

### Teoría de Pauli.

Esta teoría está basada en las hipótesis sobre el spin del electrón de Uhlenbeck - Goudsmit a las que llegaron fundamentalmente en hechos experimentales y las cuales son:

- 1.- Cada electrón posee un momento angular de spin  $s$  cuya componente en cualquier dirección tiene solamente los valores  $\pm \frac{1}{2}\hbar$ . Es decir:

$$\left. \begin{array}{l} S_x = \pm \frac{1}{2}\hbar \\ S_y = \pm \frac{1}{2}\hbar \\ S_z = \pm \frac{1}{2}\hbar \end{array} \right\} \quad \dots \dots \dots \quad (1)$$

- 2.- Cada electrón posee un momento magnético  $\mu$  debido a su spin tal que en unidades electromagnéticas es:

$$\mu = -\frac{e}{mc}s$$

donde  $e$  es la carga,  $m$ , la masa y  $s$  el momento angular debido al spin del electrón.

El spin no tiene analogía clásica, pero puesto que se trata de un momento angular, los operadores asociados a él deberán cumplir las reglas de commutación del momento angular, es decir:

$$\left. \begin{array}{l} S_x S_y - S_y S_x = i\hbar S_z \\ S_y S_z - S_z S_y = i\hbar S_x \\ S_z S_x - S_x S_z = i\hbar S_y \end{array} \right\} \quad \dots \dots \dots \quad (2)$$

Definimos los operadores:

$$\left. \begin{array}{l} S_x = \frac{1}{2}\hbar \sigma_x \\ S_y = \frac{1}{2}\hbar \sigma_y \\ S_z = \frac{1}{2}\hbar \sigma_z \end{array} \right\} \quad \dots \dots \dots \quad (3)$$

y estudiemos las propiedades de los operadores  $\sigma_s$ .  
Puesto que los eigenvalores de las componentes del spin valen

$\pm \frac{1}{2}\hbar$  (1) se sigue que:

$$\sigma_x \stackrel{?}{=} \pm 1$$

$$\sigma_y \stackrel{?}{=} \pm 1$$

$$\sigma_z \stackrel{?}{=} \pm 1$$

$$\therefore \sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1$$

Sustituyendo los operadores en las reglas de commutación (2) tenemos que:

$$\sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = 2i \sigma_z$$

$$\sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y = 2i \sigma_x$$

$$\sigma_z \sigma_x - \sigma_x \sigma_z = 2i \sigma_y$$

Formemos y estudiemos la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} 2i(\sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x) &= (2i \sigma_x) \sigma_y + \sigma_y (2i \sigma_x) = \\ &= (\sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y) \sigma_y + \sigma_y (\sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y) = \\ &= \sigma_y \sigma_z \sigma_y - \sigma_z \sigma_y^2 + \sigma_y^2 \sigma_z - \sigma_y \sigma_z \sigma_y = 0 \end{aligned}$$

$$\therefore \sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x = 0 \quad (\text{Esto es } \sigma_x \text{ y } \sigma_y \text{ comutan})$$

De la misma manera:

$$\sigma_y \sigma_z + \sigma_z \sigma_y = \sigma_z \sigma_x + \sigma_x \sigma_z = 0$$

Luego los operadores  $\sigma$  deben ser tales que:

$$\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2 \delta_{ij} \quad \text{donde } i, j = x, y, z$$

Estos operadores son:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

llamadas matrices de spin de Pauli.

$$\therefore S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Puesto que la teoría de Pauli usa como operadores matrices de  $2 \times 2$ , los operadores deben ser columnas de 2 elementos y puesto que

la teoría retiene para las otras variables dinámicas (que tienen analogía clásica) los operadores de Schrödinger, los elementos de estas columnas serán funciones del espacio de Schrödinger. Es decir:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1(x, y, z) \\ \psi_2(x, y, z) \end{pmatrix}$$

Una función  $\Psi$  de Pauli será aceptable si por lo menos una de sus componentes es diferente de cero y cada una de ellas, es aceptable en el sentido de la teoría de Schrödinger.

La función conjugada  $\bar{\Psi}$  de Pauli es el rango:

$$\bar{\Psi} = (\bar{\Psi}_1, \bar{\Psi}_2)$$

y el cuadrado hermitiano es:

$$\bar{\Psi}\Psi = (\bar{\Psi}_1, \bar{\Psi}_2) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \bar{\Psi}_1\psi_1 + \bar{\Psi}_2\psi_2$$

$$\text{Si: } \int \bar{\Psi}\Psi dV = 1$$

$$\text{esto es: } \int (\bar{\Psi}_1\psi_1 + \bar{\Psi}_2\psi_2) dV = \int \bar{\Psi}_1\psi_1 dV + \int \bar{\Psi}_2\psi_2 dV = 1$$

entonces se dice que la función  $\Psi$  está normalizada.

Los demás operadores diferenciales asociados a las otras variables dinámicas son los operadores de Schrödinger y a fin de poder operar sobre las matrices de spin se expresan como matrices de  $2 \times 2$  en la siguiente forma:

Sea el operador  $\xi$

$$\xi = \xi \cdot \mathbf{1} = \xi \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi & 0 \\ 0 & \xi \end{pmatrix}$$

Todos estos operadores se rigen por las reglas ordinarias del álgebra de las matrices, teniendo cuidado en conservar el orden de los factores producto cuyos factores no commuten entre sí:

Cualquier función  $\Psi$  de Pauli que pertenece a un sistema cuyo Hamiltoniano se requiere que dependa del tiempo debe satisfacer la ecuación

$$H\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

donde  $H$  es el operador de Pauli asociado con el Hamiltoniano  $g$ :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi_1}{\partial t} \\ \frac{\partial \psi_2}{\partial t} \end{pmatrix}$$

El valor medio de la variable dinámica  $x$  para un estado  $\Psi$  es:

$$\langle x \rangle = \int \bar{\Psi} x \Psi dV$$

donde  $x$  es el operador de Pauli asociado con la variable dinámica  $x$ .

### Operadores de Pauli

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

$$L^2 = \begin{pmatrix} L^2 & 0 \\ 0 & L^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 & 0 \\ 0 & L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \end{pmatrix}$$

$$J = L + S$$

$$J_x = L_x + S_x = \begin{pmatrix} L_x & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & L_x \end{pmatrix}$$

$$J_y = L_y + S_y = \begin{pmatrix} L_y & -i\frac{\hbar}{2} \\ i\frac{\hbar}{2} & L_y \end{pmatrix}$$

$$J_z = L_z + S_z = \begin{pmatrix} L_z + \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & L_z - \frac{\hbar}{2} \end{pmatrix}$$

$$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \frac{3\hbar^2}{4}$$

$$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = (L + S)^2 = L^2 + S^2 + 2L \cdot S = L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + 2(L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z)$$

$$\therefore J^2 = \begin{pmatrix} L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar L_z & \hbar(L_x - iL_y) \\ \hbar(L_x + iL_y) & L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \hbar L_z \end{pmatrix}$$

$$J^2 = \begin{pmatrix} L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar L_z & \hbar L^- \\ \hbar L^+ & L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \hbar L_z \end{pmatrix}$$

### Movimiento en un campo central conservativo

Estudiamos ahora por la Teoría de Pauli el problema del movimiento de una partícula en un campo central conservativo.

Primero calcularemos las eigenfunciones simultáneas de  $J_z$ ,  $L^2$  y  $J^2$  puesto que éstas son constantes del movimiento lo que puede comprobarse desarrollando las siguientes expresiones:

$$[L^2, J_z] = [L^2, J^2] = [J_z, J^2] = 0$$

Resolvemos el problema en coordenadas esféricas:

#### Eigenfunciones de $J_z$ .

La ecuación característica para  $J_z$  es:

$$J_z \psi = m_j \hbar \psi \quad (1)$$

que escrita explícitamente es:

$$\begin{pmatrix} L_z + \frac{1}{2}\hbar & 0 \\ 0 & L_z - \frac{1}{2}\hbar \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = m_j \hbar \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (2)$$

que se puede escribir como:

$$\begin{aligned} (L_z + \frac{1}{2}\hbar) \psi_1 &= m_j \hbar \psi_1 \\ (L_z - \frac{1}{2}\hbar) \psi_2 &= m_j \hbar \psi_2 \end{aligned}$$

$$\therefore \begin{cases} \frac{\partial \psi_1}{\partial \varphi} - i(m_j - \frac{1}{2})\psi_1 = 0 \\ \frac{\partial \psi_2}{\partial \varphi} - i(m_j + \frac{1}{2})\psi_2 = 0 \end{cases} \quad (3)$$

La solución de estas ecuaciones diferenciales es:

$$\begin{cases} \psi_1 = A_1(r, \theta) e^{i(m_j - \frac{1}{2})\varphi} \\ \psi_2 = A_2(r, \theta) e^{i(m_j + \frac{1}{2})\varphi} \end{cases} \quad (4)$$

Para que estas soluciones sean aceptables es necesario que  $(m_j \pm \frac{1}{2})$  sea entero.

$$\therefore m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}, \dots$$

y los valores posibles de  $J_z$  son:

$$J_z \equiv m_j \hbar \quad (5)$$

y la función de onda es:

$$\psi = \begin{pmatrix} A_1(r, \theta) e^{i(m_j - \frac{1}{2})\varphi} \\ A_2(r, \theta) e^{i(m_j + \frac{1}{2})\varphi} \end{pmatrix} \quad (6)$$

$$\text{donde } m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}, \dots$$

y  $A_1$  y  $A_2$  son funciones arbitrarias de  $r$  y  $\theta$  aceptables y una de ellas por lo menos diferente de cero.

Para continuar con la notación de Schrödinger podemos introducir el número cuántico magnético  $m_l$  (Azimutal de Schrödinger) definiendo el número cuántico:

$$m_s = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$$

$$\therefore m_j \pm \frac{1}{2} = m_j + m_s = m_l \quad \therefore m_j = m_l + m_s$$

#### Eigenfunciones de $L^2$

La ecuación característica para  $L^2$  es:

$$L^2 \psi = l(l+1)\hbar^2 \psi \quad (7)$$

que puede descomponerse como:

$$\begin{cases} L^2 \psi_1 = l(l+1)\hbar^2 \psi_1 \\ L^2 \psi_2 = l(l+1)\hbar^2 \psi_2 \end{cases} \quad (8)$$

cuyas soluciones son: (calculadas en el método de Schrödinger)

$$\begin{aligned} \psi_1 &= R_1 Y_l^{m_j - \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ \psi_2 &= R_2 Y_l^{m_j + \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \end{aligned}$$

donde  $R_1$  y  $R_2$  son funciones aceptables de  $r$  solamente.

Luego la función de onda es:

$$\psi = \begin{pmatrix} R_1 Y_l^{m_j - \frac{1}{2}} \\ R_2 Y_l^{m_j + \frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (9)$$

$$\text{donde } m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots$$

$$\text{y } l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

### Eigenfunciones de $J^2$

La ecuación característica para  $J^2$  es:

$$J^2 \psi = j(j+1) \hbar^2 \psi \quad (10)$$

que escrita explícitamente:

$$\begin{pmatrix} L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar L_z & \hbar L^- \\ \hbar L^+ & L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \hbar L_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = j(j+1) \hbar^2 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \quad (11)$$

que se puede expresar como:

$$\begin{aligned} (L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar L_z) \Psi_1 + \hbar L^- \Psi_2 &= j(j+1) \hbar^2 \Psi_1 \\ \hbar L^+ \Psi_1 + (L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \hbar L_z) \Psi_2 &= j(j+1) \hbar^2 \Psi_2 \end{aligned} \quad \{ \quad (12)$$

Sustituyamos los valores de  $\Psi_1$  y  $\Psi_2$  encontrados anteriormente y apliquemos las propiedades de los operadores  $L^2$ ,  $L_z$ ,  $L^+$  y  $L^-$  sobre las armónicas esféricas.

$$\begin{aligned} l(l+1) \hbar^2 R_l Y_l^{m_l - \frac{1}{2}} + \frac{3}{4} \hbar^2 R_1 Y_l^{m_l - \frac{1}{2}} + (m_l - \frac{1}{2}) \hbar^2 R_1 Y_l^{m_l - \frac{1}{2}} + \\ + \sqrt{(l+m_l + \frac{1}{2})(l-m_l + \frac{1}{2})} \hbar^2 R_2 Y_l^{m_l - \frac{1}{2}} = j(j+1) \hbar^2 R_1 Y_l^{m_l - \frac{1}{2}} \\ \sqrt{(l+m_l + \frac{1}{2})(l-m_l + \frac{1}{2})} \hbar^2 R_2 Y_l^{m_l + \frac{1}{2}} + l(l+1) \hbar^2 R_2 Y_l^{m_l + \frac{1}{2}} + \frac{3}{4} \hbar^2 R_2 Y_l^{m_l + \frac{1}{2}} - \\ - (m_l + \frac{1}{2}) \hbar^2 R_2 Y_l^{m_l + \frac{1}{2}} = j(j+1) \hbar^2 R_2 Y_l^{m_l + \frac{1}{2}}$$

Simplificando:

$$\begin{cases} [l(l+1) + m_l + \frac{1}{4} - j(j+1)] R_1 + \sqrt{(l+m_l + \frac{1}{2})(l-m_l + \frac{1}{2})} R_2 = 0 \\ \sqrt{(l-m_l + \frac{1}{2})(l+m_l + \frac{1}{2})} R_1 + [l(l+1) - m_l + \frac{1}{4} - j(j+1)] R_2 = 0 \end{cases} \quad \{ \quad (13)$$

Para que este sistema admita solución es necesario que:

$$\begin{vmatrix} (l+m_l + \frac{1}{2}) + (l^2 - \frac{1}{4}) - j(j+1) & \sqrt{(l+m_l + \frac{1}{2})(l-m_l + \frac{1}{2})} \\ \sqrt{(l-m_l + \frac{1}{2})(l+m_l + \frac{1}{2})} & (l-m_l + \frac{1}{2}) + (l^2 - \frac{1}{4}) - j(j+1) \end{vmatrix} = 0$$

$$\therefore [(l^2 - \frac{1}{4}) - j(j+1)][(l+m_l + \frac{1}{2}) + (l-m_l + \frac{1}{2}) + (l^2 - \frac{1}{4}) - j(j+1)] = [(l^2 - \frac{1}{4}) - j(j+1)] \cdot \\ \cdot [(l^2 + 2l + \frac{3}{4}) - j(j+1)] = [(l - \frac{1}{2})(l + \frac{1}{2}) - j(j+1)][(l + \frac{1}{2})(l + \frac{3}{2}) - j(j+1)] = 0$$

Cuyas soluciones son:

$$\begin{aligned} j(j+1) &= (l - \frac{1}{2})(l + \frac{1}{2}) \quad \therefore j = l - \frac{1}{2} \\ j(j+1) &= (l + \frac{1}{2})(l + \frac{3}{2}) \quad \therefore j = l + \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Pero:  $l = 0, 1, 2, \dots$ .

$$j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$$

( $j = -\frac{1}{2}$  no es aceptable puesto que lleva a  $J$  imaginaria)

Hay ~~tres~~ dos soluciones:

$$\begin{aligned} \text{Para } l = j + \frac{1}{2}: \quad \Psi_1 &= R_1 Y_l^{m_l - \frac{1}{2}} \\ \Psi_2 &= R_2 Y_l^{m_l + \frac{1}{2}} \end{aligned}$$

Obtenemos de (13) la relación entre  $R_1$  y  $R_2$ :

$$\frac{R_1}{R_2} = \frac{-\sqrt{(l+m_l + \frac{1}{2})(l-m_l + \frac{1}{2})}}{l(l+1) + m_l + \frac{1}{4} - (l - \frac{1}{2})(l + \frac{1}{2})} = \frac{-\sqrt{(l+m_l + \frac{1}{2})(l-m_l + \frac{1}{2})}}{l + m_l + \frac{1}{2}} = -\sqrt{l + m_l + \frac{1}{2}}$$

Luego podemos hacer que:

$$\begin{aligned} R_1 &= A \sqrt{l + m_l + \frac{1}{2}} R \\ R_2 &= -A \sqrt{l + m_l + \frac{1}{2}} R \end{aligned}$$

Normalizemos: Condición de normalización:

$$\bar{\Psi} \Psi = (\bar{\Psi}_1 \bar{\Psi}_2) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \bar{\Psi}_1 \Psi_1 + \bar{\Psi}_2 \Psi_2 = 1$$

Aplicaremos esta condición a nuestras soluciones suponiendo que  $R$  está normalizada, cosa que tenemos que hacer al resolver las ecuaciones radiales:

$$\begin{aligned} A^2 (l + m_l + \frac{1}{2}) + A^2 (l - m_l + \frac{1}{2}) &= 1 \\ \therefore A^2 (2l + 1) &= 1 \\ \therefore A &= \frac{1}{\sqrt{2l + 1}} \end{aligned}$$

Luego las soluciones serán para  $l = j + \frac{1}{2}$  serán:

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= \sqrt{\frac{l + m_l + \frac{1}{2}}{2l + 1}} R_l Y_l^{m_l - \frac{1}{2}} \\ \Psi_2 &= -\sqrt{\frac{l + m_l + \frac{1}{2}}{2l + 1}} R_l Y_l^{m_l + \frac{1}{2}} \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= R_1 Y_l^{m_l - \frac{1}{2}} \\ \Psi_2 &= R_2 Y_l^{m_l + \frac{1}{2}} \end{aligned}$$

Obtenemos de (13) los valores de  $R_1$  y  $R_2$ .

$$\frac{R_1}{R_2} = \frac{-\sqrt{(l-m_j+\frac{1}{2})(l+m_j+\frac{1}{2})}}{l(l+1)+m_j+\frac{1}{4}-(l+\frac{1}{2})(l+\frac{3}{2})} = \frac{\sqrt{(l-m_j+\frac{1}{2})(l+m_j+\frac{1}{2})}}{l-m_j+\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{l-m_j+\frac{1}{2}}}$$

Luego podemos hacer que:

$$R_1 = B \sqrt{l+m_j+\frac{1}{2}} R'$$

$$R_2 = B \sqrt{l-m_j+\frac{1}{2}} R'$$

Normalizemos estas expresiones suponiendo a  $R$  ya normalizada.

$$B^2 \left( l-m_j+\frac{1}{2} \right) + B^2 \left( l+m_j+\frac{1}{2} \right) = 1$$

$$\therefore B^2 (2l+1) = 1$$

$$\therefore B = \frac{1}{\sqrt{2l+1}}$$

Luego las soluciones son:

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} R' Y_l^{m_j-\frac{1}{2}}$$

$$\psi_2 = \sqrt{\frac{l-m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} R' Y_l^{m_j+\frac{1}{2}}$$

Para que estos coeficientes sean reales se necesita que:

$$m_j \leq l + \frac{1}{2} = j$$

$$\therefore m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots, \pm j$$

Luego las eigenfunciones simultáneas de  $J_z$ ,  $L^2$  y  $J^2$  son:

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

$$\psi = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l-m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} R' Y_l^{m_j-\frac{1}{2}} \\ -\sqrt{\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} R' Y_l^{m_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad \text{----- (14)}$$

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

$$\psi = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} R' Y_l^{m_j-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\frac{l-m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} R' Y_l^{m_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

donde:  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$   
 $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$   
 $m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}, \dots, \pm j$

y  $R$  y  $R'$  son funciones aceptables de  $r$  solamente,

### Corrección spin-orbita para el Hidrógeno.

Consideraremos aquí la corrección a los niveles de energía del átomo de hidrógeno debida a la interacción spin-orbita.

La energía de interacción es:

$$E = \xi(r) \underline{L} \cdot \underline{S} \quad (1)$$

donde  $\xi(r)$  es una función que depende del potencial,  $\underline{L}$  es el momento magnético orbital y  $\underline{S}$  el momento magnético debido al spin del electrón.

El valor de  $\xi(r)$  ha sido dado por Thomas y Frenkel, mediante consideraciones basadas en la analogía clásica de dicha interacción mediante la fórmula:

$$\xi(r) = \frac{1}{2m^2c^2r} \frac{dV(r)}{dr} \quad (2)$$

que en el caso del potencial coulombiano será:

$$\xi(r) = \frac{Ze^2}{2m^2c^2r^3} \quad (\text{V})$$

siendo por lo tanto la energía de interacción:

$$E = \frac{Ze^2}{2m^2c^2r^3} \underline{L} \cdot \underline{S} \quad (3)$$

Luego el Hamiltoniano en este problema es:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V + \frac{Ze^2}{2m^2c^2r^3} \underline{L} \cdot \underline{S} \quad (4)$$

$$\text{donde } V = -\frac{Ze^2}{r}$$

Resolvemos el problema por perturbación tomando como sistema no perturbado el de Pauli

Calculamos el operador  $\underline{L} \cdot \underline{S}$

$$\underline{J}^2 = (\underline{L} + \underline{S})^2 = \underline{L}^2 + \underline{S}^2 + 2\underline{L} \cdot \underline{S}$$

$$\therefore \underline{L} \cdot \underline{S} = \frac{1}{2}(\underline{J}^2 - \underline{L}^2 - \underline{S}^2) = \frac{1}{2}(\underline{J}^2 - \underline{L}^2 - \frac{3}{4}\hbar^2) \quad (5)$$

Aplicando este operador a las funciones de pauli puede probarse que:

$$\underline{L} \cdot \underline{S} \Psi_{j=l+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}\hbar\hbar^2 \Psi_{j=l+\frac{1}{2}} \quad (6)$$

$$\underline{L} \cdot \underline{S} \Psi_{j=l-\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2}(l+1)\hbar^2 \Psi_{j=l-\frac{1}{2}} \quad (7)$$

Calculemos la corrección a los niveles de energía.

$$H = H^0 + V$$

$$H^0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} \quad V = \frac{Ze^2}{2m^2c^2r^3} \underline{L} \cdot \underline{S}$$

$$\text{donde } H^0\Psi = E_n\Psi$$

$$\text{por lo tanto: } E_{n,j} = E_n + \Delta E$$

$$\Delta E = \langle V \rangle = \int \overline{\Psi} V \Psi dV$$

$$\text{Calculemos primeramente para } \Psi_I \equiv \Psi_{l+\frac{1}{2}}$$

$$\Delta E = \int \overline{\Psi_I} V \Psi_I dV = \frac{Ze^2}{2m^2c^2} \int \overline{\Psi_I} \frac{\underline{L} \cdot \underline{S}}{r^3} \Psi_I dV = \frac{Ze^2}{2m^2c^2} \cdot \frac{\hbar^2}{2} \int \overline{\Psi_I} \frac{1}{r^3} \Psi_I dV$$

$$= \frac{Ze^2\hbar^2}{4m^2c^2} \langle \frac{1}{r^3} \rangle \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{mc^2}$$

$$\text{Pero: } \langle \frac{1}{r^3} \rangle = \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)} \quad \text{y } E_n = -\frac{Z^2 me^4}{2\hbar^2 n^2} \quad \alpha = \frac{e^2}{c\hbar}$$

$$\therefore \Delta E = \frac{Z^9 e^2 \hbar^2}{4m^2 c^2 a_0^3 n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)} = \frac{-E_n \alpha^2 Z^2}{n(2l+1)(l+1)} = -E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{4n^2} \frac{4n}{(2l+1)(l+1)}$$

$$\therefore E_{n,l,j} = E_n \left( 1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{4n^2} \frac{4n}{(2l+1)(l+1)} \right) \quad (8)$$

$$\text{para } j = l + \frac{1}{2}$$

La corrección para  $\Psi_{II} \equiv \Psi_{j=l-\frac{1}{2}}$  es:

$$\Delta E = \int \overline{\Psi_{II}} V \Psi_{II} dV = \frac{Ze^2}{2m^2c^2} \int \overline{\Psi_{II}} \frac{\underline{L} \cdot \underline{S}}{r^3} \Psi_{II} dV = -\frac{Ze^2}{2m^2c^2} \frac{(l+1)\hbar^2}{2} \int \overline{\Psi_{II}} \frac{1}{r^3} \Psi_{II} dV$$

$$= -\frac{Ze^2(l+1)\hbar^2}{4m^2c^2} \langle \frac{1}{r^3} \rangle = -\frac{Ze^2(l+1)\hbar^2}{4m^2c^2} \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)} = +\frac{E_n \alpha^2 n Z^2}{n^3 l(2l+1)}$$

$$= +E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{4n^2} \frac{4n}{l(2l+1)}$$

$$\therefore E_{n,l,j} = E_n \left( 1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{4n^2} \frac{4n}{l(2l+1)} \right) \quad (9)$$

$$\text{para } j = l - \frac{1}{2}$$

Corrección relativista y por spin al átomo de Hidrógeno

Ahora calcularemos la corrección a los niveles de energía del átomo de Hidrógeno teniendo en consideración la corrección relativista y la spin-orbita simultáneamente.

La corrección relativista es:

$$\Delta E_{n,l} = E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{4n^2} \left[ \frac{4n}{l+\frac{1}{2}} - 3 \right] \quad (1)$$

La corrección spin-orbita es:

$$\Delta E_{n,l,j} = E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{4n^2} \frac{-4n}{(2l+1)(l+1)} \quad (2-A)$$

para  $j = l + \frac{1}{2}$

$$\Delta E_{n,l,j} = E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{4n^2} \frac{4n}{l(2l+1)} \quad (2-B)$$

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

Luego la energía total será:

$$E_n + \Delta E_{n,l} + \Delta E_{n,l,j} = E_n + \Delta E_{n,j}$$

donde  $\Delta E_{n,j}$  es la corrección total que calcularemos inmediatamente:

1º Para  $j = l + \frac{1}{2}$

$$\begin{aligned} \Delta E_{n,j} &= \Delta E_{n,l} + \Delta E_{n,l,j} = E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{4n^2} \left[ \frac{4n}{l+\frac{1}{2}} - 3 + \frac{4n}{(2l+1)(l+1)} \right] = \\ &= E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{4n^2} \left[ \frac{4n}{(l+1)} \left( \frac{l+1}{l+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2(l+\frac{1}{2})} \right) - 3 \right] = E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{4n^2} \left[ \frac{4n}{l+1} - 3 \right] = \\ &= E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{4n^2} \left[ \frac{4n}{j+\frac{1}{2}} - 3 \right] \end{aligned}$$

2º Para  $j = l - \frac{1}{2}$

$$\begin{aligned} \Delta E_{n,j} &= \Delta E_{n,l} + \Delta E_{n,l,j} = E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{4n^2} \left[ \frac{4n}{l+\frac{1}{2}} + \frac{4n}{l(2l+1)} - 3 \right] = \\ &= E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{4n^2} \left[ \frac{4n}{l} - 3 \right] = E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{4n^2} \left[ \frac{4n}{j+\frac{1}{2}} - 3 \right] \end{aligned}$$

$$\therefore \Delta E_{n,j} = E_n \frac{Z^2 \alpha^2}{4n^2} \left[ \frac{4n}{j+\frac{1}{2}} - 3 \right] \quad \text{para todo valor de } j$$

Luego la energía total será:

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

donde  $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots, n - \frac{1}{2}$

$n = 1, 2, 3, \dots$

$$E_n = -\frac{Z^2 m_e c^4}{2 \hbar^2 n^2}$$

s	p	d	f	s	p	d	f
$k=1$	$k=2$	$k=3$	$k=4$	$n=4$	$l=0$	$l=1$	$l=2$
—	—	—	—	—	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{5}{2}$
—	—	—	—	$n=3$	—	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$

$$— \qquad — \qquad — \qquad n=2 \qquad — \qquad — \qquad j=\frac{3}{2}$$

$$— \qquad — \qquad — \qquad j=\frac{1}{2}$$

$$— \qquad — \qquad — \qquad n=1 \qquad — \qquad — \qquad j=\frac{1}{2}$$

Corrección relativista de Sommerfeld.

Corrección relativista y por spin.

### Efecto Zeeman anómalo

Trataremos este problema por perturbación tomando como sistema imperturbado el que representa un átomo de hidrógeno con spin y corrección relativista en ausencia de un campo magnético y como sistema perturbado, el mismo átomo dentro de un campo magnético de intensidad  $\mu \cdot \underline{\mathcal{H}}$ . En este problema el Hamiltoniano es:

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V(r) - \frac{e^4}{8m_0^3 c^3} + \frac{Ze^2}{2m_0^2 c^2} \cdot \frac{\underline{L} \cdot \underline{s}}{r^3} + \mu \cdot \underline{\mathcal{H}}$$

$\mu$  es el momento magnético del átomo que podemos considerar formado por el debido a la órbita y el debido al spin.

$$\therefore \mu \cdot \underline{\mathcal{H}} = (\mu_L + \mu_S) \cdot \underline{\mathcal{H}} = -\frac{e}{2m_0 c} (L_z + 2S_z) \cdot \underline{\mathcal{H}} = -\frac{e \mathcal{H}}{2m_0 c} (L_z + 2S_z)$$

$$\therefore H = \frac{p^2}{2m_0} + V(r) - \frac{e^4}{8m_0^3 c^3} + \frac{Ze^2}{2m_0^2 c^2} \cdot \frac{\underline{L} \cdot \underline{s}}{r^3} - \frac{e \mathcal{H}}{2m_0 c} (L_z + 2S_z) \quad (1)$$

Los operadores  $L^2$ ,  $J^2$ ,  $J_z$  comutan con el Hamiltoniano imperturbado pues comutan con  $\underline{L} \cdot \underline{s}$  y con cualquier función de  $r$ . Luego trataremos como funciones para el sistema imperturbado las eigenfunciones simultáneas de dichos operadores, obtenidas de la teoría de Pauli.

$$H^0 = \frac{p^2}{2m_0} + V(r) - \frac{e^4}{8m_0^3 c^3} + \frac{Ze^2}{2m_0^2 c^2} \cdot \frac{\underline{L} \cdot \underline{s}}{r^3} + \sqrt{\frac{e \mathcal{H}}{2m_0 c}}$$

$$V = -\frac{e \mathcal{H}}{2m_0 c} (L_z + 2S_z)$$

$$\text{Pero: } L_z = \begin{pmatrix} L_z & 0 \\ 0 & L_z \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad S_z = \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{pmatrix}$$

$$\therefore U = -\frac{e \mathcal{H}}{2m_0 c} \begin{pmatrix} L_z + \hbar & 0 \\ 0 & L_z + \hbar \end{pmatrix}$$

La corrección a los niveles de energía es:

$$\Delta E = \langle U \rangle = \int \bar{\Psi} U \Psi dV$$

Las funciones de onda son:

$$\Psi_I = \begin{pmatrix} R' \sqrt{\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m_j+\frac{1}{2}} \\ R' \sqrt{\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad \text{para } j = l + \frac{1}{2}$$

$$\Psi_{II} = \begin{pmatrix} R \sqrt{\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m_j-\frac{1}{2}} \\ -R \sqrt{\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad \text{para } j = l - \frac{1}{2}$$

$$(L_z + 2S_z)\Psi_I = \begin{pmatrix} L_z + \hbar & 0 \\ 0 & L_z - \hbar \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R' \sqrt{\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m_j-\frac{1}{2}} \\ R' \sqrt{\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (m_j + \frac{1}{2})\hbar R' \sqrt{\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m_j-\frac{1}{2}} \\ (m_j - \frac{1}{2})\hbar R' \sqrt{\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

$$(L_z + 2S_z)\Psi_{II} = \begin{pmatrix} L_z + \hbar & 0 \\ 0 & L_z - \hbar \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R \sqrt{\frac{l-m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m_j-\frac{1}{2}} \\ -R \sqrt{\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (m_j + \frac{1}{2})\hbar R \sqrt{\frac{l-m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m_j-\frac{1}{2}} \\ -(m_j - \frac{1}{2})\hbar R \sqrt{\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \int \bar{\Psi}_I (L_z + 2S_z) \Psi_I dV &= (m_j + \frac{1}{2})\hbar \frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1} + (m_j - \frac{1}{2})\hbar \frac{l-m_j+\frac{1}{2}}{2l+1} = \\ &= \hbar \left( \frac{m_j l + m_j^2 + \frac{1}{2}m_j + \frac{1}{2}l + \frac{1}{2}m_j + \frac{1}{4} + m_j l + m_j^2 + \frac{1}{2}m_j - \frac{1}{2}l + \frac{1}{2}m_j - \frac{1}{4}}{2l+1} \right) = \\ &= \frac{2m_j(l+1)\hbar}{2l+1} = \frac{2j+1}{2j} m_j \hbar = \frac{2(j+1)(j+1)}{2j(j+1)} m_j \hbar = \frac{2j^2+3j+1}{2j(j+1)} m_j \hbar = \\ &= \frac{3j^2+3j-j^2+1}{2j(j+1)} m_j \hbar = \frac{3j(j+1)-(j-1)(j+1)}{2j(j+1)} m_j \hbar \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int \bar{\Psi}_{II} (L_z + 2S_z) \Psi_{II} dV &= (m_j + \frac{1}{2})\hbar \frac{l-m_j+\frac{1}{2}}{2l+1} + (m_j - \frac{1}{2})\hbar \frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1} = \\ &= \hbar \left( \frac{m_j l - m_j^2 + \frac{1}{2}m_j + \frac{1}{2}l - \frac{1}{2}m_j + \frac{1}{4} + m_j l + m_j^2 + \frac{1}{2}m_j - \frac{1}{2}l - \frac{1}{2}m_j - \frac{1}{4}}{2l+1} \right) = \\ &= \frac{2m_j l \hbar}{2l+1} = \frac{2j+1}{2(j+1)} m_j \hbar = \frac{2j^2+j}{2j(j+1)} m_j \hbar = \frac{3j^2+3j-j^2-2j}{2j(j+1)} m_j \hbar = \\ &= \frac{3j(j+1)-j(j+2)}{2j(j+1)} m_j \hbar \end{aligned}$$

En resumen:

Cuando  $j = l + \frac{1}{2}$ :

$$\langle L_z + 2S_z \rangle = \frac{3j(j+1) - (j-1)(j+1)}{2j(j+1)} m_j \hbar = \frac{3j(j+1) - (l-\frac{1}{2})(l+\frac{3}{2})}{2j(j+1)} m_j \hbar$$

Cuando  $j = l - \frac{1}{2}$ :

$$\langle L_z + 2S_z \rangle = \frac{3j(j+1) - j(j+2)}{2j(j+1)} m_j \hbar = \frac{3j(j+1) - (l-\frac{1}{2})(l+\frac{3}{2})}{2j(j+1)} m_j \hbar$$

Puesto que en ambos casos el resultado es el mismo, podemos resumirlo en uno solo:

$$\begin{aligned} \langle L_z + 2S_z \rangle &= \frac{3j(j+1) - (l-\frac{1}{2})(l+\frac{3}{2})}{2j(j+1)} m_j \hbar = \left[ 1 + \frac{j(j+1) - (l^2 + l - \frac{3}{4})}{2j(j+1)} \right] m_j \hbar \\ &= \left[ 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + \frac{3}{4}}{2j(j+1)} \right] m_j \hbar = \left[ 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \right] m_j \hbar \\ &= g m_j \hbar \end{aligned}$$

Donde la conexión a los niveles de energía es:

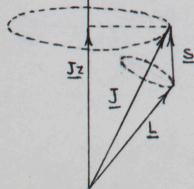
$$\Delta E = -\frac{e \hbar \Delta}{2m_0 c} m_j g$$

donde  $g$  es el factor de Landé:

$$g = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}$$

y por lo tanto la energía para el efecto Zeeman anómalo es:

$$E_{n,m_j} = -\frac{Z^2 m_e e^4}{2 \hbar^2 n^2} - \frac{e \hbar \Delta m_j g}{2m_0 c}$$



## MECANICA CUANTICA

### RELATIVISTA.

### TEORIA DE DIRAC.

Mecánica Cuántica Relativista.- Teoría de Dirac.

Puesto que la energía cinética relativista es:  $K = mc^2 - m_0 c^2$ , el Hamiltoniano relativista será:

$$H = mc^2 + V = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} + V \quad \dots \quad (1)$$

Transformemos este expresión:

$$p = mv = \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad \therefore \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} = \frac{m_0 v}{p}$$

$$\therefore 1 - \frac{v^2}{c^2} = \frac{m_0^2 v^2}{p^2}$$

$$1 = \left( \frac{m_0^2}{p^2} + \frac{1}{c^2} \right) v^2 = \frac{p^2 + m_0^2 c^2}{p^2} \cdot \frac{v^2}{c^2}$$

$$\therefore \frac{v^2}{c^2} = \frac{p^2}{p^2 + m_0^2 c^2}$$

$$1 - \frac{v^2}{c^2} = 1 - \frac{p^2}{p^2 + m_0^2 c^2} = \frac{m_0^2 c^2}{p^2 + m_0^2 c^2}$$

$$\therefore \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} = \pm \frac{m_0 c}{\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}}$$

$$\therefore H = \pm c \sqrt{p^2 + m_0^2 c^2} + V \quad \dots \quad (2)$$

Luego el operador asociado es:

$$H = \pm c \sqrt{-\hbar^2 \nabla^2 + m_0^2 c^2} + V \quad \dots \quad (3)$$

Linearización de  $H$ :

Expresemos a  $H$  como:

$$H = \pm c \sqrt{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + m_0^2 c^2} + V$$

y al radical como:

$$\sqrt{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + m_0^2 c^2} = \alpha_1 p_x + \alpha_2 p_y + \alpha_3 p_z + \alpha_m m_0 c$$

donde las  $\alpha$ s son independientes entre sí:

Elevando al cuadrado,

$$\begin{aligned} p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + m_0^2 c^2 &= (\alpha_1 p_x + \alpha_2 p_y + \alpha_3 p_z + \alpha_m m_0 c)(\alpha_1 p_x + \alpha_2 p_y + \alpha_3 p_z + \alpha_m m_0 c) \\ &= \alpha_1^2 p_x^2 + \alpha_1 \alpha_2 p_x p_y + \alpha_1 \alpha_3 p_x p_z + \alpha_1 \alpha_m p_x m_0 c + \\ &\quad + \alpha_2 \alpha_1 p_y p_x + \alpha_2^2 p_y^2 + \alpha_2 \alpha_3 p_y p_z + \alpha_2 \alpha_m p_y m_0 c + \\ &\quad + \alpha_3 \alpha_1 p_z p_x + \alpha_3 \alpha_2 p_z p_y + \alpha_3^2 p_z^2 + \alpha_3 \alpha_m p_z m_0 c + \\ &\quad + \alpha_m \alpha_1 m_0 c p_x + \alpha_m \alpha_2 m_0 c p_y + \alpha_m \alpha_3 m_0 c p_z + \alpha_m^2 m_0^2 c^2. \end{aligned}$$

Para que esto se cumple se requiere que:

$$\alpha_1^2 = \alpha_2^2 = \alpha_3^2 = \alpha_m^2 = 1$$

$$\alpha_1 \alpha_2 + \alpha_2 \alpha_1 = 0$$

$$\alpha_1 \alpha_3 + \alpha_3 \alpha_1 = 0$$

$$\alpha_1 \alpha_m + \alpha_m \alpha_1 = 0$$

$$\alpha_2 \alpha_3 + \alpha_3 \alpha_2 = 0$$

$$\alpha_2 \alpha_m + \alpha_m \alpha_2 = 0$$

$$\alpha_3 \alpha_m + \alpha_m \alpha_3 = 0$$

$$\text{En general: } \alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 2 \delta_{ij} \quad \text{donde } i, j = 1, 2, 3, m$$

Estos operadores son completamente nulos, no tienen analogía clásica y por lo tanto no los podemos referir a ninguna variable dinámica clásica y deben representar características intrínsecas del electrón completamente nulas.

Estos operadores son:

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\alpha_m = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Luego:

$$H = V \pm c(\alpha_1 p_x + \alpha_2 p_y + \alpha_3 p_z + \alpha_m m_0 c)$$

El doble signo sólo cambia el signo de las  $\alpha$ s lo cual no altera en nada su resultado como puede fácilmente comprobarse y por lo tanto el mismo resultado se obtendrá usando cualquier signo.

Por comodidad usaremos el negativo.

$$\therefore H = V - c(\alpha_1 p_x + \alpha_2 p_y + \alpha_3 p_z + \alpha_m m_0 c)$$

$$\text{o sea: } H = V - c(\alpha_1 p_x + \alpha_2 p_y + \alpha_3 p_z + \alpha_m m_0 c) \quad \dots \quad (4)$$

y el operador asociado:

$$H = V - c(\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \vec{\alpha}_m \cdot \vec{m}_c) \quad (5)$$

Luego la ecuación de Dirac es:

$$[V - c(\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \vec{\alpha}_m \cdot \vec{m}_c)]\psi = E\psi$$

$$[E - V + c(\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \vec{\alpha}_m \cdot \vec{m}_c)]\psi = 0 \quad (6)$$

Puesto que las  $\vec{\alpha}$ s son operadores que actúan sobre vectores,  $\psi$  será un vector. Pero las  $p_i$ s actúan sobre funciones, luego  $\psi$  será un vector de cuatro componentes cada una del espacio de Schrödinger; es decir:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1(x, y, z) \\ \psi_2(x, y, z) \\ \psi_3(x, y, z) \\ \psi_4(x, y, z) \end{pmatrix}$$

en la que cada función de Schrödinger es aceptable.

La función conjugada compleja de Dirac es el singlon:

$$\bar{\psi} = (\bar{\psi}_1 \bar{\psi}_2 \bar{\psi}_3 \bar{\psi}_4)$$

y el cuadrado hermitiano:

$$\bar{\psi}\psi = (\bar{\psi}_1 \bar{\psi}_2 \bar{\psi}_3 \bar{\psi}_4) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \bar{\psi}_1\psi_1 + \bar{\psi}_2\psi_2 + \bar{\psi}_3\psi_3 + \bar{\psi}_4\psi_4$$

y la condición de normalización es:

$$\int \psi \psi dV = \int \bar{\psi}_1\psi_1 dV + \int \bar{\psi}_2\psi_2 dV + \int \bar{\psi}_3\psi_3 dV + \int \bar{\psi}_4\psi_4 dV = 1$$

Los operadores de Dirac como se ha visto son matrices de  $4 \times 4$  y por lo tanto los operadores diferenciales asociados a las otras variables dinámicas serán: sea el operador  $\xi$ :

$$\xi = \begin{pmatrix} \xi & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \xi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \xi \end{pmatrix}$$

Todos estos operadores no siguen por las reglas ordinarias de las matrices, teniendo cuidado en conservar el orden de los productos cuyos

factores no comutan entre sí:

Definimos:

$$\underline{J} = \underline{L} + \underline{S}$$

donde  $\underline{J}$  es el momento angular total del átomo.

$\underline{L}$  es el momento angular orbital

y  $\underline{S}$  es el spin del electrón.

$\underline{S}$  que daremos definido como:

$$\underline{S} = \begin{cases} S_x = -\frac{i\hbar}{2} \alpha_2 \alpha_3 \\ S_y = -\frac{i\hbar}{2} \alpha_3 \alpha_1 \\ S_z = -\frac{i\hbar}{2} \alpha_1 \alpha_2 \end{cases}$$

Puede mostrarse fácilmente que  $J_z$ ,  $J^2$  y  $H$  son constantes del movimiento en el método de Dirac, esto es sus operadores comutan, cosa que comprobaremos desarrollando:

$$[H, J_z] = [H, J^2] = [J_z, J^2] = 0$$

El valor absoluto de  $\underline{S}$  es:

$$\underline{S}^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = -\frac{\hbar^2}{4} (\alpha_2 \alpha_3 \alpha_2 \alpha_3 + \alpha_3 \alpha_1 \alpha_3 \alpha_1 + \alpha_1 \alpha_2 \alpha_1 \alpha_2) \\ = -\frac{\hbar^2}{4} (-\alpha_2 \alpha_3 \alpha_3 \alpha_2 - \alpha_3 \alpha_1 \alpha_1 \alpha_3 - \alpha_1 \alpha_2 \alpha_2 \alpha_1) = \frac{3\hbar^2}{4}$$

Luego el valor absoluto de  $S$  es:

$$|S| = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$$

Por analogía con el momento angular orbital podemos definir un número cuántico  $s = \frac{1}{2}$  y por lo tanto:

$$S = \sqrt{s(s+1)} \hbar$$

La dependencia del tiempo de una función  $\psi$  de Dirac perteneciente a un sistema cuyo Hamiltoniano es  $H$  está determinada por la ecuación:

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = i\hbar \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi_1}{\partial t} \\ \frac{\partial \psi_2}{\partial t} \\ \frac{\partial \psi_3}{\partial t} \\ \frac{\partial \psi_4}{\partial t} \end{pmatrix}$$

donde  $H$  es el operador Hamiltoniano (5)

Operadores de Dirac.

$$S_x = -\frac{i\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_y = -\frac{i\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_z = -\frac{i\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\underline{J} = \underline{L} + \underline{S}$$

$$J_x = L_x + S_x = \begin{pmatrix} L_x & \frac{\hbar}{2} & 0 & 0 \\ \frac{\hbar}{2} & L_x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & L_x & \frac{\hbar}{2} \\ 0 & 0 & \frac{\hbar}{2} & L_x \end{pmatrix}$$

$$J_y = L_y + S_y = \begin{pmatrix} L_y & -i\frac{\hbar}{2} & 0 & 0 \\ i\frac{\hbar}{2} & L_y & 0 & 0 \\ 0 & 0 & L_y & -i\frac{\hbar}{2} \\ 0 & 0 & i\frac{\hbar}{2} & L_y \end{pmatrix}$$

$$J_z = L_z + S_z = \begin{pmatrix} L_z + \frac{\hbar}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & L_z - \frac{\hbar}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & L_z + \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & L_z - \frac{\hbar}{2} \end{pmatrix}$$

$$\underline{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = (\underline{L} + \underline{S})^2 = \underline{L}^2 + \underline{S}^2 + 2 \underline{L} \cdot \underline{S}$$

$$= L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + 2(L_x \cdot S_x + L_y \cdot S_y + L_z \cdot S_z)$$

$$\therefore J^2 = \begin{pmatrix} L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar L_z & \hbar(L_x - iL_y) & 0 & 0 \\ \hbar(L_x + iL_y) & L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \hbar L_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar L_z & \hbar(L_x - iL_y) \\ 0 & 0 & \hbar(L_x + iL_y) & L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \hbar L_z \end{pmatrix}$$

$$\therefore J^2 = \begin{pmatrix} L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar L_z & \hbar L^- & 0 & 0 \\ \hbar L^+ & L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \hbar L_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar L_z & \hbar L^- \\ 0 & 0 & \hbar L^+ & L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \hbar L_z \end{pmatrix}$$

$$H = V - c(\alpha_1 p_x + \alpha_2 p_y + \alpha_3 p_z + \alpha_m m_0 c)$$

$$\therefore H = \begin{pmatrix} V - m_0 c^2 & 0 & -c p_z & -c p^- \\ 0 & V - m_0 c^2 & -c p^+ & c p_z \\ -c p_z & -c p^- & V + m_0 c^2 & 0 \\ -c p^+ & c p_z & 0 & V + m_0 c^2 \end{pmatrix}$$

$$\text{donde: } p^- = p_x - i p_y ; \quad p^+ = p_x + i p_y$$

de modo la ecuación de Dirac será:

$$H \Psi = E \Psi$$

$$\therefore (E - H) \Psi = 0$$

$$[E - V + c(\alpha_1 p_x + \alpha_2 p_y + \alpha_3 p_z + \alpha_m m_0 c)] \Psi = 0$$

que escrita explícitamente será:

$$\begin{pmatrix} E - V + m_0 c^2 & 0 & c p_z & c p^- \\ 0 & E - V + m_0 c^2 & c p^+ & -c p_z \\ c p_z & c p^- & E - V - m_0 c^2 & 0 \\ c p^+ & -c p_z & 0 & E - V - m_0 c^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} = 0$$

y que en forma escalar será:

$$(E - V + m_0 c^2) \Psi_1 + c p^- \Psi_4 + c p_z \Psi_3 = 0$$

$$(E - V + m_0 c^2) \Psi_2 + c p^+ \Psi_3 - c p_z \Psi_4 = 0$$

$$(E - V - m_0 c^2) \Psi_3 + c p^- \Psi_2 + c p_z \Psi_1 = 0$$

$$(E - V - m_0 c^2) \Psi_4 + c p^+ \Psi_1 - c p_z \Psi_2 = 0$$

### Movimiento en un campo central conservativo.

Estudiaremos por el Método de Dirac el movimiento de una partícula en un campo central conservativo cuyo potencial es:  $V = V(r)$

El operador Hamiltoniano es:

$$H = V(r) + c(i\hbar \vec{\alpha} \cdot \nabla - \alpha_m \cdot \vec{m} \cdot \vec{c})$$

Las constantes del movimiento en este caso son:  $H, J_x^2$  y  $J_z$  puesto que:

$$i\hbar [H, J^2] = i\hbar [H, J_z] = i\hbar [J^2, J_z] = 0$$

que puede comprobarse calculando directamente los parámetros de Poisson:

Resolvemos este problema en coordenadas esféricas.

### Eigenfunciones de $J_z$

La ecuación característica para  $J_z$  es:

$$J_z \psi = m_j \hbar \psi \quad (1)$$

que escrita explícitamente queda:

$$\begin{pmatrix} L_z + \frac{\hbar}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & L_z - \frac{\hbar}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & L_z + \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & L_z - \frac{\hbar}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = m_j \hbar \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad (2)$$

que en forma escalar quedan:

$$(L_z + \frac{\hbar}{2}) \psi_1 = m_j \hbar \psi_1$$

$$(L_z - \frac{\hbar}{2}) \psi_2 = m_j \hbar \psi_2$$

$$(L_z + \frac{\hbar}{2}) \psi_3 = m_j \hbar \psi_3$$

$$(L_z - \frac{\hbar}{2}) \psi_4 = m_j \hbar \psi_4$$

$$\left. \begin{array}{l} \frac{\partial \psi_1}{\partial \varphi} - i(m_j - \frac{1}{2}) \psi_1 = 0 \\ \frac{\partial \psi_2}{\partial \varphi} - i(m_j + \frac{1}{2}) \psi_2 = 0 \\ \frac{\partial \psi_3}{\partial \varphi} - i(m_j - \frac{1}{2}) \psi_3 = 0 \\ \frac{\partial \psi_4}{\partial \varphi} - i(m_j + \frac{1}{2}) \psi_4 = 0 \end{array} \right\} \quad (3)$$

La solución de estas ecuaciones es:

$$\psi_1 = F_1(r, \theta) e^{i(m_j - \frac{1}{2})\varphi}$$

$$\psi_2 = F_2(r, \theta) e^{i(m_j + \frac{1}{2})\varphi}$$

$$\psi_3 = F_3(r, \theta) e^{i(m_j - \frac{1}{2})\varphi}$$

$$\psi_4 = F_4(r, \theta) e^{i(m_j + \frac{1}{2})\varphi}$$

$$\text{donde } m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}, \dots$$

luego la función de onda es:

$$\Psi = \begin{pmatrix} F_1(r, \theta) e^{i(m_j - \frac{1}{2})\varphi} \\ F_2(r, \theta) e^{i(m_j + \frac{1}{2})\varphi} \\ F_3(r, \theta) e^{i(m_j - \frac{1}{2})\varphi} \\ F_4(r, \theta) e^{i(m_j + \frac{1}{2})\varphi} \end{pmatrix} \quad (4)$$

$$\text{donde } m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}, \dots$$

y por lo tanto el valor de  $J_z$  es:

$$J_z \stackrel{?}{=} m_j \hbar \quad \dots \quad (5)$$

Para comodidad en el manejo de  $m_j$  definimos:

$$m_s = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$$

$$m_j - \frac{1}{2} = m_j - m_s = m_l \quad \therefore m_j = m_l + m_s$$

$$m_j + \frac{1}{2} = m_j + m_s = m_l$$

donde  $m_l$  es el número cuántico magnético (azimutal de Schrödinger)

### Eigenfunciones de $J^2$

La ecuación característica para  $J^2$  es:

$$J^2 \psi = j(j+1) \hbar^2 \psi \quad \dots \quad (6)$$

la que escrita explícitamente es:

$$\begin{pmatrix} L^2 + \frac{3}{4} \hbar^2 + \hbar L_z & \hbar L^- & 0 & 0 \\ \hbar L^+ & L^2 + \frac{3}{4} \hbar^2 - \hbar L_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & L^2 + \frac{3}{4} \hbar^2 + \hbar L_z & \hbar L^- \\ 0 & 0 & \hbar L^+ & L^2 + \frac{3}{4} \hbar^2 - \hbar L_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = j(j+1) \hbar^2 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad (7)$$

que en forma escalar será:

$$\left. \begin{array}{l} (L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar L_z)\psi_1 + \hbar L^- \psi_2 = j(j+1)\hbar^2 \psi_1 \\ \hbar L^+ \psi_1 + (L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \hbar L_z)\psi_2 = j(j+1)\hbar^2 \psi_2 \\ (L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar L_z)\psi_3 + \hbar L^- \psi_4 = j(j+1)\hbar^2 \psi_3 \\ \hbar L^+ \psi_3 + (L^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \hbar L_z)\psi_4 = j(j+1)\hbar^2 \psi_4 \end{array} \right\} \quad \dots \quad (8)$$

Por analogía con el método de Schrödinger ensayemos para solución del sistema (8) expresiones con armónicas esféricas.

$$\begin{aligned} \psi_1 &= R_1(r) Y_l^{m_l-\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ \psi_2 &= R_2(r) Y_l^{m_l+\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ \psi_3 &= R_3(r) Y_l^{m_l-\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ \psi_4 &= R_4(r) Y_l^{m_l+\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \end{aligned}$$

Puesto que en el sistema (8) las ecuaciones están separadas en grupos de dos encajantes separadas completamente y ambos grupos son semejantes, resolveremos sólo las dos primeras; sustituyendo en ellas a  $\psi_1$  y  $\psi_2$  se tiene: (aplicando las propiedades de los operadores  $L^2$ ,  $L_z$ ,  $L^+$  y  $L^-$  sobre las armónicas esféricas normalizadas)

$$\begin{aligned} l(l+1)\hbar^2 R_1 Y_l^{m_l-\frac{1}{2}} + \frac{3}{4}\hbar^2 R_1 Y_l^{m_l+\frac{1}{2}} + (m_l \pm \frac{1}{2})\hbar^2 R_1 Y_l^{m_l \mp \frac{1}{2}} + \sqrt{(l+m_l \pm \frac{1}{2})(l-m_l \pm \frac{1}{2})} \hbar^2 R_2 Y_l^{m_l \mp \frac{1}{2}} = \\ = j(j+1)\hbar^2 R_1 Y_l^{m_l-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{(l-m_l \pm \frac{1}{2})(l+m_l \pm \frac{1}{2})} \hbar^2 R_1 Y_l^{m_l \pm \frac{1}{2}} + l(l+1)\hbar^2 R_2 Y_l^{m_l \pm \frac{1}{2}} + \frac{3}{4}\hbar^2 R_2 Y_l^{m_l \pm \frac{1}{2}} - (m_l \pm \frac{1}{2})\hbar^2 R_2 Y_l^{m_l \mp \frac{1}{2}} = \\ = j(j+1)\hbar^2 R_2 Y_l^{m_l \pm \frac{1}{2}} \end{aligned}$$

Simplificando:

$$[l(l+1) + m_l + \frac{1}{2} - j(j+1)] R_1 + \sqrt{(l+m_l \pm \frac{1}{2})(l-m_l \pm \frac{1}{2})} R_2 = 0$$

$$\sqrt{(l-m_l \pm \frac{1}{2})(l+m_l \pm \frac{1}{2})} R_1 + [l(l+1) - m_l + \frac{1}{4} - j(j+1)] R_2 = 0$$

Para que este sistema admita solución es necesario que:

$$\begin{vmatrix} (l+m_l \pm \frac{1}{2}) + (l^2 - \frac{1}{4}) - j(j+1) & \sqrt{(l+m_l \pm \frac{1}{2})(l-m_l \pm \frac{1}{2})} \\ \sqrt{(l-m_l \pm \frac{1}{2})(l+m_l \pm \frac{1}{2})} & (l-m_l \pm \frac{1}{2}) + (l^2 - \frac{1}{4}) - j(j+1) \end{vmatrix} = 0$$

$$\begin{aligned} \therefore [(l^2 - \frac{1}{4}) - j(j+1)][(l+m_l \pm \frac{1}{2}) + (l-m_l \pm \frac{1}{2}) + (l^2 - \frac{1}{4}) - j(j+1)] &= [(l^2 - \frac{1}{4}) - j(j+1)][(l^2 + 2l + \frac{3}{4}) - \\ - j(j+1)] &= [(l - \frac{1}{2})(l + \frac{1}{2}) - j(j+1)][(l + \frac{1}{2})(l + \frac{3}{2}) - j(j+1)] = 0 \end{aligned}$$

Las soluciones son:

$$j(j+1) = (l - \frac{1}{2})(l + \frac{1}{2}) \quad \therefore j = l - \frac{1}{2}$$

$$j(j+1) = (l + \frac{1}{2})(l + \frac{3}{2}) \quad \therefore j = l + \frac{1}{2}$$

Puesto que  $l = 0, 1, 2, \dots$

$$j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$$

( $j = -\frac{1}{2}$  no es posible porque sería imaginaria)

$$m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots, \pm j$$

Luego las funciones de onda son:

$$\begin{cases} l = j + \frac{1}{2} & \begin{cases} \psi_1 = R_1(r) Y_{j+\frac{1}{2}}^{m_j-\frac{1}{2}} \\ \psi_2 = R_2(r) Y_{j+\frac{1}{2}}^{m_j+\frac{1}{2}} \end{cases} \end{cases}$$

$$\begin{cases} l = j - \frac{1}{2} & \begin{cases} \psi_1 = R_1(r) Y_{j-\frac{1}{2}}^{m_j-\frac{1}{2}} \\ \psi_2 = R_2(r) Y_{j-\frac{1}{2}}^{m_j+\frac{1}{2}} \end{cases} \end{cases}$$

La relación entre  $R_1$  y  $R_2$  es:

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

$$\frac{R_1}{R_2} = - \frac{\sqrt{(j+m_j+1)(j-m_j+1)}}{(j+\frac{1}{2})(j+\frac{3}{2}) + m_j + \frac{1}{4} - j(j+1)} = - \frac{\sqrt{(j+m_j+1)(j-m_j+1)}}{j+m_j+1} = - \sqrt{\frac{j-m_j+1}{j+m_j+1}}$$

Podemos hacer:

$$R_1 = A \sqrt{j-m_j+1} f(r)$$

$$R_2 = -A \sqrt{j+m_j+1} f(r)$$

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

$$\frac{R_1}{R_2} = - \frac{\sqrt{(j+m_j)(j-m_j)}}{(j-\frac{1}{2})(j+\frac{1}{2}) + m_j + \frac{1}{4} - j(j+1)} = \frac{\sqrt{(j+m_j)(j-m_j)}}{j-m_j} = \sqrt{\frac{j+m_j}{j-m_j}}$$

$$\therefore R_1 = B \sqrt{j+m_j} g(r)$$

$$R_2 = B \sqrt{j-m_j} g(r)$$

Luego las soluciones serán:

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

$$\begin{aligned}\psi_1 &= A \sqrt{j-m_j+1} f(r) Y_{j+\frac{1}{2}}^{m_j-\frac{1}{2}} \\ \psi_2 &= -A \sqrt{j+m_j+1} f(r) Y_{j+\frac{1}{2}}^{m_j+\frac{1}{2}} \\ \psi_3 &= C \sqrt{j-m_j+1} F(r) Y_{j+\frac{1}{2}}^{m_j-\frac{1}{2}} \\ \psi_4 &= -C \sqrt{j+m_j+1} F(r) Y_{j+\frac{1}{2}}^{m_j+\frac{1}{2}}\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}\psi_1 &= B \sqrt{j+m_j} g(r) Y_{j-\frac{1}{2}}^{m_j-\frac{1}{2}} \\ \psi_2 &= B \sqrt{j-m_j} g(r) Y_{j-\frac{1}{2}}^{m_j+\frac{1}{2}} \\ \psi_3 &= D \sqrt{j+m_j} G(r) Y_{j-\frac{1}{2}}^{m_j-\frac{1}{2}} \\ \psi_4 &= D \sqrt{j-m_j} G(r) Y_{j-\frac{1}{2}}^{m_j+\frac{1}{2}}\end{aligned}$$

después las funciones de onda posibles son:

$$\Psi_I = \begin{pmatrix} A \sqrt{j-m_j+1} f Y_{j+\frac{1}{2}}^{m_j-\frac{1}{2}} \\ -A \sqrt{j+m_j+1} f Y_{j+\frac{1}{2}}^{m_j+\frac{1}{2}} \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Psi_{II} = \begin{pmatrix} 0 \\ C \sqrt{j-m_j+1} F Y_{j+\frac{1}{2}}^{m_j-\frac{1}{2}} \\ -C \sqrt{j+m_j+1} F Y_{j+\frac{1}{2}}^{m_j+\frac{1}{2}} \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Psi_{III} = \begin{pmatrix} B \sqrt{j+m_j} g Y_{j-\frac{1}{2}}^{m_j-\frac{1}{2}} \\ B \sqrt{j-m_j} g Y_{j-\frac{1}{2}}^{m_j+\frac{1}{2}} \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Psi_{IV} = \begin{pmatrix} 0 \\ D \sqrt{j+m_j} G Y_{j-\frac{1}{2}}^{m_j-\frac{1}{2}} \\ D \sqrt{j-m_j} G Y_{j-\frac{1}{2}}^{m_j+\frac{1}{2}} \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

Normalización del espacio interno:

Condición de normalización:

$$\bar{\Psi} \Psi = (\bar{\Psi}_1 \bar{\Psi}_2 \bar{\Psi}_3 \bar{\Psi}_4) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} = \bar{\Psi}_1 \Psi_1 + \bar{\Psi}_2 \Psi_2 + \bar{\Psi}_3 \Psi_3 + \bar{\Psi}_4 \Psi_4 = 1$$

Aplicaremos esta condición a nuestras soluciones, suponiendo que  $f, F, g$  y  $G$  están normalizadas, cosa que haremos al resolver las ecuaciones radiales.

Para  $\Psi_I$  ( $y \Psi_{III}$ ):

$$A^2(j-m_j+1) + A^2(j+m_j+1) = 1$$

$$\therefore A^2(j+m_j+1) = 1$$

$$\therefore A = \frac{1}{\sqrt{2(j+1)}} = C$$

Para  $\Psi_{III}$  ( $y \Psi_{IV}$ ):

$$B^2(j+m_j) + B^2(j-m_j) = 1$$

$$\therefore B = \frac{1}{\sqrt{2j}} = D$$

Las soluciones normalizadas son:

$$\Psi_I = \begin{pmatrix} f \sqrt{\frac{j-m_j+1}{2(j+1)}} Y_{j+\frac{1}{2}}^{m_j-\frac{1}{2}} \\ -f \sqrt{\frac{j+m_j+1}{2(j+1)}} Y_{j+\frac{1}{2}}^{m_j+\frac{1}{2}} \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Psi_{III} = \begin{pmatrix} g \sqrt{\frac{j+m_j}{2j}} Y_{j-\frac{1}{2}}^{m_j-\frac{1}{2}} \\ g \sqrt{\frac{j-m_j}{2j}} Y_{j-\frac{1}{2}}^{m_j+\frac{1}{2}} \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Psi_{II} = \begin{pmatrix} 0 \\ F \sqrt{\frac{j-m_j+1}{2(j+1)}} Y_{j+\frac{1}{2}}^{m_j-\frac{1}{2}} \\ -F \sqrt{\frac{j+m_j+1}{2(j+1)}} Y_{j+\frac{1}{2}}^{m_j+\frac{1}{2}} \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Psi_{IV} = \begin{pmatrix} 0 \\ G \sqrt{\frac{j+m_j}{2j}} Y_{j-\frac{1}{2}}^{m_j-\frac{1}{2}} \\ G \sqrt{\frac{j-m_j}{2j}} Y_{j-\frac{1}{2}}^{m_j+\frac{1}{2}} \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

y la solución general es:

$$\Psi = \begin{pmatrix} f(r) \sqrt{\frac{j-m_j+1}{2(j+1)}} Y_{j+\frac{1}{2}}^{m_j-\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) + g(r) \sqrt{\frac{j+m_j}{2j}} Y_{j-\frac{1}{2}}^{m_j-\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ -f(r) \sqrt{\frac{j+m_j+1}{2(j+1)}} Y_{j+\frac{1}{2}}^{m_j+\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) + g(r) \sqrt{\frac{j-m_j}{2j}} Y_{j-\frac{1}{2}}^{m_j+\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ F(r) \sqrt{\frac{j-m_j+1}{2(j+1)}} Y_{j+\frac{1}{2}}^{m_j-\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) + G(r) \sqrt{\frac{j+m_j}{2j}} Y_{j-\frac{1}{2}}^{m_j-\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ -F(r) \sqrt{\frac{j+m_j+1}{2(j+1)}} Y_{j+\frac{1}{2}}^{m_j+\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) + G(r) \sqrt{\frac{j-m_j}{2j}} Y_{j-\frac{1}{2}}^{m_j+\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \end{pmatrix} \quad -(9)$$

donde  $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$

$m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots, \pm j$

Ecuaciones radiales para el campo central.

Determinemos ahora las ecuaciones radiales para el caso de un campo central, a fin de obtener después, a partir de éstas, las funciones de  $H$  en cada caso particular.

La ecuación característica para  $H$  es:

$$H\psi = E\psi \quad \dots \quad (1)$$

$$\text{o bien: } (E - H)\psi = 0$$

$$\text{y puesto que: } H = V(r) + c(i\hbar\alpha\cdot\nabla - \alpha m_e c^2)$$

$$= V(r) + c(\alpha\cdot p + \alpha m_e c^2)$$

luego la ecuación (1) escrita explícitamente será:

$$\begin{pmatrix} E - V + m_e c^2 & 0 & c p_z & c p^- \\ 0 & E - V + m_e c^2 & c p^+ & -c p_z \\ c p_z & c p^- & E - V - m_e c^2 & 0 \\ c p^+ & -c p_z & 0 & E - V - m_e c^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = 0 \quad \dots \quad (2)$$

que escalarmente será:

$$\left. \begin{array}{l} (E - V + m_e c^2)\psi_1 + c p^- \psi_4 + c p_z \psi_3 = 0 \\ (E - V + m_e c^2)\psi_2 + c p^+ \psi_3 - c p_z \psi_4 = 0 \\ (E - V - m_e c^2)\psi_3 + c p^- \psi_2 + c p_z \psi_1 = 0 \\ (E - V - m_e c^2)\psi_4 + c p^+ \psi_1 - c p_z \psi_2 = 0 \end{array} \right\} \quad \dots \quad (3)$$

Sustituyamos los valores de  $\psi$  encontrados anteriormente en el sistema (3) y apliquemos las propiedades de los operadores  $p^+$ ,  $p^-$  y  $p_z$  sobre las armónicas esféricas normalizadas a fin de obtener las ecuaciones diferenciales que nos permitan calcular  $f$ ,  $F$ ,  $g$  y  $G$ .

1<sup>a</sup> Ecuación:

$$(E - V + m_e c^2)f \sqrt{\frac{j+m_j+1}{2(j+1)}} \cdot Y^{m_j+\frac{1}{2}}_{j+\frac{1}{2}} + (E - V + m_e c^2)g \sqrt{\frac{j+m_j}{2j}} \cdot Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j-\frac{1}{2}} +$$

$$+ i\hbar c \left[ \frac{dF}{dr} - (j+\frac{1}{2}) \frac{F}{r} \right] \left[ \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j-m_j+2}{2(j+2)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j+\frac{3}{2}} -$$

$$- i\hbar c \left[ \frac{dF}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{F}{r} \right] \left[ \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j+m_j}{2j} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j-\frac{1}{2}} -$$

$$- i\hbar c \left[ \frac{dG}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{G}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j}{2j} \cdot \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j-m_j}{2j} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j+\frac{1}{2}} +$$

$$+ i\hbar c \left[ \frac{dG}{dr} + (j+\frac{1}{2}) \frac{G}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j}{2j} \cdot \frac{j+m_j}{2j} \cdot \frac{j+m_j-1}{2(j-1)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j-\frac{3}{2}} -$$

$$- i\hbar c \left[ \frac{dF}{dr} - (j+\frac{1}{2}) \frac{F}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j-m_j+2}{2(j+1)} \cdot \frac{j+m_j+1}{2(j+2)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j+\frac{3}{2}} -$$

$$- i\hbar c \left[ \frac{dF}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{F}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j+m_j}{2(j+1)} \cdot \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j-\frac{1}{2}} -$$

$$- i\hbar c \left[ \frac{dG}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{G}{r} \right] \left[ \frac{j+m_j}{2j} \cdot \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j+m_j}{2(j+1)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j+\frac{1}{2}} -$$

$$- i\hbar c \left[ \frac{dG}{dr} + (j+\frac{1}{2}) \frac{G}{r} \right] \left[ \frac{j+m_j}{2j} \cdot \frac{j+m_j-1}{2(j-1)} \cdot \frac{j-m_j}{2(j-1)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j-\frac{3}{2}} = 0$$

Para que esto se verifique es necesario que los coeficientes de las armónicas esféricas se anulen:

Coeficientes de  $Y^{m_j+\frac{1}{2}}_{j+\frac{1}{2}}$ :

$$(E - V + m_e c^2)f \sqrt{\frac{j-m_j+1}{2(j+1)}} - i\hbar c \left[ \frac{dG}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{G}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{j-m_j}{2j} = 0$$

$$- i\hbar c \left[ \frac{dG}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{G}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{j+m_j}{2j} = 0$$

$$\therefore (E - V + m_e c^2)f - i\hbar c \left[ \frac{dG}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{G}{r} \right] = 0$$

$$\text{o sea: } \frac{dG}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{G}{r} + \frac{i}{\hbar c} (E - V + m_e c^2)f = 0 \quad \dots \quad (4)$$

Coeficientes de  $Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j-\frac{1}{2}}$ :

$$(E - V + m_e c^2)g \sqrt{\frac{j+m_j}{2j}} - i\hbar c \left[ \frac{dF}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{F}{r} \right] \left[ \frac{j+m_j}{2j} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} = 0$$

$$- i\hbar c \left[ \frac{dF}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{F}{r} \right] \left[ \frac{j+m_j}{2j} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} = 0$$

$$\therefore (E - V + m_e c^2)g - i\hbar c \left[ \frac{dF}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{F}{r} \right] = 0$$

$$\text{o sea: } \frac{dF}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{F}{r} + \frac{i}{\hbar c} (E - V + m_e c^2)g = 0 \quad \dots \quad (5)$$

Coeficientes de  $Y^{m_j+\frac{1}{2}}_{j+\frac{1}{2}}$  y  $Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j-\frac{3}{2}}$ :

Estos coeficientes se anulan dando una identidad  $0=0$ .

2<sup>a</sup> Ecuación:

$$\begin{aligned}
 & - (E-V+m_0c^2) f \sqrt{\frac{j+m_j+1}{2(j+1)}} Y^{m_j+\frac{1}{2}}_{j+\frac{1}{2}} + (E-V+m_0c^2) g \sqrt{\frac{j-m_j}{2j}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j-\frac{1}{2}} + \\
 & + i\hbar c \left[ \frac{df}{dr} - (j+\frac{1}{2}) \frac{f}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j+m_j+2}{2(j+2)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j+\frac{1}{2}}_{j+\frac{3}{2}} - \\
 & - i\hbar c \left[ \frac{df}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{f}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j-m_j}{2j} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j-\frac{1}{2}} + \\
 & + i\hbar c \left[ \frac{dg}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{g}{r} \right] \left[ \frac{j+m_j}{2j} \cdot \frac{j+m_j}{2(j+1)} \cdot \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j+\frac{1}{2}}_{j+\frac{1}{2}} - \\
 & - i\hbar c \left[ \frac{dg}{dr} + (j+\frac{1}{2}) \frac{g}{r} \right] \left[ \frac{j+m_j}{2j} \cdot \frac{j-m_j}{2j} \cdot \frac{j-m_j-1}{2(j-1)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j+\frac{1}{2}}_{j-\frac{3}{2}} - \\
 & - i\hbar c \left[ \frac{df}{dr} - (j+\frac{1}{2}) \frac{f}{r} \right] \left[ \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j+m_j+2}{2(j+2)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j+\frac{1}{2}}_{j+\frac{3}{2}} - \\
 & - i\hbar c \left[ \frac{df}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{f}{r} \right] \left[ \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j-m_j}{2j} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j-\frac{1}{2}} + \\
 & + i\hbar c \left[ \frac{dg}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{g}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j}{2j} \cdot \frac{j-m_j}{2(j+1)} \cdot \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j+\frac{1}{2}}_{j+\frac{1}{2}} + \\
 & + i\hbar c \left[ \frac{dg}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{g}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j}{2j} \cdot \frac{j+m_j}{2j} \cdot \frac{j-m_j-1}{2(j-1)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j+\frac{1}{2}}_{j-\frac{3}{2}} = 0
 \end{aligned}$$

Para que esto se verifique es necesario que se anulen los coeficientes de las  $Y_s$ .

Coeficientes de  $Y^{m_j+\frac{1}{2}}_{j+\frac{1}{2}}$ :

$$\begin{aligned}
 & - (E-V+m_0c^2) f \left[ \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \right]^{\frac{1}{2}} + i\hbar c \left[ \frac{dg}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{g}{r} \right] \left[ \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{j+m_j}{2j} + \\
 & + i\hbar c \left[ \frac{dg}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{g}{r} \right] \left[ \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{j-m_j}{2j} = 0
 \end{aligned}$$

$$\therefore - (E-V+m_0c^2) f + i\hbar c \left[ \frac{dg}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{g}{r} \right] = 0$$

$$\therefore \frac{dg}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{g}{r} + \frac{i}{\hbar c} (E-V+m_0c^2) f = 0$$

que es la ecuación (4)

Coeficientes de  $Y^{m_j+\frac{1}{2}}_{j-\frac{1}{2}}$ :

$$\begin{aligned}
 & (E-V+m_0c^2) g \left[ \frac{j-m_j}{2j} \right]^{\frac{1}{2}} - i\hbar c \left[ \frac{df}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{f}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j}{2j} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} - \\
 & - i\hbar c \left[ \frac{df}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{f}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j}{2j} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} = 0
 \end{aligned}$$

$$\therefore g(E-V+m_0c^2) - i\hbar c \left[ \frac{df}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{f}{r} \right] = 0$$

$$\therefore \frac{df}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{f}{r} + \frac{i}{\hbar c} (E-V+m_0c^2) g = 0$$

que es la ecuación (5)

Coeficientes de  $Y^{m_j+\frac{1}{2}}_{j+\frac{3}{2}}$  y  $Y^{m_j+\frac{1}{2}}_{j-\frac{3}{2}}$ :

Estos coeficientes son iguales y de signo contrario; luego se anulan dando una identidad  $0=0$ .

3<sup>a</sup> Ecuación:

$$\begin{aligned}
 & (E-V-m_0c^2) F \sqrt{\frac{j-m_j+1}{2(j+1)}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j+\frac{1}{2}} + (E-V-m_0c^2) G \sqrt{\frac{j+m_j}{2j}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j-\frac{1}{2}} \\
 & + i\hbar c \left[ \frac{df}{dr} - (j+\frac{1}{2}) \frac{f}{r} \right] \left[ \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j-m_j+2}{2(j+2)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j+\frac{3}{2}} - \\
 & - i\hbar c \left[ \frac{df}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{f}{r} \right] \left[ \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j+m_j}{2(j+2)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j-\frac{1}{2}} \\
 & - i\hbar c \left[ \frac{dg}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{g}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j}{2j} \cdot \frac{j-m_j}{2(j+1)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j+\frac{1}{2}} + \\
 & + i\hbar c \left[ \frac{dg}{dr} + (j+\frac{1}{2}) \frac{g}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j}{2j} \cdot \frac{j+m_j}{2j} \cdot \frac{j+m_j-1}{2(j-1)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j-\frac{3}{2}} - \\
 & - i\hbar c \left[ \frac{df}{dr} - (j+\frac{1}{2}) \frac{f}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j-m_j+2}{2(j+1)} \cdot \frac{j+m_j+1}{2(j+2)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j+\frac{3}{2}} - \\
 & - i\hbar c \left[ \frac{df}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{f}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j+m_j}{2(j+1)} \cdot \frac{j-m_j+1}{2(j+2)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j-\frac{1}{2}} - \\
 & - i\hbar c \left[ \frac{dg}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{g}{r} \right] \left[ \frac{j+m_j}{2j} \cdot \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j+m_j}{2(j+1)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j+\frac{1}{2}} - \\
 & - i\hbar c \left[ \frac{dg}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{g}{r} \right] \left[ \frac{j+m_j}{2j} \cdot \frac{j+m_j-1}{2j} \cdot \frac{j-m_j}{2(j-1)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j-\frac{3}{2}} = 0
 \end{aligned}$$

Para que se cumpla esta igualdad los coeficientes deben anularse.

Coeficientes de  $Y^{m_j+\frac{1}{2}}_{j+\frac{1}{2}}$ :

$$\begin{aligned}
 & (E-V-m_0c^2) F \sqrt{\frac{j-m_j+1}{2(j+1)}} - i\hbar c \left[ \frac{dg}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{g}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{j-m_j}{2j} - \\
 & - i\hbar c \left[ \frac{dg}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{g}{r} \right] \frac{j+m_j}{2j} \left[ \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \right]^{\frac{1}{2}} = 0 \\
 & \therefore (E-V-m_0c^2) F - i\hbar c \left[ \frac{dg}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{g}{r} \right] = 0
 \end{aligned}$$

$$\text{O sea: } \frac{dg}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{g}{r} + \frac{i}{\hbar c} (E-V-m_0c^2) F = 0 \quad (6)$$

Coeficientes de  $Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j-\frac{1}{2}}$ :

$$\begin{aligned}
 & (E-V-m_0c^2) G \left[ \frac{j+m_j}{2j} \right]^{\frac{1}{2}} - i\hbar c \left[ \frac{df}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{f}{r} \right] \left[ \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{j+m_j}{2j} - \\
 & - i\hbar c \left[ \frac{df}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{f}{r} \right] \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \left[ \frac{j+m_j}{2j} \right]^{\frac{1}{2}} = 0 \\
 & \therefore (E-V-m_0c^2) G - i\hbar c \left[ \frac{df}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{f}{r} \right] = 0
 \end{aligned}$$

$$\text{O sea: } \frac{df}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{f}{r} + \frac{i}{\hbar c} (E-V-m_0c^2) G = 0 \quad (7)$$

Coeficientes de  $Y^{m_j+\frac{1}{2}}_{j+\frac{3}{2}}$  y  $Y^{m_j-\frac{1}{2}}_{j-\frac{3}{2}}$ :

Estos coeficientes nos conducen a una identidad  $0=0$

4<sup>a</sup> Ecuación:

$$\begin{aligned}
 & - (E - V - m_0 c^2) F \sqrt{\frac{j+m_j+1}{2(j+1)}} Y^{m_j+\frac{1}{2}} + (E - V - m_0 c^2) G \sqrt{\frac{j-m_j}{2j}} Y^{m_j-\frac{1}{2}} + \\
 & + i\hbar c \left[ \frac{df}{dr} - (j+\frac{1}{2}) \frac{f}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j+m_j+2}{2(j+2)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j+\frac{1}{2}} - \\
 & - i\hbar c \left[ \frac{dg}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{g}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j-m_j}{2j} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j+\frac{1}{2}} + \\
 & + i\hbar c \left[ \frac{dg}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{g}{r} \right] \left[ \frac{j+m_j}{2j} \cdot \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j+m_j}{2j} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j+\frac{1}{2}} - \\
 & - i\hbar c \left[ \frac{dg}{dr} + (j+\frac{1}{2}) \frac{g}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j}{2j} \cdot \frac{j+m_j}{2j} \cdot \frac{j-m_j-1}{2(j-1)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j+\frac{1}{2}} - \\
 & - i\hbar c \left[ \frac{df}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{f}{r} \right] \left[ \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j+m_j+2}{2(j+2)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j+\frac{1}{2}} - \\
 & - i\hbar c \left[ \frac{df}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{f}{r} \right] \left[ \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \cdot \frac{j-m_j}{2j} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j+\frac{1}{2}} + \\
 & + i\hbar c \left[ \frac{dg}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{g}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j}{2j} \cdot \frac{j-m_j}{2j} \cdot \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j+\frac{1}{2}} + \\
 & + i\hbar c \left[ \frac{dg}{dr} + (j+\frac{1}{2}) \frac{g}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j}{2j} \cdot \frac{j+m_j}{2j} \cdot \frac{j-m_j-1}{2(j-1)} \right]^{\frac{1}{2}} Y^{m_j+\frac{1}{2}} = 0
 \end{aligned}$$

Para que esta igualdad se cumplan deben anularse los coeficientes.

Coeficientes de  $Y^{m_j+\frac{1}{2}}$ :

$$\begin{aligned}
 & - (E - V - m_0 c^2) F \left[ \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \right]^{\frac{1}{2}} + i\hbar c \left[ \frac{dg}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{g}{r} \right] \left[ \frac{j+m_j}{2j} \right] \left[ \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \right]^{\frac{1}{2}} + \\
 & + i\hbar c \left[ \frac{dg}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{g}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j}{2j} \right] \left[ \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \right]^{\frac{1}{2}} = 0 \\
 \therefore & - (E - V - m_0 c^2) F + i\hbar c \left[ \frac{dg}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{g}{r} \right] = 0
 \end{aligned}$$

$$\therefore \frac{dg}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{g}{r} + \frac{i}{\hbar c} (E - V - m_0 c^2) F = 0$$

que es la ecuación (6)

Coeficientes de  $Y^{m_j-\frac{1}{2}}$ :

$$\begin{aligned}
 & (E - V - m_0 c^2) G \left[ \frac{j-m_j}{2j} \right]^{\frac{1}{2}} - i\hbar c \left[ \frac{df}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{f}{r} \right] \left[ \frac{j-m_j+1}{2(j+1)} \right] \left[ \frac{j-m_j}{2j} \right]^{\frac{1}{2}} - \\
 & - i\hbar c \left[ \frac{df}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{f}{r} \right] \left[ \frac{j+m_j+1}{2(j+1)} \right] \left[ \frac{j-m_j}{2j} \right]^{\frac{1}{2}} = 0 \\
 \therefore & (E - V - m_0 c^2) G - i\hbar c \left[ \frac{df}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{f}{r} \right] = 0
 \end{aligned}$$

$$\therefore \frac{df}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{f}{r} + \frac{i}{\hbar c} (E - V - m_0 c^2) G = 0$$

que es la ecuación (7)

Coeficientes de  $Y^{m_j+\frac{1}{2}}$  y  $Y^{m_j-\frac{1}{2}}$

Estos coeficientes son simétricos y por tanto su suma se anula.

Luego las ecuaciones radiales son:

$$\left. \begin{aligned}
 & \frac{df}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{f}{r} + \frac{i}{\hbar c} (E - V - m_0 c^2) G = 0 \\
 & \frac{dg}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{g}{r} + \frac{i}{\hbar c} (E - V + m_0 c^2) f = 0 \\
 & \frac{dF}{dr} + (j+\frac{3}{2}) \frac{F}{r} + \frac{i}{\hbar c} (E - V + m_0 c^2) g = 0 \\
 & \frac{dG}{dr} - (j-\frac{1}{2}) \frac{G}{r} + \frac{i}{\hbar c} (E - V - m_0 c^2) F = 0
 \end{aligned} \right\} \quad \text{----- (8)}$$

Luego la solución para cualquier campo central es:

$$\Psi = \begin{pmatrix} f(r) \sqrt{\frac{j-m_j+1}{2(j+1)}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) + g(r) \sqrt{\frac{j+m_j}{2j}} Y^{m_j+\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ - f(r) \sqrt{\frac{j+m_j+1}{2(j+1)}} Y^{m_j+\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) + g(r) \sqrt{\frac{j-m_j}{2j}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ F(r) \sqrt{\frac{j-m_j+1}{2(j+1)}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) + G(r) \sqrt{\frac{j+m_j}{2j}} Y^{m_j+\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ - F(r) \sqrt{\frac{j+m_j+1}{2(j+1)}} Y^{m_j+\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) + G(r) \sqrt{\frac{j-m_j}{2j}} Y^{m_j-\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \end{pmatrix} \quad \text{--- (9)}$$

donde  $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$

$m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots, \pm j$

y  $f(r)$ ,  $g(r)$ ,  $F(r)$  y  $G(r)$  satisfacen el sistema (8)

$$\frac{d^2\psi_4}{dx^2} + \frac{E^2 - m_0^2 c^4}{\hbar^2 c^2} \psi_4 = 0$$

Llamando:  $k = \frac{\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}}{\hbar c}$

Las soluciones serán:

$$\psi_1 = A_1 e^{ikx}$$

$$\psi_2 = A_2 e^{-ikx}$$

$$\psi_3 = A_3 e^{ikx}$$

$$\psi_4 = A_4 e^{-ikx}$$

Sustituyendo en (3) y simplificando:

$$(E + m_0 c^2) A_1 + c \hbar k A_4 = 0$$

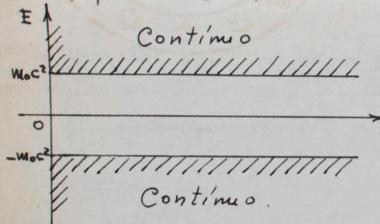
$$c \hbar k A_1 + (E - m_0 c^2) A_4 = 0$$

Para que este sistema tenga solución es necesario que:

$$\begin{vmatrix} E+m_0 c^2 & c \hbar k \\ c \hbar k & E-m_0 c^2 \end{vmatrix} = E^2 - m_0^2 c^4 - c^2 \hbar^2 k^2 = 0$$

$$\therefore E = \pm c \sqrt{\hbar^2 k^2 + m_0^2 c^4} \quad \dots \quad (4)$$

El espectro de energía es:



Recordando que el Hamiltoniano es:

$$H = \pm c \sqrt{p^2 + m_0^2 c^2} + V$$

Sabemos que el valor del momento lineal es:

$$p = \hbar^2 k^2 = \frac{E^2 - m_0^2 c^4}{c^2} \quad \dots \quad (5)$$

Calcularemos ahora los valores de las constantes:

$$\frac{A_1}{A_4} = -\frac{c \hbar k}{E + m_0 c^2} = -\frac{c \hbar}{E + m_0 c^2} \frac{\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}}{\hbar c} = -\sqrt{\frac{E - m_0 c^2}{E + m_0 c^2}} = \frac{\sqrt{E - m_0 c^2}}{\sqrt{E + m_0 c^2}} N$$

$$\therefore \psi_1 = \sqrt{E - m_0 c^2} N_1 e^{ikx} \quad \psi_2 = N_2 \sqrt{E - m_0 c^2} e^{-ikx}$$

$$\psi_4 = -N_1 \sqrt{E + m_0 c^2} e^{ikx} \quad \psi_3 = -N_2 \sqrt{E + m_0 c^2} e^{-ikx}$$

Donde  $N_1$  y  $N_2$  son constantes de normalización.

### La partícula libre. - <sup>una dimensión</sup> Método de Dirac.

Consideremos el movimiento de una partícula libre de masa en reposo  $m_0$  y resolvamos el problema en una dimensión:

En este caso:  $V=0$ ,  $p_1=p_x=p$ ,  $p_2=0$ ,  $p_3=0$ ,  $p^-=p^-$ ,  $p^+=p^+$

Luego la ecuación de Dirac en este caso será:

$$\begin{pmatrix} E + m_0 c^2 & 0 & 0 & c p \\ 0 & E + m_0 c^2 & c p & 0 \\ 0 & c p & E - m_0 c^2 & 0 \\ c p & 0 & 0 & E - m_0 c^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = 0 \quad \dots \quad (1)$$

Desarrollando:

$$\begin{aligned} (E + m_0 c^2) \psi_1 + c p \psi_4 &= 0 \\ (E + m_0 c^2) \psi_2 + c p \psi_3 &= 0 \\ (E - m_0 c^2) \psi_3 + c p \psi_2 &= 0 \\ (E - m_0 c^2) \psi_4 + c p \psi_1 &= 0 \end{aligned} \quad \left. \begin{array}{l} \\ \\ \\ \end{array} \right\} \quad \dots \quad (2)$$

$$\text{donde } p = -i \hbar \frac{d}{dx}$$

Puede notarse inmediatamente que  $\psi_1$  y  $\psi_2$ , y  $\psi_3$ ,  $\psi_4$  satisfacen al mismo par de ecuaciones diferenciales, luego  $\psi_1$  y  $\psi_2$  sólo difieren en una constante, lo mismo que  $\psi_3$  y  $\psi_4$ . Por lo tanto resolvemos sólo un par (la primera y la última).

$$\begin{aligned} (E + m_0 c^2) \psi_1 + c p \psi_4 &= 0 \\ c p \psi_1 + (E - m_0 c^2) \psi_4 &= 0 \end{aligned}$$

que escritas explícitamente quedan:

$$\begin{aligned} (E + m_0 c^2) \psi_1 - i \hbar c \frac{d \psi_4}{dx} &= 0 \\ -i \hbar c \frac{d \psi_1}{dx} + (E - m_0 c^2) \psi_4 &= 0 \end{aligned} \quad \left. \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\} \quad \dots \quad (3)$$

De la 1<sup>a</sup> ecuación:

$$\psi_1 = \frac{i \hbar c}{E + m_0 c^2} \frac{d \psi_4}{dx}$$

Sustituyendo en la 2<sup>a</sup>:

$$\frac{i \hbar c^2}{E + m_0 c^2} \frac{d^2 \psi_4}{dx^2} + (E - m_0 c^2) \psi_4 = 0$$