

A estrutura fina do Hidrogênio e o termo de Darwin

R. L. Viana,
Departamento de Física, Universidade Federal do Paraná,
Curitiba, Paraná, Brasil

1 Introdução

Um dos fatores que compõem a estrutura fina do átomo de Hidrogênio é o termo de Darwin, que resulta da não-localidade da interação entre o elétron e o campo Coulombiano do próton [1]. Em outras palavras, os níveis de energia do elétron são afetados pelos valores do campo do núcleo não só na sua posição radial r mas ao longo de um intervalo de espessura da ordem do comprimento de onda Compton do elétron

$$\lambda_c = \frac{\hbar}{m_e c} = 3,86 \times 10^{-13} m = 3,86 \times 10^{-3} \text{Å}, \quad (1)$$

devido às flutuações quânticas que interferem no movimento do elétron.

A correção que este efeito provoca na estrutura fina do átomo de Hidrogênio é chamada termo de Darwin:

$$W_D = \frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \nabla^2 V(r), \quad (2)$$

onde $V(r)$ é a energia potencial sobre o elétron devido ao campo gerado pelo próton. Este termo foi introduzido por Charles Galton Darwin (neto do famoso naturalista Charles Darwin) em 1927 [2].

No caso de um potencial Coulombiano $V(r) = -e^2/r$, temos que

$$W_D = \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m_e^2 c^2} \delta(\mathbf{r}), \quad (3)$$

onde usamos a expressão bem conhecida

$$\nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) = -4\pi \delta(\mathbf{r}). \quad (4)$$

A correção de primeira ordem nos níveis de energia devido ao termo de Darwin é o valor esperado de (3) em relação aos autoestados do átomo de hidrogênio, de modo que

$$[W_D] = \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m_e^2 c^2} \int d^3 r |\psi_{n\ell m}(\mathbf{r})|^2 \delta(\mathbf{r}) = \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m_e^2 c^2} |\psi_{n\ell m}(\mathbf{0})|^2, \quad (5)$$

onde utilizamos a propriedade de fitragem da função delta. Como $\psi_{nlm}(\mathbf{0}) = 0$ se $\ell > 0$, decorre que apenas os autoestados com $\ell = 0$ (subníveis do tipo s) são afetados pelo termo de Darwin. Por exemplo, a energia subnível $2s$ sofre uma correção de $9,057 \times 10^{-5} eV$, muito pequena porém ainda grande o suficiente para deixá-la com energia quase igual à do subnível $2p$.

Assim como os demais termos de estrutura fina, o termo de Darwin também decorre naturalmente da equação de Dirac, quando aplicada ao átomo de Hidrogênio [3]. No entanto, é possível “deduzi-lo” dentro do contexto não-relativístico fazendo algumas suposições de natureza fenomenológica, e que é o objetivo destas notas de aula [4].

2 Flutuações quânticas

As flutuações quânticas do campo eletromagnético induzem a criação de pares virtuais elétron-pósitron. O pósitron é a anti-partícula do elétron, tendo a mesma massa e spin deste, mas carga de mesmo módulo e sinal positivo. Há dois processos bem conhecidos envolvendo estas duas partículas:

- Criação de um par elétron-pósitron a partir de um fóton de alta energia
- Aniquilação de um par elétron-pósitron gerando um fóton de alta energia

Uma partícula virtual exibe várias características de uma partícula ordinária, como energia e momentum, mas sua existência é limitada pelo princípio de incerteza. Assim, um par virtual elétron-pósitron existe durante um determinado intervalo de tempo Δt entre a sua criação e a sua aniquilação. Pelo princípio de incerteza energia-tempo temos que

$$\Delta t \approx \frac{\hbar}{\Delta E}$$

onde $\Delta E \approx m_e c^2$ é da ordem da energia de repouso das partículas envolvidas. A distância percorrida por elas durante este intervalo de tempo é

$$\xi \approx c\Delta t \approx \frac{\hbar}{m_e c} = \lambda_c,$$

ou seja, da ordem do comprimento de onda Compton (1).

As interações do elétron com estes pares virtuais devidos às flutuações quânticas do campo eletromagnético fazem com que a posição do elétron seja flutuante, descrevendo uma trajetória altamente irregular conhecida pelo termo alemão *zitterbewegung*. Podemos descrever matematicamente a posição do elétron pelo vetor $\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi}$, onde $\boldsymbol{\xi}$ é um vetor aleatório cujo módulo é da ordem de grandeza de λ_c , e cuja posição e sentido flutuam randomicamente, de modo que a sua média é zero

$$\overline{\boldsymbol{\xi}} = 0, \quad (6)$$

mas sua média quadrática (variância) $\overline{\xi^2}$ é diferente de zero, e da ordem de λ_c . Supondo isotropia, todas as direções são igualmente prováveis para o vetor aleatório, de modo que

$$\overline{\xi_i \xi_j} = \frac{1}{3} \overline{\xi^2} \delta_{ij}. \quad (7)$$

Expandindo em série de potências o potencial do próton em torno da trajetória clássica \mathbf{r} do elétron teremos

$$V(\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi}) = V(\mathbf{r}) + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla V(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \xi_i \xi_j \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} + \dots \quad (8)$$

Tomando a média da expressão acima

$$\overline{V(\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi})} = V(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \overline{\xi_i \xi_j} \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} = V(\mathbf{r}) + \frac{1}{6} \overline{\xi^2} \nabla^2 V(\mathbf{r}), \quad (9)$$

onde usamos (6) e (7).

Logo, a variação do potencial do próton ao longo do intervalo de largura λ_c em torno da posição clássica do elétron é

$$\delta V(\mathbf{r}) = \overline{V(\mathbf{r} + \boldsymbol{\xi})} - V(\mathbf{r}) = \frac{1}{6} \lambda_c^2 \nabla^2 V = \frac{\hbar^2}{6m_e^2 c^2} \nabla^2 V(\mathbf{r}) \quad (10)$$

que podemos identificar como o próprio termo de Darwin [?], a menos do fator numérico (1/6 no lugar de 1/8).

Referências

- [1] C. Cohen-Tannoudji, Laloe, Diu, *Quantum Mechanics*, Vol. 2
- [2] C. G. Darwin, Proc. R. Soc. London A **116**, 227 (1927)
- [3] P. A. M. Dirac, Proc. R. Soc. London A **117**, 610 (1928). O termo de Darwin aparece no final do artigo, pg. 624.
- [4] https://en.wikipedia.org/wiki/Fine_structure