

# Átomos alcalinos

Li	$1s^2 2s$
Na	$1s^2 2s^2 2p^6 3s$
K	.
Rb	.
Cs	.
Fr	.

Configuración electrónica  $[ ]ns$  <sup>edo. base</sup>

El término del estado base  $^2S_{1/2}$

El carozo del átomo tiene el término  $^1S_0$ .

↳ El potencial efectivo para el  $e^-$  de valencia es central.

$$V(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (\text{por apantallamiento})$$

$$V(r) \xrightarrow{r \ll a_0} -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$V(r) \sim -\frac{Z(r)e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad V(r) < V_H(r)$$

El electrón con configuración  $ns$  está más amarrado para alcalinos que para H.

También los estados para un  $n'l'$  tienen menor energía que el estado  $n'l'$  para H.



Cuando  $n$  aumenta el  $e^-$  se aleja más del núcleo y su situación se parece más a H y la energía aumenta.

No hay degeneración en  $l$  como ocurre para H.

$$E_{nl_1} < E_{nl_2} \quad \text{si} \quad l_1 < l_2$$

$$E_{nl} = -\frac{1}{2} \frac{1}{(n - \delta_{nl})^2} \text{ u.a.}$$

$$E_{nl}^H = -\frac{1}{2} \frac{1}{n^2} \text{ u.a.}$$

↑  
efecto cuántico

← unidades atómicas

A buena aproximación  $\delta_{nl} \sim \delta_l$

$$E_{nl} = -\frac{1}{2} \frac{1}{n^{*2}} \quad n^* = n - \delta_l$$

Atom	$l =$	S	P	D	F
		0	1	2	3
Li		0.40	0.04	0.00	0.00
Na		1.35	0.85	0.01	0.00
K		2.19	1.71	0.25	0.00
Rb		3.13	2.66	1.34	0.01
Cs		4.06	3.59	2.46	0.02

# Potenciales centrales modelo:

Se miden las energías  $\xrightarrow{\text{ajuste}}$  defectos cuánticos



Se propone un modelo de potencial y se ajusta a las energías medidas

Potencial modelo:

$$V_{\text{mod}} = V_C(r) + V_P(r) + V_{s.o.}(r)$$

Coulomb modificado

Polarización de capozo

espín-orbita

↓ Numerov

Calcular funciones de onda

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1 + (z-1)e^{-a_1 r}}{r} - r(d_3 + d_4 r)e^{-\alpha_2 r}$$

↓ elementos de matriz

$\alpha_{1,2,3,4}$  dependen de especie atómica y de  $l$ .

$$V_P(r) = -\frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{d_c}{2r^4} \left[ 1 - e^{-\left(\frac{r}{r_c}\right)^6} \right]$$

$$V_{s.o.}(r) = \frac{1}{2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left( \frac{g_s}{2m_e c^2} \right) \frac{\vec{l} \cdot \vec{s}}{r^3}$$

tamaño efectivo del capozo

TABLE I. Optimized parameters for the  $l$ -dependent model potential.

$\alpha_c$		Li 0.1923	Na 0.9448	K 5.3310	Rb 9.0760	Cs 15.6440
$l=0$	$a_1$	2.477 180 79	4.822 231 17	3.560 794 37	3.696 284 74	3.495 463 09
	$a_2$	1.841 509 32	2.454 498 65	1.839 096 42	1.649 152 55	1.475 338 00
	$a_3$	-0.021 697 12	-1.122 550 48	-1.747 011 02	-9.860 691 96	-9.721 430 84
	$a_4$	-0.119 883 62	-1.426 313 93	-1.032 373 13	0.195 799 87	0.026 292 42
	$r_c$	0.613 408 24	0.454 894 22	0.831 675 45	1.662 421 17	1.920 469 30
$l=1$	$a_1$	3.454 146 48	5.083 825 02	3.656 704 29	4.440 889 78	4.693 660 96
	$a_2$	2.551 510 80	2.182 268 81	1.675 207 88	1.928 288 31	1.713 983 44
	$a_3$	-0.216 465 61	-1.195 346 23	-2.074 166 15	-16.795 977 70	-24.656 242 80
	$a_4$	-0.069 900 78	-1.031 428 61	-0.890 304 21	-0.816 333 14	-0.095 431 25
	$r_c$	0.615 664 41	0.457 987 39	0.852 353 81	1.501 951 24	2.133 830 95
$l=2$	$a_1$	2.519 098 39	3.533 241 24	4.127 136 94	3.787 173 63	4.324 661 96
	$a_2$	2.437 124 50	2.486 979 36	1.798 374 62	1.570 278 64	1.613 652 88
	$a_3$	0.325 055 24	-0.756 884 48	-1.699 351 74	-11.655 889 70	-6.701 288 50
	$a_4$	0.106 024 30	-1.278 523 57	-0.989 135 82	0.529 428 35	-0.740 951 93
	$r_c$	2.341 262 73	0.718 753 12	0.832 169 07	4.868 519 38	0.930 072 96
$l \geq 3$	$a_1$	2.519 098 39	1.110 566 46	1.423 104 46	2.398 489 33	3.010 483 61
	$a_2$	2.437 124 50	1.054 587 59	1.278 611 56	1.768 105 44	1.400 000 01
	$a_3$	0.325 055 24	1.732 034 28	4.774 414 76	-12.071 067 80	-3.200 361 38
	$a_4$	0.106 024 30	-0.092 656 96	-0.948 292 62	0.772 565 89	0.000 345 38
	$r_c$	2.341 262 73	28.673 505 9	6.502 943 71	4.798 313 27	1.999 696 77

Dispersion coefficients for alkali-metal dimers

M. Marinescu, H. R. Sadeghpour, and A. Dalgarno

Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics, 60 Garden Street, Cambridge, Massachusetts 02138

(Received 23 August 1993)

- Estructura fina  $\sim (100 \text{ THz})$   $s(s+1)$

$$\Delta E = \frac{1}{2} \lambda_{ne} [j(j+1) - l(l+1) - 3/4]$$

$$\lambda_{ne} = \frac{\hbar^2}{2m_e r^2} \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \right\rangle$$

- Estructura hiperfina ( $\sim \text{GHz}$ )

Importante para estados poco excitados.

$$\Delta E = \frac{1}{2} N_{02j} [F(F+1) - j(j+1) - I(I+1)]$$