Límite no relativista de la Ecuación de Dirac.

El objetivo de este ejercicio es obtener el límite no relativista de la Ecuación de Dirac que será la ecuación de Schrödinger.

La ecuación de Dirac es la siguiente:

$$\left[i\alpha\vec{\nabla} - \beta(M + Us) + E - Uv - Uc\right]\Psi = 0$$

Donde:

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix} \qquad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \qquad \Psi = \begin{pmatrix} \Psi_{up} \\ \Psi_{down} \end{pmatrix}$$

Y σ son las matrices de Pauli.

A partir de la expresión matricial para α y para β se puede expresar la Ecuación de Dirac como un sistema de dos ecuaciones.

$$i\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\Psi_{down} - (M + Us)\Psi_{up} + (E - Uv - Uc)\Psi_{up} = 0$$
$$i\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\Psi_{up} + (M + Us)\Psi_{down} + (E - Uv - Uc)\psi_{down} = 0$$

Cambiando la notación para abreviar y teniendo en cuenta que p=-i$\vec{\nabla}$ se obtiene:

$$-\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\Psi_{down} + A_{-}\Psi_{up} = 0$$
$$-\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\Psi_{up} + A_{+}\Psi_{down} = 0$$

Donde:

$$A_{\pm} = \pm(M + Us) + (E - Us - Uc) \qquad \text{(son funciones de r)}$$

Multiplicando la segunda ecuación por $\vec{\sigma}\cdot\vec{p}$ se obtiene:

$$-(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\Psi_{up} + (\vec{\sigma}\cdot\vec{p})A_{+}\Psi_{down} = 0$$

Teniendo en cuenta la siguiente identidad:

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\cdot(\vec{\sigma}\cdot\vec{p}) = \vec{p}^{\,2} = -\nabla^2$$

Se obtiene:

$$\nabla^2\Psi_{up} + (\vec{\sigma}\cdot\vec{p})A_+\Psi_{down} = 0 \qquad \text{(A)}$$

Expresando en producto escalar $\vec{\sigma}\cdot\vec{p}$ como:

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{p} = p_r\hat{r}\cdot\vec{\sigma} + p_\theta\hat{u}_\theta\cdot\vec{\sigma} + p_\phi\hat{u}_\phi\cdot\vec{\sigma}$$

Y expresando p_r como -i$\frac{\partial}{\partial r}$ se obtiene:

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})A_+\Psi_{down} = -i\hat{r}\cdot\vec{\sigma}\frac{\partial}{\partial r}\left[A_+\Psi_{down}\right] + (p_\theta\hat{u}_\theta\cdot\vec{\sigma} + p_\phi\hat{u}_\phi\cdot\vec{\sigma})A_+\Psi_{down}$$

Operando:

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})A_+\Psi_{down} = -i\hat{r}\cdot\vec{\sigma}\frac{\partial A_+}{\partial r}\Psi_{down} - i\hat{r}\cdot\vec{\sigma}A_+\frac{\partial\Psi_{down}}{\partial r} + (p_\theta\hat{u}_\theta\cdot\vec{\sigma} + p_\phi\hat{u}_\phi\cdot\vec{\sigma})A_+\Psi_{down} =$$

$$= -i\hat{r}\cdot\vec{\sigma}\frac{\partial A_+}{\partial r}\Psi_{down} + p_r\hat{r}\cdot\vec{\sigma}A_+\Psi_{down} + (p_\theta\hat{u}_\theta\cdot\vec{\sigma} + p_\phi\hat{u}_\phi\cdot\vec{\sigma})A_+\Psi_{down} =$$

$$= -i\hat{r}\cdot\vec{\sigma}\frac{\partial A_+}{\partial r}\Psi_{down} + \vec{p}\cdot\vec{\sigma}A_+\Psi_{down}$$

Sustituyendo en (A) se obtiene:

$$\nabla^2\Psi_{up} - i\hat{r}\cdot\vec{\sigma}\frac{\partial A_+}{\partial r}\Psi_{down} + \vec{p}\cdot\vec{\sigma}A_+\Psi_{down} = 0 \qquad \text{(B)}$$

Despejando del sistema de ecuaciones inicial Ψ_{down} en términos de Ψ_{up} se puede obtener de la expresión (B) una ecuación para Ψ_{up}.

De la primera ecuación se obtiene:

$$\frac{A_-}{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}\Psi_{up} = \Psi_{down} \qquad \text{(C)}$$

Y de la segunda:

$$\frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{A_+}\Psi_{up} = \Psi_{down} \qquad \text{(D)}$$

Sustituyendo por (C) el segundo término de (B) y por (D) el primero se obtiene:

$$\nabla^2\Psi_{up} - i\hat{r}\cdot\vec{\sigma}\frac{\partial A_+}{\partial r}\frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{A_+}\Psi_{up} + \vec{p}\cdot\vec{\sigma}A_+\frac{A_-}{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}\Psi_{up} = 0$$

Teniendo en cuenta ahora que:

$$i(\hat{r}\cdot\hat{\sigma})(\vec{p}\cdot\vec{\sigma}) = \frac{d}{dr} - \frac{\vec{l}\cdot\vec{\sigma}}{r}$$

Se obtiene:

$$\left[\nabla^2 + \frac{1}{A_+}\frac{dA_+}{dr}\frac{\vec{l}\cdot\vec{\sigma}}{r} + A_-A_+ - \frac{1}{A_+}\frac{dA_+}{dr}\frac{d}{dr}\right]\Psi_{up} = 0$$

Esta ecuación puede ponerse en la forma habitual de la ecuación de Schrödinger expresando Ψ_{up} como:

$$\Psi_{up} = A_+^{1/2}(r)\phi(\vec{r})$$

Esta forma se obtiene de imponer que los términos en la primera derivada de $\phi(\vec{r})$ tienen que anularse.

Con esta sustitución, con el operador Laplaciano en coordenadas esféricas

$$\nabla^2 t = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial t}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial t}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 t}{\partial\phi^2}$$

Y con la siguiente notación abreviada.

$$V_D = \frac{1}{r}\frac{dA_+}{dr}\frac{1}{A_+} + \frac{1}{2A_+}\frac{d^2A_+}{dr^2} - \frac{3}{4}\frac{1}{A_+^2}\left(\frac{dA_+}{dr}\right)^2$$

$$V_{SO} = \frac{1}{rA_+}\frac{dA_+}{dr}$$

$$V_C = A_+A_-$$

Se obtiene una ecuación tipo Schrödinger.

$$\left[\nabla^2 + V_C + V_D + V_{SO}\vec{\sigma}\cdot\vec{l}\,\right]\phi = 0$$