Università degli Studi di Perugia - Corso di Laurea Triennale in Fisica

Corso di

Meccanica Quantistica

Struttura fine per l' atomo idrogenoide

1 Correzione relativistica

$$H = c\sqrt{p^2 + m^2c^2} = mc^2\sqrt{1 + \left(\frac{p}{mc}\right)^2} \simeq mc^2\left[1 + \frac{p^2}{2m^2c^2} - \frac{1}{8}\left(\frac{p}{mc}\right)^4\right]$$

Il termine:

$$-mc^2\frac{1}{8}\left(\frac{p}{mc}\right)^4 = -\frac{T^2}{2mc^2} \equiv H_{\text{rel}} \ ,$$

può essere considerato perturbativo rispetto alla Hamiltoniana non relativistica $H_0 = T + V$, con $T = \dfrac{p^2}{2m}$ e $V(r) = -\dfrac{Ze^2}{r}$.

La correzione perturbativa al primo ordine è data da:

$$\begin{aligned}
E_{\text{rel}} = \langle H_{\text{rel}}\rangle_{n\ell m} &= -\frac{1}{2mc^2}\langle T^2\rangle_{n\ell m} = -\frac{1}{2mc^2}\langle (H_0 - V)^2\rangle_{n\ell m} \\
&= -\frac{1}{2mc^2}\langle H_0^2 - H_0V - VH_0 + V^2\rangle_{n\ell m} \\
&= -\frac{1}{2mc^2}\left(E_n^2 - 2E_n\langle V\rangle_{n\ell m} + \langle V^2\rangle_{n\ell m}\right) \\
&= -\frac{1}{2mc^2}\left[\frac{(mc^2)^2(Z\alpha)^4}{4n^4} - \frac{mc^2(Z\alpha)^2}{n^2}Z\alpha\hbar c\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle_{n\ell m} + (Z\alpha)^2\hbar^2c^2\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{n\ell m}\right] \\
&= -\frac{1}{2mc^2}\left[\frac{(mc^2)^2(Z\alpha)^4}{4n^4} - \frac{mc^2(Z\alpha)^2}{n^2}Z\alpha\hbar c\cdot\frac{mcZ\alpha}{\hbar n^2} + (Z\alpha)^2\hbar^2c^2\cdot\frac{m^2c^2(Z\alpha)^2}{\hbar^2n^3(\ell+1/2)}\right] \\
&= -\frac{1}{2mc^2}\left[\frac{(mc^2)^2(Z\alpha)^4}{4n^4} - \frac{(mc^2)^2(Z\alpha)^4}{n^4} + \frac{(mc^2)^2(Z\alpha)^4}{n^3(\ell+1/2)}\right] \\
&= -\frac{(mc^2)(Z\alpha)^4}{2n^3}\left(\frac{1}{\ell+1/2} - \frac{3}{4n}\right) \ ;
\end{aligned}$$

dove si è fatto uso dei valori medi seguenti

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle_{n\ell m} = \frac{Z}{a_0n^2} = \frac{mcZ\alpha}{\hbar n^2} \ ,$$

$$\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{n\ell m} = \frac{Z^2}{a_0^2n^3(\ell+1/2)} = \frac{m^2c^2(Z\alpha)^2}{\hbar^2n^3(\ell+1/2)} \ ,$$

e

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = \frac{\hbar}{mc\alpha} \ , \qquad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137} \ ,$$

sono, rispettivamente, il raggio di Bohr e la costante di struttura fine.

2 Effetto spin-orbita

Nel sistema di riferimento in cui l'elettrone è istantaneamente fermo (ricordare la precessione di Thomas):

$$\vec{B} = \frac{1}{2c}\vec{E}\times\vec{v} \ , \qquad \vec{E} = -\frac{\partial U}{\partial r}\frac{\vec{r}}{r} \ , \qquad U = \frac{Ze}{r} \ , \qquad (e > 0) \ ,$$

quindi

$$\vec{B} = -\frac{1}{2mc}\frac{1}{r}\frac{\partial U}{\partial r}\vec{r} \times m\vec{v} = -\frac{1}{2mc}\frac{1}{r}\frac{\partial U}{\partial r}\vec{L} \ ,$$

$$\hat{H}_{\text{s.o.}} = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = -\frac{e}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\partial U}{\partial r}\vec{L}\cdot\vec{S} = \frac{Ze^2}{2m^2c^2}\frac{1}{r^3}\vec{L}\cdot\vec{S} \ ,$$

$$\vec{L}\cdot\vec{S} = \begin{cases} \frac{1}{2}\ell\hbar^2 \ , & \left(j = \ell + \frac{1}{2}\right) \ , \\ -\frac{1}{2}(\ell+1)\hbar^2 \ , & \left(j = \ell - \frac{1}{2}\right) \ , \end{cases}$$

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{n\ell m} = \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 \ell(\ell+1/2)(\ell+1)} = \frac{m^3c^3(Z\alpha)^3}{\hbar^3 n^3 \ell(\ell+1/2)(\ell+1)} \ ,$$

$$E_{\text{s.o.}}(j = \ell + \frac{1}{2}) = \frac{mc^2(Z\alpha)^4}{2n^3}\frac{1}{2(\ell+1/2)(\ell+1)} \ , \qquad E_{\text{s.o.}}(j = \ell - \frac{1}{2}) = \frac{mc^2(Z\alpha)^4}{2n^3}\frac{(-1)}{2\ell(\ell+1/2)} \ .$$

3 Correzione relativistica + spin orbita

$$E_{\text{rel}} + E_{\text{s.o.}}(j = \ell + \frac{1}{2}) = -\frac{mc^2(Z\alpha)^4}{2n^3}\left(\frac{1}{\ell+1} - \frac{3}{4n}\right) = -\frac{mc^2(Z\alpha)^4}{2n^3}\left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n}\right) \ ,$$

$$E_{\text{rel}} + E_{\text{s.o.}}(j = \ell - \frac{1}{2}) = -\frac{m^2c^2(Z\alpha)^4}{2n^3}\left(\frac{1}{\ell} - \frac{3}{4n}\right) = -\frac{mc^2(Z\alpha)^4}{2n^3}\left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n}\right) \ .$$