



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE
MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

LA PARADOJA DE KLEIN Y SUS APLICACIONES
MODERNAS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:
FÍSICO

PRESENTA:
RODRIGO GUZMÁN CASTRO

DIRECTOR DE TESIS:
DR. FERNANDO MATÍAS MORENO YNTRIAGO



CIUDAD UNIVERSITARIA, Cd. Mx.

, 2021



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

La paradoja de Klein y sus aplicaciones modernas

por

Rodrigo Guzmán Castro

Tesis presentada para obtener el grado de

Físico

en la

FACULTAD DE CIENCIAS

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

Ciudad Universitaria, Cd. Mx., 2021

Agradecimientos

Para comenzar, agradezco a la *Universidad Nacional Autónoma de México*, quien ha sido mi casa de estudios desde el *Colegio de Ciencias y Humanidades* hasta la *Facultad de Ciencias*, en donde he vivido, sin lugar a dudas, muchas de las mejores experiencias de mi vida, pues me ha permitido conocer y aprender de personas extraordinarias, a quienes les debo gran parte de lo que soy hoy en día.

Al *Dr. Fernando Matías Moreno Yntriago*, por su confianza y el apoyo brindado a lo largo de todo este trabajo, aquellas valiosas charlas sobre física y ocasionalmente sobre historia, siempre las tendré presentes.

A los miembros de mi jurado, el *Dr. Alexis Aguilar*, el *Dr. Victor Velázquez*, a la *Dra. Aurore Courtoy*, y al *Dr. Alberto Martín*, cuyos comentarios y correcciones sobre mi trabajo, además de su amabilidad y apoyo, fueron fundamentales para mejorar este trabajo.

A mi familia, por su incondicional cariño y apoyo, en particular a mi madre, *María Elena*, a quien nunca terminaría de agradecer todo lo que ha hecho por mí, no habría llegado hasta aquí de no ser por ella. También a mis hermanos *Jacqueline* y *Daniel*, quienes nos hemos convertido, con el pasar de los años, en personas muy distintas, pero siempre los tengo presentes, pues indudablemente contribuyeron de manera muy cercana a mi desarrollo personal.

Finalmente, a mis amigos, no quisiera dejar a nadie fuera, por lo que no mencionaré nombres. Aquellos más cercanos e incluso no tan cercanos. Aquellos con quienes he compartido experiencias fantásticas a lo largo de ya casi una década e incluso con algunos más de una década. Aquellos con quienes llevo pocos años de amistad, pero han sido una de las mejores amistades que he tenido. Aquellos con quienes en algún momento tuve una muy bonita amistad, pero que por diversas circunstancias pudiéramos haberla perdido. Aquellos con quienes solo he tendido charlas casuales y amenas, en aquellas raras ocasiones que nos hemos visto a lo largo de los años. De alguna forma, todos han contribuído (más o menos) para que yo me encuentre en este punto de mi vida, espero que si algún día leen este pequeño párrafo, sepan exactamente en cual de las categorías que he descrito han de colocarse.

Índice general

Introducción	1
1. Mecánica cuántica no relativista	5
1.1. Escalón de potencial	7
1.2. Coeficientes de Transmisión y Reflexión	11
1.3. Paquetes de onda y desfaseamiento	14
1.4. Ecuación de Pauli	18
1.5. Escalón de potencial para una partícula con espín	20
1.6. Transmisión y reflexión para una partícula con espín	23
2. Matriz de Dispersión	26
2.1. Matriz de dispersión para un escalón de potencial	31
2.2. Matriz de dispersión en la ecuación de Pauli	33
2.3. Matriz de dispersión para una partícula con espín en un escalón de potencial	35
3. Ecuación de Dirac	38
3.1. Forma covariante	41
3.2. Soluciones libres	43
3.3. Potencial escalón en la ecuación de Dirac	46
3.4. Paradoja de Klein	54

4. Teoría de agujeros	58
4.1. Paridad	61
4.2. Conjugación de carga	62
4.3. Inversión temporal	65
4.4. Transformación PCT y positrones	66
4.5. Una explicación a la paradoja de Klein	68
5. Efectos cuasirelativistas	76
5.1. Grafeno	77
5.2. Paradoja de Klein en el grafeno	80
6. Confinamiento	92
6.1. Paradoja de Klein para un potencial pseudoescalar	94
7. Conclusiones	99
Bibliografía	101

Introducción

Algunos de los fenómenos más interesantes de una teoría física suelen ser aquellos que, irónicamente, la misma teoría aislada no puede explicar, o bien resultan, si no se les mira con el suficiente cuidado, paradójicos, ya que es en estos problemas que pueden encontrarse nuevas conexiones o ideas que enriquecen el quehacer científico. La paradoja de Klein podría (discutiblemente) entrar en esa categoría. Una vez que una teoría física nueva entra en escena, suele transcurrir muy poco tiempo para que los científicos establezcan las limitaciones en que dicha teoría puede ser válida. Entre otras tantas (por no decir todas) ocurrió así con la ecuación de Dirac, que por un lado ampliaba el alcance de la mecánica cuántica para incluir efectos relativistas, y a su vez era problemática en cuanto a la interpretación, pues predecía resultados desconocidos que generaron mucho interés. Un tipo de problemas discutidos muy comunmente en la mecánica cuántica son los problemas de dispersión. La idea es, en esencia, preparar los estados de un conjunto de partículas de una manera específica (determinando así, por ejemplo, un intervalo de valores del ímpetu que estas partículas han de poder tomar), para que estas se muevan con una energía y dirección determinada, y así producir colisiones entre ellas o ver como se comportan bajo la acción de una fuente externa. Ambas situaciones modificarán los estados finales de una forma muy singular, por lo que se pueden concluir ciertas propiedades fundamentales de la interacción entre partículas o bien de la naturaleza misma de la fuente externa. En 1929 Klein planteó un problema de dispersión usando la ecuación de Dirac, el cual consiste en

“lanzar” electrones hacia un potencial electrostático repulsivo, cuya energía superase la energía en reposo de los electrones, tal potencial habría de tener la forma de un escalón, i.e., si el problema se piensa unidimensional, entonces el potencial ha de ser nulo en todo punto desde $-\infty$ y hasta una cierta distancia, a partir de la cual toma un valor constante y nunca se vuelve a anular. Lo que Klein concluyó, es que para un determinado rango de energía de los estados iniciales, ocurría un efecto paradójico, pues el análisis teórico mostraba que los estados finales penetraban el potencial electrostático casi perfectamente (para valores muy grandes del potencial), siendo que dicho potencial es repulsivo para electrones y extendido en una región virtualmente infinita, aquel resultado se le otorgó el nombre de “la paradoja de Klein”.

El planteamiento teórico del problema resulta relativamente sencillo, y a lo largo de muchos años se derralloraron discusiones al respecto introduciendo conceptos de la teoría de agujeros y culminando con una respuesta más satisfactoria dentro del contexto de la electrodinámica cuántica (QED por sus siglas en inglés), sin embargo, la última palabra es siempre de la naturaleza, y para ello habrían de elaborarse experimentos que mostraran evidencia concluyente de cual es el camino más apropiado a seguir. Si bien el planteamiento teórico de la paradoja de Klein no es del todo realista para un modelo experimental, el problema más importante resulta de nuestra limitación tecnológica para producir un potencial con las características necesarias. Lo anterior es cierto en tanto que se realice el experimento en el vacío, sin embargo en 2004 se demostró la existencia estable de una estructura bidimensional de átomos de carbono, el grafeno. La importancia de este descubrimiento (para los objetivos de este trabajo) es que los portadores de carga en dicho material obedecen una ecuación tipo Dirac, y además tienen una masa efectiva nula, por lo que, en teoría, la más mínima diferencia de potencial en el grafeno habría de producir, bajo las condiciones apropiadas, un efecto análogo al de la paradoja de Klein, por supuesto, en el contexto del estado sólido. Esta característica le otorga, al grafeno,

una excelente conductividad eléctrica, y a su vez nos lleva a pensar en el problema de Klein como un problema de confinamiento.

Un potencial electrostático no es particularmente bueno restringiendo la existencia de estados de dispersión fuera de la región en que este actúa, pero podrían existir potenciales de otra naturaleza que si lo hagan, es decir, potenciales que no presenten la paradoja de Klein. Por lo tanto el efecto estudiado hace más de 90 años por Klein puede ser de utilidad como una primera prueba que ha de superar cualquier fenómeno físico que infiera el confinamiento de partículas descritas por una ecuación cuántica relativista o análoga. Dos de estos fenómenos son el modelo quiral de bolsa para el confinamiento de quarks y el de interacción nucleón-nucleón, en los que se esperaría que la paradoja de Klein no sucediera.

Este trabajo tiene como objetivo construir las bases para el estudio de la paradoja de Klein desde una perspectiva sencilla e inmediatamente relacionable con las “aplicaciones modernas” mencionadas en párrafos anteriores, por lo que se ha optado por omitir la descripción más formal y moderna en el contexto de QED, en favor de una versión más ligera en términos de la teoría de agujeros, de manera que siempre se ha de tener en mente las limitaciones de esta descripción. Así pues, el trabajo está organizado de la siguiente manera: El capítulo 1 tiene como objetivo introducir algunos de los conceptos básicos mas relevantes para el estudio teórico de la paradoja de Klein, así como analizar el problema análogo al de Klein en un contexto no relativista usando las ecuaciones de Schrödinger y de Pauli, para ello se opta por un camino singular, que está relacionado con visualizar el problema como uno de confinamiento (en el sentido que se define en ese mismo capítulo). Para el capítulo 2 se presentan esencialmente los mismos problemas que en el capítulo 1, pero ahora usando el formalismo de la matriz de dispersión en una dimensión, lo que otorga especial énfasis a la forma de las soluciones antes y después de la interacción con un potencial determinado. Es importante señalar que estos dos capítulos

podrían ser omitidos por el lector ya familiarizado con los problemas de dispersión en la mecánica cuántica no relativista, sin embargo son de mucha utilidad y autoreferenciados para el desarrollo de los capítulos posteriores. Respecto al capítulo 3, se presenta a grandes rasgos la ecuación de Dirac, poniendo especial cuidado en las diferencias que presenta respecto a la ecuación de Schrödinger (y de Pauli), asimismo se analiza formalmente el problema del que surge la paradoja de Klein, y se discute con detalle las implicaciones físicas de tal paradoja en este contexto. En el capítulo 4 se busca dar una explicación, primero a las soluciones de energía negativa que surgen naturalmente de la ecuación de Dirac, para posteriormente dar una explicación a la paradoja de Klein. Para lo anterior, se recurrirá a la teoría de agujeros y a la reinterpretación de las soluciones de energía negativa mediante el uso de las transformaciones de paridad, conjugación de carga e inversión temporal. Se continuará con una discusión extensa sobre como entender, en este contexto, la paradoja de Klein, con el objetivo de remover la noción de “paradoja” a este fenómeno físico. El capítulo 5 comienza con una breve introducción sobre algunas de las características principales del material conocido como grafeno, el cual, conforme se desarrolla en el capítulo, presenta un medio particularmente útil (y talvez único) para estudiar experimentalmente la paradoja de Klein de una manera razonablemente sencilla. Por lo que se presentan algunos detalles teóricos de los experimentos ya realizados en esta dirección, así como su explicación física. Por último, en el capítulo 6 se discute brevemente la idea de potenciales de confinamiento, en particular se presenta y estudia, en cierta medida, un potencial pseudoescalar, y en como relacionar la física de la paradoja de Klein con la “capacidad” de confinamiento de este potencial.

Capítulo 1

Mecánica cuántica no relativista

La mecánica cuántica es indudablemente una de las teorías físicas más exitosas de los últimos 100 años, las primeras décadas del siglo XX fueron el escenario de su auge, y con ello el de una revolución en el pensamiento científico y filosófico [1-3] que ha moldeado enormemente nuestro mundo moderno. Los fundamentos matemáticos de la teoría [4] resultan fascinantes, aunque impracticables de manera exhaustiva para este trabajo, por lo que este capítulo solo pretende tratar con cierto detalle algunos formalismos de la teoría, así como dar una solución a un problema muy concreto, el del escalón de potencial (electrostático).

Fue en la década entre 1920-1930 que la mecánica cuántica realmente empezó a tomar forma propia, alejándose cada vez más de ciertas nociones de la mecánica clásica, una de las formas que tomó (quizá la más popular hasta la fecha) es la llamada “mecánica ondulatoria”, que esencialmente se puede resumir en la ecuación de Schrödinger [5, pp. 1-2]:

$$\hat{H}\psi(\vec{x}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x}, t). \quad (1-1)$$

Esta es una ecuación diferencial parcial para $\psi(\vec{x}, t)$, a quien se le conoce como la “función de onda”, la cual es una función compleja del tiempo (t) y de todos los grados de libertad de un sistema particular (\vec{x}) que describe toda la información que se puede conocer sobre dicho sistema. La solución puede ser encontrada¹ una vez establecidas las condiciones iniciales y dando la forma explícita del Hamiltoniano (\hat{H}). Como cualquier teoría física, la mecánica cuántica no relativista parte de una serie de principios, conocidos usualmente como postulados de la mecánica cuántica [6, pp. 2-3], uno de ellos establece que la evolución temporal de un sistema físico está dado por la ec. (1-1).

Consideremos ahora la ec. (1-1) en una dimensión, en la representación de coordenadas². Se puede escoger, sin pérdida de generalidad, sobre el eje z , por lo que el problema unidimensional más sencillo a tratar es el de una partícula libre, cuyo Hamiltoniano tiene la forma $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$, con $\hat{p} \rightarrow -i\hbar\partial/\partial z$. Esto es en analogía al formalismo de Hamilton para la mecánica clásica, en el que si el Hamiltoniano no tiene dependencia explícita temporal, entonces este representa la energía total del sistema en cuestión, por lo que el Hamiltoniano $H_0 = p^2/2m$ representa la energía cinética de una partícula libre de masa m .

Este tipo de soluciones (de partícula libre), cuya forma matemática explícita se analizará con más detalle en la siguiente sección de este capítulo, será particularmente útil, sobre todo cuando se defina la matriz de dispersión (la matriz S), puesto que los estados de dispersión pueden ser apropiadamente descritos por dichas funciones para tiempos anteriores y posteriores al proceso de dispersión.

Supóngase que se busca confinar electrones libres en cierta región del espacio, se puede simplificar el problema a una dimensión mediante el arreglo experimental apropiado y considérese que se puede medir la posición de los electrones a cualquier distancia del eje

¹Existe un cierto rango limitado de problemas para los cuales se puede encontrar una solución analítica, y en muchos casos se opta más bien por una solución numérica.

² $\hat{x}_i \rightarrow x_i, \hat{p}_i \rightarrow -i\hbar\partial/\partial x_i$

en cuestión (por ejemplo el eje z), confinar electrones en cierta región del espacio significa entonces, en el contexto de este trabajo, que si los electrones se mueven libremente, por ejemplo desde $-z$ hacia $+z$, entonces existe una distancia z_0 a partir de la cual ya no es posible detectarlos³. Existen muchas sutilezas al respecto, las cuales serán discutidas a lo largo del capítulo, en primera aproximación se optará por un modelo teórico muy simplificado, que permitirá desarrollar las nociones físicas más básicas para el desarrollo de este trabajo.

1.1. Escalón de potencial

Para confinar electrones en cierta región del espacio debe existir algún tipo de interacción entre los electrones y alguna fuente externa, de otra forma los electrones se propagarán libremente en todo el espacio. Ya que no es del interés de este trabajo producir estados ligados, se considerará un potencial electrostático externo repulsivo para los electrones, con lo cual el Hamiltoniano ya no será, para todo el espacio, el de partícula libre, sino que habrá que considerar un término de interacción para la región en la cual actúa el potencial. Dicho término se puede agregar al Hamiltoniano teniendo en cuenta que un potencial electrostático externo se acopla, con un electrón, de la forma $e\phi(z) \equiv V(z)$. Ahora, para simplificar el problema considérese que los electrones libres han de confinarse a la región $z < 0$, entonces el potencial electrostático deberá actuar en una región “semi-infinita” (para todo $z > 0$) del espacio⁴, dicho problema es conocido como el escalón de potencial y será tratado como un problema de dispersión.

Para esto consideraremos que existen electrones propagándose libremente en cierta región del espacio, desde $z = -\infty$ (lo cual es una manera de decir que se encuentran tan

³Sería mas apropiado decir que la probabilidad de detectar electrones a partir de tal distancia es tan pequeña que es despreciable.

⁴Más adelante se discutirá brevemente que es lo que habría sucedido de haberse considerado una barrera de potencial de ancho finito.

lejos que no interactúan con el potencial), hasta que se encuentran con el potencial electrostático, como se muestra en la siguiente figura: Ya que se desea confinar los electrones

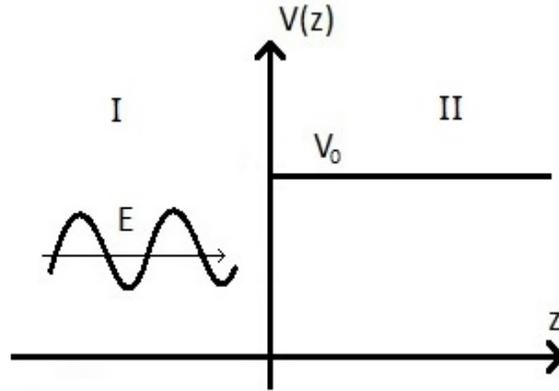


Figura 1-1: Escalón de potencial con $0 < V_0 < 2mc^2$ para un electrón incidente desde $-\infty$ con energía $E > 0$

en la región izquierda al origen $z = 0$, como se muestra en la figura 1-1, el potencial electrostático es tal que:

$$V(z) = \begin{cases} 0 & \text{si } z < 0 \\ V_0 & \text{si } z \geq 0 \end{cases}$$

Este problema es muy conocido y suele ser resuelto a detalle en libros introductorios de mecánica cuántica, de manera que en esencia se busca resolver la ecuación de Schrödinger de la forma:

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

donde m es la masa del electrón y el subíndice n indica la solución para cada región (i.e. $n = \{I, II\}$ según la figura 1-1).

Proponiendo una solución factorizable de la forma $\psi_n(z, t) = Z_n(z)T_n(t)$, se obtiene

el par de ecuaciones:

$$i\hbar \frac{dT_n(t)}{dt} = ET_n(t), \quad (1-3)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 Z_n(z)}{dz^2} + V(z)Z_n(z) = EZ_n(z). \quad (1-4)$$

La solución para la ec. (1-3) es; $T_n(t) = T(t) = Ce^{-\frac{i}{\hbar}Et} = Ce^{-i\omega t}$, con C alguna constante de normalización, y esta ecuación es válida para ambas regiones, por lo que se ha eliminado el subíndice n .

Nos resta ver la forma de la solución para z en cada región, observemos que para la región I, $V(z) = 0$, y haciendo $k^2 = 2mE/\hbar^2$, la solución más general es de la forma:

$$Z_I(z) = A_I e^{ikz} + B_I e^{-ikz}. \quad (1-5)$$

Ahora bien, es necesario interpretar físicamente las soluciones para darles sentido, dada la forma de la función $T(t)$, y de la ec. (1-5) vemos que $e^{-i(\omega t - kz)}$ representa una onda plana viajando de izquierda a derecha, mientras que $e^{-i(\omega t + kz)}$ una onda plana viajando de derecha a izquierda [5, pp. 59-60].

De esta forma, para la región I asociamos al coeficiente $A_I C = \mathcal{I}$ como la amplitud de la onda incidente, de la que tenemos control experimental (y suele ser conveniente normalizar a 1), mientras que el coeficiente $B_I C = \mathcal{R}$ será la amplitud de la onda reflejada.

Por tanto, la solución para la región I queda expresada por la función:

$$\psi_I(z, t) = e^{-i\omega t} (\mathcal{I} e^{ikz} + \mathcal{R} e^{-ikz}). \quad (1-6)$$

En cuanto a la forma de la solución para la región II, de la ec. (1-4) y haciendo

$q^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$ se obtiene la ecuación:

$$-\frac{d^2 Z_{\text{II}}(z)}{dz^2} = q^2 Z_{\text{II}}(z). \quad (1-7)$$

Aquí se pueden observar 2 casos, el primero es si $0 < V_0 < E$ y el otro es $0 < E < V_0$. Para el primer caso, se obtiene que $q^2 > 0$, de manera que la solución es de la forma:

$$Z_{\text{II}}(z) = A_{\text{II}}e^{iqz} + B_{\text{II}}e^{-iqz}. \quad (1-8)$$

De nuevo para darle sentido a las soluciones y usando el análisis que se hizo anteriormente con la forma de las soluciones $T(t)$, dado que $e^{-i(\omega t + qz)}$ representa una onda plana viajando de derecha a izquierda, hacemos $B_{\text{II}}C = 0$ pues no existen ondas incidentes desde $z = +\infty$ en la región II, por otro lado, haciendo e indentificando a $A_{\text{II}}C = \mathcal{T}$ como la amplitud de onda transmitida, entonces la solución para $0 < V_0 < E$ queda descrita por:

$$\psi_{\text{II}}(z, t) = e^{-i\omega t} \mathcal{T} e^{iqz}. \quad (1-9)$$

Para el segundo caso, se tiene que $0 < E < V_0$, por lo cual $q^2 < 0$, de esta forma basta con sustituir $q \rightarrow i|q|$ en la ec. (1-8) para obtener la solución general:

$$Z_{\text{II}}(z) = A_{\text{II}}e^{-|q|z} + B_{\text{II}}e^{|q|z}. \quad (1-10)$$

Observemos ahora que la ec. (1-10) debe ser válida para todo $z \geq 0$, y la función de onda para todo z debe ser cuadráticamente integrable, es evidente entonces que se requiere que $B_{\text{II}} = 0$, con lo cual la función de onda en la región II es:

$$\psi_{\text{II}}(z, t) = e^{-i\omega t} \mathcal{T} e^{-|q|z}. \quad (1-11)$$

1.2. Coeficientes de Transmisión y Reflexión

Como ya se ha señalado se requiere que las soluciones obtenidas, si han de representar el estado de una partícula, sean cuadráticamente integrables, a excepción de la ec. (1-11), las soluciones obtenidas no lo son, de manera que por si mismas no son funciones de onda aceptables. Existen por lo menos 2 maneras de evitar tal dificultad, una de ellas es si se trabaja con la corriente de probabilidad (la segunda se discutirá en la siguiente sección), la cual está definida por la ecuación:

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*). \quad (1-12)$$

Consideremos ondas planas de la forma $\psi^\pm(z) = Ae^{\pm ikz}$, usando dichas funciones en la ec. (1-12), se obtiene que $J^\pm = \pm|A|^2\hbar k/m$, la cual representa un flujo de partículas viajando en la dirección $\pm z$ respectivamente, para $k > 0$ y de masa m .

Ahora, dado que la ecuación de Schrödinger cumple una ecuación de continuidad⁵, usando las ecs. (1-6) y (1-9) para calcular la corriente de probabilidad (ec. (1-12)), se puede notar que dicha corriente es independiente de la posición, lo cual implica que la corriente debe ser la misma para todo z . Dicho de otra forma, la corriente en la región I es la misma que la corriente en la región II, lo cual queda expresado por la ecuación:

$$J_{\mathcal{I}} + J_{\mathcal{R}} = \frac{\hbar k}{m}(|\mathcal{I}|^2 - |\mathcal{R}|^2) = \frac{\hbar q}{m}|\mathcal{T}|^2 = J_{\mathcal{T}}. \quad (1-13)$$

Observemos que $J_{\mathcal{R}} < 0$, mientras que $J_{\mathcal{I}}, J_{\mathcal{T}} > 0$, por lo que la primera representa un flujo hacia $-z$, mientras que las dos segundas un flujo hacia $+z$. Se puede entonces re-arreglar los términos de la ec. (1-13) como $J_{\mathcal{I}} = -J_{\mathcal{R}} + J_{\mathcal{T}}$, lo cual, en términos de la dirección en la que viajan, nos dice que la corriente de probabilidad de partículas refle-

⁵ $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0$, con $\rho = \psi\psi^*$, véase por ejemplo [9, pp. 35]

jadas más la corriente de probabilidad de partículas transmitidas, debe ser exactamente igual a la corriente de probabilidad de partículas incidentes.

Usando las condiciones de continuidad de la función de onda y su derivada. Para el primer caso $0 < V_0 < E$, del par de ecs. (1-6) y (1-9):

$$\begin{aligned}\psi_{\text{I}}(z = 0) = \mathcal{I} + \mathcal{R} &= \mathcal{T} = \psi_{\text{II}}(z = 0), \\ \psi_{\text{I}}'(z = 0) = ik(\mathcal{I} - \mathcal{R}) &= iq\mathcal{T} = \psi_{\text{II}}'(z = 0).\end{aligned}\tag{1-14}$$

A partir de lo cual se obtiene:

$$\mathcal{R} = \mathcal{I} \left(\frac{k - q}{k + q} \right),\tag{1-15}$$

$$\mathcal{T} = \mathcal{I} \left(\frac{2k}{k + q} \right).\tag{1-16}$$

Por último, usando las ecs. (1-13), (1-15) y (1-16), definamos los coeficientes; $r \equiv |J_{\mathcal{R}}/J_{\mathcal{I}}|$ (de reflexión) y $t \equiv |J_{\mathcal{T}}/J_{\mathcal{I}}|$ (de transmisión), que por lo tanto indican la fracción de la onda reflejada y transmitida respectivamente, dando así la interpretación física de las soluciones encontradas aún cuando estas no son propiamente cuadráticamente integrables.

Notemos que; $r \leq 1$, $t \leq 1$ y $r + t = 1$, esta última es una manera de reescribir la ec. (1-13), mientras que las desigualdades nos dicen que no podemos tener más partículas reflejadas o transmitidas que aquellas que estamos haciendo incidir desde $z = -\infty$.

Ahora bien, veamos que cuando $E \gg V_0$ entonces $q \simeq k$, con lo que, de las ecs. (1-15) y (1-16) se tiene que $r \simeq 0$ y $t \simeq 1$, es decir, no hay reflexión, la transmisión es total, la partícula prácticamente no se percata de que existe el potencial electrostático siempre que su energía cinética sea mucho mayor que la del potencial.

Claramente este caso resulta sin sentido si lo que se busca es confinar partículas en cierta región, ya que se podría decir, en términos más “clásicos”, que las partículas tienen más energía de la que puede contener el potencial.

Respecto al segundo caso, en donde $0 < E < V_0$, aquí basta con que nuevamente se realice la sustitución $q \rightarrow i|q|$ en las ecs. (1-15) y (1-16), de lo que se obtiene:

$$\mathcal{R} = \mathcal{I} \left(\frac{k - i|q|}{k + i|q|} \right), \quad (1-17)$$

$$\mathcal{T} = \mathcal{I} \left(\frac{2k}{k + i|q|} \right). \quad (1-18)$$

En este caso observemos que se satisface $r = 1$, lo cual se puede verificar si se calcula la corriente de probabilidad, pues la corriente en la región II es 0 (¡siempre que la parte espacial de las funciones de onda sea real, la corriente de probabilidad será 0!), y por tanto:

$$J_{\mathcal{I}} = \frac{\hbar k}{m} |\mathcal{I}|^2 = \frac{\hbar k}{m} |\mathcal{R}|^2 = -J_{\mathcal{R}}. \quad (1-19)$$

Es decir, ahora la reflexión es total, sin embargo el coeficiente \mathcal{T} no es 0 (pero $J_{\mathcal{T}} = 0$), y resultaría bastante relevante para una barrera finita. Es esta la razón por la que desde un inicio se consideró un escalón de potencial y no una barrera, ya que esta última da lugar al bien conocido efecto tunel [5, pp. 76], un efecto que contrasta enormemente con lo que se esperaría de la mecánica clásica.

Por otro lado, la elección del escalón potencial electrostático repulsivo puede parecer aceptable para confinar electrones hasta el momento, pero el hecho de que el coeficiente \mathcal{T} no sea exactamente 0 ¿implica que existe una probabilidad distinta de 0 de encontrar a la partícula en la región II, por lo menos hasta una distancia $z \gg 1/|q|$ a partir de la cual sea prácticamente despreciable?. Para analizar tal situación, es necesario considerar una aproximación más “realista” a lo que experimentalmente se puede realizar, y para

ello habrá que considerar con mas cuidado la producción de los electrones así como la del campo eléctrico.

1.3. Paquetes de onda y desfaseamiento

Considérese la ec. (1-17), ya que el coeficiente \mathcal{R} es proporcional al cociente de 2 números que son complejos conjugados uno del otro, la ecuación puede ser reescrita y simplificada usando la forma polar de tales números complejos, de lo que se obtiene:

$$\mathcal{R} = -\mathcal{I} \frac{|q| + ik}{|q| - ik} = -\mathcal{I} e^{i2\delta}; \quad (1-20)$$

$$\delta = \arctan \left(\frac{k}{|q|} \right) = \arctan \sqrt{\frac{E}{V_0 - E}}.$$

Y por tanto la ec. (1-6) puede ser reescrita como; $\psi_I(z, t) = e^{-i\omega t} \mathcal{I} (e^{ikz} - e^{i2\delta} e^{-ikz})$.

Ahora, como se comentó en la sección anterior, existe el problema de que la solución en la región I no es cuadráticamente integrable, una onda plana por si misma no es normalizable en todo el espacio, pero se puede construir un paquete de onda, superponiendo ondas planas, que si lo sea. Esta descripción tiene la ventaja de que representa con mayor precisión lo que sucede físicamente, pues ninguna manera de preparar el estado inicial puede crear un eigenestado exacto del ímpetu. Para generar nuestro paquete de ondas a partir de las soluciones de la región I es necesario considerar una función que represente la distribución de los valores del ímpetu de las partículas en el paquete de onda, a dicha distribución la llamaremos $\phi(k)$, la cual es tal que es prácticamente nula en todo punto, excepto en una vecindad de algún punto k_0 (ver figura 1-2), cuyo valor representa la energía con que buscamos hacer incidir las partículas según la relación de dispersión obtenida en la sección 1.1.

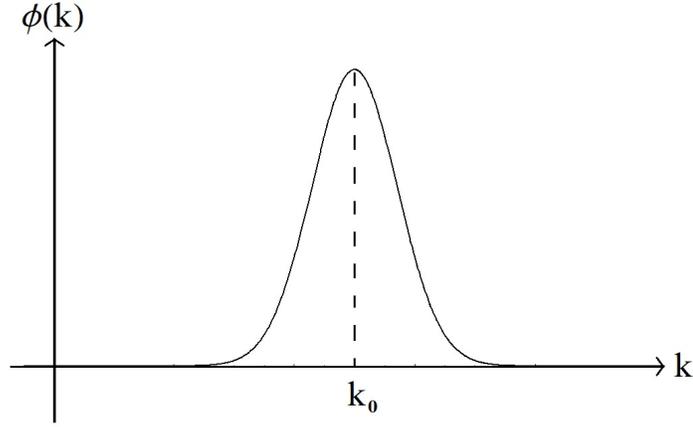


Figura 1-2: Distribución del ímpetu de las partículas en el paquete de ondas.

Así pues, resulta más práctico construir los paquetes individualmente, es decir uno que represente el paquete incidente y otro el reflejado, los cuales se obtienen de la superposición de las eigenfunciones de la energía, cuya amplitud en el espacio k está dada por la distribución $\phi(k)$ y descrita por las ecuaciones:

$$\psi_{\mathcal{I}}(z < 0, t) = \int dk \phi(k) \mathcal{I} e^{i(kz - \omega t)}, \quad (1-21)$$

$$\psi_{\mathcal{R}}(z < 0, t) = - \int dk \phi(k) \mathcal{I} e^{i(-kz - \omega t - 2i\delta)}. \quad (1-22)$$

La dinámica de tales paquetes puede entenderse de manera simplificada mediante la aproximación de fase estacionaria, el argumento (sin rigurosidad matemática) es el siguiente. Observemos que si nuestra distribución de ímpetus es parecida a la mostrada en la figura 1-2, básicamente las únicas contribuciones a las integrales de las ecs. (1-21) y (1-22) debe estar en una vecindad del punto k_0 , dado que las funciones de onda plana son funciones oscilantes, podría suceder que las contribuciones se anulen totalmente, para que esto no suceda ha de cumplirse que el argumento de dichas funciones no varíe rápidamente alrededor del punto k_0 , dicho de otra forma, sea $\varphi(k) = kz - \omega(k)t$, la fase

de la onda, entonces la contribución total del paquete no es nula siempre se cumpla que:

$$\left. \frac{d\varphi(k)}{dk} \right|_{k_0} = z - \left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k_0} t = 0. \quad (1-23)$$

Usando las ecs. (1-21) y (1-23), entonces:

$$z = \frac{\hbar k_0}{m} t. \quad (1-24)$$

Dicha ecuación es válida para $t < 0$ según la ec. (1-21), mientras que para $t > 0$ no satisface la aproximación de fase estacionaria, con lo que la contribución es básicamente nula. Para $t \rightarrow 0^-$, el paquete se desplaza hasta alcanzar el potencial en $z = 0$ en donde ocurre el proceso de dispersión.

Por otro lado, de las ecs. (1-22) y (1-23):

$$z = -\frac{\hbar k_0}{m} (t - 2\hbar\delta'(E)). \quad (1-25)$$

Por lo que la ecuación es válida solo cuando $t > 2\hbar\delta'(E)$, es decir, el paquete de ondas incidente alcanza la barrera para $t = 0$, sin embargo no comenzará a moverse hacia $-z$ sino hasta que t supere el valor $2\hbar\delta'(E)$. Existe entonces un “retraso” en el paquete de ondas reflejado, o dicho de otra forma, un desfaseamiento, que para un proceso de dispersión es de gran ayuda para determinar (si se desconoce) el tipo de potencial involucrado.

Por último, observemos que las ecs. (1-19), (1-24) y (1-25) comparten el factor $\hbar k/m$, dicha cantidad definida en la ec. (1-23) es la llamada “velocidad de grupo”, y relaciona directamente el modelo simple de onda plana con el modelo más “realista” de paquetes de onda. El resto de los resultados físicos reelevantes para este trabajo son esencialmente iguales en ambos casos, pero resultan más simples de tratar en el primer modelo.

Si lo que se busca es tomar un modelo más aproximado a la realidad, existe aún el detalle del escalón de potencial electrostático, producir un campo eléctrico con tal discontinuidad es técnicamente irrealizable⁶, el campo eléctrico ha de crecer de manera suave hasta el valor deseado. Supóngase que el potencial eléctrico alcanza el valor deseado hasta una distancia d , como se muestra en la figura 1-3. De manera que un paquete de ondas con energía alrededor de algún valor $0 < E < V_0$ puede localizarse en la región $z > 0$, y con ello, la idea de confinar electrones mediante un potencial electrostático escalón, se ha perdido. ¿Cómo podemos asegurarnos que esto no suceda?, para que el paquete y por tanto los electrones puedan ser localizados con certeza en la zona $z > 0$, dicho paquete ha de localizarse, como mínimo, con tanta precisión como una longitud de onda de Compton del electrón ($\lambda_c = h/mc$) en la zona $z > 0$, esto quiere decir que si se logra producir un campo eléctrico con el valor apropiado en una distancia $d \sim \lambda_c$, entonces los paquetes de onda “no tendrían el suficiente espacio” para concluir que los electrones se encuentran más allá de la zona $z > 0$. Pero para que esto suceda, el campo eléctrico ha de crecer muy abruptamente en una distancia muy corta y con ello creamos otro problema, pues cuando esto sucede, el potencial electrostático debe crecer más allá del valor $2mc^2$, por lo que es necesario tener en cuenta los efectos no solo cuánticos sino también relativistas del problema.

⁶Tampoco es realista pensar que el potencial existe en una región “semi-infinita” del espacio, pero esto se puede aproximar considerando que existe en una región lo suficientemente grande, de manera que el tunelaje sea despreciable.

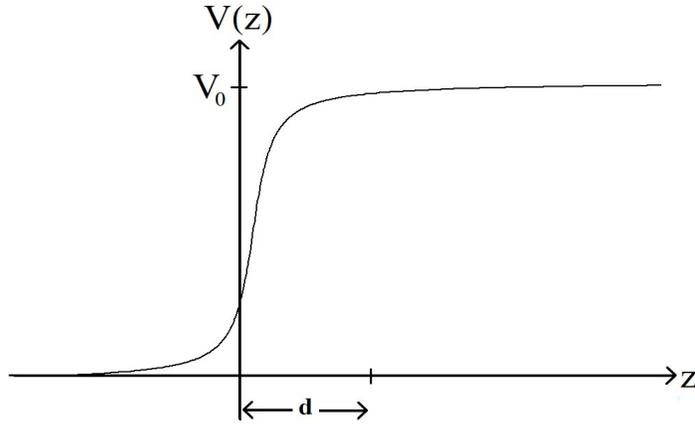


Figura 1-3: Representación gráfica más aproximada a la realidad de como se vería un escalón de potencial electrostático en el laboratorio.

1.4. Ecuación de Pauli

La ecuación de Pauli será de gran importancia antes de abordar el problema relativista, pues resulta que existe una correspondencia entre esta ecuación y la de Dirac en el límite no relativista, además, es una generalización de la ecuación de Schrödinger, pues agrega la observable de espín del electrón, que el formalismo de Schrödinger ignora parcialmente y solo puede ser introducido, en este contexto, como una hipótesis *ad hoc* para dar origen al formalismo de Pauli [7, pp. 168-172].

Para representar este grado de libertad adicional, se suele usar la notación de un espinor de dos componentes introducida por W. Pauli (1926), el cual puede ser expresado como:

$$\uparrow \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1-26)$$

$$\downarrow \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1-27)$$

Las ecs. (1-26) y (1-27) representan la componente con “espín arriba” y “espín abajo” respectivamente, en alguna dirección dada. Otro detalle muy importante para completar el formalismo y que además será absolutamente necesario de aquí en adelante, sobre todo para la ecuación de Dirac, son las matrices de Pauli, las cuales serán definidas de la siguiente forma:

$$\sigma_x \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1-28)$$

Se puede entonces escribir la ecuación de Pauli, para un electrón en interacción con un campo electromagnético externo de la siguiente forma:

$$\left[\frac{1}{2m} (\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - e\vec{A}))^2 + e\phi \right] \begin{pmatrix} \psi^+ \\ \psi^- \end{pmatrix} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi^+ \\ \psi^- \end{pmatrix}, \quad (1-29)$$

donde \vec{A} y ϕ representan al potencial vectorial y escalar respectivamente.

Por supuesto que para resolver un problema particular usando la ecuación de Pauli, en principio se debe indicar la forma explícita de los potenciales, dar las condiciones iniciales y encontrar las 2 componentes del espinor siguiendo los mismos pasos que para la ec. de Schrödinger, es decir, de cierta forma podría pensarse como resolver 2 ecs. de Schrödinger (una por componente espinorial), que en el caso más general podrían estar acopladas.

Es importante notar que en el caso de que el electrón no interactúe con un potencial

externo, se obtiene nuevamente una solución de partícula libre, cuyo Hamiltoniano es, en esencia, el mismo que el de partícula libre en Schrödinger, puesto que es fácil probar que $(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2 = \vec{p}^2$. Dado el análisis realizado en las secciones anteriores de este capítulo, resulta notable el hecho de que las soluciones de onda plana, bajo la interpretación adecuada, resultan más sencillas de trabajar y conducen a resultados físicos apropiados. En el capítulo 2 se discutirá más al respecto, por ahora y en el resto de este capítulo, se trabajará mediante esta simple aproximación.

Teniendo en mente las “nuevas reglas” de este formalismo, se procederá a calcular explícitamente la forma de las soluciones para el mismo problema del escalón de potencial electrostático. La incógnita que se desea entonces resolver en lo que resta del capítulo, es si el espín puede modificar el resultado obtenido en el caso de la ec. de Schrödinger.

1.5. Escalón de potencial para una partícula con espín

Considérese la misma situación de la figura 1-1 con la misma forma del potencial $V(z)$, y en este caso, como agregado necesario a la ecuación de Pauli, se tomará el espín hacia arriba en la dirección $+z$ para la partícula incidente, de tal forma que la ecuación de Pauli para el problema tiene la forma:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right] \begin{pmatrix} \psi_n^+(z, t) \\ \psi_n^-(z, t) \end{pmatrix} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_n^+(z, t) \\ \psi_n^-(z, t) \end{pmatrix}. \quad (1-30)$$

Análogamente que en la ecuación de Schrödinger, se divide el problema en 2 regiones como se observa en la figura 1-1, por lo cual $n = \{I, II\}$. Realmente las ecuaciones guardan gran similitud, por lo que el análisis del problema resultará parecido al de la ecuación de Schrödinger.

Se propondrá nuevamente una solución factorizable como $\psi_n^\pm(z, t) = T_n^\pm(t)Z_n^\pm(z)$,

por lo que se puede separar la ec. (1-30) en un par de ecuaciones con las variables independientes z y t , de manera que se obtienen un par de ecs. parecidas a (1-3) y (1-4), las cuales son:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} T_n^+(t) \\ T_n^-(t) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} T_n^+(t) \\ T_n^-(t) \end{pmatrix}, \quad (1-31)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} \begin{pmatrix} Z_n^+(z) \\ Z_n^-(z) \end{pmatrix} + V(z) \begin{pmatrix} Z_n^+(z) \\ Z_n^-(z) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} Z_n^+(z) \\ Z_n^-(z) \end{pmatrix}. \quad (1-32)$$

La solución de la ec.(1-31) está dada por $T_n^\pm(t) = T^\pm(t) = C^\pm e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = C^\pm e^{-i\omega t}$, que es válida para ambas regiones, con C^\pm ctes.

Para resolver la ec. (1-32)), nuevamente se separa el problema en dos regiones. La solución en la región I es la de partícula libre, haciendo $k^2 = 2mE/\hbar^2$ se obtiene:

$$Z_I(z) = \begin{pmatrix} A_I^+ \\ 0 \end{pmatrix} e^{ikz} + \begin{pmatrix} B_I^+ \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ikz} + \begin{pmatrix} 0 \\ A_I^- \end{pmatrix} e^{ikz} + \begin{pmatrix} 0 \\ B_I^- \end{pmatrix} e^{-ikz}. \quad (1-33)$$

Para entender la física de las soluciones, basta con recordar lo realizado en secciones anteriores. Usando así la forma de las funciones $T^\pm(t)$ y la ec. (1-33), se interpreta el primer término de la suma, salvo constantes, como una partícula de espín arriba en la dirección $+z$ viajando de izquierda a derecha, el segundo término es análogo, excepto que viaja de derecha a izquierda, el tercer término representa una partícula de espín abajo en la dirección $+z$ que viaja de izquierda a derecha, y el último término, análogo que el tercero, excepto que viaja de derecha a izquierda.

Por la interpretación física antes mencionada, es claro que, por lo menos el tercer término no puede existir, ya que de las condiciones iniciales, se impusieron partículas incidentes de espín arriba en la dirección $+z$, con lo cual $A_I^- = 0$. En cuanto al último término, en la siguiente sección se probará que si se mantiene distinto de cero, al imponer

las condiciones de frontera para la ecuación de Pauli, se llega a una contradicción. Por lo cual, de momento se conservará este término.

Por último, asociemos $\mathcal{I}^+ = C^+ A_1^+$, que representará a la amplitud de la onda incidente con espín arriba, mientras que $\mathcal{R}^+ = C^+ B_1^+$ a la amplitud de la onda reflejada con espín arriba, y $\mathcal{R}^- = C^- B_1^-$ la amplitud de la onda reflejada con espín abajo, con lo que el espinor de la región I toma la forma:

$$\psi_I(z, t) = e^{-i\omega t} (\mathcal{I}^+ e^{ikz} + \mathcal{R}^+ e^{-ikz}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + e^{-i\omega t} \mathcal{R}^- e^{-ikz} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1-34)$$

Antes de continuar, observemos que esta última ecuación tiene exactamente la misma forma que la ec. (1-6), excepto por el último término y por tanto, sería razonable pensar que las soluciones sean análogas a las encontradas en las ecs. (1-9) y (1-11), excepto por algún término adicional con espín abajo, lo cual podría, al calcular los coeficientes de transmisión y reflexión, llevar a un resultado distinto, de manera que la elección de un potencial electrostático, para confinar electrones en una región espacial, podría verse nuevamente en problemas.

Lo siguiente es analizar la situación en la región II, para la cual se hará $q^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$, además, como primer caso, se tomará aquel con $E > V_0$, con lo cual $q^2 > 0$, y la ec. (1-32) se puede resolver para obtener la solución general:

$$Z_{II}(z) = \begin{pmatrix} A_{II}^+ \\ 0 \end{pmatrix} e^{iqz} + \begin{pmatrix} B_{II}^+ \\ 0 \end{pmatrix} e^{-iqz} + \begin{pmatrix} 0 \\ A_{II}^- \end{pmatrix} e^{iqz} + \begin{pmatrix} 0 \\ B_{II}^- \end{pmatrix} e^{-iqz}. \quad (1-35)$$

Cuyos términos se pueden interpretar inmediatamente, y dadas las condiciones impuestas al problema, por lo que es evidente que tanto $B_{II}^- = 0$, como $B_{II}^+ = 0$, ya que no existen partículas incidentes desde $z = +\infty$. Por último, asociando $\mathcal{T}^+ = C^+ A_{II}^+$ como la

amplitud de la onda transmitida con espín arriba y $\mathcal{T}^- = C^- A_{\text{II}}^-$ la amplitud de la onda transmitida con espín abajo, se obtiene la solución:

$$\psi_{\text{II}}(z, t) = e^{-i\omega t} \left[\mathcal{T}^+ e^{iqz} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \mathcal{T}^- e^{iqz} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right]. \quad (1-36)$$

Para analizar el segundo caso, donde $0 < E < V_0$ y $q^2 < 0$, basta con hacer la sustitución $q \rightarrow i|q|$ en la ec. (1-35), donde nuevamente $B_{\text{II}}^- = B_{\text{II}}^+ = 0$, pues de otra forma la solución diverge en $z \rightarrow +\infty$ y dicha solución no es físicamente aceptable. En consecuencia, la solución para el segundo caso toma la forma:

$$\psi_{\text{II}}(z, t) = e^{-i\omega t} \left[\mathcal{T}^+ e^{-|q|z} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \mathcal{T}^- e^{-|q|z} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right]. \quad (1-37)$$

1.6. Transmisión y reflexión para una partícula con espín

Al igual que en la ec. de Schrödinger, una vez encontrada la forma explícita de los espinores, es necesario dar una interpretación física adecuada a las amplitudes asociadas. Esto se hace imponiendo las condiciones de frontera del problema a los espinores y su primer derivada, por lo cual, respecto al caso en que $V_0 < E$ se tiene, de (1-34) y (1-36):

$$\begin{aligned} \psi_{\text{I}}|_{z=0} &= (\mathcal{I}^+ + \mathcal{R}^+) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \mathcal{R}^- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \mathcal{T}^+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \mathcal{T}^- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \psi_{\text{II}}|_{z=0}, \quad (1-38) \\ \psi_{\text{I}}'|_{z=0} &= ik \left[(\mathcal{I}^+ - \mathcal{R}^+) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \mathcal{R}^- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] = iq \left[\mathcal{T}^+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \mathcal{T}^- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] = \psi_{\text{II}}'|_{z=0}. \end{aligned}$$

Con este par de ecuaciones, se puede observar que en una dimensión y bajo la acción de un potencial electrostático, para una partícula incidente con espín bien definido, las componentes del espinor no están acopladas, y por tanto del par de ecs. (1-38) se obtiene que:

$$\mathcal{I}^+ + \mathcal{R}^+ = \mathcal{T}^+, \quad (1-39)$$

$$ik(\mathcal{I}^+ - \mathcal{R}^+) = iq\mathcal{T}^+,$$

$$\mathcal{R}^- = \mathcal{T}^-, \quad (1-40)$$

$$-ik\mathcal{R}^- = iq\mathcal{T}^-.$$

Lo anterior quiere decir que la solución del par de ecs. (1-39) y (1-40) son independientes, además observa que de (1-40) obtenemos que si $\mathcal{R}^- = \mathcal{T}^- \neq 0$ entonces $-k = q$, lo cual es claramente una contracción, y por tanto $\mathcal{R}^- = \mathcal{T}^- = 0$.

¿Por qué no hay cambio de espín?, la respuesta matemática se puede hallar en la forma matricial del Hamiltoniano con potencial electrostático escalón, el cual únicamente consta de elementos no nulos en la diagonal, según la ec. (1-30), pues de esta forma los espinores no intercambian elementos y por tanto no acoplan las ecuaciones diferenciales. La respuesta física será discutida en la sección 2.3.

Lo anterior sugiere que, si se construye un Hamiltoniano con elementos no nulos fuera de la diagonal, se podrían acoplar las ecuaciones diferenciales, lo cual, al imponer las condiciones de continuidad, se obtendrían amplitudes de onda no nulas para espinores con término de espín opuesto al incidente.

Una elección (quizá la mas sencilla), es considerar la interacción con un campo magnético uniforme externo, pues dicha interacción agrega un término proporcional a $\vec{\sigma} \cdot \vec{B}$, y de la ec. (1-28), si el campo magnético apunta en cualesquiera de las direcciones x o y , se obtiene un Hamiltoniano con elementos no nulos fuera de la diagonal, y por

tanto acopla las componentes del espinor. Si bien no es el propósito de este trabajo resolver dicho problema, esta idea resultará útil en la sección 3.3, por lo que se ha incluido un bosquejo para complementar la discusión posterior.

Regresando al par de ecs. (1-39), observa que estas son exactamente iguales a las ecs. (1-14) obtenidas para Schrödinger, cuya solución es:

$$\mathcal{R}^+ = \mathcal{I}^+ \left(\frac{k - q}{k + q} \right), \quad (1-41)$$

$$\mathcal{T}^+ = \mathcal{I}^+ \left(\frac{2k}{k + q} \right). \quad (1-42)$$

El análisis de los coeficientes de transmisión y reflexión es por tanto exactamente análogo que el discutido para sus contrapartes en la ecuación de Schrödinger, por supuesto que existe una diferencia física significativa por la cual merecía la pena realizar este cálculo, y es que nos da una pista de qué podríamos esperar cuando se analice la situación en la ecuación de Dirac, pues como se ha visto, en principio un potencial electrostático no modifica la dirección de espín al dispersar una partícula en el caso no relativista.

Capítulo 2

Matriz de Dispersión

La matriz de dispersión o matriz S (S por Scattering) fue ideada inicialmente por Wheeler [8] e independientemente por Heisenberg [2, pp. 198-199], ya que el tratamiento ha sido hasta ahora meramente unidimensional, considérese la siguiente figura:

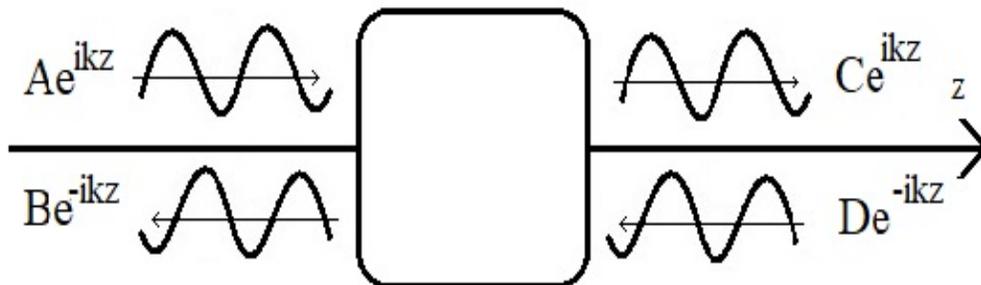


Figura 2-1: Esquema de un potencial arbitrario en una región del espacio con 2 partículas entrantes y 2 salientes

En la figura 2-1 se representan 4 ondas planas y una región del espacio en donde existe un potencial arbitrario, para el caso unidimensional existen 2 direcciones posibles, se definirán como “entrantes” aquellas con dirección de propagación hacia el potencial, mientras que “salientes” se definirán a aquellas con dirección de propagación opuesta al potencial. Es muy importante señalar que todas estas ondas son soluciones de partícula

libre, que en el caso unidimensional son ondas planas, las cuales suelen ser llamadas como “estados de dispersión”, con los que se podrían construir paquetes de onda para una aproximación más realista. Por tanto, se está pensando en el problema de la dispersión en 3 fases:

- Consideramos una partícula en un estado inicial al tiempo $t \rightarrow -\infty$ correspondiente a una partícula en $z \rightarrow -\infty$, con lo cual se quiere decir que no existe interacción entre esta y el potencial, es decir, es una partícula libre.
- La partícula evoluciona de acuerdo a la ec. de Schrödinger (1-1), en este punto se encuentra con el potencial, por el cual es dispersada.
- Una vez que la partícula fue dispersada, el estado evoluciona a un tiempo $t \rightarrow \infty$ que corresponde a una partícula en $z \rightarrow \infty$, con lo que nuevamente se quiere decir que la interacción con el potencial es básicamente nula y la partícula se encuentra en un estado final libre.

Resulta bastante conveniente trabajar los problemas físicos de esta forma, pues experimentalmente la función de onda en la región del potencial nos es usualmente inaccesible, por esta razón la información experimental que se puede obtener es aquella que tiene que ver con los estados iniciales y finales. Considérese el operador que nos lleva del estado inicial $\psi(t_0)$ al estado final $\psi(t)$, con $t_0 < t$, este es el operador de evolución temporal dado por la ecuación:

$$\hat{U}(t, t_0)\psi(t_0) = \psi(t). \quad (2-1)$$

Se puede entonces re-escribir la ec. (1-1) usando la ec. (2-1) como:

$$\hat{H}\hat{U}(t, t_0)\psi(t_0) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t, t_0)\psi(t_0) \quad (2-2)$$

A partir de lo cual se obtiene que:

$$\begin{aligned} \hat{H}\hat{U}(t, t_0) &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t, t_0), \\ \text{si } \frac{\partial\hat{H}}{\partial t} = 0 &\implies \hat{U} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}. \end{aligned} \quad (2-3)$$

Por último, usando la ec. (2-3), se definirá la matriz S por:

$$S \equiv \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \lim_{t \rightarrow \infty} \hat{U}(t, t_0). \quad (2-4)$$

Ahora, para trabajar la matriz S de una manera más práctica, considérese la figura 2-1, y de la discusión anterior, se definirá que las ondas con coeficientes A y D son entrantes, en tanto que aquellas con coeficientes B y C son salientes. Se puede entonces desarrollar las amplitudes de onda salientes como una combinación lineal de las amplitudes de onda entrantes, los coeficientes de dicha combinación lineal serán los elementos de una matriz y así cada elemento de ella representará una amplitud de dispersión entre dos estados (inicial y final). Se puede expresar lo anterior mediante la ecuación:

$$\begin{pmatrix} C \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{21} & s_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}. \quad (2-5)$$

Otra propiedad muy importante de la matriz S y que es una consecuencia de la conservación de la corriente de probabilidad, es que la matriz debe ser unitaria.

El problema ahora radica en encontrar la forma explícita de los elementos de dicha matriz, ya que por supuesto a cada problema físico distinto le corresponderán distintos elementos. Para entender más a detalle como se trabajará con la matriz de dispersión, se considerará un caso particular, que en cierto límite y bajo ciertas condiciones físicas, podrá ser fácilmente modificado para que sea más inmediata la física del problema del

escalón de potencial en este formalismo de la matriz de dispersión. Para ello considérese una barrera de potencial electrostático, como se muestra en la siguiente figura:

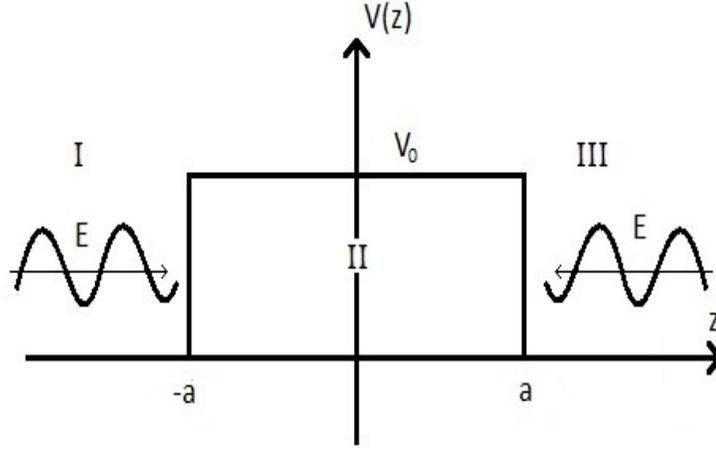


Figura 2-2: Esquema para una barrera de potencial electrostático V_0 de ancho $2a$, centrada en el origen y con dos partículas incidentes desde $-\infty$ y $+\infty$.

En la figura 2-2 se ha dividido la región en 3 partes, I y III son regiones libres de potencial, mientras que II es la región en que actúa el potencial electrostático. Existen además dos partículas incidentes desde direcciones opuestas con la misma energía incidente (menor que la del potencial V_0).

De la solución al problema de una barrera de potencial para una partícula incidente se puede entender que, si se consideran 2 ondas entrantes en direcciones opuestas, se tendrán 2 ondas salientes en direcciones opuestas, por lo cual se puede generalizar una solución simple para el caso en cuestión, usando las siguientes consideraciones; sea \mathcal{I}_1 la amplitud de onda entrante desde $-\infty$ e \mathcal{I}_2 la amplitud de onda entrante desde $+\infty$, entonces:

$$\psi_i^1(z) = \mathcal{I}_1 e^{ikz} \theta(-(z+a)), \quad (2-6)$$

$$\psi_i^2(z) = \mathcal{I}_2 e^{-ikz} \theta(z-a). \quad (2-7)$$

En donde las ecs. (2-6) y (2-7) indican la onda entrante desde $-\infty$ y desde $+\infty$ respectivamente, mientras que θ es la función escalón de Heaviside, que es tal que:

$$\theta(z' - z) = \begin{cases} 1 & \text{si } z' > z \\ 0 & \text{si } z' < z \end{cases}$$

De igual manera, llamemos \mathcal{R}_1 y \mathcal{R}_2 a las amplitudes de onda reflejadas respecto a la onda entrante 1 y 2, así como \mathcal{T}_1 y \mathcal{T}_2 las amplitudes de onda transmitidas respecto a la onda 1 y 2. Con lo cual podemos escribir:

$$\psi_o^1(z) = (\mathcal{R}_1 + \mathcal{T}_2)e^{-ikz}\theta(-(z + a)), \quad (2-8)$$

$$\psi_o^2(z) = (\mathcal{T}_1 + \mathcal{R}_2)e^{ikz}\theta(z - a). \quad (2-9)$$

En este caso las ecs. (2-8) y (2-9) representan una onda saliente hacia $-\infty$ y $+\infty$ respectivamente. Haciendo entonces $\mathcal{T}_1 + \mathcal{R}_2 = C$ y $\mathcal{R}_1 + \mathcal{T}_2 = B$, usando la ec. (2-5) se puede escribir ahora:

$$\begin{pmatrix} C \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{21} & s_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{I}_1 \\ \mathcal{I}_2 \end{pmatrix}. \quad (2-10)$$

Cuya solución y usando la forma de los coeficientes dadas en [9, pp. 71], se obtiene que:

$$s_{11} = \frac{\mathcal{T}_1}{\mathcal{I}_1} = e^{-2iqa} \frac{2kq}{2kq\cosh(2qa) - i(k^2 - q^2)\sinh(2qa)}, \quad (2-11)$$

$$s_{21} = \frac{\mathcal{R}_1}{\mathcal{I}_1} = e^{-2iqa} \frac{\sinh(2qa)(k^2 + q^2)}{(k^2 - q^2)\sinh(2qa) + 2ikq\cosh(2qa)}, \quad (2-12)$$

$$s_{12} = \frac{\mathcal{R}_2}{\mathcal{I}_2} = e^{-2iqa} \frac{\sinh(2qa)(k^2 + q^2)}{(k^2 - q^2)\sinh(2qa) + 2ikq\cosh(2qa)}, \quad (2-13)$$

$$s_{22} = \frac{\mathcal{T}_2}{\mathcal{I}_2} = e^{-2iqa} \frac{2kq}{2kq \cosh(2qa) - i(k^2 - q^2) \sinh(2qa)}. \quad (2-14)$$

Soluciones que por supuesto cumplen con la unitariedad de la matriz S , pues usando las ecs. (2-11)-(2-14), y definiendo:

$$S^\dagger \equiv \begin{pmatrix} s_{11}^* & s_{21}^* \\ s_{12}^* & s_{22}^* \end{pmatrix} \Rightarrow SS^\dagger = \mathbb{1}. \quad (2-15)$$

2.1. Matriz de dispersión para un escalón de potencial

Una vez resuelto un caso, de alguna forma más general que el del potencial electrostático escalón, se puede entender más fácilmente el por qué y cómo de los coeficientes de la matriz S en el problema del escalón de potencial.

Para empezar, se usarán las soluciones encontradas en la sección 1.1, y es importante señalar que se trabajará con el caso en que $0 < E < V_0$, pues es la región que nos interesa. Por lo tanto, la solución en la región en que actúa el potencial está dada por la ec. (1-11), la cual representa una función decreciente, al contrario de una función oscilante característica de los estados de dispersión según han sido definidos, esto implica que existe una única onda saliente, que junto a la onda entrante están expresadas en la ec. (1-6), y se pueden escribir como:

$$\psi_i(z) = \mathcal{I}e^{ikz}\theta(-z), \quad (2-16)$$

$$\psi_o(z) = \mathcal{R}e^{-ikz}\theta(-z). \quad (2-17)$$

Con esto se puede escribir la ec. (2-5), apoyándonos de la construcción de la ec. (2-10),

de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \mathcal{R} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{21} & s_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{I} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2-18)$$

Para determinar todos los elementos de la matriz, consideremos la situación reflejada espacialmente respecto al punto $z = 0$, las soluciones para este problema serán entonces aquellas dadas por las ecs. (1-6) y (1-11), con la sustitución de $z \rightarrow -z$. Aquí nuevamente se tiene una onda saliente y una entrante, dadas por las ecs.:

$$\psi'_i(z) = \mathcal{I}e^{-ikz}\theta(z), \quad (2-19)$$

$$\psi'_o(z) = \mathcal{R}e^{ikz}\theta(z). \quad (2-20)$$

Usando nuevamente la convención dada en la ec. (2-5) y en la ec. (2-10), se obtiene que:

$$\begin{pmatrix} \mathcal{R} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s'_{11} & s'_{12} \\ s'_{21} & s'_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \mathcal{I} \end{pmatrix}. \quad (2-21)$$

Nótese que se han primado los elementos de la matriz en la ec. (2-21), en distinción de los de la ec. (2-18), pues podría pensarse que se está describiendo dos situaciones físicas distintas. Lo anterior es, en principio, cierto, pero es una simple cuestión de como definimos nuestro sistema de referencia en el laboratorio, para el proceso de dispersión (en el caso del potencial electrostático escalón) le es indistinta esta elección, pues ambas soluciones están relacionadas por la transformación $z \rightarrow -z$, en tanto que los elementos de la matriz S no dependen de la coordenada espacial. Dicha situación nos permite identificar los elementos primados de la matriz S en la ec. (2-21) con los de la (2-18), y

es por tanto inmediato encontrar las soluciones:

$$s_{11} = s_{22} = 0, \quad (2-22)$$

$$s_{12} = s_{21} = \frac{\mathcal{R}}{\mathcal{I}} = \frac{k - iq}{k + iq} = -e^{2i\delta}. \quad (2-23)$$

Es inmediato notar que $|s_{12}|^2 = |s_{21}|^2 = 1$, por lo que, junto con la (2-22), cumplen con la unitariedad de la matriz.

2.2. Matriz de dispersión en la ecuación de Pauli

Una vez que se ha establecido una forma sencilla de trabajar con la matriz S , se puede inmediatamente generalizar al caso de una partícula con espín, básicamente de forma similar a la modificación hecha a la ec. de Schrödinger para convertirla en la ec. de Pauli. La situación es, ya que el problema es unidimensional, similar a la presentada por la figura 2-2, pero ahora es necesario considerar las 2 posibles configuraciones de espín, es decir, se necesita una amplitud de onda entrante desde $-\infty$ con espín arriba en la dirección $+z$ y con espín abajo en la dirección $-z$, y de igual manera para las entrantes desde $+\infty$ además de las salientes en ambas direcciones.

Se denotarán a las amplitudes de espín arriba con un superíndice “+” en tanto que aquellas con espín abajo se denotaran con un superíndice “-”, y así es posible modificar la ec. (2-5) en el formalismo de Pauli como:

$$\begin{pmatrix} C^+ \\ C^- \\ B^+ \\ B^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & s_{14} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} & s_{24} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} & s_{34} \\ s_{41} & s_{42} & s_{43} & s_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^+ \\ A^- \\ D^+ \\ D^- \end{pmatrix}. \quad (2-24)$$

Claramente la situación empieza a complicarse, puesto que se necesita encontrar el valor de 16 elementos de matriz, los cuales en general no son triviales de encontrar. Un camino para facilitar la tarea es explotar las simetrías del problema en cuestión, que es exactamente lo que se hizo tanto para la barrera como para el escalón de potencial electrostático. Sin embargo la simetría que se explotó en ambas situaciones es distinta, pues en el caso de la barrera, si se observa la figura 2-2, dicha figura permanece invariante bajo una reflexión sobre $z = 0$, por lo que no es una casualidad que se haya considerado una barrera de potencial electrostático de ancho $2a$ centrada en el origen. Por otro lado, para el caso de la figura 1-1, se produce más bien una imagen espejo del problema. ¿Cuál es entonces la diferencia?, la diferencia radica en el Hamiltoniano, ya este permanece invariante bajo la sustitución $z \rightarrow -z$ en el caso de la barrera y no para el caso del escalón. Así pues, la primer situación nos permite escribir las ecs. (2-11)-(2-14) de manera inmediata, solamente hay que fijarse en como se ven las soluciones al problema de una partícula incidente en “un lado” para escribir las del “otro lado”, lo importante aquí viene incluso desde nuestra definición dada por la ec. (2-4), pues nos está diciendo que las simetrías del Hamiltoniano serán también simetrías de la matriz S . En la segunda situación, las ecs. (2-27) y (2-33) se pudieron obtener debido a que este proceso de dispersión particular no distingue si las partículas inciden desde $-z$ o $+z$, y es la elección del observador sobre que sistema de referencia describirá la situación, o dicho de otra forma, sobre que base expresará matemáticamente la matriz S .

2.3. Matriz de dispersión para una partícula con espín en un escalón de potencial

El caso a analizar es, nuevamente, aquel en que la energía de la partícula incidente es $0 < E < V_0$, y por tanto se usarán las soluciones dadas en la sección 1.5. Partiendo de la ec. (1-34) y de la discusión dada para el par de ecs. (1-40), se puede ver que para una onda entrante de espín arriba solo habrá una onda saliente con el mismo espín (de nuevo, aún cuando $\mathcal{T}^+ \neq 0$, la ec. (1-37) no representa un estado de dispersión), a partir de lo cual es inmediato el escribir:

$$\psi_i(z) = \mathcal{I}^+ e^{ikz} \theta(-z) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2-25)$$

$$\psi_o(z) = \mathcal{R}^+ e^{-ikz} \theta(-z) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2-26)$$

Y usando la ec. (2-24) se obtiene que:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mathcal{R}^+ \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & s_{14} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} & s_{24} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} & s_{34} \\ s_{41} & s_{42} & s_{43} & s_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{I}^+ \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2-27)$$

Aquí nuevamente recurrimos a la imagen espacial reflejada del problema que ya ha sido ampliamente discutida, por lo que se puede escribir la ecuación analoga a la (2-27)

como:

$$\begin{pmatrix} \mathcal{R}^+ \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & s_{14} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} & s_{24} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} & s_{34} \\ s_{41} & s_{42} & s_{43} & s_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mathcal{I}^+ \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2-28)$$

Ahora nos encontramos con una nueva e interesante situación, pues para encontrar el valor de todos los elementos, habremos de recurrir al problema con espín hacia abajo. Si consideramos el caso de partículas incidentes desde $-z$, con espín hacia abajo en la dirección $+z$, entonces se pueden utilizar las ecuaciones (2-25) y (2-26), sustituyendo el espinor de espín arriba por uno de espín abajo, es decir:

$$\psi_i(z) = \mathcal{I}^- e^{ikz} \theta(-z) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2-29)$$

$$\psi_o(z) = \mathcal{R}^- e^{-ikz} \theta(-z) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2-30)$$

si bien se ha modificado la amplitud de onda incidente (\mathcal{I}^-), es una simple notación para enfatizar a que tipo de solución pertenecen, sin embargo para que la solución tenga sentido, se requiere que $\mathcal{I}^- = \mathcal{I}^+$, lo que implica que $\mathcal{R}^- = \mathcal{R}^+$.

De donde se obtiene que:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \mathcal{R}^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & s_{14} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} & s_{24} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} & s_{34} \\ s_{41} & s_{42} & s_{43} & s_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \mathcal{I}^- \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2-31)$$

Y de su imagen reflejada espacialmente se tiene:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \mathcal{R}^- \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & s_{14} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} & s_{24} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} & s_{34} \\ s_{41} & s_{42} & s_{43} & s_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \mathcal{I}^- \end{pmatrix}. \quad (2-32)$$

Lo cual implica que todos los elementos de la matriz son 0, excepto:

$$s_{31} = s_{13} = s_{42} = s_{24} = \frac{\mathcal{R}^+}{\mathcal{I}^+} = \frac{\mathcal{R}^-}{\mathcal{I}^-} = \frac{k - iq}{k + iq} = -e^{2i\delta}. \quad (2-33)$$

Lo que este análisis nos está diciendo con respecto al espín, es que nuestra elección de qué dirección es la componente de espín “arriba” o “abajo”, le es totalmente irrelevante al proceso de dispersión con un escalón de potencial electrostático. Sin embargo, una vez hecha esta elección por parte del observador, los estados salientes han de conservar el espín de los estados entrantes.

Ahora bien, según este modelo unidimensional de la matriz S , el proceso de dispersión se simplifica enormemente y justifica el proceder del capítulo anterior, así como los posteriores, pues los estados de dispersión describen apropiadamente los procesos físicos imponiendo la unitariedad de dicha matriz. De manera que basta con proceder como se ha hecho en el capítulo 1, pues los resultados obtenidos son inmediatamente traducibles en este formalismo. Si bien no será necesario para este trabajo, el interés de calcular la matriz S para un particular problema de dispersión, radica en que una vez obtenida, se pueden calcular las probabilidades de transición y secciones eficaces.

Capítulo 3

Ecuación de Dirac

Para este capítulo se busca abordar el problema del escalón de potencial electrostático desde un punto de vista relativista, si bien hasta ahora se ha tenido cierto éxito localizando electrones en cierta región espacial mediante dicho potencial, existen ciertas complicaciones que surgen de las soluciones a la ecuación de Dirac, más concretamente, el problema empieza a surgir cuando la energía de las partículas incidentes E y la del potencial V_0 son tal que $mc^2 < E < V_0$ y $0 < 2mc^2 < V_0$, razón por la cual el tratamiento relativista es necesario en este punto.

En 1928 Dirac publicó un artículo [10] que en esencia buscaba crear una teoría cuántica relativista consistente, es decir, una teoría que fuera a la vez consistente con los principios de la mecánica cuántica y con los de la relatividad especial¹. A partir de tal proyecto, obtuvo la famosa ecuación que lleva su nombre. Algunos detalles históricos y conceptuales pueden encontrarse en [1, 2], [16]. Independientemente de su origen, de los problemas inmediatos y posteriores que la teoría sugirió, su éxito es innegable.

¹Véase por ejemplo; Schutz, B. *A first course in general relativity*. 2^a ed. New York: Cambridge (2009), pp. 1

Para escribir la ecuación de Dirac, se definirán las siguientes matrices:

$$\alpha_i \equiv \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta \equiv \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad (3-1)$$

en donde σ_i son las matrices de Pauli definidas por la ec. (1-28), mientras que cada 0 representa una matriz de 2×2 en la cual cada elemento vale 0, y $\mathbb{1}$ representa la matriz identidad de 2×2 . Esta notación compacta será recurrente a lo largo de este trabajo, y se omitirá la presencia de la matriz $\mathbb{1}$ cuando es multiplicada por una constante (por ejemplo, la matriz 0 mencionada se habría podido escribir $0 * \mathbb{1}$), por lo que habrá que tener esto en cuenta todo el tiempo.

Dicho lo anterior, es evidente que α_i y β representan matrices de 4×4 , la razón de esto es que dichas matrices deben satisfacer el álgebra [6, pp. 8]:

$$\begin{aligned} \alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i &= 2\delta_{ij}, \\ \alpha_i \beta + \beta \alpha_i &= 0, \\ \alpha_i^2 = \beta^2 &= 1, \end{aligned} \quad (3-2)$$

la cual, en principio, se satisface si la dimensión de las matrices es par, sin embargo Dirac notó que la dimensión más baja en que esto sucede es para dimensión 4.

Las ecs. (3-2) guardan un significado muy importante, pues en ellas se codifica la relación de energía-ímpetu correcta para una partícula libre (i.e. $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$), que la teoría de la relatividad especial establece². Inicialmente Schrödinger para formular su ecuación, buscó construirla tomando como punto de partida dicha relación, a partir de la cual obtuvo la que hoy en día se conoce como la ecuación de Klein-Gordon, que se puede

²*Ibid*, pp. 48

escribir, considerando el Hamiltoniano $H^2 = p^2c^2 + m^2c^4$, como:

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = (-\hbar^2 \nabla^2 c^2 + m^2 c^4) \psi. \quad (3-3)$$

Si bien Schrödinger la descartó en su momento ya que le resultó imposible de interpretar apropiadamente, más tarde sería retomada por Dirac para formular su ecuación. Para ello Dirac tuvo la idea de construir una ecuación de primer orden espacial y temporal, la cual al ser iterada sobre si misma, reprodujera la ec. (3-3) y por tanto satisficiera la relación correcta de energía-ímpetu de la relatividad especial. Así pues, la ecuación que propuso es:

$$(c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2) \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi, \quad (3-4)$$

en donde $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$.

Inmediatamente notamos que si α y β son matrices de 4×4 , entonces ψ no puede ser una simple función, pues la ec. (3-4) es una ecuación matricial, por tanto ψ , en analogía al formalismo de Pauli, debe ser un espinor, es decir y en este caso, una matriz columna de 4 renglones.

Otro detalle importante de la teoría es que satisfaga una ecuación de continuidad y una interpretación probabilística, como analogía a la interpretación ortodoxa de la mecánica cuántica no relativista.

De esta forma, se definen las cantidades:

$$\rho = \psi^\dagger \psi, \quad (3-5)$$

$$j^k = c\psi^\dagger \alpha^k \psi, \quad (3-6)$$

donde ψ^\dagger representa la matriz traspuesta y compleja conjugada a ψ , por lo cual ρ se

puede interpretar como una densidad de probabilidad (que evidentemente será positiva definida), en tanto que j^k representará la corriente de probabilidad, la cual tiene 3 componentes espaciales.

3.1. Forma covariante

Antes de continuar, es importante construir la forma explícita de la ecuación de Dirac que sea invariante bajo transformaciones de Lorentz, no solo porque será relevante en los capítulos posteriores, sino porque, después de todo, se está construyendo una teoría consistente con la relatividad especial.

Para comenzar, se adoptará la convención de que los índices con letras griegas pueden tomar los valores $\{0, 1, 2, 3\}$, mientras que los índices con letras latinas únicamente los valores $\{1, 2, 3\}$, de manera que en las coordenadas espacio-temporales (ct, x, y, z) , un 4-vector covariante se escribe como:

$$x^\mu \equiv (x^0, x^1, x^2, x^3) \equiv (ct, x, y, z). \quad (3-7)$$

Por otro lado, si se considera la métrica de Minkoswky definida por:

$$g_{\mu\nu} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3-8)$$

entonces se pueden obtener los 4-vectores covariantes mediante la operación:

$$x_\mu \equiv (x_0, x_1, x_2, x_3) \equiv (ct, -x, -y, -z) = g_{\mu\nu}x^\nu, \quad (3-9)$$

en donde se ha usado la convención de suma de Einstein, según la cual, hay una suma implícita siempre que aparezcan índices repetidos (uno arriba y otro abajo).

Así pues, y sin entrar más en detalle, definamos las siguientes matrices:

$$\gamma^0 = \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \beta\alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad (3-10)$$

las cuales satisfacen el álgebra:

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}, \quad (3-11)$$

que no es más que una forma compacta de escribir las ecs. (3-2).

Si ahora se multiplica la ec. (3-4) por β/c y usando las ecs. (3-10), se obtiene que:

$$(-i\hbar\gamma^i\partial_i + mc)\psi = i\hbar\gamma^0\partial_0\psi, \quad (3-12)$$

en donde $\partial_i = \frac{\partial}{\partial x^i}$, $\partial_0 = \frac{\partial}{\partial x^0} = \frac{\partial}{c\partial t}$.

Arreglando los términos, finalmente se tiene:

$$(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)\psi = 0. \quad (3-13)$$

La prueba de la covarianza de esta última ecuación puede ser consultada en [6].

Por último, para introducir la interacción con un campo electromagnético externo, considérese el 4-potencial; $A^\mu = (\phi, \vec{A})$, e introducimos la sustitución mínima; $p^\mu \rightarrow p^\mu - \frac{e}{c}A^\mu$, de manera que la ec. (3-13) toma la forma:

$$(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - \frac{e}{c}\gamma^\mu A_\mu - mc)\psi = 0. \quad (3-14)$$

3.2. Soluciones libres

Para entender el significado de las componentes de ψ , considérese la ec. (3-4) para una partícula en reposo, de esta forma $\vec{p} = 0$, con lo cual se busca resolver la ecuación:

$$\begin{pmatrix} mc^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & mc^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -mc^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \quad (3-15)$$

De donde se obtienen las siguientes soluciones:

$$\psi_1 = e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_2 = e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2t} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3-16)$$

$$\psi_3 = e^{\frac{i}{\hbar}mc^2t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_4 = e^{\frac{i}{\hbar}mc^2t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3-17)$$

Las soluciones 1 y 2 corresponden a una energía positiva, en tanto que las restantes 3 y 4 corresponden a una energía negativa, si bien en estos momentos no se ha dado una explicación física de las soluciones de energía negativa, estas serán muy importantes para entender y explicar la paradoja de Klein. Por ahora nos enfocaremos en desarrollar las soluciones para una partícula con $E > 0$, pues lo relevante ahora es ver el comportamiento de una partícula relativista de energía positiva ante un potencial escalón, tal como se ha desarrollado en el formalismo de Pauli y Schrödinger, por tanto se dejará la discusión de

las soluciones con $E < 0$ para el siguiente capítulo.

Antes de continuar, es importante señalar la interpretación física de las 2 componentes de energía positiva. Se puede demostrar [6, pp. 10-13] que la ecuación de Dirac (3-14) en el límite no relativista se reduce a la ecuación de Pauli (1-23), esto nos dice pues, que las primeras dos componentes del espinor en la ecuación de Dirac, representan 2 estados de espín con energía positiva, y se podría inferir que las componentes 3 y 4 representan también dos estados de espín pero con energía negativa.

Considérese entonces el caso de una partícula de espín arriba en la dirección $+z$, en una dimensión, z , viajando de izquierda a derecha, la ecuación de Dirac (3-4) toma la forma³:

$$(c\alpha^3 p^3 + \beta mc^2)\psi(z, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(z, t). \quad (3-18)$$

Análogamente a como se ha trabajado las ecuaciones de Schrödinger y Pauli, se puede proponer una solución factorizable, pues el Hamiltoniano no depende explícitamente del tiempo, de tal forma que el espinor tenga, para las componentes de energía positiva, una solución como:

$$\psi(z, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \begin{pmatrix} u_1(z) \\ u_2(z) \\ u_3(z) \\ u_4(z) \end{pmatrix}. \quad (3-19)$$

Donde se ha denotado la parte espacial de las soluciones de energía positiva con u 's.

³A falta de una mejor notación, se debe recordar que tanto α^3 como p^3 representan la componente z de los vectores $\vec{\alpha}$ y \vec{p} respectivamente, y no la tercer potencia de estos últimos vectores, la cual habría de escribirse como $||\vec{\alpha}||^3$ y $||\vec{p}||^3$. En cuanto a c (la velocidad de la luz), ya que es una cantidad escalar, c^2 si representa la segunda potencia de dicha cantidad. Tal razonamiento ha de aplicarse con cuidado en cada caso en que aparezcan superíndices a lo largo de este trabajo, y siempre que no se especifique algo distinto.

Por tanto, de las ecs. (3-18) y (3-19), se puede escribir:

$$\begin{pmatrix} cp^3u_3 \\ -cp^3u_4 \\ cp^3u_1 \\ -cp^3u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E - mc^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E - mc^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E + mc^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E + mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix}. \quad (3-20)$$

Es evidente que esta última ecuación tiene las componentes acopladas (1 con 3 y 2 con 4), por lo cual, dadas las condiciones iniciales, se puede resolver notando que una solución de onda plana viajando de izquierda a derecha en z , con espín arriba (en el límite no relativista, las componentes 1 y 2 de la ec. de Dirac son las componentes de espín arriba y espín abajo -respectivamente- en la ecuación de Pauli, según se definió en las ecs. (1-26) y (1-27)) debe ser tal que:

$$u_1(z) = Ae^{ikz}, \quad u_2 = 0. \quad (3-21)$$

en donde $c^2\hbar^2k^2 = c^2p^2 = E^2 - m^2c^4$, además usando las ecs. (3-20) y (3-21), se obtiene que:

$$u_3(z) = Ae^{ikz} \frac{ck\hbar}{E + mc^2}, \quad u_4 = 0. \quad (3-22)$$

Y por tanto, el espinor de una partícula libre, con energía $E > 0$, viajando de izquierda a derecha, con espín arriba en la dirección $+z$ y en una dimensión, puede ser escrito como:

$$\psi(z, t) = Ae^{-i(\omega t - kz)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{ck\hbar}{E + mc^2} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3-23)$$

3.3. Potencial escalón en la ecuación de Dirac

Para tratar el problema del escalón de potencial electrostático en la ecuación de Dirac, en principio se considerará un electrón libre incidente desde $-\infty$, en una dimensión, con espín arriba en la dirección $+z$, lo cual nos deja con la ec. (3-18), a la que habrá que introducir la interacción con el campo electrostático, en forma de escalón de potencial, como se ha hecho para las ecuaciones de Schrödinger y Pauli. Por tanto, la ecuación de Dirac para el problema es:

$$(\alpha^3 p^3 + \beta mc^2 + V(z))\psi(z, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(z, t). \quad (3-24)$$

Lo que se hará a continuación es dividir el problema en 3 casos a estudiar, la razón de esto se hará evidente al analizar la física de cada una de estas situaciones. Cada caso será representado por una figura, lo que facilita visualmente destacar los parámetros que caracterizan cada uno de estos casos, por lo cual, el único parámetro que varía entre ellos es el rango de valores de la energía que pueden tomar los electrones incidentes, y las diferencias visuales en escala son solo estéticas.

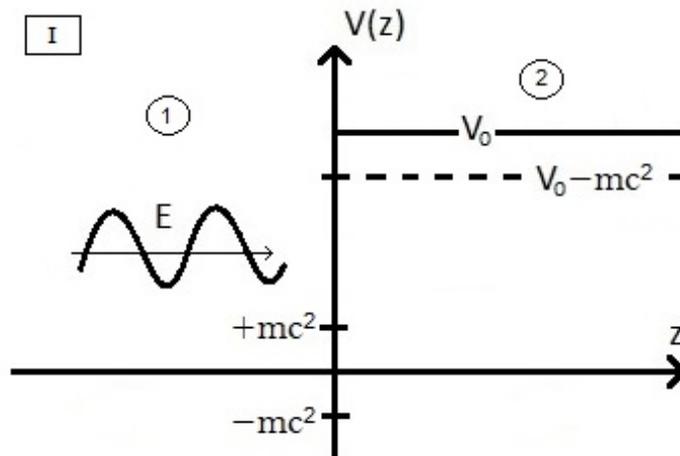


Figura 3-1: Escalón de potencial con $0 < 2mc^2 < V_0$, para un electrón incidente desde $-\infty$ con energía $mc^2 < E < V_0 - mc^2$

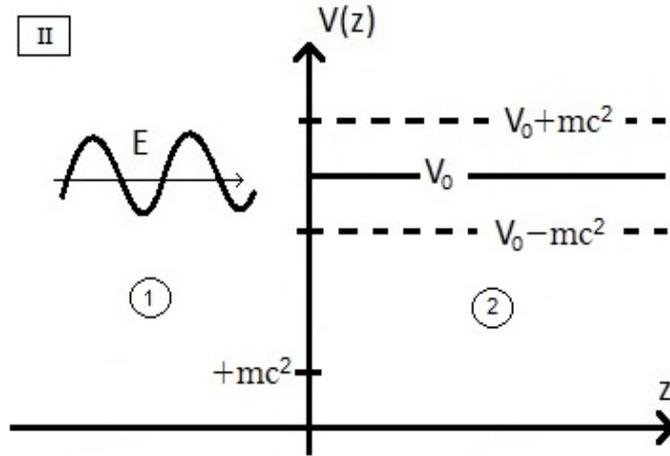


Figura 3-2: Escalón de potencial con $0 < 2mc^2 < V_0$, para un electrón incidente desde $-\infty$ con energía $V_0 - mc^2 < E < V_0 + mc^2$

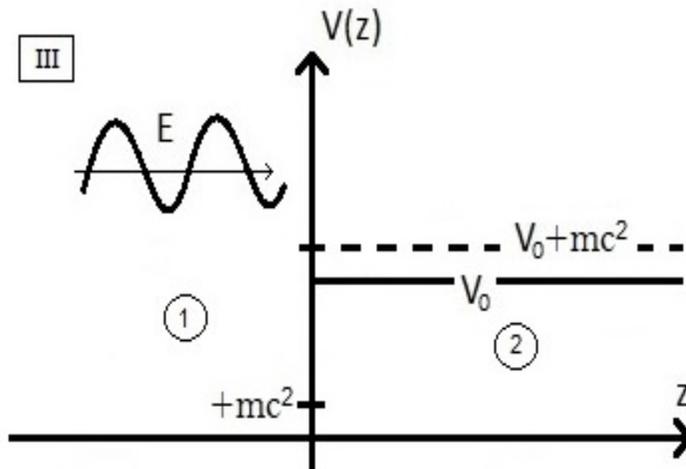


Figura 3-3: Escalón de potencial con $0 < 2mc^2 < V_0$, para un electrón incidente desde $-\infty$ con energía $V_0 + mc^2 < E$

Por lo que el potencial electrostatico escalón se puede escribir como:

$$V(z) = \begin{cases} 0 & \text{si } z < 0 \\ V_0 & \text{si } z \geq 0 \end{cases}$$

Nótese que para cada figura, se está dividiendo el problema en dos regiones:

- 1, si $z < 0$
- 2, si $z \geq 0$

Por último, a cada caso se le ha etiquetado según el rango de valores de la energía admitido para las partículas incidentes, de manera que:

- caso I, si $0 < mc^2 < E < V_0 - mc^2$ (ver figura 3-1)
- caso II, si $0 < V_0 - mc^2 < E < V_0 + mc^2$ (ver figura 3-2)
- caso III, si $0 < V_0 + mc^2 < E$ (ver figura 3-3)

Dicho lo anterior, ya que la región 1 es libre de potencial, es evidente que la ec. (3-18) describe la situación presentada en todos los casos. Y así, para soluciones con $0 < mc^2 < E$, se tiene que:

$$(c\alpha^3 p^3 + \beta mc^2)U_1(z) = EU_1(z), \quad (3-25)$$

lo que implica que:

$$\psi_1(z, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}U_1(z). \quad (3-26)$$

en donde el subíndice 1 indica la solución asociada a la región 1, indistintamente del caso que se considere, pues la diferencia radica en el valor de E .

En particular, para el problema unidimensional que se está tratando, nos interesan las soluciones de onda plana en z , con espín arriba en la dirección $+z$, con lo cual, de la ec. (3-25) y usando las formas matriciales de la ec. (3-1), se obtiene:

$$\begin{pmatrix} 0 & c\sigma^3 p^3 \\ c\sigma^3 p^3 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} mc^2 & 0 \\ 0 & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad (3-27)$$

en donde se introdujo la notación conveniente $\varphi = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$ y $\chi = \begin{pmatrix} u_3 \\ u_4 \end{pmatrix}$. Con lo que se pueden obtener el par de ecuaciones:

$$c\sigma^3 p^3 \chi = (E - mc^2)\varphi, \quad (3-28)$$

$$c\sigma^3 p^3 \varphi = (E + mc^2)\chi. \quad (3-29)$$

Y así llegar la relación de dispersión $c^2 \hbar^2 k_1^2 = (E - mc^2)(E + mc^2)$.

Finalmente, resolviendo la ec. (3-25) con las condiciones iniciales del problema, se obtiene la forma del espinor $U_1(z)$ como:

$$U_1(z) = \mathcal{I}e^{ik_1 z} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{chk_1}{E+mc^2} \\ 0 \end{pmatrix} + \mathcal{R}e^{-ik_1 z} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\frac{chk_1}{E+mc^2} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3-30)$$

que corresponden a una onda incidente (con coeficiente \mathcal{I}) y una onda reflejada (con coeficiente \mathcal{R}), ambas con espín arriba en la dirección $+z$.

¿Por qué no se toma en cuenta una onda reflejada con espín abajo?, en principio nada limita a suponer que no habrá cambio de espín, sin embargo, nótese que en la ec. (3-18), la presencia de la matriz α^3 ha acoplado las componentes 1 con 3 y 2 con 4, como ya se ha señalado y que la ec. (3-20) expresa claramente. Por otro lado, la acción del potencial electrostático escalón añade al Hamiltoniano un término proporcional a la matriz identidad, como lo expresa la ec. (3-24), y una matriz diagonal no puede, como se enfatizó en la sección 1.6, acoplar las componentes de un espinor, de manera que si se

escribiera el término con espín abajo para ambas regiones y se impusieran las condiciones de frontera (que es lo que se hará eventualmente), se obtendrían un par de ecuaciones análogas al par de ecs. (1-40), lo cual lleva a una contradicción del mismo tipo que en la ecuación de Pauli, razón por lo cual se ha optado por no escribir dichas soluciones y ahorrar álgebra innecesaria.

Ahora bien, para encontrar la forma de los espinores en la región 2, primero se analizará el caso III, posteriormente el II y por último el I.

Es claro que la ecuación de Dirac en la región 2, usando $\psi_2(z, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}U_2(z)$, tiene la forma:

$$(c\alpha \cdot p + \beta mc^2)U_2(z) = (E - V_0)U_2(z). \quad (3-31)$$

A partir de la cual se puede obtener, de manera análoga que para la región 1, el par de ecs.:

$$c\sigma^3 p^3 \chi = (E - V_0 - mc^2)\varphi, \quad (3-32)$$

$$c\sigma^3 p^3 \varphi = (E - V_0 + mc^2)\chi.$$

De donde obtenemos la relación de dispersión $c^2 \hbar^2 k_2^2 = (E - V_0 - mc^2)(E - V_0 + mc^2) > 0$, para el caso III.

Y por tanto, las soluciones tienen la forma:

$$U_2(z) = \mathcal{T} e^{ik_2 z} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{c\hbar k_2}{E - V_0 + mc^2} \\ 0 \end{pmatrix} + \mathcal{T}' e^{-ik_2 z} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\frac{c\hbar k_2}{E - V_0 + mc^2} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3-33)$$

Es claro que $\mathcal{T}' = 0$, pues de otra forma se tendrían ondas incidentes desde $+\infty$ viajando a la izquierda en la región 2, lo cual no es el problema que se busca tratar.

Por simplicidad, se definirán las cantidades:

$$q_1 = \frac{c\hbar k_1}{E + mc^2} \quad , \quad q_2 = \frac{c\hbar k_2}{E - V_0 + mc^2} \quad , \quad (3-34)$$

y así puede escribirse la solución para el caso III, en la región 2, de la forma más compacta:

$$U_2(z) = \mathcal{T} e^{ik_2 z} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ q_2 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3-35)$$

Ahora, por la continuidad de los espinores en $z = 0$, de las ecs. (3-30), (3-34) y (3-35) se obtienen el par de ecuaciones:

$$\mathcal{I} + \mathcal{R} = \mathcal{T}, \quad (3-36)$$

$$q_1(\mathcal{I} - \mathcal{R}) = q_2 \mathcal{T}.$$

De este par de ecuaciones, definiendo $\kappa \equiv q_2/q_1$, y usando el par de ecs. (3-36):

$$\frac{\mathcal{R}}{\mathcal{I}} = \frac{1 - \kappa}{1 + \kappa}, \quad (3-37)$$

$$\frac{\mathcal{T}}{\mathcal{I}} = \frac{2}{1 + \kappa}.$$

Por último, se puede calcular la corriente incidente ($J_{\mathcal{I}}$), reflejada ($J_{\mathcal{R}}$) y transmitida ($J_{\mathcal{T}}$) mediante la ec. (3-6). Es claro que las componentes 1 y 2 son 0, por lo cual se tendrá:

$$j_{\mathcal{I}}^3 = 2cq_1 |\mathcal{I}|^2, \quad (3-38)$$

$$j_{\mathcal{R}}^3 = -2cq_1 |\mathcal{R}|^2,$$

$$j_{\mathcal{T}}^3 = 2cq_2|\mathcal{T}|^2.$$

Entonces los coeficientes de transmisión y reflexión satisfacen, usando las ecs. (3-37) y (3-38):

$$r + t \equiv \left| \frac{j_{\mathcal{R}}^3}{j_{\mathcal{I}}^3} \right| + \left| \frac{j_{\mathcal{T}}^3}{j_{\mathcal{I}}^3} \right| = 1. \quad (3-39)$$

Lo que concuerda perfectamente con el resultado de su análogo no relativista para el caso en que la partícula incide con energía $E > V_0$. De igual manera, si $E \gg V_0 + mc^2$ entonces $q_1 \simeq q_2$, por lo que $r \simeq 0$ y $t \simeq 1$, lo cual indica que prácticamente no hay reflexión y por tanto la transmisión es total.

Analicemos ahora el caso II, en la región 2, para la cual se retomarán los cálculos previos, pero reconociendo que ahora la relación de dispersión es tal que:

$$c^2\hbar^2k_2^2 = (E - V_0 - mc^2)(E - V_0 + mc^2) < 0. \quad (3-40)$$

Por lo que se pueden obtener las soluciones al sustituir $k_2 \rightarrow i|k_2|$ en la ec. (3-33):

$$U_2(z) = \mathcal{T}e^{-|k_2|z} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ iq_2 \\ 0 \end{pmatrix} + \mathcal{T}'e^{|k_2|z} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -iq_2 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3-41)$$

Ahora las soluciones con $e^{|k_2|z}$ no son físicamente aceptables pues divergen para la región 2 ($z > 0$), por lo que $\mathcal{T}' = 0$. Además haciendo la sustitución $\kappa \rightarrow i\kappa$, para el par de ecs. (3-37), se obtiene:

$$\frac{\mathcal{R}}{\mathcal{I}} = \frac{1 - i\kappa}{1 + i\kappa} \Rightarrow |\mathcal{R}|^2 = |\mathcal{I}|^2. \quad (3-42)$$

Resultado que se puede entender mejor si de nuevo se calculan las corrientes de la misma forma que se hizo para obtener las ecs. (3-38):

$$\begin{aligned} j_{\mathcal{T}}^3 &= 0, \\ j_{\mathcal{I}}^3 &= -j_{\mathcal{R}}^3. \end{aligned} \tag{3-43}$$

Es inmediato entonces que $r = 1$ y $t = 0$, por lo que la reflexión es total, no hay corriente transmitida ni soluciones oscilatorias en la región 2. Dicho resultado concuerda con lo obtenido en su análogo del caso no relativista, cuando $E < V_0$.

¿Por que está sucediendo esto?, la respuesta se puede hallar en la figura 3-1. Para $z < 0$, hay una zona energética que cubre el intervalo $(-mc^2, mc^2)$, en la cual ocurre lo siguiente; supóngase que el potencial electrostático se apaga, y se buscan encontrar soluciones a la ecuación de Dirac para $-mc^2 < E < mc^2$ en las regiones 1 y 2, estas tomarán la forma de la ec. (3-41), las cuales, como se ha visto, tendrán una corriente de probabilidad asociada con valor 0 en todo punto del espacio. Así pues, se usará el término “zona prohibida” para referirse a la zona energética en la cual las soluciones no son oscilantes y la corriente de probabilidad asociada a estas es nula. Ahora supóngase que el potencial electrostático es nuevamente prendido, entonces se observa que para el caso II (i.e. $V_0 - mc^2 < E < V_0 + mc^2$), no existen soluciones oscilantes y la corriente es 0, por lo cual, el potencial ha actuado de tal forma que “mueve” (sin deformar el ancho) la zona prohibida a valores energéticos más altos (exactamente la mueve una cantidad V_0). Esta última interpretación física de cómo el potencial “mueve” la zona, será muy relevante una vez que se defina el mar de Dirac (en el siguiente capítulo) y se busque dar una explicación a la paradoja de Klein. Por lo anterior, se puede entender naturalmente que la energía de partículas incidentes del caso I (que a continuación se estudiará) deba ser acotada inferiormente por mc^2 .

3.4. Paradoja de Klein

Esencialmente ya se han desarrollado todas las herramientas necesarias para entender la paradoja de Klein (por supuesto, entender el problema, pero aún no se está en posición de explicarla). Considérese el caso I, ahora la relación de dispersión es $c^2\hbar^2k_2^2 = (E - V_0 - mc^2)(E - V_0 + mc^2) > 0$, por lo cual se esperan soluciones oscilantes del mismo tipo que en la ec. (3-33), este detalle puede parecer anti-intuitivo y desde este punto se podría sospechar que algo inesperado está ocurriendo, pero por ahora sigamos el álgebra y veamos las consecuencias. Tomando de guía el resultado obtenido en el caso III, la ec. (3-35) es también apropiada para este caso, con lo cual el par de ecs. (3-36) siguen siendo válidas, pero ahora se tiene que $q_2 < 0$, con lo que $\kappa < 0$, usando las ecs. (3-36) y (3-37) se pueden obtener los siguientes resultados:

$$j_{\mathcal{T}}^3 = \frac{4\kappa}{(1 + \kappa)^2} j_{\mathcal{I}}^3, \quad (3-44)$$

$$j_{\mathcal{R}}^3 = -\frac{(1 - \kappa)^2}{(1 + \kappa)^2} j_{\mathcal{I}}^3,$$

esto nos dice dos cosas muy importantes:

1. Dado que $\kappa < 0$, la dirección de la corriente transmitida está en dirección opuesta a la del flujo incidente.
2. Se puede concluir que la corriente reflejada es mayor que la incidente, pues $1 + \kappa < 1 - \kappa$.

Si se considera que, en principio según como se planteó el problema, no existe una fuente de electrones desde $z \rightarrow \infty$ viajando hacia la izquierda, ¿por qué se está obteniendo una corriente detrás de la barrera que viaja justo en dicha dirección?. Por otro lado, la corriente reflejada es mayor que la incidente, ¿cómo es esto posible?. Esta es la forma en

que algunos autores [6], [11] describen a la paradoja de Klein, pero no es así como Klein entendió la existencia de la paradoja que lleva su nombre [12], ¿qué es lo que entendió Klein y que en la mayoría de artículos y textos se entiende por “la paradoja de Klein”?

Para ello recurrimos nuevamente a la imagen de los paquetes de onda. Consideremos la relación de dispersión obtenida para este caso, a partir de la cual se puede calcular la velocidad de grupo, esta indica en que dirección se propaga la onda asociada a las partículas transmitidas del problema:

$$2c^2 p_2 dp_2 = 2(E - V_0) dE \implies V_g = \frac{dE}{dp_2} = \frac{c^2 p_2}{E - V_0}. \quad (3-45)$$

Es por supuesto evidente que el signo de V_g está determinado por el de p_2 , ya que $E - V_0 < 0$, y que el signo de V_g indica la dirección de propagación de la onda, si $V_g > 0$ la onda se propaga de izquierda a derecha, si $V_g < 0$ la onda se propaga de derecha a izquierda. Observemos de la relación de dispersión que:

$$c^2 p_2 = \pm \sqrt{(E - V_0)^2 - (mc^2)^2}. \quad (3-46)$$

Las ecs. (3-45) y (3-46) son también válidas para el caso I, ¿por qué entonces no se presentó una discusión al respecto?, se ha hecho de esta forma pues se buscaba dar una discusión más completa de la paradoja, además de que el álgebra realizada anterior a analizar las últimas dos ecs., será de gran utilidad al dar explicación a la paradoja.

Retomando lo dicho en el párrafo anterior, la ec. (3-45) implica que, para el caso III, $V_g > 0$ si y solo si $p_2 > 0$, por lo que la onda transmitida en la región 2 viaja de izquierda a derecha, resultado que se puede corroborar al calcular la corriente de probabilidad, por lo que no hace falta corregir ni se ha perdido generalidad en la discusión física de dicho caso. Por otro lado, según el par de ecs. (3-44), la corriente de probabilidad viaja en

una dirección que no parece la correcta, razón por la cual se podría pensar que esa es la paradoja de Klein.

Usando las ecs. (3-45) y (3-46), ahora para el caso I, $V_g > 0$ si y solo si $p_2 < 0$, esta condición sobre p_2 modifica el signo de q_2 , siendo que ahora $q_2 > 0$, y por tanto $\kappa > 0$, esto último es muy importante, pues modifica completamente la discusión sobre el par de ecs. (3-44).

Por lo anterior, tanto el par de ecs. (3-37) como las ecs. (3-44) son válidas, de manera que ahora se obtiene, para $\kappa > 0$:

$$t = \left| \frac{j_T^3}{j_I^3} \right| = \frac{4\kappa}{(1 + \kappa)^2} < 1, \quad (3-47)$$

$$r = \left| \frac{j_R^3}{j_I^3} \right| = \frac{(1 - \kappa)^2}{(1 + \kappa)^2} < 1.$$

Este último resultado nos dice que, a diferencia del caso II, la corriente transmitida no es nula, lo cual resulta bastante intrigante, pues para el caso I, la energía con la que incide el haz de electrones es aún menor que en la del caso II. Más intrigante es cuando se siguen analizando las ecuaciones con cuidado. De la definición dada para κ , se puede obtener que:

$$\kappa = \frac{k_2}{k_1} \frac{E + mc^2}{E - V_0 + mc^2} = \sqrt{\frac{(E - V_0 - mc^2)(E + mc^2)}{(E - V_0 + mc^2)(E - mc^2)}}. \quad (3-48)$$

Ahora bien, dada una energía fija del haz incidente, para $0 < E + mc^2 \ll V_0$, se tiene que $\kappa \rightarrow 1$ y usando el par de ecs. (3-47), entonces $t \rightarrow 1$ y $r \rightarrow 0$. Lo que se está obteniendo es que aún cuando el potencial electrostático sea muy intenso, tal potencial pareciera ser transparente a partículas incidentes en cierto rango de energía, ya que la transmisión es inusualmente alta, si se tuviera que recurrir a resultados conocidos, se podría pensar que nuestras partículas están haciendo una especie de tunelaje, pero, si consideramos las condiciones que hemos impuesto, tal efecto resulta paradójico.

El fenómeno descrito en el párrafo anterior es conocido en la mayoría de la literatura como la paradoja de Klein [13] e incluso a veces suele ser llamado tunelaje Klein. Esto representa un gran inconveniente para el problema del confinamiento, pues al tratar de localizar a los electrones en una cierta región espacial, se ha terminado no solo aparentemente fallando, sino que se ha fallado de la peor manera, pues la elección del potencial que se ha hecho, ha conducido al fenómeno exactamente opuesto del esperado.

Para entender que es lo que está sucediendo, se recurrirá a la teoría de agujeros y se reinterpretarán las soluciones de energía negativa de la ecuación de Dirac mediante las transformaciones de paridad, inversión temporal y conjugación de carga. De manera que, hasta el siguiente capítulo nos encontraremos en posición de discutir más al respecto y dar una explicación a esta paradoja.

Capítulo 4

Teoría de agujeros

En el capítulo anterior únicamente se ha trabajado con las soluciones de energía positiva, cuya interpretación física es inmediata al notar que en el límite no relativista dichas componentes se reducen a la ecuación de Pauli. Por otro lado se ha dejado de lado el sentido físico de las soluciones de energía negativa, las cuales son necesarias para que la descripción de los sistemas físicos modelados por la ec. de Dirac resulte más completa, y es por tanto necesario revisar aquello que se conoce como teoría de agujeros, que inicialmente fue formulada por el mismo Dirac con el objetivo de entender la naturaleza física de dichas soluciones presentes inevitablemente en su propia ecuación (3-4).

Para el desarrollo de este capítulo se describirá brevemente la teoría de agujeros, lo cual en principio explica parcialmente la naturaleza física de las soluciones de energía negativa, de manera que, para complementar dicha descripción, estas soluciones han de reinterpretarse. Dicha reinterpretación es sugerida en la propia descripción de la teoría de agujeros, pero no es trivial, por ahora es suficiente entender que la importancia de la reinterpretación de las soluciones de energía negativa es fundamental para el desarrollo de este trabajo, pues es a partir de esta interpretación que se da una explicación al

problema de la paradoja de Klein. Por supuesto que la importancia para la física en general va más allá, pues la consecuencia directa de la reinterpretación de las soluciones de energía negativa es la existencia de la antimateria, la cual ha sido una pieza clave para el desarrollo de la física moderna y en particular para el desarrollo de la física de altas energías, el modelo estándar y el estado sólido.

La idea principal de la teoría de agujeros es que la ecuación de Dirac, en principio, describe electrones relativistas (y no relativistas, como se discutió brevemente en el capítulo anterior), estos electrones sean o no de energía positiva deben cumplir el principio de exclusión de Pauli [9, pp. 202], por lo cual han de acomodarse en distintos niveles energéticos. Así pues, se definirá el estado del vacío como aquel que tiene ocupados todos sus niveles de energía negativa¹, mientras que todos los niveles de energía positiva se encuentran desocupados. El espacio de todos los niveles de energía negativa ocupados se suele conocer como “el mar de Dirac”².

Ahora bien, entre las consecuencias de esta teoría, existen 2 particularmente importantes a desarrollar; la primera es conocida como producción de pares. Para entenderla, considérese un electrón de energía negativa, este puede absorber radiación y ser excitado a un estado de energía positiva, como menciona Bjorken [6, pp. 65] “Si esto ocurre, observamos un electrón de carga $-|e|$ y energía $+E$, y en adición, un hoyo en el mar de energía negativa. El hoyo registra la ausencia de un electrón de carga $-|e|$ y energía $-E$, y será interpretado por un observador relativo al vacío como la presencia de una partícula de carga $+|e|$ y energía $+E$, esto es, un positrón.”. La segunda es conocida como aniquilación de pares, para esta se tiene un agujero en el mar de Dirac (i.e. un estado de

¹Es importante recordar que la energía está dada por la ecuación $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$, de manera no pueden existir soluciones oscilantes para $-mc^2 < E < mc^2$, por lo cual a este intervalo energético se la ha etiquetado como zona prohibida, de manera que al decir “todos los niveles de energía negativa”, se está refiriendo a todos aquellos con $E \leq -mc^2$ y solo aplica para el vacío.

²La definición más completa del mar de Dirac (i.e. no necesariamente en el vacío) incluye todos los estados ocupados por debajo de la zona prohibida.

energía negativa no ocupado), este agujero podrá ser ocupado por un electrón de energía positiva, pero para ello tendría que perder energía, pues la energía que requiere para ocupar el agujero es claramente menor a la suya, por lo que tendría que emitir radiación, quedando entonces “atrapado en el agujero”.

La explicación dada en el párrafo anterior nos da una idea del camino que se busca seguir con la reinterpretación de las soluciones de energía negativa, pues en el contexto de la teoría de agujeros, el hecho de que se haya introducido la idea del mar de Dirac, esencialmente tiene que ver con garantizar la estabilidad de los estados base en los átomos (por ejemplo que un electrón en el estado base del átomo de hidrógeno no decaiga a un estado de energía negativa), y a la vez esta idea, como se ha descrito, predice la existencia de lo que se ha llamado “positrones”, los cuales son las llamadas “antipartículas” de los electrones, es decir, las partículas (en el caso de la ecuación de Dirac, como se ha construido, electrones de masa m y carga $-|e|$) se describirán por soluciones de energía positiva, mientras que, al reinterpretar las soluciones de energía negativa, se busca describir a las antipartículas (respecto a los electrones, positrones de masa m y carga $+|e|$).

Para dar pie a la discusión sobre la reinterpretación de las soluciones de energía negativa, se optará por un camino particular, que consiste en revisar las transformaciones de paridad, conjugación de carga e inversión temporal, y es importante señalar que la construcción de estas es una especie de operación mental para entender más las propiedades ocultas de nuestras ecuaciones, sin embargo no son (de la manera en que se plantean) realizables experimentalmente, por lo que las analogías físicas que se dan, representan únicamente una ventaja para su construcción conceptual.

4.1. Paridad

La transformación de paridad es realmente una reflexión espacial, refleja cada componente espacial respecto al origen, la analogía más completa que se podría hacer es un espejo, este solo reflejará la coordenada espacial ortogonal a su superficie, de manera que habría que fijar la imagen que refleja a la vez que es rotada un ángulo π , y por tanto es compuesta de 1 reflexión + 1 rotación.

Esta reflexión espacial es una transformación (impropia³) de Lorentz y transforma las componentes espacio-temporales de la siguiente forma:

$$\vec{x}' = -\vec{x} \quad , \quad t' = t. \quad (4-1)$$

en donde \vec{x}' y t' representan las componentes transformadas.

Se definirá entonces la transformación de paridad (y de igual forma con la conjugación de carga e inversión temporal) de acuerdo a como se presentan en [6], en donde realmente son construídas explícitamente estas representaciones. Por lo cual, se puede expresar de la siguiente forma:

$$P\psi(\vec{x}, t) = \psi'(\vec{x}', t) = e^{i\varphi}\gamma^0\psi(\vec{x}, t), \quad (4-2)$$

en donde el factor de fase $e^{i\varphi}$ no es de interés físico, y $\psi'(\vec{x}', t)$ es la solución espacio-reflejada.

Un detalle importante a revisar, puesto que es de particular interés, es como se trans-

³Esto significa, a grandes rasgos, que no puede ser obtenida como aplicación sucesiva de transformaciones infinitesimales, puesto que una reflexión no es una operación continua, como lo es por ejemplo una rotación.

forma un campo electromagnético externo bajo las transformaciones que se están estudiando, para ello se utilizará el cuadripotencial que se definió para llegar a la ec. (3-10), estos potenciales serán transformados como [6, pp. 71]:

$$P\phi(\vec{x}, t) = \phi'(\vec{x}', t) = \phi(\vec{x}, t), \quad (4-3)$$

$$P\vec{A}(\vec{x}, t) = \vec{A}'(\vec{x}', t) = -\vec{A}(\vec{x}, t). \quad (4-4)$$

Se puede entender esta regla si recordamos que $\phi(\vec{x}, t)$ es generado por cargas, siendo que una carga con posición reflejada sigue teniendo el mismo signo de carga, mientras que $\vec{A}(\vec{x}, t)$ es generado por corrientes, por lo cual, una corriente reflejada espacialmente invierte su dirección, que está representado por el cambio de signo en la ec. (4-4).

Una vez que se ha definido como opera esta transformación en cada término de la ecuación de Dirac (3-14), se puede ver que la ecuación completa, transformada bajo paridad, usando las ecs. (4-1) hasta la (4-4), toma la forma:

$$\begin{aligned} P(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - \frac{e}{c}\gamma^\mu A_\mu - mc)\psi &= 0 & (4-5) \\ (i\hbar\gamma^\mu\partial'_\mu - \frac{e}{c}\gamma^\mu A'_\mu - mc)e^{i\varphi}\gamma^0\psi &= 0 \\ \therefore (i\hbar\gamma^\mu\partial'_\mu - \frac{e}{c}\gamma^\mu A'_\mu - mc)\psi' &= 0. \end{aligned}$$

Es decir, la ecuación de Dirac (3-14) es invariante bajo la transformación de paridad.

4.2. Conjugación de carga

Esta transformación, como se vió en la discusión de la teoría de agujeros, surge de manera natural, pues en el contexto de dicha teoría, se ha observado que la existencia de electrones (partículas), implica la existencia de positrones (antipartículas). Dicha corres-

pondencia uno a uno, nos dice que para una solución de un electrón ($-|e|$) de energía negativa en un campo electromagnético, de la ecuación de Dirac (3-14), le corresponde, bajo la reinterpretación de estas, una solución de energía positiva, que justo, en esta reinterpretación aparecerá como una solución para un positrón ($+|e|$) de energía positiva, por lo cual será solución a la ecuación:

$$(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu + \frac{e}{c}\gamma^\mu A_\mu - mc)\psi_c = 0, \quad (4-6)$$

en donde ψ_c representa la función de onda de carga conjugada a ψ .

De esta forma, para construir la transformación de conjugación de carga, lo que se busca es dar una transformación que lleve la ec. (3-14) a la ec. (4-6) y *viceversa*. Se denotará por C a dicha transformación, se puede construir explícitamente el operador [6, pp. 67-68], de tal forma que:

$$C\psi = i\gamma^2\psi^* = \psi_c. \quad (4-7)$$

Se puede entonces resumir la transformación de conjugación de carga en dos partes; primero se toma el complejo conjugado, e inmediatamente después se multiplica por $i\gamma^2$.

Notamos aquí que, de hecho, por construcción, la conjugación de carga no es una operación de simetría de la ecuación de Dirac, es decir, no deja invariante la ec. (3-14). Para ello sería necesario agregar un operador adicional que transforme A_μ en $-A_\mu$, esto resulta bastante interesante (aunque evidente bajo un razonamiento clásico), pues al dejar invariante la ec. (3-14), la dinámica de un positrón en un campo $-A_\mu$ es exactamente la misma que la de un electrón en un campo A_μ .

Dado que ya se ha estudiado lo que sucede con la ecuación de Dirac (3-14) bajo conjugación de carga, es interesante notar que es lo que sucede a una solución explícita,

pues es aquí cuando se hace aún más obvia la necesidad de la reinterpretación de las soluciones de energía negativa.

Considérese un espinor de partícula libre en reposo con espín arriba y de energía negativa, usando la ec. (3-17), este puede ser escrito como:

$$\psi_4 = Ae^{\frac{i}{\hbar}mc^2t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4-8)$$

con A una constante de normalización.

Por tanto, la correspondiente solución de carga conjugada, según la ec. (4-8) es:

$$\begin{aligned} i\gamma^2\psi_4^* &= i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} Ae^{\frac{i}{\hbar}mc^2t} \\ &= -Ae^{\frac{i}{\hbar}mc^2t} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \psi_2. \end{aligned} \quad (4-9)$$

Lo que esta última ecuación implica es que, la ausencia de un electrón en reposo de energía negativa y espín arriba, es equivalente a la presencia de un positrón en reposo de energía positiva y espín abajo.

4.3. Inversión temporal

Se podría decir que la inversión temporal es una especie de reflexión temporal, así como la paridad es una reflexión espacial, de igual manera como se hizo con la transformación de paridad, se puede hacer la analogía del contenido físico de esta transformación al imaginarnos un evento que es grabado en video, la inversión temporal, por supuesto, será aquella descrita al reproducir el video hacia atrás.

Dada la discusión sobre la transformación de paridad, es inmediato definir como esta inversión temporal debe transformar las componentes espacio-temporales:

$$\vec{x}' = \vec{x} \quad , \quad t' = -t. \quad (4-10)$$

Se necesita además especificar el comportamiento de los potenciales electromagnéticos bajo esta transformación, los cuales quedarán definidos por [6, pp. 72]:

$$\vec{A}'(t') = -\vec{A}(t), \quad (4-11)$$

$$\phi'(t') = \phi(t). \quad (4-12)$$

La razón física de esta transformación de los potenciales es de hecho similar a la discutida para la transformación análoga de estos campos bajo Paridad, es decir, \vec{A} es generado por corrientes, por lo que una inversión en el tiempo invierte también la dirección de la corriente y por tanto el signo de \vec{A} , mientras que ϕ es generado por cargas que no son alteradas bajo inversión temporal.

Ahora que se ha definido la forma en que se transformarán los objetos bajo inversión temporal, se puede construir de manera explícita la forma que debe tener esta inversión

temporal, siendo esta [6, pp. 73]:

$$T\psi(t) = \psi'(t') = i\gamma^1\gamma^3\psi^*. \quad (4-13)$$

Es decir, para aplicar una inversión temporal, primero debe tomarse el complejo conjugado y a continuación multiplicar por $i\gamma^1\gamma^3$

De la misma forma en que se ha hecho en las dos secciones anteriores, es interesante ver lo que le sucede a la ecuación de Dirac (3-14) bajo esta nueva transformación, y así usando la ec. (4-13):

$$\begin{aligned} T(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - \frac{e}{c}\gamma^\mu A_\mu - mc)\psi &= 0 \\ (i\hbar\gamma^\mu\partial'_\mu - \frac{e}{c}\gamma^\mu A'_\mu - mc)i\gamma^1\gamma^3\psi^* &= 0 \\ \therefore (i\hbar\gamma^\mu\partial'_\mu - \frac{e}{c}\gamma^\mu A'_\mu - mc)\psi' &= 0. \end{aligned} \quad (4-14)$$

Lo cual implica que la ecuación de Dirac (3-14) es invariante bajo inversiones temporales.

4.4. Transformación PCT y positrones

Una forma sencilla de introducir la idea de los positrones, de manera un poco más formal, es utilizar precisamente las transformaciones de paridad, conjugación de carga e inversión temporal, según las ecs. (4-5) y (4-14), las transformaciones de paridad e inversión temporal son operaciones que dejan invariante la teoría con interacción electromagnética⁴, mientras que la conjugación de carga (ec. (4-7)) construye de manera explícita la función de onda de carga conjugada, se puede entonces utilizar simultánea-

⁴Es importante señalarlo, pues la interacción débil no conserva paridad.

mente dichas transformaciones, de manera que se encuentre una correspondencia entre las funciones de onda de carga conjugada y las de electrón, es esta transformación la que será denotada como transformación PCT.

Dicha idea está directamente conectada con la interpretación de Feynman-Stueckelberg [14, 15] en la cual se reinterpreta las soluciones de energía negativa como soluciones de energía positiva viajando atrás en espacio-tiempo con el signo de la carga opuesta.

Para ver esto de una manera más obvia, lo primero que se hará es transformar un espinor, para ello se utilizarán las ecs. (4-2), (4-7) y (4-13), se definirá entonces:

$$\psi_{PCT}(x', t') \equiv PCT\psi(x, t) = ie^{i\varphi}\gamma_5\psi(x, t), \quad (4-15)$$

en donde $\psi_{PCT}(x', t')$ representa lo que se conoce como función de onda de positrón, mientras que $\gamma_5 = \gamma^5 \equiv i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$ y por supuesto $x' = -x$ y $t' = -t$.

Es decir, la ec. (4-15) implica que existe una correspondencia entre la función de onda de positrón y la función de onda de electrón multiplicada por $ie^{i\varphi}\gamma_5$ y moviéndose atrás en espacio-tiempo.

Veamos por último que sucede con la ecuación de Dirac (con interacción electromagnética externa) para un electrón de energía negativa al aplicarle la transformación PCT, para ello se escribirá la ec. (3-14) a manera de ecuación de eigenvalores (con $E > 0$) y en forma no covariante:

$$[c\vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}) + \beta mc^2 + e\phi]\psi = -E\psi. \quad (4-16)$$

Usando las ecs. (4-3), (4-4), (4-11), (4-12) y (4-15), se puede ver que la ec. (4-16) se

transforma como:

$$[c\vec{\alpha} \cdot (\vec{p}' - \frac{e}{c}\vec{A}') + \beta mc^2 + e\phi']\psi_{PCT} = +E\psi_{PCT}, \quad (4-17)$$

en donde las cantidades primadas por supuesto indican que son función de las coordenadas primadas $x' = -x$ y $t' = -t$ (Aunque ψ_{PCT} no esté primada, también lo es, lo cual es claro desde la ec. (4-15)).

Es justo la manera en que se transforma la ec. (4-16) en la ec. (4-17) la forma de entender la reinterpretación que se da a las soluciones de energía negativa en este formalismo. Además es la clave para dar explicación a la paradoja de Klein. Ahora bien, no es tan directo como hacer una transformación PCT sobre el problema y pensar que todo estará resuelto, es un tanto más sutil, pues la transformación PCT es una operación mental que se ha construido matemáticamente para poder entender físicamente lo que las soluciones a nuestras ecuaciones nos quieren decir, por lo que habrá que poner la debida atención a los detalles físicos del problema.

4.5. Una explicación a la paradoja de Klein

La teoría desarrollada en el capítulo 3 es una descripción física de partículas individuales, mientras que en este capítulo, al introducir la teoría de agujeros se ha dado pie a una descripción de muchas partículas. El mar de Dirac es quizá el ejemplo más directo y obvio de esto, la explicación presentada aquí, es por tanto encaminada totalmente en esta dirección, teoría que Schweber etiqueta con el nombre de “Hole-theoretic QED” [16, pp. 81-82].

Considérese la figura 4-1, las líneas horizontales delgadas representan el mar de Dirac en el vacío de una forma esquemática, es decir, todos los estados ocupados con $E \leq -mc^2$. Como ya se ha discutido ampliamente, existe una zona prohibida entre soluciones de energía positiva y negativa, de ancho $2mc^2$. Justamente en este sentido, en el capítulo anterior se encontró que, resolviendo la ec. de Dirac para un potencial electrostático escalón, esta zona prohibida “sube” (en la región que actúa el potencial) exactamente una cantidad V_0 . Ahora bien, si el potencial ha movido esta zona, ¿también es posible que haya modificado el nivel del mar de Dirac?.

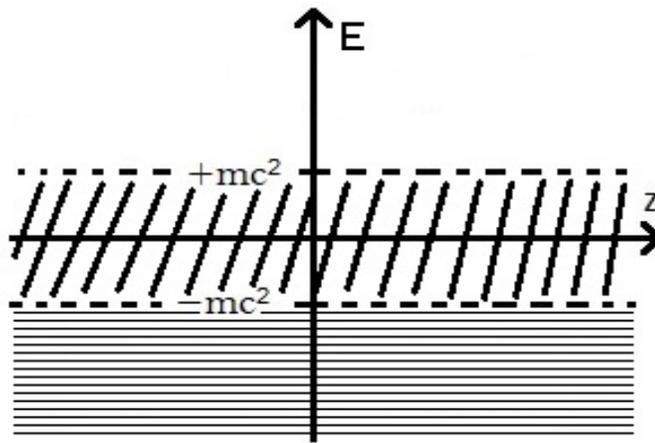


Figura 4-1: Esquema representativo del mar de Dirac en el vacío

La situación presentada en la paradoja de Klein guarda cierta analogía con lo que sucede para los electrones en un metal al aplicar un campo eléctrico externo [9, pp. 73-75], esencialmente los electrones en el metal, por el principio de exclusión de Pauli, no pueden ocupar todos el mismo nivel energético, de manera que los electrones van llenando los niveles energéticos (del metal) hasta cierta energía, conocida como la energía de Fermi. Dichos electrones se encuentran cuasi-libres, pero ligados al metal debido a un potencial que (a primera aproximación) se puede considerar como un pozo de potencial, la energía necesaria para liberar del metal a los electrones más externos es entonces la diferencia entre la altura del pozo y la energía de Fermi, y se conoce como la función de trabajo.

Si se aplica un campo eléctrico externo apropiado entonces es posible liberar algunos electrones del metal, pues la función de trabajo se ve disminuida, desde el punto de vista de los electrones [17].

El fenómeno descrito anteriormente es un efecto de tunelaje y requiere el carácter finito del ancho del potencial neto. Por otro lado, para estudiar la paradoja de Klein, el potencial externo aplicado, según se ha presentado, no es finito, por lo que la analogía no es directa, pero físicamente es relevante, pues nos da una buena pista de como entender el problema.

Considérese ahora la siguiente situación; supóngase que se toman 2 metales con caras planas paralelas uno frente al otro, separados una cierta distancia d (muy pequeña) en el vacío. Si uno de los metales se encuentra en un estado superconductor muy por debajo de su temperatura crítica, no existirá tunelaje de electrones aún cuando se aplique una diferencia de potencial (apropiada) entre ambos, esto ya que una característica del estado superconductor es que posee una brecha de energía, es decir, una región entre $E_F - \Delta$ y $E_F + \Delta$ (con E_F la energía de Fermi y 2Δ el ancho de la brecha) donde no existen estados permitidos. Una vez que el potencial alcanza el valor $e\phi \geq \Delta$ el tunelaje puede ocurrir, por lo cual se establece una corriente entre los metales [18]. La figura 4-2 representa la situación descrita de manera esquemática, se puede observar que el efecto del potencial externo es modificar la forma del potencial y bajar el nivel del mar de Fermi, permitiendo que los electrones del metal a la izquierda puedan hacer tunelaje al superconductor, siempre y cuando la diferencia de potencial sea lo suficientemente grande para poner en correspondencia estados desocupados en el superconductor con estados ocupados en el metal y estableciendo así una corriente de tunelaje.

En el tratamiento dado hasta ahora a la paradoja de Klein no existen metales, simplemente se considera la existencia de un potencial electrostático tipo escalón en cierta región del espacio. La analogía pues, se basa en la existencia de estos mares (de Dirac o

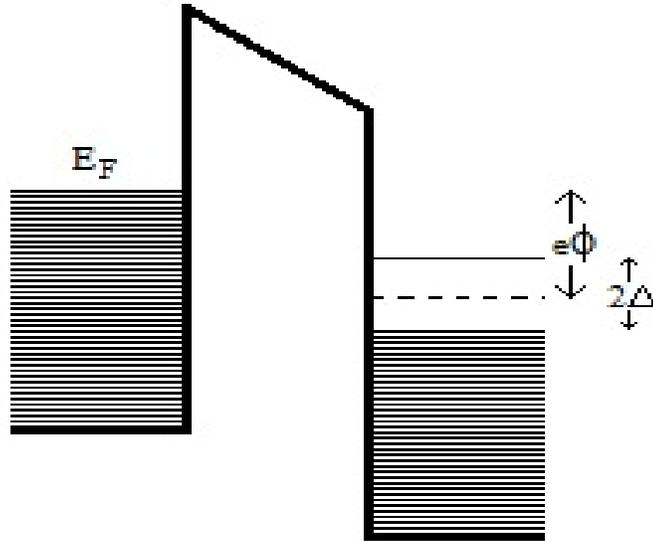


Figura 4-2: La figura representa el nivel de Fermi en un metal (izquierda) y un superconductor (derecha), al ser aplicada una diferencia de potencial $e\phi \geq \Delta$ entre ellos.

de Fermi), además de la zona prohibida o la brecha energética (que son en cierta forma parecidas), y en la acción de un potencial eléctrico externo sobre cada caso.

Según se ha definido el vacío en el contexto de la teoría de agujeros, es aquel con todos sus estados de energía negativa llenos, mientras que todos sus estados de energía positiva están desocupados (ver figura 4-1), ahora, dado que los electrones tienen masa, existe una región de ancho $2mc^2$ que se ha identificado como una zona prohibida, en el sentido de que no existen soluciones oscilantes y que además divide las regiones donde si pueden existir soluciones oscilantes de energía positiva y negativa. Una vez que se introduce un potencial electrostático externo, la zona que separa las regiones es “elevada” en exactamente la altura del campo aplicado. Siguiendo la analogía que se busca hacer, se podría pensar que el potencial disminuye el nivel del mar y con él la zona prohibida, este no es el caso, ¿Por qué?. Según se ha estudiado a lo largo de este capítulo, existe una correspondencia entre las soluciones de energía negativa y la función de onda de positrón, cuya carga es opuesta a la del electrón, y por tanto la dinámica de estos bajo un potencial

ϕ es distinta, dicho de una forma simple; si el potencial es repulsivo para electrones, es atractivo para positrones. Por tanto, el potencial electrostático sube el nivel del mar de Dirac y con él la zona prohibida, que es exactamente lo que se ha calculado⁵.

La figura 4-3 representa la acción del potencial electrostático que sube el nivel del mar de Dirac, de manera que se ponen en correspondencia estados de energía positiva (a la izquierda) con estados ocupados debajo de la zona prohibida (a la derecha). Por otro lado, se ha introducido la teoría de agujeros y la reinterpretación de las soluciones con energía por debajo de la zona prohibida (que resultan de energía negativa en el vacío). Así pues, al notar que el nivel del mar de Dirac ha aumentado, no pueden existir, en la región de la paradoja de Klein, electrones de energía positiva detrás del escalón de potencial, pues dichos estados ya se encuentran ocupados. Pero en la sección 3.4 se obtuvo una transmisión de partículas inusualmente alta, lo que nuevamente nos coloca en una posición paradójica, de manera que es necesario revisar los cálculos ya realizados, pero en el contexto de la teoría de agujeros, para entender que es lo que está sucediendo. En este sentido es importante señalar que realmente ya se ha resuelto el problema algebraicamente en la sección 3.4, es decir, las soluciones matemáticamente son aceptables, sin embargo no se contaba en aquel momento con las herramientas para entender la física de estas soluciones. Por tanto, se reanalizarán algunas de las ecuaciones del capítulo 3.

Nuevamente observemos que un electrón incidente de energía positiva no puede ocupar estados detrás del potencial, pues todos los estados ya están ocupados, sin embargo recordemos la analogía entre el metal y el superconductor, los estados ocupados debajo de la zona prohibida (en $z > 0$) pueden hacer tunelaje a la región sin potencial (en $z < 0$), por lo cual observaríamos un hueco en el mar de Dirac detrás del escalón de

⁵Si bien se han usado las palabras “sube” o “eleva”, pues pictóricamente describen la situación en cierta medida, estas pueden resultar engañosas, ya que la energía de Fermi es función de la densidad de electrones cuasi-libres en el metal, la cual no se ve modificada bajo la acción de un campo eléctrico externo, es desde el punto de vista de los electrones en un metal, que el nivel del mar de Fermi relativo al del otro metal pareciera subir.

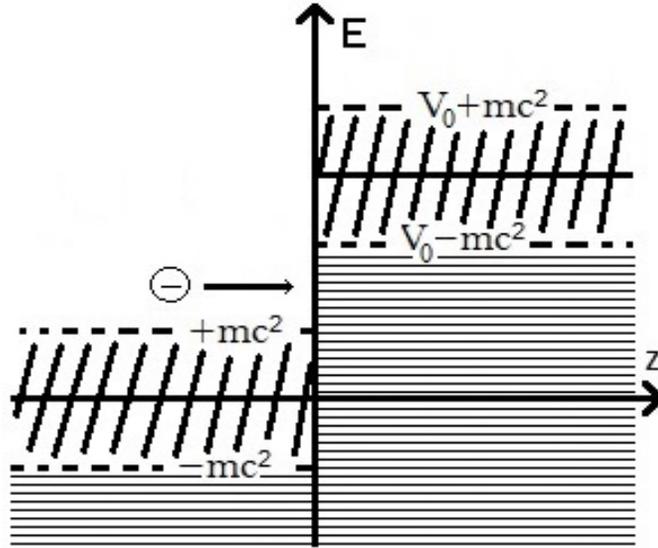


Figura 4-3: En la figura se observa la acción del potencial electrostático sobre el mar de Dirac, los electrones incidentes de energía positiva se encuentran en la región energética $mc^2 < E < V_0 - mc^2$ con estados ocupados en la región $z \geq 0$.

potencial electrostático, que interpretaríamos como un electrón de carga $+|e|$ y energía $E > 0$, además de un electrón de carga $-|e|$ y $E > 0$ en la región libre de potencial, el fenómeno que ya se había descrito al inicio de este capítulo; una creación de pares. Esta creación de pares ha sido promovida por la acción del potencial electrostático (ver figura 4-4).

Ahora notemos que las ecs. (3-30) y (3-35) siguen siendo aceptables en principio, y con ello también lo son el par de ecs. (3-44) que describen las corrientes de probabilidad, ¿que se está resolviendo entonces si todo ya estaba hecho?. Según la figura 4-4, la ec. (3-35) no está representando una partícula de carga $-|e|$ y $E > 0$, sino una partícula de carga $+|e|$ y energía $E > 0$, además dada la definición de la corriente de probabilidad en la ec. (3-6), no se hace referencia explícita al signo de la carga (por supuesto, es una corriente de probabilidad, no una corriente eléctrica), sin embargo está construída haciendo referencia implícita al signo de la carga con que ha sido construída la teoría⁶, por

⁶La ec. de Dirac fue concebida, en principio, para electrones relativistas, y es a partir de la rein-

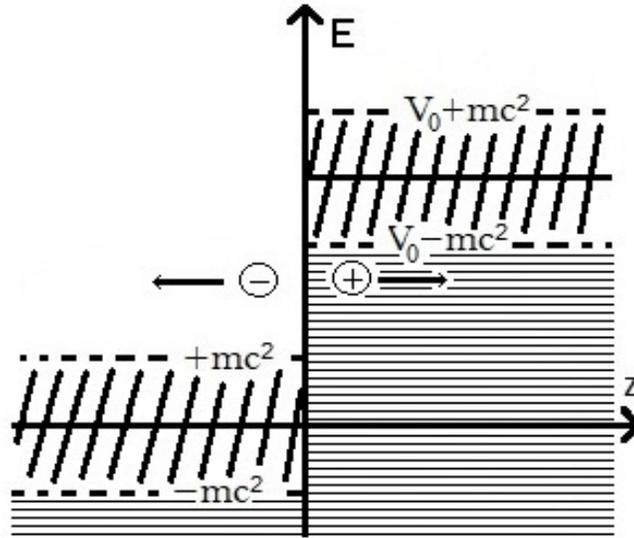


Figura 4-4: Al entrar en correspondencia estados ocupados en el lado derecho con los electrones incidentes del lado izquierdo, se produce un fenómeno de producción de pares.

lo cual es natural esperar que la corriente transmitida detrás de la barrera se encuentre en dirección opuesta a la de la partícula incidente, pues el potencial produce pares electrón-positrón, de electrón viajando desde el potencial y hacia $z < 0$, y de positrón detrás de la barrera que, por conservación del ímpetu, deben viajar en dirección opuesta al de estos electrones (i.e. hacia $z > 0$), y por tanto, un observador externo que mide una corriente de probabilidad de agujeros (positrones) viajando de izquierda a derecha equivalentemente mediría una corriente de probabilidad de electrones viajando de derecha a izquierda.

Por lo anterior, se puede entender que el par de ecs. (3-44) están expresando la naturaleza real de la paradoja de Klein, por un lado, la corriente transmitida, viajando en dirección opuesta a la esperada, está representando la creación de positrones detrás de la barrera de potencial, mientras que la corriente reflejada y que supera a la incidente está expresando, por un lado la creación de electrones y por otro lado justo a la corriente

terpretación de las soluciones de energía negativa que se predice la existencia de sus antipartículas, los positrones, si por otro lado se partiera de los positrones, los electrones emergerían naturalmente de la reinterpretación de las soluciones de energía negativa de los positrones.

de electrones realmente reflejada respecto a la incidente.

La explicación en este punto resulta suficiente para continuar, aunque no del todo satisfactoria en un sentido estricto formal, para ello es necesario utilizar un formalismo de segunda cuantización. Si bien la paradoja de Klein y la producción de pares están íntimamente relacionados según se ha tratado el problema hasta ahora, resultan no ser el mismo fenómeno [12], la producción espontánea de pares está conectada con el decaimiento del vacío inducida por un potencial escalón supercrítico [19, 20]. Ya que la discusión completa escapa al alcance del contenido actual de este trabajo, se recomienda la referencia [21].

Capítulo 5

Efectos cuasirelativistas

El grafeno es probablemente uno de los materiales más prometedores del siglo XXI, pues su estructura y composición le otorgan una serie de propiedades importantes para un rango muy amplio de aplicaciones tecnológicas, como la fabricación de transistores de alta velocidad [22], el secuenciamiento de ADN [23], pantallas táctiles flexibles [24], por mencionar algunas. Por lo cual ha sido objeto de estudio en laboratorios de todo el mundo desde que fue aislado por primera vez, de manera que hoy en día se han caracterizado, de una manera muy completa, muchas de las propiedades de este material.

En este capítulo se presentará uno de los varios efectos cuasirelativistas que algunos autores [25, pp. 485-493], [27], [32], [33] han presentado como análogo al de la paradoja de Klein, lo cual podría entenderse como que esta paradoja (quizá resultaría más conveniente llamarle tunelaje Klein) es un fenómeno característico de las ecuaciones de onda relativistas¹. Para ello se presentará de manera breve las características principales y relevantes del grafeno para el estudio del problema.

¹Si bien el problema ha sido tratado usando la ecuación de Dirac, este fenómeno no es exclusivo de fermiones, pues se puede obtener un resultado análogo usando la ecuación de Klein-Gordon.

5.1. Grafeno

En 2004 en un laboratorio en el departamento de física de la universidad de Manchester, K. Novoselov y A. Geim aislaron por primera vez unas hojas, de apenas unas pocas capas atómicas de ancho (las más anchas de $\sim 3nm$), de grafeno (Few Layers of Graphene) y caracterizaron sus propiedades eléctricas [26], motivo por el cual les fue otorgado el premio nobel de física en 2010. El método que utilizaron resulta tan simple que pudiera sorprender que nadie antes lo hubiera descubierto, pues dicho método consistió en la utilización de un trozo de cinta adhesiva y grafito², de manera simplificada, se adhirió a la cinta la porción que esta pudiera tomar de un trozo de grafito, posteriormente la cinta fue doblada hacia adelante y hacia atrás varias veces con el objetivo de obtener porciones más y más delgadas (un proceso llamado por Novoselov, et al. como exfoliación mecánica), de las cuales se hizo una selección, por medios ópticos y producidos con la ayuda de un sustrato de SiO_2 , de las películas más delgadas, que posteriormente fueron analizadas en capas individuales por microscopía de fuerza atómica (Atomic Force Microscopy).

El grafeno es un alótropo del carbono, una estructura bidimensional como las que 80 años atrás Landau [27] (entre otros) argumentó que no podían ser termodinámicamente estables y por tanto no podrían existir, lo cual explicaría parcialmente porqué no fue descubierto antes como una estructura individual estable. Un átomo de carbono neutro y libre contiene seis electrones, dos de ellos en la subcapa $2p$ (dos en la subcapa $1s$ y dos en la subcapa $2s$), ocupando un orbital cada uno, de manera que se espera que este sea bivalente, si bien así ocurre algunas veces, también es posible encontrarlo en forma cuadrivalente, lo cual puede ocurrir cuando forma enlaces con otros átomos, esto es debido a que uno de sus electrones en la subcapa $2s$ puede dejarla para ocupar el tercer orbital $2p$ que no está ocupado, por lo tanto, existirán cuatro electrones sin aparear resultado de la

²La forma más común en que básicamente cualquier persona está familiarizada con el grafito se encuentra en la punta de un lápiz.

hibridación³ entre los orbitales $2s$, $2p_x$, $2p_y$ y $2p_z$. En el grafeno, los orbitales $2s$, $2p_x$ y $2p_y$ forman un orbital de hibridación sp^2 , que se orienta sobre el plano que forma la estructura bidimensional, de manera que existen tres electrones que se ligan con sus vecinos más cercanos (enlaces σ) y por tanto, en su conjunto, reproducen una red hexagonal, en donde cada átomo de carbono se localiza en el vértice, a una distancia de $\sim 1.42\text{\AA}$ uno del otro, que nos remonta a la imagen de un panal de abeja (Ver figura 5-1). El cuarto electrón se localiza en el orbital p_z , que se orienta ortogonal al plano de la estructura bidimensional, cada uno de estos electrones forma enlaces con los de su mismo tipo de sus vecinos más cercanos (enlaces π), y que en su totalidad conforman la estructura de bandas, la cual es responsable de las propiedades eléctricas del grafeno.

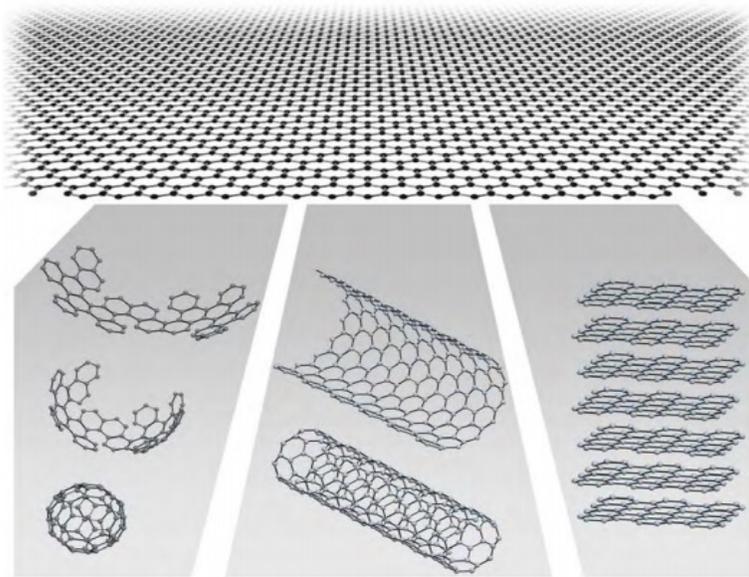


Figura 5-1: La figura muestra la estructura bidimensional del grafeno (superior), a partir de la cual se pueden formar otros 3 alótropos de carbono; fulerenos (inferior izquierda), nanotubos (inferior central) y grafito (inferior derecha). Fuente A. Geim & K. Novoselov, “The rise of graphene” [28].

Resulta particularmente curioso el hecho de que otras formas alotrópicas de carbono,

³Véase por ejemplo; Cohen-Tannoudji, C., Diu, B. & Laloë, F. *Quantum Mechanics*. Vol. I. Wiley-VCH, pp. 847-855

para ser específicos; los nanotubos de carbono, fullerenos y grafito, sean en última instancia estructuras de grafeno “dobladas” o “empaquetadas” en formas específicas. En particular, el grafito está compuesto por capas de grafeno apiladas y débilmente acopladas por fuerzas de Van der Waals, esto se sabía antes del descubrimiento de 2004, y fue con el trabajo de P. Wallace [29] que se caracterizó la estructura de bandas y el comportamiento semimetálico de dicho material. El resultado más interesante para este trabajo está relacionado con el hecho de que la estructura de bandas en el grafeno a bajas energías puede ser aproximada como conos localizados en los llamados “puntos de Dirac” (las esquinas de las zonas de Brillouin [18, pp. 89], ver figura 5-2), cuyas excitaciones a bajas energías propagándose por la red cumplen una relación de dispersión lineal. Dichas excitaciones son pseudopartículas de masa efectiva cero, usualmente conocidas como fermiones de Dirac, cuya velocidad de propagación es $v_F \approx 10^6 m/s$ [30]. Dadas tales características, la dinámica de estos conduce a lo que se ha dado el nombre de “efectos cuasirelativistas” [25, pp. 485], siendo que su descripción matemática queda expresada por una ecuación tipo Dirac en lugar de una ecuación tipo Schrödinger.

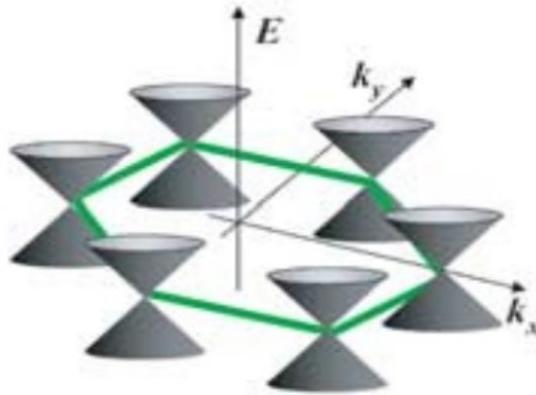


Figura 5-2: En la figura se muestra de una forma esquemática la ubicación de los conos de Dirac, por lo que a bajas energías se espera una relación de dispersión lineal de la forma $E = \pm v_f \hbar |k|$. Imagen extraída de Y. Zhang, et al. “Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry’s phase in graphene” [31].

Como se estudió en el tercer capítulo, la paradoja de Klein ocurre en tanto el potencial electrostático supere la energía $2mc^2$ y la energía de los electrones incidentes cubra la región $mc^2 < E < V_0 - mc^2$, de manera que si se requiere localizar un electrón a una distancia no mayor que la longitud de onda de Compton h/mc detrás del potencial, entonces ha de ser necesario producir una caída de potencial del orden $10^{16}V/cm$ en dicha distancia. Por tanto, la dificultad más grande para la observación experimental del tunelaje de Klein bajo estas condiciones, es la producción de un campo eléctrico con tales características.

Por otro lado, los portadores de carga en el grafeno cuentan con masa efectiva cero, de manera que no existe la zona prohibida de ancho $2mc^2$, y por tanto el grafeno resulta ser un medio efectivo donde el tunelaje Klein debería exhibirse claramente.

5.2. Paradoja de Klein en el grafeno

Considérese una partícula incidente desde $z = -\infty$, con masa efectiva $m \rightarrow 0$, a una región de potencial electrostático V_0 de ancho D , como se muestra en la siguiente figura:

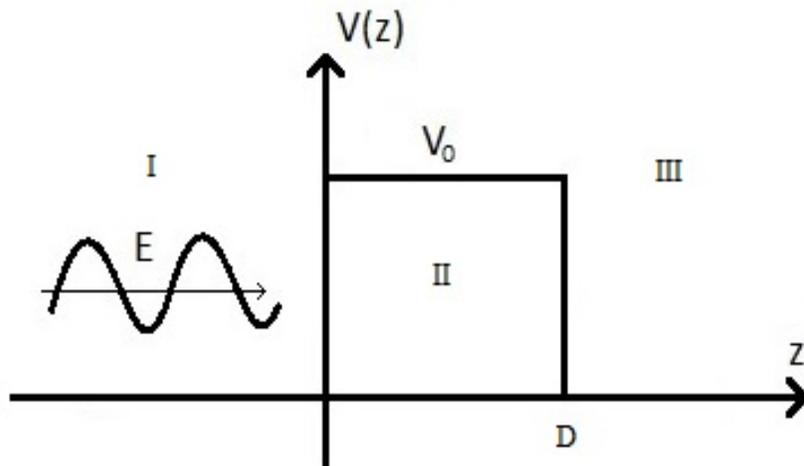


Figura 5-3: Barrera de potencial electrostático V_0 de ancho D , para una partícula incidente desde $-\infty$ con energía $0 < E < V_0$ y de masa nula.

El potencial $V(z)$ es de la forma:

$$V(z) = \begin{cases} V_0 & \text{si } 0 \leq z \leq D \\ 0 & \text{si } \textit{otros casos} \end{cases}$$

Y así la ec. de eigenvalores del problema, en 1D, es:

$$(c\alpha^3 p^3 + V_0)\psi(z) = E\psi(z). \quad (5-1)$$

De manera que se ha dividido en 3 regiones, y el caso de interés es para $0 < E < V_0$. Dado el análisis hecho en las secciones 3.3 y 3.4, las soluciones para cada una de las 3 regiones puede ser escritas de forma inmediata:

$$\psi_{\text{I}}(z) = \mathcal{I}e^{ik_1z} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \mathcal{R}e^{-ik_1z} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5-2)$$

$$\psi_{\text{II}}(z) = Ae^{ik_2z} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + Be^{-ik_2z} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5-3)$$

$$\psi_{\text{III}}(z) = \mathcal{T}e^{ik_1z} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5-4)$$

Resulta interesante la forma que han tomado los espinores con masa nula, pues la relación de dispersión para cada caso es; $c^2\hbar^2k_1^2 = E^2$ y $c^2\hbar^2k_2^2 = (E - V_0)^2$.

Imponiendo las condiciones de continuidad en $z = 0$ y $z = D$ se obtienen las ecuaciones:

$$\mathcal{I} + \mathcal{R} = A + B, \quad (5-5)$$

$$\mathcal{I} - \mathcal{R} = A - B,$$

$$Ae^{ik_2D} + Be^{-ik_2D} = \mathcal{T}e^{ik_1D},$$

$$Ae^{ik_2D} - Be^{-ik_2D} = \mathcal{T}e^{ik_1D},$$

lo cual implica que $|\mathcal{T}|^2 = |\mathcal{I}|^2$ y por supuesto $|\mathcal{R}|^2 = 0$.

A diferencia de la sección 3.4, no fue necesario considerar el límite en que el potencial V_0 es muy grande, esta es la razón por la que se espera que, en el grafeno, el tunelaje de Klein se presente de manera clara, por supuesto, no implica que sea sencillo experimentalmente.

Ahora bien, como se ha hecho hincapié, el grafeno es una estructura bidimensional, por lo que el análisis hecho anteriormente representaría un caso particular (de incidencia normal). Para entender la situación análoga presentada para los portadores de carga en el grafeno, es de mayor utilidad y simplicidad escribir la ecuación tipo Dirac en un formalismo de espinor de dos componentes. Para ello se utiliza la aproximación de amarre fuerte (tight-binding), la cual consiste en que los electrones pueden saltar únicamente entre los primeros y segundos vecinos más cercanos, además consideremos que la estructura hexagonal de la red está compuesta por 2 subredes triangulares “equivalentes”, que se etiquetarán como A y B (ver figura 5-4).

Las bandas de energía obtenidas a partir del Hamiltoniano en la aproximación de amarre fuerte son simétricas alrededor del punto de energía 0 [34], más aún, el Hamil-

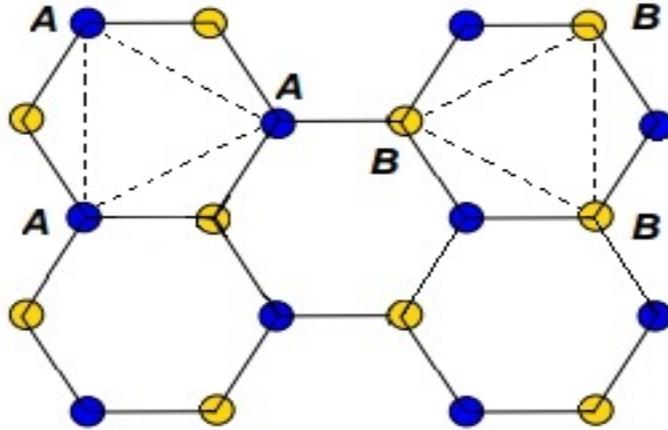


Figura 5-4: Cada estructura hexagonal en la red de átomos de carbono en el grafeno se conforma por dos subredes triangulares, determinadas por los átomos etiquetados con A o B (en azul o amarillo, respectivamente).

toniano efectivo en esta aproximación y cerca de los puntos de Dirac está compuesto de dos copias que describen cuasi-partículas de masa efectiva 0, de manera que nos es posible separar el Hamiltoniano de 4×4 en dos bloques de 2×2 , cada uno dando origen a una banda (de conducción y de valencia) y relacionadas entre sí por una operación de simetría, por lo que la física queda contenida en una ecuación de 2×2 . Dicha ecuación se puede escribir, con ayuda de las matrices de Pauli, como:

$$\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}. \quad (5-6)$$

Llamaremos entonces “cuasi-espín” al grado de libertad que indica la localización de las cuasipartículas, de manera que ψ_A y ψ_B representa la amplitud de probabilidad de que la cuasipartícula se localice en la subred A y B respectivamente.

A partir de la ec. (5-6), separando las partes espaciales y temporales como se ha

hecho, es inmediato escribir el par de ecs:

$$\begin{aligned}\hbar v_F(k_x - ik_y)\psi_B &= E\psi_A, \\ \hbar v_F(k_x + ik_y)\psi_A &= E\psi_B.\end{aligned}\tag{5-7}$$

Con lo cual se puede obtener la relación de dispersión:

$$\begin{aligned}\hbar^2 v_F^2(k_x^2 + k_y^2) &= \hbar^2 v_F^2 |\vec{k}|^2 = E^2 \\ \implies \hbar v_F |\vec{k}| &= \pm E.\end{aligned}\tag{5-8}$$

Este es el espectro cónico ilustrado en la figura 5-2 y es el resultado de la intersección de las bandas de energía originándose de las subredes A y B. Se puede entonces identificar que los estados de energía positiva son los portadores de carga, pues yacen en la banda de conducción (es decir, los estados ocupados dentro de los conos con $E > 0$), y son del tipo electrón [32]. Ahora bien, como se acaba de mostrar, los estados de energía negativa están interconectados con los de energía positiva por la misma ecuación de Dirac, existe por tanto una operación de simetría entre estos, por lo que los agujeros en la banda de valencia (es decir, los estados desocupados dentro de los conos con $E < 0$) se comportan como cuasipartículas cargadas positivamente, por tanto son el equivalente (en el grafeno) a los positrones.

Se puede ahora definir la cantidad conocida como helicidad, que en el caso del grafeno será la proyección del cuasi-espín a lo largo de la dirección de movimiento \vec{k} , y es positiva para los portadores tipo electrón y negativa para agujeros. Dicho concepto, así como el del cuasi-espín son muy importantes para entender el tunelaje Klein (así como otros fenómenos cuasirelativistas), pues la explicación se puede hallar en la conservación de estas cantidades, lo cual se explicará más adelante.

Dado que se ha introducido un nuevo formalismo para la ec. (5-6), es necesario replantear el problema bidimensional de dispersión, pues ahora no se cuenta con la dirección z . Para ello considérese una pseudo partícula (sin masa) libre incidente en la región $x < 0$, la cual forma un ángulo ϕ con respecto a la dirección x . En la región $x > 0$ existe una barrera de potencial electrostático de ancho finito D , por lo que la onda transmitida dentro de la barrera ahora forma un ángulo θ con respecto a la dirección x . Fuera de la barrera, la onda transmitida es nuevamente libre, por lo que forma un ángulo ϕ con respecto a la dirección x . Véase figura 5-5.

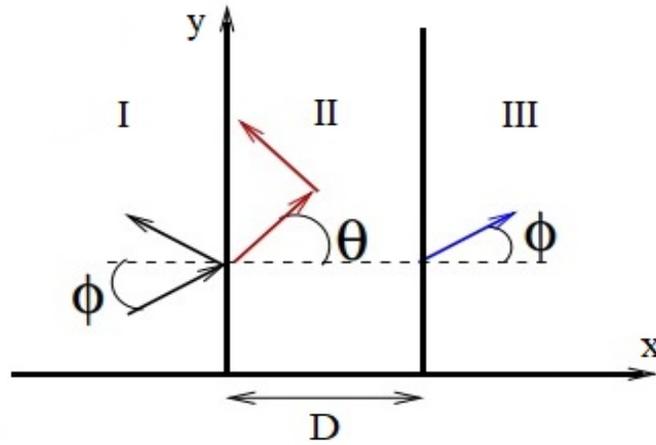


Figura 5-5: Esquema del problema en 2 dimensiones con una barrera de potencial electrostático V_0 de ancho D e infinitamente extendido en el eje y , para una pseudo-partícula incidente a un ángulo ϕ con respecto al eje x , con energía $0 < E < V_0$.

La barrera de potencial en el grafeno puede ser creada por el efecto de campo eléctrico usando un aislante delgado o por un dopaje químico local [26], y para el análisis teórico

consideremos que:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{si } 0 \leq x \leq D \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

Y así la ec. tipo Dirac que se busca resolver es:

$$[\hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{k} + V(x)] \begin{pmatrix} \psi_n^1(x, y) \\ \psi_n^2(x, y) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_n^1(x, y) \\ \psi_n^2(x, y) \end{pmatrix}, \quad (5-9)$$

en donde el subíndice $n = \{I, II, III\}$.

Para la región I, una onda plana incidente con vector de propagación \vec{k} es $\psi_{inc}^1 = \mathcal{I}e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$, y del par de ecs. (5-7), se tiene que:

$$\hbar v_F (-i\partial_x + \partial_y) \mathcal{I}e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} = \mathcal{I} \hbar v_F (k_x + ik_y) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} = E \psi_{inc}^2. \quad (5-10)$$

Dado que $k_x = |\vec{k}| \cos \phi$, $k_y = |\vec{k}| \sin \phi$, y de la ec. (5-8) para $E > 0$, se obtiene que:

$$\psi_{inc}^2 = \mathcal{I}e^{i\phi} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}. \quad (5-11)$$

Ahora para la onda reflejada, se tiene que $\psi_{ref}^1 = \mathcal{R}e^{i(-k_x x + k_y y)}$, pues el potencial solo invierte la dirección del ímpetu en x , por lo que:

$$\hbar v_F (-i\partial_x + \partial_y) \mathcal{R}e^{i(-k_x x + k_y y)} = -\mathcal{R} \hbar v_F e^{-i\phi} e^{i(-k_x x + k_y y)} = E \psi_{ref}^2. \quad (5-12)$$

Usando las ecs. (5-9), (5-11) y (5-12), se puede escribir el espinor completo de la

primer región como:

$$\psi_{\text{I}}(x, y) = \mathcal{I} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i(k_x x + k_y y)} + \mathcal{R} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\phi} \end{pmatrix} e^{i(-k_x x + k_y y)}. \quad (5-13)$$

Para la región II, ya que el potencial actúa únicamente en el eje x , el ímpetu en la dirección x se ve modificado, no así en la dirección y , por lo que el vector de propagación es ahora $\vec{k}' = (q_x, k_y)$, y de la ec. (5-9) se obtienen el par de ecuaciones:

$$\begin{aligned} \hbar v_F(q_x - ik_y)\psi_{\text{II}}^2 &= (E - V_0)\psi_{\text{II}}^1, \\ \hbar v_F(q_x + ik_y)\psi_{\text{II}}^1 &= (E - V_0)\psi_{\text{II}}^2. \end{aligned} \quad (5-14)$$

Por lo que la relación de dispersión es $\hbar v_F(q_x^2 + k_y^2) = (E - V_0)^2$.

De manera análoga que para la región I, la primer componente del espinor tendrá la forma $\psi_{\text{II}}^1 = Ae^{i(q_x x + k_y y)} + Be^{i(-q_x x + k_y y)}$, por lo que usando (5-14) entonces:

$$A\hbar v_F(q_x + ik_y)e^{i(q_x x + k_y y)} - B\hbar v_F(q_x - ik_y)e^{i(-q_x x + k_y y)} = (E - V_0)\psi_{\text{II}}^2. \quad (5-15)$$

Ahora se tiene que $q_x = |\vec{k}'|\cos\theta$, $k_y = |\vec{k}'|\sen\theta$, y dado que $E - V_0 < 0$, entonces el espinor de la región II es:

$$\psi_{\text{II}}(x, y) = A \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\theta} \end{pmatrix} e^{i(q_x x + k_y y)} + B \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\theta} \end{pmatrix} e^{i(-q_x x + k_y y)}. \quad (5-16)$$

Por último, es inmediato notar que el espinor en la región 3 debe ser:

$$\psi_{\text{III}}(x, y) = \mathcal{T} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i(k_x x + k_y y)}. \quad (5-17)$$

Imponiendo ahora las condiciones de continuidad para las ecs. (5-13), (5-16) y (5-17) se obtienen las ecuaciones:

$$\psi_{\text{I}}(x = 0, y) = \mathcal{I} + \mathcal{R} = A + B = \psi_{\text{II}}(x = 0, y), \quad (5-18)$$

$$\psi_{\text{I}}(x = 0, y) = \mathcal{I}e^{i\phi} - \mathcal{R}e^{-i\phi} = -Ae^{i\theta} + Be^{-i\theta} = \psi_{\text{II}}(x = 0, y).$$

$$\psi_{\text{II}}(x = D, y) = Ae^{iq_x D} + Be^{-iq_x D} = \mathcal{T}e^{ik_x D} = \psi_{\text{III}}(x = D, y), \quad (5-19)$$

$$\psi_{\text{I}}(x = D, y) = -Ae^{i\theta}e^{iq_x D} + Be^{-i\theta}e^{-iq_x D} = \mathcal{T}e^{i\phi}e^{ik_x D} = \psi_{\text{III}}(x = D, y).$$

Las condiciones de continuidad están traslapando las soluciones tipo electrón que son los estados ocupados en la banda de conducción hasta la energía $E = E_F$ (la energía de Fermi), para la región libre de potencial, con las soluciones tipo agujero, las cuales son estados no ocupados en la banda de valencia que se encuentra dentro de la región del potencial electrostático, ya que la posición de los conos de Dirac es modificada por la acción del potencial electrostático, de la misma forma en que sucede con la analogía entre el un superconductor y un metal, como se realizó en la sección 4.5. Esto se puede ver de una forma esquemática en la figura 5-6.

Ya que de la amplitud de la onda incidente se tiene, en principio, control experimental, la solución al sistema de ecuaciones para la amplitud de onda reflejada es:

$$\mathcal{R} = \mathcal{I} \frac{2e^{i\phi}(\text{sen}\phi + \text{sen}\theta)\text{sen}(q_x D)}{-2i\text{sen}(q_x D) - (e^{-iq_x D}\cos(\phi + \theta) + e^{iq_x D}\cos(\phi - \theta))}. \quad (5-20)$$

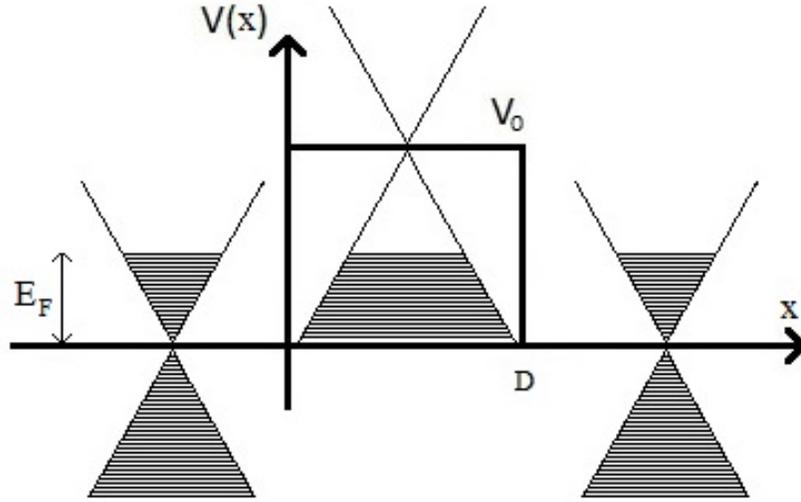


Figura 5-6: La figura muestra en líneas horizontales dentro de los conos de Dirac los estados ocupados para cada región, correspondientes a las de la figura 5-5, hasta la energía de Fermi E_F .

Y ya que los coeficientes de transmisión y reflexión deben satisfacer $|\mathcal{I}|^2 = |\mathcal{R}|^2 + |\mathcal{T}|^2$, se obtiene finalmente que:

$$|\mathcal{T}|^2 = |\mathcal{I}|^2 \frac{\cos^2 \theta \cos^2 \phi}{\cos^2 \theta \cos^2 \phi \cos^2(q_x D) + \sin^2(q_x D) (\sin \phi \sin \theta + 1)^2}. \quad (5-21)$$

Las ecs. (5-20) y (5-21) implican que para $q_x D = N\pi$ (condiciones de resonancia), con $N = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, la transmisión es perfecta, pues $|\mathcal{T}|^2 = |\mathcal{I}|^2$, $|\mathcal{R}|^2 = 0$.

Más aun, en el caso de incidencia normal, para el cual $\phi = \theta = 0$, la transmisión también es perfecta. Lo cual concuerda con lo obtenido al inicio de esta sección, en el formalismo de espinor de cuatro componentes.

Si bien en principio, para partículas sin masa no existe un mínimo teórico de campo eléctrico necesario para producir los estados tipo positrón dentro de la barrera de potencial, en la práctica un campo de $\sim 10^5 V/cm$ (11 ordenes de magnitud menor que el necesario para producir el tunelaje Klein en partículas con masa efectiva no nula) debería

ser suficiente [33].

Ahora bien, teniendo en cuenta el caso de incidencia normal, se puede entender el tunelaje de Klein a partir del hecho de que la barrera de potencial electrostático no puede modificar la dirección del espín (pseudo-espín en este caso), justo como se probó en la sección 1.5 para electrones la ecuación de Pauli. Una pseudo-partícula reflejada requeriría un cambio en la dirección del ímpetu $k_x \rightarrow -k_x$, y ya que esta partícula ha de ser del tipo electrón, su helicidad debe de ser positiva, lo cual implica que debe haber un cambio en su pseudo-espín, dado que esto no puede suceder por el tipo de potencial que se está considerando, una pseudo-partícula tipo electrón viajando de izquierda a derecha solo puede ser dispersada por este tipo de potencial a una pseudo-partícula tipo electrón o agujero viajando en la misma dirección u opuesta respectivamente⁴, es decir, es debido a la conservación del pseudo-espín.

Antes de concluir el capítulo, cabe mencionar que el estudio de estructuras bidimensionales, entre ellas el grafeno (y de su peculiar estructura de bandas), motivó en su momento el desarrollo de la teoría de bandas desde un punto de vista topológico, que eventualmente desencadenó en la predicción y descubrimiento de, por ejemplo, los aislantes topológicos. Estos en su superficie cuentan con fermiones de Dirac, que satisfacen a bajas energías una relación de dispersión lineal, como la del grafeno, por lo que su estructura de bandas sería similar (conos que se tocan en puntos aislados), de no ser porque existe una separación entre las bandas de conducción y de valencia.

Dicho lo anterior, es natural preguntarse si existen materiales análogos en tres dimensiones al grafeno (análogos en su estructura de bandas), de esta manera podría estudiarse experimentalmente el fenómeno del tunelaje de Klein en tres dimensiones de manera viable. La respuesta es que si, dichos materiales son llamados semi-metales de Dirac, los cuales son tales que, a bajas energías, las bandas de conducción y valencia se tocan en

⁴El primer caso sucedería para $E > V_0$.

puntos aislados (por supuesto, se está sobre simplificando, los semi-metales de Dirac son mucho más generales que el caso particular del grafeno, simplemente se resalta la característica que de ellos nos interesan para la conclusión de este capítulo). En concreto, se han propuesto [35] diseños experimentales para medir el tunelaje de Klein en semi-metales de Weyl, estos sistemas pueden ser creados al modular la concentración de un metal alcalino de dopaje en diferentes regiones de un semi-metal de Dirac.

Los resultados analíticos y numéricos muestran que dichos sistemas si deberían presentar tunelaje de Klein, la diferencia radica en que al estudiar analíticamente las soluciones, se obtienen condiciones de resonancia para dos ángulos (pues el problema es tridimensional), lo que produce transmisión perfecta a lo largo de anillos concéntricos completos, que se reducen perfectamente al caso bidimensional haciendo 0 alguno de los dos ángulos. Más aún, al inducir un campo magnético externo uniforme aplicado en la misma región que actúa el potencial escalón, se podría modificar enormemente el perfil de transmisión, esto es debido a que los fermiones de Dirac experimentan una fuerza de Lorentz⁵. Así sería posible, por ejemplo, inducir campos magnéticos en 2 direcciones ortogonales apropiadas, de manera que el haz perfectamente transmitido sea enfocado y seleccionado, lo cual es una clara aplicación óptica potencialmente muy importante.

⁵Si bien no se introdujo esta idea para el desarrollo previo de este capítulo (a falta de espacio), se puede estudiar analítica y numéricamente el efecto de campos magnéticos en las propiedades de transporte de grafeno [36], cuyos resultados pueden ser de gran interés en aplicaciones tecnológicas concretas.

Capítulo 6

Confinamiento

El problema del confinamiento al que se refiere este capítulo tiene su origen en lo discutido en el primer capítulo, en el cual se planteó la situación del escalón de potencial electrostático en relación con esta idea simplificada de lo que significa confinar electrones en cierta región espacial. El fenómeno del tunelaje Klein presenta un obstáculo para tal objetivo, por lo que esencialmente un potencial que no presente tal característica es un buen candidato para llegar a ser considerado como potencial de confinamiento¹, la cuestión que compete a este capítulo es por tanto mostrar que potencial cumple tal característica.

Una pista a seguir tiene que ver con los núcleos atómicos. A principios de la década de 1930-1939, la mecánica cuántica había sido, por decirlo de alguna forma, razonablemente bien establecida, mas aún, Dirac la había llevado un paso más adelante al proponer su ecuación, como se mostró en el capítulo 3. Sin embargo persistía un problema fundamental, los físicos sabían de la existencia de los protones y electrones, los primeros conformando parte del núcleo atómico a distancias típicas de $\sim 10^{-15}m$, pero siendo así,

¹Confinamiento para el tipo de interacción que este represente.

¿que los mantiene unidos?, ciertamente a esa distancia los protones deberían sufrir una repulsión eléctrica enorme, por lo que los núcleos no podrían ser estables. Para dar una posible explicación, naturalmente surgieron toda clase de teorías, pero todo fue pareciendo más claro cuando en 1932, J. Chadwick descubrió la existencia de los neutrones [37], partículas neutras y de masa muy cercana a la del protón, que también conforman, junto con los protones, los núcleos atómicos, por lo que se les suele llamar indistintamente “nucleones”. Por otro lado, y casi a la par del descubrimiento de Chadwick, Fermi se encontraba trabajando en el problema del decaimiento beta del neutrón², mediante el cual dicho neutrón decae en un protón mediante la emisión de un electrón y un neutrino³ del electrón [1, 2], [38]. Debido al gran éxito de la teoría de Fermi, se pensó inicialmente usarla para explicar la fuerza de atracción que mantiene unidos a los nucleones, la idea en sí resultaba simple y natural, en esencia se buscaba explicar la naturaleza cohesiva de la fuerza argumentando que cuando dos nucleones se encuentran a distancias nucleares uno del otro, los neutrinos y electrones (de la teoría de Fermi) saltan entre ellos una y otra vez, por lo que estos producirían una especie de fuerza de intercambio atractiva, de manera similar a como ocurre en la molécula H_2^+ entre dos protones y un electrón de intercambio. Sin embargo, los cálculos teóricos mostraron que la energía de amarre producida por este modelo, tendría una diferencia de ¡15 órdenes de magnitud! con respecto al valor esperado. En 1935, H. Yukawa propuso que en lugar del electrón y neutrino ser consideradas como las partículas intercambiadas entre nucleones, sería necesario introducir una nueva y hasta el momento desconocida partícula, a la que por aquel entonces se le nombró “mesón” [39], no fue hasta 1947 cuando se descubrió definitivamente que la partícula responsable de la interacción de Yukawa es el pión, y si bien hoy en día, bajo la concepción del modelo estándar, aquel modelo de interacción resulta una especie

²El problema se conocía con el nombre de desintegración β .

³Para ser más precisos, debe ser un antineutrino del electrón.

de efecto residual de la fuerza fuerte de QCD, es justo dicho modelo el que nos será de utilidad para el desarrollo de este capítulo.

6.1. Paradoja de Klein para un potencial pseudoescalar

Los piones son mesones pseudoescalares (de paridad negativa) [38], que en este modelo de intercambio para la interacción nucleón-nucleón, puede describirse, en cierta aproximación, mediante la introducción de un término de potencial central pseudoescalar en la ecuación de Dirac [40]. Más aún, dicha aproximación es también relevante en el llamado “modelo quirial de bolsa” (χBM), este hecho nos permite analizar la presencia de un efecto tipo Klein para tal tipo de interacción, lo cual a su vez resulta de gran importancia, pues si el potencial pseudoescalar modelado presenta un fenómeno tipo Klein, este no podría ser usado como potencial de confinamiento. En retrospectiva, siendo que dicho modelo puede ser utilizado para el confinamiento de quarks [41], es de esperar que tal interacción no presente tunelaje Klein.

La ecuación de Dirac para este tipo de interacción puede escribirse como [39]:

$$[c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2 + ig\phi(\vec{x})\gamma^0\gamma^5]\psi(\vec{x}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x}, t). \quad (6-1)$$

En donde g es una constante de acoplamiento, en tanto que ϕ representa un potencial que, en principio podría ser función de la posición. Por otro lado observemos que el número complejo i es necesario, pues de otra forma el Hamiltoniano no sería Hermitiano.

Ahora bien, nos interesaría analizar la ec. (6-1) de una manera similar a como se ha estudiado el caso del potencial electrostático escalón en la ecuación de Dirac, pues es a

partir de este que obtuvimos la paradoja de Klein. Para ello, podemos empezar pensando el problema unidimensional, en la dirección z y hagamos $g\phi(z) = V_5(z)$ tal que:

$$V_5(z) = \begin{cases} 0 & \text{si } z < 0 \\ V_5 & \text{si } z \geq 0 \end{cases}$$

en donde V_5 es constante.

Por lo tanto, en la región de espacio que actúa el potencial pseudoescalar, el Hamiltoniano toma la forma $\hat{H} = c\alpha^3 p^3 + \beta mc^2 + iV_5 \gamma^0 \gamma^5$, y con ello, la ecuación de eigenvalores para las soluciones de energía positiva queda dada por:

$$[c\alpha^3 p^3 + \beta mc^2 + iV_5 \gamma^0 \gamma^5]U(z) = EU(z). \quad (6-2)$$

Podríamos en este punto comenzar a buscar la forma analítica del espinor en la ec. (6-2), de manera similar a como se ha realizado anteriormente, y con ello analizar la física de las soluciones para finalmente concluir si nuestro potencial pseudoescalar da origen a un efecto de producción de pares. El camino que se tomará es distinto, pero es de cierta forma sugerido tomando en cuenta el análisis hecho en capítulos anteriores y expresa de una forma sencilla (y visual mayormente) la ventaja de la aproximación al problema de la paradoja de Klein mediante el uso de la teoría de agujeros.

Para comenzar, considérese el Hamiltoniano de la ec. (6-2) en su forma matricial:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & c\sigma^3 p^3 \\ c\sigma^3 p^3 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} mc^2 & 0 \\ 0 & -mc^2 \end{pmatrix} + igV_5 \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1} \\ \mathbb{1} & 0 \end{pmatrix}. \quad (6-3)$$

Sumando los términos entonces:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} mc^2 & c\sigma^3 p^3 + igV_5 \\ c\sigma^3 p^3 - igV_5 & -mc^2 \end{pmatrix}. \quad (6-4)$$

Lo que se hará a continuación es obtener la forma matricial de \hat{H}^2 , de manera que:

$$\begin{aligned} \hat{H}^2 &= \begin{pmatrix} mc^2 & c\sigma^3 p^3 + igV_5 \\ c\sigma^3 p^3 - igV_5 & -mc^2 \end{pmatrix}^2 \\ &= \begin{pmatrix} (mc^2)^2 + (c\sigma^3 p^3 + igV_5)(c\sigma^3 p^3 - igV_5) & 0 \\ 0 & (mc^2)^2 + (c\sigma^3 p^3 - igV_5)(c\sigma^3 p^3 + igV_5) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (mc^2)^2 + p^2 c^2 + icg[V_5, \sigma^3 p^3] + (gV_5)^2 & 0 \\ 0 & (mc^2)^2 + p^2 c^2 - icg[V_5, \sigma^3 p^3] + (gV_5)^2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6-5)$$

Dado que en el caso que se está estudiando, V_5 no depende de la posición, entonces $[V_5, \sigma^3 p^3] = 0$, y por lo tanto se puede reescribir la ecuación de eigenvalores (6-2) para \hat{H}^2 en forma matricial como:

$$\begin{pmatrix} (mc^2)^2 + p^2 c^2 + (gV_5)^2 & 0 \\ 0 & (mc^2)^2 + p^2 c^2 + (gV_5)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = E^2 \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (6-6)$$

Lo cual nos permite facilmente obtener la relación de dispersión:

$$(mc^2)^2 + p^2 c^2 + (gV_5)^2 = E^2. \quad (6-7)$$

Esta última ecuación es justamente la que necesitamos y que de hecho es suficiente para demostrar si existe o no paradoja de Klein para el potencial se ha elegido estudiar.

Como se ha probado a lo largo de todo este trabajo, por lo menos en el caso unidimensional y trabajando con soluciones de onda plana, nos es suficiente conocer la relación de dispersión para saber la forma de las soluciones en un problema de dispersión de este tipo. Podemos expresar lo anterior de una manera un poco más precisa si pensamos lo siguiente; supóngase que $\psi_\beta = A_\beta e^{ikz} + B_\beta e^{-ikz}$ son soluciones a la ecuación $\hat{H}_{\alpha\beta}\psi_\beta = E\psi_\beta$, si la relación de dispersión es una función de la forma $k^2 = f(E, V)$, entonces las funciones ψ_β son soluciones oscilantes si $k^2 > 0$.

Entonces la condición para que las soluciones a la ec. (6-2) sean oscilantes, dada la ec. (6-7):

$$p^2 c^2 = E^2 - (mc^2)^2 - (gV_5)^2 > 0. \quad (6-8)$$

Y por lo tanto:

$$|E| > \sqrt{(mc^2)^2 + (gV_5)^2}. \quad (6-9)$$

Evidentemente $mc^2 < \sqrt{(mc^2)^2 + (gV_5)^2}$, lo que nos lleva directamente interpretar la ec. (6-9) mediante la figura 6-1 y teniendo presente la discusión de los capítulos 3 y 4:

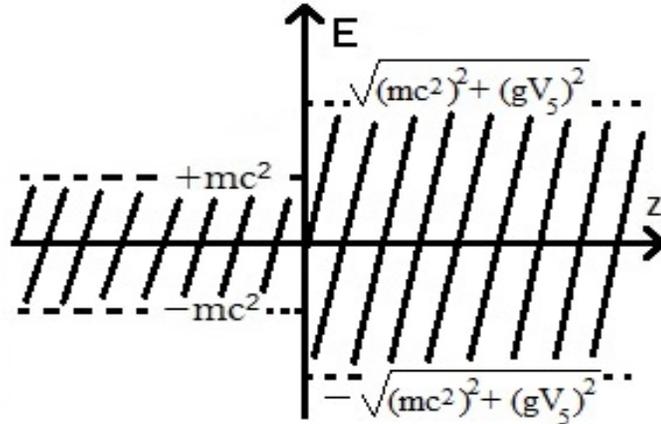


Figura 6-1: Zona prohibida en una región libre de potencial ($z < 0$) y en una región sujeta a un potencial pseudoescalar ($z \geq 0$).

La diferencia fundamental que tiene este problema con el del potencial escalón elec-

trostático es que la región en donde las soluciones son evanescentes, ahora no ha modificado su posición relativa al vacío, de hecho su posición ha quedado fija, con la diferencia de que, en la región que actúa el potencial pseudoescalar, dicha región ha aumentado su ancho. Esto último es una consecuencia de la ec. (6-9), ya que para la región energética $-\sqrt{(mc^2)^2 + (gV_5)^2} \leq E \leq \sqrt{(mc^2)^2 + (gV_5)^2}$, la ec. (6-7) nos dice que $p^2 < 0$, con lo que las soluciones dicha región son exponenciales reales, cuya corriente de probabilidad es 0.

Se puede entonces entender que el potencial pseudoescalar dado por la ec. (6-2) no conduce a una situación similar a la paradoja de Klein, por el contrario, el potencial que se ha estudiado puede entenderse, en el sentido que se definió en el capítulo 1, como un potencial de confinamiento. Dicho resultado fue generalizado por Martinez y Romero, R. P., Moreno, M. & Zentella, A. (1991) [42] a todos los potenciales supersimétricos de Dirac ($\beta\gamma^5$, $\beta\gamma^i$, γ^5 y $\beta\sigma^{0i}$).

Capítulo 7

Conclusiones

El problema que da origen a la paradoja resulta muy sencillo de plantear, pero la paradoja en sí misma adquiere mayor dificultad conceptual mientras más se estudia, no en vano fue objeto de discusión por al menos 70 años [12], más aún, dada la impracticabilidad técnica de realizar un experimento (con electrones en el vacío) que contraste la teoría con el mundo real.

Así pues, el enfoque con que se ha aproximado al problema en el desarrollo de este trabajo buscó hilar las ideas conceptuales de una forma orgánica, de manera que resulte tan natural, como sea posible, la introducción de algunas de las aplicaciones modernas que este fenómeno da lugar.

Ya que no existe a día de hoy un experimento que mida de manera directa el fenómeno y compare con las predicciones teóricas, puesto que no es posible, en la actualidad, generar en el laboratorio un campo electrostático con las condiciones necesarias en el vacío, se ha mostrado como algunas propiedades del grafeno pueden ser entendidas como análogas a efectos relativistas, dadas las características de dicho material. Para ello resultó de gran utilidad entender la resolución de la paradoja en términos de la teoría de agujeros.

El estudio del tunelaje de Klein en los sistemas de estado sólido ha mostrado un

gran potencial, ya sea para sistemas bidimensionales o tridimensionales, se podrían, por ejemplo, construir sistemas ópticos tales que bajo la influencia de campos magnéticos externos, presenten una alta selectividad y transparencia, no solo de regiones específicas en las que se transmitan las cargas (enfoque), sino también selectividad en rangos de energía muy específicos, todo esto a escalas nanométricas.

Por otro lado, la idea simplificada de confinamiento, definida para este trabajo, se contrapone directamente a la paradoja de Klein, lo que nos ha llevado a la búsqueda de un potencial de interacción para el que esta no ocurra. Para ello se escogió un potencial pseudoescalar que, en ciertas aproximaciones, resulta relevante para la interacción entre nucleones, así como un modelo quiral de bolsa para el confinamiento de quarks. Si bien un estudio detallado de este último fenómeno requiere de especial atención, escapa al alcance de la discusión actual, por lo que únicamente se presentó de manera breve y podría ser ampliado en un trabajo posterior.

Bibliografía

- [1] Gamov, G. *Thirty Years that Shook Physics; The Story of Quantum Theory*. New York: Dover, (1966).
- [2] Guillemin, V. *The Story of Quantum Mechanics*. New York: Dover, (1968).
- [3] Heisenberg, W. *Physics and Philosophy; The revolution in modern science*. New York: Harper, (1958).
- [4] Neumann, J. *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*. New Jersey: Princeton, (1955).
- [5] Griffiths, D. J. *Introduction to Quantum Mechanics*. 2^a ed. New Jersey: Prentice Hall, (2005).
- [6] Bjorken, J. D. & Drell, S. D. *Relativistic Quantum Mechanics*. New York: McGraw-Hill, (1964).
- [7] Sakurai, J. J. & Napolitano, J. *Modern Quantum Mechanics*. 2^a ed. San Francisco: Addison-Wesley, (1994).
- [8] Wheeler, J. A. “On the mathematical description of light nuclei by the method of resonating group structure”. *Phys. Rev.*, **52**, 1107 (1937).
- [9] Gasiorowicz, S. *Quantum Physics*. 3^a ed., New York: Wiley, (2003).

- [10] Dirac, P. A. M. “The quantum theory of electron”. Proc. Roy. Soc., A **117**, 610 (1928).
- [11] Itzykson, C. & Zuber, J. *Quantum Field Theory*. New York: McGraw Hill, (1980).
- [12] Calogeracos, A. & Dombey, N. “History and physics of the Klein paradox”. Contemp. Phys., **40**, 313-321 (1999).
- [13] Klein, O. “Die Reflexion von Elektronen an einem Potentialsprung nach der relativistischen Dynamik von Dirac”. Z. Physik, **53**, 157-165 (1929).
- [14] Feynman, R. P. “The theory of positrons”. Phys. Rev., **76**, 749 (1949).
- [15] Stückelberg, E. C. G. “Remarque à propos de la création de paires de particules en théorie de relativité”. Helv. Phys. Acta, **14**, 588-594 (1941).
- [16] Schweber, S. S. *QED and the men who made it; Dyson, Feynman, Schwinger and Tomonaga*. New Jersey: Princeton, (1994).
- [17] Fowler, R. H. & Nordheim, L. “Electron emission in intense electric fields”. Proc. Roy. Soc., A **119**, 173-181 (1928).
- [18] Ashcroft, N. W. & Mermin, N. D. *Solid State Physics*. Orlando: Harcourt, (1976).
- [19] Greiner, W. *Relativistic Quantum Mechanics; Wave equations*. 3^a ed. Berlin, Springer, (2000).
- [20] Greiner, W., Müller, B. & Rafelski, J. *Quantum Electrodynamics of Strong Fields*. Berlin: Springer-Verlag, (1985).
- [21] Hansen, A. & Ravndal, F. “Klein’s paradox and its resolution”. Phys. Scripta, **23**, 1036-1042 (1981).

- [22] Liao, L., et al. “High-speed graphene transistors with a self-aligned nanowire gate”. Nature, **467**, 305-308 (2010).
- [23] Garaj, S., et al. “Graphene as a subnanometre trans-electrode membrane”. Nature, **467**, 190-193 (2010).
- [24] Kim, K. S., et al. “Large-scale pattern growth of graphene films for stretchable transparent electrodes”. Nature, **457**, 706-710 (2009).
- [25] Volke, K., et al. *Analogías y conexiones en la física*. Publicado digitalmente en México: CopIt-Arxives, (2020).
- [26] Novoselov, K. S., et al. “Electric field effect in atomically thin carbon films”. Science, **306**, 666-669 (2004).
- [27] Landau, L. D. “Zur Theorie der phasenumwandlungen II”. Phys. Z. Sowjetunion, **11**, 26-35 (1937).
- [28] Geim, A. K. & Novoselov, K. S. “The rise of graphene”. Nature Materials, **6**, 183-191 (2007).
- [29] Wallace, P. R. “The band theory of graphite”. Phys. Rev., **71**, 622 (1947).
- [30] Deacon, R. S., et al. “Cyclotron resonance study of the electron and hole velocity in graphene monolayers”. Phys. Rev., **76**, 081406 (2007).
- [31] Zhang, Y., et al. “Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry’s phase in graphene”. Nature, **38**, 201-204 (2005).
- [32] Schroeder, P. R., Dresselhaus, M. S., & Javan, A. “Location of Electron and Hole Carriers in Graphite from Laser Magnetoreflexion Data”. Phys. Rev. Lett., **20**, 1292-1295 (1968).

- [33] Katsnelson, M. I., Novoselov, K. S. & Geim, A. K. “Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene”. *Nature Phys.*, **2**, 620-625 (2006).
- [34] Castro Neto, A. H., et al. “The electronic properties of graphene”. *Rev. Mod. Phys.*, **81**, 109 (2009).
- [35] Yesilyurt, C., Tan, S., Liang, G. et al. “Klein tunneling in Weyl semimetals under the influence of magnetic field”. *Sci. Rep.*, **6**, 38862 (2016).
- [36] Bala Kumar, S., Jalil, M. B. A., Tan, S. G., “Klein tunneling in graphene systems under the influence of magnetic field”. *Journal of Applied Physics*, **114**, 084314 (2013).
- [37] Chadwick, J. “Possible Existence of a Neutron”. *Nature*, **129**, 312 (1932).
- [38] Griffiths, D. J. *Introduction to elementary particles*. Weinheim: Wiley-VCH, (2004).
- [39] Yukawa, H. “On the interaction of elementary particles”. *Proc. Phys. Math. Soc. Jap.*, **17**, 48-57 (1935).
- [40] Moreno, M. & Zentella, A. “Dirac particle in a pseudoscalar potential”. *AIP Conference Proceedings*, **359**, 487 (1996).
- [41] Lee, T. D. *Particle Physics and Introduction to Field Theory*. Chur: Harwood, (1981).
- [42] Martinez y Romero, R. P., Moreno, M. & Zentella, A. “Supersymmetric properties and stability of the Dirac sea”. *Phys. Rev. D*, **43**, 2036-2040 (1991).