



Departamento de Matemáticas, Facultad de Ciencias
Universidad Autónoma de Madrid

Matemáticas y física de la ecuación de Dirac

TRABAJO DE FIN DE GRADO

Grado en Matemáticas

Autora: Ana Montero Lázaro

Tutor: Fernando Chamizo Lorente

Curso 2020-2021

Resumen

Desde el momento en el que se enuncia la ecuación de Schrödinger surge la necesidad de encontrar una versión cuántica relativista de la misma, que hoy en día conocemos como ecuación de Dirac. Su impacto en la física cuántica fue mayúsculo, introduciendo funciones de onda de cuatro coordenadas (espinores) y dando una fundamentación teórica de la existencia del espín, algo todavía desconocido en aquella época. Aunque no se trate aquí, también sirvió para conjeturar la existencia de antipartículas y fue el punto de partida de la teoría cuántica de campos.

Este trabajo cumple tres objetivos. En primer lugar, se da una motivación para la ecuación de Dirac en la que se trata de solucionar los problemas que presenta la ecuación de Klein-Gordon, un primer intento de *relativizar* la ecuación de Schrödinger. Para ello se darán por supuestos conocimientos básicos de mecánica cuántica que aparecen en el apéndice. En segundo lugar, se enuncia razonadamente la ecuación de Dirac siguiendo el procedimiento teórico original de buscar una factorización de la ecuación de Klein-Gordon y se estudian sus soluciones. Por último, se obtiene un resultado relacionado con la existencia del espín. Concretamente se muestra que, en el límite no relativista bajo campos electromagnéticos, la ecuación de Dirac se convierte en la ecuación que introdujo Pauli para electrones magnéticos. En esencia, se deduce que un electrón debe comportarse como un pequeño imán. No es en absoluto evidente que este tipo de información esté incorporada en la ecuación y no participa en su motivación. El propio Dirac dijo que era un añadido inesperado.

Abstract

As early as the Schrödinger equation was introduced, the necessity of finding a relativistic quantum formulation –known today as the Dirac equation– arised. Its repercussion on quantum physics was formidable, introducing four-coordinate wave functions (spinors) and providing a theoretical foundation for the existence of the spin, yet unknown then. Although not discussed here, it also served to conjecture the existence of antiparticles and was the starting point for quantum field theory.

This thesis meets three goals. In the first place, a motivation for the Dirac equation is given, in which we try to solve the issues presented by the Klein-Gordon equation, a first attempt to *relativize* the Schrödinger equation. In order to accomplish this, basic knowledge of quantum mechanics that appears in the appendix will be taken for granted. Secondly, the Dirac equation is obtained following the original theoretical procedure of looking for a factorization of the Klein-Gordon equation and its solutions are studied. Finally, a result related to the existence of the spin is obtained. Specifically, it is shown that, in the non-relativistic limit under electromagnetic fields, the Dirac equation becomes the equation introduced by Pauli for magnetic electrons. In essence, it follows that an electron must behave like a small magnet. It is not at all obvious that this type of information is incorporated into the equation and does not participate in its motivation. Dirac himself said it was an unexpected bonus.

Índice general

1	Introducción a la relatividad especial	1
1.1	Unidades relativistas	1
1.2	Transformaciones de Lorentz	2
1.3	El grupo de Lorentz	4
2	La ecuación de Klein-Gordon	7
2.1	Motivación	7
2.2	Relaciones básicas	7
2.3	Cálculo de la energía	8
2.4	Ecuación de Klein-Gordon	9
2.5	Problemas de la ecuación	10
3	La ecuación de Dirac	13
3.1	Motivación	13
3.2	En busca de las constantes	14
3.3	Formulaciones de la ecuación de Dirac	15
3.4	Interpretación probabilista de la ecuación de Dirac	17
4	Soluciones de la ecuación de Dirac para una partícula libre	19
4.1	Preliminares	19
4.2	Resolución	20
4.3	Caso del sistema en reposo	21
4.4	Caso general	23
5	Límite no relativista de la ecuación de Dirac	25
5.1	Límite no relativista	25
5.2	Límite no relativista en presencia de un campo electromagnético	28
	Apéndices	33
A	Introducción a la mecánica cuántica	33
A.1	El efecto fotoeléctrico	33
A.2	La ecuación de Schrödinger	35
A.3	Pozo de potencial infinito	37

CAPÍTULO 1

Introducción a la relatividad especial

1.1. Unidades relativistas

Tanto en la vida cotidiana como en la física utilizamos unidades para medir el valor de una cierta velocidad, masa, energía, aceleración... Cada una de estas magnitudes posee unidades propias y la combinación de las unidades de la masa, el tiempo y el espacio proporcionan las del resto de magnitudes. El consenso para medir es seguir el Sistema Internacional de Unidades de Medida (S.I.), de forma que las unidades de cada magnitud sean las mismas en cualquier punto del planeta. La unidad correspondiente a la masa es el kilogramo (kg), la del espacio es el metro (m) y la del tiempo es el segundo (s). Los valores de cada una de estas unidades se adoptaron para que al medir sucesos en el día a día los valores fueran pequeños. Sin embargo, en el campo de la relatividad estas medidas se hacen demasiado grandes y son muy poco manejables. Por ejemplo: la velocidad de la luz tiene el valor $c = 299792458m/s$. Por esta razón se ha decidido adoptar en este campo un sistema de medidas basados en tomar $c = 1$ conocido como *unidades relativistas*. Nótese que ahora la velocidad de la luz es adimensional, mientras que en el caso previo sus dimensiones eran *espacio/tiempo*. Esta identificación entre el espacio y el tiempo se produce al definir un segundo como la distancia a la que se mueve la luz en un segundo. Es decir, $1s = 299792458m \approx 3 \cdot 10^8m$ [18]. Una de las ventajas de este convenio es la simplificación de múltiples fórmulas como las ecuaciones de Maxwell, que escritas de forma *normal* siendo \vec{E} y \vec{B} campos electromagnéticos son

$$\nabla \cdot \vec{E} = 0, \quad \nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad \nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad \nabla \times \vec{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t},$$

pero para $\vec{E} = (0, E(x, t), 0)$ y $\vec{B} = (0, 0, B(x, t))$ y unidades relativistas se reducen a

$$(1.1) \quad \frac{\partial E}{\partial x} = -\frac{\partial B}{\partial t} \quad \text{y} \quad \frac{\partial B}{\partial x} = -\frac{\partial E}{\partial t}$$

puesto que, llamando $\vec{E} = (E_1, E_2, E_3)$ y $\vec{B} = (B_1, B_2, B_3)$:

$$\begin{aligned}
\blacksquare \nabla \cdot \vec{E} = 0 &\Rightarrow \frac{\partial E_1}{\partial x} + \frac{\partial E_2}{\partial y} + \frac{\partial E_3}{\partial z} = \frac{\partial E(x,t)}{\partial y} = 0. \\
\blacksquare \nabla \cdot \vec{B} = 0 &\Rightarrow \frac{\partial B_1}{\partial x} + \frac{\partial B_2}{\partial y} + \frac{\partial B_3}{\partial z} = \frac{\partial B(x,t)}{\partial z} = 0. \\
\blacksquare \nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} &\Rightarrow \left(\frac{\partial E_3}{\partial y} - \frac{\partial E_2}{\partial z}, \frac{\partial E_1}{\partial z} - \frac{\partial E_3}{\partial x}, \frac{\partial E_2}{\partial x} - \frac{\partial E_1}{\partial y} \right) = \\
&= -\frac{1}{c} \left(\frac{\partial B_1}{\partial t}, \frac{\partial B_2}{\partial t}, \frac{\partial B_3}{\partial t} \right) \Rightarrow \left(-\frac{\partial E(x,t)}{\partial z}, 0, \frac{\partial E(x,t)}{\partial x} \right) = \\
&= -\frac{1}{c} \left(0, 0, \frac{\partial B(x,t)}{\partial t} \right) \Rightarrow \left(0, 0, \frac{\partial E(x,t)}{\partial x} \right) = -\frac{1}{c} \left(0, 0, \frac{\partial B(x,t)}{\partial t} \right) \Leftrightarrow \\
&\Leftrightarrow \frac{\partial E(x,t)}{\partial x} = -\frac{1}{c} \frac{\partial B(x,t)}{\partial t}.
\end{aligned}$$

Usando las unidades relativistas $c = 1$ y simplificando $E(x,t) = E$ y $B(x,t) = B$, esta igualdad es

$$\frac{\partial E}{\partial x} = -\frac{\partial B}{\partial t}.$$

$$\begin{aligned}
\blacksquare \nabla \times \vec{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} &\Rightarrow \left(\frac{\partial B_3}{\partial y} - \frac{\partial B_2}{\partial z}, \frac{\partial B_1}{\partial z} - \frac{\partial B_3}{\partial x}, \frac{\partial B_2}{\partial x} - \frac{\partial B_1}{\partial y} \right) = \\
&= \frac{1}{c} \left(\frac{\partial E_1}{\partial t}, \frac{\partial E_2}{\partial t}, \frac{\partial E_3}{\partial t} \right) \Rightarrow \left(\frac{\partial B(x,t)}{\partial y}, -\frac{\partial B(x,t)}{\partial x}, 0 \right) = \\
&= \frac{1}{c} \left(0, \frac{\partial E(x,t)}{\partial t}, 0 \right) \Rightarrow \left(0, -\frac{\partial B(x,t)}{\partial x}, 0 \right) = \frac{1}{c} \left(0, \frac{\partial E(x,t)}{\partial t}, 0 \right) \Leftrightarrow \\
&\Leftrightarrow -\frac{\partial B(x,t)}{\partial x} = \frac{1}{c} \frac{\partial E(x,t)}{\partial t}.
\end{aligned}$$

Usando otra vez la misma notación y las unidades relativistas, de esta igualdad se obtiene

$$\frac{\partial B}{\partial x} = -\frac{\partial E}{\partial t}.$$

1.2. Transformaciones de Lorentz

Utilizando las ecuaciones de Maxwell vamos a deducir las transformaciones de Lorentz, que relacionan la longitud y el tiempo (x, t) percibidas por un observador O inmóvil en el origen de la recta real, nosotros, con las percibidas (x', t') por un observador O' en movimiento con velocidad v respecto al mismo origen en tiempo y espacio [12].

En esta situación la ley de la inercia sugiere que las relaciones son lineales ya que, al no haber fuerzas, los movimientos son rectilíneos y uniformes:

$$(1.2) \quad x' = Ax + Bt, \quad t' = Cx + Dt.$$

La intuición nos dice que en la segunda ecuación los coeficientes de x y t deben ser, respectivamente, 0 y 1, pero más adelante vamos a comprobar que esto no es así. Cuando O' está en su origen, lógicamente está en la posición $x' = 0$, mientras que nosotros, O , veremos que O' está en $x = vt$. Sustituyendo estos valores en la primera ecuación de (1.2) obtenemos $B = -Av$. Análogamente, como a nosotros nos parece que O' se mueve a velocidad v , a O' le parecerá que somos nosotros los que nos movemos con velocidad $-v$, así que cuando estemos en la posición $x = 0$, nuestro origen, O' lo verá como $x' = -vt'$. Sustituyendo otra vez en la primera ecuación y posteriormente en la segunda de (1.2) obtenemos ahora $D = A$. Reescribimos por lo tanto (1.2) como

$$(1.3) \quad x' = Ax - Avt, \quad t' = Cx + At.$$

Supongamos ahora que, en su movimiento, O' marca dos puntos x'_1 y x'_2 . Nosotros mediríamos esa distancia como $x_2 - x_1$ pero para O' sería, en realidad, $x'_2 - x'_1 = (Ax_2 - Avt) - (Ax_1 - Avt) = A(x_2 - x_1)$, donde A es la relación entre las distancias percibidas por ambos observadores. Si se diera la situación inversa y fuera ahora O quien marcara los puntos, entonces, puesto que el caso es simétrico, la relación entre las nuevas distancias medidas por ambos debería ser la misma. Para analizar este caso debemos despejar primero x, t en función de x', t' en (1.3). Por puro consenso físico, vamos a denotar $\gamma = A$:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} x' \\ t' \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma v \\ C & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ t \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} x \\ t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma v \\ C & \gamma \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} x' \\ t' \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{\gamma(\gamma + Cv)} \begin{pmatrix} \gamma & \gamma v \\ -C & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ t' \end{pmatrix} = \frac{1}{\gamma + Cv} \begin{pmatrix} 1 & v \\ \frac{-C}{\gamma} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ t' \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Repitiendo el proceso, en esta ocasión la relación entre las distancias es $\frac{1}{\gamma + Cv}$. Igualando a la relación que habíamos obtenido antes despejamos el coeficiente C : $\gamma = \frac{1}{\gamma + Cv} \Rightarrow C = \frac{1 - \gamma^2}{\gamma v}$ y podemos reescribir (1.3) como

$$(1.4) \quad x' = \gamma x - \gamma vt, \quad t' = \frac{1 - \gamma^2}{\gamma v} x + \gamma t.$$

Finalmente, hallamos el valor de γ [14]. Usando la regla de la cadena y aplicando la transformación (1.4) calculamos las derivadas parciales de E y B , obteniendo

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial x} &= \gamma \frac{\partial E}{\partial x'} + \frac{1 - \gamma^2}{\gamma v} \frac{\partial E}{\partial t'}, & \frac{\partial B}{\partial x} &= \gamma \frac{\partial B}{\partial x'} + \frac{1 - \gamma^2}{\gamma v} \frac{\partial B}{\partial t'}, \\ \frac{\partial E}{\partial t} &= -\gamma v \frac{\partial E}{\partial x'} + \gamma \frac{\partial E}{\partial t'}, & \frac{\partial B}{\partial t} &= -\gamma v \frac{\partial B}{\partial x'} + \gamma \frac{\partial B}{\partial t'}. \end{aligned}$$

Aplicando ahora las ecuaciones de Maxwell (1.1) tenemos que

$$\gamma \frac{\partial E}{\partial x'} + \frac{1 - \gamma^2}{\gamma v} \frac{\partial E}{\partial t'} = \gamma v \frac{\partial B}{\partial x'} - \gamma \frac{\partial B}{\partial t'}, \quad \gamma \frac{\partial B}{\partial x'} + \frac{1 - \gamma^2}{\gamma v} \frac{\partial B}{\partial t'} = \gamma v \frac{\partial E}{\partial x'} - \gamma \frac{\partial E}{\partial t'}$$

y, reordenando términos,

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x'} (\gamma E - \gamma v B) &= -\frac{\partial}{\partial t'} \left(\frac{1 - \gamma^2}{\gamma v} E + \gamma B \right), \\ \frac{\partial}{\partial x'} (\gamma B - \gamma v E) &= -\frac{\partial}{\partial t'} \left(\frac{1 - \gamma^2}{\gamma v} B + \gamma E \right).\end{aligned}$$

Éstas serían las ecuaciones de Maxwell para el observador O' si se tuviera

$$(1.5) \quad E' = \gamma E - \gamma v B = \frac{1 - \gamma^2}{\gamma v} B + \gamma E, \quad B' = \frac{1 - \gamma^2}{\gamma v} E + \gamma B = \gamma B - \gamma v E$$

puesto que entonces se cumpliría que $\frac{\partial E'}{\partial x'} = -\frac{\partial B'}{\partial t'}$ y $\frac{\partial B'}{\partial x'} = -\frac{\partial E'}{\partial t'}$. De la segunda igualdad de cada ecuación de (1.5) podemos despejar el valor $\gamma = (1 - v^2)^{-1/2}$.

Hemos deducido que las transformaciones de Lorentz en unidades relativistas son de la forma

$$(1.6) \quad x' = \gamma(x - vt), \quad t' = \gamma(t - vx) \quad \text{con} \quad \gamma = (1 - v^2)^{-1/2}.$$

Para ver la forma que tienen sin estas unidades vamos a sustituir en (1.6) las unidades de la masa (M), la longitud (L) y el tiempo (T) para *cuadrar* la posición de c , que antes no aparecía al tomar el valor 1:

- $x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2}} \equiv L = \frac{L - \frac{L}{T}T}{\sqrt{1 - (\frac{L}{T})^2}} = \frac{L}{\sqrt{1 - (\frac{L}{T})^2}}$. Necesitamos que las unidades del denominador desaparezcan, así que bastará dividir en la raíz v^2 entre c^2 . Por lo tanto, $\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2}$. Aplicamos este cambio a la siguiente ecuación.
- $t' = \frac{t - vx}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \equiv T = \frac{T - \frac{L}{T}L}{\sqrt{1 - (\frac{L}{T})^2 / (\frac{L}{T})^2}} = T - \frac{L^2}{T}$. Necesitamos que $\frac{L^2}{T}$ se convierta en T , por lo que bastará dividir v entre c^2

y las transformaciones de Lorentz serán, por lo tanto,

$$(1.7) \quad x' = \gamma(x - vt), \quad t' = \gamma(t - vx/c^2) \quad \text{con} \quad \gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2}.$$

Las velocidades que aparecen en el día a día son mucho menores que la de la luz, por lo que $v/c^2 \approx 0$ y $v^2/c^2 \approx 0$. Aplicando estos resultados en (1.7), tenemos que $x' = x - vt$ y $t' = t$, que es lo que la intuición nos sugiere.

1.3. El grupo de Lorentz

Las transformaciones de Lorentz en unidades relativistas y en forma matricial son

$$\begin{pmatrix} t' \\ x' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma v \\ -\gamma v & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ x \end{pmatrix} = \Lambda \begin{pmatrix} t \\ x \end{pmatrix}.$$

Esta matriz Λ tiene la peculiaridad de dejar invariante la forma cuadrática $t^2 - x^2$. Es decir, que la matriz asociada a la forma cuadrática, que es $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, no se modifica al pasarla a la base formada por las columnas de Λ :

$$\Lambda^t \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \Lambda = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma v \\ -\gamma v & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma v \\ -\gamma v & \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Si extendemos ahora de una dimensión más el tiempo a las tres dimensiones más el tiempo podemos definir el grupo de Lorentz como aquellas transformaciones lineales que dejan invariante la forma $t^2 - x^2 - y^2 - z^2$, cuya matriz asociada es $\eta = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$. Es decir, las matrices Λ que cumplen $\Lambda^t \eta \Lambda = \eta$. Es fácil probar que $\mathcal{L} = \{\Lambda \in \mathcal{M}_{4 \times 4}(\mathbb{R}) : \Lambda^t \eta \Lambda = \eta\}$ es un grupo no abeliano con el producto puesto que, siendo $\Lambda, \Pi, \Omega \in \mathcal{L}$:

- Es cerrado: $(\Lambda \Pi)^t \eta (\Lambda \Pi) = \Pi^t \Lambda^t \eta \Lambda \Pi = \Pi^t \eta \Pi = \eta$.
- Es asociativo: $(\Lambda \Pi) \Omega = \Lambda \Pi \Omega = \Lambda (\Pi \Omega)$.
- Hay elemento neutro: $e = I_{4 \times 4} \in \mathcal{L}$ porque $e^t \eta e = I_{4 \times 4}^t \eta I_{4 \times 4} = \eta$ y cumple que $e \Lambda = I_{4 \times 4} \Lambda = \Lambda = \Lambda I_{4 \times 4} = \Lambda e$.
- Existe un elemento inverso para cada elemento de \mathcal{L} : $\Lambda^{-1} \Lambda = I_{4 \times 4} = \Lambda \Lambda^{-1}$ y $\Lambda^{-1} \in \mathcal{L}$ porque $\Lambda \in \mathcal{L} \Rightarrow \Lambda^t \eta \Lambda = \eta \Rightarrow \eta \Lambda = (\Lambda^t)^{-1} \eta \Rightarrow \eta = (\Lambda^t)^{-1} \eta \Lambda^{-1} \Rightarrow \eta = (\Lambda^{-1})^t \eta \Lambda^{-1} \Rightarrow \Lambda^{-1} \in \mathcal{L}$.
- No es abeliano: $\Lambda \Pi \neq \Pi \Lambda$ porque incluye los giros en \mathbb{R}^3 , que no conmutan.

Cualquier teoría relativista ha de ser invariante por este grupo, que incluye los giros y simetrías de \mathbb{R}^3 en coordenadas espaciales, con matriz

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ 0 & c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ 0 & c_{31} & c_{32} & c_{33} \end{pmatrix},$$

y que sean ortogonales (es decir, $C^t C = I$) y la extensión de (1.6) en tres dimensiones, que es

$$(1.8) \quad t' = \gamma(t - vx), \quad x' = \gamma(x - vt), \quad y' = y, \quad z' = z, \quad \text{con} \quad \gamma = (1 - v^2)^{-1/2}$$

y tiene como matriz

$$\begin{pmatrix} \gamma & -\gamma v & 0 & 0 \\ -\gamma v & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

CAPÍTULO 2

La ecuación de Klein-Gordon

2.1. Motivación

La ecuación de Klein-Gordon recibe su nombre de los físicos Oskar Klein y Walter Gordon, que en 1926 propusieron que ésta describía los electrones relativistas. Previamente ya había sido introducida por Schrödinger, descartándola en favor de la ecuación que ya conocemos porque la primera resultaba problemática al dar probabilidades negativas. La versión conocida hoy en día de la ecuación de Schrödinger es una versión no relativista de la ecuación de Klein-Gordon. A continuación vamos a deducirla [15].

2.2. Relaciones básicas

En la mecánica relativista se conserva el 4-momento $\mathbf{p} = (E, \vec{p})^t$, donde E es la energía relativista y \vec{p} es el vector de momentos relativistas. Que el 4-momento se conserve significa que, siendo O y O' dos observadores relacionados por una transformación de Lorentz $\Lambda \in \mathcal{L}$, entonces los respectivos 4-momentos \mathbf{p} y \mathbf{p}' satisfacen

$$(2.1) \quad \mathbf{p}' = \Lambda \mathbf{p}.$$

Utilizando la fórmula de la función de onda (A.2) y sustituyendo $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ y $\omega = \frac{E}{\hbar}$ obtenemos $\Psi = e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x} - Et)/\hbar}$, que corresponde al momento \vec{p} y a la energía E . Usando (2.1) y que, como $\Lambda \in \mathcal{L}$, entonces $\eta = \Lambda^t \eta \Lambda$, podemos comprobar operando que $\Psi' = \Psi$. Es decir, Ψ es invariante para dos observadores O y O' .

Supongamos ahora que O y O' observan una partícula sostenida por O' . Para O la partícula se moverá con velocidad constante pero para O' la partícula estará en reposo, es decir, $\vec{p}' = \vec{0}$ y con energía E_0 *en reposo*. Los 4-momentos correspondientes serán $\mathbf{p} = \begin{pmatrix} E \\ \vec{p} \end{pmatrix}$ y $\mathbf{p}' = \begin{pmatrix} E_0 \\ \vec{0} \end{pmatrix}$. Vamos a calcular $(\mathbf{p}')^t \eta \mathbf{p}'$ primero usando (2.1) y luego mediante la definición del grupo de Lorentz para obtener un primer resultado importante:

- $(\mathbf{p}')^t \eta \mathbf{p}' = (\Lambda \mathbf{p})^t \eta (\Lambda \mathbf{p}) = \mathbf{p}^t \Lambda^t \eta \Lambda \mathbf{p} = \mathbf{p}^t \eta \mathbf{p} = E^2 - p_x^2 - p_y^2 - p_z^2$
- $(\mathbf{p}')^t \eta \mathbf{p}' = E_0^2$

Igualando ambas expresiones: $E^2 - p_x^2 - p_y^2 - p_z^2 = E_0^2 \Rightarrow E^2 = E_0^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 = E_0^2 + \|\vec{p}\|^2$. Es decir

$$(2.2) \quad E^2 = E_0^2 + \|\vec{p}\|^2.$$

2.3. Cálculo de la energía

A partir de (2.2) vamos a obtener una fórmula ciertamente similar pero que sirve de base para la ecuación de Dirac. Para ello hemos de conseguir primero la relación $E_0 = m$, que es la versión en unidades relativistas de la conocida $E = mc^2$, siguiendo el razonamiento de Einstein [9]. Esto se logra analizando desde el punto de vista de O' primero y de O después el siguiente suceso: una masa m en reposo para O' se desintegra en dos rayos de luz que viajan en sentidos opuestos por el eje X cada uno con la mitad de energía inicial *en reposo* E_0 y velocidades 1 y -1 . Como el movimiento se produce únicamente en el eje X , los momentos de los otros dos ejes serán 0 y $p'_x = \pm \frac{E_0}{2}$ dependiendo de si el rayo de luz avanza en un sentido o en el otro. Utilizando la función de onda previamente vista $\Psi = e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x} - Et)/\hbar}$ calculamos la correspondiente a cada rayo de luz:

- $\Psi_+ = e^{i(p_x^+ \cdot x' - E_0^+ t')/\hbar} = e^{i(\frac{E_0}{2} x' - \frac{E_0}{2} t')/\hbar} = e^{\frac{iE_0}{2\hbar}(x' - t')}$
- $\Psi_- = e^{i(p_x^- \cdot x' - E_0^- t')/\hbar} = e^{i(\frac{-E_0}{2} x' - \frac{E_0}{2} t')/\hbar} = e^{\frac{-iE_0}{2\hbar}(x' + t')}$

Por otro lado O observará que m ya se mueve por el eje X antes de desintegrarse, así que la energía que medirá será $E = E_0 + K$, donde K es una energía cinética que O' no percibía puesto que desde su sistema de referencia se encontraba en reposo y, por lo tanto, $K' = 0$. Como hemos visto anteriormente, Ψ es invariante para los observadores, así que las ecuaciones de onda para O serán las mismas que las que acabamos de hallar para O' . La única diferencia es que las pondremos en función de (t, x) en lugar de (t', x') utilizando la transformación de Lorentz (1.8):

- $\Psi_+ = e^{\frac{iE_0}{2\hbar}(x' - t')} = e^{\frac{iE_0}{2\hbar}(-\gamma vt + \gamma x - \gamma t + \gamma vx)} = e^{\frac{iE_0(\gamma + \gamma v)}{2\hbar}(x - t)} = e^{\frac{iE_0(1+v)\gamma}{2\hbar}(x - t)}$
- $\Psi_- = e^{\frac{-iE_0}{2\hbar}(x' + t')} = e^{\frac{-iE_0}{2\hbar}(-\gamma vt + \gamma x + \gamma t - \gamma vx)} = e^{\frac{-iE_0(\gamma - \gamma v)}{2\hbar}(x + t)} = e^{\frac{-iE_0(1-v)\gamma}{2\hbar}(x + t)}$

Por un lado, para O' tenemos dos ondas con energía $E_0/2$ cada una. Haciendo el balance de energías comprobamos que la energía inicial es igual a la final: $E_0 = E_0/2 + E_0/2$. Por otro lado, para O la energía inicial era $E_0 + K$. La energía final será la suma de la de cada onda, que viene determinada en cada caso por el coeficiente de $-it/\hbar$ de la Ψ correspondiente: $E_{\pm} = \frac{E_0(1 \pm v)\gamma}{2}$. La suma de energías de los rayos es

$$E_+ + E_- = \frac{E_0(1+v)\gamma}{2} + \frac{E_0(1-v)\gamma}{2} = \gamma E_0 = \frac{E_0}{\sqrt{1-v^2}}$$

y el balance de energías para O será, por tanto,

$$(2.3) \quad E_0 + K = \frac{E_0}{\sqrt{1-v^2}}.$$

Haciendo el desarrollo de Taylor de segundo orden para el lado derecho de la igualdad obtenemos la expresión

$$E_0 \left(1 + \frac{1}{2}v^2 \right).$$

Como para velocidades mucho menores que la de la luz ($c = 1$) la energía cinética tiene que ser como la de Newton, se tendrá que $K = \frac{1}{2}mv^2$. Operando en el lado izquierdo de (2.3) calculamos el polinomio de Taylor de orden 2:

$$E_0 + \frac{1}{2}mv^2.$$

Igualando ambos polinomios conseguimos finalmente la expresión $E_0 = m$:

$$E_0 + \frac{1}{2}mv^2 = E_0 \left(1 + \frac{1}{2}v^2 \right) \Rightarrow E_0 = m.$$

Por último, sustituyendo en (2.2) obtenemos la fórmula que relaciona momento y energía relativistas y en la que se basa la ecuación de Dirac:

$$(2.4) \quad E^2 = m^2 + \|\vec{p}\|^2.$$

No es descabellado preguntarse cómo es posible que tanto la masa como el momento tengan las mismas unidades que la energía, pero es fácil comprobar que ocurre porque estamos trabajando en unidades relativistas. Usando la misma notación que en el capítulo anterior y que la velocidad es 1:

- $E = h\nu \equiv J \cdot s \cdot \frac{1}{s} = J \equiv M \left(\frac{L}{T} \right)^2 = M \cdot 1^2 = M$
- $p = mv \equiv M \cdot \frac{L}{T} = M \cdot 1 = M$
- $m \equiv M$

2.4. Ecuación de Klein-Gordon

Usando las correspondencias $E \rightarrow i\hbar\partial_t$ y $\vec{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$ y sustituyendo en (2.4) obtenemos la deseada ecuación de Klein-Gordon:

$$\begin{aligned} E^2 = m^2 + \|\vec{p}\|^2 &\Rightarrow (i\hbar\partial_t)^2 = m^2 + (-i\hbar\nabla)^2 \Rightarrow -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} = m^2 - \hbar^2 \nabla^2 \Rightarrow \\ &\Rightarrow \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \hbar^2 \Delta + m^2 = 0. \end{aligned}$$

Aplicádoselo ahora a la función de ondas $\Psi = e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x}-Et)/\hbar}$, que sabemos que es solución de la ecuación de Schrödinger:

$$(2.5) \quad \hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - \hbar^2 \Delta \Psi + m^2 \Psi = 0.$$

Para obtener la expresión de la ecuación en unidades no relativistas primero tendremos que *transformar* (2.4) en una ecuación también en unidades no relativistas. Procedemos como de costumbre:

$$E^2 = m^2 + \|\vec{p}\|^2 \Rightarrow \left(M \left(\frac{L}{T} \right)^2 \right)^2 = M^2 + \left(M \frac{L}{T} \right)^2 \Rightarrow M^2 \frac{L^4}{T^4} = M^2 + M^2 \frac{L^2}{T^2}.$$

Para que el primer término del lado derecho de la igualdad tenga las mismas unidades que el término del lado izquierdo habrá que multiplicarlo por $\left(\frac{L}{T}\right)^4$. Es decir, por c^4 . En el caso del segundo término bastará multiplicarlo por $\left(\frac{L}{T}\right)^2$, que corresponde a c^2 , para obtener las unidades deseadas. Aplicando estos cambios la ecuación obtenida es

$$(2.6) \quad E^2 = m^2 c^4 + \|\vec{p}\|^2 c^2.$$

Utilizando otra vez las correspondencias $E \rightarrow i\hbar\partial_t$ y $\vec{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$ pero sustituyéndolas esta vez en (2.6):

$$E^2 = m^2 c^4 + \|\vec{p}\|^2 c^2 \Rightarrow (i\hbar\partial_t)^2 = m^2 c^4 + (-i\hbar\nabla)^2 c^2 \Rightarrow -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} = m^2 c^4 - \hbar^2 \nabla^2 c^2.$$

Si volvemos a aplicar Ψ y reordenamos términos obtenemos

$$(2.7) \quad \hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - \hbar^2 c^2 \Delta \Psi + m^2 c^4 \Psi = 0,$$

que es la ecuación de Klein-Gordon en unidades no relativistas.

2.5. Problemas de la ecuación

Como se ha mencionado al comienzo del capítulo, esta ecuación fue descartada en un principio por Schrödinger al no interpretar correctamente alguno de los resultados que arrojaba. Uno de los problemas era que, dado un estado inicial $\Psi(\vec{x}, t = 0)$, no era posible determinar el estado en tiempos futuros puesto que la ecuación no es de primer orden en t sino de segundo. Otro problema relevante es el hecho de que no se conserve la probabilidad total $\int |\Psi|^2$. Vamos a comprobar que esta situación no se da para la ecuación que hoy conocemos bajo el nombre de ecuación de Schrödinger. Sea $\Psi = \Psi(t, x) \in \mathbb{C}$ una función de onda que cumpla que $\Psi, \Psi_x \rightarrow 0$ suficientemente rápido cuando $x \rightarrow \infty$ y que satisface la ecuación de Schrödinger para partículas libres (A.5), entonces

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx = \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi \bar{\Psi} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} \Psi \bar{\Psi} dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\Psi_t \bar{\Psi} + \bar{\Psi}_t \Psi) dx =$$

$$\begin{aligned}
&= {}^1 \int_{-\infty}^{\infty} \left(\left(\frac{i\hbar}{2m} \Psi_{xx} - \frac{iV}{\hbar} \Psi \right) \bar{\Psi} + \left(\frac{-i\hbar}{2m} \bar{\Psi}_{xx} + \frac{iV}{\hbar} \bar{\Psi} \right) \Psi \right) dx = \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{i\hbar}{2m} \Psi_{xx} \bar{\Psi} - \frac{iV}{\hbar} \Psi \bar{\Psi} - \frac{i\hbar}{2m} \bar{\Psi}_{xx} \Psi + \frac{iV}{\hbar} \bar{\Psi} \Psi \right) dx = \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{i\hbar}{2m} \Psi_{xx} \bar{\Psi} - \frac{i\hbar}{2m} \bar{\Psi}_{xx} \Psi \right) dx = \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} (\Psi_{xx} \bar{\Psi} - \bar{\Psi}_{xx} \Psi) dx = \\
&= \frac{i\hbar}{2m} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{xx} \bar{\Psi} dx - \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\Psi}_{xx} \Psi dx \right) = \frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} (-\Psi_x \bar{\Psi}_x + \bar{\Psi}_x \Psi_x) dx = 0
\end{aligned}$$

al integrar por partes. Es decir, la probabilidad $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx$ no varía con el tiempo.

La razón por la que una ecuación sí conserva la probabilidad pero la otra no es que en el cálculo de $\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx$ hemos usado derivadas de primer orden respecto a t , que son las que aparecen en la ecuación de Schrödinger; mientras que la ecuación de Klein-Gordon sólo proporciona información sobre la derivada de segundo orden.

¹Se ha usado la ecuación de Schrödinger para una partícula $i\hbar\Psi_t = -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_{xx} + V\Psi$ para despejar Ψ_t y $\bar{\Psi}_t$ en función de Ψ_{xx} , Ψ y $\bar{\Psi}_{xx}$, $\bar{\Psi}$ respectivamente.

CAPÍTULO 3

La ecuación de Dirac

3.1. Motivación

En este capítulo vamos a deducir la ecuación de Dirac siguiendo su propia argumentación a partir de la ecuación de Klein-Gordon. Como hemos visto en el capítulo previo, la ecuación de Klein-Gordon es la versión relativista de la ecuación de Schrödinger para una partícula libre, con el problema añadido de que, dado un estado inicial $\Psi(t = 0, \vec{x})$, no se puede obtener información del estado en el futuro. Esto se podría solucionar si trabajáramos con otra expresión que no fuera de segundo orden sino de primero y que, además, implicara la ecuación de Klein-Gordon (2.5).

Así, Dirac buscó una *factorización* de dicha ecuación que tuviera la forma

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

Si existieran las constantes α_j para $j = 1, 2, 3, 4$ con las relaciones

$$(3.1) \quad \alpha_\mu^2 = 1, \quad \alpha_\mu\alpha_\nu + \alpha_\nu\alpha_\mu = 0 \quad \text{para } \mu \neq \nu, \quad 1 \leq \mu, \nu \leq 4,$$

entonces

$$\begin{aligned} & \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + i\hbar\left(\alpha_1\frac{\partial}{\partial x} + \alpha_2\frac{\partial}{\partial y} + \alpha_3\frac{\partial}{\partial z}\right) - \alpha_4 m\right) \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + i\hbar\left(\alpha_1\frac{\partial}{\partial x} + \alpha_2\frac{\partial}{\partial y} + \alpha_3\frac{\partial}{\partial z}\right) - \alpha_4 m\right) \Psi = \\ & = \hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} + \hbar^2\alpha_1\frac{\partial^2\Psi}{\partial t\partial x} + \hbar^2\alpha_2\frac{\partial^2\Psi}{\partial t\partial y} + \hbar^2\alpha_3\frac{\partial^2\Psi}{\partial t\partial z} + i\hbar\alpha_4 m\frac{\partial\Psi}{\partial t} - \\ & - \hbar^2\alpha_1\frac{\partial^2\Psi}{\partial x\partial t} - \hbar^2\alpha_1^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \hbar^2\alpha_1\alpha_2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x\partial y} - \hbar^2\alpha_1\alpha_3\frac{\partial^2\Psi}{\partial x\partial z} - i\hbar\alpha_1\alpha_4 m\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \\ & - \hbar^2\alpha_2\frac{\partial^2\Psi}{\partial y\partial t} - \hbar^2\alpha_2\alpha_1\frac{\partial^2\Psi}{\partial y\partial x} - \hbar^2\alpha_2^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} - \hbar^2\alpha_2\alpha_3\frac{\partial^2\Psi}{\partial y\partial z} - i\hbar\alpha_2\alpha_4 m\frac{\partial\Psi}{\partial y} - \\ & - \hbar^2\alpha_3\frac{\partial^2\Psi}{\partial z\partial t} - \hbar^2\alpha_3\alpha_1\frac{\partial^2\Psi}{\partial z\partial x} - \hbar^2\alpha_3\alpha_2\frac{\partial^2\Psi}{\partial z\partial y} - \hbar^2\alpha_3^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} - i\hbar\alpha_3\alpha_4 m\frac{\partial\Psi}{\partial z} - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-i\hbar\alpha_4 m \frac{\partial \Psi}{\partial t} - i\hbar\alpha_4\alpha_1 m \frac{\partial \Psi}{\partial x} - i\hbar\alpha_4\alpha_2 m \frac{\partial \Psi}{\partial y} - i\hbar\alpha_4\alpha_3 m \frac{\partial \Psi}{\partial z} + \alpha_4^2 m^2 \Psi = \\
= \hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - \hbar^2 \Delta \Psi + m^2 \Psi.
\end{aligned}$$

Es decir, la expresión anterior sería una factorización válida y las soluciones de

$$(3.2) \quad i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} + i\hbar \left(\alpha_1 \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) - \alpha_4 m \Psi = 0$$

lo serían también de la ecuación de Klein-Gordon. Por lo tanto, habríamos encontrado una ecuación de primer orden que implicara la de Klein-Gordon y que no presentara los problemas de ésta.

3.2. En busca de las constantes

Lo más sencillo sería pensar que los α_j son valores reales. Sin embargo, la conmutatividad de estos números hace imposible que se satisfaga (3.1). La brillante idea de Dirac consistió en buscar entonces soluciones matriciales, que no cumplen la propiedad conmutativa.

Una primera aproximación a la solución correcta es considerar las matrices de Pauli, que tienen la forma

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

Estas tres matrices cumplen las condiciones

$$(3.3) \quad \alpha_j^2 = I \quad \text{y} \quad \alpha_j \alpha_k + \alpha_k \alpha_j = O \quad \text{para } j \neq k, \quad 1 \leq j, k \leq 3,$$

para $\alpha_j = \sigma_j$ con $j = 1, 2, 3$, que no son más que las relaciones (3.1) consideradas para matrices en lugar de para números reales. Sin embargo, no es posible encontrar una cuarta matriz $\alpha_4 \in \mathcal{M}_{2 \times 2}(\mathbb{C})$ con estas condiciones, así que tendremos que probar con matrices de dimensión mayor.

Por otro lado, definiendo el operador Hamiltoniano análogamente al de la ecuación de Schrödinger, tenemos que

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

Uno de los postulados de la mecánica cuántica dice que, para asegurar que la energía sólo tome valores reales, H es autoadjunto. Para que esto ocurra es necesario que las $\{\alpha_\mu\}_{\mu=1}^4$ sean hermíticas ya que una propiedad de este tipo de matrices es que sus autovalores (la energía) son reales. Es decir, cada una de ellas será igual a su traspuesta conjugada: $\alpha_\mu^\dagger = \alpha_\mu$.

Es posible demostrar que la menor dimensión para la que (3.3) tiene solución con matrices hermíticas es 4. Probablemente Dirac encontró la solución probando y combinando las matrices de Pauli hasta llegar a

$$(3.4) \quad \alpha_j = \begin{pmatrix} O & \sigma_j \\ \sigma_j & O \end{pmatrix} \quad \text{para } j = 1, 2, 3 \quad \text{y} \quad \alpha_4 = \begin{pmatrix} I & O \\ O & -I \end{pmatrix},$$

donde cada matriz está definida por bloques 2×2 .

Esta solución hallada por Dirac es única excepto cambios a una base ortogonal así que, siendo U una matriz unitaria $U \in \mathcal{M}_{4 \times 4}(\mathbb{C})$ (que pasa bases ortonormales a bases ortonormales) se cumplirá que $\{U^{-1}\alpha_\mu U\}_{\mu=1}^4$ también satisface (3.3). Vamos a comprobarlo usando que las $\{\alpha_\mu\}_{\mu=1}^4$ son hermíticas y la definición de matriz unitaria $U^\dagger U = I \Rightarrow U^\dagger U U^{-1} = U^{-1} \Rightarrow U^\dagger = U^{-1}$:

- Las matrices $\{U^{-1}\alpha_\mu U\}_{\mu=1}^4$ son hermíticas:

$$(U^{-1}\alpha_\mu U)^\dagger = U^\dagger \alpha_\mu^\dagger (U^{-1})^\dagger = U^{-1}\alpha_\mu (U^\dagger)^\dagger = U^{-1}\alpha_\mu U.$$

- Cumplen la primera condición:

$$(U^{-1}\alpha_\mu U)^2 = U^{-1}\alpha_\mu U U^{-1}\alpha_\mu U = U^{-1}\alpha_\mu^2 U = U^{-1}U = I.$$

- Cumplen la segunda condición:

$$U^{-1}\alpha_\mu U U^{-1}\alpha_\nu U + U^{-1}\alpha_\nu U U^{-1}\alpha_\mu U = U^{-1}\alpha_\mu \alpha_\nu U + U^{-1}\alpha_\nu \alpha_\mu U = -U^{-1}\alpha_\nu \alpha_\mu U + U^{-1}\alpha_\nu \alpha_\mu U = O.$$

3.3. Formulaciones de la ecuación de Dirac

Denominamos *ecuación de Dirac* a la solución (3.2), donde las matrices $\{\alpha_\mu\}_{\mu=1}^4$ son las propuestas por Dirac o sus respectivos cambios de base $\{U^{-1}\alpha_\mu U\}_{\mu=1}^4$. Ésta es una primera formulación pero no es la única. Tal y como hemos definido el Hamiltoniano anteriormente, podemos manipular la ecuación para obtener una forma análoga a la de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} + i\hbar \left(\alpha_1 \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) - \alpha_4 m \Psi = 0 \Rightarrow i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H \Psi.$$

Como estamos considerando $\{\alpha_\mu\}_{\mu=1}^4$ matrices de dimensión 4, Ψ ya no es una función escalar, como antes, sino que tendremos que considerar una función $\Psi \in \mathbb{C}^4$. Para dar una tercera formulación de la ecuación de Dirac vamos a definir previamente

$$(3.5) \quad \gamma^0 = U^{-1}\alpha_4 U \quad \text{y} \quad \gamma^j = U^{-1}\alpha_j U \quad \text{para } j = 1, 2, 3.$$

En temas de partículas elementales conviene tomar

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

de forma que

$$\gamma^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} I & -I \\ I & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & O \\ O & -I \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} I & I \\ -I & I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} O & I \\ I & O \end{pmatrix},$$

$$\gamma^j = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} I & -I \\ I & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & O \\ O & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} O & \sigma_j \\ \sigma_j & O \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} I & I \\ -I & I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} O & \sigma_j \\ -\sigma_j & O \end{pmatrix}.$$

Estas matrices $\{\gamma^\mu\}_{\mu=1}^4$ son conocidas como la *representación de Weyl* [6]. En nuestro caso vamos a elegir $U = I$, obteniendo así la *representación de Dirac*:

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

Siguiendo la notación usada en relatividad $(t, x, y, z) = (x^0, x^1, x^2, x^3)$ y definiendo $\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu}$:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} + i\hbar(\alpha_1 \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial \Psi}{\partial z}) - \alpha_4 m \Psi &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow (i\hbar \partial_0 + i\hbar(\alpha_1 \partial_1 + \alpha_2 \partial_2 + \alpha_3 \partial_3) - \alpha_4 m) \Psi &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow (i\hbar(\partial_0 + \alpha_1 \partial_1 + \alpha_2 \partial_2 + \alpha_3 \partial_3) - \alpha_4 m) \Psi &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow (i\hbar(\alpha_4 \partial_0 + \alpha_4 \alpha_1 \partial_1 + \alpha_4 \alpha_2 \partial_2 + \alpha_4 \alpha_3 \partial_3) - \alpha_4^2 m) \Psi &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow (i\hbar(\gamma^0 \partial_0 + \gamma^1 \partial_1 + \gamma^2 \partial_2 + \gamma^3 \partial_3) - m) \Psi &= 0 \Rightarrow \\ & (i\hbar \sum_{\mu=0}^3 \gamma^\mu \partial_\mu - m) \Psi = 0, \end{aligned}$$

donde el 0 a la derecha de la igualdad es en realidad el vector de cuatro coordenadas cuyas entradas son todas 0. Empleando la notación del físico R. Feynman, que utiliza $\not{\partial}$ para abreviar $\sum_{\mu=0}^3 \gamma^\mu \partial_\mu$, podemos escribir

$$(3.6) \quad (i\hbar \not{\partial} - m) \Psi = 0.$$

Con las *unidades de Planck*, en las que $c = 1$ y $\hbar = 1$, se puede formular la ecuación de Dirac de una manera todavía más reducida como $(i\not{\partial} - m) \Psi = 0$.

Si quisiéramos escribir la ecuación en unidades no relativistas tendríamos que repetir todo el proceso pero buscando, en este caso, una factorización para la ecuación de Klein-Gordon con unidades no relativistas (2.7), obteniendo

$$\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c(\alpha_1 \frac{\partial}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial z}) - \alpha_4 m c^2\right) \left(i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} + i\hbar c(\alpha_1 \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial \Psi}{\partial z}) - \alpha_4 m c^2 \Psi\right).$$

Por lo tanto, la ecuación buscada es

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

donde las matrices $\{\alpha_\mu\}_{\mu=1}^4$ son las vistas anteriormente. Si quisiéramos escribirla en su forma compacta podríamos usar que $\partial = (\frac{1}{c}\partial_0, \partial_1, \partial_2, \partial_3)^2$, de manera que la ecuación anterior quede

$$\begin{aligned}
& (i\hbar\partial_0 + i\hbar c(\alpha_1\partial_1 + \alpha_2\partial_2 + \alpha_3\partial_3) - \alpha_4 mc^2) \Psi = 0 \Rightarrow \\
& \left(\frac{1}{c}i\hbar\partial_0 + i\hbar(\alpha_1\partial_1 + \alpha_2\partial_2 + \alpha_3\partial_3) - \alpha_4 mc\right) \Psi = 0 \Rightarrow \\
& \left(\frac{1}{c}i\hbar\alpha_4\partial_0 + i\hbar(\alpha_4\alpha_1\partial_1 + \alpha_4\alpha_2\partial_2 + \alpha_4\alpha_3\partial_3) - \alpha_4^2 mc\right) \Psi = 0 \Rightarrow \\
& \left(i\hbar\left(\gamma^0\frac{1}{c}\partial_0 + \gamma^1\partial_1 + \gamma^2\partial_2 + \gamma^3\partial_3\right) - mc\right) \Psi = 0 \Rightarrow \left(i\hbar\sum_{\mu=0}^3 \gamma^\mu\partial_\mu - mc\right) \Psi = 0 \Rightarrow \\
(3.7) \quad & (i\hbar\partial - mc) \Psi = 0.
\end{aligned}$$

3.4. Interpretación probabilista de la ecuación de Dirac

Como se ha mencionado anteriormente, Ψ no es una función escalar sino que $\Psi \in \mathbb{C}^4$, lo que podría alejarnos un poco de una interpretación tanto probabilista como física. Sin embargo, la norma de Ψ en \mathbb{C}^4 sigue siendo la densidad de probabilidad. Para demostrarlo vamos a probar primero que

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

despejando en la ecuación de Dirac (3.2) y en su correspondiente ecuación traspuesta y conjugada:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\Psi}{\partial t} &= -\left(\alpha_1\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \alpha_2\frac{\partial\Psi}{\partial y} + \alpha_3\frac{\partial\Psi}{\partial z}\right) - \frac{i}{\hbar}m\alpha_4\Psi, \\
\frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial t} &= -\left(\frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial x}\alpha_1 + \frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial y}\alpha_2 + \frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial z}\alpha_3\right) + \frac{i}{\hbar}m\Psi^\dagger\alpha_4
\end{aligned}$$

Sustituyendo y reordenando:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial t}\Psi + \Psi^\dagger\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \\
& = \left(-\left(\frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial x}\alpha_1 + \frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial y}\alpha_2 + \frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial z}\alpha_3\right) + \frac{im}{\hbar}\Psi^\dagger\alpha_4\right)\Psi + \Psi^\dagger\left(-\left(\alpha_1\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \alpha_2\frac{\partial\Psi}{\partial y} + \alpha_3\frac{\partial\Psi}{\partial z}\right) - \frac{im}{\hbar}\alpha_4\Psi\right) = \\
& = -\left(\frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial x}\alpha_1\Psi + \Psi^\dagger\alpha_1\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right) - \left(\frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial y}\alpha_2\Psi + \Psi^\dagger\alpha_2\frac{\partial\Psi}{\partial y}\right) - \left(\frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial z}\alpha_3\Psi + \Psi^\dagger\alpha_3\frac{\partial\Psi}{\partial z}\right) =
\end{aligned}$$

²Hasta ahora, como estábamos trabajando en unidades relativistas, usábamos la forma más común $\partial = (\partial_0, \partial_1, \partial_2, \partial_3)$.

$$\begin{aligned}
&= -\left(\frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial x}\alpha_1\Psi + \Psi^\dagger\frac{\partial\alpha_1\Psi}{\partial x}\right) - \left(\frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial y}\alpha_2\Psi + \Psi^\dagger\frac{\partial\alpha_2\Psi}{\partial y}\right) - \left(\frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial z}\alpha_3\Psi + \Psi^\dagger\frac{\partial\alpha_3\Psi}{\partial z}\right) = \\
&= -\frac{\partial(\Psi^\dagger\alpha_1\Psi)}{\partial x} - \frac{\partial(\Psi^\dagger\alpha_2\Psi)}{\partial y} - \frac{\partial(\Psi^\dagger\alpha_3\Psi)}{\partial z}.
\end{aligned}$$

Si llamamos $\vec{F} = (\Psi^\dagger\alpha_1\Psi, \Psi^\dagger\alpha_2\Psi, \Psi^\dagger\alpha_3\Psi)$, entonces

$$\frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial t}\Psi + \Psi^\dagger\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\partial(\Psi^\dagger\alpha_1\Psi)}{\partial x} - \frac{\partial(\Psi^\dagger\alpha_2\Psi)}{\partial y} - \frac{\partial(\Psi^\dagger\alpha_3\Psi)}{\partial z} = -\operatorname{div}(\vec{F}).$$

Usando esta igualdad y aplicando el teorema de la divergencia suponiendo que Ψ y sus derivadas decaen suficientemente rápido en el infinito³:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{B}(0,R)} \|\Psi\|^2 &= \int_{\mathcal{B}(0,R)} \frac{\partial}{\partial t} \|\Psi\|^2 = \int_{\mathcal{B}(0,R)} \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^\dagger\Psi) = \int_{\mathcal{B}(0,R)} \left(\frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial t}\Psi + \Psi^\dagger\frac{\partial\Psi}{\partial t} \right) = \\
&= \int_{\mathcal{B}(0,R)} -\operatorname{div}(\vec{F}) = - \int_{\partial\mathcal{B}(0,R)} \vec{F} \xrightarrow{R\rightarrow\infty} 0.
\end{aligned}$$

Esto significa que la probabilidad de encontrar la partícula en algún punto del espacio no varía con t . De hecho podemos normalizar Ψ multiplicándola por una constante para que $\int_{\mathbb{R}^3} \|\Psi\|^2 = 1$, de forma que la probabilidad total sea 1.

³Con el fin de ahorrar espacio se ha empleado una notación que sustituye las integrales dobles y triples por integrales simples pero manteniendo el recinto de integración.

CAPÍTULO 4

Soluciones de la ecuación de Dirac para una partícula libre

4.1. Preliminares

Antes de enfrentarnos a la ecuación es conveniente aclarar la notación que se va a emplear y probar algunas igualdades que serán útiles más adelante.

El *convenio de sumación de Einstein* consiste en obviar el símbolo de sumatorio cuando en el contenido de éste se repite el índice como superíndice y subíndice. Para no perder la información de hasta dónde llega la suma se usan letras griegas para los índices en el caso de cuatro coordenadas (entre 0 y 3) y letras latinas si hablamos de elementos con tres coordenadas (entre 1 y 3). Por ejemplo:

$$\gamma^\mu \partial_\mu = \sum_{\mu=0}^3 \gamma^\mu \partial_\mu \quad \text{y} \quad k_\mu x^\mu = \sum_{\mu=0}^3 k_\mu x^\mu \quad \text{pero} \quad a^i \sigma_i = \sum_{i=1}^3 a^i \sigma_i.$$

Las coordenadas de los cuadvectores se escriben con superíndices. Por ejemplo, en el capítulo anterior apareció $(t, x, y, z) = (x^0, x^1, x^2, x^3)$. Ahora vamos a llamar x a este vector y \vec{x} a sus tres últimas coordenadas. Es decir, $x = (x^\mu) = (x^0, x^1, x^2, x^3)$ pero $\vec{x} = (x^1, x^2, x^3)$. Considerando otro cuadvector $y = (y^\nu)$, hay un pseudoproducto escalar⁴ asociado a la matriz del grupo de Lorentz $\eta = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$. Por lo tanto:

$$x \cdot y = x^\mu \eta_{\mu\nu} y^\nu = \sum_{\mu=0}^3 \sum_{\nu=0}^3 x^\mu \eta_{\mu\nu} y^\nu = x^0 y^0 - x^1 y^1 - x^2 y^2 - x^3 y^3.$$

Un cuadvector relevante es el cuadrिमomento $k = (k^0, k^1, k^2, k^3) = (E, \vec{p})$, que también puede aparecer con subíndices en lugar de con superíndices. La relación entre ambas formas es, usando el convenio de sumación, $k_\mu = \eta_{\mu\nu} k^\nu = \sum_{\nu=0}^3 \eta_{\mu\nu} k^\nu$, luego $k_0 = k^0$, $k_1 = -k^1$, $k_2 = -k^2$, $k_3 = -k^3$, así que $k = (k_0, -k_1, -k_2, -k_3)$ y

$$k \cdot x = k^\mu \eta_{\mu\nu} x^\nu = k^0 x^0 - k^1 x^1 - k^2 x^2 - k^3 x^3 = k_0 x^0 + k_1 x^1 + k_2 x^2 + k_3 x^3 = k_\nu x^\nu.$$

⁴No es un producto escalar puesto que no es definido positivo.

En el capítulo anterior apareció también la notación de Feynman $\not{\partial} = \sum_{\mu=0}^3 \gamma^\mu \partial_\mu$. Análogamente, vamos a usar $\not{k} = \sum_{\mu=0}^3 \gamma^\mu k_\mu$.

Usando la representación de Dirac y las condiciones (3.3) vamos a demostrar los siguientes resultados para $1 \leq j, k \leq 3$:

- $(\gamma^0)^2 = \alpha_4^2 = I$.
- $(\gamma^j)^2 = \alpha_4 \alpha_j \alpha_4 \alpha_j = -\alpha_j \alpha_4^2 \alpha_j = -\alpha_j^2 = -I$.
- $\gamma^0 \gamma^j + \gamma^j \gamma^0 = \alpha_4 \alpha_4 \alpha_j + \alpha_4 \alpha_j \alpha_4 = \alpha_4^2 \alpha_j - \alpha_j \alpha_4 \alpha_4 = \alpha_j - \alpha_j = O$.
- $\gamma^j \gamma^k + \gamma^k \gamma^j = \alpha_4 \alpha_j \alpha_4 \alpha_k + \alpha_4 \alpha_k \alpha_4 \alpha_j = -\alpha_j \alpha_4^2 \alpha_k - \alpha_k \alpha_4^2 \alpha_j = -\alpha_j \alpha_k - \alpha_k \alpha_j = \alpha_k \alpha_j - \alpha_j \alpha_k = O$.

Resumiendo:

$$(4.1) \quad (\gamma^\mu)^2 = \begin{cases} I & \text{si } \mu = 0 \\ -I & \text{si } \mu = 1, 2, 3 \end{cases} \quad \text{y} \quad \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = O \quad \text{si } \mu \neq \nu, \quad 0 \leq \mu, \nu \leq 3$$

Ahora, aplicando la definición, reordenando términos y usando (4.1):

$$\begin{aligned} \not{k}\not{k} &= (\gamma^0 k_0 + \gamma^1 k_1 + \gamma^2 k_2 + \gamma^3 k_3) (\gamma^0 k_0 + \gamma^1 k_1 + \gamma^2 k_2 + \gamma^3 k_3) = \\ &= (\gamma^0)^2 k_0^2 + k_0 k_1 (\gamma^0 \gamma^1 + \gamma^1 \gamma^0) + k_0 k_2 (\gamma^0 \gamma^2 + \gamma^2 \gamma^0) + k_0 k_3 (\gamma^0 \gamma^3 + \gamma^3 \gamma^0) + (\gamma^1)^2 k_1^2 + \\ &+ k_1 k_2 (\gamma^1 \gamma^2 + \gamma^2 \gamma^1) + k_1 k_3 (\gamma^1 \gamma^3 + \gamma^3 \gamma^1) + (\gamma^2)^2 k_2^2 + k_2 k_3 (\gamma^2 \gamma^3 + \gamma^3 \gamma^2) + (\gamma^3)^2 k_3^2 = \\ &= k_0^2 - k_1^2 - k_2^2 - k_3^2. \end{aligned}$$

Por otro lado, como $k = (k^0, k^1, k^2, k^3) = (E, \vec{p})$ y rescatando (2.4):

$$m^2 = E^2 - \|\vec{p}\|^2 = (k^0)^2 - (k^1)^2 - (k^2)^2 - (k^3)^2 = k_0^2 - k_1^2 - k_2^2 - k_3^2.$$

Combinando estos dos últimos resultados se tiene que

$$(4.2) \quad \not{k}\not{k} = m^2.$$

Finalmente procedemos a resolver la ecuación de Dirac para una partícula libre hallando primero las soluciones para el caso *rest frame* o de sistema en reposo y después para el caso general.

4.2. Resolución

Para hallar las soluciones de la ecuación vamos a seguir el razonamiento propuesto por *Pretty Much Physics*, un canal de YouTube cuyos vídeos explican diferentes temas de física de nivel universitario. Vamos a trabajar con la forma (3.6) $(i\hbar\not{\partial} - m)\Psi = 0$. Como $\not{\partial}$ es una matriz 4×4 , en realidad m no es tal sino mI , donde I es la matriz

identidad. En general, sea A una matriz cuadrada y sea z un escalar, $A + z$ significará $A + zI$. Es decir, se identifican los escalares con escalares mediante la matriz identidad, siguiendo la notación física.

Sabemos que $\Psi \in \mathbb{C}^4$ así que tiene que tener cuatro coordenadas. Sin embargo, la Ψ que era solución de la ecuación de Schrödinger y de la ecuación de Klein-Gordon es un escalar, por lo que en principio no nos vale. Será necesario multiplicarla por una función con cuatro coordenadas que dependa de k . Las dos opciones serán $\Psi_1 = u(k)e^{-ik \cdot x/\hbar}$ y $\Psi_2 = v(k)e^{ik \cdot x/\hbar}$ puesto que cualquier otra solución se podrá expresar con Fourier como

$$\Psi(t, \vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} a(\vec{p}) e^{\pm ik \cdot x/\hbar} d\vec{p}$$

ajustando la función a para que en $t = 0$ salga lo que queramos.

A continuación vamos a ver la relación entre $\not{\partial}$ y \not{k} tanto para Ψ_1 como para Ψ_2 . Es fácil comprobar derivando que

$$\frac{\partial \Psi_1}{\partial x^j} = \frac{-i}{\hbar} k_j \Psi_1 \quad y \quad \frac{\partial \Psi_2}{\partial x^j} = \frac{i}{\hbar} k_j \Psi_2,$$

así que

$$\not{\partial} \Psi_1 = \gamma^0 \frac{\partial \Psi_1}{\partial x^0} + \gamma^1 \frac{\partial \Psi_1}{\partial x^1} + \gamma^2 \frac{\partial \Psi_1}{\partial x^2} + \gamma^3 \frac{\partial \Psi_1}{\partial x^3} = \frac{-i}{\hbar} (\gamma^0 k_0 + \gamma^1 k_1 + \gamma^2 k_2 + \gamma^3 k_3) \Psi_1 = \frac{-i}{\hbar} \not{k} \Psi_1,$$

$$\not{\partial} \Psi_2 = \gamma^0 \frac{\partial \Psi_2}{\partial x^0} + \gamma^1 \frac{\partial \Psi_2}{\partial x^1} + \gamma^2 \frac{\partial \Psi_2}{\partial x^2} + \gamma^3 \frac{\partial \Psi_2}{\partial x^3} = \frac{i}{\hbar} (\gamma^0 k_0 + \gamma^1 k_1 + \gamma^2 k_2 + \gamma^3 k_3) \Psi_2 = \frac{i}{\hbar} \not{k} \Psi_2,$$

$$(4.3) \quad \not{\partial} \Psi_1 = \frac{-i}{\hbar} \not{k} \Psi_1 \quad y \quad \not{\partial} \Psi_2 = \frac{i}{\hbar} \not{k} \Psi_2.$$

Aplicando nuestras Ψ_1, Ψ_2 en la ecuación de Dirac y usando (4.3) obtenemos:

$$\left. \begin{aligned} (i\hbar \not{\partial} - m) \Psi_1 = 0 &\Rightarrow (i\hbar \left(\frac{-i}{\hbar} \not{k}\right) - m) u(k) e^{-ik \cdot x/\hbar} = 0 \\ (i\hbar \not{\partial} - m) \Psi_2 = 0 &\Rightarrow (i\hbar \left(\frac{i}{\hbar} \not{k}\right) - m) v(k) e^{ik \cdot x/\hbar} = 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$(4.4) \quad (\not{k} - m)u(k) = 0 \quad y \quad (\not{k} + m)v(k) = 0,$$

que son las ecuaciones que tendremos que resolver para hallar $u(k)$ y $v(k)$.

4.3. Caso del sistema en reposo

Para este caso [16] consideramos $\vec{p} = \vec{0}$, luego $E^2 = m^2 + \|\vec{p}\|^2 = m^2$ y $E = m$, de forma que el cuadrimomento es $k = (E, \vec{p}) = (m, \vec{0})$ y $\not{k} = m\gamma^0$. Hemos dicho que

tanto $u(k)$ como $v(k)$ tienen cuatro coordenadas, así que serán de la forma $u(k) = (a, b, c, d)^t, v(k) = (e, f, g, h)^t$. Sustituyendo a partir de (4.4):

$$\left. \begin{aligned} (\not{k} - m)u(k) = 0 &\Rightarrow (m\gamma^0 - m)u(m, \vec{0}) = 0 \\ (\not{k} + m)v(k) = 0 &\Rightarrow (m\gamma^0 + m)v(m, \vec{0}) = 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$(4.5) \quad (\gamma^0 - I)u(m, \vec{0}) = 0 \quad \text{y} \quad (\gamma^0 + I)v(m, \vec{0}) = 0$$

son las ecuaciones a resolver. Usando primero la representación de Dirac, en la que $\gamma^0 \stackrel{Dirac}{=} \begin{pmatrix} I & O \\ O & -I \end{pmatrix}$, operamos (4.5):

$$\begin{aligned} \left[\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & 0 & & \\ & & -2 & \\ & & & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \left[\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} e \\ f \\ g \\ h \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 2 & & & \\ & 2 & & \\ & & 0 & \\ & & & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e \\ f \\ g \\ h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &\Rightarrow \begin{cases} c = 0 \\ d = 0 \end{cases} \quad \text{y} \quad \begin{cases} e = 0 \\ f = 0 \end{cases} \end{aligned}$$

De esta forma podemos escribir $u(m, \vec{0}) = (a, b, 0, 0)^t, v(m, \vec{0}) = (0, 0, g, h)^t$. Lo común es expresarlo como $u(m, \vec{0}) = (\varphi, O)^t, v(m, \vec{0}) = (O, \eta)^t$, donde cada entrada es un vector de dimensión 2. Como tanto φ como η tienen dos componentes, podemos tomar dos distintos de cada uno siempre que sean linealmente independientes entre sí, de forma que los identificaremos como φ_s y η_s . Por lo tanto, con $s = 1, 2$:

$$(4.6) \quad u_s(m, \vec{0}) \stackrel{Dirac}{=} \begin{pmatrix} \varphi_s \\ O \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad v_s(m, \vec{0}) \stackrel{Dirac}{=} \begin{pmatrix} O \\ \eta_s \end{pmatrix}.$$

Si en lugar de tomar la representación de Dirac usamos la representación de Weyl, donde $\gamma^0 \stackrel{Weyl}{=} \begin{pmatrix} O & I \\ I & O \end{pmatrix}$, y repetimos los cálculos a partir de (4.5) obtendremos $u(m, \vec{0}) = (a, b, a, b)^t, v(m, \vec{0}) = (a, b, -a, -b)^t$. Empleando la misma notación que en el caso anterior:

$$(4.7) \quad u_s(m, \vec{0}) \stackrel{Weyl}{=} \begin{pmatrix} \varphi_s \\ \varphi_s \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad v_s(m, \vec{0}) \stackrel{Weyl}{=} \begin{pmatrix} \eta_s \\ -\eta_s \end{pmatrix}.$$

Ya tenemos determinadas las soluciones Ψ_1 y Ψ_2 de la ecuación de Dirac para el caso en reposo tanto con la representación de Dirac como con la representación de Weyl.

4.4. Caso general

Las soluciones generales [17] han de verificar (4.4), así que bastará tomar

$$(4.8) \quad u_s(k) = (\not{k} + m)u_s(m, \vec{0}) \quad y \quad v_s(k) = (\not{k} - m)v_s(m, \vec{0})$$

ya que, usando (4.2):

$$\left. \begin{aligned} (\not{k} - m)u(k) &= (\not{k} - m)(\not{k} + m)u_s(m, \vec{0}) = (\not{k}\not{k} - m^2)u_s(m, \vec{0}) = 0 \\ (\not{k} + m)v(k) &= (\not{k} + m)(\not{k} - m)v_s(m, \vec{0}) = (\not{k}\not{k} - m^2)v_s(m, \vec{0}) = 0 \end{aligned} \right\}$$

De la misma manera que en el caso en reposo, podemos resolver (4.8) usando tanto la representación de Dirac como la de Weyl. Con la primera de ellas, como

$$\gamma^0 \stackrel{Dirac}{=} \begin{pmatrix} I & O \\ O & -I \end{pmatrix} \quad y \quad \gamma^j \stackrel{Dirac}{=} \begin{pmatrix} O & \sigma^j \\ -\sigma^j & O \end{pmatrix},$$

se tiene que

$$\not{k} \stackrel{Dirac}{=} \begin{pmatrix} I & O \\ O & -I \end{pmatrix} k^0 - \begin{pmatrix} O & \sigma^1 \\ -\sigma^1 & O \end{pmatrix} k^1 - \begin{pmatrix} O & \sigma^2 \\ -\sigma^2 & O \end{pmatrix} k^2 - \begin{pmatrix} O & \sigma^3 \\ -\sigma^3 & O \end{pmatrix} k^3 = \begin{pmatrix} k^0 & -\vec{\sigma} \cdot \vec{k} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{k} & -k^0 \end{pmatrix},$$

donde $\sigma^i = \sigma_i$ son las matrices de Pauli que ya aparecieron en el capítulo anterior. Operando en (4.8):

$$u_s(k) \stackrel{Dirac}{=} \left[\begin{pmatrix} k^0 & -\vec{\sigma} \cdot \vec{k} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{k} & -k^0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} m & O \\ O & m \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \varphi_s \\ O \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (k^0 + m)\varphi_s \\ (\vec{\sigma} \cdot \vec{k})\varphi_s \end{pmatrix} \xrightarrow{|\vec{k}| \ll m} \begin{pmatrix} \varphi_s \\ O \end{pmatrix}$$

$$v_s(k) \stackrel{Dirac}{=} \left[\begin{pmatrix} k^0 & -\vec{\sigma} \cdot \vec{k} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{k} & -k^0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} m & O \\ O & m \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} O \\ \eta_s \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} (\vec{\sigma} \cdot \vec{k})\eta_s \\ (k^0 + m)\eta_s \end{pmatrix} \xrightarrow{|\vec{k}| \ll m} - \begin{pmatrix} O \\ \eta_s \end{pmatrix}$$

aunque estos límites en realidad no son tales ya que hay una constante de proporcionalidad que desaparece al normalizar.

Repetiendo el proceso para la representación de Weyl con

$$\gamma^0 \stackrel{Weyl}{=} \begin{pmatrix} O & I \\ I & O \end{pmatrix} \quad y \quad \gamma^j \stackrel{Weyl}{=} \begin{pmatrix} O & \sigma^j \\ -\sigma^j & O \end{pmatrix},$$

definiendo $\bar{\sigma} \cdot k = k^0 + \vec{\sigma} \cdot \vec{k}$ y usando $\sigma \cdot k = k^0 - \vec{\sigma} \cdot \vec{k}$, entonces

$$\not{k} \stackrel{Weyl}{=} \begin{pmatrix} O & I \\ I & O \end{pmatrix} k^0 - \begin{pmatrix} O & \sigma^1 \\ -\sigma^1 & O \end{pmatrix} k^1 - \begin{pmatrix} O & \sigma^2 \\ -\sigma^2 & O \end{pmatrix} k^2 - \begin{pmatrix} O & \sigma^3 \\ -\sigma^3 & O \end{pmatrix} k^3 = \begin{pmatrix} O & \sigma \cdot k \\ \bar{\sigma} \cdot k & O \end{pmatrix},$$

luego

$$u_s(k) \stackrel{Weyl}{=} \left[\begin{pmatrix} O & \sigma \cdot k \\ \bar{\sigma} \cdot k & O \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} m & O \\ O & m \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \varphi_s \\ \varphi_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (m + \sigma \cdot k)\varphi_s \\ (m + \bar{\sigma} \cdot k)\varphi_s \end{pmatrix} \xrightarrow{|\vec{k}| \ll m} \begin{pmatrix} \varphi_s \\ \varphi_s \end{pmatrix}$$

$$v_s(k) \stackrel{Weyl}{=} \left[\begin{pmatrix} O & \sigma \cdot k \\ \bar{\sigma} \cdot k & O \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} m & O \\ O & m \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \eta_s \\ -\eta_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(m + \sigma \cdot k)\eta_s \\ (m + \bar{\sigma} \cdot k)\eta_s \end{pmatrix} \xrightarrow{|\vec{k}| \ll m} \begin{pmatrix} \eta_s \\ -\eta_s \end{pmatrix}$$

Por lo tanto, las soluciones de la ecuación de Dirac para una partícula libre son

$$\Psi_1 \stackrel{Dirac}{=} \begin{pmatrix} (k^0 + m)\varphi_s \\ (\vec{\sigma} \cdot \vec{k})\varphi_s \end{pmatrix} e^{-ik \cdot x/\hbar} \quad \text{y} \quad \Psi_2 \stackrel{Dirac}{=} - \begin{pmatrix} (\vec{\sigma} \cdot \vec{k})\eta_s \\ (k^0 + m)\eta_s \end{pmatrix} e^{ik \cdot x/\hbar}$$

en la representación de Dirac y

$$\Psi_1 \stackrel{Weyl}{=} \begin{pmatrix} (m + \sigma \cdot k)\varphi_s \\ (m + \bar{\sigma} \cdot k)\varphi_s \end{pmatrix} e^{-ik \cdot x/\hbar} \quad \text{y} \quad \Psi_2 \stackrel{Weyl}{=} \begin{pmatrix} -(m + \sigma \cdot k)\eta_s \\ (m + \bar{\sigma} \cdot k)\eta_s \end{pmatrix} e^{ik \cdot x/\hbar}$$

en la representación de Weyl. Cualquier otra solución se podrá expresar como superposición de éstas.

CAPÍTULO 5

Límite no relativista de la ecuación de Dirac

En este capítulo vamos a estudiar lo que ocurre con la ecuación de Dirac cuando las velocidades son mucho menores que las de la luz (es decir, cuando v/c es muy pequeño). Físicamente esto se denomina *límite no relativista* y vamos a probar que, en esta situación, la ecuación de Dirac *tiende* a la ecuación de Schrödinger para una partícula libre, como él mismo explicó en un artículo publicado en 1928 [7]. Este resultado no es una sorpresa sino una necesidad ya que es la base del razonamiento que usamos para deducirla en el capítulo 3. Para finalizar veremos que, al aplicar un campo electromagnético a la ecuación de Dirac, su límite no relativista será la ecuación de Pauli.

5.1. Límite no relativista

Sea $\Psi \in \mathbb{C}^4$ satisfaciendo la ecuación de Dirac tal y como en el capítulo anterior, vamos a llamar $\Psi_l \in \mathbb{C}^2$ a sus dos primeras componentes y $\Psi_s \in \mathbb{C}^2$ a las dos últimas. Usando la representación de Dirac ya que es más manejable que la de Weyl, reescribimos (3.7) para obtener dos ecuaciones acopladas para Ψ_l y Ψ_s .

Por un lado, $\partial_j = \frac{i}{\hbar} p_j$, así que $\vec{\sigma} \cdot \vec{\partial} = \sigma_1 \partial_1 + \sigma_2 \partial_2 + \sigma_3 \partial_3 = \frac{i}{\hbar} (\sigma_1 p_1 + \sigma_2 p_2 + \sigma_3 p_3) = \frac{i}{\hbar} (\vec{\sigma} \cdot \vec{p})$. Por otro, es sencillo comprobar operando que

$$\not{\partial} = \frac{1}{c} \gamma^0 \partial_0 + \gamma^1 \partial_1 + \gamma^2 \partial_2 + \gamma^3 \partial_3 = \begin{pmatrix} \frac{\partial_t}{c} & (\vec{\sigma} \cdot \vec{\partial}) \\ -(\vec{\sigma} \cdot \vec{\partial}) & -\frac{\partial_t}{c} \end{pmatrix}.$$

Usando por comodidad ∂_t en lugar de ∂_0 :

$$\begin{aligned} (i\hbar\not{\partial} - mc)\Psi = 0 &\Rightarrow \left[i\hbar \begin{pmatrix} \frac{\partial_t}{c} & (\vec{\sigma} \cdot \vec{\partial}) \\ -(\vec{\sigma} \cdot \vec{\partial}) & -\frac{\partial_t}{c} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} mc & O \\ O & mc \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \Psi_l \\ \Psi_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \begin{cases} \left(\frac{i\hbar}{c}\partial_t - mc\right)\Psi_l + i\hbar(\vec{\sigma} \cdot \vec{\partial})\Psi_s = 0 \\ -i\hbar(\vec{\sigma} \cdot \vec{\partial})\Psi_l - \left(\frac{i\hbar}{c}\partial_t + mc\right)\Psi_s = 0. \end{cases} \end{aligned}$$

Reordenando términos y multiplicando en ambas expresiones por c llegamos a

$$(5.1) \quad \begin{cases} i\hbar\partial_t\Psi_l = c(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\Psi_s + mc^2\Psi_l \\ i\hbar\partial_t\Psi_s = c(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\Psi_l - mc^2\Psi_s. \end{cases}$$

En capítulos anteriores vimos que la energía relativista, E , incluye la energía en reposo mc^2 mientras que esto no ocurre con la energía no relativista (mecánica de Newton), $E' = E - mc^2$. Esta expresión resulta ser una aproximación de la energía cinética cuando v es mucho menor que c . En este caso: $E' = E - mc^2 \approx \frac{1}{2}mv^2 \Rightarrow E \approx \frac{1}{2}mv^2 + mc^2$. En las soluciones de la ecuación de Dirac que hallamos en el capítulo anterior, $i\hbar\partial_t\Psi$ era la energía (salvo el signo), luego:

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\Psi = E\Psi &\Rightarrow \begin{pmatrix} i\hbar\partial_t & O \\ O & i\hbar\partial_t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_l \\ \Psi_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}mv^2 + mc^2 & O \\ O & \frac{1}{2}mv^2 + mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_l \\ \Psi_s \end{pmatrix} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \begin{cases} i\hbar\partial_t\Psi_l = \frac{1}{2}mv^2\Psi_l + mc^2\Psi_l \\ i\hbar\partial_t\Psi_s = \frac{1}{2}mv^2\Psi_s + mc^2\Psi_s \end{cases} \xrightarrow{v \ll c} \begin{cases} i\hbar\partial_t\Psi_l \approx mc^2\Psi_l \\ i\hbar\partial_t\Psi_s \approx mc^2\Psi_s. \end{cases} \end{aligned}$$

De estas ecuaciones nos va a ser de utilidad la última. Introduciéndola en la segunda expresión de (5.1) llegamos a:

$$(5.2) \quad \Psi_s \approx \frac{1}{2mc}(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\Psi_l.$$

Entendiendo \vec{p} como el momento linear clásico $\vec{p} = m\vec{v}$, la expresión anterior se puede reescribir como

$$\Psi_s \approx \frac{1}{2mc}(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\Psi_l = \left(\vec{\sigma} \cdot \frac{\vec{p}}{2mc}\right)\Psi_l = \left(\vec{\sigma} \cdot \frac{m\vec{v}}{2mc}\right)\Psi_l = \left(\vec{\sigma} \cdot \frac{\vec{v}}{2c}\right)\Psi_l$$

y, cuando $v/c \rightarrow 0$, entonces $\Psi_s \approx 0$. El hecho de que Ψ_s sea pequeño y, en comparación, Ψ_l sea grande es la razón por la que se han elegido en concreto esos subíndices: s y l provienen de *small* y *large* respectivamente. Como Ψ_s es pequeño, vamos a buscar una ecuación que sólo dependa de Ψ_l . Lo más sencillo sería obviar $c(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\Psi_s$ en la primera ecuación de (5.1) pero, al ser c tan grande, compensa y no podemos eliminarlo fácilmente. En su lugar vamos a sustituir (5.2) en (5.1) tomándolo como una igualdad. Previamente vamos a probar usando (3.3) una identidad que será de utilidad a la hora de operar:

- $(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2 = (\sigma_1 p_1 + \sigma_2 p_2 + \sigma_3 p_3)^2 = \sigma_1^2 p_1^2 + \sigma_2^2 p_2^2 + \sigma_3^2 p_3^2 + p_1 p_2 (\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_1) + p_1 p_3 (\sigma_1 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_1) + p_2 p_3 (\sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_2) = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 = \vec{p} \cdot \vec{p}$
- $-\hbar^2 \Delta = -\hbar^2 (\partial_1^2 + \partial_2^2 + \partial_3^2) = -\hbar^2 \left(\frac{-1}{\hbar^2} p_1^2 - \frac{1}{\hbar^2} p_2^2 - \frac{1}{\hbar^2} p_3^2\right) = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 = \vec{p} \cdot \vec{p}$

luego $(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2 = -\hbar^2 \Delta$, donde se ha usado que $\partial_j = \frac{i}{\hbar} p_j \Rightarrow \partial_j^2 = \frac{-1}{\hbar^2} p_j^2$.

De esta manera:

$$i\hbar\partial_t\Psi_l = c(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\Psi_s + mc^2\Psi_l = c(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\frac{1}{2mc}(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})\Psi_l + mc^2\Psi_l =$$

$$= \frac{1}{2m} (\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2 \Psi_l + mc^2 \Psi_l = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \Psi_l + mc^2 \Psi_l$$

y hemos conseguido una ecuación que sólo depende de Ψ_l :

$$(5.3) \quad i\hbar \partial_t \Psi_l = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \Psi_l + mc^2 \Psi_l.$$

Por último, sea $\Psi_l = \psi e^{-iEt/\hbar}$ con $\psi = \psi(x, y, z)$, vamos a ver que ψ satisface la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

Sustituimos en (5.3):

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t (\psi e^{-iEt/\hbar}) &= \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta (\psi e^{-iEt/\hbar}) + mc^2 \psi e^{-iEt/\hbar} \Rightarrow \\ \Rightarrow i\hbar \psi \frac{(-iE)}{\hbar} e^{-iEt/\hbar} &= \frac{-\hbar^2}{2m} e^{-iEt/\hbar} \Delta \psi + mc^2 \psi e^{-iEt/\hbar} \Rightarrow E\psi = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi + mc^2 \psi \end{aligned}$$

y, puesto que la energía no relativista es $E' = E - mc^2$,

$$(5.4) \quad E' \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi.$$

Por otro lado, $\Psi = \Psi_l e^{imc^2 t/\hbar}$ será la versión no relativista de Ψ_l puesto que $\Psi = \Psi_l e^{imc^2 t/\hbar} = \psi e^{-iEt/\hbar} e^{imc^2 t/\hbar} = \psi e^{-iE't/\hbar}$, que ya depende de E' . Operando vemos que

$$\partial_t \Psi = \frac{-iE'}{\hbar} e^{-iE't/\hbar} \psi \quad \text{y} \quad \Delta \Psi = e^{-iE't/\hbar} \Delta \psi.$$

Entonces, usando (5.4),

$$i\hbar \partial_t \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi,$$

que es la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para una partícula libre.

En resumen: a partir de una solución Ψ de la ecuación de Dirac hemos tomado sus dos primeras coordenadas despreciando las dos últimas por ser muy pequeñas comprobando que, tras normalizar multiplicando por $e^{imc^2 t/\hbar}$, también son solución de la ecuación de Schrödinger. Como Ψ_l y Ψ_s tienen dos componentes cada una, $\Psi = \Psi_l e^{imc^2 t/\hbar}$ también tendrá dos coordenadas, a diferencia de la única componente de la Ψ que era solución en los primeros capítulos y en el anexo. Básicamente aparece la ecuación de Schrödinger duplicada. Este resultado fue una sorpresa tanto para Dirac como para el resto de científicos que estudiaron estos fenómenos desde la segunda década del siglo XX.

5.2. Límite no relativista en presencia de un campo electromagnético

Sabiendo que una carga en movimiento genera un campo magnético, los físicos Otto Stern y Walther Gerlach llevaron a cabo una serie de experimentos para medir los campos creados por electrones que orbitan alrededor del núcleo en el átomo. El resultado fue la aparición de pequeños campos magnéticos que nada tenían que ver con los mencionados anteriormente y que, supusieron, estaban provocados por el giro sobre sí mismos de los electrones con velocidad angular constante, de donde salió el término *spin*, castellanizado como *espín*. Sin embargo esto es imposible puesto que, para que estos campos se produjeran, los electrones deberían girar a velocidades superiores a la de la luz, además de que el electrón como objeto cuántico no puede girar. La verdadera razón por la que ocurre este fenómeno es que los electrones se comportan como pequeños imanes debido a que poseen un momento angular intrínseco [20]. Una de las diferencias entre el espín y el momento angular clásico es que el primero está cuantizado mientras que el segundo es continuo. Concretamente, el espín de cualquier partícula es $n/2$ con n entero no negativo. Las partículas con espín fraccionario se conocen como *fermiones* en honor al físico Enrico Fermi mientras que aquéllas que lo tienen entero se denominan *bosones* por el también físico Satyendra Nath Bose.

Ya en 1927, Wolfgang Ernst Pauli consideró que los electrones tenían un par de funciones de onda en lugar de una única y observó cómo se comportaban en presencia de un campo electromagnético. De esta manera introdujo la ecuación de Pauli, una expresión que *compuso* para que el resultado final fuera el esperado en lugar de deducirla de principios fundamentales. A continuación vamos a estudiar el límite no relativista de la ecuación de Dirac pero esta vez aplicada a un campo electromagnético, lo que nos llevará a la mencionada ecuación de Pauli y dará cierta justificación a la existencia y comportamiento del espín.

Sean \vec{E} y \vec{B} dos campos vectoriales que generan un campo electromagnético, han de satisfacer las ecuaciones de Maxwell tal y como vimos en el capítulo 1. Sabiendo esto, vamos a definir dos nuevos conceptos: el *potencial vector* y el *potencial escalar*. El potencial vector será el campo \vec{A} tal que

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A},$$

que cumple la segunda ecuación de Maxwell puesto que, siempre que haya cierta regularidad, la divergencia de un campo vectorial en \mathbb{R}^3 es nula si y sólo si dicho campo es el rotacional de un segundo campo vectorial. El potencial escalar es la función ϕ que hace que se satisfaga la tercera ecuación de Maxwell. Así podemos definir \vec{E} :

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \Rightarrow \nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \nabla \times \vec{A}}{\partial t} = -\frac{1}{c} \nabla \times \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \Rightarrow \\ \Rightarrow \nabla \times \vec{E} + \frac{1}{c} \nabla \times \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} &= 0 \Rightarrow \nabla \times \left(\vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right) = 0 \Rightarrow \exists \phi \quad \text{tal que} \quad \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = -\nabla \phi, \end{aligned}$$

puesto que el rotacional de un campo, en este caso $\vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$, es cero si y sólo si es el gradiente de otra función. Por lo tanto tenemos que

$$\vec{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}.$$

La razón para introducir estos dos potenciales es su gran utilidad en la física clásica. Por ejemplo, el Hamiltoniano para una partícula de carga q y masa m sometida a un campo electromagnético está escrito en función de ambas:

$$H = \frac{1}{2m} \vec{T} \cdot \vec{T} + q\phi \quad \text{con} \quad \vec{T} = \vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A}.$$

Para transformar esta fórmula clásica a una cuántica habrá que llevar a cabo un procedimiento denominado *primera cuantización* en el que se sustituyen funciones escalares por operadores, así que una partícula cuántica de carga q y masa m debería tener una función de ondas Ψ que satisface la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar\partial_t\Psi = \frac{1}{2m}(\vec{T} \cdot \vec{T})\Psi + q\phi\Psi \quad \text{con} \quad \vec{T}\Psi = -i\hbar\nabla\Psi - \frac{q}{c}\vec{A}\Psi,$$

donde ahora \vec{T} es un operador en lugar de un vector. Sin embargo, Pauli se percató de que esta ecuación es falsa para el electrón y dedujo que faltaba un término adicional que, además, obligaba a que Ψ tuviera dos coordenadas en lugar de una. Esto concuerda perfectamente con los resultados obtenidos en la sección anterior, mientras que el término nuevo explica que el electrón se comporte como un pequeño imán. En definitiva, se introduce el concepto de espín. La ecuación de Pauli es:

$$(5.5) \quad i\hbar\partial_t\Psi = \frac{1}{2m}(\vec{T} \cdot \vec{T})\Psi + q\phi\Psi - \frac{q\hbar}{2mc}(\vec{\sigma} \cdot \vec{B})\Psi.$$

Vamos a deducir esta ecuación como límite no relativista de la de Dirac en un campo electromagnético como en [1] y [5]. Para ello vamos a repetir lo hecho anteriormente pero esta vez para $i\hbar\partial_t\Psi = H\Psi$ con

$$H = c\vec{\alpha} \cdot \left(-i\hbar\nabla - \frac{q}{c}\vec{A}\right) + q\phi + \alpha_4 mc^2,$$

que es el Hamiltoniano para la ecuación de Dirac en presencia de un campo electromagnético.

Como

$$\begin{aligned} \blacksquare \quad c\vec{\alpha} \cdot \left(-i\hbar\nabla - \frac{q}{c}\vec{A}\right) &= c\vec{\alpha} \cdot \vec{T} = c(\alpha_1 T_1 + \alpha_2 T_2 + \alpha_3 T_3) = \begin{pmatrix} O & c(\vec{\sigma} \cdot \vec{T}) \\ c(\vec{\sigma} \cdot \vec{T}) & O \end{pmatrix} \\ \blacksquare \quad q\phi + \alpha_4 mc^2 &= \begin{pmatrix} q\phi & O \\ O & q\phi \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} mc^2 & O \\ O & -mc^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q\phi + mc^2 & O \\ O & q\phi - mc^2 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

entonces

$$H = \begin{pmatrix} q\phi + mc^2 & c(\vec{\sigma} \cdot \vec{T}) \\ c(\vec{\sigma} \cdot \vec{T}) & q\phi - mc^2 \end{pmatrix}$$

y, sustituyendo en $i\hbar\partial_t\Psi = H\Psi$ obtenemos un par de ecuaciones anidadas:

$$(i\hbar\partial_t - H)\Psi = 0 \Rightarrow \begin{pmatrix} i\hbar\partial_t - q\phi - mc^2 & -c(\vec{\sigma} \cdot \vec{T}) \\ -c(\vec{\sigma} \cdot \vec{T}) & i\hbar\partial_t - q\phi + mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_l \\ \Psi_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$(5.6) \quad \Rightarrow \begin{cases} i\hbar\partial_t\Psi_l = c(\vec{\sigma} \cdot \vec{T})\Psi_s + q\phi\Psi_l + mc^2\Psi_l \\ i\hbar\partial_t\Psi_s = c(\vec{\sigma} \cdot \vec{T})\Psi_l + q\phi\Psi_s - mc^2\Psi_s. \end{cases}$$

Análogamente al caso de la sección anterior pero considerando ahora la carga q tenemos que $i\hbar\partial_t\Psi_s \approx mc^2\Psi_s + q\phi\Psi_s$. Tomándola como una igualdad y sustituyendo en la segunda ecuación de (5.6) obtenemos una relación entre Ψ_l y Ψ_s :

$$\Psi_s = \frac{1}{2mc}(\vec{\sigma} \cdot \vec{T})\Psi_l.$$

Sustituyendo otra vez en (5.6) pero esta vez en la primera ecuación llegamos a

$$(5.7) \quad i\hbar\partial_t\Psi_l = \frac{1}{2m}(\vec{\sigma} \cdot \vec{T})^2\Psi_l + q\phi\Psi_l + mc^2\Psi_l.$$

Volviendo a usar el cambio $\Psi = \Psi_l e^{imc^2t/\hbar}$, aunque recordemos que ahora Ψ tiene dos coordenadas, es sencillo obtener operando las relaciones

$$\Psi_l = e^{-imc^2t/\hbar}\Psi \quad \text{y} \quad \partial_t\Psi_l = e^{-imc^2t/\hbar} \left(\frac{-imc^2}{\hbar}\Psi + \partial_t\Psi \right),$$

de forma que (5.7) queda

$$i\hbar e^{-imc^2t/\hbar} \left(\frac{-imc^2}{\hbar}\Psi + \partial_t\Psi \right) = \frac{1}{2m}(\vec{\sigma} \cdot \vec{T})^2 e^{-imc^2t/\hbar}\Psi + q\phi e^{-imc^2t/\hbar}\Psi + mc^2 e^{-imc^2t/\hbar}\Psi \Rightarrow$$

$$\Rightarrow mc^2\Psi + i\hbar\partial_t\Psi = \frac{1}{2m}(\vec{\sigma} \cdot \vec{T})^2\Psi + q\phi\Psi + mc^2\Psi$$

y, finalmente,

$$(5.8) \quad i\hbar\partial_t\Psi = \frac{1}{2m}(\vec{\sigma} \cdot \vec{T})^2\Psi + q\phi\Psi.$$

Aparentemente este resultado es distinto de la ecuación de Pauli (5.5). A continuación probaremos que en realidad son lo mismo. Para ello vamos a demostrar que

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{T})^2 = \vec{T} \cdot \vec{T} - \frac{q\hbar}{c}(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) \quad \text{donde} \quad \vec{T}\Psi = -i\hbar\nabla\Psi - \frac{q}{c}\vec{A}\Psi,$$

que es el único término en el que ambas expresiones difieren [10].

Sean $\vec{a}, \vec{b} \in \mathbb{R}^3$ y σ_i las matrices de Pauli vistas anteriormente, como

$$\begin{aligned}\sigma_1\sigma_2 &= i\sigma_3, & \sigma_1\sigma_3 &= -i\sigma_2, & \sigma_2\sigma_3 &= i\sigma_1, \\ \sigma_2\sigma_1 &= -i\sigma_3, & \sigma_3\sigma_1 &= i\sigma_2, & \sigma_3\sigma_2 &= -i\sigma_1,\end{aligned}$$

entonces

$$\begin{aligned}(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) &= (\sigma_1 a_1 + \sigma_2 a_2 + \sigma_3 a_3)(\sigma_1 b_1 + \sigma_2 b_2 + \sigma_3 b_3) = \\ &= a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 + a_2 b_1 (-i\sigma_3) + a_1 b_2 i\sigma_3 + a_3 b_1 i\sigma_2 + a_1 b_3 (-i\sigma_2) + a_3 b_2 (-i\sigma_1) + a_2 b_3 i\sigma_1 = \\ &= \vec{a} \cdot \vec{b} + i \left(\sigma_1 (a_2 b_3 - a_3 b_2) + \sigma_2 (a_3 b_1 - a_1 b_3) + \sigma_3 (a_1 b_2 - a_2 b_1) \right) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b}).\end{aligned}$$

De la misma manera que con números, esta relación se cumplirá para operadores, así que se tiene

$$(5.9) \quad (\vec{\sigma} \cdot \vec{T})^2 = \vec{T} \cdot \vec{T} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{T} \times \vec{T}).$$

Como nada garantiza $T_j T_k = T_k T_j$, entonces $\vec{T} \times \vec{T} = (T_2 T_3 - T_3 T_2, T_3 T_1 - T_1 T_3, T_1 T_2 - T_2 T_1)$ no tiene por qué anularse. De hecho, sabiendo que

$$\vec{T} = -i\hbar \nabla - \frac{q}{c} \vec{A} = \left(-i\hbar \partial_x - \frac{q}{c} A_1, -i\hbar \partial_y - \frac{q}{c} A_2, -i\hbar \partial_z - \frac{q}{c} A_3 \right),$$

podemos calcular

$$T_j T_k - T_k T_j = -\hbar^2 (\partial_j \partial_k - \partial_k \partial_j) + \frac{iq\hbar}{c} (A_j \partial_k + \partial_j A_k - A_k \partial_j - \partial_k A_j) + \frac{q^2}{c^2} (A_j A_k - A_k A_j).$$

Como se cumple que $\partial_j \partial_k = \partial_k \partial_j$, $A_j A_k = A_k A_j$ y, aplicando f ,

$$A_j \partial_k f + \partial_j (A_k f) - A_k \partial_j f - \partial_k (A_j f) = (\partial_j A_k - \partial_k A_j) f,$$

entonces la expresión anterior es, simplemente,

$$T_j T_k - T_k T_j = \frac{iq\hbar}{c} (\partial_j A_k - \partial_k A_j).$$

Volviendo a usar la definición $\vec{B} = \nabla \times \vec{A} = (\partial_2 A_3 - \partial_3 A_2, \partial_3 A_1 - \partial_1 A_3, \partial_1 A_2 - \partial_2 A_1)$:

$$\begin{aligned} \left. \begin{aligned} T_2 T_3 - T_3 T_2 &= \frac{iq\hbar}{c} (\partial_2 A_3 - \partial_3 A_2) = \frac{iq\hbar}{c} B_1 \\ T_3 T_1 - T_1 T_3 &= \frac{iq\hbar}{c} (\partial_3 A_1 - \partial_1 A_3) = \frac{iq\hbar}{c} B_2 \\ T_1 T_2 - T_2 T_1 &= \frac{iq\hbar}{c} (\partial_1 A_2 - \partial_2 A_1) = \frac{iq\hbar}{c} B_3 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left. \begin{aligned} \sigma_1 (T_2 T_3 - T_3 T_2) &= \sigma_1 \frac{iq\hbar}{c} B_1 \\ \sigma_2 (T_3 T_1 - T_1 T_3) &= \sigma_2 \frac{iq\hbar}{c} B_2 \\ \sigma_3 (T_1 T_2 - T_2 T_1) &= \sigma_3 \frac{iq\hbar}{c} B_3 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \\ \Rightarrow \sigma_1 (T_2 T_3 - T_3 T_2) + \sigma_2 (T_3 T_1 - T_1 T_3) + \sigma_3 (T_1 T_2 - T_2 T_1) &= \sigma_1 \frac{iq\hbar}{c} B_1 + \sigma_2 \frac{iq\hbar}{c} B_2 + \sigma_3 \frac{iq\hbar}{c} B_3 \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\vec{\sigma} \cdot (\vec{T} \times \vec{T}) = \frac{iq\hbar}{c}(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) \Rightarrow i\vec{\sigma} \cdot (\vec{T} \times \vec{T}) = \frac{-q\hbar}{c}(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}).$$

Así, la identidad (5.9) queda

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{T})^2 = \vec{T} \cdot \vec{T} - \frac{q\hbar}{c}(\vec{\sigma} \cdot \vec{B})$$

e, introduciéndola en (5.8):

$$i\hbar\partial_t\Psi = \frac{1}{2m}\left(\vec{T} \cdot \vec{T} - \frac{q\hbar}{c}(\vec{\sigma} \cdot \vec{B})\right)\Psi + q\phi\Psi = \frac{1}{2m}(\vec{T} \cdot \vec{T})\Psi + q\phi\Psi - \frac{q\hbar}{2mc}(\vec{\sigma} \cdot \vec{B})\Psi,$$

que tiene la misma forma que la ecuación de Pauli (5.5). Por lo tanto, hemos deducido la ecuación de Pauli como límite no relativista de la ecuación de Dirac en presencia de un campo electromagnético.

APÉNDICE A

Introducción a la mecánica cuántica

La mecánica cuántica es la rama de la física que estudia la materia a escala microscópica. Surge a finales del siglo XIX gracias al concepto de cuerpo negro, introducido por Gustav Kirchhoff, pero no es hasta el siglo XX cuando realmente se desarrolla y toma relevancia. Esta disciplina supone un nuevo enfoque que pretende resolver problemas ya propuestos anteriormente y cuya solución no se había podido encontrar usando las teorías de la física entonces conocidas: la Ley de Gravitación Universal de Newton y la Teoría electromagnética. Concretamente, el primer problema que se resuelve usando la mecánica cuántica es el de la Radiación térmica, que es la radiación que emite un objeto en equilibrio. Usando la Teoría electromagnética se obtenía que esta energía era infinita, algo lógicamente imposible. Es en 1900 cuando Max Planck introduce la idea de que en realidad la energía está cuantizada, que se encuentra en paquetes discretos. De esta manera, matemáticamente hablando, sustituye la integral de las frecuencias (donde se obtenía infinito) por una suma (finita). Además, el resultado obtenido concuerda perfectamente con los observados experimentalmente. Así, Planck enuncia la hipótesis de que la radiación se emite de manera discreta en paquetes que él mismo denominó cuantos, con energía

$$E_\gamma = h\nu$$

donde h es la constante que lleva su nombre y cuyo valor es, aproximadamente, $h = 6,6261 \times 10^{-34} J \cdot s = 4,1357 eV \cdot s$ y ν es la frecuencia de la onda electromagnética asociada. Curiosamente, Planck era un férreo defensor de las leyes tradicionales de la Física e intentó que sus nuevos descubrimientos encajaran con estas, sin éxito.

A.1. El efecto fotoeléctrico

En 1905, Albert Einstein se basa en este descubrimiento para explicar el efecto fotoeléctrico, trabajo gracias al cual se le concedió el premio Nobel de Física en 1921. Este efecto se describe de la siguiente manera: unas placas de metal previamente preparadas y pulidas son irradiadas con luz y de ellas se desprenden electrones, que

llamamos foto-electrones, en una corriente fotoeléctrica. Más detalladamente y según escribió el propio Einstein en su artículo de 1905:

Los cuantos de energía penetran en la capa superficial del cuerpo y su energía se convierte, al menos en parte, en energía cinética de electrones. La imagen más simple es que un cuanto de luz cede toda su energía a un solo electrón; Asumiremos que esto sucede[...]. Un electrón provisto de energía cinética dentro del cuerpo puede haber perdido parte de su energía cinética en el momento en que llega a la superficie. Además, se debe suponer que cada electrón, al abandonar el cuerpo, tiene que realizar una cantidad de trabajo W (que es característica del cuerpo). Los electrones expulsados directamente desde la superficie y en ángulos rectos tendrán las mayores velocidades perpendiculares a la superficie. La energía cinética máxima de uno de estos electrones es

$$(A.1) \quad E_c^{max} = h\nu - W.$$

Si la placa C se carga a un potencial positivo, V_p , lo suficientemente grande para evitar que el cuerpo pierda carga eléctrica, debemos tener que

$$E_c^{max} = h\nu - W = eV_p,$$

donde e es la magnitud de la carga electrónica[...]. Si la fórmula derivada es correcta, entonces V_p , cuando se representa gráficamente en función de la frecuencia de la luz incidente, debe producir una línea recta cuya pendiente debe ser independiente de la naturaleza de la sustancia iluminada. [8]

Para que se produzca este efecto se tiene que cumplir que la frecuencia de la luz ν sea mayor que una frecuencia fijada en cada metal, la frecuencia umbral ν_0 . De esta manera habrá corriente para $\nu \geq \nu_0$. Por otro lado, como ya hemos visto, tiene que haber una energía que haga que los electrones se despeguen del metal y se sumen a la corriente. Dicha energía mínima es la cantidad de trabajo $W = h\nu_0$. Estos dos resultados se deducen del hecho de que, según la ecuación (A.1), la energía cinética del fotoelectrón será positiva cuando la energía del fotón sea mayor que el trabajo. Esta ecuación deduce también que la energía de los fotoelectrones es independiente de la intensidad de la luz y aumenta linealmente con la frecuencia de ésta [19].

Einstein prueba que el efecto fotoeléctrico no se puede explicar si se considera la luz únicamente como una onda, prediciendo que también se comporta como partículas. En consecuencia, se empiezan a tratar problemas nuevos y antiguos con un enfoque distinto, consiguiendo así grandes descubrimientos físicos en la primera mitad del siglo XX.

A.2. La ecuación de Schrödinger

Una vez Einstein demuestra la dualidad de la luz, de Broglie va más allá e hipotetiza que, de hecho, todas las partículas se comportan como ondas y viceversa, de forma que el caso del fotón es sólo un ejemplo de esta propiedad más general. Cuando pensamos en el fotón como una partícula le asociamos energía E_γ y momento p_γ y cuando lo pensamos como una onda le asociamos frecuencia ν_γ . Concretamente, a cada partícula libre con momento p le podemos asociar una onda de materia con longitud de onda de de Broglie $\lambda = h/p$. Esta onda se rige por la ecuación de Schrödinger. Consideraremos la onda escalar $\Psi(t, x) \in \mathbb{C}$, que depende de espacio y tiempo [2]. La longitud de onda de de Broglie de las ondas de materia será percibida de forma distinta por observadores distintos. Esto significa que las ondas Ψ no son directamente medibles, aunque sí que existen unas relaciones de de Broglie que son válidas para todas las partículas:

$$\begin{aligned} p &= \hbar k, \\ E &= \hbar \omega, \end{aligned}$$

donde ω es la frecuencia angular y \hbar es la constante de Dirac, con valor $\hbar = \frac{h}{2\pi}$.

Pero, ¿cuál es la forma matemática de esta onda asociada a la partícula? Supongamos que queremos que se propague en la dirección $+x$. Tenemos varias ondas que, al superponerlas consigo mismas, podrían formar la onda que buscamos. Estas son $\sin(kx - \omega t)$, $\cos(kx - \omega t)$, $e^{i(kx - \omega t)}$ y $e^{-i(kx - \omega t)}$. La convención es usar

$$\Psi(t, x) = e^{i(kx - \omega t)}$$

puesto que $e^{-i(kx - \omega t)}$ es en realidad un caso análogo a este y tanto el seno como el coseno se pueden escribir como combinación lineal de Ψ y su conjugada.

De la misma manera, en tres dimensiones la función de onda de una partícula libre es

$$(A.2) \quad \Psi(t, \vec{x}) = e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)},$$

donde, ahora, $\vec{p} = \hbar \vec{k}$. La función de onda $\Psi(t, x)$ da la probabilidad de encontrar la partícula en la posición x al medirla en tiempo t . [21]

Ahora que sabemos qué forma tiene la función de onda, vamos a ver la ecuación que determina su evolución: la ecuación de Schrödinger. Esta ecuación es una *traducción* de las leyes de Newton al nuevo lenguaje que surge con la mecánica cuántica [13]. Para ello se usan las formulaciones clásicas de la energía cinética y el momento

$$E = \frac{1}{2}mv^2 \quad \text{y} \quad p = mv,$$

de las que podemos obtener la expresión

$$(A.3) \quad E = \frac{p^2}{2m}.$$

Según el principio de correspondencia de la mecánica cuántica se tienen las relaciones

$$E \longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \text{y} \quad p \longrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}.$$

Sustituyéndolas en (A.3) y aplicándolo a $\Psi(t, x)$ obtenemos la ecuación de Schrödinger para una partícula libre [11]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(t, x).$$

La solución general de esta ecuación es $\Psi(t, x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \Phi(k) e^{i(kx - \omega(k)t)}$, donde $\Phi(k)$ es una función arbitraria de k que controla la superposición.

Si tenemos una partícula cuántica que se mueve en un potencial externo $V(t, x)$, la energía de dicha partícula será ahora la suma de las energías cinética y potencial

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(t, x).$$

Repetiendo el proceso anterior pero esta vez para esta expresión obtenemos la ecuación de Schrödinger para una partícula en potencial

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(t, x) \right) \Psi(t, x).$$

Si en vez de restringirnos al caso en una dimensión tenemos una partícula en tres dimensiones, el razonamiento será el mismo pero ahora usando $\vec{p} \longrightarrow -i\hbar \nabla$, donde $\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$. Así, la ecuación de Schrödinger en tres dimensiones finalmente será

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, \vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(t, \vec{x})$$

para una partícula libre y

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, \vec{x}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(t, \vec{x}) \right) \Psi(t, \vec{x})$$

para una partícula en potencial.

Recapitulando, éstas son las ecuaciones de Schrödinger para una partícula en los diferentes casos:

$$(A.4) \quad \text{Partícula libre: } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(t, x)$$

$$(A.5) \quad \text{Partícula en potencial: } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(t, x) \right) \Psi(t, x)$$

(A.6)

$$\text{Partícula libre en tres dimensiones: } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, \vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(t, \vec{x})$$

(A.7)

$$\text{Partícula en potencial en tres dimensiones: } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, \vec{x}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(t, \vec{x}) \right) \Psi(t, \vec{x})$$

Definiendo adecuadamente el Hamiltoniano H en cada uno de los casos anteriores podemos reescribir la ecuación de Schrödinger de forma más reducida como

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$$

o, incluso, separando variables $\Psi(t, x) = e^{-iEt/\hbar} \psi(x)$, también en la forma independiente del tiempo $E\psi = H\psi$.

A.3. Pozo de potencial infinito

Un problema clásico de la física cuántica es el del pozo de potencial infinito, en el que una partícula rebota en una caja con paredes infinitas y sin perder energía al colisionar con ellas, como se muestra en la figura (A.1) [4]. Este problema no existe en la práctica pero es útil considerarlo en la ecuación de Schrödinger puesto que proporciona soluciones exactas [3].

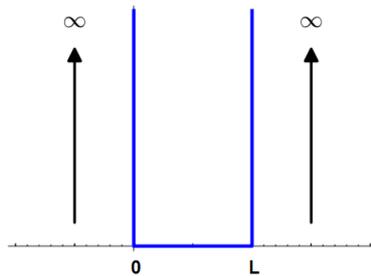


Figura A.1: Pozo de potencial infinito

Para este ejercicio consideramos la función potencial

$$V(t, x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq L \\ \infty & x \in (-\infty, 0) \cup (L, +\infty) \end{cases}$$

donde $L > 0$ es cualquier valor constante. Vamos a resolver la ecuación de Schrödinger para una partícula en potencial, que corresponde a (A.5):

$$E\Psi(t, x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(t, x) \right) \Psi(t, x).$$

La separamos en los dos casos que podemos tener:

$$\left\{ \begin{array}{ll} E\Psi(t, x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 0 \right) \Psi(t, x) & 0 \leq x \leq L \\ E\Psi(t, x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \infty \right) \Psi(t, x) & x \in (-\infty, 0) \cup (L, +\infty) \end{array} \right. \Rightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} E\Psi(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(t, x) & 0 \leq x \leq L \\ E\Psi(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(t, x) + \infty \Psi(t, x) & x \in (-\infty, 0) \cup (L, +\infty) \end{array} \right.$$

En el segundo caso surge un problema puesto que el ∞ desbarata la ecuación. Lo que en realidad ocurre es que se tiene $\Psi(t, x) = 0$, luego la única ecuación a resolver es la primera:

$$E\Psi(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(t, x)$$

con $0 \leq x \leq L$ y con valores en los extremos $\Psi(0, t) = 0 = \Psi(L, t)$. Despejando:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(t, x) = -\frac{2m}{\hbar^2} E\Psi(t, x) \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(t, x) + \frac{2m}{\hbar^2} E\Psi(t, x) = 0,$$

que es una ecuación diferencial ordinaria sencilla de resolver y cuya solución es $\Psi(t, x) = A \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right)$ con $n \in \mathbb{N}$. Introduciendo esto y su segunda derivada ahora en la EDO podemos despejar el valor de E :

$$E = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2mL^2}.$$

Como depende de n , es más conveniente utilizar la notación

$$E_n = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2mL^2},$$

que determina los niveles de energía en función de n y es claramente un conjunto de valores discreto. Puede parecer que las energías toman una cantidad continua de valores si L no es pequeño ya que en este caso el denominador será muy grande y el valor de E_n será muy pequeño. Cuanto menor sea L , por el contrario, menor será el denominador y mayor el valor de E_n , evidenciando así los *saltos* entre las energías.

Bibliografía

- [1] AJAIB, M. A. (2016). *Non-Relativistic Limit of the Dirac Equation*. Departamento de Física, Universidad Politécnica Estatal de California. <https://arxiv.org/pdf/1511.07901.pdf>.
- [2] BOSCA, M. C. (2014). La función de onda, su ecuación y su interpretación. Postulados. <http://www.fisicacuantica.es/la-funcion-de-onda-y-su-interpretacion/>. *Física cuántica en la red. Un sitio para adentrarse en la física cuántica*.
- [3] CARRILLO, R. (2020). *FM21 Mecánica Cuántica: Pozo de potencial infinito*. https://www.youtube.com/watch?v=v1VmLquAR6E&ab_channel=RamonCarrilloBastos.
- [4] CHAMIZO, F. (2015). *Un poco de física cuántica para chicos listos de primero (del grado de física o matemáticas)*. <https://matematicas.uam.es/~fernando.chamizo/physics/files/qf.pdf>.
- [5] CHAMIZO, F. (2019). *Dirac equation, spin and fine structure Hamiltonian*. https://matematicas.uam.es/~fernando.chamizo/physics/files/fine_structure.pdf.
- [6] CIVITARESE, O AND MATERA, J. M. (2019). *Mecánica cuántica II*. http://webcache.googleusercontent.com/search?q=cache:AEL0sJksSckJ:www.fisica.unlp.edu.ar/Members/matera/mecanica-cuantica-ii/notas-dirac.pdf/at_download/file+&cd=1&hl=es&ct=clnk&gl=es.
- [7] DIRAC, P. A. M. (1928). The quantum theory of the electron. (The Royal Society, publ.) *Proceedings of the Royal Society of London, A*. 117-778, 610–624.
- [8] EINSTEIN, A. (1905). Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt. (César Tomé López, trad.) *Annalen der Physik*, 17, 132–149.
- [9] EINSTEIN, A. (1905). Ist die Trägheit eines Körpers von seinem Energieinhalt abhängig?. (W. Perrett y G.B. Jeffery, trad.)(John Walker, edit.) *Annalen der Physik*, 18, 639–641.

- [10] GINGRICH, D. M. (2004). *Nonrelativistic Limit of the Dirac Equation*. Facultad de Ciencias-Física, Universidad de Alberta. <https://sites.ualberta.ca/~gingrich/courses/phys512/node46.html>.
- [11] HERNÁNDEZ, J. (2018). *Mecánica cuántica*. Curso de Química Cuántica I, facultad de Química, UNAM. <http://depa.fquim.unam.mx/jesusht/mcnotas.pdf>.
- [12] JANSSEN, B. (2005). *Breve repaso de la Relatividad Especial*. Departamento de Física Teórica y del Cosmos, Centro Andaluz de Física de Partículas Elementales, Universidad de Granada. <https://www.ugr.es/~bjanssen/text/repaso.pdf>.
- [13] LARIOS, G. (2020). ¿Qué explica la Ecuación de Dirac?. https://www.youtube.com/watch?v=tXdUZQuzQtY&ab_channel=InstitutoDeF%C3%ADsicaTe%C3%B3ricaIFT. Instituto de Física Teórica.
- [14] MARTÍNEZ, A. (2009). La Mecánica Cuántica Relativista. <http://la-mecanica-cuantica.blogspot.com/2009/07/la-mecanica-cuantica-relativista.html>. *La Mecánica Cuántica*.
- [15] PENA, C. R. (2013). *Ecuaciones de onda relativistas: Klein-Gordon*. Apuntes para la asignatura "Mecánica Cuántica Avanzada", CC. Físicas, Universidad Autónoma de Madrid. <https://members.ift.uam-csic.es/cpena/docs/guion22.pdf>.
- [16] PRETTY MUCH PHYSICS (2020). Solving the Dirac Equation | Rest Frame. https://www.youtube.com/watch?v=Le9Vcn2dS-E&ab_channel=PrettyMuchPhysics.
- [17] PRETTY MUCH PHYSICS (2020). Solving the Dirac Equation | Any Frame (Easy Mode). https://www.youtube.com/watch?v=uVrTT2_9dhs&ab_channel=PrettyMuchPhysics.
- [18] ROWE, G. (2011). *Relativistic units: $c=1$* . <http://physicspages.com/pdf/Moore/Relativistic%20units.pdf>.
- [19] RUIZ-TREJO, E. (2005). Einstein, la termodinámica y la naturaleza de la luz. https://www.universoeinstein.com.ar/images/ruiz_trejo_E_termo_luz.pdf. *Boletín de la Sociedad Mexicana de Física*, 19-3, 151–164.
- [20] TAVEL, M. A., BACHMANN, K. T. AND STENGER, V. J. (1999). What exactly is the 'spin' of subatomic particles such as electrons and protons? Does it have any physical significance, analogous to the spin of a planet?. <https://www.scientificamerican.com/article/what-exactly-is-the-spin/>. *Scientific American*.
- [21] ZWIEBACH, B., TURNER, A. AND GELLER, S. (2016). *Quantum Physics I, Lecture Note 4*. https://ocw.mit.edu/courses/physics/8-04-quantum-physics-i-spring-2016/lecture-notes/MIT8_04S16_LecNotes4.pdf.