7.6 - A aproximação de uma-partícula

A teoria de partículas idênticas que desenvolvemos no capítulo 4 e estendemos a problemas relativísticos, permite tratar estados de apenas uma partícula definindo

$$\psi_i^{(1)} = a_i^{+} |0\rangle$$

onde o vácuo é definido por $a_i |0\rangle = 0$.

No caso de elétrons e pósitrons isso não funciona. Se definirmos estados de 1 partícula como

$$\psi_\alpha^{+}(\mathbb{r}) |0\rangle \equiv |\mathbb{r}, \alpha\rangle$$

correspondendo a uma partícula localizada em $\mathbb{r}$ com número quântico α encontramos o seguinte problema: ao tentarmos normalizar o estado teremos

$$\begin{aligned}
\langle \mathbb{r}'\alpha' | \mathbb{r}\alpha\rangle &= \langle 0| \psi_{\alpha'}(\mathbb{r}') \psi_\alpha^{+}(\mathbb{r}) |0\rangle \\
&= \langle 0| -\psi_\alpha^{+}(\mathbb{r}) \psi_{\alpha'}(\mathbb{r}') |0\rangle + \delta(\mathbb{r}-\mathbb{r}') \delta_{\alpha\alpha'} \\
&\neq \delta(\mathbb{r}-\mathbb{r}') \delta_{\alpha\alpha'}
\end{aligned}$$

pois $\psi_{\alpha'}(\mathbb{r}') |0\rangle \neq 0$. Isso ocorre porque o campo $\psi_\alpha(\mathbb{r})$ contém operadores de destruição de elétrons e de criação de pósitrons. Dessa forma, não há como descrever uma única partícula na posição $\mathbb{r}$. Essa descrição só é possível de maneira aproximada.

Introduzimos um novo "vácuo eletrônico" $|0e\rangle$ tal que

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r})\,|0e\rangle = 0$$

que só é possível se todos os estados disponíveis para os pósitrons já estiverem ocupados. Logo $|0e\rangle$ está longe de ser o estado de vácuo usual.

O estado de um-elétron é então definido como

$$\boxed{|\Psi_e\rangle = \int \Psi_e(\mathbf{r},t)\,\hat{\Psi}^{+}(\mathbf{r},t)\,d^3r\,|0e\rangle}\,.$$

A normalização fica

$$1 = \langle \Psi_e|\Psi_e\rangle = \int \Psi_e^{*}(\mathbf{r}',t)\,\Psi_e(\mathbf{r},t)\,\langle 0e|\hat{\Psi}(\mathbf{r}',t)\,\hat{\Psi}^{+}(\mathbf{r},t)\,|0e\rangle\,d^3r\,d^3r'.$$

Usando

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}',t)\,\hat{\Psi}^{+}(\mathbf{r},t) + \hat{\Psi}^{+}(\mathbf{r},t)\,\hat{\Psi}(\mathbf{r}',t) = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

obtemos a condição usual para as funções de onda:

$$\boxed{\int \Psi_e^{*}(\mathbf{r},t)\,\Psi_e(\mathbf{r},t)\,d^3r = 1}\,.$$

Além disso,

$$\langle 0e|\hat{\Psi}(\mathbf{r}',t)|\Psi_e\rangle = \int \Psi_e(\mathbf{r},t)\,\langle 0e|\hat{\Psi}(\mathbf{r}',t)\,\hat{\Psi}^{+}(\mathbf{r},t)|0e\rangle\,d^3r$$

$$= \Psi_e(\mathbf{r}',t)\,,$$

ou

$$\boxed{\Psi_e(\mathbf{r},t) = \langle 0e|\hat{\Psi}(\mathbf{r},t)|\Psi_e\rangle}$$

Funções de onda de um pósitron podem ser definidas de maneira análoga usando-se o operador de conjugação de carga:

$$|0p\rangle \equiv \hat{C}\,|0e\rangle$$

$$|\Psi_p\rangle \equiv \hat{C}\,|\Psi_e\rangle = \int \Psi_e(\mathbf{r},t)\,\hat{C}\,\hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r},t)\,\hat{C}^{\dagger}\hat{C}\,d^3r\,|0e\rangle$$

$$= \int \Psi_p(\mathbf{r},t)\,\hat{\tilde{\Psi}}(\mathbf{r},t)\,C^{-1}\,|0p\rangle\,d^3r$$

onde trocamos $\Psi_e \to \Psi_p$ na função de onda para explicitar que essa combinação produz o estado aproximado de 1 pósitron. Multiplicando por $\langle 0p|C\,\tilde{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r},t)$ e usando a relação de anticomutação obtemos

$$\boxed{\Psi_p(\mathbf{r},t) = \langle 0p|\,C\,\tilde{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r},t)\,|\Psi_p\rangle}$$

Como $\Psi_e(\mathbf{r},t)$ depende de $(\mathbf{r},t)$ apenas via $\hat{\Psi}(\mathbf{r},t)$, a função de onda satisfaz a mesma equação de Dirac que o operador:

$$\gamma^{\mu}\left(\frac{\partial}{\partial x^{\mu}} - \frac{ie}{\hbar c}A_{\mu}\right)\Psi_e(\mathbf{r},t) + i\kappa\,\Psi_e(\mathbf{r},t) = 0$$

No caso dos pósitrons $\Psi_p(\mathbf{r},t)$ satisfaz a equação do campo $C\tilde{\Psi}^{\dagger} = C\Psi^{*} = \gamma^{2}\Psi^{*} \equiv u$. Conjugando a equação de Dirac obtemos

$$\gamma^{\mu *}\left(\frac{\partial}{\partial x^{\mu}} + \frac{ie}{\hbar c}A_{\mu}\right)\Psi^{*} - i\kappa\,\Psi^{*} = 0$$

$$\gamma^{\mu *}\left(\frac{\partial}{\partial x^{\mu}} + \frac{ie}{\hbar c}A_{\mu}\right)\gamma^{2}u - i\kappa\,\gamma^{2}u = 0$$

Para $\mu \neq 2$ $\quad \gamma^{\mu *}\gamma^2 = \gamma^\mu \gamma^2 = -\gamma^2\gamma^\mu$. Para $\mu = 2$ $\quad \gamma^{2*}\gamma^2 = -\gamma^2\gamma^2$. Assim podemos cancelar um γ^2 e obter

$$\gamma^\mu\left(\frac{\partial}{\partial x^\mu} + \frac{ie}{\hbar c}A_\mu\right)\psi_p(\mathbf{r},t) + i\kappa\,\psi_p(\mathbf{r},t) = 0 .$$

Finalmente, para operadores aditivos, como momento linear, angular e energia cinética, que podem ser escritos como

$$\mathcal{K} = \int \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\, K\, \hat{\psi}(\mathbf{r})\, d^3r$$

onde $K = K(\mathbf{r}, -i\hbar\nabla)$, podemos calcular

$$\langle \psi_e | \mathcal{K} | \psi_e \rangle = \int \langle 0e|\, \hat{\psi}(\mathbf{r}')\, \psi_e^*(\mathbf{r}')\, \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\, K\, \hat{\psi}(\mathbf{r})\, \psi_e(\mathbf{r}'')\, \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}'')\, |0e\rangle \; * \; d^3r'\, d^3r\, d^3r''$$

$$= \int \langle 0e|\left(\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\,\hat{\psi}(\mathbf{r}') + \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\right)\psi_e^*(\mathbf{r}')\, K\, \psi_e(\mathbf{r}'')\left(\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}'')\,\hat{\psi}(\mathbf{r}) + \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'')\right)|0e\rangle \; * \; d^3r'\, d^3r\, d^3r''$$

$$= \int \psi_e^*(\mathbf{r})\, K\, \psi_e(\mathbf{r})\, d^3r ,$$

de forma que o cálculo fica análogo à mecânica quântica de Schrödinger. A diferença é que $\psi_e(\mathbf{r})$ é um spinor de 4 componentes e $K(\mathbf{r}, -i\hbar\nabla)$ é uma matriz 4×4.

No caso livre, a equação de Dirac fica

$$\gamma^\mu \frac{\partial \Psi_e}{\partial x^\mu} + ik\Psi_e = 0$$

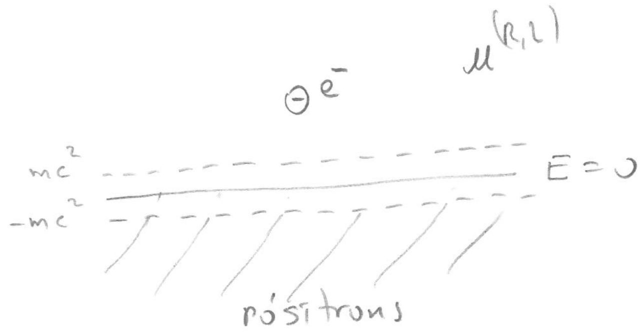
cujas soluções estão na página 187. As soluções $u^{(R,L)}$ tem energia positiva e, no limite $E_p << mc^2$, ficam

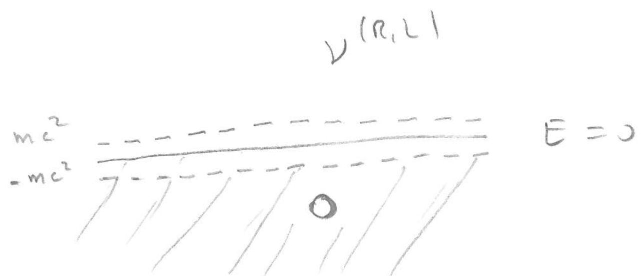
$$u^{(R)} \simeq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad u^{(L)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

representando elétrons de spin $\pm 1/2$. As soluções $\nu^{(R,L)}$ tem energia negativa e representam a aniquilação de um pósitron, i.e., uma carga negativa mas com energia negativa, e spin $\pm 1/2$:

$$\nu^{(R)} \simeq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \nu^{(L)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Esquematicamente temos





A FALTA DE uma carga + é equivalente a uma carga −

Inicialmente podemos ter

$$|\Psi\rangle = \alpha u^{(R)} + \beta u^{(L)}$$

apenas. No entanto, se houver um potencial que transfira energia para o elétron, de tal forma que $pc \simeq mc^2$, a componentes 3 e 4 (na direção de $\nu^{(L)}$ e $\nu^{(R)}$) serão ativadas.

Fisicamente, isso corresponde à aniquilação do e^- com um e^+ do vácuo. É mais preciso, então, falar do estado de "uma carga negativa" e não de "um elétron" ou "uma partícula".

Vamos então omitir o "e" de Ψ_e para simplificar a notação. A equação de "um elétron" fica

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbb{r},t)}{\partial t} = H\Psi(\mathbb{r},t)$$

$$H = c\vec{\alpha}\cdot\left(\frac{\hbar}{i}\nabla + \frac{e}{c}\mathbb{A}\right) - e\phi + \beta mc^2$$

Multiplicando a equação por Ψ^+ e subtraindo da equação conjugada hermiteana multiplicada por Ψ obtemos

$$i\hbar\left(\Psi^+\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^+}{\partial t}\Psi\right) = \frac{\hbar}{i}\Psi^+ c\vec{\alpha}\,\nabla\Psi - \frac{\hbar}{i}c\nabla\Psi^+\cdot\vec{\alpha}\,\Psi$$

ou

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^+\Psi\right) + \nabla\cdot\left(c\Psi^+\vec{\alpha}\,\Psi\right) = 0$$

que é a equação da continuidade

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla\cdot\vec{J} = 0$$

para

$$\rho = \Psi^+\Psi$$
$$\vec{J} = c\Psi^+\vec{\alpha}\,\Psi\,.$$

7.7 - Teoria de Dirac na Representação de Heisenberg

A teoria de campos relativística foi desenvolvida para os operadores $\hat{\Psi}(\mathbb{r},t)$, mas a aproximação de um elétron foi descrita em termos de funções de onda spinoriais $\Psi(\mathbb{r},t)$. Vamos agora à representação de Heisenberg para o caso de um elétron, onde funções de onda são estacionárias e operadores evoluem de acordo com

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[A,H] .$$

A Hamiltoniana é

$$H = c\vec{\alpha}\cdot\left(\mathbb{P} + \frac{e}{c}\mathbb{A}\right) - e\phi + \beta mc^2$$

e $\mathbb{r}$, $\mathbb{P}$, $\vec{\alpha}$ e $\vec{\beta}$ são variáveis dinâmicas.

Equações de movimento na presença de $\mathbb{A}$ e ϕ

Definimos

$$\mathbb{V} = \frac{d\mathbb{r}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\mathbb{r},H] = c\vec{\alpha} .$$

Contrariamente ao resultado clássico, $m\mathbb{V} \neq \mathbb{P} + \frac{e}{c}\mathbb{A}$. De fato:

$$\frac{d\mathbb{P}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\mathbb{P},H] = \frac{1}{i\hbar}\left[-i\hbar\nabla\left(e\vec{\alpha}\cdot\mathbb{A} - e\phi\right)\right] = e\nabla\phi - e\nabla(\vec{\alpha}\cdot\mathbb{A})$$

$$\frac{d\mathbb{A}}{dt} = \frac{\partial\mathbb{A}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\mathbb{A},H] = \frac{\partial\mathbb{A}}{\partial t} + c\,\vec{\alpha}\cdot\nabla\mathbb{A}$$

e

$$\frac{d}{dt}\left(\mathbb{P} + \frac{e}{c}\mathbb{A}\right) = e\nabla\phi + \frac{e}{c}\frac{\partial \mathbb{A}}{\partial t} - e\nabla(\vec{\alpha}\cdot\mathbb{A}) + e\vec{\alpha}\cdot\nabla\mathbb{A}$$

$$= -e\left[-\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbb{A}}{\partial t} - \nabla\phi\right] - e\vec{\alpha}\times(\nabla\times\mathbb{A})$$

onde usamos $\vec{\alpha}\times(\nabla\times\mathbb{A}) = \vec{\alpha}\cdot\nabla\mathbb{A} - (\vec{\alpha}\cdot\nabla)\mathbb{A} = \nabla(\vec{\alpha}\cdot\mathbb{A}) - (\vec{\alpha}\cdot\nabla)\mathbb{A}$.

Assim,
$$\frac{d}{dt}\left(\mathbb{P} + \frac{e}{c}\mathbb{A}\right) = -e\mathbb{E} - e\vec{\alpha}\times\vec{\mathbb{B}}$$

ou, ainda
$$\boxed{\frac{d}{dt}\left(\mathbb{P} + \frac{e}{c}\mathbb{A}\right) = -e\mathbb{E} - \frac{e}{c}\mathbb{V}\times\mathbb{B}}$$

que é a força de Lorentz.

Usando a identidade
$$\vec{\alpha}(H + e\phi) + (H + e\phi)\vec{\alpha} = 2c\left(\mathbb{P} + \frac{e}{c}\mathbb{A}\right)$$

podemos re-escrever
$$\frac{d}{dt}\left[\frac{1}{2}\left(\mathbb{V}\,\frac{H + e\phi}{c^2} + \frac{H + e\phi}{c^2}\,\mathbb{V}\right)\right] = -e\left(\mathbb{E} + \frac{\mathbb{V}}{c}\times\mathbb{B}\right)$$

e aproximar, no limite não relativístico, $H + e\phi \simeq mc^2$

para obter
$$\frac{d}{dt}(m\mathbb{V}) \approx -e\left(\mathbb{E} + \frac{\mathbb{V}}{c}\times\mathbb{B}\right).$$

Prova da Identidade:

$$\vec{\alpha}(H + e\phi) + (H + e\phi)\vec{\alpha} = \vec{\alpha}\left(c\vec{\alpha}\cdot\mathbb{P} + e\vec{\alpha}\cdot\mathbb{A} + \beta mc^2\right)$$
$$+ \left(c\vec{\alpha}\cdot\mathbb{P} + e\vec{\alpha}\cdot\mathbb{A} + \beta mc^2\right)\vec{\alpha}$$

Para a componente i,

- $\alpha_i(\vec{\alpha}\cdot\vec{p}) + (\vec{\alpha}\cdot\vec{p})\alpha_i = 2p_i$

pois $\alpha_i^2 = 1$, $\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 0$ p/ $i \neq j$

- $\alpha_i(\vec{\alpha}\cdot\vec{A}) + (\vec{\alpha}\cdot\vec{A})\alpha_i = 2A_i$

- $\alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0$ e

$$\vec{\alpha}(H+e\phi) + (H+e\phi)\vec{\alpha} = 2c\vec{p} + 2eA .$$

EQUAÇÕES DE MOVIMENTO LIVRES

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

$$\frac{dp}{dt} = 0 \rightarrow p = \text{const.}$$

$$\frac{d\vec{\alpha}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\vec{\alpha},H] = \frac{1}{i\hbar}\left(\vec{\alpha}H + H\vec{\alpha} - 2H\vec{\alpha}\right)$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\left[\{\vec{\alpha},H\} - 2H\vec{\alpha}\right] = \frac{2}{i\hbar}\left[cp - H\vec{\alpha}\right]$$

pois

$$\{\alpha_i,H\} = c\alpha_i(\vec{\alpha}\cdot\vec{p}) + c(\vec{\alpha}\cdot\vec{p})\alpha_i + mc^2\underbrace{(\alpha_i\beta + \beta\alpha_i)}_{=0}$$

$$= 2cp_i .$$

Como $p = \text{const}$ e $H = \text{const.}$ podemos integrar a equação.

A solução da eq. homogênea é $\sim e^{2iHt/\hbar}$ e da NÃO homogênea é $\vec{\alpha} = \text{const} = H^{-1}cp$. Assim

$$\vec{\alpha}(t) = \frac{\vec{V}(t)}{c} = cH^{-1}p + e^{2iHt/\hbar}\left(\vec{\alpha}(0) - cH^{-1}p\right)$$

Integrando de novo

$$\mathbb{r}(t) = \mathbb{r}(0) + \frac{c^2 \mathbb{p} t}{H} + \frac{\hbar c}{2iH}\left(e^{2iHt/\hbar} - 1\right)\left(\vec{\alpha}(0) - cH^{-1}\mathbb{p}\right).$$

A trajetória segue um movimento uniforme sobreposto com uma rápida oscilação de frequência $\approx \frac{mc^2}{\hbar}$ e amplitude $\hbar/mc$, que é o comprimento de onda de Compton do elétron. Esse efeito é conhecido como

Zitterbewegung = movimento tremido

e foi proposto por Schrödinger em 1930.

Da identidade anterior,

$$\vec{\alpha} H + H\vec{\alpha} = 2c\vec{p} = c\vec{p}H^{-1}H + cHH^{-1}\vec{p},$$

$$(\vec{\alpha} - c\vec{p}H^{-1})H + H(\vec{\alpha} - c\vec{p}H^{-1}) = 0$$

vemos que os elementos de matriz de $(\vec{\alpha} - c\vec{p}H^{-1})$ só serão não nulos entre estados de mesmo $\vec{p}$ mas energias opostas, mostrando que esse efeito está ligado aos pósitrons. De fato, tomando os spinores $u^{(R)}(\vec{p})$ e $v^{(R)}(\vec{p})$ com $\vec{p} = p\hat{z}$,

$$\langle u^{(R)}|(\vec{\alpha} - c\vec{p}H^{-1})H|v^{(R)}\rangle = -E_p\langle u^{(R)}|(\vec{\alpha} - c\vec{p}H^{-1})|v^{(R)}\rangle$$

$$= -\langle u^{(R)}|H(\vec{\alpha} - c\vec{p}H^{-1})|v^{(R)}\rangle.$$

Ordens de grandeza:

$$\frac{2mc^2}{\hbar} = 1.5 \times 10^{21}\ s^{-1}$$

$$\frac{\hbar}{mc} = 3.9 \times 10^{-11}\ cm$$

Podemos re-escrever o operador $\mathbb{r}(t)$ na forma

$$\mathbb{r}(t) = \mathbb{r}(0) + \frac{c^2 t}{H}\mathbb{p} + \frac{\hbar c}{H}\sin\frac{Ht}{\hbar}\, e^{iHt/\hbar}\left(\vec{\alpha}(0) - \frac{c\mathbb{p}}{H}\right)$$

que não parece hermiteano. Vamos então mostrar explicitamente que o valor esperado do último termo é nulo no estado u_R e real no estado $\Psi = \alpha u_R + \beta v_R$ para o caso $\mathbb{p} = p\hat{z}$:

(A) $u_R = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \xi \\ 0 \end{pmatrix}$; $\xi = \frac{pc}{E_p + mc^2}$

$$- \; u_R^* \alpha_x u_R = (1\ 0\ \xi\ 0)\begin{pmatrix} 0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\\\xi\\0\end{pmatrix} = (1\ 0\ \xi\ 0)\begin{pmatrix}0\\\xi\\0\\1\end{pmatrix} = 0$$

$$- \; u_R^* \alpha_y u_R = (1\ 0\ \xi\ 0)\begin{pmatrix} 0&0&0&-i\\0&0&i&0\\0&-i&0&0\\i&0&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\\\xi\\0\end{pmatrix} = (1\ 0\ \xi\ 0)\begin{pmatrix}0\\i\xi\\0\\i\end{pmatrix} = 0$$

$$- \; u_R^* \alpha_z u_R = (1\ 0\ \xi\ 0)\begin{pmatrix} 0&0&1&0\\0&0&0&-1\\1&0&0&0\\0&-1&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\\\xi\\0\end{pmatrix} = (1\ 0\ \xi\ 0)\begin{pmatrix}\xi\\0\\1\\0\end{pmatrix} = 2\xi$$

$$u_R^* \frac{cp}{H} u_R = \frac{cp}{E_p}|u_R|^2 = \frac{cp}{E_p}(1+\xi^2) = \frac{cp}{E_p}\left(1 + \frac{c^2p^2}{(E_p+mc^2)^2}\right)$$

$$= \frac{cp}{E_p(E_p+mc^2)^2}\left[E_p^2 + 2mc^2E_p + m^2c^4 + c^2p^2\right]$$

$$= \frac{cp}{E_p(E_p+mc^2)^2}\left[2E_p^2 + 2mc^2E_p\right] = \frac{2cp}{(E_p+mc^2)^2}(E_p+mc^2) = \frac{2cp}{E_p+mc^2} = 2\xi$$

Assim

$$\frac{\langle u_R|\mathbb{r}(t)|u_R\rangle}{\langle u_R|u_R\rangle} = \mathbb{r}(0) + \frac{ctp\hat{z}}{E_p}$$

(B) Para $\psi = \alpha u_R + \beta v_R$; $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ temos

$$\left(\alpha^* u_R^* + \beta^* v_R^*\right) e^{\frac{iHt}{\hbar}} \alpha_x \left(\alpha u_R + \beta v_R\right) = e^{\frac{-iE_pt}{\hbar}} \alpha^* \beta \, u_R^* \alpha_x v_R + \alpha \beta^* v_R^* \alpha_x u_R e^{\frac{iE}{}}$$

$$= \text{real}$$

$$u_R^* \alpha_x v_R = (1 \;\; 0 \;\; \xi \;\; 0) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\xi \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = (1 \;\; 0 \;\; \xi \;\; 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -\xi \end{pmatrix} = 0$$

Da mesma forma $u_R^* \alpha_y v_R = 0$. Note que para ψ da forma $\psi = \alpha u_R + \beta v_L$ esses termos seriam não nulos mas o resultado seria real.

$$u_R^* \alpha_z v_R = (1 \;\; 0 \;\; \xi \;\; 0) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\xi \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = (1 \;\; 0 \;\; \xi \;\; 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\xi \\ 0 \end{pmatrix} = 1 - \xi^2$$

O último termo fica, para a direção z:

$$\frac{\hbar c \sin E_p t/\hbar}{E_p} \left[(1-\xi^2) \left(e^{\frac{-iE_pt}{\hbar}} \alpha^* \beta + e^{iE_pt/\hbar} \alpha \beta^* \right) - \frac{cp}{E_p} \left(e^{\frac{-iE_pt}{\hbar}} + e^{\frac{iE_pt}{\hbar}} \right) \right]$$

onde usamos que $v^\dagger u = 0$ e $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

Para a partícula livre é fácil verificar que

$$\beta H + H\beta = 2mc^2 .$$

Além disso, vale

$$\gamma^5 H + H\gamma^5 = 2c\,\vec{\Sigma}\cdot\vec{p} .$$

PROVA

$$\{\gamma^5, \gamma^\mu\} = 0 \qquad \mu = 0,1,2,3 \quad \Rightarrow \quad \gamma^5\beta + \beta\gamma^5 = 0$$

$$\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$$

$$\gamma^5 \alpha_x p_x = \gamma^5\gamma^0\gamma^1 p_x = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3\gamma^0\gamma^1 p_x$$

$$= -i\gamma^0\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3\gamma^1 p_x = i\gamma^0\gamma^1\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 p_x$$

$$= \alpha_x p_x \gamma^5$$

$$\{\gamma^5, \alpha_x p_x\} = 2\gamma^5\alpha_x p_x = -2i\gamma^1\gamma^2\gamma^3\gamma^1 p_x$$

$$= +2i\gamma^2\gamma^3 p_x \qquad (\gamma^{0\,2} = 1\ ;\ \gamma^{1\,2} = -1)$$

$$\vec{\Sigma} = (\Sigma^{23}, \Sigma^{31}, \Sigma^{12})$$

$$\Sigma^{\mu\nu} = i\gamma^\mu\gamma^\nu \ \rightarrow \ \{\gamma^5, \alpha_x p_x\} = +2\Sigma_x p_x$$

$$\Rightarrow \{\gamma^5, c\vec{\alpha}\cdot\vec{p}\} = 2c\,\vec{\Sigma}\cdot\vec{p}$$

Em um auto-estado de energia positiva ($u^{(R)}$ ou $u^{(L)}$),

$$\langle \beta H + H\beta\rangle = 2mc^2 \ \rightarrow \ \langle\beta\rangle = \frac{mc^2}{E} =$$

$$= \frac{\sqrt{E^2 - p^2c^2}}{E} = \sqrt{1 - \frac{p^2c^2}{E}}$$

e

$$\langle \gamma^5 \rangle = \langle \vec{\Sigma}\cdot\vec{p}\rangle \frac{c}{E} = \langle \vec{\Sigma}\cdot\hat{p}\rangle \frac{pc}{E}$$

$\langle \vec{\Sigma}\cdot\hat{p}\rangle \to$ CHIRALIDADE

$\frac{pc}{E} \to \simeq \frac{mvc}{mc^2} = \frac{v}{c}$

Finalmente, para ver o papel do spin consideremos $\vec{A} \neq 0$ e $\phi = 0$

$$H = c\vec{\alpha}\cdot\left(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}\right) + \beta mc^2$$

$$\frac{d\vec{\Sigma}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\vec{\Sigma}, H\right] = -\frac{2c}{\hbar}\vec{\alpha}\times\left(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)$$

PROVA

$$\Sigma_x = \Sigma^{23} = i\gamma^2\gamma^3$$

$$[\Sigma_x, \beta] = i\left(\gamma^2\gamma^3\gamma^0 - \gamma^0\gamma^2\gamma^3\right) = i\left(\gamma^2\gamma^3\gamma^0 - \gamma^2\gamma^3\gamma^0\right) = 0$$

$$[\Sigma_x, \alpha_x] = i\left(\gamma^2\gamma^3\gamma^0\gamma^1 - \gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3\right)$$

$$= i\left(\gamma^2\gamma^3\gamma^0\gamma^1 + \gamma^1\gamma^2\gamma^3\gamma^0\right)$$

$$= i\left(\gamma^2\gamma^3\gamma^0\gamma^1 - \gamma^2\gamma^3\gamma^0\gamma^1\right) = 0$$

$$[\Sigma_x, \alpha_y] = i\left(\gamma^2\gamma^3\gamma^0\gamma^2 - \gamma^0\gamma^2\gamma^2\gamma^3\right)$$

$$= i\left(-\gamma^3\gamma^0 + \gamma^0\gamma^3\right) = 2i\gamma^0\gamma^3 = 2i\alpha_z$$

$$[\Sigma_x, \alpha_z] = -2i\alpha_y$$

$$\frac{1}{i\hbar}\left[\Sigma_x, c\vec{\alpha}\cdot\vec{p}\right] = -\frac{2c}{\hbar}\left[p_y\alpha_y - p_3\alpha_3\right] = -\frac{2c}{\hbar}(\vec{\alpha}\times\vec{p})_x$$

idem p/ Σ_y, Σ_z e para $\vec{A}$.

Então

$$H\frac{d\vec{\Sigma}}{dt}+\frac{d\vec{\Sigma}}{dt}H=-\frac{2c^2}{\hbar}\left\{\left[\vec{\alpha}\cdot\left(\vec{P}+\frac{e}{A}\vec{A}\right)\right]\left[\vec{\alpha}\times\left(\vec{P}+\frac{e}{c}\vec{A}\right)\right]+\left[\vec{\alpha}\times\left(\vec{P}+\frac{e}{c}\vec{A}\right)\right]\left[\vec{\alpha}\cdot\left(\vec{P}+\frac{e}{c}\vec{A}\right)\right]\right\}$$

$$=-2ec\left(\vec{\Sigma}\times(\nabla\times\vec{A})\right)=-2ec\,\vec{\Sigma}\times\vec{B}$$

No limite não relativístico $H\sim mc^2$, $\vec{S}=\frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}$ e

$$\frac{d\vec{S}}{dt}=-\frac{e}{mc}\vec{S}\times\vec{B}\equiv\vec{\mu}_e\times\vec{B}$$

e o momento magnético do elétron fica $\vec{\mu}=-\frac{e}{2mc}g_s\vec{S}$; $g_s=2$.

PROVA DA PASSAGEM ACIMA . Seja

$$(\vec{\alpha}\cdot\vec{V})(\vec{\alpha}\times\vec{V})_x+(\vec{\alpha}\times\vec{V})_x(\vec{\alpha}\cdot\vec{V})=$$

$$(\alpha_xV_x+\alpha_yV_y+\alpha_zV_z)(\alpha_yV_z-\alpha_zV_y)+(\alpha_yV_z-\alpha_zV_y)(\alpha_xV_x+\alpha_yV_y+\alpha_zV_z)$$

$$=\alpha_x\alpha_y(V_xV_z-V_zV_x)-\alpha_x\alpha_z(V_xV_y-V_yV_x)+\underbrace{\alpha_y^2}_{-1}\cancel{(V_yV_z+V_zV_y)}$$
$$-\underbrace{\alpha_z^2}_{-1}\cancel{(V_yV_z+V_zV_y)}$$

$$\alpha_x\alpha_y=\gamma^0\gamma^1\gamma^0\gamma^2=i\Sigma_z$$
$$\alpha_x\alpha_z=\gamma^0\gamma^1\gamma^0\gamma^3=-i\Sigma_y$$

$$V_xV_z-V_zV_x=\left(P_x+\frac{e}{c}A_x\right)\left(P_z+\frac{e}{c}A_z\right)-\left(P_z+\frac{e}{c}A_z\right)\left(P_x+\frac{e}{c}A_x\right)$$
$$=\frac{e}{c}\left(P_xA_z+A_xP_z-P_zA_x-A_zP_x\right)$$
$$=\frac{e}{c}\left(-i\hbar\frac{\partial A_z}{\partial x}+i\hbar\frac{\partial A_x}{\partial z}\right)=-\frac{i\hbar e}{c}(\nabla\times A)_y$$

idem p/ $V_xV_y-V_yV_x=\frac{i\hbar e}{c}(\nabla\times A)_z$

e obtemos

$$i\Sigma_z\left(-\frac{i\hbar e}{c}B_y\right)+i\Sigma_y\left(\frac{i\hbar e}{c}B_z\right)$$

$$=-\frac{\hbar e}{c}\left(\Sigma_y B_z-\Sigma_z B_y\right)=-\frac{\hbar e}{c}\left(\vec{\Sigma}\times\vec{B}\right)_x .$$

7.8 – Representação de Schrödinger e Limite Não-Relativístico

Na representação de Schrödinger a equação de Dirac é

$$\gamma^\mu\left(\frac{\partial}{\partial x^\mu}-\frac{ie A_\mu}{\hbar c}\right)\psi+i\kappa\psi=0$$

onde

$$\gamma^\mu\frac{\partial}{\partial x^\mu}=\beta\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}+\beta\vec{\alpha}\cdot\nabla$$

$$A_\mu=(\phi,-\vec{A}) , \qquad \kappa=mc/\hbar .$$

Multiplicando à esquerda por $\gamma^\mu\left(\frac{\partial}{\partial x^\mu}-\frac{ie}{\hbar c}A_\mu\right)-i\kappa$ obtemos

$$\left[\gamma^\mu\left(\frac{\partial}{\partial x^\mu}-\frac{ie}{\hbar c}A_\mu\right)-i\kappa\right]\left[\gamma^\nu\left(\frac{\partial}{\partial x^\nu}-\frac{ie}{\hbar c}A_\nu\right)+i\kappa\right]\psi=0$$

ou

$$\left[\gamma^\mu\gamma^\nu\left(\frac{\partial}{\partial x^\mu}-\frac{ie}{\hbar c}A_\mu\right)\left(\frac{\partial}{\partial x^\nu}-\frac{ie}{\hbar c}A_\nu\right)+\kappa^2\right]\psi=0$$

Separamos agora os termos $\mu=\nu$ e $\mu\neq\nu$. Usando $(\gamma^0)^2=1$ e $(\gamma^k)^2=-1$ p/ $k=1,2,3$ temos

$$\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \frac{ie}{\hbar c}\phi\right)^2 - \left(\nabla + \frac{ie}{\hbar c}\mathbb{A}\right)^2 .$$

Para $\mu \neq \nu$, os termos com $\mu = 0$ $\nu = 0$ ficam:

$\mu = 0,\ \nu = 1$ (+) $\mu = 1,\ \nu = 0$ $\quad (\gamma^0\gamma^1 = -\gamma^1\gamma^0)$

$$\gamma^0\gamma^1\left[\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \frac{ie}{\hbar c}\phi\right)\left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{ie}{\hbar c}A_x\right) - \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{ie}{\hbar c}A_x\right)\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \frac{ie}{\hbar c}\phi\right)\right]\psi$$

$$= \gamma^0\gamma^1\left[\frac{ie}{\hbar c^2}\frac{\partial}{\partial t}(A_x\psi) - \frac{ie}{\hbar c}\phi\frac{\partial}{\partial x}(\psi) + \frac{ie}{\hbar c}\frac{\partial}{\partial x}(\phi\psi) - \frac{ie}{\hbar c^2}A_x\frac{\partial\psi}{\partial t}\right]$$

$$= \alpha_x\left[\frac{ie}{\hbar c^2}\frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{ie}{\hbar c}\frac{\partial\phi}{\partial x}\right] = -\frac{ie}{\hbar c}\alpha_x\left[-\frac{\partial\phi}{\partial x} - \frac{1}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t}\right] = -\frac{ie}{\hbar c}\alpha_x E_x$$

Para $\mu \neq \nu$ e $\mu \neq 0,\ \nu \neq 0$ o procedimento é análogo e fica como exercício. O resultado final é

$$\boxed{\left[\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{ie}{\hbar}\phi\right)^2 - \left(\nabla + \frac{ie}{\hbar c}\mathbb{A}\right)^2 + \frac{e}{\hbar c}\vec{\Sigma}\cdot\vec{B} - \frac{ie}{\hbar c}\vec{\alpha}\cdot\vec{E} + k^2\right]\psi = 0}$$

Quando $\mathbb{A} = \phi = 0$, obtemos a equação de Klein-Gordon:

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + k^2\right)\psi = 0$$

que pode ser obtida diretamente de $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$ fazendo $E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ e $\vec{p} = -i\hbar\nabla$. Essa equação descreve partículas de spin 0.

Vamos agora obter o limite NÃO-relativístico da equação de DIRAC. Vamos derivar os famosos termos "cinético", "spin-órbita" e "Darwin" que aparecem no estudo da estrutura fina do átomo de Hidrogênio.

Tomamos então $\mathbb{A} = 0$ e adicionamos um potencial central $\phi = V(r)$. Assim

$$H = c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta mc^2 + V(r) \quad ; \quad \vec{p} \equiv -i\hbar\nabla$$

e buscamos soluções estacionárias, $\psi(\mathbf{r},t) = \psi(\mathbf{r})\, e^{-iEt/\hbar}$.

Escrevendo o spinor como

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_{11} \\ \psi_{12} \\ \psi_{21} \\ \psi_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

onde ψ_1 e ψ_2 tem duas componentes cada, obtemos, em forma matricial,

$$\begin{pmatrix} m_0c^2+V & c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} \\ c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} & -m_0c^2+V \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = E\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}$$

ou

$$V\psi_1 + c(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\psi_2 = \mathcal{E}\psi_1$$
$$V\psi_2 + c(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\psi_1 = (\mathcal{E}+2m_0c^2)\psi_2$$

onde $\mathcal{E} = E - m_0c^2$ é a energia total menos a parte do repouso.

Da segunda equação obtemos

$$\psi_2 = (\mathcal{E}+2m_0c^2 - V)^{-1} c(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\psi_1$$

que substituimos na primeira:

$$\mathcal{E}\psi_1 = V\psi_1 + c(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})(\mathcal{E}-V+2m_0c^2)^{-1}c(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\psi_1$$

No limite não relativístico aproximamos

$$\frac{1}{2m_0c^2+(\mathcal{E}-V)} = \frac{1}{2m_0c^2}\frac{1}{1+\frac{\mathcal{E}-V}{2m_0c^2}} \simeq \frac{1}{2m_0c^2}\left[1-\frac{\mathcal{E}-V}{2m_0c^2}\right]$$ e obtemos

$$\mathcal{E}\psi_1 = V\psi_1 + \frac{1}{2m_0}(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\left[1-\frac{\mathcal{E}-V}{2m_0c^2}\right](\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\psi_1$$

Usando agora a relação $(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B}) = \vec{A}\cdot\vec{B} + i\vec{\sigma}\cdot(\vec{A}\times\vec{B})$ temos

1) $(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})(\vec{\sigma}\cdot\vec{p}) = p^2$

2) $(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})V(\vec{\sigma}\cdot\vec{p}) = (\vec{\sigma}\cdot\vec{p}V)(\vec{\sigma}\cdot\vec{p}) = \vec{\sigma}\cdot(V\vec{p}-i\hbar\nabla V)(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})$

$$= Vp^2 - i\hbar\left[\nabla V\cdot\vec{p} + i\vec{\sigma}\cdot(\nabla V\times\vec{p})\right]$$

o que resulta em

$$\mathcal{E}\psi_1 = \left(\frac{p^2}{2m_0}+V\right)\psi_1 - \frac{1}{4m_0^2c^2}\left\{(\mathcal{E}-V)p^2 + i\hbar\left[(\nabla V)\cdot\vec{p} + i\vec{\sigma}\cdot(\nabla V\times\vec{p})\right]\right\}\psi_1$$

Fazemos agora mais uns pequenos ajustes:

a) em "ordem zero" $\mathcal{E}\Psi_1 = \left(\frac{p^2}{2m_0} + V\right)\Psi_1$ é a Eq de Schrödinger

Então podemos aproximar $(\mathcal{E}-V)\,p^2 \simeq \left(\frac{p^2}{2m_0}\right)p^2 = p^4/2m_0$

b) como $V = V(r)$; $\nabla V = \frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\mathbf{r} = \frac{dV}{dr}\hat{\mathbf{r}}$ e $(\nabla V \cdot \nabla) = \frac{dV}{dr}\frac{\partial}{\partial r}$

$\nabla = \hat{\mathbf{r}}\frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta}(\,) + \hat{\varphi}(\,)$

$$\mathcal{E}\Psi_1 = \left[\frac{p^2}{2m_0} - \frac{p^4}{8m_0^3c^2} + V(r) - \frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}\frac{dV}{dr}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{4m_0^2c^2}\hbar\vec{\sigma}\cdot\left(\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\mathbf{r}\times\mathbf{p}\right)\right]$$

identificando $\mathbf{L} = \mathbf{r}\times\mathbf{p}$

$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ obtemos finalmente

$$\mathcal{E}\Psi_1 = \Bigg[\underbrace{\left(\frac{p^2}{2m_0} + V(r)\right)}_{H_0} \underbrace{- \frac{p^4}{8m_0^3c^2}}_{W_{mv}} + \underbrace{\frac{1}{2m_0^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\vec{S}\cdot\vec{L}}_{W_{so}} \underbrace{- \frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}\frac{dV}{dr}\frac{\partial}{\partial r}}_{W_D}\Bigg]\Psi_1$$

$W_{mv} \downarrow$ termo cinético

$W_{so} \downarrow$ termo spin-órbita

$W_D \downarrow$ termo de Darwin

O termo de Darwin pode ainda ser re-escrito como

$$+\frac{\hbar^2}{8m_0^2c^2}\nabla^2 V$$

que é sua forma mais usual, como mostramos a seguir.

Termo de Darwin

Para o potencial Coulombiano $V(r) = \frac{-e^2}{r}$, $\frac{dV}{dr} = \frac{e^2}{r^2}$ e

A correção em primeira ordem no estado $\psi_{n\ell m} = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ é

$$\Delta E = -\frac{\hbar^2 e^2}{4 m_0^2 c^2} \int |Y_{\ell m}|^2 d\Omega \int_0^\infty R \frac{\partial R}{\partial r} \frac{1}{r^2} r^2 dr$$

$$= -\frac{\hbar^2 e^2}{4 m_0^2 c^2} \int_0^\infty \frac{1}{2} \frac{d}{dr}(R^2)\, dr = + \frac{\hbar^2 e^2}{8 m_0^2 c^2} R^2(0) \qquad (R(\infty) = 0)$$

Veja que $R_{n\ell}(0) \neq 0$ apenas quando $\ell = 0 \Rightarrow$ só orbitais s são afetados.
Dessa forma, o termo de Darwin pode ser re-escrito como

$$W_D = -\frac{\hbar^2 e^2}{8 m_0^2 c^2} \nabla^2\left(\frac{1}{r}\right) = \frac{\hbar^2 e^2 \pi}{2 m_0^2 c^2} \delta(\vec{r})$$

pois

$$\int \psi^* W_D \psi \, d^3 r = \frac{\hbar^2 e^2 \pi}{2 m_0^2 c^2} |\psi(0)|^2 = \frac{\hbar^2 \pi e^2}{2 m_0^2 c^2} \underbrace{|Y_{\ell m}(0,0)|^2}_{\frac{1}{2}\sqrt{\frac{2\ell+1}{\pi}}\, \delta_{m0}} \underbrace{R^2_{n\ell}(0)}_{R^2_{n0}(0)}$$

$$= \frac{\hbar^2 e^2}{8 m_0^2 c^2} R^2_{n0}(0)\, \delta_{m0}\, \delta_{\ell 0}$$

$$\Rightarrow \quad W_D = \frac{\hbar^2 e^2}{8 m_0^2 c^2} \nabla^2 V = \frac{\hbar^2 e^2 \pi}{2 m_0^2 c^2} \delta(\vec{r}) \quad \text{p/}$$

o potencial de Coulomb.

Veja Condon-Shortley -
The theory of Atomic Spectra, pg. 130

7-9 Forças Centrais e o Átomo de Hidrogênio

A Hamiltoniana de Dirac para um elétron em um campo central $\phi(r)$ é

$$H = c\vec{\alpha}\cdot\left(-i\hbar\nabla\right) + \beta mc^2 - e\phi(r) .$$

O momento angular total é

$$\vec{J} = \vec{L} + \frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma} \quad ; \quad \vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} .$$

Como $\vec{\sigma}\cdot\vec{\sigma} = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_3^2 = 3$,

$$J^2 = L^2 + \frac{3\hbar^2}{4}\mathbb{1} + \hbar\vec{L}\cdot\vec{\Sigma} .$$

Exercício : Mostre que $[\vec{L}, H] = i\hbar c(\vec{\alpha}\times\vec{p})$ e

$$\left[\frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}, H\right] = -i\hbar c(\vec{\alpha}\times\vec{p})$$

de forma que $[\vec{J}, H] = 0$.

Solução -
$$\begin{aligned}
[L_z, H] &= [xp_y - yp_x , H] \\
&= [x, c\alpha_x p_x]p_y - [y, c\alpha_y p_y]p_x - e[xp_y - yp_x, \phi] \\
&= i\hbar c(\alpha_x p_y - \alpha_y p_x) - e\left(-i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial y}x + i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial x}y\right)
\end{aligned}$$

Usando $\dfrac{\partial\phi}{\partial x} = \dfrac{\partial\phi}{\partial r}\dfrac{\partial r}{\partial x} = \dfrac{\partial\phi}{\partial r}\dfrac{x}{r}$; $\dfrac{\partial\phi}{\partial y} = \dfrac{\partial\phi}{\partial r}\dfrac{y}{r}$

o último termo se anula e

$$[L_z, H] = i\hbar c(\vec{\alpha}\times\vec{p})_z .$$

$$\frac{\hbar}{2}[\Sigma_z, H] = \frac{c\hbar}{2}[\Sigma_z, \vec{\alpha}]\cdot\vec{p} + \frac{\hbar}{2}mc^2[\Sigma_z, \beta]$$

Como
$$[\Sigma_z, \alpha_x] = 2i\alpha_y$$
$$[\Sigma_z, \alpha_y] = -2i\alpha_x$$
$$[\Sigma_z, \alpha_z] = [\Sigma_z, \beta] = 0$$

$$\frac{\hbar}{2}[\Sigma_z, H] = i\hbar c(\alpha_y p_x - \alpha_x p_y) = -i\hbar c(\vec{\alpha}\times\vec{p})_z .$$

Introduzimos agora os spinores φ_1 e φ_2 de duas componentes, de forma que o spinor de Dirac fique

$$\psi = \begin{pmatrix}\varphi_1\\ \varphi_2\end{pmatrix} .$$

A equação de autovalores fica então

$$\begin{pmatrix} -mc^2 - e\phi & -i\hbar c\vec{\sigma}\cdot\mathbb{D} \\ -i\hbar c\vec{\sigma}\cdot\mathbb{D} & -mc^2 - e\phi \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varphi_1\\ \varphi_2\end{pmatrix} = E\begin{pmatrix}\varphi_1\\ \varphi_2\end{pmatrix}$$

ou

$$(E - mc^2 + e\phi)\varphi_1 + i\hbar c\vec{\sigma}\cdot\mathbb{D}\varphi_2 = 0$$
$$(E + mc^2 + e\phi)\varphi_2 + i\hbar c\vec{\sigma}\cdot\mathbb{D}\varphi_1 = 0 .$$

Nesse espaço 2×2

$$\vec{J} = \vec{L} + \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$$
$$J^2 = L^2 + \frac{3\hbar^2}{4} + \hbar\vec{L}\cdot\vec{\sigma}$$

Como $s = 1/2$, $j = l + 1/2$ ou $j = l - 1/2$ apenas.

Buscamos auto-estados φ_1 e φ_2 que sejam auto-estados simultâneos de J^2, J_3 e H com autovalores $\hbar^2 j(j+1)$, $\hbar m$ e E, pois dessa forma ψ também o será.

Na base de J^2, J_z o estado com $j = l+1/2$ fica

$$|l+1/2, m\rangle = \sum_{m_l, m_s} \langle l\ 1/2\ m_l\ m_s | l+1/2, m\rangle\ |l\ 1/2\ m_l\ m_s\rangle$$

$$= \langle l\ 1/2\ m-1/2\ 1/2 | l+1/2\ m\rangle\ |l, m-1/2\rangle \otimes |+\rangle +$$

$$\langle l\ 1/2\ m+1/2\ -1/2 | l+1/2\ m\rangle\ |l, m+1/2\rangle \otimes |-\rangle$$

Projetando em $|\hat{r}\rangle = |\theta, \varphi\rangle$ e usando os coeficientes de C. G.:

$$\langle \theta \varphi | l+1/2, m\rangle = \sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}}\ Y_{l, m-1/2}(\theta, \varphi)\ |+\rangle + \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\ Y_{l, m+1/2}(\theta, \varphi)\ |-\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l+m+1/2}\ Y_{l, m-1/2} \\ \sqrt{l-m+1/2}\ Y_{l, m+1/2} \end{pmatrix} \equiv \mathcal{Y}_l^{jm}(\theta, \varphi)$$

com $j = l+1/2$

Da mesma forma

$$\langle \theta \varphi | l-1/2, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} -\sqrt{l-m+1/2}\ Y_{l, m-1/2} \\ \sqrt{l+m+1/2}\ Y_{l, m+1/2} \end{pmatrix} = \mathcal{Y}_l^{jm}(\theta, \varphi)$$

com $j = l-1/2$

Esses estados $\mathcal{Y}^{j,m}_{j\mp 1/2}(\theta, \varphi)$ devem representar a parte angular e de spin do elétron. Para mostrarmos isso e encontrarmos a equação para a parte radial precisamos de quatro propriedades:

(I) Usando $\vec{L}\cdot\vec{\sigma} = \frac{1}{\hbar}(J^2 - L^2 - 3\hbar^2/4)$,

$$(\vec{L}\cdot\vec{\sigma})\,\mathcal{Y}_l^{jm} = \hbar\,(j(j+1) - l(l+1) - 3/4)\,\mathcal{Y}_l^{jm} \ ; \quad l = j \mp 1/2$$

$$= \hbar\,[j(j+1) - (j\mp 1/2)(j \mp 1/2 + 1) - 3/4]\,\mathcal{Y}_l^{jm}$$

$$= \hbar\,[\pm j - 1 \pm 1/2]\,\mathcal{Y}_l^{jm} \Rightarrow \quad (\vec{L}\cdot\vec{\sigma})\,\mathcal{Y}^{jm}_{j-1/2} = \hbar\,(j+1/2)\,\mathcal{Y}^{jm}_{j-1/2}$$

$$(\vec{L}\cdot\vec{\sigma})\,\mathcal{Y}^{jm}_{j+1/2} = -\hbar\,(j+3/2)\,\mathcal{Y}^{jm}_{j+1/2}$$

(II) $$(\vec{\sigma}\cdot\hat{r})\, \mathcal{Y}^{jm}_{j\mp 1/2} = -\mathcal{Y}^{jm}_{j\pm 1/2}$$

Vamos mostrar a propriedade para o caso particular de $\theta = 0$, quando $\hat{r} = \hat{z}$ e $Y_{\ell m}(0,\varphi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\,\delta_{m,0}$. Nesse caso

$$\mathcal{Y}^{jm}_{j-1/2}(0,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2j}}\begin{pmatrix} \sqrt{j+m}\sqrt{\frac{2j}{4\pi}}\,\delta_{m,1/2} \\ \sqrt{j-m}\sqrt{\frac{2j}{4\pi}}\,\delta_{m,-1/2}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{2j+1}{8\pi}}\,\delta_{m,1/2} \\ \sqrt{\frac{2j+1}{8\pi}}\,\delta_{m,-1/2}\end{pmatrix} = \sqrt{\frac{2j+1}{8\pi}}\begin{pmatrix}\delta_{m,1/2} \\ \delta_{m,-1/2}\end{pmatrix}$$

$$\mathcal{Y}^{jm}_{j+1/2}(0,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2j+2}}\begin{pmatrix} -\sqrt{j-m+1}\sqrt{\frac{2j+2}{4\pi}}\,\delta_{m,1/2} \\ \sqrt{j+m+1}\sqrt{\frac{2j+2}{4\pi}}\,\delta_{m,-1/2}\end{pmatrix} = \sqrt{\frac{2j+1}{8\pi}}\begin{pmatrix}-\delta_{m,1/2} \\ \delta_{m,-1/2}\end{pmatrix}$$

$$(\vec{\sigma}\cdot\hat{r})(\theta=0) = \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

e claramente
$$\sigma_z\,\mathcal{Y}^{jm}_{j-1/2}(0,\varphi) = -\mathcal{Y}^{jm}_{j+1/2}$$
$$\sigma_z\,\mathcal{Y}^{jm}_{j+1/2}(0,\varphi) = -\mathcal{Y}^{jm}_{j-1/2}$$

(III) H comuta com o operador de paridade, portanto podemos procurar estados com paridade bem definida. Queremos que

$$\beta\begin{pmatrix}\varphi_1(\mathbf{r}) \\ \varphi_2(\mathbf{r})\end{pmatrix} = \pm\begin{pmatrix}\varphi_1(-\mathbf{r}) \\ \varphi_2(-\mathbf{r})\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\varphi_1(\mathbf{r}) \\ -\varphi_2(\mathbf{r})\end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad \varphi_1(-\mathbf{r}) = \pm\,\varphi_1(\mathbf{r})$$
$$\varphi_2(-\mathbf{r}) = \mp\,\varphi_2(\mathbf{r})$$

Para Ψ par, φ_1 é par, φ_2 impar.

Para Ψ impar, φ_1 é impar, φ_2 é par.

Paridade

$$\psi'(\mathbf{r}') = S\,\psi(\mathbf{r}) \qquad S = \beta \qquad \mathbf{r}' = -\mathbf{r}$$

$$\psi'(-\mathbf{r}) = \beta\,\psi(\mathbf{r}) \;\rightarrow\; \psi'(\mathbf{r}) = \beta\,\psi(-\mathbf{r})$$

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\,\psi(\mathbf{r})$$

$$\left(c\,\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta m c^2 + V(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}) = E\,\psi(\mathbf{r})$$

Multiplicando por β , $\vec{\alpha}\beta = -\beta\vec{\alpha}$

$$\left[-c\,\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta m c^2 + V(\mathbf{r})\right]\underbrace{\beta\psi(\mathbf{r})}_{\psi'(-\mathbf{r})} = E\,\underbrace{\beta\psi(\mathbf{r})}_{\psi'(-\mathbf{r})}$$

$\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$

$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla \rightarrow -\mathbf{p} = i\hbar\nabla$ e

$$\left[c\,\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta m c^2 + V(\mathbf{r})\right]\psi'(\mathbf{r}) = E\,\psi'(\mathbf{r})$$

$\Rightarrow$ $\psi(\mathbf{r})$ e $\psi'(\mathbf{r})$ são degenerados e proporcionais. Com $\beta^2 = 1$

$$\psi'(\mathbf{r}) = \beta\,\psi(-\mathbf{r}) \equiv \pm\psi(\mathbf{r})$$

$$\downarrow$$

$$\boxed{\beta\,\psi(\mathbf{r}) = \pm\,\psi(-\mathbf{r})}$$

(IV) A paridade de $\mathcal{Y}^{jm}_{\ell}$ é $(-1)^{\ell}$, portanto $\mathcal{Y}^{jm}_{j\mp 1/2}$ tem paridades opostas: $(-1)^{j-1/2} = -(-1)^{j+1/2}$. Além disso sua normalização é

$$\int \mathcal{Y}^{\dagger}\mathcal{Y}\, d\Omega = \frac{1}{2\ell+1}\int (\ell \pm m + 1/2)\,|Y_{\ell,m-1/2}|^2 d\Omega + \frac{1}{2\ell+1}\int (\ell \mp m + 1/2)\,|Y_{\ell,m+1/2}|^2 d\Omega$$

$$= \frac{1}{2\ell+1}\left[(\ell \pm m + 1/2) + (\ell \mp m + 1/2)\right] = 1$$

Dessa forma podemos escrever

$$\psi = \begin{pmatrix} F(r)\,\mathcal{Y}^{jm}_{j-1/2} \\ -i f(r)\,\mathcal{Y}^{jm}_{j+1/2} \end{pmatrix}$$

ou

$$\psi = \begin{pmatrix} G(r)\,\mathcal{Y}^{jm}_{j+1/2} \\ -i g(r)\,\mathcal{Y}^{jm}_{j-1/2} \end{pmatrix}$$

com F, f, G e g funções arbitrárias de r e o fator $(-i)$ colocado por conveniência.

Finalmente re-escrevemos

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{p} = \frac{1}{r^2}(\vec{\sigma}\cdot\vec{r})(\vec{\sigma}\cdot\vec{r})(\vec{\sigma}\cdot\vec{p}) = (\vec{\sigma}\cdot\hat{r})\left[\hat{r}\cdot\vec{p} + \frac{i\vec{\sigma}\cdot(\vec{r}\times\vec{p})}{r}\right]$$

$$= (\vec{\sigma}\cdot\hat{r})\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial r} + \frac{i\vec{\sigma}\cdot\vec{L}}{r}\right].$$

Usando $\varphi_1 = F(r)\, \mathcal{Y}^{jm}_{j-1/2}$ e $\varphi_2 = -i f(r)\, \mathcal{Y}^{jm}_{j+1/2}$ temos:

$$(E - mc^2 + e\phi) F(r) \mathcal{Y}^{jm}_{j-1/2} - c(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\left(-i f(r) \mathcal{Y}^{jm}_{j+1/2}\right) = 0 \quad \text{e}$$

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\left(-i f(r) \mathcal{Y}^{jm}_{j+1/2}\right) = \vec{\sigma}\cdot\hat{r}\left[-\hbar\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{f(r)}{r}(-\hbar)(j+3/2)\right]\mathcal{Y}^{jm}_{j+1/2}$$

$$= \hbar\left[\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{f(r)}{r}(j+3/2)\right]\mathcal{Y}^{jm}_{j-1/2}$$

A equação fica então

$$(E - mc^2 + e\phi) F(r) - \hbar c\left(\frac{d}{dr} + \frac{j+3/2}{r}\right) f(r) = 0$$

e

$$(E + mc^2 + e\phi) f(r) + \hbar c\left(\frac{d}{dr} - \frac{j-1/2}{r}\right) F(r) = 0$$

para a 2ª equação. Analogamente, escolhendo a segunda opção para ψ obtemos

$$(E - mc^2 + e\phi)\, G - \hbar c\left(\frac{d}{dr} - \frac{(j-1/2)}{r}\right) g = 0$$

$$(E + mc^2 + e\phi)\, g + \hbar c\left(\frac{d}{dr} + \frac{(j+3/2)}{r}\right) G = 0$$

Exercício: encontre essas três últimas equações.

Usando agora o potencial de Coulomb

$$\phi(r) = Ze/r$$

e

$$\lambda = j + 1/2 \;; \quad \varepsilon = \frac{E}{mc^2} \;; \quad x = \frac{mc}{\hbar} r \;, \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$$

obtemos, dividindo a primeira equação por mc^2:

$$\left(\frac{E}{mc^2} - 1 + \frac{Ze^2}{rmc^2}\right)F - \frac{\hbar c}{mc^2}\left(\frac{d}{dr} + \frac{j+3/2}{r}\right)f = 0 \qquad \text{ou}$$

usando $\frac{d}{dr} = \frac{d}{dx}\cdot\frac{mc}{\hbar}$,

$$\begin{cases} \left(\varepsilon - 1 + \frac{Z\alpha}{x}\right)F - \left(\frac{d}{dx} + \frac{\lambda+1}{x}\right)f = 0 \\ \left(\varepsilon + 1 + \frac{Z\alpha}{x}\right)f + \left(\frac{d}{dx} - \frac{\lambda-1}{x}\right)F = 0 \qquad \text{p/ a 2ª equação.} \end{cases}$$

e

Analogamente, obtemos

$$\left(\varepsilon - 1 + \frac{Z\alpha}{x}\right)G - \left(\frac{d}{dx} - \frac{\lambda-1}{x}\right)g = 0$$

$$\left(\varepsilon + 1 + \frac{Z\alpha}{x}\right)g + \left(\frac{d}{dx} + \frac{\lambda+1}{x}\right)G = 0$$

que são idênticas ao primeiro par se fizermos $G \to F$, $g \to f$, $\lambda \to -\lambda$.

Basta então resolver o primeiro par de equações.

Para $x \to \infty$ obtemos

$$(\varepsilon - 1)F - \frac{df}{dx} \simeq 0$$

$$(\varepsilon + 1)f + \frac{dF}{dx} \simeq 0 \quad \to \quad (\varepsilon+1)\frac{df}{dx} + \frac{d^2F}{dx^2} \simeq 0 \quad \text{e}$$

$$(\varepsilon+1)(\varepsilon-1)F + F'' \simeq 0 \quad ; \quad F'' - (1-\varepsilon^2)F = 0$$

$$F(x) \approx e^{\pm\sqrt{1-\varepsilon^2}\,x} \approx f(x).$$

Fazemos então a substituição

$$F(x) = e^{-\sqrt{1-\varepsilon^2}\,x} \, x^{r} \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu x^\nu$$

$$f(x) = e^{-\sqrt{1-\varepsilon^2}\,x} \, x^{r} \sum_{\rho=0}^{\infty} b_\rho x^\rho$$

e substituímos nas equações correspondentes:

$$\frac{dF}{dx} = e^{-\sqrt{1-\varepsilon^2}\,x}\left[-\sqrt{1-\varepsilon^2}\sum a_\nu x^{\nu+r} + \sum a_\nu(\nu+r)x^{\nu+r-1}\right]$$

idem para df/dx. Obtemos

$$\bullet \quad (\varepsilon-1)\sum a_\nu x^{\nu+r} + z\alpha \sum a_\nu x^{\nu+r-1} + \sqrt{1-\varepsilon^2}\sum b_\rho x^{\rho+r} - \sum b_\rho(\rho+r)x^{\rho+r-1}$$
$$- (\lambda+1)\sum x^{r+\rho-1} b_\rho = 0$$

$$\bullet \quad (\varepsilon+1)\sum b_\rho x^{\rho+r} - z\alpha \sum b_\rho x^{\rho+r-1} - \sqrt{1-\varepsilon^2}\sum a_\nu x^{\nu+r} + \sum a_\nu(\nu+r)x^{\nu+r-1}$$
$$- (\lambda-1)\sum x^{\nu+r-1} a_\nu = 0$$

Igualando as potencias mais baixas, em $r-1$, obtemos

$$z\alpha a_0 - (\lambda+1+r)\, b_0 = 0$$
$$z\alpha b_0 - (\lambda-1-r)\, a_0 = 0$$

ou

$$\begin{vmatrix} z\alpha & -(\lambda+1+r) \\ -(\lambda-1-r) & z\alpha \end{vmatrix}\begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = 0$$

A solução não trivial existe apenas se

$$z^2\alpha^2 - (\lambda+1+r)(\lambda-1-r) = 0$$
$$z^2\alpha^2 = \lambda^2 - (1+r)^2$$

e $\quad \gamma = -1 \pm \sqrt{\lambda^2 - Z^2\alpha^2}$

ou, excluindo o sinal de $-$ para garantir bom comportamento em $r=0$ e substituindo as variáveis,

$$\boxed{\gamma = -1 + \sqrt{(j+1/2)^2 - Z^2\alpha^2}}$$

Note que γ é real apenas $Z\alpha < j+1/2$. Para $j=1/2$ $(l=0)$ isso dá $Z < 1/\alpha \sim 137$.

As relações de recorrência p/ potencias maiores, $\nu+\gamma-1$, $\nu \neq 0$ ficam:

$$(\varepsilon-1)\, a_{\nu-1} + Z\alpha a_\nu + \sqrt{1-\varepsilon^2}\, b_{\nu-1} - (\lambda+1+\gamma+\nu)\, b_\nu = 0$$

$$(\varepsilon+1)\, b_{\nu-1} + Z\alpha b_\nu - \sqrt{1-\varepsilon^2}\, a_{\nu-1} - (\lambda-1-\gamma-\nu)\, a_\nu = 0$$

A série em a_ν e b_ν deve ser truncada com sempre para garantir convergência de $\psi(r) \to 0$ quando $r \to \infty$. Impomos que existe n' tal que

$$a_{n'+1} = b_{n'+1} = 0 .$$

Fazendo $\nu = n'+1$ nas equações acima obtemos

$$(\varepsilon-1)\, a_{n'} + \sqrt{1-\varepsilon^2}\, b_{n'} = 0$$

$$(\varepsilon+1)\, b_{n'} - \sqrt{1-\varepsilon^2}\, a_{n'} = 0$$

ou

$$\frac{\varepsilon-1}{\sqrt{1-\varepsilon^2}} = -\frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}}{\varepsilon+1} \quad \longrightarrow \quad \varepsilon^2 - 1 = -(1-\varepsilon^2)$$

e as equações são compatíveis. Então,

$$b_{n'} = \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}}{1+\varepsilon}\, a_{n'} = \sqrt{\frac{1-\varepsilon}{1+\varepsilon}}\, a_{n'}$$

Dividindo a 1ª recorrência por $\sqrt{1-\varepsilon}$ e a 2ª recorrência por $\sqrt{1+\varepsilon}$ obtemos

$$-\sqrt{1-\varepsilon}\,a_{\nu-1} + \frac{Z\alpha a_\nu}{\sqrt{1-\varepsilon}} + \sqrt{1+\varepsilon}\,b_{\nu-1} - \frac{(\lambda+1+\gamma+\nu)\,b_\nu}{\sqrt{1-\varepsilon}} = 0$$

$$+\sqrt{1+\varepsilon}\,b_{\nu-1} + \frac{Z\alpha b_\nu}{\sqrt{1+\varepsilon}} - \sqrt{1-\varepsilon}\,a_{\nu-1} - \frac{(\lambda-1-\gamma-\nu)\,a_\nu}{\sqrt{1+\varepsilon}} = 0$$

Subtraindo:

$$0 = \frac{Z\alpha}{\sqrt{1-\varepsilon^2}}\left(\sqrt{1+\varepsilon}\,a_\nu - \sqrt{1-\varepsilon}\,b_\nu\right) - \frac{1}{\sqrt{1-\varepsilon^2}}\left[(\lambda+1+\gamma+\nu)\sqrt{1+\varepsilon}\,b_\nu - (\lambda-1-\gamma-\nu)\sqrt{1-\varepsilon}\,a_\nu\right]$$

$$a_\nu\left[Z\alpha\sqrt{1+\varepsilon} + (\lambda-1-\gamma-\nu)\sqrt{1-\varepsilon}\right] = b_\nu\left[Z\alpha\sqrt{1-\varepsilon} + (\lambda+1+\gamma+\nu)\sqrt{1+\varepsilon}\right]$$

Fazendo $\nu = n'$ devemos ter

$$\frac{a_{n'}}{b_{n'}} = \frac{Z\alpha\sqrt{1-\varepsilon} + (\lambda+1+\gamma+n')\sqrt{1+\varepsilon}}{Z\alpha\sqrt{1+\varepsilon} + (\lambda-1-\gamma-n')\sqrt{1-\varepsilon}} = \sqrt{\frac{1+\varepsilon}{1-\varepsilon}}$$

ou

$$Z\alpha(1-\varepsilon) + (\lambda+1+\gamma+n')\sqrt{1-\varepsilon^2} = Z\alpha(1+\varepsilon) + (\lambda-1-\gamma-n')\sqrt{1-\varepsilon^2}$$

$$\boxed{Z\alpha\varepsilon = (1+\gamma+n')\sqrt{1-\varepsilon^2}}$$

Resolvendo para ε:

$$Z^2\alpha^2\varepsilon^2 = (1+\gamma+n')^2(1-\varepsilon^2)$$

$$\varepsilon^2 = \frac{(1+\gamma+n')^2}{Z^2\alpha^2 + (1+\gamma+n')^2}$$

Usando $\varepsilon = E/mc^2$

$$1+\gamma = \sqrt{(j+1/2)^2 - Z^2\alpha^2}$$ obtemos

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

que é a fórmula da estrutura fina do Hidrogênio, onde

$j = 1/2, 3/2, \ldots$ e $n' = 0, 1, 2, \ldots$

No limite em que $(j+1/2) \gg Z\alpha$ (por exemplo p/ $Z=1$), o denominador fica $\sim (j+1/2) + n' \equiv n$, que é o número quântico usual não relativístico. Nesse limite obtemos

$$E_n \sim \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{Z^2\alpha^2}{n^2}}} \simeq mc^2\left(1 - \frac{Z^2\alpha^2}{n^2}\right) = mc^2 - \frac{mZ^2e^4}{n^2\hbar^2}$$

Como último comentário, consideremos $n' = 0$. Então

$$a_0 = b_0\sqrt{\frac{1+\varepsilon}{1-\varepsilon}}$$

Da relação de recorrência,

$$Z\alpha a_0 = (\lambda + 1 + \gamma) b_0 \quad \Rightarrow \quad \text{dividindo uma pela outra}$$

$$Z\alpha = (\lambda + 1 + \gamma)\sqrt{\frac{1-\varepsilon}{1+\varepsilon}} \quad \text{e} \quad \lambda + 1 + \gamma > 0 \quad (\lambda = j + 1/2)$$

ou ainda $\sqrt{\lambda^2 - Z^2\alpha^2} + \lambda > 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{\lambda > 0}$.

A transformação $\lambda \to -\lambda$ que leva à outra paridade, com G e g, não funciona; não existe se $n' = 0$ o caso $j = \ell - 1/2$.

Fixando $n = j + 1/2 + n'$, então

$n' = 0$; só existe um estado com $j = n - 1/2$

$n' \geq 1$; existem dois estados de paridades opostas para valores $j < n - 1/2$. Esses estados são degenerados pois λ aparece ao quadrado na fórmula da energia

Exemplo $n = 1$, $n' = 0$, 1 estado com $j = 1/2 \to 1S_{1/2}$

$n = 2$, $n' = 0$, 1 estado com $j = 3/2 \to 2P_{3/2}$

$n' = 1$, 2 estados com $j = 1/2$

$2S_{1/2}$, $2P_{1/2}$.

Correções radiativas quebram essas degenerescências , quando são considerados interações com o vácuo do campo eletromagnético, conhecido como Lamb Shift (separação entre $2S_{1/2}$ e $2P_{1/2}$).