Biblioteca Digital
FCEN-UBA

BIBLIOTECA CENTRAL LUIS F LELOIR
BIBLIOTECA CENTRAL LELOIR
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES UBA

Tesis de Posgrado

Interpretación del átomo de hidrógeno en la teoría de Dirac

Bunge, Mario Augusto

1952

Tesis presentada para obtener el grado de Doctor en Ciencias Físicas de la Universidad de Buenos Aires

Este documento forma parte de la colección de tesis doctorales y de maestría de la Biblioteca Central Dr. Luis Federico Leloir, disponible en digital.bl.fcen.uba.ar. Su utilización debe ser acompañada por la cita bibliográfica con reconocimiento de la fuente.

This document is part of the doctoral theses collection of the Central Library Dr. Luis Federico Leloir, available in digital.bl.fcen.uba.ar. It should be used accompanied by the corresponding citation acknowledging the source.

Cita tipo APA:
Bunge, Mario Augusto. (1952). Interpretación del átomo de hidrógeno en la teoría de Dirac. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires.
http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_1732_Bunge.pdf

Cita tipo Chicago:
Bunge, Mario Augusto. "Interpretación del átomo de hidrógeno en la teoría de Dirac". Tesis de Doctor. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 1952.
http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_1732_Bunge.pdf

EXACTAS UBA
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

UBA
Universidad de Buenos Aires

Dirección: Biblioteca Central Dr. Luis F. Leloir, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires.
Intendente Güiraldes 2160 - C1428EGA - Tel. (++54 +11) 4789-9293
Contacto: digital@bl.fcen.uba.ar

MARIO AUGUSTO BUNGE

Interpretación del ÁTOMO DE HIDRÓGENO en la teoría de Dirac

Tesis presentada para optar al título de Doctor en Ciencias Físicomatemáticas

[redacted]

BUENOS AIRES - 1952

1732

1732

P R E F A C I O

La finalidad de este trabajo es contribuir a precisar la imagen física del átomo, investigando para ello el comportamiento de la velocidad del electrón en la teoría cuántica relativista. De los pocos casos tratables analíticamente se han elegido algunos de los que presentan mayor interés físico: el movimiento libre y el movimiento en un campo central, este último con sus espectros continuo y discreto, así como las transiciones entre uno y otro.

Con este propósito se han empleado las autofunciones hipercomplejas de la energía, que son las que mejor permiten establecer el significado físico preciso de los diversos elementos de transición de una magnitud dada, y que ponen de relieve los elementos correspondientes a los procesos de inversión del spin y de modificación virtual de la carga.

El presente trabajo se compone de tres partes. En la primera se consignan las autofunciones, se definen los operadores cuyos elementos de matriz se calculan en la segunda parte, y se indica el significado físico de los elementos de las matrices engendradas por los operadores de Dirac en el espacio de las autofunciones hipercomplejas. Además, se calculan las velocidades en la aproximación no relativista. A ello se dedican los tres primeros capítulos.

En la segunda parte se calculan los elementos de matriz de las distintas componentes de la velocidad en coordenadas polares, referidos al estado libre y a los espectros continuo y discreto del campo coulombiano. Ello ocupa los capítulos IV al VI.

En la tercera parte, que comprende los Apéndices A, B y C -- y que llevan numeración independiente, de A1 a A121-- se resuelven los problemas de integración originados en el texto. El volumen desproporcionado de esta parte se debe, en primer lugar, a que si bien la representación hipercompleja simplifica la tarea de la interpretación física y aun hace posible el descubrimiento de propiedades que quedan ocultas en la representación habitual, exige en cambio cálculos más largos y complicados que ésta. El segundo motivo es que la mayoría de las integrales radiales que se presentan se calculan, sea por primera vez con métodos propios, sea una vez más pero también con métodos nuevos.

M. A. B.

Noviembre de 1952

I N D I C E

PRIMERA PARTE

SEGUNDA PARTE

CAPITULO IV. La velocidad del electrón libre de Dirac

CAPITULO V. La velocidad del electrón en un campo coulombiano

CAPITULO VI. La velocidad del electrón del átomo hidrogenoide

INDICE

APENDICES

APENDICE A. INTEGRALES ANGULARES

CAPITULO II. <u>Electrón en un campo coulombiano(espectro continuo)</u>

CAPITULO IV . <u>Transiciones discreto-contimuo</u>

PRIMERA PARTE

C A P I T U L O I

LAS SOLUCIONES HIPERCOMPLEJAS DE LA ECUACION DE DIRAC

1.- Soluciones de la ecuación de Dirac en coordenadas cartesianas

1.1.- Impulso y velocidad en la teoría cuántica relativista

Es sabido que en la teoría de Dirac del electrón, el impulso y la velocidad se representan mediante operadores independientes entre sí, a diferencia de lo que ocurre en las demás mecánicas. Este hecho proviene de la naturaleza relativista de la teoría [1]. En efecto: consideremos un paquete de ondas representativo del estado de un electrón libre de energía E e impulso $\vec{P}$. Su velocidad de grupo es

$$\vec{v} = \frac{dE}{dP} \cdot \frac{\vec{P}}{P} \tag{1,1}$$

En la mecánica no relativista, por ser $dE/dP = P/m_o$ —siendo m_o la masa en reposo— la velocidad de propagación del paquete es

$$\vec{v} = \frac{\vec{P}}{m_o} \tag{1,2}$$

Este resultado se incluye simbólicamente, en la teoría de Schrödinger, en la fórmula

$$\vec{v} = \frac{1}{m_o} \cdot \vec{p} = \frac{h}{2\pi\, i\, m_o} \cdot \mathrm{grad} \tag{1,3}$$

En cambio, en la mecánica relativista se tiene

$$E = \pm c \left(P^2 + m_o^2 c^2 \right)^{\frac{1}{2}} \tag{1,4}$$

---

1 Cf. H.A. KRAMERS, Quantentheorie des Elektrons und der Strahlung (Leipzig, Akad. Verlagsgesellschaft, 1938), p. 292.

de donde $dE/dP = \pm c^2 P/E$, y finalmente

$$\vec{v} = \pm \frac{c^2}{E} . \vec{P} = \pm \frac{c\vec{P}}{(P^2 + m_0^2 c^2)^{\frac{1}{2}}} \tag{1,5}$$

O sea, a un mismo valor del impulso le corresponden dos sentidos opuestos de la velocidad de propagación. Esta bivalencia está contenida, también simbólicamente, en la representación de la velocidad por medio del operador algebraico (número hipercomplejo) $\vec{\alpha}$:

$$\vec{v} = -c\vec{\alpha} \qquad \alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 2\delta_{ij} , \tag{1,6}$$

cuyas componentes tienen los autovalores (valores instantáneos) $\pm c$.

En consecuencia, a cada grupo de valores de los parámetros y números cuánticos que especifican el estado de un sistema descripto por la teoría de Dirac, no le corresponde una sola función de onda sino una solución con un mínimo de 4 componentes.

1.2.- Los spinores

En la teoría corriente, cada solución de la ecuación de onda de Dirac posee 4 componentes, que son las de un spinor. Esta manera de escribir las soluciones no es cómoda ni natural. Se obtienen soluciones más generales, resultados más completos y una interpretación física correcta si, además de las coordenadas (o impulsos) se introducen en las mismas los operadores β y $\vec{\alpha}$ de la velocidad.

Tal es lo que hizo Sauter[2], quien llegó a la representación hipercompleja por consideraciones matemáticas, al buscar un método general y sintético para resolver las ecuaciones de Dirac; general pues debía poder aplicarse a resolver el problema del electrón en un campo arbitrario, y sintético pues debía prescindir de la escisión de la ecuación dada en 4 ecuaciones diferenciales parciales de primer orden. El principio de este método es el siguiente: se escribe la solución buscada como combinación lineal de los 16 operadores que forman el grupo de Dirac:

$$1, \ (\beta, \beta\vec{\alpha}), \ (i\vec{\alpha}, \vec{\sigma}), \ (\beta\tau, \beta\vec{\sigma}), \ i\tau \qquad (1,7)$$

con coeficientes indeterminados que dependen de las coordenadas y del tiempo (o del impulso y de la energía, si se trabaja en el espacio conjugado). Introduciendo dicha expresión en la ecuación de onda, se obtienen 16 ecuaciones que determinan los coeficientes.

Pero la representación hipercompleja no fué generalmente adoptada pues sólo se conocían sus ventajas matemáticas. Fué Beck[3] quien le dió sentido físico a este método, mostrando además que en los casos de interés físico basta considerar las 4 variables cinemáticas de la teoría, a saber, β y $\vec{\alpha}$.

En el presente trabajo se adopta el método de las soluciones hi-

---

2 Fritz Sauter, "Lösung der Diracschen Gleichungen ohne Spezialisierung der Diracschen Operatoren", Zeits. f. Phys., 63, 803 y 64, 295 (1930).

3 Guido Beck, "Introduction à la Théorie des Quanta", Rev.Fac.Cienc. (Coimbra), 10, 92 (1942), p. 171.

percomplejas. Por lo tanto, escribiremos

$$\psi = \psi(x^\nu, k_\nu, \gamma^\nu)\ , \quad \gamma^\nu = \beta\alpha^\nu, \quad \alpha^0 = 1, \quad \nu = 0,1,2,3, \tag{1,8}$$

donde γ^ν es el operador de la cuadrivelocidad:

$$\gamma^0 \equiv \beta = \frac{dx^0}{ds}\ , \quad -\vec{\gamma} = -\beta\vec{\alpha} = \frac{d\vec{r}}{ds} \tag{1,9}$$

y k_ν el cuadrivector de onda (que es constante):

$$k_\nu = \frac{2\pi}{h} p_\nu\ , \qquad p_0 = \frac{m_0 c}{\sqrt{1-v^2/c^2}}\ , \qquad \vec{p} = \frac{m_0\vec{v}}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \tag{1,10}$$

1.3.- Solución hipercompleja en coordenadas cartesianas

Se verifica[4] que una de las soluciones completas del tipo (1,8) de la ecuación del electrón libre

$$(p_0 + \vec{\alpha}\vec{p} + \beta m_0 c)\,\psi = 0, \quad p_0 = i\frac{h}{2\pi}\frac{\partial}{\partial x_0}\ , \quad \vec{p} = -i\frac{h}{2\pi}\,\mathrm{grad} \tag{1,11}$$

en coordenadas cartesianas es

$$\psi(\vec{k}) = N(k_0)\cdot\left(k_0 + \frac{1}{\Lambda} - \vec{k}\vec{\gamma}\right)\cdot\ e^{i\beta(k_0 x^0 + \vec{k}\vec{r})} \tag{1,12}$$

donde

$$\Lambda = \frac{h}{2\pi m_0 c} \cong 3{,}85.\ 10^{-11}\ \mathrm{cm}. \tag{1,13}$$

Si se adopta la normalización en un cubo de arista L (la llamada

---

4 G. Beck, loc. cit. y "Field concepts in quantum mechanics", Rev. Mod. Phys., 17, 187 (1945). W. Heitler, The Quantum Theory of Radiation (Oxford, Clarendon Press, 1936), p.86, emplea una solución parecida.

<u>box normalization</u>) , el factor de normalización es

$$N(k_0) = \left[L^3 \cdot 2 k_0 \left(k_0 + \frac{1}{\Lambda} \right) \right]^{-1/2} \tag{1,14}$$

Si las magnitudes β y $\vec{\gamma}$ se representan mediante matrices de cuarto orden, como es habitual, la (1,12) es una matriz de 4 filas y 4 columnas, o sea, un spinor de 16 componentes. Cada una de sus columnas constituye un spinor ordinario de 4 componentes, y en consecuencia una solución particular de las ecuaciones (1,11).

Como las matrices en cuestión son

$$\begin{Vmatrix} -1 & & & \\ & -1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{Vmatrix} \tag{1,15}$$

$$\begin{Vmatrix} & & & 1 \\ & & 1 & \\ & 1 & & \\ 1 & & & \end{Vmatrix} \qquad \begin{Vmatrix} & & & -1 \\ & & 1 & \\ & -1 & & \\ 1 & & & \end{Vmatrix} \qquad \begin{Vmatrix} & & 1 & \\ & & & -1 \\ 1 & & & \\ & -1 & & \end{Vmatrix} \tag{1,16}$$

la forma matricial explícita del spinor completo es

$$\psi \sim \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline e^{i(\vec{k}\vec{r} - k_0 x^0)} & e^{i(\vec{k}\vec{r} - k_0 x^0)} & e^{i(\vec{k}\vec{r} + k_0 x_0)} & e^{i(\vec{k}\vec{r} + k_0 x^0)} \\ \hline k_0 + \frac{1}{\Lambda} & 0 & k_z & k_x - i k_y \\ \hline 0 & k_0 + \frac{1}{\Lambda} & k_x + i k_y & -k_z \\ \hline -k_z & -(k_x - i k_y) & k_0 + \frac{1}{\Lambda} & 0 \\ \hline -(k_x + i k_y) & k_z & 0 & k_0 + \frac{1}{\Lambda} \\ \hline \end{array} \tag{1,17}$$

Las dos primeras columnas describen respectivamente los dos estados cuánticos del electrón (determinados en el sistema coordenado propio); y las dos últimas corresponden a los dos estados de spin del positrón.

Según lo muestra el esquema anterior, convendrá a veces separar la solución completa en dos partes, una de las cuales representa la solución del electrón (las dos primeras columnas) y la otra, la del positrón (las dos columnas restantes). Llamándolas ${}^{-}\psi$ y ${}^{+}\psi$, respectivamente, se tiene

$$\psi = {}^{-}\psi + {}^{+}\psi = \psi \cdot \tfrac{1}{2}(1-\beta) + \psi\,\tfrac{1}{2}(1+\beta) \qquad (1,18)$$

1.4.- Significado físico de los elementos de matriz

En la teoría de Schrödinger, el elemento de matriz

$$(k\,|M\,k') = \int \psi^{+}(k,\vec{r})\; M\; \psi(k',\vec{r})\; d\vec{r} \qquad (1,19)$$

del operador M es un número y corresponde a una transición entre estados cuánticos, a saber, la simbolizada por $k \rightarrow k'$, donde k y k' engloban todos los parámetros que caracterizan a los estados en cuestión. En cambio, en la teoría de Dirac— como lo pone de manifiesto la representación hipercompleja— cada elemento de matriz es a su vez una matriz de 4 x 4 , cuyos índices son las variables del "carácter" del electrón. En otras palabras, la transición $k \rightarrow k'$ está asociada a 16 transiciones posibles entre estados de diferente carácter. En el Capítulo II volveremos sobre esta cuestión. Por ahora baste observar la ventaja de la representación hipercompleja, que exhibe sistemáticamente las 16 transiciones posibles, a cada una de las cuales puede atribuírsele un significado físico determinado.

Tomemos como ejemplo el operador de la velocidad, que habrá de ocuparnos en lo sucesivo. El elemento de matriz correspondiente a la transición $k \to k'$ es, por (1,12) y (1,14),

$$\left(\vec{p} \left| \frac{d\vec{r}}{dt} \right| \vec{p}\,'\right) = \left(\vec{p} \left| -c\vec{\alpha} \right| \vec{p}\,'\right)$$

$$= -\beta \vec{v}\, \delta_{\vec{p}\vec{p}'} - \left[c\vec{\alpha} - \frac{\vec{\alpha}\frac{\vec{v}}{c}}{1+\sqrt{1-v^2/c^2}} \cdot \vec{v} \right] e^{i\beta 2 k_0 x^0} \cdot \delta_{\vec{p}\vec{p}'} \qquad (1,20)$$

Los elementos diagonales en todos los índices, incluso los del "carácter", están dados por el primer término, que representa la velocidad macroscópica del electrón. El segundo término, que no es diagonal en el carácter, corresponde a las <u>fluctuaciones</u> de la velocidad en torno a su valor medio v entre sus valores propios $+c$ y $-c$. Como se ve, estas fluctuaciones inobservables alcanzan su máximo (igual a c) para el electrón en reposo. La componente α_x, por ejemplo, es diagonal en todos sus índices tan sólo en el caso límite $v_x = c$, $v_y = v_z = 0$. Las fluctuaciones mencionadas corresponden al "movimiento de temblor" señalado por Schrödinger, y son características de todas las magnitudes (salvo, por supuesto, la unidad) que aparecen en la teoría de Dirac.

El objetivo central de esta tesis será, precisamente, encontrar las expresiones correspondientes a (1,20) en coordenadas esféricas, en particular con el fin de estudiar la distribución de las velocidades en el átomo hidrogenoide. Conviene advertir desde ya que la solución (1,12) representa una onda <u>progresiva</u>, en tanto que las autofunciones del campo central, que se emplean habitualmente, son ondas <u>estacionarias</u>. Si en lugar de la onda progresiva (1,12) empleamos la onda estacionaria formada a partir de ella, a saber

$$\phi(P) = \frac{1}{2}\left[\psi(\vec{P}) + \psi(-\vec{P})\right] = N\left[(P_0+m_0c)\cos\vec{K}\vec{r} - i\gamma\vec{P}\,\mathrm{sen}\,\vec{K}\vec{r}\right]\cdot e^{i\beta K_0 X_0} \tag{1,21}$$

obtenemos

$$\left(P\left|\frac{d\vec{r}}{dt}\right|P\right) = c\left[\frac{\vec{\alpha}\,\vec{P}}{P_0(P_0+m_0c)}\,\vec{P} - \vec{\alpha}\right]e^{i\beta 2K_0X^0} \tag{1,22}$$

que carece de elementos diagonales. en el "carácter".

Exactamente lo mismo ocurre con el impulso $\vec{p}$ en la teoría de Schrödinger: su valor medio referido a la onda estacionaria

$$\phi(P) = \frac{1}{2}L^{-3/2}\left[e^{i\vec{K}\vec{r}} + e^{-i\vec{K}\vec{r}}\right] \tag{1,23}$$

es nulo, ya que

$$\int \phi^*(K)\,\vec{p}\,\phi(\vec{K}')\,d\vec{r} = \frac{h}{2\pi}\vec{K}'\cdot L^{-3}\int_{L^3}\mathrm{sen}\,\vec{K}\vec{r}\,\cos\vec{K}'\vec{r}\,d\vec{r} = 0. \tag{1,24}$$

Estos resultados son obvios: significan simplemente que la velocidad de grupo de una onda estacionaria es nula, como debe serlo por definición.

2.- La ecuación de onda en coordenadas esféricas

La ecuación de onda del electrón relativista en un campo central $A_0(r)$, $\vec{A} = 0$ exterior, es

$$\left(p_0 - \frac{e}{c} A_0 + \vec{\alpha}\,\vec{p} + \beta m_0 c \right) \psi = 0 \qquad (1,25)$$

Para integrarla es conveniente pasar a coordenadas esféricas r, ϑ, φ. Ello impone una distinción entre las componentes covariantes y contravariantes de los vectores $\vec{\alpha}$ y $\vec{p}$, diferencia ésta que en coordenadas cartesianas no existe (a menos de un eventual cambio de signo si se adopta la métrica $ds^2 = dx_0^2 - d\vec{r}^2$).

2.1.- Las componentes polares del vector $\vec{\alpha}$

Como la energía cinética $\vec{\alpha}\vec{p}$ es un escalar y el impulso es un vector covariante, el operador $\vec{\alpha}$ de la velocidad resulta ser un vector contravariante de componentes

$$\begin{aligned}
\alpha^x &= \alpha_x = \operatorname{sen}\vartheta\cos\varphi\,\alpha^r + r\cos\vartheta\cos\varphi\,\alpha^\vartheta - r\operatorname{sen}\vartheta\operatorname{sen}\varphi\,\alpha^\varphi \\
\alpha^y &= \alpha_y = \operatorname{sen}\vartheta\operatorname{sen}\varphi\,\alpha^r + r\cos\vartheta\operatorname{sen}\varphi\,\alpha^\vartheta + r\operatorname{sen}\vartheta\cos\varphi\,\alpha^\varphi \\
\alpha^z &= \alpha_z = \cos\vartheta\,\alpha^r - r\operatorname{sen}\vartheta\,\alpha^\vartheta
\end{aligned} \qquad (1,26)$$

donde, a su vez,

$$\begin{aligned}
\alpha^r &= \frac{\partial r}{\partial x^k}\alpha^k = \operatorname{sen}\vartheta\cos\varphi.\alpha^x + \operatorname{sen}\vartheta\operatorname{sen}\varphi\,\alpha^y + \cos\vartheta\,\alpha^z \\
\alpha^\vartheta &= \frac{\partial \theta}{\partial x^k}\alpha^k = \frac{1}{r}\left[\cos\vartheta\cos\varphi\,\alpha^x + \cos\vartheta\operatorname{sen}\varphi\,\alpha^y - \operatorname{sen}\vartheta\,\alpha^z\right] \\
\alpha^\varphi &= \frac{\partial \varphi}{\partial x^k}\alpha^k = \frac{1}{r\operatorname{sen}\vartheta}\left[-\operatorname{sen}\varphi\,\alpha^x + \cos\varphi\,\alpha^y\right]
\end{aligned} \qquad (1,27)$$

En cambio,

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial x^k}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x^k} = \operatorname{sen}\vartheta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\vartheta\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \frac{\operatorname{sen}\varphi}{r\operatorname{sen}\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial x^k}{\partial y}\frac{\partial}{\partial x^k} = \operatorname{sen}\vartheta\operatorname{sen}\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\vartheta\operatorname{sen}\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{\cos\varphi}{r\operatorname{sen}\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \qquad (1,28)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial x^k}{\partial z}\frac{\partial}{\partial x^k} = \cos\vartheta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\operatorname{sen}\vartheta}{r}\frac{\partial}{\partial\vartheta}$$

Merced a las relaciones anteriores, el operador de la energía cinética se escribe

$$\alpha^x\frac{\partial}{\partial x} + \alpha^y\frac{\partial}{\partial y} + \alpha^z\frac{\partial}{\partial z} = \alpha^r\frac{\partial}{\partial r} + \alpha^\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \alpha^\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}, \qquad (1,29)$$

y la ecuación de onda (1,25)

$$\left[-\frac{\partial}{\partial x_0} + \frac{i}{\Lambda}\beta + \alpha^r\frac{\partial}{\partial r} + \alpha^\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \alpha^\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{i\alpha}{e}A_0(r)\right]\psi = 0, \qquad (1,30)$$

donde α es la constante de estructura fina y Λ la longitud de onda de Compton:

$$\alpha = \frac{2\pi}{h}\frac{e^2}{c} \cong \frac{1}{137}. \qquad (1,31)$$

2.2.- Propiedades de las matrices α_i

Teniendo en cuenta que

$$\alpha_x\cos\varphi + \alpha_y\operatorname{sen}\varphi = \alpha_x(\cos\varphi + \alpha_x\alpha_y\operatorname{sen}\varphi) = \alpha_x(\cos\varphi + i\sigma_z\operatorname{sen}\varphi) \qquad (1,32,a)$$
$$= \alpha_x\, e^{i\sigma_z\varphi}$$

$$\alpha_y\cos\varphi - \alpha_x\operatorname{sen}\varphi = \alpha_y\, e^{i\sigma_z\varphi}, \qquad (1,32,b)$$

las (1,27) se convierten en

$$\alpha^{r} = \alpha_x \, e^{i\sigma_z \varphi} \operatorname{sen}\vartheta + \alpha_z \cos\vartheta \qquad (1,33,a)$$

$$\alpha^{\vartheta} = \frac{1}{r}\left[\alpha_x \, e^{i\sigma_z \varphi} \cos\vartheta - \alpha_z \operatorname{sen}\vartheta \right] \qquad (1,33,b)$$

$$\alpha^{\varphi} = \frac{1}{r \operatorname{sen}\vartheta} \alpha_y \, e^{i\sigma_z \varphi} \qquad (1,33,c)$$

Como el tensor métrico tiene por componentes

$$g_{rr} = \frac{1}{g^{rr}} = 1, \quad g_{\vartheta\vartheta} = \frac{1}{g^{\vartheta\vartheta}} = r^2, \quad g_{\varphi\varphi} = \frac{1}{g^{\varphi\varphi}} = r^2 \operatorname{sen}^2\vartheta, \qquad (1,34)$$

las componentes covariantes en función de las contravariantes son

$$\alpha^{r} = \alpha_r, \qquad \alpha_\vartheta = r^2 \alpha^{\vartheta}, \qquad \alpha_\varphi = r^2 \operatorname{sen}^2\vartheta \, \alpha^{\varphi} \qquad (1,35)$$

La representación matricial de las componentes covariantes es

$$\alpha_r = \begin{Vmatrix} 0 & 0 & \cos\vartheta & \operatorname{sen}\vartheta . e^{-i\varphi} \\ 0 & 0 & \operatorname{sen}\vartheta . e^{i\varphi} & -\cos\vartheta \\ \cos\vartheta & \operatorname{sen}\vartheta . e^{-i\varphi} & 0 & 0 \\ \operatorname{sen}\vartheta . e^{i\varphi} & -\cos\vartheta & 0 & 0 \end{Vmatrix} \qquad (1,36,a)$$

$$\alpha_\vartheta = r \begin{Vmatrix} 0 & 0 & -\operatorname{sen}\vartheta & \cos\vartheta . e^{-i\varphi} \\ 0 & 0 & \cos\vartheta . e^{i\varphi} & -\operatorname{sen}\vartheta \\ -\operatorname{sen}\vartheta & \cos\vartheta e^{-i\varphi} & 0 & 0 \\ \cos\vartheta . e^{i\varphi} & \operatorname{sen}\vartheta & 0 & 0 \end{Vmatrix} \qquad (1,36,b)$$

$$\alpha_\varphi = r \cdot \operatorname{sen}\vartheta \cdot \left\| \begin{matrix} 0 & 0 & 0 & -ie^{-i\varphi} \\ 0 & 0 & ie^{i\varphi} & 0 \\ 0 & -ie^{-i\varphi} & 0 & 0 \\ ie^{i\varphi} & 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right\| \qquad (1,36,c)$$

Se verifica sin dificultad que las propiedades fundamentales de estas matrices son

$$(\alpha^r)^2 = 1,\ (\alpha^\vartheta)^2 = \frac{1}{r^2},\ (\alpha^\varphi)^2 = \frac{1}{r^2 \operatorname{sen}^2\vartheta}\ ;\ (\alpha^i)^2 = g^{ii} \qquad (1,37)$$

$$\alpha_r^2 = 1,\ \alpha_\vartheta^2 = r^2,\ \alpha_\varphi^2 = r^2 \operatorname{sen}^2\vartheta\ ;\ \alpha_i^2 = g_{ii} \qquad (1,38)$$

$$\alpha^r \alpha^\vartheta = -\alpha^\vartheta \alpha^r = i \operatorname{sen}\vartheta\, \sigma^\varphi \qquad (1,39,a)$$

$$\alpha^\vartheta \alpha^\varphi = -\alpha^\varphi \alpha^\vartheta = \frac{i}{r^2 \operatorname{sen}\vartheta}\, \sigma^r \qquad (1,39,b)$$

$$\alpha^\varphi \alpha^r = -\alpha^r \alpha^\varphi = \frac{i}{\operatorname{sen}\vartheta}\, \sigma^\vartheta \qquad (1,39,c)$$

$$\alpha_r \alpha_\vartheta = -\alpha_\vartheta \alpha_r = \frac{i}{\operatorname{sen}\vartheta}\, \sigma_\varphi \qquad (1,40,a)$$

$$\alpha_\vartheta \alpha_\varphi = -\alpha_\varphi \alpha_r = i r \operatorname{sen}\vartheta\, \sigma_r \qquad (1,40,b)$$

$$\alpha_\varphi \alpha_r = -\alpha_r \alpha_\varphi = i \operatorname{sen}\vartheta\, \sigma_\vartheta \qquad (1,40,c)$$

donde σ_i son las componentes covariantes del operador del spin.

3.- Soluciones generales en coordenadas esféricas

3.1.- Separación de variables

La (1,30) puede resolverse en la forma propuesta por Beck[5], quien separa variables en la forma

$$\psi = \left[\lambda(r;\beta) + \alpha_r\, \varphi(r;\beta)\right] .\ Y(\vartheta,\varphi;\vec{\sigma}) .\ e^{i\beta K_0 x_0} , \tag{1,41}$$

donde el corchete indica la componente radial, mientras que las Y son las llamadas armónicas esféricas con spin. Introduciendo esta expresión en la (1,30), se verifica que el problema dado se separa en un problema angular y otro radial de valores propios. El primero se reduce a

$$r\left(\alpha^r\alpha^\vartheta \frac{\partial}{\partial\theta} + \alpha^r\alpha^\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi}\right) Y = r\left(i \,\mathrm{sen}\,\vartheta\, \sigma^\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{i}{\mathrm{sen}\,\vartheta}\, \sigma^\vartheta \frac{\partial}{\partial\varphi}\right) Y$$

$$= \frac{i}{r\,\mathrm{sen}\,\vartheta}\left(\sigma_\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} - \sigma_\theta \frac{\partial}{\partial\varphi}\right) Y = \lambda Y , \tag{1,42}$$

(que en realidad no contiene r porque las componentes covariantes del spin contienen r en forma multiplicativa). El problema radial es

$$\left.\begin{aligned} -\frac{2\pi i}{h}\beta\left(P_0 + \beta \frac{e}{c} A_0 - m_0 c\right)\chi + \frac{d\psi}{dr} + \frac{2-\lambda}{r}\psi = 0 \\ -\frac{2\pi i}{h}\beta\left(P_0 + \beta \frac{e}{c} A_0 + m_0 c\right)\psi + \frac{d\chi}{dr} + \frac{\lambda}{r}\chi = 0 \end{aligned}\right\} \tag{1,43}$$

5 Guido Beck, "Solutions of Dirac's equations in hypercomplex form", Anais da Acad. Brasil. de Cienc., 19, 321 (1947).

3.2.- La componente angular

Los autovalores de (1,42) son

$$\lambda = \varkappa + 1, \quad \text{con} \quad \varkappa = \ell \ \text{para}\ \varkappa > 0, \ \text{y} \quad \varkappa = -\ell - 1 \ \text{para} \ \varkappa < 0; \tag{1,44}$$

y las correspondientes autofunciones son

$$Y_\varkappa^m = \left[\frac{(\ell-m)!}{4\pi(\ell+m+1)!}\right]^{1/2} \left\{ (\ell+m+1)\, P_\ell^m(\cos\vartheta)\, e^{i\sigma_z m\varphi} + i\sigma_y\, P_\ell^{m+1}(\cos\vartheta)\, e^{i\sigma_z(m+1)\varphi} \right\} \tag{1,45,a}$$

para $\varkappa = -\ell - 1$, y

$$Y_\varkappa^m = \left[\frac{(\ell-m)!}{4\pi(\ell+m)!}\right]^{1/2} \cdot \sigma_r \cdot \left\{ (\ell+m)\, P_{\ell-1}^m(\cos\vartheta)\, e^{i\sigma_z m\varphi} + i\sigma_y\, P_{\ell-1}^{m+1}(\cos\vartheta)\, e^{i\sigma_z(m+1)\varphi} \right\} \tag{1,45,b}$$

para $\varkappa = \ell$. En estas expresiones,

$$\sigma_r = \sigma^r = \frac{1}{r}(\vec{\sigma}\,\vec{r}) \quad , \quad \sigma^i = \tau \cdot \alpha^i ; \tag{1,46}$$

$\varkappa$ es el número cuántico asociado al impulso angular total, representado por el operador

$$\vec{J} = \vec{r} \wedge \vec{p} + \frac{1}{2}\,\frac{h}{2\pi}\,\vec{\sigma}, \tag{1,47}$$

y cuyos valores propios son

$$\text{eit}\ \vec{J} = \sqrt{j(j+1)}\ \frac{h}{2\pi} = \sqrt{\varkappa^2 - 1/4}\ \frac{h}{2\pi}, \quad j = |\varkappa| - 1/2, \tag{1,48}$$

de donde

$$j = \ell - \tfrac{1}{2} \qquad \text{si} \qquad \varkappa = \ell = 1, 2, 3, \ldots \tag{1,49,a}$$

$$j = \ell + \tfrac{1}{2} \qquad \text{si} \qquad \varkappa = -\ell - 1 = -1, -2, -3, \ldots \tag{1,49,b}$$

El número cuántico azimutal o magnético <u>m</u> toma, en esta representación, exclusivamente valores <u>positivos</u>, a diferencia de lo que ocurre habitualmente:

$$m = 0, 1, 2, \ldots \quad |\varkappa| - 1 \geqslant 0 . \tag{1,50}$$

Por último, las P_ℓ^m (cos) son las funciones esféricas:

$$P_\ell^m(\mu) = (1-\mu^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{d\mu^m} P_\ell(\mu) = \frac{(1-\mu^2)^{\frac{m}{2}}}{2^\ell \, \ell!} \cdot \frac{d^{\ell+m}}{d\mu^{\ell+m}} (\mu^2-1)^\ell \tag{1,51}$$

3.3.- <u>Propiedades de las soluciones angulares</u>

Destacaremos las siguientes relaciones, contenidas en las(1,45):

$$Y_\varkappa^m = \sigma_r Y_{-\varkappa}^m \quad , \quad (Y_\varkappa^m)^\dagger = (Y_{-\varkappa}^m)^\dagger \sigma_r \tag{1,52}$$

$$(Y_\varkappa^m)^\dagger Y_{\varkappa'}^{m'} = (Y_{-\varkappa}^m)^\dagger Y_{-\varkappa'}^{m'} \qquad \text{por ser } \sigma_r^2 = 1 \tag{1,53}$$

Además, se verifica que

$$\frac{\partial Y}{\partial \varphi} = -\frac{i}{2} \sigma_z Y + i\left(m+\frac{1}{2}\right) Y \sigma_z \tag{1,54}$$

Las autofunciones angulares están,por supuesto, normalizadas a la unidad:

$$\int_0^\pi \operatorname{sen}\vartheta \, d\vartheta \int_0^{2\pi} (Y_\varkappa^m)^\dagger Y_{\varkappa'}^{m'} \, d\varphi = \int_0^\pi \operatorname{sen}\vartheta \, d\vartheta \int_0^{2\pi} (Y_{-\varkappa}^{m*}) Y_{-\varkappa'}^{m'} \, d\varphi = \delta_{m'm} \, \delta_{\ell'\ell} \, , \tag{1,55}$$

como se verifica en el Apéndice A,Capítulo II. En cambio, las soluciones angulares correspondientes a números cuánticos $\varkappa$ y ℓ' de signos opuestos son ortogonales entre sí(cf. <u>loc.cit.</u>):

$$\int_0^\pi \operatorname{sen}\vartheta \, d\vartheta \int_0^{2\pi} (Y_{-\varkappa}^m)^\dagger Y_{\varkappa'}^{m'} \, d\varphi = \int_0^\pi \operatorname{sen}\vartheta \, d\vartheta \int_0^{2\pi} (Y_\varkappa^m)^\dagger Y_{-\varkappa'}^{m'} \, d\varphi = 0 \tag{1,56}$$

3.4.- Las 4 transiciones del número cuántico angular

Por último, observemos que al calcular los elementos de matriz de un operador cualquiera por medio de las (1,41) debemos tener en cuenta las 4 transiciones posibles del número cuántico angular :

$$\begin{array}{lll} (--) & \varkappa<0 \rightarrow \varkappa'>0 & \{\ \}^{--} \\ (++) & \varkappa>0 \rightarrow \varkappa'>0 & \{\ \}^{++} \\ (-+) & \varkappa<0 \rightarrow \varkappa'>0 & \{\ \}^{-+} \\ (+-) & \varkappa>0 \rightarrow \varkappa'<0 & \{\ \}^{+-} \end{array} \qquad (1,57)$$

Identificaremos estos cuatro tipos de transiciones mediante signos + y - colocados en la parte superior derecha de la magnitud de que se trate. Así, por ejemplo, $\{M\}^{-+}$ representará la densidad de la magnitud M correspondiente a la transición $\varkappa<0 \rightarrow \varkappa'>0$.

4.- Soluciones radiales del electrón libre

4.1.- Ondas libres estacionarias

En ausencia de campo exterior, las ecuaciones radiales son

$$-\frac{2\pi i}{h}\beta\,(P_0 - m_0 c)\chi_x + \frac{d\varphi_x}{dr} + \frac{1-x}{r}\varphi_x = 0 \qquad (1,58,a)$$

$$-\frac{2\pi i}{h}\beta\,(P_0 + m_0 c)\varphi_x + \frac{d\chi_x}{dr} + \frac{1+x}{r}\chi_x = 0 \qquad (1,58,b)$$

La estructura de las ecuaciones muestra que una de las dos componentes, χ o φ, debe contener el operador $i\beta$; eligiendo la segunda alternativa, se despeja χ de la primera ecuación, introduciéndosela en la segunda; con φ se procede análogamente. Así se obtienen dos ecuaciones de Bessel:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + k^2 - \frac{x(x+1)}{r^2}\right]\chi_x = 0 \qquad (1,59,a)$$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + k^2 - \frac{x(x-1)}{r^2}\right]\varphi_x = 0, \qquad (1,59,b)$$

donde

$$k = \frac{2\pi}{h}\,P = \frac{2\pi}{h}(P_0^2 - m_0^2\,c^2)^{\frac{1}{2}} > 0 \qquad (1,60)$$

es el número de ondas. Las soluciones de las (1,58) son

$$\left.\begin{aligned} \chi_x(k,r) &= A\, j_{-x-1}(kr) = A\, j_l(kr) \qquad (1,61,a)\\ \varphi_x(k,r) &= i\beta\, B\, j_{-x}(kr) = i\beta\, B\, j_{l+1}(kr) \qquad (1,61,b)\end{aligned}\right\}\; x = -l-1 < 0$$

$$\left.\begin{aligned} \chi_x(k,r) &= A\, j_x(kr) = A\, j_l(kr) \qquad (1,61,c)\\ \varphi_x(k,r) &= -i\beta\, B\, j_{x-1} = -i\beta\, B\, j_{l-1}(kr) \qquad (1,61,d)\end{aligned}\right\}\; x = l > 0$$

Las j_l son las llamadas funciones de Bessel esféricas, funciones a su vez de las funciones de Bessel de orden semientero:

$$j_l(x) = \left(\frac{\pi}{2x}\right)^{1/2} J_{l+\frac{1}{2}}(x) = 2^l x^l \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (l+n)!}{n!(2l+2n+1)!} \cdot x^{2l} \quad (1,62)$$

Las primeras de ellas son

$$j_0(x) = \frac{\operatorname{sen} x}{x} \quad (1,63,a)$$

$$j_1(x) = \frac{\operatorname{sen} x}{x^2} - \frac{\cos x}{x} \quad (1,63,b)$$

$$j_2(x) = \left(\frac{3}{x^2} - \frac{1}{x}\right) \operatorname{sen} x - \frac{3}{x^2} \cos x \quad (1,63,c)$$

Las constantes A y B son

$$A = \left[\frac{1}{2}\left(1 + \frac{m_0 c}{P_0}\right)\right]^{1/2} = \left\{\frac{1}{2}\left[1 + \frac{1}{\sqrt{1+\Lambda^2 K^2}}\right]\right\}^{1/2} \quad (1,64,a)$$

$$B = \left[\frac{1}{2}\left(1 - \frac{m_0 c}{P_0}\right)\right]^{1/2} = \left\{\frac{1}{2}\left[1 - \frac{1}{\sqrt{1-\Lambda^2 K^2}}\right]\right\}^{1/2} \quad (1,64,b)$$

y verifican las relaciones

$$A^2 + B^2 = 1 \quad (1,65,a)$$

$$A^2 - B^2 = \frac{m_0 c}{P_0} = (1 - v^2/c^2)^{\frac{1}{2}} \quad (1,65,b)$$

$$2AB = \left(1 - \frac{m_0^2 c^2}{P_0^2}\right)^{\frac{1}{2}} = \frac{v}{c} \quad (1,65,c)$$

Como para pequeñas velocidades

$$\lim_{v \ll c} P_0 = m_0 c$$

se tiene

$$\lim_{v \ll c} A = 1 \quad , \quad \lim_{v \ll c} B = 0 , \tag{1,66}$$

de manera que en el límite no relativista sólo es apreciable la "componente grande" χ_x , solución de la correspondiente ecuación de Schrödinger

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]\chi_\ell = 0, \quad \chi_\ell(kr) = j_\ell(kr) \tag{1,67}$$

4.2.- Normalización

Las funciones de Bessel esféricas no pueden normalizarse con el "peso " r^2 en el intervalo $(0,\infty)$ de la manera habitual, pero sí pueden ser normalizadas sus autodiferenciales. En el Apéndice B, Capítulo I, se demuestra que la normalización de las autodiferenciales equivale a la ortogonalidad delta, y que puede ponerse

$$\frac{2}{\pi} k k' \int_0^\infty j_\ell(kr)\, j_\ell(k'r)\, r^2\, dr = \delta(k'-k) = \begin{cases} \infty & \text{si } k' = k \\ 0 & \text{si } k' \neq k \end{cases} \tag{1,68}$$

de modo que el factor de normalización de las j_ℓ es

$$N(k) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} k \tag{1,69}$$

La integral de normalización es entonces

$$\int_0^\infty \left[\chi_\ell^*(k,r)\,\chi_\ell(k',r) \pm \varphi_x^*(k,r)\,\varphi_x(k',r)\right] r^2\, dr$$

$$= \frac{2}{\pi} k k' \int_0^\infty \left[A A' j_\ell(kr)\, j_\ell(k'r) \pm B B' j_{\ell\pm 1}(kr)\, j_{\ell\pm 1}(k'r)\right] r^2\, dr$$

$$= (AA' \pm BB')\,\delta(k'-k) = (A^2 \pm B^2)\,\delta(k'-k) \tag{1,70}$$

Con esto, y con la ortonormalidad (1,55) de la parte angular, las autofunciones completas (1,41) en el caso del electrón libre verifican la relación de ortonormalidad

$$\int \psi^{\dagger}(\kappa)\,\psi(\kappa')\,d\tau = \int_0^{\infty}\left[\chi_{\chi}^{*}(\kappa,r)\,\chi_{\chi'}(\kappa',r) + \varphi_{\chi}^{*}(\kappa,r)\,\varphi_{\chi'}(\kappa',r)\right] r^2\,dr \,\cdot$$

$$\cdot \iint (Y_{\chi}^{m})^{\dagger}\, Y_{\chi'}^{m'}\, d\Omega = \delta_{\ell\ell'}\,\delta_{m'm}\,\delta_{\kappa'\kappa} \quad , \qquad \delta_{\kappa'\kappa} \equiv \delta(\kappa'-\kappa) \qquad (1,71)$$

Debe observarse que, si bien la densidad de probabilidad es

$$(\chi_{\chi}^{*}\chi_{\chi} + \varphi_{\chi}^{*}\varphi_{\chi})\, Y^{\dagger} Y - (\chi^{*}\varphi - \varphi^{*}\chi)\, Y^{\dagger}\alpha_r Y,$$

al integrar sobre los ángulos se anula el segundo término debido a (1,52) y a (1,56).

En lugar de la ortonormalización delta se podría emplear el análogo de la <u>box normalization</u> utilizada para las ondas planas; es decir, podríamos imponer la anulación de las autofunciones radiales sobre una esfera de radio R. Pero, si bien las integrales de interés físico serían entonces convergentes en su totalidad, también serían mucho más complicadas.

4.3.- <u>Ondas libres progresivas</u>

Las (1,61) son las componentes radiales de ondas esféricas <u>estacionarias</u>, que resultan de la superposición de ondas esféricas progresivas emergentes (de la fuente situada en el punto r, ϑ, φ) y convergentes (hacia el mismo punto). Llamando R^{+} a las primeras y R^{-} a las segundas, podemos escribir

$$j_{\ell}(kr) = \tfrac{1}{2}\left[\, R_{\ell}^{+}(kr) + R_{\ell}^{-}(kr)\right] \qquad (1,72)$$

donde

$$R_\ell^+ = j_\ell + i n_\ell \equiv h_\ell^{(1)} \quad , \quad R_\ell^- = (R_\ell^+)^* = j_\ell - i n_\ell = h_\ell^{(2)} \qquad (1,73)$$

Las n_ℓ son las funciones de Neumann esféricas, y las R^+ y R^- son respectivamente las funciones de Hankel esféricas de primera y segunda especie. Por ejemplo, las ondas progresivas S y P son

$$R_0^+(x) = h_0^{(1)}(x) = -\frac{i}{x} \cdot e^{ix} \quad , \quad R_0^-(x) = h_0^{(2)}(x) = \frac{i}{x} \cdot e^{-ix} \qquad (1,74,a)$$

$$R_1^+(x) = h_1^{(1)}(x) = -\left(\frac{i}{x} + 1\right) \cdot \frac{e^{ix}}{x}, \quad R_1^-(x) = h_1^{(2)}(x) = \left(\frac{i}{x} - 1\right) \cdot \frac{e^{-ix}}{x} \qquad (1,74,b)$$

Las soluciones de la ecuación de Dirac que representan ondas progresivas son, en correspondencia con las (1,61),

$$\chi_\varkappa^\pm(\kappa, r) = A\, R_\ell^\pm(\kappa r) \, , \quad \varphi_\varkappa^\pm(\kappa, r) = i\beta\, B\, R_{\ell+1}^\pm(\kappa r), \ \varkappa < 0 \qquad (1,75,a)$$

$$\chi_\varkappa^\pm(\kappa, r) = A\, R_\ell^\pm(\kappa r), \quad \varphi_\varkappa^\pm(\kappa, r) = -i\beta\, B\, R_{\ell-1}^\pm(\kappa r)\, , \ \varkappa > 0 \qquad (1,75,b)$$

Como las funciones de Hankel divergen en el origem, estas soluciones no son autofunciones en el sentido corriente del término. En cambio son normalizables delta. En efecto, para una onda s se tiene

$$\frac{\kappa\kappa'}{\pi}\int_0^\infty \left[R_0^+(\kappa r)\right]^* R_0^+(\kappa' r)\, r^2\, dr = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty e^{i(\kappa'-\kappa)r}\, dr = \delta(\kappa'-\kappa) + v.p.\, \frac{i}{\pi(\kappa'-\kappa)} \qquad (1,76,a)$$

y para una onda p,

$$\frac{\kappa\kappa'}{\pi}\int_0^\infty \left[R_1^+(\kappa r)\right]^* R_1^+(\kappa' r)\, r^2\, dr = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \left(\frac{i}{\kappa r} - 1\right)\left(\frac{i}{\kappa' r} + 1\right) e^{i(\kappa'-\kappa)r}$$
$$= \delta(\kappa'-\kappa) + v.p.\, \frac{i}{\pi}\left[\frac{1}{\kappa'-\kappa} + \frac{1}{\kappa'} - \frac{1}{\kappa}\right] \qquad (1,76,b)$$

El símbolo v.p. (valor principal) significa que, al integrar la función afectada de este operador, es preciso tomar el valor principal de la integral en el sentido de Cauchy.

Ahora bien: las expresiones del tipo (1,76) adquieren sentido físico cuando se las integra sobre un paquete de ondas de ancho espectral Δk arbitrariamente pequeño centrado en k. Efectuando esta integración se tiene en ambos casos

$$\lim_{\Delta k \to 0} \int_{k-\frac{\Delta k}{2}}^{k+\frac{\Delta k}{2}} dk' \int_0^\infty \left[R_\ell^+(kr)\right]^* R_\ell^+(k'r)\, r^2\, dr = 1 \qquad (\ell = 0, 1) \tag{1,77}$$

donde se ha hecho uso de las fórmulas

$$\frac{dt}{t} = d \ln|t|, \qquad v.p. \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{dt}{t} = 0$$

Concluímos así que las ondas progresivas (1,73) gozan de las mismas propiedades de normalización(delta) que las ondas estacionarias, aun cuando no son funciones propias ya que son infinitas en el origen.

5.- Soluciones radiales del electrón en un campo coulombiano (espectro contimuo)

5.1.-Ondas estacionarias

Las ecuaciones radiales del electrón en un campo coulombiano

$$A_0 = \frac{Ze}{r} \quad , \; Z = 1,2,\ldots$$

son

$$-\frac{2\pi i}{h}\beta\,(P_0 - m_0 c)\,\chi_x + \frac{d\varphi_x}{dr} + \frac{1-x}{r}\,\varphi_x + \frac{i\alpha Z}{r}\,\chi_x = 0 \qquad (1,78,a)$$

$$-\frac{2\pi i}{h}\beta\,(P_0 + m_0 c)\,\varphi_x + \frac{d\chi_x}{dr} + \frac{1+x}{r}\,\chi_x + \frac{i\alpha Z}{r}\,\varphi_x = 0 \qquad (1,78,b)$$

Las soluciones generales son[5]

$$\chi_x(k,r) = A\,(kr)^{\rho-1}\,e^{-ikr}\left[F_1 + \varepsilon\cdot F_2\right] \qquad (1,79,a)$$

$$\varphi_x(k,r) = B\,(kr)^{\rho-1}\,e^{-ikr}\left[F_1 - \varepsilon\cdot F_2\right] \qquad (1,7b,b)$$

d nde

$$\varepsilon = -\frac{\rho + \frac{iZ}{ka_0}\,\frac{P_0}{m_0 c}}{x + \frac{iZ}{ka_0}} = -\frac{x - \frac{iZ}{ka_0}}{\rho - \frac{iZ}{ka_0}\cdot\frac{P_0}{m_0 c}} \;,\quad |\varepsilon|^2 = 1 \qquad (1,80)$$

$$\rho = (x^2 - Z^2\alpha^2)^{1/2}\left(\simeq |x| \;\text{si}\; Z = 1\right),\quad a_0 = \frac{\lambda}{\alpha} = \frac{h^2}{4\pi^2 m e^2} \simeq 0{,}53.10^{-8}\,\text{cm.} \qquad (1,81)$$

Las F_i son funciones hipergeométricas de Kummer (o confluentes,o degeneradas)que dependen del operador de la carga:

$$F_1 = F\left[\rho + \tfrac{1}{2}(1+\beta) - \beta\,\frac{iZ}{ka_0}\,\frac{P_0}{m_0 c}\;;\; 2\rho+1\;;\; i2kr\right] \qquad (1,82,a)$$

$$F_2 = F\left[\rho + \tfrac{1}{2}(1-\beta) - \beta\,\frac{iZ}{ka_0}\,\frac{P_0}{m_0 c}\;;\; 2\rho+1\;;\; i2kr\right] \qquad (1,82,b)$$

Estas funciones, que satisfacen a la ecuación diferencial

$$z u'' + (\gamma - z) u' - \alpha u = 0, \tag{1,83}$$

admiten el desarrollo en serie

$$F(\alpha;\gamma;z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n}{(\gamma)_n} \frac{z^n}{n!} \quad , \quad (\alpha)_n \equiv \alpha(\alpha+1)\ldots(\alpha+n-1) \tag{1,84}$$

Dado que

$$F(\alpha;\gamma;-z) = e^{-z} F(\gamma-\alpha;\gamma;z), \tag{1,85}$$

las conjugadas son

$$F_1^* = e^{-z} F_2 \ , \quad F_2^* = e^{-z} F_1 \tag{1,86}$$

por lo cual

$$\chi_x^* = A(kr)^{\rho-1} e^{-ikr}\left[F_2 + \varepsilon^* F_1\right] \tag{1,87,a}$$

$$\varphi_x^* = B(kr)^{\rho-1} e^{-ikr}\left[F_2 - \varepsilon^* F_1\right] \tag{1,87,b}$$

Si M es una matriz que anticonmuta con β , las F cumplen las siguientes relaciones:

$$M F_1 = F_1^- M \ , \quad M F_2 = F_2^- M \tag{1,88,a}$$

donde

$$F_1^-(\beta) = F_1(-\beta), \qquad F_2^-(\beta) = F_2(\beta) \tag{1,88,b}$$

Llamaremos $\bar{\chi}$ y $\bar{\varphi}$ a las soluciones en que se ha reemplazado F_1 por F_1^-.

Los productos que aparecen bajo el signo integral son, debido a las relaciones anteriores,

$$\chi_x^*(k,r)\,\chi_{x'}(k',r) \pm \varphi_x^*(k,r)\,\varphi_{x'}(k',r) = (kr)^{\rho-1}(k'r)^{\rho'-1}\, e^{-i(k+k')r}\,.$$

$$\left\{(AA'\pm BB')\left[F_2F_1' + \varepsilon^*\varepsilon' F_1F_2'\right] + (AA'\mp BB')\left[\varepsilon' F_2F_2' + \varepsilon^* F_1F_1'\right]\right\}, \qquad (1,89,a)$$

$$\bar{\chi}_x^*(k,r)\,\chi_{x'}(k',r) \pm \bar{\varphi}_x^*(k,r)\,\varphi_{x'}(k',r) = (kr)^{\rho-1}(k'r)^{\rho'-1}\, e^{-i(k+k')r}\,.$$

$$\left\{(AA'\pm BB')\left[\bar{F}_2F_1' + \varepsilon^*\varepsilon' \bar{F}_1\bar{F}_2'\right] + (AA'\mp BB')\left[\varepsilon' \bar{F}_2F_2' + \varepsilon^* \bar{F}_1F_1'\right]\right\}, \qquad (1,89,b)$$

$$\chi_x^*(k,r)\,\varphi_{x'}(k',r) \pm \varphi_x^*(k,r)\,\chi_{x'}(k',r) = (kr)^{\rho-1}(k'r)^{\rho'-1}\, e^{-i(k+k')r}$$

$$\left\{(AB'\pm A'B)\left[F_2F_1' - \varepsilon^*\varepsilon' F_1F_2'\right] + (AB'\mp A'B)\left[\varepsilon^* F_1F_1' - \varepsilon' F_2F_2'\right]\right\} \qquad (1,90,a)$$

y en particular, para $x' = x$, k'=k,

$$\chi^*\varphi + \varphi^*\chi = 0, \qquad (1,90,b)$$

ya que el coeficiente de 2AB es

$$(\,1 - |\varepsilon|^2\,)\,F_1F_2 = 0 \quad \text{por } (1,81).$$

Los coeficientes A y B cumplen las mismas relaciones que en el caso del electrón libre. Además, como se ve en el Apéndice C, Capítulo II, el examen de la ecuación diferencial muestra que tenemos nuevamente la ortonormalización delta:

$$\int_0^\infty \left[\chi_x^*(k,r)\,\chi_x(k',r) + \varphi_x^*(k,r)\,\varphi_x(k',r)\right] r^2\,dr = (AA'+BB')\,\delta(k'-k) \qquad (1,91)$$

En el caso no relativista, tenemos

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2Z}{a_0}\frac{1}{r}\right]\chi_\ell = 0 \qquad (1,92)$$

cuya solución es

$$\chi_l(\kappa, r) = (kr)^l \, e^{\mp ikr} \, F(l+1 \pm i \frac{Z}{\kappa a_0} ; 2(l+1) ; \pm 2ikr) \qquad (1,93)$$

En efecto, al pasar al límite no relativista debemos tomar $\beta = -1$ (pues los estados positrónicos desaparecen) , $P_0 + m_0c \cong 2m_0c$, $P_0 - m_0c = E/c$ en las ecuaciones radiales (1,78). Como en la segunda de ellas podemos despreciar $\frac{\alpha Z}{r}$ frente a $2m_0c . 2^{\pi}/h$, obtenemos para φ el valor aproximado

$$\varphi_x \simeq i \frac{\Lambda}{2} \left(\frac{d\chi_x}{dr} + \frac{1+x}{r} \chi_x \right),$$

que sustituído en la primera de las (1,78) nos da la ecuación de Schrödinger (1,92).

5.2.- Orbitas parabólicas[6]

Para hallar las soluciones correspondientes al punto de acumulación $P_0 = m_0c$ del espectro, es preciso volver a las ecuaciones diferenciales. Despejando χ_x de (1,78,a) y sustituyéndola en (1,78,b) obtenemos

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{3}{r}\frac{d}{dr} - \beta \cdot \frac{2}{a_0/Z}\frac{1}{r} + \frac{1-x^2+Z^2\alpha^2}{r^2} \right] \varphi_x = 0 \qquad (1,94)$$

cuya solución es

$$\varphi_x(r;\beta) = \frac{J_{2\rho}(\sqrt{-\beta\xi})}{\xi}, \qquad (1,95)$$

donde

6 Mario Bunge, "Solución de la ecuación de Dirac correspoddiente a las órbitas parabólicas", 20a. Reunión de la Asociación Física Argentina, Rosario, setiembre de 1952.

$$\xi = 8\,\frac{r}{a_0/Z}\ , \qquad \rho = \sqrt{\varkappa^2 - \alpha^2 Z^2} \tag{1,96}$$

Introduciendo este resultado en la primera ecuación radial, obtenemos

$$\chi_\varkappa(r,\beta) = \frac{i}{\varkappa Z}\left[(\rho-\varkappa)\,\frac{J_{2\rho}(\sqrt{-\beta\xi})}{\xi} - \frac{1}{2}\sqrt{-\beta}\cdot\frac{J_{2\rho+1}(\sqrt{-\beta\xi})}{\sqrt{\xi}}\right] \tag{1,97}$$

En el límite no relativista, $\beta = -1$, $\rho \to \varkappa = \ell$, la componente "grande" del spinor radial se reduce a

$$\chi_\ell \propto \frac{J_{2\ell+1}(\sqrt{\xi})}{\sqrt{\xi}}, \tag{1,98}$$

que es precisamente la solución de la correspondiente ecuación de Schrödinger

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + \frac{2}{a_0/Z}\,\frac{1}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]\chi_\ell = 0\,. \tag{1,99}$$

En cuanto a la otra componente, para $\ell \neq 0$ es regular en el origen pues $\rho \neq 0$, pero se torna infinita en dicho punto cuando $\ell = 0$, motivo por el cual debe excluirse del tratamiento no relativista, en el que de este modo queda una sola función, como debe ser.

Estas funciones, que clásicamente corresponden a las órbitas parabólicas del problema kepleriano, no pueden normalizarse, ni en la forma corriente— pues $r.\chi$ y $r.\varphi$ no son de cuadrado integrable— ni con el método de las autodiferenciales.

5.3.- Ondas progresivas

Análogamente a lo que se hizo con las ondas esféricas libres, las soluciones estacionarias (1,79) pueden descomponerse en ondas progresivas emergentes y convergentes, con sólo emplear la conocida descomposición [7]

$$F(\alpha;\gamma;z) = \frac{1}{2}\left[F^{+}(\alpha;\gamma;z) + F^{-}(\alpha;\gamma;z)\right] \quad (1,100)$$

donde

$$F^{+}(\alpha;\gamma;z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} e^{z} z^{\alpha-\beta}\left[1 + \frac{(1-\alpha)(\gamma-\alpha)}{z} + \frac{(1-\alpha)(2-\alpha)(\gamma-\alpha)(\gamma-\alpha+1)}{z^2 .\ 2!} + \cdots\right] \quad (1,101,a)$$

$$F^{-}(\alpha;\gamma;z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} (-z)^{-\alpha}\left[1 - \frac{\alpha(\alpha-\gamma+1)}{z} + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha-\gamma+1)(\alpha-\gamma+2)}{z^2 .\ 2!} - \cdots\right] \quad (1,101,b)$$

El comportamiento de las correspondientes autofunciones $\chi^{\pm}$ y $\varphi^{\pm}$ en el origen y en el infinito es análogo al de las funciones de Hankel esféricas; vale decir, tampoco éstas son autofunciones, si bien los desarrollos asintóticos indicados son los adecuados para ciertos problemas.

---

7 W. Gordon, Zeits. f. Phys., 48, 180 (1928).

6.- Soluciones radiales del átomo de hidrógeno (espectro discreto)

Las funciones de Kummer admiten un desarrollo en serie, el (1,84), que converge para todos los valores $P_0 > m_0 c$ de la energía. Para $P_0 < m_0 c$, en cuyo caso k se torna imaginario, dejan de converger; en efecto, al ser

$$ik = K = \frac{2\pi}{h} (m_0^2 c^2 - P_0^2)^{\frac{1}{2}} \qquad (1,102)$$

dichas series se convierten, de oscilantes, en funciones crecientes de r. Para que la función de Kummer de variable real, como lo es para $P_0 < m_0 c$, esté definida para todo valor de la misma, su primer parámetro -- o sea, α -- debe ser igual a un entero negativo. En nuestro caso, debe ser

$$\rho + \frac{1}{2}(1 \pm \beta) + \beta \frac{Z}{K a_0} \frac{P_0}{m_0 c} = - n_r \leq 0, \qquad n_r = 0, 1, 2, \qquad (1,103)$$

Esta ecuación de los autovalores se verifica para

$$\beta = -1, \qquad \rho - \frac{Z}{K a_0} \cdot \frac{P_0}{m_0 c} = - n_r \qquad (1,104)$$

Las F_1 se reducen así a polinomios de Kummer, o de Jacobi:

$$F_1 = F(-n_r; 2\rho+1; 2Kr) \qquad , \qquad F_2 = F(-n_r; 2\rho+1; 2Kr) \qquad (1,105)$$

De (1,104) deducimos los autovalores discretos de la energía (fórmula de Sommerfeld):

$$P_0 = m_0 c \left[1 + \left(\frac{Z\alpha}{n_r + \rho} \right)^2 \right]^{-1/2}, \quad = \frac{\rho + n_r}{n} \cdot m_0 c ; \qquad (1,106)$$

o bien,

$$K = \frac{Z}{a_0} \left[(\rho + n_r)^2 + Z^2 \alpha^2 \right]^{-1/2} = \frac{1}{n\, a_0/Z} \qquad (1,107)$$

donde n, que sólo es entero para $n_r = 0$, hace las veces de número cuántico principal.

Usando estos resultados, las constantes que aparecen en las autofunciones resultan

$$A = \left[\frac{1}{2} \left(\sqrt{1+\left(\frac{Z\alpha}{n_r+\rho}\right)^2} + 1 \right) \right]^{\frac{1}{2}} \qquad (1,108,a)$$

$$B = i\left[\frac{1}{2} \left(\sqrt{1+\left(\frac{Z\alpha}{n_r+\rho}\right)^2} - 1 \right) \right]^{\frac{1}{2}} \qquad (1,108,b)$$

$$\mathcal{E} = \frac{n_r}{\varkappa - \sqrt{(n_r+\rho)^2 + Z^2\alpha^2}} = \frac{n_r}{\varkappa - n} \qquad (1,109)$$

Las amplitudes A y B cumplen las relaciones

$$A^*A + B^*B = \frac{m_0 c}{p_0} = \left[1 + \left(\frac{Z\alpha}{n_r+\rho}\right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \qquad (1,110,a)$$

$$A^*A - B^*B = 1 \qquad (1,110,b)$$

$$A^*B + AB^* = 0 \qquad (1,111,a)$$

$$A^*B - AB^* = i\left[\left(\frac{m_0 c}{p_0}\right)^2 - 1 \right]^{\frac{1}{2}} = \frac{iZ\alpha}{n_r+\rho} \qquad (1,111,b)$$

Cuando el número cuántico radial $n_r > 0$, las funciones de onda radiales no normalizadas toman la forma

$$\chi_\varkappa = A\,(2Kr)^{\rho-1} e^{-Kr} \left[F(-n_r; 2\rho+1; 2Kr) + \mathcal{E}\cdot F(-n_r+1; 2\rho+1; 2Kr) \right] \qquad (1,112,a)$$

$$\psi_\varkappa = B\,(2Kr)^{\rho-1} e^{-Kr} \left[F(-n_r; 2\rho+1; 2Kr) - \mathcal{E}\cdot F(-n_r+1; 2\rho+1; 2Kr) \right] \qquad (1,112,b)$$

En particular, para $n_r=0$, por (1,109) es $\mathcal{E}=0$, y estas funciones se reducen a

$$\begin{matrix} \chi_\varkappa \\ \varphi_\varkappa \end{matrix} = \begin{matrix} A \\ B \end{matrix} (2Kr)^{\rho-1} . e^{-Kr} \qquad (1,113)$$

donde

$$K = -\frac{Z}{\varkappa a_0} \qquad \text{o sea,} \quad \varkappa = -\ell - 1 = -1, -2, -3, \dots \qquad (1,114)$$

Este caso corresponde a las órbitas circulares de la teoría de Bohr.

Los productos que aparecen en los integrandos de los elementos de matriz son

$$\chi_\varkappa^*(K,r)\chi_{\varkappa'}(K',r) \pm \varphi_\varkappa^*(K,r)\varphi_{\varkappa'}(K',r) = (2Kr)^{\rho-1}(2K'r)^{\rho'-1} e^{-(K+K')r} .$$
$$\left\{ (A^*A' \pm B^*B')(F_1F_1' + \varepsilon\varepsilon' F_2F_2') + (A^*A' \mp B^*B')(\varepsilon' F_1F_2' + \varepsilon F_1'F_2) \right\} \qquad (1,115,a)$$

$$\chi_\varkappa^*(K,r)\varphi_{\varkappa'}(K',r) \pm \varphi_\varkappa^*(K,r)\chi_{\varkappa'}(K',r) = (2Kr)^{\rho-1}(2K'r)^{\rho'-1} e^{-(K+K')r} .$$
$$\left\{ (A^*B' \pm A'B^*)(F_1F_1' - \varepsilon\varepsilon' F_2F_2') + (A^*B' \mp A'B^*)(\varepsilon' F_1F_2' - \varepsilon F_2F_1') \right\} \qquad (1,115,b)$$

En particular, por (1,111,a),

$$\chi_\varkappa^* \varphi_\varkappa + \varphi_\varkappa^* \chi_\varkappa = 0 \qquad (K' = K) \qquad (1,116)$$

En la aproximación no relativista las autofunciones son las (1,93), con

$$\ell + 1 + \frac{iZ}{ka_0} = -n_r \quad , \quad n_r = 0,1,2,\dots.$$

de donde

$$ik = K = \frac{Z}{na_0}\ , \quad n = n_r + \ell + 1\ , \quad E_n = -\ \frac{Z^2\ e^2}{2\ a_0\ n^2} \qquad (1,117)$$

y

$$\chi_{\ell,n_r} = (2Kr)^{\ell}\ e^{-Kr}\ F(\ -n_r\ ;\ 2(\ell+1)\ ;\ 2Kr) \qquad (1,118)$$

o bien, empleando los polinomios asociados de Laguerre,

$$\chi_{n,\ell} = (2kr)^{\ell}\ e^{-kr}\ L_{n+\ell}^{2\ell+1}\ (2kr) \qquad (1,119)$$

CAPITULO II

LOS OPERADORES DE LA VELOCIDAD

1.- Las componentes polares de la velocidad en mecánica clásica

La energía cinética de una masa puntual es

$$T = \frac{m_0}{2}\left(\frac{ds}{dt}\right)^2 = \frac{1}{2}\, m_0(v_i\, v^k) = \frac{1}{2}m_0\, g_{ik}v^iv^k = \frac{1}{2}m_0 g^{ik}v_iv_k \qquad (2,1)$$

Recordando las (1,34) obtenemos la expresión correspondiente a las coordenadas esféricas:

$$T = \frac{1}{2}\, m_0\left[\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\, \mathrm{sen}^2\vartheta\, \dot{\varphi}^2\right], \qquad (2,2)$$

de manera que las componentes polares covariantes y contravariantes de la velocidad lineal son

$$v_r = \dot{r} \qquad , v^r = g^{rr}\, v_r = \dot{r} \qquad (2,3)$$

$$v_\vartheta = r^2\,\dot{\vartheta} \qquad , v^\vartheta = g^{\vartheta\vartheta}\, v_\vartheta = \dot{\vartheta} = \omega^\theta \qquad (2,4)$$

$$v_\varphi = r^2\, \mathrm{sen}^2\vartheta\, \dot{\varphi} \;, v^\varphi = g^{\varphi\varphi}\, v_\varphi = \dot{\varphi} = \omega^\varphi \qquad (2,5)$$

De aquí se obtienen las componentes del impulso generalizado para todo campo que no dependa de las velocidades:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} = \frac{\partial T}{\partial v^i} = m_0\, v_i\,, \quad p^i = \frac{\partial T}{\partial v_i} = m_0\, v^i \qquad (2,6)$$

Observemos que, en un campo central, solamente p_φ es una constante del movimiento; p_r y p_ϑ no lo son ni siquiera para la partícula libre.

De las 6 componentes polares de $\vec{v}$, solamente la velocidad radial

$$v_r = v^r = \dot{r} = \frac{\vec{r}\,\vec{v}}{r} \qquad (2,7)$$

tiene la dimensión de una velocidad lineal. Las componentes covariantes son, dimensionalmente, velocidades areolares; en tanto que las contravariantes tienen la dimensión de una velocidad angular. Dado que se trata de magnitudes físicas, conviene sacrificar su carácter tensorial en aras de su significado físico, adoptando las siguientes definiciones convencionales de velocidad lineal, que son las que se emplean corrientemente:

$$V_r = v_r = \dot{r} \quad , \quad V_\vartheta = \frac{v_\vartheta}{r} = r\dot{\theta} \quad , \quad V_\varphi = \frac{v_\varphi}{r\,\mathrm{sen}\theta} = r\,\mathrm{sen}\vartheta\,\dot{\varphi} \qquad (2,8)$$

Esta adopción corresponde, geométricamente, a la elección de un sistema de base constituído por vectores $\vec{u}_k$ unitarios:

$$\vec{u}_k = \frac{\vec{e}_k}{\sqrt{g_{kk}}} \quad , \quad \vec{e}_k = \frac{\partial \vec{r}}{\partial x^k} \quad ; \quad g_{kk} = (\vec{e}_k)^2 \qquad (2,9)$$

Conservaremos, en cambio, las definiciones (2,6) de los impulsos generalizados— aun cuando solamente $p^r = p_r$ tiene las dimensiones de un impulso— pues son las que intervienen naturalmente en todo formalismo canónico, como lo son los de las teorías de Schrödinger y Dirac.

En cuanto a la velocidad areolar, suelen emplearse las siguientes expresiones:

$$A_\vartheta = r\,V_\vartheta = r^2\,\dot\vartheta = p_\vartheta/m_0 \quad , \quad A_\varphi = r\,\mathrm{sen}\,\vartheta\,V_\varphi = r^2\,\mathrm{sen}^2\vartheta\,\dot\varphi = p_\varphi/m_0 \qquad (2,\ 10)$$

En resumen, en mecánica clásica se emplean habitualmente las siguientes velocidades:

<u>velocidad angular</u>

$$\omega^\vartheta = \dot\theta \ \text{(latitudinal)}, \quad \omega^\varphi = \dot\varphi \ \text{(azimutal)} \qquad (2,11)$$

<u>velocidad lineal</u>

$$V_r = \dot r \ \text{(radial)}, \quad V_\vartheta = r\,\dot\vartheta \ \text{(latitudinal)}, \quad V_\varphi = r\,\mathrm{sen}\,\vartheta \cdot \dot\varphi \ \text{(azimutal)} \qquad (2,12)$$

<u>velocidad areolar</u>

$$A_\vartheta = r^2\,\dot\vartheta \ \text{(latitudinal)}, \quad A = r^2\,\mathrm{sen}^2\vartheta \cdot \dot\varphi \ \text{(azimutal)} \qquad (2,13)$$

De las 7 componentes polares de la velocidad, tan sólo las 3 primeras — ω^ϑ, ω^φ y $\dot r$ — se definen sin ambigüedad, es decir, sin necesidad de convenciones <u>ad hoc</u>. Esta ambigüedad que afecta a las demás componentes se trasladará, por supuesto, a la mecánica cuántica.

2.- Los operadores de la velocidad en la teoría de Schrödinger

Los operadores representativos de $\dot{r}$, $\dot{\vartheta}$ y $\dot{\varphi}$ se obtienen empleando la fórmula de derivación

$$\frac{d}{dt} F(p, q, t) = \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{2\pi i}{h} (HF - FH) \tag{2,14}$$

donde

$$H = \frac{h^2}{4\pi^2 m_0} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \operatorname{sen}^2\vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\operatorname{sen}\vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \operatorname{sen}^2\vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] + V \tag{2,15}$$

Es fácil comprobar que

$$\dot{r} = \frac{1}{m_0} \frac{h}{2\pi i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) = v^r \tag{2,16}$$

$$\dot{\vartheta} = \frac{1}{m_0} \frac{h}{2\pi i} \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{2} \cot g\vartheta \right) = \omega^\vartheta = v^\vartheta \tag{2,17}$$

$$\dot{\varphi} = \frac{1}{m_0} \frac{h}{2\pi i} \frac{1}{r^2 \operatorname{sen}^2\vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} = \omega^\varphi = v^\varphi \tag{2,18}$$

Por medio de estos operadores, que son hermíticos, definimos las componentes polares del impulso; las contravariantes son

$$p^r = m_0 v^r, \quad p^\vartheta = m_0 v^\vartheta, \quad p^\varphi = m_0 v^\varphi \tag{2,19}$$

y las covariantes

$$p_r = \frac{h}{2\pi i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right), \quad p_\vartheta = \frac{h}{2\pi i} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{2} \cot g\vartheta \right), \quad p_\varphi = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \tag{2,20}$$

Se verifica que estos operadores hermíticos cumplen las reglas de conmutación

$$p_i q_j - q_j p_i = \delta_{ij} \cdot \frac{h}{2\pi i} \tag{2,21}$$

Además, son los que permiten conservar la forma clásica del hamiltoniano en términos de los impulsos canónicos:

$$H = \frac{1}{2m_0}\left(p_r^2 + \frac{1}{r^2}p_\vartheta^2 + \frac{1}{r^2 \operatorname{sen}^2\vartheta}p_\varphi^2\right) \tag{2,22}$$

Al adoptar las representaciones (2,20) de los impulsos generalizados hemos abandonado la definición

$$\vec{p} = \frac{h}{2\pi i}\,\overrightarrow{\text{grad}}$$

que vale en coordenadas cartesianas. Las componentes polares del vector <u>gradiente</u> son

$$\frac{\partial}{\partial r}, \quad \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\vartheta}, \quad \frac{1}{r\operatorname{sen}\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{2,23}$$

No podemos fundarnos en esto para definir las componentes polares del impulso, aun cuando ello se hace a menudo; el motivo es que los operadores

$$\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial r}, \quad \frac{h}{2\pi i}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\vartheta}, \quad \frac{h}{2\pi i}\frac{1}{r\operatorname{sen}\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{2,24}$$

no son hermíticos. Y, además, no cumplen la definición lagrangiana

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}, \tag{2,25}$$

motivo éste por el cual no permiten escribir el hamiltoniano en la forma (2,22).

Las velocidades $\dot{r}$, $\dot{\vartheta}$ y $\dot{\varphi}$ son las únicas que pueden definirse directamente en mecánica cuántica, análogamente a lo que ocurría en la cinemática clásica (cf. el parágrafo anterior). Unicamente por analogía con las relaciones clásicas (2,12) y (2,13) podemos introducir las componentes de la velocidad lineal y de la velocidad areolar en la mecánica ondulatoria.

Se obtienen así las siguientes expresiones de la velocidad en la cinemática cuántica no relativista:

Velocidad angular

$$\omega^{\vartheta} = \dot{\vartheta} = \frac{h}{2\pi i m_0} \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{2} \cot g\, \vartheta \right) \tag{2,26,a}$$

$$\omega^{\varphi} = \dot{\varphi} = \frac{h}{2\pi i m_0} \frac{1}{r^2 \operatorname{sen}^2 \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \tag{2,26,b}$$

Velocidad lineal

$$V_r = \dot{r} = \frac{h}{2\pi i m_0} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \tag{2,27,a}$$

$$V_{\vartheta} = r\dot{\vartheta} = \frac{h}{2\pi i m_0} \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{2} \cot g\, \vartheta \right) \tag{2,27,b}$$

$$V_{\varphi} = r \operatorname{sen} \vartheta\, \dot{\varphi} = \frac{h}{2\pi i m_0} \cdot \frac{1}{r \operatorname{sen} \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \tag{2,27,c}$$

Velocidad areolar

$$A_{\vartheta} = r^2 \dot{\vartheta} = \frac{h}{2\pi i m_0} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{2} \cot g\, \vartheta \right) = \frac{1}{m_0} p_{\vartheta} \tag{2,28,a}$$

$$A_{\varphi} = r^2 \operatorname{sen}^2 \vartheta\, \dot{\varphi} = \frac{h}{2\pi i m_0} \frac{\partial}{\partial \varphi} = \frac{1}{m_0} p_{\varphi} = \frac{1}{m_0} L_z \tag{2,28,b}$$

3.- Los operadores de la velocidad en la teoría de Dirac

En coordenadas polares, los únicos operadores que pueden definirse directamente son, nuevamente, los de $\dot{r}$, $\dot{\vartheta}$ y $\dot{\varphi}$. Los demás deberán construirse por analogía con las magnitudes clásicas corrrespondientes.

Como ahora

$$H = -c\left[-\frac{e}{c}A_0(r) + \beta m_0 c + \alpha^r p_r + \alpha^\theta p_\theta + \alpha_\varphi p_\varphi\right. \qquad (2{,}29)$$

la (2,14) nos da

$$\dot{r} = -c\alpha^r, \quad \dot{\vartheta} = -c\alpha^\theta, \quad \dot{\varphi} = -c\alpha^\varphi \qquad (2{,}30)$$

Sacrificando nuevamente el carácter tensorial al dimensional, definimos

$$V_r = \dot{r}, \quad V_\vartheta = r\dot{\theta} = -cr\alpha^\theta, \quad V_\varphi = r\,\mathrm{sen}\,\theta\,\dot{\varphi} = -cr\,\mathrm{sen}\,\vartheta\,\alpha^\varphi \qquad (2{,}31)$$

En cuanto a la velocidad areolar, si quisiéramos fundarnos sobre la ley de las áreas tendríamos que definirla en la forma

$$\vec{A} = \frac{1}{m_0}\vec{J} = \frac{1}{m_0}\left[\vec{r}\wedge\vec{p} + \frac{1}{2}\frac{h}{2\pi}\vec{\sigma}\right], \qquad (2{,}32)$$

pues entonces sus componentes cartesianas serían constantes del movimiento. Pero, dado que en esta teoría el concepto de velocidad se introduce independientemente del de impulso, es aconsejable convenir en llamar velocidad areolar a las magnitudes

$$A_\theta = r^2\dot{\theta} = -cr^2\alpha^\theta = -c\alpha_\vartheta, \quad A_\varphi = r^2\mathrm{sen}^2\vartheta\,\dot{\varphi} = -cr^2\mathrm{sen}^2\alpha^\varphi = -c\,\alpha_\varphi \qquad (2{,}33)$$

Estas cantidades ya no serán constantes del movimiento.

En resumen, he aquí las velocidades cuyos elementos de matriz habremos de calcular:

Velocidad angular

$$\omega^{\vartheta} = \dot{\vartheta} = -c\,\alpha^{\theta} = -\frac{c}{r^2}\,\alpha_{\vartheta} \qquad (2,34,a)$$

$$\omega^{\varphi} = \dot{\varphi} = -c\,\alpha^{\varphi} = -\frac{c}{r^2 \operatorname{sen}^2\vartheta}\,\alpha_{\varphi} \qquad (2,34,b)$$

Velocidad lineal

$$V_r = \dot{r} = -c\,\alpha^{r} = -c\,\alpha_r \qquad (2,35,a)$$

$$V_{\vartheta} = r\dot{\vartheta} = -c\,r\,\alpha^{\theta} = -\frac{c}{r}\,\alpha_{\theta} \qquad (2,35,b)$$

$$V_{\varphi} = r \operatorname{sen}\vartheta\,\dot{\varphi} = -c\,r \operatorname{sen}\vartheta\,\alpha^{\varphi} = -\frac{c}{r \operatorname{sen}\vartheta}\,\alpha_{\varphi} \qquad (2,35,c)$$

Velocidad areolar

$$A_{\vartheta} = r^2\dot{\vartheta} = -c\,r^2\alpha^{\vartheta} = -c\,\alpha_{\vartheta} \qquad (2,36,a)$$

$$A_{\varphi} = r^2 \operatorname{sen}^2\vartheta\,\dot{\varphi} = -c^2 r^2 \operatorname{sen}^2\vartheta\,\alpha^{\varphi} = -c\,\alpha_{\varphi} \qquad (2,36,b)$$

4.- Significado físico de los elementos de matriz de un operador en la representación hipercompleja

Ya hemos visto, en el Capítulo I, que la representación hipercompleja pone de manifiesto la diferencia existente entre los elementos de matriz de la teoría no relativista y de la teoría de Dirac. En la primera, la transición $k \rightarrow k'$ no tiene otro significado que el de una variación del impulso de la partícula (variación virtual si se trata del problema kepleriano). Pero en la teoría de Dirac, a cada valor de k le corresponden ahora 2 valores del spin y 2 de la energía(o de la carga). Es decir, cada valor 4 está asociado a 4 valores del "carácter" del electrón. Por consiguiente, una transición $k \rightarrow k'$ implica, en esta teoría, 16 transiciones entre estados de diferente"carácter" (4 de ellas, las diagonales,son transiciones idénticas y,como se sabe, representan valores medios).

Estas 16 transiciones asociadas a la transición $k \rightarrow k'$ pueden esquematizarse en la forma

$$
(k|M|k') = \begin{array}{|c|c|c|c|}
\hline
M_{11} & M_{12} & M_{13} & M_{14} \\
\ominus\uparrow \rightarrow \ominus\uparrow & \ominus\uparrow \rightarrow \ominus\downarrow & \ominus\uparrow \rightarrow \oplus\downarrow & \ominus\uparrow \rightarrow \oplus\uparrow \\
\hline
M_{21} & M_{22} & M_{23} & M_{24} \\
\ominus\downarrow \rightarrow \ominus\uparrow & \ominus\downarrow \rightarrow \ominus\downarrow & \ominus\downarrow \rightarrow \oplus\downarrow & \ominus\downarrow \rightarrow \oplus\uparrow \\
\hline
M_{31} & M_{32} & M_{33} & M_{34} \\
\oplus\downarrow \rightarrow \ominus\uparrow & \oplus\downarrow \rightarrow \ominus\downarrow & \oplus\downarrow \rightarrow \oplus\downarrow & \oplus\downarrow \rightarrow \oplus\uparrow \\
\hline
M_{41} & M_{42} & M_{43} & M_{44} \\
\oplus\uparrow \rightarrow \ominus\uparrow & \oplus\uparrow \rightarrow \ominus\downarrow & \oplus\uparrow \rightarrow \oplus\downarrow & \oplus\uparrow \rightarrow \oplus\uparrow \\
\hline
\end{array}
\qquad
\begin{array}{lll}
\ominus & \oplus & \text{carga} \\
\uparrow & \downarrow & \text{spin}
\end{array}
\qquad (2,37)
$$

$\ominus$ y $\oplus$ simbolizan respectivamente un estado electrónico y un estado positrónico; las flechas verticales indican que el spin está sobre sus ejes principales en el sistema de referencia ligado al electrón.

El esquema anterior sólo es completo tratándose de las autofunciones del espectro continuo, las que pueden separarse en la forma (1,18):

$$\psi = {}^{-}\psi + {}^{+}\psi = \psi \tfrac{1}{2}(1-\beta) + \psi \tfrac{1}{2}(1+\beta) \tag{2,38}$$

En cuanto al espectro discreto, como el positrón carece de estados discretos en el campo de un núcleo de carga positiva, la segunda parte de esta descomposición es nula, quedando solamente las dos primeras columnas de la solución:

$${}^{-}\psi = \psi \tfrac{1}{2}(1-\beta) \tag{2,39}$$

Las formas bilineales (densidades) correspondientes al espectro discreto,

$$\overset{+}{\psi} M \psi = {}^{-}\overset{+}{\psi} M \, {}^{-}\psi = \tfrac{1}{2}(1-\beta)\, \overset{+}{\psi} M \psi \, \tfrac{1}{2}(1-\beta) \tag{2,40}$$

resultan así del tipo

$$ {}^{+}_{1}\{M\} = \begin{Vmatrix} x & x & 0 & 0 \\ x & x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{Vmatrix} \qquad \ominus \rightarrow \ominus \tag{2,41}$$

Vale decir, las transiciones discreto-discreto solamente están asociadas a procesos de inversión del spin.

En el caso de las transiciones continuo-discreto y discreto-continuo, quedan solamente 8 elementos de matriz. En el caso discreto-continuo(que comprende los procesos de ionización), las formas bilineales son del tipo

$$ {}_1^{+}\{M\} + {}_2^{-}\{M\} = \begin{Vmatrix} x & x & x & x \\ x & x & x & x \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{Vmatrix} \qquad \ominus \begin{matrix} \nearrow \ominus \\ \searrow \oplus \end{matrix} \tag{2,42} $$

En el caso de las transiciones continuo-discreto(que comprenden los procesos de captura), se tiene

$$ {}_1^{+}\{M\} + {}_2^{+}\{M\} \quad \begin{Vmatrix} x & x & 0 & 0 \\ x & x & 0 & 0 \\ x & x & 0 & 0 \\ x & x & 0 & 0 \end{Vmatrix} \tag{2,43} $$

En uno y otro caso, una transición $k \to k'$ engloba cambios de spin y cambios(virtuales) de carga; pero en la ionización estos últimos se verifican únicamente en el sentido $\ominus \to \oplus$, mientras que en el de la captura se produce el cambio opuesto.

Vemos así que los elementos de la matriz de "primera clase"

$$ {}_1\{M\} = \begin{Vmatrix} x & x & 0 & 0 \\ x & x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & x & x \\ 0 & 0 & x & x \end{Vmatrix} \tag{2,44} $$

corresponden, físicamente, a transiciones idénticas (respecto del "carácter") y a transiciones entre estados de diferente orientación del spin. Las matrices de primera clase van acompañadas del factor $\exp\ i\beta(k_0' - k_0)\ ct$, que significa una simple transición $P_0 \rightarrow P_0'$ de la energía.

En cambio, los elementos de la matriz complementaria de la anterior, o matriz de "segunda clase",

$$
{}_2\{M\} = \left\|\begin{matrix} 0 & 0 & x & x \\ 0 & 0 & x & x \\ x & x & 0 & 0 \\ x & x & 0 & 0 \end{matrix}\right\| \qquad (2,45)
$$

corresponden a transiciones entre estados de diferente signo de la carga; o sea, a procesos de producción y aniquilamiento (reales o virtuales) de pares. Las matrices de segunda clase van acompañadas del factor $\exp\ i\beta(k_0' + k_0)$, que no representa ya una simple transición de la energía sino la creación o desaparición de un par: $P_0 \rightarrow (-P_0')$.

5.- Estados estacionarios y ondas progresivas

Se ha visto en el Capítulo I, 1.4, que el empleo de ondas planas estacionarias conduce en ciertos casos a valores medios nulos, en particular cuando se trata de la velocidad lineal: tal ocurría, en coordenadas cartesianas, con $\vec{p}$ y con $\vec{\alpha}$. Lo mismo ocurrirá, según veremos en el Capítulo IV, con el operador α_r de la velocidad radial. No ocurría igual en coordenadas cartesianas cuando el estado de la partícula era descripto mediante ondas planas progresivas. Veamos qué ocurre con las ondas esféricas.

5.1.- Impulso radial de una onda esférica estacionaria

Consideremos la matriz del operador del impulso radial

$$p_r = \frac{h}{2\pi i}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) \tag{2,46}$$

en la aproximación no relativista. Si tomamos el estado estacionario libre S, de componente radial (normalizada)

$$\chi_0(kr) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} k.\ \frac{\text{sen}\ kr}{kr} \tag{2,47}$$

obtenemos

$$(\,k\,|\,p_r\,|\,k'\,) = \frac{h}{2\pi i}\cdot\frac{2}{\pi}\,k' \int_0^\infty \text{sen}\ kr.\ \cos k'r\ .dr$$

Esta integral divergente se calcula en seguida por cualquiera de los métodos conocidos:

$$(k|p_r|k') = \frac{h}{2\pi i}\ \frac{2}{\pi}\ k'\ \frac{1}{2}\left\{\int_0^\infty \text{sen}\,(k+k')r\ dr + \int_0^\infty \text{sen}\,(k-k')r\ dr\right\} = \frac{h}{2\pi i}\ \frac{2}{\pi}\ \frac{kk'}{k^2-k'^2} \tag{2,48}$$

Esta es una matriz de índices k,k' continuos; es imaginaria pero hermítica:

$$(k'|\,p_r|\,k)^* = (k\,|\,p_r|\,k')$$

Para hallar su valor medio debemos integrar sobre un paquete de ondas de ancho espectral Δk centrado en k, pasando finalmente a una onda monocromática ($\Delta k \to 0$). Teniendo la precaución de tomar el valor principal en la discontinuidad k'=k resulta

$$\overline{p_r} = \lim_{\Delta k \to 0} \int_{k-\Delta k/2}^{k+\Delta k/2} (k|\,p_r|\,k')\, dk' = 0 \qquad (2,49)$$

Es decir, el mismo resultado que en coordenadas cartesianas.

En rigor, esto sólo demuestra que el procedimiento elegido para definir valores medios da resultados con sentido físico.

§.2.- Impulso radial de una onda esférica progresiva

Tomemos ahora la onda progresiva emergente S, también libre y en la aproximación no relativista (cf.(1,74)):

$$R_0^+(kr) = \frac{k}{\pi^{1/2}} \frac{e^{ikr}}{ikr} \qquad (2,50)$$

La "matriz" de p_r (las comillas se deben a que R_0^+ no es una función propia) es ahora

$$(k\,|\,p_r\,|\,k') = \frac{\hbar k'}{2\pi} \frac{1}{\pi} \int_0^\infty e^{i(k'-k)r}\, dr = \frac{\hbar k'}{2\pi}\left[\delta(k'-k) + \right. \qquad (2,51)$$
$$\left. + \, v.p.\, \frac{i}{\pi(k'-k)}\right]$$

El valor medio, definido como en el caso anterior, es ahora

$$\overline{p_r} = \lim_{\Delta k \to 0} \frac{\hbar}{2\pi}\left\{ \int_{k-\frac{\Delta k}{2}}^{k+\frac{\Delta k}{2}} k'\,\delta(k'-k)\, dk' + \frac{i}{\pi}\, v.p. \int_{k-\Delta k/2}^{k+\Delta k/2} \frac{dk'}{k'-k} \right\} = \frac{\hbar}{2\pi} k = p, \qquad (2,52)$$

resultado concordante con el obtenido en coordenadas cartesianas.

6.3.- Velocidad radial de una onda esférica progresiva

Exactamente el mismo resultado se obtiene, por supuesto, en la teoría de Dirac, no solamente con p_r sino también con la corriente radial $\{\alpha_r\}$. Aunque la matriz de este último operador se estudiará en otros capítulos, conviene anticipar algunos resultados para mostrar desde ya cómo se calcula y para justificar físicamente el empleo de la delta, del operador v.p. y de la parte finita (de una integral divergente).

La componente radial que determina la parte de primera clase de la densidad de la corriente radial es

$$\left\{(\chi_\chi^* + \varphi_\chi^* \alpha_r)\alpha_r(\chi_\chi + \alpha_r \varphi_\chi)\right\}_1 = \chi_\chi^*(k,r)\varphi_\chi(k',r) + \varphi_\chi^*(k,r)\chi_\chi(k',r)$$

Tomando la onda progresiva S ($\chi = -1$) dada en (1,75) se tiene

$$\chi_\chi^* \varphi_\chi + \varphi_\chi^* \chi_\chi = \beta \; \frac{1}{\pi} \left\{ AB'\left(\frac{i}{k'r} + 1\right) + A'B\left(-\frac{i}{kr} + 1\right)\right\} \frac{e^{i(k'-k)r}}{r^2}$$

En el Apéndice B, Capítulo I, se ve que

$$Pf \int_0^\infty \frac{e^{itx}}{x}\, dx = \frac{i\pi}{2}\,\varepsilon(t) - \ln|t| - C,$$

de manera que

$$\int_0^\infty (\chi^*\varphi + \varphi^*\chi) r^2\, dr = \beta \left\{ \left(\frac{A'B}{k} - \frac{AB'}{k'}\right)\left[\frac{1}{2}\,\varepsilon(k'-k) + \frac{i}{\pi}\ln|k'-k| + \frac{i}{\pi}\,C\right]\right.$$

$$\left. + (AB' + A'B)\left[\delta(k'-k) + \text{v.p.}\, \frac{i}{\pi(k'-k)}\right]\right\},$$

donde C es la constante de Euler, $\varepsilon(t)$ indica el escalón unitario simétrico, y Pf la parte finita en el sentido de Hadamard. Por consiguiente, al valor medio contribuyen las integrales

$$\int_{\Delta k}\left(\frac{A'B}{k}-\frac{AB'}{k'}\right)\varepsilon(k'-k)\,dk'\to 0\,,\quad v.p.\int_{\Delta k}\left(\frac{A'B}{k}-\frac{AB'}{k'}\right)\ln|k'-k|\,dk'\to 0$$

$$\int_{\Delta k}(AB'+A'B)\,\delta(k'-k)\,dk'=2AB\,,\quad v.p.\int_{\Delta k}(AB'+A'B)\,\frac{dk'}{k'-k}\to 0$$

Recordando la (1,65,c), $2AB = v/c$, queda finalmente

$$\overline{\alpha_r}=\beta\frac{v}{c}\qquad \text{y por lo tanto}\qquad \overline{V_r}=-c\,\overline{\alpha_r}=-\beta v, \tag{2,53}$$

que en la aproximación no relativista ($\beta = -1$) coincide con el resultado (2,52).

6.- Las fluctuaciones

6.1.- Definición

La fluctuación, o dispersión cuadrática media, o desviación standard, o incertidumbre de la distribución de los valores de una magnitud física M en torno a sus valores medios $\overline{M}$ es

$$\overline{(\Delta M)^2} = \overline{M^2} - \overline{M}^2 \tag{2,54}$$

Si M es una matriz de índices discretos (i.j) , su fluctuación está dada por sus elementos no diagonales, los que según la teoría corriente no son observables:

$$\Delta^2_{ii} \| M_{ij} \| = (|M|^2)_{ii} - (M_{ii})^2 = \sum_{j \neq i} |M_{ij}|^2 \tag{2,55}$$

En general, los índices (i,j) de nuestras matrices comprenden: índices (discretos) del llamado "carácter" y de los números cuánticos, e índices (discretos o continuos) del número de ondas (k,k'). De manera que tendremos fluctuaciones en el "carácter", en el momento angular (χ y m) y en la energía. Las que más nos interesan son las incertidumbres en el "carácter", pues no parecen haber sido estudiadas anteriormente. Conviene dar un ejemplo sencillo antes de entrar en detalles.

6.2.- Ejemplo

Calculemos la fluctuación en el "carácter" de la velocidad de un electrón libre que se mueve en la dirección Ox. Por (1,20),

$$(K| - c\alpha_x | K) = - \beta v - \left[1 - \frac{v^2/c^2}{1+\sqrt{1-v^2/c^2}} \right] c\alpha_x \, e^{i\beta 2 K_0 X_0} \tag{2,56}$$

Llamando (i,j) a los índices del "carácter", se tiene

$$\left|(K| - c\alpha_x | K)_{ii}\right|^2 = v^2$$

$$\left|(K| - c\alpha_x | K)\right|^2 = v^2 + c^2 \left[1 - \frac{v^2/c^2}{1+\sqrt{1-v^2/c^2}}\right]^2,$$

de modo que

$$\overline{(\Delta v)^2} = c^2 \left[1 - \frac{v^2/c^2}{1+\sqrt{1-v^2/c^2}}\right]^2 \qquad (2,57)$$

La fluctuación misma, que es la raíz de esta expresión, es

$$\Delta v = \sqrt{\overline{(\Delta v)^2}} = c\left[1 - \frac{v^2/c^2}{1+\sqrt{1-v^2/c^2}}\right] = \begin{cases} c \text{ para } v = 0 \\ 0 \text{ para } v = c \end{cases} \qquad (2,58)$$

6.3.- Fluctuaciones en el carácter

Las magnitudes físicas (elementos de matriz) que se estudian en el presente trabajo son algo más complicadas que (2,56). En general son de la forma

$$M_{ij;\chi,\chi';m,m';k,k'} = \|D_{ij}\| F(\chi,\chi';m,m';k,k').\ e^{i\beta(k_0' \pm k_0)ct} \qquad (2,59)$$

donde D es una de las matrices del grupo de Dirac (de manera que los índices del "carácter son i,j); y F es una función, o matriz, de 6 índices, que consiste en el producto de una integral radial por una integral angular. Como se dijo, es preciso distinguir tres clases de fluctuaciones.

Por (2,55), las fluctuaciones en el "carácter" (que indicamos con el subíndice c) son

$$\Delta_c M = |F| \left[\overline{|D|^2} - |\bar{D}|^2\right]^{1/2} \qquad (2,60)$$

Como D es hermítica,

$$|D|^2 \equiv D^{+} D = 1, \qquad \overline{D} = \begin{cases} 0 \\ \pm 1 \end{cases} , \tag{2,61}$$

de manera que

$$\begin{aligned} \Delta_c M &= 0 \quad \text{si D es diagonal} \\ \Delta_c M &= F \quad \text{si D no es diagonal} \end{aligned} \tag{2,62}$$

6.4.- Fluctuaciones en el impulso angular

Por (2,55),

$$\Delta^2_{x',m'} M = D . e^{i\beta(\kappa_0' \pm \kappa_0'')X_0} \sum_{-\infty}^{\infty}{}_{x' \neq x} \sum_{0}^{|x'|-1}{}_{m' \neq m} |F(x,x';m,m';\kappa,\kappa')|^2 \tag{2,63}$$

Comúnmente tendremos

$$F(x,x';m,m';\kappa,\kappa') \propto \delta_{x',x\pm p} \cdot \delta_{m',m} , \tag{2,64}$$

en cuyo caso

$$\Delta^2_{x'm'} M = D \; e^{i\beta(\kappa_0' \pm \kappa_0)X_0} \sum_{p \neq 0} |F(x, x \pm p)|^2 \tag{2,65}$$

6.5.- Fluctuaciones en la energía

En el caso del espectro discreto, la suma sobre k' equivale a la suma sobre x' y n_r' , de manera que

$$\Delta_{\kappa'} M = D \sum_{-\infty}^{\infty}{}_{x' \neq x} \sum_{0}{}_{n_r'} |F(x,x';n_r,n_r')|^2 \tag{2,66}$$

Para el espectro contimuo,

$$F(x, x' ; m, m' ; k, k') = J(\ell, \ell' ; m, m') . C(k, k') \qquad (2,67)$$

donde C(k,k') es una función propia o impropia, continua o con singularidades(generalmente en el punto k'=k) ; vale decir, es una matriz continua (aun cuando tenga singularidades, a menudo sobre la diagonal principal) de índices k y k'. Tenemos que definir el valor medio y el cuadrado de esta matriz.

Ya hemos visto en el parágrafo 5 que el valor medio de C(k,k') debe definirse como un promedio por unidad de intervalo espectral:

$$\overline{C(k,k')} = \int_{k-\Delta k/2}^{k+\Delta k/2} C(k,k')\, dk' \qquad (2,68)$$

En cuanto al cuadrado de esta matriz continua C, como es sabido se lo define por generalización del producto de matrices de índices discretos: en la expresión

$$(C^2)_{mn} = \sum_i C_{mi} C_{in}$$

se sustituye la sumación por una integración; como nos interesan números reales, definimos el módulo elevado al cuadrado:

$$|C(k,k')|^2 = \int C^*(k,k'') . C(k'',k') . dk'' \qquad (2,69)$$

La integración debe hacerse sobre todos los valores admisibles de k", tomando eventualmente valores principales en los puntos de discontiniudad. Aplicando a esta expresión la definición (2,68) de valor medio, obtenemos el valor medio del cuadrado del módulo:

$$\overline{|C(k,k')|^2} = \int_{k-\Delta k/2}^{k+\Delta k/2} |C(k,k')|^2\, dk' = \int_{\Delta k} dk' \int C^*(k,k'')\, C(k'',k')\, dk'' \qquad (2,70)$$

De manera que, finalmente, la fluctuación cuadrática de la función C(k,k') es

$$\overline{(\Delta C)^2} = \int_{\Delta K} dk' \int C^*(k,k'')\, C(k'',k')\, dk'' - \left| \int_{\Delta K} C(k,k')\, dk' \right|^2 \tag{2,71}$$

y por lo tanto la fluctuación, respecto de la energía, de M, es

$$\Delta^2_{K'} M = D.J. \left\{ \int_{\Delta K'} dk' \int C^*(k,k'')\, C(k'',k')\, dk'' - \left| \int_{\Delta K} C(k,k')\, dk' \right|^2 \right\} \tag{2,72}$$

En particular, si $C(k,k') = f(k,k')\,\delta(k-k')$, se tratará de una matriz diagonal, esto es, de fluctuación nula. El cálculo de su fluctuación nos servirá para verificar las fórmulas anteriores:

$$\overline{(\Delta c)^2} = \int_{\Delta K} dk' \int_{-\infty}^{\infty} f^*(k,k'')\, f(k'',k')\, \delta(k''-k)\, \delta(k''-k')\, dk''$$

$$- \left| \int_{K-\Delta K/2}^{K+\Delta K/2} f(k,k')\, \delta(k'-k)\, dk' \right|^2$$

$$= \int_{\Delta K} f^*(k,k)\, f(k,k')\, \delta(k'-k)\, dk' - |f(k,k)|^2 = 0 .$$

C A P I T U L O III

LA VELOCIDAD DEL ELECTRON NO RELATIVISTA

1. Elementos de matriz. Expresiones generales

1.1.- Introducción

El comportamiento de la velocidad del electrón no relativista no parece haber sido estudiado sistemáticamente en coordenadas polares. Convendrá hacerlo aquí a fin de comparar los resultados obtenidos en la teoría de Dirac con los que da la teoría de Schrödinger tratando de identificar, en lo posible, los efectos relativistas y del spin. Además, en el caso particular del espectro discreto del átomo de hidrógeno, será instructivo comparar los elementos diagonales que dan una y otra teoría con los valores que se deducen en la teoría semiclásica de Bohr. Estos últimos son, para órbitas circulares ($l=0$) y despreciando la corrección relativista,

$$\omega^{\varphi} = \dot{\varphi} = \frac{1}{n}\,\frac{c\alpha Z}{r_n} = \frac{1}{n^3}\,\frac{m_0 Z^2 e^4 (2\pi)^3}{h^3} \cong \frac{Z^2}{n^3}\cdot 4\cdot 10^{16}\,\mathrm{seg}^{-1} \qquad (3,1)$$

$$V_{\varphi} = r_n \dot{\varphi} = \frac{1}{n}\, c\alpha Z = \frac{Z}{n}\,\frac{2\pi}{h}\,e^2 \cong \frac{Z}{n}\cdot 2\cdot 10^{8}\,\mathrm{cm}\cdot\mathrm{seg}^{-1} \qquad (3,2)$$

$$A_{\varphi} = r_n^2 \dot{\varphi} = n\, a_0\, c\alpha = n\cdot\frac{h}{2\pi m_0} \cong n\cdot 1{,}16\,\mathrm{cm}^2\cdot\mathrm{seg}^{-1} \qquad (3,3)$$

donde

$$r_n = n^2 . a_o/Z = n^2 \frac{h^2}{4\pi^2 me^2 Z} \qquad (3,4)$$

es el radio de la enésima órbita de Bohr.

En este parágrafo daremos las expresiones generales de los elementos de matriz de los operadores (2,26 a 28) respecto de las autofunciones en coordenadas esféricas. Las funciones de onda no relativistas correspondientes a un problema de simetría esférica son

$$\psi_{\ell,m}(k; r,\vartheta,\varphi) = N_\ell(k)\,\chi_\ell(k,r)\, N_\ell^m\, P_\ell^m(\cos\vartheta)\, e^{im\varphi}\, e^{-\frac{i2\pi}{h}Et}, \qquad (3,5)$$

donde

$$k = \frac{2\pi}{h} p = \frac{2\pi}{h}\sqrt{2mE}, \quad N_\ell^m = \left[\frac{2\ell+1}{4\pi}\,\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}\right]^{1/2} \qquad (3,6)$$

y donde $N_\ell(k)$ es el factor de normalización de la componente radial. Como de costumbre, los elementos de matriz de un operador M correspondientes a la transición $(k, \ell, m) \rightarrow (k', \ell', m')$ son

$$\begin{aligned}(k,\ell,m\,|\,M\,|\,k',\ell',m') &= \int \psi_{\ell,m}^*(k) . \left[M\,\psi_{\ell',m'}(k')\right] d\tau \\ &= \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \operatorname{sen}\vartheta\, d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi\; \psi_{\ell,m}^*\,(M\,\psi_{\ell',m'})\end{aligned} \qquad (3,7)$$

Los elementos no diagonales de la velocidad tienen poco interés físico, por lo cual hemos concentrado la atención sobre los valores medios; en cuanto a los primeros, nos hemos circunscripto a establecer las reglas de selección de los números cuánticos, las que determinan el comportamiento cualitativo.

Las expresiones generales se dan en el apartado siguiente.

1.2.- <u>Velocidad angular</u>

$$(k,l,m|\omega^{\vartheta}=\dot{\vartheta}|k',l',m') = \frac{h}{2\pi i m_0}\cdot e^{\frac{2\pi i}{h}(E-E')t}\cdot N_l^{*}(k)N_{l'}(k')\int_0^{\infty}\chi_l^{*}(k,r)\chi_{l'}(k',r)\,dr\,\cdot$$

$$\cdot N_l^m N_{l'}^{m'}\int_0^{\pi} P_l^m(\cos\vartheta)\left[\frac{\partial P_{l'}^{m'}}{\partial\vartheta}+\frac{1}{2}\cot g\vartheta\, P_{l'}^{m'}\right]\operatorname{sen}\vartheta\, d\vartheta\int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)\varphi}\,d\varphi \tag{3,8}$$

$$(k,l,m|\omega^{\varphi}=\dot{\varphi}|k',l',m') = \frac{h\,i\,m'}{2\pi i m_0}\, e^{\frac{2\pi i}{h}(E-E')t}\cdot N_l^{*}(k)N_{l'}(k')\int_0^{\infty}\chi_l^{*}(k,r)\chi_{l'}(k',r)\,dr$$

$$\cdot N_l^m N_{l'}^{m'}\int_0^{\pi}\frac{P_l^m(\cos\vartheta)\,P_{l'}^{m'}(\cos\vartheta)}{\operatorname{sen}^2\vartheta}\operatorname{sen}\vartheta\, d\vartheta\int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)\varphi}\,d\varphi \tag{3,9}$$

Las integrales angulares nos dan, como de costumbre, las reglas de selección, por lo cual es preciso calcularlas primero. La integración sobre el azimut da, en este caso y en todos los demás tratados en este capítulo,

$$\int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)\varphi}\,d\varphi = 2\pi\,\delta_{m'm} \tag{3,10}$$

Las integrales sobre la colatitud se reducen entonces a

$$2\pi N_l^m N_{l'}^m\int_0^{\pi} P_l^m\left[\frac{\partial P_{l'}^m}{\partial\vartheta}+\frac{1}{2}\cot g\vartheta\, P_{l'}^m\right]\operatorname{sen}\vartheta\, d\vartheta = A_{ll'}^{mm'}\propto\delta_{l',l\pm(2q+1)} \tag{3,11}$$

que se trata en el Apéndice A, Capítulo I,1; y a la conocida expresión

$$2\pi\, N_\ell^m N_{\ell'}^m \int_0^\pi \frac{P_\ell^m\, P_{\ell'}^m}{\operatorname{sen}^2\vartheta}\, \operatorname{sen}\vartheta\, d\vartheta = \frac{2\ell+1}{2m}, \qquad 0<|m|\le \ell \tag{3,12}$$

Llamando

$$N_\ell^*(k)\, N_{\ell'}(k') \int_0^\infty \chi_\ell^*(k,r)\, \chi_{\ell'}(k',r)\, r^p\, dr = R^p_{\ell,\ell'}(k,k'), \tag{3,13}$$

notación que conservaremos en todo este capítulo, queda finalmente

$$(k,\ell,m|\omega^\vartheta|k',\ell',m') = \delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)}\cdot\delta_{m',m}\cdot\frac{h}{2\pi i m_0}\cdot R^0_{\ell,\ell'}(k,k')\cdot A^{mm'}_{\ell\ell'}\, e^{i\frac{2\pi}{h}(E-E')t} \tag{3,14}$$

$$(k,\ell,m|\omega^\varphi|k',\ell',m') = \delta_{\ell'\ell}\,\delta_{m'm}\,\frac{h}{2\pi m_0}\cdot R^0_{\ell,\ell}(k,k')\,(\ell+1/2)\, e^{i\frac{2\pi}{h}(E-E')t} \tag{3,15}$$

En particular, los valores medios son

$$\overline{\omega^\vartheta} = 0 \tag{3,16}$$

$$\overline{\omega^\varphi} = \frac{h}{2\pi m_0}(\ell+1/2)\, \overline{R^0_{\ell,\ell}(k,k')} \tag{3,17}$$

1.3.- <u>Velocidad lineal</u>

Teniendo en cuenta la ortogonalidad de la componente angular,

$$(k,\ell,m|V_r|k',\ell',m') = \delta_{\ell'\ell}\,\delta_{m'm}\,\frac{h}{2\pi i m_0}\, e^{i\frac{2\pi}{h}(E-E')t}\,\cdot$$
$$\cdot\, N_\ell^*(k)\, N_\ell(k') \int_0^\infty \chi_\ell^*(k,r)\left[\frac{\partial \chi_\ell(k',r)}{\partial r} + \frac{1}{r}\chi_\ell(k',r)\right] r^2\, dr \tag{3,18}$$

La velocidad lineal latitudinal es

$$(k,l,m|V_\vartheta|k',l',m') = \delta_{l',l\pm(2q+1)}\ \delta_{m',m}\ \frac{h}{2\pi i m_0}\cdot R^{1}_{l,l'(k,k')}\ A^{mm'}_{ll'}\ e^{i\frac{2\pi}{h}(E-E')t} \tag{3,19}$$

En particular,

$$\overline{V_\vartheta} = 0 \tag{3,20}$$

Por último, la velocidad lineal azimutal es, llamando

$$2\pi N_l^m N_{l'}^m \int_0^\pi \frac{P_l^m(\cos\vartheta)\ P_{l'}^m(\cos\vartheta)}{\operatorname{sen}\vartheta} \operatorname{sen}\vartheta\, d\vartheta = B^{m,m}_{l,l'} \propto \delta_{l',l\pm 2q} \tag{3,21}$$

(cf. Apéndice A, Capítulo I,1),

$$(k,l,m|V_\varphi|k',l',m') = \delta_{l',l\pm 2q}\cdot\delta_{m',m}\ \frac{hm}{2\pi m_0}\ R^{1}_{l,l'(k,k')}\ B^{m,m}_{l,l'}\ e^{\frac{2\pi i}{h}(E-E')t} \tag{3,22}$$

El valor medio es

$$\overline{V_\varphi} = \frac{hm}{2\pi m_0}\ \overline{R^{1}_{l,l}(k,k')}\ B^{m,m}_{l,l} \tag{3,23}$$

1.4.- <u>Velocidad areolar</u>

$$(k,l,m|A_\vartheta|k',l',m') = \delta_{l',l\pm(2q+1)}\ \delta_{m',m}\ \frac{h}{2\pi i m_0}\ R^{2}_{l,l'(k,k')}\ A^{mm}_{ll'}\ e^{i\frac{2\pi}{h}(E-E')t} \tag{3,24}$$

y en particular

$$\overline{A_\vartheta} = 0 \tag{3,25}$$

La componente azimutal es

$$(k,l,m|A_\varphi|k',l',m') = \delta_{l'l}\ \delta_{m'm}\ \frac{hm}{2\pi m_0}\ R^{2}_{l,l}(k,k')\ e^{i\frac{2\pi}{h}(E-E')t} \tag{3,26}$$

Si el espectro es discreto, esta integral radial converge y su valor medio es R(k,k) =1; para el espectro continuo, su valor medio se definirá según (2,68), encontrándose también $\overline{R(k,k')}$ =1. Por consiguiente, en todos los casos

$$\overline{A_\varphi} = \overline{r^2 \operatorname{sen}^2\vartheta\, \dot{\varphi}} = \frac{1}{m_0}\overline{P_\varphi} = \frac{1}{m_0}\frac{hm}{2\pi} = \frac{1}{m_0} e i t L_z \qquad (3,27)$$

1.5.- Resumen

Los resultados que acabamos de obtener son válidos para la partícula de Schrödinger en un campo central cualquiera. Todos los operadores son diagonales en (m,m'); lo que, según (3,27), no es sino una forma de decir que vale el teorema de las áreas. Los que tienen elementos no nulos para $\ell' = \ell$ son solamente la velocidad radial y las componentes azimutales; de manera que solamente estos operadores poseen valores medios diferentes de 0. Esto no es de extrañar si se tiene en cuenta que el eje polar oz es un eje de simetría privilegiado, y que el formalismo se ha hecho precisamente de manera tal que L_z-- y no L_x, o L_y-- esté sobre sus ejes principales.

Las velocidades latitudinales tienen elementos asociados a las transiciones $\ell \to \ell \pm (2q+1)$. Y el operador V_φ admite, además de elementos diagonales, los correspondientes a las transiciones $\ell \to \ell \pm 2q$.

En cuanto a los índices (k,k'), la matriz de los mismos --o sea, la integral radial en cuestión-- depende de la forma del campo; con la excepción de $R^2_{\ell,\ell}(k,k')$, que es la integral de normalización.

2.- La velocidad del electrón libre

2.1.- Introducción

Debe observarse, ante todo, que los elementos de matriz de un operador cualquiera con referencia a las autofunciones del electrón libre no tienen las mismas dimensiones del operador, debido al tipo de normalización propio del espectro continuo. Por ejemplo, los elementos de matriz de r^n tienen la dimensión L^{n+1}. Se obtienen cantidades que tienen las dimensiones correctas si, en lugar de considerar el estado k', por ejemplo, como bien definido, se toma un paquete de ondas de ancho espectral arbitrariamente pequeño; como entonces se integra sobre k', queda el resultado deseado. En el Apéndice B, Cap. I, se ve que tal es, precisamente, el significado físico de la normalización delta. Por lo tanto, las cantidades que tienen sentido físico no son

$$(k, \ell, m \mid r^n \mid k', \ell', m'), \text{ de dimensión } L^{n+1} \tag{3,28}$$

sino las mismas promediadas sobre un paquete de ondas:

$$\overline{(k, \ell, m \mid r^n \mid k', \ell', m')} = \lim_{\Delta k \to 0} \int_{\Delta k} (k, \ell, m \mid r^n \mid k', \ell', m')\, dk' \tag{3,29}$$

donde, eventualmente, se tomará el valor principal.

Las integrales radiales se calculan en el Apéndice B, Capítulo I. No las reproduciremos aquí para no abultar innecesariamente; tan sólo utilizaremos algunos resultados para mostrar un par de casos típicos.

2.2.- Algunos resultados

Por Apéndice B(76) y 123, la velocidad angular azimutal es

$$(k,\ell,m|\omega^{\varphi}|k',\ell',m') = \delta_{\ell'\ell}\,\delta_{m'm}\,\frac{h}{2\pi m_0}\begin{cases}\frac{k}{2}\left(\frac{k}{k'}\right)^{\ell}, & k'>k\\ \frac{k'}{2}\left(\frac{k'}{k}\right)^{\ell}, & k'<k\\ \frac{k}{2} & k'=k\end{cases} \qquad (3,30)$$

Teniendo en cuenta la definición (3,29) del valor medio respecto de la energía, resulta

$$\overline{\omega^{\varphi}} = 0 \qquad (3,31)$$

El significado físico de esta relación es el siguiente: la velocidad angular de un paquete de ondas de momento angular finito y distancia media al eje de rotación infinita, debe ser nula por el teorema de las áreas. Que la distancia media al eje de rotación es infinita, es inmediato por ser

$$\overline{r} = \int_{\Delta k}(k,\ell,m|r|k',\ell,m)\,dk' \quad , \quad (k,\ell,m|r|k',\ell,m) = N_\ell(k)N_\ell(k')\int_0^{\infty}\chi_\ell^{*}(k,r)\chi_\ell(k',r)\,r^3\,dr = \infty$$

La velocidad radial es, por Apéndice B(167),

$$(k,\ell,m|V_r|k',\ell',m') = \delta_{\ell'\ell}\,\delta_{m'm}\,e^{\frac{2\pi i}{h}(E-E')t}\,\frac{h}{2\pi i m_0}\left[(\ell+1)R^{1}_{\ell,\ell}(k,k') - R^{2}_{\ell,\ell+1}(k,k')\right] \qquad (3,32)$$

Ya se ha visto en el Capítulo II,5 que debe ser nula para las ondas estacionarias que estamos considerando; tal es, en efecto, el resultado que encontramos para $\ell=0$ promediando B(168) conforme a (3,29).

En cuanto a la velocidad lineal azimutal, para $\ell = 0$ es 0, como debe ser ; la razón matemática es que $m=0$ anula a la integral angular; el motivo físico es que $\ell = 0$ corresponde precisamente a un movimiento de momento angular nulo. Para $\ell = m = 1$, las fórmulas A(7) y B(160) nos dan

$$(k,1,1 \mid V_\varphi \mid k' \neq k,1,1) = \frac{h}{2\pi m_0} \frac{\pi}{4} \left[\frac{k^2+k'^2}{kk'} \ln\left|\frac{k+k'}{k-k'}\right| - 2 \right], \qquad (3,33)$$

cuyo valor medio es 0.

Por último, la velocidad areolar azimutal es, por B(18),

$$(k,\ell,m \mid A_\varphi \mid k',\ell',m') = \frac{1}{m_0} \frac{mh}{2\pi} \delta(k'-k) \, e^{\frac{2\pi i}{h}(E-E')t}, \qquad (3,34)$$

de modo que el valor medio es (3,27).

3.- La velocidad del electrón en un campo coulombiano

3.1.- Transiciones continuo-continuo

Las integrales radiales se tratan en el Apéndice B, Capítulo II, donde se las obtiene en forma de integrales más accesibles. Las hemos dejado en la forma indicada a la espera de que sean evaluadas o tabuladas. Por no haber obtenido expresiones numéricas de las mismas no damos los elementos de matriz. Con todo, hacemos notar quem, de acuerdo a la discusión que se hace en el lugar mencionado, las integrales-- y en consecuencia los elementos de matriz-- no difieren esencialmente de las del electrón libre. Difieren cuantitativamente, en factores que contienen a x Z/ka_0 y que, por supuesto, representan la influencia de las fuerzas exteriores sobre el electrón.

3.2.- Transiciones discreto-discreto

Las integrales radiales se calculan con todo detalle en el Apéndice B, Capítulo III. Nuevamente, sólo daremos algunos resultados típicos.

Por B(227), y B(213),

$$(n,\ell,m|\omega^{\varphi}|n,\ell,m) = \frac{h}{2\pi\, m_0} \cdot \frac{1}{n^3(a_0/Z)^2} = \frac{1}{n}\ \frac{cZ\alpha}{r_n} \,, \qquad (3,35)$$

que coincide exactamente con el valor (3,1) de la teoría de Bohr.

Por B(228), la velocidad radial es

$$(n,\ell,m|V_r|n',\ell',m') = \delta_{\ell'\ell}\,\delta_{m'm}\,\frac{h}{2\pi i m_0}\,\frac{1}{2}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^2\left(\frac{1}{n^2}-\frac{1}{n'^2}\right) R^3_{\ell,\ell}(\kappa,\kappa') \cdot e^{i\frac{2\pi}{h}(E-E')t} \qquad (3,36)$$

Por B(229), la velocidad radial media es 0 — a diferencia de lo que ocurría con el electrón libre — aun para las "órbitas elípticas" ($n_r \neq 0$); y así debe ser, pues de lo contrario el electrón no quedaría confinado dentro de una cierta zona.

Por A(6) y B(214), la velocidad lineal latitudinal es

$$(n,l,m|V_\varphi|n,l,m) = \frac{h}{2\pi m_0}\cdot\frac{m(l+1/2)}{n^2(a_0/Z)}\cdot\pi\left[\sum_{r=m}^{l}\frac{(-1)^{r+m}(l+r)!}{(l-r)!(r-m)!(r+m)!}\cdot\frac{1.3.5\ldots(2r-1)}{r!}\right]^2 \tag{3,37}$$

y en particular, por A(7),

$$(n,l,l|V_\varphi|n,l,l) = \frac{hm}{m_0}\,\frac{1}{2}\,(l+1/2)\left[\frac{(2l)!}{l!\,2.4\ldots 2l}\right]^2\frac{1}{n^2\,a_0/Z} \tag{3,38}$$

Comparando con el valor semiclásico (3,2), se ve que el valor cuántico es del mismo orden.

3.3.- Transiciones continuo-discreto

Las integrales radiales se calculan en el Apéndice B, Capítulo IV. Se presenta una dificultad de orden dimensional: la dimensión de la integral R^p correspondiente a esta clase de transiciones es $L^{p-3/2}$. Vale decir, los elementos de matriz de la unidad tienen la dimensión $L^{\frac{1}{2}}$. Este resultado desagradable proviene de la distinta normalización de las autofunciones de los estados ligados y libres. Cuando se trataba de elementos de transición entre estados del espectro continuo, obviábamos la dificultad dimensional integrando sobre un paquete de ondas. Pero en este caso ello no conduce al resultado deseado. En principio puede recurrirse al artificio de elevar R^p al cuadrado, integrar sobre un paquete de ondas y finalmente extraer la raíz cuadrada. Pero las funciones $R^p(k,n)$ son demasiado complicadas para prestarse a esta operación.

Es obvio que los valores medios de cualquier magnitud (incluída la unidad) deben ser nulos. Esto se ve particularmente en el caso del impulso azimutal $p_\varphi = L_z = m_o . A_\varphi$, que en los casos anteriores era la única cantidad que estaba sobre sus ejes principales. Ahora, por la ortogonalidad de las autofunciones del continuo y del discreto (cf. B(233)) se tiene

$$(n, \ell, m \mid L_z \mid k, \ell, m) = (k, \ell, m \mid L_z \mid n, \ell, m) = 0 \quad (3,39)$$

Aquella de las velocidades cuyos elementos de matriz más interesan es la velocidad radial; por B(240), es

$$(n, \ell, m \mid V_r \mid k', \ell', m') = -(k, \ell, m \mid L_z \mid n, \ell', m') \quad (3,40)$$

$$= \delta_{\ell'\ell}\, \delta_{m'm} \frac{h}{2\pi i m_0} \frac{1}{2} \left[\left(\frac{Z}{n a_0} \right)^2 + k^2 \right] . R^3_{\ell,\ell}(k,n)$$

S E G U N D A   P A R T E

C A P I T U L O   IV

LA VELOCIDAD DEL ELECTRON LIBRE DE DIRAC

1.- Las densidades de los operadores de la velocidad

Las densidades de los operadores α_i son, si se tienen en cuenta las relaciones (1,40),

$$\{\alpha_r\} = (\chi^* \varphi + \varphi^* \chi)\, Y^+ Y\, e^{i\beta(k_0' - k_0)x_0} + (\chi^*\chi - \varphi^*\varphi)\, Y^+ \alpha_r Y\, e^{i\beta(k_0'-k_0)x_0} \tag{4,1}$$

$$\{x_\vartheta\} = -ir\,(\chi^*\varphi - \varphi^*\chi)\, \frac{1}{r \operatorname{sen}\vartheta}\, Y^+ \sigma_\varphi Y\, e^{i\beta(k_0'-k_0)x_0} + r\,(\chi^*\chi + \varphi^*\varphi)\, \frac{1}{r}\, Y^+ \alpha_\vartheta Y\, e^{i\beta(k_0'+k_0)x_0} \tag{4,2}$$

$$\{x_\varphi\} = ir\,(\chi^*\varphi - \varphi^*\chi)\, \frac{\operatorname{sen}\vartheta}{r}\, Y^+ \sigma_\vartheta Y\, e^{i\beta(k_0'-k_0)x_0} + r\,(\chi^*\chi + \varphi^*\varphi)\, \frac{1}{r}\, Y^+ \alpha_\varphi Y\, e^{i\beta(k_0'+k_0)x_0} \tag{4,3}$$

Cada una de estas expresiones engloba a su vez las 4 transiciones posibles señaladas en (1,57): (- -), (+ +), (-+), (+ -). Conviene reducir las partes angulares a expresiones que contengan únicamente

$Y^m_{-\chi}$ y $(Y^m_{-\chi})^+$, por ser éstas las más sencillas. Ello se logra con ayuda de las relaciònes (1,40) y (1,52). El cálculo se hace en el Apéndice A, Capítulo II,2 (pp. A8 - A11) .

Las componentes radiales de los elementos de matriz resultantes de la integración contienen las integrales

$$N(k)\, N(k') \int_0^\infty j_\ell(kr)\, j_{\ell'}(k'r)\, r^p dr = R^p_{\ell\ell'}(k,k') \qquad (4,4)$$

que se calculan en el Apéndice B, Capítulo I, y se tratan nuevamente en el Apéndice C,1. Ellas son:

$$\int_0^\infty (\chi^*\chi \pm \varphi^*\varphi)^{--}\, r^p\, dr = A(k)A(k')\, R^p_{\ell\ell'}(k,k') \pm B(k)B(k')\, R^p_{\ell+1,\ell'+1}(k,k') \qquad (4,5,a)$$

$$\int_0^\infty (\chi^*\chi \pm \varphi^*\varphi)^{++}\, r^p\, dr = A(k)A(k')\, R^p_{\ell\ell'}(k,k') \pm B(k)B(k')\, R^p_{\ell-1,\ell'-1}(k,k') \qquad (4,5,b)$$

$$\int_0^\infty (\chi^*\chi \pm \varphi^*\varphi)^{-+}\, r^p\, dr = A(k)A(k')\, R^p_{\ell\ell'}(k,k') \mp B(k)B(k')\, R^p_{\ell+1,\ell'-1}(k,k') \qquad (4,5,c)$$

$$\int_0^\infty (\chi^*\chi \pm \varphi^*\varphi)^{+-}\, r^p\, dr = A(k)A(k')\, R^p_{\ell\ell'}(k,k') \mp B(k)B(k')\, R^p_{\ell-1,\ell'+1}(k,k') \qquad (4,5,d)$$

$$\int_0^\infty (\chi^*\varphi \pm \varphi^*\chi)^{--}\, r^p dr = i\beta\Big[A(k)B(k')\, R^p_{\ell,\ell'+1}(k,k') \mp A(k')B(k)\, R^p_{\ell+1,\ell'}(k,k')\Big] \qquad (4,6,a)$$

$$\int_0^\infty (\chi^*\varphi \pm \varphi^*\chi)^{++}\, r^p dr = -i\beta\Big[A(k)B(k')\, R^p_{\ell,\ell'-1}(k,k') \mp A(k')B(k)\, R^p_{\ell-1,\ell'}(k,k')\Big] \qquad (4,6,b)$$

$$\int_0^\infty (\chi^*\varphi \pm \varphi^*\chi)^{-+}\, r^p dr = -i\beta\Big[A(k)B(k')\, R^p_{\ell,\ell'-1}(k,k') \pm A(k')B(k)\, R^p_{\ell+1,\ell'}(k,k')\Big] \qquad (4,6,c)$$

$$\int_0^\infty (\chi^*\varphi + \varphi^*\chi)^{+-}\, r^p dr = i\beta\Big[A(k)B(k')\, R^p_{\ell,\ell'+1}(k,k') \pm A(k')B(k)\, R^p_{\ell-1,\ell'}(k,k')\Big] \qquad (4,6,d)$$

La integración de las densidades respecto del azimut es elemental; es tratada en el Apéndice A,Cap.II, 1 y 2, donde se demuestra que sólo quedan los elementos diagonales en (m,m'), lo mismo que ocurría en la teoría de Schrödinger.

Las integraciones sobre la colatitud son un tanto más complicadas; se tratan en el Apéndice A,Cap. II,pp. A 12 a A 18. Empleamos las siguientes abreviaturas:

$$ {}^{m,m'}_{\ell,\ell'} I_1 = \delta_{m'm}\, 2\pi \int_0^\pi (\theta_3 - \theta_4)\, \mathrm{sen}\,\vartheta\, d\vartheta \propto \delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)} \quad (4,7) $$

$$ {}^{m,m'}_{\ell,\ell'} I_2 = \delta_{m'm}\, 2\pi \int_0^\pi \left[(\theta_1-\theta_2)\,\mathrm{sen}\,\vartheta + (\theta_3+\theta_4)\cos\vartheta\right] \mathrm{sen}\,\vartheta\, d\vartheta \propto \delta_{\ell',\ell\pm 2q} \quad (4,8) $$

$$ {}^{m,m'}_{\ell,\ell'} I_3 = \delta_{m'm}\, 2\pi \int_0^\pi \left[(\theta_1-\theta_2) + \mathrm{cotg}\,\vartheta\,(\theta_3+\theta_4)\right] \mathrm{sen}\,\vartheta\, d\vartheta \propto \delta_{\ell',\ell\pm 2q} \quad (4,9) $$

$$ {}^{m,m'}_{\ell,\ell'} I_4 = \delta_{m'm}\, 2\pi \int_0^\pi \frac{(\theta_3-\theta_4)}{\mathrm{sen}\,\vartheta}\, \mathrm{sen}\,\vartheta\, d\vartheta \propto \delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)} \quad (4,10) $$

$$ {}^{m,m'}_{\ell,\ell'} I_5 = \delta_{m'm}\, 2\pi \int_0^{\pi} \left[\mathrm{sen}^2\vartheta\,(\theta_1-\theta_2) + \mathrm{sen}\,\vartheta\cos\vartheta\,(\theta_3+\theta_4)\right] \mathrm{sen}\,\vartheta\, d\vartheta \propto \delta_{\ell',\ell-2q} \quad (4,11) $$

$$ {}^{m,m'}_{\ell,\ell'} I_6 = \delta_{m'm}\, 2\pi \int_0^\pi (\theta_3-\theta_4)\,\mathrm{sen}\,\vartheta\; \mathrm{sen}\,\vartheta\, d\vartheta \propto \delta_{\ell',\ell\pm 1} \quad (4,12) $$

donde las θ_i son funciones de los polinomios de Legendre asociados, que se definen en A(18) y A(19), y donde $q = 0,1,2,\dots$

Podrá objetarse, no sin razón, que abuso de las abreviaturas. Diré en mi descargo que es inevitable extremar el empleo de abreviaturas cuando se trabaja en la teoría de Dirac, si no se quiere perder totalmente de vista lo que se persigue. De no usar las abreviaturas mencionadas tendríamos, para cada uno de los 7 operadores que nos interesa, 4 expresiones como la que se escribe a continuación, y que indica los elementos de matriz de la velocidad angular azimutal para estados del mismo signo de $x<0$:

$$(k, x<0, m|\,\omega^{\varphi}\,|k', x'<0, m') = -c\beta\sigma_2 \frac{2}{\pi} kk' \int_0^{\infty} \Big[A(k)\,B(k')\,j_l(kr)\,j_{l'}(k'r)$$

$$+ A(k')\,B(k)\,j_{l+1}(kr)\,j_{l'}(k'r)\Big]\, r\,dr \,.\, 2\pi .\, \delta_{m'm} . \frac{1}{4\pi} \left[\frac{(l-m)!\,(l'-m)!}{(l+m+1)!\,(l'+m+1)!}\right]^{1/2} .$$

$$.\int_0^{\pi} \Big\{ \Big[(l+m+1)(l'+m+1)\,P_l^m P_{l'}^m - P_l^{m+1} P_{l'}^{m+1}\Big]$$

$$+ \cot g\,\vartheta \Big[(l+m+1)\,P_l^m P_{l'}^{m+1} + (l'+m+1)\,P_l^{m+1} P_{l'}^m\Big]\Big\}\, \operatorname{sen}\vartheta\, d\vartheta .\, e^{i\beta(k_0'-k_0)ct}$$

$$- c\,i\,\tau\, \frac{2}{\pi} kk' \int_0^{\infty} \Big[A(k)\,A(k')\,j_l(kr)\,j_{l'}(k'r) + B(k)\,B(k')\,j_{l+1}(kr)\,j_{l'+1}(k'r)\Big]\, r\,dr$$

$$.\, 2\pi\,\delta_{m'm}\, \frac{1}{4\pi} \left[\frac{(l-m)!\,(l'-m)!}{(l+m+1)!\,(l'+m+1)!}\right]^{1/2} \int_0^{\pi} \Big[(l+m+1)\,P_l^m P_{l'}^{m+1} - (l'+m+1)\,P_l^{m+1} P_{l'}^m\Big]\, d\vartheta .$$

$$.\, e^{i\beta(k_0'+k_0)ct}$$

2.- La velocidad angular

$$(k, \chi = -\ell -1, m | \omega^{\vartheta} = - \frac{c}{r^2} \alpha_{\vartheta} | k', \chi' = -\ell' -1, m')$$

$$= -ci\beta\, \delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)} \cdot \delta_{m'm} \left[AB'\ R^{1}_{\ell,\ell'+1}(k,k') + A'B\ R^{1}_{\ell+1,\ell'}(k,k') \right] {}^{mm}_{\ell\ell'}I_1\ e^{i\beta(k'_0-k_0)x}$$

$$+c\, \alpha_z\, \delta_{\ell',\ell\pm 2q} \cdot \delta_{m'm} \left[AA'\ R^{1}_{\ell\ell'}(k,k') + BB'\ R^{1}_{\ell+1,\ell'+1}(k,k') \right] {}^{mm}_{\ell\ell'}I_2\ e^{i\beta(k'_0+k_0)x}$$

(4,13,a)

$$(k, \chi = \ell, m | \omega^{\vartheta} | k', \chi' = \ell', m')$$

$$= -ci\beta\, \delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)}\, \delta_{m'm} \left[AB'\ R^{1}_{\ell,\ell'-1}(k,k') + A'B\ R^{1}_{\ell-1,\ell'}(k,k') \right] {}^{mm}_{\ell\ell'}I_1\ e^{i\beta(k'_0-k_0)x}$$

$$-c\, \alpha_z\, \delta_{\ell',\ell\pm 2q}\, \delta_{m'm} \left[AA'\ R^{1}_{\ell\ell'}(k,k') + BB'\ R^{1}_{\ell-1,\ell'-1}(k,k') \right] {}^{mm}_{\ell\ell'}I_2\ e^{i\beta(k'_0+k_0)x}$$

(4,13,b)

$$(k, \chi = -\ell -1, m | \omega^{\vartheta} | k', \chi' = \ell, m')$$

$$= -ci\beta\, \sigma_z\, \delta_{\ell',\ell\pm 2q} \cdot \delta_{m'm} \left[AB'\ R^{1}_{\ell,\ell'-1}(k,k') - A'B\ R^{1}_{\ell+1,\ell'}(k,k') \right] {}^{mm}_{\ell\ell'}I_2\ e^{i\beta(k'_0-k_0)x}$$

$$-c\, \tau\, \delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)} \cdot \delta_{m'm} \left[AA'\ R^{1}_{\ell,\ell'}(k,k') - BB'\ R^{1}_{\ell+1,\ell'-1}(k,k') \right] {}^{mm}_{\ell\ell'}I_1\ e^{i\beta(k'_0+k_0)x}$$

(4,13,c)

$$(k, \chi = \ell, m | \omega^{\vartheta} | k', \chi' = -\ell -1, m')$$

$$= ci\beta\, \sigma_z\, \delta_{\ell',\ell\pm 2q}\, \delta_{m'm} \left[AB'\ R^{1}_{\ell,\ell'+1}(k,k') - A'B\ R^{1}_{\ell-1,\ell'}(k,k') \right] {}^{mm}_{\ell\ell'}I_2\ e^{i\beta(k'_0-k_0)x}$$

$$+c\, \tau\, \delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)}\, \delta_{m'm} \left[AA'\ R^{1}_{\ell,\ell'}(k,k') - BB'\ R^{1}_{\ell-1,\ell'+1}(k,k') \right] {}^{mm}_{\ell\ell'}I_1\ e^{i\beta(k'_0+k_0)x}$$

(4,13,d)

$$(k, \chi = -\ell -1, m | \omega^{\varphi} = -\frac{c\alpha_{\varphi}}{r^2 \sin^2\vartheta} | k', \chi' = -\ell' -1, m')$$

$$= -c\beta\sigma_z . \delta_{\ell',\ell\pm 2q} . \delta_{m'm} \left[AB' R^{1}_{\ell,\ell'+1} (k,k') + A'B R^{1}_{\ell+1,\ell'} (k,k') \right] {}^{mm}_{\ell\ell'}I_3 \; e^{i\beta(k'_0-k_0)x_0}$$

$$-c\, i\tau\, \delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)} . \delta_{m'm} \left[AA' R^{1}_{\ell,\ell'} (k,k') + BB' R^{1}_{\ell+1,\ell'+1} (k,k') \right] {}^{mm}_{\ell\ell'}I_4 \; e^{i\beta(k'_0+k_0)x_0}$$

(4,14,a)

$$(k, \chi = \ell, m | \omega^{\varphi} | k', \chi' = \ell', m')$$

$$= -c\beta\sigma_z\, \delta_{\ell',\ell\pm 2q} . \delta_{m'm} \left[AB' R^{1}_{\ell,\ell'-1} (k,k') + A'B R^{1}_{\ell-1,\ell'} (k,k') \right] {}^{mm}_{\ell\ell'}I_3 \; e^{i\beta(k'_0-k_0)x_0}$$

$$+c\, i\tau\, \delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)}\, \delta_{m'm} \left[AA' R^{1}_{\ell,\ell'} (k,k') + BB' R^{1}_{\ell-1,\ell'-1} (k,k') \right] {}^{mm}_{\ell\ell'}I_4 \; e^{i\beta(k'_0+k_0)x_0}$$

(4,14,b)

$$(k, \chi = -\ell -1, m | \omega^{\varphi} | k', \chi' = \ell', m')$$

$$= -c\beta\, \delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)} . \delta_{m'm} \left[AB' R^{1}_{\ell,\ell'-1} (k,k') - A'B R^{1}_{\ell+1,\ell'} (k,k') \right] {}^{mm}_{\ell\ell'}I_4 \; e^{i\beta(k'_0-k_0)x_0}$$

$$+c\, i\alpha_z\, \delta_{\ell',\ell\pm 2q}\, \delta_{m',m} \left[AA' R^{1}_{\ell,\ell'} (k,k') - BB' R^{1}_{\ell+1,\ell'-1} (k,k') \right] {}^{mm}_{\ell\ell'}I_3 \; e^{i\beta(k'_0+k_0)x_0}$$

(4,14,c)

$$(k, \chi = \ell, m | \omega^{\varphi} | k', \chi' = -\ell' -1, m')$$

$$= -c\beta\, \delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)} . \delta_{m'm} \left[AB' R^{1}_{\ell,\ell'+1} (k,k') - A'B R^{1}_{\ell-1,\ell'} (k,k') \right] {}^{mm}_{\ell\ell'}I_4 \; e^{i\beta(k'_0-k_0)x_0}$$

$$-c\, i\alpha_z\, \delta_{\ell',\ell\pm 2q} . \delta_{m',m} \left[AA' R^{1}_{\ell,\ell'} (k,k') - BB' R^{1}_{\ell-1,\ell'+1} (k,k') \right] {}^{mm}_{\ell\ell'}I_3 \; e^{i\beta(k'_0+k_0)x_0}$$

(4,14,d)

Desde el punto de vista del "carácter" tenemos dos grupos de elementos de transición:

a) los diagonales (transiciones que se verifican con conservación del spin y de la carga), y

b) los de segunda clase.

La parte diagonal en el "carácter" de (4,13,a) y (4,13,b) corresponde a la fórmula (3,14) de la teoría de Schrödinger. La parte diagonal en el "carácter" de (4,14,a) y (4,14,b) corresponde a la (3,15) de la teoría de Schrödinger. Las partes no diagonales en el "carácter" no tienen, desde luego, análogo clásico; tampoco lo tienen las partes diagonales asociadas a transiciones entre valores de $\mathcal{L}$ de distinto signo.

Los elementos de la velocidad angular latitudinal que son diagonales en el "carácter" no lo son en el momento angular, resultando así, al igual que en el caso no relativista, que su valor medio es 0:

$$\overline{\omega^{\vartheta}} = 0 \qquad (4,15)$$

Los elementos de la velocidad angular azimutal que son diagonales en el "carácter" tienen elementos diagonales en el momento angular; pero, además, tienen elementos de transición $\ell \to \ell \pm 2q$ que no aparecen en la teoría de Schrödinger. El factor I_3, que es igual a 1 en la teoría no relativista, es ahora del orden de la unidad y, en particular, $I_3=1$ para $\ell = m$ (cf. Apéndice A, pág. A 15). Puesto que las integrales radiales son del mismo tipo que las que se presentan en la teoría de Schrödinger, también aquí tenemos

$$\overline{\omega^{\varphi}} = 0 \qquad (4,16)$$

valiendo el motivo expuesto en el Capítulo III,2.2 (p. 61).

3.- La velocidad lineal

$$(k, \varkappa = -\ell -1, m \,|\, V_r = -c\alpha_r \,|\, k', \varkappa' = -\ell' -1, m')$$

$$= -ci\beta\, \delta_{\ell'\ell}\, \delta_{m'm} \left[AB'\, R^2_{\ell,\ell+1}\, (k,k') - A'B\, R^2_{\ell+1,\ell}\, (k,k') \right] e^{i\beta(k'_0 - k_0)x_0} \tag{4,17,a}$$

$$(k, \varkappa = \ell \;, m \,|\, V_r \,|\, k', \varkappa' = \ell' \;, m')$$

$$= +ci\beta\, \delta_{\ell'\ell}\, \delta_{m'm} \left[AB'\, R^2_{\ell,\ell-1}\, (k,k') - A'B\, R^2_{\ell-1,\ell}\, (k,k') \right] e^{i\beta(k'_0 - k_0)x_0} \tag{4,17,b}$$

$$(k, \varkappa = -\ell -1, m \,|\, V_r \,|\, k', \varkappa' = \ell' \;, m')$$

$$= -c\,\tau\, \delta_{\ell'\ell}\, \delta_{m'm} \left[AA'\, R^2_{\ell,\ell}\, (k,k') + BB'\, R^2_{\ell+1,\ell-1} (k,k') \right] e^{i\beta(k'_0 + k_0)x_0} \tag{4,17,b}$$

$$(k, \varkappa = \ell , m \,|\, V_r \,|\, k', \varkappa' = -\ell' -1, m')$$

$$= -c\,\tau\, \delta_{\ell'\ell}\, \delta_{m'm} \left[AA'\, R^2_{\ell,\ell}\, (k,k') + BB'\, R^2_{\ell-1,\ell+1} (k,k') \right] e^{i\beta(k'_0 + k_0)x_0} \tag{4,17,d}$$

La parte diagonal en el "carácter" también lo es en $\varkappa$. Su promedio respecto de la energía es

$$\overline{V}_r = 0 \tag{4,18}$$

al igual que en el caso no relativista y por el mismo motivo, esto es, por tratarse de ondas estacionarias (cf. pp. 45 y ss.) Para obtener este resultado no es necesario aplicar la prescripción (3,29): ya los integrandos son nulos para $k'=k$; es decir, la corriente radial misma es nula.

La parte de segunda clase está asociada a una inversión del signo de $\varkappa$; por (1,49), esto significa una inversión del spin(con conservación, por supuesto, del momento angular total,que depende del valor absoluto de $\varkappa$).

Las integrales radiales que figuran en la parte de segunda clase se obtienen sustituyendo ℓ por $\ell \pm 1$ y poniendo $n=1$ en B(82). Resulta así

$$R^2_{\ell\pm1,\ell\mp1}(k,k') = -\delta(k-k') + \text{función cuyo promedio (3,29) sobre un paquete de frecuencias se anula.}$$

De manera que

$$\lim_{\Delta k\to 0}\int_{k-\frac{\Delta k}{2}}^{k+\frac{\Delta k}{2}} (k, \varkappa = -\ell-1, m \mid V_r \mid k', \varkappa = \ell, m)\, dk' = \lim_{\Delta k\to 0}\int_{k-\frac{\Delta k}{2}}^{k+\frac{\Delta k}{2}} (k, \varkappa = \ell, m \mid V_r \mid k', \varkappa' = -\ell-1, m)\, dk'$$

$$= -c\tau(A^2 - B^2)\, e^{i2\beta k_0 x_0} = -c\tau\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{\frac{1}{2}} e^{i\beta 2 k_0 x_0}$$

por lo cual la fluctuación,en el "carácter",de la velocidad radial,es (por (2,62))

$$\Delta_c V_r = c\,(1 - v^2/c^2)^{\frac{1}{2}} = \begin{cases} c & \text{para } v=0 \\ 0 & \text{para } v=c \end{cases} \qquad (4,19)$$

Lo mismo que en el caso (2,68) de las componentes rectangulares de la velocidad, la fluctuación alcanza su valor máximo c cuando el electrón está en reposo, disminuyendo con la velocidad.

Los elementos de matriz de la velocidad lineal latitudinal V_ϑ difieren de los de ω^ϑ únicamente en que las integrales radiales son de grado p=2 . Por este motivo no los escribimos. Son dignas de mención las características siguientes.

Las partes de primera clase son, por ejemplo para $\ell' = \ell - 1$,

$$-ci\beta\left[AB'\ R^2_{\ell,\ell}\ (k,k') + AB'\ R^2_{\ell+1,\ell-1}(k,k')\right] e^{i\beta(k_0'-k_0)x_0}.\ I_1$$

Por (4,19), el promedio de esta expresión respecto de la energía es nulo.

Las partes de segunda clase, por ejemplo para $\ell' = \ell$, son

$$c\,\alpha_z\left[AA'\ R^2_{\ell,\ell}\ (k,k') + BB'\ R^2_{\ell+1,\ell+1}(k,k')\right]\ \ I_2\ e^{i\beta(k_0'+k_0)x_0}$$

$$= c\,\alpha_z(AA' + BB')\ \delta(k'-k)\ \ e^{i\beta(k_0'+k_0)x_0}\ \ I_2$$

Por consiguiente, la fluctuación en el "carácter" es igual a cI_2; esto es, del orden de c, independientemente de la velocidad total.

Lo mismo que en el caso no relativista, la velocidad latitudinal media es nula; la característica nueva es la fluctuación en torno a 0.

Finalmente, los elementos de matriz de la velocidad azimutal son

$$(k, \chi = -\ell -1 , m | \quad V_\varphi = -\frac{e \alpha_\varphi}{r \operatorname{sen}\vartheta} \ | \ k', \chi' = -\ell' -1 , m')$$

$$= -e\beta\sigma_z \cdot \delta_{\ell',\ell\pm 2q} \delta_{m'm} \left[AB' \ R^2_{\ell,\ell'+1} \ (k,k') + A'B \ R^2_{\ell+1,\ell'} (k,k') \right] \ I_2 \ e^{i\beta(k_0'-k_0)x_0}$$

$$-ei\tau \ \delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)} \underset{\delta_{m'm}}{\uparrow} \left[AA' \ R^2_{\ell,\ell'} \ (k,k') + BB' \ R^2_{\ell+1,\ell'+1} (k,k') \right] \ I_1 \ e^{i\beta(k_0'+k_0)x_0}$$

(4,21,a)

$$(k, \chi = \ell , m | \quad V_\varphi \ | \ k', \chi' = \ell' , m')$$

$$= -e\beta\sigma_z \ \delta_{\ell',\ell\pm 2q} \delta_{m'm} \left[AB' \ R^2_{\ell,\ell'-1} \ (k,k') + A'B \ R^2_{\ell-1,\ell'} \ (k,k') \right] \ I_2 \ e^{i\beta(k_0'-k_0)x_0}$$

$$+ei\tau \cdot \delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)} \underset{\delta_{m',m}}{\uparrow} \left[AA' \ R^2_{\ell,\ell'} \ (k,k') + BB' \ R^2_{\ell-1,\ell'-1} (k,k') \right] \ I_1 \ e^{i\beta(k_0'+k_0)x_0}$$

(4,21,b)

$$(k', \chi = -\ell -1, \ m | \quad V_\varphi | \ k', \chi' = \ell' , m')$$

$$= -e\beta \cdot \delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)} \delta_{m'm} \left[AB' \ R^2_{\ell,\ell'-1} \ (k,k') \ - A'B \ R^2_{\ell+1,\ell'} \ (k,k') \right] \ I_1 \ e^{i\beta(k_0'-k_0)x_0}$$

$$+ei \alpha_z \cdot \delta_{\ell',\ell\pm 2q} \delta_{m'm} \left[AA' \ R^2_{\ell,\ell'} \ (k,k') - BB' \ R^2_{\ell+1,\ell'-1} (k,k') \right] \ I_2 \ e^{i\beta(k_0'+k_0)x_0}$$

(4,21,c)

$$(k', \chi = \ell, \ m | \ V_\varphi | \ k', \chi' = -\ell' -1, m')$$

$$= -e\beta \ \delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)} \underset{\delta_{m'm}}{\uparrow} \left[AB' \ R^2_{\ell,\ell'+1} \ (k,k') - A'B \ R^2_{\ell-1,\ell'} (k,k') \right] \ I_1 \ e^{i\beta(k_0'-k_0)x_0}$$

$$-e i\alpha_z \ \delta_{\ell',\ell\pm 2q} \underset{\delta_{m'm}}{\uparrow} \left[AA' \ R^2_{\ell,\ell'} \ (k,k') - BB' \ R^2_{\ell-1,\ell'+1} (k,k') \right] \ I_2 \ e^{i\beta(k_0'+k_0)x_0}$$

(4,21,d)

Si se integra B(97) sobre un paquete de ondas, se anula. Por consiguiente,

$$\overline{V_\varphi} = 0 \qquad (4,22)$$

al igual que en la teoría de Schrödinger y por el mismo motivo.

La parte de segunda clase para $\ell' = \ell$ (cf. (4,21) c y d) es

$$= \pm ci\alpha_2 \left[AA' \, R^2_{\ell,\ell} \, (k,k') - BB' \, R^2_{\ell\pm1,\ell\mp1}(k,k')\right] I_2 e^{i\beta(k_0'+k_0)x_0}$$

Por (4,19), al promediar sobre un paquete de frecuencias queda

$$\pm ci\alpha_2 (A^2+B^2) \, I_2 \, e^{i\beta \, 2k_0 x_0} \quad ,$$

de manera que la fluctuación en el carácter es

$$\Delta_c V_\theta = \Delta_c V_\varphi = c \, I_2 \qquad (4,23)$$

4.- La velocidad areolar

La diferencia entre A_ϑ y V_ϑ reside en las integrales radiales, que ahora son R^3 en lugar de R^2. Como la integral de B(101) sobre un paquete de ondas es 0, queda $\overline{A_\vartheta}=0$. También son nulas las partes de segunda clase con conservación del momento angular total.

En cuanto a la componente azimutal, sus elementos de matriz son

$$(k, \varkappa = -\ell -1, m \,|\, A_\vartheta = -c\alpha_\varphi \,|\, k', \varkappa' = -\ell' -1, m')$$

$$= -c\beta\sigma_z \cdot \delta_{\ell',\ell-2q} \cdot \delta_{m',m} \left[AB' \, R^3_{\ell,\ell'+1}(k,k') + A'B \, R^3_{\ell+1,\ell'}(k,k')\right] I_5 \, e^{i\beta(k'_0-k_0)x_0}$$

$$-ci\tau \, \delta_{\ell',\ell\pm1} \cdot \delta_{m',m} \left[AA' \, R^3_{\ell,\ell'}(k,k') + BB' \, R^3_{\ell+1,\ell'+1}(k,k')\right] I_6 \, e^{i\beta(k'_0-k_0)x_0} \tag{4,24,a}$$

$$(k, \varkappa = \ell, m \,|\, A_\varphi \,|\, k', \varkappa' = \ell', m')$$

$$= -c\beta\sigma_z \, \delta_{\ell',\ell-2q} \cdot \delta_{m',m} \left[AB' \, R^3_{\ell,\ell'-1}(k,k') + A'B \, R^3_{\ell-1,\ell'}(k,k')\right] I_5 \, e^{i\beta(k'_0-k_0)x_0}$$

$$+ ci\tau \cdot \delta_{\ell',\ell\pm1} \cdot \delta_{m',m} \left[AA' \, R^3_{\ell,\ell'}(k,k') + BB' \, R^3_{\ell-1,\ell'-1}(k,k')\right] I_6 \, e^{i\beta(k'_0+k_0)x_0} \tag{4,24,b}$$

$$(k, \varkappa = -\ell -1, m \,|\, A_\varphi \,|\, k', \varkappa' = \ell', m')$$

$$= -c\beta \, \delta_{\ell',\ell\pm1} \, \delta_{m',m} \left[AB' \, R^3_{\ell,\ell'-1}(k,k') - A'B \, R^3_{\ell+1,\ell'}(k,k')\right] I_6 \, e^{i\beta(k'_0-k_0)x_0}$$

$$+ ic\alpha_z \, \delta_{\ell',\ell-2q} \, \delta_{m',m} \left[AA' \, R^3_{\ell,\ell}(k,k') - BB' \, R^3_{\ell+1,\ell'-1}(k,k')\right] I_5 \, e^{i\beta(k'_0+k_0)x_0}$$

$$(k, \varkappa = \ell \quad , m \mid A_{\varphi} \mid k', \varkappa' = -\ell' - 1, m')$$

$$= -c\beta\, \delta_{\ell',\ell\pm1} \cdot \delta_{m'm} \left[AB'\, R^{3}_{\ell,\ell'+1}(k,k') - A'B\, R^{3}_{\ell-1,\ell'}(k,k') \right] I_6\, e^{i\beta(k'_0 - k_0)x_0}$$

$$- ci\,\alpha_2\, \delta_{\ell',\ell-2q} \cdot \delta_{m',m} \left[AA'\, R^{3}_{\ell,\ell'}(k,k') - BB'\, R^{3}_{\ell-1,\ell'+1}(k,k') \right] I_5\, e^{i\beta(k'_0 + k_0)x_0} \qquad (4,24,c)$$

Las reglas de selección del número cuántico angular son en este caso diferentes de las anteriores: hay transiciones $\ell \to \ell - 2q$ y $\ell \to \ell \pm 1$. La parte diagonal en el carácter y en $\varkappa$ es, por ejemplo para $\varkappa = -\ell - 1$,

$$-c\beta\,\bar{\sigma}_2 \left[AB'\, R^{3}_{\ell,\ell+1}(k,k') + A'B\, R^{3}_{\ell+1,\ell}(k,k') \right] I_5\, e^{i\beta(k'_0 - k_0)x_0}$$

Por B(87),

$$AB'\left[R^{3}_{\ell,\ell+1}(k,k') + A'B\, R^{3}_{\ell+1,\ell}(k,k') \right] = \left[- AB'\,\beta_1(\ell, \ell+1) + A'B\,\beta_1(\ell+1, \ell) \right] \delta(k'-k)$$

+ una función que se anula al promediar sobre un paquete de frecuencias

Por B(47,a) y B(42),

$$\beta_1(\ell,\ell+1) = \frac{a_1(\ell)}{k} - \frac{a'_1(\ell+1)}{k'} = \frac{1}{2}\left[\frac{\ell(\ell+1)}{k} - \frac{(\ell+1)(\ell+2)}{k'} \right]$$

$$\beta_1(\ell+1,\ell) = \frac{a_1(\ell+1)}{k} - \frac{a'_1(\ell)}{k'} = \frac{1}{2}\left[\frac{(\ell+1)(\ell+2)}{k} - \frac{\ell(\ell+1)}{k'} \right]$$

Recordando que $x\,\delta(x) = 0$, finalmente queda

$$AB'\, R^{3}_{\ell,\ell+1} + A'B\, R^{3}_{\ell+1,\ell} = (\ell+1)\left[\frac{AB'}{k'} + \frac{A'B}{k} \right] \delta(k'-k)$$

Por último, integrando respecto de k' queda

$$\bar{A}_\varphi = -c\beta\sigma_z \frac{2AB}{k}(\ell+1) I_5 = -\beta\sigma_z \frac{\sqrt{1-v^2/c^2}}{m_0}\frac{h}{2\pi}(\ell+1) I_5, \qquad \underset{x=-\ell-1}{(4,25)}$$

Aquí, $(\ell+1)\, I_5$, donde $I_5 = A(58)$, hace las veces del m de la teoría de Schrödinger. En particular, para $\ell = m = 0$, se tiene la contribución del spin:

$$|\bar{A}_\varphi| = \frac{1}{m}\,\frac{2}{3}\,\frac{h}{2\pi}, \qquad m = \frac{m_0}{\sqrt{1-v^2/c^2}}.$$

5.- Conclusiones

En la teoría relativista aparecen, además de términos de primera clase-- en los que están contenidos como primera aproximación los de la teoría de Schrödinger-- términos no diagonales asociados a procesos de inversión del spin y de cambio (virtual) del signo de la carga. (Es el momento de aclarar que los términos de segunda clase no indican una variación real de la carga. La interpretación correcta de estos términos se desconoce; pero si se acepta la teoría de las lagunas no pueden corresponder a otra cosa que a una producción virtual de pares.)

La frecuencia del movimiento de temblor se halla en el factor $\exp i\beta 2k_0ct$ que acompaña a los términos de segunda clase. Esta frecuencia es $\omega = 2k_0c$, cuyo valor mínimo ($2c/\Lambda = 1,6 . 10^{21}$ seg^{-1}) corresponde al electrón en reposo ($v=0$) macroscópicamente. En el caso de la velocidad radial, la amplitud de las fluctuaciones es máxima para $v=0$; en todos los casos, la frecuencia aumenta con la velocidad.

Ambos movimientos, el mecánico propiamente dicho (de traslación en el caso del electrón libre) y el de las modificaciones del "carácter", no pueden separarse entre sí más que en el caso extremo $v=0$, donde cesa el movimiento mecánico y tiene lugar únicamente el movimiento de temblor; en el otro extremo, $v=c$, el movimiento de temblor es nulo en el caso del electrón libre, donde sabemos que --si representamos al electrón mediante ondas progresivas-- la única componente no nula de la velocidad es la radial.

CAPITULO V

LA VELOCIDAD DEL ELECTRON EN UN CAMPO COULOMBIANO

1.- Densidades

Teniendo en cuenta las relaciones (1,88), se obtiene

$$\{\alpha_r\} = (\chi^* \varphi + \varphi^* \chi)\, Y^+ Y\, e^{i\beta(k_0' - k_0)x_0} + (\chi^* \bar{\chi} + \varphi^* \bar{\varphi})\, Y^+ \alpha_r Y\, e^{i\beta(k_0' + k_0)x_0} \tag{5,1}$$

$$\{\alpha_\vartheta\} = -i(\chi^* \varphi - \varphi^* \chi)\, \frac{1}{\operatorname{sen}\vartheta}\, Y^+ \sigma_\varphi Y\, e^{i\beta(k_0' - k_0)x_0} + (\chi^* \bar{\chi} - \varphi^* \bar{\varphi})\, Y^+ \alpha_\vartheta Y\, e^{i\beta(k_0' + k_0)x_0} \tag{5,2}$$

$$\{\alpha_\varphi\} = i(\chi^* \varphi - \varphi^* \chi)\, \operatorname{sen}\vartheta\, Y^+ \sigma_\vartheta Y\, e^{i\beta(k_0' - k_0)x_0} + (\chi^* \bar{\chi} - \varphi^* \bar{\varphi})\, Y^+ \alpha_\varphi Y\, e^{i\beta(k_0' + k_0)x_0} \tag{5,3}$$

Cuando, finalmente, pasemos las matrices M de segunda clase a la izquierda de los factores radiales, tendremos que efectuar la operación

$$(\chi^* \bar{\chi} \pm \varphi^* \bar{\varphi}) M - M(\bar{\chi}^* \chi \pm \bar{\varphi}^* \varphi) \tag{5,4}$$

2.- <u>La velocidad angular</u>

$$(k,\chi=-\ell-1,m \mid \omega^{\vartheta} = -\frac{c\alpha_\theta}{r^2} \mid k',\chi'=-\ell'-1,m') = -(k,\chi=\ell,\ m \mid \omega^{\vartheta} \mid \ k',\chi'=\ell',m')$$

$$= -c\,\delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)}\,\delta_{m'm}\ \ I_1\ e^{i\beta(k_0'-k_0)x_0}\ \ N_\chi(k)N_{\chi'}(k')\int_0^\infty\left[\chi_\chi^*\varphi_{\chi'}-\varphi_\chi^*\chi_{\chi'}\right]r\,dr$$

$$+\ c\,\alpha_z\,\delta_{\ell',\ell\pm 2q}\,\delta_{m'm}\ \ I_2\ e^{i\beta(k_0'+k_0)x_0}\ \ N_\chi(k)N_{\chi'}(k')\int_0^\infty\left[\bar{\chi}_\chi^*\chi_{\chi'}-\bar{\varphi}_\chi^*\varphi_{\chi'}\right]r\,dr \qquad (5,5,a)$$

$$(k,\chi=-\ell-1,m \mid \omega^{\vartheta} \mid \ k',\chi'=\ell' \ ,m') = -(k,\chi=\ell\ ,m \mid \omega^{\theta} \mid \ k',\chi'=-\ell'-1,m')$$

$$= c\,\sigma_z\,\delta_{\ell',\ell\pm 2q}\,\delta_{m'm}\ \ I_2\ e^{i\beta(k_0'-k_0)x_0}\ \ N_\chi(k)N_{\chi'}(k')\int_0^\infty\left[\chi_\chi^*\varphi_{\chi'}-\varphi_\chi^*\chi_{\chi'}\right]r\,dr$$

$$-c\,\tau\,\delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)}\,\delta_{m'm}\ \ I_1\ e^{i\beta(k_0'+k_0)x_0}\ \ N_\chi(k)N_{\chi'}(k')\int_0^\infty\left[\bar{\chi}_\chi^*\chi_{\chi'}-\bar{\varphi}_\chi^*\varphi_{\chi'}\right]r\,dr \qquad (5,5,b)$$

$$(k,\chi=-\ell-1\ ,m \mid \omega^{\varphi} \mid \ k',\chi'=-\ell'-1,m') = -(k,\chi=\ell\ \ ,m \mid \omega^{\varphi} \mid k',\chi'=\ell',m')$$

$$= ic\,\sigma_z\,\delta_{\ell',\ell\pm 2q}\,\delta_{m'm}\ \ I_3\ e^{i\beta(k_0'-k_0)x_0}\ N_\chi(k)N_{\chi'}(k')\int_0^\infty\left[\chi_\chi^*\varphi_{\chi'}-\varphi_\chi^*\chi_{\chi'}\right]r\,dr$$

$$-ci\,\tau\,\delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)}\,\delta_{m'm}\ I_4\ e^{i\beta(k_0'+k_0)x_0}\ \ N_\chi(k)N_{\chi'}(k')\int_0^\infty\left[\bar{\chi}^*\chi_{\chi'}-\bar{\varphi}_\chi^*\varphi_{\chi'}\right]r\,dr \qquad (5,5,c)$$

$$(k,\chi=-\ell-1\ ,m \mid \omega^{\varphi} \mid k',\chi'=\ell'\ m') = -(k,\ \chi=\ell\ ,m \mid \omega^{\varphi} \mid k',\chi'=-\ell'-1,m')$$

$$= -c\,i\,\delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)}\,\delta_{m'm}\ I_4\ e^{i\beta(k_0'-k_0)x_0}\ \ N_\chi(k)N_{\chi'}(k')\int_0^\infty\left[\chi_\chi^*\varphi_{\chi'}-\varphi_\chi^*\chi_{\chi'}\right]r\,dr$$

$$+\ ci\,\alpha_z\,\delta_{\ell',\ell\pm 2q}\,\delta_{m'm}\ \ I_3\ e^{i\beta(k_0'+k_0)x_0}\ \ N_\chi(k)N_{\chi'}(k')\int_0^\infty\left[\bar{\chi}^*\chi_{\chi'}-\bar{\varphi}_\chi^*\varphi_{\chi'}\right]r\,dr \qquad (5,5,d)$$

3.- La velocidad lineal

$$(k,\varkappa<0,m\,|\,V_r = -c\alpha_r\,|\,k',\varkappa'<0,m') = +\,(k,\varkappa>0,m\,|V_r|\,k',\varkappa'>0,m')$$

$$= -c\,\delta_{\ell'\ell}\,\delta_{m'm}\;e^{i\beta(k_0'-k_0)x_0}\,N_\varkappa(k)\,N_\varkappa(k')\int_0^\infty\left[\chi_\varkappa^*\varphi_\varkappa+\varphi_\varkappa^*\chi_\varkappa\right]r^2\,dr \qquad (5,6,a)$$

$$(k,\varkappa<0,m\,|V_r|\,k',\varkappa'>0,m') = +\,(k,\varkappa>0,m\,|\,V_r\,|\,k',\varkappa'<0,m')$$

$$= -c\tau\,\delta_{\ell'\ell}\,\delta_{m'm}\;e^{i\beta(k_0'+k_0)x_0}\,N_\varkappa(k)N_\varkappa(k')\int_0^\infty\left[\bar\chi_\varkappa^*(k)\chi_\varkappa(k')+\bar\varphi_\varkappa^*\varphi_\varkappa(k')\right]r^2\,dr \qquad (5,6,b)$$

Como el integrando de la parte de primera clase es 0 para $k'=k$ (cf. (1,90,b)), al igual que en el caso del electrón libre se tiene

$$\overline{V_r} = 0 \qquad (5,7)$$

La componente latitudinal de la velocidad lineal difiere de la velocidad angular correspondiente en la integral, en la cual figura r^2 en lugar de r. En cuanto a la componente azimutal, es

$$(k,\varkappa<0,m\,|\,V_\varphi = -c\frac{\alpha_\varphi}{r\sin\vartheta}\,|\,k',\varkappa'<0,m') = -\,(k,\varkappa>0,m\,|V_\varphi|\,k',\varkappa'>0,m')$$

$$= c\,\sigma_z\,\delta_{\ell',\ell\pm2q}\,\delta_{m'm}\;I_2\;e^{i\beta(k_0'-k_0)x_0}\;i\,N_\varkappa(k)N_{\varkappa'}(k')\int_0\left[\chi_\varkappa^*(k)\varphi_{\varkappa'}(k')-\varphi_\varkappa^*\chi_{\varkappa'}(k')\right]r^2$$

$$-\,ci\,\tau\,\delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)}\,\delta_{m'm}\;I_1\;e^{i\beta(k_0'+k_0)x_0}\;N_\varkappa(k)N_{\varkappa'}(k')\int_0^\infty\left[\bar\chi_\varkappa^*\chi_{\varkappa'}(k')-\bar\varphi_\varkappa^*(k)\varphi_{\varkappa'}(k')\right]r^2\,dr \qquad (5,8,a)$$

$$(k,\varkappa<0,m\,|V_\varphi|\,k',\varkappa'>0,m') = -\,(k,\varkappa>0,m\,|\,V_\varphi|\,k',\varkappa'<0,m')$$

$$= -c\,\delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)}\,\delta_{m'm}\;I_1\;e^{i\beta(k_0'-k_0)x_0}\;i\,N_\varkappa(k)N_{\varkappa'}(k')\int_0^\infty\left[\chi_\varkappa^*(k)\varphi_{\varkappa'}(k')-\varphi_\varkappa^*(k)\chi_{\varkappa'}(k')\right]r^2\,d$$

$$+\,ci\,\alpha_z\,\delta_{\ell',\ell\pm2q}\,\delta_{m'm}\;I_2\;e^{i\beta(k_0'+k_0)x_0}\;N_\varkappa(k)N_{\varkappa'}(k')\int_0^\infty\left[\bar\chi_\varkappa^*(k)\chi_{\varkappa'}(k')-\bar\varphi_\varkappa^*(k)\varphi_{\varkappa'}(k')\right]r^2\,d \qquad (5,8,b)$$

4.- Velocidad areolar

La componente latitudinal difiere de la correspondiente velocidad angular en la integral radial, donde ahora figura r^3 en lugar de r. La componente azimutal es

$$(k,\varkappa<0,m\,|A_\varphi=-c\alpha_\varphi|\,k',\varkappa'<0,m') = -(k,\varkappa>0,m\,|A_\varphi|\,k',\varkappa'>0,m')$$

$$= -c\,\sigma_z\,\delta_{\ell',\ell-2q}\,\delta_{m'm}\;I_5\,e^{i\beta(k_0'-k_0)x_0}\,.\,i\,N_\varkappa(k)N_{\varkappa'}(k')\int_0^\infty\left[\chi^+_\varkappa(\kappa)\varphi_{\varkappa'}(\kappa')-\varphi^+_\varkappa(\kappa)\chi_{\varkappa'}(\kappa')\right]\,.\,r^3dr$$

$$-\,c\,i\,\tau\,\delta_{\ell',\ell\pm1}\,\delta_{m'm}\;I_6\,e^{i\beta(k_0'+k_0)x_0}\,N_\varkappa(k)N_{\varkappa'}(k')\int_0^\infty\left[\bar{\chi}^+_\varkappa(\kappa)\chi_{\varkappa'}(\kappa')-\bar{\varphi}^+_\varkappa(\kappa)\varphi_{\varkappa'}(\kappa')\right]r^3dr \tag{5,9,a}$$

$$(k,\varkappa<0,m\,|A_\varphi|\,k',\varkappa'>0,m') = -(k,\varkappa>0,m\,|A_\varphi|\,k',\varkappa'<0,m')$$

$$= -c\,\delta_{\ell',\ell\pm1}\,\delta_{m'm}\,.\;I_6\,e^{i\beta(k_0'-k_0)x_0}\,i\,.\,N_\varkappa(k)\,N_{\varkappa'}(k')\int_0^\infty\left[\chi^+_\varkappa(\kappa)\varphi_{\varkappa'}(\kappa')-\varphi^+_\varkappa(\kappa)\chi_{\varkappa'}(\kappa')\right]r^3dr$$

$$+\,c\,i\,\alpha_z\,\delta_{\ell',\ell-2q}\,\delta_{m'm}\;I_5\,e^{i\beta(k_0'+k_0)x_0}\,N_\varkappa(k)\,N_{\varkappa'}(k')\int_0^\infty\left[\bar{\chi}^+_\varkappa(\kappa)\chi_{\varkappa'}(\kappa')-\bar{\varphi}^+_\varkappa(\kappa)\varphi_{\varkappa'}(\kappa')\right]r^3dr \tag{5,9,b}$$

5.- Características generales

La estructura de las matrices es exactamente igual que en el caso del electrón libre. La influencia del campo eléctrico nuclear radica íntegramente en las integrales radiales, las que dan la aceleración producida por el campo. Aparte de diferencias cuantitativas, debidas a la aceleración mencionada, se ve que el número de las transiciones independientes se reduce a la mitad, debido a que ~~en~~ las autofunciones radiales ya no dependen del signo de $\varkappa$.

6.- Desarrollo en ondas libres

Un modo de apreciar la influencia del campo coulombiano sobre la velocidad del electrón, es desarrollando las autofunciones correspondientes en serie de las autofunciones del electrón libre:

$$\psi_K^{Coul.} = \sum_{K'} \psi_{K'}^{Libre} \cdot C_{K'}^{K} \quad , \tag{5,10}$$

donde la sumatoria indica sumaciones sobre todos los números cuánticos e integración sobre el número de ondas. Los coeficientes $C_{k'}^{k}$, se calculan de la manera habitual:

$$\int (\psi_{K'}^{Lib})^{\dagger} \psi_K^{Coul.} \, d\tau = \sum_{K''} \int (\psi_{K'}^{Lib})^{\dagger} \psi_{K''}^{Lib} \, d\tau \quad C_{K''}^{k}$$

$$= \sum_{K''} \delta(K''-K') \, C_{K''}^{k} = C_{K'}^{K} \tag{5,11}$$

Escrita en detalle, la (5,10) es

$$N_{\chi}^{C}(k) \left[\chi_{\chi}(k,r) + \alpha_r \varphi_{\chi}(k,r) \right] Y_{\chi}^{m} \, e^{i\beta K_0 X_0}$$

$$= \int_0^{\infty} dK' \sum_{\chi'=-\infty}^{\infty} \sum_{m=0}^{|\chi'|-1} N_{\chi'}^{L}(K') \left[\chi_{\chi'}^{L}(k',r) + \alpha_r \varphi_{\chi'}^{L}(k',r) \right] Y_{\chi'}^{m'} \, e^{i\beta K_0' X_0} \cdot C_{K'\chi'm'}^{K\chi m}$$

Premultiplicando por la conjugada traspuesta de la autofunción del electrón libre, e integrando, resultan los coeficientes:

$$C_{K'\chi'm'}^{K\chi m} = \int \left(\psi_{K'\chi'm'}^{Lib} \right)^{\dagger} \psi_{K\chi m}^{Coul} \, d\tau$$

$$= e^{-i\beta K_0' X_0} \left\{ \iint (Y_{\chi'}^{m'})^{\dagger} Y_{\chi}^{m} \, d\Omega \; N_{\chi'}^{L}(K') N_{\chi}^{C}(K) \int_0^{\infty} \left[\chi_{\chi'}^{L*}(k') \chi_{\chi}(k) + \varphi_{\chi'}^{L*}(k') \varphi_{\chi}(k) \right] r^2 dr \right.$$

$+$

$$+\iint (Y_{\chi'}^{m'})^{\dagger} \alpha_r Y_{\chi}^{m}\, d\Omega \, . \overset{L}{N}_{\chi'}(k') \overset{C}{N}_{\chi}(k) \int_0^{\infty} \left[\overset{L*}{\chi}_{\chi'}(k') \varphi_{\chi}(k) - \overset{L*}{\varphi}_{\chi}(k) \chi_{\chi}(k) \right] r^2 dr \Big\} e^{i\beta k_0 x_0}$$

Recordando que

$$\iint (Y_{\chi'}^{m'})^{+} Y_{\chi}^{m}\, d\Omega = \delta_{\chi'\chi}\, \delta_{m'm} \,, \qquad \iint (Y_{\chi'}^{m'})^{+} \alpha_r Y_{\chi}^{m}\, d\Omega = \tau . \,\delta_{\chi',-\chi} \cdot \delta_{m'm} \,,$$

(cf. A(22) y A(26)), resulta finalmente

$$C_{k'\chi m}^{k\chi m} = \delta_{m',m} \left[\delta_{\chi'\chi} \quad G_{\chi}(k,k') e^{i\beta(k_0-k_0')x_0} + \tau . \delta_{\chi,-\chi} H(k,k') e^{i\beta(k_0+k_0')ct} \right] \quad (5,13)$$

donde

$$G_{\chi}(k,k') = \overset{L}{N}_{\chi}(k')\overset{C}{N}_{\chi'}(k) \int_0^{\infty} \left[\overset{L*}{\chi}_{\chi}(k') \chi_{\chi}(k) + \overset{L*}{\varphi}_{\chi}(k') \overset{C}{\varphi}_{\chi}(k) \right] r^2 dr \qquad (5,14)$$

$$H_{\chi}(k,k') = \overset{L}{N}_{\chi}(k') \overset{C}{N}_{\chi'}(k) \int_0^{\infty} \left[\overset{L*}{\chi}_{\chi}(k') \varphi_{\chi}(k) - \overset{L*}{\varphi}_{\chi'}(k') \overset{C}{\chi}_{\chi}(k) \right] r^2 dr \qquad (5,15)$$

Los coeficientes del desarrollo están normalizados. Por (5,10),

$$\int (\psi_{k\chi m}^{Coul})^{\dagger} \psi_{k'\chi m}^{Coul}\, d\tau = \sum_{k''} \sum_{k'''} (C_{k''\chi''m''}^{k\chi m})^{\dagger} \int (\overset{L}{\psi}_{k''\chi''m''})^{\dagger} \psi_{k'''\chi'''m'''}\, d\tau . C_{k'''\chi'''m'''}^{k'\chi m}$$

$$= \sum_{k''} \sum_{k'''} (C_{k''\chi''m''}^{k\chi m})^{\dagger} \delta(k'''-k'')\, \delta_{\chi''\chi'''}\, \delta_{m''m'''}\; C_{k'''\chi'''m'''}^{k'\chi m}$$

$$= \sum_{k''} (C_{k''\chi''m''}^{k\chi m})^{\dagger}\, C_{k''\chi''m''}^{k'\chi m}$$

Introduciendo (5,13) y recordando que el primer miembro vale $\delta(k'-k)$,

$$\int_0^{\infty} dk'' \sum_{\chi''} \sum_{m''} (C_{k''\chi''m''}^{k\chi m})^{\dagger} C_{k''\chi''m''}^{k'\chi m} \quad =$$

$$= \int_0^\infty dk'' \sum_{x''} \sum_{m''} \left[G^{*}_{x''}(k,k'') G_{x''}(k',k'') + H^{*}_{x''}(k,k'') H_{x''}(k',k'') \right] e^{i\beta (k_0'-k_0)x_0} = \delta(k'-k)$$

Y finalmente, integrando sobre k', por ser k >0,

$$\int_0^\infty dk' \int_0^\infty dk'' \sum_{x''=-x}^{\infty} \sum_{m''=0}^{|x''|-1} \left[G^{*}_{x''}(k,k'') G_{x''}(k',k'') + H^{*}_{x''}(k,k'') H_{x''}(k',k'') \right] e^{i\beta (k_0'-k_0)x_0} = 1 \qquad (5,16)$$

Esto nos asegura que

$$\left| C^{kxm}_{k'x'm'} \right|^2 = \left\{ |G_x(k,k')|^2 + |H_x(k,k')|^2 \right\} e^{i\beta (k_0'-k_0)x_0} \qquad (5,17)$$

es el <u>peso estadístico del estado libre</u> (k', x', m') en la distribución del estado ligado (k, x, m) sobre la totalidad de los estados libres.

La descomposición (5,10) en ondas libres nos da los elementos de matriz de una magnitud M referidos al campo coulombiano, en forma de combinación lineal de los elementos de matriz de la misma magnitud referidos a los estados libres:

$$(k, x, m \,|\, M \,|\, k', x', m') = \int (\psi^{Coul.}_{kxm})^{+} M \, \psi^{Coul.}_{k'x'm'} \, d\tau$$

$$= \int_0^\infty dk'' \int_0^\infty dk''' \sum_{x''} \sum_{m''} \sum_{x'''} \sum_{m'''} \left(C^{kxm}_{k''x''m''}\right)^{\dagger} (k'', x'', m'' \,|\, M \,|\, k''', x''', m''')^{Lib} \cdot C^{k'x'm'}_{k'''x'''m'''} \qquad (5,18)$$

Como en general

$$(k'', x'', m'' \,|\, M \,|\, k''', x''', m''')^{Lib} = \delta_{m'''m''} \left[P^{k''x''}_{k'''x'''} e^{i\beta (k_0'''-k_0'')x_0} + S^{k''x''}_{k'''x'''} e^{i\beta (k_0'''+k_0'')x_0} \right] \qquad (5,19)$$

donde P y S son matrices de primera y de segunda clase respectivamente, se tiene

$$(C^{k\chi m}_{k''\chi''m''})^{+} \quad (k'',\chi'',m'' \mid M \mid k''',\chi''',m''')^{Lib} \; C^{k'\chi'm'}_{k'''\chi'''m'''} = \delta_{m''m}\,\delta_{m'''m'}\,\delta_{m'''m''} \,.$$

$$\begin{aligned}
&\Big\{ \delta_{\chi''\chi}\,\delta_{\chi'''\chi'}\Big[P^{k''\chi''}_{k'''\chi'''}\, G^{*}_{\chi}(k,k'')\, G_{\chi'}(k',k''')\, e^{i\beta(k_0'-k_0)x_0} \\
&\qquad + S^{k''\chi''}_{k'''\chi'''}\, \bar{G}^{*}_{\chi}(k,k'')\, G_{\chi'}(k',k''')\, e^{i\beta(k_0'+k_0)x_0}\Big] \\
&+ \delta_{\chi'',\chi}\,\delta_{\chi''',-\chi}\Big[P^{k''\chi''}_{k'''\chi'''}\, \tau\, \bar{G}^{*}_{\chi}(k,k'')\, H_{\chi'}(k',k''')\, e^{i\beta(k_0'+k_0)x_0} \\
&\qquad + S^{k''\chi''}_{k'''\chi'''}\, \tau\, G^{*}_{\chi}(k,k'')\, H_{\chi'}(k',k''')\, e^{i\beta(k_0'-k_0)x_0}\Big] \\
&+ \delta_{\chi'',-\chi}\,.\,\delta_{\chi''',\chi'}\Big[\tau\,.\, P^{k''\chi''}_{k'''\chi'''}\, \bar{H}^{*}_{\chi}(k,k'')\, G_{\chi'}(k',k''')\, e^{i\beta(k_0'+k_0)x_0} \\
&\qquad + \tau\,.\, S^{k''\chi''}_{k'''\chi'''}\, H^{*}_{\chi}(k,k'')\, G_{\chi'}(k',k'')\, e^{i\beta(k_0'-k_0)x_0}\Big] \\
&+ \delta_{\chi'',-\chi}\,\delta_{\chi''',-\chi'}\Big[\tau\, P^{k''\chi''}_{k'''\chi'''}\, \tau\, H^{*}_{\chi}(k,k'')\, H_{\chi'}(k',k''')\, e^{i\beta(k_0'-k_0)x_0} \\
&\qquad + \tau\, S^{k''\chi''}_{k'''\chi'''}\, \tau\, \bar{H}^{*}_{\chi}(k,k'')\, H_{\chi'}(k',k''')\, e^{i\beta(k_0'+k_0)x_0}\Big]\Big\}
\end{aligned}$$

donde $\bar{G}(\beta) = G(-\beta)$, $\bar{H}(\beta) = H(-\beta)$. Introduciendo en (5,18) queda por último

$$
\begin{aligned}
(k,\chi,m \mid M \mid k',\chi',m') = \delta_{m'm} \int_0^\infty dk'' \int_0^\infty dk''' \Big\{ \\
\Big[P^{k''\chi}_{k'''\chi'}\, G^*_\chi(k,k'')\, G_{\chi'}(k',k''') + \tau P^{k'',-\chi}_{k''',-\chi'}\, \tau\, H^*_\chi(k,k'')\, H_{\chi'}(k',k''') \\
+ S^{k''\chi}_{k''',-\chi'}\, \tau G^*_\chi(k,k'')\, H_{\chi'}(k',k''') + \tau S^{k'',-\chi}_{k''',\chi'}\, H^*_\chi(k,k'')\, G_{\chi'}(k',k''') \Big] e^{i\beta(k'_0-k_0)x_0} \\
+ \Big[P^{k'',\chi}_{k''',-\chi'}\, \tau\, \bar{G}^*_\chi(k,k'')\, H_{\chi'}(k',k''') + \tau P^{k'',-\chi}_{k''',\chi'} \cdot \bar{H}^*_\chi(k,k'')\, G_{\chi'}(k',k''') \\
+ S^{k''\chi}_{k'''\chi'}\, \bar{G}^*_\chi(k,k'')\, G_{\chi'}(k',k''') + \tau S^{k'',-\chi}_{k''',-\chi'}\, \tau\, \bar{H}^*_\chi(k,k'')\, H_{\chi'}(k',k''') \Big] e^{i\beta(k'_0+k_0)x_0} \Big\}
\end{aligned}
\qquad (5,21)
$$

Esta expresión consta de una parte de primera clase (el primer paréntesis cuadrado) y de una de segunda clase (el segundo paréntesis). Los dos primeros términos de la parte de primera clase constituyen simplemente un promedio ponderado sobre los estados libres. Los dos términos restantes de la parte de primera clase contienen la parte fluctuante(de segunda clase) del electrón libre; vale decir, son <u>la contribución observable de las fluctuaciones del electrón libre</u>. El campo eléctrico del núcleo hace, pues, que las partes fluctuantes se manifiesten en forma observable, influyendo sobre el movimiento del electrón.

De modo, pues, que a lo que clásicamente consiste en una simple a aceleración del electrón producida por el campo, se añade un fenómeno nuevo, típico de la teoría de Dirac. Este fenómeno puede atribuirse a la modificación de las propiedades físicas del vacío por la acción de la carga exterior Ze, y la consiguiente influencia de este "vacío polarizado" sobre el movimiento mecánico del electrón.

En particular, la velocidad media del electrón en el campo no es un simple promedio ponderado sobre las velocidades del electrón libre: a la parte observable de la velocidad no sólo contribuyen las propiedades clásicas del campo sino también las propiedades físicas del vacío.

Análogamente, a la parte de segunda clase de (5,21) contribuyen, no solamente las fluctuaciones del electrón libre (contenidas en los dos segundos términos), sino también la parte de primera clase. Esta es una prueba más de la íntima unión de las propiedades mecánicas del electrón con las variables del "carácter" (spin y carga).

C A P I T U L O   VI

LA VELOCIDAD DEL ELECTRON DEL ATOMO HIDROGENOIDE

1.- Densidades

Se vió en I,6 (p.29) que una condición de existencia de autovalores discretos es $\beta = -1$ (lo que significa que el sistema protón-positrón carece de niveles estables). Por (1,18), esto implica que es preciso eliminar las dos segundas columnas de las autofunciones del espectro discreto; o, en otras palabras, que es preciso postmultiplicarlas por el operador idempotente

$$\tfrac{1}{2}(1-\beta) = \begin{Vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{Vmatrix} , \quad \left[\tfrac{1}{2}(1-\beta)\right]^2 = \tfrac{1}{2}(1-\beta)$$

selectivo de la clase. Como consecuencia de esto, la densidad de valor medio del operador M, referida a las autofunciones del espectro discreto, será

$${}^{-}\psi^{\dagger} M \,{}^{-}\psi = \tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\psi^{\dagger} M \psi\, \tfrac{1}{2}(1-\beta) \sim \begin{Vmatrix} x & x & 0 & 0 \\ x & x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{Vmatrix} \qquad (6,1)$$

Las matrices de segunda clase, al ser pre y postmultiplicadas por el operador selectivo de la clase, se anulan:

$$\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\vec{\alpha}\,\tfrac{1}{2}(1-\beta) = 0, \quad \tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\tau\,\tfrac{1}{2}(1-\beta) = 0 \qquad (6,2)$$

En cambio,

$$\tfrac{1}{2}(1-\beta)\sigma_x\tfrac{1}{2}(1-\beta) = \begin{Vmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{Vmatrix}, \quad \tfrac{1}{2}(1-\beta)\sigma_y\tfrac{1}{2}(1-\quad) = \begin{Vmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{Vmatrix} \qquad (6,3)$$

$$\tfrac{1}{2}(1-\beta)\sigma_z\tfrac{1}{2}(1-\beta) = \begin{Vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{Vmatrix}, \quad \tfrac{1}{2}(1-\beta)\, e^{i\beta x}\, \tfrac{1}{2}(1-\beta) = \tfrac{1}{2}(1-\beta)\, e^{-ix} \qquad (6,4)$$

Vale decir, las dos únicas transiciones posibles entre niveles discretos se cumplen con conservación o inversión del spin.

Las densidades de los operadores de la velocidad son

$$\{\alpha_r\} = (\chi^*\varphi + \varphi^*\chi)\,\tfrac{1}{2}(1-\beta)\, Y^+ Y\, \tfrac{1}{2}(1-\beta)\, e^{i\beta(\kappa_0'-\kappa_0)x_0} \qquad (6,5)$$

$$\{\alpha_\vartheta\} = -i(\chi^*\varphi - \varphi^*\chi)\,\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\frac{1}{\operatorname{sen}\vartheta}\, Y^+\sigma_\varphi Y\,\tfrac{1}{2}(1-\beta)\, e^{i\beta(\kappa_0'-\kappa_0)x_0} \qquad (6,6)$$

$$\{\alpha_\varphi\} = i(\chi^*\varphi - \varphi^*\chi)\,\tfrac{1}{2}(1-\beta)\operatorname{sen}\vartheta\, Y^+\sigma_\vartheta\, Y\,\tfrac{1}{2}(1-\beta)\, e^{i\beta(\kappa_0'-\kappa_0)x_0} \qquad (6,7)$$

2.- <u>La velocidad angular</u>

$$(n, \varkappa < 0, m \,|\, \omega^{\vartheta} = -\frac{c\,\alpha_{\vartheta}}{r^2} \,|\, n', \varkappa' < 0, m') = -(n, \varkappa > 0, m \,|\, \omega^{\vartheta} \,|\, n', \varkappa' > 0, m')$$

$$= -c\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)}\,\delta_{m'm}\,I_1\, e^{i(k_0-k_0')x_0}\; N_{\varkappa}(n)\, N_{\varkappa'}(n') \int_0^{\infty} \left[\chi_{\varkappa}^{*}(n)\,\varphi_{\varkappa'}(n') - \varphi_{\varkappa}^{*}(n)\,\chi_{\varkappa'}(n')\right] r\,dr \tag{6,8,a}$$

$$(n, \varkappa < 0, m \,|\, \omega^{\vartheta} \,|\, n', \varkappa' > 0, m') = -(n, \varkappa > 0, m \,|\, \omega^{\vartheta} \,|\, n', \varkappa' < 0, m')$$

$$= +c\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\sigma_z\,\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\delta_{\ell',\ell\pm 2q}\,\delta_{m'm}\,I_2\, e^{i(k_0-k_0')x_0}\,.$$

$$\cdot N_{\varkappa}(n)\, N_{\varkappa'}(n') \int_0^{\infty} \left[\chi_{\varkappa}^{*}(n)\,\varphi_{\varkappa'}(n') - \varphi_{\varkappa}^{*}(n)\,\chi_{\varkappa'}(n')\right] r\,dr \tag{6,8,b}$$

Nuevamente, el valor medio es nulo:

$$\overline{\omega^{\vartheta}} = 0 \tag{6,9}$$

$$(n, \varkappa < 0, m \,|\, \omega^{\varphi} = -\frac{c\,\alpha_{\varphi}}{r^2 \sin^2\theta} \,|\, n', \varkappa' < 0, m') = -(n, \varkappa > 0, m \,|\, \omega^{\varphi} \,|\, n', \varkappa' > 0, m')$$

$$= c\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\sigma_z\,\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\delta_{\ell',\ell\pm 2q}\,\delta_{m'm}\,I_3\, e^{i(k_0-k_0')x_0}\,.$$

$$\cdot i \cdot N_{\varkappa}(n) N_{\varkappa'}(n') \int_0^{\infty} \left[\chi_{\varkappa}^{*}(n)\,\varphi_{\varkappa'}(n') - \varphi_{\varkappa}^{*}(n)\,\chi_{\varkappa'}(n')\right] r\,dr \tag{6,10,a}$$

$$(n, \varkappa < 0, m \,|\, \omega^{\varphi} \,|\, n', \varkappa' > 0, m') = -(n, \varkappa > 0, m \,|\, \omega^{\varphi} \,|\, n', \varkappa < 0, m')$$

$$= -c\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)}\,\delta_{m'm}\,I_4\, e^{i(k_0-k_0')x_0}\, N_{\varkappa}(n) N_{\varkappa'}(n')\; i \int_0^{\infty} \left[\chi_{\varkappa}^{*}(n)\,\varphi_{\varkappa'}(n') - \varphi_{\varkappa}^{*}(n)\,\chi_{\varkappa'}(n')\right] r\,dr \tag{6,10,b}$$

El valor medio de la velocidad angular azimutal es, por C(45),

$$(n_r, \varkappa < 0, m \,|\omega^{\varphi}|\, n_r, \varkappa < 0, m) = -(n_r, \varkappa > 0, m|\omega^{\varphi}|n_r, \varkappa > 0, m)$$

$$= -\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\sigma_z\,\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\frac{cZ\alpha}{a_0/Z}\,\frac{(n-\varkappa)^2\,\Gamma(2\rho+n_r+1)}{n^2\,n_r!\,\rho\,\Gamma(2\rho+1)\left[(n-\varkappa)^2+n_r(2\rho+n_r)\right]}\,.$$

$$\cdot\left\{F_2(2\rho;-n_r,-n_r,2\rho+1,2\rho+1;1,1)-\frac{n_r^2}{(n-\varkappa)^2}F_2(2\rho;-n_r+1,-n_r+1;2\rho+1,2\rho+1;1,1)\right\}.$$

$$\cdot\ {}^{m,m}_{\ell,\ell}I_3 \qquad\qquad n_r > 0 \tag{6,11,a}$$

Y, por C(51), para $n_r=0$ (y en consecuencia para $\varkappa = -\ell-1$),

$$(n_r=0, \varkappa=-\ell-1, m|\omega^{\varphi}|\,n_r=0, \varkappa=-\ell-1, m) =$$

$$= -\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\sigma_z\,\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\frac{cZ\alpha}{a_0/Z}\,\frac{1}{\rho\varkappa^2}\cdot I_3, \qquad n_r=0 \tag{6,11,b}$$

$$= -\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\sigma_z\,\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\frac{cZ\alpha}{a_0/Z}\cdot\frac{1}{(\ell+1)^2}\,\frac{I_3}{\left[(\ell+1)^2-Z^2\alpha^2\right]^{1/2}} \tag{6,11,c}$$

Este resultado coincide, a menos del doble signo y del factor I_3 (que es del orden de la unidad) con el valor (3,1) que dan las teorías de Bohr y de Schrödinger, en la aproximación $\alpha^2=0$ y para $n = \ell+1$. La integral angular I_3 representa la corrección debida al spin; la corrección relativista está representada por la constante de la estructura fina.

Para comparar los resultados de la teoría cuántica moderna con los de la teoría de Bohr, es preciso tomar ℓ =m; clásicamente, esto significa que,para grandes valores del momento angular, las órbitas tienden a disponerse sobre el plano ecuatorial (como,en efecto,ocurre en mecánica clásica). En este caso, por A(53), $I_3=1$, de modo que

$$\overline{\omega^{\varphi}} = -\frac{1}{2}(1-\beta)\,\sigma_z\,\frac{1}{2}(1-\beta)\,\frac{cZ\alpha}{a_0/Z}\,\frac{1}{(\ell+1)^2}\,\frac{\lambda}{\left[(\ell+1)^2-Z^2\alpha^2\right]^{1/2}} \qquad (6,11,d)$$

3.- La velocidad lineal

La velocidad radial es nula:

$$(n, \varkappa < 0, m \mid V_r = -c\alpha_r \mid , n, \varkappa' < 0, m) = (n, \varkappa > 0, m \mid V_r \mid n', \varkappa' > 0, m')$$

$$= -c\,\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\delta_{\ell'\ell}\,\delta_{m'm}\,e^{i(k_0-k_0')x_0}\,.N_\varkappa(n_r)N_\varkappa(n_r')\int_0^\infty\left[\chi_\varkappa^*(n_r)\varphi_\varkappa(n_r')+\varphi_\varkappa^*(n_r)\chi_\varkappa(n_r')\right]r^2 d$$

$$= 0 \qquad (6,12,a)$$

por C(52). (Si $n_r = n_r'$, el integrando es nulo por (1,111,a); si $n_r = n_r'$, la corriente radial no es nula, pero sí lo es su promedio espacial, por la ortogonalidad C(32) de los polinomios de Kummer.)

$$(n, \varkappa < 0, m \mid V_r \mid n', \varkappa' > 0, m') = (n, \varkappa < 0, m \mid V_r \mid n', \varkappa' > 0, m') = 0 \qquad (6,12,b)$$

La componente latitudinal V_ϑ difiere de la velocidad angular correspondiente en que, en las integrales radiales, figura r^2 en lugar de r.

La componente azimutal es

$$(n, \varkappa < 0, m \quad V_\varphi = -\frac{c\alpha_\varphi}{r\,\mathrm{sen}\,\vartheta} \quad n', \varkappa < 0, m') = -(n, \varkappa > 0, m \mid V_\varphi \mid n', \varkappa' > 0, m')$$

$$= c\,\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\sigma_z\,\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\delta_{\ell',\ell\pm 2q}\,.\,\delta_{m'm}\;I_2.\;e^{i(k_0-k_0')x_0}\,.$$

$$.i\,N_\varkappa(n_r)N_{\varkappa'}(n_r')\int_0^\infty\left[\chi_\varkappa^*(n_r)\varphi_{\varkappa'}(n_r')-\varphi_\varkappa^*(n_r)\chi_{\varkappa'}(n_r')\right]r^2\,dr \qquad (6,13,a)$$

$$(n,\varkappa<0,m \mid V_\varphi \mid n',\varkappa'>0,m') = -(n,\varkappa>0,m \mid V_\varphi \mid n',\varkappa'<0,m')$$

$$= -c\,\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)}\,\delta_{m'm}\,I_1 \cdot e^{i(k_0-k_0')x_0}$$

$$\cdot i\, N_\varkappa(n_r) N_{\varkappa'}(n_r') \int_0^\infty \left[\chi_\varkappa^{+}(n_r)\,\varphi_{\varkappa'}(n_r') - \varphi_\varkappa^{+}(n_r)\,\chi_{\varkappa'}(n_r')\right] r^2\,dr \qquad (6,13,b)$$

La velocidad lineal azimutal media es, por C(40),

$$(n,\varkappa<0,m \mid V_\varphi \mid n,\varkappa<0,m) = -(n,\varkappa>0,m \mid V_\varphi \mid n,\varkappa>0,m)$$

$$= -\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\sigma_z\,\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\frac{cZ\alpha}{n}\cdot\frac{(n-\varkappa)^2 - n_r(2\rho+n_r)}{[(n-\varkappa)^2 + n_r(2\rho+n_r)]}\cdot I_2 \qquad (6,14a)$$

Para $n_r=0$,

$$(n_r=0,\varkappa=-\ell-1,m \mid V_\varphi \mid n_r=0,\varkappa=-\ell-1,m) \qquad (6,14b)$$

$$= -\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\sigma_z\,\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\frac{cZ\alpha}{\ell+1}\cdot I_2$$

A menos del signo y del factor I_2, que es del orden de la unidad, este resultado coincide con el (3,2) de la teoría de Bohr. Para $m=\ell>0$, por A(49a),

$$\overline{V}_\varphi = -\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\sigma_z\,\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\frac{cZ\alpha}{m+1}\,\frac{(2m+1)}{2m}\,\frac{\pi}{2}\,,\quad m>0 \qquad (6,14c)$$

4.- La velocidad areolar

La componente latitudinal A_ϑ se obtiene a partir de (6,8) multiplicando el integrando de la integral radial por r^2.

La componente azimutal es

$$(n, \varkappa < 0, m \mid A_\varphi = -c\,\alpha_\varphi \mid n', \varkappa' < 0, m') = -(n, \varkappa > 0, m \mid A_\varphi \mid n', \varkappa' > 0, m')$$

$$= c\ \tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\sigma_z\ \tfrac{1}{2}(1-\beta)\ \delta_{\ell', \ell - 2q}\ \delta_{m'm}\ I_5\ e^{i(k_0 - k_0')x_0}\ .$$

$$.\,i\ N_\varkappa(n_r) N_{\varkappa'}(n_r') . \int_0^\infty \left[\chi_\varkappa^*(n_r)\varphi_{\varkappa'}(n_r') - \varphi_\varkappa^*(n_r)\chi_{\varkappa'}(n_r')\right] r^3\, dr \qquad (6,15,a)$$

$$(n, \varkappa < 0, m \mid A_\varphi \mid n', \varkappa' > 0, m) = -(n, \varkappa > 0, m \mid A_\varphi \mid n', \varkappa' < 0, m')$$

$$= -c\ \tfrac{1}{2}(1-\beta)\ \delta_{\ell', \ell \pm 1}\ \delta_{m'm} I_6\ e^{i(k_0 - k_0')x_0}\ .$$

$$.\,i\ N_\varkappa(n_r) N_{\varkappa'}(n_r') . \int_0^\infty \left[\chi_\varkappa^*(n_r)\varphi_{\varkappa'}(n_r') - \varphi_\varkappa^*(n_r)\chi_{\varkappa'}(n_r')\right] r^3\, dr \qquad (6,15b)$$

El valor medio para $n_r = 0$ es, por A(58) y C(51),

$$(n_r = 0, \varkappa < 0, m \mid A_\varphi \mid n_r = 0, \varkappa < 0, m)$$

$$= -\tfrac{1}{2}(1-\beta)\,\sigma_z\,\tfrac{1}{2}(1-\beta)\ c\,\alpha\,a_0\,(\rho + 1/2)\ \frac{2(2m-1)\left[(m+1)m + (\ell+1)^2\right]}{(2\ell+1)^2(2\ell+3)} \qquad (6,16a)$$

Para comparar con la teoría de Bohr ponemos $\ell = m$; vemos así que el valor obtenido coincide con el clásico a menos de un factor proveniente del spin.

5.- Transiciones discreto- continuo

Las transiciones posibles del electrón en un campo coulombiano son cuatro:

a)transiciones libre-libre (CapítuloV),

b) " ligado-ligado (Capítulo VI)

c) " ligado-libre (ionización)

d) " libre-ligado (captura)

Las densidades de una magnitud M asociadas a las dos últimas transiciones son, recordando la (1,18),

Ionización

$$\frac{1}{2}(1-\beta)\,\overset{+}{\psi}_x(n_r)\,M\,\psi_{x'}(k) \sim \begin{Vmatrix} x & x & x & x \\ x & x & x & x \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{Vmatrix}$$

Captura

$$\overset{+}{\psi}_x(k)\,M\,\psi_{x'}(n_r)\,\frac{1}{2}(1-\beta) \sim \begin{Vmatrix} x & x & 0 & 0 \\ x & x & 0 & 0 \\ x & x & 0 & 0 \\ x & x & 0 & 0 \end{Vmatrix}$$

Las densidades de los operadores de la velocidad son, indicando con el subíndice i la transición discreto-continuo y con c la inversa,

$$\{\alpha_r\}_i = \tfrac{1}{2}(1-\beta)\left\{(\chi^*\varphi-\varphi^*\chi)\,Y^{+}Y\,e^{i\beta(\kappa_0'-\kappa_0)x_0}+(\chi^*\bar{\chi}+\varphi^*\bar{\varphi})\,Y^{+}\alpha_r Y e^{i\beta(\kappa_0'+\kappa_0)x_0}\right\}$$

(6,17a)

$$\{\alpha_r\}_c = \left\{(\chi^*\varphi+\varphi^*\chi)\,Y^{+}Y\,e^{i\beta(\kappa_0'-\kappa_0)x_0}+(\chi^*\chi+\varphi^*\varphi)\,Y^{+}\alpha_r Y\,e^{i\beta(\kappa_0'+\kappa_0)x_0}\right\}\cdot\tfrac{1}{2}(1-\beta)$$

(6,17b)

$$\{\alpha_\vartheta\}_i = \tfrac{1}{2}(1-\beta)\left\{-i(\chi^*\varphi-\varphi^*\chi)\,\frac{1}{\operatorname{sen}\vartheta}\,Y^{+}\sigma_\varphi Y\,e^{i\beta(\kappa_0'-\kappa_0)x_0}\right.$$
$$\left.+(\chi^*\bar{\chi}-\varphi^*\bar{\varphi})\,Y^{+}\alpha_\vartheta Y\,e^{i\beta(\kappa_0'+\kappa_0)x_0}\right\} \quad (6,18a)$$

$$\{\alpha_\vartheta\}_c = \left\{-i(\chi^*\varphi-\varphi^*\chi)\,\frac{1}{\operatorname{sen}\vartheta}\,Y^{+}\sigma_\varphi Y\,e^{i\beta(\kappa_0'-\kappa_0)x_0}\right.$$
$$\left.+(\chi^*\chi-\varphi^*\varphi)\,Y^{+}\alpha_\vartheta Y\,e^{i\beta(\kappa_0'+\kappa_0)x_0}\right\}\cdot\tfrac{1}{2}(1-\beta) \quad (6,18b)$$

$$\{\alpha_\varphi\}_i = \tfrac{1}{2}(1-\beta)\left\{i(\chi^*\varphi-\varphi^*\chi)\operatorname{sen}\vartheta\,Y^{+}\sigma_\vartheta Y\,e^{i\beta(\kappa_0'-\kappa_0)x_0}\right.$$
$$\left.+(\chi^*\bar{\chi}-\varphi^*\bar{\varphi})\,Y^{+}\alpha_\varphi Y\,e^{i\beta(\kappa_0'+\kappa_0)x_0}\right\} \quad (6,19a)$$

$$\{\alpha_\varphi\}_c = \left\{i(\chi^*\varphi-\varphi^*\chi)\operatorname{sen}\vartheta\,Y^{+}\sigma_\vartheta Y\,e^{i\beta(\kappa_0'-\kappa_0)x_0}\right.$$
$$\left.+(\chi^*\chi-\varphi^*\varphi)\,Y^{+}\alpha_\varphi Y\,e^{i\beta(\kappa_0'+\kappa_0)x_0}\right\}\tfrac{1}{2}(1-\beta) \quad (6,19b)$$

Las integrales radiales correspondientes se tratan en el Apéndice C,4. En las transiciones continuo-discreto, las partes de segunda clase están asociadas únicamente a procesos $\oplus \to \ominus$, como es obvio, en tanto que en las transiciones inversas las mismas corresponden a procesos $\ominus \to \oplus$. Puede verse que, a diferencia de los casos anteriores, la velocidad radial para transiciones $\varkappa' = \varkappa$ es diferente de 0, lo mismo que en el caso no relativista.

C O N C L U S I O N

LA IMAGEN FISICA DEL ATOMO

La primera imagen física del átomo fué el modelo geométrico de Rutherford y Bohr. En la primitiva teoría de Bohr, los electrones describían en torno al núcleo órbitas newtonianas perfectamente definidas, con la sola restricción de que estaban cuantificadas (condiciones de estacionariedad). En cada instante, el electrón que recorría una órbita poseía una velocidad bien definida.

De acuerdo a la interpretación corriente de la mecánica cuántica, formalizada en las teorías de Schrödinger, Heisenberg y Dirac, en general ya no es posible atribuir valores bien determinados a una cantidad física dada, sino una distribución de valores. En particular, en lugar de posiciones y velocidades tenemos ahora distribuciones de las mismas, las que permiten obtener los valores medios y las fluctuaciones, o desviaciones standard, de dichas cantidades en torno a sus valores medios.

Subsiste empero una estrecha analogía entre la imagen del átomo de hidrógeno provista por la mecánica cuántica y la imagen primitiva de Rutherford y Bohr. Por ejemplo, el valor medio de la distancia del electrón al núcleo, así como la velocidad media del mismo, son vecinos a los correspondientes valores de Bohr; y los valores propios del impulso angular L_z coinciden con los valores cuantificados de Bohr. De manera que, en grandes líneas, la imagen del átomo dada por la teoría de Bohr resulta como promedio de las distribuciones cuánticas.

Así como la mecánica de Schrödinger contiene a la de Newton, la de Dirac generaliza a su vez a aquélla con el objeto de dar cuenta del spin del electrón y de los fenómenos relativistas. Ambos efectos conducen a correcciones cuantitativas de los resultados obtenidos por la teoría de Schrödinger. Las principales modificaciones cualitativas introducidas por esta teoría son el doble signo de la energía, y el spin del electrón. La inclusión del spin, conforme a la teoría previamente propuesta por Pauli, conduce a una nueva clase de fluctuaciones, las del spin, que se añaden a las fluctuaciones ordinarias de la mecánica ondulatoria, y a las que podemos asociar la imagen de una precesión del spin durante su movimiento.

Una modificación tanto o más radical que la provocada por el descubrimiento del spin fué la referente a los dos signos de la energía, que corresponde a dos estados diferentes de la carga del electrón. Esta bivalencia de la carga conduce a fluctuaciones; en particular, las fluctuaciones que corresponden a transiciones entre estados de carga diferentes, aparecen en el formalismo hipercomplejo como elementos de matriz de segunda clase, y tienen propiedades matemáticas y físicas distintas de las fluctuaciones del spin.

En el caso de la velocidad, estas fluctuaciones aparecen formalmente como oscilaciones muy rápidas y de gran amplitud, que se intentó explicar como un "movimiento de temblor"(<u>Zitterbewegung</u>). Uno de los propósitos de este trabajo fué poner de manifiesto las fluctuaciones de segunda clase de la velocidad en coordenadas polares.

Cuando pasamos de la cinemática a la dinámica nos encontramos con la siguiente situación. En la mecánica clásica se puede aproximar cada arco de una órbita por su tangente; correspondientemente, en la mecánica ondulatoria no relativista, cada estado del electrón en un campo exterior puede describirse como un promedio ponderado sobre los estados del electrón libre(análisis de Fourier), y por consiguiente los valores medios de una cantidad son valores medios ponderados sobre los estados libres. Pero en la teoría de Dirac,la intervención de los estados libres de energía negativa (o de signo positivo de la carga) en la composición de un estado ligado, excluye la interpretación anterior dada por la teoría de Schrödinger.En particular, en la teoría relativista la velocidad media no puede ser considerada ya como un valor medio ponderado de la distribución de los movimientos de un electrón libre: además de estos valores medios intervienen las fluctuaciones de segunda clase, que contribuyen a los valores observables. Tal es lo que se muestra en el Capítulo V,6.

Esto muestra que la dinámica del electrón de Dirac es más compleja que la dinámica de Schrödinger, ya que el campo no sólo modifica directamente la distribución de las velocidades sino que también interviene indirectamente, por intermedio de las fluctuaciones de segunda clase. Esta intervención simultánea de los dos estados de carga es la característica cualitativamente nueva de la teoría de Dirac, y lo que impide considerarla como una simple generalización de la teoría de Schrödinger para movimientos rápidos.

Carecemos todavía de una imagen física satisfactoria de los estados cuánticos de un átomo en la teoría relativista. Es probable que una imagen más correcta no se limite a una sola partícula, sino que haga intervenir un número indeterminado de partículas (o de grados de libertad). En efecto, el experimento de Lamb y Retherford[1] nos muestra que la teoría de Dirac no describe con entera exactitud la posición de los niveles energéticos del átomo de hidrógeno. Para llegar a una descripción más exacta debe incluirse la influencia de las fluctuaciones del campo electromagnético en el vacío-- tal como es descripto por la electrodinámica cuántica-- y la polarización del vacío, según los nuevos métodos elaborados por Tomonaga, Schwinger, Feynman y otros.

---

1 W.E. Lamb,Jr. y R.C. Retherford, Phys. Rev., 72, 241 (1947).

APENDICE A

INTEGRALES ANGULARES

C A P I T U L O I

INTEGRALES ANGULARES DE LA TEORIA DE SCHRÖDINGER

1.- Integral B

Antes de calcular la integral

$$B^{m,m}_{\ell,\ell'} = 2\pi\, N^m_\ell\, N^m_{\ell'} \int_0^\pi \frac{P^m_\ell\, P^m_{\ell'}}{\operatorname{sen}\vartheta}\, \operatorname{sen}\vartheta\, d\vartheta \qquad A(1)$$

observemos que, por razones de paridad, su regla de selección es

$$B^{m,m}_{\ell,\ell'} \propto \delta_{\ell',\ell\pm 2q} \quad , \qquad q = 0,1,2,\ldots \qquad A(2)$$

El cálculo se hace fácilmente para los elementos diagonales, que son los más interesantes. Para ello utilizamos la fórmula [1]

$$\left[P^m_\ell(\cos\vartheta)\right]^2 = \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!} \sum_{r=m}^{\ell} \frac{(-1)^{r+m}\,(2r)!\,(\ell+r)!}{(r-m)!\,(r+m)!\,(r!)^2\,(\ell-r)!}\, \operatorname{sen}^{2r}\vartheta \qquad A(3)$$

y el conocido resultado

$$\int_0^\pi \operatorname{sen}^{2r}\vartheta\, d\vartheta = \frac{1.3.5\ldots(2r-1)}{2.4\ldots 2r}\,\pi \qquad A(4)$$

Con esto, se obtiene

$$\int_0^\pi \left[P^m_\ell(\cos\vartheta)\right]^2 d\vartheta = \pi\, \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!} \sum_{r=m}^{\ell} \frac{(-1)^{m+r}(\ell+r)!}{(r-m)!\,(r+m)!\,(\ell-r)!} \left[\frac{(2r)!}{r!\,2.4\ldots 2r}\right]^2 \qquad A(5)$$

---

1 E.W. Hobson, The Theory of Spherical and Ellipsoidal Harmonics (Cambridge, University Press, 1931), p. 176.

y por lo tanto

$$B^{m,m}_{\ell,\ell} = \pi(\ell+1/2)\sum_{r=m}^{\ell}(-)^{m+r}\frac{(\ell+r)!}{(r-m)!\,(r+m)!\,(\ell-r)!}\left[\frac{(2r)!}{r!\;2.4\ldots 2r}\right]^2 \qquad A(6)$$

En particular, para $\ell' = \ell = m$, resulta

$$B^{m,m}_{m,m} = (\ell+1/2)\,\pi\left[\frac{(2m)!}{m!\;2.4\ldots 2m}\right]^2 \qquad m\ 0 \qquad A(7)$$

y para m=0,

$$B^{00}_{00} = \frac{\pi}{2} \qquad A(8)$$

2.- Integral A

En la integral

$$A^{mm}_{\ell\ell'} = 2\pi\, N^m_\ell N^{m*}_{\ell'}\int_0^\pi P^m_\ell\left[\frac{\partial P^m_{\ell'}}{\partial\vartheta}+\frac{1}{2}\cot g\vartheta\, P^m_{\ell'}\right]\operatorname{sen}\vartheta\, d\vartheta \qquad A(9)$$

introducimos las conocidas relaciones

$$\frac{\partial P^m_{\ell'}}{\partial\vartheta} = m\cot g\vartheta\; P^m_{\ell'} - P^{m+1}_{\ell'} \qquad A(10)$$

$$P^{m+1}_{\ell'} = \frac{1}{(2\ell'+1)\operatorname{sen}\vartheta}\left[(\ell'+m)(\ell'+m+1)\,P^m_{\ell'-1} - (\ell'-m)(\ell'-m+1)\,P^m_{\ell'+1}\right] \qquad A(11)$$

$$\cos\vartheta\; P^m_{\ell'} = (2\ell'+1)^{-1}\left[(\ell'+m)\,P^m_{\ell'-1} + (\ell'-m+1)\,P^m_{\ell'+1}\right] \qquad A(12)$$

$$\frac{\partial P^m_{\ell'}}{\partial\vartheta} = \frac{1}{2\operatorname{sen}\vartheta}\left[(\ell'-m+1)\,P^m_{\ell'+1} - (\ell'+m)\,P^m_{\ell'-1}\right] \qquad A(13)$$

De esta manera, la integral dada se reduce a una combinación de las tratadas anteriormente:

$$A_{\ell\ell'}^{m\,m} = \frac{1}{2}\left[(\ell'-m+1)\, B_{\ell,\ell'+1}^{m,m} - (\ell'+m)\, B_{\ell,\ell'-1}^{m,m}\right] \qquad A(14)$$

lo que nos muestra que la regla de selección es

$$A_{\ell,\ell'}^{m,m} \propto \delta_{\ell',\ell\pm(2q+1)} \qquad q=0,1,2,\ldots \qquad A(15)$$

C A P I T U L O II

INTEGRALES ANGULARES DE LA TEORIA DE DIRAC

1.- Introducción

En última instancia, los integrandos angulares que aparecen en la densidad de una magnitud cualquiera(en coordenadas polares) son , a menos de factores no matriciales, los 6 siguientes:

$$\left(Y_{-x}^{m}\right)^{+}\sigma_i Y_{-x'}^{m'} \quad , \quad \left(Y_{-x}^{m}\right)^{+}\sigma_i\, e^{i\sigma_z\varphi}\, Y_{-x'}^{m'} \qquad A(16)$$

donde las σ_i son las componentes rectangulares de $\vec{\sigma}$. Esta simplificación se debe, por una parte,a que cualquier componente polar se expresa en términos de las cartesianas; por la otra, a las relaciones (1,52), que permiten emplear exclusivamente las funciones Y_{-x}^{m} correspondientes a $x<0$.

Demostraremos, ante todo, las relaciones de ortonormalidad (1,55) y (1,56). El producto interno de dos soluciones angulares correspondientes a números x y x' del mismo signo es

$$\iint\left(Y_{x}^{m}\right)^{+} Y_{x'}^{m'}\, d\Omega = \iint\left(Y_{-x}^{m}\right)^{+} Y_{-x'}^{m'}\, d\Omega$$

$$= \iint(\theta_1+\theta_2)\, e^{i\sigma_z(m'-m)\varphi}\, d\Omega + i\sigma_y\iint(\theta_3-\theta_4)\, e^{i\sigma_z(m'+m+1)\varphi}\, d\Omega \qquad A(17)$$

donde

$$(\theta_1\pm\theta_2) = \frac{1}{4\pi}\left[\frac{(l-m)!\,(l'-m')!}{(l+m+1)!\,(l'+m'+1)!}\right]^{1/2}\Big[(l+m+1)(l'+m'+1)\, P_l^{m} P_{l'}^{m'} \pm P_l^{m+1} P_{l'}^{m'+1}\Big] \qquad A(18)$$

$$(\partial_3 \pm \partial_4) = \frac{1}{4\pi}\left[\frac{(l-m)!\,(l'-m')!}{(l+m+1)!\,(l'+m'+1)!}\right]^{1/2}\Big[(l+m+1)\,P_l^m\,P_{l'}^{m'+1}$$

$$\pm(l'+m'+1)\,P_l^{m+1}\,P_{l'}^{m'}\Big] \qquad A(19)$$

son abreviaturas que empleamos en todo el presente trabajo.

Las integraciones sobre el azimut son ~~A(20)~~

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{i\sigma_z(m'-m)\varphi}\,d\varphi = \delta_{m',m} \qquad A(20,a)$$

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{i\sigma_z(m'+m+1)}\,d\varphi = \delta_{m',-(m+1)} \qquad A(20,b)$$

Pero, por (1,50), las transiciones m'$\rightarrow$ -(m+1) no existen, ya que m y m' deben ser siempre $\geqslant$ 0. Por consiguiente, la segunda integral es 0. Así queda finalmente, teniendo en cuenta la ortonormalidad de las funciones esféricas

$$\int_{-1}^{1} P_l^m(\mu)\,P_{l'}^m(\mu)\,d\mu = \delta_{l'l}\,\frac{2}{2l+1}\,\frac{(l+m)!}{(l-m)!} \qquad A(21)$$

la relación (1,55)

$$\iint (Y_{-\varkappa}^m)^{\dagger}\,Y_{-\varkappa'}^{m'}\,d\Omega = \iint (Y_{\varkappa}^m)^{\dagger}\,Y_{\varkappa'}^{m'}\,d\Omega = \delta_{l'l}\,\delta_{m'm} \qquad A(22)$$

Las soluciones angulares correspondientes a números $\varkappa$ y $\varkappa'$ de signos opuestos son ortogonales entre sí. La demostración es sencilla. Por (1,52),

$$(Y_{-\varkappa}^m)^{\dagger}\,Y_{\varkappa'}^{m'} = (Y_{\varkappa}^m)^{\dagger}\,Y_{-\varkappa'}^{m'} = (Y_{-\varkappa}^m)^{\dagger}\,\sigma_r\,Y_{-\varkappa'}^{m'}$$

$$= \tau\cdot(Y_{-\varkappa}^m)^{\dagger}\left[\alpha_x\,e^{i\sigma_z\varphi}\,\mathrm{sen}\,\vartheta + x_z\cos\vartheta\right]Y_{-\varkappa'}^{m'}$$

$$= \sigma_x \left[(\theta_1 - \theta_2)\,\mathrm{sen}\,\vartheta + (\theta_3 + \theta_4)\cos\vartheta \right] e^{i\sigma_z (m' + m + 1)\varphi}$$

$$+ \sigma_z \left[(\theta_1 - \theta_2)\cos\vartheta - (\theta_3 + \theta_4)\,\mathrm{sen}\,\vartheta \right] e^{i\sigma_z (m' - m)\varphi}$$

Al integrar respecto de φ, el primer término se anula por lo que se dijo anteriormente, quedando así

$$\iint (Y_{-x}^{m})^{+} Y_{x'}^{m'}\, d\Omega = \tau \iint (Y_{-x}^{m})^{+} \alpha_r Y_{-x'}^{m'}\, d\Omega$$

$$= \sigma_z \,.\, 2\pi\, \delta_{m'm} \int_0^{\pi} \left[(\theta_1 - \theta_2)\cos\vartheta - (\theta_3 + \theta_4)\,\mathrm{sen}\,\vartheta \right] \mathrm{sen}\,\vartheta\, d\vartheta$$

Ahora introducimos las relaciones de recurrencia A(12) y

$$\mathrm{sen}\,\vartheta\; P_{\ell}^{m} = (2\ell+1)^{-1} \left[P_{\ell+1}^{m+1} - P_{\ell-1}^{m+1} \right], \qquad \text{A(23)}$$

con lo cual el integrando se convierte en

$$(\theta_1 - \theta_2)\cos\vartheta - (\theta_3 + \theta_4)\,\mathrm{sen}\,\vartheta = \frac{1}{4\pi} \left[\frac{(\ell-m)!\,(\ell'-m)!}{(\ell+m+1)!\,(\ell'+m+1)!} \right]^{1/2} .$$

$$. \left\{ \frac{(\ell+m+1)(\ell'-m+1)}{2\ell+1} \left[(\ell+m) P_{\ell-1}^{m} - (\ell-m+1) P_{\ell+1}^{m} \right] P_{\ell'}^{m} \right.$$

$$\left. + \frac{(\ell-m) - (\ell+m+1)^2}{2\ell+1} P_{\ell+1}^{m+1} P_{\ell'}^{m+1} - \frac{(\ell'+m+1)}{2\ell'+1} \left[P_{\ell'+1}^{m+1} - P_{\ell'-1}^{m+1} \right] P_{\ell}^{m+1} \right\}$$

La integral de esta expresión difiere de 0 únicamente si $\ell' = \ell \pm 1$. Tomemos por ejemplo $\ell' = \ell - 1$ (la demostración para el caso restante es igualmente inmediata); por A(21),

$$\int_0^{\pi} \{\quad\} \,\mathrm{sen}\,\vartheta\, d\vartheta = \frac{(\ell+m)^2 (\ell+m+1)}{2\ell+1} \frac{2}{2\ell-1} \frac{(\ell+m-1)!}{(\ell-m-1)!} - \frac{(\ell+m)}{2\ell-1} \frac{2}{2\ell+1} \frac{(\ell+m+1)!}{(\ell-m-1)!} = 0$$

Hemos demostrado así la (1,56):

$$\iint (Y_{-x}^{m})^{+} Y_{x'}^{m'}\, d\Omega = \iint (Y_{x}^{m})^{+} Y_{-x'}^{m'}\, d\Omega = 0 \qquad \text{A(24)}$$

De paso hemos obtenido un resultado que se emplea en el texto:

$$\iint \left(Y_{-x}^{m}\right)^{\dagger} \alpha_r \, Y_{-x'}^{m'} \, d\Omega = \iint \left(Y_{x}^{m}\right)^{\dagger} \alpha_r \, Y_{x'}^{m'} \, d\Omega = 0 \qquad A(25)$$

el que se complementa con este otro, equivalente a la relación A(22) si se recuerdan las relaciones (1,52):

$$\iint \left(Y_{-x}^{m}\right)^{\dagger} \alpha_r \, Y_{x'}^{m'} \, d\Omega = \iint \left(Y_{x}^{m}\right)^{\dagger} \alpha_r \, Y_{-x'}^{m'} \, d\Omega = \tau \cdot \delta_{\ell'\ell} \, \delta_{m'm} \qquad A(26)$$

2.- Expresiones explícitas de los integrandos

Recordando la definición de Y y teniendo en cuenta las abreviaturas θ_i definidas por (A,18) y A(19), se obtiene

$$\left(Y_{-x}^{m}\right)^{\dagger}\sigma_x Y_{-x'}^{m'} = \sigma_x\left[\theta_1 e^{i\sigma_z(m'+m+1)\varphi} - \theta_2 e^{i\sigma_z(m'+m+2)\varphi}\right] - \sigma_z\left[\theta_3 e^{i\sigma_z(m'-m+1)\varphi} + \theta_4 e^{i\sigma_z(m'-m-1)\varphi}\right] \qquad A(27)$$

$$\left(Y_{-x}^{m}\right)^{\dagger}\sigma_y Y_{-x'}^{m'} = \sigma_y\left[\theta_1 e^{i\sigma_z(m'+m)\varphi} + \theta_2 e^{i\sigma_z(m'+m+2)\varphi}\right] + i\left[\theta_3 e^{i\sigma_z(m'-m+1)\varphi} - \theta_4 e^{i\sigma_z(m'-m-1)\varphi}\right] \qquad A(28)$$

$$\left(Y_{-x}^{m}\right)^{\dagger}\sigma_z Y_{-x'}^{m'} = \sigma_z(\theta_1-\theta_2) e^{i\sigma_z(m'-m)\varphi} + \sigma_x(\theta_3+\theta_4) e^{i\sigma_z(m'+m+1)\varphi} \qquad A(29)$$

$$\left(Y_{-x}^{m}\right)^{\dagger}\sigma_x e^{i\sigma_z\varphi} Y_{-x'}^{m'} = \sigma_x(\theta_1-\theta_2) e^{i\sigma_z(m'+m+1)\varphi} - \sigma_z(\theta_3+\theta_4) e^{i\sigma_z(m'-m)\varphi} \qquad A(30)$$

$$\left(Y_{-x}^{m}\right)^{\dagger}\sigma_y e^{i\sigma_z\varphi} Y_{-x'}^{m'} = \sigma_y(\theta_1+\theta_2) e^{i\sigma_z(m'+m+1)\varphi} + i(\theta_3-\theta_4) e^{i\sigma_z(m'-m)\varphi} \qquad A(31)$$

$$\left(Y_{-x}^{m}\right)^{\dagger}\sigma_z e^{i\sigma_z\varphi} Y_{-x'}^{m'} = \sigma_z\left[\theta_1 e^{i\sigma_z(m'-m+1)\varphi} - \theta_2 e^{i\sigma_z(m'-m-1)\varphi}\right] + \sigma_x\left[\theta_3 e^{i\sigma_z(m'+m)\varphi} - \theta_4 e^{i\sigma_z(m'+m+2)\varphi}\right] \qquad A(32)$$

Mediante estas expresiones podemos calcular los integrandos

$$Y^{+}\alpha_r Y \quad , \quad Y^{+}\alpha_\vartheta Y, \quad Y^{+}\alpha_\varphi Y$$

para las 4 transiciones $\chi \to \chi'$ **mencionadas en (1,57). En efecto, merced a las (1,33) resulta**

$$(Y_{-\chi}^{m})^{+}\alpha_r Y_{-\chi'}^{m'} = (Y_{\chi}^{m})^{+}\alpha_r Y_{\chi'}^{m'} =$$

$$= \operatorname{sen}\vartheta\,(Y_{-\chi}^{m})^{+}\alpha_x e^{i\sigma_z\varphi} Y_{-\chi'}^{m'} + \cos\vartheta\,(Y_{-\chi}^{m})^{+}\alpha_z Y_{-\chi'}^{m'}$$

$$= \alpha_z\left[\cos\vartheta\,(\theta_1-\theta_2) - \operatorname{sen}\vartheta\,(\theta_3+\theta_4)\right] e^{i\sigma_z(m'-m)\varphi}$$
$$+ \alpha_x\left[\operatorname{sen}\vartheta\,(\theta_1-\theta_2) - \cos\vartheta\,(\theta_3+\theta_4)\right] e^{i\sigma_z(m'+m+1)\varphi} \qquad A(33a)$$

$$(Y_{-\chi}^{m})^{+}\alpha_r Y_{\chi'}^{m'} = (Y_{\chi}^{m})^{+}\alpha_r Y_{\chi'}^{m'} = \tau(Y_{-\chi}^{m})^{+} Y_{-\chi'}^{m'}$$

$$= \tau\,(\theta_1+\theta_2)\, e^{i\sigma_z(m'-m)\varphi} + i\alpha_y\,(\theta_3-\theta_4)\, e^{i\sigma_z(m'+m+1)\varphi} \qquad A\ (33b)$$

$$(Y_{-\chi}^{m})^{+}\alpha_\vartheta Y_{-\chi'}^{m'} = -(Y_{\chi}^{m})^{+}\alpha_\vartheta Y_{\chi'}^{m'}$$

$$= r\cos\vartheta\,(Y_{-\chi}^{m})^{+}\alpha_x e^{i\sigma_z\varphi} Y_{-\chi'}^{m'} - r\operatorname{sen}\vartheta\,(Y_{-\chi}^{m})^{+}\alpha_z Y_{-\chi'}^{m'}$$

$$= -\alpha_z\left[r\operatorname{sen}\vartheta\,(\theta_1-\theta_2) + r\cos\vartheta\,(\theta_3+\theta_4)\right] e^{i\sigma_z(m'-m)\varphi}$$

$$+ \alpha_x\left[r\cos\vartheta\,(\theta_1-\theta_2) - r\operatorname{sen}\vartheta\,(\theta_3+\theta_4)\right] e^{i\sigma_z(m'+m+1)\varphi}$$

$$A(34a)$$

$$(Y^{m}_{-\varkappa})^{\dagger}\alpha_{\theta}\,Y^{m'}_{\varkappa'} = -(Y^{m}_{\varkappa})^{\dagger}\alpha_{\theta}\,Y^{m'}_{-\varkappa'} = -\frac{i}{\operatorname{sen}\vartheta}(Y^{m}_{-\varkappa})^{\dagger}\alpha_{\varphi}\,Y^{m'}_{-\varkappa'} \qquad A(34b)$$

por (1,40,a).

$$(Y^{m}_{-\varkappa})^{\dagger}\alpha_{\varphi}\,Y^{m'}_{-\varkappa'} = -(Y^{m}_{\varkappa})^{\dagger}\alpha_{\varphi}\,Y^{m'}_{\varkappa'} = r\operatorname{sen}\vartheta\,(Y^{m}_{-\varkappa})^{\dagger}\alpha_{y}\,e^{i\sigma_z\varphi}\,Y^{m'}_{-\varkappa'}$$

$$= i\tau\, r\operatorname{sen}\vartheta\,(\theta_3-\theta_4)\,e^{i\sigma_z(m'-m)\varphi} + \alpha_y\, r\operatorname{sen}\vartheta\,(\theta_1+\theta_2)\,e^{i\sigma_z(m'+m+1)\varphi}$$

A(35a)

$$(Y^{m}_{-\varkappa})^{\dagger}\alpha_{\varphi}\,Y^{m'}_{\varkappa'} = -(Y^{m}_{\varkappa})^{\dagger}\alpha_{\varphi}\,Y^{m'}_{-\varkappa'} = i\operatorname{sen}\vartheta\,(Y^{m}_{-\varkappa})^{\dagger}\alpha_{\theta}\,Y^{m'}_{-\varkappa'}$$

A(35b)

por (1,40,c).

Ahora integremos respecto del azimut. Por lo que se vió en el parágrafo anterior, sólo quedan los términos para los cuales m'=m. Los resultados son:

$$\int_0^{2\pi}(Y^{m}_{-\varkappa})^{\dagger}\alpha_r\,Y^{m'}_{-\varkappa'}\,d\varphi = \int_0^{2\pi}(Y^{m}_{\varkappa})^{\dagger}\alpha_r\,Y^{m'}_{\varkappa'}\,d\varphi$$

$$= \delta_{m'm}\;2\pi\;\alpha_z\left[\cos\vartheta(\theta_1-\theta_2)-\operatorname{sen}\vartheta\,(\theta_3+\theta_4)\right] \qquad A(36a)$$

$$\int_0^{2\pi}(Y^{m}_{-\varkappa})^{\dagger}\alpha_r\,Y^{m'}_{\varkappa'}\,d\varphi = \int_0^{2\pi}(Y^{m}_{\varkappa})^{\dagger}\alpha_r\,Y^{m'}_{-\varkappa'}\,d\varphi$$

$$= \delta_{m'm}\;2\pi\,\tau\,(\theta_1+\theta_2) \qquad A(36b)$$

$$\int_0^{2\pi} (Y_{-x}^{m})^{+} \alpha_\vartheta Y_{-x'}^{m'} \, d\varphi = - \int_0^{2\pi} (Y_{x}^{m})^{+} \alpha_\vartheta Y_{x'}^{m'} \, d\varphi$$

$$= \delta_{m'm} \; 2\pi \, \alpha_z \left[r \operatorname{sen}\vartheta \, (\theta_1 - \theta_2) + r \cos\vartheta \, (\theta_3 + \theta_4) \right] \qquad A(37a)$$

$$\int_0^{2\pi} (Y_{-x}^{m})^{+} \alpha_\vartheta Y_{x'}^{m'} \, d\varphi = - \int_0^{2\pi} (Y_{x}^{m})^{+} \alpha_\vartheta Y_{-x'}^{m'} \, d\varphi$$

$$= \delta_{m'm} \; 2\pi \, \tau \, r \, (\theta_3 - \theta_4) \qquad A(37,b)$$

$$\int_0^{2\pi} (Y_{-x}^{m})^{+} \alpha_\varphi Y_{-x'}^{m'} \, d\varphi = - \int_0^{2\pi} (Y_{x}^{m})^{+} \alpha_\varphi Y_{x'}^{m'} \, d\varphi$$

$$= \delta_{m'm} \; 2\pi \, i \tau \, r \operatorname{sen}\vartheta \, (\theta_3 - \theta_4) \qquad A(38a)$$

$$\int_0^{2\pi} (Y_{-x}^{m})^{+} \alpha_\varphi Y_{x'}^{m'} \, d\varphi = - \int_0^{2\pi} (Y_{x}^{m})^{+} \alpha_\varphi Y_{-x'}^{m'} \, d\varphi$$

$$= - \delta_{m'm} \; 2\pi \, i \alpha_z \left[r \operatorname{sen}^2\vartheta \, (\theta_1 - \theta_2) + r \operatorname{sen}\vartheta \cos\vartheta \, (\theta_3 + \theta_4) \right]$$

$$A(38b)$$

3.- **Integral I_1**

$$ {}^{m,m}_{l,l'}I_1 = \delta_{m'm} \; 2\pi \int_0^{\pi} (\theta_3 - \theta_4) \sin\vartheta \, d\vartheta $$

$$ = \frac{1}{2} \left[\frac{(l-m)!\,(l'-m)!}{(l+m+1)!\,(l'+m+1)!} \right]^{1/2} \int_{-1}^{1} \left[(l+m+1) P_l^m(\mu) P_{l'}^{m+1} - (l'+m+1) P_l^{m+1} P_{l'}^m \right] d\mu \qquad A(39) $$

Es fácil ver que la regla de selección de esta integral es

$$ {}^{m,m}_{l,l'}I_1 \propto \delta_{l',\, l \pm (2q+1)} \quad , \quad q = 0, 1, 2, \ldots \qquad A(40) $$

En particular, para $l' = l + 1$, $l = m$, utilizando las conocidas fórmulas

$$ P_n^n (\cos\ ) = 1.3\ldots (2m-3)\,(2n-1).\ \mathrm{sen}^n \vartheta \qquad A(41) $$

$$ \int_0^{\pi} \mathrm{sen}^n \, d\vartheta = \frac{2.4\ldots.(n-3)\,(n-1)}{1.3\ldots.(n-2)\,n} \qquad \text{si } n \text{ es impar} \, , \qquad A(42) $$

se obtiene

$$ {}^{m,m}_{m,m+1}I_1 = \frac{3}{2} \frac{1}{\sqrt{2\,(m+1)}} \qquad A(42,a) $$

$$ {}^{m,m}_{m,m-1}I_1 = 0 \qquad A(,42,b) $$

4.- Integral I_2

$$ {}^{m_1,m}_{\ell,\ell'}I_2 = \delta_{m_1 m}\, 2\pi \int_0^{\pi} \left[\operatorname{sen}\vartheta \,(\Theta_1 - \Theta_2) + \cos\vartheta \,(\Theta_3 + \Theta_4) \right] \operatorname{sen}\vartheta \, d\vartheta $$

$$ = \frac{1}{2} \left[\frac{(\ell-m)!\,(\ell'-m)!}{(\ell+m+1)!\,(\ell'+m+1)!} \right]^{1/2} \int_0^{\pi} \Big\{ \left[(\ell+m+1)(\ell'+m+1)\, P_\ell^m P_{\ell'}^m - P_\ell^{m+1} P_{\ell'}^{m+1} \right] \operatorname{sen}\vartheta $$

$$ + \left[(\ell+m+1)\, P_\ell^m P_{\ell'}^{m+1} + (\ell'+m+1)\, P_\ell^{m+1} P_{\ell'}^m \right] \cos\vartheta \Big\} \operatorname{sen}\vartheta \, d\vartheta \qquad A(43) $$

Merced a las relaciones de recurrencia A(8), A(23) y

$$ \operatorname{sen}\vartheta\, P_\ell^{m+1} = (2\ell+1)^{-1} \left[(\ell+m)(\ell+m+1) P_{\ell-1}^m - (\ell-m)(\ell-m+1)\, P_{\ell+1}^m \right], \qquad A(44) $$

el integrando se convierte en

$$ \frac{2m-1}{2\ell'+1} \left[(\ell+m+1)\; P_\ell^m\, P_{\ell'+1}^{m+1} - (\ell'-m+1)\; P_\ell^{m+1}\, P_{\ell'+1}^m \right] \qquad A(45) $$

Es fácil ver que la regla de selección es

$$ {}^{m_1,m}_{\ell,\ell'}I_2 \;\propto\; \delta_{\ell',\ell\pm 2q} \;,\quad q = 0,1,2,\ldots \qquad A(46) $$

Para $m=\ell$,

$$ {}^{m,m}_{\ell,\ell}I_2 = \frac{1}{2}\,\frac{(2m+1)^2}{(2m+1)!} \int_0^{\pi} (P_m^m)^2 \operatorname{sen}\vartheta \cdot \operatorname{sen}\vartheta\, d\vartheta \qquad A(47) $$

Por A(41) y A(4),

$$ \int_0^{\pi} (P_m^m)^2 \operatorname{sen}\vartheta \cdot \operatorname{sen}\vartheta\, d\vartheta = \left[1\cdot 3 \cdots (2m-3)(2m-1) \right]^2 \int_0^{\pi} \operatorname{sen}^{2(m+1)}\vartheta \; d\vartheta $$

$$ = \left[1\cdot 3 \cdots (2m-3)(2m-1) \right]^2 \cdot \frac{1\cdot 3 \cdots (2m+1)}{2\cdot 4 \cdots 2(m+1)} \cdot \pi \qquad A(48) $$

Por consiguiente,

$$ {}^{m,m}_{m,m}I_2 = \frac{(2m+1)\left((2m)!\right)^2}{(2.4\ldots2m)^3} \cdot \frac{\pi}{2} \qquad (m > 0) \qquad A(49)a) $$

Para m=0,

$$ {}^{0,0}_{0,0}I_2 = \frac{\pi}{4} \qquad A(49),b) $$

5.- <u>Integral</u> I_3

$$ {}^{m,m'}_{\ell,\ell'}I_3 = \delta_{m'm}\ 2\pi \int_0^{\pi} \left[(\theta_1 - \theta_2) + \cot g\, \vartheta\, (\theta_3 + \theta_4) \right] \operatorname{sen}\vartheta\, d\vartheta \qquad A(50) $$

El integrando es el de I_2 dividido por sen ϑ . El primer término contribuye con

$$ 2\pi \int_0^{\pi} (\theta_1 - \theta_2)\ \operatorname{sen}\vartheta\, d\vartheta = \delta_{\ell'\ell}\ \frac{2m+1}{2\ell+1} \qquad A(51) $$

El segundo, en cambio, difiere de 0 si $\ell' = \ell \pm 2q$. De modo que la regla de selección es

$$ {}^{m,m}_{\ell,\ell'}I_3 \propto \delta_{\ell',\ell \pm 2q}\ , \quad q = 0, 1, 2, \ldots \qquad A(52) $$

En particular, si $m = \ell = \ell'$, el segundo término del integrando es nulo y queda

$$ {}^{m,m}_{m,m}I_3 = \delta_{\ell'\ell} \qquad A(53) $$

6.- <u>Integral</u> I_4

$$
{}^{m,m}_{l,l'}I_4 = \delta_{m'm}\; 2\pi \int_0^{\pi} \frac{(\Theta_3-\Theta_4)}{\operatorname{sen}\vartheta}\, \operatorname{sen}\vartheta \, d\vartheta \qquad A(54)
$$

$$
= \frac{1}{2}\left[\frac{(l-m)!\,(l'-m)!}{(l+m+1)!\,(l'+m+1)!}\right]^{1/2} \int_0^{\pi} \left[(l+m+1) P_l^{m} P_{l'}^{m+1} - (l'+m+1) P_l^{m+1} P_{l'}^{m} \right] d\vartheta
$$

La regla de selección es

$$
{}^{m,m}_{l,l'}I_4 \propto \delta_{l',\, l\pm(2q+1)} \;, \quad q = 0, 1, 2, \dots \qquad A(55)
$$

7.- <u>Integral</u> I_5

$$
{}^{m,m}_{l,l'}I_5 = \delta_{m'm}\; 2\pi \int_0^{\pi} \left[\operatorname{sen}^2\vartheta \,(\Theta_1-\Theta_2) + \operatorname{sen}\vartheta \cos\vartheta \,(\Theta_3+\Theta_4) \right] \operatorname{sen}\vartheta \, d\vartheta \qquad A(56)
$$

El integrando es el de I_2 multiplicado por sen ϑ ; o sea, es

$$
\frac{1}{2}\left[\frac{(l-m)!\,(l'-m)!}{(l+m+1)!\,(l'+m+1)!}\right]^{1/2} \frac{2m-1}{2l'+1} \left[(l+m+1)(\operatorname{sen}\vartheta\, P_l^{m})\, P_{l'+1}^{m+1} - (l'-m+1)(\operatorname{sen}\vartheta\, P_l^{m+1})\, P_{l'+1}^{m} \right] \qquad A(57)
$$

Introduciendo A(23) en el primer término y A(44) en el segundo, la llave se convierte en

$$
(2l+1)^{-1} \Big\{ (l+m+1) \left[P_{l+1}^{m+1} P_{l'+1}^{m+1} - P_{l-1}^{m+1} P_{l'+1}^{m+1} \right]
$$
$$
- (l'+m+1) \left[(l+m)(l'+m+1) P_{l-1}^{m} P_{l'+1}^{m} - (l-m)(l-m+1) P_{l+1}^{m} P_{l'+1}^{m} \right] \Big\}
$$

Por la ortogonalidad de las funciones esféricas, la integral de la expresión anterior admite dos valores, según que $\ell' = \ell$ o $\ell' = \ell - 2 \geqslant 0$. Los valores son

$$ {}^{m,m}_{\ell,\ell'}I_5 = \frac{2\,(2m-1)\,\left((\ell+1)^2 + m(m+1) \right)}{(2\ell+1)^2\,(2\ell+3)} \qquad \text{A(58)}$$

$$ {}^{m,m}_{\ell,\ell-2}I_5 = -\frac{2\,(2m-1)}{(2\ell-3)^2(2\ell+1)}(\ell+m)(\ell+m+1)(\ell-m)(\ell-m-1) \qquad \text{A(59)}$$

8.- <u>Integral</u> I_6

$$ {}^{m,m'}_{\ell,\ell'}I_6 = \delta_{m'm}\, 2\pi \int_0^\pi (\theta_3 - \theta_4)\, \operatorname{sen}\vartheta \,.\, \operatorname{sen}\vartheta\, d\vartheta $$

$$ = \frac{1}{2}\left[\frac{(\ell-m)!\,(\ell'-m)!}{(\ell+m+1)!\,(\ell'+m+1)!}\right]^{1/2} \int_0^\pi \left[(\ell+m+1)\, P_\ell^{m}\, P_{\ell'}^{m+1} - (\ell+m+1)\, P_\ell^{m+1}\, P_{\ell'}^{m}\right] \operatorname{sen}\vartheta \,.\, \operatorname{sen}\vartheta\, d\vartheta \qquad \text{A(60)}$$

Introduciendo A(23), el integrando se convierte en

$$ \frac{\ell+m+1}{2\ell+1}\left[P_{\ell+1}^{m+1}\,P_{\ell'}^{m+1} - P_{\ell-1}^{m+1}\,P_{\ell'}^{m+1}\right] - \frac{\ell'+m+1}{2\ell'+1}\left[P_{\ell}^{m+1}P_{\ell'+1}^{m+1} - P_{\ell}^{m+1}P_{\ell'-1}^{m+1}\right] $$

La integral de esta función se anula a menos que $\ell' = \ell \pm 1$. Obtenemos así, merced a la relación de ortonormalización,

$$ {}^{m,m}_{\ell,\ell+1}I_6 = \frac{\left[(\ell-m+1)(\ell+m+2)\right]^{1/2}}{2\ell+3} \qquad \text{A(61)}$$

INTEGRAL I_6

$$ {}^{m,m}_{\ell,\ell-1}I_6 = -\frac{\left[(\ell-m)(\ell+m+1)\right]^{1/2}}{2\ell+1} \qquad A(62)$$

APENDICE B

INTEGRALES RADIALES (TEORIA DE SCHRÖDINGER)

C A P I T U L O I

ELECTRON LIBRE

1.- Introducción

Las integrales a evaluar son

$$R^{p}_{\ell,\ell'}(k,k') = N_{\ell}(k)\, N_{\ell'}(k') \int_0^{\infty} j_{\ell}(kr)\, j_{\ell'}(k'r)\, r^{p}\, dr \qquad B(1)$$

$$= N_{\ell}(k)\, N_{\ell'}(k')\, \frac{\pi}{2}(kk')^{-\frac{1}{2}} \int_0^{\infty} J_{\ell+\frac{1}{2}}(kr)\, J_{\ell'+\frac{1}{2}}(k'r)\, r^{p-1} dr \qquad B(1')$$

donde

$$p = 0,1,2,3 \quad ; \quad \ell' = \begin{cases} \ell \pm 2n \\ \ell \pm (2n+1) \end{cases}, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \qquad B(2)$$

y

$$\mathcal{R}_{\ell}(k,k') = N_{\ell}(k)\, N_{\ell}(k') \int_0^{\infty} j_{\ell}(kr) \left[\frac{\partial}{\partial r} j_{\ell}(k'r) + \frac{1}{r} j_{\ell}(k'r) \right] r^2\, dr \qquad B(3)$$

Algunas de las integrales B(1) convergen, otras son oscilantes y finalmente otras divergen. En particular, es oscilante la integral de normalización, de las que nos ocuparemos en primer término.

2.- Normalización de las autodiferenciales

Una característica de las autofunciones del espectro continuo es que no son de cuadrado integrable. (En el caso de las componentes radiales nos referimos, naturalmente, a las funciones $r.\chi_\ell(kr)$, ya que las χ_ℓ son de cuadrado integrable.) Este inconveniente se salva empleando el método de ortonormalización de las autodiferenciales, debido a Hellinger[1] y a Weyl[2] y adoptado en la mecánica cuántica por Born, Heisenberg y Jordan[3]. Este procedimiento consiste en normalizar, en lugar de las autofunciones $\chi_\ell(k,r)$, las correspondientes autodiferenciales

$$\delta\chi_\ell(k,r) = \int_{k-\Delta k/2}^{k+\Delta k/2} \chi_\ell(k,r)\,dk \qquad \text{B(4)}$$

Como veremos, con la normalización adecuada resulta

$$\int_0^\infty \left|\delta\chi_\ell(k,r)\right|^2 r^2\,dr = 1 \qquad \text{B(5)}$$

Físicamente, este procedimiento equivale a considerar un paquete de ondas de ancho espectral Δk en lugar de una onda monocromática.

Para obtener convergencia, que es lo que se busca, basta tomar

---

1 E. Hellinger, "Neue Begründung der Theorie quadratische Formen von unendlichvielen Veränderlichen", Journ. f. Reine u. Angw. Math.,136, 210 (1909), pp. 231 y ss.

2 H. Weyl, "Ueber gewöhnliche Differentialgleichungen mit Singularitäten",etc., Math. Annalen , 68, 220 (1910).

3 M. Born, W. Heisenberg u. P. Jordan, "Zur Quantenmechanik",II, Zeits. f. Phys., 35, 567 (1926),pp. 590 y ss. Véase además E. Fues, Ann. Phys.,80, 367 (1926); A. Wintner, Ann. Phys.,81, 577 (1926) y 82, 67 (1927). J.R.Oppenheimer, Zeits. f. Phys., 41, 268 (1927) y Phys. Rev., 38, 57 (1931). L.C. Roess, Phys. Rev., 37, 532 (1931).

una onda y su correspondiente autodiferencial, como hace Sommerfeld.[4] Más precisamente, basta considerar sólo el estado k' como difuso, formando el producto interno de $\chi_\ell(k,r)$ y $\delta\chi_\ell(k',r)$. La condición de normalización es entonces

$$\int_0^\infty \chi_\ell(k,r)\,\delta\chi_\ell(k',r)\,r^2\,dr = \int_0^\infty \chi_\ell^*(k,r)\,r^2\,dr \int_{k'-\frac{\Delta k'}{2}}^{k'+\frac{\Delta k'}{2}} \chi_\ell(k',r)\,dk' = \begin{cases} 1 & \text{si } k \in \Delta k' \\ 0 & \text{si } k \notin \Delta k' \end{cases} \qquad B(6)$$

Para demostrar esta relación multipliquemos la ecuación diferencial de $\chi_\ell(k,r)$,

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]\chi_\ell = 0 \qquad B(7)$$

por $\chi_\ell(k',r)$; luego multipliquemos por $\chi_\ell(k,r)$ la ecuación diferencial que define a $\chi_\ell(k',r)$, y restemos ambos resultados. Obtendremos así, después de multiplicar por $r^2 / k^2 - k'^2$,

$$\chi_\ell(k,r)\,\chi_\ell(k',r)\,r^2 = (k^2-k'^2)^{-1}\left\{\chi_\ell(k,r)\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{d\chi_\ell(k',r)}{dr}\right] - \chi_\ell(k',r)\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{d\chi_\ell(k,r)}{dr}\right]\right\} \qquad B(8)$$

Ahora integremos entre 0 y R $\gg\lambda$, siendo λ la longitud de onda; después de una integración por partes queda

$$\int_0^R \chi_\ell(k,r)\,\chi_\ell(k',r)\,r^2\,dr = \frac{R^2}{k^2-k'^2}\left[\chi_\ell(k,R)\cdot\frac{d\chi_\ell(k',R)}{dR} - \chi_\ell(k',R)\frac{d\chi_\ell(k,R)}{dR}\right] \qquad B(9)$$

Introducimos la expresión asintótica

---

4 A. Sommerfeld, Vorlesungen über Theoretische Physik, Bd. VI, Partielle Differentialgleichungen der Physik (Wiesbaden, Dieterich'sche Verlagsbuchhandlung, 1947), p. 213 y ss.

$$j_\ell(kR) \sim \frac{\operatorname{sen}(kR - \ell\pi/2)}{kR}, \qquad kR \gg 1 \qquad \text{B(10)}$$

en el segundo miembro; luego integramos respecto de k'. Después de una transformación trigonométrica elemental queda

$$\int_0^R r^2\,dr \int_{k'-\Delta k'/2}^{k'+\Delta k'/2} \chi_\ell(k,r)\,\chi_\ell(k',r)\,dk' = \frac{1}{2}\int_{k'-\Delta k'/2}^{k'+\Delta k'/2} \frac{N_\ell(k)\,N_\ell(k')}{kk'}\;\frac{\operatorname{sen}(k'-k)R}{k'-k}\,dk'$$

$$-(-1)^\ell\,\frac{1}{2}\int_{k'-\Delta k'/2}^{k'+\Delta k'/2} \frac{N_\ell(k)\,N_\ell(k')}{kk'}\;\frac{\operatorname{sen}(k+k')R}{k'+k}\,dk' \qquad \text{B(11)}$$

En la primera integral — a la que llamaremos I_1 — hacemos $(k'-k)R = x$; obtenemos así una expresión del tipo

$$I_1 = \frac{1}{2}\int_{(k'-k-\frac{\Delta k'}{2})R}^{(k'-k+\frac{\Delta k'}{2})R} f\left(\frac{x}{R}\right)\,\frac{\operatorname{sen} x}{x}\,dx$$

Si k no pertenece al intervalo $_{\Delta k'}$, los dos límites de la integral tienen el mismo signo; por lo tanto, $I_1 \to 0$ para $R \to \infty$. En cambio, si k pertenece al intervalo $(k' - \frac{\Delta k'}{2},\; k' + \frac{\Delta k'}{2})$, y en particular si k'=k, ambos límites tienen sentido opuesto y se tiene el conocido resultado

$$\lim_{R\to\infty} \frac{1}{2}\int_{(k'-k-\frac{\Delta k'}{2})R}^{(k'-k+\frac{\Delta k'}{2})R} f\left(\frac{x}{R}\right)\,\frac{\operatorname{sen} x}{x}\,dx = \frac{\pi}{2}\,f(0) \qquad \text{B(12)}$$

Vale decir,

$$\lim_{R\to\infty} \frac{1}{2}\int_{k'-\frac{\Delta k'}{2}}^{k'+\frac{\Delta k'}{2}} \frac{N_\ell(k)\,N_\ell(k')}{k\,k'}\cdot\frac{\operatorname{sen}(k'-k)R}{k'-k}\,dk' = \begin{cases} \dfrac{\pi}{2}\left[\dfrac{N_\ell(k)}{k}\right]^2, & k \in \Delta k' \\[2ex] 0 & k \notin \Delta k' \end{cases} \qquad \text{B(13)}$$

En la segunda integral que figura en B(11) hacemos $(k'+k)R = y$. Se ve que los dos límites de integración tienden a ∞ con R, cualquiera sea la relación en que estén k y k'; de modo que

$$\lim_{R\to\infty} \frac{1}{2} \int_{k'-\frac{\Delta k'}{2}}^{k'+\frac{\Delta k'}{2}} \frac{N_\ell(k)\, N_\ell(k')}{kk'} \; \frac{\operatorname{sen}(k'+k)R}{k'+k}\, dk' = 0 \qquad \text{B(14)}$$

Llevando B(13) y B(14) a B(11), se tiene por último

$$\lim_{R\to\infty} \int_{k'-\frac{\Delta k'}{2}}^{k'+\frac{\Delta k'}{2}} dk' \int_0^R \chi_\ell(k,r)\,\chi_\ell(k',r)\, r^2\, dr = \begin{cases} \frac{\pi}{2} \left[\frac{N_\ell(k)}{k}\right]^2, & k \in \Delta k' \\ 0 & k \notin \Delta k' \end{cases} \qquad \text{B(15)}$$

Por consiguiente, el factor de normalización es

$$N(k) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} k \quad , \qquad \text{B(16)}$$

y la relación de ortonormalidad se escribe (suponiendo que pueda invertirse el orden de las integraciones)

$$\lim_{R\to\infty} \int_{k'-\frac{\Delta k'}{2}}^{k'+\frac{\Delta k'}{2}} dk' \int_0^R \chi_\ell(k,r)\,\chi_\ell(k',r)\, r^2\, dr = \int_0^\infty \chi_\ell(k,r)\, r^2 dr \int_{k'-\frac{\Delta k'}{2}}^{k'+\frac{\Delta k'}{2}} \chi_\ell(k',r)\, dk'$$

$$= \lim_{R\to\infty} \int_{k'-\frac{\Delta k'}{2}}^{k'+\frac{\Delta k'}{2}} dk' \int_0^R \frac{2}{\pi}\, j_\ell(kr)\, j_\ell(k'r)\, r^2\, dr = \begin{cases} 1 & , k \in \Delta k' \\ 0 & k \notin \Delta k' \end{cases} \qquad \text{B(17)}$$

Como este resultado no depende del ancho $\Delta k'$ del paquete de ondas, podemos imaginar que hemos pasado finalmente al límite $\Delta k' = 0$, con lo cual la relación se inclusión $k \in k'$ se convierte en k'=k. Así se alcanza un resultado análogo al que vale en el espectro discreto:

$$\lim_{\Delta k'\to 0} \int_0^\infty \chi_\ell(k,r)\, r^2\, dr \int_{k'-\frac{\Delta k'}{2}}^{k'+\frac{\Delta k'}{2}} \chi_\ell(k'r)\, dk' = \delta_{k'k} = \begin{cases} 1, & k'=k \\ 0, & k'\neq k \end{cases} \qquad \text{B(17')}$$

Ahora bien: el método de las autodiferenciales puede extenderse, en principio, a todas las integrales del espectro continuo; pero es impracticable salvo en el caso de la integral de normalización, donde hemos podido utilizar la ecuación diferencial, que nos ha evitado el cálculo explícito de la autodiferencial. La importancia de este método no resise en su poder, que es restringido, sino en que a veces permite asignar un sentido físico apropiado a las funciones $R^{p}_{l,l'}(k,k')$ que resultan al integrar respecto de r mediante otro método. En otras palabras, a mi juicio la importancia del método de Hellinger- Weyl radica en que es equivalente a la ortonormalización delta.

En efecto, la B(17) equivale a

$$\int_0^\infty \chi_\ell(k,r)\,\chi_\ell(k',r)\,r^2\,dr = \frac{2}{\pi}\,kk'\int_0^\infty j_\ell(kr)\,j_\ell(k'r)\,r^2\,dr = \delta(k'-k) \qquad B(18)$$

puesto que, integrando respecto de k' sobre el intervalo espectral k', se obtiene la unidad cuando $k \in \Delta k'$.

Esta equivalencia se extiende a todo paquete de ondas de perfil arbitrario $C(\vec{k})$ (pero de cuadrado integrable):

$$\delta\psi(\vec{k},\vec{r}) = \int_{\vec{k}-\frac{\Delta\vec{k}}{2}}^{\vec{k}+\frac{\Delta\vec{k}}{2}} C(\vec{k})\,\psi(\vec{k},\vec{r})\,d\vec{k}, \quad d\vec{k} = dk_1\,dk_2\,dk_3, \qquad B(19)$$

siempre que la amplitud espectral esté normalizada a la unidad:

$$\int_{\Delta\vec{k}} |C(\vec{k})|\,d\vec{k} = 1 \qquad B(20)$$

En efecto, la integral de normalización de estos paquetes es

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\delta\psi(\vec{k},\vec{r})|^2 d\vec{r} = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{r} \int_{\vec{k}-\frac{\Delta\vec{k}}{2}}^{\vec{k}+\frac{\Delta\vec{k}}{2}} d\vec{k} \int_{\vec{k}'-\frac{\Delta\vec{k}'}{2}}^{\vec{k}'+\frac{\Delta\vec{k}'}{2}} C^*(\vec{k})\, C(\vec{k}')\, \psi^*(\vec{k},\vec{r})\, \psi(\vec{k}',\vec{r})\, d\vec{k}'$$

$$= \int_{\Delta\vec{k}} d\vec{k} \int_{\Delta\vec{k}'} d\vec{k}'\, C^*(\vec{k})\, C(\vec{k}') \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(k,\vec{r})\, \psi(\vec{k}',\vec{r})\, d\vec{r}$$

Pero, como

$$\left[\psi^*(\vec{k},\vec{r}),\ \psi(\vec{k}',\vec{r})\right]_{\vec{r}} = \delta(\vec{k}-\vec{k}'), \qquad \text{B(21)}$$

queda

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\delta\psi(\vec{k},\vec{r})|^2 d\vec{r} = \int_{\Delta\vec{k}} d\vec{k} \int_{\Delta\vec{k}'} C^*(\vec{k})\, C(\vec{k}')\, \delta(\vec{k}'-\vec{k})\, d\vec{k}'$$

$$= \int_{\Delta\vec{k}} |C(\vec{k})|^2\, d\vec{k} = 1. \qquad \text{Q.E.D.}$$

De manera que la normalización delta de las autofunciones es equivalente a la normalización de los paquetes de ondas.

3.- Métodos de sumación de las integrales divergentes

Para calcular las integrales B(1) divergentes se puede emplear cualquiera de los métodos de sumación conocidos. En nuestro caso, los de aplicación más sencilla son: a) la suma Cesàro ;2) la suma Abel, cuyo cálculo se facilita por la existencia de tablas de transformadas de Laplace, como la de Doetsch; 3) el empleo de la representación integral de la delta, según el método que hemos encontrado. Se verá que solamente este último permite obtener expresiones generales; los demás son practicables en cada caso particular, es decir, para cada terna (p, ℓ, ℓ'), y nos servirán de control.

Aplicaremos estos métodos a dos integrales particularmente sencillas, a fin de mostrar sus características; en los parágrafos siguientes haremos los cálculos de manera general. Sean

$$R^2_{0,0}(k,k') = \int_0^\infty \chi_0(k,r)\,\chi_0(k',r)\,r^2 dr = \frac{2}{\pi} kk' \int_0^\infty j_0(kr)\,j_0(k'r)\,r^2\,dr$$

$$= \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \text{sen } kr .\ \text{sen } k'r\,dr = \frac{1}{\pi}\left\{\int_0^\infty \cos(k'-k)r\,dr - \int_0^\infty \cos(k'+k)r\,dr\right\} \qquad B(22)$$

$$R^2_{0,1}(k,k') = \int_0^\infty \chi_0(k,r)\,\chi_1(k',r)\,r^2\,dr = \frac{2}{\pi}kk'\int_0^\infty j_0(kr)\,j_1(k'r)\,r^2\,dr$$

$$= \frac{2}{\pi}\left\{\frac{1}{k'}\int_0^\infty \frac{\text{sen } kr\ \text{sen } k'r}{r}\,dr - \int_0^\infty \text{sen } kr\,\cos k'r\,dr\right\}$$

$$= \frac{2}{\pi}\left\{\frac{1}{k'}\int_0^\infty \frac{\text{sen } kr\ \text{sen } k'r}{r}\,dr - \frac{1}{2}\left[\int_0^\infty \text{sen}(k+k')r\,dr + \int_0^\infty \text{sen}(k-k')r\,dr\right]\right\} \qquad B(23)$$

La integral convergente que figura aquí es del tipo de Frullani:

$$\int_0^{\infty} \frac{\operatorname{sen} kr \ \operatorname{sen} k'r}{r} dr = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \frac{\cos (k'-k)r - \cos (k'+k)r}{r} dr$$

$$= \frac{1}{2} \ln \left| \frac{k'+k}{k'-k} \right| \quad , \quad k' \neq k \qquad A(24)$$

Las integrales divergentes que tenemos que sumar son las de $\cos(k' \pm k)r$ y $\operatorname{sen}(k' \pm k)r$. Emplearemos sucesivamente los tres métodos mencionados, que nos darán un mismo resultado.

3.1.- Suma Cesàro

La suma Cesàro de orden α -- o suma (C, α) -- de la integral divergente

$$\int_0^{\infty} f(r)\, dr$$

es

$$(C,\alpha) \int_0^{\infty} f(r)\, dr = \lim_{R \to \infty} \int_0^{R} \left(1 - \frac{r}{R} \right)^{\alpha} f(r)\, dr \qquad B(25)$$

En nuestro caso basta tomar $\alpha = 1$. Así obtenemos

$$(C,1) \int_0^{\infty} \cos ar\, dr = \lim_{R \to \infty} \int_0^{R} \left(1 - \frac{r}{R} \right) \cos ar\, dr$$

$$= \lim_{R \to \infty} \frac{1}{a} \left[\left(1 - \frac{r}{R} \right) \operatorname{sen} ar \Big|_0^R + \frac{1}{R} \int_0^R \operatorname{sen} ar\, dr \right] = \frac{1}{a^2} \lim_{R \to \infty} \left[\frac{1 - \cos aR}{R} \right]$$

Si $a=0$, la expresión diverge antes de pasar al límite; pero si $a \neq 0$, el corchete tiende a 0 con $R \to \infty$. De manera que

$$(C,1) \int_0^{\infty} \cos ar \, dr = \text{Const.}\, \delta(a) \qquad B(25)$$

Para determinar esta constante integramos respecto de a entre -u y u 0. El primer miembro queda, invirtiendo el orden de la integración,

$$(C,1) \int_0^{\infty} dr \int_{-u}^{u} \cos ar \, da = 2 \int_0^{\infty} \frac{\text{sen } ur}{r} dr = \pi, \qquad B(26)$$

y como el segundo miembro de B(28) se convierte en Const. después de la integración, tenemos finalmente

$$(C,1) \int_0^{\infty} \cos ar \, dr = \pi \delta(a) \qquad B(27)$$

En el caso físico que nos interesa, $a = k' \pm k$, de modo que la B(22) queda, como debe ser,

$$R^2_{o,o}(k,k') = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \text{sen } kr \text{ sen } k'r \, dr = \delta(k'-k) - \delta(k'+k) = \delta(k'-k) \qquad B(28)$$

ya que, por ser $k,k' > 0$, debemos poner, siempre que estos parámetros simbolicen números de ondas,

$$\delta(k' + k) = 0. \qquad B(29)$$

La otra integral, que es nula para $a=0$ y oscilante para $a \neq 0$, se integra por partes:

$$(C,1) \int_0^{\infty} \text{sen } ar \, dr = \lim_{R \to \infty} \int_0^{R} \left(1 - \frac{r}{R}\right) \text{sen } ar \, dr$$

$$= \lim_{R \to \infty} \frac{1}{a} \left(1 - \frac{\text{sen } aR}{aR}\right) = \frac{1}{a}, \quad a \neq 0.$$

O sea,

$$(C,1)\int_0^{\infty} \text{sen } ar\, dr = \frac{1}{a}\ , \quad a \neq 0 \qquad B(30)$$

Así resulta

$$(C,1)\int_0^{\infty} \text{sen } kr \cos k'r\, dr = \begin{cases} \dfrac{k}{k^2 - k'^2} & , \quad k \neq k' \\ \dfrac{1}{4k} & , \quad k = k' \end{cases} \qquad B(31)$$

3.2.- Suma Abel

La suma Abel de la integral divergente

$$A\int_0^{\infty} f(r)\, dr$$

es el límite de la transformada de Laplace de $f(r)$ cuando el parámetro de la transformación tiende a 0:

$$(A)\int_0^{\infty} f(r)\, dr = \lim_{s\to 0}\int_0^{\infty} e^{-sr} f(r)\, dr \qquad B(32)$$

En nuestro caso, poniendo el coseno en forma exponencial se obtiene inmediatamente

$$(A)\int_0^{\infty} \cos ar\, dr = \lim_{s\to 0} \frac{1}{2}\left[\frac{1}{s - ia} + \frac{1}{s + ia}\right] = \begin{cases} 0 \text{ si } a \neq 0 \\ \infty \text{ si } a = 0 \end{cases}$$

B(33)

Vale decir, nuevamente tenemos

$$(A)\int_0^{\infty} \cos ar\, dr = \text{Const.}\ \delta(a)$$

La constante se determina como antes: integrando B(33) respecto de **a**,

$$\lim_{s\to 0} \int_{-u}^{u} \frac{s}{a^2+s^2}\,da = 2 \lim_{s\to 0} \text{arc tang}\,\frac{u}{s} = \pi \qquad B(34)$$

de modo que se tiene nuevamente la B(27).

La integral del seno se trata del mismo modo, obteniéndose igual resultado que con el método de Cesàro.

3.3.- Empleo de las deltas

Combinando B(27) y B(30) se tiene, sobreentendiendo que se trata de sumas Cesàro o Abel,

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{\infty} e^{\pm iar}\,dr = \frac{1}{2}\left[\delta(a) \pm v.p.\ \frac{i}{\pi a}\right] \equiv \delta_{\pm}(a) \qquad B(35a,)$$

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{0} e^{\pm iar}\,dr = \frac{1}{2}\left[\delta(a) \mp v.p.\ \frac{i}{\pi a}\right] \equiv \delta_{\mp}(a) \qquad B(35,b)$$

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\pm iar}\,dr = \delta(a) \qquad B(35,c)$$

donde $\delta_{\pm}(a)$ son las deltas positiva y negativa de Heisenberg, y donde **v.p.** significa que al integrar respecto de **a** es preciso tomar el valor principal en el sentido de Cauchy.

El empleo de estas fórmulas nos ahorrará el cálculo explícito de las sumas Abel o Cesàro. Por ejemplo, se obtiene automáticamente

$$\int_0^{\infty} \text{sen } kr \cos k'r \, dr = \frac{1}{4i} \int_0^{\infty} \Big[e^{i(k+k')r} + e^{i(k-k')r} - e^{-i(k-k')r} - e^{-i(k+k')r} \Big] dr$$

$$= \frac{\pi}{4i} \Big[\delta_+(k+k') + \delta_+(k-k') - \delta_-(k-k') - \delta_-(k+k') \Big] = \frac{k}{k^2 - k'^2} \quad (k' \neq k)$$

como antes (cf. B(31)).

Los métodos de Abel y Cesàro pueden aplicarse en casos sencillos, como son los ejemplos que hemos tratado en este parágrafo, pero son impracticables para obtener resultados generales. En cambio, el método de las deltas puede generalizarse fácilmente, como se verá en los parágrafos siguientes, en los que se expondrá un nuevo método para calcular las integrales R^p convergentes y oscilantes indistintamente.

4. - Un nuevo método para integrar productos de funciones de Bessel esféricas

El método que expondremos es una generalización del que acabamos de ver, y se aplica a toda integral de la forma

$$\int_0^\infty f\,(x,t)\;dx \qquad B(36)$$

cuyo integrando pueda descomponerse en la forma

$$f\,(x,t) = g_1(x,t)\;e^{itx} + g_2(x,t)\;e^{-itx} \qquad B(37)$$

donde g_1 y g_2 son polinomios de potencias crecientes o decrecientes de x.

4.1.- Transformación del integrando

Descompondremos el producto $j_\ell(kr)\;j_{\ell'}(k'r)$ en la forma B(37), para lo cual recurriremos a la conocida expresión

$$j_n(x) = \frac{1}{x}\left\{P_{n+\frac{1}{2}}(x)\cos\left(x-(n+1)\frac{\pi}{2}\right) - Q_{n+\frac{1}{2}}(x)\,\mathrm{sen}\left(x-(n+1)\frac{\pi}{2}\right)\right\} \qquad B(38)$$

donde los polinomios P y Q son

$$P_{n+\frac{1}{2}}(x) = 1 - \frac{n(n^2-1)\,(n+2)}{2^2}\cdot\frac{x^{-2}}{2!} + \frac{n(n^2-1)(n^2-4)(n^2-9)(n+4)}{2^4}\,\frac{x^{-4}}{4!} - \ldots \qquad B(39,a)$$

$$Q_{n+\frac{1}{2}}(x) = \frac{n(n+1)}{2^1}\,\frac{x^{-1}}{1!} - \frac{n(n^2-1)(n^2-4)(n+3)}{2^3}\,\frac{x^{-3}}{3!} + \ldots \qquad B(39,b)$$

Para nuestros propósitos conviene escribir B(38) en la forma

$$j_\ell(x) = \frac{i^{\ell+1}}{2x}\left[(-1)^{\ell+1}\; S_\ell(ix)\, e^{ix} + S^*_\ell(ix)\, e^{-ix}\right] \qquad B(40)$$

donde $S_\ell(ix)$ es el polinomio de grado ℓ

$$S_\ell(ix) = P_{\ell+\frac{1}{2}} + i\, Q_{\ell+\frac{1}{2}} = \sum_{n=0}^{\ell} a_n \left(\frac{i}{x}\right)^n \qquad B(41)$$

con

$$a_0 = 1,\quad a_1 = \frac{\ell(\ell+1)}{2.\ 1!},\quad a_2 = \frac{\ell(\ell^2-1)\,(\ell+2)}{2^2.\ 2!},$$

$$a_n = \frac{\ell(\ell^2-1)(\ell^2-4)\ldots(\ell^2-(n-1)^2)}{2^n\; n!} \qquad B(42)$$

En virtud de esta descomposición, nuestra integral es

$$R^p_{\ell,\ell'}(k,k') = \frac{2}{\pi}\, kk' \int_0^\infty j_\ell(kr)\, j_{\ell'}(k'r)\, r^p\, dr$$

$$= \frac{i^{\ell+\ell'+2}}{2\pi}\int_0^\infty r^{p-2}\Big\{(-1)^{\ell+\ell'} S_\ell(ikr)\, S_{\ell'}(ik'r)\, e^{i(k+k')r}$$

$$+ S^*_\ell(ikr)\, S^*_{\ell'}(ik'r)\, e^{-i(k+k')r} + (-1)^{\ell+1} S_\ell(ikr)\, S^*_{\ell'}(ik'r)\, e^{i(k-k')r}$$

$$+ (-1)^{\ell'+1} S^*_\ell(ikr)\, S_{\ell'}(ik'r)\, e^{i(k'-k)r}\Big\}\, dr, \qquad B(43)$$

donde

$$S_\ell(ikr)\, S_{\ell'}(ik'r) = \sum_{n=0}^{\ell+\ell'} \alpha_n \left(\frac{i}{r}\right)^n \qquad B(44)$$

$$S_\ell(ikr)\, S^*_{\ell'}(ik'r) = \sum_{n=0}^{\ell+\ell'} \beta_n \left(\frac{i}{r}\right)^n \qquad B(45)$$

Los coeficientes, que son números reales, difieren según que $l' > l$ o $l' < l$.

Para $l' \geq l$

$$\alpha_0 = 1$$

$$\alpha_1 = \frac{a_1}{K} + \frac{a_1'}{K'}$$

$$\alpha_2 = \frac{a_2}{K^2} + \frac{a_1 a_1'}{K K'} + \frac{a_2'}{K'^2}$$

$$\cdot \quad \cdot$$

$$\alpha_l = \frac{a_l}{K^l} + \frac{a_{l-1}\, a_1'}{K^{l-1} K'} + \cdots + \frac{a_1\, a_{l-1}'}{K\, K'^{l-1}} + \frac{a_l'}{K'^l}$$

$$\alpha_{l+1} = \frac{a_l\, a_1'}{K^l K'} + \frac{a_{l-1}\, a_2'}{K^{l-1} K'^2} + \cdots + \frac{a_{l+1}'}{K'^{l+1}}$$

$$\cdot$$

$$\alpha_{l+l'-1} = \frac{a_l\, a_{l'-1}'}{K^l\, K'^{l'-1}} + \frac{a_{l-1}\, a_{l'}'}{K^{l-1}\, K'^{l'}}$$

$$\alpha_{l+l'} = \frac{a_l\, a_{l'}'}{K^l\, K'^{l'}}$$

B(46,a)

Para $l' \leq l$

se intercambian los índices l y l' de la expresión anterior. B(46,b)

Los coeficientes restantes son

Para $l' \geq l$

$$\beta_0 = 1$$
$$\beta_1 = \frac{a_1}{K} - \frac{a'_1}{K'}$$
$$\beta_2 = \frac{a_2}{K^2} - \frac{a_1 a'_1}{K K'} + \frac{a'_2}{K'^2}$$

$$\beta_l = \frac{a_l}{K^l} - \frac{a_{l-1}\, a'_1}{K^{l-1}\, K'} + \dots + (-1)^{l-1} \frac{a_1\, a'_{l-1}}{K\, K'^{l-1}} + (-1)^l \frac{a'_l}{K'^l}$$
$$\beta_{l+1} = -\frac{a_l\, a'_1}{K^l\, K'} + \frac{a_{l-1}\, a'_2}{K^{l-1}\, K'^2} - \dots + (-1)^{l+1} \frac{a'_{l+1}}{K'^{l+1}}$$

$$\beta_{l+l'-1} = (-1)^{l'-1} \frac{a_l\, a'_{l'-1}}{K^l\, K'^{l'-1}} + (-1)^{l'} \frac{a_{l-1}\, a'_{l'}}{K^{l-1}\, K'^{l'}}$$
$$\beta_{l+l'} = (-1)^{l'} \frac{a_l\, a'_{l'}}{K^l\, K'^{l'}} \qquad \text{B(47,a)}$$

Para $l' \leq l$

se intercambian los índices l y l' de la expresión anterior B(47,b)

Ahora tenemos que calcular las integrales que aparecen en B(43). Ellas son las transformadas de Fourier de x^{-n} y x^n en $(0,\infty)$ y en el intervalo completo(en el caso de integrandos pares).

4.2.- Transformadas de Fourier de x^{-n} en $(0,\infty)$

Las integrales

$$I_n(t) = \int_0^\infty \frac{e^{itx}}{x^n}\, dx \quad , \quad n=1,2,3,\dots \qquad \text{B(48)}$$

son divergentes. Podemos calcularlas operando formalmente con las deltas de Heisenberg B(35) —esto es, integrándolas— o bien utilizando explícitamente la noción de <u>parte finita</u> de una integral divergente.

En el primer caso, partimos de B(35,a):

$$\int_0^{\infty} e^{itx}\, dx = \pi\,\delta(t) + \text{v.p.}\ \frac{i}{t}$$

Integrando respecto de t obtenemos

$$\int_{-0}^{\infty} \frac{e^{itx}}{x}\, dx = i \left\{ \pi \int \delta(t)\, dt + i\ \text{v.p.} \int \frac{dt}{t} \right\} - C$$

donde C es una constante de integración. Ahora recordamos que $\frac{dt}{t} = d \ln |t|$ e introducimos la definición diferencial de $\delta(t)$:

$$\delta(t) = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \mathcal{E}(t) \quad , \text{ donde} \qquad \mathcal{E}(t) = \begin{cases} 1 \ , & t > 0 \\ 0 \ , & t = 0 \\ -1 \ , & t < 0 \end{cases} \qquad \text{B(49)}$$

(Usualmente la función $\mathcal{E}(t)$, que es la función signo, no se define en el origen.) De esta manera resulta

$$\int_0^{\infty} \frac{e^{itx}}{x}\, dx = i\,\frac{\pi}{2}\,\mathcal{E}(t) - \ln |t| - C \qquad \text{B(50)}$$

Iterando este procedimiento obtenemos un valor de $I_n(t)$ en que figuran n constantes arbitrarias. El valor de estas constantes se determina si, en lugar del camino formal que acabamos de seguir, se usa explícitamente la noción de parte finita de una integral divergente, que fuera introducida por Hadamard[5] y explotada exitosamente por Schwartz[6].

Si f(x) es sumable en (a + ε, b) , $\varepsilon > 0$ y diverge en (a,b), se llama parte finita de la integral de f(x) al número

$$\mathrm{Pf}\int_a^b f(x)\,dx = \lim_{\varepsilon\to 0}\left[\int_{a+\varepsilon}^b f(x)\,dx - I(\varepsilon)\right] \qquad B(51)$$

siendo I(ε) la parte infinita que se ha sustraído ($I(0) = \infty$). Por ejemplo,

$$\mathrm{Pf}\int_0^b \frac{dx}{x} = \ln b$$

y en cambio $I(\varepsilon) = -\ln\varepsilon$. La misma parte infinita tiene la integral

$$\int_0^\infty \frac{\cos tx}{x}\,dx,$$

ya que su divergencia en el origen es logarítmica. De manera que

$$\mathrm{Pf}\int_0^\infty \frac{\cos tx}{x}\,dx = \lim_{\varepsilon\to 0}\left[\int_\varepsilon^\infty \frac{\cos tx}{x}\,dx - (-\ln\varepsilon)\right]$$

$$= \lim_{\varepsilon\to 0}\left[-\mathrm{Ci}(\varepsilon|t|) + \ln\varepsilon\right] \qquad B(52)$$

donde Ci (x) designa la función coseno integral. Para pequeños valores de x,

$$\mathrm{Ci}\,(x) \approx \ln\gamma x = \ln\gamma + \ln x = C + \ln x \quad , \quad C = 0{,}57721\ldots \qquad B(53)$$

---

5 Jacques Hadamard , Le Problème de Cauchy et les Equations aux Dérivées Partielles Linéaires Hyperboliques (Paris, Hermann, 1932), pp. 184 y ss.

6 Laurent Schwartz, Théorie des Distributions (Paris, Hermann, 1950), I, pp. 38 y ss.

(C es la constante de Euler). Por consiguiente,

$$\mathrm{Pf}\int_0^\infty \frac{\cos tx}{x}\,dx = \lim_{\varepsilon\to 0}\left[-C - \ln \varepsilon\,|t| + \ln\varepsilon\right] = -\ln|t| - C \qquad B(54)$$

Combinando este resultado con éste otro:

$$\int_0^\infty \frac{\operatorname{sen} tx}{x}\,dx = \frac{\pi}{2}\,\varepsilon(t), \qquad B(55)$$

obtenemos el valor de la integral I_1:

$$\mathrm{Pf}\int_0^\infty \frac{e^{itx}}{x}\,dx = i\frac{\pi}{2}\,\varepsilon(t) - \ln|t| - C, \qquad B(56)$$

que coincide con B(50), pero, ahora, con la constante de integración determinada.

Las demás integrales se obtienen a partir de ésta. Por ejemplo, para n=2 una simple integración por partes nos da

$$\int_\varepsilon^\infty \frac{e^{itx}}{x^2}\,dx = -\int_\varepsilon^\infty e^{itx}\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{x}\right)dx = -\left.\frac{e^{itx}}{x}\right|_\varepsilon^\infty + it\int_\varepsilon^\infty \frac{e^{itx}}{x}\,dx$$

La contribución de

$$\frac{e^{it\varepsilon}}{\varepsilon} = \frac{1}{\varepsilon} + \frac{it}{1!} + \frac{(it)^2}{2!}\,\varepsilon + \cdots$$

a la parte finita es it, de manera que

$$\mathrm{Pf}\int_0^\infty \frac{e^{itx}}{x^2}\,dx = it\left[1 + \mathrm{Pf}\int_0^\infty \frac{e^{itx}}{x}\,dx\right] = i^2\,\frac{\pi}{2}\,t\,\varepsilon(t) - it\left[\ln|t| + C - 1\right] \qquad B(57)$$

En general, n-1 integraciones por partes nos dan

$$\int_{\varepsilon}^{\infty} \frac{e^{itx}}{x^n}\,dx = \left\{ \frac{1}{n-1} \cdot \frac{1}{\varepsilon^{n-1}} + \frac{it}{(n-1)(n-2)}\,\frac{1}{\varepsilon^{n-2}} + \frac{(it)^2}{(n-1)(n-2)(n-3)}\,\frac{1}{\varepsilon^{n-3}} + \dots + \frac{(it)^{n-2}}{(n-1)!}\cdot\frac{1}{\varepsilon} \right\} e^{it\varepsilon} + \frac{(it)^{n-1}}{(n-1)!}\int_{\varepsilon}^{\infty}\frac{e^{itx}}{x}\,dx \qquad B(58)$$

Como $e^{it\varepsilon}/\varepsilon^{m}$ contribuye a la parte finita con $(it)^{m}/m!$, queda finalmente

$$\mathrm{Pf}\int_0^{\infty}\frac{e^{itx}}{x^n}\,dx = i^n\,\frac{\pi}{2}\,\frac{t^{n-1}}{(n-1)!}\cdot\varepsilon(t) - \frac{(it)^{n-1}}{(n-1)!}\left\{ \ln|t| + C - \left(1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \dots \frac{1}{n-1}\right)\right\},\quad n>1 \qquad B(59)$$

Al mismo resultado se llega aplicando la definición de Schwartz[7]

$$\mathrm{Pf}\int_0^{\infty}\frac{\varphi(x)}{x^n}\,dx = \lim_{\varepsilon\to 0}\left[\int_{\varepsilon}^{\infty}\frac{\varphi(x)}{x^n}\,dx + \frac{\varphi(0)}{0!}\,\frac{\varepsilon^{-n+1}}{-n+1} + \frac{\varphi'(0)}{1!}\,\frac{\varepsilon^{-n+2}}{-n+2} + \dots - \frac{\varphi^{(n-1)}(0)}{(n-1)!}\,\varepsilon^{-1} + \frac{\varepsilon^{n}(0)}{n!}\ln\varepsilon\right]$$

---

7 L. Schwartz, op. cit., I, p. 42.

4.3.- Transformada de Fourier de x^{-n} en $(-\infty, \infty)$

Para que las tfansformadas ordinarias de Fourier de x^{-n} tengan sentido, no basta tomar el valor principal , o sea,

$$\text{v.p.} \int_{-\infty}^{\infty} = \lim_{\varepsilon \to 0} \left[\int_{-\infty}^{-\varepsilon} + \int_{\varepsilon}^{\infty} \right],$$

pues ya a partir de n=2 es

$$\text{v.p.} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x^n} = \infty \qquad , \quad n \geq 2$$

Al igual que en el caso anterior, habrá que tomar la parte finita. Pero, por supuesto, no es necesario hacer todo el cálculo, ya que de B(58) se deduce

$$\text{Pf} \int_{-\infty}^{0} \frac{e^{itx}}{x^n}\, dx = (-1)^n \left[\text{Pf} \int_{0}^{\infty} \frac{e^{itx}}{x^n}\, dx \right]^*$$

$$= i^n \frac{\pi}{2} \frac{t^{n-1}}{(n-1)!}\, \varepsilon(t) + \frac{(it)^{n-1}}{(n-1)!} \left[\ln|t| + C - \left(1 + \frac{1}{2} + \cdots + \frac{1}{n-1}\right) \right], \quad n > 1 \qquad \text{B(60)}$$

por lo cual

$$\text{Pf} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{itx}}{x^n}\, dx = i^n \pi \, \frac{t^{n-1}}{(n-1)!} \cdot \varepsilon(t) \qquad \text{B(61)}$$

El mismo resultado se obtiene formalmente, tratando las integrales como si fuesen transformadas de Fourier verdaderas. En efecto, recordando que

$$F\left[\frac{df}{dx}\right] = -it \int_{-\infty}^{\infty} e^{itx} f(x)\, dx \equiv -it\, F[f]\,, \qquad B(62)$$

a partir de B(55) obtenemos

$$Pf \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{itx}}{x^2}\, dx = -\, Pf \int_{-\infty}^{\infty} e^{itx} \frac{d}{dx}\left(\frac{1}{x}\right) dx = it\; v.p.\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{itx}}{x}\, dx = i^2 \pi\, t\, \varepsilon(t)$$

y del mismo modo las demás. Schwartz[8] sigue este camino, obteniendo el mismo resultado que nosotros.

4.4.- Transformadas de Fourier de x^n en $(-\infty, \infty)$

Derivando formalmente la delta de Dirac B(35,c) obtenemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{itx}\, x^n\, dx = (-i)^n\, 2\pi\, \delta^{(n)}(t) \quad , \quad n \geqslant 0 \qquad B(63)$$

Como es sabido, $\delta^{(n)}(t-t_0)$ significa que, si $f(t)$ es continua,

$$\int_a^b f(t)\, \delta^{(n)}(t-t_0)\, dt = (-)^n f^{(n)}(t_0) \quad , t_0 \in (a,b) \qquad B(64)$$

Las integrales que figuran en B(63) no deben entenderse como sumas generalizadas (p.ej. según Cesàro) sino como definiciones de la transformada de Fourier de x^n en conformidad con la regla

$$i\, F\left[x\, f(x)\right] = \frac{d}{dt} F\left[f(x)\right]\,, \qquad B(65)$$

válida para las transformadas ordinarias. Pues si se las considera como simples integrales de funciones -- en lugar de tratárselas co-

8 L. Schwartz, op.cit., II (1951), p. 115.

mo distribuciones-- se llega a resultados tales como

$$(A)\int_{-\infty}^{\infty} e^{itx}\, x^{2n+1}\, dx = \lim_{s\to 0}\left\{\int_0^{\infty} e^{-(s-it)x}\, x^{2n+1}\, dx - \int_0^{\infty} e^{-(s+it)}x^{2n+1}\, dx\right\}$$

$$= (2n+1)!\ \lim_{s\to 0}\left[\frac{1}{(s-it)^{2(n+1)}} - \frac{1}{(s+it)^{2(n+1)}}\right] = 0 \qquad B(66)$$

y nos vemos privados de la representación integral de $\delta^{(2n+1)}(t)$.

Sin embargo, conviene advertir que, para las aplicaciones físicas consideradas en este trabajo,la diferencia entre B(63) y B(66) no aparece en los resultados finales,ya que al final siempre integramos sobre un paquete de ondas; en efecto,

$$\int_{-u}^{u} \delta^{(n)}(t)\, dt = 0, \quad n > 0. \qquad B(67)$$

4.5.- Transformadas de Fourier de x^n en $(0,\infty)$

También las integrales

$$\int_0^{\infty} e^{itx}\, x^n\, dx$$

pueden considerarse como distribuciones o como simples integrales divergentes. Como antes, adoptaremos el primer punto de vista. Derivando la delta positiva B(35,a),

$$\int_0^{\infty} e^{itx}\, dx = \pi\, \delta(t) + v.p.\ \frac{i}{t}$$

resulta

$$\int_0^{\infty} e^{itx}\, x^n\, dx = (-i)^n \pi\left[\delta^{(n)}(t) + \text{Pf}\ \frac{i(-1)^n\, n!}{\pi\, t^{n+1}}\right] \qquad B(68)$$

En este caso, Pf indica que, al integrar respecto de t , habrá que tomar la parte finita de la integral, del mismo modo que v.p. significaba que en la integración debe tomarse el valor principal. Pf g(t) es lo que se llama una distribución seudofunción.

Ahora ya podemos encarar el cálculo de las integrales R^p. Pero antes haremos un par de observaciones que facilitarán la tarea.

4 4.6.- Clasificación de las integrales

Los integrandos de las $R^p (k,k')$ son pares o impares. Como

$$j_\ell(-x) = (-)^\ell \; j_\ell(x) \qquad B(69)$$

son pares los integrandos para los cuales

$$\begin{array}{ll} p = 0,\ 2,\ \ldots \quad y \ \ell' = \ell \pm 2n \geqslant 0 & \\ p = 1,\ 3,\ \ldots \quad y \ \ell' = \ell \pm (2n+1) \geqslant 0 & \end{array} \quad ,n = 0,1,2,\ldots \qquad B(70)$$

En este caso podemos poner con ventaja (pues sólo aparecerán las deltas comunes y sus derivadas, en lugar de las deltas de Heisenberg)

$$\int_0^\infty = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty$$

En cambio, son impares los integrandos para los cuales

$$\begin{array}{ll} p = 0\ ,\ 2,\ \ldots \quad y \ \ell' = \ell \pm (2n+1) \geqslant 0 & \\ p = 1\ ,\ 3,\ \ldots \quad y \ \ell' = \ell \pm 2n \geqslant 0 & \end{array} \quad ,\ n=0,1,2,\ldots \qquad B(71)$$

Debido al papel decisivo que desempeña p , ordenaremos las integrales por orden creciente de p.

5.- Integrales de integrandos pares

5.1.- R^0, $\ell' = \ell \pm 2n \geq 0$

Por B(43) y por la paridad del integrando,

$$R^0_{\ell,\ell\pm 2n}(k,k') = \frac{(-1)^{\ell+1+n}}{4\pi}\left\{ \int_{-\infty}^{\infty} S_\ell(ikr)\, S_{\ell'}(ik'r)\, \frac{e^{i(k+k')r}}{r^2}\, dr \right.$$

$$\left. + \text{compl. conj.} + (-1)^{\ell+1} \int_{-\infty}^{\infty} S_\ell(ikr)\, S^*_{\ell'}(ik'r)\, \frac{e^{i(k-k')r}}{r^2}\, dr + \text{conj.} \right\} \qquad B(72)$$

Recordando las expresiones B(44) y B(45) de los productos de las S, y aplicando el resultado B(61), se tiene

$$\int_{-\infty}^{\infty} S_\ell(ikr)\, S_{\ell'}(ik'r)\, \frac{e^{i(k+k')r}}{r^2}\, dr = \sum_{m=0}^{2(\ell\pm n)} \alpha_m\, i^m \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i(k+k')r}}{r^{m+2}}\, dr$$

$$= \pi\, \varepsilon(k+k') \sum_{m=0}^{2(\ell\pm n)} (-1)^{m+1} \alpha_m \frac{(k+k')^{m+1}}{(m+1)!}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} S_\ell(ikr)\, S_{\ell'}(ik'r)\, \frac{e^{i(k-k')r}}{r^2}\, dr = \sum_{m=0}^{2(\ell\pm n)} \beta_m\, i^m \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i(k-k')r}}{r^{m+2}}\, dr$$

$$= \pi\, \varepsilon(k-k') \sum_{m=0}^{2(\ell\pm n)} (-1)^{m+1} \beta_m \frac{(k-k')^{m+1}}{(m+1)!} \qquad B(73)$$

Por ser α_m y β_m reales,

$$R^0_{\ell,\ell\pm 2n}(k,k') = (-1)^{\ell+n}\, \frac{1}{2} \left\{ \varepsilon(k+k') \sum_{m=0}^{2(\ell\pm n)} (-1)^m \alpha_m \frac{(k+k')^{m+1}}{(m+1)!} \right.$$

$$\left. + \varepsilon(k-k')\, (-1)^{\ell+1} \sum_{m=0}^{2(\ell\pm n)} (-1)^m \beta_m \frac{(k-k')^{m+1}}{(m+1)!} \right\} \qquad B(74)$$

O bien, explícitamente,

$$R^{0}_{\ell,\ell\pm 2n}\,(k,k'>k) = (-1)^{\ell+n}\,\frac{1}{2}\sum_{m=0}^{2(\ell\pm n)}\left[(-1)^{m}\alpha_m\,\frac{(k+k')^{m+1}}{(m+1)!} + (-1)^{\ell+1}\beta_m\,\frac{(k'-k)^{m+1}}{(m+1)!}\right] \qquad \mathrm{B(75,a)}$$

$$R^{0}_{\ell,\ell\pm 2n}\,(k,k'<k) = (-1)^{\ell+n}\,\frac{1}{2}\sum_{m=0}^{2(\ell\pm n)}\frac{(-)^{m}}{(m+1)!}\left[\alpha_m\,(k+k')^{m+1} + (-1)^{\ell+1}\beta_m\,(k-k')^{m+1}\right] \qquad \mathrm{B(75,b)}$$

$$R^{0}_{\ell,\ell\pm 2n}\,(k,k) = (-1)^{\ell+n}\,\frac{1}{2}\sum_{m=0}^{2(\ell\pm n)}(-1)^{m}\,\alpha_m\,\frac{(2k)^{m+1}}{(m+1)!} \qquad \mathrm{B(75,c)}$$

En particular, para n=0,

$$R^{0}_{\ell,\ell}\,(k,k) = \frac{k}{2\ell+1} \qquad \mathrm{B(76)}$$

5.2.- $R^{1},\ \ell' = \ell \pm (2n+1) \geq 0$

La B(43) nos da

$$R^{1}_{\ell,\ell\pm(2n+1)}\,(k,k') = \frac{(-1)^{\ell+1}\,i^{\pm(2n+1)}}{4\pi}\left\{-\int_{-\infty}^{\infty} S_{\ell}(ikr)\,S_{\ell'}(ik'r)\,\frac{e^{i(k+k')r}}{r}\,dr\right.$$

$$\left. + \text{c.c.} + (-1)^{\ell+1}\int_{-\infty}^{\infty} S_{\ell}(ikr)\,S^{*}_{\ell'}(ik'r)\,\frac{e^{i(k-k')r}}{r}\,dr - \text{c.c.}\right\} \qquad \mathrm{B(77)}$$

y la B(61)

$$R^{1}_{\ell,\ell\pm(2n+1)}\,(k,k') = i^{1\pm(2n+1)}\,\frac{1}{2}\left\{\varepsilon(k+k')\,(-1)^{\ell}\sum_{m=0}^{2(\ell\pm n)\pm 1}(-1)^{m}\alpha_m\,\frac{(k+k')^{m}}{m!}\right.$$

$$\left. + \varepsilon(k-k')\sum_{m=0}^{2(\ell\pm n)\pm 1}(-1)^{m}\beta_m\,\frac{(k-k')^{m}}{m!}\right\} \qquad \mathrm{B(78)}$$

Explícitamente,

$$R^1_{l,l\pm(2n+1)}(k,k'>k) = i^{1\pm(2n+1)}\frac{1}{2}\sum_{m=0}^{2(l\pm n)\pm 1}\frac{1}{m!}\left[(-1)^{l+m}\alpha_m(k+k')^m - \beta_m(k'-k)^m\right]$$

B(79,a)

$$R^1_{l,l\pm(2n+1)}(k,k'<k) = i^{1\pm(2n+1)}\frac{1}{2}\sum_{m=0}^{2(l\pm n)\pm 1}\frac{(-1)^m}{m!}\left[(-1)^l\alpha_m(k+k')^m + \beta_m(k-k')^m\right]$$

B(79,b)

$$R^1_{l,l\pm(2n+1)}(k,k) = i^{1\pm(2n+1)}\frac{(-1)^l}{2}\sum_{m=0}^{2(l\pm n)\pm 1}(-1)^m\alpha_m\frac{(2k)^m}{m!}$$

B(79,c)

5.3.- R^2, $l' = l \pm 2n \geq 0$

$$R^2_{l,l\pm 2n}(k,k') = \frac{(-1)^{l+n+1}}{4\pi}\left\{\int_{-\infty}^{\infty} S_l(ikr)\,S_{l'}(ik'r)\,e^{i(k+k')r}\,dr\right.$$

$$\left. + \text{c.c.} + (-1)^{l+1}\int_{-\infty}^{\infty} S_l(ikr)\,S^*_{l'}(ik'r)\,e^{i(k-k')r}\,dr + \text{c.c.}\right\}$$

B(80)

Aquí ya aparecen las deltas; además de B(61) debemos tener en cuenta B(35,c); con esto,

$$R^2_{l,l\pm 2n}(k,k') = (-1)^n\left\{(-1)^{l+1}\delta(k'+k) + \delta(k'-k)\right.$$

$$\left. + \varepsilon(k+k')\frac{(-1)^{l+1}}{2}\sum_{m=1}^{2(l\pm n)}(-1)^m\alpha_m\frac{(k+k')^{m-1}}{(m-1)!} + \varepsilon(k-k')\frac{1}{2}\sum_{m=1}^{2(l\pm n)}(-1)^m\beta_m\frac{(k-k')^{m-1}}{(m-1)!}\right\}$$

B(81)

Ya se ha visto (cf. B(29)) que en las aplicaciones físicas es preciso poner $\delta(k'+k) = 0$; de manera que, explícitamente, queda

$$R^2_{l,l\pm 2n}\,(k,\,k'>k) = (-1)^n \left\{ \delta(k'-k) + \frac{1}{2}\sum_{m=1}^{2(l\pm n)} \frac{1}{(m-1)!}\left[(-1)^{l+m+1}\alpha_m (k+k')^{m-1} + \beta_m (k'-k)^{m-1}\right]\right\} \quad B(82,a)$$

$$R^2_{l,l\pm 2n}\,(k,\,k'<k) = (-1)^n \left\{ \delta(k'-k) + \frac{1}{2}\sum_{m=1}^{2(l\pm n)} \frac{(-1)^m}{(m-1)!}\left[(-1)^{l+1}\alpha_m (k+k')^{m-1} + \beta_m (k-k')^{m-1}\right]\right\} \quad B(82,b)$$

En particular, para n=0 se verifica, después de un cálculo tedioso pero elemental, que

$$\sum_{m=1}^{2l} \frac{(-1)^m}{(m-1)!}\left[(-1)^{l+1}\alpha_m (k+k')^{m-1} + \beta_m (k-k')^{m-1}\right] = 0, \quad B(83)$$

con lo cual la integral de normalización toma el valor que ya conocíamos:

$$R^2_{l,l}\,(k,k') = \frac{2}{\pi}\, k\, k' \int_0^\infty j_l(kr)\, j_l(k'r)\, r^2\, dr = \delta(k'-k) \quad B(84)$$

5.4.- R^3 $l' = l \pm (2n+1) \geq 0$

$$R^3_{l,l\pm(2n+1)}\,(k,k') = \frac{(-1)^{l+1}\, i^{\pm(2n+1)}}{4\pi}\left\{ -\int_{-\infty}^{\infty} S_l(ikr)\, S_{l'}(ik'r)\, e^{i(k+k')r}\, r\,dr + \text{c.c.} + (-1)^{l+1}\int_{-\infty}^{\infty} S_l(ikr)\, S^{+}_{l'}(ik'r)\, e^{i(k-k')r}\, r\,dr - \text{c.c.} \right\} \quad B(85)$$

Los coeficientes de α_0 y β_0 son deltas; los de α_1 y β_1 son derivadas primeras de las deltas, por B(63). El resultado es

$$R^3_{l,l\pm(2n+1)}(k,k') = i^{1\pm(2n+1)}\Big\{(-1)^{l+1}\left[\delta'(k'+k) - \alpha_1\,\delta(k'+k)\right] - \left[\delta'(k'-k) - \beta_1\,\delta(k'-k)\right] + (-1)^{l+1}\tfrac{1}{2}\,\varepsilon(k+k')\sum_{m=2}^{2(l\pm n)\pm 1}(-)^m\alpha_m\frac{(k+k')^{m-2}}{(m-2)!} - \varepsilon(k-k')\,\tfrac{1}{2}\sum_{m=2}^{2(l\pm n)\pm 1}(-1)^m\beta_m\frac{(k-k')^{m-2}}{(m-2)!}\Big\} \qquad B(86)$$

Debemos anular no sólo $\delta(k+k')$ sino también su derivada; en efecto, siendo $x\,\delta(x)=0$, es $x\,\delta'+\delta=0$; por ser $\delta=0$ y $x\neq 0$, resulta $\delta'=0$. Así, pues, queda

$$R^3_{l,l\pm(2n+1)}(k,k'>k) = i^{\pm(2n+1)+1}\Big\{\beta_1\,\delta(k-k') - \delta'(k-k') + \tfrac{1}{2}\sum_{m=2}^{2(l\pm n)\pm 1}\frac{1}{(m-2)!}\left[(-1)^{l+m+1}\alpha_m(k+k')^{m-2} + \beta_m(k'-k)^{m-2}\right]\Big\} \qquad B(87,a)$$

$$R^3_{l,l\pm(2n+1)}(k,k'<k) = i^{\pm(2n+1)+1}\Big\{\beta_1\,\delta(k-k') - \delta'(k-k') + \tfrac{1}{2}\sum_{m=2}^{2(l\pm n)\pm 1}\frac{(-1)^m}{(m-2)!}\left[(-1)^{l+1}\alpha_m(k+k')^{m-2} - \beta_m(k-k')^{m-2}\right]\Big\} \qquad B(87,b)$$

Por ejemplo,

$$R^3_{0,1}(k,k') = -R^3_{1,0}(k,k') = \delta'(k'-k) \qquad B(88)$$

6.- Integrales de integrandos impares

6.1.- R^0, $\ell' = \ell \pm (2n+1) \geq 0$

Por B(43),

$$R^0_{\ell,\ell\pm(2n+1)}(k,k') = \frac{(-1)^{\ell+1}\, i^{\pm(2n+1)}}{2\pi}\Big\{ - Pf\int_0^\infty S_\ell(ikr)\, S_{\ell'}(ik'r)\, \frac{e^{i(k+k')r}}{r^2}\,dr$$

$$+ \text{c.c.} + (-1)^{\ell+1}\, Pf\int_0^\infty S_\ell(ikr)\, S^*_{\ell'}(ik'r)\, \frac{e^{i(k-k')r}}{r^2} - \text{c.c.}\Big\} \qquad B(89)$$

Teniendo en cuenta B(59), la primera de las integrales indicadas es

$$Pf\int_0^\infty S_\ell(ikr)\, S_{\ell'}(ikr)\, \frac{e^{i(k+k')r}}{r^2}\,dr = \sum_{m=0}^{2(\ell\pm n)\pm 1} i^m \alpha_m\, Pf\int_0^\infty \frac{e^{i(k+k')r}}{r^{m+2}}\,dr$$

$$= \sum_{m=0}^{2(\ell\pm n)\pm 1} (-1)^{m+1}\alpha_m \frac{(k+k')^{m+1}}{(m+1)!}\Big\{ \varepsilon(k+k')\frac{\pi}{2} + i\Big[\ln|k'+k| + C - \Big(1+\frac{1}{2}+\dots+\frac{1}{m+1}\Big)\Big]\Big\} \qquad B(90)$$

Las demás se calculan del mismo modo; reuniendo los resultados,

$$R^0_{\ell,\ell\pm(2n+1)}(k,k') = \pm\frac{(-1)^{\ell+n}}{\pi}\sum_{m=0}^{2(\ell\pm n)\pm 1}\frac{(-1)^m}{(m+1)!}\Big\{\alpha_m(k+k')^{m+1}\Big[\ln|k+k'| + C$$

$$- \Big(1+\frac{1}{2}+\dots+\frac{1}{m+1}\Big)\Big]$$

$$+ (-1)^\ell \beta_m (k-k')^{m+1}\Big[\ln|k-k'| + C - \Big(1+\frac{1}{2}+\frac{1}{3}+\dots+\frac{1}{m+1}\Big)\Big]\Big\} \qquad B(91)$$

6.2.- R^1, $\ell' = \ell \pm 2n \geq 0$

$$R^1_{\ell,\ell\pm 2n}(k,k') = \frac{(-1)^{\ell+1+n}}{2\pi}\Big\{ Pf\int_0^\infty S_\ell(ikr)\, S_{\ell'}(ik'r)\, \frac{e^{i(k+k')r}}{r}\,dr + \text{c.c.}$$

$$+ (-1)^{\ell+1}\, Pf\int_0^\infty S_\ell(ikr)\, S^*_{\ell'}(ik'r)\, \frac{e^{i(k-k')r}}{r}\,dr + \text{c.c.}\Big\} \qquad B(92)$$

Por ejemplo,

$$Pf \int_0^\infty S_\ell(ikr)\, S_{\ell'}(ik'r)\, \frac{e^{i(k+k')r}}{r}\, dr = \sum_{m=0}^{2(\ell\pm n)} i^m \alpha_m\, Pf \int_0^\infty \frac{e^{i(k+k')r}}{r^{m+1}}\, dr \qquad B(93)$$

$$= \sum_{m=0}^{2(\ell\pm n)} (-1)^m \alpha_m \frac{(k+k')^m}{m!} \left\{ i\varepsilon(k+k')\frac{\pi}{2} - \left[\ln|k'+k| + C - \left(1+\tfrac{1}{2}+\cdots\right)\right]\right\}$$

Resulta así

$$R^1_{\ell,\ell\pm 2n}(k,k') = \frac{(-1)^{\ell+n}}{n} \sum_{m=0}^{2(\ell\pm n)} \frac{(-1)^m}{m!} \left\{ \alpha_m (k+k')^m \left[\ln|k+k'| + C - \left(1+\tfrac{1}{2}+\cdots\right)\right]\right.$$

$$\left. + (-1)^{\ell+1} \beta_m (k-k')^m \left[\ln|k-k'| + C - \left(1+\tfrac{1}{2}+\cdots\right)\right]\right\} \qquad B(94)$$

6.3.- R^2, $\ell' = \ell \pm (2n+1) \geq 0$

$$R^2_{\ell,\ell\pm(2n+1)}(k,k') = \frac{(-1)^{\ell+1}\, i^{\pm(2n+1)}}{2\pi} \left\{ -Pf \int_0^\infty S_\ell(ikr)\, S_{\ell'}(ik'r)\, e^{i(k+k')r}\, dr\right.$$

$$\left. + c.c. + (-1)^{\ell+1}\, Pf \int_0^\infty S_\ell(ikr)\, S^*_{\ell'}(ik'r)\, e^{i(k-k')r}\, dr \right\} \qquad B(95)$$

Aquí ya aparecen,como coeficientes de α_0 y β_0, las deltas positiva y negativa. Por ejemplo,

$$-Pf \int_0^\infty S_\ell(ikr)\, S_{\ell'}(ik'r)\, e^{i(k+k')r}\, dr + c.c. = \frac{2\alpha_0}{i(k+k')}$$

$$- i\, 2 \sum_{m=1}^{2(\ell\pm n)\pm 1} \frac{(-1)^m}{(m-1)!}\, \alpha_m (k+k')^{m-1} \left[\ln|k+k'| + C - \left(1+\tfrac{1}{2}+\cdots\right)\right] \qquad B(96)$$

El resultado es

$$R^2_{l,l\pm(2n+1)}(k,k') = \frac{(-1)^l \, i^{\pm(2n+1)+1}}{\pi}\left\{ vp\frac{1}{k+k'} + vp\frac{(-1)^l}{k-k'}\right.$$

$$+ \sum_{m=1}^{2(l\pm n)\pm 1} \frac{(-1)^m}{m!}\left\{ \alpha_m (k+k')^{m-1}\left[\ln|k+k'| + C - (1+\tfrac{1}{2}+\cdots)\right]\right. \qquad B(97)$$

$$\left.\left. + \beta_m (-1)^l (k-k')^{m-1}\left[\ln|k-k'| + C - (1+\tfrac{1}{2}+\cdots)\right]\right\}\right\}$$

Por ejemplo,

$$R^2_{0,1}(k,k') = \frac{2}{\pi}\left[\frac{1}{2k'}\ln\left|\frac{k+k'}{k-k'}\right| + \frac{k}{k'^2-k^2}\right] \qquad B(98,a)$$

$$R^2_{1,0}(k,k') = R^2_{0,1}(k',k), \qquad B(98,b)$$

resultados éstos que habíamos obtenido anteriormente en el parágrafo 3 (cf. B(24) y B(31)).

6.3.- R^3, $l' = l \pm 2n \geq 0$

$$R^3_{l,l\pm 2n}(k,k') = \frac{(-1)^{l+1+n}}{2\pi}\left\{ Pf\int_0^\infty S_l(ikr)\,S_{l'}(ik'r)\,e^{i(k+k')r}\,r\,dr\right.$$

$$\left. + c.c. + (-1)^{l+1}\, Pf\int_0^\infty S_l(ikr)\,S_{l'}(ik'r)\,e^{i(k-k')r}\,r\,dr + c.c.\right\} \qquad B(99)$$

Además de las deltas positiva y negativa se presentan-- por B(68)-- sus derivadas primeras. Por ejemplo,

$$Pf\int_0^\infty S_l(ikr)\,S_{l'}(ik'r)\,e^{i(k+k')r}\,r\,dr = -i\left[\pi\,\delta'(k+k') - Pf\frac{i}{(k+k')^2}\right.$$

$$+ i\alpha_1\left[\pi\,\delta(k+k') + v.p.\frac{i}{k+k'}\right] \qquad B(100)$$

$$\left. + \sum_{m=2}^{2(l\pm n)} \frac{(-1)^m}{(m-2)!}\,\alpha_m (k+k')^{m-2}\left[-i\frac{\pi}{2}\,\varepsilon(k+k') + \ln|k+k'| - C - (1+\tfrac{1}{2}+\cdots)\right]\right]$$

El resultado es

$$R^{3}_{\ell,\ell\pm 2n}(k,k') = \frac{(-1)^{\ell+1+n}}{\pi}\left\{ -\,\mathrm{Pf}\,\frac{1}{(k+k')^2} - \mathrm{Pf}\,\frac{(-1)^{\ell+1}}{(k-k')^2} \right.$$

$$-\,\alpha_1\,\mathrm{v.p.}\,\frac{1}{k+k'} - \beta_1\,\mathrm{v.p.}\,\frac{(-1)^{\ell+1}}{k-k'}$$

$$+\sum_{m=2}^{2(\ell\pm n)} \frac{(-1)^m}{(m-2)!}\Big[\alpha_m (k+k')^{m-2}\Big(\ln|k+k'| + C - \big(1+\tfrac{1}{2}+\cdots\big)\Big)$$

$$\left. +\,(-1)^{\ell+1}\beta_m (k-k')^{m-2}\Big(\ln|k-k'| + C - \big(1+\tfrac{1}{2}+\cdots\big)\Big)\Big]\right\} \qquad \mathrm{B(101)}$$

7.- Un segundo método para calcular las integrales convergentes del producto de dos funciones de Bessel esféricas

En este parágrafo expondremos otro método para calcular las integrales que nos interesan; es menos general que el anterior, pues sólo se aplica a las integrales convergentes. La ventaja de este método formal radica en que a menudo permite obtener expresiones más compactas que los polinomios a que se llega con el método anterior.

7.1.- Descripción del método

El método que proponemos consiste en sustituir, en los integrandos de R^p, las funciones de Bessel esféricas por sus representaciones integrales

$$j_n(x) = \frac{i^{-n}}{2}\int_{-1}^{1} e^{ix\mu} P_n(\mu)\, d\mu , \quad j_{n'}(x) = \frac{i^{n'}}{2}\int_{-1}^{1} e^{-ix\mu} P_n(\mu)\, d\mu \qquad B(102)$$

donde $\mu = \cos\vartheta$, y $P_n(\cos\vartheta)$ es el polinomio de Legendre de orden n. Efectuando la sustitución indicada e invirtiendo el orden de las integraciones, se obtiene

<u>para los integrandos pares ($p + \ell + \ell'$ par)</u>

$$R^p_{\ell,\ell'}(k,k') = \frac{2}{\pi} kk' \int_0^\infty j_\ell(kr)\, j_{\ell'}(k'r)\, r^p\, dr = \frac{kk'}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} j_\ell(kr)\, j_{\ell'}(k'r)\, r^p\, dr$$

$$= \frac{kk'}{4\pi}\, i^{\ell-\ell'} \int_{-\infty}^{\infty} r^p dr \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} P_\ell(\mu)\, P_{\ell'}(\mu')\, e^{i(k\mu - k'\mu')r}\, d\mu\, d\mu'$$

$$= \frac{kk'}{2}\, i^{\ell-\ell'} \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} P_\ell(\mu)\, P_{\ell'}(\mu')\, d\mu\, d\mu' \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k\mu - k'\mu')}\, r^p\, dr$$

$$= \frac{kk'}{2}\, i^{\ell-\ell'-p} \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} P_\ell(\mu)\, P_{\ell'}(\mu')\, \delta^{(p)}(k\mu - k'\mu')\, d\mu\, d\mu' \qquad B(103)$$

y <u>para los integrandos impares ($p+\ell+\ell'$ impar)</u>

$$R^p_{\ell,\ell'}(k,k') = \frac{2}{\pi}\, kk' \int_0^\infty j_\ell(kr)\, j_{\ell'}(k'r)\, r^p\, dr$$

$$= kk'\, i^{\ell'-\ell} \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} P_\ell(\mu)\, P_{\ell'}(\mu')\, d\mu\, d\mu' . \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty e^{i(k\mu - k'\mu')r}\, r^p\, dr$$

$$= \frac{kk'}{}\, i^{\ell'-\ell-p} \iint P_\ell(\mu)\, P_{\ell'}(\mu')\, \delta_+^{(p)}(k\mu - k'\mu')\, d\mu\, d\mu' \qquad B(104)$$

El próximo paso consiste en aplicar la propiedad integral B(64) de la delta y de sus derivadas. Para ello es preciso distinguir dos casos, según que $k' > k$ o $k' < k$, ya que el argumento de las funciones esféricas debe mantenerse, en valor absoluto, menor o igual que 1.

a) <u>$k' > k$</u>

En este caso debemos integrar primero respecto de μ', porque

$$\delta(k\mu - k'\mu') = \frac{1}{k'}\, \delta\left(\mu' - \frac{k}{k'}\mu\right), \qquad \left|\frac{k}{k'}\mu\right| \leq 1 \qquad B(105)$$

$$\delta^{(p)}(k\mu - k'\mu') = \frac{(-1)^p}{k'^{p+1}} \frac{d^p}{d\mu'^p} \delta\left(\mu' - \frac{k}{k'}\mu\right) \qquad B(106)$$

$$\delta_+(k\mu - k'\mu) = \frac{1}{2}\left[\delta(k\mu - k'\mu) + Pf\frac{i}{\pi(k\mu - k'\mu')}\right] = \frac{1}{k'}\delta_-\left(\mu' - \frac{k}{k'}\mu\right) \qquad B(107)$$

$$\delta_+^{(p)}(k\mu - k'\mu') = \frac{(-1)^p}{k'^{p+1}} \frac{d^p}{d\mu'^p} \delta_-\left(\mu' - \frac{k}{k'}\mu\right) \qquad B(108)$$

$$= \frac{(-1)^p}{k'^{p+1}} \frac{1}{2}\left[\frac{d^p}{d\mu'^p}\delta\left(\mu' - \frac{k}{k'}\mu\right) - p!\,\frac{i}{\pi}(-1)^p\, Pf\frac{1}{\left(\mu' - \frac{k}{k'}\mu\right)^{p+1}}\right]$$

Introduciendo estos resultados en B(103) y B(104), y teniendo en cuenta B(64), resulta

para $p + \ell + \ell'$ par

$$R^p_{\ell,\ell'}(k, k' > k) = \frac{1}{2}\frac{k}{k'^p}\, i^{\ell' - \ell - p} \int_{-1}^{1} P_\ell(\mu) \frac{d^p P_{\ell'}\left(\frac{k}{k'}\mu\right)}{d\left(\frac{k}{k'}\mu\right)^p} d\mu \qquad B(109)$$

y **para $p + \ell + \ell'$ impar**,

$$R^p_{\ell,\ell'}(k, k' > k) = \frac{1}{2}\frac{k}{k'^p}\, i^{\ell' - \ell - p}\left\{\int_{-1}^{1} P_\ell(\mu) \frac{d^p P_{\ell'}\left(\frac{k}{k'}\mu\right)}{d\left(\frac{k}{k'}\mu\right)^p} d\mu - p!\,\frac{i}{\pi}\int_{-1}^{1} P_\ell(\mu)\, d\mu \,.\, Pf\int_{-1}^{1}\frac{P_{\ell'}(\mu')\, d\mu'}{\left(\mu' - \frac{k}{k'}\mu\right)^{p+1}}\right\}$$

$$= \frac{i^{\ell' - \ell - p - 1}}{2\pi}\frac{k}{k'^p}\, p! \int_{-1}^{1} P_\ell(\mu)\, d\mu \,.\, Pf\int_{-1}^{1}\frac{P_{\ell'}(\mu')\, d\mu'}{\left(\mu' - \frac{k}{k'}\mu\right)^{p+1}} \qquad B(110)$$

ya que el integrando de la primera integral es siempre impar para $p + \ell + \ell'$ impar.

b) <u>k' < k</u>

Ahora debemos integrar primero respecto de μ, porque

$$\delta(k\mu - k'\mu') = \frac{1}{k}\,\delta\left(\mu - \frac{k'}{k}\mu'\right) \quad , \quad \left|\frac{k'}{k}\mu'\right| \leq 1 \qquad B(111)$$

$$\delta^{(p)}(k\mu - k'\mu') = \frac{1}{k^{p+1}} \cdot \frac{d^p}{d\mu^p}\,\delta\left(\mu - \frac{k'}{k}\mu'\right) \qquad B(112)$$

$$\delta_+(k\mu - k'\mu') = \frac{1}{k}\,\delta_+\left(\mu - \frac{k'}{k}\mu'\right) \qquad B(113)$$

$$\delta_+^{(p)}(k\mu - k'\mu') = \frac{1}{k^{p+1}} \cdot \frac{1}{2}\left[\frac{d^p}{d\mu^p}\,\delta\left(\mu - \frac{k'}{k}\mu'\right) + p!\,\frac{i}{\pi}(-1)^p\, Pf\,\frac{1}{\left(\mu - \frac{k'}{k}\mu'\right)^{p+1}}\right] \qquad B(114)$$

Introduciendo estos resultados en B(103) y B(104), resulta

<u>para $p + \ell + \ell'$ par</u>

$$R^p_{\ell,\ell'}(k, k' < k) = \frac{1}{2}\, i^{\ell'-\ell-p}\, \frac{k'}{k^p}\,(-1)^p \int_{-1}^{1} P_{\ell'}(\mu)\, \frac{d^p P_\ell\left(\frac{k'}{k}\mu\right)}{d\left(\frac{k'}{k}\mu\right)^p}\, d\mu \,, \qquad B(115)$$

y <u>para $p + \ell + \ell'$ impar</u>,

$$R^p_{\ell,\ell'}(k, k' < k) = \frac{i^{\ell'-\ell-p+1}}{2\pi}\, \frac{k'}{k^p}\,(-1)^p \cdot p! \int_{-1}^{1} P_{\ell'}(\mu')\, d\mu' \cdot Pf \int_{-1}^{1} \frac{P_\ell(\mu)\, d\mu}{\left(\mu - \frac{k'}{k}\mu'\right)^{p+1}} \qquad B(116)$$

Estos resultados exhiben claramente una propiedad de las integrales R^p que ya hemos podido observar en parágrafos anteriores: son funciones de $x = k'/k$ que a menudo tienen un punto de discontinuidad (en $x=1$). El valor de $R^p(k,k)$ podrá determinarse, cuando sea finito, a partir de los valores de $R^p(x<1)$ y $R^p(x>1)$ en el entorno de $x=1$ mediante la convención

$$R^p(1) = \tfrac{1}{2}\left(R^p(1+0) + R^p(1-0) \right) \qquad B(117)$$

El cálculo efectivo de nuestras integrales se reduce, entonces, a la evaluación de integrales en principio mucho más sencillas, como son

$$\left.\begin{aligned} \int_{-1}^{1} P_\ell(\mu)\,\frac{d^p P_{\ell'}(a\mu)}{d(a\mu)^p}\,d\mu &= S^p_{\ell,\ell'}(a) \qquad B(118,a)\\ \int_{-1}^{1} P_{\ell'}(\mu)\,\frac{d^p P_{\ell}(a\mu)}{d(a\mu)^p}\,d\mu &= S^p_{\ell',\ell}(a) \qquad B(118,b)\end{aligned}\right\} \underline{p+\ell+\ell' \text{ par}}$$

$$\left.\begin{aligned} p!\int_{-1}^{1} P_\ell(\mu)\,d\mu\int_{-1}^{1}\frac{P_{\ell'}(\mu')\,d\mu'}{(\mu'-a\mu)^{p+1}} &= T^p_{\ell\ell'}(a) \qquad B(119,a)\\ p!\int_{-1}^{1} P_{\ell'}(\mu)\,d\mu\int_{-1}^{1}\frac{P_{\ell}(\mu)\,d\mu}{(\mu-a\mu')^{p+1}} &= T^p_{\ell\ell'}(a) \qquad B(119,b)\end{aligned}\right\} \underline{p+\ell+\ell' \text{ impar}}$$

en términos de las cuales, las que nos interesan son

$$\left.\begin{aligned} R^p_{\ell,\ell'}(k,k'>k) &= \frac{i^{\ell'-\ell-p}}{2}\,\frac{k}{k'^p}\,S^p_{\ell,\ell'}\left(\frac{k}{k'}\right) \qquad B(120,a)\\ R^p_{\ell,\ell'}(k,k'<k) &= \frac{i^{\ell'-\ell-p}}{2}\,\frac{k'}{k^p}\,(-1)^p\,S^p_{\ell',\ell}\left(\frac{k'}{k}\right) \qquad B(120,b)\end{aligned}\right\} \underline{p+\ell+\ell' \text{ par}}$$

$$\left.\begin{aligned} R^{p}(k,k'>k) &= \frac{i^{\ell'-\ell-p-1}}{2}\,\frac{k}{k'^{p}}\,T^{p}_{\ell,\ell'}\left(\frac{k}{k'}\right) \\ R^{p}(k,k'<k) &= \frac{i^{\ell'-\ell-p-1}}{2}\,\frac{k'}{k^{p}}\,(-1)^{p+1}\,T^{p}_{\ell',\ell}\left(\frac{k'}{k}\right) \end{aligned}\right\}\ \begin{array}{l} p+\ell+\ell' \\ \underline{\text{impar}} \end{array} \qquad \begin{array}{r} B(121,a) \\ B(121,b) \end{array}$$

A continuación nos ocuparemos de las integrales S.

6.2.- Las integrales S

Trataremos ante todo el caso p=0. Para $0 \leqslant a \leqslant 1$, los polinomios $P_\ell(a\mu)$ no son ortogonales a los $P_{\ell'}(\mu)$. Si $\ell' = \ell$ se encuentra fácilmente

$$S^{0}_{\ell,\ell}(a) = \int_{-1}^{1} P_\ell(\mu)\,P_\ell(a\mu)\,d\mu = \frac{2}{2\ell+1}\,a^{\ell} \qquad B(122)$$

Por consiguiente tenemos, por ejemplo,

$$R^{0}_{\ell,\ell}(k,k') = \begin{cases} \dfrac{k}{2\ell+1}\left(\dfrac{k}{k'}\right)^{\ell} & k' > k \qquad B(123,a) \\[2ex] \dfrac{k'}{2\ell+1}\left(\dfrac{k'}{k}\right)^{\ell} & k' < k \qquad B(123,b) \\[2ex] \dfrac{k}{2\ell+1} & k' = k \qquad B(123,c) \end{cases}$$

resultado que ya se conoce por otros métodos.[9]

---

9 G. N. Watson, A Treatise on the Theory of Bessel Functions (Cambridge, University Press,1944) ,2a. ed., p. 405.

Para $\ell' \neq \ell$ debemos recurrir el teorema de adición

$$P_n\left[\cos\vartheta\cos\vartheta' + \operatorname{sen}\vartheta\,\operatorname{sen}\vartheta'\cos(\varphi-\varphi')\right]$$
$$= P_n(\cos\vartheta)\,P_n(\cos\vartheta') + 2\sum_{m=1}^{n}\frac{(n-m)!}{(n+m)!}\cos m(\varphi-\varphi')\,P_n^m(\cos\vartheta)P_n^m(\cos\vartheta') \qquad B(124)$$

Tomando

$$\varphi-\varphi' = \frac{\pi}{2}\,,\quad \cos\vartheta' = a\,,\quad n=\ell'\,,$$

resulta

$$P_{\ell'}(a\mu) = P_{\ell'}(a)\,P_{\ell'}(\mu) + 2\sum_{m=1}^{\ell'}\frac{(\ell'-m)!}{(\ell'+m)!}\cos m\frac{\pi}{2}\,P_{\ell'}^m(a)\,P_{\ell'}^m(\mu) \qquad B(125)$$

Multiplicando por $P_\ell(\mu)$, integrando y recordando la relación de ortogonalidad

$$(P_\ell, P_{\ell'}) = \frac{2}{2\ell+1}\,\delta_{\ell'\ell}\,, \qquad B(126)$$

obtenemos

$$S^0_{\ell\ell'}(a) = \int_{-1}^{1}P_\ell(\mu)\,P_{\ell'}(a\mu)\,d\mu = P_{\ell'}(a)\frac{2}{2\ell+1}\,\delta_{\ell'\ell}$$
$$+\,2\sum_{m=1}^{\ell'}\frac{(\ell'-m)!}{(\ell'+m)!}\cos m\frac{\pi}{2}\cdot P_{\ell'}^m(a)\int_{-1}^{1}P_\ell(\mu)\,P_{\ell'}^m(\mu)\,d\mu \qquad B(127)$$

Las integrales que figuran bajo el signo de sumación se calculan fácilmente en cada caso particular; son diferentes de 0 solamente si $\ell' = \ell$, $\ell+2$, $\ell+4$,... Por lo tanto, la regla de selección es

$$S^0_{\ell,\ell'}(a) \propto \delta_{\ell',\ell+2n}\,,\quad n=0,1,2,\dots \qquad B(128)$$

Análogamente,

$$S^0_{\ell,\ell'}(a) = P_\ell(a)\frac{2}{2\ell'+1}\,\delta_{\ell'\ell} + 2\sum_{m=1}^{\ell}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}\cos m\frac{\pi}{2}\,P_\ell^m(a)$$
$$\int_{-1}^{1}P_{\ell'}(\mu)\,P_\ell^m(\mu)\,d\mu \qquad B(129)$$

Las integrales que figuran en la sumatoria son diferentes de 0 sólo si $\ell = \ell' + 2n$, de modo que

$$S^{0}_{\ell',\ell}(a) \propto \delta_{\ell',\ell-2n\geq 0}\ , \qquad n = 0,1,2,3,\ldots \quad B(130)$$

Para $p > 0$, las integrales $S^{p}(a)$ se reducen a las S^{0} gracias a la fórmula[10]

$$\frac{d^{p}}{d(a\mu)^{p}} P_{\ell'}(a\mu) = \frac{1}{(p-1)!}\Big\{(p-1)!\,[(2\ell'-1)(2\ell'-3)\cdots(2\ell'-2p+3)](2\ell'-2p+1)\,P_{\ell'-p}(a\mu)$$
$$+\ \frac{p!}{1}\,[(2\ell'-3)(2\ell'-5)\cdots(2\ell'-2p+1)](2\ell'-2p-3)\,P_{\ell'-p-2}(a\mu)$$
$$+\ \frac{(p+1)!}{2}\,[(2\ell'-5)(2\ell'-7)\cdots(2\ell'-2p-1)](2\ell'-2p-7)\,P_{\ell'-p-4}(a\mu)+\cdots\Big\}, \quad B(131)$$

que termina en P_0 si $\ell'-p$ es par, y en P_1 si $\ell'-p$ es impar. Así resulta

$$S^{p}_{\ell,\ell'}(a) = \frac{1}{(p-1)!}\Big\{(p-1)!\,[(2\ell'-1)(2\ell'-3)\cdots(2\ell'-2p+3)](2\ell'-2p+1)\,S^{0}_{\ell,\ell'-p}(a)$$
$$+\ \frac{p!}{1}\,[(2\ell'-3)(2\ell'-5)+\cdots(2\ell'-2p+1)]\,(2\ell'-2p-3)\,S^{0}_{\ell,\ell'-p-2}(a)$$
$$+\ \frac{(p+1)!}{2}\,[(2\ell'-5)(2\ell'-7)\cdots(2\ell'-2p-1)](2\ell'-2p-7)\,S^{0}_{\ell,\ell'-p-4}(a)+\cdots\Big\} \quad B(132)$$

Análogamente, desarrollando $\dfrac{d^{p}P_{\ell}(a\mu)}{d\mu^{p}}$ en lugar de $\dfrac{d^{p}P_{\ell}'(a\mu)}{d\mu^{p}}$,

---

10 E. W. Hobson, <u>The Theory of Spherical and Ellipsoidal Harmonics</u> (Cambridge, University Press, 1931), p. 35.

$$S^{p}_{l',l}(a) = \frac{1}{(p-1)!}\Big\{(p-1)!\left[(2l-1)(2l-3)\dots(2l-2p+3)\right](2l-2p+1)\, S^{0}_{l',l-p}(a)$$

$$+ \frac{p!}{4'}\left[(2l-3)(2l-5)\dots(2l-2p+1)\right](2l-2p+3)\, S^{0}_{l',l-p-2}(a)$$

$$+ \frac{(p+1)}{2}\left[(2l-5)(2l-7)\dots(2l-2p-1)\right](2l-2p-7)\, S^{0}_{l',l-p-4}(a) + \dots\Big\} \qquad \mathrm{B(133)}$$

Teniendo en cuenta B(128) y B(130), resultan las reglas de selección

$$S^{p}_{l,l'}(a) \sim \delta_{l',l+p+2n} \; ; \qquad S^{p}_{l',l}(a) \propto \delta_{l',l-p-2n} , \qquad \mathrm{B(134)}$$

que para mayor comodidad escribimos

$$S^{2q}_{l,l'}(a) \propto \delta_{l',l+2(q+n)} , \qquad S^{2q}_{l',l}(a) \propto \delta_{l',l-2(q+n)\geq 0} \qquad \mathrm{B(135,a)}$$

$$S^{2q+1}_{l,l'}(a) \propto \delta_{l',l+2(q+n)+1} , \qquad S^{2q+1}_{l',l}(a) \propto \delta_{l',l-2(q+n)-1\geq 0} \qquad \mathrm{B(135,b)}$$

Empleando los resultados indicados se encuentran, tras un breve cálculo, los siguientes resultados particulares:

$$R^{1}_{0,l+1}(k,k') = \begin{cases} \left(\frac{k}{k'}\right)^{l+1} & k' > k \qquad \mathrm{B(136,a)} \\ 0 & k' < k \qquad \mathrm{B(136,b)} \\ \frac{1}{2} & k' = k \qquad \mathrm{B(136,c)} \end{cases}$$

$$R^{1}_{l,l-1}(k,k') = \begin{cases} 0 & k' > k \qquad \mathrm{B(137,a)} \\ \left(\frac{k'}{k}\right)^{l} & k' < k \qquad \mathrm{B(137,b)} \\ \frac{1}{2} & k' = k \qquad \mathrm{B(137,c)} \end{cases}$$

las que figuran en la literatura[11].

Las demás integrales se calculan con igual facilidad en cada caso particular. Las dejamos indicadas con las respectivas reglas de selección, que son lo más interesante:

$$R^{2q}_{l,l'}(k,k'>k) = \delta_{l',l+2(q+n)} \cdot (-1)^n \frac{1}{2} \frac{k}{k'^{2q}} S^{2q}_{l,l+2(q+n)}\left(\frac{k}{k'}\right) \qquad \mathbf{B(138,a)}$$

$$R^{2q}_{l,l'}(k,k'<k) = \delta_{l',l-2(q+n)} (-1)^n \frac{1}{2} \frac{k'}{k^{2q}} S^{2q}_{l,l-2(q+n)}\left(\frac{k'}{k}\right) \qquad \mathbf{B(138,b)}$$

$$R^{2q+1}_{l,l'}(k,k'>k) = \delta_{l',l+2(q+n)+1} (-1)^n \frac{1}{2} \frac{k}{k'^{2q+1}} \cdot S^{2q+1}_{l,l+2(q+n)+1}\left(\frac{k}{k'}\right) \qquad \mathbf{B(139,a)}$$

$$R^{2q+1}_{l,l'}(k,k'<k) = \delta_{l',l-2(q+n)-1} (-1)^n \frac{1}{2} \frac{k'}{k^{2q+1}} S^{2q+1}_{l,l-2(q+n)-1}\left(\frac{k'}{k}\right) \qquad \mathbf{B(139,b)}$$

11 Watson, op.cit., p. 406. W. Magnus u. F. Oberhettinger, Formeln und Sätze für die Speziellen Funktionen der Mathematischen Physik, 2a. ed. (Berlin, Springer, 1948), p. 50.

6.3.- Las integrales T

Observemos, en primer lugar, que las transformadas de Euler de orden p de la función P_n,

$$M_n^p (a\mu) = \int_{-1}^{1} \frac{P_n(\mu')\, d\mu'}{(\mu'-a\mu)^{p+1}} \qquad p = 0,1,2,\ldots \qquad B(140)$$

se obtienen a partir de las de orden 0 por derivación:

$$M_n^p (a) = \frac{1}{p!} \frac{\partial^p}{\partial(a\mu)^p} \int_{-1}^{1} \frac{P_n(\mu')\, d\mu'}{\mu'-a\mu} = \frac{1}{p!} \frac{d^p M_n^0}{d(a\mu)^p} \qquad B(141)$$

Si fuese $a\mu > 1$, las M_n^0 definirían las funciones esféricas de segunda especie. No siéndolo, además de las $Q_n(a\mu)$ aparecerá una parte imaginaria; pero ésta última en definitiva se eliminará al calcular las T^p que nos interesan. Por ejemplo,

$$M_0^0 (a\mu) = \int_{-1}^{1} \frac{d\mu'}{\mu'-a\mu} = \ln \frac{1-a\mu}{1+a\mu} - i\pi(2n+1)$$

$$= -2\, Q_0(a\mu) - i\pi(2n+1)\, P_0(a\mu) \qquad B(142)$$

En general, se tiene

$$M_{\ell'}^0 (a\mu) = \int_{-1}^{1} \frac{P_{\ell'}(\mu')}{\mu'-a\mu}\, d\mu' = -2\, Q_{\ell'}(a\mu) - i\pi(2n+1)\, P_{\ell'}(a\mu); \qquad B(143)$$

o bien, tomando el valor principal del logaritmo,

$$M_n^0 (a\mu) = -2\, Q_n (a\mu - 0.i) \qquad B(144)$$

Por B(141),

$$M_{\ell'}^p (a\mu) = -\frac{1}{p!} \left\{ 2\, \frac{d^p Q_{\ell'}(a\mu)}{d(a\mu)^p} + i\pi(2n+1)\, \frac{d^p P_{\ell'}(a\mu)}{d(\mu a)^p} \right\} \qquad B(145)$$

de modo que, en definitiva,

$$T^{p}_{\ell,\ell'}(a) \equiv p! \int_{-1}^{1} P_\ell(\mu)\, d\mu \int_{-1}^{1} \frac{P_{\ell'}(\mu')\, d\mu'}{(\mu' - a\mu)^{p+1}}$$

$$= -2 \int_{-1}^{1} P_\ell(\mu) \frac{d^{p} Q_{\ell'}(a\mu)}{d(a\mu)^{p}}\, d\mu - i\pi(2n+1)\, S^{p}_{\ell,\ell'}(a) \qquad \text{B(146)}$$

Las $T^{p}_{\ell',\ell}$ se obtienen, en forma parecida.

Ahora bien: las $T^{p}_{\ell\ell'}$ que figuran en B(121) son aquellas para las cuales $p + \ell + \ell'$ es impar. Y en este caso el segundo término de B(146) es nulo, como ya se ha visto. Por este motivo, queda

$$T^{2q}_{\ell,\ell\pm(2n+1)}(a) = -2 \int_{-1}^{1} P_\ell(\mu) \frac{d^{2q} Q_{\ell\pm(2n+1)}(a\mu)}{d(a\mu)^{2q}}\, d\mu \qquad \text{B(147)}$$

$$a \lessgtr 1$$

$$T^{2q+1}_{\ell,\ell\pm 2n}(a) = -2 \int_{-1}^{1} P_{\ell'}(\mu) \frac{d^{2q+1} Q_{\ell\pm 2n}(a\mu)}{d(a\mu)^{2q+1}}\, d\mu \qquad \text{B(148)}$$

Como $Q^{(p)}_{n}(x)$ diverge logarítmicamente en x=1, resulta que todas las integrales R^{p} ($p \neq 0$) de integrandos impares poseen una singularidad en k'=k -- lo que ya habíamos encontrado al tratarlas mediante el método expuesto en el parágrafo 4.

El cálculo efectivo de estas integrales se efectúa sin dificultad en cada caso, utilizando las fórmulas

$$\int_{-a}^{a} x^{n} \ln \frac{1+x}{1-x}\, dx = \frac{2}{n+1} \left\{ (a^{n+1} - 1) \ln \left| \frac{1+a}{1-a} \right| + 2 \left(\frac{a}{1} + \frac{a^{3}}{3} + \dots + \frac{a^{n}}{n} \right) \right\} \qquad \text{B(149)}$$

n impar

$$\int_{-a}^{a} \frac{x^{n+1}}{1-x^{2}}\, dx = \ln \left| \frac{1+a}{1-a} \right| - 2 \left(\frac{a}{1} + \frac{a^{3}}{3} + \dots + \frac{a^{n}}{n} \right) \qquad \text{B(150)}$$

He aquí algunas muestras:

$$T^{0}_{0,1}(a) = 2 + \frac{1-a^2}{a} \ln\left|\frac{1+a}{1-a}\right| \qquad B(151,a)$$

$$T^{0}_{1,0}(a) = -\frac{2}{a} + \frac{1-a^2}{a^2} \ln\left|\frac{1+a}{1-a}\right| \qquad B(151,b)$$

$$T^{1}_{0,0}(a) = -\frac{2}{a} \ln\left|\frac{1+a}{1-a}\right| \qquad B(152,a)$$

$$T^{1}_{1,1}(a) = \frac{2}{a} - \frac{1+a^2}{a^2} \ln\left|\frac{1+a}{1-a}\right| \qquad B(152,b)$$

$$T^{2}_{0,1}(a) = -\frac{4}{1-a^2} - \frac{2}{a} \ln\left|\frac{1+a}{1-a}\right| \qquad B(153,a)$$

$$T^{2}_{1,0}(a) = -\frac{4}{(1-a^2)a^2} + \frac{2}{a} \ln\left|\frac{1+a}{1-a}\right| \qquad B(153,b)$$

$$T^{3}_{0,2}(a) = -\frac{8}{(1-a^2)^2} \qquad B(154,a)$$

$$T^{3}_{2,0}(a) = \frac{4}{(1-a^2)^2} \cdot \left(1 - \frac{6}{a^2}\right) + \frac{3}{a^3}\left[\frac{6a}{1-a^2} - \ln\left|\frac{1+a}{1-a}\right|\right] \qquad B(154,b)$$

Gracias a estas fórmulas, obtenemos los resultados que se consignan en el parágrafo siguiente.

6.4.- Integrales de integrandos impares

Las integrales de integrandos pares son de cálculo mucho más sencillo que las de integrandos impares; por tal motivo nos limitaremos a señalar algunas de éstas últimas, ya que aquéllas se reducen a las integrales elementales S^p.

$$R^0_{0,1}\ (k,k' > k) = \frac{1}{2\pi}\left[\frac{k'^2-k^2}{k'}\ \ln\left|\frac{k'+k}{k'-k}\right| + 2k\right] \qquad B(155,a)$$

$$R^0_{0,1}\ (k,k' < k) = \frac{1}{2\pi}\left[\frac{k^2-k'^2}{k'}\ \ln\left|\frac{k'+k}{k'-k}\right| - 2k\right] \qquad B(155,b)$$

$$R^0_{1,0}\ (k,k' > k) = -\frac{1}{2\pi}\left[\frac{k'^2-k^2}{k'}\ \ln\left|\frac{k'+k}{k'-k}\right| + 2k\right] = R^0_{0,1}\ (k,k'<k) \qquad B(156,a)$$

$$R^0_{1,0}\ (k,k' < k) = R^0_{0,1}\ (k,k' > k) \qquad B(156,b)$$

Estos resultados concuerdan con los hallados en 6.1. por otro método. Para k' = k podemos usar la fórmula que da Watson[1] :

$$R^0_{\ell,\ell'}\ (k,k) = \frac{2}{\pi}\ k\ \frac{1}{\ell+\ell'+1}\ \frac{\operatorname{sen}(\ell'-\ell)\,\pi/2}{\ell'-\ell} \qquad B(157)$$

de donde, para $n \neq \ell$,

$$R^0_{\ell,\ell\pm(2n+1)}\ (k,k) = (-1)^n\,\frac{k}{2\pi}\ \frac{1}{(2n+1)\left[2\ell+1 \pm (2n+1)\right]} \qquad B(158)$$

---

1 Watson, op. cit., p. 404, fórm. 7.

$$R^1_{0,0}\ (k,k'\neq k) = \frac{1}{\pi}\ \ln \left| \frac{k'+k}{k'-k} \right| \qquad B(159)$$

$$R^1_{1,1}(k'\neq k) = \frac{1}{2\pi} \left\{ \frac{k^2+k'^2}{kk'} \ln \left| \frac{k+k'}{k-k'} \right| - 2 \right\} \qquad B(160)$$

que ya habíamos encontrado en 6.2.

Para p=1 se conoce una fórmula general válida para ℓ y ℓ' cualesquiera: es la de Sonine y Schafheitlin:

$$\int_0^\infty J_\mu(kr)\, J_\nu(k'r)\, dr = \frac{k^\mu}{k'^{\mu+1}} \frac{\Gamma\left(\frac{\mu+\nu+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{-\mu+\nu+1}{2}\right)\Gamma(\nu+1)} \cdot F\left(\frac{\mu+\nu+1}{2}, \frac{\mu-\nu+1}{2}; \mu+1; \frac{k^2}{k'^2}\right)$$

$$[k'>k] \qquad B(161,a)$$

$$\int_0^\infty J_\mu(kr)\, J_\nu(k'r)\, dr = \frac{k'^\nu}{k^{\nu+1}} \frac{\Gamma\left(\frac{\mu+\nu+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\mu-\nu+1}{2}\right)\Gamma(\nu+1)} \cdot F\left(\frac{\mu+\nu+1}{2}, \frac{-\mu+\nu+1}{2}; \nu+1; \frac{k'^2}{k^2}\right) \qquad B(161,b)$$

$$[k'<k]$$

Pero estas expresiones, que son series infinitas, son de manejo muy incómodo y no permiten ver --ni siquiera en los casos más sencillos-- el comportamiento de las integrales. Por ello, para las aplicaciones físicas juzgamos preferibles las expresiones que hemos dado,aun cuando no hayamos obtenido fórmulas generales.

He aquí algunos resultados para p=2:

$$R^2_{0,1}\ (k,k'>k) = \frac{1}{\pi} \left\{ \frac{2k}{k'^2-k^2} + \frac{1}{k'} \ln \left| \frac{k'+k}{k'-k} \right| \right\} \qquad B(162,a)$$

$$R^2_{0,1}\ (k,k'<k) = \frac{1}{\pi} \left\{ \frac{k}{k'} \frac{2k}{k^2-k'^2} + \frac{1}{k} \ln \left| \frac{k'+k}{k'-k} \right| \right\} \qquad B(162,b)$$

$$R^2_{1,0}\ (k,k'>k) = \frac{1}{\pi}\left[\frac{1}{k}\ln\left|\frac{k'+k}{k'-k}\right| - \frac{2}{k}\ \frac{k'^2}{k'^2-k^2}\right] \qquad B(163,a)$$

$$R^2_{1,0}\ (k,k'<k) = \frac{1}{\pi}\left[\frac{1}{k'}\ln\left|\frac{k'+k}{k'-k}\right| - 2\ \frac{k'}{k^2-k'^2}\right] \qquad B(163,b)$$

Por último, para p=3,

$$R^3_{0,2}\ (k,k'\ \ k) = \frac{4}{\pi}\ \frac{k}{k'}\ \frac{1}{k'^2-k^2} \qquad B(164,a)$$

$$R^3_{0,2}\ (k,k'\ \ k) = \frac{1}{2\pi}\left\{\frac{k}{k'}\ \frac{6k^2-k'^2}{(k^2-k'^2)^2} + \frac{3}{k'^2}\left[\ln\left|\frac{k+k'}{k-k'}\right| - \frac{6kk'}{k^2-k'^2}\right]\right\} \qquad B(164,b)$$

7.- Integral de la velocidad radial

La integral B(3) se reduce a dos integrales ya calculadas si empleamos la fórmula de recurrencia

$$\frac{d J_\nu(x)}{dx} = \frac{\nu}{x} J_\nu - J_{\nu+1} \qquad \text{B(165)}$$

la que nos da

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{J_\nu}{\sqrt{x}}\right) = (\nu - 1/2)\frac{J_\nu}{x^{3/2}} - \frac{J_{\nu+1}}{x^{1/2}} \qquad \text{B(166)}$$

$$\frac{\partial j_\ell(k'r)}{\partial r} = \frac{\ell}{r} j_\ell(k'r) - k' j_{\ell+1}(k'r)$$

Se tiene así

$$\mathcal{R}_\ell(k,k') = N(k)\, N(k') \int_0^\infty j\,(kr)\left[\frac{\partial}{\partial r} j_\ell(k'r) + \frac{1}{r} j_\ell(k'r)\right] r^2\, dr$$

$$= (\ell + 1)\, R^1_{\ell,\ell}(k,k') - k' \cdot R^2_{\ell,\ell+1}(k,k') \qquad \text{B(167)}$$

En particular, utilizando resultados anteriores obtenemos

$$\mathcal{R}_0 = \frac{2}{\pi} \frac{k k'}{k'^2 - k^2} \qquad \text{B(168)}$$

C A P I T U L O II

ELECTRON EN UN CAMPO COULOMBIANO (ESPECTRO CONTINUO)

1.- Introducción

Las integrales son

$$R^{p}_{\ell\ell'}(k,k') = N^{*}_{\ell}(k)\, N_{\ell'}(k') \int_0^{\infty} \chi^{*}_{\ell}(k,r)\, \chi_{\ell'}(k',r)\, r^{p}\, dr \qquad B(169)$$

$$\mathcal{R}_{\ell}(k,k') = N^{*}_{\ell}(k)\, N_{\ell'}(k') \int_0^{\infty} \chi^{*}_{\ell}(k,r) \left[\frac{\partial \chi_{\ell}}{\partial r}(k',r) + \frac{\chi_{\ell}(k'r)}{r} \right] r^{2}\, dr \qquad B(170)$$

donde

$$\chi_{\ell}(k,r) = \chi^{*}_{\ell}(k,r) = (kr)^{\ell}\, e^{\mp ikr}\, F\left(\ell+1 \pm \frac{iZ}{ka_0};\, 2(\ell+1);\, \pm i2kr\right) \qquad B(171)$$

$$p = 0,1,2,3 \quad ; \quad \ell' = \begin{cases} \ell \pm 2n \\ \ell \pm (2n+1) \end{cases} \quad , \quad n = 0,\, 1,\, 2, \ldots \qquad B(172)$$

2.- Normalización de las autodiferenciales

Como $r.\chi$ no es de cuadrado integrable, normalizaremos las autodiferenciales correspondientes. Ello puede hacerse, lo mismo que en el caso del electrón libre (cf. Apénd.A,Cap.I,2) gracias a la ecuación diferencial. Tratando dicha ecuación de la misma manera que en el caso de la partícula libre, obtenemos la misma expresión B(9). En ella introducimos el valor asintótico

$$\chi_\ell(k,r) \sim C_\ell(k)\, \frac{\sin\left(kR + \delta_\ell(k)\right)}{kR}, \qquad R \gg \lambda \qquad \text{B(173)}$$

donde la amplitud es

$$C_\ell(k) = \frac{\ell!\; e^{-\frac{\pi}{2}\frac{Z}{ka_0}}}{\left|\Gamma\left(\ell+1+i\frac{Z}{ka_0}\right)\right|} \qquad \text{B(174)}$$

y la fase, que representa la acción del campo a grandes distancias,

$$\delta_\ell(k) = \frac{Z}{ka_0}\ln 2kR + \alpha_\ell - \frac{\pi}{2}\ell \qquad \text{B(175)}$$

siendo α_ℓ el argumento de la función Γ :

$$\Gamma\left(\ell+1+i\frac{Z}{ka_0}\right) = \left|\Gamma\left(\ell+1+i\frac{Z}{ka_0}\right)\right| e^{i\alpha_\ell} \qquad \text{B(176)}$$

El término logarítmico que figura en la fase es mucho menor que kR , de modo que tomando R suficientemente grande(en comparación con la longitud de onda) podemos dejarlo de lado.

Introduciendo B(173) en B(9) e integrando respecto de k' sobre un intervalo espectral $\Delta k'$, se tiene

$$\int_{k'-\frac{\Delta k'}{2}}^{k'+\frac{\Delta k'}{2}} dk' \int_0^R N_\ell^*(k) N_\ell(k') \chi_\ell^*(k,r)\, \chi_\ell(k',r)\, r^2\, dr = \int_{k'-\Delta k'/2}^{k'+\Delta k'/2} \frac{dk'}{k^2-k'^2}\, N_\ell(k)\, N_\ell(k').$$

$$C_\ell(k)\, C_\ell(k') \left\{ \frac{\operatorname{sen}[kR+\delta_\ell(k)] \cos[k'R+\delta_\ell(k')]}{k} - \frac{\operatorname{sen}[k'R+\delta_\ell(k')] \cos[kR+\delta_\ell(k)]}{k'} \right\} \qquad B(177)$$

A partir de este punto, el análisis es igual que en el caso del espacio libre, con la única diferencia de que ahora, en lugar de la función N_ℓ (k), aparece el producto $N_\ell(k)$. C_ℓ (k). El resultado final es

$$\lim_{R\to\infty} \int_0^R r^2\, dr \int_{k'-\frac{\Delta k'}{2}}^{k'+\frac{\Delta k'}{2}} N_\ell(k) N_\ell(k') \chi_\ell(k,r)\, \chi_\ell(k',r)\, dk' = \begin{cases} 1, & k \in \Delta k' \\ 0, & k \notin \Delta k' \end{cases} \qquad B(178)$$

o bien

$$N_\ell(k)\, N_\ell(k') \int_0^\infty \chi_\ell(k,r)\, \chi_\ell(k',r)\, r^2\, dr = \delta(k'-k), \qquad B(179)$$

donde el factor de normalización es

$$N_\ell(k) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{k}{C_\ell(k)} = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} k\; e^{\frac{\pi}{2}\frac{Z}{ka_0}}\, \frac{|\Gamma(\ell+1+iZ/ka_0)|}{\ell!} \qquad B(180)$$

Observemos que éste se reduce al de la partícula libre para Z=0.

3.- Ensayo de aplicación de algoritmos de convergencia

Las demás integrales son muy complicadas. A diferencia de las del electrón libre, a priori no podría decidirse siquiera cuáles convergen y cuáles no. Con todo, teniendo en cuenta que para iZ/ka_0 suficientemente pequeño nuestras autofunciones pueden aproximarse tanto cuanto se quiera por medio de las funciones de Bessel esféricas, es posible suponer que nuestras integrales convergen o divergen exactamente en las mismas condiciones en que lo hacen las del electrón libre correspondientes. Que esto es así, se demostrará al final de este capítulo.

Conviene empezar por inquirir si las integrales que nos ocupan son sumables por alguno de los procedimientos conocidos. A este respecto no interesa que converjan o no, ya que, si son convergentes, después del paso al límite que caracteriza a todo algoritmo de sumación no queda huella del mismo. Lo que interesa saber es si los resultados que se obtengan son utilizables. Para ello lo mejor parece ser ensayar la suma Abel, por ser la más potente y, a la vez, la más sencilla.

El producto de las autofunciones B(171) puede ponerse en la forma

$$\chi_\ell(k,r)\,\chi_{\ell'}(k',r) = N_\ell(k)\,N_{\ell'}(k')\,k^\ell k'^{\ell'}\,r^{\ell+\ell'}\,e^{-i(k+k')r}$$

$$\cdot\, F(\alpha;\gamma;i2kr)\,.\,F(\alpha';\gamma';i2k'r) \qquad ; \quad \alpha=\ell+1+i\frac{Z}{ka_0}\,,\ \gamma=2(\ell+1) \qquad \text{B(181,a)}$$

$$= N_\ell(k)\,N_{\ell'}(k')\,k^\ell k'^{\ell'}\,r^{\ell+\ell'}\,e^{-i(k+k')r}$$

$$\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\alpha)_m\,(\alpha')_n\,(2ikr)^m\,(2ik'r)^n}{(\gamma)_m\,(\gamma')_n\,m!\,n!} \quad ; \quad (\alpha)_m \equiv \alpha(\alpha+1)\dots(\alpha+m-1) \qquad \text{B(181,b)}$$

y en otras tres formas equivalentes, resultantes de las combinaciones de $e^{\pm ikr}$ con $e^{\mp ik'r}$. La suma Abel de R^p es entonces, suponiendo que fuese lícito el intercambio de la integración por la sumación,

$$(A)\ R^{p}_{\ell,\ell'}(k,k') = \lim_{s\to 0} \int_0^\infty e^{-sr} N_\ell(k) N_{\ell'}(k') \chi_\ell(k,r) \chi_{\ell'}(k',r)\, r^p\, dr$$

$$= N_\ell(k) N_{\ell'}(k')\, k^\ell k'^{\ell'} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_m (\alpha')_n (2ik)^m (2ik')^n}{(\gamma)_m (\gamma')_n\, m!\, n!} \lim_{s\to 0} \int_0^\infty e^{-[s+i(k+k')]r}\, r^{p+\ell+\ell'+m+n}\, dr \qquad B(182)$$

Como

$$\Gamma(p+\ell+\ell'+m+n+1) = (p+\ell+\ell')!\,(p+\ell+\ell'+1)_{m+n},$$

queda finalmente

$$(A)\ R^{p}_{\ell,\ell'}(k,k') = \frac{N_\ell(k) N_{\ell'}(k')\ (p+\ell+\ell')!}{i^{\,p+\ell+\ell'+1}\ (k+k')^{p+1}} \left(\frac{k}{k+k'}\right)^{\ell} \left(\frac{k'}{k+k'}\right)^{\ell'} \cdot$$

$$\cdot\, F_2\left[p+\ell+\ell'+1;\ \ell+1+\frac{iZ}{ka_0},\ \ell'+1+\frac{iZ}{k'a_0};\ 2(\ell+1),\ 2(\ell'+1);\ \frac{2k}{k+k'},\ \frac{2k'}{k+k'}\right] \qquad B(183)$$

donde F_2 es la serie hipergeométrica de 2 variables estudiada por Appell y Kampé de Fériet[13]:

$$F_2(a;b,b';c,c';x,y) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_{m+n}(b)_m (b')_n\, x^m y^n}{(c)_m (c')_n\, m!\, n!} \qquad B(184)$$

---

13 Paul Appell et J. Kampé de Fériet, Fonctions hypergéometriques et hypersphériques. Polynomes d'Hermite (Paris, 1926). W.N. Bailey, Generalized Hypergeometric Series (Cambridge, University Press, 1935), cap. IX.

Ahora bien: esta serie converge (absolutamente) para

$$|x| + |y| < 1$$

pero en nuestro caso $|x| + |y| = 2$.

Naturalmente, la serie podría converger para ciertos valores especiales de los parámetros que en ella figuran. Pero, aun así, su convergencia sería demasiado lenta para que pudiese ser utilizada en física.

La falla no reside ciertamente en la debilidad del factor de convergencia e^{-sr}, sino en el hecho de que la serie hipergeométrica confluente no converge uniformemente, por lo cual no puede asegurarse que sea lícito efectuar la integración término a término que hemos hecho.

En lo que sigue expondremos dos nuevos métodos que nos acercan a una solución satisfactoria de este problema muchas veces tratado pero que hasta ahora no ha sido resuelto.

4.- **Método de la representación integral**

Si encontramos una representación integral del tipo

$$\chi_\ell(kr) = \int_a^b e^{ikr\,t}\,\varphi_\ell(t)\,dt \qquad B(185)$$

el cálculo de nuestras integrales podrá hacerse a lo largo de líneas paralelas a las seguidas en el caso de la partícula libre.

Para obtener la transformada φ_ℓ introducimos B(185) en la ecuación diferencial satisfecha por χ_ℓ, que es

$$\left[x^2 \frac{d^2}{dx^2} + 2x\frac{d}{dx} + x^2 - \ell(\ell+1) + 2\varepsilon x\right]\chi_\ell(x) = 0 \qquad B(186)$$

A fin de encontrar la representación integral de cada uno de los términos de esta ecuación, partimos de las relaciones

$$\int_a^b e^{ixt}\,\frac{d\varphi_\ell}{dt}\,dt = \varphi_\ell\, e^{ixt}\Big|_a^b - ix\,\chi_\ell(x) \qquad B(187)$$

$$\int_a^b e^{ixt}\,\frac{d^2\varphi_\ell}{dt^2}\,dt = \left(\frac{d\varphi_\ell}{dt} - ix\,\varphi_\ell\right)\Big|_a^b - x^2\,\chi_\ell(x) \qquad B(188)$$

Derivando respecto de x la primera, obtenemos $x.\frac{d\chi}{dx}$, y derivando dos veces la segunda resulta $x^2\frac{d^2\chi}{dx^2}$. La ecuación diferencial se convierte así en

$$\int_a^b \left[(t^2-1)\varphi_\ell'' + 2t\,\varphi_\ell' - \ell(\ell+1)\varphi_\ell + 2i\varepsilon\,\varphi_\ell'\right] dt$$

$$+ \left[(1-t^2)(\varphi_\ell' - ix\,\varphi_\ell) - 2i\varepsilon\,\varphi_\ell\right] e^{ixt}\Big|_a^b = 0 \qquad B(189)$$

Vale decir, la transformada es la solución del problema de autovalores

$$\frac{d}{dt}\left[(1-t^2)\frac{d\varphi_\ell}{dt}\right] + \ell(\ell+1)\varphi_\ell = 2i\varepsilon\frac{d\varphi_\ell}{dt} \qquad B(190,a)$$

$$\left[(1-t^2)\left(\frac{d\varphi_\ell}{dt} - ix\varphi_\ell\right) - 2i\varepsilon\varphi_\ell\right]e^{ixt}\Big|_a^b = 0 \qquad B(190,b)$$

La primera no es del tipo de Sturm-Liouville, pero se la convierte en tal efectuando la sustitución

$$\varphi_\ell(t) = \phi_\ell(t).\exp i\varepsilon\int\frac{dt}{1-t^2} = \phi_\ell(t).\left(\frac{1+t}{1-t}\right)^{i\frac{\varepsilon}{2}} \qquad B(191)$$

La función ϕ_ℓ satisface entonces a la ecuación

$$\frac{d}{dt}\left[(1-t^2)\frac{d\phi_\ell}{dt}\right] + \ell(\ell+1)\phi_\ell - \frac{(i\varepsilon)^2}{1-t^2}\phi_\ell = 0 \qquad B(192)$$

Esta ecuación define los polinomios de Legendre $P_\ell^{i\varepsilon}(t)$ y $Q_\ell^{i\varepsilon}(t)$ de orden entero y grado imaginario. Para $-1 \leq t \leq 1$ son

$$P_\ell^{i\varepsilon}(t) = \left[\Gamma(1-i\varepsilon)\right]^{-1}\left(\frac{1+t}{1-t}\right)^{\frac{i\varepsilon}{2}}{}_2F_1\left(-\ell, \ell+1; 1-i\varepsilon; \frac{1-t}{2}\right) \qquad B(193)$$

$$Q_\ell^{i\varepsilon}(t) = \frac{\pi}{2i\,\mathrm{Sh}\,\pi\varepsilon}\left[\mathrm{Ch}\,\pi\varepsilon.\,P_\ell^{i\varepsilon}(t) - \frac{\Gamma(\ell+1+i\varepsilon)}{\Gamma(\ell+1-i\varepsilon)}P_\ell^{-i\varepsilon}(t)\right] \qquad B(194)$$

Por lo tanto, la solución general de B(190,a) es

$$\varphi_\ell(t) = \left(\frac{1+t}{1-t}\right)^{i\frac{\varepsilon}{2}}\left[A\,P_\ell^{i\varepsilon}(t) + B\,Q_\ell^{i\varepsilon}(t)\right] \qquad B(195)$$

La condición de contorno B(190,b) es satisfecha por $b= -a =1$, de manera que B(195) resuelve el problema de valores propios propuesto.

Ahora bien: debe exigirse de la solución B(195) que sea regular en el dominio (-1,1) para todo valor de ε, y en particular para $\varepsilon = 0$, puesto que en tal caso la ecuación de onda se reduce a la que define las funciones de Bessel esféricas. Pero, si $\varepsilon = 0$, $Q_\ell^{i\varepsilon}(t)$ diverge logarítmicamente en los límites $t = \pm 1$ de integración. De manera que en B(195) debemos poner B=0. Así resulta, finalmente, la representación buscada:

$$\chi_\ell(x) = C_\ell(\varepsilon)\int_{-1}^{1} e^{ixt}\left(\frac{1+t}{1-t}\right)^{i\frac{\varepsilon}{2}} P_\ell^{i\varepsilon}(t)\,dt, \qquad C_\ell(\varepsilon) = \text{const.} \qquad \text{B(196)}$$

que, efectivamente, se reduce a $j_\ell(x)$ para $\varepsilon=0$ (cf. B(102)).

Parece preferible evitar el uso explícito de las funciones esféricas de grado imaginario, a las que no estamos habituados; ello se logra si, en lugar de emplear la representación integral de χ, se representa en forma integral solamente una parte de ella, a saber, el coeficiente de $(kr)^\ell$. Se sabe[14] que

$$e^{-\frac{z}{2}} F(a;b;z) = \frac{\Gamma(b)\, z^{1-b}}{\Gamma(a)\,\Gamma(b-a)} \int_{-1}^{1} e^{\frac{z}{2}t}\,(1-t)^{b-a-1}(1+t)^{a-1}\,dt \qquad \text{B(197)}$$

$$0 < \mathrm{Re}\, a < \mathrm{Re}\, b$$

14 Magnus y Oberhettinger, op. cit., p. 114.

Merced a esta representación, el integrando de R^P, que hemos indicado en B(181), es

$$N_\ell(\kappa) N_{\ell'}(\kappa') \chi_\ell(\kappa,r) \chi_{\ell'}(\kappa',r)\, r^P = D_{\ell,\ell'}(\kappa,\kappa')\, r^{P+\ell+\ell'} \cdot$$

$$\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} e^{i(\kappa t+\kappa' t')r} (1-t)^{\ell-\frac{iZ}{\kappa a_0}} (1+t)^{\ell+\frac{iZ}{\kappa a_0}} (1-t')^{\ell'-\frac{iZ}{\kappa' a_0}} (1+t')^{\ell'+\frac{iZ}{\kappa' a_0}}\, dt\, dt' \qquad B(198)$$

donde

$$D_\ell(\kappa,\kappa') = \frac{N_\ell(\kappa) N_{\ell'}(\kappa')\, \kappa^\ell \kappa'^{\ell'}\, 2^{-2(\ell+\ell'+1)} (2\ell+1)!\,(2\ell'+1)!}{\Gamma(\ell+1+i\frac{Z}{\kappa a_0})\Gamma(\ell+1-\frac{iZ}{\kappa a_0})\Gamma(\ell'+1+i\frac{Z}{\kappa a_0})\Gamma(\ell'+1-i\frac{Z}{\kappa' a_0})} \qquad B(199,a)$$

$$= \frac{N_\ell(\kappa) N_{\ell'}(\kappa')\, \kappa^\ell \kappa'^{\ell'}\, 2^{-2(\ell+\ell'+1)} (2\ell+1)!\,(2\ell'+1)!}{|\Gamma(\ell+1+i\frac{Z}{\kappa a_0})|^2\; |\Gamma(\ell'+1+\frac{iZ}{\kappa' a_0})|^2}, \qquad B(199,b)$$

por ser

$$\Gamma(\ell+1+i\varepsilon)\,\Gamma(\ell+1-i\varepsilon) = |\Gamma(\ell+1+i\varepsilon)|^2$$

$$= |(1+i\varepsilon)(2+i\varepsilon)\ldots(\ell+i\varepsilon)\;\Gamma(1+i\varepsilon)|^2$$

$$= (1^2+\varepsilon^2)(2^2+\varepsilon^2)\ldots(\ell^2+\varepsilon^2)\,\frac{2\pi\varepsilon}{e^{\pi\varepsilon}-e^{-\pi\varepsilon}} \qquad B(200)$$

O bien, introduciendo el factor de normalización B(180),

$$D_{\ell,\ell'}(\kappa,\kappa') = \frac{\kappa^{\ell+1}\kappa'^{\ell'+1}\, e^{\frac{\pi}{2}\frac{Z}{a_0}\left(\frac{1}{\kappa}+\frac{1}{\kappa'}\right)} (2\ell+1)!\,(2\ell'+1)!\,[\ell!\,\ell'!]^{-1}}{\pi\, 2^{2(\ell+\ell')+1}\, |\Gamma(\ell+1+i\frac{Z}{\kappa a_0})|\cdot|\Gamma(\ell'+1+i\frac{Z}{\kappa' a_0})|} \qquad B(201)$$

5.- Las integrales

Al multiplicar B(198) por dr e integrar entre 0 e ∞, después de invertir el orden de las integraciones aparece la distribución que ya conocemos:

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{\infty} e^{i(kt+k't')r}\, r^n\, dr = (-i)^n\, \delta_+^{(n)}(kt+k't')$$

$$= \frac{(-i)^n}{2k'^{\,n+1}}\left[\delta^{(n)}\left(t'+\frac{k}{k'}t\right) + Pf\,\frac{(-1)^n\, n!\, i}{\pi\left(t'+\frac{k}{k'}t\right)^{n+1}}\right] \qquad \text{B(202,a)}$$

$$= \frac{(-i)^n}{2k^{n+1}}\left[\delta^{(n)}\left(t+\frac{k'}{k}t'\right) + Pf\,\frac{(-1)^n\, n!\, i}{\pi\left(t+\frac{k'}{k}t'\right)^{n+1}}\right] \qquad \text{B(202,b)}$$

La forma (a) debe utilizarse para $k' > k$, en cuyo caso debe integrarse primero respecto de t'; se empleará la (b) y se integrará primero respecto de t si $k' < k$. Recordando la propiedad integral de las derivadas de la delta, queda

$$R^{p}_{\ell,\ell'}(k,k'>k) = \frac{D_{\ell,\ell'}(k,k')\,\pi\,(-i)^{p+\ell+\ell'}}{k'^{\,p+\ell+\ell'+1}}\Bigg\{$$

$$\int_{-1}^{1} dt\,(1-t)^{\ell-i\frac{Z}{ka_0}}(1+t)^{\ell+i\frac{Z}{ka_0}}\,\frac{d^{p+\ell+\ell'}}{d\left(\frac{k}{k'}t\right)^{p+\ell+\ell'}}\left[\left(1+\frac{k}{k'}t\right)^{\ell'-i\frac{Z}{k'a_0}}\left(1-\frac{k}{k'}t\right)^{\ell'+i\frac{Z}{k'a_0}}\right]$$

$$+\frac{i}{\pi}(-1)^{p+\ell+\ell'}(p+\ell+\ell')!\int_{-1}^{1}(1-t)^{\ell-i\frac{Z}{ka_0}}(1+t)^{\ell+i\frac{Z}{ka_0}}\,dt\cdot Pf\int_{-1}^{1}\frac{(1-t')^{\ell'-i\frac{Z}{k'a_0}}(1+t')^{\ell'+i\frac{Z}{k'a_0}}}{\left(t'+\frac{k}{k'}t\right)^{p+\ell+\ell'+1}}dt'\Bigg\}$$

B(203,a)

$$R^{p}_{l,l'}(k,k'<k) = \frac{D_{l,l'}(k,k')\,\pi\,(-i)^{p+l+l'}}{k^{p+l+l'+1}} \Bigg\{ \int_{-1}^{1} dt'\,(1-t')^{l'-i\frac{Z}{k'a_0}}(1+t')^{l'+i\frac{Z}{k'a_0}} \frac{d^{p+l+l'}}{d(\frac{k'}{k}t')^{p+l+l'}} \left[\left(1+\frac{k'}{k}t'\right)^{l-i\frac{Z}{ka_0}}\left(1-\frac{k'}{k}\right)^{l+i\frac{Z}{ka_0}}\right]$$

$$+\frac{i}{\pi}(-1)^{p+l+l'}(p+l+l')!\int_{-1}^{1}(1-t')^{l'-i\frac{Z}{k'a_0}}(1+t')^{l'+i\frac{Z}{k'a_0}}dt'\,.\,Pf\int_{-1}^{1}\frac{(1-t)^{l-i\frac{Z}{ka_0}}(1+t)^{l+i\frac{Z}{ka_0}}\,dt}{(t+\frac{k'}{k}t')^{p+l+l'+1}}\Bigg\}$$

B(203,b)

Cuando Z/ka_0, que representa la acción del campo, se hace cero, estas integrales se reducen a las B(109-110-115-116) del electrón libre. Esto se ve con mayor claridad si se tiene en cuenta que las expresiones que acabamos de obtener son idénticas a las que se obtendrían utilizando la representación integral B(196).

No he logrado aun evaluar estas integrales, por lo que las dejo indicadas; probablemente todo se circunscriba a encontrar caminos de integración adecuados. Con todo, se trata evidentemente de expresiones manuables.

Una integral parecida a las integrales interiores que figuran en B(203) fué calculada por Musjelishvili[15]:

$$\int_{-a}^{a}\frac{(a+t)^{1/2+\gamma}(a-t)^{1/2-\gamma}}{t-z}\,dt = 2\pi i\left\{(a+z)^{1/2+\gamma}(a-z)^{1/2-\gamma} + i\,e^{i\pi\gamma}(z+2a\gamma)\right\} \quad B(204)$$

15 Н.И. МУСХЕЛИШВИЛИ, СИНГУЛЯРНЫЕ ИНТЕГРАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ (Moscú-Leningrado, 1946), p. 311.

Las singularidades de las B(203) no dependen del campo sino únicamente de p, ℓ, ℓ' y de k/k'. En efecto: la influencia del campo aparece solamente en el factor $D_{\ell,\ell'}(k,k')$, que es constante y vale 1 para $Z=0$, y en los términos del tipo

$$\left(\frac{1+t}{1-t}\right)^{\pm i\frac{Z}{k\,a_o}} = \exp \pm i \frac{Z}{ka_o} \ln \frac{1+t}{1-t} \qquad B(205)$$

Ahora bien: este último es un factor oscilante que sólo puede disminuir el valor de la integral en mayor o menor medida. Por consiguiente, las R^p convergen o divergen exactamente en las mismas condiciones en que convergen o divergen las integrales correspondientes al electrón libre, tal como lo adelantáramos en 3.

De las dos integrales que figuran en las B(203) la primera converge siempre, ya que el integrando carece de singularidades en el dominio de integración. En cambio, el integrando de la segunda posee una singularidad en $t' = -\frac{k}{k'}t$, de modo que ella es la responsable de las propiedades de convergencia de las R^p. Por supuesto que el problema de la convergencia queda circunscripto a los valores de la relación k/k', toda vez que se toma la parte finita de estas integrales; con todo, es interesante saber que algunas de ellas convergen.

6.- La integral de la velocidad radial

La B(170) se calcula en términos de las integrales tratadas precedentemente observando que

$$\frac{d\chi_\ell(k',r)}{dr} = \frac{\ell}{r}\,\chi_\ell(k') - ik'\chi_\ell(k') + (k'r)^\ell e^{-ik'r} \cdot \frac{2ik'}{2(\ell+1)}\left(\ell+1+\frac{iZ}{ka_0}\right) \cdot F\left(\ell+2+\frac{iZ}{k'a_0};\, 2(\ell+1)+1;\, i2k'\right) \qquad \text{B(206)}$$

Así resulta, en efecto,

$$N_\ell(k)\,N_\ell(k')\int_0^\infty \chi_\ell(k,r)\left[\frac{\partial\chi_\ell(k',r)}{\partial r} + \frac{1}{r}\,\chi_\ell(k',r)\right] r^2\,dr$$

$$= (\ell+1)\,R^1_{\ell,\ell}(k,k') - ik'\,R^2_{\ell,\ell}(k,k')$$

$$+ ik'\,\frac{(2\ell+1)}{2(\ell+1)} \cdot D_{\ell,\ell'}(k,k') \int_0^\infty r^{2(\ell+1)}\,dr \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} e^{i(kt+k't')r} \,.$$

$$.\,(1-t)^{\ell-\frac{iZ}{ka_0}}\,(1+t)^{\ell+\frac{iZ}{ka_0}}\,(1-t')^{\ell-\frac{iZ}{k'a_0}+1}\,(1+t')^{\ell+\frac{iZ}{k'a_0}+1},\; dt\,dt' \qquad \text{B(207)}$$

C A P I T U L O III

ATOMO HIDROGENOIDE

1.- Introducción

Las integrales a evaluar son

$$R^{p}_{\ell,\ell'}(\kappa,\kappa') \equiv R^{p}_{\ell,\ell'}(n,n') = N_\ell(n)\,N_{\ell'}(n') \int_0^\infty \chi_{n,\ell}(r)\,\chi_{n',\ell'}(r)\; r^{p}\, dr \qquad \text{B(208)}$$

$$\mathcal{R}_\ell(n,n') = N_\ell(n)\,N_\ell(n') \int_0^\infty \chi_{n,\ell}\left[\frac{\partial \chi_{n',\ell}}{\partial r} + \frac{\chi_{n',\ell}}{r}\right] r^2\, dr \qquad \text{B(209)}$$

donde

$$\left.\begin{aligned} &\chi_{n_r,\ell}(r) = (2\kappa r)^{\ell}\, e^{-\kappa r}\, F(-n_r;\, 2(\ell+1);\, 2\kappa r) && \text{B(210)}\\ &\text{o bien}\\ &\chi_{n,\ell}(r) = (2\kappa r)^{\ell}\, e^{-\kappa r}\, L^{2\ell+1}_{n+\ell}(2\kappa r) && \text{B(211)}\end{aligned}\right\}\ \kappa = \frac{Z}{n a_0}$$

y

$$p = 0,1,2,3 \quad , \quad \ell' = \begin{matrix} \ell \pm 2p \\ \ell \pm (2p+1) \end{matrix} \quad , \quad n = n_r + \ell + 1 \qquad \text{B(212)}$$

Se conocen diversos métodos para calcular las integrales R^p, algunas de las cuales han sido evaluadas muchas veces. Pero, salvo en el caso $n'=n$, $\ell' = \ell$, que es ciertamente el más importante, ninguno de ellos conduce a expresiones compactas. El más conocido es el de Schrödinger[1], consistente en el uso de la función generatriz de los polinomios de Laguerre que figuran en B(211). Pero el más sencillo es, sin embargo, uno que no parece haber sido usado hasta ahora, y que consiste en formar el producto de los polinomios hipergeométricos, integrando luego término a término. Tal vez no haya sido usado porque generalmente se escriben las autofunciones radiales en términos de los polinomios de Laguerre.

Antes de ocuparnos de estos métodos citaremos algunos resultados bien conocidos[2] que nos servirán de control.

$$R^{0}_{\ell,\ell}(n,n) = \frac{1}{n^3(\ell+1/2)}\,\frac{1}{(a_0/Z)^2} \qquad B(213)$$

$$R^{1}_{\ell,\ell}(n,n) = \frac{1}{n^2}\,\frac{1}{a_0/Z} \qquad B(214)$$

$$R^{2}_{\ell,\ell}(n,n) = \delta_{n'n} \qquad B(215)$$

$$R^{3}_{\ell,\ell}(n,n) = \frac{1}{2}\left[3n^2 - \ell(\ell+1)\right]\frac{a_0}{Z} \qquad B(216)$$

$$R^{4}_{\ell,\ell}(n,n) = \frac{n^2}{2}\left[5n^2+1-3\ell(\ell+1)\right]\left(\frac{a_0}{Z}\right)^2 \qquad B(217)$$

---

1 E. Schrödinger, Ann. d. Phys., 80, 437 (1926), pp. 485 y ss. E. Fues, Ann. d. Phys., 80, 367 (1926). P.S. Epstein, Proc. Nat. Acad. Sci., 12, 629 (1926). A. Unsöld, Ann. d. Phys., 82, 355 (1927). A. Kupper, Ann. d. Phys., 86, 511 (1928). K. Bechert, Ann. d. Phys., 6, 700 (1930).

2 H.A. Bethe, Quantenmechanik der Ein-und Zwei-Elektronenprobleme, Handbuch der Physik, 24,1 (Berlin, Springer, 1933), p. 286.

2.- Método de la función generatriz

La función generatriz de los polinomios de Laguerre es

$$(-1)^q(1-z)^{-1}\left(\frac{z}{1-z}\right)^q \; e^{-\frac{xz}{1-z}} = \sum_{s=q}^{\infty} L_s^q(x) \; \frac{z^s}{s!} \qquad B(218)$$

La del producto es entonces

$$(1-z_1)^{-1}(1-z_2)^{-1}\left(\frac{z_1}{1-z_1}\right)^{2\ell+1}\left(\frac{z_2}{1-z_2}\right)^{2\ell'+1} \cdot e^{-\left[\frac{2kr z_1}{1-z_1}+\frac{2k'r z_2}{1-z_2}\right]}$$

$$= \sum_{s=2\ell+1}^{\infty}\sum_{s'=2\ell'+1}^{\infty} L_s^{2\ell+1}(2kr)\, L_{s'}^{2\ell'+1}(2k'r)\; \frac{z_1^s}{s!}\; \frac{z_2^{s'}}{s'!} \qquad B(219)$$

Multiplicando por

$$N_\ell(k)\, N_{\ell'}(k')\, (kr)^\ell\, (k'r)^{\ell'}\, e^{-(k+k')r}\, r^p$$

e integrando respecto de r, resultan las R^p como coeficientes de la serie doble

$$(1-z_1)^{-1}(1-z_2)^{-1}\left(\frac{z_1}{1-z_1}\right)^{2\ell+1}\left(\frac{z_2}{1-z_2}\right)^{2\ell'+1} N_\ell(k)\, N_{\ell'}(k')\, (2k)^\ell (2k')^{\ell'} \cdot$$

$$\cdot \int_0^\infty e^{-\left[k+k'+\frac{2kz_1}{1-z_1}+\frac{2k'z_2}{1-z_2}\right]r}\; r^{p+\ell+\ell'}\; dr$$

$$= \frac{(p+\ell+\ell')!\; N_\ell(k)\, N_{\ell'}(k')\, (2k)^\ell\, (2k')^{\ell'}\, z_1^{2\ell+1}\, z_2^{2\ell'+1}}{(1-z_1)(1-z_2)\,(1-z_1)^{2\ell+1}(1-z_2)^{2\ell'+1}\left[k+k'+\frac{2kz_1}{1-z_1}+\frac{2k'z_2}{1-z_2}\right]^{p+\ell+\ell'+1}} \cdot$$

$$= \sum_{s=2\ell+1}^{\infty}\sum_{s'=2\ell'+1}^{\infty} R^p_{\ell,\ell'}(s,s')\; \frac{z_1^s}{s!}\; \frac{z_2^{s'}}{s'!}$$

B(220)

Finalmente, se desarrolla el segundo miembro en serie de potencias de z_1 y z_2 y se homologan los coeficientes con los del primer miembro, obteniéndose así las R^p. Pero este procedimiento sólo es práctico en el caso n'=n, el que permite un desarrollo sencillo del denominador. En el caso general, este método es demasiado complicado.

En lugar de la función generatriz de los polinomios de Laguerre se puede emplear con alguna ventaja la de los polinomios de Kummer:

$$\frac{e^{-\frac{xz}{1-z}}}{(1-z)^{\gamma}} = \sum_{n=0}^{\infty} F(-n;\gamma;x)\,(\gamma)_n \cdot \frac{z^n}{n!} \qquad B(221)$$

que con un cálculo análogo conduce a la expresión levemente más sencilla

$$\frac{N_\ell(n_r)\,N_{\ell'}(n_r')\,(2k)^{\ell}\,(2k')^{\ell'}\,(p+\ell+\ell')!}{(1-z_1)^{2\ell+2}\,(1-z_2)^{2\ell'+2}\left[k+k'+\frac{2kz_1}{1-z_1}+\frac{2k'z_2}{1-z_2}\right]^{p+\ell+\ell'+1}} \qquad B(222)$$

$$= \sum_{n_r=0}^{\infty}\sum_{n_r'=0}^{\infty} R^{p}_{\ell,\ell'}(n_r,n_r')\,(2\ell+2)_{n_r}\,(2\ell'+2)_{n_r'}\,\frac{z_1^{n_r}}{n_r!}\,\frac{z_2^{n_r'}}{n_r'!}$$

3.- Integración directa

El producto de dos polinomios de Kummer de grados n_r y n_r' es un polinomio de grado $n_r + n_r'$:

$$F(-n_r;\gamma;2kr)\,F(-n_r';\gamma';2k'r) = \sum_{\mu=0}^{n_r}\sum_{\nu=0}^{n_r'} \frac{(-n_r)_\mu(-n_r')_\nu\,(2k)^\mu(2k')^\nu\, r^{\mu+\nu}}{(\gamma)_\mu\,(\gamma')_\nu\,\mu!\,\nu!} \qquad B(223)$$

Nuestras integrales son entonces simplemente

$$R^p_{l,l'}(n_r,n_r') = N_l(n_r)\,N_{l'}(n_r')\,(2k)^l(2k')^{l'}\,.$$

$$\cdot\sum_{\mu=0}^{n_r}\sum_{\nu=0}^{n_r'}\frac{(-n_r)_\mu(-n_r)_\nu\,(2k)^\mu(2k')^\nu}{(2l+2)_\mu\,(2l'+2)_\nu\,\mu!\,\nu!}\int_0^\infty e^{-(k+k')r}\, r^{p+l+l'+\mu+\nu}\,dr$$

$$= \frac{N_l(n_r)\,N_{l'}(n_r')\,(2k)^l(2k')^{l'}(p+l+l')!}{(k+k')^{p+l+l'+1}}\sum_{\mu=0}^{n_r}\sum_{\nu=0}^{n_r'}\frac{(p+l+l'+1)_{\mu+\nu}(-n_r)_\mu(-n_r')_\nu}{(2l+2)_\mu(2l'+2)_\nu\,\mu!\,\nu!}\left(\frac{2k}{k+k'}\right)^\mu\left(\frac{2k'}{k+k'}\right)^\nu \qquad B(223)$$

$$R^p_{l,l'}(n_r,n_r') = N_l(n_r)\,N_{l'}(n_r')\left(\frac{2n}{n+n'}\right)^{l'}\left(\frac{2n'}{n+n'}\right)^{l}\left(\frac{a_0}{Z}\,\frac{nn'}{n+n'}\right)^{p+1}(p+l+l')!$$

$$\cdot\,F_2\left(p+l+l'+1;\,-n_r,-n_r';\,2l+2,\,2l'+2;\,\frac{2n}{n+n'},\,\frac{2n'}{n+n'}\right) \qquad B(224)$$

donde F_2 es el polinomio hipergeométrico de dos variables

$$F_2 = F_2(\alpha;-n_r,-n_r';\gamma,\gamma';x,y) = \sum_{\mu=0}^{n_r}\sum_{\nu=0}^{n_r'}\frac{(\alpha)_{\mu+\nu}(-n_r)_\mu(-n_r')_\nu\,x^\mu y^\nu}{(\gamma)_\mu(\gamma')_\nu\,\mu!\,\nu!}$$

La fórmula B(224) vale para toda cuaterna $\ell, n=n_r+\ell+1; \ell', n'=n'_r+\ell'+1$, y es mucho más sencilla que la que se obtiene mediante el método de la función generatriz.

El factor de normalización $N_\ell(n_r)$ de B(210) es

$$N_\ell(n_r) = \frac{(2\ell+2)_{n_r}}{n_r!}\, N_\ell(n) = (2\ell+2)_{n_r}\left\{\frac{4}{(a_0/2)^3\, n_r!\, n^4[(n+\ell)!]^3}\right\}^{1/2} \qquad \text{B(225)}$$

donde $N_\ell(n)$ es el de B(211). Con esto, la expresión explícita de las R^p, en forma completamente general y relativamente sencilla, es

$$R^p_{\ell,\ell'}(n,n') = \left(\frac{a_0}{2}\right)^{p-2}(p+\ell+\ell')!\,(2\ell+2)_{n_r}(2\ell'+2)_{n'_r}\cdot\left\{\frac{16}{n_r!\,n'_r!\,n^4\,n'^4[(n+\ell)!(n'+\ell')!]^3}\right\}^{1/2}$$

$$\cdot\left(\frac{nn'}{n+n'}\right)^{p+1}\left(\frac{2n}{n+n'}\right)^{\ell'}\left(\frac{2n'}{n+n'}\right)^{\ell}\cdot F_2\left(p+\ell+\ell'+1; -n_r, -n'_r; 2\ell+2, 2\ell'+2; \frac{2n'}{n+n'}, \frac{2n}{n+n'}\right)$$

$$[\ell, \ell' \geq 0] \qquad \text{B(226)}$$

Para $n_r=n'_r=0$; o sea, para $n-n' = \ell-\ell' = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots,$

$$R^p_{\ell,\ell'}(n,n') = \left(\frac{a_0}{2}\right)^{p-2}(p+\ell+\ell')!\; 8\left[n^3 n'^3 (2\ell+2)!\,(2\ell'+2)\right]^{-1/2}$$

$$\cdot\left(\frac{nn'}{n+n'}\right)^{p+1}\left(\frac{2n'}{n+n'}\right)^{\ell}\left(\frac{2n}{n+n'}\right)^{\ell'} \qquad \text{B(227)}$$

4.- Integral de la velocidad radial

Para calcular B(209) multiplicamos la ecuación diferencial de $\chi_{n',l}$, que es

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{d\chi_{n',l}}{dr}\right]-\left(\frac{Z}{n'a_0}\right)^2\chi_{n',l}-\frac{l(l+1)}{r^2}\chi_{n',l}+\frac{2Z}{a_0}\frac{1}{r}\chi_{n',l}=0$$

por $r^3.\chi_{n,l}$; luego multiplicamos la correspondiente a $\chi_{n,l}$ por $r^3.\chi_{n',l}$, restamos y finalmente integramos. Tenemos así

$$\int_0^\infty r\left\{\chi_{n,l}\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{d\chi_{n',l}}{dr}\right]-\chi_{n',l}\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{d\chi_{n,l}}{dr}\right]\right\}dr$$

$$=\left(\frac{Z}{a_0}\right)^2\left(\frac{1}{n'^2}-\frac{1}{n^2}\right)\int_0^\infty\chi_{n,l}\chi_{n',l}\,r^3\,dr$$

El primer término es, integrando por partes y teniendo en cuenta el comportamiento de las autofuncionesen el prigen y en el infinito,

$$\int_0^\infty r^2\left[\chi_{n',l}\frac{d\chi_{n,l}}{dr}-\chi_{n,l}\frac{d\chi_{n',l}}{dr}\right]dr$$

$$=-2\int_0^\infty\chi_{n,l}\left[\frac{d\chi_{n',l}}{dr}+\frac{1}{r}\chi_{n',l}\right]r^2\,dr$$

Con esto, queda finalmente

$$\mathcal{R}_l(n,n')=N_l(n)\,N_l(n')\int_0^\infty\left[\chi_{n,l}\frac{d\chi_{n',l}}{dr}+\frac{1}{r}\chi_{n,l}\chi_{n',l}\right]r^2\,dr$$

$$=\frac{1}{2}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^2\left(\frac{1}{n^2}-\frac{1}{n'^2}\right).\,R^3_{l,l}(n,n') \qquad \text{B(228)}$$

Como $R^3_{l,l}(n,n)\neq 0$ resulta en particular

$$\mathcal{R}_l(n,n)=0 \qquad \text{B(229}$$

C A P I T U L O IV

TRANSICIONES CONTINUO-DISCRETO

1.- Introducción

Las integrales a evaluar son

$$R^{p}_{\ell,\ell'}(n,k) = N_\ell(n)\, N_{\ell'}(k) \int_0^\infty \chi_{n,\ell}(r)\, \chi_{\ell'}(k,r)\, r^p\, dr \qquad \text{B(230,a)}$$

$$\mathcal{R}_\ell(n,k) = N_\ell(n)\, N_\ell(k) \int_0^\infty \chi_{n,\ell}(r) \left[\frac{\partial}{\partial r} \chi_\ell(k) + \frac{1}{r} \chi_\ell(k) \right] r^2\, dr \qquad \text{B(231,a)}$$

(transiciones discreto-continuo) y

$$R^{p}_{\ell,\ell'}(k,n) = N_\ell(k)\, N_{\ell'}(n) \int_0^\infty \chi_\ell(k,r)\, \chi_{n,\ell'}(r)\, r^p\, dr = R^{p}_{\ell',\ell}(n,k) \qquad \text{B(230,b)}$$

$$\mathcal{R}_\ell(k,n) = N_\ell(k)\, N_\ell(n) \int_0^\infty \chi_\ell(k,r) \left[\frac{\partial}{\partial r} \chi_{n,\ell} + \frac{1}{r} \chi_{n,\ell} \right] r^2\, dr \qquad \text{B(231,b)}$$

(transiciones continuo-discreto).

Ante todo, recordemos que las autofunciones del espectro continuo son ortogonales a las del discreto. Para ello multipliquemos la ecuación diferencial de $\chi_{\ell'}(k,r)$ por $\chi_{n,\ell}$, y la de ésta por $\chi_{\ell'}(k,r)$; restando e integrando, resulta

$$\left[k^2 + \left(\frac{Z}{n a_0} \right)^2 \right] R^2_{\ell,\ell'}(k,n) = \left[\ell(\ell+1) - \ell'(\ell'+1) \right] R^0_{\ell,\ell'}(k,n) \qquad \text{B(232)}$$

De aquí, para $\ell' = \ell$,

$$R^{2}_{\ell,\ell}(k,n) = R^{2}_{\ell,\ell}(n,k) = 0 \qquad B(233)$$

Para calcular las demás integrales podemos usar cualquiera de las dos representaciones de la autofunción de espectro continuo, sea en forma de serie o de integral. Elegiremos el primer camino, sugiriendo que también se ensaye el segundo.

2.- Cálculo de las integrales R^P

El integrando es

$$\chi_{n,\ell}(r)\chi_{\ell'}(\kappa,r)\, r^P = \left(\frac{2Z}{na_0}\right)^{\ell} (2\kappa)^{\ell'}\, e^{-\left[\frac{Z}{\kappa a_0}+i\kappa\right] r},$$

$$\sum_{\sigma=0}^{n_r} \frac{(-n_r)_\sigma \left(\frac{2Z}{na_0}\right)^{\sigma}}{(2\ell+2)_\sigma\ \sigma!} \sum_{\tau=0}^{\infty} \frac{\left(\ell'+1+i\frac{Z}{\kappa a_0}\right)_\tau (2i\kappa)^{\tau}}{(2\ell'+2)_\tau\ \tau!}\, r^{P+\ell+\ell'+\sigma+\tau} \qquad \text{B(234)}$$

Como

$$\int_0^\infty e^{-sr}\,dr \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^{n+q} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \frac{\Gamma(n+q+1)}{s^{n+q+1}} \qquad \text{B(235)}$$

resulta un polinomio de n_r términos cada uno de los cuales es una función hipergeométrica ordinaria:

$$R^P_{\ell,\ell'}(n,\kappa) = \frac{N_\ell(n)N_{\ell'}(\kappa)}{\left[\frac{Z}{na_0}+i\kappa\right]^{P+1}} \left(\frac{2}{1+i\kappa n\frac{a_0}{Z}}\right)^{\ell} \left(\frac{2}{i+\frac{Z}{na_0\kappa}}\right)^{\ell'}\cdot$$

$$\sum_{\sigma=0}^{n_r} \frac{(-n_r)_\sigma\,(P+\ell+\ell'+\sigma)!}{(2\ell+2)_\sigma\ \sigma!} \left(\frac{2}{1+i\kappa n\frac{a_0}{Z}}\right)^{\sigma} \sum_{\tau=0}^{\infty} \frac{\left(\ell'+1+i\frac{Z}{\kappa a_0}\right)_\tau (P+\ell+\ell'+\sigma+1)_\tau}{(2\ell'+2)_\tau\ \tau!} \left(\frac{2i\kappa}{\frac{Z}{na_0}+i\kappa}\right. \qquad \text{B(236)}$$

$$= \frac{N_\ell(n)\,N_{\ell'}(\kappa)}{\left(\frac{Z}{na_0}+i\kappa\right)^{P+1}} \left(\frac{2}{1+i\kappa n\frac{a_0}{Z}}\right)^{\ell} \left(\frac{2}{i+\frac{Z}{na_0\kappa}}\right)^{\ell'}\cdot$$

$$\sum_{\sigma=0}^{n_r} \frac{(-n_r)_\sigma\,(P+\ell+\ell'+\sigma)!}{(2\ell+2)_\sigma\ \cdot\sigma!} \left(\frac{2}{1+i\kappa n\frac{a_0}{Z}}\right)^{\sigma}\cdot F\left(\ell'+1+i\frac{Z}{\kappa a_0},\ P+\ell+\ell'+\sigma+1;\ 2(\ell'+1);\ \frac{2i\kappa}{\frac{Z}{na_0}+i\kappa}\right) \qquad \text{B(237)}$$

En particular, para transiciones desde y a las "órbitas circulares" $n_r = 0$,

$$R^p_{\ell,\ell'}(n,\kappa) = \frac{N_\ell(n)\, N_{\ell'}(\kappa)}{\left(\frac{z}{na_0} + i\kappa\right)^{p+1}} \left(\frac{2}{1 + i\kappa n \frac{a_0}{z}}\right)^{\ell} \left(\frac{2}{i + \frac{z}{na_0\kappa}}\right)^{\ell'} .$$

$$. F\left(\ell'+1+\frac{iz}{\kappa a_0},\ p+\ell+\ell'+1\ ;\ 2(\ell'+1);\ \frac{2i\kappa}{\frac{z}{na_0}+i\kappa}\right) \qquad \text{B(238)}$$

Para las transiciones de y al punto de acumulación $n = \infty$ del espectro, tenemos las integrales

$$\int_0^\infty e^{-\frac{z}{na_0}r} . (2\kappa r)^{\ell} F\left(-n_r;\ 2(\ell+1);\ \frac{2z}{na_0} r\right) . \frac{J_{2\ell'+1}\left(\sqrt{\frac{8z}{a_0}r}\right)}{\sqrt{\frac{8z}{a_0}r}}\, r^p\, dr \qquad \text{B(239)}$$

Cada uno de los términos de este polinomio se conoce[1]. Pero estas expresiones carecen de sentido físico, porque las autofunciones correspondientes a las órbitas parabólicas carecen de normalización en el sentido ordinario, por lo cual no pueden siquiera dimensionarse correctamente.

---

1 G. Doetsch, Tabellen zur Laplace-Transformation (Berlin, Springer, 1947), fórm. 8.33 (p. 135).

3.- <u>Integrales de la velocidad radial</u>

Procediendo en forma análoga a como lo hicimos en el Cap.III,4 de este Apéndice, se obtiene la relación

$$\int_0^\infty r\left\{\chi_\ell(k,r)\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{d\chi_{n,\ell}}{dr}\right]-\chi_{n,\ell}\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{d\chi_{n,\ell}}{dr}\right]\right\}dr$$
$$=\left[\left(\frac{Z}{na_0}\right)^2+k^2\right]\int_0^\infty \chi_{n,\ell}(r)\,\chi_\ell(k,r)\,r^3\,dr$$

Integrando dos veces por partes y teniendo en cuenta el comportamiento de las funciones en el origen y en el infinito, el primer miembro es

$$\left\{\begin{array}{l} -2\displaystyle\int_0^\infty \chi_\ell(k)\left[\frac{d\chi_{n,\ell}}{dr}+\frac{1}{r}\chi_{n,\ell}\right]r^2\,dr \\ \\ +2\displaystyle\int_0^\infty \chi_{n,\ell}(r)\left[\frac{d\chi_\ell(k)}{dr}+\frac{1}{r}\chi_\ell(k)\right]r^2\,dr\ ; \end{array}\right.$$

de manera que, finalmente, se tiene

$$\mathcal{R}_\ell(n,k)=-\mathcal{R}_\ell(k,n)=\frac{1}{2}\left[\left(\frac{Z}{na_0}\right)^2+k^2\right]R^3_{\ell,\ell}(k,n) \qquad B(240)$$

La diferencia de signo entre la integral de captura y la de ionización corresponde al hecho físico de la diferencia de signo de la velocidad radial en uno y otro proceso físico.

APENDICE C

INTEGRALES RADIALES (TEORIA DE DIRAC)

1.- <u>Electrón libre</u>

Las integrales son

$$N(k)\,N(k')\int_0^\infty \left[AB'\, j_\ell(kr)\, j_{\ell'}(k'r) \pm A'B\, j_{\ell''}(kr)\, j_{\ell'''}(k'r)\right] r^p\, dr$$

$$= AB'\, R^p_{\ell\ell'}(k,k') \pm A'B\, R^p_{\ell''\ell'''}(k,k') \qquad C(1)$$

$$N(k)\,N(k)\int_0^\infty \left[AA'\, j_\ell(kr)\, j_{\ell'}(k'r) \pm BB'\, j_{\ell''}(kr)\, j_{\ell'''}(k'r)\right] r^p\, dr$$

$$= AA'\, R^p_{\ell\ell'}(k,k') \pm BB'\, R^p_{\ell''\ell'''}(k,k') \qquad C(2)$$

donde

$$R^p_{\ell\ell'}(k,k') = N(k)\,N(k')\int_0^\infty j_\ell(kr)\; j_{\ell'}(k'r)\, r^p\, dr \qquad C(3)$$

Las R^p han sido calculadas en el Apéndice B, Capítulo I; reproducir aquí los resultados sería abultar innecesariamente este trabajo. Sin embargo, para facilitar su empleo consignaremos las integrales que más nos interesan. En primer lugar, la integral de normalización

$$N(k)\,N(k')\int_0^\infty \left[AA'\, j_\ell(kr)\, j_\ell(k'r) + BB'\, j_{\ell\pm 1}(kr)\, j_{\ell\pm 1}(k'r)\right] r^2\, dr$$

$$= (AA' + BB')\, \delta(k'-k) \qquad C(4)$$

Integrando respecto de k' sobre un paquete de ondas obtenemos la unidad, por ser $A^2 + B^2 = 1$ (cf. (1,65,a)).

$$A B' R^{1}_{l,l+1} + A' B R^{1}_{l+1,l} = \begin{cases} A B' \left(\frac{\kappa}{\kappa'}\right)^{l+1}, & \kappa' > \kappa \qquad C(5a) \\ A' B \left(\frac{\kappa'}{\kappa}\right)^{l+1}, & \kappa' < \kappa \qquad C(5b) \\ A B = \frac{1}{2}\frac{v}{c}, & \kappa' = \kappa \qquad C(5c) \end{cases}$$

por B (136 y 137).

$$A B' R^{1}_{l,l-1} + A' B R^{1}_{l-1,l} = \begin{cases} A' B \left(\frac{\kappa}{\kappa'}\right)^{l}, & \kappa' > \kappa \qquad C(6a) \\ A B' \left(\frac{\kappa'}{\kappa}\right)^{l}, & \kappa' < \kappa \qquad C(6b) \\ A B = \frac{1}{2}\frac{v}{c}, & \kappa' = \kappa \qquad C(6c) \end{cases}$$

$$A B' R^{2}_{0,1} - A' B R^{2}_{1,0} = \begin{cases} \frac{2}{\pi}\frac{\left(A B' \kappa + A' B \frac{\kappa'^2}{\kappa}\right)}{\kappa'^2 - \kappa^2} + \frac{1}{\pi}\left(\frac{AB'}{\kappa'} - \frac{A'B}{\kappa}\right) \ln\left|\frac{\kappa'+\kappa}{\kappa'-\kappa}\right| & [\kappa' > \kappa] \quad C(7,a) \\ \frac{2}{\pi}\frac{\left(A B' \frac{\kappa^2}{\kappa'} + A' B \kappa'\right)}{\kappa^2 - \kappa'^2} + \frac{1}{\pi}\left(\frac{AB'}{\kappa} - \frac{A'B}{\kappa'}\right) \ln\left|\frac{\kappa'+\kappa}{\kappa'-\kappa}\right| & [\kappa' < \kappa] \quad C(7,b) \end{cases}$$

por B (162 y 163).

$$AB' R^2_{1,0} - A'B R^2_{0,1} = \begin{cases} -\dfrac{2}{\pi} \dfrac{\left(AB' \frac{k'^2}{k} + A'Bk\right)}{k'^2 - k^2} + \dfrac{1}{\pi}\left(\dfrac{AB'}{k} - \dfrac{A'B}{k'}\right) \ln\left|\dfrac{k'+k}{k'-k}\right| & [k' > k] \quad C\,(8,a) \\[2ex] -\dfrac{2}{\pi} \dfrac{\left(AB'k' + A'B \frac{k^2}{k'^2}\right)}{k^2 - k'^2} + \dfrac{1}{\pi}\left(\dfrac{AB'}{k'} - \dfrac{A'B}{k}\right) \ln\left|\dfrac{k'+k}{k'-k}\right| & [k' < k] \quad C\,(8,b) \end{cases}$$

$$AB' R^2_{0,1} + A'B R^2_{1,0} = \begin{cases} \dfrac{2}{\pi} \dfrac{\left(AB'k - A'B \frac{k'^2}{k}\right)}{k'^2 - k^2} + \dfrac{1}{\pi}\left(\dfrac{AB'}{k'} + \dfrac{A'B}{k}\right) \ln\left|\dfrac{k'+k}{k'-k}\right| & [k' > k] \quad C\,(9,a) \\[2ex] \dfrac{2}{\pi} \dfrac{\left(AB' k^2/k' - A'Bk'\right)}{k^2 - k'^2} + \dfrac{1}{\pi}\left(\dfrac{AB'}{k} + \dfrac{A'B}{k'}\right) \ln\left|\dfrac{k'+k}{k'-k}\right| & [k' < k] \quad C\,(9,b) \end{cases}$$

$$AB' R^2_{1,0} + A'B R^2_{0,1} = \begin{cases} -\dfrac{2}{\pi} \dfrac{\left(AB' \frac{k'^2}{k} - A'Bk\right)}{k'^2 - k^2} + \dfrac{1}{\pi}\left(\dfrac{AB'}{k} + \dfrac{A'B}{k'}\right) \ln\left|\dfrac{k'+k}{k'-k}\right| & [k' > k] \quad C\,(10,a) \\[2ex] -\dfrac{2}{\pi} \dfrac{\left(AB'k' - A'B \frac{k^2}{k'}\right)}{k^2 - k'^2} + \dfrac{1}{\pi}\left(\dfrac{AB'}{k'} + \dfrac{A'B}{k}\right) \ln\left|\dfrac{k'+k}{k'-k}\right| & [k' < k] \quad C\,(10,b) \end{cases}$$

$$A B' R^{3}_{0,1} + A' B R^{3}_{1,0} = (A B' - A' B)\, \delta'(k - k')$$

$$A B' R^{3}_{1,0} + A' B R^{3}_{0,1} = -(A B' - A' B)\, \delta'(k - k')$$

por $B(88)$.

2.- Electrón en un campo coulombiano

Las integrales son

$$N_\chi(k)\,N_{\chi'}(k')\int_0^\infty\left[\bar{\chi}_\chi^*(k,r)\,\chi_{\chi'}(k',r)\pm\bar{\varphi}_\chi^*(k,r)\,\varphi_{\chi'}(k',r)\right]r^p\,dr \qquad C(12)$$

$$N_\chi(k)\,N_{\chi'}(k')\int_0^\infty\left[\chi_\chi^*(k,r)\,\varphi_{\chi'}(k',r)\pm\varphi_\chi^*(k,r)\,\chi_{\chi'}^*(k',r)\right]r^p\,dr \qquad C(13)$$

$$p=1,2,3$$

y la integral de normalización

$$N_\chi(k)\,N_\chi(k')\int_0^\infty\left[\chi_\chi^*(k,r)\,\chi_\chi(k',r)+\varphi_\chi^*(k,r)\,\varphi_\chi(k',r)\right]r^2\,dr \qquad C(14)$$

2.1.- Normalización

A fin de aplicar el método de las autodiferenciales escribimos las ecuaciones diferenciales (1,78) para k' y sus conjugadas para k:

$$-\frac{2\pi i}{h}\beta\,(P_0'-m_0c)\,\chi_\chi(k')+\frac{d\varphi_\chi}{dr}(k')+\frac{1-\chi}{r}\varphi_\chi(k')+\frac{i\alpha Z}{r}\chi_\chi(k')=0 \quad (a)$$

$$-\frac{2\pi i}{h}\beta\,(P_0'+m_0c)\,\varphi_\chi(k')+\frac{d\chi_\chi}{dr}(k')+\frac{1+\chi}{r}\chi_\chi(k')+\frac{i\alpha Z}{r}\varphi_\chi(k')=0 \quad (b)$$

$$+\frac{2\pi i}{h}\beta\,(P_0-m_0c)\,\chi_\chi^*(k)+\frac{d\varphi_\chi^*}{dr}(k)+\frac{1-\chi}{r}\varphi_\chi^*(k)-\frac{i\alpha Z}{r}\chi_\chi^*(k)=0 \quad (c)$$

$$+\frac{2\pi i}{h}\beta\,(P_0+m_0c)\,\varphi_\chi^*(k)+\frac{d\chi_\chi^*}{dr}(k)+\frac{1+\chi}{r}\chi_\chi^*(k)-\frac{i\alpha Z}{r}\varphi_\chi^*(k)=0 \quad (d)$$

Multiplicamos (a) por $\chi_x^*(k)$ y (b) por $\varphi_x^*(k)$, sumando los resultados; luego multiplicamos (c) por $\chi_x(k')$, (d) por $\varphi_x(k')$ y sumamos; sumando los resultados y multiplicando por r^2, se obtiene

$$\frac{2\pi i}{h}\beta\,(P_0'-P_0)\left[\chi_x^*(k)\chi_x(k')+\varphi_x^*(k)\varphi_x(k')\right] r^2 = \frac{d}{dr}\left\{ r^2\left[\chi_x^*(k)\varphi_x(k')+\varphi_x^*(k)\chi_x(k')\right]\right\} \qquad C(15)$$

Integramos entre 0 y R, introduciendo en el segundo miembro los valores asintóticos

$$\left.\begin{aligned}\chi_x &\sim A\,C_x\,\frac{\operatorname{sen}[kR+\delta_x(k)]}{kR}\\ \varphi_x &\sim i\beta\,B\,C_x\,\frac{\cos[kR+\delta_x(k)]}{kR}\end{aligned}\right\}\; x=-l-1<0 \qquad C(16,a)$$

$$\left.\begin{aligned}\chi_x &\sim A\,C_x\,\frac{\cos[kR+\delta_x(k)]}{kR}\\ \varphi_x &\sim -i\beta\,B\,C_x\,\frac{\operatorname{sen}[kR+\delta_x(k)]}{kR}\end{aligned}\right\}\; x=l>0 \qquad C(17,b)$$

donde la amplitud es

$$C_x=\frac{\Gamma(\rho+1)\;e^{-\frac{\pi}{2ka_0}\cdot\frac{P_0}{m_0c}}}{\left|\Gamma\left(\rho+1+i\frac{Z}{ka_0}\cdot\frac{P_0}{m_0c}\right)\right|}, \qquad C(18)$$

y donde no interesa el valor de la fase pues termina por desaparecer, al igual que en el caso no relativista. Así se logra

$$\int_0^R\left[\chi_x^*(k,r)\chi_x(k',r)+\varphi_x^*(k,r)\varphi_x(k',r)\right]r^2\,dr$$
$$=\frac{h}{2\pi}\,\frac{1}{P_0'-P_0}\,\frac{C_x^2}{kk'}\left\{AB'\operatorname{sen}(kR+\delta_x)\cos(k'R+\delta_x) - A'B\cos(kR+\delta_x)\operatorname{sen}(k'R+\delta_x)\right\} \qquad C(19)$$

Integrando respecto de k' y pasando finalmente al límite se tiene

$$\lim_{R\to\infty}\int_0^R r^2\,dr\int_{k'-\frac{\Delta k'}{2}}^{k'+\frac{\Delta k'}{2}}\left[\chi_x^{*}(k,r)\,\chi_x(k',r)+\varphi_x^{*}(k,r)\,\varphi_x(k',r)\right]dk'$$

$$=\frac{AB\cdot P_0\cdot \pi}{\frac{h}{2\pi}\cdot k^3}\left|\frac{\Gamma(\rho+1)}{\Gamma\left(\rho+1+i\frac{z}{ka_0}\frac{P_0}{m_0c}\right)}\right|^2\cdot e^{-\frac{\pi z}{ka_0}\cdot\frac{P_0}{m_0c}} \qquad C(20)$$

si $k\in(k'-\Delta k'/2\ ,\ k'+\Delta k'/2)$, y 0 en caso contrario. De donde el factor de normalización resulta ser

$$N_x(k)=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}k\cdot\left[\frac{\frac{h}{2\pi}\,k}{2ABP_0}\right]^{1/2}\frac{\left|\Gamma\left(\rho+1+i\frac{z}{ka_0}\frac{P_0}{m_0c}\right)\right|}{\Gamma(\rho+1)} \qquad C(21)$$

Análogamente al caso no relativista, esto nos autoriza a poner finalmente

$$N_x(k)\,N_x(k')\int_0^\infty\left[\chi_x^{*}(k,r)\,\chi_x(k',r)+\varphi_x^{*}(k,r)\,\varphi_x(k',r)\right]r^2\,dr \qquad C(22)$$

$$=(AA'+BB')\,\delta(k'-k)$$

2.2.- Método de la representación integral

Para evaluar las demás integrales empleamos el mismo método que en el caso no relativista (cf. Apéndice B, Cap. II). Las diferencias principales son, en primer lugar, la presencia de β en los integrandos; ella no molesta pues en resumidas cuentas duplica el número de integrales. En segundo lugar, la presencia del irracional $\sqrt{\varkappa^2 - Z^2\alpha^2} = \rho$ en el exponente de r; este sí es un inconveniente, porque ρ se presenta en el método que propusimos como orden de derivación. No obstante, para átomos livianos podemos poner en buena aproximación $\sqrt{\varkappa^2 - Z^2\alpha^2} \simeq |\varkappa|$. Con esta aproximación perderemos algún efecto relativista, pero no modificaremos esencialmente las autofunciones ni, por consiguiente, las integrales. En efecto, el comportamiento asintótico de las autofunciones aproximadas es el mismo que el de las exactas: una simple inspección de C(16) muestra que la sustitución de ρ por $|\varkappa|$ sólo afecta a la amplitud y a la fase de las autofunciones. En cuanto al comportamiento en el origen, esta sustitución elimina la singularidad que tienen las autofunciones exactas para los estados $S_{\frac{1}{2}}$ ($\varkappa = -1$) y $P_{\frac{1}{2}}$, entre los cuales figura nada menos que el estado fundamental. De manera que, en rigor, si nos exponemos a perder un efecto de segundo orden, ganamos en cambio al eliminar una divergencia físicamente inadmisible y que, según lo señala Sommerfeld[1], es mera consecuencia de la singularidad del potencial.

Las representaciones integrales que nos interesan son, por (1,82), (1,88) y B(197),

---

1 Arnold Sommerfeld, Wellenmechanik (N.York, F.Ungar, s.f.), p. 287.

$$e^{-ikr}F = \frac{\Gamma(2\rho+1)\; 2^{-2\rho}}{\Gamma\left(\rho+\frac{1}{2}(1\pm\beta)-\beta\, i\,\frac{Z}{ka_0}\cdot\frac{p_0}{m_0c}\right)\Gamma\left(\rho+\frac{1}{2}(1\mp\beta)+\beta\, i\,\frac{Z}{ka_0}\,\frac{p_0}{m_0c}\right)}$$

$$\cdot\int_{-1}^{1} e^{ikrt}(1-t)^{\rho-\frac{1}{2}(1\pm\beta)+\beta\frac{iZ}{ka_0}\frac{p_0}{m_0c}}\,(1+t)^{\rho-\frac{1}{2}(1\mp\beta)-\beta\cdot\frac{iZ}{ka_0}\frac{p_0}{m_0c}}\cdot dt \qquad C(23)$$

$$e^{-ikr}\bar{F} = \frac{\Gamma(2\rho+1)\; 2^{-2\rho}}{\Gamma\left(\rho+\frac{1}{2}(1\pm\beta)-\beta\frac{iZ}{ka_0}\frac{p_0}{m_0c}\right)\Gamma\left(\rho+\frac{1}{2}(1\mp\beta)+\beta\frac{iZ}{ka_0}\frac{p_0}{m_0c}\right)},$$

$$\cdot\int_{-1}^{1} e^{ikrt}(1-t)^{\rho-\frac{1}{2}(1\mp\beta)-\beta\frac{iZ}{ka_0}\frac{p_0}{m_0c}}\,(1+t)^{\rho-\frac{1}{2}(1\pm\beta)+\beta\frac{iZ}{ka_0}\frac{p_0}{m_0c}}\,dt \qquad C(24)$$

donde β debe tratarse ahora, no como una matriz, sino como una variable que toma los valores -1 (electrón) y +1 (positrón). Sustituyendo estas expresiones en las integrales, y siguiendo el mismo camino que en el caso no relativista, obtenemos las expresiones buscadas en forma integral. No juzgamos razonable reproducirlas dada su longitud y debido a que no difieren esencialmente de las correspondientes a la teoría de Schrödinger.

3.- Electrón del átomo hidrogenoide (espectro discreto)

3.1.- Ortogonalidad

La integral de normalización se calculará en el apartado siguiente. Aquí demostraremos la ortogonalidad de las autofunciones . Para esto procederemos de la misma manera que en 2.1.; haciendo así obtenemos la fórmula C(15). Si en ella sustituímos β por -1 de conformidad con 1(104); y si tenemos en cuenta que, por la fórmula de Sommerfeld,

$$P_0 - P_0' = m_0 c \left[\frac{\rho + n_r}{n} - \frac{\rho + n_r'}{n'} \right], \quad n = \left[(\rho + n_r)^2 + Z^2 \alpha^2 \right]^{1/2}$$

obtenemos

$$2ni \frac{m_0 c}{h} \left[\frac{\rho + n_r}{n} - \frac{\rho + n_r'}{n'} \right] \left[\chi_x^*(n) \chi_x(n') + \varphi_x^*(n) \varphi_x(n') \right] r^2$$

$$= \frac{d}{dr} \left\{ r^2 \left[\chi_x^*(n) \varphi_x(n') + \varphi_x^*(n) \chi_x(n') \right] \right\} \qquad \text{C(25)}$$

La integral del segundo miembro es 0, pues las autofunciones son nulas en el infinito. Por consiguiente,

$$\left(\frac{\rho + n_r}{n} - \frac{\rho + n_r'}{n} \right) \int_0^\infty \left[\chi_x^*(n_r) \chi_x(n_r') + \varphi_x^*(n_r) \varphi_x(n_r') \right] r^2 \, dr = 0$$

o sea,

$$N_x(n_r) N_x(n_r') \int_0^\infty \left[\chi_x^*(n_r) \chi_x(n_r') + \varphi_x^*(n_r) \varphi_x(n_r') \right] r^2 \, dr \qquad \text{C(26)}$$

$$= \delta_{n_r', n_r} = \delta_{n', n}$$

3.2.- Cálculo de las integrales para n_r, $n'_r \neq 0$

El problema se reduce a calcular las 4 integrales

$$R^p_{ij} = \int_0^\infty e^{-(K+K')r} \, (2Kr)^{\rho-1} (2K'r)^{\rho'-1} F_i . F_j . r^p \, dr \qquad C(27)$$

Utilizaremos el mismo método empleado en el caso no relativista; es decir, hallaremos las transformadas de Laplace del polinomio a que se reduce el integrando cuando se efectúa el producto de las funciones de Kummer. Cabe advertir, de pasada, que el método de la función generatriz de los polinomios de Laguerre es en este caso singularmente inapropiado, debido a que el grado de los mismos no es entero sino irracional.

Como el cálculo es elemental lo reproduciremos solamente para R_{11}.

$$R^p_{11} = (2\kappa)^{\rho-1}(2\kappa')^{\rho'-1} \sum_{s=0}^{n_r} \sum_{t=0}^{n'_r} \frac{(-n_r)_s \, (-n'_r)_t \, (2\kappa)^s (2\kappa')^t}{(2\rho+1)_s \, (2\rho'+1)_t \, s! \, t!} \int_0^\infty e^{-(\kappa+\kappa')r} . r^{p+\rho+\rho'-2} . r^{s+t} . dr$$

$$= \frac{\Gamma(\rho+\rho'+p-1)}{(\kappa+\kappa')^{p+1}} \left(\frac{2\kappa}{\kappa+\kappa'}\right)^{\rho-1} \left(\frac{2\kappa'}{\kappa+\kappa'}\right)^{\rho'-1} .$$

$$. \sum_{s=0}^{n_r} \sum_{t=0}^{n'_r} \frac{(\rho+\rho'+p-1)_{s+t} \, (-n_r)_s \, (-n'_r)_t}{(2\rho+1)_s \, (2\rho'+1)_t \, . \, s! \, t!} \left(\frac{2\kappa}{\kappa+\kappa'}\right)^s \left(\frac{2\kappa'}{\kappa+\kappa'}\right)^t \qquad C(28)$$

Introduciendo

$$n = \left[(\rho + n_r)^2 + Z^2\alpha^2 \right]^{1/2}$$

y llamando

$$\sum_{s=0}^{n_r} \sum_{t=0}^{n'_r} \frac{(\alpha)_{s+t}\,(-n_r)_s\,(-n'_r)_t}{(\gamma)_s\,(\gamma')_t\;\; s!\;t!}\, x^s y^t = F_2(\alpha; -n_r, -n'_r; \gamma, \gamma'; x, y)$$

C(29)

$$\Gamma(\rho+\rho'+p-1)\left[\frac{a_0}{Z}\;\frac{n n'}{n+n'}\right]^{p+1}\left(\frac{2n'}{n+n'}\right)^{\rho-1}\left(\frac{2n}{n+n'}\right)^{\rho'-1} = D^{p}_{n,n'} \qquad C(30)$$

resulta finalmente

$$R^{p}_{11} = D^{p}_{n,n'} \cdot F_2\left(\rho+\rho'+p-1;\ -n_r,\ -n'_r;\ 2\rho+1,\ 2\rho'+1;\ \frac{2n'}{n+n'},\ \frac{2n}{n+n'}\right) \qquad C(30,a)$$

$$R^{p}_{22} = D^{p}_{n,n'} \cdot F_2\left(\rho+\rho'+p-1;\ -n_r+1,-n'_r+1;\ 2\rho+1,\ 2\rho'+1;\ \frac{2n'}{n+n'},\ \frac{2n}{n+n'}\right) \qquad C(30,b)$$

$$R^{p}_{12} = D^{p}_{n,n'} \cdot F_2\left(\rho+\rho'+p-1;\ -n_r,\ -n'_r+1;\ 2\rho+1,\ 2\rho'+1;\ \frac{2n'}{n+n'},\ \frac{2n}{n+n'}\right) \qquad C(30,c)$$

$$R^{p}_{21} = D^{p}_{n,n'} \cdot F_2\left(\rho+\rho'+p-1;\ -n_r+1,-n'_r;\ 2\rho+1,\ 2\rho'+1;\ \frac{2n'}{n+n'},\ \frac{2n}{n+n'}\right) \qquad C(30,d)$$

3.3.- Normalización

Las expresiones anteriores permiten calcular todas las integrales radiales de la teoría de Dirac. Pero la integral de normalización se calcula con mayor comodidad recurriendo a la relación que vincula a los polinomios hipergeométricos con los de Sonine

$$T_m^n(x) = \frac{1}{m!} - \frac{s}{1!(m+1)!} + \frac{s^2}{2!(m+2)} - \dots + \frac{(-)^n s^n}{n!(m+n)!} \qquad C(31)$$

(n entero). Los polinomios de Sonine[2] son ortogonales:

$$\int_0^\infty e^{-x}\, x^{2\rho}\, T_{2\rho}^{n_r}(x)\, T_{2\rho}^{n_r'}(x)\, dx = \delta_{n_r',\, n_r} \left[\Gamma(n_r+1)\, \Gamma(2\rho+n_r+1)\right]^{-1} \qquad C(32)$$

y están vinculados a los hipergeométricos en la forma

$$F(-n_r;\, 2\rho+1;\, x) = (-1)^{n_r}\, \Gamma(2\rho+1)\, \Gamma(n_r+1)\, T_{2\rho}^{n_r}(x) \qquad C(33)$$

Merced a estas relaciones obtenemos en seguida

$$R_{11}^2 = \frac{\left[\Gamma(2\rho+1)\, \Gamma(n_r+1)\right]^2}{(2\kappa)^3} \int_0^\infty e^{-\xi}\, \xi^{2\rho} \left[T_{2\rho}^{n_r}(\xi)\right]^2 d\xi$$

$$= \frac{\left[\Gamma(2\rho+1)\right]^2 n_r!}{\Gamma(2\rho+1+n_r)} \left(\frac{n a_0}{2Z}\right)^3 \qquad C(34)$$

$$R_{22}^2 = \frac{\left[\Gamma(2\rho+1)\, \Gamma(n_r)\right]^2}{(2\kappa)^3} \int_0^\infty e^{-\xi}\, \xi^{2\rho} \left[T_{2\rho}^{n_r-1}(\xi)\right] d\xi$$

$$= \frac{\left[\Gamma(2\rho+1)\right]^2 (n_r-1)!}{\Gamma(2\rho+n_r)} \left(\frac{n a_0}{2Z}\right)^3 \qquad (n_r \geq 1) \qquad C(35)$$

$$R_{12}^2 = R_{21}^2 = 0$$

Con esto, la integral de normalización es

---

2 Véase p.ej. H. Bateman, Partial Differential Equations of Mathematical Physics (N.York, Dover, 1944), pp. 451 y ss. En la literatura consultada no he visto que se utilicen los polinomios de Sonine para este fin.

$$\int_0^\infty \left[\chi_x^*(n_r)\chi_x(n_r') \pm \varphi_x^*(n_r)\varphi_x(n_r') \right] r^2\, dr$$

$$= (A^*A' \pm B^*B')(R_{11}^2 + \varepsilon\varepsilon' R_{22}^2) + (A^*A' \mp BB')(\varepsilon' R_{12}^2 + \varepsilon R_{21}^2)$$

$$= \delta_{n_r', n_r} (A^*A' \pm B^*B') \left(\frac{n\iota_0}{2Z}\right)^3 \frac{[\Gamma(2\rho+1)]^2 \cdot n_r!}{\Gamma(2\rho+n_r)} \left[\frac{1}{2\rho+n_r} + \frac{\varepsilon^2}{n_r} \right] \qquad C(36)$$

Teniendo en cuenta (1,110), la constante de normalización resulta

$$N_x(n_r) = \frac{n-x}{\Gamma(2\rho+1)} \left\{ \frac{\gamma(\rho+n_r)\Gamma(2\rho+n_r+1)}{(\iota_0/Z)^3\, n_r!\, n^4 \left[(n-x)^2 + n_r(2\rho+n_r) \right]} \right\}^{1/2}, \quad n_r \neq 0 \qquad C(37)$$

De pasada hemos obtenido tres integrales importantes:

$$N_x(n_r)\, N_x(n_r') \int_0^\infty \left[\chi_x^*(n_r)\chi_x(n_r') - \varphi_x^*(n_r)\varphi_x(n_r') \right] r^2\, dr = \delta_{n_r', n_r} \cdot \frac{(\rho+n_r)}{n} \qquad C(38)$$

$$N_x(n_r)\, N_x(n_r') \int_0^\infty \left[\chi_x^*(n_r)\varphi_x(n_r') + \varphi_x^*(n_r)\chi_x(n_r') \right] r^2\, dr = 0 \qquad C(39)$$

tanto para $n_r' \neq n_r$ como para $n_r' = n_r$.

$$N_x(n_r)\, N_x(n_r') \int_0^\infty \left[\chi_x^*(n_r)\varphi_x(n_r') - \varphi_x^*(n_r)\chi_x(n_r') \right] r^2\, dr \qquad C(40)$$

$$= \delta_{n_r', n_r} \cdot \frac{iZ\alpha}{n} \cdot \frac{(n-x)^2 - n_r(2\rho+n_r)}{(n-x)^2 + n_r(2\rho+n_r)}$$

3.4.- Integrales normalizadas para n'_r, $n_r \neq 0$

Si en 3.2 introducimos el factor de normalización que acabamos de calcular, obtenemos

$$N_x(n_r)\, N_{x'}(n'_r) \int_0^\infty \left[\chi_x^*(n_r)\, \chi_{x'}(n_r) \pm \varphi_x^*(n_r)\, \varphi_{x'}(n'_r) \right] r^p\, dr$$

$$= N_x(n_r)\, N_{x'}(n'_r) \left\{ (A^*A' \pm B^*B')(R_{11}^p + \varepsilon\varepsilon' R_{22}^p) + (A^*A' \mp B^*B')(\varepsilon' R_{12}^p + \varepsilon R_{21}^p) \right\}$$

$$= \left(\frac{a_0}{Z}\right)^{p-2} \frac{(n-x)(n'-x')}{\Gamma(2\rho+1)\,\Gamma(2\rho'+1)} \left\{ \frac{(\rho+n_r)(\rho'+n'_r)\,\Gamma(2\rho+n_r+1)\,\Gamma(2\rho'+n'_r+1)}{n^4 n'^4\, n_r!\, n'_r!\, [(n-x)^2+n_r(2\rho+n_r)][(n'-x')^2+n'_r(2\rho'+n'_r)]} \right\}^{\prime\prime}$$

$$\cdot\, \Gamma(\rho+\rho'+p-1) \left(\frac{n n'}{n+n'}\right)^{p+1} \left(\frac{n'}{n+n'}\right)^{\rho-1} \left(\frac{n}{n+n'}\right)^{\rho'-1} \cdot\, 2^{\rho+\rho'+1} \,\cdot$$

$$\cdot \left\{ (A^*A' \pm B^*B') \left[F_2\left(\rho+\rho'+p-1; -n_r, -n'_r; 2\rho+1, 2\rho'+1; \frac{2n'}{n+n'}, \frac{2n}{n+n'}\right) \right.\right.$$

$$\left. + \frac{n_r n'_r}{(n-x)(n'-x')}\, F_2\left(\rho+\rho'+p-1; -n_r+1, -n_r+1; 2\rho+1, 2\rho'+1; \frac{2n'}{n+n'}, \frac{2n}{n+n'}\right) \right]$$

$$+ (A^*A' \mp B^*B') \left[F_2\left(\rho+\rho'+p-1; -n_r, -n'_r+1; 2\rho+1, 2\rho'+1; \frac{2n'}{n+n'}, \frac{2n}{n+n'}\right) \cdot \frac{n'_r}{x'-n'} \right.$$

$$\left.\left. + \frac{n_r}{x-n} \cdot F_2\left(\rho+\rho'+p-1; -n_r+1, -n'_r; 2\rho+1, 2\rho'+1; \frac{2n'}{n+n'}, \frac{2n}{n+n'}\right) \right] \right\}$$

(C/41)

En particular, los valores medios de r^{-1} y de r son

$$\overline{\left(\frac{1}{r}\right)} = \frac{1}{a_0/Z}\,\frac{(n-x)^2\,(\rho+n_r)\,\Gamma(2\rho+n_r+1)}{n^2\,n_r!\,\rho\,\Gamma(2\rho+1)\,[(n-x)^2+n_r(2\rho+n_r)]}\,\cdot$$

$$\Big\{\frac{n}{\rho+n_r}\Big[F_2(2\rho,-n_r,-n_r;2\rho+1,2\rho+1;1,1)+\frac{n_r^2}{(n-x)^2}F_2(2\rho;-n_r+1,-n_r+1;2\rho+1,2\rho+1;1,1)\Big]$$

$$-\frac{2n_r}{n-x}F_2(2\rho;-n_r,-n_r+1;2\rho+1,2\rho+1;1,1)\Big\} \qquad C(42)$$

$$\bar{r} = \frac{a_0}{Z}\,\frac{(n-x)^2(\rho+n_r)\,\Gamma(2\rho+n_r+1)}{n_r!\,\Gamma(2\rho)\,[(n-x)^2+n_r(2\rho+n_r)]}\,\cdot$$

$$\cdot\Big\{\frac{n}{\rho+n_r}\Big[F_2(2\rho+2;-n_r,-n_r;2\rho+1;2\rho+1;1,1)+\frac{n_r^2}{(n-x)^2}F_2(2\rho+2;-n_r+1,-n_r+1;2\rho+1,2\rho+1;1,1)\Big]$$

$$-\frac{2n_r}{n-x}F_2(2\rho+2;-n_r,-n_r+1;2\rho+1,2\rho+1;1,1)\Big\} \qquad C(43)$$

Las integrales restantes son

$$N_{\varkappa}(n_r) N_{\varkappa'}(n_r') \int_0^{\infty} \left[\chi_{\varkappa}^{*}(n_r) \varphi_{\varkappa'}(n_r') \pm \varphi_{\varkappa}^{*}(n_r) \chi_{\varkappa'}(n_r') \right] r^{p} \, dr$$

$$= N_{\varkappa}(n_r) N_{\varkappa'}(n_r') \Big\{ (A^{*}B' \pm A'B^{*}) (R_{11}^{p} - \varepsilon\varepsilon' R_{22}^{p})$$

$$+ (A^{*}B' \mp A'B^{*}) (\varepsilon' R_{12}^{p} - \varepsilon R_{21}^{p}) \Big\} =$$

$$= \left(\frac{\omega}{2}\right)^{p-2} \frac{(n-\varkappa)(n'-\varkappa')}{\Gamma(2\rho+1)\,\Gamma(2\rho'+1)} \left\{ \frac{(\rho+n_r)(\rho'+n_r')\,\Gamma(2\rho+n_r+1)\,\Gamma(2\rho'+n_r'+1)}{n^4 n'^4 n_r!\, n_r'!\, [(n-\varkappa)^2+n_r(2\rho+n_r)][(n'-\varkappa')^2+n_r'(2\rho'+n_r')]} \right\}^{1/2}$$

$$\cdot \Gamma(\rho+\rho'+p-1) \left(\frac{nn'}{n+n'}\right)^{p+1} \left(\frac{n'}{n+n'}\right)^{\rho-1} \left(\frac{n}{n+n'}\right)^{\rho'-1} \cdot Z^{\rho+\rho'+1} \,.$$

$$\cdot \Big\{ (A^{*}B' \pm A'B^{*}) \Big[F_2\Big(\rho+\rho'+p-1; -n_r, -n_r'; 2\rho+1, 2\rho'+1; \frac{2n'}{n+n'}, \frac{2n}{n+n'}\Big)$$

$$- \frac{n_r n_r'}{(n-\varkappa)(n'-\varkappa')} F_2\Big(\rho+\rho'+p-1; -n_r+1, -n_r'+1; 2\rho+1, 2\rho'+1; \frac{2n'}{n+n'}, \frac{2n}{n+n'}\Big) \Big]$$

$$+ (A^{*}B' \mp A'B^{*}) \Big[\frac{n_r'}{\varkappa'-n'} F_2\Big(\rho+\rho'+p-1; -n_r, -n_r'+1; 2\rho+1, 2\rho'+1; \frac{2n'}{n+n'}, \frac{2n}{n+n'}\Big)$$

$$- \frac{n_r}{\varkappa-n} F_2\Big(\rho+\rho'+p-1; -n_r+1, -n_r'; 2\rho+1, 2\rho'+1; \frac{2n'}{n+n'}, \frac{2n}{n+n'}\Big) \Big] \Big\} \qquad \text{C(44)}$$

En particuñar, interesan las dos siguientes:

$$N_\chi^2(n_r)\int_0^\infty\left[\chi_\chi^*(n_r)\,\varphi_\chi(n_r)-\varphi_\chi^*(n_r)\,\chi_\chi(n_r)\right]r\,dr$$

$$=\frac{iZ\alpha}{a_0/Z}\;\frac{(n-\chi)^2}{n^2\rho\,n_r!}\;\frac{\Gamma(2\rho+n_r+1)}{\Gamma(2\rho+1)\left[(n-\chi)^2+n_r(2\rho+n_r)\right]}\cdot$$

$$\cdot\left\{F_2(2\rho;-n_r,-n_r;2\rho+1,2\rho+1;1,1)-\frac{n_r^2}{(n-\chi)^2}F_2(2\rho;-n_r+1,-n_r+1;2\rho+1,2\rho+1;1,1)\right\}$$

C (45)

$$N_\chi^2(n_r)\int_0^\infty\left[\chi_\chi^*(n_r)\,\varphi_\chi(n_r)-\varphi_\chi^*(n_r)\,\chi_\chi(n_r)\right]r^3\,dr$$

$$=i\alpha\,a_0\;\frac{(n-\chi)^2}{n_r!}\;\frac{\Gamma(2\rho+n_r+1)\;(\rho+1/2)}{\Gamma(2\rho+1)\left[(n-\chi)^2+n_r(n_r+2\rho)\right]}\cdot$$

$$\cdot\left\{F_2(2\rho+2;-n_r,-n_r;2\rho+1,2\rho+1;1,1)-\frac{n_r^2}{(n-\chi)^2}F_2(2\rho+2,-n_r+1,-n_r+1;2\rho+1,2\rho+1;1,1)\right.$$

C (46)

3.5.- Integrales para $n_r = n'_r = 0$

El factor de normalización de las autofunciones 1(113) es

$$N_x = \left\{ \frac{8\rho}{(a_0/Z)^3 x^4 \Gamma(2\rho+1)} \right\}^{1/2} \qquad C(47)$$

Las integrales son elementales(son simples integrales eulerianas):

$$\left.\begin{aligned} N_x N_{x'} \int_0^\infty [\chi_x^* \chi_{x'} \pm \varphi_x^* \varphi_{x'}] \, r^p \, dr \\ N_x N_{x'} \int_0^\infty [\chi_x^* \varphi_{x'} \pm \varphi_x^* \chi_{x'}] \, r^p \, dr \end{aligned}\right\} = \left\{\begin{aligned} &(A^* A' \pm B^* B') \\ &(A^* B' \pm A' B^*) \end{aligned}\right. .$$

$$\cdot \left(\frac{a_0}{Z}\right)^{p-2} \left\{ \frac{\rho \rho'}{x^4 x'^4 \Gamma(2\rho+1)\Gamma(2\rho'+1)} \right\}^{1/2} \cdot 2^{\rho+\rho'+1} \left| \frac{x x'}{x+x'} \right|^{p+1} \left(\frac{x'}{x+x'}\right)^{\rho-1} \left(\frac{x}{x+x'}\right)^{\rho'-1} \cdot \Gamma(\rho+\rho'+p-1) \qquad C(48)$$

En particular,

$$N_x^2 \int_0^\infty [|\chi_x|^2 + |\varphi_x|^2] \, r^p \, dr = \left(\frac{|x| a_0}{2Z}\right)^{p-2} |x|^{p-2} \frac{\Gamma(2\rho+p-1)}{\Gamma(2\rho+1)} \qquad C(49)$$

$$N_x^2 \int_0^\infty [|\chi_x|^2 - |\varphi_x|^2] \, r^p \, dr = \left(\frac{a_0}{2Z}\right)^{p-2} \cdot \rho \, |x|^{p-3} \frac{\Gamma(2\rho+p-1)}{\Gamma(2\rho+1)} \qquad C(50)$$

$$N_x^2 \int_0^\infty [\chi_x^* \varphi_x - \varphi_x^* \chi_x] \, r^p \, dr = iZ\alpha \left(\frac{a_0}{2Z}\right)^{p-2} |x|^{p-3} \frac{\Gamma(2\rho+p-1)}{\Gamma(2\rho+1)} \qquad C(51)$$

$$N_x^2 \int_0^\infty [\chi_x^* \varphi_x + \varphi_x^* \chi_x] \, r^p \, dr = 0 \qquad C(52)$$

De la C(49) extraemos los valores medios de **r** y de $\mathbf{r}^{-1}$:

$$\left.\begin{aligned} \overline{\left(\frac{1}{r}\right)} &= \frac{1}{\varkappa^2 \rho} \quad \frac{1}{a_0/Z} \\ \overline{r} &= \varkappa^2 (\rho + 1/2) \cdot \frac{a_0}{Z} \end{aligned}\right\} \quad n_r = 0$$

C(53)

C(54)

4.- Transiciones discreto-continuo

Las integrales son

$$N_{\varkappa}(n_r)\, N_{\varkappa'}(k) \int_0^{\infty} \left[\chi_{\varkappa}^{*}(n_r)\, \chi_{\varkappa'}(k) \pm \psi_{\varkappa}^{*}(n_r)\, \psi_{\varkappa'}(k) \right] r^{P}\, dr \qquad C(55,a)$$

$$N_{\varkappa}(n_r)\, N_{\varkappa'}(k) \int_0^{\infty} \left[\chi_{\varkappa}^{*}(n_r)\, \psi_{\varkappa'}(k) \pm \psi_{\varkappa}^{*}(n_r)\, \chi_{\varkappa'}(k) \right] r^{P}\, dr \qquad C(56,a)$$

~~C(57,a)~~

que corresponden a las transiciones discreto-continuo, y

$$N_{\varkappa}(k)\, N_{\varkappa'}(n_r) \int_0^{\infty} \left[\chi_{\varkappa}^{*}(k)\, \chi_{\varkappa'}(n_r) \pm \psi_{\varkappa}^{*}(k)\, \psi_{\varkappa'}(n_r) \right] r^{P}\, dr \qquad C(55,b)$$

$$N_{\varkappa}(k)\, N_{\varkappa'}(n_r) \int_0^{\infty} \left[\chi_{\varkappa}^{*}(k)\, \psi_{\varkappa'}(n_r) \pm \psi_{\varkappa}^{*}(k)\, \chi_{\varkappa'}(n_r) \right] r^{P}\, dr \qquad C(56,b)$$

$$N_{\varkappa}(k)\, N_{\varkappa'}(n_r) \int_0^{\infty} \left[\bar{\chi}_{\varkappa}^{*}(k)\, \chi_{\varkappa'}(n_r) \pm \bar{\psi}_{\varkappa}^{*}(k)\, \psi_{\varkappa'}(n_r) \right] r^{P}\, dr \qquad C(57,b)$$

(transiciones continuo- discreto). Basta considerar solamente el grupo (a) o el (b), ya que, si llamamos $R_{\varkappa\varkappa'}(n,k)$ a una integral del primer tipo, la correspondiente a la transición inversa es simmplemente

$$R_{\varkappa\varkappa'}(k,n) = R^{*}_{\varkappa'\varkappa}(n,k) \qquad C(58)$$

4.1.- Las integrales para $n_r \neq 0$

Lo primero que hay que calcular son las integrales

$$R^p_{ij} = \int_0^{\infty} e^{-\left(\frac{Z}{na_o}+ik\right)r} \left(\frac{2}{na_o/Z}\right)^{\rho-1} (kr)^{\rho'-1}\, F_i(\text{disc.})\, F_j(\text{cont.})\, r^p dr \quad C(59)$$

donde

$$F_i(\text{discr.}) = (1,105), \qquad F_i(\text{cont.}) = (1,82)$$

Esas integrales son análogas a las correspondientes integrales de la teoría no relativista. Las calculamos del mismo modo, es decir, utilizando la representación de F_1(cont) en serie. Los resultados completos son

$$N_\chi(n_r)\, N_{\chi'}(k) \int_0^{\infty} \left[\chi_\chi^*(n_r)\chi_{\chi'}(k) \pm \varphi_\chi^*(n_r)\varphi_{\chi'}(k) \right] r^p\, dr$$

$$= N_\chi(n_r)\, N_{\chi'}(k) \Big\{ \left[A^*(n_r)A(k) \pm B^*(n_r)B(k)\right]\left[R^p_{11} + \mathcal{E}_\chi(n_r)\,\mathcal{E}_{\chi'}(k)\, R^p_{22}\right]$$

$$+ \left[A^*(n_r)A(k) \mp B^*(n_r)B(k)\right]\left[\mathcal{E}_{\chi'} R^p_{12} + \mathcal{E}_\chi(n_r).\, R^p_{21}\right] \Big\}$$

$$= \frac{N_\chi(n_r)\, N_{\chi'}(k)}{\left(\frac{Z}{na_o} + ik\right)^{p+1}} \left(\frac{2}{1 + ikna_o/Z}\right)^{\rho-1} \left(\frac{1}{i + \frac{Z}{na_o k}}\right)^{\rho'-1}$$

$$\cdot \Big\{ \left[A^*(n_r)A(k) \pm B^*(n_r)B(k)\right] \Bigg[\sum_{s=0}^{n_r} \frac{(-n_r)_s}{(2\rho+1)_s} \frac{\Gamma(\rho+\rho'+p-1+s)}{s!} \left(\frac{2}{1+ikna_o/Z}\right)^s \cdot$$

$$\cdot\, F\left(\rho' + \tfrac{1}{2}(1+\beta) - \beta \cdot \frac{iZ}{ka_o} \cdot \frac{\rho_o}{mc},\ \rho+\rho'+p-1;\ 2\rho'+1;\ \frac{2ik}{\frac{Z}{na_o}+ik}\right) +$$

$$+ \mathcal{E}_x(n_r)\,\mathcal{E}_{x'}(k) \sum_{s=0}^{n_r-1} \frac{(-n_r+1)_s\,\Gamma(\rho+\rho'+p-1+s)}{(2\rho+1)_s \cdot s!} \left(\frac{2}{1+ikna_0/Z}\right)^s \cdot$$

$$\cdot\, F\left(\rho+\tfrac{1}{2}(1-\beta)-\beta\,\frac{iZ}{ka_0}\cdot\frac{p_0}{m_0c},\ \rho+\rho'+p-1;\ 2\rho'+1;\ \frac{2ik}{\frac{Z}{na_0}+ik}\right)\Bigg]$$

$$+\left[A^*(n_r)\,A(k) \mp B^*(n_r)\,B(k)\right] \Bigg[\mathcal{E}_{x'}(k) \sum_{s=0}^{n_r} \frac{(-n_r)_s\,\Gamma(\rho+\rho'+p-1+s)}{(2\rho+1)_s \cdot s!} \left(\frac{2}{1+ikna_0/Z}\right)$$

$$F\left(\rho'+\tfrac{1}{2}(1-\beta)-\beta\,\frac{iZ}{ka_0}\cdot\frac{p_0}{m_0c},\ \rho+\rho'+p-1;\ 2\rho'+1;\ \frac{2ik}{\frac{Z}{na_0}+ik}\right)$$

$$+ \mathcal{E}_x(k) \sum_{s=0}^{n_r-1} \frac{(-n_r+1)_s\,\Gamma(\rho+\rho'+p-1+s)}{(2\rho+1)_s \cdot s!} \left(\frac{2}{1+ikna_0/Z}\right)^s \cdot$$

$$\cdot\, F\left(\rho'+\tfrac{1}{2}(1+\beta)-\beta\,\frac{iZ}{ka_0}\,\frac{p_0}{m_0c},\ \rho+\rho'+p-1;\ 2\rho'+1;\ \frac{2ik}{\frac{Z}{na_0}+ik}\right)\Bigg]\Bigg\} \qquad C(59)$$

La C(57) se obtiene a partir de ésta tomando la compleja conjugada, permutando k por n_r y x por x', y cambiando el signo de β.

En cuanto a las restantes, son

$$N_\varkappa(n_r)\, N_{\varkappa'}(k) \int_0^{\infty} \left[\chi_\varkappa^*(n_r)\, \varphi_{\varkappa'}(k) \pm \varphi_\varkappa^*(n_r)\, \chi_{\varkappa'}(k) \right] r^p\, dr$$

$$= N_\varkappa(n_r)\, N_{\varkappa'}(k) \Big\{ \left[A^*(n_r)\, B(k) \pm A(k)\, B^*(n_r) \right] \left(R_{11}^p - \varepsilon_\varkappa(n_r)\, \varepsilon_{\varkappa'}(k)\, R_{22}^p \right)$$

$$+ \left[A^*(n_r)\, B(k) \mp A(k)\, B^*(n_r) \right] \left(\varepsilon_{\varkappa'}(k)\, R_{12}^p - \varepsilon_\varkappa(n_r)\, R_{21}^p \right) \Big\}$$

$$= \frac{N_\varkappa(n_r)\, N_{\varkappa'}(k)}{\left(\frac{Z}{n a_0} + ik \right)^{p+1}} \left(\frac{2}{1 + ikn a_0/Z} \right)^{\rho - 1} \left(\frac{1}{\frac{Z}{n a_0 k} + i} \right)^{\rho' - 1}$$

$$\cdot \Big\{ \left[A^*(n_r)\, B(k) \pm A(k)\, B^*(n_r) \right] \Big[\sum_{s=0}^{n_r} \frac{(-n_r)_s\, \Gamma(\rho + \rho' + p - 1 + s)}{(2\rho + 1)_s \cdot s!} \left(\frac{2}{1 + ikn a_0/Z} \right)^s \cdot$$

$$\cdot F\left(\rho' + \tfrac{1}{2}(1+\beta) - \beta \cdot \frac{iZ}{k a_0} \cdot \frac{\rho_0}{m_0 c},\ \rho + \rho' + p - 1;\ 2\rho' + 1;\ \frac{2ik}{\frac{Z}{n a_0} + ik} \right)$$

$$- \varepsilon_\varkappa(n_r)\, \varepsilon_{\varkappa'}(k) \sum_{s=0}^{n_r - 1} \frac{(-n_r + 1)_s\, \Gamma(\rho + \rho' + p - 1 + s)}{(2\rho + 1)_s \cdot s!} \left(\frac{2}{1 + ikn a_0/Z} \right)^s \cdot$$

$$\cdot F\left(\rho + \tfrac{1}{2}(1 - \beta) - \beta\, \frac{iZ}{k a_0} \cdot \frac{\rho_0}{m_0 c},\ \rho + \rho' + p - 1;\ 2\rho' + 1;\ \frac{2ik}{\frac{Z}{n a_0} + ik} \right)$$

$$+ \left[A^*(n_r)\, B(k) \mp A(k)\, B^*(n_r) \right] \Big[\varepsilon_{\varkappa'}(k) \sum_{s=0}^{n_r} \frac{(-n_r)_s\, \Gamma(\rho + \rho' + p - 1 + s)}{(2\rho + 1)_s \cdot s!} \left(\frac{2}{1 + ikn a_0/Z} \right)^s \cdot$$

$$\cdot F\left(\rho' + \tfrac{1}{2}(1 - \beta) - \beta\, \frac{iZ}{k a_0}\, \frac{\rho_0}{m_0 c},\ \rho + \rho' + p - 1;\ 2\rho' + 1;\ \frac{2ik}{\frac{Z}{n a_0} + ik} \right)$$

$$- \varepsilon_\varkappa(n_r) \sum_{s=0}^{n_r - 1} \frac{(-n_r + 1)_s\, \Gamma(\rho + \rho' + p - 1 + s)}{(2\rho + 1)_s \cdot s!} \left(\frac{2}{1 + ikn a_0/Z} \right)^s \cdot$$

$$F\left(\rho' + \tfrac{1}{2}(1+\beta) - \beta \cdot \frac{iZ}{k a_0}\, \frac{\rho_0}{m_0 c},\ \rho + \rho' + p - 1;\ 2\rho' + 1,\ \frac{2ik}{\frac{Z}{n a_0} + ik} \right) \Big] \Big\}$$

C (60)

FCEFN-BA

4.2.- Las integrales para $n_r=0$.

$$N_\chi N_{\chi'}(k)\int_0^\infty \left[\chi_\chi^* \chi_{\chi'}(k) \pm \varphi_\chi^* \varphi_{\chi'}(k)\right] r^p\, dr$$

$$= N_\chi N_{\chi'}(k) \frac{\Gamma(\rho+\rho'+p-1)}{\left(\frac{Z}{na_0}+ik\right)^{p+1}} \left(\frac{2}{1+ikna_0/Z}\right)^{\rho-1} \left(\frac{1}{Z/na_0k+i}\right)^{\rho'-1} \cdot$$

$$\left\{ \left[A^* A(k) \pm B^* B(k)\right] F\left(\rho'+\tfrac{1}{2}(1+\beta)-\beta\frac{iZ}{ka_0}\cdot\frac{P_0}{m_0c}, \rho+\rho'+p-1; 2\rho'+1; \frac{2ik}{\frac{Z}{na_0}+ik}\right)\right.$$

$$\left. + \,\varepsilon_{\chi'}(k)\left[A^* A(k) \mp B^* B(k)\right] F\left(\rho'+\tfrac{1}{2}(1-\beta)-\beta\frac{iZ}{ka_0}\frac{P_0}{m_0c}, \rho+\rho'+p-1; 2\rho'+1; \frac{2ik}{\frac{Z}{na_0}+ik}\right)\right\}$$

C (61)

$$N_\chi N_{\chi'}(k)\int_0^\infty \left[\chi_\chi^* \varphi_\chi(k) \pm \varphi_\chi^* \chi_\chi(k)\right] r^p\, dr$$

$$= N_\chi N_{\chi'}(k) \frac{\Gamma(\rho+\rho'+p-1)}{\left(\frac{Z}{na_0}+ik\right)^{p+1}} \left(\frac{2}{1+ikn\frac{a_0}{Z}}\right)^{\rho-1} \left(\frac{1}{i+\frac{Z}{na_0k}}\right)^{\rho'-1}$$

$$\left\{ \left[A^* B(k) \pm B^* A(k)\right] F\left(\rho'+\tfrac{1}{2}(1+\beta)-\beta\cdot\frac{iZ}{ka_0}\cdot\frac{P_0}{m_0c}, \rho+\rho'+p-1; 2\rho'+1; \frac{2ik}{\frac{Z}{na_0}+ik}\right)\right.$$

$$\left. - \,\varepsilon_{\chi'}(k)\left[A^* B(k) \mp B^* A(k)\right] F\left(\rho+\tfrac{1}{2}(1-\beta)-\beta\cdot\frac{iZ}{ka_0}\cdot\frac{P_0}{m_0c}, \rho+\rho'+p-1; 2\rho'+1; \frac{2ik}{\frac{Z}{na_0}+ik}\right)\right\}$$

C (62)