

Trabajo de fin de grado

La caja cuántica relativista: efecto del espín para una partícula en un pozo de potencial

Doble grado en Física y Matemáticas

Facultad de Ciencias Físicas



Juan Ramón Gómez García

Tutor: José Alberto Ruiz Cembranos

Resumen

El problema de la partícula relativista en un pozo de potencial resulta muy ilustrativo para entender algunos de los efectos que la relatividad especial produce cuando entra en contacto con la mecánica cuántica, particularmente, el efecto del espín sobre el espectro de energía. Para dar cuenta de ello, resolvemos el problema de una partícula de espín 0 y de una partícula de espín $1/2$ confinada en un pozo de potencial (unidimensional y tridimensional), mediante la solución de las ecuaciones de Klein-Gordon y Dirac. Estudiamos, además, las diferencias formales entre ambas ecuaciones, que requieren unas condiciones de contorno especiales en el tratamiento de la ecuación de Dirac. Comparamos los resultados obtenidos en ambos casos y comprobaremos que ambos coinciden con el régimen no relativista. El efecto del espín desaparece en este límite, lo que muestra que es una manifestación puramente relativista en este problema.

Abstract

The problem of a relativistic particle in a box becomes very illustrative to understand some of the implications of special relativity for quantum physics, in particular, the effect of spin in the energy spectra. To show this, we treat the problems of a spin-0 particle and a spin- $1/2$ particle confined in a squared well potential (unidimensional and tridimensional), by solving the Klein-Gordon and Dirac equations. We study the differences in the structure of the two equations, which require special boundary conditions in the treatment of the Dirac equation. We compare the results obtained for both cases and test that they agree on the non-relativistic limit. The effect of spin disappears on this limit, which reveals that it is a purely relativistic manifestation in this problem.

Índice

1. Introducción	4
2. Partícula de espín 0. La ecuación de Klein-Gordon	5
2.1. La ecuación de Klein-Gordon	5
2.2. Forma Hamiltoniana de la ecuación de Klein-Gordon	6
2.3. Solución de la ecuación de Klein-Gordon para pozos cuadrados de potencial	8
2.3.1. Solución para un pozo cuadrado de potencial unidimensional	8
2.3.2. Solución para un pozo cuadrado de potencial tridimensional	10
3. Partículas con espín 1/2. La ecuación de Dirac	11
3.1. La ecuación de Dirac	11
3.2. Solución de la ecuación de Dirac para pozos cuadrados de potencial	13
3.2.1. Solución para un pozo cuadrado de potencial unidimensional	15
3.2.2. Solución para un pozo cuadrado de potencial tridimensional	19
4. Comparación entre los espectros de energía para partículas relativistas de espín 0 y de espín 1/2 en un pozo de potencial	21
4.1. El caso unidimensional	21
4.2. El caso tridimensional	22
5. Conclusiones	23
Bibliografía	24

1. Introducción

El problema de la partícula en un pozo de potencial es, probablemente, uno de los problemas más simples en mecánica cuántica no relativista que, sin embargo, ocupa un lugar primordial en cualquier curso introductorio sobre esta materia. Más allá de sus aplicaciones o consecuencias físicas, su importancia reside en lo esclarecedor que resulta para comprender la naturaleza de los sistemas cuánticos. Asuntos como la cuantización de la energía, la existencia de un nivel energético fundamental distinto del 0 o la interpretación probabilista del comportamiento del sistema, que tan chocantes resultan cuando se estudian por primera vez, quedan enseguida de manifiesto en la solución de este problema.

No menos revelador resulta el mismo problema cuando se le da un enfoque relativista. Su estudio permite vislumbrar de manera clara algunas de las implicaciones de la relatividad especial cuando entra en contacto con la física cuántica. Sin embargo, y al contrario de lo que ocurre con el caso no relativista, es difícil encontrar en los textos básicos sobre mecánica cuántica relativista un tratamiento detallado de este problema. Su importancia, en este caso, no es solo pedagógica sino que puede tener profundas implicaciones físicas: por mencionar alguna, y aunque se escapa del nivel de esta memoria, en el campo de la gravedad cuántica se ha mostrado, aplicando el Principio de Indeterminación Generalizado al problema de una partícula en una caja, que la longitud de la misma está cuantizada en términos de una longitud fundamental, lo que aporta indicios de una posible cuantización del espacio [5].

En este sentido, el objetivo del trabajo que se presenta será el estudio del comportamiento de una partícula relativista confinada en un pozo de potencial mediante la solución de las ecuaciones de Klein-Gordon, para espín 0, y de Dirac, para espín 1/2, poniendo especial atención en las implicaciones de la elección de las condiciones de contorno y en los efectos del espín sobre el espectro energético de la partícula. Además, tendremos presentes en todo momento los resultados no relativistas, que nos permitirán dar cuenta, bajo determinadas condiciones, de la validez de nuestro procedimiento. Para realizar todo este análisis seguiremos fielmente los desarrollos que se presentan en [1], [2] y [3].

En la sección 2, nos centramos en caso de partículas con espín 0. En las dos primeras subsecciones, usando como principales referencias [6] y [3], introducimos brevemente la ecuación de Klein-Gordon, que describe este tipo de sistemas. En la última subsección, resolvemos la ecuación, primero para partículas libres y, posteriormente, en presencia de un potencial. En este último caso, siguiendo de nuevo [3], el enfoque que daremos al problema será el de sustituir el potencial por una dependencia posicional de la masa de la partícula, lo que permitirá evitar el problema de la paradoja de Klein. Se abordan tanto el caso unidimensional como el tridimensional.

En la sección 3, siguiendo una estructura similar a la anterior, trabajaremos con partículas de espín 1/2, que describiremos mediante las soluciones de la ecuación de Dirac. Nos fijaremos para ello en [6], [1] y [2]. Veremos que, en este caso, es necesario relajar las condiciones de contorno que imponemos al problema, con el fin de obtener soluciones diferentes de la trivial [4].

En la sección 4, se realiza una comparación de los resultados obtenidos en las dos secciones anteriores, poniendo de manifiesto los efectos que el espín tiene sobre el espectro de energías de las soluciones. Igualmente, comprobaremos que, cuando el pozo es suficientemente grande, este efecto desaparece y se recuperan las soluciones no relativistas dadas por el espectro de la ecuación de Schrödinger.

Para concluir, incluimos una última sección en la que se resumen y comentan brevemente los aspectos más importantes tratados a lo largo de este desarrollo.

2. Partícula de espín 0. La ecuación de Klein-Gordon

2.1. La ecuación de Klein-Gordon

En esta primera subsección, obtenemos la bien conocida ecuación de Klein-Gordon cuyas soluciones describen el comportamiento de partículas relativistas de espín 0. Seguiremos, para ello, el desarrollo que aparece en [6].

La ecuación de ondas no-relativista para partículas de espín 0 en ausencia de campo electromagnético es la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right] \psi, \quad (1)$$

donde podemos identificar los operadores

$$\hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad , \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla \quad (2)$$

de energía y momento, respectivamente. Para obtener una versión relativista de la ecuación anterior, comenzamos considerando partículas libres, para las que se verifica la relación

$$p^\mu p_\mu = \frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p} \cdot \mathbf{p} = m^2 c^2. \quad (3)$$

Para obtener la versión cuántica de esta relación, introducimos el operador cuadrimomento

$$\hat{p}^\mu = i\hbar \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\nabla \right) \quad (4)$$

lo que nos permite escribir la ecuación (3) en términos de operadores como

$$\hat{p}^\mu \hat{p}_\mu \psi = m^2 c^2 \psi \quad (5)$$

o, equivalentemente,

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi = 0, \quad (6)$$

que es la ecuación de Klein-Gordon. Observamos que es invariante Lorentz, por ser $p^\mu p_\mu$ un escalar. Además, es una ecuación diferencial de orden 2, por lo que las soluciones tienen dos grados de libertad, en contraste con la ecuación de Schrödinger que es de primer orden. Haciendo explícita la separación entre estos dos grados de libertad, la ecuación de Klein-Gordon puede transformarse, como veremos en la siguiente subsección, en una ecuación lineal en $\frac{\partial}{\partial t}$, lo que nos permitirá determinar un Hamiltoniano para el sistema.

Buscaremos soluciones para la ecuación (6) de la forma

$$\psi = A \exp \left[+\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}\mathbf{x} - E_{\mathbf{p}}t) \right]. \quad (7)$$

Introduciéndolas en (6) y calculando, obtenemos de nuevo (3), por lo que las funciones de onda de este tipo proporcionan una solución adecuada para partículas libres. De este modo, para partículas con momento \mathbf{p} dado, tenemos dos posibles valores para la energía

$$E_{\mathbf{p}} = \pm \sqrt{m^2 c^2 + \mathbf{p}^2}. \quad (8)$$

Este resultado presenta el primer problema de la ecuación de Klein-Gordon: hemos obtenido soluciones de energía negativa, que deben mantenerse para tener un conjunto completo de soluciones.

Volviendo ahora a la ecuación (6), observamos que si ψ es solución, también lo será su conjugado ψ^* , lo que nos permite obtener lo siguiente:

$$\begin{aligned} 0 &= \psi^* \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi - \psi \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi^* \\ &= \nabla_\mu (\psi^* \nabla^\mu \psi - \psi \nabla^\mu \psi^*). \end{aligned} \quad (9)$$

Tenemos, entonces, una cuadri-densidad de corriente conservada dada por

$$j_\mu = \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla_\mu \psi - \psi \nabla_\mu \psi^*), \quad (10)$$

donde el factor $i\hbar/2m$ hace que la primera componente, j_0 , tenga unidades de densidad de probabilidad ($1/\text{cm}^3$). Además, permite ajustar las ecuaciones en el límite no relativista. Escribiendo $j_\mu = (\rho, \mathbf{j})$, la ecuación (9) tiene forma de ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \quad (11)$$

Además, integrando a todo el espacio de configuración y teniendo en cuenta que las funciones de onda decaen suficientemente en el infinito, obtenemos

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} d^3x = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho d^3x = - \lim_{V \rightarrow \infty} \int_V \nabla \cdot \mathbf{j} d^3x = - \lim_{S \rightarrow \infty} \int_S \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S} = 0, \quad (12)$$

de manera que

$$\int_V \rho d^3x = \text{cte.}$$

Según lo anterior, parece natural interpretar la cantidad ρ como una densidad de probabilidad. Sin embargo, introduciendo (7) en la definición de ρ , resulta

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = \frac{i\hbar}{2m} (|\psi|^2 (\mp i |E_{\mathbf{p}}|) - |\psi|^2 (\pm i |E_{\mathbf{p}}|)) = \pm \hbar \frac{|\psi|^2}{m} |E_{\mathbf{p}}|. \quad (13)$$

La existencia de soluciones de energía negativa contradice esta interpretación.

Una descripción alternativa puede hacerse en términos de la carga. Multiplicando la ecuación anterior por la carga elemental e , obtenemos

$$j'_\mu = \frac{ie\hbar}{2m} (\psi^* \nabla_\mu \psi - \psi \nabla_\mu \psi^*) = (\rho', \mathbf{j}'), \quad (14)$$

de manera que ρ' puede interpretarse ahora como una densidad de carga. En este sentido, para cada momento \mathbf{p} , la ecuación de Klein-Gordon predice la existencia de dos soluciones: una de energía positiva, $\psi_{(+)}$, y otra de energía negativa, $\psi_{(-)}$. Las soluciones de energía positiva proporcionan una descripción adecuada para una partícula de carga $+e$, mientras que las de energía negativa describen satisfactoriamente el comportamiento de partículas de la misma masa pero carga opuesta $-e$. De este modo, cada partícula cargada tiene asociada otra de igual masa y carga opuesta: en este sentido, la ecuación de Klein-Gordon predice la existencia de antipartículas.

2.2. Forma Hamiltoniana de la ecuación de Klein-Gordon

En esta sección y la siguiente seguiremos los desarrollos que aparecen en [3], completando algunos de los pasos intermedios que han sido omitidos en el artículo.

Haciendo explícitos los dos grados de libertad, consideramos que ψ y $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ son independientes, y definimos dos funciones de onda φ y χ que nos permiten escribir

$$\psi = \varphi + \chi, \quad (15)$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = mc^2(\varphi - \chi) \quad (16)$$

o, equivalentemente,

$$\varphi = \frac{1}{2}\psi + i\frac{\hbar}{2mc^2}\frac{\partial\psi}{\partial t}, \quad (17)$$

$$\chi = \frac{1}{2}\psi - i\frac{\hbar}{2mc^2}\frac{\partial\psi}{\partial t}. \quad (18)$$

Derivando con respecto al tiempo en la primera de estas ecuaciones y utilizando (6), calculamos

$$\begin{aligned} \frac{\partial\varphi}{\partial t} &= \frac{1}{2}\frac{\partial\psi}{\partial t} + i\frac{\hbar}{2mc^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} \\ &= \frac{1}{2}\frac{\partial\psi}{\partial t} + i\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\psi - i\frac{mc^2}{2\hbar}\psi \\ &= i\frac{\hbar}{2m}\nabla^2(\varphi + \chi) - i\frac{mc^2}{\hbar}\varphi. \end{aligned}$$

Procediendo de igual manera para la componente χ , podemos escribir

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2(\varphi + \chi) + mc^2\varphi, \quad (19)$$

$$i\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2(\varphi + \chi) - mc^2\chi. \quad (20)$$

Las ecuaciones anteriores ya son ecuaciones lineales en $\frac{\partial}{\partial t}$, similares a la ecuación de Schrödinger. Sin embargo, podemos escribirlas de manera aún más compacta en términos de las matrices de Pauli

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (21)$$

Para ello, definimos el biespinor

$$\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (22)$$

y el operador

$$\hat{H} = -(\sigma_3 + i\sigma_2)\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + mc^2\sigma_3, \quad (23)$$

de forma que las ecuaciones (19) y (20) se resumen en

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \quad (24)$$

que, ahora sí, es una ecuación de tipo Schrödinger.

En esta representación, el cuadrivector densidad tiene una forma especialmente simple. Calculando,

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{i\hbar}{2mc^2} \left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial t} \right) \\ &= \frac{1}{2}(\varphi^* + \chi^*)(\varphi - \chi) + \frac{1}{2}(\varphi + \chi)(\varphi^* - \chi^*) \\ &= \varphi^*\varphi - \chi^*\chi, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} [(\varphi^* + \chi^*) \nabla (\varphi + \chi) - (\varphi + \chi) \nabla (\varphi^* + \chi^*)], \end{aligned}$$

lo que puede escribirse, de manera más compacta, como

$$\rho = \Psi^\dagger \sigma_3 \Psi, \quad (25)$$

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} \left[\Psi^\dagger \sigma_3 (\sigma_3 + i\sigma_2) \nabla \Psi - (\nabla \Psi^\dagger) \sigma_3 (\sigma_3 + i\sigma_2) \Psi \right]. \quad (26)$$

2.3. Solución de la ecuación de Klein-Gordon para pozos cuadrados de potencial

Comenzamos calculando la solución para la ecuación libre de Klein-Gordon. Teniendo en cuenta la representación que hemos introducido en (23) y (24) para dicha ecuación, buscaremos soluciones de la forma

$$\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} \exp \left[+\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et) \right]. \quad (27)$$

Introduciendo lo anterior en (23) obtenemos

$$E \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \frac{p^2}{2m} \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} mc^2 \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} \quad (28)$$

o, equivalentemente,

$$\begin{cases} \left(E - \frac{p^2}{2m} - mc^2 \right) \varphi_0 - \frac{p^2}{2m} \chi_0 = 0 \\ \frac{p^2}{2m} \varphi_0 + \left(E + \frac{p^2}{2m} + mc^2 \right) \chi_0 = 0 \end{cases}. \quad (29)$$

Para que este sistema tenga solución distinta a la trivial hay que imponer que el determinante de su matriz de coeficientes se anule, lo que nos lleva de nuevo a la condición (3) (ver cálculo en [7]). En tal caso, sumando las dos ecuaciones del sistema, la condición que deben cumplir las soluciones es

$$(\mp |E_p| + mc^2) \varphi_0 = (\pm |E_p| + mc^2) \chi_0. \quad (30)$$

De este modo, las soluciones están determinadas salvo una constante de proporcionalidad. Dos representantes del conjunto de soluciones son

$$\begin{aligned} \varphi_0^\pm &= \frac{mc^2 \pm |E_p|}{2\sqrt{mc^2 |E_p|}}, \\ \chi_0^\pm &= \frac{mc^2 \mp |E_p|}{2\sqrt{mc^2 |E_p|}}. \end{aligned} \quad (31)$$

Observamos que la elección de otro par de valores para $\varphi_0^\pm, \chi_0^\pm$ da lugar a un cambio en la constante de normalización A , dando lugar a la misma solución al problema.

Por último, notamos que la dependencia en \mathbf{p} aparece únicamente a través del módulo p , de modo que una solución general para partículas con momento p se obtiene como superposición de las soluciones correspondientes al mismo módulo p en diferentes direcciones.

2.3.1. Solución para un pozo cuadrado de potencial unidimensional

Abordamos ahora el problema de encontrar las soluciones de la ecuación de Klein-Gordon unidimensional para partículas sometidas a un potencial de la forma

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{si } x \in [0, L] \\ V_0, & \text{si } x \notin [0, L] \end{cases}, \quad (32)$$

Como es bien sabido, la solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un potencial de esta forma, con $V_0 \rightarrow \infty$, es una función de onda que, en la región interior, tiene un comportamiento

$$\psi_n(x) \propto \sin(k_n x), \quad (33)$$

con $k_n = \frac{n\pi}{L}$, $1, 2, \dots$. Los autovalores, por otro lado, son de la forma

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2}. \quad (34)$$

Sin embargo, un tratamiento similar no es válido en este caso, pues da lugar al problema conocido como ‘paradoja de Klein’, relacionada con la creación de partículas y antipartículas: el flujo de probabilidad reflejado por la barrera de potencial es superior al flujo incidente. Para evitar esto, el problema se puede reformular, de acuerdo con [1], sustituyendo el potencial anterior por una dependencia en la posición de la masa de la partícula

$$m(x) = \begin{cases} m, & \text{si } x \in [0, L] \\ M \rightarrow \infty, & \text{si } x \notin [0, L] \end{cases}. \quad (35)$$

De este modo, las soluciones al problema tendrán, en cada región, la forma de las ecuaciones de onda descritas al principio de la sección para partículas libres. Separaremos, además, la parte temporal, de modo que

$$\Psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar} \Psi_B(x), \quad (36)$$

donde la parte espacial que se obtiene es, como dijimos, combinación lineal de dos soluciones correspondientes a las direcciones positiva y negativa del momento. De este modo, para una partícula de energía dada E ,

$$\Psi_B(x) = \begin{cases} C\Psi_0^\pm(p')e^{ip'x/\hbar} + D\Psi_0^\pm(p')e^{-ip'x/\hbar}, & \text{si } x < 0 \\ A\Psi_0^\pm(p)e^{ipx/\hbar} + B\Psi_0^\pm(p)e^{-ipx/\hbar}, & \text{si } x \in [0, L] \\ E\Psi_0^\pm(p')e^{ip'x/\hbar} + F\Psi_0^\pm(p')e^{-ip'x/\hbar}, & \text{si } x > L \end{cases}, \quad (37)$$

donde $p = \sqrt{\frac{E^2}{c^2} - m^2 c^2}$ y $p' = \sqrt{\frac{E^2}{c^2} - M^2 c^2}$. Cuando $M \rightarrow \infty$, la cantidad p' es imaginaria y las exponenciales asociadas a las constantes D y E se anulan. Por otro lado, teniendo en cuenta que $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Psi_B(x) = 0$, obtenemos que $C = F = 0$. Por otro lado, Así, las soluciones se anulan fuera del pozo de potencial y tenemos

$$\Psi_B(x) = \begin{cases} A\Psi_0^\pm(p)e^{ipx/\hbar} + B\Psi_0^\pm(p)e^{-ipx/\hbar}, & \text{si } x \in [0, L] \\ 0, & \text{si } x \notin [0, L] \end{cases}. \quad (38)$$

Impondremos ahora condiciones de contorno sobre la solución anterior. En primer lugar, por continuidad, $\Psi_B(0) = 0 = \Psi_B(L)$. De las primera de estas igualdades, obtenemos que $B = -A$. Teniendo en cuenta esto, la solución en el interior del pozo se escribe como

$$\Psi_B(x) = A\Psi_0^\pm \sin\left(\frac{px}{\hbar}\right). \quad (39)$$

Imponiendo, ahora, la segunda de las desigualdades anteriores, obtenemos

$$\sin\left(\frac{pL}{\hbar}\right) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{pL}{\hbar} = n\pi, \quad n \in \mathbb{Z},$$

es decir, el momento está cuantizado:

$$p_n = \frac{n\hbar\pi}{L}, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (40)$$

Por último, imponiendo que $\int_0^L \rho dx = 1$, usando (25) y teniendo en cuenta que, de acuerdo con (31), $|\varphi_0^\pm|^2 - |\chi_0^\pm|^2 = \pm 1$, tenemos

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}, \quad (41)$$

por lo que

$$\Psi_B(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right), & \text{si } x \in [0, L] \\ 0, & \text{si } x \notin [0, L] \end{cases}. \quad (42)$$

Los autovalores asociados a las soluciones anteriores están dados entonces por

$$\begin{aligned} E_B(n) &= \sqrt{\frac{n^2\pi^2\hbar^2c^2}{L^2} + m^2c^4} \\ &= mc^2 \sqrt{1 + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{m^2c^2L^2}} \\ &\approx mc^2 + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} + \dots \end{aligned} \quad (43)$$

En la última línea hemos desarrollado para valores pequeños de $p/(mc) = n\pi\hbar/(Lmc)$, resultando mc^2 la energía en reposo y el segundo sumando una contribución correspondiente a las soluciones de la ecuación de Schrödinger.

2.3.2. Solución para un pozo cuadrado de potencial tridimensional

Consideramos ahora una caja tridimensional $\mathbb{V} = \{(x_1, x_2, x_3 : 0 \leq x_i \leq L_i, i = 1, 2, 3)\}$ y un pozo infinito de potencial dado por

$$m(\mathbf{x}) = \begin{cases} m, & \mathbf{x} \in \mathbb{V} \\ M \rightarrow \infty, & \mathbf{x} \notin \mathbb{V} \end{cases}. \quad (44)$$

Observamos que el potencial anterior puede separarse en términos de potenciales unidimensionales como $m(\mathbf{x}) = m + (M - m) \prod_{i=1}^3 [\theta(x_i - L_i) - \theta(-x_i)]$, por lo que la parte espacial de la ecuación de onda debe poder escribirse como producto de funciones de onda unidimensionales viajando en cada dirección. Es decir, la solución al problema debe ser una combinación lineal de las ocho ondas planas

$$e^{i \sum_{i=1}^3 \epsilon_i p_i x_i / \hbar}, \quad (45)$$

donde ϵ_i puede tomar los valores ± 1 . Por ser el potencial constante, el valor del momento de todas esas ondas es el mismo, $(\pm p_1, \pm p_2, \pm p_3)$, de manera que podemos escribir

$$\Psi_B(\mathbf{x}) = \begin{cases} \Psi_0^\pm(\mathbf{p}) \sum_{\epsilon} A_{\epsilon} e^{i \sum_{i=1}^3 \epsilon_i p_i x_i / \hbar}, & \mathbf{x} \in \mathbb{V} \\ 0, & \mathbf{x} \notin \mathbb{V} \end{cases}. \quad (46)$$

El valor nulo de la función fuera del pozo se obtiene razonando de forma análoga al caso unidimensional.

Vamos a imponer ahora las condiciones de contorno que, en este caso, están dadas por

$$\Psi_B(0, x_2, x_3) = \Psi_B(x_1, 0, x_3) = \Psi_B(x_1, x_2, 0) = 0,$$

$$\Psi_B(L_1, x_2, x_3) = \Psi_B(x_1, L_2, x_3) = \Psi_B(x_1, x_2, L_3) = 0.$$

De la primera de las condiciones, se obtiene

$$0 = \Psi_B(0, x_2, x_3) = \sum_{\epsilon_2, \epsilon_3 = \pm 1} (A_{(1, \epsilon_2, \epsilon_3)} + A_{(-1, \epsilon_2, \epsilon_3)}) e^{i \sum_{i=2}^3 \epsilon_i p_i x_i / \hbar}, \quad \forall x_2, x_3 \in \mathbb{R}, \quad (47)$$

de modo que $A_{(1,\epsilon_2,\epsilon_3)} + A_{(-1,\epsilon_2,\epsilon_3)} = 0$. Procediendo de igual manera con el resto de coordenadas, tenemos

$$\begin{aligned} A_{(1,\epsilon_2,\epsilon_3)} + A_{(-1,\epsilon_2,\epsilon_3)} &= 0, \\ A_{(\epsilon_1,1,\epsilon_3)} + A_{(\epsilon_1,-1,\epsilon_3)} &= 0, \\ A_{(\epsilon_1,\epsilon_2,1)} + A_{(\epsilon_1,\epsilon_2,-1)} &= 0, \end{aligned} \tag{48}$$

lo que nos permite reescribir, en el interior del cubo,

$$\Psi_B(\mathbf{x}) = A\Psi_B(\mathbf{p}) \prod_{i=1}^3 \sin\left(\frac{p_i x_i}{\hbar}\right). \tag{49}$$

Por otro lado, de las tres últimas condiciones de contorno, se sigue directamente que

$$p_i = \frac{n_i \hbar \pi}{L_i}, \quad i = 1, 2, 3; \quad n_i \in \mathbb{Z}. \tag{50}$$

Finalmente, la condición de normalización para la densidad, $\int_{\mathbb{V}} \rho d^3x = 1$, implica

$$A = \sqrt{\frac{2^3}{L_1 L_2 L_3}}. \tag{51}$$

Los valores de las energías para cada estado son

$$\begin{aligned} E_B(\mathbf{n}) &= \sqrt{\sum_{i=1}^3 \frac{n_i^2 \pi^2 \hbar^2 c^2}{L_i^2} + m^2 c^4} \\ &\approx mc^2 + \sum_{i=1}^3 \frac{n_i^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL_i^2} + \dots, \end{aligned} \tag{52}$$

donde hemos hecho el mismo desarrollo que en el caso unidimensional.

3. Partículas con espín 1/2. La ecuación de Dirac

3.1. La ecuación de Dirac

Buscamos ahora una ecuación capaz de describir el comportamiento relativista de partículas con espín 1/2. Partiremos de la suposición de que dicha ecuación tiene que tener la forma de la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi. \tag{53}$$

Además, el enfoque relativista del problema requiere un tratamiento simétrico del espacio y del tiempo, lo que implica que las derivadas espaciales presentes en la ecuación deben ser también de primer orden. Por otro lado, las soluciones deben ser compatibles con la ecuación de Klein-Gordon, obtenida directamente de la expresión relativista para la energía de una partícula. Teniendo en cuenta todo esto, Dirac propuso una ecuación de onda de la forma

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{\hbar c}{i} \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{\nabla} + \beta mc^2 \right) \psi. \tag{54}$$

La ecuación anterior tiene que ser, además, invariante bajo rotaciones espaciales, por lo que los coeficientes $\boldsymbol{\alpha}$ no pueden ser escalares. En consecuencia, una función de onda que satisfaga la

ecuación anterior tampoco puede ser un escalar, sino que debe pertenecer a una representación no trivial del grupo de Lorentz:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{x}, t) \\ \psi_2(\mathbf{x}, t) \\ \vdots \\ \psi_N(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix}. \quad (55)$$

Puesto que el hamiltoniano tiene que ser un operador autoadjunto, las matrices α y β deben verificar

$$\alpha = \alpha^\dagger \quad ; \quad \beta = \beta^\dagger. \quad (56)$$

Por otro lado, para que la ecuación anterior sea compatible con la ecuación de Klein-Gordon, es decir, ha de cumplirse la relación (3). Imponemos esta condición:

$$\begin{aligned} c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4 = E^2 &= \left(\frac{\hbar c}{i} \alpha \nabla + \beta m c^2 \right) \left(\frac{\hbar c}{i} \alpha \nabla + \beta m c^2 \right) \\ &= (c \alpha \cdot \mathbf{p} + \beta m c^2) (c \alpha \cdot \mathbf{p} + \beta m c^2). \end{aligned}$$

Desarrollando el primer y el último miembro de la igualdad anterior,

$$c^2 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \delta_{ij} p_i p_j + m^2 c^4 = c^2 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \alpha_i \alpha_j p_i p_j + m^2 c^3 \sum_{i=1}^3 (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) p_i + m^2 c^4 \beta^2. \quad (57)$$

Por tanto, para que lo anterior sea cierto, se tienen que dar las relaciones:

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij} I_N, \quad (58)$$

$$\{\alpha_i, \beta\} = 0, \quad (59)$$

$$\alpha_i^2 = \beta^2 = I_N, \quad (60)$$

siendo I_N la matriz identidad de dimensión N .

Con lo anterior tenemos determinada la estructura de la ecuación de Dirac. Para escribirla de forma más compacta introducimos un nuevo conjunto de matrices γ^μ ($\mu = 0, 1, 2, 3$), definidas por

$$\gamma^0 = \beta \quad , \quad \gamma^i = \beta \alpha_i = \gamma^0 \alpha_i, \quad (61)$$

con $i = 1, 2, 3$. Se sigue directamente de las propiedades obtenidas para α_i y β que

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu} I_N, \quad (62)$$

$$(\gamma^0)^\dagger = \gamma^0 \quad , \quad (\gamma^i)^\dagger = -\gamma^i. \quad (63)$$

Multiplicando (54) por β y usando (62) y (63), la ecuación de Dirac se escribe

$$(i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu - mc) \psi = 0. \quad (64)$$

Finalmente, introduciendo la notación $\gamma^\mu \partial_\mu = \not{\partial}$ y usando unidades naturales, llegamos a

$$(i\not{\partial} - m)\psi = 0 \quad (65)$$

Para poder pasar a la solución de la ecuación de Dirac es necesario obtener de forma explícita la forma de las matrices α_i y β . Las condiciones que deben satisfacerse son las dadas por (58)-(60) y, bajo tales condiciones, la representación de dichas matrices no es única. Introducimos a continuación la que se conoce como ‘representación de Pauli’, pues será la que utilizemos en las secciones siguientes.

Un análisis de las relaciones (58), (59) y (60) arroja que la dimensión más baja que permite su verificación es $N = 4$. Para este caso, se comprueba inmediatamente que una posible representación para α_i y β está dada por

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix}, \quad (66)$$

donde σ_i son las matrices de Pauli. Introduciendo explícitamente (21), tenemos

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \alpha_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \alpha_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \beta &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (67)$$

3.2. Solución de la ecuación de Dirac para pozos cuadrados de potencial

Examinamos, en primer lugar, la solución de la ecuación libre de Dirac. Para ello, la escribiremos como

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} + mc^2\beta) \psi. \quad (68)$$

Buscamos estados estacionarios de la forma

$$\boldsymbol{\Psi}(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}) \exp[-(i/\hbar)Et], \quad (69)$$

que transforman la ecuación (68) en

$$E\psi(\mathbf{x}) = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + mc^2\beta) \psi(\mathbf{x}). \quad (70)$$

Separamos las cuatro componentes del cuadriespino $\psi(\mathbf{x})$ en dos

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad (71)$$

siendo

$$\varphi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad \chi = \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \quad (72)$$

Utilizando la expresión de α_i y β en función de las matrices de Pauli, obtenemos

$$E \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \cdot \hat{\mathbf{p}} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} + mc^2 \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (73)$$

Para estados con momento \mathbf{p} , las funciones φ , χ son

$$\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} \exp \left[\left(\frac{i}{\hbar} \right) \mathbf{p} \cdot \mathbf{x} \right], \quad (74)$$

con lo que las ecuaciones anteriores dan lugar al siguiente sistema de ecuaciones algebraicas:

$$\begin{cases} (E - mc^2)I_2\varphi_0 - c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}\chi_0 = 0 \\ -c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}\varphi_0 + (E + mc^2)I_2\chi_0 = 0 \end{cases}. \quad (75)$$

La condición para existencia de soluciones no triviales está dada por

$$\begin{vmatrix} (E - mc^2)I_2 & -c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ -c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & (E + mc^2)I_2 \end{vmatrix} = 0. \quad (76)$$

Lo que conduce de nuevo, como era esperado a

$$E_p = \pm c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2c^2}. \quad (77)$$

Despejando en una de las ecuaciones de (75),

$$\chi_0 = \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E + mc^2}\varphi_0. \quad (78)$$

Definimos ahora el biespinor φ_0 como

$$\varphi_0 = U = \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \end{pmatrix}, \quad (79)$$

con la condición de normalización

$$U^\dagger U = U_1^* U_1 + U_2^* U_2 = 1. \quad (80)$$

El conjunto completo de soluciones se puede escribir como

$$\Psi_{p\epsilon} = N \begin{pmatrix} U \\ \frac{c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{mc^2 + \epsilon|E_p|} U \end{pmatrix} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - \epsilon|E_p|t) \right], \quad (81)$$

donde $\epsilon \in \{+1, -1\}$ y N es una constante de normalización. Para determinar el valor de dicha constante, imponemos que las soluciones formen un conjunto ortonormal, lo que matemáticamente se expresa como

$$\int \Psi_{p\epsilon}^\dagger(\mathbf{x}, t) \Psi_{p'\epsilon'}(\mathbf{x}, t) d^3x = \delta_{\epsilon\epsilon'} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \quad (82)$$

Calculamos:

$$\begin{aligned} \int \Psi_{p\epsilon}^\dagger(\mathbf{x}, t) \Psi_{p'\epsilon'}(\mathbf{x}, t) d^3x &= N^2 \left(1 + \frac{c^2(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}')}{(mc^2 + \epsilon|E_p|)^2} \right) \delta_{\epsilon\epsilon'} \int \exp \left[\left(-\frac{i}{\hbar} \right) (\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot \mathbf{x} \right] d^3x \\ &= N^2 \left(1 + \frac{c^2(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}')}{(mc^2 + \epsilon|E_p|)^2} \right) (2\pi\hbar)^3 \delta_{\epsilon\epsilon'} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \end{aligned}$$

Por tanto, tiene que ser

$$N^2 \left(1 + \frac{c^2(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}')}{(mc^2 + \epsilon|E_p|)^2} \right) (2\pi\hbar)^3 = 1.$$

Finalmente, despejando, resulta

$$N = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \sqrt{\frac{(mc^2 + \epsilon|E_p|)}{2\epsilon|E_p|}}. \quad (83)$$

Vamos a introducir, para terminar, un nuevo operador que nos permitirá clasificar por completo los estados para una partícula libre. Sea el operador

$$\hat{\Sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{\sigma}} & 0 \\ 0 & \hat{\boldsymbol{\sigma}} \end{pmatrix} \cdot \hat{\mathbf{p}}. \quad (84)$$

Se comprueba de manera inmediata que

$$[\hat{H}_f, \hat{\Sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}] = 0, \quad (85)$$

siendo \hat{H}_f el hamiltoniano de la ecuación de Dirac para una partícula libre. Además,

$$\left[\hat{\mathbf{p}}, \hat{\boldsymbol{\Sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}} \right] = 0. \quad (86)$$

Esto significa que los operadores \hat{H}_f , $\hat{\boldsymbol{\Sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}}$ y $\hat{\mathbf{p}}$ pueden diagonalizarse simultáneamente. Lo mismo ocurre con el operador ‘helicidad’, definido como

$$\hat{\Lambda}_S = \frac{\hbar}{2} \hat{\boldsymbol{\Sigma}} \cdot \frac{\hat{\mathbf{p}}}{|\hat{\mathbf{p}}|}, \quad (87)$$

que representa la proyección del spin sobre la dirección del momento.

Para un partícula viajando en la dirección del eje z ,

$$\hat{\Lambda}_S = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (88)$$

Claramente sus autovalores son $\pm \frac{\hbar}{2}$ y los autoestados están dados por

$$\begin{pmatrix} u_+ \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} u_- \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ u_+ \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ u_- \end{pmatrix}, \quad (89)$$

siendo

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

Ahora ya podemos clasificar completamente las ondas libres que se propagan en la dirección z :

$$\begin{aligned} \Psi_{p,\epsilon,+} &= N \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \frac{c\hat{\sigma}_z p}{mc^2 + \epsilon|E_p|} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (pz - \epsilon|E_p|t) \right], \\ \Psi_{p,\epsilon,-} &= N \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \frac{c\hat{\sigma}_z p}{mc^2 + \epsilon|E_p|} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \exp \left[\frac{i}{\hbar} (pz - \epsilon|E_p|t) \right]. \end{aligned} \quad (90)$$

3.2.1. Solución para un pozo cuadrado de potencial unidimensional

Estudiamos a continuación las soluciones de la ecuación de Dirac en presencia de un pozo cuadrado de potencial que, de nuevo, representaremos mediante una dependencia de la masa en la posición dada por (35). Nuestra referencia será, en este caso, [1].

Del mismo modo que ocurría con la ecuación de Klein-Gordon, la solución en cada región viene dada por una combinación de ondas libres, anulándose en el exterior del pozo cuando tomamos $M \rightarrow \infty$. En la región interior, tenemos, para la parte espacial,

$$\Psi_B(z) = A e^{i\hbar pz} \begin{pmatrix} U \\ \frac{c\hat{\sigma}_z p}{mc^2 + \epsilon|E_p|} U \end{pmatrix} + B e^{-i\hbar pz} \begin{pmatrix} U \\ \frac{-c\hat{\sigma}_z p}{mc^2 + \epsilon|E_p|} U \end{pmatrix}, \quad (91)$$

donde $U = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $U = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ o una combinación lineal de ambas.

Como hicimos en el caso anterior, vamos a comenzar imponiendo la continuidad de la función de onda en los extremos del intervalo

$$\Psi_B(0) = 0 = \Psi_B(L).$$

Sin embargo, veremos que, en este caso, la exigencia de la continuidad de la función de onda no conduce a un resultado satisfactorio. En efecto, la imposición de las condiciones anteriores conduce a una solución idénticamente nula de la ecuación de onda.

El problema anterior tiene que ver con la existencia de extensiones autoadjuntas para el hamiltoniano y para su estudio es necesario profundizar en la teoría de operadores. Un análisis más detallado del problema puede encontrarse en [4]. Trataremos de proporcionar un enfoque alternativo al problema basándonos en dicho análisis. Para ello, comenzamos observando que la corriente de probabilidad de Dirac, dada por

$$j = c\Psi^\dagger\alpha_x\Psi, \quad (92)$$

se anula cuando imponemos las condiciones anteriores:

$$j(0) = j(L) = 0. \quad (93)$$

Impondremos unas condiciones de contorno a nuestro problema que, aunque no garanticen la continuidad de la función de onda, sí mantengan la nulidad de la corriente de probabilidad en los extremos del pozo. Una elección que cumpla estos requisitos está dada, como veremos, por

$$i\beta\alpha_z\Psi(0) = \Psi(0) \quad , \quad -i\beta\alpha_z\Psi(L) = \Psi(L). \quad (94)$$

Denominando

$$P = \frac{cp}{mc^2 + \epsilon|E_p|}$$

y teniendo en cuenta que

$$\beta\alpha_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

la primera de las condiciones anteriores conduce a

$$A \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ P \\ 0 \end{pmatrix} + B \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -P \\ 0 \end{pmatrix} = \Psi_B(0) = i\beta\alpha_z\Psi_B(0) = iA \begin{pmatrix} P \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} + iB \begin{pmatrix} -P \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Para helicidad distinta el resultado es análogo. Puesto que las dos filas no nulas de la ecuación anterior constituyen ecuaciones linealmente dependientes, despejando en una de ellas obtenemos

$$B = A \frac{iP - 1}{iP + 1}. \quad (95)$$

Notamos, además, que

$$\left| \frac{iP - 1}{iP + 1} \right| = 1,$$

por lo que podemos escribir

$$\frac{iP - 1}{iP + 1} = e^{\delta}, \quad (96)$$

con $\delta = \arctan\left(\frac{2P}{P^2-1}\right)$. Introduciendo el resultado anterior en la expresión de la función de onda, resulta

$$\Psi_B(z) = A \begin{pmatrix} 2 \cos\left(\frac{pz}{\hbar} - \frac{\delta}{2}\right) U \\ 2iP \sin\left(\frac{pz}{\hbar} - \frac{\delta}{2}\right) \hat{\sigma}_z U \end{pmatrix}. \quad (97)$$

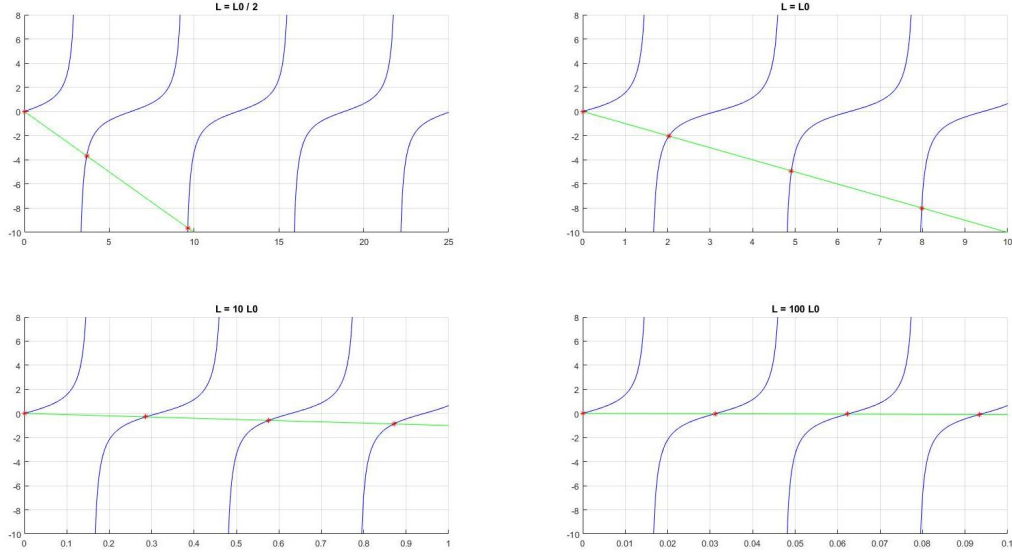


Figura 1: Solución gráfica de (99) para la masa del electrón y los valores (a) $L = \frac{1}{2}L_0$, (b) $L = L_0$, (c) $L = 10L_0$ y (d) $L = 100L_0$.

Para calcular el espectro de energía utilizamos la condición de contorno en $z = L$. Su imposición nos da, en este caso,

$$-i \left(A e^{i \frac{pL}{\hbar}} - B e^{-i \frac{pL}{\hbar}} \right) = A e^{i \frac{pL}{\hbar}} + B e^{-i \frac{pL}{\hbar}}.$$

Despejando e introduciendo la relación entre los coeficientes A y B que hemos obtenido, lo anterior equivale a

$$e^{i \frac{pL}{\hbar}} (iP + 1)^2 = e^{-i \frac{pL}{\hbar}} (iP - 1)^2.$$

Despejando,

$$\frac{e^{i \frac{pL}{\hbar}} - e^{-i \frac{pL}{\hbar}}}{e^{i \frac{pL}{\hbar}} + e^{-i \frac{pL}{\hbar}}} = \frac{2iP}{P^2 - 1}.$$

Por último, introduciendo la definición de P , obtenemos

$$\tan \left(\frac{pL}{\hbar} \right) = -\frac{p}{mc}, \quad (98)$$

ecuación trascendente que nos da la cuantización del momento p . La energía, una vez conocido p , se calcula de nuevo a partir de (3).

Vamos a analizar ahora la influencia de tamaño del pozo en las soluciones del problema que acabamos de analizar. Introduciendo el vector de onda $\hbar \mathbf{k} = \mathbf{p}$, la ecuación trascendente anterior se escribe como

$$\tan(kL) = -kL_0, \quad (99)$$

donde $L_0 := \frac{\hbar}{mc}$ es la longitud de onda Compton de la partícula. En la figura 1 se obtienen gráficamente las primeras soluciones de la ecuación anterior para un electrón y diferentes valores de L .

Para valores pequeños de L , la pendiente de la recta $y(k) = kL_0$ no es despreciable dentro de la escala marcada por el periodo de la tangente que aparece en el término izquierdo de (99). Sin embargo, a medida que L aumenta, dicha pendiente se aproxima a 0, observando en el caso $L = 100L_0$ que la recta es prácticamente constante e igual a 0. En tal caso, las soluciones de la ecuación trascendente coinciden en los primeros niveles con los ceros de la función tangente, de modo que los niveles de energía son los predichos por la ecuación de Schrödinger en el caso no

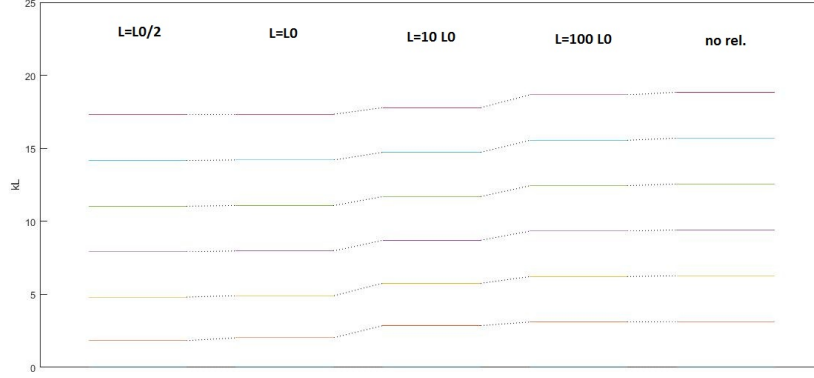


Figura 2: Soluciones de (99) para pozos de longitudes $\frac{1}{2}L_0$, L_0 , $10L_0$ y $100L_0$, junto con el caso no relativista.

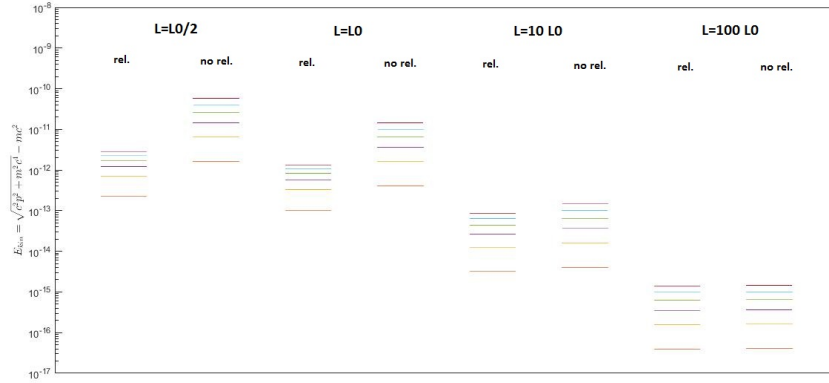


Figura 3: Espectro de energías relativista y no relativista para los diferentes tamaños del pozo.

relativista. Es decir, los efectos relativistas no son apreciables cuando la longitud de onda Compton de la partícula es despreciable respecto al pozo de potencial, de modo que su comportamiento coincide con el de una partícula no relativista.

Este comportamiento puede observarse también en la figura 2, en la que se muestran los valores numéricos de las soluciones de la ecuación, así como los valores de kL en el caso no relativista, dados por $kL = n\pi$, con $n = 1, 2, \dots$. En la figura 3, por otro lado, se representa la energía cinética relativista junto con el correspondiente valor no relativista para cada una de las longitudes del pozo que estamos estudiando. Observamos, de nuevo, como las divergencias entre ambas predicciones se hacen cada más pequeñas a medida que aumenta el tamaño del pozo de potencial.

Para terminar esta sección, vamos a analizar el comportamiento de la densidad de probabilidad en función del tamaño del pozo de potencial. Recordamos que, para poder obtener soluciones no nulas de la ecuación de Dirac, hemos impuesto condiciones de contorno menos restrictivas que en el caso no relativista, eliminando así la continuidad de la densidad de probabilidad en las barreras de potencial. Sin embargo, vemos que esta continuidad se recupera cuando el pozo es lo suficientemente ancho, poniendo de nuevo de manifiesto el comportamiento no relativista de la partícula cuando se da dicha situación. Por último, comprobamos que, en efecto, la corriente de probabilidad sí que es nula en los extremos del pozo, que es justamente lo que buscábamos con las nuevas condiciones de contorno. Para ello, multiplicamos por $\bar{\Psi} = \Psi^\dagger \beta$ las condiciones (94), obteniendo

$$\mp i \bar{\Psi} \beta \alpha_z \Psi = \bar{\Psi} \Psi.$$

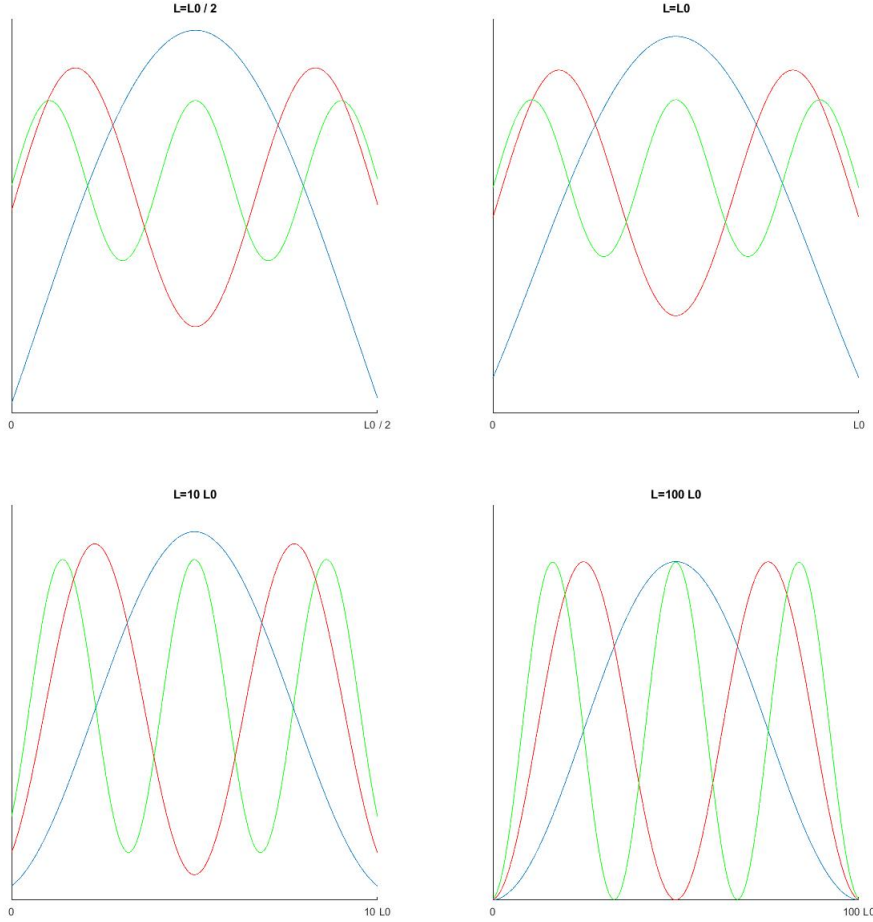


Figura 4: Gráfica de las funciones de densidad de probabilidad para los primeros niveles de energía y los diferentes tamaños de caja. En azul, $n = 1$; en rojo, $n = 2$; en verde, $n = 3$.

La parte de la izquierda en la igualdad anterior representa, justamente, la corriente de probabilidad. Evaluando la parte de la izquierda en $z = 0$, tenemos

$$\bar{\Psi}\Psi|_{z=0} = |B + C|^2 - |B - C|^2 P^2 = 0,$$

donde hemos usado la relación entre A y B que obtuvimos antes. El mismo resultado se obtiene para $z = L$, de modo que la corriente de probabilidad se anula en las fronteras del pozo.

3.2.2. Solución para un pozo cuadrado de potencial tridimensional

Consideramos ahora una partícula confinada en una caja tridimensional de lados L_1 , L_2 y L_3 que modelamos mediante un potencial de la forma (44). Como ya notamos anteriormente, este potencial puede escribirse de forma más compacta como

$$m(\mathbf{x}) = m + (M - m) \prod_{i=1}^3 [\theta(x_i - L_i) + \theta(-x_i)].$$

En el caso de la ecuación de Klein-Gordon, por analogía con el desarrollo no relativista, supusimos que las soluciones al problema tridimensional pueden escribirse como producto de funciones de ondas unidimensionales viajando en cada dirección, gracias a la separabilidad del potencial. Sin embargo, esto no es posible cuando tratamos las soluciones de la ecuación de Dirac en un pozo

tridimensional, debido a la estructura de spinor de las soluciones. En su lugar, supondremos, de acuerdo con [2], funciones de onda de la forma

$$\Psi = \left(\begin{array}{c} \left[\prod_{j=1}^3 (B_j e^{\frac{i}{\hbar} p_j x_j} + C_j e^{-\frac{i}{\hbar} p_j x_j}) \right] U \\ \sum_{m=1}^3 \left[\prod_{j=1}^3 (B_j e^{\frac{i}{\hbar} p_j x_j} + C_j (-1)^{\delta_{jm}} e^{-\frac{i}{\hbar} p_j x_j}) P u_{p_m} \right] \sigma_m U \end{array} \right), \quad (100)$$

donde $u_p = (u_{p_1}, u_{p_2}, u_{p_3})$ es un vector unitario en la dirección de \mathbf{p} y P se define como en la sección anterior.

Como en el caso unidimensional, imponemos las condiciones de contorno

$$i\beta\alpha_l\Psi(0) = \Psi(0) \quad , \quad -i\beta\alpha_l\Psi(L) = \Psi(L), \quad (101)$$

con $l \in \{1, 2, 3\}$. Teniendo en cuenta que

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

la condición $\pm i\beta\alpha_l\Psi = \Psi$ implica

$$\pm \begin{pmatrix} i \sum_{m=1}^3 \left[\prod_{j=1}^3 (B_j e^{\frac{i}{\hbar} p_j x_j} + C_j (-1)^{\delta_{jm}} e^{-\frac{i}{\hbar} p_j x_j}) P u_{p_m} \right] \sigma_l \sigma_m U \\ -i \left[\prod_{j=1}^3 (B_j e^{\frac{i}{\hbar} p_j x_j} + C_j e^{-\frac{i}{\hbar} p_j x_j}) \right] \sigma_l U \end{pmatrix} = \Psi. \quad (102)$$

Igualando la componente superior en los dos lados de la ecuación anterior y teniendo en cuenta que U puede escogerse de manera arbitraria, obtenemos

$$\left[\prod_{j=1}^3 (B_j e^{\frac{i}{\hbar} p_j x_j} + C_j e^{-\frac{i}{\hbar} p_j x_j}) \right] I = \pm i \sum_{m=1}^3 \left[\prod_{j=1}^3 (B_j e^{\frac{i}{\hbar} p_j x_j} + C_j (-1)^{\delta_{jm}} e^{-\frac{i}{\hbar} p_j x_j}) P u_{p_m} \right] \sigma_l \sigma_m. \quad (103)$$

Por otro lado, multiplicando por la derecha la ecuación de las componentes inferiores por $\pm i\sigma_l$, se obtiene

$$\left[\prod_{j=1}^3 (B_j e^{\frac{i}{\hbar} p_j x_j} + C_j e^{-\frac{i}{\hbar} p_j x_j}) \right] I = \pm i \sum_{m=1}^3 \left[\prod_{j=1}^3 (B_j e^{\frac{i}{\hbar} p_j x_j} + C_j (-1)^{\delta_{jm}} e^{-\frac{i}{\hbar} p_j x_j}) P u_{p_m} \right] \sigma_m \sigma_l, \quad (104)$$

donde, además, hemos tenido en cuenta que $\sigma_l^2 = I$. Sumando las dos ecuaciones anteriores, y utilizando la relación de anticonmutación de las matrices de Pauli, $\{\sigma_l, \sigma_m\} = 2\delta_{lm}I$, tenemos

$$\begin{aligned} 2 \left[\prod_{j=1}^3 (B_j e^{\frac{i}{\hbar} p_j x_j} + C_j e^{-\frac{i}{\hbar} p_j x_j}) \right] I &= \pm 2i \sum_{m=1}^3 \left[\prod_{j=1}^3 (B_j e^{\frac{i}{\hbar} p_j x_j} + C_j (-1)^{\delta_{jm}} e^{-\frac{i}{\hbar} p_j x_j}) P u_{p_m} \right] \delta_{lm} I \\ &= \pm 2i \left[\prod_{j=1}^3 (B_j e^{\frac{i}{\hbar} p_j x_j} + C_j (-1)^{\delta_{jl}} e^{-\frac{i}{\hbar} p_j x_j}) P u_{p_l} \right] I. \end{aligned} \quad (105)$$

Dividiendo ambos lados de la igualdad por $2 \prod_{j \neq l}^3 (B_j e^{\frac{i}{\hbar} p_j x_j} + C_j e^{-\frac{i}{\hbar} p_j x_j})$, resulta

$$B_l e^{\frac{i}{\hbar} p_l x_l} + C_l e^{-\frac{i}{\hbar} p_l x_l} = \pm i (B_l e^{\frac{i}{\hbar} p_l x_l} - C_l e^{-\frac{i}{\hbar} p_l x_l}) P u_{p_l}. \quad (106)$$

Hemos deducido así tres pares de condiciones linealmente independientes, uno por cada coordenada espacial, a partir de las condiciones de contorno. Evaluando en $x_l = 0$ y tomando el signo positivo, tenemos

$$B_l + C_l = i(B_l - C_l) P u_{p_l}. \quad (107)$$

Por otro lado, en $x_l = L$, la condición anterior se escribe

$$B_l e^{\frac{i}{\hbar} p_l L} + C_l e^{-\frac{i}{\hbar} p_l L} = \pm i (B_l e^{\frac{i}{\hbar} p_l L} - C_l e^{-\frac{i}{\hbar} p_l L}) P u_{p_l}. \quad (108)$$

De la primera de las relaciones anteriores, obtenemos

$$C_l = \frac{i P u_{p_l} - 1}{i P u_{p_l} + 1} B_l. \quad (109)$$

Esto, introducido en la segunda relación, conduce a

$$\tan\left(\frac{p_l L_l}{\hbar}\right) = \frac{2 P u_{p_l}}{P^2 u_{p_l}^2 - 1} = \frac{2(E + mc^2)p}{(p_l^2 - p^2)c - 2mc(E + mc^2)}. \quad (110)$$

Hemos obtenido un conjunto de tres ecuaciones trascendentes acopladas en p_1, p_2, p_3 que fijan la cuantización del momento y a partir de cuyas soluciones podemos obtener el espectro de energías.

4. Comparación entre los espectros de energía para partículas relativistas de espín 0 y de espín 1/2 en un pozo de potencial

Una vez obtenidos los espectros de energía tanto para partículas de espín 0 como para partículas de espín 1/2, el siguiente paso es realizar un análisis comparativo de ambos resultados para poder extraer conclusiones acerca de los efectos del espín en el comportamiento de las partículas relativistas. Estudiaremos por separado el caso unidimensional y el tridimensional, como hemos hecho hasta ahora.

4.1. El caso unidimensional

Recapitulando, los valores de la energía para las soluciones de las ecuaciones de Klein-Gordon y Dirac para partículas sometidas a un pozo de potencial unidimensional de longitud L están dados por

$$\begin{aligned} \text{Klein-Gordon} \quad E_B(n) &= \sqrt{c^2 p_n^2 + m^2 c^4}, \quad p_n = \frac{n\hbar\pi}{L}, \\ \text{Dirac} \quad E_B(n) &= \sqrt{c^2 p_n^2 + m^2 c^4}, \quad \tan\left(\frac{p_n L}{\hbar}\right) = -\frac{p_n}{mc}. \end{aligned} \quad (111)$$

Para seguir el criterio utilizado en [3], trabajaremos con la cantidad adimensional $\mathcal{T} = T/(mc^2) = E/(mc^2) - 1$, donde T es la energía cinética. Además, para simplificar la notación, llamaremos $x_n = \frac{p}{mc}$ y $L_C = \frac{L}{L_0}$, donde L_0 es la longitud de onda Compton de la partícula. Así, obtenemos

$$\begin{aligned} \text{Klein-Gordon} \quad \mathcal{T}_B^{KG}(n) &= \sqrt{x_n^2 + 1} - 1, \quad x_n = \frac{n\pi}{L_C}, \\ \text{Dirac} \quad \mathcal{T}_B^D(n) &= \sqrt{x_n^2 + 1} - 1, \quad \tan(L_C x_n) = -x_n. \end{aligned} \quad (112)$$

Resulta evidente, por tanto, que la principal diferencia entre ambos espectros reside en la forma de obtener el valor x_n . Fijémonos ahora en la ecuación trascendental que aparece en el espectro de la ecuación de Dirac, que escribiremos como

$$\tan(y_n) = -\frac{y_n}{L_C}, \quad y_n = x_n L_C. \quad (113)$$

Cuando la longitud del pozo es mucho mayor que la longitud de onda Compton de la partícula, esto es, cuando $L_C \gg 1$, tenemos que $\tan(y_n) \approx 0$ y, por tanto, $y_n \approx n\pi$. O lo que es lo mismo, $x_n = n\pi/L_C$, que coincide con el valor obtenido para la ecuación de Klein-Gordon. Es decir, cuando la longitud del pozo se hace muy grande, el espectro de energía de la ecuación de Dirac coincide con el de la ecuación de Klein-Gordon y, por tanto, el efecto del espín desaparece. Más aún, cuando

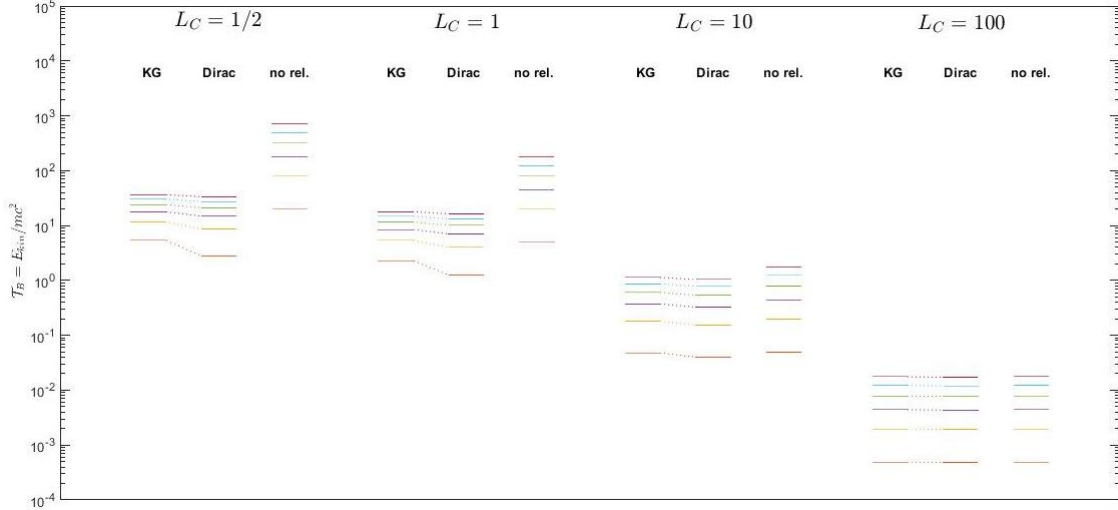


Figura 5: Comparación de la energía cinética \mathcal{T}_B (en unidades de mc^2) para las soluciones de las ecuaciones de KG, Dirac y no relativista.

analizamos las soluciones de la ecuación de Dirac para un pozo unidimensional, concluimos que longitudes grandes del pozo corresponden con el límite no relativista del problema, por lo que podemos concluir que el efecto del espín sobre la energía de una partícula en una caja es puramente relativista.

Si buscamos el origen de las diferencias en la cuantización del momento que hemos obtenido para las dos ecuaciones, observamos que este se encuentra en las diferentes condiciones de contorno utilizadas en ambos problemas. En la ecuación de Klein-Gordon, que es una ecuación de segundo orden en las derivadas temporales, exigimos la continuidad de las soluciones en los extremos del pozo de potencial. En particular, esta exigencia llevaba asociada la anulación de la densidad de corriente de probabilidad en tales extremos. Sin embargo, la ecuación de Dirac es una ecuación ‘solo’ de orden 1 en las derivadas espaciales, por lo que las restricciones que imponemos a sus soluciones deben ser más débiles. Concretamente, vimos que si mantenemos las mismas condiciones de contorno es imposible obtener soluciones no triviales de la ecuación de Dirac. En este sentido, la imposición de que la función de onda se anule en las paredes del pozo debe ser relajada, y mantendremos únicamente el requerimiento de que la densidad de corriente sea nula. Sin embargo, estamos viendo que en el límite no relativista ambas soluciones recuperan el espectro obtenido de la ecuación de Schrödinger, al menos en los primeros niveles de energía, por lo que ambas condiciones son equivalentes en este límite.

4.2. El caso tridimensional

En el caso tridimensional los resultados son, esencialmente análogos al caso unidimensional aunque con mayor complejidad en los cálculos, por lo que lo analizaremos de forma más breve. En las secciones anteriores hemos obtenido los espectros de energía para partículas de espín 0 y espín 1/2 sometidas a un pozo de potencial tridimensional:

$$\begin{aligned}
 \text{Klein-Gordon} \quad E_B(\mathbf{n}) &= \sqrt{c^2 \mathbf{p}^2(\mathbf{n}) + m^2 c^4}, & p_i(\mathbf{n}) &= \frac{n_i \hbar \pi}{L_i} \quad i = 1, 2, 3, \\
 \text{Dirac} \quad E_B(\mathbf{n}) &= \sqrt{c^2 \mathbf{p}^2(\mathbf{n}) + m^2 c^4}, & \tan\left(\frac{p_i L_i}{\hbar}\right) &= \frac{2(E + mc^2)p}{(p_i^2 - p^2)c - 2mc(E + mc^2)}, \quad i = 1, 2, 3.
 \end{aligned}
 \tag{114}$$

Considerando el caso en que $L_1 = L_2 = L_3 = L$, usando de nuevo la energía cinética en unidades de mc^2 y definiendo $x_i(\mathbf{n}) = \frac{v_i L_0}{\hbar}$, $L_C = L/L_0$, obtenemos

$$\begin{aligned} \text{Klein-Gordon} \quad \mathcal{T}_B^{KG}(\mathbf{n}) &= \sqrt{\mathbf{x}^2(\mathbf{n}) + 1} - 1, \quad x_i = \frac{n_i \pi}{L_C}, \quad i = 1, 2, 3, \\ \text{Dirac} \quad \mathcal{T}_B^D(n) &= \sqrt{\mathbf{x}^2(\mathbf{n}) + 1} - 1, \quad \tan(x_i(\mathbf{n})L_C) = \frac{2(\mathcal{T}_B^D(\mathbf{n})+2)x_i(\mathbf{n})}{x_i^2(\mathbf{n}) - (\mathcal{T}_B^D(\mathbf{n})+2)^2} \quad i = 1, 2, 3. \end{aligned} \quad (115)$$

De nuevo, definiendo $y_i(\mathbf{n}) = x_i(\mathbf{n})L_C$, las ecuaciones trascendentales anteriores puede reescribirse de la siguiente manera:

$$\tan(y_i(\mathbf{n})) = L_C \frac{2(\mathcal{T}_B^D(\mathbf{n}) + 2)y_i(\mathbf{n})}{y_i^2(\mathbf{n}) - L_C^2(\mathcal{T}_B^D(\mathbf{n}) + 2)^2}. \quad (116)$$

De esta última ecuación se obtiene que, cuando $L_C \gg 1$, $\tan(y_i(\mathbf{n})) \approx 0$ y, por tanto, $x_i \approx \frac{n_i \pi}{L_C}$. Es decir, recuperamos de nuevo las soluciones de la ecuación de Klein-Gordon que, en este caso, además, coinciden con las no relativistas. De nuevo, el efecto del espín sobre la energía es un efecto puramente relativista que desaparece cuando el tamaño de la caja es lo suficientemente grande.

5. Conclusiones

En esta memoria, hemos encontrado los espectros de energía para partículas relativistas de espín 0 y espín 1/2 sometidas a un pozo cuadrado de potencial, en sus versiones unidimensional y tridimensional, haciendo una comparativa entre los diferentes resultados y con el caso no relativista. Destacamos a continuación algunos de los aspectos más importantes que se desprenden de nuestro estudio.

En primer lugar, observamos que las dimensiones del pozo de potencial tienen un papel fundamental en la manifestación de los efectos relativistas en el problema. La escala en la que estos efectos se aprecian viene determinada por la longitud de onda Compton de la partícula L_0 . Como se ve a lo largo del desarrollo, para tamaños de caja del orden $L \sim 100L_0$ los resultados obtenidos concuerdan con los no relativistas. Por tanto, el régimen no relativista se alcanza bajo la condición $L \gg L_0$.

En segundo lugar, como se menciona a lo largo del texto, la ecuación de Klein-Gordon es una ecuación de segundo orden en las derivadas espaciales, similar a la ecuación de Schrödinger, por lo que sus soluciones se han encontrado siguiendo un procedimiento similar al que usualmente se sigue en el tratamiento del problema no relativista. La ecuación de Dirac, en cambio, es de primer orden, lo que demanda unas condiciones de contorno más débiles. Concretamente, debemos eliminar la imposición de la continuidad de sus soluciones en los extremos del pozo de potencial, sustituyéndola por otra más laxa, la de la anulación de la densidad de probabilidad que, no obstante, recupera en el límite no relativista las condiciones impuestas a la ecuación de Schrödinger. Esto tiene dos consecuencias remarcables. Primero, la cuantización del momento de la partícula se obtiene a través de una ecuación trascendente, para cuya solución, que presentamos gráficamente, es necesario recurrir a métodos numéricos. Segundo, la densidad de probabilidad dada por las correspondientes funciones de onda no presenta nodos en el régimen relativista. Estos efectos, debidos a la estructura de espinor de la solución, desaparecen cuando la longitud de la caja aumenta (límite no relativista) lo que supone un primer indicio de que los efectos del espín en este sistema son de naturaleza relativista.

Por último, la comparación de los espectros obtenidos para ambas ecuaciones muestra que el espín tiene igualmente un efecto sobre los niveles energéticos, siendo más bajos los obtenidos mediante la ecuación de Dirac que los obtenidos como solución de la ecuación de Klein-Gordon. Una vez más, ambos espectros se equiparan entre sí y con el no relativista para longitudes del orden $L \gtrsim L_0$, dando evidencia definitiva de que el efecto del espín sobre la energía de una partícula es un efecto puramente relativista.

Bibliografía

- [1] P. ALBERTO, C. FIOLEAIS, V.M.S. GIL, Eur. J. Phys. **17** (1996) 19.
- [2] P. ALBERTO, S. DAS, E.C. VAGENAS, Phys. Lett. A **375** (2011) 1436.
- [3] P. ALBERTO, S. DAS, E.C. VAGENAS, Eur. J. Phys. **39** (2018) 39.
- [4] V. ALONSO, S. VICENZO, L. MONDINO, Eur. J. Phys. **18** (1997) 315.
- [5] S. DAS, E.C. VAGENAS, A.F. ALI, Phys. Lett. **B690** (2010) 407-412.
- [6] W. GREINER, *Relativistic quantum mechanics: wave equations*, 3^a edición, Springer-Verlag, Berlín, 2000.
- [7] C. ITZYKSON, J. ZUBER, *Quantum Field Theory*, McGraw-Hill, Berlin, 1980.