+m_J)(J-m_J+1)(I-m_I)(I+m_I+1)} \delta_{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} \delta_{m_F+\frac{1}{2}, m_F+\frac{1}{2}} \\
& + \frac{\hbar^2 A}{2} \sqrt{(J-m_J)(J+m_J+1)(I+m_I)(I-m_I+1)} \delta_{-\frac{1}{2}, +\frac{3}{2}} \delta_{m_F+\frac{1}{2}, m_F-\frac{3}{2}} \\
& + \hbar^2 A m_J m_I \delta_{-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} \delta_{m_F+\frac{1}{2}, m_F-\frac{1}{2}} - g_I \mu_B B_0 m_I \delta_{-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} \delta_{m_F+\frac{1}{2}, m_F-\frac{1}{2}} \\
& + g_J \mu_B B_0 m_J \delta_{-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} \delta_{m_F+\frac{1}{2}, m_F-\frac{1}{2}}.
\end{aligned}$$

$$V_{21} = \frac{1}{2} \hbar^2 A \sqrt{\left(I + \frac{1}{2} \right)^2 - m_F^2}$$

$$\begin{aligned}
V_{22} = & \frac{\hbar^2 A}{2} \sqrt{(J+m_J)(J-m_J+1)(I-m_I)(I+m_I+1)} \delta_{+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} \delta_{m_F-\frac{1}{2}, m_F+\frac{1}{2}} \\
& + \frac{\hbar^2 A}{2} \sqrt{(J-m_J)(J+m_J+1)(I+m_I)(I-m_I+1)} \delta_{+\frac{1}{2}, +\frac{3}{2}} \delta_{m_F-\frac{1}{2}, m_F-\frac{3}{2}} \\
& + \hbar^2 A m_J m_I \delta_{+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} \delta_{m_F-\frac{1}{2}, m_F-\frac{1}{2}} - g_I \mu_B B_0 m_I \delta_{+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} \delta_{m_F-\frac{1}{2}, m_F-\frac{1}{2}} \\
& + g_J \mu_B B_0 m_J \delta_{+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} \delta_{m_F-\frac{1}{2}, m_F-\frac{1}{2}}.
\end{aligned}$$

$$V_{22} = +\frac{1}{2} \hbar^2 A \left(m_F - \frac{1}{2} \right) - g_I \mu_B B_0 \left(m_F - \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} g_J \mu_B B_0,$$

Con estos elementos de matriz se construye la ecuación secular, la cuál resulta ser una ecuación cuadrática. Las soluciones se calculan de manera usual utilizando la fórmula general para encontrar las raíces de un polinomio de segundo grado, obteniendo como resultado:

$$\delta E = -g_I \mu_B B_0 m_F - \frac{1}{4} \hbar^2 A$$

$$\pm \frac{1}{2} \sqrt{2 \hbar^2 A B_0 \mu_B (g_I + g_J) m_F + \hbar^4 A^2 \left(I + \frac{1}{2} \right)^2 + B_0^2 \mu_B^2 (g_I + g_J)^2} \quad (3.63)$$

El próximo paso consiste en encontrar el valor de A . Una forma fácil de calcularla, sin recurrir a la definición, es la siguiente: Lo que nos interesa es encontrar la energía de los niveles Zeeman correspondiente al estado base de los átomos alcalinos. Como mencionamos anteriormente, ν_{HFS} se define en función de la frecuencia de transición entre los niveles hiperfinos del estado base de estos átomos, cuyo valor a sido dado por convención internacional. Ahora analizaremos un caso simple en ausencia de inducción magnética externa ($B_0 = 0$), la ecuación (3.60) se puede escribir como:

$$\hat{V} = A \hat{I} \cdot \hat{J},$$

por otro lado, sabemos que:

$$\hat{F} = \hat{I} + \hat{J}$$

$$\hat{F}^2 = \hat{J}^2 + \hat{I}^2 + 2 \hat{I} \cdot \hat{J},$$

entonces,

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

por lo tanto:

$$\hat{V} = \frac{A}{2} (\hat{F}^2 - \hat{I}^2 - \hat{J}^2)$$

Utilizando el anterior operador, calculamos la diferencia de energía entre los niveles hiperfinos del estado base ($m_F = 0$) de los átomos alcalinos. Para ello utilizaremos la representación F, I, J , esto es, usaremos los vectores de estado:

$$|F, I, J\rangle = \left| I + \frac{1}{2}, I, \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$|F, I, J\rangle = \left| I - \frac{1}{2}, I, \frac{1}{2} \right\rangle$$

Donde:

$$F = I + \frac{1}{2} \dots (\text{NIVEL HIPERFINO SUPERIOR}).$$

$$F = I - \frac{1}{2} \dots (\text{NIVEL HIPERFINO INFERIOR}).$$

Entonces:

$$\begin{aligned} \hat{V} \left| I + \frac{1}{2}, I, \frac{1}{2} \right\rangle &= \delta E_F \left| I + \frac{1}{2}, I, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \hat{V} \left| I - \frac{1}{2}, I, \frac{1}{2} \right\rangle &= \delta E_{F-1} \left| I - \frac{1}{2}, I, \frac{1}{2} \right\rangle, \end{aligned}$$

por lo que la diferencia de energía es:

$$\delta E_F - \delta E_{F-1} = E_{HFS} = \frac{1}{2} \hbar^2 A (2I + 1),$$

es decir,

$$A = \frac{2E_{HFS}}{\hbar^2(2I + 1)}$$

Aquí E_{HFS} representa la energía de separación de los niveles hiperfinos de los átomos alcalinos en el estado base ($m_F = 0$) y esta dada como $E_{HFS} = h\nu_{HFS}$, donde $\nu_{HFS} = 9,192631770 \times 10^9 \text{ Hz}$, corresponde a la frecuencia de transición entre estos niveles hiperfinos para el átomo alcalino de Cs - 133.

Finalmente, y usando el valor encontrado de A la ecuación (3.63) para encontrar el corrimiento de la energía de los niveles hiperfinos de los átomos alcalinos se reescribe como:

$$\begin{aligned} \delta E &= -\frac{h\nu_{HFS}}{2(2I + 1)} - g_I \mu_B m_F B_0 \\ &\pm \frac{1}{2} h\nu_{HFS} \sqrt{1 + \frac{4m_F \mu_B (g_I + g_J)}{2I + 1} \frac{B_0}{h\nu_{HFS}} + \frac{\mu_B^2 (g_I + g_J)^2}{h^2 \nu_{HFS}^2} B_0^2}, \end{aligned} \quad (3.64)$$

la cual es conocida como la ecuación de BREIT-RABI. El signo “+” en la raíz cuadrada corresponde al nivel hiperfino superior F , mientras que el signo “-” corresponde al nivel inferior ($F - 1$).

Para nuestro caso en particular analizaremos la ecuación de BREIT-RABI del átomo de Cs - 133 para un nivel hiperfino superior $F = 4$ y un nivel hiperfino inferior $F = 3$. Para ello seguiremos los siguientes pasos:

Primer Paso: Calcularemos el Número Cuántico Nuclear I :

De lo expresado anteriormente, el nivel hiperfino superior F se calcula como:

$$F = I + J.$$

Entonces para un $F = 4$ y un $J = \frac{1}{2}$, tenemos que:

$$4 = I + \frac{1}{2}$$
$$I = \frac{7}{2}$$

Segundo Paso: Calcularemos el Factor de Lánde del electrón g_J .

Como sabemos el factor de Lánde del electrón g_J se encuentra expresado como:

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}.$$

A está expresión reemplazamos los números cuánticos obtenidos para nuestro caso de estudio: $L = 0$, $J = \frac{1}{2}$ y $S = \frac{1}{2}$, por lo que se obtiene:

$$g_J = 2$$

Tercer Paso: Calcularemos los Números Cuánticos Magnéticos asociados a F

Para $F = 3$:

- $m_F = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$

Para $F = 4$:

- $m_F = -4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4$

Cuarto Paso: Reemplazar todos los valores obtenidos en la Ecuación de Breit - Rabi para encontrar los Corrimientos de Energía de los Niveles Hiperfinos $F = 4$ y $F = 3$.

$$h = 6,63 \times 10^{-34} J \times s$$

$$\mu_B = 9,27 \times 10^{-24} J/Tesla$$

$$\nu_{HFS} = 9,192631770 \times 10^9 Hz$$

$$g_I = 1$$

$$g_J = 2$$

$$I = \frac{7}{2}$$

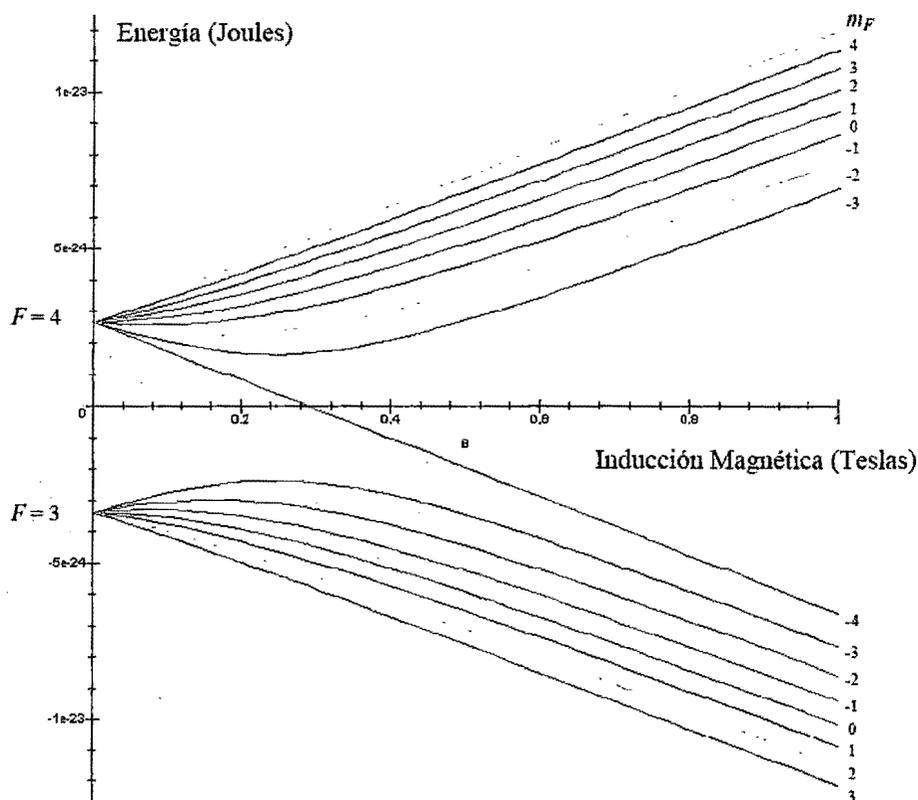


Figura 1. Gráfica de la ecuación de Breit-Rabi para el estado base del Cesio 133.

3.4.3. Expresión analítica del cálculo de la frecuencia de transición entre los niveles hiperfinos de los átomos alcalinos en un campo magnético externo pequeño

De la ecuación (3.64) podemos despejar la inducción magnética B_0 , para ello calculamos la expresión de la energía asociada a la transición de un nivel hiperfino inferior a un nivel inmediato hiperfino superior de un mismo número cuántico magnético total $|F, m_F\rangle \rightarrow |F - 1, m_F\rangle$ está dada por:

$$\begin{aligned} \delta E(F, m_F) - \delta E(F - 1, m_F) &= h\nu \\ &= h\nu_{HFS} \sqrt{1 + \frac{4m_F}{2I + 1} \frac{\mu_B(g_I + g_J)}{h\nu_{HFS}} B_0 + \frac{\mu_B^2(g_I + g_J)^2}{h^2\nu_{HFS}^2} B_0^2} \end{aligned} \quad (3.65)$$

De la ecuación anterior (3.65) podemos obtener a B_0

$$B_0 = \frac{h\nu_{HFS}}{(g_I + g_J)\mu_B} \left(-\frac{2m_F}{2I + 1} \pm \sqrt{\frac{4m_F^2}{(2I + 1)^2} + \frac{\nu^2}{\nu_{HFS}^2} - 1} \right) \quad (3.66)$$

En donde el signo más en la raíz se utiliza para $m_F \geq 0$ y el signo menos para $m_F = 0$.

Cabe hacer notar que utilizando la ecuación (3.65) se puede justificar el hecho de que la frecuencia correspondiente a la transición $|6^2S_{\frac{1}{2}}, F = 3, m_F = 0\rangle$ a $|6^2S_{\frac{1}{2}}, F = 4, m_F = 0\rangle$, para el átomo alcalino del Cs - 133 en campos magnéticos pequeños sea la más cercana a la frecuencia que define a la frecuencia hiperfina de separación (ν_{HFS}) LÓPEZ, DOMÍNGUEZ y DE CARLOS [4]. Esto se verifica haciendo un desarrollo de series de Taylor de (3.65) alrededor de B_0 :

$$\nu(B_0) = \nu_{HFS} + \frac{2m_F}{2I + 1} \frac{(g_I + g_J)\mu_B}{h} B_0 + \frac{1}{2} \frac{(g_I + g_J)^2 \mu_B^2}{h^2 \nu_{HFS}^2} \left[1 - \frac{4m_F^2}{(2I + 1)^2} \right] B_0^2 + \dots$$

De la ecuación anterior se puede ver claramente que para $m_F \neq 0$ la frecuencia de transición depende linealmente de B_0 , mientras que para $m_F = 0$ la dependencia es cuadrática.

Adicionalmente hacemos notar que los valores típicos de B_0 en nuestro caso son del orden de 10^{-6} Teslas.

Capítulo 4

Materiales y Métodos

4.1. Materiales

El presente trabajo experimental - computacional no fue sometido a experimentación en el laboratorio.

En este sentido, se ha desarrollado en base a libros especializados en el tema, además de artículos científicos relacionados a nuestro tema de investigación.

La presente tesis ha sido realizada íntegramente en Latex (MikTeX 2.9). Además, se utilizó el uso del programa de Matlab 2011, el cuál ha sido utilizado como herramienta para la obtención de gráficas de los corrimientos energéticos y de las frecuencias de transición entre los niveles hiperfinos ($F = 3$ y $F = 4$) y ($F = 4$ y $F = 5$) para el átomo de Cs - 133 y para el átomo de Rb - 85, haciendo variar el campo magnético externo, cuya magnitud es del orden de 10^{-6} Teslas.

4.1.1. Latex

Es un programa o software muy usado especialmente en la creación de libros, documentos científicos y técnicos que contengan fórmulas matemáticas, que está formado mayoritariamente por órdenes construidas a partir de comandos de TeX.

4.1.2. Matlab

Es un programa o software muy usado en universidades y centros de investigación y desarrollo para la implementación de algoritmos y realizar cálculos numéricos con vectores y matrices. Como caso particular puede trabajar también con números escalares tanto reales como complejos. Una de las capacidades más atractivas es la de realizar una amplia variedad de gráficos de datos y funciones en dos y en tres dimensiones. Matlab tiene también un lenguaje de programación propio, el cual se puede arrancar como cualquier otro programa de WINDOWS.

4.2. Métodos

Para el presente trabajo de investigación, se ha utilizado métodos analíticos, para este caso el cálculo de los corrimientos de energía y frecuencia de transición entre niveles hiperfinos, el cual tiene relación con la estructura hiperfina de los átomos alcalinos.

Debido a la naturaleza experimental del presente trabajo, el método de estudio es del tipo cuantitativo - cualitativo y analítico; en el cual en primer lugar fue necesario el entendimiento de la problemática física y de las ecuaciones que rigen su estudio. Además, se utilizó literatura especializada, que incluye textos y revistas científicas, las cuales proporcionaron diferentes expresiones y cálculos; como es el caso de la Ecuación de Breit - Rabi y de la Expresión Analítica del Cálculo de la Frecuencia de Transición entre Niveles Hiperfinos para los átomos alcalinos.

Capítulo 5

Resultados

5.1. Cálculo de los Corrimientos de Energía en los Niveles Hiperfinos para el átomo alcalino del Cs - 133 en un Campo Magnético ($B_0 = 2 \times 10^{-6} \text{Teslas}$)

- Para un $F = 3$ y $F = 4$:

Primer Paso: Calcularemos el Número Cuántico Nuclear I :

De lo expresado anteriormente, el nivel hiperfino superior F se calcula como:

$$F = I + J.$$

Entonces para un $F = 4$ y un $J = \frac{1}{2}$, tenemos que:

$$4 = I + \frac{1}{2}$$
$$I = \frac{7}{2}$$

Segundo Paso: Calcularemos la energía de separación hiperfina para un campo magnético $B_0 = 0$.

$$h\nu_{HFS} = (6,63 \times 10^{-34} \text{ J} \times \text{s})(9,192631770 \times 10^9 \text{ Hz}) = 60,9469 \times 10^{-25} \text{ J}$$

Tercer Paso: Calcularemos los Números Cuánticos Magnéticos asociados a F

Para $F = 3$:

- $m_F = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$

Para F = 4:

- $m_F = -4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4$

Cuarto Paso: Reemplazar todos los valores obtenidos en la Ecuación de Breit - Rabi.

$$h\nu_{HFS} = 60,9469 \times 10^{-25} J$$

$$\mu_B = 9,27 \times 10^{-24} J/Tesla$$

$$g_I = 1$$

$$g_J = 2$$

$$I = \frac{7}{2}$$

Por lo que los Corrimientos de Energía para el átomo alcalino del Cs - 133 queda:

- **Para un F = 3:**

$$\begin{aligned} \delta E_{(F=3)} = & -3,8092 \times 10^{-25} J - 0,927 \times 10^{-25} J/Teslas.(m_F).(2 \times 10^{-6} Teslas) \\ & -30,47345 \times 10^{-25} J \times \sqrt{1 + 2,2815(m_F).(2 \times 10^{-6}) + 20,82(2 \times 10^{-6})^2} \end{aligned}$$

Entonces:

$$\delta E_{(m_F=-3)} \approx -3,42820843 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=-2)} \approx -3,42822492 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=-1)} \approx -3,42824646 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=0)} \approx -3,42826500 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=1)} \approx -3,42828354 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=2)} \approx -3,42829402 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=3)} \approx -3,42832026 \times 10^{-24} J$$

- **Para un F = 4:**

$$\begin{aligned} \delta E_{(F=4)} = & -3,8092 \times 10^{-25} J - 0,927 \times 10^{-25} J/Teslas.(m_F).(2 \times 10^{-6} Teslas) \\ & +30,47345 \times 10^{-25} J \times \sqrt{1 + 2,2815(m_F).(2 \times 10^{-6}) + 20,82(2 \times 10^{-6})^2} \end{aligned}$$

Entonces:

$$\delta E_{(m_F=4)} \approx +2,66650542 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=3)} \approx +2,66648037 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=2)} \approx +2,66646248 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=1)} \approx +2,66644354 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=0)} \approx +2,66642500 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=-1)} \approx +2,66640646 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=-2)} \approx +2,66638426 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=-3)} \approx +2,66636292 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=-4)} \approx +2,66634326 \times 10^{-24} J$$

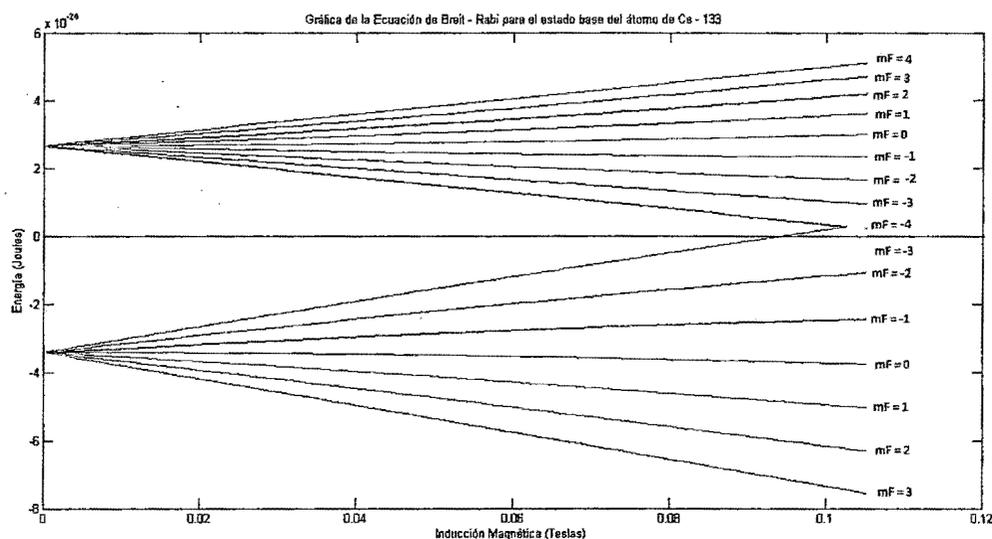


Figura 5.1: Gráfica de la Ecuación de Breit - Rabi para los niveles hiperfinos ($F = 3$) y ($F = 4$) del estado base del Cs - 133

- Para un $F = 4$ y $F = 5$:

Primer Paso: Calcularemos el Número Cuántico Nuclear I :

De lo expresado anteriormente, el nivel hiperfino superior F se calcula como:

$$F = I + J.$$

Entonces para un $F = 4$ y un $J = \frac{1}{2}$, tenemos que:

$$5 = I + \frac{1}{2}$$

$$I = \frac{9}{2}$$

Segundo Paso: Calcularemos la energía de separación hiperfina para un campo magnético $B_0 = 0$.

$$h\nu_{HFS} = (6,63 \times 10^{-34} J \times s)(9,192631770 \times 10^9 Hz) = 60,9469 \times 10^{-25} J$$

Tercer Paso: Calcularemos los Números Cuánticos Magnéticos asociados a F

Para $F = 4$:

- $m_F = -4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4$

Para $F = 5$:

- $m_F = -5, -4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4, 5$

Cuarto Paso: Reemplazar todos los valores obtenidos en la Ecuación de Breit - Rabi.

$$h\nu_{HFS} = 60,9469 \times 10^{-25} J$$

$$\mu_B = 9,27 \times 10^{-24} J/Tesla$$

$$g_I = 1$$

$$g_J = 2$$

$$I = \frac{9}{2}$$

Por lo que los Corrimientos de Energía para el átomo alcalino del Cs - 133 queda:

- **Para un $F = 4$:**

$$\delta E_{(F=4)} = -3,047345 \times 10^{-25} J - 0,927 \times 10^{-25} J/Teslas.(m_F).(2 \times 10^{-6} Teslas)$$

$$-30,47345 \times 10^{-25} J \times \sqrt{1 + 1,8252(m_F).(2 \times 10^{-6}) + 20,82(2 \times 10^{-6})^2}$$

Entonces:

$$\delta E_{(m_F=-4)} \approx -3,35198426 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=-3)} \approx -3,35202048 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=-2)} \approx -3,35204052 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=-1)} \approx -3,35206096 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=0)} \approx -3,35208000 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=1)} \approx -3,35209804 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=2)} \approx -3,35210206 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=3)} \approx -3,35212072 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=4)} \approx -3,35214436 \times 10^{-24} J$$

■ Para un $F = 5$:

$$\begin{aligned} \delta E_{(F=5)} = & -3,047345 \times 10^{-25} J - 0,927 \times 10^{-25} J/\text{Teslas} \cdot (m_F) \cdot (2 \times 10^{-6} \text{Teslas}) \\ & + 30,47345 \times 10^{-25} J \times \sqrt{1 + 1,8252(m_F) \cdot (2 \times 10^{-6}) + 20,82(2 \times 10^{-6})^2} \end{aligned}$$

Entonces:

$$\delta E_{(m_F=5)} \approx +2,74270381 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=4)} \approx +2,74268579 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=3)} \approx +2,74266026 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=2)} \approx +2,74264802 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=1)} \approx +2,74262904 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=0)} \approx +2,74261100 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=-1)} \approx +2,74259196 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=-2)} \approx +2,74258248 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=-3)} \approx +2,74257325 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=-4)} \approx +2,74256820 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=-5)} \approx +2,74255462 \times 10^{-24} J$$

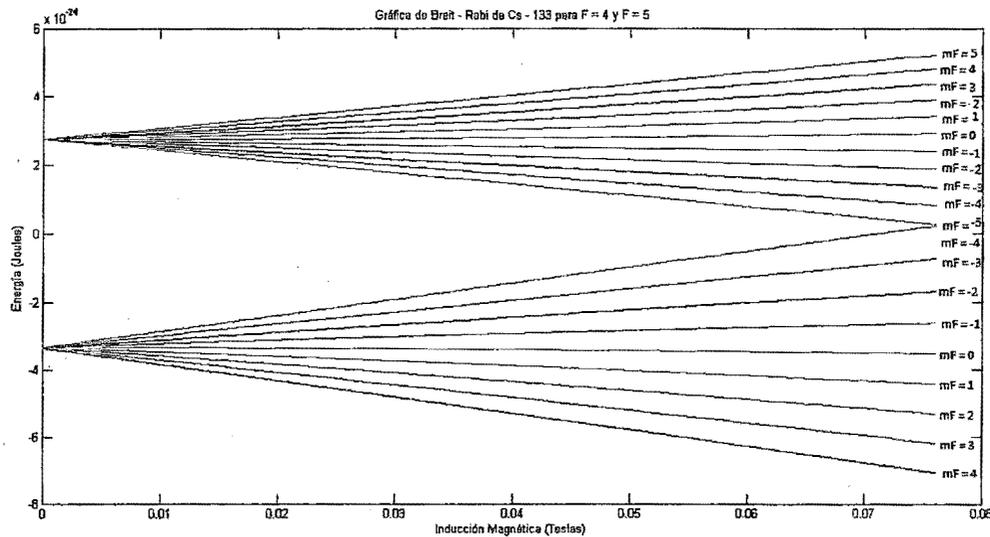


Figura 5.2: Gráfica de la Ecuación de Breit - Rabi para los niveles hiperfinos ($F = 4$) y ($F = 5$) del estado base del Cs - 133

5.2. Cálculo de los Corrimientos de Energía para el átomo alcalino del Rb - 85 en los Niveles Hiperfinos en un Campo Magnético ($B_0 = 2 \times 10^{-6} \text{ Teslas}$)

■ Para un $F = 3$ y $F = 4$:

Primer Paso: Calcularemos el Número Cuántico Nuclear I :

De lo expresado anteriormente, el nivel hiperfino superior F se calcula como:

$$F = I + J.$$

Entonces para un $F = 4$ y un $J = \frac{1}{2}$, tenemos que:

$$4 = I + \frac{1}{2}$$

$$I = \frac{7}{2}$$

Segundo Paso: Calcularemos la energía de separación hiperfina para un campo magnético $B_0 = 0$.

$$h\nu_{HFS} = (6,63 \times 10^{-34} \text{ J} \times \text{s})(6,8 \times 10^9 \text{ Hz}) = 45,084 \times 10^{-25} \text{ J}$$

Tercer Paso: Calcularemos los Números Cuánticos Magnéticos asociados a F

Para $F = 3$:

$$\blacksquare m_F = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$$

Para $F = 4$:

$$\blacksquare m_F = -4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4$$

Cuarto Paso: Reemplazar todos los valores obtenidos en la Ecuación de Breit - Rabi.

$$h\nu_{HFS} = 45,084 \times 10^{-25} J$$

$$\mu_B = 9,27 \times 10^{-24} J/Tesla$$

$$g_I = 1$$

$$g_J = 2$$

$$I = \frac{7}{2}$$

Por lo que los Corrimientos de Energía para el átomo alcalino del Rb - 85 queda:

■ Para un $F = 3$:

$$\begin{aligned} \delta E_{(F=3)} = & -2,81775 \times 10^{-25} J - 0,927 \times 10^{-25} J/Teslas.(m_F).(2 \times 10^{-6} Teslas) \\ & - 22,542 \times 10^{-25} J \times \sqrt{1 + 3,084(m_F).(2 \times 10^{-6}) + 38,04(2 \times 10^{-6})^2} \end{aligned}$$

Entonces:

$$\delta E_{(m_F=-3)} \approx -2,53591938 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=-2)} \approx -2,53593792 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=-1)} \approx -2,53595646 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=0)} \approx -2,53597500 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=1)} \approx -2,53599354 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=2)} \approx -2,53601208 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=3)} \approx -2,53603062 \times 10^{-24} J$$

■ Para un $F = 4$:

$$\delta E_{(F=4)} = -2,81775 \times 10^{-25} J - 0,927 \times 10^{-25} J/\text{Teslas} \cdot (m_F) \cdot (2 \times 10^{-6} \text{ Teslas}) \\ + 22,542 \times 10^{-25} J \times \sqrt{1 + 3,084(m_F) \cdot (2 \times 10^{-6}) + 38,04(2 \times 10^{-6})^2}$$

Entonces:

$$\delta E_{(m_F=4)} \approx +1,97249916 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=3)} \approx +1,97248062 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=2)} \approx +1,97246208 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=1)} \approx +1,97244354 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=0)} \approx +1,97242500 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=-1)} \approx +1,97240646 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=-2)} \approx +1,97238792 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=-3)} \approx +1,97236938 \times 10^{-24} J$$

$$\delta E_{(m_F=-4)} \approx +1,97235084 \times 10^{-24} J$$

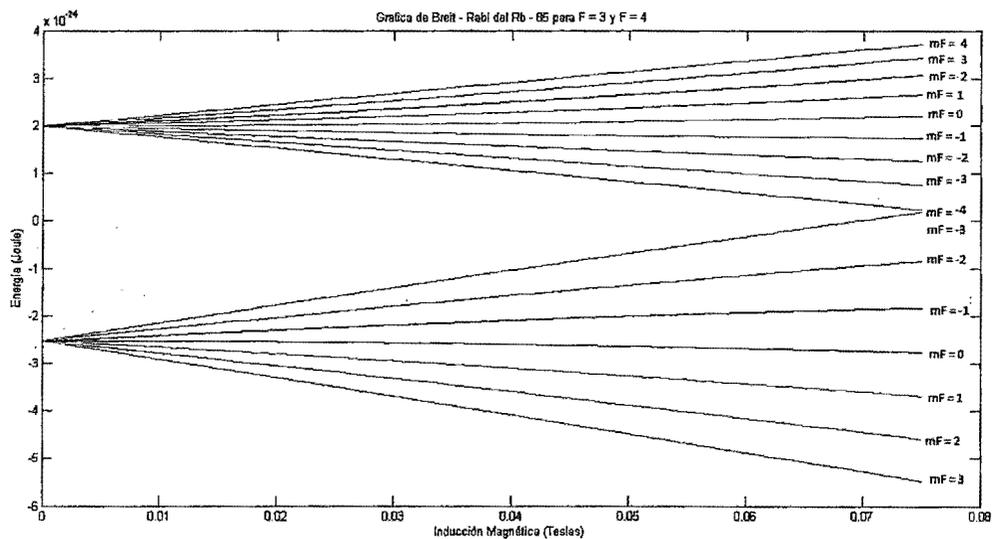


Figura 5.3: Gráfica de la ecuación de Breit - Rabi para los niveles hiperfinos ($F = 3$) y ($F = 4$) del estado base del Rb - 85

■ Para un $F = 4$ y $F = 5$:

Primer Paso: Calcularemos el Número Cuántico Nuclear I :

De lo expresado anteriormente, el nivel hiperfino superior F se calcula como:

$$F = I + J.$$

Entonces para un $F = 4$ y un $J = \frac{1}{2}$, tenemos que:

$$5 = I + \frac{1}{2}$$
$$I = \frac{9}{2}$$

Segundo Paso: Calcularemos la energía de separación hiperfina para un campo magnético $B_0 = 0$.

$$h\nu_{HFS} = (6,63 \times 10^{-34} J \times s)(6,8 \times 10^9 Hz) = 45,084 \times 10^{-25} J$$

Tercer Paso: Calcularemos los Números Cuánticos Magnéticos asociados a F

Para $F = 4$:

$$\blacksquare m_F = -4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4$$

Para $F = 5$:

$$\blacksquare m_F = -5, -4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4, 5$$

Cuarto Paso: Reemplazar todos los valores obtenidos en la Ecuación de Breit - Rabi.

$$h\nu_{HFS} = 45,084 \times 10^{-25} J$$

$$\mu_B = 9,27 \times 10^{-24} J/Tesla$$

$$g_I = 1$$

$$g_J = 2$$

$$I = \frac{9}{2}$$

Por lo que los Corrimientos de Energía para el átomo alcalino del Rb - 85 queda:

$$\blacksquare \text{ Para un } F = 4:$$

$$\begin{aligned}\delta E_{(F=4)} &= -2,2542 \times 10^{-25} J - 0,927 \times 10^{-25} J/\text{Teslas} \cdot (m_F) \cdot (2 \times 10^{-6} \text{Teslas}) \\ &\quad - 22,542 \times 10^{-25} J \times \sqrt{1 + 2,4672(m_F) \cdot (2 \times 10^{-6}) + 38,04(2 \times 10^{-6})^2}\end{aligned}$$

Entonces:

$$\begin{aligned}\delta E_{(m_F=-4)} &\approx -2,47954584 \times 10^{-24} J \\ \delta E_{(m_F=-3)} &\approx -2,47956438 \times 10^{-24} J \\ \delta E_{(m_F=-2)} &\approx -2,47958292 \times 10^{-24} J \\ \delta E_{(m_F=-1)} &\approx -2,47960146 \times 10^{-24} J \\ \delta E_{(m_F=0)} &\approx -2,47962000 \times 10^{-24} J \\ \delta E_{(m_F=1)} &\approx -2,47963854 \times 10^{-24} J \\ \delta E_{(m_F=2)} &\approx -2,47965708 \times 10^{-24} J \\ \delta E_{(m_F=3)} &\approx -2,47967562 \times 10^{-24} J \\ \delta E_{(m_F=4)} &\approx -2,47969416 \times 10^{-24} J\end{aligned}$$

■ Para un $F = 5$:

$$\begin{aligned}\delta E_{(F=5)} &= -2,2542 \times 10^{-25} J - 0,927 \times 10^{-25} J/\text{Teslas} \cdot (m_F) \cdot (2 \times 10^{-6} \text{Teslas}) \\ &\quad + 22,542 \times 10^{-25} J \times \sqrt{1 + 2,4672(m_F) \cdot (2 \times 10^{-6}) + 38,04(2 \times 10^{-6})^2}\end{aligned}$$

Entonces:

$$\begin{aligned}\delta E_{(m_F=5)} &\approx +2,02884062 \times 10^{-24} J \\ \delta E_{(m_F=4)} &\approx +2,02883921 \times 10^{-24} J \\ \delta E_{(m_F=3)} &\approx +2,02882604 \times 10^{-24} J \\ \delta E_{(m_F=2)} &\approx +2,02881708 \times 10^{-24} J \\ \delta E_{(m_F=1)} &\approx +2,02879854 \times 10^{-24} J \\ \delta E_{(m_F=0)} &\approx +2,02878000 \times 10^{-24} J \\ \delta E_{(m_F=-1)} &\approx +2,02876146 \times 10^{-24} J \\ \delta E_{(m_F=-2)} &\approx +2,02874292 \times 10^{-24} J \\ \delta E_{(m_F=-3)} &\approx +2,02872105 \times 10^{-24} J \\ \delta E_{(m_F=-4)} &\approx +2,02871321 \times 10^{-24} J\end{aligned}$$

$$\delta E_{(m_F=-5)} \approx +2,02870294 \times 10^{-24} J$$

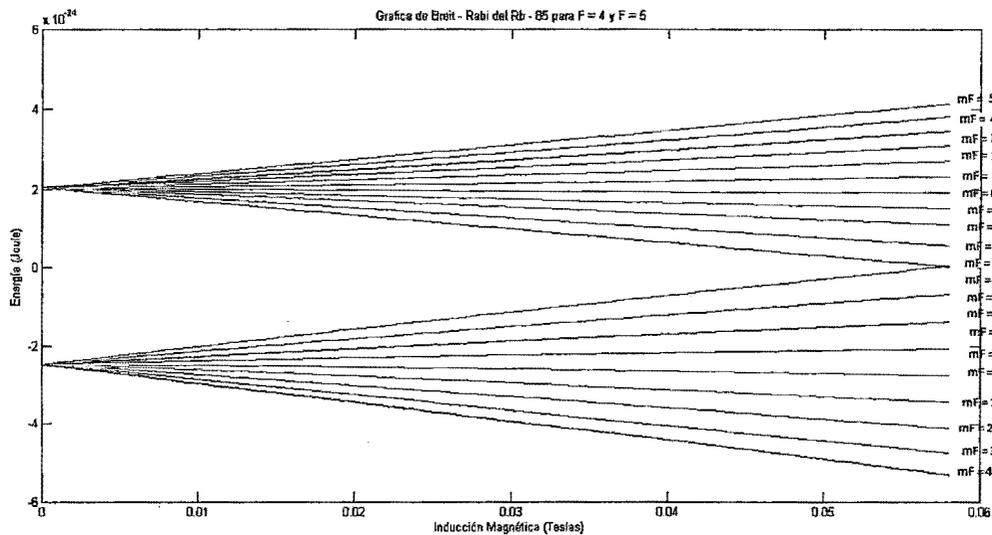


Figura 5.4: Gráfica de la ecuación de Breit - Rabi para los niveles hiperfinos ($F = 4$) y ($F = 5$) del estado base del Rb - 85

5.3. Cálculo de las Frecuencias de Transición entre los Niveles Hiperfinos para el átomo alcalino del Cs - 133 en un Campo Magnético ($B_0 = 2 \times 10^{-6} \text{ Teslas}$)

- Para un $F = 3$ y $F = 4$:

Reemplazando todos los valores obtenidos en la Expresión Analítica del Cálculo de la Frecuencia de Transición entre los Niveles Hiperfinos.

$$h = 6,63 \times 10^{-34} J \times s$$

$$\mu_B = 9,27 \times 10^{-24} J/\text{Tesla}$$

$$\nu_{HFS} = 9,1926 \times 10^9 \text{ Hz}$$

$$g_I = 1$$

$$g_J = 2$$

$$I = \frac{7}{2}$$

$$\blacksquare m_F = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$$

Se obtiene la siguiente expresión simplificada:

$$\nu(B_0) = 9,1926 \times 10^9 \text{ Hz} + 1,04865 \times 10^{10} \text{ Hz/teslas}(m_F)(B_0)$$

Entonces:

$$\nu B_{(m_F=-3)} \approx 0,919253708 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

$$\nu B_{(m_F=-2)} \approx 0,919255805 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

$$\nu B_{(m_F=-1)} \approx 0,919257902 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

$$\nu B_{(m_F=0)} \approx 0,91926 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

$$\nu B_{(m_F=1)} \approx 0,919262097 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

$$\nu B_{(m_F=2)} \approx 0,919264194 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

$$\nu B_{(m_F=3)} \approx 0,919266291 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

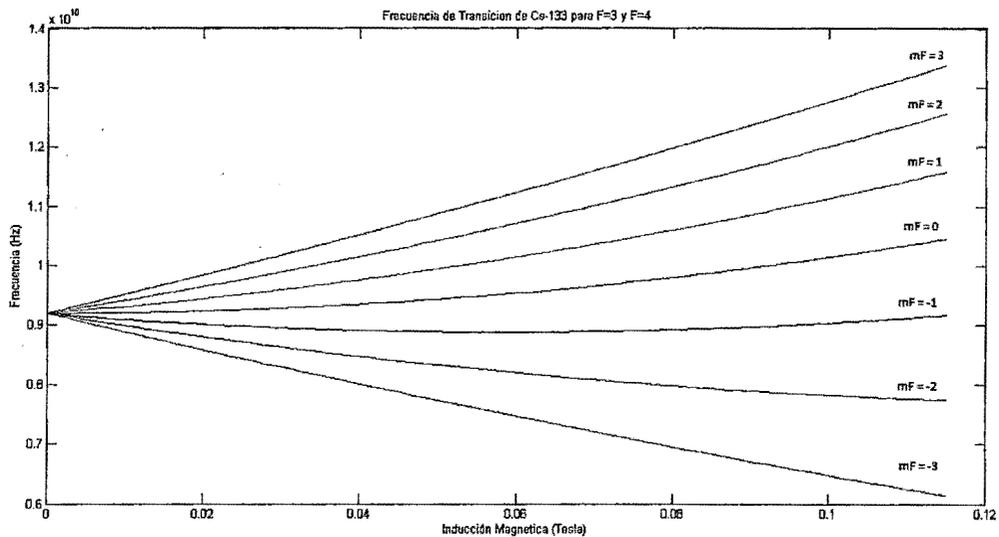


Figura 5.5: Gráfica de la Frecuencia de Transición entre los niveles hiperfinos ($F = 3$) y ($F = 4$) del estado base del Cs - 133

$$\blacksquare \text{ Para un } F = 4 \text{ y } F = 5:$$

Reemplazando todos los valores obtenidos en la Expresión Analítica del Cálculo de la Frecuencia de Transición entre los Niveles Hiperfinos.

$$h = 6,63 \times 10^{-34} J \times s$$

$$\mu_B = 9,27 \times 10^{-24} J/Tesla$$

$$\nu_{HFS} = 9,1926 \times 10^9 Hz$$

$$g_I = 1$$

$$g_J = 2$$

$$I = \frac{9}{2}$$

$$\blacksquare m_F = -4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4$$

Se obtiene la siguiente expresión simplificada:

$$\nu(B_0) = 9,1926 \times 10^9 Hz + 0,83892 \times 10^{10} Hz/teslas(m_F)(B_0)$$

Entonces:

$$\nu B_{(m_F=-4)} \approx 0,919253288 \times 10^{10} Hz$$

$$\nu B_{(m_F=-3)} \approx 0,919254966 \times 10^{10} Hz$$

$$\nu B_{(m_F=-2)} \approx 0,919256644 \times 10^{10} Hz$$

$$\nu B_{(m_F=-1)} \approx 0,919258322 \times 10^{10} Hz$$

$$\nu B_{(m_F=0)} \approx 0,91926 \times 10^{10} Hz$$

$$\nu B_{(m_F=1)} \approx 0,919261677 \times 10^{10} Hz$$

$$\nu B_{(m_F=2)} \approx 0,919263355 \times 10^{10} Hz$$

$$\nu B_{(m_F=3)} \approx 0,919265033 \times 10^{10} Hz$$

$$\nu B_{(m_F=4)} \approx 0,919266711 \times 10^{10} Hz$$

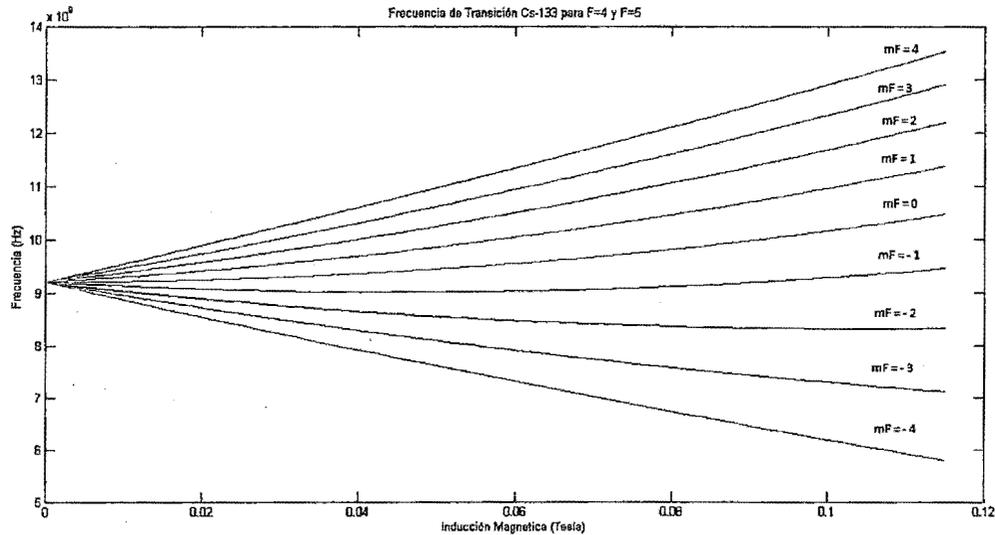


Figura 5.6: Gráfica de la Frecuencia de Transición entre los niveles hiperfinos ($F = 4$) y ($F = 5$) del estado base del Cs - 133

5.4. Cálculo de las Frecuencias de Transición entre los Niveles Hiperfinos para el átomo alcalino del Rb - 85 en un Campo Magnético ($B_0 = 2 \times 10^{-6} \text{ Teslas}$)

- Para un $F = 3$ y $F = 4$:

Reemplazando todos los valores obtenidos en la Expresión Analítica del Cálculo de la Frecuencia de Transición entre los Niveles Hiperfinos.

$$h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J} \times \text{s}$$

$$\mu_B = 9,27 \times 10^{-24} \text{ J/Tesla}$$

$$\nu_{HFS} = 6,8 \times 10^9 \text{ Hz}$$

$$g_I = 1$$

$$g_J = 2$$

$$I = \frac{7}{2}$$

- $m_F = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$

Se obtiene la siguiente expresión simplificada:

$$\nu(B_0) = 6,8 \times 10^9 \text{ Hz} + 1,04865 \times 10^{10} \text{ Hz/teslas}(m_F)(B_0)$$

Entonces:

$$\nu B_{(m_F=-3)} \approx 0,679993708 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

$$\nu B_{(m_F=-2)} \approx 0,679995805 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

$$\nu B_{(m_F=-1)} \approx 0,679997902 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

$$\nu B_{(m_F=0)} \approx 0,68 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

$$\nu B_{(m_F=1)} \approx 0,680002097 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

$$\nu B_{(m_F=2)} \approx 0,680004194 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

$$\nu B_{(m_F=3)} \approx 0,680006291 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

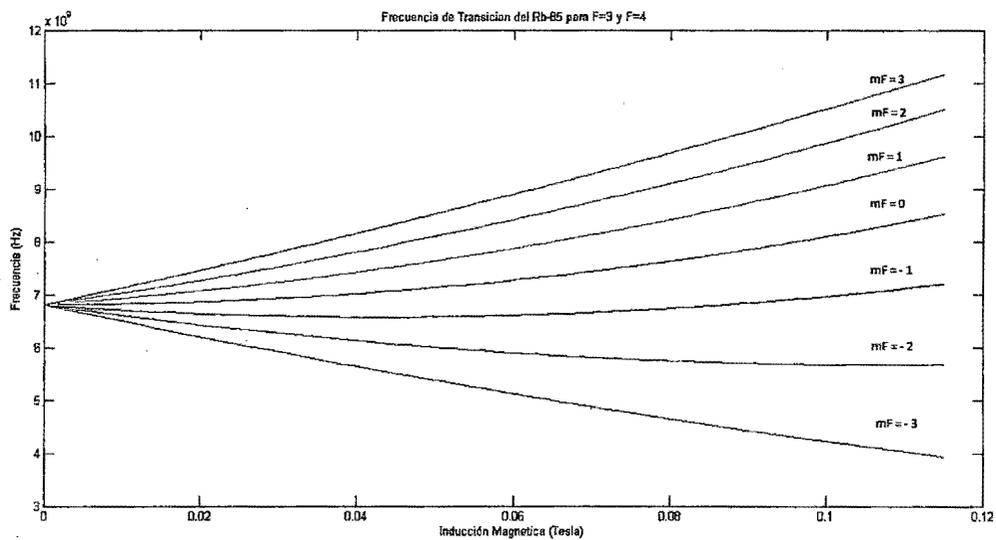


Figura 5.7: Gráfica de la Frecuencia de Transición entre los niveles hiperfinos ($F = 3$) y ($F = 4$) del estado base del Rb - 85

■ Para un $F = 4$ y $F = 5$:

Reemplazando todos los valores obtenidos en la Expresión Analítica del Cálculo de la Frecuencia de Transición entre los Niveles Hiperfinos.

$$h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J} \times \text{s}$$

$$\mu_B = 9,27 \times 10^{-24} \text{ J/Tesla}$$

$$\nu_{HFS} = 6,8 \times 10^9 \text{ Hz}$$

$$g_I = 1$$

$$g_J = 2$$

$$I = \frac{9}{2}$$

$$\blacksquare m_F = -4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4$$

Se obtiene la siguiente expresión simplificada:

$$\nu(B_0) = 6,8 \times 10^9 \text{ Hz} + 0,83892 \times 10^{10} \text{ Hz/teslas}(m_F)(B_0)$$

Entonces:

$$\nu B_{(m_F=-4)} \approx 0,679993288 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

$$\nu B_{(m_F=-3)} \approx 0,679994966 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

$$\nu B_{(m_F=-2)} \approx 0,679996644 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

$$\nu B_{(m_F=-1)} \approx 0,679998322 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

$$\nu B_{(m_F=0)} \approx 0,68 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

$$\nu B_{(m_F=1)} \approx 0,680001677 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

$$\nu B_{(m_F=2)} \approx 0,680003355 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

$$\nu B_{(m_F=3)} \approx 0,680005033 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

$$\nu B_{(m_F=4)} \approx 0,680006711 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

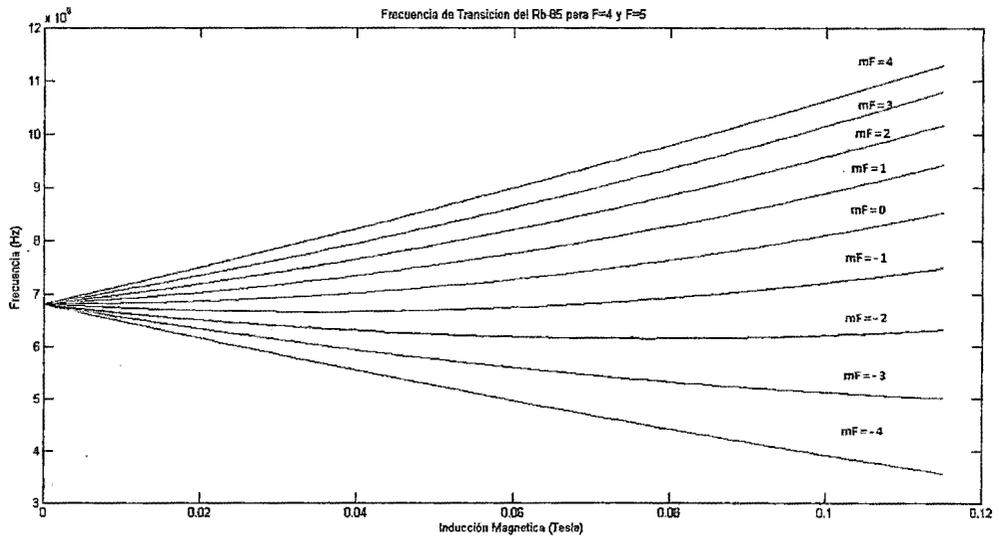


Figura 5.8: Gráfica de la Frecuencia de Transición entre los niveles hiperfinos ($F = 4$) y ($F = 5$) del estado base del Rb - 85

Capítulo 6

Discusión

En el presente trabajo de tesis, existen varios puntos de discusión uno de ellos son los resultados obtenidos de los corrimientos energéticos entre los niveles hiperfinos ($F = 4$ y $F = 5$) para el átomo de Cs - 133 en un campo magnético de $B_0 = 2 \times 10^{-6}$ Teslas, del cual se observó que tienen el mismo comportamiento que los resultados obtenidos anteriormente en la publicación de LÓPEZ, DOMÍNGUEZ y DE CARLOS [4] entre los niveles hiperfinos ($F = 3$) y ($F = 4$), por lo que podemos tener fiabilidad de nuestros resultados obtenidos.

Por otro lado los resultados obtenidos de los corrimientos energéticos entre los niveles hiperfinos ($F = 3$ y $F = 4$) y ($F = 4$ y $F = 5$) para el átomo de Rb - 85 en un campo magnético de $B_0 = 2 \times 10^{-6}$ Teslas, tienen el mismo comportamiento que los resultados obtenidos para el átomo de Cs - 133 con la diferencia de que los corrimientos energéticos del átomo de Cs - 133 es mayor a los del átomo de Rb - 85.

En relación a los valores obtenidos de las frecuencias de transición entre los niveles hiperfinos ($F = 3$ y $F = 4$) y ($F = 4$ y $F = 5$) del átomo de Cs - 133 y Rb - 85 se notó que es mayor en el átomo del Cs - 133, por lo que el átomo de Cs - 133 tiene una mayor energía de transición; pero un menor periodo de transición que del Rb - 85.

Capítulo 7

Conclusiones

- La ecuación de BREIT-RABI, describe en forma perfecta la ruptura de la degeneración de los niveles hiperfinos del estado base de los átomos alcalinos para nuestro caso el átomo de Cs - 133 y Rb - 85.
- Los valores obtenidos de los corrimientos energéticos para cada uno de los números cuánticos magnéticos asociados a un nivel hiperfino superior F siempre son positivos por lo que resultan ser de una estructura energética mayor a dicho nivel hiperfino; mientras que los corrimientos energéticos para cada uno de los números cuánticos magnéticos asociados a un nivel hiperfino inferior $F - 1$ son negativos por lo que resultan ser de una estructura energética menor.
- Las gráficas de los corrimientos energéticos del átomo de Cs - 133 y Rb - 85 entre niveles hiperfinos, presentan siempre un mismo comportamiento lineal .
- Las gráficas de los corrimientos energéticos del átomo de Cs - 133 y Rb - 85 para un nivel hiperfino superior F siempre es creciente con respecto a los números cuánticos magnéticos positivos incluido el cero a medida que aumenta el campo magnético externo. A diferencia de las gráficas de los corrimientos energéticos con respecto a los números cuánticos magnéticos negativos que siempre es decreciente a medida que aumenta el campo magnético externo.

- Las gráficas de los corrimientos energéticos del átomo de Cs - 133 y Rb - 85 para un nivel hiperfino inferior $F - 1$ siempre es creciente con respecto a los números cuánticos magnéticos negativos a medida que aumenta el campo magnético externo. Por el contrario de los corrimientos energéticos con respecto a los números cuánticos magnéticos positivos incluido el cero que siempre es decreciente a medida que aumenta el campo magnético externo.
- Los números cuánticos magnéticos usados para el cálculo de las frecuencias de transición entre los niveles hiperfinos, son los pertenecientes al nivel hiperfino inferior.
- Las gráficas de las frecuencias de transición entre los niveles hiperfinos para el átomo de Cs - 133 y Rb - 85 siempre es creciente con respecto a los números cuánticos magnéticos positivos incluido el cero a medida que aumenta el campo magnético externo. A diferencia de las gráficas de las frecuencia de transición con respecto a los números cuánticos magnéticos negativos que es decreciente a medida que aumenta el campo magnético externo.

Bibliografía

- [1] BEISER A., *Conceptos de Física Moderna*, Research Scientist, Columbia University, 1965.

- [2] COHEN-TANNOUDJI., *Quantum Mechanics*, ed. Jhon Wiley Sons, New York, 1977.

- [3] DE LA PEÑA L., *Introducción a la Mecánica Cuántica*, 3a. ed., Universidad Nacional Autónoma de México, 2006.

- [4] LÓPEZ M., DOMÍNGUEZ I. y DE CARLOS E., *Corrección de Efectos Sistemáticos por Campo Magnético en el Patrón Primario de Frecuencia de Bombeo Óptico del CENAM*, art. de la Facultad de Ciencias del UAEM, México.

- [5] LÓPEZ LÓPEZ S., LÓPEZ ROMERO J.M. y DE CARLOS LÓPEZ E., *Mejoras al Reloj Atómico de Bombeo Óptico del CENAM*, art. del CENAM, México.

- [6] SHIRLEY. J., *Instruments and Measurements*, Abril 1997.

- [7] RAMSEY N. F., *Molecular Beams* (Oxford University Press, Oxford, 1956).

- [8] VANIER J., AUDOIN, C. *The Quantum Physics of Atomic Frequency Standards* (Adam Hilger, Bristol, 1989).