LISTA #4

11. Átomo de hidrogênio na teoria de Dirac

Procuramos estados ligados para o potencial de Coulomb. Para estados de energia positiva temos

$$0 < E < mc^2$$

Escrevemos as equações da solução na forma:

$$(*) \begin{cases} \left[\dfrac{E - mc^2}{\hbar c} + \dfrac{Z}{r}\left(\dfrac{e^2}{\hbar c}\right)\right] G(r) = -\dfrac{dF}{dr}(r) + \dfrac{\kappa}{r} F(r) \\ \\ \left[\dfrac{E + mc^2}{\hbar c} + \dfrac{Z}{r}\left(\dfrac{e^2}{\hbar c}\right)\right] F(r) = \dfrac{dG}{dr}(r) + \dfrac{\kappa}{r} G(r) \end{cases}$$

Consideramos o caso : $\kappa = \pm(j + 1/2)$, $|\kappa| = j + 1/2$

Aparece a constante de estrutura fina $\alpha = \dfrac{e^2}{\hbar c}$.

Definimos duas constantes (parâmetros da energia)

• **Def**

$$A \equiv \frac{mc^2 - E}{\hbar c} = \frac{mc^2 - E}{mc^2} \frac{1}{(\hbar/mc)} = \frac{mc^2 - E}{mc^2 \, \lambda\!\!\!^{-}} > 0 ,$$

onde $\lambda\!\!\!^{-}$ é o comprimento de onda de Compton

• **Def**

$$B \equiv \frac{mc^2 + E}{\hbar c} = \frac{mc^2 + E}{mc^2 \, \lambda\!\!\!^{-}} > 0 .$$

• **Def**

$$D \equiv \sqrt{AB} = \frac{1}{\lambda\!\!\!^{-}} \sqrt{\frac{m^2c^4 - E^2}{m^2c^4}}$$

A eq. de Dirac pode ser deixada na forma adimensional, definindo a nova variável:

• Def: $\rho \equiv D r$

$$\frac{d}{dr} = \left(\frac{d\rho}{dr}\right)\frac{d}{d\rho} = D\frac{d}{d\rho}$$

As eq.'s (*) ficam:

$$\left[-\frac{A}{D} + \frac{Z\alpha}{\rho}\right]G(\rho) = -\frac{dF}{d\rho}(\rho) + \frac{\kappa}{\rho}F(\rho)$$

$$\left[\frac{B}{D} + \frac{Z\alpha}{\rho}\right]F(\rho) = \frac{dG}{d\rho} + \frac{\kappa}{\rho}G(\rho)$$

Seja:

$$\frac{A}{D} = \Lambda(E) = \frac{A}{\sqrt{AB}} = \sqrt{\frac{A}{B}},$$

$$\frac{B}{D} = \frac{B}{\sqrt{AB}} = \sqrt{\frac{B}{A}} = \Lambda^{-1}(E),$$

e em forma mais compacta:

$$(**)\quad \begin{cases} \left(-\Lambda(E) + \dfrac{Z\alpha}{\rho}\right)G(\rho) = -\dfrac{dF}{d\rho}(\rho) + \dfrac{\kappa}{\rho}F(\rho) \\[2ex] \left(\Lambda^{-1}(E) + \dfrac{Z\alpha}{\rho}\right)F(\rho) = \dfrac{dG}{d\rho}(\rho) + \dfrac{\kappa}{\rho}G(\rho) \end{cases}$$

Estimamos o comportamento assintótico para $\rho \to \infty$:

$$-\Lambda\, G(\rho) \underset{\infty}{\approx} -\frac{dF}{d\rho}(\rho)$$

$$\frac{1}{\Lambda} F(\rho) \underset{\infty}{\approx} \frac{dG}{d\rho}(\rho)$$

$$F(\rho) \underset{\infty}{=} \Lambda \frac{dG}{d\rho} = \Lambda \frac{d}{d\rho}\left(\frac{1}{\Lambda}\frac{dF}{d\rho}\right) = \frac{d^2}{d\rho^2}F$$

ou

$$\frac{d^2F}{d\rho^2} - F = 0\,,$$

com soluções : $F = e^{\pm\rho}$.

- Para termos uma solução que satisfaça a condição de contorno, $F, G \longrightarrow 0$, para $\rho \to \infty$, a única possivel é $e^{-\rho}$.

Usando o método (bem conhecido) de Fuchs-Frobenius, escrevemos as soluções como séries, tirando explicitamente o comportamento assintótico:

$$(\circ)\begin{cases} F(\rho) = e^{-\rho} \sum\limits_{\mu=0}^{\infty} a_\mu\, \rho^{\mu+s} \equiv e^{-\rho} f(\rho) \\ G(\rho) = e^{-\rho} \sum\limits_{\nu=0}^{\infty} b_\nu\, \rho^{\nu+s} \equiv e^{-\rho} g(\rho) \end{cases}$$

O expoente s determina o comportamento em $\rho = 0$.
Substituímos as soluções $(\circ)$ em $(**)$ notando que

$$F'(\rho) = -e^{-\rho} f(\rho) + e^{-\rho} f'(\rho)$$
$$G'(\rho) = -e^{-\rho} g(\rho) + e^{-\rho} g'(\rho)$$

multiplicamos por ρ e eliminamos a exponencial $e^{-\rho}$

$$(-\Lambda\rho + Z\alpha)\, g(\rho) = -\rho\,(-f(\rho) + f'(\rho)) + \kappa\, f(\rho)$$

$$\left(\frac{1}{\Lambda}\rho + Z\alpha\right) f(\rho) = \rho\,(-g(\rho) + g'(\rho)) + \kappa\, g(\rho)$$

rearranjando termos

$$-\Lambda\rho\, g(\rho) - \rho f(\rho) = -\rho f'(\rho) + \kappa f(\rho) - Z\alpha\, g(\rho)$$

$$\frac{1}{\Lambda}\rho f(\rho) + \rho g(\rho) = \rho g'(\rho) + \kappa g(\rho) - Z\alpha\, f(\rho)$$

e finalmente:

$$\begin{cases} \Lambda\rho\, g(\rho) + \rho\, f(\rho) = \rho f'(\rho) - \kappa f(\rho) + Z\alpha\, g(\rho) \\ \frac{1}{\Lambda}\rho f(\rho) + \rho\, g(\rho) = \rho g'(\rho) + \kappa g(\rho) - Z\alpha\, f(\rho) \end{cases}$$

Substituindo as séries de (4) obtemos

$$\sum_{\mu=0}^{\infty} (\Lambda b_\mu + a_\mu)\,\rho^{\mu+s+1} = \sum_{\mu=0}^{\infty} \left[(\mu+s-\kappa)\, a_\mu + Z\alpha\, b_\mu\right] \times$$
$$\times\, \rho^{\mu+s}$$

$$\sum_{\mu=0}^{\infty} \left(\frac{1}{\Lambda} a_\mu + b_\mu\right) \rho^{\mu+s+1} =$$
$$= \sum_{\mu=0}^{\infty} \left[(\mu+s+\kappa)\, b_\mu - Z\alpha\, a_\mu\right] \rho^{\mu+s}$$

Para comparar as potências de ρ, mudamos o índice de soma no lado esquerdo, com

$$\mu+1 \longrightarrow \mu$$

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} (\Lambda\, b_{\mu-1} + a_{\mu-1})\, \rho^{\mu+s} = \sum_{\mu=0}^{\infty} \left[(\mu+s-\kappa) a_\mu + Z\alpha\, b_\mu\right] \rho^{\mu+s}$$

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} \left(\frac{1}{\Lambda} a_{\mu-1} + b_{\mu-1}\right) \rho^{\mu+s} = \sum_{\mu=0}^{\infty} \left[(\mu+s+\kappa) b_\mu - Z\alpha\, a_\mu\right] \rho^{\mu+s}$$

e para os primeiros coeficientes temos:

$$(s-\kappa) a_0 + Z\alpha\, b_0 = 0$$
$$(s+\kappa) b_0 - Z\alpha\, a_0 = 0$$

Para condições iniciais não triviais, obtemos a equação:

$$(s^2 - \kappa^2) + (Z\alpha)^2 = 0$$

$$s^2 = \kappa^2 - (Z\alpha)^2 \implies s_\pm = \pm\sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha)^2}$$

- <u>Condição de contorno</u>: soluções regulares em $r=0$. Só a raiz positiva pode ser aceita:

$$s = \sqrt{(j+1/2)^2 - (Z\alpha)^2} = \sqrt{\varkappa^2 - (Z\alpha)^2}$$

Das séries, temos as equações recursiva:

$\mu \geqslant 1$

$$(0) \begin{cases} \Lambda\, b_{\mu-1} + a_{\mu-1} = (\mu+s-\kappa) a_\mu + Z\alpha\, b_\mu \\[2ex] \dfrac{1}{\Lambda} a_{\mu-1} + b_{\mu-1} = (\mu+s+\kappa) b_\mu - Z\alpha\, a_\mu \end{cases}$$

multiplicando a 2ª por Λ obtemos

$$-\begin{cases} \Lambda b_{\mu-1} + a_{\mu-1} = (\mu+s-\kappa) a_\mu + Z\alpha\, b_\mu \\ a_{\mu-1} + \Lambda b_{\mu-1} = (\mu+s+\kappa)\Lambda b_\mu - (Z\alpha)\Lambda a_\mu \end{cases}$$

e tirando a 2ª da 1ª chegamos a

$$0 = \left[(\mu+s-\kappa) + Z\alpha\Lambda\right] a_\mu + \left[Z\alpha - (\mu+s+\kappa)\Lambda\right] b_\mu$$

ou

$$\boxed{\left[Z\alpha\Lambda + (\mu+s-\kappa)\right] a_\mu = \left[(\mu+s+\kappa)\Lambda - Z\alpha\right] b_\mu} \quad (00)$$

Dessas relações, obtemos o comportamento assintótico

$$\frac{a_{\mu+1}}{a_\mu} \underset{\mu\to\infty}{\sim} \frac{1}{\mu},$$

que é o mesmo da série da função

$$e^\rho = \sum_{\mu=0}^{\infty} \frac{1}{\mu!} \rho^\mu .$$

C.C. Portanto, para manter a condição de contorno em $\rho \to \infty$, precisamos cortar as séries (polinômios). Digamos que cortamos a série em $\mu = N$,

$$a_{N+1} = b_{N+1} = 0$$

Das relações de recorrência (0) temos:

$$\frac{1}{\Lambda} a_N + b_N = 0$$

ou $$-\Lambda b_N = a_N$$

$$a_N = -\Lambda b_N = -\frac{\Lambda\left[Z\alpha\Lambda + (N+s-\kappa)\right]}{\left[(N+s+\kappa)\Lambda - Z\alpha\right]}\, a_N$$

que conduz à eq.:

$$(N+s+\kappa)\Lambda - Z\alpha = -\Lambda\left[Z\alpha\Lambda + (N+s-\kappa)\right]$$

$$= -(Z\alpha)\Lambda^2 - \Lambda(s+N-\kappa)$$

$$2(s+N)\Lambda = Z\alpha(1-\Lambda^2)$$

$$2(s+N)\Lambda = Z\alpha\left(1 - \frac{mc^2-E}{mc^2+E}\right)$$

$$= Z\alpha\left(\frac{mc^2+E-mc^2+E}{mc^2+E}\right)$$

$$2(s+N)\Lambda = Z\alpha\,\frac{2E}{mc^2+E}$$

Portanto:

$$(s+N)\sqrt{\frac{mc^2-E}{mc^2+E}} = Z\alpha\,\frac{E}{mc^2+E}$$

ou

$$(Z\alpha)E = (s+N)\sqrt{(mc^2+E)(mc^2-E)}$$

$$= (s+N)\sqrt{m^2c^4-E^2}$$

e tomando quadrado dessa relação:

$$(Z\alpha)^2 E^2 = (s+N)^2 (m^2c^4 - E^2)$$

A solução positiva é dada por

$$E = \sqrt{\frac{m^2c^4(s+N)^2}{(s+N)^2 + (Z\alpha)^2}}$$

$$= mc^2 \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{(Z\alpha)^2}{(s+N)^2}}}$$

ou

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

com $N = 0, 1, 2 \ldots$

Uma forma mais familiar pode ser obtida através do limite não relativístico. Em ordem mais baixa, temos:

$$E \approx mc^2 \left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{(N+|\kappa|)^2} \right]^{-1/2}$$

$$\approx mc^2 \left\{ 1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2(N+|\kappa|)^2} \right\}$$

e

$$E' = E - mc^2 = - \frac{(Z\alpha)^2 mc^2}{2(N+|\kappa|)^2}$$

Comparando com os estados ligados para a eq. de Schrödinger:

$$E' = -\frac{(Z\alpha)^2 mc^2}{2n^2} \,, \qquad (*)$$

onde $n = 1,2,3\ldots$ é o número quântico principal, com $l = 0,1,\ldots,(n-1)$, $0 \leq l \leq n-1$

Identificamos então:

$$N + (j+1/2) = n \Rightarrow N = n - (j+1/2)$$

$n = 1,2,3\ldots$
$N = 0,1,2\ldots$

$$\Rightarrow 0 < j + 1/2 \leq n$$

$$0 < j \leq n - \frac{1}{2}$$

A quantização da energia para o átomo de hidrogênio fica:

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

Note que a chamada 'degenerescência acidental' do átomo de hidrogênio, como dada em (*) e discutida no caso semi-clássico no problema 3, é removida pelos efeitos relativísticos. Além do número quântico principal, agora E depende de 'j', o número de momentum angular. O resultado de Dirac tinha sido anticipado em 1916 por Sommerfeld usando a 'velha teoria quântica'.