

Esta hoja constituye una especie de culminación de tu trabajo. Vamos, por fin, a deducir el Hamiltoniano de la estructura fina. Para ello seguiremos [2]. Seguro que hay fuentes mejores pero, aparte de que me es más familiar, esta se ajusta mejor a lo que sabes, es breve y no requiere grandes requisitos, de hecho cosas que has aprendido en hojas anteriores se explican desde el principio. Si quieres una referencia alternativa más convencional, mira [1, §4.3].

Vamos primero con el enunciado. Siguiendo el segundo capítulo de [5], el Hamiltoniano H de la estructura fina viene dado como una suma de cuatro términos:

$$(1) \quad H = H_0 + H_{\text{rel}} + H_{\text{spin-orbit}} + H_{\text{Darwin}}$$

donde H_0 es el término principal, lo que aparecía en la ecuación de Schrödinger en la primera hoja,

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V$$

y el resto son correcciones:

$$H_{\text{rel}} = -\frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2}, \quad H_{\text{spin-orbit}} = \frac{1}{2m^2c^2r} \frac{dV}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}, \quad H_{\text{Darwin}} = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \Delta V.$$

Antes de seguir, es necesario señalar que a pesar de que formalmente lo único que hay que hacer es resolver la ecuación de Schrödinger con H en lugar de con H_0 , esto es,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi,$$

en realidad hay una diferencia conceptual y es que Ψ será ahora vectorial, tendrá dos coordenadas y H actúa sobre cada una de ellas. Esto se relaciona con el espín. La primera coordenada es la parte de espín arriba y la otra la de espín abajo. Un físico escribiría $|\Psi\rangle = \Psi_1|+\rangle + \Psi_2|-\rangle$ y un matemático diría que es una forma rara de de indicar que Ψ es (Ψ_1, Ψ_2) (como vector columna) o, equivalentemente, $|+\rangle = \vec{e}_1$, $|-\rangle = \vec{e}_2$ con $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2\}$ la base canónica de \mathbb{C}^2 . La idea de que las funciones de onda de los electrones tiene dos coordenadas se menciona en [3] y ya existía antes del Hamiltoniano de la estructura fina y de la ecuación de Dirac. Parte de tu tarea en esta hoja será entenderlo.

Analicemos la naturaleza de cada corrección. La primera es relativista, debido a que en relatividad la energía no es exactamente $\frac{1}{2}mv^2 + V$, la segunda se debe a que el electrón del átomo de hidrógeno girando alrededor del protón genera un campo magnético (ley de Ampère) pero el electrón tiene también un momento magnético intrínseco, el espín, es decir, se comporta como un pequeño imán y entonces hay cierta energía magnética a tener en cuenta. La corrección de Darwin es más difícil de explicar porque, a diferencia de las otras, no tiene un equivalente clásico. Se puede entender pensando que en el mundo cuántico una partícula no está en una

posición definida sino en todas al tiempo con cierta probabilidad, pudiendo concentrarse más la nube de probabilidad cuanto mayor es su momento. Eso lleva a pensar que la distancia r del electrón al núcleo que se pone en el potencial de Coulomb es solo una aproximación y hay que sustituirlo por un promedio. En [5, §2.4.1] hay una deducción intuitiva a partir de esta idea.

Ahora vamos a explicar cada uno de los elementos que aparecen en H . El potencial V es la energía potencial correspondiente al campo eléctrico del par electrón-protón. Esto es $K\mathbf{e}^2/r$ con \mathbf{e} la carga del electrón y K la constante de Coulomb, como en la primera hoja. Es muy habitual, y así lo haremos aquí, utilizar *unidades gaussianas* en las que $K = 1$ y por tanto tendremos

$$V = \frac{\mathbf{e}^2}{r}.$$

Este cambio a unidades gaussianas no es complicado, lo puedes entender como un cambio en las unidades de carga. En vez de medirlas en culombios, las medimos en *estatoculombios* (statcoulombs en inglés) multiplicando el resultado por $10^{-9/2}$ si quieres conservar los metros y los kilos (en otro caso se deben usar centímetros y gramos). No tenemos mucha intuición acerca de cuánto es un culombio, por tanto no cambia nuestros esquemas. En culombios \mathbf{e} es aproximadamente $-1,602 \cdot 10^{-19}$ y en *estatoculombios*, $-4,803 \cdot 10^{-10}$ y para conservar metros y kilos sería $-1,519 \cdot 10^{-14}$.

En H_{rel} hay un \mathbf{p}^4 . Recuerda que \mathbf{p} era un operador vectorial (el gradiente por una constante) y \mathbf{p}^2 es un operador escalar (el Laplaciano por una constante), esto es, en vez de literalmente \mathbf{p}^2 como operador, se refiere al producto escalar $\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}$. El \mathbf{p}^4 hay que entenderlo como aplicar dos veces \mathbf{p}^2 .

Los operadores \mathbf{S} y \mathbf{L} en $H_{\text{spin-orbit}}$ son los operadores de espín y momento angular:

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad \text{y} \quad \mathbf{L} = \vec{r} \times \mathbf{p}$$

con $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ las matrices de Pauli y $\vec{r} = (x, y, z)$. el producto escalar de los operadores significa $S_1 L_1 + S_2 L_2 + S_3 L_3$.

En H_{Darwin} el símbolo Δ indica el Laplaciano. Los físicos prefieren indicarlo con ∇^2 .

Una última cuestión, en parte para que entiendas mejor [2] y en parte para tu cultura general, es la motivación para el nombre “estructura fina” y su relación con la constante del mismo nombre. Lo primero es fácil, simplemente los niveles de energía que calculaste en la primera hoja, así como otros que no vimos correspondientes al efecto Zeeman, cuando se examinan experimentalmente con una precisión fina muestran algunas diferencias con respecto a lo calculado y presentan pequeños desdobles. La *constante de estructura fina* es en unidades Gaussianas

$$\alpha = \frac{\mathbf{e}^2}{\hbar c}$$

En el sistema internacional la fórmula sería $\alpha = Ke^2/(\hbar c)$. El caso es que en cualquier sistema de unidades resulta ser adimensional y cercano a $1/137$.

1) Usando el sistema internacional, comprueba que α es adimensional y que realmente está cerca de $1/137$.

En [4] puedes ver varias expresiones alternativas para α . Lo que tiene de interesante α es que en cierto modo mide cuánto de importantes son las correcciones relativistas en el átomo de hidrógeno. Si en vez de ser un número pequeño fuera grande, entonces la ecuación de Schrödinger con $H = H_0$, que no tiene en cuenta efectos relativistas, no aproximaría los niveles de energía. La idea está recogida en los siguientes ejercicios. El primero, de una forma u otra, quizá lo hayas hecho.

2) Recuerda de la primera hoja (quinto ejercicio) el parámetro r_0 que parecía en la función de ondas del estado fundamental del electrón en el átomo de hidrógeno. Se le llama *radio de Bohr* e indica, en términos clásicos, una longitud comparable a la distancia típica al electrón. Muestra que se tiene $r_0 = \hbar^2/(me^2)$ en unidades gaussianas ($\hbar^2/(Kme^2)$ en el sistema internacional). Por tanto, $r_0 = \hbar/(m\alpha c)$.

3) Siguiendo con razonamientos clásicos, al igualar la fuerza eléctrica e^2/r^2 a la fuerza centrífuga, deduce que la velocidad clásica del electrón es $v = -e/\sqrt{mr_0}$ y finalmente que su momento newtoniano clásico $p = mv$ verifica $\alpha = p/(mc)$. Es decir, que α da la proporción entre el momento newtoniano del electrón y el que tendría, siempre dentro de la mecánica de Newton, al ir a la velocidad de la luz.

Esta idea clásica de que p es como $m\alpha c$, da la intuición de que H_{rel} es del orden de α^2 veces más pequeño que H_0 , porque $p^4/(8m^3c^2)$ entre $p^2/(2m)$ es $\frac{1}{4}\alpha^2$ desde el punto de vista clásico, y lo mismo se aplica al resto de los términos. Por tanto, lo que cabe esperar es que la variación en los niveles de energía sea la energía sin los efectos relativistas multiplicada por algo de orden α^2 , como ocurre en realidad y veremos en una próxima hoja. Todo esto te puede sonar a pura fantasía porque los términos en (1) son operadores y no magnitudes escalares pero funciona, y es usado a menudo por los físicos, en última instancia porque los momentos clásicos aproximan a los cuánticos. Por si tienes curiosidad, hay una corrección más pequeña que correspondería a multiplicar por α^3 y no tiene explicación a partir de (1) ni de la física cuántica que hemos visto. Es el llamado *efecto Lamb* que desempeñó un papel fundamental en el desarrollo de la teoría cuántica de campos y excede sobradamente el nivel del grado.

El único de ejercicio “de verdad” de esta hoja es:

4) Lee [2] completándolo, si quieres, con las referencias que te parezcan convenientes y escribe a partir de ello una versión con tus palabras y con explicaciones más detalladas de la deducción de (1). No hace falta que incluyas la parte de la transformación de Foldy-Wouthuysen a no ser que tengas interés en ello. Esto es, la deducción principal debe ser la de §IV.1

Aquí van algunas observaciones e indicaciones:

- La deducción no es como la de un teorema matemático. Es imposible justificar todo con rigor porque, a fin de cuentas, solo estamos deduciendo una aproximación razonable, eso sí, desde primeros principios. Nota que ya la teoría de perturbación solo tiene una justificación matemática en el límite y en física se usa para valores concretos. En resumidas cuentas, no te pongas muy exquisito con el rigor cuando no sea posible usarlo.
- Es necesario que introduzcas y hables del espín con algún detalle. Nota que hay un salto cualitativo con respecto a las hojas anteriores. En la ecuación de Schrödinger la función de ondas es escalar y ahora estamos considerando una con dos coordenadas. Por otro lado, en la ecuación de Dirac tenía cuatro componentes cuyo significado físico no estaba muy claro. El Hamiltoniano de la estructura fina tiende un puente entre ambas situaciones.
- En general, no te limites a explicaciones tan sucintas como las de [2], explica todo con detalle.

Tarea a entregar. Esta es seguramente la parte más importante de tu TFG. De nuevo prefiero dejarte bastante libertad para que lo plantees a tu gusto sin siquiera indicaciones sobre la extensión. Lo fundamental es que pongas explicaciones suficientemente detalladas y buenas para que siga los razonamientos un potencial miembro del tribunal que no haya visto esto nunca. Yo intentaría que el resultado fuera más largo que corto para que todo esté bien explicado. Trata de buscar conexiones con lo que has estudiado en hojas anteriores. En la versión final del trabajo seguramente habrá que tocar un poco las referencias pero eso no significa que ahora no las pongas.

Referencias

- [1] J. D. Bjorken and S. D. Drell. *Relativistic quantum mechanics*. McGraw-Hill Book Co., New York-Toronto-London, 1964.
- [2] F. Chamizo. Dirac equation, spin and fine structure hamiltonian. <http://matematicas.uam.es/~fernando.chamizo/physics/physics.html>, 2019.
- [3] W. Pauli Jr. On the quantum mechanics of magnetic electrons. *Nature*, 119:282, 1927.

- [4] Wikipedia contributors. Fine-structure constant — Wikipedia, the free encyclopedia. https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Fine-structure_constant&oldid=1059865225, 2021. [Online; accessed 14-December-2021].
- [5] B. Zwiebach. Quantum physics III. MIT OpenCourseWare, <https://ocw.mit.edu/courses/physics/8-06-quantum-physics-iii-spring-2018/>, 2018.