

Ecuación de Dirac

Dirac, al tratar de formular una ecuación de onda relativista, partió del hecho de que en la relatividad especial las cuatro coordenadas $\{x, y, z, ict\}$ figuren en un plano de igualdad, de modo que la ecuación debe contener derivadas del mismo orden con respecto a las cuatro variables. Además, si queremos obtener una densidad de probabilidad ρ positiva definida, debe ser $\rho = \psi^\dagger \psi$, lo cual sólo se logra cuando la derivada con respecto al tiempo es de primer orden, como en la ecuación de Schrödinger. Se llega así a la conclusión de que la ecuación debe ser de primer orden en las derivadas con respecto a las cuatro coordenadas. Si en la fórmula $E = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}$ linealizamos formalmente el radical, se tendrá $E = c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2$ y, haciendo las sustituciones

las substituciones de los operadores, se obtiene la ecuación de Dirac para una partícula libre $\{E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \text{ y } \vec{p} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla}\}$:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{c\hbar}{i} \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \psi + \beta mc^2 \psi \rightarrow (16)$$

en la cual las cuatro coordenadas, $(\vec{\alpha}, \beta)$ deben determinarse de tal modo que al elevar al cuadrado la expresión, $E = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2$, se obtenga,

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

Es efectuando la operación mencionada,

$$E^2 = c^2 \sum_{i,j=1}^3 \frac{1}{2} (\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i) p_i p_j + mc^3 \sum_{i=1}^3 (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) p_i + \beta^2 m^2 c^4 \rightarrow (17)$$

para que esto se reduzca a la forma deseada, las $(\vec{\alpha}, \beta)$ deben satisfacer estas condiciones,

$$\frac{1}{2} (\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i) = \delta_{ij} \quad ; \quad \alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0 \quad ; \quad \beta^2 = 1 \quad (i,j=1,2,3) \rightarrow (18)$$

Es decir, las contro constantes $(\vec{\alpha}, \beta)$ anticommutan todas entre sí y su cuadrado es igual a 1. Debido a la propiedad anticommutativa, es obvio que las $(\vec{\alpha}, \beta)$ no pueden ser números ordinarios. Trataremos de encontrar una representación de ellas por medio de matrices cuadradas.

Como el Hamiltoniano de la ecuación (16) debe ser hermitiano y $-i\hbar \vec{\nabla}$ o $\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$ es un operador hermitiano, se deduce que las matrices $(\vec{\alpha}, \beta)$ deben ser hermitianas. Una matriz hermitiana siempre se puede diagonalizar, pero las $(\vec{\alpha}, \beta)$ debido a que no conmutan entre sí, no se pueden diagonalizar simultáneamente. Sin embargo podemos escoger una representación en la que una de las contro matrices, por ejemplo β , sea diagonal. Como $\beta^2 = I$, los elementos diagonales de β son $(+1)$ o (-1) . De la ecuación (18) se tiene,

$$\alpha_i \beta = -\beta \alpha_i$$

$$\therefore \alpha_i \beta \alpha_i = -\beta$$

tomando la traza de esta ecuación y usando la propiedad,
 $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$, $\alpha_i \beta \alpha_i = -\beta$

Se encuentran,

$$\text{Tr}(\alpha_i \beta \alpha_i) = \text{Tr}(\beta \alpha_i^2) = \text{Tr}(\beta) = \text{Tr}(-\beta) = -\text{Tr}(\beta) \quad \therefore \text{Tr}(\beta) = 0$$

Por lo tanto, si la matriz β tiene " n " elementos iguales a $(+1)$ y " n' " elementos iguales a (-1) , para que su traza sea cero debe ser $n = n'$, y en consecuencia la dimensión de la matriz β es un número par. Podemos representar a β de esta manera,

$$\beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix},$$

donde I es la matriz unidad de dimensión $n \times n$.

Las matrices $\vec{Q}$ las podemos representar así,

$$\vec{Q} = \begin{pmatrix} \vec{Q}_{11} & \vec{Q}_{12} \\ \vec{Q}_{21} & \vec{Q}_{22} \end{pmatrix},$$

donde $\vec{Q}_{ii}$ son matrices de dimensión $n \times n$.
Entonces la ecuación (18), $\vec{Q}\beta + \beta\vec{Q} = 0$, nos dice que

$$\begin{pmatrix} \vec{Q}_{11} & \vec{Q}_{12} \\ \vec{Q}_{21} & \vec{Q}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{I} & 0 \\ 0 & -\vec{I} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \vec{I} & 0 \\ 0 & -\vec{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{Q}_{11} & \vec{Q}_{12} \\ \vec{Q}_{21} & \vec{Q}_{22} \end{pmatrix} = 0$$

$$\begin{pmatrix} \vec{Q}_{11} & -\vec{Q}_{12} \\ \vec{Q}_{21} & -\vec{Q}_{22} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \vec{Q}_{11} & \vec{Q}_{12} \\ -\vec{Q}_{21} & -\vec{Q}_{22} \end{pmatrix} = 0$$

$$\begin{pmatrix} 2\vec{Q}_{11} & 0 \\ 0 & -2\vec{Q}_{22} \end{pmatrix} = 0,$$

$$\vec{Q}_{11} = \vec{Q}_{22} = 0$$

es decir,

Por conveniencia podemos elegir $\vec{\alpha}_{12} = \vec{\alpha}_{21}$,
 en cuyo caso las matrices $(\vec{\alpha}, \beta)$ tendrán esta
 representación

$$\alpha_x = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_y = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_z = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \rightarrow (19)$$

donde (σ_i, I) son matrices hermitianas $n \times n$, y para
 que las α_i satisfagan la ec. (18), las σ_i deben obedecer
 ciertas restricciones,

$$\frac{1}{2} (\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i) = \delta_{ij} \rightarrow (20)$$

Si $n=1$ las σ_i son números ordinarios, y la ec. (20)
 $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij}$ (no existen 3 números que tengan esta propiedad).
 Si $n=2$ las σ_i son matrices hermitianas 2×2 y una
 representación de σ_i es por medio de las matrices de Pauli.

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

los cuales subeamos que en efecto satisfacen a la ecuación (22). Se llega así a la conclusión de que la representación más sencilla de las $(\vec{\alpha}, \beta)$ es por medio de matrices 4×4 , como las dadas por las ecuaciones (19), siendo σ_i las matrices de Pauli.

La energía, $E = c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m c^2$, con $\vec{\alpha} = (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$ y $\beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$. $\alpha_x = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix}$, $\alpha_y = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{pmatrix}$ y $\alpha_z = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{pmatrix}$.

Ya que las matrices $(\vec{\alpha}, \beta)$ son de 4×4 , es natural que las funciones de onda sobre las cuales se aplican sean matrices columna 4×1 :

$$\psi(\vec{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}, t) \\ \psi_2(\vec{r}, t) \\ \psi_3(\vec{r}, t) \\ \psi_4(\vec{r}, t) \end{pmatrix}$$

La función de onda transpuesta conjugada, $\psi^\dagger$, es una matriz renglón de 1×4 :

$$\psi^\dagger(\vec{r}, t) = (\psi_1^*(\vec{r}, t), \psi_2^*(\vec{r}, t), \psi_3^*(\vec{r}, t), \psi_4^*(\vec{r}, t))$$

Usando la ecuación (16), la ecuación satisfecha por $\psi^\dagger$ ecuación (16)

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{c\hbar}{i} \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \psi + \beta m c^2 \psi$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} = \frac{c\hbar}{i} \vec{\nabla} \psi^\dagger \cdot \vec{\alpha} - \psi^\dagger \beta m c^2$$

→ (21)

transpuesta:

Multiplicando la ec. (16) a la izquierda por $\psi^\dagger$, multipli-
 cando la ec. (21) a la derecha por ψ , y sumándolas,
 se obtiene la ecuación de continuidad,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0, \quad (22)$$

$$\rho \equiv \psi^\dagger \psi = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + |\psi_3|^2 + |\psi_4|^2$$

$$\vec{j} \equiv c \psi^\dagger \vec{\alpha} \psi$$

La densidad de probabilidad, ρ , es positiva definida
 y así desaparece la dificultad que se presentaba en
 este aspecto con la ecuación de Klein-Gordon.
 El hamiltoniano de Dirac, $\hat{H}_0$, será y
 en presencia de un potencial,

$$\hat{H}_0 = c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m c^2 + V(\vec{r})$$

Soluciones de la ecuación de Dirac para una partícula libre
 Si en la ecuación (16) ponemos, $\psi(\vec{r}, t) = u(\vec{p}, E) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)}$
 con $\vec{p}, E$ constantes, se obtiene la siguiente ecuación algebraica
 para determinar a la matriz columna $u(\vec{p}, E)$,

$$E = c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2 \quad \times \quad \psi$$

$$E u e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)} = (c \vec{p} \cdot \vec{\alpha} + \beta mc^2) u e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)}$$

$$E u = (c \vec{p} \cdot \vec{\alpha} + \beta mc^2) u, \quad \text{escribiendo} \quad u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$$

con u_1, u_2 matrices de dos renglones, y una columna, y
 usando la relación explícita de $(\vec{\alpha}, \beta)$ dada en las eqs. (19)

$$E \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = c \vec{p} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} Eu_1 \\ Eu_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & c \vec{p} \cdot \vec{\sigma} \\ c \vec{p} \cdot \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} mc^2 I & 0 \\ 0 & -mc^2 I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} E u_1 &= c(\vec{p} \cdot \vec{\sigma}) u_2 + mc^2 u_1 \\ E u_2 &= c(\vec{p} \cdot \vec{\sigma}) u_1 - mc^2 u_2 \end{aligned} \quad (*)$$

Eliminando una de las u 's se obtiene,

$$(E - mc^2)(E + mc^2)u_i = c^2(\vec{p} \cdot \vec{\sigma})(\vec{p} \cdot \vec{\sigma})u_i = c^2 \vec{p}^2 u_i \quad (i=1,2)$$

el último paso es una consecuencia de la fórmula general,

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) &= \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j A_i B_j = \sum_{i,j} \left(i \sum_k \epsilon_{ijk} \sigma_k + \delta_{ij} \right) A_i B_j \\ &= i \vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}) + \vec{A} \cdot \vec{B}, \end{aligned}$$

válida cuando $\vec{A}$ conmuta con $\vec{\sigma}$.

Las ecuaciones $(E^2 - m^2 c^4)u_i = c^2 \vec{p}^2 u_i$

tienen solución no trivial sólo cuando $E^2 - m^2 c^4 = c^2 \vec{p}^2$.

Esta ecuación en E tiene dos raíces,

$$E_+ \equiv +\sqrt{m^2 c^4 + c^2 \vec{p}^2} \quad \text{y} \quad E_- \equiv -\sqrt{m^2 c^4 + c^2 \vec{p}^2}$$

Cuando E tiene alguno de estos valores, una de las u_i es completamente arbitraria, y su forma más general es una combinación lineal,

$$c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

la otra u_i se determina usando una de las ecuaciones (*) (existen por lo tanto cuatro soluciones linealmente independientes),

$$E = E_+, \quad c_2 = 0; \quad u = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \gamma p_z \\ \gamma(p_x + i p_y) \end{pmatrix}$$

$$E = E_+, \quad c_1 = 0$$

$$u = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \gamma(p_x - i p_y) \\ -\gamma p_z \end{pmatrix}$$

$$E = E_-, \quad c_2 = 0; \quad u = \begin{pmatrix} -\gamma p_z \\ -\gamma(p_x + i p_y) \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$E = E_-, \quad c_1 = 0$$

$$u = \begin{pmatrix} -\gamma(p_x - i p_y) \\ \gamma p_z \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

con $\gamma \equiv \frac{c}{mc^2 + E_+}$

$$P_x \sigma_x + P_y \sigma_y + P_z \sigma_z = P_x \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + P_y \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + P_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_z & P_x - iP_y \\ P_x + iP_y & -P_z \end{pmatrix}$$

$$u_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$c_1 = 1$$

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$u_2 = \gamma \begin{pmatrix} P_z & P_x - iP_y \\ P_x + iP_y & -P_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \gamma \begin{pmatrix} P_z \\ P_x + iP_y \end{pmatrix}$$

$$E = E_+ , \quad c_2 = 0 ; \quad u = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \gamma P_z \\ \gamma(P_x + iP_y) \end{pmatrix} \quad \checkmark$$

$$\vec{p} \rightarrow (P_x, P_y, P_z)$$

$$\vec{\sigma} \rightarrow (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$$

$$u_2 \rightarrow u_2 \left(c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right)$$

$$E u_2 = c(\vec{p} \cdot \vec{\sigma}) u_1 - m c^2 u_2$$

$$(E_+ + m c^2) u_2 = c(\vec{p} \cdot \vec{\sigma}) u_1 = c(P_x \sigma_x + P_y \sigma_y + P_z \sigma_z) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$u_2 = \underbrace{\left(\frac{c}{E_+ + m c^2} \right)}_{\gamma} \begin{pmatrix} P_x \sigma_x + P_y \sigma_y + P_z \sigma_z \\ 0 \end{pmatrix}$$

Venmos ahora si la ecuación de Dirac contiene por si alguna característica que corresponden al espín de la partícula que describe. Sabemos que las constantes del movimiento son aquellos operadores que conmutan con el Hamiltoniano. En la mecánica de Schrödinger el momento angular orbital de una partícula libre conmuta con su Hamiltoniano. Venmos si esto ocurre tambien en la mecánica de Dirac. Los operadores respectivos son,

$$\vec{L} = (\vec{r} \times \vec{p}) \quad \text{y} \quad H_D = c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m c^2 \quad \vec{\alpha} \cdot \vec{p} = \alpha_x p_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z$$

el conmutador vale,

$$[H_D, \vec{L}] = [c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m c^2, (\vec{r} \times \vec{p})] = [c \vec{\alpha} \cdot \vec{p}, \vec{r} \times \vec{p}] = c \{ \alpha_x [p_x, \vec{r} \times \vec{p}] + \alpha_y [p_y, \vec{r} \times \vec{p}] + \alpha_z [p_z, \vec{r} \times \vec{p}] \} = c \frac{\hbar}{i} \vec{\alpha} \times \vec{p} \rightarrow (23)$$

Como el conmutador es diferente de cero, se deduce que el momento angular orbital no es una constante del movimiento. Sin embargo, de la propiedad de las matrices de Pauli,

$$\sigma_k \sigma_m = i \left(\sum_n \epsilon_{nkm} \sigma_n \right) + \delta_{km}$$

$$\sigma_k \sigma_m - \sigma_m \sigma_k = 2i \sum_n \epsilon_{nkm} \sigma_n ;$$

se deduce que,

por lo tanto,

es decir,

Definiendo el siguiente operador

$$\frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma} \equiv \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix},$$

y calculamos su conmutador con el hamiltoniano de Dirac,

$$[H_0, \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma}] = [c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2, \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma}] = [c \vec{\alpha} \cdot \vec{p}, \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma}]$$

$$= \frac{\hbar c}{2} \begin{pmatrix} 0 & [\vec{\sigma} \cdot \vec{p}, \vec{\sigma}] \\ [\vec{\sigma} \cdot \vec{p}, \vec{\sigma}] & 0 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar c}{i} \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \times \vec{p}$$

$$[A, B] = AB - BA$$

De las ecuaciones (23) y (25):

$$[H_0, \vec{L}] = \frac{\hbar c}{i} \vec{\alpha} \times \vec{p} \quad \text{y} \quad [H_0, \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma}] = -\frac{\hbar c}{i} \vec{\alpha} \times \vec{p} \rightarrow (2s)$$

Se deduce que el operador

$$\vec{J} \equiv \vec{L} + \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma} = (\vec{r} \times \vec{p}) I + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} \rightarrow (26)$$

conmuta con el hamiltoniano de la partícula libre y es por lo tanto una constante del movimiento. Es natural identificar a $(\frac{\hbar}{2}) \vec{\Sigma}$ con el espín de la partícula. Se llega así al resultado de que la ecuación de Dirac asigna automáticamente a la partícula que describe un momento angular intrínseco (espín) de magnitud $\hbar/2$.