

Presentem la quantificació de camps de bosons i fermions. Quantifiquem el camp de Klein-Gordon i el seu límit no relativista: el camp complex de Schrödinger. Mostrem la relació entre l'equació de Schrödinger i la de Dirac.

Quantificació del camp. Segon quantificació.

Josep Planelles

El camp escalar real de Klein-Gordon

És el cas del camp real en el que la Lagrangiana conté un terme d'energia potencial proporcional al camp. En unitats naturals ($c = \hbar = 1$) i la notació $\partial_\mu = \partial_t - \nabla$, escrivim aquesta Lagrangiana en la forma: $\mathcal{L} = \frac{1}{2}(\partial_\mu \phi)^2 - \frac{1}{2}m^2 \phi^2$. Explicitant les coordenades i emprant unitats arbitràries $\mathcal{L} = \frac{1}{2} \frac{1}{c^2} (\partial_t \phi)^2 - \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 - \frac{1}{2} \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \phi^2$.

Si injectem aquesta $\mathcal{L}$ en l'equació d'Euler-Lagrange, $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} - \nabla \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \phi} = 0$, on $\dot{\phi} = \partial_t \phi$, des de: $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} = -\frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \phi$; $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} = \frac{1}{c^2} \dot{\phi}$; $-\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} = -\frac{1}{c^2} \frac{d^2 \phi}{dt^2}$; $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \phi} = -\nabla \phi$; $-\nabla \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \phi} = \nabla^2 \phi$ trobem:

$$-\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{d^2 \phi}{dt^2} + \hbar^2 \nabla^2 \phi = m^2 c^2 \phi$$

que és l'equació de Klein-Gordon.¹

El camp escalar complex

Considerem dos camps ϕ_1 i ϕ_2 reals diferents amb la mateixa massa (massa degenerada), cadascun solució de l'equació de Klein-Gordon $\partial_\mu^2 \phi_1 + m^2 \phi_1 = 0$, $\partial_\mu^2 \phi_2 + m^2 \phi_2 = 0$. Podem definir el camp complex $\phi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + i\phi_2)$ i el seu adjunt $\phi^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - i\phi_2)$. Atès que ϕ_1 i ϕ_2 són diferents, $\phi^+ \neq \phi$ (el camp no és hermitic). Tanmateix, és immediat comprovar que ϕ i ϕ^+ donen compliment a l'equació de Klein-Gordon: $\partial_\mu^2 \phi + m^2 \phi = 0$, $\partial_\mu^2 \phi^+ + m^2 \phi^+ = 0$.

A partir de la Lagrangiana de cada camp real, $\mathcal{L} = \frac{1}{2} \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)^2 - \frac{1}{2} m^2 \phi^2$, que escrivim en notació compacta, $\mathcal{L} = \frac{1}{2} [\partial_\mu \phi]^2 - \frac{1}{2} m^2 \phi^2$, podem escriure una única lagrangiana que genera les dues equacions dinàmiques: $\mathcal{L} = \frac{1}{2} [\partial_\mu \phi_1]^2 - \frac{1}{2} m^2 \phi_1^2 + \frac{1}{2} [\partial_\mu \phi_2]^2 - \frac{1}{2} m^2 \phi_2^2$.

Si escrivim la norma $[\partial_\mu \phi_1]^2$ del vector $\partial^\mu \phi_1$ en la forma $\partial_\mu \phi_1 \partial^\mu \phi_1$ (∂^μ representa el vector columna i ∂_μ el transposat en forma de matriu fila) i calculem:

$$\mathcal{L} = \partial_\mu \phi^+ \partial^\mu \phi - m^2 \phi^+ \phi = \frac{1}{2} \partial_\mu (\phi_1 - i\phi_2) \partial^\mu (\phi_1 + i\phi_2) - \frac{1}{2} m^2 (\phi_1 - i\phi_2)(\phi_1 + i\phi_2)$$

Tenint en compte que, per ser reals els camps ϕ_i , aleshores, $\partial_\mu \phi_i \partial^\mu \phi_i = [\partial_\mu \phi_i]^2$, i també $(\phi_1 - i\phi_2)(\phi_1 + i\phi_2) = \phi_1^2 + \phi_2^2$, trobem:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} [\partial_\mu \phi_1]^2 + \frac{1}{2} [\partial_\mu \phi_2]^2 - \frac{1}{2} m^2 \phi_1^2 - \frac{1}{2} m^2 \phi_2^2$$

La Lagrangiana $\mathcal{L} = \partial_\mu \phi^+ \partial^\mu \phi - m^2 \phi^+ \phi$ és suma de les Lagrangianes dels dos camps reals que constitueixen el camp complex i, en termes del camp complex, resulta ser idèntica a la de cada component real (excepte el factor $\frac{1}{2}$).²

¹ L'equació de Klein-Gordon, $-\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \hbar^2 \nabla^2 \phi = m^2 c^2 \phi$, en unitats naturals ($c = \hbar = 1$) la podem escriure en la forma $\partial_\mu^2 \phi + m^2 \phi = 0$, on ∂_μ^2 representa, $\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2$.

² Fem notar que injectar " $\mathcal{L}$ " o " $2 \mathcal{L}$ " en l'equació d'Euler-Lagrange genera la mateixa equació dinàmica.

Si escrivim la Lagrangiana en termes dels camps reals podem definir el moments conjugats de cada camp: $\Pi_i(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}_i} = \dot{\phi}_i$ amb $i = 1, 2$. També podem definir els moments conjugats dels camps complexos ϕ i ϕ^+ :

$$\Pi(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}^+(x)} = \dot{\phi}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Pi_1(x) + i\Pi_2(x))$$

$$\Pi^+(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}(x)} = \dot{\phi}^+(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Pi_1(x) - i\Pi_2(x))$$

Les relacions de commutació del camp complex les podem calcular a partir de les del camps reals. Són totes zero, excepte $[\phi(x), \Pi^+(y)] = [\phi^+(x), \Pi(y)] = i \delta^3(x - y)$.

Límit no relativista de la Lagrangiana escalar complexa

Cas de ser ϕ un camp complex, la Lagrangiana $\mathcal{L} = \frac{1}{2} \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 - \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 - \frac{1}{2} m^2 \phi^2$ ha de ser modificada amb els següents canvis: $\dot{\phi}^2 \rightarrow \dot{\phi}^+ \dot{\phi}$, $\phi^2 \rightarrow \phi^+ \phi$ i $(\nabla \phi)^2 \rightarrow \nabla \phi^+ \nabla \phi$.

Escrivim ara el següent *ansatz* per al camp: $\phi = e^{i\alpha t} \Psi$, $\phi^+ = e^{-i\alpha t} \Psi^+$ amb $\alpha = mc^2/\hbar$ i calculem les derivades que apareixen en la Lagrangiana:

$$\frac{\partial \phi^+}{\partial t} = e^{-i\alpha t} (\dot{\Psi}^+ - i\alpha \Psi^+) \quad ; \quad \frac{\partial \phi}{\partial t} = e^{i\alpha t} (\dot{\Psi} + i\alpha \Psi);$$

$$\rightarrow \frac{\partial \phi^+}{\partial t} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \dot{\Psi}^+ \dot{\Psi} + \alpha^2 \Psi^+ \Psi + i\alpha (\dot{\Psi}^+ \Psi - \Psi^+ \dot{\Psi})$$

Aleshores, la Lagrangiana queda escrita en la forma:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \frac{1}{c^2} \dot{\Psi}^+ \dot{\Psi} + \frac{i m}{2\hbar} (\dot{\Psi}^+ \Psi - \Psi^+ \dot{\Psi}) - \frac{1}{2} \nabla \Psi^+ \nabla \Psi$$

En el límit no relativista, el terme que va dividit per c^2 és rebutjable enfront dels altres, de manera que la Lagrangiana no relativista queda resumida a:

$$\mathcal{L}_{nr} = \frac{i m}{2\hbar} (\dot{\Psi}^+ \Psi - \Psi^+ \dot{\Psi}) - \frac{1}{2} \nabla \Psi^+ \nabla \Psi$$

Si introduïm aquesta $\mathcal{L}_{nr}$ en l'equació d'Euler-Lagrange, $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} - \nabla \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \phi} = 0$, ens trobem les següents derivades:

$$\frac{\partial \mathcal{L}_{nr}}{\partial \Psi^+} = \frac{i m}{2\hbar} \dot{\Psi} \quad ; \quad \frac{\partial \mathcal{L}_{nr}}{\partial \dot{\Psi}^+} = -\frac{i m}{2\hbar} \Psi \quad ; \quad -\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}_{nr}}{\partial \dot{\Psi}^+} = \frac{i m}{2\hbar} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad ; \quad \frac{\partial \mathcal{L}_{nr}}{\partial \nabla \Psi^+} = -\frac{1}{2} \nabla \Psi \quad ; \quad -\frac{d}{d\nabla} \frac{\partial \mathcal{L}_{nr}}{\partial \nabla \Psi^+} = \frac{1}{2} \nabla^2 \Psi \quad ;$$

que substituïdes en l'equació d'Euler-Lagrange donen lloc a:

$$\frac{i m}{2\hbar} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{i m}{2\hbar} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla^2 \Psi = 0 \rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi}$$

que és l'equació de Schrödinger per a una partícula lliure.

El camp escalar complex amb interacció

Considerem dos camps ϕ_1 i ϕ_2 reals diferents amb la mateixa massa i que interaccionen entre si amb un potencial $U(\phi_1, \phi_2) = g (\phi_1^2 + \phi_2^2)^2$, on g és la intensitat de la interacció. Aquest potencial inclou self-energy en el terme ϕ_i^4 i un terme creuat $2\phi_1^2 \phi_2^2$ que fa que els dos camps

interaccionen.³ Aleshores si, com adés, definim el camp complex $\phi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + i\phi_2)$ i el seu adjunt $\phi^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - i\phi_2)$, atès que $2\phi^+\phi = \phi_1^2 + \phi_2^2$, el terme potencial d'interacció que cal restar a la Lagrangiana el podem escriure en la forma $U = 4g(\phi^+\phi)^2$. Si incloem el factor 4 dins de la intensitat de la interacció g i assumim unitats naturals ($c = \hbar = 1$), podem escriure la Lagrangiana en la forma $\mathcal{L} = \partial_\mu \phi^+ \partial^\mu \phi - m^2 \phi^+ \phi - g(\phi^+\phi)^2$.

Límit no relativista de la Lagrangiana escalar complexa amb interacció

Lagrangiana complexa amb interacció simplement conté el terme extra $V = -g(\phi^+\phi)^2$ respecte la que no té interacció. Aleshores, si fem ús de l'*ansatz* $\phi = e^{i\alpha t} \Psi$, $\phi^+ = e^{-i\alpha t} \Psi^+$ amb $\alpha = mc^2/\hbar$ per al camp, hi ha prou en afegir a Lagrangiana aquest terme addicional que simplement resulta $V = -g(\phi^+\phi)^2 = -g(\Psi^+\Psi)^2$,

$$\mathcal{L}_{nr} = \frac{i m}{2\hbar} (\dot{\Psi}^+ \Psi - \Psi^+ \dot{\Psi}) - \frac{1}{2} \nabla \Psi^+ \nabla \Psi - g(\Psi^+ \Psi)^2$$

Si introduïm $\mathcal{L}_{nr}$ en l'equació d'Euler-Lagrange, $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} - \nabla \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \phi} = 0$, apareix la derivada addicional $\frac{\partial V}{\partial \Psi^+} = -\frac{\partial g(\Psi^+ \Psi)^2}{\partial \Psi^+} = -2g\Psi^+ \Psi$, a més de les que ja havíem trobat en el cas de no interacció ($g = 0$). La inclusió de la qual en el límit no relativista, on rebutgem el terme que va dividit per c^2 , de l'equació d'Euler-Lagrange dóna lloc a:

$$\frac{i m}{2\hbar} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{i m}{2\hbar} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla^2 \Psi - 2g\Psi^+ \Psi = 0$$

Límit no relativista de la Lagrangiana escalar complexa amb sense self-energy ($g = 0$) però en presència d'un potencial extern $V(x)$ que entra en la forma $V\Psi^+\Psi$

En l'apartat anterior hem obtingut la Lagrangiana del límit no relativista la qual, sense interacció, $g = 0$, resulta: $\mathcal{L}_{nr} = \frac{i m}{2\hbar} (\dot{\Psi}^+ \Psi - \Psi^+ \dot{\Psi}) - \frac{1}{2} \nabla \Psi^+ \nabla \Psi$. Aquesta Lagrangiana amb les equacions d'Euler-Lagrange genera la mateixa equació de moviment que si la multipliquem per un número. Multipliquem $\mathcal{L}_{nr}$ per $\frac{\hbar^2}{m}$ i afegim el potencial extern $V(x)\Psi^+\Psi$:

$$\mathcal{L}_{nr} = \frac{i \hbar}{2} (\dot{\Psi}^+ \Psi - \Psi^+ \dot{\Psi}) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \Psi^+ \nabla \Psi - V(x)\Psi^+\Psi$$

La derivada addicional és ara: $\frac{\partial V}{\partial \Psi^+} = -\frac{\partial V(x)\Psi^+\Psi}{\partial \Psi^+} = -V(x)\Psi$, i Euler-Lagrange dóna lloc a:

$$i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi - V(x)\Psi = 0 \rightarrow \boxed{i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(x)\Psi}$$

que és l'equació de Schrödinger. S'aplega al mateix resultat amb $\mathcal{L}_{nr}$ si introduïm el potencial escalat $(m/\hbar^2)V\Psi^+\Psi$. Fem notar que si usem unitats atòmiques: $\hbar = m = 1$.

³ Fem notar que l'equació d'Euler-Lagrange per a cada camp depèn de la derivada del potencial respecte a aquest camp. Per exemple, la contribució del terme creuat en l'equació del moviment de ϕ_1 serà proporcional a $\partial U / \partial \phi_1$ que conté el terme $4g\phi_1(\phi_1^2 + \phi_2^2)$. Això implica que l'evolució de ϕ_1 depèn de ϕ_2 i viceversa, establint així una interacció efectiva entre ambdós camps. Tanmateix, com els dos camps estan sota la influència del potencial $U(\phi_1, \phi_2)$, quan un camp pren cert valor, modifica el potencial efectiu que veu l'altre camp, cosa que vol dir que la presència d'un camp afecta la dinàmica de l'altre, fent que els dos camps estiguin acoblats

Més sobre el camp clàssic de Schrödinger

Hem vist a l'apartat anterior que l'equació de Schrödinger pot ser vista com l'equació d'Euler-Lagrange per a la densitat Lagrangiana $\mathcal{L}$ definida per l'expressió:⁴

$$\mathcal{L} = i \frac{\hbar}{2} (\Psi^* \dot{\Psi} - \dot{\Psi}^* \Psi) - \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \Psi^* \cdot \vec{\nabla} \Psi - V \Psi^* \Psi$$

En efecte, l'equació d'Euler-Lagrange,⁵ $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi^*} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}^*} \right) - \vec{\nabla} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{\nabla} \Psi^*} \right) = 0$, amb els càlculs:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi^*} = i \frac{\hbar}{2} \dot{\Psi} - V \Psi; \quad -\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}^*} \right) = i \frac{\hbar}{2} \frac{d\Psi}{dt} = i \frac{\hbar}{2} \dot{\Psi}; \quad -\vec{\nabla} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{\nabla} \Psi^*} \right) = \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \vec{\nabla} \Psi = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi$$

inserir en ella, dóna lloc a: $i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi$, que és l'equació de Schrödinger.

Anàlogament, per ser el camp $\Psi(x, t)$ complex i, per tant ser equivalent a dos camps reals $Re\Psi(x, t)$ i $Im\Psi(x, t)$, hauríem de obtenir dues equacions de camp acoblades fent variar independentment $\delta Re\Psi(x, t)$ i $\delta Im\Psi(x, t)$. Tanmateix, és més fàcil derivar les equacions de camp, en una forma manifestament complexa, considerant que $\delta\Psi(x, t)$ i $\delta\Psi^*(x, t)$ són de fet dues variables independents i, per tant, tenir dos jocs d'equacions d'Euler-Lagrange:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi^*} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}^*} \right) - \vec{\nabla} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{\nabla} \Psi^*} \right) = 0 \quad \text{i} \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}} \right) - \vec{\nabla} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{\nabla} \Psi} \right) = 0$$

De la primera ja hem obtingut l'equació de Schrödinger. De la segona obtenim el complex conjugat de l'equació.

Hi ha però més Lagrangianes que donen lloc a la mateixa equació dinàmica de Schrödinger. En el llibre de Haken⁶ se proposa la Lagrangiana següent:

$$\mathcal{L} = \Psi^* \left(i\hbar \dot{\Psi} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi - V(x) \Psi \right)$$

De manera tenim dos conjunts de variables, $(\Psi^*, \dot{\Psi}^*)$ i $(\Psi, \dot{\Psi})$. Amb el primer joc, com $\dot{\Psi}^*$ no apareix en la definició de $\mathcal{L}$, l'equació d'Euler-Lagrange se resumeix a $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi^*} = 0$, que dóna lloc a:

$$i\hbar \dot{\Psi} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi - V(x) \Psi = 0$$

que és l'equació de Schrödinger

Del segon joc, si tenim en compte que: $\Psi^* \nabla^2 \Psi = \nabla(\Psi^* \nabla \Psi) - \nabla(\Psi \nabla \Psi^*) + \Psi \nabla^2 \Psi^*$, tenim $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^* - V(x) \Psi^*$. Tanmateix, $-\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}} \right) = -\frac{d}{dt} i\hbar \Psi^* = -i\hbar \dot{\Psi}^*$, donant lloc a:

$$-i\hbar \dot{\Psi}^* + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^* - V(x) \Psi^* = 0$$

que és la conjugada de l'equació de Schrödinger.

⁴ Aquesta $\mathcal{L}$ és la que hem obtingut en l'apartat anterior multiplicada per $\frac{\hbar^2}{m}$, per tant dóna lloc a la mateixa equació dinàmica, com mostrem ací i es la forma més habitual de presentar la Lagrangiana de l'equació de Schrödinger, veure e.g. l'eq. 5 en A.A. Deriglazov, *Phys. Lett. A* 373 (2009) 3920–3923.

⁵ Veure apunts "ones i partícules"

⁶ H. Haken, *Quantum Field Theory of Solids, an Introduction*, North-Holland 1983

El moment conjugat de Ψ , $\Pi(x, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}} = i\hbar \Psi^*$, ens permet escriure la densitat Hamiltoniana,

$$\mathcal{H} = \Pi(x, t)\dot{\Psi}(x, t) - \mathcal{L} = \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(x)\Psi \right) = \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right) \Psi$$

i, per tant, l'hamiltonià: $H = \int \mathcal{H} dx = \int \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right) \Psi dx$

on reconeixem el terme entre parèntesis com l'hamiltonià d'una partícula sota l'acció d'un potencial $V(x)$. Aquest operador té un conjunt d'auto-funcions i autovalors,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right) \phi_\mu(x) = E_\mu \phi_\mu(x),$$

de manera que els estats estacionaris $\phi_\mu(x, t)$ són el producte de $\phi_\mu(x)$ per una fase imaginària, $e^{-i E_\mu t/\hbar}$, que és funció del temps. Els estats generals són una combinació lineal d'aquests,

$$\Psi(x, t) = \sum_{\mu} b_{\mu}(0) e^{-i E_{\mu} t/\hbar} \phi_{\mu}(x) \equiv \sum_{\mu} b_{\mu}(t) \phi_{\mu}(x)$$

Per tant, $b_{\mu}(t) = \int dx \Psi(x, t) \phi_{\mu}^*(x)$.

De manera anàloga, $\Psi^*(x, t) = \sum_{\mu} b_{\mu}^+(t) \phi_{\mu}^*(x)$ i, per tant, $b_{\mu}^+(t) = \int dx \Psi^*(x, t) \phi_{\mu}(x)$.

Tornant sobre l'hamiltonià: H , substituint $\Psi(x, t)$, $\Psi^*(x, t)$ trobem:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\mu, \nu} \int b_{\mu}^+(t) \phi_{\mu}^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right) b_{\nu}(t) \phi_{\nu}(x) dx = \\ &= \sum_{\mu, \nu} \int b_{\mu}^+(t) \phi_{\mu}^*(x) E_{\nu} b_{\nu}(t) \phi_{\nu}(x) dx = \sum_{\mu} E_{\mu} b_{\mu}^+(t) b_{\mu}(t) \end{aligned}$$

Si comparem aquest resultat amb el camp quàntic de Klein-Gordon i la seua quantificació⁷ observem que l'equació a que hem aplegat per a l'Hamiltoniana és idèntica a la que obtinguérem allí per a la cadena d'oscil·ladors harmònics: és una suma de les energies dels diferents estats multiplicades pel terme $b_{\mu}^+(t) b_{\mu}(t) = b_{\mu}^+(0) b_{\mu}(0) = n_{\mu}$ que representa la població de l'estat ϕ_{μ} . Podem ara procedir a quantificar el camp de Schrödinger⁸ substituint els coeficients $b_{\mu}^+(t)$, $b_{\mu}(t)$ per operadors b_{μ}^+ , b_{μ} amb les regles de commutació $[b_{\mu}, b_{\nu}^+] = \delta_{\mu\nu}$, $[b_{\mu}, b_{\nu}] = 0$, $[b_{\mu}^+, b_{\nu}^+] = 0$, obtenint així l'Hamiltonià en segon quantificació d'un sistema bosònic.⁹

El cas concret de l'oscil·lador

En l'apartat anterior hem obtingut una expressió en segon quantificació de l'operador Hamiltonià d'una partícula en un potencial $V(\mathbf{r})$ després de quantificar l'equació de Schrödinger

⁷https://www3.uji.es/~planelle/APUNTS/QFT/camps_per_curiosos.pdf, J. Planelles 2025, *Teoria de camps per amateurs i curiosos*.

⁸ D'ací prové el nom segon quantificació, atès que l'equació de Schrödinger ja és el resultat de la quantificació de les equacions clàssiques de la mecànica.

⁹ Més en davant mostrarem perquè diem que si fem ús de $[b_{\mu}, b_{\nu}^+] = \delta_{\mu\nu}$, $[b_{\mu}, b_{\nu}] = [b_{\mu}^+, b_{\nu}^+] = 0$ quantifiquem un sistema bosònic i no un fermiònic.

com si fos un camp clàssic: $H = \sum_i^\infty E_i b_i^+ b_i = \sum_i^\infty E_i n_i$, on la suma s'estén als infinits estats propis i els operadors de creació i aniquilació tenen les mateixes regles de commutació que la dels operadors de la cadena d'oscil·ladors harmònics simples: $[b_i, b_j^+] = \delta_{ij}$, $[b_i, b_j] = 0$, $[b_i^+, b_j^+] = 0$. Aquest Hamiltonià pot representar un sistema amb múltiples nivells o modes (per exemple, un sistema de partícules independents o un camp quàntic). Cada mode i té els seu propis operadors b_i, b_i^+ que actuen sobre aquest mode exclusivament. Per exemple,

$$b_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle$$

El estats venen representats pels nombres d'ocupació (o nivell) de cada mode.¹⁰ En el cas de l'oscil·lador harmònic simple sols hi ha un mode normal $|n_i\rangle$ i per tant, només un operador de creació b^+ i un d'aniquilació b , de manera que $[b, b^+] = 1$, $[b, b] = [b^+, b^+] = 0$, l'Hamiltonià és resumeix a $H = \hbar\omega b^+ b$,¹¹ i l'operador nombre $n = b^+ b$, que no és més que $H/\hbar\omega$, ens dona el nivell energètic. Interpretem alternativament que el mode està n vegades excitat (i per tant té una energia $n\hbar\omega$) o que hi ha n partícules en el mode (i per tant té una energia n vegades $\hbar\omega$).

Si considerem un estat de l'oscil·lador harmònic simple $|\Psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle$, els quadrat del mòdul dels coeficients $|c_i|^2$ són el nombre fraccionar d'ocupació del nivell $|i\rangle$. El valor mitjà de l'energia $\langle E \rangle = \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \sum_{i,j} c_i^* c_j \hbar\omega \langle i | b^+ b | j \rangle = \sum_{i,j} c_i^* c_j \hbar\omega j \delta_{ij} = \sum_i |c_i|^2 \hbar\omega i$.

Hamiltonià d'un sistema fermiònic en segon quantificació

Sabem que en tres o més dimensions sols hi ha dos tipus de partícules: fermions, com per exemple els electrons, que estan descrits per funcions antisimètriques respecte el bescavi de partícules idèntiques i presenten la característica que els nombres d'ocupació sols poden ser zero o la unitat (dos electrons no poden tindre els quatre nombres quàntics iguals), i bosons, com per exemple els fotons, que estan descrits per funcions simètriques respecte el bescavi de partícules idèntiques i no tenen restriccions en el valor del nombre d'ocupació.¹²

Si representem els estats de sistemes independent pel nombres d'ocupació $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$, la regla de commutació $[b_i^+, b_j^+] = 0$ implica que les funcions d'ona són simètriques respecte el bescanvi de les dues partícules: $b_i^+ b_j^+ |0\rangle = b_j^+ b_i^+ |0\rangle \rightarrow |i, j\rangle = |j, i\rangle$.

Si volem que la funció siga antisimètrica cal que $\{b_i^+, b_j^+\} = 0$, és a dir cal que els operadors anticommen: ¹³ $b_i^+ b_j^+ |0\rangle = -b_j^+ b_i^+ |0\rangle \rightarrow |i, j\rangle = -|j, i\rangle$.

Per tant, una volta obtingut l'Hamiltonià en el límit no relativista $H = \sum_\mu^\infty E_\mu b_\mu^+(t) b_\mu(t)$ si procedim a quantificar substituint els coeficients $b_\mu^+(t), b_\mu(t)$ per operadors b_μ^+, b_μ amb les regles de commutació $[b_\mu, b_\nu^+] = \delta_{\mu\nu}$, $[b_\mu, b_\nu] = 0$, $[b_\mu^+, b_\nu^+] = 0$, obtenint l'Hamiltonià en segon quantificació d'un sistema bosònic. Aquesta forma de quantificar permet definir els

¹⁰ Acceptar una ocupació superior a la unitat en un mode és incompatible amb el caràcter fermiònic (una ocupació superior a la unitat és una característica dels bosons), per això diem que quantificar amb $[b_\mu, b_\nu^+] = \delta_{\mu\nu}$, $[b_\mu, b_\nu] = 0$, $[b_\mu^+, b_\nu^+] = 0$, dona lloc a un camp quàntic bosònic.

¹¹ La forma més habitual de l'operador: $H = \hbar\omega (a^+ a + \frac{1}{2})$, és idèntica, excepte que dona lloc a unes energies desplaçades $\hbar\omega/2$ respecte l'origen d'energies. En teoria de camps es corregeix l'origen d'energies per evitar que la suma d'energies fonamentals dels infinits modes siga infinita.

¹² Més detalls en <https://www3.uji.es/~planelle/APUNTS/QQ/PpiPauli.pdf>

¹³ Més detalls en <https://www3.uji.es/~planelle/APUNTS/QQ/SUSY.pdf>

operadors $\hat{\psi}(t, x)$, $\hat{\psi}^+(t, x)$ que aniquila/crea una partícula en un lloc específic de l'espai. L'operador camp $\hat{\psi}(t, x)$ té un moment canònic conjugat $\Pi^0(t, x)$ amb regles de commutació $[\hat{\psi}(t, x), \Pi^0(t, y)] = i\hbar\delta(x - y)$ que recorda la regla de commutació $[x, p] = i\hbar$ de la mecànica quàntica.¹⁴

Que passa amb la anticommutació? Que passa amb els fermions?

Si volem quantificar un camp fermiònic, cal substituir els coeficients $b_\mu^+(t)$, $b_\mu(t)$ per operadors b_μ^+ , b_μ amb les regles d'anticommutació $\{b_\mu, b_\nu^+\} = \delta_{\mu\nu}$, $\{b_\mu, b_\nu\} = 0$, $\{b_\mu^+, b_\nu^+\} = 0$, per tal de garantir el compliment del principi de Pauli. La consideració d'aquestes regles entre creadors i aniquiladors comporta, de manera anàloga al que passava amb bosons, anticommutació del camp fermiònic i el moment conjugat, $\Pi^0(t, x) = i\hbar\hat{\psi}^+(t, x)$, $\{\hat{\psi}(t, x), \Pi^0(t, y)\} = i\hbar\delta(x - y)$, perdent-se així l'analogia amb la commutació de coordenada i moment. Els commutadors bosònics passen a ser anticommutadors fermiònics. Per exemple, els bosons donen compliment a la commutació $[\hat{\psi}(t, y), \hat{\psi}^+(t, x)] = \delta^3(x - y)$, mentre que els fermions donen compliment a l'anticommutació: $\{\hat{\psi}^+(t, x), \hat{\psi}(t, y)\} = \delta^3(x - y)$.

Un punt important a subratllar és que tant en bosons com en fermions, els operadors de camp han de *respectar la causalitat relativista*. Això implica que els operadors locals en punts de l'espai-temps separats per intervals *no causals* (és a dir, punts que no poden comunicar-se amb senyals a velocitat menor o igual que la de la llum, anomenats punts amb *separació espacial*¹⁵) han de ser compatibles, a més d'hermítics, si corresponen a magnituds físiques mesurables. Això vol dir que no han d'interferir. En termes matemàtics, vol dir que han de commutar, de manera que no importa l'ordre en què una magnitud i altra són mesurades.¹⁶

Els operadors d'observables poden construir-se a partir del camp. Per exemple, escrivim l'hamiltonià en la forma: $\hat{H} = \int d^3x \hat{\psi}^+(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x)\right) \hat{\psi}(x)$, o la densitat de nombre de partícules com: $\hat{n} = \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}(x)$, etc. La commutació dels operadors associats a observables compatibles bosònics queda garantida des de la commutació nul·la $[\hat{\psi}(t, x), \hat{\psi}^+(t, y)] = 0$ sota la condició $(x - y)^2 < 0$. Ara bé, no podem usar aquesta regla amb fermions per garantir la commutació dels operadors associats a observables compatibles, ja que violaria l'estadística fermiònica, generant funcions d'ona simètriques en lloc d'antisimètriques. En el cas de fermions, els camps anticommuten: $\{\hat{\psi}^+(y), \hat{\psi}(x)\} = 0$. Aleshores, com podem garantir la causalitat?

Encara que el camp fermiònic no és hermític,¹⁷ els observables fermiònics són polinomis hermítics en $\hat{\psi}^+(y)$ i $\hat{\psi}(x)$, com per exemple $\hat{n}$, $\hat{H}$, etc. I és precisament l'anticommutació $\{\hat{\psi}^+(y), \hat{\psi}(x)\} = 0$ en *interval·ls espacials* $((x - y)^2 < 0, \text{ i.e., } |t_x - t_y| < |x - y|)$ la que assegura que observables locals com ara que la densitat de partícules $\hat{n} = \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}(x)$ en punts separats espacialment commuten, garantint així la causalitat: $[\hat{n}(x), \hat{n}(y)] = 0$ si $(x - y)^2 < 0$. Podem comprovar aquest exemple: $[\hat{n}(x), \hat{n}(y)] = \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}(x) \hat{\psi}^+(y) \hat{\psi}(y) - \hat{\psi}^+(y) \hat{\psi}(y) \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}(x)$. Si x, y són dos punts amb *separació espacial*, $(x - y)^2 < 0$, aleshores $\{\hat{\psi}^+(y), \hat{\psi}(x)\} = 0$, de manera que $\hat{\psi}(x) \hat{\psi}^+(y) = \hat{\psi}^+(y) \hat{\psi}(x)$ i finalment, $[\hat{n}(x), \hat{n}(y)] = 0$.

¹⁴ Vegeu J. Planelles 2025 https://www3.uji.es/~planelle/APUNTS/QFT/camps_per_curiosos.pdf. També Cap. 11.1 de T. Lancaster and S.J. Blundell, *Quantum Field Theory for the Gifted Amateur*, Oxford 2014.

¹⁵ La distància $(x - y)^2 = (t_x - t_y)^2 - |x - y|^2$ en un espai de Minkowski se diu temporal si $|t_x - t_y| > |x - y|$, lluminosa si $|t_x - t_y| = |x - y|$ i espacial si està dins del conus de llum, i.e., $|t_x - t_y| < |x - y|$.

¹⁶ Evitem això la paradoxa de la comunicació instantània, superlumínica.

¹⁷ A diferència del fermions, el camp bosònic pot ser hermític o no.

L'oscil·lador fermiònic

En l'apartat anterior hem trobat l'Hamiltoniana com una suma de les energies dels diferents estats multiplicades pel terme $b_\mu^+(t)b_\mu(t) = b_\mu^+(0)b_\mu(0) = n_\mu$ que representa la població de l'estat, la qual és idèntica a la que obtinguérem amb anterioritat per a la cadena d'oscil·ladors harmònics. Després hem procedit a la quantificació bosònica, és a dir, hem substituït els coeficients $b_\mu(t)$, $b_\mu^+(t)$ per operadors de creació i aniquilació amb les regles de commutació $[b_i, b_j^+] = \delta_{ij}$, $[b_i, b_j] = 0$, $[b_i^+, b_j^+] = 0$. Finalment, hem particularitzat el cas d'un únic oscil·lador el qual, excepte un corriments $\frac{1}{2}$ de l'origen d'energia, coincideix amb l'Hamiltonià de l'oscil·lador harmònic amb la realització $b = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + \frac{d}{dx})$, $b^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - \frac{d}{dx})$.

Ens preguntem que passaria si procedim a la quantificació fermiònica en el cas d'un únic oscil·lador, $\{a, a^+\} = 1$, $\{a, a\} = 0$, $\{a^+, a^+\} = 0$ (per tant, $a a = a^+ a^+ = 0$). En aquest cas, els operadors admeten una realització en termes de les matrius de Pauli: $a = \frac{1}{2}\sigma_-$, $a^+ = \frac{1}{2}\sigma_+$ amb $\sigma_\pm = \sigma_x \pm i\sigma_y$. Per tant, $a^+ a = \frac{1}{4}(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 - i(\sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x)) = \frac{1}{4}(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + 2\sigma_z)$, és a dir, $\hat{n} = a^+ a = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$ és diagonal amb dos autovalors 1 (estat ocupat) i 0 (estat buit).

Cal dir que aquest oscil·lador, com veurem en apartats posteriors, NO és el límit no relativista de l'equació de Dirac per a una partícula sotmesa a un potencial harmònic. Aquest límit és un espinor, on la component gran és aproximadament solució de l'equació de Schrödinger per a un oscil·lador harmònic no relativista, amb una component petita que aporta informació sobre la quiralitat del fermió.

Una última idea que ha de quedar clara: en 3D hi ha dos tipus de partícules, i per tant de camps, bosons i fermions. La quantificació d'aquests camps amb creadors i aniquiladors substituint coeficients $A_\mu(t)$ per operadors A , que en el cas bosònic implica commutadors i en el fermiònic anticommutadors, és conseqüència exclusiva de l'estadística d'un tipus de partícula o altra i de *respectar la causalitat relativista*, impeding acció mesurable immediata a distància.

L'equació de Dirac

Dirac va cercar una equació de la forma: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \mathcal{H}_D \Psi(\mathbf{r}, t)$, és a dir una equació diferencial de primer ordre respecte del temps, com l'equació de Schrödinger, cosa que permet construir una mecànica amb principi de causalitat: si es coneix l'Hamiltonià i la funció d'ona en un temps t_0 és podrà determinar unívocament la funció en qualsevol temps posterior. I com férem amb l'equació de Klein-Gordon, va usar una partícula lliure en un medi homogeni de guia perquè sabia que havia de donar compliment a l'equació relativista $E^2 = m^2 c^4 + p^2 c^2$. Aleshores, amb la finalitat d'aconseguir la primera derivada en el temps, reescriu l'equació anterior en la forma $(E/c)^2 = m^2 c^2 + p^2 \equiv A^2$ i prova de factoritzar $(E/c)^2 - A^2 = 0$. Escriu: $(E/c)^2 - A^2 = \left(\frac{E}{c} + A\right)\left(\frac{E}{c} - A\right) = 0$, i es pregunta que és A per tal que el seu quadrat siga igual a $(E/c)^2 = m^2 c^2 + p^2$ i prova d'escriure $A = \sum_\mu^4 \gamma_\mu p_\mu$, amb $p_0 = mc$ i γ_μ factors a determinar.

Aleshores, com cal que: $m^2 c^2 + p^2 A^2 = \sum_\mu^4 \gamma_\mu^2 p_\mu^2 + \sum_{\mu \neq \nu}^4 \gamma_\mu \gamma_\nu p_\mu p_\nu \rightarrow \sum_{\mu \neq \nu}^4 \gamma_\mu \gamma_\nu p_\mu p_\nu = 0$. Per tant, cal que factors donen compliment a l'anticommutació $\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = \delta_{\nu\mu}$. És possible la realització d'aquets coeficients que anticommen amb matrius 4×4 .¹⁸

¹⁸ Detalls en J. Planelles, <https://www3.uji.es/~planelle/APUNTS/QQ/dirac.pdf>

L'equació de Dirac per a una partícula lliure en una dimensió la determinem de manera semblant, amb $p_0 = mc$, escrivim $A = \gamma_0 p_0 + \gamma_p p$, i fem que:

$$A^2 = p_0^2 + p^2 = \gamma_0^2 p_0^2 + \gamma_p^2 p^2 + (\gamma_0 \gamma_p + \gamma_p \gamma_0) p_0 p = 0$$

Per tant, $\gamma_0 \gamma_p + \gamma_p \gamma_0 = 0$. Podem realitzar el coeficients amb $\gamma_0 = \sigma_z$, $\gamma_p = \sigma_x$, on σ_i són les matrius de Pauli. És immediat comprovat que $\sigma_z^2 = \sigma_x^2 = \mathbb{I}$, $i(\sigma_z \sigma_x + \sigma_x \sigma_z) = 0$.

Per tant, a partir de $\frac{E}{c} = \gamma_0 mc + \gamma_p p$, escrivim l'Hamiltonià de Dirac per a la partícula lliure 1D com: $\mathcal{H}_D = c\gamma_p p + \gamma_0 mc^2$, de manera que amb $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, l'equació queda:

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + ic\gamma_p \hbar \frac{\partial}{\partial x} - \gamma_0 mc^2)\Psi(x, t)$$

Es convenient reescriure l'equació anterior en una forma més simètrica respecte espai i temps. Multiplicant a esquerres per γ_0^{-1} , atès que $\gamma_0^{-1} = \sigma_z^{-1} = \sigma_z = \gamma_0$ i $\gamma_0^{-1} \gamma_p = \sigma_z \sigma_x = i\sigma_y = \gamma_1$, escrivim: $(i\hbar \gamma_0 \frac{\partial}{\partial t} + ic\gamma_1 \hbar \frac{\partial}{\partial x} - mc^2)\Psi(x, t) = 0$, que en unitats naturals ($c = \hbar = 1$) queda:

$$(i\gamma_0 \partial_t + i\gamma_1 \partial_x - m)\Psi(x, t) = 0$$

On com hem dit, podem substituir $\gamma_0 = \sigma_z$, $\gamma_1 = i\sigma_y$. Adonem-nos-en que cal que $\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$.

Si afegim un potencial $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$, tenim: $(i\sigma_z \partial_t - \sigma_y \partial_x - (m + V))\Psi(x, t) = 0$, que inserint les matrius equival a dues equacions:

$$\begin{aligned} i\partial_t \psi_1 + i\partial_x \psi_2 - (m + V)\psi_1 &= 0 \\ i\partial_t \psi_2 + i\partial_x \psi_1 + (m + V)\psi_2 &= 0 \end{aligned}$$

Cerquem solucions estacionaries, escrivim doncs $\psi_i(x, t) = e^{-iEt} \phi_i(x)$ i trobem,

$$\begin{aligned} (E - m - V)\phi_1 &= -i\partial_x \phi_2 \\ (E + m + V)\phi_2 &= -i\partial_x \phi_1 \end{aligned}$$

En el límit no relativista $E \approx m \gg V$. Podem aproximar $E + m + V \approx 2m$, de manera que $\phi_2 = -\frac{i}{2m} \partial_x \phi_1$. Portant-ho a la primera equació $(E - m - V)\phi_1 = -i\partial_x \phi_2 = -\frac{1}{2m} \partial_x^2 \phi_1$, trobem

$$\left(-\frac{1}{2m} \partial_x^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2\right) \phi_1 = (E - m)\phi_1$$

que és l'equació de Schrödinger per a un oscil·lador harmònic no relativista, amb una subtillesa clau: L'espinoir complet té una segon component petita que porta informació sobre el caràcter quiral (espinoir) del sistema.

En el límit de massa zero l'equació d'autovalors de Dirac commuta amb l'operador σ_x , el qual canvia la quiralitat de l'espinoir: $\sigma_x \begin{pmatrix} \phi_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \phi_1 \end{pmatrix}$. En sistemes relativistes, la massa m trenca la simetria quiral, cosa fonamental en fenòmens com per exemple transicions topològiques on m actua com un paràmetre d'obertura de banda.

Un últim apunt: l'equació de Dirac $(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\Psi = 0$ pot derivar-se de la densitat Lagrangiana $\mathcal{L} = \bar{\psi}(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi$, amb $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$ amb les equacions d'Euler-Lagrange, de manera semblant a com hem fet per a totes les equacions dinàmiques (veure e.g. Lancaster and Blundell capítol 38.1).