



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Facultat de Matemàtiques
i Informàtica

GRAU DE MATEMÀTIQUES

Treball final de grau

L'EQUACIÓ DE DIRAC I LA MODELITZACIÓ PEL GRAFÈ

Autor: Lúdia Llort Agudé

Director: Dr. Tomás Sanz Perela

Realitzat a: Departament de Matemàtiques i Informàtica

Barcelona, 10 de juny de 2024

Abstract

My Grade's Final Project will deal with some topics such as the Fourier space analysis, the Quantum Mechanics and the General Relativity in order to introduce and study the Equation that arose from the fusion of these physic theories and became one of the most unique and beautiful equations in the history of the twentieth century: the Dirac's Equation.

Furthermore, it will approach the origin of the Dirac's Equation to give a rise to an exhaustive research of the Dirac's operator and the result that will demonstrate the existence of the space of solutions for the the Dirac's Equation.

And, last but not least, it will offer an outstanding application of the Dirac's Equation for a material that is currently on point due to its extraordinary properties in the electric conduction: the modeling of graphene in terms of the Dirac's Equation.

Resum

En el meu Treball de Fi de Grau es tractaran temes com l'anàlisi de l'espai de Fourier, la Mecànica Quàntica i la Relativitat General per donar pas a l'Equació que va sorgir de la fusió d'aquestes teories físiques i que va esdevenir una de les equacions més especials i més boniques de la història del segle XX: l'Equació de Dirac.

Per un costat, s'abordarà la deducció de l'Equació per donar lloc a un estudi exhaustiu de l'operador de Dirac i a la consideració de l'existència de l'espai de solucions de l'Equació de Dirac.

I, per l'altre, es donarà una aplicació rellevant d'aquesta per un material que actualment es troba en un gran àlgid degut a les seves extraordinàries propietats de conducció elèctrica: la modelització de grafè a través de l'Equació de Dirac.

Agraïments

Aquest treball no hagués estat res si el meu tutor no m'hagués proposat el tema una tarda ben assolellada a la Facultat de Farmàcia, quan intentava organitzar la meva vida entre la Facultat de Matemàtiques i Informàtica i la Facultat de Física i Química. És per això que m'agradaria expressar el meu agraïment al meu tutor, el Dr. Tomás Sanz Perela, per la seva gran guia durant tot aquest projecte, per la seva paciència i per la seva gran dedicació perquè tot estigués ben argumentat i fos coherent.

Per tots aquests anys durant el Grau de Matemàtiques vull donar gràcies a les persones que, de manera incondicional, han estat al meu costat animant-me i donant-me suport. A la meva mare Josefina, qui sempre ha estat al meu costat en els moments més durs de la carrera i qui m'ha recolzat sempre i ha intentat animar-me a seguir endavant amb els meus propòsits. Al meu pare Jaume, per animar-me a ser la matemàtica de la família perquè de informàtics amb dos a la família ja n'hi ha suficient i per alegrar-me els dies amb les bromes tan dolentes. A les meves amigues l'Elena i la Yaiza, amb qui aquests quatre anys he viscut grans moments i he compartit molt riures i moltes alegries. I, finalment, a la meva gata Nala que va poder acompanyar-me durant els primers dos anys de la carrera i que oficialment ha passat tots els cursos de la meva vida al meu costat des del tres anys i al meu gos Thor que tenia ganes de jugar i de sortir al carrer en els moments més inoportuns. Sense tots ells aquests Grau de Matemàtiques no hagués estat el mateix. Moltes gràcies a tots!

Índex

1	Introducció	1
1.1	Fonaments matemàtics	1
1.1.1	Anàlisi Funcional	2
1.1.2	La Transformada de Fourier	5
1.1.3	Espais de Sobolev	14
1.2	Fonaments físics	15
1.2.1	Mecànica Quàntica	15
1.2.2	Relativitat General	19
2	Equació de Dirac	21
2.1	Deducció de l'equació	21
2.2	Estudi de l'operador de Dirac	25
2.3	Existència de solucions	26
3	Grafè	31
3.1	Estructura atòmica del grafè	31
3.2	Modelització per l'equació de Dirac	35
4	Conclusions	46

Capítol 1

Introducció

Per començar amb l'estudi de l'Equació de Dirac serà clau considerar alguns fonaments previs. Amb l'objectiu de justificar els passos més importants dins de l'anàlisi de l'Equació, a continuació, s'introdueixen certes nocions sobre l'Anàlisi Funcional, la Transformada de Fourier, els Espais de Sobolev, la Mecànica Quàntica i la Relativitat General.

1.1 Fonaments matemàtics

Definició 1.1.1. *Un espai de Banach és un espai vectorial complet i normat dins de la mètrica definida per la seva pròpia norma.*

Definició 1.1.2. *Un espai de Hilbert és un espai vectorial amb producte intern real o complex tal que, a més, és un espai mètric complet respecte a la funció distància induïda pel producte intern.*

Definició 1.1.3. *Es denotarà com $C_0(\mathbb{R}^n)$ a l'espai de Banach de les funcions contínues $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ amb norma:*

$$\|f\|_{C_0(\mathbb{R}^n)} = \|f\|_\infty := \max_{x \in \mathbb{R}^n} |f(x)|. \quad (1.1.1)$$

A més, es denotarà per $C^r(\mathbb{R}^n)$, $r \in \mathbb{N}$, l'espai de les funcions contínues i diferenciables r vegades. També, s'anomenarà $C_c(\mathbb{R}^n)$ com el subespai de les funcions contínues i amb suport compacte.

Definició 1.1.4. *Donat $p \in [1, \infty)$, es defineix $L^p(\mathbb{R}^n)$ com l'espai de les funcions mesurables $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ tals que la norma:*

$$\|f\|_{L^p(\mathbb{R}^n)} := \left(\int_{\mathbb{R}^n} |f(x)|^p dx \right)^{\frac{1}{p}} \quad (1.1.2)$$

és finita.

En particular, els espais $L^p(\mathbb{R}^n)$ són espais de Banach i, a més, $L^2(\mathbb{R}^n)$ és un espai de Hilbert amb el producte escalar:

$$\langle f, g \rangle_{L^2(\mathbb{R}^n)} := \int_{\mathbb{R}^n} f(x) \overline{g(x)} dx \quad (1.1.3)$$

Notació 1. A partir d'ara, es denotarà el producte escalar de l'espai $L^2(\mathbb{R}^n)$ com $\langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2(\mathbb{R}^n)} := \langle \cdot, \cdot \rangle$

Definició 1.1.5. L'espai de Schwarz està definit com:

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}^n) := \left\{ f \in C^\infty(\mathbb{R}^n) : \forall k, l \in \mathbb{N}^n, \sup_{x \in \mathbb{R}^n} \left| x_1^{k_1} \cdots x_n^{k_n} \left(\frac{\partial^{l_1}}{\partial x_1^{l_1}} \cdots \frac{\partial^{l_n}}{\partial x_n^{l_n}} f \right) (x) \right| < +\infty \right\}. \quad (1.1.4)$$

Teorema 1.1.6. (de la Convergència Dominada) Donada una successió de funcions integrables, $\{f_k\}_{k \in \mathbb{N}}$, tal que convergeix puntualment a una funció mesurable f , si existeix una funció g integrable tal que, per a tot k , $|f_k| \leq g$, llavors la funció f és integrable amb $\int f dx = \lim \int f_k dx$.

Teorema 1.1.7. (de la Convergència Monòtona) Si es té una successió $\{f_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ de funcions mesurables, $f_k : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$, tals que, per a tot $k \leq m$ i $x \in \mathbb{R}^n$, $f_k(x) \leq f_m(x)$ i existeix g una funció que compleixi que $g(x) := \lim_{k \rightarrow \infty} f_k(x)$, aleshores g és mesurable i $\int g dx = \lim_{k \rightarrow \infty} \int f_k dx$.

1.1.1 Anàlisi Funcional

Com a context explicatiu dels conceptes que més endavant s'usaran, sobretot, a la Mecànica Quàntica, cal introduir l'estudi de l'anàlisi funcional matemàtic.

Definició 1.1.8. Un operador lineal és tota aplicació lineal entre dos espais vectorials. En particular, si V i W són espais vectorials, llavors l'operador $A : V \rightarrow W$ compleix que per a tota funció $\phi, \varphi \in V$ i per a tot $\alpha \in \mathbb{C}$:

$$\begin{cases} A(\phi + \varphi) = A(\phi) + A(\varphi) \\ A(\alpha\phi) = \alpha A(\phi) \end{cases}.$$

Concretament, per l'evolució del treball serà necessari considerar un operador lineal, A , tal que $A : L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$. D'aquesta manera, a més, es tindrà que per convenció física el producte intern de l'espai de Hilbert, $L^2(\mathbb{R}^n)$, és lineal en el sentit que per a tota funció $\phi, \varphi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ i $\forall \lambda \in \mathbb{C}$:

$$\begin{cases} \langle \phi, \lambda \varphi \rangle = \lambda \langle \phi, \varphi \rangle \\ \langle \lambda \phi, \varphi \rangle = \overline{\lambda} \langle \phi, \varphi \rangle \end{cases}. \quad (1.1.5)$$

Definició 1.1.9. Es defineix un operador lineal $A : L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$ com a acotat si existeix una constant C tal que $\|A\varphi\| \leq C\|\varphi\|$ per a tot $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^n)$.

Tanmateix, quan es tracta de la Mecànica Quàntica s'observa que hi ha una dificultat en concret. Aquesta és que, generalment, els operadors en aquest àmbit no són acotats. Per aquest motiu, cal tractar amb operadors no acotats que poden no estar definits a tot l'espai de Hilbert només en un subespai rellevant de l'espai de Hilbert, el qual s'anomena el *domini de l'operador*.

Definició 1.1.10. *Un operador no acotat A de $L^2(\mathbb{R}^n)$ és una aplicació lineal tal que $A : \text{Dom}(A) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$.*

Teorema 1.1.11. *(de les Transformacions Lineals i Acotades) Sigui U un espai normat i V un espai de Banach. Si W és un subespai dens de U i $T : W \rightarrow V$ és una aplicació lineal i acotada, llavors existeix una única aplicació lineal i acotada $G : U \rightarrow V$ tal que $G|_W = T$.*

Teorema 1.1.12. *(de Riesz) Si $f : L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathbb{C}$ és un funcional lineal i acotat, aleshores existeix una única $\chi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ tal que $f(\varphi) = \langle \chi, \varphi \rangle$, per a tota funció $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^n)$.*

Definició 1.1.13. *Sigui A un operador no acotat de $L^2(\mathbb{R}^n)$ i es defineix l'adjunt de l'operador A com l'operador A^* que compleix que per un vector $\phi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ pertany a $\text{Dom}(A^*)$ si el funcional lineal, $\langle \phi, A\varphi \rangle$, definit per a tot $\varphi \in \text{Dom}(A)$ és acotat.*

A més a més, per $\phi \in \text{Dom}(A^*)$, existeix per $A^*\phi$ un únic vector χ tal que per a tot $\varphi \in \text{Dom}(A)$ es té que:

$$\langle \chi, \varphi \rangle = \langle \phi, A\varphi \rangle. \quad (1.1.6)$$

Observació 1.1.14. La demostració d'aquest fet es basa en veure que, com que el funcional lineal és acotat i $\text{Dom}(A)$ és dens, pel Teorema de Transformacions Lineals i Acotades, es té una única extensió acotada del funcional lineal per a tot l'espai de Hilbert i que, pel Teorema de Riesz, es garanteix l'existència i la unicitat de χ .

Definició 1.1.15. *Un operador no acotat A de $L^2(\mathbb{R}^n)$ és simètric si, per a tot $\phi, \varphi \in \text{Dom}(A)$:*

$$\langle \phi, A\varphi \rangle = \langle A\phi, \varphi \rangle. \quad (1.1.7)$$

Definició 1.1.16. *Un operador A és auto-adjunt si $\text{Dom}(A^*) = \text{Dom}(A)$ i $A^*\phi = A\phi$, per a tot $\phi \in \text{Dom}(A)$.*

Proposició 1.1.17. *Sigui A un operador simètric en $L^2(\mathbb{R}^n)$, aleshores:*

1. *Per tot $\psi \in \text{Dom}(A)$, la quantitat $\langle \psi, A\psi \rangle$ és un valor real. Més en general, si $\psi, A\psi, \dots, A^{m-1}\psi \in \text{Dom}(A)$, aleshores $\langle \psi, A^m\psi \rangle$ també és real.*
2. *Sigui λ un valor propi de A , és a dir, $\lambda \in \mathbb{C}$ tal que $A\psi = \lambda\psi$ per algun $\psi \in \text{Dom}(A)$ no nul. Llavors λ és un valor real.*

Demostració.

1. Com que A és un operador simètric i $\psi \in \text{Dom}(A)$ es té que:

$$\langle \psi, A\psi \rangle = \langle A\psi, \psi \rangle = \overline{\langle \psi, A\psi \rangle}.$$

Per la qual cosa, si un valor és igual al mateix valor però conjugat, aleshores el valor és real, com es volia provar.

Ara bé, si es considera $\psi, A\psi, \dots, A^{m-1}\psi \in \text{Dom}(A)$ es pot anar iterant el mateix procediment que l'anterior i es troba que:

$$\langle \psi, A^m\psi \rangle = \langle A^m\psi, \psi \rangle = \overline{\langle \psi, A^m\psi \rangle}.$$

2. Si se suposa que λ és un valor propi de A , aleshores es compleix que:

$$\overline{\lambda} \langle \psi, \psi \rangle = \langle \psi, A\psi \rangle = \langle A\psi, \psi \rangle = \lambda \langle \psi, \psi \rangle.$$

Així mateix, com que ψ és no nul per hipòtesis, llavors $\lambda = \overline{\lambda}$. És a dir, λ és un valor real.

□

Proposició 1.1.18. *Segui A un operador no acotat, aleshores A és simètric, si i només si, A^* és una extensió d' A .*

Demostració. Per una banda, si A és simètric, aleshores per a tot ϕ per l'expressió (1.1.7) i per la desigualtat de Cauchy-Schwarz, s'obté que:

$$|\langle \phi, A\phi \rangle| \leq \|A\phi\| \|\phi\|.$$

Per tant, es veu que $\phi \in \text{Dom}(A^*)$. És a dir, (1.1.7) mostra que l'únic vector $A^*\phi$ per al qual es compleix $\langle \phi, A\phi \rangle = \langle A^*\phi, \phi \rangle$ és $A\phi$. La qual cosa implica que $\text{Dom}(A) = \text{Dom}(A^*)$.

Per l'altra, si A^* és una extensió d' A , llavors per a cada $\phi \in \text{Dom}(A)$ es té que:

$$\langle \phi, A\phi \rangle = \langle A^*\phi, \phi \rangle = \langle A\phi, \phi \rangle,$$

per a tot $\phi \in \text{Dom}(A)$, la qual cosa mostra la simetria de A .

□

Definició 1.1.19. *Un operador A és essencialment auto-adjunt si la clausura en $L^2(\mathbb{R}^n) \times L^2(\mathbb{R}^n)$ de la gràfica de l'operador A és una gràfica d'un operador auto-adjunt.*

Observació 1.1.20. Cal fer notar que si A és un operador, aleshores la gràfica de A és $G(A) = \{(\varphi, A\varphi) : \varphi \in \text{Dom}(A)\}$. Llavors, si es considera l'operador B com la clausura de $G(A)$, de manera que;

$$\text{Dom}(B) = \{\varphi \in L^2(\mathbb{R}^n) : \exists (\varphi_k)_{k \in \mathbb{Z}} \in \text{Dom}(A) \text{ tal que } \lim_{k \rightarrow \infty} \varphi_k = \varphi \text{ i que } \exists \lim_{k \rightarrow \infty} A\varphi_k\}, \quad (1.1.8)$$

on $\lim_{k \rightarrow \infty} A\varphi_k = B\varphi$, i B és un operador auto-adjunt, aleshores A és un operador essencialment auto-adjunt.

En particular, es pot observar que A és un operador auto-adjunt si A^* i A és el mateix operador en el mateix domini. És a dir, un operador auto-adjunt o essencialment auto-adjunt és simètric.

Definició 1.1.21. *Un operador és unitari si és un operador lineal com $U : L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$ tal que se satisfaci $U^*U = UU^* = Id$.*

Concretament, si un operador és unitari implica que el domini de l'operador és dens i que aquest preserva el producte escalar del propi espai on està definit.

1.1.2 La Transformada de Fourier

En el cos del treball, serà bàsic tenir uns coneixements previs sobre la Transformada de Fourier, ja que la major part de les operacions en l'espai, $L^2(\mathbb{R}^n)$, seran més senzilles un cop feta aquesta transformada. És per això que seguidament es veuran les definicions i propietats necessàries per poder seguir detalladament els diferents passos que es duran a terme durant el treball.

Definició 1.1.22. *Donada una funció $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$ es defineix la seva Transformada de Fourier, que es denotarà per $\widehat{f}$, o bé, per $\mathcal{F}f$, com:*

$$\widehat{f}(p) = (\mathcal{F}f)(p) := \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} f(x) e^{-ix \cdot p} dx, \quad x, p \in \mathbb{R}^n. \quad (1.1.9)$$

Les propietats que segueixen de la definició són les següents.

Siguin $f, g \in L^1(\mathbb{R}^n)$:

1. *Linealitat:* Per a tot $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$;

$$\widehat{\alpha f + \beta g}(p) = \alpha \widehat{f}(p) + \beta \widehat{g}(p). \quad (1.1.10)$$

Demostració. Siguin $f, g \in L^1(\mathbb{R}^n)$. Aplicant la definició de la Transformada de Fourier i per la linealitat de les integrals, s'obté el resultat que es vol provar:

$$\begin{aligned} \widehat{\alpha f + \beta g}(p) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} (\alpha f(x) + \beta g(x)) e^{-ix \cdot p} dx = \\ &= \frac{\alpha}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} f(x) e^{-ix \cdot p} dx + \frac{\beta}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} g(x) e^{-ix \cdot p} dx = \alpha \widehat{f}(p) + \beta \widehat{g}(p). \end{aligned}$$

□

2. *Translació i modulació:* Per a tot $x_0, p_0 \in \mathbb{R}^n$:

$$\begin{cases} \widehat{f(\cdot - x_0)}(p) = e^{-ix_0 \cdot p} \widehat{f}(p) \\ \widehat{f(x) e^{ip_0 \cdot x}}(p) = \widehat{f}(p_0 + p) \end{cases}. \quad (1.1.11)$$

Demostració. Siguin $f, g \in L^1(\mathbb{R}^n)$. Per la primera identitat, s'aplica la definició i un canvi de variable:

$$\begin{aligned}\widehat{f(x - x_0)}(p) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} f(x - x_0) e^{-ix \cdot p} dx = \left\{ \begin{array}{l} y = x - x_0 \\ dy = dx \end{array} \right\} = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} f(y) e^{-i(y+x_0) \cdot p} dy = e^{-ix_0 \cdot p} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} f(y) e^{-iy \cdot p} dy = \\ &= e^{-ix_0 \cdot p} \widehat{f}(p).\end{aligned}$$

Pel que fa la segona propietat, fent un procediment similar es troba el resultat desitjat:

$$\begin{aligned}\widehat{f}(p_0 + p) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} f(x) e^{-ix \cdot (p_0 + p)} dx = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} f(x) e^{-ix \cdot p_0} e^{-ix \cdot p} dx = \\ &= \widehat{f(x) e^{ix \cdot p_0}}(p).\end{aligned}$$

□

3. *Diferenciació i multiplicació:* Per a qualsevol funció contínua $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ amb $\frac{\partial f}{\partial x_j} \in L^1(\mathbb{R}^n)$ per $j \in \{1, \dots, n\}$, $x = (x_1, \dots, x_n)$ i $p = (p_1, \dots, p_n)$;

$$\widehat{\frac{\partial f}{\partial x_j}}(p) = ip_j \widehat{f}(p). \quad (1.1.12)$$

Si $h(x) = xf(x)$ és absolutament integrable amb $x \in \mathbb{R}^n$, llavors;

$$\widehat{h}(p) = i \cdot \nabla(\widehat{f})(p). \quad (1.1.13)$$

Demostració. Per un costat, se sap per definició que:

$$\widehat{\frac{\partial f}{\partial x_j}}(p) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} \frac{\partial f}{\partial x_j}(x) e^{-ix \cdot p} dx.$$

Llavors, sabent que $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, aleshores en les cues la funció f tendeix a zero. A més, tenint en compte el Teorema de Green¹, es fa²:

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} \frac{\partial f}{\partial x_j}(x) e^{-ix \cdot p} dx &= \int_{\partial \mathbb{R}^n} f(x) e^{-ix \cdot p} \nu_j dx - \int_{\mathbb{R}^n} f(x) \frac{\partial(e^{-ix \cdot p})}{\partial x_j} dx = \\ &= 0 - ip_j \int_{\mathbb{R}^n} f(x) e^{-ix \cdot p} dx = ip_j \widehat{f}(p). \end{aligned}$$

Per altra banda, si $h(x) = xf(x)$;

$$\begin{cases} \widehat{h}(p) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} xf(x) e^{-ix \cdot p} dx \\ i \cdot \nabla(\widehat{f})(p) = \frac{i}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} f(x) (-ix) e^{-ix \cdot p} dx \end{cases}.$$

Efectivament, s'observa amb les definicions que:

$$\frac{i}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} f(x) (-ix) e^{-ix \cdot p} dx = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} xf(x) e^{-ix \cdot p} dx = \widehat{h}(p).$$

□

Lema 1.1.23. (*Continuïtat*) Si $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$, aleshores $\mathcal{F}f$ és una funció contínua.

Demostració. Per provar la continuïtat, suposem que tenim una successió $\{p_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ tal que $\lim_{k \rightarrow \infty} p_k = p$. La idea es poder aplicar el Teorema de la Convergència Dominada i veure que si $h_k(x) = f(x)e^{-ix \cdot p_k}$ i $h(x) = f(x)e^{-ix \cdot p}$, aleshores;

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^n} |h_k(x) - h(x)| dx = 0.$$

¹El Teorema de Green anuncia el següent: $\int_{\Omega} \frac{\partial f}{\partial x_j} g dx = \int_{\partial \Omega} f g \nu_j dx - \int_{\Omega} f \frac{\partial g}{\partial x_j} dx$.

²S'ha usat que si $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ i $|g| \leq 1$, aleshores: $\int_{\mathbb{R}^n} \partial_{x_j} f g = - \int_{\mathbb{R}^n} f \partial_{x_j} g$. Aquest fet es pot veure directament a través de la idea de què $B_R \subset \mathbb{R}^n$ (on $\partial B_R = C\mathbb{R}^n$ i $C \in \mathbb{R}$), ja que, llavors, pel Teorema de Green;

$$\int_{B_R} \partial_{x_j} f g = \int_{\partial B_R} f g \nu_j - \int_{B_R} f \partial_{x_j} g.$$

Ara bé, com que $|g| \leq 1$ i $|\nu_j| \leq 1$ per ser un vector normal unitari;

$$\left| \int_{\partial B_R} f g \nu_j \right| \leq \sup_{\partial B_R} |f| |\partial B_R|.$$

Tanmateix, si $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$;

$$\begin{aligned} |f(x)| &\leq C_n |x|^{-(n+1)}, \text{ on } C_n \in \mathbb{R} \\ \Rightarrow \left| \int_{\partial B_R} f g \nu_j \right| &\leq D \mathbb{R}^{-1} \rightarrow_{|x| \rightarrow \infty} 0, \text{ on } D \in \mathbb{R}. \end{aligned}$$

És a dir, cal veure que, a part de tenir una successió que convergeix puntualment, existeix una funció integrable g tal que s'està complint $|h_k(x)| \leq g$. Vegem-ho:

$$|h_k(x)| \leq |f(x)| |e^{-ix \cdot p_k}| = |f(x)|$$

Per tant, $|h_k(x)| \leq |f(x)|$, llavors, com que $f \in L^1$, es pot aplicar el Teorema 1.1.6..

$$\begin{aligned} & \lim_{k \rightarrow \infty} |\widehat{f}(p_k) - \widehat{f}(p)| = \\ &= \lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} f(x) (e^{-ix \cdot p_k} - e^{-ix \cdot p}) dx \right| \leq \\ &\leq \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} |f(x) (e^{-ix \cdot p_k} - e^{-ix \cdot p})| dx = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \lim_{k \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^n} |h_k(x) - h(x)| dx = 0. \end{aligned}$$

Com a conseqüència, $\mathcal{F}f$ és contínua.

□

Una de les propietats particulars de la transformada de Fourier és l'estreta relació que es té amb la convolució de les funcions.

Definició 1.1.24. *Siguin $f, g \in L^1(\mathbb{R}^n)$, llavors la seva convolució $f * g$ es defineix com:*

$$(f * g)(x) := \int_{\mathbb{R}^n} f(y)g(x - y)dy, \quad x \in \mathbb{R}^n. \quad (1.1.14)$$

Teorema 1.1.25. *(Propietat de Convolució) Siguin $f, g \in L^1(\mathbb{R}^n)$. Llavors;*

$$\widehat{f * g} = (2\pi)^{\frac{n}{2}} \widehat{f} \widehat{g}. \quad (1.1.15)$$

Demostració. Siguin $f, g \in L^1(\mathbb{R}^n)$. Aplicant la definició de la Transformada de Fourier i el Teorema de Fubini es troba que:

$$\begin{aligned} \widehat{f}(p)\widehat{g}(p) &= \left(\frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} f(x)e^{-ix \cdot p} dx \right) \left(\frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} g(y)e^{-iy \cdot p} dy \right) = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} f(x)g(y)e^{-i(x+y) \cdot p} dx dy = \left\{ \begin{array}{l} z = x + y \\ dz = dx \end{array} \right\} = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-iz \cdot p} \left(\int_{\mathbb{R}^n} f(z - y)g(y)dy \right) dz. \end{aligned}$$

Com a conseqüència;

$$\widehat{f}(p)\widehat{g}(p) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \widehat{f * g}(p).$$

□

Concretament, per la Transformada de Fourier en $L^2(\mathbb{R}^n)$ es veu que compleix una isometria dins d'aquest espai. No obstant, per comprovar-ho, cal introduir uns resultats previs.

Lema 1.1.26. *Siguin $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ i $y \in \mathbb{R}^n$, sigui f_{-y} la translació de f definida com:*

$$f_{-y}(x) = f(x - y). \quad (1.1.16)$$

Llavors, l'aplicació de la translació és contínua de $\mathbb{R}^n$ a $L^2(\mathbb{R}^n)$.

Demostració. Sigui $\epsilon > 0$. Com que $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$, llavors existeix una funció contínua $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ amb suport compacte tal que:

$$|f - g| < \epsilon.$$

Per la continuïtat de g es té que existeix $\delta \in \mathbb{R}$ tal que, amb la norma euclidiana, $\|u - v\| < \delta$ implica que:

$$|g(u) - g(v)| < \epsilon.$$

La qual cosa condueix a:

$$\left(\int_{\mathbb{R}^n} |g(y - u) - g(y - v)|^2 dy \right)^{\frac{1}{2}} < \epsilon \Rightarrow \|g(y - u) - g(y - v)\|_{L^2(\mathbb{R}^n)} < \epsilon.$$

Si s'uneix el que se sap, per la desigualtat triangular, s'obté que:

$$\begin{aligned} & \|f(y - u) - f(y - v)\|_{L^2(\mathbb{R}^n)} \leq \\ & \leq \|f(y - u) - g(y - u)\|_{L^2(\mathbb{R}^n)} + \|g(y - u) - g(y - v)\|_{L^2(\mathbb{R}^n)} + \\ & + \|g(y - v) - f(y - v)\|_{L^2(\mathbb{R}^n)} < 3\epsilon. \end{aligned}$$

Per tant, ja s'ha vist que la translació és una aplicació contínua.

□

Definició 1.1.27. *Sigui una funció positiva H tal que tingui una Transformada de Fourier positiva i que la seva integral sigui fàcil de integrar:*

$$H(y) = e^{-|y|}. \quad (1.1.17)$$

Es defineix:

$$h_\lambda(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} H(\lambda y) e^{iy \cdot x} dy, \quad \lambda > 0. \quad (1.1.18)$$

D'aquesta definició es pot veure que existeix $C \in \mathbb{R}$ tal que:

$$h_\lambda(x) = C \frac{\lambda}{\lambda^2 + x^2}. \quad (1.1.19)$$

I, per tant;

$$\int_{\mathbb{R}^n} h_\lambda(x) dx = 1. \quad (1.1.20)$$

Proposició 1.1.28. *Si $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$, llavors;*

$$(f * h_\lambda)(x) = \int_{\mathbb{R}^n} H(\lambda y) \widehat{f}(y) e^{ix \cdot y} dy. \quad (1.1.21)$$

Demostració. Per l'aplicació directa del Teorema de Fubini i per la definició $h_\lambda(x)$, es té:

$$\begin{aligned} (f * h_\lambda)(x) &= \int_{\mathbb{R}^n} f(x - y) dy \left(\frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} H(\lambda z) e^{iz \cdot y} dz \right) = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} f(x - y) e^{iz \cdot y} dy \int_{\mathbb{R}^n} H(\lambda z) dz = \\ &= \left(\frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} f(y) e^{iz \cdot (x - y)} dy \right) \int_{\mathbb{R}^n} H(\lambda z) dz = \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} H(\lambda z) \widehat{f}(z) e^{ix \cdot z} dz. \end{aligned}$$

□

Lema 1.1.29. *Si $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ i f és contínua en el punt x , llavors:*

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} (f * h_\lambda)(x) = f(x). \quad (1.1.22)$$

Demostració. Sigui $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$, $h_\lambda \in L^2(\mathbb{R}^n)$ i $p = 2$, $q = 2$ tals que $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$, aleshores $(f * h_\lambda)(x)$ està ben definida per a tot x . Llavors, per l'expressió (1.1.18);

$$\begin{aligned} |(f * h_\lambda)(x) - f(x)|^2 &\leq \int_{\mathbb{R}^n} |(f(x - y) - f(x)) h_\lambda(y)|^2 dy \leq \\ &\leq \int_{\mathbb{R}^n} |f(x - y) - f(x)|^2 |h_\lambda(y)|^2 dy = \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} |f(x - y) - f(x)|^2 \left| \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} H(\lambda z) e^{iz \cdot y} dz \right|^2 dy \leq \\ &\leq \int_{\mathbb{R}^n} |f(x - y) - f(x)|^2 dy \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbb{R}^n} |H(\lambda z)|^2 dz. \end{aligned}$$

Com que $g(y) = \|f_{-y} - f\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}^2$ és una funció contínua, acotada i es té que $g(0) = 0$, com a resultat, la part dreta de la integral tendeix a 0 quan $\lambda \rightarrow 0$ pel Teorema de la Convergència Dominada.

□

Lema 1.1.30. *Si $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$ i $g(x) = \overline{f(-x)}$, aleshores $\widehat{g}(p) = \overline{\widehat{f}(p)}$.*

Demostració. La prova consisteix en una aplicació directa de les definicions:

$$\begin{aligned}\widehat{g}(p) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} g(x) e^{-ix \cdot p} dx = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} \overline{f(-x)} e^{-ix \cdot p} dx = \\ &= \frac{-1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} \overline{f(y)} e^{iy \cdot p} dy = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} \overline{f(y)} e^{-iy \cdot p} dy.\end{aligned}$$

□

Així mateix, un cop introduïts tots aquests resultats es podrà demostrar el Teorema de Plancherel, el qual serà essencial per provar la isometria de la Transformada de Fourier dins de $L^2(\mathbb{R}^n)$.

Teorema 1.1.31. *(de Plancherel) La Transformada de Fourier definida a $L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$ pot ser estesa únicament a un operador lineal acotat de $L^2(\mathbb{R}^n)$ tal que per a tot $f, g \in L^2(\mathbb{R}^n)$:*

$$\langle f, g \rangle_{L^2(\mathbb{R}^n)} = \langle \widehat{f}, \widehat{g} \rangle_{L^2(\mathbb{R}^n)}. \quad (1.1.23)$$

Demostració. Siguin $f \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$, $\widetilde{f}(x) = \overline{f(-x)}$, es defineix $g = f * \widetilde{f}$, és a dir;

$$g(x) = \int_{\mathbb{R}^n} f(y) \overline{f(y-x)} dy.$$

Es considera $f_{-x} = f(y-x)$. Llavors, a més, se sap que el producte intern a $L^2(\mathbb{R}^n)$ és una aplicació contínua i que la funció f_{-x} és contínua de $\mathbb{R}^n$ a $L^2(\mathbb{R}^n)$. És a dir, si s'uneix les dues continuïtats, es veu que g és una funció contínua.

Per una banda, per la desigualtat de Cauchy-Schwarz es té que:

$$\begin{aligned}|g(x)| &= \left| \int_{\mathbb{R}^n} f(y) \overline{f(y-x)} dy \right| \leq \\ &\leq \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^n)} \|f_{-x}\|_{L^2(\mathbb{R}^n)} = \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}^2.\end{aligned}$$

Com a conseqüència, g està acotada.

Per altra banda, per la Proposició 1.1.28.:

$$(g * h_\lambda)(0) = \int_{\mathbb{R}^n} H(\lambda y) \widehat{g}(y) dy.$$

Com que g és contínua i acotada, pel Lema 1.1.29.:

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} (g * h_\lambda)(0) = g(0) = \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}^2.$$

A més, pel Lema 1.1.30., $\widehat{g} = |\widehat{f}|^2 \geq 0$ i com que $\lim_{\lambda \rightarrow 0} H(\lambda y) = 1$, el Teorema de la Convergència Monòtona dóna que:

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}^n} H(\lambda y) \widehat{g}(y) dy = \int_{\mathbb{R}^n} |\widehat{f}(y)|^2 dy.$$

De manera que, queda demostrat que $\widehat{f} \in L^2(\mathbb{R}^n)$ i es compleix que:

$$\|\widehat{f}\|_{L^2(\mathbb{R}^n)} = \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}, \text{ on } f \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n).$$

I, equivalentment, per $f, g \in L^2(\mathbb{R}^n)$, l'expressió (1.1.23).

□

De fet, aquest teorema diu que la Transformada de Fourier és un operador lineal dens definit al subconjunt dens $L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$ en $L^2(\mathbb{R}^n)$. De manera que, existeix una única extensió acotada, $\mathcal{F}$, d'aquest operador en tot $L^2(\mathbb{R}^n)$. I a més a més, també afirma que existeix una isometria entre els espais de les funcions a $L^2(\mathbb{R}^n)$ i les Transformades de Fourier definides a $L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$, a través del producte de $L^2(\mathbb{R}^n)$.

Lema 1.1.32. *Siguin $f, g \in L^1(\mathbb{R}^n)$. Aleshores, es té que $\widehat{f}, \widehat{g} \in L^1(\mathbb{R}^n)$ i:*

$$\int_{\mathbb{R}^n} \widehat{f}(x) g(x) dx = \int_{\mathbb{R}^n} f(p) \widehat{g}(p) dp. \quad (1.1.24)$$

Demostració. Primerament, cal veure que si $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$, llavors $\widehat{f} \in L^1(\mathbb{R}^n)$. A través de la definició de la Transformada de Fourier i la d'un espai $L^1(\mathbb{R}^n)$, es troba que:

$$\begin{aligned} |\widehat{f}(p)| &= \left| \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} f(x) e^{-ix \cdot p} dx \right| \leq \left| \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \right| \int_{\mathbb{R}^n} |f(x)| |e^{-ix \cdot p}| dx = \\ &= \left| \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \right| \int_{\mathbb{R}^n} |f(x)| dx. \end{aligned}$$

Ara bé, com que $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$, aleshores $\int_{\mathbb{R}^n} |f| < +\infty$ i $|\widehat{f}(p)| < +\infty$. Per tant, $\widehat{f} \in L^1(\mathbb{R}^n)$.

D'altra banda, pel Teorema de Fubini, ja que $f, g \in L^1(\mathbb{R}^n)$:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^n} \widehat{f}(x)g(x)dx &= \int_{\mathbb{R}^n} \left(\frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} f(p)e^{-ix \cdot p} dp \right) g(x)dx = \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} \left(\frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} g(x)e^{-ix \cdot p} dx \right) f(p)dp = \int_{\mathbb{R}^n} f(p)\widehat{g}(p)dp. \end{aligned}$$

□

Teorema 1.1.33. *La Transformada de Fourier és un operador unitari a $L^2(\mathbb{R}^n)$.*

Demostració. Com que la Transformada de Fourier és una isometria, el seu domini és un subespai tancat de $L^2(\mathbb{R}^n)$. Si aquest subespai no és tot $L^2(\mathbb{R}^n)$, llavors existeix una funció g tal que $\int_{\mathbb{R}^n} \widehat{f}g \, dx = 0$, per a tot $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ i $\|g\| \neq 0$. No obstant, per (1.1.24) es té que per a tot $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$;

$$\int_{\mathbb{R}^n} \widehat{f}g \, dx = \int_{\mathbb{R}^n} f\widehat{g} \, dx.$$

Tanmateix, això comporta que $\widehat{g} = 0$ per quasi tot x , contradient el fet que $\|g\| \neq 0$.

□

A més, també serà útil introduir la definició de la Inversa de la Transformada de Fourier per tal de poder passar de l'espai de moments al de posicions.

Teorema 1.1.34. *(Fórmula Inversa per les Transformades de Fourier de $L^2(\mathbb{R}^n)$) Sigui $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$. Llavors, la Fórmula Inversa de la Transformada de Fourier és:*

$$(\mathcal{F}^{-1}f)(x) = (\mathcal{F}f)(-x). \quad (1.1.25)$$

Demostració. Cal notar que al ser $\widehat{f} \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$ un conjunt dens en $L^2(\mathbb{R}^n)$. Per veure el que es vol, només cal comprovar la fórmula. Sigui $\tilde{f}(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} \widehat{f}(p)e^{ix \cdot p} dp$, llavors per a tot $g \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$;

$$\begin{aligned} \langle g, \tilde{f} \rangle_{L^2(\mathbb{R}^n)} &= \int_{\mathbb{R}^n} g(x) \overline{\left(\frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} \widehat{f}(p)e^{ix \cdot p} dp \right)} dx = \\ &= \left(\frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} g(x)e^{-ix \cdot p} dx \right) \overline{\widehat{f}(p)} dp = \\ &= \langle \mathcal{F}g, \mathcal{F}f \rangle_{L^2(\mathbb{R}^n)}. \end{aligned}$$

I, pel Teorema de Plancherel, $f = \tilde{f}$.

□

En conclusió, es pot afirmar que la Transformada de Fourier definida inicialment de l'espai de Banach s'estén a $L^2(\mathbb{R}^n)$ de manera que existeix una isometria en aquest últim espai on es preservaran les propietats essencials per tal de trobar les solucions de l'Equació de Dirac.

1.1.3 Espais de Sobolev

Sigui $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ un conjunt obert tal que $\Omega \neq \emptyset$ i un cos.

Definició 1.1.35. Es denota $L^1_{loc}(\Omega)$ al conjunt:

$$L^1_{loc}(\Omega) = \left\{ f : \Omega \rightarrow \mathbb{C} \text{ mesurables} : f|_K \in L^1(K) \forall K \subset \Omega, K \text{ compacte} \right\}. \quad (1.1.26)$$

Definició 1.1.36. Donada $u \in L^1_{loc}(\Omega)$ tal que:

$$\int_{\Omega} w \phi = - \int_{\Omega} u \frac{\partial \phi}{\partial x_j}, \quad \forall \phi \in \mathcal{C}_c^\infty(\Omega). \quad (1.1.27)$$

Aleshores, direm que w és la derivada feble de u en la direcció x_j i la denotem com $w := \frac{\partial u}{\partial x_j}$.

Definició 1.1.37. Es defineix l'espai de Sobolev d'ordre 1 sobre Ω com:

$$H^1(\Omega) = \left\{ v \in L^2(\Omega) : \frac{\partial v}{\partial x_i} \in L^2(\Omega) i = 1, \dots, n \right\}. \quad (1.1.28)$$

Teorema 1.1.38. $(H^1(\Omega), (\cdot, \cdot)_{1,\Omega})$ és de Hilbert.

Demostració. Se sap que $(H^1(\Omega), (\cdot, \cdot)_{1,\Omega})$ és un espai prehilbertià. És a dir, és un espai vectorial sobre un cos, Ω , on existeix un producte escalar que compleix:

- $\forall x, y \in (H^1(\Omega), (\cdot, \cdot)_{1,\Omega})$ tals que $\langle x, y \rangle = \overline{\langle y, x \rangle}$.
- $\forall a \in \Omega, \forall x$ i $y \in (H^1(\Omega), (\cdot, \cdot)_{1,\Omega})$, aleshores $\langle ax, y \rangle = a \langle x, y \rangle$.
- $x, y, z \in (H^1(\Omega), (\cdot, \cdot)_{1,\Omega})$, llavors $\langle x + y, z \rangle = \langle x, z \rangle + \langle y, z \rangle$.
- $\forall x \in (H^1(\Omega), (\cdot, \cdot)_{1,\Omega})$ es té que $\langle x, x \rangle \geq 0$. A més, $\langle x, x \rangle = 0$ si i només si $x = 0$.

Aquestes propietats es veuen immediatament aplicant les definicions del producte escalar de $L^2(\Omega)$.

Queda provar si aquest espai és hilbertià. Sigui $\{v_m\}$ una successió de Cauchy de $H^1(\Omega)$. Cal veure si les successions $\{v_m\}$ i $\left\{ \frac{\partial v_m}{\partial x_i} \right\}$ per $1 \leq i \leq n$ són successions de Cauchy a $L^2(\Omega)$.

Com que:

$$\|u\|_{1,\Omega}^2 = \int_{\Omega} \left(u^2 + \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial u}{\partial x_i} \right)^2 \right) \geq \int_{\Omega} u^2 = \|u\|_{0,\Omega}^2,$$

llavors, s'aplica el producte escalar a les successions:

$$\|v_p - v_q\|_{1,\Omega} < \epsilon \Rightarrow \|v_p - v_q\|_{0,\Omega} < \epsilon$$

$$\left\| \frac{\partial v_p}{\partial x_i} - \frac{\partial v_q}{\partial x_i} \right\|_{1,\Omega} < \epsilon \Rightarrow \left\| \frac{\partial v_p}{\partial x_i} - \frac{\partial v_q}{\partial x_i} \right\|_{0,\Omega} < \epsilon.$$

Per tant, les dues successions són de Cauchy. Siguin $\left\{ \begin{array}{l} v_m \rightarrow v \in L^2(\Omega) \\ \frac{\partial v_m}{\partial x_i} \rightarrow v^i \in L^2(\Omega) \end{array} \right.$, aleshores cal provar que $\frac{\partial v}{\partial x_i} = v^i$. Per veure-ho, es considera $\frac{\partial v_m}{\partial x_i}$. Se sap que $v_m \rightarrow v$ a $L^2(\Omega)$. A més, es té que $L^2(\Omega)$ és dens a $\mathcal{C}_c(\Omega)$. Com a resultat, $\frac{\partial v_m}{\partial x_i} \rightarrow \frac{\partial v}{\partial x_i} = v^i$ per tenir un únic límit.

□

1.2 Fonaments físics

Definició 1.2.1. *Un observable clàssic és una quantitat física que pot ser observada a través d'una mesura del sistema físic.*

Exemple 1.2.2. Alguns exemples de d'observables clàssics poden ser la posició, el moment o l'energia.

Definició 1.2.3. *S'anomena funció d'ona a la funció φ si aquesta representa la descripció matemàtica d'un estat quàntic d'un sistema quàntic aïllat.*

1.2.1 Mecànica Quàntica

Per tal de comprendre les bases teòriques de la Mecànica Quàntica, es necessita anunciar els Postulats de la Mecànica Quàntica.

Postulat 1.2.4. *(Primer Postulat de la Mecànica Quàntica) L'estat del sistema de partícules ve representat per un vector unitari φ d'un espai de Hilbert apropiat. Si φ_1 i φ_2 són dos vectors unitaris de tals que $\varphi_2 = c\varphi_1$ per alguna constant $c \in \mathbb{C}$, llavors φ_1 i φ_2 representen el mateix estat físic.*

Típicament es consideren l'espai de Hilbert $L^2(\mathbb{R}^n)$ i una funció d'ona $\varphi : L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathbb{C}$ tal que $\|\varphi\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}$.

Postulat 1.2.5. *(Segon Postulat de la Mecànica Quàntica) Per a cada funció de valors reals f dins de l'espai de fase clàssic, en altres paraules, f és un observable clàssic, es té associat un operador auto-adjunt $\check{f}$ de l'espai de Hilbert associat a un sistema quàntic donat.*

Postulat 1.2.6. *(Tercer Postulat de la Mecànica Quàntica) Per un sistema quàntic que estigui en un estat el qual és descrit per un vector unitari $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^n)$, aleshores la probabilitat per mesurar l'observable f satisfà:*

$$E(f) = \langle \varphi, \check{f}\varphi \rangle. \quad (1.2.1)$$

Concretament, el valor esperat per mesurar f és:

$$\langle \check{f} \rangle_\varphi = \langle \varphi, \check{f}\varphi \rangle. \quad (1.2.2)$$

Un resultat que segueix d'aquest postulat és que si un sistema quàntic es troba en un estat descrit per un vector unitari $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ i algun observable $\check{f}$ tal que $\check{f}\varphi = \lambda\varphi$ per $\lambda \in \mathbb{R}$, llavors per a tot $m \in \mathbb{Z}_+$:

$$E(f^m) = \left\langle \left(\check{f} \right)^m \right\rangle_{\varphi} = \lambda^m. \quad (1.2.3)$$

Postulat 1.2.7. (*Quart Postulat de la Mecànica Quàntica*) Donat un sistema quàntic que es trobi en un estat φ si es fa la mesura de l'observable f associat al sistema, aleshores l'estat passa a ser φ' i, immediatament, per algun $\lambda \in \mathbb{R}$ es compleix que:

$$\check{f}\varphi' = \lambda\varphi'. \quad (1.2.4)$$

Fins ara, res depenia del temps però en realitat es té que $\varphi = \varphi(\mathbf{x}, t)$. De fet, es pot pensar l'estat com $\varphi : \mathbb{R} \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$ tal que $t \mapsto \varphi(t)$.

A més, en la majoria dels casos, els operadors amb els quals es treballaran són no acotats, ja que els observables com la posició i el moment lineal no són funcions acotades. A continuació, s'introdueixen els operadors més rellevants com són la posició i el moment.

Definició 1.2.8. Sigui ψ una funció d'ona. Es defineix l'operador de posició, amb $\text{Dom}(X) = \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^n)$, i l'operador del moment lineal, amb $\text{Dom}(P) = \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^n)$, per operadors corresponents a la posició per $j \in \{1, \dots, n\}$ com:

$$\begin{aligned} X_j &= x_j \\ P_j &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} = \hbar p_j \end{aligned} \quad (1.2.5)$$

tals que, aleshores;

$$\begin{aligned} X\psi &= (x_1, \dots, x_n)\psi \\ P\psi &= \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_n} \right) \psi \end{aligned} \quad (1.2.6)$$

Postulat 1.2.9. (*Cinquè Postulat de la Mecànica Quàntica*) L'evolució temporal d'una funció d'ona φ en un sistema quàntic ve donada per l'equació d'Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \check{\mathcal{H}}\varphi. \quad (1.2.7)$$

On $\check{\mathcal{H}}$ és l'operador corresponent al hamiltonià clàssic, o l'energia total del sistema.

Definició 1.2.10. A partir del Cinquè Postulat de la Mecànica Quàntica i sabent que els valors propis de l'equació de Schrödinger representen l'energia del sistema, es considera l'operador energia com:

$$\check{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \quad (1.2.8)$$

Per veure que existeix alguna solució de l'equació de Schrödinger, cal veure que l'expressió $e^{-\frac{it\tilde{\mathcal{H}}}{\hbar}}$ té un sentit raonable. La idea és que l'expressió (1.2.7) es pot considerar com una equació diferencial ordinària en l'espai de Banach $L^2(\mathbb{R}^n)$, ja que llavors l'equació tindria com a solució:

$$\varphi(t) = e^{-\frac{it\tilde{\mathcal{H}}}{\hbar}} \varphi_0 \quad (1.2.9)$$

on φ_0 equival a la solució a temps $t = 0$.

Pel cas més particular, si $\tilde{\mathcal{H}}$ és un operador acotat, aleshores l'exponencial $e^{-\frac{it\tilde{\mathcal{H}}}{\hbar}}$ pot ser definit per una sèrie de potències convergent. No obstant, més generalment, si $\tilde{\mathcal{H}}$ és no acotat, la convergència de l'exponencial no és tan immediata, perquè no es podria definir amb una sèrie.

Com que l'operador del Hamiltonià podrà dependre de la posició i/o el moment, cal observar que ni l'operador posició ni el de moments no estan definits per a tot l'espai $L^2(\mathbb{R}^n)$. En altres paraules, pot ser que, per $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^n)$, no es tingui $x_j\varphi \in L^2(\mathbb{R}^n)$. Igualment, pot ser que les derivades parcials no existeixin o que $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}\varphi$ no es trobi dins l'espai $L^2(\mathbb{R}^n)$. És a dir, els operadors de posició i moment són operadors no acotats, tal i com s'havia comentat amb anterioritat. Per aquest motiu, cal introduir quan es té que l'operador de posició i l'operador de moments són auto-adjunts.

Proposició 1.2.11. *Els operadors de posició i de moment són simètrics. És a dir, per a totes les funcions $\phi, \psi \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ es té que:*

$$\langle \phi, X\psi \rangle = \langle X\phi, \psi \rangle \quad (1.2.10)$$

i que:

$$\langle \phi, P\psi \rangle = \langle P\phi, \psi \rangle. \quad (1.2.11)$$

Demostració. D'una banda, per a tot $j \in \{1, \dots, n\}$, tenim que $x_j\phi(x), x_j\psi(x) \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^n) \subset L^2(\mathbb{R}^n)$. Com que $x_j \in \mathbb{R}$, aleshores;

$$\int_{\mathbb{R}^n} x_j\psi(x)\overline{\phi(x)}dx = \int_{\mathbb{R}^n} \psi(x)\overline{x_j\phi(x)}dx.$$

Cal notar que aquestes integrals són convergents per ser productes de funcions de $L^2(\mathbb{R}^n)$.

Per altra banda, si es consideren les hipòtesis plantejades a l'enunciat, integrant per parts;

$$-i\hbar \int_{\mathbb{R}^n} \overline{\phi(x)} \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(x) dx = i\hbar \int_{\mathbb{R}^n} \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{\phi(x)} \psi(x) dx.$$

Ara bé, com $\overline{\frac{\partial}{\partial x_j} \phi(x)} = \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{\phi(x)}$, aleshores es troba que:

$$-i\hbar \int_{\mathbb{R}^n} \overline{\phi(x)} \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(x) dx = i\hbar \int_{\mathbb{R}^n} \overline{\frac{\partial}{\partial x_j} \phi(x)} \psi(x) dx = \int_{\mathbb{R}^n} \overline{\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \phi(x)\right)} \psi(x) dx.$$

□

Com a resultat, els operadors de posició i moments són operadors simètrics en un cert subespai de $L^2(\mathbb{R}^n)$. De fet, en aquest subespai els operadors de posició i moments són operadors auto-adjunts. Per veure-ho es farà servir el resultat següent.

Proposició 1.2.12. *Sigui $V : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ una funció mesurable. Es defineix $V(\mathbf{X})$ com l'operador no acotat amb domini:*

$$\text{Dom}(V(\mathbf{X})) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^n) | V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) \in L^2(\mathbb{R}^n)\} \quad (1.2.12)$$

i tal que:

$$[V(\mathbf{X})\psi](\mathbf{x}) = V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}). \quad (1.2.13)$$

Aleshores, $\text{Dom}(V(\mathbf{X}))$ és dens en $L^2(\mathbb{R}^n)$ i $V(X)$ és auto-adjunt en aquest domini.

Demostració. Per una banda, es considera el subconjunt $E_m \subset \mathbb{R}^n$ donat per:

$$E_m = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : |V(\mathbf{x})| < m\},$$

tal que $\mathbb{R}^n = \cup_m E_m$. Llavors, per a tot $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ es té que $\psi \cdot 1_{E_m}$, on 1_{E_m} fa de indicador, pertany al $\text{Dom}(V(\mathbf{X}))$. A més, usant el Teorema de Convergència Dominada, s'obté $\psi \cdot 1_{E_m} \rightarrow_{m \rightarrow \infty} \psi$. Com a conseqüència, el conjunt $\text{Dom}(V(\mathbf{X}))$ és dens en $L^2(\mathbb{R}^n)$.

Per l'altra, com que V es defineix dins els valors reals, és fàcil observar que $V(\mathbf{X})$ és simètric en $\text{Dom}(V(\mathbf{X}))$. Per aquest motiu, per la Proposició 1.1.18., $V(\mathbf{X})^*$ és una extensió de $V(\mathbf{X})$.

Així mateix, donat $\phi \in \text{Dom}(V(\mathbf{X})^*)$ es té per definició;

$$\psi \mapsto \int_X \psi(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}) \overline{\phi(\mathbf{x})} d\mathbf{x}, \quad \psi \in \text{Dom}(V(\mathbf{X}))$$

és un operador lineal acotat. Llavors, aquest operador té una única extensió a $L^2(\mathbb{R}^n)$ i existeix una única $\chi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ tal que:

$$\int_X \phi(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}) \overline{\psi(\mathbf{x})} d\mathbf{x} = \int_X \phi(\mathbf{x}) \overline{\chi(\mathbf{x})} d\mathbf{x}.$$

En altres paraules;

$$\int_X \phi(\mathbf{x}) \left[V(\mathbf{x}) \overline{\psi(\mathbf{x})} - \overline{\chi(\mathbf{x})} \right] d\mathbf{x} = 0$$

per a tot $\phi \in \text{Dom}(V(\mathbf{X}))$. Prenent $\phi = (V\psi - \chi) \cdot 1_{E_m}$, es veu que $\psi V - \chi$ és zero a gairebé tot arreu de E_m per a tot m . Per tant, és zero a gairebé tot arreu de $\mathbb{R}^n$. A més a més, com que ψV és igual a χ com a element de $L^2(\mathbb{R}^n)$, llavors $\psi \in \text{Dom}(V(\mathbf{X}))$. És a dir, s'ha demostrat que $\text{Dom}(V(\mathbf{X})^*) = \text{Dom}(V(\mathbf{X}))$.

Ja que se sap que $V(\mathbf{X})^*$ és una extensió de $V(\mathbf{X})$, aleshores $V(\mathbf{X})$ és auto-adjunt en $\text{Dom}(V(\mathbf{X}))$.

□

Corol·lari 1.2.13. *L'operador posició $X_j = x_j$ és auto-adjunt en el domini:*

$$\text{Dom}(X_j) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^n) | x_j \psi(\mathbf{x}) \in L^2(\mathbb{R}^n)\}. \quad (1.2.14)$$

Proposició 1.2.14. *Per a cada $j = 1, 2, \dots, n$, es defineix el domini $\text{Dom}(P_j) \subset L^2(\mathbb{R}^n)$ com:*

$$\text{Dom}(P_j) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^n) | p_j \hat{\psi}(\mathbf{p}) \in L^2(\mathbb{R}^n)\}. \quad (1.2.15)$$

On $\hat{\psi}$ és la Transformada de Fourier de ψ . Es defineix P_j en aquest domini de manera que:

$$P_j \psi = \mathcal{F}^{-1}(\hbar p_j \hat{\psi}(\mathbf{p})). \quad (1.2.16)$$

Aleshores, P_j és auto-adjunt en $\text{Dom}(P_j)$.

Així doncs, el Teorema Espectral³ diu que si es té $\check{H}$ un operador auto-adjunt, aleshores existeix una base ortonormal $(\{e_j\}_{j=1, \dots, n})$ de l'operador dins de l'espai de Hilbert i, com a conseqüència, aquesta està formada pels vectors propis. En el cas per a $E_j \in \mathbb{R}$, si $\check{H}e_j = E_j e_j$, aleshores l'exponencial estarà definida com:

$$e^{-\frac{it\check{H}}{\hbar}} e_j = e^{-\frac{itE_j}{\hbar}} e_j \quad (1.2.17)$$

on $e^{-\frac{it\check{H}}{\hbar}}$ és unitari i, per tant, acotat.

És per aquest motiu, que en Mecànica Quàntica els operadors es volen considerar com auto-adjunts.

1.2.2 Relativitat General

Com a conceptes pertanyents a l'àmbit de la Relativitat General cal destacar alguns que s'usaran durant l'execució del treball.

Definició 1.2.15. *L'energia relativista d'un objecte amb massa m i velocitat v es defineix com:*

$$E = \gamma mc^2. \quad (1.2.18)$$

On c és la velocitat de la llum en el buit i $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$ és el factor de Lorentz. En particular, quan $v = 0$, l'energia passa a ser l'energia en repòs.

³Veure els capítols 7 i 10 de la referència [1].

Definició 1.2.16. *Es defineix la massa relativista com la magnitud que depèn del sistema de referència que s'agafi:*

$$m = \gamma m_0. \quad (1.2.19)$$

On m_0 és la massa en repòs, la qual s'interpreta com la massa que és independent del moviment del sistema.

La qual cosa implica que el moment lineal d'una partícula és equivalent a:

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} = \gamma m_0 \mathbf{v}. \quad (1.2.20)$$

Així doncs, si es considera de manera general un sistema tal que $\gamma = 1$ i $m = m_0$ i es desenvolupen les expressions (1.2.18) i (1.2.20), s'obté la relació entre l'energia i el moment relativista:

$$E^2 - |\mathbf{p}|^2 c^2 = \gamma^2 m^2 c^4 - \gamma^2 m^2 v^2 c^2 = \gamma^2 m^2 c^4 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) = \frac{\gamma^2}{\gamma^2} m^2 c^4,$$

és a dir;

$$E^2 - |\mathbf{p}|^2 c^2 = m^2 c^4. \quad (1.2.21)$$

Aquesta relació la farem servir per definir l'equació de Dirac.

Capítol 2

Equació de Dirac

L'Equació de Dirac descriu com actua un electró o un positró relativista segons si es mou en un camp lliure de forces, o bé, en un camp amb forces o amb altres partícules.

En aquest capítol, ens centrarem en l'Equació que estudia el cas per a electrons o positrons en un camp lliure, sense forces. En aquest context, la seva importància deriva del fet que a temps llargs les partícules tendeixen a comportar-se com partícules lliures. És a dir, com a partícules sense tenir en compte les característiques relativistes. Veurem d'on sorgeix l'Equació com a tal, estudiarem l'operador que es defineix a partir de l'Equació i provarem el Teorema que ens assegura l'existència de l'espai de solucions de l'Equació de Dirac.

2.1 Deducció de l'equació

Des d'un punt de vista més físic, per deduir l'Equació es considera el moviment relativístic d'una partícula a $\mathbb{R}^3$ d'*spin* $-\frac{1}{2}$ i massa en repòs m . De fet, per una partícula lliure es té per la teoria no relativista, (1.2.8) i (1.2.5), que:

$$\begin{cases} E \mapsto i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \\ p_{x_i} \mapsto -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \end{cases}, \quad (2.1.1)$$

on $\hbar$ és la constant de Planck. Així doncs, si s'aplica el que se sap de la teoria relativista clàssica, (1.2.21), es coneix que:

$$E = \sqrt{c^2|\mathbf{p}|^2 + m^2c^4}. \quad (2.1.2)$$

Aleshores, combinant el que s'ha introduït amb els Postulats de la Mecànica Quàntica, s'obté que s'ha de satisfer la relació:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \mathbf{x}) = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} \psi(t, \mathbf{x}) = \sqrt{-c^2 \hbar^2 \Delta + m^2 c^4} \psi(t, \mathbf{x}), \quad (2.1.3)$$

on $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}$ és el Laplaciana. Aquesta equació s'anomena Equació de Klein-Gordon¹.

Dirac va observar que en aquesta equació no seria possible afegir-hi cap camp electromagnètic extern, de forma que es mantingués invariant relativísticament. Per aquest motiu i basant-se amb el fet que a Mecànica Quàntica l'evolució d'una equació respecte la variable temporal ha de ser de primer ordre, Dirac va proposar l'energia de la forma:

$$E_D = c \sum_{j=1}^3 \alpha_j p_j + \beta m c^2 = c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m c^2, \quad (2.1.4)$$

on $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ i β han de ser tal que l'expressió (2.1.2) es compleixi. És a dir;

$$E_D = c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m c^2 = \sqrt{c^2 |\mathbf{p}|^2 + m^2 c^4}. \quad (2.1.5)$$

Desenvolupant l'expressió $\frac{E_D^2}{c^2}$, s'aconsegueix que:

$$\begin{aligned} \left(\frac{E_D}{c} \right)^2 &= \left(\sum_{j=1}^3 \alpha_j p_j + \beta m c \right)^2 = \\ &= \alpha_1^2 p_1^2 + \alpha_2^2 p_2^2 + \alpha_3^2 p_3^2 + \beta^2 m^2 c^2 + \alpha_1 p_1 \alpha_2 p_2 + \alpha_2 p_2 \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 \alpha_3 p_3 + \\ &+ \alpha_3 p_3 \alpha_2 p_2 + \alpha_1 p_1 \alpha_3 p_3 + \alpha_3 p_3 \alpha_1 p_1 + \alpha_1 p_1 \beta m c + \alpha_2 p_2 \beta m c + \alpha_3 p_3 \beta m c + \\ &+ \beta m c \alpha_1 p_1 + \beta m c \alpha_2 p_2 + \beta m c \alpha_3 p_3 + \beta^2 m^2 c^2. \end{aligned}$$

I imposant (2.1.2.), es té:

$$\left(\frac{E_D}{c} \right)^2 = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 + m^2 c^2. \quad (2.1.6)$$

Com a conseqüència;

$$\begin{cases} \alpha_j \alpha_k + \alpha_k \alpha_j = 2 \cdot \text{Id}, & j \neq k, j, k = 1, 2, 3 \\ \alpha_j \beta + \beta \alpha_j = 0, & j = 1, 2, 3 \\ \alpha_j^2 = \text{Id}, & j = 1, 2, 3 \\ \beta^2 = \text{Id} \end{cases}. \quad (2.1.7)$$

D'aquí s'observa que α i β són quantitats anti-commutatives, de manera que els valors de α , β no poden ser nombres complexos. Una elecció natural és que $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ i β siguin matrius n -dimensionals amb coeficients a $\mathbb{C}$. A continuació, es veurà si és possible trobar $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ i β que satisfacin les relacions de (2.1.5).

¹Normalment, el fet de posar el Laplaciana dins d'una arrel no tindria sentit. Cal fer esment, però, sobre la importància de l'espai de les Transformades de Fourier. A partir de la Transformada de Fourier es veu que les multiplicacions que es donen a l'operador de moments equivalen a les derivades a l'espai de Hilbert de les posicions (1.1.12).

Per una banda, es té per la teoria de la mecànica quàntica que cal que les matrius n -dimensionals α i β siguin *matrius auto-adjuntes*, en particular, *matrius hermítiques*. Per la teoria d'Anàlisi Funcional, es té que si operador és auto-adjunt, aleshores aquest és simètric. Per tant, es pot apreciar que perquè siguin matrius simètriques és necessari que se satisfaci el producte escalar de l'espai de Hilbert tal que:

$$\langle M \cdot \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{u}, M \cdot \mathbf{v} \rangle, \quad (2.1.8)$$

on M és una matriu i $\mathbf{u}, \mathbf{v}$ són vectors en els complexos. No obstant;

$$\begin{cases} \langle M \cdot \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = \int (M \cdot \mathbf{u})^T \cdot \bar{\mathbf{v}} = \int \mathbf{u}^T \cdot M^T \cdot \bar{\mathbf{v}} \\ \langle \mathbf{u}, M \cdot \mathbf{v} \rangle = \int \mathbf{u}^T \cdot \overline{M \cdot \mathbf{v}} = \int \mathbf{u}^T \cdot \overline{M} \cdot \bar{\mathbf{v}} \end{cases}, \quad (2.1.9)$$

de manera que s'ha de complir:

$$M^T = \overline{M}. \quad (2.1.10)$$

Com a resultat, les matrius α, β les matrius que actuen com a operadors han de ser *matrius hermítiques*.

Per l'altra, es necessita determinar el valor de n . Per fer-ho, s'utilitzen les relacions:

$$\begin{cases} \alpha_j = \beta^2 \alpha_j \\ \alpha_j \beta + \beta \alpha_j = 0 \rightarrow \alpha_j = -\beta \alpha_j \beta \end{cases}, \quad (2.1.11)$$

les quals són conseqüència de (2.1.5). Com a resultat, s'obté;

$$\text{tr}(\alpha_j) = \text{tr}(\beta^2 \alpha_j) = -\text{tr}(\beta \alpha_j \beta) = -\text{tr}(\alpha_j). \quad (2.1.12)$$

Cal notar que l'última igualtat sorgeix del fet que la inversa de β és ella mateixa ($\beta = \beta^{-1}$) i que la traça és invariant per canvi de base.

A més, com que també s'ha de complir $\alpha_j^2 = \text{Id}$, és necessari que les matrius α_j tinguin com a valors propis -1 o $+1$. Aquests dos fets impliquen que n ha de ser un nombre parell. En particular, un exemple molt comú són les matrius de Pauli:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.1.13)$$

Cal notar que cadascuna de les matrius formen part d'una base de matrius hermítiques 2×2 . Llavors, al ser α i β anti-commutatives i σ_1, σ_2 i σ_3 també s'escull:

$$\beta = \begin{pmatrix} \text{Id}_2 & 0 \\ 0 & -\text{Id}_2 \end{pmatrix}, \alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix} \text{ per a } j = 1, 2, 3. \quad (2.1.14)$$

Aleshores, amb aquesta elecció (2.1.4) dona lloc, un cop s'ha fet servir el Cinquè Postulat de la Mecànica Quàntica, a l'equació següent:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \mathbf{x}) = H_0 \psi(t, \mathbf{x}), \quad (2.1.15)$$

on H_0 és l'operador diferencial matricial amb $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ tal que:

$$H_0 = -i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2 = \begin{pmatrix} mc^2 \cdot \text{Id}_2 & -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \\ -i\hbar c \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla & -mc^2 \cdot \text{Id}_2 \end{pmatrix}. \quad (2.1.16)$$

L'operador H_0 s'anomena operador lliure de Dirac. Llavors, usant la notació i $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ i escrivint $\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla$ explícitament, tenim:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla &= \sigma_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + \sigma_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + \sigma_3 \frac{\partial}{\partial x_3} = \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_2} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_3} = \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \frac{\partial}{\partial x_1} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i \frac{\partial}{\partial x_2} \\ i \frac{\partial}{\partial x_2} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_3} & 0 \\ 0 & -\frac{\partial}{\partial x_3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} + i \frac{\partial}{\partial x_2} & \frac{\partial}{\partial x_1} - i \frac{\partial}{\partial x_2} \\ \frac{\partial}{\partial x_1} + i \frac{\partial}{\partial x_2} & -\frac{\partial}{\partial x_3} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.1.17)$$

Per tant, l'operador de Dirac té l'expressió:

$$H_0 = \begin{pmatrix} mc^2 & 0 & -i\hbar c \frac{\partial}{\partial x_3} & -i\hbar c \frac{\partial}{\partial x_1} - \hbar c \frac{\partial}{\partial x_2} \\ 0 & mc^2 & -i\hbar c \frac{\partial}{\partial x_1} + \hbar c \frac{\partial}{\partial x_2} & i\hbar c \frac{\partial}{\partial x_3} \\ -i\hbar c \frac{\partial}{\partial x_3} & -i\hbar c \frac{\partial}{\partial x_1} - \hbar c \frac{\partial}{\partial x_2} & -mc^2 & 0 \\ -i\hbar c \frac{\partial}{\partial x_1} + \hbar c \frac{\partial}{\partial x_2} & i\hbar c \frac{\partial}{\partial x_3} & 0 & -mc^2 \end{pmatrix}. \quad (2.1.18)$$

Finalment, per l'expressió (2.1.15) es pot afirmar que $\psi(t, \mathbf{x}) \in \mathbb{C}^4$ és el vector de les funcions d'ona de la partícula que compleix el Cinquè Postulat de la Mecànica Quàntica.

En particular, l'operador de Dirac que descriu els electrons relativístics lliures de forces és el que té dimensió 2×2 . Com que es necessiten només tres matrius per α_1, α_2 i β , és suficient considerar les matrius de Pauli. Així que:

$$H_0 = -i\hbar c \left(\sigma_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + \sigma_2 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) + \sigma_3 mc^2. \quad (2.1.19)$$

En altres paraules;

$$H_0 = \begin{pmatrix} mc^2 & -i\hbar c \frac{\partial}{\partial x_1} - \hbar c \frac{\partial}{\partial x_2} \\ -i\hbar c \frac{\partial}{\partial x_1} + \hbar c \frac{\partial}{\partial x_2} & -mc^2 \end{pmatrix}. \quad (2.1.20)$$

En aquest cas, el vector de les funcions d'ona solució de l'equació de Dirac se situaria a $\mathbb{C}^2$.

2.2 Estudi de l'operador de Dirac

Normalment, l'anàlisi de l'operador lliure de Dirac està fet dins de l'espai de Fourier. Com que generalment es considera l'operador de Dirac, H_0 , com una matriu 4×4 com a l'expressió (2.1.16), l'espai de Hilbert a considerar, per l'espai de posició $x \in \mathbb{R}^3$ és:

$$L^2(\mathbb{R}^3) \oplus L^2(\mathbb{R}^3) \oplus L^2(\mathbb{R}^3) \oplus L^2(\mathbb{R}^3) = (L^2(\mathbb{R}^3))^4 =: (L^2(\mathbb{R}^3, d^3x))^4. \quad (2.2.1)$$

Un cop entesa la isometria que hi ha en aquest espai, pel Teorema 1.1.31., podem observar que existeix la següent diagrama:

$$\begin{array}{ccc} (L^2(\mathbb{R}^3, d^3x))^4 & \xrightarrow{\mathcal{F}} & (L^2(\mathbb{R}^3, d^3p))^4 \\ \uparrow & & \downarrow \\ (L^2(\mathbb{R}^3, d^3x))^4 & \xleftarrow{\mathcal{F}^{-1}} & (L^2(\mathbb{R}^3, d^3p))^4 \end{array} \quad (2.2.2)$$

De manera que quan s'aplica la Transformada de Fourier a la matriu s'és més fàcil poder dur a terme el procés de diagonalització de la matriu dins de l'espai $(L^2(\mathbb{R}^3, d^3p))^4$ gràcies a les seves propietats. Per tant, per l'operador de Dirac s'aconsegueix el resultat:

$$h(\mathbf{p}) := (\mathcal{F}H_0\mathcal{F}^{-1})(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} mc^2 \cdot \text{Id}_2 & c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & -mc^2 \cdot \text{Id}_2 \end{pmatrix}. \quad (2.2.3)$$

És a dir, les expressions sabudes, (1.1.13) i (1.1.15), de la Transformada de Fourier es poden aplicar i per l'operador de Dirac de dimensió 4×4 es té que:

$$(\mathcal{F}H_0\mathcal{F}^{-1})(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} mc^2 & 0 & \hbar c p_3 & \hbar c p_1 - i\hbar c p_2 \\ 0 & mc^2 & \hbar c p_1 + i\hbar c p_2 & -\hbar c p_3 \\ \hbar c p_3 & \hbar c p_1 - i\hbar c p_2 & -mc^2 & 0 \\ \hbar c p_1 + i\hbar c p_2 & \hbar c p_3 & 0 & -mc^2 \end{pmatrix}. \quad (2.2.4)$$

A través de la Transformada de Fourier, el problema original dins l'espai de posicions passa a estar dins l'espai de moments com:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \widehat{\psi}(t, \mathbf{p}) = (\mathcal{F}H_0\mathcal{F}^{-1})(\mathbf{p}) \widehat{\psi}(t, \mathbf{p}). \quad (2.2.5)$$

A partir d'aquesta expressió es pot estudiar els valors propis de $h(\mathbf{p})$ segons en funció de $\mathbf{p}$. Concretament, es defineix $\lambda(\mathbf{p})$ com l'expressió de (2.1.2):

$$\lambda(\mathbf{p}) := \sqrt{c^2|\mathbf{p}|^2 + m^2c^4}. \quad (2.2.6)$$

Aleshores, els quatre valors propis queden determinats com:

$$\lambda_1(\mathbf{p}) = \lambda_2(\mathbf{p}) = -\lambda_3(\mathbf{p}) = -\lambda_4(\mathbf{p}) = \lambda(\mathbf{p}). \quad (2.2.7)$$

I la transformació unitària que diagonalitza $h(\mathbf{p})$ en funció de $\mathbf{p}$ té la forma de:

$$u(\mathbf{p}) = \frac{(mc^2 + \lambda(p)) \cdot \text{Id}_4 + \beta c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}}{\sqrt{2\lambda(p)(mc^2 + \lambda(p))}} \quad (2.2.8)$$

i es compleix:

$$u(\mathbf{p})h(\mathbf{p})u^{-1}(\mathbf{p}) = \beta\lambda(p). \quad (2.2.9)$$

En efecte;

$$\begin{aligned} u(\mathbf{p})h(\mathbf{p}) &= \left(\frac{(mc^2 + \lambda(p)) \cdot \text{Id}_4 + \beta c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}}{\sqrt{2\lambda(p)(mc^2 + \lambda(p))}} \right) \begin{pmatrix} mc^2 \cdot \text{Id}_2 & c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & -mc^2 \cdot \text{Id}_2 \end{pmatrix} = \\ &= \lambda(p) \left(\frac{(mc^2 + \lambda(p)) \cdot \beta + \text{Id}_4 c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}}{\sqrt{2\lambda(p)(mc^2 + \lambda(p))}} \right) = \\ &= \lambda(p) \beta \left(\frac{(mc^2 + \lambda(p)) \cdot \text{Id}_4 + c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}}{\sqrt{2\lambda(p)(mc^2 + \lambda(p))}} \right) \beta \\ &= \lambda(p) u(\mathbf{p}) \beta. \end{aligned}$$

Com a resultat, pel diagrama (2.2.2) i per l'expressió (2.2.3) s'obté que:

$$(u(\mathcal{F}H_0\mathcal{F}^{-1})u^{-1})(\mathbf{p}) = \beta\lambda(p). \quad (2.2.10)$$

A més, per veure quina forma té la funció d'ona de la partícula només cal tenir en compte que si $\varphi \in (L^1(\mathbb{R}^3, d^3p))^4 \cap (L^2(\mathbb{R}^3, d^3p))^4$ tal que $\varphi(p) = u(\mathcal{F}(\phi(x)))$, per les propietats de la Transformada de Fourier, s'obté:

$$\phi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} u(\mathbf{p})^{-1} \varphi(\mathbf{p}) d^3p. \quad (2.2.11)$$

2.3 Existència de solucions

Per acabar de veure que l'operador de Dirac és un operador auto-adjunt i, per tant, l'Equació de Dirac es pot resoldre, és necessari provar el següent resultat.

Teorema 2.3.1. *L'operador de Dirac és un operador essencialment auto-adjunt en el domini dens $(C_c^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}))^4$ i auto-adjunt dins l'espai de Sobolev:*

$$\text{Dom}(H_0) = (H^1(\mathcal{R}^3))^4. \quad (2.3.1)$$

Demostració. De l'expressió (2.2.10) es veu que:

$$\text{Dom}(H_0) = \mathcal{F}^{-1}u^{-1}\text{Dom}(\beta\lambda(p)) = \mathcal{F}^{-1}u^{-1}\text{Dom}(\lambda(p)) = \mathcal{F}^{-1}\text{Dom}(\lambda(p)), \quad (2.3.2)$$

ja que β és una matriu constant que no depèn de p i u^{-1} és una transformació unitària.

Ara, cal veure a on l'operador de Dirac és autoadjunt. A partir de la Proposició 1.2.12., per fer-ho és necessari saber, per $\psi(p) \in (L^2(\mathbb{R}^3))^4$, quan $\int_{\mathbb{R}^3} \lambda(p)^2 |\psi(p)|^2 < +\infty$. Així doncs, per la definició de $\lambda(p)$:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} (m^2 c^4 + c^2 |\mathbf{p}|^2) |f(p)|^2 dp &= \int_{\mathbb{R}^3} m^2 c^4 |f(p)|^2 d^3 p + \int_{\mathbb{R}^3} c^2 |\mathbf{p}|^2 |f(p)|^2 d^3 p = \\ &= m c^2 \int_{\mathbb{R}^3} |f(p)|^2 d^3 p + c \int_{\mathbb{R}^3} |\mathbf{p}|^2 |f(p)|^2 d^3 p. \end{aligned}$$

Ara bé, com que m, c són constants, llavors la quantitat anterior és finita, si i només si, $\int_{\mathbb{R}^3} (1 + |\mathbf{p}|^2) |f(p)|^2 d^3 p < +\infty$.

Per tant, quan $m \neq 0$ ², l'operador $\lambda(p)$ és auto-adjunt en:

$$\left\{ f \in (L^2(\mathbb{R}^3, d^3 p))^4 \mid \sqrt{1 + |\mathbf{p}|^2} f \in (L^2(\mathbb{R}^3, d^3 p))^4 \right\}. \quad (2.3.3)$$

Tanmateix, aquest conjunt coincideix amb la Transformada de Fourier de l'espai de Sobolev de H_0 , definit a l'apartat 1.1.3 del Capítol 1, la qual cosa implica que l'espectre de H_0 equival a l'espectre de l'operador $\beta\lambda(p)$ donat per $\lambda_i(p)$, amb $i = 1, 2, 3, 4$.

Per provar que l'operador de Dirac és essencialment auto-adjunt, es considera l'operador de Dirac dins del conjunt $(\mathcal{S}(\mathbb{R}^3))^4$, on $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ és l'espai de les funcions de Schwarz, definit en el Capítol 1.

Ara bé, es coneix que el conjunt $(\mathcal{S}(\mathbb{R}^3))^4$ és invariant respecte de les Transformacions de Fourier per les propietats que s'han vist en l'apartat de la Transformada de Fourier del Capítol 1, perquè, per definició, l'espai de Schwarz està contingut dins de $L^2(\mathbb{R}^n)$:

$$(\mathcal{FS}(\mathbb{R}^3))^4 = (\mathcal{S}(\mathbb{R}^3))^4. \quad (2.3.4)$$

Sigui $\widetilde{H}_0$ l'operador definit en aquest domini, és a dir;

$$\begin{cases} \text{Dom}(\widetilde{H}_0) = (\mathcal{S}(\mathbb{R}^3))^4 \\ \widetilde{H}_0 \psi = -i c \alpha \cdot \nabla \psi + \beta m c^2 \psi, \quad \psi \in (\mathcal{S}(\mathbb{R}^3))^4 \end{cases}. \quad (2.3.5)$$

Llavors, és convenient comprovar que $\widetilde{H}_0$ és essencialment auto-adjunt. Per tant, si es considera la clausura $\widetilde{H}_0^{cl}$, definida a:

$$\begin{aligned} \text{Dom}(\widetilde{H}_0^{cl}) &= \{ \psi \in (L^2(\mathbb{R}^3))^4 : \exists (\psi_k)_{k \in \mathbb{Z}} \in \text{Dom}(\widetilde{H}_0) \text{ tal que } \lim_{k \rightarrow \infty} \psi_k = \psi \text{ i que} \\ &\quad \exists \lim_{k \rightarrow \infty} \widetilde{H}_0 \psi_k \}, \quad (2.3.6) \end{aligned}$$

²Si $m = 0$, no es tindria cap partícula.

$$\text{com } \widetilde{H}_0^{cl} \psi = \lim_{k \rightarrow \infty} \widetilde{H}_0 \psi_k.$$

Observació 2.3.2. En tota la demostració els límits estaran definits dins l'espai de $(L^2(\mathbb{R}^3))^4$. Per tant;

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \psi_k = \psi \Leftrightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} \|\psi - \psi_k\|_{(L^2(\mathbb{R}^3))^4} = 0. \quad (2.3.7)$$

No obstant, per les transformacions unitàries de l'operador de Dirac, l'expressió següent és certa:

$$H_0 \psi_k = \mathcal{F}^{-1} \left(\sqrt{1 + |\mathbf{p}|^2} \widehat{\psi_k} \right). \quad (2.3.8)$$

Així doncs, per la isometria entre les funcions de $(L^2(\mathbb{R}^3))^4$ donada pel Teorema de Plancherel 1.1.31., l'expressió (2.3.3) és equivalent a veure quan existeix el límit en $(L^2(\mathbb{R}^3))^4$ de $\sqrt{1 + |\mathbf{p}|^2} \widehat{\psi_k}$. A més, com que l'espai de Sobolev és un conjunt tancat per ser un espai de Hilbert, llavors $\text{Dom}(\widetilde{H}_0^{cl}) = (H^1(\mathbb{R}^3))^4$. La qual cosa implica que $\widetilde{H}_0^{cl}$ és auto-adjunt i, com a resultat, $\widetilde{H}_0$ és essencialment auto-adjunt.

Sigui $\dot{H}_0$ l'operador de Dirac en el domini $(\mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}))^4$. Ara, es vol provar que la clausura de $\dot{H}_0$ equival a H_0 . Se sap que $\text{Dom}(\dot{H}_0) \subset \text{Dom}(\widetilde{H}_0)$ i que per les clausures es té que $\text{Dom}(\dot{H}_0^{cl}) \subset \text{Dom}(\widetilde{H}_0^{cl}) = (H^1(\mathbb{R}^3))^4$, de manera que és suficient provar que:

$$(\mathcal{S}(\mathbb{R}^3))^4 = \text{Dom}(\widetilde{H}_0) \subset \text{Dom}(\dot{H}_0^{cl}). \quad (2.3.9)$$

On es considera, de manera similar a $\widetilde{H}_0^{cl}$, $\dot{H}_0^{cl}$ definida a:

$$\text{Dom}(\dot{H}_0^{cl}) = \{\psi \in (L^2(\mathbb{R}^3))^4 : \exists (\psi_k)_{k \in \mathbb{Z}} \in \text{Dom}(\dot{H}_0) \text{ tal que } \lim_{k \rightarrow \infty} \psi_k = \psi \text{ i que } \exists \lim_{k \rightarrow \infty} \dot{H}_0 \psi_k\}, \quad (2.3.10)$$

$$\text{com } \dot{H}_0^{cl} \psi = \lim_{k \rightarrow \infty} \dot{H}_0 \psi_k.$$

Donada $\psi \in (\mathcal{S}(\mathbb{R}^3))^4$, cal trobar una successió $(\psi_k)_{k \in \mathbb{Z}} \in (\mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^3))^4$ amb:

$$\begin{cases} \lim_{k \rightarrow \infty} \psi_k = \psi \\ \lim_{k \rightarrow \infty} \dot{H}_0 \psi_k = \widetilde{H}_0 \psi \end{cases}. \quad (2.3.11)$$

Es considera $f \in (\mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^3))^4$ tal que:

$$\begin{cases} f(\mathbf{x}) = 1, & |\mathbf{x}| \leq 1 \\ f(\mathbf{x}) = 0, & |\mathbf{x}| \geq 2 \\ 0 \leq f(\mathbf{x}) \leq 1, & \forall \mathbf{x} \end{cases}. \quad (2.3.12)$$

I també, per a tot $\varphi \in (\mathcal{S}(\mathbb{R}^3))^4$, es defineix:

$$\varphi_k(\mathbf{x}) = f\left(\frac{1}{k}\mathbf{x}\right) (1 - f(k\mathbf{x})) \varphi(\mathbf{x}). \quad (2.3.13)$$

Així que, es té que $\varphi_k \in (\mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^3))^4$. Per una banda;

$$\begin{aligned}\lim_{k \rightarrow \infty} \varphi_k &= \lim_{k \rightarrow \infty} f\left(\frac{1}{k}\mathbf{x}\right) (1 - f(k\mathbf{x})) \varphi(\mathbf{x}) = \\ &= \lim_{k \rightarrow \infty} 1 \cdot (1 - 0) \cdot \varphi = \varphi.\end{aligned}$$

I, per l'altra;

$$\begin{aligned}\dot{H}_0 \varphi_k(\mathbf{x}) - \widetilde{H}_0 \varphi(\mathbf{x}) &= -ic\alpha \cdot \nabla \varphi_k(\mathbf{x}) + \beta mc^2 \varphi_k(\mathbf{x}) - \widetilde{H}_0 \varphi(\mathbf{x}) = \\ &= -ic\alpha \cdot \nabla \left(f\left(\frac{1}{k}\mathbf{x}\right) (1 - f(k\mathbf{x})) \varphi(\mathbf{x}) \right) + \beta mc^2 \left(f\left(\frac{1}{k}\mathbf{x}\right) (1 - f(k\mathbf{x})) \varphi(\mathbf{x}) \right) - \widetilde{H}_0 \varphi(\mathbf{x}) = \\ &= -\frac{ic}{k} (1 - f(k\mathbf{x})) \varphi(\mathbf{x}) \alpha \cdot \nabla f\left(\frac{1}{k}\mathbf{x}\right) + ickf\left(\frac{1}{k}\mathbf{x}\right) \varphi(\mathbf{x}) \alpha \cdot \nabla f(k\mathbf{x}) - \\ &- icf\left(\frac{1}{k}\mathbf{x}\right) (1 - f(k\mathbf{x})) \alpha \cdot \nabla (\varphi(\mathbf{x})) + f\left(\frac{1}{k}\mathbf{x}\right) (1 - f(k\mathbf{x})) \beta mc^2 \varphi(\mathbf{x}) - \widetilde{H}_0 \varphi(\mathbf{x}) = \\ &= -\frac{ic}{k} (1 - f(k\mathbf{x})) \varphi(\mathbf{x}) \alpha \cdot \nabla f\left(\frac{1}{k}\mathbf{x}\right) +\end{aligned}\tag{2.3.14}$$

$$+ ickf\left(\frac{1}{k}\mathbf{x}\right) \varphi(\mathbf{x}) \alpha \cdot \nabla f(k\mathbf{x}) +\tag{2.3.15}$$

$$+ \left(f\left(\frac{1}{k}\mathbf{x}\right) (1 - f(k\mathbf{x})) - 1 \right) \widetilde{H}_0 \varphi(\mathbf{x}).\tag{2.3.16}$$

Per acabar de demostrar l'expressió $\lim_{k \rightarrow \infty} \dot{H}_0 \varphi_k = \widetilde{H}_0 \varphi$ és necessari provar mitjançant les normes a $(L^2(\mathbb{R}^3))^4$ que l'expressió calculada queda anul·lada quan $k \rightarrow \infty$.

Primerament, per (2.3.15):

$$\begin{aligned}&\left(\int_{\mathbb{R}^3} \left| -\frac{ic}{k} (1 - f(k\mathbf{x})) \varphi(\mathbf{x}) \alpha \cdot \nabla f\left(\frac{1}{k}\mathbf{x}\right) \right|^2 d^3x \right)^{\frac{1}{2}} = \\ &= \left(\int_{\mathbb{R}^3} \left| -\frac{ic}{k} \right|^2 |1 - f(k\mathbf{x})|^2 |\varphi(\mathbf{x})|^2 |\alpha|^2 \cdot \left| \nabla f\left(\frac{1}{k}\mathbf{x}\right) \right|^2 d^3x \right)^{\frac{1}{2}} \leq \\ &\leq \left| \frac{c}{k} \right| \left(\int_{\mathbb{R}^3} |1 - f(k\mathbf{x})|^2 |\varphi(\mathbf{x})|^2 |\alpha|^2 \cdot \left| \nabla \left(f\left(\frac{1}{k}\mathbf{x}\right) \right) \right|^2 d^3x \right)^{\frac{1}{2}} \leq \\ &\leq C \frac{1}{k} \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\varphi(\mathbf{x})|^2 d^3x \right)^{\frac{1}{2}} = C \frac{1}{k} \|\varphi(\mathbf{x})\| \rightarrow_{k \rightarrow \infty} 0.\end{aligned}$$

per $C \in \mathbb{R}$. Ja que, quan $k \rightarrow \infty$, $|1 - f(k\mathbf{x})| \rightarrow_{k \rightarrow \infty} 1$ i $0 \leq f(\mathbf{x}) \leq 1$, per a tot $\mathbf{x}$.

Per l'expressió (2.3.16), usant la definició de f (2.3.13) i fent un canvi de variable $k\mathbf{x} = \mathbf{y}$ es té:

$$\begin{aligned} & \left(\int_{\mathbb{R}^3} \left| i c k f \left(\frac{1}{k} \mathbf{x} \right) \varphi(\mathbf{x}) \alpha \cdot \nabla f(k\mathbf{x}) \right|^2 d^3x \right)^{\frac{1}{2}} \leq \\ & \leq \left(\int_{\mathbb{R}^3} c^2 k^2 |\varphi(\mathbf{x})|^2 |\nabla (f(k\mathbf{x}))|^2 d^3x \right)^{\frac{1}{2}} \leq \\ & \leq \sup_{\mathbf{y}} \left| \psi \left(\frac{\mathbf{y}}{k} \right) \right| \frac{c}{\sqrt{k}} \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla (f(\mathbf{y}))|^2 d^3y \right)^{\frac{1}{2}} \rightarrow_{k \rightarrow \infty} 0. \end{aligned}$$

Finalment, per (2.3.17), per la definició de la funció f quan $k \rightarrow \infty$ l'expressió queda nul·la.

Com a resultat, tot això prova les expressions (2.3.12) i, per tant, (2.3.10).

□

És més, a partir d'aquest Teorema es té que l'operador de Dirac té les propietats bàsiques de la Mecànica Quàntica i, com a conseqüència, sigui possible l'existència de solucions per l'Equació de Dirac.

Capítol 3

Grafè

El grafè és una partícula composta per carboni amb nombre atòmic $Z = 6$ i 4 electrons de valència. A l'any 1987, es va anomenar grafè a l'al·lòtrop de carboni cristal·lí d'una sola capa 2-dimensional. Així mateix, no va ser fins després del 2004 quan Geim i Novoselov descobriren que el transport electrònic del grafè està governat per l'Equació de Dirac. Aquesta és una de les raons per les quals l'Equació de Dirac té una certa rellevància actualment.

L'objectiu d'aquesta secció és trobar el Hamiltonià corresponent al comportament dels electrons del grafè responsables de la conducció electrònica entre els àtoms de carboni i veure la relació amb l'operador de Dirac.

3.1 Estructura atòmica del grafè

Per tal de poder entendre com es comporta el grafè és necessari entendre i calcular l'estructura de banda del grafè. És a dir, entendre les bases dels estats electrònics.

Primerament, es defineix l'estructura cristal·lina. El grafè és una formació 2-dimensional d'àtoms de carboni organitzats en una estructura de panell com:

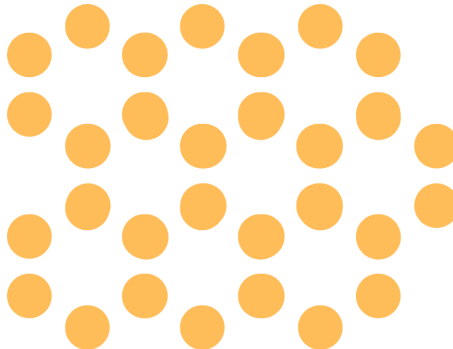


Figura 3.1: Estructura 2- dimensional del grafè.

S'observa que es té una base de dos àtoms, és costum anomenar cada àtom per una lletra de l'abecedari. En aquest cas, s'utilitzarà els noms de A i B :

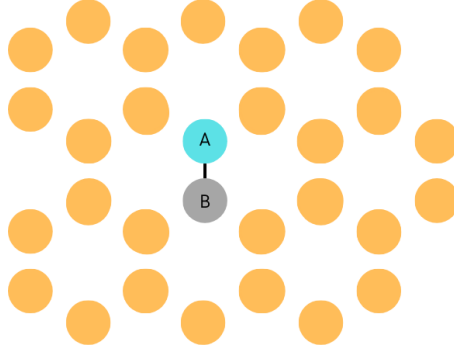
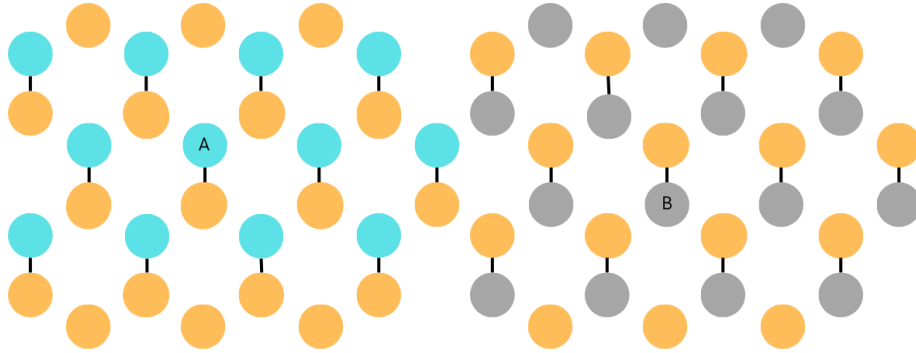


Figura 3.2: Estructura 2- dimensional del grafè segons la base A i B .

Cal notar que el conjunt dels àtoms A i els de B formen, respectivament, un enreixat hexagonal.



(a) Estructura 2- dimensional del grafè dels àtoms A .

(b) Estructura 2- dimensional del grafè dels àtoms B .

Cadascun d'aquests enreixats s'anomena *sub-enreixat*.

A més, es considera la connexió de l'àtom B amb els seus tres veïns més propers corresponents als àtoms del tipus A . Aquests són:

$$\begin{aligned} v_{\uparrow} &= a_0(0, 1) \\ v_{\swarrow} &= a_0\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right) \\ v_{\searrow} &= a_0\left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right) \end{aligned} \quad (3.1.1)$$

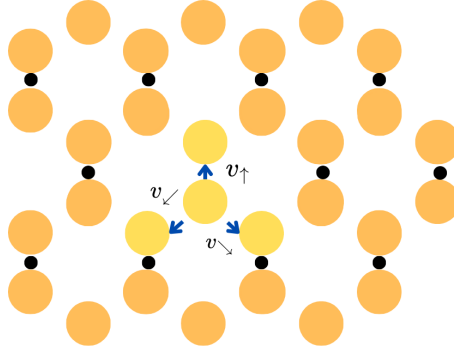


Figura 3.4: Estructura 2-dimensional del grafè.

Llavors, l'estructura de panell del grafè pot ser interpretada per la unió de dos sub-enreixats hexagonals. Així mateix, es defineix una unitat de cel·la primitiva com:

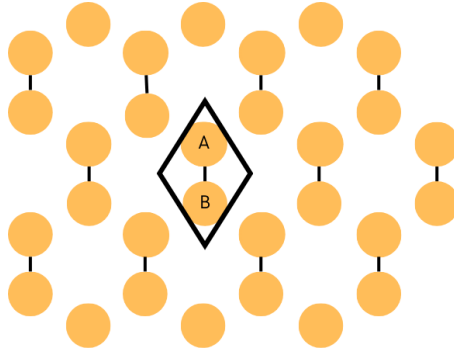


Figura 3.5: Unitat de cel·la de l'estructura 2-dimensional del grafè.

En la imatge es pot observar que la figura del rombe és una unitat primitiva de cel·la perquè conté un àtom de A i un de B .

Per tal de determinar el Hamiltonià dels electrons en el grafè caldrà considerar només les cel·les veïnes més propers a una cel·la qualsevol de carboni, per propietats que es veuran més endavant.

Així doncs, com que aquesta estructura està definida a partir d'un enreixat hexagonal amb dos àtoms com a base, es pot arribar a cada punt de l'enreixat a partir d'una combinació lineal de dos vectors base, e_+ i e_- . Definint $a = \sqrt{3}a_0$ amb $a_0 \sim 1.42\text{\AA}^1$ com la distància entre dos àtoms de carboni adjacents, aquesta base es pot veure com els enreixats dels vectors primitius:

$$\begin{aligned} e_+ &= a \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \\ e_- &= a \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \end{aligned} \quad (3.1.2)$$

A més, la longitud a és la constant de l'enreixat pel cas del grafè.

¹ $\text{\AA}$ és l'Àmstrong, una unitat de longitud que equival a 10^{-10} metres.

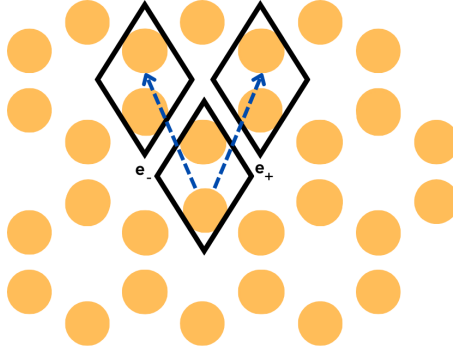


Figura 3.6: Estructura 2- dimensional del grafè.

Definició 3.1.1. Per $k = 0, 1, 2, 3, 4$, es defineixen $\mathbf{R}_k$ com les cel·les situades a:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{R}_0 = (0, 0) \\ \mathbf{R}_1 = e_+ \\ \mathbf{R}_2 = e_- \\ \mathbf{R}_3 = -e_+ \\ \mathbf{R}_4 = -e_- \end{array} \right. . \quad (3.1.3)$$

Observació 3.1.2. En particular, s'identifiquen les cel·les amb el seu centre i fent abús de notació ens referirem també a la cel·la per $\mathbf{R}_k$.

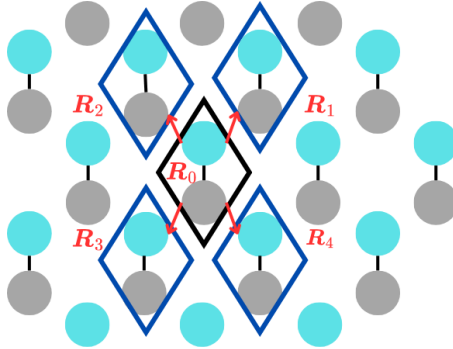


Figura 3.7: Estructura 2-dimensional del grafè.

Per altra banda, és necessari estudiar el caràcter dels orbitals involucrats en la construcció del bloc d'estats pel transport d'electrons en el grafè, és a dir, cal saber en quins orbitals estan els electrons responsables de la conducció electrònica.

Principi 3.1.3. (de Pauli) Estableix que dues o més partícules idèntiques amb spin $\frac{1}{2}$ no poden ocupar, al mateix temps, el mateix estat quàntic dins d'un sistema quàntic.

Definició 3.1.4. Es defineix la configuració electrònica d'un element químic com la distribució dels electrons d'un àtom en un conjunt de funcions d'ona d'un electró, anomenades orbitals atòmics, d'acord amb el Principi de Pauli.

En particular, les lletres s , p , d i f indiquen el tipus de d'orbital atòmic, els coeficients enters i positius de cada un dels orbitals indiquen la capa que els electrons es troben dins l'àtom i els exponents de cada lletra fan referència al nombre d'electrons situats en la capa i orbital indicats.

Observació 3.1.5. Cadascun dels àtoms de carboni té la següent configuració electrònica:

$$C : 1s^2 2s^2 2p^2. \quad (3.1.4)$$

Concretament, els electrons de valència ocupen els estats $2s$ i $2p$, els estats més allunyats dels electrons dins l'àtom. La qual cosa implica que les ones viatgeres del grafè tenen un caràcter s i p . Per aquest motiu, es considera una base s , p per descriure els blocs d'electrons. De manera que, els electrons poden trobar-se en els estats s , p_x , p_y i p_z en cadascun dels àtoms de carboni en una unitat de cel·la donada. Així mateix, en total, hi hauria vuit orbitals per unitat de cel·la en el model.

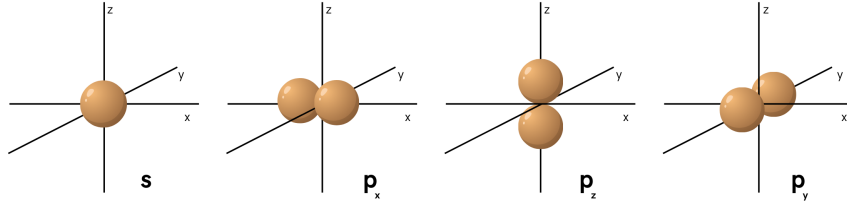


Figura 3.8: Probabilitat de trobar els possibles orbitals per la unitat de cel·la per a cada àtom A i B .

3.2 Modelització per l'equació de Dirac

La modelització del grafè es basa en l'estudi del Hamiltonià pels electrons que configuren el grafè. Així doncs, és essencial veure com es construeix aquest i quines són les propietats que li aporta el propi material.

En primer lloc, considerem un procediment general per un model amb un sol àtom per unitat de cel·la, per a $k \in \mathbb{N}$, $r_k \in \mathbb{R}^2$ és la posició de l'àtom. De manera que, a partir d'aquest concepte s'introdueixen els aspectes com les funcions d'ona, el Hamiltonià i el Hamiltonià dins de l'espai de moments.

Definició 3.2.1. Per $k \in \mathbb{N}$, aleshores s'anomena $H(\mathbf{r}_k)$ a l'energia de l'electró que viatja des de $\mathbf{r}_0$ fins a la posició $\mathbf{r}_k$.

Definició 3.2.2. Siguin $\sigma \in \{s, p_x, p_y, p_z\}$ i $k \in \mathbb{N}$, es defineix $\psi_\sigma(\mathbf{r}_k)$ com la funció d'ona de l'orbital σ i centrada a la posició $\mathbf{r}_k$.

Notació 2. En el treball s'usarà la notació anterior per la funció d'ona, tot i que implícitament cada funció d'ona depèn de també de la posició x . És a dir, $\psi_\sigma(\mathbf{r}_k) := \psi_\sigma(\mathbf{x} - \mathbf{r}_k)$.

Ara bé, com que la modelització del Hamiltonià d'un element és un fet físic, aquest s'ha de buscar a través de les mesures empíriques d'aspectes mesurables com és l'energia entre els diferents àtoms del material deguda a la interacció entre els electrons dels àtoms.

Per a $c_{\sigma k} \in \mathbb{C}$, on $k \in \mathbb{N}$ i $\sigma \in \{s, p_x, p_y, p_z\}$, se suposa que la funció d'ona d'una regió del grafè que engloba n posicions té la forma de:

$$\psi = \sum_{\sigma \in \{s, p_x, p_y, p_z\}} \sum_{k=0}^n c_{\sigma k} \psi_{\sigma}(\mathbf{r}_k), \text{ on } \sum_{\sigma \in \{s, p_x, p_y, p_z\}} \sum_{k=0}^n |c_{\sigma k}| = 1. \quad (3.2.1)$$

Aleshores, abans d'arribar al bloc del Hamiltonià final i a partir de la funció d'ona del grafè, es calculen els elements del Hamiltonià dins de la base orbital, $H_{\sigma_i, \sigma_j}(\mathbf{r}_k)$ on $\sigma_i, \sigma_j \in \{s, p_x, p_y, p_z\}$, com:

$$H_{\sigma_i, \sigma_j}(\mathbf{r}_k) := \langle \psi_{\sigma_i}(\mathbf{r}_0) | H(\mathbf{r}_k) | \psi_{\sigma_j}(\mathbf{r}_k) \rangle. \quad (3.2.2)$$

Notació 3. Per exemple, si se suposa $\psi_{\sigma_i}(\mathbf{r}_0) = (\psi_{\sigma_i,1}(\mathbf{r}_0), \psi_{\sigma_i,2}(\mathbf{r}_0), \psi_{\sigma_i,3}(\mathbf{r}_0))$ i $\psi_{\sigma_j}(\mathbf{r}_k) = (\psi_{\sigma_j,1}(\mathbf{r}_k), \psi_{\sigma_j,2}(\mathbf{r}_k), \psi_{\sigma_j,3}(\mathbf{r}_k))$, la notació feta servir en (3.2.2) correspondria al càlcul:

$$\langle \psi_{\sigma_i}(\mathbf{r}_0) | H(\mathbf{r}_k) | \psi_{\sigma_j}(\mathbf{r}_k) \rangle = \left(\overline{\psi_{\sigma_i,1}(\mathbf{r}_0)}, \overline{\psi_{\sigma_i,2}(\mathbf{r}_0)}, \overline{\psi_{\sigma_i,3}(\mathbf{r}_0)} \right) H(\mathbf{r}_k) \begin{pmatrix} \psi_{\sigma_j,1}(\mathbf{r}_k) \\ \psi_{\sigma_j,2}(\mathbf{r}_k) \\ \psi_{\sigma_j,3}(\mathbf{r}_k) \end{pmatrix}. \quad (3.2.3)$$

Per tal de poder avançar més en la modelització del grafè, caldrà considerar l'espai de moments lineal, és a dir, l'espai de Fourier. De fet, a causa de la periodicitat d'un cristall, es pot considerar la Transformada de Fourier discreta pel moment lineal $\mathbf{p}$ de l'element $H_{\sigma_i, \sigma_j}(\mathbf{p})$ del Hamiltonià, segons els orbitals descrits per $\sigma_i, \sigma_j \in \{s, p_x, p_y, p_z\}$, com:

$$H_{\sigma_i, \sigma_j}(\mathbf{p}) = \sum_{k \in \mathbb{N}} e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_0)} H_{\sigma_i, \sigma_j}(\mathbf{r}_k). \quad (3.2.4)$$

A partir d'aquest fet, es podrà veure quina estructura té el Hamiltonià en l'espai de moments i comprovar les similituds respecte l'operador de Dirac.

Ara bé, com que es té un model amb més d'un àtom per unitat de cel·la i diversos orbitals, és convenient redefinir els conceptes (3.2.1.) i (3.2.2.) i l'expressió (3.2.1).

Definició 3.2.3. Per $k = 0, 1, 2, 3, 4$, aleshores s'anomena $H(\mathbf{R}_k)$ a l'energia de l'electró en el grafè que passa des de $\mathbf{R}_0$ fins a la cel·la $\mathbf{R}_k$.

Definició 3.2.4. Siguin $\sigma \in \{s, p_x, p_y, p_z\}$, $k = 0, 1, 2, 3, 4$ i $\alpha = A, B$, es defineix $\psi_{\sigma}^{\alpha}(\mathbf{R}_k)$ com la funció d'ona de l'orbital σ i a la cel·la $\mathbf{R}_k$.

Definició 3.2.5. *Es defineix la funció d'ona d'una regió del grafè que engloba 4 cel·les com:*

$$\psi = \sum_{\alpha \in \{A,B\}} \sum_{\sigma \in \{s,p_x,p_y,p_z\}} \sum_{k=0}^4 c_{\alpha\sigma k} \psi_{\sigma}^{\alpha}(\mathbf{R}_k), \text{ on } \sum_{\alpha \in \{A,B\}} \sum_{\sigma \in \{s,p_x,p_y,p_z\}} \sum_{k=0}^4 |c_{\alpha\sigma k}| = 1. \quad (3.2.5)$$

Així doncs, es reanomenen els índexs dels estats orbitals pels índexs orbitals i atòmics, per calcular cadascun dels elements del Hamiltonià, $\sigma_i, \sigma_j \in \{s, p_x, p_y, p_z\}$, com:

$$H_{\sigma_i \sigma_j}^{\alpha \beta}(\mathbf{R}_k) := \langle \psi_{\sigma_i}^{\alpha}(\mathbf{R}_0) | H(\mathbf{R}_k) | \psi_{\sigma_j}^{\beta}(\mathbf{R}_k) \rangle, \text{ on } \alpha, \beta = A, B, \quad (3.2.6)$$

on els súper-índexs grecs fan referència als àtoms del sub-enreixat i els sub-índexs als orbitals de cada àtom. De manera que, el Hamiltonià final i la base orbital queden ordenats en blocs de sub-enreixats com:

$$H(\mathbf{R}_k) = \begin{pmatrix} H^{AA}(\mathbf{R}_k) & H^{AB}(\mathbf{R}_k) \\ H^{BA}(\mathbf{R}_k) & H^{BB}(\mathbf{R}_k) \end{pmatrix}. \quad (3.2.7)$$

En conjunt, agrupant cadascun dels blocs sub-enreixats, per a cada $\alpha, \beta = A, B$ s'acabaria tenint un Hamiltonià de la forma:

$$H^{\alpha \beta}(\mathbf{R}_k) = \begin{pmatrix} H_{ss}^{\alpha \beta}(\mathbf{R}_k) & H_{sp_x}^{\alpha \beta}(\mathbf{R}_k) & H_{sp_y}^{\alpha \beta}(\mathbf{R}_k) & H_{sp_z}^{\alpha \beta}(\mathbf{R}_k) \\ H_{p_x s}^{\alpha \beta}(\mathbf{R}_k) & H_{p_x p_x}^{\alpha \beta}(\mathbf{R}_k) & H_{p_x p_y}^{\alpha \beta}(\mathbf{R}_k) & H_{p_x p_z}^{\alpha \beta}(\mathbf{R}_k) \\ H_{p_y s}^{\alpha \beta}(\mathbf{R}_k) & H_{p_y p_x}^{\alpha \beta}(\mathbf{R}_k) & H_{p_y p_y}^{\alpha \beta}(\mathbf{R}_k) & H_{p_y p_z}^{\alpha \beta}(\mathbf{R}_k) \\ H_{p_z s}^{\alpha \beta}(\mathbf{R}_k) & H_{p_z p_x}^{\alpha \beta}(\mathbf{R}_k) & H_{p_z p_y}^{\alpha \beta}(\mathbf{R}_k) & H_{p_z p_z}^{\alpha \beta}(\mathbf{R}_k) \end{pmatrix}. \quad (3.2.8)$$

Com a conseqüència, el Hamiltonià pels electrons del grafè consistirà en una matriu 8×8 amb dos sub-enreixats per quatre graus de llibertat d'orbitals.

Seguint el procediment general, caldria generalitzar l'expressió de la Transformada de Fourier pels elements del Hamiltonià per a un cristall amb una base que conté dos àtoms per computar el bloc del Hamiltonià pel grafè, $\alpha, \beta = A, B$. Així mateix, sigui $\tau_{\alpha}(\mathbf{R}_k)$, per $k = 0, 1, 2, 3, 4$ i $\alpha = A, B$, la posició de l'àtom α dins de la cel·la $\mathbf{R}_k$, aleshores aquesta generalització és la definida per:

$$H_{\sigma_i \sigma_j}^{\alpha \beta}(\mathbf{p}) = \sum_{k \in \mathbb{N}} e^{i\mathbf{p} \cdot (\tau_{\beta}(\mathbf{R}_k) - \tau_{\alpha}(\mathbf{R}_0))} H_{\sigma_i \sigma_j}^{\alpha \beta}(\mathbf{R}_k), \quad (3.2.9)$$

de manera que posant-ho tot en comú i anàlogament a l'estructura definida a (3.2.7), la matriu completa del Hamiltonià del grafè dins de l'espai de Fourier té la forma de:

$$H(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} H^{AA}(\mathbf{p}) & H^{AB}(\mathbf{p}) \\ H^{BA}(\mathbf{p}) & H^{BB}(\mathbf{p}) \end{pmatrix}. \quad (3.2.10)$$

Ara, la feina estaria en calcular els elements de tots els blocs dels sub-enreixats. Tanmateix, només caldrà centrar-se en els càlculs dels elements del Hamiltonià tals que involucrin els orbitals p_z , ja que se sap amb procediments empírics² que les propietats electròniques del grafè venen donades per l'orbital p_z .

Al centrar-se en els orbitals de p_z , es considera els elements del Hamiltonià entre els orbitals de p_z :

$$H_{p_z p_z}^{\alpha\beta}(\mathbf{R}_k) = \langle \psi_{p_z}^{\alpha}(\mathbf{R}_0) | H(\mathbf{R}_k) | \psi_{p_z}^{\beta}(\mathbf{R}_k) \rangle. \quad (3.2.11)$$

Observació 3.2.6. Com que com a cel·la primitiva es té $\alpha, \beta = A, B$, llavors s'obté un conjunt de quatre elements corresponents a les diferents combinacions dels sub-enreixats per a cada vector $\mathbf{R}_k$ de l'enreixat.

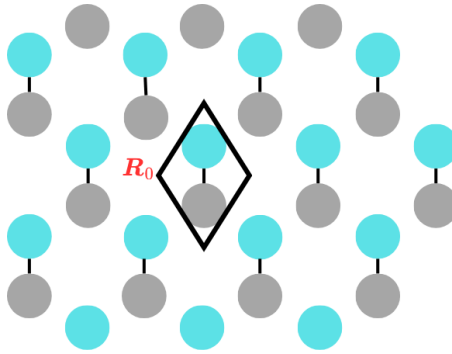


Figura 3.9: Unitat de cel·la agafa com origen $\mathbf{R}_0$.

Experimentalment, els elements de la matriu que formen l'expressió (3.2.11) que corresponen a la mateixa unitat de cel·la $\mathbf{R}_0$ tenen la forma de:

$$\begin{cases} H_{p_z p_z}^{AA}(\mathbf{R}_0) = \langle \psi_{p_z}^A(\mathbf{R}_0) | H(\mathbf{R}_0) | \psi_{p_z}^A(\mathbf{R}_0) \rangle = \epsilon_p \\ H_{p_z p_z}^{AB}(\mathbf{R}_0) = \langle \psi_{p_z}^A(\mathbf{R}_0) | H(\mathbf{R}_0) | \psi_{p_z}^B(\mathbf{R}_0) \rangle = V_{pp\pi} \\ H_{p_z p_z}^{BA}(\mathbf{R}_0) = \langle \psi_{p_z}^B(\mathbf{R}_0) | H(\mathbf{R}_0) | \psi_{p_z}^A(\mathbf{R}_0) \rangle = V_{pp\pi} \\ H_{p_z p_z}^{BB}(\mathbf{R}_0) = \langle \psi_{p_z}^B(\mathbf{R}_0) | H(\mathbf{R}_0) | \psi_{p_z}^B(\mathbf{R}_0) \rangle = \epsilon_p \end{cases}. \quad (3.2.12)$$

En altres paraules, es tenen quatre elements del Hamiltonià que fan referència a les diferents combinacions entre els tipus A i B d'àtoms dins de la mateixa unitat de cel·la. De fet, els elements de la matriu amb el mateix tipus d'àtom dins de la mateixa unitat de cel·la són simplement l'energia corresponent a un estat orbital específic. En aquest cas i segons llibres de text físics, aquesta energia s'anomena *energia de l'electró en l'orbital p del carboni*, on $\epsilon_p = 0.0 \text{ eV}$. D'altra banda, segons la literatura física, els elements del Hamiltonià entre els diferents tipus d'àtoms són els *paràmetres de la Muntanya russa*, "slater coaster parameters"³, en concret, $V_{pp\pi} = -3.07 \text{ eV}$. Com a resultat, aquests són tots els elements del Hamiltonià pels estats p_z que corresponen a una mateixa unitat de cel·la.

²Veure a [13].

³Aquests paràmetres són un nombre que es pot trobar dins de la literatura per components específiques.

Per altra banda, per les cel·les $\mathbf{R}_0$ i $\mathbf{R}_1$, a causa del decaïment de la funció d'ona pels elements que corresponen a dos àtoms llunyans, el Hamiltonià de A de $\mathbf{R}_0$ a A de $\mathbf{R}_1$ serà pràcticament zero i, per tant, per B de $\mathbf{R}_0$ a B de $\mathbf{R}_1$ i B de $\mathbf{R}_0$ a A de $\mathbf{R}_1$ també. Així que les components de la matriu del Hamiltonià que s'obtenen són:

$$\begin{cases} H_{p_z p_z}^{AB}(\mathbf{R}_1) = \langle \psi_{p_z}^A(\mathbf{R}_0) | H(\mathbf{R}_1) | \psi_{p_z}^B(\mathbf{R}_1) \rangle = V_{pp\pi} \\ H_{p_z p_z}^{AA}(\mathbf{R}_1) = \langle \psi_{p_z}^A(\mathbf{R}_0) | H(\mathbf{R}_1) | \psi_{p_z}^A(\mathbf{R}_1) \rangle \sim 0 \\ H_{p_z p_z}^{BA}(\mathbf{R}_1) = \langle \psi_{p_z}^B(\mathbf{R}_0) | H(\mathbf{R}_1) | \psi_{p_z}^A(\mathbf{R}_1) \rangle \sim 0 \\ H_{p_z p_z}^{BB}(\mathbf{R}_1) = \langle \psi_{p_z}^B(\mathbf{R}_0) | H(\mathbf{R}_1) | \psi_{p_z}^B(\mathbf{R}_1) \rangle \sim 0 \end{cases} \quad (3.2.13)$$

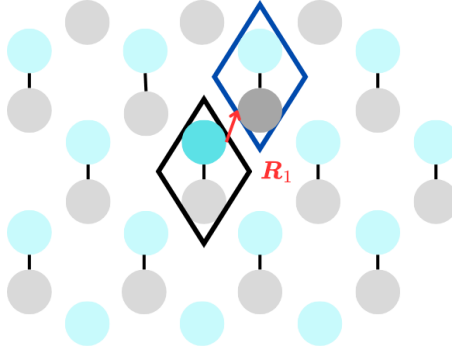


Figura 3.10: Àtoms pels quals la magnitud dels elements de la matriu del Hamiltonià és la més gran en les unitats de cel·la de la relació entre $\mathbf{R}_0$ i $\mathbf{R}_1$.

Observació 3.2.7. Cal observar que l'element que importa és el que correspon al tipus A de la unitat de cel·la original ($\mathbf{R}_0$) i al tipus B de la unitat de cel·la veïna ($\mathbf{R}_1$).

Com a conseqüència, les contribucions d'unitats de cel·la més llunyanes es podran negligir degut a la naturalesa localitzada de l'orbital atòmic, el qual permet confinar l'anàlisi a unes poques unitats de cel·la al voltant de la cel·la original.

Amb el mateix procediment, es pot veure que es tindrà la mateixa situació per les següents situacions:

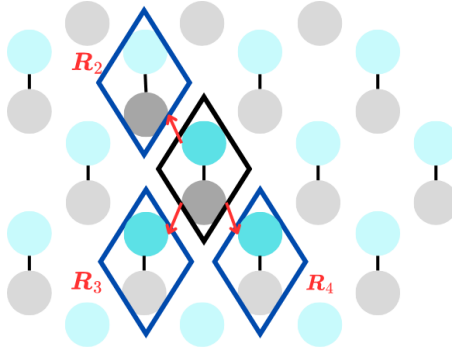


Figura 3.11: Unitats de cel·la seleccionades per establir la relació entre $\mathbf{R}_0$ i $\mathbf{R}_2$, $\mathbf{R}_3$, $\mathbf{R}_4$.

$$\begin{cases} H_{p_z p_z}^{AB}(\mathbf{R}_2) = \langle \psi_{p_z}^A(\mathbf{R}_0) | H(\mathbf{R}_2) | \psi_{p_z}^B(\mathbf{R}_2) \rangle = V_{pp\pi} \\ H_{p_z p_z}^{BA}(\mathbf{R}_3) = \langle \psi_{p_z}^B(\mathbf{R}_0) | H(\mathbf{R}_3) | \psi_{p_z}^A(\mathbf{R}_3) \rangle = V_{pp\pi} \\ H_{p_z p_z}^{BA}(\mathbf{R}_4) = \langle \psi_{p_z}^B(\mathbf{R}_0) | H(\mathbf{R}_4) | \psi_{p_z}^A(\mathbf{R}_4) \rangle = V_{pp\pi} \end{cases} \quad (3.2.14)$$

Així doncs, seguint amb el procediment esmentat anteriorment, es poden començar a escriure els elements del Hamiltonià corresponents als estats p_z del grafè, on $\mathbf{p} = (p_1, p_2)$, com:

$$H_{p_z p_z}^{\alpha\beta}(\mathbf{p}) = \sum_{k \in \mathbb{N}} e^{i\mathbf{p} \cdot (\tau_\beta(\mathbf{R}_k) - \tau_\alpha(\mathbf{R}_0))} H_{p_z p_z}^{\alpha\beta}(\mathbf{R}_k) \quad (3.2.15)$$

i es desenvolupa el sumatori només sobre les unitats de cel·la veïnes. Per una banda, les component pels blocs AA i BB seran exactament el valor de ϵ_p , ja que aquests tipus de combinacions entre els àtoms és no nul·la només quan es calcula l'energia entre $\mathbf{R}_0$ i $\mathbf{R}_0$. Per l'altra, segons les expressions (3.2.13) i (3.2.14) no nuls que s'han trobat prèviament, pels blocs AB i BA es té, respectivament, que:

$$H_{p_z p_z}^{AB}(\mathbf{p}) = e^{i\mathbf{p} \cdot (\tau_B(\mathbf{R}_0) - \tau_A(\mathbf{R}_0))} H_{p_z p_z}^{AB}(\mathbf{R}_0) + e^{i\mathbf{p} \cdot (\tau_B(\mathbf{R}_1) - \tau_A(\mathbf{R}_0))} H_{p_z p_z}^{AB}(\mathbf{R}_1) \\ + e^{i\mathbf{p} \cdot (\tau_B(\mathbf{R}_2) - \tau_A(\mathbf{R}_0))} H_{p_z p_z}^{AB}(\mathbf{R}_2) \quad (3.2.16)$$

i

$$H_{p_z p_z}^{BA}(\mathbf{p}) = e^{i\mathbf{p} \cdot (\tau_A(\mathbf{R}_0) - \tau_B(\mathbf{R}_0))} H_{p_z p_z}^{BA}(\mathbf{R}_0) + e^{i\mathbf{p} \cdot (\tau_A(\mathbf{R}_3) - \tau_B(\mathbf{R}_0))} H_{p_z p_z}^{BA}(\mathbf{R}_3) \\ + e^{i\mathbf{p} \cdot (\tau_A(\mathbf{R}_4) - \tau_B(\mathbf{R}_0))} H_{p_z p_z}^{BA}(\mathbf{R}_4). \quad (3.2.17)$$

Cal esmentar que els coeficients que multipliquen els factors exponencials són equivalents a $V_{pp\pi}$, el *paràmetre de la Muntanya russa*.

Com que els arguments de les exponencials contenen la diferència entre els centres dels orbitals p_z associats als àtoms de carboni més propers entre les diferents unitats de cel·la, per tal de poder completar els càlculs es té que:

$$\begin{cases} \tau_B(\mathbf{R}_0) - \tau_A(\mathbf{R}_0) = -v_\uparrow \\ \tau_A(\mathbf{R}_0) - \tau_B(\mathbf{R}_0) = v_\uparrow \\ \tau_B(\mathbf{R}_1) - \tau_A(\mathbf{R}_0) = -v_\swarrow \\ \tau_A(\mathbf{R}_3) - \tau_B(\mathbf{R}_0) = v_\swarrow \\ \tau_B(\mathbf{R}_2) - \tau_A(\mathbf{R}_0) = -v_\searrow \\ \tau_A(\mathbf{R}_4) - \tau_B(\mathbf{R}_0) = v_\searrow \end{cases} \quad (3.2.18)$$

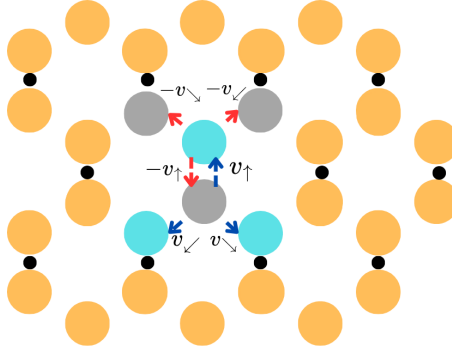


Figura 3.12: Estructura 2-dimensional del grafè.

Com a resultat;

$$H_{p_z p_z}^{BA}(\mathbf{p}) = V_{pp\pi} (e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{v}_{\uparrow}} + e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{v}_{\swarrow}} + e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{v}_{\searrow}}) = V_{pp\pi} f(\mathbf{p}), \quad (3.2.19)$$

$$H_{p_z p_z}^{AB}(\mathbf{p}) = \overline{H_{p_z p_z}^{BA}(\mathbf{p})} \quad (3.2.20)$$

i

$$H_{p_z p_z}^{AA}(\mathbf{p}) = H_{p_z p_z}^{BB}(\mathbf{p}) = \epsilon_p \quad (3.2.21)$$

d'on la funció $f(\mathbf{p})$, anomenada com factor d'estructura, està definida de la següent manera:

$$f(\mathbf{p}) = e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{v}_{\uparrow}} + e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{v}_{\swarrow}} + e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{v}_{\searrow}}. \quad (3.2.22)$$

Observació 3.2.8. Cal notar que els Hamiltonians pels blocs AA i BB són independents pel moment $\mathbf{p}$. De fet, totes les dependències venen donades pel factor d'estructura.

Així mateix, l'objectiu és trobar la descripció dels estats p_z en el grafè. Per estudiar-ho, es considera el Hamiltonià pels estats p_z :

$$H_{p_z p_z}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} H_{p_z p_z}^{AA}(\mathbf{p}) & H_{p_z p_z}^{AB}(\mathbf{p}) \\ H_{p_z p_z}^{BA}(\mathbf{p}) & H_{p_z p_z}^{BB}(\mathbf{p}) \end{pmatrix}. \quad (3.2.23)$$

Observació 3.2.9. Cal notar que el Hamiltonià (3.2.23) és una matriu 2×2 , ja que el grafè té una base formada per dos àtoms (A i B) i només es té en compte l'orbital p_z .

La base també pot ser apreciada en la definició de l'estat propi ψ , on la primera component correspon a l'estat p_z de l'àtom A i la segona a l'estat p_z per l'àtom B :

$$\hat{\psi}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \hat{\psi}_{p_z}^A(\mathbf{p}) \\ \hat{\psi}_{p_z}^B(\mathbf{p}) \end{pmatrix}. \quad (3.2.24)$$

A partir d'aquest plantejament, si es combinen les expressions (3.2.19), (3.2.20), (3.2.21) i (3.2.23), s'obté que:

$$H(\mathbf{p}) := H_{p_z p_z}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \epsilon_p & f(\mathbf{p})V_{pp\pi} \\ f(\mathbf{p})V_{pp\pi} & \epsilon_p \end{pmatrix}. \quad (3.2.25)$$

De totes maneres, com que $\epsilon_p = 0$, llavors;

$$H(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} 0 & f(\mathbf{p})V_{pp\pi} \\ f(\mathbf{p})V_{pp\pi} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.2.26)$$

Per altra banda, serà rellevant treballar amb la *zona de Brillouin*, ja que l'energia corresponent a alguns dels seus punts s'apropen al nivell de l'energia de Fermi⁴.

Definició 3.2.10. *Es defineix la zona de Brillouin com la cel·la primitiva d'un cristall, en particular, del grafè dins de l'espai de moments.*

En particular, la importància de l'energia de Fermi vindrà donada pel fet que quan el moment lineal se situï a prop d'un que tingui l'energia de Fermi, aleshores la seva funció d'ona estarà equivalentment situada sobre l'energia de valència i la de conductivitat, de manera que, aquests electrons situats en aquesta regió serien molt probablement els responsables de la conductivitat elèctrica. De fet, si s'aprecia la *zona de Brillouin* del grafè i es defineix un conjunt específic dels valors del moment, s'obté la figura:

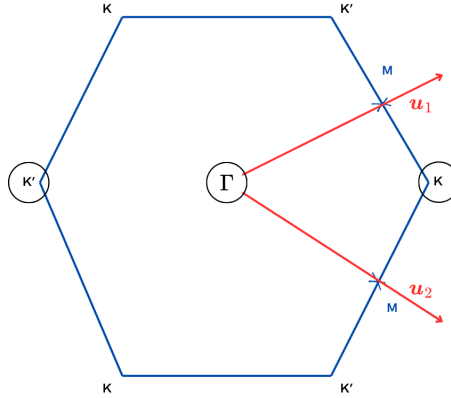


Figura 3.13: Zona de Brillouin de l'estructura 2-dimensional del grafè.

on els vectors de la cel·la dins de l'espai de moments:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_1 &= \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} (\sqrt{3}, 1) \\ \mathbf{u}_2 &= \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} (\sqrt{3}, -1) \end{aligned} \quad (3.2.27)$$

En la figura de la *zona de Brillouin*, s'especifica uns pocs punts de moment simètrics. Pel grafè aquests punts són els Γ , el centre de la *zona de Brillouin*; els punts K i K' , equivalents als vèrtexs de l'hexàgon de la *zona de Brillouin*; i els punts M , els quals es troben a la vora de l'estructura, són els punts mitjans entre els K i K' . En particular, els punts K i K' dins de l'estructura electrònica del grafè tenen la propietat que l'energia dels estats d'aquests se situa a prop del nivell de l'energia de Fermi.

⁴És aquella que es defineix com $E(\mathbf{p}) = 0$ i és la responsable de la conductivitat elèctrica.

A causa de la simetria dels punts de la *zona de Brillouin*, escollint un punt dels K i un dels punts K' seran suficients per veure si es compleix l'Equació de Dirac també per la resta de punts de la zona. En concret, escollim els punts marcats amb un cercle de la figura 3.13:

$$\begin{cases} \Gamma = (0, 0) \\ \mathbf{K} = \frac{1}{3}(\mathbf{u}_1 + \mathbf{u}_2) \\ \mathbf{K}' = -\frac{1}{3}(\mathbf{u}_1 + \mathbf{u}_2) \end{cases} \quad (3.2.28)$$

A més, l'estructura electrònica es pot obtenir fàcilment diagonalitzant el Hamiltonià $H(\mathbf{p})$. Fent-ho, s'obtenen dues energies que difereixen només per un signe:

$$E(\mathbf{p}) = \pm V_{pp\pi} |f(\mathbf{p})|. \quad (3.2.29)$$

L'energia amb signe positiu és la que correspon a la banda electrònica de conducció i l'energia negativa és la banda electrònica de valència. Cal observar, però, que la dependència del moment per a les energies està donada pel valor absolut del factor d'estructura f . Aquest factor, concretament, té la característica que s'anul·la als punts primitius K i K' de la *zona de Brillouin*. Com a conseqüència, les bandes de conducció i de valència es creuen en el *nivell de Fermi*.

De fet, l'energia de banda del grafè⁵ pot ser representada per una funció de p_1 i p_2 en el pla del moment.

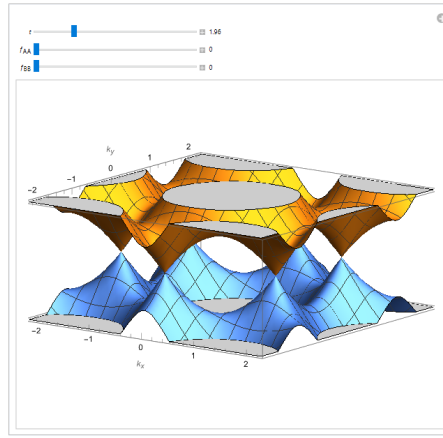


Figura 3.14: Energia de banda pel grafè, on $k_x = p_1$ i $k_y = p_2$.

Observació 3.2.11. Cal apreciar que hi ha sis punts del moment on les bandes es creuen. Aquestes corresponen als vèrtexs de la *zona de Brillouin* hexagonal. La figura també mostra com es veuen les bandes pels punts veïns a K i K' . A més, es pot observar que les bandes de conducció i de valència tenen una forma de con, els vèrtexs dels quals es troben entre ells en el *nivell de Fermi*.

Així mateix, per investigar el comportament dels electrons més a prop del *nivell de Fermi*, s'expandeix el Hamiltonià pels punts veïns dels punts primitius K i K' .

⁵Aquesta figura es pot veure a través de la referència [14], on es pot anar canviant els paràmetres segons com convingui.

Per aquest motiu, es defineix el vector moment $\mathbf{q}$ com el moment relatiu al punt K , $|\mathbf{q}| \ll |\mathbf{K}|$. La idea és poder expressar arbitràriament el moment $\mathbf{p}$ en termes de $\mathbf{q}$ i considerar $|\mathbf{q}|$ com una petita quantitat:

$$\mathbf{p} = \mathbf{q} + \mathbf{K}. \quad (3.2.30)$$

Aquest fet garanteix la descripció dels estats al voltant del punt K . Així doncs, sigui $|\mathbf{q}|$ una quantitat petita, es pot expandir el factor d'estructura f . Ara bé, pel grafè es pot considerar el primer ordre de $\mathbf{q}$ en l'expansió. De manera que;

$$\begin{aligned} f(\mathbf{p}) &\approx f(\mathbf{K}) + \nabla f(\mathbf{K})(\mathbf{q} + \mathbf{K} - \mathbf{K}) = \nabla f(\mathbf{K})(\mathbf{q}) = \\ &= i \left(v_{\uparrow} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{v}_{\uparrow}} + v_{\swarrow} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{v}_{\swarrow}} + v_{\searrow} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{v}_{\searrow}} \right) (q_x, q_y) = \\ &= ia_0 \left(\frac{\sqrt{3}}{2} (-e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{v}_{\swarrow}} + e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{v}_{\searrow}}), e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{v}_{\uparrow}} - \frac{1}{2} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{v}_{\swarrow}} - \frac{1}{2} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{v}_{\searrow}} \right) (q_x, q_y). \end{aligned}$$

Si se substitueixen els vectors per les expressions de (3.1.1);

$$\begin{aligned} f(\mathbf{p}) &\approx ia_0 \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \left(\frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2} \right), 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2} \right) - \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2} \right) \right) (q_x, q_y) = \\ &= ia_0 \left(\frac{3}{2}i, 1 + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \right) (q_x, q_y) = \\ &= a_0 \left(-\frac{3}{2}, i\frac{3}{2} \right) (q_x, q_y) \\ f(\mathbf{p}) &\approx \frac{3}{2}a_0(-1)(q_x - iq_y). \end{aligned} \quad (3.2.31)$$

Aleshores, el Hamiltonià del grafè pot ser aproximat pel moment al voltant del punt K com:

$$H_K(\mathbf{q}) = -\frac{3}{2}a_0 V_{pp\pi} \begin{pmatrix} 0 & q_x - iq_y \\ q_x + iq_y & 0 \end{pmatrix} \text{ amb } \psi_K(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} \varphi_{Kp_z}^A(\mathbf{q}) \\ \varphi_{Kp_z}^B(\mathbf{q}) \end{pmatrix}. \quad (3.2.32)$$

A més, aquest Hamiltonià també es pot escriure de forma reduïda a través de les matrius de Pauli i el moment relatiu al punt K :

$$\begin{aligned} \tilde{\boldsymbol{\sigma}} &= (\sigma_x, \sigma_y) \\ \mathbf{q} &= (q_x, q_y) \end{aligned} \quad (3.2.33)$$

i absorbint el factor (-1) en les amplituds de la base, es troba que:

$$H_K(\mathbf{q}) = \hbar\nu_F \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{q}, \quad (3.2.34)$$

on $\hbar\nu_F = \frac{3}{2}a_0 V_{pp\pi}$.

Aquesta aproximació és coneguda com l'*aproximació del continu* o l'*aproximació de llargues longituds d'ona* perquè descriu electrons amb longituds d'ona molt més llargues que les distàncies atòmiques entre els àtoms de carboni.

Anàlogament, pel punt K' també es tindria que:

$$f(\mathbf{p}) \sim \frac{3}{2}a_0(q_x + iq_y) \quad \text{amb} \quad \mathbf{p} = \mathbf{q} + \mathbf{K}' \quad (3.2.35)$$

I amb un procediment similar s'obté el Hamiltonià corresponent al punt K' :

$$H_{K'}(\mathbf{q}) = \frac{3}{2}a_0V_{pp\pi} \begin{pmatrix} 0 & q_x + iq_y \\ q_x - iq_y & 0 \end{pmatrix} \quad \text{amb} \quad \psi_{K'}(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} \varphi_{K'p_z}^A(\mathbf{q}) \\ \varphi_{K'p_z}^B(\mathbf{q}) \end{pmatrix} \quad (3.2.36)$$

i el Hamiltonià continu:

$$H_{K'}(\mathbf{q}) = \hbar\nu_F \widetilde{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{q}, \quad (3.2.37)$$

amb:

$$\widetilde{\boldsymbol{\sigma}} = (\sigma_x, -\sigma_y). \quad (3.2.38)$$

Ara bé, com que s'ha suposat que $\hbar\nu_F = \frac{3}{2}a_0V_{pp\pi}$, on $V_{pp\pi} = 3.07\text{eV} = 3.07 \cdot 1.602 \times 10^{-19}\text{J}$ i $\hbar = 6.626 \times 10^{-34}\text{J}\cdot\text{s}$, llavors $\nu_F \sim 1 \times 10^6\text{m/s}$. Per tant;

$$\nu_F \sim \frac{c}{300}. \quad (3.2.39)$$

És més, ν_F és la *velocitat de Fermi* dels electrons en el grafè.

Aleshores, es pot dir que el Hamiltonià derivat pels electrons del grafè és del tipus de la matriu 2×2 de l'operador de Dirac. Per tant, si el Hamiltonià de Dirac és:

$$H(\mathbf{q}) = \hbar c \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{q} + mc^2 \sigma_z. \quad (3.2.40)$$

I si es considera $m \rightarrow 0$, ja que la massa dels electrons es pot considerar nul·la, i aproximant la velocitat de la llum com ν_F , la *velocitat de Fermi*, aleshores el Hamiltonià de Dirac passa a ser el Hamiltonià deduït pel grafè pels estats p_z :

$$H(\mathbf{q}) = \hbar\nu_F \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{q}. \quad (3.2.41)$$

Com a conclusió, es pot afirmar que els electrons del grafè es comporten com a partícules sense massa on la velocitat de la llum està normalitzada i és 300 vegades més petita que la velocitat de la llum en el buit.

Capítol 4

Conclusions

Per finalitzar, cal concloure que en aquest treball s'ha pogut provar les diferents propietats de la Transformada de Fourier amb les quals s'ha demostrat el Teorema de Plancherel, el qual ha estat essencial per l'estudi d'Equació de Dirac, ja que ha permès treballar a través de la isometria entre l'espai de posició amb el de moments lineals.

S'ha estudiat la deducció de l'Equació de Dirac, així com l'operador de Dirac. En concret, aquests apartats han permès trobar un plantejament adient de l'operador de Dirac, el qual ha estat clau per afirmar si l'espai de solucions existeix i a on es troben les solucions. De fet, a partir del Teorema (2.3.1.), s'ha vist que aquest espai de solucions existeix.

Per últim, però no per això menys important, s'ha provat que la modelització del grafè ve donada per l'Equació de Dirac, de manera que, el comportament de la conductivitat elèctrica del grafè es pot analitzar a través de les solucions de l'Equació. Com a conclusió, una conducció elèctrica que podria ser altament difícil d'abordar acaba sent regida per una sola equació, la qual té el seu propi espai de solucions.

Bibliografia

- [1] Hall, B.C.: *Quantum Theory for Mathematicians*, Graduate Texts in Mathematics, Springer, 2013.
- [2] Plonka, G.; Potts, D.; Steidl, G.; Tasche, M.: *Numerical Fourier Analysis, Second Edition*, Applied and Numerical Harmonic Analysis, Birkhäuser, Switzerland, 2023.
- [3] Stein, E.M.; Weiss, G.: *Introduction to Fourier Analysis on Euclidean Spaces*, Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1971.
- [4] *Real and Complex Analysis*, McGraw-Hill Series in Higher Mathematics, 1970.
- [5] Lawrence, C. E.: *Partial Differential Equations*, Graduate Studies in Mathematics, Volume 19, American Mathematical Society, 2010.
- [6] Styer, D.F.: *Notes on Relativistic Dynamics*, 2021.
- [7] Thaller, B.: *The Dirac Equation*, Texts and Monographs in Physics, Springer-Verlag, Berlin, 1992.
- [8] Low, T.: *Calculating the band structure of graphene.*, 2022. https://www.youtube.com/watch?v=3b34QM15JTM&list=PLWt5FuzgdX4nqxssbJNofLMhSUcr_mFL&index=2
- [9] Low, T.: *Deriving the Dirac Hamiltonian in Graphene.*, 2023. https://www.youtube.com/watch?v=TuWvO8oig0E&list=PLWt5FuzgdX4nqxssbJNofLMhSUcr_mFL&index=3
- [10] Liu, D.; Wicklund, J.: *Graphene - A two-dimensional Dirac Material*, 2014.
- [11] Low, T.: *Basics of crystal structure and terminologies, we make it easier to understand in 2D.*, 2022. https://www.youtube.com/watch?v=rpZOt_rBx4I
- [12] Hückel, E.: *Z. Physik*, 1931,70,204.
- [13] Glosario de términos usados en fotoquímica, Universidad Autònoma de Barcelona, Servei de Publicacions, Bellaterra, 1999.
- [14] Konschuh, S.: *Spin-Orbit Coupling Effects From Graphene To Graphite*, Universität Regensburg, 2011.

- [15] Chatterjee, Sarbani; Chatterjee, Sohini:
<https://demonstrations.wolfram.com/BandStructureOfGraphene/>