



UNIVERSIDADE FEDERAL DO MARANHÃO
Bacharelado Interdisciplinar em Ciência e Tecnologia

Gilberson Rickelmy Amaral Campos Diniz

**Aplicação da Mecânica Quântica Relativística no Estudo de Sistemas Atômicos
Exóticos**

São Luís - MA

2025

Gilberson Rickelmy Amaral Campos Diniz

Aplicação da Mecânica Quântica Relativística no Estudo de Sistemas Atômicos Exóticos

Monografia apresentada ao curso de Bacharelado Interdisciplinar em Ciência e Tecnologia da Universidade Federal do Maranhão, como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Bacharel em Ciência e Tecnologia.

Orientador: Prof. Dr. Frederico Elias Passos dos Santos

São Luís - MA

2025

Ficha gerada por meio do SIGAA/Biblioteca com dados fornecidos pelo(a) autor(a).
Diretoria Integrada de Bibliotecas/UFMA

Campos Diniz, Gilberson Rickelmy Amaral.

Aplicação da Mecânica Quântica Relativística no Estudo
de Sistemas Atômicos Exóticos / Gilberson Rickelmy Amaral
Campos Diniz. - 2025.

61 f.

Orientador(a): Frederico Elias Passos dos Santos.

Curso de Ciência e Tecnologia, Universidade Federal do
Maranhão, São Luis, 2025.

1. Mecânica Quântica. 2. Relatividade Restrita. 3.
Física de Partículas. 4. Átomos Exóticos. I. Santos,
Frederico Elias Passos dos. II. Título.

Gilberson Rickelmy Amaral Campos Diniz

Aplicação da Mecânica Quântica Relativística no Estudo de Sistemas Atômicos Exóticos

Monografia apresentada ao curso de Bacharelado Interdisciplinar em Ciência e Tecnologia da Universidade Federal do Maranhão, como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Bacharel em Ciência e Tecnologia.

Trabalho _____ em São Luís - MA, 20 de fevereiro de 2025:

Prof. Dr. Frederico Elias Passos dos Santos
Orientador

Prof. Dr. Guillermo Lazar Mentech
Examinador

Prof. Dr. Josberg Silva Rodrigues
Examinador

São Luís - MA
2025

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, pela saúde e força que me permitiram conduzir este trabalho.

À minha família, em especial à minha mãe e à minha esposa, pela compreensão, paciência e incentivo em cada etapa da minha formação. Sem o apoio emocional e o exemplo de persistência que vocês representam, este objetivo não teria se tornado realidade.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Frederico Elias Passos dos Santos, pela confiança depositada, pela disponibilidade e pelas valiosas sugestões que ampliaram minha visão acadêmica e científica. Sua paciência e orientações foram fundamentais para o desenvolvimento deste trabalho.

Aos colegas e amigos, dentro e fora da universidade, que compartilharam desafios, conquistas e me incentivaram a concluir este estudo.

À Universidade Federal do Maranhão, pela infraestrutura, bibliotecas e laboratórios que tornaram possível a pesquisa, bem como pelos docentes, cujas aulas e debates forneceram bases sólidas e inspiração para prosseguir.

Ao PIBIC-CNPq e FAPEMA, pelo apoio financeiro que contribuiu para a construção das bases deste trabalho.

"Cada ideia é uma coisa diferente, uma nova experiência de arregalar os olhos! Tudo além da minha imaginação! Eu sou só um pedaço minúsculo do mundo!"

Mestre Oden - *One Piece*

RESUMO

Este Trabalho de Conclusão de Curso investiga a aplicação da Mecânica Quântica e da Relatividade Restrita na análise dos níveis de energia em átomos hidrogenóides e exóticos, como o hidrogênio piônico. Inicialmente, são discutidos os resultados da Equação de Schrödinger, determinando as funções de onda e os níveis de energia no modelo hidrogenóide convencional em coordenadas esféricas. Em seguida, compara-se o regime não relativístico com as previsões das equações de Klein-Gordon e Dirac, evidenciando como efeitos relativísticos rompem degenerescências presentes no modelo de Schrödinger. No estudo de sistemas exóticos, observa-se que a maior massa reduzida do hidrogênio muônico e piônico resulta em energias de ligação significativamente mais elevadas. Especificamente no hidrogênio piônico, a inclusão de um termo de interação forte é essencial para reproduzir dados experimentais, como a correção de aproximadamente 7meV no estado fundamental, em concordância com a literatura. Além disso, discute-se a influência de efeitos adicionais, como a polarização de vácuo e a estrutura interna das partículas, para aprimorar a precisão das previsões teóricas. Os resultados reforçam a importância do formalismo quântico-relativístico para a descrição de átomos exóticos, demonstrando como fatores além do potencial coulombiano simples desempenham um papel crucial na determinação dos níveis de energia, fornecendo subsídios para investigações futuras sobre estados ligados ainda mais complexos.

Palavras-Chaves: mecânica quântica; relatividade restrita; física de partículas; átomos exóticos.

ABSTRACT

This Final Course Project investigates the application of Quantum Mechanics and Special Relativity in the analysis of energy levels in hydrogen-like and exotic atoms, such as pionic hydrogen. Initially, the results of the Schrödinger Equation are discussed, determining the wave functions and energy levels in the conventional hydrogen-like model in spherical coordinates. Next, the non-relativistic regime is compared with the predictions of the Klein-Gordon and Dirac equations, highlighting how relativistic effects break degeneracies present in the Schrödinger model. In the study of exotic systems, it is observed that the higher reduced mass of muonic and pionic hydrogen results in significantly higher binding energies. Specifically, in pionic hydrogen, the inclusion of a strong interaction term is essential to reproduce experimental data, such as the correction of approximately 7 meV in the ground state, in agreement with the literature. Additionally, the influence of further effects, such as vacuum polarization and the internal structure of particles, is discussed to enhance the accuracy of theoretical predictions. The results reinforce the importance of the quantum-relativistic formalism for describing exotic atoms, demonstrating how factors beyond the simple Coulomb potential play a crucial role in determining energy levels, providing a foundation for future investigations into even more complex bound states.

Keywords: quantum mechanics; special relativity; particle physics; exotic atoms.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Esquema simplificado para o Modelo Padrão.	17
---	----

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Partículas elementares.	16
Tabela 2 – Hádrons.	16
Tabela 3 – Funções de onda para $n = 1, 2$	52
Tabela 4 – Funções de onda para $n = 3, 4$	53

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

BICT *Bacharelado Interdisciplinar em Ciência e Tecnologia*

NIST *National Institute of Standards and Technology*

UFMA *Universidade Federal do Maranhão*

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	12
2	FORMALISMOS DA MECÂNICA CLÁSSICA	20
2.1	Formalismo Newtoniano	20
2.2	Formalismo Lagrangiano	21
2.3	Formalismo Hamiltoniano	22
2.4	Princípios da Relatividade: Tempo, espaço e movimento	24
2.5	Convenções da relatividade restrita	25
3	MECÂNICA QUÂNTICA: MODELOS TEÓRICOS E FERRAMENTAS MATEMÁTICAS	29
3.1	Equação de Schrödinger	29
3.2	Equação de Schrödinger em coordenadas esféricas	31
3.2.1	Resolução da parte angular	32
3.2.2	Resolução da parte radial	36
3.3	Equação de Klein-Gordon	39
3.4	Equação de Dirac	45
4	RESULTADOS	52
4.1	Funções de onda para estados $\psi_{n,l,m}$ e energias	52
4.2	Energias relativísticas	54
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	57
	REFERÊNCIAS	59

1 INTRODUÇÃO

A Física de partículas é uma das áreas mais fascinantes e desafiadoras da Física Moderna. Ela lida com o estudo das partículas elementares, que são as unidades fundamentais da matéria. Desse modo, o objetivo da Física Moderna é explicar os fenômenos físicos que ocorrem em escalas muito pequenas.

É sabido que desde a Grécia antiga o comportamento da natureza e do ser humano já inquietava os primeiros filósofos que propuseram uma série de explicações baseadas nos conhecimentos de sua época. Demócrito (460-370 a.C.) e Leucipo (c¹.V. a.C.), por exemplo, já utilizavam a nomenclatura "átomo", porém só no século XX, esse termo transformou-se em convicção para explicar que toda a matéria existente é formada de átomos (SAMPAIO; CALCADA, 2005). Isso demonstra a incrível capacidade de evolução da ciência que, atualmente, tem no advento da Mecânica Quântica a maneira mais aceita para compreender o mundo em escala atômica e subatômica, além de explicar os fenômenos ligados ao mundo globalizado em que vivemos, que não podem mais ser explicados sob o viés da mecânica clássica.

Por meio da Mecânica Quântica é possível desenvolver novas tecnologias que melhorem a qualidade de vida dos indivíduos, tal como a ressonância magnética, que permite criar imagens do interior do corpo humano, através de sinais magnéticos gerados pelas moléculas de água presentes no paciente. Outro exemplo, é o uso na eletrônica através dos semicondutores, como os transistores, que permitiram o avanço considerável dos computadores. Além disso, foi indispensável para o desenvolvimento de usinas nucleares e possibilitou os estudos sobre a energia de fusão nuclear.

Tendo em vista a importância da Mecânica Quântica e da física de partículas, torna-se indispensável definir as partículas elementares: "partículas que não possuem nenhuma estrutura interna". No início dos anos 1930 os que ocupavam esses postos eram os prótons, nêutrons, elétrons, fótons e neutrinos. Porém, em meados dos anos

¹ Significa *circa* sendo equivalente a "por volta de" ou "aproximadamente".

1960 surgiu pela primeira vez a teoria dos modelos de quarks sugerida por Murray Gell-Mann ²(MARTIN; SHAW, 2019; HENNEBACH et al., 2014).

Os quarks são considerados os constituintes fundamentais de toda a matéria, pertencendo à família dos férmions no Modelo Padrão da Física de Partículas. Segundo (MOREIRA, 2009, p.1), citando Kane,

O Modelo Padrão é, na história, a mais sofisticada teoria matemática sobre a natureza. Apesar da palavra "modelo" em seu nome, o Modelo Padrão é uma teoria compreensiva que identifica as partículas básicas e especifica como interagem. Tudo o que acontece em nosso mundo (exceto os efeitos da gravidade) resulta das partículas do Modelo Padrão interagindo de acordo com suas regras e equações.

Desse modo, os quarks estão presentes em todas as partículas subatômicas, como prótons e nêutrons. São partículas de interação forte e são divididos em seis tipos ou sabores, todos com spin de $1/2$ e separados em pares ou gerações: *up*(u) e *down*(d), *charmed*(c) e *strange*(s), *top*(t) e *bottom*(b). Cada geração é composta de um quark com carga $+2/3$ (u, c ou t) e outro com carga elétrica $-1/3$ (d, s ou b). Além disso, cada sabor pode apresentar-se em três diferentes estados de carga, denominados cores: vermelho, azul e verde. Os quarks *up* e *down* são os mais comuns e formam os prótons e nêutrons que compõem o núcleo de um átomo.

Os outros quarks são extremamente raros e só podem ser encontrados em condições extremas, como em experimentos de física de partículas. Ademais, cada uma dessas variações possui uma antipartícula correspondente, totalizando 36 quarks (MOREIRA, 2004). Diferente de partículas como elétrons e fótons, os quarks nunca foram observados de forma isolada, estando confinados dentro de partículas compostas chamadas hádrons, devido a uma propriedade denominada confinamento quântico, que é uma das características fundamentais da teoria das interações fortes, também chamada de Cromodinâmica Quântica ³.

Além dos quarks, existem os léptons que também são férmions e possuem spin $-1/2$. Da mesma forma que os quarks, também são separados em pares ou gerações: cada par possui um lépton com carga elétrica $-e$ e um neutrino neutro correspondente.

² Murray Gell-Mann (1929-2019) foi um físico teórico que em 1969 ganhou o Nobel em Física graças às suas descobertas sobre as classificações das partículas elementares e suas interações.

³ A Cromodinâmica Quântica (QCD, do inglês *Quantum Chromodynamics*) é a teoria que descreve a interação forte, responsável pela coesão de quarks em hádrons (SAUTER, 2003).

Os três léptons carregados que existem são: o elétron ($-e$), o muon ($-\mu$) e o tau ($-\tau$). Os léptons, diferentemente dos quarks, não participam da interação forte, interagem somente por meio de forças eletromagnéticas e força fraca. Já os neutrinos apresentam somente interações fracas, o que os torna extremamente difíceis de detectar (MARTIN; SHAW, 2019).

Os férmions são partículas que possuem spin semi-inteiro e obedecem às estatísticas de Fermi-Dirac (FERMION, 2019). Eles também obedecem ao princípio de exclusão de Pauli, isto é, dois férmions idênticos não podem ocupar o mesmo estado quântico simultaneamente. Os férmions se dividem em léptons e em quarks. Já os léptons se subdividem em três gerações. A primeira composta por um elétron (e^-), uma partícula carregada negativamente, e um neutrino do elétron (ν_e), uma partícula neutra e com massa extremamente pequena. A segunda geração é composta por um múon (μ^-), que é similar ao elétron, porém bem mais pesado e um neutrino do múon (ν_μ), uma partícula neutra e leve. A terceira e última geração é formada por um tau (τ^-), mais pesada que o múon e o elétron, e o neutrino do tau (ν_τ), que exerce a função de correspondente neutro da partícula. Os neutrinos, por sua vez, são interessantes por serem partículas que interagem muito fracamente com a matéria, o que os torna difíceis de detectar.

Contudo, um termo ainda não foi explorado, trata-se dos bósons que são partículas mediadoras das forças fundamentais. Ao contrário dos férmions, os bósons são partículas que possuem spin inteiro e não obedecem ao princípio de exclusão de Pauli. Obedecem, portanto, à estatística de Bose-Einstein que define que não existe um limite para o número de partículas que podem ter o mesmo valor de *momentum*.

Os bósons dividem-se nas seguintes partículas: glúon (g), fóton(γ), bósons W e gráviton (hipotético). Os glúons são responsáveis por mediar a força forte de curto alcance, que é a que mantém os quarks unidos dentro dos hádrons. Também carrega a propriedade "cor"⁴ e atua apenas entre partículas com carga de cor. Os fótons transportam a força eletromagnética, são bósons de massa nula e por isso é uma interação de longo alcance.

⁴ Cor é uma propriedade da matéria, não tendo relação com o significado de cor na óptica ou no cotidiano (MOREIRA, 2007).

Temos também bósons W^+ , W^- e Z^0 . São os mediadores da força fraca, uma interação que governa os processos de decaimento radiativo e fusão nuclear. Por serem massivos, o alcance das interações são curtas. Quanto ao gráviton, temos somente uma inferência sobre a sua existência, pois embora seja previsto como mediador da interação gravitacional nas teorias da gravidade quântica, ele ainda não foi detectado por meio de experimentos. Sendo, portanto, a hipótese de ser um bóson de massa nula (IAG/USP, 2024b).

Por fim, temos o chamado Bóson de Higgs (H), que foi descoberto em 2012, no Grande Colisor de Hádrons (LHC). Esse bóson é uma partícula especial responsável por conferir massa à outras partículas através do campo de Higgs. Postula-se que um Bóson de Higgs não possui spin e dentro do modelo padrão, sua paridade deve ser positiva. Para determinar a existência do Bóson de Higgs do Modelo Padrão foi necessário medir com precisão a taxa de decaimento do bóson em outras partículas e comparar os resultados com as previsões teóricas já existentes.

Inicialmente, o Bóson de Higgs foi inferido em 1964 pelo físico britânico Peter Higgs (1929-2024). Entretanto, até o momento da construção do colisor em 2008, não se tinha condições tecnológicas para detectar o Bóson de Higgs. A detecção do bóson é um evento extremamente raro, uma vez que são necessárias cerca de 1 trilhão (10^{12}) de colisão próton-próton para cada evento observado (CERN, 2013).

As duas últimas partículas aqui trabalhadas, não são partículas elementares, trata-se, portanto, de partículas compostas, os chamados hádrons. Eles são formados por quarks mantidos juntos por meio da força forte mediada por glúons. Os hádrons podem ser classificados em duas categorias principais: Os bárions e os mésons.

Os bárions são partículas massivas sujeitas a interação forte com spin $1/2$. São formados por três quarks e os exemplos mais comuns são os prótons e nêutrons. Os prótons são compostos por dois quarks *up* (u) e um quark *down* (d), com carga elétrica $+1$. Já os nêutrons são compostos por dois quarks *down* (d) e um quark *up* (u), com carga elétrica neutra (IAG/USP, 2024a).

Os mésons possuem spin inteiro, tal qual o pión, constituídos por dois quarks, sendo um quark e um antiquark. No caso do pión, este é composto por um quark *up* (u) e um antiquark *down* ($\bar{d}$).

Quanto ao comportamento dessas partículas, os bárions são estáveis, no caso dos prótons ou possuem uma vida útil curta, no caso do nêutron livre. Os mésons, por sua vez, são instáveis e decaem rapidamente.

Com o objetivo de compreender a organização dessas partículas elementares e suas interações, construímos as seguintes tabelas⁵:

Tabela 1 – Partículas elementares.

Férmions	Quarks	<i>up (u)</i> <i>down (d)</i> <i>strange (s)</i> <i>charmed (c)</i> <i>top (t)</i> <i>bottom (b)</i> anti quarks ($\bar{u}, \bar{d}, \bar{s}, \bar{c}, \bar{t}, \bar{b}$)
	Léptons	Primeira geração - elétron (<i>e</i>) - neutrino do elétron (ν_e) Segunda geração - múon (μ) - neutrino do múon (ν_μ) Terceira geração - táu (τ) - neutrino do táu (ν_τ)
Bósons	Glúon (<i>g</i>)	
	Fótons (γ)	
	Bósons W (W^+ , W^- e Z^0)	
	Gráviton (hipotético)	
	Bóson de Higgs (<i>H</i>)	

Fonte: Autoria própria.

Tabela 2 – Hádrons.

Hádrons	Bárions	Próton Nêutron
	Mésons	Píon Káon

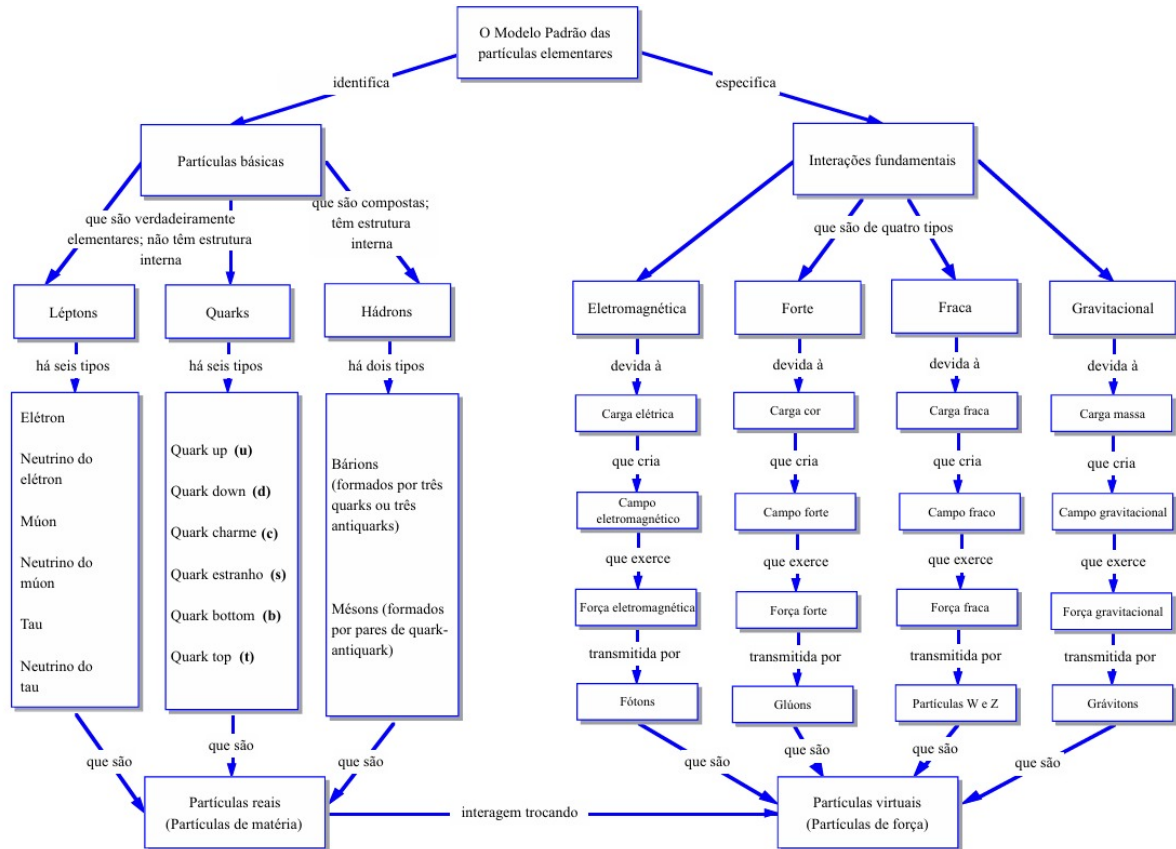
Fonte: Autoria própria.

Moreira (2009) apresenta um esquema simplificado do Modelo Padrão. Por se tratar de uma representação, deve ser tomada de maneira crítica pois sugere que a

⁵ Estas tabelas contemplam somente as partículas citadas no texto, não contemplam todas as partículas existentes na literatura, tais como os axions, leptoquarks, pentaquarks, etc. Para saber mais, ver: (GROUP et al., 2024) .

interação gravitacional está perfeitamente integrada ao Modelo Padrão, o que ainda não foi comprovado e talvez nem venha a ser.

Figura 1 – Esquema simplificado para o Modelo Padrão.



Fonte: Moreira (2009).

Um dos sistemas que pretendemos estudar é o Hidrogênio Piônico e para isso, é fundamental conhecer o píon(π), que é um méson de massa aproximadamente 273 vezes maior que a massa do elétron. Existem três tipos diferentes de píons, chamados de pi-plus(π^+), pi-minus(π^-) e pi-zero(π^0), que diferem em suas cargas elétricas e em suas massas. O π^+ e o π^- têm cargas elétricas opostas, enquanto o π^0 é uma partícula neutra. Devido à sua curta vida útil e alta instabilidade, o píon apresenta desafios significativos para sua detecção e estudo. A vida útil média do píon é de apenas $(2,6033 \pm 0,0005) \times 10^{-8} s$ (GROUP et al., 2024), o que significa que ele se decompõe muito rapidamente nas partículas subatômicas múon e neutrino muônico. Isso torna difícil observar o píon diretamente e medir suas propriedades, mas ainda sim é possível a formação de estados ligados.

A sua descoberta e estudos foram fundamentais para o desenvolvimento da Teoria Quântica de Campos (TQC), auxiliando no entendimento da interação forte entre

as partículas nucleares. Uma das formas de se estudar a interação e o comportamento das partículas é através dos átomos exóticos. Os átomos exóticos consistem em sistemas atômicos que contêm partículas diferentes das usuais, essas partículas podem ser um lépton, um méson (como um pión), ou um bárion (como um antipróton). Pode ocorrer também uma substituição no núcleo do átomo, como no caso da substituição por um pósitron ou um múon positivamente carregado (NUSSENZVEIG, 2014).

A partir desses conceitos, o presente trabalho propõe o estudo de átomos hidrogenóides por meio de uma metodologia de revisão bibliográfica da literatura corrente sobre o assunto. Desse modo, a presente monografia está organizada da seguinte maneira: Na primeira parte, introduzimos a mecânica clássica e seus formalismos (Newtoniana, Lagrangiana e Hamiltoniana), bem como os princípios e convenções da Relatividade restrita, que alterou nossa concepção de espaço, tempo e movimento.

Na segunda parte, são discutidas as equações de Schrödinger, Klein-Gordon e Dirac, examinando seu papel fundamental na consolidação da Mecânica Quântica, bem como as bases conceituais que permitem analisar sistemas exóticos como o hidrogênio piônico e muônico.

A princípio utilizamos a Equação de Schrödinger em semelhança ao que é feito com átomos hidrogenóides. No entanto, a Equação de Schrödinger é uma equação não relativística, pois não é invariante mediante as transformações de Lorentz.

Essa adaptação conceitual motivou diversos estudos por parte de vários pesquisadores, culminando naquilo que conhecemos hoje como a Equação de Klein-Gordon, que descreve a função de onda de partículas escalares (ou seja, de spin 0). No entanto, a densidade de probabilidade obtida a partir da solução da Equação de Klein-Gordon não é necessariamente positiva definida e a teoria admite tanto energias positivas quanto energias negativas, refletindo a natureza relativística e a ausência de uma projeção de spin nas soluções dessa equação.

Dadas as dificuldades conceituais e físicas enfrentadas pela Equação de Klein-Gordon, o físico, matemático e engenheiro Paul Adrien Maurice Dirac (1902–1984) desenvolveu a Equação de Dirac, cuja formulação descreve de modo relativístico as partículas de spin $1/2$. Com esse formalismo, foi possível obter uma densidade de

probabilidade positiva bem definida, resolvendo o problema central da equação de Klein-Gordon. Além disso, a teoria de Dirac prenunciou a existência do pósitron descoberto experimentalmente, alguns anos mais tarde. Por conta de sua importância e de seu caráter pioneiro no estudo de partículas de spin semi-inteiro, faz-se necessário abordar também, neste trabalho, a Equação de Dirac.

Por fim, dedica-se à análise de átomos hidrogenóides, descrevendo seus níveis de energias fundamentais, com destaque para a influência decisiva das correções relativísticas e de interação forte na determinação dos níveis de energia. Essa abordagem evidencia como o aumento significativo da massa reduzida e a inclusão de termos hadrônicos são importantes para reproduzir valores experimentais e aprofundar a compreensão desse sistema exótico.

2 FORMALISMOS DA MECÂNICA CLÁSSICA

No universo da Física, o movimento é umas das questões mais fundamentais e intrigantes. Desde os primórdios da ciência, a busca por compreender as leis que governam o movimento dos corpos tem impulsionado grandes mentes a formular teorias e modelos que capturam as nuances e complexidades desse fenômeno universal.

Um dos primeiros estudos desse fenômeno se deu através de Isaac Newton (1643-1727), que, com suas Leis do Movimento, forneceu uma estrutura sólida para compreender a relação entre forças e movimento. Entretanto, à medida que a exploração da dinâmica se aprofundava, tornou-se claro que uma estrutura matemática era necessária para lidar com sistemas mais complexos e variados.

Nesse sentido, esta sessão abordará os formalismos da Mecânica Clássica, um conjunto de abordagens matemáticas que aprofundaram consideravelmente nossa compreensão sobre o movimento. Tais formalismos constituem a base da Física e contribuíram para a formulação de alguns modelos teóricos e matemáticos amplamente utilizados e que exploraremos posteriormente.

2.1 Formalismo Newtoniano

A Mecânica Newtoniana, como mencionado anteriormente, se baseia nos três axiomas ou leis postulados por Newton em 1687. São eles :

1ª Lei: Uma partícula livre (partícula que não está sujeita a nenhuma interação) ou está em repouso ou em movimento retilíneo com velocidade constante.

2ª Lei: Quando uma partícula interage, seu estado de movimento é alterado da seguinte maneira:

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt}, \quad (2.1)$$

onde $\vec{F}$ é a resultante das forças que atuam sobre a partícula e $\vec{p}$ é o seu momento linear, cuja definição não relativística é $\vec{p} = m\vec{v}$.

3ª Lei: Quando duas partículas interagem, a força numa delas possui o mesmo módulo, mesma direção e sentido contrário à força que atua na outra (NETO, 2004).

Essas leis do movimento, embora revolucionárias, apresentavam uma descrição fenomenológica do comportamento de objetos sobre a influência de forças. Entretanto, sistemas do mundo real muitas vezes envolvem múltiplos graus de liberdade⁶, variáveis independentes e geometrias complexas. Devido a isso cientistas buscaram abordagens mais robustas para modelar e compreender o movimento.

2.2 Formalismo Lagrangiano

Ao analisar sistemas sujeitos a vínculos, nota-se um esforço para obter suas soluções utilizando a Mecânica Newtoniana, pois exige o uso de um número superior de variáveis aos graus de liberdade do sistema. A Mecânica Lagrangiana nos permite obter as equações de movimento de um corpo de uma forma mais simples, sem a utilização de um complexo diagrama de forças. Nesta situação, são criadas variáveis independentes q_k com k variando de $1, \dots, n$ e n correspondendo ao número de graus de liberdade (LEMOS, 2007). Um sistema mecânico holônomo⁷ de n graus de n variáveis generalizadas são suficientes para especificar a sua configuração em cada instante.

Dito isto, vamos definir um sistema que pode ser caracterizado por uma função escalar, a Lagrangiana (L) em termos da energia cinética (K) e da energia potencial (U), expressa em termos das coordenadas generalizadas e tempo. Temos, então:

$$L = K - U, \quad (2.2)$$

onde $K = K(q_k, \dot{q}_k)$ e $U = U(q_k, t)$. A Lagrangiana, portanto, pode ser escrita como:

$$L = L(q_k, \dot{q}_k, t), \quad (2.3)$$

com $k = 1, 2, \dots, n$.

A configuração desse sistema, em algum momento, pode passar para outro estado de configuração e, para isso, ele deve obedecer o princípio de Hamilton, também

⁶ É a quantidade mínima de números reais para determinar o estado físico de um sistema.

⁷ Um sistema mecânico holônomo é aquele em que as restrições que atuam sobre o movimento das partículas do sistema podem ser expressas como relações algébricas que dependem apenas das coordenadas gerais e do tempo.

conhecido como princípio da mínima ação, que estabelece: "A evolução do sistema da configuração 1 para a configuração 2 é tal que a ação é um mínimo"(NETO, 2004).

Para tal uma ação é definida como

$$S = \int_{t1}^{t2} L(q_k, \dot{q}_k, t) dt. \quad (2.4)$$

Utilizando o cálculo variacional, obtém-se o seguinte:

$$\delta S = \int_{t1}^{t2} \sum_{k=1}^N \left(\frac{\partial L}{\partial q_k} \delta q_k + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \delta \dot{q}_k \right) dt = \int_{t1}^{t2} \sum_{k=1}^N \left(\frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) \delta q_k dt. \quad (2.5)$$

Como $\delta q_k(t)$ são funções arbitrárias de t , a condição para que o sistema tenha uma ação mínima, $\delta S = 0$, é satisfeita se:

$$\frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = 0 \quad (2.6)$$

Se os q_k 's não possuírem vínculos, temos que os δq_k 's são independentes. Para esse caso, e somente para esse caso, temos o exposto em (2.6). Esta equação nos fornece a evolução temporal do sistema e é chamada de equação de Euler-Lagrange.

2.3 Formalismo Hamiltoniano

Uma desvantagem percebida na Mecânica Lagrangiana é que seu significado físico, embora elegante, pode não ser tão intuitivo ou fácil de interpretar em alguns casos. Desse modo, o Hamiltoniano pode ser interpretado, em muitos casos, como a energia total do sistema. Outra vantagem é descrever o movimento do sistema em termos de duas equações diferenciais de primeira ordem, enquanto que o movimento do sistema no formalismo Lagrangiano é regido por uma equação de segunda ordem (2.6):

Na formulação lagrangiana, o movimento de um sistema mecânico com n graus de liberdade é regido por n equações diferenciais ordinárias de segunda ordem no tempo. A dinâmica de Hamilton consiste em substituir as n equações de Lagrange por um certo conjunto equivalente de $2n$ equações diferenciais ordinárias de primeira ordem. De modo geral, as equações de Hamilton para problemas específicos não são mais fáceis de resolver do que as equações de Lagrange. A importância do formalismo hamiltoniano reside em fornecer um método poderoso, geral e flexível para a investigação de questões estruturais da mecânica, e,

sobretudo, em servir de fundamento para a Mecânica Quântica e a mecânica estatística (LEMOS, 2007).

Adotamos a Lagrangiana sem a dependência explícita no tempo, ou seja, $\frac{\partial L}{\partial t} = 0$. Ao derivar em relação ao tempo, temos:

$$\dot{L} = \frac{d}{dt} (L(q, \dot{q})) = \frac{\partial L}{\partial q} \dot{q} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \ddot{q}. \quad (2.7)$$

Substituindo na equação de Euler-Lagrange, obtemos

$$\dot{L} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{q} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \frac{d}{dt} \dot{q} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{q} \right), \quad (2.8)$$

ou ainda

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{q} - L \right) = 0. \quad (2.9)$$

Definimos, então

$$H = p\dot{q} - L, \quad (2.10)$$

com H sendo a Hamiltoniana do sistema, onde $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$ é o momento canonicamente conjugado à variável q .

Observa-se então que as variáveis do Hamiltoniano são (q, p, t) . Então temos:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} (p\dot{q} - H) dt. \quad (2.11)$$

Variando a ação:

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} (\delta p \dot{q} - p \delta \dot{q} - \delta H) dt, \quad (2.12)$$

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \left(\delta p \dot{q} - \dot{p} \delta q - \frac{\delta H}{\delta q} \delta q - \frac{\delta H}{\delta p} \delta p \right) dt, \quad (2.13)$$

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \left(\left(\dot{q} - \frac{\delta H}{\delta p} \right) \delta p - \left(\dot{p} - \frac{\delta H}{\delta q} \right) \delta q \right) dt. \quad (2.14)$$

De (2.14), ao extremar a ação, obtemos duas equações:

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}. \quad (2.15)$$

As equações (2.15) são chamadas de equações de Hamilton, ou mesmo equações canônicas do movimento.

Agora suponha uma função $F = F(q, p, t)$. Tomando a sua derivada temporal:

$$\frac{d}{dt}F = \frac{\partial F}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial F}{\partial p}\dot{p} + \frac{\partial F}{\partial t}. \quad (2.16)$$

Substituindo (2.15) na equação anterior:

$$\frac{d}{dt}F = \frac{\partial F}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial F}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} + \frac{\partial F}{\partial t} = \{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t}. \quad (2.17)$$

Observamos o parêntese de Poisson:

$$\{F, H\} = \frac{\partial F}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial F}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q}. \quad (2.18)$$

Note também as possíveis operações:

$$\{q, p\} = 1, \quad (2.19)$$

$$\{q, q\} = \{p, p\} = 0. \quad (2.20)$$

Esses parênteses possuem uma grande importância ao se passar da Mecânica Clássica para a Mecânica Quântica. Ao adicionar o termo $i\hbar$ encontramos a representação dos comutadores

$$[.,.] = i\hbar \{.,.\}. \quad (2.21)$$

2.4 Princípios da Relatividade: Tempo, espaço e movimento

Albert Einstein (1879-1955) foi uma das maiores personalidades do século XX. Suas contribuições revolucionaram o campo da ciência, já que ousou criticar as bases da Física que parecia ser uma ciência inabalável. Essas contribuições podem ser contempladas em quatro artigos publicados no periódico *Annalen der Physik* de Berlim. A grosso modo, esse material lançou as bases da teoria da relatividade que mudou completamente a forma como percebemos o tempo, o espaço e o movimento. Antes

das observações de Einstein, físicos, como o holandês Hendrik Antoon Lorentz (1853-1928), comprovaram que as equações de Maxwell (1831-1879) não se comportavam seguindo os princípios da mecânica clássica. Necessitou-se então elaborar alguma teoria capaz de generalizar o comportamento para qualquer sistema.

Lorentz, nos apresentou em 1904 as transformações de Lorentz, dadas por:

$$x' = \gamma(x - vt), \quad y' = y, \quad z' = z, \quad t' = \gamma \left(t - \frac{vx}{c^2} \right), \quad (2.22)$$

onde:

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad (2.23)$$

$$\beta = \frac{v}{c}. \quad (2.24)$$

Os apontamentos de Lorentz serviram de base para a formulação da Teoria Especial da Relatividade, que consiste de dois postulados:

- 1.As leis segundo as quais os estados dos sistemas físicos mudam são independentes de qual de dois sistemas de coordenadas⁸, que se encontram em movimento translacional uniforme um relativo ao outro, se usa para descrever essas mudanças.
- 2.Cada raio de luz movimenta-se num sistema de coordenadas “em repouso” com a velocidade definida V , independentemente se este raio de luz é emitido por um corpo em repouso ou em movimento (PIATTELLA, 2020).

2.5 Convenções da relatividade restrita

Neste tópico, apresentaremos algumas das convenções da relatividade restrita que serão significativas para o entendimento dos objetivos deste trabalho. A primeira delas é a do quadrivetor, definido como um vetor no espaço de Minkowski⁹ (tetradimensional e real) que, ao sofrer uma transformação de Lorentz, comporta-se de modo análogo às coordenadas espaço-temporais t , x , y e z , isso posto, o tempo passa a ser considerado como uma quarta coordenada ordinária.

⁸ Acreditamos que a expressão correta seria “de qualquer sistema de coordenadas”. Todavia, preferimos colocar a expressão *ipsis litteris*.

⁹ Hermann Minkowski (1864-1909) foi um físico e matemático alemão que nasceu em uma parte do Império Russo onde hoje é o atual território da Lituânia. Lecionou na Universidade de Königsberg, no *Eidgenössische Polytechnikum*, atual ETH Zurique, onde foi professor de Einstein.

O conceito de espaço-tempo foi desenvolvido matematicamente por Hermann Minkowski (1864-1909) em um ensaio de 1908 , através da célebre citação:

Cavalheiros! Os conceitos de espaço e tempo que gostaria de desenvolver perante vós erguem-se do solo da Física experimental. Aí reside a sua força. As suas tendências são radicais. Doravante, o espaço só por si e o tempo só por si irão mergulhar totalmente na sombra e somente uma espécie de união entre os dois continuará a ser real (P. MANSION, 1909 *apud* SANTOS, 2009).

Matematicamente o quadrivetor pode ser expresso como:

$$X^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, x, y, z), \quad (2.25)$$

onde c é a velocidade da luz.

É importante notar que a métrica de Minkowski ($g_{\mu\nu}$) é o instrumento matemático que permite medir intervalos no espaço-tempo. Em sua forma mais usual, adota-se a convenção de sinais $(+, -, -, -)^{10}$, de modo que a equação da métrica seja expresso como:

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu, \quad \text{com} \quad g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.26)$$

Aqui, ds^2 é uma grandeza invariante sob transformações de Lorentz.

Desse modo, se X^μ são as componentes contravariantes, as componentes covariantes X_μ são obtidas por:

$$X_\mu = g_{\mu\nu} X^\nu. \quad (2.27)$$

Para simplificar a escrita dessas expressões, frequentemente adota-se a Notação de Einstein, em que qualquer índice repetido em um mesmo termo implica soma sobre todos os valores possíveis desse índice. Por exemplo, a expressão

$$g_{\mu\nu} X^\nu, \quad (2.28)$$

deve ser entendida como

$$\sum_{\nu=0}^3 g_{\mu\nu} X^\nu, \quad (2.29)$$

¹⁰ Ou alternativamente $(-, +, +, +)$, dependendo da referência bibliográfica.

dispensando o uso explícito de $\sum$ e agilizando a manipulação de tensores.

Em problemas de eletromagnetismo relativístico, o potencial eletromagnético costuma ser unificado em um único quadri vetor, que pode ser escrito em versão contravariante (A^μ) e covariante (A_μ), conforme:

$$A^\mu = g^{\mu\nu} A_\nu \quad \text{e} \quad A_\mu = g_{\mu\nu} A^\nu. \quad (2.30)$$

No espaço-tempo de Minkowski com assinatura $(+, -, -, -)$, a matriz métrica $g_{\mu\nu}$ e a sua inversa $g^{\mu\nu}$ são iguais, fazendo com que, numericamente, as componentes contravariantes e covariantes só diferenciam-se pelos sinais das componentes espaciais.

Os produtos internos de quadri vetores só podem ser feitos entre um vetor covariante e contravariante (SAKURAI; NAPOLITANO, 2013), de modo que:

$$A^\mu B_\mu = A^0 B^0 - \vec{A} \cdot \vec{B}. \quad (2.31)$$

Eventualmente se $B = A$ temos

$$A^\mu A_\mu = A^0 A^0 - \vec{A} \cdot \vec{A} = (A^0)^2 - \vec{A}^2. \quad (2.32)$$

Um ponto importante das transformações de Lorentz é que os produtos internos entre quaisquer quadri vetores são invariantes (SAKURAI; NAPOLITANO, 2013). Dito isso, tendo um quadri vetor no espaço-tempo $x^\mu = (ct, \vec{x})$, então seu quadrigradiente será

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{\partial}{c \partial t}, \nabla \right) \equiv \partial_\mu. \quad (2.33)$$

Ao generalizar o operador Laplaciano para a métrica de Minkowski, adiciona-se a coordenada temporal à descrição. Assim, o operador (∇^2) no regime não relativístico dá lugar ao chamado d'Alembertiano, denotado por $(\square)$, que incorpora também a derivada em relação ao tempo:

$$\square = \partial_\mu \partial^\mu = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}. \quad (2.34)$$

Explicitamente, para o quadripotencial eletromagnético, temos:

$$A^\mu = (A^0, A^1, A^2, A^3) = \left(\frac{V}{c}, A_x, A_y, A_z \right), \quad (2.35)$$

$$A_\mu = (A_0, A_1, A_2, A_3) = \left(\frac{V}{c}, -A_x, -A_y, -A_z \right), \quad (2.36)$$

onde V é o potencial elétrico e $\vec{A} = (A_x, A_y, A_z)$ é o potencial vetor magnético. Dessa forma, as equações de Maxwell podem ser escritas em linguagem tensorial covariante, ressaltando o fato de que a descrição dos campos elétricos e magnéticos permanece invariante em diferentes referenciais inerciais na Relatividade Restrita. A partir desse quadrvetor, de acordo com Sakurai e Napolitano (2013), podemos definir a derivada covariante como:

$$D_\mu = \partial_\mu + \frac{ie}{\hbar} A_\mu. \quad (2.37)$$

Já no contexto da dinâmica relativística de partículas, define-se o quadrvetor momento:

$$p^\mu = (p^0, p^1, p^2, p^3) = \left(\frac{E}{c}, p_x, p_y, p_z \right), \quad (2.38)$$

no qual E é a energia total da partícula e $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ seu vetor de momento clássico. Uma das consequências mais conhecidas desse formalismo é a relação de massa-energia:

$$p^\mu p_\mu = m_0^2 c^2, \quad (2.39)$$

que podemos reescrever, usando a Notação de Einstein como:

$$p^\mu p_\mu = p^0 p_0 - p^i p_i = \frac{E^2}{c^2} - |\vec{p}|^2 = m_0^2 c^2, \quad (2.40)$$

onde i varia de 1 a 3. Obtemos assim a relação de energia para a partícula livre

$$E^2 = |\vec{p}|^2 c^2 + m_0^2 c^4, \quad (2.41)$$

que fornece a equivalência entre energia, momento p e massa de repouso m_0 .

3 MECÂNICA QUÂNTICA: MODELOS TEÓRICOS E FERRAMENTAS MATEMÁTICAS

Como questiona Feynman, se por algum motivo todo o conhecimento científico fosse destruído, e tivéssemos como missão sintetizar o máximo de conhecimento em poucas palavras, em uma única frase, esta seria: "A hipótese quântica" ou "Todas as coisas são feitas de átomos" (FEYNMAN *apud* DONANGELO; CAPAZ, 2009). Tal questionamento demonstra que a ciência nunca mais foi a mesma depois do advento da Mecânica Quântica. Essa área da Física tem seu desenvolvimento ligado ao uso do microscópio, que permitiu aos seres humanos uma visão do mundo de forma mais profunda a partir de uma escala menor.

Nesse sentido, a Mecânica Quântica é uma teoria que explica com sucesso o comportamento de partículas em nível atômico e subatômico. Seus princípios têm como pioneiro o trabalho de Max Planck (1858-1947), no início do século XX intitulado "Sobre a Teoria da lei de distribuição de energia do espectro normal". Trabalho em que se dedicou a radiação do corpo negro, detectando que a radiação não era absorvida em um fluxo constante, mas sim em pequenas quantidades de energia denominada quanta, e que a menor quantidade de energia que o corpo poderia perder ou absorver era $\epsilon = h\nu$, onde ν é a frequência da radiação emitida ou recebida, e h uma constante fundamental da natureza posteriormente chamada de constante de Planck.

Apesar das descobertas de Planck terem sido fundamentais para estabelecer os princípios da Mecânica Quântica, nesta seção nos deteremos no estudo das equações que buscaram descrever o comportamento de sistemas quânticos.

3.1 Equação de Schrödinger

Diferente da Mecânica Clássica, que utiliza da segunda lei de Newton (2.1) para determinar a posição de uma partícula em um dado instante, a Mecânica Quântica se

utiliza da função de onda da partícula, que possui uma interpretação probabilística, já que não é possível determinar com precisão a posição e o momento, como descrito no princípio da incerteza de Heisenberg.

Segundo Custodio et al.(2002), dentro da Mecânica Quântica, o primeiro passo para modelar um sistema é a formulação da equação de Schrödinger, descrita da seguinte forma:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{x}, t) + U(x, t) \psi(x, t), \quad (3.1)$$

Onde $\hbar$ é a constante reduzida de Planck:

$$\hbar = \frac{6.62607015 \times 10^{-34}}{2\pi} \text{ JHz}^{-1}, \quad (3.2)$$

Tendo em vista a já mencionada interpretação probabilística, a probabilidade de encontrar uma partícula em uma região do espaço em um determinado tempo t é:

$$P = \int_V \psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) d^3\vec{x} \quad (3.3)$$

Em que ψ^* é o complexo conjugado de ψ . Podemos encontrar as funções de onda estacionária para a Equação de Schrödinger expressando a função de onda como o produto de uma função dependente da posição, com uma função dependente do tempo de tal forma (NUSSENZVEIG, 2014):

$$\psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) e^{-i\omega t}, \quad (3.4)$$

O que leva a:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = E \psi(\vec{x}) e^{-i\omega t}. \quad (3.5)$$

Onde $E = \hbar\omega$, trata-se da energia da partícula. Verifica-se que o operador Hamiltoniano $\hat{H}$ presente na equação (3.1) é identificado, como mostra (NUSSENZVEIG, 2014):

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(x, t), \quad (3.6)$$

e que a Equação de Schrödinger independente do tempo, é:

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (3.7)$$

3.2 Equação de Schrödinger em coordenadas esféricas

O operador Hamiltoniano é essencial na formulação da Mecânica Quântica, sendo obtido da energia clássica ao substituir o momento clássico pelo operador de momento quântico. Essa transformação resulta no operador Hamiltoniano na forma:

$$H = \frac{1}{2\mu} p^2 + U \quad \rightarrow \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + U, \quad (3.8)$$

a partir daqui passaremos a adotar a massa reduzida (μ) para simplificar problemas de dois corpos para um, onde:

$$\mu = \left(\frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_p} \right)^{-1}, \quad (3.9)$$

em que (m_e) é a massa do elétron e (m_p) a massa do próton.

O momento linear $\vec{p}$, na Mecânica Quântica, é representado por um operador diferencial, onde:

$$\vec{p} \rightarrow -i\hbar \nabla. \quad (3.10)$$

Esse operador pode ser expresso em termos de coordenadas cartesianas:

$$\vec{p} = -i\hbar \left(\hat{i} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{j} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{k} \frac{\partial}{\partial z} \right). \quad (3.11)$$

Contudo, para muitos problemas físicos, como sistemas com simetria esférica, é conveniente adotar coordenadas esféricas, nas quais o operador Laplaciano assume uma forma mais adequada para resolver a equação de Schrödinger. Em coordenadas esféricas, o Laplaciano é dado por:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}. \quad (3.12)$$

A equação de Schrödinger independente do tempo (3.7) para potenciais esfericamente simétricos pode ser expressa como:

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right) + U(r)\psi. \quad (3.13)$$

Nessa equação, r , θ e ϕ são coordenadas esféricas que descrevem a posição da partícula, e $U(r)$ é o potencial esfericamente simétrico. Para resolver essa equação, busca-se uma solução separável na forma:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi). \quad (3.14)$$

Aqui, $R(r)$ é a parte radial e $Y(\theta, \phi)$ é a parte angular da função de onda. Ao substituir essa forma na equação de Schrödinger, obtemos duas equações: uma para a parte radial e outra para a parte angular. A equação angular, conhecida como a equação de Legendre ¹¹, é dada por:

$$\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \left(\frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right) = -l(l+1) \sin^2 \theta Y. \quad (3.15)$$

A solução dessa equação, $Y(\theta, \phi)$, depende dos números quânticos l e m , que determinam a quantização dos momentos angulares. Já a equação radial é:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) - \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} (U - E) R(r) = l(l+1) R(r). \quad (3.16)$$

A solução da equação radial (3.16) depende do número quântico principal n e determina os níveis de energia da partícula. O termo $l(l+1)$ aparece devido à separação de variáveis e está relacionado ao momento angular da partícula. O conjunto de números quânticos n , l , e m caracteriza completamente os estados estacionários do sistema, com suas respectivas autofunções e autovalores de energia.

3.2.1 Resolução da parte angular

Podemos separar a função da mesma maneira que foi realizada anteriormente.

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = \Theta(\theta) \Phi(\phi). \quad (3.17)$$

De modo que as equações separadas, são:

$$\frac{1}{\Theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right) - l(l+1) \sin^2 \theta = m^2, \quad (3.18)$$

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = -m^2. \quad (3.19)$$

A equação (3.18) não possui uma solução tão simples, portanto utilizaremos outro método para solucioná-la. No entanto, (3.19) possui uma solução bem simples:

$$\frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = -m^2 \Phi \Rightarrow \Phi_m(\phi) = e^{im\phi}. \quad (3.20)$$

¹¹ A equação de Legendre é uma equação diferencial de segunda ordem que aparece frequentemente em problemas de Física e Engenharia, muitas vezes é usada como modelo para introdução das chamadas funções especiais (GOTO, 1994).

Para garantir solução única para cada ponto do espaço, $|m| = 1, 2, 3, \dots$ Na equação (3.18), utilizaremos os operadores de momento angular:

Na Mecânica Clássica, o momento angular é definido como

$$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}. \quad (3.21)$$

Já na Mecânica Quântica, se converte no operador:

$$\hat{L}_z = -i\hbar\partial_\phi, \quad (3.22)$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right], \quad (3.23)$$

onde a notação ∂_α equivale á $\partial_\alpha = \frac{\partial}{\partial\alpha}$, onde o Laplaciano ∇^2 se torna:

$$\nabla^2 = \left(\partial_r + \frac{1}{r} \right)^2 - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}. \quad (3.24)$$

Aplicando esses operadores na equação angular, obtemos:

$$\hat{L}_z Y_{l,m} = \beta_m Y_{l,m}, \quad (3.25)$$

$$\hat{L}^2 Y_{l,m} = \alpha_l Y_{l,m}. \quad (3.26)$$

Ao compararmos com a Mecânica Clássica percebemos que os autovalores de $\hat{L}_z$ devem estar contidos entre um valor mínimo e um valor máximo. Portanto, definiremos os operadores escada:

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y, \quad (3.27)$$

$$\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y. \quad (3.28)$$

Verificamos os comutadores entre os operadores de momento e momento angular:

$$[x, \hat{p}_x] = [y, \hat{p}_y] = [z, \hat{p}_z] = i\hbar, \quad (3.29)$$

$$[x, \hat{p}_y] = [x, \hat{p}_z] = [y, \hat{p}_x] = [y, \hat{p}_z] = [z, \hat{p}_x] = [z, \hat{p}_y] = 0, \quad (3.30)$$

$$[\hat{L}_x, y] = i\hbar z, [\hat{L}_z, x] = i\hbar y, [\hat{L}_y, z] = i\hbar x, \quad (3.31)$$

$$[\hat{L}_x, \hat{p}_y] = i\hbar \hat{p}_z, [\hat{L}_z, \hat{p}_x] = i\hbar \hat{p}_y, [\hat{L}_y, \hat{p}_z] = i\hbar \hat{p}_x, \quad (3.32)$$

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z, [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y, [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x, \quad (3.33)$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0, \quad (3.34)$$

$$[\hat{L}_{\pm}, \hat{L}^2] = 0, \quad (3.35)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_+] = \hbar \hat{L}_+, \quad (3.36)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_-] = -\hbar \hat{L}_-. \quad (3.37)$$

Aplicando (3.36) na função angular:

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_+]Y_{l,m} = \hbar \hat{L}_+Y_{l,m}, \quad (3.38)$$

$$\hat{L}_z \hat{L}_+Y_{l,m} - \hat{L}_+ \hat{L}_zY_{l,m} = \hbar \hat{L}_+Y_{l,m}, \quad (3.39)$$

substituindo (3.25), obtemos:

$$\hat{L}_z \hat{L}_+Y_{l,m} - \hat{L}_+ \beta_m Y_{l,m} = \hbar \hat{L}_+Y_{l,m}, \quad (3.40)$$

$$\hat{L}_z \hat{L}_+Y_{l,m} = (\hbar + \beta_m) \hat{L}_+Y_{l,m}. \quad (3.41)$$

Percebe-se que o termo $\hat{L}_+Y_{l,m}$ é uma autofunção do momento angular $\hat{L}$ com o autovalor $\beta_{m+1} = \hbar + \beta_m$. Espera-se obter β_m como termo recursivo no formato:

$$\beta_m = m\hbar + cte. \quad (3.42)$$

Considera-se que β_m possa variar entre um valor mínimo e um valor máximo que são iguais em módulo, e varia de acordo com l , portanto:

$$\beta_{min} = m_{min}\hbar + cte, \quad (3.43)$$

$$\beta_{max} = m_{max}\hbar + cte, \quad (3.44)$$

$$-m_{min}\hbar - cte = m_{max}\hbar + cte, \quad (3.45)$$

$$m_{max}\hbar - cte = m_{max}\hbar + cte, \quad (3.46)$$

$$cte = 0, \quad (3.47)$$

Logo:

$$\beta_m = m\hbar. \quad (3.48)$$

Temos então de (3.22),(3.25) e (3.48):

$$-i\hbar\partial_\phi Y_{l,m} = m\hbar Y_{l,m}. \quad (3.49)$$

Podemos explicitar os operadores de escada:

$$\hat{L}_+ = i\hbar e^{i\phi} \left(-i\partial_\theta + \frac{1}{\tan(\theta)} \partial_\phi \right), \quad (3.50)$$

$$\hat{L}_- = i\hbar e^{-i\phi} \left(i\partial_\theta + \frac{1}{\tan(\theta)} \partial_\phi \right). \quad (3.51)$$

Percebe-se que ao utilizar o operador $\hat{L}_-$ em $Y_{l,min}$ obtemos a função nula

$$\hat{L}_- Y_{l,min} = 0. \quad (3.52)$$

Substituindo os valores obtidos até agora, temos :

$$i\hbar e^{-i\phi} \left(i\partial_\theta + \frac{1}{\tan(\theta)} \partial_\phi \right) \Theta(\theta)_{l,min} e^{im\phi} = 0. \quad (3.53)$$

Nos deparamos então com uma equação diferencial cujo resultado é:

$$\Theta(\theta)_{l,min} = cte \cdot \sin(\theta)^{m_{max}}. \quad (3.54)$$

Com isso obtemos então a autofunção:

$$Y_{l,m_{min}}(\theta, \phi) = \Theta(\theta)_{l,min} = C_{l,m_{min}} \sin(\theta)^{m_{max}} e^{-im_{max}\phi}. \quad (3.55)$$

Continuamos com o operador $\hat{L}_+$

$$\hat{L}_+ Y_{l,m_{min}} = c Y_{l,m_{min}+1}. \quad (3.56)$$

Verifica-se ainda que :

$$\hat{L}_+ \hat{L}_- = (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)(\hat{L}_x - i\hat{L}_y), \quad (3.57)$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z. \quad (3.58)$$

Então de (3.55) e (3.26) segue:

$$\hat{L}^2 Y_{l,m_{min}} = \hat{L}_+ \hat{L}_- Y_{l,m_{min}} + \hat{L}_z^2 Y_{l,m_{min}} - \hbar \hat{L}_z Y_{l,m_{min}}, \quad (3.59)$$

$$\alpha_l Y_{l,m_{min}} = m_{min}^2 \hbar^2 Y_{l,m_{min}} - \hbar^2 m_{min} Y_{l,m_{min}} = \hbar^2 (m_{min}^2 - m_{min}) Y_{l,m_{min}}, \quad (3.60)$$

$$\alpha_l = \hbar^2 (m_{min}^2 - m_{min}) = \hbar^2 m_{max} (m_{max} + 1). \quad (3.61)$$

Nota-se que em (3.59), o termo $\hat{L}_+ \hat{L}_- Y_{l,m_{min}} = 0$, como já vimos em (3.52). Percebe-se ainda que o α depende de l , portanto, concluímos que de (3.61) que:

$$l = m_{max}. \quad (3.62)$$

Que é um número maior ou igual a zero. Para obtermos as outras autofunções do momento angular, basta utilizarmos o operador $\hat{L}_+$ na função (3.56), considerando sempre que $m = -l, \dots, l$.

Ainda sendo, temos, para $l = 0$:

$$Y_{0,0} = C_{0,0}. \quad (3.63)$$

Para $l = 1$

$$Y_{1,-1} = C_{1,-1} \sin(\theta) e^{-i\phi}, Y_{1,0} = C_{1,0} \cos(\theta), Y_{1,1} = C_{1,1} \sin(\theta) e^{i\phi}. \quad (3.64)$$

E assim por diante. A normalização é escolhida de modo que :

$$\int Y_{l,m}^* Y_{l,m} d\Omega = 1, \quad (3.65)$$

$$Y_{l,m}^* = Y_{l,-m}. \quad (3.66)$$

3.2.2 Resolução da parte radial

A solução da parte radial segue uma linha diferente. Partindo de (3.8) temos o Hamiltoniano como:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + U. \quad (3.67)$$

Precisamos conhecer a energia potencial. Consideramos para isso um sistema formado por duas partículas interagindo via força elétrica, então a energia potencial é:

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (3.68)$$

Obteremos então:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2\mu} \left(-\hbar^2 \left(\partial_r + \frac{1}{r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \hat{L}^2 \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (3.69)$$

Substituindo (3.69) na Equação de Schrödinger independente do tempo (3.7), temos:

$$ER_{n,l}Y_{l,m} = \left(-\frac{1}{2\mu} \left(-\hbar^2 \left(\partial_r + \frac{1}{r} \right)^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) R_{n,l}Y_{l,m}. \quad (3.70)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\left(\partial_r + \frac{1}{r} \right)^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - E \right) R_{n,l} Y_{l,m} = 0. \quad (3.71)$$

Definimos:

$$r = \Lambda \bar{r}, \quad (3.72)$$

$$R = \Lambda^{-3/2} \bar{R}. \quad (3.73)$$

Onde Λ se trata de uma quantidade com unidade de comprimento, enquanto $\bar{r}$ e $\bar{R}$ quantidades adimensionais. Temos de (3.71)

$$\left(- \left(\left(\partial_{\bar{r}} + \frac{1}{\bar{r}} \right)^2 + \frac{l(l+1)}{\bar{r}^2} \right) - \frac{e^2 2\mu \Lambda}{4\pi\epsilon_0 \bar{r} \hbar^2} - \frac{2\mu \Lambda^2}{\hbar^2} E \right) \bar{R}_{n,l} = 0. \quad (3.74)$$

Vamos escolher a quantidade Λ de forma tal que está relacionada ao raio de Bohr:

$$\Lambda = \frac{1}{2} a_0 = \frac{2\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 \mu}. \quad (3.75)$$

E fazendo

$$\frac{2\mu \Lambda^2}{\hbar^2} E = -k^2. \quad (3.76)$$

Temos uma equação bem mais simples, substituindo esses valores em (3.74)

$$\left(- \left(\left(\partial_{\bar{r}} + \frac{1}{\bar{r}} \right)^2 + \frac{l(l+1)}{\bar{r}^2} \right) - \frac{1}{\bar{r}} + k^2 \right) \bar{R}_{n,l} = 0. \quad (3.77)$$

Essa função deve satisfazer a condição de contorno e a integral por todo o espaço do produto entre ela e seu complexo conjugado deve ser igual a 1.

$$\int \psi^* \psi r^2 dr d\Omega = \int \bar{R}^* Y^* \bar{R} Y \bar{r}^2 d\bar{r} d\Omega = \int \bar{R}^* \bar{R} \bar{r}^2 d\bar{r} = 1. \quad (3.78)$$

Para isso a função precisa ser de quadrado integrável:

$$\lim_{\bar{r} \rightarrow 0} \bar{r} \bar{R} = 0, \quad (3.79)$$

$$\lim_{\bar{r} \rightarrow \infty} \bar{r} \bar{R} = 0. \quad (3.80)$$

Ao fazer $\bar{R} = \frac{1}{\bar{r}} f$, verificamos que f também satisfaz as condições de contorno. Por esse motivo, podemos reescrever a equação (3.77) como:

$$\left(k^2 - \frac{1}{\bar{r}} + \frac{l(l+1)}{\bar{r}^2} \right) f(\bar{r}) - \frac{\partial^2}{\partial \bar{r}^2} f(\bar{r}) = 0. \quad (3.81)$$

Obteve-se a solução em termo das funções de Whittaker do tipo M e W ¹²:

$$f(\bar{r}) = c_1 M_{\frac{1}{2k}, l+\frac{1}{2}}(2k\bar{r}) + c_2 W_{\frac{1}{2k}, l+\frac{1}{2}}(2k\bar{r}). \quad (3.82)$$

Para que a função não possua solução não trivial, ao menos uma das constantes deve ser não nula. Façamos $c_1 = N$. Dadas as condições de contorno,

$$c_2 = -N \lim_{\bar{r} \rightarrow 0} \frac{M_{\frac{1}{2k}, l+\frac{1}{2}}(2k\bar{r})}{W_{\frac{1}{2k}, l+\frac{1}{2}}(2k\bar{r})} = -N \lim_{\bar{r} \rightarrow 0} \frac{(2k\bar{r})^{2l+1} \Gamma(l - \frac{1}{2k} + 1)}{\Gamma(2l + 1)} = 0. \quad (3.83)$$

Portanto $c_2 = 0$. Já do comportamento assintótico próximo do infinito:

$$f(\bar{r}) \approx cte \frac{e^{k\bar{r}} (2k\bar{r})^{-\frac{1}{2k}}}{\Gamma(l - \frac{1}{2k} + 1)}, \quad (3.84)$$

a equação deve satisfazer uma condição obtida da expansão dos termos de (3.84). Como não podemos fazer a constante nula, nos resta:

$$\frac{1}{\Gamma(l - \frac{1}{2k} + 1)} = 0. \quad (3.85)$$

Essa expressão só tem solução possível quando a função Gamma (Γ) tende para o infinito, e isso só ocorre quando seu domínio for os números inteiros negativos, portanto:

$$l - \frac{1}{2k} + 1 = -N \rightarrow N + l + 1 = \frac{1}{2k}, \quad (3.86)$$

$$n = \frac{1}{2k}. \quad (3.87)$$

Percebe-se que $\frac{1}{2k}$ se trata de um número natural maior que 1, então $N + l + 1 = n$ e portanto $l \leq n - 1$. Verificamos então que l é limitado pelo valor de n . Observe também que podemos obter os autovalores de energia utilizando (3.75), (3.76) e (3.87).

$$E_n = -\frac{e^4 \mu}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{1}{2} \mu c^2 \alpha^2 \frac{1}{n^2}. \quad (3.88)$$

onde $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137}$ é a constante de estrutura fina¹³ e c é a velocidade da luz¹⁴.

¹² São soluções da equação de Whittaker, uma equação hipergeométrica confluyente escrita na forma adjunta (OLIVEIRA, 2005).

¹³ De acordo com o NIST esse valor é de $7.297\,352\,5643 \times 10^{-3}$ (STANDARDS; TECHNOLOGY, 2025).

¹⁴ De acordo com o NIST esse valor é de $299\,792\,458\,ms^{-1}$ (STANDARDS; TECHNOLOGY, 2025).

E a solução torna-se:

$$\psi_{n,l,m} = C_{n,l} M_{n,l+\frac{1}{2}} \left(\frac{r}{\Lambda n} \right) Y_{l,m}(\theta, \phi). \quad (3.89)$$

A forma explícita de algumas destas soluções será apresentada na seção "Resultados".

3.3 Equação de Klein-Gordon

Uma das Equações Quânticas relativísticas de maior impacto é a de Klein-Gordon. Vale lembrar que o início do desenvolvimento da Mecânica Quântica foi marcada por um desafio constante de se unir à relatividade especial. Portanto, a Equação de Klein-Gordon configura-se como uma ferramenta fundamental na teoria quântica de campos para descrever partículas sem spin, e uma das primeiras tentativas de conciliação dessas duas teorias (BARROSO; OKADA; SANTOS, 2024).

Para deduzir a equação de Klein-Gordon partiremos da equação (2.41). Substituiremos os observáveis clássicos por operadores conforme fizemos na seção anterior. Assim temos:

$$E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^2. \quad (3.90)$$

Reescrevendo os operadores de energia e momento:

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}; \quad \hat{p} = -i\hbar \nabla. \quad (3.91)$$

E substituindo na equação (3.90), temos que

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\hbar^2 c^2 \nabla^2 \psi + m^2 c^4 \psi. \quad (3.92)$$

Ou ainda,

$$\left[\frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right] \psi = 0, \quad (3.93)$$

ou

$$\left(\square - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi = 0. \quad (3.94)$$

Observe que esta expressão é muito semelhante à equação de onda clássica, com a adição do termo m^2 . Notamos a presença de uma escala de comprimento $\frac{\hbar}{mc}$, conhecida como comprimento de onda de Compton (SAKURAI; NAPOLITANO, 2013).

A Equação de Klein-Gordon reúne quase todas as propriedades esperadas de uma equação de onda relativística para uma partícula de spin zero: ela é invariante sob transformações de Lorentz, isto é, é relativisticamente covariante, e suas soluções incluem, para uma partícula livre de massa m , a típica dependência temporal exponencial e^{-iEt} e, no espaço, uma onda plana $e^{ip \cdot x}$, onde p é o momento da partícula (SAKURAI; NAPOLITANO, 2013).

$$\psi = e^{-\frac{i}{\hbar} p^\mu x_\mu} = \psi = e^{-\frac{i}{\hbar} (Et - \vec{p} \cdot \vec{x})}. \quad (3.95)$$

Esse resultado decorre do fato de o produto interno (2.31) entre o quadrivetor posição e o quadrivetor momento ser:

$$x \cdot p = x^\mu p_\mu = Et - \vec{x} \cdot \vec{p}. \quad (3.96)$$

Para uma partícula livre, a Equação de Klein-Gordon pode ser escrita como:

$$\hat{p}^\mu \hat{p}_\mu \psi = m^2 c^2 \psi. \quad (3.97)$$

Ao aplicar (3.95) na equação anterior, obtemos a mesma relação massa-energia mencionada anteriormente (2.39). Desse modo, chegamos à equação de energia:

$$p^\mu p_\mu = m_0^2 c^2 \quad (3.98a)$$

$$\frac{E^2}{c^2} - \vec{p} \cdot \vec{p} = m_0^2 c^2 \quad (3.98b)$$

$$E = \pm \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2}. \quad (3.98c)$$

identificamos então que existem soluções para energias negativas que estão diretamente relacionadas com a existência de antipartículas (BUENO, 2014).

Para estudar a dinâmica de uma partícula com spin 0 consideraremos a equação de Klein-Gordon acoplada com o campo eletromagnético

$$\left(D_\mu D^\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi = 0, \quad (3.99)$$

onde D_μ é a derivada covariante (2.37). Para o potencial de Coulomb, consideramos o referencial do núcleo $A^0 = V/c$ e $A = 0$, portanto, temos

$$V(r) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (3.100)$$

de modo que

$$A^0 = \frac{V}{c} = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 cr}. \quad (3.101)$$

Então,

$$D_0 = \partial_0 - i\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 c\hbar r}\right); \quad D_i = \partial_i. \quad (3.102)$$

Substituindo em (3.99), obtemos

$$\left(\partial_0 - i\frac{\alpha}{r}\right)^2 \psi - \partial_i \partial_i \psi + \frac{1}{\lambda^2} \psi = 0, \quad (3.103)$$

com

$$\lambda = \frac{\hbar}{mc} \quad (3.104)$$

e α a constante de estrutura fina. Para encontrar os autoestados de energia definimos,

$$\psi = e^{-i\frac{E}{\hbar c}x_0} \psi_{E,l,m}(r, \Omega). \quad (3.105)$$

Das relações descritas em sessões anteriores sabemos que,

$$\partial_i \partial_i = \nabla^2 = \left(\partial_r + \frac{1}{r}\right)^2 - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}, \quad (3.106)$$

então de (3.103), obtemos

$$-\left(\frac{E}{\hbar c} + i\frac{\alpha}{r}\right)^2 \psi_{E,l,m} - \left(\left(\partial_r + \frac{1}{r}\right)^2 - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}\right) \psi_{E,l,m} + \frac{1}{\lambda^2} \psi_{E,l,m} = 0. \quad (3.107)$$

Definimos também

$$\psi_{E,l,m}(r, \Omega) = R(r)Y_{l,m}(\Omega), \quad (3.108)$$

como $Y_{l,m}$ são autovetores de $-\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2}$ com autovalores $-l(l+1)$ (NETO, 2016), reescrevemos na forma

$$-\left(\frac{E}{\hbar c} + i\frac{\alpha}{r}\right)^2 R(r) - \left(\left(\partial_r + \frac{1}{r}\right)^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) R(r) + \frac{1}{\lambda^2} R(r) = 0, \quad (3.109)$$

fazemos $R(r) = \frac{1}{r}f(r)$, então após algumas simplificações obtemos:

$$-\left(\frac{E^2}{\hbar^2 c^2} + 2\frac{E}{\hbar c} \frac{\alpha}{r} + \frac{\alpha^2}{r^2}\right) f(r) - \left(\partial_r^2 - \frac{1}{r^2}l(l+1)\right) f(r) + \frac{1}{\lambda^2} f(r) = 0, \quad (3.110)$$

Podemos construir a corrente de probabilidade aplicando (3.97) tanto para ψ quanto para ψ^* , obtendo

$$j_\mu = c \left(ie\psi^* D_\mu \psi - ie(D_\mu \psi)^* \psi \right). \quad (3.111)$$

Esse vetor encapsula tanto a densidade de carga através da componente temporal (j_0) quanto a corrente $\vec{j}$ associados ao campo ψ

$$j_0 = c \left(ie\psi^* D_0\psi - ie(D_0\psi)^*\psi \right), \quad (3.112)$$

ou seja,

$$j_0 = c\rho \Rightarrow \rho = ie\psi^* D_0\psi - ie(D_0\psi)^*\psi, \quad (3.113)$$

simplificando ainda mais temos

$$\rho = ie\psi^* \partial_0\psi - ie\partial_0\psi^*\psi + \frac{2e^2 A_0}{\hbar} \psi^*\psi \quad (3.114a)$$

$$\rho = 2 \frac{E}{\hbar c} \left(\psi^*\psi + \frac{\alpha \hbar c}{Er} \psi^*\psi \right). \quad (3.114b)$$

Não podemos garantir que ρ seja necessariamente positiva em todos os pontos do espaço, por conta das soluções de energia negativa. Entretanto para interpretar ρ como uma densidade de carga precisamos que satisfaça a seguinte condição:

$$\int |\rho| dr < \infty, \quad (3.115)$$

portanto

$$\int \psi^* \left(1 + \frac{\alpha \hbar c}{Er} \right) \psi r^2 dr < \infty, \quad (3.116)$$

como só possui a dependência radial, temos da relação anterior $\psi = R(r) = \frac{1}{r} f(r)$, então

$$\int \left(1 + \frac{\alpha \hbar c}{Er} \right) f f^* dr < \infty. \quad (3.117)$$

Para evitar divergência, quando $r \rightarrow 0$, precisamos que

$$\lim_{r \rightarrow 0} \sqrt{1 + \frac{\alpha \hbar c}{Er}} f(r) = 0, \quad (3.118)$$

isso nos leva a $f(0) = 0$.

De (3.110), podemos por $f(r)$ em evidência ficando com

$$-\left(\frac{E^2}{\hbar^2 c^2} - \frac{1}{\lambda^2} + 2 \frac{E \alpha}{\hbar c r} + \frac{\alpha^2}{r^2} - \frac{1}{r^2} l(l+1) \right) f(r) - \partial_r^2 f(r) = 0, \quad (3.119)$$

do mesmo modo que fizemos com a equação de Schrödinger definiremos a variável adimensional

$$r = \Lambda \bar{r} \quad (3.120a)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} = \frac{\partial^2}{\Lambda^2 \partial \bar{r}^2}, \quad (3.120b)$$

substituindo, temos

$$-\left(\frac{E^2}{\hbar^2 c^2} - \frac{1}{\lambda^2} + 2\frac{E}{\hbar c} \frac{\alpha}{\Lambda \bar{r}} + \frac{\alpha^2}{\Lambda^2 \bar{r}^2} - \frac{1}{\Lambda^2 \bar{r}^2} l(l+1)\right) f(\bar{r}) - \frac{1}{\Lambda^2} \partial_{\bar{r}}^2 f(\bar{r}) = 0, \quad (3.121)$$

multiplicando a equação anterior por Λ^2

$$\left(\left(-\frac{E^2}{\hbar^2 c^2} + \frac{1}{\lambda^2}\right) \Lambda^2 - 2\Lambda \frac{E}{\hbar c} \frac{\alpha}{\bar{r}} - \frac{\alpha^2}{\bar{r}^2} + \frac{1}{\bar{r}^2} l(l+1)\right) f(\bar{r}) - \partial_{\bar{r}}^2 f(\bar{r}) = 0. \quad (3.122)$$

Escolhemos Λ de modo que $2\Lambda \frac{E}{\hbar c} \alpha = 1$, portanto

$$\Lambda = \frac{\hbar c}{2E\alpha}, \quad (3.123)$$

substituindo, temos

$$\left(\left(-\frac{E^2}{\hbar^2 c^2} + \frac{1}{\lambda^2}\right) \left(\frac{\hbar c}{2E\alpha}\right)^2 - \frac{1}{\bar{r}} - \frac{\alpha^2}{\bar{r}^2} + \frac{1}{\bar{r}^2} l(l+1)\right) f(\bar{r}) - \partial_{\bar{r}}^2 f(\bar{r}) = 0, \quad (3.124)$$

definimos também

$$\left(-\frac{E^2}{\hbar^2 c^2} + \frac{1}{\lambda^2}\right) \left(\frac{\hbar c}{2E\alpha}\right)^2 = \kappa^2, \quad (3.125)$$

e

$$-\alpha^2 + l(l+1) = l_{\alpha}(l_{\alpha}+1), \quad (3.126)$$

com

$$l_{\alpha} = \sqrt{1 - \frac{\alpha^2}{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}} \left(l + \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2}. \quad (3.127)$$

Obtemos então a seguinte equação a partir de (3.124)

$$\left(\kappa^2 - \frac{1}{\bar{r}} + \frac{1}{\bar{r}^2} l_{\alpha}(l_{\alpha}+1)\right) f(\bar{r}) - \partial_{\bar{r}}^2 f(\bar{r}) = 0. \quad (3.128)$$

Analogamente como fizemos com a equação de Schrödinger a solução para essa equação se encontra na forma das funções de Whittaker do tipo M e W

$$f(\bar{r}) = c_1 M_{\frac{1}{2\kappa}, l_{\alpha} + \frac{1}{2}}(2\kappa\bar{r}) + c_2 W_{\frac{1}{2\kappa}, l_{\alpha} + \frac{1}{2}}(2\kappa\bar{r}), \quad (3.129)$$

precisamos que

$$\frac{1}{\Gamma(l_{\alpha} - \frac{1}{2\kappa} + 1)} = 0, \quad (3.130)$$

para isso

$$l_{\alpha} - \frac{1}{2\kappa} + 1 = -N \rightarrow N + l_{\alpha} + 1 = \frac{1}{2\kappa}, \quad (3.131)$$

$$N + l + 1 = \frac{1}{2\kappa} - l_\alpha + l, \quad (3.132)$$

observe que

$$\frac{1}{2\kappa} - l_\alpha + l = n, \quad (3.133)$$

é um número natural maior que 1, portanto, isolando κ

$$\kappa = \frac{1}{2(n + l_\alpha - l)}. \quad (3.134)$$

Da relação (3.125), temos

$$\left(-\frac{E^2}{\hbar^2 c^2} + \frac{1}{\lambda^2}\right) \left(\frac{\hbar c}{2E\alpha}\right)^2 = \left(\frac{1}{2(n + l_\alpha - l)}\right)^2, \quad (3.135)$$

manipulando e substituindo (3.104) encontramos a seguinte energia

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \alpha^2 \left(\frac{1}{(n+l_\alpha-l)}\right)^2}}, \quad (3.136)$$

expandindo em série de potências, temos

$$E = mc^2 \left(1 - \frac{\alpha^2}{2n^2} - \alpha^4 \left(\frac{1}{2n^3(l + \frac{1}{2})} - \frac{3}{8n^4}\right) + \dots\right), \quad (3.137)$$

com $(n = 1, 2, \dots)$. O primeiro termo é a energia de repouso da partícula, que ocorre na dinâmica clássica relativística. O segundo termo corresponde aos níveis de energia não relativística. E o terceiro termo se trata da correção da estrutura fina, que rompe a degenerescência dos estados de mesmo valor de n e diferente valor de l (DOMÍNGUEZ-ADAME; MÉNDEZ, 1994).

Historicamente, Schrödinger chegou a propor uma equação relativística análoga a esta antes de desenvolver sua equação não relativística. Entretanto, ela foi inicialmente rejeitada, pois apesar de sua densidade de probabilidade ser conservada, ela não era positiva definida, ou seja tornava impossível a interpretação probabilística padrão da função de onda. Em essência, a dificuldade surge porque a Equação de Klein-Gordon é de segunda ordem na derivada temporal, ao contrário da equação de Schrödinger (não relativística) ou da posterior equação de Dirac (relativística para spin $1/2$), que são de primeira ordem no tempo.

Esse grau de liberdade extra (trazido pela derivada de segunda ordem no tempo) aparece na forma de “soluções duplicadas” e, em nível conceitual, pode ser interpretado

como um sinal de carga, mostrando que a teoria naturalmente contém estados que poderiam estar associados a partículas e antipartículas (SAKURAI; NAPOLITANO, 2013).

3.4 Equação de Dirac

Para superar as limitações da Equação de Klein-Gordon o físico Paul Adrien Maurice Dirac (1902–1984) propôs uma nova abordagem para partículas de spin $1/2$, trata-se de uma equação de primeira ordem no tempo (GRIFFITHS, 2020), permitindo assim uma interpretação útil dos estados de energia negativa.

A equação de Dirac pode ser escrita como:

$$(i\hbar c \gamma^\mu D_\mu - mc^2)\psi = 0, \quad (3.138)$$

onde γ^μ são as matrizes gama 4×4 que satisfazem a álgebra de Clifford, e $\mathbf{I}$ representa a matriz identidade 4×4 :

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} \mathbf{I}. \quad (3.139)$$

As matrizes de gamma possuem várias formas de representações, cada uma sendo útil para algo. As representações mais utilizadas são: A representação de Dirac, a de Weyl e a de Majorana.

A representação de Dirac é mais conveniente para a discussão do limite não relativístico da equação de Dirac apresentando-se na forma:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} I_2 & 0_2 \\ 0_2 & -I_2 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0_2 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0_2 \end{pmatrix}. \quad (3.140)$$

A representação de Weyl que facilita os estudos da qualidade de férmions:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0_2 & I_2 \\ -I_2 & 0_2 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0_2 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0_2 \end{pmatrix}. \quad (3.141)$$

E a representação de Majorana, onde todas as componentes da matriz de Dirac são imaginárias, e todos os espinores e equação de Dirac reais:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0_2 & \sigma^2 \\ -\sigma^2 & 0_2 \end{pmatrix}, \gamma^1 = \begin{pmatrix} i\sigma^3 & 0_2 \\ 0_2 & i\sigma^3 \end{pmatrix}, \gamma^2 = \begin{pmatrix} 0_2 & -\sigma^2 \\ \sigma^2 & 0_2 \end{pmatrix}, \gamma^3 = \begin{pmatrix} -i\sigma^1 & 0_2 \\ 0_2 & -i\sigma^1 \end{pmatrix} \quad (3.142)$$

Nas equações (3.140), (3.141) e (3.142) são usadas as notações: I_2 é a matriz unidade 2×2 , 0_2 é uma matriz 2×2 com todas as componentes nulas e σ^i são as matrizes de Pauli (SMIRNOV; JR, 2016):

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.143)$$

Note que a álgebra de Clifford (3.139), implica em

$$(\gamma^0)^2 = 1, \quad (3.144)$$

$$(\gamma^i)^2 = -1 \quad i = 1, 2, 3, \quad (3.145)$$

e

$$\gamma^\mu \gamma^\nu \equiv \gamma^\nu \gamma^\mu \quad \text{se} \quad \mu \neq \nu. \quad (3.146)$$

Diferente da equação de Klein-Gordon, a equação de Dirac é linear em relação às derivadas de primeira ordem no tempo e também na posição, o que possibilita uma definição consistente de densidade de probabilidade (ρ) e corrente de probabilidade ($\vec{j}$).

$$c\rho = \psi^\dagger \psi, \quad (3.147)$$

$$\vec{j} = \psi^\dagger \alpha \psi, \quad (3.148)$$

sendo $\alpha = \gamma^0 \gamma$. Esta construção faz com que ρ seja positiva definida (desde que ψ seja normalizada adequadamente) e obedeça a equação de continuidade (3.149) que garante a conservação da probabilidade (SAKURAI; NAPOLITANO, 2013):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0. \quad (3.149)$$

Em ausência de campo eletromagnético, e dada a anticomutação das matrizes gama, uma solução da Equação de Dirac também satisfaz a Equação de Klein-Gordon. De fato:

$$(i\hbar c \gamma^\mu \partial_\mu + mc^2)(i\hbar c \gamma^\nu \partial_\nu - mc^2)\psi = 0 \implies (-\hbar^2 c^2 \square - m^2 c^4)\psi = 0. \quad (3.150)$$

Isso demonstra a consistência entre ambas as equações, embora a de Klein-Gordon não trate adequadamente do spin e apresente problemas de interpretação probabilística.

A solução para a equação ψ é uma matriz de quatro componentes chamado de *bi-spinor* ou Spinor de Dirac:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \quad (3.151)$$

Onde as duas primeiras componentes representam a solução para uma partícula (energia positiva), e as outras duas representam a solução para antipartículas (energia negativa) (JEAKELE; VERNECK; TRISTÃO, 2024):

$$\psi_A = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad \psi_B = \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \quad (3.152)$$

Ao considerarmos as partículas em repouso, ou seja $p = 0$, a solução admite quatro soluções independentes

$$\begin{aligned} \psi_1 &= e^{-i(mc^2/\hbar)t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_2 = e^{-i(mc^2/\hbar)t} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \psi_3 &= e^{+i(mc^2/\hbar)t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_4 = e^{+i(mc^2/\hbar)t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.153)$$

que descreve respectivamente, "um elétron com spin para cima, um elétron com spin para baixo, um pósitron com spin para cima, e um pósitron com spin para baixo" (GRIFFITHS, 2020).

Se considerarmos uma onda plana do tipo:

$$\psi(\vec{x}, t) = e^{-i(Et - \vec{p} \cdot \vec{x})/\hbar} \psi_p, \quad (3.154)$$

a Equação de Dirac impõe a relação de dispersão:

$$E^2 = |\vec{p}|^2 c^2 + m^2 c^4, \quad (3.155)$$

o que fornece as soluções de energia

$$E = \pm \sqrt{|\vec{p}|^2 c^2 + m^2 c^4}. \quad (3.156)$$

As energias positivas estão associadas como estados de partículas, portanto, compatíveis com as relações de energia de Einstein na relatividade Restrita. Para lidar com as energias negativas, Dirac propôs que todos esses estados já estariam ocupados e por isso, não seria possível para um elétron passar do estado de energia positiva para o estado de energia negativa devido ao princípio da exclusão de Pauli. Já quando uma partícula sai de um estado de energia negativa para um estado de energia positiva, a lacuna deixada se comporta como uma partícula com a mesma massa que o elétron, mas com carga contrária, portanto, um pósitron, uma antipartícula (SAKURAI; NAPOLITANO, 2013).

A seguir, desenvolvemos a solução, passo a passo, para o potencial coulombiano que liga o elétron (partícula de spin 1/2) ao núcleo (próton), adotando como principal referência os trabalhos clássicos em Mecânica Quântica Relativística.

Partindo de (3.138), em que

$$(i\hbar c\gamma^\mu D_\mu - mc^2)\psi = 0, \quad (3.157)$$

adotaremos o referencial do núcleo atômico. Por conta disso o núcleo não se movimenta e não gera campo magnético, portanto,

$$\vec{A} = 0, \quad (3.158)$$

e

$$A^0 = V/c \quad \text{com} \quad V(r) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (3.159)$$

Dessa forma a derivada covariante (2.37) se torna

$$D_\mu = \partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} (A^0/c, 0), \quad (3.160)$$

e a equação de Dirac se converte na seguinte notação compacta

$$\left(ic\gamma^0 \left(\partial_0 - i\alpha \frac{1}{r} \right) + ic\gamma^i \partial_i - mc^2 \right) \psi = 0, \quad (3.161)$$

onde identificamos a constante de estrutura fina (α).

Para buscar autoestados de energia, assume-se

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar c} Et} \psi_E(\vec{r}). \quad (3.162)$$

Ao inserir essa forma em (3.161) e multiplicar por γ^0 pela esquerda, como ψ_E é um espinor conseguimos encontrar através da multiplicação de matrizes as seguintes equações:

$$\left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r} - i\sigma^i \partial_i\right)\psi_a - \frac{mc}{\hbar}\psi_b = 0, \quad (3.163)$$

$$\left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r} + i\sigma^i \partial_i\right)\psi_b - \frac{mc}{\hbar}\psi_a = 0. \quad (3.164)$$

Isolando ψ_b e substituindo na equação (3.164) encontramos

$$\left[\left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r} + i\sigma^i \partial_i\right)\left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r} - i\sigma^i \partial_i\right) - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right]\psi_a = 0, \quad (3.165)$$

e após desenvolver essa equação, obtemos

$$\left[\left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r}\right)^2 + \alpha i \sigma_r \frac{1}{r^2} + \nabla^2 - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right]\psi_a = 0. \quad (3.166)$$

Esse procedimento mostra explicitamente como termos do tipo $\sigma_r = \sigma^i r^i / r$ e derivadas radiais aparecem e levam, após separação das variáveis angulares, a uma equação radial. Substituímos (3.24) na equação anterior

$$\left[\left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r}\right)^2 + \alpha i \sigma_r \frac{1}{r^2} + \left(\partial_r + \frac{1}{r}\right)^2 - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right]\psi_a = 0, \quad (3.167)$$

reescrevemos o operador $\hat{L}^2$

$$\hat{L}^2 = \hbar^2 \hat{K}^2 - \hbar^2 \hat{K}, \quad (3.168)$$

onde:

$$\hat{K} = 1 + \frac{\sigma^k L^k}{\hbar}, \quad (3.169)$$

verifica-se que

$$\hat{K}^2 = \frac{1}{4} + \frac{\hat{J}^2}{\hbar^2}. \quad (3.170)$$

Naturalmente surge o momento angular total

$$\hat{J} = \hat{L} + \frac{\hbar}{2}\sigma = \hat{L} + \hat{S}, \quad (3.171)$$

que comuta com o Hamiltoniano de Dirac para potenciais centrais (BJORKEN; DRELL, 1965). O termo $\frac{1}{2}\sigma$ corresponde ao operador de spin no formalismo de Dirac, e σ as matrizes de spin de Pauli (3.143) (GRIFFITHS, 2020). Os autovalores de K são:

$$K\psi_k = k\psi_k, \quad (3.172)$$

$$k = \pm \left(j + \frac{1}{2} \right), \quad (3.173)$$

com $k = \dots, -2, -1, 1, 2, \dots$, Aqui j representa o número quântico do momento angular total.

Reescrevemos (3.167), então temos:

$$\left[\left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r} \right)^2 + \left(\partial_r + \frac{1}{r} \right)^2 - \frac{\hat{K}^2}{r^2} + \frac{1}{r^2} (\hat{K} - \alpha \sigma_r i) - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right] \psi_a = 0, \quad (3.174)$$

buscamos uma equação semelhante à equação de Schrödinger, introduzimos o operador:

$$\hat{O} = \hat{K} - \alpha \sigma_r i, \quad (3.175)$$

$$\hat{O}^2 = \hat{K}^2 - \alpha^2, \quad (3.176)$$

portanto, os autovalores desse operador são:

$$o = \pm \sqrt{k^2 - \alpha^2}. \quad (3.177)$$

Observa-se que apenas o sinal positivo é compatível com as condições de contorno, onde $r = 0$ e $r \rightarrow \infty$. Reescrevemos então com base nas autofunções do operador O

$$\left[\left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r} \right)^2 + \left(\partial_r + \frac{1}{r} \right)^2 - \frac{\alpha^2}{r^2} - \frac{o^2}{r^2} + \frac{1}{r^2} o - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right] \psi_O = 0. \quad (3.178)$$

Assim como na equação de Klein-Gordon, adicionaremos a variável adimensional

$$r = \Lambda \bar{r}, \quad (3.179)$$

com

$$\Lambda = \frac{\hbar c}{2E\alpha}, \quad (3.180)$$

também definiremos

$$\kappa^2 = \left(\frac{m^2 c^2}{\hbar^2} - \frac{E^2}{\hbar^2 c^2} \right) \left(\frac{\hbar c}{2E\alpha} \right)^2, \quad (3.181)$$

e

$$o = o' + 1. \quad (3.182)$$

Substituindo esses valores em (3.178), obtemos

$$\left(\kappa^2 - \frac{1}{\bar{r}} + \frac{1}{\bar{r}^2} o'(o' + 1) \right) \psi_O - \partial_{\bar{r}}^2 \psi_O = 0. \quad (3.183)$$

A equação (3.183) é idêntica a (3.128), admitindo o mesmo conjunto de soluções além de satisfazer as mesmas condições de contorno.

Nesse sentido, de forma análoga, encontramos:

$$\kappa = \frac{1}{2(n - |k| + \sqrt{k^2 + \alpha^2})}, \quad (3.184)$$

e, portanto, a energia

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \alpha^2 \left(\frac{1}{(n - |k| + \sqrt{k^2 + \alpha^2})} \right)^2}}, \quad (3.185)$$

alternativamente em forma de série

$$E = mc^2 \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{n^2} - \frac{1}{2} \frac{\alpha^4}{n^4} \left(\frac{n}{|k|} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right), \quad (3.186)$$

ou

$$E = mc^2 \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{n^2} - \frac{1}{2} \frac{\alpha^4}{n^4} \left(\frac{n}{j + 1/2} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right). \quad (3.187)$$

Assim como em Klein-Gordon, o primeiro termo aqui também corresponde à energia de repouso da partícula, o segundo corresponde aos níveis de energia não relativística, e o terceiro termo está associado à estrutura fina que também rompe a degenerescência. Diferente de Klein-Gordon aqui a energia incrementa o número quântico j associado ao momento angular total, que inclui tanto o momento angular orbital l quanto o spin, conforme indicado em (3.171).

4 RESULTADOS

Nesta seção, apresentamos as funções de onda obtidas a partir da Equação de Schrödinger para um átomo hidrogenóide no regime não relativístico, bem como as energias. também faremos uma comparação entre os resultados obtidos para a energia em cada equação.

4.1 Funções de onda para estados $\psi_{n,l,m}$ e energias

No átomo hidrogenóide, as soluções não relativísticas de Schrödinger no potencial coulombiano fornecem funções de onda $\psi_{n,l,m}(\vec{r})$. Nas Tabelas 3 e 4, listam-se explicitamente as soluções para $n = 1, 2, 3, 4$ e $l = 0, 1$, usando a notação espectral habitual ($l = 0 \rightarrow S$ e $l = 1 \rightarrow P$), em coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) .

Tabela 3 – Funções de onda para $n = 1, 2$

n	l	m	Função de Onda
1	0	0	$e^{-\frac{r}{2\Lambda}}$
2	0	0	$e^{-\frac{r}{4\Lambda}} \left(2 - \frac{r}{2\Lambda}\right)$
	1	-1	$re^{-\frac{r}{4\Lambda}} e^{-i\phi} \sin \theta$
		0	$re^{-\frac{r}{4\Lambda}} \cos \theta$
		1	$re^{-\frac{r}{4\Lambda}} e^{i\phi} \sin \theta$

Fonte: Autoria própria.

Tabela 4 – Funções de onda para $n = 3, 4$.

n	l	m	Função de Onda
3	0	0	$e^{-\frac{r}{6\Lambda}} \left(\frac{r^2}{18\Lambda^2} - \frac{r}{\Lambda} + 3 \right)$
	1	-1	$re^{-\frac{r}{6\Lambda}} e^{-i\phi} \sin \theta \left(4 - \frac{r}{3\Lambda} \right)$
		0	$re^{-\frac{r}{6\Lambda}} \cos \theta \left(4 - \frac{r}{3\Lambda} \right)$
		1	$re^{-\frac{r}{6\Lambda}} e^{i\phi} \sin \theta \left(4 - \frac{r}{3\Lambda} \right)$
4	0	0	$e^{-\frac{r}{8\Lambda}} \left(4 - \frac{3r}{2\Lambda} + \frac{r^2}{8\Lambda^2} - \frac{r^3}{384\Lambda^3} \right)$
	1	-1	$re^{-\frac{r}{8\Lambda}} e^{-i\phi} \sin \theta \left(\frac{r^2}{32\Lambda^2} - \frac{5r}{4\Lambda} + 10 \right)$
		0	$re^{-\frac{r}{8\Lambda}} \cos \theta \left(\frac{r^2}{32\Lambda^2} - \frac{5r}{4\Lambda} + 10 \right)$
		1	$re^{-\frac{r}{8\Lambda}} e^{i\phi} \sin \theta \left(\frac{r^2}{32\Lambda^2} - \frac{5r}{4\Lambda} + 10 \right)$

Fonte: Autoria própria.

Assim como esperado, na parte radial aparecem os conhecidos polinômios de Laguerre, como casos particulares das funções de Whittaker. Já a energia obtida foi

$$E_n = -\frac{1}{2}\mu c^2 \alpha^2 \frac{1}{n^2}. \quad (4.1)$$

Para o caso do hidrogênio convencional, usamos os valores da massa do elétron e do próton de acordo com (GROUP et al., 2024)

$$m_e = (0.51099895069 \pm 0.00000000016) \text{ MeV}/c^2, \quad (4.2)$$

$$m_p = (938.27208943 \pm 0.000000029) \text{ MeV}/c^2. \quad (4.3)$$

Desconsiderando a incerteza, a massa reduzida μ do sistema elétron–próton é dada por

$$\mu = \left(\frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_p} \right)^{-1} \approx 0.51072080345 \text{ MeV}/c^2, \quad (4.4)$$

fornecendo o valor para a energia do estado fundamental de

$$E_0 \approx -13.5983 \text{ eV}. \quad (4.5)$$

O mesmo pode ser feito para outros átomos, incluindo os exóticos como o Hidrogênio muônico. Neste sistema, o elétron é substituído por um múon que possui massa

$$m_\mu = (105.6583755 \pm 0.00000023) \text{ MeV}/c^2. \quad (4.6)$$

neste caso a energia do estado fundamental é

$$E_0 \approx -2528.4934eV, \quad (4.7)$$

correspondendo a um valor muito maior devido a sua massa ser bem maior. Já no caso do hidrogênio piônico:

$$m_\pi = (139.57039 \pm 0.00018) \text{ MeV}/c^2. \quad (4.8)$$

E sua energia:

$$E_0 \approx -3234.9491eV, \quad (4.9)$$

mais uma vez enfatizando a relação com a massa.

4.2 Energias relativísticas

Nas seções anteriores, também calculamos as energias a partir das equações relativísticas de Klein-Gordon e Dirac. Os resultados encontrados foram:

$$E_{KG} = -\frac{1}{2}mc^2 \left(\frac{\alpha^2}{n^2} + \alpha^4 \left(\frac{1}{n^3(l + \frac{1}{2})} - \frac{3}{4n^4} \right) + \dots \right), \quad (4.10)$$

$$E_D = -\frac{1}{2}mc^2 \left(\frac{\alpha^2}{n^2} + \frac{\alpha^4}{n^4} \left(\frac{n}{j + 1/2} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right), \quad (4.11)$$

onde subtraímos a energia de repouso da partícula. No caso do hidrogênio, devemos utilizar a Energia de Dirac. A correção da energia do nível fundamental é:

$$\Delta E_{1S_{1/2}} = -0.1811meV, \quad (4.12)$$

assim como no hidrogênio muônico:

$$\Delta E_{1S_{1/2}} = -37.452meV. \quad (4.13)$$

No caso do hidrogênio piônico, devemos utilizar a Energia de Klein-Gordon. A correção da energia do nível fundamental é:

$$\Delta E_{1S} = -0.24742meV. \quad (4.14)$$

No caso dos níveis de energia de Klein-Gordon, os estados 2S e 2P deixam de ser degenerados:

$$\Delta E_{2P} - \Delta E_{2S} = 0.1208 \text{meV}. \quad (4.15)$$

No caso dos níveis de energia de Dirac, os estados 2S e 2P se mantêm parcialmente degenerados:

$$\Delta E_{2P_{1/2}} - \Delta E_{2S_{1/2}} = 0. \quad (4.16)$$

Ao fazermos uma comparação desses resultados com os dados experimentais, vemos que o resultado (4.14) não é suficiente para explicar o nível fundamental de energia. Isso se deve ao fato de que o pión não é uma partícula fundamental e não podemos negligenciar sua forma e os efeitos da interação forte. Este último efeito pode ser incluído considerando o hamiltoniano

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \Delta \hat{H}. \quad (4.17)$$

Onde $\hat{H}_0$ é o Hamiltoniano não perturbado

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (4.18)$$

em que $\Delta \hat{H}$ se trata dos termos perturbativos

$$\Delta \hat{H} = \begin{cases} \frac{3\hbar^2 a_{\pi p}}{2r_p^3 \mu} r, & r < r_p \\ 0, & r > r_p \end{cases}, \quad (4.19)$$

$\Delta \hat{H}_{str}$ é responsável pelas correções de interação forte que surgem da física hadrônica em distâncias $\lesssim r_p$. Nesse contexto, introduz-se o parâmetro $a_{\pi p} \approx 0,084 \frac{\hbar}{m_{\pi} c}$, associado ao espalhamento pión-próton na escala de energia nuclear. Dessa maneira, o termo perturbativo contribui de forma distinta para o ajuste dos níveis de energia do sistema. As correções do nível podem ser calculadas, aproximadamente, tomando o valor esperado da perturbação:

$$\Delta E = \langle \Delta H \rangle_0 = 7,03 \text{meV}. \quad (4.20)$$

Hennebach et al. (2014) fornece um valor de $7,09 \text{meV}$, mostrando que nosso último resultado é coerente. Para tornar o resultado ainda mais próximo, é necessário

considerar outros efeitos que foram negligenciados, como os relacionados à forma do núcleo e à quantização do campo eletromagnético. Ao incluirmos os efeitos do campo eletromagnético quantizado, também vamos poder verificar que os níveis de energia $\Delta E_{2S_{1/2}}$ e $\Delta E_{PS_{1/2}}$ deixam de ser degenerados, sendo este efeito mais notável no caso do hidrogênio muônico.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

O presente Trabalho de Conclusão de Curso teve como objetivo a análise dos níveis de energia e das correções associadas a átomos hidrogenóides, aplicando métodos da Mecânica Quântica e da Relatividade Restrita. Inicialmente, formulou-se o Hamiltoniano não relativístico do sistema de dois corpos, considerando a massa reduzida apropriada ao átomo hidrogenóide exótico. Em seguida, foram incluídos os efeitos relativísticos.

A partir desses modelos, calculou-se as funções de onda e as energias de ligação no caso não-relativístico para em seguida obtermos essas mesmas energias no contexto relativístico com a equação de Klein-Gordon e equação de Dirac.

Essas expressões para energia foram utilizadas para calcular a estrutura aproximada dos níveis de energia e incluir alguns efeitos relativísticos, mostrando o que muda quando consideramos os efeitos relativísticos e quando não são considerados. O resultado mostrou que alguns níveis de energia, antes degenerados, agora possuem energias diferentes, embora alguma degenerescência permaneça.

Ao final, discutimos as mudanças necessárias ao modelo para tocar o resultado mais compatível com os dados experimentais, sendo um deles os efeitos da interação forte. Destaca-se também que é possível usar estes mesmos resultados em outros átomos exóticos.

Para trabalhos futuros, destaca-se a possibilidade de incorporar termos de polarização de vácuo, utilizando elementos de Teoria Quântica de Campos para refinar as previsões em comparação com dados experimentais de alta precisão. Outra perspectiva é analisar ordens superiores em teoria de perturbação, investigando correções de segunda ordem e efeitos radiativos adicionais em estados de maior número quântico. Também se mostra relevante um estudo mais aprofundado da estrutura interna tanto do próton quanto do pión, permitindo obter parâmetros nucleares mais precisos e aprimorar a concordância entre teoria e experiência.

Logo, esta monografia consolida a importância do formalismo quântico-relativístico no estudo de átomos exóticos, evidenciando como correções além do

potencial coulombiano são decisivas para uma descrição confiável dos níveis de energia. Espera-se que estas reflexões sirvam como base para pesquisas futuras, aprofundando a compreensão da interação forte em escalas hadrônicas e contribuindo para o avanço da Física de Partículas e Nuclear.

REFERÊNCIAS

- BARROSO, I.; OKADA, K.; SANTOS, D. A derivação da equação de klein-gordon. **Cadernos de Física PPGFIS-UFES 2024**, Blucher, São Paulo, p. 26–34, 2024.
- BJORKEN, J. D.; DRELL, S. D. **Relativistic quantum mechanics**. [S.l.]: McGraw-Hill College, 1965.
- BUENO, C. **Equação de Klein-Gordon**. 2014. Disponível em: <https://www.ifsc.usp.br/~lattice/wp-content/uploads/2014/12/CaioBueno_MQII_KleinGordon.pdf>. Acesso em 05 de Fevereiro de 2025.
- CERN, A. science. **New results indicate that new particle is a Higgs boson**. 2013. Disponível em: <<https://home.web.cern.ch/news/news/physics/new-results-indicate-new-particle-higgs-boson>>. Acesso em 29 de Dezembro de 2024.
- CUSTODIO, R.; POLITI, J. R. d. S.; SEGALA, M.; HAIDUKE, R. L. A.; CYRILLO, M. Quatro alternativas para resolver a equação de schrödinger para o átomo de hidrogênio. **Química Nova**, SciELO Brasil, v. 25, p. 159–170, 2002.
- DOMÍNGUEZ-ADAME, F.; MÉNDEZ, B. semiclásica a los efectos relativistas en el potencial de coulomb. **Revista Española de Física**, v. 8, p. 4, 1994.
- DONANGELO, R. J.; CAPAZ, R. B. **Introdução à Mecânica Quântica**. [S.l.]: Fundação CECIERJ, 2009. v. 2.
- FERMION. 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1351/goldbook.F02342>>.
- GOTO, M. O método dos operadores na equação de legendre. **Rev. Bras. de Ensino de Física**, v. 16, p. 21, 1994.
- GRIFFITHS, D. **Introduction to elementary particles**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2020.
- GROUP, P. D. et al. **The Review of particle physics**. 2024. Disponível em: <<https://pdg.lbl.gov/>>. Acesso em 05 de Fevereiro de 2025.
- HENNEBACH, M.; ANAGNOSTOPOULOS, D.; DAX, A.; FUHRMANN, H.; GOTTA, D.; GRUBER, A.; HIRTL, A.; INDELICATO, P.; LIU, Y. W.; MANIL, B. et al. Hadronic shift in pionic hydrogen. **The European Physical Journal A**, Springer, v. 50, p. 1–10, 2014.
- IAG/USP. **Bárions**. 2024. Disponível em: <<http://www.astro.iag.usp.br/~ronaldo/intrcosm/Glossario/index.html>>. Acesso em 05 de Janeiro de 2025.
- IAG/USP. **Bóson**. 2024. Disponível em: <<http://www.astro.iag.usp.br/~ronaldo/intrcosm/Glossario/Boson.html#:~:text=Partículas%20de%20spin%20inteiro%20que,responsáveis%20pelo%20transporte%20das%20interações>>. Acesso em 29 de Dezembro de 2024.
- JEAKEL, A. P.; VERNECK, G. A.; TRISTÃO, M. H. A equação de dirac e sua importância na comprovação do fator g de spin. **Cadernos de Física PPGFIS-UFES 2024**, Blucher, São Paulo, p. 60–67, 2024.

- LEMOS, N. A. **Mecânica analítica**. [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2007.
- MARTIN, B. R.; SHAW, G. **Nuclear and particle physics: an introduction**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2019.
- MOREIRA, M. A. Partículas e interações. **Física na escola. São Paulo. Vol. 5, n. 2 (out. 2004), p. 10-14**, 2004.
- MOREIRA, M. A. A física dos quarks e a epistemologia. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, SciELO Brasil, v. 29, p. 161–173, 2007.
- MOREIRA, M. A. O modelo padrão da física de partículas. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, SciELO Brasil, v. 31, p. 1306–1, 2009.
- NETO, F. A. d. C. **O oscilador de Klein-Gordon (2+1)-D sujeito a interações externas**. 66 p. Dissertação (Programa de Pós-Graduação em Física) — Universidade Federal do Maranhão, São Luís, 2016.
- NETO, J. B. **Mecânica Newtoniana, Lagrangiana e Hamiltoniana**. [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2004.
- NUSSENZVEIG, H. M. **Curso de física básica: Ótica, relatividade, física quântica (vol. 4)**. [S.l.]: Editora Blucher, 2014.
- OLIVEIRA, E. C. de. **Funções especiais com aplicações**. [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2005.
- PIATTELLA, O. F. O artigo fundador da teoria da relatividade restrita: Sobre a eletrodinâmica dos corpos em movimento. **Cadernos de Astronomia**, v. 1, n. 1, p. 157–176, 2020.
- SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. **Mecânica Quântica Moderna**. 2. ed. Porto Alegre: Bookman, 2013. ISBN 978-85-65837-09-5.
- SAMPAIO, J. L.; CALCADA, C. S. **Física: volume único**. São Paulo: Editora Atual, 2005.
- SANTOS, J. C. Minkowski, geometria e relatividade. **Revista Brasileira de História da Matemática**, v. 9, n. 18, p. 115–131, 2009.
- SAUTER, W. K. Fenomenologia em cromodinâmica quântica com propagador de glúon modificado. 2003.
- SMIRNOV, A.; JR, A. J. D. F. Representações da equação de Dirac em 1+1 dimensões. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, SciELO Brasil, v. 38, n. 3, p. e3312, 2016.
- STANDARDS, N. I. of; TECHNOLOGY. **Information at the foundation of modern science and technology from the Physical Measurement Laboratory of NIST**. 2025. Disponível em: <<https://physics.nist.gov/cuu/Constants/>>. Acesso em 04 de Fevereiro de 2025.