En esta hoja vamos a estudiar el *límite no relativista* de la ecuación de Dirac. En la jerga física, esta expresión se refiere a lo que ocurre cuando las velocidades son mucho menores que las de la luz, esto es, v/c pequeño. En esta situación, deduciremos que, en un sentido más físico que matemático, la ecuación de Dirac tiende a la ecuación de Schrödinger de una partícula libre. Esto es necesario para que la teoría sea coherente y muestra que realmente cumple con su motivación. También nos ocuparemos del límite no relativista en presencia de un campo electromagnético, lo cual requerirá generalizar primero la ecuación de Dirac y se relaciona con el concepto de *espín*.

Dentro del temario previsto, el límite no relativista y todo lo relativo al espín estaban separados. Mi plan era que viéramos más sobre el espín de lo que aparece en este hoja pero me temo que ya ha quedado bastante larga. De hecho, si vemos que ya has completado el número de páginas recomendado, y a ti te parece bien, podríamos acabar con esta hoja. Si quieres o necesitas más material, seguiríamos estudiando más a fondo el espín o la invariancia de la ecuación de Dirac por las transformaciones de Lorentz (que supongo que para un estudiante de grado de física, es la parte más difícil de entender de [Dir28]), la cual lleva al concepto de *espinor*, que es una variante del de vector en $\mathbb{C}^4$.

Trabajaremos con la representación de Dirac. Se podría usar también la de Weyl (como en [LB14, §36.5]) o cualquier otra, pero sería menos directo. Dada $\Psi \in \mathbb{C}^4$ cumpliendo la ecuación de Dirac, llamemos $\Psi_l \in \mathbb{C}^2$ a sus dos primeras coordenadas y $\Psi_s \in \mathbb{C}^2$ a las dos últimas (si usáramos una representación distinta de la de Dirac, habría que escoger combinaciones de las coordenadas).

1) Muestra que la ecuación de Dirac (en unidades relativistas) equivale al par de ecuaciones acopladas para Ψ_l y Ψ_s:

$$\begin{cases} i\hbar\partial_t\Psi_l = (\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\Psi_s + m\Psi_l, \\ i\hbar\partial_t\Psi_s = (\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\Psi_l - m\Psi_s. \end{cases}$$

Recuerda que $\vec{\sigma}\cdot\vec{p}$ significa $\sigma_1 p_1 + \sigma_2 p_2 + \sigma_3 p_3$ y que $p_j = -i\hbar\partial_{x_j}$ es la coordenada j del operador momento.

2) Explica por qué en unidades no relativistas las ecuaciones anteriores son

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

En una hoja anterior, habíamos visto que la energía relativista E incorpora la energía en reposo mc^2 mientras que en la mecánica de Newton no está incluida y $E' = E - mc^2$ resulta una aproximación de la energía cinética $\frac{1}{2}mv^2$, cuando las velocidades son mucho más pequeñas que las de la luz. En este caso, E es muy parecida a mc^2 porque $\frac{1}{2}mv^2$ es comparativamente despreciable. Todas las soluciones de la ecuación de Dirac se pueden poner como superposición de autoestados que cumplen $H\Psi = E\Psi$ (las soluciones que estudiaste en la última hoja). Si para las energías involucradas estamos en la situación en la que v/c es pequeño, entonces debería cumplirse $i\hbar\partial_t\Psi_l \approx mc^2\Psi_l$ y también $i\hbar\partial_t\Psi_s \approx mc^2\Psi_s$.

3) Trata de explicar en unas líneas el párrafo anterior con un poco más de detalle.

4) A partir de $i\hbar\partial_t\Psi_s \approx mc^2\Psi_s$, deduce de la segunda ecuación del sistema $\Psi_s \approx \big(\vec{\sigma}\cdot\frac{\vec{p}}{2mc}\big)\Psi_l$.

Si identificamos $\vec{p}$ con el momento lineal clásico $m\vec{v}$, esto indica que, para v/c pequeño, Ψ_s es mucho menor que Ψ_l, tiende formalmente a cero cuando $v/c \to 0$. Con ojos matemáticos esto no suena muy riguroso, porque $\vec{p}$ es un operador, no una cantidad concreta, pero no ahondaremos más en ello.

La situación descrita en el ejercicio es la que motiva la notación. Los subíndices de Ψ_l y Ψ_s vienen de *large* y *small*. Al ser Ψ_s pequeño, lo despreciaremos considerando una ecuación que solo contenga Ψ_l. No es tan fácil como tachar simplemente el término $c(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\Psi_s$ de la primera ecuación del sistema porque c es grande y compensa la pequeñez de Ψ_s. Hay que hacer algo un poco más complicado.

5) Dando la relación $\Psi_s \approx \big(\vec{\sigma}\cdot\frac{\vec{p}}{2mc}\big)\Psi_l$ por exacta, tomándola como una igualdad, deduce

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

Con ello, nos hemos desecho de las dos últimas coordenadas de Ψ y tenemos una ecuación que solo involucra las dos primeras, esto es, Ψ_l. Nota que $(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})^2$ significa $(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})$, esto es, aplicar dos veces el operador $(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})$, que es matricial.

6) Demuestra que $(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})^2 = \vec{p}\cdot\vec{p} = -\hbar^2\Delta$ donde Δ es el operador de Laplace, la suma de las derivadas parciales segundas no cruzadas. Aquí, como es habitual en física, se identifican escalares con escalares por la matriz identidad. Un matemático purista escribiría $(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})^2 = I\vec{p}\cdot\vec{p} = -\hbar^2 I\Delta$ con I la identidad 2×2.

7) Escribiendo $\Psi_l = \psi e^{-iEt/\hbar}$, muestra que si ψ solo depende de la posición, entonces satisface la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula libre:

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

Una partícula libre solo tiene energía cinética y recuerda que E' la aproximaba en el régimen no relativista, en el que v/c es pequeño. Si lo de la ψ independiente del tiempo te resulta raro, hay otra manera de ver esto. Recuerda que las soluciones de la ecuación de Schrödinger son superposiciones de $e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x}-Et)/\hbar}$. Usar E o usar $E' = E - mc^2$ es solo una cuestión de normalización, aunque lo natural desde el punto de vista no relativista es, por supuesto, E'. De esta forma, $\Psi = \Psi_l e^{imc^2t/\hbar}$ debería ser la versión no relativista de Ψ_l.

8) Prueba que $\Psi = \Psi_l e^{imc^2t/\hbar}$ satisface la ecuación de Schrödinger (dependiente del tiempo) para una partícula libre:

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

Recapitulando, hemos partido de una solución de Ψ de la ecuación de Dirac y al quedarnos con las dos primeras coordenadas (porque las otras son comparativamente pequeñas), tras cierta normalización, obtenemos una solución Ψ de la ecuación de Schrödinger. Lo que resulta un poco chocante es que esta última Ψ tiene dos coordenadas. Es decir, obtenemos la ecuación de Schrödinger dos veces. La razón para ello está relacionado con lo que se llama *espín*, con ello pasamos al siguiente tema.

El concepto de espín despistó a los físicos durante años. Ya el propio Schrödinger notó en [Sch26] que su ecuación funcionaba bien para el átomo de hidrógeno pero no concordaba con los experimentos en otras situaciones aparentemente similares. Sin tratar de ser fiel a la historia, el hecho es que en cierto momento los físicos se percataron de que algunas partículas, como el electrón que Dirac intentaba representar con su ecuación, tenía un momento angular intrínseco. Desde el punto de vista clásico esto correspondería a girar sobre sí mismo con velocidad angular constante, de ahí el nombre, derivado del inglés *spin*. Por cuestiones cuánticas difíciles de explicar, esto se traduce en que para estas partículas hay que especificar dos funciones de onda, dos soluciones de la ecuación de Schrödinger, para indicar lo que sería el eje de giro en cada instante para la física clásica[1].

Pauli en [PJ27], el artículo en el que introdujo las matrices σ_j, consideró los electrones con pares de funciones de onda y estudió cómo debería afectarles un campo electromagnético. Para ello introdujo lo que llamamos hoy la *ecuación de Pauli*. Algo con lo que el propio Pauli no estaba satisfecho, era que no se deducía de principios fundamentales, sino que se creaba en cierta medida a partir de lo que uno quería obtener. Nuestro próximo objetivo es deducir la ecuación de Pauli como límite no relativista de la de Dirac en un campo electromagnético.

9) [opcional, solo si tienes tiempo y ganas y después de acabar el resto de los ejercicios] Busca información histórica acerca de cómo se llegó al concepto de espín. Hay todo un libro de alta

[1] En principio esto suena bien desde el punto de vista clásico porque especificar un eje de giro es lo mismo que especificar un punto en la esfera unidad, lo cual requiere dos coordenadas, latitud y longitud. Sin embargo, la complicada realidad cuántica con sus fases complejas hace que esta analogía se derrumbe y que, más allá del nivel divulgativo, pensar en el espín como un giro sea más una fuente de confusión que una ayuda.

divulgación dedicado a ello escrito por un físico de primer nivel: [Tom97], pero la verdad es que a mí no me parece muy legible.

Antes de nada, tienes que aprender un mínimo de la notación del electromagnetismo. Recuerda de lo que leíste de [Cha16] que los campos electromagnéticos venían dados por dos campos vectoriales $\vec{E}$ y $\vec{B}$ que satisfacían las ecuaciones de Maxwell. Es muy útil introducir lo que se llaman el *potencial vector* y el *potencial escalar* que permiten reducir el número de ecuaciones de Maxwell a dos. Para empezar, hay un resultado matemático que dice que (bajo condiciones de regularidad) la divergencia de un campo en $\mathbb{R}^3$ es cero si y solo si es igual al rotacional de otro campo. Entonces si definimos el campo $\vec{A}$, llamado *potencial vector*, tal que

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

la segunda ecuación de Maxwell se cumple automáticamente. Por otro lado, el rotacional de un campo es nulo si y solo si es el gradiente de una función (esto seguro que lo viste en Cálculo II). Entonces existe una función ϕ, llamada *potencial escalar*, tal que para $\vec{E}$ satisfaciendo la tercera ecuación de Maxwell,

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

10) Explica de dónde sale esta fórmula.

En conclusión, usando $\vec{A}$ y ϕ, en lugar de cuatro ecuaciones de Maxwell, tenemos dos[2]. Da por conocido (sería un poco largo de explicar) que, en física clásica, el Hamiltoniano (de algún modo, la energía) para una partícula de masa m y carga q sometida a un campo electromagnético responde a la fórmula

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

Por supuesto, podría haber escrito $\|\vec{T}\|^2$ en lugar de $\vec{T}\cdot\vec{T}$, ahora verás la razón.

La filosofía de la ecuación de Schrödinger es que se puede pasar de fórmulas clásicas a cuánticas cambiando funciones escalares por operadores (en la jerga, a esto se le llama *primera cuantización*). Por tanto, sin saber nada del espín, una partícula cuántica cargada debería tener una función de ondas Ψ escalar (de una coordenada) que resuelve la ecuación de Schrödinger:

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

Nota que ahora $\vec{T}$ es un operador con tres coordenadas, en lugar de un vector de $\mathbb{R}^3$, y $(\vec{T}\cdot\vec{T})\Psi$ significa $(T_1T_1 + T_2T_2 + T_3T_3)\Psi = \sum_j T_j(T_j\Psi)$ que vuelve a dar una función escalar.

[2]En principio esto es solo un truco matemático pero, a la postre, los potenciales vector y escalar tienen más significado físico que lo que puede parecer. Por ejemplo, $(\phi, \vec{A})$ se comporta bien bajo las trasformaciones de Lorentz y en mecánica cuántica $\vec{A}$ y ϕ son más importantes que $\vec{E}$ y $\vec{B}$.

11) Explica con el detalle que necesites el párrafo anterior.

Pues bien, resulta que esta ecuación de Schrödinger para partículas cargadas que hemos deducido, es falsa para el electrón. Según los argumentos de Pauli, no justificados desde primeros principios, faltaba un término, de modo que lo correcto parecía ser la *ecuación de Pauli* que requería que ahora Ψ tuviera dos coordenadas:

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

Desde el punto de vista físico, los electrones reaccionan ante un campo electromagnético como otras cargas pero, por alguna razón, tienen una respuesta añadida al campo magnético, dada por el nuevo término: se comportan como pequeños imanes. Pauli ajustó la constante delante de $(\vec{\sigma}\cdot\vec{B})$ para que las cosas funcionaran pero con argumentos mezclando mecánica clásica y cuántica, lo natural para lo que "gira" el electrón por su espín era que esta constante tuviera un 4 en el denominador en vez de un 2.

Lo que vamos a ver ahora es esta ecuación de Pauli se deduce como límite no relativista de la de Dirac. Continuando el comentario anterior, si creemos, con Dirac, que los electrones se rigen por la ecuación de Dirac, deducimos que se comportan como pequeños imanes. Este es un gran triunfo de la física teórica, pues en la motivación de la ecuación de Dirac no había nada relativo al espín ni al pequeño imán asociado a él. Sale como una conclusión teórica insospechada que cuadra perfectamente con las experiencias. Dirac consideró que la deducción de la existencia del espín (aquí solo vemos su efecto magnético pero se puede ser más completo) era "un añadido inesperado".

Una cosa creíble (dalo por supuesto), a la vista del Hamiltoniano electromagnético, es que el Hamiltoniano para la ecuación de Dirac sea

$$H = \vec{\alpha}\cdot\big(-i\hbar\nabla - q\vec{A}\big) + q\phi + \alpha_4 m$$

o, en unidades no relativistas,

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

12) [opcional] ¿Sabrías decir, aunque sea vagamente, por qué esto es natural?

Con ello, la ecuación de Dirac bajo la acción de un campo electromagnético es $i\hbar\partial_t\Psi = H\Psi$.

13) Llamando, como antes, Ψ_l a las dos primeras coordenadas de Ψ, reproduce lo hecho en ejercicios anteriores para deducir que cuando v/c es pequeño y el tamaño de $\vec{A}$ y ϕ no es desmesurado, se tiene la ecuación aproximada

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

que con el cambio que ya habíamos usado $\Psi = \Psi_l e^{imc^2t/\hbar}$ (esto define una Ψ que, por supuesto, no es la del principio: tiene dos coordenadas), equivale a

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

A primera vista esta ecuación difiere de la ecuación de Pauli. Lo que vamos a probar es que en realidad son iguales. Es decir, nuestro objetivo es demostrar la igualdad:

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{T})^2 = \vec{T}\cdot\vec{T} - \frac{q\hbar}{c}(\vec{\sigma}\cdot\vec{B}) \qquad \text{donde} \quad \vec{T}\Psi = -i\hbar\nabla\Psi - \frac{q}{c}\vec{A}\Psi. \tag{1}$$

Por favor, antes de seguir, asegúrate de que entiendes que esto es todo lo que necesitamos y que no tienes problemas con la notación.

La clave para obtener (1) es una identidad vectorial para las matrices de Pauli. Para que no te hagas un lío, vamos a verla primero con vectores en lugar de con operadores.

14) Dados dos vectores $\vec{a}, \vec{b} \in \mathbb{R}^3$, demuestra que

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}\cdot\vec{b}) = \vec{a}\cdot\vec{b} + i\vec{\sigma}\cdot(\vec{a}\times\vec{b}).$$

Te explico con detalle la notación: El primer miembro es el producto de dos matrices 2×2, porque recuerda que $\vec{\sigma}\cdot\vec{a} = \sum_j \sigma_j a_j$. Como ya sabes, los físicos identifican escalares con escalares por la matriz identidad y ese es el significado de $\vec{a}\cdot\vec{b}$. A un matemático le gustaría más escribir $(\vec{a}\cdot\vec{b})I$ con I la matriz identidad 2×2, si quieres hazlo así en tu trabajo, como prefieras. Por último $\vec{a}\times\vec{b}$ es el producto vectorial de toda la vida.

Al igual que se cumple cuando las coordenadas son números, se cumplirá cuando son operadores, pero es importante respetar el orden por la falta de conmutatividad. De esta forma, se deduce

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

Con números, es decir, si se tuviera $\vec{T}\in\mathbb{R}^3$, entonces $\vec{T}\times\vec{T}$ sería nulo pero como las coordenadas son operadores, se tiene

$$\vec{T}\times\vec{T} = \big(T_2T_3 - T_3T_2, T_3T_1 - T_1T_3, T_1T_2 - T_2T_1\big)$$

que no se anula en general porque nada asegura $T_jT_k = T_kT_j$.

15) Teniendo en cuenta lo anterior, explica por qué (1) se deduce de

$$\vec{T}\times\vec{T} = i\frac{q\hbar}{c}\vec{B}.$$

Ambos miembros de esta igualdad se entienden como operadores que actúan sobre funciones regulares. Es decir, lo que significa, en forma totalmente expandida, es que para f una función regular

$$T_2(T_3 f) - T_3(T_2 f) = i\frac{q\hbar}{c}B_1 f, \quad T_3(T_1 f) - T_1(T_3 f) = i\frac{q\hbar}{c}B_2 f, \quad T_1(T_2 f) - T_2(T_1 f) = i\frac{q\hbar}{c}B_3 f.$$

Ahora viene el ejercicio que seguramente te va a costar más de esta hoja. Te doy algunas indicaciones después del enunciado. Con él finaliza la prueba de (1), y por tanto de que la ecuación obtenida como límite no relativista de la ecuación de Dirac bajo campos electromagnéticos, es la ecuación de Pauli.

16) Demuestra la igualdad del ejercicio anterior.

Esto está hecho en unas pocas líneas de [Cha19, p.3] pero con tan pocos detalles que difícilmente lo seguirá alguien sin experiencia previa en física cuántica. Tanto si miras esta referencia como si no, las siguientes tres sugerencias te pueden ser de bastante ayuda como esquema de la demostración. Seguirlas no es obligatorio, si prefieres proceder con un cálculo directo o encuentras un método alternativo, adelante con ello. 1) Muestra que, como operadores, $\nabla \times \nabla$ y $\vec{A} \times \vec{A}$ son nulos. No pierdas de vista que son operadores que actúan sobre una función supuesta regular. Si lo entiendes bien, lo primero te debiera resultar fácil y lo segundo trivial. 2) Deduce que la identidad es equivalente a $\vec{B} = \nabla \times \vec{A} + \vec{A} \times \nabla$, de nuevo como operadores. 3) Muestra que $\big(\nabla \times \vec{A} + \vec{A} \times \nabla\big)(f) = (\nabla \times \vec{A})f$ donde en el último paréntesis, $\nabla \times \vec{A}$ es el rotacional de toda la vida, que por tanto coincide con $\vec{B}$, por definición.

Tarea a entregar. Ya ves que esta hoja es larga pero cada ejercicio, excepto el último, corresponde a un paso más bien pequeño. Tu tarea es conectar todos esos pasos en un conjunto coherente, añadiendo todas las explicaciones que consideres pertinentes, con los dos objetivos que hemos alcanzado respecto al límite no relativista. Primero, llegar a la ecuación de Schrödinger de la partícula libre y después, deducir la ecuación de Pauli.

No te pongo limitaciones de espacio. Prefiero que te extiendas algo más a que te quedes corta en explicaciones. Como ves, en esta hoja no solo hay problemas sino también comentarios más o menos extensos. Aprovecha lo que te resulte de interés, redactándolo a tu manera.

Referencias

[Cha16] F. Chamizo. Las ecuaciones de Maxwell en plan fácil. `http://www.uam.es/fernando.chamizo/physics/physics.html`, 2016.

[Cha19] F. Chamizo. Dirac equation, spin and fine structure Hamiltonian. `http://www.uam.es/fernando.chamizo/physics/physics.html`, 2019.

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

[LB14] T. Lancaster and S. J. Blundell. *Quantum Field Theory for the Gifted Amateur*. Oxford University Press, 2014.

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

[Sch26] E. Schrödinger. An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. *Phys. Rev.*, 28:1049–1070, Dec 1926.

[Tom97] S. Tomonaga. *The story of spin.* University of Chicago Press, Chicago IL, 1997.