La ecuación de Dirac es algo así como la ecuación de Schrödinger relativista para partículas libres. En esta hoja, que es una de las más importantes de tu trabajo, por fin llegaremos a su enunciado. Mi primera intención era que estudiáramos también aquí las soluciones básicas de la ecuación, pero creo que la hoja es ya suficientemente larga. No te preocupes porque esto añada un nuevo punto en el temario. No es necesario cubrirlo del todo y siempre lo podemos ajustar sobre la marcha. La recomendación es que el TFG debería contener unas 30 páginas de texto y hay que intentar no escribir mucho más material definitivo, aunque está permitido añadir apéndices.

Recuerda el problema que arrastrábamos de la hoja anterior. La *ecuación de Klein-Gordon*:

$$\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} - \hbar^2\Delta\Psi + m^2\Psi = 0 \tag{1}$$

es relativista, un análogo natural de la ecuación de Schrödinger para una partícula libre. Pero dado un estado inicial $\Psi(\vec{x}, t = 0)$ no es posible deducir sin más información el estado en los tiempos futuros, y esto además afecta a la interpretación probabilista de $\int |\Psi|^2$. Es similar a lo que ocurre en la ecuación de ondas: fijar $u(x, 0)$ da lugar a infinitas soluciones si no se fija también el valor de $u_t(x, 0)$.

Este último problema sugirió a Dirac que quizá hubiera una ecuación de primer orden que implicara (1). Por ejemplo, la ecuación de ondas se puede "factorizar" usando

$$0 = \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \Big(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}\Big)\Big(\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x}\Big).$$

De esta forma todas las soluciones de $u_t + u_x = 0$, las cuales son simplemente $u(x, t) = f(x-t)$, son también soluciones de la ecuación de ondas $u_{tt} - u_{xx} = 0$ pero no al revés. Es decir, $u_t + u_x = 0$ es una ecuación de primer orden que implica la de ondas.

1) Comprueba la factorización anterior de la ecuación de ondas y escribe un ejemplo de una solución suya acotada que no verifique $u_t + u_x = 0$.

Con esta idea en mente, buscó una "factorización" del primer miembro de (1) de la forma

$$\Big(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + i\hbar\big(\alpha_1\frac{\partial}{\partial x} + \alpha_2\frac{\partial}{\partial y} + \alpha_3\frac{\partial}{\partial z}\big) - \alpha_4 m\Big)\Big(i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} + i\hbar\big(\alpha_1\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \alpha_2\frac{\partial\Psi}{\partial y} + \alpha_3\frac{\partial\Psi}{\partial z}\big) - \alpha_4 m\Psi\Big)$$

suponiendo que la ecuación buena era

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} + i\hbar\big(\alpha_1\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \alpha_2\frac{\partial\Psi}{\partial y} + \alpha_3\frac{\partial\Psi}{\partial z}\big) - \alpha_4 m\Psi = 0 \tag{2}$$

con α_j constantes. La notación habitual, proveniente de [Dir28] (hay un enlace en [Wik17]), es llamar β a α_4 pero eso es irrelevante.

Resulta que al imponer que la factorización anterior diera realmente el primer miembro de (1), llegó a que las constantes de (2) satisfacen las siguientes relaciones:

$$\alpha_\mu^2 = 1, \qquad \alpha_\mu\alpha_\nu + \alpha_\nu\alpha_\mu = 0 \quad \text{para } \mu \neq \nu, \quad 1 \le \mu, \nu \le 4. \tag{3}$$

Estas ecuaciones no tienen solución por la lapidaria razón de que los números reales cumplen la propiedad conmutativa, por tanto parece que no queda más que abandonar. Dirac tuvo en [Dir28] la imaginativa idea de buscar soluciones con matrices para impedir la conmutatividad. En el interesante libro [BM08] hay más acerca de esta idea y la biografía de Dirac.

2) Comprueba que realmente si tuviéramos (3) entonces habríamos factorizado (1) y, por tanto, (2) implicaría (1).

Desde el punto del vista del álgebra, las soluciones matriciales tienen alguna motivación. Igual que los complejos extienden a los reales y permiten resolver más ecuaciones, los complejos se extienden con matrices (los cuaterniones y los octoniones se pueden interpretar matricialmente). Lo que parece un cuento de hadas es que ese artificio matemático vaya a corresponder a algo físico porque para que (2) tenga sentido tendríamos que pensar que Ψ deja de ser una función escalar.

El paso de números a matrices tenía cierto precedente en física cuántica[1] pues un año antes de la publicación de [Dir28], W. Pauli en su estudio del momento magnético del electrón [PJ27] había necesitado tres "cantidades" σ_1, σ_2 y σ_3, que cumplieran

$$\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = 1, \quad \sigma_1\sigma_2 - \sigma_2\sigma_1 = 2i\sigma_3, \quad \sigma_2\sigma_3 - \sigma_3\sigma_2 = 2i\sigma_1, \quad \sigma_3\sigma_1 - \sigma_1\sigma_3 = 2i\sigma_2.$$

Con esta motivación definió lo que hoy en día se llaman las *matrices de Pauli*:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{y} \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Estas matrices casi resuelven (3), en el sentido de que

$$\sigma_j^2 = I \qquad \text{y} \qquad \sigma_j\sigma_k + \sigma_k\sigma_j = O \quad \text{para } j \neq k, \qquad 1 \le j, k \le 3,$$

entendiendo que I, la matriz identidad, es el análogo de 1 y O, la matriz nula, el de 0. Sin embargo no es posible completar este conjunto de matrices para que se cumpla del todo (3).

3) Comprueba tres de las relaciones anteriores, las que tú prefieras, por ejemplo $\sigma_1^2 = I$, $\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_1 = O$, $\sigma_2^2 = I$. Demuestra que no existe ninguna matriz $\alpha_4 \in \mathcal{M}_{2\times 2}(\mathbb{C})$ tal que (3) se verifique con $\alpha_j = \sigma_j$, $j = 1, 2, 3$.

[1] De hecho una de las primeras formulaciones, hoy obsoleta, de la mecánica cuántica consistió en cambiar cantidades escalares, como las coordenadas de la posición o el momento, por matrices [Wik20].

Antes de seguir, vamos con un comentario medianamente técnico. Si comparamos (2) con la ecuación de Schrödinger, es natural definir el operador Hamiltoniano asociado (la energía) como

$$H = -i\hbar\big(\alpha_1 \frac{\partial}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial z}\big) + \alpha_4 m.$$

Recuerda lo que hiciste del pozo de potencial. Allí se calculaban autofunciones del operador Hamiltoniano H y los autovalores daban la energía. Es natural (y está entre los postulados de la mecánica cuántica [GP90]) que el operador H sea autoadjunto, para asegurar que la energía solo tome valores reales. Recuerdes o no de algún curso de grado qué significa esto aquí, el caso es que requiere que las matrices α_μ sean *hermíticas*, es decir, que satisfagan $A^\dagger = A$ donde $\dagger$ en el exponente es la abreviatura que se usa en física para trasponer una matriz y conjugar sus elementos.

Se puede probar [Mes99, XX.7] que la dimensión más baja para la que (3) tiene solución con matrices hermíticas es 4. Desconozco si hay una prueba fácil de esto. Dirac posiblemente procedió por tanteos, jugando con las matrices de Pauli, encontrando la solución

$$\alpha_j = \begin{pmatrix} O & \sigma_j \\ \sigma_j & O \end{pmatrix} \quad \text{para } j = 1, 2, 3 \qquad \text{y} \qquad \alpha_4 = \begin{pmatrix} I & O \\ O & -I \end{pmatrix}. \tag{4}$$

Donde las matrices están definidas por bloques 2×2.

4) Usando las propiedades antes mencionadas de las matrices de Pauli, comprueba que estas α_μ son matrices hermíticas que verifican (3), siempre cambiando 0 y 1 por la matriz nula y la matriz identidad.

En realidad, la solución dada por Dirac permite generar una infinidad de ellas.

5) Sea $\{\alpha_\mu\}_{\mu=1}^4$ como en (4). Demuestra que para cualquier $U \in \mathcal{M}_{4\times 4}(\mathbb{C})$ unitaria[2] se cumple que $\{U^{-1}\alpha_\mu U\}_{\mu=1}^4$ también son matrices hermíticas que resuelven (3).

Hay un resultado que afirma que no hay más soluciones que las del ejercicio anterior (si tienes curiosidad por la prueba, que no es sencilla, está en [Mes99, XX.III.10]). Es decir, la solución dada por Dirac es única salvo cambios de base de las matrices a una base ortonormal.

Sustituyendo en (2) la solución de Dirac, o cualquier otra de la familia, tenemos por fin la *ecuación de Dirac* que también se puede escribir en perfecta analogía con la ecuación de Schrödinger como

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \qquad \text{con } H \text{ como antes.}$$

[2] Recuerda de álgebra lineal que una matriz cuadrada U se dice que es unitaria si $U^\dagger U = I$. Estas matrices son las que preservan el producto escalar en $\mathbb{C}^n$ o, equivalentemente, pasan bases ortonormales en bases ortonormales.

Una diferencia crucial es que, para que esto tenga sentido, Ψ no puede ser una función escalar, como era en la ecuación de Schrödinger, sino que debe tener cuatro coordenadas para que sea posible premultiplicar por las α_μ sus derivadas. Así pues, fijados tiempo y posición, $\Psi \in \mathbb{C}^4$. En principio esto nos aleja mucho de la interpretación probabilista, y de cualquier interpretación física. Ya veremos más adelante cómo se recupera.

Hay una formulación de la ecuación de Dirac mucho más sugestiva a la hora de estudiar su significado relativista y consiste en definir:

$$\gamma^0 = \alpha_4 \qquad \text{y} \qquad \gamma^j = \alpha_4\alpha_j \quad \text{para } j = 1, 2, 3.$$

Con la notación habitual en relatividad[3] $(t, x, y, z) = (x_0, x_1, x_2, x_3)$, que hace hincapié en que espacio y tiempo son de la misma naturaleza. Coherentemente, ∂_μ significa la derivada parcial con respecto a x_μ. Con esta notación, la ecuación de Dirac se escribe como

$$\Big(i\hbar\sum_{\mu=0}^{3}\gamma^\mu\partial_\mu - m\Big)\Psi = 0. \tag{5}$$

Donde el cero de la derecha es vectorial (de cuatro coordenadas, un matemático purista escribiría $\vec{0}$ y también $\vec{\Psi}$ pero nunca se hace). Si escogemos la solución de Dirac (4), se sigue

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} I & O \\ O & -I \end{pmatrix} \qquad \text{y} \qquad \gamma^j = \begin{pmatrix} O & \sigma_j \\ -\sigma_j & O \end{pmatrix}.$$

6) Comprueba que la ecuación de Dirac admite esta formulación con estas γ^μ.

Los γ^μ anteriores, que corresponden a (4) se dice que son la *representación de Dirac*. Para algunos temas es conveniente considerar una solución distinta que corresponde a tomar la matriz unitaria

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} I & I \\ -I & I \end{pmatrix}$$

en el ejercicio en el que se generaban todas las soluciones a partir de la de Dirac.

7) Comprueba que U es unitaria y que lo único que hace es cambiar γ^0. Concretamente, que para la solución $U^{-1}\alpha_\mu U$ se tiene:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} O & I \\ I & O \end{pmatrix} \qquad \text{y} \qquad \gamma^j = \begin{pmatrix} O & \sigma_j \\ -\sigma_j & O \end{pmatrix}.$$

Estos γ^μ se dice que son la *representación de Weyl*.

[3]Los físicos ponen superíndices, x^μ en vez de x_μ, como en las γ^μ, pero no te preocupes por ello.

En los libros de física la ecuación de Dirac (5) aparece a menudo en la forma compacta

$$(i\hbar\partial\!\!\!/ - m)\Psi = 0$$

porque, siguiendo una notación introducida por R. Feynman, $\partial\!\!\!/$ abrevia $\sum_{\mu=0}^{3}\gamma^\mu\partial_\mu$. Incluso también aparece simplemente como $(i\partial\!\!\!/ - m)\Psi = 0$. Esto ocurre cuando se utilizan las llamadas *unidades de Planck*, o *unidades naturales*, con las que no solo $c = 1$ sino que también $\hbar = 1$.

Implícitamente nosotros estamos todo el rato trabajando en unidades relativistas. Para referencia futura vamos a deshacerlas.

8) Escribe (5) en unidades no relativistas. Para ello ten en cuenta que las γ^μ son constantes adimensionales.

Ahora vamos a ver qué relación tiene esta función de ondas "vectorial" Ψ que aparece en la ecuación de Dirac con probabilidades. La fórmula es simple, resulta que $\|\Psi\|^2$, la norma de Ψ en $\mathbb{C}^4$, es la densidad de probabilidad. Para que esto tenga sentido tenemos que demostrar que la probabilidad total $\int_{\mathbb{R}^3}\|\Psi\|^2\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$ se conserva para las soluciones de la ecuación de Dirac (2). Con este fin, se necesitan las igualdades

$$\frac{\partial\|\Psi\|^2}{\partial t} = \Psi^\dagger\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial t}\Psi = -\frac{\partial(\Psi^\dagger\alpha_1\Psi)}{\partial x} - \frac{\partial(\Psi^\dagger\alpha_2\Psi)}{\partial y} - \frac{\partial(\Psi^\dagger\alpha_3\Psi)}{\partial z}.$$

9) Demuestra que estas igualdades son ciertas para cualquier solución de (2) y, suponiendo que Ψ y sus derivadas decaen suficientemente rápido en el infinito, aplica el teorema de la divergencia en una bola arbitrariamente grande para deducir que $\int_{\mathbb{R}^3}\|\Psi\|^2$ es constante en t.

Al igual que en el caso de la ecuación de Schrödinger, se normaliza Ψ multiplicándola por una constante de forma que $\int_{\mathbb{R}^3}\|\Psi\|^2 = 1$ y así la probabilidad total es 1.

Tarea a entregar. Debes elaborar un documento que contenga las soluciones de los ejercicios dentro de una explicación que motive la ecuación de Dirac en sus diversas formulaciones y muestre en qué sentido se conserva la probabilidad.

Tómate el tiempo que necesites. Esta es una parte central de tu TFG y debes poner cuidado en ella dando explicaciones que resulten atractivas para el tribunal, el cual es posible que conozca la forma final de la ecuación pero no lo que lleva a ella. La extensión también la deja a tu elección. Supongo que yo ocuparía más de cinco pero no lo tomes como obligación. Creo que el fichero fuente `.tex` de esta hoja te ahorrará mucho trabajo copiando algunas de las fórmulas que he tecleado. No es necesario que escribas todos los cálculos en lo que incluyas de las soluciones de los ejercicios pero tampoco estaría bien que dejases todo indicado.

Referencias

[BM08] S. Baselga Moreno. *Dirac. La belleza matematica.* Nivola libros y ediciones, 2008.

[Dir28] P. A. M. Dirac. The quantum theory of the electron. *Proc. Royal Soc. London A*, 117(778):610–624, 1928.

[GP90] A. Galindo and P. Pascual. *Quantum mechanics. I.* Texts and Monographs in Physics. Springer-Verlag, Berlin, 1990. Translated from the Spanish by J. D. García and L. Alvarez-Gaumé.

[Mes99] A. Messiah. *Quantum mechanics.* Dover books on physics. Dover Publications, 1999.

[PJ27] W. Pauli Jr. On the quantum mechanics of magnetic electrons. *Nature*, 119:282, 1927.

[Wik17] Wikipedia. Dirac equation — Wikipedia, the free encyclopedia, 2017. [Online; accessed 9-January-2017].

[Wik20] Wikipedia contributors. Matrix mechanics — Wikipedia, the free encyclopedia, 2020. [Online; accessed 22-December-2020].