Teorema do Virial: Uma Aplicação

Felipe Mazzi

Universidade Estadual de Campinas

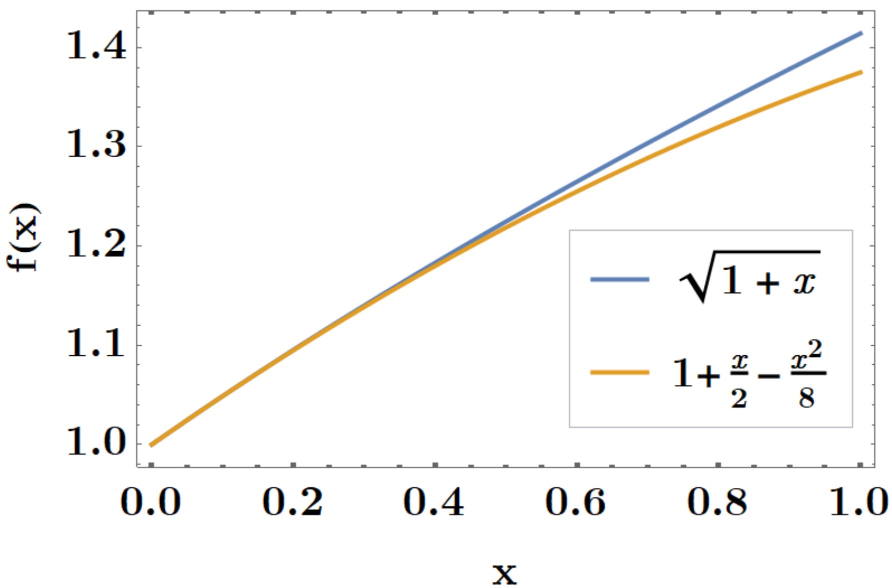
- Correção relativística para a energia cinética

$$H_0 = \boxed{\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e}} - \frac{Ze^2}{r} \quad \Rightarrow \quad H_0 \left|n; lm\right\rangle = -\frac{Z^2e^2}{2a_0n^2} \left|n; lm\right\rangle$$

$$K = \sqrt{\boldsymbol{p}^2c^2 + m_e^2c^4} - m_ec^2$$

$$= m_ec^2 \sqrt{1 + \frac{\boldsymbol{p}^2}{m_e^2c^2}} - m_ec^2$$

$$= \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e} - \boxed{\frac{\boldsymbol{p}^4}{8m_e^3c^2}} + \cdots$$



Motivação

- Correção relativística como perturbação:

$$H_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r} \qquad \Rightarrow \qquad H = H_0 - \frac{1}{8}\frac{\boldsymbol{p}^4}{m_e^3 c^2}$$

- Variação de energia:

$$\Delta_{nl}^{(1)} = -\langle n; lm| \left(\frac{(\boldsymbol{p}^2)^2}{8m_e^3 c^2}\right) |n; lm\rangle$$

Motivação

- Correção relativística como perturbação:

$$H_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r} \qquad \Rightarrow \qquad H = H_0 - \frac{1}{8}\frac{\boldsymbol{p}^2}{m_e^3 c^2}$$

- Variação de energia:

$$\Delta_{nl}^{(1)} = -\langle n; lm| \left(\frac{(\boldsymbol{p}^2)^2}{8m_e^3 c^2}\right) |n; lm\rangle = -\frac{1}{2m_e c^2}\langle n; lm| \left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e}\right)^2 |n; lm\rangle$$

Motivação

- Correção relativística como perturbação:

$$H_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r} \qquad \Rightarrow \qquad H = H_0 - \frac{1}{8}\frac{\boldsymbol{p}^2}{m_e^3 c^2}$$

- Variação de energia:

$$\Delta_{nl}^{(1)} = -\langle n; lm| \left(\frac{(\boldsymbol{p}^2)^2}{8m_e^3c^2}\right) |n; lm\rangle = -\frac{1}{2m_ec^2}\langle n; lm| \left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e}\right)^2 |n; lm\rangle$$

$$= -\frac{1}{2m_ec^2}\langle n; lm| \left(H_0 + \frac{Ze^2}{r}\right)^2 |n; lm\rangle$$

Motivação

- Correção relativística como perturbação:

$$H_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r} \qquad \Rightarrow \qquad H = H_0 - \frac{1}{8}\frac{\boldsymbol{p}^2}{m_e^3 c^2}$$

- Variação de energia:

$$\Delta_{nl}^{(1)} = -\langle n; lm| \left(\frac{(\boldsymbol{p}^2)^2}{8m_e^3 c^2}\right) |n; lm\rangle$$

$$= -\frac{1}{2m_e c^2}\langle n; lm| \left(H_0 + \frac{Ze^2}{r}\right)^2 |n; lm\rangle$$

$$= -\frac{1}{2m_e c^2}\left(\left(E_n^{(0)}\right)^2 + 2E_n^{(0)}\boxed{\langle n; lm|\frac{Ze^2}{r}|n; lm\rangle} + \langle n; lm|\frac{Z^2 e^4}{r^2}|n; lm\rangle\right)$$

Teorema do Virial

- Queremos provar que:

$$\langle n; lm | \left(\frac{Ze^2}{r} \right) | n; lm \rangle = -2E_n^{(0)}$$

- Considerando um caso geral:

$$G = \sum_i \boldsymbol{p}_i \cdot \boldsymbol{r}_i \quad \Rightarrow \quad \frac{dG}{dt} = \sum_i \dot{\boldsymbol{p}}_i \cdot \boldsymbol{r}_i + \sum_i \boldsymbol{p}_i \cdot \dot{\boldsymbol{r}}_i$$

$$\frac{dG}{dt} = \sum_i \boldsymbol{F}_i \cdot \boldsymbol{r}_i + \sum_i m\, \dot{\boldsymbol{r}}_i \cdot \dot{\boldsymbol{r}}_i = -\sum_i \nabla V \cdot \boldsymbol{r}_i + 2T$$

Teorema do Virial

- Queremos provar que:

$$\frac{dG}{dt} = -\sum_i \nabla V \cdot \boldsymbol{r}_i + 2T$$

movimento periódico

$$\overline{\frac{dG}{dt}} = \frac{1}{\tau}\int_0^{\tau} \frac{dG}{dt} dt = \boxed{\frac{1}{\tau}[G(\tau) - G(0)]}$$

Pode ficar arbitrariamente pequeno

$$\langle T \rangle = \frac{1}{2}\overline{\sum_i \nabla V \cdot \boldsymbol{r}_i} = \frac{1}{2}\overline{\frac{\partial V}{\partial r} r}$$

Teorema do Virial

- Queremos provar que:

$$\langle T \rangle = \frac{1}{2}\overline{\frac{\partial V}{\partial r} r} \xrightarrow{V = ar^{n+1}} \frac{n+1}{2}\langle V \rangle$$

$$n = -2 \quad \Rightarrow \quad \langle T \rangle = -\frac{1}{2}\langle V \rangle \quad \Rightarrow \quad E_n^{(0)} = \frac{1}{2}\langle V \rangle$$

- Voltando:

$$\boxed{\langle n; lm| \left(\frac{Ze^2}{r}\right) |n; lm\rangle = -2E_n^{(0)}}$$

Obrigado!