

Índice

Introducción	XI
---------------------	-----------

Tema 1

Teoría de la dispersión	Pag 1
1.1. Introducción	3
1.2. Amplitud y sección eficaz de dispersión	4
1.3. Aproximación de Born	9
1.4. Dispersión por átomos con nube electrónica	14
1.5. Teoría de la dispersión por ondas parciales	17
1.6. Aplicaciones del análisis de ondas parciales	21
1.6.1. Dispersión por un potencial tipo delta	21
1.6.2. Dispersión por un pozo esférico de potencial	23
1.6.3. Aproximación de Born para el cálculo de los desfases en onda parcial	25

1.6.4.	Longitud de dispersión y rango efectivo	27
1.7.	Dispersión elástica por partículas idénticas	28
1.8.	Dispersión inelástica. Absorción de partículas	32
1.8.1.	Aproximación de umbral	34
1.8.2.	Fórmula de Breit-Wigner	37
1.9.	Apéndice: Resolución numérica del problema de dispersión .	41
1.9.1.	Método RKF de orden 5	45
1.9.2.	Funciones esféricas de Bessel	48
1.9.3.	Polinomios de Legendre	49
1.9.4.	Secciones eficaces	50
1.9.5.	Ejemplo: Dispersión bajo potencial de Morse	50

Tema 2

Teoría semiclásica de la radiación Pag 59

2.1.	Introducción	61
2.2.	Campo Electromagnético	62
2.3.	Electrón ligado en un campo electromagnético	65
2.4.	Procesos radiativos en el átomo	67
2.4.1.	Absorción de un fotón	68
2.4.2.	Emisión estimulada de un fotón	70

2.4.3.	Emisión espontánea de un fotón	71
2.4.4.	Cálculo de la tasa de transición para la emisión espontánea	73
2.5.	Aproximación Dipolar	75
2.5.1.	Coefficientes de Einstein	78
2.6.	Apéndice I: Algunos procesos de interacción entre átomos y fotones	80
2.6.1.	Procesos de emisión	80
2.6.2.	Procesos de absorción	83
2.7.	Apéndice II: El láser semiconductor	85
2.7.1.	Emisión estimulada y espontánea	86
2.7.2.	Proceso de absorción	90
2.7.3.	Ganancia óptica	91
2.7.4.	Diseño de un diodo láser	92
2.7.5.	Ecuaciones de transferencia	93

Tema 3

Mecánica cuántica relativista Pag 97

3.1.	Introducción	99
3.1.1.	Relaciones de indeterminación en el dominio relativista	100
3.2.	La ecuación de Klein-Gordon	102

3.3. Límite no relativista de la ecuación de Klein-Gordon	109
3.4. Ecuación de Klein-Gordon en la forma de Schrödinger	110
3.5. <i>Zitterbewegung</i>	116
3.6. Ejemplo: átomo piónico con núcleo puntual	118
3.7. La ecuación de Dirac	121
3.7.1. Densidad y corriente de probabilidad	125
3.7.2. Conjugación de carga	126
3.7.3. Límite no relativista	127
3.8. Teoría de huecos de Dirac	129
3.9. Soluciones de la ecuación de Dirac para partículas libres . .	131
3.10. Formulación covariante de la ecuación de Dirac	136
3.10.1. Inversión espacial	140
3.10.2. Inversión temporal	141
3.10.3. Transformación PCT	143
3.11. Ejemplo: Partícula de Dirac en un campo exterior	144
3.11.1. Transmisión en barrera de potencial. Paradoja de Klein	149
3.12. Apéndice: Introducción a la teoría cuántica de campos	151
3.12.1. Cuantización del campo electromagnético libre. El fotón	152
3.12.2. Bosones	163

3.12.3. Fermiones	171
-----------------------------	-----

Tema 4
Problemas resueltos

Pag 177

4.1. Teoría de la dispersión	178
4.1.1. Problema	178
4.1.2. Problema	180
4.1.3. Problema	183
4.1.4. Problema	185
4.1.5. Problema	186
4.1.6. Problema	188
4.1.7. Problema	189
4.1.8. Problema	192
4.1.9. Problema	193
4.2. Teoría semiclásica de la radiación	197
4.2.1. Problema	197
4.2.2. Problema	198
4.2.3. Problema	199
4.2.4. Problema	201
4.2.5. Problema	202

4.2.6. Problema	204
4.2.7. Problema	205
4.2.8. Problema	206
4.2.9. Problema	207
4.2.10. Problema	209
4.3. Mecánica cuántica relativista	210
4.3.1. Problema	210
4.3.2. Problema	212
4.3.3. Problema	213
4.3.4. Problema	214
4.3.5. Problema	216
Bibliografía	219

Tema 3

Mecánica cuántica relativista

1. Introducción
2. La ecuación de Klein-Gordon
3. Límite no relativista de la ecuación de Klein-Gordon
4. Ecuación de Klein-Gordon en la forma de Schrödinger
5. *Zitterbewegung*
6. Ejemplo: Átomo piónico con núcleo puntual
7. La ecuación de Dirac
8. Teoría de huecos de Dirac
9. Soluciones de la ecuación de Dirac para partículas libres
10. Formulación covariante de la ecuación de Dirac
 - a) Inversión espacial
 - b) Inversión temporal
 - c) Transformación PCT

11. Ejemplo: Partícula de Dirac en un campo exterior
 - a) Transmisión en barrera de potencial. Paradoja de Klein
12. Apéndice: Introducción a la teoría cuántica de campos
 - a) Cuantización del campo electromagnético libre. El fotón
 - 1) Campo electromagnético clásico
 - 2) Cuantización del campo electromagnético
 - 3) El fotón
 - 4) Conclusiones y comentarios adicionales
 - b) Bosones
 - 1) Partículas sin espín
 - 2) Cuantización del campo bosónico
 - 3) Partículas y antipartículas
 - c) Fermiones

3.1. Introducción

En el ámbito no relativista, la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \quad (3.1)$$

se deducía de la combinación de las hipótesis ondulatoria de de Broglie, $\lambda = \hbar/p$, y corpuscular de Einstein, $E = h\nu$, con la ecuación para la energía de la mecánica de Newton

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \quad (3.2)$$

Formalmente, en la ecuación (3.1) el papel de la energía E lo juega el operador $i\hbar\partial/\partial t$, siempre que el operador del momento lineal p sea $(\hbar/i)\nabla$.

El sentido físico de la función de onda ψ en la mecánica cuántica no relativista consiste en que el cuadrado de su módulo determina la probabilidad de obtener, como resultado de una medición efectuada en un instante dado, un cierto valor de la coordenada de la partícula. Tal interpretación probabilística lleva asociada la definición de una densidad de probabilidad

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, t)\psi^*(\mathbf{r}, t) \quad (3.3)$$

tal que la probabilidad de detección de la partícula en un entorno dr del punto \mathbf{r} en el instante de tiempo t es $\psi(\mathbf{r}, t)\psi^*(\mathbf{r}, t)dr$. Ésta es la magnitud positiva más sencilla que se puede obtener a partir de la función ψ e impone sobre ella una condición de normalización, ya que la probabilidad de hallar la partícula en cualquier punto del espacio debe ser la unidad en cualquier instante de tiempo. Por tanto, la función de onda debe estar normalizada de forma que

$$\int \rho(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = 1 \quad (3.4)$$

Localmente esta condición de constancia de la probabilidad se formula como una ecuación de continuidad para el flujo de probabilidad

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (3.5)$$

siendo \mathbf{J} la corriente de probabilidad asociada. Esta ecuación expresa el hecho de que la partícula cuántica tiene continuidad en todos los puntos del

espacio, esto es, la variación en el tiempo de la densidad de probabilidad asociada a la evolución temporal de su función de onda, necesariamente se produce por el flujo de corriente de probabilidad en ese punto. Para determinar la expresión exacta de \mathbf{J} , debemos introducir la definición de la densidad (3.3) en la ecuación de continuidad (3.5). Tras realizar los pasos algebraicos que nos permiten factorizar el operador ∇ en (3.5), dada la ecuación de Schrödinger, obtenemos la expresión

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (3.6)$$

3.1.1. Relaciones de indeterminación en el dominio relativista

A primera vista se podría esperar que la formulación relativista de la mecánica cuántica fuera posible mediante una generalización más o menos inmediata de la mecánica cuántica no relativista. Sin embargo, un examen detallado muestra que se deben introducir además nuevos principios para obtener una teoría relativista lógicamente consistente.

Es entonces claro que, al igual que en el caso no relativista, se puede exigir la posibilidad de una medición tan precisa y tan rápida de la coordenada como se quiera. Sin embargo, la existencia de una velocidad límite (la velocidad de la luz) produce nuevas limitaciones en el proceso de medida de las magnitudes físicas. Se obtiene ahora un principio de incertidumbre relativista, exigiendo que en la expresión $\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar$ la incertidumbre en la medida de la coordenada espacial Δx sea inferior al límite $c\Delta t$, siendo Δt la duración del proceso de medida. Por tanto, la condición

$$\Delta p \cdot \Delta t \sim \frac{\hbar}{c} \quad (3.7)$$

determina la máxima precisión alcanzable por principio en el proceso de medida. Así, una medida relativista precisa del momento o la posición de la partícula sólo es posible en el caso extremo de una duración infinitamente grande del proceso de medición.

En el formalismo matemático de la teoría, esta limitación se manifiesta en la incompatibilidad de la medición precisa de una coordenada con el

hecho de poder asegurar siquiera el carácter positivo de la energía de una partícula libre. Como se verá en lo que sigue, el sistema completo de funciones de onda que representa una partícula libre deberá incluir funciones con frecuencias (energías) negativas. Dichas funciones de onda de las partículas, con frecuencias negativas están ligadas a la existencia de sus antipartículas. Por ejemplo, la antipartícula del electrón es el positrón, con carga eléctrica positiva, $+e$, y la misma masa que el electrón. La aparición de estas funciones en el desarrollo de la función de onda del sistema conlleva la formación de pares partícula-antipartícula durante el mismo proceso de medida. Esta aparición inevitable de nuevas partículas invalida totalmente el concepto de medida de una coordenada durante ese proceso de medición.

Como ejemplo, en el sistema en reposo de un electrón, consideraciones dimensionales dan para el radio clásico del electrón el valor

$$r = \frac{ke^2}{mc^2} = \alpha \frac{\hbar}{mc} \quad (3.8)$$

siendo α la constante de estructura fina. Por tanto, el error mínimo de una medición de las coordenadas del electrón es

$$\Delta x \sim \frac{\hbar}{mc} \quad (3.9)$$

que se asocia con una indeterminación del momento $\Delta p \sim mc$, correspondiente a la energía mínima umbral para la aparición de un par electrón-positrón. Es decir, el propio proceso de medida de la posición del electrón posibilita la aparición de un par partícula-antipartícula.

Como conclusión, tanto la coordenada, \mathbf{x} , como el impulso, \mathbf{p} , de la partícula dejan de ser buenas variables dinámicas para describir el sistema. Se demuestra además que las funciones de onda $\psi(\mathbf{x})$, entendidas en su sentido primitivo, no pueden figurar en el formalismo de una teoría relativista consecuente, ya que son portadoras de información inobservable. Por el contrario, el impulso de la partícula sí puede aparecer en tanto la partícula sea libre, puesto que al conservarse en ese caso, puede medirse con una precisión arbitraria. Cabe deducir, entonces, que la teoría relativista debe renunciar a la interpretación temporal de los procesos de interacción entre partículas, ya que las únicas magnitudes observables serán las características (impulsos, polarización, espín) de las partículas libres, tanto las iniciales que entran en interacción como las finales que aparecen como resultado de la interacción.

El planteamiento característico de un problema en la mecánica cuántica relativista consiste en la determinación de las amplitudes de probabilidad de las transiciones que ligan los estados inicial y final dados del sistema, para los tiempos $t \rightarrow \pm\infty$. El conjunto de estas amplitudes entre todos los estados posibles forma la llamada *matriz de dispersión* o matriz S (de *scattering*), y contiene toda la información con sentido físico observable relativa a los procesos de interacción que se dan en el sistema.

3.2. La ecuación de Klein-Gordon

La versión relativista de la expresión (3.2) en ausencia de un potencial $V(\mathbf{r})$ es

$$E^2 = (c\mathbf{p})^2 + (mc^2)^2 \quad (3.10)$$

donde en E se debe incluir la energía de la partícula en reposo $E_0 = mc^2$. Las mismas sustituciones que en el caso no relativista para los operadores de energía y momento, $E \rightarrow i\hbar\partial/\partial t$ y $\mathbf{p} \rightarrow (\hbar/i)\nabla$, llevan a una ecuación relativista para la función de onda de la forma¹

$$\Delta\psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \psi \quad (3.11)$$

La ecuación anterior (3.11) se llama *ecuación de Klein-Gordon* y, a diferencia de la ecuación de Schrödinger (3.1) sí tiene la forma de una ecuación de onda, aunque con un término fuente proporcional a m^2 y a la propia función ψ . Este hecho es necesariamente así puesto que la ecuación de Klein-Gordon debe corresponder, cuando $m = 0$, al campo cuántico de los fotones, partículas relativistas de masa en reposo nula. La diferencia adicional es que la función de onda del fotón es vectorial², dado que el espín del fotón es

¹Por analogía con el operador laplaciano de derivación espacial $\Delta = \nabla^2$, se suelen agrupar los operadores de derivación espacial y temporal en un único operador de derivación espacio-temporal, llamado dalembertiano $\square \equiv (1/c^2)\partial^2/\partial t^2 - \Delta$, con lo que (3.11) se leería

$$\left[\square + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right] \psi = 0$$

²La función de onda de espín de una partícula de espín S tiene $2S + 1$ componentes, una por cada estado posible del espín. La función de onda completa ψ es producto de la función de onda espacial y la función de onda de espín, pero es ésta última la que define las propiedades de transformación de ψ . Así, para una partícula de espín 0 la función

1. Por tanto, deberá satisfacerse la ecuación de Klein-Gordon para cada componente de la función de onda del fotón.

Es importante subrayar la invariancia relativista de la ecuación de Klein-Gordon. Se deduce de la invariancia relativista de la relación (3.10) de energía-momento.

Recordemos que las coordenadas espacio-temporales se escriben como las componentes de un cuadrivector $x^\mu = (ct, x, y, z)$ donde $\mu = 0, \dots, 3$. El índice μ en posición superior, indica que nos referimos a las componentes contravariantes, mientras que $x_\mu = (ct, -x, -y, -z)$ indica las componentes covariantes, resultantes del cambio de signo de las componentes espaciales. Asimismo, el momento y la energía total constituyen las componentes del cuadrivector $p^\mu = (E/c, p_x, p_y, p_z)$. El producto escalar de dos cuadrivectores se define, usando el convenio de índices repetidos de Einstein, como

$$a \cdot b = a^\mu b_\mu = a_0 b^0 - a_1 b^1 - a_2 b^2 - a_3 b^3 \quad (3.12)$$

y por tanto, al ser la reducción tensorial de un cuadrivector contravariante y un cuadrivector covariante, constituye un escalar y es invariante bajo las transformaciones de Lorentz. Y a partir del producto escalar, se define la norma del cuadrivector a (o su norma al cuadrado a^2), en la forma $a^2 \equiv a^\mu a_\mu$. Para los cuadrivectores de posición y energía-momento, tenemos los productos escalares

$$x^2 = x^\mu x_\mu = c^2 t^2 - \mathbf{r}^2 \quad (3.13)$$

que representa el cuadrado del intervalo espacio-temporal,

$$p^2 = p^\mu p_\mu = E^2/c^2 - \mathbf{p}^2 = m^2 c^2 \quad (3.14)$$

proporcional al cuadrado de la masa en reposo de la partícula, y

$$p \cdot x = p^\mu x_\mu = Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} \quad (3.15)$$

que es la fase de la onda plana de una partícula libre, $\psi = \exp(-ip \cdot x/\hbar)$. Todos ellos son invariantes por transformaciones de Lorentz.

de onda es escalar, para una partícula de espín 1/2 tiene dos componentes, en forma de un espinor, y para una partícula de espín 1 tiene tres componentes, y por ello, puede representarse como un vector.

La ecuación de Klein-Gordon se deduce de la relación relativista de energía-momento $p^2 - m^2 c^2 = 0$, con las substituciones operacionales cuánticas definidas anteriormente, y por tanto, es una ecuación invariante bajo las transformaciones de Lorentz.

Deducimos ahora la ecuación de continuidad del flujo de probabilidad (3.5), para la ecuación de Klein-Gordon. Es fácil averiguar un camino sencillo para su obtención matemática. La ecuación de continuidad debe deducirse de la ecuación (3.11), y contiene los operadores de derivación temporal y espacial. Resulta así necesario realizar pasos que eliminen el término fuente proporcional a m^2 en (3.11), que no contiene ningún operador de derivación. Multiplicando la ecuación original (3.11) por ψ^* y su ecuación conjugada compleja por ψ , y restando ambas ecuaciones resultantes, obtenemos

$$\frac{1}{c^2} \psi^* \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi - \frac{1}{c^2} \psi \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi^* + \psi \Delta \psi^* - \psi^* \Delta \psi = 0 \quad (3.16)$$

Factorizando los operadores $\partial/\partial t$ y ∇ , podemos escribir

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) + \nabla (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) = 0 \quad (3.17)$$

Esta ecuación ya tiene la apariencia de una ecuación de continuidad, y sólo queda fijar la constante de proporcionalidad global que determina las propiedades del flujo de probabilidad que queremos analizar. Para ello, nos servimos del caso de una partícula cuántica libre, con función de onda $\psi = \exp[i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)/\hbar]$, para la cual la corriente de probabilidad está dada por la velocidad de la partícula, $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$. Para que la ecuación de continuidad anterior determine un valor $\mathbf{J} = \mathbf{p}/m$ para una partícula libre, es necesario que se escriba en la forma

$$\frac{i\hbar}{2mc^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) + \frac{\hbar}{2mi} \nabla (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = 0 \quad (3.18)$$

Por tanto, de la ecuación de Klein-Gordon ha sido posible deducir que la magnitud

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \quad (3.19)$$

es una cantidad conservada sobre todo el espacio

$$\int \rho(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = 1 \quad (3.20)$$

con una corriente de probabilidad asociada

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (3.21)$$

A diferencia de la densidad dada por la expresión (3.3), con esta nueva definición (3.19), $\rho(\mathbf{r}, t)$ depende no sólo de la función ψ , sino también de su derivada temporal $\partial\psi/\partial t$, por lo que no es una cantidad definida positiva, y no puede interpretarse como una densidad de probabilidad. Como ejemplo, las soluciones de onda plana para las funciones de onda de la partícula libre de Klein-Gordon, con energía positiva E y negativa $-E$ son

$$\psi^{(\pm)} = \sqrt{\frac{mc^2}{VE}} \exp [i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} \mp Et) / \hbar] \quad (3.22)$$

estando normalizadas en el volumen V accesible a la partícula, de forma que

$$\int \rho^{(\pm)}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = \pm V$$

En el caso de la ecuación no relativista de Schrödinger, una partícula libre, con un momento bien definido \mathbf{p} , necesariamente debía tener una energía positiva, igual a $p^2/2m$. Una energía negativa correspondía, en ese caso, a estados ligados de la partícula. Ahora, la ecuación relativista (3.10) que relaciona energía y momento no impone esta limitación sobre el signo de E . La energía de una partícula libre de Klein-Gordon, no tiene un signo definido. El hecho de que la cantidad conservada no tenga naturaleza probabilística está relacionado con este hecho de que la energía, que es proporcional a la derivada temporal de ψ respecto al tiempo, no tenga un signo definido. Dada la teoría cuántica subyacente en el formalismo de la ecuación de Klein-Gordon, las nuevas soluciones de energía negativa son necesarias, desde el punto de vista matemático, para construir la solución general, en términos de superposición de estados con energías (frecuencias) de ambos signos. Desde el punto de vista físico, con ello, introduciremos el concepto novedoso de antipartícula, fruto de la naturaleza relativista de la teoría cuántica. Dichas antipartículas están conectadas matemáticamente con las funciones de onda de energía negativa. Pero, como estas funciones no tienen significado físico para partículas libres³, debe encontrarse una nueva definición de la función $\rho(\mathbf{r}, t)$ que permita la introducción de las partículas asociadas a las funciones de onda de energía negativa. Este significado físico

³Basta considerar la relación relativista entre la velocidad \mathbf{v} , el momento \mathbf{p} y la energía

completo queda patente cuando se estudia su comportamiento en presencia de un campo electromagnético, como veremos.

En la función de onda de la partícula libre, dado que la parte temporal es proporcional a un factor exponencial complejo, $\psi \propto \exp(-iEt/\hbar)$, la operación de conjugación compleja se reduce a cambiar el signo de i en este factor, y por tanto, se podría interpretar como la función de onda de una partícula con energía negativa, $\psi^* \propto \exp[-i(-E)t/\hbar]$. Es decir, la operación de conjugación compleja podría relacionar los estados con energías de distinto signo de la partícula. Analicemos esta posibilidad de forma más detallada en la ecuación de Klein-Gordon en presencia de un campo electromagnético.

En presencia de un campo definido por los potenciales escalar $\phi(\mathbf{r}, t)$ y vectorial $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, la ecuación de Klein-Gordon se modifica aplicando la condición de “acoplamiento mínimo”, según la cual se debe sustituir el momento \mathbf{p} por $\mathbf{p} - e\mathbf{A}$ y la energía E por $E - e\phi$. En su versión cuántica, se traduce a $i\hbar\partial/\partial t \rightarrow i\hbar\partial/\partial t - e\phi$ y $(\hbar/i)\nabla \rightarrow (\hbar/i)\nabla - e\mathbf{A}$, por lo que (3.11) toma la forma

$$\frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\phi \right)^2 \psi = \left[\left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right)^2 + m^2 c^2 \right] \psi \quad (3.23)$$

la densidad $\rho(\mathbf{r}, t)$ se convierte en

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2mc^2} \left[\psi^* \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\phi \right) \psi - \psi \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\phi \right) \psi^* \right] \quad (3.24)$$

y la corriente $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ se escribe como

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2m} \left[\psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right) \psi - \psi \left(-\frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right) \psi^* \right] \quad (3.25)$$

La posibilidad de diferenciar los estados de energía en presencia del campo electromagnético, reside en el hecho de que la energía de interacción de la

E de una partícula libre

$$\mathbf{v} = \frac{c^2}{E} \mathbf{p}$$

para darnos cuenta que para $E < 0$, al tener la velocidad y el momento sentidos contrarios, la corriente de probabilidad $\mathbf{J} = -\mathbf{v}$ determinaría un flujo de probabilidad dirigido en sentido contrario al movimiento de la partícula, lo que no tiene sentido físico.

partícula con el campo es directamente proporcional a la carga eléctrica de la partícula. Si una partícula de Klein-Gordon de carga $-e$ tiene energía E , una partícula semejante a ella (misma masa en reposo m , en un estado libre de momento definido \mathbf{p} y con los mismos estados cuánticos internos) pero con carga $+e$ verificará la misma ecuación de Klein-Gordon, si se considera que está en un estado con momento $-\mathbf{p}$ y tiene una energía $-E$ ⁴. La cuestión fundamental es cómo están relacionadas las funciones de onda de tales partículas: la existencia de una transformación unitaria entre ellas indicaría si son interdependientes y daría información sobre su naturaleza física.

Aplicando la conjugación compleja a la ecuación original (3.23), obtenemos

$$\frac{1}{c^2} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\phi \right)^2 \psi^* = \left[\left(-\frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right)^2 + m^2 c^2 \right] \psi^* \quad (3.26)$$

o bien

$$\frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + e\phi \right)^2 \psi^* = \left[\left(\frac{\hbar}{i} \nabla + e\mathbf{A} \right)^2 + m^2 c^2 \right] \psi^* \quad (3.27)$$

Comparando esta última ecuación con la original, (3.23), vemos que la función de onda conjugada, ψ^* , también verifica la ecuación de Klein-Gordon para una partícula de energía positiva, pero con una carga de signo opuesto, $-e$. Por tanto, aunque la función de onda ψ de Klein-Gordon no tiene sentido físico para una partícula de energía negativa y carga $+e$, su función conjugada compleja ψ^* , sí tiene significado físico puesto que representa a una partícula de la misma naturaleza (misma masa en reposo m y con los mismos estados cuánticos internos), con la misma energía, pero con signo positivo, y carga $-e$. Estas nuevas partículas, asociadas a la función de onda ψ^* , se denominan las *antipartículas* de las partículas de carga $+e$. Por tanto, la ecuación de Klein-Gordon describe tanto partículas como antipartículas, con carga opuesta entre ellas. Para obtener la función de onda de una antipartícula, con la misma energía que la partícula, conocida la función de onda ψ de la partícula, se debe aplicar la conjugación compleja ψ^* . Tal operación matemática tiene gran relevancia en el formalismo

⁴Tal resultado sencillo tiene su origen en el carácter invariante relativista de la ecuación de Klein-Gordon, y por tanto, no tiene analogía en la ecuación de Schrödinger (de orden 1 en la derivada temporal y de orden 2 en las derivadas espaciales).

de la teoría cuántica y recibe el nombre de *conjugación de carga*⁵. Ésta es la transformación unitaria, mencionada anteriormente, que interrelaciona según se ha descrito, las partículas y sus antipartículas.

Tras esta descripción de la solución general para la función de onda de Klein-Gordon, debemos revisar la cuestión pendiente de la interpretación no probabilística para la densidad $\rho(\mathbf{r}, t)$ y la corriente $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ asociadas. La existencia de una transformación unitaria, la conjugación de carga, que relaciona las funciones de ambos tipos de partícula, permite la posibilidad de transformación de una partícula en antipartícula, o viceversa, dentro del marco de la teoría cuántica relativista. Por tanto, ya no existirá una ley de conservación del número de partículas de cada tipo, como en la mecánica cuántica no relativista. Dicha ley de conservación se expresaba, como hemos visto en 3.1, por la ecuación de continuidad (3.5). Ahora, debemos encontrar la nueva cantidad conservada. Fijémonos de nuevo en la ecuación (3.19) para la función densidad $\rho(\mathbf{r}, t)$. Contiene dos productos de la función ψ y la función ψ^* , es decir, una función de onda de partícula y una función de onda de antipartícula. Entonces, se deduce que la cantidad conservada que determina la función $\rho(\mathbf{r}, t)$ debe representar al mismo tiempo a ambos tipos de partícula, y debe crearse o destruirse exclusivamente por pares (esto es, un par partícula-antipartícula de carga neta nula). Tal cantidad es la carga eléctrica. Por tanto, la densidad ρ debe definir la función densidad de carga eléctrica $e\rho(\mathbf{r}, t)$, de forma que $e\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ sea la densidad de corriente eléctrica. La ecuación de continuidad resultante será la ecuación de la conservación de la carga eléctrica, y la integral a todo el espacio

$$\int e\rho(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = Q \quad (3.28)$$

será la carga total Q del sistema dado de partículas y antipartículas.

Una vez que se ha interpretado correctamente el significado físico de la densidad y corriente de probabilidad para partículas de Klein-Gordon, es posible extender el campo de aplicación de dicha ecuación a partículas sin carga. Teniendo en cuenta que, en este caso, la densidad de carga debe ser nula, de la ecuación (3.19), se obtiene la condición

$$\psi = \psi^* \quad (3.29)$$

⁵Al realizar esta operación, no debemos olvidar que, por su propia definición de conjugación o “cambio” de carga, debemos cambiar también el signo de la carga en todas las expresiones ya que sino estaríamos relacionando funciones con energías definidas de signo contrario.

que debe satisfacer la función de onda para representar una partícula de masa en reposo m y sin carga. Con esto, la corriente de probabilidad también se anula idénticamente, con lo cual la ecuación de continuidad es idénticamente nula, como era de esperar. Para esta partícula sin carga, su función de onda es real y se puede expresar como

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi^{(+)} + \psi^{(-)} \right) = \sqrt{\frac{2mc^2}{VE}} \cos[(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et) / \hbar] \quad (3.30)$$

donde el prefactor $1/\sqrt{2}$ se obtiene requiriendo que ψ_0 tenga también norma unidad en V .

Como comentario final, se observa que la teoría relativista lleva a nuevos grados de libertad para la partícula, en este caso, la carga eléctrica. Como hemos visto, existen tres tipos de soluciones para la función de onda de una partícula (libre, sin espín y con un momento \mathbf{p} bien definido), a saber, con carga eléctrica positiva, negativa o nula.

3.3. Límite no relativista de la ecuación de Klein-Gordon

Queremos estudiar el límite no relativista de la ecuación de Klein-Gordon. Para ello, escribimos la función de onda en la forma

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}, t) \exp(imc^2 t / \hbar) \quad (3.31)$$

dividiendo la dependencia temporal en la función de onda en dos términos, uno de ellos conteniendo la masa en reposo de la partícula. En el límite no relativista la diferencia entre la energía total y la energía en reposo de la partícula es pequeña. Por tanto, definiremos la energía cinética E'

$$E' = E - mc^2 \quad (3.32)$$

exigiendo que sea no relativista, es decir, $E' \ll mc^2$. Con estas condiciones, se satisface

$$\left| i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right| \approx E' \varphi \ll mc^2 \varphi \quad (3.33)$$

de modo que la ecuación de Klein-Gordon para la función de onda φ se escribe en el límite no relativista como

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi \quad (3.34)$$

y resulta ser la ecuación de Schrödinger para una partícula libre sin espín.

3.4. Ecuación de Klein-Gordon en la forma de Schrödinger

Para que la ecuación de Klein-Gordon sea verdaderamente la extensión relativista de la ecuación de Schrödinger para una partícula sin espín, es necesario que, en el límite no relativista, se reduzca a ésta, como muestra la sección anterior 3.3, y además, que la función de onda φ a la que se reduce la función de onda de Klein-Gordon ψ corresponda efectivamente a la función de onda de la partícula. Para ello, además la función de onda de la antipartícula χ , en este límite debe anularse. La comprobación de estos resultados requiere el análisis de la ecuación de Klein-Gordon en la forma de Schrödinger, esto es, la transformación de la ecuación de Klein-Gordon, que es de segundo orden en la derivada temporal, en un sistema de dos ecuaciones acopladas del tipo de Schrödinger, esto es, de primer orden en la derivada temporal. Adicionalmente, la dependencia de la función de onda de Klein-Gordon con el nuevo grado de libertad de las partículas, su carga eléctrica, resultará más patente con el análisis que sigue.

Nuestro punto de partida es la definición de dos funciones φ y χ dependientes de la función de onda original ψ según las expresiones

$$\varphi = \frac{1}{2} \left[\psi + \frac{1}{mc^2} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] \quad (3.35)$$

$$\chi = \frac{1}{2} \left[\psi - \frac{1}{mc^2} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] \quad (3.36)$$

de forma que se satisface

$$\varphi + \chi = \psi \quad (3.37)$$

$$\varphi - \chi = \frac{1}{mc^2} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (3.38)$$

Como se comprobará, cada una de ellas, φ ó χ , cumple también la ecuación de Klein-Gordon.

La elección de estas dos funciones no es casual. Dado que $i\hbar\partial\psi/\partial t = E\psi$, en el límite no relativista $E - mc^2 \ll mc^2$, las dos funciones toman los valores apropiados $\varphi \simeq \psi$ y $\chi \simeq 0$. Así, será suficiente para el objetivo de la sección, marcado en las primeras líneas de la misma, encontrar el tipo de partícula que representa cada una de ellas, comprobando que en el límite no relativista, φ se asocia con las partículas y χ se asocia con las antipartículas.

A partir de la ecuación de Klein-Gordon (3.11), se deducen las ecuaciones acopladas de φ y χ

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta(\varphi + \chi) + mc^2\varphi \quad (3.39)$$

$$i\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\Delta(\varphi + \chi) - mc^2\chi \quad (3.40)$$

que se pueden expresar de forma compacta como

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} + mc^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (3.41)$$

que, definiendo la función Ψ de dos componentes

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \varphi(\mathbf{r}, t) \\ \chi(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} \quad (3.42)$$

adquiere una forma análoga a la de la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = H\Psi \quad (3.43)$$

por lo que se llama ecuación de Klein-Gordon el forma de Schrödinger. El operador hamiltoniano resulta ser ahora

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta(\sigma_3 + i\sigma_2) + mc^2\sigma_3 \quad (3.44)$$

expresado en función del conjunto de matrices⁶ 2×2

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.45)$$

⁶Estas matrices son idénticas a las matrices de Pauli, con la diferencia de que, en este caso, no se aplican sobre el espacio del espín, sino sobre el espacio de los vectores Ψ de las funciones de onda.

que, con la matriz unidad I de orden 2×2 , constituyen una base del espacio de las matrices complejas de orden 2×2 . En presencia de un campo electromagnético, el hamiltoniano debe tomar la forma, tras la aplicación de la condición de “acoplamiento mínimo”

$$H(e) = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right)^2 (\sigma_3 + i\sigma_2) + mc^2\sigma_3 + e\phi I \quad (3.46)$$

Por tanto, hemos obtenido la formulación de Schrödinger de la ecuación de Klein-Gordon, y este hecho reside en que la propia función $\Psi(\mathbf{r}, t)$ (esto es, cada una de sus componentes) satisface la ecuación de Klein-Gordon. Para su demostración, partimos de la ecuación, deducida de (3.43),

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + H \right) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) \Psi = 0 \quad (3.47)$$

ó

$$\left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} - H^2 \right) \Psi = 0 \quad (3.48)$$

Por las propiedades de las matrices de Pauli, $(\sigma_3 + i\sigma_2)^2 \equiv 0$, de forma que $H^2 = -c^2\hbar^2\Delta + (mc^2)^2$ y, de aquí, deducimos que la ecuación anterior se corresponde con la ecuación de Klein-Gordon para Ψ

$$\left[\Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right] \Psi = 0 \quad (3.49)$$

y que, por lo tanto, cumplen cada una de sus componentes.

Veamos ahora cómo se describe la densidad y corriente de carga para esta función de dos componentes. En esta representación, la densidad de carga tiene una forma particularmente simple, muy parecida a la expresión para la función de onda de Schrödinger, salvo la diferencia de que ahora tratamos con una función de onda de dos componentes. A partir de las relaciones (3.37) y (3.38), con su substitución directa en la definición de la densidad de Klein-Gordon, (3.19), se obtiene

$$e\rho(\mathbf{r}, t) = e(\varphi^*\varphi - \chi^*\chi) = e(|\varphi|^2 - |\chi|^2) \quad (3.50)$$

resultado que nos permite identificar, sin duda, la representación de partícula de carga e para la función φ y la representación de antipartícula de carga

– e para la función χ . En términos de la función Ψ de dos componentes, la densidad de carga se escribe

$$e\rho(\mathbf{r}, t) = e\Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \sigma_3 \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (3.51)$$

donde el superíndice \dagger denota la función de onda adjunta (transpuesta conjugada). La corriente de carga asociada es

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{e\hbar}{2mi} \left[\Psi^\dagger \sigma_3 (\sigma_3 + i\sigma_2) \nabla \Psi - (\nabla \Psi^\dagger) \sigma_3 (\sigma_3 + i\sigma_2) \Psi \right] \quad (3.52)$$

Dado que las funciones φ y χ corresponden a los dos tipos de partículas que cumplen una misma ecuación (3.49), debe existir una transformación unitaria que defina la conjugación de carga, de forma que las partículas queden ligadas con sus antipartículas. Dada la expresión (3.50) para la densidad de carga, la conjugación de carga podría establecer una de las dos transformaciones $\varphi \rightarrow \chi^*$, $\chi \rightarrow \varphi^*$ ó $\varphi \rightarrow \chi$, $\chi \rightarrow \varphi$, para las funciones φ y χ (cualesquiera otras transformaciones se reducen a éstas, salvo un factor complejo de módulo unidad). Para decidir cuál de las dos es la correcta, debemos exigir además que la partícula y la antipartícula tengan el mismo estado de energía, bajo la conjugación de carga. En otras palabras, el hamiltoniano H debe conmutar con la operación de conjugación de carga. Del estudio de las ecuaciones (3.39) y (3.40) (de las que se dedujo la expresión del hamiltoniano H) se concluye que esto se cumple si la conjugación de carga se lleva a cabo mediante el cambio $\varphi \rightarrow \chi^*$, $\chi \rightarrow \varphi^*$.

Por tanto, al aplicar la conjugación compleja las funciones φ y χ intercambian sus papeles, lo que en notación matricial se escribe como

$$\Psi_c = \sigma_1 \Psi^* \quad (3.53)$$

donde por Ψ_c se ha denotado la función conjugada de carga. Además, Ψ es la función conjugada de carga de Ψ_c puesto que obedece la relación $(\Psi_c)_c = \sigma_1 (\sigma_1 \Psi^*)^* = \Psi$. A partir de la ecuación de Klein-Gordon (3.43) para Ψ , y la propiedad de transformación del hamiltoniano bajo la conjugación compleja

$$\sigma_1 H^*(e) \sigma_1 = -H(-e) \quad (3.54)$$

donde $H(e)$ es el hamiltoniano dependiente de la carga eléctrica, definido en (3.46), se deduce que la función de onda conjugada de carga satisface también una ecuación de Klein-Gordon, en la forma

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_c = H(-e) \Psi_c \quad (3.55)$$

con una carga eléctrica de signo contrario. Por tanto, Ψ_c describe partículas de Klein-Gordon con la misma energía (positiva), y carga de signo contrario, esto es, las antipartículas.

Las partículas neutras pueden ser descritas también dentro de este formalismo, dado que las partículas neutras, sin carga, son sus propias antipartículas. Matemáticamente su función de onda conjugada de carga debe satisfacer

$$\Psi_c = e^{i\alpha}\Psi \quad (3.56)$$

con α real, de forma que ambas funciones, Ψ y Ψ_c , coincidan salvo un factor de módulo unidad. La función de onda ψ de la partícula de Klein-Gordon neutra es real (véase la función de onda de (3.30)), y dada la relación (3.38) para φ y χ , la suma $\varphi + \chi$ debe ser real. Asimismo para la función de onda real conjugada de carga, la suma $e^{i\alpha}(\varphi + \chi)$ debe ser real. Se concluye que necesariamente $e^{i\alpha}$ es real con los valores posibles ± 1 . Por tanto, existen dos tipos de partículas neutras, dependiendo del signo de su paridad de carga⁷. Partículas neutras con paridad de carga positiva, para las cuales $\Psi_c = \Psi$, y partículas neutras con paridad de carga negativa, con $\Psi_c = -\Psi$.

Nos queda por determinar la validez del límite no relativista para la función de onda de dos componentes. Para ello, estudiamos la descripción de la partícula libre en el formalismo de Schrödinger de la ecuación de Klein-Gordon. En lugar de deducir las funciones de onda Ψ directamente, resulta ya más cómodo partir de las expresiones conocidas para las soluciones de onda plana (autoestados del momento \mathbf{p}) para la función de onda de Klein-Gordon ψ , con energía positiva o negativa,

$$\psi^{(\pm)} = \sqrt{\frac{mc^2}{VE}} \exp [i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} \mp Et) / \hbar] \quad (3.57)$$

normalizadas en el volumen V accesible a la partícula, y con ayuda de las definiciones de φ y χ , que para una onda plana tienen la forma

$$\varphi = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{E}{mc^2} \right) \psi \quad (3.58)$$

⁷Esta propiedad de paridad de la función de onda es análoga a la que se da entre bosones y fermiones, cuyas tienen funciones de onda son, respectivamente, pares o impares (es decir, mantienen su signo o lo cambian) ante un intercambio de dos partículas de un conjunto de partículas idénticas. No se refiere, por tanto, a paridad respecto al cambio de signo de las coordenadas espaciales.

$$\chi = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{E}{mc^2} \right) \psi \quad (3.59)$$

escribir la expresión correspondiente a la función de dos componentes Ψ . Para la función de onda de la partícula libre con energía positiva encontramos

$$\Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{VEmc^2}} \begin{pmatrix} E + mc^2 \\ mc^2 - E \end{pmatrix} \exp[i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)/\hbar] \quad (3.60)$$

y para la función de onda de energía negativa, correspondiente a la antipartícula, se escribe

$$\Psi^{(-)}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{VEmc^2}} \begin{pmatrix} mc^2 - E \\ mc^2 + E \end{pmatrix} \exp[i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} + Et)/\hbar] \quad (3.61)$$

En el límite no relativista, la energía total E tiene el valor aproximado

$$E \simeq mc^2 \left(1 + \frac{\mathbf{v}^2}{2c^2} \right) \quad (3.62)$$

por lo que el límite no relativista de las funciones de onda de dos componentes de energías definidas queda escrito en la forma

$$\Psi_{NR}^{(+)}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \begin{pmatrix} 1 \\ -\mathbf{v}^2/4c^2 \end{pmatrix} \exp[i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)/\hbar] \quad (3.63)$$

$$\Psi_{NR}^{(-)}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \begin{pmatrix} -\mathbf{v}^2/4c^2 \\ 1 \end{pmatrix} \exp[i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} + Et)/\hbar] \quad (3.64)$$

Por lo tanto, para una partícula libre de energía positiva en el límite no relativista la componente χ , asociada a la antipartícula, de la función de onda es despreciable, mientras que la componente φ satisface la ecuación de Schrödinger correspondiente, (ecuación 3.39, con $\chi \rightarrow 0$, para una energía $E - mc^2$ de la partícula, y con carga $+e$). Para una partícula libre de energía negativa (antipartícula), es la componente φ , asociada a la partícula, la que se hace despreciablemente pequeña, mientras que la componente χ satisface la ecuación de Schrödinger (ecuación 3.40, con $\varphi \rightarrow 0$, para una energía de nuevo positiva, $E - mc^2$ de la antipartícula, y con carga $-e$). Queda así explicada la ausencia de antipartículas en la mecánica cuántica no relativista, puesto que la probabilidad de su detección, proporcional a $|\chi|^2$, es ínfimamente pequeña.

3.5. Zitterbewegung

La ecuación relativista de Schrödinger, la ecuación de Klein-Gordon, presenta dos tipos de soluciones para las partículas libres. Consideremos la construcción de un paquete de ondas localizado, y veremos cómo estamos obligados siempre a incorporar en la función de onda componentes de energía positiva y negativa. Para ver esto cualitativamente supongamos que tenemos un paquete construido únicamente con componentes de energías positivas. En el instante inicial, $t = 0$, tenemos la representación

$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = \int A_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^{(+)} \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar) \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \quad (3.65)$$

donde $a_{\mathbf{p}}^{(+)} \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar)$ es la función de onda con momento bien definido, de valor \mathbf{p} , siendo $A_{\mathbf{p}}$ su contribución al paquete de ondas. La amplitud de la solución de onda plana para una energía positiva está dada, según (3.60), por

$$a_{\mathbf{p}}^{(+)} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{VEmc^2}} \begin{pmatrix} E + mc^2 \\ mc^2 - E \end{pmatrix} \quad (3.66)$$

y contiene las dos componentes, una de la partícula y otra de la antipartícula. Tras la evolución libre del paquete de ondas, en un instante t posterior, la función de onda es

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int A_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^{(+)} \exp[i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)/\hbar] \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \quad (3.67)$$

Supongamos ahora que aplicamos matemáticamente a $\Psi(\mathbf{r}, t)$ el operador de posición \mathbf{r} . Dado que en la representación de momento, $\mathbf{r} = i\hbar\nabla_{\mathbf{p}}$, el resultado es

$$\mathbf{r}\Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \int \left[a_{\mathbf{p}}^{(+)} (\nabla_{\mathbf{p}} A_{\mathbf{p}}) + A_{\mathbf{p}} (\nabla_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^{(+)}) \right] \exp[i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)/\hbar] \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \quad (3.68)$$

El primer término en el integrando corresponde a la función de onda de momento \mathbf{p} bien definido, y energía positiva, con una amplitud relativa $\nabla_{\mathbf{p}} A_{\mathbf{p}}$. El segundo término contiene la derivada respecto de \mathbf{p} de la solución de onda plana de energía positiva, y da lugar a un hecho destacable. Para evaluar el operador gradiente respecto al vector momento en términos de la energía total de la partícula, utilizamos la relación

$$\nabla_{\mathbf{p}} f(E) = \left(\frac{1}{E} \nabla_{\mathbf{p}} E \right) \left(E \frac{df}{dE} \right) = \frac{c^2}{E^2} \left(E \frac{df}{dE} \right) \mathbf{p} \quad (3.69)$$

De la dependencia con la energía de las funciones de onda de energía positiva y negativa, mostrada en las ecuaciones (3.60) y (3.61), se infiere que la derivada de la función f respecto a la energía, como figura en (3.69), cambia la solución de energía positiva a energía negativa y viceversa. Esto es,

$$\nabla_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^{(+)} = -\frac{c^2 \mathbf{p}}{2E^2} a_{\mathbf{p}}^{(-)} \quad (3.70)$$

donde

$$a_{\mathbf{p}}^{(-)} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{VE mc^2}} \begin{pmatrix} mc^2 - E \\ mc^2 + E \end{pmatrix} \quad (3.71)$$

es la amplitud para la solución de onda plana de energía negativa. Por tanto, la aplicación del operador \mathbf{r} da lugar, en el instante t , al valor

$$\mathbf{r}\Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \int \left[a_{\mathbf{p}}^{(+)} (\nabla_{\mathbf{p}} A_{\mathbf{p}}) - A_{\mathbf{p}} \frac{c^2 \mathbf{p}}{2E^2} a_{\mathbf{p}}^{(-)} \right] \exp [i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et) / \hbar] \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \quad (3.72)$$

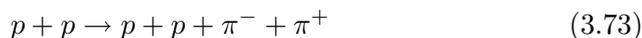
e introduce en el paquete de ondas componentes de energía negativa (el segundo término en la integral) que no formaban parte de $\Psi(\mathbf{r}, 0)$. Extendiendo este resultado, de forma equivalente, la aplicación de cualquier potencial exterior perturbador, dependiente del vector de coordenadas \mathbf{r} tendrá el mismo efecto sobre la función de onda.

La mezcla de los estados de energía positiva y negativa tiene una consecuencia directa muy importante sobre el valor medio de cualquier operador dependiente de la posición. Dado que los factores temporales de las soluciones de energía definida son de la forma $\exp(\pm iEt/\hbar)$, al calcular el valor medio del operador, por ejemplo $\int \Psi^\dagger(\mathbf{r}, t) \mathbf{r} \sigma_3 \Psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}$ a partir de la fórmula anterior, los términos cruzados proporcionales a $a_{\mathbf{p}}^{(+)*} a_{\mathbf{p}}^{(-)}$ dan lugar a términos oscilatorios, de frecuencia angular muy alta, $\omega = 2E/\hbar$, que hacen oscilar el valor medio del operador respecto al valor que se produciría para soluciones exclusivamente de energía positiva. Este fenómeno se conoce como *zitterbewegung* (que en alemán significa vibración) y se observa como una oscilación del paquete de ondas, resultado de la excitación por parte del potencial perturbador de los estados de energía negativa, asociados a la presencia de antipartículas. La magnitud del *zitterbewegung* depende fundamentalmente del rango de variación del potencial externo. A medida que la distancia efectiva de variación del potencial externo sea próxima a la longitud de onda Compton de la partícula, $\lambda = h/mc$, el efecto será más acentuado lo que se interpreta como que la energía de excitación aso-

ciada, $E \simeq mc^2 + cp = 2mc^2$, se acerca al umbral de creación de un par partícula-antipartícula.

3.6. Ejemplo: átomo piónico con núcleo puntual

Los átomos piónicos consisten de un núcleo y uno, ó más, mesones π (llamados también piones), que lo circundan. Los piones se generan en los procesos de dispersión inelástica de los protones, como por ejemplo



Una vez formados, son ralentizados y filtrados del haz que los contienen, y finalmente se hace que incidan sobre el sistema que quiere estudiarse. Al pasar cerca de un átomo, el pión es capturado por éste y, simultáneamente, se emiten varios electrones, en lo que se conoce como *captura de Auger*. En general, ya que la probabilidad de la captura de dos o más piones es muy pequeña, los átomos piónicos tienen un solo pión, y lo mismo que sucede con los átomos muónicos generados por la captura de un muón.

Ya que los piones no tienen espín ($s = 0$), su ecuación de onda es la ecuación de Klein-Gordon. La energía de interacción entre el pión y el núcleo consiste esencialmente en dos partes diferenciadas. En primer lugar, la interacción electromagnética descrita a través del potencial de Coulomb. En segundo lugar, una interacción fuerte, definida por un potencial complejo, cuya parte imaginaria da cuenta de la posibilidad de captura de un nuevo pión, esta vez por el núcleo atómico.

Como ejemplo característico de resolución de la ecuación de Klein-Gordon, ahora vamos a determinar los niveles energéticos de un átomo piónico modelo (formado por la captura de un pión π^-) despreciando la interacción fuerte con el núcleo atómico.

Dado el potencial atractivo de Coulomb entre los protones del núcleo y el pión capturado, la ecuación de Klein-Gordon para la componente dependiente de la coordenada radial, $u(r) = R(r)/r$, de la función de onda se escribe

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1) - (Z\alpha)^2}{r^2} + \frac{2\varepsilon Z\alpha}{\hbar c} \frac{1}{r} - \frac{m_\pi^2 c^4 - \varepsilon^2}{(\hbar c)^2} \right] R_l(r) = 0 \quad (3.74)$$

donde α es la constante de estructura fina, $m_\pi c^2 \simeq 140$ MeV es la energía en reposo del pión y ε es la energía del pión en el estado ligado, que debe satisfacer $-m_\pi c^2 < \varepsilon < m_\pi c^2$.

Con ayuda de las sustituciones

$$\beta = 2 \frac{\sqrt{m_\pi^2 c^4 - \varepsilon^2}}{\hbar c} \quad (3.75)$$

$$\mu = \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2} \quad (3.76)$$

$$\lambda = \frac{2\varepsilon Z\alpha}{\hbar c\beta} \quad (3.77)$$

la ecuación de ondas (3.74) para la función $R_l(r)$, en términos de la variable radial adimensional $\rho = \beta r$, se escribe

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\mu^2 - 1/4}{\rho^2} + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} \right] R_l(\rho) = 0 \quad (3.78)$$

Para poder anticipar la solución general, es conveniente conocer cuál es la dependencia asintótica de la función de onda con ρ , en los límites superior $\rho \rightarrow \infty$ e inferior $\rho \rightarrow 0$ de integración.

En el caso $\rho \rightarrow \infty$, podemos despreciar los términos proporcionales a $1/\rho$, de modo que la ecuación de Klein-Gordon (3.78) se reduce a

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{1}{4} \right] R_l(\rho) = 0 \quad (3.79)$$

La solución de esta ecuación que es normalizable es

$$R_l(\rho) = A \exp(-\rho/2) \quad (3.80)$$

En el caso $\rho \rightarrow 0$, el término dominante es el proporcional a la mayor potencia de $1/\rho$, lo que hace que la ecuación de Klein-Gordon adquiera la forma asintótica

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\mu^2 - 1/4}{\rho^2} \right] R_l(\rho) = 0 \quad (3.81)$$

La solución es de la forma potencial, $R_l(\rho) = B\rho^\nu$, donde el exponente satisface $\nu = 1/2 \pm \mu$. La función de onda será normalizable cuando no tenga comportamiento singular en el origen. Ya que en (3.81) aparece μ^2 , se puede convenir en que μ es positiva, por lo que, para que el exponente sea positivo o cero, la solución que satisface este requerimiento corresponde al signo positivo en ν , esto es

$$R_l(\rho) = B\rho^{1/2+\mu} \quad (3.82)$$

La función de onda radial $u(r) = R(r)/r$ tiene una singularidad en el origen cuando $l = 0$, aunque se trata de una singularidad evitable, por lo que la función de onda puede ser todavía normalizada. Este comportamiento de la función de onda para $\rho \rightarrow 0$ es novedoso respecto al caso no relativista (solución de la ecuación de Schrödinger) y es característico de las funciones de onda en onda s relativistas bajo la acción del potencial de Coulomb. Finalmente, vemos que, por la propia definición (3.76) de μ , cuando $l = 0$, sólo existen soluciones de tipo real a la función de onda para $Z\alpha < 1/2$.

Por tanto, reuniendo los perfiles de onda de los dos límites anteriores, nuestra elección para la solución general será de la forma

$$R_l(\rho) = N\rho^{1/2+\mu} \exp(-\rho/2) f(\rho) \quad (3.83)$$

donde la función desconocida f debe tener dos límites definidos. Cuando $\rho \rightarrow 0$ debe tender a una constante, y cuando $\rho \rightarrow \infty$ debe ser tal que se asegure la normalización de la función de la onda. La ecuación diferencial que satisface tal función $f(\rho)$ es

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \left(\frac{c}{\rho} - 1 \right) \frac{d}{d\rho} - \frac{a}{\rho} \right] f(\rho) = 0 \quad (3.84)$$

donde, por simplificación, hemos introducido las anotaciones

$$2\mu + 1 = c \quad (3.85)$$

$$\mu + 1/2 - \lambda = a \quad (3.86)$$

El último paso consiste en resolver dicha ecuación (3.84) por el método de las series de potencias, asumiendo la forma

$$f(\rho) = \sum_{m=0}^{\infty} f_m \rho^m \quad (3.87)$$

La solución se obtiene como la fórmula recurrente para la sucesión de los coeficientes

$$f_m = \frac{f_{m-1}}{m} \frac{a + m - 1}{c + m - 1} \quad (3.88)$$

Se puede demostrar que la solución desarrollada (función hipergeométrica confluyente ${}_1F_1(a, c; \rho)$) diverge en el límite $\rho \rightarrow \infty$. Para que pueda representar una solución física, es necesario que la serie definida anteriormente tenga, a partir de un m dado, todos sus coeficientes iguales a cero. Para ello es necesario que, para un valor positivo fijo de n , tengamos

$$a = -m \quad (3.89)$$

ya que en este caso, $f_{m'} = 0$ para todo $m' > m$.

Por tanto, de (3.89), (3.86) y las definiciones (3.75)-(3.77), los autovalores de la energía para el potencial coulombiano resultan ser de la forma

$$E_{nl} = m_\pi c^2 \left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{\left(n - l - \frac{1}{2} + \left[\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - (Z\alpha)^2 \right]^{1/2} \right)^2} \right] \quad (3.90)$$

donde se ha introducido el número cuántico principal $n = m + l + 1$, que toma valores $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ con $l = 0, 1, \dots, (n - 1)$. La energía de enlace de la partícula de Klein-Gordon ligada es $E_b = E - m_\pi c^2$.

3.7. La ecuación de Dirac

La ecuación de Dirac es la ecuación de ondas cuántica relativista que describe las partículas fundamentales de espín 1/2, tales como los electrones, y que satisface conjuntamente los criterios de la teoría cuántica y la relatividad especial. Predice la existencia de las antipartículas, y se anticipó en el tiempo a su detección experimental. De hecho, la confirmación experimental de la teoría de Dirac por el descubrimiento de la antipartícula del electrón, el positrón, es uno de los grandes hitos en la física teórica moderna. Sus grandes éxitos han sido la predicción del momento magnético del electrón, la explicación de la estructura fina en los niveles atómicos, o

la fundamentación rigurosa de la necesidad de espín del electrón. No obstante, no debe olvidarse que la ecuación de Dirac tiene un amplio rango de aplicabilidad, incluyendo los *quarks* o los protones o neutrones, todas ellas partículas de espín 1/2. Sin embargo, es una teoría de una sola partícula, y no tiene en cuenta la creación o destrucción de partículas.

Seguimos el desarrollo original de Dirac, que en 1928 buscaba una ecuación de ondas relativista del tipo de Schrödinger, esto es, con derivada de primer orden en el tiempo,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \quad (3.91)$$

y que permitiera definir una densidad de probabilidad definida positiva. La ecuación de Klein-Gordon es la ecuación relativista válida para partículas sin espín, ya que no aparecen en el hamiltoniano los términos típicos de acoplamiento entre momento angular y campo electromagnético, por ejemplo, los introducidos *ad hoc* por Pauli en la ecuación para el electrón que lleva su nombre. El espín aparecerá de manera natural, sin necesidad de imponerlo, para la ecuación de Dirac.

Dado que lo que se busca es una ecuación de la forma (3.91) en la que tanto el momento como la energía desempeñen papeles análogos (es decir, que todas las derivadas, tanto espaciales como temporales, sean de primer orden) y que sea invariante por una transformación de Lorentz, se plantea una ecuación lineal en la forma

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial t} \psi = H\psi = (\alpha \cdot \mathbf{c}\mathbf{p} + \beta mc^2) \psi \quad (3.92)$$

La exigencia de que esta ecuación sea compatible con la ley de conservación de la norma del vector momento-energía (3.10) se convierte, entonces, en

$$H^2\psi = (\alpha \cdot \mathbf{c}\mathbf{p} + \beta mc^2)^2 \psi = (c^2\mathbf{p}^2 + m^2c^4) \psi \quad (3.93)$$

Estableciendo la comparación, se observa que los coeficientes α y β no pueden ser simples escalares (que conmutarían entre sí), sino operadores que satisfagan las relaciones

$$\alpha_i^2 = \beta^2 = I \quad (3.94)$$

$$\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 2\delta_{ij} I \quad (3.95)$$

$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0 \quad (3.96)$$

para $i, j = x, y, z$, donde I es el operador identidad en el espacio de las funciones de onda. Además, ya que el hamiltoniano debe ser hermítico (con autovalores reales), debe exigirse que α y β sean operadores hermíticos también

$$\alpha^\dagger = \alpha \quad (3.97)$$

$$\beta^\dagger = \beta \quad (3.98)$$

Puesto que el número de estos operadores es finito y que todas las restricciones que deben cumplirse pueden expresarse como relaciones de conmutación entre ellos, es posible representarlos como operadores matriciales y suponer que actúan sobre ψ , que pasa a ser ahora un vector columna. Puesto que estamos tratando el caso de una partícula libre, por homogeneidad e isotropía, la ecuación no puede depender explícitamente de (\mathbf{r}, t) . Siendo así, el operador matricial α conmuta con el operador \mathbf{p} , por no contener al vector \mathbf{r} . Y, en conclusión, α debe depender exclusivamente del estado interno de la partícula, a través de los grados de libertad internos, que se manifiestan en la forma vectorial que adopta la función de onda ψ .

Como el cuadrado de estos operadores α_i y β es la identidad, según (3.94), se sigue que sus autovalores posibles sólo pueden ser reales e iguales a ± 1 . Además, de las reglas de anticonmutación entre los distintos α_i y β , se concluye que la traza de cada operador será nula. Por tanto, poseen tantos autovalores positivos como negativos, indicando que la dimensión del subespacio de las funciones de onda sobre el que actúan debe ser par, necesariamente. El espacio de menor dimensión par, $N = 2$, no puede ser el adecuado, ya que sólo existen tres matrices que anticonmutan, las matrices σ de Pauli, mientras que necesitamos un total de cuatro, tres α_i más una β . Por tanto, el espacio de matrices de menor dimensión que puede satisfacer este conjunto de relaciones es el de matrices 4×4 .

Es fácil comprobar que las matrices

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix} \quad (3.99)$$

definidas en términos de las matrices σ de Pauli, y

$$\beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (3.100)$$

hacen que las relaciones (3.95) y (3.96) queden satisfechas. Entonces la ecuación relativista buscada se escribe

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left(\frac{\hbar}{i} c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + mc^2 \beta \right) \psi \quad (3.101)$$

y constituye la *ecuación de Dirac* para una partícula libre. La ecuación de Dirac modificada en presencia de un campo electromagnético se obtiene sin más que sustituir, de la manera usual, los operadores de derivación temporal y de momento por sus versiones “electromagnéticas” (como se hizo en 3.2 de este tema)

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\phi \right) \psi = \left[c \boldsymbol{\alpha} \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e \mathbf{A} \right) + mc^2 \beta \right] \psi \quad (3.102)$$

Nótese que al ser la dimensión de los operadores matriciales 4×4 , la función de onda ψ debe tener cuatro componentes que se acoplan entre sí y varían de forma interdependiente. Nótese además que las matrices α aparecen acopladas directamente con el potencial magnético \mathbf{A} , y así se producirá una interacción entre los grados internos de libertad y el campo magnético.

La ecuación de Dirac, como toda ecuación relativista, admite soluciones de energía positiva y negativa. Comprobemos este hecho para el caso sencillo de una partícula en reposo. La ecuación de Dirac se escribe, con $\mathbf{p} = 0$,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = mc^2 \beta \psi \quad (3.103)$$

y se busca una función de onda propia del operador energía con la forma

$$\psi = \varphi \exp(-iEt/\hbar) \quad (3.104)$$

siendo φ un vector de cuatro componentes que depende exclusivamente de los grados de libertad internos. Introduciendo esta expresión en (3.103), obtenemos

$$E\varphi = mc^2 \beta \varphi \quad (3.105)$$

y, puesto que β tiene valores propios dobles ± 1 , los posibles autovalores de la energía para la partícula en reposo son $\pm mc^2$, con carácter doble, positivos y negativos. En general, para una partícula en movimiento los posibles valores de la energía de nuevo serán dobles, positivos y negativos, y estarán entonces comprendidos en el intervalo $(-\infty, -mc^2)$ o en el intervalo (mc^2, ∞) .

3.7.1. Densidad y corriente de probabilidad

En este punto del desarrollo podemos proponer como densidad de probabilidad el escalar definido positivo

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \psi^\dagger(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) \quad (3.106)$$

Evaluemos ahora la expresión de Dirac para la corriente de probabilidad asociada a la densidad definida en (3.106). Dado que la ecuación de Dirac es lineal en las derivadas espaciales y temporal, podemos utilizar el mismo método para la deducción de \mathbf{J} que el desarrollado en la ecuación de Schrödinger, o en la ecuación de Klein-Gordon escrita en la forma de Schrödinger. La función de onda adjunta satisface la ecuación adjunta de Dirac, que se escribe

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} = i\hbar c \nabla \psi^\dagger \cdot \alpha + mc^2 \psi^\dagger \beta \quad (3.107)$$

No debemos olvidar la naturaleza matricial de cada término, que explica la transposición de términos al tomar la matriz adjunta. Multiplicando dicha ecuación por la izquierda por ψ , y la ecuación de Dirac original por ψ^\dagger por la derecha, sustrayendo el resultado, se elimina el término proporcional a la energía en reposo, y obtenemos una ecuación de continuidad

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^\dagger \psi) + \nabla \cdot (\psi^\dagger c \alpha \psi) = 0 \quad (3.108)$$

de modo que podemos volver a interpretar

$$\rho = \psi^\dagger \psi \quad (3.109)$$

como una densidad de probabilidad (cuya integral sobre todo el espacio se conserva) y

$$\mathbf{J} = \psi^\dagger c \alpha \psi \quad (3.110)$$

como una corriente de probabilidad.

El operador $c\alpha$ juega en la expresión anterior para la corriente de probabilidad el papel de un operador velocidad⁸. Nótese que los valores propios del operador velocidad son $\pm c$ y, por lo tanto, parece que una partícula que estuviera en un estado propio de este operador tendría la velocidad de la luz. Sin embargo, las partículas se construyen con combinaciones de funciones de onda de estados de energía positiva y negativa y, al aplicar el operador velocidad, se obtiene siempre un valor comprendido entre 0 y c .

3.7.2. Conjugación de carga

Como en el caso de la ecuación de Klein-Gordon se establece para la ecuación de Dirac una relación entre estados de energía negativa y carga e , y estados de energía positiva y carga $-e$, esto es, entre las partículas de energía negativa y carga e y las antipartículas de energía positiva y carga $-e$. Para demostrarlo, partimos de la compleja conjugada de la ecuación de Dirac (3.102) en presencia de un campo electromagnético,

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\phi\right)\psi^* = (c\alpha^* \cdot (i\hbar\nabla - e\mathbf{A}) + mc^2\beta)\psi^* \quad (3.111)$$

Si multiplicamos esta ecuación a la izquierda por $i\beta\alpha_y$, teniendo en cuenta que $\alpha^* = -\alpha_y\alpha\alpha_y$, obtenemos el resultado

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\phi\right)(i\beta\alpha_y\psi^*) = \left[c\alpha \cdot \left(\frac{\hbar}{i}\nabla + e\mathbf{A}\right) + mc^2\beta\right](i\beta\alpha_y\psi^*) \quad (3.112)$$

que debemos comparar con la ecuación de Dirac original (3.102). Confirmamos que si ψ es solución de la ecuación de Dirac, la función conjugada de carga, definida ahora como $\psi_c \equiv i\beta\alpha_y\psi^*$, es solución de la ecuación de Dirac para una partícula de igual masa, energía positiva, y carga $-e$. El factor i es necesario para exigir que la conjugación sea una operación cerrada en el sentido de que la conjugación de la función de onda conjugada coincida con la función de onda original, es decir,

$$(\psi_c)_c = \psi \quad (3.113)$$

⁸La corriente de una partícula es igual al producto de su función densidad por su velocidad.

La conjugación compleja invierte el signo de la energía y el momento de modo que si ψ representa una partícula de energía negativa y carga e , la función ψ_c representará una antipartícula de energía positiva y carga $-e$. Sin embargo, como veremos posteriormente, existe una diferencia sustancial en la explicación de esta correspondencia.

3.7.3. Límite no relativista

Tomando el límite no relativista de la ecuación de Dirac, cuando $E - mc^2 \ll mc^2$, verificaremos que, como sucedía en la formulación de Klein-Gordon, la mitad de las componentes de la función de onda se anulan, mientras que la otra mitad satisface la ecuación de Schrödinger correspondiente a una partícula, con flujo de probabilidad conservado. Además, dado el acoplamiento a través de la ecuación de Dirac de los grados de libertad internos con el campo electromagnético, en el límite no relativista se comprobará que dicho estado interno corresponde efectivamente al estado de espín.

Dado que esperamos la anulación de la mitad de las componentes, será conveniente escribir la función de onda en la forma

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (3.114)$$

donde el espinor de cuatro componentes ψ se descompone en dos espinores φ y χ de dos componentes cada uno. La ecuación de Dirac en presencia del campo electromagnético (3.102) en esta representación resulta ser

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = c \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right) \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} + e\phi \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \\ + mc^2 \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.115)$$

que se divide en las dos ecuaciones acopladas

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi = c \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right) \cdot \sigma \chi + (e\phi + mc^2) \varphi \quad (3.116)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi = c \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right) \cdot \sigma \varphi + (e\phi - mc^2) \chi \quad (3.117)$$

En el límite no relativista, cuando la energía total es apenas mayor que la energía en reposo

$$E - mc^2 \simeq e\phi \ll mc^2 \quad (3.118)$$

podemos asumir para la función de onda χ

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi = E\chi \simeq mc^2 \chi \quad (3.119)$$

en orden principal en \mathbf{v}^2/c^2 . Entonces la ecuación (3.117) se expresa

$$\chi \simeq \frac{1}{2mc} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} \varphi \quad (3.120)$$

de modo que χ es del orden de $|\mathbf{v}|/c$ más pequeño que φ . Introduciendo este resultado en la ecuación para la función φ , ésta se reduce a la forma no relativista

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi = \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]^2 \varphi + (e\phi + mc^2) \varphi \quad (3.121)$$

Utilizando la siguiente propiedad de las matrices de Pauli

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A}') (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A}'') = (\mathbf{A}' \cdot \mathbf{A}'') I + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A}' \times \mathbf{A}'') \quad (3.122)$$

siendo \mathbf{A}' y \mathbf{A}'' dos vectores tridimensionales arbitrarios e I la matriz 2×2 identidad, la expresión entre corchetes de (3.121) admite el desarrollo

$$\left[\left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]^2 \varphi = \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right)^2 \varphi - e\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \times \mathbf{A} + \mathbf{A} \times \nabla) \varphi \quad (3.123)$$

Al ser

$$(\nabla \times \mathbf{A} + \mathbf{A} \times \nabla) \varphi = \nabla \times (\mathbf{A}\varphi) + \mathbf{A} \times \nabla \varphi = (\nabla \times \mathbf{A}) \varphi = \mathbf{B}\varphi \quad (3.124)$$

donde $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ es el campo magnético aplicado externamente, la ecuación (3.121) pasa a escribirse como

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - e\mathbf{A} \right)^2 \varphi - \frac{e}{m} \left(\frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right) \varphi + (e\phi + mc^2) \varphi \quad (3.125)$$

que se conoce como la *ecuación de Pauli*. Esta es, precisamente, la ecuación de Schrödinger para una partícula de espín 1/2, donde el segundo término

del segundo miembro representa la energía de interacción entre el espín y el campo magnético⁹. Resulta así que la teoría de Dirac asocia naturalmente al electrón el operador vector de espín $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$, sin necesidad de postularlo explícitamente como ocurría en la teoría no relativista, correspondiente al espín 1/2 del electrón. Además, dicha ecuación (3.125) lleva al valor correcto del factor giromagnético $g = 2$ del electrón libre¹⁰. Para demostrarlo, consideremos el electrón en un campo magnético uniforme

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (3.126)$$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r} \quad (3.127)$$

y supongamos que se trata de un campo magnético débil, de forma que se puedan despreciar los términos proporcionales a \mathbf{A}^2 . Entonces, desarrollando el factor cuadrático en (3.125), obtenemos

$$(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 \approx \mathbf{p}^2 - 2e\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{p}^2 - e\mathbf{p} \cdot \mathbf{B} \times \mathbf{r} = \mathbf{p}^2 - e\mathbf{B} \cdot \mathbf{L} \quad (3.128)$$

siendo $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ el momento angular orbital. Por tanto, la ecuación de Pauli se escribe en este caso

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi = \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e}{2m} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) + e\phi + mc^2 \right] \varphi \quad (3.129)$$

que muestra, efectivamente, que el factor g del vector de espín tiene un valor igual a 2.

3.8. Teoría de huecos de Dirac

Habíamos comentado anteriormente, en la discusión de la correspondencia entre partículas de energía negativa y carga $+e$ y antipartículas de

⁹Compárese, por ejemplo, con el término $\frac{e}{m}(\mathbf{S} \cdot \mathbf{B})$ de interacción entre el campo magnético y el momento angular de espín que aparece en los libros de texto de mecánica cuántica.

¹⁰El factor giromagnético, g relaciona el momento angular \mathbf{J} de una partícula de masa m y carga e con su momento magnético asociado \mathbf{m} , de modo que

$$\mathbf{m} = \frac{ge}{2m}\mathbf{J}$$

energía positiva, y carga $-e$, que la teoría de Dirac mostraba en este aspecto una diferencia sustancial con la ecuación de Klein-Gordon. En la sección 3.2 nos vimos obligados a interpretar la ecuación de continuidad obtenida como una ecuación de conservación de carga eléctrica. En consecuencia, una partícula no se podía transformar en una antipartícula puesto que ello violaría la conservación de la carga. Matemáticamente, la existencia de dos normalizaciones distintas para la densidad de carga ($+1$ para las partículas, y -1 para las antipartículas) penalizaba tal transformación.

Para la ecuación de Dirac existe una densidad de probabilidad bien definida, y tiene la misma normalización tanto para las partículas como para las antipartículas, y además en la definición de la densidad $\rho = \psi^\dagger \psi$ se combinan entre sí todos los estados posibles de partícula, en contraposición con la densidad de Klein-Gordon (3.19), que exigía la combinación exclusivamente de un estado de partícula y un estado de antipartícula, con una carga neta nula.

Entonces, en la teoría de Dirac nada impide que una partícula pueda transformarse en una antipartícula, por ejemplo, una partícula de energía positiva E puede realizar una transición a un estado de energía negativa $-E'$, liberando la diferencia de energía $E - (-E') = E + E'$ en forma de radiación. Dado que no existe un límite inferior a las energías negativas de las partículas de Dirac, como se deduce de (3.105), cada partícula de energía positiva podría realizar un ciclo indefinido de transiciones a niveles de energía cada vez menores, emitiendo radiación de forma continua, pero esto no es el comportamiento que se produce en la realidad. Para dar razón a esta imposibilidad Dirac hizo una hipótesis adicional: todos los estados de energía negativa están ocupados por electrones. Entonces, por el principio de exclusión de Pauli, no es posible que un electrón de energía positiva pueda transferirse a un estado de energía negativa ya ocupado. El *estado de vacío* se define como la ausencia de electrones reales, con energía positiva. Es el estado energético estable más profundo, y también recibe el nombre de “mar de Dirac”.

La hipótesis física del continuo de energía negativa tiene importantes consecuencias. El principio de Pauli prohíbe las transiciones de electrones reales hacia estados inferiores ocupados. Pero por otro lado, un electrón de energía negativa puede absorber radiación, y si la energía de radiación $\hbar\omega$ es mayor que el salto de energía, $\hbar\omega > 2mc^2$, el electrón de energía negativa

será excitado hacia un estado de energía positiva. En este caso se ha creado físicamente un electrón real y un hueco. El hueco se comporta como una partícula con carga $+e$, por lo que el hueco debe definirse en este marco teórico como la antipartícula del electrón, y se llama *positrón*. La creación de un electrón y un hueco por la absorción de fotones constituye así la creación de un par electrón-positrón, y tiene la energía umbral $\hbar\omega = 2mc^2$.

El resultado más importante de la teoría de huecos es ser la primera teoría que introduce un modelo para el vacío. El vacío se representa por el mar de Dirac, que consiste en los estados de energía negativa ocupados por electrones, y tiene una energía negativa infinita y una carga negativa infinita. Ambas deben ser renormalizadas al valor nulo, de forma que el punto cero de la energía y la carga deben tomarse como los valores para el mar de Dirac. Un hecho destacable es la posible modificación del vacío por la influencia de campos externos, deformando las funciones de onda de los estados ocupados de energía negativa, produciendo una *polarización del vacío*, susceptible de ser medida experimentalmente.

Es claro que esta interpretación es insuficiente. Si definimos el vacío como un mar de infinitas partículas necesitamos una teoría para muchas partículas en la que se tengan en cuenta las interacciones mutuas entre las partículas. Para ello será necesario desarrollar la teoría cuántica de campos para el electrón, el positrón, y los fotones del campo electromagnético.

3.9. Soluciones de la ecuación de Dirac para partículas libres

Examinemos las soluciones de la ecuación de Dirac para partículas libres, que escribimos de nuevo en la forma

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = H_D\psi = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + mc^2\beta)\psi \quad (3.130)$$

Los estados estacionarios, estados propios de la energía ε de la partícula, que satisfacen la “ecuación de Dirac independiente del tiempo”

$$H_D\psi = \varepsilon\psi \quad (3.131)$$

son de la forma

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp(-i\varepsilon t/\hbar) \quad (3.132)$$

Si utilizamos ahora la división de la función de onda de cuatro componentes en dos funciones de onda de dos componentes cada una, según (3.114) la ecuación (3.131) se puede escribir entonces en la forma

$$\varepsilon \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix} \cdot \mathbf{p} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (3.133)$$

o, separando cada componente,

$$\varepsilon\varphi = c\sigma \cdot \mathbf{p}\chi + mc^2\varphi \quad (3.134)$$

$$\varepsilon\chi = c\sigma \cdot \mathbf{p}\varphi - mc^2\chi \quad (3.135)$$

Los estados con momento definido serán (estados propios del operador momento \mathbf{p}) de la forma

$$\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar) \quad (3.136)$$

Escribiendo ahora como π el autovalor del operador momento \mathbf{p} para las funciones de onda anteriores, se llega al sistema de ecuaciones acopladas

$$(\varepsilon - mc^2) \varphi_0 I - c\sigma \cdot \pi \chi_0 = 0 \quad (3.137)$$

$$(\varepsilon + mc^2) \chi_0 I - c\sigma \cdot \pi \varphi_0 = 0 \quad (3.138)$$

Este sistema lineal homogéneo de ecuaciones algebraicas tiene solución distinta de la trivial ($\mathbf{p} = 0$) sólo cuando el determinante de los coeficientes sea nulo. En este caso, la ecuación característica (matricial) es

$$(\varepsilon^2 - m^2 c^4) I - c^2 (\sigma \cdot \pi) (\sigma \cdot \pi) = 0 \quad (3.139)$$

que equivale a la condición

$$\varepsilon^2 = c^2 \pi^2 + m^2 c^4 \quad (3.140)$$

Por tanto, las soluciones para la energía de la partícula son

$$\varepsilon = \pm E_\pi, \quad E_\pi = \sqrt{c^2 \pi^2 + m^2 c^4} \quad (3.141)$$

Los dos signos en la ecuación anterior para el factor de evolución temporal de la función de onda corresponden a los dos tipos de solución de la ecuación de Dirac: la solución de energía positiva y la de energía negativa. Una vez fijado el valor de ε , el conjunto de coeficientes de la función de onda satisface

$$\chi_0 = \frac{c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})}{\varepsilon + mc^2} \varphi_0 \quad (3.142)$$

Definamos el espinor de dos componentes φ_0 en la forma

$$\varphi_0 = U = \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \end{pmatrix} \quad (3.143)$$

con la normalización

$$U^\dagger U = U_1^* U_1 + U_2^* U_2 = 1 \quad (3.144)$$

donde U_1, U_2 son funciones complejas. Obtenemos de este modo las soluciones de la ecuación de Dirac para una partícula libre en la forma

$$\Psi_{\pi\lambda}(\mathbf{r}, t) = N \left(\begin{array}{c} U \\ \frac{c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})}{\lambda E_\pi + mc^2} U \end{array} \right) \exp(i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \lambda E_\pi t) / \hbar) \quad (3.145)$$

que, como se observa, depende del autovalor del operador momento y del índice $\lambda = \pm 1$, que caracteriza las soluciones de energía positiva o negativa, $\varepsilon = \lambda E_\pi$. La constante de normalización N se determina por la condición

$$\int \Psi_{\pi\lambda}^\dagger(\mathbf{r}, t) \Psi_{\pi'\lambda'}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\pi - \pi') \quad (3.146)$$

y tiene el valor

$$N = \sqrt{\frac{\lambda E_\pi + mc^2}{2\lambda E_\pi}} \quad (3.147)$$

Los estados $\Psi_{\pi\lambda}(\mathbf{r}, t)$ son autofunciones del operador momento \mathbf{p} , con autovalor igual a π

$$\mathbf{p} \Psi_{\pi\lambda}(\mathbf{r}, t) = \pi \Psi_{\pi\lambda}(\mathbf{r}, t) \quad (3.148)$$

Para cada valor del momento, \mathbf{p} , existen dos tipos de solución, aquella con $\lambda = 1$, $\varepsilon = E_\pi$, y aquella con $\lambda = -1$, $\varepsilon = -E_\pi$. Ahora vamos a comprobar que existe un número cuántico adicional, la *helicidad*, que nos sirve para clasificar de forma correcta tales diferentes estados.

En primer lugar, definimos el operador vectorial de espín \mathbf{S} en la forma

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Sigma} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \end{pmatrix} \quad (3.149)$$

Es fácil demostrar que el operador $\mathbf{S} \cdot \mathbf{p}$ conmuta con el hamiltoniano de Dirac y con el operador momento, esto es,

$$[H_D, \mathbf{S} \cdot \mathbf{p}]_- = 0 \quad (3.150)$$

$$[\mathbf{p}, \mathbf{S} \cdot \mathbf{p}]_- = 0 \quad (3.151)$$

Esto significa que los operadores H_D , $\mathbf{S} \cdot \mathbf{p}$ y \mathbf{p} pueden diagonalizarse simultáneamente. Esto sucede también en el caso del operador normalizado, el *operador helicidad*

$$\Lambda_S = \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} \quad (3.152)$$

que define la proyección del espín en la dirección del momento de la partícula.

Si el electrón se mueve en la dirección del eje z , tenemos el operador de helicidad

$$\Lambda_S = S_z = \frac{\hbar}{2} \Sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.153)$$

con los autovalores doblemente degenerados, $\pm\hbar/2$. Los autovectores son, en este caso,

$$\begin{pmatrix} U_1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} U_{-1} \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ U_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ U_{-1} \end{pmatrix} \quad (3.154)$$

donde

$$U_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, U_{-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.155)$$

Por tanto, ahora ya podemos clasificar completamente las funciones de onda de Dirac de partículas libres con espín 1/2 que se mueven en la

dirección del eje z con momento bien definido, π . Las denotaremos por $\Psi_{\pi\lambda s_z}(\mathbf{r}, t)$ y vendrán dadas explícitamente por

$$\Psi_{\pi\lambda,+1/2}(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{\lambda E_\pi + mc^2}{2\lambda E_\pi}} \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \frac{c(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})}{\lambda E_\pi + mc^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \exp[i(\boldsymbol{\pi}\cdot\mathbf{r} - \lambda E_\pi t)/\hbar] \quad (3.156)$$

$$\Psi_{\pi\lambda,-1/2}(\pi, t) = \sqrt{\frac{\lambda E_\pi + mc^2}{2\lambda E_\pi}} \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \frac{c(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})}{\lambda E_\pi + mc^2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \exp[i(\boldsymbol{\pi}\cdot\mathbf{r} - \lambda E_\pi t)/\hbar] \quad (3.157)$$

y las relaciones de normalización deben extenderse en la forma

$$\int \Psi_{\pi\lambda s_z}^\dagger(\mathbf{r}, t) \Psi_{\pi'\lambda' s'_z}(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\pi_z - \pi'_z) \delta_{s_z s'_z} \quad (3.158)$$

Nota sobre neutrinos

En las ecuaciones (3.116) o (3.117) es la masa de las partículas la que acopla las funciones φ y χ . Para partículas de espín 1/2 y masa en reposo nula, como se supone que es el caso de los neutrinos, resulta $E = cp$ y, en consecuencia, $\varphi = \chi$ si el espín está bien definido en la dirección de propagación. Ninguna de ellas puede desaparecer en ningún caso ya que la partícula tiene siempre la velocidad de la luz y es esencialmente relativista. Sin embargo, se observa experimentalmente que los neutrinos tienen siempre helicidad negativa, es decir, cuando su espín está bien definido a lo largo de la dirección de movimiento, dicho espín tiene siempre el valor $s_z = -\hbar/2$. Por consiguiente, una de dichas funciones no parece representar a ninguna partícula realmente existente en la Naturaleza.

En las interacciones débiles intervienen siempre neutrinos. Existe una asimetría en estas interacciones en la forma de una *violación de la paridad*. Es fundamental el estudio conducente a determinar si esta asimetría es una asimetría esencial (inherente al mecanismo de las interacciones débiles) o se trata de una asimetría “accidental”, debida a un exceso de neutrinos con helicidad negativa en el comienzo del Universo (como la que se ha sugerido

para explicar el predominio de la materia sobre la antimateria en el Universo actual).

3.10. Formulación covariante de la ecuación de Dirac

Para las consideraciones que siguen es conveniente escribir la ecuación de Dirac en notación 4-dimensional, notación que muestra la simetría entre las coordenadas espaciales \mathbf{r} y temporal t . El 4-vector de posición se escribe

$$x = \begin{pmatrix} ct \\ \mathbf{r} \end{pmatrix}.$$

Con las definiciones de las cuatro matrices γ (de 4×4) en la forma

$$\gamma^0 = \beta \quad (3.159)$$

$$\gamma_i = \beta \alpha_i \quad (3.160)$$

con $i = 1, 2, 3$, la ecuación de Dirac se escribe

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc) \psi = 0 \quad (3.161)$$

esto es

$$\left(i\hbar \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - mc \right) \psi = 0 \quad (3.162)$$

considerando que la componente “de tiempo” del vector de 4-momento, p_0 , es el operador

$$p_0 = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \quad (3.163)$$

La principal propiedad de las matrices γ se puede resumir en

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} I \quad (3.164)$$

donde $g^{\mu\nu}$ es el tensor métrico de Minkowski

$$g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.165)$$

e I es la matriz unidad 4×4 . Además γ^0 es unitaria y hermítica

$$(\gamma^0)^\dagger = \gamma^0 \quad (3.166)$$

mientras que las matrices γ_i son antihermíticas

$$\gamma_i^\dagger = -\gamma_i \quad (3.167)$$

De entre todas las representaciones posibles, escogemos la representación estándar, en la que dichas matrices toman la forma

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (3.168)$$

$$\gamma_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad (3.169)$$

Por último, en presencia de un campo electromagnético, la ecuación de Dirac, bajo la consideración del acoplamiento gauge mínimo, se debe escribir

$$[\gamma^\mu (p_\mu - eA_\mu) - mc] \psi = 0 \quad (3.170)$$

La *covarianza de la ecuación de Dirac* exige que se cumplan dos condiciones separadas:

1. Debe existir una regla explícita que permita al observador \mathcal{B} calcular su función de onda $\psi'(x')$ en términos de la función de onda $\psi(x)$, dada para el observador \mathcal{A} , y ambas funciones deben representar el mismo estado físico del sistema.
2. De acuerdo con el principio de relatividad restringida, que afirma que las ecuaciones básicas de la física deben ser las mismas en todos los sistemas inerciales, la función de onda $\psi'(x')$ debe ser la solución de la ecuación de Dirac en el sistema inercial fijo en \mathcal{B} . Es decir,

$$(\gamma'^\mu p'_\mu - mc) \psi'(x') = 0 \quad (3.171)$$

donde las matrices γ' deben satisfacer las mismas relaciones que γ .

Para ello, se puede demostrar, tras un largo desarrollo algebraico¹¹, que el único requerimiento será que las matrices γ en ambos sistemas de referencia, estén relacionadas por alguna transformación de simetría

$$\gamma'^{\mu} = U^{\dagger} \gamma^{\mu} U \quad (3.172)$$

donde U es un operador unitario, $U^{\dagger} = U^{-1}$. Ya que esta transformación unitaria no cambia en nada la física, sin pérdida de generalidad, se puede suponer que las matrices γ son las mismas independientemente del sistema inercial en que son evaluadas.

Ahora construiremos explícitamente la transformación entre $\psi'(x')$ y $\psi(x)$. Esta transformación debe ser lineal, ya que tanto la transformación de Lorentz como la ecuación de Dirac son ecuaciones lineales en las coordenadas del espacio-tiempo. Por tanto, debemos tener la igualdad

$$\psi'(x') = \psi'(Ax) = \mathbb{S}(A)\psi(x) = \mathbb{S}(A)\psi(A^{-1}x') \quad (3.173)$$

donde $\mathbb{S}(A)$ es una matriz 4×4 que opera sobre las componentes del bispinor de cuatro componentes $\psi(x)$. \mathbb{S} es función de los coeficientes de la matriz de transformación de Lorentz, A , que relaciona las coordenadas de los dos sistemas de referencia inerciales

$$x'^{\mu} = A^{\mu}_{\nu} x^{\nu} \quad (3.174)$$

El principio de relatividad, que establece la invariancia de las leyes físicas en todos los sistemas inerciales, implica la existencia del operador inverso $\mathbb{S}^{-1}(A)$, que satisfará

$$\psi(x) = \mathbb{S}^{-1}(A)\psi'(x') = \mathbb{S}^{-1}(A)\psi'(Ax) \quad (3.175)$$

e, intercambiando los papeles de los sistemas de los observadores \mathcal{A} y \mathcal{B} , también que

$$\psi(x) = \mathbb{S}(A^{-1})\psi'(x') = \mathbb{S}(A^{-1})\psi'(Ax) \quad (3.176)$$

¹¹Véase la página 104 y siguientes en Greiner, W., “Relativistic Quantum Mechanics. Wave equations”, Springer-Verlag, 1987

Comparando ambas ecuaciones, se concluye que el operador \mathbb{S} debe ser tal que

$$\mathbb{S}^{-1}(A) = \mathbb{S}(A^{-1}) \quad (3.177)$$

Nuestro objetivo es construir un operador \mathbb{S} que satisfaga estas relaciones. Comencemos escribiendo la ecuación de Dirac para el observador \mathcal{A}

$$\left(i\hbar\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - mc \right) \psi(x) = 0 \quad (3.178)$$

Expresando la función de onda en el sistema del observador \mathcal{B} , encontramos que

$$\left(i\hbar\gamma^\mu \mathbb{S}^{-1}(A) \frac{\partial}{\partial x^\mu} - mc \mathbb{S}^{-1}(A) \right) \psi'(x') = 0 \quad (3.179)$$

dado que el operador $\partial/\partial x^\mu$ no es matricial. Multiplicando por la izquierda la ecuación anterior por $\mathbb{S}(A)$, obtenemos que

$$\left(i\hbar\mathbb{S}(A)\gamma^\mu\mathbb{S}^{-1}(A)\frac{\partial}{\partial x^\mu} - mc \right) \psi'(x') = 0 \quad (3.180)$$

Por último, de la transformación entre las coordenadas de ambos sistemas $x'^\mu = A^\mu_\nu x^\nu$, se infiere que

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} = \frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x'^\nu} = A^\nu_\mu \frac{\partial}{\partial x'^\nu} \quad (3.181)$$

Por tanto, la ecuación de Dirac definida en el sistema de \mathcal{B} , en términos de las coordenadas x' , se lee

$$\left(i\hbar \left\{ \mathbb{S}(A)\gamma^\mu\mathbb{S}^{-1}(A)A^\nu_\mu \right\} \frac{\partial}{\partial x'^\nu} - mc \right) \psi'(x') = 0 \quad (3.182)$$

El principio de relatividad exige que dicha ecuación sea idéntica a la ecuación de Dirac, ya que se requiere la invariancia de la forma de las ecuaciones físicas. Por tanto, el operador $\mathbb{S}(A)$ debe satisfacer la propiedad adicional

$$\mathbb{S}(A)\gamma^\mu\mathbb{S}^{-1}(A)A^\nu_\mu = \gamma^\nu \quad (3.183)$$

o, equivalentemente,

$$\mathbb{S}(A)\gamma^\nu\mathbb{S}^{-1}(A) = A^\nu_\mu\gamma^\mu \quad (3.184)$$

3.10.1. Inversión espacial

Ahora estudiaremos las propiedades de transformación del biespinor Ψ bajo la transformación impropia de Lorentz para la inversión espacial

$$\mathbf{r}' = -\mathbf{r} \quad (3.185)$$

$$t' = t \quad (3.186)$$

que se corresponden con la matriz de transformación

$$A_{\mu}^{\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.187)$$

Llamaremos ahora $\mathbb{P}(A)$ al operador de transformación, ya que es el operador de paridad. Debe satisfacer, como antes la ecuación (3.184)

$$\mathbb{P}(A)\gamma^{\nu}\mathbb{P}^{-1}(A) = A_{\mu}^{\nu}\gamma^{\mu} \quad (3.188)$$

Al ser ahora A una matriz diagonal, multiplicando por ella, por la izquierda, obtenemos

$$A_{\nu}^{\sigma}\mathbb{P}(A)\gamma^{\nu}\mathbb{P}^{-1}(A) = A_{\nu}^{\sigma}A_{\mu}^{\nu}\gamma^{\mu} = \delta_{\mu}^{\sigma}\gamma^{\mu} = \gamma^{\sigma} \quad (3.189)$$

dado que

$$A_{\nu}^{\sigma}\gamma^{\nu} = A^{\sigma\sigma}\gamma^{\sigma} \quad (3.190)$$

sin suma en σ , ya que en cada fila o columna de la matriz sólo hay un término distinto de cero.

Llegamos a

$$\mathbb{P}^{-1}(A)\gamma^{\sigma}\mathbb{P}(A) = A^{\sigma\sigma}\gamma^{\sigma} \quad (3.191)$$

Dadas las propiedades de las matrices γ , esta ecuación admite la solución directa

$$\mathbb{P}(A) = e^{i\varphi}\gamma^0 \quad (3.192)$$

donde φ es una fase constante, físicamente inobservable.

Ya que las transformaciones propias de Lorentz tras una rotación de ángulo 4π devuelven a un espín a su valor inicial, postulamos que el biespinor

vuelve a su valor inicial tras aplicarle cuatro inversiones espaciales, por lo que debe satisfacerse

$$[\mathbb{P}(A)]^4 = I \quad (3.193)$$

lo que nos da las 4 soluciones para el factor $e^{i\varphi}$

$$e^{i\varphi} = \pm 1, \pm i \quad (3.194)$$

Una vez elegida esta fase, se observa que, para un electrón en reposo, los cuatro estados de espín y energía tienen paridad definida

$$\mathbb{P}(A)\psi_1 = e^{i\varphi}\psi_1 \quad (3.195)$$

$$\mathbb{P}(A)\psi_2 = e^{i\varphi}\psi_2 \quad (3.196)$$

$$\mathbb{P}(A)\psi_3 = -e^{i\varphi}\psi_3 \quad (3.197)$$

$$\mathbb{P}(A)\psi_4 = -e^{i\varphi}\psi_4 \quad (3.198)$$

y por tanto, las autofunciones de energía positiva y energía negativa tienen paridad opuesta.

3.10.2. Inversión temporal

Estudiaremos ahora, las propiedades de transformación del biespinor Ψ bajo la otra transformación impropia de Lorentz: la inversión temporal. La dinámica de la teoría de Dirac es invariante bajo inversión temporal si, al realizar la transformación

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} \quad (3.199)$$

$$t' = -t \quad (3.200)$$

la forma de la ecuación de Dirac no cambia. Entonces, la función de onda transformada por el operador de inversión \mathbb{T} ,

$$\psi'(\mathbf{r}, t') = \mathbb{T}\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, -t) \quad (3.201)$$

describe una partícula de Dirac que se propaga hacia atrás en el tiempo. Esto es físicamente posible si la nueva función de onda $\psi'(\mathbf{r}, t')$ satisface también la ecuación de Dirac. Para construir el operador de inversión temporal, es conveniente recuperar la notación no covariante de la ecuación de Dirac

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H_D \psi \quad (3.202)$$

donde expresamos, de nuevo, H_D en términos de la matrices α y β , como

$$H_D = -i\hbar c\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + mc^2\beta \quad (3.203)$$

Aplicando el operador \mathbb{T} y su inverso, dado que

$$\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -\frac{\partial}{\partial t'} \quad (3.204)$$

se deben satisfacer simultáneamente

$$\mathbb{T}i\mathbb{T}^{-1} = \pm i \quad (3.205)$$

$$\mathbb{T}H_D\mathbb{T}^{-1} = \mp H_D \quad (3.206)$$

En primer lugar, determinamos las propiedades de transformación del hamiltoniano. Dado que en presencia de un campo electromagnético, tiene el valor

$$H_D = c\boldsymbol{\alpha}(-i\hbar\nabla - e\mathbf{A}) + mc^2\beta + e\phi \quad (3.207)$$

es necesario estudiar cómo se transforman \mathbf{A} y ϕ . El potencial \mathbf{A} está generado por corrientes móviles (que cambian de signo cuando se invierte el tiempo) y el potencial ϕ está generado por una distribución escalar de carga (que no cambia de signo cuando se invierte el tiempo). Ambas componentes tienen distintas propiedades de transformación, en particular

$$\mathbb{T}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)\mathbb{T}^{-1} = \mathbf{A}(\mathbf{r}, -t) = -\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (3.208)$$

$$\mathbb{T}\phi(\mathbf{r}, t)\mathbb{T}^{-1} = \phi(\mathbf{r}, -t) = \phi(\mathbf{r}, t) \quad (3.209)$$

Por lo tanto, para que se satisfaga la ecuación de Dirac en el sistema primado, es necesario que

$$\mathbb{T}\boldsymbol{\alpha}\mathbb{T}^{-1} = -\boldsymbol{\alpha} \quad (3.210)$$

$$\mathbb{T}\beta\mathbb{T}^{-1} = \beta \quad (3.211)$$

Con esto,

$$\mathbb{T}H_D(\mathbf{r}, t)\mathbb{T}^{-1} = H_D(\mathbf{r}, -t) = H_D(\mathbf{r}, t) \quad (3.212)$$

y entonces, necesariamente, deberemos tomar

$$\mathbb{T}i\mathbb{T}^{-1} = -i \quad (3.213)$$

Esto nos indica que el operador \mathbb{T} contiene el operador de conjugación compleja, que denotaremos por \mathbb{K} . Podemos introducir un nuevo operador \mathbb{T}_0 , tal que

$$\mathbb{T} = \mathbb{T}_0\mathbb{K} \quad (3.214)$$

y exigir directamente

$$\mathbb{T}_0\alpha\mathbb{T}_0^{-1} = -\alpha \quad (3.215)$$

$$\mathbb{T}_0\beta\mathbb{T}_0^{-1} = \beta \quad (3.216)$$

La solución para el operador de inversión temporal es

$$\mathbb{T} = i\gamma^1\gamma^3\mathbb{K} \quad (3.217)$$

y se comprueba que está en concordancia con el concepto de inversión temporal de la física clásica.

3.10.3. Transformación PCT

Estudiamos ahora cómo se conectan las funciones de onda de los electrones y los positrones, con ayuda de la transformación compuesta de inversión temporal, conjugación de carga e inversión espacial.

El estado conjugado de carga $\psi_c = i\beta\alpha_y\psi^*$ se puede obtener, a la luz de nuestros últimos desarrollos, mediante el operador \mathbb{C} , definido por

$$\psi_c = i\gamma^2\gamma^0\mathbb{K}\psi \equiv \mathbb{C}\psi \quad (3.218)$$

ya que describe una partícula con la misma masa en reposo, la misma dirección de espín (polarización), pero con una carga opuesta y un signo opuesto de la energía y del momento. Por tanto, si $\psi(\mathbf{r}, t)$ describe un electrón con momento \mathbf{p} y energía negativa, $\psi_c(\mathbf{r}, t)$ describe un positrón con momento $-\mathbf{p}$ y energía positiva, y ambas partículas se propagan hacia adelante en el tiempo.

Ahora combinamos el operador de paridad, \mathbb{P} , el operador de conjugación de carga, \mathbb{C} , y el operador de inversión temporal, \mathbb{T} . La nueva función de onda es

$$\psi_{PCT}(\mathbf{r}, t) = \mathbb{P}\mathbb{C}\mathbb{T}\psi(\mathbf{r}, t) = ie^{i\varphi}\gamma^5\psi(-\mathbf{r}, -t) \quad (3.219)$$

donde hemos definido $\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$. Por tanto, si $\psi(\mathbf{r}, t)$ es una función de onda de un electrón de energía negativa, entonces, $\psi_{PCT}(\mathbf{r}, t)$ es una función de onda de un positrón de energía positiva, que está afectado por el operador conjugación de carga. Luego, $\psi_{PCT}(\mathbf{r}, t)$ es una función de onda de un positrón con energía positiva que se mueve hacia adelante en el tiempo y el espacio y es, salvo el factor $ie^{i\varphi}\gamma^5$, idéntica a la función de onda de un electrón con energía negativa, que se mueve hacia atrás en el tiempo y el espacio. Este resultado es fundamental a la hora de desarrollar una teoría completa del campo conjunto positrón-electrón.

Finalmente, apuntar que la simetría de la teoría relativista frente a la transformación PCT es uno de los pilares actuales de la teoría cuántica de campos, que estudia la interacción de las partículas fundamentales. Bajo la exigencia de invariancia relativista, junto con la aplicación de la conexión entre espín y estadística¹², siempre se puede garantizar la invariancia de la interacción entre dichas partículas bajo la operación PCT, independientemente de la forma exacta de la interacción. Este brillante resultado fue obtenido en 1954 por R. Lüders, y se conoce como el *teorema PCT*.

3.11. Ejemplo: Partícula de Dirac en un campo exterior

Entre las soluciones estacionarias de la ecuación de Dirac en un campo exterior pueden tenerse estados tanto del espectro continuo como del espectro discreto. Al igual que en la teoría no relativista, los estados del espectro continuo corresponden a un movimiento de extensión infinita en el que la partícula puede encontrarse a distancias arbitrariamente grandes, por lo que puede considerarse libre. Dado que los valores propios del hamiltoniano son dobles $\varepsilon = \pm E_p$, el espectro continuo corresponde a las regiones de energía $\varepsilon \geq mc^2$ y $\varepsilon \leq -mc^2$. Cuando $-mc^2 \leq \varepsilon \leq mc^2$, la partícula no es capaz de llegar al infinito, de modo que el movimiento es finito y el estado pertenece al espectro discreto.

Para partículas de Dirac en un campo exterior, la función de onda se

¹²Según esta conexión, las partículas de espín semientero obedecen la estadística de Fermi-Dirac y las partículas de espín entero obedecen la estadística de Bose-Einstein.

puede construir como superposición de ondas planas de Dirac de frecuencias tanto positivas como negativas. Sin embargo, este esquema lleva a dificultades importantes. Tomemos como ejemplo característico, el espectro de energía de una partícula de Dirac en un pozo unidimensional de potencial de anchura a y profundidad V_0 , es decir,

$$V = \begin{cases} 0 & |z| > a/2 \\ -V_0 & |z| < a/2 \end{cases} \quad (3.220)$$

Ocurre, en efecto, que a medida que aumenta la profundidad del pozo de potencial, los niveles correspondientes de energía pueden atravesar la línea frontera $\varepsilon = 0$, es decir, pasar de valores positivos a negativos para los estados libres de partículas. A pesar de todo, por completitud tales estados siguen perteneciendo al espectro del electrón, y no del positrón. Sería más correcto hacer corresponder a los electrones sólo aquellos estados que, tras un desacoplamiento infinitamente lento del campo exterior, tienen el límite $\varepsilon \rightarrow mc^2$. Con todo, la energía del electrón puede ser entonces negativa, de modo que el vacío $\varepsilon = 0$, ya no será el estado de energía más baja. Teniendo en cuenta el comportamiento del campo, según la teoría de Dirac de huecos, esto da lugar a la aparición de pares positrón-electrón. Además, si sigue aumentando la profundidad del pozo de potencial, un nivel electrónico puede incluso llegar a alcanzar la frontera negativa $\varepsilon = -mc^2$, en cuyo caso se anula el valor de la energía mínima para la creación de una par positrón-electrón. Así, se inicia inmediatamente la formación espontánea de tales pares, proceso que en ningún caso puede interpretarse dentro de una teoría de una sola partícula.

Estudiemos con detalle estas conclusiones para el pozo de potencial unidimensional anterior. Denotemos las distintas regiones del espacio como

$$\begin{aligned} I: & \quad z < -a/2 \\ II: & \quad -a/2 < z < a/2 \\ III: & \quad z > a/2 \end{aligned} \quad (3.221)$$

La ecuación de Dirac en estas regiones es de la forma

$$\begin{aligned} E\psi_I &= (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + mc^2\beta) \psi_I \\ (E + V_0)\psi_{II} &= (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + mc^2\beta) \psi_{II} \\ E\psi_{III} &= (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + mc^2\beta) \psi_{III} \end{aligned} \quad (3.222)$$

y como coordenada espacial las funciones de onda sólo dependen de z .

Mientras que las funciones en I y III son soluciones libres de la ecuación de Dirac, la función de onda en II se obtiene de la solución libre con la sustitución $E \rightarrow E + V_0$. Por tanto, no existe un salto en el espín en las fronteras del pozo de potencial, y podemos restringir la discusión a funciones de onda con espín definido, "hacia arriba". Permitiendo que la energía se sitúe en el intervalo $-\infty < E < \infty$, podemos describir el movimiento tanto de partículas como antipartículas. La solución conjunta a la ecuación de Dirac, prescindiendo del factor temporal habitual, está dada por

$$\begin{aligned} \psi_I = & A \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \frac{cp_I}{E+mc^2} \end{pmatrix} \exp(ip_I z/\hbar) \\ & + A' \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \frac{-cp_I}{E+mc^2} \end{pmatrix} \exp(-ip_I z/\hbar) \end{aligned} \quad (3.223)$$

donde

$$p_I = \sqrt{\left(\frac{E}{c}\right)^2 - (mc)^2} \quad (3.224)$$

y se ha hecho uso de la relación $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = p_I \sigma_3 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = p_I \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Asimismo

$$\begin{aligned} \psi_{II} = & B \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \frac{cp_{II}}{E+V_0+mc^2} \end{pmatrix} \exp(ip_{II} z/\hbar) \\ & + B' \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \frac{-cp_{II}}{E+V_0+mc^2} \end{pmatrix} \exp(-ip_{II} z/\hbar) \end{aligned} \quad (3.225)$$

donde

$$p_{II} = \sqrt{\left(\frac{E + V_0}{c}\right)^2 - (mc)^2} \quad (3.226)$$

Finalmente,

$$\begin{aligned} \psi_{III} = & C \left(\begin{array}{c} \left(\begin{array}{c} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right) \\ \frac{cp_{III}}{E+mc^2} \end{array} \right) \exp(ip_{III}z/\hbar) \\ & + C' \left(\begin{array}{c} \left(\begin{array}{c} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right) \\ \frac{-cp_{III}}{E+V_0+mc^2} \end{array} \right) \exp(-ip_{III}z/\hbar) \end{aligned} \quad (3.227)$$

donde

$$p_{III} = \sqrt{\left(\frac{E}{c}\right)^2 - (mc)^2} = p_I \quad (3.228)$$

En las fronteras del pozo, tanto la función de onda como su derivada deben ser continuas. Matemáticamente se corresponde con las cuatro relaciones

$$\begin{aligned} \psi_I(-a/2) &= \psi_{II}(-a/2) \\ \psi'_I(-a/2) &= \psi'_{II}(-a/2) \\ \psi_{II}(a/2) &= \psi_{III}(a/2) \\ \psi'_{II}(a/2) &= \psi'_{III}(a/2) \end{aligned} \quad (3.229)$$

Una quinta relación adicional da cuenta de la normalización de la función de onda

$$\int \psi^\dagger \psi d\mathbf{r} = 1 \quad (3.230)$$

Con ayuda de estas cinco relaciones, es posible resolver el conjunto de coeficientes (A, A', B, B', C, C') en función de uno de ellos.

En vez de determinar la relación exacta entre estos coeficientes, es más instructiva la discusión de los distintos niveles de energía. En primer lugar, vamos a asumir que $V_0 < 2mc^2$. Entonces, tenemos que considerar cuatro intervalos de definición de la energía.

- (1) $E > mc^2$. Corresponde al fenómeno de dispersión de electrones libres que inciden desde la izquierda, y son dispersados por el pozo de potencial atractivo. Si en la región II, la anchura del potencial es un

múltiplo entero de la longitud de onda del electrón, existirá una resonancia, que se mostrará como un estado del electrón ligado al pozo. La probabilidad tomará entonces valores máximos en el interior del pozo.

- (2) $mc^2 - V_0 < E < mc^2$. Corresponden a estados ligados con un decrecimiento exponencial en la probabilidad en la región exterior al pozo, en las regiones I y II.
- (3) $-mc^2 - V_0 < E < mc^2 - V_0$. Los positrones incidentes, estados del continuo de energía negativa, sienten un potencial repulsivo, a causa de la positividad de su carga, y son dispersados por el potencial. Ya que la probabilidad de encontrar un electrón en la región II decrece exponencialmente en este caso, una gran proporción de los positrones se verán reflejados en la frontera del pozo.
- (4) $E < -mc^2 - V_0$. Los positrones son dispersados en el pozo de potencial repulsivo. De nuevo, pueden existir resonancias cuando a sea igual a un número entero de longitudes de onda.

Suponemos ahora que $V_0 > 2mc^2$. En este caso, aparece un nuevo dominio para la energía entre (2) y (3). En particular, su expresión es

- (2 bis) $mc^2 - V_0 < E < -mc^2$. En este dominio, son posibles estados ligados del electrón, y sus funciones de onda ya no tienen un decrecimiento exponencial en I y III, sino que se unen a una función de onda continua de la misma energía $E < -mc^2$.

Por tanto, la probabilidad de encontrar la partícula lejos del pozo de potencial ya no es despreciable. Podemos interpretar este resultado con ayuda de la teoría de Dirac de los huecos. Significa que un hueco en ese estado viajará del pozo hacia el infinito como un positrón, y si ese estado no está ocupado, será rellenado de forma progresiva por un electrón que proviene del mar de Dirac (estado de vacío). Así, será posible la creación espontánea de un par electrón-positrón. Un estado ligado no ocupado será espontáneamente ocupado por un electrón del continuo de cargas negativas, mientras que el positrón creado viajará lejos del pozo hacia el infinito. Entonces, siendo así,

se dice que el pozo de potencial es *supercrítico* para la producción espontánea de pares positrón-electrón. A causa de la degeneración del espín del electrón, en cada caso, existirán dos estados de positrón, con espín hacia arriba y hacia abajo.

3.11.1. Transmisión en barrera de potencial. Paradoja de Klein

La teoría de huecos vuelve a ser esencial para explicar el comportamiento de una partícula de Dirac de energía E , que incide sobre una barrera de potencial de altura V_0 cuando se satisface $V_0 > E + mc^2$.

El potencial del escalón se define por

$$V = \begin{cases} 0 & z < 0 \\ V_0 & z > 0 \end{cases} \quad (3.231)$$

y la solución de onda plana para la ecuación de Dirac, con espín definido hacia arriba¹³, se define en las dos regiones en que hemos dividido el espacio. Para $z < 0$, la onda incidente tiene la expresión

$$\psi_{Ii} = A \left(\begin{array}{c} \left(\begin{array}{c} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right) \\ \frac{cp_I}{E+mc^2} \end{array} \right) \exp(ip_I z/\hbar) \quad (3.232)$$

donde

$$p_I = \sqrt{\left(\frac{E}{c}\right)^2 - (mc)^2} \quad (3.233)$$

Para $z > 0$, la onda transmitida es

$$\psi_{II} = B \left(\begin{array}{c} \left(\begin{array}{c} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right) \\ \frac{cp_{II}}{E-V_0+mc^2} \end{array} \right) \exp(ip_{II} z/\hbar) \quad (3.234)$$

donde

$$p_{II} = \sqrt{\left(\frac{E-V_0}{c}\right)^2 - (mc)^2} \quad (3.235)$$

¹³De nuevo, no existe salto en el espín en la frontera $z = 0$ del escalón

Decisivo es el hecho de que cuando $V_0 > E + mc^2$, el momento p_{II} es real¹⁴, permitiendo la propagación de ondas planas libres en la región $z > 0$. Este hecho, como se verá más adelante, sólo puede comprenderse asumiendo la existencia de un segundo continuo de energía correspondiente a las soluciones de Dirac de energía negativa. Finalmente, tras el impacto de la onda incidente, se produce también una onda reflejada que se propaga en la región $z < 0$, en la forma

$$\psi_{Ir} = C \left(\begin{array}{c} 1 \\ 0 \\ \frac{-cp_I}{E+mc^2} \\ 0 \end{array} \right) \exp(-ip_I z/\hbar) \quad (3.236)$$

donde, de nuevo,

$$p_I = \sqrt{\left(\frac{E}{c}\right)^2 - (mc)^2} \quad (3.237)$$

Aplicando las condiciones de continuidad de la función de onda y su derivada en la frontera del escalón, $z = 0$, se obtienen los coeficientes A , B , C en función de uno de ellos.

La corriente de probabilidad para la ecuación de Dirac libre se escribe (ecuación 3.110) $\mathbf{J} = \psi^\dagger c\alpha\psi$. Evaluándola para las tres ondas en interacción, se encuentra

$$\mathbf{J}_{Ii} = \frac{2p_I c^2}{E + mc^2} |A|^2 \mathbf{u}_z \quad (3.238)$$

$$\mathbf{J}_{Ir} = -\frac{2p_I c^2}{E + mc^2} |C|^2 \mathbf{u}_z \quad (3.239)$$

$$\mathbf{J}_{Ii} = \frac{2p_{II} c^2}{E - V_0 + mc^2} |B|^2 \mathbf{u}_z \quad (3.240)$$

De aquí, evaluando los coeficientes A , B , C , según se muestra anteriormente, una de las conclusiones destacables es que

$$|\mathbf{J}_{Ir}| > |\mathbf{J}_{Ii}| \quad (3.241)$$

Es decir, el flujo de probabilidad reflejado es mayor que el incidente. Es necesario por tanto que en la región II el flujo de probabilidad se dirija

¹⁴Cuando $V_0 < E + mc^2$, la función de onda transmitida decae exponencialmente en la región $z > 0$, y el desarrollo del problema tiene las mismas conclusiones que en la teoría no relativista

en la dirección $-z$, esto es, los electrones abandonan la región II, pero, de acuerdo con nuestra hipótesis inicial, ¡no existen electrones que realicen este desplazamiento!. Este hecho constituye la llamada *paradoja de Klein*.

Para prevenir la transición de los electrones hacia estados de energía negativa, debe exigirse que todos los niveles de energía del electrón que satisfagan $\varepsilon < -mc^2$, estén ocupados. Esta hipótesis permite la siguiente explicación. El escalón de potencial $V_0 > E + mc^2$ aumenta la energía del electrón en la región II lo suficiente como para que puedan solaparse los dos continuos de energía, el positivo en $z > 0$ y el negativo en $z < 0$. Así, en este caso, los electrones que impactan sobre el escalón de potencial desde la izquierda, en realidad son capaces de golpear los electrones del vacío empujándoles en la dirección $z > 0$, dando lugar a un flujo de probabilidad de los positrones en la dirección $+z$, y por consiguiente, un flujo de probabilidad de electrones en la dirección contraria, $-z$. Como se ha comentado anteriormente, este fenómeno está relacionado con la creación de un par positrón-electrón en la frontera del escalón de potencial.

3.12. Apéndice: Introducción a la teoría cuántica de campos

En este apéndice se desarrollan las principales ideas del llamado *formalismo de la segunda cuantización*. En la mecánica cuántica no relativista, en el estudio de las funciones de onda asociadas al movimiento de las partículas, ya se introdujo una primera cuantización, exigiendo que los niveles energéticos ligados tuvieran valores discretos definidos. En la mecánica cuántica relativista, se asume una nueva cuantización, al exigir que el número de partículas presentes en el campo cuántico dado tome valores discretos, una vez se han definido los llamados *operadores de creación y destrucción de partículas*.

3.12.1. Cuantización del campo electromagnético libre. El fotón

3.12.1.1. Campo electromagnético clásico

Sea $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ el potencial vector del campo electromagnético libre que satisface la condición de transversalidad

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (3.242)$$

En este caso, el potencial escalar es $\phi = 0$, y los campos \mathbf{E} y \mathbf{B} están dados por

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (3.243)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (3.244)$$

Las ecuaciones de Maxwell se reducen a la ecuación de ondas para \mathbf{A}

$$\Delta \mathbf{A} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} \quad (3.245)$$

En la electrodinámica clásica, el paso de la descripción continua del campo electromagnético, en función del potencial \mathbf{A} , a una descripción mediante una sucesión discreta de variables que representan los distintos modos de vibración del campo se efectúa considerando el campo en un determinado volumen V del espacio, grande, pero finito. Entonces, el campo en un volumen finito se puede desarrollar en serie de ondas planas estacionarias, cada una de las cuales corresponde a un determinado modo de vibración, en la forma

$$\mathbf{A} = \sum_{\mathbf{k}} (\vec{a}_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + \vec{a}_{\mathbf{k}}^* \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})) \quad (3.246)$$

donde los coeficientes $\vec{a}_{\mathbf{k}}$ dependen del tiempo en la forma $\exp(-i\omega t)$, con $\omega = c|\mathbf{k}|$. En virtud de la condición de transversalidad, los vectores complejos $\vec{a}_{\mathbf{k}}$ son ortogonales al vector de onda \mathbf{k} , esto es, $\vec{a}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{k} = 0$. La suma anterior se extiende al conjunto discreto infinito de valores del vector de onda. Por tanto, el campo electromagnético en el volumen dado queda determinado completamente al conocer el conjunto de vectores $\vec{a}_{\mathbf{k}}$. Estas magnitudes se pueden considerar como un conjunto discreto de las variables de campo clásicas.

Para poder aplicar de forma directa el formalismo cuántico, es conveniente escribir las fórmulas anteriores en términos de las variables canónicas del campo¹⁵, $\mathbf{P}_{\mathbf{k}}$ y $\mathbf{Q}_{\mathbf{k}}$. Éstas se definen por las igualdades

$$\mathbf{Q}_{\mathbf{k}} = \sqrt{\varepsilon_0 V} (\vec{a}_{\mathbf{k}} + \vec{a}_{\mathbf{k}}^*) \quad (3.247)$$

$$\mathbf{P}_{\mathbf{k}} = \dot{\mathbf{Q}}_{\mathbf{k}} = -i\omega\sqrt{\varepsilon_0 V} (\vec{a}_{\mathbf{k}} - \vec{a}_{\mathbf{k}}^*) \quad (3.248)$$

con las relaciones inversas

$$\vec{a}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2\sqrt{\varepsilon_0 V}} \left(\mathbf{Q}_{\mathbf{k}} + \frac{i}{\omega} \mathbf{P}_{\mathbf{k}} \right) \quad (3.249)$$

$$\vec{a}_{\mathbf{k}}^* = \frac{1}{2\sqrt{\varepsilon_0 V}} \left(\mathbf{Q}_{\mathbf{k}} - \frac{i}{\omega} \mathbf{P}_{\mathbf{k}} \right) \quad (3.250)$$

Así, en las nuevas variables, el potencial vector tiene la expresión

$$\mathbf{A} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 V}} \sum_{\mathbf{k}} \left(\mathbf{Q}_{\mathbf{k}} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) - \frac{1}{\omega} \mathbf{P}_{\mathbf{k}} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \right) \quad (3.251)$$

y de aquí, se obtienen los desarrollos del campo eléctrico y magnético, en la forma

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 V}} \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{P}_{\mathbf{k}} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + \omega \mathbf{Q}_{\mathbf{k}} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})) \quad (3.252)$$

$$\mathbf{B} = -\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 V}} \sum_{\mathbf{k}} \left(\mathbf{k} \times \mathbf{Q}_{\mathbf{k}} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + \frac{1}{\omega} \mathbf{k} \times \mathbf{P}_{\mathbf{k}} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \right) \quad (3.253)$$

Hemos utilizado aquí que $\ddot{\mathbf{Q}}_{\mathbf{k}} = -\omega^2 \mathbf{Q}_{\mathbf{k}}$, y que $\nabla \times [f(\mathbf{C} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{D}] = f'(\mathbf{C} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{C} \times \mathbf{D}$ para cualquier función f arbitraria del producto $\mathbf{C} \cdot \mathbf{r}$ y para cualesquiera vectores \mathbf{C} y \mathbf{D} independientes de \mathbf{r} .

Finalmente, el hamiltoniano (correspondiente a la energía total del campo) tiene la expresión

$$H = \frac{1}{2} \varepsilon_0 \int (|\mathbf{E}|^2 + c^2 |\mathbf{B}|^2) d\mathbf{r} \quad (3.254)$$

¹⁵Por su propia definición se observa que estas variables son reales

que, en las variables canónicas, y tras integrar en el volumen V del sistema¹⁶, se lee

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{P}_{\mathbf{k}}^2 + \omega^2 \mathbf{Q}_{\mathbf{k}}^2) \quad (3.255)$$

Cada uno de los vectores $\mathbf{Q}_{\mathbf{k}}$ y $\mathbf{P}_{\mathbf{k}}$ es perpendicular al vector de onda \mathbf{k} , de forma que cada uno de ellos posee dos componentes independientes, $Q_{\mathbf{k}\alpha}$, $P_{\mathbf{k}\alpha}$ con $\alpha = 1, 2$. La dirección de estos vectores $\mathbf{Q}_{\mathbf{k}}$ y $\mathbf{P}_{\mathbf{k}}$ determina la dirección de la polarización de la onda correspondiente. Entonces, la función de Hamilton, que escribimos en la forma

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\alpha} (P_{\mathbf{k}\alpha}^2 + \omega^2 Q_{\mathbf{k}\alpha}^2) \quad (3.256)$$

se descompone como suma de términos independientes. Cada término se corresponde con una onda estacionaria con un vector de onda y polarización determinados, y tiene la forma de un oscilador armónico unidimensional. Por eso, este desarrollo del campo se denomina *desarrollo en osciladores armónicos*.

3.12.1.2. Cuantización del campo electromagnético

El procedimiento expuesto para la descripción clásica del campo electromagnético hace evidente el camino hacia su cuantización. Hemos de considerar que las variables canónicas $Q_{\mathbf{k}\alpha}$ y $P_{\mathbf{k}\alpha}$, esto es, las coordenadas y momentos generalizados, deben tener operadores cuánticos asociados que satisfagan las reglas de conmutación

$$[Q_{\mathbf{k}\alpha}, P_{\mathbf{k}\alpha}] = Q_{\mathbf{k}\alpha} P_{\mathbf{k}\alpha} - P_{\mathbf{k}\alpha} Q_{\mathbf{k}\alpha} = i\hbar \quad (3.257)$$

mientras que los operadores con diferentes \mathbf{k} ó α conmutan entre sí.

La definición consecuente del operador hamiltoniano del campo exige el cálculo de

$$H = \frac{1}{2} \varepsilon_0 \int (|\mathbf{E}|^2 + c^2 |\mathbf{B}|^2) d\mathbf{r} \quad (3.258)$$

¹⁶Para las funciones trigonométricas, el valor medio de $\cos^2(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ y $\sin^2(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ es igual a $\frac{1}{2}$; el valor medio de $\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ es cero. Además, dado que para una onda plana, $\vec{a}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{k} = 0$, se satisface $\mathbf{Q}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{k} = 0$ y, por tanto, $|\mathbf{k} \times \mathbf{Q}_{\mathbf{k}}|^2 = k^2 \mathbf{Q}_{\mathbf{k}}^2$. Lo mismo sucede con el vector $\mathbf{P}_{\mathbf{k}}$.

en términos de los operadores $Q_{\mathbf{k}\alpha}$, $P_{\mathbf{k}\alpha}$. Dado que los productos $Q_{\mathbf{k}\alpha} \cdot P_{\mathbf{k}\alpha}$ se multiplican por la función $\sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$, que tiene un valor medio nulo, el operador hamiltoniano que se obtiene es

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\alpha} (P_{\mathbf{k}\alpha}^2 + \omega^2 Q_{\mathbf{k}\alpha}^2) \quad (3.259)$$

que se corresponde con la función clásica de Hamilton, como era de esperar. La determinación de los valores propios de este operador hamiltoniano no requiere cálculos especiales, puesto que se reduce al conocido problema de los niveles de energía de un oscilador unidimensional. Por consiguiente, los niveles de energía del campo electromagnético son

$$E = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left(N_{\mathbf{k}\alpha} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad (3.260)$$

con los $N_{\mathbf{k}\alpha}$ números enteros no negativos.

En vista de la fórmula (3.259), teniendo en cuenta las propiedades del oscilador armónico, el operador hamiltoniano puede escribirse en la forma

$$H = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}\alpha} [(iP_{\mathbf{k}\alpha} + \omega Q_{\mathbf{k}\alpha})(-iP_{\mathbf{k}\alpha} + \omega Q_{\mathbf{k}\alpha}) + (-iP_{\mathbf{k}\alpha} + \omega Q_{\mathbf{k}\alpha})(iP_{\mathbf{k}\alpha} + \omega Q_{\mathbf{k}\alpha})] \quad (3.261)$$

Si siguiendo con la analogía con el oscilador cuántico, definimos los operadores $c_{\mathbf{k}\alpha}$, $c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger$

$$c_{\mathbf{k}\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} (iP_{\mathbf{k}\alpha} + \omega Q_{\mathbf{k}\alpha}) \quad (3.262)$$

$$c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} (-iP_{\mathbf{k}\alpha} + \omega Q_{\mathbf{k}\alpha}) \quad (3.263)$$

cuyo conmutador se anula cuando \mathbf{k} ó α son distintos y, para iguales \mathbf{k} y α , satisface

$$[c_{\mathbf{k}\alpha}, c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger] = 1 \quad (3.264)$$

A partir de los únicos elementos de matriz no nulos para los operadores $Q_{\mathbf{k}\alpha}$ y $P_{\mathbf{k}\alpha}$, entre los niveles consecutivos de energía del oscilador armónico,¹⁷

$$\langle N_{\mathbf{k}\alpha} | Q_{\mathbf{k}\alpha} | N_{\mathbf{k}\alpha} - 1 \rangle = \langle N_{\mathbf{k}\alpha} - 1 | Q_{\mathbf{k}\alpha} | N_{\mathbf{k}\alpha} \rangle = \sqrt{\frac{N_{\mathbf{k}\alpha} \hbar}{2\omega}} \quad (3.265)$$

¹⁷Véase, por ejemplo, A.F.J. Levi, "Applied Quantum Mechanics", Cambridge University Press, 2003.

$$\langle N_{\mathbf{k}\alpha} | P_{\mathbf{k}\alpha} | N_{\mathbf{k}\alpha} - 1 \rangle = i\omega \sqrt{\frac{N_{\mathbf{k}\alpha} \hbar}{2\omega}} \quad (3.266)$$

$$\langle N_{\mathbf{k}\alpha} - 1 | P_{\mathbf{k}\alpha} | N_{\mathbf{k}\alpha} \rangle = -i\omega \sqrt{\frac{N_{\mathbf{k}\alpha} \hbar}{2\omega}} \quad (3.267)$$

obtenemos los elementos de matriz no nulos para los operadores $c_{\mathbf{k}\alpha}$, $c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger$ en la forma

$$\langle N_{\mathbf{k}\alpha} - 1 | c_{\mathbf{k}\alpha} | N_{\mathbf{k}\alpha} \rangle = \sqrt{N_{\mathbf{k}\alpha}} \quad (3.268)$$

$$\langle N_{\mathbf{k}\alpha} | c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger | N_{\mathbf{k}\alpha} - 1 \rangle = \sqrt{N_{\mathbf{k}\alpha}} \quad (3.269)$$

Entonces, para los productos $c_{\mathbf{k}\alpha} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger$, $c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha}$ los elementos de matriz correspondientes se escriben

$$\begin{aligned} \langle N_{\mathbf{k}\alpha} | c_{\mathbf{k}\alpha} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger | N_{\mathbf{k}\alpha} \rangle &= \sum_n \langle N_{\mathbf{k}\alpha} | c_{\mathbf{k}\alpha} | n \rangle \langle n | c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger | N_{\mathbf{k}\alpha} \rangle \\ &= \langle N_{\mathbf{k}\alpha} | c_{\mathbf{k}\alpha} | N_{\mathbf{k}\alpha} + 1 \rangle \langle N_{\mathbf{k}\alpha} + 1 | c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger | N_{\mathbf{k}\alpha} \rangle \\ &= N_{\mathbf{k}\alpha} + 1 \end{aligned} \quad (3.270)$$

$$\begin{aligned} \langle N_{\mathbf{k}\alpha} | c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha} | N_{\mathbf{k}\alpha} \rangle &= \sum_n \langle N_{\mathbf{k}\alpha} | c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger | n \rangle \langle n | c_{\mathbf{k}\alpha} | N_{\mathbf{k}\alpha} \rangle \\ &= \langle N_{\mathbf{k}\alpha} | c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger | N_{\mathbf{k}\alpha} - 1 \rangle \langle N_{\mathbf{k}\alpha} - 1 | c_{\mathbf{k}\alpha} | N_{\mathbf{k}\alpha} \rangle \\ &= N_{\mathbf{k}\alpha} \end{aligned} \quad (3.271)$$

Así, el operador hamiltoniano toma la forma

$$H = \frac{1}{2} \hbar \omega \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left(c_{\mathbf{k}\alpha} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger + c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha} \right) \quad (3.272)$$

y es diagonal en la representación considerada, y sus valores propios

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2} \hbar \omega \sum_{\mathbf{k}\alpha} \langle N_{\mathbf{k}\alpha} | c_{\mathbf{k}\alpha} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger + c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha} | N_{\mathbf{k}\alpha} \rangle \\ &= \frac{1}{2} \hbar \omega \sum_{\mathbf{k}\alpha} (2N_{\mathbf{k}\alpha} + 1) = \hbar \omega \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left(N_{\mathbf{k}\alpha} + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (3.273)$$

coinciden con los calculados anteriormente.

Para la expresión cuántica del potencial vector, utilizamos de nuevo un desarrollo en ondas planas, con la diferencia de que ahora los coeficientes son operadores. Lo escribimos en la forma, de acuerdo con la relación establecida entre (3.249), (3.250) y (3.262), (3.263)

$$\mathbf{A} = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left(c_{\mathbf{k}\alpha} \mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha} + c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger \mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha}^* \right) \quad (3.274)$$

donde

$$\mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega V}} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \mathbf{e}^{(\alpha)} \quad (3.275)$$

Aquí, $\mathbf{e}^{(\alpha)}$ es el vector unitario que indica la dirección y sentido de la polarización de cada oscilador¹⁸. Los vectores son perpendiculares al vector de onda \mathbf{k} y, para cada \mathbf{k} , existen dos polarizaciones independientes.

Análogamente, para los operadores del campo \mathbf{E} y \mathbf{B} , encontramos

$$\mathbf{E} = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left(c_{\mathbf{k}\alpha} \mathbf{E}_{\mathbf{k}\alpha} + c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger \mathbf{E}_{\mathbf{k}\alpha}^* \right) \quad (3.276)$$

$$\mathbf{B} = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left(c_{\mathbf{k}\alpha} \mathbf{B}_{\mathbf{k}\alpha} + c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger \mathbf{B}_{\mathbf{k}\alpha}^* \right) \quad (3.277)$$

expresiones en las que

$$\mathbf{E}_{\mathbf{k}\alpha} = i\omega \mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha} \quad (3.278)$$

y

$$\mathbf{B}_{\mathbf{k}\alpha} = i\mathbf{k} \times \mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha} \quad (3.279)$$

Los vectores $\mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha}$ son ortogonales entre sí en el sentido de que

$$\int \mathbf{A}_{\mathbf{k}'\alpha'} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha}^* d\mathbf{r} = \frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega} \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad (3.280)$$

Relaciones análogas valen para los vectores $\mathbf{B}_{\mathbf{k}\alpha}$ y $\mathbf{E}_{\mathbf{k}\alpha}$. Conviene escribir su normalización en la forma

$$\int \left(\mathbf{E}_{\mathbf{k}'\alpha'} \cdot \mathbf{E}_{\mathbf{k}\alpha}^* + c^2 \mathbf{B}_{\mathbf{k}'\alpha'} \cdot \mathbf{B}_{\mathbf{k}\alpha}^* \right) d\mathbf{r} = \frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0} \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad (3.281)$$

Sustituyendo los operadores de campo \mathbf{E} y \mathbf{B} en el hamiltoniano, y efectuando la integración en el volumen del sistema, teniendo en cuenta las relaciones anteriores de normalización, obtendremos el operador hamiltoniano expresado en función de los operadores c y c^\dagger . El resultado es, de nuevo,

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2}\varepsilon_0 \int \left(|\mathbf{E}|^2 + c^2 |\mathbf{B}|^2 \right) d\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{2}\varepsilon_0 \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left(c_{\mathbf{k}\alpha} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger + c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha} \right) \int \left(|\mathbf{E}_{\mathbf{k}\alpha}|^2 + c^2 |\mathbf{B}_{\mathbf{k}\alpha}|^2 \right) d\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{2}\hbar\omega \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left(c_{\mathbf{k}\alpha} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger + c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha} \right) \end{aligned} \quad (3.282)$$

¹⁸La normalización de este vector, en general complejo, está dada por la relación $\mathbf{e}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{e}^{*(\alpha')} = \delta_{\alpha\alpha'}$

En la teoría clásica, el impulso del campo viene dado por la integral, en el volumen del sistema, del vector de Poynting (promediado en un período de oscilación), $\bar{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}\varepsilon_0\mathbf{E} \times \mathbf{B}^*$, esto es

$$\mathbf{P} = \frac{1}{2} \int \varepsilon_0 \mathbf{E} \times \mathbf{B}^* d\mathbf{r} \quad (3.283)$$

Al pasar a la teoría cuántica, sustituimos los campos \mathbf{E} y \mathbf{B} por los operadores correspondientes. Dado que los únicos elementos de matriz no nulos están asociados a los productos vectoriales

$$\mathbf{E}_{\mathbf{k}\alpha} \times \mathbf{B}^*_{\mathbf{k}\alpha} = \omega \mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha} \times \mathbf{k} \times \mathbf{A}^*_{\mathbf{k}\alpha} = \omega |\mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha}|^2 \mathbf{k} = \frac{1}{\omega} |\mathbf{E}_{\mathbf{k}\alpha}|^2 \mathbf{k} \quad (3.284)$$

y

$$\mathbf{E}^*_{\mathbf{k}\alpha} \times \mathbf{B}_{\mathbf{k}\alpha} = \omega \mathbf{A}^*_{\mathbf{k}\alpha} \times \mathbf{k} \times \mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha} = \omega |\mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha}|^2 \mathbf{k} = \frac{c^2}{\omega} |\mathbf{B}_{\mathbf{k}\alpha}|^2 \mathbf{k} \quad (3.285)$$

se obtiene el operador impulso del campo en la forma

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \frac{1}{2} \frac{\varepsilon_0}{\omega} \sum_{\mathbf{k}\alpha} \mathbf{k} \left(c_{\mathbf{k}\alpha} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger + c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha} \right) \int \left(|\mathbf{E}_{\mathbf{k}\alpha}|^2 + c^2 |\mathbf{B}_{\mathbf{k}\alpha}|^2 \right) d\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\alpha} \hbar \mathbf{k} \left(c_{\mathbf{k}\alpha} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger + c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha} \right) \end{aligned} \quad (3.286)$$

de acuerdo con la conocida relación clásica $E = cp$, entre la energía y el impulso de las ondas planas. Los valores propios de este operador son

$$\mathbf{P} = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left(N_{\mathbf{k}\alpha} + \frac{1}{2} \right) \hbar \mathbf{k} \quad (3.287)$$

La representación de los operadores cuánticos descrita hasta aquí se denomina *representación en números de ocupación*, y se corresponde con la descripción del estado del sistema en función de los números cuánticos $N_{\mathbf{k}\alpha}$, denominados números de ocupación de los osciladores de vector de onda \mathbf{k} y polarización definida por el vector unitario $\mathbf{e}^{(\alpha)}$. En esta representación, los operadores de campo han resultado ser independientes del tiempo, mientras que la función de onda del sistema dependerá del tiempo, y de los números de ocupación, $\psi(t, N_{\mathbf{k}\alpha})$.

Será más útil en el desarrollo de la teoría relativista, utilizar la llamada *representación de Heisenberg*, en la cual son los operadores los que dependen explícitamente del tiempo, mientras que la función de onda queda

dependiente exclusivamente de los números de ocupación. Primordialmente, esta descripción de Heisenberg permite una identificación más clara de la invariancia relativista de la teoría, al equiparar el papel del tiempo con el papel de las coordenadas espaciales. Por ejemplo, para el operador $\mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha}$, tal paso a la representación de Heisenberg conlleva la sustitución del factor $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$, del desarrollo (3.246), por el factor $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t)$. Se comprueba así que, para la transición de un estado inicial a un estado final que signifique el aumento o la reducción del número de ocupación en una unidad, este factor adicional $\exp(\pm i\omega t)$ da cuenta del incremento o decremento de la energía del sistema en un cuanto $\hbar\omega$.

3.12.1.3. El fotón

La fórmula para la energía del campo electromagnético

$$E = \hbar\omega \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left(N_{\mathbf{k}\alpha} + \frac{1}{2} \right) \quad (3.288)$$

plantea la siguiente dificultad. El estado de energía más baja es aquél en el que se anulan los números de ocupación de todos los osciladores, denominado *estado de vacío del campo electromagnético*. Pero, ya que cada oscilador posee en este caso una energía del punto cero no nula, con el valor $(1/2)\hbar\omega$, el sumatorio anterior da lugar a una contribución infinita en el estado de vacío. Esta divergencia puede evitarse describiendo la energía e impulso del campo, sustrayendo esta contribución de la fórmula anterior. Con esta renormalización¹⁹, obtenemos

$$E = \sum_{\mathbf{k}\alpha} N_{\mathbf{k}\alpha} \hbar\omega \quad (3.289)$$

$$\mathbf{P} = \sum_{\mathbf{k}\alpha} N_{\mathbf{k}\alpha} \hbar\mathbf{k} \quad (3.290)$$

De esta manera, es inmediato introducir el concepto de *cuantos de luz o fotones*, considerando que el campo electromagnético libre es un conjunto

¹⁹Desde el punto de vista matemático, este proceso de renormalización consiste en la aplicación de la llamada *normalidad* a los productos de operadores, de forma que siempre figuren en ellos los operadores c^\dagger (de creación de fotones) a la izquierda de los operadores c (de destrucción de fotones). Con esto se elimina la contribución del vacío, asociada a los elementos de matriz de productos de operadores que tienen la disposición contraria a la expuesta anteriormente.

de partículas, cada una de las cuales posee una energía $e = \hbar\omega$ y transporta un impulso $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, verificándose la relación $\omega = c|\mathbf{k}|$, que es precisamente la que corresponde, según la teoría relativista, a una partícula de masa en reposo nula que viaja siempre a la velocidad de la luz. El número de ocupación $N_{\mathbf{k}\alpha}$ tienen, entonces, el significado de número de fotones con un impulso \mathbf{k} y una polarización $\mathbf{e}^{(\alpha)}$. La propiedad de polarización del fotón es análoga al concepto de espín en otras partículas.

En este método de descripción del sistema cuántico, los números de ocupación de los estados representan las variables independientes y los operadores definidos actúan como funciones sobre ellos. El papel fundamental lo representan el operador de *creación de partículas*, $c_{\mathbf{k}\alpha}$, y el operador de *destrucción de partículas*, $c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger$, llamados así en correspondencia con su efecto de aumentar o disminuir del número de ocupación del estado sobre el que actúan. El operador $c_{\mathbf{k}\alpha}$ aplicado sobre el estado $|N_{\mathbf{k}\alpha}\rangle$ da (véase (3.268))

$$c_{\mathbf{k}\alpha} |N_{\mathbf{k}\alpha}\rangle = \sqrt{N_{\mathbf{k}\alpha}} |N_{\mathbf{k}\alpha} - 1\rangle \quad (3.291)$$

esto es, aniquila un fotón de impulso \mathbf{k} de forma que el número de ocupación de ese estado pasa a ser $N_{\mathbf{k}\alpha} - 1$. Asimismo, la acción del operador $c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger$ sobre el estado $|N_{\mathbf{k}\alpha}\rangle$ es (véase (3.269))

$$c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger |N_{\mathbf{k}\alpha}\rangle = \sqrt{N_{\mathbf{k}\alpha} + 1} |N_{\mathbf{k}\alpha} + 1\rangle \quad (3.292)$$

y, por tanto, añade un fotón de impulso \mathbf{k} , pasando el número de ocupación a valer $N_{\mathbf{k}\alpha} + 1$. La acción conjunta de los dos, de acuerdo con el principio de normalidad para el producto de operadores, es

$$c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha} |N_{\mathbf{k}\alpha}\rangle = \sqrt{N_{\mathbf{k}\alpha}} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger |N_{\mathbf{k}\alpha} - 1\rangle = N_{\mathbf{k}\alpha} |N_{\mathbf{k}\alpha}\rangle \quad (3.293)$$

y por tanto, podemos definir el llamado *operador número de ocupación*

$$\widehat{N}_{\mathbf{k}\alpha} = c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha} \quad (3.294)$$

cuyos valores propios son iguales a los números de ocupación de cada estado de oscilación

$$\widehat{N}_{\mathbf{k}\alpha} |N_{\mathbf{k}\alpha}\rangle = N_{\mathbf{k}\alpha} |N_{\mathbf{k}\alpha}\rangle \quad (3.295)$$

El número admisible de fotones en cualquier estado no está limitado y puede ser arbitrario, por lo que la regla de conmutación de los operadores de creación y destrucción

$$\left[c_{\mathbf{k}\alpha}, c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger \right] = 1 \quad (3.296)$$

corresponde al caso de partículas que obedecen la estadística de Bose: *los fotones son bosones*.

En términos del operador de número, el hamiltoniano se reduce, de nuevo, a

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \hbar \omega \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left(c_{\mathbf{k}\alpha} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger + c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha} \right) \\ &= \frac{1}{2} \hbar \omega \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left(1 + 2c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha} \right) = \hbar \omega \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left(\hat{N}_{\mathbf{k}\alpha} + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (3.297)$$

con los valores propios de energía asociados

$$E = \hbar \omega \sum_{\mathbf{k}\alpha} \left(N_{\mathbf{k}\alpha} + \frac{1}{2} \right) \quad (3.298)$$

Las ondas planas $\mathbf{A}_{\mathbf{k}\alpha}$ que figuran en el operador \mathbf{A} (ecuación 3.274) como coeficientes de los operadores de destrucción de fotones, se pueden interpretar como las funciones de onda de los fotones con impulso \mathbf{k} y polarización $\mathbf{e}^{(\alpha)}$. Esta interpretación se corresponde con el desarrollo en la mecánica cuántica no relativista de la función de onda en términos de los estados estacionarios de una partícula.

Hablando de la función de onda de un fotón, subrayamos una vez más que no puede considerarse en la teoría relativista como una amplitud de probabilidad de localizar espacialmente al fotón, en contraposición con el sentido que tiene en la mecánica cuántica no relativista (por las razones expuestas en la sección 3.1.1). Pero, en virtud de la posibilidad de medir con certeza el impulso de una partícula libre, cuando se define en la representación de impulsos, dicha función de onda tiene un sentido físico claro ya que es posible determinar la probabilidad de que el fotón seleccionado tenga valores \mathbf{k} y $\mathbf{e}^{(\alpha)}$ para el impulso y la polarización, respectivamente. En concreto, dicha probabilidad tendrá un valor

$$W_{\mathbf{k}\alpha} \propto \left| \hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}\alpha}^* \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k}) \right|^2 \quad (3.299)$$

donde

$$\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}\alpha} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega V}} \mathbf{e}^{(\alpha)} \quad (3.300)$$

es la función de onda en la representación de impulsos, y $\mathbf{A}(\mathbf{k})$ es el coeficiente con vector de onda \mathbf{k} del desarrollo de Fourier del potencial vector $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$.