

Relativisztikus Kvantummechanika alapok,

2. rész

January 25, 2005

1 A folytonossági egyenlet

Akárcsak a Schrödinger és Klein-Gordon egyenlet esetén, azt reméljük, hogy a Dirac egyenletben szereplő bispinor alakú hullámfüggvénynek fizikai értelmet tudunk adni, megszerkesztve a Dirac egyenlethez tartozó kontinuitási egyenletet. Ahhoz hogy megkapjuk a folytonossági egyenletet, balról beszorozzuk a

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\hbar \alpha_k \frac{\partial \psi}{\partial x_k} + mc^2 \beta \psi, \quad (1)$$

(megj.: az ismétlődő k index szummázást jelent a térkoordináták indexeire)
Dirac egyenletet a hullámfüggvénynek megfelelő, konjugált bispinorral:

$$\psi^+ = (\psi_1^* \psi_2^* \psi_3^* \psi_4^*) \quad (2)$$

Így a következő egyenlethez jutunk:

$$i\hbar \psi^+ \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\hbar \psi^+ \alpha_k \frac{\partial \psi}{\partial x_k} + mc^2 \psi^+ \beta \psi \quad (3)$$

Ennek az egyenletnek a konjugált egyenlete:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^+}{\partial t} \psi = i\hbar \frac{\partial \psi^+}{\partial x_k} \alpha_k \psi + mc^2 \psi^+ \beta \psi \quad (4)$$

Az utóbbi két egyenletet kivonva egymásból, megkapjuk a keresett folytonossági egyenletet:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0 \quad (5)$$

ahol:

$$\rho = \psi^+ \psi = \psi_\mu^* \psi_\mu \quad (6)$$

$$\vec{j} = c\psi^+ \vec{\alpha} \psi \quad (7)$$

Azonnal látható, hogy a Klein-Gordon egyenlettől eltérően, a Dirac egyenlet esetén a ρ mennyiség pozitívan definiált és így lehetségessé válik az, hogy valószínűség-sűrűségként értelmezhesük, akárcsak a Schrödinger egyenlet esetén tettük. A ρ a részecske megtalálhatósági valószínűsége lesz, $\vec{j}$ meg neki megfelelő áramsűrűség. Ezáltal nem adtunk azonban még fizikai értelmet a bispinorban megjelenő négy komponensnek. A továbbiakban az lesz a célunk, hogy ezen négy komponens fizikai értelmét tisztázzuk.

2 A Dirac egyenlet megoldása szabad részecskére

Feladatunk megoldani szabadon mozgó részecske esetén a Dirac egyenletet, és a megoldásnak a fizikai értelmezése. Reméljük, hogy ezáltal közelebb jutunk ahhoz is, hogy a hullámfüggvény bispinorát értelmezzük. A Pauli egyenlet esetén láttuk, hogy a spinor alakú hullámfüggvényt a spin szabadsági fokok bevezetésére használtuk. Analóg módon azt váránk el, hogy a Dirac egyenlet esetén is ezek a komponensek valahogy a spin-szabadsági fokokhoz kapcsolódjanak.

Az első fontos észrevétel az, hogy az impulzusnyomaték valamely komponenséhez rendelt operátor (például $L_3 = L_z$) most nem kommutál a Dirac egyenletben szereplő Hamilton függvénnyel:

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{L}_3] &= [c\vec{\alpha}\vec{p} + \beta mc^2, x_1\hat{p}_2 - x_2\hat{p}_1] = \\ &= c\{\alpha_1\hat{p}_2[\hat{p}_1, x_1] - \alpha_2\hat{p}_1[\hat{p}_2, x_2]\} = -ic\hbar(\alpha_1\hat{p}_2 - \alpha_2\hat{p}_1) \neq 0 \end{aligned} \quad (8)$$

A nemrelativisztikus kvantummechanikában tanultak alapján, ezért az következik, hogy az impulzusnyomaték egy szabad részecskére nem mozgásállandó (vagyis ha egy szabad részecske energiája adott, az impulzusnyomaték nem egy jól meghatározott mennyiség). Hogy megmentjük szabad részecskére az impulzusnyomaték megmaradásának a törvényét (ami a tér forgás-szimetriáját tükrözi) feltételezzük, hogy a részecske össz-impulzusnyomatékában:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (9)$$

szerepelnie kell feltétlenül egy mozgásállapottól független impulzusnyomatéknak ($\vec{S}$), ami a részecske *spinje*. Ezt az $\vec{S}$ impulzusnyomatéket úgy kell meghatároznunk, hogy teljesüljenek az alábbi feltételek:

- A $\vec{S}$ hez rendelt vektoriális operátor komponensei teljesítsék az impulzusnyomaték operátor komponenseire jellemző kommutálási összefüggéseket:

$$[\hat{S}_1, \hat{S}_2] = i\hbar\hat{S}_3 \quad (10)$$

$$[\hat{S}_2, \hat{S}_3] = i\hbar\hat{S}_1 \quad (11)$$

$$[\hat{S}_3, \hat{S}_1] = i\hbar\hat{S}_2 \quad (12)$$

- a $\vec{S}$ -hez rendelt operátor kommutáljon a $\vec{L}$ -hez rendelt operátorral, hogy a $\vec{J}$ össz-impulzusnyomaték értelmezve legyen. ($\vec{S}$ és $\vec{L}$ egyszerre és egzaktul mérhető legyen)

$$[\hat{S}_j, \hat{L}_k] = 0; (j, k = 1, 2, 3) \quad (13)$$

- a teljes $\vec{J}$ impulzusnyomatékhoz rendelt operátor kommutáljon a $\hat{H}$ operátorral, hogy $\vec{J}$ mozgásállandó lehessen szabad és rögzített energiájú részecske esetén. Így szabad részecskére az impulzusnyomaték megmaradása ne sérüljön!

$$[\hat{J}_k, \hat{H}] = 0; (k = 1, 2, 3) \quad (14)$$

Azonnal ellenőrizhető, hogy a

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma} \quad (15)$$

megválasztással az összes fenti feltétel teljesül. A $\vec{\Sigma}$ vektort, a hozzá rendelt operátoron keresztül értelmezzük. Ezen vektoriális operátor komponensei

$$\hat{\Sigma}_1 = -i\alpha_2\alpha_3 \quad (16)$$

$$\hat{\Sigma}_2 = -i\alpha_3\alpha_1 \quad (17)$$

$$\hat{\Sigma}_3 = -i\alpha_1\alpha_2, \quad (18)$$

ahol α_i a Dirac mátrixokat jelöli. A $\vec{\Sigma}$ operátor tehát a Dirac egyenlet által leírt részecske spinjét (belső impulzusnyomatékát) jellemzi. Ahhoz, hogy meghatározzuk a részecske spinjét (vagy jobban mondva spin-kvantumszámát) a spint jellemző vektoriális operátor egyik komponensének a sajátértékeit keressük. A megszokás szerint legyen ez $\hat{\Sigma}_3$. Keressük tehát $\hat{\Sigma}_3$ sajátértékeit. A Dirac mátrixokra a bevezetett reprezentációt használva

$$\hat{\Sigma}_3 = -i \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{pmatrix} = \quad (19)$$

$$= -i \begin{pmatrix} \sigma_1\sigma_2 & 0 \\ 0 & \sigma_1\sigma_2 \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} i\sigma_3 & 0 \\ 0 & i\sigma_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} \quad (20)$$

behelyettesítve a σ_3 Pauli mátrix alakját:

$$\hat{\Sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (21)$$

Innen azonnal, következik, hogy az $\hat{S}_3$ operátor sajátértékei $\pm\hbar/2$, és mindenik kétszeresen elfajult. Hasonló eredményre jutunk (csak komplikáltabb módon) ha a $\hat{S}_2$ vagy $\hat{S}_1$ komponensekkel dolgozunk. Ezáltal kijelenthetjük, hogy a Dirac egyenlet egy $s = 1/2$ spin-kvantumszámmal rendelkező részecskét ír le! Az $s = 1/2$ -es spin léte automatikusan benne van tehát a Dirac egyenletbe azáltal, hogy a hullámfüggvény egy többkomponensű mennyiség. A Pauli egyenletnél tanultak értelmében azonban egy $s = 1/2$ -es spin-kvantumszámmal rendelkező részecske leírására elegendő lenne egy kétkomponensű spinor is. A Dirac egyenletnél azonban az $s = 1/2$ -es spinű részecske leírására egy négykomponensű bispinort használunk. Meg kell tehát még magyarázni honnan adódik négy és nem csak két komponens. Azért, hogy e kérdésre választ adhassunk, vizsgáljuk egy szabad részecske mozgását a z tengely irányában. A megoldást a nemrelativisztikus esethez hasonlóan síkhullám alakban keressük:

$$\psi(\vec{x}, t) = ue^{\frac{i}{\hbar}(p_3x_3 - Et)}, \quad (22)$$

ahol u egy konstans bispinor:

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} \quad (23)$$

Behelyettesítve ezt a megoldást a Dirac-egyenlet ismert alakjába, az

$$Eu = cp_3\alpha_3u + mc^2\beta u, \quad (24)$$

egyenlet adódik. Mivel ebben az egyenletben 4×4 -es mátrixok szerepelnek, az egyenlet ekvivalens négy egyenlettel. Felhasználva az α_3 és β mátrixok alakját, az általunk használt reprezentációban:

$$(E - mc^2)u_1 - cp_3u_3 = 0 \quad (25)$$

$$(E - mc^2)u_2 - cp_3u_4 = 0 \quad (26)$$

$$(E + mc^2)u_3 - cp_3u_1 = 0 \quad (27)$$

$$(E + mc^2)u_4 - cp_3u_2 = 0 \quad (28)$$

Ahhoz, hogy ennek az egyenletrendszernek a triviálistól ($u_\mu = 0$) különböző megoldásai legyenek, az szükséges, hogy az egyenletrendszer determinánsa nulla legyen. Vagyis:

$$\begin{vmatrix} E - mc^2 & 0 & -cp_3 & 0 \\ 0 & E - mc^2 & 0 & cp_3 \\ -cp_3 & 0 & E + mc^2 & 0 \\ 0 & cp_3 & 0 & E + mc^2 \end{vmatrix} = 0, \quad (29)$$

ahonnan az E értékére azonnal két megoldás adódik:

$$E = \pm c\sqrt{p_3^2 + m^2 c^2} = \pm E_p \quad (30)$$

Látható, hogy akárcsak a zérós spinű részecskékre felírt Klein-Gordon egyenlet esetén, itt is megjelennek negatív energiájú megoldások!

Az $E = +E_p$ megoldás esetén két egymástól lineárisan független bispinort kapunk,

$$u_I = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp_3}{E_p+mc^2} \\ 0 \end{pmatrix} ; u_{II} = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -\frac{cp_3}{E_p+mc^2} \end{pmatrix} \quad (31)$$

és hasonlóan az $E = -E_p$ esetben is:

$$u_{III} = N \begin{pmatrix} -\frac{cp_3}{E_p+mc^2} \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} ; u_{IV} = N \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{cp_3}{E_p+mc^2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (32)$$

Azonnal belátható, hogy az N normálási faktor értéke mint a négy lineárisan független megoldásra:

$$N = \sqrt{\frac{E_p + mc^2}{2E_p}} \quad (33)$$

Azt kapjuk tehát, hogy szabad részecskére a Hamilton operátornak két (egymással ellenkező előjelű) megoldása van, és mindenik megoldás kétszeresen elfajult. A z tengely irányában való szabad mozgás speciális esetében a Hamilton operátor, kommutál az S_3 spinkomponenshez rendelt operátorral. Így ezen sajátállapotokban egzaktul meghatározható S_3 értéke is. Mielőtt elvégeznénk ezt, egy lényeges megjegyzést kell tennünk. Általános esetben $[\hat{H}, \hat{S}_3] \neq 0$, és a Hamilton operátor nem $\hat{S}_3$ -al, hanem az $\hat{Y}$

$$\hat{Y} = \frac{\hat{\vec{p}}\hat{\vec{\Sigma}}}{|\vec{p}|} = \frac{1}{p}\hat{p}_k\hat{\Sigma}_k \quad (34)$$

helicitás operátorral kommutál. A helicitás-operátor a spin-operátor projekciója az impulzus-vektor irányába. Ha a részecske impulzusa, a z tengely irányába mutat azonnal következik, hogy a helicitás-operátor $\hat{\Sigma}_3$, vagyis: $[\hat{H}, \hat{S}_3] = 0$.

Az $\hat{S}_3$ operátorral hatva az u_ν energia-sajátvektorokra, azonnal adódik, hogy:

$$\hat{S}_3 u_I = \frac{\hbar}{2} u_I; \hat{S}_3 u_{II} = -\frac{\hbar}{2} u_{II}; \hat{S}_3 u_{III} = \frac{\hbar}{2} u_{III}; \hat{S}_3 u_{IV} = -\frac{\hbar}{2} u_{IV} \quad (35)$$

Figyelembe véve, hogy:

$$\hat{H} u_I = E_p u_I; \hat{H} u_{II} = E_p u_{II}; \hat{H} u_{III} = -E_p u_{III}; \hat{H} u_{IV} = -E_p u_{IV}, \quad (36)$$

fizikai értelmet tudunk adni úgy az energia-sajátértékek mind pedig az S_3 sajátértékek kétszeres elfajulására. Jól meghatározott impulzusú szabad részecske esetén tehát négy egymástól független megoldást kapunk (ahogy ez elvárható abból, hogy a hullámfüggvény egy bispinor) és ez a négy megoldás a $\hat{H}$ és $\hat{S}_3$ operátoroknak a következő sajátértékeinek felel meg:

$$\left(+E_p, +\frac{\hbar}{2}\right); \left(+E_p, -\frac{\hbar}{2}\right); \left(-E_p, +\frac{\hbar}{2}\right); \left(-E_p, -\frac{\hbar}{2}\right) \quad (37)$$

A Dirac egyenletben levő bispinor alakú hullámfüggvény négy komponensének tehát egy fizikai értelmet is tudunk adni: ez a négy komponens azért jelenik meg, hogy jellemezzük az $s = 1/2$ -es spinkvantumszámú részecske lehetséges spin-állapotait, és ugyanakkor az egyelőre magyarázatlan pozitív illetve negatív energiájú állapotokat. A negatív energiájú állapotoknak még eddig nem tudtunk fizikai értelmet adni, mert ilyen esettel a gyakorlatban még nem találkoztunk (A relativitáselmélet $E = mc^2$ összefüggése értelmében a negatív energiájú állapotok negatív tömegű állapotokat jelentene!). Ezen problémával egy későbbi részben fogunk majd foglalkozni.

A nemrelativisztikus határesetben $E_p \simeq mc^2$ és így:

$$\frac{cp_3}{E_p + mc^2} \simeq \frac{p_3}{2mc} \sim \frac{v}{c} \ll 1 \quad (38)$$

A négy u_ν bispinor esetén el lehet hanyagolni ezen kis tagokat és így a következő eredményre jutunk:

$$u_I = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad u_{II} = N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (39)$$

$$u_{III} = N \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad u_{IV} = N \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (40)$$

A nemrelativisztikus határesetben tehát a Dirac egyenlet bispinorának négy komponense, rendre a

- + energiájú és $+1/2\hbar$ -s S_3 spinű
 - + energiájú és $-1/2\hbar$ -s S_3 spinű
 - – energiájú és $+1/2\hbar$ -s S_3 spinű
 - – energiájú és $-1/2\hbar$ -s S_3 spinű
- állapotok hullámfüggvényeit adja meg.

3 A Dirac egyenlet kovariáns alakja

A Dirac egyenlet:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (c\vec{\alpha}\vec{p} + mc^2\beta)\psi \quad (41)$$

A fenti egyenlet egy szimmetrikusabb formába írható a γ_μ ($\mu = 1, 2, 3, 4$) mátrixok bevezetésével:

$$\gamma_k = -i\beta\alpha_k \quad (k = 1, 2, 3) \quad (42)$$

$$\gamma_4 = \beta \quad (43)$$

Könyen igazolhatjuk, hogy a γ_μ mátrixok hermitikusak, vagyis $\gamma_\mu^\dagger = \gamma_\mu$ és ellenőrizhetjük, hogy igaz reájuk a következő egyenlet:

$$\gamma_\mu\gamma_\nu + \gamma_\nu\gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu} \quad (\mu, \nu = 1, 2, 3, 4) \quad (44)$$

Bevezetve az $x_4 = ict$ négyes koordinátát és a (41) Dirac egyenletet balról beszorozva $i\beta/c$ -vel:

$$\beta(-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_4}) - (i\beta\vec{\alpha}\vec{p} + imc\beta^2)\psi = 0 \quad (45)$$

Felhasználva az alábbi jelöléseket,

$$\begin{aligned} \hat{p}_4 &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_4} \\ -i\beta\vec{\alpha} &= \vec{\gamma} \end{aligned} \quad (46)$$

a (45) egyenlet tovább alakítható:

$$(\gamma_4\hat{p}_4 + \vec{\gamma}\vec{p} - imc)\psi = 0 \quad (47)$$

Bevezetve most a

$$\gamma_\mu p_\mu = \gamma_4 \hat{p}_4 + \vec{\gamma} \vec{p} \quad (48)$$

kovariáns, négyesvektorokkal felírt alakot, azonnal adódik a Dirac egyenlet kovariáns alakja:

$$(\gamma_\mu \hat{p}_\mu - imc)\psi = 0 \quad (49)$$

Felírhatjuk az ezzel hermitikusan konjugált egyenletet is:

$$\psi^+ ((\gamma_\mu \hat{p}_\mu)^+ + imc)\psi = 0 \quad (50)$$

Felhasználva, hogy $\hat{p}_4^* = \hat{p}_4$ és $\hat{\vec{p}}^* = i\hbar \nabla = -\hat{\vec{p}}$ a fenti alak tovább alakítható:

$$\psi^+ (\gamma_4 \hat{p}_4 - \vec{\gamma} \hat{\vec{p}} + imc)\psi = 0 \quad (51)$$

Az egyenletet γ_4 -el jobbról beszorozva, és felhasználva a γ mátrixokra érvényes antikommutálási összefüggéseket:

$$\psi^+ \gamma_4 (\gamma_4 \hat{p}_4 + \vec{\gamma} \hat{\vec{p}} + imc)\psi = 0 \quad (52)$$

Bevezetve, most az úgynevezett "adjungált" hullámfüggvényt

$$\bar{\psi} = \psi^+ \gamma_4 \quad (53)$$

$$\begin{aligned} \bar{\psi} &= (\psi_1^* \psi_2^* \psi_3^* \psi_4^*) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \\ &= (\psi_1^* \psi_2^* - \psi_3^* - \psi_4^*), \end{aligned} \quad (54)$$

azonnal megkapjuk a konjugált Dirac egyenlet gyakran használt alakját is:

$$\bar{\psi} (\gamma_\mu p_\mu + imc) = 0 \quad (55)$$

4 Részecske elektromágneses térben

Egy e töltéssel rendelkező Dirac részecske ($1/2$ -es spinű részecske) hullámegyenlete egy külső elektromágneses térben, formálisan megkapható úgy ahogy a Schrödinger egyenlet és a Klein-Gordon egyenlet esetén tettük, a $\hat{p}_\mu$ operátort a $\hat{p}_\mu - eA_\mu$ operátorral kicserélve. (Akárcsak a Klein-gordon egyenlet esetén, A_μ itt is a négyespotenciált jelenti). Az egyenlet automatikusan kovariáns marad, ugyanis a p_μ és A_μ mennyiségek ugyanolyan módon transzformálódnak. A Dirac egyenlet kovariáns alakja tehát elektromágneses térben:

$$(\gamma_\mu(\hat{p}_\mu - eA_\mu) - imc)\psi = 0 \quad (56)$$

Az egyenletet felírhatjuk a Hamilton operátor segítségével is:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi = (c\vec{\alpha}(\vec{p} - e\vec{A}) + \beta mc^2 + eA_0)\psi \quad (57)$$

Ez a parciális differenciál-egyenletrendszer megoldható néhány egyszerű esetben, mint például Coulomb tér esetén vagy homogén mágneses térben.

A Coulomb típusú centrális térben való megoldás lényeges a Hidrogén típusú atomok energianívóinak a pontos meghatározására. Komplikált számítások után, azt kapjuk, hogy az energianívókat egy n' főkvantumszám, és az össz-impulzusnyomaték moduluszát jellemző j mellékkvantumszám határozza meg:

$$E_{nj} = mc^2 \left\{ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{\left(n' + \sqrt{j + \frac{1}{2} + \alpha^2 Z^2}\right)} \right\}^{-\frac{1}{2}} \quad (58)$$

Az n' és j kvantumszámok lehetséges értékei

$$n' = 0, 1, 2, 4, \dots \quad (59)$$

$$j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \dots, \quad (60)$$

és

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \simeq \frac{1}{137} \quad (61)$$

az úgynevezett *finomszerkezeti állandó*. Mivel a finomszerkezeti állandó kicsi, az E_{nj} kifejezésében a gyök sorbafejthető, és az első tagok alapján megkapjuk az energiaszintek megközelítő értékeit

$$E_{nj} = mc^2 - \frac{1}{2}\alpha^2 mc^2 \frac{Z^2}{n^2} \left\{ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) + \dots \right\} \quad (62)$$

ahol

$$n = n' + j + \frac{1}{2} = 1, 2, 3, \dots, \quad (63)$$

a Schrödinger egyenlet megoldásából ismert főkvantumszám. A (62) képletben az első tag a nyugalmi tömegnek megfelelő energia, a második tag a nemrelativisztikus megoldás során kapott érték, és a következő tagok a relativisztikus korrekciókat adják. Az energianívóknak a j kvantumszámtól való függése a nemrelativisztikus elméletben nem jelenik meg. Ez a j -től való függés az úgynevezett *finomszerkezetet adja*. A nagyfelbontású spektroszkópokkal kapott kísérleti eredmények igazolják a Hidrogén típusú atomok finom szerkezetének a létét, vagyis az energianívók nagyon kismértékű felhasadását a j függvényében. A Dirac egyenlet sem írja azonban le tökéletesen a Hidrogén energianívóit, ezeknek a teljes leírását a relativisztikus kvantum-térelmélet adja. Egy azonnali példa erre a $2S_{1/2}$, $2P_{1/2}$, és $2P_{3/2}$ energiaállapotok. A nemrelativisztikus tárgyalás alapján ezeknek az energiái azonosak. A Dirac elmélet alapján a $2S_{1/2}$ és $2P_{1/2}$ állapotok energiái azonosak, míg a $2P_{3/2}$ állapot energiája valamikéval ($10^{-4}eV$) nagyobb. A nagyon precíz mérések azonban azt adják, hogy a $2S_{1/2}$ állapot energiája valamikéval különbözik a $2P_{1/2}$ állapot energiájától. Ez a jelenség az úgynevezett *Lamb effektus*, melynek a magyarázata csak a relativisztikus kvantum-térelmélet keretében lesz lehetséges.

5 Töltéskonjugáció

Célunk most a $-e$ töltésű Dirac részecske hullámfüggvényének a megadása elektromágneses térben, ha ismerjük az e töltésű részecske hullámfüggvényét.

Kiindulunk a Dirac egyenlet kovariáns alakjából elektromágneses térben:

$$(\gamma_\mu(\hat{p}_\mu - eA_\mu) - imc)\psi = 0 \quad (64)$$

A konjugált egyenlet, különválasztva a negyedik komponenst:

$$\left(\gamma_4^*(\hat{p}_4^* - eA_4^*) + \vec{\gamma}^*(\vec{\hat{p}}^* - e\vec{A}^*) + imc \right) \psi^* = 0 \quad (65)$$

Figyelembe véve azt hogy

$$\begin{aligned} \hat{p}_4^* &= \hat{p}_4, \quad \vec{\hat{p}}^* = -\vec{\hat{p}} \\ A_4^* &= \left(\frac{i}{c} A_0 \right)^* = -\frac{i}{c} A_0 = -A_4, \quad \vec{A}^* = \vec{A}, \end{aligned} \quad (66)$$

($A_0 = \varphi$ a skalárpotenciál) a konjugált egyenlet a következő alakra hozható:

$$\left(-\gamma_4^*(\hat{p}_4 + eA_4) + \vec{\gamma}^*(\vec{p} + e\vec{A}) - imc\right) \psi^* = 0 \quad (67)$$

Egy C transzformáció segítségével bevezetünk egy új függvényt, ψ_c -t, amit a következőképpen definiálunk

$$\psi^* = C\psi_c \text{ vagy } \psi_c = C^{-1}\psi^*, \quad (68)$$

ahol a C operátor (mátrix) eleget tesz a következő összefüggéseknek

$$\vec{\gamma} = C^{-1}\vec{\gamma}^*C \quad (69)$$

$$\gamma_4 = -C^{-1}\gamma_4^*C, \quad (70)$$

és kommutál a $\hat{p}_\mu$ operátorokkal.

A (67) egyenletet operátoraiban végrehajtva most a C transzformációt, vagy ha úgy tetszik ψ^* -ot ψ függvényében felírva, és az egyenletet balról C^{-1} -el beszorozva:

$$(\gamma_\mu(\hat{p}_\mu + eA_\mu) - imc) \psi_C = 0, \quad (71)$$

ami egy $-e$ töltésű részecskére felírt Dirac egyenlet. Ennek a ψ_C megoldása direkt módon kapcsolódik tehát az e töltésű részecskére kapott megoldáshoz:

$$\psi_C = C^{-1}\psi^* \quad (72)$$

Ha meghatározzuk tehát a (70) tulajdonságoknak eleget tevő C mátrixot, a ψ ismeretében egyértelműen megkapjuk a keresett ψ_C megoldást. A C mátrix alakja persze függ a Dirac mátrixok felírásához használt reprezentációtól. Azonnal belátható, hogy a

$$C = \gamma_2 \quad (73)$$

megválasztással a kívánt tulajdonságok teljesülnek, ugyanis γ_2 antikommutál bármely más γ_i Dirac mátrixsal, és triviálisan kommutál saját magával. A választott reprezentációban γ_2 valós, tehát $C^* = C$. Ugyanakkor $\gamma_2^2 = 1$. Figyelembe véve azt is, hogy a γ_μ mátrixok hermitikusak, azonnal adódik a keresett C -re, hogy:

$$C = C^+ = C^* = C^{-1} \quad (74)$$

6 Negatív energiával rendelkező állapotok. A pozitron

A negatív energiájú állapotok léte egy komoly problémét jelnetett a Dirac egyenlet számára. Negatív energiájú állapotokban a tömeg is negatív lenne, egy negatív tömegű részecske meg nagyon furcsán viselkedne: a reá ható erővel ellenkező irányban gyorsulna, az impulzusa a sebességével ellenkező irányítású lenne, és sok más eddig nem megfigyelt tulajdonsággal rendelkezne. Mivel ilyen negatív tömegű részecskéket a fizika nem figyelt meg, valami más magyarázatot kellett adni a negatív energiájú állapotoknak.

A manapság elfogadott *lyuk-elméletet*, Dirac javasolta 1930-ban. A lyuk-elmélet alapján a mindent körülvevő vákum, egy negatív energiájú részecskék tengere, ahol minden lehetséges negatív állapot be van töltve. A vákum tehát egy végtelen sűrűségű Fermi gáz, ahol az összes lehetséges energia-állapotok foglaltak. Egy ilyen Fermi gáz megfigyelhetetlen, és fizikailag tehát ugyanolyan tulajdonságokkal rendelkezik mint a klasszikus vákum. A létező feles spinű részecskéink nem kerülhetnek tehát negatív energiájú állapotokban, mivel ezen állapotok foglaltak. (Az egyszerűség kedvéért beszéljünk a következőkben elektronokról, ugyanis ezek azon $1/2$ -es spinű eleminek tekintett részecskék, melyekre a Dirac egyenletet a leginkább alkalmazzuk). Ha a teljesen betöltött negatív energiájú elektronok tengeréből hiányzik egy elektron, ez úgy viselkedik mint egy "lyuk", és az így kapott rendszer ekvivalens egy ellenkező tömegű, ellenkező energiájú és töltésű részecskével. Egy ilyen részecske tehát úgy jelenne meg mint az elektron tömegével egyenlő tömegű, de pozitív e töltéssel rendelkező részecske. Egy ilyen részecskét *pozitronnak* nevezzük, és azt mondjuk, hogy az elektron *antirészecskéje*. Dirac lyuk-elméletére azután kezdtek figyelni, miután Anderson 1932-ben kísérletileg felfedezte a pozitront. Manapság úgy tartjuk, hogy nem csak az elektronnak, hanem minden más elemi részecskének is létezik antirészecskéje. Ezek közül sokat kísérletileg is sikerült hamar felfedeznünk.

A lyuk-elmélet egy másik nagy sikere, hogy konszekvensen magyarázza a részecske-antirészecske anihiláció és párkeltés jelenségeit is. Ha a negatív energiájú részecskék tengerében egy részecske elegendő energiához jut, hogy a végső energiája pozitív legyen, a részecske megjelenik az általunk észlelt pozitív energiájú világban, és egy lyukat hagy maga után. Ez a lyuk, meg az előbbieik alapján úgy viselkedik, mint egy antirészecske. Ezáltal, tehát egy $E > 2mc^2$ energia befektetésével egy részecske-antirészecske párt tudunk kelteni. Ezt a párkeltési folyamatot számos kísérlet igazolja.

Egy létező részecske és antirészecske ugyanakkor anihilálódhat, a részecske beugorva a negatív energiájú szabad helyre. Ezáltal úgy a részecske mint az antirészecske számunkra eltűnik. Egy ilyen anihilációs folyamat során $2mc^2$ energia szabadulna fel. Az elektron-pozitron anihilációs folyamatok manapság az elemi részecske fizikában egy klasszikus jelenségnek számítanak.

Dirac lyukelmélete tehát sikeresen magyarázza a negatív energiájú állapotok megfigyelhetetlenségét, illetve a részecskéknek megfelelő antirészecskék létét és ezeknek számos tulajdonságait. A lyukelméletben bevezetett teljesen elfoglalt

és ezért megfigyelhetetlen negatív energiájú állapotok léte nehezen elfogadható azonban még ma is számos fizkus számára.

7 A nemrelativisztikus és gyengén relativisztikus közelítés

Olyan esetekben, mikor az $1/2$ -es spinnel rendelkező részecske tömege nem különbözik jelentős mértékben a nyugalmi tömegtől, vagyis a részecske sebessége nem közelíti meg túlságosan a fénysebességet a nehezen kezelhető Dirac egyenlet helyett egy valamicskével egyszerűbb egyenlettel dolgozhatunk. Célunk, ezen egyszerűbb, gyengén relativisztikus egyenlet levezetése. Mielőtt nekifognánk ezen feladatnak, itt megjegyezzük, hogy ezen rész során a Dirac egyenletben szereplő $\hat{p}_\mu$ operátorok jelölésében a kalapot végig mellőzni fogjuk. Mindig nyilvánvaló kell legyen azonban számunkra mikor van szó operátorról, és mikor egyszerű fizikai mennyiségről!

Ha a szabad részecske mozgásánál kapott megoldásokat vizsgáljuk, a gyengén relativisztikus esetben azt a következtetést vonhatjuk le, hogy a bispinor alakú megoldásban levő két spinor komponens

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi' \\ \chi' \end{pmatrix} \quad (75)$$

közül az egyik jóval kisebb a másiknál. Ha $E = +E_p$ akkor $\chi' \ll \varphi'$.

A (57) egyenletben a ψ függvény helyett egy újabb Φ függvényt vezetünk be, hogy különválassuk a nyugalmi tömeghez tartozó energiát:

$$\psi = \Phi e^{-imc^2 t/\hbar} \quad (76)$$

Behelyettesítve ezt a Dirac egyenlet (57) alakjába azt kapjuk, hogy:

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \left(c\vec{\alpha}(\vec{p} - e\vec{A}) + (\beta - 1)mc^2 + eA_0 \right) \Phi \quad (77)$$

A

$$\Phi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (78)$$

jelöléssel az egyenlet felbomlik két 2×2 -es mátrix egyenletre:

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = c\vec{\sigma}(\vec{p} - e\vec{A})\chi + eA_0\varphi \quad (79)$$

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = c\vec{\sigma}(\vec{p} - e\vec{A})\varphi + eA_0\chi - 2mc^2\chi \quad (80)$$

A kis mozgási sebességek határesetében $\chi \ll \varphi$, ezért a (80) egyenletben elhanyagolhatók azok a tagok amelyek a χ spinort tartalmazzák, kivéve az utolsó tagot, ahol ez a nagy mc^2 taggal van szorozva. Ezáltal a (80) egyenlet értelmében:

$$\chi = \frac{1}{2mc} \vec{\sigma}(\vec{p} - e\vec{A})\varphi \quad (81)$$

Ezt visszahelyettesítve a (79) egyenletbe:

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left\{ \frac{1}{2m} [\vec{\sigma}(\vec{p} - e\vec{A})]^2 + eA_0 \right\} \varphi \quad (82)$$

Felhasználva most a Pauli mátrixokra érvényes:

$$(\vec{\sigma}\vec{A})(\vec{\sigma}\vec{B}) = \vec{A}\vec{B} + i\sigma(\vec{A} \times \vec{B}) \quad (83)$$

egyenletet, írhatjuk, hogy

$$[\vec{\sigma}(\vec{p} - e\vec{A})]^2 = (\vec{p} - e\vec{A})^2 - e\hbar \vec{\sigma}\vec{B}, \quad (84)$$

ahol:

$$\vec{B} = \text{rot}\vec{A} \quad (85)$$

A (84) alakot használva most a (82) egyenletbe, azonnal adódik a számunkra már jól ismert *Pauli egyenlet*:

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \hat{H}\varphi = \left\{ \frac{1}{2m} [\vec{\sigma}(\vec{p} - e\vec{A})]^2 + eA_0 - \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma}\vec{B} \right\} \varphi \quad (86)$$

A Pauli egyenlet, tehát a Dirac egyenlet nemrelativisztikus alakja. Úgy kaptuk meg, hogy elhanyagoltuk az összes v/c -s tagokat, és az egyenletben ezért c már nem szerepel. A Pauli egyenlet a Schrödinger egyenlettől a megjelenő

$$V_m = -\frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma}\vec{B} \quad (87)$$

spin-mágneses tér kölcsönhatási tagban különbözik. Az egyenlet főleg elektronokra érvényes, és az egyenlet alapján következik az elektron spin-mágneses nyomatéka:

$$\vec{\mu} = \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \quad (88)$$

A megtalálhatósági valószínűség-sűrűség

$$\rho = \psi^+ \psi = \varphi^+ \varphi + \chi^+ \chi \quad (89)$$

alakjában az utolsó tagot elhanyagolhatjuk, és ezáltal megkapjuk a Pauli egyenlet esetén a valószínűség-sűrűség alakját az egyenletben szereplő spinor segítségével:

$$\rho = \varphi^+ \varphi \quad (90)$$

A következőkben vizsgáljuk a Dirac egyenletet egy jobb megközelítést alkalmazva, ami a gyengén relativisztikus határesetet fogja leírni. Az egyszerűség kedvéért tekintsük azt, hogy a vonatkoztatási rendszerünkben csak elektrosztatikus tér van, vagyis: $\vec{A} = 0$. Felírjuk az $\vec{A} = 0$ esetben a (79), (80) és (81) egyenleteket:

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = c\vec{\sigma}\vec{p}\chi + eA_0\varphi \quad (91)$$

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = c\vec{\sigma}\vec{p}\varphi + eA_0\chi - 2mc^2\chi \quad (92)$$

$$\chi = \frac{1}{2mc} \vec{\sigma}\vec{p}\varphi \quad (93)$$

A (92) egyenlet utolsó tagjából kifejezzük χ értékét

$$\chi = \frac{1}{2mc^2} \left[c\vec{\sigma}\vec{p}\varphi + eA_0\chi - i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} \right], \quad (94)$$

majd a fenti kifejezésben levő időszerinti derivált tagban behelyettesítjük a (93) formát:

$$\chi = \frac{1}{2mc^2} \left[c\vec{\sigma}\vec{p}\varphi + \frac{eA_0}{2mc} \vec{\sigma}\vec{p}\varphi - \frac{i\hbar}{2mc} \vec{\sigma}\vec{p} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right] \quad (95)$$

A fenti egyenletet behelyettesítve (91)-be

$$i\hbar \left[1 + \frac{p^2}{4m^2c^2} \right] \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left[\frac{p^2}{2m} + eA_0 + \frac{e}{4m^2c^2} (\vec{\sigma}\vec{p})A_0(\vec{\sigma}\vec{p}) \right] \varphi, \quad (96)$$

ezt meg beszorozva bal oldalról $1 - p^2/4m^2c^2$ -el, és csak a $(v/c)^2$ -es nagyságrendig megtartva a tagokat, egy klasszikus

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \hat{H}' \varphi \quad (97)$$

formában írható egyenletet kapunk. A megjelenő Hamilton operátor alakja:

$$\hat{H}' = \frac{p^2}{2m} + eA_0 + \frac{p^2}{4m^2c^2}(\vec{\sigma}\vec{p})A_0(\vec{\sigma}\vec{p}) - \frac{p^4}{8m^3c^2} - \frac{e}{4m^2c^2}p^2A_0 \quad (98)$$

A megjelenő (97) egyenlet azonban nem analóg a Schrödinger egyenlettel, ugyanis a $\int \varphi^+ \varphi d\vec{r}$ valószínűség-sűrűség időben nem lesz állandó. Ez azonnal belátható, ugyanis a (89) képletben itt már nem elhanyagolható a $\chi^* \chi$ tag! Ezért φ egy nem jól értelmezett spinor-hullámfüggvény lesz. Helyette be kell vezetnünk a φ_0 hullámfüggvényt, amelyre:

$$\frac{d}{dt} \int \varphi_0^+ \varphi_0 d\vec{r} = 0 \quad (99)$$

Tételezzük fel, hogy φ_0

$$\varphi_0 = \hat{O}\varphi \quad (100)$$

transzformációval kapható meg, és φ_0 -ra igaz:

$$\int \varphi_0^+ \varphi_0 d\vec{r} = \int (\varphi^+ \varphi + \chi^+ \chi) d\vec{r} \quad (101)$$

Behelyettesítve ide χ értékét a nullad-rendű (81) közelítésben

$$\int \varphi_0^+ \varphi_0 d\vec{r} = \int \varphi^+ \left[1 + \frac{p^2}{4m^2c^2} \right] \varphi d\vec{r}, \quad (102)$$

azonnal adódik a $\hat{O}$ operátor alakja:

$$\hat{O} = \left[1 + \frac{p^2}{4m^2c^2} \right]^{1/2} \simeq 1 + \frac{p^2}{8m^2c^2} \quad (103)$$

Ezt a transzformációt végrehajtva a (97) egyenletben:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi_0 = \hat{H} \varphi_0 \quad (104)$$

$$\hat{H} = \hat{O} \hat{H}' \hat{O}^{-1} \quad (105)$$

egy rövid számítás után adódik, hogy:

$$\begin{aligned} \hat{H} = \frac{p^2}{2m} + eA_0 - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \frac{e}{4m^2c^2}(p^2A_0 - A_0p^2) - \frac{e}{4m^2c^2}p^2A_0 + \\ + \frac{e}{4m^2c^2}(\vec{\sigma}\vec{p})A_0(\vec{\sigma}\vec{p}) \end{aligned} \quad (106)$$

Felhasználva most a

$$(p^2 A_0 - A_0 p^2) = -\hbar^2 \Delta A_0 + 2i\hbar \vec{E} \vec{p} \quad (107)$$

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma} \vec{p}) A_0 (\vec{\sigma} \vec{p}) &= A_0 p^2 + (\vec{\sigma} \vec{p} A_0) (\vec{\sigma} \vec{p}) = A_0 p^2 + i\hbar (\vec{\sigma} \vec{E}) (\vec{\sigma} \vec{p}) = \\ &= A_0 p^2 + i\hbar \vec{E} \vec{p} - \hbar \vec{\sigma} (\vec{E} \times \vec{p}) \end{aligned} \quad (108)$$

egyenleteket, ahol $\vec{E} = -\nabla A_0$, megkapjuk a gyengén relativisztikus közelítésben a Dirac egyenletben szereplő Hamilton operátor alakját:

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + eA_0 - \frac{p^4}{8m^3 c^2} + \frac{e\hbar^2}{8m^3 c^2} \Delta A_0 - \frac{e\hbar}{4m^2 c^2} \vec{\sigma} (\vec{E} \times \vec{p}) \quad (109)$$

Az utolsó három tag a Schrödinger egyenletben kevéssé Hamilton operátor relativisztikus korrekciói. Az első tag a relativisztikus mozgási energia, impulzus függvényében való kifejtéséből származik:

$$c\sqrt{p^2 + m^2 c^2} - mc^2 = mc^2 \left(1 + \frac{p^2}{2m^2 c^2} - \frac{p^4}{8m^4 c^4} \right) - mc^2 \simeq \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2} \quad (110)$$

A második tag az úgynevezett Darwin energia, és spintől független. A harmadik tag a spin-pálya kölcsönhatási tag, és a spin illetve orbitális mozgásokból adódó mágneses nyomatékok kölcsönhatásából származik. Centrális elektrosztatikus tér esetén:

$$\vec{E} = -\frac{\vec{r}}{r} \frac{d}{dr} A_0 \quad (111)$$

és ezáltal az utolsó tagot a következő egyszerűbb, és könnyebben interpretálható alakban tudjuk írni:

$$-\frac{e\hbar}{4m^2 c^2} \vec{\sigma} (\vec{E} \times \vec{p}) = \frac{e\hbar}{4m^2 c^2 r} \vec{\sigma} (\vec{r} \times \vec{p}) \frac{d}{dr} A_0 = \frac{e}{2m^2 c^2 r} \frac{dA_0}{dr} \vec{S} \vec{L} \quad (112)$$