8. RELATIVISZTIKUS KVANTUMMECHANIKA ÉS REPREZENTÁCIÓELMÉLET

E fejezet első részében az m_0 nyugalmi tömegű, feles spinű relativisztikus részecske kvantummechanikai tárgyalásával foglalkozunk. Látni fogjuk, hogy az eddig tanultak csak a kis sebességű mozgás esetére érvényesek. Így az előzőekben megismert Pauli-Schrödinger egyenlet a pontosabb leírást adó Dirac egyenlet kis sebességek esetén érvényes határesetének tekinthető csupán.

Előre bocsátjuk, hogy ezen fejezetben végig cgs egységben dolgozunk, valamint alkalmazzuk az Einstein-konvenciót: összegzés értendő szorzatban előforduló minden kettős indexre ($\mu, \nu, ...$: négyes összegző indexek; $i, j, k, ..$: hármas összegző indexek.) Továbbá egy felülhúzott nyíllal ($\vec{\gamma}$), vagy kövérszedéssel ($\mathbf{a}$) jelölt vektor mennyiség alatt mindig hármas vektort értünk, és használjuk a $\partial/\partial x \equiv \partial_x$ rövidített írásmódot.

A fejezet második részében a fizikai mennyiségeket jelentő operátorok különböző reprezentálásaival foglalkozunk, amelyek közül eddig csak a koordináta reprezentációval ismerkedtünk meg behatóbban. Ezzel összefüggésben megemlítjük a kvantummechanikai képeket, amelyek az operátorok (fizikai mennyiségek) és a Hilbert térbeli állapotvektorok (fizikai álapotok) időfejlődésben játszott szerepének megválasztását jelentik.

Jegyzetünkben szorosan követjük Nagy Károly "Kvantummechanika" c. tankönyvében megadott menetet (IX. fejezet), amelyet további elmélyülést igénylő hallgatóknak figyelmébe ajánlok, Marx György jól bevált Kvantummechanika tankönyvével együtt.

8.1. A DIRAC EGYENLET

A speciális relativitáselmélet szempontjából az

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi, \qquad H = \frac{p^2}{2m_0} + V,$$

($\mathbf{p} = m\mathbf{v}$, $m = m_0/\sqrt{1-v^2/c^2}$) Schrödinger egyenlettel szembeni legnagyobb jogos kifogás az, hogy nyilvánvalóan nem Lorentz invariáns, mivel aszimmetrikus az idő- és tér-koordinátákban; idő-koordinátában csak elsőrendű, míg tér-koordinátákban másodrendű deriváltak szerepelnek benne.

Ezen a nehézségen segíteni lehet, ha kiindulunk a speciális relativitáselmélet egyik alapvető összefüggéséből,

$$p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 + p_4^2 = -m_0^2c^2, \tag{104}$$

amely az

$$\begin{aligned} x_1 &= x & p_1 &= m\dot{x}_1 \\ x_2 &= y & p_2 &= m\dot{x}_2 \\ x_3 &= z & p_3 &= m\dot{x}_3 \\ x_4 &= ict & p_4 &= m\dot{x}_4 = imc = \frac{i}{c}E \end{aligned}$$

definíciókból következik. (Kihasználtuk a közismert $E = mc^2$ relációt.)

Az impulzusokra a

$$p_\mu \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_\mu} \equiv \frac{\hbar}{i}\partial_\mu, \qquad \mu = 1, ..., 4,$$

hozzárendelést alkalmazva, a (104) összefüggés alapján a *Klein-Gordon egyenlet*et

$$-\hbar^2\left(\partial_1^2 + \partial_2^2 + \partial_3^2 + \partial_4^2\right)\Psi \equiv -\hbar^2\partial_\mu\partial_\mu\Psi = -m_0^2c^2\Psi,$$

azaz

$$\left(\Delta - \frac{1}{c^2}\partial_t^2\right)\Psi = \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\Psi, \tag{104a}$$

amely már Lorentz-invariáns. Viszont időben másodrendű, ezért ahhoz, hogy az állapotfüggvényt időben nyomon követhessük, nem elegendő csupán $\Psi(t = t_0)$ megadása, szükség van a derivált, $\partial\Psi(t)/\partial t|_{t=t_0}$ egy t_0 időpillanatban való ismeretére is.

Hasonlóan a nemrelativisztikus Schrödinger egyenletnél követett eljáráshoz (ld. 2.2.c. pont), balról Ψ^*-gal beszorozva és integrálva a térkoordinátákra, a Klein-Gordon egyenletből is levezethető egy kontinuitási egyenlet:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathrm{div}\mathbf{j} = 0,$$

ahol

$$\mathbf{j} = \frac{1}{2m_0}\frac{\hbar}{i}\left(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*\right)$$

és

$$\rho = \frac{1}{2m_0c^2}\frac{\hbar}{i}\left(\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} - \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right).$$

Minthogy Ψ és $\partial\Psi/\partial t$ egymástól függetlenül megadható, a fenti egyenlettel értelmezett sűrűség negatív is lehet. Ezért nem lehetséges a valószínűségi értelmezés. További nehézséget jelent, hogy a spin bevétele a leírásba olyan módon, ahogy azt a Schrödinger egyenletnél tettük, elrontaná a Lorentz invarianciát. (A Klein-Gordon egyenlet a kvantumtérelméletben a zérus spinű részecskék, pl. pionok, állapotegyenlete).

Dirac nyomán az említett problémákon úgy segíthetünk, hogy gyököt vonunk a (104) egyenlet mindkét oldalából. A gyökvonást úgy végezzük el, hogy szimbolikus (γ) operátorok bevezetésével teljes négyzetté alakítjuk az egyenlet baloldalát:

$$-m_0^2c^2 = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 + p_4^2 = (\gamma_1 p_1 + \gamma_2 p_2 + \gamma_3 p_3 + \gamma_4 p_4)^2 \equiv (\gamma_\mu p_\mu)^2. \tag{104}$$

Így a gyökvonás eredménye,

$$im_0c = \gamma_\mu p_\mu,$$

azonnal adja Dirac egyenletét ($p_\mu \to \hbar\partial_\mu/i$):

$$(\gamma_\mu \partial_\mu + \kappa)\,\Psi = 0, \tag{105}$$

ahol $\kappa = m_0 c/\hbar$ az m_0 tömegű részecske Compton hullámszáma. Bebizonyítható, hogy a (105) alatti egyenlet Lorentz invariáns (ld. Nagy Károly könyv).

Mielőtt a (105) Dirac egyenletet részletekbe menően vizsgálnánk, felderítjük a Dirac-féle "gamma-operátorok" mibenlétét. Feltételezzük, hogy $[\gamma_\mu, p_\nu] = 0, [p_\mu, p_\nu] = 0$, de $[\gamma_\mu, \gamma_\nu] \neq 0$. Elvégezzük a négyzetre emelést:

$$\begin{aligned}
p_\mu p_\mu = (\gamma_\mu p_\mu)^2 = \gamma_\mu^2 p_\mu^2 + \\
+\gamma_1\gamma_2 p_1 p_2 + \gamma_1\gamma_3 p_1 p_3 + \gamma_1\gamma_4 p_1 p_4 \\
+\gamma_2\gamma_1 p_2 p_1 + \gamma_2\gamma_3 p_2 p_3 + \gamma_2\gamma_4 p_2 p_4 \\
+\gamma_3\gamma_1 p_3 p_1 + \gamma_3\gamma_2 p_3 p_2 + \gamma_3\gamma_4 p_3 p_4 \\
+\gamma_4\gamma_1 p_4 p_1 + \gamma_4\gamma_1 p_3 p_2 + \gamma_4\gamma_3 p_4 p_3.
\end{aligned}$$

Az egyenlőség akkor és csakis akkor áll fenn, ha teljesülnek a következő szabályok:

$$\gamma_\mu^2 = 1, \quad \mu = 1, ..., 4,$$

$$\gamma_\mu\gamma_\nu + \gamma_\nu\gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu}, \quad \mu, \nu = 1, ..., 4. \tag{106}$$

Azok a gamma operátorok, amelyek a fenti tulajdonságokat teljesítik, legkönnyebben matrix alakban (reprezentációban) adhatók meg:

$$\gamma_1 = \begin{pmatrix} & & & -i \\ & & -i & \\ & i & & \\ i & & & \end{pmatrix}, \quad \gamma_2 = \begin{pmatrix} & & & -1 \\ & & 1 & \\ & 1 & & \\ -1 & & & \end{pmatrix}, \quad \gamma_3 = \begin{pmatrix} & & -i & \\ & & & i \\ i & & & \\ & -i & & \end{pmatrix},$$

$$\gamma_4 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}. \tag{106a}$$

Könnyen belátható a gamma-matrixok hermiticitása is:

$$\gamma_\mu^+ = \gamma_\mu, \qquad \mu = 1, ..., 4,$$

ugyanis egy A matrix önadjungált, ha elemeire teljesül a következő összefüggés: $(A^+)_{rs} = A_{sr}^*$.

A gamma-matrixok hasonlóak a Pauli-féle spinmatrixokhoz, amelyek a feles spinoperátor matrix reprezentációjának felelnek meg: $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$, ahol

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

A Pauli-matrixoknak is (106)-hoz hasonló tulajdonságaik vannak (négyzetük az egységmatrix és antikommutálnak), így nem véletlen, hogy a $\gamma-$matrixok kifejezhetők a $\sigma-$matrixokkal.

$$\vec{\gamma} = i \begin{pmatrix} & -\vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & \end{pmatrix}, \quad \gamma_4 = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix},$$

ahol 1 a 2×2-es egységmatrixot jelöli. (Később, a spin tárgyalásánál fogjuk látni, hogy a gamma- és σ-matrixok közti összefüggésnek mélyebb oka van.)

Visszatérve a (105) alatti Dirac egyenletre,

$$(\gamma_\mu \partial_\mu + \kappa 1)\, \Psi = 0,$$

(ahol 1 most a 4×4-es egységmatrixot jelöli) megállapíthatjuk, hogy a Dirac-féle állapotfüggvény egy négykomponensű mennyiség,

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}.$$

Ψ nem vektor, hanem spinor, amely egy teljes forgatásra előjelet vált. A négy komponens jelentéséről később még szólunk.

A kontinuitási egyenlet levezetése érdekében szükség van a Dirac-állapot (hermitikus) adjungáltjára:

$$\Psi^+ = (\psi_1^*,\, \psi_2^*,\, \psi_3^*,\, \psi_4^*)\,,$$

valamint a Dirac egyenlet adjungáltjára:

$$(\partial_\mu \Psi)^+ \gamma_\mu^+ + \kappa 1 \Psi^+ = 0.$$

Mármost $(\vec{\partial}\Psi)^+ = \vec{\partial}\Psi^+$, és $(\partial_4 \Psi)^+ = -\partial_4 \Psi^+$, valamint a gamma-matrixok önadjungáltsága miatt az adjungált Dirac egyenlet, részletesen kiírva:

$$\partial_1 \Psi^+ \gamma_1 + \partial_2 \Psi^+ \gamma_2 + \partial_3 \Psi^+ \gamma_3 - \partial_4 \Psi^+ \gamma_4 + \kappa \Psi^+ = 0.$$

Az adjungált egyenletet még beszorozzuk jobbról γ_4-gyel és kihasználjuk a gamma-matrixok antikommutációs tulajdonságát, hogy azonos előjelekkel ellátott tagokat kapjunk:

$$-\partial_1 \bar{\Psi} \gamma_1 - \partial_2 \bar{\Psi} \gamma_2 - \partial_3 \bar{\Psi} \gamma_3 - \partial_4 \bar{\Psi} \gamma_4 + \kappa \bar{\Psi} = 0, \tag{105a}$$

ahol még bevezettük a $\Psi^+\gamma_4 \equiv \bar{\Psi}$ jelölést is. A továbbiakban ezt a módosított egyenletet hívjuk *adjungált Dirac egyenlet*nek és $\bar{\Psi}-$t *Dirac-adjungált*nak. Rövidített formába írva:

$$\left(\partial_\mu \bar{\Psi}\right)\gamma_\mu - \kappa\bar{\Psi} = 0 \quad /\Psi \qquad \Rightarrow \qquad \left(\partial_\mu \bar{\Psi}\right)\gamma_\mu \Psi - \kappa\bar{\Psi}\Psi = 0,$$

ahol a jobboldali egyenlet az adjungált egyenlet $\Psi-$vel jobbról történő beszorzása révén keletkezett.

Hasonlóan, a Dirac egyenlet és ennek $\bar{\Psi}-$vel balról történő beszorzása révén keletkezett egyenlet a következő:

$$\bar{\Psi}/ \quad \gamma_\mu\left(\partial_\mu \Psi\right) + \kappa\Psi = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \bar{\Psi}\gamma_\mu\left(\partial_\mu \Psi\right) + \kappa\bar{\Psi}\Psi = 0.$$

A két jobboldali egyenletet összeadva teljes négyes divergenciát kapunk, amely egy kontinuitási egyenletnek felel meg:

$$\partial_\mu\left(\bar{\Psi}\gamma_\mu\Psi\right) = 0 \qquad \Leftarrow \qquad \bar{\Psi}\gamma_\mu\left(\partial_\mu\Psi\right) + \left(\partial_\mu\bar{\Psi}\right)\gamma_\mu\Psi = 0.$$

Bevezetve a $\rho = \Psi^+\Psi = \psi_\mu^*\psi_\mu \geq 0$ *valószínűségsűrűség*(!) és a $\mathbf{j} = \vec{j} = ic\bar{\Psi}\vec{\gamma}\Psi$ (hármasvektor) *áramsűrűség* mennyiségeket, a teljes divergencia egy kontinuitási egyenlet szokásos alakját ölti:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathrm{div}\mathbf{j} = 0. \tag{107}$$

A Dirac egyenletből tehát következik a valószínűségi sűrűség megmaradását kifejező kontinuitási egyenlet, s így a Dirac egyenlet a Schrödinger egyenlet relativisztikus általánosításának tekinthető, annak minden elméleti és filozófiai következményével együtt. A következő fejezetekben éppen ennek az állításnak részletesebb kifejtésével fogunk foglalkozni.

8.2. AZ ELEKTROMÁGNESES TÉRREL KÖLCSÖNHATÓ RÉSZECSKE DIRAC EGYENLETE

Elektromágneses tér jelenléte esetén a kanonikus impulzusok helyett a kinetikus impulzusokat kell használnunk (ld. előző fejezet):

$$p_\mu \quad \to p_\mu - \frac{q}{c}A_\mu \equiv K_\mu, \quad \mu = 1, ..., 4,$$

ahol q a részecske töltését jelöli, és $A_4 = i\Phi$. Azaz

$$\frac{\hbar}{i}\partial_\mu \quad \to \frac{\hbar}{i}\partial_\mu - \frac{q}{c}A_\mu, \quad \mu = 1, ..., 4,$$

s így

$$\partial_\mu \quad \to \partial_\mu - \frac{iq}{\hbar c}A_\mu, \quad \mu = 1, ..., 4.$$

A Dirac egyenlet elektromágneses tér esetén tehát:

$$\left[\gamma_\mu\left(\partial_\mu - \frac{iq}{\hbar c}A_\mu\right) + \kappa\right]\Psi = 0 \tag{108}$$

Kimutatható, hogy ez az egyenlet is Lorentz invariáns (ld. Nagy Károly könyv).

Kíváncsiak vagyunk a H energiaoperátor alakjára. Ezért átírjuk (108)-at

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi \tag{108a}$$

formába, és leolvassuk H alakját. A negyedik (idő-) komponenst külön kezelve, a következőt kapjuk:

$$\left[\gamma_i\left(\partial_i - \frac{iq}{\hbar c}A_i\right) + \gamma_4\left(\partial_4 - \frac{iq}{\hbar c}A_4\right) + \kappa\right]\Psi = 0.$$

Szorozzuk be ezt az egyenletet balról $\hbar c\gamma_4-$gyel, valamint vegyük figyelembe, hogy $\partial_4 = \partial_t/ic$, $A_4 = i\Phi$ és $\kappa = m_0c/\hbar$. Kapjuk:

$$\left(\hbar c\gamma_4\gamma_i\partial_i - \gamma_4\gamma_i iqA_i + \frac{\hbar}{i}\partial_t + q\Phi + \gamma_4 m_0c^2\right)\Psi = 0.$$

Ebből átrendezéssel adódik a kívánt egyenlet forma:

$$i\hbar\partial_t\Psi = (\hbar c\gamma_4\gamma_i\partial_i - iq\gamma_4\gamma_i A_i + q\Phi + m_0c^2\gamma_4)\Psi.$$

A relativisztikus energiaoperátor alakja tehát:

$$H = \hbar c\gamma_4\gamma_i\partial_i - iq\gamma_4\gamma_i A_i + q\Phi + m_0c^2\gamma_4. \tag{109}$$

Gömbszimmetrikus elektromos tér esetén [$A_i = 0$, $\Phi = \Phi(r)$; pl. egy atomon belüli mag elektromos tér, amely az elektron mozgását meghatározza],

$$H = +ic\gamma_4\gamma_i p_i + q\Phi(r) + m_0c^2\gamma_4 \quad \underset{v\ll c}{\longrightarrow} \quad \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + q\Phi + ..., \tag{109a}$$

amely átmegy a jól ismert nemrelativisztikus (kinetikus+potenciális energia) Hamilton operátor alakba (bizonyítás később). Az irodalomban a γ_μ-matrixok helyett általában az $\alpha_i = i\gamma_4\gamma_i$ és $\beta = \gamma_4$ matrixokat használják. Ezekkel felírva a szabad ($A_\mu = 0$) Dirac energiaoperátor a következő alakot ölti:

$$H = c\alpha_i\mathbf{p}_i + m_0c^2\beta. \tag{109b}$$

8.3. A DIRAC EGYENLET ÉS A SPIN

Ebben a fejezetben kimutatjuk, hogy a Dirac egyenlet automatikusan számot ad a feles spin létéről. Emlékeztetünk arra, hogy az impulzusmomentum csererelációkkal történő (csoportelméleti) tárgyalása ugyancsak utalt a feles impulzusmomentum-kvantumszám létezésére. Ezt később a spinnel azonosítottuk a Stern-Gerlach kísérlet kapcsán. A spin kvantummechanikai tárgyalását a Schrödinger egyenlet keretében oly módon vittük végbe, hogy az energiaoperátorhoz egyszerűen hozzáírtuk a spin operátorát tartalmazó mágneses térbeli potenciális energia tagot. Most látni fogjuk, hogy a Dirac egyenlet minden további kiegészítés nélkül tartalmazza a részecske spinjére vonatkozó információkat.

Matematikai és csoportelméleti tétel az, hogy centrális erőtér esetén az impulzusmomentum állandó, megmaradó mennyiség (mozgásállandó). Mint láttuk, a mozgásállandók az energiaoperátorral felcserélhetők (ld. 3.4. fejezet). Ezért a kérdés az, hogy a pályaimpulzus nyomaték, az $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, felcserélhető-e a Dirac-féle energiaoperátorral gömbszimmetrikus külső tér esetén (elegendő csak a $z-$komponensre bizonyítani):

$$\frac{\mathrm{d}L_z}{\mathrm{d}t} = \frac{i}{\hbar}\big[H, L_z\big] = \Big[H, \frac{\partial}{\partial\varphi}\Big] = \frac{i}{\hbar}\big[H, (x_1p_2 - x_2p_1)\big] =?$$

Az energiaoperátor gömbszimmetrikus külső elektromos tér esetén, mint láttuk, három tagból tevődik össze:

$$H = ic\gamma_4\gamma_i p_i + q\Phi(r) + m_0c^2\gamma_4. \tag{109a}$$

A második és harmadik tag zérust ad a felcserélés alkalmával, mivel nem függnek a φ azimutális koordinátától. Az első tag felcserélésénél pedig kihasználjuk a

$$[p_i, x_j] = \frac{\hbar}{i}\delta_{ij}, \quad [p_i, p_j] = 0, \quad [x_i, x_j] = 0$$

kommutációs törvényeket, s ezért csak a $[H, x_1]$, ill. $[H, x_2]$ felcserélésekkel kell foglalkoznunk. Így például

$$[H, x_1] = ic\gamma_4\gamma_i[p_i, x_1] = ic\gamma_4\gamma_i\frac{\hbar}{i}\delta_{i1}.$$

Folytatva a levezetést:

$$\frac{\mathrm{d}L_z}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}L_3}{\mathrm{d}t} = \frac{i}{\hbar}\big[ic\gamma_4\gamma_i p_i, (x_1p_2 - x_2p_1)\big] =$$

$$= -\frac{c}{\hbar}\gamma_4\gamma_i\Big[\frac{\hbar}{i}\delta_{i1}p_2 - \frac{\hbar}{i}\delta_{i2}p_1\Big] = ic\gamma_4(\gamma_1p_2 - \gamma_2p_1) \neq 0.$$

Ciklikus felcseréléssel hasonló kifejezést kaphatunk a második és első komponensre.

$\mathbf{L}$ időben nem állandó volta azt jelenti, hogy a pályaimpulzus momentum nem a teljes impulzusmomentuma a Dirac egyenlet által leírt részecskének.

Jelöljük a teljes, megmaradó impulzusmomentumot $\mathbf{J}-$vel, és a hiányzó impulzusmomentumot $\mathbf{S}-$sel. A

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{J}}{\mathrm{d}t} = 0$$

teljes impulzusmomentum megmaradást kifejező egyenletből az ismeretlen $\mathbf{S}$ operátor meghatározható. Bizonyítjuk, hogy $\mathbf{S}$ egy olyan vektor operátor, amelynek matrix-értékű komponensei

$$S_i = \frac{\hbar}{2}\Sigma_i, \qquad \Sigma_i = -i\gamma_j\gamma_k, \quad (i,j,k) = ps\,perm.$$

kifejezhetők a Dirac-féle gamma matrixokkal. [Arról is meggyőződhetünk, hogy a $4 \times 4-$es Σ matrixok rendre az ún. "nagy" Pauli-féle $\Sigma-$matrixok, amelyek a "kis" ($2 \times 2-$es) Pauli matrixok diagonálisba való szupermatrixszá történő elrendezéséből kaphatók meg:

$$\Sigma_i = \begin{pmatrix} \sigma_i & \\ & \sigma_i \end{pmatrix},$$

ahol a matrixon belül a "kis" Pauli matrixok szerepelnek. A Pauli-féle 2×2-es szupermátrixos alakkal történő számolás általában hamarabb eredményre vezet, mint a 4×4-es γ-matrixok használata.]

Bizonyítani fogjuk, hogy pl. $J_3 = L_3 + S_3$ időben állandó, azaz

$$\frac{\mathrm{d}S_z}{\mathrm{d}t} = -ic\gamma_4(\gamma_1 p_2 - \gamma_2 p_1).$$

Bizonyítás. A (109a) energiaoperátornak megint csak az első tagja ad járulékot a felcseréléshez:

$$\frac{\mathrm{d}S_z}{\mathrm{d}t} = \frac{i}{\hbar}[H, S_z] = \frac{i}{\hbar}[ic\gamma_4\gamma_i p_i, \frac{\hbar}{2}\Sigma_3] =$$
$$-\frac{c}{2}[\gamma_4\gamma_i p_i, \Sigma_3] = -\frac{c}{2}[\gamma_4\gamma_i p_i, -i\gamma_1\gamma_2] =$$
$$+\frac{ic}{2}[\gamma_4\gamma_1 p_1 + \gamma_4\gamma_2 p_2 + \gamma_4\gamma_3 p_3, \gamma_1\gamma_2].$$

A további kiértékelés érdekében felhasználjuk a gamma-matrixok (106) alatt ismertetett tulajdonságait:

$$\gamma_\mu^2 = 1, \quad \mu = 1,2,3,4, \qquad \text{és} \qquad \gamma_\mu\gamma_\nu = -\gamma_\nu\gamma_\mu, \quad \mu \neq \nu.$$

A harmadik tag kommutátorát a legegyszerűbb kiértékelni, mivel

$$\gamma_4\gamma_3\gamma_1\gamma_2 = \gamma_1\gamma_2\gamma_4\gamma_3,$$

azaz a harmadik tag kommutátora zérust ad eredményül.

A második tag kiértékeléséhez figyelembe vesszük, hogy

$$[\gamma_4\gamma_2, \gamma_1\gamma_2] = \gamma_4\gamma_2\gamma_1\gamma_2 - \gamma_1\gamma_2\gamma_4\gamma_2$$
$$= \gamma_1\gamma_4\gamma_2\gamma_2 + \gamma_1\gamma_4\gamma_2^2 = 2\gamma_1\gamma_4.$$

Végül az első taghoz felhasználjuk, hogy

$$[\gamma_4\gamma_1, \gamma_1\gamma_2] = \gamma_4\gamma_1\gamma_1\gamma_2 - \gamma_1\gamma_2\gamma_4\gamma_1$$
$$= \gamma_4\gamma_2 - \gamma_2\gamma_4 = -2\gamma_2\gamma_4.$$

A három kommutátor együttesen tehát

$$+\frac{ic}{2}[-2\gamma_2\gamma_4 p_1 + 2\gamma_1\gamma_4 p_2 + 0p_3] = +ic[\gamma_1\gamma_4 p_2 - \gamma_2\gamma_4 p_1] = -ic\gamma_4[\gamma_1 p_2 - \gamma_2 p_1] = \frac{\mathrm{d}S_z}{\mathrm{d}t}.$$

Q.E.D.

Tehát a $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ operátor mozgásállandó centrális erőtérben, de $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ és $\mathbf{S} = \hbar\vec{\Sigma}/2$, $(\Sigma_i = -i\gamma_j\gamma_k)$ külön-külön nem! Mivel $\mathbf{S}-$ről jóformán még semmit sem tudunk, joggal merül fel a kérdés, hogy mik a sajátértékei? $\mathbf{L}-$nek már ismerjük a sajátértékeit; az egyik módszer a sajátértékek meghatározására éppen a felcserélési törvények alkalmazásával történt. Ezért kérdésünket úgy is megfogalmazhatjuk, hogy milyen felcserélési törvénynek tesznek eleget $\mathbf{S}$ komponensei, azaz

$$[S_i, S_j] = ?$$

Elegendő az első két komponensre számolni:

$$[S_x, S_y] \equiv [S_1, S_2] = \frac{\hbar^2}{4}[\Sigma_1, \Sigma_2] = -\frac{\hbar^2}{4}[\gamma_2\gamma_3, \gamma_3\gamma_1]$$

$$= -\frac{\hbar^2}{4}(\gamma_2\gamma_3\gamma_3\gamma_1 - \gamma_3\gamma_1\gamma_2\gamma_3) = -\frac{\hbar^2}{4}(\gamma_2\gamma_1 - \gamma_1\gamma_2)$$
$$= +\frac{\hbar^2}{2}\gamma_1\gamma_2 = +\frac{\hbar^2}{2}i(-i\gamma_1\gamma_2) == +\frac{\hbar}{2}\hbar i\Sigma_3 = \hbar i S_3 \equiv i\hbar S_z.$$

(Ezt az eredményt azonnal megkaphattuk volna a Pauli-matrixokra vonatkozó csererelációk felhasználásával.)

Tehát $\mathbf{S}$ az impulzusmomentum felcserélési szabályait elégíti ki, ezért sajátérték egyenleteit rögtön felírhatjuk az

$$\mathbf{S}^2\psi = \hbar^2 s(s+1)\psi, \quad s = 0, \underline{\frac{1}{2}}, 1, \frac{3}{2}, ...$$

és

$$S_z\psi = \hbar m_s\psi, \quad m_s = -s, -s+1, ..., s-1, s.$$

alakban. Viszont a felcserélési törvény által megengedett lehetséges s kvantumszámok közül csak az $s = \frac{1}{2}$ van összhangban a gamma matrixok tulajdonságaival. Ugyanis $S_z = \frac{\hbar}{2}\Sigma_3$ lévén,

$$\Sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & 1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}.$$

A Σ_3 matrixnak viszont egységnyi abszolút értékű $\lambda = 2m_3$ sajátértékei vannak. A

$$(\Sigma_3 - \lambda)\psi = 0$$

sajátérték egyenletből

$$0 = \det|\Sigma_3 - \lambda| = \begin{vmatrix} 1-\lambda & & & \\ & -1-\lambda & & \\ & & 1-\lambda & \\ & & & -1-\lambda \end{vmatrix} = (1-\lambda)^2(1+\lambda)^2 \to \lambda = \pm 1.$$

Ezért $m_s = \pm\frac{1}{2}$ lehet csak, azaz $s = \frac{1}{2}$ sajátérték van csak összhangban a gamma matrixok tulajdonságaival.

Megállapíthatjuk tehát, hogy a Dirac egyenlet olyan részecske relativisztikus hullámegyenlete, amelynek spinje feles. A Dirac egyenlet a fermionok kvantummechanikai állapotegyenlete.

8.4. AZ ELEKTRON SAJÁT MÁGNESES MOMENTUMA

Emlékezzünk arra vissza, hogy a Schrödinger egyenletbe mesterségesen raktuk be az elektron spinjéből származó $\mathbf{M}^{\mathbf{S}}$ mágneses nyomaték és egy $\mathbf{B}$ külső mágneses tér kölcsönhatásából származó $V^{\mathbf{S}}_{magn} = -(\mathbf{M}^{\mathbf{S}}, \mathbf{B})$ mágneses potenciális energiát tartalmazó tagot. Kérdés az, hogy a Dirac egyenlet vajon tartalmazza-e ezt a mágneses potenciállal kapcsolatos információt.

Mágneses tér esetén a $\mathbf{p}$ kanonikus impulzus helyett a $\mathbf{p} - q\mathbf{A}/c \equiv \mathbf{K}$ kinetikus impulzussal dolgozunk. (Továbbra is cgs egységet használunk, innen a c megjelenése, valamint a $\mathbf{B} = \mathrm{rot}\mathbf{A}$ mágneses indukció vektort Gauss egységben mérjük.) Mágneses tér jelenléte esetén a Dirac egyenlet, amint azt (108) alatt láttuk, a következőképpen írható:

$$\left[\gamma_\mu \left(\partial_\mu - \frac{iq}{\hbar c} A_\mu\right) + \kappa\right] \Psi = 0.$$

A gömbölyű zárójelben a négyes kinetikus impulzussal arányos mennyiséget szokásos módon $D_\mu -$val jelöljük, s így a Dirac egyenlet kompakt alakban írva:

$$(\gamma_\mu D_\mu + \kappa)\Psi = 0. \tag{110}$$

Célunk az, hogy a Dirac egyenletet nemrelativisztikus, $\mathbf{p}^2$ operátort is tartalmazó, Schrödinger egyenlet alakra hozzuk, s ebből leolvassuk a mágneses potenciál-tag létét, vagy nemlétét. Szorozzuk meg ezért az egyenletet balról a $(\gamma_\mu D_\mu - \kappa)$ operátorral:

$$(\gamma_\mu D_\mu - \kappa)(\gamma_\nu D_\nu + \kappa)\Psi = 0.$$

Azaz

$$(\gamma_\mu D_\mu \gamma_\nu D_\nu - \kappa^2)\Psi = 0. \tag{111}$$

Most az első három indexre vonatkozóan kihasználjuk a 7. fejezetben a kinetikus impulzusok felcserélési relációiról tanultakat:

$$[D_i, D_j] = -\frac{iq}{\hbar c} B_k, \quad (i, j, k) = \text{páros permutáció}$$

és

$$B_k = (\nabla \times \mathbf{A})_k = \epsilon_{ijk} \partial_i A_j.$$

Ezáltal a bonyolult négyzetes operátort a következőképpen alakíthatjuk tovább:

$$\gamma_\mu \gamma_\nu D_\mu D_\nu - \kappa^2 = D_1^2 + D_2^2 + D_3^2 + D_4^2 - \kappa^2$$

$$+\gamma_1\gamma_2 D_1 D_2 + \gamma_2\gamma_1 D_2 D_1$$

$$+\gamma_1\gamma_3 D_1 D_3 + \gamma_3\gamma_1 D_3 D_1$$

$$+\gamma_1\gamma_4 D_1 D_4 + \gamma_4\gamma_1 D_4 D_1$$

$$+\gamma_2\gamma_3 D_2 D_3 + \gamma_3\gamma_2 D_3 D_2$$

$$+\gamma_2\gamma_4 D_2 D_4 + \gamma_4\gamma_2 D_4 D_2$$

$$+\gamma_3\gamma_4 D_3 D_4 + \gamma_4\gamma_3 D_4 D_3 =$$

$$D_1^2 + D_2^2 + D_3^2 + D_4^2 - \kappa^2$$

$$+\gamma_1\gamma_2[D_1, D_2] + \gamma_1\gamma_3[D_1, D_3]$$

$$+\gamma_1\gamma_4[D_1, D_4] + \gamma_2\gamma_3[D_2, D_3]$$

$$+\gamma_2\gamma_4[D_2, D_4] + \gamma_3\gamma_4[D_3, D_4].$$

A további kiértékelés érdekében megvizsgáljuk azokat a tagokat, amelyekben γ_4, ill. D_4 szerepel. Például:

$$\gamma_1\gamma_4[D_1, D_4] = \gamma_1\gamma_4(D_1 D_4 - D_4 D_1)$$

$$= \gamma_1\gamma_4 \left[\left(\partial_1 - \frac{iq}{\hbar c} A_1\right) \left(\frac{1}{ic}\partial_t + \frac{q}{\hbar c}\Phi\right) - \left(\frac{1}{ic}\partial_t + \frac{q}{\hbar c}\Phi\right) \left(\partial_1 - \frac{iq}{\hbar c} A_1\right) \right] =$$

$$= \gamma_1\gamma_4 \left[\frac{q}{\hbar c} [\partial_1, \Phi] - \frac{q}{\hbar c^2} [A_1, \partial_t] \right]$$

$$= \gamma_1\gamma_4 \frac{q}{\hbar c} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x_1} + \frac{1}{c} \frac{\partial A_1}{\partial_t} \right) = -\frac{q}{\hbar c} \gamma_1\gamma_4 \mathcal{E}_1 \equiv -\frac{q}{\hbar c} i \Sigma_1' \mathcal{E}_1,$$

ahol felhasználtuk az

$$\vec{\mathcal{E}} = -\nabla\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

Maxwell-egyenletet, és bevezettük a γ_4 matrixszal kapcsolatos Σ_i' matrixot a következő definícióval:

$$\Sigma_i' = -i\gamma_i\gamma_4 = \begin{pmatrix} & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & \end{pmatrix}, \quad (i = 1, 2, 3).$$

(Emlékeztetünk arra, hogy a "nagy" Pauli matrixok kapcsolata a gamma matrixokkal:

$$\Sigma_i = -i\gamma_j\gamma_k = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & \\ & \vec{\sigma} \end{pmatrix}, \quad (ijk) = \text{páros permutáció.})$$

Folytatva a négyzetes operátor kiértékelését:

$$\gamma_\mu\gamma_\nu D_\mu D_\nu - \kappa^2 =$$

$$D_\mu D_\mu - \kappa^2 + \frac{q}{\hbar c}(\vec{\Sigma}, \mathbf{B}) - i\frac{q}{\hbar c}(\vec{\Sigma}', \vec{\mathcal{E}}).$$

Tehát a (111) alatti "négyzetes" Dirac egyenlet a következő egzakt formába írható át:

$$(D_\mu D_\mu - \kappa^2)\Psi + \left[\frac{q}{\hbar c}(\vec{\Sigma}, \mathbf{B}) - i\frac{q}{\hbar c}(\vec{\Sigma}', \vec{\mathcal{E}}) \right] \Psi = 0. \tag{111}$$

(Az első tagban felismerhetjük a Klein-Gordon egyenletet, míg a második tag tartalmazza a spinnel való kölcsönhatásból származó információt.)

Most térünk át a nemrelativisztikus, kisenergiájú esetre. Az energia a D_4 operátorral kapcsolatos. Elvégezzük a közelítést.

$$D_4^2 = \left(\partial_4 - \frac{iq}{\hbar c}A_4\right)^2 = \left(\frac{1}{ic}\frac{\partial}{\partial t} + \frac{q}{\hbar c}\Phi\right)^2 = \left(\frac{1}{\hbar c}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right) + \frac{q}{\hbar c}\Phi\right)^2 =$$

$$\frac{1}{(\hbar c)^2}\Big(-H + q\Phi\Big)^2 = \frac{1}{(\hbar c)^2}(H' + m_0c^2 - e\Phi)^2 = \left(\frac{m_0c^2}{\hbar c}\right)^2\left(1 + \frac{H' - q\Phi}{m_0c^2}\right)^2$$

$$\approx \left(\frac{m_0c}{\hbar}\right)^2\left(1 + 2\frac{H' - q\Phi}{m_0c^2}\right) = \left(\frac{m_0c}{\hbar}\right)^2 + \frac{2m_0}{\hbar^2}(H' - q\Phi) \approx$$

$$\approx \left(\frac{m_0c}{\hbar}\right)^2 + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} - q\Phi\right) = \kappa^2 - \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} + q\Phi\right) \approx D_4^2.$$

(Itt a $H' = -\frac{\hbar}{i}\partial_t$ helyettesítést alkalmaztuk.)

A (111) alatti "négyzetes" Dirac egyenlet, amelyet a következőképpen is írhatunk:

$$(\mathbf{D}^2 + D_4^2 - \kappa^2)\Psi - \frac{e}{\hbar c}\Big[(\vec{\Sigma}, \mathbf{B}) - i(\vec{\Sigma}', \vec{\mathcal{E}})\Big]\Psi = 0,$$

az előbbi közelítés elvégzése után a következő alakot ölti ($q = -e$):

$$\left(\mathbf{D}^2 - \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(\frac{\hbar}{i}\partial_t - e\Phi\right)\right)\Psi - \frac{e}{\hbar c}\Big[(\vec{\Sigma}, \mathbf{B}) - i(\vec{\Sigma}', \vec{\mathcal{E}})\Big]\Psi = 0. \quad \Big/ - \frac{\hbar^2}{2m_0}$$

A jelölés szerint elvégezzük a beszorzást, és $-i\hbar\partial_t-$t átvisszük a túloldalra:

$$\left(-\frac{\hbar}{2m_0}\vec{\mathbf{D}}^2 - e\Phi + \frac{\hbar e}{2m_0 c}\Big[(\vec{\Sigma}, \mathbf{B}) - i(\vec{\Sigma}', \vec{\mathcal{E}})\Big]\right)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}. \tag{112}$$

Ez viszont éppen a Pauli-Schrödinger egyenlet (ld. 4.5.3. fejezet) a szögletes zárójelben megjelenő második tagtól eltekintve! Erről a tagról viszont kimutatható, hogy a potenciális energiát jelentő $e\Phi$ taghoz képest elhanyagolható, mert annak $(v/c)^2-$szerese. A szögletes zárójel első tagja éppen a spinmozgáshoz tartozó mágneses térbeli potenciális energia tag (ld. 4. fejezet): $V^{\mathbf{S}}_{magn} = -(\mathbf{M}^S, \mathbf{B})$, ahol a spin-mágneses momentum $\mathbf{M}^S = -2\mu_B\frac{1}{\hbar}\mathbf{S} = -\mu_B\vec{\Sigma}$, $\quad \mu_B = e\hbar/2m_0c$. (A V^L_{magn} mágneses potenciális energiát a $\mathbf{D}^2 = (\partial_i + ieA_i/\hbar c)^2$ operátorból származtathatjuk le [ld.7. fejezet].) Most már csak azt kell belátni a 4. fejezethez való teljes összhang érdekében, hogy a $\vec{\Sigma}$ operátor sajátértéke ± 1 lehet csak. Ebből ui. következne, hogy a saját mágneses momentum $\mathbf{B}$ bármely irányára nézve: $\pm\frac{\hbar e}{2m_0c} = \pm\mu_B$.

Bizonyítás. Kiindulunk a definícióból:

$$\vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \Sigma_1 \\ \Sigma_2 \\ \Sigma_3 \end{pmatrix} = -i\begin{pmatrix} \gamma_2\gamma_3 \\ \gamma_3\gamma_1 \\ \gamma_1\gamma_2 \end{pmatrix}.$$

A $z-$irányú komponensről már beláttuk, hogy sajátértéke ± 1. Most belátjuk Σ_1-ről is:

$$|\Sigma_1 - \lambda| = 0,$$

hiszen

$$\Sigma_1 = \begin{pmatrix} & 1 & & \\ 1 & & & \\ & & & 1 \\ & & 1 & \end{pmatrix},$$

és így

$$0 = \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & & \\ 1 & -\lambda & & \\ & & -\lambda & 1 \\ & & 1 & -\lambda \end{vmatrix} = -\lambda \begin{vmatrix} -\lambda & & \\ & -\lambda & 1 \\ & 1 & -\lambda \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 1 & & \\ & -\lambda & 1 \\ & 1 & -\lambda \end{vmatrix} =$$

$$\lambda^2(\lambda^2-1) - (\lambda^2-1) = (\lambda^2-1)(\lambda^2-1) = (\lambda^2-1)^2 = 0 \rightarrow \lambda = \pm 1.$$

Hasonlóan, $|\Sigma_2 - \lambda| = 0-$ból szintén következik: $\lambda \pm 1$.

8.5. AZ ELEKTRON SZABAD MOZGÁSA (A_μ=0).

Kiindulunk a (105) alatt megismert Dirac egyenletből:

$$(\gamma_\mu \partial_\mu + \kappa)\, \Psi = 0.$$

Kézenfekvő feltenni a kérdést: vajon a szabad Dirac egyenletnek is vannak síkhullám megoldásai? Tehát:

$$\Psi = C \exp(ik_\mu x_\mu)$$

megoldása-e a Dirac egyenletnek állandó (x_μ-független)

$$C = \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \end{bmatrix}$$

amplitúdók és k_μ, $(\mu = 1, ..., 4)$ állandók mellett? Amennyiben $k_\mu-$ ről kiderülne, hogy éppen a négyes hullámszám-vektor komponenseivel egyenlő, akkor a fenti megoldás tényleg a Schrödinger egyenletet is kielégítő korábban megismert síkhullám megoldás lenne (amely a valóságban előforduló hullámcsomag-megoldás extrem közelítése). Ugyanis

$$\Psi = C \exp(ik_\mu x_\mu) = C \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_\mu x_\mu\right) = C \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{px} + p_4 x_4)\right)$$

$$= C \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{px} + \frac{i}{c} E\, ict)\right) = C \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\mathbf{px} - Et)\right).$$

Behelyettesítve ezt a feltételezett megoldást a Dirac egyenletbe, kapjuk:

$$(\gamma_1 \partial_1 + \gamma_2 \partial_2 + \gamma_3 \partial_3 + \gamma_4 \partial_4 + \kappa) \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \end{bmatrix} e^{\frac{i}{\hbar} p_\mu x_\mu} = 0.$$

Kihasználva, hogy C komponensei a négyes térben állandók, elvégezhetjük a deriválásokat:

$$\frac{i}{\hbar}(\gamma_1 p_1 + \gamma_2 p_2 + \gamma_3 p_3 + \gamma_4 p_4 + \frac{\hbar}{i}\kappa) \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \end{bmatrix} = 0.$$

Homogén lineáris egyenletrendszert kaptunk $C_\mu-$k meghatározására. Triviálistól különböző megoldás akkor és csakis akkor van, ha

$$\frac{i}{\hbar}\det\left|\gamma_\mu p_\mu + \frac{\hbar}{i}\kappa\right| = 0.$$

Részletesen kiírva:

$$\frac{i}{\hbar}\det\Bigg[i\begin{pmatrix} & & & -p_1 \\ & & -p_1 & \\ & p_1 & & \\ p_1 & & & \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} & & & -p_2 \\ & & p_2 & \\ & p_2 & & \\ -p_2 & & & \end{pmatrix} +$$

$$+i\begin{pmatrix} & & -p_3 & \\ & & & p_3 \\ p_3 & & & \\ & -p_3 & & \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p_4 & & & \\ & p_4 & & \\ & & -p_4 & \\ & & & -p_4 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{i}\begin{pmatrix} \kappa & & & \\ & \kappa & & \\ & & \kappa & \\ & & & \kappa \end{pmatrix}\Bigg] =$$

$$= \frac{1}{\hbar}\begin{vmatrix} p_4 + \frac{\hbar}{i}\kappa & 0 & -ip_3 & -ip_1 - p_2 \\ 0 & p_4 + \frac{\hbar}{i}\kappa & -ip_1 + p_2 & ip_3 \\ ip_3 & +ip_1 + p_2 & -p_4 + \frac{\hbar}{i}\kappa & 0 \\ ip_1 - p_2 & -ip_3 & 0 & -p_4 + \frac{\hbar}{i}\kappa \end{vmatrix} = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 + p_4^2 + m_0^2c^2 = 0.$$

Ez viszont éppen megegyezik a (104) alatti alapösszefüggéssel. Tehát $p_\mu-$t azonosíthatjuk a négyes impulzussal.

Vizsgáljuk a negyedik komponenst:

$$p_4 = i\frac{E}{c}.$$

Négyzetre emelve

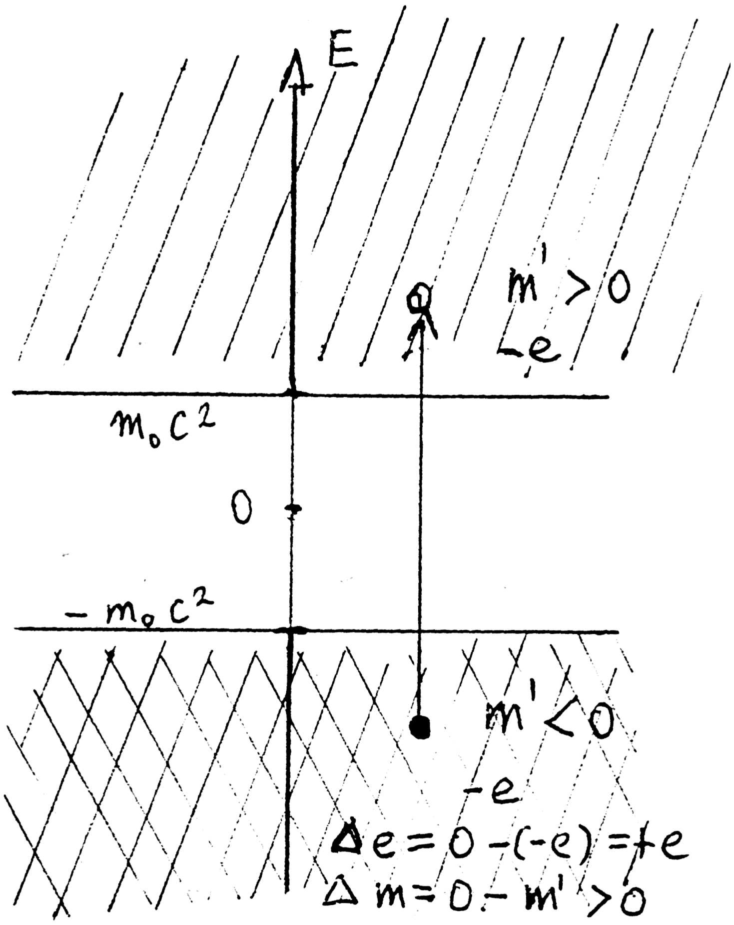
$$-p_4^2 = \frac{E^2}{c^2} = \mathbf{p}^2 + m_0^2c^2 \quad \Rightarrow \quad E^2 = c^2\left(\mathbf{p}^2 + m_0^2c^2\right).$$

Gyököt vonva az energia négyzetéből,

$$E = \pm c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m_0^2c^2}. \tag{113}$$

kapjuk azt a nevezetes összefüggést, amely messzemenő következtetések levonását teszi lehetővé. Minthogy az impulzus abszolút értéke szabad részecske esetén 0 és $+\infty$ között tetszőlegesen változhat, (113) azt jelenti, hogy a részecske szabad (kinetikus) energiája $-\infty$ is lehet (ld. 53. ábra):

$$-\infty \le E \le -m_0c^2 \quad \textit{és} \quad m_0c^2 \le E \le +\infty.$$



53. ábra. Szabad részecske lehetséges energiája és a párgerjesztés szemléltetése.

Az (113) egyenlettel kapcsolatban néhány lényeges megállapítást tehetünk:

i) Az energia nem korlátos alulról;

ii) A szabad részecske teljes energiája negatív is lehet.

Az i) megállapításból az következik, hogy nem létezik a nemrelativisztikus Schrödinger egyenlet tárgyalásánál tanult Rayleigh-Ritz-féle variációs elv. Nem alkalmazhatjuk tehát azokat a kényelmes módszereket, amelyek az energia korlátosságán alapulnak. Nagysebességű elektron mozgások esetén (ilyen található a nehéz atomokban is) a legtöbb kvantumkémiai módszer csődöt mond. [A probléma szép illusztrálását és egy kivezető út felvázolását találhatjuk meg a J.Chem.Phys. **80**, 4333, (1984) cikkben.]

A ii) megállapításból az következik, hogy minden részecskének van egy vele egyező tömegű, de ellentett töltésű antirészecske párja. Ez a következő módon látható be. Az alapvető Einstein reláció, az $E = -c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m_0^2c^2} \equiv m'c^2$ összefüggés a negatív energiájú részecske tömegére $m' < 0$ negatív értéket jelent. Vegyünk ekkor egy pozitív és negatív tömegű elektront:

tömeg	töltés
$m' = m_e > 0$	$-e$
$m' = -m_e < 0$	$-e$

Ilyen rendszer létezése esetén azt tapasztalnánk, hogy az azonos töltések taszítása miatt a negatív tömegű részecske nem távolodna a pozitív tömegű elektrontól, hanem éppen vele egy irányba mozdulna el. Ilyen egyirányba haladó elektron "vonatokat" viszont eddig még soha nem figyeltek meg.

A probléma megoldására Dirac feltételezte 1927-ben, hogy az $m' = -m_e < 0$ tömegű elektronállapotok mind be vannak töltve az engedélyezett Pauli nívókon. Ez az ún. Dirac tenger, amelyet a vákuummal azonosítunk. Vákuum állapotban minden fizikai mennyiség (tömeg, töltés, stb.) értéke zérus, és minden fizikai mennyiség értéket ehhez képest figyelünk meg. Ha például elektromágneses gerjesztés révén egy negatív energiájú és így negatív tömegű elektront felgerjesztünk a pozitív energiájú tartományba, akkor az a jól ismert, pozitív tömegű elektronként fog mérőműszereink számára megjelenni. A Dirac tengerben viszont hiányzni fog ez a negatív tömegű és töltésű elektron, s így a vákuum szerkezetében további változás figyelhető meg: egyúttal egy hiány, "lyuk" is keletkezik, amely $0 - m' = 0 - (-m_e) = m_e > 0$ tömeget és $0 - (-e) = +e$ töltést képvisel. Ezt az együttes folyamatot hívjuk párkeltésnek (ld. 53. ábra.). Az elektron tömegével azonos, de töltésével ellentétes, szimultán keletkező részecskét *pozitron*nak nevezzük. Anderson 1932-ben történt pozitron felfedezése a Dirac egyenlet nagy diadala volt.

Ezen megjegyzések után térjünk vissza röviden a szabad mozgás tárgyalásához. A teljes megoldáshoz a Ψ hullámfüggvényben szereplő C amplitúdó meghatározására is szükség lenne. Utalunk Nagy Károly Kvantummechanika c. könyvének IX. fejezetére, ahol a számolás részletezve van, itt csak a végeredményt foglaljuk össze.

A részletes tárgyalásból kiderül, hogy az állapotfüggvény első két komponense az ún. "nagy", a másik kettő pedig az ún. "kicsi" komponens, ami $v/c-$szerese a nagynak:

$$\Psi = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sim 1 \\ \sim 1 \\ \sim v/c \\ \sim v/c \end{bmatrix}$$

Másrészt, $v \sim c$ extrém relativisztikus esetben megmutatható, hogy a szabad részecske spinje és impulzusa egymáshoz képest csaknem párhuzamosan áll be: a spin és momentum egymáshoz viszonyított beállását *helicitás*nak (csavarodásnak) nevezzük és a

$$\hat{h} = \frac{\vec{\Sigma}\mathbf{p}}{p}$$

operátor várható értékével jellemezzük (amelyet $h-$val jelölünk). A számolásokból kiderül, hogy az adódó négy független megoldást az energia $E > 0, E < 0$ és $h = +1, h = -1$ négyféle párosításával jellemezhetjük.

Nemrelativisztikus közelítésben csak az első két komponensnek van szerepe:

$$\Psi_{E,h} \approx \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix}.$$

A Dirac egyenletet csak erre a két komponensre redukálva (a nemrelativisztikus közelítés elvégzése után) éppen a (44) alatti Pauli egyenletet kapnánk vissza.

Megjegyezzük, hogy a Dirac egyenletnek akkor is van megoldása, ha az m_0 nyugalmi tömeg nulla. Szabad tér esetén:

$$\gamma_\mu \partial_\mu \Psi = 0. \tag{114}$$

Ez a Weyl egyenlet, amely például a szabad neutrínók viselkedését írja le.

8.6. A H-ATOM KVANTUMELMÉLETE A DIRAC EGYENET ALAPJÁN.

A pontos spektroszkópiai kísérletek megmutatták, hogy a hidrogénatom színképe összetettebb, mint azt a Schrödinger egyenlet (Bohr képlet) alapján várjuk. Az elektronnak spinje révén saját mágneses momentuma is van és ez kölcsönhatásba lép a pályamomentummal arányos mágneses momentummal. Így, az ún. spin-pálya kölcsönhatás miatt a színkép finomszerkezetet mutat, amely a Dirac egyenlettel leírható. Mint láttuk, a Dirac egyenlet természetes módon tartalmazza az elektron spinjével kapcsolatos információkat is. A Dirac egyenlettel történő tárgyalás megmutatja, hogy a hidrogénatom energiaszintjei nemcsak az n főkvantumszámtól függnek, hanem az ℓ mellékkvantumszámtól és a j teljes impulzusmomentum kvantumszámtól is ($j = \ell \pm 1/2$).

Kiindulunk a Dirac egyenlet (108a) alatti $i\hbar\partial_t\Psi = H\Psi$ alakjából, ahol H a (109) alatti Dirac Hamilton operátort jelöli. Minthogy a hidrogénatom problémájában a potenciál konzervatív ($\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = 0, \Phi(\mathbf{r},t) = \phi(r)$), sőt gömbszimmetrikus, ezért szeparálhatjuk a hullámfüggvényt a szokásos módon: $\Psi(\mathbf{r},t) = \psi(\mathbf{r})\exp(-iEt/\hbar)$. A megoldandó probléma tehát a következőképpen írható fel:

$$(H - E)\psi(\mathbf{r}) = 0, \quad H = \hbar c \gamma_4 \vec{\gamma}\vec{\partial} + e\phi + m_0 c^2 \gamma_4. \tag{115}$$

Vezessük be

$$\vec{\Sigma}' = -i\vec{\gamma}\gamma_4$$

vektoroperátort (amelyet az irodalomban átalában $\vec{\alpha}$-val jelölnek) a

$$\Sigma_i = -i\gamma_j\gamma_k,$$

(ijk =páros permutáció) mintájára. Könnyű belátni, hogy

$$\{\Sigma_i', \Sigma_j'\} = 2\delta_{ij},$$

valamint, hogy $\vec{\Sigma}'$ és $\vec{\Sigma}$ között az összefüggés:

$$\vec{\Sigma}' = -\gamma_5\vec{\Sigma}, \qquad \gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4.$$

Az itt bevezetett γ_5 operátornak a többi γ_μ operátorhoz hasonló tulajdonsága van:

$$\gamma_5\gamma_\mu = -\gamma_\mu\gamma_5, \qquad \gamma_5^2 = 1.$$

A feladat tehát a

$$H = c\vec{\Sigma}'\mathbf{p} + m_0c^2\gamma_4 + e\phi(r)$$

Hamilton operátorban előforduló $\vec{\Sigma}'\mathbf{p}$ operátor gömbi polárkoordinátákba való felírása. Felhasználjuk az ismert összefüggést:

$$(\vec{\Sigma}\mathbf{a})(\vec{\Sigma}\mathbf{b}) = (\mathbf{ab}) + i(\vec{\Sigma}, [\mathbf{a}\times\mathbf{b}]),$$

ahol $\mathbf{a}$ és $\mathbf{b}$ két, tetszőleges vektor operátor. Legyen $\mathbf{a} = \mathbf{r}$ és $\mathbf{b} = \mathbf{L}$:

$$(\vec{\Sigma}\mathbf{r})(\vec{\Sigma}\mathbf{L}) = (\mathbf{rL}) + i(\vec{\Sigma}, [\mathbf{r}\times[\mathbf{r}\times\mathbf{p}]]) = i(\vec{\Sigma}, \mathbf{r}(\mathbf{rp}) - r^2\mathbf{p}) = i(\vec{\Sigma}, \mathbf{r})(\mathbf{rp}) - ir^2(\vec{\Sigma}\mathbf{p}),$$

ahol felhasználtuk az $\mathbf{a}\times(\mathbf{b}\times\mathbf{c}) = \mathbf{b}(\mathbf{ac}) - (\mathbf{ab})\mathbf{c}$ összefüggést. Így tehát

$$ir^2(\vec{\Sigma}\mathbf{p}) = i(\vec{\Sigma}\mathbf{r})(\mathbf{rp}) - (\vec{\Sigma}\mathbf{r})(\vec{\Sigma}\mathbf{L}).$$

Átalakítva:

$$r^2(\vec{\Sigma}\mathbf{p}) = (\vec{\Sigma}\mathbf{r})\Big((\mathbf{rp}) + i(\vec{\Sigma}\mathbf{L})\Big).$$

$(-\gamma_5)$-tel szorozva és r^2-tel osztva kapjuk:

$$\begin{aligned}(\vec{\Sigma}'\mathbf{p}) &= (\vec{\Sigma}'\frac{\mathbf{r}}{r})\left((\frac{\mathbf{r}}{r}\mathbf{p}) + i\frac{(\vec{\Sigma}\mathbf{L})}{r}\right) = \\ {\Sigma_r}'&\left(\frac{\hbar}{i}\nabla_r + i\frac{(\vec{\Sigma}\mathbf{L})}{r} + \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r} - \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\right) = \\ {\Sigma_r}'&\left(-i\hbar(\partial_r + \frac{1}{r}) + \frac{i}{r}\big((\vec{\Sigma}\mathbf{L}) + \hbar\big)\right).\end{aligned} \tag{116}$$

Tehát

$$\begin{aligned}H &= c\vec{\Sigma}'\mathbf{p} + m_0c^2\gamma_4 + e\phi(r) = \\ -ic\hbar{\Sigma_r}'\big(\partial_r + \frac{1}{r}\big) &+ \frac{ic}{r}\Sigma_r'(\vec{\Sigma}\mathbf{L}) + \hbar) + m_0c^2\gamma_4 + e\phi(r) = \\ -ic\hbar{\Sigma_r}'\frac{i}{\hbar}p_r &+ \frac{ic}{r}\Sigma_r'\gamma_4\Omega + m_0c^2\gamma_4 + e\phi(r),\end{aligned}$$

ahol bevezettük a $\gamma_4\Omega = \vec{\Sigma}\mathbf{L} + \hbar$ jelölést. Mármost belátható, hogy az Ω operátor felcserélhető az energia operátorral: $[H, \Omega] = 0$. Ugyanis

$$[\Sigma_r', \Omega] = 0, \quad [\gamma_4, \Omega] = 0, \quad [p-_r, \Omega] = 0.$$

Másrészt

$$\Omega^2 = (\vec{\Sigma}\mathbf{L} + \hbar)^2 = (\vec{\Sigma}\mathbf{L})^2 + 2\hbar(\vec{\Sigma}\mathbf{L}) + \hbar^2 = \left(\mathbf{L} + \frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{4},$$

ugyanis

$$(\vec{\Sigma}\mathbf{L})^2 = (\vec{\Sigma}\mathbf{L})(\vec{\Sigma}\mathbf{L}) = (\mathbf{L}, \mathbf{L}) + i(\vec{\Sigma}, \mathbf{L}\times\mathbf{L}) = L^2 - \hbar(\vec{\Sigma}, \mathbf{L})$$

és $\vec{\Sigma}^2 = 3$. Tehát $\mathbf{S} = \hbar\vec{\Sigma}/2$ miatt

$$\Omega^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 + \frac{\hbar^2}{4} \equiv J^2 + \frac{\hbar^2}{4}.$$

A sajátértékegyenletet rögtön felírhatjuk:

$$\Omega^2\eta_j = \hbar^2(j(j+1)+\frac{1}{4})\eta_j, \qquad j=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{5}{2}...,$$

azaz

$$\Omega^2\eta_k = \hbar^2k^2\eta_k, \qquad k^2=(j+\frac{1}{2})^2 = 1^2,2^2,3^2,...,$$

avagy

$$\Omega\eta_k = \hbar k\eta_k, \qquad k=(j+\frac{1}{2}) = \pm1,\pm2,\pm3,\dots .$$

Mivel H felcserélhető Ω-val, van közös sajátfüggvény rendszerük. Ezért a keresett energiasajátérték egyenlet:

$$\Big[E\cdot 1 - e\phi(r)\cdot 1 - m_0c^2\gamma_4 + ic\hbar\Sigma_r{}'\frac{i}{\hbar}p_r - \frac{ic}{r}\Sigma_r'\gamma_4\hbar k\Big]\psi = 0.$$

Felhasználva a

$$\Sigma_r' = \begin{pmatrix} & & -i & \\ & & & -i \\ i & & & \\ & i & & \end{pmatrix}, \quad \gamma_4 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix},$$

$$\Sigma_r'\gamma_4 = \begin{pmatrix} & & i & \\ & & & i \\ i & & & \\ & i & & \end{pmatrix}, \quad \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

konkrét előállításokat, a hidrogénatom sajátérték problémája a következőképpen írható fel:

$$(E-e\phi(r)-m_0c^2)\psi_1(\mathbf{r}) + \hbar c(\partial_r + r^{-1})\psi_3(\mathbf{r}) + \hbar ckr^{-1}\psi_3(\mathbf{r}) = 0, \qquad (*)$$

$$(E-e\phi(r)-m_0c^2)\psi_2(\mathbf{r}) + \hbar c(\partial_r + r^{-1})\psi_4(\mathbf{r}) + \hbar ckr^{-1}\psi_4(\mathbf{r}) = 0,$$

$$(E-e\phi(r)+m_0c^2)\psi_3(\mathbf{r}) - \hbar c(\partial_r + r^{-1})\psi_1(\mathbf{r}) + \hbar ckr^{-1}\psi_1(\mathbf{r}) = 0, \qquad (*)$$

$$(E-e\phi(r)+m_0c^2)\psi_4(\mathbf{r}) - \hbar c(\partial_r + r^{-1})\psi_2(\mathbf{r}) + \hbar ckr^{-1}\psi_2(\mathbf{r}) = 0.$$

Elegendő csak a két (*)-gal jelölt egyenlettel foglalkoznunk, mivel az alattuk lévő egyenletek egyszerű $1\leftrightarrow 2$, $3\leftrightarrow 4$ egyidejű (és megengedett) helyettesítéssel ezekből megkaphatók. Más szóval, a ψ_1,ψ_3 komponensekre vonatkozó egyenletek ugyanazt az eredményt adják, mint a ψ_2,ψ_4 komponensekre vonatkozók s így csak két komponenssel kell foglalkoznunk. A szög- és spinváltozók szeparálása után visszmaradó radiális komponenseket $f(r), g(r)$-rel jelölve, azaz a

$$\Psi = \Big(\frac{1}{r}\Big)\begin{pmatrix} f(r)F_{ljm_jm_s}(\vartheta,\varphi,s) \\ g(r)G_{ljm_jm_s}(\vartheta,\varphi,s) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_3 \end{pmatrix}$$

előállítást a Dirac egyenletbe való helyettesítés után a két megmaradó csatolt radiális egyenlet a következő:

$$(E-e\phi(r)-m_0c^2)f(r) + \hbar c\frac{\mathrm{d}g(r)}{\mathrm{d}r} + \hbar c(k+1)\frac{1}{r}g(r) = 0,$$

$$(E-e\phi(r)+m_0c^2)g(r) - \hbar c\frac{\mathrm{d}f(r)}{\mathrm{d}r} + \hbar c(k+1)\frac{1}{r}f(r) = 0.$$

E csatolt radiális egyenletrendszer az $e\phi(r) = -e^2/r, E=\hbar\omega, m_0c^2=\hbar\omega_0, e^2/\hbar c\equiv\alpha = 1/137$ jelölések bevezetése után ugyanúgy a Sommerfeld-féle polinom módszerrel oldható meg, mint a nemrelativisztikus esetben. Először az aszimptotikus megoldást határozzuk meg: $f_a(r) = g_a(r) = \exp(-\beta r)$, ahol

$\beta = \sqrt{\omega_0^2 - \omega^2}/c$. Majd a teljes megoldást ezen aszimptotikus megoldás és két ismeretlen polinom szorzataként vesszük fel. A regularitási követelmény miatt a polinomoknak véges fokszámúaknak kell lenni, valahol meg kell szakadni az összegzésnek. E megszakadás következményeként az E energiasajátértékekre csak az

$$E = m_0 c^2 \left[1 + \frac{\alpha^2}{(n' + \sqrt{k^2 - \alpha^2})^2} \right]^{-1/2} \tag{117}$$

sajátértékek adódnak $n' = 0, 1, 2, ...$ sajátértékek mellett. Mint látjuk, az energiasajátérték most a $k = j + 1/2$, $j = \ell \pm 1/2$ kvantumszámoktól is függ, valamint tartalmazza az $\alpha = 1/137$ finomszerkezeti állandót. Felhasználva a kis x esetén érvényes $1/\sqrt{1+x} = 1 - \frac{1}{2}x + \frac{3}{4}x^2 - ...$ sorfejtést, az energiasajátértéket jó közelítéssel az

$$E = m_0 c^2 \left[1 - \frac{\alpha^2}{2n^2} - \frac{\alpha^4}{2n^4} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right], \quad n = n' + j + \frac{1}{2}, \quad l - \frac{1}{2} \leq j \leq l + \frac{1}{2} \tag{117a}$$

képlettel adhatjuk meg.

A zárójelben álló első tag a relativisztikus tárgyalásból adódó nyugalmi energia járuléka. A második tag a Schrödinger egyenletből adódó Bohr-féle energiakifejezés. A harmadik tag megjelenése szolgáltat magyarázatot a hidrogénatom finomszerkezetére, amely tehát teljesen relativisztikus eredetű.

A sajátfüggvények meghatározását is magábafoglaló részletes tárgyalás iránt érdeklődőknek figyelmébe ajánljuk Marx György, illetve Nagy Károly Kvantummechanika tankönyveit.

8.7. A SPIN-PÁLYA KÖLCSÖNHATÁS

Az előző fejezetben említést tettünk az elektron spin és pályamozgása révén keletkező mágneses momentumok kölcsönhatásáról, amely a finomszerkezetet okozta az hidrogénatom színképében. Most ezen spinpálya kölcsönhatásnak általánosabb tárgyalását adjuk. Megvizsgáljuk, hogy a nemrelativisztikus közelítés esetén milyen formában jelentkezik a spinpálya kölcsönhatásból adódó energiaoperátor.

Tekintsük a

$$H = c\vec{\Sigma}'\mathbf{p} + m_0c^2\gamma_4 + V(r)$$

energiaoperátort ($\mathbf{A} = 0, V(r) = q\phi(r)$.)

A $\vec{\Sigma}'$ matrix kifejezhető a 2×2-es Pauli matrixokkal:

$$\vec{\Sigma}' = \begin{pmatrix} & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} & 1 \\ 1 & \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} & -i \\ i & \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}.$$

Válasszuk le az energiából a nyugalmi energiát: $E = m_0c^2 + E'$. A Dirac egyenletet a 2×2-es matrixok megjelenése miatt átírjuk a következő módon:

$$(E' \cdot 1 + m_0c^2 \cdot 1 - H)\psi = 0, \quad \psi = \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix}, \quad \psi_a = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad \psi_b = \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \tag{118}$$

A $H-$beli $\gamma_4 = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$ miatt (ahol 1 a 2×2-es egységmatrixot jelöli) a következő csatolt egyenletrendszert kapjuk ψ_a és ψ_b meghatározására:

$$(E' - V(r))\psi_a = c(\vec{\sigma}\mathbf{p})\psi_b,$$

$$(E' + 2m_0c^2 - V(r))\psi_b = c(\vec{\sigma}\mathbf{p})\psi_a.$$

Ez utóbbiból kifejezhetjük ψ_b-t:

$$\psi_b = (E' + 2m_0c^2 - V(r))^{-1}c(\vec{\sigma}\mathbf{p})\psi_a,$$

és behelyettesíthetjük az első egyenletbe:

$$E'\psi_a = \Big[c(\vec{\sigma}\mathbf{p})\big(E' + 2m_0c^2 - V(r)\big)^{-1}c(\vec{\sigma}\mathbf{p}) + V\Big]\psi_a.$$

Ez egy Schrödinger típusú energiasajátérték egyenletre hasonlít. Így a V potenciális tag melletti bonyolult tag a kinetikus energiaoperátort jelenti, amelyben az inverz operátort sorba fejthetjük $[(1+x)^{-1} = 1 - x \ (|x| << 1)$ felhasználásával] a következőképpen:

$$\Big[c(\vec{\sigma}\mathbf{p})\big(E' + 2m_0c^2 - V(r)\big)^{-1}c(\vec{\sigma}\mathbf{p}) + V\Big] =$$

$$\Big[c(\vec{\sigma}\mathbf{p})(2m_0c^2)^{-1}(1 - \frac{E' - V(r)}{2m_0c^2})c(\vec{\sigma}\mathbf{p}) + V\Big] =$$

$$\Big[\frac{p^2}{2m_0} - \frac{p^2(E' - V(r))}{4m_0^2c^2} + V(r) + \frac{1}{4m_0^2c^2}(\vec{\sigma}\mathbf{p})V(r)(\vec{\sigma}\mathbf{p})\Big].$$

Felhasználva (116)-ot a Dirac egyenletből végül is a következő egyenlet származtatható le:

$$\left[\frac{p^2}{2m_0} - \frac{p^4}{8m_0^3c^2} + V(r) - \frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2m_0^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}(\mathbf{S},\mathbf{L})\right]\psi_a = E'\psi_a.$$

Amint látjuk, az első és harmadik tag a szokásos kinetikus és potenciális energiaoperátorral egyezik meg, ami a nemrelativisztikus Schrödinger egyenletben szerepel. Ezért a mellettük megjelenő tagok a spin konzisztens tárgyalása és a relativisztikus tárgyalásmód következménye. Az utolsó tag a spin-pálya kölcsönhatásból eredő energiajárulék.

Most belátjuk, hogy az utolsó tag, az ún. 'spin-pálya kölcsönhatás' tag, a mágneses momentumok révén megvalósuló mágneses potenciális energiával arányos. A 4. fejezetben láttuk, hogy a spinhez, ill. pályamomentumhoz tartozó mágneses nyomaték

$$\mathbf{M}^L = -\frac{e\hbar}{2m_0c}\frac{1}{\hbar}\mathbf{L} \equiv -\mu_B\frac{1}{\hbar}\mathbf{L},$$

$$\mathbf{M}^S = -2\mu_B\frac{1}{\hbar}\mathbf{S}$$

Ezért az utolsó tagot a következőképpen is írhatjuk

$$\frac{1}{e^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\Big(\mathbf{M^S},\mathbf{M^L}\Big).$$

$V(r) = -e^2/r$ esetén látjuk, hogy a spin-pálya tag r^{-3}-mal arányos és a benneszereplő konstans, valamint az előforduló effektív (Bohr-rádiusz) távolságok miatt kicsi $V(r)-$hez képest.

8.8. REPREZENTÁCIÓELMÉLET

8.8.1. FOLYTONOS ÉS DISZKRÉT REPREZENTÁCIÓK.

Tekintsük az

$$(E-H)|\psi\rangle = 0$$

stacionárius Schrödinger egyenletet, ahol $H = H(x_i, p_i, \Sigma_i, ...)$ az energiaoperátor, amely függ az koordináta, impulzus, spin, ... operátoroktól, $|\psi\rangle$ pedig a kvantummechanikai rendszer E energiájú állapotát jellemzi.

A kvantummechanika axiómái közé tartozik az, hogy a fizikai mennyiségekhez absztrakt operátorokat, a fizikai állapotokhoz pedig Hilbert-térbeli absztrakt állapotvektorokat rendelünk. Kérdés az, hogy miként "reprezentáljuk" (jelenítsük meg, tegyük hozzáférhetővé a számolások számára) ezeket az absztrakt mennyiségeket. A választ a 3. fejezet elején egyszer már megfogalmaztuk: bárhogyan, csak arra kell ügyelnünk, hogy az egyes "reprezentált" operátorok kielégítsék a kvantummechanika alaptörvényét jelentő felcserélési relációkat, nevezetesen

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_j] = \frac{\hbar}{i}\delta_{ij}, \qquad i,j = 1,2,3.$$

A reprezentációelmélet alapját az az állítás (Riesz-Fischer tétel) képezi, hogy az egyes önadjungált operátoroknak *van* teljes sajátfüggvény rendszere (ez a bázis) és e szerint "reprezentálunk": az operátorokat matrixelemeikkel, az állapotokat pedig a kifejtési együtthatókkal.

Vannak folytonos és diszkrét reprezentációk, attól függően, hogy milyen operátor sajátállapot rendszere szerint akarunk reprezentálni. (A diszkrét reprezentációt szokták matrix, vagy $n-$reprezentációnak is hívni.) Van e kettő kombinációjából adódó ún. vegyes reprezentáció is, amikor az operátor sajátértékspektruma diszkrét és folytonos (ilyen pl. a hidrogénatom energiaoperátorának a spektruma).

Az $x-$reprezentációban (vagy koordináta reprezentációban) a bázist az $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$ sajátérték egyenlet összes $|x\rangle$ sajátállapota adja. Bár a 3. fejezetben foglalkoztunk már ezekkel a sajátállapotokkal és megállapítottuk róluk, hogy ($x-$reprezentációban) a Dirac-delta disztribúciókkal azonosak, erre a konkrét előállításra most nem lesz szükségünk, csupán a norma kifejezését kell ismernünk. (Folytonos spektrum esetén ez is Dirac-delta.)

Magát az $\hat{x}$ absztrakt operátort az $|x\rangle$ bázison vett matrixelemével reprezentáljuk koordináta reprezentációban:

$$\langle x'|\hat{x}|x\rangle = x\langle x'|x\rangle = x\delta(x'-x),$$

ahol felhasználtuk a sajátértékegyenletet és a norma kifejezését.

A $\hat{p}-$operátor matrixelemeinek definíciója az $x-$reprezentációban:

$$\langle x'|\hat{p}|x\rangle = \langle x'|\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}|x\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\delta(x'-x),$$

ugyanis csak így teljesül a $[\hat{p},\hat{x}]$ kommutátor operátor mátrixelemeire a felcserélési reláció:

$$\langle x'|[\hat{p},\hat{x}]|x\rangle = \frac{\hbar}{i}\delta(x-x').$$

A $|\psi\rangle$ absztrakt állapotvektor kifejthető az $x-$reprezentációhoz tartozó absztrakt $|x\rangle$ állapotok szerint, mivel azok teljes rendszert alkotnak ($\sum_x \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x$, $c_x = c(x)$) :

$$|\psi\rangle = \sum_x c_x|x\rangle, \quad \text{ahol} \quad c_x = \langle x|\psi\rangle \equiv \psi(x).$$

Ez azt jelenti, hogy az absztrakt $|\psi\rangle$ állapotvektorhoz egyértelmű módon hozzárendelhető a $c_x \equiv \psi(x)$ folytonos számsorozat (függvény). Tehát az eddig állapotfüggvénynek, hullámfüggvénynek nevezett mennyiség nem más, mint az absztrakt $|\psi\rangle$ állapotvektor koordináta sajátállapotok szerinti kifejtésének együtthatói (függvényei).

A $(H-E)|\psi\rangle = 0$ absztrakt sajátérték egyenletből számokat (matrixelemeket) nyerhetünk, ha képezzük az $\langle x|$ absztrakt állapottal alkotott skalárszorzatát: $\langle x|H-E|\psi\rangle = 0$. Felhasználva az $1 = \sum_{x'}|x'\rangle\langle x'|$ teljességi relációt, a következő összefüggést nyerjük a fenti matrix elemre:

$$\langle x|\big(H(\hat{p},\hat{x},...)-E\big)\sum_{x'}|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle = \sum_{x'}\langle x|H(\hat{p},\hat{x},...)-E|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x'\Big(H(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x'},x',...)-E\Big)\delta(x-x')\psi(x') = \Big(H(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x},x,...)-E\Big)\psi(x) = 0.$$

Tehát a stacionárius Schrödinger egyenlet nem más, mint a fenti operátor sajátérték egyenlet koordináta reprezentációbeli alakja. (Ezért hívják néha az $x-$reprezentációt Schrödinger reprezentációnak.)

Az $p-$, vagy impulzus reprezentációban a bázist a $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$ sajátérték egyenlettel meghatározott $|p\rangle$ sajátállapotok adják, amelyekkel a 3. fejezetben foglalkoztunk. A $\hat{p}$ operátor *diagonális* a $p-$reprezentációban:

$$\langle p'|\hat{p}|p\rangle = p \cdot \delta(p' - p) \cdot \quad .$$

Ahhoz, hogy a $[\hat{p}, \hat{x}] = \hbar/i$ operátor egyenlőség fennálljon, az $\hat{x}$ operátor $p-$reprezentációbeli matrixelemét a következőképpen kell választanunk:

$$\langle p'|\hat{x}|p\rangle = \left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}\delta(p' - p)\right).$$

Ekkor ugyanis

$$\langle p'|[\hat{p}, \hat{x}]|p\rangle = \frac{\hbar}{i}\delta(p' - p).$$

A teljesség kihasználásával felírjuk a Schrödinger egyenlet impulzus reprezentációs alakját:

$$0 = \langle p|H - E|\psi\rangle = \langle p|H - E|\sum_{p'}|p'\rangle\langle p'|\psi\rangle = \sum_{p'}\langle p|H(\hat{p}, \hat{x}, ...) - E|p'\rangle\langle p'|\psi\rangle$$

$$= \int \mathrm{d}p' \left(H(p', -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p'}, ...) - E\right)\delta(p - p')\psi(p')$$

$$= \left(H(p, -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}, ...) - E\right)\psi(p) = 0.$$

Példaként írjuk fel a harmonikus oszcillátor (HO) probléma energiaoperátorát:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{\hat{x}^2}{2M},$$

ahol $M^{-1} = D = m\omega^2$, a direkciós erő. A megfelelő Schrödinger egyenlet impulzus reprezentációban:

$$\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial p^2} - E\right)\psi(p) = 0,$$

$x-$reprezentációban:

$$\left(\frac{x^2}{2M} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - E\right)\psi(x) = 0.$$

A HO probléma $x-$ és $p-$reprezentációbeli szimmetriája szembeszökő (vö. határozatlansági reláció).

Másik példa legyen a lineáris potenciál, a $V = -kx$ problémája. A Schröringer egyenlet $p-$reprezentációban

$$\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{\hbar k}{i}\frac{\partial}{\partial p} - E\right)\psi(p) = 0,$$

míg $x-$reprezentációban

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - kx - E\right)\psi(x) = 0.$$

Ennek a példának az érdekessége az, hogy $p-$reprezentációban van analitikus, zárt alakban írható megoldás, míg $x-$reprezentációban nincs. Tehát néha célszerűbb impulzus reprezentációban dolgozni.

Az eddigi reprezentációk folytonos spektrumhoz tartozó operátorok sajátállapotai szerinti reprezentációk voltak. Most megismerkedünk a *diszkrét-*, vagy matrix-reprezentációkkal, amelyeket

$n-$reprezentációknak is szoktak hívni. Az $n-$reprezentáció $|n\rangle$ bázisa tetszőleges, diszkrét spektrumot szolgáltató operátor sajátállapotaiként áll elő (ilyenek pl. a HO energiaállapotok). Az $\hat{x}-$operátort az $\langle n'|\hat{x}|n\rangle \equiv x_{n'n}$, matrixelemekkel, a $\hat{p}-$operátort az $\langle n'|\hat{p}|n\rangle \equiv p_{n'n}$, matrixelemekkel reprezentáljuk oly módon, hogy a $[\mathbf{p}, \mathbf{x}] = (\hbar/i) \cdot 1$ matrix egyenlőség teljesüljön. Egy $|\psi\rangle$ fizikai állapotot pedig a

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \quad \rightarrow \quad \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ . \\ c_n \\ . \\ . \end{bmatrix}$$

számoszloppal reprezentáljuk, ahol $c_n = \langle n|\psi\rangle$. Az $1 = \sum_{n'} |n'\rangle\langle n'|$ teljességet kifejező (operátor) összefüggést felhasználva, a Schrödinger egyenlet:

$$0 = \langle n|(H - E)|\psi\rangle = \sum_{n'} \langle n|(H - E)|n'\rangle\langle n'|\psi\rangle = \sum_{n'} (H_{nn'} - E\delta_{nn'})c_{n'} = 0,$$

azaz

$$(\mathbf{H} - E \cdot 1)\mathbf{c} = 0.$$

Itt $\mathbf{H}$ most az energiamatrixot jelöli, 1 pedig az egységmatrixot.

Konkrét diszkrét reprezentációnak az egységnyi tömegű és körfrekvenciájú HO bázisállapotokat választva ($|n\rangle \equiv \varphi_n^{HO}\rangle$) megmutatható, hogy

$$\mathbf{p} = \frac{\sqrt{\hbar/2}}{i} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & . \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & . \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & . \\ 0 & 0 & . & . & . \end{pmatrix}$$

és

$$\mathbf{x} = \sqrt{\hbar/2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & . \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & . \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & . \\ 0 & 0 & . & . & . \end{pmatrix}$$

Ebben a reprezentációban tehát

$$\mathbf{px} - \mathbf{xp} = \frac{\hbar}{2i} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & ... \\ 0 & 1 & 0 & \sqrt{6} & ... \\ -\sqrt{2} & 0 & 1 & 0 & ... \\ 0 & -\sqrt{6} & 0 & 1 & ... \end{pmatrix} - \frac{\hbar}{2i} \begin{pmatrix} -1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & ... \\ 0 & -1 & 0 & \sqrt{6} & ... \\ -\sqrt{2} & 0 & -1 & 0 & ... \\ 0 & -\sqrt{6} & 0 & -1 & ... \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{i} \cdot 1.$$

Azaz teljesül a felcserélési reláció.

Az energiaoperátor is kiszámolható. Egységnyi tömegű és egységnyi körfrekvenciájú oszcillátor energiaoperátora az adott HO reprezentációban

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2} + \frac{\mathbf{x}^2}{2} = \hbar \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & ... \\ 0 & 1 + \frac{1}{2} & 0 & ... \\ 0 & 0 & 2 + \frac{1}{2} & ... \end{pmatrix}$$

diagonális. A diagonális elemekben felismerjük a HO sajátértékeit.

Meg kell még vizsgálnunk a norma, teljesség és a különböző reprezentációk közti ”átjárás” (transzformáció) kérdését.

Norma. Folytonos spektrumhoz tartozó reprezentáció esetén:

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x-x'),$$

diszkrét reprezentáció esetén pedig

$$\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}.$$

A norma reprezentáció független, mivel az egy matrixelem, azaz szám.

Teljesség. Kiindulva a kifejtési tételből

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle = \sum_n |n\rangle c_n = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle,$$

látjuk, hogy a teljesség kifejeződik az egységoperátorban:

$$1 = \sum_n |n\rangle\langle n| = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x|x\rangle\langle x|,$$

ahol az első összefüggés a diszkrét reprezentációkra, a második pedig a folytonos reprezentációk esetére vonatkozik. (Vegyes reprezentáció esetén a második egyenlőség jel helyett + áll.)

Minthogy a teljességet kifejező egységoperátor – lévén operátor – reprezentációtól nem független, vizsgáljuk meg, milyen matrixelemeket kapunk $x-$reprezentációban a folytonos, ill. diszkrét reprezentációk teljességét kifejező egységoperátorra.

Az $x-$reprezentáció teljességét kifejező egységoperátor matrixeleme $x-$reprezentációban

$$\langle x|1|x'\rangle = \sum_{x''}\langle x|x''\rangle\langle x''|x'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x''\delta(x-x'')\delta(x''-x') = \delta(x-x');$$

az $n-$reprezentáció teljességét kifejező egységoperátor matrixeleme az $x-$reprezentációban:

$$\langle x|1|x'\rangle = \sum_n\langle x|n\rangle\langle n|x'\rangle = \sum_n \psi_n(x)\psi_n(x')^* = \delta(x-x'),$$

amely eredményt már a 4. fejezetben megismertük.

A teljességet kifejező egységoperátorok $n-$reprezentációbeli matrixelemei is mindkét esetben megegyeznek a normával:

$$\langle n|1|n'\rangle = \sum_x\langle n|x\rangle\langle x|n'\rangle = \int \mathrm{d}x\psi_n^*(x)\psi_{n'}(x) = \delta_{nn'},$$

$$\langle n|1|n'\rangle = \sum_{n''}\langle n|n''\rangle\langle n''|n'\rangle = \sum_{n''}\delta_{nn''}\delta_{n''n'} = \delta_{nn'}.$$

Két reprezentáció közti ”átjárás” (transzformáció) *unitér* operátorokkal, ill. matrixokkal lehetséges.

Definíció: Unitér operátorok azok az operátorok, amelyek nem változtatják meg egy skalárszorzat értékét, azaz

$$\langle c|d\rangle = \langle Uc|Ud\rangle = \langle U^+Uc|d\rangle \to U^+U = 1 \to U^+ = U^{-1} \to UU^+ = 1.$$

Matrix reprezentációban az unitér feltétel:

$$\langle n|1|m\rangle = \delta_{nm} = \langle n|U^+U|m\rangle = \sum_k \langle n|U^+|k\rangle\langle k|U|m\rangle$$
$$= \sum_k \langle k|U|n\rangle^* \langle k|U|m\rangle = \sum_k U^*_{kn} U_{km}.$$

Itt kihasználtuk, hogy az adjungált operátor matrixa egyenlő a transzponált matrix komplex konjugáljával: $U^+ = (U^T)^*$.

Unitér matrixra példa: legyen $A = A^+$, ekkor

$$U = e^{iA} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(iA)^n,$$

$$U^+ = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(-iA^+)^n = e^{-iA^+} = e^{-iA}.$$

Vizsgáljuk meg általánosan, hogy milyen kapcsolat van két diszkrét reprezentáció között. Tartozzon ehhez a két reprezentációhoz az $|\omega_n\rangle$ és $|\eta_m\rangle$ bázisállapot sorozat. Egy tetszőleges fizikai állapot kifejthető ezen bázisállapotok szerint és a kifejtési együtthatók egyértelműen jellemzik az állapotot:

$$|\psi\rangle = \sum_m a_m|\eta_m\rangle = \sum_n b_n|\omega_n\rangle$$

Azaz

$$|\psi\rangle \underset{\eta}{\rightarrow} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ . \\ . \end{pmatrix},$$

illetve

$$|\psi\rangle \underset{\omega}{\rightarrow} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ . \\ . \end{pmatrix}.$$

A kérdés az, hogy az állapotfüggvény ezen kétféle reprezentációja között mi a kapcsolat, azaz hogyan fejezhető ki $b_m = \langle\omega_m|\psi\rangle$ együttható az $a_m = \langle\eta_m|\psi\rangle$ együtthatóval. A kapcsolat megtalálása érdekében fejtsük ki az $|\omega_m\rangle$ bázisfüggvényeket az $|\eta_n\rangle-$ek teljes rendszere szerint:

$$|\omega_m\rangle = \sum_{n'} U^*_{mn'}|\eta_{n'}\rangle, \quad \text{ahol} \quad U^*_{mn'} = \langle\eta_{n'}|\omega_m\rangle = \langle\omega_m|\eta_{n'}\rangle^*.$$

Az adjungáltja:

$$\langle\omega_m| = \sum_{n''} \langle\eta_{n''}|U_{mn''}.$$

Ezzel

$$b_m = \langle\omega_m|\psi\rangle = \sum_{n''} \langle\eta_{n''}|U_{mn''}|\psi\rangle = \sum_{n''} U_{mn''}\langle\eta_{n''}|\psi\rangle = \sum_{n''} U_{mn''}a_{n''},$$

azaz $\mathbf{b} = \mathbf{Ua}$.

Most bizonyítjuk, hogy $\mathbf{U}$ unitér:

$$\langle\omega_n|\omega_m\rangle = \delta_{nm} = \sum_{n'n''} \langle\eta_{n''}|U_{nn''}U^*_{mn'}|\eta_{n'}\rangle = \sum_{n'n''} U_{nn''}U^*_{mn'}\delta_{n''n'}$$

$$= \sum_{n'n''} U_{nn''}(U^+)_{n'm}\delta_{n''n'} = \sum_{n'} U_{nn'}(U^+)_{n'm} = \delta_{nm}. \quad QED.$$

Folytonos reprezentációk közti transzformációt a

$$|\psi\rangle = \sum_x \psi(x)|x\rangle = \sum_p \psi(p)|p\rangle$$

egyenlőségből adódó

$$\psi(x) = \sum_p \psi(p)\langle x|p\rangle$$

transzformációs képlet adja, ahol az

$$\langle x|p\rangle \equiv U(p,x) = \frac{1}{\sqrt{h}} e^{\frac{i}{\hbar}px},$$

(folytonos) unitér matrix éppen a koordináta reprezentációbeli impulzus sajátfüggvény (ld. 4.2 fejezet).

Most azt vizsgáljuk, hogy az *operátorok* különböző reprezentációi között mi a transzformáció. Írjuk fel a

$$(H - E)|\psi\rangle = 0$$

absztrakt Schrödinger egyenletetet az "**a**" és "**b**" együttható sorozattal jellemzett η, ill. ω reprezentációban:

$$\mathbf{H}^{(\eta)}\mathbf{a} = E\mathbf{a}, \qquad \mathbf{H}^{(\omega)}\mathbf{b} = E\mathbf{b}.$$

A kérdés tehát az, hogy miként fejezhetjük ki $\mathbf{H}^{(\eta)}$–t $\mathbf{H}^{(\omega)}$–vel?

Mivel

$$\mathbf{b} = \mathbf{U}\mathbf{a}, \quad \text{ahol} \quad \mathbf{U}^+\mathbf{U} = 1,$$

írhatjuk:

$$\mathbf{H}^{(\omega)}\mathbf{U}\mathbf{a} = E\mathbf{U}\mathbf{a}.$$

Ezt $\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^+$–szal beszorozva, kapjuk:

$$\mathbf{U}^{-1}\mathbf{H}^{(\omega)}\mathbf{U}\mathbf{a} = E\mathbf{a} = \mathbf{H}^{(\eta)}\mathbf{a}.$$

Tehát a tanszformációt szintén az $\mathbf{U}$ unitér matrix (operátor) biztosítja:

$$\mathbf{H}^{(\eta)} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{H}^{(\omega)}\mathbf{U} = \mathbf{U}^+\mathbf{H}^{(\omega)}\mathbf{U}.$$

Számítsuk most ki egy O operátor p–reprezentációbeli $\langle p|O|p'\rangle = O(p,p')$ és x–reprezentációbeli $\langle x|O|x'\rangle = O(x,x')$ matrixelemei közti transzformációt.

$$O(p,p') = \sum_{x,x'} U^+(p,x)O(x,x')U(p',x') = \int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}x' \frac{1}{h} e^{-i(px-p'x')/\hbar} O(x,x').$$

Legyen $O = x$. Ekkor $O(x,x') = \delta(x-x')\cdot x$. Ezért

$$\langle p|xp'\rangle = \int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}x' \frac{1}{h} e^{-i(px-p'x')/\hbar} \delta(x-x')\cdot x = \int \mathrm{d}x \frac{1}{h} e^{-i(p-p')x/\hbar}\cdot x$$

$$= \frac{1}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial p'}\int e^{i(p'-p)x/\hbar}\mathrm{d}x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p'}\delta(p-p') = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}\delta(p-p'),$$

ahol az utolsó egyenlőséget parciális integrálással kaptuk, és többször is kihasználtuk a $\delta(x) = \int \exp(ikx)\mathrm{d}k/2\pi$ ismert összefüggést. Így az x operátor $p-$reprezentációban $-(\hbar/i)(\partial/\partial p)$ lesz. Amit korábban csak "kitaláltunk", hogy a felcserélési reláció teljesüljön, most "kijött", általános reprezentációelméleti tételek felhasználásával.

8.8.2. KVANTUMMECHANIKAI KÉPEK.

Mindeddig olyan kvantummechanikai "képben" (ábrázolásban) dolgoztunk, amelyben az alapvető $(\hat{x}, \hat{p}, ...)$ operátor "áll" (időtől független),

$$\frac{\partial \hat{a}}{\partial t} = 0,$$

és az időfüggést az állapotfüggvény $\Psi(t)$ hordozta az

$$i\hbar\frac{\partial|\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{h}|\Psi(t)\rangle$$

állapotegyenlet révén, amelynek megoldását a

$$|\Psi(t_0)\rangle = |\varphi\rangle$$

kezdőfeltétel egyértelműen meghatározza. Ilyen absztrakt operátorokra példa a $\hat{h}$ energia, az $\hat{\mathbf{x}}$ koordináta, a $\hat{\mathbf{p}}$ impulzus, vagy az $\hat{\mathbf{L}}$ impulzusmomentum operátor.

Minthogy csak a matrixelemeknek van fizikai jelentésük, elképzelhető más "szereposztás" az állapotok és operátorok között. Tekintsünk ugyanis egy matrixelemet

$$\mathcal{A}(t) = \langle\Psi_1(t)|\hat{a}\Psi_2(t)\rangle$$

és definiáljunk egy időfüggő unitér operátort a következőképpen:

$$|\Psi(t)\rangle = U(t,t_0)|\varphi\rangle = U(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle,$$

amelyből $U(t_0,t_0) = 1$ következik. Behelyettesítve a fenti definíciót a Schrödinger egyenletbe, $t_0 = 0$ kezdő időpillanatot választva és kihasználva a $|\varphi\rangle$ kiinduló állapot tetszőlegességét, az U operátorra az

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}U(t)}{\mathrm{d}t} = \hat{h}U(t)$$

mozgásegyenlet adódik, amelynek adjungáltja, az energiaoperátor önadjungáltsága miatt ($\hat{h} = \hat{h}^+$ a Hilbert tér elemein), a következő:

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}U^+(t)}{\mathrm{d}t} = -U^+(t)\hat{h}.$$

Az első egyenletet $U^{+}-$szal balról, az adjungált egyenletet $U-$val jobbról beszorozva, majd az így nyert egyenleteket összeadva a következő összefüggést kapjuk:

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}U(t)^{+}U(t)}{\mathrm{d}t} = -U(t)^{+}hU(t) + U(t)^{+}hU(t) = 0.$$

Másrészt $U^{+}(t_0) = 1$, tehát $U^{+}(t_0)U(t_0) = 1$, és így az előző eredményünkből tetszőleges időpillanatra is

$$U^{+}(t)U(t) = 1,$$

amellyel az $U(t)$ operátor unitaritását bizonyítottuk.

Ezzel az időfejlesztő unitér operátorral előállíthatunk a Schrödinger képből olyan kvantummechanikai képet, az ún *Heisenberg kép*et, amelyben az operátorok "mozognak" (időfüggők) és az állapotok "állnak" (időfüggetlenek):

$$\mathcal{A}(t) = \langle\Psi_1(t)|\hat{a}\Psi_2(t)\rangle = \langle U(t)\varphi_1|\hat{a}U(t)\varphi_2\rangle = \langle\varphi_1|U^{+}(t)\hat{a}U(t)\varphi_2\rangle \equiv \langle\varphi_1|\hat{A}(t)\varphi_2\rangle.$$

Kérdés, mi a dinamikai egyenlet a most kapott időfüggő $\hat{A}(t)$ operátorra?

$$\frac{\mathrm{d}\hat{A}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Big(U^{+}(t)\,\hat{a}\,U(t)\Big) = \frac{i}{\hbar}\Big[U^{+}(t)\,\hat{h}\hat{a}\,U(t) - U^{+}(t)\,\hat{a}\hat{h}\,U(t)\Big] =$$

$$\frac{i}{\hbar}\Big[U^{+}(t)\hat{h}U(t)\,U^{+}(t)\hat{a}U(t) - U^{+}(t)\hat{a}U(t)\,U^{+}(t)\hat{h}U(t)\Big] = \frac{i}{\hbar}\Big[\hat{H}(t)\hat{A}(t) - \hat{A}(t)\hat{H}(t)\Big].$$

Megkaptuk az időfüggő operátorokra vonatkozó mozgásegyenletet, amelyet érdemes összefoglalva újra kiírni:

$$\frac{\mathrm{d}\hat{A}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{i}{\hbar}\Big[\hat{H}(t)\hat{A}(t) - \hat{A}(t)\hat{H}(t)\Big] = \frac{i}{\hbar}\Big[\hat{H}(t), \hat{A}(t)\Big].$$

Az energiaoperátor mozgásállandó, mivel

$$\frac{\mathrm{d}\hat{H}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{i}{\hbar}\Big[\hat{H}(t)\hat{H}(t) - \hat{H}(t)\hat{H}(t)\Big] = 0,$$

azaz $\hat{H}(t) = \hat{h}$ =állandó időben, s így a 3. fejezetben megismert

$$\frac{\mathrm{d}\hat{O}}{\mathrm{d}t} = \frac{i}{\hbar}\Big[\hat{h}\hat{O} - \hat{O}\hat{h}\Big]$$

kvantummechanikai időderivált definíciószerű bevezetésének oka nyilvánvalóvá válik. Egyben látjuk a Hamilton operátor kitüntetett szerepét, amelynek állandóságából

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}U(t)}{\mathrm{d}t} = \hat{h}U(t) = \hat{H}U(t)$$

írható, amelynek megoldása

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}.$$

Megjegyezzük még röviden, hogy van még egy "vegyes" kvantummechanikai kép is, az ún. *kölcsönhatási* (vagy Dirac) kép, amelyben mind az operátor, mind az állapot mozoghat. Ennek fontossága a perturbáció számítás területén mutatkozik meg. Ekkor a H teljes energiaoperátor felbontható egy

H_0 ismert és egy K "kölcsönhatási" (gyenge) részre, amit perturbációként kezelünk: $H = H_0 + K$. Az operátorok mozgását H_0 kormányozza:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{A}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{i}{\hbar}[H_0, \mathbf{A}(t)],$$

míg az állapotot K határozza meg:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t) = K\psi(t).$$

Összefoglalásképpen:

Schrödinger kép	Heisenberg kép	Dirac kép
$\frac{\partial \hat{a}}{\partial t} = 0$	$\frac{\mathrm{d}\hat{A}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}(t), \hat{A}(t)\right] + \frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t}$	$\frac{\mathrm{d}\mathbf{A}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{i}{\hbar}\left[H_0, \mathbf{A}(t)\right] + \frac{\partial \mathbf{A}(t)}{\partial t}$
$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t) = \hat{h}\Psi(t)$	$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0$	$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t) = K\psi(t)$
$\mathcal{A}(t) = \langle \Psi_1(t) \vert \hat{a}\Psi_2(t)\rangle$	$\mathcal{A}(t) = \langle \varphi_1 \vert \hat{A}(t)\varphi_2\rangle$	$\mathcal{A}(t) = \langle \psi_1(t) \vert \mathbf{A}(t)\psi_2(t)\rangle$