23. Ecuaciones de onda relativistas: Dirac

[Sch 5.3, Sak 3.1-2]

Motivación

La ecuación de Dirac se puede introducir siguiendo dos grandes líneas: el desarrollo histórico de la Mecánica Cuántica, o el punto de vista "moderno" consistente en estudiar las representaciones del grupo de Lorentz y construir objetos que se transforman de manera adecuada para generar estructuras invariantes. Nosotros seguiremos la primera vía, dejando la segunda para cursos avanzados en Teoría Cuántica de Campos, y basaremos la motivación para desarrollar la ecuación de Dirac en la superación de algunos de los aspectos insatisfactorios de la ecuación de Klein-Gordon.

El principal objetivo de las ecuaciones de onda relativistas es proporcionar una descripción fundamental (i.e. no limitada a $v \ll c$) del electrón. Aunque la ecuación de Klein-Gordon posee muchas de las propiedades deseables,

- (i) El hecho de partir de la expresión cuadrática de la relación de dispersión $E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4$ ha dado lugar, a través del principio de correspondencia, a una ecuación diferencial de segundo orden en el tiempo. Por otra parte, el concepto de evolución temporal en mecánica cuántica está basado en ecuaciones diferenciales lineales alternativamente, se podría preguntar cómo distinguir entre las dos soluciones posibles para E como función de \mathbf{p} , negativa y positiva, de la relación de dispersión.
- (ii) La densidad de probabilidad ρ asociada a la ecuación de Klein-Gordon compleja es real, pero no tiene un signo definido. Esto está relacionado con la observación anterior: tanto $e^{-ik\cdot x}$ como $e^{+ik\cdot x}$ son soluciones, i.e. existen soluciones que se propagan hacia adelante y hacia atrás en el tiempo (cf. también la discusión del Zitterbewegung).
- (iii) La ecuación de Klein-Gordon no arroja luz sobre la naturaleza del spin.

El problema que nos plantearemos será: ¿es posible construir una ecuación de onda invariante Lorentz lineal el ∂_t , partiendo de la relación de dispersión para una partícula relativista libre y aplicando el principio de correspondencia? (Dirac 1928).

Derivación

En términos del cuadrimomento $p = \hbar k = (E/c, \mathbf{p})$ la relación de dispersión se puede escribir como

$$p_{\mu}p^{\mu} - m^2c^2 = 0. (23.1)$$

Supongamos que es posible factorizar esta expresión como

$$p_{\mu}p^{\mu} - m^{2}c^{2} = (\beta^{\mu}p_{\mu} - mc)(\gamma^{\nu}p_{\nu} + mc) = 0$$
(23.2)

con β^{μ} , γ^{μ} = cte. (i.e. $\neq f(p)$). En tal caso podríamos construir una ecuación imponiendo que uno de los dos factores se anule, y aplicando el principio de correspondencia

$$(E/c, \mathbf{p}) \rightarrow (i\hbar \partial_t/c, -i\hbar \nabla).$$
 (23.3)

Para que la factorización exista hay que encontrar una solución en β^{μ} , γ^{μ} de

$$\beta^{\mu}\gamma^{\nu}p_{\mu}p_{\nu} + mc(\beta^{\mu} - \gamma^{\mu})p_{\mu} - m^{2}c^{2} = 0.$$
 (23.4)

Haciendo $\beta^{\mu} = \gamma^{\mu} \ \forall \mu$, esto se reduce a

$$\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}p_{\mu}p_{\nu} - m^{2}c^{2} = \frac{1}{2} \left(\gamma^{\mu}\gamma^{\nu} + \gamma^{\nu}\gamma^{\mu}\right)p_{\mu}p_{\nu} - m^{2}c^{2} = 0, \qquad (23.5)$$

donde en el último paso hemos usado que $p_{\mu}p_{\nu}$ es simétrico bajo $\mu \leftrightarrow \nu$. Dado que por hipótesis $p^2 = \eta^{\mu\nu}p_{\mu}p_{\nu} = m^2c^2$, se sigue que la ecuación se satisface si

$$\boxed{\{\gamma^{\mu}, \gamma^{\nu}\} = 2\eta^{\mu\nu}\mathbf{1},}$$
(23.6)

donde el factor 1 deja abierta la posibilidad de que γ^{μ} no sea un número, sino una matriz. Un conjunto de cuatro elementos $\{\gamma^{\mu}\}$ que satisface (23.6) es llamado álgebra de Clifford.

Si encontramos una solución del álgebra de Clifford, podremos aplicar el principio de correspondencia a uno de los dos factores $\gamma^{\mu}p_{\mu} \pm mc = 0$. Como veremos más adelante, la elección del signo es irrelevante; por ahora elegiremos el -, lo que nos conduce a la **ecuación de Dirac** (libre)

$$i\hbar \gamma^{\mu} \partial_{\mu} - mc \psi = 0.$$
(23.7)

Nótese que, si γ^{μ} es una matriz, ψ será un vector con su misma dimensión.

¹Es evidente que γ^{μ} no puede ser una constante escalar, ya que la condición $\gamma^{\mu}p_{\mu}\pm mc=0$ no se puede satisfacer con un γ^{μ} escalar independiente de p. De hecho, luego demostraremos explícitamente que (23.6) no tiene soluciones escalares.

Propiedades del álgebra de Clifford

Planteémonos ahora el problema de encontrar cuatro matrices $N \times N$, $\{\gamma^{\mu}, \mu = 0, 1, 2, 3\}$, que satisfagan (23.6). (No excluiremos a priori la posibilidad N = 0.) Es posible derivar varias propiedades genéricas:

• **Dimensión:** de (23.6) se sigue $(\gamma^0)^2 = -(\gamma^i)^2 = 1$. Por lo tanto, las cuatro matrices son invertibles $((\gamma^0)^{-1} = \gamma^0, \ (\gamma^i)^{-1} = -\gamma^i)$, ergo su determinante es distinto de cero. Usando esto:

$$\mu \neq \nu \rightarrow \gamma^{\mu} \gamma^{\nu} = -\gamma^{\nu} \gamma^{\mu} \Rightarrow \det(\gamma^{\mu}) \det(\gamma^{\nu}) = \det(-\mathbf{1}) \det(\gamma^{\nu}) \det(\gamma^{\mu})$$
$$\Rightarrow \det(-\mathbf{1}) = (-1)^{N} = 1$$
$$\Rightarrow N \text{ es par }.$$
(23.8)

• Traza:

$$\mu \neq \nu \rightarrow \gamma^{\mu} \gamma^{\nu} = -\gamma^{\nu} \gamma^{\mu} \Rightarrow \gamma^{\mu} = -(\gamma^{\nu})^{-1} \gamma^{\mu} (\gamma^{\nu})^{-1}$$

$$\Rightarrow \operatorname{Tr}(\gamma^{\mu}) = -\operatorname{Tr}[(\gamma^{\nu})^{-1} \gamma^{\mu} (\gamma^{\nu})^{-1}] = -\operatorname{Tr}(\gamma^{\mu})$$

$$\Rightarrow \operatorname{Tr}(\gamma^{\mu}) = 0.$$
(23.9)

• Hermiticidad: como veremos más abajo, para poder construir un hamiltoniano hermítico asociado a la ecuación de Dirac es necesario imponer $(\gamma^0)^{\dagger} = \gamma^0$, $(\gamma^0 \gamma^k)^{\dagger} = \gamma^0 \gamma^k$. De esto último se sigue

$$\gamma^k \gamma^0 = (\gamma^0 \gamma^k)^{\dagger} = (\gamma^k)^{\dagger} (\gamma^0)^{\dagger} = (\gamma^k)^{\dagger} \gamma^0$$

$$\Rightarrow (\gamma^k)^{\dagger} = \gamma^0 \gamma^k \gamma^0 = -(\gamma^0)^2 \gamma^k = -\gamma^k ,$$
(23.10)

i.e. γ^0 es hermítica y las γ^k son antihermíticas.

• Representaciones: las soluciones de (23.6) no son únicas: es fácil comprobar que si $\{\gamma^{\mu}\}$ es una solución, entonces $\{\Omega\gamma^{\mu}\Omega^{-1}\}$, donde Ω es cualquier matriz invertible, también lo es. Cada solución específica es una representación del álgebra.

Intentemos ahora construir matrices de dimensiones N=0,2,4 que satisfagan las propiedades anteriores:

- N=0: el único número complejo con traza nula es $0 \Rightarrow$ no hay solución.
- N=2: todas las matrices 2×2 de traza nula son combinaciones lineales de las matrices de Pauli

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$
 (23.11)

Dichas matrices satisfacen el álgebra

$$\{\sigma_i, \sigma_i\} = 2\delta_{ij}\mathbf{1}\,,\tag{23.12}$$

y de aquí es fácil concluir que no será posible construir con ellas cuatro matrices que satisfagan (23.6).²

• N=4: partiendo de (23.12), es muy fácil construir matrices 4×4 que satisfacen (23.6). Las dos representaciones más utilizadas son

$$\gamma^{0} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad \gamma^{k} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_{k} \\ -\sigma_{k} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{(representación estándar o de Dirac)}$$

$$0 \quad \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1} \\ 0 & \sigma_{k} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & \sigma_{k} \\ 0 & \sigma_{k} \end{pmatrix} \quad \text{(representación estándar o de Dirac)}$$

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ -\sigma_k & 0 \end{pmatrix} \quad \text{(representación de Weyl o quiral)}. \tag{23.13}$$

donde hemos adoptado una notación de bloques 2×2 . Independientemente de la representación usada, estas son las llamadas **matrices de Dirac** o **matrices** γ . La aparición de las matrices de Pauli es la primera indicación de que la estructura del álgebra de Clifford está relacionada con el spin.³

Cuando se considera la contracción de las matrices de Dirac con un cuadrivector, es frecuente usar la notación

$$\gamma^{\mu}v_{\mu} := \psi. \tag{23.14}$$

Por ejemplo, en esta notación la ecuación de Dirac se escribe

$$(i\hbar\partial - mc)\psi = 0. \tag{23.15}$$

Normalmente se usa la expresión en inglés "v-slash", "d-slash", etc. para referirse a estos objectos, que evidentemente son matrices 4×4 .

Propiedades de la ecuación de Dirac libre

Solución general

Volvamos a la ecuación de Dirac (23.7). Ahora sabemos que γ^{μ} son matrices 4×4 , de manera que ψ será un vector de cuatro componentes, que llamamos (e)spinor. El

 $^{^2}$ Las matrices de Pauli si permiten construir el equivalente del álgebra de Clifford en espaciotiempos con dos dimensiones espaciales.

 $^{^3}$ Es importante subrayar que el hecho de que la dimensión de las matrices de Dirac y la dimensión del espaciotiempo sean iguales no quiere decir que sean la misma cantidad, aunque el estudio de las propiedades del grupo de Lorentz permite demostrar que N es una función de la dimensión d del espaciotiempo: en general, las matrices son $2^{\left[\frac{d}{2}\right]}\times 2^{\left[\frac{d}{2}\right]}.$

índice que distingue las componentes de un espinor, así como los índices matriciales de γ^{μ} , son llamados espinoriales (spinorial).

La ecuación de Dirac libre tiene como solución particular una onda plana $e^{\pm ik \cdot x}$ multiplicada por un espinor arbitrario. Por lo tanto, es evidente que su solución general se puede escribir en la forma

$$\psi(\mathbf{x},t) = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{\sqrt{(2\pi)^3 (2k^0)}} \sum_{s=\pm 1} \left\{ a_s(\mathbf{k}) u_s(\mathbf{k}) e^{-ik \cdot x} + b_s^*(\mathbf{k}) v_s(\mathbf{k}) e^{ik \cdot x} \right\}, \quad (23.16)$$

donde $a_s(\mathbf{k}), b_s(\mathbf{k})$ son coeficientes complejos y los espinores u_s, v_s son una base ortonormal del espacio cuatridimensional de espinores:

$$u_s^{\dagger} \cdot u_{s'} = \delta_{ss'}, \qquad v_s^{\dagger} \cdot v_{s'} = \delta_{ss'}, \qquad u_s^{\dagger} \cdot v_{s'} = 0.$$
 (23.17)

Una elección simple es

$$u_{+} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u_{-} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad v_{+} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad v_{-} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (23.18)$$

Hamiltoniano y lagrangiano

Si separamos la ecuación de Dirac en una parte con ∂_t y otra con las derivadas espaciales podemos escribirla en la forma

$$i\hbar\gamma^0\partial_0\psi = -i\hbar\gamma^k\partial_k\psi + mc\psi \rightarrow i\hbar\partial_t\psi = -i\hbar c\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla\psi + mc^2\beta\psi$$
$$= \left[c\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\mathbf{p}} + mc^2\beta\right]\psi$$
(23.19)

donde hemos multiplicado ambos lados por $c\gamma_0$, y definido $\beta := \gamma^0, \alpha_k := \gamma^0 \gamma^k$. Esta forma es fuertemente reminiscente de una ecuación de Schrödinger, de manera que es tentador considerar el operador

$$\hat{H}_0 := c \,\alpha \cdot \hat{\mathbf{p}} + mc^2 \beta \tag{23.20}$$

como un hamiltoniano libre del sistema. Es importante advertir que al separar la dependencia temporal hemos roto la invariancia Lorentz, de manera que no está claro si es realmente lícito interpretar \hat{H}_0 como un hamiltoniano. Ignorando por ahora este problema, es interesante advertir que \hat{H}_0 no es necesariamente hermítico: si $imponemos \, \hat{H}_0^{\dagger} = \hat{H}_0$, se sigue necesariamente la condición de hermiticidad $(\gamma^0)^{\dagger} = \gamma^0, \ (\gamma^0 \gamma^k)^{\dagger} = \gamma^0 \gamma^k$ que discutimos más arriba.

⁴Este es simplemente un ejemplo del problema, más general, de la definición apropiada de un hamiltoniano en sistemas relativistas.

Por otra parte, la ecuación de Dirac se puede derivar de manera trivial como la ecuación de movimiento de la densidad lagrangiana

$$\mathcal{L} = c \,\overline{\psi} (i\hbar \partial \!\!\!/ - mc) \psi$$

= $\psi^{\dagger} (i\hbar \partial_t + i\hbar c \,\alpha \cdot \nabla - mc^2 \beta) \psi$, (23.21)

donde hemos introducido la notación

$$\overline{\psi} := \psi^{\dagger} \gamma^0 \,. \tag{23.22}$$

Ecuación de continuidad

Si se manipula (23.19) haciendo

$$\psi^{\dagger} \times (23.19) - [(23.19)]^{\dagger} \times \psi$$
 (23.23)

la ecuación resultante es

$$i\hbar \left[\psi^{\dagger} \partial_{t} \psi + (\partial_{t} \psi^{\dagger}) \psi \right] = -i\hbar c \sum_{k} \left[\psi^{\dagger} \alpha_{k} \partial_{k} \psi + (\partial_{k} \psi^{\dagger}) \alpha_{k} \psi \right]$$

$$\downarrow \qquad \qquad \downarrow$$

$$\partial_{t} (\psi^{\dagger} \psi) + \sum_{k} \partial_{k} (\psi^{\dagger} c \alpha_{k} \psi) = 0 ,$$

$$(23.24)$$

i.e. tenemos una ecuación de continuidad

$$\partial_{\mu}j^{\mu} = 0 \quad \leftrightarrow \quad \partial_{t}\rho + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$$
 (23.25)

con

$$\rho := \psi^{\dagger} \psi \,, \, \mathbf{j} := \psi^{\dagger} c \alpha_k \psi \quad \Leftrightarrow \quad j^{\mu} := c \, \overline{\psi} \gamma^{\mu} \psi \,, \, j = (c \rho, \mathbf{j}) \,. \tag{23.26}$$

Nótese que

- (i) $\rho \geq 0$ por construcción, contrariamente al caso KG, y
- (ii) la ecuación en términos de ρ y **j** no es manifiestamente covariante, pero su versión como divergencia nula de una cuadricorriente sí lo es.

Acoplamiento al campo electromagnético

El acoplamiento de un campo electromagnético a través de la prescripción de acoplamiento mínimo es trivial, como en el caso de Klein-Gordon. Basta sustituir las derivadas por derivadas covariantes

$$\partial_{\mu} \rightarrow D_{\mu} = \partial_{\mu} + \frac{iq}{\hbar c} A_{\mu}$$
 (23.27)

y la ecuación queda

$$(i\hbar D - mc)\psi = 0. (23.28)$$

Si se repite la manipulación de la que se derivó la ecuación de continuidad en el caso libre, se obtiene un resultado notable: la forma de la ecuación de continuidad no cambia, porque los nuevos términos que contienen el cuadripotencial vector se cancelan. En consecuencia, la ecuación de continuidad en presencia de un campo electromagnético es, de nuevo,

$$\partial_{\mu}j^{\mu} = 0 \,, \quad j^{\mu} := c \,\overline{\psi}\gamma^{\mu}\psi \,. \tag{23.29}$$

El motivo por el que j^{μ} no cambie en presencia del campo es que es un objeto invariante gauge. De hecho, si se escribe la densidad lagrangiana de la que se deriva la ecuación de Dirac con $A_{\mu} \neq 0$,

$$\mathcal{L} = \overline{\psi}c(i\hbar D - mc)\psi \tag{23.30}$$

es inmediato comprobar que

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_{\mu}} = -\frac{q}{c} j^{\mu} \,. \tag{23.31}$$

La corriente conservada es, precisamente, la corriente de Nöther asociada a la invariancia de \mathcal{L} bajo transformaciones gauge, y por lo tanto es simplemente el objeto que representa la *corriente electromagnética conservada* en la electrodinámica cuántica.

Nota sobre la elección de signo en la ecuación de Dirac

Cuando hemos introducido la ecuación de Dirac había dos posibilidades para el signo del término de masa, $\pm mc$; hemos elegido -mc y anunciado que demostraríamos que ambas posibilidades son perfectamente equivalentes. Definamos la matriz

$$\gamma^5 := i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \,. \tag{23.32}$$

Es fácil comprobar (ejercicio) $\{\gamma^5, \gamma^{\mu}\} = 0 \ \forall \mu, y \ \det(\gamma^5) = 1$. Por lo tanto

$$(i\hbar D\!\!\!/ -mc)\psi = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \gamma^5 (i\hbar D\!\!\!/ -mc)\psi = 0 \quad \Leftrightarrow \quad (i\hbar D\!\!\!/ +mc)\gamma^5 \psi = 0 \,, \quad (23.33)$$

i.e. las soluciones de ambas ecuaciones están relacionadas por una multiplicación por la matriz constante γ^5 , de manera que contienen exactamente la misma información q.e.d.