

1 Notación:

Vectores tridimensionales con “flechita” \vec{x} , \vec{r} . Versores con “sombrecito” \hat{e}_x
Tetravectores en notación covariante (x^μ) Operadores en negrita: \mathbf{H} , \mathbf{c} , $\vec{\mathbf{A}}$, \mathbf{x}^μ

2 Ecuación de Klein Gordon

A partir de la relación de dispersión relativista para una partícula libre masiva

$$E^2 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4$$

vía el remplazo $p \rightarrow -i\hbar\nabla$, $E \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ obtenemos la “Ecuación de Klein-Gordon”:

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi = -\hbar^2 c^2 \nabla^2 \Psi + m_0^2 c^4 \Psi \quad (1)$$

Introduciendo la notación

$$\square \Psi = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi - \nabla^2 \Psi$$

(\square se lee *D'Alambertiano*) la Ec. de KG toma la forma

$$-\square \Psi = \frac{m_0^2 c^4}{\hbar^2} \Psi$$

Recordemos que una transformación de Lorentz \mathcal{L} es una transformación lineal de las coordenadas

$$(x')^\mu = \mathcal{L}^\mu(x^\nu) = \Lambda^{\mu\nu} \eta_{\nu\lambda} x^\lambda$$

que preserva la métrica de Minkowski

$$\eta_{\mu\nu} = \eta^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{L}(\eta_{\alpha\beta}) = \Lambda_\mu^\alpha \Lambda_\nu^\beta \eta_{\alpha\beta} = \eta_{\mu\nu}$$

Ante una transformación de Lorentz, un campo escalar transforma como

$$\mathcal{L}(\phi)(\mathcal{L}^{-1}(x')^\mu) = \phi(x^\mu)$$

De esta manera, el operador $\partial_\mu = (\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \nabla)$ transforma como un vector covariante:

$$\partial_\mu \rightarrow (\partial')_\mu = \eta_{\mu\alpha} (\Lambda^{-1})^{\alpha\beta} \partial_\beta \quad (2)$$

Luego, el operador D'Alambertiano transforma como un escalar de Lorentz

$$\square' \Psi = (\partial')^\mu (\partial')_\mu = (\Lambda^{-1})^{\mu\beta} \partial_\beta \eta_{\mu\gamma} (\Lambda^1)^{\gamma\rho} \partial_\rho \quad (3)$$

$$= \eta_{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu = \square \Psi \quad (4)$$

Naturalmente, queremos determinar si este planteo es consistente con los requerimientos mínimos de la formulación cuántica, y en particular identificar el significado de Ψ .

2.0.1 Densidad de corriente

De manera análoga al caso no relativista, podemos definir las denominadas densidad y corriente de probabilidad: En el caso no relativista, la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi \quad (5)$$

de donde

$$i\hbar \Psi^* \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi^* \nabla^2 \Psi$$

y, conjugando,

$$-i\hbar \Psi \frac{\partial}{\partial t} \Psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi \nabla^2 \Psi^*$$

de lo que se sigue que

$$\begin{aligned} i\hbar \left(\Psi \frac{\partial}{\partial t} \Psi^* + \Psi^* \frac{\partial}{\partial t} \Psi \right) &= -\frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*) \\ \left(\Psi \frac{\partial}{\partial t} \Psi^* + \Psi^* \frac{\partial}{\partial t} \Psi \right) &= -\frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*) \\ \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) &= -\nabla \cdot \frac{\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*}{2mi/\hbar} \end{aligned}$$

de manera que definiendo $\rho = \Psi^* \Psi$ y $\vec{j} = \hbar \frac{\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*}{2mi}$ encontramos que estas cantidades satisfacen la ecuación de continuidad:

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

Por construcción, en el caso no relativista ρ es una cantidad positiva, y \vec{j} es un campo vectorial real. Análogamente, en el caso de la Ec. de Klein-Gordon,

$$\begin{aligned}
-\Psi^* \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi &= -\hbar^2 c^2 \Psi^* \nabla^2 \Psi + m_0^2 c^4 \Psi^* \Psi \\
-\Psi \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi^* &= -\hbar^2 c^2 \Psi \nabla^2 \Psi^* + m_0^2 c^4 \Psi^* \Psi \\
(\Psi \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi^* - \Psi^* \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi) &= c^2 (\Psi \nabla^2 \Psi^* - \Psi^* \nabla^2 \Psi) \\
\frac{\partial}{\partial t} (\Psi \frac{\partial}{\partial t} \Psi^* - \Psi^* \frac{\partial}{\partial t} \Psi) &= c^2 \nabla \cdot (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)
\end{aligned}$$

Luego, definiendo

$$\rho_{KG} = \frac{\mathbf{i}\hbar}{2m_0 c^2} (\Psi \frac{\partial}{\partial t} \Psi^* - \Psi^* \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi) \quad (6)$$

$$\vec{j}_{KG} = \frac{\hbar}{2m_0 \mathbf{i}} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \quad (7)$$

vemos que nuevamente se satisface la ecuación de continuidad.

Sin embargo, si ahora reemplazamos $\Psi = A + \mathbf{i}B$ en la expresión de ρ_{KG} :

$$\begin{aligned}
\rho_{KG} &= \frac{\mathbf{i}\hbar}{2m_0 c^2} \left((A - \mathbf{i}B) \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \mathbf{i} \frac{\partial B}{\partial t} \right) - (A + \mathbf{i}B) \left(\frac{\partial A}{\partial t} - \mathbf{i} \frac{\partial B}{\partial t} \right) \right) \\
&= \frac{-\mathbf{i}\hbar}{m_0 c^2} \left(A \frac{\partial B}{\partial t} - B \frac{\partial A}{\partial t} \right) = \frac{\hbar}{m_0 c^2} \Im(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t})
\end{aligned}$$

que puede ser negativa, por lo que no admite una interpretación como una “densidad de probabilidad”.

Por otro lado, notamos que ρ_{KG} y \vec{j}_{KG} son las componentes de un tetravector contravariante

$$j^\mu \equiv (c\rho_{KG}, \vec{j}_{KG}) = \eta^{\mu\nu} j_\nu$$

donde $\eta^{\mu\nu}$ es la métrica de Minkowski. Para verlo, introducimos el operador tetra-momento $\mathbf{p}_\mu = -\frac{\mathbf{i}\hbar}{2m_0} \partial_\mu = -\frac{\mathbf{i}\hbar}{2m_0} (\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \nabla)$, de manera que

$$j_\mu = (\Psi \mathbf{p}_\mu \Psi^* - \Psi^* \mathbf{p}_\mu \Psi)$$

que transforma correctamente si Ψ es un campo escalar.

2.1 Ondas Planas

Las funciones tipo onda plana

$$\Psi(\vec{r}, t) = \mathcal{N}^{1/2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t}$$

son soluciones de la Ec. de KG si $\hbar^2 \omega^2 = \hbar^2 \vec{k}^2 + m_0^2 c^4$ y por lo tanto

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \quad (8)$$

$$E = \hbar\omega = \pm\sqrt{|\vec{p}|^2 + m_0^2c^4} \quad (9)$$

por lo que la Ec. de Klein Gordon admite soluciones de energía negativa.

La densidad de tetra-corriente para estas soluciones viene dada por

$$j^\mu = \frac{\hbar}{m_0} \Im(\psi\partial_\mu\psi^*) = \frac{\hbar}{m_0}(\omega/c, \vec{k})\mathcal{N}$$

como $E = \hbar\omega = \pm\sqrt{m_0^2c^4 + c^2p^4}$ puede ser negativo, la correspondiente densidad $\rho = \frac{j^0}{c} = \frac{\hbar\omega}{m_0c^2}\mathcal{N}$ puede ser positiva o negativa.

2.2 Ecuación de KG en un campo externo.

Podemos incluir un acoplamiento entre el campo de KG y un campo externo mediante el remplazo

$$\begin{aligned} \vec{p} &\rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \\ \vec{E} &\rightarrow E - e\Phi \end{aligned}$$

donde Φ y \vec{A} son los potenciales escalar y vector.

De esta manera,

$$\left(\mathbf{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\Phi\right)^2\Psi = (-\mathbf{i}\hbar c\nabla - e\vec{A})^2\Psi + m_0^2c^4\Psi$$

de donde

$$\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2} - 2e\hbar\mathbf{i}\Phi\frac{\partial}{\partial t} - e\hbar\mathbf{i}\frac{\partial\Phi}{\partial t} + e^2\Phi^2\right)\Psi = (-\hbar^2c^2\nabla^2 + \mathbf{i}e\hbar c\nabla\cdot\vec{A} + 2\mathbf{i}e\hbar c\vec{A}\cdot\nabla + e^2\vec{A}^2)\Psi + m_0^2c^4\Psi$$

O reagrupando,

$$\left(\hbar^2\Box + m_0^2c^4 + \mathbf{i}e\hbar c\left(\frac{1}{c}\frac{\partial\Phi}{\partial t} + \nabla\cdot\vec{A}\right) + 2\mathbf{i}e\hbar c\left(\frac{\Phi}{c}\frac{\partial}{\partial t} + \vec{A}\cdot\nabla\right) + e^2\vec{A}^2 - e^2\Phi^2\right)\Psi = 0 \quad (10)$$

2.3 Transformaciones de Gauge

Por medio del cambio de variables $\Psi = \eta e^{-\mathbf{i}\frac{\hbar}{c}\varphi}$ para $\varphi \equiv \varphi(t, \vec{x})$, obtenemos una nueva ecuación de KG para η ,

$$\left(\mathbf{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\Phi'\right)^2\eta = (-\mathbf{i}\hbar c\nabla - e\vec{A}')^2\eta + m_0^2c^4\eta$$

donde $\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} - \nabla\varphi$ y $\Phi \rightarrow \Phi' = \Phi - \frac{\partial\varphi}{\partial t}$. Los nuevos campos corresponden entonces a una transformación de gauge respecto a los originales, que no cambia

los campos eléctrico y magnético asociados. Si en particular elegimos φ tal que satisfaga la ecuación

$$\square\varphi = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial\Phi}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{A}\right)$$

los nuevos campos satisfacen la condición del gauge de Lorentz, por lo que el tercer término en 10 se anula, obteniéndose

$$\left(c^2\hbar^2\square + m_0^2c^4 + 2ie\hbar c\left(\frac{\Phi}{c}\frac{\partial}{\partial t} + \vec{A} \cdot \nabla\right) + e^2\vec{A}^2 - e^2\Phi^2\right)\eta = 0$$

2.4 Límite no relativista

Por medio de la transformación de gauge generada por $\varphi = \frac{m_0c^2}{e}t$ es posible anular el término cuártico en c^4 :

$$\left(c^2\hbar^2\square + 2ie\hbar c\left(\frac{\Phi - m_0c^2/e}{c}\frac{\partial}{\partial t} + \vec{A} \cdot \nabla\right) + e^2\vec{A}^2 + 2e\Phi m_0c^2 - e^2\Phi^2\right)\Psi = 0$$

Agrupando ahora según las potencias de c involucradas,

$$\left(\left(\frac{1}{2m_0}(-\hbar\mathbf{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A})^2 + e\Phi - \mathbf{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right) + \frac{\hbar^2}{2m_0c^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + 2\mathbf{i}\frac{e}{\hbar}\Phi\frac{\partial}{\partial t} - \frac{e^2}{\hbar^2}\Phi^2\right)\right)\Psi = 0$$

El primer término se anula idénticamente si Φ es una solución de la Ec. de Schrödinger no relativista.

Nota: Si en vez de elegir $\varphi = \frac{m_0c^2}{e}t$ proponíamos $\varphi = -\frac{m_0c^2}{e}t$, la ecuación resultante sería

$$\left(\left(\frac{1}{2m_0}(-\hbar\mathbf{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A})^2 + e\Phi + \mathbf{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right) + \frac{\hbar^2}{2m_0c^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - 2\mathbf{i}\frac{e}{\hbar}\Phi\frac{\partial}{\partial t} - \frac{e^2}{\hbar^2}\Phi^2\right)\right)\Psi = 0$$

donde el término “no relativista” puede escribirse como $\left(\frac{1}{2m_0}(-\hbar\mathbf{i}\nabla + \frac{e}{c}\vec{A})^2 + e\Phi - \mathbf{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)^*\Psi = 0$ que resulta ser la ecuación de Schrödinger “conjugada” para una partícula de carga e .

2.5 Partícula en un potencial central

Nos proponemos ahora encontrar las soluciones estacionarias (esto es, soluciones de la forma $\Psi(t, \vec{x}) = \Phi_s(\vec{x})e^{-iEt/\hbar}$) para la Ec. de Klein Gordon, en presencia de un campo eléctrico central estacionario, y en ausencia de campos magnéticos. En este caso, podemos elegir $\vec{A} = 0$ y Φ independiente del tiempo.

$$(E^2 - m_0^2c^4 + \hbar^2c^2\nabla^2 - 2Ee\Phi(r) + e^2\Phi^2(r))\Psi_s = 0 \quad (11)$$

Debido a la simetría central del campo, es natural plantear soluciones de la forma $\Psi_s(\vec{r}) = R_l(r)Y_l^m(\vec{n})$ donde $\vec{r} = r\vec{n}$ y $Y_l^m(\vec{n})$ son los esféricos armónicos. Remplazando obtenemos

$$\hbar^2 c^2 \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{l(l+1)}{r^2} + \left(\frac{E - e\Phi(r)}{\hbar c} \right)^2 - m_0^2 c^2 / \hbar^2 \right) R[r] = 0 \quad (12)$$

2.6 Soluciones libres con simetría esférica.

En este caso, asumimos que $\Phi = 0$. Si llamamos $k^2 = \left(\left(\frac{E}{\hbar c} \right)^2 - m_0^2 c^2 / \hbar^2 \right)$ la ec. ?? se reduce a

$$\hbar^2 c^2 \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right) R[r] = 0$$

Que es completamente equivalente a la correspondiente ecuación no relativista, con la única novedad de que ahora la energía de la solución es de la forma $E = \pm \sqrt{\hbar^2 k^2 + m_0^2 c^2}$ y puede tomar tanto el signo positivo como el negativo.

2.7 Partícula en un pozo de potencial.

Supongamos que ahora el potencial tiene la forma $-U\Theta(r/a)$, esto es, un pozo de potencial de radio a y “profundidad” eU . Para encontrar sus soluciones, consideramos tres casos: 1. $E > m_0 c^2$ En este caso, las soluciones del problema serán de la forma

$$R_l(r) = \begin{cases} (\cos(\phi_l) j_l(k_{ext} a) + \sin(\phi_l) n_l(k_{ext} a)) j_l(k_{int} r) & r < a \\ j_l(k_{int} a) (\cos(\phi_l) j_l(k_{ext} r) + \sin(\phi_l) n_l(k_{ext} r)) & r > a \end{cases}$$

con $k_{ext}^2 = \left(\left(\frac{E}{\hbar c} \right)^2 - m_0^2 c^2 / \hbar^2 \right)$ y $k_{int}^2 = \left(\left(\frac{E+U}{\hbar c} \right)^2 - m_0^2 c^2 / \hbar^2 \right)$ donde $n_l(u)$ es la función de esférica de Neumann.

La condición de continuidad en la derivada en $r = a$ impone que

$$\frac{k_{int} j_l'(k_{int} a)}{k_{ext} j_l(k_{int} a)} = \frac{(\cos(\phi_l) j_l'(k_{ext} a) + \sin(\phi_l) n_l'(k_{ext} a))}{(\cos(\phi_l) j_l(k_{ext} a) + \sin(\phi_l) n_l(k_{ext} a))}$$

lo que determina el valor de las fases ϕ_l . Observamos ahora que si $U > 2m$, existen valores de k_{ext} para los que $k_{int}^2 < 0$.

2. $m_0 c^2 - < E < m_0 c$. En este caso, las soluciones son de la forma

$$R_l(r) = \begin{cases} h_l(k_{ext} a) j_l(k_{int} r) & r < a \\ h_l(k_{ext} r) j_l(k_{int} a) & r > a \end{cases}$$

donde $h_l(u) = j_l(u) + \mathbf{i} n_l(u)$ es la función de Hankel de orden l . En este caso, solo las soluciones con $-\mathbf{i} k_{ext} > 0$ son admitidas. La condición de regularidad impone ahora que

$$\frac{k_{int}}{k_{ext}} = - \frac{h_l'(k_{ext} a) j_l(k_{int} a)}{h_l(k_{ext} a) j_l'(k_{int} a)}$$

Para el caso $l = 0$, $h_l = \exp(\mathbf{i}u)/(\mathbf{i}u)$ y $j_l = \sin(u)/(\mathbf{i}u)$, de manera que la condición se reduce a

$$\frac{k_{int}}{k_{ext}} = - \tan(k_{int} a)$$

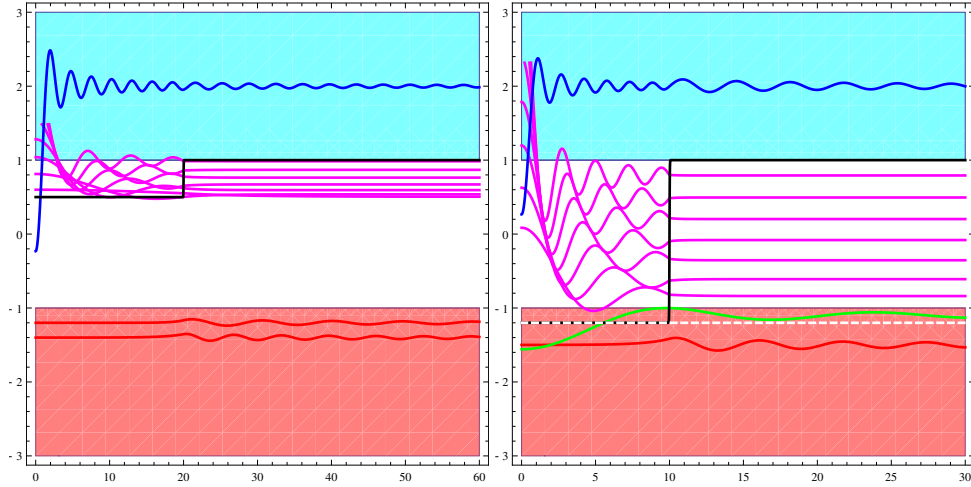


Figure 1: Espectro y funciones de onda para el pozo de potencial relativista. A la izquierda, el caso cuasi no relativista ($\frac{U}{m_0c^2} = .5$, $a = 20\frac{\hbar}{mc}$), a la derecha, el caso ultra relativista ($\frac{U}{m_0c^2} = 2.2$, $a = 10\frac{\hbar}{mc}$). En el caso “no relativista” vemos que el espectro tiene un sector de energía positiva, con un espectro análogo al del caso no relativista con un potencial atractivo, un una banda de energía negativa con uno análogo al de un potencial repulsivo. En el caso ultrarelativista, vemos que una banda dentro del sector de energías “negativas” se comporta dentro del pozo como si estuviera en presencia de un potencial atractivo, pero con una relación de dispersión decreciente.

Si despejamos k_{ext} en términos de k_{int} , obtenemos una ecuación trascendente similar a la del caso no relativista. Sin embargo encontramos una novedad: no importa cuán grande sea eU , un pozo de potencial de radio $a < \frac{\hbar}{mc}$ no es capaz de sostener estados ligados, lo que es una consecuencia del principio de incerteza, y de la relación de incerteza relativista.

3. $m_0c^2 > -E$. Las soluciones son de la misma forma que para el caso con $E > m_0c^2$, cambiando eU por $-eU$. Si $eU < 2m_0c^2$, encontramos que las soluciones tienen el comportamiento que esperamos en el caso no relativista para una partícula que encuentra una barrera de potencial de altura eU : si $E > U + m_0c^2$ k_{int} y k_{ext} son reales, mientras que si $|E| < eU + m_0c^2$, en el interior del pozo, k_{int} se vuelve imaginario, por lo que esperamos que las soluciones decaigan en su interior exponencialmente. Sin embargo, si $U > m_0c^2$, existe un intervalo de energías $U - m_0c^2 > |E| > m_0c^2$ para el que las soluciones dentro del pozo no decaen: las partículas ingresan dentro del pozo, pero su impulso decrece al aumentar $|E|$. Esto da origen a la llamada “paradoja de Klein”: para un potencial suficientemente atractivo, las partículas de energía cercanas al mínimo del potencial parecen escapar del potencial con facilidad, mientras que aquellas con energía mayor sí resultan confinadas.

2.8 Partícula en un potencial Coulombiano.

Para el caso del campo Coulombiano, $\Phi(r) = \frac{-Ze}{4\pi\epsilon_0 r}$ podemos resolver este problema en forma cerrada. La ecuación correspondiente viene dada por

$$\left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{l(l+1)}{r^2} + \left(\frac{E + \frac{e^2 Z}{4\pi\epsilon_0 r}}{\hbar c} \right)^2 - m_0^2 c^2 / \hbar^2 \right) \Psi[r] = 0 \quad (13)$$

reagrupando términos

$$- \left(-\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\lambda(\lambda+1)}{r^2} - \frac{2n\zeta}{r} + \zeta^2 \right) \Psi[r] = 0 \quad (14)$$

donde

$$(\lambda+1)\lambda = l(l+1) - (Z\alpha)^2 \rightarrow \lambda = \frac{\sqrt{(2l+1)^2 - (2Z\alpha)^2} - 1}{2}$$

$$n = \frac{\alpha Z E}{\sqrt{m_0^2 c^4 - E^2}}$$

$$\zeta^2 = \frac{m_0^2 c^4 - E^2}{\hbar^2 c^2}$$

y

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c}$$

es la constante de estructura fina. La ecuación es completamente análoga a la del caso no relativista con el remplazo $\frac{2m_0 E}{\hbar^2} \rightarrow -\zeta^2$, $\frac{2m_0 c \alpha}{\hbar} \rightarrow 2n$, $l \rightarrow \lambda$, por lo que su resolución es análoga.

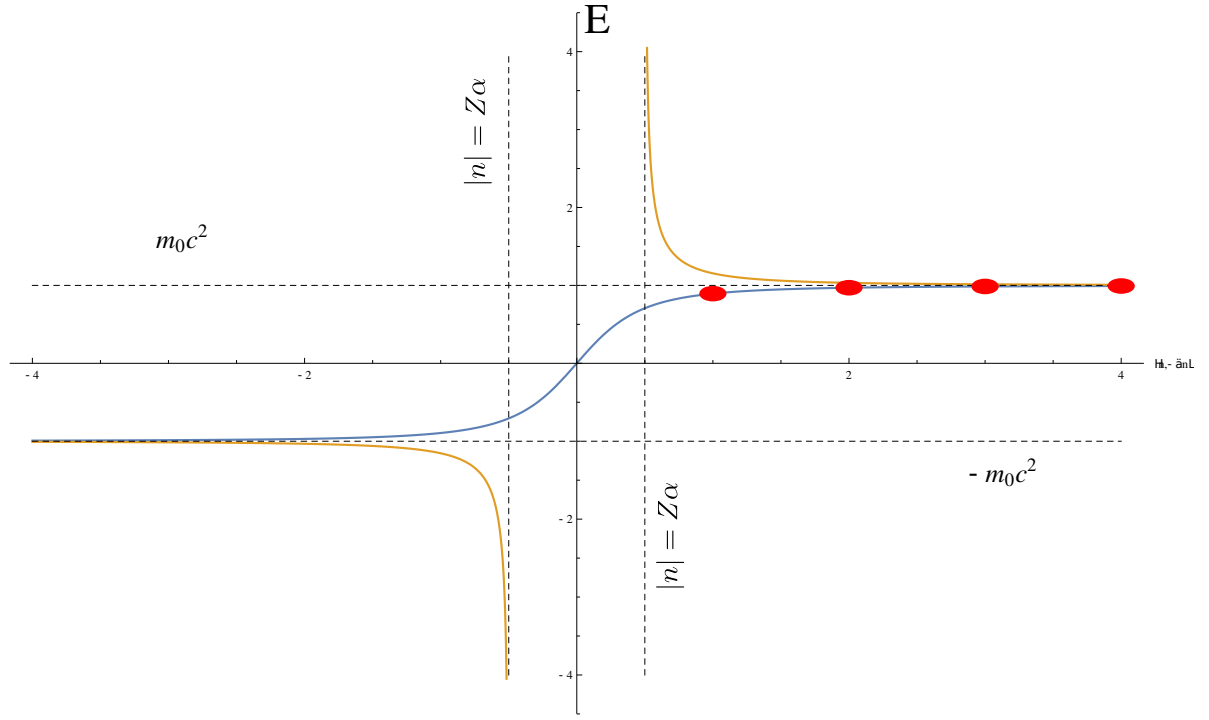
Por medio del cambio de variables $u = r\zeta$ encontramos que las soluciones son de la forma $\Psi(r) = F(\zeta r)$ con F tal que

$$\left(-\frac{1}{u} \frac{\partial^2}{\partial u^2} u + \frac{\lambda(\lambda+1)}{u^2} - \frac{2n}{u} + 1 \right) F_{n,\lambda}(u) = 0 \quad (15)$$

En función del parámetro n la energía y el factor de escala vienen dados por

$$E(n) = \frac{n}{\sqrt{n^2 + (Z\alpha)^2}} m_0 c^2$$

$$\zeta = \frac{m_0 c}{\hbar} \frac{Z\alpha}{\hbar \sqrt{n^2 + (\alpha Z)^2}}$$



Los valores admisibles para n son aquellos para los que 1. $E^2 \geq 0$ (lo que implica $n^2 \geq 0$) y 2. que la ecuación tenga soluciones acotadas en todo el espacio.

Vemos que la primera condición se satisface si n es real, que corresponden a valores de la energía entre $-m_0 c^2$ y $m_0 c^2$, o si $n^2 < -(Z\alpha)^2$, valores para los que $E^2 > m_0^2 c_0^2$ (ver figura).

Para verificar la segunda condición, debemos resolver la ecuación en ambos casos:

2.8.1 Soluciones con ($E^2 < m_0^2 c^4$) - Estados ligados

Para resolver la Ec. ??, observamos que para $u \rightarrow 0$, esta se reduce a

$$\left(\frac{1}{u} \frac{\partial^2}{\partial u^2} u - \frac{\lambda(\lambda+1)}{u^2}\right) F(u) \approx 0$$

que tiene soluciones u^λ y $u^{-\lambda-1}$. Por otro lado, para $u \rightarrow \infty$

$$\left(-\frac{1}{u} \frac{\partial^2}{\partial u^2} u + 1\right) F(u) \approx 0$$

que tiene soluciones de la forma $F_{n\lambda}(u) \approx e^{\pm u}/u$. Nos interesan las soluciones acotadas en todo el espacio, por lo que solo es admisible la solución con $-$. Teniendo en cuenta las dos situaciones límite, proponemos que la solución de la

Ec. ?? sea de la forma $F(u) = r^l e^{-u} g(2u)$. Reemplazando en ?? obtenemos

$$v g''(v) + (2\lambda + 2 - r) g'(v) + (n - 1 - \lambda) g(v) = 0 \quad (16)$$

que es la ecuación asociada de Laguerre, con parámetros $b = 2\lambda - 1$ y $a = 1 + \lambda - n$. Propongamos una solución como serie de potencias

$$g(v) = \sum_m c_m v^m$$

con $a_0 \neq 0$. Reemplazando en la ecuación ?? y agrupando potencias de igual orden obtenemos

$$\sum_m ((m(m+1) + (\lambda+1)(m+1))c_{m+1} - (m - (n - \lambda - 1))c_m) v^m = 0$$

de manera que los coeficientes satisfacen la ecuación de recurrencia

$$\frac{c_{m+1}}{c_m} = \frac{m - n - \lambda - 1}{(m+1)(m + \lambda + 1)}$$

Si $(n - \lambda - 1)$ no es un entero no negativo, la suma tiene infinitos términos que, para $m \rightarrow \infty$ se comportan como $a_m \propto 1/m!$. En tal caso, $g(v) \approx e^v$ y $F(r) \approx u^l e^{-u} e^{2u} = u^l e^u$ no está acotada. Por otro lado, si $n - \lambda - 1 = n'$ es un entero no negativo, la serie se corta y $g(v)$ resulta ser un *Polinomio asociado de Legendre* de grado $n' = n - \lambda - 1$ y orden $2\lambda + 2$. Las soluciones correspondientes son entonces de la forma

$$\psi_{n,l,m}(r, \vec{n}) = \mathcal{N}_{n',l} L_{n'}^{(2\lambda(l)+1)}(2\zeta r) (\zeta r)^{\lambda(l)} e^{-\zeta r} Y_{l,m}(\vec{n})$$

con \mathcal{N}_{lm} un factor de normalización. Reemplazando en el factor de escala y en la energía obtenemos $\zeta = 2Z\alpha \frac{m_0 c}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{(n'+\lambda+1)^2 + (2Z\alpha)^2}}$ y $E = \frac{m_0 c^2 (n'+\lambda+1)}{\sqrt{(n'+\lambda+1)^2 + (2Z\alpha)^2}}$

Expandiendo en serie de potencias de α , encontramos que

$$E = m_0 c^2 - \frac{m_0 c^2 Z^2 \alpha^2}{2(n+l+1)^2} - \frac{1}{m_0 c^2} \frac{(n+l+1) - 3l - 3/2}{8(2l+1)} \left(\frac{m_0 c^2 Z^2 \alpha^2}{2(n+l+1)^2} \right)^2 + \dots$$

donde identificamos la energía en reposo en el primer término, la energía de ligadura no relativista en el segundo, y una corrección relativista en el segundo término que depende tanto de $n+l+1$ como de l , por lo que rompe la degeneración accidental que encontramos en el caso no relativista.

Observaciones

- Las soluciones que encontramos son reales sólo si λ lo es. Si $Z\alpha > 1$, λ se vuelve imaginario para valores pequeños valores de l , lo que hace que E se vuelva compleja. Si esto ocurre, $e^{\frac{iE}{\hbar}t}$ ya no es una fase y las soluciones correspondientes ya no son estacionarias.

- Las soluciones son normalizables, y están concentradas en torno al origen. Decimos por ello que corresponden a estados ligados.
- Las soluciones tienen siempre energía positiva.
- Las correcciones relativistas rompen la degeneración accidental en la energía no relativista (que es función de $l + n'$).

Aplicaciones

- átomo π -onico.
- determinación de “escalas de energía”.

2.8.2 Soluciones con $E^2 > m_0^2 c^4$. Estados libres

Consideremos ahora el caso con $n^2 < 0$. Observamos que en este caso, la integral

$$g(v) = \frac{\Gamma(2\lambda)}{\Gamma(\lambda - n)\Gamma(\lambda + n)} \int_0^1 e^{vt} t^{\lambda-n} (1-t)^{\lambda+n} dt$$

es solución de ?? (Demostrar). Como en este caso tanto $u \rightarrow 2\zeta r$, como n son números imaginarios, la integral está definida y acotada para cualquier valor de $\lambda > -1$. De esta manera, E puede tomar cualquier valor $> m_0 c^2$ o menor que $-m_0 c^2$. Despejando n en función de la energía,

$$n = \mathbf{i}$$

Si llamamos $\nu = -\mathbf{i}n = \frac{\alpha Z E}{\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}}$ y $k = -\mathbf{i}\zeta = \frac{\sqrt{E^2 - m_0^2 c^4}}{\hbar c}$, la función radial completa tiene la forma

$$\begin{aligned} R_{\nu l}(r) &= (\mathbf{i}kr)^\lambda \frac{\Gamma(2\lambda)}{|\Gamma(\lambda - \mathbf{i}\nu)|^2} \int_0^1 e^{\mathbf{i}kr(2t-1)} t^{\lambda-\mathbf{i}\nu} (1-t)^{\lambda+\mathbf{i}\nu} dt \\ &= (\mathbf{i}kr)^\lambda \frac{\Gamma(2\lambda)}{2|\Gamma(\lambda - \mathbf{i}\nu)|^2} \int_{-1}^1 e^{\mathbf{i}kr\tau} \left(\frac{1+\tau}{2}\right)^{\lambda-\mathbf{i}\nu} \left(\frac{1-\tau}{2}\right)^{\lambda+\mathbf{i}\nu} d\tau \\ &= (\mathbf{i}kr)^\lambda \frac{\Gamma(2\lambda)}{|\Gamma(\lambda - \mathbf{i}\nu)|^2} \mathbf{i}\Im \int_0^1 e^{\mathbf{i}kr\tau} \left(\frac{1+\tau}{2}\right)^{\lambda-\mathbf{i}\nu} \left(\frac{1-\tau}{2}\right)^{\lambda+\mathbf{i}\nu} d\tau \end{aligned}$$

Para $kr \rightarrow \infty$, $R_{\nu l} \approx j_l(kr + \log(kr) \dots)$