26ª aula

Desenvolvendo os dois últimos termos para a equação temos:

$$\left[(E-e\phi)^2 - (c\vec{p}-e\vec{A})^2 - m^2c^4 + e\hbar c\vec{\sigma}'\cdot\vec{H} - ie\hbar c\,\vec{\alpha}\cdot\vec{E} \right]\Psi = 0$$

que deve ser comparada com

$$\left[(E-e\phi)^2 - (c\vec{p}-e\vec{A})^2 - m^2c^4 \right]\Psi = 0$$

Vamos estudar o papel destes últimos dois termos, fazendo o limite não relativístico

tome $\quad E = E' + mc^2$

$$(E-e\phi)^2 - m^2c^4 = \left(E' - e\phi + mc^2\right)^2 - m^2c^4$$

$$= (E'-e\phi)^2 + 2mc^2(E'-e\phi)$$

$$\Rightarrow + 2mc^2(E'-e\phi)$$

$$E'\Psi = \left[\frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + e\phi - \frac{e\hbar}{2mc}\,\vec{\sigma}'\cdot\vec{H} + i\frac{e\hbar}{2mc}\,\vec{\alpha}\cdot\vec{E} \right]\Psi$$

Pense na eq. não relativística de Schrödinger

<u>Interpretação dos 2 termos adicionais</u>

(1) $-\frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma}'\cdot\vec{H}$ energia de interação entre uma partícula de momento magnético $\frac{e\hbar}{2mc}$ e o campo magnético $\vec{H}$

(2) $\dfrac{ie\hbar}{2mc}\,\vec{\alpha}\cdot\vec{E}$

vimos $c\vec{\alpha} = \vec{v}$ $\qquad \langle\psi|c\vec{\alpha}|\psi\rangle = \langle\psi|\vec{v}|\psi\rangle$

$\vec{\alpha}$ é da ordem $\dfrac{v}{c}\langle\psi|\psi\rangle$

se a partícula sente o campo elétrico E em uma região com dimensão a

$$e\phi \sim e\int E\,dr \sim eEa$$

$$\Delta x\Delta p \sim \hbar$$

$$ap \sim \hbar \quad \therefore \quad p \sim \frac{\hbar}{a} \sim mv$$

assim $$\frac{\frac{ie\hbar}{2mc}\vec{\alpha}\cdot\vec{E}}{e\phi} \sim \frac{\frac{e\hbar}{mc}\frac{v}{c}E}{eEa} = \frac{\frac{e\hbar v}{mc^2}}{e\frac{\hbar}{mv}} = \frac{v^2}{c^2}$$

e, portanto, se anula qdo $v \to 0$

Este termo dá origem a interação spin-órbita (como veremos a seguir)

Equação de Dirac para um campo central

tome: $A(\vec{r},t) = 0 \qquad \phi(\vec{r},t) = \phi(r)$

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi$$

$$H = c\,\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta mc^2 + V$$

onde $V = e\phi$

potencial central → momento angular é conservado

↓

Qual? $\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}$?

De fato o momento angular total deveria conservar.

Tente $\vec{r}\times\vec{p}$!

No enfoque de Heisenberg, fica fácil de verificar

pag 83 Sakurai

$$i\hbar\frac{dL_x}{dt} = [L_x, H]$$

$$i\hbar\frac{dL_x}{dt} = L_x H - H L_x$$

$$= c\vec{\alpha}\cdot\left((yP_z - zP_y)\vec{P} - \vec{P}(yP_z - zP_y)\right)$$

importante:

$$\boxed{\begin{aligned} &L_x = yP_z - zP_y \\ &H = c\,\vec{\alpha}\cdot\vec{P} + \beta mc^2 + V \\ &[\beta mc^2, L_x] = 0 \\ &[V(r), L_x] = 0 \end{aligned}}$$

As componentes de $\vec{L}$ só agem em θ e φ

cancelam

$$= c\vec{\alpha}\cdot\Big[(yP_zP_x - zP_yP_x)\vec{i} - (P_x yP_z - P_x zP_y)\vec{i}$$

cuidado | cancelam

$$+ (yP_zP_y - zP_yP_y)\vec{j} - (P_y yP_z - P_y zP_y)\vec{j}$$

cancelam

$$+ (yP_zP_z - zP_yP_z)\vec{k} - (P_z yP_z - P_z zP_y)\vec{k}\Big]$$

cancelam

cuidado

$$= c\alpha_y\left((yP_y - P_y y)P_z\right) + c\alpha_z\left((-zP_z + P_z z)P_y\right)$$

$[x_i, P_n] = i\hbar\delta_{in}$

$$= i\hbar c(\alpha_y P_z - \alpha_z P_y)$$ não é zero! não conserva

$$= -i\hbar c(\alpha_z P_y - \alpha_y P_z)$$

está faltando alguma coisa para ser somada a $\vec{r}\times\vec{p}$ p/ fornecer o momento angular total → este pois conserva.

tente $\vec{\sigma}'$: $i\hbar \dfrac{d\sigma_x'}{dt} = \sigma_x' H - H\sigma_x'$

onde $\vec{\sigma}' = \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{pmatrix}\vec{i} + \begin{pmatrix} \sigma_y & 0 \\ 0 & \sigma_y \end{pmatrix}\vec{j} + \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix}\vec{k}$

$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.

Lembre tb que $\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$

$[\sigma_x', \beta mc^2] = 0$

$$\begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c & 0 \\ 0 & d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ac & 0 \\ 0 & bd \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ca & 0 \\ 0 & db \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c & 0 \\ 0 & d \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{bmatrix}$$

matrizes diagonais comutam

$[\sigma_x', V] = 0$

assim $i\hbar \dfrac{d\sigma'}{dt} = [\sigma_x', c\vec{\alpha}.\vec{p}] = [\sigma_x', \alpha_x]cp_x + [\sigma_x', \alpha_y]cp_y + [\sigma_x', \alpha_z]cp_z$

$= [\sigma_x', \alpha_y]cp_y + [\sigma_x', \alpha_z]cp_z = \left\{\begin{bmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{bmatrix}\right\}cp_y$

$[\sigma_x', \alpha_x] = 0$

feito de σ_x's — feito de σ_x's

$+ \left\{\begin{bmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & \sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & \sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{bmatrix}\right\}cp_z$

$$= \begin{bmatrix} 0 & \sigma_x\sigma_y-\sigma_y\sigma_x \\ \sigma_x\sigma_y-\sigma_y\sigma_x & 0 \end{bmatrix} cP_y + \begin{bmatrix} 0 & \sigma_x\sigma_z-\sigma_z\sigma_x \\ \sigma_x\sigma_z-\sigma_z\sigma_x & 0 \end{bmatrix} cP_z$$

$$= \begin{bmatrix} 0 & 2i\,\sigma_z \\ 2i\sigma_z & 0 \end{bmatrix} cP_y + \begin{bmatrix} 0 & -2i\sigma_y \\ -2i\sigma_y & 0 \end{bmatrix} cP_z$$

$[\sigma_i,\sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k$

$$= 2ic\left(\alpha_z P_y - \alpha_y P_z\right)$$

se multiplicarmos isto por $\frac{\hbar}{2}$ obtemos $-i\hbar \frac{dL_x}{dt}$

assim definimos $\vec{S} \equiv \frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma}$ (momento angular de spin do elétron)

e o momento angular total fica $\vec{L} + \frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma} = \vec{J}$

e $[\vec{J}, H] = 0$

<u>Interação de spin órbita</u>

tome $\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$ onde Ψ_1 e Ψ_2 são spinores

primeiras duas, últimas duas componentes de Ψ

tome $E = E' + mc^2$ depois fazemos → E' e $V \ll mc^2$

$$E\psi = (c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta mc^2 + V)\psi$$

$$E'\psi + mc^2\psi = (c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta mc^2 + V)\psi$$

$$\begin{pmatrix} E'+mc^2 & 0 \\ 0 & E'+mc^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1 \\ \psi_2\end{pmatrix} = \left\{\begin{pmatrix} 0 & c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} \\ c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} & 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix} mc^2 & 0 \\ 0 & -mc^2\end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V & 0 \\ 0 & V\end{pmatrix}\right\}\begin{pmatrix}\psi_1 \\ \psi_2\end{pmatrix}$$

$$(E'+mc^2)\psi_1 = c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\,\psi_2 + mc^2\psi_1 + V\psi_1$$

$$(E'+mc^2)\psi_2 = c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\,\psi_1 - mc^2\psi_2 + V\psi_2$$

$$\boxed{\begin{aligned} &(E'-V)\psi_1 - c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\,\psi_2 = 0 \\ &(E'+2mc^2-V)\psi_2 - c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\,\psi_1 = 0 \end{aligned}}$$

olhe a 2ª equação no limite E' e $V \ll mc^2$

$$mc^2\psi_2 \sim cp\,\psi_1 \quad \therefore \quad \psi_2 \sim \frac{c(mv)}{mc^2}\psi_1 \sim \frac{v}{c}\psi_1$$

ou seja ψ_2 fica muito menor que ψ_1 qdo $v \ll c$

Tomemos $\psi_2 = (E'+2mc^2-V)^{-1} c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\,\psi_1$ da 2ª eq. e
e substituimos na 1ª equação

$$E'\psi_1 = c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\,(E'+2mc^2-V)^{-1} c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\,\psi_1 + V\psi_1$$

$$= c^2(2mc^2)^{-1}\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\left(1+\frac{E'-V}{2mc^2}\right)^{-1}\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\,\psi_1 + V\psi_1$$

$$= \frac{1}{2m}(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\left(1+\frac{E'-V}{2mc^2}\right)^{-1}(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\,\psi_1 + V\psi_1$$

até aqui sem aproximações

Conhecemos a aproximação

$$\left(1+\frac{E'-V}{2mc^2}\right)^{-1} \approx 1 - \frac{E'-V}{2mc^2}$$

$$\downarrow$$

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

$$E'\psi_1 = \frac{1}{2m}(\vec{\sigma}.\vec{p})\left(1-\frac{E'-V}{2mc^2}\right)\vec{\sigma}.\vec{p}\,\psi_1 + V\psi_1$$

Sakurai 165 lembre que $(\vec{\sigma}.\vec{a})(\vec{\sigma}.\vec{b}) = a.b + i\vec{\sigma}.(\vec{a}\times\vec{b})$

p/ tirar o $\left(1-\frac{E'-V}{2mc^2}\right)$ de dentro dos $(\vec{\sigma}.\vec{p})(\quad)(\vec{\sigma}.\vec{p})$

note que $\vec{p}V = V\vec{p} - i\hbar\vec{\nabla}V$

$$-i\hbar\vec{\nabla}(V\psi) = (-i\hbar\vec{\nabla}V)\psi - \underbrace{i\hbar V\vec{\nabla}\psi}_{V\vec{p}} = (V\vec{p} - i\hbar\vec{\nabla}V)\psi$$

Assim, primeiro tiremos o $\left(1-\frac{E'-V}{2mc^2}\right)$ de lá

$$E'\psi_1 = \frac{1}{2m}\left(1-\frac{E'-V}{2mc^2}\right)(\vec{\sigma}.\vec{p})(\vec{\sigma}.\vec{p})\,\psi_1$$

$$+\frac{1}{2m}\cdot\frac{-i\hbar}{2mc^2}(\vec{\sigma}.\vec{\nabla}V)(\vec{\sigma}.\vec{p})\,\psi_1 + V\psi_1$$

$\Rightarrow$ usando 2 vezes a formula $(\vec{\sigma}.\vec{a})(\vec{\sigma}.\vec{b}) = \vec{a}.\vec{b} + i\vec{\sigma}.(\vec{a}\times\vec{b})$

$$E'\psi_1 = \left[\left(1 - \frac{E'-V}{2mc^2}\right)\frac{p^2}{2m} + V\right]\psi_1$$

$$\frac{-i\hbar}{4m^2c^2}(\vec{\nabla}V)\cdot\vec{p}\,\psi_1 + \frac{\hbar}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\cdot(\vec{\nabla}V\times\vec{p})\psi_1$$

p/ um potencial esfericamente simétrico

$$\vec{\nabla}V = \frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\vec{r} \quad \therefore \quad \vec{\nabla}V\times\vec{p} = \frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\vec{r}\times\vec{p} = \frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\vec{L}$$

$$\vec{\nabla}V\cdot\vec{p} = \vec{\nabla}V\cdot -i\hbar\vec{\nabla} = -i\hbar\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\vec{r}\cdot\vec{\nabla} = \frac{-i\hbar dV}{r\,dr}\frac{r\partial}{\partial r} = \frac{-i\hbar dV}{dr}\frac{\partial}{\partial r}$$

$$\frac{E'-V}{2mc^2} = \frac{p^2}{2m\,2mc^2} = \frac{p^2}{4m^2c^2}$$

mas

$$(E-V)^2 = c^2p^2 + m^2c^4$$

$$(E'+mc^2-V)^2 = c^2p^2 + m^2c^4$$

$$E'^2 + \cancel{m^2c^4} + 2E'mc^2 - \cancel{V^2} - 2V(E'+mc^2) = c^2p^2 + \cancel{m^2c^4}$$

$$E' = V + \frac{p^2}{2m} \quad \therefore \quad E'-V = \frac{p^2}{2m}$$

Assim temos

$$E'\psi_1 = \left(\frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2} + V - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\frac{dV}{dr}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{\partial r}\underbrace{\left(\tfrac{1}{2}\hbar\vec{\sigma}\right)\cdot\vec{L}}_{\vec{S}\cdot\vec{L}}\right)\psi_1$$

termo de correção de massa

não tem analogo clássico DARWIN

Spin órbita

1213 Cohen verifiquem