A equação de Dirac: átomo de um elétron

A idéia é resolver o problema de um elétron sob a influência do potencial:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$$

Na aula passada, vimos que o problema ficou reduzido à solução das equações acopladas:

$$[E - m - V(r)]u(r) - [\frac{d}{dr} + \frac{\lambda+1}{r}]v(r) = 0$$
$$[E + m - V(r)]v(r) + [\frac{d}{dr} - \frac{\lambda-1}{r}]u(r) = 0$$

Nossa expectativa é que os termos de estrutura fina, tratados para o átomo de Hidrogênio por teoria de perturbação, surjam naturalmente como solução da equação de Dirac. Para resolver estas equações, introduziremos novas escalas, dadas por: $\begin{cases} \epsilon \equiv \frac{E}{m} \\ x \equiv mr \end{cases}$ e a constante de estrutura fina $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = e^2 \approx \frac{1}{137}$.

Lembre que escrevemos a equação de Dirac para um corpo só e no limite de altas energias, ela não funciona. Precisaríamos de uma teoria de campos de muitos corpos relativística que levasse em consideração a criação de pares, partícula+anti-partícula.

A equação de Dirac: átomo de um elétron

Substituindo as novas variáveis temos:

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

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

Um bom começo é analisar o comportamento destas equações para $x \to \infty$ e impor as condições assimptóticas esperadas do problema.

$$\text{No limite } x \to \infty, \text{ temos } \begin{cases} (1) \;\; [\epsilon - 1]u(x) - [\frac{d}{dx}]v(x) = 0 \\ \\ (2) \;\; [\epsilon + 1]v(x) + [\frac{d}{dx}]u(x) = 0 \end{cases}$$

Substituindo $u(x)$ de (1) em (2), obtemos:

$$[\epsilon + 1]v(x) + [\frac{d}{dx}]\left(\frac{1}{\epsilon - 1}[\frac{d}{dx}]v(x)\right) = 0 \Rightarrow \frac{d^2 v}{dx^2} = (1 - \epsilon^2)v$$

O que sabemos sobre ϵ? Classicamente, a energia cinética $E - m - V(r)$ é igual à zero no ponto de retorno clássico e como a partícula está prisioneira e o ponto clássico é a fronteira, podemos concluir que $E - m < 0$, pois $V(r) < 0 \; \forall \; r$. Isso implica em $\dfrac{E}{m} = \epsilon < 1$ e $(1 - \epsilon^2) > 0$. Consequentemente,

$$v(x) = exp[-(1 - \epsilon^2)^{1/2} x] \text{ para } x \to \infty.$$

A equação de Dirac: átomo de um elétron

Ignorando a normalização por hora, temos que

$[\epsilon - 1]u(x) - \frac{dv}{dx} = 0 \rightarrow u(x) = exp[-(1-\epsilon^2)^{1/2}x]$ para $x \rightarrow \infty$ também.

No caso da equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio, ao chegar no comportamento assimptótico da função radial, expandíamos a função em uma série de potências que multiplicava a exponencial e concluíamos que a série precisava ser interrompida (caso contrário a função divergiria no infinito). Isso quantizava a energia. Seguiremos passos semelhantes para $u(x)$ e $v(x)$, isto é:

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

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

Assumimos que encontraremos uma solução usando o mesmo γ para ambas as séries. Inserindo estas expressões nas equações diferenciais, reagrupando as potências, obtemos que os termos de menor potência serão os envolvendo $x^{\gamma-1}$(coeficientes da derivada primeira e dos termos $\frac{\lambda\pm 1}{x}$ e $\mp\frac{Z\alpha}{x}$).

Isso permite escrever $\begin{cases} (Z\alpha)a_0 - (\gamma+\lambda+1)b_0 = 0 \\ (\gamma-\lambda+1)a_0 + (Z\alpha)b_0 = 0 \end{cases}$

Willian (2020) no site de FI002

A equação de Dirac: átomo de um elétron

As outras potências fornecem fórmulas de recorrência, relacionando a_i e b_i com a_{i-1} e b_{i-1}. Para que isso funcione, não podemos aceitar a solução trivial $a_0 = b_0 = 0$ do sistema de equações acima. Exigimos, então, que o determinante se anule, isto é $(Z\alpha)^2 + (\gamma + \lambda + 1)(\gamma - \lambda + 1) = 0$. Essa condição fornece:

$$\gamma = -1 \pm [\lambda^2 - (Z\alpha)^2]^{1/2}$$

Sintoma de problemas para altas energias: se $\begin{cases} \lambda = j + 1/2 < Z\alpha \\ \text{argumento da raíz} \\ \text{quadrada negativo} \end{cases}$

Para átomos com $Z\alpha \approx 1$, o campo é tão intenso nas proximidades do núcleo que teríamos criação de pares (e^+, e^-) de forma expontânea. A equação de Dirac de um corpo só não dá conta do recado. Consideraremos $Z\alpha << 1$. Para o menor valor de $j, j = \frac{1}{2}$, isso implica em

$$\gamma \approx \begin{cases} \text{Sinal positivo} \rightarrow -1 + 1 - \frac{1}{2}(Z\alpha)^2 = \text{número negativo} \approx 0 \\ \\ \text{Sinal negativo} \rightarrow -1 - 1 + \frac{1}{2}(Z\alpha)^2 = \text{número negativo} \approx -2 \end{cases}$$

$\gamma < 0$ *causa divergência em* $r = 0$. *Precisamos resolver isso. Note que para* $j > \frac{1}{2}$, *o* γ *obtido com sinal +(-) é sempre positivo (negativo).*

A equação de Dirac: átomo de um elétron

Para $Z\alpha << 1$, a divergência do γ obtido com sinal positivo, só aparece para $j = \frac{1}{2}$ e é relativamente fraca (removível se considerarmos que o núcleo tem dimensão diferente de zero).

Assim, tomamos $\gamma = -1 + [(j+\frac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2]^{1/2}$ e escrevemos b_0 em função de a_0 (determinante do slide 3 igual à zero permite isso). No final, a_0 será determinado por condição de normalização. Assim sendo, do slide 3, temos $b_0 = a_0(Z\alpha)/(\gamma+\lambda+1)$. Podemos encontrar o restante da série, os a_i e b_i, igualando coeficientes de mesma ordem, a partir de x^γ. Esse exercício leva à:

$$\boxed{\begin{aligned}(1-\epsilon)a_{i-1} - Z\alpha a_i - (1-\epsilon^2)^{1/2}b_{i-1} + (\lambda+1+\gamma+i)b_i = 0\\ (1+\epsilon)b_{i-1} + Z\alpha b_i - (1-\epsilon^2)^{1/2}a_{i-1} - (\lambda-1-\gamma-i)a_i = 0\end{aligned}}$$

Willian (2020) no site de FI002

Multiplicando a primeira equação por $(1+\epsilon)^{1/2}$ e a segunda por $(1-\epsilon)^{1/2}$, e somando as duas (com isso, nos livramos dos a_{i-1} e b_{i-1}), obtemos:

$$-Z\alpha(1+\epsilon)^{1/2}a_i - (1-\epsilon)^{1/2}(\lambda-1-\gamma-i)a_i + Z\alpha(1-\epsilon)^{1/2}b_i +$$

$+ (1+\epsilon)^{1/2}(\lambda+1+\gamma+i)b_i = 0$, fornecendo uma relação entre a_i e b_i :

$$\boxed{\frac{b_i}{a_i} = \frac{Z\alpha(1+\epsilon)^{1/2} + (\lambda-1-\gamma-i)(1-\epsilon)^{1/2}}{Z\alpha(1-\epsilon)^{1/2} + (\lambda+1+\gamma+i)(1+\epsilon)^{1/2}}}$$

A equação de Dirac: átomo de um elétron

Note que

- Se $i \to +\infty \Rightarrow \dfrac{b_i}{a_i} = -\dfrac{(1-\epsilon)^{1/2}}{(1+\epsilon)^{1/2}}$, ou seja, a_i é proporcional à b_i. Para valores grandes de x, este termo dominará à série.
- Nestas condições, $(i \to +\infty)$, troque $b_{i-1} \to -\dfrac{(1-\epsilon)^{1/2}}{(1+\epsilon)^{1/2}}\, a_{i-1}$ na segunda equação da caixa verde e obtenha $\dfrac{a_i}{a_{i-1}} = \dfrac{2(1-\epsilon^2)^{1/2}}{i}$.
- A função exponencial $e^{\zeta x} = 1 + \zeta x + \dfrac{(\zeta x)^2}{2!} + \ldots \dfrac{(\zeta x)^{i-1}}{(i-1)!} + \dfrac{(\zeta x)^i}{i!} + \ldots$ tem essa propriedade, com $\zeta = 2(1-\epsilon^2)^{1/2}$.
- Isso faz com que

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

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

explodam no infinito, se as séries não forem interrompidas.

A equação de Dirac: átomo de um elétron

- Para interromper a série em $i = n' + 1$, precisamos que $a_{n'+1} = b_{n'+1} = 0$.

  Com isso as equações da caixa verde do slide 5 ficam:

$$n' = i - 1 \begin{cases} (1-\epsilon)a_{n'} - (1-\epsilon^2)^{1/2} b_{n'} = 0 \\ (1+\epsilon)b_{n'} - (1-\epsilon^2)^{1/2} a_{n'} = 0 \end{cases} \Rightarrow \text{ambas fornecem } \frac{b_{n'}}{a_{n'}} = \left[\frac{1-\epsilon}{1+\epsilon}\right]^{1/2}$$

  Combinando este resultado com a caixa azul do slide 5, temos

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

  E isso resulta na quantização da energia: $(1+\gamma+n')(1-\epsilon^2)^{1/2} = Z\alpha\epsilon$

- Colocando o c de volta, encontramos que a energia do átomo de hidrogênio fica:

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

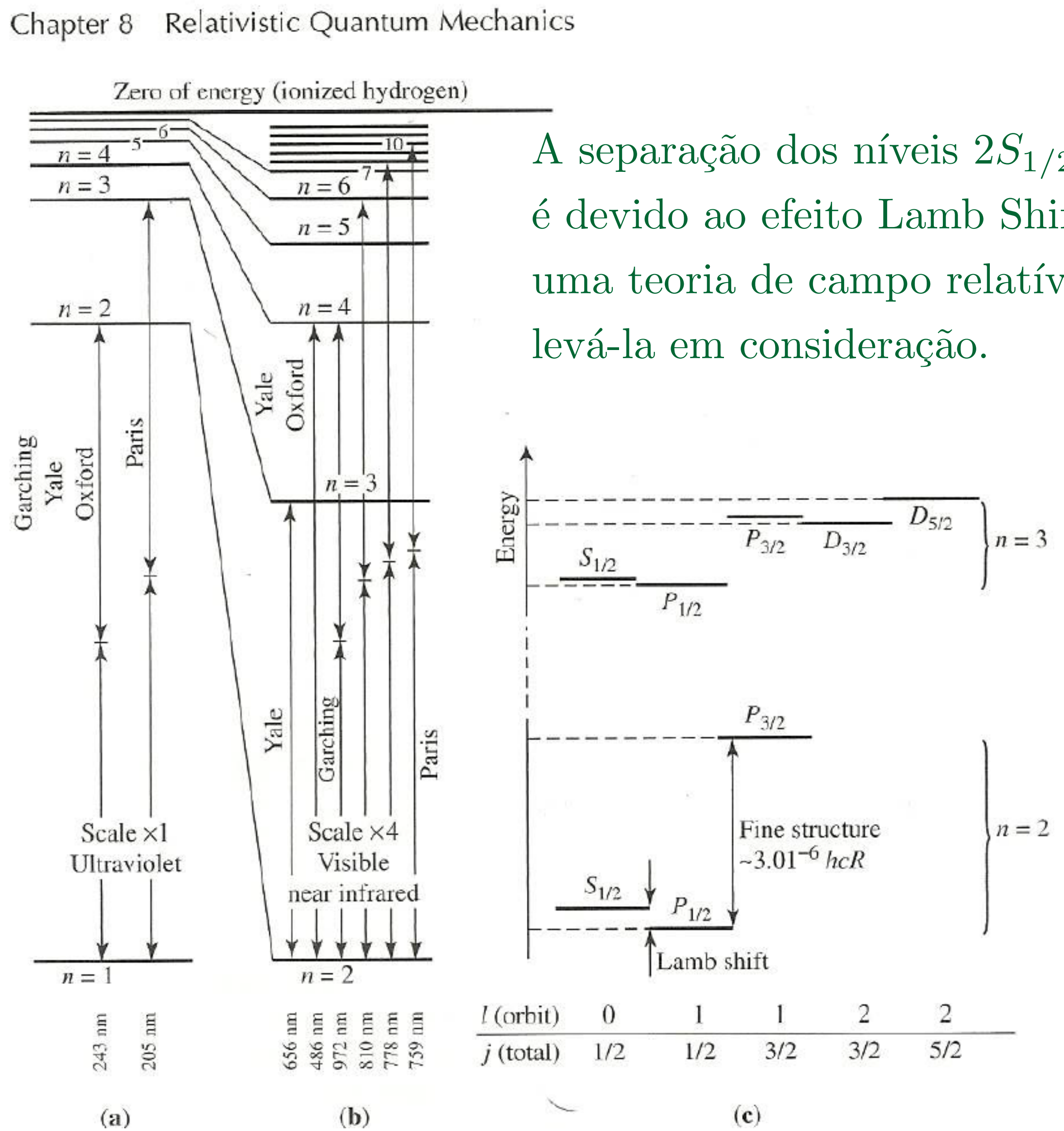
  Willian (2020) no site de FI002

- O termo de menor ordem em $Z\alpha$, é

$$E = mc^2 - \frac{1}{2}\frac{mc^2(Z\alpha)^2}{n^2} \text{ com } n \equiv j + 1/2 + n' \rightarrow \text{série de Balmer (cap.3)}.$$

- Ordens superiores *(exercício 8.16 da lista)* $\begin{cases}\text{correção da energia cinética (eq. 5.3.10)} \\ \text{e interação spin-órbita (eq. 5.3.31).}\end{cases}$

A equação de Dirac: átomo de um elétron



A separação dos níveis $2S_{1/2}$ e $2P_{1/2}$ é devido ao efeito Lamb Shif que exige uma teoria de campo relatívistica para levá-la em consideração.