§ Conjugação da carga : C

A teoria dos buracos (holes) no "mar de Dirac" implica na existência de elétrons e pósitrons, satisfazendo a equação de Dirac, com a mesma massa e cargas opostas. A imagem pictórica de um buraco no "mar das energias negativas" significa a ausência de um estado de energia $E<0$, e a ausência de uma carga $e<0$. A falta deste estado no mar de Dirac é equivalente à presença de uma partícula de energia $E>0$, e carga $-e>0$.

A equação de Dirac deverá admitir esta nova simetria:

$$\psi \to \psi^c \quad , \text{ tal que}$$

$$\left(i\hbar \not\partial - \frac{e}{c} \not A - mc\right)\psi = 0 \ , \qquad (1)$$

$$\left(i\hbar \not\partial + \frac{e}{c} \not A - mc\right)\psi^c = 0 \ . \qquad (2)$$

Precisamos construir ψ^c, onde foi trocado o sinal da carga. Para trocar o sinal de (e/c), notando que A_μ é real, tomamos c.c. de (1):

$$\left[-\left(i\hbar\partial_\mu + \frac{e}{c} A_\mu\right)\gamma^{\mu *} - mc\right]\psi^* = 0$$

Precisamos de uma transformação (matriz) que troque o sinal de $\gamma^{\mu *}$. Seja $C\gamma^0$ a tal transformação:

$$(C\gamma^0)\,\gamma^{\mu *}\,(C\gamma^0)^{-1} = -\gamma^\mu$$

equivalentemente, temos as relações:

$$C\gamma^0(\gamma^\mu)^*\gamma^0 C^{-1} = -\gamma^\mu$$

$$= C(\gamma^\mu)^T C^{-1} = -\gamma^\mu$$

ou

$$C(\gamma^\mu)^T = -\gamma^\mu C .$$

Também: $C^{-1}\gamma^\mu C = -(\gamma^\mu)^T$

Observando as propriedades das matrizes γ^μ, temos que C comuta com (γ^1, γ^3) e anticomuta com (γ^0, γ^2). Uma realização possível de C, nesta representação é

$$C = i\gamma^2\gamma^0 , \quad \text{com}$$

$C^{-1} = C^\dagger = C^T = -C$. Com γ^5 comuta:

$$C\gamma^5 = i\,C\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 C = \gamma^5 C$$

A equação de Dirac, para o estado com a carga conjugada, fica

$$0 = (C\gamma^0)\left[-(i\hbar\partial_\mu + \frac{e}{c}A_\mu)\gamma^{\mu *} - mc\right](C\gamma^0)^{-1}(C\gamma^0\psi^*)$$

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

com

$$\psi^c = C\gamma^0\psi^* = e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2t}\begin{pmatrix} & & & 1 \\ & & -1 & \\ & -1 & & \\ 1 & & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$\Rightarrow \psi^c = e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2t}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

O estado conjugado ψ^c, está associado à energia positiva e spin para cima.

II Para o caso mais geral, usamos os projetores:

$$\Lambda_{\pm}(p) = \frac{1}{2mc}(\pm \not{p} + mc)$$

$$P(n) = \frac{1+\gamma^5 \not{n}}{2}$$

Seja então um estado genérico:

$$\psi = \left(\frac{\varepsilon\not{p}+mc}{2mc}\right)\left(\frac{1+\gamma^5\not{n}}{2}\right)\psi,$$

com $\varepsilon = \pm$, sinal da energia (e.d.p).
Calcular o estado conjugado:

$$\psi^c = C\gamma^0\left(\frac{\varepsilon\not{p}+mc}{2mc}\right)^*\left(\frac{1+\gamma^5\not{n}}{2}\right)^*\psi^*$$

Usamos agoras as seguintes propriedades:

i) $\gamma^{5*} = \gamma^5$, $\gamma^0\gamma^5 = -\gamma^5\gamma^0$

ii) $\gamma^0(\gamma^\mu)^* = (\gamma^\mu)^T\gamma^0$

$$\Rightarrow \psi^c = C\left(\frac{\varepsilon \not{p}^T + mc}{2mc}\right)\left(\frac{1-\gamma^5 \not{\alpha}^T}{2}\right)\gamma^0\psi^*$$

iii) finalmente, lembramos que

$$[C, \gamma^5] = 0 , \quad C(\gamma^\mu)^T = -\gamma^\mu C$$

$$\psi^c = \left(\frac{-\varepsilon \not{p} + mc}{2mc}\right)\left(\frac{1+\gamma^5 \not{\alpha}}{2}\right)C\gamma^0\psi^*$$

$$= \left(\frac{-\varepsilon \not{p} + mc}{2mc}\right)\left(\frac{1+\gamma^5 \not{\alpha}}{2}\right)\psi^c$$

Assim, C muda o sinal do quadrivector p (em particular de $p_0 = E/c$). Lembremos que o projetor do spin, projeta estados de spin diferentes, dependendo do setor da energia. Assim, o spin está invertido no estado conjugado.

A simetria completa da equação de Dirac é obtida pelas operações seguintes:

A) tomamos o complexo conjugado (c.c.) de ψ

$$\psi \rightarrow \psi^* ;$$

B) multiplicamos por $C\gamma^0$. Isto muda o sinal de e (carga) na equação de Dirac;

c) mudamos o potencial eletromagnético

$$A_\mu \longrightarrow -A_\mu$$

e voltamos para a eq. de Dirac original

ψ^c é a função de onda associada a um pósitron

$$A) + B) + C) \Rightarrow \left(i\hbar \not{\partial} - \frac{e}{c}\not{A} - mc\right)\psi_c = 0$$

"Para todo estado fisicamente possível de um elétron num potencial A_μ, temos um estado fisicamente possível de um pósitron num potencial $-A_\mu$".

A dinâmica de um pósitron num campo $-A_\mu$ é exatamente a mesma que a de um elétron num campo A_μ. As soluções com energia positiva para o pósitron se correspondem com as soluções de energia negativa do elétron (e vice-versa). Com a teoria dos buracos, temos passado para uma teoria de muitas partículas, que descreve partículas e anti-partículas de diferentes cargas e spins. Portanto, não podemos mais manter a interpretação probabilística da função de onda, requerida numa teoria de uma partícula, já que agora o número de partículas não é conservado (temos, por exemplo, processos de criação e aniquilação de pares partícula - antipartícula). A saída para este problema, é adotar uma teoria de campos com a presença de partículas e antipartículas tratadas de maneira equivalente. Dado este resultado, não podemos mais rejeitar equações, como a de Klein-Gordon, por não possuir uma interpretação probabilística como na teoria de Schrödinger de uma partícula.

§ O Átomo de Hidrogênio na Teoria de Dirac

Procuramos os estados ligados para um potencial central, tipo Coulomb. A eq. de Dirac deste problema é

$$\mathcal{H}\psi = \left[c(\vec{\alpha}\cdot\vec{p}) + mc^2\beta + V(r)\right]\psi = E\psi,$$

com

$$V(r) = -\frac{Zk}{r}$$

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} = \vec{L} + \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma} = \vec{r}\times\vec{p} + \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$$

comuta com o Hamiltoniano (ver Lista de exercícios). Podemos portanto, construir autofunções simultaneas de $(\mathcal{H}, J^2, J_z)$. O operador spin tem que ser pensado como

$$\vec{\Sigma} = I_{2\times2}\otimes\vec{\sigma} = \left(\begin{array}{c|c} \vec{\sigma} & 0 \\ \hline 0 & \vec{\sigma} \end{array}\right),$$

com o momentum angular total como:

$$\vec{J} = (\vec{r} \times \vec{p}) I + \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma}$$

Escrevemos a solução na forma de bi-spinores

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \cdots \\ \chi \end{pmatrix}$$

φ e χ são autofunções de (J^2, J_z, L^2, S^2), para $S = \frac{1}{2}$. O acoplamento do momentum angular fornece os valores do j total:

$$D^{(\ell)} \times D^{(1/2)} = D^{(\ell+\frac{1}{2})} + D^{(\ell-\frac{1}{2})}$$

, para $\ell > 0$,

isto é, $j = \ell \pm \frac{1}{2}$. As autofunções para este problema foram construídas no primeiro semestre.

A matriz dos coeficientes de Clebsch-Gordan tem a forma:

$$\begin{array}{c} \mathcal{Y}^{\ell+\frac{1}{2}, m}_{\ell, 1/2} \\ \mathcal{Y}^{\ell-1/2, m}_{\ell, 1/2} \\ \\ \end{array} \begin{array}{c} \begin{pmatrix} \sqrt{\dfrac{\ell+m+1/2}{2\ell+1}} & \sqrt{\dfrac{\ell-m+1/2}{2\ell+1}} \\ -\sqrt{\dfrac{\ell-m+1/2}{2\ell+1}} & \sqrt{\dfrac{\ell+m+1/2}{2\ell+1}} \end{pmatrix} \\ \begin{array}{cc} Y_\ell^{m-\frac{1}{2}} \chi_+ & \quad Y_\ell^{m+\frac{1}{2}} \chi_- \end{array} \end{array} ,$$

ou seja:

$$\mathcal{Y}^{j=\ell+\frac{1}{2}, m}_{\ell, 1/2} = \sqrt{\frac{\ell+m+1/2}{2\ell+1}}\, \chi_+ Y_\ell^{m-\frac{1}{2}} + \sqrt{\frac{\ell-m+1/2}{2\ell+1}}\, \chi_- Y_\ell^{m+1/2}$$

$$\mathcal{Y}_{\ell,1/2}^{j=\ell+\frac{1}{2},m} = \frac{1}{\sqrt{2\ell+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{\ell+m+1/2}\; Y_\ell^{m-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\ell-m+1/2}\; Y_\ell^{m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

e

$$\mathcal{Y}_{\ell,1/2}^{j=\ell-\frac{1}{2},m} = \frac{1}{\sqrt{2\ell+1}} \begin{pmatrix} -\sqrt{\ell-m+1/2}\; Y_\ell^{m-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\ell+m+1/2}\; Y_\ell^{m+1/2} \end{pmatrix}$$

Ambas soluções satisfazem as equações de autovalores

$$J^2\, \mathcal{Y}_{\ell s}^{jm} = j(j+1)\hbar^2\, \mathcal{Y}_{\ell s}^{jm}$$

$$(\vec{L}\cdot\vec{\sigma})\, \mathcal{Y}_{\ell s}^{jm} = [j(j+1) - \ell(\ell+1) - 3/4]\hbar\, \mathcal{Y}_{\ell s}^{jm}$$
$$= -(1+\varkappa)\hbar\, \mathcal{Y}_{\ell}^{jm},$$

com

$$\varkappa = \begin{cases} -(\ell+1), & \text{para } j = \ell + \frac{1}{2}, = -(j+1/2) \\ +\ell, & \text{para } j = \ell - \frac{1}{2}, = (j+1/2) \end{cases}$$

Para um dado j, os estados diferem em $\Delta\ell = \pm 1$, e portanto tem paridade diferente. Também eles estarão ligados por um operador escalar <u>ímpar</u>.

Como $|\Delta l|=1$, este operador será uma combinação linear de $Y^m_1(\theta,\varphi)$. Portanto será proporcional à coordenada $\vec{r}$. O único operador deste tipo (pseudo-escalar) é

$$\frac{(\vec{\sigma}\cdot\vec{r})}{r} = \vec{\sigma}\cdot\hat{r}$$

Temos:

$$\mathcal{Y}^{j=l+\frac{1}{2},m}_{ls} = \left(\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{r}}{r}\right)\mathcal{Y}^{j=l'-\frac{1}{2},m}_{l's}$$

$$= (\vec{\sigma}\cdot\hat{r})\,\mathcal{Y}^{j=l'-\frac{1}{2},m}_{l's}$$

e também:

$$(\vec{\sigma}\cdot\hat{r})\,\mathcal{Y}^{j=l+\frac{1}{2},m}_{ls} = \underbrace{(\vec{\sigma}\cdot\hat{r})^2}_{1}\,\mathcal{Y}^{j=l'-\frac{1}{2},m}_{l's}$$

$$j=l+\tfrac{1}{2}=l'-\tfrac{1}{2} \qquad = \mathcal{Y}^{j=l'-\frac{1}{2},m}_{l's}$$

A solução geral para o problema de forças centrais, para um dado (j,m), tem a forma:

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

$$\psi_{jm} = \begin{pmatrix} \dfrac{i\,G_j^{(+)}}{r}\mathcal{Y}_l^{l+\frac{1}{2},m} + i\dfrac{G_j^{(-)}}{r}\mathcal{Y}_{l'}^{l'-\frac{1}{2},m} \\ \hdashline \dfrac{F_j^{(+)}}{r}\mathcal{Y}_l^{l+\frac{1}{2},m} + \dfrac{F_j^{(-)}}{r}\mathcal{Y}_{l'}^{l'-\frac{1}{2},m} \end{pmatrix},$$

onde a forma dos coeficientes é escolhida por conveniência. Finalmente notamos que o problema de forças centrais também conserva a paridade. Portanto as autofunções podem ser construídas como tendo paridade definida. As funções esféricas (generalizadas) de Ψ_{jm} tem paridades diferentes. A paridade está associada à inversão de coordenadas

$$t' = t, \quad \vec{x}' = -\vec{x},$$

que é um caso particular de uma transformação de Lorentz. No espaço dos spinores, a simetria de inversão está associada à transformação:

$$\psi'(x') = \beta\psi(x) = \pm\psi(x)$$

Para o caso livre em repouso, vemos que a paridade está invertida para partículas e antipartículas

$$\beta\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\varphi(x')\\ \hline -\chi(x')\end{pmatrix} = \pm\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}$$

a) Paridade (+):

$$\varphi(-x) = \varphi(x), \quad \chi(-x) = -\chi(x)$$

b) Paridade (-):

$$\varphi(-x) = -\varphi(x), \quad \chi(-x) = \chi(x)$$

Assim as soluções de paridade definida, têm a forma:

$$\psi^{(p)}_{Jm} = \begin{pmatrix} i\dfrac{G(r)}{r}\, \mathcal{Y}_{\ell}^{jm} \\ \hdashline \dfrac{F(r)}{r}(\vec{\sigma}\cdot\hat{r})\, \mathcal{Y}_{\ell}^{jm} \end{pmatrix}, \qquad (*)$$

onde a paridade é $p = (-1)^{\ell}$. Procuramos agora a equação radial para uma solução do tipo $(*)$

$$\left\{ c \begin{pmatrix} 0 & (\vec{\sigma}\cdot\vec{p}) \\ \hdashline (\vec{\sigma}\cdot\vec{p}) & 0 \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} I & 0 \\ \hdashline 0 & -I \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} \tilde{\varphi} \\ \hdashline \tilde{\chi} \end{pmatrix} =$$

$$= [E - V(r)] \begin{pmatrix} \tilde{\varphi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix},$$

e em componentes spinoriais:

$$\begin{cases} c\,(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\tilde{\chi} + mc^2\tilde{\varphi} = [E - V(r)]\,\tilde{\varphi} \\ c\,(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\tilde{\varphi} - mc^2\tilde{\chi} = [E - V(r)]\,\tilde{\chi} \end{cases} \qquad (**)$$

Precisamos calcular termos do tipo:

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\,\frac{f(r)}{r}\,\varphi = \frac{(\vec{\sigma}\cdot\vec{r})}{r^2}\left[(\vec{\sigma}\cdot\vec{r})(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\right]\frac{f(r)}{r}\,\varphi$$

porque $(\vec{\sigma}\cdot\hat{r})^2 = 1$. Usamos identidade:

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B}) = \vec{A}\cdot\vec{B} + i\,\vec{\sigma}\cdot(\vec{A}\times\vec{B})$$

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{r})(\vec{\sigma}\cdot\vec{p}) = \vec{r}\cdot\vec{p} + i\,\vec{\sigma}\cdot(\vec{r}\times\vec{p})$$
$$= \vec{r}\cdot\vec{p} + i(\vec{\sigma}\cdot\vec{L})$$

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\,\frac{f(r)}{r}\varphi = \frac{(\vec{\sigma}\cdot\vec{r})}{r^2}\left[\vec{r}\cdot(-i\hbar\nabla) + i(\vec{\sigma}\cdot\vec{L})\right]\cdot$$
$$\cdot\,\frac{f(r)}{r}\varphi$$

$$= \frac{(\vec{\sigma}\cdot\vec{r})}{r^2}\left[-i\hbar r\frac{d}{dr}\left(\frac{f(r)}{r}\right) - i(1+\varkappa)\hbar\frac{f(r)}{r}\right]\varphi$$

$$= \left[-i\hbar\frac{d}{dr}\left(\frac{f(r)}{r}\right) - i(1+\varkappa)\hbar\frac{f(r)}{r^2}\right]\left(\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{r}}{r}\right)\varphi$$

com
$$\left(\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{r}}{r}\right)\varphi = \chi \,,\quad \left(\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{r}}{r}\right)\chi = \varphi$$

Usando $\tilde{\varphi} = i\,\frac{G(r)}{r}\varphi$, $\tilde{\chi} = \frac{F(r)}{r}(\vec{\sigma}\cdot\hat{r})\varphi$

As equações (**) ficam:

$$c\left[-i\hbar\frac{d}{dr}\left(\frac{F(r)}{r}\right) - i(1+\bar{\varkappa})\hbar\frac{F(r)}{r^2}\right]\varphi + mc^2\,\frac{iG(r)}{r}\varphi =$$
$$= \left[E - V(r)\right]i\,\frac{G(r)}{r}\varphi$$

e a outra:

$$c\left[-i\hbar\frac{d}{dr}\left(\frac{iG(r)}{r}\right)-i(1+\varkappa)\hbar\frac{iG(r)}{r^2}\right]\chi-mc^2\frac{F(r)}{r}\chi=$$

$$=\left[E-V(r)\right]\frac{F(r)}{r}\chi\,,$$

$$\boxed{\begin{array}{l}\varkappa=(j+1/2)\\ \bar{\varkappa}=-(j+1/2)=-\varkappa\end{array}}$$

eliminando os spinores, e notando que

$$\frac{d}{dr}\left(\frac{f(r)}{r}\right)=\frac{1}{r}\frac{df(r)}{dr}-\frac{1}{r^2}f(r)\,,$$

obtemos:

$$(\diamond)\qquad\boxed{\begin{aligned}\left[E-mc^2-V(r)\right]G(r)&=-c\hbar\frac{dF(r)}{dr}+\frac{\varkappa c}{r}F(r)\hbar\\ \left[E+mc^2-V(r)\right]F(r)&=c\hbar\frac{dG(r)}{dr}+\frac{\varkappa c\hbar}{r}G(r)\end{aligned}}$$

No caso do átomo de hidrogênio:

$$V(r)=-\frac{Ze^2}{r}\,.$$

Os estados ligados de $(\diamond)$ são obtidos por métodos convencionais para equações diferenciais, impondo condições de contorno apropriadas:

a) regulares em $r=0$,

b) $F(r), G(r)\longrightarrow 0$, $r\to\infty$, suficientemente rápido, para termos estados ligados.

A solução para os estados ligados é

$$E_n = mc^2 \left[1 + \frac{Z^2\alpha^2}{\left(n-(j+\frac{1}{2})+\sqrt{(j+\frac{1}{2})^2 - Z^2\alpha^2}\,\right)^2} \right]^{-1/2}$$

número quântico principal : $n = 1, 2, \ldots, \infty$

momentum angular:

$$0 \leq j \leq n - \frac{1}{2} \quad ,$$

com a restrição $0 \leq l \leq n-1$ (como no átomo de hidrogênio não-relativístico). Aparece, na relação acima a constante α

• Def: Constante de estrutura fina

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137.3}$$

Como para o elétron, $\alpha \ll 1$, podemos expandir a fórmula acima em série de α:

$$E_n \approx mc^2 \left\{ 1 - \frac{1}{2}\frac{Z^2\alpha^2}{n^2}\left[1 + \frac{Z^2\alpha^2}{n}\left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right] + O(Z^6\alpha^6) \right\}$$

A correção relativística remove a degenerescência em j dos níveis do átomo de hidrogênio (perturbação sobre o acoplamento spin-órbita)

[redacted]

§ Detalhes da transformação de F-W com campos

Para comodidade, nesta seção escrevemos $c=1$, $\hbar=1$
~~O~~ Hamiltoniano de Dirac com campo é escrito como

$$\mathcal{H} = \vec{\alpha}\cdot(\vec{p}-e\vec{A}) + \beta m + e\phi$$

$$= \beta m + \Theta + \mathcal{E}$$

Θ : operador ímpar ("odd") , $\Theta \equiv \vec{\alpha}\,(\vec{p}-e\vec{A})$,
$\mathcal{E}$: operador par ("even") , $\mathcal{E} = e\phi$.

$\Theta \equiv \vec{\alpha}\cdot(\vec{p}-e\vec{A})$ é o operador que acopla componentes 'grandes' e 'pequenas'. Queremos, através de sucessivas TFW, eliminar os termos ímpares. Isto não pode ser feito em forma fechada, como no caso da partícula livre. Procedemos então a guardar até termos em $\frac{1}{m^3}$ para energia cinética e até $\frac{1}{m^2}$ para termos que envolvem os campos.

Em geral, a transformação escrita como e^{iS}, depende do tempo:

$$\psi' = e^{iS}\psi$$

$$i\,\partial_t \psi' = e^{iS}(\mathcal{H}-\dot{S})\,e^{-iS}\psi = \mathcal{H}'\psi'$$

Para o Hamiltoniano transformado:

$$\mathcal{H}' = e^{iS}(\mathcal{H}-\dot{S})\,e^{-iS}$$

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H} + i\,[S,\mathcal{H}] - \frac{1}{2}[S,[S,\mathcal{H}]] - \frac{i}{6}[S,[S,[S,\mathcal{H}]]]$$
$$+ \frac{1}{24}[S,[S,[S,[S,m\beta]]]] -$$
$$- \dot{S} - \frac{i}{2}[S,\dot{S}] + \frac{1}{6}[S,[S,\dot{S}]]$$

escrito até a ordem desejada. Na ordem mais baixa e lembrando o caso livre, propomos

$$S = -i\beta \frac{\Theta}{2m} .$$

Precisamos calcular os comutadores na ordem dada. Temos.

$$[\beta\Theta, \beta] = -2\Theta \quad , \quad [\beta\Theta, \mathcal{E}] = \beta\,[\Theta, \mathcal{E}]$$

$$[\beta\Theta, \Theta] = 2\beta\,\Theta^2 \quad , \quad [\beta\Theta, \beta\Theta^2] = -2\Theta^3$$

$$[\beta\Theta, \beta[\Theta,\mathcal{E}]] = -[\Theta, [\Theta, \mathcal{E}]] \, , \; [\beta\Theta, \Theta^3] = 2\beta\Theta^4$$

Assim:

$$i\,[S, \mathcal{H}] = \frac{1}{2m}[\beta\Theta, \; \beta m + \Theta + \mathcal{E}]$$

$$= \frac{1}{2m}\left\{-2m\Theta + 2\beta\Theta^2 + \beta\,[\Theta, \mathcal{E}]\right\}$$

$$= -\Theta + \frac{\beta}{m}\Theta^2 + \frac{\beta}{2m}[\Theta, \mathcal{E}] .$$

Depois:

$$\frac{i^2}{2}\left[S, [S, \mathcal{H}]\right] = \frac{i}{2}\left[S, i\,[S, \mathcal{H}]\right]$$

$$= \frac{1}{4m}\left[\beta\Theta, \; -\Theta + \frac{\beta}{m}\Theta^2 + \frac{\beta}{2m}[\Theta, \mathcal{E}]\right]$$

$$= \frac{1}{4m}\left\{-2\beta\Theta^2 - \frac{2}{m}\Theta^3 - \frac{1}{2m}[\Theta, [\Theta, \mathcal{E}]]\right\}$$

$$= -\frac{\beta}{2m}\Theta^2 - \frac{\Theta^3}{2m^2} - \frac{1}{8m^2}[\Theta, [\Theta, \mathcal{E}]] .$$

Agora:

$$\frac{i^3}{3!}[S,[S,[S,\mathcal{H}]]] = \frac{i}{3}\left[S, \frac{i^2}{2}[S,[S,\mathcal{H}]]\right]$$

$$= \frac{1}{6m}\left[\beta\Theta, -\frac{\beta}{2m}\Theta^2 - \frac{1}{2m^2}\Theta^3 - \cancel{\frac{1}{8m^2}[\Theta,[\Theta,\mathcal{E}]]}\right]$$

o último termo é eliminado porque envolve os campos e calculamos com precisão $\frac{1}{m^2}$

$$= \frac{1}{6m}\left\{\frac{2}{2m}\Theta^3 - \frac{1}{2m^2}2\beta\Theta^4\right\} = \frac{1}{6m^2}\Theta^3 - \frac{1}{6m^3}\beta\Theta^4$$

Finalmente:

$$\frac{i^4}{4!}[S,[S,[S,[S,\mathcal{H}]]]] = \frac{i}{4}\left[S, \frac{i^3}{3!}[S,[S,[S,\mathcal{H}]]]\right]$$

$$= \frac{1}{8m}\left[\beta\Theta, \frac{1}{6m^2}\Theta^3\right] = \frac{1}{48m^3}\left(2\beta\Theta^4\right) = \frac{1}{24m^3}\beta\Theta^4$$

Os termos com $\dot{S}$ envolvem os campos:

$$-\dot{S} = +i\frac{\beta\dot{\Theta}}{2m}$$

$$-\frac{i}{2}[S,\dot{S}] = \frac{(-i)}{2}\frac{i}{2m}\left[\beta\Theta, \frac{\beta\dot{\Theta}}{2m}i\right]$$

$$= \frac{i}{8m^2}\left(\beta\Theta\beta\dot{\Theta} - \beta\dot{\Theta}\beta\Theta\right) = -\frac{i}{8m^2}[\Theta,\dot{\Theta}]$$

Coletamos agora todos os termos em $\mathcal{H}'$:

$$\mathcal{H}' = \beta m + \cancel{\mathcal{O}} + \mathcal{E} + \left(-\cancel{\mathcal{O}} + \frac{\beta \mathcal{O}^2}{m} + \frac{\beta}{2m}[\mathcal{O},\mathcal{E}]\right)$$
$$+ \left(-\frac{\beta}{2m}\mathcal{O}^2 - \frac{\mathcal{O}^3}{2m^2} - \frac{1}{8m^2}[\mathcal{O},[\mathcal{O},\mathcal{E}]]\right) +$$
$$+ \left(\frac{1}{6m^2}\mathcal{O}^3 - \frac{1}{6m^3}\beta\mathcal{O}^4\right) + i\frac{\beta\dot{\mathcal{O}}}{2m} - \frac{i}{8m^2}[\mathcal{O},\dot{\mathcal{O}}]$$
$$+ \frac{1}{24m^3}\beta\mathcal{O}^4$$
$$= \left\{\beta\left(m + \frac{\mathcal{O}^2}{2m} - \frac{1}{8m^3}\mathcal{O}^4\right) + \mathcal{E} - \frac{1}{8m^2}[\mathcal{O},[\mathcal{O},\mathcal{E}]]\right.$$
$$\left. - \frac{i}{8m^2}[\mathcal{O},\dot{\mathcal{O}}]\right\} +$$
$$+ \left\{\frac{\beta}{2m}[\mathcal{O},\mathcal{E}] - \frac{1}{3m^2}\mathcal{O}^3 + i\frac{\beta\dot{\mathcal{O}}}{2m}\right\}$$

Assim, o novo Hamiltoniano pode ser escrito como

$$\mathcal{H}' = \beta m + \mathcal{O}' + \mathcal{E}',$$

onde

$$\mathcal{O}' = \frac{\beta}{2m}[\mathcal{O},\mathcal{E}] + \frac{i\beta\dot{\mathcal{O}}}{2m} - \frac{1}{3m^2}\mathcal{O}^3 .$$

Agora o termo ímpar é da ordem $\frac{1}{m}$. Este termo tem que ser usado na próxima transformação W-F

$$S' = -i\beta\frac{\mathcal{O}'}{2m} = -\frac{i\beta}{2m}\left(\frac{\beta}{2m}[\mathcal{O},\mathcal{E}] + \frac{i\beta\dot{\mathcal{O}}}{2m} - \frac{1}{3m^2}\mathcal{O}^3\right)$$

Pode-se mostrar, que na ordem desejada, não geramos mais termos pares. Assim:

$$\mathcal{H}'' = \beta m + \mathcal{E}' + \mathcal{O}''$$

e o termo ímpar $\mathcal{O}''$ pode ser eliminado com uma terceira TFW. Resultado:

$$\mathcal{H}''' = \beta m + \mathcal{E}'$$

$$= \beta\left(m + \frac{\mathcal{O}^2}{2m} - \frac{1}{8m^3}\mathcal{O}^4\right) + \mathcal{E} - \frac{1}{8m^2}[\mathcal{O},[\mathcal{O},\mathcal{E}]]$$

$$- \frac{i}{8m^2}[\mathcal{O},\dot{\mathcal{O}}]$$

Precisamos avaliar os termos do desenvolvimento:

$$\mathcal{O}^2 = \left(\vec{\alpha}\cdot(\vec{p}-e\vec{A})\right)^2 = [\vec{\sigma}\cdot(\vec{p}-e\vec{A})][\vec{\sigma}\cdot(\vec{p}-e\vec{A})]$$

$$= (\vec{p}-e\vec{A})^2 + i\vec{\sigma}\cdot[(\vec{p}-e\vec{A})\times(\vec{p}-e\vec{A})]$$

Analisar:

$$\vec{p}\times\vec{A} = -\vec{A}\times\vec{p} - i(\nabla\times\vec{A})$$

$$= -\vec{A}\times\vec{p} - i\vec{B}$$

$$\frac{1}{2m}\mathcal{O}^2 = \frac{(\vec{p}-e\vec{A})^2}{2m} - \frac{1}{2m}e(\vec{\sigma}\cdot\vec{B})$$

$$\frac{\mathcal{O}^4}{8m^3} = \frac{(\vec{p}-e\vec{A})^4}{8m^3} \approx \frac{p^4}{8m^3}$$ (lembrar que os campos entram em até $\frac{1}{m^2}$)

Agora precisamos calcular:

$$[\Theta,\mathcal{E}]+i\dot{\Theta} = [\vec{\alpha}\cdot(\vec{p}-e\vec{A}),\, e\phi] + i\,\vec{\alpha}\cdot(-e\,\partial_t\vec{A})$$

$$[\vec{\alpha}\cdot(\vec{p}-e\vec{A}),\, e\phi] = e\,\vec{\alpha}\cdot[\vec{p},\phi] = -ie\vec{\alpha}\cdot\nabla\phi$$

$$[\Theta,\mathcal{E}]+i\dot{\Theta} = -ie\,\vec{\alpha}\cdot(\nabla\phi+\partial_t\vec{A}) = ie\vec{\alpha}\cdot\vec{E}$$

e portanto

$$\frac{1}{8m^2}\left([\Theta,\mathcal{E}]+i\dot{\Theta}\right) = \frac{ie}{8m^2}(\vec{\alpha}\cdot\vec{E})$$

e finalmente o comutador com Θ

$$\left[\Theta,\, \frac{ie}{8m^2}(\vec{\alpha}\cdot\vec{E})\right] = \frac{ie}{8m^2}\left[\vec{\alpha}\cdot(\vec{p}-e\vec{A}),\, \vec{\alpha}\cdot\vec{E}\right]$$

$$\approx \frac{ie}{8m^2}\left[(\vec{\alpha}\cdot\vec{p}),\, (\vec{\alpha}\cdot\vec{E})\right]$$

$$(\vec{\alpha}\cdot\vec{p})(\vec{\alpha}\cdot\vec{E}) = (\vec{\sigma}\cdot\vec{p})(\vec{\sigma}\cdot\vec{E}) = (\vec{p}\cdot\vec{E}) + i\vec{\sigma}\cdot(\vec{p}\times\vec{E})$$

$$(\vec{\alpha}\cdot\vec{E})(\vec{\alpha}\cdot\vec{p}) = (\vec{E}\cdot\vec{p}) + i\sigma\cdot(\vec{E}\times\vec{p})$$

$$[p_i,E_i] = -i\,\partial_i E_i \implies \vec{p}\cdot\vec{E} = \vec{E}\cdot\vec{p} - i(\nabla\cdot\vec{E})$$

$$\vec{p}\times\vec{E} = -\vec{E}\times\vec{p} - i(\nabla\times\vec{E})$$

$$\left[\Theta,\, \frac{ie}{8m^2}(\vec{\alpha}\cdot\vec{E})\right] = \frac{ie}{8m^2}\left[(\vec{\alpha}\cdot\vec{p}),\, (\vec{\alpha}\cdot\vec{E})\right]$$

$$= \frac{ie}{8m^2}\left(-i\,\nabla\cdot\vec{E} \underset{+i\vec{\sigma}\cdot}{-i}(\nabla\times\vec{E})\right) + \frac{ie\,2(-i)\vec{\sigma}\cdot(\vec{E}\times\vec{p})}{8m^2}$$

$$= \frac{e}{8m^2}\nabla\cdot\vec{E} + \frac{ie}{8m^2}\left[\sigma\cdot(\nabla\times\vec{E})\right] + \frac{2e}{8m^2}\vec{\sigma}\cdot(\vec{E}\times\vec{p})$$

$$= \frac{e}{8m^2}(\nabla\cdot\vec{E}) + \frac{ie}{8m^2}\left[\vec{\sigma}\cdot(\nabla\times\vec{E})\right] + \frac{e}{4m^2}\vec{\sigma}\cdot(\vec{E}\times\vec{p})$$

Assim, o Hamiltoniano completo fica

$$\mathcal{H}''' = \beta\left(m + \frac{(\vec{p}-e\vec{A})^2}{2m} - \frac{\vec{p}^4}{8m^3}\right) + e\phi - \frac{e}{2m}\beta(\vec{\sigma}\cdot\vec{B})$$

$$- \frac{ie}{8m^2}\left[\vec{\sigma}\cdot(\nabla\times\vec{E})\right] - \frac{e}{4m^2}\vec{\sigma}\cdot(\vec{E}\times\vec{p}) - \frac{e}{8m^2}(\nabla\cdot\vec{E})$$