

A equação de Dirac: átomo de um elétron

A idéia é resolver o problema de um elétron sob a influência do potencial:

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

Na aula passada, vimos que o problema ficou reduzido à solução das equações acopladas:

$$[E - m - V(r)]u(r) - \left[\frac{d}{dr} + \frac{\lambda + 1}{r}\right]v(r) = 0$$

$$[E + m - V(r)]v(r) + \left[\frac{d}{dr} - \frac{\lambda - 1}{r}\right]u(r) = 0$$

Nossa expectativa é que os termos de estrutura fina, tratados para o átomo de Hidrogênio por teoria de perturbação, surjam naturalmente como solução da equação de Dirac. Para resolver estas equações, introduziremos novas escalas,

dadas por:
$$\begin{cases} \epsilon \equiv \frac{E}{m} \\ x \equiv mr \end{cases}$$
 e a constante de estrutura fina $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = e^2 \approx \frac{1}{137}$.

Lembre que escrevemos a equação de Dirac para um corpo só e no limite de altas energias, ela não funciona. Precisaríamos de uma teoria de campos de muitos corpos relativística que levasse em consideração a criação de pares, partícula+anti-partícula.

A equação de Dirac: átomo de um elétron

Substituindo as novas variáveis temos:

$$\left[\epsilon - 1 - \frac{Z\alpha}{x}\right]u(x) - \left[\frac{d}{dx} + \frac{\lambda + 1}{x}\right]v(x) = 0$$

$$\left[\epsilon + 1 + \frac{Z\alpha}{x}\right]v(x) + \left[\frac{d}{dx} - \frac{\lambda - 1}{x}\right]u(x) = 0$$

Um bom começo é analisar o comportamento destas equações para $x \rightarrow \infty$ e impor as condições assintóticas esperadas do problema.

$$\text{No limite } x \rightarrow \infty, \text{ temos } \begin{cases} (1) [\epsilon - 1]u(x) - \left[\frac{d}{dx}\right]v(x) = 0 \\ (2) [\epsilon + 1]v(x) + \left[\frac{d}{dx}\right]u(x) = 0 \end{cases}$$

Substituindo $u(x)$ de (1) em (2), obtemos:

$$[\epsilon + 1]v(x) + \left[\frac{d}{dx}\right] \left(\frac{1}{\epsilon - 1} \left[\frac{d}{dx}\right]v(x) \right) = 0 \Rightarrow \frac{d^2v}{dx^2} = (1 - \epsilon^2)v$$

O que sabemos sobre ϵ ? Classicamente, a energia cinética $E - m - V(r)$ é igual à zero no ponto de retorno clássico e como a partícula está prisioneira e o ponto clássico é a fronteira, podemos concluir que $E - m < 0$, pois

$V(r) < 0 \forall r$. Isso implica em $\frac{E}{m} = \epsilon < 1$ e $(1 - \epsilon^2) > 0$. Consequentemente,

$$v(x) = \exp[-(1 - \epsilon^2)^{1/2}x] \text{ para } x \rightarrow \infty.$$

A equação de Dirac: átomo de um elétron

Ignorando a normalização por hora, temos que

$$[\epsilon - 1]u(x) - \frac{dv}{dx} = 0 \rightarrow u(x) = \exp[-(1 - \epsilon^2)^{1/2}x] \text{ para } x \rightarrow \infty \text{ também.}$$

No caso da equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio, ao chegar no comportamento assintótico da função radial, expandíamos a função em uma série de potências que multiplicava a exponencial e concluíamos que a série precisava ser interrompida (caso contrário a função divergiria no infinito). Isso quantizava a energia. Seguiremos passos semelhantes para $u(x)$ e $v(x)$, isto é:

$$u(x) = e^{-(1-\epsilon^2)^{1/2}x} x^\gamma \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i$$

$$v(x) = e^{-(1-\epsilon^2)^{1/2}x} x^\gamma \sum_{i=0}^{\infty} b_i x^i$$

Assumimos que encontraremos uma solução usando o mesmo γ para ambas as séries. Inserindo estas expressões nas equações diferenciais, reagrupando as potências, obtemos que os termos de menor potência serão os envolvendo $x^{\gamma-1}$ (coeficientes da derivada primeira e dos termos $\frac{\lambda \pm 1}{x}$ e $\mp \frac{Z\alpha}{x}$).

$$\text{Isso permite escrever } \begin{cases} (Z\alpha)a_0 - (\gamma + \lambda + 1)b_0 = 0 \\ (\gamma - \lambda + 1)a_0 + (Z\alpha)b_0 = 0 \end{cases}$$

A equação de Dirac: átomo de um elétron

As outras potências fornecem fórmulas de recorrência, relacionando a_i e b_i com a_{i-1} e b_{i-1} . Para que isso funcione, não podemos aceitar a solução trivial $a_0 = b_0 = 0$ do sistema de equações acima. Exigimos, então, que o determinante se anule, isto é $(Z\alpha)^2 + (\gamma + \lambda + 1)(\gamma - \lambda + 1) = 0$. Essa condição fornece:

$$\gamma = -1 \pm [\lambda^2 - (Z\alpha)^2]^{1/2}$$

Sintoma de problemas para altas energias: se $\left\{ \begin{array}{l} \lambda = j + 1/2 < Z\alpha \\ \text{argumento da raiz} \\ \text{quadrada negativo} \end{array} \right.$

Para átomos com $Z\alpha \approx 1$, o campo é tão intenso nas proximidades do núcleo que teríamos criação de pares (e^+ , e^-) de forma espontânea. A equação de Dirac de um corpo só não dá conta do recado. Consideraremos $Z\alpha \ll 1$. Para o menor valor de j , $j = \frac{1}{2}$, isso implica em

$$\gamma \approx \left\{ \begin{array}{l} \text{Sinal positivo} \rightarrow -1 + 1 - \frac{1}{2}(Z\alpha)^2 = \text{número negativo} \approx 0 \\ \text{Sinal negativo} \rightarrow -1 - 1 + \frac{1}{2}(Z\alpha)^2 = \text{número negativo} \approx -2 \end{array} \right.$$

$\gamma < 0$ causa divergência em $r = 0$. Precisamos resolver isso. Note que para $j > \frac{1}{2}$, o γ obtido com sinal $+(-)$ é sempre positivo (negativo).

A equação de Dirac: átomo de um elétron

Para $Z\alpha \ll 1$, a divergência do γ obtido com sinal positivo, só aparece para $j = \frac{1}{2}$ e é relativamente fraca (removível se considerarmos que o núcleo tem dimensão diferente de zero).

Assim, tomamos $\gamma = -1 + [(j + \frac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2]^{1/2}$ e escrevemos b_0 em função de a_0 (determinante do slide 3 igual a zero permite isso). No final, a_0 será determinado por condição de normalização. Assim sendo, do slide 3, temos $b_0 = a_0(Z\alpha)/(\gamma + \lambda + 1)$. Podemos encontrar o restante da série, os a_i e b_i , igualando coeficientes de mesma ordem, a partir de x^γ . Esse exercício leva à:

$$\begin{aligned} (1 - \epsilon)a_{i-1} - Z\alpha a_i - (1 - \epsilon^2)^{1/2}b_{i-1} + (\lambda + 1 + \gamma + i)b_i &= 0 \\ (1 + \epsilon)b_{i-1} + Z\alpha b_i - (1 - \epsilon^2)^{1/2}a_{i-1} - (\lambda - 1 - \gamma - i)a_i &= 0 \end{aligned}$$

Multiplicando a primeira equação por $(1 + \epsilon)^{1/2}$ e a segunda por $(1 - \epsilon)^{1/2}$, e somando as duas (com isso, nos livramos dos a_{i-1} e b_{i-1}), obtemos:

$$\begin{aligned} -Z\alpha(1 + \epsilon)^{1/2}a_i - (1 - \epsilon)^{1/2}(\lambda - 1 - \gamma - i)a_i + Z\alpha(1 - \epsilon)^{1/2}b_i + \\ + (1 + \epsilon)^{1/2}(\lambda + 1 + \gamma + i)b_i = 0, \end{aligned}$$

fornecendo uma relação entre a_i e b_i :

$$\frac{b_i}{a_i} = \frac{Z\alpha(1 + \epsilon)^{1/2} + (\lambda - 1 - \gamma - i)(1 - \epsilon)^{1/2}}{Z\alpha(1 - \epsilon)^{1/2} + (\lambda + 1 + \gamma + i)(1 + \epsilon)^{1/2}}$$

A equação de Dirac: átomo de um elétron

Note que

- Se $i \rightarrow +\infty \Rightarrow \frac{b_i}{a_i} = -\frac{(1-\epsilon)^{1/2}}{(1+\epsilon)^{1/2}}$, ou seja, a_i é proporcional à b_i . Para valores grandes de x , este termo dominará à série.
- Nestas condições, ($i \rightarrow +\infty$), troque $b_{i-1} \rightarrow -\frac{(1-\epsilon)^{1/2}}{(1+\epsilon)^{1/2}} a_{i-1}$ na segunda equação da caixa verde e obtenha $\frac{a_i}{a_{i-1}} = \frac{2(1-\epsilon^2)^{1/2}}{i}$.
- A função exponencial $e^{\zeta x} = 1 + \zeta x + \frac{(\zeta x)^2}{2!} + \dots + \frac{(\zeta x)^{i-1}}{(i-1)!} + \frac{(\zeta x)^i}{i!} + \dots$ tem essa propriedade, com $\zeta = 2(1-\epsilon^2)^{1/2}$.
- Isso faz com que

$$u(x) = e^{-(1-\epsilon^2)^{1/2}x} x^\gamma \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i$$

$$v(x) = e^{-(1-\epsilon^2)^{1/2}x} x^\gamma \sum_{i=0}^{\infty} b_i x^i$$

explodam no infinito, se as séries não forem interrompidas.

A equação de Dirac: átomo de um elétron

- Para interromper a série em $i = n' + 1$, precisamos que $a_{n'+1} = b_{n'+1} = 0$.
Com isso as equações da caixa verde do slide 5 ficam:

$$n' = i - 1 \begin{cases} (1 - \epsilon)a_{n'} - (1 - \epsilon^2)^{1/2}b_{n'} = 0 \\ (1 + \epsilon)b_{n'} - (1 - \epsilon^2)^{1/2}a_{n'} = 0 \end{cases} \Rightarrow \text{ambas fornecem } \frac{b_{n'}}{a_{n'}} = \left[\frac{1 - \epsilon}{1 + \epsilon} \right]^{1/2}$$

Combinando este resultado com a caixa azul do slide 5, temos

$$\frac{Z\alpha(1 + \epsilon)^{1/2} + (\lambda - 1 - \gamma - n')(1 - \epsilon)^{1/2}}{Z\alpha(1 - \epsilon)^{1/2} + (\lambda + 1 + \gamma + n')(1 + \epsilon)^{1/2}} = \left[\frac{1 - \epsilon}{1 + \epsilon} \right]^{1/2}$$

E isso resulta na quantização da energia: $(1 + \gamma + n')(1 - \epsilon^2)^{1/2} = Z\alpha\epsilon$

- Colocando o c de volta, encontramos que a energia do átomo de hidrogênio

fica:
$$E = \frac{mc^2}{\left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{\left[\sqrt{(j+1/2)^2 - (Z\alpha)^2} + n' \right]^2} \right]^{1/2}}$$

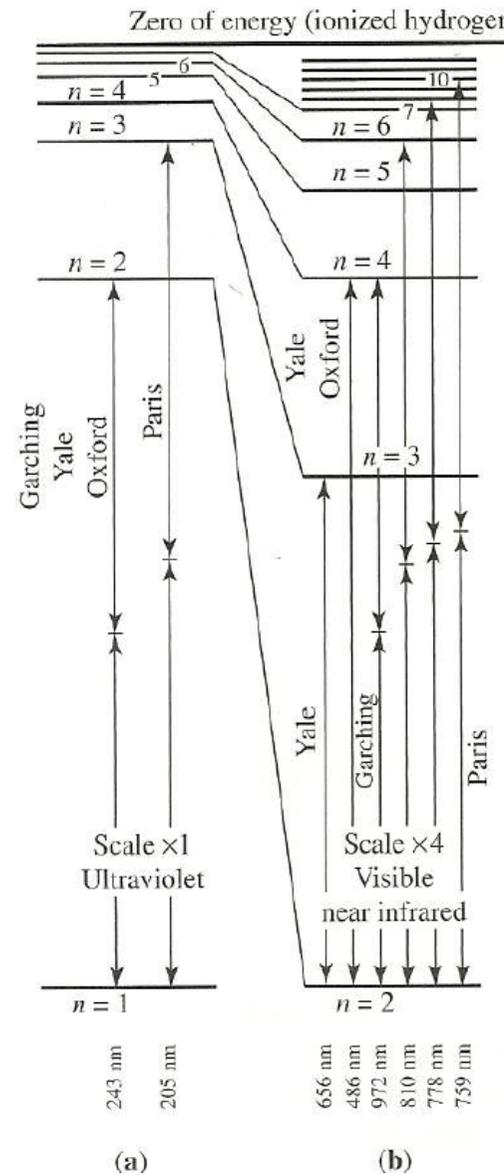
- O termo de menor ordem em $Z\alpha$, é

$$E = mc^2 - \frac{1}{2} \frac{mc^2 (Z\alpha)^2}{n^2} \text{ com } n \equiv j + 1/2 + n' \rightarrow \text{série de Balmer (cap.3).}$$

- *(exercício 8.16 da lista)* Ordens superiores $\begin{cases} \text{correção da energia cinética (eq. 5.3.10)} \\ \text{e interação spin-órbita (eq. 5.3.31).} \end{cases}$

A equação de Dirac: átomo de um elétron

Chapter 8 Relativistic Quantum Mechanics



A separação dos níveis $2S_{1/2}$ e $2P_{1/2}$ é devido ao efeito Lamb Shift que exige uma teoria de campo relativística para levá-la em consideração.

