

Análisis histórico del origen de la ecuación de Dirac, a partir de su relación con la estructura fina del hidrógeno

$$\left(i\hbar\gamma^\mu \partial_\mu - mc \right) \psi = 0$$

Joan Leonardo Duarte Bernal
Departamento de Física
Universidad Pedagógica Nacional

Trabajo de grado para optar al título de
Licenciado en Física
Bogotá 2024

Análisis histórico del origen de la ecuación de Dirac, a partir de su
relación con la estructura fina del hidrógeno

Joan Leonardo Duarte Bernal

Trabajo de grado presentado como requisito parcial para optar al título de:
Licenciado en física

Director:
Yesid Javier Cruz Bonilla

Línea de profundización:
La enseñanza de la Física y la relación Física-Matemática

Universidad Pedagógica Nacional de Colombia
Facultad de Ciencia y Tecnología, Departamento de Física
Bogotá, Colombia
2024

Agradecimientos

En esta página deseo agradecer infinitamente a mis padres, Fernando y Luz Marina, y a mi hermano Steven. Sin su inmenso apoyo nada de lo que hice dentro de la carrera y en este trabajo hubiese sido posible, siempre han sido y serán mi mayor inspiración para seguir adelante en la vida y para alcanzar las metas que me propongo.

También quiero agradecer a mis profesores del departamento, en primer lugar, a mi asesor el profesor Yesid Cruz, quien me acompañó en este proceso y me ayudó a sacar adelante este trabajo, ha sido un honor haber trabajado con él. Así mismo a los profesores de la línea de investigación de la cual hago parte, con quienes tuve un mayor acercamiento y me enseñaron muchas cosas no solo a nivel académico sino también a nivel personal. Y de igual manera, a los demás profesores de la licenciatura en física con quienes tuve clase, siempre agradeceré inmensamente todas las maravillosas enseñanzas que me brindaron.

Por último, pero no menos importante a mis compañeros que me acompañaron en este proceso. En primer lugar, a Alexa, con quien formé un extraordinario equipo de trabajo desde el primer semestre, y siempre nos apoyamos mutuamente para dar lo mejor de nosotros durante la realización de esta carrera; y por otro lado a Juanes, con quien tuve tantas discusiones enriquecedoras para retroalimentar nuestros respectivos trabajos. Espero que este sea uno de los muchos logros que alcanzaremos en nuestras vidas.

Contenido

	PÁGINA
INTRODUCCIÓN	6
FUNDAMENTOS DE LA INVESTIGACIÓN	7
ANTECEDENTES.....	8
OBJETIVOS	9
<i>Objetivo General</i>	9
<i>Objetivos Específicos</i>	9
CAPÍTULO 1	
SOBRE LA ESTRUCTURA FINA Y SU RELACIÓN CON LA NECESIDAD DE UNA TEORÍA CUÁNTICA RELATIVISTA	10
1.1 RECORRIDO HISTÓRICO ENTORNO AL DESCUBRIMIENTO DE LA ESTRUCTURA FINA DEL ÁTOMO DE HIDRÓGENO	10
1.2 INSTRUMENTACIÓN NECESARIA PARA LA OBSERVACIÓN DE LA ESTRUCTURA FINA	14
1.3 PRIMERA EXPLICACIÓN TEÓRICA DE LA ESTRUCTURA FINA.....	17
1.3.1 <i>Consideraciones previas</i>	17
1.3.2 <i>Explicación de la estructura fina de Arnold Sommerfeld</i>	20
CAPÍTULO 2	
EN BUSCA DE UNA TEORÍA CUÁNTICA RELATIVISTA PARA DAR CUENTA DE LOS FENÓMENOS DE DESDOBLAMIENTO	29
2.1 RELATIVIDAD ESPECIAL EN LOS PRIMEROS TRABAJOS DE LA NUEVA TEORÍA CUÁNTICA	30
2.2 RELACIÓN DEL ESPÍN CON LA RELATIVIDAD ESPECIAL Y LA ESTRUCTURA FINA	31
2.3 ECUACIONES CUÁNTICO-RELATIVISTAS PREVIAS A DIRAC Y SU NEXO CON LA ESTRUCTURA FINA	37
2.3.1 <i>Schrödinger y su enfoque relativista</i>	37
2.3.2 <i>Ecuación de Klein-Gordon</i>	39
2.3.2.1 <i>Historia</i>	39
2.3.2.2 <i>Problemas y críticas a la ecuación de Klein-Gordon</i>	41
2.4 PERTURBACIONES PARA APROXIMARSE A LA ESTRUCTURA FINA	45
CAPÍTULO 3	
LA ECUACIÓN DE DIRAC	49
3.1 ASPECTOS DESTACABLES DE LA VIDA Y EL TRABAJO DE PAUL DIRAC PREVIOS A LA PUBLICACIÓN DE SU ECUACIÓN	49
3.2 EL ORIGEN DE LA ECUACIÓN DE DIRAC	52
3.3 EL ÉXITO DE LA ECUACIÓN DE DIRAC: RESULTADOS PARA UN ELECTRÓN EN UN CAMPO ELECTROMAGNÉTICO	58
3.4 LA FÓRMULA DEFINITIVA PARA LA ESTRUCTURA FINA DEL ÁTOMO DE HIDRÓGENO.....	60
3.4.1 <i>La aproximación de Dirac</i>	60
3.4.2 <i>La expresión completa de la estructura fina</i>	65
CONCLUSIONES	72
REFERENCIAS	74
ANEXOS	79
A.1. DESARROLLO TEÓRICO DE SOMMERFELD PARA LA ESTRUCTURA FINA	79
A.2. EXPANSIÓN BINOMIAL DE LA FÓRMULA DE SOMMERFELD	86
B.1. FORMA DE OBTENER LA ECUACIÓN DE KLEIN-GORDON PARA UNA PARTÍCULA LIBRE	88
B.2. ECUACIÓN DE KLEIN-GORDON PARA EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO	89
B.3. SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE KLEIN-GORDON PARA LA ENERGÍA DEL ÁTOMO DE HIDRÓGENO	89
B.4. ENERGÍAS Y DENSIDADES DE PROBABILIDAD NEGATIVA DE LA ECUACIÓN DE KLEIN-GORDON	94
B.5. PERTURBACIONES PARA OBTENER LA ESTRUCTURA FINA EN UNA PRIMERA APROXIMACIÓN	96
C.1. FORMA DE EXPRESAR LA ECUACIÓN DE DIRAC A PARTIR DE LAS MATRICES γ_j	101

C.2. SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE DIRAC EN EL VACÍO: PARTÍCULA CON $\mathbf{p}=0$	102
C.3. INVARIANZA DE LA ECUACIÓN DE DIRAC BAJO TRANSFORMACIONES DE LORENTZ	104
C.4. DENSIDAD DE PROBABILIDAD DE LA ECUACIÓN DE DIRAC	106
C.5. ECUACIÓN DE DIRAC PARA UN CAMPO ELECTROMAGNÉTICO. APARICIÓN DEL MOMENTO MAGNÉTICO Y ESPÍN DEL ELECTRÓN.....	107
C.6. ECUACIÓN DE DIRAC PARA EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO	109
C.7. APROXIMACIÓN DE PRIMER ORDEN PARA LA ESTRUCTURA FINA DEL ÁTOMO DE HIDRÓGENO CON LA ECUACIÓN DE DIRAC	113
C.8. SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE DIRAC PARA LA FORMULA COMPLETA DE LA ENERGÍA QUE DA CUENTA DE LA ESTRUCTURA FINA	115

Introducción

La ecuación de Dirac es una de las ecuaciones fundamentales de la física, pues gracias a esta, dos de las más grandes teorías del siglo XX, la relatividad especial y la mecánica cuántica, se unificaron, dando como resultado, la explicación de fenómenos que hasta entonces no eran comprendidos de manera satisfactoria para los físicos: la estructura fina del hidrógeno y el espín del electrón; pero además de ello, predijo algo aún no descubierto por la humanidad, la antimateria (Carretero, 2013). Por esta razón, y considerando su relevancia para la física moderna, en el presente trabajo de grado se realiza un análisis histórico del origen de la ecuación de Dirac, a partir del fenómeno que tuvo una influencia significativa en su invención y confirmación: el fenómeno de la estructura fina del átomo de hidrógeno. Este análisis surge al plantear la necesidad de profundizar en los aspectos conceptuales y matemáticos que llevaron al surgimiento de la ecuación, los cuales, a partir de una perspectiva histórica, permiten obtener un acercamiento a la teoría más famosa de Paul Dirac, pues como señala el físico e historiador Helge Kragh: *“El enfoque histórico es a menudo beneficioso para un acercamiento de los aspectos conceptuales y técnicos de la física, ya que ofrece una mirada más profunda y crítica de sus problemas”* (Kragh, 1992).

En el origen de la ecuación de Dirac, que se relaciona con la búsqueda de una explicación para la estructura fina mediante una teoría cuántica compatible con la relatividad especial, las matemáticas desempeñaron un papel fundamental, por lo cual, el análisis histórico presentado en este trabajo de grado está vinculado profundamente con parte del formalismo matemático que permitió a los físicos entender y desarrollar las explicaciones a lo descrito previamente. En ese sentido, debido a que existen distintas formas de abordar la historia de la física, este trabajo adopta la perspectiva del físico e historiador Olivier Darrigol, quien, en uno de sus libros de historia de la teoría cuántica, describe que: *“En el desarrollo de las teorías de la física moderna, las matemáticas juegan un papel considerable [...] Y este papel fundamental de las matemáticas no puede ser explicado sin profundizar en detalles técnicos más allá de lo que es común en algunos estudios históricos”* (Darrigol, 1992). No obstante, es importante aclarar que el formalismo matemático no constituye el eje fundamental del trabajo, y dado que muchos de los desarrollos son bastante extensos, estos se encuentran al detalle en la sección de anexos para aquel lector que desee profundizar en ellos. De esta manera, se ha buscado establecer un vínculo entre el contexto histórico, los aspectos conceptuales, y los resultados experimentales y matemáticos obtenidos por los físicos de finales del siglo XIX e inicios del siglo XX, en relación con la necesidad de una ecuación como la de Dirac.

Por tanto, para abordar lo expuesto anteriormente, este trabajo de grado se divide en tres capítulos:

- En el capítulo 1, se analiza el fenómeno de la estructura fina desde una perspectiva histórica a partir de los experimentos que permitieron observarla y medirla, describiendo luego como con el surgimiento de la teoría cuántica, fue fundamental el trabajo de Arnold Sommerfeld, quien haciendo uso de las ecuaciones de la relatividad especial de Einstein y del modelo atómico de Bohr, obtuvo una expresión útil para describir de forma precisa el desdoblamiento en los niveles de energía del átomo de hidrógeno, expresión que sería el eje fundamental para las teorías cuánticas compatibles con la relatividad especial que se propondrían en la década de los 20 del siglo XX.
- En el capítulo 2, se describe cómo a partir de 1924, con el surgimiento de la nueva teoría cuántica (posteriormente denominada mecánica cuántica por Max Born), los físicos de la época se esforzaban por hacer que sus teorías cuánticas fueran compatibles con la relatividad especial. Sin embargo, se expone cómo esto los condujo a enfrentar grandes problemas, incluida la incapacidad para explicar la fórmula de la estructura fina propuesta por Sommerfeld que describía los desdoblamientos en el espectro del hidrógeno. En este contexto,

se exploran las distintas hipótesis, resultados y teorías aproximadas, que surgieron entre 1924 y 1927 en relación con la explicación de la estructura fina a través de una teoría cuántica-relativista. Y se destaca cómo fenómenos como el del espín, desempeñaron un papel fundamental en este proceso.

- El capítulo 3 comienza resaltando los aspectos más relevantes de la vida de Paul Dirac antes de 1928, para luego examinar cómo gracias a muchos de los trabajos descritos en los capítulos 1 y 2, Dirac logró desarrollar su famosa ecuación, la cual fue ampliamente reconocida por la comunidad científica de la época como la correcta para describir el electrón mediante una teoría que unificaba la mecánica cuántica y la relatividad especial. Posteriormente, se analiza como por medio de la ecuación de Dirac, se pudo dar cuenta del espín del electrón, de la estructura fina del átomo de hidrógeno, y de otros resultados fundamentales que se describen en el capítulo.

Finalmente, se presentan las respectivas conclusiones obtenidas a partir del desarrollo del trabajo, seguidas de la bibliografía utilizada, y de los respectivos anexos que contienen los desarrollos matemáticos esenciales para un estudio más profundo de las temáticas expuestas.

Fundamentos de la investigación

Teniendo en cuenta lo expuesto anteriormente, es pertinente destacar una vez más que el propósito del presente trabajo de grado surge al plantear la necesidad de analizar los aspectos históricos que llevaron al surgimiento de la ecuación de Dirac, con el fin de profundizar en su contexto, sus problemáticas y sus aspectos conceptuales y matemáticos más relevantes, para así lograr tener una aproximación al tema descrito. En particular, el análisis realizado se enfoca en los aspectos históricos, considerando la importancia de este tipo de análisis desde una perspectiva pedagógica, pues de acuerdo con estudios como los de la profesora María Mercedes Ayala, la historia es un recurso para los maestros de ciencias, el cual ayuda a facilitar la comprensión y uso de un concepto, de una ley o de una teoría (Ayala, 2006).

Además, para este trabajo se contempla la perspectiva del profesor Igal Galili, quien destaca que: *“Los análisis históricos juegan un papel esencial en la estructura del conocimiento de la física. Pues diversos contenidos del pasado aportan y enriquecen el sentido de las afirmaciones de las teorías físicas. Esto se debe a que la cognición humana requiere de la comparación y el contraste entre las alternativas conceptuales en el proceso de aprendizaje.”* (Galili, 2008). Y así mismo se toma en cuenta la perspectiva del profesor Orozco, quien describe que los análisis históricos: *“Arrojan mayores niveles de comprensión sobre la actividad de la ciencia, contribuyen a la consolidación de las comunidades científicas y proporcionan importantes criterios pedagógicos para las prácticas de la educación en ciencias, en los diferentes niveles de la enseñanza”* (Orozco, 2005).

Por otro lado, cabe señalar que en distintas investigaciones sobre la enseñanza-aprendizaje de la mecánica cuántica se ha identificado un problema: el exceso de formalismo matemático y la escasa discusión conceptual que se le otorga a los temas (Hernández, 2018). En esta línea, la ecuación de Dirac, como tema central para comprender la unión entre la mecánica cuántica y la relatividad especial, no es ajena a dicha problemática (Physics Forums, 2013). Por tanto, trabajos como el del profesor Abhang, enfatizan la importancia de integrar la historia en el proceso de comprensión de la física cuántica, ya que esto ayuda a hacerla más entendible e interesante, permitiendo generar un equilibrio entre el aspecto conceptual y el tratamiento matemático a la hora de su estudio (Abhang, 2005). Dicho equilibrio es precisamente lo que se ha buscado privilegiar en este trabajo de grado, el cual se fundamenta en la siguiente pregunta:

¿Cómo aproximarse a la ecuación de Dirac a partir de un análisis histórico de su origen y su relación con la estructura fina del hidrógeno?

Con base en lo descrito previamente, es importante destacar que el presente trabajo de grado, a través de un análisis histórico realizado a partir de la revisión de artículos originales, actas de conferencias, correspondencia entre los científicos y otros elementos disponibles sobre el tema abordado; brinda la oportunidad de ser un documento de consulta para aquellos estudiantes que deseen aproximarse a la ecuación de Dirac y al fenómeno que tuvo relación con su origen: el de la estructura fina del átomo de hidrógeno. Donde de acuerdo con lo expuesto por la profesora Sandra Forero en su tesis doctoral, este tipo de análisis se convierten en trabajos originales que contribuyen a profundizar en el tema de estudio, pues: *“El análisis histórico de las explicaciones y construcciones de conceptos que permiten comprender, fenómenos naturales en una época determinada, se convierte en trabajos originales, no solo por lo exhaustivo de la investigación sino por la escasez y dificultad de conseguir información primaria.”* (Forero, 2014).

Además, este trabajo pretende ser un recurso para que los maestros en formación del Departamento de Física de la Universidad Pedagógica Nacional, se aproximen desde un análisis histórico a una ecuación relativista de la mecánica cuántica, específicamente a la deducida por Paul Dirac, permitiéndoles con ello, acercarse a uno de los fenómenos de desdoblamiento que se presenta en los niveles de energía del átomo de hidrógeno, así como al estudio del espín del electrón desde una perspectiva relativista.

Antecedentes

Para la elaboración de este trabajo de grado, se realizó una exhaustiva revisión de diversas fuentes de información relacionadas con investigaciones y trabajos previos sobre el análisis histórico del origen de la ecuación de Dirac y su relación con la estructura fina del hidrógeno. A continuación, se describen aquellas que proporcionaron la información más relevante:

- **The Genesis of Dirac's Relativistic Theory**, del físico e historiador Helge Kragh, el cual es un trabajo publicado en el Archive for History of Exact Sciences, en el año 1981. Este trabajo proporciona un hilo conductor sobre los acontecimientos históricos que llevaron al origen de la ecuación de Dirac, y destaca su relación con el espín y la estructura fina del átomo de hidrógeno.
- **Una introducción de la ecuación de Dirac a partir de la invariancia espacio – temporal**, de Jhonny Darío García Pineda, la cual es una tesis de la licenciatura en física de la Universidad Pedagógica Nacional, publicada en el año 2006. Y, **Matemáticas y física de la ecuación de Dirac**, de Ana Montero Lázaro, que es una tesis de la universidad autónoma de Madrid publicada en el año 2021. Estas dos tesis describen el formalismo matemático desde el cual se puede derivar la ecuación de Dirac.
- **Sobre los niveles de energía del electrón en el átomo de hidrógeno utilizando algunas teorías de la mecánica cuántica**, de Julio Abraham Mendoza Fierro, que es un trabajo de grado de la universidad autónoma de Chihuahua (México), publicado en el año 2014. En parte de este trabajo, se establece como a partir de las ecuaciones de Schrödinger, Klein-Gordon y Dirac; se obtienen distintas fórmulas para la descripción de los niveles de energía en el átomo de hidrógeno.

Por lo tanto, teniendo en cuenta los antecedentes previamente mencionados, el presente trabajo de grado busca proporcionar una perspectiva adicional sobre cómo el fenómeno de la estructura fina del hidrógeno contribuyó significativamente al origen y confirmación de la ecuación de Dirac, a través de un análisis que combina los aspectos históricos con el formalismo matemático de los temas tratados.

Objetivos

Objetivo General

Realizar un análisis histórico del origen de la ecuación de Dirac, enfocándose en su relación con la estructura fina del átomo de hidrógeno.

Objetivos Específicos

- Analizar el fenómeno de la estructura fina del hidrógeno desde una perspectiva histórica, identificando a partir del modelo de Sommerfeld, su relación con la relatividad especial.
- Revisar los aportes previos a la ecuación de Dirac que buscaron explicar la estructura fina del hidrógeno, mediante la integración de la relatividad especial en las nuevas formulaciones de la mecánica cuántica.
- Examinar el surgimiento de la ecuación de Dirac, destacando principalmente su capacidad para explicar la estructura fina del hidrógeno.

Capítulo 1

Sobre la estructura fina y su relación con la necesidad de una teoría cuántica relativista

El 2 de enero de 1928, Paul Dirac introduce por primera vez ante la comunidad científica, su célebre ecuación que logra conciliar exitosamente la relatividad especial con la mecánica cuántica. En su artículo titulado: La teoría cuántica del electrón. Dirac expone de manera concisa el fenómeno que condujo al desarrollo de esta notable ecuación, de la siguiente manera:

“La nueva mecánica cuántica, cuando se aplica al problema de la estructura del átomo con electrones como cargas puntuales, no da resultados que estén de acuerdo con el experimento. Las discrepancias consisten en los fenómenos de “desdoblamiento”, siendo el número observado de estados estacionarios para un electrón en un átomo, el doble del número dado por la teoría.” (Dirac, 1928a)

Dirac continúa explicando, que físicos como W. Pauli y C. Darwin ofrecieron una explicación aproximada al fenómeno de desdoblamiento gracias al uso de la idea de espín introducida por Goudsmit y Uhlenbeck, obteniendo resultados acordes con el experimento para el espectro del átomo de hidrógeno. Sin embargo, también describe que existía cierta incompletitud en los métodos que se habían desarrollado para dar cuenta de dicho fenómeno. La incompletitud se debía a que: *“Los métodos propuestos no están de acuerdo con la relatividad o con la teoría general de la transformación de la mecánica cuántica”* (Dirac, 1928a).

Y por lo tanto propuso que: *“Parece ser que el hamiltoniano más simple para un electrón que satisface tanto la relatividad como la teoría general de transformación ¹, conduce a la explicación de todos los fenómenos de desdoblamiento sin suposiciones adicionales”* (Dirac, 1928a)

Con base en lo anterior, se evidencia claramente que el fenómeno de desdoblamiento desempeñó un papel destacable en la formulación de la ecuación de Dirac. Por consiguiente, a continuación, se describirá en qué consiste dicho fenómeno, su historia, y su relación con la necesidad de una teoría cuántica-relativista.

1.1 Recorrido Histórico entorno al descubrimiento de la estructura fina del átomo de hidrógeno

Es fundamental iniciar destacando, que el fenómeno de “desdoblamiento”, al cual se refirió Dirac en su primer artículo sobre la teoría cuántica del electrón en 1928, es comúnmente reconocido en la literatura científica con el nombre de estructura fina. Esta denominación es dada, debido a la detección de dos o más líneas espectrales notablemente finas y cercanas entre sí, que se observan al analizar detalladamente los espectros de emisión de los átomos. Donde cabe resaltar que, tanto en la teoría de Dirac, como en las teorías previas, se dedicó una atención particular al estudio del “desdoblamiento” o estructura fina del átomo de hidrógeno, debido a que

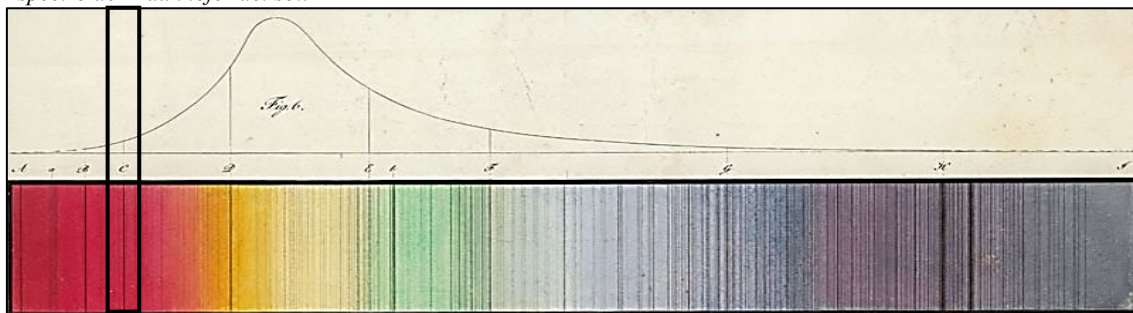
¹ De acuerdo con los trabajos de Dirac, y como es descrito en su artículo de 1927 (*La interpretación física de la mecánica cuántica*). La teoría general de transformación se refiere a una formulación matemática de la mecánica cuántica postulada por Dirac, la cual le permitió demostrar que las consecuencias físicas dadas por las formulaciones de Schrödinger y Heisenberg eran equivalentes. Por lo cual, en el contexto de su artículo, satisfacer la teoría general de la transformación, se refiere a satisfacer las formulaciones de la mecánica cuántica existentes en 1928. (Dalitz, 2022)

este átomo se consideraba como el sistema más fundamental para ser abordado mediante los principios de la mecánica cuántica.

Así pues, para tener una aproximación al fenómeno de la estructura fina del hidrógeno, es imprescindible primero adentrarse en su historia. Para ello, se toma como punto de partida el año de **1817**, cuando el físico y astrónomo Joseph Von Fraunhofer, haciendo pasar un rayo de luz proveniente del sol por una lente de un teodolito² seguido de un prisma para descomponer el rayo en sus distintos colores, detecta un conjunto de líneas negras incrustadas en diferentes partes de los colores que estaba observando. Fraunhofer etiquetó a cada una de las líneas oscuras con una letra, donde para el presente trabajo es de especial importancia la línea que él llamó **C** (hoy conocida como **H- α**), la cual se puede observar en la parte roja del espectro de la figura 1,1.

Figura 1,1.

Espectro de Fraunhofer del sol.



Nota. Espectro del Sol, marcado con las letras que Fraunhofer le asignó a las líneas oscuras que observó por primera vez en 1817. Tomado de (Museum, 2023)

Seis años más tarde, Fraunhofer inventa la rejilla de difracción, con la cual pudo dividir y observar con una mayor precisión cada una de las líneas del espectro solar, donde gracias a sus increíbles mediciones, describe que la longitud de onda asociada a la línea **C** del espectro, corresponde a 2.422×10^{-5} Pariser Zoll³, que convertido a unidades actuales da un valor de 656.3 nm (G.F. Bassan et al., 1989). Posteriormente se encontraría que dichas mediciones, correspondían al espectro de absorción del hidrógeno para una longitud de onda de 656.28 nm.

El espectro de emisión para esa misma longitud de onda se encontró por primera vez en el año **1851**, cuando A. Masson detecta una emisión de luz al pasar una corriente eléctrica a través de un gas de hidrógeno. La luz observada por medio de un espectroscopio, consistía en una línea de color rojo, la cual Masson etiquetó con la letra griega " **α** " (G.F. Bassan et al., 1989). Diez años más tarde el físico y astrónomo sueco A. Angstrom, luego de varios estudios con gases, describe que la línea **α** tiene una longitud de onda igual a la línea oscura **C** observada previamente por Fraunhofer, describiendo que el espectro de emisión y de absorción de la línea llamada como **C**, pertenecen al hidrógeno (Angstrom, 1861).

Así, para la década de los 60 del siglo XIX, se empiezan a llevar a cabo exhaustivos estudios tales como los de Robert Bunsen y Gustav Kirchhoff, los cuales buscaban dar una explicación a los espectros de absorción y de emisión de diversos elementos químicos. Sin embargo, es hasta el año **1871** cuando el físico G.J Stoney, estudia el espectro del hidrógeno desde una perspectiva similar a la de los trabajos del físico Éleuthère Mascart⁴, en donde atribuye los espectros de emisión de los elementos a una vibración armónica dentro de los átomos. En su artículo de 1871,

² Instrumento óptico de precisión que consiste en un telescopio móvil montado sobre un eje para girar alrededor de unos ejes horizontales y verticales, permitiendo proporcionar lecturas angulares. Para el siglo XIX se usaba para topografía, y en astronomía para medir las posiciones precisas de las estrellas.

³ Pariser Zoll, que traducida al español significa **línea de París**, es una antigua medida de longitud que se utilizó en toda Europa desde el siglo XVII hasta el siglo XIX.

⁴ En 1869, el físico Éleuthère Mascart atribuye la observación de un doblete en una línea del espectro del átomo de sodio, a distintas vibraciones armónicas cercanas producidas por dicho elemento (Mascart, 1869).

Stoney deduce una fórmula para explicar las distintas longitudes de onda λ_n emitidas por el hidrógeno, expresión (1,1), donde con base en las mediciones de angstrom y Fraunhofer, describe que: $h=4102.37 \times 10^{-7} \text{ mm}$; $F=4862.11 \times 10^{-7} \text{ mm}$; y $C=6563.93 \times 10^{-7} \text{ mm}$, “son el 32, 27 y 20 armónicos de una vibración fundamental, cuya longitud de onda en el vacío es: $\lambda_0=0.013127714 \text{ mm}$ ” (Stoney, 1871). La fórmula deducida fue:

$$\lambda_n = \frac{0.013127714 \text{ mm}}{n} \quad (1,1)$$

Siendo n un número entero correspondiente al armónico respectivo de las longitudes de onda λ_n emitidas. Así, apoyándose en dicha expresión, Stoney describe que: “Los otros armónicos de este movimiento fundamental en las moléculas de hidrógeno, estos son el 19, 21 y 22; no se encuentran en este espectro del hidrógeno. Pero hay otros dos espectros del hidrógeno en el cual se conoce un gran número de líneas, y la posibilidad de que los armónicos perdidos se encuentren entre ellos en sus respectivas posiciones debe ser mapeado con suficiente precisión” (Stoney, 1871). Es decir, a través de ese enfoque, él deduce que debe haber otras longitudes de onda bastante cercanas a la longitud de onda emitida correspondiente al armónico 20 ($\lambda_C=6563.93 \times 10^{-7} \text{ mm}$). Por lo cual, se puede considerar a Stoney como la primera persona en estimar la posibilidad de observar múltiples líneas en la posición C del espectro del átomo de hidrógeno (Jammer, 1989).

La fórmula de Stoney era precisa únicamente para tres longitudes de onda observadas, por lo cual, catorce años más tarde en 1885 el primer físico en deducir correctamente todas las líneas de una serie espectral del hidrógeno, fue Johann Jakob Balmer, quien estudiando las mediciones de las longitudes de onda del espectro de emisión, afirma que: “las relaciones numéricas entre las longitudes de onda de las primeras cuatro líneas espectrales del hidrógeno deben atraer nuestra atención en particular” (Balmer, 1885). La expresión deducida por Balmer fue:

$$\lambda = h \frac{m^2}{m^2 - 2^2} \quad (1,2)$$

Con $^5 h = 3645.6 \cdot 10^{-7} \text{ mm}$, y $m=3,4,5,6$. A dicha expresión (1,2), es a lo que se le conoce hoy en día como la serie de Balmer, donde si $m=3$, da como resultado la longitud de onda asociada a la línea C, la cual, a partir de ese momento se le llamo como: **H- α** . Además, la expresión (1,2) deducía a parte de la línea C, otras líneas espectrales observadas previamente en los experimentos, las cuales se pueden observar en la figura 1,2:

Figura 1,2.

Fotografía del espectro visible del hidrógeno.



Nota. Líneas de emisión del átomo de hidrógeno, etiquetadas en la parte superior como las conocía Stoney en 1871 de acuerdo con la denominación de Fraunhofer, y etiquetadas en la parte inferior, con la notación de Balmer en 1885. Además, se puede notar que, con espectroscopia convencional como se explicará posteriormente, no se hace posible observar líneas cercanas o dobles a la línea C (**H- α**). Tomado y modificado de (Mesa, 2011).

A pesar de la concordancia entre los valores calculados y observados, la fórmula de Balmer presentaba ciertas discrepancias para longitudes de onda corta (Jammer, 1989). Además, omitía la consideración realizada por Stoney acerca de las posibles líneas bastante cercanas a la línea

⁵ Para ese momento no se había deducido la constante de Planck h . Por lo cual Balmer en su artículo original (Balmer, 1885) designo con la letra h , a su constante para dar cuenta de las líneas espectrales del hidrógeno.

C(H- α) del espectro de emisión del átomo de hidrógeno. No obstante, dicha consideración no fue tomada en cuenta, ya que para el año de 1885 aún no se contaba con evidencia que respaldara la existencia de esas líneas.

Es hasta el año de **1887** cuando los físicos Abraham Michelson y Edward Morley un mes después de haber publicado los resultados de su famoso experimento sobre el movimiento relativo de la tierra y el éter luminífero; publican en diciembre del mismo año un artículo titulado: Sobre un método para hacer que la longitud de onda de la luz de sodio sea el estándar real y práctico de longitud (Michelson & Morley, 1887). En dicho artículo, se exponen los resultados de un experimento que buscaba medir con suficiente exactitud la longitud de onda de la línea espectral **D** correspondiente al espectro de emisión del átomo de sodio. La importancia de esta medición radicaba en que una vez obtenido con exactitud el valor de dicha longitud de onda, este podría utilizarse como una referencia estable y reproducible para establecer un estándar de longitud. Sin embargo, Michelson y Morley se enfrentaron a un desafío durante su investigación, ya que su interferómetro les permitía realizar mediciones de longitud de onda con una alta resolución, en donde al estudiar el espectro del sodio, se percataron de que: “*Hay una ligera dificultad que debe notarse como consecuencia del hecho de que hay dos series de ondas en la luz de sodio*” (Michelson & Morley, 1887). Es decir, encontraron el doblete de las líneas D del átomo de sodio medido previamente por Éleuthère Mascart y M. H. Fizeau.

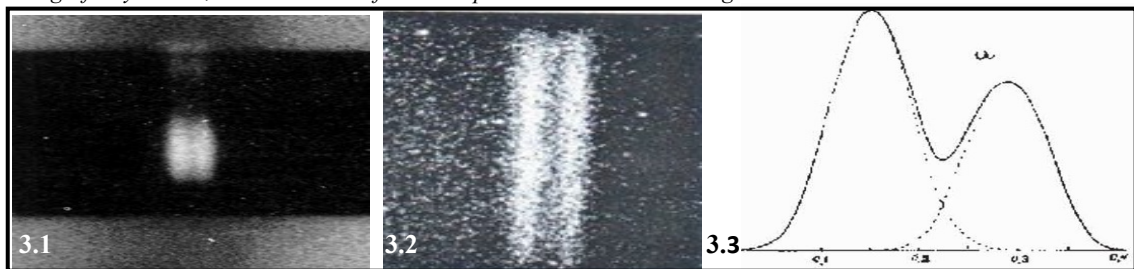
A causa de lo anterior, Michelson y Morley estudiaron el espectro de otros elementos distintos al sodio, para detectar si estos también presentaban líneas espectrales dobles. Durante este proceso, descubrieron que la línea roja **C(H- α)** asociada al espectro del átomo de hidrógeno: “*debe ser una línea doble con componentes de aproximadamente un-sexagésimo tan distante como las líneas del sodio*” (Michelson & Morley, 1887). Donde de acuerdo con las mediciones que ya se tenían para el espectro del sodio, sus líneas dobles estaban separadas por 0.60 nm (M D’Anna y T Corridoni, 2018). Por lo cual, una sexagésima parte de esa distancia equivale a 0.01 nm . Es decir, de acuerdo con los resultados obtenidos por Michelson y Morley, su primera medición demostró la presencia de una línea espectral doble en la región roja (**H- α**) del espectro del átomo de hidrógeno, con una separación de $0.01 \text{ nm} = 1 \times 10^{-8} \text{ mm}$, según sus primeras mediciones.

Posteriormente, a la línea espectral doble del átomo de hidrógeno descubierta por Michelson y Morley, se le daría el nombre de estructura fina, siendo Arnold Sommerfeld la primera persona en usar esta denominación en su modelo relativista del átomo de hidrógeno (A.Sommerfeld, 1916b).

Por lo tanto, para el año de 1887, se tenía en cuenta que al observar con espectroscopia de alta resolución la línea espectral **C(H- α)** correspondiente al espectro de emisión del átomo de hidrógeno, esta presentaba un doblete, el cual se puede observar en la figura 1,3.

Figura 1,3.

Fotografías y curvas, de la estructura fina del espectro del átomo de hidrógeno



Nota. Fotografías [3.1 y 3.2] de la línea doble C (H- α) del espectro del átomo de hidrógeno, detectadas con un espectrómetro de Hilger complementado con prismas de vidrio, para obtener una mayor resolución. Curvas [3.3] de intensidad de luz detectadas por Michelson, donde las dos curvas de mayor altura corresponden a la línea doble C (H- α). Tomado de (Gilbert N. Lewis y Frank H. Spedding, 1933) y (Albert A. Michelson, 1892).

Mediciones de la estructura fina del hidrógeno se continuaron realizando en los años posteriores a su primera detección. Entre ellas se encuentra la realizada por Albert A. Michelson en 1892, quien, mejorando los métodos usados en su primera medición, encuentra un valor de separación de $1.4 \times 10^{-8} \text{ mm}$ entre las líneas **H- α** correspondientes al espectro de emisión del átomo de hidrógeno (Albert A. Michelson, 1892); lo cual en términos de longitud de onda equivalía a: $\lambda_{\text{H-}\alpha 1} = 656.112 \text{ nm}$ y $\lambda_{\text{H-}\alpha 2} = 656.126 \text{ nm}$, para las dos longitudes de onda cercanas detectadas. Valores consistentes con distintas mediciones realizadas en años posteriores.

1.2 Instrumentación necesaria para la observación de la estructura fina

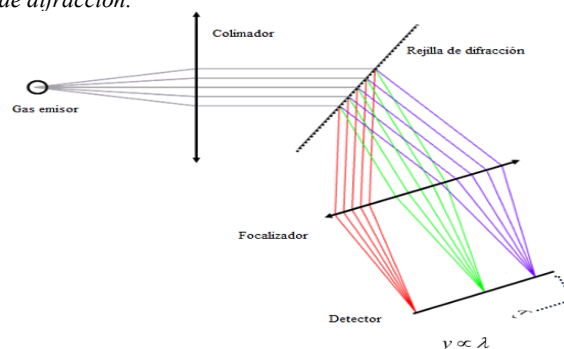
Teniendo en cuenta el contexto anterior, es importante destacar ahora por qué hasta 1887 no se disponía de una medición u observación directa de la estructura fina. Esto se debía a que los métodos comúnmente utilizados para observar los espectros atómicos empleaban rejillas de difracción; sin embargo, para detectar la estructura fina se necesitaba de instrumentos espectroscópicos de mayor resolución, ya que con una rejilla de difracción convencional (*bajo número de rendijas*) no era posible detectarla. Para entender por qué, hay que tener en cuenta el fenómeno que sucede cuando la luz pasa por una rejilla de difracción compuesta por **N** rendijas separadas por una distancia **d**. Así pues, cuando la luz incide en las **N** rendijas cuyo tamaño es del orden de su longitud de onda, esta se difracta, creando un patrón de difracción. Dicho patrón está conformado por una serie de “picos” conocidos como los máximos, los cuales se encuentran separados a una distancia proporcional a la longitud de onda de la luz incidente (λ). Por lo tanto, diferentes longitudes de onda tienen distinta localización de sus máximos, donde la ecuación que permite dar cuenta de la localización de cada uno de esos máximos es:

$$y = \frac{Ln\lambda}{d}; n = 0,1,2,3,\dots \quad (1,3)$$

Siendo, **y** la posición de cada máximo que permite observar la luz, y **L** la distancia entre la rejilla de difracción y la pantalla de observación. Ver figura 1,4, para observar un ejemplo de cómo distintas longitudes de onda tienen una localización diferente **y** de sus máximos, para ese sistema de referencia:

Figura 1,4.

Representación de una rejilla de difracción.



*Nota. Representación de una rejilla de difracción, donde se observa que la localización **y** de los máximos, depende de la longitud de onda de la luz. Así mismo, cuando el número de rendijas **N** es lo suficientemente grande, solo es posible percibir los primeros máximos para cada una de las longitudes de onda. Tomado y modificado de (Zemax, 2021).*

Con base en la figura 1,4 se ve que la rejilla de difracción permite separar la luz de distintas longitudes de onda (λ). Sin embargo, si hay longitudes de onda lo suficientemente cercanas, su separación no será perceptible. Esto viene determinado por “la potencia de resolución de la rejilla de difracción” (Schwartz, 2016); donde dicha potencia se determina a partir del criterio de Rayleigh, con el cual se determina una ecuación que permite deducir el número **N** de rendijas necesarias para poder observar una separación apreciable de las distintas longitudes de ondas, esta ecuación viene dada por la expresión (1,4):

$$N = \frac{\lambda}{\lambda' - \lambda} \quad (1,4)$$

Donde para las longitudes de onda (λ' y λ) de la estructura fina, se tiene que para poder apreciar la separación de **H- α** , se requiere de una rejilla de difracción con:

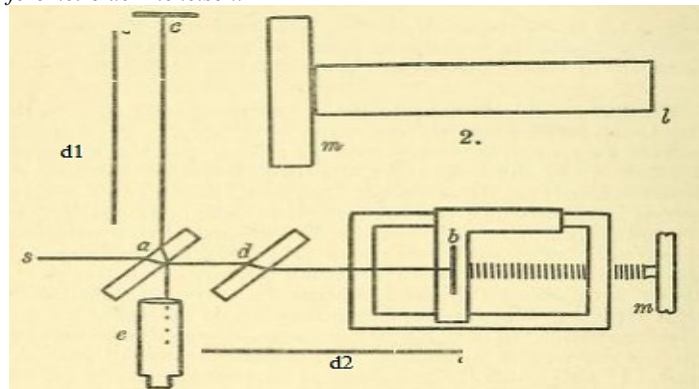
$$N = \frac{656.112nm}{656.126-656.112} = 46\ 865 \text{ rendijas.}$$

Sin embargo, las rejillas de difracción con mayor resolución tienen del orden de 10 000 rendijas (Schwartz, 2016). Por lo tanto, esto permite comprender por qué para observar la estructura fina del átomo de hidrógeno, se requirió de instrumentos diferentes a una rejilla de difracción, tales como el interferómetro de Michelson.

El interferómetro de Michelson fue entonces el primer instrumento utilizado para detectar la estructura fina, y su principio de funcionamiento depende del fenómeno de interferencia constructiva y destructiva de las ondas de luz. En este caso, para el interferómetro de Michelson de la figura 1,5, la luz de la fuente **s** ya colimada, se hace pasar por un divisor de haz **a**, el cual divide la luz en 2 haces. Estos haces son dirigidos hacia dos espejos **c** y **b** que reflejan la luz, donde dependiendo la distancia ($\Delta d = d_2 - d_1$) a la cual estén los espejos que se mueven con un tornillo micrométrico **m**, ambos haces al encontrarse producen interferencia constructiva o destructiva. Esto genera un patrón, que, en el caso del interferómetro de Michelson, consiste en un conjunto de franjas circulares conocidas como las franjas de Haidinger. Y estas franjas pueden ser utilizadas para estudiar diversos fenómenos, dependiendo de la aplicación deseada.

Figura 1,5.

Representación del interferómetro de Michelson.



Nota. Representación del interferómetro de Michelson con el cual se detectó por primera vez la estructura fina del hidrógeno. Tomado y modificado de: (Michelson & Morley, 1887)

Así, para la detección de la estructura fina, se observó que la diferencia entre las distintas longitudes de onda se podía detectar teniendo en cuenta que estas generaban un patrón particular de concordancia y discordancia (ver figura 1,6). De forma que en el experimento de Michelson y Morley al colimarse un único “color” del espectro separado previamente por un prisma, modificando la distancia Δd entre los dos espejos, se buscaba obtener un mismo patrón ya sea de concordancia o de discordancia al menos dos veces seguidas, y a partir de ello se hallaba la diferencia entre las dos longitudes de onda $\Delta\lambda$, mediante la siguiente expresión⁶:

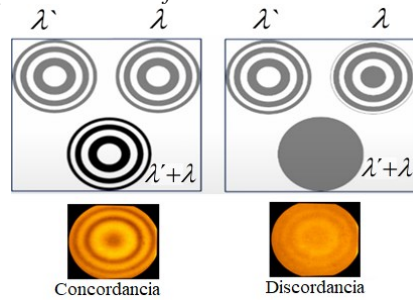
$$\Delta\lambda \approx \frac{\lambda^2}{\Delta d} \quad (1,5)$$

Donde en la expresión (1,5), λ^2 es el promedio de la longitud de onda observada convencionalmente (656.28 nm), y Δd la distancia entre los espejos cuando se produce la concordancia o discordancia por segunda vez consecutiva.

⁶ Dicha expresión es la usada actualmente, pues en 1887 se determinaba a partir de un cierto número de cuentas de las veces que se repetía el patrón ya fuera de concordancia o discordancia (Michelson & Morley, 1887).

Figura 1,6.

Representación del patrón producido por la estructura fina en el átomo de sodio.



Nota. Representación del fenómeno de concordancia y discordancia que permite observar y calcular la diferencia de longitudes de onda de la estructura fina. Tomado y modificado de: (M D'Anna y T Corridoni, 2018) y (Roorkee, 2018).

Por lo tanto, para la estructura fina del hidrógeno se tiene que en un interferómetro de Michelson se necesita de una distancia de los espejos del orden de:

$$\Delta d \approx \frac{(656.119\text{nm})^2}{656.126\text{nm} - 656.112\text{nm}} = 30.7\text{mm}.$$

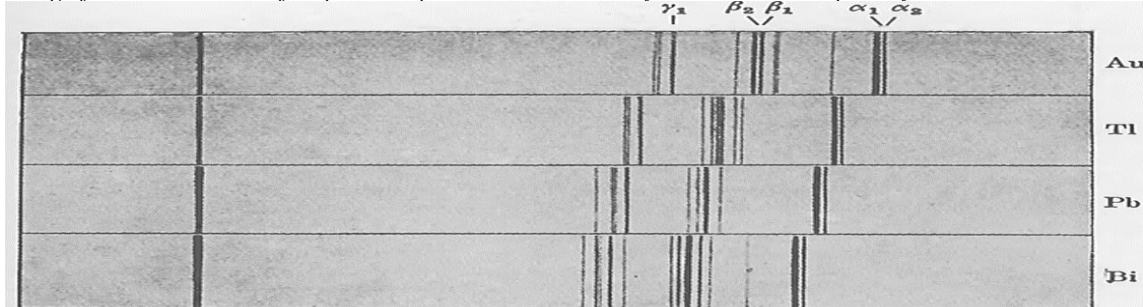
Esto es, que para obtener el fenómeno de concordancia dos veces seguidas, teniendo en cuenta que una vuelta completa en el tornillo micrométrico equivale a 0.5 mm , se necesita de aproximadamente 60 vueltas del tornillo micrométrico para medir la estructura fina del átomo de hidrógeno, y tan solo de 3 vueltas para medir la estructura fina del átomo de sodio (M D'Anna y T Corridoni, 2018). De esta manera, realizando distintas mediciones, variando la distancia entre los espejos, se logra medir la diferencia de las longitudes de onda $\Delta\lambda = 1.4 \times 10^{-8}\text{ mm}$ que dan cuenta de la estructura fina del átomo de hidrógeno, tal como lo hizo Michelson en 1892 (Albert A. Michelson, 1892).

Por otro lado, a medida que los métodos de espectroscopia evolucionaban, también se emplearon diferentes técnicas para estudiar la estructura fina, y otros desdoblamientos aún más sutiles como la estructura hiperfina o el efecto Lamb. Por ejemplo, para medir la estructura fina posterior al año de 1887, se usaron interferómetros como el de Fabry-Perot, o instrumentos como fotómetros que miden la intensidad de la luz y permiten generar curvas como las obtenidas por el físico Friedrich Paschen que sirvieron para confirmar la teoría de Sommerfeld en 1916, historia que se detalla más adelante en el presente trabajo.

Además, es importante destacar que años después del descubrimiento de los rayos X por Wilhelm Roentgen en 1895, se llevaron a cabo investigaciones en el campo de la espectroscopia de rayos X. Donde dichas investigaciones revelaron la existencia de una estructura fina en átomos como el oro (Au), el talio (Tl), el plomo (Pb), y el bismuto (Bi), cuyos espectros de emisión se encuentran en el rango de los rayos X debido a su alto número atómico Z (ver figura 1,7).

Figura 1,7

Fotografías de la estructura fina para el espectro de emisión en rayos x del oro, talio, plomo y bismuto.



Nota. Fotografías de la estructura fina de distintos elementos, donde las líneas (α_1, α_2) y (β_1, β_2) corresponden a las líneas dobles del espectro en rayos X de la serie L, además la separación para la estructura fina de los rayos X es mucho mayor debido a que estos son generados por átomos cuyo número atómico es alto. Tomado de (Arthur Compton, 1926) que recupera la imagen de una de las investigaciones en espectroscopia de rayos X, realizada por el físico Manne Siegbahn, quien también inventó dicha notación para los rayos x y su desdoblamiento en 1916 (Siegbahn, 1916).

Así pues, considerando los resultados experimentales obtenidos en espectroscopía, distintos físicos continuaron realizando trabajos a finales del siglo XIX y principios del siglo XX, con el objetivo de encontrar fórmulas más precisas que pudieran explicar los espectros atómicos. No obstante, ninguna de las fórmulas descubiertas lograba dar cuenta de la estructura fina, ya que como describe el físico e historiador Helge Kragh, el fenómeno de la estructura fina: “No desempeñó un papel significativo en el desarrollo de la física hasta 1916, cuando Arnold Sommerfeld lo convirtió en objeto de un análisis teórico detallado” (Kragh, 1985).

1.3 Primera explicación Teórica de la estructura fina

1.3.1 Consideraciones previas

Los estudios teóricos de los espectros de emisión de los átomos en el siglo XIX, se enfocaban principalmente en dar cuenta de las líneas espectrales a partir de fórmulas empíricas, tales como la encontrada por Balmer en 1885. La razón de por qué se producían dichas líneas era un campo en el cual aún no se había profundizado, pues de acuerdo con las hipótesis como la de Stoney (Stoney, 1871), se pensaba que el espectro en su conjunto estaba producido por las vibraciones libres de los átomos, conocidas como sus “armónicos”. Sin embargo, esta explicación tenía un gran problema, y es que como se había observado, el espectro detectado era discreto con ciertas longitudes de onda características, lo cual, entraba en contradicción con la hipótesis de los armónicos, que predecía la existencia de un conjunto de líneas continuas con frecuencias cuyo valor fuese un múltiplo entero de una frecuencia fundamental.

Además, como se demostró en 1908, la hipótesis anterior estaba en desacuerdo con el principio de combinación de Rydberg-Ritz, propuesto por el físico Walther Ritz; quien, con base en la fórmula obtenida por Johannes Rydberg en 1890 para dar cuenta del espectro de emisión del hidrógeno y otros elementos, propone una fórmula, la cual establecía que las frecuencias de las líneas espectrales de un elemento, podían ser descritas como la diferencia entre dos términos espectrales, los cuales estaban relacionados con valores enteros, y tomaban unos valores particulares para cada elemento químico (Kragh, 2012); por ejemplo para el caso más simple (*descrito en términos actuales*), se demostraba que para el átomo de hidrógeno, la frecuencia ν de la luz emitida, venía dada por la siguiente expresión:

$$\nu = T_1 - T_2 \quad (1,6)$$

Donde T_1 y T_2 eran los siguientes términos: $T_1 = \frac{R_H}{n_1^2}$ y $T_2 = \frac{R_H}{n_2^2}$. Y, por lo tanto, se tenía que:

$$\nu = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (1,7)$$

Siendo R_H la constante de Rydberg para el hidrógeno igual a $109\,677\text{ cm}^{-1}$ (Atkins, 2006); $n_1 < n_2$ números enteros que representan los distintos niveles de energía.

La fórmula (1,7), junto con la deducida por Balmer (1,2), daban cuenta de que el espectro de emisión era efectivamente discreto, lo cual no podía ser explicado de manera satisfactoria mediante la física clásica. Fue hasta el año de **1913** cuando el físico danés Niels Henrik David Bohr, proporcionó la primera explicación teórica completa para el espectro del átomo de hidrógeno. Para ello, Bohr utilizó las fórmulas mencionadas anteriormente, como apoyo en su explicación de los espectros atómicos. Sin embargo, hubo un problema que ni las fórmulas empíricas ni los desarrollos de Bohr lograron explicar, el de la estructura fina del átomo de hidrógeno. Para comprender esto, resulta esencial adentrarse en las consideraciones iniciales que Bohr tomó en cuenta, pues al examinar estos aspectos, se establece una conexión con el trabajo posterior llevado a cabo por Arnold Sommerfeld, quien finalmente logró proporcionar una primera explicación teórica de este fenómeno.

Por consiguiente, es importante iniciar destacando que previo al trabajo desarrollado por Bohr, distintos físicos ya habían propuesto diferentes modelos del átomo y posibles explicaciones para sus espectros de emisión. Así, además de los conocidos modelos de Thomson y de Rutherford, uno los modelos que introdujo por primera vez las ideas de cuantización expuestas por Max Planck en 1901, fue el modelo del matemático y físico John William Nicholson, quien, estudiando los espectros de la corona solar, describe que: “*Las bases físicas fundamentales del espectro coronal pueden estar en la teoría de la radiación de Planck [...]. En ciertos casos, nos lleva a suponer que las líneas de una serie pueden emanar de átomos cuyo momento angular interno tiene cantidades discretas de un valor estándar*” (Nicholson, 1912). Sin embargo, más allá de ello, Nicholson no desarrollo a profundidad su modelo y no trato el problema de la estabilidad de los átomos⁷. Aun así, Niels Bohr en julio de 1913 en su famoso artículo: Sobre la Constitución de Átomos y Moléculas (Bohr, 1913), reconoce que los trabajos de Nicholson sirvieron de base para sus desarrollos, a partir de los cuales da una explicación para la estabilidad de los átomos, y a su vez explica la razón por la cual estos emiten y absorben energía.

Para dar cuenta de lo previamente descrito, Bohr realiza una serie de consideraciones las cuales eran: suponer que el electrón describe una órbita estacionaria alrededor del núcleo teniendo en cuenta que su masa es lo suficientemente pequeña comparada a la del núcleo; suponer la velocidad del electrón lo suficientemente baja comparada con la velocidad de la luz, y por lo tanto no considerar expresiones relativistas de la energía; y por último, aunque en su artículo describe que la órbita del electrón puede ser elíptica, para sus cálculos él la considera circular (Bohr, 1913).

Con las consideraciones nombradas, Bohr se basa en la teoría de Planck para proponer una solución al problema de la estabilidad de los átomos, describiendo que los electrones se encuentran en ciertos estados estacionarios sin emitir energía mientras el sistema no sea perturbado desde el exterior, y de acuerdo con su descripción: “*De la teoría de Planck, debemos esperar que la cantidad de energía emitida en el proceso considerado⁸ es igual a $\tau h\nu$, donde h es la constante de Planck y τ un número entero*” (Bohr, 1913). Con ello muestra que la energía (W) de un electrón en su respectiva órbita para el átomo de hidrógeno es⁹:

$$W = \frac{2\pi^2 m e^4}{h^2 \tau^2} \quad (1,8)$$

Siendo m y e , la masa y carga del electrón respectivamente, h la constante de Planck y τ un número entero. Donde a partir de la formula anterior, en la segunda parte de su artículo, trata el espectro de emisión del átomo de hidrógeno, suponiendo que la cantidad de energía emitida por el sistema, pasando de un estado correspondiente a $\tau = \tau_2$, a uno correspondiente a $\tau = \tau_1$ es:

$$W_{\tau_2} - W_{\tau_1} = \frac{2\pi^2 m e^4}{h^2} \left(\frac{1}{\tau_2^2} - \frac{1}{\tau_1^2} \right) \quad (1,9)$$

Que, de acuerdo con la fórmula de cuantización de la energía $W = h\nu$, describe que la frecuencia ν asociada a la radiación emitida es:

$$\nu = \frac{2\pi^2 m e^4}{h^3} \left(\frac{1}{\tau_2^2} - \frac{1}{\tau_1^2} \right) \quad (1,10)$$

Por lo tanto, con base en la fórmula (1,10), Bohr establece todas las series para el espectro del átomo de hidrógeno. Donde para el presente trabajo, la famosa línea **C** (**H- α**), corresponde a la energía emitida durante la transición de un electrón desde un estado de energía con $\tau_2 = 3$ a un estado de energía con $\tau_1 = 2$.

⁷ Uno de los principales problemas que tenían los modelos atómicos propuestos, era que, de acuerdo con la electrodinámica clásica, si los electrones orbitaban alrededor del núcleo atómico, estos al estar sometidos a una aceleración centrípeta, deberían emitir radiación electromagnética constante, por lo cual los átomos no serían estables.

⁸ Bohr anteriormente estaba discutiendo el proceso de emisión de energía de un electrón en el átomo y como esto llevaba a ciertas contradicciones si se trataba el problema desde la física clásica.

⁹ En todas las fórmulas descritas en el artículo de Bohr se supone la constante de Coulomb $K=1$.

Es importante resaltar, que además de las derivaciones anteriores, otro de los resultados destacados del trabajo de Bohr, fue establecer que el momento angular (L) permitido para los electrones en sus órbitas estables está cuantizado, y viene dado por la siguiente expresión:

$$L = \tau \frac{h}{2\pi} \quad (1,11)$$

Por tanto, gracias a los resultados descritos y a las demás explicaciones teóricas presentadas en su artículo, el trabajo de Bohr se destacó como uno de los más importantes en la historia de la física. Pues fue el primero en proporcionar una explicación teórica a la estabilidad de los electrones en el átomo, y permitió dar cuenta de la emisión y absorción de luz por parte de los átomos a partir de las transiciones energéticas de los electrones entre sus niveles de energía. Además, un año más tarde, su trabajo se vería fuertemente soportado gracias a los resultados del experimento de James Franck y Gustav Hertz¹⁰, publicados en abril de 1914 (Kragh, 2012).

Ahora bien, aunque el objetivo principal de Bohr, tal como lo dice el título de su artículo era el desarrollo de una teoría general “Sobre la Constitución de Átomos y Moléculas”, su teoría proporcionaba una excelente explicación únicamente para el hidrógeno y otros átomos similares, lo que en inglés se le conoce como: “hydrogen-like atoms”. Sin embargo, de acuerdo con el físico Max Jammer (Jammer, 1989), los esfuerzos de Bohr para buscar una teoría completa que se pudiera extender a sistemas atómicos más complejos, fracasaron. Además, para el átomo de hidrógeno, aún quedaba una incógnita que seguía sin resolverse, la de su estructura fina.

Aparentemente Bohr no estaba al tanto de la estructura fina del hidrógeno cuando desarrollo su trabajo, pues este fenómeno de cierta forma contradecía su teoría original del hidrógeno, donde las líneas del espectro de emisión no eran necesariamente líneas únicas. Por ejemplo, como se describió previamente, de acuerdo con lo informado por Michelson y Morley en 1887, cuando se observa con espectroscopia de alta resolución la línea correspondiente a una transición de $\tau_2 = 3$ a $\tau_1 = 2$ en la ecuación (1,10), esta resulta ser una línea doble con frecuencias distintas y bastante cercanas; fenómeno que no es posible de explicarse con la expresión de Bohr. Pues en la ecuación (1,10) con $\tau_2 = n + 1$ y $\tau_1 = n$ siendo $n \geq 1$, se obtienen las series estándar del hidrógeno de Lyman, Balmer, Paschen, etc. Pero sin ningún desdoblamiento.

Bohr estuvo al tanto de la estructura fina al año siguiente de la publicación de su famoso artículo de 1913, donde para aquella época, debido a que también ya había sido observado el efecto Zeeman y el efecto Stark¹¹, en principio él atribuyó los dobletes de la estructura fina al efecto Stark producido por el campo eléctrico dentro del tubo de gas que contenía el hidrógeno (Hoyer, 1981). Sin embargo, al estudiar profundamente los experimentos del efecto Stark, Bohr concluyó que su hipótesis era errónea. Por lo cual, en enero de 1915, retomando la hipótesis que no había tenido muy en cuenta en su primer artículo de 1913, acerca de que las orbitas que describían los electrones no eran realmente circulares sino elípticas, y además, incorporando esta vez correcciones relativistas, afirma que:

*“Me gustaría aquí, poner mi atención a un efecto de otra naturaleza, el cual involucra una corrección para las fórmulas teóricas para el espectro del hidrógeno, esto es, la **variación de la masa del electrón con su velocidad** [...]. La relación entre la frecuencia de rotación de la órbita y la frecuencia de revolución del electrón viene dada por: $\frac{2\pi^2 e^4}{n^2 c^2 h^2}$, que para $n=2$ es del mismo orden de magnitud que las líneas **dobles** del hidrógeno observadas”* (Bohr, 1915)

¹⁰ Experimentos realizados con electrones acelerados dentro de un tubo que contenía gas de vapor. Donde Frank y Hertz se dieron cuenta que había una pérdida de energía por parte de los electrones a ciertos voltajes. La pérdida de energía del electrón correspondía a la diferencia de energía entre el estado fundamental y el estado excitado del átomo, que, por transición al estado fundamental, reemitía esta energía en forma de luz de acuerdo con la condición de frecuencia de Bohr.

¹¹ Los efectos Zeeman y Stark, descubiertos en 1896 y 1913 respectivamente, corresponden al desdoblamiento que sufren las líneas de los espectros de emisión de los átomos, cuando estos son sometidos a campos magnéticos (efecto Zeeman) y a campos eléctricos (efecto Stark).

No obstante, Bohr no alcanzó a tratar completamente esa idea en su trabajo, y en el mismo artículo, mencionó que esperaba abordar su modelo incluyendo las expresiones relativistas con mayor detalle en futuras investigaciones. Sin embargo, antes de que tuviera la oportunidad de hacerlo, otro científico lo hizo primero, Arnold Sommerfeld.

1.3.2 Explicación de la estructura fina de Arnold Sommerfeld

Teniendo en cuenta las consideraciones propuestas por Bohr mencionadas previamente, en 1916 el físico alemán Arnold Johannes Wilhelm Sommerfeld publica una serie de artículos en los cuales proporciona una explicación para las órbitas elípticas de los electrones en el modelo atómico de Bohr, incorporando luego los efectos relativistas en su análisis para dar cuenta de la estructura fina del átomo de hidrógeno. Además, tres años más tarde, publica un libro que se convirtió en un gran referente para la teoría cuántica de la época, titulado: Estructura atómica y líneas espectrales (Sommerfeld A. , 1919). En dicho libro, Sommerfeld expone con un mayor detalle todo lo referente a sus artículos relacionados con la espectroscopía, además, a medida que pasaban los años, el libro añadía los últimos descubrimientos en dicho campo de la física por medio de nuevas ediciones. A continuación, con base en los trabajos mencionados de Sommerfeld, se describe el procedimiento para llegar a la primera explicación teórica de la estructura fina, teniendo en cuenta que los cálculos detallados de ciertas expresiones se encuentran en el anexo [A.1.](#)

Así pues, una de las primeras consideraciones realizadas por Sommerfeld, consistió en suponer el movimiento del electrón como un problema bidimensional, ya que como él lo expone: “*el movimiento en una elipse representa un problema de dos grados de libertad*” (Sommerfeld A. , 1919). De acuerdo con esta concepción, supuso al protón en uno de los focos de la elipse, y al electrón orbitándolo, para a partir de ello encontrar la expresión de la energía que el electrón tendría en una órbita elíptica. Donde es importante destacar, que Sommerfeld inicia su trabajo a partir de las expresiones clásicas de la energía, para evaluar si únicamente la suposición de una órbita elíptica permite hallar una expresión que explique algún tipo de desdoblamiento. Sin embargo, este enfoque resultó insuficiente, y fue necesario incorporar las expresiones de la relatividad especial para lograr el éxito en su análisis. Para comprender por qué, es necesario tener en cuenta que la energía clásica empleada en el modelo de una órbita elíptica es:

$$H = W = E_{kin} + E_{pot} = \frac{1}{2m} \left[(p_r)^2 + \frac{1}{r^2} (p_\theta)^2 \right] - \frac{e^2}{r} \quad (1,14)$$

Donde m es la masa del electrón, e su carga, r su distancia al núcleo, p_r y p_θ su momento radial y angular respectivamente.

Sommerfeld a partir de la expresión (1,14) hace uso de la mecánica analítica, para expresar la energía total como la ecuación de Hamilton-Jacobi, y a partir de ella aplicar ciertas condiciones de cuantización. De acuerdo con dicha formulación, expresa el momento en términos de la acción S , y por lo tanto la energía total (W) queda como:

$$W = \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 \right] - \frac{e^2}{r} \quad (1,15)$$

Con la expresión (1,15), Sommerfeld postula en su artículo de 1915, a lo que hoy en día se le conoce como la condición de cuantización de Wilson-Sommerfeld, ya que también había sido propuesta en ese mismo año por el físico William Wilson. Dicha condición, lo que hace es generalizar la cuantización del momento angular planteada previamente por Bohr en 1913. En ese contexto, al abordar un sistema con dos grados de libertad, relacionado con los momentos p_r y p_θ , Sommerfeld describe que: “*Desglosando el enfoque cuántico desde el principio, según los f grados de libertad del sistema, utilizando sujeto a una elección adecuada de las coordenadas q_i , postulo la siguiente ecuación: $\oint dp_i dq_i = h, i=1,2,...f.$ ” (A.Sommerfeld, 1916a). Donde*

desarrollando la ecuación para los " p_n " momentos, llega a la famosa **condición de cuantización de Wilson-Sommerfeld (1,16)**:

$$\oint p_k dq_k = n_k h \quad (1,16)$$

Siendo k , la coordenada correspondiente a (r, θ) , y h la constante de Planck. La ecuación (1,16) generaliza entonces las condiciones de cuantización del momento para sistemas con más de un grado de libertad. Por ejemplo, teniendo $k = \theta$, se obtiene:

$$\oint p_\theta d\theta = n_\theta h$$

Y dado que en ausencia de torques externos el momento angular p_θ se conserva:

$$p_\theta \oint d\theta = n_\theta h$$

Que, para una revolución completa, la integral de línea cerrada se convierte en:

$$\begin{aligned} p_\theta \int_0^{2\pi} d\theta &= n_\theta h \\ \rightarrow p_\theta &= n_\theta \frac{h}{2\pi} \end{aligned} \quad (1,17)$$

Siendo (1,17) la cuantización del momento angular postulada por Bohr en 1913, solo que en este caso Sommerfeld llama a n_θ como el número cuántico azimutal. Así, teniendo en cuenta el momento en términos de la acción y la cuantización postulada por Sommerfeld, obtuvo:

$$\frac{\partial S}{\partial \theta} = n_\theta \frac{h}{2\pi} \quad (1,18)$$

Y reemplazando (1,18) en (1,15), Sommerfeld llegó a la siguiente expresión:

$$2mW + \frac{2me^2}{r} = \left[\left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(n_\theta \frac{h}{2\pi} \right)^2 \right] \quad (1,19)$$

Despejando $\frac{\partial S}{\partial r}$ de (1,19) y aplicando la cuantización para el momento radial de (1,16), obtuvo la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} \oint p_r dr &= n_r h \\ \rightarrow \oint \frac{\partial S}{\partial r} dr &= n_r h \end{aligned} \quad (1,20)$$

$$\rightarrow \oint \sqrt{2mW + \frac{2me^2}{r} - \frac{h^2 n_\theta^2}{4\pi^2 r^2}} dr = n_r h \quad (1,21)$$

Siendo n_r el segundo número cuántico introducido por Sommerfeld en 1916. Luego, para resolver la integral (1,21), desarrolla un método conocido como el método de integración compleja (Sommerfeld A. , 1919), a partir del cual obtiene la siguiente solución:

$$\oint \sqrt{2mW + \frac{2me^2}{r} - \frac{h^2 n_\theta^2}{4\pi^2 r^2}} dr = -2\pi i \left(-i \frac{h n_\theta}{2\pi} - \frac{me^2}{\sqrt{2mW}} \right)$$

Y teniendo en cuenta (1,21), obtiene:

$$\rightarrow -2\pi i \left(-i \frac{hn_\theta}{2\pi} - \frac{me^2}{\sqrt{2mW}} \right) = n_r h \quad (1,22)$$

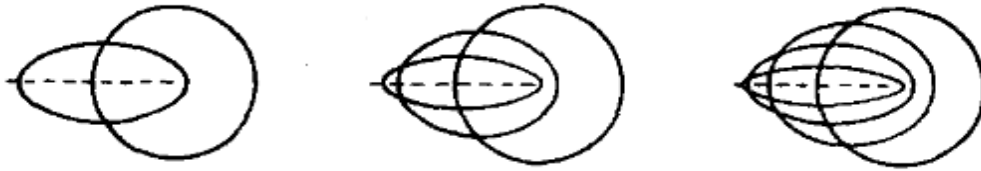
Donde despejando W de (1,22), Sommerfeld deriva la fórmula de la energía total para un electrón en una órbita clásica elíptica (1,23):

$$W = -\frac{2\pi^2 me^4}{h^2} \frac{1}{(n_\theta + n_r)^2} = -\frac{2\pi^2 me^4}{h^2} \frac{1}{(n)^2} \quad (1,23)$$

De acuerdo con historiadores de la física como Max Jammer (Jammer, 1989), Sommerfeld se desilusiono de cierta forma con la expresión obtenida (1,23), pues dicha expresión es análoga a la expresión (1,8) ya obtenida por Bohr, con $\tau=n = n_\theta + n_r$ ¹². Dándose cuenta de que, para una órbita elíptica con dos grados de libertad, obtenía la misma energía que para una órbita circular, solo que, a diferencia de Bohr, Sommerfeld propone dos números cuánticos en lugar de uno, los cuales permitían dar cuenta de las distintas formas para las orbitas del electrón en el átomo, todas con la misma energía.

Figura 1,8

Representación de las distintas órbitas elípticas del electrón en el modelo clásico de Sommerfeld



Nota. Órbitas propuestas por Sommerfeld, donde para los distintos niveles de energía $n = n_\theta + n_r$, existen distintas posibles formas de las órbitas de acuerdo con los números cuánticos n_θ y n_r . En la figura está representada $n=2$, $n=3$, y $n=4$. Tomado de: (A.Sommerfeld, 1916a)

Sommerfeld, extendió su modelo anterior, considerando 3 grados de libertad para el electrón, esto es, tres coordenadas para definir su posición (r, θ, φ); aun así, tampoco encontró una solución para la energía que diera cuenta de la estructura fina. Por lo cual, faltaba una consideración distinta que Bohr también había nombrado en 1915, la de incluir las expresiones relativistas de la energía. Este nuevo tratamiento del átomo de hidrógeno se hace en una segunda parte del artículo de 1916, titulada: La estructura fina del hidrógeno y las líneas similares al hidrógeno (A.Sommerfeld, 1916a). Dicho tratamiento se realiza en la segunda parte del trabajo mencionado, y se inicia con una descripción de los diversos desdoblamientos observados tanto en el espectro visible del hidrógeno como en el espectro de los rayos X de otros elementos, como se mostró en las figuras 1,3 y 1,4 del presente trabajo.

A partir de estos hallazgos, Sommerfeld introduce la idea de que, para comprender el fenómeno de desdoblamiento, es necesario considerar los efectos relativistas relacionados con la "variación" de la masa en función de la velocidad, así como la expresión de la energía cinética relativista, ecuaciones (1.24) y (1.25):

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad (1,24)$$

$$E_{kin} = mc^2 - m_0c^2 = m_0c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} - 1 \right) \quad (1,25)$$

Siendo m_0 la masa en reposo del electrón, c la velocidad de la luz, $\beta^2 = \frac{v^2}{c^2}$.

¹² Sommerfeld denomina a $\tau=n_\theta + n_r$ como el número cuántico principal n , es decir $n=n_\theta + n_r$, y de acuerdo con esto determina que como $n \geq 1$, y $n_\theta \geq 1$ de acuerdo con la cuantización del momento angular que propuso Bohr, entonces $n_r \geq 0$.

Con ello, siguió un proceso análogo al descrito previamente para una órbita elíptica clásica con dos grados de libertad, teniendo en cuenta que la energía (W) ahora es:

$$W = m_0 c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} - 1 \right) - \frac{Ze^2}{r} \quad (1,26)$$

Donde para dar cuenta de los dos grados de libertad del electrón en la órbita elíptica relativista, tiene en cuenta la velocidad (v) para una órbita elíptica dentro del factor β :

$$\beta^2 = \frac{v^2}{c^2} = \frac{(\dot{r})^2 + (r\dot{\theta})^2}{c^2} \quad (1,27)$$

Que en términos de los momentos es:

$$\beta^2 = \frac{v^2}{c^2} = \frac{(\dot{r})^2 + (r\dot{\theta})^2}{c^2} = \frac{1}{c^2 m^2} \left(p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\theta^2 \right) \quad (1,28)$$

Y teniendo en cuenta la masa relativista, obtiene que:

$$\frac{\beta^2}{(1 - \beta^2)} = \frac{1}{c^2 m_0^2} \left(p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\theta^2 \right) \quad (1,29)$$

Donde, dejando de nuevo el momento en términos de la acción, establece una relación de la expresión (1,29) con la energía (1,26), llegando a:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 = 2m_0 W + \frac{2m_0 Z e^2}{r} + \frac{1}{c^2} \left(W + \frac{Z e^2}{r} \right)^2$$

Aplicando la cuantización del momento azimutal (angular) y la cuantización del momento radial, Sommerfeld obtuvo la siguiente ecuación (1,30), análoga a la obtenida en el caso clásico (1,21) pero con unos términos adicionales debido a la corrección relativista:

$$\rightarrow \oint \sqrt{2m_0 W + \frac{2m_0 Z e^2}{r} - \frac{h^2 n_\theta^2}{4\pi^2 r^2} + \frac{1}{c^2} \left(W + \frac{Z e^2}{r} \right)^2} dr = n_r h \quad (1,30)$$

La integral (1,30) tiene la misma solución que la hallada para la integral (1,21) del caso clásico, pues como se puede observar en el anexo [A.1](#), realizando los cambios de variable pertinentes se obtiene una solución similar, donde la expresión obtenida es:

$$-2\pi i \left(-\sqrt{-\frac{h^2 n_\theta^2}{4\pi^2} + \frac{Z^2 e^4}{c^2}} - \frac{m_0 Z e^2 + \frac{W Z e^2}{c^2}}{\sqrt{2m_0 W + \frac{W^2}{c^2}}} \right) = n_r h \quad (1,31)$$

A partir de dicha expresión (1,31), se despeja la energía W , obteniendo así la expresión para la energía en el modelo atómico relativista de Sommerfeld (1,32):

$$W_{n_r, n_\theta} = m_0 c^2 \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{\left(n_r + \sqrt{n_\theta^2 - Z^2 \alpha^2} \right)^2} \right]^{-1/2} - m_0 c^2 \quad (1,32)$$

La expresión para la energía (1,32)¹³, le permitió a Sommerfeld dar cuenta por primera vez de forma teórica de la estructura fina, veintinueve años después de su descubrimiento. Para entender por qué, primero hay que analizar cada una de las variables involucradas en dicha expresión (1,32):

- m_0c^2 : Es un valor que da cuenta de la energía en reposo del electrón.
- α : es la **constante de estructura fina** que Sommerfeld introdujo por primera vez en 1916, y como se puede observar en el anexo [A.1](#), esta se obtiene a partir de una factorización para despejar W de la expresión (1,31). Esta constante comenzó a adquirir una relevancia significativa en su época y ha permanecido como una de las constantes más utilizadas en las teorías físicas desde mediados del siglo XX hasta la actualidad. La constante originalmente se dedujo en términos del sistema CGS de unidades, y por tanto se definió como:

$$\alpha = \frac{e^2}{c\hbar} \quad (1,33)$$

Siendo e la carga del electrón, c la velocidad de la luz, \hbar la constante de Planck dividida sobre 2π .

- Z : Se refiere al número atómico del elemento como de hidrógeno (hydrogen-like).
- n_r y n_θ : Son los números cuánticos que Sommerfeld denominó radial y azimutal respectivamente. Estos números, cumplen con las siguientes condiciones:
- El número cuántico principal n es la suma del número cuántico radial y azimutal, esto es: $n = n_r + n_\theta$
- Dado que tanto n y n_θ debían ser números mayores o iguales a 1, por las condiciones de cuantización de la energía y de momento angular, postuladas por Planck y Bohr explicadas anteriormente, entonces:

$$\begin{aligned} n &= n_r + n_\theta \\ n &\geq 1 \\ n_\theta &\geq 1 \\ \rightarrow n_r &= 0, 1, 2, 3, \dots \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta lo anterior, luego de haber deducido la energía para el electrón en una órbita relativista, Sommerfeld procedió a calcular para el átomo de hidrógeno, las distintas frecuencias asociadas a la radiación electromagnética emitida por un electrón al hacer una transición entre distintos niveles de energía, y con ello da cuenta de que:

“Las líneas que tienen el mismo número cuántico principal ahora se han separado debido a la relatividad” (Sommerfeld A. , 1919).

Además, al expandir en series de potencias la fórmula (1,32) como se puede ver en el anexo [A.2](#), para los dos primeros términos significativos obtuvo:

$$W_{n_r, n_\theta} \approx -\frac{2\pi^2 m_0 e^4}{h^2} \frac{1}{n^2} - \frac{1}{2} \frac{m_0 c^2 \alpha^4}{n^4} \left(\frac{n}{n_\theta} - \frac{3}{4} \right) + \dots \quad (1,34)$$

Donde el primer término de la expresión (1,34) es la misma expresión de la energía (1,8) del modelo clásico de Bohr; mientras que los demás términos se refieren a las correcciones relativistas del nuevo modelo de Sommerfeld. A continuación, en la tabla (1), se exponen los valores calculados de la energía (W_{n_r, n_θ}) para el átomo de hidrógeno ($Z=1$), de acuerdo con la fórmula (1,32), para las tres primeras órbitas dadas por el número cuántico principal n . Así mismo en la figura (1,9), se representan dichos niveles de energía, en comparación a los dados por la teoría clásica de Sommerfeld y de Bohr (*los niveles dados por las expresiones (1,23) y (1,8) que en general son los mismos*), en donde es posible observar que el modelo teórico relativista del átomo

¹³ Esta expresión se encuentra en el sistema CGS de unidades tal como fue deducida originalmente, esto es, tomando $K = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 1$.

de Sommerfeld permite predecir nuevas transiciones energéticas que dan cuenta de la estructura fina:

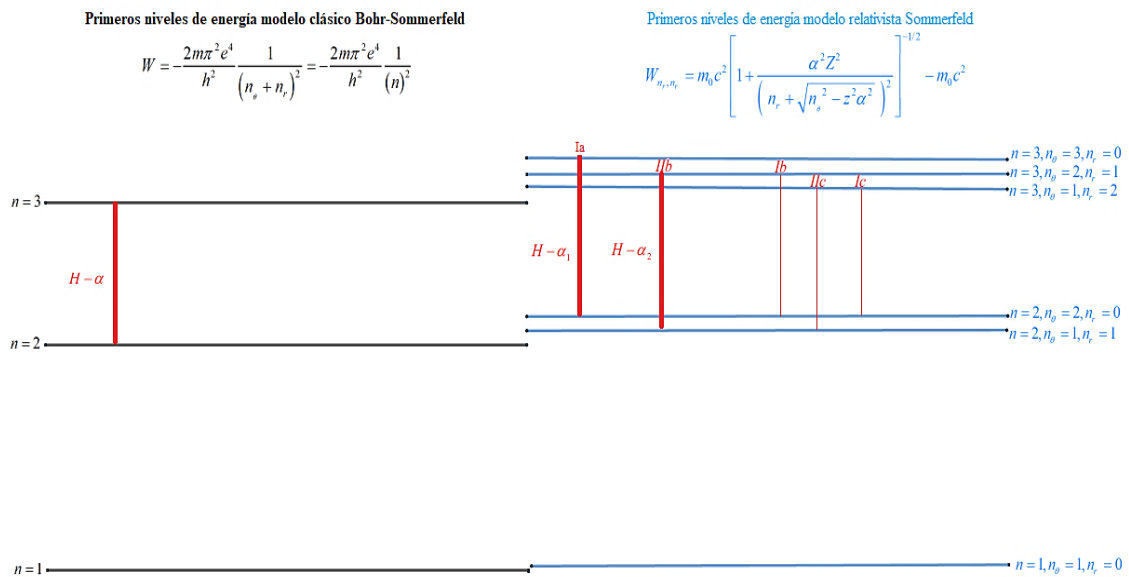
TABLA I
VALORES DE LOS NÚMEROS CUÁNTICOS Y ENERGÍA PARA UN ELECTRÓN EN EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO, DE ACUERDO CON EL MODELO RELATIVISTA DEL ÁTOMO DE SOMMERFELD

n=1 un posible valor de energía, órbita K		
$n_\theta=1$	$n_r=0$	$W_{110} = -13,60587415 \text{ ev}$
n=2, dos posibles valores de energía, órbita L		
$n_\theta=1$	$n_r=1$	$W_{211} = -3,40147985 \text{ ev}$
$n_\theta=2$	$n_r=0$	$W_{220} = -3,40143457 \text{ ev}$
n=3, tres posibles valores de energía, órbita M		
$n_\theta=1$	$n_r=2$	$W_{312} = -1,51176379 \text{ ev}$
$n_\theta=2$	$n_r=1$	$W_{321} = -1,51175037 \text{ ev}$
$n_\theta=3$	$n_r=0$	$W_{330} = -1,51174590 \text{ ev}$

Nota. Tabla que contiene los valores de la energía W_{n_θ, n_r} del electrón, de acuerdo con sus números cuánticos (n_θ, n_r) correspondientes al modelo atómico relativista de Sommerfeld, los cuales fueron calculados con base a la formula deducida (1,32).

Figura 1,9

Representación de los primeros niveles de energía en el modelo clásico y relativista de Sommerfeld, para el átomo hidrógeno.



Nota. Esquema de los primeros niveles de energía dados por el modelo clásico y relativista propuesto por Sommerfeld para el átomo de hidrógeno, donde es posible observar que en el modelo relativista se produce un desdoblamiento en los niveles energéticos para $n > 1$, con respecto a los niveles propuestos por el modelo clásico. Las líneas rojas representan la radiación electromagnética emitida en el rango visible del espectro cuando se produce una transición energética por parte del electrón, nombradas en la parte superior de acuerdo con la notación de Sommerfeld, y cuyo grosor representa la intensidad. Las demás transiciones de los niveles representados emiten radiación en el rango no visible del espectro. Elaboración propia.

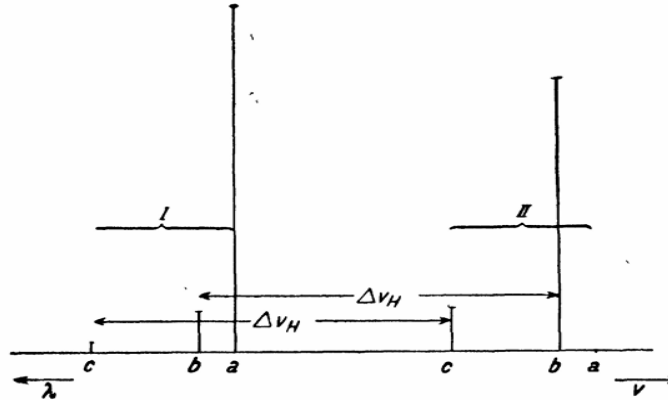
Como se puede observar en la figura 1,9, de acuerdo con la expresión relativista de Sommerfeld (1,32), existen seis posibles transiciones energéticas de los niveles con número cuántico principal $n=3$ a $n=2$, donde en contraste al modelo clásico de Bohr que predice una única línea de emisión (**H- α**), el modelo relativista de Sommerfeld predice seis líneas de emisión en el rango visible del espectro para los niveles recién nombrados¹⁴. Sin embargo, la estructura

¹⁴ Las demás transiciones energéticas en los niveles representados en el esquema de la figura 7, tienen asociadas radiaciones electromagnéticas en el rango no visible del espectro. Las otras longitudes de onda emitidas en el espectro visible que se deben a transiciones energéticas con $n > 3$, no se encuentran allí representadas.

fina observada desde 1887 no aparecía como seis líneas distintas sino como dos. Para explicar esto, Sommerfeld inventa unas reglas denominadas: **reglas de intensidad**, sobre las cuales se hablará con mayor detalle posteriormente en el presente trabajo, pues se requirió de la nueva teoría cuántica para poderlas explicar. En dichas reglas, se describe que, de las 6 líneas predichas: 1 está prohibida (la transición de W_{330} a W_{211}); tres tienen una intensidad bastante débil, por lo cual se necesita de instrumentos como fotómetros para detectarlas (*las líneas Ib IIc y Ic de la figura 1,9*); y las dos restantes son las líneas correspondientes a la estructura fina $H - \alpha_1$ y $H - \alpha_2$ (*las líneas Ia y IIb de la figura 1,9*). Las intensidades de las líneas descritas se encuentran representadas por las líneas verticales de la figura 1,10:

Figura 1,10

Diagrama de las intensidades de las longitudes de onda emitida por las transiciones energéticas de $n=3$ a $n=2$



Nota. Diagrama donde se observan las intensidades de las 6 líneas de emisión predichas por Sommerfeld para las transiciones energéticas de $n=3$ a $n=2$. En el diagrama, la línea vertical representa la intensidad, donde se puede observar que la (Ia) y la (IIb) tienen la mayor longitud, esas dos líneas, son las correspondientes a la **estructura fina**; así mismo la línea IIa tiene cero intensidad, y las líneas restantes representan una menor intensidad con respecto a las dos primeras. Tomado de: (Sommerfeld A. , 1919).

Así, de acuerdo con su artículo de 1916 Sommerfeld describe que: “*Nuestra suposición sobre las intensidades es una hipótesis adicional plausible y está completamente respaldada por los hechos*” (A.Sommerfeld, 1916a). Los hechos a los que se refería Sommerfeld eran dos:

El **primero**, consistió en contrastar su teoría con el experimento. Para ello consideró que, de acuerdo con sus reglas de intensidad, las líneas observadas que describen la estructura fina eran las denominadas como Ia y IIb. A partir de esto, procedió a calcular las respectivas diferencias de longitudes de onda y frecuencias entre estas dos líneas para comparar sus resultados teóricos con las mediciones realizadas por Michelson en 1892. Donde después de realizar los cálculos, Sommerfeld llegó a la conclusión de que:

“*Con respecto a la fuerza de los componentes del doblete, la observación está de acuerdo con la teoría*” (A.Sommerfeld, 1916a)

Para observar por qué, a continuación, se replica el cálculo teórico y se contrastará con el resultado obtenido por Michelson (el cual ya se enuncio previamente en el presente trabajo). Así, teniendo en cuenta la expresión (1,23), y la relación de Planck: $W = h\nu$, se obtiene que:

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{ch}{W_{n_r, n_r} - W'_{n_r, n_r}}$$

$$\rightarrow \lambda = \frac{h}{m_0 c} \left\{ \left[1 + \frac{\alpha^2}{(n_r + \sqrt{n_\theta^2 - \alpha^2})^2} \right]^{-1/2} - \left[1 + \frac{\alpha^2}{(n'_r + \sqrt{n_\theta'^2 - \alpha^2})^2} \right]^{-1/2} \right\}^{-1} \quad (1,35)$$

Donde calculando para las transiciones: $(n = 3, n_\theta = 3, n_r = 0 \rightarrow n' = 2, n'_\theta = 2, n'_r = 0)$ y $(n = 3, n_\theta = 2, n_r = 1 \rightarrow n' = 2, n'_\theta = 1, n'_r = 1)$, correspondientes a: $H - \alpha_1$ (Ia) y $H - \alpha_2$ (IIb) respectivamente, se obtiene:

$$\lambda_{H\alpha_1} = 656.1091272 \text{ nm}; \lambda_{H\alpha_2} = 656.0949575 \text{ nm}.$$

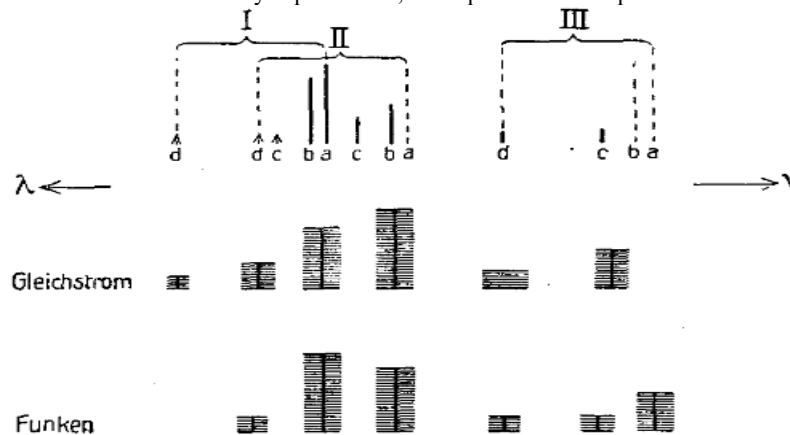
Cuya diferencia es: $\Delta\lambda = 0.014169755 \text{ nm} = 1.416 \cdot 10^{-8} \text{ mm}$. Este valor concuerda con el resultado experimental obtenido por Michelson en 1892 de $1.4 \times 10^{-8} \text{ mm}$ (Albert A. Michelson, 1892), así como con mediciones posteriores de la estructura fina. Lo cual demuestra que la fórmula encontrada por Sommerfeld producía resultados que concordaban con los experimentos ¹⁵.

El **segundo** hecho al cual se refirió Sommerfeld para comprobar su teoría tiene que ver con los resultados experimentales obtenidos por el físico Friedrich Paschen, quien estudiando el espectro del helio ionizado (He^+ es decir con dos protones y un electrón), detecta que en la longitud de onda $\lambda_{He} = 468.6 \text{ nm}$ correspondiente a una transición de $n=4$ a $n=3$, existían en realidad 12 líneas con distintas intensidades tal como lo predecía la teoría de Sommerfeld. En un artículo del físico e historiador Helge Kragh (Kragh, 1985), se reporta que el 21 de mayo de 1916, Paschen le envía una carta a Sommerfeld diciéndole que: "*Mis medidas ahora están terminadas y concuerdan en todas partes de la manera más hermosa con sus finas estructuras*".

De igual forma, Sommerfeld en su artículo de 1916, publica una imagen comparando sus predicciones teóricas con los resultados experimentales de Paschen para la estructura fina del helio, figura 1,11:

Figura 1,11

Imagen de la estructura fina del helio teórica y experimental, correspondiente a las posibles transiciones de $n=4$ a $n=3$



Nota. Diagrama para la estructura fina del helio. La primera corresponde a la predicción teórica realizada por Sommerfeld, donde para el helio, existen 12 posibles líneas cercanas para la emisión de $n=4$ a $n=3$, la altura de cada línea corresponde a su respectiva intensidad. La segunda gleichstrom (que significa corriente continua en alemán) y la tercera funken (que significa en alemán chispa), corresponden a las líneas detectadas por Paschen, de un espectro del helio producido por la excitación del gas con corriente continua, y otro con grandes descargas de electricidad al cual se le llama producción por chispa; en estas dos imágenes la luz se detectaba con instrumentos que median la intensidad de la radiación, por lo cual, las alturas de cada una de las barras da cuenta de la intensidad de las líneas espectrales. Cada forma de producir el espectro permite excitar mejor distintos niveles de energía, por ello la combinación de los resultados obtenidos por las dos imágenes, da cuenta de las 12 líneas para el helio. Tomado de: (A.Sommerfeld, 1916a)

Por lo tanto, de acuerdo con lo anteriormente presentado, se infiere que Sommerfeld obtuvo el resultado que esperaba, esto es, obtener una explicación teórica de la estructura fina. Además de ello, su trabajo recibió distintos elogios por parte de los físicos de la época, ya que de cierta forma su teoría permitía conciliar aspectos de la relatividad especial con la llamada antigua teoría cuántica¹⁶. Por ejemplo, Bohr en una carta enviada a Sommerfeld el 19 de marzo de 1916, le

¹⁵ En el artículo de 1916, Sommerfeld calcula el resultado de la diferencia en frecuencia, una medida común para la época, esto se hace tomando la velocidad de la luz $c=1$, cuya expresión da como resultado: $\Delta\nu = \frac{\Delta\lambda}{\lambda_{H\alpha_1} \cdot \lambda_{H\alpha_2}} = \frac{3,29169 \cdot 10^{-8}}{\text{nm}} = 0.329 \text{ cm}^{-1}$, que es el resultado mostrado en su trabajo (A.Sommerfeld, 1916a).

¹⁶ Se suele denominar por los historiadores de la física como "antigua teoría cuántica" a los resultados obtenidos entre los años 1900 a 1923 en dicho campo, y que son anteriores al artículo de Louis de Broglie de 1924 (M, Massimi, 2005).

escribe que: “*Muchas gracias por sus artículos más interesantes y hermosos. No creo que nunca haya disfrutado la lectura de algo más de lo que disfruté el estudio de ellos [...]. El punto de vista que había tomado da nueva luz y apoyo a sus suposiciones, en su hermosa aplicación de la teoría de la relatividad*” (Bohr, 1916)¹⁷.

Einstein, en una carta enviada el 3 de agosto de 1916 le escribe a Sommerfeld que: “*Sus análisis espectrales figuran entre mis mejores experiencias en física*” (Einstein, 1916). Y Planck en su conferencia del nobel dada en 1920, elogia el trabajo de Sommerfeld diciendo que: “*Como A. Sommerfeld mostró, de una extensión lógica de las leyes de la distribución cuántica con varios grados de libertad, y de la consideración de la variación de la masa inercial de acuerdo a la teoría de la relatividad, esa fórmula mágica surgió, con la cual, tanto el espectro del hidrógeno como del helio, revelan su enigma de la estructura fina, un logro comparable al famoso descubrimiento del planeta Neptuno, cuya existencia fue calculada antes de que el ojo humano lo hubiese visto*” (Planck, 1920).

Años más tarde, la teoría de Sommerfeld se reinterpretaría y se encontraría que su fórmula tendría una mejor explicación con base en una nueva teoría cuántica y en una propiedad del electrón que no se tuvo en cuenta en su modelo, el espín. Sin embargo, de acuerdo con el historiador de la física John Heilbron, la teoría de Bohr y de Sommerfeld del átomo, guio a los físicos a la invención de la nueva teoría cuántica a partir de 1925 (Heilbron, 1968).

Además, como se verá en los capítulos posteriores, las fórmulas de Sommerfeld (1,32) y (1,34) se convirtieron en una referencia para el desarrollo de una teoría cuántica compatible con la relatividad especial, pues entre 1924 a 1927, los físicos buscaron que al estudiar el átomo de hidrógeno con las nuevas formulaciones de la mecánica cuántica, se obtuviera la expresión (1,32) o (1,34) por medio de correcciones relativistas; y solo sería hasta el desarrollo de la ecuación de Dirac en 1928 que se encontraría una explicación completamente consistente para ambas expresiones.

Para finalizar este capítulo, es pertinente resaltar que, además del gran logro de la estructura fina, Sommerfeld contribuyó de forma significativa en posteriores desarrollos de la teoría cuántica. Al mismo tiempo, se convirtió en un gran maestro y fuente de referencia de muchos talentos, como muestra de ello: Werner Heisenberg, Wolfgang Pauli, Peter Debye, Hans Bethe, Linus Pauling, Isidor Rabi y Max von Laue, todos fueron estudiantes suyos, hicieron grandes contribuciones a la física, y veían a Sommerfeld como su gran tutor (Beléndez, 2017). Aun así, pese a todos sus logros, Sommerfeld nunca recibió el premio nobel de física a pesar de ser nominado **84** veces, razón por la cual muchos historiadores de la física lo llaman: “*El eterno candidato al nobel*” (Beléndez, 2017).

¹⁷ Fragmento de una carta de Bohr enviada a Sommerfeld tomado de (Hoyer, 1981).

Capítulo 2

En busca de una teoría cuántica relativista para dar cuenta de los fenómenos de desdoblamiento

Para el año 1917, la teoría de Sommerfeld se había convertido en un gran avance tanto para la teoría atómica como para la relatividad especial; sin embargo, esta aún presentaba ciertas incompletitudes en algunos aspectos. El primero de ellos, y como se describió previamente, consistía en las reglas de intensidad inventadas por Sommerfeld de forma empírica para dar cuenta de todas las líneas predichas por su modelo de estructura fina, sin embargo, para él aun no era claro del por qué estas reglas funcionaban y que aspecto físico subyacía en ellas.

Por otro lado, a modo de información suplementaria, es relevante destacar que, dadas las circunstancias de la época, había una corriente de físicos con tendencias ultraconservadoras, tales como Philipp Lenard o Johannes Stark, quienes atacaron abiertamente las nuevas teorías atómicas y por supuesto la teoría de la relatividad de Einstein, y dado que la teoría de Sommerfeld hacía uso y de cierta forma confirmaba las ecuaciones de la relatividad especial, esta también fue atacada con base a ciertos resultados experimentales que no entraban en total acuerdo con la teoría de Sommerfeld (Kragh, 1985). Dichas objeciones, se apoyaban en parte, en ciertas limitaciones que presentaba la teoría de Sommerfeld-Bohr, por ejemplo, fenómenos como el de Paschen-Back¹⁸ no se podían explicar a partir de esta. Pues hay que tener en cuenta que para 1916 aún no se había profundizado en un estudio más detallado del electrón, que, como se describirá posteriormente, dicho estudio permite intuir una propiedad adicional de esa partícula, que permite explicar efectos como el nombrado.

Además, durante el período comprendido entre 1916 y 1923, la “teoría cuántica antigua” (M, Massimi, 2005) contaba con ciertas limitaciones, entre las cuales se incluyen:

- La incapacidad para explicar fenómenos como el efecto Zeeman anómalo, debido a la falta de un modelo más preciso para el electrón.
- El problema de la intensidad de las distintas líneas espectrales, sobre las cuales no había un entendimiento claro.
- No se tenía un entendimiento completamente claro del efecto Stark.
- La idea de “órbita” aun causaba ciertas dificultades en la comprensión de la teoría atómica que estaban estudiando Pauli, Heisenberg y Born (Bucher, 2008).

Así, de acuerdo con el análisis que se ha realizado hasta este punto, se evidencia que para los años 20 del siglo XX, se requería de una nueva teoría cuántica que se integrara de cierta forma con la teoría de la relatividad especial a fin de proporcionar una explicación satisfactoria para diversos fenómenos. Y como se describirá en las próximas secciones de este capítulo, los físicos precursores de esa nueva teoría cuántica, buscaban que desde su origen esta fuera compatible con la relatividad especial, lo cual condujo a avances significativos que, a su vez, resultaron ser de gran importancia para el posterior desarrollo de la ecuación de Dirac.

¹⁸ Como se describió en el pie de página 11, las líneas espectroscópicas sufren una serie de desdoblamientos más allá de los conocidos en presencia de campos magnéticos. Donde en campos magnéticos débiles, las líneas presentan el denominado efecto Zeeman anómalo, es decir, un desdoblamiento de entre 4 a 6 líneas; distintas al conocido efecto Zeeman normal, que es la división de las líneas espectrales en 3, debido a campos magnéticos. Con esto, Ernst Back y Friedrich Paschen se dieron cuenta que, si el campo magnético va variando de una intensidad débil a una fuerte, el efecto anómalo Zeeman se convierte en un efecto Zeeman normal, a este fenómeno es al que se le conoce como efecto Paschen-Back.

2.1 Relatividad especial en los primeros trabajos de la nueva teoría cuántica

Se puede considerar que después de los avances pioneros de Sommerfeld en la aplicación de la relatividad especial para la comprensión teórica de un fenómeno atómico, distintos trabajos posteriores al suyo también hicieron uso de esa misma relación; por ejemplo, el 1 de mayo de 1923 Arthur H. Compton, publica el artículo titulado: Una teoría cuántica de la dispersión de los rayos X por elementos ligeros (Compton, 1923), en el cual utiliza las expresiones del momento y energía relativista para explicar el fenómeno conocido hoy en día como efecto Compton.

Aproximadamente un año después, el 29 de noviembre de 1924, Louis-Victor de Broglie presenta en París su tesis de doctorado titulada: Investigaciones sobre la teoría cuántica. En la cual expone a lo largo de 7 capítulos, distintas relaciones entre la cuántica y la teoría de la relatividad, el principio de mínima acción para la dinámica de un electrón, la naturaleza cuántica de la luz, la mecánica estadística y cuántica¹⁹ aplicada a los gases, la difusión de rayos X y gamma(γ), y por supuesto uno de sus resultados más famosos sobre la naturaleza ondulatoria de las partículas materiales. Para ello parte de la suposición de que, siguiendo a Einstein, la energía puede ser considerada equivalente a la masa, y, por lo tanto: “*A cada porción de energía con una masa adecuada m_0 , se le puede asociar un fenómeno periódico de frecuencia ν_0 , tal que uno encuentra: $h\nu_0 = m_0c^2$* ” (de Broglie, 1924). Con esa expresión, trabaja y expone en su tesis las distintas relaciones que se pueden obtener a partir de ella, donde la más famosa es la relación: $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{p}\lambda = \hbar$ [Siendo p el momento, λ la longitud de onda, k el número de onda, asociados a la partícula; h la constante de Planck, $\hbar = h/2\pi$]. Exponiendo dentro de sus conclusiones que: “*En resumen, he desarrollado nuevas ideas capaces tal vez de acelerar la síntesis necesaria para unificar, desde el principio, los dos dominios físicos opuestos de la radiación, basados en dos concepciones opuestas: corpúsculos y ondas [...]. He dejado deliberadamente vagas las definiciones de ondas de fase²⁰ y los fenómenos periódicos de los cuales tales ondas son una realización. Por lo tanto, la presente teoría debe considerarse más bien provisional, y no como una doctrina establecida*” (de Broglie, 1924).

Teniendo en cuenta lo expuesto, varios historiadores de la física han planteado la pregunta de por qué de Broglie no planteó una ecuación de onda asociada a las denominadas “ondas de fase” del electrón; y aunque no puede haber una respuesta completamente clara, algunos argumentan que esto se debió a su falta de contacto con los mejores físicos teóricos de la época que se encontraban principalmente en Alemania, y a su indiferencia con respecto a cierto conocimiento matemático necesario para plantearla (Chodos, 2010). A pesar de esto, su trabajo fue un gran referente para alguien que sí la planteó, Erwin Schrödinger, quien teniendo en cuenta que el trabajo de Louis de Broglie estaba fundamentado en una formulación relativista, intentó inicialmente desarrollar su ecuación teniendo en cuenta dicha formulación, aunque sin tener éxito, publicando entonces una ecuación de ondas sin incorporar la relatividad, historia que se describe posteriormente en el presente capítulo.

Sin embargo, antes de analizar lo anterior, primero es importante resaltar que meses después de la publicación de L. de Broglie, Werner Heisenberg (mientras se recuperaba de una rinitis alérgica conocida como fiebre del heno), trabajó y publicó el 29 de julio de 1925 un artículo titulado: Sobre la reinterpretación teórica cuántica de las relaciones cinemáticas y mecánicas; trabajo que fue revisado previamente a petición de Heisenberg por Wolfgang Pauli y Max Born (Jagdish & Helmut, 1982), y que se considera el pionero de la mecánica cuántica matricial junto con los trabajos publicados dos meses después por Born y Jordan. Donde cabe destacar que esta nueva teoría cuántica, debido a su formalismo matemático, no fue aceptada de forma inmediata

¹⁹ Para noviembre de 1924, ya se empezaba a usar el término de: mecánica cuántica. Pues como se ha descrito, normalmente se le conocía como teoría cuántica antigua o nueva, sin embargo, en un artículo de junio de 1924, Max Born por primera vez usa el término de mecánica cuántica, y desde ese momento se le empezó a llamar de esa manera.

²⁰ A lo largo de su trabajo, ondas de fase, hace referencia a las ondas asociadas a los electrones (de Broglie, 1924).

por la comunidad científica de la época, ya que para esos años, los físicos estaban más familiarizados con las ecuaciones diferenciales que con el formalismo matricial. Además, debido a que los primeros fenómenos que se trataron con dicha teoría fueron: el oscilador armónico, el oscilador anarmónico, y la teoría de la dispersión. Ciertos físicos aún esperaban una adecuada explicación por parte de la nueva teoría de Heisenberg, para un sistema físico fundamental que se había convertido en el examen de la teoría cuántica: el átomo de hidrógeno.

Fue hasta el 17 de enero de 1926 cuando W. Pauli publica el artículo titulado: Sobre el espectro del hidrógeno desde el punto de vista de la nueva mecánica cuántica. Trabajo en el cual, utilizando la nueva formulación de la teoría cuántica de Heisenberg, deduce la fórmula de Bohr de la energía para el espectro del átomo de hidrógeno, lo cual, fue un gran triunfo para la nueva mecánica cuántica matricial. A pesar de ello, Pauli era consciente de que esta nueva teoría no era capaz de producir la fórmula de la energía de Sommerfeld para la estructura fina del hidrógeno, para la cual era necesaria la inclusión de la relatividad especial. Además, de acuerdo con sus otros trabajos, él estaba intentando explicar el efecto Zeeman anómalo y su relación con el espín del electrón²¹ haciendo uso de la relatividad especial, y dado que la mecánica de Heisenberg no la incluía, Pauli concluye que: *“Modificaciones a las bases fundamentales de la nueva mecánica cuántica aun serán necesarias”* (W.Pauli, 1926). Además, describe que todos los resultados empíricos del efecto Zeeman y del espín, encontrarían una explicación: *“Solo cuando se calcule la estructura fina relativista a partir de las bases de la nueva mecánica cuántica”* (W.Pauli, 1926).

El fenómeno de la estructura fina volvía entonces a ser un problema nuevamente para inicios de 1926, ya que como se acaba de describir, a Pauli de cierta forma le inquietaba que la nueva mecánica cuántica planteada por Heisenberg, Born y Jordan, no diera cuenta de ese fenómeno y no incorporará la relatividad especial. Además, había otro problema que, según los físicos de la época, necesitaba también del uso de la relatividad especial para su resolución, este era el problema del entendimiento del espín y su relación con distintos fenómenos espectroscópicos. Por lo cual, antes de continuar con el análisis de los acontecimientos de 1926 en relación con la búsqueda de una nueva teoría cuántica que incorporase la relatividad especial, a continuación, se describirá cómo el estudio del espín estuvo estrechamente ligado a esa búsqueda.

2.2 Relación del espín con la relatividad especial y la estructura fina

Para iniciar, es importante resaltar que un análisis a profundidad de este fenómeno tan importante para la física requiere de un trabajo propio para ello, sin embargo, a continuación, se destacan los aspectos físicos que fueron clave entorno a la concepción del espín, poniendo énfasis en su relación con la relatividad especial y con la estructura fina. Para ello, es de señalar que uno de los primeros fenómenos asociados al descubrimiento del espín del electrón se remonta a 1897, cuando el científico Thomas Preston, al analizar el comportamiento del espectro del átomo de cadmio en presencia de un campo magnético, encuentra un efecto anómalo al ya conocido efecto Zeeman normal descubierto por Pieter Zeeman en 1896. Diecinueve años más tarde, ya con la teoría del átomo de Sommerfeld-Bohr consolidada, los físicos Peter Debye y A. Sommerfeld hacen uso de esa teoría, para explicar el efecto Zeeman normal; que para recordar, es ese desdoblamiento adicional a la estructura fina, que sufren las líneas espectrales cuando los átomos que las producen se encuentran inmersos en un campo magnético. Para explicar esto, los dos físicos mencionados anteriormente, proponen que dicho efecto se debe a la interacción del momento magnético orbital del electrón con un campo magnético externo, donde, dada la visión mecanicista del átomo que se tenía para la época, el momento magnético orbital (μ) estaba dado por la siguiente expresión que depende de la carga e y la masa m_e del electrón:

$$\mu = \frac{e\hbar}{2m_e} \quad (2,1)$$

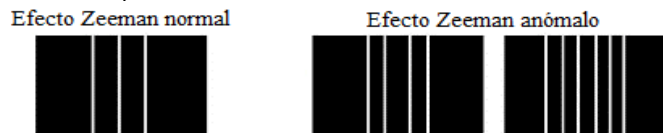
²¹ Para 1926, Pauli ya había teorizado un grado de libertad adicional del electrón, que en 1927 lo denominaría como el espín.

La expresión (2,1) se dedujo, suponiendo que el electrón orbita alrededor del núcleo, con un periodo de revolución T , y un momento angular orbital L . Y fue propuesta por primera vez en 1911 por el físico Pierre Weiss como: $\mu = \frac{eL}{2m_e}$. Luego, con la cuantización del momento angular propuesta por Bohr en 1913, se toma que ese valor de L debe ser un múltiplo entero de \hbar ; obteniéndose con ello la expresión (2,1), la cual se pasó de llamar de: magnetón de Weiss a magnetón de Bohr. Así, por la teoría electromagnética, se supuso que el átomo sufriría la interacción con un campo magnético externo \vec{B} , de acuerdo con la expresión: $\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$. Lo cual, permitía entender que el desdoblamiento en los niveles de energía del electrón, eran debidos a una energía potencial adicional $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$, que se añadía al átomo en presencia de campos magnéticos.

Sin embargo, la explicación anterior solo permitía entender el desdoblamiento Zeeman normal, no el anómalo. Donde para recordar, dicho efecto Zeeman anómalo, se llamó así debido a que era una anomalía que se manifestaba solo en ciertos átomos, donde, en presencia de un campo magnético normalmente débil, los desdoblamientos espectrales típicos del efecto Zeeman normal, se subdividían en aún más líneas. En otras palabras, lo que normalmente sería un desdoblamiento triple en el efecto Zeeman normal, se convertía en un desdoblamiento cuádruple o incluso más complejo en el efecto Zeeman anómalo, como se muestra en la figura 2.1:

Figura 2,1

Imagen representativa de los dos tipos de efecto Zeeman.



Nota. Imagen representativa donde se observa que en el efecto Zeeman anómalo el desdoblamiento de las líneas espectrales es aún mayor con respecto al desdoblamiento del efecto Zeeman normal. Es importante resaltar que estos efectos se producen en presencia de campos magnéticos, a diferencia del fenómeno de la estructura fina que se produce de manera natural sin presencia de ningún campo externo. Tomado de: (Instituto Nacional de Astrofísica, s.f.)

Para poder explicar el efecto anómalo Zeeman, A. Sommerfeld y A. Landé, propusieron alrededor del año 1922, la llamada: hipótesis del núcleo magnético. En esta hipótesis proponían que, en los elementos químicos, tanto el núcleo como los electrones cercanos a él (*aquellos en la órbita K como la denominaban en la época*), poseían un momento angular adicional al orbital con valores cuantizados de $\frac{\hbar}{2}$ (Jammer, 1989). Dicha hipótesis, les permitía poder introducir un momento angular neto para el átomo, al cual lo denominaron con la letra: \vec{J} . Y con ello, dedujeron que el átomo también debía poseer un momento magnético neto debido a \vec{J} . Explicando que el efecto Zeeman anómalo, se producía por la interacción del campo magnético externo con el momento magnético neto que debía tener el átomo. Sin embargo, esta hipótesis fue desarrollada de forma empírica, y Sommerfeld siendo consciente de ello, dejó la incógnita de como poder explicar de forma teórica ese momento angular neto \vec{J} , producido por la adición del momento angular orbital con ese nuevo grado de libertad propio del núcleo y de los electrones. Además, en ese mismo año, el alumno de Sommerfeld, W. Heisenberg, publica un artículo titulado: Sobre la teoría cuántica de la estructura lineal y las reflexiones anómalas de Zeeman (Heisenberg W. , 1922). En dicho trabajo, Heisenberg desarrolla una teoría para explicar los efectos Zeeman, describiendo que para ello era necesario que \vec{J} siempre tomara valores de: $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots)$. Y aunque al principio recibiera fuertes críticas tanto de Pauli como de Sommerfeld por ello, dichos resultados fueron de cierta forma fundamentales para la concepción del espín.

Luego, en diciembre de ese mismo año de 1922, se publica un artículo titulado: La evidencia experimental del momento magnético del átomo de plata (W. Gerlach, O. Stern, 1922). Donde los físicos W. Gerlach y O. Stern, experimentando con átomos de plata enviados a través de un campo magnético no homogéneo, observan que dichos átomos se desvían únicamente en dos haces, contrario a lo que se esperaría de acuerdo con la predicción clásica (*una desviación continua de*

los haces). Su experimento los condujo entonces, a concluir que el átomo de plata poseía un momento magnético neto que estaba cuantizado.

Ahora bien, con base en los estudios experimentales realizados con átomos de plata, así como en las teorías de Bohr-Sommerfeld y Sommerfeld-Landé, en trabajos llevados a cabo entre 1923 y 1924, se modelaba el átomo de plata bajo la premisa de que 46 de sus electrones ocupaban 4 órbitas internas cerradas con un momento angular orbital neto nulo²². Además, se suponía que su único electrón de valencia se encontraba en una quinta órbita, hoy en día denominada como 5s, cuyo momento angular orbital también se suponía igual a cero, según lo establecido por las teorías de la época (1923-1924) (Jammer, 1989). Por lo tanto, si según el experimento, se infería que el átomo de plata poseía un momento magnético neto y cuantizado, una explicación plausible para ello era que este se generaba por un momento magnético propio del electrón de la capa 5s.

Para obtener una explicación clara a lo anterior, se necesitó de una serie de trabajos clave. El primero de ellos fue realizado por W. Pauli, quien, de acuerdo con sus memorias, desde otoño de 1922, estaba bastante infeliz por no encontrar una explicación total del efecto Zeeman anómalo, pues: “¿Cómo uno puede lucir feliz cuando está pensando acerca del efecto Zeeman anómalo?” (W.Pauli, 1946). Pauli claramente estaba determinado a entender dicho efecto, y por ello decidió que para explicar satisfactoriamente este fenómeno, era necesario considerar lo siguiente: abundar más en la hipótesis propuesta por Sommerfeld y Landé; profundizar en el artículo de Heisenberg sobre la teoría cuántica de la estructura lineal y las reflexiones anómalas de Zeeman; realizar distintos estudios de metales alcalinos y elementos que tuvieran un único electrón de valencia en la capa S (*esto era importante, pues como en el caso del átomo de plata, en los elementos alcalinos todos los electrones de las capas internas al estar en pares, no contribuyen al momento angular neto del átomo, y el único electrón de valencia que tienen, al estar en la capa S, tampoco posee momento angular orbital*) (Jammer, 1989). Además, dado que Pauli era un ferviente seguidor de la teoría de la relatividad especial, decide analizar el efecto Zeeman anómalo por medio de esta.

Así, gracias a las consideraciones previamente nombradas, en 1925 se publica un artículo de Pauli titulado: Sobre la influencia de la velocidad en la masa del electrón en el efecto Zeeman (W.Pauli, 1925b). En este artículo, se presenta la conclusión acerca de que, en los elementos alcalinos y elementos con un electrón de valencia en la capa S, sus momentos magnéticos netos y sus cambios de energía causados por un campo magnético externo, son debidos exclusivamente a una propiedad intrínseca de ese único electrón de valencia; es decir, que tanto las desviaciones particulares cuantizadas encontradas en el experimento de Stern-Gerlach, así como el desdoblamiento anómalo de los espectros en un campo magnético externo, se debía a que ese único electrón de valencia tiene un momento magnético intrínseco causado por una propiedad cuántica peculiar: “clásicamente indescriptible” (W.Pauli, 1925b).

Con base en dicho estudio, Pauli concibió de cierta forma por primera vez una propiedad adicional intrínseca al electrón, que hacía que este tuviera un momento magnético propio. Donde es importante resaltar que para ello, se basó en la aplicación de la relatividad especial al estudio del efecto Zeeman. Pues hay que tener en cuenta que como el nombre de su artículo lo indica, en este se publicó una serie de cálculos considerando la fórmula relativista de la variación de la masa de los electrones a causa de su velocidad, y fue en parte gracias a ello, que Pauli logró demostrar que el momento magnético neto de los átomos que estudió, era causado por un momento magnético intrínseco del electrón de valencia.

Así mismo, es importante señalar que tomando como referencia el estudio anterior y los estudios del físico Edmund Stoner en relación con la distribución de los electrones en un átomo,

²² Posteriormente con el desarrollo de la mecánica cuántica, se comprueba que efectivamente en el átomo de plata, sus orbitas internas al tener electrones en pares tienen un momento angular neto de $L_i=0$.

teniendo en cuenta los números cuánticos conocidos para la época $(n, k_1, k_2, m_1)^{23}$; Pauli también encontró su famoso principio de exclusión, enunciado por primera vez de la siguiente forma: “*Nunca puede haber dos o más electrones equivalentes en el átomo, para los cuales en campos fuertes los valores de todas las cantidades cuánticas n, k_1, k_2, m_1 coincidan. Si un electrón está presente en el átomo y tiene estos valores cuánticos específicos, entonces ese estado está ocupado*” (W.Pauli, 1925a). Basado en este principio, y en datos experimentales de estudios espectroscópicos en presencia y ausencia de campos magnéticos, Pauli, dedujo que estos números debían cumplir ciertas restricciones. Por ejemplo, para dar cuenta del desdoblamiento del espectro de los átomos alcalinos en campos magnéticos, encontró que el momento angular neto $j=k+m_1$ debía tomar valores de: $j=k_2 - \frac{1}{2}$; $j = k_1 - \frac{1}{2}$; $j = k_1 - \frac{3}{2}$; donde determino que para que esta regla empírica se cumpliera, m_1 debía tomar valores de $\pm \frac{1}{2}$ en unidades de \hbar (Jammer, 1989). El siguiente paso era entonces determinar a que se debía ese momento magnético intrínseco del electrón, y por qué ese cuarto grado de libertad tomaba esos valores de $= \pm \frac{\hbar}{2}$. Sin embargo, Pauli no dio una hipótesis contundente en ese momento, pues como se describió previamente, él decía que eso era algo: “*clásicamente indescriptible*” (W.Pauli, 1925b).

Quien, si dio una primera hipótesis del por qué el electrón tenía un momento magnético intrínseco, fue el físico Ralph Kronig. Quien, de acuerdo con los estudios históricos del físico Eugene Commins (Commins, 2012), Kronig en enero de 1925, leyendo una carta de Pauli que contenía los detalles de los cuatro números cuánticos y sus respectivas restricciones, describió que ese cuarto grado de libertad del electrón se debía a un momento angular intrínseco, el cual era provocado por un movimiento de giro del electrón alrededor de su propio eje, asociando el número m_1 a un giro del electrón, denotando a $m_1 = s$. Con esta idea, Kronig explicó de manera fenomenológica la causa del desdoblamiento de los espectros atómicos en ausencia de campos magnéticos, esto es, la estructura fina. Donde según su explicación, desde el marco de referencia del electrón, el movimiento orbital del núcleo genera un campo magnético, y debido al momento magnético intrínseco del electrón, se produce una interacción entre ese campo magnético generado por el núcleo y el momento magnético propio del electrón, lo cual le añade una energía potencial adicional causando el desdoblamiento de sus niveles de energía, por lo cual, a ese fenómeno se le denominó, a partir de ese momento, acoplamiento espín-órbita. Sin embargo, hubo un problema, y es que teniendo en cuenta la visión anterior, los cálculos de Kronig fallaban debido a la presencia de un factor adicional g con un valor que él no supo explicar (*Problema que se explica en la siguiente página del presente trabajo*). Además, su visión de un electrón rotando sobre su propio eje fue rechazada por Pauli, Kramers, y Heisenberg, pues si el electrón tenía un momento angular intrínseco de valor $\frac{\hbar}{2}$, este debía rotar a una velocidad mayor a la de la luz (c); pues si s es un momento angular intrínseco entonces:

$$\begin{aligned} s &= \frac{\hbar}{2} \\ \rightarrow \frac{\hbar}{2} &= mrv \\ \rightarrow v &= \frac{\hbar}{2r_e m_e} \end{aligned} \quad (2,2)$$

Siendo r_e un valor conocido como el radio clásico del electrón $\approx 2.8 \cdot 10^{-15}m$; y m_e su masa.

Donde la expresión (2,2) da un valor de $v \approx 68.5 c$. Es decir, que el electrón debería rotar a aproximadamente 68 veces la velocidad de la luz. Es por ello y por el problema del factor g , que probablemente Kronig no decidió publicar en un artículo todas sus ideas.

²³ Para 1924, Edmund Stoner y Bohr, estaban llevando a cabo distintos estudios tanto experimentales como teóricos, para determinar la distribución de los electrones en un átomo; donde con base en los números cuánticos ya conocidos por Sommerfeld que se explicaron en el capítulo 1 (n, n_r, n_θ); estos físicos se apoyan en observaciones experimentales de los espectros atómicos en campos magnéticos, y de los espectros en rayos X, para proponer los nuevos números (n, k_1, k_2, m_1) hoy en día conocidos como (n, l, m, s) con las respectivas restricciones de valores que cada uno podía tomar. La especial peculiaridad de esto, es que dichos números fueron determinados gracias a puras observaciones experimentales, pues ni la ecuación de Schrödinger, ni la de Dirac, ni la teoría de Heisenberg se usó para ello (Jammer, 1989).

Por otro lado, unos meses más tarde en ese mismo año de 1925, los físicos Samuel Goudsmit y George Uhlenbeck, de forma independiente a los trabajos de Kronig, trabajando inicialmente en un modelo nuevo para dar cuenta de la estructura fina de Sommerfeld, pero ahora incorporando los 4 números cuánticos descubiertos, y con base en el artículo del principio de exclusión de Pauli, llegan a la conclusión de que el electrón “gira”. Goudsmit en una conferencia dictada en 1971, recuerda cómo fue su descubrimiento de la siguiente manera: “*Cuando llegó el día en que tuve que hablarle a Uhlenbeck sobre el principio de Pauli, él me dijo: ¿Pero no ves lo que esto implica? Significa que hay un cuarto grado de libertad para el electrón. Significa que el electrón tiene un espín, que gira*” (Goudsmit, 1971).

En dicha conferencia, Goudsmit comenta que él estaba muy emocionado, sin embargo, Uhlenbeck estudiando a profundidad lo que ello implicaba, se da cuenta que, si eso sucedía, efectivamente encontraban el mismo problema de Kronig acerca de que el electrón debía rotar a velocidades mayores a la de la luz. Sin embargo, ellos ya le habían pasado un artículo a su tutor Paul Ehrenfest para que él publicara sus ideas, y cuando Uhlenbeck se arrepintió debido al fallo encontrado, ya no había nada que hacer. De acuerdo con Goudsmit, la situación fue la siguiente: “*Acabábamos de escribir y entregar un breve artículo en alemán a Ehrenfest, quien quería enviarlo a "Naturwissenschaften"[una revista de ciencia]. Ahora, Uhlenbeck asustado, fue a donde Ehrenfest y le dijo: No lo envíes, porque probablemente esté mal; es imposible; no se puede tener un electrón que gire a tan alta velocidad y tenga el momento adecuado. Y Ehrenfest le respondió: Es demasiado tarde, ya lo he enviado. Yo (Goudsmit) nunca tuve la idea de que estaba mal porque no sabía lo suficiente. Lo único que recuerdo es que Ehrenfest me dijo: Bueno, es una buena idea, aunque puede que sea incorrecta. Pero todavía no tienes reputación, así que no tienes nada que perder*” (Goudsmit, 1971)

Pues efectivamente el artículo se publicó, y se titula: Reemplazar la hipótesis de restricción no mecánica con un requisito sobre el comportamiento interno de cada electrón individual (Uhlenbeck, G. Goudsmit, S., 1925). Por lo cual, en general, el crédito del “descubrimiento” del espín, es de Goudsmit y de Uhlenbeck. Y aunque si bien dicha visión clásica del espín como una rotación intrínseca del electrón tenía sus problemas, esta también tenía sus virtudes, pues gracias a suponer un momento angular intrínseco del electrón, Goudsmit y Uhlenbeck pudieron dar una primera explicación fenomenológica de dos efectos²⁴:

- La **estructura fina** del hidrógeno como una consecuencia del llamado acoplamiento espín-órbita.
- El efecto anómalo Zeeman, como una consecuencia de la interacción del momento magnético intrínseco del electrón, a causa de su espín.

Lo anterior, lo explicaron de forma detallada, en un artículo posterior titulado: Espín de los electrones y la estructura del espectro (Goudsmit, Uhlenbeck, 1926). Sin embargo, su explicación no era completa, pues se debía partir de un supuesto que ellos no podían entender, y que fue explicado gracias a la **relatividad especial**, esto era, el factor $g=2$ del electrón. Donde para comprender como la relatividad especial era nuevamente necesaria para explicar este fenómeno cuántico asociado al espín, hay que partir teniendo en cuenta que dicho factor g se introdujo desde la perspectiva de que, si el electrón posee un “giro” intrínseco, entonces también tiene un momento magnético intrínseco ($\vec{\mu}_s$), el cual viene dado por el electromagnetismo clásico, pero con un factor de corrección g , como se puede observar en la expresión (2,3) en unidades gaussianas:

$$\vec{\mu}_s = g \frac{e}{2m_e c} \vec{s} \quad (2,3)$$

Donde \vec{s} , m_e , e son el espín, masa y carga del electrón respectivamente, $\vec{\mu}_s$ su momento magnético intrínseco, c la velocidad de la luz y g el factor de corrección.

²⁴ Como se describió previamente, esto también fue explicado por Kronig y Pauli, pero sin ser contundentes a la hora de publicar y de asociar esos dos efectos directamente con el espín del electrón.

Con la expresión (2,3), se explicó que de manera análoga a como se describió al principio de esta sección, si el efecto Zeeman normal se debía a la interacción de un campo magnético externo con el momento magnético orbital, entonces el efecto Zeeman anómalo se debía a la interacción del campo magnético externo \mathbf{B} con el momento magnético intrínseco del electrón, debido a una energía potencial adicional (U) que viene dada por la expresión (2,4):

$$\mathbf{U} = -\mu_s \cdot \mathbf{B} = g \frac{e}{2m_e c} \mathbf{s} \cdot \mathbf{B} \quad (2,4)$$

Donde para que la formula (2,4) diera cuenta del efecto Zeeman anómalo, el factor g debía ser igual a: $g = 2$.

Por otro lado, teniendo en cuenta (2,3), Goudsmit y Uhlenbeck también explicaron que la estructura fina se debía al acoplamiento espín-órbita²⁵, entendido a partir de la interacción que se produce entre el momento magnético intrínseco del electrón con el campo magnético producido por el protón, desde el sistema de referencia del electrón. Y describieron con la formula (2,5), que la energía potencial adicional del electrón que causaba el desdoblamiento de sus niveles energéticos, y por lo tanto la estructura fina, era:

$$U_{\text{espin-órbita}} = g \frac{1}{2m_e^2 c^2} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{L}) \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \quad (2,5)$$

Siendo L el momento angular orbital, r la distancia del electrón al protón, V la energía potencial electrostática, y s el valor de espín.

Incluso, en su artículo de 1926, describen que la estructura fina debería empezar a tomar el nombre de: “*Dobletes de espín*” (Goudsmit, Uhlenbeck, 1926). La cuestión era que, para dar cuenta de la estructura fina, ellos ahora debían suponer un factor de: $g = 1$ en la expresión (2,5). Por lo cual Goudsmit y Uhlenbeck, al final de su estudio se plantearon las siguientes preguntas:

- ¿Es el factor $g = 1$ o $g = 2$?
- Y si la estructura fina se había explicado gracias a la relatividad especial en el modelo de Sommerfeld, ¿esta teoría podría entonces también dar respuesta a la cuestión anterior sobre el factor g ?

Las respuestas a las preguntas anteriores fueron dadas de forma parcial por Llewellyn Thomas como se explicará a continuación, y de forma completa por Paul Dirac como se explicará en el capítulo 3 del presente trabajo.

Así pues, en un artículo publicado en Nature el 10 de abril de 1926, L.Thomas, describe: “*Uhlenbeck y Goudsmit han mostrado que las grandes dificultades de la teoría atómica en explicar la estructura espectral y los efectos Zeeman, pueden evitarse usando la idea de un electrón rotando. Aunque a pesar de que su teoría está de acuerdo con la observación, esta involucra una discrepancia cuantitativa [...]. Esta discrepancia desaparece sin embargo cuando el problema es examinado más cercanamente desde el punto de vista de la teoría de la relatividad.*” (Thomas, 1926). Por lo tanto, Thomas afirma que, desde el marco de referencia del electrón, este no está en reposo, ya que, si este tiene un “giro” intrínseco, entonces debe tener correcciones relativistas que surgen desde su propio marco en rotación. Con dicha suposición, Thomas aplica las respectivas correcciones relativistas para el electrón, aplicando sucesivamente transformaciones de Lorentz a su movimiento de giro, obteniendo que para el electrón en un campo magnético externo \mathbf{B} , teniendo en cuenta su acoplamiento espín-órbita, este tendrá una energía potencial (U) adicional dada por la expresión (2,6):

$$U = -\frac{ge}{2m_e c} \mathbf{s} \cdot \mathbf{B} + \frac{(g-1)}{2m_e^2 c^2} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{L}) \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \quad (2,6)$$

²⁵ En la siguiente sección 2.4 se profundiza en ello, explicando como dicho acoplamiento espín órbita permite deducir la estructura fina gracias a la adición de un término adicional al hamiltoniano del electrón a partir de la ecuación (2,5).

Demostrando que si el factor g siempre toma un valor de $g = 2$, esto conlleva a que la ecuación (2,6) incorpore y recupere simultáneamente las expresiones (2,4) y (2,5). Por tanto, Thomas demostró que con un valor de $g = 2$ se podía explicar el efecto Zeeman anómalo y la **estructura fina** del átomo de hidrógeno (Brown, 2007).

Así, gracias a la aplicación de la relatividad especial se podía entender fenomenológicamente los dos efectos nombrados previamente. Además, se permitía dar cuenta del factor g asociado al momento magnético del electrón, que a su vez estaba asociado al espín. Es por ello por lo que a partir de ese momento los físicos creían que la explicación del espín debía estar relacionada con la relatividad especial. Por ejemplo, A. Sommerfeld el 5 de agosto de 1926 le escribe a Einstein invitándolo a dar una conferencia en Múnich, que: “*Hay mucho que discutir. Probablemente ya estás intentando encajar el electrón giratorio (¡que es indispensable!) en la teoría de la relatividad, ¿no?*” (Sommerfeld, 1926).

Al mismo tiempo, para agosto de ese año (1926), ya con las ecuaciones Schrödinger y Klein–Gordon publicadas, los físicos se planteaban el objetivo de poder incorporar el espín en alguna de ellas, sobre todo en la de Klein–Gordon que era la relativista; sin embargo, como se verá a continuación, ninguna de esas ecuaciones logró dicho objetivo, y fue hasta la ecuación de Dirac, que el espín surgió de forma natural en una ecuación cuántica-relativista.

2.3 Ecuaciones cuántico-relativistas previas a Dirac y su nexa con la estructura fina

Como se describió en la sección 2.1 del presente trabajo, los primeros trabajos relacionados con la nueva teoría cuántica hacían uso de la relatividad especial, y así mismo se vio que gran parte de la preocupación de Pauli con respecto a la nueva teoría de Heisenberg, Jordán y Born postulada en 1925, era que esta no incorporaba la relatividad especial en su formulación, razón por la cual no daba cuenta en un inicio de la estructura fina. Sin embargo, existía otra formulación de la nueva teoría cuántica publicada por primera vez en enero de 1926 por el físico austriaco Erwin Schrödinger, quien intentó que su formulación fuese compatible con la relatividad especial desde un inicio.

2.3.1 Schrödinger y su enfoque relativista

Si bien el trabajo de Schrödinger requiere de un análisis extenso, en la presente sección se enfatiza en como su ecuación fue pensada para ser compatible con la relatividad especial desde su primera formulación, sin embargo, al no ser publicada ante la comunidad científica, el crédito es dado a otros físicos como se describe más adelante. Lo anterior resulta de especial importancia para tener en cuenta que antes de la ecuación de Dirac, los físicos precursores de la mecánica cuántica intentaron hallar también una ecuación con las mismas características a la de Dirac, pero encontrando grandes dificultades.

Así pues, para iniciar, es relevante tener en cuenta que el trabajo de Schrödinger tuvo como principal referente el trabajo de L. de Broglie²⁶, el cual, al estar fundamentado en la relatividad especial, influyó a que Schrödinger buscara desde un principio una ecuación que incorporara la expresión relativista de la energía en su hamiltoniano propuesto, encontrando sin embargo dificultades en ello. En su primera versión del artículo del 27 de enero de 1926 titulado: La cuantización como problema de valores propios. En el cual se publica por primera vez su famosa ecuación, él describe que:

²⁶ En su artículo de enero de 1926 escribe que: “*No quisiera dejar de mencionar que debo la inspiración de estas consideraciones (las de plantear una ecuación de onda asociada al electrón) principalmente a las ingeniosas tesis de Louis de Broglie y a mis reflexiones sobre la distribución espacial de esas ondas de fase*” (Schrödinger, 1926a)

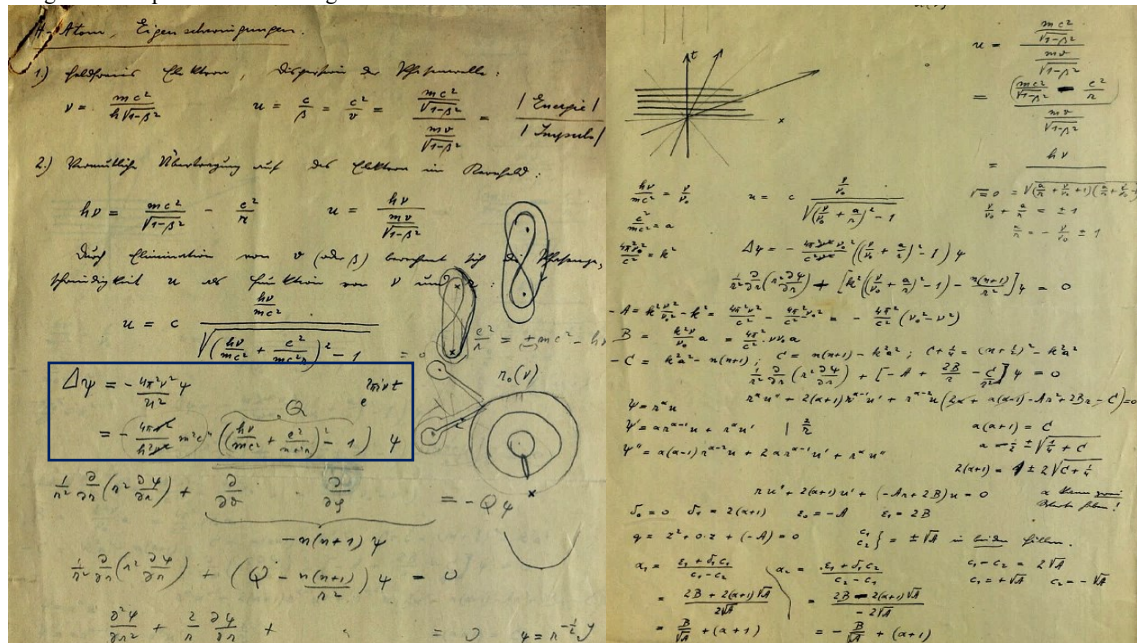
“En esta comunicación me gustaría considerar primero el caso más simple (no relativista y no perturbado) del átomo de hidrógeno [...]. La condición de frecuencia (relacionada con la energía del átomo) de Bohr en sí misma es solo una fórmula aproximada. Pero esto sólo es aparente y se evita por completo si se desarrolla la teoría relativista, a través de la cual se transmite una comprensión más profunda [...]. Aunque lamentablemente su impecable implementación aún tropieza con ciertas dificultades” (Schrödinger, 1926a)

Las dificultades con las que Schrödinger tropezó se deben a que su ecuación relativista, no daba cuenta de la fórmula de la energía (1,32) de Sommerfeld que describía la estructura fina, y tampoco incorporaba o daba cuenta del espín. En un artículo posterior de 1926 titulado: Una teoría ondulatoria de la mecánica de los átomos y las moléculas. Schrödinger da una visión distinta de cómo llegó a su ecuación, y reconoce de la siguiente manera los dos problemas previamente mencionados: “Primero, hasta ahora no me ha sido posible por el momento extender la teoría relativista a un sistema de más de un electrón [...]. Segundo, la teoría relativista del átomo de hidrógeno esta aparentemente incompleta; pues los resultados están en grave contradicción con el experimento, en la bien conocida formula de Sommerfeld para el desplazamiento de la estructura fina, y su llamado número cuántico azimutal, que debe ser un número semi- entero, en vez de un número entero. La anterior deficiencia debe estar íntimamente conectada con la teoría del electrón giratorio de Uhlenbeck y Goudsmit. Pero, en que forma el espín puede ser tomado en cuenta en la presente teoría, es aún desconocido.” (Schrödinger, 1926b)

La afirmación anterior dada por Schrödinger permite mostrar que, en efecto, para 1926, los físicos buscaban que la ecuación cuántico-relativista correcta, diera cuenta tanto de la estructura fina como del espín. Por tanto, a pesar de que Schrödinger había estado trabajando en su ecuación relativista desde finales de 1925, él decide no publicarla detalladamente debido a que esta no lograba describir completamente los fenómenos previamente nombrados. En la Figura (2,2), se presenta una fotografía de los apuntes de 1925 de Erwin Schrödinger, donde se evidencia su intento por resolver el átomo de hidrógeno mediante un enfoque relativista, antes de publicar su ecuación no relativista.

Figura 2,2

Imagen de los apuntes de Schrödinger del año 1925.



Nota. Imagen de las notas de Schrödinger, donde el título que se puede observar en la parte superior izquierda dice: H-Atom, Eigenschwingungen (Átomo de H, oscilaciones naturales). Donde la ecuación que se encuentra encerrada en el recuadro es la hoy en día llamada ecuación de Klein-Gordon para el átomo de hidrógeno; por otro lado, en la segunda página, está el proceso que estaba llevando a cabo para solucionar dicha ecuación. Tomado de: (Universitat wien, s.f.)

En el recuadro azul de la figura 2,2, se puede observar que Schrödinger ya había planteado la expresión conocida como la ecuación de Klein-Gordon²⁷, publicada un año después de la fecha de la que datan dichos apuntes. Dirac en una conferencia dada en 1977, describe como su buen amigo Erwin Schrödinger le comento a él, por qué no publicó su versión relativista de la ecuación:

“Schrödinger por supuesto estaba profundamente influenciado por la belleza de la relatividad. Y ustedes se podrían preguntar porque su ecuación es no relativista. Hay una contradicción aquí. Schrödinger me explico esto años después. No recuerdo exactamente cuándo, pero fue alrededor de 1940, cuando lo conocí bien. Él me dijo que estaba trabajando desde el punto de vista relativista inspirado por de Broglie, y él entonces estaba conducido a una ecuación de onda relativista la cual era una generalización de la ecuación de De Broglie, introduciendo potenciales electromagnéticos.

Cuando él llegó a su ecuación relativista, su primera inquietud fue aplicarla al átomo de hidrógeno para saber qué resultados le darían. El cálculo le dio resultados que no estaban de acuerdo con la observación.

Schrödinger estaba extremadamente decepcionado por eso, y pensó que su ecuación de onda no era buena del todo, y la abandono. Él se rindió por unos meses, y entonces volvió al trabajo, y tomo una segunda mirada al problema, notando que, si usaba su ecuación en una aproximación no relativista, los resultados que obtenía estaban de acuerdo con los resultados experimentales, ignorando los efectos relativistas. Así que él fue capaz de publicar su ecuación en una forma no relativista, y en acuerdo con el experimento.” (Dirac, 1977)

Dirac continúa explicando por qué la formulación relativista de Schrödinger falló y como él pudo arreglar dicho problema, pero eso es historia para el tercer capítulo del presente trabajo. Por otro lado, es de destacar que, a pesar de que Schrödinger no publicó su versión relativista de la ecuación, él en las siguientes versiones de su artículo [*La cuantización como problema de valores propios*] publicadas el: 23 de febrero, 10 mayo y 21 junio, del año 1926 respectivamente, profundiza más a detalle en su ecuación clásica, y en el problema de incorporar la relatividad en la mecánica cuántica. Especialmente en la cuarta versión de su artículo, del 21 de junio, describió cómo considerar la relatividad especial en su ecuación para explicar los efectos que experimenta el átomo en un campo magnético, resaltando los desafíos que debían superarse para lograr una integración de su teoría con la relatividad especial. Así pues, a continuación, se pasará a analizar por qué la ecuación relativista planteada por Schrödinger (hoy en día conocida como la ecuación de Klein-Gordon) falla en dar cuenta de la estructura fina y no incorpora el espín. Permitiendo así, profundizar en el problema que se tenía en 1926 con respecto a la búsqueda de una ecuación cuántica relativista.

2.3.2 Ecuación de Klein-Gordon

2.3.2.1 Historia

Como se describió en la sección pasada, ya desde 1925 Schrödinger planteaba una ecuación de onda relativista la cual no publicó. A diferencia de él, muchos físicos realizaron un trabajo similar logrando llegar a la misma ecuación, hoy en día conocida como la ecuación de Klein-Gordon. En ese sentido, dado que hubo distintos caminos para obtener la misma ecuación, en la presente sección se hará un énfasis en los fundamentos de los trabajos que condujeron a su planteamiento, mostrando así, como tantos físicos lograron obtenerla; razón por la cual Pauli en una carta enviada a Schrödinger la llamo como: “*la ecuación con los muchos padres*” [*Carta de Pauli a Schrödinger, 22-nov-1926, tomada de: (A.Herman & K.Meyenn, 1979)*]. No obstante, antes de entrar en dicha historia, es importante tener en cuenta las dos formas matemáticas en las que comúnmente se presenta la ecuación, la cual se obtiene partiendo del hecho de que si la ecuación de Schrödinger es en esencia un hamiltoniano clásico cuyas variables dinámicas que lo conforman son reemplazadas por operadores cuánticos, entonces la ecuación de Klein-Gordon se deduce de

²⁷ En la sección 2.3.2.1 se muestra que esa es la ecuación que publica Oskar Klein en su artículo de 1926.

forma similar, solo que esta vez el hamiltoniano está conformado por un hamiltoniano relativista. Donde para una partícula libre, se demuestra en el anexo [B.1](#), que la ecuación de Klein-Gordon (2,7) en su forma convencional, y (2,8) en su forma cuadri-vectorial, es:

$$-\hbar^2 c^2 \Delta \psi + m^2 c^4 \psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \quad (2,7)$$

$$(\square + m^2)\psi = 0 \quad (2,8)$$

Donde (2,8) se escribe en esa forma compacta, teniendo en cuenta que \square es el operador D'Alembertiano, y está en unidades naturales $c = \hbar = 1$. Además, el laplaciano de ψ se denota en este trabajo como $\Delta\psi$. Por otro lado, m es la masa de la partícula y c es la velocidad de la luz.

El primer físico en publicar la ecuación (2,7) fue el físico sueco Oskar Klein, en un artículo titulado: Teoría cuántica y teoría de la relatividad Penta dimensional. Quien contrario a Schrödinger, Klein llegó a la ecuación (2,7) buscando una teoría de cinco dimensiones que combinara la relatividad general, el electromagnetismo y la mecánica cuántica; teoría que también estaba trabajando el físico Theodor Kaluza, y que hoy en día se le conoce como teoría de Kaluza-Klein²⁸. Así pues, con base en su teoría 5-dimensional, Klein supone que: “*Las ecuaciones de movimiento de las partículas eléctricas toman la forma de ecuaciones de líneas geodésicas en campos electromagnéticos, que, si se interpretan como ecuaciones de radiación considerando la materia como un tipo de propagación de ondas, se llega casi automáticamente a una ecuación diferencial parcial de segundo orden, que puede verse como una generalización de la ecuación de ondas (de Schrödinger) ordinaria*” (Klein, 1926). Así, considerando que, para el átomo de hidrógeno, los términos gravitacionales en su teoría cinco dimensional se pueden despreciar, Klein publica por primera vez su famosa ecuación para el átomo de hidrógeno (2,9):

$$\Delta \psi + \frac{4\pi^2}{c^2 \hbar^2} [(h\nu - eV)^2 - m^2 c^4] \psi = 0 \quad (2,9)$$

Donde claramente para un electrón libre (en ausencia de potenciales, $eV = 0$); y se recupera la ecuación (2,7), haciendo uso de la fórmula de Planck $h\nu = E$, y aplicando luego el operador respectivo de la energía: $E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$.

Esta ecuación (2,9) es la que se encerró en el recuadro de la figura 2,2, sacando factor común $m^2 c^4$, y reemplazando el respectivo potencial de Coulomb V ; permitiendo así reconocer que efectivamente Schrödinger ya había planteado la ecuación a finales de 1925, solo que como él no la publicó, el crédito de su primera aparición es históricamente dado a Klein.

A parte de la primera publicación de la ecuación el 28 de abril de 1926 por Oskar Klein, en ese mismo año, 7 físicos más publicaron y dedujeron la ecuación de formas distintas, aunque no muy diferentes a la forma en la que llegó Klein o Schrödinger. En un artículo del físico e historiador Helge Kragh, titulado: La ecuación de los muchos padres. La ecuación de Klein-Gordon en 1926 (Kragh, 1984); se hace un análisis de esos tantos trabajos que llegaron a la misma ecuación en 1926. A continuación, con base en dicho artículo, se organizan cronológicamente dichos trabajos:

- **28 de abril 1926:** Oskar Klein como se describió previamente, publica por primera vez su ecuación cuántica relativista.
- **11 de junio de 1926:** el físico soviético Vladimir Fock, en desconocimiento del artículo de Klein, e inspirado por el trabajo de Schrödinger, publica su versión relativista de este. En ciertos textos de hecho llaman a la ecuación: la ecuación de Klein-Fock-Gordon.
- **19 de julio de 1926:** L. de Broglie en busca de extender la teoría Schrödinger publica su versión relativista de la ecuación.
- **30 de agosto de 1926:** El físico húngaro Johann Kudar, con base en la formulación de Hamilton-Jacobi llega a la ecuación. Este físico era asistente de Pauli, quien también llegó a

²⁸ Dado el éxito de la relatividad general publicada en 1915, distintos físicos se motivaron por buscar una primera teoría del campo unificado. En ese sentido la teoría de Klusa-Klein establecía una conexión entre el electromagnetismo y la gravedad, a través de una teoría que suponía un espacio-tiempo de cinco dimensiones: cuatro espaciales y una temporal (Klein, 1926).

la ecuación de Klein-Gordon, pero él no la publicó, pues como se describe en la siguiente sección 2.3.2.2, Pauli no estaba muy de acuerdo con ella. Sin embargo, su asistente Kudar, le reporta a Schrödinger y a Dirac, en una carta, que ellos (Pauli y Kudar) han estado trabajando la ecuación, pero que no se encuentran para nada satisfechos con ella.

- **19 de septiembre de 1926:** En la unión soviética aún sin conocer el trabajo de Klein, los físicos Dmitri Ivanenko y Gueorgui Gámov, deducen la ecuación, y la publican en un artículo titulado: Sobre la teoría ondulatoria de la materia.
- **29 de septiembre de 1926:** El físico alemán Walter Gordon, con el fin de explicar cómo las frecuencias e intensidades emitidas por el efecto Compton se calculan según la teoría de Schrödinger, aplica dicha ecuación en su versión relativista. Históricamente la ecuación se etiquetó con su apellido, debido a que fue el primer físico en aplicarla y en explicar un efecto físico de forma exitosa gracias a ella.
- **8 de noviembre de 1926:** Dirac, con el objetivo de explicar el efecto Compton a partir de la nueva teoría cuántica, introduce una versión relativista de la ecuación de Schrödinger, aunque claramente esa no fue la versión final de su famosa ecuación publicada en 1928.
- **27 de diciembre de 1926:** el físico húngaro Eugene Guth, deduce de forma independiente y publica la ecuación, buscando extender la teoría de Schrödinger a la relatividad especial.

Se puede ver de acuerdo con lo anterior, que históricamente, la búsqueda de una formulación relativista de la mecánica cuántica era un trabajo en el cual muchos físicos estaban trabajando. Sin embargo, al utilizar la ecuación de Klein-Gordon, se encontraron con ciertas dificultades para las cuales no se tenían respuestas en ese momento, además, esta ecuación no abordaba los efectos que se estaban intentando comprender con dicha formulación: la estructura fina y el espín del electrón.

2.3.2.2 Problemas y críticas a la ecuación de Klein-Gordon

El primer físico en publicar un artículo correspondiente a la aplicación de la ecuación de Klein-Gordon, fue Vladimir Fock, quien en junio de 1926 se encontraba viviendo en la ciudad de Leningrado (actual San Petersburgo), por lo cual, en su desconocimiento del artículo de Klein, dedujo la ecuación de Klein-Gordon con el objetivo de publicar una extensión relativista a la teoría de Schrödinger. A diferencia de Klein, Fock si aplico la ecuación a distintos sistemas físicos, con el fin de comprobar que resultados obtenía de esta. En su artículo titulado: Sobre la mecánica ondulatoria de Schrödinger; muestra distintos resultados, algunos relacionados con la ecuación de Schrödinger clásica y otros con su versión relativista. Con respecto a su versión relativista, el aplica la ahora llamada ecuación de Klein-Gordon, al problema que él tituló: “*Movimiento relativista de Kepler*”, obteniendo que efectivamente para el átomo de hidrógeno: “*Obtienes, la fórmula de Sommerfeld, con la diferencia de que los cuantos parciales son semi-enteros [...]. Así, el anterior desarrollo teórico presenta considerables dificultades*” (Fock, 1926). Por lo tanto, esa energía obtenida por Fock difiere del resultado obtenido por Sommerfeld, y por lo tanto no conduce al desdoblamiento correcto de la estructura fina; resultado fallido que también obtuvo Schrödinger, y por ello nunca publicó su versión relativista de la ecuación.

Para comprender la discrepancia obtenida por Fock, Schrödinger y otros físicos, como P. Epstein y F. Brouwer posteriormente, en relación con la estructura fina derivada de la ecuación de Klein-Gordon, es necesario analizar la fórmula de energía que se obtiene al aplicar esta ecuación al átomo de hidrógeno. Para ello, se parte entonces de la ecuación de Klein-Gordon para el átomo de hidrógeno, cuya deducción se puede observar en el anexo [B.2](#), y la cual se puede escribir de la siguiente forma:

$$-c^2\hbar^2\Delta\psi + m^2c^4\psi = \left(\mathbf{E} + \frac{\hbar c\alpha}{r}\right)^2\psi \quad (2,10)$$

Donde: $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$ es la constante de estructura fina en el Sistema internacional de unidades, $\Delta\psi$ el operador laplaciano, m la masa del electrón, c la velocidad de la luz, y \mathbf{E} son los valores propios de la energía a encontrar.

El procedimiento para solucionar la ecuación (2,10) es análogo a cuando se soluciona el átomo de hidrógeno para la ecuación de Schrödinger. Donde en el anexo B.3, se puede observar cómo se obtienen los respectivos valores de la energía E_{nl} que solucionan la ecuación (2,10), y que son los que obtuvieron Fock, Schrödinger, y los demás físicos que solucionaron el átomo de hidrógeno en 1926 con la ecuación de Klein-Gordon. Estos valores son los dados por la expresión (2,11):

$$E_{nl} = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{\left(n - l - \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2}\right)^2}}} \quad (2,11)$$

Donde:

- $m_0 c^2$: es la energía en reposo del electrón.
- α : la constante de estructura fina.
- n : indica el nivel correspondiente de energía 1,2,3,4,...
- l : da cuenta del momento angular orbital y toma valores de: $l \leq n - 1$

La fórmula de la energía E_{nl} (2,11), se puede observar que depende de dos variables n y l , que son los llamados números cuánticos: n (*número cuántico principal*) y l (*número cuántico azimutal o momento angular orbital*). Estos números, como se puede observar en el anexo B.3, salen de la solución radial y angular de la ecuación (2,10). Donde dichas soluciones, son las que imponen ciertas condiciones para esos números. Así pues, el número l solo puede tomar valores de: $l \leq n - 1$, debido a que, de la solución a la ecuación angular, l esta relacionado con los armónicos esféricos, y esto impone que $l=0,1,2,3, \dots$. Por otro lado, de la fórmula de recurrencia que surge de una parte de la solución a la ecuación radial, se obtiene que l solo puede tomar valores que estén en el rango de: $l \leq n - 1$; donde $n = 1,2,3, \dots$

Ahora bien, si se observa la expresión (2,11), esta tiene una forma similar a la que obtuvo Sommerfeld en 1916 (la expresión (1,32) del presente trabajo). Sin embargo, cuando se calculan los valores de energía con la ecuación (2,11), estos presentan una desviación a partir de la tercera o cuarta cifra decimal con respecto a los valores obtenidos por Sommerfeld, y por ello cuando se calcula la diferencia de longitudes de onda que dan cuenta de la estructura fina, esta da resultados que no están acordes con el experimento. Para entender por qué, en la tabla (2) se observan los niveles de energía para el átomo de hidrógeno que se obtienen gracias a la ecuación de Klein-Gordon, comparados con los valores descritos en la tabla (1) a partir de la fórmula de Sommerfeld:

TABLA 2
VALORES DE LOS NÚMEROS CUÁNTICOS Y ENERGÍA PARA UN ELECTRÓN EN EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO, DE ACUERDO CON LA SOLUCIÓN OBTENIDA DE LA ECUACIÓN DE KLEIN-GORDON

Sommerfeld (Tabla 1)		Klein-Gordon
n=1 un posible valor de energía, órbita K		
$W_{110} = -13,60587415$ ev	$l = 0$	$W_{10} = -13,60659877$ ev
n=2, dos posibles valores de energía, órbita L		
$W_{211} = -3,40147985$ ev	$l = 0$	$W_{20} = -3,40157043$ ev
$W_{220} = -3,40143457$ ev	$l = 1$	$W_{21} = -3,40144966$ ev
n=3, tres posibles valores de energía, órbita M		
$W_{312} = -1,51176379$ ev	$l = 0$	$W_{30} = -1,51179063$ ev
$W_{321} = -1,51175037$ ev	$l = 1$	$W_{31} = -1,51175484$ ev
$W_{330} = -1,51174590$ ev	$l = 2$	$W_{32} = -1,51174769$ ev

Nota. Tabla que contiene los valores de la energía $W_{n,l}$ del electrón, de acuerdo con sus números cuánticos (n, l) que se obtienen al solucionar la ecuación de Klein-Gordon. Los valores están calculados con base en la ecuación (2,11), **restando el factor $m_0 c^2$** .

Donde cabe resaltar que los valores escritos en la tabla (2), se hallan restándole a la ecuación (2,11) el valor de $m_0 c^2$; esto se debe a que cuando se plantea el hamiltoniano para resolver la

ecuación de Klein-Gordon, este se propone teniendo en cuenta la energía total que tiene el electrón en el átomo, por lo cual, para hallar su energía de ligadura en el átomo de hidrógeno, hay que restarle su energía en reposo (m_0c^2).

No obstante, a pesar de la alta concordancia que tienen los niveles de energía obtenidos con la ecuación de Klein-Gordon comparada con los niveles de energía que se obtienen con el modelo de Bohr, resulta que para dar cuenta de la estructura fina se requiere de un nivel de precisión altísimo tal como lo da el modelo de Sommerfeld. Por lo cual, como se describió previamente, se puede observar en la tabla (2), que dichos valores de la energía obtenidos con la ecuación de Klein-Gordon, discrepan a partir de la tercera o cuarta cifra decimal con respecto a los valores obtenidos con el modelo de Sommerfeld, que hasta el momento (1926) era el modelo más preciso, pues este, como ya se describió en el capítulo 1, era el que permitía dar cuenta de los resultados experimentales para la estructura fina del átomo de hidrógeno.

Así pues, cabe recordar que el valor de separación de las longitudes de onda para la estructura fina, experimental, y calculado por el modelo de Sommerfeld eran de:

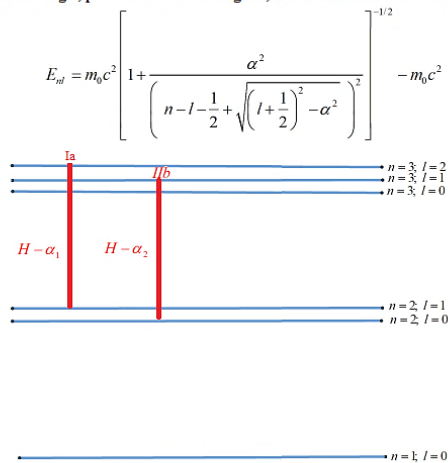
- ($\lambda_{H\alpha_1} = 656.1091272 \text{ nm}$; $\lambda_{H\alpha_2} = 656.0949575 \text{ nm}$.)
- Con una separación de: $\Delta\lambda = 0.014169755 \text{ nm} = 1.416 \cdot 10^{-8} \text{ mm}$)

Ahora, si se observa la tabla (2), al igual que con la fórmula de Sommerfeld, existen 6 posibles transiciones de energía entre $n=3$ a $n=2$. Sin embargo, de acuerdo con las reglas de intensidad que propuso Sommerfeld, la transición que da cuenta de $\lambda_{H\alpha_1}$ y $\lambda_{H\alpha_2}$, y por lo tanto de la estructura fina, son aquellas que pasan de $W_{32} \rightarrow W_{21}$ y $W_{31} \rightarrow W_{20}$ (Sommerfeld A. , 1919). Por tanto, las transiciones que dan cuenta de la estructura fina de acuerdo con la ecuación de Klein-Gordon, se representan en el diagrama de la figura (2,3):

Figura 2,3

Representación de los primeros niveles de energía obtenidos a partir de la ecuación de Klein-Gordon.

Niveles de energía, para el átomo de hidrógeno, de acuerdo con la ecuación de Klein-Gordon



Nota. Imagen de la representación de los 3 primeros niveles de energía para el átomo de hidrógeno, dados por la solución a la ecuación de Klein-Gordon, donde de acuerdo con las reglas de intensidad de Sommerfeld, la estructura fina se debe a la diferencia entre las dos líneas $H\alpha_1$ y $H\alpha_2$ representadas en la figura 2,3. Elaboración propia.

Con base en lo anterior, y en los valores de la tabla (2), las dos longitudes correspondientes que dan cuenta de la estructura fina con la ecuación de Klein-Gordon, son:

- $\lambda_{H\alpha_1} = \frac{hc}{(W_{32}-W_{21}) \cdot 1.6 \cdot 10^{-19}} = 656.1045075 \text{ nm}$
- $\lambda_{H\alpha_2} = \frac{hc}{(W_{31}-W_{20}) \cdot 1.6 \cdot 10^{-19}} = 656.0650642 \text{ nm}$

Por lo tanto, la ecuación de Klein-Gordon predecía un valor de desdoblamiento de:

$$\Delta\lambda = 0.0394433 \text{ nm} = 3.944 \cdot 10^{-8} \text{ mm}.$$

Donde dicho valor, no está de acuerdo ni con el experimento, ni con el modelo de Sommerfeld, pues el desdoblamiento de la estructura fina es de: $\Delta\lambda = 1.416 \cdot 10^{-8} \text{ mm}$, como se mostró en el capítulo 1. Es decir, la ecuación de Klein-Gordon falla en dar cuenta de la estructura fina del átomo de hidrógeno.

V. Fock, E. Schrödinger, P. Epstein, entre otros físicos entre 1926 y 1927; obtuvieron precisamente ese resultado de $\Delta\lambda = 3.944 \cdot 10^{-8} \text{ mm}$ para la estructura fina. Un resultado incorrecto, que los llevó a ellos y a la comunidad científica de la época, a rechazar la ecuación de Klein-Gordon como una formulación cuántica-relativista completamente exitosa. Pues como se ha explicado a lo largo de este capítulo, la prueba definitiva para esa formulación unificadora de la relatividad especial y la mecánica cuántica, radicaba en su capacidad para explicar la estructura fina del átomo de hidrógeno, y la ecuación de Klein-Gordon, sin lugar a duda, no cumplía con este requisito.

Por otro lado, además del fallo anterior, los físicos también esperaban que dicha ecuación diera cuenta de forma directa del espín del electrón, como se describió en la sección 2.2. Sin embargo, al solucionar la ecuación (2,10), está, al igual que la ecuación de Schrödinger, solo daba cuenta de los números cuánticos ($n, l, y m$), es decir, no incorporaba el espín s de forma directa; y por lo tanto tampoco podía dar cuenta del efecto Zeeman anómalo. Por ejemplo, W. Pauli, se oponía firmemente a que dicha ecuación fuese la expresión final que unificase la relatividad especial y la mecánica cuántica, pues él si creía que tanto el espín como la estructura fina debían surgir de una expresión que lograra esto, ya que él estaba trabajando en dicho problema. Es por ello que se puede apreciar a continuación, como en una carta enviada a su colega Gregor Wentzel, le comunica que está muy preocupado porque la ecuación de Klein-Gordon no permite obtener la fórmula de Sommerfeld, y además, porque al resolverla, sus funciones propias no eran ortogonales²⁹, y por ello le escribe que: “*He perdido completamente la confianza en dicha ecuación diferencial*” [Carta de Pauli a Wentzel, 05-Jul-1926; (A.Herman & K.Meyenn, 1979)].

Al mismo tiempo, es fundamental destacar que durante ese período comprendido entre 1926 y 1927, los físicos se enfrentaron a otro problema relacionado con la ecuación de Klein-Gordon. Esta dificultad residía como se demuestra en el anexo B.4, en el hecho de que la ecuación producía valores negativos para las energías (E) y para las densidades de probabilidad (ρ), de acuerdo con las ecuaciones (2,12) y (2,13):

$$E = \pm\sqrt{p^2 + m^2} \quad (2,12)$$

$$\rho = i\left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) = 2E \quad (2,13)$$

Como se puede observar ρ depende de E , que permite soluciones tanto positivas como negativas que dependen del momento p y la masa m . Por ende, la densidad de probabilidad ρ podía tomar valores negativos, de acuerdo con la ecuación de Klein-Gordon.

Cuestión que trató Gordon en su artículo de septiembre de 1926, pero que sin embargo no profundizó mucho en ello. Dicho problema, quedó abierto y solo sería hasta años posteriores que se les daría una interpretación a dichos resultados. Así pues, para 1926, la ecuación de Klein-Gordon fue descartada, y la búsqueda de una formulación cuántica-relativista continuó, hasta que finalmente en 1928, la ecuación de Dirac logró cumplir con este objetivo.

Sin embargo, antes de finalizar esta sección, es importante destacar que, en 1934, W. Pauli y V. Weisskopf reconsideraron nuevamente la ecuación de Klein-Gordon para cuantizar los campos cuánticos. Lo anterior, llevo a distintos físicos a la conclusión de que las soluciones de la ecuación de Klein-Gordon incluyen un campo escalar cuántico o pseudo-escalar, cuyos cuantos son partículas sin espín (o valor de espín $S=0$) como los mesones π , K , y el bosón de Higgs; por lo

²⁹ Esto lo buscaba Pauli, para poder establecer entre otras cosas, una relación entre la mecánica cuántica matricial y ondulatoria, y para ello necesitaba que las funciones propias de un sistema fuesen ortogonales. Se puede ver en (Carta de Pauli a Wentzel, 05-Jul-1926; (A.Herman & K.Meyenn, 1979)), como él le describe dicho problema a Wentzel.

tanto, gracias eso, la ecuación de Klein-Gordon pasó del rechazo a considerarse como otra de las ecuaciones fundamentales para la teoría cuántica de campos. (Kragh, 1984).

2.4 Perturbaciones para aproximarse a la estructura fina

Debido a la discrepancia que existía entre la ecuación de Klein-Gordon y los resultados experimentales de la estructura fina, y a la falta de la incorporación del espín dentro de dicha ecuación cuántico-relativista, en 1926, distintos físicos pensaron que el problema de incluir la teoría de la relatividad especial dentro de la mecánica cuántica para dar cuenta de lo anterior, se podía tratar por ese momento, a partir de la adición de distintas correcciones tanto a la teoría de Heisenberg como a la teoría de Schrödinger. Donde vale la pena resaltar, que dicho método de añadir correcciones o perturbaciones a las teorías cuánticas existentes para explicar distintos efectos, era algo que ya se había utilizado en el pasado, pues desde 1918, Niels Bohr y dos años más tarde Hans Kramers, propusieron una primera teoría cuántica de perturbaciones para poder explicar los efectos de los campos eléctricos perturbadores en el átomo de hidrógeno (efecto Stark). Además, con base en dichos trabajos, Heisenberg, Born y Pauli, en 1922, 1924 y 1925, publicaron una serie de artículos donde aplicaron la teoría de perturbaciones para explicar el comportamiento de los átomos en campos magnéticos, y para estudiar átomos más complicados como el átomo de Helio (Darrigol, 1992).

Considerando lo anterior y el increíble éxito que para 1926 tenían las nuevas formulaciones de la teoría cuántica de Heisenberg, Schrödinger y Dirac, con respecto a la explicación de fenómenos como: los niveles de energía del modelo de Bohr, el oscilador armónico cuántico, el oscilador anarmónico cuántico, el efecto Stark, los problemas de dispersión, las reglas de intensidad de los espectros atómicos, entre otros. Varios físicos decidieron que la incorporación del espín y la relatividad especial en la nueva teoría cuántica para explicar la estructura fina en su primera aproximación³⁰, se podía realizar por medio de la inclusión de correcciones a las teorías ya existentes. En este campo se realizaron distintos trabajos entre 1926 y 1927, los cuales, a grandes rasgos se enfocaban en utilizar un método similar. Sin embargo, antes de entrar en los detalles de este método, es pertinente destacar los trabajos más significativos³¹ que se publicaron en relación con lo descrito previamente:

- El 16 de marzo de 1926, W. Heisenberg y P. Jordan publican un artículo titulado: Aplicación de la mecánica cuántica a el problema del efecto Zeeman anómalo. En ese trabajo, describen que para poder explicar el efecto Zeeman anómalo y la estructura fina del hidrógeno, es necesario tener en cuenta la hipótesis de Goudsmit y Uhlenbeck del “*electrón giratorio*” (Heisenberg & Jordan, 1926). Con ello realizan y muestran los cálculos necesarios para explicar los dos fenómenos descritos previamente; donde para el caso de la estructura fina, llegan a su primera aproximación, añadiendo dos perturbaciones al hamiltoniano, debidas al acoplamiento espín-órbita y a las correcciones relativistas de la fórmula de la energía. Con lo anterior, Heisenberg y Jordan, concluyen que su estudio sirve de gran soporte para su teoría y para la teoría del espín del electrón de Goudsmit y Uhlenbeck; pues ya desde febrero de 1926, Heisenberg se había estado comunicando con Goudsmit, describiéndole como él estaba usando su hipótesis del espín para poder explicar la estructura fina y el efecto anómalo Zeeman. (Heisenberg W. , 1925)
- Usando un método similar al de Heisenberg, Gregor Wentzel en la sexta parte de su artículo titulado: Los sistemas periódicos múltiples en la mecánica cuántica, publicado el 27 de marzo

³⁰ Como se explicará más adelante en la presente sección, dar cuenta de la fórmula en su primera aproximación, era obtener una fórmula análoga a la (1,34) que obtuvo Sommerfeld cuando expandió binomialmente la fórmula de la energía total (1,32).

³¹ Para destacar los trabajos que se consideraron más significativos entre 1926 y 1927 con respecto a la obtención de la estructura fina por medio de perturbaciones, se tuvo como referencia los estudios históricos de A. Pais, H. Kragh, y O. Darrigol.

de 1926, describe que se puede obtener la fórmula de Sommerfeld solo en una primera aproximación por medio del método de perturbaciones, siendo necesario que: “*Los momentos angulares deben normalizarse como semi-enteros [...] Lo cual se establece atribuyendo un momento angular propio al electrón de acuerdo con Goudsmit*” (Wentzel, 1926).

- Entre finales de 1926 e inicios de 1927, los físicos estadounidenses Carl Eckart (Eckart, 1926) y Charles Francis Richter (Richter, 1927), publican cada uno un artículo, describiendo como a partir de correcciones relativistas a la ecuación de Schrödinger, es posible de obtenerse la fórmula de Sommerfeld en su primera aproximación, por su puesto ambos también destacan que, para ello, es fundamental hacer uso de correcciones debido al acoplamiento espín-órbita.
- En 1927 W. Pauli publica un artículo titulado: La mecánica cuántica de los electrones magnéticos (W.Pauli, 1927). En este trabajo se introduce por primera vez la ecuación de Pauli-Schrödinger, útil para describir la interacción del electrón con un campo electromagnético externo. Donde la formulación de dicha ecuación se basa fundamentalmente en la utilización de las famosas matrices de Pauli, las cuales se introducen por primera vez en ese artículo. Además, tanto la ecuación de Pauli como sus matrices, tendrán una gran relación con el desarrollo de la ecuación de Dirac como se describe posteriormente en el presente trabajo. Por otro lado, Pauli también muestra como gracias a la adición de correcciones relativistas y de espín a la ecuación de Schrödinger, se pueden obtener los niveles de energía de la estructura fina en su primera aproximación.
- Finalmente, otro de los trabajos que se consideran significativos para la explicación de la estructura fina por medio de perturbaciones, fue el del físico Charles Galton Darwin (nieto del famoso Charles Darwin de la teoría de la evolución) quien ya desde 1920 había trabajado con correcciones a la fórmula de la estructura fina de Sommerfeld (Darwin C. , 1920) . El 30 de julio de 1927 publica su artículo titulado: El electrón como un vector de onda. En este artículo describe que con la adición de correcciones relativistas y de espín al hamiltoniano de la ecuación de Schrödinger, es posible dar cuenta de los siguientes fenómenos: la intensidad de las distintas líneas espectrales (las que se describieron en el capítulo 1, y que fueron deducidas empíricamente por Sommerfeld); el momento magnético del electrón; y la fórmula de la estructura fina en primera aproximación. Además, entre otras cosas, en dicho artículo Darwin describe que el espín se puede entender con la hipótesis de que: “*la función de onda de un electrón tiene dos componentes*” (Darwin C. , 1927) Dicha hipótesis es supremamente importante, pues más tarde gracias a la ecuación de Dirac como se explicará en el capítulo 3, y de acuerdo con el físico teórico Francis Villatoro, el espín actualmente se puede entender como dos componentes asociadas a la función de onda del electrón, tal como lo hipotetizó Darwin en 1927 (Villatoro, 2013).

Ahora bien, a continuación, se analiza el método y las conclusiones que se obtuvieron entre 1926 y 1927, durante la búsqueda de la fórmula que describe la estructura fina del hidrógeno en su primera aproximación. Así pues, para iniciar, hay que recordar que, hasta esa época, la fórmula que aún se consideraba como la mejor para dar cuenta de la estructura fina, era la hallada por Sommerfeld en 1916, la cual es la expresión (1,32) que se explicó en el capítulo 1, y cuya expansión binomial como se puede observar en el anexo [A.2](#) , se puede expresar como:

$$W \approx m_0 c^2 \left[1 - \frac{1}{2} \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} - \frac{1}{2} \frac{\alpha^4 Z^4}{n^4} \left(\frac{n}{n_\theta} - \frac{3}{4} \right) - \frac{3}{16} \frac{\alpha^{16} Z^{16}}{n^4 n_\theta^6} + \frac{3}{4} \frac{z^8 \alpha^8}{n^5 n_\theta} + \frac{15}{4} \frac{z^{32} \alpha^{32}}{n^8 n_\theta^6} + \dots \right] - m_0 c^2 \quad (2,14)$$

De (2,14), recordando que la constante de estructura fina es aproximadamente: $\alpha \approx \frac{1}{137}$, y teniendo en cuenta que el término que contiene α^2 da cuenta de la energía del átomo de hidrógeno no perturbado; entonces la corrección en primera aproximación es el siguiente término, que contiene a: $\alpha^4 \approx 2.8 \cdot 10^{-9}$; permitiendo así desprestigiar a los otros términos que tienen a $\alpha^8, \alpha^{16}, \alpha^{32}, \dots$ Por tanto, para el hidrógeno ($z=1$), la fórmula para la energía (W) que da cuenta de la estructura fina en su primera aproximación es (2,15):

$$W \approx - \left[E_n + E_n \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{n_\theta} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (2,15)$$

Donde el término: $E_n = \frac{m_0 c^2 \alpha^2}{2 n^2}$, es la energía para el átomo de hidrógeno de Bohr. Siendo n el número cuántico principal, y n_θ el número cuántico azimutal propuesto por Sommerfeld.

Es decir que el término: $E_n \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{n_\theta} - \frac{3}{4} \right)$, es la primera corrección relativista que encontró Sommerfeld. Así pues, desde 1926 cuando se buscaba encontrar la fórmula de la estructura fina por medio de correcciones a las teorías cuánticas no relativistas, se esperaba hallar la fórmula (2,15), aunque teniendo en cuenta que el número cuántico n_θ que Sommerfeld introdujo, se había redefinido en términos de los nuevos números cuánticos encontrados. Así, con base en lo previamente descrito, la clave del método de perturbaciones que se usó desde 1926 y que se usa en la actualidad, se basa en la fórmula descrita en el numeral 4 del artículo de 1925: Sobre la mecánica cuántica II de Born, Heisenberg, y Jordán (Born et al., 1925). Dicha fórmula establece que la corrección de primer orden de la energía, para un hamiltoniano al cual se le añaden perturbaciones viene dada por (2,16):

$$E^1 = \langle H_1 \rangle = \langle \psi | H_1 | \psi \rangle \quad (2,16)$$

Siendo E^1 la corrección al valor de la energía del hamiltoniano no perturbado; y $\langle H_1 \rangle$ el valor esperado del hamiltoniano de la perturbación. Además, es importante resaltar que así presentada la fórmula (2,16), esta con la notación actual; pero en el artículo de 1925 (Born et al., 1925) se describe como $W_1 = \bar{H}_1$.

Entonces, a partir de (2,16) como se demuestra en el anexo B.5, se pueden obtener las distintas correcciones al hamiltoniano para dar cuenta de la estructura fina. Donde la primera corrección que se introdujo al hamiltoniano del átomo de hidrógeno es la corrección relativista de primer orden de la energía cinética (H_r), la cual es:

$$H_r = \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} \quad (2,17)$$

Donde \hat{p} representa el operador momento lineal, m es la masa del electrón y c la velocidad de la luz.

Y por tanto, la primera corrección hallada a los niveles de energía del átomo de hidrógeno es:

$$\begin{aligned} E_r^1 &= \langle H_r \rangle = \langle \psi | H_r | \psi \rangle = - \frac{1}{8m^3c^2} \langle \psi | \hat{p}^4 | \psi \rangle \\ \rightarrow E_r^1 &= - \frac{2E_n^2}{mc^2} \left[\frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right] \end{aligned} \quad (2,18)$$

Que depende de los números cuántico principal n y angular l .

Donde el desarrollo completo para llegar a la ecuación (2,18) se encuentra en el anexo B.5.

Por lo tanto, al añadirse dicha energía (2,18) a los niveles de energía del átomo de hidrógeno no relativista, se obtuvo:

$$E_{nl} = -E_n - \frac{2E_n^2}{m_e c^2} \left[\frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right] \quad (2,19)$$

Siendo E_n los niveles de energía del átomo de Bohr, es decir $E_n \approx \frac{13.6}{n^2} \text{ eV}$

La fórmula (2,19), da aproximadamente los mismos valores que se obtienen con la ecuación de Klein-Gordon y que se describieron en la tabla (2) del presente trabajo. Por tanto, eso significaba y corroboraba que, añadiendo correcciones relativistas únicamente, efectivamente se obtenía un valor de desdoblamiento erróneo para la estructura fina de: $\Delta\lambda = 3.944 \cdot 10^{-8} \text{ mm}$, correspondiente a las transiciones de: ($E_{32} \rightarrow E_{21}$ ^ $E_{31} \rightarrow E_{20}$). No obstante, como se discutió en la sección 2.2, hacia 1926, muchos físicos reconocían la importancia de la noción de espín para explicar diversos fenómenos espectroscópicos, incluida la estructura fina. Por lo tanto, la siguiente corrección a la energía que se debía tener en cuenta, tal como lo demostró Thomas en 1926, era la debida al acoplamiento espín-órbita, la cual viene dada por (2,20):

$$H_{E-O} = \frac{(g-1)}{2m_e c^2} (\vec{S} \cdot \vec{L}) \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m_e c^2 r^3} (\vec{S} \cdot \vec{L}) = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m_e c^2 \hat{r}^3} \cdot \frac{1}{2} [\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2] \quad (2,20)$$

Expresión explicada en la sección 2.2 del presente trabajo. Y que como se demuestra en el anexo B.5, al desarrollarse, $(\vec{S} \cdot \vec{L})$ se puede dejar en términos de los operadores de momento total angular \hat{J} , angular \hat{L} , y espín \hat{S} .

Y, en consecuencia, la energía de corrección debido al acoplamiento espín-órbita es:

$$E_{E-O}^1 = \langle H_{E-O} \rangle = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m_e c^2} \cdot \frac{1}{2} \left\langle \frac{1}{\hat{r}^3} \right\rangle (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)$$

$$\rightarrow E_{E-O}^1 = \frac{E_n^2}{m_e c^2} \left[n \frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l(l+\frac{1}{2})(l+1)} \right] \quad (2,21)$$

Así, gracias a la fórmula (2,16), añadiendo entonces la corrección relativista (2,18), y la corrección debido al acoplamiento espín-órbita (2,21), los físicos obtuvieron³² la siguiente energía para el átomo de hidrógeno:

$$E_{ef} = E_{bohr} + E_r^1 + E_{E-O}^1 = E_{nj} = - \left[E_n + E_n \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (2,22)$$

Donde el desarrollo completo para llegar a la ecuación (2,21), se encuentra en el anexo B.5.

Siendo (2,22) una expresión análoga a la expresión (2,15) encontrada por Sommerfeld, es decir, la fórmula que da cuenta de la estructura fina en su primera aproximación. Solo que ahora, gracias a los numerosos estudios espectroscópicos, tanto experimentales como teóricos, realizados para la época, el número n_θ fue reemplazado por: $j + \frac{1}{2}$, el cual tenía en cuenta el valor de momento angular total j , dependiente de los valores de momento angular l y de espín s . Por lo tanto, teniendo en cuenta esa aproximación de primer orden (2,22) que se halló entre 1926 y 1927, por medio del método de perturbaciones de Born-Heisenberg y Jordán publicado en 1925, distintos físicos llegaron a las siguientes conclusiones:

- En todos los trabajos significativos que se nombraron al principio de esta sección, los físicos señalan que gracias a la introducción de la hipótesis del espín de Goudsmit y Uhlenbeck, ellos pudieron lograr dar cuenta en una primera aproximación de la estructura fina. Por lo cual, estos trabajos contribuyeron significativamente a fortalecer la aceptación general del concepto de espín como una propiedad inherente del electrón, esencial para comprender tanto el fenómeno de la estructura fina como otros fenómenos relacionados.
- Dado que (2,22) fue obtenida gracias a la adición de correcciones relativistas y de espín, físicos como W. Pauli y C. Darwin, reconocieron que la ecuación definitiva capaz de unificar exitosamente la relatividad especial y la mecánica cuántica, debía dar cuenta tanto del espín como de la estructura fina del hidrógeno en su forma completa de manera natural, es decir, sin necesidad suponer términos ad hoc. Darwin describía que: “Una formulación todavía debe ser encontrada [...] pues la deducción de la fórmula de separación de Sommerfeld debe ser exacta y no simplemente una primera aproximación” (Darwin C. , 1927). Y Pauli, lo describía de esta manera: “Se debe requerir de una teoría final que sea formulada de manera relativista-invariante desde el principio, y que permita calcular correcciones más elevadas” (W.Pauli, 1927). Aun así, a pesar de que en la búsqueda de esa ecuación final trabajaron arduamente físicos como: Pauli, Kramers, Wigner, Jordán, Landau, entre otros; ninguno de ellos logró encontrar la ecuación cuántico-relativista definitiva. Y sería solo hasta el 2 de enero de 1928, que Paul Dirac publicaría tan anhelada ecuación.

³² En los distintos trabajos significativos que se nombraron, realizados entre 1926-1927, se suele encontrar la adición de las distintas correcciones como: $H = H_0 + H_1 + H_2$. Siendo H_0 el hamiltoniano asociado a la energía no perturbada; H_1 la corrección relativista; y H_2 la corrección de espín.

Capítulo 3

La ecuación de Dirac

En un discurso conmemorativo a Paul Dirac, dado el 13 de noviembre de 1995, durante la dedicación de una placa puesta en su honor en la Abadía de Westminster, el físico Stephen Hawking expresó: “Dirac ha hecho más que nadie en este siglo con la excepción de Einstein, para hacer avanzar la física y cambiar nuestra imagen del universo” (Pais et al., 1998). Es por tanto que en el presente capítulo se describirá parte del trabajo de Paul Dirac, mostrando por qué efectivamente se considera como uno de los físicos más importantes de la historia, ya que durante la época que se ha venido relatando en la cual se estaba creando la mecánica cuántica, él fue uno de sus mayores contribuyentes. En ese sentido, se llevará a cabo un análisis enfocado en su logro más significativo: la creación de la célebre ecuación que logró exitosamente unificar la relatividad especial y la mecánica cuántica, proporcionando así una explicación definitiva de la estructura fina del hidrógeno. Asimismo, se presentará una perspectiva adicional sobre la motivación que llevó a Dirac a formular su destacada ecuación, y se resaltarán el por qué su ecuación también le permitió describir el espín del electrón y predecir un nuevo tipo de materia nunca antes encontrada, la antimateria; lo cual, es considerado por muchos físicos como uno de los mayores logros de la física teórica (Farmelo, 2009a).

3.1 Aspectos destacables de la vida y el trabajo de Paul Dirac previos a la publicación de su ecuación

Antes de entrar en el análisis de los aspectos físicos y matemáticos relacionados con el origen de la ecuación de Dirac, es pertinente resaltar aquellos aspectos de su vida y de su trabajo que lo forjaron como persona y que posiblemente lo influyeron en su pensamiento e invención de dicha ecuación. En ese sentido, es relevante iniciar describiendo que ya desde su nacimiento el 08 de agosto de 1902, Paul Adrien Maurice Dirac, hijo de Charles Dirac, inmigrante suizo que se mudó a Bristol, y de Florence Hannah Holten, una destacada bibliotecaria inglesa, se vio inmerso en un hogar que él describió posteriormente como autoritario e infeliz, en el cual nunca conoció algún tipo de afecto o amor en sus primeros años de vida. Esto se debe a que su padre Charles, quien había prestado 3 años de servicio militar en suiza y que luego se convirtió en profesor de lenguas modernas en Inglaterra, obligaba a Paul y a sus hermanos Felix y Beatrice a hablar con él únicamente en francés, mientras que ellos se sentían más cómodos con el lenguaje de su madre quien solo hablaba inglés, llegando a pensar incluso en su niñez, que todos los hombres hablaban solo francés y que todas las mujeres hablaban solo inglés. Esto marcó fuertemente la personalidad tan callada de Dirac que tuvo durante toda su vida, ya que en su vejez le conto a su amigo el biólogo y médico Kurt Hofer que: “Como descubrí que no podía expresarme en francés, era mejor para mí quedarme en silencio” [Entrevista a Paul Dirac recogida por (Farmelo, 2009a)]. Así, durante toda su infancia se cuenta que Paul Dirac, tuvo una niñez parecida a la de Isaac Newton: siempre silencioso, pensante, solitario, y sin interés alguno por interactuar con otros los otros niños de su escuela (Farmelo, 2009a).

Más tarde, el joven Dirac cursó sus estudios de secundaria en la escuela de Merchant Venturers en una época especialmente difícil para la humanidad (1914-1918), que, debido a la Primera Guerra Mundial, existió una deserción significativa en las clases más avanzadas dictadas por la escuela. Esto permitiría a Dirac avanzar en sus estudios rápidamente adelantando cursos en los cuales había plazas vacías. Luego, en septiembre de 1918, Paul seguiría los pasos de su hermano Felix, quien estudio ingeniería mecánica en el Merchant Venturers' College asociado a la universidad de Bristol, solo que Paul Dirac prefirió estudiar ingeniería eléctrica. Allí, un año más

tarde estudiando su ingeniería, fue cuando sucedió un acontecimiento que lo impactó profundamente en su vida, ya que el 7 de noviembre de 1919, se publicó en la prensa inglesa una noticia que mostraba los resultados obtenidos en dos expediciones británicas dirigidas por Arthur Eddington y Frank Dyson, en las cuales se comprobaba que la medida de la desviación de la luz de estrellas distantes coincidía con la predicción teórica de la Teoría de la Relatividad General de Einstein de 1915. Dirac recuerda que: *“Todo el mundo estaba cansado de la guerra en 1919, todo el mundo quería olvidarla, y entonces llegó la relatividad como una hermosa idea que condujo a un nuevo dominio del pensamiento. Fue un escape de la guerra [...] En esa época yo era estudiante de ingeniería y por su puesto fui flechado por la emoción producida por la relatividad.”* (Dirac, 1977). Así, desde ese momento, Dirac se vio profundamente interesado en el estudio de la relatividad especial y general, estudiando con los cursos que se ofrecieron durante sus estudios de ingeniería dictados por el profesor Charlie Broad, y con el libro de Arthur Eddington: espacio, tiempo y gravitación.

Dirac finalizó sus estudios de ingeniería eléctrica en 1921, y a pesar de que nunca trabajó como ingeniero ni se interesó por las labores ingenieriles, la experiencia que adquirió gracias a dichos estudios le ayudaría a los futuros trabajos que realizó como físico, pues en sus memorias afirmó que:

“Previo a estudiar ingeniería, yo estaba interesado solo en las ecuaciones exactas. Para mi trabajar con aproximaciones era intolerable. Bueno, pues el entrenamiento que yo recibí como ingeniero me enseñó a tolerar aproximaciones en las cuales a veces hay una considerable cantidad de belleza en ellas [...]. Yo creo que, si yo no hubiese tenido ese entrenamiento de la ingeniería, no hubiese tenido ningún éxito con el trabajo que hice después, porque fue realmente necesario alejarme del pensamiento de que uno solo puede trabajar con resultados que solo pueden ser deducidos lógicamente del conocimiento de las leyes exactas de la naturaleza en las cuales uno tiene una fe implícita. Los Ingenieros se preocupan solo por tener ecuaciones que son útiles para describir la naturaleza. Ellos no les importa mucho sobre como las ecuaciones son obtenidas. Una vez ellos las obtienen, proceden a utilizarlas, y obtienen resultados necesarios para su trabajo. Y esto me condujo por su puesto a que dicha perspectiva, es en realidad la mejor perspectiva para tener. Nosotros los físicos queremos una descripción de la naturaleza, nosotros queremos encontrar las ecuaciones que la describen, y lo mejor que podemos encontrar son ecuaciones aproximadas, y tenemos que reconciliarnos a nosotros mismos con una ausencia estricta de lógica en las ecuaciones.” (Dirac, 1977).

Ese pensamiento marcó su forma de pensar, pues él en sus futuros trabajos se preocupaba especialmente por encontrar ecuaciones útiles que describieran la naturaleza, y que además fueran matemáticamente bellas. Donde ese pensamiento de belleza matemática lo adquirió gracias a que, al no encontrar trabajo como ingeniero, y al no tener los recursos suficientes para ir a la universidad de Cambridge en ese momento, su profesor Ronald Hassé, lo animó a estudiar matemáticas en la misma universidad de Bristol.

Estudiando matemáticas, Dirac conocería a su profesor Peter Fraser, del cual aprendió dos grandes lecciones: La primera, aprender a usar la matemática rigurosa, pues muchas veces la necesitaría para el desarrollo de sus trabajos; y la segunda, la importancia de la geometría proyectiva, ya que, gracias a ella, pudo entender ciertas relaciones del espacio de Minkowski, y sería: *“la herramienta más útil para mis investigaciones”* (Dirac, 1977). Así mismo, continuó estudiando física de manera autónoma y participaba en los cursos de física extracurriculares que le ofrecía la carrera de matemáticas, donde aprendió sobre la teoría cuántica de la época gracias a las clases del profesor Arthur Tyndall; sin embargo, a Dirac en ese momento no le interesó mucho la teoría atómica, pues él estaba más interesado en la relatividad. Así, al finalizar su grado en matemáticas en 1923, gracias a las recomendaciones de su profesor Ronald Hassé quien lo recomendó en el Saint John's College de la universidad de Cambridge, y a su padre quien le prestó el dinero que le faltaba para poder realizar su doctorado; Dirac entró a realizar sus estudios post graduales en la universidad de Cambridge, donde en un principio buscaba ser asesorado por Ebenezer Cunningham, quien junto a Eddington eran de las personas en Inglaterra que más sabían

sobre la relatividad de Einstein, sin embargo, Cunningham no estaba disponible en ese momento, y el supervisor de Dirac en Cambridge sería Ralph Fowler.

Gracias a Ralph Fowler, Dirac se interesaría por el estudio de la teoría atómica, ya que: “*En un principio yo estuve algo decepcionado cuando Fowler se convirtió en mi supervisor. Ya que mi interés estaba en lo geométrico, y especialmente en la relatividad [...]. Luego encontré que mi decepción era injusta. Fowler me introdujo a un nuevo campo de interés, esto es, el átomo de Rutherford, Bohr y Sommerfeld [...]. Me vi entonces sumergido en el centro de los problemas concernientes a la explicación de los átomos*” (Dirac, 1977). Donde uno de los libros de los cuales Paul Dirac se apoyó para sus primeros estudios de la teoría atómica, fue el libro de Sommerfeld: *Atomic structure and spectral lines* (Dirac, 1963). Libro en el cual se hallaba la fórmula de la estructura fina (1,32) que ha sido clave para el presente trabajo, y que en 1928 le permitiría a Dirac demostrar la validez de su ecuación cuántica relativista.

Durante su estancia en Cambridge, Paul Dirac viviría una de las etapas más productivas de su carrera. Allí trabajó con Rutherford; conoció a uno de sus ídolos Arthur Eddington; se volvió amigo de Patrick Blackett (a quien se le atribuye la invención de la cámara de niebla, y al cual Oppenheimer intentaría envenenar con una manzana) y de Peter Kapitza (quien descubriría el fenómeno de superfluidez en 1937). En 1924, publicaría sus primeros artículos, en total cinco, relacionados con física estadística, relatividad especial, y con el átomo de Bohr. Aprendiendo gracias a su profesor Fowler, a publicar siempre sus trabajos, pues al ser una persona tan callada y tan poco interesada en la comunicación de sus ideas, Fowler una vez le dijo que: “*Bueno, si no vas a escribir tu trabajo, mejor retírate del negocio*” (Dirac, 1963).

Luego en 1925, a pesar de que en los primeros meses del año se tomaría un descanso de sus estudios y sus trabajos debido a la noticia devastadora del suicidio de su hermano Felix; en septiembre de ese año, Dirac recibió un artículo que su profesor Fowler le envió para que lo revisara. Dicho artículo era el famoso trabajo de Heisenberg: Sobre la reinterpretación teórica cuántica de las relaciones cinemáticas y mecánicas. Sobre el cual Dirac se sentiría bastante intrigado, ya que, en ese trabajo, Heisenberg describió que ciertas cantidades de su teoría no conmutaban, y Dirac, quien en su grado de matemáticas había estudiado los cuaterniones y la mecánica de Hamilton, recordó que: “*Yo había leído en libros de mecánica avanzada sobre esas cantidades extrañas, los corchetes de Poisson, y por lo que recordaba, había una gran similitud entre el corchete de Poisson de dos cantidades u y v , y el conmutador $uv-vu$ [...]. Entonces la idea de conectar los corchetes de Poisson con conmutadores, formó el inicio de mi trabajo en la nueva mecánica cuántica*” (Dirac, 1977).

A partir de lo mencionado, Paul Dirac dedicó intensamente los meses de septiembre a noviembre de 1925, a establecer una conexión entre las matemáticas que él había aprendido y las presentes en el artículo de Heisenberg. Como resultado de su arduo trabajo, el 01 de diciembre de 1925 se publica un artículo fundamental titulado: *Las ecuaciones fundamentales de la mecánica cuántica* (Dirac, 1925), en el cual se sentarían las bases matemáticas de la nueva teoría cuántica. Luego, en 1926 Dirac continuaría publicando una serie de trabajos que lo catalogarían como uno de los grandes referentes de la mecánica cuántica : en enero estudió el átomo de hidrógeno a partir de la teoría de Heisenberg; en abril estudió el efecto Compton a partir de la nueva mecánica cuántica; en mayo, publicó su tesis de doctorado titulada *Mecánica cuántica* (Dirac, 1926a), en la cual establece los principios fundamentales de la teoría cuántica de forma independiente a como lo realizó Heisenberg, Jordan y Born, y gracias a dicha tesis, obtendría el título de doctor en física en junio del mismo año. En agosto, tras familiarizarse y estudiar la teoría cuántica de Schrödinger, Dirac publicó su artículo titulado: *Sobre la teoría de la mecánica cuántica* (Dirac, 1926b), en el cual, de manera independiente a Enrico Fermi, deduce lo que hoy en día se conoce como la estadística de Fermi-Dirac. Y finalmente en septiembre de 1926, finaliza su estancia en Cambridge para trasladarse al instituto de física teórica de Copenhague, donde trabajaría junto a Niels Bohr.

Durante su estancia en Copenhague, Dirac trabaja su artículo sobre: La interpretación física de la mecánica cuántica (Dirac, 1927a), en el cual desarrolla su teoría general de transformación y demuestra que la teoría cuántica de Heisenberg y de Schrödinger eran equivalentes, además allí introduce por primera vez su famosa función delta de Dirac. En febrero de 1927, junto a Bohr trabaja sobre: La teoría de emisión y absorción de radiación electromagnética (Dirac, 1927b), trabajo en el cual desarrolla la teoría que describe matemáticamente la creación y destrucción de fotones por medio de los operadores de creación y de destrucción, y establece las bases para la segunda cuantización, siendo este uno de los trabajos pioneros de la teoría cuántica de campos moderna (Farmelo, 2009a). Y más tarde a mediados de febrero de 1927, Dirac decide viajar a Gotinga, en donde conoce y se vuelve amigo de Robert Oppenheimer. Además, aprovecha para compartir y discutir ideas con: Born, Weyl, Jordan, y Heisenberg. Y en junio de 1927, invitado por Paul Ehrenfest, Dirac viaja a Holanda y allí conoce a Uhlenbeck y Goudsmit, con quienes probablemente discutió acerca del espín del electrón (Kragh, 1990).

Gracias a los trabajos previamente mencionados de Dirac, unos años más tarde se le reconocería como uno de los cofundadores de la mecánica cuántica. No obstante, para mediados de 1927, él aún no se sentía completamente satisfecho. Esto se debe a que muchos de los logros que había alcanzado en ese momento, ya habían sido abordados y publicados días antes por físicos como: Jordan, Born, Pauli, Fermi y Slater. Lo cual es una muestra de por qué esa época es comúnmente denominada como: "*la época dorada de la mecánica cuántica*" según numerosos historiadores (Jammer, 1989). En este contexto, es cuando Paul Dirac comparte con su amigo Robert Oppenheimer, su deseo de tomarse un descanso de la mecánica cuántica durante el verano de 1927 (Oppenheimer, 1927). Donde después de dicho descanso, Dirac se embarcaría en una labor que lo catapultaría como uno de los físicos más trascendentales de la historia: la formulación de la ecuación cuántica-relativista del electrón.

3.2 El origen de la ecuación de Dirac

A finales de septiembre de 1927 luego de sus vacaciones de verano, Paul Dirac, decide empezar a trabajar en la unificación de la teoría que más le gustaba: la relatividad especial de Einstein. Y la teoría que más dominaba y que ayudó a inventar: la mecánica cuántica. Esto era algo que él solía hacer con las teorías físicas que encontraba expresadas en forma no relativista, pues según recuerda en una de sus entrevistas: "*Me resultaba siempre interesante y casi que como un juego, tomar la física que no estuviese expresada en forma relativista, y expresarla de forma que fuese compatible con la relatividad especial*" (Dirac, 1977).

Considerando lo anterior, desde que Dirac leyó el artículo de Heisenberg en 1925 y mientras desarrollaba su trabajo de las ecuaciones fundamentales de la mecánica cuántica, él fue consciente de que la nueva teoría cuántica era no relativista. Sin embargo, para ese año de 1925, él no se preocupó mucho por ello, ya que lo considero como: "*un problema no esencial*" (Dirac, 1977). Luego, al pasar los meses y al desarrollar el átomo de hidrógeno, al igual que Pauli, Schrödinger y otros físicos de la época como se describió en el capítulo 2, Dirac se percató de que la nueva teoría cuántica fallaba en dar cuenta de la estructura fina del hidrógeno, y dado que dicho problema estaba relacionado con la relatividad especial, decide empezar a trabajar en ello. No se sabe con exactitud en qué momento, pero al parecer, él siempre estuvo pensando en ese problema, pues en su entrevista con Thomas Kuhn, se le preguntó si él había trabajado en su ecuación relativista únicamente desde mediados de 1927, a lo cual Dirac le respondió: "*No creo, yo estuve trabajando en ello todo el tiempo*" (Dirac, 1963).

Así pues, el problema esencial con el cual Dirac empezó a desarrollar su ecuación y como él siempre recordó en la mayoría de las conferencias en las cuales la explicaba, consistía en que la ecuación cuántica relativista que él buscaba debía involucrar únicamente derivadas de primer orden. Para entender por qué esto era importante, hay que recordar que la ecuación cuántica relativista que se tenía para la época previa a 1928, era la ecuación de **Klein-Gordon**, la cual

consistía en usar la expresión de energía relativista: $E^2 = (mc^2)^2 + (pc)^2$, y reemplazar las variables dinámicas en términos de sus respectivos operadores cuánticos, obteniendo así la ecuación (3,1):

$$-\hbar^2 c^2 \Delta \psi + m^2 c^4 \psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \quad (3,1)$$

El problema con dicha ecuación (3,1) además de su discrepancia con los resultados experimentales cuando se aplica al átomo de hidrógeno, radica en que, como se demuestra en el anexo B.4, y tal como se mostró con la expresión (2,13) del segundo capítulo del presente trabajo, la segunda derivada temporal en el lado derecho de la ecuación (3,1), conduce a densidades de probabilidad negativas, lo cual para Dirac: “no tenía sentido alguno” (Dirac, 1977). Entonces, en busca de una solución a este problema, él propone tomar la raíz cuadrada de la energía relativista, teniendo en cuenta las tres dimensiones espaciales del momento, es decir:

$$H = E = c \sqrt{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + m^2 c^2} \quad (3,2)$$

Para que así, al reemplazar (3,2), en la ecuación fundamental de la teoría cuántica (3,3), que, según Dirac era la ecuación: “Más hermosa y poderosa de la mecánica cuántica, con la cual yo había trabajado, y tenía que ser correcta” (Dirac, 1975):

$$H\psi = E\psi \quad (3,3)$$

Obtuviese entonces la siguiente expresión:

$$\left(c \sqrt{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + m^2 c^2} \right) \psi = E\psi \quad (3,4)$$

De forma que al reemplazar la energía y el momento por sus respectivos operadores:

- $E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$
- $P_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}; P_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}; P_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$

Dirac lograba que la ecuación (3,4) fuese de primer orden con respecto a: $\frac{\partial}{\partial t}$, superando el problema de la segunda derivada con respecto al tiempo. No obstante, él aún sentía que la raíz de la ecuación (3,4) era “inadecuada”, y teniendo en cuenta su antecedente matemático, empezó a buscar como linealizar dicha raíz de alguna forma (Dirac, 1963). El problema, es que al principio encontró que esto era algo no trivial, pues la forma que proponía para linealizar la raíz tenía que ver con encontrar una expresión de la forma (3,5):

$$(\alpha_x p_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z + \beta mc)^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + m^2 c^2 \quad (3,5)$$

Para que así, al reemplazar (3,5) dentro de la raíz de la expresión (3,4), obtuviese una ecuación que involucraba derivadas de primer orden tanto en el espacio como en el tiempo:

$$\left(c \sqrt{(\alpha_x p_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z + \beta mc)^2} \right) \psi = E\psi$$

$$c(\alpha_x p_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z + \beta mc)\psi = E\psi \quad (3,6)$$

$$\left[-i\hbar c \left(\alpha_x \frac{\partial}{\partial x} + \alpha_y \frac{\partial}{\partial y} + \alpha_z \frac{\partial}{\partial z} \right) + \beta mc^2 \right] \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (3,7)$$

Y para qué (3,5) fuera posible, necesitaba que:

$$\alpha_j^2 = \beta^2 = 1 \wedge \alpha_j \beta + \beta \alpha_j = \alpha_j \alpha_k + \alpha_k \alpha_j = 0; \text{ con } j, k = x, y, z. \text{ Siendo } j \neq k. \quad (3,8)$$

Sin embargo, Dirac se dio cuenta de que ningún escalar $(\alpha_j \wedge \beta)$ cumple con las condiciones (3,8); y tuvo que trabajar arduamente para poder encontrar una solución que satisficiera dichas condiciones. Él recuerda que este problema lo inquietó profundamente y le supuso grandes esfuerzos para resolverlo. Según sus recuerdos, expresó: “Yo estaba muy preocupado, pero parecía que eso no preocupaba mucho a los físicos de esa época. Recuerdo mucho un incidente en el congreso de Solvay de 1927, durante el intervalo de una de las conferencias. Niels Bohr vino a mí y me preguntó: “¿En que estas trabajando ahora?”. Y le dije que yo estaba tratando de obtener la teoría relativista satisfactoria del electrón. Y Bohr me respondió: “Pero Klein ya

ha resuelto ese problema”. Bohr creía que esa era la solución del problema. Yo entonces empecé a explicarle a Bohr que yo estaba insatisfecho con eso, y quería explicarle por qué. Pero entonces la siguiente conferencia inició, nuestra charla se cortó, y nunca tuve la oportunidad de explicarle cuales eran mis objeciones de la teoría de Klein “ (Dirac, 1975).

Para Dirac, era algo intolerable que muchos físicos estuviesen satisfechos con la ecuación de Klein-Gordon, por lo tanto, luego del congreso de Solvay de 1927, continuó trabajando arduamente en un ambiente que fue perfecto para él, ya que en noviembre del mismo año recibió una plaza de investigación en el Saint John's College de la universidad de Cambridge del cual era egresado. Allí, él recuerda que tuvo la oportunidad de continuar trabajando arduamente y en completa soledad para poder realizar los cambios radicales que la ecuación cuántica relativista requería (Dirac, 1975).

Ya que Dirac era una persona muy callada, trabajaba completamente solo, e interactuaba con pocas personas en Cambridge únicamente cuando dictaba sus seminarios; no se sabe con certeza la fecha exacta en la cual encontró la solución al problema de encontrar una ecuación que pudiera ser escrita en la forma de la expresión (3,6) y (3,7), satisfaciendo las condiciones (3,8). De acuerdo con diversos historiadores y biógrafos de Paul Dirac, es muy probable que haya encontrado su ecuación a mediados de diciembre de 1927, y la primera persona a la cual le informó fue a su amigo el físico Charles Galton Darwin, quien el 26 de diciembre de 1927, le escribe a Bohr que: “Estuve en Cambridge hace unos días y vi a Dirac. Él ha obtenido un nuevo sistema completo de ecuaciones para el electrón, las cuales dan cuenta de forma correcta del espín en todos los casos, y parece ser la gran cosa. Sus ecuaciones son ecuaciones diferenciales de primer orden y no de segundo. Él me dijo algo sobre ellas, pero aún no he verificado que son correctas para el átomo de hidrógeno” [Carta de C.G Darwin a N.Bohr; recuperada de (Kragh, 1981)]. La siguiente persona informada acerca del descubrimiento de la ecuación por parte de Dirac, y que se percató de que dicha ecuación también daba cuenta del espín y de la estructura fina del hidrógeno en primer orden, fue su ex director de tesis y ahora colega, el físico Ralph Fowler, quien enviaría a la Royal Society, un artículo en el cual Dirac publica por primera vez su ecuación, titulado: La teoría cuántica del electrón (Dirac, 1928a), y que se recibió el 2 de enero de 1928.

Paul Dirac encontró su ecuación, dándose cuenta de que para lograr obtener su ecuación de primer orden y expresarla de la forma (3,6) es decir: $c(\alpha_x p_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z + \beta mc)\psi = E\psi$. En realidad, los $(\alpha_j \wedge \beta)$ que hacían esto posible, tenían que ser unas **matrices** especiales, que por tanto cumplieran con las condiciones (3,8). Como se muestra a continuación, dichas matrices están relacionadas con las matrices que Wolfgang Pauli había introducido en su artículo: La mecánica cuántica de los electrones magnéticos (W.Pauli, 1927), y que fueron fundamentales para describir el espín del electrón. Para comprender la razón detrás de esto, es esencial tener en cuenta la perspectiva de Dirac, quien, en su conferencia de 1977 (Dirac, History of twentieth century physics., 1977), recordó que el elemento clave para derivar su ecuación estaba en la capacidad de linealizar la siguiente expresión:

$$\sqrt{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + m^2 c^2}.$$

Y para ello proponía, teniendo en cuenta (3,5), reescribir el radicando de la raíz como:

$$p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + m^2 c^2 = (\alpha_x p_x + \alpha_y p_y + \alpha_z p_z + \beta mc)^2 \quad (3,5)$$

Logrando así eliminar la raíz de su ecuación. Sin embargo, él era consciente de que teniendo en cuenta la relación de conmutación del momento: $[p_i, p_j] = 0 \rightarrow p_i p_j = p_j p_i$. Y llamando a: $\alpha_x = \alpha_1; \alpha_y = \alpha_2; \alpha_z = \alpha_3; \beta = \alpha_4$; y a $p_x = p_1; p_y = p_2; p_z = p_3$, para facilitar los cálculos, al expandir el lado derecho de la expresión (3,5) obtenía que:

$$\begin{aligned} (\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3 + \alpha_4 mc)^2 &= \alpha_1^2 p_1^2 + \alpha_2^2 p_2^2 + \alpha_3^2 p_3^2 + \alpha_4^2 m^2 c^2 + p_1 p_2 (\alpha_1 \alpha_2 + \alpha_2 \alpha_1) \\ &+ p_1 p_3 (\alpha_1 \alpha_3 + \alpha_3 \alpha_1) + p_1 mc (\alpha_1 \alpha_4 + \alpha_4 \alpha_1) + p_2 p_3 (\alpha_2 \alpha_3 + \alpha_3 \alpha_2) + p_2 mc (\alpha_2 \alpha_4 + \alpha_4 \alpha_2) \\ &+ p_3 mc (\alpha_3 \alpha_4 + \alpha_4 \alpha_3) \end{aligned} \quad (3,9)$$

Con (3,9), Dirac se percató de que los términos cruzados de dicha expresión formaban un anticonmutador de la forma: $\{\alpha_i, \alpha_j\} = \alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i$. Y por tanto, para que (3,9) fuese igual a (3,5) necesitaba que:

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = 0, \text{ y que } \alpha_i^2 = 1. \quad (3,10)$$

(Nota: En adelante cuando se trate de ecuaciones matriciales, $\mathbf{0}$ representa la Matriz nula, \mathbf{I} representa la matriz identidad)

Que son las condiciones (3,8) expuestas previamente, pero que ahora estaban expresadas de una forma que Dirac recordó que las matrices de Pauli satisfacían. Esto se debe a que ya desde 1927 él había trabajado con dichas matrices, pues de acuerdo con sus memorias: “Cuando Pauli visitó Copenhague, discutimos acerca del espín del electrón. Nosotros estábamos inclinados a la introducción de tres sigma-variables $[\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3]$ para describir las tres componentes de espín. Yo obtuve esas variables independientemente de Pauli, y Pauli posiblemente también las obtuvo independientemente de mí” (Dirac, 1977). El problema estaba en que las matrices de Pauli eran tres, y solo permitían la siguiente condición:

$$(\sigma_1 p_1 + \sigma_2 p_2 + \sigma_3 p_3)^2 = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 \quad (3,11)$$

Es decir que: $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 0$ y que $\sigma_i^2 = 1$; con $i=1,2,3$. Siendo:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3,12)$$

En consecuencia, aunque la expresión (3,11) guardaba una gran similitud con la solución del problema de hallar una expresión como la (3,5); Dirac necesitaba de una matriz más, para hallar la solución definitiva, y por tanto su ecuación. La resolución del problema le tomo meses, como se ha venido exponiendo, y de acuerdo con Dirac, la encontró de la siguiente manera:

“La solución vino a mi como caída del cielo, quizás uno de mis éxitos no merecidos. Ya que vino a mi jugando con las matemáticas [...]. Me tomo mucho tiempo ese dilema, antes de que inesperadamente yo me diera cuenta de que no eran necesarias las cantidades σ , las cuales son representadas por solo dos filas y dos columnas. ¿Por qué no usar cuatro filas y cuatro columnas? Matemáticamente no había ningún impedimento para ello. Reemplazando las matrices σ , por unas con cuatro filas y cuatro columnas, uno puede tomar fácilmente la raíz cuadrada de la suma de cuatro cuadrados, o incluso de cinco cuadrados si uno quiere. Bueno, eso es lo que conduce a una nueva ecuación de onda para el electrón, una ecuación que es lineal en las cuatro componentes del cuadri-vector momento y energía” (Dirac, 1977).

Así pues, las matrices de cuatro filas y cuatro columnas que Dirac encontró, que resolvían su problema fueron:

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3,13)$$

$$\alpha_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Donde cada matriz satisface las condiciones requeridas (3,10), esto es:

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = 0 \quad (i \neq j) \quad ; \quad \alpha_i^2 = 1 \quad ; \quad \text{para: } i, j=1,2,3,4.$$

Y por lo tanto Dirac logra expresar la que él llamaba ecuación fundamental de la mecánica cuántica: $(c\sqrt{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 + m^2 c^2})\psi = E\psi$; como: $(c\sqrt{(\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3 + \alpha_4 mc)^2})\psi = E\psi$. Pudiendo ahora si eliminar la raíz, gracias a sus matrices (3,13) y obteniendo por primera vez la que hoy en día se conoce como la **ecuación de Dirac (3,14)**:

$$c(\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3 + \alpha_4 mc)\psi = E\psi \quad (3,14)$$

La ecuación (3,14) cumplía entonces con el primer requerimiento que Dirac buscaba, pues al reemplazar las variables dinámicas por sus respectivos operadores cuánticos, obtenía una ecuación de primer orden, simétrica con respecto al espacio y el tiempo, esto es (3,15):

$$-i\hbar c \left(\alpha_1 \frac{\partial \psi}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial \psi}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) + \alpha_4 mc^2 \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (3,15)$$

Esto marcó el primer gran logro personal para Dirac, pues como él comentó posteriormente: “Mi nueva ecuación satisfacía el requerimiento de ser lineal en $\frac{\partial \psi}{\partial t}$, lo cual permitía aplicar la teoría general de transformación de la mecánica cuántica, y también permitía aplicar la interpretación estándar de la función de onda, donde $|\psi|^2$ es algo que siempre debe ser positivo” (Dirac, 1975). Este logro fue muy significativo, ya que, como se describió previamente, a Dirac le resultaba intolerable que la ecuación de Klein-Gordon condujera a densidades de probabilidad negativas, y como se detalla en el anexo C.4, Darwin demostraría que la ecuación de Dirac (3,15) no presenta este problema, ya que sus densidades de probabilidad son siempre positivas de la forma:

$$\rho \equiv \psi^\dagger \psi = |\psi|^2 \geq 0$$

(ver anexo C.4, para profundizar en como la ecuación de Dirac conduce a esta expresión)

Ahora bien, es importante resaltar, que las matrices (3,13) no son las únicas que Dirac descubrió para satisfacer su ecuación. Y a pesar de que según todos sus relatos él siempre afirmó haber encontrado las matrices: “jugando con las matemáticas”, en su artículo de 1928, proporciona una forma de hallar las matrices α_j , a partir de una extensión de dimensión cuatro de las matrices de Pauli; pero además también describe otras matrices γ_j que también satisfacen su ecuación. De acuerdo con su artículo de 1928: (Dirac, 1928a), todas las posibles formas de representar sus matrices, y que satisfacen su ecuación, se generan a partir de las siguientes matrices (ver nota³³):

$$\sigma_j' = \begin{pmatrix} \sigma_j & 0 \\ 0 & \sigma_j \end{pmatrix} \quad \text{Para } j=1,2,3. \quad (3,16)$$

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}; \rho_2 = i \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{pmatrix}; \rho_3 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$$

Donde σ_j son las matrices de Pauli (3,12), I la matriz identidad, 0 la matriz nula; todas de dimensión 2×2 . De forma que dichas matrices al ser elementos de las matrices: $(\sigma_j', \rho_1, \rho_2, \rho_3)$, generan matrices de dimensión 4×4 .

Por tanto, las matrices que él expuso para satisfacer su ecuación, y que comúnmente se utilizan en la notación actual son:

$$\alpha_j = \rho_1 \cdot \sigma_j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix} \quad \text{Para } j = 1,2,3; \quad \alpha_4 = \rho_3 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (3,17)$$

$$\gamma_j = \rho_2 \cdot \sigma_j = i \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix} \quad \text{Para } j = 1,2,3; \quad \gamma_4 = \rho_3 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (3,18)$$

$$\gamma^j = \rho_3 \cdot \alpha_j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ -\sigma_j & 0 \end{pmatrix} \quad \text{Para } j = 1,2,3; \quad \gamma^0 = \rho_3 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (3,19)$$

Todas de dimensión 4×4 , ya que cada elemento de las matrices presentadas es una matriz de 2×2 (siendo σ_j las matrices de Pauli e I la matriz identidad). Y cumplen con la condición de $\{\alpha_i, \alpha_j\} = \{\gamma_i, \gamma_j\} = 2\delta_{ij}I$. Y $\{\gamma^i, \gamma^j\} = 2\eta_{ij}I$, siendo η_{ij} los elementos de la métrica Minkowski de signatura $(+, -, -, -)$.

Dirac presentó las diversas representaciones de sus matrices con el fin de expresar su ecuación de una manera más conveniente, dependiendo de las distintas propiedades y resultados que buscaba demostrar. Por ejemplo, en su artículo de 1928, se introduce una representación alternativa de la ecuación utilizando las matrices (3,18). Así mismo, en años posteriores y con el nacimiento de la teoría cuántica de campos, la ecuación (3,15) se empezó a representar a partir de las matrices (3,19), con el propósito de expresarla en notación relativista de la forma (3,20), como se demuestra en el anexo C.1:

$$(i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu - mc)\psi = 0 \quad (3,20)$$

³³**Nota importante:** En lo que sigue, todas las matrices son de dimensión 4×4 . Por lo cual se escriben de forma compacta, representándolas con una matriz de dos filas y dos columnas, donde cada elemento dicha matriz, representa una matriz de dimensión 2×2 . Por ejemplo, se puede observar que las matrices (3,17) son la forma compacta de las matrices (3,13).

Y actualmente se suele escribir haciendo uso de la notación de Slash de Feynman, donde se define el operador: $\not{\partial} = \gamma^\mu \partial_\mu$. Por lo tanto, la ecuación (3,20) también se puede expresar como:

$$(i\hbar\not{\partial} - mc)\psi = 0 \quad (3,21)$$

O en unidades naturales haciendo: $\hbar = c = 1$, se suele escribir como (3,22):

$$(i\not{\partial} - m)\psi = 0 \quad (3,22)$$

Por otro lado, en este punto es crucial señalar que históricamente después de derivar su ecuación (3,20), Dirac inicialmente no demostró un gran interés por las interpretaciones físicas de la misma en el vacío, pues cuando se le preguntó posteriormente, acerca de las interpretaciones físicas que él le dio a sus matrices α_j , y a las funciones de onda ψ de cuatro componentes a las cuales su ecuación conducía, respondió que: “*Bueno en principio uno solo tenía que aceptar que la idea de que cuatro componentes eran necesarias[...]. Era algo que solo provenía de las matemáticas [...]. Yo no intente descifrar cuales eran las propiedades de ello, mi principal preocupación era saber si [la ecuación] era correcta cuando la pusiera en un campo electromagnético. Eso era un problema más importante*” (Dirac, 1963). No obstante, es importante destacar brevemente que la solución de la ecuación (3,20) para una partícula con momento lineal nulo, permite obtener los siguientes valores para la energía, cada una con dos autoestados, como se muestra en el anexo C.2:

$$\mathbf{E}_1 = mc^2 \text{ con estados propios: } \psi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \psi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \mathbf{E}_2 = -mc^2 \text{ con estados propios: } \psi_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \psi_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Posteriormente, Paul Ehrenfest denominaría a cada función de onda ψ_j de cuatro componentes como espinores de Dirac (Rajasekaran, 2003), que, para el caso de un electrón, los dos autoestados asociados a la energía \mathbf{E}_1 se interpretarían como sus dos estados de espín, pues $\psi_1 \wedge \psi_2$ son estados propios del operador espín \mathbf{S}_z en su forma de cuatro dimensiones, como se puede ver en el anexo C.2. Ya que siendo: $\mathbf{S}_z = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}_z$; entonces: $\mathbf{S}_z \psi_1 = \frac{\hbar}{2} \psi_1$; $\mathbf{S}_z \psi_2 = -\frac{\hbar}{2} \psi_2$ ³⁴. Ahora bien, la solución correspondiente a la energía \mathbf{E}_2 , es lo que más tarde condujo a Paul Dirac a prever la existencia de la antimateria³⁵, también con dos estados de espín, ya que los estados $\psi_3 \wedge \psi_4$ cumplen la misma condición mencionada. Por lo cual, aunque en un inicio aparentemente Dirac no le prestó mucha atención a la solución de su ecuación en el vacío, esta posteriormente le permitió obtener distintas interpretaciones; algo que como él recuerda, le costó mucho más trabajo, pues para poder interpretar a profundidad las implicaciones físicas de su ecuación, necesitó de: “*una reflexión más concentrada y sostenida para aclarar las ideas*” (Dirac, 1963).

Continuando con la historia del nacimiento de la ecuación, lo que si resulta evidente es que, conforme a su artículo de 1928, antes de someter su ecuación a prueba para un electrón en presencia de un campo electromagnético, Dirac llevó a cabo una verificación preliminar asegurándose de que su ecuación fuera invariante ante transformaciones de Lorentz. Para realizar esto, él demostró que para dos sistemas de referencia z y z' , la ecuación cumple que:

$$\begin{aligned} (i\hbar\gamma^\mu \partial_\mu - mc)\psi &= 0 \rightarrow \text{Para } z \\ (i\hbar\gamma^\mu \partial'_\mu - mc)\psi' &= 0 \rightarrow \text{Para } z' \end{aligned} \quad (3,23)$$

Es decir, que para dos sistemas de referencia (z y z') que estén relacionados bajo una transformación de Lorentz dada por la matriz Λ , ambos sistemas verán la misma ecuación de Dirac. Y como se demuestra en el anexo C.3, para que eso se cumpla, debe existir una matriz $S(\Lambda)$

³⁴ Autoestados similares de dos componentes, conocidos como espinores de Pauli, ya se habían utilizado para describir el espín en 1927 gracias a la ecuación de Schrödinger–Pauli (W.Pauli, 1927).

³⁵ En su artículo de 1928, Dirac explica que su ecuación cumple con el requisito de incluir el operador de primer orden $\frac{\partial \psi}{\partial t}$. Como se demostró en el anexo C.4, este aspecto conduce a la generación de densidades de probabilidad positivas. Por lo tanto, para Dirac, desde la perspectiva de la nueva teoría cuántica, no había obstáculos para que su ecuación admitiera soluciones con energía negativa E_2 . Y, por tanto, más tarde esa solución de energía negativa lo conduce a su interpretación de la antimateria. Interpretación que requirió de un trabajo propio para ello, y que no está dentro de los alcances del presente trabajo.

que transforme el espinor de Dirac para el sistema de referencia z' de la forma: $\psi' = S(\Lambda)\psi$. Y que además cumpla con la siguiente relación:

$$A_{\nu}^{\mu}\gamma^{\nu} = S(\Lambda)^{-1}\gamma^{\mu}S(\Lambda)$$

Donde A_{ν}^{μ} es la transformación de Lorentz, γ^{μ} las matrices de Dirac, y $S(\Lambda)$ la matriz que transforma el espinor de Dirac, la cual depende de la transformación de Lorentz aplicada, tal como se describe en el anexo C.3.

3.3 El Éxito De La Ecuación de Dirac: resultados para un electrón en un campo electromagnético

Si bien Paul Dirac consideró un notable logro la obtención de su ecuación, ya que conseguía una formulación relativista de primer orden, simétrica con respecto al espacio y el tiempo, con densidades de probabilidad positivas, e invariante bajo transformaciones de Lorentz. Para él resultaba imperativo demostrar que esta proporcionara resultados que dieran cuenta de ciertos hallazgos experimentales. Esto se debe a que, más allá de la necesidad lógica de que una teoría física debe explicar datos empíricos, es importante resumir los fenómenos que motivaron el desarrollo de su ecuación, los cuales fueron detallados en los capítulos 1 y 2 del presente trabajo. Siguiendo este razonamiento, es importante tener en cuenta que una de las necesidades que condujo al surgimiento de una nueva teoría cuántica compatible con la relatividad especial de Einstein, fue la necesidad de dar cuenta de los trabajos de Sommerfeld en relación con el fenómeno de la estructura fina del átomo de hidrógeno; además, al pasar los años, efectos como el Zeeman anómalo conducían a la conclusión de que el electrón tenía un momento magnético intrínseco y por lo tanto un espín, donde para obtener una descripción precisa de tales fenómenos, se requirió de correcciones relativistas a la teoría atómica tal como lo hizo Llewellyn Thomas. Posteriormente, con la aparición de la nueva teoría cuántica, se descubrió que ecuaciones como la de Klein-Gordon, aunque eran compatibles con la relatividad especial, no lograban concordar con los resultados experimentales observados y conducían a ciertas inconsistencias. Y, por consiguiente, la mejor solución disponible en ese momento, consistió en introducir correcciones relativistas a las formulaciones no relativistas de la mecánica cuántica.

Es entonces cuando Paul Dirac empieza a desarrollar su ecuación, en principio, buscando cumplir con los requisitos matemáticos necesarios que él consideraba para una teoría cuántica relativista como se describió en la sección anterior, y luego, buscando dar cuenta de: *“Todos los fenómenos de desdoblamiento sin suposiciones arbitrarias”* (Dirac, 1928a). Donde para ello era necesario aplicarla para un electrón en un campo electromagnético, ya que hasta ahora la ecuación encontrada (3,15): *“Era solo una ecuación en ausencia de cualquier campo de fuerza. Para obtener algo interesante tenía que ponerla en un campo electromagnético”* (Dirac, 1977). Y esto no fue un trabajo difícil para Dirac, pues él recordó haber trabajado en ese problema previamente, ya que: *“Era un problema de mecánica clásica poner las ecuaciones de movimiento de una partícula cargada, en una forma hamiltoniana expresada de manera relativista. Creo que eso fue resuelto probablemente en los inicios de este siglo [xx], pero nunca me molestó en mirar quien lo hizo. Yo entonces procedí a trabajar en ello, lo cual no me fue difícil, y usé el mismo método para mi nueva ecuación”* (Dirac, 1977).

Así, para incorporar los efectos de un campo electromagnético al hamiltoniano de su ecuación, Dirac introdujo dos términos adicionales. Uno de ellos relacionado con la interacción eléctrica, y otro asociado con la interacción magnética. Específicamente a su ecuación en el vacío: $(c\vec{\alpha}\vec{p} + \alpha_4 mc^2)\psi = E\psi$, se le suma la energía potencial eléctrica $U = q\phi$, que describe la energía que el electrón adquiere debido a su interacción con un campo eléctrico externo; y el término asociado al momento lineal \vec{p} se reemplaza por el momento canónico $(\vec{p} - q\vec{A})$ que tiene en cuenta la interacción del electrón con un campo magnético externo, siendo \vec{A} el vector potencial magnético asociado a dicho campo. Por lo tanto, la ecuación que Dirac propuso en presencia de un campo electromagnético es:

$$(c\vec{\alpha}(\vec{p} - q\vec{A}) + q\phi + \alpha_4 mc^2)\psi = E\psi \quad (3,24)$$

Siendo: q la carga de la partícula a la cual se aplica la ecuación; ϕ el potencial eléctrico; \vec{A} el vector potencial magnético; y $\vec{\alpha} \vec{p}$ la contracción de: $\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3$, es decir, en esta notación a las matrices también se les pone una flecha en la parte superior, pero no deben ser confundidas con vectores; y en adelante, las matrices de Pauli y de Dirac, que tienen esa notación, indica que hay una suma entre el producto de la matriz con el término que se esté multiplicando. Donde se sugiere consultar el anexo [C.5](#) para obtener detalles sobre los términos añadidos a la ecuación.

La expresión (3,24), fue suficiente para dar cuenta de todos los fenómenos de desdoblamiento conocidos para la época, tal como lo expone Dirac en sus dos artículos: La teoría cuántica del electrón I, publicado el 2 de enero de 1928; y la teoría cuántica del electrón II, publicado el 2 de febrero del mismo año. Sin embargo, antes de dar cuenta del fenómeno de desdoblamiento que condujo a su ecuación, es decir, el de la estructura fina del hidrógeno; Dirac deseaba examinar las diferencias entre su ecuación (3,24), y la ecuación de Klein-Gordon en presencia de un campo electromagnético, la cual es: $\left[\left(\frac{E - q\phi}{c}\right)^2 - (\vec{p} - q\vec{A})^2 - m^2 c^2\right]\psi = 0$ (3,24.1). Esto para determinar qué términos distintos obtenía de su nueva teoría. Para ello, como se demuestra en el anexo [C.5](#), se manipula matemáticamente (3,24), y se obtiene el siguiente resultado:

$$\left[\left(\frac{E - q\phi}{c}\right)^2 - (\vec{p} - q\vec{A})^2 - m^2 c^2 + \hbar q \vec{\sigma} \vec{B} - \frac{i\hbar q \vec{\alpha} \vec{E}}{c}\right]\psi = 0 \quad (3,25)$$

Donde se puede notar que la expresión (3,25) de Dirac difiere en dos términos de la ecuación (3,24.1) de Klein-Gordon para un campo electromagnético. Siendo este detalle el que llevó a Paul Dirac, a darse cuenta de que su ecuación, a diferencia de todas las teorías cuántico-relativistas previas a la suya, introducía por primera vez en la historia, dos términos adicionales de manera natural: $\hbar q \vec{\sigma} \vec{B} + \frac{i\hbar q \vec{\alpha} \vec{E}}{c}$. Términos que al dividirse sobre $2m$, conducirían a: “nuevos efectos físicos” como describiría años más tarde Dirac en su libro: los principios de la mecánica cuántica (Dirac, 1930b); debido a que:

- El término: $\frac{i\hbar q}{2mc} \vec{\alpha} \vec{E}$. Fue interpretado por Dirac, como una energía potencial adicional debida a un momento dipolar eléctrico intrínseco del electrón $\frac{i\hbar q}{2mc} \vec{\alpha}$, y al campo eléctrico externo \vec{E} . Sin embargo, al ser un término puramente imaginario, él describió que: “*Es dudoso que el momento eléctrico tenga algún significado físico*” (Dirac, 1928a). Así pues, las discusiones entorno a ello, llevaron a los físicos de la época a ignorar este término efectivamente. Sin embargo, para el año de 1950 los físicos E. M. Purcell y N. F. Ramsey, publicaron un artículo en el cual describen que puede haber una posibilidad de que las partículas elementales tengan un momento eléctrico dipolar: “*La cuestión de la posible existencia de un momento dipolar eléctrico de un núcleo o de una partícula elemental se convierte en una cuestión experimental. La evidencia de la mayoría de los experimentos con moléculas, átomos, nucleones y partículas elementales no es tan concluyente como se supone*” (Purcell & Ramsey, 1950). Y actualmente se han realizado experimentos que demuestran que el electrón tiene un momento dipolar eléctrico muy pequeño, pero distinto de cero (Popa, 2023). Por lo tanto, en parte, la ecuación de Dirac volvía a predecir una vez más, un fenómeno nunca antes observado.
- El término $\frac{\hbar q \vec{\sigma} \vec{B}}{2m}$ era un término muy conocido para la época, pues como se describió en la sección 2.2 del presente trabajo, en el estudio de la estructura fina y el efecto Zeeman anómalo, se tuvo la necesidad de asociarle al electrón un momento magnético intrínseco debido a su espín, de forma que cuando el electrón estuviese en presencia de un campo magnético \vec{B} , este adquiriría una energía potencial adicional dado por la ecuación (2,4), que en el sistema internacional de unidades era: $U = -\mu_s \cdot \vec{B} = g \frac{e}{2m} \vec{s} \cdot \vec{B}$.

Más tarde L. Thomas encontró por medio de correcciones relativistas que g debía ser igual a 2; y posteriormente W. Pauli por medio de su ecuación, describe la misma energía potencial a partir de su nueva descripción del espín por medio de sus matrices σ como: $U = \frac{e}{m} \vec{s} \cdot \vec{B} = \frac{e \hbar}{m 2} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$.

Así pues, el término $\frac{\hbar q \vec{\sigma} \vec{B}}{2m}$, obtenido por la ecuación de Dirac, permitía dar cuenta de forma natural y sin suposiciones arbitrarias del momento magnético del electrón: $\mathbf{g} \frac{q}{2m} \vec{S}$ con un factor de $\mathbf{g} = 2$ ³⁶, y un espín de: $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$. Siendo este, otro de los grandes logros de la ecuación de Dirac, ya que como se describió en el capítulo 2, el espín, el factor \mathbf{g} , y el momento magnético del electrón, eran descripciones y términos que siempre se habían introducido de manera ad hoc para dar cuenta de distintos fenómenos espectroscópicos; y durante la época de (1925-1927) muchos físicos como Pauli, siempre defendían que estos términos debían surgir de manera natural a partir de una formulación cuántico-relativista. Por ejemplo, cuando Pauli introdujo su ecuación que también permite dar cuenta del espín, describió que: “*La teoría que se formula aquí debe considerarse sólo provisional, ya que se tiene que exigir una teoría última que sea formulada de manera relativista-invariante desde el principio*” (W.Pauli, 1927). Fue entonces Dirac quien logró esa teoría última, dándole la razón a Pauli y a los demás físicos que siempre confiaron en que la teoría cuántica relativista correcta, debía dar cuenta de los fenómenos descritos previamente.

Paul Dirac se sorprendió cuando se dio cuenta de lo anteriormente expuesto, ya que según sus afirmaciones:

“Yo no estaba interesado en traer el espín del electrón dentro de mi ecuación de onda. La razón de esto es que mi dominio de interés era hacer que la teoría de la relatividad estuviera de acuerdo con la teoría general de transformación. Al principio creí que el caso más simple para resolver este problema era para una partícula sin espín, y luego me preocuparía sobre como incorporar el espín. Fue una gran sorpresa para mi cuando descubrí que el caso más simple involucraba el espín.” (Dirac, 1977).

Y aunque dicho resultado fue notable para Dirac, él aún se sentía ansioso, ya que le hacía falta comprobar si su ecuación daba cuenta del fenómeno de desdoblamiento al aplicarla al átomo de hidrógeno, y según recordó más tarde: “*Tenía una gran ansiedad de saber si obtendría el resultado correcto o no [...]. Supongo que no se aprecia del todo la ansiedad que uno siente cuando prueba una nueva idea*” (Dirac, 1963).

3.4 La fórmula definitiva para la estructura fina del átomo de hidrógeno

El resultado definitivo en el cual trabajó Paul Dirac antes de la publicación de su artículo el 2 de enero de 1928, consistió entonces en comprobar que su ecuación aplicada al átomo de hidrógeno, diera cuenta del fenómeno de la estructura fina o “*duplexity*” como él lo denominaba. Este resultado era fundamental para Dirac, pues, como se ha expuesto previamente, la falla más significativa de las teorías cuánticas relativistas previas a la suya, recaía en su falta de precisión para dar cuenta de la fórmula que describía la estructura fina del hidrógeno en su totalidad. Así pues, el procedimiento utilizado por Dirac para resolver su ecuación aplicada al átomo de hidrógeno, se fundamentó en la determinación de la parte radial de la misma, a partir de la cual, él encontró en una primera aproximación, los términos que explicaban el desdoblamiento en los niveles de la energía. Donde para analizar el por qué Dirac abordó este problema únicamente en su primera aproximación, resulta crucial examinar a continuación los aspectos matemáticos más destacables involucrados en su resolución. Y esto a su vez, permitirá comprender el desarrollo llevado a cabo por C. Darwin y W. Gordon, quienes días después de la publicación de Dirac, demostraron que la ecuación también explicaba la estructura fina en su totalidad.

3.4.1 La aproximación de Dirac

Considerando lo anterior, es importante destacar que en los anexos [C.6](#) y [C.7](#), se encuentran en detalle los procedimientos matemáticos que se describen a continuación, pues para determinar los valores de energía para el átomo de hidrógeno mediante la ecuación de Dirac, se requiere de

³⁶ Más tarde con la teoría cuántica de campos se descubriría que $\mathbf{g} = 2.002\ 319\ 304\ 361\ 18$.

un análisis matemático de gran amplitud. En este contexto, la ecuación (3,24), para el átomo de hidrógeno, se formula dejando la energía potencial eléctrica en términos de la constante de estructura fina α , e ignorando el potencial vectorial magnético \vec{A} , de la siguiente manera:

$$\left(c\vec{\alpha}\vec{p} + \alpha_4 mc^2 - \frac{\hbar c\alpha}{r} \right) \psi = E\psi \quad (3,26)$$

Donde teniendo en cuenta la simetría del problema, para Dirac fue fundamental expresar su ecuación en términos de una parte radial y una parte angular de la siguiente manera:

$$\left(c\alpha_r \left(p_r + \frac{i}{r} (\vec{\Sigma} \cdot \vec{L} + \hbar) \right) + \alpha_4 mc^2 - \frac{\hbar c\alpha}{r} \right) \psi = E\psi \quad (3,27)$$

Donde p_r es el respectivo momento radial, $\vec{\Sigma}$ las matrices de Pauli en su forma 4x4; \vec{L} el momento angular, α_4 la matriz de Dirac correspondiente, y α_r la matriz de Dirac que se elige para solucionar la ecuación como se expone a continuación.

La expresión (3,27) permite distinguir una parte radial debido a r , y otra angular debido a \vec{L} , sin embargo, para poder separarlas, Dirac hizo uso de los distintos operadores de momento angular conocidos con sus respectivas funciones propias. Para ello, él introdujo un nuevo operador \mathbf{K} , definido como³⁷:

$$\mathbf{K} = \alpha_4 (\vec{\Sigma} \cdot \vec{L} + \hbar) \quad (3,28)$$

De forma que la ecuación (3,27) quedaba descrita como (3,29):

$$\left(c\alpha_r \left(p_r + \frac{i}{r} \alpha_4 \mathbf{K} \right) + \alpha_4 mc^2 - \frac{\hbar c\alpha}{r} \right) \psi = E\psi \quad (3,29)$$

Y teniendo en cuenta que el operador (3,28) conmuta tanto con el hamiltoniano de su ecuación, como con el operador de momento angular al cuadrado, Dirac pudo encontrar que las funciones propias (Υ) y los valores propios (κ) del operador \mathbf{K} propuesto, eran:

$$\mathbf{K} \Upsilon(\theta, \phi) = \hbar \kappa \Upsilon(\theta, \phi) \quad \text{siendo } \kappa = \pm \left(j + \frac{1}{2} \right); \text{ con } j = l + s.$$

Ahora bien, al igual que con la ecuación de Schrödinger y de Klein-Gordon para el átomo de hidrógeno, para Dirac era claro que los valores de la energía provenían de la parte radial de su ecuación, es por ello por lo que no es explícita su interpretación de las funciones propias del operador \mathbf{K} . Sin embargo, es importante destacar que a las funciones $\Upsilon(\theta, \phi)$, se les denominaría posteriormente como los armónicos espinoriales, siendo estos una generalización para los armónicos esféricos en su representación de cuatro componentes que requería la ecuación de Dirac (Littlejohn, 2021). Lo anterior conduce entonces a proponer una solución a la ecuación (3,29) de la forma: $\psi = \mathbf{R}(r)\Upsilon(\theta, \phi)$. Con la cual al reemplazar dicha solución en (3,29), Dirac logra separar la ecuación radial a solucionar, la cual es (3,30):

$$\left(c\alpha_r p_r + c\alpha_r \frac{i}{r} \alpha_4 \hbar \kappa + \alpha_4 mc^2 - \frac{\hbar c\alpha}{r} \right) R(r) = ER(r) \quad (3,30)$$

Para resolver la ecuación (3,30), Dirac posteriormente en su libro: los principios de la mecánica cuántica (Dirac, 1930b), describe que la representación más apropiada para su matriz α_r que le permitió resolver su ecuación fue:

$$\alpha_r = \begin{pmatrix} 0 & -iI \\ iI & 0 \end{pmatrix}$$

De forma que reemplazando α_4 y α_r en (3,30), Dirac obtuvo (3,31):

$$\begin{pmatrix} I \left(mc^2 - \frac{\hbar c\alpha}{r} - E \right) & I \left(-icp_r - \frac{c\hbar\kappa}{r} \right) \\ I \left(icp_r - \frac{c\hbar\kappa}{r} \right) & I \left(-mc^2 - \frac{\hbar c\alpha}{r} - E \right) \end{pmatrix} R(r) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3,31)$$

Siendo I la matriz identidad de dimensión 2x2.

³⁷ Es de resaltar que las ecuaciones y términos están descritas en una notación distinta a la usada por Dirac en su artículo de 1928, sin embargo, ambas son completamente equivalentes. Por ejemplo, en su artículo, \mathbf{K} lo describe como: $\alpha_4 \{ (\sigma, m) + \hbar \}$

La expresión (3,31) requiere inicialmente de una función $R(r)$ de cuatro componentes, sin embargo, cuando se expande la ecuación (3,31) como se puede observar en el anexo C.6, el problema se puede reescribir en términos de dos ecuaciones, por lo cual $R(r)$ se puede escribir en términos de dos componentes, ya que las otras dos restantes: “*Son la repetición de las otras dos componentes*” (Dirac, 1928a). Así pues, se propone como Ansatz³⁸ para $R(r)$ a:

$$R(r) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} G(r) \\ F(r) \end{pmatrix} \quad (3,32)$$

De forma que reemplazando a (3,32) y al momento radial $p_r = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)$ en la expresión (3,31), Dirac obtuvo el siguiente conjunto de ecuaciones:

$$\begin{aligned} \left(E - mc^2 + \frac{\hbar c \alpha}{r} \right) G(r) + c\hbar \frac{\partial F(r)}{\partial r} + \frac{c\hbar \kappa F(r)}{r} &= 0 \\ \left(E + mc^2 + \frac{\hbar c \alpha}{r} \right) F(r) - c\hbar \frac{\partial G(r)}{\partial r} + \frac{c\hbar \kappa G(r)}{r} &= 0 \end{aligned} \quad (3,33)$$

El par de ecuaciones (3,33) son fundamentales para la determinación completa de los valores de energía del átomo de hidrógeno. Y es plausible pensar que, si Paul Dirac las hubiese solucionado, habría encontrado que su ecuación permitía hallar la fórmula completa de la estructura fina en concordancia con la fórmula deducida por Sommerfeld en 1916. Sin embargo, como se describirá posteriormente en el presente capítulo, Dirac tuvo sus razones para tratar el problema solo en su primera aproximación.

Por ende, el siguiente paso que tomó Dirac luego de obtener las ecuaciones (3,33), consistió en hallar una ecuación diferencial de segundo orden para poder compararla con las ecuaciones previas que se habían resuelto para el átomo de hidrógeno. Para ello, como se demuestra en el anexo C.7, de (3,33) se deriva la segunda ecuación, se despeja $\frac{\partial F(r)}{\partial r}$ de la primera, y se realizan ciertos cambios de variable, para encontrar la siguiente expresión:

$$\frac{\partial^2 G(r)}{\partial^2 r} + \left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r} \right)^2 G(r) - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} G(r) - \frac{G(r)}{r^2} (\kappa^2 - \kappa) - \frac{1}{c\hbar} \frac{\partial V}{\partial r} \left(\frac{1}{B} \frac{\partial G(r)}{\partial r} - \frac{\kappa G(r)}{Br} \right) = 0 \quad (3,34)$$

Siendo: $B = \frac{1}{c\hbar} \left(E + mc^2 + \frac{\hbar c \alpha}{r} \right)$

Dirac procede a comparar la expresión (3,34), con las teorías previas a la suya, por lo tanto, supone a: $\mathbf{G}(\mathbf{r}) = r\mathbf{R}(\mathbf{r})$. Y reemplaza los valores propios (κ) del operador K que se definieron previamente, obteniendo la siguiente expresión:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial^2 r} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r} \right)^2 - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{1}{c\hbar} \frac{\partial V}{\partial r} \left(\frac{1}{B} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{(l+1)}{Br} \right) \right] R(r) = 0 \quad (3,35)$$

La obtención de la expresión (3,35), fue para Paul Dirac una de las mayores emociones de su vida, pues gracias a ella, se dio cuenta por primera vez de que su ecuación conducía a los “*fenómenos de desdoblamiento sin suposiciones arbitrarias*” (Dirac, 1928a). Esto lo hizo, comparando a (3,35) con las teorías previas a la suya que se describieron en el capítulo 2 del presente trabajo, de la siguiente forma:

- Como se puede observar en el anexo B.3, cuando se resuelve la ecuación de Klein-Gordon para el átomo de hidrógeno, resulta que la parte radial de dicha ecuación viene dada por (3,36):

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial^2 r} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r} \right)^2 - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) = 0 \quad (3,36)$$

³⁸ Es el término común utilizado en la terminología científica, para referirse a la estimación que se hace para encontrar la solución de una determinada ecuación.

De forma que comparando (3,36) con (3,35), se puede observar que los primeros cinco términos de la expresión de Dirac (3,35), corresponden a los mismos obtenidos por medio de la ecuación de Klein-Gordon (3,36). Sin embargo, como se describió en la sección 2.3.2.2 del presente trabajo, cuando se resuelve (3,36), se obtiene un desdoblamiento que no está de acuerdo con los resultados experimentales de la estructura fina, ya que conforme a la explicación dada en la sección 2.4, para comprender completamente la estructura fina, era necesario considerar no solo los efectos relativistas, sino también los efectos asociados con el espín del electrón y su acoplamiento espín-órbita, y es por ello que la expresión (3,36) de Klein-Gordon no era suficiente.

- Entonces, de acuerdo con el punto anterior, la expresión (3,35) de Dirac, aparte de tener en cuenta las correcciones relativistas de Klein-Gordon, contiene **dos nuevos términos**, que Paul Dirac analiza e interpreta como la corrección debida al acoplamiento espín-órbita, estos son:

$$\frac{1}{c\hbar} \frac{\partial V}{\partial r} \left(\frac{1}{B} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{(l+1)}{Br} \right) R(r) \quad (3,37)$$

De forma que multiplicando por $\frac{m_e}{m_e}$ la expresión (3,37), obtiene (3,38):

$$m_e \left(\frac{1}{m_e c \hbar} \frac{\partial V}{\partial r} \frac{1}{B} \frac{\partial R(r)}{\partial r} - \frac{l}{m_e c \hbar B r} \frac{\partial V}{\partial r} R(r) - \frac{1}{m_e c \hbar B r} \frac{\partial V}{\partial r} R(r) \right) \quad (3,38)$$

Llevando a Dirac a darse cuenta de que el término: $\frac{1}{m_e c \hbar B r} \frac{\partial V}{\partial r}$ en su primera aproximación, permite reemplazar a: $c\hbar B$, por: $E + mc^2 = 2mc^2$ como se demuestra en el anexo C.7. Y por lo tanto el término resaltado de la expresión (3,38) es:

$$\frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} = \frac{-e^2}{8\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2 r^3} \quad \text{siendo } V = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (3,39)$$

El término (3,39) es equivalente al encontrado entre 1926 y 1927 mediante la teoría de perturbaciones desarrollada por Pauli, Darwin y otros físicos como Thomas; donde este último lo dedujo en 1926 para explicar la estructura fina en su primera aproximación, como se describió en la sección 2.4 de este trabajo. Por lo tanto, Dirac al recordar que el acoplamiento espín-órbita era proporcional a la expresión: $\frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} = \frac{-e^2}{8\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2 r^3}$, comprendió que su ecuación (3,35), también **contenía el término restante necesario para explicar la estructura fina en su primera aproximación**³⁹, describiendo que: “La presente teoría por lo tanto en su primera aproximación, conduce a los mismos niveles de energía obtenidos por Darwin, los cuales están en acuerdo con el experimento” (Dirac, 1928a).

En síntesis, gracias a la expresión (3,35), Dirac se dio cuenta de que su ecuación incorporaba de manera natural los efectos relativistas y los de espín-órbita que daban cuenta de la estructura fina en una primera aproximación. Cumpliendo con el requerimiento final que él se había propuesto para la obtención de una ecuación cuántica-relativista, esto es: “Una ecuación que diera cuenta de los fenómenos de desdoblamiento sin suposiciones arbitrarias” (Dirac, 1928a).

Según sus memorias, cuando Dirac obtuvo todos los resultados que se han venido describiendo a partir de la sección 3.2 del presente trabajo, se dio cuenta de que su ecuación:

“Era una ecuación realmente exitosa. Conducía automáticamente a que el electrón tenía un espín cuántico semi-entero, tal como los experimentos lo requerían. Conducía también a que el electrón tenía un momento magnético, y cuando la apliqué al átomo de hidrógeno en su primera aproximación, obtuve resultados que estaban de acuerdo con la observación. Escribí entonces

³⁹ Es importante recordar que la estructura fina en su primera aproximación venía dada por la expresión (2,21) del presente trabajo, siendo esta la fórmula más cercana a la encontrada por Sommerfeld en 1916.

este trabajo y lo publiqué, dejando la primera aproximación en el tratamiento del átomo de hidrógeno” (Dirac, 1977).

En su conferencia de 1977, Paul Dirac también explicó por qué solo consideró que su ecuación explicara la estructura fina en su primera aproximación y no en su forma completa, con el fin de obtener la tan esperada fórmula de Sommerfeld:

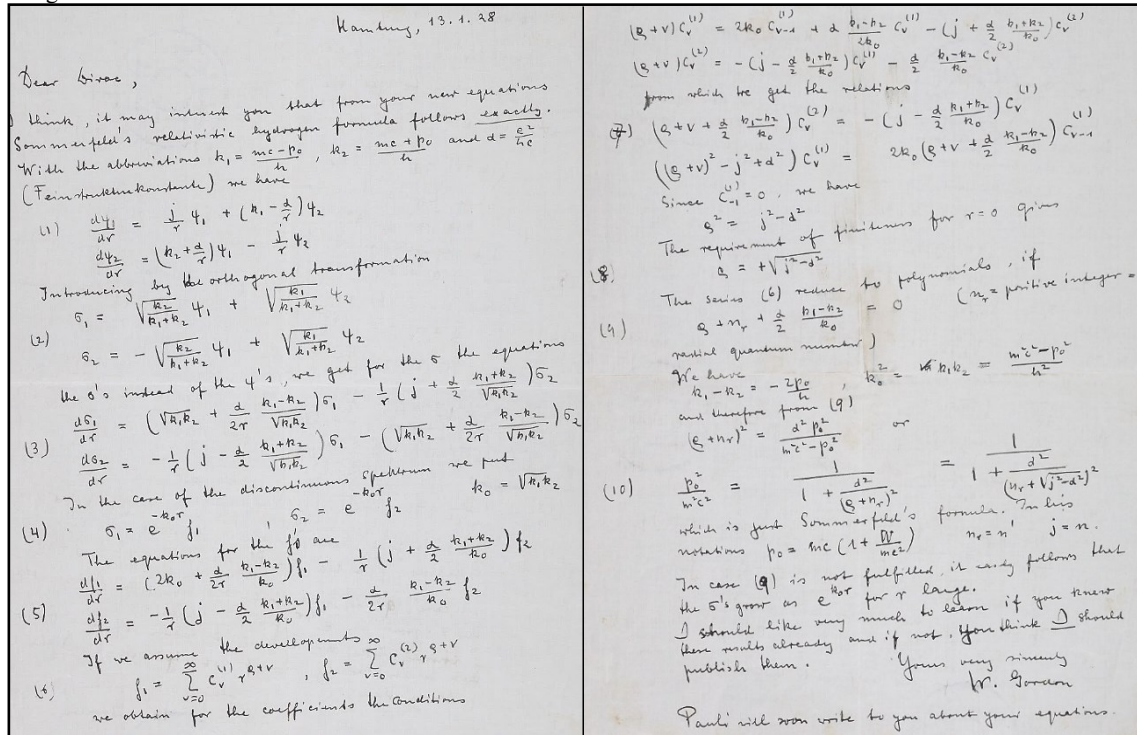
“Ustedes se preguntarán por qué yo inmediatamente no considere aproximaciones de mayor orden, y la razón para ello es que estaba realmente aterrado de hacer eso. Yo estaba aterrado de que, en mayores aproximaciones, los resultados no fueran los correctos; y dado que estaba tan feliz de haber obtenido una teoría que fuera correcta en su primera aproximación, yo quería consolidar ese éxito al publicarlo de esa forma, sin tomar el riesgo de fallar en aproximaciones de mayor orden” (Dirac, 1977).

No obstante, en tan solo unos días después de la publicación de su artículo, Paul Dirac se daría cuenta de que uno de sus mayores miedos no se haría realidad, ya que su ecuación si demostraba de forma completa la estructura fina del hidrógeno, como lo demostraron sus colegas Charles Galton Darwin y Walter Gordon.

Y es que en tan solo once días después de la publicación del artículo de Dirac, el 13 de enero de 1928, Walter Gordon le envía desde Hamburgo una carta a Dirac con dos páginas, demostrándole que a partir de su ecuación se obtiene la formula exacta de la estructura fina de Sommerfeld. Gordon inicia la carta escribiéndole: “Querido Dirac, yo creo que puede interesarte que de tu nueva ecuación la formula relativista del hidrógeno de Sommerfeld se obtiene exactamente” (Gordon, 1928). Así mismo, dos días más tarde, Gordon le envía una segunda carta, aclarándole los resultados que se obtenían de la fórmula de la estructura fina dependiendo de los valores que toman los números cuánticos. En la figura 3,1 se puede observar fotos de la primera carta de Gordon, en la cual le comunica sus resultados a Dirac:

Figura 3,1

Imágenes de la carta de Walter Gordon enviada a Paul Dirac.



Nota. Imágenes de la carta de Gordon enviada el 13 de enero de 1928 a Paul Dirac, donde le comunica como a partir de su nueva ecuación, se deduce la formula exacta de la estructura fina de Sommerfeld. En la primera imagen las expresiones marcadas como (1) son equivalentes a las ecuaciones (3,33) que se describieron previamente en el presente trabajo; y en la segunda foto la expresión marcada como (10) es la fórmula de la estructura fina de Sommerfeld. Tomado de: (Gordon, 1928).

Un poco después de haber recibido la correspondencia de Gordon; Darwin quien como se describió previamente, había estado trabajando desde el 26 de diciembre con la nueva ecuación de Dirac (ya que Dirac antes de publicar su artículo le había mostrado su trabajo a Darwin), también encuentra la fórmula exacta para la estructura fina, lo cual hizo muy feliz a Dirac, pues en sus palabras él recordó que: “*La aproximación de mayor orden fue trabajada por Darwin quien me escribió y me dijo sus resultados, y yo fui muy feliz de escuchar que estos estaban de acuerdo con la observación*” (Dirac, 1977).

Meses más tarde, Gordon y Darwin publicarían cada uno sus respectivos artículos, demostrando de forma detallada como la ecuación de Dirac daba cuenta de la estructura fina del hidrógeno. Estos trabajos permitieron profundizar en cómo se obtiene dicha solución que se describirá a continuación. Donde para ello, es importante retomar las ecuaciones (3,33), las cuales surgen de la parte radial de la ecuación de Dirac para el átomo de hidrógeno. Ecuaciones que, de acuerdo con lo descrito previamente, Paul Dirac no solucionó completamente y por ello no logró describir el término completo para la energía del átomo de hidrógeno relativista tal como lo hizo Gordon y Darwin.

3.4.2 La expresión completa de la estructura fina

Fue crucial entonces en el trabajo de Gordon y Darwin, buscar una solución a las expresiones (3,33), para que, dentro de esa búsqueda, se determinaran los valores propios de la energía que solucionaban el átomo de hidrógeno por medio de la ecuación de Dirac. A continuación, se describe los pasos más importantes para encontrar dichos valores de la energía, y se recomienda al lector remitirse al anexo C.8, para observar el desarrollo de forma detallada.

Teniendo en cuenta lo anterior, el primer paso consistió en realizar un análisis asintótico de las expresiones (3,33) encontradas por Dirac. Para ello, se inicia tomando valores muy grandes de r , de forma que las ecuaciones (3,33) toman la forma (3,40):

$$\begin{aligned} (E - mc^2)G(r) + c\hbar \frac{\partial F(r)}{\partial r} &= 0 \\ (E + mc^2)F(r) - c\hbar \frac{\partial G(r)}{\partial r} &= 0 \end{aligned} \quad (3,40)$$

Desacoplando las expresiones (3,40), se obtienen dos ecuaciones diferenciales de segundo orden lineales de la forma:

$$\frac{\partial^2 F(r)}{\partial^2 r} + \frac{((mc^2)^2 - E^2)}{c^2 \hbar^2} F(r) = 0$$

Tanto para $F(r)$ como para $G(r)$

Cuya solución que se puede normalizar es:

$$G(r) = F(r) = Ae^{-p} \quad (3,41)$$

$$\text{Con: } p = rs \quad \wedge \quad s = \frac{\sqrt{(mc^2)^2 - E^2}}{c\hbar}$$

Teniendo en cuenta la solución (3,41), las expresiones (3,33) se pasan a reescribir en términos de la nueva variable p , reemplazando el respectivo valor de $r = \frac{p}{s}$, y las siguientes funciones de la forma:

$$\begin{aligned} G(p) &= g(p)e^{-p} \\ F(p) &= f(p)e^{-p} \end{aligned}$$

Siendo $g(p) \wedge f(p)$, funciones que complementan la solución (3,41), y que permiten hallar una solución para cualquier valor de r .

De manera que realizando los cambios descritos previamente dentro de las expresiones (3,33), se obtienen las siguientes expresiones (3,42):

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dp} - 1 + \frac{\kappa}{p}\right)f(p) - \left(\sqrt{\frac{mc^2 - E}{mc^2 + E}} - \frac{\alpha}{p}\right)g(p) &= 0 \\ \left(\frac{d}{dp} - 1 - \frac{\kappa}{p}\right)g(p) - \left(\sqrt{\frac{mc^2 + E}{mc^2 - E}} + \frac{\alpha}{p}\right)f(p) &= 0 \end{aligned} \quad (3,42)$$

La solución para las expresiones (3,42), se encuentran por medio del análisis asintótico opuesto, es decir, para valores muy pequeños de r y por tanto de p . Obteniendo a partir de ello, las siguientes dos ecuaciones:

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dp} + \frac{\kappa}{p}\right)f(p) + \frac{\alpha}{p}g(p) &= 0 \\ \left(\frac{d}{dp} - \frac{\kappa}{p}\right)g(p) - \frac{\alpha}{p}f(p) &= 0 \end{aligned} \quad (3,43)$$

Desacoplando las ecuaciones (3,43), se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 f(p)}{d^2 p} + \frac{1}{p} \frac{df(p)}{dp} + \frac{\alpha^2 - \kappa^2}{p^2} f(p) &= 0 \\ \frac{d^2 g(p)}{d^2 p} + \frac{1}{p} \frac{dg(p)}{dp} + \frac{\alpha^2 - \kappa^2}{p^2} g(p) &= 0 \end{aligned} \quad (3,44)$$

Donde las ecuaciones (3,44) son ecuaciones totalmente equivalentes, y tienen la forma de una ecuación de Cauchy-Euler. Cuya solución para $f(p) \wedge g(p)$ que se puede normalizar es:

$$\begin{aligned} f(p) &= Ap^\tau \\ g(p) &= Bp^\tau \end{aligned} \quad (3,45)$$

Siendo $\tau = \sqrt{(\kappa^2 - \alpha^2)}$

Combinando entonces los dos análisis asintóticos propuestos, se obtiene que las expresiones que dan solución a las ecuaciones (3,42) y por tanto a las expresiones (3,33), son:

$$\begin{aligned} G(p) &= Bp^\tau e^{-p} \\ F(p) &= Ap^\tau e^{-p} \end{aligned} \quad (3,46)$$

Sin embargo, hace falta hallar los parámetros B y A, para encontrar la solución completa a (3,42). Y dado que Gordon y Darwin, ya habían solucionado el problema del átomo de hidrógeno con la ecuación de Klein-Gordon, tuvieron en cuenta que las expresiones (3,46) son muy similares a cuando se encuentra la solución de dicho problema. Por lo tanto, se sabía para la época, que la solución completa, sumada a los dos análisis asintóticos descritos previamente, consistía en suponer que los parámetros B y A, tenían que estar relacionados con series de potencias, que es parte de lo que se puede observar en la figura 3,1 de la carta que Gordon le envió a Dirac, con la respectiva solución al problema. Por ende, se supuso que B y A son:

$$A = \sum_{u=0}^{\infty} f_u p^u; \quad B = \sum_{u=0}^{\infty} g_u p^u \quad (3,47)$$

Así, cuando se reemplaza (3,46) en (3,42), teniendo en cuenta los valores de los parámetros A y B descritos en (3,47), se obtiene las siguientes dos expresiones que permiten encontrar las relaciones que se tienen que cumplir, para que (3,42) tenga solución. Estas son:

$$\begin{aligned} (u + \tau + \kappa)f_u - f_{u-1} + \frac{E - mc^2}{q} g_{u-1} + \alpha g_u &= 0 \\ (u + \tau - \kappa)g_u - g_{u-1} - \frac{E + mc^2}{q} f_{u-1} - \alpha f_u &= 0 \end{aligned} \quad (3,48)$$

$$\text{Con: } \tau = \sqrt{(\kappa^2 - \alpha^2)}; \quad q = \sqrt{(mc^2)^2 - E^2}$$

Donde manipulando las expresiones (3,48) como se demuestra en el anexo C.8, se encuentra que existe una relación entre los coeficientes f_u y g_u , de la siguiente forma:

$$f_u = \frac{q(u + \tau - \kappa) - (E + mc^2)\alpha}{((E + mc^2)(u + \tau + \kappa) + q\alpha)} g_u \quad (3,49)$$

Las expresiones (3,48) y (3,49), tienen una importancia fundamental, ya que estas permiten hallar los coeficientes f_u y g_u que dan cuenta de los parámetros A y B que dan la solución total (3,46) a la parte radial (3,33) de la ecuación de Dirac aplicada al átomo de hidrógeno. Sin embargo, lo importante para Gordon y Darwin, era encontrar los valores de la energía para el problema nombrado; y dado que dichos físicos eran expertos en el análisis matemático del átomo de hidrógeno, recordaron que con las ecuaciones previas a la de Dirac, las expresiones de la forma (3,47), siempre debían tener un valor máximo que hacía converger las series de potencias propuestas para la solución de las ecuaciones diferenciales para el átomo de hidrógeno ya fuese con la ecuación de Schrödinger o con la de Klein-Gordon. Donde para el caso de la ecuación de Dirac, con las condiciones encontradas en (3,48) y en (3,49), se supuso entonces un valor máximo: $f_{u_{max}}$ y $g_{u_{max}}$ tal que hiciera converger las series (3,47). Y que por tanto con: $f_{u_{max+1}} = g_{u_{max+1}} = 0$, reemplazado en las expresiones (3,48), y con $f_{u_{max}}, g_{u_{max}}$ reemplazado en la expresión (3,49), se obtuviese las siguientes dos relaciones:

$$\begin{aligned} f_{u_{max}} &= \frac{E - mc^2}{q} g_{u_{max}} \\ f_{u_{max}} &= \frac{q(u_{max} + \tau - \kappa) - (E + mc^2)\alpha}{((E + mc^2)(u_{max} + \tau + \kappa) + q\alpha)} g_{u_{max}} \end{aligned} \quad (3,50)$$

Donde dividiendo las dos expresiones (3,50), se obtiene que:

$$\frac{E - mc^2}{q} = \frac{q(u_{max} + \tau - \kappa) - (E + mc^2)\alpha}{((E + mc^2)(u_{max} + \tau + \kappa) + q\alpha)} \quad (3,51)$$

Teniendo en cuenta (3,51), se encuentra que existe una relación entre la energía E y el valor de u_{max} que hace converger la serie que da solución a la parte radial (3,33) de la ecuación de Dirac. Y por lo tanto al despejar la energía E de la ecuación (3,51) como se demuestra en el anexo C.8, se hallan todos los valores propios de la energía que dan solución al átomo de hidrógeno por medio de la ecuación de Dirac. De forma que considerando los parámetros τ y q , descritos en la expresión (3,48), se obtiene que los valores de la energía obtenidos de (3,51) son:

$$\rightarrow E = mc^2 \left[1 + \frac{\alpha^2}{(u_{max} + \sqrt{\kappa^2 - \alpha^2})^2} \right]^{-1/2} \quad (3,52)$$

Finalmente reemplazando $\kappa = \left(j + \frac{1}{2}\right)$, que son los valores propios del operador K (3,28) propuesto por Dirac en su artículo de 1928 para solucionar su ecuación. Y teniendo en cuenta además que u_{max} es un valor numérico que hace converger la sumatoria; Gordon y Darwin consideraron que la expresión (3,52) para la energía, tenía la misma forma que la expresión de la estructura fina hallada por Sommerfeld, donde gracias a los estudios realizados entre (1916-1928), ya se sabía que, en la energía, dicho valor máximo debía estar relacionado con ciertos números cuánticos de la forma: $u_{max} = n - \kappa = n - \left(j + \frac{1}{2}\right)$. Por lo tanto, Walter Gordon y Charles Galton Darwin, encontraron que efectivamente los valores propios de la energía que solucionaban el átomo de hidrógeno con la ecuación de Dirac, eran los dados por la expresión (3,53) que se muestra a continuación:

$$\rightarrow E_{n,j} = mc^2 \left[1 + \frac{\alpha^2}{\left(n - \left(j + \frac{1}{2} \right) + \sqrt{\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - \alpha^2} \right)^2} \right]^{-1/2} \quad (3,53)$$

Donde:

- n representa el número cuántico principal.
- $j = l + s$ el número de momento angular total, siendo l el momento angular orbital y s el espín.
 - α es la constante de estructura fina.
- mc^2 es la energía asociada a la masa en reposo del electrón.

Una vez obtenida la expresión (3,53), Gordon y Darwin procedieron a comparar si dichos valores de la energía coincidían tanto con los resultados experimentales, como con la fórmula de Sommerfeld. Esto era necesario, ya que como se describió en el capítulo 2, la expresión (2,11) para la energía del átomo de hidrógeno con la ecuación de Klein-Gordon, a pesar de ser bastante similar a la de Sommerfeld, discrepaba de esta última a partir de la tercera o cuarta cifra decimal, y por tanto, no producía resultados consistentes con los datos experimentales de la estructura fina. Sin embargo, cuando se calculan los posibles valores para la energía con la expresión (3,53) proveniente de la ecuación de Dirac, se obtienen resultados exactamente iguales a los dados por la fórmula de Sommerfeld (1,32) encontrada en 1916. En consecuencia, la ecuación de Dirac de forma exacta “conduce a la fórmula original de Sommerfeld para los niveles del hidrógeno” (Darwin., 1928).

Por consiguiente, para dar cuenta de lo descrito anteriormente, en la tabla (3) se describen los primeros valores de la energía del átomo de hidrógeno calculados a partir de la expresión (3,53) obtenida de la ecuación de Dirac⁴⁰:

TABLA 3
VALORES DE LOS NÚMEROS CUÁNTICOS Y ENERGÍA PARA UN ELECTRÓN EN EL ÁTOMO DE HIDRÓGENO, DE ACUERDO CON LA SOLUCIÓN OBTENIDA DE LA ECUACIÓN DE DIRAC

Sommerfeld (Tabla 1)		Dirac
n=1 un posible valor de energía, órbita K		
$W_{110} = -13,60587415 \text{ ev}$	$j = 1/2$	$W_{1,1/2} = -13,60587415 \text{ ev}$
n=2, dos posibles valores de energía, órbita L		
$W_{211} = -3,40147985 \text{ ev}$	$j = 1/2$	$W_{2,1/2} = -3,40147985 \text{ ev}$
$W_{220} = -3,40143457 \text{ ev}$	$j = 3/2$	$W_{2,3/2} = -3,40143457 \text{ ev}$
n=3, tres posibles valores de energía, órbita M		
$W_{312} = -1,51176379 \text{ ev}$	$j = 1/2$	$W_{3,1/2} = -1,51176379 \text{ ev}$
$W_{321} = -1,51175037 \text{ ev}$	$j = 3/2$	$W_{3,3/2} = -1,51175037 \text{ ev}$
$W_{330} = -1,51174590 \text{ ev}$	$j = 5/2$	$W_{3,5/2} = -1,51174590 \text{ ev}$

Nota. Tabla que contiene los valores de la energía $W_{n,j}$ del electrón, de acuerdo con sus números cuánticos (n, j) que se obtienen al solucionar la ecuación de Dirac. Los valores están calculados con base en la ecuación (3,53), restando el factor m_0c^2 .

Donde se puede observar, gracias a la tabla (3), que efectivamente los valores de la energía obtenidos con la ecuación de Dirac, son exactamente iguales a los valores que se obtuvieron en 1916 gracias a la fórmula de Sommerfeld. Este logro representó un hito importante para la teoría de Dirac, pues durante cuatro años, desde la publicación de la tesis de Louis-Victor de Broglie en 1924, los físicos se habían esforzado por encontrar una explicación del modelo de Bohr-

⁴⁰ Para calcular los valores de la energía de ligadura del electrón en el átomo de hidrógeno a partir de la expresión (3,53) es necesario restarle el término m_0c^2 . Esto es debido a que, al igual que con la ecuación relativista de Klein-Gordon; la ecuación relativista de Dirac tiene en cuenta la energía total del electrón, esto es, su energía de ligadura y su energía asociada a la masa en reposo. Y por lo tanto para dar cuenta únicamente de la energía del electrón en el átomo, se debe restar su energía en reposo.

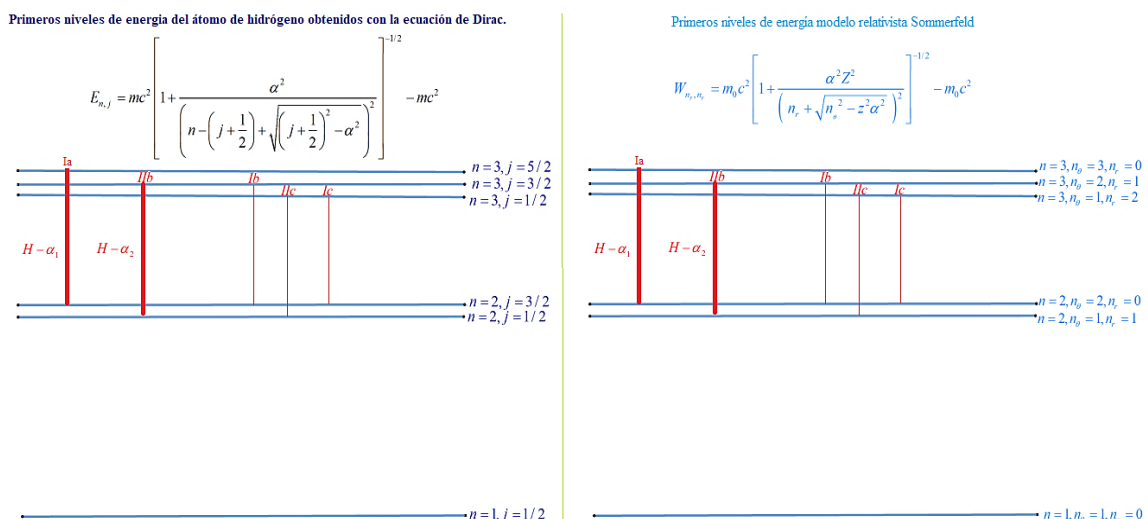
Sommerfeld mediante una nueva teoría cuántica compatible con la relatividad especial, sin obtener éxito alguno; y fue entonces la teoría de Paul Dirac la única capaz de resolver este desafío. Asimismo, es importante mencionar que para muchos físicos resulta curioso el hecho de que, en 1916, Sommerfeld pudo haber deducido de manera precisa la fórmula para describir la estructura fina del hidrógeno, a pesar de no tener conocimiento del espín y de los nuevos métodos de la mecánica cuántica que surgirían años después. Algunos atribuyen este logro a un mero accidente, mientras que otros lo relacionan con unas presuntas propiedades de simetría presentes en el problema resuelto por Sommerfeld, y posteriormente por Dirac (Biedenharn, 1982).

Y aunque en el desarrollo inicial de su ecuación, Paul Dirac no estaba intentando incorporar el espín en ella, fue precisamente gracias a la inclusión natural de esta propiedad, que su ecuación logró el éxito donde las otras ecuaciones fallaron. Pues como se expuso en el capítulo 2, todas las teorías cuánticas relativistas anteriores a la de Dirac, no lograban explicar con precisión la fórmula de Sommerfeld y por ende tampoco la estructura fina, debido a que como lo demostraron los físicos a través de la teoría de perturbaciones, no se sabía cómo incorporar el espín de manera natural en las ecuaciones cuánticas relativistas. Así pues, otro de los grandes logros que consolidó la ecuación de Dirac como la expresión relativista definitiva para describir el electrón, fue la demostración de que el desdoblamiento de los niveles de energía en el átomo de hidrógeno, conocido como estructura fina, surgía de forma natural en su ecuación, debido a los efectos relativistas inherentes al electrón y a su acoplamiento de espín-órbita.

En la figura 3,2 se puede observar una representación que compara los niveles de energía del átomo de hidrógeno dados por la teoría de Dirac y de Sommerfeld, donde las representaciones son similares, ya que ambas teorías permitieron describir de manera exacta los desdoblamientos que dan cuenta de la estructura fina del hidrógeno. Sin embargo, a diferencia del modelo propuesto por Sommerfeld que se describió en el capítulo 1, en el cual no se entendía con completa certeza el significado de los números (n_r, n_θ) , y la diferencia de las intensidades de la radiación electromagnética emitida entre las distintas transiciones energéticas; con la ecuación de Dirac se explicó de manera exacta y sin suposiciones arbitrarias⁴¹ la razón del fenómeno de la estructura fina, observado desde 1887 gracias al interferómetro de Michelson.

Figura 3,2

Representación de los primeros niveles de energía para el átomo hidrógeno, obtenidos a partir de la ecuación de Dirac, comparados con los obtenidos por Sommerfeld en 1916.



⁴¹ Es importante recordar que Dirac utilizó esa frase para describir cómo su ecuación predijo de forma natural los efectos del espín y del acoplamiento espín-órbita, lo que contrastaba con las teorías anteriores, que añadían estos efectos de manera ad hoc.

En específico, de acuerdo con (3,53), el desdoblamiento que se observa en los experimentos se debe a la radiación electromagnética emitida, a causa de las siguientes transiciones energéticas del electrón: $(n = 3, j = 5/2 \rightarrow n' = 2, j' = 3/2)$ y $(n = 3, j = 3/2 \rightarrow n' = 2, j' = 1/2)$. Las cuales dan los siguientes valores de desdoblamiento calculados gracias a la expresión (3,54):

$$\lambda_{emitida} = \frac{c}{\nu} = \frac{ch}{E_{n,j} - E'_{n,j}}$$

$$\rightarrow \lambda = \frac{h}{mc} \left\{ \left[\mathbf{1} + \frac{\alpha^2}{\left(n - (j + \frac{1}{2}) + \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - \alpha^2} \right)^2} \right]^{-1/2} - \left[\mathbf{1} + \frac{\alpha^2}{\left(n' - (j' + \frac{1}{2}) + \sqrt{(j' + \frac{1}{2})^2 - \alpha^2} \right)^2} \right]^{-1/2} \right\}^{-1} \quad (3,54)$$

$$\rightarrow \lambda_{H\alpha_1} = 656.1091272 \text{ nm}; \lambda_{H\alpha_2} = 656.0949575 \text{ nm}.$$

Cuya diferencia es: $\Delta\lambda = 0.014169755 \text{ nm} = 1.416 \cdot 10^{-8} \text{ mm}$. La ecuación de Dirac, por lo tanto, da cuenta de forma exacta del resultado experimental obtenido por Michelson en 1892 de: $1.4 \times 10^{-8} \text{ mm}$ (Albert A. Michelson, 1892), así como de las mediciones posteriores de la estructura fina.

Gracias a los resultados anteriores demostrados por Gordon y Darwin, Dirac se sentiría muy feliz con su ecuación, y por lo tanto un mes después de la publicación de su primer artículo, el 02 de febrero de 1928, publicaría una segunda parte de este titulado: La teoría cuántica del electrón parte II (Dirac, 1928b). En este artículo Dirac profundiza acerca de las intensidades de las distintas líneas espectrales, las reglas de selección que permite describirlas, y también da una explicación al efecto Zeeman por medio de su ecuación. Por ejemplo, de acuerdo con la figura 3,2, desde 1916 Sommerfeld había planteado unas reglas empíricas para describir la intensidad de las distintas líneas espectrales que su modelo predecía, y ahora con la mecánica cuántica y con la teoría de Dirac, se pudo entender dichas reglas. En ese sentido, el desdoblamiento que comúnmente se observa y que se denomina estructura fina, corresponde a que las líneas denominadas como **Ia** y **IIb** de la figura 3,2, tienen la mayor intensidad posible porque cumplen con la regla de que: $(j' - j = -1)$, lo cual equivale a la intensidad más fuerte en una transición energética de acuerdo con las reglas explicadas por Arnold Sommerfeld en la tercera edición de su libro: Estructura Atómica y Líneas Espectrales, publicado en 1934 y fundamentado en las nuevas teorías cuánticas de la época⁴².

Así pues, para febrero de 1928, el trabajo de Dirac empezaría a recibir distintos elogios: El primero fue dado por su amigo Heisenberg, quien el 13 de febrero le envía una carta diciéndole: “Admiro tu último trabajo acerca del espín en el más alto grado” y como aún no sabía del trabajo de Gordon, le pregunta: “Has obtenido la fórmula de Sommerfeld en todas sus aproximaciones?” (Heisenberg, 1928).

Pauli el 15 de febrero de 1928, le envía una carta a Kronig diciéndole que: “Ahora que se ha publicado el trabajo de Dirac. ¡Es maravilloso lo cierto que es todo! El señor Gordon pudo calcular sin dificultad que, a partir de la teoría de Dirac, se sigue exactamente la antigua fórmula de Sommerfeld para los niveles de energía” [Correspondencia de Pauli 1928 (A.Herman & K.Meyenn, 1979)].

En una entrevista con Thomas Kuhn, el físico Léon Rosenfeld, describió que una vez se conoció en 1928 la ecuación de Dirac, esta fue vista como la verdadera solución al problema del electrón relativista y “fue considerada realmente como una absoluta maravilla” (Rosenfeld,

⁴² En la tercera edición del libro Estructura Atómica y Líneas Espectrales publicada en 1934. Sommerfeld explica que la intensidad de las líneas espectrales se determina a partir de ciertas “reglas de intensidad” que dependen de la diferencia de los números cuánticos l y j , a partir de los cuales se determina la longitud de onda emitida con base en la fórmula (3,54) del presente trabajo. Ver (Sommerfeld A. , 1919, (Tercera ed., Vol. 1), pág. 273).

1963). Y el físico e historiador Helge Kragh describe en su libro dedicado a la vida de Paul Dirac que: “A principios de los años treinta, la ecuación de Dirac se había convertido en una de las piedras angulares de la física, marcando una nueva era de la teoría cuántica.” (Kragh, 1990).

Más tarde también Arnold Sommerfeld describiría que: “El éxito de la ecuación de Dirac fue sorprendente. Proporciono automáticamente el espín del electrón y el momento magnético correcto del mismo. Esto último dio lugar a una explicación matemáticamente inevitable de los efectos anómalos Zeeman [...]. Nuestra confianza en la fórmula de la estructura fina aumentó desde su derivación de la ecuación de Dirac” (A.Sommerfeld, 1940).

Lo descrito anteriormente ejemplifica cómo, a partir de 1928 y en los años posteriores, la ecuación de Dirac se convirtió en uno de los avances teóricos más comentados. No obstante, aunque en principio todos los comentarios eran positivos, posteriormente empezaría a recibir fuertes críticas debido a que Dirac había dejado un problema aún sin resolver: La existencia de energías negativas para el electrón (Farmelo, 2009b). Resolver dicho problema le llevaría aproximadamente dos años, y la historia detrás de ello requiere de un análisis detallado que va más allá de los alcances del presente trabajo, pues la solución planteada por Dirac en su artículo: Una teoría de electrones y protones (Dirac, 1930a), fue lo que eventualmente lo llevó a predecir la existencia de la antimateria, la cual sería descubierta en 1932 por el físico Carl D. Anderson.

Finalmente, es relevante culminar el presente capítulo destacando que la ecuación de Dirac ha sido ampliamente reconocida como una ecuación fundamental para la física de partículas, ya que todos los fermiones (quarks y leptones) cuyo espín es de $\frac{1}{2}$, satisfacen la ecuación de Dirac (Rajasekaran, 2003). Así mismo, muchos físicos la consideran como el punto de partida para la teoría cuántica de campos (García, 2015). Y Richard Feynman, uno de los principales exponentes de dicha teoría, una vez expresó que: “Cuando yo era joven, Dirac era mi héroe. Logró un gran avance, un nuevo método de hacer física. Pues tuvo el coraje de simplemente adivinar la forma de una ecuación, la ecuación que ahora llamamos: ecuación de Dirac” (Feynman, 1987).

Conclusiones

- El análisis presentado a lo largo de este trabajo permitió evidenciar que el fenómeno de la estructura fina del átomo de hidrógeno tuvo una influencia bastante significativa en el origen y desarrollo de una teoría cuántica relativista, pues a lo largo de 41 años, distintos físicos que buscaron una explicación físico matemática a dicho fenómeno, tuvieron que hacer uso de la teoría de la relatividad especial y de la teoría cuántica para cumplir con ese objetivo. En ese sentido, se identificó que el primer trabajo que dio cuenta de ello fue el realizado por Arnold Sommerfeld en 1916, quien, gracias al uso de las expresiones relativistas de la energía, de la mecánica analítica y de la cuantización de Wilson-Sommerfeld, logró deducir la primera fórmula capaz de describir el desdoblamiento en los niveles de energía del átomo de hidrógeno observados por primera vez en 1887 por Michelson y Morley. Además, se pudo evidenciar que en la búsqueda de dicha fórmula, Sommerfeld descubrió la constante de estructura fina, la cual ha resultado ser de gran importancia para la física moderna.
- Se encontró que entre 1924 y 1927, durante la búsqueda de una explicación a la estructura fina mediante las nuevas formulaciones de la mecánica cuántica, se desarrollaron distintos trabajos, los cuales, para alcanzar dicho objetivo, no solo hicieron uso de las expresiones relativistas de la energía, sino que también necesitaron incorporar una propiedad intrínseca del electrón recién descubierta llamada espín. En específico, la estructura fina del hidrógeno se consiguió explicar en una primera aproximación gracias a la inclusión de correcciones relativistas y de espín a las formulaciones de Schrödinger y Heisenberg. Además, esto llevó a que físicos como Pauli y Darwin intuyeran que la ecuación cuántica relativista definitiva, capaz de explicar la estructura fina en su totalidad, debía incorporar de manera natural tanto el espín del electrón como la relatividad especial.
- Al examinar el formalismo matemático empleado por Paul Dirac en la creación de su ecuación, se reconocieron varios factores que fueron claves para él, durante dicho proceso, estos son: buscar que su ecuación fuera de primer orden tanto en el espacio como en el tiempo; hacer que su ecuación a diferencia de la de Klein-Gordon, condujera a densidades de probabilidad únicamente positivas; enfocarse principalmente en los aspectos matemáticos para linealizar la raíz de su ecuación; verificar la covarianza de su ecuación bajo transformaciones de Lorentz; y verificar que al resolver su ecuación para el átomo de hidrógeno, esta diera cuenta de los desdoblamientos en sus niveles de energía. Gracias a ello, se logró identificar los aspectos fundamentales involucrados en el origen de la ecuación.
- Se ha reconocido la importancia que tuvo el fenómeno de la estructura fina del hidrógeno para la validación de la ecuación de Dirac ante la comunidad científica de la época, pues como se discutió en el presente trabajo, previo a la publicación de la ecuación de Dirac, ya se había planteado otra ecuación cuántica relativista, la cual se rechazó debido a su incapacidad para dar cuenta de la estructura fina del átomo de hidrógeno. Además, lo anterior se evidenció específicamente gracias al análisis realizado en el capítulo 3, donde se encontró que en efecto Paul Dirac publicó su ecuación solo después de verificar que esta predecía los fenómenos de desdoblamiento de manera consistente con los experimentos.
- Se ha identificado que otro de los grandes logros alcanzados por la ecuación de Dirac radicó en su capacidad para incorporar el espín del electrón sin necesidad de recurrir a términos ad hoc, así como por su habilidad para explicar de manera natural el factor $g=2$. Este logro fue fundamental para la época, ya que desde 1925 varios físicos habían introducido el espín del electrón y el valor del factor g , para dar cuenta de ciertos fenómenos espectroscópicos y del momento magnético intrínseco del electrón, respectivamente. Sin embargo, antes de la ecuación de Dirac, ningún físico había logrado explicar estos fenómenos a través de una

ecuación cuántica relativista, tal como se había estudiado que debería ocurrir. De forma que Paul Dirac, al darse cuenta de que al aplicar su ecuación a un electrón en un campo electromagnético, se obtenía que este tiene un espín asociado con un factor de g exactamente igual a 2, demuestra lo increíblemente precisa que fue su ecuación para explicar dichas propiedades del electrón a través de una ecuación cuántica compatible con la relatividad especial. Además, considerando que la ecuación de Dirac fue producto de su juego con las matemáticas, como él mismo lo señaló, esto permite resaltar la importancia fundamental de la matemática en el desarrollo de teorías que permiten dar explicaciones a distintos fenómenos físicos, aspecto que es relevante en la línea de investigación: la enseñanza de la física y la relación física matemática, dentro de la cual se desarrolló el presente trabajo de grado.

- En este trabajo se integraron los aspectos históricos con el formalismo matemático de lo que se fue analizando, de forma que se ha generado un documento que puede servir de consulta para aquellos estudiantes de la licenciatura en física de la Universidad Pedagógica Nacional, que deseen realizar un estudio detallado de la estructura fina y su relación con la ecuación de Dirac, propiciando con ello un acercamiento a una ecuación relativista de la mecánica cuántica desde una perspectiva histórica, y a un estudio del espín del electrón desde una perspectiva relativista.
- Finalmente, en relación con la conclusión anterior, es de destacar que para el desarrollo del presente trabajo de grado, se han recuperado numerosos trabajos originales, correspondencia entre científicos y actas de conferencias de los autores de las teorías y ecuaciones tratadas; de forma que la traducción de estos documentos aporta material que a menudo no está disponible en español para el estudio de los temas presentados. Así mismo, se requirió de una investigación exhaustiva de la historia entorno al surgimiento de la ecuación de Dirac, y de un estudio de ciertos temas de física cuántica relativista, para de esa forma poder establecer esa conexión entre lo que se iba analizando a nivel histórico con parte del formalismo matemático que sustentaba las teorías y ecuaciones analizadas. De forma que, con base en lo anterior, deseo destacar que gracias al desarrollo de este trabajo, he tenido la oportunidad de experimentar un maravilloso proceso de metacognición y de aprendizaje autónomo entorno a cada una de las temáticas tratadas.

Referencias

- A.Herman, & K.Meyenn. (22 de Noviembre de 1979). *Wolfgang Pauli scientific correspondence with BOHR, EINSTEIN, HEISENBERG U.A* (Vols. 1:1919-1929). Hamburgo: Springer-Verlag. <https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-540-78798-3>
- A.Sommerfeld. (1916a). Zur Quantentheorie der Spektrallinien. *Annalen der Physik*(17). <https://doi.org/10.1002/andp.19163561702>
- A.Sommerfeld. (1916b). The fine structure of Hydrogen and Hydrogen-like lines. *the european physical journal*. <https://doi.org/10.1140/epjh/e2013-40054-0>
- A.Sommerfeld. (1919). *Atomic structure and spectral lines* (Tercera ed., Vol. 1). Traducción del alemán por Henry L.Brose. Methuen Publishing.
- A.Sommerfeld. (1926). *The collected papers of albert einstein-Universidad de princeton*. Volume 15: The Berlin Years: Writings & Correspondence, June 1925-May 1927. (English Translation Supplement): <https://einsteinpapers.press.princeton.edu/vol15-trans/377>
- A.Sommerfeld. (1940). Zur Feinstruktur der Wasserstofflinien. Geschichte und gegenwärtiger Stand der Theorie. *Naturwissenschaften* 28. <https://doi.org/10.1007/BF01490583>
- Abhang, R. Y. (2005). Making introductory quantum physics understandable and interesting. Maharashtra, india.
- Abraham Pais, M. J. (1998). *PAUL DIRAC THE MAN AND HIS WORK*. Cambridge University Press.
- Albert A. Michelson. (1892). On the Application of Interference Methods to Spectroscopic Measurements II. *Philosophical Magazine*. <https://doi.org/10.1080/14786449208620318>
- Angstrom, A. (1861). Ueber die Fraunhofer'schen Linien im Sonnenspectrum. *annalen der physik*. <https://doi.org/10.1002/andp.18621931007>
- Arthur Compton. (1926). *X-Rays in theory and experiment*. D Van Nostrand Company Ltd New York.
- Atkins, P. (2006). *Physical Chemistry*. W.H. Freeman.
- Ayala, M. M. (2006). Los análisis histórico críticos y la recontextualización de saberes científicos.
- Balmer, J. J. (1885). Nota sobre las líneas espectrales del hidrógeno. *Verhandlungen der Naturforschenden Gesellschaft in Basel*, 548-560. <https://www.biodiversitylibrary.org/item/42693#page/560/mode/1up>
- Beléndez, A. (24 de Julio de 2017). *Sommerfeld: el eterno candidato al Nobel*. OpenMind BBVA: <https://www.bbvaopenmind.com/ciencia/grandes-personajes/sommerfeld-el-eterno-candidato-al-nobel/>
- Biedenharn, L. C. (1982). The "Sommerfeld Puzzle" Revisited and Resolved. *Foundations of Physics*, 13(1). <https://doi.org/10.1007/BF01889408>
- Bohr, N. (1913). On the constitution of atoms and molecules. *Philosophical Magazine Series* 6. <https://doi.org/10.1080/14786441308634955>
- Bohr, N. (1915). On the series spectrum of hydrogen and the structure of the atom. *Philosophical Magazine*. <https://doi.org/10.1080/14786440208635311>
- Brown, R. G. (2007). *Thomas Precession*. Duke University: <https://webhome.phy.duke.edu/~rgb/Class/phy319/phy319/node134.html>
- Bucher, M. (2008). *Rise and premature fall of the old quantum theory*. Physics Dept., Cal. State Univ.: <https://arxiv.org/pdf/0802.1366.pdf>
- Carretero, J. A. (2013). *Dirac. La antimateria. El reflejo oscuro de la materia*. Villatuerta: Editec.
- Chodos, A. (2010). This Month in Physics History: October 18, 1933: Louis de Broglie elected to Academy. *AMERICAN PHYSICAL SOCIETY*. <https://www.aps.org/publications/apsnews/201010/physicshistory.cfm>
- Commins, E. D. (2012). Electron Spin and Its History. *Annual Review of Nuclear and Particle Science*. <https://doi.org/10.1146/annurev-nucl-102711-094908>
- Compton, A. H. (1923). A Quantum Theory of the Scattering of X-rays by Light Elements. *Phys. Rev.*, 21(5). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.21.483>

- Dalitz, R. (2022). *cerncourier*. Paul Dirac: a genius in the history of physics: <https://cerncourier.com/a/paul-dirac-a-genius-in-the-history-of-physics/>
- Darrigol, O. (1992). *From c-Numbers to q-Numbers*. UNIVERSITY OF CALIFORNIA PRESS.
- Darwin, C. (1920). The dynamical motions of charged particles. *Philosophical Magazine Series* 6. <https://doi.org/10.1080/14786440508636066>
- Darwin, C. (1927). The Electron as a Vector Wave. *Proc. R. Soc. Lond.* (116), 227-253. <https://doi.org/10.1098/rspa.1927.0134>
- Darwin, C. G. (1928). The Wave Equations of the Electron. *Proceedings of the Royal Society*. <https://doi.org/10.1098/rspa.1928.0076>
- de Broglie, L. (1924). Researches on the Quantum Theory. *Tesis*. https://fondationlouisdebroglie.org/LDB-oeuvres/De_Broglie_Kracklauer.pdf
- Dietterich, S. (2018). *Dietterich Labs*. Mathematical and physics channel.: <https://www.youtube.com/@DietterichLabs>
- Dirac, P. A. (1925). The fundamental equations of quantum mechanics. *Royal Society*. <https://doi.org/10.1098/rspa.1925.0150>
- Dirac, P. A. (05 de 1926a). Quantum mechanics. *Thesis for Ph. D.* <https://diginole.lib.fsu.edu/islandora/object/fsu%3A641>
- Dirac, P. A. (1926b). On the theory of quantum mechanics. *Royal Society*. <https://doi.org/10.1098/rspa.1926.0133>
- Dirac, P. A. (1927a). The physical interpretation of the quantum dynamics. *Royal Society*. <https://doi.org/10.1098/rspa.1927.0012>
- Dirac, P. A. (1927b). The quantum theory of the emission and absorption of radiation. *Royal Society*. <https://doi.org/10.1098/rspa.1927.0039>
- Dirac, P. A. (1928a). The quantum theory of the electron. *Proceedings of the Royal Society of London*. <https://doi.org/10.1098/rspa.1928.0023>
- Dirac, P. A. (1928b). The quantum theory of the Electron. Part II. *The Royal Society*. <https://doi.org/10.1098/rspa.1928.0056>
- Dirac, P. A. (1930a). A theory of electrons and protons. *Proc. R. Soc. Lond.* <https://doi.org/10.1098/rspa.1930.0013>
- Dirac, P. A. (1930b). *The Principles of Quantum Mechanics*. Oxford University Press.
- Dirac, P. A. (06 de 05 de 1963). Entrevista. (T. S. Kuhn, Entrevistador) <https://www.aip.org/history-programs/niels-bohr-library/oral-histories/4575-2>
- Dirac, P. A. (15 de Abril de 1975). The history of the positron. Roma. <https://lamediateca.infn.it/mediateca/view.php?v=227>
- Dirac, P. A. (1977). History of twentieth century physics. *Recollections of an Exciting era*. Tallahassee, Florida: Edited by C. Weiner. <https://archive.org/details/historyoftwentie0000inte/page/136/mode/2up>
- Eckart, C. (1926). The Hydrogen Spectrum in the New Quantum Theory. *Phys. Rev.*(28). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.28.927>
- Einstein, 1916. (s.f.). *The collected papers of albert einstein-Universidad de princeton*. Volume 8: The Berlin Years: Correspondence, 1914-1918 (English translation supplement): <https://einsteinpapers.press.princeton.edu/vol8-trans/269>
- Farmelo, G. (2009a). *The strangest man. The hidden life of PAUL DIRAC*. Basic Books.
- Farmelo, G. (2009b). Did Dirac predict the positron? *Contemporary Physics*. <https://doi.org/10.1080/00107510903217214>
- Feynman, R. P. (1987). The reason for antiparticles. *Cambridge University Press*. <https://doi.org/10.1017/CBO9781107590076.002>
- Fock, V. (1926). Zur Schrödingerschen Wellenmechanik. *Z. Physik*, 242-250. <https://doi.org/10.1007/BF01399113>
- Forero, S. M. (2014). *Sadi Carnot y la segunda Ley de la Termodinámica. La historia de la ciencia como pedagogía natural*. <http://hdl.handle.net/20.500.12209/81>
- G.F. Bassan, M. Inguscio, T.W. Hilsnct. (1989). The Hydrogen Atom (An Historical Account of Studies of Its Spectrum). *Springer, Berlin, Heidelberg*. https://doi.org/10.1007/978-3-642-88421-4_1

- Galili, I. (2008). HISTORY OF PHYSICS AS A TOOL FOR TEACHING. *The Hebrew University of Jerusalem*.
- Garay, F. R. (2011). Perspectivas de historia y contexto cultural en la enseñanza de las ciencias: Discusiones para los procesos de enseñanza y aprendizaje. *Ciência & Educação*.
- Garcia, J. (2015). PAUL DIRAC. Parte 2: ¿Cómo llegó Dirac a su ecuación? *Aula 141*. <https://www.youtube.com/watch?v=BI5udYKvSts>
- Glilbert N. Lewis y Frank H. Spedding. (1933). A Spectroscopic Search for H3 in Concentrated H2. *Physical Review*. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.43.964>
- Gordon, W. (1928). *Paul A.M. Dirac Collection*. Letter to Dr. Dirac, January 13, 1928: <https://diginole.lib.fsu.edu/islandora/object/fsu%3A585359>
- Goudsmit, S. (1971). The discovery of the electron spin. <https://www.lorentz.leidenuniv.nl/history/spin/goudsmit.html>
- Goudsmit, Uhlenbeck. (1926). Spinning Electrons and the Structure of Spectra. *Nature*(117), 264-265. <https://doi.org/10.1038/117264a0>
- Heilbron, J. L. (1968). Quantum Historiography and the Archive for History of Quantum Physics. *History of Science*, 7. <https://doi.org/10.1177/007327536800700103>
- Heisenberg. (13 de Febrero de 1928). *Letter to Dr. Dirac, February 13, 1928, page 1*. <https://diginole.lib.fsu.edu/islandora/object/fsu%3A585353>
- Heisenberg, W. (1922). Zur Quantentheorie der Linienstruktur und der anomalen Zeemanefekte. *Z. Physik* (8), 273-297. <https://doi.org/10.1007/BF01329602>
- Heisenberg, W. (1925). *Niels Bohr Library & Archives*. Correspondencia de Heisenberg y Goudsmit: <https://repository.aip.org/islandora/object/nbla:285444#page/36/mode/1up>
- Hernández, C. G. (2018). *Sobre la importancia de axiomatizar la mecánica newtoniana haciendo uso del formalismo matemático de Von Neumann para la enseñanza de la mecánica cuántica*. Bogota: Universidad pedagógica nacional.
- Hoyer, U. (1981). *Work on Atomic Physics (1912 - 1917)*. North Holland.
- Instituto Nacional de Astrofísica, Ó. y. (s.f.). *Imagen del efecto Zeeman normal y anómalo*. <https://slideplayer.es/amp/13021847/>
- Jagdish, M., & Helmut, R. (1982). *The historical development of quantum theory* (Vol. 3). Springer.
- Jammer, M. (1989). *The conceptual development of quantum mechanics*. Tomash Publishers.
- Klein, O. (1926). Quantentheorie und funfdimensionale Relativitätstheorie. *Zeitschrift für Physik*, 895-906. <https://doi.org/10.1007/BF01397481>
- Kragh, H. (1981). The Genesis of Dirac's Relativistic Theory. *Springer-Verlag*.
- Kragh, H. (1984). Equation with the many fathers. The Klein-Gordon equation in 1926. *American journal of physics*, 1024-1032. <http://dx.doi.org/10.1119/1.13782>
- Kragh, H. (1985). The Fine Structure of Hydrogen and the Gross Structure of the Physics Community. *Historical Studies in the Physical Sciences*, 15(2). <https://doi.org/10.2307/27757550>
- Kragh, H. (1990). *Dirac_ A scientific biography*. Cambridge University Press.
- Kragh, H. (1992). A Sense of History: History of Science and the Teaching of Introductory Quantum Theory. *Science and education*, 349-363. <https://doi.org/10.1007/BF00430962>
- Kragh, H. (2012). *Niels Bohr and the quantum atom*. Oxford university press.
- Lancaster, T., & Blundell, S. (2014). *Quantum field theory for the Gifted Amateur*. Oxford university press.
- Littlejohn, R. G. (2021). *Solutions of the Dirac Equation and Their Properties*. University Of California Berkeley: <https://bohr.physics.berkeley.edu/classes/221/notes/spdirac.pdf>
- M D'Anna y T Corridoni. (2018). Measuring the Separation of the Sodium D-doublet with a Michelson Interferometer. *European Physical Society*. <https://doi.org/10.1088/1361-6404/aa8e76>
- M, Massimi. (2005). From the old quantum theory to the new quantum theory: reconsidering Kuhn's incommensurability. *Cambridge University Press*, 78-111. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511535352.007>
- M. Born, W.Heisenberg ,P.Jordan. (1925). On quantum mechanics II. *Z.Phys.*(35). <http://fisica.ciens.ucv.ve/~svincenz/SQM333.pdf>

- Mascart, M. (1869). Sur les spectres ultra-violet. *Comptes Rendus* 69, 338. <https://www.biodiversitylibrary.org/item/23684#page/344/mode/1up>
- Mesa, J. B. (2011). *ESPECTROS ATOMICOS. ATOMO HIDROGENO*. Departamento de física-UNIVERSIDAD MILITAR NUEVA GRANADA.
- Michelson, A., & Morley, E. (1887). On a method of making the wavelength of sodium light the actual and practical standard of length. *American Journal of Science*. <https://doi.org/10.2475/ajs.s3-34.204.427>
- Museum, D. (2023). *Tools of cosmology [Imagen]*. <https://history.aip.org/exhibits/cosmology/tools/pic-spectroscopy-fraunhofer-spectrum.htm>
- Nicholson, J. (1912). The constitution of the solar corona III. *Monthly notices of the royal astronomical society*, LXXII. <https://doi.org/10.1093/mnras/72.9.729>
- Oppenheimer, J. R. (1927). *Letter to Dr. Dirac*. <https://diginole.lib.fsu.edu/islandora/object/fsu:585187>
- Orozco, J. C. (2005). ATAJO Y DESVIACIONES. LOS ESTUDIOS HISTÓRICO-CRÍTICOS Y LA ENSEÑANZA DE LAS CIENCIAS.
- Physics Forums. (2013). *Undergraduate-level explanation of Dirac Equation*. <https://www.physicsforums.com/threads/undergraduate-level-explanation-of-dirac-equation.695379/>
- Planck, M. (1920). Max Planck nobel lecture . *The Genesis and Present State of Development of the Quantum Theory*. <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/1918/planck/lecture/>
- Popa, S. (2023). Physicists measure the electron electric dipole moment to unprecedented precision. *Physics World*. <https://physicsworld.com/a/physicists-measure-the-electron-electric-dipole-moment-to-unprecedented-precision/>
- Prasad, R. (2023). *Advanced Physics* . Advanced Physics channel .
- Purcell, E. M., & Ramsey, N. F. (1950). On the Possibility of Electric Dipole Moments for Elementary Particles and Nuclei. *PHYSICAL REVIEW JOURNALS ARCHIVE*. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.78.807>
- Rajasekaran, G. (2003). The Discovery of Dirac Equation and its Impact on Present-day Physics. *Reson*, 8, 59-74. <https://doi.org/10.1007/BF02866760>
- Richter, C. F. (1927). The Hydrogen Atom with a Spinning Electron in Wave Mechanics. *National Academy of Sciences*. <https://www.jstor.org/stable/84949>
- Roorkee, I. (2018). *Lecture 25 : Michelson Interferometer and Its Applications - II*. <https://www.youtube.com/watch?v=jSCSgzhIRbs&t=623s>
- Rosenfeld, L. (1963). Entrevista de Leon Rosenfeld con Thomas Khun. <https://www.aip.org/history-programs/niels-bohr-library/oral-histories/4847-1>
- Schrödinger, E. (1926a). Quantisierung als Eigenwertproblem. *Annalen der Physik*, 384, 273-376. <https://doi.org/10.1002/andp.19263840404>
- Schrödinger, E. (1926b). An Undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. *Physical Review*. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.28.1049>
- Schwartz, M. (2016). *Diffraction and resolution*. Scholars harvard: <https://scholar.harvard.edu/files/schwartz/files/lecture19-diffraction.pdf>
- Siegbahn, M. (1916). Relations between the K and L Series of the High-Frequency Spectra. *Nature*, 676. <https://doi.org/10.1038/096676b0>
- Stoney, G. (1871). On the cause of the interrupted spectra of gases. *Philosophical Maga*, 291-296. <https://www.jstor.org/stable/20540925>
- Thomas, L. H. (1926). The Motion of the Spinning Electron. *Nature*, 117. <https://doi.org/10.1038/117514a0>
- Uhlenbeck, G. Goudsmit, S. (1925). Ersetzung der Hypothese vom unmechanischen Zwang durch eine Forderung bezüglich des inneren Verhaltens jedes einzelnen Elektrons. *Die Naturwissenschaften*. <https://doi.org/10.1007/BF01558878>
- Universität wien . (s.f.). *Schrödinger, Erwin: Notizen mit der Überschrift "H-Atom, Eigenschwingungen"*. <https://fedora.phaidra.univie.ac.at/fedora/objects/o:164829/methods/bdef:Book/view?language=en#>

- Villatoro, F. (6 de Enero de 2013). *La ciencia de la mula francis*. Nota dominical: Qué es el espín de una partícula: <https://francis.naukas.com/2013/01/06/nota-dominical-que-es-el-espín-de-una-partícula/>
- W. Gerlach, O. Stern. (1922). Der experimentelle Nachweis des magnetischen Moments des Silberatoms. *Z. Physik* 8. <https://doi.org/10.1007/BF01329580>
- W. Heisenberg, P. Jordan. (1926). Application of quantum mechanics to the problem of the anomalous Zeeman effect. *Zeit. Phys*(37), 263-277. <https://doi.org/10.1007/BF01397100>
- W.Pauli. (1925a). Über den Zusammenhang des Abschlusses der Elektronengruppen im Atom mit der Komplexstruktur der Spektren. 776. <https://doi.org/10.1007/BF02980631>
- W.Pauli. (1925b). Über den Einfluß der Geschwindigkeitsabhängigkeit der Elektronenmasse auf den Zeemaneffekt. *Zeitschrift für Physik*, 373-385. <https://doi.org/10.1007/BF02980592>
- W.Pauli. (1926). ON THE HYDROGEN SPECTRUM FROM THE STANDPOINT OF THE NEW QUANTUM MECHANICS. 414. https://www.informationphilosopher.com/solutions/scientists/pauli/H_Spectrum_Pauli.pdf
- W.Pauli. (1927). Zur Quantenmechanik des magnetischen Elektrons. *Z. Physik*(43), 601–623. <https://doi.org/10.1007/BF01397326>
- W.Pauli. (1946). Remarks on the History of the Exclusion Principle. *Science*, 103(2669), 213-215. <https://www.jstor.org/stable/1673346>
- Wentzel, V. G. (1926). Die mehrfach periodischen Systeme in der Quanten mechanik. *Z. Physik*, 80-94. <https://doi.org/10.1007/BF01397309>
- Wolfgang Fleischer, G. S. (1984). Bound State Solutions of the Klein-Gordon Equation for Strong Potentials. *Zeitschrift für Naturforschung A*, 39, 703-719. <https://doi.org/10.1515/zna-1984-0801>
- Zemax. (2021). *How to build a spectrometer - theory*. <https://support.zemax.com/hc/en-us/articles/1500005578762-How-to-build-a-spectrometer-theory>

Anexos

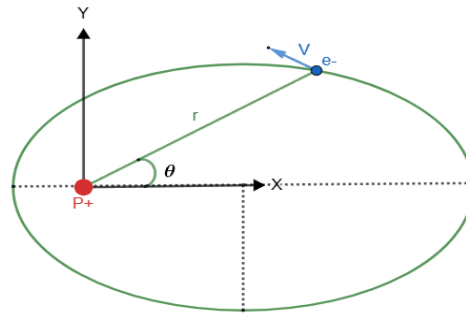
Nota: Los cálculos realizados en la presente sección anexos, tienen como base un estudio propio y autónomo de los distintos temas. Para ello se tomó como referencia diferentes libros de teoría cuántica de campos, mecánica cuántica, y ciertos elementos multimedia de distintas universidades que se encuentran alojados en la red. En ese sentido, los desarrollos paso a paso de las distintas expresiones y sus respectivas explicaciones son de elaboración propia, y los elementos tomados explícitamente, se referencian como es debido.

A.1. Desarrollo teórico de Sommerfeld para la estructura fina

Para encontrar los valores de energía encontrados por Sommerfeld tanto en el caso clásico, como en el caso relativista, se toma como referencia (Sommerfeld A. , 1919). Para ello, se tiene en cuenta primero un modelo atómico con órbitas elípticas como se observa en la figura 1-A

Figura 1, A

Representación del movimiento orbital de un electrón en la órbita elíptica propuesta por Sommerfeld



Nota. Diagrama coordenado para representar el movimiento orbital de un electrón a partir de dos grados de libertad (r, θ) . Elaboración propia.

A partir de dicha consideración entonces se procede primero del caso clásico, y luego se trata el caso relativista. Para el caso clásico se tiene que la energía cinética es:

$$E_{kin} = \frac{1}{2} m v^2$$

Cuya velocidad para una órbita elíptica viene determinada como:

$$\begin{aligned} \text{Vector posición: } \vec{s} &= (r \cos \theta, r \sin \theta) \\ \rightarrow \vec{v} &= \frac{d\vec{s}}{dt} = (\dot{r} \cos \theta - r\dot{\theta} \sin \theta, \dot{r} \sin \theta + r\dot{\theta} \cos \theta) \\ &\text{como para la energía cinética se necesita } v^2 = \vec{v} \cdot \vec{v} \\ \rightarrow v^2 &= (\dot{r} \cos \theta)^2 + (r\dot{\theta} \sin \theta)^2 - 2r\dot{\theta}\dot{r} \cos \theta \sin \theta + (\dot{r} \sin \theta)^2 + (r\dot{\theta} \cos \theta)^2 + 2r\dot{\theta}\dot{r} \cos \theta \sin \theta \\ \rightarrow v^2 &= (\dot{r} \cos \theta)^2 + (r\dot{\theta} \sin \theta)^2 + (\dot{r} \sin \theta)^2 + (r\dot{\theta} \cos \theta)^2 \\ \rightarrow v^2 &= (\dot{r})^2 (\sin^2 \theta + \cos^2 \theta) + (r\dot{\theta})^2 (\sin^2 \theta + \cos^2 \theta) \\ &\rightarrow v^2 = (\dot{r})^2 + (r\dot{\theta})^2 \end{aligned}$$

Así la energía cinética y la energía potencial vienen dadas por:

$$\begin{aligned} E_{kin} &= \frac{1}{2} m [(\dot{r})^2 + (r\dot{\theta})^2] \\ E_{pot} &= \frac{-e^2}{r} \end{aligned}$$

Donde en el término energía potencial la constante de coulomb K, se toma con un valor de 1.

Ahora se tiene en cuenta que el momento se define en términos de la energía cinética como:

$$p_q = \frac{dE_{kin}}{dq}$$

Entonces el momento radial p_r , y el momento "azimutal" p_θ como lo llamo Sommerfeld (*que es lo que se conoce hoy en día como momento angular*), vienen dados por:

$$p_r = \frac{\partial E_{kin}}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}$$

$$p_\theta = \frac{\partial E_{kin}}{\partial \dot{\theta}} = mr^2\dot{\theta}$$

Así, la energía total para el electrón, describiendo la energía cinética en términos de momento es:

$$H = W = E_{kin} + E_{pot} = \frac{1}{2m} \left[(p_r)^2 + \frac{1}{r^2} (p_\theta)^2 \right] - \frac{e^2}{r}$$

Ahora, a diferencia de Bohr, Sommerfeld no iguala directamente la expresión de energía total a la expresión de energía de Planck, si no que hace uso de la mecánica analítica, para expresar la energía total como la ecuación de Hamilton-Jacobi, y a partir de ella aplicar las condiciones de cuantización. De acuerdo con dicha formulación, el momento en términos de la acción S, viene dado por la siguiente expresión:

$$p_q = \frac{\partial S}{\partial q}$$

Por lo tanto, las dos componentes del momento quedan descritas como:

$$p_r = \frac{\partial S}{\partial r}$$

$$p_\theta = \frac{\partial S}{\partial \theta}$$

Que, reemplazando esta definición de los momentos, se obtiene la energía total del electrón como:

$$W = \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 \right] - \frac{e^2}{r}$$

Ahora se organiza la ecuación, para obtener la siguiente ecuación de Hamilton-Jacobi para el electrón en una órbita elíptica:

$$2mW + \frac{2me^2}{r} = \left[\left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 \right] \quad 1A$$

Con esta expresión, Sommerfeld ahora postula en su artículo de **1915**, a lo que hoy en día se le conoce como la condición de cuantización de Wilson-Sommerfeld:

$$\oint p_k dq_k = n_k h$$

Siendo k, la coordenada correspondiente a los distintos grados de libertad. La ecuación generaliza entonces las condiciones de cuantización del momento para sistemas con más de un grado de libertad:

$$\oint p_\theta d\theta = n_\theta h$$

Y dado que en ausencia de torques externos el momento angular p_θ se conserva:

$$p_{\theta} \oint d\theta = n_{\theta} h$$

Que, para una revolución completa, la integral de línea cerrada se convierte en:

$$p_{\theta} \int_0^{2\pi} d\theta = n_{\theta} h$$

$$\rightarrow p_{\theta} = n_{\theta} \frac{h}{2\pi}$$

Que es la cuantización del momento angular postulada por Bohr en 1913, solo que en este caso Sommerfeld llama a n_{θ} como el número cuántico azimutal. Así combinando esta expresión con la definición del momento en términos de la acción:

$$\frac{\partial S}{\partial \theta} = n_{\theta} \frac{h}{2\pi}$$

Que reemplazándolo en la fórmula de energía 1A:

$$2mW + \frac{2me^2}{r} = \left[\left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(n_{\theta} \frac{h}{2\pi} \right)^2 \right]$$

Despejando $\frac{\partial S}{\partial r}$, se obtiene:

$$\frac{\partial S}{\partial r} = \sqrt{2mW + \frac{2me^2}{r} - \frac{h^2 n_{\theta}^2}{4\pi^2 r^2}}$$

Donde como se describió $\frac{\partial S}{\partial r} = p_r$, y aplicando la condición de cuantización, se obtiene:

$$\oint p_r dr = n_r h$$

$$\rightarrow \oint \frac{\partial S}{\partial r} dr = n_r h$$

$$\rightarrow \oint \sqrt{2mW + \frac{2me^2}{r} - \frac{h^2 n_{\theta}^2}{4\pi^2 r^2}} dr = n_r h \quad (2A)$$

Para resolver la integral (2A) Sommerfeld propone las siguientes abreviaturas:

$$A = 2mW$$

$$B = me^2$$

$$C = \frac{-h^2 n_{\theta}^2}{4\pi^2}$$

De forma que la integral a resolver, es para una órbita completa siendo r_{max} y r_{min} los puntos más lejanos al núcleo:

$$\int_{r_{min}}^{r_{max}} \sqrt{A + \frac{2B}{r} + \frac{C}{r^2}} dr$$

La solución a dicha integral, Sommerfeld la realiza por medio de un método denominado "*método de integración compleja*" (Sommerfeld A. , 1919), donde su solución viene dada por la siguiente expresión:

$$\int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \sqrt{A + \frac{2B}{r} + \frac{C}{r^2}} dr = -2\pi i \left(-\sqrt{C} - \frac{B}{\sqrt{A}} \right) \quad (3A)$$

Por lo tanto, volviendo a las variables originales se obtiene:

$$\oint \sqrt{2mW + \frac{2me^2}{r} - \frac{h^2 n_\theta^2}{4\pi^2 r^2}} dr = \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \sqrt{2mW + \frac{2me^2}{r} - \frac{h^2 n_\theta^2}{4\pi^2 r^2}} dr = -2\pi i \left(-i \frac{hn_\theta}{2\pi} - \frac{me^2}{\sqrt{2mW}} \right)$$

Entonces:

$$\begin{aligned} \oint \sqrt{2mW + \frac{2me^2}{r} - \frac{h^2 n_\theta^2}{4\pi^2 r^2}} dr &= n_r h \\ -2\pi i \left(-i \frac{hn_\theta}{2\pi} - \frac{me^2}{\sqrt{2mW}} \right) &= n_r h \end{aligned} \quad (4A)$$

Donde despejando W de (4A), se obtiene la energía total clásica para un electrón:

$$W = -\frac{2\pi^2 me^4}{h^2} \frac{1}{(n_\theta + n_r)^2} = -\frac{2\pi^2 me^4}{h^2} \frac{1}{(n)^2}$$

Ahora, como se describió en el capítulo 1, esta energía no dio cuenta de la estructura fina, por lo cual se tiene que hacer uso de la relatividad para poder dar cuenta de dicho fenómeno. Esto se hace teniendo en cuenta que la energía cinética relativista más la energía potencial de un electrón en una órbita elíptica para el electrón es:

$$W = m_0 c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} - 1 \right) - \frac{Ze^2}{r}$$

Se procede a despejar el factor $\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$:

$$\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} = \frac{W}{m_0 c^2} + \frac{Ze^2}{m_0 c^2 r} + 1 = \frac{W + (Ze^2/r)}{m_0 c^2} + 1$$

De forma que de acuerdo con la velocidad y momento para una órbita elíptica como se mostró para el caso clásico, se tiene:

$$\beta^2 = \frac{v^2}{c^2} = \frac{(\dot{r})^2 + (r\dot{\theta})^2}{c^2} = \frac{1}{c^2 m^2} \left(p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\theta^2 \right)$$

Que teniendo en cuenta la masa relativista $m = \frac{m_0}{\sqrt{1-\beta^2}}$, la anterior expresión queda;

$$\begin{aligned} \beta^2 &= \frac{1}{c^2 m_0^2} \left(p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\theta^2 \right) (1-\beta^2) \\ \rightarrow \frac{\beta^2}{(1-\beta^2)} &= \frac{1}{c^2 m_0^2} \left(p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\theta^2 \right) \end{aligned}$$

Ahora se deja el termino $\frac{\beta^2}{(1-\beta^2)}$ en términos del factor $\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$ así:

$$\begin{aligned} \frac{\beta^2}{(1-\beta^2)} &= \frac{\beta^2}{-(\beta^2-1)} = \frac{\beta^2-1+1}{-(\beta^2-1)} = \frac{\beta^2-1}{-(\beta^2-1)} - \frac{1}{(\beta^2-1)} = -1 - \frac{1}{(\beta^2-1)} = -1 - \frac{1}{-(1-\beta^2)} = \frac{1}{1-\beta^2} - 1 \\ \rightarrow \frac{1}{1-\beta^2} - 1 &= \frac{1}{c^2 m_0^2} \left(p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\theta^2 \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rightarrow \frac{1}{1-\beta^2} &= 1 + \frac{1}{c^2 m_0^2} \left(p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\theta^2 \right) \\ \rightarrow \gamma &= \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} = \sqrt{1 + \frac{1}{c^2 m_0^2} \left(p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\theta^2 \right)} \end{aligned}$$

Por lo tanto, se puede igualar con la expresión inicialmente encontrada $\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} = \frac{W+(Ze^2/r)}{m_0 c^2} + 1$:

$$\begin{aligned} \frac{W + (Ze^2/r)}{m_0 c^2} + 1 &= \sqrt{1 + \frac{1}{c^2 m_0^2} \left(p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\theta^2 \right)} \\ \left(\frac{W + (Ze^2/r)}{m_0 c^2} + 1 \right)^2 &= 1 + \frac{1}{c^2 m_0^2} \left(p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\theta^2 \right) \end{aligned}$$

Donde se retoma la definición del momento en términos de la acción, al igual que en el caso clásico, por lo cual:

$$\begin{aligned} \left(\frac{W + (Ze^2/r)}{m_0 c^2} + 1 \right)^2 &= 1 + \frac{1}{c^2 m_0^2} \left(\left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 \right) \\ \left(\frac{W + (Ze^2/r)}{m_0 c^2} + 1 \right)^2 - 1 &= \frac{1}{c^2 m_0^2} \left(\left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 \right) \\ c^2 m_0^2 \left(\frac{W + (Ze^2/r)}{m_0 c^2} + 1 \right)^2 - c^2 m_0^2 &= \left(\left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 \right) \\ c^2 m_0^2 \left(\left(\frac{W + (Ze^2/r)}{m_0 c^2} \right)^2 + \frac{2(W + (Ze^2/r))}{m_0 c^2} + 1 \right) - c^2 m_0^2 &= \left(\left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 \right) \\ \frac{(W + Ze^2/r)^2}{c^2} + 2m_0(W + (Ze^2/r)) &= \left(\left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 \right) \\ \rightarrow \left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 &= 2m_0 W + \frac{2m_0 Ze^2}{r} + \frac{1}{c^2} \left(W + \frac{Ze^2}{r} \right)^2 \end{aligned}$$

Y se aplica la cuantización del momento angular para $\frac{\partial S}{\partial \theta} = n_\theta \frac{h}{2\pi}$:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(n_\theta \frac{h}{2\pi} \right)^2 &= 2m_0 W + \frac{2m_0 Ze^2}{r} + \frac{1}{c^2} \left(W + \frac{Ze^2}{r} \right)^2 \\ \rightarrow \left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 &= 2m_0 W + \frac{2m_0 Ze^2}{r} - \frac{h^2 n_\theta^2}{4\pi^2 r^2} + \frac{1}{c^2} \left(W + \frac{Ze^2}{r} \right)^2 \\ \rightarrow \frac{\partial S}{\partial r} &= \sqrt{2m_0 W + \frac{2m_0 Ze^2}{r} - \frac{h^2 n_\theta^2}{4\pi^2 r^2} + \frac{1}{c^2} \left(W + \frac{Ze^2}{r} \right)^2} \end{aligned}$$

Se aplica ahora la cuantización para el momento radial:

$$\begin{aligned} \oint \frac{\partial S}{\partial r} dr &= n_r h \\ \rightarrow \oint \sqrt{2m_0 W + \frac{2m_0 Ze^2}{r} - \frac{h^2 n_\theta^2}{4\pi^2 r^2} + \frac{1}{c^2} \left(W + \frac{Ze^2}{r} \right)^2} dr &= n_r h \end{aligned}$$

De forma que se pueden organizar los términos de la raíz, así:

$$2m_0W + \frac{2m_0Ze^2}{r} - \frac{h^2n_\theta^2}{4\pi^2r^2} + \frac{W^2}{c^2} + \frac{2WZe^2}{c^2r} + \frac{Z^2e^4}{c^2r^2}$$

Y se proponen las siguientes abreviaturas:

$$A = 2m_0W + \frac{W^2}{c^2}$$

$$B = m_0Ze^2 + \frac{WZe^2}{c^2}$$

$$C = -\frac{h^2n_\theta^2}{4\pi^2} + \frac{Z^2e^4}{c^2}$$

Que, reemplazándolas dentro de la raíz, se obtiene así la misma integral (3A), por lo cual tiene la misma solución:

$$\int_{r_{min}}^{r_{max}} \sqrt{A + \frac{2B}{r} + \frac{C}{r^2}} dr = -2\pi i \left(-\sqrt{C} - \frac{B}{\sqrt{A}} \right)$$

$$\rightarrow -2\pi i \left(-\sqrt{C} - \frac{B}{\sqrt{A}} \right) = n_r h$$

Que volviendo a las variables originales se obtiene:

$$-2\pi i \left(-\sqrt{-\frac{h^2n_\theta^2}{4\pi^2} + \frac{Z^2e^4}{c^2}} - \frac{m_0Ze^2 + \frac{WZe^2}{c^2}}{\sqrt{2m_0W + \frac{W^2}{c^2}}} \right) = n_r h$$

Para poder despejar W de esta expresión se requiere factorizar los siguientes términos:

$$\dagger m_0Ze^2 + \frac{WZe^2}{c^2} = m_0Ze^2 \left(1 + \frac{W}{m_0c^2} \right)$$

$$\dagger 2m_0W + \frac{W^2}{c^2} = \frac{W^2}{c^2} + 2\frac{W}{c}cm_0 + (m_0c)^2 - (m_0c)^2 = m_0^2c^2 \left[\left(\frac{W^2}{m_0^2c^4} + \frac{2W}{m_0c^2} + 1 \right) - 1 \right]$$

$$= m_0^2c^2 \left[\left(\frac{W}{m_0c^2} + 1 \right)^2 - 1 \right]$$

$$\dagger -\frac{h^2n_\theta^2}{4\pi^2} + \frac{Z^2e^4}{c^2} = -\frac{h^2n_\theta^2}{4\pi^2} \left(1 - \frac{z^2}{n_\theta^2} \frac{e^4 4\pi^2}{c^2 h^2} \right) = -\frac{h^2n_\theta^2}{4\pi^2} \left(1 - \frac{z^2}{n_\theta^2} \alpha^2 \right)$$

Se ve que, de la factorización del último término, se obtiene la denominada estructura fina:

$$\alpha = \frac{e^2 2\pi}{ch} = \frac{e^2}{c\hbar}$$

Por lo tanto, se reemplazan los términos factorizados para obtener W:

$$-2\pi i \left(-i \frac{\hbar n_\theta}{2\pi} \sqrt{\left(1 - \frac{z^2}{n_\theta^2} \alpha^2 \right)} - \frac{Ze^2 \left(1 + \frac{W}{m_0c^2} \right)}{c \sqrt{\left[\left(\frac{W}{m_0c^2} + 1 \right)^2 - 1 \right]}} \right) = n_r h$$

$$\begin{aligned}
& \rightarrow \left(-hn_{\theta} \sqrt{\left(1 - \frac{z^2}{n_{\theta}^2} \alpha^2\right)} + \frac{2\pi i Z e^2 \left(1 + \frac{W}{m_0 c^2}\right)}{c \sqrt{\left[\left(\frac{W}{m_0 c^2} + 1\right)^2 - 1\right]}} \right) = n_r h \\
& \rightarrow \frac{2\pi i Z e^2 \left(1 + \frac{W}{m_0 c^2}\right)}{c \sqrt{\left[\left(\frac{W}{m_0 c^2} + 1\right)^2 - 1\right]}} = n_r h + hn_{\theta} \sqrt{\left(1 - \frac{z^2}{n_{\theta}^2} \alpha^2\right)} \\
& \rightarrow \frac{2\pi i Z e^2 \left(1 + \frac{W}{m_0 c^2}\right)}{c \sqrt{\left[\left(\frac{W}{m_0 c^2} + 1\right)^2 - 1\right]}} = h \left(n_r + n_{\theta} \sqrt{\left(1 - \frac{z^2}{n_{\theta}^2} \alpha^2\right)} \right) = h \left(n_r + \sqrt{(n_{\theta}^2 - z^2 \alpha^2)} \right) \\
& \rightarrow \frac{2\pi i Z e^2 \left(1 + \frac{W}{m_0 c^2}\right)}{hc \sqrt{\left[\left(\frac{W}{m_0 c^2} + 1\right)^2 - 1\right]}} = \left(n_r + \sqrt{(n_{\theta}^2 - z^2 \alpha^2)} \right) \\
& \rightarrow \frac{2\pi i Z e^2 \left(1 + \frac{W}{m_0 c^2}\right)}{hc \sqrt{\left[\left(\frac{W}{m_0 c^2} + 1\right)^2 - 1\right]}} = \left(n_r + \sqrt{(n_{\theta}^2 - z^2 \alpha^2)} \right) \\
& \rightarrow \frac{\alpha i Z \left(1 + \frac{W}{m_0 c^2}\right)}{\sqrt{\left[\left(\frac{W}{m_0 c^2} + 1\right)^2 - 1\right]}} = \left(n_r + \sqrt{(n_{\theta}^2 - z^2 \alpha^2)} \right) \\
& \rightarrow \frac{\alpha i Z \left(1 + \frac{W}{m_0 c^2}\right)}{\sqrt{\left(\frac{W}{m_0 c^2} + 1\right)^2 \left[1 - \left(\frac{W}{m_0 c^2} + 1\right)^{-2}\right]}} = \left(n_r + \sqrt{(n_{\theta}^2 - z^2 \alpha^2)} \right) \\
& \rightarrow \frac{\alpha i Z}{\sqrt{\left[1 - \left(\frac{W}{m_0 c^2} + 1\right)^{-2}\right]}} = \left(n_r + \sqrt{(n_{\theta}^2 - z^2 \alpha^2)} \right) \\
& \rightarrow \frac{-\alpha^2 Z^2}{1 - \left(\frac{W}{m_0 c^2} + 1\right)^{-2}} = \left(n_r + \sqrt{(n_{\theta}^2 - z^2 \alpha^2)} \right)^2 \\
& \rightarrow 1 - \left(\frac{W}{m_0 c^2} + 1\right)^{-2} = \frac{-\alpha^2 Z^2}{\left(n_r + \sqrt{(n_{\theta}^2 - z^2 \alpha^2)} \right)^2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rightarrow \left(\frac{W}{m_0 c^2} + 1 \right)^{-2} &= 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{\left(n_r + \sqrt{(n_\theta^2 - z^2 \alpha^2)} \right)^2} \\ \rightarrow \frac{W}{m_0 c^2} + 1 &= \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{\left(n_r + \sqrt{(n_\theta^2 - z^2 \alpha^2)} \right)^2} \right]^{-1/2} \\ W &= m_0 c^2 \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{\left(n_r + \sqrt{n_\theta^2 - z^2 \alpha^2} \right)^2} \right]^{-1/2} - m_0 c^2 \end{aligned}$$

Que es la energía que da cuenta de la estructura fina en el modelo de Sommerfeld. Esta expresión se puede expandir en series de potencia de la siguiente forma:

A.2. Expansión Binomial de la fórmula de Sommerfeld

Aplicamos expansión binomial

$$(1+x)^n = 1 + nx + \frac{n(n-1)}{2!}x^2 + \dots$$

→ llamando al termino $L = n_r + \sqrt{n_\theta^2 - z^2 \alpha^2}$

$$\rightarrow L = n_r + \sqrt{n_\theta^2 - z^2 \alpha^2} = n_r + n_\theta \left(\sqrt{1 - \frac{z^2 \alpha^2}{n_\theta^2}} \right) = n_r + n_\theta \left(1 - \frac{1}{2} \frac{z^2 \alpha^2}{n_\theta^2} - \frac{1}{8} \frac{z^4 \alpha^4}{n_\theta^4} - \dots \right)$$

$$n = n_r + n_\theta$$

$$\rightarrow L = n_r + \sqrt{n_\theta^2 - z^2 \alpha^2} = n_r + n_\theta - \frac{1}{2} \frac{z^2 \alpha^2}{n_\theta} - \frac{1}{8} \frac{z^4 \alpha^4}{n_\theta^3} - \dots = n - \frac{1}{2} \frac{z^2 \alpha^2}{n_\theta} - \frac{1}{8} \frac{z^4 \alpha^4}{n_\theta^3} - \dots$$

Ahora se realiza lo mismo con el término de la energía:

$$\begin{aligned} \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{\left(n_r + \sqrt{n_\theta^2 - z^2 \alpha^2} \right)^2} \right]^{-1/2} &= \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{(L)^2} \right]^{-1/2} \\ \rightarrow \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{(L)^2} \right]^{-1/2} &= 1 - \frac{1}{2} \frac{\alpha^2 Z^2}{L^2} + \frac{3}{8} \frac{z^4 \alpha^4}{L^4} + \dots = 1 - \frac{1}{2} \alpha^2 Z^2 L^{-2} + \frac{3}{8} z^4 \alpha^4 L^{-4} + \dots \end{aligned}$$

Entonces:

$$\begin{aligned} L^{-2} &= \left(n - \frac{1}{2} \frac{z^2 \alpha^2}{n_\theta} - \frac{1}{8} \frac{z^4 \alpha^4}{n_\theta^3} - \dots \right)^{-2} = \left(n \left[1 - \frac{1}{2} \frac{z^2 \alpha^2}{n n_\theta} - \frac{1}{8} \frac{z^4 \alpha^4}{n n_\theta^3} - \dots \right] \right)^{-2} \\ &= \frac{1}{n^2} \left[1 - \frac{1}{2} \frac{z^2 \alpha^2}{n n_\theta} - \frac{1}{8} \frac{z^4 \alpha^4}{n n_\theta^3} - \dots \right]^{-2} \end{aligned}$$

$$L^{-2} = \frac{1}{n^2} \left[1 - \frac{1}{2} \frac{z^2 \alpha^2}{n n_\theta} - \frac{1}{8} \frac{z^4 \alpha^4}{n n_\theta^3} - \dots \right]^{-2} = \frac{1}{n^2} \left[1 + \frac{z^2 \alpha^2}{n n_\theta} + \frac{3}{8} \frac{z^4 \alpha^4}{n^2 n_\theta^3} - \dots \right]$$

$$L^{-4} = \left(n - \frac{1 z^2 \alpha^2}{2 n_\theta} - \frac{1 z^4 \alpha^4}{8 n_\theta^3} - \dots \right)^{-4} = \left(n \left[1 - \frac{1 z^2 \alpha^2}{2 n n_\theta} - \frac{1 z^4 \alpha^4}{8 n n_\theta^3} - \dots \right] \right)^{-4}$$

$$= \frac{1}{n^4} \left[1 - \frac{1 z^2 \alpha^2}{2 n n_\theta} - \frac{1 z^4 \alpha^4}{8 n n_\theta^3} - \dots \right]^{-4}$$

$$L^{-4} = \frac{1}{n^4} \left[1 - \frac{1 z^2 \alpha^2}{2 n n_\theta} - \frac{1 z^4 \alpha^4}{8 n n_\theta^3} - \dots \right]^{-4} = \frac{1}{n^4} \left[1 + 2 \frac{z^2 \alpha^2}{n n_\theta} + 10 \frac{z^8 \alpha^8}{n^2 n_\theta^6} - \dots \right]$$

Por lo tanto, se tiene que:

$$\rightarrow \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{(L)^2} \right]^{-1/2} = 1 - \frac{1}{2} \alpha^2 Z^2 L^{-2} + \frac{3}{8} z^4 \alpha^4 L^{-4} + \dots = 1 - \frac{1}{2} \alpha^2 Z^2 \left\{ \frac{1}{n^2} \left[1 + \frac{z^2 \alpha^2}{n n_\theta} + \frac{3 z^8 \alpha^8}{8 n^2 n_\theta^6} - \dots \right] \right\}$$

$$+ \frac{3}{8} z^4 \alpha^4 \left\{ \frac{1}{n^4} \left[1 + 2 \frac{z^2 \alpha^2}{n n_\theta} + 10 \frac{z^8 \alpha^8}{n^2 n_\theta^6} - \dots \right] \right\}$$

$$\rightarrow \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{(L)^2} \right]^{-1/2} = 1 - \frac{1 \alpha^2 Z^2}{2 n^2} - \frac{1 \alpha^4 Z^4}{2 n^3 n_\theta} - \frac{3 \alpha^{16} Z^{16}}{16 n^4 n_\theta^6} + \frac{3 z^4 \alpha^4}{8 n^4} + \frac{3 z^8 \alpha^8}{4 n^5 n_\theta} + \frac{15 z^{32} \alpha^{32}}{4 n^8 n_\theta^6} + \dots$$

$$\rightarrow \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{(L)^2} \right]^{-1/2} = 1 - \frac{1 \alpha^2 Z^2}{2 n^2} - \frac{1 \alpha^4 Z^4}{2 n^4} \left(\frac{n}{n_\theta} - \frac{3}{4} \right) - \frac{3 \alpha^{16} Z^{16}}{16 n^4 n_\theta^6} + \frac{3 z^8 \alpha^8}{4 n^5 n_\theta} + \frac{15 z^{32} \alpha^{32}}{4 n^8 n_\theta^6} + \dots$$

$$\text{dado que } \alpha \approx \frac{1}{137} \rightarrow \alpha^4 = \frac{1}{352275361} \approx 2.8 \cdot 10^{-9}$$

Así $\alpha^8, \alpha^{16}, \dots$ son factores muy pequeños, Por lo tanto, si se toman los primeros términos, la fórmula w se puede escribir como:

$$\rightarrow \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{(L)^2} \right]^{-1/2} \approx 1 - \frac{1 \alpha^2 Z^2}{2 n^2} - \frac{1 \alpha^4 Z^4}{2 n^4} \left(\frac{n}{n_\theta} - \frac{3}{4} \right) + \dots$$

$$W \approx m_0 c^2 \left[1 - \frac{1 \alpha^2 Z^2}{2 n^2} - \frac{1 \alpha^4 Z^4}{2 n^4} \left(\frac{n}{n_\theta} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right] - m_0 c^2$$

$$= -\frac{1 m_0 c^2 \alpha^2 Z^2}{2 n^2} - \frac{1 m_0 c^2 \alpha^4 Z^4}{2 n^4} \left(\frac{n}{n_\theta} - \frac{3}{4} \right) + \dots$$

Como:

$$\alpha^2 = \frac{e^4 4 \pi^2}{c^2 h^2}$$

Entonces la energía W es:

$$\rightarrow W \approx -\frac{1 m_0 c^2 e^4 4 \pi^2 Z^2}{2 n^2 c^2 h^2} - \frac{1 m_0 c^2 \alpha^4 Z^4}{2 n^4} \left(\frac{n}{n_\theta} - \frac{3}{4} \right) + \dots$$

$$\rightarrow W \approx -\frac{2 \pi^2 m_0 e^4 Z^2}{n^2 h^2} - \frac{1 m_0 c^2 \alpha^4 Z^4}{2 n^4} \left(\frac{n}{n_\theta} - \frac{3}{4} \right) + \dots$$

Que para el hidrógeno $z=1$, se obtiene la misma expresión clásica más unas correcciones relativistas como se explicó en el capítulo 1.

$$\rightarrow W = -\frac{2 \pi^2 m e^4}{h^2} \frac{1}{(n)^2} (\text{Energía clásica})$$

$$\rightarrow W_{n_r, n_\theta} \approx -\frac{2\pi^2 m_0 e^4}{h^2} \frac{1}{n^2} - \frac{1}{2} \frac{m_0 c^2 \alpha^4}{n^4} \left(\frac{n}{n_\theta} - \frac{3}{4} \right) + \dots \text{ (Energía relativista)}$$

Donde muchas veces, el termino $-\frac{2\pi^2 m_0 e^4}{h^2} \frac{1}{(n)^2}$ correspondiente a la energía clásica, se suele expresar como:

$$E_n \approx -\frac{2\pi^2 m_0 e^4}{h^2} \frac{1}{n^2} = \frac{m_0 c^2 \alpha^2}{2 n^2}$$

Recordando que se está trabajando con la constante de Coulomb $K=1$.

B.1. Forma de obtener la ecuación de Klein-Gordon para una partícula libre

La forma más elemental de obtener la ecuación de Klein-Gordon para una partícula libre, parte de plantear el problema de valores propios:

$$H\psi = E\psi$$

Donde se tiene en cuenta que, para una partícula libre, esto es, sin potencial V , el hamiltoniano relativista, viene dado por la expresión de energía total:

$$H^2 = (Pc)^2 + (mc^2)^2 \rightarrow H = \sqrt{(Pc)^2 + (mc^2)^2}$$

Ahora, teniendo en cuenta que las variables dinámicas vienen dadas por los siguientes operadores:

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \Delta \\ P &= -i\hbar\nabla \\ E &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \end{aligned}$$

Entonces se obtiene que al reemplazar en el hamiltoniano se obtiene:

$$\begin{aligned} \rightarrow \sqrt{(-i\hbar\nabla c)^2 + (mc^2)^2} \psi &= \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \psi \\ -\hbar^2 c^2 \Delta \psi + m^2 c^4 \psi &= -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \end{aligned}$$

Ecuación en notación relativista

Teniendo en cuenta la ecuación anterior, se obtiene que, para pasarla a notación relativista, se hace uso de las unidades naturales. Esto es: $\hbar=c=1$. Por lo tanto, la ecuación queda como:

$$\begin{aligned} -\Delta \psi + m^2 \psi &= -\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \\ -\Delta \psi + m^2 \psi + \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} &= 0 \end{aligned}$$

Ahora, teniendo en cuenta, que en relatividad la generalización del operador laplaciano, viene dada por el operador llamado *d'Alembertiano*, que se define en unidades naturales como:

$$\square = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta$$

Reemplazándolo en la ecuación, se llega a:

$$\rightarrow (\square + m^2)\psi = 0$$

Que es la ecuación de Klein-Gordon en notación relativista.

B.2. Ecuación de Klein-Gordon para el átomo de hidrógeno

Se parte del hamiltoniano para la partícula libre primero, con la ecuación **independiente del tiempo**:

$$H\psi = E\psi$$

Donde el hamiltoniano H: es la energía total relativista del electrón, más la energía potencial qV debido a su interacción con el protón:

$$\begin{aligned} \sqrt{(Pc)^2 + (mc^2)^2}\psi + qV\psi &= E\psi \\ \rightarrow ((E-qV)^2 - p^2c^2)\psi &= m^2c^4\psi \end{aligned}$$

Ahora se reemplaza p por su respectivo operador, y $q = -e$ que es la carga del electrón:

$$\begin{aligned} \rightarrow ((E+eV)^2 - (-i\hbar\nabla)^2c^2)\psi &= m^2c^4\psi \\ \rightarrow (E+eV)^2\psi - c^2(-i\hbar\nabla)^2\psi &= m^2c^4\psi \\ \rightarrow (E+eV)^2\psi + c^2\hbar^2\Delta\psi &= m^2c^4\psi \end{aligned}$$

Reemplazando ahora el respectivo potencial de Coulomb:

$$\begin{aligned} V &= \frac{e}{4\pi\epsilon_0 r} \\ \rightarrow (E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r})^2\psi + c^2\hbar^2\Delta\psi &= m^2c^4\psi \end{aligned}$$

Donde recordando que en el sistema internacional de unidades la constante de estructura fina es:

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$$

Se reescribe de la siguiente forma, para poder trabajarla mejor:

$$\begin{aligned} \rightarrow (E + \frac{\hbar c\alpha}{r})^2\psi + c^2\hbar^2\Delta\psi &= m^2c^4\psi \\ \rightarrow -c^2\hbar^2\Delta\psi + m^2c^4\psi &= (E + \frac{\hbar c\alpha}{r})^2\psi \end{aligned}$$

B.3. Solución de la ecuación de Klein-Gordon para la energía del átomo de hidrógeno

Primero, se reemplaza el termino laplaciano en esféricas, dentro de la ecuación de Klein-gordon, el cual es:

$$\Delta = \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

Y haciendo el algebra respectiva, reemplazando dicho laplaciano en la ecuación de Klein-Gordon para el átomo de hidrógeno, se llega a la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{r^2 m^2 c^2}{\hbar^2} \psi + r^2 \left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r} \right)^2 \psi = - \frac{1}{\text{sen}(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\text{sen}(\theta) \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\text{sen}^2(\theta)} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2}$$

Y se resuelve de forma análoga a cuando se soluciona la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno, (*dentro tópico de mecánica cuántica 2, dictado por la línea 2: la enseñanza de la física y la relación física matemática, de la licenciatura en física de la universidad pedagógica nacional, realizamos dicha solución con la profesora Sandra Ávila, por lo cual, los procedimientos mencionados a continuación aprovechan dichas soluciones*). Donde la parte angular de la ecuación es una ecuación cuya solución es bastante conocida y son los famosos armónicos esféricos. Por lo tanto, lo primero que se propone una solución por separación de variables de la forma:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

Con: $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ = los armónicos esféricos, que tienen las siguientes imposiciones, para los números l y m :

$$\begin{aligned} -l &\leq m \leq l \\ l &\geq 0 \end{aligned}$$

Además, se sabe que los armónicos esféricos son las funciones propias del operador \hat{L}^2 cuyos valores propios son: $\hbar^2 l(l+1)$. Por lo tanto, para que dicha ecuación diferencial se cumpla, ambos lados deben ser igual a una constante, que se impone igual a $K = l(l+1)$, para que de esta forma al reemplazar:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)}{\partial r} \right) - \frac{r^2 m^2 c^2}{\hbar^2} R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) + r^2 \left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r} \right)^2 R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ = l(l+1) = - \frac{1}{\text{sen}(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\text{sen}(\theta) \frac{\partial R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\text{sen}^2(\theta)} \frac{\partial^2 R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)}{\partial \varphi^2} \end{aligned}$$

Donde, aplicando las respectivas derivadas, y separando las funciones se llega a las dos ecuaciones:

$$\frac{1}{\text{sen}(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\text{sen}(\theta) \frac{\partial Y_{lm}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\text{sen}^2(\theta)} \frac{\partial^2 Y_{lm}(\theta, \varphi)}{\partial \varphi^2} + l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi) = 0 \quad (A.1)$$

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r} \right)^2 - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0 \quad (R.1)$$

Donde la primera ecuación (A.1) su solución como se describió previamente, ya se impuso, porque era una solución conocida que son los armónicos esféricos. Para la solución de la segunda ecuación, que es la radial (R.1), se requiere de unos cambios de variable particulares, y es la solución a esta ecuación la que permite determinar los valores propios de la energía E del átomo de hidrógeno para la ecuación de Klein-Gordon. Dicha solución se hace, teniendo como referente la solución que se presenta la revista de investigación natural en ciencias físicas de los físicos Wolfgang Fleischer y Gerhard Soff (Wolfgang Fleischer, 1984), y el archivo de video del físico Sam Dietterich (Dietterich, 2018).

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r} \right)^2 - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0$$

Haciendo los siguientes cambios de variable:

$$R = \frac{u}{r}$$

$$\beta = 2 \frac{(m^2 c^4 - E^2)^{1/2}}{\hbar c}$$

Llegando, luego de reemplazar y expandir a:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l^2 + l + \frac{1}{4} - \alpha^2 - \frac{1}{4}}{r^2} + \frac{2E\alpha}{\hbar cr} - \frac{\beta^2}{4} \right] u = 0$$

$$\rightarrow \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2 - \frac{1}{4}}{r^2} + \frac{2E\alpha}{\hbar cr} - \frac{\beta^2}{4} \right] u = 0$$

Ahora se hace $\mu = \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2}$

$$\rightarrow \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\mu^2 - \frac{1}{4}}{r^2} + \frac{2E\alpha}{\hbar cr} - \frac{\beta^2}{4} \right] u = 0$$

Dividiendo por β^2 y aplicando un nuevo cambio de variable:

$$\rho = \beta r; \lambda = \frac{2E\alpha}{\hbar c\beta}; w(\rho) = u(r)$$

Se llega a la siguiente ecuación diferencial:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\mu^2 - \frac{1}{4}}{\rho^2} + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} \right] w(\rho) = 0$$

Dicha ecuación diferencial se soluciona proponiendo soluciones asintóticas, esto es, mirar la forma que toma la ecuación cuando:

$$\rho \rightarrow \infty$$

$$\rho \rightarrow \text{valores pequeños}$$

Donde para $\rho \rightarrow \infty$, la ecuación tiene el siguiente comportamiento:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{1}{4} \right] w(\rho) = 0$$

Que es una ecuación diferencial de segundo orden sencilla, con solución de la forma:

$$w(\rho) = e^{-\rho/2}$$

Por otro lado, para $\rho \rightarrow \text{valores pequeños}$, se tiene que la ecuación tiene el comportamiento:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\mu^2 - \frac{1}{4}}{\rho^2} \right] w(\rho) = 0$$

Que es una ecuación de Cauchy Euler, cuya solución para que se normalíza es:

$$w(\rho) = \rho^{\frac{1}{2} + \mu}$$

Por lo tanto, la solución de la ecuación diferencial inicial, luego de los análisis asintóticos, debe ser de la forma:

$$w(\rho) = \rho^{\frac{1}{2}+\mu} e^{-\frac{\rho}{2}} v(\rho)$$

Donde $v(\rho)$ es una función que determina la solución total, y debe tender a 1, en los casos límites. Para encontrar $v(\rho)$, se reemplaza $w(\rho)$, en la ecuación diferencial:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\mu^2 - \frac{1}{4}}{\rho^2} + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} \right] \rho^{\frac{1}{2}+\mu} e^{-\frac{\rho}{2}} v(\rho) = 0$$

Donde luego de hacer el algebra, y calcular las derivadas, se llega a:

$$\left(\frac{1}{2} + \mu\right) \frac{1}{\rho} v - 2 \left(\frac{1}{2} + \mu\right) \frac{1}{\rho} \frac{dv}{d\rho} + \frac{dv}{d\rho} - \frac{d^2 v(\rho)}{d\rho^2} - \frac{\lambda}{\rho} v = 0$$

Que haciendo nuevamente los siguientes cambios de variable:

$$b = \left(\frac{1}{2} + \mu - \lambda\right); \quad d = 2\mu + 1$$

Se llega a la siguiente ecuación:

$$\frac{d^2 v(\rho)}{d\rho^2} + \left(\frac{d}{\rho} - 1\right) \frac{dv}{d\rho} - \frac{b}{\rho} v = 0$$

Esta ecuación diferencial debe ser solucionada por series de potencias, cuya solución es de la forma:

$$v(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j$$

Calculando las derivadas y reemplazando en la ecuación diferencial se obtiene:

$$\sum_{j=0}^{\infty} [j(j+1)c_{j+1} + d(j+1)c_{j+1} - jc_j - bc_j] \rho^{j-1} = 0$$

Donde la única parte que se puede hacer igual a cero es:

$$[j(j+1)c_{j+1} + d(j+1)c_{j+1} - jc_j - bc_j] = 0$$

Despejando c_{j+1} :

$$c_{j+1} = \frac{j+b}{j(j+1)+d(j+1)} c_j$$

Reemplazando $j = j - 1$, se obtiene entonces la siguiente formula de recursión:

$$c_j = \frac{j-1+b}{j(j-1)+jd} c_{j-1}$$

Donde para que la solución sea convergente debe haber un j_{max} en el cual la serie termine, y por lo tanto que en el siguiente término de la serie: $j_{max} + 1$, el valor de c_j sea cero:

$$0 = \frac{j_{max} + b}{j_{max} + 1 + (j_{max} + 1)d} c_j$$

Es decir que:

$$j_{max} + b = 0$$

Ahora, j_{max} debe ser algún número entero no negativo k de la serie:

$$k + b = 0$$

Reemplazando b :

$$\frac{1}{2} + \mu - \lambda + k = 0$$

Reemplazando μ y λ :

$$\frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2} - \frac{2E\alpha}{\hbar c \beta} + k = 0$$

Donde: $\beta = 2 \frac{(m^2 c^4 - E^2)^{1/2}}{\hbar c}$.

Por lo tanto, despejando E , se obtienen finalmente los valores de la energía que solucionan la ecuación:

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{\left(k + \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2}\right)^2}}}$$

Donde como ya se sabía, de acuerdo con la fórmula de Sommerfeld, dicho valor de k debía estar relacionado con el número cuántico principal n y con el número que se conocía como n_r :

De forma que, teniendo en cuenta los valores que podían tomar dichos números, y de acuerdo con los datos espectroscópicos, se seleccionó:

$$k = n - l - 1$$

Obteniendo finalmente la energía para el átomo de hidrógeno con la ecuación de Klein-Gordon:

$$E_{nl} = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{\left(n - l - \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2}\right)^2}} = m_0 c^2 \left[1 + \frac{\alpha^2}{\left(n - l - \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2}\right)^2} \right]^{-1/2}$$

Donde los valores que puede tomar n deben ser enteros para que k sea un entero. Además, de los armónicos esféricos se sabe que $l = 0, 1, 2, 3, \dots$

$$\rightarrow n = k + l + 1$$

Donde para un valor fijo de k sé que ve siempre:

$$n \geq l + 1$$

Por lo tanto:

$$l \leq n - 1$$

B.4. Energías y densidades de probabilidad negativa de la ecuación de Klein-Gordon

Para ver como la ecuación de Klein-Gordon se satisface para energías negativas, se parte recordando que se está trabajando con $c=\hbar = 1$:

$$\begin{aligned}(\square + m^2)\psi &= 0 \\ \square &= \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \\ \square &= \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \\ \rightarrow \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta + m^2 \right) \psi &= 0\end{aligned}$$

Se supone la una solución de forma de una onda plana:

$$\psi(t, \vec{x}) = e^{-i(kx - \omega t)}$$

Donde para una onda aplicando las relaciones de: de Broglie se tiene que:

$$(kx - \omega t) = \left(\frac{p}{\hbar} x - 2\pi\nu t \right) = \left(\frac{px - 2\pi\nu\hbar t}{\hbar} \right) = \left(\frac{px - Et}{\hbar} \right) = (Et - px)_{en \text{ unidades naturales}}$$

Ahora del cuadri-vector momento y posición:

$$\begin{aligned}p &= (E, \vec{p}) \\ x &= (t, \vec{x})\end{aligned}$$

Entonces:

$$p \cdot x = (Et - px)$$

Por lo tanto la onda se reescribe como:

$$\psi(t, \vec{x}) = e^{-ipx}$$

Donde se calcula por simplicidad en 1 dimensión las derivadas:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -E^2 \psi$$

$$\Delta = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = p^2 \psi$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta + m^2 \right) \psi = 0$$

$$\rightarrow -E^2 \psi + p^2 \psi + m^2 \psi = 0$$

$$E^2 \psi = (p^2 + m^2) \psi$$

Esto implica que ψ satisface:

$$\rightarrow E^2 = p^2 + m^2$$

$$\rightarrow E = \pm\sqrt{p^2 + m^2}$$

Es decir, energías tanto positivas, como negativas.

Lo anterior, es la base para demostrar las **probabilidades negativas**, donde se parte teniendo en cuenta que, la corriente de probabilidad se define como:

$$J = -i\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial x} + i\psi \frac{\partial\psi^*}{\partial x}$$

Calculando, su derivada espacial:

$$\frac{\partial J}{\partial x} = -i\psi^* \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + i\psi \frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}$$

Pero la ecuación de Klein-Gordon en 1 dimensión es:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta + m^2 \right) \psi &= 0 \\ \rightarrow \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} &= m^2\psi + \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} \end{aligned}$$

Remplazando en la derivada espacial de la corriente de probabilidad:

$$\begin{aligned} \frac{\partial J}{\partial x} &= -i\psi^* \left(m^2\psi + \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} \right) + i\psi \left(m^2\psi^* + \frac{\partial^2\psi^*}{\partial t^2} \right) = -i \left(\psi^* \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - \psi \frac{\partial^2\psi^*}{\partial t^2} \right) \\ \frac{\partial J}{\partial x} &= -i \left(\psi^* \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - \psi \frac{\partial^2\psi^*}{\partial t^2} \right) \end{aligned}$$

Ahora se hace uso de la ecuación de continuidad en 1 dimensión:

$$\begin{aligned} \frac{\partial\rho}{\partial t} &= -\frac{\partial J}{\partial x} \\ \rightarrow \frac{\partial\rho}{\partial t} &= i \left(\psi^* \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - \psi \frac{\partial^2\psi^*}{\partial t^2} \right) \end{aligned}$$

Así la densidad de probabilidad es:

$$\rho = i \left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial t} \right)$$

Y ya se vio que para una partícula libre, se tiene una solución de la forma:

$$\psi(t, \vec{x}) = e^{-ipx}$$

$$\rightarrow \psi^*(t, \vec{x}) = e^{ipx}$$

$$\text{con: } px = (Et - px)$$

$$\rightarrow \frac{\partial\psi}{\partial t} = -iE\psi$$

$$\begin{aligned} &\rightarrow \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = iE\psi^* \\ \rightarrow \rho &= i \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = i(-iE\psi^*\psi - iE\psi\psi^*) \end{aligned}$$

$$\psi\psi^* = e^{-ipx}e^{ipx} = 1$$

$$\rightarrow \rho = i(-iE - iE) = -2i^2E = 2E$$

Es decir que depende de la energía E, que puede tomar valores positivos y negativos, permitiendo dicha ecuación de Klein-Gordon, soluciones con densidad de probabilidad negativa.

B.5. Perturbaciones para obtener la estructura fina en una primera aproximación

La teoría de perturbaciones en general es un capítulo propio de muchos libros de mecánica cuántica, por tanto, a continuación se tiene en cuenta dichos cálculos en la notación actual, realizando una combinación con los resultados obtenidos en los trabajos originales de los físicos nombrados en la sección 2.4. Para ello, la primera corrección al hamiltoniano viene dada por la introducción de una corrección de primer orden debido a la energía cinética relativista:

$$T = E_{total} - m_0c^2 = \sqrt{pc^2 + (m_0c^2)^2} - m_0c^2 = m_0c^2 \left[\sqrt{\left(\frac{pc}{m_0c}\right)^2 + 1} - 1 \right]$$

Donde teniendo en cuenta el termino : $\sqrt{\left(\frac{pc}{m_0c}\right)^2 + 1}$ el cual se puede expandir como:

$$(1+x)^{1/2} = 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 + \frac{1}{16}x^3 - \dots$$

$$\left[1 + \left(\frac{pc}{m_0c}\right)^2 \right]^{1/2} = \left[1 + \frac{1}{2}\left(\frac{pc}{m_0c}\right)^2 - \frac{1}{8}\left(\frac{pc}{m_0c}\right)^4 + \frac{1}{16}\left(\frac{pc}{m_0c}\right)^6 - \dots \right]$$

Como se busca la corrección en **primera aproximación**, se toman entonces solo los 3 primeros términos, por tanto, la energía cinética queda descrita como:

$$T = m_0c^2 \left[\sqrt{\left(\frac{pc}{m_0c}\right)^2 + 1} - 1 \right] = m_0c^2 \left[1 + \frac{1}{2}\left(\frac{pc}{m_0c}\right)^2 - \frac{1}{8}\left(\frac{pc}{m_0c}\right)^4 - 1 \right] = \frac{p^2}{2m_0} - \frac{p^4}{8m^3c^2}$$

$$T = \frac{p^2}{2m_0} - \frac{p^4}{8m^3c^2}$$

Donde teniendo en cuenta que en mecánica cuántica, p, es un operador:

$$T = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} - \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2}$$

Donde se llama a : $-\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2}$, como H_r por ser la corrección de primer orden al hamiltoniano debido a la relatividad

De acuerdo con la teoría de perturbaciones, que ya se había establecido desde 1924, se establece que, para sistemas no degenerados, la corrección a los valores propios de un hamiltoniano, esto es la energía, viene dada por la siguiente expresión:

$$E_r^1 = \langle H_r \rangle = \langle \psi | H_r | \psi \rangle = -\frac{1}{8m^3c^2} \langle \psi | \hat{p}^4 | \psi \rangle = -\frac{1}{8m^3c^2} \langle \psi | \hat{p}^2 \hat{p}^2 | \psi \rangle = -\frac{1}{8m^3c^2} \langle a | | b \rangle$$

donde: $\langle a | = \langle \psi | \hat{p}^2$; $| b \rangle = \hat{p}^2 | \psi \rangle$

Ahora, la formula anterior se puede aplicar aun cuando el átomo de hidrógeno es claramente un sistema degenerado de acuerdo con la ecuación de Schrödinger; sin embargo, dado que el operador \hat{p}^2 conmuta con el operador \hat{L}^2 el cual tiene funciones propias que no tienen degeneración, entonces al tener funciones propias en común dada su conmutatividad, el método se puede aplicar para esa primera corrección sin ningún problema.

Continuando con el método, entonces hay que hacer actuar a los operadores sobre sus funciones propias, de la ecuación de Schrödinger se tiene entonces:

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} | \psi \rangle + V(\hat{r}) | \psi \rangle = E_n | \psi \rangle \rightarrow \hat{p}^2 | \psi \rangle = 2m [E_n - V(\hat{r})] | \psi \rangle$$

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} | \psi \rangle \right]^\dagger = \langle \psi | \hat{p}^2 = \langle \psi | 2m [E_n - V(\hat{r})]$$

pues: \hat{p} , $V(\hat{r})$ son herméticos.

$$\rightarrow E_r^1 = -\frac{1}{8m^3c^2} \langle \psi | \hat{p}^2 \hat{p}^2 | \psi \rangle = -\frac{1}{8m^3c^2} \langle \psi | 2m [E_n - V(\hat{r})] 2m [E_n - V(\hat{r})] | \psi \rangle = -\frac{1}{2mc^2} \langle \psi | [E_n - V(\hat{r})]^2 | \psi \rangle$$

$$\rightarrow E_r^1 = -\frac{1}{2mc^2} \langle \psi | [E_n - V(\hat{r})]^2 | \psi \rangle = -\frac{1}{2mc^2} \langle [E_n - V(\hat{r})]^2 \rangle = -\frac{1}{2mc^2} \langle E_n^2 - 2E_n V(\hat{r}) + V^2(\hat{r}) \rangle$$

$$\rightarrow E_r^1 = -\frac{1}{2mc^2} [E_n^2 - 2E_n \langle V(\hat{r}) \rangle + \langle V^2(\hat{r}) \rangle]$$

Porque E_n son los valores numéricos de la energía del átomo de Bohr pues son los que solucionan la ecuación de Schrödinger.

Ahora recordando que: $V(\hat{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\hat{r}}$

$$\rightarrow E_r^1 = -\frac{1}{2mc^2} \left[E_n^2 - 2E_n \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left\langle \frac{1}{\hat{r}} \right\rangle + \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left\langle \frac{1}{\hat{r}^2} \right\rangle \right]$$

Así pues, se necesita entonces los valores esperados de: $\frac{1}{\hat{r}}$ y $\frac{1}{\hat{r}^2}$, los cuales se pueden calcular por distintos métodos, y ya desde 1926 como se puede observar en el artículo de Heisenberg (Heisenberg & Jordan, Application of quantum mechanics to the problem of the anomalous Zeeman effect, 1926) están dados por:

$$\left\langle \frac{1}{\hat{r}} \right\rangle = \frac{e^2 m}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \left(\frac{e^2 m}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \right)^2 \frac{1}{(l + \frac{1}{2})n^3}$$

$$\rightarrow E_r^1 = -\frac{1}{2mc^2} \left[E_n^2 - 2E_n \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{n^2} + \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^4 \frac{m^2}{\hbar^4} \frac{1}{(l + \frac{1}{2})n^3} \right]$$

$$\text{Recordando la energía de Bohr : } E_n = \frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2}$$

$$\rightarrow E_r^1 = -\frac{1}{2mc^2} \left[E_n^2 - 4E_n^2 + E_n^2 \frac{4n}{(l + \frac{1}{2})} \right] = -\frac{E_n^2}{2mc^2} \left[\frac{4n}{(l + \frac{1}{2})} - 3 \right] = -\frac{2E_n^2}{mc^2} \left[\frac{n}{(l + \frac{1}{2})} - \frac{3}{4} \right]$$

Y por lo tanto la corrección a la energía, debido a los efectos relativistas de primer orden es:

$$\rightarrow E_r^1 = -\frac{2E_n^2}{mc^2} \left[\frac{n}{(l + \frac{1}{2})} - \frac{3}{4} \right]$$

Corrección debido al acoplamiento Espín-Órbita

Recordando que Thomas encontró en 1926 que para explicar el acoplamiento espín-órbita, era necesario aplicar ciertas correcciones relativistas y de acuerdo con la expresión (2,6) teniendo en cuenta la relatividad, la energía potencial del electrón que se agrega al hamiltoniano debido a ese acoplamiento espín-órbita es:

$$U = H = \frac{(g-1)}{2m_e^2 c^2} (\vec{S} \cdot \vec{L}) \frac{1}{r} \frac{dV}{dr}$$

Donde V denota a la energía potencial del sistema ligado:

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \rightarrow \frac{dV}{dr} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

Entonces, la corrección al hamiltoniano debido al acoplamiento espín órbita es:

$$H_{E-o} = \frac{(g-1)}{2m_e^2 c^2} (\vec{S} \cdot \vec{L}) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^3}$$

$g = 2$ según Thomas

$$\rightarrow H_{E-o} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2 r^3} (\vec{S} \cdot \vec{L})$$

Dado que el método más sencillo para aplicar la corrección a la energía es el método de perturbaciones de primer orden, se hace necesario entonces expresar los operadores $\vec{S} \cdot \vec{L}$ en términos de operadores que tengan valores propios conocidos, esto se puede hacer teniendo en cuenta que:

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S} \rightarrow \hat{J}^2 = (\hat{L} + \hat{S}) \cdot (\hat{L} + \hat{S}) = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L} \cdot \hat{S}$$

$$\rightarrow \hat{L} \cdot \hat{S} = \frac{1}{2} [\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2]$$

Por tanto, el hamiltoniano de corrección queda descrito como:

$$H_{E-O} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2 \hat{r}^3} \cdot \frac{1}{2} [\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2]$$

Por tanto, la corrección a la energía viene dada por:

$$E_{E-O}^1 = \langle H_{E-O} \rangle = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2} \cdot \frac{1}{2} \left\langle \frac{1}{\hat{r}^3} \right\rangle \langle \hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2 \rangle$$

Donde gracias a la elección anterior, se conocen entonces los valores propios de cada uno de esos tres operadores, y por tanto calcular sus valores esperados es sencillo, pues:

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 |\psi\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |\psi\rangle \\ \hat{L}^2 |\psi\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |\psi\rangle \\ \hat{S}^2 |\psi\rangle &= \hbar^2 s(s+1) |\psi\rangle \end{aligned}$$

$$\rightarrow \langle \hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2 \rangle = \langle \hat{J}^2 \rangle - \langle \hat{L}^2 \rangle - \langle \hat{S}^2 \rangle = \hbar^2 [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$$

Ahora, teniendo en cuenta que el valor de espín siempre es de $\pm \frac{1}{2}$; entonces:

$$\langle \hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2 \rangle = \hbar^2 \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \right] = \hbar^2 \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right]$$

Y por otro lado el valor esperado de $\frac{1}{\hat{r}^3}$ que como se describió previamente se calculó ya desde 1926, y se puede hallar por distintos métodos, y viene dado por:

$$\left\langle \frac{1}{\hat{r}^3} \right\rangle = \frac{1}{l(l + \frac{1}{2})(l + 1)n^3 a_0^3}$$

$$\begin{aligned} \rightarrow E_{E-O}^1 &= \langle H_{E-O} \rangle = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2} \cdot \frac{1}{2} \langle \hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2 \rangle \left\langle \frac{1}{\hat{r}^3} \right\rangle \\ &= \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m_e^2 c^2} \cdot \frac{\hbar^2}{2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \cdot \frac{1}{l(l + \frac{1}{2})(l + 1)n^3 a_0^3} \end{aligned}$$

$$\text{Remplazando } a_0 = \frac{\hbar}{m_e c \alpha}; \alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c}$$

$$E_{E-O}^1 = \langle H_{E-O} \rangle = \frac{1}{2m_e^2} \cdot \frac{\hbar^2}{2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \cdot \frac{c^2 m_e^3 \alpha^4}{l(l + \frac{1}{2})(l + 1)n^3 \hbar^2}$$

$$\text{Teniendo en cuenta que: } E_n = \frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2} = \frac{m c^2 \alpha^2}{2} \frac{1}{n^2} \rightarrow E_n^2 = \frac{m^2 c^4 \alpha^4}{4n^4}$$

$$E_{E-O}^1 = \frac{n}{m_e c^2} \cdot \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \cdot \frac{E_n^2}{l(l + \frac{1}{2})(l + 1)}$$

La energía adicional debido al acoplamiento espín-órbita es;

$$E_{E-o}^1 = \frac{E_n^2}{m_e c^2} \left[n \frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l(l+\frac{1}{2})(l+1)} \right]$$

Finalmente, entonces para hallar la corrección de la estructura fina, se suman las dos correcciones a la energía mostradas anteriormente.

Corrección de primer orden a la estructura fina

La suma de las dos perturbaciones a la energía de primer orden es:

$$E_r^1 + E_{E-o}^1 = -\frac{2E_n^2}{m_e c^2} \left[\frac{n}{l+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right] + \frac{E_n^2}{m_e c^2} \left[n \frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l(l+\frac{1}{2})(l+1)} \right]$$

Para ello se tiene en cuenta que:

$$j = l + s = l \pm \frac{1}{2}$$

pues $s = \pm \frac{\hbar}{2}$ pero el \hbar ya se tomó en cuenta dentro de la ecuación, y para el cálculo tomamos $s = \frac{1}{2}$

$$\begin{aligned} \rightarrow j &= l + \frac{1}{2} \\ \rightarrow l &= j - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

$$E_r^1 + E_{E-o}^1 = -\frac{2E_n^2}{m_e c^2} \left[\frac{n}{j} - \frac{3}{4} \right] + \frac{E_n^2}{m_e c^2} \left[n \frac{\left(l + \frac{1}{2}\right)\left(l + \frac{3}{2}\right) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l\left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)} \right]$$

$$E_r^1 + E_{E-o}^1 = -\frac{2E_n^2}{m_e c^2} \left[\frac{n}{j} - \frac{3}{4} \right] + \frac{E_n^2}{m_e c^2} \left[n \frac{\left(l^2 + \frac{3}{2}l + \frac{l}{2} + \frac{3}{4}\right) - l^2 - l - \frac{3}{4}}{l\left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)} \right]$$

$$E_r^1 + E_{E-o}^1 = -\frac{2E_n^2}{m_e c^2} \left[\frac{n}{j} - \frac{3}{4} \right] + \frac{E_n^2}{m_e c^2} \left[n \frac{l}{l\left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)} \right]$$

$$E_r^1 + E_{E-o}^1 = -\frac{2E_n^2}{m_e c^2} \left[\frac{n}{j} - \frac{3}{4} \right] + \frac{E_n^2}{m_e c^2} \left[n \frac{1}{j\left(j - \frac{1}{2} + 1\right)} \right]$$

$$E_r^1 + E_{E-o}^1 = -\frac{2E_n^2}{m_e c^2} \left[\frac{n}{j} - \frac{3}{4} \right] + \frac{E_n^2}{m_e c^2} \left[n \frac{1}{j^2 + \frac{j}{2}} \right]$$

$$E_r^1 + E_{E-o}^1 = -\frac{2E_n^2}{m_e c^2} \left[\frac{n}{j} - \frac{3}{4} \right] + \frac{E_n^2}{m_e c^2} \left[n \frac{1}{j^2 + \frac{j}{2}} \right]$$

$$\begin{aligned} E_r^1 + E_{E-o}^1 &= \frac{-E_n^2}{m_e c^2} \left[\frac{2n}{j} - \frac{6}{4} - \frac{n}{j^2 + \frac{j}{2}} \right] = \frac{-E_n^2}{m_e c^2} \left[\frac{2n}{j} - \frac{6}{4} - \frac{n}{j^2 + \frac{j}{2}} \right] \\ &= \frac{-E_n^2}{m_e c^2} \left[\frac{2nj^2 + nj - nj}{j \cdot j^2 + \frac{j}{2}} - \frac{6}{4} \right] \end{aligned}$$

$$E_r^1 + E_{E-0}^1 = \frac{-E_n^2}{m_e c^2} \left[\frac{2n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{6}{4} \right] = \frac{-2E_n^2}{m_e c^2} \left[\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right]$$

Finalmente, entonces la estructura fina en primera aproximación viene dada por la suma de la energía sin perturbación, más las dos perturbaciones encontradas:

$$E_{ef} = E_{bohr} + E_r^1 + E_{E-0}^1 = -E_n - \frac{2E_n^2}{m_e c^2} \left[\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right]$$

Que para dejarla análoga a la expresión de Sommerfeld; $E_n = \frac{m c^2 \alpha^2}{2} \frac{1}{n^2}$

$$E_{ef} = -E_n - \frac{2E_n E_n}{m_e c^2} \left[\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right] = -E_n - \frac{2E_n m c^2 \alpha^2}{m_e c^2 2n^2} \left[\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right] = -E_n - \frac{E_n \alpha^2}{n^2} \left[\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right]$$

$$E_{ef} = - \left[E_n + \frac{E_n \alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right]$$

C.1. Forma de expresar la ecuación de Dirac a partir de las matrices γ^j

Teniendo en cuenta la ecuación de Dirac: $-i\hbar c \left(\alpha_1 \frac{\partial}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial z} \right) \psi + \alpha_4 m c^2 \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$
Primero se iguala a cero y se divide sobre c, obteniendo:

$$i\hbar \frac{1}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t} + i\hbar \left(\alpha_1 \frac{\partial \psi}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial \psi}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) - \alpha_4 m c \psi = 0$$

Ahora se multiplica toda la ecuación por la matriz ρ_3 , y se tiene en cuenta la definición de las matrices γ^j dadas en (3,19): $\boldsymbol{\gamma}^j = \rho_3 \cdot \alpha_j$; $\boldsymbol{\gamma}^0 = \rho_3 = \alpha_4$, y las condiciones: $\{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij}$. Entonces se tiene que:

$$\rho_3 i\hbar \frac{1}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t} + i\hbar \left(\rho_3 \alpha_1 \frac{\partial \psi}{\partial x} + \rho_3 \alpha_2 \frac{\partial \psi}{\partial y} + \rho_3 \alpha_3 \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) - \rho_3 \alpha_4 m c \psi = 0$$

$$\rightarrow i\hbar \gamma^0 \frac{1}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t} + i\hbar \left(\gamma^1 \frac{\partial \psi}{\partial x} + \gamma^2 \frac{\partial \psi}{\partial y} + \gamma^3 \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) - I m c \psi = 0$$

Recordando que como es una ecuación matricial $I m = m c$

Ahora se hace uso del operador relativista: $\partial_0 = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}$, $\partial_1 = \frac{\partial}{\partial x}$, $\partial_2 = \frac{\partial}{\partial y}$, $\partial_3 = \frac{\partial}{\partial z}$. Obteniendo:

$$i\hbar \gamma^0 \partial_0 + i\hbar (\gamma^1 \partial_1 \psi + \gamma^2 \partial_2 \psi + \gamma^3 \partial_3 \psi) - m c \psi = 0$$

$$\rightarrow i\hbar (\gamma^0 \partial_0 + \gamma^1 \partial_1 + \gamma^2 \partial_2 + \gamma^3 \partial_3) \psi - m c \psi = 0$$

Y teniendo en cuenta el criterio de sumatoria de Einstein, la ecuación de Dirac se escribe como:

$$(i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu - m c) \psi = 0$$

Que también, se puede escribir haciendo uso de la notación de slash de Feynman, donde se define el siguiente operador: $\not{\partial} = \gamma^\mu \partial_\mu$. Y por lo tanto la ecuación también se puede expresar como:

$$(i\hbar\not{\partial} - mc)\psi = 0$$

O en unidades naturales haciendo: $\hbar = c = 1$

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

Así mismo existen distintas formas de representar la ecuación de acuerdo con las matrices que se usen y que por supuesto cumplan con las condiciones que Dirac impuso. Donde todas las representaciones, proporcionan soluciones equivalentes.

C.2. Solución de la ecuación de Dirac en el vacío: partícula con $\vec{p}=0$

Dada la ecuación de Dirac en el vacío:

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

Para solucionarla, se empieza corriendo los índices de 0 a 3:

$$i\hbar(\gamma^0 \partial_0 + \gamma^1 \partial_1 + \gamma^2 \partial_2 + \gamma^3 \partial_3)\psi - mc\psi = 0$$

Donde el caso más sencillo es para una con $\vec{p}=0$, esto es: $\partial_1\psi = \partial_2\psi = \partial_3\psi = 0$. Ya que son los tres operadores asociados al momento lineal de la partícula. Se obtiene entonces que:

$$i\hbar\gamma^0 \partial_0\psi - mc\psi = 0$$

Dicha ecuación se suele solucionar por distintos métodos, donde uno de los métodos más intuitivos es verla como una ecuación de valores propios, pues reemplazando a: $\partial_0 = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}$, se tiene que:

$$i\hbar\gamma^0 \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \psi - mc\psi = 0 \rightarrow \gamma^0 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = mc^2 \psi$$

Y recordando que el operador de energía se define como: $E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$; y recordando que γ^0 es una matriz, entonces se puede multiplicar a ambos lados por $(\gamma^0)^{-1}$, obteniendo así la siguiente ecuación:

$$(\gamma^0)^{-1} mc^2 \psi = E\psi$$

Esta expresión es una ecuación de valores propios donde E son los valores propios de la energía, asociados a la matriz $(\gamma^0)^{-1} mc^2$; y ψ son los estados propios asociados a cada valor de la energía. De tal forma que al resolverse de forma explícita, recordando la definición de la matriz γ^0 :

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \rightarrow (\gamma^0)^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Y por tanto la ecuación en su forma matricial es:

$$\begin{pmatrix} mc^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & mc^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -mc^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \\ \psi_c \\ \psi_d \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \\ \psi_c \\ \psi_d \end{pmatrix}$$

Donde se observa que esta vez, los autoestados son de cuatro componentes, y son conocidos como **los espinores de Dirac**. Así pues, los valores y estados propios correspondientes a dicha matriz son:

$$E_1 = mc^2 \text{ posee dos estados propios: } \psi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \wedge \psi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$E_2 = -mc^2 \text{ posee dos estados propios: } \psi_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \wedge \psi_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Es decir, la solución a la ecuación da como resultado, dos posibles valores de energía cada uno con dos autoestados propios, esto en un principio inquieto a Dirac, y como se puede leer en el análisis histórico, físicos como Heisenberg, lo criticaron por ello. Sin embargo, la interpretación física a la que llegó Dirac posteriormente, después de un arduo trabajo es la siguiente:

- La solución a la ecuación de Dirac suponiendo que la partícula en reposo es un electrón, da como resultado dos soluciones. La solución correspondiente a $E_1 = mc^2$ describe al electrón una energía en reposo de mc^2 , el cual puede estar en dos estados correspondientes ψ_1 y ψ_2 , esos dos estados posibles en los que puede estar el electrón son su espín, lo cual se demuestra a continuación.
- La solución correspondiente a $E_2 = -mc^2$ se puede interpretar como una antipartícula del electrón, la cual tiene la misma energía en reposo que el electrón, pero tiene carga eléctrica opuesta al electrón, es decir, carga positiva. A dicha partícula es a lo que hoy en día se conoce como positrón. Y también tiene dos estados correspondientes ψ_3 y ψ_4 asociados a su espín. Aunque el análisis a profundidad de como Dirac interpretó y dedujo la antimateria gracias a esto, requiere de un trabajo propio para ello.

Teniendo, en cuenta lo anterior, y aunque Dirac demostró la existencia del espín, a partir de su ecuación en un campo electromagnético. Los autoestados $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$ se interpretaron como el espín de la partícula, ya que estos son autoestados de la matriz del operador de espín S_z en su forma cuatridimensional:

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Pues cumple que:

$$S_z \psi_1 = \frac{\hbar}{2} \psi_1$$

$$S_z \psi_2 = -\frac{\hbar}{2} \psi_2$$

$$S_z \psi_3 = \frac{\hbar}{2} \psi_3$$

$$S_z \psi_4 = -\frac{\hbar}{2} \psi_4$$

Es importante, describir, que la solución anterior, es una solución que se obtiene independiente del tiempo, es por ello, que para describir la solución completa de la ecuación teniendo en cuenta la evolución temporal de ψ , se toma la siguiente ecuación sin reemplazar por el operador de energía:

$$\gamma^0 i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = mc^2 \psi$$

De forma que al reemplazar γ^0 , se obtiene que:

$$\begin{pmatrix} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_a \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_b \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_c \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_d \end{pmatrix} = mc^2 \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \\ \psi_c \\ \psi_d \end{pmatrix}$$

Es decir, se obtienen cuatro ecuaciones diferenciales desacopladas de primer orden, donde si se reemplaza por el operador de energía se tienen que cumplir las siguientes condiciones:

$$\begin{aligned} [E - mc^2]\psi_a &= 0 \\ [E - mc^2]\psi_b &= 0 \\ [E + mc^2]\psi_c &= 0 \\ [E + mc^2]\psi_d &= 0 \end{aligned}$$

Es decir que si $E = mc^2$, ψ_c y ψ_d tienen que ser cero; y si $E = -mc^2$, ψ_a y ψ_b tienen que ser cero, lo cual es consistente con la solución hallada previamente. Así pues, todas las ecuaciones diferenciales correspondientes a cada componente del espinor de Dirac son idénticas para ψ_a y ψ_b e idénticas para ψ_c y ψ_d .

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_a &= mc^2 \psi_a \rightarrow \psi_a = \psi_a(0) e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t} \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_c &= mc^2 \psi_c \rightarrow \psi_c = \psi_c(0) e^{\frac{imc^2}{\hbar}t} \end{aligned}$$

De forma que las soluciones más generales, que cumplen con las condiciones de la energía expuestas previamente son:

$$\psi^{(1)} = \psi_a(0) e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \psi^{(2)} = \psi_b(0) e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \psi^{(3)} = \psi_c(0) e^{\frac{imc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \psi^{(4)} = \psi_d(0) e^{\frac{imc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

C.3. Invarianza de la ecuación de Dirac bajo transformaciones de Lorentz

Para realizar esta demostración Dirac parte del hecho de que, si su ecuación es la misma para dos sistemas de referencia relacionados bajo una transformación de Lorentz, entonces se cumple que:

$$\begin{aligned} (i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu - mc)\psi &= 0 \rightarrow \text{Para } Z \\ (i\hbar \gamma^\mu \partial'_\mu - mc)\psi' &= 0 \rightarrow \text{Para } Z' \end{aligned}$$

Esto se hace ya que él no conocía como transformaban sus espinores ψ , por lo cual no se podía únicamente relacionar ambas ecuaciones bajo una transformación y verificar que efectivamente era la misma. Así pues, lo que si se sabía era que sus matrices γ^μ están formadas por valores constantes, y por lo tanto para dos observadores Z y Z' estas no cambian. Por otro lado, el operador ∂_μ transforma de la siguiente manera:

Dada la transformación de un cuadrivector $x^\mu \rightarrow \Lambda^\mu_\nu x^\nu$ entonces:

$$\partial'_\mu = \frac{\partial}{\partial x'^\mu} = \frac{\partial}{\partial \Lambda^\mu_\nu x^\nu} \rightarrow \partial_\nu = \Lambda^\mu_\nu \partial'_\mu \rightarrow \partial_\mu = \Lambda^\nu_\mu \partial'_\nu$$

Ahora bien, se propone que cual sea la transformación de Lorentz dada por la matriz Λ , el espinor transforme a partir de una matriz de transformación $S(\Lambda)$:

$$\begin{aligned} \psi' &\rightarrow S(\Lambda)\psi \\ \text{Por lo tanto: } \psi &\rightarrow S(\Lambda)^{-1}\psi' \end{aligned}$$

Ahora se busca que relación debe cumplir la matriz $S(\Lambda)$ que transforma el espinor; de forma que efectivamente al transformar toda la ecuación, esta sea invariante bajo dos observadores z y z' . Para ello se reemplaza en la ecuación para el sistema no primado las dos relaciones:

$$\begin{aligned}\partial_\mu &= \Lambda_\mu^\nu \partial'_\nu \\ \psi &\rightarrow S(\Lambda)^{-1} \psi'\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)\psi &= 0 \rightarrow (i\hbar\gamma^\mu\Lambda_\mu^\nu\partial'_\nu - mc)S(\Lambda)^{-1}\psi' = 0 \\ &\rightarrow (i\hbar\gamma^\mu\Lambda_\mu^\nu\partial'_\nu S(\Lambda)^{-1} - mcS(\Lambda)^{-1})\psi' = 0\end{aligned}$$

Donde se propone que la matriz $S(\Lambda)$ no cambie en el espacio-tiempo:

$$\rightarrow (i\hbar\gamma^\mu\Lambda_\mu^\nu S(\Lambda)^{-1}\partial'_\nu - mcS(\Lambda)^{-1})\psi' = 0$$

Dado que Λ_ν^μ son valores, se puede correr sin ningún problema:

$$\rightarrow (i\hbar\Lambda_\mu^\nu\gamma^\mu S(\Lambda)^{-1}\partial'_\nu - mcS(\Lambda)^{-1})\psi' = 0$$

Multiplicando a ambos lados por $S(\Lambda)$:

$$(i\hbar\Lambda_\mu^\nu S(\Lambda)\gamma^\mu S(\Lambda)^{-1}\partial'_\nu - mcS(\Lambda)S(\Lambda)^{-1})\psi' = 0$$

$$\begin{aligned}\text{Por supuesto: } S(\Lambda)S(\Lambda)^{-1} &= I \\ \rightarrow (i\hbar\Lambda_\mu^\nu S(\Lambda)\gamma^\mu S(\Lambda)^{-1}\partial'_\nu - mc)\psi' &= 0\end{aligned}$$

Y para poder comparar esta ecuación con la del sistema z' se realiza el cambio de:

$$\begin{aligned}\nu &\rightarrow \mu \\ \mu &\rightarrow \nu \\ \rightarrow (i\hbar\Lambda_\nu^\mu S(\Lambda)\gamma^\nu S(\Lambda)^{-1}\partial'_\mu - mc)\psi' &= 0\end{aligned}$$

Comparándola con la ecuación del sistema z' : $(i\hbar\gamma^\mu\partial'_\mu - mc)\psi' = 0$, se tiene que para que sean iguales:

$$\Lambda_\nu^\mu S(\Lambda)\gamma^\nu S(\Lambda)^{-1} = \gamma^\mu$$

Donde esa es la relación que debe cumplir $S(\Lambda)$, que normalmente se puede reescribir como:

Multiplicando por izquierda a ambos lados por $S(\Lambda)^{-1}$:

$$\begin{aligned}\Lambda_\nu^\mu S(\Lambda)^{-1} S(\Lambda)\gamma^\nu S(\Lambda)^{-1} &= S(\Lambda)^{-1}\gamma^\mu \\ \rightarrow \Lambda_\nu^\mu \gamma^\nu S(\Lambda)^{-1} &= S(\Lambda)^{-1}\gamma^\mu\end{aligned}$$

Multiplicando por derecha a ambos lados por $S(\Lambda)$:

$$\Lambda_\nu^\mu \gamma^\nu S(\Lambda)^{-1} S(\Lambda) = S(\Lambda)^{-1}\gamma^\mu S(\Lambda)$$

$$\Lambda_\nu^\mu \gamma^\nu = S(\Lambda)^{-1}\gamma^\mu S(\Lambda)$$

Donde es importante describir nuevamente el significado de dicha relación. Esto es, que para una transformación de Lorentz Λ dada; la ecuación de Dirac será invariante siempre y cuando exista una matriz $S(\Lambda)$ que transforme a los espinores de Dirac, y que dicha matriz satisfaga la relación:

$$\Lambda_\nu^\mu \gamma^\nu = S(\Lambda)^{-1}\gamma^\mu S(\Lambda)$$

Por ejemplo: Si hay un sistema de referencia z en reposo con respecto a otro sistema de referencia z' que se esta moviendo a velocidad constante en dirección del eje z , ambos sistemas se relacionan por la matriz de transformación Λ_ν^μ . Y los dos sistemas de referencia “ven” la misma ecuación de Dirac, ya que existe una matriz de transformación $S(\Lambda)$ que transforma el espinor del sistema primado como: $\psi' \rightarrow S(\Lambda)\psi$. Donde para la transformación descrita dicha matriz es:

$$S(\Lambda) = \frac{1}{\sqrt{m}} \begin{pmatrix} \sqrt{E - |p|} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{E + |p|} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{E + |p|} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{E - |p|} \end{pmatrix}$$

siendo E y p la energía y momento del observador en movimiento en dirección del eje z.

Donde la matriz $S(\Lambda)$ se construye a partir de la transformación de Lorentz dada. Dados los alcances del presente trabajo, no se presenta la demostración detallada de la obtención de dicha matriz; no obstante, se proporciona la referencia pertinente para explorar con mayor profundidad este aspecto: (Lancaster & Blundell, 2014).

C.4. Densidad de probabilidad de la ecuación de Dirac

Dada la ecuación de Dirac: $-i\hbar c \left(\alpha_i \frac{\partial}{\partial x^i} \right) \psi + \alpha_4 mc^2 \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$ con $i=1,2,3$. Lo que se realiza es encontrar una expresión que permita deducir la forma que toma la densidad de probabilidad, a partir de una expresión ya conocida, tal como la ecuación de continuidad que está relacionada con la conservación de la probabilidad.

Para lograr lo anteriormente descrito, se inicia multiplicando la ecuación de Dirac por el espinor conjugado por izquierda, esto es:

$$-i\hbar c \psi^\dagger \alpha_i \frac{\partial \psi}{\partial x^i} + mc^2 \psi^\dagger \alpha_4 \psi = i\hbar \psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

Luego se toma el conjugado de la ecuación inicial teniendo en cuenta que es una ecuación matricial:

$$\left(-i\hbar c \left(\alpha_i \frac{\partial}{\partial x^i} \right) \psi + \alpha_4 mc^2 \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^\dagger \rightarrow i\hbar c \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial x^i} \alpha_i + \psi^\dagger \alpha_4 mc^2 = -i\hbar \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t}$$

Se multiplica la ecuación conjugada por derecha por ψ :

$$i\hbar c \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial x^i} \alpha_i \psi + mc^2 \psi^\dagger \alpha_4 \psi = -i\hbar \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} \psi$$

Se restan las dos ecuaciones descritas en negrilla:

$$\begin{aligned} -i\hbar c \psi^\dagger \alpha_i \frac{\partial \psi}{\partial x^i} - i\hbar c \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial x^i} \alpha_i \psi + mc^2 \psi^\dagger \alpha_4 \psi - mc^2 \psi^\dagger \alpha_4 \psi &= i\hbar \psi^\dagger \frac{\partial \psi}{\partial t} + i\hbar \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} \psi \\ -i\hbar c \left[\frac{\partial}{\partial x^i} (\psi^\dagger \alpha_i \psi) \right] &= i\hbar \frac{\partial (\psi^\dagger \psi)}{\partial t} \end{aligned}$$

Se puede definir a $\frac{\partial}{\partial x^i}$ como un gradiente:

$$\begin{aligned} -i\hbar c \nabla (\psi^\dagger \vec{\alpha} \psi) &= i\hbar \frac{\partial (\psi^\dagger \psi)}{\partial t} \\ -\nabla (c \psi^\dagger \vec{\alpha} \psi) &= \frac{\partial (\psi^\dagger \psi)}{\partial t} \\ \rightarrow \frac{\partial (\psi^\dagger \psi)}{\partial t} &= -\nabla (c \psi^\dagger \vec{\alpha} \psi) \end{aligned}$$

Recordando que la ecuación de continuidad es: $\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla J$, entonces por comparación se ve que para la ecuación de Dirac:

$$\begin{aligned} J &\equiv c \psi^\dagger \vec{\alpha} \psi \\ \rho &\equiv \psi^\dagger \psi = |\psi|^2 \end{aligned}$$

Donde siempre: $\rho \geq 0$.

C.5. Ecuación de Dirac para un campo electromagnético. Aparición del momento magnético y espín del electrón

Para tener en cuenta los efectos de un campo electromagnético dentro del hamiltoniano de la ecuación de Dirac, se añade dos términos extras; uno asociado a la interacción eléctrica y otro asociado a la interacción magnética. El más sencillo, que ya se conocía, y tal como se hace con la ecuación de Schrödinger, es el asociado a la energía potencial eléctrica que tiene el electrón debido a la interacción con el campo eléctrico externo: $U = q\phi$ donde ϕ es el potencial eléctrico y q la carga de la partícula sobre la cual se aplica la ecuación de Dirac.

El siguiente término para adicionar, es el debido a la interacción magnética, y para ello se hace uso de la mecánica lagrangiana. El lagrangiano de una partícula cargada inmersa en un campo electromagnético viene dado por:

$$L = \frac{m\vec{v}^2}{2} - q\phi - q\vec{v} \cdot \vec{A}$$

Donde \vec{A} es el vector potencial magnético. Este lagrangiano se deduce de la mecánica de Lagrange y parte de la fuerza de Lorentz. Ahora bien, de dicho lagrangiano se deduce un término conocido como el momentum canónico, que se define como:

$$\vec{p}_c = \frac{\partial L}{\partial \vec{v}} = m\vec{v} - q\vec{A} = \vec{p} - q\vec{A}$$

Así para cualquier hamiltoniano, clásico y relativista, el término que involucre el momentum, debe ser reemplazado por dicho momento canónico \vec{p}_c para tener en cuenta las interacciones magnéticas.

Por lo tanto, recordando que el hamiltoniano (ecuación) de Dirac en el vacío es:

$$\begin{aligned} c(\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3 + \alpha_4 mc)\psi &= E\psi \\ (c\alpha_i p_i + \alpha_4 mc^2)\psi &= E\psi \\ \rightarrow (c\vec{\alpha}\vec{p} + \alpha_4 mc^2)\psi &= E\psi \end{aligned}$$

De acuerdo con lo anterior, para un campo electromagnético, a dicha ecuación se le suma el término de energía potencial, y el momentum se cambia por el momentum canónico:

$$(c\vec{\alpha}\vec{p} + \alpha_4 mc^2)\psi = E\psi \rightarrow (c\vec{\alpha}(\vec{p} - q\vec{A}) + q\phi + \alpha_4 mc^2)\psi = E\psi$$

Que es la ecuación de Dirac para un campo electromagnético.

Aparición del momento magnético del electrón y el Espín.

Dirac se propuso demostrar como su ecuación era distinta a la de Klein Gordon, para ver qué resultados obtenía con su nueva ecuación. Para ello se inicia igualando a cero la ecuación de Dirac, y se sigue el siguiente proceso teniendo como base los cálculos mostrados por el doctor en física Rajendra Prasad (Prasad, 2023):

$$[E - q\phi - c\vec{\alpha}(\vec{p} - q\vec{A}) - \alpha_4 mc^2]\psi = 0$$

Ahora se multiplica por derecha la ecuación por la expresión: $[E - q\phi + c\vec{\alpha}(\vec{p} - q\vec{A}) + \alpha_4 mc^2]$ teniendo en cuenta que es una ecuación matricial, por lo cual hay que tener cuidado con el orden de los términos así:

$$\left[[E - q\phi + c\vec{\alpha}(\vec{p} - q\vec{A}) + \alpha_4 mc^2] [E - q\phi - c\vec{\alpha}(\vec{p} - q\vec{A}) - \alpha_4 mc^2] \right] \psi = 0$$

$$\left[(E - q\phi)^2 - c^2 \vec{\alpha}^2 (\vec{p} - q\vec{A})^2 - \alpha_4^2 m^2 c^4 - c(E - q\phi) \vec{\alpha} (\vec{p} - q\vec{A}) - (E - q\phi) \alpha_4 m c^2 + c \vec{\alpha} (\vec{p} - q\vec{A}) (E - q\phi) \right. \\ \left. - c \vec{\alpha} (\vec{p} - q\vec{A}) \alpha_4 m c^2 + \alpha_4 m c^2 (E - q\phi) - \alpha_4 m c^2 c \vec{\alpha} (\vec{p} - q\vec{A}) \right] \psi = 0$$

Ahora los siguientes términos se hacen igual a cero:

$$\begin{aligned} * - (E - q\phi) \alpha_4 m c^2 + \alpha_4 m c^2 (E - q\phi) &= -m c^2 \alpha_4 (E - q\phi) + m c^2 \alpha_4 (E - q\phi) = 0 \\ * - c \vec{\alpha} (\vec{p} - q\vec{A}) \alpha_4 m c^2 - \alpha_4 m c^2 c \vec{\alpha} (\vec{p} - q\vec{A}) &= -m c^3 \vec{\alpha} \alpha_4 (\vec{p} - q\vec{A}) - m c^3 \alpha_4 \vec{\alpha} (\vec{p} - q\vec{A}) \\ - m c^3 \vec{\alpha} \alpha_4 (\vec{p} - q\vec{A}) + m c^3 \vec{\alpha} \alpha_4 (\vec{p} - q\vec{A}) &= 0 \end{aligned}$$

Por tanto, la ecuación queda como:

$$[(E - q\phi)^2 - c^2 \vec{\alpha}^2 (\vec{p} - q\vec{A})^2 - m^2 c^4 - c(E - q\phi) \vec{\alpha} (\vec{p} - q\vec{A}) + c \vec{\alpha} (\vec{p} - q\vec{A}) (E - q\phi)] \psi = 0$$

La expresión $\vec{\alpha}^2 (\vec{p} - q\vec{A})^2$ se reescribe usando la siguiente identidad de pauli: $(\vec{\alpha} \cdot \vec{B})(\vec{\alpha} \cdot \vec{C}) = (\vec{B} \cdot \vec{C}) + i\vec{\sigma}(\vec{B} \times \vec{C})$.

$$\begin{aligned} \text{Si } \vec{B} = \vec{C} = (\vec{p} - q\vec{A}) \\ \vec{\alpha}^2 (\vec{p} - q\vec{A})^2 = [\vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - q\vec{A})][\vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - q\vec{A})] = (\vec{p} - q\vec{A})^2 + i\vec{\sigma}[(\vec{p} - q\vec{A}) \times (\vec{p} - q\vec{A})] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{identidad: } \vec{u} \times (\vec{v} + \vec{w}) &= \vec{u} \times \vec{v} + \vec{u} \times \vec{w} \\ (\vec{p} - q\vec{A}) \times (\vec{p} - q\vec{A}) &= (\vec{p} - q\vec{A}) \times \vec{p} - (\vec{p} - q\vec{A}) \times q\vec{A} = \vec{p} \times \vec{p} - q\vec{A} \times \vec{p} - \vec{p} \times q\vec{A} + q\vec{A} \times q\vec{A} = -q(\vec{A} \times \vec{p} + \vec{p} \times \vec{A}) \\ [(\vec{p} - q\vec{A}) \times (\vec{p} - q\vec{A})] &= -q(\vec{A} \times \vec{p} + \vec{p} \times \vec{A}) \\ (\vec{A} \times \vec{p} + \vec{p} \times \vec{A})\psi &= \vec{A} \times -i\hbar\nabla\psi - i\hbar\nabla \times \vec{A}\psi \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{propiedad: } \nabla \times \vec{A}\psi &= \psi\nabla \times \vec{A} + \nabla\psi \times \vec{A} \\ (\vec{A} \times \vec{p} + \vec{p} \times \vec{A})\psi &= \vec{A} \times -i\hbar\nabla\psi - i\hbar\nabla \times \vec{A}\psi = -i\hbar(\vec{A} \times \nabla\psi) - i\hbar(\nabla\psi \times \vec{A}) - i\hbar\psi\nabla \times \vec{A} \\ &= -i\hbar(\vec{A} \times \nabla\psi) + i\hbar(\vec{A} \times \nabla\psi) - i\hbar\psi\nabla \times \vec{A} = -i\hbar\psi\nabla \times \vec{A} = -i\hbar\nabla \times \vec{A}\psi \rightarrow (\vec{A} \times \vec{p} + \vec{p} \times \vec{A}) = -i\hbar\nabla \times \vec{A} \\ [(\vec{p} - q\vec{A}) \times (\vec{p} - q\vec{A})] &= -q(\vec{A} \times \vec{p} + \vec{p} \times \vec{A}) = -q(-i\hbar\nabla \times \vec{A}) = i\hbar q\nabla \times \vec{A} \end{aligned}$$

Donde de las ecuaciones de Maxwell: $\nabla \times \vec{A} = \vec{B}$

$$\rightarrow [(\vec{p} - q\vec{A}) \times (\vec{p} - q\vec{A})] = i\hbar q\vec{B}$$

Entonces:

$$\begin{aligned} \vec{\alpha}^2 (\vec{p} - q\vec{A})^2 &= (\vec{p} - q\vec{A})^2 + i\vec{\sigma}[(\vec{p} - q\vec{A}) \times (\vec{p} - q\vec{A})] \\ \vec{\alpha}^2 (\vec{p} - q\vec{A})^2 &= (\vec{p} - q\vec{A})^2 - \hbar q\vec{\sigma}\vec{B} \end{aligned}$$

Se reemplaza dentro de la expresión señalada:

$$[(E - q\phi)^2 - c^2 \vec{\alpha}^2 (\vec{p} - q\vec{A})^2 - m^2 c^4 - c(E - q\phi) \vec{\alpha} (\vec{p} - q\vec{A}) + c \vec{\alpha} (\vec{p} - q\vec{A}) (E - q\phi)] \psi = 0$$

$$[(E - q\phi)^2 - c^2 [(\vec{p} - q\vec{A})^2 - \hbar q\vec{\sigma}\vec{B}] - m^2 c^4 - c(E - q\phi) \vec{\alpha} (\vec{p} - q\vec{A}) + c \vec{\alpha} (\vec{p} - q\vec{A}) (E - q\phi)] \psi = 0$$

Ahora se simplifica el termino en rojo:

$$-c(E - q\phi) \vec{\alpha} (\vec{p} - q\vec{A}) + c \vec{\alpha} (\vec{p} - q\vec{A}) (E - q\phi) = c \left[\begin{array}{c} \cancel{-E\vec{\alpha}p} + qE\vec{\alpha}A + q\phi\vec{\alpha}p - \cancel{q^2\phi\vec{\alpha}A} \\ \cancel{+\vec{\alpha}pE} - \cancel{q\vec{\alpha}p\phi} - \cancel{q\vec{\alpha}AE} + \cancel{q^2\vec{\alpha}A\phi} \end{array} \right] = c [q\vec{\alpha} [E, \vec{A}] + q\vec{\alpha} [\phi, \vec{p}]]$$

Se calculan los dos conmutadores:

$$\begin{aligned} [E, \vec{A}]\psi &= i\hbar\partial_t(\vec{A}\psi) - \vec{A}i\hbar\partial_t\psi = i\hbar\psi\partial_t\vec{A} \rightarrow [E, \vec{A}] = i\hbar\partial_t\vec{A} \\ [\phi, \vec{p}]\psi &= -i\hbar\phi\partial_r\psi + i\hbar\partial_r(\phi\psi) = i\hbar\psi\partial_r\phi \rightarrow [\phi, \vec{p}] = i\hbar\partial_r\phi \end{aligned}$$

$$c(E - q\phi) \vec{\alpha} (\vec{p} - q\vec{A}) - c \vec{\alpha} (\vec{p} - q\vec{A}) (E - q\phi) = c [q\vec{\alpha} [E, \vec{A}] + q\vec{\alpha} [\phi, \vec{p}]] = c [i\hbar q\vec{\alpha} [\partial_t\vec{A} + \partial_r\phi]]$$

Pero de las ecuaciones de Maxwell se tiene que el campo eléctrico es: $\vec{E} = -\partial_r\phi - \partial_t\vec{A}$

$$c(E - q\phi)\vec{\alpha}(\vec{p} - q\vec{A}) - c\vec{\alpha}(\vec{p} - q\vec{A})(E - q\phi) = -i\hbar qc\vec{\alpha}\vec{E}$$

Reemplazando este término dentro de la ecuación señalada:

$$[(E - q\phi)^2 - c^2[(\vec{p} - q\vec{A})^2 - \hbar q\vec{\sigma}\vec{B}] - m^2c^4 - c(E - q\phi)\vec{\alpha}(\vec{p} - q\vec{A}) + c\vec{\alpha}(\vec{p} - q\vec{A})(E - q\phi)]\psi = 0$$

$$[(E - q\phi)^2 - c^2[(\vec{p} - q\vec{A})^2 - \hbar q\vec{\sigma}\vec{B}] - m^2c^4 - i\hbar qc\vec{\alpha}\vec{E}]\psi = 0$$

Que es a la ecuación a la que llegó Dirac para demostrar como a partir de ella se deducía que el electrón tiene un momento magnético asociado y por tanto un espín intrínseco, como se explica en la sección 3.3 del presente trabajo:

$$\rightarrow [(E - q\phi)^2 - c^2(\vec{p} - q\vec{A})^2 - m^2c^4 + c^2\hbar q\vec{\sigma}\vec{B} - i\hbar qc\vec{\alpha}\vec{E}]\psi = 0$$

Y dividiendo todo por c^2 :

$$\rightarrow \left[\left(\frac{E - q\phi}{c} \right)^2 - (\vec{p} - q\vec{A})^2 - m^2c^2 + \hbar q\vec{\sigma}\vec{B} - \frac{i\hbar q\vec{\alpha}\vec{E}}{c} \right] \psi = 0$$

Finalmente, para comparar esta expresión con la de Klein-Gordon, Dirac escribe de forma análoga la ecuación de Klein-Gordon en presencia de un campo electromagnético así:

$$\sqrt{(Pc)^2 + (mc^2)^2}\psi + qV\psi = E\psi$$

$$\sqrt{(P - q\vec{A})^2c^2 + (mc^2)^2}\psi = E - qV\psi$$

$$\left[\left(\frac{E - q\phi}{c} \right)^2 - (\vec{p} - q\vec{A})^2 - m^2c^2 \right] \psi = 0$$

Ecuación de Klein-Gordon en un campo electromagnético.

C.6. Ecuación de Dirac para el átomo de hidrógeno

Se parte de la ecuación de Dirac planteada en un campo electromagnético:

$$(c\vec{\alpha}(\vec{p} - q\vec{A}) + q\phi + \alpha_4mc^2)\psi = E\psi$$

Donde para el hidrógeno se tiene que:

$$\vec{A} = 0; \phi = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 r} = \hbar c \frac{e}{4\pi\epsilon_0 \hbar c r}; \vec{\alpha}\vec{p} = \alpha_i p_i \text{ con } i=1,2,3.$$

$$\rightarrow \left(c\vec{\alpha}\vec{p} + \alpha_4mc^2 - \hbar c \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c r} \right) \psi = E\psi$$

Lo anterior se hace para dejar el potencial descrito en términos de la constante de estructura fina:

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c}$$

Entonces para el átomo de hidrógeno la ecuación de Dirac es:

$$\left(c\vec{\alpha}\vec{p} + \alpha_4mc^2 - \frac{\hbar c\alpha}{r} \right) \psi = E\psi$$

Dado que el átomo de hidrógeno se trata de un problema de potencial central, la ecuación es más sencilla de resolverse dejándola en términos de una parte radial y otra angular, tal como se hace con la ecuación de Schrödinger. Para ello se hace uso del método aconsejado por el físico Sam Dieterich (Dieterich, 2018), donde primero se reescribe $\vec{\alpha}\vec{p}$ de la siguiente forma:

Primero combinando los primeros dos factores:

$$(\vec{a}\vec{r})(\vec{a}\vec{r})(\vec{a}\vec{p}) = (x\alpha_x + y\alpha_y + z\alpha_z)(x\alpha_x + y\alpha_y + z\alpha_z)(\vec{a}\vec{p}) = (x^2 + y^2 + z^2)(\vec{a}\vec{p}) = r^2(\vec{a}\vec{p})$$

Ahora se hace lo mismo, pero combinando los dos últimos factores, esto es:

$$\begin{aligned} (\vec{a}\vec{r})(\vec{a}\vec{r})(\vec{a}\vec{p}) &= (\vec{a}\vec{r})(x\alpha_x + y\alpha_y + z\alpha_z)(p_x\alpha_x + p_y\alpha_y + p_z\alpha_z) \\ &= (\vec{a}\vec{r})(xp_x + xp_y\alpha_x\alpha_y + xp_z\alpha_x\alpha_z + yp_x\alpha_y\alpha_x + yp_y + yp_z\alpha_y\alpha_z + zp_x\alpha_z\alpha_x + zp_y\alpha_z\alpha_y + zp_z) \\ &= (\vec{a}\vec{r})(xp_x + yp_y + zp_z + xp_y\alpha_x\alpha_y + yp_x\alpha_y\alpha_x + xp_z\alpha_x\alpha_z + zp_x\alpha_z\alpha_x + yp_z\alpha_y\alpha_z + zp_y\alpha_z\alpha_y) \\ &\quad \text{Recordando que las matrices de Dirac cumplen que: } \{\alpha_i, \alpha_j\} = 0 \rightarrow \alpha_i\alpha_j = -\alpha_j\alpha_i \\ &= (\vec{a}\vec{r})\left(xp_x + yp_y + zp_z + \alpha_x\alpha_y(xp_y - yp_x) + \alpha_x\alpha_z(xp_z - zp_x) + \alpha_y\alpha_z(yp_z - zp_y)\right) \\ &= (\vec{a}\vec{r})\left(\vec{r}\vec{p} + \alpha_x\alpha_y(xp_y - yp_x) + \alpha_x\alpha_z(xp_z - zp_x) + \alpha_y\alpha_z(yp_z - zp_y)\right) \\ &\quad \text{Ahora se reescribe la última expresión multiplicando por } 1 = i \cdot (-i) \\ &= (\vec{a}\vec{r})\left(\vec{r}\vec{p} + i(-i\alpha_x\alpha_y(xp_y - yp_x) - i\alpha_x\alpha_z(xp_z - zp_x) - i\alpha_y\alpha_z(yp_z - zp_y))\right) \\ &= (\vec{a}\vec{r})\left(\vec{r}\vec{p} + i\left(\begin{array}{l} -\frac{i}{2}\alpha_x\alpha_y(xp_y - yp_x) - \frac{i}{2}\alpha_x\alpha_y(xp_y - yp_x) - \frac{i}{2}\alpha_x\alpha_z(xp_z - zp_x) - \frac{i}{2}\alpha_x\alpha_z(xp_z - zp_x) \\ -\frac{i}{2}\alpha_y\alpha_z(yp_z - zp_y) - \frac{i}{2}\alpha_y\alpha_z(yp_z - zp_y) \end{array}\right)\right) \\ &= (\vec{a}\vec{r})\left(\vec{r}\vec{p} + i\left(\frac{-i}{2}(xp_y - yp_x)(\alpha_x\alpha_y + \alpha_x\alpha_y) - \frac{i}{2}(xp_z - zp_x)\alpha_x\alpha_z(\alpha_x\alpha_z + \alpha_x\alpha_z) - \frac{i}{2}(yp_z - zp_y)(\alpha_y\alpha_z + \alpha_y\alpha_z)\right)\right) \\ &\quad \text{Recordando que las matrices de Dirac cumplen que: } \{\alpha_i, \alpha_j\} = 0 \rightarrow \alpha_i\alpha_j = -\alpha_j\alpha_i \\ &= (\vec{a}\vec{r})\left(\vec{r}\vec{p} + i\left(\frac{-i}{2}(xp_y - yp_x)(\alpha_x\alpha_y - \alpha_y\alpha_x) - \frac{i}{2}(xp_z - zp_x)(\alpha_x\alpha_z - \alpha_z\alpha_x) - \frac{i}{2}(yp_z - zp_y)(\alpha_y\alpha_z - \alpha_z\alpha_y)\right)\right) \end{aligned}$$

Donde:

$$\alpha_i\alpha_j - \alpha_j\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [\sigma_i, \sigma_j] & 0 \\ 0 & [\sigma_i, \sigma_j] \end{pmatrix}$$

Y teniendo en cuenta la relación de conmutación de las matrices de Pauli:

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$$

Entonces:

$$\begin{aligned} \alpha_i\alpha_j - \alpha_j\alpha_i &= \begin{pmatrix} 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k & 0 \\ 0 & 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k \end{pmatrix} \\ \alpha_x\alpha_y - \alpha_y\alpha_x &= 2i\begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix} = 2i\Sigma_z \\ \alpha_x\alpha_z - \alpha_z\alpha_x &= -2i\begin{pmatrix} \sigma_y & 0 \\ 0 & \sigma_y \end{pmatrix} = -2i\Sigma_y \\ \alpha_y\alpha_z - \alpha_z\alpha_y &= 2i\begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{pmatrix} = 2i\Sigma_x \end{aligned}$$

Por lo tanto la expresión se puede escribir como:

$$\begin{aligned} (\vec{a}\vec{r})(\vec{a}\vec{r})(\vec{a}\vec{p}) &= (\vec{a}\vec{r})\left(\vec{r}\vec{p} + i\left(\frac{-i}{2}(xp_y - yp_x)2i\Sigma_z - \frac{i}{2}(xp_z - zp_x)(-2i\Sigma_y) - \frac{i}{2}(yp_z - zp_y)(2i\Sigma_x)\right)\right) \\ &= (\vec{a}\vec{r})\left(\vec{r}\vec{p} + i\left((xp_y - yp_x)\Sigma_z - (xp_z - zp_x)(\Sigma_y) + (yp_z - zp_y)(\Sigma_x)\right)\right) \end{aligned}$$

Recordando que: $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = (yp_z - zp_y), -(xp_z - zp_x), (xp_y - yp_x)$

Entonces: $(\vec{a}\vec{r})(\vec{a}\vec{r})(\vec{a}\vec{p}) = (\vec{a}\vec{r})\left(\vec{r}\vec{p} + i(\vec{\Sigma} \cdot \vec{L})\right)$

Retomando las dos formas que se acaban de encontrar para reescribir $(\vec{a}\vec{r})(\vec{a}\vec{r})(\vec{a}\vec{p})$ se tiene que:

$$r^2(\vec{a}\vec{p}) = (\vec{a}\vec{r})\left(\vec{r}\vec{p} + i(\vec{\Sigma} \cdot \vec{L})\right)$$

El momento radial, se suele definir como: $p_r = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)$

$$r^2(\vec{\alpha}\vec{p}) = (r\alpha_r)(rp_r + i(\vec{\Sigma} \cdot \vec{L}) + i\hbar) = r^2\alpha_r \left(p_r + \frac{i}{r}((\vec{\Sigma} \cdot \vec{L}) + \hbar) \right)$$

Demostrando que en la ecuación de Dirac $(\vec{\alpha}\vec{p}) = \alpha_r \left(p_r + \frac{i}{r}((\vec{\Sigma} \cdot \vec{L}) + \hbar) \right)$

Por lo tanto, volviendo a la ecuación de Dirac para el átomo de hidrógeno se tiene que:

$$\left(c\vec{\alpha}\vec{p} + \alpha_4 mc^2 - \frac{\hbar c\alpha}{r} \right) \psi = E\psi \rightarrow \left(c\alpha_r \left(p_r + \frac{i}{r}(\vec{\Sigma} \cdot \vec{L} + \hbar) \right) + \alpha_4 mc^2 - \frac{\hbar c\alpha}{r} \right) \psi = E\psi$$

Y así la ecuación de Dirac queda en términos de una parte radial y una angular:

$$\left(c\alpha_r \left(p_r + \frac{i}{r}(\vec{\Sigma} \cdot \vec{L} + \hbar) \right) + \alpha_4 mc^2 - \frac{\hbar c\alpha}{r} \right) \psi = E\psi$$

Para poder separar una parte angular y otra parte radial, se hace necesario introducir un nuevo operador, el cual fue supuesto por Paul Dirac en su artículo de 1928, este es:

$$K = \alpha_4(\vec{\Sigma} \cdot \vec{L} + \hbar)$$

El operador K que introdujo Dirac, tiene la particularidad de conmutar con el operador momento angular al cuadrado: J^2 , que a su vez también conmuta con el hamiltoniano de Dirac. Esto significa que los tres operadores tienen funciones propias en común. Pero, además, dado que K y J^2 dependen del operador \vec{L} , esto permite hallar los valores propios de K, siendo estos:

$$K\psi = \hbar\kappa\psi$$

$$\text{con } \kappa = \pm \left(j + \frac{1}{2} \right)$$

Por tanto, la ecuación de Dirac se reescribe en términos de K aprovechando que $\alpha_4^2 = 1$:

$$\left(c\alpha_r \left(p_r + \frac{i}{r}\alpha_4\alpha_4(\vec{\Sigma} \cdot \vec{L} + \hbar) \right) + \alpha_4 mc^2 - \frac{\hbar c\alpha}{r} \right) \psi = E\psi$$

$$\left(c\alpha_r \left(p_r + \frac{i}{r}\alpha_4 K \right) + \alpha_4 mc^2 - \frac{\hbar c\alpha}{r} \right) \psi = E\psi$$

Y dado que se conocen las funciones propias comunes de J^2 y K, que están relacionadas con los armónicos esféricos, y se le conocen como los armónicos esféricos espinoriales:

$$Y(\theta, \phi) \text{ armónicos esféricos espinoriales}$$

$$K\psi = \hbar\kappa\psi \rightarrow KY(\theta, \phi) = \hbar\kappa Y(\theta, \phi)$$

Entonces la función ψ que soluciona la ecuación de Dirac se propone como: $\psi = R(r)Y(\theta, \phi)$

$$c\alpha_r p_r \psi + c\alpha_r \frac{i}{r}\alpha_4 K\psi + \alpha_4 mc^2 \psi - \frac{\hbar c\alpha}{r} \psi = E\psi$$

$$c\alpha_r p_r R(r)Y(\theta, \phi) + c\alpha_r \frac{i}{r}\alpha_4 R(r)KY(\theta, \phi) + \alpha_4 mc^2 R(r)Y(\theta, \phi) - \frac{\hbar c\alpha}{r} R(r)Y(\theta, \phi) = ER(r)Y(\theta, \phi)$$

$$c\alpha_r p_r R(r)Y(\theta, \phi) + c\alpha_r \frac{i}{r}\alpha_4 R(r)\hbar\kappa Y(\theta, \phi) + \alpha_4 mc^2 R(r)Y(\theta, \phi) - \frac{\hbar c\alpha}{r} R(r)Y(\theta, \phi) = ER(r)Y(\theta, \phi)$$

$$Y(\theta, \phi) \left(c\alpha_r p_r R(r) + c\alpha_r \frac{i}{r}\alpha_4 R(r)\hbar\kappa + \alpha_4 mc^2 R(r) - \frac{\hbar c\alpha}{r} R(r) \right) = ER(r)Y(\theta, \phi)$$

$$\left(c\alpha_r p_r R(r) + c\alpha_r \frac{i}{r}\alpha_4 R(r)\hbar\kappa + \alpha_4 mc^2 R(r) - \frac{\hbar c\alpha}{r} R(r) \right) = ER(r)$$

Y al igual que con la ecuación de Schrödinger, la solución para la energía viene de esa ecuación radial:

$$\left(c\alpha_r p_r + c\alpha_r \frac{i}{r}\alpha_4 \hbar\kappa + \alpha_4 mc^2 - \frac{\hbar c\alpha}{r} \right) R(r) = ER(r)$$

Sin embargo, Dirac tiene que proponer una matriz α_r que le permitan resolver dicha ecuación, para ello propone la siguiente representación:

$$\alpha_r = \begin{pmatrix} 0 & -iI \\ iI & 0 \end{pmatrix}$$

Esto se puede hacer, ya que cualquier matriz que cumpla con las condiciones de las matrices de Dirac, sirven como solución para su ecuación, lo único que cambia es la base en la que están representadas; así reemplazando α_r y α_4 se tiene que:

$$\begin{aligned} & \left(c\alpha_r p_r + c\alpha_r \frac{i}{r} \alpha_4 \hbar \kappa + \alpha_4 mc^2 - \frac{\hbar c \alpha}{r} \right) R(r) = ER(r) \\ & \left(\begin{pmatrix} 0 & -iI \\ iI & 0 \end{pmatrix} c p_r + \begin{pmatrix} 0 & -iI \\ iI & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \frac{i}{r} c \hbar \kappa + \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} mc^2 - \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} \frac{\hbar c \alpha}{r} \right) R(r) = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} ER(r) \\ & \left(\begin{pmatrix} 0 & -i c p_r \\ i c p_r & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -I \frac{c \hbar \kappa}{r} \\ -I \frac{c \hbar \kappa}{r} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} mc^2 I & 0 \\ 0 & -mc^2 I \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{\hbar c \alpha}{r} I & 0 \\ 0 & \frac{\hbar c \alpha}{r} I \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} EI & 0 \\ 0 & EI \end{pmatrix} \right) R(r) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Recordando que cada bloque de las matrices presentadas es una matriz de 2x2; se puede reemplazar las respectivas I , para dar cuenta, que de las 4 ecuaciones que se obtienen para el espinor $R(r)$, solo hay dos distintas, de forma que $R(r)$ se puede proponer como un espinor de 2 componentes de la siguiente forma:

Anzats:

$R(r) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} G(r) \\ F(r) \end{pmatrix}$ donde $F(r)$ y $G(r)$ son espinores de dos componentes cada uno:

$$\begin{pmatrix} I \left(mc^2 - \frac{\hbar c \alpha}{r} - E \right) & I \left(-i c p_r - \frac{c \hbar \kappa}{r} \right) \\ I \left(i c p_r - \frac{c \hbar \kappa}{r} \right) & I \left(-mc^2 - \frac{\hbar c \alpha}{r} - E \right) \end{pmatrix} \frac{1}{r} \begin{pmatrix} G(r) \\ F(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Esto se puede hacer, ya que como se muestra a continuación cuando se expande la expresión matricial, donde cada elemento esta multiplicado por una matriz de 2x2 se obtiene:

$$\begin{pmatrix} mc^2 - \frac{\hbar c \alpha}{r} - E & 0 & -i c p_r - \frac{c \hbar \kappa}{r} & 0 \\ 0 & mc^2 - \frac{\hbar c \alpha}{r} - E & 0 & -i c p_r - \frac{c \hbar \kappa}{r} \\ i c p_r - \frac{c \hbar \kappa}{r} & 0 & -mc^2 - \frac{\hbar c \alpha}{r} - E & 0 \\ 0 & i c p_r - \frac{c \hbar \kappa}{r} & 0 & -mc^2 - \frac{\hbar c \alpha}{r} - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \\ \psi_c \\ \psi_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

De lo que se obtienen 4 ecuaciones:

$$\begin{aligned} & \left(mc^2 - \frac{\hbar c \alpha}{r} - E \right) \psi_a + \left(-i c p_r - \frac{c \hbar \kappa}{r} \right) \psi_c \\ & \left(mc^2 - \frac{\hbar c \alpha}{r} - E \right) \psi_b + \left(-i c p_r - \frac{c \hbar \kappa}{r} \right) \psi_d \\ & \left(i c p_r - \frac{c \hbar \kappa}{r} \right) \psi_a + \left(-mc^2 - \frac{\hbar c \alpha}{r} - E \right) \psi_c \\ & \left(i c p_r - \frac{c \hbar \kappa}{r} \right) \psi_b + \left(-mc^2 - \frac{\hbar c \alpha}{r} - E \right) \psi_d \end{aligned}$$

Y llamando a; $\frac{G(r)}{r} = \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix}$; $\frac{F(r)}{r} = \begin{pmatrix} \psi_c \\ \psi_d \end{pmatrix}$

Se reduce entonces a dos ecuaciones:

$$\left(mc^2 - \frac{\hbar c \alpha}{r} - E \right) \frac{G(r)}{r} + \left(-i c p_r - \frac{c \hbar \kappa}{r} \right) \frac{F(r)}{r} = 0$$

$$\left(icp_r - \frac{c\hbar\kappa}{r} \right) \frac{G(r)}{r} + \left(-mc^2 - \frac{\hbar c\alpha}{r} - E \right) \frac{F(r)}{r} = 0$$

Y recordando que: $p_r = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right)$

La primera ecuación será:

$$\begin{aligned} & \left(mc^2 - \frac{\hbar c\alpha}{r} - E \right) \frac{G(r)}{r} + \left(-c\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) - \frac{c\hbar\kappa}{r} \right) \frac{F(r)}{r} = 0 \\ & \left(mc^2 - \frac{\hbar c\alpha}{r} - E \right) \frac{G(r)}{r} + \left(-c\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{F(r)}{r} \right) + \frac{F(r)}{r^2} \right) - \frac{c\hbar\kappa F(r)}{r^2} \right) = 0 \\ & \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{F(r)}{r} \right) = \frac{\partial F(r)}{r \partial r} - \frac{F(r)}{r^2} \\ \rightarrow & \left(mc^2 - \frac{\hbar c\alpha}{r} - E \right) \frac{G(r)}{r} + \left(-c\hbar \left(\frac{\partial F(r)}{r \partial r} - \frac{F(r)}{r^2} + \frac{F(r)}{r^2} \right) - \frac{c\hbar\kappa F(r)}{r^2} \right) = 0 \\ & \rightarrow \left(mc^2 - \frac{\hbar c\alpha}{r} - E \right) \frac{G(r)}{r} + \left(-c\hbar \left(\frac{\partial F(r)}{r \partial r} \right) - \frac{c\hbar\kappa F(r)}{r^2} \right) = 0 \\ \rightarrow & \left(mc^2 G(r) - \frac{\hbar c\alpha}{r} G(r) - EG(r) \right) + \left(-c\hbar \left(\frac{\partial F(r)}{\partial r} \right) - \frac{c\hbar\kappa F(r)}{r} \right) = 0 \\ & \left(E - mc^2 + \frac{\hbar c\alpha}{r} \right) G(r) + c\hbar \frac{\partial F(r)}{\partial r} + \frac{c\hbar\kappa F(r)}{r} = 0 \end{aligned}$$

La segunda ecuación será:

$$\begin{aligned} & \left(c\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{G(r)}{r} \right) + \frac{G(r)}{r^2} \right) - \frac{c\hbar\kappa G(r)}{r^2} \right) + \left(-mc^2 - \frac{\hbar c\alpha}{r} - E \right) \frac{F(r)}{r} = 0 \\ & \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{G(r)}{r} \right) = \frac{\partial G(r)}{r \partial r} - \frac{G(r)}{r^2} \\ \rightarrow & \left(c\hbar \left(\frac{\partial G(r)}{r \partial r} - \frac{G(r)}{r^2} + \frac{G(r)}{r^2} \right) - \frac{c\hbar\kappa G(r)}{r^2} \right) + \left(-mc^2 - \frac{\hbar c\alpha}{r} - E \right) \frac{F(r)}{r} = 0 \\ & \left(c\hbar \left(\frac{\partial G(r)}{r \partial r} \right) - \frac{c\hbar\kappa G(r)}{r^2} \right) + \left(-mc^2 - \frac{\hbar c\alpha}{r} - E \right) \frac{F(r)}{r} = 0 \\ & \left(E + mc^2 + \frac{\hbar c\alpha}{r} \right) F(r) - c\hbar \frac{\partial G(r)}{\partial r} + \frac{c\hbar\kappa G(r)}{r} = 0 \end{aligned}$$

De forma que las dos ecuaciones a resolver son:

$$\begin{aligned} & \left(E - mc^2 + \frac{\hbar c\alpha}{r} \right) G(r) + c\hbar \frac{\partial F(r)}{\partial r} + \frac{c\hbar\kappa F(r)}{r} = 0 \quad (DH1) \\ & \left(E + mc^2 + \frac{\hbar c\alpha}{r} \right) F(r) - c\hbar \frac{\partial G(r)}{\partial r} + \frac{c\hbar\kappa G(r)}{r} = 0 \quad (DH2) \end{aligned}$$

No obstante, Dirac no las resuelve explícitamente como se describió en el capítulo 3, si no que por el contrario procede a dejar una en términos de otra para así poderlas comparar con las teorías previas, y así mirar si podía obtener nuevos términos que dieran cuenta de la estructura fina del hidrógeno en su primera aproximación. Más tarde Darwin y Gordon si solucionan ambas ecuaciones permitiéndoles encontrar la estructura fina completa del hidrógeno.

C.7. Aproximación de primer orden para la estructura fina del átomo de Hidrógeno con la ecuación de Dirac

Como se describió en el capítulo 3, Dirac no resuelve las ecuaciones de forma completa, si no que las reescribe en términos de una sola ecuación para así poder compararla con las teorías previas, y observar si obtenía los términos necesarios para poder hallar la estructura fina en su primera aproximación:

Para ello parte de la ecuación (DH2) planteada previamente:

$$\left(E + mc^2 + \frac{\hbar c \alpha}{r}\right) F(r) - c \hbar \frac{\partial G(r)}{\partial r} + \frac{c \hbar \kappa G(r)}{r} = 0$$

Llamando a: $\left(E + mc^2 + \frac{\hbar c \alpha}{r}\right) = c \hbar B$

La ecuación queda escrita como: $\frac{\partial G(r)}{\partial r} - \frac{\kappa G(r)}{r} = BF(r)$

Derivando con respecto a r:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial G(r)}{\partial r} - \frac{\kappa G(r)}{r} = BF(r) \right)$$

$$\frac{\partial^2 G(r)}{\partial^2 r} - \frac{\kappa}{r} \frac{\partial G(r)}{\partial r} + \frac{\kappa G(r)}{r^2} = B \frac{\partial F(r)}{\partial r} + \frac{\partial B}{\partial r} F(r) \quad (DH3)$$

Ahora de la ecuación (DH1) tiene que:

$$\left(E - mc^2 + \frac{\hbar c \alpha}{r}\right) G(r) + c \hbar \frac{\partial F(r)}{\partial r} + \frac{c \hbar \kappa F(r)}{r} = 0$$

$$\frac{\partial F(r)}{\partial r} = -\frac{1}{c \hbar} \left(E - mc^2 + \frac{\hbar c \alpha}{r}\right) G(r) - \frac{\kappa F(r)}{r}$$

$$\text{recordando que: } \left(E + mc^2 + \frac{\hbar c \alpha}{r}\right) = c \hbar B \rightarrow \frac{\partial B}{\partial r} = \frac{1}{c \hbar} \frac{\partial V}{\partial r}$$

$$\text{Y teniendo en cuenta que: } \frac{\partial G(r)}{\partial r} - \frac{\kappa G(r)}{r} = BF(r) \rightarrow F(r) = \frac{1}{B} \frac{\partial G(r)}{\partial r} - \frac{\kappa G(r)}{Br}$$

Por lo tanto, la ecuación (DH3) reemplazando lo previamente hallado queda como:

$$\frac{\partial^2 G(r)}{\partial^2 r} - \frac{\kappa}{r} \frac{\partial G(r)}{\partial r} + \frac{\kappa G(r)}{r^2} = B \frac{\partial F(r)}{\partial r} + \frac{\partial B}{\partial r} F(r)$$

$$\frac{\partial^2 G(r)}{\partial^2 r} - \frac{\kappa}{r} \frac{\partial G(r)}{\partial r} + \frac{\kappa G(r)}{r^2} = \left[-\frac{B}{c \hbar} \left(E - mc^2 + \frac{\hbar c \alpha}{r}\right) G(r) - \frac{\kappa B F(r)}{r} \right] + \frac{1}{c \hbar} \frac{\partial V}{\partial r} \left(\frac{1}{B} \frac{\partial G(r)}{\partial r} - \frac{\kappa G(r)}{Br} \right)$$

$$\frac{1}{c \hbar} \left(E + mc^2 + \frac{\hbar c \alpha}{r}\right) = B$$

$$\rightarrow -\frac{1}{c^2 \hbar^2} \left(E + mc^2 + \frac{\hbar c \alpha}{r}\right) \left(E - mc^2 + \frac{\hbar c \alpha}{r}\right) G(r)$$

$$= \frac{-1}{c^2 \hbar^2} \left(\left(\left(E + \frac{\hbar c \alpha}{r}\right) + mc^2 \right) \left(\left(E + \frac{\hbar c \alpha}{r}\right) - mc^2 \right) \right)$$

$$= \frac{-1}{c^2 \hbar^2} \left(\left(E + \frac{\hbar c \alpha}{r}\right)^2 - m^2 c^4 \right) G(r)$$

$$\rightarrow \frac{\kappa B F(r)}{r} = \frac{\kappa}{r} B \left(\frac{1}{B} \frac{\partial G(r)}{\partial r} - \frac{\kappa G(r)}{Br} \right) = \frac{\kappa}{r} \frac{\partial G(r)}{\partial r} - \frac{\kappa^2}{r^2} G(r)$$

Reemplazando

$$\frac{\partial^2 G(r)}{\partial^2 r} - \frac{\kappa}{r} \frac{\partial G(r)}{\partial r} + \frac{\kappa G(r)}{r^2}$$

$$= \left[\frac{-1}{c^2 \hbar^2} \left(\left(E + \frac{\hbar c \alpha}{r}\right)^2 - m^2 c^4 \right) G(r) - \frac{\kappa}{r} \frac{\partial G(r)}{\partial r} + \frac{\kappa^2}{r^2} G(r) \right] + \frac{1}{c \hbar} \frac{\partial V}{\partial r} \left(\frac{1}{B} \frac{\partial G(r)}{\partial r} - \frac{\kappa G(r)}{Br} \right)$$

$$\frac{\partial^2 G(r)}{\partial^2 r} - \frac{\kappa}{r} \frac{\partial G(r)}{\partial r} + \frac{\kappa G(r)}{r^2} + \frac{\left(E + \frac{\hbar c \alpha}{r}\right)^2}{c^2 \hbar^2} G(r) - \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} G(r) + \frac{\kappa}{r} \frac{\partial G(r)}{\partial r} - \frac{\kappa^2}{r^2} G(r) - \frac{1}{c \hbar} \frac{\partial V}{\partial r} \left(\frac{1}{B} \frac{\partial G(r)}{\partial r} - \frac{\kappa G(r)}{Br} \right) = 0$$

Por lo tanto, la ecuación obtenida es:

$$\frac{\partial^2 G(r)}{\partial^2 r} + \left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r}\right)^2 G(r) - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} G(r) - \frac{G(r)}{r^2} (\kappa^2 - \kappa) - \frac{1}{c\hbar} \frac{\partial V}{\partial r} \left(\frac{1}{B} \frac{\partial G(r)}{\partial r} - \frac{\kappa G(r)}{Br}\right) = 0$$

Y Dirac para poderla comparar con las teorías anteriores, supone que:

$$G(r) = rR(r)$$

$$r \frac{\partial^2 R(r)}{\partial^2 r} + 2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} + \left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r}\right)^2 rR(r) - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} rR(r) - \frac{rR(r)}{r^2} (\kappa^2 - \kappa) - \frac{1}{c\hbar} \frac{\partial V}{\partial r} \left(\frac{1}{B} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\kappa}{Br}\right) rR(r) = 0$$

$$\frac{\partial^2 R(r)}{\partial^2 r} + \frac{2}{r} \frac{\partial R(r)}{\partial r} + \left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r}\right)^2 R(r) - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} R(r) - \frac{R(r)}{r^2} (\kappa^2 - \kappa) - \frac{1}{c\hbar} \frac{\partial V}{\partial r} \left(\frac{1}{B} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\kappa}{Br}\right) R(r) = 0$$

$$\text{Recordando que: } \kappa = \left(j + \frac{1}{2}\right) = \left(l + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) = (l + 1)$$

$$(\kappa^2 - \kappa) = (l + 1)((l + 1) - 1) = l(l + 1)$$

$$\rightarrow \frac{\partial^2 R(r)}{\partial^2 r} + \frac{2}{r} \frac{\partial R(r)}{\partial r} + \left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r}\right)^2 R(r) - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} R(r) - \frac{l(l + 1)R(r)}{r^2} - \frac{1}{c\hbar} \frac{\partial V}{\partial r} \left(\frac{1}{B} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{(l + 1)}{Br}\right) R(r) = 0$$

Y por tanto la ecuación que le permite llegar a su análisis de la estructura fina comparándola con la ecuación de Klein-Gordon y con los términos de acoplamiento espín-órbita es:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial^2 r} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \left(\frac{E}{\hbar c} + \frac{\alpha}{r}\right)^2 - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} - \frac{l(l + 1)}{r^2} - \frac{1}{c\hbar} \frac{\partial V}{\partial r} \left(\frac{1}{B} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{(l + 1)}{Br}\right) \right] R(r) = 0$$

Donde el termino: $\frac{1}{c\hbar} \frac{\partial V}{\partial r} \left(\frac{1}{B} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{(l + 1)}{Br}\right)$ es el asociado al acoplamiento espín-órbita.

Que multiplicándolo por la masa del electrón:

$$m_e \left(\frac{1}{m_e c\hbar} \frac{\partial V}{\partial r} \frac{1}{B} \frac{\partial R(r)}{\partial r} - \frac{1}{m_e c\hbar Br} \frac{\partial V}{\partial r} lR(r) - \frac{1}{m_e c\hbar Br} \frac{\partial V}{\partial r} R(r) \right)$$

Dirac se percató que el último término es proporcional a las teorías previas, que describen el término de acoplamiento como: $\frac{(g-1)}{2m_e c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} (\vec{S} \cdot \vec{L}) \propto \frac{1}{2m_e c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr}$

Y para ello Dirac toma la aproximación de:

$$\rightarrow \frac{\hbar c \alpha}{r} \ll E + mc^2 \rightarrow c\hbar B \approx E + mc^2 = 2mc^2 \text{ siendo } E \text{ la energía total relativista para } v \ll c.$$

Permitiendo expresar el último término como: $\rightarrow \frac{1}{m_e c\hbar Br} \frac{\partial V}{\partial r} = \frac{1}{2m_e c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr}$

C.8. Solución de la ecuación de Dirac para la formula completa de la energía que da cuenta de la estructura fina

Los físicos Charles Galton Darwin y Walter Gordon, si encuentran la formula completa de la estructura fina a partir de la ecuación de Dirac. Para ello se parte de las dos ecuaciones halladas previamente en el tratamiento del átomo de hidrógeno con la ecuación de Dirac, y se sigue un procedimiento análogo a como cuando se soluciona los estados propios de energía en la ecuación

de Klein-Gordon, para ello se tiene como referencia el método realizado por el físico Sam Dietterich (Dietterich, 2018):

El buscar una solución a (DH1) y (DH2), permite establecer ciertas condiciones y parámetros para que esas dos ecuaciones tengan solución. Dentro de las condiciones encontradas, como se expone a continuación, se establecen los valores de energía E que se deben tener para que esas dos ecuaciones tengan solución. Finalmente, es importante resaltar que el procedimiento que se muestra a continuación no tiene como objetivo dar solución total al átomo de hidrógeno de Dirac, si no que de forma análoga a como se hizo en 1928, se busca encontrar los valores propios de la energía, sin encontrar al final de forma explícita las componentes de los espinores de Dirac que solucionan toda la ecuación.

Entonces, retomando las ecuaciones radiales expresadas anteriormente:

$$\begin{aligned} \left(E - mc^2 + \frac{\hbar c \alpha}{r}\right) G(r) + c\hbar \frac{\partial F(r)}{\partial r} + \frac{c\hbar \kappa F(r)}{r} &= 0 \quad (DH1) \\ \left(E + mc^2 + \frac{\hbar c \alpha}{r}\right) F(r) - c\hbar \frac{\partial G(r)}{\partial r} + \frac{c\hbar \kappa G(r)}{r} &= 0 \quad (DH2) \end{aligned}$$

Se tiene que para solucionar las dos ecuaciones mostradas se inicia con un análisis asintótico. El primero es cuando $r \rightarrow \infty$, obteniendo las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned} (E - mc^2)G(r) + c\hbar \frac{\partial F(r)}{\partial r} &= 0 \\ (E + mc^2)F(r) - c\hbar \frac{\partial G(r)}{\partial r} &= 0 \end{aligned}$$

Con ello se despeja $G(r)$ y $F(r)$ de ambas ecuaciones y se toma su respectiva derivada:

$$\begin{aligned} G(r) &= \frac{c\hbar}{(mc^2 - E)} \frac{\partial F(r)}{\partial r}; \rightarrow \frac{\partial G(r)}{\partial r} = \frac{c\hbar}{(mc^2 - E)} \frac{\partial^2 F(r)}{\partial^2 r} \\ F(r) &= \frac{c\hbar}{(E + mc^2)} \frac{\partial G(r)}{\partial r}; \rightarrow \frac{\partial F(r)}{\partial r} = \frac{c\hbar}{(E + mc^2)} \frac{\partial^2 G(r)}{\partial^2 r} \end{aligned}$$

Reemplazando las respectivas derivadas se tiene que:

$$\begin{aligned} G(r) &= \frac{c\hbar}{(mc^2 - E)} \frac{c\hbar}{(E + mc^2)} \frac{\partial^2 G(r)}{\partial^2 r} \rightarrow \frac{\partial^2 G(r)}{\partial^2 r} = -\frac{((mc^2)^2 - E^2)}{c^2 \hbar^2} G(r) \\ F(r) &= \frac{c\hbar}{(E + mc^2)} \frac{c\hbar}{(mc^2 - E)} \frac{\partial^2 F(r)}{\partial^2 r} \rightarrow \frac{\partial^2 F(r)}{\partial^2 r} = -\frac{((mc^2)^2 - E^2)}{c^2 \hbar^2} F(r) \end{aligned}$$

Las dos ecuaciones resaltadas son dos ecuaciones equivalentes de segundo orden, lineales, las cuales se resuelven y se obtiene que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 F(r)}{\partial^2 r} + \frac{((mc^2)^2 - E^2)}{c^2 \hbar^2} F(r) &= 0 \\ \rightarrow F(r) = e^{cr} \rightarrow \text{polinomio característico: } r^2 + \frac{((mc^2)^2 - E^2)}{c^2 \hbar^2} &= 0 \end{aligned}$$

$$G(r) = F(r) = Ae^{-p} + Be^p$$

Siendo:

$$\begin{aligned} p &= rs \\ s &= \frac{\sqrt{(mc^2)^2 - E^2}}{c\hbar} \end{aligned}$$

Donde el término Be^p es claramente no normalizable, por ello se hace $B=0$, y entonces para valores de r muy grande, las soluciones toman la siguiente forma:

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}) = \mathbf{F}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}e^{-r\mathbf{s}}$$

O se puede dejar en términos de $p \rightarrow \mathbf{G}(\mathbf{r}) = \mathbf{F}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}e^{-p}$, teniendo que:

$$\begin{aligned} G(p) &= g(p)e^{-p} \\ F(p) &= f(p)e^{-p} \end{aligned}$$

Por tanto volviendo a las ecuaciones diferenciales (DH1), (DH2), en términos de $p = rs$:

$$\begin{aligned} \left(E - mc^2 + s \frac{\hbar c \alpha}{p}\right) G(p) + c \hbar s \frac{\partial F(p)}{\partial p} + s \frac{c \hbar \kappa F(p)}{p} &= 0 \\ \left(E + mc^2 + s \frac{\hbar c \alpha}{p}\right) F(p) - c \hbar s \frac{\partial G(p)}{\partial p} + s \frac{c \hbar \kappa G(p)}{p} &= 0 \end{aligned}$$

Reemplazando $s = \frac{\sqrt{(mc^2)^2 - E^2}}{c \hbar}$:

$$\begin{aligned} \left(E - mc^2 + \frac{\sqrt{(mc^2)^2 - E^2} \hbar c \alpha}{c \hbar p}\right) G(p) + c \hbar \frac{\sqrt{(mc^2)^2 - E^2}}{c \hbar} \frac{\partial F(p)}{\partial p} + \frac{\sqrt{(mc^2)^2 - E^2} c \hbar \kappa F(p)}{c \hbar p} &= 0 \\ \left(E + mc^2 + \frac{\sqrt{(mc^2)^2 - E^2} \hbar c \alpha}{c \hbar p}\right) F(p) - c \hbar \frac{\sqrt{(mc^2)^2 - E^2}}{c \hbar} \frac{\partial G(p)}{\partial p} + \frac{\sqrt{(mc^2)^2 - E^2} c \hbar \kappa G(p)}{c \hbar p} &= 0 \end{aligned}$$

entonces:

$$\begin{aligned} \left(E - mc^2 + \sqrt{(mc^2)^2 - E^2} \frac{\alpha}{p}\right) G(p) + \sqrt{(mc^2)^2 - E^2} \frac{\partial F(p)}{\partial p} + \sqrt{(mc^2)^2 - E^2} \frac{\kappa F(p)}{p} &= 0 \\ \left(E + mc^2 + \sqrt{(mc^2)^2 - E^2} \frac{\alpha}{p}\right) F(p) - \sqrt{(mc^2)^2 - E^2} \frac{\partial G(p)}{\partial p} + \sqrt{(mc^2)^2 - E^2} \frac{\kappa G(p)}{p} &= 0 \end{aligned}$$

despejando:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F(p)}{\partial p} + \frac{\kappa F(p)}{p} + \left(\frac{E - mc^2}{\sqrt{(mc^2)^2 - E^2}} + \frac{\alpha}{p}\right) G(p) &= 0 \\ \frac{\partial G(p)}{\partial p} - \frac{\kappa G(p)}{p} - \left(\frac{E + mc^2}{\sqrt{(mc^2)^2 - E^2}} + \frac{\alpha}{p}\right) F(p) &= 0 \end{aligned}$$

Y teniendo en cuenta que: $\sqrt{(mc^2)^2 - E^2} = \sqrt{(mc^2 + E)(mc^2 - E)}$

Se tiene que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F(p)}{\partial p} + \frac{\kappa F(p)}{p} + \left(-\sqrt{\frac{mc^2 - E}{mc^2 + E}} + \frac{\alpha}{p}\right) G(p) = 0 \rightarrow \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} + \frac{\kappa \mathbf{F}(\mathbf{p})}{\mathbf{p}} - \left(\sqrt{\frac{mc^2 - E}{mc^2 + E}} - \frac{\alpha}{p}\right) \mathbf{G}(\mathbf{p}) &= 0 \\ \frac{\partial \mathbf{G}(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\kappa \mathbf{G}(\mathbf{p})}{\mathbf{p}} - \left(\sqrt{\frac{mc^2 + E}{mc^2 - E}} + \frac{\alpha}{p}\right) \mathbf{F}(\mathbf{p}) &= 0 \end{aligned}$$

Recordando que:

$$\begin{aligned} G(p) &= g(p)e^{-p} \\ F(p) &= f(p)e^{-p} \end{aligned}$$

Se tiene en cuenta que las ecuaciones resaltadas previamente quedan como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F(p)}{\partial p} &= e^{-p} \frac{\partial f(p)}{\partial p} - f(p)e^{-p} \\ \frac{\partial G(p)}{\partial p} &= e^{-p} \frac{\partial g(p)}{\partial p} - g(p)e^{-p} \\ \left(\frac{\partial}{\partial p} - 1 + \frac{\kappa}{p}\right) f(p) - \left(\sqrt{\frac{mc^2 - E}{mc^2 + E}} - \frac{\alpha}{p}\right) g(p) &= 0 \\ \left(\frac{\partial}{\partial p} - 1 - \frac{\kappa}{p}\right) g(p) - \left(\sqrt{\frac{mc^2 + E}{mc^2 - E}} + \frac{\alpha}{p}\right) f(p) &= 0 \end{aligned}$$

Ya son derivadas totales pues solo depende de p:

$$\left(\frac{d}{dp} - 1 + \frac{\kappa}{p}\right) f(p) - \left(\sqrt{\frac{mc^2 - E}{mc^2 + E}} - \frac{\alpha}{p}\right) g(p) = 0$$

$$\left(\frac{d}{dp} - 1 - \frac{\kappa}{p}\right) g(p) - \left(\sqrt{\frac{mc^2 + E}{mc^2 - E}} + \frac{\alpha}{p}\right) f(p) = 0$$

Donde para encontrar $f(p)$ y $g(p)$ ahora se hace un análisis asintótico de las dos ecuaciones anteriores, pero suponiendo $p \rightarrow 0$, obteniendo:

$$\left(\frac{d}{dp} + \frac{\kappa}{p}\right) f(p) + \frac{\alpha}{p} g(p) = 0 \quad (1)$$

$$\left(\frac{d}{dp} - \frac{\kappa}{p}\right) g(p) - \frac{\alpha}{p} f(p) = 0 \quad (2)$$

Ahora se desacoplan estas dos ecuaciones, para ello se hace el siguiente proceso:

Derivando la primera (1):

$$\frac{d^2 f(p)}{d^2 p} + \frac{\kappa}{p} \frac{df(p)}{dp} - \frac{\kappa}{p^2} f(p) + \frac{\alpha}{p} \frac{dg(p)}{dp} - \frac{\alpha g(p)}{p^2} = 0$$

de la primera (1) despejo $g(p)$:

$$g(p) = -\frac{p}{\alpha} \frac{df(p)}{dp} - \frac{\kappa}{\alpha} f(p)$$

de la segunda (2) despejo: $\frac{dg(p)}{dp}$

$$\frac{dg(p)}{dp} = \frac{\alpha}{p} f(p) + \frac{\kappa}{p} g(p) = \frac{\alpha}{p} f(p) + \frac{\kappa}{p} \left(-\frac{p}{\alpha} \frac{df(p)}{dp} - \frac{\kappa}{\alpha} f(p)\right)$$

$$\frac{dg(p)}{dp} = \frac{\alpha}{p} f(p) - \frac{\kappa}{\alpha} \frac{df(p)}{dp} - \frac{\kappa^2}{p\alpha} f(p)$$

$$\rightarrow \frac{d^2 f(p)}{d^2 p} + \frac{\kappa}{p} \frac{df(p)}{dp} - \frac{\kappa}{p^2} f(p) + \frac{\alpha}{p} \frac{dg(p)}{dp} - \frac{\alpha g(p)}{p^2} = 0$$

$$\rightarrow \frac{d^2 f(p)}{d^2 p} + \frac{\kappa}{p} \frac{df(p)}{dp} - \frac{\kappa}{p^2} f(p) + \frac{\alpha}{p} \left(\frac{\alpha}{p} f(p) - \frac{\kappa}{\alpha} \frac{df(p)}{dp} - \frac{\kappa^2}{p\alpha} f(p)\right) - \frac{\alpha}{p^2} \left(-\frac{p}{\alpha} \frac{df(p)}{dp} - \frac{\kappa}{\alpha} f(p)\right) = 0$$

$$\rightarrow \frac{d^2 f(p)}{d^2 p} + \boxed{\frac{\kappa}{p} \frac{df(p)}{dp}} - \boxed{\frac{\kappa}{p^2} f(p)} + \frac{\alpha^2}{p^2} f(p) - \boxed{\frac{\kappa}{p} \frac{df(p)}{dp}} - \frac{\kappa^2}{p^2} f(p) + \frac{1}{p} \frac{df(p)}{dp} + \boxed{\frac{\kappa}{p^2} f(p)} = 0$$

$$\underline{\underline{\rightarrow \frac{d^2 f(p)}{d^2 p} + \frac{1}{p} \frac{df(p)}{dp} + \frac{\alpha^2 - \kappa^2}{p^2} f(p) = 0}}$$

Ahora se hace un proceso analogo pero con la segunda (2):

derivando la segunda (2):

$$\frac{d^2 g(p)}{d^2 p} - \frac{\kappa}{p} \frac{dg(p)}{dp} + \frac{\kappa}{p^2} g(p) - \frac{\alpha}{p} \frac{df(p)}{dp} + \frac{\alpha}{p^2} f(p) = 0$$

despejando de la segunda(2) $f(p)$:

$$f(p) = \frac{p}{\alpha} \frac{dg(p)}{dp} - \frac{\kappa}{\alpha} g(p)$$

de la primera despejo $\frac{df(p)}{dp}$:

$$\frac{df(p)}{dp} = -\frac{\alpha}{p}g(p) - \frac{\kappa}{p}f(p) = -\frac{\alpha}{p}g(p) - \frac{\kappa}{p}\left(\frac{p}{\alpha}\frac{dg(p)}{dp} - \frac{\kappa}{\alpha}g(p)\right) = -\frac{\alpha}{p}g(p) - \frac{\kappa}{\alpha}\frac{dg(p)}{dp} + \frac{\kappa^2}{p\alpha}g(p)$$

reemplazando

$$\frac{d^2g(p)}{d^2p} - \frac{\kappa}{p}\frac{dg(p)}{dp} + \frac{\kappa}{p^2}g(p) - \frac{\alpha}{p}\left(-\frac{\alpha}{p}g(p) - \frac{\kappa}{\alpha}\frac{dg(p)}{dp} + \frac{\kappa^2}{p\alpha}g(p)\right) + \frac{\alpha}{p^2}\left(\frac{p}{\alpha}\frac{dg(p)}{dp} - \frac{\kappa}{\alpha}g(p)\right) = 0$$

$$\frac{d^2g(p)}{d^2p} - \boxed{\frac{\kappa}{p}\frac{dg(p)}{dp}} + \boxed{\frac{\kappa}{p^2}g(p)} + \frac{\alpha^2}{p^2}g(p) + \boxed{\frac{\kappa}{p}\frac{dg(p)}{dp}} - \frac{\kappa^2}{p^2}g(p) + \frac{1}{p}\frac{dg(p)}{dp} - \boxed{\frac{\kappa}{p^2}g(p)} = 0$$

$$\rightarrow \frac{d^2g(p)}{d^2p} + \frac{1}{p}\frac{dg(p)}{dp} + \frac{\alpha^2 - \kappa^2}{p^2}g(p) = 0$$

Se tiene entonces que las ecuaciones señaladas son equivalentes:

$$\frac{d^2f(p)}{d^2p} + \frac{1}{p}\frac{df(p)}{dp} + \frac{\alpha^2 - \kappa^2}{p^2}f(p) = 0$$

$$\frac{d^2g(p)}{d^2p} + \frac{1}{p}\frac{dg(p)}{dp} + \frac{\alpha^2 - \kappa^2}{p^2}g(p) = 0$$

Por tanto, su solución va a ser análoga, donde las dos ecuaciones anteriores son ecuaciones de Cauchy-Euler, que se solucionan suponiendo una solución de la forma que se expone a continuación:

$$\text{cauchy euler: } ax^2y'' + bxy' + cy = 0$$

Se reescriben entonces como:

$$p^2\frac{d^2f(p)}{d^2p} + p\frac{df(p)}{dp} + \alpha^2 - \kappa^2 f(p) = 0$$

como es una ecuación de cauchy-euler se propone como solución: $f(p) = p^a$ siendo a un valor real

$$\rightarrow f'(p) = ap^{a-1}; f''(p) = a(a-1)p^{a-2}$$

reemplazando:

$$p^2a(a-1)p^{a-2} + pap^{a-1} + (\alpha^2 - \kappa^2)p^a = 0$$

$$a(a-1)p^a + ap^a + (\alpha^2 - \kappa^2)p^a = 0$$

$$p^a[a^2 - a + a + (\alpha^2 - \kappa^2)] = 0$$

$$p^a[a^2 + (\alpha^2 - \kappa^2)] = 0$$

$$\rightarrow a^2 + (\alpha^2 - \kappa^2) = 0 \rightarrow a^2 = -(\alpha^2 - \kappa^2) \rightarrow a^2 = (\kappa^2 - \alpha^2)$$

$$\rightarrow a = \pm\sqrt{(\kappa^2 - \alpha^2)} = \pm \tau$$

Llamando a:

$$\tau = \sqrt{(\kappa^2 - \alpha^2)}$$

Por tanto, la solución para $f(p)$ y $g(p)$, teniendo en cuenta la solución propuesta de la ecuación de cauchy-euler es:

$$f(p) = g(p) = Ap^\tau + Bp^{-\tau}$$

Pero el termino $p^{-\tau}$ es no normalizable (ver una gráfica para ver que dicha función toma una forma no normalizable), entonces, se tiene que, la solución de las ecuaciones para $p \rightarrow 0$ es:

$$f(p) = Ap^\tau$$

$$g(p) = Bp^\tau$$

Por tanto, combinando los dos análisis asintóticos anteriores, se tiene que, para las dos ecuaciones:

$$\frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} + \frac{\kappa \mathbf{F}(\mathbf{p})}{\mathbf{p}} - \left(\sqrt{\frac{mc^2 - E}{mc^2 + E}} - \frac{\alpha}{\mathbf{p}} \right) \mathbf{G}(\mathbf{p}) = \mathbf{0}$$

$$\frac{\partial \mathbf{G}(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\kappa \mathbf{G}(\mathbf{p})}{\mathbf{p}} - \left(\sqrt{\frac{mc^2 + E}{mc^2 - E}} + \frac{\alpha}{\mathbf{p}} \right) \mathbf{F}(\mathbf{p}) = \mathbf{0}$$

Su solución se aproxima a:

$$G(p) = Bp^\tau e^{-p}$$

$$F(p) = Ap^\tau e^{-p}$$

Donde A y B son dos funciones que dan la solución completa a las ecuaciones. Teniendo como referencia la ecuación de Klein-Gordon, se tiene que A y B debe tomar la forma de una serie de potencias para obtener la solución final de las ecuaciones, por tanto, se propone como Ansatz:

$$A = \sum_{u=0}^{\infty} f_u p^u$$

$$B = \sum_{u=0}^{\infty} g_u p^u$$

Volviendo a las ecuaciones:

$$\left(\frac{d}{dp} - 1 + \frac{\kappa}{p} \right) f(p) - \left(\sqrt{\frac{mc^2 - E}{mc^2 + E}} - \frac{\alpha}{p} \right) g(p) = 0$$

$$\left(\frac{d}{dp} - 1 - \frac{\kappa}{p} \right) g(p) - \left(\sqrt{\frac{mc^2 + E}{mc^2 - E}} + \frac{\alpha}{p} \right) f(p) = 0$$

Con: $f(p) = Ap^\tau$; $g(p) = Bp^\tau$.

Y como se demostró previamente se tiene que: $\sqrt{\frac{mc^2 - E}{mc^2 + E}} = -\frac{E - mc^2}{\sqrt{(mc^2)^2 - E^2}}$; $\sqrt{\frac{mc^2 + E}{mc^2 - E}} = \frac{E + mc^2}{\sqrt{(mc^2)^2 - E^2}}$

Llamando al siguiente parámetro como:

$$q = \sqrt{(mc^2)^2 - E^2}$$

Se tiene reemplazando las soluciones $f(p) = Ap^\tau$; $g(p) = Bp^\tau$, en las ecuaciones, lo siguiente, para poder encontrar A y B con el ansatz propuesto:

$$\frac{d}{dp} Ap^\tau - Ap^\tau + \frac{\kappa}{p} Ap^\tau + \frac{E - mc^2}{q} Bp^\tau + \frac{\alpha}{p} Bp^\tau = 0$$

$$\frac{d}{dp} Bp^\tau - Bp^\tau - \frac{\kappa}{p} Bp^\tau - \frac{E + mc^2}{q} Ap^\tau + \frac{\alpha}{p} Ap^\tau = 0$$

Recordando que la derivada de una sumatoria es: $\frac{d}{dp} \sum_{u=0}^{\infty} f_u p^u = \sum_{u=1}^{\infty} u f_u p^{u-1} = \sum_{u=0}^{\infty} u f_u p^{u-1}$

$$\rightarrow \frac{d}{dp} Ap^\tau = \sum_{u=0}^{\infty} u f_u p^{u-1} p^\tau + \sum_{u=0}^{\infty} f_u p^u \tau p^{\tau-1} = \sum_{u=0}^{\infty} u f_u p^{u-1+\tau} + \tau f_u p^{u+\tau-1}$$

Entonces reemplazando el termino anterior en: $\frac{d}{dp} Ap^\tau - Ap^\tau + \frac{\kappa}{p} Ap^\tau + \frac{E - mc^2}{q} Bp^\tau + \frac{\alpha}{p} Bp^\tau = 0$

$$\begin{aligned}
& \sum_{u=0}^{\infty} u f_u p^{u-1+\tau} + \tau f_u p^{u+\tau-1} - \sum_{u=0}^{\infty} f_u p^u p^\tau + \frac{\kappa}{p} \sum_{u=0}^{\infty} f_u p^u p^\tau + \frac{E - mc^2}{q} \sum_{u=0}^{\infty} g_u p^u p^\tau + \frac{\alpha}{p} \sum_{u=0}^{\infty} g_u p^u p^\tau = 0 \\
& \sum_{u=0}^{\infty} u f_u p^{u-1+\tau} + \tau f_u p^{u+\tau-1} - \sum_{u=0}^{\infty} f_u p^{u+\tau} + \kappa \sum_{u=0}^{\infty} f_u p^{u+\tau-1} + \frac{E - mc^2}{q} \sum_{u=0}^{\infty} g_u p^{u+\tau} + \alpha \sum_{u=0}^{\infty} g_u p^{u+\tau-1} = 0 \\
& \sum_{u=0}^{\infty} u f_u p^{u-1+\tau} + \tau f_u p^{u+\tau-1} - \sum_{u=0}^{\infty} f_{u-1} p^{u-1+\tau} + \kappa \sum_{u=0}^{\infty} f_u p^{u+\tau-1} + \frac{E - mc^2}{q} \sum_{u=0}^{\infty} g_{u-1} p^{u-1+\tau} + \alpha \sum_{u=0}^{\infty} g_u p^{u+\tau-1} = 0 \\
& \underline{\underline{\sum_{u=0}^{\infty} \left[(u + \tau + \kappa) f_u - f_{u-1} + \frac{E - mc^2}{q} g_{u-1} + \alpha g_u \right] p^{u+\tau-1} = 0}}
\end{aligned}$$

Y haciendo un proceso análogo con: $\frac{d}{dp} B p^\tau - B p^\tau - \frac{\kappa}{p} B p^\tau - \frac{E+mc^2}{q} A p^\tau + \frac{\alpha}{p} A p^\tau = 0$, se obtiene que:

$$\underline{\underline{\sum_{u=0}^{\infty} \left[(u + \tau - \kappa) g_u - g_{u-1} - \frac{E + mc^2}{q} f_{u-1} - \alpha f_u \right] p^{u+\tau-1} = 0}}$$

Para que las dos ecuaciones con sumatorias resaltadas sean iguales a cero, se debe tener que:

$$\begin{aligned}
& (u + \tau + \kappa) f_u - f_{u-1} + \frac{E - mc^2}{q} g_{u-1} + \alpha g_u = 0 \\
& (u + \tau - \kappa) g_u - g_{u-1} - \frac{E + mc^2}{q} f_{u-1} - \alpha f_u = 0
\end{aligned}$$

Donde se manipularán las dos ecuaciones escritas previamente, para hallar una relación entre g_u y f_u , recordando que: $\tau = \sqrt{(\kappa^2 - \alpha^2)}$; $q = \sqrt{(mc^2)^2 - E^2}$. Este análisis como se describe posteriormente es el que permite obtener los valores permitidos de la energía, que por tanto cumplen con las condiciones propuestas, y dan solución a la ecuación:

Multiplicando por $E + mc^2$ la ecuación resaltada en verde:

$$\begin{aligned}
& E + mc^2 \left((u + \tau + \kappa) f_u - f_{u-1} + \alpha g_u \right) - \frac{(mc^2 - E)E + mc^2}{q} g_{u-1} = 0 \\
& \rightarrow E + mc^2 \left((u + \tau + \kappa) f_u - f_{u-1} + \alpha g_u \right) - q g_{u-1} = 0
\end{aligned}$$

Y por otro lado multiplicando por q la ecuación resaltada en azul:

$$q(u + \tau - \kappa) g_u - q g_{u-1} - (E + mc^2) f_{u-1} - q \alpha f_u = 0$$

Restando:

$$\begin{aligned}
& q(u + \tau - \kappa) g_u - q g_{u-1} - (E + mc^2) f_{u-1} - q \alpha f_u - \left[E + mc^2 \left((u + \tau + \kappa) f_u - f_{u-1} + \alpha g_u \right) - q g_{u-1} \right] = 0 \\
& \rightarrow -f_u (E + mc^2 (u + \tau + \kappa) + q \alpha) - g_u \left((E + mc^2) \alpha - q (u + \tau - \kappa) \right) = 0
\end{aligned}$$

Y por tanto la primera relación encontrada entre g_u y f_u es:

$$f_u = \frac{q(u + \tau - \kappa) - (E + mc^2) \alpha}{(E + mc^2)(u + \tau + \kappa) + q \alpha} g_u$$

Se tiene entonces que:

$$\begin{aligned}
& (u + \tau + \kappa) f_u - f_{u-1} + \frac{E - mc^2}{q} g_{u-1} + \alpha g_u = 0 \\
& (u + \tau - \kappa) g_u - g_{u-1} - \frac{E + mc^2}{q} f_{u-1} - \alpha f_u = 0
\end{aligned}$$

$$f_u = \frac{q(u + \tau - \kappa) - (E + mc^2)\alpha}{((E + mc^2)(u + \tau + \kappa) + q\alpha)} g_u$$

Estas tres ecuaciones previamente descritas son las que permiten encontrar los parámetros A y B, faltantes para hallar la solución final a la parte radial de la ecuación radial del átomo de hidrógeno de Dirac. Pero claramente A y B ($A = \sum_{u=0}^{\infty} f_u p^u$, $B = \sum_{u=0}^{\infty} g_u p^u$) son sumatorias que se proponen, que para que den solución a la ecuación, deben converger en algún punto, esto se traduce en que debe haber un $f_{u_{\max}}$ y $g_{u_{\max}}$ tal que: $f_{u_{\max}+1} = g_{u_{\max}+1} = 0$. Reemplazando dichos términos se tiene que:

$$(u + \tau + \kappa)f_{u_{\max}+1} - f_{u_{\max}+1-1} + \frac{E - mc^2}{q} g_{u_{\max}+1-1} + \alpha g_{u_{\max}+1} = 0 \rightarrow f_{u_{\max}} = \frac{E - mc^2}{q} g_{u_{\max}}$$

$$(u + \tau - \kappa)g_{u_{\max}+1} - g_{u_{\max}+1-1} - \frac{E + mc^2}{q} f_{u_{\max}+1-1} - \alpha f_{u_{\max}+1} = 0 \rightarrow g_{u_{\max}} = -\frac{E + mc^2}{q} f_{u_{\max}}$$

de lo que se obtiene que:

$$f_{u_{\max}} = \frac{E - mc^2}{q} g_{u_{\max}}$$

$$g_{u_{\max}} = -\frac{E + mc^2}{q} f_{u_{\max}}$$

Y también que:

$$f_{u_{\max}} = \frac{q(u_{\max} + \tau - \kappa) - (E + mc^2)\alpha}{((E + mc^2)(u_{\max} + \tau + \kappa) + q\alpha)} g_{u_{\max}}$$

Por lo tanto, es posible establecer las siguientes relaciones:

$$\frac{f_{u_{\max}}}{g_{u_{\max}}} = \frac{E - mc^2}{q} = \frac{q(u_{\max} + \tau - \kappa) - (E + mc^2)\alpha}{((E + mc^2)(u_{\max} + \tau + \kappa) + q\alpha)}$$

$$\rightarrow \frac{E - mc^2}{q} = \frac{q(u_{\max} + \tau - \kappa) - (E + mc^2)\alpha}{((E + mc^2)(u_{\max} + \tau + \kappa) + q\alpha)}$$

La expresión señalada en naranja relaciona entonces el término máximo que hace converger la sumatoria de los términos A y B, y que permiten por tanto dar solución a la ecuación radial de Dirac, para el átomo de hidrógeno. Se puede observar que tiene relación directa con la energía, es decir que solo ciertos valores de energía permiten solucionar la ecuación, y son a su vez los valores propios de la energía en el átomo de hidrógeno de Dirac.

Se despeja E ahora de la expresión naranja:

$$\frac{E - mc^2}{q} ((E + mc^2)(u_{\max} + \tau + \kappa) + q\alpha) + (E + mc^2)\alpha - q(u_{\max} + \tau - \kappa) = 0$$

$$\text{recuerde } q = \sqrt{(mc^2)^2 - E^2} = \sqrt{(mc^2 - E)(mc^2 + E)}$$

$$\frac{E - mc^2 \cdot (E + mc^2)}{q} (u_{\max} + \tau + \kappa) + (E - mc^2)\alpha + (E + mc^2)\alpha - q(u_{\max} + \tau - \kappa) = 0$$

Entonces:

$$\begin{aligned}
& -q(u_{\max} + \tau + \kappa) + (E - mc^2)\alpha + (E + mc^2)\alpha - q(u_{\max} + \tau - \kappa) = 0 \\
& -qu_{\max} - q\tau - q\kappa + E\alpha - mc^2\alpha + E\alpha + mc^2\alpha - qu_{\max} - q\tau + q\kappa = 0 \\
& -qu_{\max} - q\tau + E\alpha + E\alpha - qu_{\max} - q\tau = 0 \\
& 2E\alpha - 2qu_{\max} - 2q\tau = 0 \\
& E\alpha = q(u_{\max} + \tau)
\end{aligned}$$

$$\rightarrow E^2\alpha^2 = q^2(u_{\max} + \tau)^2$$

Recordando que: $q = \sqrt{(mc^2)^2 - E^2}$; $\tau = \sqrt{(\kappa^2 - \alpha^2)}$, se tiene que:

$$E^2\alpha^2 = \left((mc^2)^2 - E^2 \right) \left(u_{\max} + \sqrt{(\kappa^2 - \alpha^2)} \right)^2$$

$$E^2\alpha^2 = (m^2c^4 - E^2) \left(u_{\max} + \sqrt{(\kappa^2 - \alpha^2)} \right)^2$$

$$E^2\alpha^2 = m^2c^4 \left(u_{\max} + \sqrt{(\kappa^2 - \alpha^2)} \right)^2 - E^2 \left(u_{\max} + \sqrt{(\kappa^2 - \alpha^2)} \right)^2$$

$$E^2\alpha^2 + E^2 \left(u_{\max} + \sqrt{(\kappa^2 - \alpha^2)} \right)^2 = m^2c^4 \left(u_{\max} + \sqrt{(\kappa^2 - \alpha^2)} \right)^2$$

$$E^2 \left(\alpha^2 + \left(u_{\max} + \sqrt{(\kappa^2 - \alpha^2)} \right)^2 \right) = m^2c^4 \left(u_{\max} + \sqrt{(\kappa^2 - \alpha^2)} \right)^2$$

$$E^2 = m^2c^4 \frac{\left(u_{\max} + \sqrt{(\kappa^2 - \alpha^2)} \right)^2}{\left(\alpha^2 + \left(u_{\max} + \sqrt{(\kappa^2 - \alpha^2)} \right)^2 \right)}$$

$$E^2 = m^2c^4 \frac{\left(u_{\max} + \sqrt{(\kappa^2 - \alpha^2)} \right)^2}{\left(u_{\max} + \sqrt{(\kappa^2 - \alpha^2)} \right)^2 \left(\frac{\alpha^2}{\left(u_{\max} + \sqrt{(\kappa^2 - \alpha^2)} \right)^2} + 1 \right)}$$

$$E^2 = m^2c^4 \frac{1}{\left(\frac{\alpha^2}{\left(u_{\max} + \sqrt{(\kappa^2 - \alpha^2)} \right)^2} + 1 \right)}$$

$$E = mc^2 \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{\left(u_{\max} + \sqrt{(\kappa^2 - \alpha^2)} \right)^2}}}$$

$$\rightarrow E = mc^2 \left[1 + \frac{\alpha^2}{\left(u_{\max} + \sqrt{\kappa^2 - \alpha^2} \right)^2} \right]^{-1/2}$$

Donde finalmente reemplazando $\kappa = \left(j + \frac{1}{2} \right)$, que son los valores propios del operador K que propuso Dirac, como se describió previamente; y teniendo en cuenta que u_{\max} es un valor numérico, que hace converger la sumatoria, teniendo en cuenta que la expresión resaltada para la energía ya se conocía desde la época de Sommerfeld, y luego con la ecuación de Klein-Gordon y los experimentos respectivos se tenía en cuenta que: $u_{\max} = n - \kappa = n - \left(j + \frac{1}{2} \right)$, siendo n el número cuántico principal que representa el nivel de la energía. Por tanto, Walter Gordon y

Charles Galton Darwin, encontraron que efectivamente los valores propios para el átomo de hidrógeno de Dirac son:

$$\rightarrow E = mc^2 \left[1 + \frac{\alpha^2}{\left(n - \left(j + \frac{1}{2} \right) + \sqrt{\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - \alpha^2} \right)^2} \right]^{-1/2}$$

Finalmente, con los valores de energía establecidos, se puede continuar el procedimiento para encontrar las relaciones de recurrencia finales que le dan solución a los espinores de Dirac, $F(r)$ y $G(r)$, que solucionan el átomo de hidrógeno en su forma completa. Sin embargo, dicho procedimiento y solución requiere de un análisis adicional que no está dentro de los alcances del presente trabajo, pero que se puede consultar en distintos libros que tienen apartados de mecánica cuántica relativista y que solucionan de forma completa el átomo de Hidrógeno para la ecuación de Dirac como: (Introducción a la mecánica cuántica, Luis de la peña, 2013).