

Seminário

**Acoplamento L-S na mecânica quântica
relativista**

Artur Carlos Ferreira Alho

Ano Lectivo de 2006/2007
12 de Julho de 2007

Resumo

Pretende-se, de uma forma geral com este seminário, estudar a equação de Dirac e algumas das suas propriedades. Numa primeira fase é discutida a generalização da mecânica quântica à teoria relativista e as razões que levaram Dirac a construir uma equação de primeira ordem nas derivadas em ordem ao tempo e ao espaço. A imposição da lineariedade leva a uma equação matricial e à descrição do sistema em termos da função de onda bispinorial. São discutidas, a covariância da equação e as suas soluções para a partícula livre, assim como as soluções em que existe um potencial externo. Neste último caso mostra-se que para certos valores do potencial (potenciais fortes) existe uma probabilidade finita para transições entre estados de energia positiva e negativa (Paradoxo de Klein) e discute-se a forma como Dirac solucionou o problema (Teoria dos Buracos de Dirac). Na segunda parte é introduzida a equação de Dirac em coordenadas esféricas, juntamente, com o operador de Runge-Lenz, os harmónicos esféricos bispinoriais e os seus números quânticos. São discutidas as soluções de partícula livre e as soluções para uma partícula num poço de potencial. A terceira e última parte consiste na determinação numérica das soluções para a partícula no poço de potencial, e mostrar, que para grandes valores do raio do poço, as soluções aproximam-se da situação não-relativista, situação em que o acoplamento spin-órbita não existe e os níveis energéticos são degenerados. Concluindo que a lineariedade da equação de Dirac, como equação relativista, leva naturalmente ao aparecimento do termo de acoplamento entre o spin e o momento angular orbital, demonstrando a sua natureza relativista.

Conteúdo

1	Mecânica Quântica	3
1.1	Princípios da mecânica quântica	3
1.2	Simetrias e momento angular	4
1.2.1	Valores próprios do momento angular	7
1.2.2	Funções próprias do momento angular	10
1.2.3	Operador Paridade	11
1.3	Equação de Schrodinger em coordenadas esféricas	12
1.4	Poço de potencial esférico	13
1.5	Spin	15
1.5.1	Spin $\frac{1}{2}$	16
1.6	Momento angular total	17
1.7	Acoplamento $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$	18
1.8	Spinors num campo central	18
2	Relatividade Restrita	22
2.1	O Princípio da Relatividade	22
2.2	Espaço de Minkowski	23
2.2.1	Energia e momento	25
2.3	Grupo de Lorentz	26
2.3.1	Transformações próprias de Lorentz	27
2.3.2	Transformações impróprias de Lorentz	31
2.4	Grupo de Poincaré	31
3	Mecânica Quântica Relativista	32
3.1	Equação de Klein-Gordon	32
3.2	Equação de Dirac	34
3.2.1	Propriedades das matrizes α e β e a representação padrão	35
3.2.2	Probabilidade e Corrente	37
3.2.3	Momento angular e spin	37
3.2.4	Matrizes γ e a Forma Covariante da Equação de Dirac	39
3.3	Covariância da Equação de Dirac	40
3.3.1	Transformações de equivalência	40

3.3.2	Transformações de Lorentz da função de onda	41
3.3.3	Covariantes Bilineares	44
3.4	Soluções da equação de Dirac	47
3.4.1	Partícula em Repouso	47
3.4.2	Partícula Livre	48
3.4.3	Propriedades dos spinors	49
3.4.4	Paradoxo de Klein	53
3.4.5	A Teoria dos "Buracos" de Dirac	58
4	Potencial Central	59
4.1	Operador Runge-Lenz	59
4.1.1	A função de onda bispinorial	62
4.2	Equação de Dirac em coordenadas esféricas	63
4.3	Partícula livre	66
4.4	Poço de Potencial esférico	67
5	Conclusão	70
	Appendices	70
A	Soluções Numéricas	71
A.1	Poço de potencial esférico na teoria não relativista	71
A.2	Poço de potencial esférico na teoria relativista	73

Capítulo 1

Mecânica Quântica

1.1 Princípios da mecânica quântica

- Um estado quântico é descrito pela função de estado $|\Psi\rangle$ que contém toda a informação possível sobre o sistema. Na representação das coordenadas tem-se a função de onda $\langle \mathbf{r} | \Psi \rangle = \psi(q_i, s_i, t)$ onde s_i designa outros números quânticos para além dos possíveis de descrever a partir das coordenadas (por exemplo o spin). $\rho = |\psi(q_i, s_i, t)|^2 \geq 0$ tem a interpretação duma densidade de probabilidade de encontrar o sistema num estado com coordenadas q_i , números quânticos internos s_i , no instante t .
- Os observáveis físicos são representados por operadores hermiticos lineares. A hermiticidade dos operadores implica que estes tenham valores próprios reais.
- Um estado do sistema é um estado próprio do operador $\hat{\Omega}$ se

$$\hat{\Omega}|\Psi_n\rangle = \omega_n|\Psi_n\rangle \quad (1.1)$$

onde Ψ_n é o estado próprio a que corresponde o valor próprio ω_n . Na representação das coordenadas tem-se

$$\hat{\Omega}(q, s, t)\psi(q, s, t) = \omega_n\psi(q, s, t) \quad (1.2)$$

- Uma função de onda arbitrária pode ser escrita como combinação linear de um conjunto completo e ortonormal de funções próprias, ϕ_n , dum conjunto completo de operadores que comutam $\{\Omega_1, \Omega_2, \dots\}$. Assim

$$\psi = \sum_n a_n \phi_n \quad (1.3)$$

com a_n coeficientes complexos.

- O resultado duma medição é qualquer um dos valores-próprios, ω_n , com probabilidade $|a_n|^2$. O valor expectável ou valor médio de um observável é dado por

$$\langle \hat{\Omega} \rangle = \langle \Psi | \hat{\Omega} | \Psi \rangle = \sum_s \int dq_1 \dots \psi^*(q_i, s_i, t) \hat{\Omega} \psi^*(q_i, s_i, t) = \sum_n |a_n|^2 \omega_n \quad (1.4)$$

- A evolução no tempo dum sistema físico é dada pela equação de Schrodinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad (1.5)$$

onde o hamiltoniano \hat{H} é um operador linear e hermitico, $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$. Se o Hamiltoniano não depende do tempo tem-se a equação de Schrodinger independente do tempo

$$\hat{H} \psi = E \psi \quad (1.6)$$

A linearidade do operador hamiltoniano implica o princípio da sobreposição e a hermiticidade conduz à conservação de probabilidade

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \Psi | \Psi \rangle &= \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} | \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi | \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle \\ &= \left\langle -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi | \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi | -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi \right\rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \left[\langle \hat{H} \Psi | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{H} \Psi \rangle \right] = 0 \end{aligned} \quad (1.7)$$

1.2 Simetrias e momento angular

Na mecânica quântica a evolução no tempo de um observável que não depende explicitamente do tempo, i.e. $\frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial t} = 0$, é dada por

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \hat{\Omega} \rangle}{dt} &= \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} | \hat{\Omega} | \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi | \hat{\Omega} | \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle \\ &= \left\langle -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi | \hat{\Omega} \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi | \hat{\Omega} | -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi \right\rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \left[\langle \hat{H} \Psi | \hat{\Omega} \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{\Omega} | \hat{H} \Psi \rangle \right] \\ &= \frac{i}{\hbar} \left[\langle \Psi | \left[\hat{H}, \hat{\Omega} \right] | \Psi \rangle \right] \end{aligned} \quad (1.8)$$

ou seja, se o observável comuta com o Hamiltoniano

$$\left[\hat{\Omega}, \hat{H} \right] = 0 \quad (1.9)$$

então $\langle \Omega \rangle$ é uma quantidade conservada ou constante do movimento.

$$\frac{d\langle \Omega \rangle}{dt} = 0 \quad (1.10)$$

Uma simetria é a transformação nas coordenadas do sistema que deixa o Hamiltoniano invariante. As leis de conservação são consequência das simetrias do sistema.

• **Invariância de translação**

Considere-se um sistema fechado de N partículas livres. Visto que o espaço é homogêneo, o Hamiltoniano do sistema é invariante perante translações. Para um deslocamento infinitesimal

$$\delta \mathbf{r} : \mathbf{r}_k \rightarrow \mathbf{r}_k + \delta \mathbf{r} \quad k = 1, \dots, N \quad (1.11)$$

a função de onda transforma-se da seguinte forma

$$\psi(\mathbf{r}_k + \delta \mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}_k) + \delta \mathbf{r} \sum_k \nabla_k \psi(\mathbf{r}_k) \quad (1.12)$$

onde

$$1 + \delta \mathbf{r} \sum_k \nabla_k \quad (1.13)$$

é o operador de translação infinitesimal que transforma $\psi(\mathbf{r}_k)$ em $\psi(\mathbf{r}_k + \delta \mathbf{r})$. Se o Hamiltoniano é invariante sob a transformação então este comuta com o operador

$$\left(\sum_k \nabla_k \right) \hat{H} - \hat{H} \left(\sum_k \nabla_k \right) = 0 \quad (1.14)$$

qualquer que seja $\delta \mathbf{r}$. O operador momento na mecânica quântica é $-i\hbar \nabla$, ou seja, da relação anterior tem-se que

$$[\hat{p}, \hat{H}] = 0 \quad (1.15)$$

e a quantidade de movimento é uma constante do movimento, $\frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} = 0$. Como a derivação de funções de várias variáveis não depende da ordem de derivação, então o mesmo é dizer que as três componentes do momento comutam entre si

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (1.16)$$

e os seus valores podem ser determinados simultaneamente.

• **Invariância de rotação**

Além da propriedade de homogeneidade, o espaço é também isotrópico: todas as direcções são equivalentes. Assim o Hamiltoniano de um sistema de partículas fechado deve ser invariante para uma rotação de todo o sistema de um ângulo arbitrário em torno de um eixo qualquer. Seja $\delta \boldsymbol{\phi}$ o vector de rotação infinitesimal, igual em grandeza ao ângulo de rotação $\delta \phi$ e que tem a direcção do eixo de rotação. As variações $\delta \mathbf{r}_k$ devidas à rotação são

$$\delta \mathbf{r}_k = \delta \boldsymbol{\phi} \wedge \mathbf{r}_k \quad (1.17)$$

a função de onda transformada é

$$\begin{aligned}
\psi(\mathbf{r}_k + \delta\mathbf{r}) &= \psi(\mathbf{r}_k) + \sum_k \delta\mathbf{r}_k \cdot \nabla_k \psi(\mathbf{r}_k) \\
&= \psi(\mathbf{r}_k) + \sum_k \delta\phi \wedge \mathbf{r}_k \cdot \nabla_k \psi(\mathbf{r}_k) \\
&= \left(1 + \delta\phi \sum_k \mathbf{r}_k \wedge \nabla_k \right) \psi(\mathbf{r}_k)
\end{aligned} \tag{1.18}$$

com

$$1 + \delta\phi \sum_k \mathbf{r}_k \wedge \nabla_k \tag{1.19}$$

o operador de rotação infinitesimal. Este operador comuta com o Hamiltoniano

$$\left(\sum_k \mathbf{r}_k \wedge \nabla_k \right) \hat{H} - \hat{H} \left(\sum_k \mathbf{r}_k \wedge \nabla_k \right) = 0 \tag{1.20}$$

o que traduz a conservação da quantidade $\sum_k \mathbf{r}_k \wedge \nabla_k$ para qualquer $\delta\phi$. Esta quantidade é o momento angular

$$\hat{L} = -i\hbar (\mathbf{r} \wedge \nabla) \tag{1.21}$$

e é uma constante do movimento, $\frac{d\langle \hat{L} \rangle}{dt} = 0$.

As componentes do momento angular obedecem às seguintes relações de comutação

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijl} \hat{L}_l \tag{1.22}$$

pelo que a medição dos valores das componentes do momento angular não podem ser determinadas simultaneamente. Estas relações de comutação definem uma álgebra. Contudo, cada uma das três componentes de \mathbf{L} comuta com o operador $\mathbf{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$. Por exemplo

$$\begin{aligned}
[L_z, \mathbf{L}^2] &= [L_z, L_x^2] + [L_z, L_y^2] \\
&= [L_z, L_x] L_x + L_x [L_z, L_x] + [L_z, L_y] L_y + L_y [L_z, L_y] \\
&= i\hbar (L_y L_x + L_x L_y) - i\hbar (L_x L_y + L_y L_x) = 0
\end{aligned} \tag{1.23}$$

da mesma forma

$$[L_x, \mathbf{L}^2] = 0 \tag{1.24}$$

$$[L_y, \mathbf{L}^2] = 0 \tag{1.25}$$

ou seja, os valores próprios do quadrado do momento angular podem ser determinados simultaneamente com uma das suas componentes. É conveniente formar combinações complexas de L_x e L_y .

Assim, definindo

$$L_+ = L_x + iL_y \tag{1.26}$$

$$L_- = L_x - iL_y \quad (1.27)$$

tem-se das relações (1.22) que

$$[L_+, L_-] = 2\hbar L_z \quad , \quad [L_z, L_+] = \hbar L_+ \quad , \quad [L_z, L_-] = -\hbar L_- \quad (1.28)$$

e

$$\begin{aligned} L^2 &= L_+ L_- + L_z^2 - \hbar L_z \\ &= L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z \end{aligned} \quad (1.29)$$

Em coordenadas esféricas

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi \\ y &= r \sin \theta \sin \phi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned} \quad (1.30)$$

(1.21) fica

$$\hat{L} = i\hbar \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \hat{\theta} - \frac{\partial}{\partial \theta} \hat{\phi} \right) \quad (1.31)$$

e as componentes cartesianas¹

$$\begin{aligned} L_x &= i\hbar \cot \theta \left(-\sin \phi + \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{\sin \phi}{\cot \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \\ L_y &= i\hbar \cot \theta \left(\cos \phi + \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{\cos \phi}{\cot \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \\ L_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \end{aligned} \quad (1.32)$$

ou seja

$$L_{\pm} = \pm \hbar e^{\pm i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (1.33)$$

e

$$L^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (1.34)$$

1.2.1 Valores próprios do momento angular

Para determinar os valores-próprios da projecção do momento angular numa certa direcção é conveniente direccionar o eixo polar nessa direcção. Aplicando o operador L_z à função de onda tem-se em coordenadas esféricas

$$L_z \psi(r, \theta, \phi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \psi(r, \theta, \phi) \quad (1.35)$$

$\hat{r} = \hat{x} \sin \theta \cos \phi + \hat{y} \sin \theta \sin \phi + \hat{z} \cos \theta$

¹ $\hat{\theta} = \hat{x} \cos \theta \cos \phi + \hat{y} \cos \theta \sin \phi - \hat{z} \sin \theta$

$\hat{\phi} = -\hat{x} \sin \phi + \hat{y} \cos \phi$

integrando vem

$$\psi = f(r, \theta) e^{\frac{i}{\hbar} L_z \phi} \quad (1.36)$$

com $f(r, \theta)$ uma função arbitrária de r e θ . Para que a função de onda seja unívoca, esta tem de ser periódica em ϕ de período 2π , ou seja os valores próprios de L_z são

$$L_z = \hbar m_l \quad , \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1.37)$$

e a função própria

$$\Phi_{m_l}(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l \phi} \quad (1.38)$$

que obedece à relação de ortogonalidade

$$\int_0^{2\pi} \Phi_{m_l}^*(\phi) \Phi_{m_l'}(\phi) d\phi = \delta_{m_l m_l'} \quad (1.39)$$

Os valores próprios do operador L^2 são reais e positivos visto que o operador é hermitico e que

$$L^2 - L_z^2 = L_x^2 + L_y^2 \quad (1.40)$$

é sempre positivo. Esta equação mostra ainda que existe um l que corresponde ao valor máximo de $|m_l|$ para um dado valor de L^2 tal que

$$\eta(l) \geq |m_l| \quad (1.41)$$

onde η são os valores próprios de L^2 . Para determinar a sua dependência de l aplica-se o operador $\hat{L}_z \hat{L}_\pm$ à função própria do operador L_z

$$L_z L_\pm \psi_{m_l} \quad (1.42)$$

usando as relações de comutação (1.28) tem-se

$$L_z L_\pm \psi_{m_l} = \hbar(m_l \pm 1) L_\pm \psi_{m_l} \quad (1.43)$$

ou seja a função $L_\pm \psi_{m_l}$ é, a menos de uma constante, função própria do operador L_z com valor próprio $\hbar(m_l \pm 1)$

$$\psi_{m_l+1} = L_+ \psi_{m_l} \quad , \quad \psi_{m_l-1} = L_- \psi_{m_l} \quad (1.44)$$

assim da definição de l tem-se

$$L_+ \psi_l = 0 \quad (1.45)$$

Aplicando a (1.45) o operador L_- e usando (1.29) obtém-se

$$L_- L_+ \psi_l = (L^2 - L_z^2 - \hbar \hat{L}_z) \psi_l \quad (1.46)$$

como

$$\hat{L}^2\psi_l = \eta(l)\psi_l \quad , \quad \hat{L}_z^2\psi_l = \hbar^2 l^2 \psi_l \quad , \quad \hat{L}_z\psi_l = \hbar l \psi_l \quad (1.47)$$

tem-se de (1.46) que

$$\eta(l) = \hbar^2 l(l+1) \quad (1.48)$$

Para um dado valor de l , a componente $L_z = \hbar m_l$ pode assumir os valores

$$-l \leq m_l \leq l \quad (1.49)$$

ou seja, existem $2l + 1$ valores de m_l o que corresponde a dizer que o nível energético de momento l é $2l + 1$ degenerado.

Para um sistema em que o Hamiltoniano é rotacionalmente invariante, as três componentes do momento angular comutam com este, ou seja, as matrizes são diagonais em relação à energia e todos os elementos da matriz não diagonais que correspondem às transições entre estados de energia diferente (l diferentes) são nulos. Claramente

$$\langle l m_l | L_z | l' m'_l \rangle = \hbar m_l \delta_{ll'} \delta_{m_l m'_l} \quad (1.50)$$

$$\langle l m_l | L^2 | l' m'_l \rangle = \hbar^2 l(l+1) \delta_{ll'} \delta_{m_l m'_l} \quad (1.51)$$

que corresponde à diagonalização destes operadores. Contudo as equações (1.44) mostram que as matrizes dos operadores L_+ e L_- têm elementos não nulos para transições $m_l - 1 \rightarrow m_l$ e $m_l \rightarrow m_l + 1$ respectivamente, correspondentes ao mesmo nível energético (mesmo l). Tendo em conta que $L_\pm^* = L_\mp$ pode-se calcular os valores próprios dos operadores L_+ e L_-

$$\begin{aligned} |\Gamma_\pm|^2 &= \langle m_l | L_\mp L_\pm | m_l \rangle \\ &= \langle m_l | [L^2 - L_z(L_z \pm \hbar)] | m_l \rangle \\ &= \hbar^2 l(l+1) - \hbar^2 m_l(m_l \pm 1) \\ &= \hbar^2 (l \mp m_l)(l \pm m_l + 1) \end{aligned} \quad (1.52)$$

$$\Gamma_\pm = \hbar \sqrt{(l \mp m_l)(l \pm m_l + 1)} \quad (1.53)$$

sendo a relação de ortogonalidade

$$\langle l m_l | L_\pm | l' m'_l \rangle = \Gamma_\pm \delta_{ll'} \delta_{m_l, m'_l \pm 1} \quad (1.54)$$

Das relações (1.26) e (1.27) tem-se que

$$\langle l, m_l | L_x | l, m_l - 1 \rangle = \langle l, m_l - 1 | L_x | l, m_l \rangle = \frac{\hbar}{2} \sqrt{(l + m_l)(l - m_l + 1)} \quad (1.55)$$

$$\langle l, m_l | L_y | l, m_l - 1 \rangle = -\langle l, m_l - 1 | L_y | l, m_l \rangle = -i \frac{\hbar}{2} \sqrt{(l + m_l)(l - m_l + 1)} \quad (1.56)$$

1.2.2 Funções próprias do momento angular

Como os operadores \hat{L}_z e \hat{L}^2 só dependem das variáveis θ e ϕ , então as suas funções próprias contêm uma função arbitrária de r . Seja Y_{lm_l} a parte angular da função de onda, característica das funções-próprias do momento angular tal que

$$\int |Y_{lm_l}|^2 \sin \theta d\theta d\phi = 1 \quad (1.57)$$

De facto o problema de determinar as funções-próprias comuns aos operadores \hat{L}^2 e L_z admite a separação das variáveis θ e ϕ , ou seja

$$Y_{lm_l}(\theta, \phi) = \Phi_{m_l}(\phi) \Theta_{lm_l}(\theta) \quad (1.58)$$

onde Φ_{m_l} são as funções próprias de \hat{L}_z dadas por (1.38) que obedecem a (1.39). As funções Θ_{lm_l} são normalizadas pela relação

$$\int_0^\pi |\Theta_{lm_l}|^2 \sin \theta d\theta = 1 \quad (1.59)$$

e a relação de ortogonalidade para Y_{lm_l} é

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{l'm_l'}^* Y_{lm_l} \sin \theta d\theta d\phi = \delta_{ll'} \delta_{m_l m_l'} \quad (1.60)$$

Para determinar a forma da parte angular da função de onda escreve-se a equação de valores próprios para L^2

$$-\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} = l(l+1) \psi \quad (1.61)$$

substituindo a função de onda por (1.58) obtem-se

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta_{lm_l}}{\partial \theta} \right) - \frac{m_l^2}{\sin^2 \theta} \Theta_{lm_l} + l(l+1) \Theta_{lm_l} = 0 \quad (1.62)$$

A solução desta equação é dada em termos dos polinómios associados de Legendre $P_l^{m_l}(\cos \theta)$. Normalizando de acordo com a condição (1.59) a solução fica então

$$\Theta_{lm_l}(\theta) = (-1)^{m_l} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m_l)!}{2(l+m_l)!}} P_l^{m_l}(\cos \theta) \quad , \quad m_l \geq 0 \quad (1.63)$$

Para m_l negativos a função Θ_{lm_l} é determinada pela relação

$$\Theta_{l,-|m_l|} = (-1)^{m_l} \Theta_{l|m_l|} \quad (1.64)$$

A parte angular da função de onda é então dada por

$$Y_{lm_l}(\theta, \phi) = (-1)^{\frac{m_l+|m_l|}{2}} \left[\frac{(2l+1)(l-|m_l|)!}{4\pi(l+|m_l|)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_l^{|m_l|}(\cos \theta) e^{im_l \phi} \quad (1.65)$$

1.2.3 Operador Paridade

Além das transformações de translação e rotação no espaço existe ainda a transformação de inversão no espaço. Esta transformação é dada por

$$x \rightarrow -x \quad , \quad y \rightarrow -y \quad , \quad z \rightarrow -z \quad , \quad (1.66)$$

Definindo o operador paridade

$$\hat{P}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}) \quad (1.67)$$

com a equação de valores-próprios

$$\hat{P}\psi(\mathbf{r}) = P\psi(\mathbf{r}) \quad (1.68)$$

tem-se de (1.67) e do facto que $\hat{P}\psi(-\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})$ a relação $P^2 = I$ pelo que

$$P = \pm 1 \quad (1.69)$$

Para $P = 1$ a função de onda diz-se par e para $P = -1$ a função de onda diz-se ímpar.

A invariância do Hamiltoniano perante a transformação de inversão no espaço reflecte a simetria do espaço em relação às reflexões. Então se o operador \hat{P} comuta com o Hamiltoniano a paridade é conservada, ou seja, se um estado dum sistema isolado tem uma certa paridade (par ou ímpar), esta conserva-se ao longo do tempo. O operador momento angular é também invariante perante a transformação de inversão no espaço, ou seja, este operador comuta com \hat{P} . Assim, um estado do sistema pode ter uma certa paridade simultaneamente com certos valores do momento angular l e da sua projecção m_l . De facto todos os estados que diferem no valor m_l têm a mesma paridade.

Para determinar a paridade do estado de uma partícula com momento l tem-se que em coordenadas esféricas a transformação de inversão no espaço é dada por

$$r \rightarrow r \quad , \quad \theta \rightarrow \pi - \theta \quad , \quad \phi \rightarrow \phi + \pi \quad (1.70)$$

assim, a parte radial da função de onda não é alterada pela transformação, enquanto que, os Harmónicos esféricos se transformam de acordo com²

$$Y_{lm_l}(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^l Y_{lm_l}(\theta, \phi) \quad (1.71)$$

ou seja, a paridade de um estado com momento angular l é

$$P = (-1)^l \quad (1.72)$$

para l par os estados são pares enquanto que para l ímpar os estados são ímpares.

² Y_{lm_l} é, a menos de uma constante, dada por $P_l^{m_l}(\cos\theta)e^{im_l\phi}$. Substituindo ϕ por $\phi + \pi$, o factor $e^{im_l\phi}$ vem multiplicado por $(-1)^{m_l}$, e substituindo θ por $\pi - \theta$, a função $P_l^{m_l}(\cos\theta)$ fica $P_l^{m_l}(-\cos\theta) = (-1)^{l-m_l}P_l^{m_l}(\cos\theta)$

1.3 Equação de Schrodinger em coordenadas esféricas

O hamiltoniano de partícula livre em coordenadas esféricas escreve-se

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \right\} \end{aligned} \quad (1.73)$$

Com L^2 dado por (1.34). Na presença de um potencial independente do tempo, a equação de Schrodinger independente do tempo fica

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \right\} \psi + V(r, \theta, \phi) \psi \quad (1.74)$$

Se o potencial (e consequentemente o Hamiltoniano) tem simetria central, $V(\mathbf{r}) = V(r)$, o momento angular é uma quantidade conservada do movimento e a função de onda é um estado próprio dos operadores L^2 e L_z . Assim pode-se escrever esta como

$$\psi_{lm_l}(r, \theta, \phi) = R_l(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi) \quad (1.75)$$

Substituindo (1.75) em (1.74) e aplicando (1.61) obtém-se a equação radial

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} R(r) \right) + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0 \quad (1.76)$$

usando a identidade

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) &= \frac{1}{r^2} \left\{ 2r \frac{d}{dr} + r^2 \frac{d^2}{dr^2} \right\} \\ &= \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{d^2}{dr^2} \end{aligned} \quad (1.77)$$

(1.76) fica

$$\frac{d^2}{dr^2} R(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} R(r) + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0 \quad (1.78)$$

Com a substituição

$$R(r) = \frac{g(r)}{r} \quad (1.79)$$

a equação radial para $g(r)$ é

$$\frac{d^2}{dr^2} g(r) + \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] g(r) = 0 \quad (1.80)$$

1.4 Poço de potencial esférico

Para um potencial

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & , \quad r \leq R_0 \\ 0 & , \quad r > R_0 \end{cases} \quad (1.81)$$

existem estados ligados para $-V_0 < E < 0$

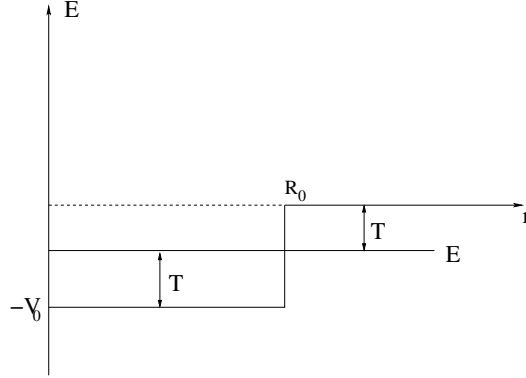


Figura 1.1: $-V_0 < E < 0$

- Para $r \leq R_0$

A energia cinética é positiva, e o momento da partícula é dado por

$$p^2 = 2m(E + V_0) \quad (1.82)$$

Definindo a distância radial adimensional

$$\rho = ar \quad (1.83)$$

com a o vector de onda dado pela relação de De Broglie $\mathbf{a} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}$

$$a^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} > 0 \quad (1.84)$$

(1.78) fica

$$\frac{d^2}{d\rho^2} R + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} R + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R = 0 \quad (1.85)$$

As soluções desta equação diferencial que são regulares na origem são as funções esféricas de Bessel do 1º tipo

$$R(r) = A j_l(ar) = A \sqrt{\frac{\pi ar}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(ar) \quad (1.86)$$

com

$$a = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar} \quad (1.87)$$

- Para $r > R_0$

A energia cinética é negativa

$$\frac{p^2}{2m} = E \implies p^2 = 2mE < 0 \quad (1.88)$$

Definindo

$$p'^2 = -2mE > 0 \quad (1.89)$$

o vector de onda é

$$a'^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0 \quad (1.90)$$

e a distância adimensional

$$\rho' = a'r = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} r \quad (1.91)$$

pelo que (1.78) fica

$$\frac{d^2}{d\rho'^2} R + \frac{2}{\rho'} \frac{d}{d\rho'} R - \left[1 + \frac{l(l+1)}{\rho'^2} \right] R = 0 \quad (1.92)$$

e as soluções desta equação são as funções esféricas de Bessel modificadas. As soluções que decrescem exponencialmente quando $r \rightarrow +\infty$ são as funções do 3º tipo

$$R(r) = B \sqrt{\frac{\pi a' r}{2}} K_{l+\frac{1}{2}}(a' r) \quad (1.93)$$

As constantes A e B podem ser eliminadas através da relação de continuidade da derivada logaritmica em $r = R_0$

$$\frac{d}{dr} \ln[A j_l(\rho)]|_{r=R_0} = \frac{d}{dr} \ln[B K_{l+\frac{1}{2}}(\rho')]|_{r=R_0} \quad (1.94)$$

$$\frac{j'_l(\rho) d\rho}{j_l(\rho) dr} = \frac{\frac{d}{d\rho'} \left[\sqrt{\frac{\pi \rho'}{2}} K_{l+\frac{1}{2}}(\rho') \right]}{\sqrt{\frac{\pi \rho'}{2}} K_{l+\frac{1}{2}}(\rho')} \frac{d\rho'}{dr} \quad (1.95)$$

usando as relações de recorrência

$$j'_l(\rho) = \frac{l}{\rho} j_l(\rho) - j_{l+1}(\rho) \quad (1.96)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\rho'} \left[\sqrt{\frac{\pi \rho'}{2}} K_{l+\frac{1}{2}}(\rho') \right] &= (-1)^{-(l+1)} (-1)^{l+2} \sqrt{\frac{\pi \rho'}{2}} K_{l+\frac{3}{2}}(\rho') + \\ &+ (-1)^{-(l+1)} (-1)^{l+1} \frac{l}{\rho'} \sqrt{\frac{\pi \rho'}{2}} K_{l+\frac{1}{2}}(\rho') \end{aligned} \quad (1.97)$$

(1.95) fica

$$a'K_{l+\frac{3}{2}}(a'R_0)j_l(aR_0) - aK_{l+\frac{1}{2}}(a'R_0)j_{l+1}(aR_0) = 0 \quad (1.98)$$

Esta equação é resolvida numericamente para vários valores de l (Apêndice A1).

1.5 Spin

Considere-se uma partícula composta de outras partículas. Além da energia interna esta possui um momento angular L , devido ao movimento interno das partículas que a compõem. Este momento angular pode ter $2L + 1$ orientações diferentes no espaço, ou seja, o movimento de uma partícula composta é descrito pelas suas coordenadas e por uma variável discreta que corresponde à projecção do seu momento angular interno numa direcção espacial. Esta propriedade é característica tanto de partículas compostas como de partículas elementares e tem natureza puramente quântica. Este momento angular intrínseco designa-se por *spin* da partícula, enquanto que o momento angular associado ao movimento denomina-se momento angular orbital.

Os operadores de spin devem assim obedecer às relações de comutação dos operadores do momento angular

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar\epsilon_{ijl}\hat{S}_l \quad (1.99)$$

e

$$-s \leq m_s \leq s \quad (1.100)$$

onde $\hbar m_s$ são os valores próprios do operador S_z e s o valor máximo absoluto de m_s . Sabe-se de factos experimentais que a diferença entre o valor máximo e mínimo de S_z , i.e. $2s$, deve ser um número inteiro positivo ou zero pelo que

$$s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \quad (1.101)$$

e os valores próprios do operador S^2 são

$$S^2 = \hbar^2 s(s+1) \quad (1.102)$$

Para um certo valor de s a componente S_z pode assumir $2s + 1$ valores e as matrizes dos operadores que actuam nas funções do spin são de ordem $2s + 1$.

Tal como as componentes do momento angular orbital, os valores próprios das três componentes do operador de spin são

$$\hat{S}_z = \hbar m_s \quad (1.103)$$

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \sqrt{(s + m_s)(s - m_s + 1)} \quad (1.104)$$

$$\hat{S}_y = -\frac{i\hbar}{2} \sqrt{(s + m_s)(s - m_s + 1)} \quad (1.105)$$

1.5.1 Spin $\frac{1}{2}$

Maior parte das partículas, por exemplo o electrão, têm spin $\frac{1}{2}$. Neste caso $s = \frac{1}{2}$ e $m_s = \pm \frac{1}{2}$. As matrizes têm ordem 2 e a forma

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma} \quad (1.106)$$

com

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.107)$$

na representação em que $S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z$ é diagonal. Estas são as matrizes de Pauli que juntamente com a matriz identidade, $I_{2 \times 2}$, formam um conjunto completo de matrizes, tal que, qualquer matriz arbitrária 2×2 pode ser escrita em termos destas. Então

$$a_0 I_2 + \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0 \quad (1.108)$$

se e só se $a_0 = 0$ e $\mathbf{a} = 0$.

Aa matrizes de Pauli têm traço nulo, determinante -1 e são unitárias, então, qualquer matriz M 2×2 pode ser escrita com

$$M = \frac{1}{2} [Tr M + (Tr M \boldsymbol{\sigma}) \cdot \boldsymbol{\sigma}] \quad (1.109)$$

Entre si obedecem à relação

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k \quad (1.110)$$

ou seja

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \epsilon_{ijk} \sigma_k \quad (1.111)$$

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij} \quad (1.112)$$

Da relação (1.110) pode-se provar a relação geral

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \wedge \mathbf{B}) \quad (1.113)$$

que é um exemplo da decomposição do tipo (1.109). Para $s = \frac{1}{2}$, (1.102) fica

$$S^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \quad (1.114)$$

e (1.103)

$$S_z = \hbar m_s \quad , \quad m_s = \pm \frac{1}{2} \quad (1.115)$$

Os operadores de spin não actuam no espaço das coordenadas. Sejam χ_{m_s} as funções próprias dos operadores S^2 e S_z . Das equações de valores próprios na forma matricial vê-se que as funções χ_{m_s} têm de ser funções de duas componentes dadas a menos de uma fase por

$$\chi_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.116)$$

e são ortonormais entre si

$$\langle \chi_{m_s} | \chi_{m'_s} \rangle = \delta_{m_s m'_s} \quad (1.117)$$

1.6 Momento angular total

O facto da função de onda ter várias componentes é uma característica da existência de spin. Se a função de onda tem uma só componente que depende apenas das coordenadas então o spin é zero. Ou seja, a função de onda de um sistema com spin tem a forma

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1(x_k) \\ \psi_2(x_k) \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (1.118)$$

As funções de onda de duas componentes designam-se por *spinors*. Em geral o producto escalar implica a integração sobre o espaço das coordenadas e o somatório sobre as componentes da função de spin χ_{m_s} , eq. (1.4).

Para um sistema com spin o momento angular total é

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (1.119)$$

Se o Hamiltoniano é invariante perante rotações

$$[\mathbf{J}, H] = 0 \quad (1.120)$$

e $\langle J_z \rangle$ e $\langle \mathbf{J}^2 \rangle$ são constantes do movimento. É então possível construir funções próprias de J^2 , J_z , L^2 e S^2 .

A adição de momentos angulares é em geral

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 \quad (1.121)$$

onde \mathbf{J}_1 e \mathbf{J}_2 são operadores que actuam em espaços distintos. As funções próprias dos operadores J^2 , J_z , J_1^2 e J_2^2 de valores próprios $\hbar^2 j(j+1)$, $\hbar m_j$, $\hbar^2 j_1(j_1+1)$ e $\hbar^2 j_2(j_2+1)$ podem ser construídas como combinação linear das funções próprias de J_1^2 e J_{1z} e de J_2^2 e J_{2z}

$$\psi_{jm_j} = \sum_{m_1} \sum_{m_2} C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m_j) \psi_{j_1 m_1} \psi_{j_2 m_2} \quad (1.122)$$

com $C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m_j)$ os coeficientes de Clebsch-Gordan. Nesta representação os valores próprio de J_z são

$$m_j = m_1 + m_2 \quad (1.123)$$

e os valores possíveis para j são dados pela relação triângular

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \quad (1.124)$$

onde $j_1(-j_1 \leq m_1 \leq j_1)$ e $j_2(-j_2 \leq m_2 \leq j_2)$.

1.7 Acoplamento $L \cdot S$

Na mecânica quântica não-relativista e na física atômica o acoplamento spin-órbita aparece da interacção entre o spin do electrão no átomo e o campo magnético criado pelo núcleo no referencial próprio do electrão. O termo extra no Hamiltoniano é para um sistema de partícula única

$$H_{sp} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{H} \quad (1.125)$$

onde $\boldsymbol{\mu}$ é o momento magnético do electrão

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e\hbar}{mc}\mathbf{S} \quad (1.126)$$

e \mathbf{H} o campo magnético na posição da partícula. Este campo magnético está relacionado relativisticamente com o campo eléctrico criado pelo núcleo no seu referencial próprio. Se este campo é um campo electrostático tem simetria esférica, então, o termo de interacção no Hamiltoniano é dado por

$$H_{sp} = \frac{e}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \quad (1.127)$$

e o hamiltoniano do sistema

$$H = H_0 + V(r) + H_{sp} \quad (1.128)$$

com H_0 dado por (1.73).

1.8 Spinores num campo central

Na ausência da interacção spin-órbita, o Hamiltoniano (1.128), comuta com S_z e L_z e a função de onda em que H_0 , L^2 , L_z e S_z são simultaneamente diagonais tem a forma

$$\psi_{nl}(\mathbf{r}, s) = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi) \chi_{m_s}(s) \quad (1.129)$$

No caso em que a interacção spin-órbita existe, L_z e S_z não comutam com o hamiltoniano

$$\begin{aligned}
[S_3, \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}] &= [S_3, S_i L_i] \\
&= [S_3, S_i] L_i + S_i [S_3, L_i] \\
&= [S_3, S_1] L_1 + [S_3, S_2] L_2 \\
&= i \{S_2 L_1 - S_1 L_2\}
\end{aligned} \tag{1.130}$$

em termos dos índices cartesianos

$$[S_z, \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}] = i \{L_x S_y - L_y S_x\} \tag{1.131}$$

Da mesma forma

$$[L_z, \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}] = -i \{L_x S_y - L_y S_x\} \tag{1.132}$$

Ou seja, das equações anteriores tem-se que o operador $\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$ comuta com H . O operador $J^2 = (L+S)^2$ também comuta com H , visto que comuta com H_0 e com qualquer função de r enquanto que

$$2\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = J^2 - L^2 - S^2 \tag{1.133}$$

comuta com J^2 visto que $[L^2, L_k] = 0$ e $[S^2, S_k] = 0$. De forma a achar as funções próprias que diagonalizam simultaneamente H , J^2 , J_z , L^2 e S^2 tem-se de (1.122) e (1.129)

$$\psi_{nj}(\mathbf{r}, s) = R_{nj}(r) \sum_{m_l} \sum_{m_s} C(ls j; m_l m_s m_j) Y_{lm_l}(\theta, \phi) \chi_{m_s}(s) \tag{1.134}$$

Para $s = \frac{1}{2}$ as quatro soluções independentes são explicitamente dadas por:

- Para $j = l + \frac{1}{2}$

$$\psi_{l+\frac{1}{2}} = \frac{R_{l+\frac{1}{2}}}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l+m_j+\frac{1}{2}} & Y_{lm_j-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{l-m_j+\frac{1}{2}} & Y_{lm_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \tag{1.135}$$

- Para $j = l - \frac{1}{2}$

$$\psi_{l-\frac{1}{2}} = \frac{R_{l-\frac{1}{2}}}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} -\sqrt{l-m_j+\frac{1}{2}} & Y_{lm_j-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{l+m_j+\frac{1}{2}} & Y_{lm_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \tag{1.136}$$

onde os coeficientes são os coeficientes de Clebsh-Gordan para $j_1 = l$ e $j_2 = \frac{1}{2}$. Para $l = 0$, os únicos estados possíveis correspondem aos estados para $j = l + \frac{1}{2}$, visto que para os estados $j = l - \frac{1}{2}$, $l = 0$ corresponde a ter

$j < 0$.

Da equação (1.133) tem-se que

$$\begin{aligned}\hbar \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma} \psi_{jm_j} &= \left(J^2 - L^2 - \frac{3}{4} \hbar^2 \right) \psi_{jm_j} \\ &= \hbar^2 \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right) \psi_{jm_j}\end{aligned}\quad (1.137)$$

ou seja os valores próprios de $\frac{\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{\hbar}$ são

$$\begin{cases} l = -1 + (j + \frac{1}{2}) & j = l + \frac{1}{2} \\ -(l+1) = -1 - (j + \frac{1}{2}) & j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (1.138)$$

Definindo o operador

$$\hat{K} = \hbar \left(1 + \frac{\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{\hbar} \right) \quad (1.139)$$

tem-se de (1.138) que os valores-próprios de \hat{K} são

$$\hat{K} \psi_{jm_j} = -\hbar k \psi_{jm_j} \quad (1.140)$$

com

$$k = \begin{cases} -(l+1) = -(j + \frac{1}{2}) & j = l + \frac{1}{2} \\ l = j + \frac{1}{2} & j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (1.141)$$

Para $l = 0$, só um valor de k é possível, $k = -1$. k toma todos os valores inteiros excepto zero. Do módulo de $|k|$ pode-se obter j

$$j = |k| - \frac{1}{2} \quad (1.142)$$

e em termos de k , l é dado por

$$l = \begin{cases} k & k > 0 \\ -(k+1) & k < 0 \end{cases} \quad (1.143)$$

ou seja, conhecendo k , sabe-se j e l . Em termos da notação espectroscópica $k = -1, 1, -2, 2, \dots$ corresponde aos estados $s_{\frac{1}{2}}, p_{\frac{1}{2}}, p_{\frac{3}{2}}, d_{\frac{3}{2}}, \dots$

Em termos de k a paridade da função de onda fica

$$P = (-1)^l = (-1)^{j + \frac{S_k}{2}} \quad (1.144)$$

com

$$S_k = \frac{k}{|k|} \quad (1.145)$$

Para cada valor de j os dois spinores de Pauli dados por (1.135) e (1.136) têm momentos angulares l diferentes e por conseguinte paridades diferentes. Definindo l' , tal que

$$l' = l_{-k} \quad (1.146)$$

tem-se que

$$l' = \begin{cases} k-1 & k > 0 \\ -k & k < 0 \end{cases} \quad (1.147)$$

e

$$l' = \begin{cases} l+1 & j = l + \frac{1}{2} \\ l-1 & j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (1.148)$$

As últimas relações entre l' e l pode ser escrita na forma

$$l - l' = S_k \quad (1.149)$$

Assim os spinores de Pauli podem ser escritos como

$$\chi_{km_j} = Y_{jlm_j} \quad j = l + \frac{1}{2} \quad (1.150)$$

$$\chi_{-km_j} = Y_{jl'm_j} \quad j = l - \frac{1}{2} \quad (1.151)$$

e

$$\hat{K}\chi_{km_j} = -\hbar k\chi_{km_j} \quad (1.152)$$

$$\hat{K}\chi_{-km_j} = \hbar k\chi_{-km_j} \quad (1.153)$$

Uma relação importante entre os spinores é

$$\left(\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}}{r}\right)\chi_{km_j} = -\chi_{-km_j} \quad (1.154)$$

Para demonstrar esta relação note-se que o operador $\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{r}$ é um escalar pelo que é invariante sob rotações, comutando com J^2 . $\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{r}$ também comuta com J_z , ou seja, $(\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}}{r})\chi_{km_j}$ tem os mesmos valores de j e m_j . Como $\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{r}$ é ímpar, tem-se

$$\left(\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}}{r}\right)\chi_{km_j} = a\chi_{-km_j} \quad (1.155)$$

De (1.113) tem-se que $(\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}}{r})^2 = 1$ pelo que $a^2 = 1$. De modo a obter a direcciona-se \hat{r} ao longo da direcção do eixo dos zz . Assim pondo $\theta = 0$ em (1.65)

$$Y_{lm_l}(\hat{z}) = \left(\frac{2l+1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \delta_{m0} \quad (1.156)$$

e para χ_{km_j}

$$\chi_{km_j} = \left(\frac{2l+1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} C\left(l\frac{1}{2}j; 0m_j\right) \chi_{m_s} \quad (1.157)$$

ou seja

$$a(2l')^{\frac{1}{2}} C\left(l'\frac{1}{2}j; 0m_j\right) = 2m_j(2l+1)^{\frac{1}{2}} C\left(l\frac{1}{2}j; 0m_j\right) \quad (1.158)$$

Para os quatro casos possíveis $j = l \pm \frac{1}{2}$, $m_j = \frac{1}{2}$ obtém-se $a = -1$.

Capítulo 2

Relatividade Restrita

2.1 O Princípio da Relatividade

Na mecânica clássica não-relativista um sistema de referência em relação ao qual o espaço é sempre homogéneo e isotrópico e o tempo uniforme denomina-se inercial. Das propriedades do espaço e tempo supramencionadas conclui-se que num sistema inercial qualquer movimento livre efectua-se com velocidade constante em grandeza e direcção, em particular se este se encontrar em repouso permanecerá em repouso por um tempo ilimitado, lei da inércia.

A experiência mostra que se outro sistema de referência move-se com movimento rectilíneo e uniforme em relação a um sistema inercial então estes serão totalmente equivalentes do ponto de vista mecânico. Existe assim uma infinidade de sistemas inerciais, que se movem uns relativamente aos outros, rectilínea e uniformemente. Em todos estes sistemas as propriedades do espaço e tempo são as mesmas assim como todas as leis mecânicas, princípio da relatividade de Galileu.

Matematicamente, o princípio da relatividade de Galileu expressa-se no facto das leis da mecânica serem invariantes sob as seguintes transformações, transformações de Galileu:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{V}t \quad (2.1)$$

$$t' = t \quad (2.2)$$

com \mathbf{V} a velocidade de S' em relação a S .

Substituindo na 2ª lei de Newton obtém-se:

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a}' = m \frac{d^2}{dt^2}(\mathbf{r} - \mathbf{V}t) = m\mathbf{a} \quad (2.3)$$

pelo que a lei de Newton é invariante sob as transformações de Galileu.

Anos de investigação nas áreas do electromagnetismo e óptica deram origem

às equações de Maxwell, no entanto estas equações não são invariantes relativamente às transformações de Galileu. Uma das consequências das equações de Maxwell é que no vázio a luz propaga-se com a mesma velocidade em todas as direcções e é máxima, de valor:

$$c = 3 \times 10^8 (m/s) \quad (2.4)$$

Na altura várias hipóteses surgiram de forma a resolver este problema. Mas foi com a experiência de Michelson-Morley que Lorentz sugeriu a contração do espaço e verificou que as equações de Maxwell eram invariantes sob as seguintes transformações:

$$ct' = \gamma(ct - \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{r}) \quad (2.5)$$

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \frac{(\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{r})\boldsymbol{\beta}(\gamma - 1)}{\beta^2} - \boldsymbol{\beta}\gamma ct \quad (2.6)$$

com $\boldsymbol{\beta} = \frac{\mathbf{V}}{c}$ e $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$.

No seguimento da experiência de Michelson-Morley e das conclusões de Lorentz, Einstein formula a teoria da relatividade restrita usando os dois seguintes postulados:

1. As leis da física são as mesmas para todos os observadores inerciais
2. A velocidade da luz é a mesma para todos os observadores inerciais

A formulação física que incorpora estes dois postulados diz-se *covariante* (forma invariante).

2.2 Espaço de Minkowski

Na teoria da relatividade restrita, espaço e tempo consistem numa única identidade, devendo-se então largar as noções newtonianas de uma única coordenada temporal e a existência de "espaço num certo momento no tempo". Ao espaço geométrico onde é formulada a teoria da relatividade restrita denomina-se espaço de Minkowski ou espaço-tempo 4-dimensional. Um ponto neste espaço-tempo consiste em 3 valores nas coordenadas espaciais e 1 valor na coordenada temporal, definindo-se assim um *evento* como o momento único no espaço e tempo.

Um evento é especificado pelo 4-vector contravariante

$$x^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, x, y, z) \quad \text{com } \mu = 0, 1, 2, 3 \quad (2.7)$$

as coordenadas espaciais representam-se por x^i com $i = 1, 2, 3$

O intervalo infinitesimal entre dois eventos é dado por

$$(ds)^2 = (cdt)^2 - (dx)^2 - (dy)^2 - (dz)^2 \quad (2.8)$$

ou

$$ds^2 = c^2 dt^2 - dr^2 \quad (2.9)$$

De facto é fácil verificar que a equação (2.9) é invariante perante as transformações (2.5) e (2.6).

Introduzindo a métrica (pseudo-euclidiana), definida pelo tensor

$$\eta_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

pode-se reescrever (2.8) na forma compacta

$$ds^2 = \eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu \quad (2.11)$$

ou seja,

$$dx_\mu = \eta_{\mu\nu} dx^\nu \quad (\text{baixa o índice}) \quad (2.12)$$

transformando um vector contravariante num covariante. Multiplicando à esquerda por $\eta^{\sigma\mu}$

$$\eta^{\sigma\mu} dx_\mu = \eta^{\sigma\mu} \eta_{\mu\nu} dx^\nu \quad (2.13)$$

$$= \delta_\nu^\sigma dx^\nu \quad (2.14)$$

$$= dx^\sigma \quad (\text{eleva o índice}) \quad (2.15)$$

onde se usou

$$\eta^{\sigma\mu} \eta_{\mu\nu} = \delta_\nu^\sigma \quad (2.16)$$

Com δ_ν^μ o símbolo de Kronecker: $\delta_\nu^\mu = 1$ se $\mu = \nu$ e $\delta_\nu^\mu = 0$ se $\mu \neq \nu$.

De facto

$$\eta^{\mu\nu} = \eta_{\mu\nu} \quad (2.17)$$

ou na forma matricial

$$\eta = \eta^{-1} \quad (2.18)$$

e

$$\text{Tr}(\eta^{\mu\nu}) = \eta_{\mu\nu} \eta^{\mu\nu} = \delta_\mu^\mu = 4 \quad (2.19)$$

i.e., para a métrica definida em (2.10) a transformação entre os vectores covariantes e contravariantes é dada por $x_0 = x^0$ e $x_i = -x^i$.

O producto escalar à semelhança do espaço Euclidiano é definido como a acção da métrica em dois vectores

$$\eta(a, b) = \eta_{\mu\nu} a^\mu b^\nu = a^0 b^0 - \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \quad (2.20)$$

Se o produto escalar é zero os vectores dizem-se ortogonais. A norma de um vector é definida como o produto escalar do vector com ele mesmo, que contrariamente ao espaço Euclidiano não é definida positiva

$$\text{se } \eta_{\mu\nu}a^\mu a^\nu \text{ é } \begin{cases} < 0, & a^\mu \text{ diz-se 'spacelike'} \\ = 0, & a^\mu \text{ diz-se 'lightlike' ou nulo} \\ > 0, & a^\mu \text{ diz-se 'timelike'} \end{cases} \quad (2.21)$$

2.2.1 Energia e momento

A trajectória de uma partícula real a qual para a métrica definida em (2.9) é sempre *spacelike* e calcula-se por integração do elemento infinitesimal

$$s(\lambda) = \int_{\text{caminho}} d\lambda \sqrt{\eta_{\mu\nu} \frac{dx^\mu}{d\lambda} \frac{dx^\nu}{d\lambda}} \quad (2.22)$$

onde λ é um parâmetro do qual depende a curva $x^\mu(\lambda)$. O vector tangente à curva é $\frac{dx^\mu}{d\lambda}$. É conveniente o parâmetro ser um invariante de Lorentz, assim, pode-se escolher o tempo no referencial em repouso, tempo próprio (τ), como um bom parâmetro. Da definição de tempo próprio é fácil verificar as relações:

$$d\tau = \frac{dt}{\gamma} \quad \text{e} \quad d\tau = \frac{ds}{c} \quad (2.23)$$

Nesta parametrização o vector tangente à trajectória $x^\mu(\tau)$ é o 4-vector velocidade

$$u^\mu = \frac{dx^\mu}{d\tau} \quad \text{ou} \quad u^\mu = c \frac{dx^\mu}{ds} \quad (2.24)$$

Sendo a sua norma

$$u^2 = \eta_{\mu\nu} \frac{dx^\mu}{d\tau} \frac{dx^\nu}{d\tau} = c^2 \frac{d\tau^2}{d\tau^2} = c^2 \quad (2.25)$$

Das relações (2.23) e (2.24) têm-se que

$$\mathbf{u} = \gamma \mathbf{v} \quad (2.26)$$

e

$$u^0 = \frac{dx^0}{d\tau} = \frac{d(ct)}{\frac{1}{\gamma} dt} = \gamma c \quad (2.27)$$

ou seja,

$$u^\mu = \gamma(c, \mathbf{v}) \quad (2.28)$$

no referencial de repouso

$$u^\mu = (c, \mathbf{0}) \quad (2.29)$$

Em relatividade restrita queremos que a expressão do momento de uma partícula seja a mesma em qualquer sistema de inércia. Define-se então o tetra-vector energia-momento:

$$p^\mu = mu^\mu \quad (2.30)$$

onde m é a massa da partícula. A componente espacial é simplesmente

$$\mathbf{p} = \gamma m \mathbf{v} \quad (2.31)$$

e a componente temporal

$$p^0 = \gamma mc \quad (2.32)$$

Definindo a energia relativista, E , como

$$E = \gamma mc^2 \quad (2.33)$$

tal que no limite não-relativista a expressão da energia seja $E = R + T$, com $R = mc^2$ constante (energia de repouso) e $T = mc^2(\gamma - 1) = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{3}{8}m\frac{v^4}{c^2} + \dots$ (energia cinética), o 4-vector energia-momento fica

$$p^\mu = \left(\frac{E}{c}, \mathbf{p}\right) \quad (2.34)$$

e a norma

$$p^2 = \frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p}^2 = mc^2 \quad (2.35)$$

sendo esta a relação relativista entre energia e momento. No caso de uma partícula sem massa esta expressão reduz-se a

$$E = |\mathbf{p}|c \quad (2.36)$$

2.3 Grupo de Lorentz

As transformações lineares mais gerais entre dois sistemas de inércia, são da forma:

$$x^\mu \rightarrow x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu + a^\mu \quad (2.37)$$

Para translações ($\Lambda^\mu_\nu = 0$) a diferença Δx^μ não é alterada e o intervalo (2.8) é invariante. Pode-se assim reescrever a equação (2.37) com $a^\mu = 0$

$$x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu \quad (2.38)$$

ou na forma matricial

$$\mathbf{x}' = \mathbf{\Lambda} \mathbf{x} \quad (2.39)$$

A equação (2.11) fica

$$ds^2 = (d\mathbf{x})^T \boldsymbol{\eta} (d\mathbf{x}) \quad (2.40)$$

$$= (d\mathbf{x}')^T \boldsymbol{\eta} (d\mathbf{x}') \quad (2.41)$$

$$= (d\mathbf{x})^T \boldsymbol{\Lambda}^T \boldsymbol{\eta} \boldsymbol{\Lambda} (d\mathbf{x}) \quad (2.42)$$

ou seja,

$$\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\Lambda}^T \boldsymbol{\eta} \boldsymbol{\Lambda} \quad (2.43)$$

ou

$$\eta_{\rho\sigma} = \Lambda_\rho^\mu \Lambda_\sigma^\nu \eta_{\mu\nu} \quad (2.44)$$

As matrizes reais que satisfazem (2.43) são as transformações de Lorentz. De (2.43) conclui-se que

$$\det(\boldsymbol{\Lambda}) = \pm 1 \quad (2.45)$$

ou seja, para qualquer transformação de Lorentz existe uma transformação inversa tal que

$$\Lambda_\nu^\mu \Lambda_\rho^\nu = \delta_\rho^\mu \quad (\text{relação de ortogonalidade}) \quad (2.46)$$

Como o produto de duas transformações de Lorentz é também ele uma transformação de Lorentz então o conjunto de todas as transformações de Lorentz formam um grupo, o grupo de Lorentz $O(3, 1)$.

Este grupo contém um subgrupo que é isomórfico com $O(3)$, o grupo das rotações no espaço tridimensional. Este subgrupo é o conjunto de todas as matrizes $\boldsymbol{\Lambda}$ da forma

$$\boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{R}) = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{R} \end{pmatrix} \quad (2.47)$$

onde \mathbf{R} é uma matriz 3×3 que satisfaz

$$\mathbf{1} = \mathbf{R}^T \mathbf{1} \mathbf{R} \quad (2.48)$$

com $\mathbf{1}$ a matriz identidade 3×3 .

O conjunto de todas as transformações de Lorentz pode ser dividido em quatro subconjuntos dependendo do determinante ser 1 (transformações próprias) ou -1 (transformações impróprias).

2.3.1 Transformações próprias de Lorentz

O grupo das transformações próprias é um grupo contínuo e pode ser obtido através de transformações infinitesimais,

$$\Lambda_\nu^\mu = \delta_\nu^\mu + \epsilon \lambda_\nu^\mu + \dots \quad (2.49)$$

com ϵ infinitesimal. De (2.46) e conservando apenas os termos de primeira ordem em ϵ tem-se que

$$\begin{aligned}\Lambda_\nu^\mu \Lambda_\rho^\nu &= (\delta_\nu^\mu + \epsilon \lambda_\nu^\mu)(\delta_\rho^\nu + \epsilon \lambda_\rho^\nu) \\ \delta_\rho^\mu &= \delta_\nu^\mu \delta_\rho^\nu + \epsilon(\lambda_\nu^\mu \delta_\rho^\nu + \lambda_\rho^\nu \delta_\nu^\mu) + O(\epsilon^2) \\ \delta_\rho^\mu &= \delta_\rho^\mu + \lambda_\rho^\mu + \lambda_\rho^\mu \\ \lambda^{\mu\nu} &= -\lambda^{\nu\mu}\end{aligned}\tag{2.50}$$

pelo que $\lambda^{\mu\nu}$ é um tensor anti-simétrico, ou seja, o grupo das transformações próprias contém seis parâmetros independentes que correspondem a três rotações e três boosts.

Qualquer transformação infinitesimal pode também ser escrita em termos dos geradores definidos por

$$\Omega = \frac{d}{d\lambda} \Lambda|_{\lambda=0}\tag{2.51}$$

tal que

$$\Lambda(\lambda) = \mathbf{I} + \lambda^{\mu\nu} \Omega_{\mu\nu} + \dots\tag{2.52}$$

A transformação finita de um ângulo λ pode ser pensada como ocorrendo em n passos, cada um deles consistindo numa rotação de um ângulo $\frac{\lambda}{n}$

$$\Lambda(\lambda) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \left(\mathbf{I} + \frac{\lambda^{\mu\nu}}{n} \Omega_{\mu\nu} \right)^n\tag{2.53}$$

ou seja,

$$\Lambda(\lambda) = e^{\lambda\Omega}\tag{2.54}$$

com $\Omega_{\mu\nu} = -\Omega_{\nu\mu}$ os geradores infinitesimais.

• Rotações

O subgrupo das rotações consiste de todos os Λ dados por (2.47).

Para rotações em torno do eixo dos xx de um ângulo θ_1 a matriz transformação é:

$$\Lambda(R_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \theta_1 & \sin \theta_1 \\ 0 & 0 & -\sin \theta_1 & \cos \theta_1 \end{pmatrix}\tag{2.55}$$

e o gerador infinitesimal

$$\Omega^{23} = \frac{d}{d\theta_1} \Lambda(R_1)|_{\theta_1=0} \implies \Omega^{23} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}\tag{2.56}$$

Para rotações em torno do eixo dos yy de um ângulo θ_2 a matriz transformação é:

$$\Lambda(R_2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta_2 & 0 & -\sin \theta_2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \sin \theta_2 & 0 & \cos \theta_2 \end{pmatrix} \quad (2.57)$$

e o gerador infinitesimal

$$\Omega^{31} = \frac{d}{d\theta_2} \Lambda(R_2)|_{\theta_2=0} \implies \Omega^{31} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.58)$$

Para rotações em torno do eixo dos zz de um ângulo θ_3 a matriz transformação é:

$$\Lambda(R_3) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta_3 & \sin \theta_3 & 0 \\ 0 & -\sin \theta_3 & \cos \theta_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.59)$$

e o gerador infinitesimal

$$\Omega^{12} = \frac{d}{d\theta_3} \Lambda(R_3)|_{\theta_3=0} \implies \Omega^{12} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.60)$$

Definindo para as rotações

$$(\theta^1, \theta^2, \theta^3) \equiv (\lambda_3^2, \lambda_1^3, \lambda_2^1) \quad (2.61)$$

e

$$(\Omega^{23}, \Omega^{31}, \Omega^{12}) = \imath (J_1, J_2, J_3) \quad (2.62)$$

temos para uma rotação finita numa direcção arbitrária

$$\Lambda(R) = e^{\imath \theta \cdot \mathbf{J}} \quad (2.63)$$

onde \mathbf{J} são geradores hermiticos que satisfazem

$$[J_1, J_2] = \imath \epsilon_{123} J_3 \quad (2.64)$$

ou seja, satisfazem as mesmas relações de comutação do momento angular.

- **Boosts**

Os boosts podem ser pensados como "rotações entre as direcções espaciais e de tempo" e correspondem à mudança de coordenadas para um sistema que viaja com velocidade constante.

Para um referencial que se move no eixo dos xx a matriz transformação é

$$\Lambda(B_1) = \begin{pmatrix} \cosh \omega_1 & -\sinh \omega_1 & 0 & 0 \\ -\sinh \omega_1 & \cosh \omega_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.65)$$

e o gerador infinitesimal

$$\Omega^{10} = \frac{d}{d\omega_1} \Lambda(B_1)|_{\omega_1=0} \implies \Omega^{10} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.66)$$

De forma similar os geradores infinitesimais Ω^{20} e Ω^{30} são

$$\Omega^{20} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \Omega^{30} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.67)$$

Definindo

$$(\omega^1, \omega^2, \omega^3) \equiv (\lambda^{01}, \lambda^{02}, \lambda^{03}) \quad (2.68)$$

e

$$(\Omega^{01}, \Omega^{02}, \Omega^{03}) = \imath (K_1, K_2, K_3) \quad (2.69)$$

temos para um boost finito numa direcção arbitrária

$$\Lambda(B) = e^{\imath \omega \cdot \mathbf{K}} \quad (2.70)$$

Estes geradores são anti-hermiticos pelo que, os boosts não são transformações unitárias, e satisfazem as seguintes relações de comutação

$$[K_1, K_2] = -\imath \epsilon_{123} J_3 \quad (2.71)$$

e com os geradores das rotações

$$[K_1, J_2] = \imath \epsilon_{123} K_3 \quad (2.72)$$

Em geral os geradores infinitesimais $\Omega_{\mu\nu}$ satisfazem as relações de comutação

$$[\Omega_{\mu\nu}, \Omega_{\rho\sigma}] = \eta_{\mu\rho} \Omega_{\nu\sigma} + \eta_{\nu\sigma} \Omega_{\mu\rho} - \eta_{\mu\sigma} \Omega_{\nu\rho} - \eta_{\nu\rho} \Omega_{\mu\sigma} \quad (2.73)$$

2.3.2 Transformações impróprias de Lorentz

- **Inversão no espaço:** $x^0 \rightarrow x^0$, $\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$

$$\Lambda(I_S) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.74)$$

- **Inversão no tempo:** $x^0 \rightarrow -x^0$, $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}$

$$\Lambda(I_T) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.75)$$

2.4 Grupo de Poincaré

O grupo de Poincaré consiste do grupo de Lorentz incluindo as translações no espaço-tempo, eq.(2.37). Os geradores para translações infinitesimais são os operadores hermiticos p^μ , e as suas relações de comutação com os operadores hermiticos para as “rotações” no plano $x^\mu - x^\mu$, $\Omega_{\mu\nu} = -\Omega_{\nu\mu}$ são

$$[\Omega_{\mu\nu}, p_\sigma] = i(\eta_{\nu\sigma} p_\mu - \eta_{\mu\sigma} p_\nu) \quad (2.76)$$

e as relações de comutação entre estes geradores com eles mesmos

$$[p_\mu, p_\nu] = 0 \quad (2.77)$$

$$[\Omega_{\mu\nu}, \Omega_{\rho\sigma}] = -i(\eta_{\mu\rho} \Omega_{\nu\sigma} - \eta_{\nu\rho} \Omega_{\mu\sigma} + \eta_{\mu\sigma} \Omega_{\rho\nu} - \eta_{\nu\sigma} \Omega_{\rho\mu}) \quad (2.78)$$

As equações (2.76), (2.77), (2.78) definem a álgebra de Poincaré.

O grupo de Poincaré contém dois invariantes ou operadores de Casimir:

$$C_1 = \hat{P}^\mu \hat{P}_\mu \quad (2.79)$$

que para um estado-próprio do momento tem valores próprios $p^2 = \frac{E^2}{c^2} = m^2 c^2$. O operador \hat{J}^2 não é um Casimir, visto não comutar com os boosts. De forma a construir o segundo Casimir introduz-se o vector de Pauli-Lubanski

$$\begin{aligned} \hat{W}_\mu &= -\frac{1}{2} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} \hat{J}^{\nu\rho} \hat{P}^\sigma \\ \hat{W}_\mu \hat{P}^\mu &= 0 \end{aligned} \quad (2.80)$$

tal que

$$C_2 = \hat{W}_\mu \hat{W}^\mu \quad (2.81)$$

Capítulo 3

Mecânica Quântica Relativista

3.1 Equação de Klein-Gordon

Formalmente, a transição da mecânica clássica para a mecânica quântica pode ser feita por substituição das quantidades clássicas por operadores apropriados (substituições canônicas). Em particular, a energia

$$E \longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (3.1)$$

e o momento na representação das coordenadas

$$\mathbf{p} \longrightarrow -i\hbar \nabla \quad (3.2)$$

Na mecânica quântica não relativista toda a dinâmica do sistema é descrita pela equação de onda da forma

$$(H - E)\Psi = 0 \quad (3.3)$$

O Hamiltoniano clássico para uma partícula livre não-relativista de massa m é

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad (3.4)$$

Pode-se assim obter a equação de onda não-relativista ou equação de Schrödinger para a partícula livre

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \psi(x, t) \quad (3.5)$$

claramente não covariante sob transformações de Lorentz.

A primeira tentativa para obter uma equação relativista foi a de usar o Hamiltoniano clássico relativista

$$H = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4} \quad (3.6)$$

que aplicado a (3.3) leva à seguinte equação de onda

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) = \sqrt{-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4} \psi(x) \quad (3.7)$$

com $x \equiv x^\mu = (ct, \mathbf{x})$.

Surge então o problema de interpretar a raiz quadrada de um operador. Pode-se contundo expandir em série a raiz quadrada, obtendo-se potências do operador diferencial

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) = mc^2 \left(1 - \frac{\nabla^2}{2m^2 c^2} - \frac{\nabla^4}{8m^4 c^4} + \dots \right) \psi(x) \quad (3.8)$$

o que torna a equação assimétrica entre as coordenadas espaciais e de tempo e o numero infinito de derivadas torna a teoria não-local. A primeira forma de encontrar uma equação consistente com a teoria da relatividade, evitando o problema com a raiz quadrada no operador de energia cinética, foi a de tomar o quadrado do Hamiltoniano (3.6)

$$H^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (3.9)$$

introduzindo soluções de energia negativa. A equação de onda que se obtém é então

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(x) = [-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4] \psi(x) \quad (3.10)$$

ou ainda,

$$\left[\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial (ct)^2} - \hbar^2 \nabla^2 + m^2 c^2 \right] \psi(x) = 0 \quad (3.11)$$

$$\left[\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \psi(x) = 0 \quad (3.12)$$

Esta é a chamada equação de Klein-Gordon e contém a simetria desejada entre espaço e tempo. É fácil verificar que o operador D'Alembertiano, $\square = \partial_\mu \partial^\mu$, é um escalar e consequentemente a função de onda ψ é também ela um escalar (não contém spin)

$$\psi'(x') = \psi(x) \quad (3.13)$$

Em analogia com a equação de Schrodinger, espera-se que a corrente seja conservada e com ela a densidade de probabilidade sob a forma de uma equação de continuidade, para isso multiplica-se à esquerda a equação (3.12) pelo complexo conjugado ψ^* e subtrai-se ψ multiplicado pelo complexo conjugado (c.c) de (3.12)

$$\psi^*(x) \left[\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \psi(x) - \psi(x) \left[\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \psi^*(x) = 0 \quad (3.14)$$

ou

$$\psi^* \square \psi - \psi \square \psi^* = \partial_\mu (\psi^* \partial^\mu \psi) = 0 \quad (3.15)$$

onde $\psi^* \overleftrightarrow{\partial}^\mu \psi = \psi^* \overrightarrow{\partial}^\mu \psi - \psi^* \overleftarrow{\partial}^\mu \psi$. Tem-se então

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \quad ; \quad j^\mu = \psi^* \partial^\mu \psi \quad (3.16)$$

Na teoria da relatividade o 4-vector corrente é $j^\mu = (\rho c, \mathbf{j})$ pelo que a densidade será

$$\rho = \frac{1}{c^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \quad (3.17)$$

Esta equação mostra que ρ não pode ser interpretada como uma densidade de probabilidade por não ser definida positiva.

3.2 Equação de Dirac

Em 1928 Paul Maurice Dirac propôs uma outra equação relativista. Como na teoria não-relativista a lineariedade da função de onda em ordem ao tempo permite que, conhecendo a função de onda num certo instante, esta possa ser determinada num qualquer instante posterior e além disso, evita a ocorrência de uma densidade de probabilidade negativa. Então, Dirac propôs que a equação de onda relativista fosse linear no tempo e que, devido à simetria existente entre tempo e coordenadas espaciais na teoria da relatividade, esta fosse também linear no operador momento

$$H_D = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}c + \beta mc^2 \quad (3.18)$$

com $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3)$ e β coeficientes adimensionais independentes de E e \mathbf{p} . Como o espaço-tempo é isotrópico e homogêneo o Hamiltoniano é independente do tempo e das coordenadas espaciais, logo os coeficientes não podem depender das coordenadas espaço-tempo e comutam com \mathbf{r} e \mathbf{p} . A equação de onda (3.3) fica

$$(E - \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}c - \beta mc^2) \Psi = 0 \quad (3.19)$$

na representação das coordenadas

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) = \left[-i\hbar c \sum_{i=1}^3 \alpha^i \nabla_i + \beta mc^2 \right] \psi(x) \quad (3.20)$$

De modo a ter uma teoria consistente com a teoria da relatividade a relação entre energia e momento para a partícula livre deve prevalecer, para tal itera-se a equação anterior

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(x) = \left[-i\hbar c \sum_{i=1}^3 \alpha^i \nabla_i + \beta mc^2 \right]^2 \psi(x) \quad (3.21)$$

e por comparação com a equação de Klein-Gordon (3.12) o segundo termo de (3.21) deve ser tal que

$$\left(-i\hbar c \sum_{i=1}^3 \alpha^i \nabla_i + \beta mc^2\right)^2 = \hbar^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4 \quad (3.22)$$

expandindo o quadrado

$$\begin{aligned} & \left(-i\hbar \sum_{i=1}^3 \alpha^i \nabla_i + \beta mc^2\right) \left(-i\hbar \sum_{j=1}^3 \alpha^j \nabla_j + \beta mc^2\right) \quad (3.23) \\ &= -\hbar^2 c^2 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \alpha^i \nabla_i \alpha^j \nabla_j - i\hbar mc^3 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 (\beta \alpha^i \nabla_i + \beta \alpha^j \nabla_j) + \beta^2 m^2 c^4 \\ &= -\hbar^2 c^2 \sum_{i,j=1}^3 \left(\frac{\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i}{2}\right) \nabla_i \nabla_j - i\hbar mc^3 \sum_{i=1}^3 (\alpha^i \beta + \beta \alpha^i) \nabla_i + \beta^2 m^2 c^4 \end{aligned}$$

e comparando então com o segundo termo de (3.22), verifica-se que os coeficientes têm de obedecer às seguintes relações

$$\begin{cases} \alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i \stackrel{\text{def}}{=} \{\alpha^i, \alpha^j\} = 2\delta_{ij} \\ \alpha^i \beta + \beta \alpha^i \stackrel{\text{def}}{=} \{\alpha^i, \beta\} = 0 \\ \beta^2 = 1 \end{cases} \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (3.24)$$

Estas relações de anti-comutação definem uma álgebra. É claro que os coeficientes não podem ser números, assim Dirac propôs que estes fossem matrizes $N \times N$ e que a função de onda fosse uma matriz coluna com N elementos

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

3.2.1 Propriedades das matrizes α e β e a representação padrão

- **Hermiticidade**

Para que o Hamiltoniano (3.18) seja Hermitico, os coeficientes têm de ser hermiticos

$$\alpha^{i\dagger} = \alpha^i \quad ; \quad \beta^\dagger = \beta \quad (3.26)$$

que juntamente com $\alpha^2 = 1$ e $\beta^2 = 1$ implica que tenham valores-próprios reais e iguais a ± 1

- **Traço Nulo**

Das relações de anticomutação e da propriedade $Tr(AB) = Tr(BA)$, pode-se concluir que têm traço nulo

$$\begin{aligned}\alpha^i \beta &= -\beta \alpha^i \quad \Rightarrow \quad \alpha^i = -\beta \alpha^i \beta \\ Tr(\alpha^i) &= -Tr(\beta \alpha^i \beta) = -Tr(\alpha^i \beta^2) = -Tr(\alpha^i) \\ Tr(\alpha^i) &= 0\end{aligned}\tag{3.27}$$

de forma semelhante

$$Tr(\beta) = 0\tag{3.28}$$

- **Dimensão (N) par**

Para que as matrizes tenham o traço nulo o número de valores próprios $+1$ e -1 tem de ser igual, ou seja N deve ser par

$$\begin{aligned}det(\alpha^i \beta) &= det(-\beta \alpha^i) \\ \Rightarrow det(\alpha^i) det(\beta) &= det(-\mathbf{1}) det(\beta) det(\alpha^i) = (-1)^N det(\alpha^i) det(\beta) \\ \Rightarrow N &= par\end{aligned}$$

- **$N \geq 4$**

Para $N = 2$ existem no máximo três matrizes linearmente independentes e que anticomutam: por exemplo as matrizes de Pauli

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\tag{3.29}$$

que juntamente com a matriz identidade formam uma base no espaço de matrizes hermiticas 2×2 , não podendo portanto haver uma matriz β em duas dimensões. Deve-se portanto ter $N = 4$ como a menor dimensão onde se realiza (3.24)

- **Representação de Dirac**

Em 4 dimensões (3.24) pode ser satisfeita, se

$$\alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\tag{3.30}$$

onde 1 é a matriz identidade 2×2 . Esta representação padrão foi introduzida por Dirac.

3.2.2 Probabilidade e Corrente

Um das razões que levou Dirac à "sua" equação foi a seguinte: se se quer prevenir a ocorrência de uma densidade de probabilidade negativa, tem de se evitar derivadas em ordem ao tempo na expressão para ρ , ou seja, a equação de onda tem de ser de primeira ordem na derivada em ordem ao tempo. As expressões para a densidade de probabilidade e o vector corrente são deduzidas multiplicando a equação de Dirac (3.20) por ψ^\dagger à esquerda

$$\psi^\dagger \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \right] = \psi^\dagger \left[-i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + \beta mc^2 \right] \psi \quad (3.31)$$

e subtraindo a equação hermitica conjugada multiplicada por ψ à direita.

$$\psi \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^\dagger \right] = \psi \left[i\hbar c \boldsymbol{\alpha}^\dagger \cdot \boldsymbol{\nabla} + \beta^\dagger mc^2 \right] \psi^\dagger \quad (3.32)$$

Tendo em conta a hermiticidade de α e β e $[\alpha^i, \nabla_i] = [\beta, \nabla_i] = 0$ tem-se que

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^\dagger \psi) + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\psi^\dagger c \boldsymbol{\alpha} \psi) = 0 \quad (3.33)$$

que comparando com a equação de continuidade

$$\partial_\mu j^\mu = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (3.34)$$

dá

$$\rho = \psi^\dagger \psi = \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* & \psi_3^* & \psi_4^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + |\psi_3|^2 + |\psi_4|^2 \quad (3.35)$$

que é claramente definida positiva e

$$\mathbf{j} = \psi^\dagger c \boldsymbol{\alpha} \psi \quad (3.36)$$

tendo α características de velocidade¹

3.2.3 Momento angular e spin

Na mecânica quântica não-relativista o operador momento angular comuta com o Hamiltoniano de partícula livre. Para o caso relativista o comutador entre o momento angular e o Hamiltoniano é

$$[H_D, L_k] = (c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2) L_k - L_k (c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2) \quad (3.37)$$

¹de facto na dinâmica Hamiltoniana a velocidade generalizada é dada por $v_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = c \alpha^i$

como β comuta com \mathbf{L} o comutador fica

$$\begin{aligned}
[c\alpha_j p_j, L_k] &= c\alpha_j p_j \epsilon_{kl n} x_l p_n - c\epsilon_{kl n} x_l p_n \alpha_j p_j \\
&= (-i\hbar)^2 c\epsilon_{kl n} \{\alpha_j \partial_j x_l \partial_n - x_l \partial_n \alpha_j \partial_j\} \\
&= (-i\hbar)^2 c\epsilon_{kl n} \alpha_j \{\partial_j x_l \partial_n - x_l \partial_j \partial_n\} \\
&= (-i\hbar)^2 c\epsilon_{kl n} \alpha_j [\partial_j, x_l] \partial_n \\
&= (-i\hbar)^2 c\epsilon_{kl n} \alpha_j \partial_n \delta_{jl} \\
&= -i\hbar c \epsilon_{k j n} \alpha_j p_n \\
&= -i\hbar c (\boldsymbol{\alpha} \wedge \mathbf{p})_k
\end{aligned}$$

ou seja

$$[H_D, \mathbf{L}] = -i\hbar c (\boldsymbol{\alpha} \wedge \mathbf{p}) \quad (3.38)$$

que é diferente de zero, pelo que o Momento Angular não é uma quantidade conservada para uma partícula livre relativista. O quadrado do momento angular L^2 também não comuta com o Hamiltoniano livre de Dirac

$$\begin{aligned}
[H_D, L^2] &= [c\alpha_j p_j, L_k^2] \\
&= [c\alpha_j p_j, L_k] L_k + L_k [c\alpha_j p_j, L_k] \\
&= -i\hbar c \epsilon_{k j n} \alpha_j (p_n L_k + L_k p_n) \\
&= -i\hbar c \epsilon_{j n k} \alpha_j \{p_n, L_k\}
\end{aligned} \quad (3.39)$$

Na mecânica quântica o operador de Spin é dado pela matrizes de Pauli $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$, o análogo relativista será uma matriz 4×4 , define-se então

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Sigma} \quad (3.40)$$

onde na representação de Dirac

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \quad (3.41)$$

O comutador entre o Hamiltoniano e o operador de Spin é

$$\begin{aligned}
[H_D, \mathbf{S}_k] &= \left[(c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2), \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Sigma}_k \right] \\
&= c \frac{\hbar}{2} \{\alpha_i p_i \Sigma_k - \Sigma_k \alpha_i p_i\} \\
&= c \frac{\hbar}{2} p_i \{\alpha_i \Sigma_k - \Sigma_k \alpha_i\}
\end{aligned} \quad (3.42)$$

agora

$$\alpha_i \Sigma_k - \Sigma_k \alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & [\sigma_i, \sigma_k] \\ [\sigma_i, \sigma_k] & 0 \end{pmatrix} \quad (3.43)$$

e

$$[\sigma_i, \sigma_k] = 2i\epsilon_{ikl}\sigma_l \quad (3.44)$$

(3.42) fica

$$\begin{aligned} [H_D, \mathbf{S}_k] &= c \frac{\hbar}{2} \epsilon_{ikl} \alpha_l p_i \\ &= c \frac{\hbar}{2} 2i\epsilon_{kli} \alpha_l p_i \\ &= i\hbar c (\boldsymbol{\alpha} \wedge \mathbf{p})_k \end{aligned} \quad (3.45)$$

ou seja,

$$[H_D, \mathbf{S}] = i\hbar c (\boldsymbol{\alpha} \wedge \mathbf{p}) \quad (3.46)$$

o operador de spin não comuta com o Hamiltoniano, mas o quadrado do operador de spin $S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \mathbf{1}_4$ comuta.

O operador momento angular total \mathbf{J}

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (3.47)$$

que comuta com o Hamiltoniano

$$\begin{aligned} [H_D, \mathbf{J}] &= [H_D, \mathbf{L} + \mathbf{S}] \\ &= [H_D, \mathbf{L}] + [H_D, \mathbf{S}] = 0 \\ &= -i\hbar c (\boldsymbol{\alpha} \wedge \mathbf{p}) + i\hbar c (\boldsymbol{\alpha} \wedge \mathbf{p}) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.48)$$

é uma quantidade conservada para uma partícula livre relativista de Spin $\frac{1}{2}$.

3.2.4 Matrizes γ e a Forma Covariante da Equação de Dirac

Convém encontrar uma forma (forma covariante) da equação de Dirac onde tempo e espaço são tratados de maneira semelhante. Multiplicando a equação (3.20) por $\frac{\beta}{c}$ e tendo em conta que $\beta^2 = 1$

$$i \left(\beta \frac{\partial}{\partial(ct)} + \beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} \right) \psi(x) = \frac{mc}{\hbar} \psi(x) \quad (3.49)$$

Define-se então as Matrizes γ

$$\gamma^0 \stackrel{\text{def}}{=} \beta \quad , \quad \gamma^i \stackrel{\text{def}}{=} \beta \alpha^i \quad , \quad \gamma^\mu \stackrel{\text{def}}{=} (\gamma^0, \boldsymbol{\gamma}) \quad (3.50)$$

na representação de Dirac

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \quad (3.51)$$

Com estas definições γ^0 é Hermitico, com $(\gamma^0)^2 = 1$, e γ^i anti-Hermitico, i.e., $(\gamma^i)^\dagger = -\gamma^i$, com $(\gamma^i)^2 = -1$ tal que em termos das matrizes γ as relações de comutação (3.24) escrevem-se

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu \stackrel{\text{def}}{=} \{\gamma^\mu \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu} \quad \mu, \nu = 0, 1, 2, 3 \quad (3.52)$$

Substituindo as matrizes em (3.20) tem-se a forma covariante da equação de Dirac

$$i\gamma^\mu \partial_\mu \psi(x) = \frac{mc}{\hbar} \psi(x) \quad (3.53)$$

ou ainda

$$\left[i\not{\partial} - \frac{mc}{\hbar} \right] \psi(x) = 0 \quad (3.54)$$

onde se introduziu a notação, devida a Feynman

$$\not{\partial} = \gamma^\mu \partial_\mu = \gamma^0 \partial_0 + \boldsymbol{\gamma} \cdot \boldsymbol{\nabla} \quad (3.55)$$

3.3 Covariância da Equação de Dirac

Considere-se a equação de Dirac em dois referenciais de inércia que se movem com velocidade constante um relativamente ao outro. Um observador mede a função de onda $\psi'(x')$ enquanto que o outro mede a função de onda $\psi(x)$. O princípio da relatividade diz que ambas as funções de onda estão relacionadas através de uma transformação tal que o estado físico descrito por estas é o mesmo e que, a forma das equações físicas deve ser a mesma em ambos os referenciais

$$\left[i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{mc}{\hbar} \right] \psi(x) = 0 \quad (3.56)$$

$$\left[i\gamma'^\mu \partial'_\mu - \frac{mc}{\hbar} \right] \psi'(x') = 0 \quad (3.57)$$

3.3.1 Transformações de equivalência

Adicionalmente as matrizes γ'^μ têm de satisfazer as relações de anti-comutação (3.52) para que os observadores não consigam distinguir os seus sistemas de inércia. Assim

$$\gamma'^\mu \gamma'^\nu + \gamma'^\nu \gamma'^\mu = 2\eta^{\mu\nu} \quad (3.58)$$

e

$$\gamma'^{0\dagger} = \gamma'^0, \quad \gamma'^{i\dagger} = -\gamma'^i \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.59)$$

De facto pode-se demonstrar³ que se as relações anteriores são satisfeitas então as matrizes γ^μ e γ'^μ estão relacionadas por uma transformação unitária

$$\gamma'^\mu = U^\dagger \gamma^\mu U, \quad U^\dagger = U^{-1} \quad (3.60)$$

³teorema fundamental de Pauli

A uma transformação deste tipo chama-se transformação de equivalência ou semelhança e não altera a física. Podemos assim, passar toda a transformação para a função de onda e usar a mesma representação em todos os referenciais de inércia.

3.3.2 Transformações de Lorentz da função de onda

A transformação entre $\psi'(x')$ e $\psi(x)$ deve ser linear, porque tanto a equação de Dirac como as transformações de Lorentz são lineares nas coordenadas espaço-tempo. Assim esta deve ter a forma

$$\psi'(x') = \psi'(\Lambda x) = S(\Lambda)\psi(x) \quad (3.61)$$

com

$$x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu} x^{\nu} \quad (3.62)$$

e

$$\frac{\partial}{\partial x'^{\mu}} = \frac{\partial x^{\nu}}{\partial x'^{\mu}} \frac{\partial}{\partial x^{\nu}} = (\Lambda^{-1})^{\nu}_{\mu} \partial_{\nu} \quad (3.63)$$

Substituindo (3.61) e (3.63) em (3.57)

$$\left(i\gamma^{\mu}(\Lambda^{-1})^{\nu}_{\mu} \partial_{\nu} - \frac{mc}{\hbar} \right) S(\Lambda)\psi(x) = 0 \quad (3.64)$$

multiplicando à esquerda por $S^{-1}(\Lambda)$ e como $S(\Lambda)$ comuta com a derivada (não depende de x) e com Λ^{ν}_{μ} (são apenas números), (3.64) fica

$$\left(iS^{-1}(\Lambda)\gamma^{\mu}S(\Lambda)(\Lambda^{-1})^{\nu}_{\mu} \partial_{\nu} - \frac{mc}{\hbar} S^{-1}(\Lambda)S(\Lambda) \right) \psi(x) = 0 \quad (3.65)$$

comparando com (3.56)

$$S^{-1}(\Lambda)\gamma^{\mu}S(\Lambda)(\Lambda^{-1})^{\nu}_{\mu} = \gamma^{\nu} \quad (3.66)$$

ou

$$S^{-1}(\Lambda)\gamma^{\mu}S(\Lambda) = \Lambda^{\mu}_{\nu}\gamma^{\nu} \quad (3.67)$$

As equações acima são as relações fundamentais que permitem obter S e encontrado S está provada a covariância da equação de Dirac. Estas relações são válidas tanto para transformações de Lorentz discretas como contínuas, visto que a dedução acima não depende do $\det(\Lambda) = \pm 1$.

Em geral, uma função de onda que se transforma de acordo com (3.61) e (3.67) são spinores de Lorentz de quatro componentes ou *bispinores*.

De forma a construir a forma de S para uma dada transformação de Lorentz, pode-se começar por considerar transformações infinitesimais, visto que a transformação finita pode ser obtida por exponenciação. Então expandindo o operador S em potências de ϵ até primeira ordem:

$$S(1 + \epsilon\lambda) = I + \epsilon T \quad (3.68)$$

e

$$S^{-1}(1 + \epsilon\lambda) = I - \epsilon T \quad (3.69)$$

Substituindo na relação fundamental (3.67)

$$S^{-1}\gamma^\mu S = (I - \epsilon T)\gamma^\mu(I + \epsilon T)$$

$$S^{-1}\gamma^\mu S = \gamma^\mu + \epsilon(\gamma^\mu T - T\gamma^\mu) = \Lambda_\nu^\mu \gamma^\nu \quad (3.70)$$

usando a relação (2.49) tem-se

$$\gamma^\mu + \epsilon(\gamma^\mu T - T\gamma^\mu) = \gamma^\mu + \epsilon\lambda_\nu^\mu \gamma^\nu \quad (3.71)$$

ou seja,

$$\gamma^\mu T - T\gamma^\mu = \lambda_\nu^\mu \gamma^\nu \quad (3.72)$$

A solução desta equação é

$$T = \frac{1}{8}\lambda^{\mu\nu}(\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu) \quad (3.73)$$

e (3.68) fica

$$S = 1 + \frac{\epsilon}{8}\lambda^{\mu\nu}(\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu) + \dots \quad (3.74)$$

Para a transformação finita

$$S = \lim_{n \rightarrow +\infty} \left[1 + \frac{\lambda^{\mu\nu}}{8n}(\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu) \right]^n = e^{\frac{\lambda^{\mu\nu}}{8}(\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu)} \quad (3.75)$$

Com S o operador transformação e T o gerador. Definindo

$$\sigma_{\mu\nu} = \frac{1}{2i}[\gamma_\mu, \gamma_\nu] \quad (3.76)$$

S fica

$$S = e^{\frac{i}{4}\lambda^{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu}} \quad (3.77)$$

• Rotações

Para rotações definiu-se $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \theta_3) = (\lambda_{23}, \lambda_{31}, \lambda_{12})$. Os geradores T são então:

$$\theta_1 \Rightarrow T(R_1) = \frac{1}{2}\gamma_2\gamma_3 = -\frac{1}{2}\alpha_2\alpha_3 = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & \sigma_1 \end{pmatrix} \quad (3.78)$$

$$\theta_2 \Rightarrow T(R_2) = \frac{1}{2}\gamma_3\gamma_1 = -\frac{1}{2}\alpha_3\alpha_1 = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} \sigma_2 & 0 \\ 0 & \sigma_2 \end{pmatrix} \quad (3.79)$$

$$\theta_3 \Rightarrow T(R_3) = \frac{1}{2}\gamma_1\gamma_2 = -\frac{1}{2}\alpha_1\alpha_2 = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} \quad (3.80)$$

Para rotações finitas

$$S_R = e^{\frac{i}{2}\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{\Sigma}} \quad (3.81)$$

usando (1.113)

$$(\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{\Sigma})(\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{\Sigma}) = \boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{\theta} \quad (3.82)$$

pode-se escrever, desenvolvendo (3.81) em série

$$S_R = \cos \frac{\theta}{2} + i\hat{\theta}\cdot\boldsymbol{\Sigma} \sin \frac{\theta}{2} \quad (3.83)$$

onde $\hat{\theta}$ é o versor na direcção da rotação.

• Boosts de Lorentz

Para os boosts definiu-se $\boldsymbol{\omega} = (\omega_1, \omega_2, \omega_3) = (\lambda_{01}, \lambda_{02}, \lambda_{03})$ tal que

$$\begin{cases} \hat{\omega} \equiv \hat{V} \\ \tanh \omega = \frac{V}{c} \end{cases} \quad (3.84)$$

onde V é a velocidade relativa dos dois referenciais.

Os geradores T são então:

$$\omega_1 \Rightarrow T(L_1) = \frac{1}{2}\gamma_0\gamma_1 = -\frac{1}{2}\alpha^1 \quad (3.85)$$

$$\omega_2 \Rightarrow T(L_2) = \frac{1}{2}\gamma_0\gamma_2 = -\frac{1}{2}\alpha^2 \quad (3.86)$$

$$\omega_3 \Rightarrow T(L_3) = \frac{1}{2}\gamma_0\gamma_3 = -\frac{1}{2}\alpha^3 \quad (3.87)$$

Para transformação finita

$$S_L = e^{-\frac{1}{2}\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\alpha}} \quad (3.88)$$

usando

$$(\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\alpha})^2 = \boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\omega} \quad (3.89)$$

pelo que se tem

$$S_L = \cosh \frac{\omega}{2} - \hat{\omega}\cdot\boldsymbol{\alpha} \sinh \frac{\omega}{2} \quad (3.90)$$

• Inversão no Espaço, Operador Paridade \hat{P}

A inversão no espaço é dada pela matriz transformação (2.74)

$$\Lambda_{\nu}^{\mu} = \eta_{\mu\nu} \quad (3.91)$$

Seja \hat{P} o operador que transforma os spinores tal que, $\hat{P}\psi(x) = \psi(-x)$ e que satisfaz (3.67)

$$\begin{aligned} P^{-1}(\Lambda)\gamma^\mu P(\Lambda) &= \Lambda_\nu^\mu \gamma^\nu \\ &= \eta_{\mu\nu} \gamma^\nu \\ &= \gamma_\mu \end{aligned} \quad (3.92)$$

Das relações (3.58) vê-se facilmente que (3.92) é satisfeita para

$$P = \lambda \gamma^0 = \lambda \beta \quad (3.93)$$

com λ uma constante arbitrária tal que $|\lambda|^2 = \lambda^* \lambda = 1$. Assim de (3.93) tem-se que as duas primeiras componentes do bispinor têm paridade intrínseca oposta em relação à terceira e quarta componente.

3.3.3 Covariantes Bilineares

Estando definida a matriz S é de esperar que $\psi^\dagger \psi$ seja um escalar

$$\psi'^\dagger \psi' = (S\psi)^\dagger S\psi = \psi^\dagger S^\dagger S\psi \quad (3.94)$$

ou seja, $\psi^\dagger \psi$ é um escalar se a matriz transformação S for unitária, $S^\dagger S = 1$. Verifica-se que S_R é unitária enquanto que S_L não o é. É contudo possível demonstrar que

$$S^{-1} = \gamma^0 S^\dagger \gamma^0 \quad (3.95)$$

tanto para S_R como para S_L e com esta relação mostrar que a corrente é um 4-vector. Para isso escreve-se (3.35) e (3.36) da seguinte forma

$$j^\mu(x) = c\psi^\dagger(x)\gamma^0\gamma^\mu\psi(x) \quad (3.96)$$

e

$$\begin{aligned} j'^\mu &= c\psi'^\dagger(x')\gamma^0\gamma^\mu\psi'(x') \\ &= c\psi^\dagger(x)S^\dagger\gamma^0\gamma^\mu S\psi(x) \\ &= c\psi^\dagger(x)\gamma^0\gamma^0 S^\dagger\gamma^0\gamma^\mu S\psi(x) \\ &= c\psi^\dagger(x)\gamma^0 S^{-1}\gamma^\mu S\psi(x) \end{aligned} \quad (3.97)$$

Aplicando (3.67) à equação anterior tem-se

$$j'^\mu = \Lambda_\nu^\mu j^\nu \quad (3.98)$$

ou seja, j^μ comporta-se como um 4-vector. Convém escrever (3.97) como

$$j^\mu = c\bar{\psi}(x)S^{-1}\gamma^\mu S\psi(x) \quad (3.99)$$

onde $\bar{\psi}$ é o adjunto de Dirac

$$\bar{\psi} \stackrel{\text{def}}{=} \psi^\dagger \beta \equiv \psi^\dagger \gamma^0 \quad (3.100)$$

(3.94) mostra que ρ sendo a componente temporal de um 4-vector, não é um escalar!

Pode-se contudo definir o produto de Dirac como

$$\bar{\psi}(x)\psi(x) = \psi^\dagger(x)\gamma^0\psi(x) = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 - |\psi_3|^2 - |\psi_4|^2 \quad (3.101)$$

que é um invariante relativista

$$\begin{aligned} (\bar{\psi}(x)\psi(x))' &= \psi'^\dagger(x)\gamma^0\psi'(x) \\ &= \psi^\dagger(x)S^\dagger\gamma^0S\psi(x) \\ &= \psi^\dagger(x)\gamma^0\psi(x) \\ &= \bar{\psi}(x)\psi(x) \end{aligned} \quad (3.102)$$

onde se usou a relação $S^\dagger\gamma^0S = \gamma^0$. O producto de Dirac é também invariante perante a transformação de inversão no espaço, pelo que é um escalar. Podem-se definir outras quantidades covariantes em termos de combinações bilineares das funções de onda de Dirac. Para construir um pseudo-escalar define-se a matriz

$$\gamma^5 \equiv i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \quad (3.103)$$

tendo em conta as relações de anti-comutação pode-se escrever (3.103) de uma forma mais geral

$$\gamma^5 = \frac{i}{4!}\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma}\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\rho\gamma^\sigma \quad (3.104)$$

que na representação de Dirac tem a forma

$$\gamma^5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.105)$$

Da definição resultam as propriedades importantes

$$\{\gamma^5, \gamma^\mu\} = 0 \quad (3.106)$$

$$(\gamma^5)^2 = 1 \quad (3.107)$$

O covariante bilinear $\bar{\psi}(x)\gamma_5\psi(x)$ é um invariante de Lorentz

$$\begin{aligned} (\bar{\psi}(x)\gamma_5\psi(x))' &= \bar{\psi}'(x)\gamma^5\psi'(x) = \psi'^\dagger(x)\gamma^0\gamma^5\psi'(x) \\ &= \psi^\dagger(x)S^\dagger\gamma^0\gamma^5S\psi(x) \\ &= \psi^\dagger(x)\gamma^0\gamma^0S^\dagger\gamma^0\gamma^5S\psi(x) \\ &= \bar{\psi}(x)S^{-1}\gamma^5S\psi(x) \end{aligned} \quad (3.108)$$

agora

$$\begin{aligned}
S^{-1}\gamma^5 S &= \frac{i}{4!}\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} (S^{-1}\gamma^\mu S) (S^{-1}\gamma^\nu S) (S^{-1}\gamma^\rho S) (S^{-1}\gamma^\sigma S) \\
&= \frac{i}{4!}\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} (\Lambda_\alpha^\mu \gamma^\alpha) (\Lambda_\beta^\nu \gamma^\beta) (\Lambda_\lambda^\rho \gamma^\lambda) (\Lambda_\delta^\sigma \gamma^\delta) \\
&= \frac{i}{4!}\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} \Lambda_\alpha^\mu \Lambda_\beta^\nu \Lambda_\lambda^\rho \Lambda_\delta^\sigma \gamma^\alpha \gamma^\beta \gamma^\lambda \gamma^\delta \\
&== \frac{i}{4!} \det(\Lambda) \epsilon_{\alpha\beta\lambda\delta} \gamma^\alpha \gamma^\beta \gamma^\lambda \gamma^\delta \\
&= \det(\Lambda) \gamma^5
\end{aligned} \tag{3.109}$$

como para transformações próprias de Lorentz $\det(\Lambda) = +1$ e para a transformação de inversão no espaço $\det(\Lambda) = -1$, ou seja, o mesmo é dizer que na equação (3.109) $[\gamma^5, S]$ e $\{\gamma^5, P\} = 0$, pelo que $\bar{\psi}(x)S^{-1}\gamma^5 S\psi(x)$ se transforma como um pseudo-escalar.

De facto, tal como qualquer matriz complexa 2×2 se pode exprimir em termos de 4 matrizes linearmente independentes também qualquer matriz 4×4 se pode exprimir em termos de 16 matrizes 4×4 linearmente independentes...

$$\begin{aligned}
\bar{\psi}\mathbf{1}\psi &= \text{escalar} & (1 \text{ componente}) \\
\bar{\psi}\gamma^5\psi &= \text{pseudo-escalar} & (1 \text{ componente}) \\
\bar{\psi}\gamma^\mu\psi &= \text{vector} & (4 \text{ componentes}) \\
\bar{\psi}\gamma^\mu\gamma^5\psi &= \text{pseudo-vector} & (4 \text{ componentes}) \\
\bar{\psi}\sigma^{\mu\nu}\psi &= \text{tensor anti-simétrico} & (6 \text{ componentes})
\end{aligned} \tag{3.110}$$

Por vezes é necessário calcular traços e contrações de matrizes γ . Algumas propriedades das matrizes são:

1. $\gamma_\mu\gamma^\mu = 4$
2. $\gamma_\mu\gamma^\nu\gamma^\mu = -2\gamma^\nu$
3. $\gamma_\mu\gamma^\nu\gamma^\rho\gamma^\mu = 4\eta^{\nu\rho}$
4. $\gamma_\mu\gamma^\nu\gamma^\rho\gamma^\sigma\gamma^\mu = -2\gamma^\sigma\gamma^\rho\gamma^\nu$
5. O traço do producto de um número ímpar de matrizes γ é zero
6. $Tr(\mathbf{1}) = 4$
7. $Tr(\gamma^\mu\gamma^\nu) = 4\eta^{\mu\nu}$
8. $Tr(\gamma_\mu\gamma^\nu\gamma^\rho\gamma^\mu) = 4\eta^{\nu\rho}$
9. $Tr(\gamma_\mu\gamma^\nu\gamma^\rho\gamma^\sigma) = 4(\eta^{\mu\nu}\eta^{\rho\sigma} - \eta^{\mu\rho}\eta^{\nu\sigma} + \eta^{\mu\sigma}\eta^{\nu\rho})$ Como γ^5 é o produto de um número par de matrizes. tem-se devido à propriedade 5 que $Tr(\gamma^5\gamma^\mu) = Tr(\gamma^5\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\rho) = 0$. Quando γ^5 é multiplicado por um número par de matrizes tem-se

10. $Tr(\gamma^5) = 0$
11. $Tr(\gamma^5 \gamma^\mu \gamma^\nu) = 0$
12. $Tr(\gamma^5 \gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\rho \gamma^\sigma) = 4i\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma}$

3.4 Soluções da equação de Dirac

3.4.1 Partícula em Repouso

Considere-se a equação de Dirac para uma partícula em repouso (referencial próprio), isto é $\mathbf{p} = 0$ ou $\nabla\psi(x) = 0$, a função de onda não depende das coordenadas espaciais

$$\left[i\gamma^0 \frac{\partial}{\partial(ct)} - \frac{mc}{\hbar} \right] \psi(t) = 0 \quad (3.111)$$

ou

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(t) = \beta \frac{mc^2}{\hbar} \psi(t) \quad (3.112)$$

explicitamente

$$i\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \\ \psi_3(t) \\ \psi_4(t) \end{pmatrix} = \frac{mc^2}{\hbar} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \\ \psi_3(t) \\ \psi_4(t) \end{pmatrix} \quad (3.113)$$

As 4 soluções independentes escrevem-se

$$\psi_1(t) = \omega_1(0)e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t} \quad ; \quad \psi_2(t) = \omega_2(0)e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t} \quad (3.114)$$

$$\psi_3(t) = \omega_3(0)e^{i\frac{mc^2}{\hbar}t} \quad ; \quad \psi_4(t) = \omega_4(0)e^{i\frac{mc^2}{\hbar}t} \quad (3.115)$$

com

$$\omega_1(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \omega_2(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.116)$$

$$\omega_3(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \omega_4(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.117)$$

ignorando por agora as constantes de integração. Aplicando o operador energia $i\hbar\partial_t$ é imediato ver que existem soluções de energia positiva para ψ_1

e ψ_2 e soluções de energia negativa para ψ_3 e ψ_4 . Pode-se então dividir as soluções em duas soluções distintas

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \varphi(x) \\ \chi(x) \end{pmatrix} \quad ; \quad \omega(p) = \begin{pmatrix} u(p) \\ v(p) \end{pmatrix} \quad (3.118)$$

Como $\mathbf{p} = 0$ o operador \mathbf{J} reduz-se ao operador de spin Σ_3 . aplicando-o às quatro soluções independentes (3.116) e (3.117), facilmente se verifica que este tem valores próprios $+1$ para ψ_1 e ψ_3 e -1 para ψ_2 e ψ_4 . Define-se assim as seguintes matrizes coluna

$$u_{\uparrow}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u_{\downarrow}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad v_{\uparrow}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad v_{\downarrow}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.119)$$

com $u(0)$ spinores para uma partícula em repouso de energia positiva e $v(0)$ para energias negativas. Estes spinores constituem a base de vectores na qual se expande um spinor geral de Dirac 4×1 .

3.4.2 Partícula Livre

Para uma partícula livre os estados quânticos têm energia e momento bem definidos e são descritos por soluções de ondas planas. Por outro lado nas relações (3.114) e (3.115) reconhece-se o argumento mc^2 como o producto escalar $p_{\mu}x^{\mu}$ calculado no referencial próprio da partícula. Assim as soluções devem ser do tipo

$$\psi(x) = \omega(p)e^{-\frac{i}{\hbar}p_{\mu}x^{\mu}} \quad (3.120)$$

substituindo em (3.54) tem-se

$$(\gamma^{\mu}p_{\mu} - mc)w(p) = 0 \quad (3.121)$$

que é a equação de Dirac no espaço dos momenta. Esta equação é puramente algébrica, não contém derivadas. Agora

$$\begin{aligned} \gamma^{\mu}p_{\mu} &= \gamma^0 p^0 - \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{p} = \frac{E}{c} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - \mathbf{p} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{E}{c} & -\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} & -\frac{E}{c} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.122)$$

e (3.121) fica

$$\begin{pmatrix} \frac{E}{c} - mc & -\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} & -\frac{E}{c} - mc \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(p) \\ v(p) \end{pmatrix} = 0 \quad (3.123)$$

donde se obtém

$$u(p) = c \frac{\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{E - mc^2} v(p) \quad e \quad v(p) = c \frac{\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{E + mc^2} u(p) \quad (3.124)$$

Agora

$$\begin{aligned}\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} &= p_x \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + p_y \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + p_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (3.125)$$

e as quatro soluções independentes são:

$$\text{se } u_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{então } w_1(p) = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp_z}{E+mc^2} \\ \frac{cp_+}{E+mc^2} \end{pmatrix} \quad (3.126)$$

$$\text{se } u_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{então } w_2(p) = N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{cp_-}{E+mc^2} \\ \frac{-cp_z}{E+mc^2} \end{pmatrix} \quad (3.127)$$

para soluções de energia positiva, $E = \sqrt{m^2c^4 + \mathbf{p}^2c^2}$, e

$$\text{se } v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{então } w_3(p) = N \begin{pmatrix} \frac{cp_z}{E-mc^2} \\ \frac{cp_+}{E-mc^2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.128)$$

$$\text{se } v_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{então } w_4(p) = N \begin{pmatrix} \frac{cp_-}{E-mc^2} \\ \frac{-cp_z}{E-mc^2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.129)$$

para soluções de energia negativa, $E = -\sqrt{m^2c^4 + \mathbf{p}^2c^2}$, onde

$$p_+ = p_x + ip_y \quad (3.130)$$

e

$$p_- = p_x - ip_y \quad (3.131)$$

3.4.3 Propriedades dos spinores

- Normalização e relações de ortogonalidade

É conveniente normalizar os spinores tal que a relação de ortogonalidade seja

$$w_r^\dagger(p)w_{r'}(p) = 2\frac{|E|}{c}\delta_{rr'} \quad (3.132)$$

assim, por exemplo

$$\begin{aligned}
w_1^\dagger w_1 &= N^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{cp_z}{E+mc^2} & \frac{p_-}{E+mc^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp_z}{E+mc^2} \\ \frac{p_+}{E+mc^2} \end{pmatrix} \\
&= N^2 \left\{ 1 + 0 + c^2 \frac{p_z^2}{(E+mc^2)^2} + c^2 \frac{p_x^2 + p_y^2}{(E+mc^2)^2} \right\} \\
&= N^2 \left\{ 1 + c^2 \frac{p^2}{(E+mc^2)^2} \right\} \\
&= N^2 \left\{ \frac{(E+mc^2)^2 + c^2 p^2}{(E+mc^2)^2} \right\} \\
&= N^2 \left\{ \frac{(m^2 c^4 + c^2 p^2) + 2Em^2 + E^2}{(E+mc^2)^2} \right\} \\
&\Rightarrow N^2 \frac{2E(mc^2 + E)}{(E+mc^2)^2} = \frac{2|E|}{c} \\
&\Rightarrow N = \sqrt{\frac{E+mc^2}{c}} \quad E > 0
\end{aligned} \tag{3.133}$$

para soluções de energia negativa

$$\begin{aligned}
w_3^\dagger w_3 &= N^2 \begin{pmatrix} \frac{cp_z}{E-mc^2} & \frac{p_-}{E-mc^2} & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{cp_z}{E-mc^2} \\ \frac{p_+}{E-mc^2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\
&= N^2 \left\{ c^2 \frac{p_z^2}{(E-mc^2)^2} + c^2 \frac{p_x^2 + p_y^2}{(E-mc^2)^2} + 1 + 0 \right\} \\
&= N^2 \left\{ 1 + c^2 \frac{p^2}{(E-mc^2)^2} \right\} \\
&= N^2 \left\{ \frac{(|E|+mc^2)^2 + c^2 p^2}{(|E|+mc^2)^2} \right\} \\
&= N^2 \left\{ \frac{(m^2 c^4 + c^2 p^2) + 2|E|m^2 + |E|^2}{(|E|+mc^2)^2} \right\} \\
&\Rightarrow N^2 \frac{2|E|(mc^2 + |E|)}{(|E|+mc^2)^2} = \frac{2|E|}{c} \\
&\Rightarrow N = \sqrt{\frac{|E|+mc^2}{c}} \quad E < 0
\end{aligned} \tag{3.134}$$

- **Equação adjunta de Dirac**

A normalização anterior torna a normalização em termos do spinore adjunto muito simples, visto que

$$E\omega(p) = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2) \omega(p) \quad (3.135)$$

$$E\omega^\dagger(p) = \omega^\dagger(p) (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2) \quad (3.136)$$

multiplicando (3.135) por $\omega^\dagger(\mathbf{p})\beta$ à esquerda, (3.136) por $\beta\omega(\mathbf{p})$ à direita e somando, obtém-se

$$2E\omega^\dagger(p)\beta\omega(p) = 2mc^2\omega^\dagger(p)\omega(p) \quad (3.137)$$

ou seja,

$$\bar{\omega}_r(p)\omega_{r'}(p) = 2mc \frac{|E|}{E} \delta_{rr'} \quad (3.138)$$

que é um invariante relativista, com $\frac{|E|}{E} = \epsilon_r$ e

$$\epsilon_r = \begin{cases} +1 & r = 1, 2 \\ -1 & r = 3, 4 \end{cases} \quad (3.139)$$

A equação adjunta de Dirac é obtida multiplicando (3.136) por β à direita

$$\bar{\omega}(\mathbf{p}) (\gamma^\mu p_\mu - mc) = 0 \quad (3.140)$$

e tem a forma covariante.

- **Relação de completude**

Devido às relações de ortonormalização anteriores, a relação de completude para os spinores de Dirac escreve-se

$$\sum_{r=1}^4 \epsilon_r w_r(p) \otimes \bar{w}_r(p) = 2mc \mathbf{1}_4 \quad (3.141)$$

- **Helicidade**

Os spinores de Dirac não são estados próprios do operador S_z (excepto nos casos $\mathbf{p} = p_z$ e $\mathbf{p} = 0$), visto que não comuta com o Hamiltoniano. Por outro lado a equação (3.123) mostra que para cada momento \mathbf{p} existem duas soluções distintas, esta degenerescência mostra que tem de haver um outro observável que comuta com H e \mathbf{p} tal que os seus valores próprios distinguem estes estados. Define-se assim o operador Helicidade

$$\hat{h}(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} = \frac{\hbar}{2} \frac{\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} \quad (3.142)$$

e fisicamente corresponde ao spin da partícula paralelo à direcção do movimento. É então possível encontrar estados próprios do Hamiltoniano que sejam estados próprios do operador helicidade, tal que para um dado 4-momento existem 4 soluções linearmente independentes caracterizadas por $cp_0 = \pm|E(\mathbf{p})|$ e $\mathbf{h}(\mathbf{p}) = \pm\frac{\hbar}{2}$. Explicitamente os estados próprios são dados pela equação de valores próprios:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} u(\mathbf{p}) = \pm u(\mathbf{p}) \quad (3.143)$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} v(\mathbf{p}) = \pm v(\mathbf{p}) \quad (3.144)$$

onde \mathbf{n} é o versor na direcção do movimento, $\mathbf{n} = \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|}$.

Para o valor-próprio $\lambda = 1$ a equação (3.143) fica

$$\begin{pmatrix} n_3 & n_1 - in_2 \\ n_1 + in_2 & -n_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (3.145)$$

uma solução deste sistema é:

$$\text{se } a = n_3 + 1 \quad \text{então } b = n_1 + in_2 \quad (3.146)$$

Normalizando tal que $u_1^\dagger u_1 = 1$ fica

$$u_1 = \frac{1}{\sqrt{2(n_3 + 1)}} \begin{pmatrix} n_3 + 1 \\ n_1 + in_2 \end{pmatrix} \quad (3.147)$$

e

$$\omega_1(\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{2(n_3 + 1)}} \sqrt{\frac{|E| + mc^2}{c}} \begin{pmatrix} n_3 + 1 \\ n_1 + in_2 \\ \frac{c|\mathbf{p}|}{E + mc^2} \begin{pmatrix} n_3 + 1 \\ n_1 + in_2 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \quad (3.148)$$

De forma semelhante para os outros spinors.

• Limite não-relativista

Inserindo (3.118) em (3.20) obtém-se o sistema de equações acopladas

$$\begin{cases} i\frac{\partial\varphi(x)}{\partial t} &= -ic\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \chi(x) + \frac{mc^2}{\hbar}\varphi(x) \\ i\frac{\partial\chi(x)}{\partial t} &= -ic\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \varphi(x) - \frac{mc^2}{\hbar}\chi(x) \end{cases} \quad (3.149)$$

No limite não-relativista $E - mc^2 \ll mc^2$ e pode-se fazer a substituição

$$\begin{pmatrix} \varphi(x) \\ \chi(x) \end{pmatrix} = e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2t} \begin{pmatrix} \varphi_0(x) \\ \chi_0(x) \end{pmatrix} \quad (3.150)$$

onde $\varphi_0(x)$ e $\chi_0(x)$ variam devagar com o tempo. Substituindo (3.150) em (3.149) tem-se

$$\begin{cases} i\frac{\partial\varphi_0(x)}{\partial t} &= -ic\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \chi_0(x) \\ i\frac{\partial\chi_0(x)}{\partial t} &= -ic\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \varphi_0(x) - 2\frac{mc^2}{\hbar}\chi_0(x) \end{cases} \quad (3.151)$$

Visto que $\chi_0(x)$ varia devagar com o tempo pode-se resolver aproximadamente a segunda equação de (3.151) tal que

$$\chi_0(x) \simeq -i\hbar \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla}}{2mc} \varphi_0(x) \ll \varphi_0(x) \quad (3.152)$$

pelo que se denominam φ e χ as grandes e pequenas componentes respectivamente. Agora substituindo (3.151) na primeira equação de (3.151) e multiplicando ambos os lados por \hbar obtém-se a equação de Schrodinger (3.5). Ou seja no limite não-relativista as grandes componentes obedecem à equação de Schrodinger enquanto que as pequenas componentes são desprezadas, o que faz com que as soluções de energia negativa não apareçam na mecânica quântica não-relativista.

3.4.4 Paradoxo de Klein

Considere-se a dispersão de uma partícula livre de Dirac de energia E e momento p , por uma barreira de potencial infinita tal que

$$V(z) = \begin{cases} 0 & , \quad z < 0 \\ V & , \quad z > 0 \end{cases} \quad (3.153)$$

Para $z < 0$ a função de onda incidente escreve-se

$$\psi_I(x) = \omega_I e^{-\frac{i}{\hbar}(\frac{E}{c}t - pz)} \quad (3.154)$$

e obedece à equação de Dirac

$$\left(\frac{E}{c} - \alpha_3 p - \beta mc \right) \omega_I = 0 \quad (3.155)$$

Na presença do potencial, $z > 0$, a energia da partícula é $E - V$ e o momento, p' tal que

$$p'^2 = \left(\frac{E - V}{c} \right)^2 - m^2 c^2 \quad (3.156)$$

As funções de onda reflectida e transmitida são

$$\psi_R(x) = \omega_R e^{-\frac{i}{\hbar}(\frac{E}{c}t + pz)} \quad (3.157)$$

$$\psi_T(x) = \omega_T e^{-\frac{i}{\hbar}(\frac{E}{c}t - p'z)} \quad (3.158)$$

e obedecem às equações

$$\left(\frac{E}{c} + \alpha_3 p - \beta mc \right) \omega_R = 0 \quad (3.159)$$

$$\left(\frac{E - V}{c} - \alpha_3 p' - \beta mc \right) \omega_T = 0 \quad (3.160)$$

Em $z = 0$ a continuidade da função de onda requer que

$$\omega_I + \omega_R = \omega_T \quad (3.161)$$

somando (3.155) e (3.159) tem-se

$$\left(\frac{E}{c} - \beta mc\right)(\omega_I + \omega_R) = \alpha_3 p(\omega_I - \omega_R) \quad (3.162)$$

e substituindo (3.161) em (3.160)

$$\left(\frac{E}{c} - \beta mc\right)(\omega_I + \omega_R) = \left(\frac{V}{c} - \alpha_3 p'\right)(\omega_I + \omega_R) \quad (3.163)$$

dividindo as duas ultimas equações

$$\left(\frac{V}{c} - \alpha_3 p'\right)(\omega_I + \omega_R) = \alpha_3 p(\omega_I - \omega_R) \quad (3.164)$$

ou seja

$$-\left\{\frac{V}{c} - \alpha_3(p - p')\right\}\omega_I = \left\{\frac{V}{c} + \alpha_3(p + p')\right\}\omega_R \quad (3.165)$$

Multiplicando por $\left(\frac{V}{c} - \alpha_3(p + p')\right)$

$$-\left\{\frac{V}{c} - \alpha_3(p - p')\right\}\left\{\frac{V}{c} - \alpha_3(p + p')\right\}\omega_I = \left\{\left(\frac{V}{c}\right)^2 - (p + p')^2\right\}\omega_R \quad (3.166)$$

expandindo e usando a relação (2.35) e (3.156), (3.166) fica

$$\omega_R = \frac{2\frac{V}{c}\left(-\frac{E}{c} + \alpha_3 p\right)}{\left(\frac{V}{c}\right)^2 - (p + p')^2}\omega_I = r\omega_I \quad (3.167)$$

analogamente para a amplitude adjunta

$$\omega_R^\dagger = r\omega_I^\dagger \quad (3.168)$$

isto é

$$\omega_R^\dagger \omega_R = \left(\frac{2\frac{V}{c}}{\left(\frac{V}{c}\right)^2 - (p + p')^2}\right)^2 \omega_I^\dagger \left(-\frac{E}{c} + \alpha_3 p\right)^2 \omega_I \quad (3.169)$$

agora, multiplicando a equação (3.155) por $\omega_I^\dagger \alpha$ à esquerda e a sua adjunta por $\alpha \omega_I$ à direita e somando obtém-se⁴

$$\omega_I^\dagger \alpha_3 \omega_I = \frac{cp}{E} \omega_I^\dagger \omega_I \quad (3.170)$$

⁴ver mecânica dos spinors, valor médio do observável velocidade, momento

onde se usaram as relações de anticomutação entre α e β . Usando a relação anterior em (3.169) tem-se que

$$\begin{aligned}\omega_R^\dagger \omega_R &= \left(\frac{2\frac{V}{c}}{\left(\frac{V}{c}\right)^2 - (p+p')^2} \right)^2 \left\{ \left(\frac{E^2}{c^2} + p^2 \right) \omega_I^\dagger \omega_I - \frac{2Ep}{c} \omega_I^\dagger \alpha_3 \omega_I \right\} \\ &= \left(\frac{2\frac{V}{c}}{\left(\frac{V}{c}\right)^2 - (p+p')^2} \right)^2 \left\{ \frac{E^2}{c^2} - p^2 \right\} \omega_I^\dagger \omega_I \\ &= \left(\frac{2Vm}{\left(\frac{V}{c}\right)^2 - (p+p')^2} \right)^2 \omega_I^\dagger \omega_I\end{aligned}\tag{3.171}$$

O coeficiente de reflexão, R , é então

$$R = \frac{\omega_R^\dagger \omega_R}{\omega_I^\dagger \omega_I} = \left(\frac{2Vm}{\left(\frac{V}{c}\right)^2 - (p+p')^2} \right)^2\tag{3.172}$$

Para E fixo, quando V aumenta de 0 até $E - mc^2$, R aumenta de 0 até 1, i.e., a partícula transmitida tem $p' = 0$ e é totalmente reflectida.

Quando V continua a aumentar de $E - mc^2$ até $E + mc^2$, tem-se da equação (3.156) que p' é imaginário puro. Assim,

$$p' = i\hbar q\tag{3.173}$$

com q real para $E - mc^2 < V < E + mc^2$. A onda transmitida é agora

$$\psi_T = \omega_T e^{-qz - i\frac{E}{\hbar}t}\tag{3.174}$$

Assim substituindo p' por $i\hbar q$ na equação (3.167) e p' por $-i\hbar q$ na equação (3.168), o coeficiente de reflexão, R , fica

$$R = \frac{(2V)^2(E^2 - c^2 p_0^2)}{[(V + cp)^2 + \hbar^2 c^2 q^2][(V - cp)^2 + \hbar^2 c^2 q^2]}\tag{3.175}$$

Da relação (3.156) pode-se ver que

$$\begin{aligned}E^2 - 2EV + V^2 &= c^2 p'^2 + m^2 c^4 \\ p^2 c^2 + m^2 c^4 - 2EV + V^2 &= c^2 p'^2 + m^2 c^4 \\ (V \pm pc)^2 \mp 2cpV - 2EV &= c^2 p'^2 \\ (V \pm pc)^2 + c^2 \hbar^2 q^2 &= 2V(E \pm pc)\end{aligned}\tag{3.176}$$

que substituindo em (3.168) dá

$$R = 1\tag{3.177}$$

Para $V > E + mc^2$ a equação (3.156) mostra que $p'^2 > 0$, ou seja, R é dado por (3.152). Contudo verifica-se que para $V > E + mc^2$, $E - V$ na relação (3.156) é negativo e assim a partícula tem energia negativa:

$$E - V = -\sqrt{p'^2 c^2 + m^2 c^4} < 0 \quad (3.178)$$

Concluindo:

- para $z < 0$, $V = 0$ e o espectro para energias positivas começa em $E = mc^2$ enquanto que para energias negativas $E \leq -mc^2$
 - Para $z > 0$, o espectro de energia sofre um aumento de $V(> 0)$ e três possíveis situações ocorrem:
1. Quando $V \leq E - mc^2$ existe transmissão através da transição para soluções de energia positiva na região $z > 0$

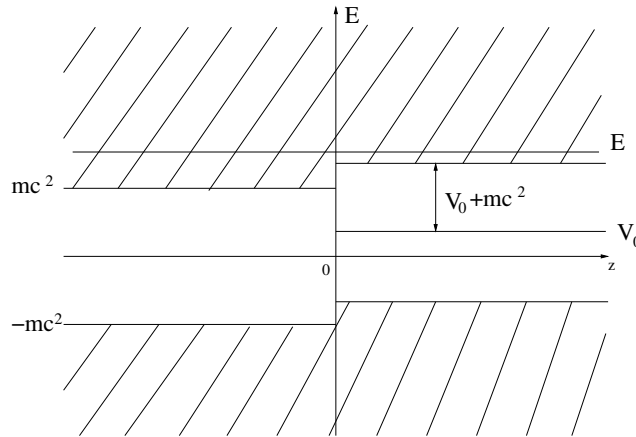


Figura 3.1: $V_0 \leq E - mc^2$

2. Quando $E - mc^2 \leq V \leq E + mc^2$, a onda incidente de energia $E (> 0)$ é completamente reflectida pela barreira de potencial V , visto que, para $z > 0$, E situa-se entre os espectros de energia positiva e negativa

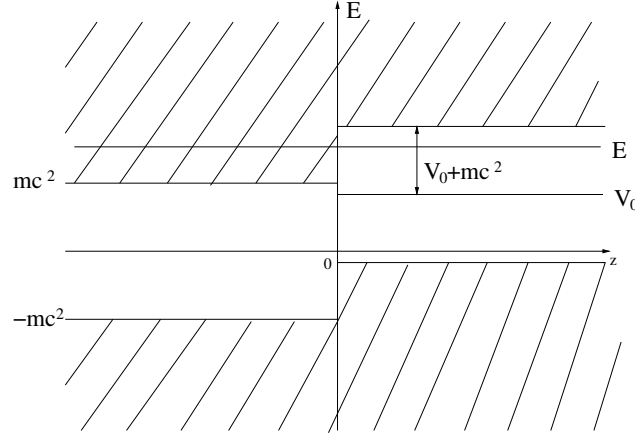


Figura 3.2: $E - mc^2 \leq V_0 \leq E + mc^2$

3. Para $V \geq E + mc^2$ a transmissão é possível por transição para soluções de energia negativa

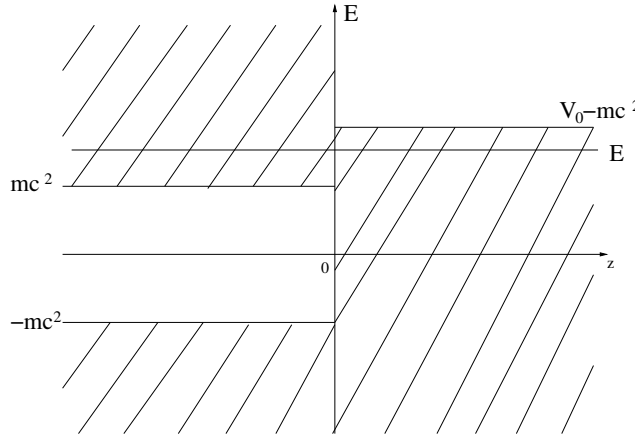


Figura 3.3: $V_0 \geq E + mc^2$

Assim para $V \geq E + mc^2$ a partícula de Dirac de energia positiva E penetra na barreira transitando para um estado de energia negativa. Quando V é infinitamente grande tem-se da equação (3.172) que

$$\lim_{V \rightarrow +\infty} R = \frac{E - pc}{E + pc} \quad (3.179)$$

3.4.5 A Teoria dos "Buracos" de Dirac

A equação de Dirac admite soluções de energia negativa e na presença de campos externos admite também a possibilidade de transições entre estados de energia positiva e negativa, tal como mostra o paradoxo de Klein. A existência de uma probabilidade finita e de um contínuo de estados negativos implica que os estados de energia positiva deveriam fazer para esses rápidas e sucessivas transições radiativas, catástrofe radiativa, e assim os átomos não seriam estáveis.

Em 1930, Dirac forneceu um primeiro tratamento consistente das soluções de energia negativa. Dirac hipotetizou o vácuo como consistindo de todos os níveis de energia negativa completamente ocupados, mar de Dirac, e todos os níveis de energia positiva desocupados. De acordo com o princípio de exclusão de Pauli, cada estado de energia negativa contém duas partículas de Dirac, não podendo existir transições para estados de energia negativa, visto estes estarem todos ocupados. Desta forma Dirac solucionou o problema da catástrofe radiativa.

Uma partícula do mar de Dirac pode contudo absorver radiação. Se a energia de radiação absorvida for maior que $2mc^2$ a partícula é então excitada para um nível de energia positiva, deixando um buraco. Esta buraco é interpretada como uma partícula de energia positiva, visto que para voltar a preencher o buraco é necessário uma partícula de energia negativa e momento oposto. A partícula associada ao buraco contém a mesma massa que a partícula excitada e na presença de um campo electromagnético esta contém carga oposta (anti-partículas). No caso do electrão a anti-partícula é o positrão e foi descoberto experimentalmente por Anderson em 1933.

Capítulo 4

Potencial Central

4.1 Operador Runge-Lenz

Para um sistema onde existe um potencial central o Hamiltoniano tem a forma geral

$$H = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2 + V(r) \quad (4.1)$$

Provou-se na secção 3.2.3 que o Hamiltoniano livre de Dirac não comuta com o operador momento angular nem com o operador de spin, comutando com o momento angular total \hat{J} . Como $V(r)$ tem simetria esférica, este é invariante perante rotações do sistema e comuta com J . Ou seja, o operador momento angular total comuta com o Hamiltoniano (4.1)

$$[\hat{J}, H] = 0 \quad (4.2)$$

e J é uma quantidade conservada. Das relações (1.133), (3.40) e do facto que $\Sigma^2 = 3\mathbf{I}_4$ tem-se que

$$\begin{aligned} J^2 &= L^2 + S^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \\ &= L^2 + \frac{\hbar^2}{4}\Sigma^2 + \hbar\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\Sigma} \\ &= L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\Sigma} \end{aligned} \quad (4.3)$$

agora

$$(\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\Sigma})^2 = \begin{pmatrix} (\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 & 0 \\ 0 & (\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

e

$$\begin{aligned} (\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 &= (\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \\ &= L^2 - \hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \end{aligned} \quad (4.5)$$

onde se usou a relação (1.113) e o facto de $\mathbf{L} \wedge \mathbf{L} = i\hbar\mathbf{L}$. Assim (4.3) pode ser escrito como

$$J^2 + \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 = \hbar^2 \left(1 + \frac{\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}}{\hbar}\right)^2 \quad (4.6)$$

o que implica que $\left(1 + \frac{\Sigma \cdot \mathbf{L}}{\hbar}\right)^2$, mas não necessariamente $1 + \frac{\Sigma \cdot \mathbf{L}}{\hbar}$ é uma constante do movimento. Contudo pode-se mostrar que o operador hermitico de Runge-Lenz ou operador $\hat{K} - \text{Dirac}$ definido por

$$\hat{K}_D = \hbar\beta \left(1 + \frac{\Sigma \cdot \mathbf{L}}{\hbar}\right) \quad (4.7)$$

e que é o análogo relativista de (1.139) comuta com o Hamiltoniano livre de Dirac, com $V(r)$ e com J :

$$[\hat{K}_D, \hat{H}_D] = [\hat{K}_D, c\alpha \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2] \quad (4.8)$$

Como \hat{K}_D comuta com β o comutador fica

$$[\hat{K}_D, \hat{H}_D] = [\beta\Sigma \cdot \mathbf{L}, c\alpha \cdot \mathbf{p}] + [\hbar\beta, c\alpha \cdot \mathbf{p}] \quad (4.9)$$

e como α e β anticomutam

$$[\hat{K}_D, \hat{H}_D] = \beta \{\Sigma \cdot \mathbf{L}, c\alpha \cdot \mathbf{p}\} + 2\hbar c\beta\alpha \cdot \mathbf{p} \quad (4.10)$$

Agora

$$\begin{aligned} \Sigma \cdot \mathbf{L} \alpha \cdot \mathbf{p} &= \gamma^5 \sigma \cdot \mathbf{L} \sigma \cdot \mathbf{p} \\ &= \gamma^5 [\mathbf{L} \cdot \mathbf{p} + i\sigma (\mathbf{L} \wedge \mathbf{p})] \end{aligned} \quad (4.11)$$

Da mesma forma

$$\begin{aligned} \alpha \cdot \mathbf{p} \Sigma \cdot \mathbf{L} &= \gamma^5 \sigma \cdot \mathbf{p} \sigma \cdot \mathbf{L} \\ &= \gamma^5 (\mathbf{p} \cdot \mathbf{L} + i\sigma (\mathbf{p} \wedge \mathbf{L})) \end{aligned} \quad (4.12)$$

como $\mathbf{L} \cdot \mathbf{p} = \mathbf{p} \cdot \mathbf{L} = 0$ o anticomutador em (4.10) fica

$$\beta \{\Sigma \cdot \mathbf{L}, c\alpha \cdot \mathbf{p}\} = i c \beta \gamma^5 \sigma (\mathbf{L} \wedge \mathbf{p} + \mathbf{p} \wedge \mathbf{L}) \quad (4.13)$$

pode-se mostrar que

$$\begin{aligned} (\mathbf{L} \wedge \mathbf{p})_l &= ((\mathbf{r} \wedge \mathbf{p}) \wedge \mathbf{p})_l \\ &= \epsilon_{lmn} (\epsilon_{ijk} x_j p_k)_m p_n \\ &= \epsilon_{lmn} \epsilon_{mjk} x_j p_k p_n \\ &= -\epsilon_{mln} \epsilon_{mjk} x_j p_k p_n \\ &= -\{\delta_{lj} \delta_{nk} - \delta_{lk} \delta_{nj}\} x_j p_k p_n \\ &= -x_l p_n^2 + x_j p_j p_l \end{aligned} \quad (4.14)$$

ou seja

$$\mathbf{L} \wedge \mathbf{p} = -\mathbf{r} p^2 + (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}) \mathbf{p} \quad (4.15)$$

e que

$$\begin{aligned}
(\mathbf{p} \wedge \mathbf{L})_l &= (\mathbf{p} \wedge (\mathbf{r} \wedge \mathbf{p}))_l \\
&= \epsilon_{lmn} p_m (\epsilon_{ijk} x_j p_k)_n \\
&= \epsilon_{nlm} \epsilon_{njk} p_m x_j p_k \\
&= \{\delta_{lj} \delta_{mk} - \delta_{lk} \delta_{mj}\} p_m x_j p_k \\
&= p_k x_l p_k - p_j x_j p_l \\
&= (-i\hbar \delta_{kl} + x_l p_k) p_k - p_j x_j p_l \\
&= -i\hbar p_l + x_l p_k^2 - p_j x_j p_l
\end{aligned} \tag{4.16}$$

ou seja

$$\mathbf{p} \wedge \mathbf{L} = \mathbf{r} p^2 - (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{p} - i\hbar \mathbf{p} \tag{4.17}$$

e (4.13) fica

$$\begin{aligned}
\beta \{\Sigma \cdot \mathbf{L}, c\alpha \cdot \mathbf{p}\} &= \imath c \beta \gamma^5 \sigma (-\mathbf{r} p^2 + (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}) \mathbf{p} + \mathbf{r} p^2 - (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{p} - i\hbar \mathbf{p}) \\
&= \imath c \beta \gamma^5 \sigma ([\mathbf{r}, \mathbf{p}] \mathbf{p} - i\hbar \mathbf{p}) \\
&= \imath c \beta \gamma^5 \sigma (3i\hbar \mathbf{p} - i\hbar \mathbf{p}) \\
&= -2c\hbar \beta \gamma^5 \sigma \cdot \mathbf{p}
\end{aligned} \tag{4.18}$$

então para o comutador (4.8) tem-se que

$$\begin{aligned}
[\hat{K}_D, \hat{H}_D] &= -2c\hbar \beta \gamma^5 \sigma \cdot \mathbf{p} + 2c\beta \alpha \cdot \mathbf{p} \\
&= -2c\hbar \beta \gamma^5 \sigma \cdot \mathbf{p} + 2c\beta \gamma^5 \sigma \cdot \mathbf{p} \\
&= 0
\end{aligned} \tag{4.19}$$

Como \hat{K}_D comuta com qualquer função de r , então comuta com o hamiltoniano (4.1). O operador Runge-Lenz também comuta com o momento angular total \hat{J}

$$\begin{aligned}
[\hat{K}_D, \hat{J}] &= \left[\beta (\Sigma \cdot \mathbf{L} + \hbar), \hat{L} + \frac{\hbar}{2} \Sigma \right] \\
&= \left[\beta \Sigma \cdot \mathbf{L}, \hat{L} + \frac{\hbar}{2} \Sigma \right] \\
&= \beta [\Sigma \cdot \mathbf{L}, \mathbf{L}] + \beta \left[\Sigma \cdot \mathbf{L}, \frac{\hbar}{2} \Sigma \right]
\end{aligned} \tag{4.20}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{K}_D, \hat{J}] &= \beta \{\sigma_i L_i L_j - L_j \sigma_i L_i\} + \frac{\hbar}{2} \beta \{\sigma_i L_i \sigma_j - \sigma_j \sigma_i L_i\} \\
&= \beta \sigma_i \{L_i L_j - L_j L_i\} + \frac{\hbar}{2} \beta \{\sigma_i \sigma_j - \sigma_j \sigma_i\} L_i \\
&= \beta \sigma_i [L_i, L_j] + \frac{\hbar}{2} \beta [\sigma_i, \sigma_j] L_i \\
&= i\hbar \beta \epsilon_{ijk} \sigma_i L_k + \frac{\hbar}{2} \beta 2i \epsilon_{ijk} \sigma_k L_i \\
&= -i\hbar \beta \epsilon_{jik} \sigma_i L_k + i\hbar \beta \epsilon_{jki} \sigma_k L_i \\
&= -i\hbar \beta (\boldsymbol{\sigma} \wedge \mathbf{L}) + i\hbar \beta (\boldsymbol{\sigma} \wedge \mathbf{L}) \\
&= 0
\end{aligned}$$

De acordo com (4.6) e (4.7), $K_D^2 = \hbar^2 \left(1 + \frac{\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}}{\hbar}\right)^2 = J^2 + \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2$ tal que os valores próprios k^2 de K_D^2 são $\hbar^2 j(j+1) + \frac{\hbar^2}{4} = \hbar^2 \left(j + \frac{1}{2}\right)^2$, ou seja, os valores próprios de \hat{K}_D são $k = \pm \hbar \left(j + \frac{1}{2}\right)$, e os valores absolutos de $|k|$ são inteiros positivos. Pode-se ainda verificar que como $K_D^2 = L^2 + \hbar^2 + \hbar \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}$, ou ainda

$$L^2 = K_D^2 - \hbar \beta \hat{K}_D \quad (4.21)$$

a relação entre os valores próprios de L^2 e K^2 é $k(k+1) = l(l+1)$.

4.1.1 A função de onda bispinorial

Na secção (1.8) viu-se que a função de onda de uma partícula com momento angular l e spin $s = \frac{1}{2}$ é proporcional aos harmónicos esféricos spinoriais $\chi_{\pm k, m_j} = Y_{j \mp \frac{1}{2}, m_j}$. A generalização relativista consiste em incluir um grau de liberdade extra associado às componentes de energia negativa dos bispinores

$$\psi_{jm_j}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \chi_{jm_j} \\ \varphi_{jm_j} \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

Para um estado de momento angular total j existem duas soluções possíveis correspondentes aos estados com $l = j - \frac{1}{2}$ e $l' = j + \frac{1}{2}$. Assim a solução geral será combinação linear destas duas soluções

$$\psi_{jm_j}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} g_{lj}(r) Y_{ljm_j}(\theta, \phi) + g_{l'j}(r) Y_{l'jm_j}(\theta, \phi) \\ i f_{lj}(r) Y_{ljm_j}(\theta, \phi) + i f_{l'j}(r) Y_{l'jm_j}(\theta, \phi) \end{pmatrix} \quad (4.23)$$

Esta solução pode ser simplificada na representação em que o operador de paridade total é diagonal. Para isso note-se que a operação de inversão no espaço não comuta com o Hamiltoniano livre de Dirac, isto porque o termo $\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}$ é ímpar sob a transformação de inversão enquanto que βmc^2 é par. Assim o operador de inversão multiplicado por β comuta com o hamiltoniano. Seja então o operador de paridade total $\hat{P} = \beta I_s$. Como os harmónicos esféricos spinoriais contêm paridade externa $I_s = (-1)^l$, e $l-l' =$

S_k , cada componente do bispinore só pode conter um valor de l . Por outro lado o operador de paridade intrínseca β diz que as duas componentes do bispinor têm paridades intrínsecas opostas, pelo que se escreve os bispinores como

$$\psi_{jm_j}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} g(r)\chi_{k,m_j} \\ \imath f(r)\chi_{-k,m_j} \end{pmatrix} \quad (4.24)$$

onde $g(r)$ e $f(r)$ são funções radiais que em geral dependem de k e a fase \imath foi introduzida de forma a que as equações radiais sejam explicitamente reais. O facto de l não ser um bom número quântico deve-se ao facto do Hamiltoniano de Dirac não comutar com L^2 porque o termo $\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}$ é ímpar e mistura os spinores.

4.2 Equação de Dirac em coordenadas esféricas

Para escrever a equação de Dirac em coordenadas esféricas faz-se uso da identidade

$$\begin{aligned} (\mathbf{r} \wedge \mathbf{L})_l &= (\mathbf{r} \wedge (\mathbf{r} \wedge \mathbf{p}))_l \\ &= \epsilon_{lmn} x_m (\epsilon_{ijk} x_j p_k)_n \\ &= \epsilon_{nlm} \epsilon_{njk} x_m x_j p_k \\ &= (\delta_{lj} \delta_{mk} - \delta_{lk} \delta_{mj}) x_m x_j p_k \\ &= x_k x_l p_k - x_j x_j p_l \end{aligned} \quad (4.25)$$

ou seja

$$\mathbf{r} \wedge (\mathbf{r} \wedge \mathbf{p}) = \mathbf{r}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}) - r^2 \mathbf{p} \quad (4.26)$$

ou ainda

$$\hat{\mathbf{r}} \wedge (\hat{\mathbf{r}} \wedge \nabla) = \hat{\mathbf{r}}(\hat{\mathbf{r}} \cdot \nabla) - \nabla \quad (4.27)$$

donde se obtém

$$\nabla = \hat{\mathbf{r}}(\hat{\mathbf{r}} \cdot \nabla) - \hat{\mathbf{r}} \wedge (\hat{\mathbf{r}} \wedge \nabla) \quad (4.28)$$

O primeiro termo do hamiltoniano de Dirac fica

$$\begin{aligned}
c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} &= -\imath c\hbar \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla \\
&= -\imath c\hbar \boldsymbol{\alpha} \cdot [\hat{\mathbf{r}}(\hat{\mathbf{r}} \cdot \nabla) - \hat{\mathbf{r}} \wedge (\hat{\mathbf{r}} \wedge \nabla)] \\
&= -\imath c\hbar \boldsymbol{\alpha} \cdot \left[\hat{\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\imath}{\hbar} \frac{\hat{\mathbf{r}} \wedge \mathbf{L}}{r} \right] \\
&= -\imath c\hbar \left[\alpha_r \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\imath}{\hbar} \frac{1}{r} \gamma^5 \boldsymbol{\Sigma}(\hat{\mathbf{r}} \wedge \mathbf{L}) \right] \\
&= -\imath c\hbar \left[\alpha_r \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\imath}{\hbar} \frac{1}{r} \gamma^5 (-\imath)(\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{r}})(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{L}) \right] \quad (4.29) \\
&= -\imath \hbar c \alpha_r \left[\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}}{\hbar} \right] \\
&= -\imath \hbar c \alpha_r \left[\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \left(\frac{\beta}{\hbar} \hat{K}_D - 1 \right) \right] \\
&= -\imath \hbar c \gamma^5 \Sigma_r \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} - \frac{1}{\hbar} \frac{\beta}{r} \hat{K}_D \right)
\end{aligned}$$

Assim o Hamiltoniano (4.1) fica na forma matricial

$$H = \begin{pmatrix} mc^2 + V(r) & -\imath \hbar c \sigma_r \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} - \frac{1}{r} \frac{\hat{K}}{\hbar} \right) \\ -\imath \hbar c \sigma_r \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} - \frac{1}{r} \frac{\hat{K}}{\hbar} \right) & -mc^2 + V(r) \end{pmatrix} \quad (4.30)$$

e a equação de Dirac independente do tempo

$$E \begin{pmatrix} \chi_{jm_j} \\ \varphi_{jm_j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc^2 + V(r) & -\imath \hbar c \sigma_r \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} - \frac{1}{r} \frac{\hat{K}}{\hbar} \right) \\ -\imath \hbar c \sigma_r \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} - \frac{1}{r} \frac{\hat{K}}{\hbar} \right) & -mc^2 + V(r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_{jm_j} \\ \varphi_{jm_j} \end{pmatrix} \quad (4.31)$$

que resulta no sistema de equações

$$\{E - mc^2 - V(r)\} g(r) \chi_{k,m_j} = -\hbar c \sigma_r \left\{ \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} - \frac{1}{r} \frac{\hat{K}}{\hbar} \right\} f(r) \chi_{-k,m_j} \quad (4.32)$$

$$\{E + mc^2 - V(r)\} f(r) \chi_{-k,m_j} = \hbar c \sigma_r \left\{ \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} - \frac{1}{r} \frac{\hat{K}}{\hbar} \right\} g(r) \chi_{k,m_j} \quad (4.33)$$

agora, usando as relações (1.152), (1.153) e (1.154) tem-se finalmente

$$\{E - mc^2 - V(r)\} g(r) = \hbar c \left\{ - \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} \right) + \frac{k}{r} \right\} f(r) \quad (4.34)$$

$$\{E + mc^2 - V(r)\} f(r) = \hbar c \left\{ \frac{d}{dr} + \frac{1}{r} + \frac{k}{r} \right\} g(r) \quad (4.35)$$

ou

$$\left\{ \frac{d}{dr} + \frac{k+1}{r} \right\} g_k(r) = a_2 f_{-k}(r) \quad (4.36)$$

$$\left\{ \frac{d}{dr} - \frac{k-1}{r} \right\} f_{-k}(r) = -a_1 g_k(r) \quad (4.37)$$

Estas são as equações radiais com

$$a_1 = \frac{(E - V(r)) - mc^2}{\hbar c}, \quad a_2 = \frac{(E - V(r)) + mc^2}{\hbar c} \quad (4.38)$$

e

$$a = \sqrt{a_1 a_2} = \sqrt{\frac{(E - V(r))^2 - m^2 c^4}{(\hbar c)^2}} \quad (4.39)$$

Por vezes é conveniente usar

$$G = r g, \quad F = r f \quad (4.40)$$

e as equações radiais ficam

$$\left\{ \frac{d}{dr} + \frac{k}{r} \right\} G = a_2 F \quad (4.41)$$

$$\left\{ \frac{d}{dr} - \frac{k}{r} \right\} F = -a_1 G \quad (4.42)$$

Em geral, pode-se encontrar uma equação diferencial de segunda ordem em g (G) ou f (F) eliminando uma das funções radiais. Assim pondo $f(r)$ em evidência na equação (4.36), substituindo em (4.37) e notando que $\frac{d}{dr} \left(\frac{1}{a_2} \right) = \frac{\frac{dV}{dr}}{a_2^2} + \frac{1}{a_2} \frac{d}{dr}$ tem-se

$$\left\{ \frac{\frac{dV}{dr}}{a_2} + \frac{d}{dr} - \frac{k-1}{r} \right\} \left\{ \frac{d}{dr} + \frac{k+1}{r} \right\} g_k(r) = -a_2 a_1 g_k(r) \quad (4.43)$$

agora, expandindo o primeiro termo e tendo em conta que $\frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \right) = -\frac{1}{r^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr}$ a equação de segunda ordem em $g_k(r)$, para qualquer potencial $V(r)$, fica

$$\begin{aligned} \frac{d^2 g_k(r)}{dr^2} + \frac{\hbar c \frac{dV}{dr}}{E - V + mc^2} \frac{dg_k(r)}{dr} + \frac{2}{r} \frac{dg_k(r)}{dr} \\ + \left[\frac{(E - V)^2 - m^2 c^4}{(\hbar c)^2} - \frac{k(k+1)}{r^2} + \frac{k}{r} \frac{\hbar c \frac{dV}{dr}}{E - V + mc^2} \right] g_k(r) = 0 \end{aligned} \quad (4.44)$$

e $f_{-k}(r)$ é obtida substituindo a solução de (4.44) em (4.37).

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{E - V(r) + mc^2} \right) &= \frac{d}{dr} \frac{1}{E - V(r) + mc^2} + \frac{1}{E - V(r) + mc^2} \frac{d}{dr} \\ &= \frac{\frac{dV}{dr}}{(E - V(r) + mc^2)^2} + \frac{1}{E - V(r) + mc^2} \frac{d}{dr} \end{aligned}$$

4.3 Partícula livre

Uma partícula livre de Dirac, na representação do momento angular, obedece às equações (4.44) e à respectiva $f_{-k}(r)$, com $V(r) = 0$. Assim para $g_k(r) = g_{jl}(r)$ e tendo em conta que $k(k+1) = l(l+1)$ tem-se

$$\frac{d^2 g_{jl}(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dg_{jl}(r)}{dr} + \left[\frac{p^2}{(\hbar)^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] g_{jl}(r) = 0 \quad (4.45)$$

com $p^2 c^2 = \hbar^2 a^2 c^2 = E^2 - m^2 c^4 > 0$. Definindo a distância radial adimensional

$$\rho = ar \quad (4.46)$$

a equação (4.45) fica

$$\frac{d^2 g_{jl}(ar)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dg_{jl}(ar)}{d\rho} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] g_{jl}(ar) = 0 \quad (4.47)$$

que tem como soluções as funções esféricas de Bessel. A solução regular em $r = 0$ são as funções Esféricas de Bessel do primeiro tipo $j_l(\rho)$

$$g_{jl}(\rho) = A j_l(\rho) \quad (4.48)$$

com A constante de normalização. Fazendo a mudança de variável (4.46) em (4.36) e substituindo (4.48) obtem-se para $f_{jl}(\rho)$

$$f_{jl}(\rho) = \frac{Aa}{a_2} \left\{ j_l'(\rho) + \frac{k+1}{\rho} j_l(\rho) \right\} \quad (4.49)$$

Para $k < 0$ tem-se $l = -(k+1)$, $l' = -k$ e $l' = l+1$. Usando a relação de recorrência

$$j_l'(z) = \frac{l}{z} j_l(z) - j_{l+1}(z) \quad (4.50)$$

a equação (4.49) fica

$$f_{jl}(\rho) = -\frac{Aa}{a_2} j_{l'}(\rho) \quad , \quad k < 0 \quad (4.51)$$

Para $k > 0$ tem-se $l = k$, $l' = k-1$ e $l' = l-1$. Usando a relação de recorrência

$$j_l'(z) = -\frac{l+1}{z} j_l(z) - j_{l-1}(z) \quad (4.52)$$

a equação (4.49) fica

$$f_{jl}(\rho) = \frac{Aa}{a_2} j_{l'}(\rho) \quad , \quad k > 0 \quad (4.53)$$

As soluções (4.51) e (4.53) podem ser escritas como

$$\begin{aligned} f_{jl'}(\rho) &= AS_k \frac{a}{a_2} j_{l'}(\rho) \\ &= A \frac{k}{|k|} \sqrt{\frac{E - mc^2}{E + mc^2}} j_{l'}(\rho) \end{aligned} \quad (4.54)$$

A função de onda para uma partícula livre é então

$$\psi_{km_j} = \begin{pmatrix} j_l(\rho) \chi_{km_j} \\ iS_k \sqrt{\frac{E - mc^2}{E + mc^2}} j_{l'}(\rho) \chi_{-km_j} \end{pmatrix} \quad (4.55)$$

Numa zona onde existe um potencial constante V_0 , as soluções são as mesmas substituindo E por $E - V_0$.

4.4 Poço de Potencial esférico

Para um potencial

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & , \quad r \leq R_0 \\ 0 & , \quad r > R_0 \end{cases} \quad (4.56)$$

estados ligados existem para $-V_0 < E - mc^2 < 0$

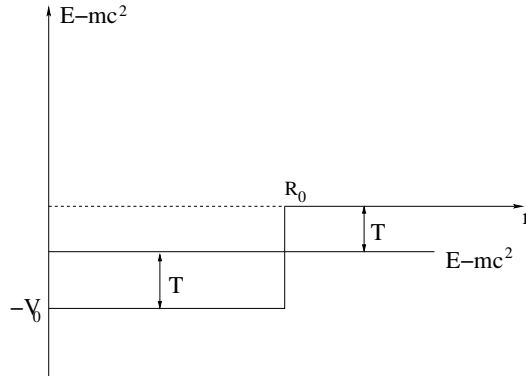


Figura 4.1: $-V_0 < E - mc^2 < 0$

- Para $r \leq R_0$

A energia cinética da partícula é positiva e a relação energia momento dada por

$$p^2 c^2 = (E + V_0)^2 - m^2 c^4 > 0 \quad (4.57)$$

A partícula comporta-se como uma partícula livre de energia $E + V_0$. As soluções radiais são então dadas por

$$g_k = A j_l(\rho) = A \sqrt{\frac{\pi a r}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(\rho) \quad (4.58)$$

e

$$f_{-k} = A \frac{k}{|k|} \sqrt{\frac{E + V_0 - mc^2}{E + V_0 + mc^2}} j_{l'}(\rho) \quad (4.59)$$

com

$$a = \frac{\sqrt{(E + V_0)^2 - m^2 c^4}}{\hbar c} \quad (4.60)$$

- Para $r > R_0$

A energia cinética é negativa e análogamente ao caso não-relativista, define-se

$$p'^2 = m^2 c^4 - E^2 > 0 \quad (4.61)$$

tal que o vector de onda é

$$a' = \frac{\sqrt{m^2 c^4 - E^2}}{\hbar c} \quad (4.62)$$

Com estas definições (4.45) fica

$$\frac{d^2 g_k}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dg_k}{dr} - \left[a'^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] g_k = 0 \quad (4.63)$$

Introduzindo

$$\rho' = a' r \quad (4.64)$$

obtém-se a equação diferencial

$$\frac{d^2 g_k}{d\rho'^2} + \frac{2}{\rho'} \frac{dg_k}{d\rho'} - \left[1 + \frac{l(l+1)}{\rho'^2} \right] g_k = 0 \quad (4.65)$$

As soluções desta equação que decrescem exponencialmente para zero quando r é grande, são as funções esféricas de Bessel modificadas do 3º tipo

$$g_{jl} = C \sqrt{\frac{\pi a' r}{2}} K_{l+\frac{1}{2}}(\rho') \quad (4.66)$$

com C constante de normalização. Fazendo a mudança de variável (4.64) em (4.36) e substituindo (4.66) obtém-se para $f_{jl'}(\rho')$

$$f_{jl'} = \frac{a'}{a'_2} \left\{ \frac{d}{d\rho'} + \frac{(k+1)}{\rho'} \right\} g_{jl} \quad (4.67)$$

com $a'_2 = E + mc^2$.

Para $k < 0$, $l = -(k+1)$ e $l' = -k$. Assim inserindo (4.66) em (4.67) tem-se

$$f_{jl'} = C \frac{a'}{a'_2} \left\{ \frac{d}{d\rho'} - \frac{l}{\rho'} \right\} \sqrt{\frac{\pi a' r}{2}} K_{l+\frac{1}{2}}(\rho') \quad (4.68)$$

e usando a relação de recorrência (1.97) e a relação $l' = l + 1$ para $k < 0$ obtém-se

$$f_{-k} = -C \frac{a'}{a'_2} \sqrt{\frac{\pi a' r}{2}} K_{l'+\frac{1}{2}}(\rho') \quad (4.69)$$

Para $k > 0$, $l = k$, $l' = k - 1$ e (4.67) fica

$$f_{jl'} = C \frac{a'}{a'_2} \left\{ \frac{d}{d\rho'} + \frac{l+1}{\rho'} \right\} \sqrt{\frac{\pi a' r}{2}} K_{l+\frac{1}{2}}(\rho') \quad (4.70)$$

usando a relação $l' = l - 1$ e a relação de recorrência

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\rho'} \left[\sqrt{\frac{\pi \rho'}{2}} K_{l+\frac{1}{2}}(\rho') \right] &= (-1)^{-(l+1)} (-1)^l \sqrt{\frac{\pi \rho'}{2}} K_{l'+\frac{1}{2}}(\rho') + \\ &- (-1)^{-(l+1)} (-1)^{l+1} \frac{l+1}{\rho'} \sqrt{\frac{\pi \rho'}{2}} K_{l+\frac{1}{2}}(\rho') \end{aligned} \quad (4.71)$$

obtém-se

$$f_{-k} = -C \frac{a'}{a'_2} \sqrt{\frac{\pi a' r}{2}} K_{l'+\frac{1}{2}}(\rho') \quad (4.72)$$

ou seja f_{-k} é igual para $k > 0$ e $k < 0$. As constantes de normalização A e C podem ser eliminadas da relação de continuidade da função de onda em $r = R_0$

$$\frac{g_{jl}(aR_0)}{f_{jl'}(aR_0)} = \frac{g_{jl}(a'R_0)}{f_{jl'}(a'R_0)} \quad (4.73)$$

substituindo na equação anterior (4.58), (4.59), (4.66) e (4.72) obtém-se finalmente

$$a_2 a' j_l(aR_0) K_{l'+\frac{1}{2}}(a'R_0) + S_k a'_2 a j_{l'}(aR_0) K_{l+\frac{1}{2}}(a'R_0) = 0 \quad (4.74)$$

Esta equação é resolvida numericamente para vários valores de k . (Apêndice A2).

Capítulo 5

Conclusão

Analisando os gráficos (A.2) e (A.3) em apêndice, vê-se que quando o raio do poço aumenta, os níveis de energia com o mesmo número quântico l agrupam-se tornando-se degenerados e semelhantes aos níveis de energia dados pela teoria não-relativista (A.1). Este efeito faz-se notar mais para níveis de energia com l maior, como os estados $h_{\frac{9}{2}}$ e $h_{\frac{11}{2}}$. Pode-se concluir que com o aumento do raio, j deixa de ser necessário à classificação dos níveis e l é um bom número quântico, ou seja, o acoplamento $L-S$ desaparece. De notar que o valor do potencial $V_0 = \frac{1}{2}$ foi escolhido de forma a evitar problemas com os estados de energia negativa. Conclui-se então que o aumento do raio do poço diminui a energia dos estados para valores próximos dos estados não-relativistas e o acoplamento $L - S$ responsável pelo efeito de ‘split’ nos níveis de energia desaparece. Demonstra-se assim a natureza relativista do acoplamento spin-órbita.

Apêndice A

Soluções Numéricas

A.1 Poço de potencial esférico na teoria não relativista

A equação (1.98) é explicitamente dada por

$$\begin{aligned} & \sqrt{-2mER_0} K_{l+\frac{3}{2}}(\sqrt{-2mER_0}) j_l(\sqrt{2m(E+V_0)}R_0) \\ & - \sqrt{2m(E+V_0)} K_{l+\frac{1}{2}}(\sqrt{-2mER_0}) j_{l+1}(\sqrt{2m(E+V_0)}R_0) = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Esta equação pode ser escrita em termos das quantidades escaladas

$$y = \frac{E}{mc^2} + \alpha \quad \text{com} \quad \alpha = \frac{V_0}{mc^2} \quad (\text{A.2})$$

e

$$x_R = \frac{R_0}{L_0} \quad \text{com} \quad L_0 = \frac{\hbar}{mc} \quad (\text{A.3})$$

estas quantidades são a energia cinética em unidades de mc^2 e o raio do poço em unidades de comprimento de onda de compton respectivamente. Assim (A1) fica

$$\begin{aligned} & \sqrt{2(\alpha-y)} K_{l+\frac{3}{2}}\left(x_R \sqrt{2(\alpha-y)}\right) J_{l+\frac{1}{2}}\left(x_R \sqrt{2y}\right) \\ & - \sqrt{2y} K_{l+\frac{1}{2}}\left(x_R \sqrt{2(\alpha-y)}\right) J_{l+\frac{3}{2}}\left(x_R \sqrt{2y}\right) = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Para α fixo, esta equação é resolvida numericamente para y em função de x_R para dados valores de l . Na figura (A.1) estão marcados os primeiros valores de y até $l = 5$ para $x_R = 100$ com $\alpha = \frac{1}{2}$. Os níveis de energia são representados na notação espectroscópica nl_j , onde o nível de energia é dado pela n solução da equação.

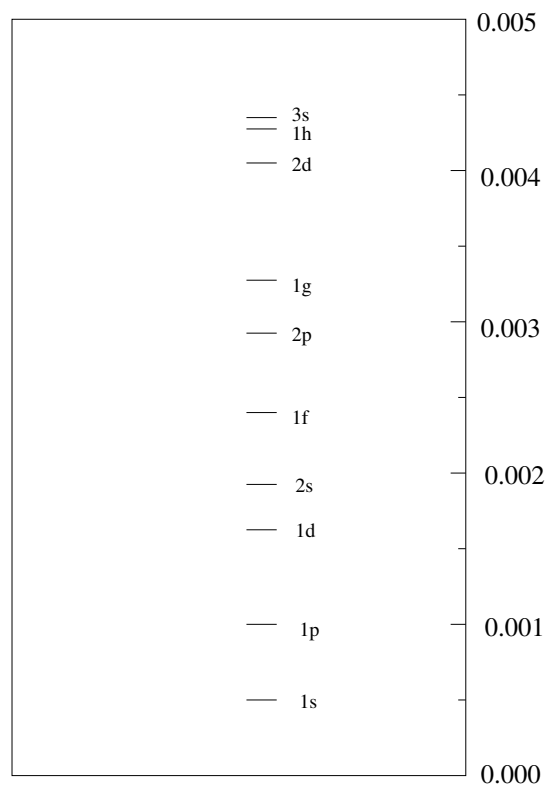


Figura A.1: valores de $\frac{E+V_0}{mc^2}$ para $x_R = 100$

A.2 Poço de potencial esférico na teoria relativista

A equação (4.74) é explicitamente dada por

$$\begin{aligned}
& J_{l+\frac{1}{2}} \left(\frac{\sqrt{\{E + V_0\}^2 - m^2 c^4}}{\hbar c} R_0 \right) K_{l'+\frac{1}{2}} \left(\frac{\sqrt{m^2 c^4 - E^2}}{\hbar c} R_0 \right) \frac{(E + V_0 + mc^2)}{E + mc^2} \\
& + S_k \sqrt{\frac{\{E + V_0\}^2 - m^2 c^4}{m^2 c^4 - E^2}} J_{l'+\frac{1}{2}} \left(\frac{\sqrt{\{E + V_0\}^2 - m^2 c^4}}{\hbar c} R_0 \right) \\
& \times K_{l+\frac{1}{2}} \left(\frac{\sqrt{m^2 c^4 - E^2}}{\hbar c} R_0 \right) = 0
\end{aligned} \tag{A.5}$$

Introduzindo as quantidades escaladas

$$y = \frac{E - mc^2}{mc^2} + \alpha \quad \text{com} \quad \alpha = \frac{V_0}{mc^2} \tag{A.6}$$

e

$$x_R = \frac{R_0}{L_0} \quad \text{com} \quad L_0 = \frac{\hbar}{mc} \tag{A.7}$$

estas quantidades são a energia cinética em unidades de mc^2 e o raio do poço em unidades de comprimento de onda de compton respectivamente. Assim (A5) fica

$$\begin{aligned}
& (y + 2) J_{l+\frac{1}{2}} \left(x_R \sqrt{y^2 + 2y} \right) K_{l'+\frac{1}{2}} \left(x_R \sqrt{(\alpha - y)(y - \alpha + 2)} \right) \\
& \times \sqrt{(\alpha - y)(y - \alpha + 2)} + S_k (y - \alpha + 2) \sqrt{y^2 - 2y} \\
& \times J_{l'+\frac{1}{2}} \left(x_R \sqrt{y^2 + 2y} \right) K_{l+\frac{1}{2}} \left(x_R \sqrt{(\alpha - y)(y - \alpha + 2)} \right) = 0
\end{aligned} \tag{A.8}$$

Para α fixo, esta equação é resolvida numericamente para y em função de x_R para dados valores de k , l e l' . Na figura (A.2) estão marcados os primeiros valores de y até $l = 5$ para $x_R = 10$ com $\alpha = \frac{1}{2}$ e na figura (A3) os mesmos valores de y para $x_R = 100$. Os níveis de energia são representados na notação espectroscópica nl_j , onde o nível de energia é dado pela n solução da equação.

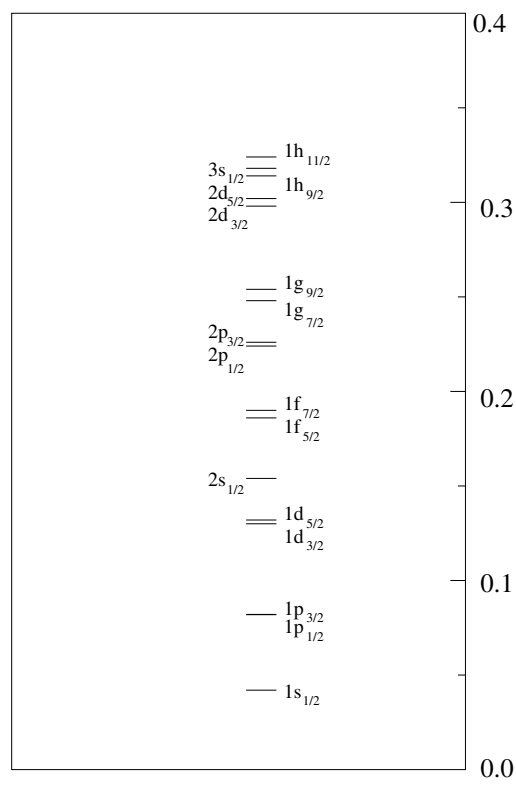


Figura A.2: valores de $\frac{E+V_0-mc^2}{mc^2}$ para $x_R = 10$

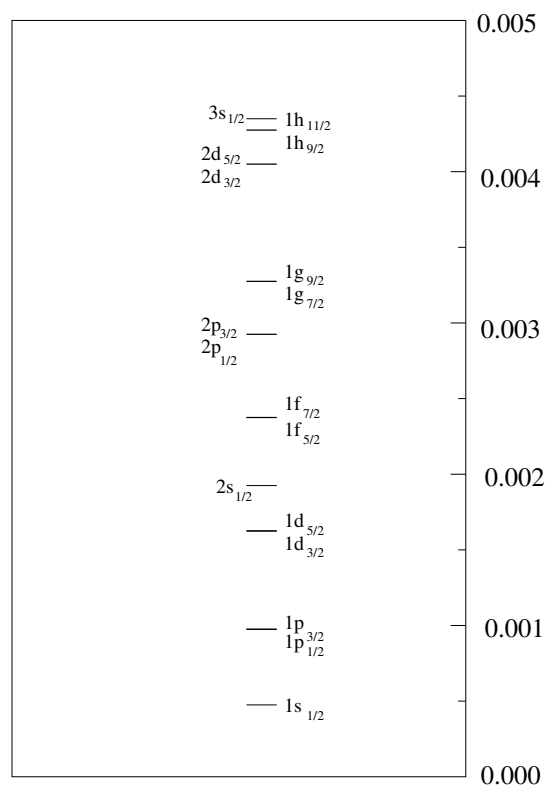


Figura A.3: valores de $\frac{E+V_0-mc^2}{mc^2}$ para $x_R = 100$

Bibliografia

- [1] M. Abramowitz and I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. Applied Mathematics. National Bureau of Standards, U.S, may 1968.
- [2] I J R Aitchison and A J G Hey. *Gauge Theories in Particle Physics*, volume From Relativistic Quantum Mechanics to QED of *Graduat Student in Physics*. IOP, 2002.
- [3] P. Alberto, M. Fiolhais, and M. Oliveira. On the relativistic l-s coupling. *Eur. J. Phys.*, 19:553–562, 1998.
- [4] James D. Bjorken and Sidney D. Drell. *Relativistic Quantum Mechanics*. McGraw-Hill, U.S, 1964.
- [5] B.H. Brandsen and C.J. Joachain. *Physics of Atoms and Molecules*. Prentice Hall, London, 2nd edition, 2003.
- [6] Sean M. Carrol. *Lecture Notes on General Relativity*, chapter I. December 1997.
- [7] P. A. M. Dirac. *The Principles of Quantum Mechanics*. Oxford University Press, London, 4th edition, 1958.
- [8] H. Goldstein, C. Poole, and J. Safko. *Classical Mechanics*. Addison Wesley, 3rd edition, 2002.
- [9] W. Greiner. *Relativistic Quantum Mechanics: Wave Equations*. Springer-Verlag, Berlin, 3rd edition, 2000.
- [10] David Griffiths. *Introduction to Elementary Particles*. John Wiley and Sons (VCH), 2004.
- [11] Francis Halzen and Alan D. Martin. *Quarks and Leptons: An Introductory Course in Modern Particle Physics*. John Wiley & Sons, USA.
- [12] L. Landau and E. Lifshitz. *Mecânica Quântica: Teoria Não Relativista*. Mir, Moscou, 1985.
- [13] Rubin H. Landau. *Quantum mechanics II: a second course in quantum theory*. John Wiley & Sons Inc, New York, 2nd edition, 1996.

- [14] Roger G. Newton. *Quantum Physics: A Text for Graduate Students (Graduate Texts in Contemporary Physics)*. Springer-Verlag New York Inc., 2002.
- [15] M. E. Rose. *Relativistic electron theory*. John Wiley & Sons Inc., New York, 1961.
- [16] Franz Schwabl. *Advanced Quantum Mechanics*. Springer, 2000.
- [17] S. S Schweber. *An introduction to relativistic quantum field theory*. Harper and Row, 1961.
- [18] Bernd Thaller. *The Dirac Equation*. Springer-Verlag, 1992.
- [19] Hans Weber and George Arfken. *Mathematical Methods for Physicists*. Academic Press Inc., U.S., 5th edition, 2001.
- [20] Ta-You Wu and W.Y. Pauchy Hwang. *Relativistic Quantum Mechanics and Quantum Fields*. World Scientific Publishing, 1991.