AULA 16

MECÂNICA QUÂNTICA II

AULA 16

4.3) Átomo de Hidrogênio usando a Equação de Dirac

Problema de Coulomb

$$H\psi = E\psi$$

onde $H = c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + mc^2\beta - \dfrac{Ze^2}{r}$ (77)

sabemos que $[J^k, H] = 0$

$[J^k, J^l] = i\,\varepsilon^{klm} J^m \hbar$

$[H, \Pi] = 0$ $\quad$ Π é o operador de Paridade

logo vamos diagonalizar H, $\vec{J}^2$, J_z e Π.

$$H\,\psi_{Ejm} = E\,\psi_{Ejm} \quad (78)$$

onde escrevemos

$$\psi_{Ejm} = \begin{pmatrix} \overbrace{U_{Ejm}}^{2\times 1} \\ \underbrace{V_{Ejm}}_{2\times 1} \end{pmatrix} \quad (79)$$

Para que ψ_{Ejm} seja autovetor de paridade devemos ter

$$\Pi\,\psi_{Ejm}(\vec{x}) = S_p\,\psi_{Ejm}(-\vec{x}) = \gamma_0\,\psi_{Ejm}(-\vec{x}) = \pm\,\psi_{Ejm}(\vec{x})$$

$$\begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}\begin{pmatrix} U_{Ejm}(-\vec{x}) \\ V_{Ejm}(-\vec{x}) \end{pmatrix} = \pm\begin{pmatrix} U_{Ejm}(\vec{x}) \\ V_{Ejm}(\vec{x}) \end{pmatrix} \quad (80)$$

$\Rightarrow$ U_{Ejm} e V_{Ejm} devem ter paridades opostas!

A equação de autovalores de H é

$$\left[c \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma}\cdot\vec{p} \\ \vec{\sigma}\cdot\vec{p} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} mc^2 & 0 \\ 0 & -mc^2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\frac{Ze^2}{r} & 0 \\ 0 & -\frac{Ze^2}{r} \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} U_{Ejm} \\ V_{Ejm} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} U_{Ejm} \\ V_{Ejm} \end{pmatrix} \quad (81)$$

Examinemos a parte angular dos espinores de 2 componentes U e V:

Dado l sabemos que $j = l \pm 1/2$ ou seja $l = j \mp 1/2$

Definimos autofunções simultâneas de J^2, J_z, L^2 e S^2

$$\varphi_{jm}^{-} = \sqrt{\frac{l+1/2+m}{2l+1}}\, Y_{l\, m-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sqrt{\frac{l+1/2-m}{2l+1}}\, Y_{l\, m+\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (82)$$

p/ $l = j - 1/2$ e

$$\varphi_{jm}^{+} = \sqrt{\frac{l+1/2-m}{2l+1}}\, Y_{l\, m-1/2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \sqrt{\frac{l+\frac{1}{2}+m}{2l+1}}\, Y_{l\, m+\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (83)$$

p/ $l = j + 1/2$ [Veja Gottfried Cap. 3 Eq. (165) e (183)]

Note que φ^+ e φ^- tem paridades opostas pois l difere de uma unidade c/ Paridade $(-1)^{j \pm \frac{1}{2}}$

Assim escrevemos

por conveniência

$$\Psi_{Ejm}^{(1)} = \begin{pmatrix} \varphi_{jm}^{-}\, g_1 \\ \varphi_{jm}^{+}\, i f_1 \end{pmatrix} \quad (84a)$$

$$\Psi^{(2)}_{Ejm} = \begin{pmatrix} \varphi^{+}_{jm}\, g_2 \\ \varphi^{-}_{jm}\, i f_2 \end{pmatrix} \quad (84b)$$

por conveniência

Vamos analisar inicialmente as soluções do tipo 1. Sub. (84a) em (81)

$$c\,\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\ \varphi^{+}_{jm}\, i f_1 + \left(mc^2 - \frac{Ze^2}{r} - E\right)\varphi^{-}_{jm}\, g_1 = 0 \quad (85a)$$

$$c\,\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\ \varphi^{-}_{jm}\, g_1 + \left(-mc^2 - \frac{Ze^2}{r} - E\right)\varphi^{+}_{jm}\, i f_1 = 0 \quad (85b)$$

Agora precisamos relacionar $\vec{\sigma}\cdot\vec{p}$ com $\vec{L}$

$$\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{x}\ \ \vec{\sigma}\cdot\vec{x}}{r^2} = 1$$

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{p} = \frac{(\vec{\sigma}\cdot x)^2}{r^2}\ \vec{\sigma}\cdot\vec{p} = \left[\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{x}}{r^2}\right]\left[(\vec{\sigma}\cdot\vec{x})(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\right]$$

$$= \frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{x}}{r^2}\left[\vec{x}\cdot\vec{p} + i\,\vec{\sigma}\cdot\,(\vec{x}\times\vec{p})\right] = \vec{\sigma}\cdot\hat{x}\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{i}{r}\,\vec{\sigma}\cdot\vec{L}\right] \quad (86)$$

agora lembramos da soma de spin 1/2 + mom. angular l -

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{L} = \left[\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \frac{3}{4}\hbar^2\right]\frac{1}{\hbar} \qquad \text{onde} \quad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

então temos

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{L}\ \varphi^{\pm}_{jm} = \hbar\left[j(j+1) - \left(j\pm\tfrac{1}{2}\right)\left(j\pm\tfrac{1}{2}+1\right) - \frac{3}{4}\right]\varphi^{\pm}_{jm}$$

$$= \hbar\left[\mp\left(j+\tfrac{1}{2}\right) - 1\right]\varphi^{\mp}_{jm} \quad (87)$$

Além disso

$$\vec{\sigma}\cdot\hat{x}\ \varphi^{\pm}_{jm} = -\varphi^{\mp}_{jm} \quad (88)$$ (Mostre!)

As equações (85a) e (85b) com essas expressões passam a ser

$$-c\hbar\frac{\partial}{\partial r}f_1 - \frac{c\hbar}{r}\left(j+\frac{1}{2}+1\right)f_1 + \left(mc^2 - \frac{Ze^2}{r} - E\right)g_1 = 0 \quad (89a)$$

$$c\hbar\frac{\partial}{\partial r}g_1 + \frac{c\hbar}{r}\left(1-j-\frac{1}{2}\right)g_1 - \left(mc^2 + \frac{Ze^2}{r} + E\right)f_1 = 0 \quad (89b)$$

Agora definimos $f_1 = \frac{F_1(r)}{r}$ e $g_1 = \frac{G_1(r)}{r}$ (90)

subst. (90) em (89a) e (89b)

$$\hbar c\left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{j+1/2}{r}\right]F_1 - \left[mc^2 - \frac{Ze^2}{r} - E\right]G_1 = 0 \quad (91a)$$

$$\hbar c\left[\frac{\partial}{\partial r} - \frac{(j+\frac{1}{2})}{r}\right]G_1 - \left[mc^2 + \frac{Ze^2}{r} + E\right]F_1 = 0 \quad (91b)$$

Analogamente (Mostre!) para as soluções do tipo 2 temos:

$$\hbar c\left[\frac{\partial}{\partial r} - \frac{(j+\frac{1}{2})}{r}\right]F_2 - \left[mc^2 - \frac{Ze^2}{r} - E\right]G_2 = 0 \quad (92a)$$

$$\hbar c\left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{(j+\frac{1}{2})}{r}\right]G_2 - \left[mc^2 + \frac{Ze^2}{r} + E\right]F_2 = 0 \quad (92b)$$

Note que se definirmos $\boxed{\lambda = j + 1/2}$

$F_1(\lambda) = F_2(-\lambda)$ e $G_1(\lambda) = G_2(-\lambda)$

o que permite condensar (91) e (92) em

$$\hbar c\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\lambda}{r}\right)F_i^{(\lambda)}(r)-\left(mc^2-\frac{Ze^2}{r}-E\right)G_i^{(\lambda)}(r)=0 \quad (93a)$$

$$\hbar c\left(\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\lambda}{r}\right)G_i^{(\lambda)}(r)-\left(mc^2+\frac{Ze^2}{r}+E\right)F_i^{(\lambda)}(r)=0 \quad (93b)$$

se $\boxed{\begin{array}{ll} i=1 & \lambda=j+1/2 \\ i=2 & \lambda=-(j+1/2) \end{array}}$

Condições de Contorno:

Para termos estados ligados (espectro discreto) devemos ter

$$\int d^3x\,\psi^\dagger\psi<\infty \longrightarrow \begin{cases} \bullet\ \psi\to 0 \text{ suficientemente rápido para } r\to\infty \\ \bullet\ \psi \text{ não deve ser divergente na origem} \end{cases}$$

Façamos uma troca de variável

$$G_i^{(\lambda)} \equiv \left(K_i^{(\lambda)}+I_i^{(\lambda)}\right)\sqrt{mc^2+E} \quad (94a)$$

$$F_i^{(\lambda)} \equiv \left(K_i^{(\lambda)}-I_i^{(\lambda)}\right)\sqrt{mc^2-E} \quad (94b)$$

não vamos escrever no que segue os índices i e λ de K e I mas devem ser sub-entendidos aqui.

$$\hbar c\sqrt{mc^2-E}\left[\frac{\partial K}{\partial r}-\frac{\partial I}{\partial r}+\frac{\lambda}{r}(K-I)\right]-\left[mc^2-E-\frac{Ze^2}{r}\right](K+I)\sqrt{E+mc^2}=0$$

(95a)

$$\hbar c\sqrt{mc^2+E}\left[\frac{\partial K}{\partial r}+\frac{\partial I}{\partial r}-\frac{\lambda}{r}(K+I)\right]-\left[mc^2+\frac{Ze^2}{r}+E\right](K-I)\sqrt{mc^2-E}=0 \quad (95b)$$

Para obter equações que contenham apenas $\frac{dK}{dr}$ ou $\frac{dI}{dr}$ somamos e subtraímos (95a) e (95b) obtendo

$$\frac{dK}{dr}-\frac{K}{\hbar c}\left(p-\frac{E}{p}\frac{Ze^2}{r}\right)=\left(\lambda-\frac{mc^2Ze^2}{\hbar cp}\right)\frac{I}{r} \quad (96a)$$

$$\frac{dI}{dr}+\frac{I}{\hbar c}\left(p-\frac{E}{p}\frac{Ze^2}{r}\right)=\left(\lambda+\frac{mc^2Ze^2}{\hbar cp}\right)\frac{K}{r} \quad (96b)$$

$$p=\sqrt{m^2c^4-E^2}$$

Derivando (96a) com relação a r e utilizando (96b) obtemos finalmente

$$r\frac{d^2K}{dr^2}+\frac{dK}{dr}+\left(2Ze^2E-p-p^2r+\frac{\gamma^2}{r}\right)K=0 \quad (97)$$

onde tomamos $\hbar=c=1$ e definimos $\gamma\equiv\sqrt{\lambda^2-Z^2e^4}$

Mudando de variável para $x=2pr$ e extraindo o comportamento assintótico para $x\to 0$ e $x\to\infty$

$$K=e^{-\frac{x}{2}}x^{\gamma}M \quad (98)$$

chegamos então a:

$$x\frac{d^2M}{dx^2}+(2\gamma+1-x)\frac{dM}{dx}-\left(\gamma-\frac{Ze^2E}{p}\right)M=0 \quad (99)$$

cuja solução é a função hipergeométrica confluente ${}_1F_1$

$$M(x) = \underset{\text{constantes}}{c_1 \; {}_1F_1(a, b; x) + c_2} \, x^{1-c} \, {}_1F_1(a-c+1, 2-c; x) \quad (100)$$

$$a \equiv \gamma - \frac{Ze^2E}{p} \qquad c = 2\gamma + 1$$

para não divergir em $x \to 0 \implies c_2 = 0$

para $\psi \to 0$, $r \to \infty \implies a = -n'$, $n' \geq 0$ inteiro

$$M(x) = {}_1F_1(-n', 2\gamma+1; x) \quad (101)$$

$$\gamma - \frac{Ze^2E}{p} = \gamma - \frac{Ze^2E}{\sqrt{m^2c^4 - E^2}} = -n' \quad (102)$$

para cada um dos valores $n' > 0$ existem 2 soluções normalizáveis das equações radiais correspondentes a $\lambda = \pm(j + 1/2)$

$$E_{n'j} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{Z^2e^4}{\left[n' + \sqrt{(j+\frac{1}{2})^2 - Z^2e^4}\right]^2}}} \quad (103) \qquad n' = 0, 1, \ldots$$

reintroduzindo os fatores dimensionais $\hbar, c$ e usando

$\alpha = \dfrac{e^2}{\hbar c}$ e definindo $n' = n - (j + 1/2)$

\# quântico principal

$$E_{n'j} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{Z^2\alpha^2}{\left[n - (j+\frac{1}{2}) + \sqrt{(j+\frac{1}{2})^2 - Z^2\alpha^2}\right]^2}}} \quad (104)$$

Note que $j_{min} = 1/2$ então para que E_{nj} seja real

$$(j+\tfrac{1}{2})^2 - Z^2\alpha^2 > 0 \quad \Longrightarrow \quad Z < \frac{j+\frac{1}{2}}{\alpha} \xrightarrow{j=1/2} Z < \frac{1}{\alpha}\,!$$

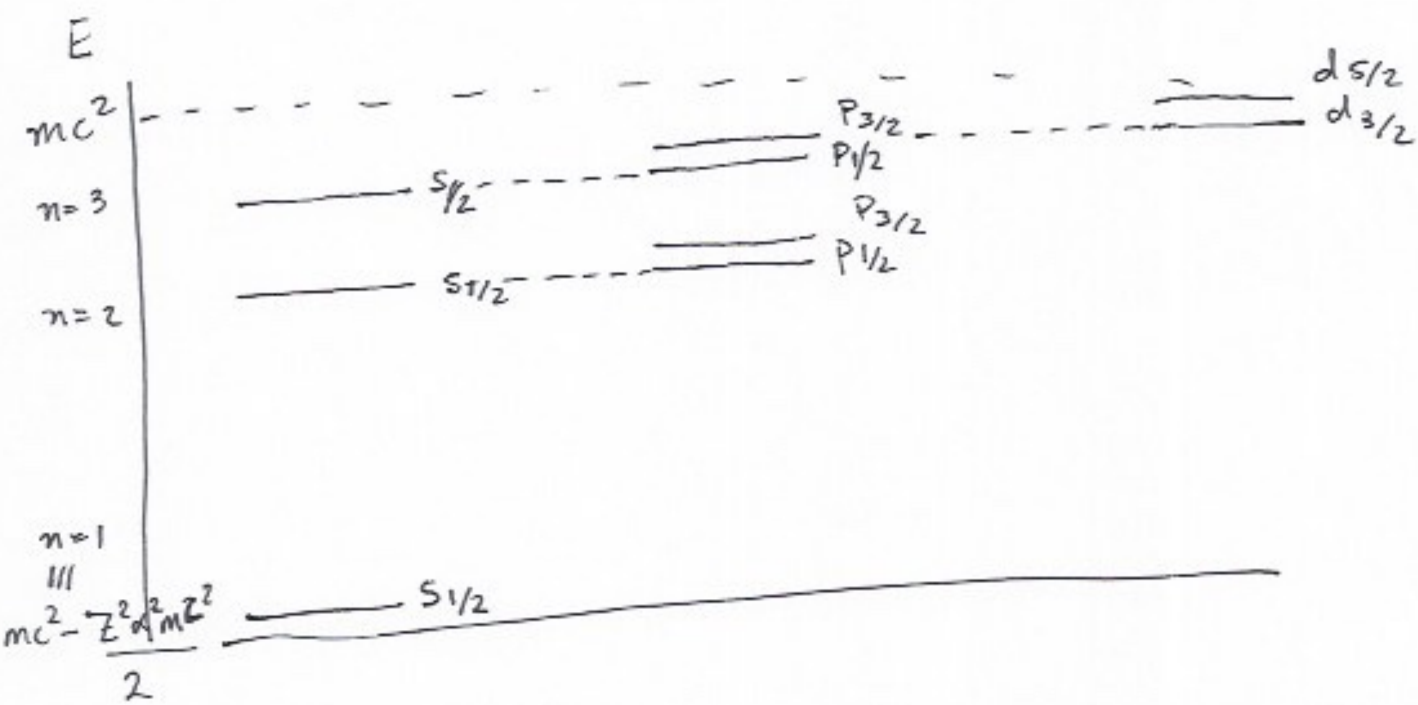
$\therefore\; Z < 137$

Expandindo (104) até ordem $Z^4\alpha^4$

$$E_{nj} = mc^2\left[1 - \frac{Z^2\alpha^2}{2n^2} - \frac{Z^4\alpha^4}{2n^4}\left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right) + \cdots\right]$$

que não depende de l e é exatamente a fórmula derivada em MQ.I.

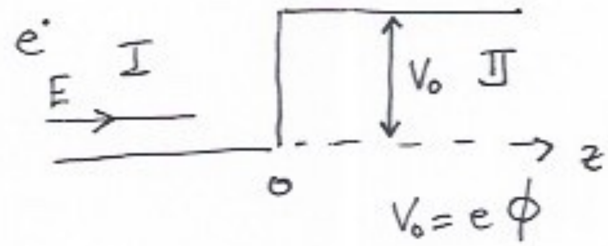
Os níveis $2s_{1/2}$ e $2p_{1/2}$, por exemplo, continuam degenerados em todas as ordens em $Z^2\alpha^2$. Como sabemos observa-se um pequeno desvio no espectro entre esses níveis (desvio de Lamb) que é completamente explicado pela QED.



4.4) Paradoxo de Klein

Consideramos um problema unidimensional em que temos um potencial

$$V = \begin{cases} 0 & z < 0 \\ V_0 & z \geq 0 \end{cases}$$



e uma onda incidente de $-\infty$

$$\psi_{inc} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ cp/(E+mc^2) \\ 0 \end{pmatrix} e^{i(pz - Et)/\hbar} \qquad E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$$

esquecendo o fator $e^{-iEt/\hbar}$ a onda refletida é

$$\psi_{ref} = a\, e^{-\frac{ipz}{\hbar}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -pc/(E+mc^2) \\ 0 \end{pmatrix} + b\, e^{-\frac{ipz}{\hbar}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{pc}{E+mc^2} \end{pmatrix}$$

por outro lado a onda transmitida é

$$\psi_{trans} = f\, e^{\frac{iqz}{\hbar}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ cq/(E-V_0+mc^2) \\ 0 \end{pmatrix} + d\, e^{\frac{iqz}{\hbar}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{-qc}{E-V_0+mc^2} \end{pmatrix}$$

onde $cq = \sqrt{(E-V_0)^2 - m^2c^4}$ (104)

Agora impomos que ψ é contínua em $z = 0$

$$\psi_{inc}(0) + \psi_{ref}(0) = \psi_{trans}(0)$$

$$\Longrightarrow \begin{cases} 1 + a = f & \text{(i)} \\ b = d & \text{(ii)} \end{cases}$$

$$\frac{p}{E+mc^2} - \frac{p}{E+mc^2}\,a = \frac{f\,q}{E-V_0+mc^2} \quad \text{(iii)}$$

$$\frac{b\,p}{E+mc^2} = \frac{-d\,q}{E-V_0+mc^2} \quad \text{(iv)}$$

$$\Longrightarrow \begin{cases} b = d = 0 \\ a + 1 = f \\ -a + 1 = r f \end{cases} \Longrightarrow \boxed{a = \frac{1-r}{1+r}} \quad \boxed{f = \frac{2}{1+r}} \qquad \boxed{r = \frac{q}{p}\,\frac{(E+mc^2)}{E-V_0+mc^2}}$$

de (104) vemos que a onda espalhada é atenuada exponencialmente se $|E-V_0| < mc^2$. Por outro lado, há onda espalhada se $|E-V_0| > mc^2$!!

Calculemos a corrente incidente e transmitida para $V_0 \geq E + mc^2$

$$J_z = c\,\psi^+ \alpha_3 \psi = c\,\psi^+ \begin{pmatrix} 0 & \sigma_3 \\ \sigma_3 & 0 \end{pmatrix} \psi$$

$$J^z_{inc} = c \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ pc/E+mc^2 \\ 0 \end{pmatrix}^+ \begin{pmatrix} 0 & \sigma_3 \\ \sigma_3 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{pc}{(E+mc^2)} \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{2pc^2}{E+mc^2}$$

$$J^z_{trans} = c\, f \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ qc/(E-V_0+mc^2) \\ 0 \end{pmatrix}^{+} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_3 \\ \sigma_3 & \end{pmatrix} f \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ qc/(E-V_0+mc^2) \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{2qc^2}{E-V_0+mc^2} \frac{4}{(1+r)^2}$$

$$\frac{J^z_{trans}}{J^z_{inc}} = \frac{2qc^2}{E-V_0+mc^2} \frac{4}{(1+r)^2} \cdot \frac{E+mc^2}{2pc^2} = \frac{4r}{(1+r)^2}$$

Além disso temos que

$$J^z_{ref} = -\frac{2pc^2}{E+mc^2} \left(\frac{1-r}{1+r}\right)^2$$

e a interferência (Mostre!) entre ψ_{inc} e ψ_{ref} cancela.

Note que a corrente é conservada

$$J^z_{inc} + J^z_{ref} = J^z_{trans}.$$

Note que para $V_0 > E + mc^2 \Rightarrow r < 0$ fazendo com que $|J^z_{ref}| > |J^z_{inc}|$!! Além disso $J^z_{trans} < 0$!

O que está acontecendo aqui ? Claramente a interpretação que demos à equação de Dirac (assim como à equação de Klein-Gordon) precisa ser modificada.

Uma forma de entender o que está acontecendo aqui é dizer que as partículas incidentes induzem a criação de pares de partícula e antipartícula na barreira quando $V_0 \geq 2mc^2$. As antipartículas, tendo carga oposta encontram $z>0$ uma região de potencial atrativo e se movem p/ a direita. Isso explica a corrente negativa do lado direito. As partículas criadas na barreira, por outro lado, sentem um potencial repulsivo e se movem p/ a esquerda e junto com a corrente incidente que é totalmente refletida formam a corrente total do lado esquerdo > corrente incidente. Mas a carga total é conservada $\Rightarrow J^z_{inc} + J^z_{ref} = J^z_{tran}$.

Vemos aqui claramente que a descrição de partícula única não se sustenta p/ $V_0 \geq 2mc^2$. (energia suficiente para a criação de pares e^+e^-). Teorias de partícula única não podem lidar com campos tão forte. Esse e outros problemas desse tipo só podem ser tratados adequadamente em teoria quântica de campos.

De fato Dirac foi motivado na busca de sua equação pela crença que a evolução temporal do sistema quântico deveria ser unitária, isto é, a evolução do vetor de estado que descreve a condição inicial do sistema deveria ser descrita por uma transf. unitária. Ele estava correto.

Na TQC. ~~a~~ equação de Klein-Gordon assim como a equação de Dirac não governam a evolução temporal do vetor de estado. Elas governam a evolução dos operadores de campo! Vetores de estado em todas as teorias de campo evoluem de acordo com transf. unitárias como Dirac assumiu!

A equação de Dirac considerada como teoria de partícula única, descreve bem, por exemplo, elétrons relativísticos desde que efeitos devido ao pósitron possam ser ignorados. Sabemos hoje que teorias invariantes de Lorentz para partículas de qualquer spin e momento magnético podem ser construídas. O aspecto mais significativo é que o ψ que aparece na equação de Dirac não pode ser interpretado consistentemente como função de onda, como fizemos na equação de Schrödinger, mas são operadores de campo que anticomutam descrevendo férmions de spin 1/2.

Veja. "Teoria Quântica Relativística", Lifshitz vol 4. (Introdução)