

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA

Paulo
Guimarães
S/U Atit
Guimarães
Adel

ESTADOS ESTACIONÁRIOS DE DUAS PARTÍCULAS DE DIRAC

EM UM CENTRO COULOMBIANO



Jorge Futoshi Yamamoto

Tese apresentada ao Instituto
de Física da Universidade de
São Paulo, para a obtenção do
Título de Doutor em Ciências.

Defesa: 13/09/91

São Paulo

1991

SBI-IFUSP



305M810T1822

530.41

Y19e

D

e 1

FICHA CATALOGRÁFICA

Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Yamamoto, Jorge Futoshi

Estados estacionários de duas partículas de Dirac
em um centro coulombiano. São Paulo, 1991.

Tese (Doutorado) - Universidade de São Paulo. Ins-
tituto de Física. Departamento de Física dos Mate-
riais e Mecânica.

Área de Concentração: Física do Estado Sólido
Orientador: Prof. Dr. Augusto Agostinho Neto

Unitermos: 1. Série isoeletrônica do hélio; 2.
Partícula de Dirac; 3. Hamiltoniano relativístico.

ÍNDICE

Resumo	1
Abstract	2
Introdução	3
I. O Hamiltoniano	
A) O Hamiltoniano modelo	4
B) Modelos para as interações	
interação elétron-elétron	5
o núcleo	9
interação elétron-núcleo e as correções radiativas .	11
C) Outros métodos	
método de Tamm-Dancoff	15
equação de Bethe-Salpeter	17
II. FUNÇÕES-BASE	
A) A equação de Dirac	21
B) As funções $\psi_{\epsilon}(\vec{r})$	24
C) Parte angular de $\psi_{\epsilon}(\vec{r})$	26
D) Parte radial de $\psi_{\epsilon}(\vec{r})$	29
E) A forma das funções-base	37
F) O limite não-relativístico	41
G) Algumas definições	43
H) Cálculo da superposição	44
III. EQUAÇÃO SECULAR	
A) A equação de autovalores e a função total	46
B) Elementos de matriz dos operadores de uma partícula ..	49
elementos de matriz do operador $\frac{1}{2\lambda}\vec{\alpha}\cdot\vec{p}$	51
elementos de matriz do operador $\left[\frac{mc}{2\lambda}\beta - \frac{\epsilon}{2\lambda c}\right]$	52
elementos de matriz do operador $-Z\alpha/\rho$	53
resumo dos resultados obtidos	55
C) Elementos de matriz para o operador $e^2/ \vec{r}_1 - \vec{r}_2 $	58
D) Equação secular	64

IV. RESULTADOS E CONCLUSÃO	68
APÊNDICE A: Polinômios de Laguerre Generalizados	A1
APÊNDICE B: Elementos de matriz de $\frac{1}{2\lambda} \vec{\alpha} \cdot \vec{p}$ e $\left[\frac{mc}{2\lambda} \beta - \frac{\epsilon}{2\lambda c} \right]$	B1
APÊNDICE C: Elementos de matriz de $Z\alpha/\rho$	C1
APÊNDICE D: Elementos de matriz de $e^2/ \vec{r}_1 - \vec{r}_2 $	D1
D.1) parte angular	D5
D.2) parte radial	D10
REFERÊNCIAS	R1

RESUMO

A proposta do trabalho é obter os valores dos níveis de energia do átomo de hélio ou de ions tipo hélio por meio de um Hamiltoniano modelo que descreve os estados estacionários de um sistema de duas partículas de Dirac em um centro coulombiano.

A função de onda total é escrita como uma combinação de produtos diretos anti-simetrizados de bispinores similares às soluções para uma partícula.

Parte dos espectros do átomo de hélio e do Si^{12+} para os momentos angulares totais $J = 0, 1, 2$ (paridades par e ímpar, respectivamente) são obtidos.

ABSTRACT

The helium and helium-like ions energy levels are evaluated using a Hamiltonian operator that describes the stationary states of two-Dirac particles system in an external Coulomb field.

The total wave function of the system is an anti-symmetrized combination of tensor products of bispinors, similar to the one-particle Dirac solutions.

The partial helium and Si^{12+} spectra are obtained for the total angular momenta $J = 0, 1, 2$ (even and odd parities, respectively).

INTRODUÇÃO

O método exposto neste trabalho consiste em obter um sistema de equações algébricas de autovalores a partir de um hamiltoniano fenomenológico que descreve os estados de um sistema de duas partículas de Dirac em um centro coulombiano.

A função de onda para o sistema é escrita como a combinação linear de produtos diretos anti-simetrizados de funções para uma partícula. Estas funções, similares às soluções de Dirac para um férmion, formam um conjunto completo nas variáveis de coordenadas e de *spin* e são dependentes de um único parâmetro não linear (λ), relacionado com a auto-energia do sistema.

No capítulo I, é apresentado o hamiltoniano modelo utilizado neste trabalho e seus limites de validade.

No capítulo II, as funções de uma partícula, denominadas daqui em diante como funções-base, são discutidas e analisadas.

O capítulo III mostra a função de onda total do sistema e a equação secular obtida por intermédio do hamiltoniano.

Por último, os resultados e a conclusão são apresentados no capítulo IV.

CAPÍTULO I

O HAMILTONIANO

Neste capítulo é apresentado o Hamiltoniano modelo usado neste trabalho, seus limites de validade e também são lembrados os modelos alternativos existentes que têm propósitos semelhantes.

I. A) O HAMILTONIANO MODELO

O operador

$$\mathcal{H}(1,2) = c\vec{\alpha}_1 \cdot \vec{p}_1 + c\vec{\alpha}_2 \cdot \vec{p}_2 + mc^2(\beta_1 + \beta_2) - Ze^2 \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (\text{I.1})$$

e a equação de autovalores

$$(\mathcal{H}(1,2) - E)\Psi_{JM}(1,2) = 0 \quad (\text{I.2})$$

são utilizados para a descrição dos estados ligados de um sistema de dois férmions puntiformes submetidos ao potencial de um centro coulombiano de carga $Z|e|$. Cada um dos férmions possui carga $e = -|e|$, momento angular intrínseco (*spin*) de valor igual a $1/2$ e massa de repouso m .

O termo $c\vec{\alpha} \cdot \vec{p}$, sendo c a velocidade da luz, $\vec{\alpha} = (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$

matrizes de Dirac na representação "standard" e \vec{p} o momentum tridimensional do férmion, corresponde à energia cinética da partícula. O termo $mc^2\beta$, onde β é uma outra matriz de Dirac, representa a energia de repouso. A interação entre os férmions é dada por $e^2/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, enquanto que a interação de cada uma das partículas com o centro coulombiano é descrita por $-Ze^2/r$.

O termo E na equação (I.2) é a energia total e $\Psi_{JH}(1,2)$ é a função de onda do sistema.

I.B) MODELOS PARA AS INTERAÇÕES

Ao se adotar o Hamiltoniano modelo (I.1), onde aparecem apenas as coordenadas de spin e de orbitais dos férmions para descrever, por exemplo, o átomo de hélio, a motivação é principalmente fenomenológica.

Segue-se abaixo uma discussão sobre os modelos para as interações entre os elétrons, para o núcleo e a interação deste com os elétrons.

interação elétron-elétron

De acordo com o formalismo da Eletrodinâmica Quântica (EDQ), a amplitude da interação elétron-elétron, sem a presença de potenciais externos, é dada pela expressão¹ da matriz S de espalhamento^[4]:

¹ As expressões nesta seção estão no sistema de unidades atômicas: $e = \hbar = m_e = 1$, $c \cong 137$.

$$\langle f|S|i\rangle = \langle f| T \exp\left\{ -\frac{i}{c} \int \mathcal{H}_{int}(x) d^4x \right\} |i\rangle, \quad (I.3)$$

onde $|i\rangle$ e $|f\rangle$ representam, respectivamente, os estados inicial e final do sistema; T representa o operador cronológico e \mathcal{H}_{int} , a densidade do Hamiltoniano de interação que, no caso da interação eletromagnética, é dada por:

$$\mathcal{H}_{int} = -\frac{1}{c} j^\mu(x) A_\mu(x), \quad (I.4)$$

sendo $j^\mu(x)$ o operador quadricorrente e $A^\mu(x)$ o operador quadripotencial eletromagnético. Considere, para todos os fins, que o calibre utilizado é o calibre de Coulomb, dado por $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$, onde \vec{A} é a componente tridimensional de $A^\mu(x)$.

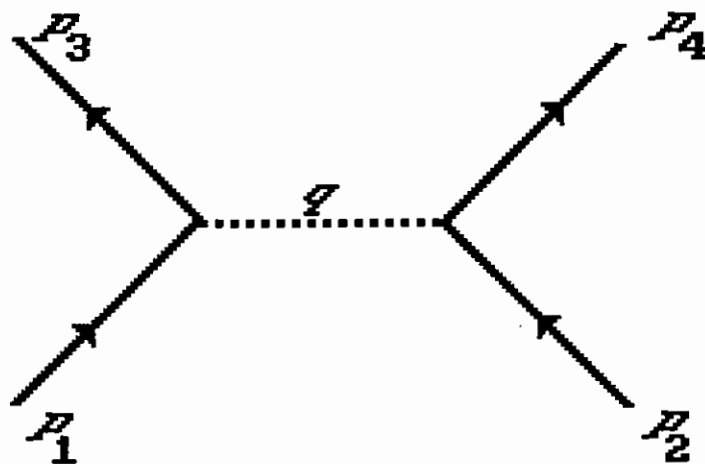
Os elementos da matriz S podem ser expandidos numa série de potências em $1/c$, no caso de interações eletromagnéticas. Para tratar do problema específico da interação elétron-elétron, os estados final e inicial devem cada um apresentar tão somente dois elétrons. Assim, o primeiro termo da expansão da matriz S é nulo^[2], já que não há fótons em ambos os estados.

O termo seguinte, de segunda ordem em $1/c$, pode ser representado graficamente por meio de dois diagramas de Feynman^[10], como mostra a figura 1. Nela, os valores p_1 e p_2 representam os *quadrimenta* iniciais dos elétrons e p_3 e p_4 , os *quadrimenta* finais.

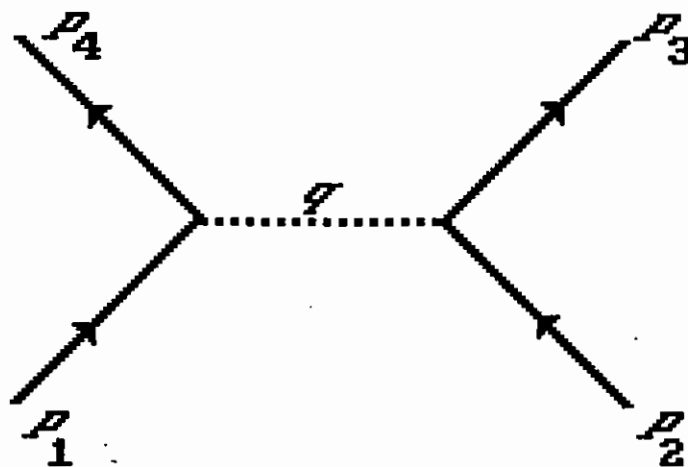
A figura 1(a) mostra o diagrama de Feynman que representa o chamado espalhamento direto, onde ocorre a troca de um fóton de *quadrimentum* $q = p_1 - p_3 = p_4 - p_2$ entre os dois elétrons. A outra figura, 1(b), é consequência do fato dos dois elétrons formarem um sistema de partículas idênticas: o diagrama representa o chamado espalhamento de troca ("exchange"), sendo $q = p_1 - p_4 = p_3 - p_2$.

Da soma das amplitudes referentes aos diagramas apresentados pode-se obter a expressão para a seção de choque do chamado espalhamento de Møller⁽¹⁴⁾.

O resultado que interessa obter a partir dos diagramas 1(a) e 1(b) é o chamado potencial de interação entre os elétrons.



(a)



(b)

Figura 1: diagramas de Feynman referentes ao espalhamento de dois férmions em segunda ordem de $1/c$. As linhas contínuas representam as trajetórias dos férmions e as pontilhadas, as dos fótons.

A função V_{int} que representa este potencial no espaço de configurações é [2], [13]:

$$V_{int} = (1 - \vec{\alpha}_1 \cdot \vec{\alpha}_2) \frac{e^2}{r}, \quad (I.5)$$

sendo r a distância entre os elétrons, ω o valor da energia trocada entre os elétrons 1 e 2 por meio de um fóton, α_1 e α_2 as matrizes de Dirac já comentadas anteriormente.

Há dificuldades no uso direto do potencial (I.5) para os cálculos referentes à interação elétron-elétron: o potencial não é hermitiano e depende dos estados inicial e final.

Uma maneira de contornar estes problemas é expandir o fator de fase em (I.5) numa série de potências até a ordem de v^2/c^2 (v é a velocidade da partícula). Para ordens superiores de v^2/c^2 , seria obrigatório levar em conta os graus de liberdade do campo eletromagnético.

A componente v_k da velocidade tridimensional de um elétron é dada por

$$v_k = [h_D, x_k] = c\alpha_k \quad ; \quad k = 1, 2, 3 ;$$

sendo $h_D = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2 + V$ o Hamiltoniano para uma partícula de Dirac sob um potencial V .

Portanto, a expansão do potencial V_{int} é dada por [2]:

$$V_{int} \cong V_B = \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{2r_{12}} \left[\vec{\alpha}_1 \cdot \vec{\alpha}_2 + \frac{(\vec{\alpha}_1 \cdot \vec{r}_{12})(\vec{\alpha}_2 \cdot \vec{r}_{12})}{r_{12}^2} \right]. \quad (I.6)$$

(r_{12} : distância entre os elétrons)

A expressão (I.6) acima é denominada potencial de interação de Breit [6].

O termo relevante em (I.6) é o primeiro ($1/r_{12}$), que é o

próprio operador de interação coulombiana instantânea entre os elétrons e já se encontra no Hamiltoniano (I.1). O termo restante, denominado interação de Breit, representa uma correção da ordem ^[5] de $Z^3 \alpha^2 \text{Ry}$ nos níveis de energia de um átomo de número atômico Z , sendo $\alpha \approx 1/137$ e $1 \text{ Ry} \approx 13,6 \text{ eV}$. Portanto, para valores baixos de Z , a contribuição da interação de Breit é pequena, como mostra Mann & Johnson^[21] para o caso de estados fundamentais e Mohr^[23] no caso das transições $2^3S_1 - 2^3P_{0,2}$. Assim, o uso da interação coulombiana instantânea como modelo para a interação elétron-elétron é satisfatório para os casos que se pretende analisar neste trabalho.

Caso fosse proposto o cálculo dos valores de energia de ions com números atômicos Z muito grandes, o uso da interação de Breit na forma (I.6) para corrigir a interação entre os elétrons não seria adequado, uma vez que é uma aproximação em v^2/c^2 . Contudo, mesmo que fosse utilizado uma forma mais precisa^{[5],[13],[21]} da interação de Breit, seria preciso incluir os efeitos referentes ao deslocamento de Lamb, já que a ordem de grandeza entre a correção acrescentada à interação de Breit e este deslocamento são comparáveis^{[5],[13]}.

o núcleo

No modelo apresentado em (I.1), o núcleo do átomo é considerado puntiforme, com massa infinita e admite-se que sua interação com os elétrons é um potencial externo. A rigor, átomos de hélio ou ions tipo hélio deveriam ser entendidos como um problema de três corpos. Além disso, seria preciso levar em conta que o núcleo possui uma estrutura interna complexa, apresenta momento

magnético e mesmo outros momentos multipolares e tem dimensões e massa finitas.

Contudo, os efeitos ligados a estas últimas considerações sobre os níveis atômicos são bastante pequenos e podem ser desprezados no momento. A massa do núcleo de um átomo é muito grande (massa_{próton} \approx 1836 massa_{elétron}) em relação à soma das massas dos elétrons. Além disto, a correção dada aos níveis de energia devido às dimensões finitas do núcleo é aproximadamente^[5] igual a

$$\frac{2\pi}{3} Ze^2 |u(0)|^2 \langle r^2 \rangle ,$$

onde $u(0)$ é o valor da função de onda atômica na origem e $\langle r^2 \rangle$, o valor quadrático médio do raio da distribuição de carga nuclear em torno do seu centro de massa. Esta correção é feita praticamente nos estados S. Por exemplo, no caso do hidrogênio ou de ions hidrogenóides, com $Z \ll 137$, a correção no nível $1S_{1/2}$ é da ordem de 1 Mhz ($\approx 1,5 \times 10^{-10}$ hartrees), já que a razão entre o raio do núcleo e o raio de Bohr é aproximadamente 10^{-4} .

A contribuição aos níveis de energia do hélio devido aos efeitos da massa finita do núcleo, principalmente do chamado termo de "polarização de massa" por Bethe & Salpeter^[5] ou correção de Hughes-Eckart^[16] por outros é da ordem^[12] de 10^{-7} .

Estes cálculos das correções de massa e tamanho do núcleo citados acima foram realizados usando o formalismo ou aproximações não-relativísticas. Uma extensão desses cálculos usando a teoria relativística foi realizada por Stone^[27], que considerou o núcleo como sendo um conjunto de partículas de Dirac. Grant & Quiney^[13] discutem as condições de contorno das funções de onda relativísticas caso fosse considerado uma distri-

buição esfericamente simétrica das cargas do núcleo.

Outro fato a ser comentado é o acoplamento do momento magnético nuclear $\vec{\mu}_N$ com o momento do elétron (incluindo também o momento magnético anômalo), que também contribui para o surgimento da estrutura hiperfina do átomo. Como o módulo do momento magnético nuclear, $|\vec{\mu}_N|$, é proporcional à razão entre a massa m_e do elétron e a massa m_p do próton, $m_e/m_p \approx 1/1836$, a separação (quando há) dos níveis é pequena. Por exemplo, para o nível 2^3S do He^3 a frequência experimental $\Delta\nu = \Delta E/h$, que corresponde à separação do nível da estrutura hiperfina, é igual a $(6739.71 \pm 0.05) \text{Mhz}^{[29]}$, aproximadamente 10^{-6} hartrees, conforme indicação de Bethe & Salpeter.

Há muitos cálculos de estrutura hiperfina de sistemas de muitos corpos usando a teoria não-relativística, como o de Lindgren *et al.*^[18], mas não foi encontrado na bibliografia disponível algum trabalho análogo onde aplicou-se a teoria relativística.

interação elétron-núcleo e correções radiativas

No Hamiltoniano (I.1), o potencial do núcleo é entendido como um potencial externo gerado por um centro coulombiano atrativo localizado na origem.

A interação de um elétron com um potencial externo eletromagnético pode ser representado pelo diagrama de Feynman que se encontra na figura 2(a), onde $q = p' - p$, sendo q o *quadrimentum* do fóton e p', p os *quadrimenta* do elétron antes e depois da interação, respectivamente. Os demais diagramas, 2(b), 2(c), 2(d) e 2(e), representam as chamadas correções radiativas^[11] em pri-

meira aproximação de α e se referem à interação do elétron com o seu próprio campo.

Os diagramas ^[5] 2(b) e 2(c), denominados "diagramas de auto-energia", mostram o elétron emitindo e absorvendo o mesmo fóton (virtual) de *quadrimentum* k antes ou depois de haver interagido com o potencial externo; o diagrama 2(d), denominado "diagrama próprio do deslocamento de Lamb", representa o elétron emitindo um fóton k virtual e absorvendo o mesmo após ter intera-

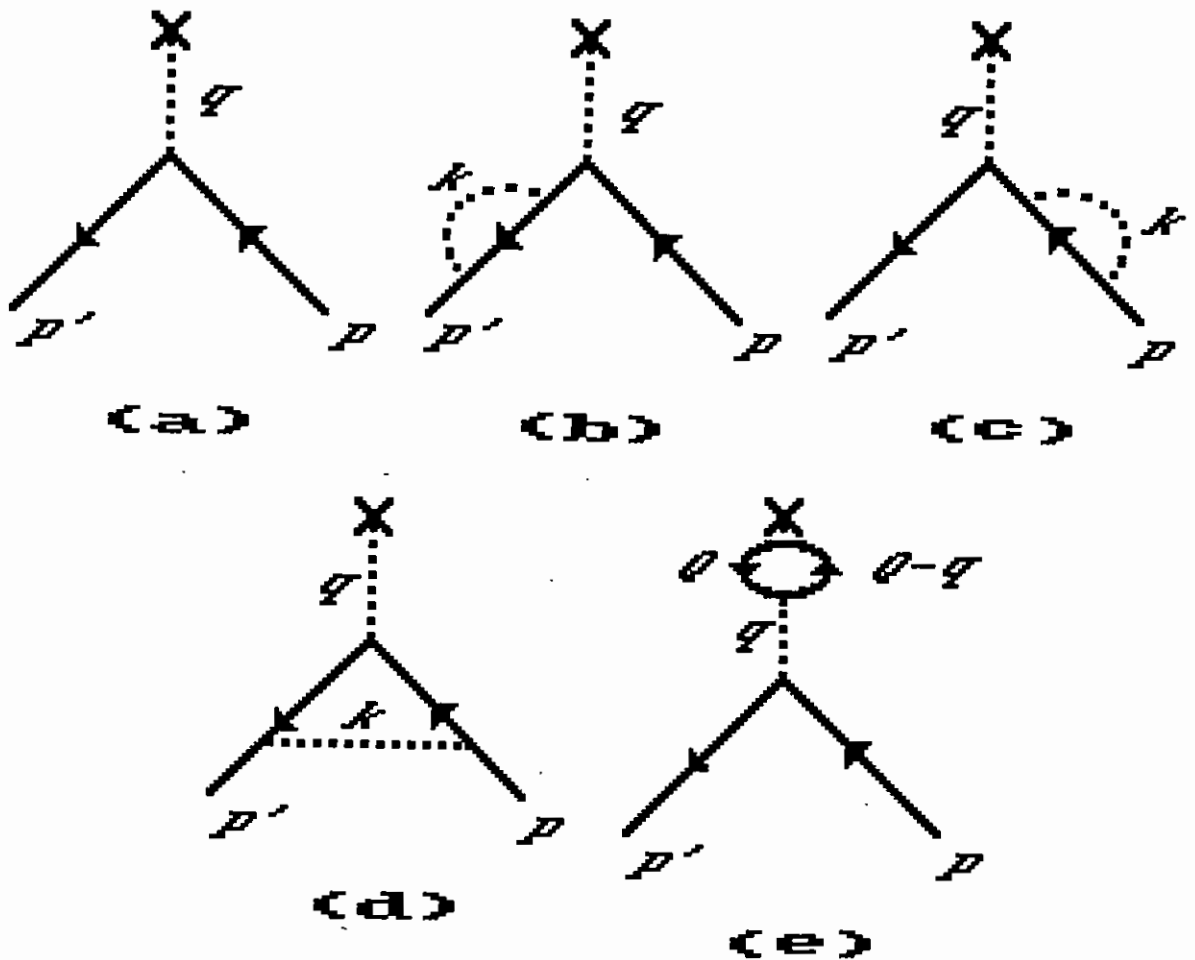


Figura 2: diagramas de Feynman referentes à interação de um férmion com um potencial externo e suas correções radiativas de primeira ordem em α .

gido com o potencial; finalmente, o "diagrama de polarização do vácuo", figura 2(e), mostra a criação de um par virtual elétron-pósitron pelo potencial externo e sua conseqüente aniquilação.

Baseando nas regras de Feynman^[10], calcula-se para cada um dos diagramas descritos no parágrafo acima uma amplitude de probabilidade que, somados, dão conta do processo de interação em primeira ordem de α .

Quando se trata de estados ligados, estas correções explicam^[5] o chamado deslocamento de Lamb^[17] e o momento magnético anômalo do elétron. Apenas por curiosidade, estes fenômenos serviram para confirmar a validade dos resultados obtidos pela teoria da Eletrodinâmica Quântica.

O momento magnético anômalo do elétron é uma correção ao seu momento magnético devido à sua auto-interação. Assim, em primeira ordem de α , tem-se:

$$\mu = \left[1 + \frac{\alpha}{2\pi} \right] \mu_0 \quad (1.8)$$

onde $\mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc}$.

Historicamente, denominou-se deslocamento de Lamb à separação entre os níveis $2S_{1/2}$ e $2P_{1/2}$ do hidrogênio, em desacordo com o que previa a equação de Dirac, que apresenta o mesmo valor de energia para ambos os estados. O deslocamento de Lamb é, contudo, observado em todos os níveis e a constante ligada a estas correções é dada pela expressão

$$\frac{\alpha}{3\pi} \left[\log \left(\frac{mc^2}{\lambda} \right) - \frac{3}{8} - \frac{1}{5} \right] \quad (1.9)$$

sendo λ a chamada "massa virtual" do fóton, relacionada com as divergências da auto-energia quando se considera os *quadrimenta*

k dos fótons virtuais próximos de zero^[11].

O termo contendo $1/5$ em (I.9) se origina do diagrama 2(e) e os demais, assim como o termo $\alpha/2\pi$ em (I.8), vêm dos diagramas 2(b), 2(c) e 2(d).

Contudo, o efeito destas correções nos níveis de energia de um átomo ou íon com Z relativamente baixo pode ser negligenciado. Por exemplo, no caso do átomo de hélio, a razão entre as correções radiativas e a energia total da separação entre os níveis $2^3S_1 - 2^3P_0$ é da ordem de 0,002%^[23]. Bethe & Salpeter mostra que o termo que mais contribui para as correções radiativas de um átomo de dois elétrons é aquele que se refere ao "diagrama próprio do deslocamento de Lamb" (fig.2(d)) e é da ordem de $Z^2\alpha^3$.

Para valores de Z muito grandes, o valor do deslocamento de Lamb passa a ser significativo. Todavia, neste caso, ele precisa ser levado em conta juntamente com a interação de Breit, como já foi escrito no final da seção I.B. Isto pode melhor ser entendido observando a figura 3: em 3(a), tem-se o "diagrama de autoenergia"; em 3(b), a "polarização do vácuo"; em 3(c), a interação elétron-elétron (espalhamento de Møller). O número de vértices (cruzamento entre a linha pontilhada e a linha contínua)

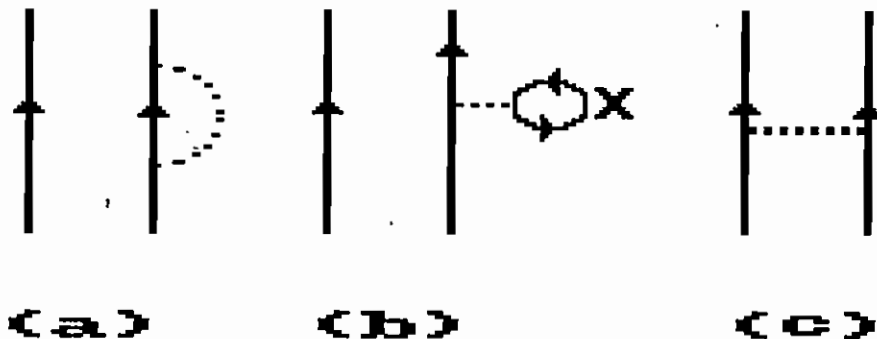


Figura 3: diagramas de Feynman referentes às (a) auto-interação; (b) "polarização do vácuo"; (c) interação de Møller.

indica a ordem de correção (primeira aproximação em α) no formalismo da EDQ e é o mesmo para os três.

Eventualmente, caso fosse calculado o deslocamento de Lamb nos níveis de um átomo de dois elétrons, as maiores contribuições^[13] viriam das correções radiativas da interação de um elétron com o potencial externo (figuras 2(b),..., (e)). Note nas figuras 3(a) e 3(b) que tudo ocorre como se as respectivas linhas à esquerda não estivessem presentes. Contudo, a álgebra envolvida nos cálculos das correções radiativas tem-se mostrado bastante árdua, como Grant & Quiney^[13] declara e Mohr^[23] mostra, no caso do problema de N-elétrons, principalmente em relação aos "diagramas de auto-energia".

I.C) OUTROS MÉTODOS

Discute-se nesta seção outros modelos que descrevem sistemas constituídos de duas ou mais partículas.

método de Tamm-Dancoff^[5]

Este método permite descrever um sistema de duas ou mais partículas carregadas em qualquer ordem de aproximação desejada. Consiste em obter um conjunto de equações integrais acopladas na representação de *momentum* a partir da equação simbólica abaixo:

$$(E - H_0)\Psi = H'\Psi \quad (I.10)$$

O operador H' representa as interações entre as partículas e fótons, a interação coulombiana entre as cargas e a interação das partículas com eventuais potenciais externos.

Inicialmente, considere que não há quaisquer interações, *i.e.*, que $H'=0$. As autofunções do operador H_0 podem ser representadas por $\phi_{n,m}$ e cada uma delas indicam um certo estado que contém n partículas e m fótons, todos não-interagentes. A função de estado total Ψ , portanto, pode ser expandida no chamado espaço de Fock como uma soma infinita na forma:

$$\begin{aligned} \Psi &= a_0 \phi_0 + a_{1,0}(\vec{p}) \phi_{1,0} + a_{1,1}(\vec{p}; \vec{k}) \phi_{1,1} + a_{2,0}(\vec{p}_1, \vec{p}_2) \phi_{2,0} + \dots = \\ &= \sum a_{n,m}(\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_n; \vec{k}_1, \dots, \vec{k}_m) \phi_{n,m} \end{aligned} \quad (I.11)$$

O estado ϕ_0 representa o vácuo, *i.e.*, a ausência de partículas e fótons e a_0 é a sua amplitude de probabilidade em relação ao estado efetivo Ψ . Do mesmo modo, os demais valores para $a_{n,m}(\vec{p}, \dots; \vec{k} \dots)$ dão a amplitude de probabilidade dos correspondentes estados $\phi_{n,m}$ onde ocorrem n partículas com seus respectivos momenta \vec{p} e m fótons com seus respectivos momenta \vec{k} . Por exemplo, $a_{1,0}(\vec{p})$ é a amplitude de probabilidade de haver uma única partícula, com momentum \vec{p} , e a ausência de fótons.

Utilizando os operadores de criação e aniquilação de partículas e fótons de acordo com o formalismo da Teoria Quântica dos Campos, pode-se obter os elementos de matriz do operador H' indicando a transição entre os estados distintos $\phi_{n',m'}$ e $\phi_{n,m}$.

Para calcular as amplitudes $a_{n,m}$, substituí-se na equação (I.10) a função Ψ pela sua expansão dada por (I.11). Em seguida, aplica-se em ambos os lados da equação (I.10) um produto de n operadores de aniquilação de partículas e m operadores de aniquilação de fótons. Toma-se, depois, o produto escalar entre o resultado obtido e o vetor ϕ_0 , referente ao estado de vácuo. Desta maneira, isola-se os termos referentes ao vetor $\phi_{n,m}$ e obtém-se

um conjunto infinito de equações integrais acopladas envolvendo as diversas amplitudes $a_{n,m}(\vec{p}_1, \dots; \vec{k}_1, \dots)$ e sem depender mais de operadores de criação e aniquilação e do vetor ϕ_0 .

Para o caso de um sistema de dois férmions, e.g., elétrons, o vetor principal na expansão Ψ é $\phi_{2,0}(\vec{p}_1, \vec{p}_2)$. Se for levado em conta somente este vetor, obtém-se uma única equação para $a_{2,0}(\vec{p}_1, \vec{p}_2)$. Contudo, se for adotado a teoria dos pares de Dirac, deve-se admitir a ocorrência de pósitrons, ou melhor, pares elétron-pósitron. Assim, acoplados aos termos referentes ao vetor $\phi_{2,0}$ no conjunto de equações, pode-se também ter a amplitude $a_{2,(1),0}$ referente ao vetor $\phi_{2,(1),0}$ i.e., a ocorrência de três elétrons e um pósitron, onde (1) indica o par elétron-pósitron.

Também pode-se incluir no operador H' a interação dos elétrons com o campo de radiação, o que leva ao acoplamento do vetor $\phi_{2,0}$ com $\phi_{2,1}$, por exemplo, bem como com estados na forma $\phi_{2,(1),1}$, $\phi_{2,2}$ e assim por diante.

Portanto, mais e mais estados de ordem superior podem ser acrescentados, ao menos em princípio, ao conjunto de equações acopladas.

Há também o chamado "novo método de Tamm-Dancoff". Similar ao próprio método de Tamm-Dancoff, se diferencia deste por envolver também os estados de energia negativa e considerar como estado de vácuo não o vetor ϕ_0 , mas o vetor de estado com o menor autovalor, correspondente ao estado de ausência de partículas e a presença de potenciais externos e do campo de radiação.

equação de Bethe-Salpeter

O método descrito anteriormente não exhibe uma clara invari-

ança relativística, ao contrário da chamada equação de Bethe-Salpeter.

Durante o final da década de 40, Feynman, Schwinger, Tomonaga e Dyson desenvolveram^[26] um tratamento relativisticamente invariante para o problema de espalhamento de duas ou mais partículas. Bethe & Salpeter^[25], em 1951, apresentaram uma extensão do formalismo desenvolvido por Feynman para ser aplicado ao problema de estados ligados de dois férmions interagentes, na ausência de quaisquer potenciais externos. Estes dois férmions interagem entre si por meio de troca de fótons ou mésons (quando se trata de núcleons).

No caso de um espalhamento envolvendo ambos os férmions, o método de Feynman fornece uma receita para calcular a amplitude de probabilidade do processo por intermédio de uma função amplitude ("kernel") $K(3,4;1,2)$, ou seja, dado um estado inicial $\psi(1,2)$, onde um dos férmions se encontra na posição x_1^μ do espaço-tempo e o outro em x_2^μ , o estado final $\psi(3,4)$ pode ser deduzido usando o "kernel" $K(3,4;1,2)$.

A função amplitude pode ser escrita como uma série em g^2 , sendo g a constante de acoplamento da interação, seja esta eletrodinâmica ou mesônica. Cada um dos termos desta série é representado por um diagrama de Feynman correspondente.

No caso de estados ligados, é preciso considerar que o tempo de interação entre as partículas é infinito, ao contrário do caso do espalhamento. Assim, exclui-se dentro da função amplitude o termo correspondente à propagação de férmions livres não-interagentes. Com este argumento e adotando a representação no espaço de *momentum*, Bethe & Salpeter obtiveram uma equação

integro-diferencial para os estados ligados de dois férmions na ausência de potenciais externos e que se mostra invariante por Lorentz.

É possível escrever a equação de Bethe & Salpeter em termos do operador de *quadrimentum* total P^μ do sistema e do operador de *quadrimentum* p^μ relativo. Sejam m_a e m_b as respectivas massas de repouso dos férmions em questão. Considere que K^μ representa o *quadrimentum* total de um certo autoestado do operador P^μ com auto-energia K^0 . Para que a função de onda referente a K^μ represente um estado ligado é preciso que a seguinte condição seja obedecida:

$$|K|^2 = K^\mu K_\mu < (m_a + m_b)^2$$

O cálculo das funções de onda usando a equação de Bethe-Salpeter é feito numa forma aproximada, já que seria preciso interromper em algum ponto a série que representa a função amplitude. No caso da constante de acoplamento g ser suficientemente pequena, é possível obter uma boa aproximação considerando somente o primeiro termo não-nulo da série, que se refere à troca entre ambos os férmions de um único *quantum* de cada vez. Ordens maiores que representam a troca simultânea de dois ou mais *quanta* ou a formação de pares virtuais podem ser desprezadas.

Contudo, mesmo que fossem eventualmente levados em conta termos de ordem superior em qualquer um dos métodos aqui apresentados, é ilusório acreditar que com isso seja possível obter uma solução exata^[18].

Por exemplo, no caso da interação eletromagnética, correções radiativas de ordem superior a α podem incluir processos representados pelos diagramas da figura 4. Todavia, os fótons, além de

interagirem com o campo virtual dos elétrons, também podem interagir com o campo virtual de outras partículas, e.g., mésons. Esta interação com outras partículas é representada por diagramas similares ao diagrama de "polarização do vácuo", ou seja, diagramas que representam a formação e conseqüente aniquilação de um par de mésons.

Considere m_e a massa do elétron e $M (>m_e)$ a massa de um dado méson. A ordem de grandeza dos termos que representam a "polarização do vácuo" de mésons é $(m_e/M)^2$ menor que a dos elétrons^[14].

Certos mésons, como *muons* e *pions*, apresentam um valor para suas massas de tal modo que a razão m_e/M é da mesma ordem de grandeza que α . Assim, termos referentes à formação de pares virtuais de *pions* e *muons* podem concorrer com os termos dos pares elétron-pósitron de ordem superior. A Eletrodinâmica Quântica admite o tratamento de *muons*, mas no caso de *pions* não mais se aplica, já que são partículas referentes à interação forte^[18].

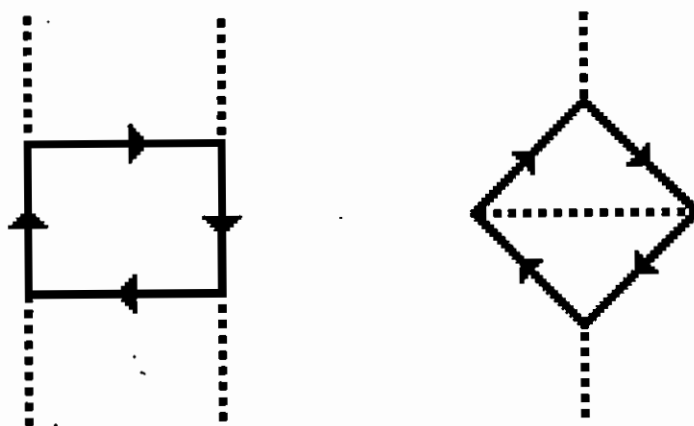


Figura 4: correções radiativas de segunda ordem em α .

CAPÍTULO II

FUNÇÕES - BASE

Uma maneira de construir funções de onda de sistemas de muitos corpos é a partir do produto direto de funções de onda de uma partícula. No caso de problemas envolvendo átomos, é conveniente usar como funções-base as soluções de uma equação de onda para uma partícula sob um potencial externo adequado.

Neste trabalho adota-se, como funções-base, funções semelhantes às soluções da equação de Dirac para um férmion de carga e (onde $e = \pm |e|$) submetido a um centro coulombiano.

Inicialmente, será apresentado a equação de Dirac na sua forma geral e seu uso para a resolução de um problema específico. Em seguida, serão estudadas as soluções para os estados ligados e as condições de contorno. Finalmente, as funções-base para este trabalho serão estabelecidas e analisadas.

II. A) A EQUAÇÃO DE DIRAC

Considere uma partícula de *spin* 1/2, massa m e carga e , sob um dado quadripotencial eletromagnético $A^\mu(x) = (\frac{\Phi(x)}{c}, \vec{A}(x))$, sendo $\Phi(x)$ o potencial escalar e $\vec{A}(x)$, o potencial-vetor, ambos funções das coordenadas $x^\mu = (x^0 \equiv ct, \vec{r})$ no espaço-tempo. A equação de Dirac para a função de onda $\psi(x)$ dessa partícula, na

forma covariante, é [4]:

$$\left[\gamma^\mu (p_\mu - eA_\mu) - mc \right] \psi(x) = 0. \quad (\text{II.1})$$

O operador $p^\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu}$ é o operador de *quadrimentum*, γ^μ são matrizes quadradas de ordem 4 que obedecem às condições

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2 g^{\mu\nu},$$

onde $g^{\mu\nu}$ é o tensor métrico cujas componentes são $g^{00} = 1$, $g^{kk} = -1$ ($k = 1, 2, 3$) e $g^{\mu\nu} = 0$ ($\mu \neq \nu$).

A equação (II.1) pode ser reescrita numa forma mais adequada para obter as funções-base se multiplicar à sua esquerda pela matriz γ^0 :

$$\frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) = \left[\vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - e\vec{A}) + \beta mc + \frac{e}{c} \Phi \right] \psi(x). \quad (\text{II.1}')$$

Defini-se o operador :

$$h = c\vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - e\vec{A}) + \beta mc^2 + e\Phi, \quad (\text{II.2})$$

onde as matrizes β e $\vec{\alpha}$ (matrizes de Dirac) representam os produtos matriciais:

$$\vec{\alpha} = \gamma^0 \vec{\gamma} = \gamma^0 (\gamma^1, \gamma^2, \gamma^3) = (\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3),$$

$$\beta \equiv \gamma^0.$$

Na representação "standard", as matrizes acima tomam a forma:

$$\beta = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix},$$

$$\alpha_1 = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \alpha_2 = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{bmatrix}, \quad \alpha_3 = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_3 \\ \sigma_3 & 0 \end{bmatrix},$$

onde "0" denota uma matriz nula 2x2, "1" é a matriz identidade de ordem 2 e $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ são as matrizes de Pauli.

É preciso agora encontrar as soluções referentes aos estados estacionários do elétron sob um potencial externo eletrostático de uma carga puntiforme $Z|e|$ (Z inteiro) colocada na origem das coordenadas. Para tanto, admita que

$$\vec{A} = 0 ,$$

$$e\Phi = - \frac{Ze^2}{r} ,$$

e definir a função de onda como

$$\psi(x) = \exp(-i\epsilon t) \psi_{\epsilon}(\vec{r}) ,$$

onde ϵ é o valor da energia do elétron. Portanto, (II.1') torna-se

$$\left[c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2 - \frac{Ze^2}{r} \right] \psi_{\epsilon}(\vec{r}) = \epsilon \psi_{\epsilon}(\vec{r}) . \quad (II.3)$$

O termo $c\vec{\alpha} \cdot \vec{p}$ representa o operador de energia cinética e o segundo termo, βmc^2 , está associado com a energia de repouso da partícula. A equação (II.3) é comumente chamada de equação de Dirac-Coulomb^[28].

Utilizando o parâmetro

$$\lambda = \left[mc^2 - \frac{\epsilon^2}{c^2} \right]^{1/2} \quad (II.4)$$

que está relacionado com o valor quadrático médio do *momentum* da partícula, a equação (II.3), após a divisão por $2\lambda c$, adquire a forma abaixo:

$$\left[\frac{1}{2\lambda} \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \frac{mc}{2\lambda} \beta - \frac{\epsilon}{2\lambda c} - Z \frac{e^2}{\hbar c} \frac{1}{2\lambda r} \right] \psi_{\epsilon}(\vec{r}) = 0 .$$

Definindo

$$\rho = \frac{2\lambda r}{h} \quad (\text{II.5})$$

tem-se que

$$\left[\frac{1}{2\lambda} \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \frac{mc}{2\lambda} \beta - \frac{\epsilon}{2\lambda c} - \frac{Z\alpha}{\rho} \right] \psi_{\epsilon}(\vec{r}) = 0 \quad (\text{II.3'})$$

onde $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \cong \frac{1}{137}$ é a constante de estrutura fina.

II.B) AS FUNÇÕES $\psi_{\epsilon}(\vec{r})$

As soluções para a equação (II.3), as $\psi_{\epsilon}(\vec{r})$, são bispinores. Devido à simetria esférica do sistema, é conveniente adotar as variáveis angulares r, θ, φ para o bispinor $\psi_{\epsilon}(\vec{r})$:

$$\psi_{\epsilon} = \psi_{\epsilon}(r, \theta, \varphi) .$$

Na representação "standard", ψ_{ϵ} toma a forma

$$\psi_{\epsilon}(\vec{r}) = \begin{bmatrix} \phi(r, \theta, \varphi) \\ \chi(r, \theta, \varphi) \end{bmatrix} .$$

As quantidades ϕ e χ são espinores de ordem 1, onde a primeira é denominada "grande componente" e a segunda, "pequena componente".

Abaixo são apresentados quais os operadores que comutam com o operador (II.2) e quais são as condições de contorno a serem impostas às funções de onda.

Considere o operador de momento angular total \vec{J} da partícula dado por

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} .$$

O operador \vec{L} representa o momento angular orbital da partícula e \vec{S} , o seu momento intrínseco - o *spin*. Como não há uma direção

preferencial no espaço, é possível concluir que o operador \vec{J} comuta com o operador \hbar , dado por (II.2). Se não, veja que^[24]:

$$\begin{aligned}
 [\vec{J}, \hbar] &= c[\vec{J}, \vec{\alpha} \cdot \vec{p}] + mc^2 \underbrace{[\vec{J}, \beta]}_{=0} - Ze^2 \underbrace{[\vec{J}, \frac{1}{r}]}_{=0} = \\
 &= c[\vec{J}, \vec{\alpha} \cdot \vec{p}] + c[\vec{S}, \vec{\alpha} \cdot \vec{p}].
 \end{aligned}$$

Se for considerada uma única componente de \vec{J} , observe que:

$$[J_1, \vec{\alpha} \cdot \vec{p}] = \alpha_2 [J_1, p_2] + \alpha_3 [J_1, p_3] = i(\alpha_2 p_3 - \alpha_3 p_2),$$

ou seja, tem-se uma quantidade não-nula para $[\vec{J}, \vec{\alpha} \cdot \vec{p}]$:

$$i \vec{\alpha} \times \vec{p} \neq 0.$$

Por sua vez, para $\vec{S} = \frac{1}{2} \vec{\sigma}$, novamente tomando uma das componentes, obtém-se que:

$$\frac{1}{2} [\sigma_1, \vec{\alpha} \cdot \vec{p}] = i(\alpha_3 p_2 - \alpha_2 p_3) \rightarrow -i \vec{\alpha} \times \vec{p} \neq 0.$$

Usou-se acima a seguinte propriedade das matrizes de Pauli:

$$\sigma_k \sigma_m = 2i \epsilon_{kmn} \sigma_n,$$

onde ϵ_{kmn} é o tensor anti-simétrico de Levi-Civita.

Portanto, conclui-se que, a partir dos resultados acima, \vec{J} é uma constante de movimento.

Já o momento angular orbital \vec{L} , ao contrário do que ocorre com equação de Schrödinger na situação correspondente, não é uma constante de movimento. Contudo, o número quântico ℓ , associado ao operador \vec{L} , se já não representa mais um valor definido para o momento angular orbital, continua definindo a paridade do estado, como será mostrado adiante.

A seguir, as partes angular e radial das funções $\psi_{\epsilon}(\vec{r})$ são analisadas.

II.C) PARTE ANGULAR DE $\psi_\epsilon(\vec{r})$

A parte angular das componentes ϕ e χ do bispinor ψ_ϵ é proporcional ao espinor esférico

$$\Omega_{j\mu}(\vec{n}) = \sum_{\sigma=\pm 1/2} \langle l \frac{1}{2} \mu-\sigma \sigma | j \mu \rangle Y_{l,\mu-\sigma}(\vec{n}) \chi^\sigma, \quad (\text{II.6})$$

onde

$$\vec{n} = \frac{\vec{r}}{r};$$

$Y_{l,\mu-\sigma}(\vec{n})$: harmônicos esféricos;

$$\chi^\sigma : \chi^{1/2} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \chi^{-1/2} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix};$$

$\langle l \frac{1}{2} \mu-\sigma \sigma | j \mu \rangle$: coeficiente de Clebsch-Gordan, referente ao acoplamento do momento $l = 0, 1, 2, \dots$ com o momento intrínseco de valor $1/2$; μ é a projeção no eixo z do momento angular total \vec{J} ; $\sigma = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ é a projeção de spin.

Explicitamente^[4],

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

$$\Omega_{j\mu}(\vec{n}) = \begin{bmatrix} - \left[\frac{j-\mu+1}{2j+2} \right]^{1/2} Y_{l,\mu-1/2}(\vec{n}) \\ \left[\frac{j+\mu+1}{2j+2} \right]^{1/2} Y_{l,\mu+1/2}(\vec{n}) \end{bmatrix}$$

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

$$\Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) = \begin{bmatrix} \left[\frac{j+\mu}{2j} \right]^{1/2} Y_{\ell, \mu-1/2}(\vec{n}) \\ \left[\frac{j-\mu}{2j} \right]^{1/2} Y_{\ell, \mu+1/2}(\vec{n}) \end{bmatrix} .$$

O espinoz esférico $\Omega_{j\ell\mu}(\vec{n})$ é uma autofunção dos operadores j^2 , j_z , l^2 , l_z , s^2 , s_z (\vec{j} é o operador momento angular total da partícula, j_z é operador de projeção no eixo z do operador \vec{j} ; \vec{l} é o operador momento orbital e l_z , a sua projeção no eixo z; \vec{s} é o operador de momento de spin e s_z , sua projeção no eixo z):

$$j^2 \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) = j(j+1) \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) ,$$

$$l^2 \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) = \ell(\ell+1) \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) ,$$

$$s^2 \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) = \frac{3}{4} \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \quad (s = 1/2) .$$

Existe um outro operador para o qual $\Omega_{j\ell\mu}(\vec{n})$ é também uma autofunção:

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{l} + 1 = j^2 - l^2 - s^2 + 1$$

cujos autovalores são

$$-(\vec{\sigma} \cdot \vec{l} + 1) \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) = [-(j + \frac{1}{2})^2 + \ell(\ell + 1)] \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) = \kappa \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) ,$$

ou seja,

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

Como j é sempre um valor positivo, o valor de κ é sempre diferente de zero:

$$\kappa = \pm 1, \pm 2, \dots$$

É importante notar que

$$j = |\kappa| - \frac{1}{2}$$

e que

$$l = \begin{cases} \kappa & , \text{ para } \kappa > 0 \\ -(\kappa + 1) & , \text{ para } \kappa < 0 \end{cases} .$$

Portanto, com o valor de κ é sempre possível obter o valor de j e l .

Os espinores esféricos são ortonormais:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left[\Omega_{j, l, \mu}(\vec{n}) \right]^\dagger \Omega_{j, l, \mu}(\vec{n}) \sin\theta \, d\theta \, d\varphi = \delta_{j, j'} \delta_{l, l'} \delta_{\mu, \mu'} .$$

Desta forma, o conjunto

$$\left\{ \Omega_{j, l, \mu}(\vec{n}), \kappa = \pm 1, \pm 2, \dots; -j \leq \mu \leq j \right\}$$

forma um conjunto ortonormal no espaço das coordenadas angulares e no espaço de *spin* 1/2.

Como o operador \vec{J} comuta com \hbar , tanto a "grande" como a "pequena" componente possuem o mesmo valor para o módulo de κ . Resta definir quais valores de l cada uma das componentes deve apresentar.

Os valores de κ que possuem o mesmo módulo e sinais opostos correspondem a diferentes valores de l , que definem a paridade do estado. O operador associado à paridade é o operador de inversão espacial, que leva \vec{r} em $-\vec{r}$. Tal operador comuta com \hbar .

Para que a equação de Dirac mantenha-se invariante sob uma inversão espacial, as funções ϕ e χ , na representação "standard", transformam-se, segundo Landau^[4]:

$$\phi \longrightarrow i\phi$$

$$\chi \longrightarrow -i\chi$$

Por sua vez, o espinor esférico $\Omega_{j\ell\mu}(\vec{n})$, sob uma inversão espacial, transforma-se segundo a expressão:

$$\Omega_{j\ell\mu}(-\vec{n}) = (-1)^\ell \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) .$$

Portanto, a "pequena" e a "grande" componente transformam-se sob uma inversão espacial do seguinte modo^[41]:

$$\phi \longrightarrow i(-1)^\ell \phi ,$$

$$\chi \longrightarrow -i(-1)^\ell \chi .$$

Para que o estado representado por ψ_ϵ tenha uma paridade definida, é preciso que a "pequena" componente χ apresente um valor $\bar{\ell}$ distinto do valor ℓ que a "grande" componente ϕ possui:

$$\psi = \begin{bmatrix} \phi \\ \chi \end{bmatrix} \propto \begin{bmatrix} \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \\ \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \end{bmatrix}$$

e

$$\bar{\ell} = 2j - \ell$$

(Note que o bispinor tem sua paridade definida pelo valor de ℓ).

II.D) PARTE RADIAL DE $\psi_\epsilon(\vec{r})$

Considere que $g(r)$ e $f(r)$ são, respectivamente, as partes radiais da "grande" e da "pequena" componente:

$$\psi_\epsilon(\vec{r}) = \begin{bmatrix} ig(r) \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \\ -f(r) \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \end{bmatrix} \quad (II.7)$$

As fases nas componentes do bispinor foram escolhidas por conve-

niência^[1].

A ação do operador $\vec{\alpha} \cdot \vec{p}$ sobre a função de onda $\psi_{\epsilon}(\vec{r})$ é descrita por:

$$\frac{1}{2\lambda} \begin{bmatrix} 0 & \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} ig(r) \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \\ -f(r) \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \end{bmatrix} = \frac{1}{2\lambda} \begin{bmatrix} -(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) f(r) \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \\ i(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) g(r) \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \end{bmatrix}.$$

Veja que

$$\Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) = -(\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}).$$

Então,

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2\lambda} (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) f(r) &= \frac{1}{2\lambda} (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) (\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) f(r) = \\ &= -i \left[\frac{d}{d\rho} + \frac{2}{\rho} + \frac{1}{\rho} \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{I}}{\hbar} \right] \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) f(r). \end{aligned}$$

Como

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{I} \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) = -(1 + \kappa) \hbar \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}),$$

tem-se, desta forma, que:

$$-\frac{1}{2\lambda} (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) f(r) = -i \left[\frac{d}{d\rho} - \frac{\kappa - 1}{\rho} \right] f(r) \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}).$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned} \frac{i}{2\lambda} (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) g(r) &= -\frac{i}{2\lambda} (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) (\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) g(r) = \\ &= -\left[\frac{d}{d\rho} + \frac{2}{\rho} + \frac{1}{\rho} \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{I}}{\hbar} \right] \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) g(r). \end{aligned}$$

Neste caso,

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{I}) \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) = (\kappa - 1) \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}).$$

Portanto,

$$\frac{i}{2\lambda} (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) g(r) = -\left[\frac{d}{d\rho} + \frac{\kappa + 1}{\rho} \right] g(r) \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}).$$

Juntando os resultados acima com os resultados da aplicação

dos demais operadores sobre a função de onda, obtém-se o seguinte conjunto de equações diferenciais para a parte radial:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[\frac{d}{d\rho} + \frac{1 - \kappa}{\rho} \right] f(\rho) - \frac{1}{2} \left\{ \frac{mc^2 - \epsilon}{mc^2 + \epsilon} \right\}^{1/2} g(\rho) + \frac{Z\alpha}{\rho} g(\rho) = 0 \\ \left[\frac{d}{d\rho} + \frac{1 + \kappa}{\rho} \right] g(\rho) - \frac{1}{2} \left\{ \frac{mc^2 + \epsilon}{mc^2 - \epsilon} \right\}^{1/2} f(\rho) - \frac{Z\alpha}{\rho} f(\rho) = 0 . \end{array} \right. \quad (II.8)$$

Considere o comportamento de $g(r)$ e $f(r)$ nas situações em que $r \rightarrow 0$ e $r \rightarrow \infty$. Quando r é pequeno, o conjunto de equações acima torna-se:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[\frac{d}{d\rho} + \frac{1 - \kappa}{\rho} \right] f(\rho) + \frac{Z\alpha}{\rho} g(\rho) = 0 \\ \left[\frac{d}{d\rho} + \frac{1 + \kappa}{\rho} \right] g(\rho) - \frac{Z\alpha}{\rho} f(\rho) = 0 , \end{array} \right.$$

ou

$$\left\{ \begin{array}{l} (\rho f)' - \frac{\kappa}{\rho} (\rho f) + \frac{Z\alpha}{\rho} (\rho g) = 0 \\ (\rho g)' + \frac{\kappa}{\rho} (\rho g) - \frac{Z\alpha}{\rho} (\rho f) = 0 . \end{array} \right.$$

Assim, como ρg e ρf aparecem de modo equivalente em ambas as equações, pode-se procurar as soluções na forma de uma mesma potência γ de ρ [4]:

$$\rho g = a \rho^\gamma , \quad \rho f = b \rho^\gamma .$$

Obtém-se que:

$$\left\{ \begin{array}{l} \gamma b \rho^{\gamma-1} - \kappa b \rho^{\gamma-1} + Z\alpha a \rho^{\gamma-1} = 0 \\ \gamma a \rho^{\gamma-1} + \kappa a \rho^{\gamma-1} - Z\alpha b \rho^{\gamma-1} = 0 \end{array} \right.$$

ou seja,

$$\begin{cases} Z\alpha a + (\gamma - \kappa)b = 0 \\ (\gamma + \kappa)a - Z\alpha b = 0 \end{cases} .$$

Para que o sistema tenha uma solução não-trivial, é preciso que:

$$\gamma^2 - \kappa^2 + (Z\alpha)^2 = 0$$

ou

$$\gamma = \left[\kappa^2 - (Z\alpha)^2 \right]^{1/2} . \quad (\text{II.9})$$

Assim, na origem, as funções $g(r)$ e $f(r)$ se comportam da seguinte forma:

$$g, f \propto \rho^{\gamma-1} .$$

desde que $|\kappa| > Z\alpha$; caso contrário, não haveria soluções finitas na origem.

O comportamento assintótico das funções radiais $g(\rho)$ e $f(\rho)$ pode ser analisado se tomar o limite para $r \rightarrow \infty$ do sistema de equações (II.8):

$$\begin{cases} f'(\rho) - \frac{1}{2} \left\{ \frac{mc^2 - \epsilon}{mc^2 + \epsilon} \right\}^{1/2} g(\rho) = 0 \\ g'(\rho) - \frac{1}{2} \left\{ \frac{mc^2 + \epsilon}{mc^2 - \epsilon} \right\}^{1/2} f(\rho) = 0 \end{cases} \quad (\text{II.10})$$

As soluções adequadas para o conjunto de equações acima são da forma $\exp\{-\frac{1}{2} \rho\}$. As funções g e f , portanto, decrescem exponencialmente para valores muito grandes de r .

Considere que

$$g(\rho) = c_1 e^{-\frac{1}{2} \rho} , \quad (\text{II.11a})$$

$$f(\rho) = c_2 e^{-\frac{1}{2} \rho} .$$

Ao substituir por (II.11a) as correspondentes expressões em (II.10), é encontrado que

$$c_1 = [mc^2 + \epsilon]^{1/2}, \quad (II.11b)$$

$$c_2 = -[mc^2 - \epsilon]^{1/2}.$$

Após a análise do comportamento da parte radial do bispinor ψ_ϵ nas situações de limite ($r \rightarrow 0$ e $r \rightarrow \infty$), a etapa seguinte é procurar uma forma para as funções radiais válidas para todos os valores de r .

A forma geral proposta para g e f é:

$$g_{n,\kappa}(\rho) = [mc^2 + \epsilon]^{1/2} \rho^{\gamma-1} e^{-\rho/2} \left[aL_n^{(2\gamma)}(\rho) + bL_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right], \quad (II.12a)$$

$$f_{n,\kappa}(\rho) = -[mc^2 - \epsilon]^{1/2} \rho^{\gamma-1} e^{-\rho/2} \left[cL_n^{(2\gamma)}(\rho) + dL_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right]. \quad (II.12b)$$

com os coeficientes a, b, c e d ainda a determinar. As expressões $L_n^{(2\gamma)}(\rho)$ denotam os polinômios de Laguerre generalizados (PLG). Tais polinômios formam uma base para o espaço das funções quadraticamente integráveis^[15].

Landau^[4] e Bethe & Salpeter^[5] utilizam os PLG na forma de funções hipergeométricas confluentes, como mostra a equação (A.1b). Contudo, Bethe & Salpeter indicam o trabalho de Davis^[9], onde este sugere o uso dos próprios PLG para facilitar a manipulação algébrica.

Para determinar os coeficientes a, b, c e d , vamos substituir em (II.8) as funções $g(\rho)$ e $f(\rho)$ respectivamente pelas expressões (II.12a) e (II.12b). As relações de recorrência abaixo,

$$L_n^{(\alpha)}(x) - L_{n-1}^{(\alpha)}(x) = \frac{1}{\alpha + n} \left[(n+1)L_{n+1}^{(\alpha)}(x) - (n+1-x)L_n^{(\alpha)}(x) \right], \quad (II.13a)$$

$$x \frac{d}{dx} L_n^{(\alpha)}(x) = n L_n^{(\alpha)}(x) - (\alpha+n) L_{n-1}^{(\alpha)}(x) \quad (\text{II. 13b})$$

e o fato de que os PLG são linearmente independentes nos leva, portanto, a obter o seguinte sistema de equações algébricas:

$$Z\alpha \left\{ \frac{mc^2 + \epsilon}{mc^2 - \epsilon} \right\}^{1/2} a - (\gamma+n-\kappa) c - nd = 0,$$

$$Z\alpha \left\{ \frac{mc^2 + \epsilon}{mc^2 - \epsilon} \right\}^{1/2} b + (2\gamma+n) c + (\gamma+n+\kappa) d = 0,$$

$$(\gamma+n+\kappa) a + nb + Z\alpha \left\{ \frac{mc^2 - \epsilon}{mc^2 + \epsilon} \right\}^{1/2} c = 0,$$

$$(2\gamma+n) a + (\gamma+n-\kappa)b - Z\alpha \left\{ \frac{mc^2 - \epsilon}{mc^2 + \epsilon} \right\}^{1/2} d = 0,$$

$$a - c = 0,$$

$$b + d = 0,$$

cujas soluções não-triviais são da forma:

$$\frac{a}{b} = - \frac{\frac{Z\alpha mc}{\lambda} - \kappa}{2\gamma + n} \quad (\text{II. 14})$$

ou, de modo equivalente,

$$\frac{a}{b} = - \frac{n}{\kappa + \frac{Z\alpha mc}{\lambda}} \quad (\text{II. 14'})$$

Para que os coeficientes não fossem nulos, foi imposta a seguinte condição:

$$\frac{Z\alpha \epsilon}{\lambda c} = \gamma + n. \quad (\text{II. 15})$$

Tomando-se a definição do parâmetro λ dada pela expressão (II.4) e isolando-se ϵ em (II.15), é encontrada a fórmula para os autovalores do espectro discreto:

$$\epsilon = \frac{mc^2}{\left[1 + \left[\frac{Z\alpha}{\gamma + n} \right]^2 \right]^{1/2}}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{II.16})$$

Seria adequado para as funções-base ψ_ϵ que não houvesse uma dependência explícita do parâmetro λ nos coeficientes a e b . Para tanto, pode-se eliminar esta dependência se as expressões (II.14) e (II.14') forem igualadas, por onde obtém-se a expressão

$$\frac{Z\alpha mc}{\lambda} = \left[(\gamma + n)^2 + (Z\alpha)^2 \right]^{1/2}, \quad (\text{II.17})$$

e substituí-la em (II.14'), que passa, assim, a ter a forma

$$\frac{b}{a} = - \frac{\kappa + [(\gamma + n)^2 + (Z\alpha)^2]^{1/2}}{n}. \quad (\text{II.14''})$$

Um certo cuidado é necessário na situação em que se toma o valor de $n=0$: neste caso, há uma indefinição na expressão acima, a não ser que o valor de κ seja negativo (lembrar-se que $\gamma = [\kappa^2 - (Z\alpha)^2]^{1/2}$). Fica claro, portanto, que para valores de $n = 0$ só se permitem valores de $\kappa < 0$.

Considere $a = A_{n,\kappa}$ uma constante de normalização a ser determinada. Com os resultados acima obtidos, as funções radiais são dadas por

$$g_{n,\kappa}(\rho) = A_{n,\kappa} (mc^2)^{1/2} \left[1 + \epsilon/mc^2 \right]^{1/2} \rho^{\gamma-1} e^{-\rho/2} \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{\kappa + [(\gamma+n)^2 + (Z\alpha)^2]^{1/2}}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right].$$

$$f_{n,\kappa}(\rho) = -A_{n,\kappa} (mc^2)^{1/2} \left[1 - \epsilon/mc^2 \right]^{1/2} \rho^{\gamma-1} e^{-\rho/2} \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{\kappa + [(\gamma+n)^2 + (Z\alpha)^2]^{1/2}}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right]$$

(II.18)

(Para $n = 0$, $L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho)$ é nulo).

Com a condição

$$\int \psi_{\epsilon}^{\dagger}(\vec{r}) \psi_{\epsilon}(\vec{r}) dV = \left(\frac{\hbar}{2\lambda} \right)^3 \int_0^{\infty} d\rho \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \psi_{n\kappa\mu}^{\dagger}(\rho, \theta, \varphi) \psi_{n\kappa\mu}(\rho, \theta, \varphi) \rho^2 \sin\theta = 1,$$

sendo $\psi_{\epsilon}(\vec{r}) = \psi_{n,\kappa,\mu}(\rho, \theta, \varphi)$ dado por (II.7), onde substituiu-se as funções radiais f e g pelas expressões (II.18), é possível obter a constante de normalização $A_{n,\kappa}$:

$$A_{n,\kappa} = \frac{1}{2(mc^2)^{1/2}} \left[\frac{n!}{\Gamma(2\gamma+n+1)} \right]^{1/2} \frac{[(\gamma+n)^2 + (Z\alpha)^2]^{1/2} - \kappa}{[(\gamma+n)^2 + (Z\alpha)^2]^{1/4}} \left(\frac{2\lambda}{\hbar} \right)^{3/2}.$$

Note que, para $n = 0$, a constante de normalização é proporcional a

$$A_{0,\kappa} \propto \left\{ 1 - \frac{\kappa}{[\gamma^2 + (Z\alpha)^2]^{1/2}} \right\}^{1/2} = \left\{ 1 - \frac{\kappa}{|\kappa|} \right\}^{1/2}.$$

Se $\kappa > 0$, o valor de $A_{0,\kappa}$ é nulo; por outro lado, se $\kappa < 0$, $A_{0,\kappa}$ é diferente de zero. Portanto, não existem soluções da equação de Dirac para uma partícula em um centro coulombiano com PLG de grau zero se os valores de κ forem positivos, como já se observou parágrafos acima.

II.E) A FORMA DAS FUNÇÕES-BASE

Os bispinores ψ_ϵ , que passarão a ser denotados por $|n \kappa \mu\rangle$, são representados na forma:

$$\begin{aligned}
 |n \kappa \mu\rangle &= \\
 &= \sqrt{2} \left[\frac{\lambda}{\hbar} \right]^{\frac{3}{2}} \left[\frac{n!}{\Gamma(2\gamma+n+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\{[(\gamma+n)^2 + (Z\alpha)^2]^{1/2} - \kappa\}^{1/2}}{[(\gamma+n)^2 + (Z\alpha)^2]^{1/4}} \rho^{\gamma-1} e^{-\rho/2} \cdot \\
 &\quad \cdot \begin{bmatrix} i(1 + \epsilon/mc^2)^{\frac{1}{2}} \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) - \frac{\kappa + [(\gamma+n)^2 + (Z\alpha)^2]^{\frac{1}{2}}}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \\ (1 - \epsilon/mc^2)^{\frac{1}{2}} \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{\kappa + [(\gamma+n)^2 + (Z\alpha)^2]^{\frac{1}{2}}}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \end{bmatrix} \\
 &\hspace{15em} (II.19)
 \end{aligned}$$

Com os valores (II.4) e (II.16) para λ e ϵ , respectivamente, e sendo $\rho = \frac{2\lambda r}{\hbar}$, tem-se as autofunções que descrevem estados ligados de uma partícula.

Outra maneira de escrever as funções-base acima é na forma a seguir, que permite uma melhor visualização das suas propriedades:

$$\begin{aligned}
 |n \kappa \mu\rangle &= \\
 &= \sqrt{2} \left[\frac{\lambda}{\hbar} \right]^{\frac{3}{2}} \left[\frac{n!}{\Gamma(2\gamma+n+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\{[(\gamma+n)^2 + (Z\alpha)^2]^{1/2} - \kappa\}^{1/2}}{[(\gamma+n)^2 + (Z\alpha)^2]^{1/4}} \rho^{\gamma-1} e^{-\rho/2} \cdot
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) \begin{pmatrix} i(1 + \epsilon/mc^2)^{\frac{1}{2}} \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \\ (1 - \epsilon/mc^2)^{\frac{1}{2}} \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \end{pmatrix} \right] + \\
& - \frac{\kappa + [(\gamma+n)^2 + (Z\alpha)^2]^{\frac{1}{2}}}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \begin{pmatrix} i(1 + \epsilon/mc^2)^{\frac{1}{2}} \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \\ -(1 - \epsilon/mc^2)^{\frac{1}{2}} \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \end{pmatrix} \Bigg] e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1}.
\end{aligned}
\tag{II.19'}$$

A função-base $|n \kappa \mu\rangle$ é completa nas variáveis espaciais r , θ , φ ; os espinores esféricos $\Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \equiv \Omega_{j\ell\mu}(\theta, \varphi)$ são autofunções dos operadores $j^2, j_z, l^2, l_z, s^2, s_z$ e formam uma base no espaço de *spin* 1/2.

Os coeficientes $(1+\epsilon/mc^2)^{1/2}$ e $(1-\epsilon/mc^2)^{1/2}$ se referem ao comportamento assintótico da função de onda de uma partícula submetida a um potencial, conforme (II.10), (II.11a), (II.11b) e determinam as amplitudes com que os espinores compõem os bispinores que representam estados de uma partícula.

O bispinor é autofunção dos operadores j^2 , j_z e do operador paridade. Lembre-se que a "grande" e "pequena" componentes possuem paridades opostas entre si, como já foi observado no final da seção II.C.

Em (II.19'), vê-se que $|n \kappa \mu\rangle$ pode ser escrito como uma combinação de bispinores nas formas:

$$\xi_1(\kappa, \mu) = \begin{bmatrix} i(1 + \epsilon/mc^2)^{\frac{1}{2}} \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \\ (1 - \epsilon/mc^2)^{\frac{1}{2}} \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \end{bmatrix},$$

$$\xi_2(\kappa, \mu) = \begin{bmatrix} i(1 + \epsilon/mc^2)^{\frac{1}{2}} \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \\ -(1 - \epsilon/mc^2)^{\frac{1}{2}} \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \end{bmatrix}$$

que são linearmente independentes.

A princípio, é possível utilizar como funções-base os bispinores ξ_1 e ξ_2 sem quaisquer vínculos entre ambos, isto é, a função-base seria dada por uma combinação linear da forma:

$$\left\{ A_1 \xi_1(\kappa, \mu) + A_2 \xi_2(\kappa, \mu) \right\} e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} L_n^{(2\gamma)}(\rho)$$

(A_1 e A_2 são coeficientes a determinar).

A função de onda total do sistema de duas partículas é construída a partir da somatória de produtos diretos das funções-base referentes a cada uma das partículas \underline{a} e \underline{b} ; portanto, caso fossem adotadas as funções-base no formato acima, os termos da função de onda total seguiriam o seguinte padrão:

$$e^{-\rho/2} \rho^{\gamma_1-1} L_{n_1}^{(2\gamma_1)}(\rho) \xi_{z_1}^a(\kappa_1, \mu_1) \otimes \xi_{z_2}^b(\kappa_2, \mu_2) L_{n_2}^{(2\gamma_2)}(\rho) e^{-\rho/2} \rho^{\gamma_2-1},$$

(*)

onde

a, b : índices que mostram a qual das partículas \underline{a} e \underline{b} o bis-

pinor se refere;

(n_1, κ_1, μ_1) e (n_2, κ_2, μ_2) : conjuntos de números quânticos que denotam a configuração do sistema;

$z_1, z_2 = 1, 2$: indicam qual o tipo de bispinor, se ξ_1 ou ξ_2 .

O uso da função de onda total, segundo o formato dado por (*), para calcular os elementos de matriz do Hamiltoniano efetivo do sistema nos levaria a uma equação quadrática de autovalores λ :

$$(\lambda^2 A + \lambda B + C)x = 0 ,$$

onde A, B, C são matrizes e x, autovetor ligado a λ .

O conjunto de autovalores obtidos comporta tanto valores de autoenergia compatíveis com a experiência como também valores não-físicos. Explica-se a ocorrência de tais valores não-físicos pelo fato dos bispinores ξ_1 e ξ_2 não estarem vinculados, ou seja, por estar sendo considerados graus de liberdade adicionais à função total do sistema. Portanto, a função-base a ser levada em conta é representada por (II.19) ou (II.19'), isto é, serão tomadas as amplitudes relativas dos bispinores dadas pelas relações (II.19) e (II.19'), ou seja, aquelas que entram na composição de um auto-estado em um centro coulombiano.

É possível escrever os coeficientes $(1+\epsilon/mc^2)^{1/2}$ e $(1-\epsilon/mc^2)^{1/2}$ em termos dos valores κ e n , a partir das relações (II.15) e (II.17):

$$\frac{Z\alpha mc}{\lambda} + \frac{Z\alpha\epsilon}{\lambda c} = \frac{Z\alpha mc}{\lambda} \left[1 + \frac{\epsilon}{mc^2} \right] = [(\gamma+n)^2 + (Z\alpha)^2]^{1/2} + (\gamma + n),$$

e, portanto, lembrando que $\rho = 2\lambda r/\hbar$,

$$\left[1 + \frac{\epsilon}{mc^2} \right] = \frac{[(\gamma+n)^2 + (Z\alpha)^2]^{\frac{1}{2}} + (\gamma + n)}{[(\gamma+n)^2 + (Z\alpha)^2]^{1/2}} \quad (\text{II.20a})$$

e

$$\left[1 - \frac{\epsilon}{mc^2} \right] = \frac{[(\gamma+n)^2 + (Z\alpha)^2]^{\frac{1}{2}} - (\gamma + n)}{[(\gamma+n)^2 + (Z\alpha)^2]^{1/2}} \quad (\text{II.20b})$$

Com as expressões (II.20a) e (II.20b), o bispinor dado por (II.19) pode ser reescrito como:

$$|n \kappa \mu\rangle =$$

$$= \sqrt{2} \left[\frac{\lambda}{\hbar} \right]^{\frac{3}{2}} \left[\frac{n!}{\Gamma(2\gamma+n+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \left\{ \frac{[(\gamma+n)^2 + (Z\alpha)^2]^{1/2} - \kappa}{(\gamma+n)^2 + (Z\alpha)^2} \right\}^{\frac{1}{2}} \rho^{\gamma-1} e^{-\rho/2}$$

$$\left[\begin{aligned} & i \{ [(\gamma+n)^2 + (Z\alpha)^2]^{1/2} - (\gamma + n) \}^{1/2} \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \right. \\ & \quad \left. - \frac{\kappa + ((\gamma+n)^2 + (Z\alpha)^2)^{1/2}}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \\ & \{ [(\gamma+n)^2 + (Z\alpha)^2]^{1/2} - (\gamma + n) \}^{1/2} \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \right. \\ & \quad \left. + \frac{\kappa + ((\gamma+n)^2 + (Z\alpha)^2)^{1/2}}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \end{aligned} \right]$$

(II.19'')

Tem-se, assim, as funções que descrevem os estados ligados de uma partícula em um centro coulombiano.

II.F) O LIMITE NÃO-RELATIVÍSTICO

O limite não-relativístico da função de onda (II.19'') pode ser obtido se $c \rightarrow \infty$ ou $\alpha = 0$:

$\gamma \rightarrow |\kappa|,$

$$|n \kappa \mu \rangle_{c \rightarrow \infty} = \sqrt{2} \left[\frac{\lambda}{\hbar} \right]^{\frac{3}{2}} \left[\frac{n!}{\Gamma(2|\kappa|+n+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{[n+|\kappa|-\kappa]^{1/2}}{|\kappa|+n} \rho^{|\kappa|-1} e^{-\rho/2} \cdot$$

$$\left[\begin{array}{c} i[2(|\kappa|+n)]^{1/2} \left[L_n^{(2|\kappa|)}(\rho) - \frac{\kappa+|\kappa|+n}{n} L_{n-1}^{(2|\kappa|)}(\rho) \right] \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \\ 0 \end{array} \right]$$

Para valores de $\kappa < 0$ ou $\kappa = -(\ell+1)$ e $n \geq 0$, tem-se que

$$|N -(\ell+1) \mu \rangle = \frac{2i}{N^{1/2}} \left[\frac{\lambda}{\hbar} \right]^{\frac{3}{2}} \left[\frac{(N-\ell-1)!}{(N+\ell)!} \right]^{\frac{1}{2}} \rho^\ell e^{-\rho/2} L_{N-\ell-1}^{(2\ell+1)}(\rho) \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n})$$

(II.21a)

onde $n = N-\ell-1$, sendo N identificado como o número quântico principal, já que n indica o número de raízes do polinômio. Aqui usou-se a relação de recorrência abaixo:

$$L_n^{(2\ell+2)}(\rho) - L_{n-1}^{(2\ell+2)}(\rho) = L_n^{(2\ell+1)}(\rho) = L_{N-\ell-1}^{(2\ell+1)}(\rho)$$

Por sua vez, valores de $\kappa > 0$, ou $\kappa = \ell$, e $n \geq 1$, levam ao seguinte resultado:

$$|n \kappa \mu \rangle_{c \rightarrow \infty} = \frac{2}{i} \left[\frac{\lambda}{\hbar} \right]^{\frac{3}{2}} \left[\frac{n!}{(2\ell+n'+1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{(n'+\ell+1)^{1/2}} \rho^\ell e^{-\rho/2} \frac{1}{\rho} \cdot$$

$$\cdot \left[(2\ell+n'+1)L_{n'}^{(2\ell)}(\rho) - (n'+1)L_{n'+1}^{(2\ell)}(\rho) \right] \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}).$$

Por conveniência, usou-se $n' = n-1$. Considerando $n' = N-\ell-1$, $n' \geq 0$, e usando o fato que

$$\frac{1}{\rho} \left[(2\ell+n'+1)L_{n'}^{(2\ell)}(\rho) - (n'+1)L_{n'+1}^{(2\ell)}(\rho) \right] = L_{n'}^{(2\ell+1)}(\rho)$$

chega-se à expressão abaixo:

$$|N \ell \mu\rangle = -\frac{2i}{N^{1/2}} \left[\frac{\lambda}{\hbar}\right]^{\frac{3}{2}} \left[\frac{(N-\ell-1)!}{(N+\ell)!}\right]^{\frac{1}{2}} \rho^\ell e^{-\rho/2} L_{N-\ell-1}^{(2\ell+1)}(\rho) \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \quad (\text{II.21b})$$

Ambos os resultados (II.21a) e (II.21b) são condizentes com a função de onda não-relativística de uma partícula num potencial coulombiano, obtida por meio da equação de Pauli.

II.G) ALGUMAS DEFINIÇÕES

Para abreviar um pouco as expressões encontradas neste trabalho, defini-se as seguintes funções:

$$z(\kappa, n) = [(\gamma+n)^2 + (Z\alpha)^2]^{1/2} = [\kappa^2 + 2\gamma n + n^2]^{1/2} \quad (\text{II.22a})$$

$$\Delta_+(\kappa, n) = [z(\kappa, n) + \gamma + n]^{1/2} \quad (\text{II.22b})$$

$$\Delta_-(\kappa, n) = [z(\kappa, n) - (\gamma + n)]^{1/2} \quad (\text{II.22c})$$

$$\eta_+(\kappa, n) = [z(\kappa, n) + \kappa]^{1/2} \quad (\text{II.22d})$$

$$\eta_-(\kappa, n) = [z(\kappa, n) - \kappa]^{1/2} \quad (\text{II.22e})$$

Com elas, as funções-base (II.19") tomam a forma:

$$|n \kappa \mu\rangle = \sqrt{2} \left[\frac{\lambda}{\hbar}\right]^{\frac{3}{2}} \left[\frac{n!}{\Gamma(2\gamma+n+1)}\right]^{\frac{1}{2}} \frac{\eta_-(\kappa, n)}{z(\kappa, n)} \rho^{\gamma-1} e^{-\rho/2} \cdot \left[\begin{array}{l} i\Delta_+(\kappa, n) \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) - \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \\ \Delta_-(\kappa, n) \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \end{array} \right] \quad (\text{II.23})$$

As definições (II.22a ... e) serão utilizadas a partir daqui em todo o trabalho.

II.H) CÁLCULO DA SUPERPOSIÇÃO

É calculada nesta seção a superposição ("overlapping") do bispinor ψ_{ϵ} ,

$$\psi_{\epsilon}(\rho, \theta, \varphi) = \begin{bmatrix} ig_{n,\kappa}(\rho) \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \\ -f_{n,\kappa}(\rho) \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \end{bmatrix}$$

usando a sua forma (II.19") ou (II.23) e as condições de ortogonalidade dos espinores esféricos^[4] e dos PLG^[8]:

$$\int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \left[\Omega_{j'\ell'\mu'}(\vec{n}) \right]^{\dagger} \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \sin\theta \, d\varphi \, d\theta = \delta_{j'j} \delta_{\ell'\ell} \delta_{\mu'\mu} = \delta_{\kappa'\kappa} \delta_{\mu'\mu} \quad (\text{II.24a})$$

$$\int_0^{\infty} e^{-\rho} \rho^{2\gamma} L_{n'}^{(2\gamma)}(\rho) L_n^{(2\gamma)}(\rho) \, d\rho = \frac{\Gamma(2\gamma+n+1)}{n!} \delta_{n',n} \quad (\text{II.24b})$$

Assim,

$$\begin{aligned} \langle n'\kappa'\mu' | n \kappa \mu \rangle &= \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \psi_{n'\kappa'\mu'}^{\dagger}(\rho, \theta, \varphi) \psi_{n\kappa\mu}(\rho, \theta, \varphi) \rho^2 \sin\theta \, d\varphi \, d\theta \, d\rho = \\ &= \int_0^{\infty} d\rho \rho^2 \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \left[-ig_{n',\kappa'}(\rho) \Omega_{j'\ell'\mu'}^{\dagger}(\vec{n}) ; -f_{n,\kappa}(\rho) \Omega_{j\bar{\ell}\mu}^{\dagger}(\vec{n}) \right]. \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} ig_{n,\kappa}(\rho) \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \\ -f_{n,\kappa}(\rho) \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \end{bmatrix} =$$

$$\begin{aligned}
&= \int_0^\infty d\rho \rho^2 \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \left[g_{n',\kappa}(\rho) g_{n,\kappa}(\rho) \Omega_{j,\ell,\mu}^\dagger(\vec{n}) \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) + \right. \\
&\quad \left. + f_{n',\kappa}(\rho) f_{n,\kappa}(\rho) \Omega_{j,\bar{\ell},\mu}^\dagger(\vec{n}) \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \right] = \\
&= \delta_{\kappa',\kappa} \delta_{\mu',\mu} \int_0^\infty d\rho \rho^2 \left[g_{n',\kappa}(\rho) g_{n,\kappa}(\rho) + f_{n',\kappa}(\rho) f_{n,\kappa}(\rho) \right].
\end{aligned}$$

Observe que o conjunto de valores $\{j, \ell, \bar{\ell}\}$ estão associados ao mesmo κ . Substituindo $g_{n,\kappa}(\rho)$ e $f_{n,\kappa}(\rho)$ pelas suas respectivas expressões encontradas em (II.23) e usando a relação de ortogonalidade dos PLG, chega-se ao valor abaixo para o superposição:

$$\begin{aligned}
\langle n' \kappa' \mu' | n \kappa \mu \rangle &= \delta_{\kappa',\kappa} \delta_{\mu',\mu} \left\{ \delta_{n',n} + \right. \\
&\quad - \frac{\eta_-(\kappa', n) \eta_+(\kappa', n')}{4\mathcal{Z}(\kappa', n) \mathcal{Z}(\kappa', n')} \left[\Delta_+(\kappa', n') \Delta_+(\kappa', n) - \Delta_-(\kappa', n') \Delta_-(\kappa', n) \right] \delta_{n', n+1} + \\
&\quad \left. - \frac{\eta_-(\kappa', n') \eta_+(\kappa', n)}{4\mathcal{Z}(\kappa', n') \mathcal{Z}(\kappa', n)} \left[\Delta_+(\kappa', n') \Delta_+(\kappa', n) - \Delta_-(\kappa', n') \Delta_-(\kappa', n) \right] \delta_{n', n-1} \right\}.
\end{aligned} \tag{II.25a}$$

Numa forma mais abreviada, pode-se escrever que

$$\langle n' \kappa' \mu' | n \kappa \mu \rangle = \delta_{\kappa',\kappa} \delta_{\mu',\mu} \langle n' \kappa' || n \kappa \rangle \tag{II.25b}$$

onde

$$\begin{aligned}
\langle n' \kappa' || n \kappa \rangle &= \delta_{n',n} - \delta_{n',n\pm 1} \frac{1}{4} \frac{\eta_-(\kappa', n_{<}) \eta_+(\kappa', n_{>})}{\mathcal{Z}(\kappa', n_{<}) \mathcal{Z}(\kappa', n_{>})} \cdot \\
&\quad \cdot \left[\Delta_+(\kappa', n') \Delta_+(\kappa', n) - \Delta_-(\kappa', n') \Delta_-(\kappa', n) \right] \tag{II.25c}
\end{aligned}$$

sendo que $n_{>} = \max(n', n)$ e $n_{<} = \min(n', n)$, desde que $n' = n \pm 1$.

Em (II.25a), pode-se perceber que os termos à direita da igualdade são excludentes entre si, isto é, quando um deles apresentar um valor não-nulo, os demais se igualam a zero.

CAPÍTULO III

EQUAÇÃO SECULAR

A partir das funções de uma partícula apresentadas no capítulo anterior, constrói-se a função de onda total para um certo valor de momento angular J do sistema de duas partículas de Dirac. Em seguida, calcula-se os elementos de matriz do Hamiltoniano do sistema. Tal procedimento leva a um sistema de equações algébricas que permite obter os autovalores e os autovetores do sistema de dois férmions em um centro coulombiano.

Primeiramente, na seção III.A deste capítulo, são apresentados a equação de autovalores e a função total; em seguida, na seção III.B, são obtidos os elementos de matriz dos operadores contidos no Hamiltoniano que atuam nas coordenadas de uma única partícula; na seção III.C se encontram os elementos de matriz do operador de interação coulombiana entre ambas as partículas; finalmente, na seção III.D, tem-se um resumo de todos os elementos de matriz obtidos nas seções anteriores e o sistema de equações algébricas.

III.A) A EQUAÇÃO DE AUTOVALORES E A FUNÇÃO TOTAL

O Hamiltoniano modelo é, conforme a equação (I.1),

$$\mathcal{H}(1,2) = c\vec{\alpha}_1 \cdot \vec{p}_1 + c\vec{\alpha}_2 \cdot \vec{p}_2 + mc^2(\beta_1 + \beta_2) - Ze^2 \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

e a equação de autovalores é dado por

$$\left[\mathcal{H}(1,2) - E \right] \Psi_{JM}(1,2) = 0,$$

onde $\Psi_{JM}(1,2)$ é a função total, conforme a equação (I.2).

Como foi feito no capítulo sobre as funções-base, vamos dividir a equação acima por $2\lambda c$, onde λ está relacionado com o *momentum* quadrático médio por partícula:

$$\left\{ \left[\frac{1}{2\lambda} \vec{\alpha}_1 \cdot \vec{p}_1 + \frac{mc}{2\lambda} \beta_1 - \frac{Z\alpha}{\rho_1} - \frac{E}{4\lambda c} \right] + \left[\frac{1}{2\lambda} \vec{\alpha}_2 \cdot \vec{p}_2 + \frac{mc}{2\lambda} \beta_2 - \frac{Z\alpha}{\rho_2} - \frac{E}{4\lambda c} \right] + \frac{\hbar}{2\lambda} \frac{\alpha}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right\} \Psi_{JM}(1,2) = 0.$$

Considere o autovalor $E = 2\epsilon$, onde ϵ é a energia por partícula; assim, a equação passa a ser escrita na forma:

$$\left\{ \left[\hbar_1 - \frac{\epsilon}{2\lambda c} \right] + \left[\hbar_2 - \frac{\epsilon}{2\lambda c} \right] + \frac{\hbar}{2\lambda} \frac{\alpha}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right\} \Psi_{JM}(1,2) = 0, \quad (\text{III.1})$$

onde

$$\hbar_s - \frac{\epsilon}{2\lambda c} = \frac{1}{2\lambda} \vec{\alpha}_s \cdot \vec{p}_s + \frac{mc}{2\lambda} \beta_s - \frac{\epsilon}{2\lambda c} - \frac{Z\alpha}{\rho_s}, \quad s = 1, 2. \quad (\text{III.2})$$

A função $\Psi_{JM}(1,2)$ é escrita em termos de uma somatória de produtos diretos anti-simetrizados das funções-base já apresentadas no capítulo anterior. Os índices J e M se referem respectivamente ao momento angular total dos férmions 1 e 2 do sistema em questão e à projeção deste momento no eixo z . Explicitamente,

$$\Psi_{JM}(1,2) = \sum_{\substack{n_1 \kappa_1 n_2 \kappa_2}} A_{n_1 \kappa_1 n_2 \kappa_2} \frac{1}{2} (1-P(1,2)) \sum_{\mu_1 \mu_2} \langle j_1 j_2 \mu_1 \mu_2 | J M \rangle.$$

$$\cdot [(1)|n_1 \kappa_1 \mu_1\rangle] \otimes [(2)|n_2 \kappa_2 \mu_2\rangle].$$

(III.3)

(O operador $P(1,2)$ é o operador de troca das partículas).

A somatória é realizada para todos os valores possíveis de $n_1, \kappa_1, \mu_1, n_2, \kappa_2, \mu_2$ tal que para $\kappa < 0$, $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ e para $\kappa > 0$, $n = 1, 2, \dots$; escolhido um certo valor para J , o coeficiente de Clebsch-Gordan $\langle j_1 j_2 \mu_1 \mu_2 | J M \rangle$ cuida para que na somatória entrem somente os termos que seguem a seguinte relação de desigualdade triangular:

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2,$$

onde

$$j_1 = |\kappa_1| - \frac{1}{2};$$

$$j_2 = |\kappa_2| - \frac{1}{2};$$

μ_1 : projeção no eixo z de j_1 ;

μ_2 : projeção no eixo z de j_2 ;

$$\mu_1 + \mu_2 = M.$$

Os coeficientes $A_{n_1 \kappa_1 n_2 \kappa_2}$, que serão calculados, dão a amplitude de probabilidade com que uma possível configuração $(n_1, \kappa_1; n_2, \kappa_2)$ comparece em um certo estado estacionário do sistema.

Nas funções-base $[(s)|n \kappa \mu \rangle]$, o índice s denota as coordenadas $\rho_s, \theta_s, \varphi_s$ das partículas 1 e 2. Sob a ação do operador $P(1,2)$, tem-se que:

$$\begin{aligned} (1 - P(1,2))[(1)|n_1 \kappa_1 \mu_1\rangle] \otimes [(2)|n_2 \kappa_2 \mu_2\rangle] = \\ = [(1)|n_1 \kappa_1 \mu_1\rangle] \otimes [(2)|n_2 \kappa_2 \mu_2\rangle] - [(1)|n_2 \kappa_2 \mu_2\rangle] \otimes [(2)|n_1 \kappa_1 \mu_1\rangle]. \end{aligned}$$

(III.4)

Um conjunto de equações algébricas é obtido a partir da equação (III.1) se multiplicarmos à sua esquerda por (1 - P(1,2)).

$$\cdot \left[\sum_{\mu'_1 \mu'_2} \langle j'_1 j'_2 \mu'_1 \mu'_2 | J' M' \rangle [(1) | n'_1 \kappa'_1 \mu'_1 \rangle] \otimes [(2) | n'_2 \kappa'_2 \mu'_2 \rangle] \right]^\dagger =$$

$$= (1 - P(1,2)) \sum_{\mu'_1 \mu'_2} \langle j'_1 j'_2 \mu'_1 \mu'_2 | J' M' \rangle [(1) \langle n'_1 \kappa'_1 \mu'_1 |] \otimes$$

$$\otimes [(2) \langle n'_2 \kappa'_2 \mu'_2 |].$$

e integrarmos o produto obtido nas variáveis ρ , θ , φ . O resultado de tal procedimento denominamos elementos de matriz. A seguir, serão calculados os elementos de matriz de cada um dos operadores que compõem o Hamiltoniano modelo.

III.B) ELEMENTOS DE MATRIZ DOS OPERADORES DE UMA PARTÍCULA

Denominamos operadores de uma partícula aqueles que, no Hamiltoniano modelo, atuam apenas sobre as coordenadas de uma das partículas 1 e 2. Eles estão representados pelo operador $\hbar_s - \frac{\epsilon}{2\lambda c}$ (vide expressão (III.2)).

Os elementos de matriz destes operadores, escolhido uma certa configuração $(n_1, \kappa_1; n_2, \kappa_2)$, são dados por

$$\frac{1}{2}(1-P(1,2)) \sum_{\mu_1 \mu_2} \langle j_1 j_2 \mu_1 \mu_2 | J M \rangle [(1) \langle n_1 \kappa_1 \mu_1 |] \otimes [(2) \langle n_2 \kappa_2 \mu_2 |].$$

$$\cdot \left\{ \left[\hbar_1 - \frac{\epsilon}{2\lambda c} \right] + \left[\hbar_2 - \frac{\epsilon}{2\lambda c} \right] \right\} \frac{1}{2}(1-P(1,2)) \sum_{\mu_1 \mu_2} \langle j_1 j_2 \mu_1 \mu_2 | J M \rangle \cdot$$

$$\cdot [(1) | n_1 \kappa_1 \mu_1 \rangle] \otimes [(2) | n_2 \kappa_2 \mu_2 \rangle] =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\mu_1' \mu_2' \mu_1 \mu_2} \langle j_1' j_2' \mu_1' \mu_2' | J' M' \rangle \langle j_1 j_2 \mu_1 \mu_2 | J M \rangle.$$

$$\cdot [(1) \langle n_1' \kappa_1' \mu_1' |] \otimes [(2) \langle n_2' \kappa_2' \mu_2' |] \left\{ \left[\hbar_1 - \frac{\epsilon}{2\lambda c} \right] + \left[\hbar_2 - \frac{\epsilon}{2\lambda c} \right] \right\} \cdot \\ \cdot (1-P(1,2)) [(1) |n_1 \kappa_1 \mu_1 \rangle] \otimes [(2) |n_2 \kappa_2 \mu_2 \rangle].$$

O operador $P(1,2)$ comuta com $[\hbar_1 - \frac{\epsilon}{2\lambda c}] + [\hbar_2 - \frac{\epsilon}{2\lambda c}]$, bem como com o Hamiltoniano total.

A expressão acima se torna, usando (III.4) e a expressão (II.25b) para a superposição:

$$\frac{1}{2} \sum_{\mu_1' \mu_2' \mu_1 \mu_2} \langle j_1' j_2' \mu_1' \mu_2' | J' M' \rangle \langle j_1 j_2 \mu_1 \mu_2 | J M \rangle \cdot \left\{ [(1) \langle n_1' \kappa_1' \mu_1' |] \left[\hbar_1 - \frac{\epsilon}{2\lambda c} \right] [(1) |n_1 \kappa_1 \mu_1 \rangle] \otimes \right. \\ \otimes [(2) \langle n_2' \kappa_2' \mu_2' |] [(2) |n_2 \kappa_2 \mu_2 \rangle] + \\ - [(1) \langle n_1' \kappa_1' \mu_1' |] \left[\hbar_1 - \frac{\epsilon}{2\lambda c} \right] [(1) |n_2 \kappa_2 \mu_2 \rangle] \otimes \\ \otimes [(2) \langle n_2' \kappa_2' \mu_2' |] [(2) |n_1 \kappa_1 \mu_1 \rangle] + \\ + [(1) \langle n_1' \kappa_1' \mu_1' |] [(1) |n_1 \kappa_1 \mu_1 \rangle] \otimes \\ \otimes [(2) \langle n_2' \kappa_2' \mu_2' |] \left[\hbar_2 - \frac{\epsilon}{2\lambda c} \right] [(2) |n_2 \kappa_2 \mu_2 \rangle] + \\ - [(1) \langle n_1' \kappa_1' \mu_1' |] [(1) |n_2 \kappa_2 \mu_2 \rangle] \otimes \\ \left. \otimes [(2) \langle n_2' \kappa_2' \mu_2' |] \left[\hbar_2 - \frac{\epsilon}{2\lambda c} \right] [(2) |n_1 \kappa_1 \mu_1 \rangle] \right\} = \\ = \frac{1}{2} \sum_{\mu_1' \mu_2' \mu_1 \mu_2} \langle j_1' j_2' \mu_1' \mu_2' | J' M' \rangle \langle j_1 j_2 \mu_1 \mu_2 | J M \rangle \cdot \\ \cdot \left\{ \langle n_1' \kappa_1' \mu_1' | \hbar_1 - \frac{\epsilon}{2\lambda c} | n_1 \kappa_1 \mu_1 \rangle \delta_{\kappa_2' \kappa_2} \delta_{\mu_2' \mu_2} \langle n_2' \kappa_2' | n_2 \kappa_2 \rangle + \right. \\ - \langle n_1' \kappa_1' \mu_1' | \hbar_1 - \frac{\epsilon}{2\lambda c} | n_2 \kappa_2 \mu_2 \rangle \delta_{\kappa_2' \kappa_1} \delta_{\mu_2' \mu_1} \langle n_2' \kappa_2' | n_1 \kappa_1 \rangle + \\ \left. + \delta_{\kappa_1' \kappa_1} \delta_{\mu_1' \mu_1} \langle n_1' \kappa_1' | n_1 \kappa_1 \rangle \langle n_2' \kappa_2' \mu_2' | \hbar_2 - \frac{\epsilon}{2\lambda c} | n_2 \kappa_2 \mu_2 \rangle + \right.$$

$$- \delta_{\kappa'_1 \kappa'_2} \delta_{\mu'_1 \mu'_2} \langle n'_1 \kappa'_1 | | n_2 \kappa_2 \rangle \langle n'_2 \kappa'_2 \mu'_2 | \hbar - \frac{\epsilon}{2\lambda c} | n_1 \kappa_1 \mu_1 \rangle \}. \quad (\text{III.5})$$

A expressão $\langle n' \kappa' \mu' | \hbar - \frac{\epsilon}{2\lambda c} | n \kappa \mu \rangle$ representa o produto escalar nas variáveis de *spin* e orbitais. Os resultados das integrais referentes a cada um dos termos do operador \hbar são apresentados abaixo.

Elementos de matriz do operador $\frac{1}{2\lambda} \vec{\alpha} \cdot \vec{p}$

Para este operador, na representação "standard", tem-se o seguinte resultado:

$$\begin{aligned} \langle n' \kappa' \mu' | \frac{\vec{\alpha} \cdot \vec{p}}{2\lambda} | n \kappa \mu \rangle &= \langle n' \kappa' \mu' | \frac{1}{2\lambda} \begin{bmatrix} 0 & \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & 0 \end{bmatrix} | n \kappa \mu \rangle = \\ &= \frac{\lambda}{4mc} \left[\frac{n'! n!}{\Gamma(2\gamma' + n' + 1) \Gamma(2\gamma' + n + 1)} \right]^{1/2} \frac{\eta_-(\kappa', n') \eta_-(\kappa', n)}{\sqrt{\varphi(\kappa', n') \varphi(\kappa', n)}} \delta_{\kappa' \kappa} \delta_{\mu' \mu} \cdot \\ &\cdot \left[2\varphi(\kappa', n) I_{n', n}^{(2\gamma')} - \frac{2(\gamma' + n)}{n} \eta_+^2(\kappa', n) I_{n', n-1}^{(2\gamma')} + \frac{1}{n} \eta_+^2(\kappa', n) N_{n', n-1}^{(2\gamma')} + \right. \\ &- \frac{2(\gamma' + n)}{n'} \eta_+^2(\kappa', n') I_{n'-1, n}^{(2\gamma')} + \frac{1}{n} \eta_+^2(\kappa', n') N_{n'-1, n}^{(2\gamma')} + \\ &\left. + \frac{2}{n' n} \varphi(\kappa', n) \eta_+^2(\kappa', n') \eta_+^2(\kappa', n) I_{n'-1, n-1}^{(2\gamma')} \right]. \quad (\text{III.6}) \end{aligned}$$

onde $\gamma' = [\kappa'^2 - (Z\alpha)^2]^{1/2}$.

As funções $\varphi(\kappa, n)$ e $\eta_+(\kappa, n)$ são mostradas, respectivamente, em (II.22a) e (II.22d); os símbolos $N_{n', n}^{(2\gamma')}$ e $I_{n', n}^{(2\gamma')}$ se referem ao resultado das integrais abaixo, que envolvem os polinômios de Laguerre generalizados (PLG):

$$N_{n', n}^{(2\gamma')} = \int_0^{\infty} d\rho \rho^{2\gamma'} e^{-\rho} L_{n'}^{(2\gamma')}(\rho) L_n^{(2\gamma')}(\rho) =$$

$$= \frac{\Gamma(2\gamma' + n + 1)}{n!} \delta_{n', n}, \quad n', n \geq 0; \quad (\text{III.7a})$$

$$\begin{aligned} I_{n', n}^{(2\gamma')} &= \int_0^\infty d\rho \rho^{2\gamma'-1} e^{-\rho} L_{n'}^{(2\gamma')}(\rho) L_n^{(2\gamma')}(\rho) = \\ &= \sum_{v=0}^{\min(n', n)} \frac{\Gamma(2\gamma' + v)}{v!}, \quad n', n \geq 0. \quad (\text{III.7b}) \end{aligned}$$

O resultado dado por $N_{n', n}^{(2\gamma')}$ é a relação de ortogonalidade dos PLG, já mostrada em (II.24b); a resolução da integral (III.7b) se encontra no apêndice A.

A forma utilizada para a função-base $|n \kappa \mu\rangle$ foi a expressão (II.19) que, com as notações apresentadas em (II.22a) a (II.22e), torna-se

$$\begin{aligned} |n \kappa \mu\rangle &= \sqrt{2} \left[\frac{\lambda}{\hbar} \right]^{3/2} \left[\frac{n!}{\Gamma(2\gamma + n + 1)} \right]^{1/2} \eta_{-}(\kappa, n) \zeta^{-1/2}(\kappa, n) \cdot \\ &\cdot e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} \left[\begin{array}{l} i(1+\epsilon/mc^2)^{1/2} \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) - \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \\ (1-\epsilon/mc^2)^{1/2} \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \end{array} \right]. \end{aligned} \quad (\text{III.8})$$

Os detalhes sobre o cálculo do elemento de matriz (III.6) se encontram no apêndice B.

elemento de matriz do operador $\left[\frac{mc}{2\lambda} \beta - \frac{\epsilon}{2\lambda c} \right]$

Para este operador, o elemento de matriz é representado por:

$$\langle n' \kappa' \mu' | \frac{mc}{2\lambda} \beta - \frac{\epsilon}{2\lambda c} | n \kappa \mu \rangle = \langle n' \kappa' \mu' | \left[\begin{array}{cc} \frac{mc^2 - \epsilon}{2\lambda c} & 0 \\ 0 & -\frac{mc^2 + \epsilon}{2\lambda c} \end{array} \right] | n \kappa \mu \rangle =$$

$$= - \frac{\lambda}{4mc} \left[\frac{n!n!}{\Gamma(2\gamma'+n'+1)\Gamma(2\gamma'+n+1)} \right]^{1/2} \frac{\eta_-(\kappa', n')\eta_-(\kappa', n)}{\sqrt{\varphi(\kappa', n')\varphi(\kappa', n)}} \delta_{\kappa'\kappa} \delta_{\mu'\mu} \cdot \left\{ \frac{\eta_+^2(\kappa', n)}{n} N_{n', n-1}^{(2\gamma')} + \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} N_{n'-1, n}^{(2\gamma')} \right\}. \quad (\text{III.9})$$

Os termos $\varphi(\kappa, n)$, $\eta_+(\kappa, n)$, $\eta_-(\kappa, n)$, $N_{n', n}^{(2\gamma')}$ são, respectivamente, dados por (II.22a), (II.22d), (II.22e) e (III.7a). O cálculo do elemento acima se encontra no apêndice B. A forma da função-base utilizada acima é a mesma que se usou no cálculo do elemento de matriz do operador $\frac{1}{2\lambda} \vec{\alpha} \cdot \vec{p}$, isto é, a forma (III.8).

Juntando os elementos de matriz (III.6) e (III.9), obtém-se a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \langle n' \kappa' \mu' | \frac{1}{2\lambda} \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \frac{1}{2\lambda} \left[mc\beta - \frac{\epsilon}{c} \right] | n \kappa \mu \rangle = \\ = \frac{\lambda}{2mc} \left[\frac{n!n!}{\Gamma(2\gamma'+n'+1)\Gamma(2\gamma'+n+1)} \right]^{1/2} \frac{\eta_-(\kappa', n')\eta_-(\kappa', n)}{\sqrt{\varphi(\kappa', n')\varphi(\kappa', n)}} \delta_{\kappa'\kappa} \delta_{\mu'\mu} \cdot \\ \cdot \left[\varphi(\kappa', n) I_{n', n}^{(2\gamma')} - \frac{(\gamma'+n) \eta_+^2(\kappa', n)}{n} I_{n', n-1}^{(2\gamma')} - \right. \\ \left. - \frac{(\gamma'+n) \eta_+^2(\kappa', n')}{n'} I_{n'-1, n}^{(2\gamma')} + \varphi(\kappa', n) \frac{\eta_+^2(\kappa', n')\eta_+^2(\kappa', n)}{n'n} \right. \\ \left. \cdot I_{n'-1, n-1}^{(2\gamma')} \right]. \quad (\text{III.10}) \end{aligned}$$

Elementos de matriz do operador $-\frac{Z\alpha}{\rho}$

O operador $-Z\alpha/\rho$ representa o potencial do centro de Coulomb o qual cada partícula está submetida.

A dedução do elemento de matriz referente a este operador, se for usada a função-base na forma (III.8), nos leva a obter uma expressão para o elemento de matriz que contém os fatores $(1+\epsilon/mc^2)$ e $(1-\epsilon/mc^2)$. O primeiro fator, $(1+\epsilon/mc^2)$, surge do pro-

duto matricial entre as "grandes" componentes dos bispinores de índices n', κ', μ' e n, κ, μ que compõem o elemento de matriz. O segundo fator, por sua vez, surge do produto entre as "pequenas" componentes.

Esses fatores podem ser substituídos pelas relações (II.20a) e (II.20b), respectivamente, já que estas relações estão associadas com as amplitudes relativas entre os polinômios de Laguerre generalizados $L_n^{(2\gamma)}(\rho)$ e $L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho)$ existentes em cada uma das componentes (a "grande" e a "pequena") da função-base.

É mais cômodo, contudo, usar a função-base na forma (II.23), onde já se encontram substituídos os fatores em discussão pelas relações supracitadas:

$$\begin{aligned}
 |n \kappa \mu \rangle = & \\
 = \sqrt{2} \left(\frac{\lambda}{\hbar} \right)^{3/2} & \left[\frac{n!}{\Gamma(2\gamma+n+1)} \right]^{1/2} \frac{\eta_-(\kappa, n)}{\varphi(\kappa, n)} e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} \cdot \\
 & \cdot \begin{bmatrix} i\Delta_+(\kappa, n) \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) - \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \\ \Delta_-(\kappa, n) \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \end{bmatrix} .
 \end{aligned}$$

Adotando a forma acima para a função-base no cálculo do elemento de matriz do operador $-Z\alpha/\rho$ (vide detalhes no apêndice C), obtém-se que:

$$\begin{aligned}
 \langle n' \kappa' \mu' | -\frac{Z\alpha}{\rho} |n \kappa \mu \rangle = & \\
 = -\frac{Z\alpha}{4} \left[\frac{n'!n!}{\Gamma(2\gamma'+n'+1)\Gamma(2\gamma'+n+1)} \right]^{1/2} & \frac{\eta_-(\kappa', n')\eta_-(\kappa', n)}{\varphi(\kappa', n')\varphi(\kappa', n)} \delta_{\kappa'\kappa} \delta_{\mu'\mu} \cdot \\
 \cdot \left\{ \left[\Delta_+(\kappa', n')\Delta_+(\kappa', n) + \Delta_-(\kappa', n')\Delta_-(\kappa', n) \right] \right. & \left. \left[I_{n', n}^{(2\gamma')} + \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} \right] \right. \\
 \cdot \frac{\eta_+^2(\kappa', n)}{n} I_{n'-1, n-1}^{(2\gamma')} & \left. + \left[\Delta_-(\kappa', n')\Delta_-(\kappa', n) - \Delta_+(\kappa', n')\Delta_+(\kappa, n) \right] \right\} .
 \end{aligned}$$

$$\cdot \left[\frac{\eta_+^2(\kappa', n)}{n} I_{n', n-1}^{(2\gamma')} + \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} I_{n'-1, n}^{(2\gamma')} \right] \} .$$

(III.11)

As funções $\varphi(\kappa, n)$, $\Delta_+(\kappa, n)$, $\Delta_-(\kappa, n)$, $\eta_+(\kappa, n)$, $\eta_-(\kappa, n)$ e $I_{n', n}^{(2\gamma')}$ estão definidas respectivamente em (II.22a) a (II.22e) e (III.7b). Note que a expressão acima depende somente dos valores n , n' e κ' , e é independente do parâmetro λ .

resumo dos resultados obtidos

Os elementos de matriz dos operadores que envolvem somente coordenadas de uma das partículas, ou operadores de uma partícula, são, conforme as expressões (III.10) e (III.11):

$$\begin{aligned} & \langle n' \kappa' \mu' | \frac{1}{2\lambda} \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \frac{1}{2\lambda} \left[mc\beta - \frac{\epsilon}{c} \right] | n \kappa \mu \rangle = \\ & = \frac{\lambda}{2mc} \left[\frac{n'! n!}{\Gamma(2\gamma' + n' + 1) \Gamma(2\gamma' + n + 1)} \right]^{1/2} \frac{\eta_-(\kappa', n') \eta_-(\kappa', n)}{\sqrt{\varphi(\kappa', n') \varphi(\kappa', n)}} \delta_{\kappa' \kappa} \delta_{\mu' \mu} \\ & \cdot \left[\varphi(\kappa', n) \left[I_{n', n}^{(2\gamma')} + \frac{\eta_+^2(\kappa', n') \eta_+^2(\kappa', n)}{n' n} I_{n'-1, n-1}^{(2\gamma')} \right] + \right. \\ & \quad \left. - (\gamma' + n) \left[\frac{\eta_+^2(\kappa', n)}{n} I_{n', n-1}^{(2\gamma')} + \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} I_{n'-1, n}^{(2\gamma')} \right] \right] = \\ & = \frac{\lambda}{mc} \delta_{\kappa' \kappa} \delta_{\mu' \mu} \langle n' \kappa' | CR | n \kappa \rangle, \end{aligned} \quad (III.10')$$

$$\begin{aligned} & \langle n' \kappa' \mu' | \frac{Z\alpha}{\rho} | n \kappa \mu \rangle = \\ & = \frac{Z\alpha}{4} \left[\frac{n'! n!}{\Gamma(2\gamma' + n' + 1) \Gamma(2\gamma' + n + 1)} \right]^{1/2} \frac{\eta_-(\kappa', n') \eta_-(\kappa', n)}{\varphi(\kappa', n') \varphi(\kappa', n)} \delta_{\kappa' \kappa} \delta_{\mu' \mu} \\ & \cdot \left\{ \left[\Delta_+(\kappa', n') \Delta_+(\kappa', n) + \Delta_-(\kappa', n') \Delta_-(\kappa', n) \right] \left[I_{n', n}^{(2\gamma')} + \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \frac{\eta_+^2(\kappa', n)}{n} I_{n'-1, n-1}^{(2\gamma')} \right] + \left[\Delta_-(\kappa', n') \Delta_-(\kappa', n) - \Delta_+(\kappa', n') \Delta_+(\kappa', n) \right] \right\}. \end{aligned}$$

$$\cdot \left[\frac{\eta_+^2(\kappa', n)}{n} I_{n', n-1}^{(2\gamma')} + \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} I_{n'-1, n}^{(2\gamma')} \right] \Big\} =$$

$$= \delta_{\kappa' \kappa} \delta_{\mu' \mu} \langle n' \kappa' | P | n \kappa \rangle, \quad (\text{III.11}')$$

onde $\langle n' \kappa' | CR | n \kappa \rangle$ e $\langle n' \kappa' | P | n \kappa \rangle$ são notações para abreviar os valores dos elementos de matriz.

Substituindo em (III.5) os respectivos elementos de matriz dos operadores de uma partícula pelas expressões (III.10') e (III.11'), obtém-se:

$$\begin{aligned} & [(\text{III.5})] = \\ & = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mu_1' \mu_2' \\ \mu_1 \mu_2}} \langle j_1' j_2' \mu_1' \mu_2' | J' M' \rangle \langle j_1 j_2 \mu_1 \mu_2 | J M \rangle \delta_{\kappa_1' \kappa_1} \delta_{\kappa_2' \kappa_2} \delta_{\mu_1' \mu_1} \delta_{\mu_2' \mu_2} \cdot \\ & \left\{ \left[\frac{\lambda}{mc} \langle n_1' \kappa_1' | CR_1 | n_1 \kappa_1 \rangle - \langle n_1' \kappa_1' | P_1 | n_1 \kappa_1 \rangle \right] \langle n_2' \kappa_2' | n_2 \kappa_2 \rangle + \right. \\ & \quad \left. + \langle n_1' \kappa_1' | n_1 \kappa_1 \rangle \left[\frac{\lambda}{mc} \langle n_2' \kappa_2' | CR_2 | n_2 \kappa_2 \rangle - \langle n_2' \kappa_2' | P_2 | n_2 \kappa_2 \rangle \right] \right\} + \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mu_1' \mu_2' \\ \mu_1 \mu_2}} \langle j_1' j_2' \mu_1' \mu_2' | J' M' \rangle \langle j_1 j_2 \mu_1 \mu_2 | J M \rangle \delta_{\kappa_1' \kappa_2} \delta_{\kappa_2' \kappa_1} \delta_{\mu_1' \mu_2} \delta_{\mu_2' \mu_1} \cdot \\ & \left\{ \left[\frac{\lambda}{mc} \langle n_1' \kappa_1' | CR_1 | n_2 \kappa_2 \rangle - \langle n_1' \kappa_1' | P_1 | n_2 \kappa_2 \rangle \right] \langle n_2' \kappa_2' | n_1 \kappa_1 \rangle + \right. \\ & \quad \left. + \langle n_1' \kappa_1' | n_2 \kappa_2 \rangle \left[\frac{\lambda}{mc} \langle n_2' \kappa_2' | CR_2 | n_1 \kappa_1 \rangle - \langle n_2' \kappa_2' | P_2 | n_1 \kappa_1 \rangle \right] \right\}. \end{aligned}$$

Os índices em CR_1 , CR_2 , P_1 e P_2 se referem às partículas 1 e 2; os coeficientes de Clebsch-Gordan da segunda somatória acima tornam-se^[22]:

$$\begin{aligned} & \langle j_1 j_2 \mu_1 \mu_2 | J M \rangle \delta_{\kappa_1' \kappa_2} \delta_{\kappa_2' \kappa_1} \delta_{\mu_1' \mu_2} \delta_{\mu_2' \mu_1} = \\ & = \langle j_2 j_1 \mu_2 \mu_1 | J M \rangle \delta_{\kappa_1' \kappa_2} \delta_{\kappa_2' \kappa_1} \delta_{\mu_1' \mu_2} \delta_{\mu_2' \mu_1} = \end{aligned}$$

$$= (-1)^{j_1 + j_2 - J} \delta_{\kappa'_1 \kappa'_2} \delta_{\kappa'_2 \kappa'_1} \langle j'_1 j'_2 \mu'_1 \mu'_2 | J M \rangle,$$

uma vez que $j = |\kappa| - 1/2$.

A somatória em μ'_1, μ'_2, μ_1 e μ_2 é:

$$\sum_{\mu'_1 \mu'_2 \mu_1 \mu_2} \langle j'_1 j'_2 \mu'_1 \mu'_2 | J' M' \rangle \langle j'_1 j'_2 \mu'_1 \mu'_2 | J M \rangle = \delta_{J' J} \delta_{M' M}.$$

Portanto, (III.5) é representado por:

$$\begin{aligned} [(III.5)] &= \frac{1}{2} \delta_{J' J} \delta_{M' M} \left\{ \frac{\lambda}{mc} \left[\langle n'_1 \kappa'_1 | CR_1 | n_1 \kappa_1 \rangle \langle n'_2 \kappa'_2 | | n_2 \kappa_2 \rangle + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \langle n'_1 \kappa'_1 | | n_1 \kappa_1 \rangle \langle n'_2 \kappa'_2 | CR_2 | n_2 \kappa_2 \rangle \right] \delta_{\kappa'_1 \kappa'_1} \delta_{\kappa'_2 \kappa'_2} + \right. \\ &\quad \left. - (-1)^{j_1 + j_2 - J} \left[\langle n'_1 \kappa'_1 | CR_1 | n_2 \kappa_2 \rangle \langle n'_2 \kappa'_2 | | n_1 \kappa_1 \rangle + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \langle n'_1 \kappa'_1 | | n_2 \kappa_2 \rangle \langle n'_2 \kappa'_2 | CR_2 | n_1 \kappa_1 \rangle \right] \delta_{\kappa'_1 \kappa'_2} \delta_{\kappa'_2 \kappa'_1} \right\} + \\ &\quad - \left[\left[\langle n'_1 \kappa'_1 | P_1 | n_1 \kappa_1 \rangle \langle n'_2 \kappa'_2 | | n_2 \kappa_2 \rangle + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \langle n'_1 \kappa'_1 | | n_1 \kappa_1 \rangle \langle n'_2 \kappa'_2 | P_2 | n_2 \kappa_2 \rangle \right] \delta_{\kappa'_1 \kappa'_1} \delta_{\kappa'_2 \kappa'_2} + \right. \\ &\quad \left. - (-1)^{j_1 + j_2 - J} \left[\langle n'_1 \kappa'_1 | P_1 | n_2 \kappa_2 \rangle \langle n'_2 \kappa'_2 | | n_1 \kappa_1 \rangle + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \langle n'_1 \kappa'_1 | | n_2 \kappa_2 \rangle \langle n'_2 \kappa'_2 | P_2 | n_1 \kappa_1 \rangle \right] \delta_{\kappa'_1 \kappa'_2} \delta_{\kappa'_2 \kappa'_1} \right] \left. \right\}. \end{aligned} \quad (III.12)$$

Assim, temos em (III.12), juntamente com (III.10') e (III.11'), o elemento de matriz para todos os operadores de uma partícula. Resta agora obter o elemento de matriz para o operador de interação coulombiana entre ambas as partículas 1 e 2, o operador $e^2/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, que é o assunto da seção seguinte.

III.C) ELEMENTOS DE MATRIZ PARA O OPERADOR $e^2/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$

A interação coulombiana entre os férmions 1 e 2 do sistema é representada pelo operador $e^2/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, ou, numa forma adimensional:

$$\frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \longrightarrow \frac{\alpha}{\frac{2\lambda}{\hbar}|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

conforme a equação (III.1).

O operador acima pode ser escrito como uma expansão em termos de momentos 2^{l_c} -polares, como mostra a expressão abaixo:

$$\frac{\alpha}{\frac{2\lambda}{\hbar}|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = 4\pi\alpha \sum_{l_c=0}^{\infty} \frac{1}{2l_c + 1} \frac{\rho_{<}^{l_c}}{\rho_{>}^{l_c+1}} \sum_{m_{l_c}=-l_c}^{l_c} Y_{l_c, m_{l_c}}(\vec{n}_1) Y_{l_c, m_{l_c}}^*(\vec{n}_2). \quad (\text{III.13})$$

Os vetores $\vec{r}_1 = r_1 \vec{n}_1$ e $\vec{r}_2 = r_2 \vec{n}_2$ indicam as respectivas posições de cada uma das partículas 1 e 2 em relação à origem. Conforme equação (II.5), tem-se que $\rho = (2\lambda r)/\hbar$. Se $r_1 > r_2$, então $\rho_{<} = 2\lambda r_2/\hbar$ e $\rho_{>} = 2\lambda r_1/\hbar$; caso contrário, se $r_2 > r_1$, então $\rho_{<} = 2\lambda r_1/\hbar$ e $\rho_{>} = 2\lambda r_2/\hbar$. Os símbolos $Y_{l_c, m_{l_c}}(\vec{n})$ denotam os harmônicos esféricos.

Na seção anterior III.B, os cálculos dos elementos de matriz de cada um dos operadores de uma partícula eram relativamente simples, pois envolviam somente as coordenadas de uma das partículas. Nos cálculos para obter o elemento de matriz do operador (III.13), contudo, estão vinculadas as variáveis de ambas as partículas:

$$\begin{aligned}
& \left\{ \sum_{\mu_1' \mu_2'} \langle j_1' j_2' \mu_1' \mu_2' | J' M' \rangle [(1) \langle n_1' \kappa_1' \mu_1' |] \otimes [(2) \langle n_2' \kappa_2' \mu_2' |] \right\} \frac{\alpha}{\frac{2\lambda}{\hbar} |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \\
& \cdot (1 - P(1,2)) \left\{ \sum_{\mu_1 \mu_2} \langle j_1 j_2 \mu_1 \mu_2 | JM \rangle [(1) | n_1 \kappa_1 \mu_1 \rangle] \otimes [(2) | n_2 \kappa_2 \mu_2 \rangle] \right\} = \\
& = \sum_{\mu_1' \mu_2' \mu_1 \mu_2} \langle j_1' j_2' \mu_1' \mu_2' | J' M' \rangle \langle j_1 j_2 \mu_1 \mu_2 | JM \rangle \cdot \\
& \cdot \left\{ [(1) \langle n_1' \kappa_1' \mu_1' |] \otimes [(2) \langle n_2' \kappa_2' \mu_2' |] \frac{\alpha}{\frac{2\lambda}{\hbar} |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \cdot \right. \\
& \qquad \qquad \qquad \cdot [(1) | n_1 \kappa_1 \mu_1 \rangle] \otimes [(2) | n_2 \kappa_2 \mu_2 \rangle] + \\
& \left. - [(1) \langle n_1' \kappa_1' \mu_1' |] \otimes [(2) \langle n_2' \kappa_2' \mu_2' |] \frac{\alpha}{\frac{2\lambda}{\hbar} |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \cdot \right. \\
& \qquad \qquad \qquad \cdot [(1) | n_2 \kappa_2 \mu_2 \rangle] \otimes [(2) | n_1 \kappa_1 \mu_1 \rangle] \left. \right\} .
\end{aligned}$$

(III.14)

A forma para a função-base a ser usada na dedução do elemento de matriz acima é aquela dada pela expressão (II.23). As justificativas apresentadas para a utilização desta forma para a função-base no cálculo do elemento de matriz do operador $-Z\alpha/\rho$ podem também aqui serem adotadas.

No membro à direita da igualdade na equação (III.14), encontram-se dois termos os quais convencionou-se denominá-los, respectivamente, termo direto e termo de troca.

Inicialmente, vamos calcular o termo direto. A partir da expressão obtida para este termo, é possível encontrar a expressão para o termo de troca por analogia.

Usando o operador na forma (III.13), o termo direto passa a ser escrito como uma somatória em ℓ_c e m_{ℓ_c} de integrais, onde cada uma delas podem ser separadas numa parte angular com as va-

riáveis $\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2$ e numa parte radial com as variáveis ρ_1 e

ρ_2 :

$$\sum_{\substack{j'_1 j'_2 \mu'_1 \mu'_2 \\ \mu'_1 \mu'_2 \mu_1 \mu_2}} \langle j'_1 j'_2 \mu'_1 \mu'_2 | J' M' \rangle \langle j_1 j_2 \mu_1 \mu_2 | J M \rangle [(1) \langle n'_1 \kappa'_1 \mu'_1 |] \otimes [(2) \langle n'_2 \kappa'_2 \mu'_2 |] \cdot \frac{\alpha}{\frac{2\lambda_1}{\hbar} |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} [(1) | n_1 \kappa_1 \mu_1 \rangle] \otimes [(2) | n_2 \kappa_2 \mu_2 \rangle] =$$

$$= 4\pi\alpha \sum_{\ell_c=0}^{\infty} \frac{1}{2\ell_c + 1} [(2J'+1)(2J+1)]^{1/2} (-1)^{j'_2 + j_2 - j'_1 - j_1 - M' - M}$$

$$\cdot \sum_{\substack{j'_1 j'_2 J' \\ \mu'_1 \mu'_2 -M'}} \begin{bmatrix} j'_1 & j'_2 & J' \\ \mu'_1 & \mu'_2 & -M' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ \mu_1 & \mu_2 & -M \end{bmatrix} [(1) \langle n'_1 \kappa'_1 \mu'_1 |] \otimes [(2) \langle n'_2 \kappa'_2 \mu'_2 |] \cdot$$

$$\cdot \frac{\rho_<}{\rho_>} \sum_{m_{\ell_c}=-\ell_c}^{\ell_c} Y_{\ell_c, m_{\ell_c}}(\vec{n}_1) Y_{\ell_c, m_{\ell_c}}^*(\vec{n}_2) [(1) | n_1 \kappa_1 \mu_1 \rangle] \otimes [(2) | n_2 \kappa_2 \mu_2 \rangle].$$

(III.15)

Em (III.15), os coeficientes de Clebsch-Gordan foram substituídos pelos símbolos 3-j de Wigner, conforme Messiah^[22]:

$$\langle j_1 j_2 \mu_1 \mu_2 | J M \rangle = (-1)^{j_2 - j_1 - M} (2J+1)^{1/2} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ \mu_1 & \mu_2 & -M \end{bmatrix} \quad \text{(III.16)}$$

Na parte angular, as integrais em θ_1, φ_1 são feitas separadamente das integrais em θ_2, φ_2 , levando ao seguinte resultado para o termo direto (III.15):

$$[(III.15)] =$$

$$= \frac{\alpha}{16} \sum_{\ell_c=0}^{\infty} (-1)^{j'_2 + j_2 + J} \delta_{J, J'} \delta_{M, M'} [(2j'_1+1)(2\ell'_1+1)(2\ell_1+1)(2j_1+1)]^{1/2} \cdot$$

$$\cdot [(2j'_2+1)(2\ell'_2+1)(2\ell_2+1)(2j_2+1)]^{1/2} \begin{bmatrix} \ell'_1 & \ell_c & \ell_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ell'_2 & \ell_c & \ell_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

$$\cdot \left\{ \begin{array}{ccc} l_c & j'_1 & l_1 \\ \frac{1}{2} & l_1 & l'_1 \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} l_c & j'_2 & l_2 \\ \frac{1}{2} & l_2 & l'_2 \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} j_2 & j_1 & J \\ j'_1 & j'_2 & l_c \end{array} \right\} \left[\begin{array}{c} \text{parte} \\ \text{radial} \end{array} \right] \cdot$$

(III.17)

Os valores j'_1 e l'_1 estão relacionados com κ'_1 , bem como j'_2 e l'_2 estão com κ'_2 e assim, sucessivamente, os demais j e l , por meio das expressões já apresentadas no capítulo II:

$$j = |\kappa| - \frac{1}{2},$$

$$l = \begin{cases} \kappa & , \kappa > 0; \\ -\kappa-1 & , \kappa < 0. \end{cases} \quad \text{(III.18a)}$$

Os símbolos 3-j

$$\left[\begin{array}{ccc} l' & l_c & l \\ 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \quad \text{(III.18b)}$$

e os símbolos 6-j

$$\left\{ \begin{array}{ccc} j_2 & j_1 & J \\ j'_1 & j'_2 & l_c \end{array} \right\} \quad \text{(III.18c)}$$

apresentam cada qual propriedades de simetria^[22] que restringem o número de termos na somatória em l_c , tornando-a finita. A quantidade l_c pode ser interpretada como o valor do momento do fóton trocado entre as partículas 1 e 2, levando uma delas do estado de momento total j_1 e paridade l_1 para o estado de momento j'_1 e paridade l'_1 , e a outra, do estado de momento j_2 e paridade l_2 para o estado de momento j'_2 e paridade l'_2 . O elemento de matriz (III.17), portanto, representa a amplitude de probabilidade de tal transição.

Os detalhes da dedução da fórmula transcrita em (III.17) se encontram no apêndice D.

O cálculo da parte radial do termo direto envolve, para cada valor válido de lc , a resolução de dezesseis integrais do tipo:

$$R_{lc}(n'_1, \kappa'_1, n'_2, \kappa'_2; n_1, \kappa_1, n_2, \kappa_2) =$$

$$= \int_0^\infty \int_0^\infty \rho_1^{\gamma'_1 + \gamma_1} \rho_2^{\gamma'_2 + \gamma_2} e^{-\rho_1 - \rho_2} \frac{\rho_<^{lc}}{\rho_<^{lc+1}} L_{n'_1}^{(2\gamma'_1)}(\rho_1) L_{n'_2}^{(2\gamma'_2)}(\rho_2) L_{n_1}^{(2\gamma_1)}(\rho_1) \cdot$$

$$\cdot L_{n_2}^{(2\gamma_2)}(\rho_2) d\rho_1 d\rho_2.$$

(III.19)

A integral (III.19) acima doravante será denominada integral-base, para facilitar as citações posteriores.

Como os PLG (Polinômios de Laguerre Generalizados) são representados pela forma abaixo,

$$L_n^{(2\gamma)}(\rho) = \sum_{m=0}^n \frac{(-1)^m \Gamma(2\gamma+n+1)}{m!(n-m)!\Gamma(2\gamma+m+1)} \rho^m,$$

pode-se substituí-los pela fórmula acima em (III.19), ficando esta apenas com integrais contendo potências de ρ e exponenciais $e^{-\rho}$. Estas integrais são observadas com cuidado no apêndice D.

A integral-base, resolvida, é dada por:

$$R_{lc}(n'_1, \kappa'_1, n'_2, \kappa'_2; n_1, \kappa_1, n_2, \kappa_2) =$$

$$= \frac{\Gamma(2\gamma'_1+n'_1+1)\Gamma(2\gamma'_2+n'_2+1)\Gamma(2\gamma_1+n_1+1)\Gamma(2\gamma_2+n_2+1)}{2^{\gamma'_1+\gamma'_2+\gamma_1+\gamma_2}} \cdot$$

$$\cdot \sum_{m'_1, m'_2, m_1, m_2} \frac{(-1/2)^{m'_1+m'_2+m_1+m_2}}{m'_1!(n'_1-m'_1)!m'_2!(n'_2-m'_2)!m_1!(n_1-m_1)!m_2!(n_2-m_2)!} \cdot$$

$$\cdot \frac{\Gamma(\gamma'_1+\gamma'_2+\gamma_1+\gamma_2+m'_1+m'_2+m_1+m_2+1)}{\Gamma(2\gamma'_1+m'_1+1)\Gamma(2\gamma'_2+m'_2+1)\Gamma(2\gamma_1+m_1+1)\Gamma(2\gamma_2+m_2+1)} \cdot$$

$$\cdot \left\{ \frac{1}{\gamma'_2+\gamma_2+m'_2+m_2+lc+1} {}_2F_1(1, lc-\gamma'_1-\gamma_1-m'_1-m_1+1; lc+\gamma'_2+\gamma_2+m'_2+m_2+2; -1) + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{\gamma'_1 + \gamma_1 + m'_1 + m_1 + lc + 1} {}_2F_1(1, lc - \gamma'_2 - \gamma_2 - m'_2 - m_2 + 1; lc + \gamma'_1 + \gamma_1 + m'_1 + m_1 + 2; -1) \right\}, \quad (\text{III.19'})$$

onde as funções

$${}_2F_1(a, b; c; y) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+k)\Gamma(b+k)}{k!\Gamma(c+k)} y^k \quad (\text{III.20})$$

são denominadas funções hipergeométricas de Gauss^[8].

Considere a função hipergeométrica existente em (III.19'), conforme a definição (III.20),

$$\begin{aligned} {}_2F_1(1, lc - \alpha_1 + 1; lc + \alpha_2 + 2; -1) &= \\ &= \frac{\Gamma(lc + \alpha_2 + 2)}{\Gamma(lc - \alpha_1 + 1)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(k+1)\Gamma(lc - \alpha_1 + k + 1)}{k!\Gamma(lc + \alpha_2 + k + 2)} (-1)^k, \end{aligned}$$

sendo $\alpha_1 = \gamma'_1 + \gamma_1 + m'_1 + m_1$ e $\alpha_2 = \gamma'_2 + \gamma_2 + m'_2 + m_2$.

O desenvolvimento da somatória acima leva à seguinte expressão:

$$\begin{aligned} {}_2F_1(1, lc - \alpha_1 + 1; lc + \alpha_2 + 2; -1) &= \\ &= 1 - \left[\frac{lc - \alpha_1 + 1}{lc + \alpha_2 + 2} \right] \left[1 - \left[\frac{lc - \alpha_1 + 2}{lc + \alpha_2 + 3} \right] \left[1 - \left[\frac{lc - \alpha_1 + 3}{lc + \alpha_2 + 4} \right] \left[1 - \dots \right. \right. \right. \end{aligned} \quad (\text{III.21})$$

A parte radial do termo direto indicado em (III.17) se encontra no apêndice D, equação (D.23). São dezesseis termos similares ao resultado da integral-base com os seus devidos fatores.

A dedução da parte radial do termo de troca é imediata, pois basta trocar $n_1 \leftrightarrow n_2$ e $\kappa_1 \leftrightarrow \kappa_2$ nas expressões que compõem a parte radial do termo direto. A parte angular do termo de troca,

contudo, exige um cuidado maior, para que seja possível definir a fase.

O elemento de matriz da interação coulombiana entre as partículas é, portanto, destacando somente a parte angular dos termos direto (Q_A) e de troca (Q_B):

$$\begin{aligned}
 & \langle n'_1 \kappa'_1, n'_2 \kappa'_2 | Q_A | n_1 \kappa_1, n_2 \kappa_2 \rangle - \langle n'_1 \kappa'_1, n'_2 \kappa'_2 | Q_B | n_1 \kappa_1, n_2 \kappa_2 \rangle = \\
 & = \frac{\alpha_1}{16} [(2j'_1 + 1)(2l'_1 + 1)(2l_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j'_2 + 1)(2l'_2 + 1)(2l_2 + 1)(2j_2 + 1)]^{1/2} \\
 & \cdot \left\{ (-1)^{j'_2 + j_2 + J} \sum_{l_c} \begin{bmatrix} l'_1 & l_c & l_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l'_2 & l_c & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_c & j'_1 & j_1 \\ \frac{1}{2} & l_1 & l'_1 \end{bmatrix} \right\} \cdot \\
 & \quad \cdot \left\{ \begin{bmatrix} l_c & j'_2 & j_2 \\ \frac{1}{2} & l_2 & l'_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_2 & j_1 & J \\ j'_1 & j'_2 & l_c \end{bmatrix} \right\} \cdot \left[\begin{array}{l} \text{parte} \\ \text{radial} \end{array} \right] + \\
 & - (-1)^{j'_2 + j_2 + 1} \sum_{l_c} \begin{bmatrix} l'_1 & l_c & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l'_2 & l_c & l_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_c & j'_1 & j_2 \\ \frac{1}{2} & l_2 & l'_1 \end{bmatrix} \cdot \\
 & \quad \cdot \left\{ \begin{bmatrix} l_c & j'_2 & j_1 \\ \frac{1}{2} & l_1 & l'_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ j'_1 & j'_2 & l_c \end{bmatrix} \right\} \cdot \left[\begin{array}{l} \text{parte} & n_1 \leftrightarrow n_2 \\ \text{radial} & \kappa_1 \leftrightarrow \kappa_2 \end{array} \right] .
 \end{aligned}$$

(III.22)

III.D) A EQUAÇÃO SECULAR

Com os elementos de matriz indicados nas expressões (III.12) e (III.22), pode-se agora calcular as auto-energias do sistema de duas partículas em um centro coulombiano.

Cabe aqui situar o que foi e o que será feito daqui em diante.

Considerou-se um dado valor para o momento total J e uma

certa paridade (par ou ímpar). Considerou-se também um conjunto de configurações $(n_1, \kappa_1; n_2, \kappa_2)$ tal que , como muitas vezes foi enfatizado, se $J = |\kappa| - 1/2$, então

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2 .$$

A paridade do sistema é dado por $l_1 + l_2 = L$, onde L é par ou ímpar e l_1, l_2 seguem a regra apresentada em (III.18a). Com isso, construiu-se a função total $\Psi_{JM}(1,2)$, visto em (III.3), onde M é a projeção no eixo z do momento J .

A equação (III.1), que pode ser representada por

$$\mathcal{H} \Psi_{JM}(1,2) = 0$$

ou por

$$\mathcal{H} \sum_{\substack{n_1, \kappa_1, n_2, \kappa_2}} A_{n_1, \kappa_1, n_2, \kappa_2} \Phi_{n_1, \kappa_1, n_2, \kappa_2}(1,2) = 0 , \quad (III.23)$$

onde

$$\begin{aligned} \Phi_{n_1, \kappa_1, n_2, \kappa_2}(1,2) &= \\ &= \frac{1}{2} (1-P(1,2)) \sum_{\mu_1, \mu_2} \langle j_1, j_2, \mu_1, \mu_2 | JM \rangle [(1) | n_1, \kappa_1, \mu_1 \rangle] \otimes [(2) | n_2, \kappa_2, \mu_2 \rangle] \end{aligned}$$

foi multiplicada à sua esquerda por um dado $\Phi_{n'_1, \kappa'_1, n'_2, \kappa'_2}^\dagger(1,2)$ (complexo conjugado de $\Phi_{n_1, \kappa_1, n_2, \kappa_2}(1,2)$) e integrada nas variáveis ρ, θ e φ . Este procedimento, feito para cada um dos operadores que compõem \mathcal{H} (vide seções III.B e III.C), nos levou a obter os elementos de matriz.

Portanto, baseando nos resultados representados por (III.12)

¹ Os números $n'_1, \kappa'_1, n'_2, \kappa'_2$ pertencem também ao conjunto de configurações associados ao momento J .

e (III.22), tem-se esta expressão abaixo, obtida a partir da equação (III.23):

$$\begin{aligned}
& \frac{\lambda}{mc} \sum_{n_1 \kappa_1 n_2 \kappa_2} A_{n_1 \kappa_1 n_2 \kappa_2} \left[\left[\langle n'_1 \kappa'_1 | CR_1 | n_1 \kappa_1 \rangle \langle n'_2 \kappa'_2 | | n_2 \kappa_2 \rangle + \right. \right. \\
& \qquad \qquad \qquad \left. \left. + \langle n'_1 \kappa'_1 | | n_1 \kappa_1 \rangle \langle n'_2 \kappa'_2 | CR_2 | n_2 \kappa_2 \rangle \right] \delta_{\kappa'_1 \kappa_1} \delta_{\kappa'_2 \kappa_2} + \right. \\
& - (-1)^{j_1 + j_2 - J} \left[\langle n'_1 \kappa'_1 | CR_1 | n_2 \kappa_2 \rangle \langle n'_2 \kappa'_2 | | n_1 \kappa_1 \rangle + \right. \\
& \qquad \qquad \qquad \left. \left. + \langle n'_1 \kappa'_1 | | n_2 \kappa_2 \rangle \langle n'_2 \kappa'_2 | CR_2 | n_1 \kappa_1 \rangle \right] \delta_{\kappa'_1 \kappa_2} \delta_{\kappa'_2 \kappa_1} \right] = \\
& = \sum_{n_1 \kappa_1 n_2 \kappa_2} A_{n_1 \kappa_1 n_2 \kappa_2} \left[\left[\langle n'_1 \kappa'_1 | P_1 | n_1 \kappa_1 \rangle \langle n'_2 \kappa'_2 | | n_2 \kappa_2 \rangle + \right. \right. \\
& \qquad \qquad \qquad \left. \left. + \langle n'_1 \kappa'_1 | | n_1 \kappa_1 \rangle \langle n'_2 \kappa'_2 | P_2 | n_2 \kappa_2 \rangle \right] \delta_{\kappa'_1 \kappa_1} \delta_{\kappa'_2 \kappa_2} + \right. \\
& - (-1)^{j_1 + j_2 - J} \left[\langle n'_1 \kappa'_1 | P_1 | n_2 \kappa_2 \rangle \langle n'_2 \kappa'_2 | | n_1 \kappa_1 \rangle + \right. \\
& \qquad \qquad \qquad \left. \left. + \langle n'_1 \kappa'_1 | | n_2 \kappa_2 \rangle \langle n'_2 \kappa'_2 | P_2 | n_1 \kappa_1 \rangle \right] \delta_{\kappa'_1 \kappa_2} \delta_{\kappa'_2 \kappa_1} + \right. \\
& \left. - \langle n'_1 \kappa'_1, n'_2 \kappa'_2 | Q_A | n_1 \kappa_1, n_2 \kappa_2 \rangle + \langle n'_1 \kappa'_1, n'_2 \kappa'_2 | Q_B | n_1 \kappa_1, n_2 \kappa_2 \rangle \right].
\end{aligned}
\tag{III.24}$$

Para cada configuração $(n'_1, \kappa'_1; n'_2, \kappa'_2)$ obtém-se uma equação do tipo acima, cujas incógnitas são $A_{n_1 \kappa_1 n_2 \kappa_2}$ e λ . O conjunto de todas as equações (III.24), cada uma referente a uma das configurações $(n'_1, \kappa'_1; n'_2, \kappa'_2)$, pode ser escrito na forma de matrizes, como é mostrado a seguir:

$$\frac{\lambda}{mc} [CR][x] = [P + Q][x] \tag{III.25}$$

onde [CR] é a matriz cujos elementos são aqueles referentes aos operadores indicados por CR_1 e CR_2 , $[P + Q]$ é a matriz indicada por P_1, P_2, Q_A e Q_B , $[x]$ é uma matriz coluna composta pelas ampli-

tudes $A_{n_1 \kappa_1 n_2 \kappa_2}$, formando o autovetor associado ao autovalor λ .

A equação secular decorrente da fórmula (III.25) fornece, portanto, os autovalores λ . Os elementos das matrizes [CR] e [P+Q] são valores numéricos dependentes exclusivamente dos números n e κ , isto é, do conjunto de configurações $(n_1, \kappa_1; n_2, \kappa_2)$ devidamente escolhido para um dado valor de J .

CAPÍTULO IV

RESULTADOS E CONCLUSÃO

A solução da equação algébrica (III.24) ou (III.25), de dimensão n , fornece n autovalores e n autovetores.

Considerando o i -ésimo autovalor $\lambda_i^{(n)}$, quando é utilizado um conjunto de n vetores-base e recordando a relação

$$\lambda_i^{(n)} c = \left\{ (mc)^2 - \left[\epsilon_i^{(n)} \right]^2 \right\}^{1/2},$$

a energia de ligação do i -ésimo estado é obtida pela expressão:

$$E_i^{(n)} = 2 \left[\epsilon_i^{(n)} - m_0 c^2 \right] = 2 \left[\left\{ (mc)^2 - (\lambda_i^{(n)} c)^2 \right\}^{1/2} - m_0 c^2 \right].$$

Se o conjunto de funções-base é ampliado para m elementos ($m > n$), observa-se que

$$E_i^{(m)} < E_i^{(n)}, \quad (E_i < 0),$$

de acordo com o teorema de J.K.L. MacDonald^[43].

Entende-se, portanto, os valores $E_i^{(n)}$ como limitantes superiores aos valores das energias de ligação de n estados do sistema e os correspondentes autovetores como aproximação às respectivas autofunções.

Na seqüência, casos particulares são apresentados.

Para $Z=2$, $J=0$ e paridade par, as tabelas 1A, 1B e 1C exibem respectivamente, a evolução dos coeficientes $A_{n_1 \kappa_1 n_2 \kappa_2}$ das dez configurações $(n_1, \kappa_1; n_2, \kappa_2)$ que entram, com maior amplitude, na

composição dos autovetores ligados à energia de ligação mais baixa (tabela 1A), à energia do primeiro estado excitado (tabela 1B) e à energia de um estado de dupla excitação (tabela 1C).

Na composição de um estado de momento angular J , entram os bispinores tais que $|j_1 - j_2| \leq J \leq |j_1 + j_2|$ e, para $J=0$, tem-se que $j_1 = j_2$, i.e., $|\kappa_1| = |\kappa_2|$. Se a paridade é par, então $\kappa_1 = \kappa_2$.

Os resultados apresentados a seguir nas tabelas são, em geral, os que se esperam.

A unidade em que a energia de ligação está calculada é $m_0 c^2 \alpha^2$, ou seja, α^2 vezes a energia de repouso da partícula: para o elétron e no sistema de unidades atômicas, $m_0 = 1$ e $c = 1/\alpha$, os valores vêm dados em hartrees.

TABELA 1A

CONVERGÊNCIA DA ENERGIA E DOS COEFICIENTES DE DEZ CONFIGURAÇÕES
REFERENTES AO ESTADO FUNDAMENTAL PARA Z=2 (J=0, PAR)

dimensão da matriz	1	5	14	30
ENERGIA →	-2.84779	-2.87477	-2.89708	-2.90015
$n_1 \kappa_1 \quad n_2 \kappa_2$	COEFICIENTES			
0 -1 0 -1	-0.70707	0.68625	0.67761	0.67868
0 -2 0 -2	—	0.03916	0.04459	0.04503
1 -1 0 -1	—	-0.06777	-0.08186	-0.07955
1 -1 1 -1	—	-0.05509	-0.06546	-0.06582
1 1 1 1	—	0.02769	0.03153	0.03184
1 -2 0 -2	—	—	0.03434	0.03821
2 -1 0 -1	—	—	0.08378	0.07819
2 -1 1 -1	—	—	-0.01601	-0.02051
2 1 1 1	—	—	0.02427	0.02701
2 -2 1 -2	—	—	—	0.01585
dimensão da matriz	55	91	140	204
ENERGIA →	-2.90148	-2.90217	-2.90258	-2.90286
$n_1 \kappa_1 \quad n_2 \kappa_2$	COEFICIENTES			
0 -1 0 -1	0.67893	0.67907	0.67916	0.67921
0 -2 0 -2	0.04489	0.04476	0.04467	0.04460
1 -1 0 -1	-0.07858	-0.07806	-0.07776	-0.07756
1 -1 1 -1	-0.06552	-0.06531	-0.06516	-0.06507
1 1 1 1	0.03174	0.03165	0.03158	0.03154
1 -2 0 -2	0.03861	0.03854	0.03844	0.03835
2 -1 0 -1	0.07806	0.07792	0.07786	0.07782
2 -1 1 -1	-0.02084	-0.02075	-0.02063	-0.02055
2 1 1 1	0.02729	0.02725	0.02717	0.02711
2 -2 1 -2	0.01941	0.02021	0.02036	0.02037

TABELA 1A (CONTINUAÇÃO)

dimensão da matriz	285
ENERGIA →	-2.90305
$n_1 \quad \kappa_1 \quad n_2 \quad \kappa_2$	COEFICIENTES
0 -1 0 -1	0.67925
0 -2 0 -2	0.04456
1 -1 0 -1	-0.07742
1 -1 1 -1	-0.06501
1 1 1 1	0.03150
1 -2 0 -2	0.03829
2 -1 0 -1	0.07780
2 -1 1 -1	-0.02049
2 1 1 1	0.02707
2 -2 1 -2	0.02034

TABELA 1B

CONVERGÊNCIA DA ENERGIA E DOS COEFICIENTES DE DEZ CONFIGURAÇÕES
REFERENTES AO PRIMEIRO ESTADO EXCITADO PARA Z=2 (J=0, PAR)

dimensão da matriz	5	14	30	55
ENERGIA →	-1.69299	-1.97349	-2.09296	-2.12436
$n_1 \kappa_1 \quad n_2 \kappa_2$	COEFICIENTES			
0 -1 0 -1	0.33337	0.27055	0.20164	0.17060
1 -1 0 -1	1.14748	0.73176	0.53389	0.43462
1 -1 1 -1	0.34184	0.18906	0.12708	0.09980
2 -1 0 -1	—	-0.59439	-0.58112	-0.53504
2 -1 1 -1	—	-0.18182	-0.17632	-0.16080
3 -1 0 -1	—	—	0.40501	0.46774
3 -1 1 -1	—	—	0.13115	0.14767
4 -1 0 -1	—	—	—	-0.22993
5 -1 0 -1	—	—	—	—
6 -1 0 -1	—	—	—	—
dimensão da matriz	91	140	204	285
ENERGIA →	-2.13817	-2.14302	-2.14459	-2.14566
$n_1 \kappa_1 \quad n_2 \kappa_2$	COEFICIENTES			
0 -1 0 -1	0.15398	0.14531	0.14128	0.13939
1 -1 0 -1	0.39107	0.36736	0.35701	0.35219
1 -1 1 -1	0.08943	0.08340	0.08109	0.07991
2 -1 0 -1	-0.49234	-0.47086	-0.45881	-0.45360
2 -1 1 -1	-0.14655	-0.14012	-0.13614	-0.13463
3 -1 0 -1	0.46906	0.46000	0.45362	-0.44984
3 -1 1 -1	0.14615	0.14278	0.14068	0.13938
4 -1 0 -1	-0.30122	-0.32116	-0.32523	-0.32600
5 -1 0 -1	0.15405	0.20422	0.22183	0.22710
6 -1 0 -1	—	-0.09121	-0.12474	-0.13655

TABELA 1C

CONVERGÊNCIA DA ENERGIA E DOS COEFICIENTES DE DEZ CONFIGURAÇÕES
REFERENTES A UM ESTADO DUPLAMENTE EXCITADO PARA Z=2 (J=0, PAR)

dimensão da matriz	5	14	30	55
ENERGIA →	-0.69883	-0.70575	-0.70996	-0.71030
$n_1 \kappa_1 \quad n_2 \kappa_2$	COEFICIENTES			
0 -2 0 -2	-0.40821	-0.39763	-0.39376	-0.39437
1 1 1 1	0.57735	0.56240	0.55694	0.55787
0 -3 0 -3	—	0.04172	0.04468	0.04469
1 -2 0 -2	—	0.03593	-0.40423	-0.03869
1 -2 1 -2	—	0.03268	-0.03782	-0.03769
1 2 1 2	—	0.05113	-0.05476	-0.05476
2 1 1 1	—	0.05082	-0.05717	-0.05473
2 -2 0 -2	—	—	-0.05243	-0.05077
2 2 1 2	—	—	0.03287	0.03474
3 1 1 1	—	—	0.07418	0.07184
dimensão da matriz	91	140	204	285
ENERGIA →	-0.71042	-0.71047	-0.71049	-0.71051
$n_1 \kappa_1 \quad n_2 \kappa_2$	COEFICIENTES			
0 -2 0 -2	-0.39447	-0.39452	-0.39454	-0.39456
1 1 1 1	0.55795	0.55802	0.55806	0.55808
0 -3 0 -3	-0.04454	-0.04446	-0.04419	-0.04440
1 -2 0 -2	0.03821	0.03802	0.03793	0.03788
1 -2 1 -2	0.03751	0.03743	0.03739	0.03737
1 2 1 2	0.05458	0.05449	0.05444	0.05441
2 1 1 1	-0.05405	-0.05379	-0.05366	-0.05359
2 -2 0 -2	-0.05103	-0.05103	-0.05103	-0.05103
2 2 1 2	0.03464	0.03450	0.03441	0.03437
3 1 1 1	0.07221	0.07221	0.07221	0.07220

Para o estado fundamental, a maior contribuição vem do produto direto indicado pelos números (0 -1 0 -1). Lembrando o significado das funções de uma partícula, é como se ambos os férmions ocupassem o estado de energia mais baixo.

Os coeficientes que descrevem o primeiro estado excitado mostram que, ainda em termos de uma partícula, as contribuições mais importantes se referem às situações em que se tem uma partícula no estado mais baixo e a segunda partícula podendo ocupar o primeiro, segundo, terceiro,... estado excitado.

Quanto ao estado com dupla excitação apresentado, as duas funções base mais importantes correspondentes aos números (0 -2 0 -2) e (1 1 1 1), ambos com $\ell=1$, pode ser interpretado como o estado em que ambas as partículas estão no primeiro estado excitado (estado de uma partícula) com $\ell=1$. Comentários sobre estados com dupla excitação serão feitos mais adiante.

As tabelas também mostram que há uma convergência simultânea da autofunção e do autovalor. Se o autovalor apresenta uma incerteza no i -ésimo algarismo após a vírgula, o mesmo pode se dizer dos coeficientes das funções base.

As tabelas 2A, 2B e 2C mostram para $Z = 14$ ($Z\alpha \approx 0.1$), o mesmo que foi apresentado acima para os estados correspondentes.

TABELA 2A

CONVERGÊNCIA DA ENERGIA E DOS COEFICIENTES DE DEZ CONFIGURAÇÕES
REFERENTES AO ESTADO FUNDAMENTAL PARA Z=14 (J=0, PAR)

dimensão da matriz	14	30	55	91
ENERGIA →	-187.8738	-187.8775	-187.8794	-187.8807
	COEFICIENTES			
$n_1 \kappa_1 \quad n_2 \kappa_2$				
0 -1 0 -1	0.70230	0.70228	0.70227	0.70228
0 -2 0 -2	0.00622	0.00633	0.00635	0.00635
1 -1 0 -1	-0.01139	-0.01147	-0.01147	-0.01147
1 -1 1 -1	-0.00749	-0.00758	-0.00759	-0.00759
1 1 1 1	0.00437	0.00445	0.00446	0.00447
1 -2 0 -2	0.00485	0.00547	0.00556	0.00558
2 -1 0 -1	0.00595	0.00576	0.00573	0.00573
2 -1 1 -1	-0.00291	-0.00323	-0.00325	-0.00325
2 1 1 1	0.00339	0.00382	0.00388	0.00390
2 -2 1 -2	—	0.00235	0.00288	0.00301
	COEFICIENTES			
dimensão da matriz	140	204	240	
ENERGIA →	-187.8815	-187.8821	-187.8822	
	COEFICIENTES			
$n_1 \kappa_1 \quad n_2 \kappa_2$				
0 -1 0 -1	0.70228	0.70228	0.70228	
0 -2 0 -2	0.00635	0.00635	0.00635	
1 -1 0 -1	-0.01147	-0.01146	-0.01146	
1 -1 1 -1	-0.00759	-0.00758	-0.00758	
1 1 1 1	0.00447	0.00446	0.00446	
1 -2 0 -2	0.00559	0.00559	0.00559	
2 -1 0 -1	0.00574	0.00574	0.00574	
2 -1 1 -1	-0.00324	-0.00324	-0.00324	
2 1 1 1	0.00390	0.00390	0.00390	
2 -2 1 -2	0.00304	0.00305	0.00305	

TABELA 2B

CONVERGÊNCIA DA ENERGIA E DOS COEFICIENTES DE DEZ CONFIGURAÇÕES

REFERENTES AO PRIMEIRO ESTADO EXCITADO PARA Z=14 (J=0, PAR)

dimensão da matriz	14	30	55	91
ENERGIA →	-117.3108	-119.2987	-119.6352	-119.6920

$n_1 \kappa_1 \quad n_2 \kappa_2$	COEFICIENTES			
0 -1 0 -1	0.21922	0.19211	0.18450	0.18281
1 -1 0 -1	0.84676	0.74097	0.71128	0.70463
1 -1 1 -1	0.19449	0.16506	0.15750	0.15591
2 -1 0 -1	-0.49318	-0.52260	-0.51838	-0.51606
2 -1 1 -1	-0.09542	-0.10418	-0.10378	-0.10336
2 -1 2 -1	-0.02444	-0.02514	-0.02469	-0.02455
3 -1 0 -1	—	0.23285	0.26709	0.27176
3 -1 1 -1	—	0.06023	0.06803	0.06902
4 -1 0 -1	—	—	-0.09493	-0.11005
4 -1 1 -1	—	—	-0.02299	-0.02671

dimensão da matriz	140	204	240
ENERGIA →	-119.7002	-119.7012	-119.7012

$n_1 \kappa_1 \quad n_2 \kappa_2$	COEFICIENTES		
0 -1 0 -1	0.18248	0.18244	0.18244
1 -1 0 -1	0.70342	0.70326	0.70326
1 -1 1 -1	0.15561	0.15558	0.15558
2 -1 0 -1	-0.51556	-0.51548	-0.51548
2 -1 1 -1	-0.10328	-0.10327	-0.10327
2 -1 2 -1	-0.02452	-0.02452	-0.02452
3 -1 0 -1	0.27228	0.27233	0.27233
3 -1 1 -1	0.06913	0.06914	0.06914
4 -1 0 -1	-0.11211	-0.11233	-0.11233
4 -1 1 -1	-0.02720	-0.02725	-0.02725

TABELA 2C

CONVERGÊNCIA DA ENERGIA E DOS COEFICIENTES DE DEZ CONFIGURAÇÕES
REFERENTES A UM ESTADO DUPLAMENTE EXCITADO PARA Z=14 (J=0, PAR)

dimensão da matriz	14	30	55	91
ENERGIA →	- 46.8516	- 46.8551	- 46.8557	- 46.8559

$n_1 \kappa_1 \quad n_2 \kappa_2$	COEFICIENTES			
0 -2 0 -2	-0.39372	-0.39343	-0.39324	-0.39320
1 -1 1 -1	-0.04438	-0.04531	-0.04408	-0.04450
1 1 1 1	0.58241	0.58236	0.58254	0.58255
1 -2 0 -2	0.00447	0.00476	0.00469	0.00469
1 2 1 2	0.00741	0.00828	0.00832	0.00832
2 1 1 1	-0.00588	-0.00632	-0.00633	-0.00632
2 1 2 1	-0.00566	-0.00621	-0.00622	-0.00621
2 -2 0 -2	—	-0.00432	-0.00429	-0.00430
2 2 1 2	—	0.00507	0.00540	0.00541
3 1 1 1	—	0.00657	0.00652	0.00652

dimensão da matriz	140	204	240
ENERGIA →	- 46.8560	- 46.8561	- 46.8561

$n_1 \kappa_1 \quad n_2 \kappa_2$	COEFICIENTES		
0 -2 0 -2	-0.39322	-0.39305	-0.39305
1 -1 1 -1	-0.04513	-0.04390	-0.04390
1 1 1 1	0.58252	0.58268	0.58268
1 -2 0 -2	0.00470	0.00466	0.00466
1 2 1 2	0.00832	0.00832	0.00832
2 1 1 1	-0.00630	-0.00633	-0.00633
2 1 2 1	-0.00621	-0.00621	-0.00621
2 -2 0 -2	-0.00430	-0.00430	-0.00430
2 2 1 2	0.00541	0.00541	0.00541
3 1 1 1	0.00652	0.00652	0.00652

Comparando os dois grupos de tabelas, o que se nota é uma convergência bem mais rápida para o valor mais elevado de Z . O fato corresponde às expectativas, uma vez que a interação entre as partículas passa a ter um valor cada vez menor quando comparado com a interação com o centro coulombiano, tendendo assim a se comportar como partículas independentes. Portanto, para $Z \gg 1$ um único produto de bispinores pode já consistir em uma razoável descrição do estado.

comparação com outros valores teóricos

Desde os trabalhos de Hylleraas^[38] e a obra de Bethe & Salpeter^[5], inúmeros trabalhos teóricos foram realizados com o objetivo de obter a mesma precisão que os experimentos espectroscópicos.

Uma parte de tais trabalhos procura descrever o sistema de dois elétrons a partir de um hamiltoniano não-relativístico. Os efeitos devido à relatividade e à quantização da interação eletromagnética são calculados por intermédio da teoria de perturbação. Como exemplos, pode-se citar os trabalhos de C.L. Pekeris^[45], K. Frankowski & C.L. Pekeris^[35], Y. Accad, C.L. Pekeris & B. Schiff^[30], A.J. Thakkar & V.H. Smith, Jr.^[46], D.E. Freund, B.D. Huxtable & J.D. Morgan III^[36], Z. Xiao-lin^[47], A. Kono & S. Hattori^[40], G.W.F. Drake^[34] e J. Baker, R.H. Hill & J.D. Morgan III^[31].

A idéia existente na literatura citada acima é a mesma que é utilizada neste trabalho: a função de onda do sistema é expandida em termos de funções das coordenadas das partículas e dos parâmetros associados à descrição dos estados. Os autovalores são

fornecidos por meio do método variacional.

Outros trabalhos, por sua vez, já incorporam os efeitos relativísticos, tratando os elétrons como partículas de Dirac. J. Krause^[41], por intermédio do método variacional, determina os valores de parâmetros que entram na composição dos bispinores e encontra os valores para as energias de ligação do estado fundamental (1^1S_0) e dos primeiros estados excitados 2^1S_0 , 2^3S_1 , 2^3P_2 , 2^3P_1 e 2^3P_0 de vários ions tipo hélio. Valores das taxas de transições radiativas para os casos $2^3S_1 \rightarrow 1^1S_0$, $2^1P_1 \rightarrow 1^1S_0$, $2^3P_{1,2} \rightarrow 1^1S_0$, também são obtidos.

As energias de ligação do estado fundamental apresentados no trabalho de Krause para diversos valores de Z são praticamente equivalentes aos valores obtidos pelo método exposto neste trabalho utilizando a base mínima (uma única configuração; no caso, $\kappa_1 = \kappa_2 = -1$, $n_1 = n_2 = 0$), como mostra a tabela 3. A mesma tabela também serve para enfatizar a observação feita no final do item anterior, quando foi declarado que, quando $Z \gg 1$, as energias de ligação obtidos podem, eventualmente, serem razoáveis no caso de um único produto de bispinores.

TABELA 3

VALORES DOS NÍVEIS FUNDAMENTAIS PARA VÁRIOS Z

Z	$ E_1 $ (eV)*	$ E_2 $ (au)†	$ E_2 $ (eV)‡
2	77.4928	2.84780	77.4926
5	598.099	21.9796	598.096
10	2557.05	93.9695	2557.04
15	5887.50	216.360	5887.46
20	10603.1	389.654	10603.0
25	16723.4	614.570	16723.3
30	24274.4	892.062	24274.3
35	33288.9	1223.34	33288.8
40	43807.7	1609.89	43807.4
45	55879.9	2053.54	55879.7
50	69564.7	2556.44	69564.3
60	102070.0	3750.97	102069.1
70	142072.0	5221.02	142071.2
80	190656.0	7006.45	190655.3
90	249445.0	9166.90	249444.1
100	321010.0	11796.9	321010.1

* conforme referência [41].

† valores deste trabalho usando a base mínima (em hartrees).

‡ valores em eV deste trabalho usando a conversão:

$$1 \text{ hartree} = 27.2113961 \text{ eV.}$$

Obs.: os valores acima são negativos.

Por meio também do cálculo variacional, S.P. Goldman^[37] obtém as energias de ligação para os estados fundamentais dos átomos de He, Be, C e Ne e suas correspondentes seqüências iso-eletrônicas. Correções nos níveis devido à interação de Breit são calculadas por meio da Teoria de Perturbação.

A técnica da MBPT (Teoria de Perturbação para muitos corpos) é utilizada por S.A. Blundell *et al.*^[32] e por Y. Ishikawa^[39] para obter o valor da energia do estado fundamental do He. Ishikawa também calcula a energia do estado fundamental de vários íons da série isoeletrônica do He e dos átomos de Ne e Ar.

F.A. Parpia e I.P. Grant^[44] apresentam os valores para o estado fundamental do He e de alguns íons (um deles com $Z=14$) com dois elétrons usando um método não-perturbativo, baseando-se em uma seqüência de configurações.

Nas próximas páginas, são apresentadas tabelas comparativas dos resultados obtidos pelos autores citados e pelo presente trabalho nos casos de $Z=2$ (tabela 4) e $Z=14$ (tabela 5). A unidade utilizada é o hartree.

As tabelas existentes também apresentam uma notação para identificar os estados, baseada no acoplamento de Russel-Saunders, ou seja, os estados são identificados pela paridade, pelo momento angular orbital e pelo momento de *spin*. Sistemas com dois férmions possuem apenas: (a) estados singletos cujo *spin* total é zero, $S=0$; (b) estados tripletos com $S=1$. Como $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, deve-se ter $|J-S| \leq L \leq J+S$.

A última relação implica que estados singletos vêm de estados com $J=L$ e estados tripletos são originários de estados com $L=(J-1)$, $L=J$ e $L=J+1$.

Para $J=0$ e paridade par, no limite não-relativístico obtém-se estados 1S_0 e 3P_0 ; se $J=0$ e a paridade ímpar, estados 3P_0 são obtidos e apenas estes, uma vez que dois férmions não possuem estados S e paridade ímpar e assim por diante.

O quadro abaixo resume a correspondência entre as notações relativísticas e não-relativísticas.

QUADRO I

<u>Paridade par</u>	
$J = 0$	$^1S_0, ^3P_0$
$J = 1$	$^1P_1, ^3S_1, ^3P_1, ^3D_1$
$J = 2$	$^1D_2, ^3P_2, ^3D_2, ^3F_2$
\vdots	\vdots

<u>Paridade ímpar</u>	
$J = 0$	3P_0
$J = 1$	$^1P_1, ^3P_1, ^3D_1$
$J = 2$	$^1D_2, ^3P_2, ^3D_2, ^3F_2$
\vdots	\vdots

A correspondência deve ser feita considerando o limite não-relativístico da função de onda ($c \rightarrow \infty$). Na maioria das situações, a identificação pode ser feita por uma simples inspeção nos coeficientes mais relevantes dos bispinores.

TABELA 4

VALORES DAS ENERGIAS DE LIGAÇÃO DO ESTADO FUNDAMENTAL E DOS PRIMEIROS ESTADOS EXCITADOS PARA Z=2

J=0 (par) [dim=305]

	E_1	E_2	E_3	E_4	E_5	E_6
(1^1S_0)	-2.90305	-2.902716	-2.903856	-2.903856	-2.861813	-2.847808
(2^1S_0)	-2.14566	-	-	-	-	-2.089625

J=0 (ímpar) [dim=210]

	E_1	E_6
(1^3P_0)	-2.13044	-2.13066
(2^3P_0)	-2.04058	-

J=1 (par) [dim=279]

	E_1	E_6
(1^3S_1)	-2.17464	-2.16677
(1^3D_1)	-2.03276	-
(2^3S_1)	-2.02694	-

J=1 (ímpar) [dim=259]

	E_1	E_6
(1^3P_1)	-2.12913	-2.13066
(1^1P_1)	-2.11992	-2.12149

J=2 (par) [dim=303]

	E_1	E_6
(1^3D_2)	-2.01814	-
(1^1D_2)	-2.00601	-

J=2 (ímpar) [dim=297]

	E_1	E_6
(1^3P_2)	-2.13064	-2.13066

E_1 :este trabalho; E_2 :conf. ref.[39]; E_3 :conf. ref.[32]; E_4 :conf. ref.[44]; E_5 :conf. ref.[37]; E_6 :conf. ref.[41]. As dimensões das matrizes utilizadas por este trabalho para calcular as energias estão entre colchetes.

Obs.: os valores de E_6 foram convertidos de eV para hartrees.

TABELA 5

VALORES DAS ENERGIAS DE LIGAÇÃO DO ESTADO FUNDAMENTAL E DOS PRIMEIROS ESTADOS EXCITADOS PARA Z=14

J=0 (par) dim=240		
-187.8822 (1^1S_0)	-187.8423 ^(a)	-187.8881 ^(b)
-119.7012 (2^1S_0)	-	-
-107.4234 (3^1S_0)	-	-

(a):conforme referência [37].

(b):conforme referência [44]. Este valor foi obtido a partir de extrapolações.

J=0 (ímpar) dim=156	J=1 (par) dim=197	J=1 (ímpar) dim=160
-119.6063 (1^3P_0)	-120.2510 (1^3S_1)	-119.6349 (1^3P_1)
-107.6323 (2^1P_0)	-107.2910 (1^3D_1)	-119.2617 (1^1P_1)
-101.1804 (3^1P_0)		-106.1555 (2^3P_1)
		-105.9684 (2^1P_1)

J=2 (par) dim=180	J=2 (ímpar) dim=176
-106.8108 (1^3D_2)	-119.6878 (1^3P_2)
-105.3905 (1^1D_2)	-106.1873 (2^3P_2)

Obs: foi encontrado na literatura disponível somente os valores teóricos para o estado fundamental, como mostram as referências.

O trabalho computacional para obter todos os valores de energia transcritos neste trabalho foi realizado no computador Convex C220 do Centro de Computação Eletrônica da USP.

Juntamente com as energias do estado fundamental e dos primeiros estados excitados, obtém-se também os valores dos chamados estados com dupla excitação.

Estados duplamente excitados de um sistema de dois elétrons são aqueles em que, pensando em termos da teoria de uma partícula, ambos os férmions se encontram nos primeiros estados excitados.

É possível reconhecer um estado duplamente excitado se o valor de energia deste estado, bem como os valores dos coeficientes da expansão, em particular, os coeficientes com valores relevantes, pouco mudarem à medida que o número de funções-base forem aumentando, .i.e., à medida que a dimensão das matrizes forem crescendo, como está exemplificado nas Tabelas 1C e 2C.

Os trabalhos teóricos encontrados usam a teoria não-relativística, como o de J. Callaway^[33] e L.Lipsky et al.^[42]. Os cálculos foram efetuados a partir da expansão da função de onda do sistema em produtos diretos de funções de uma partícula, onde ocorrem parâmetros associados aos estados de uma partícula a serem determinados.

A seguir, uma tabela comparativa (Tabela 6) entre os valores obtidos por Lipsky, Callaway e o presente trabalho é apresentado para $Z=2$. Os valores estão em hartrees.

TABELA 6

VALORES DAS ENERGIAS DE ESTADOS DUPLAMENTE EXCITADOS
NO CASO DE Z=2

E_1	E_2	E_3	dim	J
1S (par)				
-0.775245	-0.778395	-0.778097	305	0(p)
-0.615133	-0.619165	-0.621849	305	0(p)
-0.546940	-0.547760	-0.547376	305	0(p)
3P (par)				
		-0.710509	305	0(p)
-0.706881	-0.709990	-0.707696	279	1(p)
		-0.709482	303	2(p)
-0.566717	-0.567715	-0.567801	305	0(p)
3P (ímpar)				
		-0.758121	210	0(i)
-0.758288	-0.759990	-0.758888	259	1(i)
		-0.758645	297	2(i)
		-0.583737	210	0(i)
-0.583354	-0.584555	-0.580926	259	1(i)
		-0.583732	297	2(i)
		-0.578200	210	0(i)
-0.578534	-0.578935	-0.575881	297	2(i)
		-0.548829	210	0(i)
-0.548534	-0.548660	-0.547413	259	1(i)
		-0.551384	297	2(i)
-0.539517	-0.539520	-0.539509	210	0(i)
-0.528462	-0.528525	-0.528476	297	2(i)

(continua na próxima página)

TABELA 6 (continuação)

3S (par)	-0.559309	-0.559660	-0.560408	279	1(p)
1P (par)	-0.579794	-0.580215	-0.576182	279	1(p)
1P (ímpar)	-0.688365	-0.690685	-0.691467	259	1(i)
	-0.596563	-0.597040	-0.594122	259	1(i)
	-0.562920	-0.563675	-0.566089	259	1(i)
	-0.546206	-0.546425	-0.544763	259	1(i)
	-0.533865	-0.534200	-0.535522	259	1(i)
	-0.527455	-0.527465	-0.528063	259	1(i)
3D (par)	-0.583195	-0.583620	-0.579971	279	1(p)
3D (ímpar)					
	-0.558983	-0.559210	-0.558472	259	1(i)
			-0.561272	297	2(i)
	-0.520607	-0.520670	-0.522036	297	2(i)
1D (par)	-0.697481	-0.699350	-0.689327	303	2(p)
	-0.567703	-0.568580	-0.567723	303	2(p)
1D (ímpar)	-0.563470	-0.563715	-0.564192	297	2(i)

Os valores na coluna E_1 são os de Lipsky et al. [42], os da coluna E_2 são de Callaway [33] e os da coluna E_3 , os deste trabalho. A coluna dim apresenta a dimensão da matriz utilizada e a coluna J, o valor do momento total e a sua paridade, (p) par ou (i) ímpar. Os valores de E_2 estão originalmente em Ry.

A comparação entre os valores que constam na tabela 6 foi feita baseando-se no quadro I que relaciona as notações relativísticas e não-relativísticas para a identificação do sistema.

Tanto o trabalho de Lipsky et al. e o de Callaway não levam em conta o momento total J, tarefa esta imediata no método aqui apresentado.

comparação com os valores experimentais

Para comparar com valores experimentais tabelados para a energia de ionização e para as energias de transição entre os vários estados, é preciso recordar que os valores das tabelas precedentes admitem a massa do núcleo infinita. Para levar em conta a massa finita do núcleo, o procedimento é ditado por Bethe e Salpeter (ref.5, pg.167): toma-se o valor da energia constante da tabela e multiplica-se pela relação

$$\frac{M}{M+m}$$

onde M é a massa do núcleo e m, a massa do férmion.

ENERGIA DE IONIZAÇÃO

O valor da energia de ionização é obtido subtraindo do valor do estado fundamental de duas partículas o valor do estado fundamental de uma partícula.

Utilizando a relação (II.16) que descreve a energia dos estados de uma partícula com $n=0$ e $\kappa=-1$, obtém-se que:

$$\text{para } Z=2, \quad -2.00011;$$

$$\text{para } Z=14, \quad -98.2571;$$

e a energia do estado fundamental vale:

$$\text{para } Z=2, \quad -2.90305;$$

para Z=14, -187.8822.

Deve ser lembrado que a relação (II.16) e os valores constantes nas tabelas não levam em conta a interação de Breit e o deslocamento de Lamb; sendo estes da ordem de $\alpha^3 Z^4 \alpha^2 mc^2$, afetam a sexta casa após a vírgula para Z=2 e a segunda casa após a vírgula para Z=14.

Usando os valores da constante de Rydberg $Ry_{He} = 109722.267 \text{ cm}^{-1}$ para o hélio e $Ry_{\infty} = 109737 \text{ cm}^{-1}$ para Z=14, o valor da energia de ionização para Z=2 é

experimental ^[3]	teórico
198310.76 cm^{-1}	198145.25 cm^{-1}

e para Z=14,

experimental ^[3]	teórico
19661693 cm^{-1}	19670379 cm^{-1}

Os valores teóricos acima são obtidos do seguinte modo: como a diferença entre o estado fundamental de duas partículas e o estado fundamental de uma partícula está em hartrees, multiplica-se o resultado por dois e obtém-se o valor em Ry. Assim, multiplica-se os resultados pelas respectivas constantes de Rydberg e chega-se ao valor em unidades de cm^{-1} .

ENERGIAS DE TRANSIÇÃO

Para obter as energias de transição entre o estado fundamental e os estados excitados, calcula-se a diferença entre o nível fundamental e o estado excitado e multiplica-se o resultado por duas vezes a constante de Rydberg, obtendo desta maneira a energia de transição em cm^{-1} , como estão apresentados nas tabelas 7, 8 e 9 a seguir.

TABELA 7

COMPARAÇÃO ENTRE OS VALORES TEÓRICOS E EXPERIMENTAIS PARA Z=2
(PRIMEIROS ESTADOS EXCITADOS)

estado †	teórico cm ⁻¹	experimental [3] cm ⁻¹
2 ¹ S ₀ (0p)	166205	166271.70
1 ³ S ₁ (1p)	159846	159850.32
1 ¹ P ₁ (11)	171854	171129.15
1 ³ P ₀ (01)	169545	169082.19
1 ³ P ₁ (11)	169833	169081.19
1 ³ P ₂ (21)	169501	169081.11
2 ³ P ₀ (01)	189264	185559.28
1 ¹ D ₂ (2p)	196850	186099.22

† Os números entre parênteses representam o momento total J e sua paridade, par ou ímpar: (J,p ou i)

TABELA 8

COMPARAÇÃO ENTRE OS VALORES TEÓRICOS E EXPERIMENTAIS PARA Z=14

(PRIMEIROS ESTADOS EXCITADOS)

estado	teórico cm ⁻¹	experimental [3] cm ⁻¹
2 ¹ S ₀ (0p)	14963957	-
3 ¹ S ₀ (0p)	17658659	-
1 ³ S ₁ (1p)	14843246	14819000
1 ¹ P ₁ (11)	15060525	15040000
2 ¹ P ₁ (11)	17977993	17620000
1 ³ P ₀ (01)	14984807	14950000
1 ³ P ₁ (11)	14978442	
1 ³ P ₂ (21)	14966810	
2 ³ P ₀ (01)	17612789	17600000
2 ³ P ₁ (11)	17936952	
2 ³ P ₂ (21)	17929928	
1 ³ D ₁ (1p)	17687629	17604000
1 ³ D ₂ (2p)	17792977	

TABELA 9

COMPARAÇÃO ENTRE OS VALORES TEÓRICOS E EXPERIMENTAIS PARA OS
ESTADOS COM DUPLA EXCITAÇÃO (Z=2)

(conforme tabela 6)

Teórico (hartree)	Teórico (cm ⁻¹)	Experimental ^[3] (cm ⁻¹)	
¹ S (par)			
-0.778097	466309	466750	0(p)
-0.621849	500597	501200	0(p)
-	-	507720	0(p)
-0.547376	516940	517400	0(p)
-	-	517960	0(p)
³ P (par)			
-0.710509	481141	481301.5	0(p)
-0.707696	481758		1(p)
-0.709482	481366		2(p)
-0.567801	512458	512600	0(p)
³ P (ímpar)			
-0.758121	470693	470310	0(i)
-0.758888	470525		1(i)
-0.758645	470578		2(i)
-0.583737	508961	508920	0(i)
-0.580926	509577		1(i)
-0.583732	508962		2(i)
-0.578200	510176	510111	0(i)
-	-		
-0.575881	510684		2(i)
-0.548829	516621	516775	0(i)
-0.547413	516932		1(i)
-0.551384	516060		2(i)
-0.539509	518666	-	0(i)
-0.528476	521087	521433	2(i)

(continua)

3S (par)				
-0.560408	514080	514700		1(p)
1P (par)				
-0.576182	510618	509094		1(p)
1P (impar)				
-0.691467	485320	484942.534		1(i)
-0.594122	506682	506175.33		1(i)
-0.566089	512833	513399.733		1(i)
-0.544763	517513	517330.574		1(i)
-	-	517500		
-0.535522	519541	519939.687		1(i)
-0.528063	521178	521566.787		1(i)
3D (par)				
-0.579971	509787	509890		1(p)
3D (impar)				
-0.558472	514505	514473.5		1(i)
-0.561272	513890			2(i)
-0.522036	522500	522920		2(i)
1D (par)				
-0.689327	485789	482960		2(p)
-0.567723	512475	512160		2(p)
1D (impar)				
-0.564192	513250	513550		2(i)

conclusão

A partir do hamiltoniano fenomenológico apresentado no capítulo I, foi obtida uma equação secular que permite calcular as energias e as autofunções dos estados estacionários de um sistema de dois férmions submetidos a um centro coulombiano de carga $Z|e|$.

O modelo utilizado para o sistema acima, que leva em conta os efeitos relativísticos e trata o centro coulombiano como um potencial externo, mostrou-se preciso dentro das expectativas para descrever o átomo de hélio e os íons tipo hélio.

Os resultados teóricos obtidos, relacionados nas tabelas apresentadas neste capítulo, mostram uma concordância satisfatória com os valores experimentais.

No caso de $Z=14$, correspondente ao íon de silício com dois elétrons (Si XIII), os autovalores convergiram relativamente rápido, uma vez que a interação entre os elétrons contribuem pouco para os valores de auto-energia em relação à interação destas partículas com o núcleo. É possível afirmar que, para outros valores médios de Z da série isoeletrônica do hélio, os cálculos das suas auto-energias e de suas auto-funções se comportem de modo semelhante.



APÊNDICE A

POLINÔMIOS DE LAGUERRE GENERALIZADOS

Os Polinômios de Laguerre Generalizados (PLG) são representados por:

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \sum_{m=0}^n \frac{(-1)^m \Gamma(\alpha+n+1)}{m!(n-m)!\Gamma(\alpha+m+1)} x^m, \quad (\text{A.1a})$$

$$\text{Re}(\alpha) > -1, \quad n=0, 1, 2, \dots$$

Os PLG e as funções hipergeométricas confluentes se relacionam da seguinte forma:

$${}_1F_1(-n; \alpha+1; z) = \frac{n!\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha+n+1)} L_n^{(\alpha)}(z), \quad (\text{A.1b})$$

sendo que,

$${}_1F_1(a; b; z) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+k)}{\Gamma(b+k)} \frac{z^k}{k!}.$$

A relação de ortogonalidade dos PLG é dado por:

$$\int_0^{\infty} e^{-x} x^{\alpha} L_n^{(\alpha)}(x) L_m^{(\alpha)}(x) dx = \frac{\Gamma(\alpha+n+1)}{n!} \delta_{n,m}.$$

Uma integral que surge neste trabalho é:

$$I_{n',n}^{\alpha} = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\alpha-1} L_n^{(\alpha)}(x) L_{n'}^{(\alpha)}(x) dx.$$

Como não se encontrou o resultado desta integral nas

referências disponíveis, utilizou-se a função geratriz^[8] dos PLG para resolvê-la:

$$\sum_n r^n L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{e^{-x \frac{r}{1-r}}}{(1-r)^{\alpha+1}} \quad (\text{A.2})$$

Assim,

$$\begin{aligned} \sum_{n',n} r^{n'} t^n I_{n',n}^\alpha &= \int_0^\infty e^{-x} x^{\alpha-1} \sum_{n'} r^{n'} L_{n'}^{(\alpha)}(x) \sum_n t^n L_n^{(\alpha)}(x) dx = \\ &= \frac{1}{(1-r)^{\alpha+1} (1-t)^{\alpha+1}} \int_0^\infty x^{\alpha-1} \exp\left[-\frac{x}{2} \left(\frac{1+r}{1-r} + \frac{1+t}{1-t}\right)\right] dx \quad (\text{A.3}) \end{aligned}$$

Fazendo uma mudança de variável, ficamos com

$$\begin{aligned} \frac{2^\alpha}{(1-r)^{\alpha+1} (1-t)^{\alpha+1} \left(\frac{1+r}{1-r} + \frac{1+t}{1-t}\right)^\alpha} \int_0^\infty e^{-y} y^{\alpha-1} dy &= \\ &= \frac{\Gamma(\alpha)}{(1-r)(1-t)[1-rt]^\alpha} \end{aligned}$$

Já que

$$(1-z)^{-\xi} = \frac{1}{\Gamma(\xi)} \sum_v \frac{\Gamma(\xi+v)}{v!} z^v$$

e usando esta igualdade no resultado acima, chegamos à seguinte seguinte expressão para (A.3):

$$\sum_{n',n} r^{n'} t^n I_{n',n}^\alpha = \sum_{w,u,v} \frac{\Gamma(\alpha+v)}{v!} r^{w+v} t^{u+v}$$

Considere que $w+v = n'$ e $u+v = n$; a comparação entre os coeficientes de ambas as somatórias permite-nos encontrar o resultado para a integral:

$$I_{n',n}^{\alpha} = \sum_{v=0}^{\min(n,n')} \frac{\Gamma(\alpha + v)}{v!} \quad (\text{A.4})$$

APÊNDICE B

$$\text{ELEMENTOS DE MATRIZ DE } \frac{\vec{\alpha} \cdot \vec{p}}{2\lambda} \text{ e } \left[\frac{mc}{2\lambda} \beta - \frac{\epsilon}{2\lambda c} \right]$$

Aplicando o operador $\frac{\vec{\alpha} \cdot \vec{p}}{2\lambda}$ sobre a função-base na forma (III.8), fica-se com:

$$\begin{aligned} \frac{\vec{\alpha} \cdot \vec{p}}{2\lambda} |n \kappa \mu\rangle &= \sqrt{2} \left[\frac{\lambda}{\hbar} \right]^{3/2} \left[\frac{n!}{\Gamma(2\gamma+n+1)} \right]^{1/2} \zeta^{-1/2}(\kappa, n) \eta_-(\kappa, n) \\ &\cdot \begin{bmatrix} 0 & \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{2\lambda} \\ \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{2\lambda} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} i \left[1 + \epsilon/mc^2 \right]^{1/2} \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) - \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \\ \left[1 - \epsilon/mc^2 \right]^{1/2} \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \end{bmatrix} \\ &\cdot e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} = \end{aligned}$$

$$= \sqrt{2} \left[\frac{\lambda}{\hbar} \right]^{3/2} \left[\frac{n!}{\Gamma(2\gamma+n+1)} \right]^{1/2} \zeta^{-1/2}(\kappa, n) \eta_-(\kappa, n).$$

$$\begin{aligned} &\left[\begin{array}{l} \left[1 - \epsilon/mc^2 \right]^{1/2} \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{2\lambda} \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} \\ i \left[1 + \epsilon/mc^2 \right]^{1/2} \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{2\lambda} \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) - \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} \end{array} \right] \\ &\hspace{15em} \text{(B.1)} \end{aligned}$$

O resultado da aplicação do operador $\vec{\sigma} \cdot \vec{p}$ sobre as componentes do bispinor já foi mostrado no capítulo II, referente às funções-base, no início da seção II.D:

$$\frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{p}}{2\lambda} \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} =$$

$$\begin{aligned}
&= i \left[\frac{d}{d\rho} + \frac{1-\kappa}{\rho} \right] e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) = \\
&= i \left[\Delta_+^2(\kappa, n) \frac{1}{\rho} L_n^{(2\gamma)}(\rho) - \frac{1}{2} L_n^{(2\gamma)}(\rho) - \frac{1}{n} \eta_+^2(\kappa, n) \Delta_+^2(\kappa, n) \frac{1}{\rho} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) + \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2n} \eta_+^2(\kappa, n) L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \quad (\text{B.2a})
\end{aligned}$$

Acima, usou-se a relação de recorrência (II.13b) e as definições (II.22a) a (II.22e). De forma análoga, tem-se que

$$\begin{aligned}
&i \frac{\vec{\alpha} \cdot \vec{p}}{2\lambda} \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) - \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} = \\
&= - \left[\frac{d}{d\rho} + \frac{1+\kappa}{\rho} \right] e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) - \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) = \\
&= \left[\Delta_-^2(\kappa, n) \frac{1}{\rho} L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{1}{2} L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{1}{n} \eta_+^2(\kappa, n) \Delta_-^2(\kappa, n) \frac{1}{\rho} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) + \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2n} \eta_+^2(\kappa, n) L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \quad (\text{B.2b})
\end{aligned}$$

Substituindo (B.2a) e (B.2b) em (B.1), o elemento de matriz procurado é:

$$\begin{aligned}
&\langle n' \kappa' \mu' | \frac{\vec{\alpha} \cdot \vec{p}}{2\lambda} | n \kappa \mu \rangle = \\
&= \frac{1}{4} \left[\frac{n'! n!}{\Gamma(2\gamma' + n' + 1) \Gamma(2\gamma + n + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\eta_-(\kappa', n') \eta_-(\kappa, n)}{\sqrt{\mathcal{Z}(\kappa', n')} \sqrt{\mathcal{Z}(\kappa, n)}} \int_0^\infty d\rho \rho^2 \int_0^\pi d\theta \sin\theta \cdot \\
&\cdot \int_0^{2\pi} d\varphi \left[-i \left[1 + \epsilon/mc^2 \right]^{\frac{1}{2}} \left[L_{n'}^{(2\gamma')}(\rho) - \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} L_{n'-1}^{(2\gamma')}(\rho) \right] e^{-\rho/2} \rho^{\gamma'-1} \cdot \right. \\
&\quad \left. \cdot \Omega_{j'\ell'\mu'}^\dagger(\vec{n}) ; \right. \\
&\quad \left. \left[1 - \epsilon/mc^2 \right]^{\frac{1}{2}} \left[L_{n'}^{(2\gamma')}(\rho) + \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} L_{n'-1}^{(2\gamma')}(\rho) \right] e^{-\rho/2} \rho^{\gamma'-1} \Omega_{j'\bar{\ell}'\mu'}^\dagger(\vec{n}) \right].
\end{aligned}$$

$$\left[\begin{aligned} & i(1-\epsilon/mc^2)^{\frac{1}{2}} \left[\Delta_+^2(\kappa, n) \frac{1}{\rho} L_n^{(2\gamma)}(\rho) - \frac{1}{2} L_n^{(2\gamma)}(\rho) - \frac{1}{n} \eta_+^2(\kappa, n) \Delta_+^2(\kappa, n) \right. \\ & \quad \left. \cdot \frac{1}{\rho} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{1}{2n} \eta_+^2(\kappa, n) L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \\ & (1+\epsilon/mc^2)^{\frac{1}{2}} \left[\Delta_-^2(\kappa, n) \frac{1}{\rho} L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{1}{2} L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{1}{n} \eta_+^2(\kappa, n) \Delta_-^2(\kappa, n) \right. \\ & \quad \left. \frac{1}{\rho} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{1}{2n} \eta_+^2(\kappa, n) L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \end{aligned} \right] \quad (B.3)$$

Fazendo o produto dos bispinores que ocorre em (B.3), obtém-se que:

$$\begin{aligned} \langle n' \kappa' \mu' | \frac{\vec{\alpha} \cdot \vec{p}}{2\lambda} | n \kappa \mu \rangle &= \\ &= \frac{1}{4} \left[\frac{n'! n!}{\Gamma(2\gamma'+n'+1) \Gamma(2\gamma+n+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\eta_-(\kappa', n') \eta_-(\kappa, n)}{\sqrt{z(\kappa', n')} \sqrt{z(\kappa, n)}} \left[1 - \frac{\epsilon^2}{m^2 c^4} \right]^{1/2} \\ &\cdot \int_0^\infty d\rho \rho^{\gamma'+\gamma} e^{-\rho} \left[\left[L_{n'}^{(2\gamma')}(\rho) - \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} L_{n'-1}^{(2\gamma')}(\rho) \right] \left[\Delta_+^2(\kappa, n) \right. \right. \\ &\cdot \frac{1}{\rho} L_n^{(2\gamma)}(\rho) - \frac{1}{2} L_n^{(2\gamma)}(\rho) - \frac{1}{n} \eta_+^2(\kappa, n) \Delta_+^2(\kappa, n) \frac{1}{\rho} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) + \\ &+ \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{2n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \left. \right] \left[\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \Omega_{j'\ell'\mu'}^\dagger(\vec{n}) \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \right] + \\ &+ \left[L_{n'}^{(2\gamma')}(\rho) + \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} L_{n'-1}^{(2\gamma')}(\rho) \right] \left[\Delta_-^2(\kappa, n) \frac{1}{\rho} L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \right. \\ &+ \frac{1}{2} L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{1}{n} \eta_+^2(\kappa, n) \Delta_-^2(\kappa, n) \frac{1}{\rho} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{2n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \left. \right] \\ &\cdot \left[\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \Omega_{j'\bar{\ell}'\mu'}^\dagger(\vec{n}) \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \right] \end{aligned}$$

A integral nas variáveis angulares é, conforme a equação (II.24a):

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \Omega_{j', l', \mu'}^\dagger(\vec{n}) \Omega_{j\mu}(\vec{n}) = \delta_{j'j} \delta_{l'l} \delta_{\mu'\mu} = \delta_{\kappa'\kappa} \delta_{\mu'\mu}.$$

Portanto, com o resultado desta integral, os valores de γ , que é função de κ , passam a serem escritos como função de κ' , denotado por γ' . Desenvolvendo a expressão para o elemento de matriz acima, efetuando as integrais em ρ , que são dados pelas fórmulas (III.7a) e (III.7b), e lembrando que

$$\left[1 - \frac{\epsilon^2}{m^2 c^4} \right]^{1/2} = \frac{\lambda}{mc},$$

obtém-se, portanto:

$$\begin{aligned} \langle n' \kappa' \mu' | \frac{\vec{\alpha} \cdot \vec{p}}{2\lambda} | n \kappa \mu \rangle = & \\ = \frac{\lambda}{4mc} \left[\frac{n'! n!}{\Gamma(2\gamma' + n' + 1) \Gamma(2\gamma' + n + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} & \frac{\eta_-(\kappa', n') \eta_-(\kappa', n)}{\sqrt{\zeta(\kappa', n') \zeta(\kappa', n)}} \delta_{\kappa'\kappa} \delta_{\mu'\mu} \\ \cdot \left[\left[\Delta_+^2(\kappa', n) + \Delta_-^2(\kappa', n) \right] I_{n', n}^{(2\gamma')} - \frac{\eta_+^2(\kappa', n)}{n} \left[\Delta_+^2(\kappa', n) - \Delta_-^2(\kappa', n) \right] I_{n', n-1}^{(2\gamma')} + \right. & \\ + \frac{\eta_+^2(\kappa', n)}{n} N_{n', n-1}^{(2\gamma')} - \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} \left[\Delta_+^2(\kappa', n) - \Delta_-^2(\kappa', n) \right] I_{n'-1, n}^{(2\gamma')} + & \\ + \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} N_{n'-1, n}^{(2\gamma')} + \frac{\eta_+^2(\kappa', n') \eta_+^2(\kappa', n)}{n' n} \left[\Delta_+^2(\kappa', n) + \Delta_-^2(\kappa', n) \right] & \\ \left. I_{n'-1, n-1}^{(2\gamma')} \right]. & \end{aligned}$$

Pelas expressões de $\Delta_+(\kappa, n)$ e $\Delta_-(\kappa, n)$ apresentadas em (II.22b) e (II.22c), tem-se que:

$$\begin{aligned} \Delta_+^2(\kappa', n) + \Delta_-^2(\kappa', n) &= 2\zeta(\kappa', n), \\ \Delta_+^2(\kappa', n) - \Delta_-^2(\kappa', n) &= 2(\gamma' + n). \end{aligned}$$

Assim, a expressão para o elemento de matriz do operador $\frac{\vec{\alpha} \cdot \vec{p}}{2\lambda}$

é:

$$\begin{aligned}
\langle n' \kappa' \mu' | \frac{\vec{\alpha} \cdot \vec{p}}{2\lambda} | n \kappa \mu \rangle &= \\
&= \frac{\lambda}{4mc} \left[\frac{n'! n!}{\Gamma(2\gamma' + n' + 1) \Gamma(2\gamma' + n + 1)} \right]^{1/2} \frac{\eta_-(\kappa', n') \eta_-(\kappa', n)}{\sqrt{\varphi(\kappa', n') \varphi(\kappa', n)}} \delta_{\kappa' \kappa} \delta_{\mu' \mu} \\
&\cdot \left[2\varphi(\kappa', n) I_{n', n}^{(2\gamma')} - \frac{2(\gamma' + n)}{n} \eta_+^2(\kappa', n) I_{n', n-1}^{(2\gamma')} + \frac{1}{n} \eta_+^2(\kappa', n) N_{n', n-1}^{(2\gamma')} + \right. \\
&- \frac{2(\gamma' + n)}{n'} \eta_+^2(\kappa', n') I_{n'-1, n}^{(2\gamma')} + \frac{1}{n'} \eta_+^2(\kappa', n') N_{n'-1, n}^{(2\gamma')} + \\
&\quad \left. + \frac{2}{n' n} \varphi(\kappa', n) \eta_+^2(\kappa', n') \eta_+^2(\kappa', n) I_{n'-1, n-1}^{(2\gamma')} \right],
\end{aligned}$$

Este é o resultado apresentado em (III.6), capítulo III.

Por sua vez, aplicando o operador $\frac{mc}{2\lambda} \beta - \frac{\epsilon}{2\lambda c}$ sobre a função-base $|n \kappa \mu\rangle$ dada por (III.8), fica-se com:

$$\begin{aligned}
&\left[\begin{array}{cc} \frac{mc^2 - \epsilon}{2\lambda c} & 0 \\ 0 & -\frac{mc^2 + \epsilon}{2\lambda c} \end{array} \right] |n \kappa \mu\rangle = \\
&= \sqrt{2} \left[\frac{\lambda}{\hbar} \right]^{3/2} \left[\frac{n!}{\Gamma(2\gamma + n + 1)} \right]^{1/2} \varphi^{-1/2}(\kappa, n) \eta_-(\kappa, n) \cdot \\
&\cdot \left[\begin{array}{c} i \frac{mc}{2\lambda} (1 - \epsilon/mc^2)(1 + \epsilon/mc^2)^{\frac{1}{2}} \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) - \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \\ - \frac{mc}{2\lambda} (1 + \epsilon/mc^2)(1 - \epsilon/mc^2)^{\frac{1}{2}} \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \end{array} \right] \\
&\quad \cdot e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} = \\
&= \sqrt{2} \left[\frac{\lambda}{\hbar} \right]^{3/2} \left[\frac{n!}{\Gamma(2\gamma + n + 1)} \right]^{1/2} \varphi^{-1/2}(\kappa, n) \eta_-(\kappa, n).
\end{aligned}$$

$$\left[\begin{array}{l} i \frac{1}{2}(1-\epsilon/mc^2)^{\frac{1}{2}} \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) - \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \\ - \frac{1}{2}(1+\epsilon/mc^2)^{\frac{1}{2}} \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \end{array} \right] \cdot e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1}.$$

O elemento de matriz para este operador, é, usando o resultado acima:

$$\begin{aligned} \langle n' \kappa' \mu' | \frac{mc}{2\lambda} \beta - \frac{\epsilon}{2\lambda c} | n \kappa \mu \rangle &= \\ &= \frac{1}{4} \left[\frac{n'! n!}{\Gamma(2\gamma' + n' + 1) \Gamma(2\gamma + n + 1)} \right]^{1/2} \frac{\eta_-(\kappa', n') \eta_-(\kappa, n)}{\sqrt{\zeta(\kappa', n') \zeta(\kappa, n)}} \int_0^\infty d\rho \rho^2 \int_0^\pi d\theta \sin\theta \cdot \\ &\cdot \int_0^{2\pi} d\varphi \left[-i \left[1 + \epsilon/mc^2 \right]^{\frac{1}{2}} \left[L_{n'}^{(2\gamma')}(\rho) - \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} L_{n'-1}^{(2\gamma')}(\rho) \right] \Omega_{j'\ell'\mu'}^\dagger(\vec{n}) ; \right. \\ &\left. \left[1 - \epsilon/mc^2 \right]^{\frac{1}{2}} \left[L_{n'}^{(2\gamma')}(\rho) + \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} L_{n'-1}^{(2\gamma')}(\rho) \right] \Omega_{j'\bar{\ell}'\mu'}^\dagger(\vec{n}) \right] e^{-\rho/2} \rho^{\gamma'-1} \cdot \\ &\cdot \left[\begin{array}{l} i \frac{1}{2}(1-\epsilon/mc^2)^{\frac{1}{2}} \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) - \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \\ - \frac{1}{2}(1+\epsilon/mc^2)^{\frac{1}{2}} \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \end{array} \right] e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} = \\ &= \frac{1}{8} \left[\frac{n'! n!}{\Gamma(2\gamma' + n' + 1) \Gamma(2\gamma + n + 1)} \right]^{1/2} \frac{\eta_-(\kappa', n') \eta_-(\kappa, n)}{\sqrt{\zeta(\kappa', n') \zeta(\kappa, n)}} \cdot \\ &\cdot \int_0^\infty d\rho \rho^2 \left\{ \frac{\lambda}{mc} e^{-\rho} \rho^{\gamma'+\gamma-2} \left[L_{n'}^{(2\gamma')}(\rho) - \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} L_{n'-1}^{(2\gamma')}(\rho) \right] \cdot \right. \\ &\cdot \left. \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) - \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \left[\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \Omega_{j'\ell'\mu'}^\dagger(\vec{n}) \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \right] + \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{\lambda}{mc} e^{-\rho} \rho^{\gamma'+\gamma-2} \left[L_{n'}^{(2\gamma')}(\rho) + \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} L_{n'-1}^{(2\gamma')}(\rho) \right] \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \right. \\
& \quad \left. + \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \left[\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \Omega_{j', \vec{\ell}', \mu'}(\vec{n}) \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \right].
\end{aligned}$$

As integrais nas variáveis angulares já foram vistas anteriormente; portanto, desenvolvendo o resultado acima, e usando as fórmulas (III.7b) para as integrais em ρ , tem-se que:

$$\begin{aligned}
\langle n' \kappa' \mu' | \frac{mc}{2\lambda} \beta - \frac{\epsilon}{2\lambda c} | n \kappa \mu \rangle = \\
= - \frac{\lambda}{4mc} \left[\frac{n'! n!}{\Gamma(2\gamma'+n'+1)\Gamma(2\gamma'+n+1)} \right]^{1/2} \frac{\eta_-(\kappa', n') \eta_-(\kappa, n)}{\sqrt{\zeta(\kappa', n') \zeta(\kappa, n)}} \delta_{\kappa' \kappa} \delta_{\mu' \mu} \\
\cdot \left\{ \frac{\eta_+^2(\kappa', n)}{n} N_{n', n-1}^{(2\gamma')} + \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} N_{n'-1, n}^{(2\gamma')} \right\}.
\end{aligned}$$

Este é a expressão (III.9) que consta no capítulo III.

APÊNDICE C

ELEMENTOS DE MÁTRIZ DE $\frac{Z\alpha}{\rho}$

De acordo com a discussão feita no capítulo III, seção III.B, na parte que se refere ao operador $Z\alpha/\rho$, será usada a função-base na forma (II.23) para calcular o elemento de matriz deste operador. Aplicando o operador sobre a função-base, tem-se que:

$$\frac{Z\alpha}{\rho} |n \kappa \mu \rangle = Z\alpha \sqrt{2} \left[\frac{\lambda}{\hbar} \right]^{3/2} \left[\frac{n!}{\Gamma(2\gamma+n+1)} \right]^{1/2} \frac{\eta_-(\kappa, n)}{\varphi(\kappa, n)} \rho^{\gamma-2} e^{-\rho/2} \cdot \begin{pmatrix} i\Delta_+(\kappa, n) \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) - \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \\ \Delta_-(\kappa, n) \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \end{pmatrix}.$$

Portanto, o elemento de matriz é dado por:

$$\langle n' \kappa' \mu' | \frac{Z\alpha}{\rho} | n \kappa \mu \rangle = \frac{Z\alpha}{4} \left[\frac{n'! n!}{\Gamma(2\gamma'+n'+1)\Gamma(2\gamma+n+1)} \right]^{1/2} \frac{\eta_-(\kappa', n') \eta_-(\kappa, n)}{\varphi(\kappa', n') \varphi(\kappa, n)} \cdot \int_0^\infty d\rho \rho^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \rho^{\gamma'-1} e^{-\rho/2} \cdot \left[-i\Delta_+(\kappa', n') \left[L_{n'}^{(2\gamma')}(\rho) - \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} L_{n'-1}^{(2\gamma')}(\rho) \right] \Omega_{j'\ell'\mu'}^\dagger(\vec{n}') \right. \\ \left. \Delta_-(\kappa', n') \left[L_{n'}^{(2\gamma')}(\rho) + \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} L_{n'-1}^{(2\gamma')}(\rho) \right] \Omega_{j'\bar{\ell}'\mu'}(\vec{n}') \right].$$

$$\begin{aligned}
& \cdot \rho^{\gamma-2} e^{-\rho/2} \left[\begin{aligned} & \Delta_+(\kappa, n) \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) - \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \\ & \Delta_-(\kappa, n) \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \end{aligned} \right] = \\
& = \frac{Z\alpha}{4} \left[\frac{n'!n!}{\Gamma(2\gamma'+n'+1)\Gamma(2\gamma+n+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\eta_-(\kappa', n')\eta_-(\kappa, n)}{\mathcal{Z}(\kappa', n')\mathcal{Z}(\kappa, n)} \cdot \\
& \cdot \int_0^\infty d\rho \rho^{\gamma'+\gamma-1} e^{-\rho} \left\{ \begin{aligned} & \Delta_+(\kappa', n')\Delta_+(\kappa, n) \left[L_{n'}^{(2\gamma')}(\rho) - \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} L_{n'-1}^{(2\gamma')}(\rho) \right] \cdot \\ & \cdot \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) - \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \left[\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \Omega_{j'\ell'\mu'}^\dagger(\vec{n}') \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \right] + \\ & + \Delta_-(\kappa', n')\Delta_-(\kappa, n) \left[L_{n'}^{(2\gamma')}(\rho) + \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} L_{n'-1}^{(2\gamma')}(\rho) \right] \cdot \\ & \cdot \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right] \left[\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \Omega_{j'\bar{\ell}'\mu'}^\dagger(\vec{n}') \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \right] \end{aligned} \right\}. \tag{C.1}
\end{aligned}$$

As integrais nas variáveis angulares possuem resultados já conhecidos (vide expressão II.24a). As integrais em ρ , uma vez que o fator $\rho^{\gamma'+\gamma-1}$ torna-se $\rho^{2\gamma'-1}$, são da forma $I_{n',n}^{(2\gamma')}$ (conforme equação III.7b), como pode ser visto se forem desenvolvidos os produtos existentes em (C.1):

$$\begin{aligned}
[C.1] & = \\
& = \frac{Z\alpha}{4} \left[\frac{n'!n!}{\Gamma(2\gamma'+n'+1)\Gamma(2\gamma+n+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\eta_-(\kappa', n')\eta_-(\kappa, n)}{\mathcal{Z}(\kappa', n')\mathcal{Z}(\kappa, n)} \delta_{\kappa'\kappa} \delta_{\mu'\mu} \cdot \\
& \cdot \left\{ \begin{aligned} & \Delta_+(\kappa', n')\Delta_+(\kappa, n) \left[I_{n',n}^{(2\gamma')} - \frac{\eta_+^2(\kappa', n)}{n} I_{n',n-1}^{(2\gamma')} - \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} I_{n'-1,n}^{(2\gamma')} + \right. \\ & \left. + \frac{\eta_+^2(\kappa', n')\eta_+^2(\kappa, n)}{n'n} I_{n'-1,n-1}^{(2\gamma')} \right] + \\ & + \Delta_-(\kappa', n')\Delta_-(\kappa, n) \left[I_{n',n}^{(2\gamma')} + \frac{\eta_+^2(\kappa', n)}{n} I_{n',n-1}^{(2\gamma')} + \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} I_{n'-1,n}^{(2\gamma')} + \right. \\ & \left. + \frac{\eta_+^2(\kappa', n')\eta_+^2(\kappa, n)}{n'n} I_{n'-1,n-1}^{(2\gamma')} \right] \end{aligned} \right\}
\end{aligned}$$

$$+ \left. \frac{\eta_+^2(\kappa', n') \eta_+^2(\kappa', n)}{n' n} I_{n'-1, n-1}^{(2\gamma')} \right\}.$$

Rearranjando os termos na equação acima, obtém-se a expressão para o elemento de matriz (III.11):

$$\begin{aligned} \langle n' \kappa' \mu' | \frac{Z\alpha}{\rho} | n \kappa \mu \rangle &= \\ &= \frac{Z\alpha}{4} \left[\frac{n'! n!}{\Gamma(2\gamma' + n' + 1) \Gamma(2\gamma' + n + 1)} \right]^{1/2} \frac{\eta_-(\kappa', n') \eta_-(\kappa', n)}{\mathcal{Z}(\kappa', n') \mathcal{Z}(\kappa', n)} \delta_{\kappa' \kappa} \delta_{\mu' \mu} \cdot \\ &\cdot \left\{ \left[\Delta_+(\kappa', n') \Delta_+(\kappa', n) + \Delta_-(\kappa', n') \Delta_-(\kappa', n) \right] \left[I_{n', n}^{(2\gamma')} + \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} \right. \right. \\ &\cdot \left. \left. \frac{\eta_+^2(\kappa', n)}{n} I_{n'-1, n-1}^{(2\gamma')} \right] + \left[\Delta_-(\kappa', n') \Delta_-(\kappa', n) - \Delta_+(\kappa', n') \Delta_+(\kappa', n) \right] \right. \\ &\cdot \left. \left[\frac{\eta_+^2(\kappa', n)}{n} I_{n', n-1}^{(2\gamma')} + \frac{\eta_+^2(\kappa', n')}{n'} I_{n'-1, n}^{(2\gamma')} \right] \right\}. \end{aligned}$$

APÊNDICE D

ELEMENTOS DE MATRIZ DE $e^2/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$

Neste apêndice é apresentado o desenvolvimento do elemento de matriz (III.14) ou, em particular, do termo direto (III.15), o qual é transcrito abaixo:

$$\begin{aligned}
 & \left[\begin{array}{l} \text{termo} \\ \text{direto} \end{array} \right] = \\
 & = \sum_{\mu_1' \mu_2' \mu_1 \mu_2} \langle j_1' j_2' \mu_1' \mu_2' | J' M' \rangle \langle j_1 j_2 \mu_1 \mu_2 | JM \rangle [(1) \langle n_1' \kappa_1' \mu_1' |] \otimes [(2) \langle n_2' \kappa_2' \mu_2' |] \cdot \\
 & \quad \cdot \frac{\alpha}{\frac{2\lambda}{\hbar} |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} [(1) | n_1 \kappa_1 \mu_1 \rangle] \otimes [(2) | n_2 \kappa_2 \mu_2 \rangle] = \\
 & = 4\pi\alpha \sum_{l_c=0}^{\infty} \frac{1}{2l_c + 1} [(2J'+1)(2J+1)]^{1/2} (-1)^{j_2' + j_2 - j_1' - j_1 - M' - M} \cdot \\
 & \cdot \sum_{\mu_1' \mu_2' \mu_1 \mu_2} \begin{bmatrix} j_1' & j_2' & J' \\ \mu_1' & \mu_2' & -M' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ \mu_1 & \mu_2 & -M \end{bmatrix} [(1) \langle n_1' \kappa_1' \mu_1' |] \otimes [(2) \langle n_2' \kappa_2' \mu_2' |] \cdot \\
 & \cdot \frac{\rho_{<}^{l_c}}{\rho_{>}^{l_c+1}} \sum_{m_{l_c} = -l_c}^{l_c} Y_{l_c, m_{l_c}}(\vec{n}_1) Y_{l_c, m_{l_c}}^*(\vec{n}_2) [(1) | n_1 \kappa_1 \mu_1 \rangle] \otimes [(2) | n_2 \kappa_2 \mu_2 \rangle].
 \end{aligned}
 \tag{D.1}$$

Os coeficiente de Clebsch-Gordan foram substituídos pelos símbolos 3-j de Wigner, conforme a expressão (III.16).

As funções-base são escritas na forma (II.23), ou seja,

$$|n \kappa \mu\rangle = \sqrt{2} \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^{3/2} \begin{bmatrix} ig_{n,\kappa}(\rho) \Omega_{j\ell\mu}(\vec{n}) \\ -f_{n,\kappa}(\rho) \Omega_{j\bar{\ell}\mu}(\vec{n}) \end{bmatrix}, \quad (D.2)$$

onde

$$g_{n,\kappa}(\rho) = \left[\frac{n!}{\Gamma(2\gamma+n+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\eta_-(\kappa, n)}{\zeta(\kappa, n)} e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} \Delta_+(\kappa, n) \left[L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right],$$

$$f_{n,\kappa}(\rho) = \left[\frac{n!}{\Gamma(2\gamma+n+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\eta_-(\kappa, n)}{\zeta(\kappa, n)} e^{-\rho/2} \rho^{\gamma-1} \Delta_-(\kappa, n) \left[-L_n^{(2\gamma)}(\rho) + \frac{\eta_+^2(\kappa, n)}{n} L_{n-1}^{(2\gamma)}(\rho) \right]. \quad (D.3)$$

Portanto, substituindo no termo direto (D.1) as funções-base por (D.2), obtém-se que:

$$4\pi\alpha \sum_{\ell_c=0}^{\infty} \frac{1}{2\ell_c+1} [(2J'+1)(2J+1)]^{1/2} (-1)^{j'_2+j_2-j'_1-j_1-M'-M}$$

$$\cdot \sum_{\substack{\mu'_1, \mu'_2, \mu_1, \mu_2, m_{\ell_c}}} \begin{bmatrix} j'_1 & j'_2 & J' \\ \mu'_1 & \mu'_2 & -M' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ \mu_1 & \mu_2 & -M \end{bmatrix} 4 \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^6 \left(\frac{\hbar}{2\lambda}\right)^6$$

$$\cdot \int_0^{\infty} d\rho_1 \rho_1^2 \int_0^{\infty} d\rho_2 \rho_2^2 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{\pi} d\theta_1 \sin\theta_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \int_0^{\pi} d\theta_2 \sin\theta_2$$

$$\cdot \left[-ig_{n'_1, \kappa'_1}(\rho_1) \Omega_{j'_1 \ell'_1 \mu'_1}(\vec{n}_1) \quad ; \quad -f_{n'_1, \kappa'_1}(\rho_1) \Omega_{j'_1 \bar{\ell}'_1 \mu'_1}(\vec{n}_1) \right] \otimes$$

$$\otimes \left[-ig_{n'_2, \kappa'_2}(\rho_2) \Omega_{j'_2 \ell'_2 \mu'_2}(\vec{n}_2) \quad ; \quad -f_{n'_2, \kappa'_2}(\rho_2) \Omega_{j'_2 \bar{\ell}'_2 \mu'_2}(\vec{n}_2) \right]$$

$$\cdot \left[\frac{\rho_{<}}{\rho_{>}} Y_{\ell_c, m_{\ell_c}}(\vec{n}_1) Y_{\ell_c, m_{\ell_c}}^*(\vec{n}_2) \right] \begin{bmatrix} ig_{n_1, \kappa_1}(\rho_1) \Omega_{j_1 \ell_1 \mu_1}(\vec{n}_1) \\ -f_{n_1, \kappa_1}(\rho_1) \Omega_{j_1 \bar{\ell}_1 \mu_1}(\vec{n}_1) \end{bmatrix} \otimes$$

$$\begin{aligned}
& \otimes \left[\begin{array}{c} 1g_{n_2, \kappa_2}(\rho_2) \Omega_{j_2 \ell_2 \mu_2}(\vec{n}_2) \\ -f_{n_2, \kappa_2}(\rho_2) \Omega_{j_2 \bar{\ell}_2 \mu_2}(\vec{n}_2) \end{array} \right] = \\
& = \frac{\pi}{4} \alpha \sum_{\ell_c=0}^{\infty} \frac{1}{2\ell_c + 1} [(2J'+1)(2J+1)]^{1/2} (-1)^{j_2' + j_2 - j_1' - j_1 - M' - M} \\
& \cdot \int_{\mu_1' \mu_2' \mu_1 \mu_2^m \ell_c} \left[\begin{array}{ccc} j_1' & j_2' & J' \\ \mu_1' & \mu_2' & -M' \end{array} \right] \left[\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J \\ \mu_1 & \mu_2 & -M \end{array} \right] \cdot \\
& \cdot \int_0^{\infty} d\rho_1 \rho_1^2 \int_0^{\infty} d\rho_2 \rho_2^2 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{\pi} d\theta_1 \sin\theta_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \int_0^{\pi} d\theta_2 \sin\theta_2 \cdot \\
& \cdot \left[g_{n_1', \kappa_1}(\rho_1) g_{n_2', \kappa_2}(\rho_2) \frac{\rho_{<}^{\ell_c}}{\rho_{>^{\ell_c+1}}} g_{n_1, \kappa_1}(\rho_1) g_{n_2, \kappa_2}(\rho_2) \cdot \right. \\
& \cdot \left[\Omega_{j_1' \ell_1 \mu_1}^\dagger(\vec{n}_1) Y_{\ell_c, m}(\vec{n}_1) \Omega_{j_1 \ell_1 \mu_1}(\vec{n}_1) \otimes \Omega_{j_2' \ell_2 \mu_2}^\dagger(\vec{n}_2) Y_{\ell_c, m}^*(\vec{n}_2) \Omega_{j_2 \ell_2 \mu_2}(\vec{n}_2) \right] + \\
& + g_{n_1', \kappa_1}(\rho_1) f_{n_2', \kappa_2}(\rho_2) \frac{\rho_{<}^{\ell_c}}{\rho_{>^{\ell_c+1}}} g_{n_1, \kappa_1}(\rho_1) f_{n_2, \kappa_2}(\rho_2) \cdot \\
& \cdot \left[\Omega_{j_1' \ell_1 \mu_1}^\dagger(\vec{n}_1) Y_{\ell_c, m}(\vec{n}_1) \Omega_{j_1 \ell_1 \mu_1}(\vec{n}_1) \otimes \Omega_{j_2' \bar{\ell}_2 \mu_2}^\dagger(\vec{n}_2) Y_{\ell_c, m}^*(\vec{n}_2) \Omega_{j_2 \bar{\ell}_2 \mu_2}(\vec{n}_2) \right] + \\
& + f_{n_1', \kappa_1}(\rho_1) g_{n_2', \kappa_2}(\rho_2) \frac{\rho_{<}^{\ell_c}}{\rho_{>^{\ell_c+1}}} f_{n_1, \kappa_1}(\rho_1) g_{n_2, \kappa_2}(\rho_2) \cdot \\
& \cdot \left[\Omega_{j_1' \bar{\ell}_1 \mu_1}^\dagger(\vec{n}_1) Y_{\ell_c, m}(\vec{n}_1) \Omega_{j_1 \bar{\ell}_1 \mu_1}(\vec{n}_1) \otimes \Omega_{j_2' \ell_2 \mu_2}^\dagger(\vec{n}_2) Y_{\ell_c, m}^*(\vec{n}_2) \Omega_{j_2 \ell_2 \mu_2}(\vec{n}_2) \right] + \\
& + f_{n_1', \kappa_1}(\rho_1) f_{n_2', \kappa_2}(\rho_2) \frac{\rho_{<}^{\ell_c}}{\rho_{>^{\ell_c+1}}} f_{n_1, \kappa_1}(\rho_1) f_{n_2, \kappa_2}(\rho_2) \cdot \\
& \cdot \left. \left[\Omega_{j_1' \bar{\ell}_1 \mu_1}^\dagger(\vec{n}_1) Y_{\ell_c, m}(\vec{n}_1) \Omega_{j_1 \bar{\ell}_1 \mu_1}(\vec{n}_1) \otimes \Omega_{j_2' \bar{\ell}_2 \mu_2}^\dagger(\vec{n}_2) Y_{\ell_c, m}^*(\vec{n}_2) \Omega_{j_2 \bar{\ell}_2 \mu_2}(\vec{n}_2) \right] \right] \\
\end{aligned} \tag{D.4}$$

Em (D.4), as integrais que envolvem os espinores esféricos

$\Omega_{j\bar{l}\mu}(\vec{n})$ podem ser tratadas do seguinte modo: uma vez que

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) \Omega_{j\bar{l}\mu}(\vec{n}) = -\Omega_{j\bar{l}\mu}(\vec{n}) ,$$

então,

$$\begin{aligned} & \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \Omega_{j', l', \mu'}^\dagger(\vec{n}) Y_{l_c, m_{l_c}}(\vec{n}) \Omega_{j\bar{l}\mu}(\vec{n}) = \\ &= \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \left[(-\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) \Omega_{j', l', \mu'}^\dagger(\vec{n}) \right]^\dagger Y_{l_c, m_{l_c}}(\vec{n}) \left[(-\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) \Omega_{j\bar{l}\mu}(\vec{n}) \right] = \\ &= \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \Omega_{j', l', \mu'}^\dagger(\vec{n}) Y_{l_c, m_{l_c}}(\vec{n}) (\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) (\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) \Omega_{j\bar{l}\mu}(\vec{n}) = \\ &= \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \Omega_{j', l', \mu'}^\dagger(\vec{n}) Y_{l_c, m_{l_c}}(\vec{n}) \Omega_{j\bar{l}\mu}(\vec{n}) , \end{aligned}$$

(D.5)

Já que $(\vec{\sigma} \cdot \vec{n})(\vec{\sigma} \cdot \vec{n}) = 1$.

Portanto, o termo direto (D.4) vem a ser escrito como

$$\begin{aligned} & \left[\begin{array}{c} \text{termo} \\ \text{direto} \end{array} \right] = \\ &= \frac{\pi}{4} \alpha \sum_{l_c=0}^{\infty} \frac{1}{2l_c + 1} [(2J' + 1)(2J + 1)]^{1/2} (-1)^{j'_2 + j'_2 - j'_1 - j_1 - M' - M} \cdot \\ & \cdot \int_{\mu'_1 \mu'_2 \mu_1 \mu_2 m_{l_c}} \left[\begin{array}{ccc} j'_1 & j'_2 & J' \\ \mu'_1 & \mu'_2 & -M' \end{array} \right] \left[\begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & J \\ \mu_1 & \mu_2 & -M \end{array} \right] \int_0^\infty d\rho_1 \rho_1^2 \int_0^\infty d\rho_2 \rho_2^2 \cdot \\ & \cdot \left[g_{n_1, \kappa_1}(\rho_1) g_{n_2, \kappa_2}(\rho_2) \frac{\rho_<^{l_c}}{\rho_>} g_{n_1, \kappa_1}(\rho_1) g_{n_2, \kappa_2}(\rho_2) + \right. \\ & + g_{n_1, \kappa_1}(\rho_1) f_{n_2, \kappa_2}(\rho_2) \frac{\rho_<^{l_c}}{\rho_>} g_{n_1, \kappa_1}(\rho_1) f_{n_2, \kappa_2}(\rho_2) + \\ & \left. + f_{n_1, \kappa_1}(\rho_1) g_{n_2, \kappa_2}(\rho_2) \frac{\rho_<^{l_c}}{\rho_>} f_{n_1, \kappa_1}(\rho_1) g_{n_2, \kappa_2}(\rho_2) + \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + f_{n_1, \kappa_1}(\rho_1) f_{n_2, \kappa_2}(\rho_2) \frac{\rho_<^{\ell_c}}{\rho_>^{\ell_c+1}} f_{n_1, \kappa_1}(\rho_1) f_{n_2, \kappa_2}(\rho_2) \Big] \cdot \\
& \cdot \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^\pi d\theta_1 \sin\theta_1 \Omega_{j_1, \ell_1, \mu_1}^\dagger(\vec{n}_1) Y_{\ell_c, m_{\ell_c}}(\vec{n}_1) \Omega_{j_1, \ell_1, \mu_1}(\vec{n}_1) \cdot \\
& \cdot \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \int_0^\pi d\theta_2 \sin\theta_2 \Omega_{j_2, \ell_2, \mu_2}^\dagger(\vec{n}_2) Y_{\ell_c, m_{\ell_c}}^*(\vec{n}_2) \Omega_{j_2, \ell_2, \mu_2}(\vec{n}_2) \cdot
\end{aligned}$$

(D.6)

A seguir, calculam-se em separado as partes angular e radial existentes em (D.6) nas respectivas seções abaixo.

D.1) PARTE ANGULAR

As integrais nas variáveis angulares são, como pode ser visto acima, da forma:

$$\begin{aligned}
& \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \Omega_{j, \ell, \mu}^\dagger(\vec{n}) Y_{\ell_c, m_{\ell_c}}(\vec{n}) \Omega_{j, \ell, \mu}(\vec{n}) = \\
& = \sum_{\sigma, \sigma' = \pm 1/2} \langle \ell', \frac{1}{2} \mu' - \sigma' \sigma' | j' \mu' \rangle \langle \ell \frac{1}{2} \mu - \sigma \sigma | j \mu \rangle \cdot \\
& \cdot \left\{ \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{\ell', \mu', -\sigma'}^*(\vec{n}) Y_{\ell_c, m_{\ell_c}}(\vec{n}) Y_{\ell, \mu - \sigma}(\vec{n}) \right\} \chi^{\sigma'} \dagger \chi^\sigma,
\end{aligned}$$

(D.7)

onde substituíram-se os espinores esféricos pelas expressões (II.6).

O produto $\chi^{\sigma'} \dagger \chi^\sigma$ é igual a $\delta_{\sigma', \sigma}$; portanto, o resultado (D.7) é levado a

$$\begin{aligned}
& \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \Omega_{j', \ell', \mu'}^\dagger(\vec{n}) Y_{\ell_c, m_{\ell_c}}(\vec{n}) \Omega_{j\mu}(\vec{n}) = \\
= & \sum_{\sigma' = \pm 1/2} \langle \ell' \frac{1}{2} \mu' - \sigma' \sigma' | j' \mu' \rangle \langle \ell \frac{1}{2} \mu - \sigma' \sigma' | j \mu \rangle \cdot \\
& \cdot \left\{ \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{\ell', \mu' - \sigma'}^*(\vec{n}) Y_{\ell_c, m_{\ell_c}}(\vec{n}) Y_{\ell, \mu - \sigma'}(\vec{n}) \right\}.
\end{aligned} \tag{D.8}$$

Os valores $\mu' - \sigma'$ e $\mu - \sigma'$ são as projeções no eixo z dos valores ℓ' e ℓ , respectivamente; se for feita a troca

$$\mu' - \sigma' \rightarrow \nu' \quad \text{e} \quad \mu - \sigma' \rightarrow \nu,$$

tal que

$$-\ell' \leq \nu' \leq \ell' \quad \text{e} \quad -\ell \leq \nu \leq \ell,$$

e somar sobre todos os possíveis valores de ν' e ν , obtém-se que:

$$\begin{aligned}
& \sum_{\sigma' = \pm 1/2} \langle \ell' \frac{1}{2} \mu' - \sigma' \sigma' | j' \mu' \rangle \langle \ell \frac{1}{2} \mu - \sigma' \sigma' | j \mu \rangle \cdot \\
& \cdot \left\{ \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{\ell', \mu' - \sigma'}^*(\vec{n}) Y_{\ell_c, m_{\ell_c}}(\vec{n}) Y_{\ell, \mu - \sigma'}(\vec{n}) \right\} = \\
= & \sum_{\nu', \nu, \sigma'} (-1)^{1 - \ell' - \ell - \mu' - \mu} \sqrt{(2j' + 1)(2j + 1)} \begin{bmatrix} \ell' & \frac{1}{2} & j' \\ \nu' & \sigma' & -\mu' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ell & \frac{1}{2} & j \\ \nu & \sigma' & -\mu \end{bmatrix} \cdot \\
& \cdot \left\{ (-1)^{\nu'} \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{\ell', -\nu'}(\vec{n}) Y_{\ell_c, m_{\ell_c}}(\vec{n}) Y_{\ell, \nu}(\vec{n}) \right\},
\end{aligned} \tag{D.9}$$

onde trocou-se os coeficientes de Clebsch-Gordan pelos símbolos 3-j. Estes símbolos, bem como os coeficientes de Clebsch-Gordan cuidam para que a igualdade (D.9) se mantenha, já que os termos da somatória não são nulos somente se $\nu' + \sigma' = \mu'$ e $\nu + \sigma' = \mu$.

Usou-se também o fato que

$$Y_{\ell', \nu'}^*(\vec{n}) = (-1)^{\nu'} Y_{\ell', -\nu'}(\vec{n}). \quad (D.10)$$

A integral envolvendo os três harmônicos esféricos que ocorre em (D.9) resulta em^[22]:

$$\begin{aligned} \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{\ell', -\nu'}(\vec{n}) Y_{\ell_c, m_{\ell_c}}(\vec{n}) Y_{\ell, \nu}(\vec{n}) &= \\ &= \left[\frac{(2\ell'+1)(2\ell_c+1)(2\ell+1)}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{bmatrix} \ell' & \ell_c & \ell \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ell' & \ell_c & \ell \\ -\nu' & m_{\ell_c} & \nu \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (D.11)$$

Portanto, o resultado para (D.9) é:

$$\begin{aligned} [(D.9)] &= \\ &= \left[\frac{(2j'+1)(2\ell'+1)(2\ell_c+1)(2\ell+1)(2j+1)}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{bmatrix} \ell' & \ell_c & \ell \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ &\cdot \sum_{\nu', \nu, \sigma'} (-1)^{1-\ell'-\ell-\mu'-\mu+\nu'} \begin{bmatrix} \ell' & \ell_c & \ell \\ -\nu' & m_{\ell_c} & \nu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ell' & \frac{1}{2} & j' \\ \nu' & \sigma' & -\mu' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ell & \frac{1}{2} & j \\ \nu & \sigma' & -\mu \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (D.12)$$

Usando as propriedades^[22] dos símbolos 3-j:

$$\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \mu_1 & \mu_2 & \mu_3 \end{bmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{bmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ \mu_2 & \mu_1 & \mu_3 \end{bmatrix} \quad (D.13a)$$

(propriedade válida para quaisquer permutações de colunas),

$$\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \mu_1 & \mu_2 & \mu_3 \end{bmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -\mu_1 & -\mu_2 & -\mu_3 \end{bmatrix}, \quad (D.13b)$$

$$\sum_{\mu_1 \mu_2 \mu_3} (-1)^{j_1+j_2+j_3+\mu_1+\mu_2+\mu_3}$$

$$\begin{bmatrix} j_2 & j_1 & j_4 \\ \mu_2 & \mu_1 & \mu_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_1 & j_3 & j_5 \\ \mu_1 & \mu_3 & \mu_5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_3 & j_2 & j_6 \\ \mu_3 & \mu_2 & \mu_6 \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} J_4 & J_5 & J_6 \\ \mu_4 & \mu_5 & \mu_6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_4 & J_5 & J_6 \\ J_3 & J_2 & J_1 \end{bmatrix},$$

(D.13c)

sendo o símbolo

$$\begin{bmatrix} J_4 & J_5 & J_6 \\ J_3 & J_2 & J_1 \end{bmatrix}$$

denominado símbolo 6-J^[22].

Assim, o resultado para (D.12), ou seja, para a integral (D.7), é:

$$\int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \Omega_{j', \ell', \mu'}^\dagger(\vec{n}) Y_{\ell_c, m_{\ell_c}}(\vec{n}) Y_{\ell_c, \mu}(\vec{n}) =$$

$$= (-1)^{-\mu' + 1/2} \left[\frac{(2j'+1)(2\ell'+1)(2\ell_c+1)(2\ell+1)(2j+1)}{4\pi} \right]^{1/2} \begin{bmatrix} \ell' & \ell_c & \ell \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \ell_c & j' & j \\ m_{\ell_c} & -\mu' & \mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ell_c & j' & j \\ \frac{1}{2} & \ell & \ell' \end{bmatrix}.$$

(D.14)

Portanto, o resultado para o termo direto (D.6), usando a expressão (D.14) obtida acima para as integrais nas variáveis angulares $\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2$, é:

$$\left[\begin{array}{c} \text{termo} \\ \text{direto} \end{array} \right] =$$

$$= \frac{\alpha}{16} \sum_{\ell_c=0}^{\infty} [(2J'+1)(2j'_1+1)(2\ell'_1+1)(2\ell_1+1)(2j_1+1)(2j'_2+1)(2\ell'_2+1)]^{1/2} \cdot [(2\ell_2+1)(2j_2+1)(2J+1)]^{1/2} \begin{bmatrix} \ell'_1 & \ell_c & \ell_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ell'_2 & \ell_c & \ell_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \ell_c & j'_1 & j_1 \\ \frac{1}{2} & \ell_1 & \ell'_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ell_c & j'_2 & j_2 \\ \frac{1}{2} & \ell_2 & \ell'_2 \end{bmatrix} \left[\begin{array}{c} \text{parte} \\ \text{radial} \end{array} \right].$$

$$\sum_{\substack{\mu'_1, \mu'_2, \mu_1, \mu_2, m_{lc}}} (-1)^{j'_2 + j_2 - j'_1 - j_1 - M' - M} (-1)^{1 - \mu'_1 - \mu'_2 + m_{lc}} \cdot \begin{bmatrix} j'_1 & j'_2 & J' \\ \mu'_1 & \mu'_2 & -M' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ \mu_1 & \mu_2 & -M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_c & j'_1 & j_1 \\ m_{lc} & -\mu'_1 & \mu_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_c & j_2 & j_2 \\ -m_{lc} & -\mu'_2 & \mu_2 \end{bmatrix}. \quad (D.15)$$

Usando o resultado abaixo^[22]

$$\sum_{\substack{m_1, m_2, m_3 \\ m_4, m_5}} (-1)^{j_1 + j_2 + j_3 + m_1 + m_2 + m_3} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j_6 \\ m_1 & -m_2 & m_6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_2 & j_3 & j_5 \\ m_2 & -m_3 & m_5 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} j_3 & j_1 & j_4 \\ m_3 & -m_1 & m_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_5 & j_4 & j_6 \\ m_5 & m_4 & m_6 \end{bmatrix} = \delta_{j'_6, j_6} \delta_{m'_6, m_6} \frac{1}{2j_6 + 1} \begin{Bmatrix} j_5 & j_4 & j_6 \\ j_1 & j_2 & j_3 \end{Bmatrix}. \quad (D.16)$$

para a somatória nos índices $\mu'_1, \mu'_2, \mu_1, \mu_2$ e m_{lc} na expressão (D.15), obtém-se para o termo direto o seguinte resultado para a sua parte angular :

$$\begin{aligned} & \left[\begin{array}{l} \text{termo} \\ \text{direto} \end{array} \right] = \\ & = \frac{\alpha}{16} \sum_{l_c=0}^{\infty} (-1)^{j'_2 + j_2 + J} \delta_{j', j} \delta_{M', M} [(2j'_1 + 1)(2l'_1 + 1)(2l_1 + 1)(2j_1 + 1)]^{1/2} \cdot \\ & \cdot [(2j'_2 + 1)(2l'_2 + 1)(2l_2 + 1)(2j_2 + 1)]^{1/2} \begin{bmatrix} l'_1 & l_c & l_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l'_2 & l_c & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \\ & \cdot \left\{ \begin{array}{ccc} l_c & j'_1 & j_1 \\ \frac{1}{2} & l_1 & l'_1 \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} l_c & j'_2 & j_2 \\ \frac{1}{2} & l_2 & l'_2 \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{ccc} j_2 & j_1 & J \\ j'_1 & j'_2 & l_c \end{array} \right\} \left[\begin{array}{l} \text{parte} \\ \text{radial} \end{array} \right]. \end{aligned} \quad (D.17)$$

D.2) PARTE RADIAL

Explicitamente, a parte radial que se encontra no termo direto visto acima (equação (D.17)) é, conforme a expressão (D.6), dado por:

$$\begin{aligned} \left[\begin{array}{c} \text{parte} \\ \text{radial} \end{array} \right] &= \int_0^{\infty} d\rho_1 \rho_1^2 \int_0^{\infty} d\rho_2 \rho_2^2 \cdot \\ &\cdot \left[g_{n'_1, \kappa'_1}(\rho_1) g_{n'_2, \kappa'_2}(\rho_2) \frac{\rho_<^{\ell_c}}{\rho_>^{\ell_c+1}} g_{n_1, \kappa_1}(\rho_1) g_{n_2, \kappa_2}(\rho_2) + \right. \\ &+ g_{n'_1, \kappa'_1}(\rho_1) f_{n'_2, \kappa'_2}(\rho_2) \frac{\rho_<^{\ell_c}}{\rho_>^{\ell_c+1}} g_{n_1, \kappa_1}(\rho_1) f_{n_2, \kappa_2}(\rho_2) + \\ &+ f_{n'_1, \kappa'_1}(\rho_1) g_{n'_2, \kappa'_2}(\rho_2) \frac{\rho_<^{\ell_c}}{\rho_>^{\ell_c+1}} f_{n_1, \kappa_1}(\rho_1) g_{n_2, \kappa_2}(\rho_2) + \\ &\left. + f_{n'_1, \kappa'_1}(\rho_1) f_{n'_2, \kappa'_2}(\rho_2) \frac{\rho_<^{\ell_c}}{\rho_>^{\ell_c+1}} f_{n_1, \kappa_1}(\rho_1) f_{n_2, \kappa_2}(\rho_2) \right]. \end{aligned}$$

(D.18)

O termo acima ocorre para cada valor válido de ℓ_c ; são os símbolos 3-j e 6-j da parte angular que determinam tais valores para ℓ_c .

As funções $f_{n, \kappa}(\rho)$ e $g_{n, \kappa}(\rho)$ estão apresentadas nas equações (D.3). Substituindo estas funções na expressão (D.18), obtém-se uma soma de dezesseis integrais na forma:

$$R_{\ell_c}(n'_1, \kappa'_1, n'_2, \kappa'_2; n_1, \kappa_1, n_2, \kappa_2) =$$

$$= \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \rho_1^{\gamma'_1 + \gamma_1} \rho_2^{\gamma'_2 + \gamma_2} e^{-\rho_1 - \rho_2} \frac{\rho_<^{\ell_c}}{\rho_<^{\ell_c+1}} L_{n'_1}^{(2\gamma'_1)}(\rho_1) L_{n'_2}^{(2\gamma'_2)}(\rho_2) L_{n_1}^{(2\gamma_1)}(\rho_1) \cdot L_{n_2}^{(2\gamma_2)}(\rho_2) d\rho_1 d\rho_2, \quad (D.19)$$

como foi citado no capítulo III, equação (III.19).

Substituindo os polinômios de Laguerre generalizados em (D.19) pela sua forma (A.1a), o termo acima se torna:

$$\begin{aligned} R_{\ell_c}(n'_1, \kappa'_1, n'_2, \kappa'_2; n_1, \kappa_1, n_2, \kappa_2) &= \\ &= \sum_{m'_1, m'_2, m_1, m_2} \frac{(-1)^{m'_1} \Gamma(2\gamma'_1 + n'_1 + 1)}{m'_1! (n'_1 - m'_1)! \Gamma(2\gamma'_1 + m'_1 + 1)} \frac{(-1)^{m'_2} \Gamma(2\gamma'_2 + n'_2 + 1)}{m'_2! (n'_2 - m'_2)! \Gamma(2\gamma'_2 + m'_2 + 1)} \cdot \\ &\quad \frac{(-1)^{m_1} \Gamma(2\gamma_1 + n_1 + 1)}{m_1! (n_1 - m_1)! \Gamma(2\gamma_1 + m_1 + 1)} \frac{(-1)^{m_2} \Gamma(2\gamma_2 + n_2 + 1)}{m_2! (n_2 - m_2)! \Gamma(2\gamma_2 + m_2 + 1)} \cdot \\ &\quad \cdot \mathfrak{K}_{\ell_c}(m'_1, \kappa'_1, m'_2, \kappa'_2; m_1, \kappa_1, m_2, \kappa_2), \quad (D.19') \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned} \mathfrak{K}_{\ell_c}(m'_1, \kappa'_1, m'_2, \kappa'_2; m_1, \kappa_1, m_2, \kappa_2) &= \\ &= \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} [\rho_1^{\gamma'_1 + \gamma_1 + m'_1 + m_1}] [\rho_2^{\gamma'_2 + \gamma_2 + m'_2 + m_2}] e^{-(\rho_1 + \rho_2)} \frac{\rho_<^{\ell_c}}{\rho_<^{\ell_c+1}} d\rho_1 d\rho_2, \quad (D.20) \end{aligned}$$

e, conforme (II.9),

$$\begin{aligned} \gamma'_1 &= \sqrt{\kappa_1'^2 - (Z\alpha)^2}, \quad \gamma_2' = \sqrt{\kappa_2'^2 - (Z\alpha)^2}, \\ \gamma_1 &= \sqrt{\kappa_1^2 - (Z\alpha)^2}, \quad \gamma_2 = \sqrt{\kappa_2^2 - (Z\alpha)^2}. \end{aligned}$$

Considerando que $\alpha_1 = \gamma'_1 + \gamma_1 + m'_1 + m_1$ e $\alpha_2 = \gamma'_2 + \gamma_2 + m'_2 + m_2$, a

integral (D.20) é escrita como:

$$\begin{aligned}
 \mathfrak{K}_{\ell c} (m'_1, \kappa'_1, m'_2, \kappa'_2; m_1, \kappa_1, m_2, \kappa_2) &= \\
 &= \int_0^\infty \int_0^\infty \rho_1^{\alpha_1} \rho_2^{\alpha_2} e^{-(\rho_1 + \rho_2)} \frac{\rho_1^{\ell c}}{\rho_1^{\ell c + 1}} d\rho_1 d\rho_2 = \\
 &= \int_0^\infty d\rho_1 e^{-\rho_1} \rho_1^{\alpha_1 - \ell c - 1} \int_0^{\rho_1} d\rho_2 e^{-\rho_2} \rho_2^{\alpha_2 + \ell c} + \\
 &\quad + \int_0^\infty d\rho_1 e^{-\rho_1} \rho_1^{\alpha_1 + \ell c} \int_{\rho_1}^\infty d\rho_2 e^{-\rho_2} \rho_2^{\alpha_2 - \ell c - 1} .
 \end{aligned}
 \tag{D.20'}$$

As integrais

$$\int_0^{\rho_1} d\rho_2 e^{-\rho_2} \rho_2^{\alpha_2 + \ell c} = \gamma(\alpha_2 + \ell c + 1; \rho_1) ,$$

$$\int_{\rho_1}^\infty d\rho_2 e^{-\rho_2} \rho_2^{\alpha_2 - \ell c - 1} = \Gamma(\alpha_2 - \ell c; \rho_1) ,$$

são representações de funções Gama incompletas^[8]. Assim, a expressão (D.20') torna-se:

$$\begin{aligned}
 \mathfrak{K}_{\ell c} (m'_1, \kappa'_1, m'_2, \kappa'_2; m_1, \kappa_1, m_2, \kappa_2) &= \int_0^\infty d\rho_1 e^{-\rho_1} \rho_1^{\alpha_1 - \ell c - 1} \gamma(\alpha_2 + \ell c + 1; \rho_1) + \\
 &\quad + \int_0^\infty d\rho_1 e^{-\rho_1} \rho_1^{\alpha_1 + \ell c} \Gamma(\alpha_2 - \ell c; \rho_1) .
 \end{aligned}
 \tag{D.20''}$$

As integrais acima possuem soluções^[8] na forma de funções hipergeométricas de Gauss:

$$\int_0^{\infty} e^{-st} t^{\beta-1} \gamma(\alpha, t) dt = \frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\alpha(1+s)^{\alpha+\beta}} {}_2F_1\left(1, \alpha+\beta; \alpha+1; \frac{1}{1+s}\right),$$

$$\Re(\alpha+\beta) > 0, \quad \Re(s) > 0, \quad (\text{D.21a})$$

$$\int_0^{\infty} e^{-st} t^{\beta-1} \Gamma(\alpha, t) dt = \frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\beta(1+s)^{\alpha+\beta}} {}_2F_1\left(1, \alpha+\beta; \beta+1; \frac{s}{1+s}\right),$$

$$(\text{D.21b})$$

onde

$${}_2F_1(a, b; c; y) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+k)\Gamma(b+k)}{k!\Gamma(c+k)} y^k$$

conforme eq. (III.20).

Portanto, substituindo as integrais em (D.20") pelos respectivos resultados (D.21a) e (D.21b), encontramos que:

$$\mathfrak{K}_{\ell c}(m'_1, \kappa'_1, m'_2, \kappa'_2; m_1, \kappa_1, m_2, \kappa_2) =$$

$$= \frac{\Gamma(\alpha_1 + \alpha_2 + 1)}{2^{\alpha_1 + \alpha_2 + 1}} \left\{ \frac{{}_2F_1(1, \alpha_1 + \alpha_2 + 1; \alpha_2 + \ell c + 2; 1/2)}{\alpha_2 + \ell c + 1} + \right.$$

$$\left. + \frac{{}_2F_1(1, \alpha_1 + \alpha_2 + 1; \alpha_1 + \ell c + 2; 1/2)}{\alpha_1 + \ell c + 1} \right\}.$$

Usando a transformação abaixo,

$${}_2F_1(a, b; c; y) = (1-y)^{-a} {}_2F_1(a, c-b; c; \frac{z}{z-1}),$$

obtemos finalmente que:

$$\mathfrak{K}_{\ell c}(m'_1, \kappa'_1, m'_2, \kappa'_2; m_1, \kappa_1, m_2, \kappa_2) =$$

$$= \frac{\Gamma(\alpha_1 + \alpha_2 + 1)}{2^{\alpha_1 + \alpha_2}} \left\{ \frac{{}_2F_1(1, \ell c - \alpha_1 + 1; \alpha_2 + \ell c + 2; -1)}{\alpha_2 + \ell c + 1} + \right.$$

$$\left. + \frac{{}_2F_1(1, \ell c - \alpha_2 + 1; \alpha_1 + \ell c + 2; -1)}{\alpha_1 + \ell c + 1} \right\},$$

$$(\text{D.22})$$

onde $\alpha_1 = \gamma'_1 + \gamma_1 + m'_1 + m_1$ e $\alpha_2 = \gamma'_2 + \gamma_2 + m'_2 + m_2$.

Cada uma das funções hipergeométricas acima podem ser desenvolvidas segundo a expressão dada por (III.21).

Com o resultado obtido em (D.22), obtém-se a expressão completa para a integral-base (D.19'). O resultado para esta integral-base se encontra transcrito no capítulo III, eq.(III.19'). A parte radial (D.18) é, portanto:

$$\begin{aligned}
 & \left[\begin{array}{l} \text{parte} \\ \text{radial} \end{array} \right] = \\
 & = \left[\frac{n_1'!n_2'!n_1!n_2!}{\Gamma(2\gamma_1+n_1'+1)\Gamma(2\gamma_2+n_2'+1)\Gamma(2\gamma_1+n_1+1)\Gamma(2\gamma_2+n_2+1)} \right]^{1/2} \cdot \\
 & \cdot \frac{\eta_-(\kappa_1', n_1')\eta_-(\kappa_2', n_2')\eta_-(\kappa_1, n_1)\eta_-(\kappa_2, n_2)}{\mathcal{G}(\kappa_1', n_1')\mathcal{G}(\kappa_2', n_2')\mathcal{G}(\kappa_1, n_1)\mathcal{G}(\kappa_2, n_2)} \left\{ \left[\Delta_+(\kappa_1', n_1')\Delta_+(\kappa_2', n_2') \right. \right. \\
 & \cdot \Delta_+(\kappa_1, n_1)\Delta_+(\kappa_2, n_2) + \Delta_+(\kappa_1', n_1')\Delta_-(\kappa_2', n_2')\Delta_+(\kappa_1, n_1)\Delta_-(\kappa_2, n_2) + \\
 & + \Delta_-(\kappa_1', n_1')\Delta_+(\kappa_2', n_2')\Delta_-(\kappa_1, n_1)\Delta_+(\kappa_2, n_2) + \Delta_-(\kappa_1', n_1')\Delta_-(\kappa_2', n_2') \cdot \\
 & \cdot \Delta_-(\kappa_1, n_1)\Delta_-(\kappa_2, n_2) \left. \right] \left[R_{\ell c}(n_1', \kappa_1', n_2', \kappa_2'; n_1, \kappa_1, n_2, \kappa_2) + \right. \\
 & + \frac{\eta_+^2(\kappa_2', n_2')\eta_+^2(\kappa_2, n_2)}{n_2'n_2} R_{\ell c}(n_1', \kappa_1', n_2'-1, \kappa_2'; n_1, \kappa_1, n_2-1, \kappa_2) + \\
 & + \frac{\eta_+^2(\kappa_1', n_1')\eta_+^2(\kappa_1, n_1)}{n_1'n_1} R_{\ell c}(n_1'-1, \kappa_1', n_2', \kappa_2'; n_1-1, \kappa_1, n_2, \kappa_2) + \\
 & + \frac{\eta_+^2(\kappa_1', n_1')\eta_+^2(\kappa_2', n_2')\eta_+^2(\kappa_1, n_1)\eta_+^2(\kappa_2, n_2)}{n_1'n_2'n_1'n_2} \cdot \\
 & \left. \left. \cdot R_{\ell c}(n_1'-1, \kappa_1', n_2'-1, \kappa_2'; n_1-1, \kappa_1, n_2-1, \kappa_2) \right] + \right. \\
 & + \left[-\Delta_+(\kappa_1', n_1')\Delta_+(\kappa_2', n_2')\Delta_+(\kappa_1, n_1)\Delta_+(\kappa_2, n_2) + \Delta_+(\kappa_1', n_1')\Delta_-(\kappa_2', n_2') \cdot \right. \\
 & \left. \cdot \Delta_+(\kappa_1, n_1)\Delta_-(\kappa_2, n_2) - \Delta_-(\kappa_1', n_1')\Delta_+(\kappa_2', n_2')\Delta_-(\kappa_1, n_1)\Delta_+(\kappa_2, n_2) + \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \Delta_-(\kappa'_1, n'_1) \Delta_-(\kappa'_2, n'_2) \Delta_-(\kappa_1, n_1) \Delta_-(\kappa_2, n_2) \Big]. \\
& \cdot \left[\frac{\eta_+^2(\kappa_2, n_2)}{n_2} R_{\ell c}(n'_1, \kappa'_1, n'_2, \kappa'_2; n_1, \kappa_1, n_2-1, \kappa_2) + \right. \\
& + \frac{\eta_+^2(\kappa'_2, n'_2)}{n'_2} R_{\ell c}(n'_1, \kappa'_1, n'_2-1, \kappa'_2; n_1, \kappa_1, n_2, \kappa_2) + \frac{\eta_+^2(\kappa'_1, n'_1) \eta_+^2(\kappa_1, n_1)}{n'_1 n_1} \\
& \cdot \frac{\eta_+^2(\kappa_2, n_2)}{n_2} R_{\ell c}(n'_1-1, \kappa'_1, n'_2, \kappa'_2; n_1-1, \kappa_1, n_2-1, \kappa_2) + \frac{\eta_+^2(\kappa'_1, n'_1)}{n'_1} \\
& \cdot \left. \frac{\eta_+^2(\kappa'_2, n'_2) \eta_+^2(\kappa_1, n_1)}{n'_2 n_1} R_{\ell c}(n'_1-1, \kappa'_1, n'_2-1, \kappa'_2; n_1-1, \kappa_1, n_2, \kappa_2) \right] + \\
& + \left[-\Delta_+(\kappa'_1, n'_1) \Delta_+(\kappa'_2, n'_2) \Delta_+(\kappa_1, n_1) \Delta_+(\kappa_2, n_2) - \Delta_+(\kappa'_1, n'_1) \Delta_-(\kappa'_2, n'_2) \right. \\
& \cdot \Delta_+(\kappa_1, n_1) \Delta_-(\kappa_2, n_2) + \Delta_-(\kappa'_1, n'_1) \Delta_+(\kappa'_2, n'_2) \Delta_-(\kappa_1, n_1) \Delta_+(\kappa_2, n_2) + \\
& \quad \left. + \Delta_-(\kappa'_1, n'_1) \Delta_-(\kappa'_2, n'_2) \Delta_-(\kappa_1, n_1) \Delta_-(\kappa_2, n_2) \right]. \\
& \cdot \left[\frac{\eta_+^2(\kappa_1, n_1)}{n_1} R_{\ell c}(n'_1, \kappa'_1, n'_2, \kappa'_2; n_1-1, \kappa_1, n_2, \kappa_2) + \frac{\eta_+^2(\kappa'_2, n'_2)}{n'_2} \right. \\
& \cdot \frac{\eta_+^2(\kappa_1, n_1) \eta_+^2(\kappa_2, n_2)}{n_1 n_2} R_{\ell c}(n'_1, \kappa'_1, n'_2-1, \kappa'_2; n_1-1, \kappa_1, n_2-1, \kappa_2) + \\
& + \frac{\eta_+^2(\kappa'_1, n'_1)}{n'_1} R_{\ell c}(n'_1-1, \kappa'_1, n'_2, \kappa'_2; n_1, \kappa_1, n_2, \kappa_2) + \frac{\eta_+^2(\kappa'_1, n'_1)}{n'_1} \\
& \cdot \left. \frac{\eta_+^2(\kappa'_2, n'_2) \eta_+^2(\kappa_2, n_2)}{n'_2 n_2} R_{\ell c}(n'_1-1, \kappa'_1, n'_2-1, \kappa'_2; n_1, \kappa_1, n_2-1, \kappa_2) \right] + \\
& + \left[\Delta_+(\kappa'_1, n'_1) \Delta_+(\kappa'_2, n'_2) \Delta_+(\kappa_1, n_1) \Delta_+(\kappa_2, n_2) - \Delta_+(\kappa'_1, n'_1) \Delta_-(\kappa'_2, n'_2) \right. \\
& \cdot \Delta_+(\kappa_1, n_1) \Delta_-(\kappa_2, n_2) - \Delta_-(\kappa'_1, n'_1) \Delta_+(\kappa'_2, n'_2) \Delta_-(\kappa_1, n_1) \Delta_+(\kappa_2, n_2) + \\
& \quad \left. + \Delta_-(\kappa'_1, n'_1) \Delta_-(\kappa'_2, n'_2) \Delta_-(\kappa_1, n_1) \Delta_-(\kappa_2, n_2) \right].
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot \left[\frac{\eta_+^2(\kappa_1, n_1) \eta_+^2(\kappa_2, n_2)}{n_1 n_2} R_{\ell_c}(n'_1, \kappa'_1, n'_2, \kappa'_2; n_1-1, \kappa_1, n_2-1, \kappa_2) + \right. \\
& + \frac{\eta_+^2(\kappa'_2, n'_2) \eta_+^2(\kappa_1, n_1)}{n'_2 n_1} R_{\ell_c}(n'_1, \kappa'_1, n'_2-1, \kappa'_2; n_1-1, \kappa_1, n_2, \kappa_2) + \\
& + \frac{\eta_+^2(\kappa'_1, n'_1) \eta_+^2(\kappa_2, n_2)}{n'_1 n_2} R_{\ell_c}(n'_1-1, \kappa'_1, n'_2, \kappa'_2; n_1, \kappa_1, n_2-1, \kappa_2) + \\
& \left. + \frac{\eta_+^2(\kappa'_1, n'_1) \eta_+^2(\kappa'_2, n'_2)}{n'_1 n'_2} R_{\ell_c}(n'_1-1, \kappa'_1, n'_2-1, \kappa'_2; n_1, \kappa_1, n_2, \kappa_2) \right] \Bigg\}.
\end{aligned}
\tag{D.23}$$

Para encontrar a parte radial do termo de troca basta trocar n_1 por n_2 , κ_1 por κ_2 e vice-versa.

REFERÊNCIAS

- [1] A. I. Akhiezer & V. B. Berestetskiĭ - "*Quantum Electrodynamics*" - Interscience Publishers, New York (1965).
- [2] A. Antonelli, Tese de Doutorado, IFUSP, São Paulo (1981).
- [3] S. Bashkin & J. O. Stoner, Jr. - "*Atomic Energy Levels and Grotrian Diagrams 1*" - North-Holland/American Elsevier, New York (1975)
- [4] V. B. Berestetskiĭ, E. M. Lifshitz & L. P. Pitaevskiĭ - "*Relativistic Quantum Theory , Part I*" - Pergamon Press, Oxford (1971).
- [5] H. A. Bethe & E. E. Salpeter - "*Quantum Mechanics of One- and Two- Electron Atoms*" - Plenum/Rosetta Edition, New York (1977).
- [6] G. Breit, *Phys. Rev.* **34**, 553 (1929); **36**, 383 (1930); **39**, 616 (1932).
- [7] J. P. Buchet, M. C. Buchet-Poulizac, A. Denis, J. Désesquelles, M. Druetta, J. P. Grandin & X. Husson, *Phys. Rev. A*, **23**, 3354 (1981).
- [8] H. Buchholz - "*The Confluent Hypergeometric Function*" - Springer-Verlag, New York (1969).
- [9] L. Davis, *Phys. Rev.*, **56**, 186 (1939).
- [10] R. P. Feynman, *Phys. Rev.*, **76**, 749 (1949); **76**, 769 (1949).
- [11] R. P. Feynman - "*Quantum Electrodynamics*" - Benjamin/Cummings Publ. Co., Reading (1962).

- [12] L.M.Gramani, *Dissertação de Mestrado*, IFUSP, São Paulo (1989).
- [13] I.P.Grant & H.M.Quiney, *Adv.in Atom. and Molec. Phys.*, **23**, 37 (1988).
- [14] W.Heitler -"*The Quantum Theory of Radiation*"- Dover Publ., New York (1984).
- [15] J.R.Higgins -"*Completeness and Basis Properties of Sets of Special Functions (Cambridge Tracts on Mathematics, 72)*"- University Press, Cambridge (1977).
- [16] D.S.Hughes & C.Eckart, *Phys.Rev.*, **36**, 694 (1930).
- [17] W.E.Lamb & R.C.Retherford, *Phys.Rev.*, **72**, 241 (1947).
- [18] E.Lifchitz & L.Pitaevskiĭ -"*Théorie Quantique Relativiste, Deuxième Partie*"- Éditions Mir, Moscou (1973).
- [19] I.Lindgren, J.Lindgren & A.-M.Mårtensson, *Z.Physik*, **A279**, 113 (1976).
- [20] A.E.Livingston, S.J.Hinterlong, J.A.Poirier, R.DeSerio & H.G.Berry, *J.Phys.B*, **13**, L139 (1980).
- [21] J.B.Mann & W.R.Johnson, *Phys.Rev.A*, **4**, 41 (1971).
- [22] A.Messiah -"*Mécanique Quantique, tome 2*"- Dunod Éditeur, Paris (1964).
- [23] P.J.Mohr, *Nucl.Instr.and Meth.in Phys.Research*, **B9**, 459 (1985).
- [24] M.E.Rose -"*Relativistic Electron Theory*"- John Wiley & Sons Inc., New York (1961).
- [25] E.E.Salpeter & H.A.Bethe, *Phys.Rev.*, **84**, 1232 (1951).
- [26] J.Schwinger -"*Selected Papers on Quantum Electrodynamics*"- Dover Publ., New York (1958).
- [27] A.P.Stone, *Proc.Phys.Soc.(London)*, **77**, 786 (1961).

- [28] J. Sucher, *Phys. Rev. A*, **22**, 348 (1980).
- [29] G. Weinreich & V. Hughes, *Phys. Rev.*, **95**, 1451 (1954).
- [30] Y. Accad, C.L. Pekeris & B. Schiff, *Phys. Rev.*, **183**, 78 (1969);
Phys. Rev. A, **4**, 516 (1971).
- [31] J. Baker, R.H. Hill & J.D. Morgan III, *AIP Conference Proc.*,
189, 123 (1989).
- [32] S.A. Blundell, W.R. Johnson, Z.W. Liu & J. Sapirstein,
Phys. Rev. A, **39**, 3768 (1989).
- [33] J. Callaway, *Phys. Lett.*, **66A**, 201 (1978).
- [34] G.W.F. Drake, *Phys. Rev. Lett.*, **59**, 1549 (1987); *Nucl. Instr. &
Meth. in Phys. Res.*, **B31**, 7 (1988); *AIP Conference Proc.*,
189, 146 (1989); *Phys. Rev. Lett.*, **65**, 2769 (1990).
- [35] K. Frankowski & C.L. Pekeris, *Phys. Rev.*, **146**, 46 (1966).
- [36] D.E. Freund, B.D. Huxtable & J.D. Morgan III, *Phys. Rev. A*, **29**,
980 (1984).
- [37] S.P. Goldman, *Phys. Rev. A*, **37**, 16 (1988).
- [38] E.A. Hylleraas, *Z. Phys.*, **48**, 469 (1928); **54**, 347 (1929).
- [39] Y. Ishikawa, *Phys. Rev. A*, **42**, 1142 (1990).
- [40] A. Kono & S. Hattori, *Phys. Rev. A*, **34**, 1727 (1986).
- [41] J. Krause, *Phys. Rev. A*, **34**, 3692 (1986).
- [42] L. Lipsky, R. Anania & M.J. Conneely, *Atom. Data & Nucl. Data
Tab.*, **20**, 127 (1977).
- [43] J.K.L. MacDonald, *Phys. Rev.*, **43**, 830 (1933).
- [44] F.A. Parpia & I.P. Grant, *J. Phys. B*, **23**, 211 (1990).
- [45] C.L. Pekeris, *Phys. Rev.*, **115**, 1216 (1959); *Phys. Rev.*, **126**,
1470 (1962); *Phys. Rev.*, **127**, 509 (1962).
- [46] A.J. Thakkar & V.H. Smith, Jr., *Phys. Rev. A*, **15**, 1 (1977).
- [47] Z. Xiao-Lin, *Commun. in Theor. Phys.*, **8**, 127 (1987).