



F. Domínguez-Adame

Obtener correcciones de estructura fina no requiere el uso de complicadas ecuaciones relativistas



B. Méndez

Aproximación semiclásica a los efectos relativistas en el potencial de Coulomb

F. Domínguez-Adame y B. Méndez

ABSTRACT: We obtain the fine-structure corrections to the energy levels of spinless particles in the Coulomb potential by means of a semiclassical approach. Those energy levels can be expressed in terms of time averages using the relativistic classical dynamics and the virial theorem. The transition from classical dynamics to quantum mechanics is achieved replacing time averages by the non-relativistic expectation values of the corresponding quantum operators. Corrections to the energy levels agree with the Klein-Gordon equation predictions as well as with the experimental splitting observed in pionic atoms. Since our approach is rather simple, we believe that it is suitable to introduce relativistic corrections in introductory courses in quantum mechanics.

1. INTRODUCCIÓN

Existen dos problemas considerados habitualmente en detalle en los libros de texto de Física Cuántica, que son la dinámica de las partículas en el potencial coulombiano y el oscilador armónico [1, 2]. El potencial de Coulomb siempre ha suscitado interés debido a su enorme relevancia en el estudio de problemas relacionados como son los átomos hidrogenoides (electrón ligado a un núcleo), positronio (electrón ligado a su antipartícula), átomos piónicos (pión negativo ligado a un núcleo), e impurezas donadoras o aceptoras así como excitones de Wannier en semiconductores. La ecuación de Schrödinger presenta la enorme ventaja de ser exactamente resoluble en términos de funciones conocidas, tanto en el espacio de coordenadas como en el espacio de momentos [3, 4, 5], lo que explica que este problema pueda ser presentado y resuelto en cursos de Física Cuántica elemental. La consecuencia inmediata es que los niveles cuantizados de energía pueden obtenerse mediante expresiones compactas sin necesidad de recurrir a soluciones numéricas, que lógicamente

complicarían la resolución del problema, al menos a un nivel elemental como es el que consideramos desde el principio. Como sucede siempre en Física, los resultados obtenidos deben compararse con el experimento, y es bien sabido que los niveles encontrados mediante la ecuación de Schrödinger no concuerdan completamente con los datos que ofrece la espectroscopia atómica. El problema radica en que el electrón es realmente una partícula relativista, y dichas correcciones han de tenerse en cuenta a la hora de hacer un cálculo más detallado de los niveles energéticos. El tratamiento relativista que explica correctamente los resultados experimentales (ignorando efectos de polarización del vacío) se basa en la ecuación de Dirac para partículas con spin $1/2$ (átomos hidrogenoides) y en la ecuación de Klein-Gordon para partículas sin spin [6] (átomos piónicos). Sin embargo, la mayoría de los cursos introductorios en Física Cuántica omiten cualquier referencia a las ecuaciones relativistas.

En este trabajo nos proponemos obtener las correcciones de estructura fina a los niveles de energía de partículas sin spin en el potencial coulombiano, basándonos en lo que podríamos denominar una aproximación semiclásica. Para ellos consideramos las correcciones relativistas de menor orden a la energía de una partícula clásica moviéndose bajo la acción del potencial de Coulomb. Veremos que los cálculos pueden simplificarse enormemente si se utiliza el teorema del virial. Hasta este punto nuestro tratamiento se basa en conceptos que se han adquirido en los cursos elementales de Mecánica Clásica. La transición desde la dinámica clásica a la dinámica cuántica se lleva a cabo reemplazando los promedios temporales, que aparecen como consecuencia del teorema del virial clásico, por los valores esperados no relativistas de los correspondien-

tes operadores cuánticos. Veremos que los resultados coinciden plenamente con los obtenidos mediante la ecuación de Klein-Gordon, pero así hemos evitado tener que hacer uso de ella y, por el contrario, sólo se utilizan conocimientos ya adquiridos por el alumno.

2. TRATAMIENTO CUÁNTICO

Antes de pasar a explicar el tratamiento semiclásico objeto del presente trabajo, vamos a resumir las características principales de la dinámica cuántica de partículas de spin nulo en un campo coulombiano. Consideramos la ecuación de Klein-Gordon para una partícula con carga $-e$ (e es la carga elemental positiva) ligada a un núcleo en reposo de carga Ze . Por comodidad, en lo que sigue usaremos unidades tales que $\hbar = c = 1$. Entonces tenemos que [1]

$$(-\nabla^2 + m^2) \psi(\mathbf{r}, t) = \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{Ze^2}{r} \right)^2 \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

Dada que el potencial es separable en coordenadas esféricas proponemos la siguiente solución

$$\psi(\mathbf{r}, t) = R(r) Y_{lm}(\theta, \phi) e^{-iEt}, \quad (2)$$

siendo Y_{lm} un armónico esférico. Al introducir esta solución en (1) se obtiene una ecuación para la amplitud radial $R(r)$ que es formalmente idéntica a la ecuación de Schrödinger

$$\left(p_r^2 + \frac{l(l+1) - Z^2\alpha^2}{r^2} - 2E \frac{Z\alpha}{r} \right) R(r) = (E^2 - m^2) R(r) \quad (3)$$

donde $\alpha = e^2 \sim 1/137$ es la constante de estructura fina (recordemos que $\hbar = c = 1$) y

$$p_r = -i \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} \right) \quad (4)$$

es el momento conjugado de la variable r (ver la Ref. [4]). Los niveles de energía se pueden obtener ahora sin grandes dificultades matemáticas dada la analogía formal entre (3) y la ecuación de Schrödinger para el potencial de Coulomb. Desarrollando en serie de potencias en α los niveles de energía obtenidos se encuentra que [1]

$$E_{nl} = m \left[1 - \frac{Z^2\alpha^2}{2n^2} - \frac{Z^4\alpha^4}{2n^4} \cdot \left(\frac{n}{l+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right] + \mathcal{O}(Z^6\alpha^6). \quad (5)$$

siendo $n = 1, 2, \dots$. El primer término es la energía en reposo de la partícula, al igual que ocurre en la dinámica clásica relativista. El segundo término del desarrollo corresponde a los niveles de energía no relativistas, esto es, los niveles obtenidos al resolver directamente la ecuación de Schrödinger. El tercer término es la corrección de estructura fina, que rompe la degeneración de los estados con el mismo valor de n y diferente valor de l . Cabe destacar que en los experimentos se ha comprobado que

para átomos piónicos no muy pesados las correcciones de orden superior son solamente un 1% del tercer término, y dicha corrección es inaccesible con las actuales técnicas de medida [6]. En este sentido, por ejemplo, Wang y colaboradores [6] han encontrado que el desdoblamiento de los niveles piónicos en Ti debido a la corrección de estructura fina coincide, dentro del error experimental, con el valor calculado a partir de (5).

3. TRATAMIENTO SEMICLÁSICO

Hasta ahora hemos presentado un breve resumen de cómo suelen tratarse los efectos relativistas en partículas con spin nulo [1]. Sin embargo, según comentamos anteriormente, nuestro propósito es evitar desarrollos que puedan resultar demasiado elevados en un curso de introducción a la Física Cuántica. En esta Sección proponemos un método alternativo que nos conduzca a la ecuación (5) (resaltamos una vez más que dicha ecuación es correcta dentro del margen experimental actualmente disponible, y que por tanto podemos darla por válida), pero que evite el uso de la ecuación de Klein-Gordon (1). Para ello comenzamos con la ecuación del movimiento de una partícula relativista *clásica* en el potencial de Coulomb creado por un núcleo en reposo

$$\mathbf{p}^2 + m^2 = \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right)^2. \quad (6)$$

Haciendo el promedio temporal de la ecuación (6), que denotaremos por $\langle \dots \rangle$, se encuentra que la energía de la partícula viene dada por

$$E = -Ze^2 \langle r^{-1} \rangle + [m^2 + \langle \mathbf{p}^2 \rangle - Ze^4 (\langle r^{-2} \rangle - \langle r^{-1} \rangle^2)]^{1/2}. \quad (7)$$

Puesto que estamos interesados en las correcciones relativistas de menor orden, desarrollamos la expresión (7) en serie de potencias de $1/m$, con lo que omitiendo términos de orden superior se llega a

$$E = m - Ze^2 \langle r^{-1} \rangle + \left(\frac{\langle \mathbf{p}^2 \rangle}{2m} \right) - \frac{1}{2m} \left(\frac{\langle \mathbf{p}^2 \rangle}{2m} \right)^2 - \frac{Ze^4}{2m} (\langle r^{-2} \rangle - \langle r^{-1} \rangle^2). \quad (8)$$

Llegados a este punto conviene darse cuenta que el término $\langle \mathbf{p}^2 \rangle / 2m$ corresponde al promedio temporal de la energía cinética no relativista de la partícula. En primera aproximación utilizaremos el teorema del virial no relativista para reemplazar dicho término por $-(1/2) \langle V \rangle = (Ze^2/2) \langle r^{-1} \rangle$. Conviene señalar que estamos interesados en los estados ligados, que clásicamente corresponden a órbitas cerradas de la partícula, y por tanto una de las hipótesis básicas del teorema del virial se cumple, y es que tanto el momento como la posición de la partícula no crezcan indefinidamente [7]. Por consiguiente, con la sustitución antes indicada, la ecuación (8) se puede escribir entonces como

$$E = m \left[1 - \left(\frac{Ze^2}{2m} \right) \langle r^{-2} \rangle - \left(\frac{Z^2 e^4}{2m^2} \right) \left(\langle r^{-2} \rangle - \frac{3}{4} \langle r^{-1} \rangle^2 \right) \right]. \quad (9)$$

Debemos resaltar que la ecuación (9) se ha obtenido siguiendo un procedimiento estrictamente clásico, y que en ningún momento se han utilizado principios de la Física Cuántica. Creemos, por tanto, que un alumno con conocimientos de Mecánica Clásica debería poder seguir los razonamientos expuestos hasta el momento sin especiales dificultades. El problema que nos queda por resolver es cómo realizar la transición a la Mecánica Cuántica. Para dar este paso, que es quizás el más crucial, como lo ha sido siempre desde que se introdujeron los primeros conceptos cuánticos, postulamos que los promedios temporales los podemos reemplazar por los valores esperados de los correspondientes operadores cuánticos. Recordemos que uno de los postulados básicos de la Física Cuántica establece que el resultado más probable de una medida viene dado por el valor esperado del correspondiente operador cuántico asociado a la magnitud física medida. Este proceso de medida se puede entender como el resultado de escoger al azar un cierto sistema físico de entre una colección de sistemas idénticos. Por consiguiente, nuestro principal postulado no es más que el análogo a la hipótesis ergódica de la Física Estadística. Admitido, por tanto, este paso, lo que resta es sencillo. Los valores esperados de los operadores r^{-1} y r^{-2} son fácilmente calculables para el caso del potencial coulombiano, según la Mecánica Cuántica no relativista [8]. Por tanto, hacemos la sustitución

$$\begin{aligned} \langle r^{-1} \rangle &\rightarrow m \frac{Ze^2}{n^2}, \\ \langle r^{-2} \rangle &\rightarrow m^2 \frac{Z^2 e^4}{n^3 (l + 1/2)}, \end{aligned} \quad (10)$$

en la ecuación (9) y obtenemos finalmente la expresión (5) para las correcciones relativistas a los niveles de energía de la partícula.

4. CONCLUSIONES

Hemos demostrado que las correcciones relativistas de los niveles de energía de una partícula sin spin sometida a

la acción del campo coulombiano creado por un núcleo fijo (átomos piónicos) pueden obtenerse mediante argumentos semiclásicos. Este resultado se alcanza usando la Mecánica Clásica relativista y la Mecánica Cuántica no relativista, evitando así el recurso a la Mecánica Cuántica relativista. En breves palabras, el procedimiento seguido consiste en *cuantizar* después de estimar los valores de la energía en términos de los momentos y los valores esperados, en vez de hacerlo antes, como es usual en los libros de texto de Mecánica Cuántica avanzada. Los resultados obtenidos concuerdan plenamente con los que predice la ecuación de Klein-Gordon, y que a su vez están en perfecto acuerdo con las observaciones experimentales en átomos piónicos dentro, claro está, de las limitaciones experimentales. Aunque los efectos de spin no se han incluido, ya que posiblemente exigen un refinamiento de nuestros argumentos que está más allá de los objetivos que nos hemos marcado con este trabajo, creemos que el método que hemos presentado puede ser muy útil en cursos introductorios de Física Cuántica como una alternativa para estudiar efectos relativistas sin usar elaboradas teorías cuántico-relativistas [9].

Queremos agradecer a Enrique Maciá sus comentarios y sugerencias sobre el presente trabajo.

REFERENCIAS

- [1] L. I. SCHIFF: *Quantum Mechanics*. McGraw-Hill, New York, 1968.
- [2] F. SCHWABL: *Quantum Mechanics*. Springer-Verlag, Berlin, 1990.
- [3] M. M. NIETO: *Am. J. Phys.* **47**, 1067 (1979).
- [4] J. R. LOMBARDI: *Phys. Rev. A* **22**, 797 (198).
- [5] K. ANDREW y J. SUPLEE: *Am. J. Phys.* **58**, 1177 (1990).
- [6] K. C. WANG, F. BOHEM, A. A. HANH, H. E. HENRIKSON, J. P. MILLER, R. J. POWERS, P. VOGEL, J. L. VUILLEUMIER y R. KUNSELMAN: *Phys. Lett. B* **79**, 170 (1978).
- [7] A. RAÑADA: *Dinámica clásica*. Alianza Editorial, Madrid, 1990.
- [8] H. A. BETHE y E. E. SALPETER: *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Systems*. Plenum, New York, 1957. p. 103.
- [9] B. THALLER: *The Dirac Equation*, Springer-Verlag, Berlin, 1992.

F. Domínguez-Adame y B. Méndez
están en el Departamento de Física de Materiales,
Universidad Complutense, 28040 Madrid

Newton

Solución a las Interacciones Cruzadas:
«No pretendo explicar mediante hipótesis las propiedades de la luz, sino presentarlas y probarlas mediante la razón y los experimentos»