

AULA 23

Vimos que $(E - e\phi)^2 = (c\vec{p} - e\vec{A})^2 + m^2c^4$

junto com $E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

$$\vec{p} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla}$$

nos leva a equação relativística de uma partícula carregada sujeita a um potencial eletromagnético

- No limite não relativístico $mc^2 \gg e\phi \psi, i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi$

obtemos a equação de Schrödinger

- O spin não pode ser incorporado a esta equação, pois os operadores de spin transformam como um vetor tridimensional e portanto violam a invariância mediante transformação de Lorentz (Roberto de Quadri vetores)

Tomemos um caso particular $A(\vec{r}, t) = A(\vec{r})$ e $\phi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r})$

$$\left(\frac{-\hbar^2 \partial^2}{\partial t^2} - 2ie\hbar \phi \frac{\partial}{\partial t} - ie\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} + e^2 \phi^2 \right) \psi$$

$$= \left(-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + 2ie\hbar c \vec{A} \cdot \vec{\nabla} + ie\hbar c (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) + e^2 A^2 + m^2 c^4 \right) \psi$$

$-iEt/\hbar$
tome $\psi(\vec{r}, t) = u(r) e^{-iEt/\hbar}$

separável

$$\left(E^2 - 2e\phi E + e^2 \phi^2 \right) u(r) e^{-iEt/\hbar} = \text{Lado direito}$$

$$\boxed{(E - e\phi)^2 u = \left(-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + 2ie\hbar c \vec{A} \cdot \vec{\nabla} + ie\hbar c \vec{\nabla} \cdot \vec{A} + e^2 A^2 + m^2 c^4 \right) u}$$

Caso particular $A=0$ $\phi(\vec{r}) = \phi(r)$

$$(-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4) u(\vec{r}) = (E - e\phi)^2 u(\vec{r})$$

se tomarmos $u(\vec{r}) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}$$

$$\frac{1}{r^2} 2r \frac{d}{dr} + \frac{d^2}{dr^2} = \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{d^2}{dr^2}$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \psi = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\psi + r \dot{\psi}) = \frac{1}{r} (\dot{\psi} + \dot{\psi} + r \ddot{\psi}) = \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{d^2}{dr^2}$$

$$-\hbar^2 c^2 \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{l(l+1)\hbar^2}{\hbar^2 r^2} \right) R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) = \left((E - e\phi)^2 - m^2 c^4 \right) R(r) Y_{lm}$$

$$\left(-\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) = \frac{(E - e\phi)^2 - m^2 c^4}{\hbar^2 c^2} R(r)$$

$$l = 0, 1, \dots$$

se tomarmos $E = E' + mc^2$ e considerarmos $E' e\phi \ll mc^2$

o lado direito fica

$$\frac{E^2 - 2e\phi E + e^2 \phi^2 - m^2 c^4}{\hbar^2 c^2} = \left[E'^2 + 2mc^2 E' + m^2 c^4 - 2e\phi E' \right.$$

$$\left. - 2e\phi mc^2 + e^2 \phi^2 - m^2 c^4 \right] / (\hbar^2 c^2) = \frac{2mc^2(E' - e\phi)}{\hbar^2 c^2} = \frac{2m(E' - e\phi)}{\hbar^2}$$

onde não relativistas

Níveis de energia do potencial coulombiano

potencial $e\phi = -\frac{ze^2}{r}$

come $f = \alpha r \quad \alpha^2 = \frac{4(m^2c^4 - E^2)}{\hbar^2c^2}$

$$\left(-\frac{1}{f} \frac{d^2}{d(f/\hbar)^2} f/\hbar + \frac{l(l+1)}{(f/\hbar)^2} \right) R = \left(E^2 - 2E \underbrace{-\frac{ze^2}{f/\hbar}}_{e\phi} + \frac{z^2e^4}{(f/\hbar)^2} - m^2c^4 \right) \frac{R}{\hbar^2c^2}$$

$$\left(-\frac{1}{f} \frac{d^2}{df^2} f + \frac{l(l+1)}{f^2} \right) R = \frac{1}{\alpha^2} \left(\frac{E^2 - m^2c^4}{\hbar^2c^2} + \frac{2EZ\alpha}{f\hbar^2c^2} + \frac{Z^2e^4}{f^2\hbar^2c^2} \right) R$$

come $4 \frac{m^2c^4 - E^2}{\hbar^2c^2} = \alpha^2$

$$A \equiv \frac{ze^2}{\hbar c}$$

$$A = \frac{2E\hbar}{\hbar c \alpha}$$

$$\left(-\frac{1}{f} \frac{d^2}{df^2} f + \frac{l(l+1)}{f^2} \right) R = \frac{1}{\alpha^2} \left(-\frac{\alpha^2}{4} + \frac{2E\hbar \alpha}{f\hbar c} + \frac{\alpha^2 \hbar^2}{f^2} \right) R$$

$$= \left(-\frac{1}{4} + \frac{A}{f} + \frac{\hbar^2}{f^2} \right) R$$

$$\left[\frac{1}{f} \frac{d^2}{df^2} f + \frac{A}{f} - \frac{1}{4} - \frac{[\hbar^2 - l(l+1)]}{f^2} \right] R = 0$$

note (limites não relativísticos)

$$\alpha^2 = 4 \frac{m^2 c^4 - E^2}{\hbar^2 c^2} = 4 \frac{m^2 c^4 - (E' + mc^2)^2}{\hbar^2 c^2}$$

$$= 4 \frac{\cancel{m^2 c^4} - E'^2 - 2 mc^2 E' - \cancel{m^2 c^4}}{\hbar^2 c^2}$$

$$= \frac{-8 E' m}{\hbar^2} = \frac{8 m |E'|}{\hbar^2}$$

$$A = \frac{2\hbar}{\hbar c} \frac{E}{\alpha} = \frac{2\hbar}{\hbar c} \frac{E' + mc^2}{\alpha} = \frac{2\hbar}{\hbar c} \frac{mc^2}{\alpha}$$

$$= \frac{2\hbar}{\hbar c} \frac{mc^2}{\frac{8^{1/2} m^{1/2} |E'|^{1/2}}{\hbar}} = \frac{2 z e^2}{\hbar^2 c^2} \frac{m^{1/2} \hbar c^2}{2^{1/2} |E'|^{1/2}}$$

$$= \frac{z e^2}{\hbar} \left(\frac{m}{2|E'|} \right)^{1/2}$$

De volta à equação

$$\left\{ \frac{1}{\rho} \frac{d^2 \rho}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{[e(e+1) - \hbar^2]}{\rho^2} \right\} R = 0$$

Esta equação tem a cara da equação não relativística exceto que $l(l+1)$ foi substituído por $l(l+1) - \alpha^2$ (compare com

eq. 16.7 do Schiff) onde $\alpha^2 = \frac{8m|E|}{\hbar^2}$ $A = \frac{2mZe^2}{\hbar^2} = \frac{Ze^2}{\hbar} \left(\frac{m}{2|E|} \right)^{1/2}$

Passos p/ solução do problema:

- tome $R(r) = F(r) e^{-\frac{1}{2}\rho}$

- Expanda $F(\rho) = \rho^s (a_0 + a_1 \rho + a_2 \rho^2 + \dots)$

$$\equiv \rho^s L(\rho)$$

$$a_0 \neq 0 \text{ as } \geq 0$$

- Ache $a_{\nu+1} = \frac{\nu + l + 1 - A}{(\nu+1)(\nu+2l+2)} a_\nu$
relação equivalente ao

↓
não relativístico

- Verifique que se a série não terminar ela explode

- Termine a série impondo

$$A = n = n' + l + 1$$

↓

1, 2, ...

inteiros positivos

Para o caso relativístico se impusermos

$$A(A+1) = l(l+1) - \alpha^2 \Rightarrow A = \frac{-1}{2} \pm \frac{1}{2} [(2l+1)^2 - 4\alpha^2]^{1/2}$$

1 para! $\lambda = \frac{n' + s + 1}{2}$
 $\downarrow$
 inteiro positivo ou zero

as soluções p/λ : se $\ell > 0$ uma é positiva e a outra é negativa

é pequeno $\mu = \frac{ze^2}{\hbar c} \sim \frac{z}{137}$

$$\therefore \lambda = -1/2 \pm 1/2 \sqrt{(2\ell+1)^2 - 4\mu^2}$$

considerando que $\left(\frac{z}{137}\right)^2 \ll 1$

se $\ell \neq 0$ o sinal $\oplus$ dá $\lambda > 0$ bem [complicada na origem]
 " " $\ominus$ dá $\lambda < 0$ mal

se $\ell = 0$ ambas as raízes são negativas

$$\lambda = -1/2 \left(1 \mp \sqrt{1 - 4\mu^2} \right)$$

$$= -1/2 \left(1 \mp (1 - 2\mu^2) \right) = \frac{-\mu^2}{-1 + \mu^2} \rightarrow \text{mais próximo de zero}$$

É possível mostrar que se tomássemos uma distribuição de carga (e não uma carga pontual) positiva, só a solução com sinal $\oplus$, isto é $-\mu^2$, perde. Exercício 3

Assum
$$1 = n' + \left[-1/2 + 1/2 \left((2l+1)^2 - 4j^2 \right)^{1/2} \right] + 1$$

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

ricordando
$$1 - \left(\frac{m^2 c^4 - E^2}{\hbar^2 c^2} \right) = \alpha^2$$

$$1 = \frac{2E\hbar}{\hbar c \alpha} \quad \therefore \alpha = \frac{2E}{\hbar c} \frac{\hbar}{1}$$

$$\alpha^2 = \frac{4E^2}{\hbar^2 c^2} \frac{\hbar^2}{1^2}$$

$$\therefore 1 - \frac{m^2 c^4 - E^2}{\hbar^2 c^2} = \frac{4E^2}{\hbar^2 c^2} \frac{\hbar^2}{1^2}$$

$$\therefore E^2 = \frac{m^2 c^4}{1 + \hbar^2 / a^2}$$

$$E = mc^2 \left(1 + \hbar^2 / a^2 \right)^{-1/2}$$

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

$$= mc^2 \left[\frac{1 + \hbar^2}{\left(n' + 1/2 + (l+1/2) \left(1 - \left(\frac{\hbar}{l+1/2} \right)^2 \right)^{1/2} \right)^2} \right]^{-1/2}$$

ma
$$n = n' + l + 1$$

$$E \approx mc^2 \left[\frac{1 + \hbar^2}{\left(n + 1/2 + (l+1/2) \left(1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar}{l+1/2} \right)^2 \right) \right)^2} \right]^{-1/2}$$

$$= mc^2 \left[1 + \frac{p^2}{\left[n - \frac{1}{2} \frac{p^2}{2\ell+1/2} \right]^2} \right]^{1/2}$$

$$= mc^2 \left[1 + \frac{p^2}{n^2 \left(1 - \frac{p^2}{2n(\ell+1/2)} \right)^2} \right]^{1/2}$$

$$(1-x)^{-2} \approx 1 + 2x \quad x \ll 1$$

$$E = mc^2 \left[1 + \frac{p^2}{n^2} \left(1 + \frac{p^2}{n(\ell+1/2)} \right) \right]^{1/2}$$

$$(1+x)^{-1/2} = 1 + (-1/2)(1+x)^{-3/2} \Big|_{x=0} + (+3/4)(1+x)^{-5/2} \Big|_{x=0} \frac{x^2}{2} = 1 - \frac{x}{2} + \frac{3}{8} x^2$$

$$E = mc^2 \left[1 - \frac{p^2}{2n^2} - \frac{p^4}{2n^3(\ell+1/2)} + \frac{3}{8} \left(\frac{p^2}{n^2} \right)^2 \right]$$

$$E = mc^2 \left[1 - \frac{p^2}{2n^2} - \frac{p^4}{2n^4} \left(\frac{n}{\ell+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right]$$

lembRANDO que
 $p = \frac{ze^2}{\hbar c}$

termo de estrutura
 fin: separa ℓ do n

$$- \frac{z^2 e^4}{2 \hbar^2 c^2 n^2} \rightarrow - mc^2 \frac{p^2}{2n^2} = - \frac{m z^2 e^4}{2 \hbar^2 n^2} = - \frac{E_I}{n^2}$$

↑
 átomo
 de Hidrogênio
 p/ $z=1$

lembra que p | um dado n , l é no máximo $n-1$ e no mínimo zero

A diferença ^{máxima} entre níveis com mesmo n mas l 's diferentes
 será:

$$\frac{mc^2 p^4}{2n^4} \left(\frac{n}{1/2} - \frac{n}{(n-1)+1/2} \right) =$$

$$\frac{mc^2 p^4}{n^3} \left(1 - \frac{1}{2(n-1)+1} \right) = \frac{mc^2 p^4}{n^3} \left(1 - \frac{1}{2n-1} \right)$$

$$= \frac{mc^2 p^4}{n^3} \left(\frac{2n-1-1}{2n-1} \right) = \frac{mc^2 p^4}{n^3} \frac{n-1}{n-1/2}$$

p | $n=2$ isto é $\frac{1}{12} mc^2 p^4$

No livro do Cohen sobre estrutura fina por teoria de perturbação, verificamos que a diferença máxima será $\frac{1}{32} mc^2 p^4$ (e está ^{e está} ~~concorde~~ com a experiência)

Se fôssemos feito p | 3 então l , teríamos

$$\frac{mc^2 p^4}{2n^4} \left(\frac{n}{1/2+1/2} - \frac{n}{n-1/2+1/2} \right) = \frac{mc^2 p^4}{2n^3} \left(\frac{1}{1} - \frac{1}{n} \right) = \frac{mc^2 p^4}{n^3} \frac{n-1}{2n}$$

$\uparrow$ menor J $\downarrow$ maior J $n^3=8$

$$= \frac{mc^2 p^4}{8} \cdot \frac{1}{4} = \frac{mc^2 p^4}{32}$$