1. Relativisztikus kvantummechanika

1.1. Minkowski-tér

A négydimenziós Minkowski-tér bázisvektorai $\mathbf{e}_\mu$ ($\mu = 0, 1, 2, 3$), a téridő-vektorok

$$\mathbf{x} = x^\mu \mathbf{e}_\mu \,, \tag{1}$$

ahol a *kontravariáns* koordináták,

$$x = \left(x^0, x^1, x^2, x^3\right) = (ct, \overrightarrow{x}) \ . \tag{2}$$

A bázisvektorok skaláris szorzata,

$$\mathbf{e}_\mu \cdot \mathbf{e}_\nu = g_{\mu\nu} \tag{3}$$

ahol $\mathsf{g} = \{g_{\mu\nu}\}$ a metrikus tenzor (fundamentális mátrix):

$$\mathsf{g} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} \ . \tag{4}$$

A pszeudo-euklidészi Minkowski-téren a skaláris szorzat (Minkowski-szorzat) kifejezhető a kontravariáns vektorkomponensekkel:

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = x^\mu y^\nu \, \mathbf{e}_\mu \cdot \mathbf{e}_\nu = x^\mu g_{\mu\nu} \, y^\nu = x \, \mathsf{g} \, y \,. \tag{5}$$

Egy téridő-vektor normája:

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{x} = c^2 t^2 - \overrightarrow{x}^2 \,, \tag{6}$$

ami lehet pozitív (időszerű vektor), negatív (térszerű vektor) vagy zérus (fényszerű vektor).

A Minkowski-tér *duális terét* az ℓ lineáris formák alkotják,

$$\ell\left(\mathbf{x}\right) = \ell\left(x^\mu \mathbf{e}_\mu\right) = x^\mu \ell\left(\mathbf{e}_\mu\right) \ . \tag{7}$$

A skaláris szorzaton keresztül az ℓ lineáris forma egyértelműen azonosítható a Minkowski-tér következő vektorával,

$$\boldsymbol{\ell} = \ell^\mu \, \mathbf{e}_\mu \,, \tag{8}$$

úgy, hogy

$$\ell\left(\mathbf{x}\right) = \ell\left(\mathbf{e}_\mu\right) \, x^\mu \equiv \boldsymbol{\ell} \cdot \mathbf{x} = \ell^\nu g_{\nu\mu} \, x^\nu \ , \tag{9}$$

azaz

$$\ell\left(\mathbf{e}_\mu\right) = g_{\mu\nu} \, \ell^\nu \,. \tag{10}$$

Vezessük be a metrikus tenzor inverzét:

$$\mathsf{g}^{-1} = \{g^{\mu\nu}\} \ , \tag{11}$$

melyre

$$g^{\mu\nu}g_{\nu\lambda} = \delta^{\mu}_{\cdot\lambda}\,, \tag{12}$$

$$g_{\mu\nu}g^{\nu\lambda} = \delta_{\mu}^{\cdot\lambda}\,, \tag{13}$$

ahol

$$\delta^{\mu}_{\cdot\lambda} = \delta_{\mu}^{\cdot\lambda} = \begin{cases} 1 & \text{ha} \quad \mu = \lambda \\ 0 & \text{ha} \quad \mu \neq \lambda \end{cases}\,, \tag{14}$$

és a Minkowski-szorzat esetében nyilvánvalóan fennáll, hogy

$$g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu}\ . \tag{15}$$

A lineáris formához rendelt Minkowski-vektor kontravariáns komponensei,

$$\ell^{\mu} = g^{\mu\nu}\ell\left(\mathbf{e}_{\nu}\right)\ . \tag{16}$$

Egy $\mathbf{x}$ téridő-vektor *kovariáns* vektorkomponenseinek nevezzük a hozzárendelt lineáris leképezés (duális) komponenseit:

$$x_{\mu} \equiv x\left(\mathbf{e}_{\mu}\right) = g_{\mu\nu}\,x^{\nu}\,, \tag{17}$$

és

$$x^{\mu} = \delta^{\mu}_{\cdot\nu}\,x^{\nu} = g^{\mu\lambda}g_{\lambda\nu}x^{\nu} = g^{\mu\lambda}\,x_{\lambda}\,. \tag{18}$$

A kovariáns koordinátákat kiírva:

$$x_{\mu} = \left(ct, -\overrightarrow{x}\right)\ . \tag{19}$$

1.2. Lorentz-transzformációk

A Minkowski-távolság négyzete,

$$ds^2 = c^2dt^2 - \left(d\overrightarrow{x}\right)^2 = dx^{\mu}dx_{\mu} \tag{20}$$

független az inerciarendszer választásától. (Homogén) Lorentz-transzformációnak nevezzük a Minkowski-tér mértéktartó, valós értékű lineáris transzformációit. A bázisvektorok transzformációja,

$$\mathbf{e}_{\nu} = \mathbf{e}'_{\mu}\,\Lambda^{\mu}_{\cdot\nu} \tag{21}$$

implikálja a kontravariáns koordináták transzformációját,

$$\mathbf{x} = x^{\mu}\mathbf{e}_{\mu} = x^{\mu}\,\mathbf{e}'_{\nu}\,\Lambda^{\nu}_{\cdot\mu} = x'^{\nu}\mathbf{e}'_{\nu} \Longrightarrow x'^{\nu} = \Lambda^{\nu}_{\cdot\mu}\,x^{\mu} \tag{22}$$

vagy rövidebben,

$$\Lambda = \{\Lambda^{\mu}_{\cdot\nu}\} \Longrightarrow x' = \Lambda\,x\,. \tag{23}$$

A Lorentz-transzformáció mértéktartó:

$$x'^{\mu}y'_{\mu} = x'^{\mu}g_{\mu\tau}y'^{\tau} = \Lambda^{\mu}_{\cdot\nu}\,x^{\nu}g_{\mu\tau}\Lambda^{\tau}_{\cdot\lambda}\,y^{\lambda} = x^{\nu}\Lambda^{\mu}_{\cdot\nu}\,g_{\mu\tau}\Lambda^{\tau}_{\cdot\lambda}\,y^{\lambda} = x^{\nu}y_{\nu}\,, \tag{24}$$

amiből

$$g_{\mu\tau}\,\Lambda^{\mu}_{\cdot\,\nu}\,\Lambda^{\tau}_{\cdot\,\lambda} = g_{\nu\lambda} \tag{25}$$

következik. A $\mathsf{\Lambda}$ mátrix transzponáltjával:

$$\left(\mathsf{\Lambda}^T\right)_{\nu}^{\cdot\,\mu} \equiv \Lambda^{\mu}_{\cdot\,\nu} \tag{26}$$

a fenti azonosság átírható:

$$\left(\mathsf{\Lambda}^T\right)_{\nu}^{\cdot\,\mu}\; g_{\mu\tau}\,\Lambda^{\tau}_{\cdot\,\lambda} = g_{\nu\lambda} \tag{27}$$

azaz

$$\mathsf{\Lambda}^T\mathsf{g}\,\mathsf{\Lambda} = \mathsf{g}\,. \tag{28}$$

Fennállnak a következő tulajdonságok:

1) $\Lambda^{\mu}_{\cdot\,\nu} = \delta^{\mu}_{\cdot\,\nu}$ megoldás: $\delta_{\mu}^{\cdot\,\tau} g_{\tau\sigma}\delta^{\sigma}_{\cdot\,\nu} = g_{\mu\nu}$

2) $\det\mathsf{\Lambda}^T\mathsf{g}\mathsf{\Lambda} = (\det\mathsf{\Lambda})^2\det\mathsf{g} = \det\mathsf{g} \Longrightarrow \det\mathsf{\Lambda} = \pm 1$

3) Ha $\mathsf{\Lambda}$ megoldás, akkor $\mathsf{\Lambda}^{-1}$ is megoldás: $\mathsf{g} = \left(\mathsf{\Lambda}^T\right)^{-1}\mathsf{g}\mathsf{\Lambda}^{-1} = (\mathsf{\Lambda}^{-1})^T\,\mathsf{g}\mathsf{\Lambda}^{-1}$

4) Ha $\mathsf{\Lambda}_1$ és $\mathsf{\Lambda}_2$ megoldás, akkor $\mathsf{\Lambda}_1\mathsf{\Lambda}_2$ is megoldás: $(\mathsf{\Lambda}_1\mathsf{\Lambda}_2)^T\,\mathsf{g}\mathsf{\Lambda}_1\mathsf{\Lambda}_2 = \mathsf{\Lambda}_2^T\mathsf{\Lambda}_1^T\mathsf{g}\mathsf{\Lambda}_1\mathsf{\Lambda}_2 = \mathsf{\Lambda}_2^T\mathsf{g}\mathsf{\Lambda}_2 = \mathsf{g}$,
melyekből következik, hogy a Lorentz transzformációk csoportot alkotnak (Lorentz csoport).

Infinitezimális Lorentz-transzformáció, ω:

$$\mathsf{\Lambda} = \mathsf{I} + \omega \Longrightarrow \left(\mathsf{I} + \omega^T\right)\mathsf{g}\,(\mathsf{I} + \omega) = \mathsf{g} \underset{\text{elsőrendben}}{\Longrightarrow} \omega^T\mathsf{g} = -\mathsf{g}\omega \tag{29}$$

$$\left(\omega^T\right)_{\mu}^{\cdot\,\tau} g_{\tau\nu} = \omega^{\tau}_{\cdot\,\mu}\,g_{\tau\nu} = g_{\nu\tau}\,\omega^{\tau}_{\cdot\,\mu} = \omega_{\nu\mu} \quad \text{és} \quad g_{\mu\tau}\omega^{\tau}_{\cdot\,\nu} = \omega_{\mu\nu} \tag{30}$$

$$\Downarrow$$

$$\omega_{\mu\nu} = -\omega_{\nu\mu} \tag{31}$$

Hogyan transzformálódnak a kovariáns koordináták?

$$x'_{\mu} = g_{\mu\nu}\,x'^{\nu} = g_{\mu\nu}\Lambda^{\nu}_{\cdot\,\tau}\,x^{\tau} = g_{\mu\nu}\Lambda^{\nu}_{\cdot\,\tau}g^{\tau\sigma}x_{\sigma} = \overline{\Lambda}_{\mu}^{\sigma}x_{\sigma} \tag{32}$$

ahol

$$\overline{\Lambda}_{\mu}^{\cdot\,\sigma} = g_{\mu\nu}\Lambda^{\nu}_{\cdot\,\tau}g^{\tau\sigma} \tag{33}$$

vagy

$$\overline{\mathsf{\Lambda}} = \mathsf{g}\,\mathsf{\Lambda}\,\mathsf{g}^{-1}\,. \tag{34}$$

Fennáll a következő reláció:

$$\left(\mathsf{\Lambda}^T\right)_{\mu}^{\cdot\,\tau}\,\overline{\Lambda}_{\tau}^{\cdot\,\nu} = \Lambda^{\tau}_{\cdot\,\mu}\,g_{\tau\sigma}\Lambda^{\sigma}_{\cdot\,\rho}\,g^{\rho\nu} = g_{\mu\rho}\,g^{\rho\nu} = \delta_{\mu}^{\cdot\,\nu} \tag{35}$$

vagy

$$\mathsf{\Lambda}^T\,\overline{\mathsf{\Lambda}} = \mathsf{\Lambda}^T\mathsf{g}\mathsf{\Lambda}\mathsf{g}^{-1} = \mathsf{g}\mathsf{g}^{-1} = \mathsf{I} \Longrightarrow \overline{\mathsf{\Lambda}} = \left(\mathsf{\Lambda}^{-1}\right)^T\,. \tag{36}$$

Négyes-derivált:

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} \Longrightarrow \partial_\mu x^\nu = \delta_\mu^{\cdot\,\nu} \tag{37}$$

$$\partial_\mu = \left(\frac{\partial}{c\partial t}, \overrightarrow{\nabla}\right) \tag{38}$$

∂_μ kovariáns vektor:

$$\partial'_\mu = \frac{\partial}{\partial x'^\mu} = \frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu}\frac{\partial}{\partial x^\nu} = \left(\Lambda^{-1}\right)^{\nu}_{\cdot\,\mu}\,\partial_\nu = \left[\left(\Lambda^{-1}\right)^T\right]_\mu^{\cdot\,\nu}\,\partial_\nu = \overline{\Lambda}_\mu^{\cdot\,\nu}\,\partial_\nu \tag{39}$$

Következésképpen $\partial^\mu = \left(\frac{\partial}{c\partial t}, -\overrightarrow{\nabla}\right)$ kontravariáns vektor és a d'Alembert operátor,

$$\partial_\mu \partial^\mu = \frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} - \Delta \equiv \Box \tag{40}$$

Lorentz-invariáns.

1.3. Relativisztikus kinematika

A négyes-sebesség definíciója

$$u^\mu = \frac{dx^\mu}{d\tau} = \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\left(c, \overrightarrow{v}\right) \tag{41}$$

ahol τ a sajátidő és

$$\overrightarrow{v} = \frac{d\overrightarrow{r}\,(t)}{dt}\,, \tag{42}$$

amiből következik, hogy a négyes-sebesség normája Lorentz-invariáns:

$$u^\mu g_{\mu\nu} u^\nu = u^\mu u_\mu = \frac{c^2 - v^2}{1-\frac{v^2}{c^2}} = c^2\,. \tag{43}$$

Az energia-impulzus négyesvektor,

$$p^\mu = m u^\mu = \left(\frac{E}{c}, \overrightarrow{p}\right)\,, \tag{44}$$

ahol m a részecske nyugalmi tömege és

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \tag{45}$$

a részecske energiája. Nyilván a p^μ normája is Lorentz-invariáns:

$$p^\mu g_{\mu\nu} p^\nu = p^\mu p_\mu = m^2 c^2 \tag{46}$$

ami expliciten kiírva az ún. energia-impulzus összefüggés:

$$E^2 - c^2 p^2 = \left(mc^2\right)^2\,. \tag{47}$$

1.4. Elektrodinamika

Négyes-potenciál:

$$A^\mu = \left(\frac{\phi}{c}, \overrightarrow{A}\right)\ ,\ A_\mu = \left(\frac{\phi}{c}, -\overrightarrow{A}\right)\ , \tag{48}$$

melyből a térerősség tenzor az alábbi módon definiálható:

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu \tag{49}$$

$$F^{i0} = \frac{E_i}{c} \quad F^{ij} = -\epsilon_{ijk} B_k\,. \tag{50}$$

Négyes áramsűrűség:

$$j^\mu = \left(c\rho, \overrightarrow{j}\right)\ , \tag{51}$$

melyre fennáll a kontinuitási egyenlet,

$$\partial_\mu j^\mu = 0\,, \tag{52}$$

illetve

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla}\overrightarrow{j} = 0\,. \tag{53}$$

A Maxwell-egyenletek:

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = \mu_0 j^\nu \tag{54}$$

$$\epsilon_{\lambda\tau\mu\nu}\partial^\tau F^{\mu\nu} = 0\,, \tag{55}$$

ahol $\epsilon_{\lambda\tau\mu\nu}$ a négy-dimenziós teljesen szimmetrikus tenzor $\epsilon_{0123} = 1$ normálással.

A relativisztikus energia-impulzus összefüggés (a Lagrange- és Hamilton-formalizmus rövid összefoglalója a Kvantummechanika 2 szemelvények függelékében található)

Négyes kinetikus impulzus:

$$K^\mu = p^\mu - qA^\mu = \left(\frac{E - q\phi}{c}, \overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right) \tag{56}$$

$$K_\mu = p_\mu - qA_\mu = \left(\frac{E - q\phi}{c}, -\overrightarrow{p} + q\overrightarrow{A}\right) \tag{57}$$

$$\Downarrow$$

$$K^\mu K_\mu = \frac{(E - q\phi)^2}{c^2} - \left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right)^2 = m^2c^2 \tag{58}$$

azaz

$$E = \sqrt{m^2c^4 + c^2\left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right)^2} + q\phi\,. \tag{59}$$

A relativisztikus kvantummechanika feladata az, hogy a (58) összefüggésnek megfelelő, Lorentz-invariáns állapotegyenletet vezessen be úgy, hogy a hullámfüggvényre és operátorokra kirótt kvantummechanikai axiómák (pl. valószínűségi értelmezés, felcserélési relációk) érvényben maradjanak.

1.5. Felcserélési relációk és operátorok koordináta reprezentációban

A nem-relativisztikus kvantumelméletben a koordináta és a kanonikus impulzus operátorok felcserélési relációja:

$$\left[p^i,x^j\right]=\begin{cases}-i\hbar & \text{ha } \; i=j\\ 0 & \text{ha } \; i\neq j\end{cases} \qquad (i,j=1,2,3)\;. \tag{60}$$

Figyelembevéve, hogy

$$\delta_{\mu\nu}=\delta_{\mu}^{\cdot\,\tau}g_{\tau\nu}=g_{\mu\nu}\,, \tag{61}$$

$$\delta^{\mu\nu}=\delta^{\mu}_{\cdot\,\tau}g^{\tau\nu}=g^{\mu\nu}\,, \tag{62}$$

a fenti felcserélési relációkat az alábbi módon írhatjuk,

$$\left[p^i,x^j\right]=i\hbar\,\delta^{ij}\,,$$

és terjesztjük ki a négyesvektorokra,

$$[p^\mu,x^\nu]=i\hbar\,\delta^{\mu\nu}=i\hbar\,g^{\mu\nu}\,. \tag{63}$$

A p^μ négyes-impulzus operátorok kontravariáns vektorként transzformálódnak, ami biztosítja a felcserélési relációk Lorentz-kovarianciáját:

$$C^{\mu\nu}\equiv[p^\mu,x^\nu]\rightarrow \mathsf{C}=i\hbar\mathsf{g}^{-1} \tag{64}$$

$$C'^{\mu\nu}=[p'^\mu,x'^\nu]=\Lambda^{\mu}_{\cdot\,\tau}\Lambda^{\nu}_{\cdot\,\lambda}\left[p^\tau,x^\lambda\right]=\Lambda^{\mu}_{\cdot\,\tau}\left[p^\tau,x^\lambda\right]\left(\Lambda^T\right)_{\lambda}^{\cdot\,\nu}=\Lambda^{\mu}_{\cdot\,\tau}C^{\tau\lambda}\left(\Lambda^T\right)_{\lambda}^{\cdot\,\nu} \tag{65}$$

azaz

$$\mathsf{C}'=\mathsf{\Lambda}\mathsf{C}\mathsf{\Lambda}^T=i\hbar\mathsf{\Lambda}\mathsf{g}^{-1}\mathsf{\Lambda}^T=i\hbar\mathsf{g}^{-1}\mathsf{g}\mathsf{\Lambda}\mathsf{g}^{-1}\mathsf{\Lambda}^T=i\hbar\mathsf{g}^{-1}\overline{\mathsf{\Lambda}}\mathsf{\Lambda}^T=i\hbar\mathsf{g}^{-1}\,. \tag{66}$$

Koordináta reprezentációban ezért a négyesimpulzus operátort a következőképpen definiáljuk,

$$p^\mu=\left(p^0,\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}\right)\,. \tag{67}$$

ahol

$$\left[p^0,ct\right]=i\hbar\rightarrow p^0=\frac{i\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t}\,. \tag{68}$$

Mivel $p^0=\frac{E}{c}$, a fenti definícióból következik, hogy az energia operátora:

$$E=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,. \tag{69}$$

Összefoglalva tehát:

$$p^\mu=\left(\frac{i\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t},\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}\right)=i\hbar\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t},-\overrightarrow{\nabla}\right)=i\hbar\partial^\mu \tag{70}$$

$$p_\mu=\left(\frac{i\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t},-\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}\right)=i\hbar\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t},\overrightarrow{\nabla}\right)=i\hbar\partial_\mu \tag{71}$$

A kinetikus impulzus operátora:

$$K^\mu=p^\mu-qA^\mu=i\hbar\partial^\mu-qA^\mu=\left(\frac{1}{c}\left(i\hbar\partial_t-q\phi\right),-i\hbar\overrightarrow{\nabla}-q\overrightarrow{A}\right)\,, \tag{72}$$

$$K_\mu=p_\mu-qA_\mu=i\hbar\partial_\mu-qA_\mu=\left(\frac{1}{c}\left(i\hbar\partial_t-q\phi\right),i\hbar\overrightarrow{\nabla}+q\overrightarrow{A}\right)\,. \tag{73}$$

1.6. A Klein-Gordon egyenlet

A (72) és (73) operátorokat behelyettesítve a Lorentz-kovariáns (58) egyenletbe és hattatva a hullámfüggvényre, kapjuk a *Klein-Gordon egyenletet*,

$$\left[\frac{1}{c^2}\left(i\hbar\partial_t - q\phi\right)^2 - \left(i\hbar\overrightarrow{\nabla} + q\overrightarrow{A}\right)^2\right]\psi\left(\overrightarrow{r},t\right) = m^2c^2\psi\left(\overrightarrow{r},t\right)\ . \tag{74}$$

Az $\overrightarrow{A}\left(\overrightarrow{r},t\right) = 0,\ \phi\left(\overrightarrow{r},t\right) = 0$ esetben (szabad részecske) a fenti egyenlet a

$$\left[\Box + \kappa^2\right]\psi\left(\overrightarrow{r},t\right) = 0 \tag{75}$$

alakra redukálódik, ahol $\varkappa = \frac{mc}{\hbar}$ a Compton hullámszám és $\Box = \frac{1}{c^2}\partial_t^2 - \Delta$.

Időtől független vektor- és skalárpotenciálra a hullámfüggvényt a szokott

$$\psi\left(\overrightarrow{r},t\right) = \psi\left(\overrightarrow{r}\right)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{76}$$

alakban keresve kapjuk a *stacionárius Klein-Gordon egyenletet*:

$$\left[\left(i\hbar\overrightarrow{\nabla} + q\overrightarrow{A}\right)^2 - \frac{\left(E - q\phi\right)^2}{c^2} + m^2c^2\right]\psi\left(\overrightarrow{r}\right) = 0\quad . \tag{77}$$

Szabad részecskére a

$$\left[-\hbar^2\Delta - \frac{E^2}{c^2} + m^2c^2\right]\psi\left(\overrightarrow{r}\right) = 0 \tag{78}$$

egyenlet megoldása a

$$\psi\left(\overrightarrow{r}\right) = A\,e^{\frac{i}{\hbar}\overrightarrow{p}\overrightarrow{r}} \tag{79}$$

síkhullám, és a (59) egyenletnek megfelelően

$$c^2p^2 + m^2c^4 - E^2 = 0 \tag{80}$$

adódik. Ebből következik, hogy a szabad részecske energiája

$$E = \pm\sqrt{m^2c^4 + c^2p^2} \tag{81}$$

tehát $E \geq mc^2$ vagy $E \leq -mc^2$. A negatív energiás megoldások megjelenése 'újdonság' a klasszikus relativisztikus mechanikához képest. Belátható, hogy a pozitív és negatív energiás megoldások együtt alkotnak teljes rendszert az állapotok Hilbert terén.

A staconárius Klein-Gordon egyenlet a H-atomra $\left(\overrightarrow{A}\left(\overrightarrow{r}\right) = 0,\ \phi\left(\overrightarrow{r}\right) = -Ze^2/r\right)$ megoldható és a pozitív energia sajátértékeket $1/c^2$ szerint sorfejtve kapjuk, hogy

$$E_{n\ell} \simeq mc^2 - \frac{m\left(Ze^2\right)^2}{2\hbar^2n^2} + \frac{m\left(Ze^2\right)^4}{4\hbar^4n^4c^2}\left(\frac{3}{2} - \frac{4n}{2\ell+1}\right) + \ldots\quad , \tag{82}$$

ahol n és ℓ a nem-relativisztikus tárgyalásban megismert fő- és mellékkvantumszámok. Látható, hogy a H-atom energiaszintjeinek durvaszerkezetét (Balmer-tag) jól kaptuk vissza, a finomszerkezetre viszont a Klein-Gordon egyenlet a kísérleteknek ellentmondó predikciót ad.

Még komolyabb problémába ütközünk, ha a hullámfüggvény valószínűségi értelmezésén alapuló koontinuitási egyenletet próbáljuk levezetni. A (75) egyenletet konjugálva,

$$\left[\Box + \kappa^2\right] \psi\left(\overrightarrow{r}, t\right)^* = 0 \quad , \tag{83}$$

majd $\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right)$-vel balról beszorozva, ugyanakkor a (75) egyenletet $\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right)^*$-vel balról beszorozva és az így nyert két egyenletet egymásból kivonva nyerjük, hogy

$$\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right) \Box\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right)^* - \psi\left(\overrightarrow{r}, t\right)^* \Box\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right) = 0 \quad , \tag{84}$$

amit tovább átalakíthatunk a

$$\begin{aligned} & \frac{1}{c^2}\left(\psi\partial_t^2\psi^* - \psi^*\partial_t^2\psi\right) - \left(\psi\Delta\psi^* - \psi^*\Delta\psi\right) \\ & = \frac{1}{c^2}\partial_t\left(\psi\partial_t\psi^* - \psi^*\partial_t\psi\right) - \overrightarrow{\nabla}\left(\psi\overrightarrow{\nabla}\psi^* - \psi^*\overrightarrow{\nabla}\psi\right) = 0 \end{aligned} \tag{85}$$

formában. Az egyenletet $\frac{i\hbar}{2m}$-mel beszorozva, majd a megtalálási valószínűségsűrűséget

$$\begin{aligned} \rho\left(\overrightarrow{r}, t\right) &= \frac{i\hbar}{2mc^2}\left(\psi^*\left(\overrightarrow{r}, t\right)\partial_t\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right) - \psi\left(\overrightarrow{r}, t\right)\partial_t\psi^*\left(\overrightarrow{r}, t\right)\right) \\ &= \mathrm{Re}\left(\psi^*\left(\overrightarrow{r}, t\right)\frac{i\hbar\partial_t}{mc^2}\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right)\right) \end{aligned} \tag{86}$$

és az áramsűrűséget

$$\begin{aligned} \overrightarrow{j}\left(\overrightarrow{r}, t\right) &= \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\left(\overrightarrow{r}, t\right)\overrightarrow{\nabla}\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right) - \psi\left(\overrightarrow{r}, t\right)\overrightarrow{\nabla}\psi^*\left(\overrightarrow{r}, t\right)\right) \\ &= \mathrm{Re}\left(\psi^*\left(\overrightarrow{r}, t\right)\frac{\overrightarrow{p}}{m}\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right)\right) \end{aligned} \tag{87}$$

módon definiálva, valóban adódik, hogy

$$\partial_t\rho\left(\overrightarrow{r}, t\right) + \overrightarrow{\nabla}\overrightarrow{j}\left(\overrightarrow{r}, t\right) = 0 \quad . \tag{88}$$

Míg az áramsűrűség definíciója megegyezik a Schrödinger egyenlet alapján nyert kifejezéssel, a valószínűségsűrűségé különbözik attól. A problémát az jelenti, hogy $\rho\left(\overrightarrow{r}, t\right)$ nem pozitív definit. Ugyanis az időben másodrendű Klein-Gordon egyenletben a $\partial_t\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right)$-re, aminek nincs fizikai jelentése, $\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right)$-től független kezdeti feltétel róható ki. A szabad részecske valószínúségsűrűsége:

$$\rho\left(\overrightarrow{r}, t\right) = \frac{E}{mc^2}\left|\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right)\right|^2 \quad , \tag{89}$$

ami negatív energiás megoldásokra, $E = -\sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$, negatív valószínűségsűrűséghez vezet.

Ezenkívül a hullámfüggvény skalár volta miatt nincsen lehetőség spin értelmezésére sem, így a Klein-Gordon egyenlet - amint azt a kvantumtérelmélet megmutatta - a nulla spinű részecskék (pl. π-mezonok) téregyenlete.

1.7. A Dirac egyenlet

Láttuk tehát, hogy a Klein-Gordon egyenlet valószínűségi értelmezését az akadályozta meg, hogy benne az időderivált négyzete szerepelt. Ezért Paul Dirac (1928) nyomán a hullámfüggvény mozgásegyenletében p_μ lineáris formáját engedjük meg (az elektromágneses térrel kölcsönható részecske mozgásegyenletét később tárgyaljuk)

$$\underline{(\gamma^\mu p_\mu - mc)\,\psi = 0} \quad , \tag{90}$$

ahol a γ^μ operátorok felcserélhetők a p_μ operátorokkal. Ezt úgy interpretálhatjuk, hogy a ψ hullámfüggvény a négyzetesen integrálható függvények Hilbert-terének (ahol a p_μ operátorok hatnak) és egy új szabadsági fokokat reprezentáló Hilbert-tér (ahol a γ^μ operátorok hatnak) tenzorszorzatának eleme.

Hattassuk a $\gamma^\nu p_\nu + mc$ operátort a fenti egyenletre:

$$(\gamma^\nu p_\nu + mc)\,(\gamma^\mu p_\mu - mc)\,\psi = \left(\gamma^\nu p_\nu \gamma^\mu p_\mu - m^2c^2\right)\psi = 0 \quad , \tag{91}$$

A p_μ operátorok felcserélhetőségét is figyelembe véve:

$$\gamma^\nu\gamma^\mu p_\mu p_\nu = \frac{1}{2}\left(\gamma^\nu\gamma^\mu p_\mu p_\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu p_\nu p_\mu\right) \tag{92}$$

$$= \frac{1}{2}\left(\gamma^\nu\gamma^\mu + \gamma^\mu\gamma^\nu\right) p_\mu p_\nu \; . \tag{93}$$

Szeretnénk ugyanakkor, ha érvényben maradna a relativisztikus energia-impulzus összefüggés. Ehhez megköveteljük, hogy a fenti kifejezés $p^\mu p_\mu$-vel legyen egyenlő, azaz teljesülnie kell a következő antikommutációs relációknak:

$$\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = \underline{\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}} \quad . \tag{94}$$

Ebből egyúttal az is következik, hogy

$$\left(\gamma^0\right)^2 = 1 \quad \text{és} \quad \left(\gamma^i\right)^2 = -1 \quad (i = 1, 2, 3) \tag{95}$$

A fenti csererelációkat teljesítő operátorok ún. *Clifford algebrát* alkotnak.

Mivel $p_\mu = i\hbar\partial_\mu$, Dirac egyenlete szabad részecskére:

$$\underline{(i\gamma^\mu\partial_\mu - \varkappa)\,\psi = 0}\;, \tag{96}$$

ahol (mint a Klein-Gordon egyenletben) $\varkappa = \frac{mc}{\hbar}$ a Compton hullámszám.

1.8. A Dirac mátrixok

1.8.1. A γ^μ mátrixok dimenziója

Állítás: A γ^μ operátorok véges, n dimenziós ábrázolásaira fennáll, hogy n páros.

Bizonyítás:

(i) Belátható, hogy bármely γ^μ operátor nyoma zérus. Ugyanis:

$$\mathrm{Tr}\gamma^0 = -\mathrm{Tr}\gamma^0 \left(\gamma^j\right)^2 = -\mathrm{Tr}\gamma^j\gamma^0\gamma^i = \mathrm{Tr}\left(\gamma^j\right)^2\gamma^0 = -\mathrm{Tr}\gamma^0 \ , \tag{97}$$

$$\mathrm{Tr}\gamma^j = \mathrm{Tr}\gamma^j \left(\gamma^0\right)^2 = \mathrm{Tr}\gamma^0\gamma^j\gamma^0 = -\mathrm{Tr}\left(\gamma^0\right)^2\gamma^j = -\mathrm{Tr}\gamma^j \ , \tag{98}$$

ahol felhasználtuk a nyomképzés ciklikus tulajdonságát.

(ii) Mivel $\left(\gamma^0\right)^2 = 1$, γ^0 lehetséges sajátértékei 1 vagy -1, illetve $\left(\gamma^j\right)^2 = -1$ miatt γ^j lehetséges sajátétékei $\pm i$.

Tételezzük fel, hogy m sajátérték 1 (vagy i) és $n-m$ sajátérték -1 (vagy $-i$). Ekkor,

$$\mathrm{Tr}\gamma^0 = m - (n-m) = 2m - n = 0 \quad , \tag{99}$$

$$\mathrm{Tr}\gamma^j = [m - (n-m)]\, i = (2m-n)\, i = 0 \quad , \tag{100}$$

tehát n páros.

1.8.2. Standard ábrázolás

Belátható, hogy a négydimenziós Dirac csoport irreducibilis ábrázolásai egy vagy négydimenziósak. Ezek közül csak az utóbbi felel meg a Clifford algebrának, így a γ^μ operátorokat a továbbiakban 4×4-es mátrixokkal reprezentáljuk. Az alábbi, ún. standard ábrázolás,

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1_2 & 0 \\ 0 & -1_2 \end{pmatrix} \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \tag{101}$$

eleget tesz a megkövetelt antikommutációs relációknak:

$$\left\{\gamma^i, \gamma^k\right\} = -\begin{pmatrix} \left\{\sigma^i, \sigma^k\right\} & 0 \\ 0 & \left\{\sigma^i, \sigma^k\right\} \end{pmatrix} = -2\delta^{ik}\, 1_4 = 2g^{ik}\, 1_4 \tag{102}$$

$$\left\{\gamma^0, \gamma^i\right\} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix} = 0 \tag{103}$$

A továbbiakban szükségünk lesz még a mátrixok adjungáltjaira vonatkozó összefüggésekre:

$$\left(\gamma^0\right)^\dagger = \gamma^0 \quad \left(\gamma^i\right)^\dagger = -\gamma^i \tag{104}$$

$$\gamma^0\gamma^i = -\gamma^i\gamma^0 \Longrightarrow \left(\gamma^i\right)^\dagger = \gamma^0\gamma^i\gamma^0 \tag{105}$$

A Dirac egyenletben szereplő *hullámfüggvények* következésképpen *négykomponensűek*:

$$\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right) = \begin{pmatrix} \psi_1\left(\overrightarrow{r}, t\right) \\ \psi_2\left(\overrightarrow{r}, t\right) \\ \psi_3\left(\overrightarrow{r}, t\right) \\ \psi_4\left(\overrightarrow{r}, t\right) \end{pmatrix} \quad . \tag{106}$$

Megjegyezzük, hogy a $\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$ Dirac mátrix:

$$\gamma^5 = i\underbrace{\begin{pmatrix} 1_2 & 0 \\ 0 & -1_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ -\sigma_1 & 0 \end{pmatrix}}_{\begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix}}\underbrace{\begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ -\sigma_2 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_3 \\ -\sigma_3 & 0 \end{pmatrix}}_{\begin{pmatrix} -i\sigma_1 & 0 \\ 0 & -i\sigma_1 \end{pmatrix}} = \begin{pmatrix} 0 & I_2 \\ I_2 & 0 \end{pmatrix} \quad . \tag{107}$$

is a Clifford algebra szerint antikommutál a γ^μ mátrixokkal.

1.9. Az elektromágneses térrel kölcsönható részecske mozgásegyenlete

Elektromágneses tér jelenléte esetén a Dirac egyenletbe a p_μ kanonikus impulzusok helyett a K_μ kinetikus impulzusokat írjuk,

$$(\gamma^\mu K_\mu - mc)\,\psi = 0 \tag{108}$$

ahol

$$K_\mu = p_\mu - qA_\mu = i\hbar\partial_\mu - qA_\mu \tag{109}$$

$$\Downarrow$$

$$\underline{(\gamma^\mu\,(i\hbar\partial_\mu - qA_\mu) - mc)\,\psi = 0} \tag{110}$$

vagy

$$\underline{\left(i\gamma^\mu\left(\partial_\mu + \frac{iq}{\hbar}A_\mu\right) - \kappa\right)\psi = 0\,.} \tag{111}$$

A nem-relativisztikus elmélethez hasonlóan vizsgáljuk meg a Dirac egyenlet invarianciáját a

$$\overrightarrow{A}' = \overrightarrow{A} + \overrightarrow{\nabla}\Lambda,\ \phi' = \phi - \partial_t\Lambda \Rightarrow A'_\mu = \left(\frac{\phi - \partial_t\Lambda}{c}, -\overrightarrow{A} - \overrightarrow{\nabla}\Lambda\right) = A_\mu - \partial_\mu\Lambda \tag{112}$$

*mértéktranszformáció*val szemben:

$$\left(i\gamma^\mu\left(\partial_\mu + \frac{iq}{\hbar}A'_\mu\right) - \kappa\right)\psi' = 0 \tag{113}$$

$$\Downarrow$$

$$\left[i\gamma_\mu\left(\partial_\mu + \frac{iq}{\hbar}A_\mu - \frac{iq}{\hbar}\partial_\mu\Lambda\right) - \kappa\right]\psi' = 0 \tag{114}$$

alakban írható. Nyilvánvaló, hogy a hullámfüggvény

$$\underline{\psi' = \psi e^{\frac{iq}{\hbar}\Lambda}} \tag{115}$$

transzformációja kielégíti a (114) egyenletet. Ugyanis

$$\left(\partial_\mu - \frac{iq}{\hbar}\partial_\mu\Lambda\right)\psi e^{\frac{iq}{\hbar}\Lambda} = e^{\frac{iq}{\hbar}\Lambda}\partial_\mu\psi\,, \tag{116}$$

és utána $e^{\frac{iq}{\hbar}\Lambda}$-val egyszerűsítve a (110) Dirac egyenlethez jutunk. A (115) transzformáció teljes mértékben ekvivalens a nem-relativisztikus esetben levezetett mértéktranszformációval!

A (110) egyenletben kiírva ∂_μ és A_μ idő- és térszerű komponenseit,

$$K_\mu = \left(\frac{1}{c}\left(i\hbar\partial_t - q\phi\right), -\left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right)\right), \tag{117}$$

kapjuk, hogy

$$\left[\frac{1}{c}\gamma^0\left(i\hbar\partial_t - q\phi\right) - \overrightarrow{\gamma}\left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right) - mc\right]\psi = 0\,, \tag{118}$$

melyet $-c\gamma^0-$lal balról szorozva,

$$\left[\left(-i\hbar\partial_t + q\phi\right) + c\gamma^0\overrightarrow{\gamma}\left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right) + \gamma^0 mc^2\right]\psi = 0\,, \tag{119}$$

majd az idő szerinti deriváltat külön kezelve nyerjük a következő egyenletet,

$$i\hbar\partial_t\psi = \left[c\gamma^0\overrightarrow{\gamma}\left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right) + q\phi + \gamma^0 mc^2\right]\psi\,. \tag{120}$$

Vezessük be az $\overrightarrow{\alpha} \equiv \gamma^0\overrightarrow{\gamma}$ és $\beta \equiv \gamma^0$ mátrixokat. Az α_i mátrixok alakja,

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \tag{121}$$

míg a β mátrix nyilvánvalóan

$$\beta = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix}. \tag{122}$$

Az új mátrixokkal a Dirac egyenlet az

$$i\hbar\partial_t\psi = \left[c\,\overrightarrow{\alpha}\left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right) + q\phi + \beta mc^2\right]\psi\,, \tag{123}$$

alakot ölti, melyből az

$$i\hbar\partial_t\psi = H\psi \tag{124}$$

analógia alapján leolvashatjuk a relativisztikus Hamilton operátort:

$$H = c\,\overrightarrow{\alpha}\left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right) + q\phi + \beta mc^2\,, \tag{125}$$

mely az $\underline{\alpha}$ és β mátrixok ismeretében nyilvánvalóan hermitikus. Időfüggetlen vektor- és skalárpotenciál esetén a hullámfüggvényt $\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right) = \psi\left(\overrightarrow{r}\right)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ alakban keresve a Hamilton operátor sajátérték problémájához, azaz a *stacionárius Dirac egyenlet*hez jutunk

$$H\psi\left(\overrightarrow{r}\right) = \left[c\,\overrightarrow{\alpha}\left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\left(\overrightarrow{r}\right)\right) + q\phi\left(\overrightarrow{r}\right) + \beta mc^2\right]\psi\left(\overrightarrow{r}\right) = E\,\psi\left(\overrightarrow{r}\right)\,. \tag{126}$$

1.10. A kontinuitási egyenlet

Induljunk ki a Dirac egyenlet

$$i\hbar\partial_t\psi = \left[c\,\overrightarrow{\alpha}\left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right) + q\phi + \beta mc^2\right]\psi \tag{127}$$

alakjából, melyet a hullámfüggvény komponensei szerint kiírunk:

$$i\hbar\partial_t\psi_r = c\overrightarrow{\alpha}_{rs}(\overrightarrow{p}\psi_s - q\overrightarrow{A}\psi_s) + q\phi\psi_r + mc^2\beta_{rs}\psi_s \; . \tag{128}$$

Konjugáljuk az egyenletek mindkét oldalát:

$$-i\hbar\partial_t\psi_r^* = -c\overrightarrow{\alpha}^*_{rs}(\overrightarrow{p}\psi_s^* - q\overrightarrow{A}\psi_s^*) + q\phi\psi_r^* + mc^2\beta^*_{rs}\psi_s^* \tag{129}$$

$$= -c\,(\overrightarrow{p}\psi_s^*)\,\overrightarrow{\alpha}_{sr} - q\overrightarrow{A}\psi_s^*\overrightarrow{\alpha}_{sr} + q\phi\psi_r^* + mc^2\psi_s^*\beta_{sr} \; , \tag{130}$$

ahol felhasználtuk, hogy $(\overrightarrow{p}\psi_r)^* = \left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}\psi_r\right)^* = -\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}\psi_r^* = -\overrightarrow{p}\psi_r^*$, valamint, hogy az $\overrightarrow{\alpha}$ és β mátrixok hermitikusak. A fenti egyenletek összefoglalhatjuk a következő módon:

$$-i\hbar\partial_t\psi^\dagger = c\left(-\overrightarrow{p} - \frac{q}{c}\overrightarrow{A}\right)\psi^\dagger\overrightarrow{\alpha} + q\phi\psi^\dagger + mc^2\psi^\dagger\beta \; , \tag{131}$$

ahol

$$\psi^\dagger = (\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*) \tag{132}$$

a hullámfüggvény adjungáltja. Az (127) egyenletet ψ^+-szal balról, a (131) egyenletet ψ-vel jobbról beszorozva, majd az így nyert két egyenletet egymásból kivonva kapjuk, hogy

$$i\hbar\left[\psi^\dagger\partial_t\psi + \left(\partial_t\psi^\dagger\right)\psi\right] = c\left[\psi^\dagger\overrightarrow{\alpha}\,\overrightarrow{p}\psi + \left(\overrightarrow{p}\psi^\dagger\right)\overrightarrow{\alpha}\psi\right] \tag{133}$$

$$\Downarrow$$

$$\partial_t\left(\psi^\dagger\psi\right) + \overrightarrow{\nabla}\left(c\psi^\dagger\overrightarrow{\alpha}\psi\right) = 0 \; , \tag{134}$$

amiből a megtalálási valószínűségsűrűség és áramsűrűség megfelelő definíciójával,

$$\underline{\rho = \psi^\dagger\psi} \quad \text{és} \quad \underline{\overrightarrow{j} = c\psi^\dagger\overrightarrow{\alpha}\psi} \; , \tag{135}$$

a

$$\partial_t\rho + \overrightarrow{\nabla}\overrightarrow{j} = 0 \tag{136}$$

kontinuitási egyenlet kapható. Nyilvánvaló, hogy ρ pozitív definit, tehát a Dirac egyenlet által leírt részecskére alkalmazható a kvantummechanika valószínűségi értelmezése.

A későbbiekben belátjuk, hogy a

$$j^\mu = \left(c\rho, \overrightarrow{j}\right) = c\psi^\dagger\gamma^0\gamma^\mu\psi \tag{137}$$

négyes áramsűrűségvektor kontravariáns négyesvektor és így a kontinuitási egyenlet a kovariáns

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \tag{138}$$

alakban írható, azaz tetszőleges inerciarendszerben érvényes.

1.11. A konjugált spinor, konjugált Dirac egyenlet

A fenti eredményhez eljuthatunk a Dirac egyenlet kovariáns alakjából is,

$$\gamma^\mu \partial_\mu \psi + \frac{iq}{\hbar}\gamma^\mu A_\mu \psi + i\kappa\psi = 0 \tag{139}$$

amit ismételten a hullámfüggvény komponensei szerint írunk fel,

$$\gamma^\mu_{rs}\partial_\mu \psi_s + \frac{iq}{\hbar}\gamma^\mu_{rs} A_\mu \psi_s + i\kappa\psi_r = 0 \tag{140}$$

majd konjugálunk,

$$(\gamma^\mu_{rs})^* \partial_\mu \psi^*_s - \frac{iq}{\hbar}(\gamma^\mu_{rs})^* A_\mu \psi^*_s - i\kappa\psi^*_r = 0 \tag{141}$$

$$\Downarrow \tag{142}$$

$$(\partial_\mu \psi^*_s)(\gamma^\mu)^\dagger_{sr} - \frac{iq}{\hbar} A_\mu \psi^*_s (\gamma^\mu)^\dagger_{sr} - i\kappa\psi^*_r = 0\,. \tag{143}$$

A hullámfüggvény adjungáltjával,

$$\psi^\dagger = \begin{pmatrix} \psi^*_1 & \psi^*_2 & \psi^*_3 & \psi^*_4 \end{pmatrix} \tag{144}$$

a fenti egyenlet a

$$\left(\partial_\mu \psi^\dagger\right)(\gamma^\mu)^\dagger - \frac{iq}{\hbar} A_\mu \psi^\dagger (\gamma^\mu)^\dagger - i\kappa\psi^\dagger = 0 \tag{145}$$

alakban foglalható össze. A γ^μ mátrixok adjungáltjára vonatkozó azonosságot felhasználva,

$$\left(\partial_\mu \psi^\dagger\right)\gamma^0\gamma^\mu\gamma^0 - \frac{iq}{\hbar} A_\mu \psi^\dagger \gamma^0\gamma^\mu\gamma^0 - i\kappa\psi^\dagger = 0\,, \tag{146}$$

melyet jobbról γ^0-lal beszorozva és bevezetve a

$$\overline{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0 \tag{147}$$

konjugált spinort, nyerjük a *konjugált Dirac egyenletet*:

$$\underline{\left(\partial_\mu \overline{\psi}\right)\gamma^\mu - \frac{iq}{\hbar} A_\mu \overline{\psi}\gamma^\mu - i\kappa\overline{\psi} = 0\,.} \tag{148}$$

A (139) egyenletet balról $\overline{\psi}$-sal, a (148) egyenletet jobbról ψ-vel beszorozva, majd a két egyenletet összeadva kapjuk, hogy

$$\overline{\psi}\gamma^\mu\partial_\mu\psi + \left(\partial_\mu\overline{\psi}\right)\gamma^\mu\psi = 0\,, \tag{149}$$

azaz

$$\partial_\mu\left(\overline{\psi}\gamma^\mu\psi\right) = 0\,. \tag{150}$$

illetve

$$\partial_\mu j^\mu = 0\,, \tag{151}$$

ahol

$$j^\mu = c\overline{\psi}\gamma^\mu\psi = c\psi^\dagger\gamma^0\gamma^\mu\psi\,. \tag{152}$$

1.12. A szabad elektron spektruma

Zérus vektor- és skalárpotenciál esetén a (126) egyenlet,

$$\begin{pmatrix} mc^2 I_2 & c\overrightarrow{\sigma}\overrightarrow{p} \\ c\overrightarrow{\sigma}\overrightarrow{p} & -mc^2 I_2 \end{pmatrix} \psi\left(\overrightarrow{r}\right) = E\psi\left(\overrightarrow{r}\right) \ , \tag{153}$$

megoldását kereshetjük a

$$\psi\left(\overrightarrow{r}\right) = U e^{\frac{i}{\hbar}\overrightarrow{p}\overrightarrow{r}} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}\overrightarrow{p}\overrightarrow{r}} \tag{154}$$

alakban, ahol $\overrightarrow{p}$ most az impulzusoperátor sajátértékét jelöli. Behelyettesítés után a

$$H\left(\overrightarrow{p}\right) U = E\,U \tag{155}$$

mátrix sajátértékegyenletet kapjuk, ahol

$$H\left(\overrightarrow{p}\right) = \begin{pmatrix} mc^2 I_2 & c\overrightarrow{\sigma}\overrightarrow{p} \\ c\overrightarrow{\sigma}\overrightarrow{p} & -mc^2 I_2 \end{pmatrix} \ . \tag{156}$$

Nemtriviális ($U \neq 0$) megoldás csak akkor létezik, ha a szekuláris mátrix determinánsa, $\det\left(E - H\left(\overrightarrow{p}\right)\right)$, eltűnik. Kihasználva a $\left(\overrightarrow{\sigma}\overrightarrow{p}\right)^2 = p^2 I_2$ azonosságot,

$$\left(E - mc^2\right)\left(E + mc^2\right) - c^2 p^2 = 0 \ . \tag{157}$$

Innen a szabad részecske energiája

$$E = \pm\sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2} \tag{158}$$

értékeket vehet fel, csakúgy mint a Klein-Gordon egyenlet esetében.

A megoldásokat részletesen a gyakorlaton vizsgáljuk: itt csak annyit jegyzünk meg, hogy $\overrightarrow{p} = 0$ esetén (álló részecske) mindkét pozitív és mindkét negatív energiás megoldásokból a koordinátarendszer bármely tengelyére vonatkoztatva határozott, $\pm 1/2$ spinű állapotok keverhetők ki, mivel a Hamilton operátor mátrixa felcserélhető a Pauli mátrixokkal:

$$\left[\begin{pmatrix} mc^2 I_2 & 0 \\ 0 & -mc^2 I_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix}\right] = 0 \quad (i = x, y, z) \ . \tag{159}$$

1.13. Nem-relativisztikus közelítés: kinetikus energia korrekció, spin-pálya kölcsönhatás és a Darwin-tag

Ebben a fejezetben $1/c^2$-tel arányos korrekciókat találunk a Pauli-Schrödinger egyenlethez. A

$$\left[c\overrightarrow{\alpha}\left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right) + q\phi + \beta mc^2\right]\psi = E\psi \tag{160}$$

stacionárius Dirac egyenlet megoldását bontsuk fel két (egyenként két-komponensű) részre,

$$\psi = \begin{pmatrix} \chi \\ \varphi \end{pmatrix} \ , \tag{161}$$

ahol χ és φ az ún. nagy- és kiskomponens. Írjuk ki részletesen a (160) egyenletet:

$$\begin{pmatrix} E - mc^2 - q\phi & -c\vec{\sigma}\vec{K} \\ -c\vec{\sigma}\vec{K} & E + mc^2 - q\phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi \\ \varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$
$$\Downarrow$$
$$\left(E - mc^2 - q\phi\right)\chi - c\vec{\sigma}\vec{K}\varphi = 0 \quad , \tag{162}$$
$$\left(E + mc^2 - q\phi\right)\varphi - c\vec{\sigma}\vec{K}\chi = 0 \quad . \tag{163}$$

A φ kiskomponens kifejezhető a (163) egyenletből,

$$\varphi = \left(E + mc^2 - q\phi\right)^{-1} c\vec{\sigma}\vec{K}\chi \, . \tag{164}$$

Pozitív energiás megoldásokra szorítkozva, először éljünk az $E + mc^2 - q\phi \simeq 2mc^2$ közelítéssel:

$$\varphi = \frac{1}{2mc}\vec{\sigma}\vec{K}\chi \, . \tag{165}$$

Ezt visszahelyettesítve a (162) egyenletbe és bevezetve az $E' = E - mc^2$ jelölést, valamint alkalmazva a $(\vec{\sigma}\vec{a})\left(\vec{\sigma}\vec{b}\right) = \vec{a}\vec{b} + i\left(\vec{a} \times \vec{b}\right)\vec{\sigma}$ és $\vec{K} \times \vec{K} = -\frac{\hbar q}{i}\vec{B}$ összefüggéseket,

$$\left[E' - q\phi - \frac{1}{2m}\left(\vec{\sigma}\vec{K}\right)\left(\vec{\sigma}\vec{K}\right)\right]\chi = \left[E' - q\phi - \frac{1}{2m}\vec{K}^2 - \frac{i}{2m}\left(\vec{K} \times \vec{K}\right)\vec{\sigma}\right]\chi \tag{166}$$
$$= \left[E' - q\phi - \frac{\vec{K}^2}{2m} + \frac{\hbar q}{2m}\vec{B}\vec{\sigma}\right]\chi = 0 \, , \tag{167}$$

a χ nagykomponensre a szokásos Pauli-Schrödinger egyenletet kapjuk a spin-paramágneses járulékot is beleértve,

$$E'\chi = H_P\,\chi \, , \tag{168}$$

ahol bevezettük a Pauli-Schrödinger Hamilton operátort,

$$H_P = \frac{1}{2m}\left(\vec{\sigma}\vec{K}\right)\left(\vec{\sigma}\vec{K}\right) + q\phi = \frac{\vec{K}^2}{2m} + q\phi - \frac{\hbar q}{2m}\vec{B}\vec{\sigma} \, . \tag{169}$$

Lépjünk túl ezen a közelítésen! A

$$\begin{aligned} \varphi &= \frac{1}{2mc^2}\left(1 + \frac{E' - q\phi}{2mc^2}\right)^{-1} c\vec{\sigma}\vec{K}\chi \\ &\simeq \frac{1}{2mc^2}\left(1 - \frac{E' - q\phi}{2mc^2}\right) c\vec{\sigma}\vec{K}\chi \, , \end{aligned} \tag{170}$$

kifejezést ismételten visszahelyettesítve a (162) egyenletbe kapjuk, hogy

$$\left(E' - q\phi\right)\chi = \frac{1}{2m}\vec{\sigma}\vec{K}\left(1 - \frac{E' - q\phi}{2mc^2}\right)\vec{\sigma}\vec{K}\chi \, , \tag{171}$$

ill. a fenti egyenlete átrendezve és kihasználva H_P definícióját,

$$
\begin{aligned}
E'\chi &= H_P\chi - \frac{1}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\vec{K}\ \left(E'-q\phi\right)\ \vec{\sigma}\vec{K}\ \chi \\
&= H_P\chi - \frac{1}{4m^2c^2}\left(\vec{\sigma}\vec{K}\right)\left(\vec{\sigma}\vec{K}\right)\left(E'-q\phi\right)\chi - \frac{1}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\vec{K}\left[E'-q\phi, \vec{\sigma}\vec{K}\right]\chi \\
&= H_P\chi - \frac{1}{2mc^2}\left(H_P-q\phi\right)\left(E'-q\phi\right)\chi - \frac{1}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\vec{K}\left[\vec{\sigma}\vec{K}, q\phi\right] \ .
\end{aligned}
\tag{172}
$$

A (172) egyenlet második tagja $1/c^2$ rendig közelíthető mint

$$
H_M \equiv -\frac{1}{2mc^2}\left(H_P-q\phi\right)^2\chi \simeq -\frac{1}{8m^3c^2}K^4\chi \quad , \tag{173}
$$

ahol a mágneses teret tartalmazó járulékokat figyelmen kívűl hagytuk. Ez a járulék a *relativisztikus tömegnövekedést* (kinetikus energia korrekciót) írja le, hiszen

$$
E'-q\phi = \sqrt{m^2c^4+K^2c^2} - mc^2 \simeq \frac{K^2}{2m} - \frac{1}{8m^3c^2}K^4 + \dots \tag{174}
$$

Nézzük meg, hogy ez a korrekció mennyiben befolyásolja a hidrogén atom energiaszintjeit az időfüggetlen perturbációszámítás elsőrendjében:

$$
H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} \quad , \quad E_n^{(0)} = -\frac{m\left(Ze^2\right)^2}{2\hbar^2n^2} = -\frac{mc^2\left(Z\alpha\right)^2}{2n^2} \quad , \tag{175}
$$

ahol $\alpha = e^2/\hbar c = \hbar/mca_0$ a finomszerkezeti állandó,

$$
\begin{aligned}
H_1 &= -\frac{p^4}{8m^3c^2} = -\frac{1}{2mc^2}\left(H_0 + \frac{Ze^2}{r}\right)^2 \\
&= -\frac{1}{2mc^2}\left(H_0^2 + 2H_0\frac{Ze^2}{r} + \frac{\left(Ze^2\right)^2}{r^2}\right) \ .
\end{aligned}
\tag{176}
$$

Innen

$$
\begin{aligned}
\delta E_{n\ell m}^{(1)} &= \langle n\ell m\,|H_1|\,n\ell m\rangle \\
&= -\frac{1}{2mc^2}\left(\left(E_n^{(0)}\right)^2 + 2E_n^{(0)}\underbrace{\left\langle\frac{Ze^2}{r}\right\rangle_{n\ell m}}_{-2E_n^{(0)}} + Z^2e^4\ \underbrace{\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{n\ell m}}_{Z^2/\left[a_0^2n^3(\ell+1/2)\right]}\right) \\
&= -\frac{1}{2mc^2}\left(-\frac{3}{4}m^2c^4\alpha^4\frac{Z^4}{n^4} + \alpha^4m^2c^4Z^4\frac{1}{n^3\left(\ell+1/2\right)}\right) = \\
&= \underbrace{-\frac{mc^2}{2}\left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2}_{E_n^{(0)}}\left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2\left(\frac{n}{\ell+1/2} - \frac{3}{4}\right) \quad ,
\end{aligned}
\tag{177}
$$

azaz a korrekció α^2 nagyságrendű és a főhéjak mellékkvantumszám (ℓ) szerinti felhasadását eredményezi. Ez az eredmény egyébként megegyezik a Klein-Gordon egyenletből kapott sajátenergia $1/c^2$ rendű közelítésével.

Foglalkozzunk most a (172) egyenlet harmadik tagjával:

$$-\frac{1}{4m^2c^2}\left(\overrightarrow{\sigma}\overrightarrow{K}\right)\left(\overrightarrow{\sigma}\left[\overrightarrow{K},q\phi\right]\right)=-\frac{1}{4m^2c^2}\overrightarrow{K}\left[\overrightarrow{K},q\phi\right]-\frac{i}{4m^2c^2}\overrightarrow{\sigma}\left(\overrightarrow{K}\times\left[\overrightarrow{K},q\phi\right]\right) \tag{178}$$

A jobboldalon álló első kifejezés az ún. *Darwin tag*hoz ad járulékot, mellyel a későbbiekben foglalkozunk. A (178) kifejezés második tagját tovább alakítjuk,

$$\left(\overrightarrow{K}\times\left[\overrightarrow{K},q\phi\right]\right)_i=\varepsilon_{ijk}K_j\left[K_k,q\phi\right]=\underbrace{[\underbrace{\varepsilon_{ijk}K_jK_k}_{-\frac{\hbar q}{ic}B_i},q\phi]}_{=0}-\varepsilon_{ijk}\left[K_j,q\phi\right]K_k$$

$$=-(\underbrace{\left[\overrightarrow{K},q\phi\right]}_{=\left[\overrightarrow{p},q\phi\right]}\times\overrightarrow{K})_i$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{i}{4m^2c^2}\overrightarrow{\sigma}\left(\left[\overrightarrow{p},q\phi\right]\times\overrightarrow{K}\right)=\frac{\hbar}{4m^2c^2}\overrightarrow{\sigma}\left(\left[\overrightarrow{\nabla}(q\phi)\right]\times\overrightarrow{K}\right)\quad .$$

Stacionárius elektromágneses térre szorítkozva, ezt a korrekciót

$$H_{sp}=-\frac{\hbar}{4m^2c^2}\overrightarrow{\sigma}\left(q\overrightarrow{\mathcal{E}}\times\overrightarrow{K}\right) \tag{179}$$

alakban írhatjuk, amit a *spin-pálya kölcsönhatás*sal azonosítunk. Centrális potenciálra

$$\overrightarrow{\mathcal{E}}=-\overrightarrow{\nabla}\phi(r)=-\frac{d\phi(r)}{dr}\frac{1}{r}\overrightarrow{r} \tag{180}$$

és zérus mágneses tér esetén,

$$H_{sp}=\frac{\hbar q}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{d\phi(r)}{dr}\overrightarrow{\sigma}\left(\overrightarrow{r}\times\overrightarrow{p}\right)=\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{d\left(q\phi(r)\right)}{dr}\overrightarrow{L}\overrightarrow{S}\ , \tag{181}$$

adódik, amit az $\overrightarrow{M}_L=-\frac{e}{2m}\overrightarrow{L}$ pálya-mágneses momentum és $\overrightarrow{M}_S=-\frac{e}{m}\overrightarrow{S}$ spin-mágneses momentum operátorok segítségével ($q=-e,\ V(r)=q\phi(r)$) átírhatunk a

$$H_{sp}=\frac{1}{c^2e^2}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\overrightarrow{M}_L\overrightarrow{M}_S \tag{182}$$

formába. Ennek elsősorban nagyobb rendszámú elemek esetén ill. szilárdtestekben a kötött (atommaghoz közeli) pályák spin-pálya $\left(j=\ell\pm\frac{1}{2}\right)$ felhasadásában van szerepe. Mágneses anyagokban ugyancsak elsősorban a spin-pálya kölcsönhatás felelős az ún. magnetokristályos anizotrópia jelenségéért.

Vizsgáljuk meg a H-atom energiaszintjeinek korrekcióját spin-pálya kölcsönhatás következtében a perturbációszámítás elsőrendjében. Ehhez a

$$H_1=\frac{Ze^2}{2m^2c^2}\frac{1}{r^3}\overrightarrow{L}\overrightarrow{S} \tag{183}$$

perturbáló operátort átírjuk a

$$H_1 = \frac{Ze^2}{4m^2c^2}\frac{1}{r^3}\left(J^2 - L^2 - S^2\right) \tag{184}$$

alakra és a perturbálatlan hullámfüggvényeket a J^2, J_z, L^2, és S^2 közös sajátfüggvényeiként vesszük föl,

$$|n,\ell,j,m_j\rangle = \sum_{m_s=\pm\frac{1}{2}} C\left(j,m_j;\ell,m_\ell\frac{1}{2}m_s\right)\left|n;\ell,m_\ell,\frac{1}{2}m_s\right\rangle\left|\frac{1}{2},m_s\right\rangle\ , \tag{185}$$

ahol $C\left(j,m_j;\ell,m_\ell\frac{1}{2}m_s\right)$a Clebsh-Gordan együtthatók és $j=\ell\pm\frac{1}{2}$. Ekkor,

$$\delta E^{(1)}_{n,\ell,j,m_j} = \frac{Z\hbar^2e^2}{4m^2c^2}\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle_{n\ell}\left(j\,(j+1)-\ell\,(\ell+1)-\frac{3}{4}\right)\ , \tag{186}$$

valamint

$$\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle_{n\ell} = \left(\frac{Z}{na_0}\right)^3\frac{1}{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)\ell\,(\ell+1)} \tag{187}$$

felhasználásával,

$$\delta E^{(1)}_{n,\ell,j,m_j} = \underbrace{\frac{Z\hbar^2e^2}{2m^2c^2n}\left(\frac{Z}{na_0}\right)^3}_{-E_n^{(0)}\left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2} n\frac{j\,(j+1)-\ell\,(\ell+1)-\frac{3}{4}}{(2\ell+1)\,\ell\,(\ell+1)}\ . \tag{188}$$

Némi algebrai átalakítás után,

$$\begin{aligned}\frac{j\,(j+1)-\ell\,(\ell+1)-\frac{3}{4}}{(2\ell+1)\,\ell\,(\ell+1)} &\underset{j=\ell+\frac{1}{2}}{=} \frac{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)\left(\ell+\frac{3}{2}\right)-\ell\,(\ell+1)-\frac{3}{4}}{(2\ell+1)\,\ell\,(\ell+1)} = \frac{1}{(2\ell+1)\,(\ell+1)}\\ &= \frac{1}{\ell+\frac{1}{2}}-\frac{1}{\ell+1} = \frac{1}{\ell+\frac{1}{2}}-\frac{1}{j+\frac{1}{2}}\ ,\end{aligned} \tag{189}$$

$$\begin{aligned}\frac{j\,(j+1)-\ell\,(\ell+1)-\frac{3}{4}}{(2\ell+1)\,\ell\,(\ell+1)} &\underset{j=\ell-\frac{1}{2}}{=} \frac{\left(\ell-\frac{1}{2}\right)\left(\ell+\frac{1}{2}\right)-\ell\,(\ell+1)-\frac{3}{4}}{(2\ell+1)\,\ell\,(\ell+1)} = -\frac{1}{(2\ell+1)\,\ell}\\ &= \frac{1}{\ell+\frac{1}{2}}-\frac{1}{\ell} = \frac{1}{\ell+\frac{1}{2}}-\frac{1}{j+\frac{1}{2}}\ ,\end{aligned} \tag{190}$$

$$\delta E^{(1)}_{n,\ell,j,m_j} = -E_n^{(0)}\left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2\left(\frac{n}{\ell+\frac{1}{2}}-\frac{n}{j+\frac{1}{2}}\right)\ . \tag{191}$$

Ezt az eredményt összevonva az energiaszintek relativisztikus kinetikus energiakorrekciójával, adódik, hogy

$$\delta E^{(1)}_{n,\ell,j,m_j} = E_n^{(0)}\left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2\left(\frac{n}{j+1/2}-\frac{3}{4}\right)\ , \tag{192}$$

ami megegyezik a H-atom Dirac egyenletből számolt sajátenergiájának $1/c^2$-rendű korrekciójával. A fenti levezetés azonban $\ell=0$ esetén nem érvényes, mivel akkor $\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle_{n\ell}\sim\frac{1}{\ell}$ divergál. Véges méretű atommagot feltételezve $\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle_{n\ell}$ véges, de az $\overrightarrow{L}\,\overrightarrow{S}$ operátor mátrixeleme zérus, így a spin-pálya kölcsönhatás az s-pályák energiáját nem változtatja meg a perturbációszámítás első rendjében.

1.13.1. A normálás szerepe

A továbbiakban szorítkozzunk a zérus mágneses tér esetére. A Pauli-Schrödinger egyenlet relativisztikus korrekcióira tett fenti meggondolások akkor lennének maradéktalanul érvényesek, ha a χ nagykomponenst tekinthetnénk az elektron állapotát meghatározó normált hullámfüggvénynek. Nem szabad azonban elfelednünk, hogy a teljes (négykomponensű) hullámfüggvényt kell normálnunk, azaz

$$\int d^3r\ \psi^+\psi = \int d^3r\ \left(\chi^+\chi + \varphi^+\varphi\right) = 1 \quad . \tag{193}$$

A kiskomponens normája

$$\begin{aligned}\int d^3r\ \varphi^+\varphi &\simeq \frac{1}{4m^2c^2}\int d^3r\ \chi^+ \left(\overrightarrow{\sigma}\overrightarrow{p}\right)\left(\overrightarrow{\sigma}\overrightarrow{p}\right)\chi \\ &\simeq \frac{1}{4m^2c^2}\int d^3r\ \chi^+p^2\chi \quad ,\end{aligned} \tag{194}$$

ezért

$$1 = \int d^3r\ \chi^+\left(1+\frac{p^2}{4m^2c^2}\right)\chi = \int d^3r\ \chi_S^+\chi_S \quad , \tag{195}$$

ahol a normált nagykomponenst χ_S-sel jelöltük. $1/c^2$ rendben:

$$\chi_S = \left(1+\frac{p^2}{8m^2c^2}\right)\chi \quad \Longrightarrow \quad \chi = \left(1-\frac{p^2}{8m^2c^2}\right)\chi_S \quad . \tag{196}$$

Ez azt jelenti, hogy egy normált (kétkomponensű) hullámfüggvénnyel dolgozva a hiányzó kiskomponens (φ) normáját az $1-\frac{p^2}{8m^2c^2}$ operátor hatásával vehetjük figyelembe $1/c^2$ rendig. Vegyük észre, hogy ezzel az eljárással valójában egy $\frac{1}{c^2}$-rendű *unitér transzformációt* hajtottunk végre a négykomponensű ψ és $\begin{pmatrix}\chi_S\\0\end{pmatrix}$ függvények között.

Az előző fejezetben levezetett $1/c^2$-rendű Hamilton operátort H-val jelölve,

$$E'\chi = H\chi\ , \tag{197}$$

következik, hogy

$$E'\chi_S = \left(1+\frac{p^2}{8m^2c^2}\right)H\left(1-\frac{p^2}{8m^2c^2}\right)\chi_S \quad , \tag{198}$$

amiből ugyancsak $1/c^2$ rendig az

$$E'\chi_S \simeq \left(H + \left[\frac{p^2}{8m^2c^2}, H\right]\right)\chi_S \tag{199}$$

egyenletet kapjuk. Látható, hogy az egyetlen újabb $1/c^2$-rendű korrekcióhoz akkor jutunk, ha a kommutátorba H helyett a $q\phi$ operátort helyettesítjük, mivel a többi járulék vagy kiesik vagy $1/c^2$-ben magasabb rendű korrekciót szolgáltat. Kezeljük ezt a tagot együtt a (178) jobboldalának első tagjával ($\overrightarrow{K}$-t $\overrightarrow{p}$-vel helyettesítve):

$$H_D = -\frac{1}{4m^2c^2}\overrightarrow{p}\left[\overrightarrow{p}, q\phi\right] + \frac{1}{8m^2c^2}\left[p^2, q\phi\right] = \frac{1}{8m^2c^2}\left(\left[\overrightarrow{p}, q\phi\right]\overrightarrow{p} - \overrightarrow{p}\left[\overrightarrow{p}, q\phi\right]\right) \tag{200}$$

$$= -\frac{1}{8m^2c^2}\left[\overrightarrow{p},\left[\overrightarrow{p}, q\phi\right]\right] = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\left[\overrightarrow{\nabla},\left[\overrightarrow{\nabla}, q\phi\right]\right] = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\Delta\left(q\phi\right)\ , \tag{201}$$

amit *Darwin-tag*nak nevezünk, melynek nincsen klasszikus magyarázata. Eredete arra vezethető vissza, hogy az elektron nem tekinthető pontszerű részecskének, hanem egy h/mc (Compton hullámhossz) lineáris méretű tértartományban 'rezeg' (Zitterbewegung). A Zitterbewegung a pozitív és negatív energiás állapotok közötti interferencia következménye: a klasszikus elmélet erről valóban nem ad számot. Mivel a $q\phi = -Ze^2/r$ Coulomb potenciálra,

$$H_D\left(\overrightarrow{r}\right) = \frac{Ze^2\hbar^2\pi}{2m^2c^2}\,\delta\left(\overrightarrow{r}\right) \ , \tag{202}$$

$$\delta E^{(1)}_{n\ell m} = \int d^3r\,\psi_{n\ell m}\left(\overrightarrow{r}\right)^* H_D\left(\overrightarrow{r}\right)\psi_{n\ell m}\left(\overrightarrow{r}\right) = \frac{Ze^2\hbar^2\pi}{2m^2c^2}|\psi_{n\ell m}\left(0\right)|^2 \ , \tag{203}$$

ami csak az s-pályák esetén zérustól különböző:

$$\psi_{n00}\left(0\right) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}2\left(\frac{Z}{na_0}\right)^{3/2} \to |\psi_{n00}\left(0\right)|^2 = \frac{1}{\pi}\left(\frac{Z}{na_0}\right)^3 \ ,$$

amiből

$$\delta E^{(1)}_{n00} = \frac{Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2}\left(\frac{Z}{na_0}\right)^3 = \left(\frac{\hbar^2 Z^2}{2ma_0^2n^2}\right)^2\frac{2n}{mc^2}\frac{e^2m}{\hbar^2}a_0 = \left(E_n^{(0)}\right)^2\frac{2n}{mc^2}. \tag{204}$$

Összefoglalva tehát, a Dirac egyenlet $1/c^2$-rendű sorfejtésével a

$$\left(H_P + H_M + H_D + H_{sp}\right)\chi = \left(E - mc^2\right)\chi \tag{205}$$

sajátértékegyenlethez jutottunk, ahol χ a normált kétkomponensű hullámfüggvény,

$$H_P = \frac{1}{2m}\overrightarrow{K}^2 - \frac{\hbar q}{2m}\overrightarrow{B}\,\overrightarrow{\sigma} + q\phi \ , \tag{206}$$

a Pauli-Schrödinger Hamilton operátor,

$$H_M = -\frac{1}{8m^3c^2}K^4 \ , \tag{207}$$

a kinetikus energia relativisztikus tömegnövekedés következtében fellépő korrekciója,

$$H_D = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\Delta\left(q\phi\right) \ , \tag{208}$$

a Darwin tag, mely a potenciális energia klasszikus analógiával nem rendelkező korrekciója és

$$H_{sp} = -\frac{\hbar q}{4m^2c^2}\overrightarrow{\sigma}\left(\overrightarrow{\mathcal{E}}\times\overrightarrow{K}\right) \tag{209}$$

a spin-pálya kölcsönhatás.

1.13.2. A nemrelativisztikus áramsűrűség származtatása

Nézzük meg, hogy mi a kapcsolat a relativisztikusan származtatott áramsűrűség és annak korábban megismert nemrelativisztikus formája között. Most csak a vezető rendű tagokat vizsgáljuk, ezért elegendő használnunk a

$$\varphi \simeq \frac{\overrightarrow{\sigma}\overrightarrow{K}}{2mc}\chi \tag{210}$$

közelítést. Ezért

$$\vec{j} = c\psi^\dagger \vec{\alpha}\psi = c\left(\chi^\dagger, \varphi^\dagger\right) \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi \\ \varphi \end{pmatrix} = c\left(\chi^\dagger \vec{\sigma}\varphi + \varphi^\dagger \vec{\sigma}\chi\right)$$
$$= \frac{1}{2m}\left(\chi^\dagger \vec{\sigma}\left(\vec{\sigma}\vec{K}\right)\chi + \left[\left(\vec{K}\chi\right)^\dagger \vec{\sigma}\right]\vec{\sigma}\chi\right) \quad . \tag{211}$$

$$\sigma_i\left(\vec{\sigma}\vec{K}\right) = \sigma_i\sigma_j K_j = \left(\delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k\right)K_j = K_i + i\left(\vec{K}\times\vec{\sigma}\right)_i$$
$$\left(\vec{K}\chi\right)^\dagger \vec{\sigma}\sigma_i = \left(K_j\chi\right)^\dagger \sigma_j\sigma_i = \left(K_i\chi\right)^\dagger - i\left[\left(\vec{K}\chi\right)^\dagger \times \vec{\sigma}\right]_i$$

$$\Downarrow$$

$$\vec{j} = \frac{1}{2m}\left(\chi^\dagger \vec{K}\chi + \left(\vec{K}\chi\right)^\dagger \chi\right) + \frac{i}{2m}\left(\chi^\dagger\left(\vec{K}\times\vec{\sigma}\right)\chi - \left(\vec{K}\chi\right)^\dagger \times \vec{\sigma}\chi\right) . \tag{212}$$

Az első tag:

$$\underline{j}_{nr} \equiv \frac{1}{m}\,\mathrm{Re}\left(\chi^\dagger \vec{K}\chi\right) = \frac{\hbar}{2im}\chi^\dagger\left[\overrightarrow{\nabla} - \overleftarrow{\nabla}\right]\chi - \frac{q}{m}\chi^\dagger \underline{A}\chi\,, \tag{213}$$

megegyezik a nemrelativisztikus eredménnyel.

A második tag:

$$\chi^\dagger\left(\vec{K}\times\vec{\sigma}\right)\chi = \frac{\hbar}{i}\chi^\dagger\left(\overrightarrow{\nabla}\times\vec{\sigma}\right)\chi - q\chi^\dagger\left(\vec{A}\times\vec{\sigma}\right)\chi$$

$$\left(\vec{K}\chi\right)^\dagger \times \vec{\sigma}\chi = -\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}\chi^\dagger \times \vec{\sigma}\chi - q\chi^\dagger\left(\vec{A}\times\vec{\sigma}\right)\chi$$

$$\Downarrow$$

$$\underline{j}_m \equiv \frac{i}{2m}\left(\chi^\dagger\left(\vec{K}\times\vec{\sigma}\right)\chi - \left(\vec{K}\chi\right)^\dagger \times \vec{\sigma}\chi\right)$$
$$= \frac{\hbar}{2m}\left(\chi^\dagger\left(\overrightarrow{\nabla}\times\vec{\sigma}\right)\chi + \overrightarrow{\nabla}\chi^\dagger \times \vec{\sigma}\chi\right)$$
$$= \frac{\hbar}{2m}\overrightarrow{\nabla}\times\left(\chi^\dagger\vec{\sigma}\chi\right) = -\frac{1}{e}\overrightarrow{\nabla}\times\chi^\dagger \vec{M}_S\chi \tag{214}$$

új járulékot jelent, mely a spin-mágnesezettséghez kapcsolódik $\left(\vec{M}_S = -\frac{\hbar e}{2m}\vec{\sigma}\right)$. A megfelelő töltésáram

$$-e\,\vec{j}_m\left(\vec{r},t\right) = \mathrm{rot}\,\vec{M}_S\left(\vec{r},t\right) \quad , \tag{215}$$

ahol

$$\vec{M}_S\left(\vec{r},t\right) = \chi^\dagger\left(\vec{r},t\right)\vec{M}_S\,\chi\left(\vec{r},t\right) \tag{216}$$

az elektron spinje miatt fellépő mágnesezettség sűrűség.

1.14. A Dirac egyenlet Lorentz invarianciája

Írjuk fel a

$$\left(\gamma^{\mu}\left(i\hbar\partial_{\mu}-qA_{\mu}(\mathsf{x})\right)-mc\right)\psi(\mathsf{x})=0 \tag{217}$$

Dirac egyenletet a

$$\mathsf{\Lambda}=e^{\omega}\ ,\ \omega^{T}\mathsf{g}=-\mathsf{g}\omega\ ,\ \omega_{\mu\nu}=-\omega_{\nu\mu}\ , \tag{218}$$

homogén Lorentz transzformáció

$$x'^{\mu}=\Lambda^{\mu}_{\cdot\nu}\,x^{\nu},\ \partial_{\mu}=\frac{\partial x'^{\nu}}{\partial x^{\mu}}\partial'_{\nu}=\partial'_{\nu}\Lambda^{\nu}_{\cdot\mu}=\left(\Lambda^{T}\right)_{\mu}^{\cdot\nu}\partial'_{\nu}\ \rightarrow\ \partial'_{\mu}=\overline{\Lambda}_{\mu}^{\cdot\nu}\partial_{\nu} \tag{219}$$

$$A'_{\mu}(\mathsf{x}')=\overline{\Lambda}_{\mu}^{\cdot\nu}A_{\nu}(\mathsf{x})\ , \tag{220}$$

alkalmazásával:

$$\left(\gamma^{\mu}\left(i\hbar\partial'_{\mu}-qA'_{\mu}(\mathsf{x}')\right)-mc\right)\psi'(\mathsf{x}')=0 \tag{221}$$

$$\Downarrow$$

$$\left[\gamma^{\mu}\left(\overline{\mathsf{\Lambda}}\right)_{\mu}^{\cdot\nu}\left(i\hbar\partial_{\nu}-qA_{\nu}(\mathsf{x})\right)-mc\right]\psi'(\mathsf{x}')=0\ . \tag{222}$$

ahol $\psi'(\mathsf{x}')$ a transzformált hullámfüggvény. Bevezetve a hullámfüggvény $\mathcal{S}(\mathsf{\Lambda})$ transzformációját, melyet a γ^{μ}-hez hasonlóan 4×4-es mátrixszal reprezentálunk,

$$\psi'(\mathsf{x}')=\mathcal{S}(\mathsf{\Lambda})\ \psi(\mathsf{x})\ , \tag{223}$$

a (222) egyenletet a

$$\left[\gamma^{\mu}\,\overline{\Lambda}_{\mu}^{\cdot\nu}\left(i\hbar\partial_{\nu}-qA_{\nu}(\mathsf{x})\right)-mc\right]\mathcal{S}(\mathsf{\Lambda})\ \psi(\mathsf{x})=0 \tag{224}$$

alakban írhatjuk. A (217) egyenlet segítségével eliminálva az $mc\,\mathcal{S}(\mathsf{\Lambda})\,\psi(\mathsf{x})$ tagot a

$$\left(\gamma^{\mu}\,\overline{\Lambda}_{\mu}^{\cdot\nu}\mathcal{S}(\mathsf{\Lambda})-\mathcal{S}(\mathsf{\Lambda})\,\gamma^{\nu}\right)\left(i\hbar\partial_{\nu}-qA_{\nu}(\mathsf{x})\right)\psi(\mathsf{x})=0 \tag{225}$$

összefüggést nyerjük. Tetszőleges hullámfüggvény és négyespotenciál esetén ez csak úgy teljesülhet, ha megköveteljük a

$$\gamma^{\mu}\,\overline{\Lambda}_{\mu}^{\cdot\nu}\mathcal{S}(\mathsf{\Lambda})-\mathcal{S}(\mathsf{\Lambda})\,\gamma^{\nu}=0 \tag{226}$$

egyenlőséget, illetve

$$\mathcal{S}(\mathsf{\Lambda})^{-1}\ \gamma^{\mu}\,\mathcal{S}(\mathsf{\Lambda})\ \overline{\Lambda}_{\mu}^{\cdot\nu}=\gamma^{\nu}\ . \tag{227}$$

Kihasználva, hogy $\mathsf{\Lambda}^{T}=\overline{\mathsf{\Lambda}}^{-1}$, a fenti összefüggés a következőképpen alakítható:

$$\begin{aligned}&\mathcal{S}(\mathsf{\Lambda})^{-1}\gamma^{\mu'}\,\mathcal{S}(\mathsf{\Lambda})\ \overline{\Lambda}_{\mu'}^{\cdot\nu}\left(\Lambda^{T}\right)_{\nu}^{\cdot\mu}=\mathcal{S}(\mathsf{\Lambda})^{-1}\gamma^{\mu'}\,\mathcal{S}(\mathsf{\Lambda})\ \delta_{\mu'}^{\cdot\mu}=\\&\underline{\mathcal{S}(\mathsf{\Lambda})^{-1}\gamma^{\mu}\,\mathcal{S}(\mathsf{\Lambda})}=\gamma^{\nu}\left(\Lambda^{T}\right)_{\nu}^{\cdot\mu}\ \underline{=\Lambda^{\mu}_{\cdot\nu}\gamma^{\nu}}\,.\end{aligned} \tag{228}$$

Állítás: A (228) egyenlet megoldása

$$\underline{\mathcal{S}(\mathsf{\Lambda})=e^{\frac{1}{4}\omega_{\mu\nu}\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}}} \tag{229}$$

Bizonyítás: Vezessük be az infinitezimális τ mátrixot,

$$\mathcal{S}(\Lambda) = e^{-\tau} \ . \tag{230}$$

Az ismert Hausdorff kifejtés szerint,

$$e^{\tau}\gamma^{\mu}e^{-\tau} = \gamma^{\mu} + [\tau, \gamma^{\mu}] + \frac{1}{2!}[\tau, [\tau, \gamma^{\mu}]] + \frac{1}{3!}[\tau, [\tau, [\tau, \gamma^{\mu}]]] + \dots \ . \tag{231}$$

Ugyanakkor

$$\Lambda^{\mu}_{\ \boldsymbol{.}\nu}\gamma^{\nu} = \left(e^{\omega}\right)^{\mu}_{\ \boldsymbol{.}\nu}\gamma_{\nu} = \gamma^{\mu} + \omega^{\mu}_{\ \boldsymbol{.}\nu}\gamma^{\nu} + \frac{1}{2!}\left(\omega^{2}\right)^{\mu}_{\ \boldsymbol{.}\nu}\gamma^{\nu} + \frac{1}{3!}\left(\omega^{3}\right)^{\mu}_{\ \boldsymbol{.}\nu}\gamma^{\nu} + \dots \ . \tag{232}$$

Könnyen belátható, hogy a két fenti sorfejtés azonosságát a második, azaz elsőrendben infinitezimális tagok egyenlősége,

$$[\tau, \gamma^{\mu}] = \omega^{\mu}_{\ \boldsymbol{.}\nu}\gamma^{\nu} \ , \tag{233}$$

biztosítja. Ugyanis ekkor teljes indukcióval bizonyítható, hogy

$$\underbrace{[\tau, [\tau, \dots [\tau, \gamma^{\mu}]]]}_{n} = \left(\omega^{n}\right)^{\mu}_{\ \boldsymbol{.}\nu}\gamma^{\nu} \ , \tag{234}$$

ahol n az egymásba ágyazott kommutátorok számát jelöli. Mivel feltételezésünk szerint $n = 1$-re a fenti állítás teljesül, csak azt kell belátnunk, hogy

$$\begin{aligned}[\tau, \underbrace{[\tau, [\tau, \dots [\tau, \gamma^{\mu}]]]}_{n-1}] &= \left[\tau, \left(\omega^{n-1}\right)^{\mu}_{\ \boldsymbol{.}\nu}\gamma^{\nu}\right] = \left(\omega^{n-1}\right)^{\mu}_{\ \boldsymbol{.}\nu}[\tau, \gamma^{\nu}] \\ &= \left(\omega^{n-1}\right)^{\mu}_{\ \boldsymbol{.}\nu}\omega^{\nu}_{\lambda}\gamma^{\lambda} = \left(\omega^{n}\right)^{\mu}_{\ \boldsymbol{.}\lambda}\gamma^{\lambda} \ . \end{aligned} \tag{235}$$

Ezek után bizonyítjuk, hogy a (233) egyenlet megoldása $\tau = -\frac{1}{4}\omega_{\mu\nu}\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}$. A γ^{μ} mátrixok antikommutációs relációja alapján ugyanis:

$$\begin{aligned}\tau\gamma^{\mu} &= -\frac{1}{4}\omega_{\lambda\delta}\gamma^{\lambda}\gamma^{\delta}\gamma^{\mu} = \frac{1}{4}\omega_{\lambda\delta}\gamma^{\lambda}\gamma^{\mu}\gamma^{\delta} - \frac{1}{2}\omega_{\lambda\delta}\gamma^{\lambda}g^{\mu\delta} \\ &= -\frac{1}{4}\omega_{\lambda\delta}\gamma^{\mu}\gamma^{\lambda}\gamma^{\delta} + \frac{1}{2}\omega_{\lambda\delta}\gamma^{\delta}g^{\lambda\mu} - \frac{1}{2}\omega_{\lambda\delta}\gamma^{\lambda}g^{\mu\delta} \\ &= \gamma^{\mu}\tau + \frac{1}{2}\omega_{\lambda\delta}\gamma^{\delta}g^{\lambda\mu} + \frac{1}{2}g^{\mu\delta}\omega_{\delta\lambda}\gamma^{\lambda} = \gamma^{\mu}\tau + \omega^{\mu}_{\ \boldsymbol{.}\lambda}\gamma^{\lambda} \ , \end{aligned} \tag{236}$$

ahol felhasználtuk, hogy $\omega_{\lambda\delta} = -\omega_{\delta\lambda}$ és $g^{\lambda\mu} = g^{\mu\lambda}$. Ezzel az állítást bizonyítottuk.

Mivel

$$\frac{1}{4}\omega_{\mu\nu}\gamma^{\mu}\gamma^{\nu} = \frac{1}{8}\omega_{\mu\nu}\gamma^{\mu}\gamma^{\nu} - \frac{1}{8}\omega_{\nu\mu}\gamma^{\mu}\gamma^{\nu} \tag{237}$$

$$= \frac{1}{8}\omega_{\mu\nu}\left(\gamma^{\mu}\gamma^{\nu} - \gamma^{\nu}\gamma^{\mu}\right) = \frac{1}{8}\omega_{\mu\nu}[\gamma^{\mu}, \gamma^{\nu}] \tag{238}$$

a $\mathcal{S}(\Lambda)$ spinor transzformáció a

$$\mathcal{S}(\Lambda) = e^{-\frac{i}{\hbar}\omega_{\mu\nu}\sigma^{\mu\nu}} \tag{239}$$

formában is írható, ahol

$$\sigma^{\mu\nu} = \frac{i\hbar}{8}[\gamma^{\mu}, \gamma^{\nu}] \ , \tag{240}$$

a hullámfüggvény Lorentz transzformációjának (a Lorentz transzformáció spinor ábrázolásának) infinitezimális generátora.

1.15. Fizikai mennyiségek Lorentz transzformáltja

Az O hermitikus operátorral megadott fizikai mennyiségnek egy adott ψ állapotban a Minkowski téren értelmezett sűrűsége,

$$O(\mathsf{x}) = \psi(\mathsf{x})^\dagger O \psi(\mathsf{x}) \ . \tag{241}$$

melyet a konjugált Dirac-spinor, $\overline{\psi}(\mathsf{x}) = \psi(\mathsf{x})^\dagger \gamma^0$, segítségével az

$$O(\mathsf{x}) = \overline{\psi}(\mathsf{x})\, \overline{O}\, \psi(\mathsf{x}) \ , \tag{242}$$

alakban is írhatunk, ahol

$$\overline{O} = \gamma^0 O \, . \tag{243}$$

Példa a valószínűségsűrűség és valószínűségi áramsűrűségre,

$$\varrho(\mathsf{x}) = \overline{\psi}(\mathsf{x})\, \gamma^0 \psi(\mathsf{x}) \ , \ j^k(\mathsf{x}) = c\overline{\psi}(\mathsf{x})\, \gamma^k \psi(\mathsf{x}) \ \ (k = 1, 2, 3) \ , \tag{244}$$

ill. a négyes áramsűrűségre,

$$j^\mu(\mathsf{x}) = \left(c\varrho(\mathsf{x}) \, , \overrightarrow{j}(\mathsf{x}) \right) = \overline{\psi}(\mathsf{x}) \ (c\gamma^\mu) \ \psi(\mathsf{x}) \ . \tag{245}$$

Segédtétel: Bármely Lorentz transzformációra

$$\mathcal{S}(\Lambda)^{-1} = \gamma^0 \mathcal{S}(\Lambda)^\dagger \gamma^0 \ . \tag{246}$$

Bizonyítás:

$$\gamma^0 \mathcal{S}(\Lambda)^\dagger \gamma^0 = \gamma^0 \left(e^{-\tau}\right)^\dagger \gamma^0 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \gamma^0 \left(-\tau^\dagger\right)^n \gamma^0 \tag{247}$$

Felhasználva, hogy

$$\gamma^\mu = \gamma^0 \left(\gamma^\mu\right)^\dagger \gamma^0 \, , \tag{248}$$

$$\gamma^0 \left(-\tau^\dagger\right) \gamma^0 = \frac{1}{4} \omega_{\mu\nu} \gamma^0 \left(\gamma^\nu\right)^\dagger \left(\gamma^\mu\right)^\dagger \gamma^0 = \frac{1}{4} \omega_{\mu\nu} \gamma^0 \left(\gamma^\nu\right)^\dagger \gamma^0 \gamma^0 \left(\gamma^\mu\right)^\dagger \gamma^0 \tag{249}$$

$$= \frac{1}{4} \omega_{\mu\nu} \gamma^\nu \gamma^\mu = -\frac{1}{4} \omega_{\mu\nu} \gamma^\mu \gamma^\nu = \tau \tag{250}$$

$$\Downarrow$$

$$\gamma^0 \left(-\tau^\dagger\right)^2 \gamma^0 = \left(\gamma^0 \left(-\tau^\dagger\right) \gamma^0\right)^2 = \tau^2 \ \ldots \ \gamma^0 \left(-\tau^\dagger\right)^n \gamma^0 = \tau^n \tag{251}$$

$$\Downarrow$$

$$\gamma^0 \mathcal{S}(\Lambda)^\dagger \gamma^0 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tau^n}{n!} = e^\tau = \mathcal{S}(\Lambda)^{-1} \ . \tag{252}$$

Következésképpen az $O(\mathsf{x})$ sűrűség transzformáltja,

$$\begin{aligned}
O'(\mathsf{x}') &= \psi'(\mathsf{x}')^\dagger O\,\psi'(\mathsf{x}') \\
&= [\mathcal{S}(\Lambda)\,\psi(\mathsf{x})]^\dagger O\,\mathcal{S}(\Lambda)\ \psi(\mathsf{x}) \\
&= \psi(\mathsf{x})^\dagger \mathcal{S}(\Lambda)^\dagger O\,\mathcal{S}(\Lambda)\ \psi(\mathsf{x}) \\
&= \overline{\psi}(\mathsf{x})\,\gamma^0\mathcal{S}(\Lambda)^\dagger\gamma^0\gamma^0 O\,\mathcal{S}(\Lambda)\ \psi(\mathsf{x}) \\
&= \overline{\psi}(\mathsf{x})\ \left(\mathcal{S}(\Lambda)^{-1}\gamma^0 O\mathcal{S}(\Lambda)\right)\ \psi(\mathsf{x}) \\
&= \overline{\psi}(\mathsf{x})\ \left(\mathcal{S}(\Lambda)^{-1}\overline{O}\mathcal{S}(\Lambda)\right)\ \psi(\mathsf{x})\ ,
\end{aligned} \tag{253}$$

amit úgy fogalmazhatunk meg, hogy a hullámfüggvény helyett az $\overline{O}$ operátor transzformálódik:

$$\overline{O}' = \mathcal{S}(\Lambda)^{-1}\overline{O}\mathcal{S}(\Lambda) \tag{254}$$

és ezzel

$$O'(\mathsf{x}') = \overline{\psi}(\mathsf{x})\,\overline{O}'\psi(\mathsf{x})\ . \tag{255}$$

1.15.1. A négyes áramsűrűségvektor

A (228) és (253) egyenletek alapján,

$$\begin{aligned}
j'^\mu(\mathsf{x}') &= c\overline{\psi}(\mathsf{x})\ \left(\mathcal{S}(\Lambda)^{-1}\gamma^\mu\mathcal{S}(\Lambda)\right)\ \psi(\mathsf{x}) \\
&= c\overline{\psi}(\mathsf{x})\ \left(\Lambda^\mu_{\cdot\nu}\gamma^\nu\right)\ \psi(\mathsf{x}) = \Lambda^\mu_{\cdot\nu}\left[c\overline{\psi}(\mathsf{x})\ \gamma^\nu\,\psi(\mathsf{x})\right] \\
&= \Lambda^\mu_{\cdot\nu}\,j^\nu(\mathsf{x})\ ,
\end{aligned} \tag{256}$$

tehát a négyes áramsűrűség vektorként transzformálódik. Ebből azonnal következik, hogy a $\varrho(\mathsf{x}) = \frac{1}{c}j^0(\mathsf{x})$ megtalálási valószínűségsűrűség nem invariáns a Lorentz transzformációra nézve.

Belátható továbbá, hogy a $\overline{\psi}\psi$ és $\overline{\psi}\gamma^5\psi$ skalár, $\overline{\psi}\gamma^5\gamma^\mu\psi$ vektor, valamint, hogy $\overline{\psi}\gamma^\mu\gamma^\nu\psi$ kétindexes tenzor.

1.16. Térbeli forgatások és a spin

Az $\overrightarrow{n}$ tengely körüli, óramutató járásával ellentétes irányú, φ szögű infinitezimális térbeli forgatás:

$$\overrightarrow{r}' = \overrightarrow{r} + \varphi\,\overrightarrow{n}\times\overrightarrow{r}\ , \tag{257}$$

azaz

$$x'^i = x^i + \varepsilon_{ikj}n_k x^j\varphi\,.$$

Az infinitezimális Lorentz transzformáció mátrixa tehát,

$$\omega^i_{\cdot j} = \varepsilon_{ikj}n_k\varphi \quad (i,j=1,2,3)\ , \tag{258}$$

$$\omega^\mu_{\cdot 0} = \omega^0_{\cdot\mu} = 0 \quad (\mu=0,1,2,3)\ . \tag{259}$$

Ezért a spinor-téren értelmezett infinitezimális transzformáció,

$$\frac{1}{4}\omega_{\mu\nu}\gamma^\mu\gamma^\nu = \frac{1}{4}\omega_{ij}\gamma^i\gamma^j = \frac{1}{4}\varepsilon_{ijk}\gamma^i\gamma^j n_k\varphi = -\frac{i}{\hbar}\overrightarrow{n}\overrightarrow{S}\varphi \ ,$$

ahol

$$S^k = \frac{i\hbar}{4}\varepsilon_{kij}\gamma^i\gamma^j \ , \tag{260}$$

vagy

$$\overrightarrow{S} = \frac{i\hbar}{4}\overrightarrow{\gamma} \times \overrightarrow{\gamma} \ , \tag{261}$$

illetve komponensenként kiírva,

$$S^1 = \frac{\hbar}{2}i\gamma^2\gamma^3 \ , \ S^2 = \frac{\hbar}{2}i\gamma^3\gamma^1 \ , \ S^3 = \frac{\hbar}{2}i\gamma^1\gamma^2 \ . \tag{262}$$

Vizsgáljuk meg az S^i mátrixok felcserélési relációit:

$$\left[S^1, S^2\right] = \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^2 \left[\gamma^2\gamma^3, \gamma^3\gamma^1\right] = \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^2 \left(\gamma^2\gamma^3\gamma^3\gamma^1 - \gamma^3\gamma^1\gamma^2\gamma^3\right) \tag{263}$$

$$= \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^2 \left(-\gamma^2\gamma^1 + \gamma^1\gamma^2\right) = i\hbar\frac{i\hbar}{2}\gamma^1\gamma^2 = i\hbar S^3 \ , \tag{264}$$

és ugyanígy,

$$\left[S^2, S^3\right] = i\hbar S^1 \ , \ \left[S^3, S^1\right] = i\hbar S^2 \tag{265}$$

azaz

$$\left[S^i, S^j\right] = i\hbar\varepsilon_{ijk}S^k \ . \tag{266}$$

A térbeli forgatás S^i infinitezimális generátorai a spinor-téren teljesítik a Lee-algebrát, ezért ezeket *spin*-operátoroknak nevezzük. Továbbá:

$$\left(S^1\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{4}\gamma^2\gamma^3\gamma^2\gamma^3 = \frac{\hbar^2}{4}I \tag{267}$$

és ugyanígy

$$\left(S^2\right)^2 = \left(S^3\right)^2 = \frac{\hbar^2}{4}I \ , \tag{268}$$

tehát

$$\overrightarrow{S}^2 = \frac{3\hbar^2}{4}I = \hbar^2 s\left(s+1\right)I \implies \underline{s = \frac{1}{2}} \ . \tag{269}$$

A Dirac egyenlet által leírt hullámfüggvény komponenseit a térbeli forgatásokkal hatására egy $\frac{1}{2}$-es impulzusmomentum (spin) operátor transzformálja. Ezt úgy értelmezzük, hogy az elektron $s = \frac{1}{2}$ spinnel rendelkezik. Érthető, hogy a Klein-Gordon egyenletnél, ahol a hullámfüggvény skalár (egykomponensű) volt, nem beszélhettünk spinről.

A γ^μ mátrixok standard ábrázolásait használva,

$$\overrightarrow{S} = \frac{i\hbar}{4}\overrightarrow{\gamma} \times \overrightarrow{\gamma} = \frac{i\hbar}{4}\begin{pmatrix} 0 & \overrightarrow{\sigma} \\ -\overrightarrow{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 & \overrightarrow{\sigma} \\ -\overrightarrow{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \tag{270}$$

$$= -\frac{i\hbar}{4}\begin{pmatrix} \overrightarrow{\sigma} \times \overrightarrow{\sigma} & 0 \\ 0 & \overrightarrow{\sigma} \times \overrightarrow{\sigma} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \overrightarrow{\sigma} & 0 \\ 0 & \overrightarrow{\sigma} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\overrightarrow{\Sigma} \ , \tag{271}$$

ahol

$$\vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} . \tag{272}$$

Ez megnyugtató abból szempontból, hogy a Pauli egyenletben a $\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$-t vezettük be a spin operátoraként.

1.17. A teljes impulzusmomentum

A hullámfüggvény transzformációja térbeli forgatásra tehát,

$$\psi'\left(R\left(\varphi,\vec{n}\right)\vec{r},t\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{n}\,\vec{S}\varphi\right)\psi\left(\vec{r},t\right) \tag{273}$$

illetve

$$\psi'\left(\vec{r},t\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{n}\,\vec{S}\varphi\right)\,\psi\left(R\left(-\varphi,\vec{n}\right)\vec{r},t\right) \ . \tag{274}$$

Számítsuk ki $\psi\left(R\left(-\varphi,\vec{n}\right)\vec{r},t\right)$-t egy infinitezimális forgatásra:

$$\psi\left(R\left(-\varphi,\vec{n}\right)\vec{r},t\right) \simeq \psi\left(\vec{r},t\right) - \varphi\,\left(\vec{n}\times\vec{r}\right)\,\underline{\nabla}\psi\left(\vec{r},t\right) = \psi\left(\vec{r},t\right) - \varphi\,\vec{n}\left(\vec{r}\times\vec{\nabla}\right)\psi\left(\vec{r},t\right) \tag{275}$$

$$= \psi\left(\vec{r},t\right) - \frac{i}{\hbar}\varphi\,\vec{n}\,\left(\vec{r}\times\vec{p}\right)\psi\left(\vec{r},t\right) = \left[I - \frac{i}{\hbar}\varphi\,\vec{n}\,\vec{L}\right]\psi\left(\vec{r},t\right) \ , \tag{276}$$

ill. véges forgatásra

$$\psi\left(R\left(-\varphi,\vec{n}\right)\vec{r},t\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{n}\,\vec{L}\varphi\right)\psi\left(\vec{r},t\right) \ . \tag{277}$$

Következésképpen a négykomponensű hullámfüggvény (teljes) transzformációja a térbeli forgatásokkal szemben,

$$\psi'\left(\vec{r},t\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{n}\,\vec{J}\varphi\right)\psi\left(\vec{r},t\right) \ , \tag{278}$$

azaz a relativisztikus kvantumelméletben a térbeli forgatások infinitezimális generátora a

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \tag{279}$$

teljes impulzusmomentum operátor.

A Dirac egyenlet

$$i\hbar\partial_t\psi = H\psi \tag{280}$$

alakja különös jelentőségű, mert a nem-relativisztikus tárgyalással teljesen analóg módon lehetőséget ad valamely O operátor kvantummechanikai időderiváltjának kiszámítására,

$$\frac{dO}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[H,O\right] \quad , \tag{281}$$

és ezáltal annak megállapítására, hogy az adott operátorhoz rendelt fizikai mennyiség mozgásállandó vagy sem. Gömbszimmetrikus potenciál esetén a nem-relativisztikus esetben láttuk, hogy az impulzusmomentum

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \tag{282}$$

mozgásállandó volt. Nézzük meg, hogy fennáll-e ez a relativisztikus esetben is! Zérus vektorpotenciált véve a Hamilton operátor

$$H = c\vec{\alpha}\vec{p} + \beta mc^2 + q\phi \tag{283}$$

alakú. Ekkor

$$[H, L_i] = [c\vec{\alpha}\vec{p} + q\phi, \varepsilon_{ijk}x_j p_k] \quad , \tag{284}$$

hiszen L_i kommutál βmc^2-tel. (Az L_i operátor a spinorok terén egységoperátorként hat, ezért valójában $L_i I$-t kellene írnunk.) A fenti kommutátort két részre bontva,

$$\begin{aligned}[c\alpha_l p_l, \varepsilon_{ijk}x_j p_k] &= c\varepsilon_{ijk}\alpha_l\,[p_l, x_j p_k] = c\varepsilon_{ijk}\alpha_l(\underbrace{[p_l, x_j]}_{\frac{\hbar}{i}\delta_{lj}}p_k + x_j\underbrace{[p_l, p_k]}_{0}) \\ &= \frac{\hbar c}{i}\left(\vec{\alpha} \times \vec{p}\right)_i \end{aligned} \tag{285}$$

$$\begin{aligned}[q\phi, \varepsilon_{ijk}x_j p_k] &= q\varepsilon_{ijk}\,[\phi, x_j p_k] = q\varepsilon_{ijk}(\underbrace{[\phi, x_j]}_{0}p_k + x_j\underbrace{[\phi, p_k]}_{-\frac{\hbar}{i}\partial_k\phi}) \\ &= -\frac{\hbar q}{i}\left(\vec{r} \times \vec{\nabla}\phi\right)_i \quad , \end{aligned} \tag{286}$$

kapjuk, hogy

$$\left[H, \vec{L}\right] = \frac{\hbar}{i}\left[c\left(\vec{\alpha} \times \vec{p}\right) - q\left(\vec{r} \times \vec{\nabla}\phi\right)\right] \quad , \tag{287}$$

melyből centrális potenciálra csak a második tag tűnik el. Relativisztikus esetben centrális potenciálra a impulzusmomentum nem mozgásállandó!

Bizonyítjuk, hogy centrális potenciál esetén a *teljes impulzusmomentum*

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \tag{288}$$

mozgásállandó, ahol

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} \quad , \tag{289}$$

a spin-operátor. Ugyanis

$$[H, S_i] = \frac{\hbar c}{2}[\alpha_l p_l, \Sigma_i] = \frac{\hbar c}{2} p_l [\alpha_l, \Sigma_i] =$$

$$= \frac{\hbar c}{2} p_l \left[\begin{pmatrix} 0 & \sigma_l \\ \sigma_l & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_l \\ \sigma_l & 0 \end{pmatrix} \right]$$

$$= \frac{\hbar c}{2} p_l \begin{pmatrix} 0 & [\sigma_l, \sigma_i] \\ [\sigma_l, \sigma_i] & 0 \end{pmatrix} = i\hbar c \varepsilon_{lik} p_l \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}$$

$$= -\frac{\hbar c}{i} \left(\underline{\alpha} \times \overrightarrow{p} \right)_i \quad . \tag{290}$$

így tehát

$$\underline{\frac{d\overrightarrow{J}}{dt} = -q \left(\overrightarrow{r} \times \overrightarrow{\nabla} \phi \right) = \overrightarrow{r} \times \overrightarrow{F}} \quad , \tag{291}$$

ahol $\overrightarrow{F} = -\overrightarrow{\nabla}(q\phi)$ az erő. A fenti összefüggés szerint a Dirac egyenlet által leírt részecskére ható forgatónyomaték a teljes impulzusmomentum időderiváltjával egyezik meg, ami centrális potenciál esetén valóban zérus.

1.17.1. Térbeli tükrözés

A Minkowski térben a koordináta tengelyek tükrözését az

$$x^{0\prime} = x^0 \quad x^{i\prime} = -x^i \quad (i = 1, 2, 3) \, , \tag{292}$$

transzformáció írja le, tehát

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} = \overline{\Lambda} \, . \tag{293}$$

A transzformált Dirac egyenlet:

$$\left(\gamma^0 K_0 - \gamma^i K_i - mc \right) \psi' (\mathsf{x}') = 0 \, , \tag{294}$$

amit tovább átalakítva kapjuk

$$\left(K_0 - \gamma^0 \gamma^i K_i - mc\gamma^0 \right) \psi' = \left(K_0 + \gamma^i \gamma^0 K_i - mc\gamma^0 \right) \psi' = 0 \tag{295}$$

$$\Downarrow$$

$$\left(\gamma^0 K_0 + \gamma^i K_i - mc \right) \gamma^0 \psi' = 0 \, , \tag{296}$$

azaz a hullámfüggvény

$$\psi' = \gamma^0 \psi \tag{297}$$

transzformációja mellett a Dirac egyenlet invariáns marad a tükrözésre. Vizsgáljuk meg a korábban bevezetett mennyiségek viselkedését a térbeli tükrözésre:

$$(\psi')^\dagger \psi' = \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^0 \psi = \psi^\dagger \psi \tag{298}$$

$$\overline{\psi}' \psi' = \left(\gamma^0 \psi\right)^\dagger \gamma^0 \gamma^0 \psi = \psi^\dagger \gamma^0 \psi = \overline{\psi} \psi \; . \tag{299}$$

Ezek *valódi skalárok*. Továbbá,

$$\overline{\psi}' \gamma^5 \psi' = \psi^\dagger \gamma^5 \gamma^0 \psi = -\psi^\dagger \gamma^0 \gamma^5 \psi = -\overline{\psi} \gamma^5 \psi \, , \tag{300}$$

amit *pszeudóskalár*nak nevezünk. Ugyanígy:

$$\overline{\psi}' \gamma^i \psi' = -\overline{\psi} \gamma^i \psi \quad \text{és} \quad \overline{\psi}' \gamma^0 \psi' = \overline{\psi} \gamma^0 \psi \; , \tag{301}$$

tehát $j_\mu = ic\overline{\psi}\gamma_\mu\psi$ *poláris vagy normál vektor*, valamint

$$\overline{\psi}' \gamma^i \gamma^5 \psi' = \overline{\psi} \gamma^i \gamma^5 \psi \quad \text{és} \quad \overline{\psi}' \gamma^0 \gamma^5 \psi' = -\overline{\psi} \gamma^0 \gamma^5 \psi \; , \tag{302}$$

azaz $\overline{\psi}\gamma^\mu\gamma^5\psi$ ún. *axiálvektor*.