

## ESTRUTURA FINA DO NÍVEL $n=2$

O NÍVEL  $n=2$  DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO CONSISTE NOS SUB-NÍVEIS DEGENERADOS:  $2s (n=2, l=0, m=0)$ ,  $2p (n=2, l=1, m=0, \pm 1)$ . SEM LEVAR EM CONTA OS SPINS DO ELÉTRON E DO PRÓTON, TERÍAMOS DEGENERESCÊNCIA 4. LEVANDO EM CONTA O SPIN DO ELÉTRON, ESSA DEGENERESCÊNCIA VAI PARA 8. COMO A ESTRUTURA FINA NÃO ENVOLVE O SPIN DO PRÓTON, ELE É APENAS UM ESPECTADOR E NÃO PRECISA SER CONSIDERADO POR ENQUANTO (VER MAIS ADIANTE NA ESTRUTURA HIPERFINA).

RECORDANDO  $W_f$ :

$$W_f = \underbrace{-\frac{\vec{p}^4}{8mc^3}}_{W_{mo}} + \underbrace{\frac{e^2}{2m^2c^2R^3} \vec{L} \cdot \vec{S}}_{W_{so}} + \underbrace{\frac{\pi \hbar^2 e^2}{2m^2c^2} \delta^{(3)}(\vec{r})}_{W_p}$$

PRIMEIRAMENTE, NOTAMOS QUE TODOS OS TERMOS COMUTAM COM  $L^2$ :

•  $[L^2, W_{mo}] = 0$ , PORQUE  $[L^2, \vec{p}^2] = 0$ , COMO

VISTO NA SOLUÇÃO DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO, E  $\vec{p}^4 = \vec{p}^2 \cdot \vec{p}^2$

$[L^2, W_{S_0}] = 0$  PRIMEIRAMENTE,  $[L^2, f(R)] = 0$ , QUALQUER QUE SEJA FUNÇÃO  $f(R)$ , POIS  $L^2$  SÓ ATUA NA PARTE ANGULAR E NÃO EM  $R$ . ALÉM DISSO,  $[L^2, \vec{L}] = 0$  POIS  $L^2$  COMUTA COM QUALQUER COMPONENTE DE  $\vec{L}$ , E  $[L^2, \vec{S}] = 0$ , POIS ATUAM EM VARIÁVEIS DISTINTAS.

$[L^2, W_D] = 0$  PORQUE  $\delta^{(3)}(\vec{R})$  SÓ ATUA EM  $R$  (LEMBRE-SE QUE  $\vec{R} = 0 \Rightarrow R = 0$ , INDEPENDENTE DOS ÂNGULOS  $\theta, \phi$ )

COMO  $[L^2, W_f] = 0$ ,  $W_f$  NÃO TEM ELEMENTOS DE MATRIZ NÃO NULOS ENTRE SUB-ESPAÇOS COM 2 DIFERENTES, E TEM FORMA BLOCO-DIAGONAL:

$$(W_f)_{n=2} = \begin{matrix} & \begin{matrix} 2s & 2p \end{matrix} \\ \begin{matrix} 2s \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ 2p \end{matrix} & \left( \begin{array}{c|c} \dots & 0 \\ \dots & \\ \hline & \dots \\ & \dots \\ & \dots \\ & \dots \\ & \dots \\ & \dots \\ & \dots \\ & \dots \end{array} \right) \end{matrix}$$

PORTANTO, SÓ PRECISAMOS DE  $W_f$  DENTRO DE CADA SUB-ESPAÇO  $2s$  E  $2p$ .

## $W_f$ NO SUB-ESPAÇO $2s$

ESSE SUB-ESPAÇO É BI-DIMENSIONAL E UMA BASE POSSÍVEL É:

$$|m=2, l=0, m_l=0, m_s = \pm 1/2\rangle$$

$W_{ms}$  E  $W_D$  NÃO ATUAM NO SPIN E SÓ DEPENDEM DA PARTE ORBITAL, PORTANTO SÃO PROPORCIONAIS À MATRIZ UNITÁRIA NESSE SUBESPAÇO. PARA A PARTE ORBITAL, USAMOS A AUTO-FUNÇÃO DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO:  $\psi_{2,0,0}(\vec{r})$ , QUE É PURAMENTE RADIAL. O RESULTADO É DISCUTIDO NO COMPLEMENTO B<sub>XII</sub>:

$$\begin{aligned} \langle W_{ms} \rangle_{2s} &= \langle m=2, l=0, m=0 | \left( -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{8mc^2} \right) | m=2, l=0, m=0 \rangle \\ &= -\frac{13}{128} mc^2 \alpha^4 \quad \text{ONDE } \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \end{aligned}$$

ANALOGAMENTE:

$$\langle W_D \rangle_{2s} = \frac{1}{16} mc^2 \alpha^4$$

FINALMENTE  $\langle \ell=0, m_e=0 | L_i | \ell=0, m=0 \rangle = 0$   
 PARA  $i = x, y, z$  (LEMBRE-SE DE QUE  
 $L_{x,y} \propto L^+ \pm L^-$ ), LOGO

$$\langle W_{SO} \rangle_{2s} \propto \langle \vec{L} \cdot \vec{S} \rangle_{2s} = 0$$

SOMANDO TUDO:

$$\langle W_f \rangle_{2s} = -\frac{5}{128} m c^2 \alpha^4.$$

$W_f$  NO SUB-ESPAÇO 2P

ESSE SUB-ESPAÇO É DE DIMENSÃO 6 E  
 UMA BASE POSSÍVEL É:

$$|n=2, \ell=1, m_\ell, m_s\rangle \rightarrow |m_\ell, m_s\rangle$$

ONDE  $m_\ell = -1, 0, 1$  E  $m_s = \pm \frac{1}{2}$ .

ALÉM DE COMUTAREM COM  $L^2$ ,  $W_{ms}$  E  $W_D$  COMUTAM COM CADA COMPONENTE DE  $\vec{L}$ :  $L_x, L_y, L_z$ . ISSO PORQUE  $\vec{L}$  SÓ ATUA NAS VARIÁVEIS ANGULARES,  $\theta, \phi$ , E (a)  $W_D$  SÓ DEPENDE DE  $R$ ;  
 (b)  $\vec{p}^2 \propto \nabla^2$ , QUE, COMO VIMOS NO CAPÍTULO 6, SÓ DEPENDE DE  $L^2$ , QUE COMUTA COM CADA COMPONENTE DE  $\vec{L}$ . ALÉM DISSO,  $W_{ms}$  E  $W_D$  COMUTAM COM  $\vec{S}$ :  $S_x, S_y, S_z$ .

RESUMINDO:

$$\begin{aligned} [W_{ms}, L_i] &= 0 & [W_{ms}, S_i] &= 0 \\ [W_D, L_i] &= 0 & [W_D, S_i] &= 0 \quad (i=x, y, z) \end{aligned}$$

ISSO QUER DIZER QUE AMBOS  $W_{ms}$  E  $W_D$  SÃO PROPORCIONAIS À MATRIZ UNITÁRIA NO SUB-ESPAÇO  $2p$ :

$$\langle m'_e, m'_s | \begin{Bmatrix} W_{ms} \\ W_D \end{Bmatrix} | m_e, m_s \rangle = \begin{Bmatrix} C_{m'_e, m'_s} \\ C_D \end{Bmatrix} \delta_{m'_e, m_e} \delta_{m'_s, m_s}$$

DE FATO, SE  $[O, L_i] = 0$  E  $[O, S_i] = 0$ :

$$\begin{aligned} \langle m'_e, m'_s | [O, L_z] | m_e, m_s \rangle &= 0 \\ \langle m'_e, m'_s | 0L_z - L_z0 | m_e, m_s \rangle &= 0 \\ \hbar (m_e - m'_e) \langle m'_e, m'_s | 0 | m_e, m_s \rangle &= 0 \end{aligned}$$

E SEGUE QUE, SE  $m_l \neq m'_l$ , ENTÃO:

$$\langle m'_l, m'_s | 0 | m_l, m_s \rangle = 0$$

PROCEDENDO DE MANEIRA ANALOGA:

$$\hbar(m_s - m'_s) \langle m'_l, m'_s | 0 | m_l, m_s \rangle = 0$$

E  $\langle m'_l, m'_s | 0 | m_l, m_s \rangle = 0$  SE  $m_s \neq m'_s$   
PORTANTO,  $\langle m'_l, m'_s | 0 | m_l, m_s \rangle$  SÓ É NÃO  
NULO SE  $m_l = m'_l$  E  $m_s = m'_s$  E SÓ HÁ  
ELEMENTOS NA DIAGONAL. ALÉM DISSO,  
ELES SÃO TODOS IGUAIS, OU SEJA, NÃO DE  
PENDEM DE  $m_l$  OU  $m_s$ . ISSO PORQUE,  
LEMBRANDO QUE, PARA  $l=1$ :

$$L_+ |m_l, m_s\rangle = \sqrt{2 - m_l(m_l + 1)} \hbar |m_l + 1, m_s\rangle$$

ENTÃO:

$$\begin{aligned} \langle m_l + 1, m_s | 0 | m_l + 1, m_s \rangle &= \\ &= \frac{1/\hbar^2}{2 - m_l(m_l + 1)} \langle m_l, m_s | L_- \circ L_+ | m_l, m_s \rangle \\ &= \frac{1/\hbar^2}{2 - m_l(m_l + 1)} \langle m_l, m_s | 0 L_- L_+ | m_l, m_s \rangle \end{aligned}$$

JÁ QUE  $[0, L_-] = 0$ .

$$\begin{aligned}
 \text{MAS: } L_- L_+ &= (L_x - i L_y)(L_x + i L_y) \\
 &= L_x^2 + L_y^2 + i(L_x L_y - L_y L_x) \\
 &= L_x^2 + L_y^2 - \hbar L_z \\
 &= L^2 - L_z^2 - \hbar L_z
 \end{aligned}$$

E:

$$\begin{aligned}
 L_- L_+ |m_l, m_s\rangle &= \hbar^2 [2 - m_l^2 - m_l] |m_l, m_s\rangle \\
 &= \hbar^2 [2 - m_l(m_l + 1)] |m_l, m_s\rangle
 \end{aligned}$$

FINALMENTE:

$$\langle m_l + 1, m_s | 0 | m_l + 1, m_s \rangle = \langle m_l, m_s | 0 | m_l, m_s \rangle$$

ANALOGAMENTE, DE  $[0, S_-] = 0$ :

$$\langle m_l, m_s + 1 | 0 | m_l, m_s + 1 \rangle = \langle m_l, m_s | 0 | m_l, m_s \rangle$$

E VEMOS QUE OS ELEMENTOS DA DIAGONAL NÃO DEPENDEM DE  $m_l$  OU  $m_s$ , CONFORME QUERÍAMOS DEMONSTRAR.

PORTANTO, SÓ PRECISAMOS CALCULAR UM DELES: (COMPLEMENTO B<sub>XII</sub>):

$$\langle W_{m_l} \rangle_{2p} = -\frac{7}{384} m c^2 \alpha^4$$

$\langle W_D \rangle_{2p} = 0$  (ESSE SE ANULA PORQUE  $W_D \propto \delta^{(3)}(\vec{r})$  E SÓ NÃO SE ANULA EM NÍVEIS S ( $l=0$ ), POIS  $R_{m_l}(0) = 0$  SE  $l > 0$ ).

## CÁLCULO DE $\langle W_{so} \rangle_{2p}$

O TERMO DE SPIN-ÓRBITA É:

$$W_{so} = \frac{e^2}{2m^2c^2} \frac{1}{R^3} \vec{L} \cdot \vec{S}$$

A PARTE QUE DEPENDE DE  $R$  PODE SER CALCULADA A PARTIR DA FUNÇÃO RADIAL  $R_{21}(r)$ :

$$\xi_{2p} = \frac{e^2}{2m^2c^2} \int_0^{\infty} \frac{1}{r^3} |R_{21}(r)|^2 r^2 dr = \frac{mc^2 \alpha^4}{48 \hbar^2}$$

E FICAMOS COM OS ELEMENTOS DE MATRIZ:

$$\xi_{2p} \langle m_l', m_s' | \vec{L} \cdot \vec{S} | m_l, m_s \rangle$$

ESTES SÃO MAIS FACILMENTE CALCULADOS NA BASE DA SOMA  $\vec{L} + \vec{S} = \vec{J}$ :

$$|m_l, m_s\rangle \longrightarrow |j, m_j\rangle$$

COMO  $l=1, s=1/2 \Rightarrow j=1/2$  OU  $3/2$



ALÉM DISSO, O SEGUINTE TRUQUE É MUITO ÚTIL:

$$\vec{J}^2 = (\vec{L} + \vec{S})^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S}$$

$$\Rightarrow \vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2)$$

ASSIM, NA BASE "SOMADA":

$$\begin{aligned} \langle j', m_j' | \vec{L} \cdot \vec{S} | j, m_j \rangle &= \frac{1}{2} \langle j', m_j' | (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2) | j, m_j \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \langle j', m_j' | j, m_j \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - 2 - \frac{3}{4}] \delta_{jj'} \delta_{m_j m_j'} \\ &= \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - \frac{11}{4}] \delta_{jj'} \delta_{m_j m_j'} \end{aligned}$$

ASSIM,  $W_{so}$  JÁ É DIAGONAL NA BASE SOMADA E ASSUME VALORES QUE SÓ DEPENDEM DE  $j$

$$j = 1/2 \Rightarrow W_{so} = -\hbar^2 \zeta_{2p} = -\frac{m c^2 \alpha^4}{48}$$

$$j = 3/2 \Rightarrow W_{so} = \frac{\hbar^2}{2} \zeta_{2p} = \frac{m c^2 \hbar^4}{96}$$

$$W_{SO}^{(2p)} = \hbar^2 \omega_{SO}^{2p} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}$$

A DEGENERESCÊNCIA DO NÍVEL  $2p$  É PARCIALMENTE REMOVIDA POR  $W_f$  E O NÍVEL QUE TINHA DEGENERESCÊNCIA  $6$  SE ABRE EM DOIS NÍVEIS, UM COM DEG.  $2$  E OUTRO COM  $4$ .

COMO  $W_{ms}$  E  $W_D$  SÃO PROPORCIONAIS À IDENTIDADE EM  $2p$ , ESSA PROPRIEDADE É PRESERVADA EM QUALQUER BASE. ASSIM, A ESTRUTURA BLOCO-DIAGONAL É MANTIDA POR  $W_f = W_{ms} + W_{SO} + W_D$

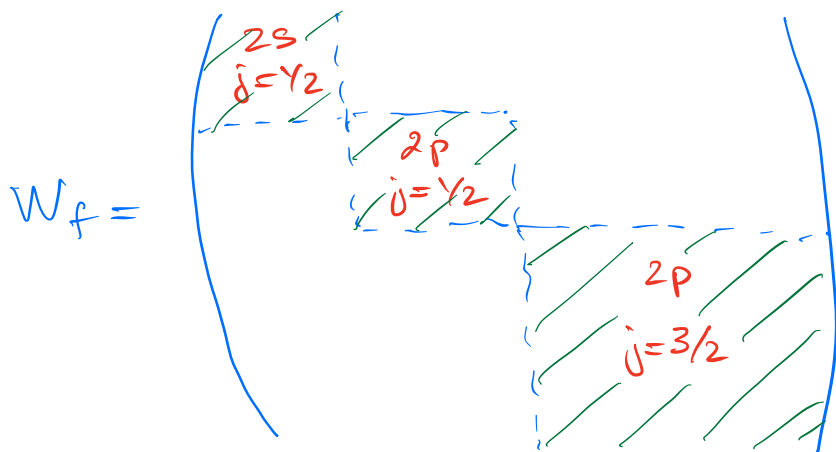
$$W_f^{(2p)} = \begin{pmatrix} \text{---} & 0 \\ 0 & \text{---} \end{pmatrix}$$

$j=1/2$  (top-left block)       $j=3/2$  (bottom-right block)

• DEVE-SE NOTAR QUE O NÍVEL  $2s$  TEM  
 $l=0, s=1/2 \Rightarrow j=1/2$  E AS BASES ORIGINAL  
 E SOMADA SÃO A MESMA:

$$|m_l=0, m_s=\pm 1/2\rangle = |j=1/2, m_j=\pm 1/2\rangle$$

ASSIM, GLOBALMENTE PARA O NÍVEL  $2p$



EM CADA  
 BLOCO,  
 $W_f$  É PROPOR-  
 CIONAL À  
 IDENTIDADE

A NOTAÇÃO ESPECTROSCÓPICA USUAL É:

$$2s, j=1/2 \Rightarrow 2s_{1/2}$$

$$2p, j=1/2 \Rightarrow 2p_{1/2}$$

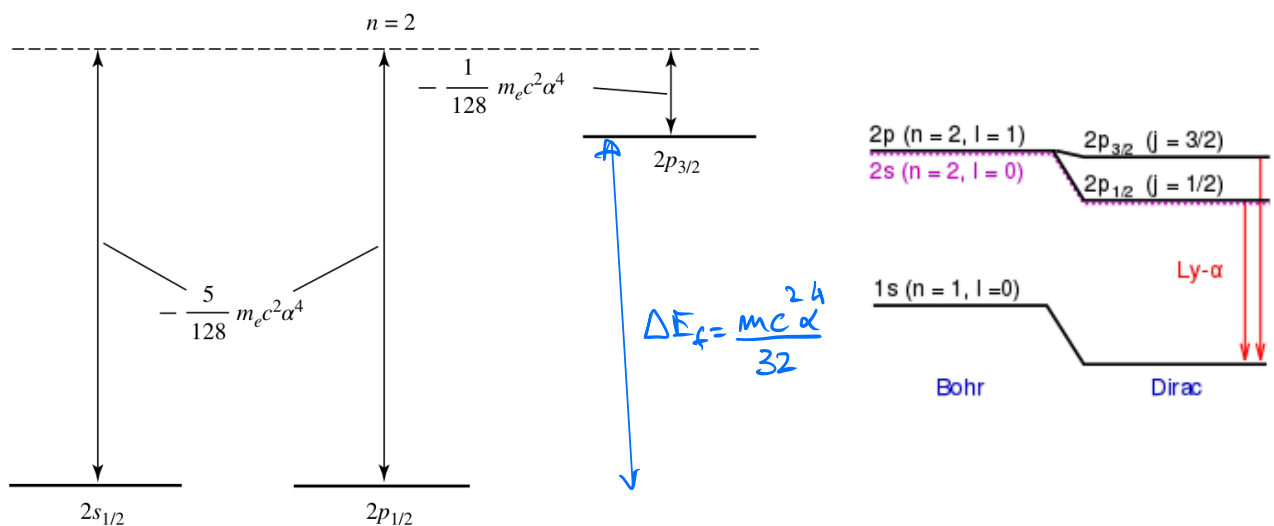
$$2p, j=3/2 \Rightarrow 2p_{3/2}$$

JUNTANDO TODOS OS CÁLCULOS:

$$W_f^{2s_{1/2}} = -\frac{5}{128} mc^2 \alpha^4$$

$$W_f^{2p_{1/2}} = -\left(\frac{7}{384} + \frac{1}{48}\right) mc^2 \alpha^4 = -\frac{5}{128} mc^2 \alpha^4$$

$$W_f^{2p_{3/2}} = \left(-\frac{7}{384} + \frac{1}{96}\right) mc^2 \alpha^4 = -\frac{1}{128} mc^2 \alpha^4$$



(a) A TRANSIÇÃO  $2p \rightarrow 1s$ , QUE GERA FÓTONS DE ENERGIA:  $\Delta E = E_2 - E_1 = E_I \left(1 - \frac{1}{4}\right) = \frac{3}{4} E_I$

SE SEPARA EM DUAS LINHAS, CUJA SEPARAÇÃO É  $\Delta E_f = \frac{4}{128} mc^2 \alpha^4 = \frac{1}{32} mc^2 \alpha^4$  (VER FIGURA)

(b) OS NÍVEIS  $2s_{1/2}$ ,  $2p_{1/2}$  TÊM A MESMA ENERGIA ATÉ ESSA ORDEM EM TEORIA DE PERTURBAÇÃO. ESSA IGUALDADE É VÁLIDA EM TODAS AS ORDENS: NA TEORIA DE DIRAC, OS NÍVEIS EXATOS DE ENERGIA SÓ DEPENDEM DE  $n$  E  $j$ :

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

EXPANDINDO EM  $\alpha^2$ :

$$E_{n,j} = mc^2 - \frac{1}{2} \frac{mc^2 \alpha^2}{n^2} - \frac{mc^2}{2n^4} \left( \frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \alpha^4 + \dots$$

$mc^2$ : ENERGIA DE REPOUSO DO ELÉTRON

$$\frac{mc^2 \alpha^2}{2} = \frac{mc^2}{2} \frac{e^2}{\hbar^2 c^4} = \frac{me^2}{2\hbar^2 c^4} \equiv E_I$$

QUE É O RESULTADO NÃO-RELATIVÍSTICO  
O 3º TERMO COINCIDE COM OS VALORES DA ESTRUTURA FINA QUE CALCULAMOS.

(C) CORREÇÕES ADVINDAS DA QUANTIZAÇÃO DOS CAMPOS ELETROMAGNÉTICOS (QED) "LEVANTAM" O NÍVEL  $2S_{1/2}$  EM RELAÇÃO AO NÍVEL  $2P_{1/2}$ : DESLOCAMENTO LAMB ("LAMB SHIFT")

