SOLUÇÃO DE KLEIN GORDON PARA PARTÍCULA CARREGADA SEM SPIN

Aluna: Ana Elisa D. Barioni
Professor: Marco Aurélio P. Lima

PROBLEMA 8.7 SAKURAI

This problem is taken from *Quantum Mechanics II: A Second Course in Quantum Theory*, 2nd ed., by Rubin H. Landau (1996). A spinless electron is bound by the Coulomb potential $V(r) = -Ze^2/r$ in a stationary state of total energy $E \leq m$. You can incorporate this interaction into the Klein-Gordon equation by using the covariant derivative with $V = -e\Phi$ and $\mathbf{A} = 0$. Work with the upper component of the wave function.

(a) Assume that the radial and angular parts of the equation separate and that the wave function can be written as $e^{-iEt}[u_l(kr)/r]Y_{lm}(\theta,\phi)$. Show that the radial equation becomes

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \left[\frac{2EZ\alpha}{\gamma\rho} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+1)-(Z\alpha)^2}{\rho^2}\right]u_l(\rho) = 0,$$

where $\alpha = e^2$, $\gamma^2 = 4(m^2 - E^2)$, and $\rho = kr$.

PROBLEMA 8.7 SAKURAI

(b) Assume that this equation has a solution of the usual form of a power series times the $\rho \to \infty$ and $\rho \to 0$ solutions, that is,

$$u_l(\rho) = \rho^k (1 + c_1 \rho + c_2 \rho^2 + \cdots) e^{-\rho/2},$$

and show that

$$k = k_\pm = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2}$$

and that only for k_+ is the expectation value of the kinetic energy finite and that this solution has a nonrelativistic limit that agrees with the solution found for the Schrödinger equation.

(c) Determine the recurrence relation among the c_i's for this to be a solution of the Klein-Gordon equation, and show that unless the power series terminates, the will function will have an incorrect asymptotic form.

(d) In the case where the series terminates, show that the energy eigenvalue for the k_+ solution is

$$E = \frac{m}{\left(1 + (Z\alpha)^2 \left[n - l - \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2}\right]^{-2}\right)^{1/2}},$$

where n is the principal quantum number.

OUTLINE DA RESOLUÇÃO
Item a)

- Escrevemos a equação de Klein-Gordon

$$\left[D^{\mu}D_{\mu} + m^2\right]\Psi(\vec{x},t) = 0$$

- Usando a definição $D^{\mu} = \partial_{\mu} - ieA_{\mu}$ e $\vec{A} = 0$, temos

$$\left[\left(\partial_t - \frac{iZe^2}{r}\right)^2 - \nabla^2 + m^2\right]\Psi(\vec{x},t) = 0$$

- Substituimos a função de onda sugerida no enunciado
- Calculamos o laplaciano (em termos do operador momento) e a derivada temporal

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\partial_r(r^2\partial_r) - \frac{1}{r^2}\vec{L}^2$$

- E temos

$$\left[\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)^2 - m^2 \ - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\Psi(\vec{x},t) + \frac{u''(r)}{r}e^{-iEt}Y_{lm} = 0$$

OUTLINE DA RESOLUÇÃO
Item a)

- Usamos as definições do enunciado $\alpha = e^2$, $\gamma^2 = 4(m^2 - E^2)$ e $\rho = \gamma r$

$$\left[-\frac{\gamma^2}{4} + 2\frac{ZE\alpha}{\frac{\rho}{\gamma}} + \left(\frac{Z\alpha}{\frac{\rho}{\gamma}}\right)^2 - m^2 - \frac{l(l+1)}{\left(\frac{\rho}{\gamma}\right)^2}\right]\frac{u(\rho)}{\frac{\rho}{\gamma}} + \frac{\gamma^3}{\rho}u''(r) = 0$$

- Depois basta multiplicar a equação inteira por $\frac{\rho}{\gamma^3}$

$$\frac{d^2u_\ell(\rho)}{d\rho^2} + \left[\frac{2EZ\alpha}{\gamma\rho} - \frac{1}{4} - \frac{\ell(\ell+1) - (Z\alpha)^2}{\rho^2}\right]u_\ell(\rho) = 0$$

OUTLINE DA RESOLUÇÃO
Item b)

- Se $\rho \to \infty$ a equação de Klein Gordon fica

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} - \frac{1}{4}u = 0$$

- A solução é dada por $u = Ae^{\frac{\rho}{2}} + Be^{-\frac{\rho}{2}}$
- Porém se $\rho \to \infty$ o primeiro termo explode, logo só podemos ter o segundo termo
- Escrevemos então, seguindo a sugestão do enunciado, u como uma série multiplicando a solução no infinito, de forma que

$$u(\rho) = e^{-\frac{\rho}{2}} \sum_{j=0}^{\infty} C_j \, \rho^{j+k}$$

OUTLINE DA RESOLUÇÃO
Item b)

- Substituindo na equação radial do item a) e obtemos

$$[k(k-1) - l(l+1) + (Z\alpha)^2]C_0\rho^{k-2}$$
$$+\sum_{j=0}^{\infty}\left\{\left[-(j+k) + 2\frac{ZE\alpha}{\gamma}\right]C_j + [(j+k)(j+k+1) - l(l+1) + (Z\alpha)^2]C_{j+1}\right\}\rho^{j+k-1} = 0$$

- Fazendo o primeiro termo nulo, obtemos a relação

$$k^2 - k - l(l+1) + (Z\alpha)^2 = 0$$

- De onde obtemos

$$k = \frac{1 \pm \sqrt{1+4[l(l+1)-(Z\alpha)^2]}}{2} = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2}$$

OUTLINE DA RESOLUÇÃO

Item b)

$$u(\rho) = e^{-\frac{\rho}{2}} \sum_{j=0}^{\infty} C_j\, \rho^{j+k}$$

$$k = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2}$$

- Note que para $\rho \to 0$ a solução se aproxima de $\frac{u}{r} = r^{k-1}$. Logo, apenas o k com sinal positivo serve pois no caso do sinal negativo, como $Z\alpha \ll 1$, o caso $l = 0$ nos leva a $k \to 0$ e a solução então diverge na origem.
- Por outro lado, o k com sinal positivo nos leva a $k \to l + 1$ e $\frac{u}{r} = r^l$, o que concorda com a solução da equação de Schrodinger. Logo, esse é o limite não relativístico da solução que obtivemos.
- Considere ainda k com sinal positivo, mas com $l = 0$, temos que o termo dentro da raiz é menor do que $\left(\frac{1}{2}\right)^2$, o que nos leva a um $k < 1$ e portanto uma solução radial com expoente negativo. Porém, podemos levar em conta que o termo físico que devemos analisar é a probabilidade $|u(r)|^2 dr = |R(r)|^2 dr$, onde $R(r)$ é a parte radial da função de onda. A probabilidade se comporta bem na origem e a condição de contorno $u(0) = 0$ é satsfeita.

OUTLINE DA RESOLUÇÃO
Item c)

- Note que usamos apenas o primeiro termo da série na equação de Klein-Gordon. Vamos agora obter a relação de recorrência.
- Fazendo o termo dentro do somatório nulo, temos

$$C_{j+1} = \frac{[j+k]-2\frac{ZE\alpha}{\gamma}}{(j+k)(j+k+1)-l(l+1)+(Z\alpha)^2} C_j$$

- Se a série não terminar, conforme $j \rightarrow \infty$ k e $l(l+1) + (Z\alpha)^2$ se tornam desprezíveis e temos
- $C_{j+1} = \frac{j}{j^2} C_j = \frac{1}{j} C_j$
- Essa é a relação de recorrência da série exponencial, logo temos uma solução que tende à exponencial e portanto é divergente. Isso não concorda com o esperado.

OUTLINE DA RESOLUÇÃO
Item d)

- Assim, a série deve terminar para algum $j = N$. Se assim for,
- $C_{N+1} = 0$, o que implica que $\mathrm{N} + k - 2\frac{ZE\alpha}{\gamma} = 0$
- Seguindo o que já fizemos no capítulo 3, definimos o número quântico principal como $n = N + l + 1$
- Logo

$$n - \mathrm{l} - 1 + k = 2\frac{ZE\alpha}{2\sqrt{m^2 - E^2}}$$

$$[(Z\alpha)^2 + (n - \mathrm{l} - 1 + k)^2]E^2 = (n - \mathrm{l} - 1 + k)^2 m^2$$

- Lembramos que

$$k = \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2}$$

OUTLINE DA RESOLUÇÃO

Item d)

$$[(Z\alpha)^2+(n-\mathrm{l}-1+k)^2]E^2=(n-\mathrm{l}-1+k)^2m^2$$

- Lembramos que

$$k=\frac{1}{2}+\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-(Z\alpha)^2}$$

- Finalmente, isolando E obtemos

$$E=\frac{m}{\left[1+\frac{(Z\alpha)^2}{n-\mathrm{l}-\frac{1}{2}+\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-(Z\alpha)^2}}\right]^{\frac{1}{2}}}$$

OUTLINE DA RESOLUÇÃO

Item e)

$$E = \frac{m}{\left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n - l - \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2}}\right]^{\frac{1}{2}}}$$

- Expandindo em série usando o WolframAlpha para fazer os cálculos, obtemos
- $E = m - \frac{m}{2n^2}(Z\alpha)^2 + \frac{m}{2n^2}\left[\frac{3}{4n^2} - \frac{1}{n\left(l+\frac{1}{2}\right)}\right](Z\alpha)^4 + O((Z\alpha)^6)$

energia de repouso

Fórmula de Bohr

Correção relativística

- Precisão de $1{,}5\%$ em relação aos dados experimentais. Parece muito bom, mas não fica dentro da barra de incerteza experimental, fazendo com que a equação de Klein Gordon perdesse seu crédito diante da comunidade científica.

FELIZ ANO NOVO E OBRIGADA POR ESTARMOS JUNTOS EM 2020

- Modern Quantum Mechanics – Sakurai & Jim Napilotano, 2nd ed

- Quantum Mechanics – L.I. Schiff,3 rd ed