En esta hoja tratamos la ecuación de Dirac, la cual tiene unas consecuencias físicas bastante amplias y por ello le dediqué dos apartados en la propuesta inicial. Al prepararlo, creo que es mejor hacer algo más breve por dos razones. En primer lugar, estas consecuencias estarían un poco fuera de lugar en un trabajo sobre las matemáticas del espín y, por otro lado, el trabajo ya tiene una extensión razonable sin más contenidos.

Dirac fue uno de los mayores artífices de la física cuántica y junto con von Neumann, el que acercó más la teoría a las matemáticas. Si quieres añadir o leer algo sobre él, te recomiendo que mires [BM08] que es breve y está muy bien escrito.

Fíjate que para nosotros, e históricamente, el espín es algo llovido del cielo que proviene de hechos experimentales y no guarda relación con las fórmulas de Planck o de Broglie. Dirac mostró a través de su ecuación que una teoría cuántica del electrón compatible con la relatividad especial lleva al espín. Esta justificación teórica es el objetivo final de esta hoja. El único conocimiento que vamos a suponer de relatividad especial es la fórmula para la energía

$$E^2 = m^2c^4 + \|\vec{p}\|^2c^2 \tag{1}$$

donde $\vec{p}$ es el momento (en rigor, las coordenadas espaciales del cuadrimomento). Fíjate que para una partícula en reposo (con $\vec{p} = \vec{0}$), esta fórmula es el $E = mc^2$ que aparece en todos los sitios. Si nunca la has visto, te digo una breve motivación: cuando un cuerpo se mueve con velocidad $\vec{v}$ su masa crece siguiendo la ley $m \mapsto \gamma m$ con $\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2}$, $v = \|\vec{v}\|$. Entonces el momento $m\vec{v}$ pasa a ser $\vec{p} = \gamma m\vec{v}$ y la energía relativista, $E = \gamma mc^2$. Sustituyendo se tiene (1). Para más detalles puedes mirar [Sch85].

Si recuerdas la hoja 3 y lo que has leído en [Cha15], la ecuación de Schrödinger para una partícula libre (en ausencia de fuerzas, $V = 0$) es

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi. \tag{2}$$

Uno podría "justificar" esta ecuación pidiendo que $e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x}-Et)/\hbar}$, que aúna las fórmulas de Planck y de Broglie, sea solución e interpretando que simplemente afirma $E = \|\vec{p}\|^2/2m$, lo cual es una relación bien conocida de la mecánica básica cuando no hay potencial ($E = \frac{1}{2}mv^2$ y $\vec{p} = m\vec{v}$). Procediendo de esta forma, si usamos la fórmula relativista (1), la ecuación natural es la llamada *ecuación de Klein-Gordon*:

$$\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} - \hbar^2c^2\Delta\Psi + m^2c^4\Psi = 0. \tag{3}$$

1) Comprueba que realmente $\Psi = e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x}-Et)/\hbar}$ satisface esta ecuación.

Lo mismo (3) te ha aparecido en algún curso de análisis con $\hbar = c = 1$. Es la ecuación de ondas con un término más. El propio Schrödinger comenzó introduciendo (3) pero vio que daba problemas y se quedó con (2). Con lo que hemos visto, dos problemas importantes son que la probabilidad $\int |\Psi|^2$ no se conserva y que dado un estado inicial $\Psi(\vec{x}, t = 0)$ no es posible deducir sin más información el estado en los tiempos futuros. Es lo mismo que ocurre en la ecuación de ondas: fijar $u(x, 0)$ da lugar a infinitas soluciones si no se fija también el valor de $u_t(x, 0)$. La razón matemática general para ello es que (3) no es de primer orden en t mientras que (2) sí lo es.

Este último problema sugirió a Dirac que quizá hubiera una ecuación de primer orden que implicara (3). Por ejemplo, la ecuación de ondas se puede "factorizar" usando

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

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

Con esta idea en mente, buscó una "factorización" del primer miembro de (3) de la forma

$$\Big(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - i\hbar c\big(\alpha_1\frac{\partial}{\partial x} + \alpha_2\frac{\partial}{\partial y} + \alpha_3\frac{\partial}{\partial z}\big) + \alpha_4 mc^2\Big)\Big(i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} - i\hbar c\big(\alpha_1\frac{\partial \Psi}{\partial x} + \alpha_2\frac{\partial \Psi}{\partial y} + \alpha_3\frac{\partial \Psi}{\partial z}\big) + \alpha_4 mc^2\Psi\Big)$$

suponiendo que la ecuación buena era

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} - i\hbar c\big(\alpha_1\frac{\partial \Psi}{\partial x} + \alpha_2\frac{\partial \Psi}{\partial y} + \alpha_3\frac{\partial \Psi}{\partial z}\big) + \alpha_4 mc^2\Psi = 0 \tag{4}$$

con α_j constantes. Si comparamos con la ecuación de Schrödinger o pensamos de nuevo en términos de $e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x} - Et)/\hbar}$, es natural definir el Hamiltoniano asociado (la energía) como

$$H = i\hbar c\big(\alpha_1\frac{\partial}{\partial x} + \alpha_2\frac{\partial}{\partial y} + \alpha_3\frac{\partial}{\partial z}\big) - \alpha_4 mc^2. \tag{5}$$

Resulta que al imponer que la factorización anterior diera realmente el primer miembro de (3), llegó a que las constantes de (4) satisfacen las siguientes relaciones:

$$\alpha_\mu^2 = 1, \qquad \alpha_\mu\alpha_\nu + \alpha_\nu\alpha_\mu = 0 \quad \text{para } \mu \neq \nu, \quad 1 \leq \mu, \nu \leq 4. \tag{6}$$

Estas ecuaciones no tienen solución por tanto parece que no queda más que abandonar.

2) [Trivial] Explica por qué (6) no tiene solución.

Dirac tuvo la imaginativa idea de pensar que quizá hay que buscar soluciones con matrices. La expresión (5) sugiere que deberíamos pedir que fueran hermíticas (para que H también lo sea). Desde el punto del vista del álgebra, las soluciones matriciales tienen alguna motivación. Igual que los complejos extienden a los reales y permiten resolver más ecuaciones, los complejos se extienden con matrices (los cuaterniones y los octoniones se pueden interpretar matricialmente). Lo que parece un cuento de hadas es que ese artificio matemático vaya a corresponder a algo físico porque para que (4) tenga sentido tendríamos que pensar que Ψ deja de ser una función escalar.

En toda esta hoja he utilizado la notación original de Dirac, sobre todo para que puedas hacer el siguiente ejercicio. Es algo diferente de la habitual actualmente, ten cuidado si acaso comparas con otras fuentes.

3) Lee §2 de [Dir28] (hay un enlace en [Wik17]). Te aclaro algo más de la notación, $(p_1, p_2, p_3) := -ih\nabla$ y $(\sigma, \mathbf{p}) := \sigma_1 p_1 + \sigma_2 p_2 + \sigma_3 p_3$ con σ_j las de cuatro dimensiones (hoy en desuso), no las de Pauli.

Se puede probar que no hay soluciones ni con matrices 2×2 (lo iba a poner como ejercicio pero ya es bastante larga esta hoja) ni con matrices 3×3. Las primera solución ocurre en dimensión 4. Claramente no es única, porque si α_μ cumple (6), $C^{-1}\alpha_\mu C$ también (con C unitaria si se quiere preservar la hermiticidad). En realidad, cualquier elección da lugar a la misma física y hay dos elecciones famosas. Aunque no las usaremos para nada, las que da Dirac en [Dir28] son, definidas por bloques 2×2,

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

donde O y $\mathbb{I}$ son las matrices nula e identidad 2×2 y aquí y en lo sucesivo σ_j, $j = 1, 2, 3$ son las matrices de Pauli habituales de las hojas anteriores. Con ello, Dirac tuvo que imponer que la función de ondas ya no era una función escalar que toma valores en $\mathbb{C}$ sino una función que toma valores en $\mathbb{C}^4$. Con estos convenios, (4) es lo que se llama la *ecuación de Dirac*.

Vamos a ver que (4) salva la interpretación probabilista que no conservaba (3). Escribimos $A^\dagger$ para indicar la matriz traspuesta conjugada de A. De esta forma $\Psi^\dagger\Psi$ es $\|\Psi\|^2$, el módulo como vector de $\mathbb{C}^4$. Utilizando que α_j son hermíticas ($\alpha_j^\dagger = \alpha_j$), a partir de (4) se tiene

$$\text{(7)} \qquad \frac{\partial\|\Psi\|^2}{\partial t} = \Psi^\dagger \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial t}\Psi = c\Big(\frac{\partial(\Psi^\dagger\alpha_1\Psi)}{\partial x} + \frac{\partial(\Psi^\dagger\alpha_2\Psi)}{\partial y} + \frac{\partial(\Psi^\dagger\alpha_3\Psi)}{\partial z}\Big).$$

La última expresión es la divergencia de un campo y, como en la ecuación de Schrödinger (el caso de una dimensión lo hiciste en la hoja 3), si Ψ decae adecuadamente en el infinito, al aplicar el teorema de la divergencia se concluye que la integral en $\mathbb{R}^3$ del primer miembro es cero. Por tanto $\int_{\mathbb{R}^3} \|\Psi\|^2$ es constante en t y se puede normalizar como uno. De esta forma, la regla de Born de que $\int_B \|\Psi\|^2$ es la probabilidad de que la partícula se detecte en la región B se puede mantener si contradicciones.

4) Explica este argumento, en especial deduce (7) de (4).

Por último, vamos al objetivo de esta hoja, probar que la ecuación de Dirac (4) sugiere la existencia del espín. Para ello hay que recordar un poco de física. En mecánica clásica, el momento angular de una partícula se define como $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p} = (yp_3 - zp_2, zp_1 - xp_3, xp_2 - yp_1)$. Cada una de sus componentes se conserva para partículas libres o para las que se mueven bajo fuerzas centrales.

En mecánica cuántica estas componentes son operadores que actúan sobre las funciones de onda (con p_j como en [Dir28]). ¿Qué quiere decir la conservación en términos de operadores? Significa la conmutación con el Hamiltoniano[1].

Vamos a ver que en este sentido, la conservación del momento angular falla en la ecuación de Dirac. Consideremos la tercera componente $L_z = xp_2 - yp_1$ (con las otras, el cálculo es análogo). Se tiene, con H como en (5),

$$(L_z H - HL_z)\Psi = c\hbar^2 \sum_{j=1}^{3} \alpha_j \left(\Big(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} \Big) \frac{\partial \Psi}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \Big(x\frac{\partial \Psi}{\partial y} - y\frac{\partial \Psi}{\partial x} \Big) \right)$$

donde $(x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$. Es fácil ver que las derivadas segundas se cancelan y resulta

$$L_z H - HL_z = \hbar^2 c \Big(\alpha_2 \frac{\partial}{\partial x} - \alpha_1 \frac{\partial}{\partial y} \Big) = i\hbar c(\alpha_2 p_1 - \alpha_1 p_2) \tag{8}$$

que no es el operador nulo.

5) Comprueba (8).

Lo que vamos a ver es que existe una matriz constante S tal que $(L_z + S)H - H(L_z + S)$ es nulo, eso significa que para un electrón regulado por (4) falta añadir S al momento angular para que se conserve, lo que sugiere que ese momento angular que falta es intrínseco, está en el propio electrón. Esta matriz S tiene que ver con σ_3 e indica el espín en la dirección z. Más adelante, añadiré algún comentario sobre esto, ahora vamos con las matemáticas probando la existencia de S.

6) Deduce de $(L_z + S)H - H(L_z + S) = L_z H - HL_z - (S\alpha_4 - \alpha_4 S)mc^2 - c(S\alpha_j - \alpha_j S)p_j$ que la existencia de tal S constante con $(L_z + S)H - H(L_z + S)$ nulo, equivale a que haya una solución de las ecuaciones matriciales:

$$S\alpha_1 - \alpha_1 S = i\hbar\alpha_2, \quad S\alpha_2 - \alpha_2 S = -i\hbar\alpha_1, \quad S\alpha_3 - \alpha_3 S = 0, \quad S\alpha_4 - \alpha_4 S = 0.$$

[1] Esto es un poco largo de explicar, dalo por supuesto. Solo te diré que si conmutan, se pueden diagonalizar simultáneamente y entonces las mediciones correspondientes al operador son, en cierto modo, independientes del Hamiltoniano, que regula la evolución del sistema. En [FLS65, §17] hay una explicación en términos de simetrías.

7) Utilizando las relaciones (6), prueba que $S = -\frac{1}{2}i\hbar\alpha_1\alpha_2$ resuelve estas ecuaciones. Creo que hay unicidad pero no pido que la demuestres, solo que compruebes la solución.

En el último ejercicio la comprobación es independiente de la elección particular de las α_μ, se usa (6) nada más, pero si comprobases qué sale para las matrices, citadas anteriormente, que escogió Dirac en [Dir28], verás que S sale la matriz σ_3 duplicada en la diagonal con un factor $-i\hbar/2$. En la conservación de L_x y L_y saldría lo mismo pero con σ_1 y σ_2. Esto apunta a una conexión con el espín tal como lo habíamos estudiado hasta ahora. También el factor $-i\hbar/2$ es significativo. Cuando se resuelve la ecuación de Schrödinger para el electrón del átomo de hidrógeno (un protón y un electrón ligados por fuerza eléctrica), los momentos angulares son múltiplos, en cierto sentido, de $-i\hbar$ y la aparición en espectroscopía de niveles de energía que parecían corresponder a mitades de momentos angulares en presencia de campos magnéticos (efecto Zeeman anómalo) es lo que hizo sospechar que existía el espín. Sirva todo esto para justificar que, aunque en esta hoja no hemos profundizado demasiado porque excede los límites de tu trabajo, hay una estrecha relación entre la información matemática que contiene la ecuación de Dirac y el espín como propiedad física.

Un último comentario. Si la ecuación de Dirac (4) indica un electrón con espín y los espines los representábamos con elementos de $\mathbb{C}^2$, parece que lo normal sería que Ψ tuviera dos coordenadas y no cuatro pero, como hemos dicho, es imposible resolver (6) en dimensión dos. ¿Por qué hay el doble de información? ¿Por qué en S las matrices de espín aparecen duplicadas? Cuando uno escribe soluciones explícitas de (4), lo cual no hemos hecho aquí, hay dos tipos de términos [Kla13, Ch. 4] lo que hizo pensar a Dirac que en realidad (4) tiene información de dos partículas: lo que hoy llamamos el electrón y su antipartícula el positrón. Sin ninguna evidencia experimental, Dirac tuvo la osadía de conjeturar a partir de la estructura de las soluciones de (4) que los positrones existían y años después se detectaron en el laboratorio.

En este último tema de tu trabajo, más avanzado, te dejo bastante libertad para lo que me entregues:

8) Escribe con tus palabras y con la extensión que consideres razonable, lo que te parezca más relevante y atractivo de lo que has aprendido de esta hoja. Debe incluir, por supuesto, la ecuación de Dirac y algo acerca de su relación con el espín.

Referencias

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

[Cha15] F. Chamizo. Un poco de física cuántica para chicos listos de primero (del grado de física o matemáticas). `http://www.uam.es/fernando.chamizo/physics/physics.html`, 2015.

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

[FLS65] R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands. *The Feynman lectures on physics. Vol. 3: Quantum mechanics.* Addison-Wesley Publishing Co., Inc., Reading, Mass.-London, 1965.

[Kla13] R. D. Klauber. *Student Friendly Quantum Field Theory.* Sandtrove Press, second edition, 2013.

[Sch85] B. F. Schutz. *A First Course in General Relativity.* Cambridge University Press, Cambridge, 1985.

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