Las reglas de Bohr fueron generalizadas a sistemas con más grados de libertad por Arnold Sommerfeld.

Sommerfeld basó su generalización en las variables acción-ángulo de la Mecánica Clásica.

Consideremos un sistema de n grados de libertad y un sistema de coordenadas canónicas donde la ecuación de Hamilton-Jacobi es separable. Sean las coodenadas canónicas q_i, p_i. Supongamos además que en este sistema las coordenadas y momentums son funciones periódicas del tiempo. La variable de acción, asociada al grado de libertad i es $A_i = \oint p_i d q_i$. La integral se extiende sobre los valores clásicos permitidos de q_i. A_i es el área en espacio de fases correspondiente al movimiento clásico de la coordenada q_i.

Reglas de Bohr Sommerfeld: $\oint p_i d q_i = n_i h$

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2=E \qquad p=\sqrt{2m\left(E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)} \qquad x_\pm=\pm\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$$

$$4\int_0^{x_+}\sqrt{2m\left(E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)}dx=nh$$

$$\sqrt{\frac{m\omega^2}{2}}x=\sqrt{E}\cos\alpha,\, \alpha(x_+)=0 \quad 4\sqrt{2mE}\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\int_0^{\frac{\pi}{2}}d\alpha\,\mathrm{sen}^2\alpha=$$

$$\cos 2\alpha=1-2\mathrm{sen}^2\alpha \qquad 8\frac{E}{\omega}\frac{\pi}{4}=nh$$

$$E=nh\nu$$

La integral de acción se puede encontrar de manera directa usando variable compleja. Miremos el plano complejo x. La integral de acción corresponde a la trayectoria que encierra los dos puntos de ramificación de $p(x)$ con un corte entre ellos. En el plano complejo, calculamos la integral de acción, mirando el plano complementario. Allí no hay corte: La función es analítica en todas partes excepto por un polo en $x=\infty$. Usando el teorema de Cauchy, se tiene:

$$\oint p\,dx=2\pi i\,\mathrm{Res}(p(x)) \qquad x=\infty$$

$$x=t^{-1} \qquad dx=-\frac{1}{t^2}dt, \qquad \sqrt{2m\left(E-\frac{1}{2}m\omega^2t^{-2}\right)}\frac{1}{t^2}dt$$

$$\sqrt{2m\left(E-\frac{1}{2}m\omega^2t^{-2}\right)\frac{1}{t^2}}_{t=0} \quad =\frac{m\omega i}{t^3}\sqrt{\left(1-\frac{2E}{m\omega^2}t^2\right)}=$$

$$\frac{m\omega i}{t^3}\left(1-\frac{E}{m\omega^2}t^2\right) \qquad \mathrm{Res}=-\frac{E}{\omega}i$$

$$\oint p\,dx=\frac{2\pi E}{\omega}$$

Dada la conservación del momentum angular para potenciales centrales, el movimiento es planar.

$$E = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\varphi^2}{2mr^2} - \frac{\alpha}{r}$$

$$\oint p_\varphi d\varphi = n_\varphi h = 2\pi p_\varphi,\ p_\varphi = n_\varphi \hbar\ p_r = \sqrt{2m\left(E - \frac{p_\varphi^2}{2mr^2} + \frac{\alpha}{r}\right)}$$

p_r tiene dos puntos de ramificación. Cortamos el plano uniendo estos dos puntos a lo large del eje $\operatorname{Re} r$. En el plano complementario sólo hay: un polo en infinito y un polo en $r = 0$.

$$\frac{1}{t^2}\sqrt{2mE - p_\varphi^2 t^2 + 2m\alpha t} = \frac{1}{t^2}\sqrt{2mE}\sqrt{1 - \frac{p_\varphi^2}{2mE}t^2 + \frac{\alpha}{E}t}$$

$$\mathrm{Res}_\infty = \sqrt{2mE}\frac{1}{2}\frac{\alpha}{E} = \alpha\sqrt{\frac{m}{2E}} \qquad \mathrm{Res}_0 = p_\varphi i$$

$$\oint p_r dr = 2\pi i\left(\alpha\sqrt{\frac{m}{2E}} + p_\varphi i\right) = n_r h$$

$$-\alpha^2\frac{m}{2E} = (n_r + n_\varphi)^2\hbar^2 \qquad E = -\frac{m\alpha^2}{2(n_r + n_\varphi)^2\hbar^2}$$

El espectro es degenerado. La energía sólo depende del número cuántico principal $n = n_r + n_\varphi$, lo que corresponde a varios valores de n_r, n_φ. Esto se manifiesta en el espectro como lineas gruesas, que con mayor resolución aparecen como dos líneas delgadas muy cercanas(Estructura fina).

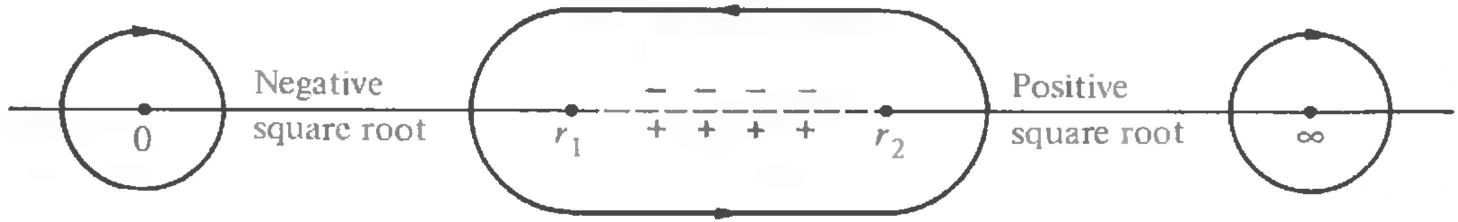

Figura 1.

Atomo de Hidrógeno Relativista: $L=-mc^2\sqrt{1-\frac{\vec{v}^{\,2}}{c^2}}+\frac{a}{r}$, $v^2=\dot{r}^{\,2}+r^2\dot{\varphi}^2$, $p_\varphi=\frac{\partial L}{\partial\dot{\varphi}}=m\gamma r^2\dot{\varphi}$

$p_r=m\gamma\dot{r}$, $p_r^2+\frac{p_\varphi^2}{r^2}=m^2\gamma^2\dot{r}^{\,2}+m^2\gamma^2r^2\dot{\varphi}^2=m^2\gamma^2v^2=\frac{-m^2c^4+K^2}{c^2}=m^2\gamma^2c^2\Big(1-1+\frac{v^2}{c^2}\Big)$.

$p_\varphi=n_\varphi\hbar$. $E=K-\frac{a}{r}$, $p_r=\sqrt{-m^2c^2+\frac{(E+\frac{a}{r})^2}{c^2}-\frac{p_\varphi^2}{r^2}}$

- Dos puntos de ramificación. Corte a lo largo del eje $\operatorname{Re} r$.
- Polo en $r=0$. $\operatorname{Res}=\sqrt{\frac{a^2}{c^2}-p_\varphi^2}$
- $r=\frac{1}{t},\frac{1}{t^2}\sqrt{-m^2c^2+\frac{(E+a\,t)^2}{c^2}-p_\varphi^2t^2}=\frac{1}{t^2}\sqrt{-m^2c^2+\frac{E^2}{c^2}}\,\Big(1+\frac{a\,E\,t}{(-m^2c^4+E^2)}\Big)$, $\operatorname{Res}=-i\frac{a\,E}{(m^2c^4-E^2)}\sqrt{m^2c^2-\frac{E^2}{c^2}}=-\frac{i\,a\,E}{c^2\sqrt{m^2c^2-\frac{E^2}{c^2}}}$
- $\frac{a\,E}{c^2\sqrt{m^2c^2-\frac{E^2}{c^2}}}-\sqrt{-\frac{a^{\,2}}{c^2}+p_\varphi^2}=n_r\hbar$
- $\left(\frac{a}{c^2}\right)^2E^2=\left(n_r\hbar+\sqrt{-\frac{a^2}{c^2}+p_\varphi^2}\right)^2\Big(m^2c^2-\frac{E^2}{c^2}\Big)$

$$E^2=\frac{m^2c^2\left(n_r\hbar+\sqrt{-\frac{a^2}{c^2}+p_\varphi^2}\right)^2}{\left(\frac{a}{c^2}\right)^2+\frac{\left(n_r\hbar+\sqrt{-\frac{a^2}{c^2}+p_\varphi^2}\right)^2}{c^2}},\ E=\frac{m\,c^2\left(n_r\hbar+\sqrt{-\frac{a^2}{c^2}+p_\varphi^2}\right)}{\sqrt{\frac{a^2}{c^2}+\left(n_r\hbar+\sqrt{-\frac{a^2}{c^2}+p_\varphi^2}\right)^2}}$$

$$E=\frac{m\,c^2\left(n_r\hbar+\sqrt{-\frac{a^2}{c^2}+p_\varphi^2}\right)}{\sqrt{\frac{a^2}{c^2}+\left(n_r\hbar+\sqrt{-\frac{a^2}{c^2}+p_\varphi^2}\right)^2}}=\frac{m\,c^2}{\sqrt{1+\frac{a^2}{c^2}\frac{1}{\left(n_r\hbar+\sqrt{-\frac{a^2}{c^2}+p_\varphi^2}\right)^2}}}$$

$$E=\qquad\frac{m\,c^2}{\sqrt{1+\frac{a^2}{c^2}\frac{1}{\left(n_r\hbar+\sqrt{-\frac{a^2}{c^2}+n_\varphi^2\hbar^2}\right)^2}}}\sim$$

$$m\,c^2-\frac{m\,a^2}{2(n_r+n_\varphi)^2\hbar^2}+\frac{m\left(-1-4\,\frac{n_r}{n_\varphi}\right)\frac{a^4}{c^2}}{8\,(n_r+n_\varphi)^4\hbar^4}+$$

$$m\,c^2-\quad\frac{m\,a^2}{2(n_r+n_\varphi)^2\hbar^2}\left[1+\frac{2a^2}{c^2\hbar^2(n_r+n_\varphi)^2}\left(\frac{1}{8}+\frac{1}{2}\,\frac{n_r}{n_\varphi}\right)\right],\quad n=n_r+n_\varphi$$

$$E=m\,c^2-\frac{m\,a^2}{2n^2\hbar^2}\left[1+\frac{a^2}{c^2\hbar^2 n}\left(\frac{1}{4n}+\frac{n-n_\varphi}{n_\varphi n}\right)\right]=$$

$$m\,c^2-\frac{m\,a^2}{2n^2\hbar^2}\left[1+\frac{a^2}{c^2\hbar^2 n}\left(\frac{1}{n_\varphi}-\frac{3}{4n}\right)\right]=$$

$$E=m\,c^2-\frac{m\,a^2}{2n^2\hbar^2}\left[1+\frac{\alpha^2}{n}\left(\frac{1}{n_\varphi}-\frac{3}{4n}\right)\right]$$

El espectro depende de n_r, n_φ por separado. La degeneración se ha eliminado.

$\alpha = k\frac{e^2}{\hbar c}$= constante de estructura fina=$7.297 \times 10^{-3} \simeq \frac{1}{137}$

Cuando se examinan las líneas del espectro del hidrógeno a una resolución muy alta, se encuentran que son dobletes poco espaciados entre sí($\sim 10^{-4}$ veces la separación entre líneas adyacentes). Esta división se llama estructura fina.

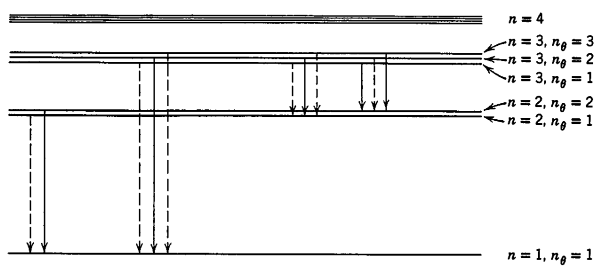

Figura 2.

La separación (estructura fina) de algunos niveles

del átomo de H. Las transiciones posibles se denotan

por una flecha sólida.

- Las transiciones correspondientes a flechas sólidas se observan.
- Las transiciones correspondientes a flechas punteadas no se observan.
- Las transiciones ocurren sólo si $n_{\varphi_i} - n_{\varphi_f} = \pm 1$. Regla de selección.