

os h's são:

$|l, 1/2, J, m\rangle$ que na representação

das coordenadas eram as:

$$Y_{l, h=l \pm 1/2, m} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \pm \sqrt{l \pm m + 1/2} Y_l^{m-1/2}(\theta, \phi) \\ \sqrt{l \mp m + 1/2} Y_l^{m+1/2}(\theta, \phi) \end{pmatrix}$$

que são autofunções de $\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} (J^2 - L^2 - S^2)$

com autovalores

$$\frac{\hbar^2}{2} (J(J+1) - l(l+1) - 1/2(1/2+1))$$

$$= \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{(l \pm 1/2)(l + 3/2)}{(l + 1/2)} - l(l+1) - \frac{3}{4} \right)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} l^2 + 1/2 l + 3/2 & l + 3/4 \\ l^2 - 1/4 & -l^2 - l - 3/4 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar^2 l}{2} \quad \text{ou} \quad p | h = l + 1/2$$

$$\frac{\hbar^2}{2} (-l-1) = -\frac{(l+1)\hbar^2}{2} \quad p | h = l - 1/2$$

As autofunções serão do tipo:

$$\Psi_{n, l, m} = R_{n, l}(r) Y_{l, h=l \pm 1/2, m}$$

atôm $\Delta_{\text{neg}} = \langle \psi_{\text{nem}} | H_{\text{es}} | \psi_{\text{nem}} \rangle$

$$= \frac{1}{2m_e^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right\rangle_{\text{ne}} \langle \vec{L} \cdot \vec{S} \rangle_{\text{atôm}}$$

$\uparrow$ correção no termo deduzido $\downarrow$

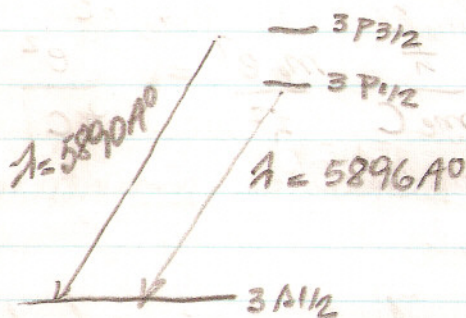
$\frac{\hbar^2}{2}$	l	$ l\rangle \quad m = l + 1/2$
$-(l+1)$		$ l\rangle \quad m = l - 1/2$

Para ser específico, considere o átomo de Na

$$(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6 (3s)^2 (3p)^0$$

vão

3s não é mais degenerado com 3p devido aos 10 elétrons internos



Para aproximarmos a ordem de magnitude, vamos notar que para $Z=1$

$$\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \approx \frac{1}{a_0} \frac{-e^2/a_0}{a_0} \sim \frac{-e^2}{a_0^3}$$

$\therefore$ a diferença entre níveis é da ordem $\frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{\hbar^2}{2} \frac{e^2}{a_0^3} \sim \frac{e^2}{a_0^3} \left(\frac{\hbar}{m_e} \right)^2$

Considerando que

$$\frac{e^2}{m_e c^2} : \frac{\hbar}{m_e c} : a_0 :: 1 : 137 : (137)^2$$

$\downarrow$ $\downarrow$ $\swarrow$
 raio clássico do elétron comprimento de onda Compton termo de Bohr

pl ver isto lembra que $\frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$

$$\frac{\frac{e^2}{m_e c^2}}{\frac{\hbar}{m_e c}} = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$$

$$\frac{\frac{\hbar}{m_e c}}{a_0} = \frac{\frac{\hbar}{m_e c}}{\frac{\hbar^2}{m_e e^2}} = \frac{\hbar}{m_e c} \frac{m_e e^2}{\hbar^2} = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$$

Assim tipicamente o termo de estrutura fina está relacionado com $\frac{e^2}{a_0}$ (Balmer)

$$\left(\frac{e^2}{a_0^3} \frac{\hbar^2}{m_e^2 c^2} \right) : \frac{e^2}{a_0} :: \left(\frac{1}{137} \right)^2 : 1$$

$$\frac{e^2}{a_0} \div \frac{e^2 \hbar^2}{a_0^3 m_e^2 c^2} = \frac{e^2}{a_0} \frac{a_0^3 m_e^2 c^2}{e^2 \hbar^2} = \frac{a_0^2 m_e^2 c^2}{\hbar^2} = \left(\frac{a_0}{\hbar/m_e c} \right)^2 = (137)^2$$

Efeito Zeeman

átomo do tipo hidrogênio em um campo magnético uniforme

construa $\vec{A} \rightarrow$ tal que $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ de um campo homogêneo na direção $\hat{z}$

$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r}$ serve pois

$$\vec{A} = \frac{-1}{2} (By \hat{x} - Bx \hat{y})$$

$$\begin{aligned} \text{e } \vec{\nabla} \times \vec{A} &= \hat{x} \left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} \right) + \hat{y} \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \\ &\quad + \hat{z} \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) = \hat{z} \left(\frac{1}{2} B - \left(\frac{B}{2} \right) \right) \\ &= B \hat{z} \end{aligned}$$

A Hamiltoniana é obtida pela substituição

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c}$$

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} + V_e(r) \rightarrow H = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} + V_e(r) - \frac{e}{2m_e c} (\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) + \frac{e^2 A^2}{2m_e c^2}$$

$$\text{mas } \langle \vec{x}' | \vec{p} \cdot \vec{A}(\vec{x}) | \rangle = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}' \cdot [\vec{A}(\vec{x}') \langle \vec{x}' | \rangle]$$

$$= \vec{A}(\vec{x}') \cdot \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}' \langle \vec{x}' | \rangle + \langle \vec{x}' | \rangle \cdot \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}' \cdot \vec{A}(\vec{x}') = \langle \vec{x}' | \vec{A}(\vec{x}) \cdot \vec{p} | \rangle +$$

$$\langle \vec{x}' | \rangle \frac{1}{i} \nabla' \cdot \vec{A}(\vec{x}')$$

Assim $\vec{p} \cdot \vec{A} = \vec{A} \cdot \vec{p}$ sempre que $\vec{\nabla}' \cdot \vec{A}(\vec{x}') = 0$

p/ o caso em questão $\vec{\nabla}' \cdot \left(-\frac{1}{2} B y \hat{x} + B x \hat{y} \right) = 0$

Assim $\vec{p} \cdot \vec{A} = \vec{A} \cdot \vec{p} = \frac{1}{2} B (x p_y - y p_x) = \frac{1}{2} B L_z$

$$A^2 = \frac{1}{2} |B|^2 (x^2 + y^2)$$

Assim temos

$$H = \frac{p^2}{2m_e} + V_e(r) - \frac{e}{2m_e c} B L_z + \frac{e^2}{8m_e c^2} |B|^2 (x^2 + y^2)$$

Falta ainda
a interação
el spin

$$\rightarrow -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{-e}{m_e c} \vec{S} \cdot \vec{B} = \frac{-e}{m_e c} |B| S_z$$

Nosso problema

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_e} + V_e(r)$$

$$H_{LS} = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV_e(r)}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S}$$

$$H_B = -\frac{e|B|}{2m_e c} (L_z + 2S_z)$$

$$\downarrow -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$