Università degli Studi di Napoli “Federico II”

Scuola Politecnica e delle Scienze di Base
Area Didattica di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali

Dipartimento di Fisica “Ettore Pancini”

Laurea triennale in Fisica

Correzioni relativistiche per l’atomo idrogenoide

Relatore:
Prof. Gennaro Miele

Candidato:
Pellegrino Piantadosi
Matricola N85000848

Anno Accademico 2017-2018

Indice

Introduzione 1

1. ATOMO IDROGENOIDE NON RELATIVISTICO 2

2. PERTURBAZIONI RELATIVISTICHE 4

2.1 Energia cinetica 5

2.2 Precessione dello spin elettronico 6
2.2.1 Precessione di Thomas 6
2.2.2 Interazione spin-orbita 10

2.3 Potenziale delocalizzato 12

2.4 Struttura fine 13

3. ATOMO IDROGENOIDE RELATIVISTICO 15

3.1 Hamiltoniano 16

3.2 Autovalori 18

4. ALTRE CORREZIONI 21

4.1 Correzione radiativa 21

4.2 Struttura iperfine 22

Conclusioni 25

A. Autofunzioni imperturbate 26

B. Trasformazione di boost 28

C. Componenti spinoriali 29

Introduzione

L'atomo di idrogeno rappresenta un sistema fisico fondamentale per la comprensione della struttura della materia ed è per questo stato, fin dalla sua scoperta, oggetto di studio della fisica teorica e sperimentale. Teoricamente il problema dell'atomo ad un elettrone gode di particolare semplicità schematica viste le peculiari simmetrie del sistema. Sperimentalmente l'atomo si è mostrato agevolmente "osservabile" mediante le tecniche spettroscopiche la cui precisione progressivamente sempre maggiore ha permesso una caratterizzazione molto dettagliata dei suoi livelli energetici. La necessità di giustificare teoricamente il grande numero di dati spettroscopici ha dato il principale impulso alla formulazione della meccanica quantistica che all'aumentare della precisione delle misure ha subito un graduale processo di raffinamento, dalle sue versioni semiclassiche fino alla sua estensione a teoria quantistica di campo. In ogni sua riformulazione la teoria si è dimostrata molto predittiva e le sue conferme ne hanno sancito il successo.
Il presente lavoro di tesi si propone di analizzare, dal punto di vista teorico, le conseguenze dei fenomeni previsti della relatività ristretta sull'atomo idrogenoide ed in particolare la formalizzazione necessaria per ottenere le espressioni corrette dei livelli energetici compatibili con le misure spettroscopiche.
Nel Capitolo 1 si richiamano brevemente i principali risultati che si ricavano dalla trattazione non relativistica dell'atomo. Il Capitolo 2 è incentrato sulla ricerca delle perturbazioni di natura relativistica che, seppur integrabili soddisfacentemente con metodi approssimativi, rendono necessaria una riformulazione relativistica della teoria quantistica nell'ambito della quale il problema è ritrattato nel Capitolo 3. Nel Capitolo 4 infine si accenna a correzioni aggiuntive che, poiché producono effetti osservabili, sono importanti da menzionare.

Capitolo 1

Atomo idrogenoide non relativistico

Si consideri il sistema fisico che descrive un atomo idrogenoide costituito da un nucleo centrale, puntiforme di massa m_n e carica Ze, ed un solo elettrone, di massa m_e e carica $-e$, orbitante a distanza $\boldsymbol{r}$ dal nucleo con momento cinetico relativo $\boldsymbol{p}$. Nell'approssimazione non relativistica l'hamiltoniano relativo del sistema, indicando con m la massa ridotta[1], assume la forma

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}$$

in cui il primo termine costituisce la parte cinetica ed il secondo[2], $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$, è il potenziale coulombiano.

Il problema dell'atomo idrogenoide non relativistico è allora ricondotto, nel sistema del centro di massa, alla risoluzione dell'equazione stazionaria di Schrodinger

$$\mathcal{H}_0|\psi\rangle = E^0|\psi\rangle$$

che, applicando le regole di corrispondenza, nella rappresentazione delle coordinate si scrive

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^{\boldsymbol{2}} - \frac{Ze^2}{r}\right)\psi(\boldsymbol{r}) = E^0\psi(\boldsymbol{r})$$

[1] Dato che $m_n \gg m_e \Rightarrow \ m \equiv \frac{m_n m_e}{m_n + m_e} \approx m_e$.

[2] Si adotta il sistema di unità di misura di Gauss (cgs).

dove E^0 è l'energia di legame dell'elettrone e ψ è la funzione d'onda ad esso associata, ovvero l'orbitale atomico. L'equazione può essere risolta analiticamente e, indicando con $Ry \equiv \frac{e^2}{2a_0}$ la costante di Rydberg e con $a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{me^2}$ il raggio di Bohr, si trova che l'energia risulta essere quantizzata in livelli contrassegnati dal numero quantico n

$$E_n^0 = -\frac{Z^2 Ry}{n^2} \qquad n = 0,1,2..$$

e le autofunzioni associate a tali autovalori assumono la forma fattorizzata

$$\psi_{nlm_l}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta,\varphi) \qquad \begin{matrix} l = 0,\dots,n-1 \\ m_l = -l,\dots,+l \end{matrix}$$

dove le funzioni angolari $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ sono le armoniche sferiche mentre la funzione radiale è $R_{nl}(r) = N_{nl}e^{-\frac{\rho}{2}}\rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$, avendo definito $\rho \equiv \frac{2Z}{na_0}r$ e indicato con N_{nl} una costante di normalizzazione, con $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ i polinomi di Laguerre.

Le autofunzioni ψ_{nlm_l} costituiscono una base di autovettori comune agli operatori $\mathcal{H}_0, \boldsymbol{L}^2, L_z$ (avendo indicato con $\boldsymbol{L}$ il momento angolare orbitale dell'elettrone) ovvero

$$\boldsymbol{L}^2\psi_{nlm_l} = \hbar^2 l(l+1)\psi_{nlm_l} \qquad L_z\psi_{nlm_l} = \hbar m_l \psi_{nlm_l}$$

Definendo la costante $\alpha \equiv \frac{e^2}{\hbar c} \cong \frac{1}{137}$, i livelli energetici assumono la forma

$$E_n^0 = -\frac{mc^2(Z\alpha)^2}{2n^2}$$

Si nota che i livelli energetici dipendono solo dal numero quantico principale n e, poiché le autofunzioni dipendono dai tre numeri quantici n, l, m_l, per ogni autovalore si ha degenerazione di autostati pari a n^2.

In realtà, dato che l'elettrone è una particella con spin $1/2$, la funzione d'onda completa deve dipendere anche dal numero quantico di spin $m_s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$ ed è fattorizzabile in parte spaziale e parte di spin

$$\psi_{nlm_lm_s}(\boldsymbol{r}, s) = \psi_{nlm_l}(\boldsymbol{r})\chi_{s,m_s}$$

$$\boldsymbol{s}^2\chi_{s,m_s} = \frac{3}{4}\hbar^2\chi_{s,m_s} \qquad s_z\chi_{s,m_s} = \hbar m_s \chi_{s,m_s}$$

La degenerazione complessiva degli autostati dell'atomo idrogenoide non relativistico è allora pari a $2n^2$.

Capitolo 2

Perturbazioni relativistiche

Una trattazione relativistica del problema dell'atomo idrogenoide richiede di prendere in considerazione fenomeni che possono essere integrati a quanto già detto trattandoli come perturbazioni all'atomo non relativistico. Nella teoria delle perturbazioni gli effetti relativistici sono descritti da operatori che vanno a sommarsi all'hamiltoniano imperturbato di modo che l'hamiltoniano completo del sistema può scriversi come

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{rel}$$

dove $\mathcal{H}_{rel}$ si vedrà essere somma di tre contributi la cui espressione può essere derivata a partire da considerazioni di cinematica e dinamica relativistiche

$$\mathcal{H}_{rel} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_3$$

Data la degenerazione degli autovalori E_n^0, per trovare le correzioni ai livelli energetici si applica la teoria perturbativa degenere al primo ordine, ovvero si diagonalizza la perturbazione nel sottospazio di degenerazione.

$$E^{rel} = \langle \mathcal{H}_1 \rangle + \langle \mathcal{H}_2 \rangle + \langle \mathcal{H}_3 \rangle = E_1 + E_2 + E_3$$

2.1 Energia cinetica

In relatività l'energia totale di una particella ha la forma

$$\mathcal{E} = \sqrt{\boldsymbol{p}^2c^2 + m^2c^4} = T + mc^2$$

da cui si ha per l'energia cinetica relativistica

$$T = \sqrt{\boldsymbol{p}^2c^2 + m^2c^4} - mc^2 = mc^2\left(\sqrt{\frac{\boldsymbol{p}^2}{m^2c^2} + 1} - 1\right)$$

Dato che per l'elettrone atomico $\frac{v}{c}$ è sufficientemente piccolo, si può sviluppare la radice in serie di Taylor e approssimare al secondo ordine

$$T \approx mc^2\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m^2c^2} - \frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^4c^4}\right) = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2}$$

Il primo termine è proprio l'energia cinetica dell'atomo non relativistico, il secondo termine invece costituisce la correzione relativistica ovvero il primo contributo all'hamiltoniano $\mathcal{H}_{rel}$

$$\mathcal{H}_1 = -\frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2}$$

Si osservi che $\mathcal{H}_1$ è invariante per rotazione e che non agisce sullo spin sicché $[\mathcal{H}_1, \boldsymbol{L}^2] = [\mathcal{H}_1, L_z] = [\mathcal{H}_1, s_z] = 0$, per cui è diagonale su $|\psi_{nlm_lm_s}\rangle$.

Si può adesso valutare la prima correzione relativistica ai livelli energetici

$$E_1 = \langle\psi_{nlm_lm_s}|\mathcal{H}_1|\psi_{nlm_lm_s}\rangle = \left\langle\psi_{nlm_lm_s}\left|-\frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2}\right|\psi_{nlm_lm_s}\right\rangle =$$

$$= -\frac{1}{2mc^2}\left\langle\psi_{nlm_lm_s}\left|\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\right)^2\right|\psi_{nlm_lm_s}\right\rangle$$

Dato che l'operatore tra parentesi braket coincide con il quadrato dell'energia cinetica imperturbata, dall'espressione di $\mathcal{H}_0$ si ha

$$E_1 = -\frac{1}{2mc^2}\left\langle\psi_{nlm_lm_s}\left|\left(\mathcal{H}_0 + \frac{Ze^2}{r}\right)^2\right|\psi_{nlm_lm_s}\right\rangle =$$

$$= -\frac{1}{2mc^2}\left(\langle\psi_{nlm_lm_s}|{\mathcal{H}_0}^2|\psi_{nlm_lm_s}\rangle + Ze^2\left\langle\psi_{nlm_lm_s}\left|\mathcal{H}_0\frac{1}{r}\right|\psi_{nlm_lm_s}\right\rangle + Ze^2\left\langle\psi_{nlm_lm_s}\left|\frac{1}{r}\mathcal{H}_0\right|\psi_{nlm_lm_s}\right\rangle + Z^2e^4\left\langle\psi_{nlm_lm_s}\left|\frac{1}{r^2}\right|\psi_{nlm_lm_s}\right\rangle\right) =$$

$$= -\frac{1}{2mc^2}\left({E_n^0}^2 + 2Ze^2E_n^0\left\langle\psi_{nlm_lm_s}\left|\frac{1}{r}\right|\psi_{nlm_lm_s}\right\rangle + Z^2e^4\left\langle\psi_{nlm_lm_s}\left|\frac{1}{r^2}\right|\psi_{nlm_lm_s}\right\rangle\right) = [3]$$

$$= -\frac{1}{2mc^2}\left({E_n^0}^2 + 2Ze^2E_n^0\frac{Z}{a_0n^2} + Z^2e^4\frac{Z^2}{{a_0}^2n^3\left(l+\frac{1}{2}\right)}\right) =$$

$$= -\frac{1}{2mc^2}\left({E_n^0}^2 - 4{E_n^0}^2 + 4{E_n^0}^2\frac{n}{l+\frac{1}{2}}\right) =$$

$$= \frac{2{E_n^0}^2}{mc^2}\left(\frac{3}{4} - \frac{n}{l+\frac{1}{2}}\right)$$

In termini della costante α la correzione può essere scritta come

$$E_1 = -E_n^0\frac{(Z\alpha)^2}{n^2}\left(\frac{3}{4} - \frac{n}{l+\frac{1}{2}}\right)$$

2.2 Precessione dello spin elettronico

Dalla relatività dei sistemi deriva un moto di precessione dello spin elettronico che è conseguenza dell'azione combinata di due fenomeni.

2.2.1 Precessione di Thomas

Si indichi con $\underline{x}$ il quadrivettore evento nello spazio-tempo di Minkowski tale che

$$\underline{x} \equiv \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} ct \\ \boldsymbol{x} \end{pmatrix}$$

[3] Si veda Appendice A.

con Λ una generica matrice di trasformazione del gruppo di Lorentz ristretto, con Λ_B la matrice di boost della forma generale[4]

$$\Lambda_B(\beta) = \begin{pmatrix} \gamma_\beta & -\gamma_\beta\beta_x & -\gamma_\beta\beta_y & -\gamma_\beta\beta_z \\ -\gamma_\beta\beta_x & 1+(\gamma_\beta-1)\frac{\beta_x^2}{\beta^2} & (\gamma_\beta-1)\frac{\beta_x\beta_y}{\beta^2} & (\gamma_\beta-1)\frac{\beta_x\beta_z}{\beta^2} \\ -\gamma_\beta\beta_y & (\gamma_\beta-1)\frac{\beta_y\beta_x}{\beta^2} & 1+(\gamma_\beta-1)\frac{\beta_y^2}{\beta^2} & (\gamma_\beta-1)\frac{\beta_y\beta_z}{\beta^2} \\ -\gamma_\beta\beta_z & (\gamma_\beta-1)\frac{\beta_z\beta_x}{\beta^2} & (\gamma_\beta-1)\frac{\beta_z\beta_y}{\beta^2} & 1+(\gamma_\beta-1)\frac{\beta_z^2}{\beta^2} \end{pmatrix}$$

dove $\boldsymbol{\beta} \equiv \frac{\boldsymbol{v}}{c}$ e $\gamma_\beta \equiv \frac{1}{\sqrt{1-\boldsymbol{\beta}^2}}$ è il fattore di Lorentz, e con Λ_R la matrice di rotazione della forma generale

$$\Lambda_R = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & R_1^1 & R_2^1 & R_3^1 \\ 0 & R_1^2 & R_2^2 & R_3^2 \\ 0 & R_1^3 & R_2^3 & R_3^3 \end{pmatrix}$$

dove R è la matrice di una rotazione del gruppo ortogonale speciale $SO(3)$.

Si indichi con O l'osservatore nel sistema di riferimento di laboratorio in cui il nucleo è fisso, con O' l'osservatore nel sistema di riferimento in cui l'elettrone è a riposo al tempo t, con O'' l'osservatore nel sistema di riferimento in cui l'elettrone è a riposo al tempo $t+\delta t$. Nel sistema di riferimento di O l'elettrone al tempo t ha velocità $\boldsymbol{v}$ mentre a $t+\delta t$ ha velocità $\boldsymbol{v}+\delta\boldsymbol{v}$. Il passaggio da un sistema di riferimento all'altro è fissato dalle seguenti trasformazioni di Lorentz

$$\begin{matrix} O \to O' : \quad \underline{x}' = \Lambda_B(\boldsymbol{\beta})\underline{x} \\ O \to O'' : \ \underline{x}'' = \Lambda_B(\boldsymbol{\beta}+\delta\boldsymbol{\beta})\underline{x} \end{matrix} \qquad \Rightarrow \qquad O' \to O'' : \quad \underline{x}'' = \Lambda_B(\boldsymbol{\beta}+\delta\boldsymbol{\beta})\Lambda_B(-\boldsymbol{\beta})\underline{x}'$$

Al fine di semplificare la trattazione, si supponga che inizialmente la velocità dell'elettrone sia diretta lungo l'asse x e che l'incremento avvenga nel piano xy sicchè

$$\boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \beta \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \delta\boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \delta\beta_x \\ \delta\beta_y \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{\beta}+\delta\boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \beta+\delta\beta_x \\ \delta\beta_y \\ 0 \end{pmatrix}$$

Inoltre, allo scopo di trovare un'espressione trattabile per $\gamma_{\boldsymbol{\beta}+\delta\boldsymbol{\beta}}$, essendo $\delta\boldsymbol{\beta}$ un piccolo incremento, è possibile approssimare $|\boldsymbol{\beta}+\delta\boldsymbol{\beta}|^2$ al primo ordine in $\delta\beta$

$$|\boldsymbol{\beta}+\delta\boldsymbol{\beta}|^2 \approx \boldsymbol{\beta^2} + 2\boldsymbol{\beta}\cdot\delta\boldsymbol{\beta}$$

[4] Si veda Appendice B.

$$\gamma_{\boldsymbol{\beta}+\delta\boldsymbol{\beta}} = (1 - |\boldsymbol{\beta} + \delta\boldsymbol{\beta}|^2)^{-\frac{1}{2}} \approx 1 + \frac{1}{2}|\boldsymbol{\beta} + \delta\boldsymbol{\beta}|^2 + \frac{3}{8}|\boldsymbol{\beta} + \delta\boldsymbol{\beta}|^4 \approx$$

$$\approx 1 + \frac{1}{2}\boldsymbol{\beta^2} + \frac{3}{8}\boldsymbol{\beta}^4 + \boldsymbol{\beta}\cdot\delta\boldsymbol{\beta} + \frac{3}{2}\boldsymbol{\beta^2}(\boldsymbol{\beta}\cdot\delta\boldsymbol{\beta}) \approx$$

$$\approx \gamma_\beta + \left(1 + \frac{3}{2}\boldsymbol{\beta^2}\right)(\boldsymbol{\beta}\cdot\delta\boldsymbol{\beta}) \approx \gamma_\beta + {\gamma_\beta}^3(\boldsymbol{\beta}\cdot\delta\boldsymbol{\beta}) = \gamma_\beta + {\gamma_\beta}^3\beta\delta\beta_x$$

Per le matrici di trasformazione si ottengono allora le seguenti espressioni al primo ordine in $\delta\beta$

$$\Lambda_B(-\boldsymbol{\beta}) = \begin{pmatrix} \gamma_\beta & \gamma_\beta\beta & 0 & 0 \\ \gamma_\beta\beta & \gamma_\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\Lambda_B(\boldsymbol{\beta}+\delta\boldsymbol{\beta}) \approx \begin{pmatrix} \gamma_\beta + {\gamma_\beta}^3\beta\delta\beta_x & -(\gamma_\beta\beta + {\gamma_\beta}^3\delta\beta_x) & -\gamma_\beta\delta\beta_y & 0 \\ -(\gamma_\beta\beta + {\gamma_\beta}^3\delta\beta_x) & \gamma_\beta + \gamma_\beta^3\beta\delta\beta_x & \frac{(\gamma_\beta - 1)\delta\beta_y}{\beta} & 0 \\ -\gamma_\beta\delta\beta_y & \frac{(\gamma_\beta - 1)\delta\beta_y}{\beta} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\Lambda_B(\boldsymbol{\beta}+\delta\boldsymbol{\beta})\Lambda_B(-\boldsymbol{\beta}) \approx \begin{pmatrix} 1 & -\gamma_\beta^2\delta\beta_x & -\gamma_\beta\delta\beta_y & 0 \\ -\gamma_\beta^2\delta\beta_x & 1 & \frac{(\gamma_\beta - 1)\delta\beta_y}{\beta} & 0 \\ -\gamma_\beta\delta\beta_y & -\frac{(\gamma_\beta - 1)\delta\beta_y}{\beta} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Una generica trasformazione del gruppo di Lorentz ristretto può essere espressa come composizione di un boost Λ_B e una rotazione Λ_R per cui la matrice di trasformazione $O' \to O''$ può scriversi come

$$\Lambda_B(\boldsymbol{\beta}+\delta\boldsymbol{\beta})\Lambda_B(-\boldsymbol{\beta}) = \Lambda_B(\Delta\boldsymbol{\beta})\Lambda_R(\Delta\boldsymbol{\Omega})$$

Si consideri l'osservatore O''' rispetto al quale l'elettrone è a riposo al tempo $t + \delta t$ e che non ruota rispetto all'osservatore O':

$$O \to O''' : \underline{x}''' = \Lambda_R(-\Delta\boldsymbol{\Omega})\Lambda_B(\boldsymbol{\beta}+\delta\boldsymbol{\beta})\underline{x} \qquad O' \to O''' : \underline{x}''' = \Lambda_B(\Delta\boldsymbol{\beta})\,\underline{x}'$$

$$O'' \to O''' : \underline{x}''' = \Lambda_R(-\Delta\boldsymbol{\Omega})\underline{x}''$$

Se $\mathbb{B}$ e $\mathbb{R}$ sono rispettivamente i generatori infinitesimali di boost e rotazioni, ovvero

$$\mathbb{B} = \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \qquad \mathbb{R} = \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right]$$

allora le trasformazioni infinitesime possono essere scritte come

$$\Lambda_B \approx \mathbb{1} - \Delta\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbb{B} \qquad \Lambda_R \approx \mathbb{1} - \Delta\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbb{R}$$

da cui

$$\Lambda_B(\boldsymbol{\beta} + \delta\boldsymbol{\beta})\Lambda_B(-\boldsymbol{\beta}) \approx \mathbb{1} - \Delta\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbb{B} - \Delta\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbb{R}$$

L'espressione matriciale trovata per $\Lambda_B(\boldsymbol{\beta} + \delta\boldsymbol{\beta})\Lambda_B(-\boldsymbol{\beta})$ in termini di generatori infinitesimali diventa

$$\Lambda_B(\boldsymbol{\beta} + \delta\boldsymbol{\beta})\Lambda_B(-\boldsymbol{\beta}) = \mathbb{1} - \left(\gamma_\beta^2 \delta\beta_x + \gamma_\beta \delta\beta_y\right) \cdot \mathbb{B} - \left(\frac{\gamma_\beta - 1}{\beta^2}\right)(\boldsymbol{\beta} \times \delta\boldsymbol{\beta}) \cdot \mathbb{R}$$

e quindi, per confronto e generalizzando, si trova un'espressione esplicita dell'angolo di rotazione

$$\Delta\boldsymbol{\Omega} = \left(\frac{\gamma_\beta - 1}{\beta^2}\right)(\boldsymbol{\beta} \times \delta\boldsymbol{\beta})$$

La variazione nel tempo di $-\Delta\boldsymbol{\Omega}$ definisce la velocità angolare del sistema di riferimento di O''' rispetto ad O

$$\boldsymbol{\omega}_T \equiv -\frac{d\boldsymbol{\Omega}}{dt} = \frac{1}{c^2}\left(\frac{\gamma_\beta - 1}{\beta^2}\right)\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{v} \approx \frac{1}{2c^2}\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{v}$$

Questa velocità angolare è l'origine del moto di precessione, di natura puramente cinematica, che prende il nome di precessione di Thomas.

2.2.2 Interazione spin-orbita

L'elettrone orbitante intorno al nucleo è immerso in un campo elettrico

$$\boldsymbol{E} = \frac{1}{e}\frac{dV}{dr}\frac{\boldsymbol{r}}{r} = \frac{Ze}{r^3}\boldsymbol{r}$$

Nel sistema di riferimento solidale all'elettrone il campo elettromagnetico $(\boldsymbol{E}', \boldsymbol{B}')$ è legato al campo elettromagnetico del sistema solidale al nucleo $(\boldsymbol{E}, \boldsymbol{B})$ mediante le seguenti trasformazioni di Lorentz

$$\boldsymbol{E'}_{\parallel} = \boldsymbol{E}_{\parallel} \qquad \boldsymbol{B'}_{\parallel} = \boldsymbol{B}_{\parallel}$$
$$\boldsymbol{E'}_{\perp} = \gamma(\boldsymbol{E}_{\perp} + \boldsymbol{\beta} \times \boldsymbol{B}) \qquad \boldsymbol{B'}_{\perp} = \gamma(\boldsymbol{B}_{\perp} - \boldsymbol{\beta} \times \boldsymbol{E})$$

dove le componenti parallele e perpendicolari sono in riferimento a $\boldsymbol{\beta}$. Approssimando $\gamma \approx 1$, si ha che l'elettrone sperimenta un campo magnetico

$$\boldsymbol{B}' \approx \boldsymbol{B} - \boldsymbol{\beta} \times \boldsymbol{E} = \boldsymbol{B} + \frac{Ze}{r^3}\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{B} + \frac{Ze}{mcr^3}\boldsymbol{L}$$

con $\boldsymbol{L} \equiv \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ momento angolare orbitale dell'elettrone.

Dato il momento intrinseco di spin $\boldsymbol{s}$ dell'elettrone, il momento magnetico $\boldsymbol{\mu}_s = -\frac{ge}{2mc}\boldsymbol{s}$ (dove g è il fattore di Landè dell'elettrone) ad esso associato interagisce con il campo magnetico $\boldsymbol{B}'$ sicché lo spin, trattato alla stregua di un momento angolare classico, descrive un moto di precessione con velocità angolare di Larmor $\boldsymbol{\omega'}_L \equiv \frac{ge}{2mc}\boldsymbol{B'}$ che, considerando la rotazione del sistema di riferimento e quindi il contributo della precessione di Thomas con $\boldsymbol{a} = \frac{-e}{m}\boldsymbol{E} = -\frac{Ze^2}{mr^3}\boldsymbol{r}$, è descritto dalla seguente equazione

$$\frac{d\boldsymbol{s}}{dt} = \boldsymbol{\mu}_s \times \boldsymbol{B}' + \boldsymbol{\omega}_T \times \boldsymbol{s} = (\boldsymbol{\omega'}_L + \boldsymbol{\omega}_T) \times \boldsymbol{s}$$

L'energia potenziale associata a tale interazione è data da

$$U' = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \boldsymbol{B}' + \boldsymbol{s} \cdot \boldsymbol{\omega}_T = \frac{ge}{2mc}\boldsymbol{s} \cdot \boldsymbol{B} + \frac{gZe^2}{2m^2c^2r^3}\boldsymbol{s} \cdot \boldsymbol{L} - \frac{1}{2c^2}\frac{Ze^2}{m^2r^3}\boldsymbol{s} \cdot \boldsymbol{L} =$$
$$= \frac{ge}{2mc}\boldsymbol{s} \cdot \boldsymbol{B} + (g-1)\frac{Ze^2}{2m^2c^2r^3}\boldsymbol{s} \cdot \boldsymbol{L}$$

Se si approssima il fattore di Landè dell'elettrone a $g \cong 2$ si ottiene in definitiva

$$U' = \frac{e}{mc}\boldsymbol{s} \cdot \boldsymbol{B} + \frac{Ze^2}{2m^2c^2r^3}\boldsymbol{s} \cdot \boldsymbol{L}$$

Il secondo termine dell'energia potenziale rappresenta l'interazione dello spin dell'elettrone con il suo stesso moto orbitale ed è nota come interazione spin-orbita.

L'interazione spin-orbita costituisce il secondo contributo all'hamiltoniano $\mathcal{H}_{rel}$

$$\mathcal{H}_2 = \xi(r)\, \boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{L}$$

dove si è definito $\xi(r) \equiv \frac{Ze^2}{2m^2c^2r^3}$. Si osservi che $[\mathcal{H}_2; \boldsymbol{L^2}] = [\mathcal{H}_2; \boldsymbol{s}^2] = 0$ ma $[\mathcal{H}_2; L_z] \neq 0$, $[\mathcal{H}_2; s_z] \neq 0$ di conseguenza $\mathcal{H}_2$ non è diagonale su $|\psi_{nlm_lm_s}\rangle$. Si introduce allora il momento angolare totale $\boldsymbol{J} \equiv \boldsymbol{L} + \boldsymbol{s}$ tale che

$$\boldsymbol{J}^2 = \boldsymbol{L}^2 + \boldsymbol{s}^2 + 2\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{s} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{s} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{L}^2 - \boldsymbol{s}^2)$$

e la nuova base di autovettori

$$|\psi_{nlsj\, m_j}\rangle = \sum_{m_l,m_s} \langle l, s, m_l, m_s | j, m_j\rangle |\psi_{nl\, s m_l m_s}\rangle$$

comune a $\mathcal{H}, \boldsymbol{L}^2, \boldsymbol{s}^2, \boldsymbol{J}^2, J_z$ su cui è possibile valutare la correzione

$$E_2 = \left\langle \psi_{nls\, jm_j} \middle| \mathcal{H}_2 \middle| \psi_{nls\, jm_j} \right\rangle = \left\langle \psi_{nls\, jm_j} \middle| \xi(r)\, \boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{L} \middle| \psi_{nls\, jm_j} \right\rangle = \left\langle \psi_{nls\, jm_j} \middle| \frac{\xi(r)}{2}\,(\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{L}^2 - \boldsymbol{s}^2) \middle| \psi_{nls\, jm_j} \right\rangle =$$

$$= \left\langle \psi_{nls\, jm_j} \middle| \frac{\xi(r)}{2}\, \boldsymbol{J}^2 \middle| \psi_{nls\, jm_j} \right\rangle - \left\langle \psi_{nls\, jm_j} \middle| \frac{\xi(r)}{2}\, \boldsymbol{L}^2 \middle| \psi_{nls\, jm_j} \right\rangle - \left\langle \psi_{nls\, jm_j} \middle| \frac{\xi(r)}{2}\, \boldsymbol{s}^2 \middle| \psi_{nls\, jm_j} \right\rangle =$$

$$= \frac{1}{2}\left\langle \psi_{nls\, jm_j} \middle| \xi(r) \middle| \psi_{nls\, jm_j} \right\rangle \left(\hbar^2 j(j+1) - \hbar^2 l(l+1) - \hbar^2 s(s+1)\right) = [5]$$

$$= \frac{Z^4 e^2 \hbar^2}{4m^2c^2a_0^3} \frac{\left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right)}{n^3 l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)} =$$

$$= \frac{{E_n^0}^2}{mc^2} \frac{n\left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right)}{l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)}$$

dove j, secondo le regole di composizione dei momenti angolari, può assumere i valori $j = l - \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}$ e in cui si suppone, al fine di avere un'interazione spin-orbita, $l \neq 0$.

In termini della costante α la correzione può essere scritta come

$$E_2 = -E_n^0 \frac{(Z\alpha)^2}{n} \frac{\left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right)}{l(2l+1)(l+1)}$$

[5] Si veda Appendice A.

2.3 Potenziale delocalizzato

In una teoria quantistica non relativistica non è possibile derivare formalmente la terza correzione relativistica ai livelli energetici di un atomo idrogenoide, è tuttavia possibile dedurne un'espressione a partire da considerazioni di tipo euristico.

L'equivalenza relativistica tra massa ed energia ha per conseguenza che una particella particolarmente energetica può dare luogo alla formazione di altre particelle. In accordo con il principio di indeterminazione, se l'elettrone orbitale è localizzato in una regione dello spazio di dimensione lineare Δx allora l'indeterminazione sul momento cinetico è dell'ordine di $\Delta p \approx \frac{\hbar}{2\Delta x}$. In particolare, affinché si abbia un'energia sufficiente per la formazione di particelle

$$\Delta E \approx c\Delta p \approx mc^2 \quad \Rightarrow \quad \Delta p \approx mc \approx \frac{\hbar}{2\Delta x} \quad \Rightarrow \quad \Delta x \approx \frac{\hbar}{2mc} \equiv \frac{\lambda\!\!\!^{-}_{c}}{2}$$

dove $\lambda\!\!\!^{-}_{c}$ è la lunghezza d'onda Compton ridotta dell'elettrone. Le particelle eventualmente coinvolte, compreso l'elettrone, hanno una posizione che fluttua rapidamente con indeterminazione proporzionale alla lunghezza d'onda Compton. All'oscillazione risultante ci si riferisce con il termine Zitterbewegung. L'elettrone orbitale allora subisce un potenziale coulombiano delocalizzato

$$V(\boldsymbol{r} + \delta\boldsymbol{r}) \approx V(\boldsymbol{r}) + \delta\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{\nabla} V + \frac{1}{2}(\delta\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{\nabla})(\delta\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{\nabla})V$$

In media, per l'isotropia, la fluttuazione è nulla $\langle \delta\boldsymbol{r} \rangle = 0$ e $\langle \delta\boldsymbol{r}_i^2 \rangle = \frac{1}{3}\langle \delta\boldsymbol{r}^2 \rangle$ mentre i prodotti misti, poiché non correlati, si annullano

$$\langle V(\boldsymbol{r} + \delta\boldsymbol{r}) \rangle \approx V(\boldsymbol{r}) + \frac{1}{6}\,\langle \delta\boldsymbol{r}^2 \rangle\, \boldsymbol{\nabla^2} V$$

prendendo $\delta r = \sqrt{3\left(\frac{\lambda\!\!\!^{-}_{c}}{2}\right)^2} = \frac{\sqrt{3}}{2}\lambda\!\!\!^{-}_{c}$, ed essendo $\boldsymbol{\nabla^2} V = 4\pi Z e^2 \delta(\boldsymbol{r})$, si ottiene

$$\langle V(\boldsymbol{r} + \delta\boldsymbol{r}) \rangle = V(\boldsymbol{r}) + \frac{\pi Z e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2}\delta(\boldsymbol{r})$$

Il potenziale coulombiano agente sull'elettrone in oscillazione risulta allora corretto da un termine, detto termine di Darwin, che costituisce il terzo contributo all'hamiltoniano $\mathcal{H}_{rel}$

$$\mathcal{H}_3 = \frac{\pi Z e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2}\delta(\boldsymbol{r})$$

Il termine di Darwin è diagonale su $|\psi_{nlm_lm_s}\rangle$ per cui è possibile valutarne il contributo ai livelli energetici dell'atomo

$$E_3 = \langle\psi_{nlm_lm_s}|\mathcal{H}_3|\psi_{nlm_lm_s}\rangle = \left\langle\psi_{nlm_lm_s}\left|\frac{\pi Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2}\delta(\boldsymbol{r})\right|\psi_{nlm_lm_s}\right\rangle =$$

$$= \frac{\pi Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2}\langle\psi_{nlm_lm_s}|\delta(\boldsymbol{r})|\psi_{nlm_lm_s}\rangle =$$

$$= \frac{\pi Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2}\left|\psi_{n00m_s}(0)\right|^2 = {}^{6}\ \frac{\pi Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2}\frac{Z^3}{\pi a_0^3 n^3} =$$

$$= \frac{2E_n^{o\,2}}{mc^2}n$$

Si osservi che l'espressione è stata ottenuta considerando che le uniche autofunzioni imperturbate non nulle in $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{0}$ sono quelle per cui $l = 0$, pertanto il termine di Darwin agisce solo sugli stati a simmetria sferica.

In termini della costante α la correzione può essere scritta come

$$E_3 = -E_n^0\frac{(Z\alpha)^2}{n}$$

2.4 Struttura fine

Mettendo insieme i tre contributi si trova che, secondo la teoria perturbativa degenere al primo ordine, la correzione relativistica totale ai livelli energetici è data da

$$E^{rel} = E_1 + E_2 + E_3 =$$

$$= -E_n^0\frac{(Z\alpha)^2}{n^2}\left(\frac{3}{4} - \frac{n}{l+\frac{1}{2}}\right) - \begin{cases} E_n^0\dfrac{(Z\alpha)^2}{n}\dfrac{\left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right)}{l(2l+1)(l+1)} & l \neq 0 \\ E_n^0\dfrac{(Z\alpha)^2}{n} & l = 0 \end{cases}$$

[6] Si veda Appendice A.

e, in generale, per ogni $l = 0, \dots, n-1$ si può riscrivere come

$$E_{nj}^{rel} = E_n^0 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4}\right)$$

L'espressione relativisticamente corretta dei livelli energetici di un atomo idrogenoide in definitiva risulta essere

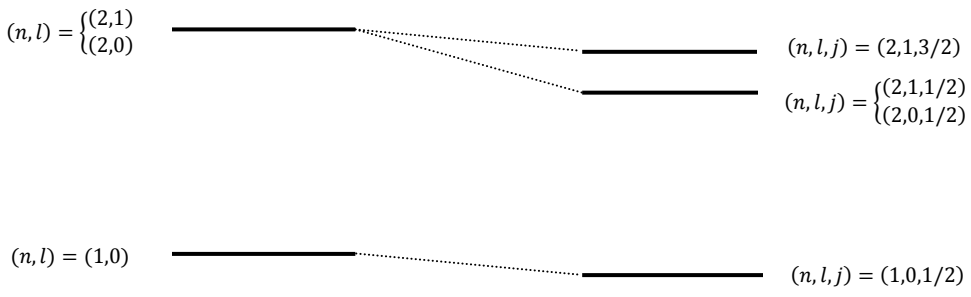
$$E_{nj} = E_n^0\left(1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4}\right)\right)$$

Si conclude che ogni livello imperturbato E_n^0 , degenere $2n^2$ volte, in realtà a causa degli effetti relativistici subisce una separazione (splitting) in un multipletto con componenti che differiscono da E_n^0 per un termine pari a E_{nj}^{rel} la cui dipendenza dai numeri quantici n e j fa sì che il numero di tali componenti sia fissato dagli autovalori (a meno di un fattore $\hbar$) assumibili dal momento angolare totale $j = l \oplus s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, n - \frac{1}{2}$. Si hanno quindi n componenti per ogni multipletto la cui separazione si riduce al crescere di n e j e che, rispetto al livello imperturbato, hanno energia maggiore in valore assoluto (stato più legato), $|E_{nj}| > |E_n^0|$. Si noti che la degenerazione dei livelli imperturbati è solo parzialmente rimossa, rimane infatti una degenerazione residua legata all'indipendenza di E_{nj}^{rel} dal numero quantico l (nonostante i termini correttivi, presi singolarmente, ne dipendano) che, per una fissata componente nj del multipletto, può assumere i valori $l = j \oplus s = j \pm \frac{1}{2}$ purché $l < n$; a ciò si aggiunge la degenerazione in $m_j = -j, \dots, j$ per cui la degenerazione residua complessiva della componente a livello energetico più alto è pari a $2j + 1$ mentre per le altre è $2(2j + 1)$.

Alla separazione energetica risultante si dà il nome di *struttura fine* dell'atomo idrogenoide e l'entità della sua rilevanza relativa è misurata da

$$\frac{E_{nj}^{rel}}{E_n^0} \propto (Z\alpha)^2$$

La costante α è perciò detta costante di struttura fine.



Capitolo 3

Atomo idrogenoide relativistico

La teoria perturbativa ha permesso di includere nella teoria quantistica non relativistica effetti relativistici che non possono essere trascurati poiché determinanti per la spiegazione delle osservazioni spettroscopiche. Nella teoria quantistica relativistica i tre contributi, precedentemente derivati singolarmente, si ritrovano inclusi, nella stessa forma e in modo teoricamente più corretto, nella soluzione dell'equazione di Dirac per un atomo idrogenoide, ovvero, nelle approssimazioni fatte, per un elettrone in presenza di un potenziale coulombiano

$$V = -\frac{Ze^2}{r}$$

L'hamiltoniano del sistema, in questo caso, diventa

$$\mathcal{H} = c\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{p} + bmc^2 - \frac{Ze^2}{r}$$

con $\boldsymbol{a} \equiv (a^{\boldsymbol{i}})$ e b definiti , nella rappresentazione standard, da

$$a^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix} \qquad\qquad b = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}$$

dove le σ^i sono le matrici di Pauli ovvero le componenti del vettore

$$\boldsymbol{\sigma} \equiv \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{bmatrix}$$

Il problema dell'atomo idrogenoide relativistico è allora ricondotto, nel sistema del centro di massa, alla risoluzione dell'equazione stazionaria di Dirac che si scrive come

$$\left(c\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{p} + bmc^2 - \frac{Ze^2}{r}\right)\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{r}) = E\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{r})$$

dove le $\boldsymbol{\psi}$ sono spinori a quattro componenti.

3.1 Hamiltoniano

Lo spinore $\boldsymbol{\psi}$ può essere scritto in termini di spinori a due componenti $\boldsymbol{\psi} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\psi}_+ \\ \boldsymbol{\psi}_- \end{pmatrix}$ e l'equazione di Dirac, in forma matriciale, diventa

$$\begin{pmatrix} mc^2 + V & c\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} \\ c\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} & -mc^2 + V \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{\psi}_+ \\ \boldsymbol{\psi}_- \end{pmatrix} = E\begin{pmatrix} \boldsymbol{\psi}_+ \\ \boldsymbol{\psi}_- \end{pmatrix}$$

Dalla seconda equazione si ricava

$$\boldsymbol{\psi}_- = \frac{1}{E + mc^2 - V}(c\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{\psi}_+$$

che, sostituita nella prima, dà

$$E\boldsymbol{\psi}_+ = \left[(mc^2 + V) + (c\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\frac{1}{E + mc^2 - V}(c\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\right]\boldsymbol{\psi}_+$$

Se si definisce $E' \equiv E - mc^2$, e sostituendolo in luogo di E, si osserva che per $\frac{v}{c} \ll 1$ $\Rightarrow \frac{E'-V}{2mc^2} \approx \frac{p^2}{4m^2c^2} \ll 1$ sicché è possibile la seguente approssimazione

$$E'\boldsymbol{\psi}_+ \approx \left[V + \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - (\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\left(\frac{E'-V}{4m^2c^2}\right)(\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\right]\boldsymbol{\psi}_+ \equiv \boldsymbol{H}_+\boldsymbol{\psi}_+$$

La condizione di normalizzazione impone che sia

$$\int \left(\boldsymbol{\psi}_+{}^\dagger\boldsymbol{\psi}_+ + \boldsymbol{\psi}_-{}^\dagger\boldsymbol{\psi}_-\right) d\boldsymbol{r} = 1$$

per cui, in generale, $\boldsymbol{\psi}_+$ non è normalizzata. All'ordine $\left(\frac{v}{c}\right)^2$, essendo $\boldsymbol{\psi}_- \approx \frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})}{2mc}\boldsymbol{\psi}_+$, la condizione di normalizzazione diventa

$$\int \left(\boldsymbol{\psi}_+{}^{\dagger}\left(1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{4m^2c^2}\right)\boldsymbol{\psi}_+\right)d\boldsymbol{x} \approx 1$$

Al fine di avere uno spinore normalizzato si può allora introdurre

$$\boldsymbol{\Psi} \equiv \left(1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)\boldsymbol{\psi}_+$$

Moltiplicando a sinistra entrambi i membri dell'equazione $\boldsymbol{H}_+\boldsymbol{\psi}_+ = E'\boldsymbol{\psi}_+$ per

$\left(1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)^{-1} \approx \left(1-\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)$ e scrivendo $\boldsymbol{\psi}_+ = \left(1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)^{-1}\boldsymbol{\Psi}$ si ottiene[7], indicando con { ; } le parentesi di anticommutazione,

$$\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V-\left\{\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2};\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V\right)\right\}-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\left(\frac{E'-V}{4m^2c^2}\right)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\right]\boldsymbol{\Psi} = \left[E^{'}-\left\{\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2};E'\right\}\right]\boldsymbol{\Psi}$$

$$\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V-\frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2}+\frac{1}{8m^2c^2}\left(\{\boldsymbol{p}^2;E^{'}-V\}-2(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})(E^{'}-V)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\right)\right]\boldsymbol{\Psi} = E'\boldsymbol{\Psi}$$

$$\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V-\frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2}+\frac{1}{2m^2c^2r}\frac{dV}{dr}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{L}+\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\boldsymbol{\nabla}^2V\right]\boldsymbol{\Psi} = E'\boldsymbol{\Psi}$$

$$\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}-\frac{Ze^2}{r}-\frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2}+\frac{Ze^2}{2m^2c^2r^3}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{L}+\frac{\pi Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2}\delta(\boldsymbol{r})\right]\boldsymbol{\Psi} = E'\boldsymbol{\Psi}$$

L'equazione ottenuta porta a scrivere l'hamiltoniano del sistema nella forma approssimata

$$\mathcal{H} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}-\frac{Ze^2}{r}-\frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2}+\frac{Ze^2}{2m^2c^2r^3}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{L}+\frac{\pi Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2}\delta(\boldsymbol{r})$$

in cui è evidente che i primi due termini costituiscono l'hamiltoniano imperturbato non relativistico e i restanti tre gli hamiltoniani associati alle perturbazioni relativistiche.

---

[7] Si utilizza la seguente identità : $\{A^2;B\}-2ABA = \left[A;[A;B]\right]$
Se $A = (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})$ e $B = (E^{'}-V)$
$\{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})^2;E^{'}-V\}-2(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})(E^{'}-V)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}) = \left[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p});[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p});E^{'}-V]\right] = [(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p});i\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nabla}V] =$
$= \hbar^2\boldsymbol{\nabla}^2V+2\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{\nabla}V\times\boldsymbol{p}) = \hbar^2\boldsymbol{\nabla}^2V+4\,\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{L}$

3.2 Autovalori

Se le componenti dello spinore $\boldsymbol{\psi}$ vengono scritte in forma fattorizzata

$$\boldsymbol{\psi} = \begin{pmatrix} \frac{F(r)}{r}\left|l_+, s, j, m_j\right\rangle \\ i\frac{G(r)}{r}\left|l_-, s, j, m_j\right\rangle \end{pmatrix}$$

l'equazione di Dirac, in forma matriciale, diventa allora

$$\begin{pmatrix} mc^2 + V & c\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} \\ c\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} & -mc^2 + V \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{F(r)}{r}\left|l_+, s, j, m_j\right\rangle \\ i\frac{G(r)}{r}\left|l_-, s, j, m_j\right\rangle \end{pmatrix} = E\begin{pmatrix} \frac{F(r)}{r}\left|l_+, s, j, m_j\right\rangle \\ i\frac{G(r)}{r}\left|l_-, s, j, m_j\right\rangle \end{pmatrix}$$

da cui si ottiene un sistema di due equazioni e, per l'azione degli operatori[8], la parte angolare si elimina

$$\begin{cases} -\hbar c\left(\frac{dG}{dr} - k\frac{G}{r}\right) = (E - mc^2 - V)F \\ \\ \hbar c\left(\frac{dF}{dr} + k\frac{F}{r}\right) = (E + mc^2 - V)G \end{cases}$$

dove $k = \pm\left(j + \frac{1}{2}\right)$. Definendo $\rho \equiv r\frac{\sqrt{m^2c^4 - E^2}}{\hbar c}$ il sistema può essere riscritto come

$$\begin{cases} \left(\frac{d}{d\rho} - \frac{k}{\rho}\right)G - \left(\frac{mc^2 - E}{\sqrt{m^2c^4 - E^2}} + \frac{Z\alpha}{\rho}\right)F = 0 \\ \\ \left(\frac{d}{d\rho} + \frac{k}{\rho}\right)F - \left(\frac{mc^2 + E}{\sqrt{m^2c^4 - E^2}} - \frac{Z\alpha}{\rho}\right)G = 0 \end{cases}$$

Studiando il comportamento asintotico, e ricordando che lo stato dell'elettrone deve essere legato, si scrive

$$\rho \to \infty \;\Rightarrow\; \begin{cases} \frac{dG}{d\rho} = \left(\frac{mc^2 - E}{\sqrt{m^2c^4 - E^2}}\right)F \\ \\ \frac{dF}{d\rho} = \left(\frac{mc^2 + E}{\sqrt{m^2c^4 - E^2}}\right)G \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{d^2G}{d\rho^2} = G \\ \\ \frac{d^2F}{d\rho^2} = F \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} G \sim h\rho^q e^{-\rho} \\ \\ F \sim h'\rho^q e^{-\rho} \end{cases}$$

[8] Si veda Appendice C.

$$\rho \to 0 \Rightarrow \begin{cases} \left(\frac{d}{d\rho} - \frac{k}{\rho}\right) G - \left(\frac{Z\alpha}{\rho}\right) F = 0 \\ \left(\frac{d}{d\rho} + \frac{k}{\rho}\right) F + \left(\frac{Z\alpha}{\rho}\right) G = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} h(q-k)\rho^{q-1} = h' Z\alpha \rho^{q-1} \\ h'(q+k)\rho^{q-1} = \text{-}hZ\alpha\rho^{q-1} \end{cases} \Rightarrow q^2 - k^2 = -(Z\alpha)^2$$

Da cui l'unico valore, compatibile con l'andamento delle funzioni, è

$$q = +\sqrt{k^2 - (Z\alpha)^2}$$

Scrivendo adesso le funzioni radiali in serie di potenze, sostituendole nel sistema ed eguagliando i termini in ρ^{q+N-1} si ha

$$F = \rho^q e^{-\rho} \sum_N a_N \rho^N \qquad G = \rho^q e^{-\rho} \sum_N a'_N \rho^N$$

$$\begin{cases} (q+N-k)a_N - a_{N-1} = \left(\frac{mc^2 + E}{\sqrt{m^2c^4 - E^2}}\right) a'_{N-1} - (Z\alpha) a'_N \\ (q+N+k)a'_N - a'_{N-1} = \left(\frac{mc^2 - E}{\sqrt{m^2c^4 - E^2}}\right) a_{N-1} + (Z\alpha) a_N \end{cases}$$

Si ottiene la seguente equazione per a_N e a'_N

$$\left[(mc^2 - E)(q+N-k) + (Z\alpha)\sqrt{m^2c^4 - E^2}\right] a_N - \left[\sqrt{m^2c^4 - E^2}(q+N+k) - (Z\alpha)(mc^2 - E)\right] a'_N = 0$$

Dato che le serie non possono essere illimitate deve esistere un $\bar{N}$ tale che $a_{\bar{N}-1} \neq 0$ e $a_{\bar{N}} = 0$. Per $N = \bar{N}$

$$\begin{cases} -a_{\bar{N}-1} = \left(\frac{mc^2 + E}{\sqrt{m^2c^4 - E^2}}\right) a'_{\bar{N}-1} - (Z\alpha) a'_{\bar{N}} \\ (q+\bar{N}+k)a'_{\bar{N}} - a'_{\bar{N}-1} = \left(\frac{mc^2 - E}{\sqrt{m^2c^4 - E^2}}\right) a_{\bar{N}-1} \end{cases} \Rightarrow \begin{matrix} a'_{\bar{N}} = 0 \\ a_{\bar{N}-1} = -\left(\frac{mc^2 + E}{\sqrt{m^2c^4 - E^2}}\right) a'_{\bar{N}-1} \end{matrix}$$

Se si inseriscono questi risultati nell'equazione per a_N e a'_N con $N = \bar{N} - 1 \equiv \tilde{N}$

$$2\sqrt{m^2c^4 - E^2}\left(q + \tilde{N}\right) = -2E(Z\alpha) \quad \Rightarrow \quad (m^2c^4 - E^2)\left(\sqrt{k^2 - (Z\alpha)^2} + \tilde{N}\right)^2 = E^2(Z\alpha)^2$$

In conclusione, definendo il numero quantico principale come

$$n \equiv \widetilde{N} + |k| = \widetilde{N} + j + \frac{1}{2}$$

si ricava l'espressione corretta per i livelli energetici

$$E_{nj} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{(Z\alpha)^2}{\left(n - \left(j + \frac{1}{2}\right) + \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2}\right)^2}}}$$

È possibile a questo punto sviluppare in serie in modo da ottenere la seguente approssimazione all'ordine $(Z\alpha)^4$

$$E_{nj} \approx mc^2 \left[1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} - \frac{(Z\alpha)^4}{2n^4}\left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right)\right]$$

Si nota che il primo termine è l'energia a riposo, il termine dell'ordine $(Z\alpha)^2$ coincide con l'energia imperturbata, mentre i termini in $(Z\alpha)^4$ descrivono la struttura fine.

Capitolo 4

Altre correzioni

A solo scopo di completezza e senza pretesa di esaustività, si accenna brevemente a correzioni aggiuntive che rifiniscono la teoria necessaria per la spiegazione delle osservazioni spettroscopiche condotte per un atomo idrogenoide "isolato" che conservi le simmetrie ipotizzate.

4.1 Correzione radiativa

Una delle importanti correzioni aggiuntive che bisogna richiamare è quella che dà origine al così detto "Lamb shift". Si tratta di un termine aggiuntivo che si deriva nell'ambito dell'elettrodinamica quantistica ed è associato all'interazione dell'elettrone atomico con il campo quantizzato di radiazione. L'entità della correzione è significativa solo per gli stati con $l = 0$ ed ha l'effetto di rimuovere la degenerazione in $l = j \pm \frac{1}{2}$ prevista dalla teoria relativistica.

Si trova che l'espressione approssimata di tale correzione è data da

$$E^{Lamb} = \frac{8Z^4\alpha^3 Ry}{3\pi n^3} ln \frac{mc^2}{\Delta E_n} \delta_{l0}$$

dove ΔE_n è una differenza di energia media, tra il livello imperturbato e l'energia degli stati interagenti con il campo di radiazione, che va determinata numericamente ma che tipicamente è dell'ordine della decina di Ry. Per $n = 2$ è pari a $17{,}8Ry$.

4.2 Struttura iperfine

Nella definizione del sistema si è approssimato il nucleo ad una carica puntiforme e di massa praticamente infinita rispetto a quella dell'elettrone. Tale approssimazione, considerati gli ordini di grandezza delle masse e delle dimensioni atomiche, è più che giustificata ai fini delle correzioni relativistiche, tuttavia, così facendo, si è del tutto ignorata la composizione particellare del nucleo. Il nucleo è costituito da un insieme di neutroni e protoni ed entrambi i tipi di particelle rientrano nella classe dei fermioni, ovvero delle particelle con spin $^1/_2$. Per tenere conto dei momenti intrinseci e di eventuali momenti orbitali, si definisce il momento angolare totale del nucleo $\boldsymbol{I}$, detto spin nucleare, tale che

$$\boldsymbol{I}^2|I, M_I\rangle = \hbar^2 I(I+1)|I, M_I\rangle \qquad I_z|I, M_I\rangle = \hbar M_I|I, M_I\rangle$$

e a cui è associato un momento magnetico

$$\boldsymbol{\mu}_{nuc} = \frac{g_I e}{2m_p c}\boldsymbol{I}$$

dove m_p è la massa del protone e g_I è il fattore di Landè nucleare. Il momento magnetico nucleare interagisce con il momento orbitale ed il momento intrinseco dell'elettrone. Dall'elettromagnetismo classico si ha che il potenziale vettore $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ associato ad un momento di dipolo magnetico è dato da

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) = \frac{(\boldsymbol{\mu}_{nuc} \times \boldsymbol{r})}{r^3}$$

e il campo magnetico è $\boldsymbol{B} = rot\boldsymbol{A}$. L'interazione può allora essere formalizzata, nell'approssimazione lineare in A, dall'operatore

$$\mathcal{H}_{nuc} = \frac{e}{mc}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p} - \boldsymbol{\mu}_s\cdot\boldsymbol{B} = \frac{e}{mcr^3}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{\mu}_{nuc} - \boldsymbol{\mu}_s\cdot\boldsymbol{B}$$

L'hamiltoniano del sistema comprendente il termine nucleare diventa allora

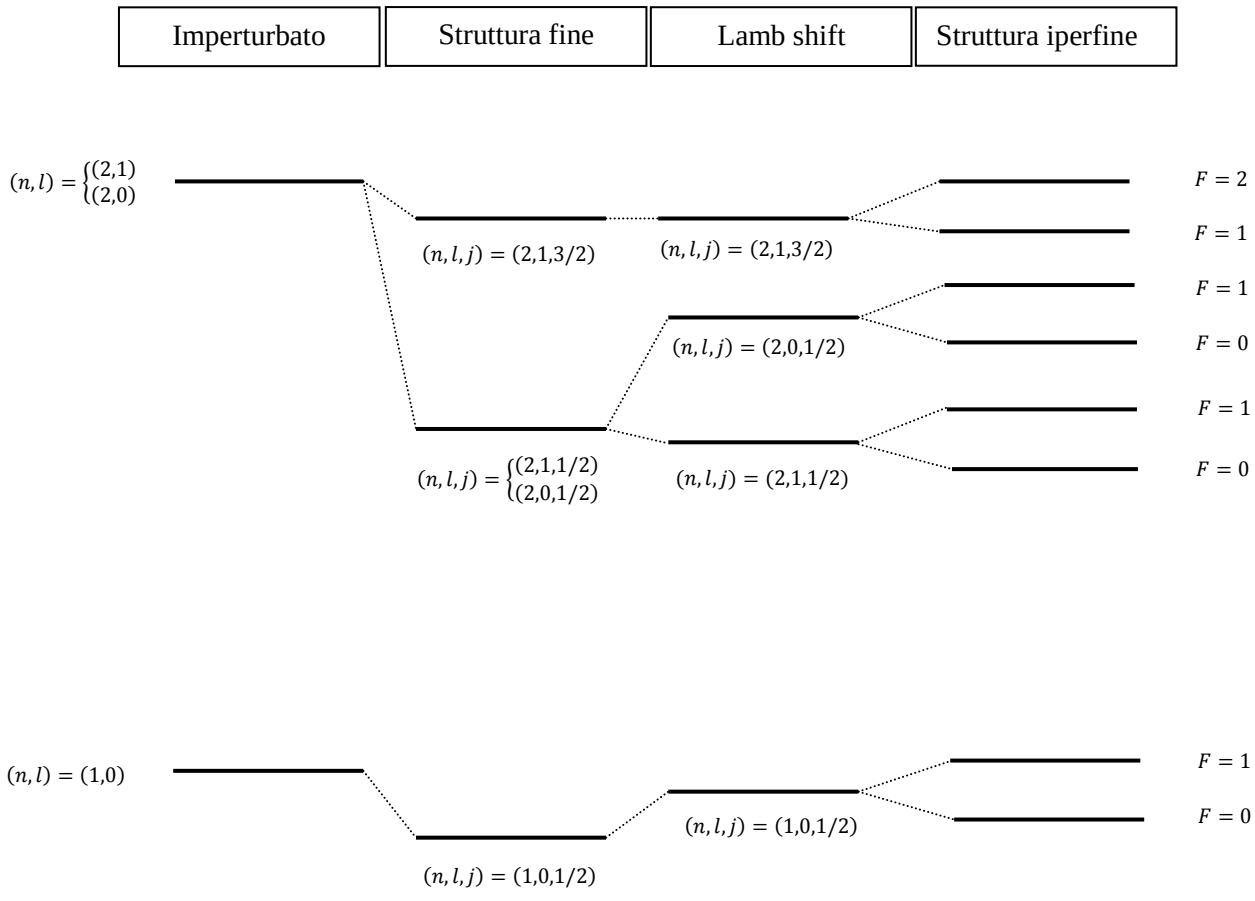
$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{rel} + \mathcal{H}_{nuc}$$

In analogia a quanto fatto per le correzioni relativistiche, l'hamiltoniano nucleare può essere trattato come un termine perturbativo. Tralasciando il calcolo dettagliato si trova che la correzione apportata è data da

$$E^{nuc} = \frac{\zeta}{2}[F(F+1) - I(I+1) - j(j+1)]$$

dove $\zeta \equiv \frac{2g_I Z^3 \alpha Ry\, m_e}{m_p n^3 j(j+1)(2l+1)}$ e $\boldsymbol{F} \equiv \boldsymbol{I} + \boldsymbol{J} \Rightarrow F = I \oplus j = |I-j|, \dots, I+j$.

Il risultato di questa correzione è quello di produrre per ogni livello nlj una separazione in multipletti ognuno avente $(2j+1)$ (se $j < I$) o $(2I+1)$ (se $I < j$) componenti caratterizzate dal numero quantico F. Ogni componente conserva però una degnerazione in F dovuta ai possibili $M_F = -F, \dots, F$, ovvero pari a $(2F+1)$. La struttura in multipletti dei livelli risultante è detta *struttura iperfine* dell'atomo idrogenoide e la sua rilevanza è misurata da ζ che è infatti detta costante di struttura iperfine.



Atomo di idrogeno

Imperturbato		Struttura fine		Lamb shift		Struttura iperfine	
$E^0(eV)$		$E^{rel}(eV)$		$E^{Lamb}(eV)$		$E^{nuc}(eV)$	
$n=1$	$-13{,}6$	$j=1/2$	$-1{,}81\cdot10^{-4}$	$l=0$	$+3{,}38\cdot10^{-5}$	$F=0$	$-4{,}41\cdot10^{-6}$
						$F=1$	$+1{,}47\cdot10^{-6}$
$n=2$	$-3{,}40$	$j=1/2$	$-5{,}65\cdot10^{-5}$	$l=0$	$+4{,}26\cdot10^{-6}$	$F=0$	$-5{,}50\cdot10^{-7}$
						$F=1$	$+1{,}83\cdot10^{-7}$
				$l=1$	$-7{,}10\cdot10^{-8}$	$F=0$	$-1{,}83\cdot10^{-7}$
						$F=1$	$+6{,}10\cdot10^{-8}$
		$j=3/2$	$-1{,}13\cdot10^{-5}$	$l=1$	$+3{,}30\cdot10^{-8}$	$F=1$	$-7{,}90\cdot10^{-8}$
						$F=2$	$+1{,}80\cdot10^{-8}$

Atomo di idrogeno

Conclusioni

Ricapitolando, definito ed inquadrato il sistema da studiare, sono stati presentati i tre fenomeni di natura relativistica che risultano determinanti ai fini della trattazione prefissata. Ognuno di essi è stato formalizzato, per essere opportunamente trattato, mediante operatori che, inclusi in una teoria perturbativa, hanno permesso di derivare un'espressione esplicita per le correzioni relativistiche ai livelli energetici. I risultati in questo modo ottenuti, con un certo senso di intuitività e a priori consapevolezza, sono poi stati confermati, e quindi avvalorati, dalla più elaborata teoria di Dirac la quale, a costo di un maggiore grado di formalizzazione, si è mostrata utile nel diretto e rapido ottenimento, come opportuno limite di approssimazione, dei medesimi risultati che, alla luce della teoria perturbativa, hanno conservato un chiaro significato fisico altrimenti arcano e di difficile interpretazione. A ciò sono state poi affiancate, a completamento, delle correzioni secondarie la cui necessità è stata frutto dell'estrema semplificazione del sistema.

In conclusione, si è dedotto che le simmetrie supposte inizialmente, e manifestatesi in termini di degenerazione dei livelli, per effetti relativistici (e non) in parte vengono meno (degenerazione accidentale) con la conseguente formazione di strutture di splitting, fine ed iperfine, che fanno capo ad una maggiore complessità del sistema il quale, di conseguenza, si appresta a descrivere con maggiore accuratezza l'atomo idrogenoide reale. Il modello risultante infatti si dimostra essere un eccezionale strumento di comprensione del mondo microscopico e di intercessione con le osservazioni empiriche nel duplice rapporto di verifica e previsione, ed è per questo da reputare, anche in vista delle sue possibili generalizzazioni ed estensioni, un notevole risultato della ricerca teorica fondamentale ed applicata.

Appendice A

Autofunzioni imperturbate

Le autofunzioni per un atomo idrogenoide non relativistico hanno la forma generale

$$\psi_{nlm_l}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta,\varphi)$$

$$R_{nl}(r) = N_{nl}\, e^{-\frac{\rho}{2}}\rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \qquad Y_{lm_l}(\theta,\varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\left[\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}} P_l^{|m|}(cos\theta)e^{im\varphi}$$

con $\rho \equiv \frac{2Z}{na_0}r$ e dove $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$, $P_l^{|m|}(cos\theta)$ denotano rispettivamente i polinomi di Laguerre e di Legendre associati

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = \sum_{k=0}^{n-l-1}(-1)^{k+1}\frac{[(n+l)!]^2\rho^k}{((n-l-1)-k)!(2l+1+k)!k!}$$

$$P_l^{|m|}(cos\theta) = \frac{(-1)^l}{2^l l!}(1-cos^2\theta)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{l+|m|}}{d(cos\theta)^{l+|m|}}(1-cos^2\theta)^l$$

La costante N_{nl} è fissata dalla condizione di normalizzazione

$$\left\|\psi_{nlm_l}\right\|^2 = \int\left|\psi_{nlm_l}(r,\theta,\varphi)\right|^2 d\boldsymbol{r} = \int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr = 1$$

$$\Rightarrow \quad {N_{nl}}^2 = \left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}$$

Le uniche funzioni ad essere non nulle per $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{0}$ sono quelle per cui $l = 0$, ovvero quelle a simmetria sferica, per le quali

$$\left|\psi_{n00}(\boldsymbol{r} = \boldsymbol{0})\right|^2 = \frac{Z^3}{\pi a_0^3 n^3}$$

Conoscendo l'espressione esplicita delle autofunzioni è possibile valutare su esse i valori di aspettazione di alcune semplici funzioni di r

$$\langle r\rangle \equiv \langle\psi_{nlm_l}|r|\psi_{nlm_l}\rangle = a_0\frac{n^2}{Z}\left\{1+\frac{1}{2}\left[1-\frac{l(l+1)}{n^2}\right]\right\}$$

$$\langle r^2\rangle \equiv \langle\psi_{nlm_l}|r^2|\psi_{nlm_l}\rangle = a_0^2\frac{n^4}{Z^2}\left\{1+\frac{3}{2}\left[1-\frac{l(l+1)-1/3}{n^2}\right]\right\}$$

$$\langle r^3 \rangle \equiv \langle \psi_{nlm_l} | r^3 | \psi_{nlm_l} \rangle = a_0^3 \frac{n^6}{Z^3} \left\{ 1 + \frac{27}{8} \left[1 - \frac{1}{n^2} \left(\frac{35}{27} - \frac{10}{9}(l+2)(l-1) \right) + \frac{1}{9n^4}(l+2)(l^2-1) \right] \right\}$$

$$\langle \frac{1}{r} \rangle \equiv \left\langle \psi_{nlm_l} \middle| \frac{1}{r} \middle| \psi_{nlm_l} \right\rangle = \frac{Z}{a_0 n^2}$$

$$\langle \frac{1}{r^2} \rangle \equiv \left\langle \psi_{nlm_l} \middle| \frac{1}{r^2} \middle| \psi_{nlm_l} \right\rangle = \frac{Z^2}{a_0^2 n^3 (l+1/2)}$$

$$\langle \frac{1}{r^3} \rangle \equiv \left\langle \psi_{nlm_l} \middle| \frac{1}{r^3} \middle| \psi_{nlm_l} \right\rangle = \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 l(l+1/2)(l+1)}$$

Appendice B

Trasformazione di boost

Si considerino due sistemi di riferimento inerziali O e O' con assi paralleli e origini coincidenti a $t = t' = 0$ ma in moto l'uno rispetto all'altro con velocità $\boldsymbol{v}$ di direzione generica. Per ottenere le leggi di trasformazione delle coordinate si scompone il vettore posizione nelle componenti parallela e perpendicolare rispetto a $\boldsymbol{v}$

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_{\parallel} + \boldsymbol{x}_{\perp}$$

Dalle consuete leggi di trasformazione delle coordinate per sistemi in moto relativo con velocità diretta lungo uno degli assi, si ha

$$\boldsymbol{x}'_{\parallel} = \gamma(\boldsymbol{x}_{\parallel} - \boldsymbol{v}t) \qquad \boldsymbol{x}'_{\perp} = \boldsymbol{x}_{\perp} \qquad t' = \gamma\left(t - \frac{\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{x}}{c^2}\right)$$

da cui, ricordando che $\boldsymbol{x}_{\parallel} \equiv \frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{v}}{v^2}\boldsymbol{v}$ **,**

$$\boldsymbol{x}' = \boldsymbol{x}'_{\parallel} + \boldsymbol{x}'_{\perp} = \gamma(\boldsymbol{x}_{\parallel} - \boldsymbol{v}t) + \boldsymbol{x}_{\perp} = \boldsymbol{x} + (\gamma - 1)\boldsymbol{x}_{\parallel} - \gamma\boldsymbol{v}t =$$

$$= \boldsymbol{x} + \left[(\gamma - 1)\frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{v}}{v^2} - \gamma t\right]\boldsymbol{v}$$

Una trasformazione di boost è allora espressa dalle seguenti leggi

$$\begin{cases} \boldsymbol{x}' = \boldsymbol{x} + \left[(\gamma - 1)\dfrac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{v}}{v^2} - \gamma t\right]\boldsymbol{v} \\ \\ t' = \gamma\left(t - \dfrac{\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{x}}{c^2}\right) \end{cases}$$

e può essere rappresentata dalla matrice Λ_B definita per componenti

$$(\Lambda_B)^i_{\ j} = \delta^i_j + (\gamma - 1)\frac{v^i v_j}{v^2} \qquad (\Lambda_B)^0_{\ 0} = \gamma$$

$$(\Lambda_B)^i_{\ 0} = -\gamma\frac{v^i}{c} \qquad (\Lambda_B)^0_{\ j} = -\gamma\frac{v_j}{c}$$

con $i, j = 1,2,3$.

Appendice C

Componenti spinoriali

Dato l'hamiltoniano dell'equazione di Dirac per un potenziale coulombiano

$$\mathcal{H} = c\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{p} + bmc^2 - \frac{Ze^2}{r}$$

si considerano gli operatori $\boldsymbol{L}^2$, $\boldsymbol{\Sigma}^2$, $\boldsymbol{J}^2$ essendo $\boldsymbol{L}$ il generatore infinitesimale delle rotazioni, $\boldsymbol{J} \equiv \boldsymbol{L}\mathbb{1} + \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma}$ e, nella rappresentazione di Dirac,

$$\boldsymbol{\Sigma} \equiv \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}$$

Si introduce inoltre l'operatore

$$K \equiv b(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{J}) - \frac{\hbar}{2}b = b(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{L}) + \hbar b$$

Si può verificare che $[\mathcal{H};\boldsymbol{J}^2] = [\mathcal{H};J_z] = [\mathcal{H};K] = 0$ per cui si sceglie la base di autovettori comuni $|\boldsymbol{\psi}\rangle$ su cui $K|\boldsymbol{\psi}\rangle = -\hbar k|\boldsymbol{\psi}\rangle$. Per gli autovalori si trova che

$$K^2 = \boldsymbol{J}^2 + \frac{\hbar^2}{4} \;\Rightarrow\; K^2|\boldsymbol{\psi}\rangle = \left(\boldsymbol{J}^2 + \frac{\hbar^2}{4}\right)|\boldsymbol{\psi}\rangle \;\Rightarrow\; \hbar^2k^2 = \hbar^2 j(j+1) + \frac{\hbar^2}{4} = \hbar^2\left(j+\frac{1}{2}\right)^2$$

$$k = \pm\left(j+\frac{1}{2}\right)$$

Se si scrive lo spinore a quattro componenti come $\boldsymbol{\psi} = \begin{pmatrix}\boldsymbol{\psi}_+\\ \boldsymbol{\psi}_-\end{pmatrix}$ l'equazione agli autovalori per K, in forma matriciale, diventa

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}+\hbar & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}-\hbar \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{\psi}_+\\ \boldsymbol{\psi}_-\end{pmatrix} = -\hbar k\begin{pmatrix}\boldsymbol{\psi}_+\\ \boldsymbol{\psi}_-\end{pmatrix} \;\Rightarrow\; \begin{cases}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}\boldsymbol{\psi}_+ = -\hbar(1+k)\boldsymbol{\psi}_+\\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}\boldsymbol{\psi}_- = -\hbar(1-k)\boldsymbol{\psi}_-\end{cases}$$

Facendo agire $\boldsymbol{L}^2$ sugli spinori a due componenti si ottiene

$$\boldsymbol{L}^2\boldsymbol{\psi}_\pm = \left(\boldsymbol{J}^2 - \hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L} - \frac{3}{4}\hbar^2\right)\boldsymbol{\psi}_\pm = \left[\hbar^2 j(j+1) + \hbar^2(1\pm k) - \frac{3}{4}\hbar^2\right]\boldsymbol{\psi}_\pm =$$

$$= \hbar^2\left[j(j+1)\pm k + \frac{1}{4}\right]\boldsymbol{\psi}_\pm = \hbar^2 l_\pm(l_\pm+1)\boldsymbol{\psi}_\pm$$

$$k = +\left(j+\frac{1}{2}\right) \Rightarrow l_\pm = j\pm\frac{1}{2} \qquad k = -\left(j+\frac{1}{2}\right) \Rightarrow l_\pm = j\mp\frac{1}{2}$$

Si conclude che $\boldsymbol{\psi}_{\pm}$, contrariamente a $\boldsymbol{\psi}$, sono autofunzioni di $\boldsymbol{L}^2$ con autovalori $\hbar^2 l_{\pm}(l_{\pm}+1)$ e che hanno parità opposta.

Gli spinori a due componenti possono essere fattorizzati in parte radiale ed angolare

$$\boldsymbol{\psi} = \begin{pmatrix} \frac{F(r)}{r}\left|l_+, s, j, m_j\right\rangle \\ i\frac{G(r)}{r}\left|l_-, s, j, m_j\right\rangle \end{pmatrix}$$

con $\left|l_{\pm}, s, j, m_j\right\rangle = \sum_{m_{l_{\pm}}, m_s}\left\langle l_{\pm}, m_{l_{\pm}}, s, m_s \middle| j, m_j\right\rangle \left|l_{\pm}, m_{l_{\pm}}, s, m_s\right\rangle$.

Nell'ambito della risoluzione dell'equazione di Dirac sui due spinori agisce l'operatore $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}$; al fine di studiarne l'azione si osservi che

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} = \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}}{r^2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}) = \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}}{r^2}[\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p} + i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})] = \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}}{r^2}[\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p} + i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}]$$

L'operatore $\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}}{r}$, essendo uno pseudoscalare, ha l'effetto di cambiare la parità e, poiché $\left(\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}}{r}\right)^2 = 1$, è ragionevole supporre (pur essendo dimostrabile) che la sua azione sulla parte angolare degli spinori sia la seguente

$$\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}}{r}\left|l_{\pm}, s, j, m_j\right\rangle = -\left|l_{\mp}, s, j, m_j\right\rangle$$

Da tali considerazioni si conclude che, ricordando l'azione di $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}$ su $\boldsymbol{\psi}_{\pm}$,

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{\psi}_+ = i\hbar\frac{1}{r}\left(\frac{dF}{dr} + \frac{k}{r}F\right)\left|l_-, s, j, m_j\right\rangle \qquad (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{\psi}_- = -\hbar\frac{1}{r}\left(\frac{dG}{dr} - \frac{k}{r}G\right)\left|l_+, s, j, m_j\right\rangle$$

Bibliografia

[1] Bhom D., *Quantum theory*. Prentice Hall, 1951.

[2] Bransden B. H., Joachain C. J., *Physics of atoms and molecules.* Longman Scientific and Technical, 1983.

[3] Caldirola P., Cirelli R., Prosperi G.M., *Introduzione alla fisica teorica.* Utet, 1996.

[4] Dirac P., *The principles of quantum mechanics.* Oxford at the Clarendon Press, 1958.

[5] Gasperini M., *Manuale di relatività ristretta.* Springer, 2010.

[6] Jackson J. D., *Classical electrodynamics.* Wiley, 1962.

[7] Landau L. D., Lifshitz E. M., *Course of theoretical physics III: Quantum mechanics, non-relativistic theory.* Oxford Pergman Press, 1958.

[8] Landau L. D., Lifshitz E. M., *Course of theoretical physics IV: Relativistic quantum theory.* Oxford Pergman Press, 1971.

[9] Schwabl F., *Quantum mechanics.* Springer, 1995.

[10] Schwabl F., *Advanced quantum mechanics.* Springer, 2008.