Gabarito: Lista 5

December 13, 2018

Problema 1

Trabalhando na representação de Heisenberg obtenha a equação de movimento para os operadores posição ($\vec{x}$) e momento linear ($\vec{p}$) para a teoria de Dirac livre.

Solução:

Na representação de Heisenberg, a evolução temporal dos operadores é dada pela equação de Heisenberg

$$i\hbar\frac{dA\left(t\right)}{dt}=\left[A\left(t\right),H\right]. \tag{1}$$

Considere agora a equação de Dirac livre

$$\left(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu}-\frac{mc}{\hbar}\right)\psi\left(x\right)=0, \tag{2}$$

onde $x=(ct,\vec{x})$. Separando explicitamente as componentes especiais e temporais na equação (2), a equação de Dirac assume uma forma similar a equação de Schrodinger não relativistaca

$$\left(i\vec{\gamma}\cdot\nabla+i\gamma^{0}\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}-\frac{mc}{\hbar}\right)\psi\left(\vec{x},t\right)=0.$$

Multiplicando a equação logo acima pela matriz $\hbar c\gamma^{0}$, obtemos que

$$\left(i\hbar c\gamma^{0}\vec{\gamma}\cdot\nabla+i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-mc^{2}\gamma^{0}\right)\psi\left(\vec{x},t\right)=0, \tag{3}$$

onde foi utilizado que $\left(\gamma^{0}\right)^{2}=1$. Definindo

$$\beta=\gamma^{0},\qquad\vec{\alpha}=\gamma^{0}\vec{\gamma}=\beta\vec{\gamma},$$

e lembrando que

$$\vec{p}=\frac{\hbar}{i}\nabla,$$

a equação (3) pode ser reescrita como

$$\left(c\vec{\alpha}\cdot\vec{p}+\beta mc^{2}\right)\psi\left(\vec{x},t\right)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi\left(\vec{x},t\right). \tag{4}$$

A equação (4) é a forma Hamiltoniana da equação de Dirca livre. Como consequência direta, o operador Hamiltoniano é dada por

$$H = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2. \tag{5}$$

Estamos agora em condições de determinar as equações de movimento dos operadores $\vec{x}$ e $\vec{p}$ para a teoria livre de Dirac. Para o operador $\vec{x}$, temos que

$$\left[x^i, H\right] = \left[x^i, c\alpha^j \vec{p}_j + \beta mc^2\right] = c\alpha^j \left[x^i, \vec{p}_j\right] = c\alpha^j i\hbar\delta^i_j = i\hbar c\alpha^i,$$

enquanto que para o operador $\vec{p}$

$$\left[p^i, H\right] = \left[p^i, c\alpha^j \vec{p}_j + \beta mc^2\right] = c\alpha^j \left[p^i, \vec{p}_j\right] = 0.$$

Por fim, temos que

$$\frac{d\vec{x}\,(t)}{dt} = c\vec{\alpha}, \qquad \frac{d\vec{p}\,(t)}{dt} = 0. \tag{6}$$

Problema 2

Seja uma partícula cuja hamiltoniana é a de Dirac livre. Obtenha o comutador do operador de spin $\frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}$ com a hamiltoniana deste sistema. Para tanto demonstre em geral que

$$\left[\Sigma^j, \alpha^k\right] = 2i\epsilon^{jkl}\alpha^l.$$

Solução:

As matrizes Σ^j e α^k podem ser escritas explicitamente como

$$\Sigma^j = \begin{pmatrix} \sigma^j & 0 \\ 0 & \sigma^j \end{pmatrix} = I_2 \otimes \sigma^j$$

e

$$\alpha^k = \gamma^0\gamma^k = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ -\sigma^k & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^k \\ \sigma^k & 0 \end{pmatrix} = \sigma^1 \otimes \sigma^k,$$

onde $\otimes$ é o produto tensorial entre dois operadores e I_2 é a matriz identidade em duas dimensões. Temos então que

$$\left[\Sigma^j, \alpha^k\right] = \left[I_2 \otimes \sigma^j, \sigma^1 \otimes \sigma^k\right] = \sigma^1 \otimes \left[\sigma^j, \sigma^k\right] = 2i\varepsilon^{jkl}\sigma^1 \otimes \sigma_l = 2i\varepsilon^{jkl}\alpha_l,$$

onde utilizamos a bem conhecida relação de comutação entre as matrizes de Pauli. Por fim, temos que

$$\left[S^j, H\right] = ic\hbar\varepsilon^{jkl}\alpha_l p_k,$$

ou em notação vetorial

$$\left[\vec{S}, H\right] = -ic\hbar\vec{\alpha} \times \vec{p}. \tag{7}$$

Problema 3

Faça duas rotações em torno do eixo z, uma de 2π e outra de 4π, do spinor

$$\mathit{\Psi} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Solução:

O gerador de rotações sob espinores é dado por

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}. \tag{8}$$

Temos então que uma rotação $R_z(\theta)$ em torno do eixo z é da forma

$$R_z(\theta) = \exp\left(-\frac{i}{2}\Sigma_z\theta\right). \tag{9}$$

Sabendo que

$$(\Sigma_z)^2 = (I_2 \otimes \sigma_z)(I_2 \otimes \sigma_z) = \left(I_2 I_2 \otimes (\sigma_z)^2\right) = I_2 \otimes I_2 = I_4,$$

podemos reescrever (9) como

$$R_z(\theta) = I_4 \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - i\Sigma_z \sin\left(\frac{\theta}{2}\right). \tag{10}$$

A forma matricial de $R_z(\theta)$ é dada por

$$R_z(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) + i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix}$$

$$R_z(\theta) = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\theta}{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\theta}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix}. \tag{11}$$

O espinor que será rotacionado é

$$\Psi_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

de forma que

$$\Psi_\theta = R_z(\theta)\Psi_0 = e^{-i\frac{\theta}{2}}\Psi_0. \tag{12}$$

O resultado em (12) nos leva a um interessante fato sobre espinores:

$$\Psi_\theta = \begin{cases} -\Psi_0 & \theta = 2\pi \\ \Psi_0 & \theta = 4\pi \end{cases}.$$

Diferentemente de vetores, espinores não são invariantes sob uma rotação de $\theta = 2\pi$, mas sim sob uma rotação de $\theta = 4\pi$.

Problema 4

Obtenha as energias dos estados ligados da Dirac na presença de um potencial de Coulomb. Quais são os estados correspondentes?

Solução:

Considere a equação de Dirac na presença de um campo externo A_μ:

$$\left(i\gamma^\mu\partial_\mu - \frac{e}{\hbar c}\gamma^\mu A_\mu - \frac{mc}{\hbar}\right)\psi\left(x\right) = 0, \tag{13}$$

onde $A_\mu = \left(\phi, \vec{A}\right)$. A fim de obtermos uma forma Hamiltoniana para (13), basta seguirmos os mesmo passos feitos no Problema 1. Como resultado, obtemos que

$$\left(\frac{\hbar c}{i}\vec{\alpha}\cdot\nabla + e\vec{\alpha}\cdot\vec{A} + e\phi + \beta mc^2\right)\psi\left(\vec{x}, t\right) = i\hbar\frac{\partial\psi\left(\vec{x}, t\right)}{\partial t}.$$

A fim de encontramos os estados ligados na presença de um potencial de Coulomb, iremos escolher

$$\phi = -\frac{Ze}{r}, \qquad \vec{A} = 0.$$

Definindo

$$v\left(r\right) = e\phi = -\frac{Ze^2}{r}, \tag{14}$$

temos que a equação de auto valores do Hamiltoniano é da forma

$$\left(\frac{\hbar c}{i}\vec{\alpha}\cdot\nabla + v\left(r\right) + \beta mc^2\right)\psi_E\left(\vec{r}\right) = E\psi_E\left(\vec{r}\right). \tag{15}$$

Analogamente ao que foi feito no tratamento não-relativistico de potenciais centrais, nós estamos interessantes em encontrar constantes de movimento (operadores que comutam com o Hamiltoniano) a fim de reduzir o problema a um sistema de equações diferencias radiais acopladas. Num primeiro momento, poderiamos tentar utilizar os operadores L^2 e L_z, de forma analoga ao caso não-relativistico. Contudo, note que

$$\left[L^j, H\right] = \varepsilon^{jkl}\left[x_k p_l, H\right] = \varepsilon^{jkl}\left[x_k p_l, c\alpha^m p_m\right] = i\hbar\varepsilon^{jkl}c\alpha^m\delta_{km}p_l = i\hbar c\left(\vec{\alpha}\times\vec{p}\right)^j. \tag{16}$$

O resultado do significado acima é direto: o momento ângular não é mais uma constante de movimento! Todavia, note também que no Problema 2 foi mostrado que

$$\left[S^j, H\right] = -ic\hbar\left(\vec{\alpha}\times\vec{p}\right)^j,$$

que é igual a (16), mas com um sinal de menos global. Tal fato implica que o momento ângular total

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} = \vec{L} + \frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}, \qquad \vec{\Sigma} = \begin{pmatrix}\vec{\sigma} & 0\\ 0 & \vec{\sigma}\end{pmatrix},$$

é uma constante de movimento, ou seja,

$$\left[\vec{J}, H\right] = 0. \tag{17}$$

Como consequência do potencial $v\left(r\right)$ ser esféricamente simétrico, outra constante de movimento do problema é a paridade

$$\mathcal{P} = \gamma^0 R_P,$$

tal que

$$\mathcal{P}\psi\left(\vec{x},t\right) = \gamma^0 R_p \psi\left(\vec{x},t\right) = \gamma^0 \psi\left(-\vec{x},t\right).$$

Portanto, as autofunções com momento angular e paridade bem definidas devem satisfazer

$$J^2 \psi_{Ejm}\left(\vec{r}\right) = j\left(j+1\right)\hbar^2 \psi_{Ejm}\left(\vec{r}\right), \qquad J_3 \psi_{Ejm}\left(\vec{r}\right) = m\hbar\psi_{Ejm}\left(\vec{r}\right) \tag{18}$$

e também

$$\mathcal{P}\psi_{Ejm}\left(\vec{r}\right) = \pm\psi_{Ejm}\left(\vec{r}\right). \tag{19}$$

Utilizando a representação

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix}, \qquad \vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$$

a equação (15) adquire a forma

$$\left[\frac{\hbar c}{i}\begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma}\cdot\nabla \\ \vec{\sigma}\cdot\nabla & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} mc^2 & 0 \\ 0 & -mc^2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} v\left(r\right) & 0 \\ 0 & v\left(r\right) \end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} = E\begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix}, \tag{20}$$

onde $U\left(\vec{r}\right)$ e $V\left(\vec{r}\right)$ contém respectivamente as duas componentes superiores e inferiores de $\psi_{Ejm}\left(\vec{r}\right)$. Como consequência de (18), as funções $U\left(\vec{r}\right)$ e $V\left(\vec{r}\right)$ devem ter momento ângular bem definido. Podemos também utilizar (19) para analisar a paridade dessas funções:

$$\begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} U\left(-\vec{r}\right) \\ V\left(-\vec{r}\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U\left(-\vec{r}\right) \\ -V\left(-\vec{r}\right) \end{pmatrix} = \pm\begin{pmatrix} U\left(\vec{r}\right) \\ V\left(\vec{r}\right) \end{pmatrix}.$$

O que obtivemos é que $U\left(\vec{r}\right)$ e $V\left(\vec{r}\right)$ devem ter paridades opostar, ou seja,

$$U\left(-\vec{r}\right) = \pm U\left(\vec{r}\right), \qquad V\left(-\vec{r}\right) = \mp V\left(\vec{r}\right).$$

A equação matricial (20) pode ser decomposta em duas equações matricias acopladas para as funções $U_{jm}\left(\vec{r}\right)$ e $V_{jm}\left(\vec{r}\right)$, ou seja,

$$\left(mc^2 - E + v\left(r\right)\right)U_{jm} + c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}V_{jm} = 0 \tag{21}$$

e

$$\left(-mc^2 - E + v\left(r\right)\right)V_{jm} + c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}U_{jm} = 0. \tag{22}$$

A fim de tratarmos as equações (21) e (22), vamos introduzir as funções angulares de duas componentes

$$\mathcal{Y}^{\pm}_{jm}\left(\hat{r},s\right) = \sum_{m_s} C^{m_s}_{jm} Y_{j\pm\frac{1}{2},m-m_s}\chi_{m_s}\left(s\right), \tag{23}$$

onde os $C^{m_s}_{jm}$ são coeficientes de Clebsch-Gordon e $s = \pm 1/2$ é uma variável de spin. Os $\mathcal{Y}^{\pm}_{jm}\left(\hat{r},s\right)$ são autofunções simultâneas de J^2, J_3, L^2 e S^2, ou seja,

$$\begin{aligned}
J^2\mathcal{Y}^{\pm}_{jm}\left(\hat{r},s\right) &= j\left(j+1\right)\hbar^2\mathcal{Y}^{\pm}_{jm}\left(\hat{r},s\right), \\
J_3\mathcal{Y}^{\pm}_{jm}\left(\hat{r},s\right) &= m\hbar\mathcal{Y}^{\pm}_{jm}\left(\hat{r},s\right), \\
L^2\mathcal{Y}^{\pm}_{jm}\left(\hat{r},s\right) &= \left(j\pm\frac{1}{2}\right)\left(j\pm\frac{1}{2}+1\right)\hbar^2, \\
S^2\mathcal{Y}^{\pm}_{jm}\left(\hat{r},s\right) &= \frac{3}{4}\hbar^2\mathcal{Y}^{\pm}_{jm}\left(\hat{r},s\right).
\end{aligned} \tag{24}$$

As componentes de spin nas equações acima são dadas pelas matrizes de Pauli usuais. A paridade de $\mathcal{Y}^{\pm}_{jm}\left(\hat{r},s\right)$ é dada por $\left(-1\right)^{j\pm\frac{1}{2}}$, de modo que para um dado valor de j os dois tipos de função angular $(\pm)$ tem paridades opostas.

Existem duas possíveis soluções para $\psi_{Ejm}\left(\vec{r}\right)$ com momento angular total bem definido:

$$\psi^{(1)}_{Ejm}\left(\vec{r}\right) = \begin{pmatrix} \mathcal{Y}^{-}_{jm}\left(\hat{r},s\right)g_1\left(r\right) \\ \mathcal{Y}^{+}_{jm}\left(\hat{r},s\right)if_1\left(r\right) \end{pmatrix} \tag{25}$$

e

$$\psi^{(2)}_{Ejm}\left(\vec{r}\right) = \begin{pmatrix} \mathcal{Y}^{+}_{jm}\left(\hat{r},s\right)g_2\left(r\right) \\ \mathcal{Y}^{-}_{jm}\left(\hat{r},s\right)if_2\left(r\right) \end{pmatrix}. \tag{26}$$

Os dois tipos de funções de onda de quatro componentes não têm um valor de momento angular orbital bem definido, pois ambas contém componentes tanto com $l = j + 1/2$ como componentes com $l = j - 1/2$. Na medida em que as componentes V_{jm} sejam pequenas comparadas com as componentes U_{jm}, as soluções do tipo 1 e 2 terão predominantemente $l = j - 1/2$ e $l = j + 1/2$, respectivamente.

Vamos agora considerar a solução (2)[1]. Podemos então reescrever as equações (21) e (22) como

$$\begin{aligned}
&\left(mc^2 - E + v\left(r\right)\right)\mathcal{Y}^{+}_{jm}\left(\hat{r},s\right)g_2\left(r\right) + c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\mathcal{Y}^{-}_{jm}\left(\hat{r},s\right)if_2\left(r\right) = 0, \\
&c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\mathcal{Y}^{+}_{jm}\left(\hat{r},s\right)g_2\left(r\right) - \left(mc^2 + E - v\left(r\right)\right)\mathcal{Y}^{-}_{jm}\left(\hat{r},s\right)if_2\left(r\right) = 0.
\end{aligned} \tag{27}$$

Sabendo que a matrizes de Pauli obdecem

$$\begin{aligned}
\left(\vec{A}\cdot\vec{\sigma}\right)\left(\vec{B}\cdot\vec{\sigma}\right) &= A_j\sigma_j B_k\sigma_k = A_jB_k\left(2i\varepsilon^{jkl}\sigma_l + \sigma_k\sigma_j\right) \\
&= 2i\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{A}\times\vec{B}\right) + A_jB_k\left(2\delta_{kj} - \sigma_j\sigma_k\right) \\
&= 2i\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{A}\times\vec{B}\right) + 2\vec{A}\cdot\vec{B} - \left(\vec{A}\cdot\vec{\sigma}\right)\left(\vec{B}\cdot\vec{\sigma}\right) \\
\left(\vec{A}\cdot\vec{\Sigma}\right)\left(\vec{B}\cdot\vec{\Sigma}\right) &= \vec{A}\cdot\vec{B} + i\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{A}\times\vec{B}\right),
\end{aligned} \tag{28}$$

é possível mostrar que

$$I_2 = \frac{\left(\vec{\sigma}\cdot\vec{r}\right)\left(\vec{\sigma}\cdot\vec{r}\right)}{r^2}. \tag{29}$$

Como consequência, temos que

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{p} = \frac{\left(\vec{\sigma}\cdot\vec{r}\right)\left(\vec{\sigma}\cdot\vec{r}\right)}{r^2}\vec{\sigma}\cdot\vec{p} = \frac{\left(\vec{\sigma}\cdot\vec{r}\right)}{r^2}\left[\vec{r}\cdot\vec{p} + i\vec{\sigma}\cdot\left(\vec{r}\times\vec{p}\right)\right] = \left(\vec{\sigma}\cdot\hat{r}\right)\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{i}{r}\vec{\sigma}\cdot\vec{L}\right], \tag{30}$$

[1] A analise da solução (1) pode ser encontrada na Seção 11.5.2 do livro "Mecânica Quântica - A. Toledo Piza".

onde novamente utilizamos (28). Temos ainda que

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{L}=\frac{2}{\hbar}\vec{S}\cdot\vec{L}=\frac{J^2-L^2-S^2}{\hbar}=\frac{1}{\hbar}\left(J^2-L^2-\frac{3}{4}\hbar^2\right),$$

implicando que

$$\begin{aligned}
\vec{\sigma}\cdot\vec{L}\mathcal{Y}^{\pm}_{jm}\left(\hat{r},s\right)&=\frac{1}{\hbar}\left(J^2-L^2-\frac{3}{4}\hbar^2\right)\mathcal{Y}^{\pm}_{jm}\left(\hat{r},s\right)=\frac{1}{\hbar}\left[j\left(j+1\right)\hbar^2-\left(j\pm\frac{1}{2}\right)\left(j\pm\frac{1}{2}+1\right)\hbar^2-\frac{3}{4}\hbar^2\right]\mathcal{Y}^{\pm}_{jm}\left(\hat{r},s\right)\\
\vec{\sigma}\cdot\vec{L}\mathcal{Y}^{\pm}_{jm}\left(\hat{r},s\right)&=\left[\mp\left(j+\frac{1}{2}\right)-1\right]\hbar\mathcal{Y}^{\pm}_{jm}\left(\hat{r},s\right).
\end{aligned}\tag{31}$$

Utilizando também que

$$\left(\vec{\sigma}\cdot\hat{r}\right)\mathcal{Y}^{\pm}_{jm}\left(\hat{r},s\right)=-\mathcal{Y}^{\mp}_{jm}\left(\hat{r},s\right)$$

juntamente com (31) a (30), temos que

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\mathcal{Y}^{\pm}_{jm}\left(\hat{r},s\right)=\left(\vec{\sigma}\cdot\hat{r}\right)\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{i}{r}\left[\mp\left(j+\frac{1}{2}\right)-1\right]\hbar\right]\mathcal{Y}^{\pm}_{jm}\left(\hat{r},s\right)=-\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{i}{r}\left[\mp\left(j+\frac{1}{2}\right)-1\right]\hbar\right]\mathcal{Y}^{\mp}_{jm}\left(\hat{r},s\right).$$

A expressão logo acima nos permite reescrever as equações (27). Temos como resultado que

$$\begin{aligned}
\left(mc^2-E+v\left(r\right)\right)\mathcal{Y}^{+}_{jm}\left(\hat{r},s\right)g_2\left(r\right)-c\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{i}{r}\left[\left(j+\frac{1}{2}\right)-1\right]\hbar\right]\mathcal{Y}^{+}_{jm}\left(\hat{r},s\right)if_2\left(r\right)&=0,\\
-c\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{i}{r}\left[-\left(j+\frac{1}{2}\right)-1\right]\hbar\right]\mathcal{Y}^{-}_{jm}\left(\hat{r},s\right)g_2\left(r\right)-\left(mc^2+E-v\left(r\right)\right)\mathcal{Y}^{-}_{jm}\left(\hat{r},s\right)if_2\left(r\right)&=0.
\end{aligned}$$

Fazendo algumas simplificações

$$\begin{aligned}
\left(mc^2-E+v\left(r\right)\right)g_2\left(r\right)-c\left[\hbar\frac{\partial}{\partial r}-\left[\left(j+\frac{1}{2}\right)-1\right]\frac{\hbar}{r}\right]f_2\left(r\right)&=0,\\
\left(mc^2+E-v\left(r\right)\right)f_2\left(r\right)-c\left[\hbar\frac{\partial}{\partial r}+\left[\left(j+\frac{1}{2}\right)+1\right]\frac{\hbar}{r}\right]g_2\left(r\right)&=0.
\end{aligned}\tag{32}$$

Introduzindo

$$F_2\left(r\right)=rf_2\left(r\right),\qquad G_2\left(r\right)=rg_2\left(r\right),$$

a equação (32) adquire uma forma mais simples:

$$\begin{aligned}
c\hbar\left[\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\left(j+\frac{1}{2}\right)}{r}\right]F_2\left(r\right)-\left(mc^2+v\left(r\right)-E\right)G_2\left(r\right)&=0,\\
c\hbar\left[\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\left(j+\frac{1}{2}\right)}{r}\right]G_2\left(r\right)-\left(mc^2-v\left(r\right)+E\right)F_2\left(r\right)&=0.
\end{aligned}\tag{33}$$

Para as soluções (1), temos que

$$\begin{aligned}
c\hbar\left[\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\left(j+\frac{1}{2}\right)}{r}\right]F_1\left(r\right)-\left(mc^2+v\left(r\right)-E\right)G_1\left(r\right)&=0,\\
c\hbar\left[\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\left(j+\frac{1}{2}\right)}{r}\right]G_1\left(r\right)-\left(mc^2-v\left(r\right)+E\right)F_1\left(r\right)&=0.
\end{aligned}\tag{34}$$

Olhando para as equações radiais (33) e (34), podemos ver que as funções F_i e G_i, com $i=1,2$, podem ser vistas como dependentes do parâmetro $\lambda = j + 1/2$. Definindo então $F_i^{(\lambda)}(r)$ e $G_i^{(\lambda)}(r)$, tal que

$$F_1^{(\lambda)} = F_2^{(-\lambda)} \qquad \text{e} \qquad G_1^{(\lambda)} = G_2^{(-\lambda)},$$

podemos acomodar os dois tipos de soluções em um só sistema de equações radiais

$$\begin{aligned} c\hbar\left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\lambda}{r}\right] F_i^{(\lambda)}(r) - \left(mc^2 + v(r) - E\right) G_i^{(\lambda)}(r) = 0, \\ c\hbar\left[\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\lambda}{r}\right] G_i^{(\lambda)}(r) - \left(mc^2 - v(r) + E\right) F_i^{(\lambda)}(r) = 0. \end{aligned} \tag{35}$$

As equações (35) podem ser reduzidas a equações diferenciais conhecidas através de transformações apropriadas:

$$K_i^{(\lambda)} = \frac{G_i^{(\lambda)}}{\sqrt{1+E}} + \frac{F_i^{(\lambda)}}{\sqrt{1-E}}, \qquad I_i^{(\lambda)} = \frac{G_i^{(\lambda)}}{\sqrt{1+E}} - \frac{F_i^{(\lambda)}}{\sqrt{1-E}},$$

onde as transformações inversas são dadas por

$$G_i^{(\lambda)} = \frac{\sqrt{1+E}}{2}\left(K_i^{(\lambda)} + I_i^{(\lambda)}\right), \qquad F_i^{(\lambda)} = \frac{\sqrt{1-E}}{2}\left(K_i^{(\lambda)} - I_i^{(\lambda)}\right).$$

Introduzindo também a notação $p = \sqrt{1-E^2} = \sqrt{1+E}\sqrt{1-E}$, as equações (35) assumem a forma

$$\frac{dK_i^{(\lambda)}}{dr} + \left(p - \frac{Ze^2}{p}\frac{1}{r}\right) K_i^{(\lambda)} = \left(\lambda + \frac{Ze^2}{p}\right)\frac{1}{r} I_i^{(\lambda)}, \tag{36}$$

$$\frac{dI_i^{(\lambda)}}{dr} - \left(p - \frac{Ze^2}{p}\frac{1}{r}\right) I_i^{(\lambda)} = \left(\lambda - \frac{Ze^2}{p}\right)\frac{1}{r} K_i^{(\lambda)}. \tag{37}$$

Podemos aplicar uma segunda derivada com relação a r na equação (36), resultando em

$$\frac{d^2K_i^{(\lambda)}}{dr^2} + \left(p - \frac{Ze^2}{p}\frac{1}{r}\right)\frac{dK_i^{(\lambda)}}{dr} + \frac{Ze^2}{p}\frac{1}{r^2}K_i^{(\lambda)} = \left(\lambda + \frac{Ze^2}{p}\right)\frac{1}{r}\frac{dI_i^{(\lambda)}}{dr} - \frac{Ze^2}{p}\frac{1}{r^2}I_i^{(\lambda)}.$$

É possível eliminar a dependência de $I_i^{(\lambda)}$ na equação acima utilizando (36) e (37). O resultado é

$$r\frac{d^2K_i^{(\lambda)}}{dr^2} + \frac{dK_i^{(\lambda)}}{dr} + \left(2Ze^2E + p - p^2 r - \frac{\gamma^2}{r}\right) K_i^{(\lambda)} = 0, \tag{38}$$

onde foi definido o parâmetro $\gamma = \sqrt{\lambda^2 - Z^2e^4}$. Por fim, definindo as transformações

$$x = 2pr, \qquad K_i^{(\lambda)}(x) = e^{-\frac{x}{2}} x^{\gamma} M_i^{(\lambda)}(x), \tag{39}$$

a equação (38) pode ser reescrita como

$$x\frac{d^2M_i^{(\lambda)}(x)}{dx^2} + (2\gamma + 1 - x)\frac{dM_i^{(\lambda)}(x)}{dx} - \left(\gamma - \frac{Ze^2E}{p}\right) M_i^{(\lambda)}(x) = 0. \tag{40}$$

A solução da equação acima é a função hipergeométrica confluente

$$M_i^{(\lambda)}(x) = F\left(\gamma - \frac{Ze^2E}{p}, 2\gamma + 1, x\right).$$

	n=0	n=1	n=2	n=3	$\cdots$
l=0	+, j=1/2	+, j=1/2	+, j=1/2	+, j=1/2	$\cdots$
l=1	+, j=3/2	+, j=3/2; -, j=1/2	+, j=3/2; -, j=1/2	+, j=3/2; -, j=1/2	$\cdots$
l=2	+, j=5/2	+, j=5/2; -, j=3/2	+, j=5/2; -, j=3/2	+, j=5/2; -, j=3/2	$\cdots$
l=3	+, j=7/2	+, j=7/2; -, j=5/2	+, j=7/2; -, j=5/2	+, j=7/2; -, j=5/2	$\cdots$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$

Table 1: Estados do átomo hidrogenóide relativisco organizados em termos dos valores de l e n. O momento angular total é dado por j. Os símbolos $+$ e $-$ fazem refência as soluções do tipo 1 e 2, respectivamente.

Uma pequana pausa para falarmos um pouco sobre essas funções. A equação diferencial

$$x\frac{d^2F}{dx^2} + (b - x)\frac{dF}{dx} - aF = 0$$

tem como solução a função hipergeométrica confluente

$$F(a, b, x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a^{(k)}}{b^{(k)}}\frac{x^k}{k!},$$

onde

$$a^{(0)} = 1, \qquad a^{(k)} = a(a+1)(a+2)\cdots(a+k-1),$$

o mesmo para $b^{(n)}$.

As propriedades das funções hipergeométricas confluente que são de relavância mais imediata para o espectro discreto do átomo hidrogenóide relativistico são as que garantem a normalizabilidade das funções $\psi^{(1)}_{Ejm}(\vec{r})$ e $\psi^{(2)}_{Ejm}(\vec{r})$. Isso nos leva a exigir regularidade de $K_i^{(\lambda)}(x)$ na origem ($r = 0$). Como consequência de (39), temos que $\gamma = \sqrt{\lambda^2 - Z^2e^4} > 0$. Em segundo lugar, o anulamento de $K_i^{(\lambda)}(x)$ no limite $x \to \infty$ exige que o eventual crescimento com x de $M_i^{(\lambda)}(x)$ seja de fato dominado por um comportamento exponencia decrescente. Isso ocorre quando a é um inteiro não positivo. Como consequência

$$\gamma - \frac{Ze^2E}{p} = -n, \qquad n \geq 0.$$

Após um pouco de álgebra

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{Z\alpha}{\gamma+n}\right)^2}}, \tag{41}$$

onde os fatores de $\hbar$ e c foram re-introduzidos, resultado em

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}, \qquad \gamma = \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - Z^2\alpha^2}.$$

Para cada um dos valores $n > 0$ existem duas soluções normalizáveis das equações radiais, correspondentes a $\lambda = \pm(j + 1/2)$. Contudo, o caso particular $n = 0$ somente a solução $\lambda = j + 1/2$ permanece. Na Tabela 1 são mostrados os primeiros estados do átomo hidrogenóide relativistico[2].

[2] Para mais detalhes sobre a degenerescência do sistema, ver Seção 11.5.3 do livro "Mecânica Quântica - A. Toledo Piza".