Esta hoja es un poco larga porque tiene muchas explicaciones, en gran medida tomadas de otros trabajos que he dirigido relacionados con la ecuación de Dirac. Es importante que la entiendas bien porque constituye una parte fundamental de tu TFG. Seguramente te podrás saltar unas cuantas cosas porque las sepas de antemano.

La ecuación de Dirac en su forma habitual es algo así como la ecuación de Schrödinger relativista para partículas libres. Por ello, hay que saber algo de relatividad. Aquí lo reduciremos a un mínimo, simplemente la relación entre la energía y el momento y un aspecto meramente notacional.

Por consideraciones que provenían de las ecuaciones de Maxwell, H.A. Lorentz introdujo unas transformaciones que mezclaban espacio y tiempo para cambiar de sistema inercial. A. Einstein, con su famoso artículo [3] sobre la relatividad especial, dio un carácter real a las transformaciones de Lorentz, en vez del ficticio atribuido por Lorentz, y elevó su importancia más allá de la electrodinámica haciéndolas participar en una nueva mecánica. H. Minkowski creó un contexto matemático para la relatividad especial (que originariamente no agradó a Einstein) a través de un espacio de cuatro dimensiones. Esencialmente, en vez de tiempos y espacios por separado consideró vectores $\vec{s} = (ct, x, y, z)$ con c la velocidad de la luz y la manera de medir $d\tau^2 = dt^2 - c^{-2}\big(dx^2 + dy^2 + dz^2\big)$, de esta forma, las transformaciones de Lorentz eran las aplicaciones que dejaban invariantes las longitudes. Para velocidades cotidianas, $d\tau$ es como el diferencial de tiempo pero para velocidades cercanas a la de la luz, no lo es. El análogo del momento lineal es el *cuadrimomento*

$$\mathbf{p} = m\frac{d\vec{s}}{d\tau} = \Big(\frac{mc}{\sqrt{1-v^2/c^2}}, \frac{mv_x}{\sqrt{1-v^2/c^2}}, \frac{mv_y}{\sqrt{1-v^2/c^2}}, \frac{mv_z}{\sqrt{1-v^2/c^2}}\Big).$$

Se comporta bien por las transformaciones de Lorentz y para todos los observadores tiene longitud al cuadrado m^2 con la manera de medir de Minkowski. Las tres últimas coordenadas, cuando $|v| \ll c$, son aproximaciones del momento clásico. Una hipotética ley de conservación del cuadrimomento aproxima a la conservación del momento lineal newtoniano en estas tres últimas coordenadas y la nueva coordenada debería aproximar a la otra conservación que conocemos de la mecánica de Newton: la de la energía. Por Taylor, para $|v| \ll c$

$$\frac{mc}{\sqrt{1-v^2/c^2}} = mc + \frac{1}{c}\cdot\frac{1}{2}mv^2 + \dots$$

lo que sugiere que multiplicando por c aproximamos la energía cinética salvo una constante (en la mecánica de Newton añadir una constante fija a la energía es irrelevante porque solo su variación se manifiesta en trabajo). Por tanto, escribimos $\mathbf{p} = (c^{-1}E, \vec{p})$ donde E es la energía relativista y $\vec{p}$ es el momento (tridimensional) relativista. Por las fórmulas anteriores, lo dicho respecto a la longitud se traduce en la fórmula $(c^{-2}E)^2 - c^{-2}\|\vec{p}\|^2 = m^2$ o, equivalentemente,

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

Para $\vec{p}=\vec{0}$ se sigue la famosa fórmula $E=mc^2$. Si cuantizamos (1) cambiando energías y momentos por sus operadores, se llega a la *ecuación de Klein-Gordon*

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

1) Comprueba esta deducción de la ecuación de Klein-Gordon a partir de (1).

En principio la ecuación de Klein-Gordon es un análogo natural de la ecuación de Schrödinger para una partícula libre e introduciendo un potencial de Coulomb uno podría pensar que estamos en condiciones de resolver el problema del átomo de hidrógeno relativista. Sin embargo hay un problema fundamental que deriva de que la ecuación es de segundo orden: dado un estado inicial $\Psi(\vec{x},t=0)$ no es posible deducir sin más información el estado en los tiempos futuros, y esto además afecta a la interpretación probabilista de $\int|\Psi|^2$. Es similar a lo que ocurre en la ecuación de ondas: fijar $u(x,0)$ da lugar a infinitas soluciones si no se fija también el valor de $u_t(x,0)$.

Para introducir la nueva ecuación creada por P.A.M. Dirac, es muy conveniente trabajar con *unidades relativistas*. Si ya las conoces, te puedes saltar el siguiente párrafo y ejercicio.

En breve, las unidades relativistas consisten en suponer que la velocidad de la luz c es igual a 1 (un uno adimensional). Esto significa que 299792458 metros es lo mismo que un segundo. Consecuentemente podemos medir el tiempo con unidades de longitud o la longitud con unidades de tiempo. Al principio esto es lioso pero con una mínima práctica uno se acostumbra a ello y lo bueno que tiene este convenio es que muchas fórmulas, entre ellas la ecuación de Dirac, se vuelven más simples y fáciles de recordar. Por ejemplo, en textos avanzados no es difícil ver que se emplea $E=m$ con E la energía y m la masa. Está en unidades relativistas y para pasarla a unidades "normales", llamadas no relativistas, se haría del siguiente modo: Sabemos que la energía (como el trabajo) es fuerza por espacio y la fuerza masa por aceleración, por tanto sus unidades son $ML/T^2\cdot L=M(L/T)^2$ mientras que las unidades de m son M entonces el $(L/T)^2$ que falta debe ser c^2, ya que $c=1$ hace que las unidades de L y T coincidan, por tanto la fórmula normal es $E=mc^2$. Fíjate que es más sugestivo pensar que la energía es igual a la masa, lo que afirma $E=m$, que pensar $E=mc^2$. La única pega de las unidades relativistas es que uno pierde la intuición acerca de qué es grande y pequeño a nuestra escala porque c^2 es enorme en nuestra vida diaria mientras que 1 no lo es.

2) Una de las trasformaciones de Lorentz en unidades relativistas es $t'=(t-vx)/\sqrt{1-v^2}$ con t y t' tiempos, x espacio y v velocidad. Escríbela en unidades no relativistas.

La ecuación de Klein-Gordon en unidades relativistas es:

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

Volviendo al problema antes señalado de que sea de segundo orden y de la comparación con la ecuación de ondas, Dirac pensó que quizá hubiera una ecuación de primer orden que implicara (2). 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, Dirac buscó una "factorización" del primer miembro de (2) de la forma

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

suponiendo que la ecuación buena era

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} + i\hbar\big(\alpha_1\frac{\partial \Psi}{\partial x} + \alpha_2\frac{\partial \Psi}{\partial y} + \alpha_3\frac{\partial \Psi}{\partial z}\big) - \alpha_4 m\Psi = 0 \tag{3}$$

con α_j constantes. La notación habitual, proveniente de [2] (hay un enlace en [7]), es llamar β a α_4 pero eso es irrelevante.

Resulta que al imponer que la factorización anterior diera realmente el primer miembro de (2), llegó a que las constantes de (3) satisfacen las siguientes relaciones:

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

Estas ecuaciones no tienen solución por la lapidaria razón de que los números reales cumplen la propiedad conmutativa, por tanto parece que no queda más que abandonar. Dirac tuvo en [2] la imaginativa idea de buscar soluciones con matrices para impedir la conmutatividad. En el interesante libro [1] hay más acerca de esta idea y la biografía de Dirac.

3) Comprueba que realmente si tuviéramos (4) entonces habríamos factorizado (2) y, por tanto, (3) implicaría (2).

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 (3) tenga sentido tendríamos que pensar que Ψ deja de ser una función escalar.

El paso de números a matrices tenía cierto precedente en física cuántica[1] pues un año antes de la publicación de [2], W. Pauli en su estudio del momento magnético del electrón [6] había

[1] De hecho una de las primeras formulaciones, hoy obsoleta, de la mecánica cuántica consistió en cambiar cantidades escalares, como las coordenadas de la posición o el momento, por matrices [8].

necesitado tres “cantidades” σ_1, σ_2 y σ_3, que cumplieran

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

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

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

Estas matrices casi resuelven (4), en el sentido de que

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

entendiendo que I, la matriz identidad, es el análogo de 1 y O, la matriz nula, el de 0. Sin embargo no es posible completar este conjunto de matrices para que se cumpla del todo (4).

4) Comprueba tres de las relaciones anteriores, las que tú prefieras, por ejemplo $\sigma_1^2 = I$, $\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_1 = O$, $\sigma_2^2 = I$. Demuestra que no existe ninguna matriz $\alpha_4 \in \mathcal{M}_{2\times 2}(\mathbb{C})$ tal que (4) se verifique con $\alpha_j = \sigma_j$, $j = 1, 2, 3$.

Antes de seguir, vamos con un comentario medianamente técnico. Si comparamos (3) con la ecuación de Schrödinger, es lógico definir el operador Hamiltoniano asociado (la energía) como

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

Es natural (y está entre los postulados de la mecánica cuántica [4]) que el operador H sea autoadjunto, para asegurar que la energía solo tome valores reales. Recuerdes o no de algún curso de grado qué significa esto aquí, el caso es que requiere que las matrices α_μ en (5) sean *hermíticas*, es decir, que satisfagan $A^\dagger = A$ donde $\dagger$ en el exponente es la abreviatura que se usa en física para trasponer una matriz y conjugar sus elementos.

Se puede probar [5, XX.7] que la dimensión más baja para la que (4) tiene solución con matrices hermíticas es 4. Desconozco si hay una prueba fácil de esto. Dirac posiblemente procedió por tanteos, jugando con las matrices de Pauli, encontrando la solución

$$\alpha_j = \begin{pmatrix} O & \sigma_j \\ \sigma_j & O \end{pmatrix} \quad \text{para } j = 1, 2, 3 \qquad \text{y} \qquad \alpha_4 = \begin{pmatrix} I & O \\ O & -I \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Donde las matrices están definidas por bloques 2×2.

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

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

6) Sea $\{\alpha_\mu\}_{\mu=1}^4$ como en (6). Demuestra que para cualquier $U \in \mathcal{M}_{4\times 4}(\mathbb{C})$ unitaria[2] se cumple que $\{U^{-1}\alpha_\mu U\}_{\mu=1}^4$ también son matrices hermíticas que resuelven (4).

Hay un resultado que afirma que no hay más soluciones que las del ejercicio anterior (si tienes curiosidad por la prueba, que no es sencilla, está en [5, XX.III.10]). Es decir, la solución dada por Dirac es única salvo cambios de base de las matrices a una base ortonormal.

Sustituyendo en (3) la solución de Dirac, o cualquier otra de la familia, tenemos por fin la *ecuación de Dirac* que también se puede escribir en perfecta analogía con la ecuación de Schrödinger como

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi \qquad \text{con } H \text{ como en (5).}$$

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

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

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

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

$$\Big(i\hbar\sum_{\mu=0}^{3}\gamma^\mu\partial_\mu - m\Big)\Psi = 0. \tag{7}$$

Donde el cero de la derecha es vectorial (de cuatro coordenadas, un matemático purista escribiría $\vec{0}$ y también $\vec{\Psi}$ pero nunca se hace). Si escogemos la solución de Dirac (6), se sigue

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

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

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

[3]Los físicos utilizan superíndices, x^μ en vez de x_μ, como en las γ^μ, pero no te preocupes por ello. Si lo escribes en tu trabajo, ponlo como prefieras.

Los γ^μ anteriores, que corresponden a (6) se dice que son la *representación de Dirac*. Para algunos temas es conveniente considerar una solución distinta que corresponde a tomar la matriz unitaria

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

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

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

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

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

En los libros de física la ecuación de Dirac (7) aparece a menudo en la forma compacta

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

porque, siguiendo una notación introducida por R. Feynman, $\partial\!\!\!/$ abrevia al operador

$$\gamma^0\partial_0 + \gamma^1\partial_1 + \gamma^2\partial_2 + \gamma^3\partial_3.$$

Incluso también aparece simplemente como $(i\partial\!\!\!/ - m)\Psi = 0$. Esto ocurre cuando se utilizan las llamadas *unidades de Planck*, o *unidades naturales*, con las que no solo $c = 1$ sino que también $\hbar = 1$.

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

9) Escribe (7) en unidades no relativistas. Para ello ten en cuenta que las γ^μ son constantes matriciales adimensionales.

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

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

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

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

Tarea a entregar. Escribe un documento que justifique la ecuación de Dirac con lo que has aprendido a través los ejercicios anteriores. Incluye lo que quieras de relatividad o bien con explicaciones o bien con referencias.

Esta es una parte importante de tu trabajo y quiero dejarte bastante libertad para que lo plantees a tu gusto. Por ello, no te pongo limitación sobre la extensión. Aprovecha lo que quieras de mis explicaciones o busca otras que te gusten más.

Referencias

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

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

[3] A. Einstein. Zur Elektrodynamik bewegter Körper. *Annalen der Physik*, 17:891–921, 1905.

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

[5] A. Messiah. *Quantum Mechanics.* Dover books on physics, 1999.

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

[7] Wikipedia contributors. Dirac equation — Wikipedia, the free encyclopedia. `https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Dirac_equation&oldid=1057515916`, 2021. [Online; accessed 29-November-2021].

[8] Wikipedia contributors. Matrix mechanics — Wikipedia, the free encyclopedia. `https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Matrix_mechanics&oldid=1050864801`, 2021. [Online; accessed 29-November-2021].