22. Ecuaciones de onda relativistas: Klein-Gordon

[Sch 5.1-2]

Ecuaciones de onda relativistas

En el momento actual tenemos dos formalismos cualitativamente diferentes, tanto en la estructura como en la aplicabilidad, para los dos componentes de un sistema electromagnético:

- La materia cargada está descrita por un formalismo intrínsecamente no relativista, basado en la función de onda ψ que resuelve una ecuación de Schrödinger con un potencial apropiado.[1] Los estados del sistema tienen un número de partículas fijo (jerga: *espacio de Hilbert de una partícula*), y tienen asociada una densidad de probabilidad $|\psi|^2$.

- La radiación electromagnética libre está descrita por un formalismo completamente relativista, basado en la definición de un operador de campo $\hat{\Phi}_{\mathrm{I}}$ en la imagen de interacción (o, de manera equivalente, de sus modos de Fourier, i.e. los operadores de creación y destrucción) y de un hamiltoniano apropiado. Los estados no tienen un número fijo de partículas, ya que es posible crear y destruir cuantos de campo (jerga: *espacio de Fock*).

Siguiendo el desarrollo histórico, nos ocuparemos primero de construir una descripción de la materia válida en el régimen relativista, buscando ecuaciones de ondas que sean covariantes bajo transformaciones de Lorentz y cuyas soluciones admitan una interpretación probabilística. En concreto, el objetivo será obtener una descripción cuántica de un electrón relativista. Este ejercicio nos permitirá comprender el origen del spin del electrón, y hará emerger el concepto de antimateria, proporcionando un punto de partida natural para una segunda cuantización de los campos de materia (promoción de la función de onda relativista a operador campo).

En primer lugar derivaremos la ecuación de Klein-Gordon [Schrödinger 1926; Gordon 1926; Klein 1927], y estudiaremos sus limitaciones para describir el electrón. Para superarlas, en un segundo paso construiremos la ecuación de Dirac.

[1] Nótese que los observables derivados de la ecuación de Schrödinger no son invariantes bajo transformaciones de Lorentz, y que la separación entre energía cinética y potencial no tiene sentido a velocidades comparables a c.

Ecuación de Klein-Gordon libre

Derivación

La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo en el espacio de coordenadas tiene la forma

$$i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{x},t) = \left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V(\mathbf{x})\right]\psi(\mathbf{x},t)\,, \qquad \psi(\mathbf{x},t)\in\mathbb{C}\,. \tag{22.1}$$

El origen de la misma es la aplicación del *principio de correspondencia*

$$E \;\leftrightarrow\; i\hbar\partial_t \qquad\qquad \mathbf{p} \;\leftrightarrow\; -i\hbar\nabla \tag{22.2}$$

a la relación de dispersión no relativista

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x})\,. \tag{22.3}$$

Una manera evidente de intentar la construcción de una versión relativista de la ecuación de Schrödinger para una partícula libre es repetir el ejercicio, y aplicar el principio de correspondencia a la relación de dispersión relativista

$$E^2 = \mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4\,. \tag{22.4}$$

Recordando la definición de la coordenada minkowskiana $x^0 := ct$, el resultado es una ecuación diferencial de la forma

$$-\hbar^2\partial_0^2\phi(\mathbf{x},t) = \left[-\hbar^2\nabla^2 + m^2c^2\right]\phi(\mathbf{x},t) \tag{22.5}$$

o, escrito de otra forma,

$$\boxed{\left[\partial_0^2 - \nabla^2 + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right]\phi(\mathbf{x},t) = 0\,.} \tag{22.6}$$

Esta es la **ecuación de Klein-Gordon para una partícula libre**. Observaciones:

- De ahora en adelante utilizaremos un formalismo covariante, e.g. $\partial_0^2 - \nabla^2 = \partial_\mu\partial^\mu$ etc., con métrica $\eta = \mathrm{diag}(1,-1,-1,-1)$. En particular, la ecuación se convierte en

$$\boxed{\left[\partial_\mu\partial^\mu + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right]\phi(x) = 0\,.} \tag{22.7}$$

- El operador diferencial que aparece en la ecuación es real. Por lo tanto, es natural que las soluciones sean $\phi(\mathbf{x},t)\in\mathbb{R}$, aunque en principio es posible $\psi(\mathbf{x},t)\in\mathbb{C}$.

- Como preparación para el formalismo típico de la teoría cuántica de campos, es conveniente preguntarse qué densidades lagrangianas dan lugar a una ecuación de movimiento (Euler-Lagrange) con la forma de una ecuación de onda dada. Es fácil comprobar **(ejercicio)** que

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{Schrödinger}} &= \psi^* \left[i\hbar\partial_t + \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} - V(\mathbf{x}) \right] \psi \,, \\ \mathcal{L}_{\text{KG};\phi\in\mathbb{R}} &= \frac{1}{2} \left[\partial_\mu\phi\partial^\mu\phi - \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\phi^2 \right] \,, \\ \mathcal{L}_{\text{KG};\phi\in\mathbb{C}} &= \partial_\mu\phi^*\partial^\mu\phi - \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\phi^*\phi \end{aligned} \tag{22.8}$$

cumplen este requisito. Recuérdese que las ecuaciones de Euler-Lagrange se obtienen minimizando la acción

$$S = \int \mathrm{d}t \int \mathrm{d}^3x \, \mathcal{L} = \frac{1}{c} \int \mathrm{d}^4x \, \mathcal{L} \,. \tag{22.9}$$

También es fácil comprobar que S_{KG} es invariante Lorentz tanto para $\phi \in \mathbb{R}$ como para $\phi \in \mathbb{C}$. Esto se sigue del hecho que $\mathcal{L}$ es invariante si ϕ se transforma como un escalar **(ejercicio)**, y de que la matriz Λ que implementa la transformación (vectorial) del cuadrivector de coordenadas tiene determinante de norma uno ($\Lambda \in SO(3,1)$)

$$x' = \Lambda x \;\Rightarrow\; \mathrm{d}^4x' = \underbrace{|\det \Lambda|}_{=1} \mathrm{d}^4x = \mathrm{d}^4x \,. \tag{22.10}$$

- Aunque en este contexto queremos interpretarlo como una función de onda, es convencional referirse a ϕ como **campo de Klein-Gordon** o **campo escalar** (debido a que es un escalar bajo transformaciones de Lorentz).

Soluciones

La ecuación KG se puede resolver fácilmente con técnicas de análisis de Fourier. Para ello introducimos un *cuadrivector número de ondas*

$$k := (k^0, \mathbf{k})^T \,, \qquad\qquad k^0 := \frac{\omega(\mathbf{k})}{c} = \sqrt{\mathbf{k}^2 + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}} \,. \tag{22.11}$$

Es fácil comprobar que k^0 tiene las dimensiones correctas de longitud inversa. Dado que la ecuación libre tiene como soluciones particulareslas dos ondas planas linealmente independientes $e^{\pm ik\cdot x}$, con $k \cdot x = k^\mu x_\mu = \omega(\mathbf{k})t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{x}$:

$$\left[\partial_\mu\partial^\mu + \frac{m^2c^2}{\hbar^2} \right] e^{\pm ik\cdot x} = \left[-k_\mu k^\mu + \frac{m^2c^2}{\hbar^2} \right] e^{\pm ik\cdot x} = \underbrace{\left[-(k^0)^2 + \mathbf{k}^2 + \frac{m^2c^2}{\hbar^2} \right]}_{=0} e^{\pm ik\cdot x} \,, \tag{22.12}$$

la solución general para $\phi(\mathbf{x},t) \in \mathbb{C}$ se podrá escribir como una combinación lineal arbitraria de la forma

$$\phi(\mathbf{x},t) = \sqrt{\hbar c} \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{\sqrt{(2\pi)^3 2k^0}} \left\{ a(\mathbf{k}) e^{-ik\cdot x} \,+\, b(\mathbf{k})^* e^{ik\cdot x} \right\} . \tag{22.13}$$

Si $\phi(\mathbf{x},t) \in \mathbb{R}$ las constantes de integración están constreñidas por la condición de realidad $a(\mathbf{k}) = b(\mathbf{k})$.

La integral se lleva a cabo sobre las componentes espaciales de k, y no sobre las cuatro componentes, porque k^0 no es una variable independiente — su valor está determinado por la relación de dispersión (22.11). Este es también el motivo para normalizar las constantes de integración de manera que aparezca el factor $(2k^0)^{-1/2}$ en el integrando: es evidente que $\mathrm{d}^3 k$ no es invariante bajo transformaciones de Lorentz, pero es fácil comprobar (**ejercicio**) que $\mathrm{d}^3 k/\sqrt{2k^0}$ sí lo es.

Interpretación probabilística

La interpretación física de las soluciones de la ecuación de Schrödinger está basada en la posibilidad de definir una densidad y una corriente de probabilidad

$$\rho(\mathbf{x},t) := |\psi(\mathbf{x},t)|^2 \,, \qquad \mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} \{\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi\} \tag{22.14}$$

que satisfacen una **ecuación de continuidad**

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \tag{22.15}$$

que garantiza la conservación de la probabilidad. Es fácil comprobar que, dado un potencial cualquiera, para que (22.15) se cumpla basta que ψ sea una solución de la ecuación de Schrödinger correspondiente.

Por lo tanto es importante estudiar si la ecuación KG preserva estas propiedades. Consideremos el caso $\phi \in \mathbb{C}$, multipliquemos la ecuación por ϕ^* a la derecha, y manipulémosla para obtener algo similar a una ecuación de continuidad:

$$\begin{aligned}
&\left[\partial_\mu \partial^\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right] \phi = 0 \\
&\quad \Rightarrow \quad \phi^* \left[\partial_\mu \partial^\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right] \phi = 0 \\
&\quad \Rightarrow \quad \phi \left[\partial_\mu \partial^\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right] \phi^* = 0 \\
&\quad \Rightarrow \quad \text{(sumando las dos últimas ecuaciones)} \;\; \phi^* \partial_\mu \partial^\mu \phi = \phi \partial_\mu \partial^\mu \phi^* \\
&\quad \Leftrightarrow \quad \partial_\mu \{\phi^* \partial^\mu \phi - \phi \partial^\mu \phi^*\} = 0 \\
&\quad \Leftrightarrow \quad \frac{1}{c^2} \partial_t \{\phi^* \partial_t \phi - \phi \partial_t \phi^*\} - \sum_{k=1}^{3} \partial_k \{\phi^* \partial_k \phi - \phi \partial_k \phi^*\} = 0 \,.
\end{aligned} \tag{22.16}$$

Por lo tanto, es posible reproducir la ecuación de continuidad preservando la misma definición de $\mathbf{j}$ que se tenía, pero con

$$\rho := \frac{i\hbar}{2mc^2}\left\{\phi^*\partial_t\phi - \phi\partial_t\phi^*\right\} \quad \in \mathbb{R}\,. \tag{22.17}$$

En notación covariante, con $j^0 := c\rho$ se puede escribir

$$\partial_\mu j^\mu = 0\,. \tag{22.18}$$

Este parece un buen punto de partida para construir una interpretación probabilística. Por otra parte, si $\phi \in \mathbb{R}$ tanto ρ como $\mathbf{j}$ se anulan. Dado que es natural considerar soluciones reales de la ecuación KG libre, la interpretación probabilística de la misma parece un tanto forzada. Además, aunque $\rho \in \mathbb{R}$ *no* ocurre, en general, $\rho \geq 0$, lo que complica considerar ρ como una densidad de probabilidad.

Acoplamiento al campo electromagnético

Si trabajamos con $\phi(x) \in \mathbb{C}$, es fácil construir una ecuación de KG en la que el campo escalar ϕ se acopla al campo electromagnético a través de la sustitución mínima: basta prescribir la propiedad de transformación gauge que encontramos para una función de onda que satisface la ecuación de Schrödinger

$$A_\mu \;\to\; A'_\mu = A_\mu - \partial_\mu\chi\,, \qquad\qquad \phi \;\to\; \phi' = e^{\frac{iq}{\hbar c}\chi}\phi\,, \tag{22.19}$$

donde q es la carga eléctrica asociada al campo. Ahora es fácil comprobar **(ejercicio)** que si definimos la **derivada covariante**

$$D_\mu := \partial_\mu + \frac{iq}{\hbar c}A_\mu \tag{22.20}$$

la **ecuación covariante de Klein-Gordon**

$$\left[D_\mu D^\mu + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right]\phi = 0 \tag{22.21}$$

es invariante gauge.

Interpretación probabilística en presencia de un campo electromagnético

Para construir una densidad y una corriente de probabilidad que satisfacen una ecuación de continuidad basta repetir exactamente la misma secuencia de operaciones que en (22.16), esta vez partiendo de la ecuación covariante. El resultado es **(ejercicio)**

$$\partial_\mu \underbrace{\left\{\phi^* D_\mu\phi - (\phi^* D_\mu\phi)^*\right\}}_{=2i\mathrm{Im}\{\phi^* D_\mu\phi\}} = 0\,, \tag{22.22}$$

i.e.

$$\partial_\mu J^\mu = 0\,, \qquad\qquad J^\mu := -\frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\,\{\phi^* D_\mu \phi\} := (c\rho, \mathbf{J})\,. \tag{22.23}$$

Es trivial ver que la cuadricorriente J^μ es invariante gauge. Las consideraciones hechas en el caso de la ecuación KG libre (i.e. en ausencia de campo electromagnético) se aplican también ahora, con la diferencia de que la invariancia gauge fuerza el carácter complejo de ϕ: el campo de KG no puede ser real si $A_\mu \neq 0$.

Descripción lagrangiana

De nuevo, es útil construir una densidad lagrangiana cuyas ecuaciones de Euler-Lagrange sean la ecuación de KG en presencia de un campo electromagnético. Es fácil comprobar que tal densidad se obtiene simplemente sustituyendo $\partial_\mu \to D_\mu$ en (22.8)

$$\mathcal{L}_{\mathrm{KG}} = D_\mu \phi^* D^\mu \phi - \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\phi^*\phi\,. \tag{22.24}$$

Es interesante observar que, en particular,

$$\frac{\partial \mathcal{L}_{\mathrm{KG}}}{\partial A_\mu} = -\frac{iq}{\hbar c}\,\{\phi^*\partial^\mu\phi - \phi\partial^\mu\phi^*\} + \frac{2q^2}{\hbar^2c^2}A^\mu\phi^*\phi = -\frac{iq}{\hbar c}\cdot 2i\,\mathrm{Im}\,\{\phi^* D^\mu\phi\}\,. \tag{22.25}$$

Así, se dice que “el cuadripotencial vector se acopla a la cuadricorriente”.

Límite no relativista

Una última propiedad deseable para una ecuación de onda relativista es que reproduzca la dinámica no relativista conocida (i.e. la ecuación de Schrödinger) en el límite $v \ll c \Leftrightarrow |\mathbf{k}| \ll mc/\hbar$. En dicho límite la relación de dispersión relativista se puede desarrollar en serie de potencias como

$$\begin{aligned} E(\mathbf{k}) = \hbar\omega(\mathbf{k}) = \hbar c k^0 = \hbar c\sqrt{\frac{m^2c^2}{\hbar^2} + k^2} & \\ = mc^2\sqrt{1 + \frac{\hbar^2k^2}{m^2c^2}} &\overset{|\mathbf{k}|\ll mc/\hbar}{\approx} mc^2\left(1 + \frac{1}{2}\frac{\hbar^2k^2}{m^2c^2} + \dots\right) \\ = mc^2 + \frac{\hbar^2k^2}{2m} + \dots\,, & \end{aligned} \tag{22.26}$$

i.e. la energía se puede escribir como la energía en reposo mc^2, más la energía no relativista $\mathbf{p}^2/2m$, más correcciones de orden superior en v/c.

Para obtener una expansión similar de la función de onda $\phi(x)$ empezaremos con la solución general (22.13) de la ecuación libre, y consideraremos un Ansatz de la forma

$$\begin{aligned}\phi(\mathbf{x},t) &= e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t}\phi_-(\mathbf{x},t) \,+\, e^{i\frac{mc^2}{\hbar}t}\phi_+(\mathbf{x},t) \\ &= e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t}\left\{\phi_-(\mathbf{x},t) \,+\, e^{i\frac{2mc^2}{\hbar}t}\phi_+(\mathbf{x},t)\right\}\,.\end{aligned} \tag{22.27}$$

Nótese que el factor de fase global de la segunda línea tiene la forma que correspondería a la evolución temporal de una solución estacionaria con energía mc^2; es decir, estamos intentando aislar la contribución de la energía en reposo y que los coeficientes $\phi_\pm(\mathbf{x},t)$ contengan la dependencia no trivial. Introduciendo el Ansatz en

$$\left[\frac{1}{c^2}\partial_t^2 - \nabla^2 + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right]\phi = 0 \tag{22.28}$$

y multiplicando ambos miembros de la ecuación por $\frac{\hbar^2}{2m}e^{i\frac{mc^2}{\hbar}t}$, se obtiene

$$\underbrace{-i\hbar\partial_t\phi_- - \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\phi_-}_{\text{(I)}} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{2mc^2}\partial_t^2\phi_-}_{\text{(II)}} + \underbrace{e^{i\frac{2mc^2}{\hbar}t}\left\{i\hbar\partial_t\phi_+ + \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\phi_+ + \frac{\hbar^2}{2mc^2}\partial_t^2\phi_+\right\}}_{\text{(III)}} = 0\,. \tag{22.29}$$

Los tres términos son

(I) una ecuación de Schrödinger libre (si es igualado a cero) para ϕ_-,

(II) un término de segunda derivada temporal de ϕ_- que se puede interpretar como una corrección relativista a la ecuación de Schrödinger, y

(III) una estructura idéntica para ϕ_+, multiplicada por una fase de oscilación temporal con frecuencia $2mc^2/\hbar$.

Interpretación

El factor de fase relativo entre las partes $-$ y $+$ es el mismo que aparece en el Ansatz. Si consideramos la evolución del sistema a lo largo de tiempos $\Delta t \gtrsim 2mc^2/\hbar$ el factor de fase global en (III) se "promediará" a cero, ya que da lugar a cambios de signo muy rápidos de ese miembro de la ecuación; nótese que si m es la masa del electrón $2mc^2/\hbar \simeq (6.45 \times 10^{-22}\ \mathrm{s})^{-1}$, de manera que a la escala atómica[2] esto ocurrirá de manera muy eficiente.

[2]Recuérdese que las frecuencias típicas de los átomos son varios órdenes de magnitud menores.

La imagen resultante es que ϕ_- puede ser considerado el límite no relativista de la ecuación KG, e incluso sabemos como introducir correcciones (añadiendo el término con ∂_t^2 en la ecuación de Schrödinger). El término con ϕ_+ se hace relevante sólo para tiempos muy pequeños, y es convencionalmente llamado de **Zitterbewegung** ("movimiento rápido"). La interpretación de ϕ_- como función de onda no relativista está reforzada por el hecho de que si despreciamos la parte ϕ_+ del Ansatz

$$\partial_t \phi \approx e^{-i\frac{mc^2}{\hbar}t}\left(-i\frac{mc^2}{\hbar}\right)\phi_- \quad \Rightarrow \quad \rho = \frac{i\hbar}{2mc^2}\left\{\phi^*\partial_t\phi - \phi\partial_t\phi^*\right\} \approx |\phi_-|^2 \tag{22.30}$$

tiene precisamente la forma que conocemos para el caso no relativista.

Zitterbewegung: interpretación de Feynman-Stückelberg

Es posible arrojar más luz sobre el término de Zitterbewegung introduciendo el Ansatz en la acción

$$\begin{aligned} S = \int \mathrm{d}^4x\, \mathcal{L}_{\mathrm{KG}} &= \int \mathrm{d}t \int_V \mathrm{d}^3x \left\{ \frac{1}{c^2}\partial_t\phi^*\partial_t\phi - \sum_j \partial_j\phi^*\partial_j\phi - \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\phi^*\phi \right\} \\ &= \int \mathrm{d}t \int_V \mathrm{d}^3x\, \phi^* \left\{ -\frac{1}{c^2}\partial_t^2 + \nabla^2 - \frac{m^2c^2}{\hbar^2} \right\} \phi\,, \end{aligned} \tag{22.31}$$

donde se ha pasado de la primera a la segunda línea integrando por partes. Sustituyendo (22.27) y operando se llega fácilmente a

$$\begin{aligned} S = \int \mathrm{d}t \int_V \mathrm{d}^3x\, \frac{2m}{\hbar^2}\Bigg\{ &\phi_-^* \left[i\hbar\partial_t + \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} - \frac{\hbar^2\partial_t^2}{2mc^2} \right] \phi_- \\ &+ \phi_+^* \left[-i\hbar\partial_t + \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} - \frac{\hbar^2\partial_t^2}{2mc^2} \right] \phi_+ \\ &+ e^{-i\frac{2mc^2}{\hbar}t}\phi_+^* \left[i\hbar\partial_t + \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} - \frac{\hbar^2\partial_t^2}{2mc^2} \right] \phi_- \\ &+ e^{-i\frac{2mc^2}{\hbar}t}\phi_-^* \left[-i\hbar\partial_t + \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} - \frac{\hbar^2\partial_t^2}{2mc^2} \right] \phi_+ \Bigg\}. \end{aligned} \tag{22.32}$$

Los dos últimos términos, que contienen los factores de oscilación rápida y mezclan ϕ_- y ϕ_+, deberían de nuevo anularse[3] cuando se estudian escalas de tiempo lo suficientemente largas, dejando sólo los dos primeros términos. En dicha aproximación los dos campos ϕ_- y ϕ_+ son independientes, y la minimización de la acción da lugar, respectivamente, a una ecuación de Schrödinger (con término corrector

[3]Por supuesto, esta es una idea intuitiva que podría no verificarse si se estudia la solución detallada de un problema concreto.

∂_t^2) para ϕ_- y a una ecuación de Schrödinger (idem) *con el signo opuesto en el tiempo* para ϕ_+. Por lo tanto, es posible interpretar el campo ϕ_+ como la parte de la solución “que se propaga hacia atrás en el tiempo”; esto se llama interpretación de Feynman-Stückelberg.