Estrutura Hiperfina (spin-spin)

Aula 8

Além do momento magnético do elétron, o núcleon (particularmente o próton).
O momento magnético associado ao spin do elétron era dado por

$$\vec{\mu}_e = -\frac{g_e e}{2 m_e c}\vec{S}_e$$

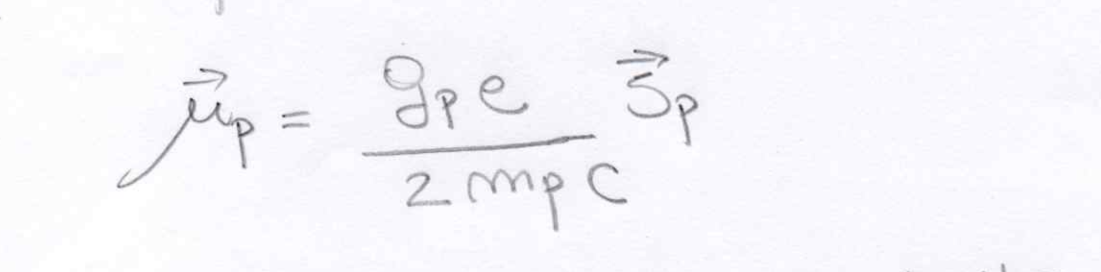
(e: carga do próton, e>0)

onde tínhamos usado $\boxed{g_e = 2 + O(\alpha) \simeq 2}$

Para o próton temos analogamente,

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

onde o fator giromagnético do próton é diferente do do elétron. O g_e é obtido a partir da equação de Dirac (2) + as correções perturbativas vindo da Eletrodinâmica Quântica.



Dirac

$\Rightarrow \quad 2 + O(\alpha^2)$

No caso do próton, ele não é uma partícula elementar, e portanto não é possível calcular (a partir de primeiros princípios) o valor de g_p. Ele é extraído experimentalmente

$$g_p \simeq 5.6$$

O campo magnético gerado pelo $\vec{\mu}_p$ é dado por (Jackson, cap 5.6, pg 184)

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

Então o campo magnético devido ao momento magnético do próton induz um termo no hamiltoniano:

$$H_{eh} = -\vec{\mu}_e\cdot\vec{B}_p = \frac{e}{m_e c}\vec{S}_e\cdot\vec{B}_p \quad (\text{usando } g_e = 2)$$

$$= \frac{g_p e^2}{2 m_p m_e c^2}\,\frac{3(\vec{S}_e\cdot\hat{r})(\vec{S}_p\cdot\hat{r}) - \vec{S}_e\cdot\vec{S}_p}{r^3}$$

$$+ \frac{g_p e^2}{2 m_p m_e c^2}\,\frac{8\pi}{3}\,\vec{S}_e\cdot\vec{S}_p\,\delta^{(3)}(\vec{r})$$

Para calcular as correções às energias, fazemos simplesmente

$$E^1_{eh} = \langle H_{eh} \rangle$$ no estado $|\psi\rangle$ desejado.

Estado fundamental ($\ell = 0$)

$$\psi_{100}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\, e^{-r/a}$$, só depende de r (é esfericamente simétrica)

com

$$a = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$$ o raio de Bohr.

Então,

$$E^1_{eh} = \frac{g_p e^2}{2 m_p m_e c^2} \left\langle \frac{3\vec{S}_e\cdot\hat{r}\,\vec{S}_p\cdot\hat{r} - \vec{S}_e\cdot\vec{S}_p}{r^3} \right\rangle_{100}$$

$$+ \frac{4\pi}{3}\frac{g_p e^2}{m_p m_e c^2} \langle 100|\vec{S}_e\cdot\vec{S}_p|100\rangle \int \underbrace{r^2 dr\, d\Omega}_{d^3r}\, |\psi_{100}(r)|^2 \delta^{(3)}(\vec{r})$$

Vamos mostrar que o primeiro termo é zero.

Para calcular o primeiro termo de E_{eh} é útil calcular a integral

$$I = \int (\vec{a}\cdot\hat{r})(\vec{b}\cdot\hat{r}) \operatorname{sen}\theta \, d\theta \, d\phi$$

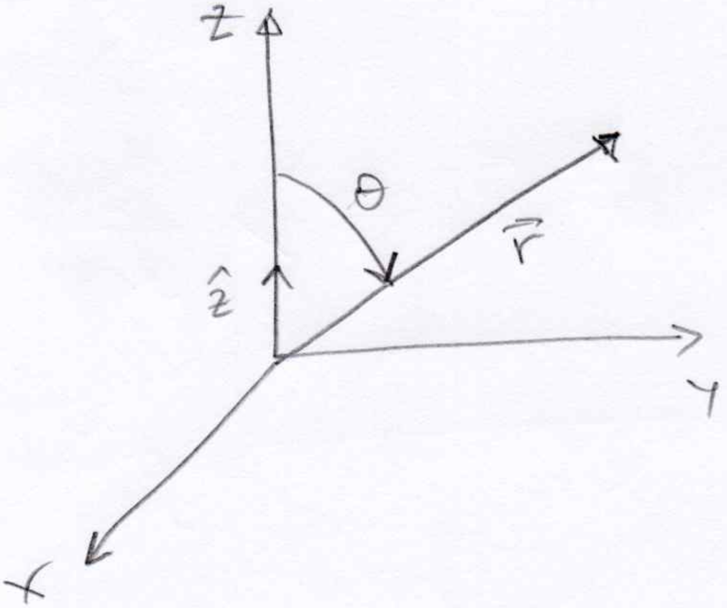
para $\vec{a}$ e $\vec{b}$ dois vetores arbitrários.

Dado que I é um escalar deve ser proporcional a $\vec{a}\cdot\vec{b}$, já que é linear em $\vec{a}$ e $\vec{b}$.

$\Rightarrow \left[\ I = K\,\vec{a}\cdot\vec{b}\right.$ onde K é uma constante a ser determinada, e é a mesma para todos os pares $\vec{a}$ e $\vec{b}$.

Então se, por exemplo, escolhemos

$$\vec{a} = \hat{z} = \vec{b}$$



$$\Rightarrow \begin{cases} \vec{a}\cdot\hat{r} = \hat{z}\cdot\hat{r} = \cos\theta \\ \vec{b}\cdot\hat{r} = \hat{z}\cdot\hat{r} = \cos\theta \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad I = \int \cos^2\theta \, \text{sen}\,\theta \, d\theta \, d\phi$$

$$= 2\pi \int_0^\pi \cos^2\theta \, (-d\cos\theta) = 2\pi \int_\pi^0 \cos^2\theta \, d\cos\theta$$

$$= 2\pi \int_{-1}^{1} x^2 \, dx = 2\pi \left\{ \frac{1}{3} - \frac{(-1)^3}{3} \right\} = \frac{4\pi}{3}$$

$$\Rightarrow \quad I = \frac{4\pi}{3} = k(\hat{z} \cdot \hat{z}) \Rightarrow \boxed{k = \frac{4\pi}{3}}$$

$\Rightarrow$ Em geral, para todo par de vetores $\vec{a}, \vec{b}$

$$\left[I = \int (\vec{a} \cdot \hat{r})(\vec{b} \cdot \hat{r}) \, \text{sen}\,\theta \, d\theta \, d\phi = \frac{4\pi}{3} \vec{a} \cdot \vec{b} \right]$$

Então,

$$\left\langle \frac{3 \vec{S}_e \cdot \hat{r} \, \vec{S}_p \cdot \hat{r} - \vec{S}_e \cdot \vec{S}_p}{r^3} \right\rangle_{100}$$

$$= \int \frac{|\psi_{100}(r)|^2 r^2 \, dr}{r^3} \int \left\{ 3 \vec{S}_e \cdot \hat{r} \, \vec{S}_p \cdot \hat{r} - \vec{S}_e \cdot \vec{S}_p \right\} \text{sen}\,\theta \, d\theta \, d\phi$$

Mas $\int 3\vec{S}_e \cdot \hat{r}\, \vec{S}_p \cdot \hat{r} \,\operatorname{sen}\theta \, d\theta \, d\phi = 3 \cdot \frac{4}{3}\pi \, \vec{S}_e \cdot \vec{S}_p$

e $\int \vec{S}_e \cdot \vec{S}_p \,\operatorname{sen}\theta \, d\theta \, d\phi = \vec{S}_e \cdot \vec{S}_p \, 2\pi \int_0^\pi \operatorname{sen}\theta \, d\theta$

$= 4\pi \, \vec{S}_e \cdot \vec{S}_p$

$$\Rightarrow \left\langle \frac{3\vec{S}_e \cdot \hat{r}\, \vec{S}_p \cdot \hat{r} - \vec{S}_e \cdot \vec{S}_p}{r^3} \right\rangle_{100} = 0$$

Então a correção hiperfina vem totalmente do segundo termo:

$$E^1_{eh} = \frac{4\pi}{3} \frac{g_p e^2}{m_p m_e c^2} \langle \vec{S}_e \cdot \vec{S}_p \rangle_{100} \, |\psi_{100}(0)|^2$$

$$E^1_{eh} = \frac{4\pi}{3} \frac{g_p e^2}{m_p m_e} \frac{1}{c^2 \pi a^3} \langle \vec{S}_e \cdot \vec{S}_p \rangle_{100} \Bigg]$$

Para $l = 0$, o momento angular total é a soma dos 2 spins

$$\vec{J} = \vec{S}_e + \vec{S}_p \quad \text{(ou o spin total)}$$

$$\Rightarrow \vec{S}_e \cdot \vec{S}_p = \frac{1}{2}\left(J^2 - S_e^2 - S_p^2\right)$$

$\Rightarrow$ nos estados $|n\, l\, m_l\rangle = |1\,0\,0\rangle$ teremos

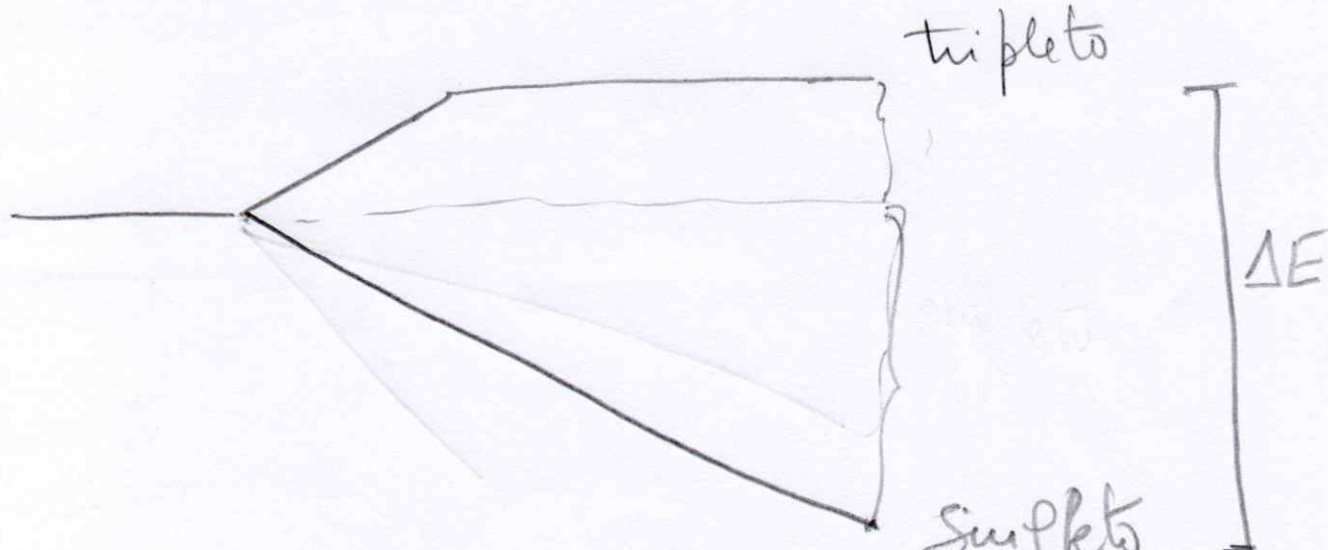
$$\vec{S}_e \cdot \vec{S}_p |1\,0\,0\rangle = \frac{\hbar^2}{2}\left(j(j+1) - \frac{3}{4} - \frac{3}{4}\right)|1\,0\,0\rangle$$

$$\Rightarrow \langle \vec{S}_e \cdot \vec{S}_p \rangle_{100} = \frac{\hbar^2}{2}\left(j(j+1) - \frac{3}{2}\right)$$

O sistema de 2 spin 1/2, $\vec{S}_e$ e $\vec{S}_p$ pode estar (adição de momento angular $\frac{1}{2} \oplus \frac{1}{2} = 0 \oplus 1$, MQI) No tripleto de $j = 1$ ou no singleto de $j = 0$.

$$\Rightarrow \langle \vec{S}_e \cdot \vec{S}_p \rangle_{100} = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{4} & \text{para o tripleto} \\ -\frac{3}{4}\hbar^2 & \text{para o singleto} \end{cases}$$

$\Rightarrow$



$$E'_{eh} = \frac{4}{3}\frac{g_p e^2}{m_p m_e c^2}\frac{\hbar^2}{a^3}\begin{cases}+\frac{1}{4}\\ -\frac{3}{4}\end{cases}$$

⇒ A diferência de energia entre o nível do tripleto e do singleto é

$$\Delta E_{eh} = \frac{4}{3}\frac{g_p e^2}{m_p m_e c^2}\frac{\hbar^2}{a^3} = \frac{4}{3}\frac{g_p e^2}{m_p m_e}\frac{\hbar^4}{m_e e^2}\frac{1}{a^4}\frac{1}{c^2}$$

(usando $a = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$

$$\Delta E_{eh} = \frac{4}{3}\frac{g_p \hbar^4}{m_p m_e^2 c^2}\frac{1}{a^4}$$

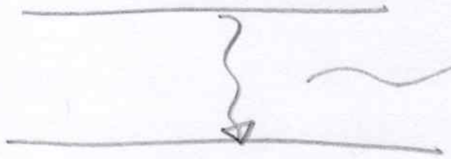
$\hbar = 6.582\ 10^{-16}$ eVs

$a = 0.53\ 10^{-10}$ m

$$\boxed{\Delta E_{eh} = \frac{4}{3}\frac{g_p \hbar^4}{(m_p c^2)(m_e c^4)}\frac{c^4}{a^4} = 5.9\ 10^{-6}\ \text{eV}}$$

↪ muito menor que 13.6 eV ou $(10^{-3}-10^{-4})$ eV da estrutura fina.

MAS essa transição do estado $|100\rangle$ do tripleto $\rightarrow$ singleto no átomo de hidrogênio é de muita importância na astrofísica/cosmologia.



$\rightsquigarrow \gamma$ com $\nu = \dfrac{\Delta E'_{eh}}{h} = 1420\,\text{MHz}$

ou $$\boxed{\lambda_{eh} = \frac{c}{\nu} = \frac{ch}{\Delta E'_{eh}} \simeq 21\ \text{cm}}$$

é a famosa linha de 21 cm do hidrogênio.
(microondas, rádio)