

A Relativisztikus kvantummechanika alapjai

January 25, 2005

A kvantummechanika Schrödinger egyenletének a felírása után azonnal kiderül, hogy ez az egyenlet nem relativisztikusan kovariáns. (Aránylag könnyen igazolható, hogy a Schrödinger egyenlet Galilei kovariáns, és ezt gyakorlatként az olvasóra bízuk). Felvetődik tehát egy relativisztikusan kovariáns kvantumelmélet szükségessége, ehhez meg az első lépés egy relativisztikusan kovariáns hullámegyenlet felírása lenne. Az első ilyen irányú próbálkozások 1926-1927 között Gordon, Fock meg Klein neveihez fűződnek. Hamarosan kiderült, hogy nem lehet egy minden részecskére egységes hullámegyenletet felírni, és a különböző spinű részecskékre különböző egyenleteket kell használnunk. Az is nyilvánvalóvá vált, hogy egy adott spinű részecske esetén több elfogadható egyenletet lehet felírni, és ezáltal ezen részecskékre többféle relativisztikus tárgyalásmód lehetséges. A relativitáselmélet és a kvantummechanika egyeztetése rigurozusan és ellentmondásmentesen a kvantum-tér elmélet keretében történik majd meg.

Ezen fejezet keretében két relativisztikusan kovariáns egyenletet fogunk tárgyalni, amelyek a zéros és 1/2-es spinű részecskékre elfogadott hullámegyenlet. Ezen egyenletek alkalmazásával számos érdekes kvantummechanikai és relativisztikus effektust lehet magyarázni.

1 A Klein-Gordon egyenlet

A Schrödinger egyenletet a Galilei kovariáns $E = \frac{p^2}{2m}$ egyenlet kvantálásával kapjuk, felhasználva a következő operátor hozzárendeléseket (*kanónikus kvantálást*):

$$E \longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}; \quad \vec{p} \longrightarrow -i\hbar \nabla \quad (1)$$

Az így kapott Schrödinger egyenlet Galilei kovariáns lesz. Ezen tanulság alapján arra gondolhatunk, hogy ha egy relativisztikusan kovariáns egyenletben csinálnánk meg a fenti operátor megfeleltetést egy relativisztikusan kovariáns egyenletet kapunk. A nemrelativisztikus kvantummechanikában tanultak alapján a kiindulási egyenletünk a szabad részecske relativisztikus össz-energiája lesz:

$$E = \frac{p^2}{2m} \longrightarrow E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4. \quad (2)$$

Elvégezve a kanónikus kvantálást

$$\left. \begin{aligned} E &\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \\ \vec{p} &\rightarrow -i\hbar \nabla \end{aligned} \right\} \text{kanonikus kvantálás} \quad (3)$$

egy Schrödinger egyenletnek megfelelő relativisztikusan kovariáns hullámgyenletet kapunk a szabad részecskére:

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

A fenti egyenletben $\psi = \psi(\vec{r}, t)$ a rendszer (részecske) hullámfüggvénye. A fenti összefüggés a szabadon mozgó részecskére felírt **Klein-Gordon egyenlet**. Bevezetve a

$$\square = \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}, \quad (5)$$

D’Alambert operátort, a szabad részecskére a Klein-Gordon egyenletet a

$$\left[\square - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right] \psi(\vec{r}, t) = 0, \quad (6)$$

alakban írhatjuk. Az egyenlet azonnal felírható a négyes koordináták és négyes impulzusok segítségével egy olyan alakban, ahol a relativisztikus kovariancia bebizonyosodik:

$$x_\mu \equiv (x, y, z, ict) \quad (7)$$

$$p_\mu \rightarrow \hat{p}_\mu = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} \quad (8)$$

$$\left[\sum_\mu \hat{p}_\mu^2 + m^2 c^2 \right] \psi(\vec{r}, t) = 0 \quad (9)$$

Ez utóbbi összefüggés az m nyugalmi tömegű szabad részecskére felírt Klein-Gordon egyenlet relativisztikusan kovariáns alakja.

A Klein-Gordon egyenletre a kontinuitási egyenletet ugyanúgy kapjuk meg, mint a Schrödinger egyenlet esetén:

$$\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2 \psi(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = [\hbar^2 \Delta - m^2 c^2] \psi \quad |\psi^* \quad (10)$$

$$\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2 \psi^*(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = [\hbar^2 \Delta - m^2 c^2] \psi^* \quad |\psi \quad (11)$$

Kivonva egymásból a fenti két egyenletet:

$$\frac{\hbar^2}{c^2} \left[\psi^* \frac{\partial^2 \psi(\vec{r}, t)}{\partial t^2} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*(\vec{r}, t)}{\partial t^2} \right] = \hbar^2 (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*) \quad (12)$$

Az egyenlet két oldalát tovább alakítjuk:

$$\psi^* \frac{\partial^2 \psi(\vec{r}, t)}{\partial t^2} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial t} \left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right] \quad (13)$$

$$(\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*) = \nabla \cdot (\psi^* \cdot \nabla \psi - \psi \cdot \nabla \psi^*) \quad (14)$$

Bevezetve a:

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{i\hbar}{2mc^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \\ \vec{j} &= \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \end{aligned} \quad (15)$$

jelöléseket megkapjuk a kontinuitási egyenlet jólismert alakját:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0 \quad (16)$$

a Schrödinger egyenletnél tanultak alapján ρ a megtalálhatósági valószínűség-sűrűség lenne, és $\vec{j}$ meg az ennek megfelelő valószínűségi áramsűrűség. Később még visszatérünk arra a kérdésre, hogy ez az értelmezés elfogadható-e?

A ρ és $\vec{j}$ (15) alakjában a konstansokat, úgy választottuk meg, hogy a nemrelativisztikus határesetben visszkapjuk az ismert képleteket. Ez azonnal belátható, ha egy konzervatív rendszerünk van. Ilyenkor a nemrelativisztikus stacionárius megoldás

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(r) \cdot e^{\frac{-iEt}{\hbar}}, \quad (17)$$

ahonnan következik, hogy

$$\rho(\vec{r}, t) = \frac{i\hbar}{2mc^2} \cdot (-i) \cdot \frac{E}{\hbar} \cdot 2 = \frac{E}{mc^2} \psi^* \psi \approx \psi^* \psi, \quad (18)$$

ami a klasszikus eredmény. Ilyen szempontból a ρ megtalálhatósági valószínűség-sűrűség értelmezése jó, mert a kis sebességek határesetében visszkapjuk a nemrelativisztikus eredményt.

Még mielőtt a problémákra kitérnénk érdemes felírni a kapott kontinuitási egyenletet kovariáns alakban is

$$\sum_{\mu} \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} j_{\mu} = 0, \quad (19)$$

ahol:

$$j_{\mu} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x_{\mu}} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x_{\mu}}) \quad (20)$$

Az így bevezetett áramsűrűség négyesvektor:

$$j_{\mu} = (j_x, j_y, j_z, ic\rho) \quad (21)$$

Azonnal felfigyelhetünk a Klein-Gordon egyenlettel kapcsolatos első problémára, ami onnan adódik, hogy az egyenlet úgy a térkoordináta, mint az idő szerinti másodrendű deriváltakat tartalmazza. Kezdeti feltételként tehát nem elégséges megadni a $\psi(\vec{r}, 0)$ hullámfüggvényt, hanem ennek a $\frac{\partial\psi}{\partial t}(\vec{r}, 0)$ időszerinti deriváltjára is szükségünk lesz, vagyis $\psi(\vec{r}, 0)$ és $\frac{\partial\psi}{\partial t}(\vec{r}, 0)$ egymástól független változók. Ezek alapján úgy a hullámfüggvényre vonatkozó posztulátumot, mint az evolúciós posztulátumot is meg kell változtatni. A második lényeges probléma a megtalálhatósági valószínűség-sűrűség (15) alakjából származik, ami nem feltétlenül pozitívan értelmezett. Ezek alapján ρ -nak és ezáltal a ψ hullámfüggvénynek sem adhatunk egy olyan egyszerű valószínűségi értelmezést mint a Schrödinger egyenlet esetén tettük. Ezen probléma áthidalására Pauli és Weisskopf a töltéssel rendelkező részecskék esetén egy új értelmezést adott a megtalálhatósági valószínűség-sűrűség helyett bevezetve a töltés-sűrűséget, a valószínűségi áramsűrűség helyett meg a töltés-áramsűrűséget.

$$\rho \text{ helyett} \Rightarrow \rho_e = \frac{ie\hbar}{2mc^2} \left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial t} \right) \text{ töltés-sűrűség} \quad (22)$$

$$\vec{j} \text{ helyett} \Rightarrow \vec{j}_e = \frac{e\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \text{ töltés-áramsűrűség} \quad (23)$$

Ezen mennyiségek minden probléma nélkül már lehetnek negatívak is, és így a Klein-Gordon egyenletnek meg az ebből származó kontinuitási egyenletnek új fizikai értelmezést tudunk adni. Probléma marad azonban a töltéssel nem rendelkező részecskék esetére a ρ és ezáltal a ψ értelmezése.

1.1 A Klein-Gordon egyenlet megoldása szabad részecskére

A klasszikus esethez hasonlóan tételezzük fel, hogy a szabad részecskére megint síkhullám alakú megoldásaink vannak:

$$\psi(\vec{r}, t) = A \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{r}\vec{p} - Et)} \quad (24)$$

Behelyettesítve ezt a Klein-gordon egyenletbe:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = A \cdot \frac{E^2}{\hbar^2} (-1) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{r}\vec{p} - Et)} = -A \cdot \frac{E^2}{\hbar^2} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{r}\vec{p} - Et)} \quad (25)$$

$$\Delta \psi = \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} \psi = -A \cdot \frac{p^2}{\hbar^2} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{r}\vec{p} - Et)} \quad (26)$$

$$\frac{\hbar^2}{c^2} (-A) \frac{E^2}{\hbar^2} = (-A) \frac{\hbar^2 p^2}{\hbar^2} - Am^2 c^2 \quad (27)$$

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \Rightarrow E = \pm E_p \quad E_p = c\sqrt{p^2 + m^2 c^2} \quad (28)$$

Azt kapjuk, hogy a részecske energiájára megjelenik egy negatív energiájú megoldás is. Problémaként adódik ennek a negatív energiájú megoldásnak a fizikai értelmezése. A negatív energiájú megoldás értelmezésére sokan negatív tömegű állapotok

létét javasolták. Ez a feltételezés megoldaná ρ értékében kapott negatív értékek problémáját is, annélkül, hogy töltés-sűrűséget vezessünk be ennek az értelmezésére. A negatív tömegű állapotokat azonban a természetben nem észleljük, így ezen negatív tömegű (vagy negatív energiájú) megoldásokat "parazita" (nem fizikai) megoldásoknak tekintjük.

Egy másik komoly probléma amit a Klein-Gordon egyenlet felvet az elemi részecskék spinjével kapcsolatos. Láttuk, hogy sok elemi részecske egy plusz szabadsági fokkal, spinnel rendelkezik aminek a léte a nemrelativisztikus kvantummechanikából nem következik. Ezért reméltük, hogy a spin szabadsági fokok automatikusan megjelennek a relativisztikus elmélet keretében. A spin szabadsági fok léte azonban nem következik a Klein-Gordon egyenletből! Erre a problémára is azonnal választ adhatunk, feltételezve, hogy a a Klein-Gordon egyenlet csak a spin nélküli részecskékre alkalmazható, vagyis csak az $S = 0$ spin kvantumszámmal jellemzett elemi részecskék relativisztikus hullámegyenletét adja. Ilyen $S = 0$ spinű részecskék például a K-mezonok és a pionok.

1.2 A Klein-Gordon egyenlet elektromágneses térben

A klasszikus elektrodinamikában a Hamilton-függvény az elektromágneses tér jelenlétében felírható az impulzus helyett az elektromágneses impulzust használva

$$p_\mu \longrightarrow p_\mu - eA_\mu \quad A_\mu = (A_x, A_y, A_z, \frac{i}{c}\varphi), \quad (29)$$

ahol A_x, A_y, A_z a vektorpotenciál komponensei, míg $\frac{i}{c}\varphi$ a skalárpotenciál. A szabad részecskére felírt

$$\sum_\mu p_\mu^2 = -m^2 c^2 \quad (30)$$

egyenletünk, az elektromágneses térben a

$$\sum_\mu (p_\mu - eA_\mu)^2 = -m^2 c^2 \quad (31)$$

egyenletté alakul. Ezen utóbbi egyenlet relativisztikusan kovariáns, és az elektromágneses térben levő Klein-Gordon egyenlet felírása érdekében erre alkalmazzuk a kanonikus kvantálást:

$$p_\mu \rightarrow \hat{p}_\mu = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} \quad (32)$$

$$A_\mu \rightarrow \hat{A}_\mu = A_\mu \quad (33)$$

Behelyettesítve ezen megfeleltetéseket a (31) egyenletbe

$$\left[\sum_\mu \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} - eA_\mu \right)^2 + m^2 c^2 \right] \psi(\vec{r}, t) = 0, \quad (34)$$

ami elektromágneses térben a Klein-Gordon egyenlet kovariáns alakja. Az egyenletet a t és x, y, z koordinátákban felírva:

$$\frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi \right)^2 \psi = \left[\left(-i\hbar \nabla - e\vec{A} \right)^2 + m^2 c^2 \right] \psi \quad (35)$$

A fenti egyenletet ψ^* -gal beszorozva, illetve a konjugált egyenletet felírva és azt ψ -vel beszorozva, a kettőt kivonva egymásból, megint megkapható a kontinuitási egyenlet:

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}_e = 0 \quad (36)$$

$$\rho_e = \frac{ie\hbar}{2mc^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) - \frac{e^2 \varphi}{mc^2} \psi^* \psi \quad (37)$$

$$\vec{j}_e = \frac{e\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) - \frac{e^2 \varphi}{m} \psi^* \psi \quad (38)$$

Ezen egyenletben szereplő ρ és $\vec{j}$ mennyiségeknek, illetve a ψ hullámfüggvénynek hasonló értelmezést adhatunk mint a szabad részecske esetén. A kapott kontinuitási egyenletet fel tudjuk írni négyesvektor alakban is:

$$\sum_{\mu} \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} j_{\mu}^e = 0 \quad (39)$$

$$j_{\mu}^e = (j_x, j_y, j_z, ic\rho) \quad (40)$$

$$j_{\mu}^e = \frac{e\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x_{\mu}} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x_{\mu}} \right) - \frac{e^2 A_{\mu}}{m} \psi^* \psi \quad (41)$$

Következtetések amiket levonhatunk a Klein-Gordon egyenletre vonatkozóan:

- A Klein-Gordon egyenletnek számos megoldatlan problémája van: (i) az időbeli másodrendű deriváltak léte (ii) a hullámfüggvény illetve a kontinuitási egyenletben megjelenő ρ és $\vec{j}$ mennyiségek fizikai értelmezése (iii) a negatív energiájú parazita megoldások léte
- A Klein-gordon egyenlet alkalmazhatósága nagyon korlátozott. Az adott értelmezések alapján zérós spinű, töltéssel rendelkező elemi részecskék esetére alkalmazható.
- Minden felmerülő probléma ellenére, a kvantummechanika fejlődése szempontjából egy fontos egyenlet, ugyanis ez volt az első próbálkozás egy relativisztikusan kovariáns hullámeqyenlet felírására.

2 A Dirac egyenlet

A Dirac egyenlet az első sikeresnek mondható relativisztikus hullámeqyenlet. A Dirac egyenlet a feles spinű részecskék relativisztikus hullámeqyenlete, és nagyon fontos a gyakorlati alkalmazások szempontjából ugyanis az: elektronok, protonok, neutronok, μ -mezonok és hiperonok elfogadott hullámeqyenlete. Az egyenletet 1928-ban P.A.M. Dirac, Nobel-díjas fizikus javasolta.

2.1 A Dirac egyenlet felírása

A Klein-Gordon egyenlet és a Schrödinger egyenlet példáiból tanulva egy olyan egyenletet keresünk amely az alábbi tulajdonságokkal rendelkezik:

- Az egyenlet egy relativisztikusan kovariáns egyenlet kvantálásából kell hogy származzon, hogy a relativisztikus kovariancia és a korreszpondencia elvnek eleget tegyen.
- Az egyenlet az idő szerinti első rendű deriváltat kell csak tartalmazza azért, hogy elkerüljük mindazon problémákat amikkel a Klein-Gordon egyenletnél találkoztunk.
- Az egyenlet a térkoordinátáknak is csak az elsőrendű deriváltjait kell tartalmazza, máskülönben az egyenlet kovariáns alakban való felírása sérülne.
- Az egyenlet lineáris kell legyen, hogy a Schrödinger egyenletnél ismert szuperpozíció tulajdonságának eleget tegyen.

Kiindulási egyenletünk feltétlenül az $E = p^2/2m$ klasszikus egyenletnek megfelelő

$$E = c\sqrt{p^2 + m^2c^2} \quad (42)$$

egyenlet lesz. Jobb eljárás hián a kanónikus kvantálást alkalmazzuk:

$$\left. \begin{aligned} E &\longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \\ \vec{p} &\longrightarrow -i\hbar \nabla \end{aligned} \right\} \text{kanonikus kvantálás} \quad (43)$$

Egy operátor gyöke azonban nem lineáris operátor és nem egyértelműen értelmezett! Ezért a fenti kvantálás egyszerű behelyettesítése a (42) egyenletben elfogadhatatlan egyenlethez vezet. Az alkalmazott eljárás az, hogy megpróbáljuk a (42) egyenletet lineáris alakban felírni:

$$\sqrt{\sum_{k=1}^3 p_k^2 + m^2c^2} = \sum_{k=1}^3 \hat{\alpha}_k \cdot p_k + \hat{\beta} \cdot mc \quad (44)$$

A fenti egyenlet szerint linearizáljuk tehát a gyökös tagot. A linearizálás persze nem lehetséges, ha α_i és β egyszerű számok, de lehetséges, ha α_i és β

operátorok, például mátrixok. A (44) egyenlet értelmében:

$$\begin{aligned} \left(\sum_{j=1}^3 \hat{\alpha}_j p_j + \hat{\beta} mc \right) \left(\sum_{k=1}^3 \hat{\alpha}_k p_k + \hat{\beta} mc \right) &= p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 + m^2 c^2 = \\ &= \hat{\alpha}_1^2 p_1^2 + \hat{\alpha}_2^2 p_2^2 + \hat{\alpha}_3^2 p_3^2 + \hat{\beta}^2 m^2 c^2 + \\ &+ (\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2 + \hat{\alpha}_2 \hat{\alpha}_1) p_1 p_2 + (\hat{\alpha}_2 \hat{\alpha}_3 + \hat{\alpha}_3 \hat{\alpha}_2) p_2 p_3 + (\hat{\alpha}_3 \hat{\alpha}_1 + \hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_3) p_1 p_3 + \\ &+ (\hat{\alpha}_1 \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_1) p_1 mc + (\hat{\alpha}_2 \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_2) p_2 mc + (\hat{\alpha}_3 \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_3) p_3 mc \end{aligned} \quad (45)$$

Itt feltételeztük, hogy az $\hat{\alpha}_i$ és $\hat{\beta}$ operátorok kommutálnak az impulzus komponenseivel. A (44) egyenlet igaz lesz, ha:

$$\begin{cases} \hat{\alpha}_1^2 = \hat{\alpha}_2^2 = \hat{\alpha}_3^2 = \hat{\beta}^2 = \hat{I} \\ \hat{\alpha}_j \hat{\alpha}_k + \hat{\alpha}_k \hat{\alpha}_j = 0; \rightarrow \quad \{\hat{\alpha}_j, \hat{\alpha}_k\} = 0 \quad j \neq k \\ \hat{\alpha}_j \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_j = 0; \rightarrow \quad \{\hat{\alpha}_j, \hat{\beta}\} = 0 \end{cases} \quad (46)$$

Ha megkapjuk az $\hat{\alpha}_i$ és $\hat{\beta}$ operátorokat, melyek a fenti feltételeknek eleget tesznek megvan a keresett egyenletet is a kanonikus kvantálás segítségével:

$$E = c \left(\sum_{k=1}^3 \hat{\alpha}_k p_k + \hat{\beta} mc \right) \quad (47)$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\hbar \sum_{k=1}^3 \hat{\alpha}_k \frac{\partial \psi}{\partial x_k} + \hat{\beta} mc^2 \psi \quad (48)$$

Ez lenne a Dirac egyenlet szabad részecskére. A feladat tehát az $\hat{\alpha}_i$ és $\hat{\beta}$ operátorok megkeresése.

2.2 A Dirac mátrixok

Mivel $H = c \left(\sum_{k=1}^3 \hat{\alpha}_k p_k + \hat{\beta} mc \right)$ egy szabad részecske Hamilton függvénye, ez transzláció és idő-eltolás invariáns kell legyen, tehát H nem függhet sem az x, y, z koordinátáktól, sem pedig az időtől. Ugyanakkor az $\hat{\alpha}_k$ és $\hat{\beta}$ operátorok nem függhetnek sem p -től sem E -től, mert ez megváltoztatná a liindulási relativisztikusan kovariáns egyenletünket. Az elmondottak alapján tehát $\hat{\alpha}_k$ és $\hat{\beta}$ nem lehet tehát $\vec{r}, t$ -től függő mennyiség, sem ezek deriváltjait nem tartalmazza. Mivel $\hat{\alpha}_k$ és $\hat{\beta}$ operátor kell legyen, a legegyszerűbb megválsztás az ha $\hat{\alpha}_k$ és $\hat{\beta}$ mátrixok. Itt megjegyezzük, hogy az általános tárgyalásmódban nem szükséges ismerni $\hat{\alpha}_k$ és $\hat{\beta}$ konkrét alakját, elég csak megadni a (46) tulajdonságokat.

Egy első, bevezető jellegű kurzus keretében fontos azonban a $\hat{\alpha}_k$ és $\hat{\beta}$ -t egy konkrét reprezentációban felírni. A következőkben meghatározzuk az $\hat{\alpha}_k$ és $\hat{\beta}$ mátrixokat egy olyan reprezentációt használva ahol $\hat{\beta}$ diagonális mátrix.

Mivel $\hat{H}$ és $\hat{p}_k$ hermitikus operátorok, lényeges, hogy $\hat{\alpha}_k$, $\hat{\beta}$ szintén hermitikus operátorok legyenek $\Rightarrow \hat{\alpha}_k$ és $\hat{\beta}$ négyzetes mátrixok. Felhasználva ezt a tényt és a (46) tulajdonságokat azonnal belátható, hogy $\hat{\alpha}_k$, $\hat{\beta}$ unitér operátorok:

$$\hat{\alpha}_k^\dagger = \hat{\alpha}_k \text{ (hermitikusok)} \quad (49)$$

$$\hat{\alpha}_k^{-1} = \hat{\alpha}_k \left(\hat{\alpha}_k^2 = \hat{I} \right) \quad (50)$$

A bizonyítás hasonló a $\hat{\beta}$ -ra is. Könnyen bizonyítható az is, hogy:

$$Sp(\alpha_k) = Sp(\beta) = 0 \quad (51)$$

Példaként itt bebizonyítjuk, hogy $Sp(\beta) = 0$:

$$\alpha_k \beta = -\beta \alpha_k \Rightarrow \alpha_k \beta \alpha_k^{-1} = -\beta \quad (52)$$

$$Sp(\alpha_k \beta \alpha_k^{-1}) = -Sp(\beta), \text{ de} \quad (53)$$

$$Sp(\alpha_k \beta \alpha_k^{-1}) = Sp(\beta), \quad (54)$$

mert α_k egy unitér operátor, és egy unitér operátorral képzett reprezentációcsere nem változtatja meg a mátrix nyomát. Az utóbbi két egyenlet alapján:

$$Sp(\beta) = -Sp(\beta) \Rightarrow Sp(\beta) = 0 \quad (55)$$

Hasonlóan igazolható, hogy: $Sp(\alpha_k) = 0$.

Egy olyan reprezentációt keresünk tehát, ahol β diagonális.

- Mivel $\beta^2 = 1$, a diagonális elemek vagy $+1$ vagy -1 lesznek.
- Mivel $Sp(\beta) = 0$, ezért a $+1$ és -1 elemek száma megegyezik, tehát a β mátrixnak páros számú sora és oszlopa van! α_k sorainak és oszlopainak száma megegyezik a β -ével, mivel ugyanazon mátrix-egyenletben szerepelnek.
- A legegyszerűbb lehetőség ami a fenti két feltételnek eleget tesz, amikor (2×2) -es mátrixaink vannak. A (46) típusú antikommutálási tulajdonságoknak a $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ Pauli mátrixok tesznek eleget. AZONBAN hamar belátható, hogy nem létezik egy negyedik olyan mátrix, amelyik antikommutál mindenikkel ezek közül.
- Negyedrendű (4×4) -es mátrixokra van tehát szükség!!!!

Felhasználva a Pauli mátrixok ismert tulajdonságait, azonnal belátható, hogy egy lehetséges reprezentáció

$$\alpha_1 = \begin{bmatrix} 0 & \hat{\sigma}_1 \\ \hat{\sigma}_1 & 0 \end{bmatrix}; \quad (56)$$

$$\alpha_2 = \begin{bmatrix} 0 & \hat{\sigma}_2 \\ \hat{\sigma}_2 & 0 \end{bmatrix}; \quad (57)$$

$$\hat{\alpha}_3 = \begin{bmatrix} 0 & \hat{\sigma}_3 \\ \hat{\sigma}_3 & 0 \end{bmatrix}; \quad (58)$$

$$\hat{\beta} = \begin{bmatrix} \hat{I} & 0 \\ 0 & -\hat{I} \end{bmatrix}; \quad (59)$$

$$(60)$$

ahol

$$\hat{\sigma}_1 = \hat{\sigma}_x; \quad \hat{\sigma}_2 = \hat{\sigma}_y; \quad \hat{\sigma}_3 = \hat{\sigma}_z; \quad (61)$$

a Pauli mátrixok, és:

$$\hat{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}; \quad 0 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}; \quad (62)$$

$$\hat{\sigma}_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}; \quad (63)$$

$$\hat{\sigma}_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}; \quad (64)$$

$$\hat{\sigma}_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}; \quad (65)$$

$$(66)$$

Bevezetve az

$$\hat{\vec{\alpha}} = \begin{bmatrix} 0 & \hat{\vec{\sigma}} \\ \hat{\vec{\sigma}} & 0 \end{bmatrix} = \vec{i} \begin{bmatrix} 0 & \hat{\sigma}_1 \\ \hat{\sigma}_1 & 0 \end{bmatrix} + \vec{j} \begin{bmatrix} 0 & \hat{\sigma}_2 \\ \hat{\sigma}_2 & 0 \end{bmatrix} + \vec{k} \begin{bmatrix} 0 & \hat{\sigma}_3 \\ \hat{\sigma}_3 & 0 \end{bmatrix} \quad (67)$$

vektoriális mátrixot, szabad részecskére a Dirac egyenlet a következő alakú lesz:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-i\hbar \left(\hat{\vec{\alpha}} \cdot \nabla \right) + \hat{\beta} mc^2 \right] \psi \quad (68)$$

Mivel az $\hat{\alpha}_k$ és $\hat{\beta}$ operátorok (4×4) -es mátrixok, ezért a ψ hullámfüggvény, amire hat, egy négykomponensű oszlopmátrix, amit bispinornak nevezünk:

$$\psi(\vec{r}, t) = \begin{bmatrix} \psi_1(\vec{r}, t) \\ \psi_2(\vec{r}, t) \\ \psi_3(\vec{r}, t) \\ \psi_4(\vec{r}, t) \end{bmatrix} \longrightarrow \text{bispinor} \quad (69)$$

A $\hat{\alpha}_\mu$ és $\hat{\beta}$ mátrixok a bispinor komponenseit keverik, a ∇ és $\frac{\partial}{\partial t}$ operátorok meg a bispinor komponenseire mint függvényekre hatnak! A (68) egyenlet a szabad részecskére felírt Dirac egyenlet, ami ekvivalens négy összekapcsolt elsőrendű parciális differenciálegyenlettel. Bevezetve a

$$\hat{H} = -ic \sum_{k=1}^3 \hbar \alpha_k \frac{\partial}{\partial x_k} + \beta mc^2, \quad (70)$$

”Hamilton operátort” a Dirac egyenlet a Schrödinger egyenlettel azonos alakban írható:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \psi(\vec{r}, t) \quad (71)$$

A Dirac egyenletben megjelenő hullámfüggvény egy négykomponensű objektum. Ezen négy komponensnek fizikai értelmet kell adni. Ezt próbáljuk meg a következőkben.