A equação de Dirac: partícula livre em repouso

Para uma situação onde $\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} << \beta m$ (caso extremo é o referencial da partícula) a equação de Dirac fica: $i\partial_t \Psi = (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m)\Psi = \beta m \Psi$

Como β é diagonal, é fácil obter 4 soluções linearmente independentes:

$$\Psi_1 = e^{-imt} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}; \ \Psi_2 = e^{-imt} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}; \ \Psi_3 = e^{+imt} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}; \ \Psi_4 = e^{+imt} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Exatamente como no caso da equação de Klein-Gordon, a parte de baixo do vetor coluna corresponde à energia negativa e a parte de cima à energia positiva. Ambas as partes de baixo e de cima da função de onda de Dirac, têm, como veremos, uma componente que chamaremos de "spin para cima" e outra de "spin para baixo". Exploraremos esse assunto com mais detalhes.

Partícula livre na direção $\hat{\mathbf{z}}$.

Consideremos agora uma partícula livre com momento diferente de zero na direção $\hat{\mathbf{z}}$, isto é $\mathbf{p} = p\hat{\mathbf{z}} \Rightarrow H\Psi = E\Psi$ com $H = \alpha_z p + \beta m$. Esta Hamiltoniana já não é diagonal na base de spinores (autokets de β), pois $[\alpha_z, \beta] \neq 0$.

Lembre que $\alpha_i = \gamma^0\gamma^i,\ \beta = \gamma^0,\ {\gamma^0}^2 = 1$ *e que se* $\mu \neq \nu \begin{cases} \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 0 \\ [\gamma^\mu, \gamma^\nu] \neq 0 \end{cases}$

A equação de Dirac: partícula livre na direção z

Para ser demonstrado no problema 8.11 da lista 6, afirmamos que a matriz que representa H fica:

$$H = \begin{pmatrix} m & 0 & p & 0 \\ 0 & m & 0 & -p \\ p & 0 & -m & 0 \\ 0 & -p & 0 & -m \end{pmatrix}$$

Consequentemente, a equação de Dirac nesta representação é dada por:

$$\begin{pmatrix} m & 0 & p & 0 \\ 0 & m & 0 & -p \\ p & 0 & -m & 0 \\ 0 & -p & 0 & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix}$$

Observe que para obter u_1, u_2, u_3 e u_4, resolvendo as equações acopladas

$$\text{temos: } \begin{cases} u_1 \text{ e } u_3 \text{ estão acoplados entre si, pois } H_{13} = H_{31} = p \neq 0 \\ u_1 \text{ e } u_3 \text{ não estão acoplados com } u_2 \text{ e } u_4, \text{ pois } \begin{cases} H_{12} = H_{21} = 0 \\ H_{14} = H_{41} = 0 \\ H_{32} = H_{23} = 0 \\ H_{34} = H_{43} = 0 \end{cases} \end{cases}$$

Note que os acoplamentos para u_2 e u_4 são muito similares à estes (estão acoplados entre si, mas não estão com os outros).

A equação de Dirac: partícula livre na direção z

Para as duas equações acopladas em u_1 e u_3, achamos $E = \pm E_p$. As mesmas energias são achadas para as equações acopladas em u_2 e u_4. De novo achamos a energia "correta" positiva e a energia "espúria" negativa. Veremos que a energia negativa terá uma interpretação "palatável".

Antes de apresentar esta interpretação, vamos discutir o assunto spin. Do problema 8.11 encontramos as seguintes soluções:

$$(1)\ \text{Para } E = +E_p \begin{cases} u_1 = 1; u_3 = +\frac{p}{E_p+m}; u_2 = u_4 = 0 \\ \\ u_2 = 1; u_4 = -\frac{p}{E_p+m}; u_1 = u_3 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \textit{No limite não-} \\ \textit{relativístico} \\ u_1 >> u_3 \\ u_2 >> u_4 \end{cases}$$

$$(2)\ \text{Para } E = -E_p \begin{cases} u_3 = 1; u_1 = -\frac{p}{E_p+m}; u_2 = u_4 = 0 \\ \\ u_4 = 1; u_2 = +\frac{p}{E_p+m}; u_1 = u_3 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \textit{No limite não-} \\ \textit{relativístico} \\ u_3 >> u_1 \\ u_4 >> u_2 \end{cases}$$

Antes de continuar, precisamos responder o que esperamos do operador

$$\mathbf{\Sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \Sigma_z, \text{ com } \mathbf{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \to \text{ uma matriz } 4 \times 4?$$

Autoestados deste operador são autoestados de spin na direção de $\mathbf{p}$.

A equação de Dirac: partícula livre na direção z

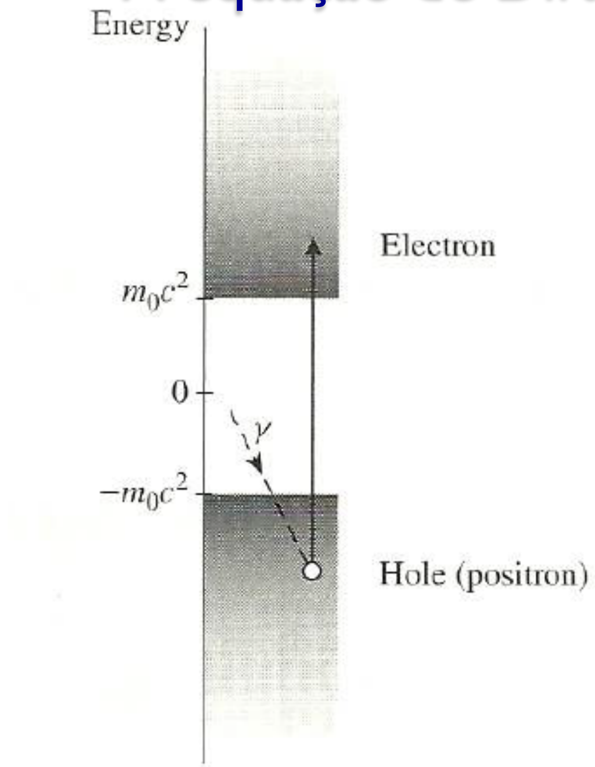
Mostre que $[\boldsymbol{\Sigma}\cdot\hat{\mathbf{p}}, H] = 0 \Rightarrow$Autoestados de H também são autoestados de $\boldsymbol{\Sigma}\cdot\hat{\mathbf{p}}$. Aqui reside o nascimento relativístico do spin do elétron. O autor sugere a aplicação de $\boldsymbol{\Sigma}\cdot\hat{\mathbf{p}}$ como uma projeção do spin ao longo de $\mathbf{p}$. De fato, o valor médio deste operador para um estado arbitrário te dá a projeção do spin na direção de $\mathbf{p}$ (num grande número de experimentos). Estado, cujo spin aponta na direção de $\mathbf{p}$ tem heliticidade positiva (regra da mão direita - R) e no sentido oposto ao movimento tem heliticidade negativa (regra da mão esquerda - L).

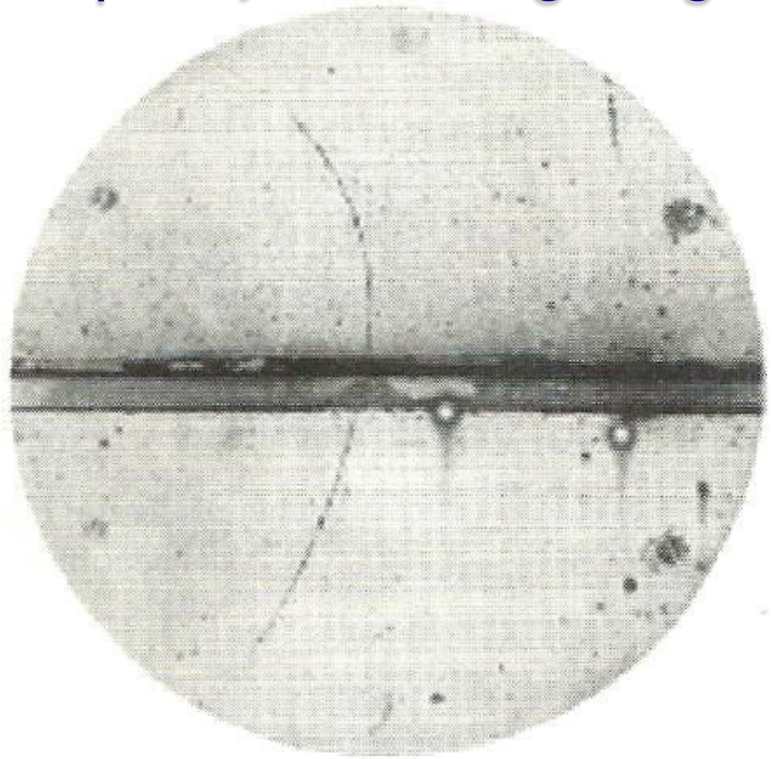
$$E = +E_p \Longrightarrow u_R^{(+)}(p) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p}{E_p+m} \\ 0 \end{bmatrix} ; \; u_L^{(+)}(p) = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -\frac{p}{E_p+m} \end{bmatrix}$$

$$E = -E_p \Longrightarrow u_R^{(-)}(p) = \begin{bmatrix} -\frac{p}{E_p+m} \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} ; \; u_L^{(-)}(p) = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{p}{E_p+m} \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

No limite não relativístico: $\begin{cases} \text{spin para cima e para baixo para } +E_p \\ \text{spin para cima e para baixo para } -E_p \end{cases}$

A equação de Dirac: interpretação da energia negativa





Interpretação

Um background (todos os estados com energia negativa) preenchido com carga infinita e energia infinita. Como elétrons são férmions nenhum dos estados com energia negativa aceita um novo elétron. Entretanto, se fornecermos energia suficiente, um elétron pula para um nível de energia positiva. O Buraco na banda de energia negativa é o pósitron (todas as propriedades do elétron; só a carga muda de sinal). O traço curvo (pósitron sob ação de um campo magnético) comprovou isso.

A equação de Dirac: interações eletromagnéticas

Podemos escrever a equação de Dirac para a partícula livre em um formato reduzido 2×2, com auxílio da Hamiltoniana $H = \boldsymbol{\alpha}.\mathbf{p} + \beta m$ escrita por

$$H = \begin{bmatrix} m & \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p} & -m \end{bmatrix} \Rightarrow \underbrace{\begin{bmatrix} m & \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p} & -m \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}}_{H\Psi} = \underbrace{E\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}}_{E\Psi}$$

Para introduzir interações eletromagnéticas fazemos: $\mathbf{p} \to \mathbf{p} - e\mathbf{A} = \tilde{\mathbf{p}}$

$$\begin{bmatrix} m & \boldsymbol{\sigma}\cdot\tilde{\mathbf{p}} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\tilde{\mathbf{p}} & -m \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = E\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} \text{ com } \Psi = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}$$

Para energias não relativísticas, podemos escrever $E = K + m$ onde $K << m$ é a energia cinética. Com isso a equação de baixo fica $\boldsymbol{\sigma}\cdot\tilde{\mathbf{p}}u - mv = (K+m)v$, que pode ser reduzida à $\boldsymbol{\sigma}\cdot\tilde{\mathbf{p}}u = 2mv \to v = \dfrac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\tilde{\mathbf{p}}}{2m}u$ e que se inserida na equação de cima, $mu + \boldsymbol{\sigma}\cdot\tilde{\mathbf{p}}v = Eu$, fornece: $\boxed{\dfrac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\tilde{\mathbf{p}})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\tilde{\mathbf{p}})}{2m}u = Ku}$

De FI001, temos $\dfrac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\tilde{\mathbf{p}})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\tilde{\mathbf{p}})}{2m}u = \left[\dfrac{\tilde{\mathbf{p}}^2}{2m} + \dfrac{i\boldsymbol{\sigma}}{2m}\cdot(\tilde{\mathbf{p}}\times\tilde{\mathbf{p}})\right]u.$

Na representação das coordenadas, temos $\quad \boldsymbol{\nabla}\times(\mathbf{A}u) = (\boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{A})u + \boldsymbol{\nabla}u\times\mathbf{A}$

$\tilde{\mathbf{p}}\times\tilde{\mathbf{p}}u = (i\boldsymbol{\nabla} + e\mathbf{A})\times(i\boldsymbol{\nabla}u + e\mathbf{A}u) = ie[\boldsymbol{\nabla}\times(\mathbf{A}u) + \mathbf{A}\times\boldsymbol{\nabla}u] =$

$= ie(\boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{A})u = ie\mathbf{B}u,$ onde $\mathbf{B}$ é o campo magnético associado à $\mathbf{A}$.

A equação de Dirac: interações eletromagnéticas

Inserido esses últimos resultados na equação da caixa verde do slide anterior,

temos: $\left[\frac{\tilde{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{i\boldsymbol{\sigma}}{2m}\cdot(ie\mathbf{B})\right]u = Ku$. Se usarmos $\begin{cases} \boldsymbol{\mu} = g\frac{e}{2m}\mathbf{S} \rightarrow \begin{cases}\text{momento}\\ \text{magnético}\end{cases} \\ \mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma} \rightarrow \begin{cases}\text{operador}\\ \text{de spin}\end{cases} \\ g = 2 \rightarrow \begin{cases}\text{constante}\\ \text{giromagnética}\end{cases} \end{cases}$

obtemos: $\left[\frac{\tilde{\mathbf{p}}^2}{2m} - \boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B}\right]u = Ku$. E isso permite concluir que a equação de Dirac, na presença de campo eletromagnético, e no limite não relativístico, se reduz à equação independente do tempo de Schrödinger com autovalor de energia K, para uma partícula com momento magnético $\boldsymbol{\mu}$ na presença de um campo magnético externo $\mathbf{B}$. O momento magnético foi derivado do operador de spin com constante giromagnética $g = 2$.

Começamos o curso (FI001), postulando spin e analisando experimentos de Stern-Gerlach. Vimos agora que o spin (com seus dois autovalores possíveis) nasce naturalmente da equação de Dirac.

A equação de Dirac: simetrias

Vamos agora examinar algumas simetrias inerentes à equação de Dirac. Em especial, consideraremos situações onde uma partícula de spin $\frac{1}{2}$ se encontra sob a influência de um potencial externo. Isto é, analisaremos as simetrias da equação

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{x},t) = H\Psi(\mathbf{x},t) = E\Psi(\mathbf{x},t)$$

onde $H = \boldsymbol{\alpha}.\mathbf{p} + \beta m + V(\mathbf{x})$. Note que esta forma destrói a covariança da equação, a menos que V tenha origem eletromagnética e tenhamos tomado um referencial onde $\mathbf{A} = 0$.

Momento angular

Na equação de Schrödinger exploramos a simetria de rotação, ao notar que $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ comutava com Hamiltonianas com "potenciais centrais",

isto é $[H, \mathbf{L}] = 0$ devido à $\begin{cases} [\mathbf{L}, \mathbf{p}^2] = 0 \\ \\ [\mathbf{L}, \mathbf{x}^2] = 0 \end{cases}$

Consideraremos, agora, o comutador $[H, \mathbf{L}]$ para a Hamiltoniana de Dirac. Comecemos pela Hamiltoniana da partícula livre, $H = \boldsymbol{\alpha}.\mathbf{p} + \beta m$. Note que $[\beta, \mathbf{L}] = 0$ pois, β é constante. Mas e o $[\boldsymbol{\alpha}.\mathbf{p}, \mathbf{L}]$?

A equação de Dirac: simetrias

Para a componente i do momento angular, temos $[\boldsymbol{\alpha}.\mathbf{p}, L_i] = [\alpha_l p_l, \epsilon_{ijk} x_j p_k]$, onde repetição de índices latinos significa somar de 1 à 3. Como α_l comuta com o operador unidade, temos:

$$[\boldsymbol{\alpha}.\mathbf{p}, L_i] = \epsilon_{ijk}\alpha_l [p_l, x_j] p_k = \epsilon_{ijk}\alpha_l(-i\delta_{lj})p_k = -i\epsilon_{ijk}\alpha_j p_k \neq 0.$$

Ou seja, o momento angular orbital não comuta com a Hamiltoniana de Dirac. Isto significa que $\mathbf{L}$ não é uma grandeza que se conserva para partículas de spin $\frac{1}{2}$ livres ou sob influência de potenciais centrais.
Considere agora a comutação entre a Hamiltoniana e o operador $\boldsymbol{\Sigma}$ do slide 3. Especificamente, com sua componente i, isto é $[\boldsymbol{\alpha}.\mathbf{p} + \beta m, \Sigma_i]$.

Usando (mostre!) que $\begin{cases} \beta\Sigma_i = \Sigma_i\beta \\ [\alpha_i, \Sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\alpha_k \rightarrow \text{ vem de } [\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k \\ \epsilon_{kij} = \epsilon_{ijk} \end{cases}$

obtemos $[\boldsymbol{\alpha}.\mathbf{p} + \beta m, \Sigma_i] = [\alpha_k p_k, \Sigma_i] = [\alpha_k, \Sigma_i] p_k = 2i\epsilon_{kij}\alpha_j p_k = 2i\epsilon_{ijk}\alpha_j p_k$

E isso mostra que *Embora nem* $\mathbf{L}$ *e nem* $\boldsymbol{\Sigma}$ *comutem com* H, *a soma*

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \ \textit{comuta com } H.$$

A equação de Dirac: simetrias

Paridade

No caso onde $V(\mathbf{x}) = V(|\mathbf{x}|)$, esperamos que as soluções tenha paridade bem definida, isto é $\Psi(-\mathbf{x}) = \pm\Psi(\mathbf{x})$. Não parece ser esse o caso, pois a Hamiltoniana de Dirac do slide 8, aparentemente muda com as trocas $\begin{cases} \mathbf{x} \to -\mathbf{x} \\ \text{e} \\ \mathbf{p} \to -\mathbf{p} \end{cases}$

Entretanto, um olhar mais atento para as soluções de H, na forma de spinores, sugere que o operador precisa ser mudado. O operador de paridade definido no capítulo 4, atuava nas funções por meio das propriedades $\begin{cases} \pi^\dagger \mathbf{x} \pi = -\mathbf{x} \\ \\ \pi^\dagger \mathbf{p} \pi = -\mathbf{p} \end{cases}$

Um operador paridade completo (representado por matrizes 4×4) precisa atuar no espaço de spinores e deve ser diferente de $\pi \mathbb{1}$ (esse muda a Hamiltoniana). A proposta é que ele seja do tipo $\mathcal{P} \equiv \pi U_p$ e que U_p seja encontrato pela exigência de satisfazer $\mathcal{P}^\dagger H \mathcal{P} = H$ e pela expectativa de que $U_p^2 = \mathbb{1}$.

Para isso basta exigir que $\begin{cases} \mathcal{P}^\dagger \boldsymbol{\alpha}.\mathbf{p} \mathcal{P} = \boldsymbol{\alpha}.\mathbf{p} = U_P^\dagger \pi \boldsymbol{\alpha}.\mathbf{p} \pi U_p = \underbrace{-U_p^\dagger \boldsymbol{\alpha} U_p}_{\boldsymbol{\alpha}} .\mathbf{p} \\ \\ \mathcal{P}^\dagger \beta \mathcal{P} = U_p^\dagger \beta U_p = \beta \end{cases}$

A equação de Dirac: simetrias

As 3 propriedades $\begin{cases} U_p^2 = \mathbb{1} \\ U_p^\dagger \boldsymbol{\alpha} U_p = -\boldsymbol{\alpha} \\ U_p^\dagger \beta U_p = \beta \end{cases}$ são satisfeitas se tomarmos $U_p = \beta = \beta^\dagger$

$$\text{Assim, } H\Psi(\mathbf{x}) = E\Psi(\mathbf{x}) \Rightarrow \begin{cases} \beta\pi H\Psi(\mathbf{x}) = E\beta\pi\Psi(\mathbf{x}) \\ \\ \beta\pi H\pi^2\beta^2\Psi(\mathbf{x}) = E\beta\pi\Psi(\mathbf{x}) \\ \\ H\big(\pi\beta\Psi(\mathbf{x})\big) = E\big(\pi\beta\Psi(\mathbf{x})\big) \end{cases}$$

e $\therefore$ se $\Psi(\mathbf{x})$ é solução $\pi\beta\Psi(\mathbf{x}) = \beta\Psi(-\mathbf{x})$ também é.

Como $[H, \mathcal{P}] = 0$, as autofunções de $\mathcal{P}$ também são autofunções de H.

Assim concluímos até agora que a Hamiltoniana de Dirac, comuta com $\mathbf{J}^2$, J_z e $\mathcal{P}$. No capítulo 3, definimos boas candidatas para isso, as chamadas

funções spin-angulares $\mathcal{Y}_l^{j=l\pm 1/2, m} = \dfrac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \pm\sqrt{l \pm m + \frac{1}{2}}\, Y_l^{m-1/2}(\theta,\phi) \\ \\ \sqrt{l \mp m + \frac{1}{2}}\, Y_l^{m+1/2}(\theta,\phi) \end{pmatrix}$

Mais detalhes sobre isso veremos nas próximas aulas na solução da equação de Dirac para potenciais centrais.

A equação de Dirac: simetrias

Conjugação da carga

Para a equação de Klein-Gordon, vimos que poderíamos separar as soluções com energia positiva e energia negativa, entre solução da "partícula" e da "anti-partícula por meio da associação $\begin{cases} \Psi_{\text{partícula}} \equiv \Psi_{E>0}(\mathbf{x}, t) \\ \Psi_{\text{anti-partícula}} \equiv \Psi^*_{E<0}(\mathbf{x}, t) \end{cases}$

Vamos, primeiro tentar algo semelhante com a equação de Dirac e depois conectar as duas soluções por alguma operação de simetria. Para nossos propósitos, a anti-partícula é um objeto que se comporta exatamente como a partícula, exceto que tem sua carga elétrica com sinal oposto ao da partícula. Para explorar isso, tomemos a equação de Dirac na sua forma covariante com campos eletromagnéticos:

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - e\gamma^\mu A_\mu - m)\Psi(\mathbf{x}, t) = 0.$$

Tomando o complexo conjugado desta equação, temos:

$$(-i(\gamma^\mu)^* \partial_\mu - e(\gamma^\mu)^* A_\mu - m)\Psi^*(\mathbf{x}, t) = 0$$

Note que o sinal relativo entre o dois primeiros termos difere em relação a equação original. Se apenas trocarmos o sinal da carga não obtemos a equação original. Vamos procurar por uma matriz $\tilde{C}$, tal que

$$\tilde{C}(\gamma^\mu)^* \tilde{C}^{-1} = -\gamma^\mu$$

A equação de Dirac: simetrias

Conjugação da carga - continuação

Assim se inserirmos $\mathbb{1} = \tilde{C}^{-1}\tilde{C}$ na equação estrelada do slide anterior, temos

$$(-i(\gamma^\mu)^*\partial_\mu - e(\gamma^\mu)^* A_\mu - m)\tilde{C}^{-1}\tilde{C}\Psi^*(\mathbf{x}, t) = 0$$

Se agora multiplicarmos pela esquerda por $\tilde{C}$, podemos escrever

$$(-i\tilde{C}(\gamma^\mu)^*\tilde{C}^{-1}\partial_\mu - e\tilde{C}(\gamma^\mu)^*\tilde{C}^{-1}A_\mu - m\tilde{C}\tilde{C}^{-1})\tilde{C}\Psi^*(\mathbf{x}, t) = 0$$

E finalmente com auxílio de $\tilde{C}(\gamma^\mu)^*\tilde{C}^{-1} \equiv -\gamma^\mu$, obtemos:

$$(i\gamma^\mu\partial_\mu + e\gamma^\mu A_\mu - m)\tilde{C}\Psi^*(\mathbf{x}, t) = 0$$

Ou seja, se $\Psi(\mathbf{x}, t)$ é a solução da "equação do elétron", $\tilde{C}\Psi^*(\mathbf{x}, t)$ é solução da "equação do pósitron".

Precisamos achar $\tilde{C}$. Note que γ^0, γ^1 e γ^3 são reais e γ^2 é imaginário puro, isto é $(\gamma^2)^* = -\gamma^2$. Mostre que $\tilde{C} = i\gamma^2$ satisfaz todas as condições acima. Assim a solução da anti-partícula é $i\gamma^2\Psi^*(\mathbf{x}, t)$. É conveniente escrever isso em termos de $\bar{\Psi} = \Psi^\dagger\gamma^0 = (\Psi^*)^T\gamma^0$ (T indica, matriz transposta). Assim, temos: $\tilde{C}\Psi^*(\mathbf{x}, t) \equiv \mathcal{C}\Psi = i\gamma^2\left(\bar{\Psi}\gamma^0\right)^T \equiv U_C\left(\bar{\Psi}\right)^T$ onde $U_C = i\gamma^2\gamma^0$.

E isso define o operador de conjugação de carga $\mathcal{C}$, *por* $\mathcal{C}\Psi(\mathbf{x}, t) = U_C\left(\bar{\Psi}\right)^T$.

Note que a parte espacial e temporal da onda livre ganha um complexo conjugado que efetivamente implica em $\mathbf{x} \to -\mathbf{x}$ e $t \to -t$.