UNICAMP

Universidade Estadual de Campinas

Soluções para potenciais centrais

Willian Vieira dos Santos - RA: 086202

Professor: Dr. Marco Aurélio Pinheiro Lima

FI002 - Mecânica Quântica

06/01/2021

A equação de Dirac: átomo de 1 elétron

Partindo das equações acopladas:

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

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

onde $\varepsilon \equiv \frac{E}{m}$, $x \equiv mr$, $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \sim \frac{1}{137}$

As soluções para $u(x)$ e $v(x)$ em série de potências no limite $x \to \infty$

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

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

Para obter os termos de menor potência com $i=0$ temos

$$u(x) = e^{-(1-\varepsilon^2)^{1/2} x}\, x^{\gamma} a_0$$

$$v(x) = e^{-(1-\varepsilon^2)^{1/2} x}\, x^{\gamma} b_0$$

Inserindo estas equações na solução

acopladas:

$$\left[\varepsilon - 1 + \frac{Z\alpha}{x}\right] e^{fx} x^{\gamma} a_0 - \left[\frac{d}{dx} + \frac{\lambda+1}{x}\right] e^{fx} x^{\gamma} b_0 = 0$$

com $f = -(1-\varepsilon^2)^{1/2}$

resolvendo:

$$(\varepsilon - 1) e^{fx} x^{\gamma} a_0 + Z\alpha e^{fx} x^{\gamma-1} a_0 - x^{\gamma} b_0 \frac{de^{fx}}{dx}$$

$$- e^{fx} b_0 \frac{dx^{\gamma}}{dx} - (\lambda+1) e^{fx} x^{\gamma-1} b_0 = 0$$

$$(\varepsilon - 1) e^{fx} x^{\gamma} a_0 - (1-\varepsilon^2)^{1/2} x^{\gamma} b_0 e^{fx} + Z\alpha e^{fx} x^{\gamma-1} a_0$$

$$-\gamma e^{fx} b_0 x^{\gamma-1} - (\lambda+1) e^{fx} x^{\gamma-1} b_0 = 0$$

Considerando somente os termos $x^{\gamma-1}$, pois $x^{\gamma} = x . x^{\gamma-1}$ e os termos x^{γ} divergem com $x \to \infty$, temos:

$$\underbrace{e^{fx} x^{\gamma-1} \left[Z\alpha a_0 - \gamma b_0 - (\lambda+1) b_0\right] = 0}$$

$$Z\alpha a_0 - (\gamma + \lambda + 1) b_0 = 0$$

Da mesma forma, para outra solução acoplada:

$$-\left[\varepsilon + 1 + \frac{Z\alpha}{x}\right] e^{fx} x^{\gamma} b_0 + \left[\frac{d}{dx} - \frac{\lambda - 1}{x}\right] e^{fx} x^{\gamma} a_0 = 0$$

resolvendo:

$$(\varepsilon + 1) e^{fx} x^{\gamma} b_0 + Z\alpha e^{fx} x^{\gamma - 1} b_0 + x^{\gamma} a_0 \frac{de^{fx}}{dx}$$

$$+ e^{fx} a_0 \frac{dx^{\gamma}}{dx} - (\lambda - 1) e^{fx} x^{\gamma - 1} a_0 = 0$$

$$e^{fx} x^{\gamma - 1} \underbrace{\left[Z\alpha b_0 + \gamma a_0 - (\lambda - 1) a_0\right]}_{(\gamma - \lambda + 1) a_0 + Z\alpha b_0 = 0} = 0$$

Para ordens mais altas onde $i > 0$, podemos usar o mesmo procedimento:

$$\left[\varepsilon - 1 + \frac{Z\alpha}{x}\right] e^{fx} x^{\gamma} a_i x^{i} - \left[\frac{d}{dx} + \frac{\lambda + 1}{x}\right] e^{fx} x^{\gamma} b_i x^{i} = 0$$

$$(\varepsilon - 1) e^{fx} x^{\gamma + i} a_i + Z\alpha e^{fx} x^{\gamma + i - 1} a_i - x^{\gamma + i} b_i \frac{de^{fx}}{dx}$$

$$- e^{fx} b_i \frac{dx^{\gamma + i}}{dx} - (\lambda + 1) e^{fx} x^{\gamma + i - 1} b_i = 0$$

Podemos abaixar em uma ordem $x^{\gamma + i}$ de modo a não divergir e encontrar uma relação de recorrência $\left\{ \begin{array}{l} a_i \text{ e } a_{i-1} \\ b_i \text{ e } b_{i-1} \end{array} \right.$

$$(\varepsilon-1)e^{fx}x^{\gamma+i-1}a_{i-1}+Z\alpha e^{fx}x^{\gamma+i-1}a_i \ldots$$

$$-x^{\gamma+i-1}b_{i-1}\frac{de^{fx}}{dx}-e^{fx}b_i\frac{dx^{\gamma+i}}{dx}-(\lambda+1)e^{fx}x^{\gamma+i-1}b_i=0$$

Colocando todos $e^{fx}x^{\gamma+i-1}$ em evidência:

$$e^{fx}x^{\gamma+i-1}\Big[(\varepsilon-1)a_{i-1}+Z\alpha a_i+(1-\varepsilon^2)^{1/2}b_{i-1}-(\gamma+i)b_i$$
$$-(\lambda+1)b_i\Big]=0$$

Podemos multiplicar os termos por -1:

$$(1-\varepsilon)a_{i-1}-Z\alpha a_i-(1-\varepsilon^2)^{1/2}b_{i-1}+(\gamma+i+\lambda+1)b_i=0$$

Da mesma forma, para outra solução acoplada:

$$\left[\varepsilon+1+\frac{Z\alpha}{x}\right]e^{fx}x^{\gamma}b_ix^i+\left[\frac{d}{dx}-\frac{\lambda-1}{x}\right]e^{fx}x^{\gamma}a_ix^i=0$$

resolvendo:

$$(\varepsilon+1)e^{fx}x^{\gamma+i-1}b_{i-1}+Z\alpha e^{fx}x^{\gamma+i-1}b_i$$

$$+x^{\gamma+i-1}a_{i-1}\frac{de^{fx}}{dx}+e^{fx}a_i\frac{dx^{\gamma+i}}{dx}-(\lambda-1)e^{fx}x^{\gamma+i-1}a_i=0$$

$$e^{fx}x^{\gamma+i-1}\Big[(\varepsilon+1)b_{i-1}+Z\alpha b_i-(1-\varepsilon^2)^{1/2}a_{i-1}+(\gamma+i)a_i$$
$$-(\lambda-1)a_i\Big]=0$$

tilibra

$(\gamma + i) = -(-\gamma - i)$ então:

$$(1+\varepsilon) b_{i-1} + Z\alpha b_i - (1-\varepsilon^2)^{1/2} a_{i-1} - (\lambda - 1 - \gamma - i) a_i = 0$$

Para encontrar a energia do átomo de hidrogênio, partimos da quantização de energia deduzida em aula:

$$(1+\gamma+n')(1-\varepsilon^2)^{1/2} = Z\alpha\varepsilon$$

onde $n' = i-1$, pelo desenvolvimento das relações $a_{i-1} \to a_{n'}$ e $b_{i-1} \to b_{n'}$.

tomamos $\gamma = -1 + \left[(j+\frac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2\right]^{1/2}$ (slides)

e lembrando que $\varepsilon \equiv E/m$

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

atribuindo $A = \left[\left[(j+\frac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2\right]^{1/2} + n'\right]$

$$(1-\varepsilon^2) = \frac{(Z\alpha\varepsilon)^2}{A^2} \longrightarrow \frac{1}{\varepsilon^2} - 1 = \frac{(Z\alpha)^2}{A^2}$$

$$\frac{1}{\varepsilon^2} = \frac{(Z\alpha)^2}{A^2} + 1$$

$$\varepsilon^2 = \frac{1}{1 + \frac{(Z\alpha)^2}{A^2}}$$

$$\frac{E^2}{m^2} = \frac{1}{1 + (Z\alpha)^2/A^2}$$

$$E = \frac{m}{\left[1+(Z\alpha)^2/A^2\right]^{1/2}}$$ em unidades naturais $(c = 1)$

retornando c^2:

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