Capítulo 1

Introducción a la mecánica cuántica relativista

Serán útiles los siguientes cuadrivectores de la relatividad especial

$$p^\mu = (E/c, \boldsymbol{p}) \qquad p_\mu = (E/c, -\boldsymbol{p}) \qquad x_\mu = (ct, -\boldsymbol{x}) \qquad x^\mu = (ct, \boldsymbol{x})$$

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \boldsymbol{\nabla}\right) \equiv \partial_\mu \qquad \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, -\boldsymbol{\nabla}\right) \equiv \partial^\mu$$

y las contracciones

$$p^\mu p_\mu = \frac{E^2}{c^2} - p^2 = m^2c^2 \qquad x^\mu x_\mu = c^2t^2 - x^2$$

donde la última igualdad en la primera contracción es para una única partícula libre, que es lo que consideramos por el momento.

De lo que sabemos en mecánica cuántica tenemos

$$H = \frac{p^2}{2m} \tag{1}$$

$$E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad \boldsymbol{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla} \tag{2}$$

La cuántica es de por sí covariante (susceptible de escribirse en términos de cuadrivectores) y vemos que la siguiente ecuación

$$P_\mu = i\hbar\partial_\mu = i\hbar\frac{\partial}{\partial x^\mu}$$

condensa las dos en (2). Veremos luego que en relatividad la expresión (1) no sirve y tendremos que usar (2).

Paritmos de la ecuación de Schrödinger para la partícula libre, que es

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi \tag{3}$$

y entonces podemos hacer la cuenta

$$\psi^* \times (3) \to i\hbar\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\nabla^2\psi$$

y conjugando la ecuación,

$$\psi \times (3)^* \to -i\hbar\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi\nabla^2\psi^*$$

y restando ambas expresiones se obtiene

$$i\hbar\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi\nabla^2\psi^* - \psi^*\nabla^2\psi\right)$$

$$i\hbar\frac{\partial(\psi^*\psi)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\psi^*\boldsymbol{\nabla}\psi - \psi\boldsymbol{\nabla}\psi^*\right) = 0$$

la cual se puede reescribir como

$$\frac{\partial(\psi^*\psi)}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\frac{\hbar}{2mi}[\psi^*\boldsymbol{\nabla}\psi - \psi\boldsymbol{\nabla}\psi^*]\right) = 0$$

que es una analogía de la conservación de la carga en electrodinámica. Recordemos que la conservación de la carga era $\partial_t\rho + \nabla\cdot\boldsymbol{J} = 0$. Entonces, la ecuación de Schrödinger se puede interpretar como una especie de conservación de la probabilidad en el tiempo. Notemos que $\psi^*\psi = |\psi|^2 \geq 0$. Todo esto parece bastante razonable y es parte del fundamento de las hipótesis básicas de la mecáncia cuántica.

Tratando de llevar la (1) a algo relativista podemos pensar en las expresiones correspondientes, que son

$$E^2 = c^2p^2 + m^2c^4$$

$$E = \sqrt{c^2p^2 + m^2c^4} = H \qquad \text{con } H\psi = E\psi$$

Pero esto se pone muy complicado debido a la raíz. Para evitarla se puede considerar directamente el cuadrado. Entonces,

$$H^2 = E^2 = c^2p^2 + m^2c^4$$

lo cual nos lleva a la ecuación

$$-\hbar\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = -\hbar^2 c^2 \boldsymbol{\nabla}^2\psi + m^2c^4\psi \tag{4}$$

que es la llamada ecuación de Klein-Gordon. En términos de las contracciones de cuadrivectores

$$p^\mu p_\mu = m^2c^2 \qquad -\partial_\mu\partial^\mu\psi = \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi,$$

donde el operador $\square^2 \equiv \partial_\mu\partial^\mu$ es el dalembertiano, se puede poner como

$$\left(\square^2 + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\psi = 0.$$

Ahora, procediendo de modo ídem al caso anterior, para construirme una corriente coservada se tienen

$$\psi^*\cdot(4) = -\hbar^2\psi^*\partial_t^2\psi = -\hbar^2c^2\psi^*\nabla^2\psi + m^2c^4\psi^*\psi$$

$$\psi\cdot(4)^* = -\hbar^2\psi\partial_t^2\psi^* = -\hbar^2c^2\psi\nabla^2\psi^* + m^2c^4\psi\psi^*$$

y restando ambas ecuaciones tenemos

$$\hbar^2\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^*\partial_t\psi - \psi\partial_t\psi^*\right) = \hbar^2c^2\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\psi^*\boldsymbol{\nabla}\psi - \psi\boldsymbol{\nabla}\psi^*\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{i}{c^2}[\psi^*\partial_t\psi - \psi\partial_t\psi^*]\right) + i\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\psi\boldsymbol{\nabla}\psi^* - \psi^*\boldsymbol{\nabla}\psi\right) = 0$$

El problema es que no puede asegurarse que esta $\rho \equiv i/c^2[\psi^*\partial_t\psi - \psi\partial_t\psi^*]$ sea definida positiva, lo cual sería necesario para seguir una coherencia.

$$\psi = N\,\mathrm{e}^{i/\hbar(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-Et)}$$

$$\partial_t\psi = -N\frac{iE}{\hbar}\,\mathrm{e}^{i/\hbar(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-Et)}$$

$$\rho = \frac{i}{c^2}\left(N^*\,\mathrm{e}^{-i/\hbar(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-Et)}(-N)\frac{iE}{\hbar}\,\mathrm{e}^{i/\hbar(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-Et)} - N\,\mathrm{e}^{i/\hbar(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-Et)}N^*\frac{E}{\hbar}\,\mathrm{e}^{i/\hbar(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-Et)}\,\mathrm{e}^{i\pi/2}\right)$$

$$\rho = -\frac{i}{c^2}\left(2|N|^2\frac{iE}{\hbar}\right) < 0 \quad \text{si} \quad E > 0$$

para una onda plana. Necesito considerar $E < 0$ pues $E = \pm\sqrt{c^2p^2 + m^2c^4}$ y la base debe ser completa.

La densidad ρ es positiva si tuviese $E < 0$ pero esto causa el problema de tener materia inestable, pues nunca se alcanza el fundamental. Acá muere en este atolladero la ecuación de Klein-Gordon.

1.0.1 La ecuación de Dirac

Dirac parte de pedir una ecuación lineal en el impulso $\boldsymbol{p}$

$$H = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{p} + \beta mc^2$$

usando $H\psi = E\psi$ y $H^2 = E^2 = c^2p^2 +, m^2c^4$ y con $\beta, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{p}$ operadores.

$$H^2 = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{p} + \beta mc^2)(c\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{p} + \beta mc^2)$$

$$H^2 = c^2\alpha_i p_i \alpha_\ell p_\ell + c^3 \alpha_i p_i \beta m + \beta mc^3 \alpha_i p_i + \beta^2 m^2 c^4$$

$$H^2 = c^2 \alpha_i \alpha_\ell p_i p_\ell + c^3 m p_i \underbrace{(\alpha_i \beta + \beta \alpha_i)}_{=0} + \beta^2 m^2 c^4$$

$$H^2 = c^2 \underbrace{\left(\frac{\alpha_i \alpha_\ell + \alpha_\ell \alpha_i}{2}\right)}_{\delta_{i\ell}} p_i p_\ell + m^2 c^4 \underbrace{\beta^2}_{=1}$$

$$\alpha_i \alpha_\ell + \alpha_\ell \alpha_i = 2\delta_{i\ell} \qquad \alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0 \qquad \beta^2 = 1$$

Como se ve, estos no pueden ser simples escalares. Dirac pide

- $\boldsymbol{\alpha}, \beta$ hermíticos
- $\beta^2 = 1$ $\alpha^2 = 1$ autovalores ± 1
- traza nula

$$\alpha_i \beta = -\beta \alpha_i \quad \rightarrow \quad \beta \alpha_i \beta = -\beta^2 \alpha_i = -\alpha_i$$

$$Tr(\alpha_i) = -Tr(\beta \alpha_i \beta) = -Tr(\beta\beta\alpha_i)$$

- dimensión par

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \qquad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}$$

  donde cada elemento de la matriz es de 2×2.

Entonces

$$H\vec{\psi} = i\hbar \frac{\partial \vec{\psi}}{\partial t}, \qquad H \in 4 \times 4, \vec{\psi} \in 4 \times 1, \qquad \vec{\psi} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\hbar c \sum_k \alpha_k \frac{\partial \psi}{\partial x_k} + mc^2 \beta \psi \tag{5}$$

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^\dagger}{\partial t} = i\hbar c\sum_k \frac{\partial\psi^\dagger}{\partial x_k}\alpha_k + mc^2\psi\alpha_k\beta$$

$$\psi^\dagger\cdot(5) - (5)^\dagger\cdot\psi \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^\dagger psi) = -i\hbar c\sum_k\frac{\partial}{\partial x_k}(\psi^\dagger\alpha_k\psi)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^\dagger psi) + c\sum_k\frac{\partial}{\partial x_k}(\psi^\dagger\alpha_k\psi) = 0$$

Y si $\rho \equiv \psi^\dagger\psi$ ahora tenemos una densidad de proababilidad como requiere la naturaleza.

1.0.2 Ejemplo: partícula libre quieta

Sea una partícula libre en reposo,

$$\boldsymbol{p} = 0 \qquad H = \beta mc^2$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \beta mc^2\psi$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_1\\\psi_2\\\psi_3\\\psi_4\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}mc^2 & 0 & 0 & 0\\ 0 & mc^2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -mc^2 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -mc^2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\\psi_2\\\psi_3\\\psi_4\end{pmatrix}$$

Tenemos cuatro ecuaciones, dos con energía positiva y dos con energía negativa

$$i\hbar\frac{\partial\psi_i}{\partial t} = mc^2\psi_i \qquad i\hbar\frac{\partial\psi_i}{\partial t} = -mc^2\psi_i$$

$$\psi_1 = \mathrm{e}^{-imc^2t/\hbar}\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix} \qquad \psi_3 = \mathrm{e}^{imc^2t/\hbar}\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix}$$

Como aún tenemos degeneración de orden dos, necesitaremos un operadore que conmute con el H

$$\vec{\Sigma} = \begin{pmatrix}\vec{\sigma} & 0\\ 0 & \vec{\sigma}\end{pmatrix} \qquad [H,\vec{\Sigma}] = 0$$

$$\Sigma_3 = \begin{pmatrix}\sigma_3 & 0\\ 0 & \sigma_3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1\end{pmatrix}$$

$$\psi_1, E = mc^2, \Sigma_3 = 1 \qquad \psi_2, E = mc^2, \Sigma_3 = -1$$
$$\psi_3, -E = mc^2, \Sigma_3 = 1 \qquad \psi_4, -E = mc^2, \Sigma_3 = -1$$

Podemos identificar

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}$$

$$\text{si } p \neq 0 \Rightarrow [H, \boldsymbol{\Sigma}] = 2ic\boldsymbol{\alpha} \times \boldsymbol{p}$$

1.0.3 Energías negativas

Como $E = \pm\sqrt{c^2p^2 + m^2c^4}$ hay $E < 0$ y además un *gap* de ancho $2mc^2$ entre ellas. Las $E < 0$ harían que la materia jamás alcance un estado fundamental y por ende jamás se estabilice. Dirac piensa que los estados de $E < 0$ están todos llenos. No decaen más electrones allí dentro. Es el mar de Dirac. Iluminando ese vacío se lo puede excitar.

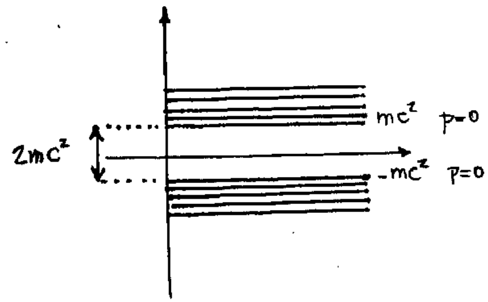

Figura 0.1

Podemos hacer saltar a la zona positiva una carga $(-e)$ dejando un huevo positivo (equivalente a una carga $+e$). Es una creación e pares $\gamma \to e^-e^+$, sin embargo el proceso inverso $e^-e^+ \to \gamma$ de aniquilación de pares ocurre prontamente. Se observó experimentalmente.

Fotos extra para el asunto de las energías negativas a continuación:

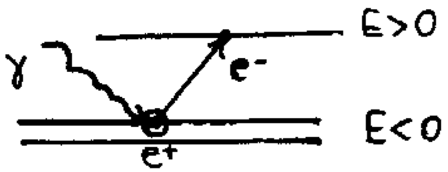

Figura 0.2