Estructura fina de hidrógeno

- En la estructura principal (Schrödinger) falta:
  - Espín del electrón
  - Efectos relativistas } hoy los consideramos
  - Efectos de la estructura del núcleo (estructura hiperfina)
  - Naturaleza cuántica del campo electromagnético (efecto Lamb)

Para conocer el orden de magnitud del error causado por la omisión de efectos relativistas usamos el mod. de Bohr

$$rmv = L = \hbar n$$

Para el estado base

$$\frac{v}{c} = \frac{\hbar}{crm} \underset{r \sim a_0}{=} \frac{\hbar}{c a_0 m} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = \alpha \approx \frac{1}{137}$$

¿Cómo incorporar efectos relativistas?

No relativista $\xrightarrow{\text{correcciones}}$ débilmente rel.

relativista $\xrightarrow{\text{límite } \frac{v}{c} \ll 1}$ débilmente rel. (no se puede generalizar)

En la práctica

no rel. $\longrightarrow$ débilmente relativista.

rel. $\nearrow$

- Hacia una ecuación relativista.

- Recordando para caso no. rel.

① H clásico $\mathcal{H} = \frac{|\vec{p}|^2}{2m}$

② $\vec{p} \longrightarrow \vec{P}$, $\mathcal{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

③ Actuar en un estado $|\psi\rangle$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \frac{P^2}{2m} |\psi\rangle$$

- Una generalización natural

$$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$$

$$\mathcal{H} = (p^2c^2 + m^2c^4)^{1/2}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} \; |\psi\rangle$$

$$= mc^2 \sqrt{1 + \frac{P^2}{m^2c^2}} \; |\psi\rangle$$

Podríamos intentar expandir en serie

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle \overset{p \ll mc}{=} mc^2\left(1 + \frac{p^2}{2m^2c^2} - \frac{p^4}{8m^4c^4} + \cdots\right)|\psi\rangle$$

en la base $|\vec{r}\rangle$ tenemos $\nabla^2, \nabla^2, \ldots$
asimetría entre espacio y tiempo.

Hay dos estrategias para lidiar con la $\sqrt{\ }$
(1), (2).

(1) $H^2 = c^2p^2 + m^2c^4$
aplicado a $|\psi\rangle$ $\qquad H \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}|\psi\rangle = \left(-\frac{c^2p^2}{\hbar^2} - \frac{m^2c^4}{\hbar^2}\right)|\psi\rangle$$

En la base $|\vec{r}\rangle$

$$\left[\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \left(\frac{mc^2}{\hbar}\right)^2\right]\psi = 0$$

Ecuación de Klein–Gordon

- $2^{\underline{o}}$ orden $\to$ requiere $\psi(0), \dot{\psi}(0)$
- $\int|\psi|$ no es constante.
- ψ es escalar (no hay espín)

(2) Ecuación de Dirac

$$H = (c^2p^2 + m^2c^4)^{1/2}$$ ¿Podemos calcular la $(\ldots)^{1/2}$?

$$c^2p^2 + m^2c^4 = (\ ???\ )^2$$

??? debe ser una funcion lineal de cp y mc^2

La función lineal más general es

$$c^2p^2 + m^2c^4 = (c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta mc^2)^2$$

¿Cómo son $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$, β?

$$= (c\alpha_1 p_1 + c\alpha_2 p_2 + c\alpha_3 p_3 + \beta mc^2)^2$$

- $\alpha_1^2 = \alpha_2^2 = \alpha_3^2 = \beta^2 = 1$
- $\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 0 \qquad i \neq j$
- $\alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0 \qquad i = 1, 2, 3$

- $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \beta$ no pueden ser números complejos.
- $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \beta$ deben ser hermitianos (Para que H lo sea)

→ Por (Ej. 1.8.8 y 14.3.6 de Shankar)

vector de matrices de Pauli $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \qquad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{2\times 2} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1}_{2\times 2} \end{pmatrix}$$

Ojo: $\vec{\alpha}$ y β no son únicas pues si se hace una transformación uitaria se mantienen las propiedades.

$$\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Obtenemos la ecuación de Dirac

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = (c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2)\psi$$

$\therefore \psi$ debe ser un vector de 4 componentes

- Primer orden en t y $\vec{r}$ ✓
- Sale espín ✓ (pero ¿por qué 4 componentes?)

$$\psi = \begin{pmatrix} \overset{\text{2 componentes cada uno}}{\chi} \\ \phi \end{pmatrix} \quad ; \quad \psi(t) = \psi e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$$

$$E\psi = \left(c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta m c^2\right)\psi$$

$$E\begin{pmatrix} \chi \\ \phi \end{pmatrix} = \left[\begin{pmatrix} 0 & c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} \\ c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} mc^2\mathbb{I} & 0 \\ 0 & -mc^2\mathbb{I} \end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix} \chi \\ \phi \end{pmatrix}$$

para $\vec{p} \to 0$

$$E\begin{pmatrix} \chi \\ \phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc^2\mathbb{I} & 0 \\ 0 & -mc^2\mathbb{I} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \chi \\ \phi \end{pmatrix}$$

$$2mc^2 \begin{cases} \text{———} \; mc^2 \\ \text{———} \; -mc^2 \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} E_1 & \Omega \\ \Omega & E_n \end{pmatrix}$$

Si $p_z \neq 0$ pero $p_x, p_y = 0$

$$E\begin{pmatrix} \chi \\ \phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc^2\mathbb{I} & c\sigma_z p_z \\ c\sigma_z p_z & -mc^2\mathbb{I} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \chi \\ \phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc^2 & 0 & cp_z & 0 \\ 0 & mc^2 & 0 & -cp_z \\ cp_z & 0 & -mc^2 & 0 \\ 0 & -cp_z & 0 & -mc^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \\ \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}$$

$$E\begin{pmatrix} \chi \\ \phi \end{pmatrix} = \left[\begin{pmatrix} 0 & c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} \\ c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} mc^2\mathbb{I} & 0 \\ 0 & -mc^2\mathbb{I} \end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix} \chi \\ \phi \end{pmatrix}$$

- Campos electromagnéticos

$$\mathcal{H} = \left[(\vec{p} - q\vec{A}/c)^2 c^2 + m^2c^4\right]^{1/2} + q\phi$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[c\vec{\alpha}\cdot(\vec{p} - q\vec{A}/c) + \beta mc^2 + q\phi\right]\psi$$

$$E\psi = \left[c\vec{\alpha}\cdot(\vec{p} - q\vec{A}/c) + \beta mc^2 + q\phi\right]\psi$$

Para hidrógeno

- $A = 0$
- núcleo tiene masa infinita
- $V = e\phi = -e^2/4\pi\epsilon_0 r$

$$\begin{pmatrix} E - mc^2 - V & -c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} \\ -c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} & E + mc^2 - V \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\chi \\ \phi\end{pmatrix} = 0,$$

Esto es de 2x2

$$(E - V - mc^2)\chi - c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\,\phi = 0$$

$$(E - V + mc^2)\phi - c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\,\chi = 0$$

$$\phi = \frac{c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{E - V + mc^2}\chi$$

E en eq de Schrödinger

$$E = E_s + mc^2$$

Veamos burdamente cuánto es $\frac{c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{E-V+mc^2}$

$$\phi = \frac{c\,mv}{\underbrace{E_s - V}_{\text{Energía cinética}} + 2mc^2}\chi$$

en el caso no relativista $E_s - V \ll mc^2$

$\frac{v}{c} \ll 1$

$$\phi \approx \frac{\cancel{c}\cancel{m}v}{2\cancel{m}c^{\cancel{2}}}\chi \approx \frac{v}{c}\chi$$

componente chica

componente grande

Buscando el límite donde débilmente rel. llegamos al hamiltoniano de estructura fina.

$$\begin{aligned} H = {} & m_e c^2 && \text{(masa en reposo)} \\ & + \frac{p^2}{2m_e} + V(r) && \text{principal} \\ & - \frac{p^4}{8m_e^3c^2} && \text{corr. relativista.} \\ & + \frac{1}{2m_e^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} && \text{espín-órbita} \\ & + \frac{\hbar^2}{8m_e^2c^2}\nabla^2 V(r) && \text{Darwin} \\ & + \dots \end{aligned}$$