1 Relativisztikus kvantummechanika

1.1 Négyesvektorok és Lorentz transzformáció

A négydimenziós téridő-vektorok

$$\mathbf{x} = x^\mu \mathbf{e}_\mu \qquad (1)$$
$$(\mu = 0, 1, 2, 3)$$

pszeudo-euklidészi teret alkotnak (Minkowski-tér), ahol a vektorok *kontravariáns* komponensei

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

A bázisvektorok skaláris szorzata:

$$\mathbf{e}_\mu \cdot \mathbf{e}_\nu = g_{\mu\nu} \qquad (3)$$

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

$$\mathsf{g} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} . \qquad (4)$$

A Minkowski-vektorok skaláris szorzata (Minkowski-szorzat) kifejezhető a kontravariáns vektorkomponensekkel:

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

Egy téridő-vektor normája:

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{x} = c^2 t^2 - \overrightarrow{x}^2 \qquad (6)$$

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

A Minkowski-tér *duális terét* az ϖ lineáris formák alkotják:

$$\varpi\left(\mathbf{x}\right) = \varpi\left(x^\mu \mathbf{e}_\mu\right) = x^\mu \varpi\left(\mathbf{e}_\mu\right) \equiv x^\mu \omega_\mu \, . \qquad (7)$$

A skaláris szorzat lehetőséget ad arra, hogy az ω_μ komponensek által meghatározott lineáris formát azonosítsuk a Minkowski-tér vektoraival:

$$\boldsymbol{\omega} = \omega^\mu \mathbf{e}_\mu \, , \qquad (8)$$

ahol

$$\omega_\mu = g_{\mu\nu}\, \omega^\nu \, , \qquad (9)$$

hiszen ekkor

$$\varpi\left(\mathbf{x}\right) = x^\mu g_{\mu\nu}\, \omega^\nu = \mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{x} \, . \qquad (10)$$

Az $\mathbf{x}$ téridő-vektor *kovariáns* vektorkomponenseinek nevezzük a hozzárendelt duális leképezés komponenseit:

$$x_\mu = g_{\mu\nu}\, x^\nu \qquad (11)$$

azaz

$$x_\mu = (ct, -\overrightarrow{x}) \ . \qquad (12)$$

Vezessük be a metrikus tenzor inverzét:

$$\mathsf{g}^{-1} = \{g^{\mu\nu}\} \tag{13}$$

$$g^{\mu\nu} g_{\nu\lambda} = \delta^{\mu}_{\lambda} \tag{14}$$
$$g_{\mu\nu} g^{\nu\lambda} = \delta_{\mu}^{\lambda} \tag{15}$$

ahol

$$\delta^{\mu}_{\lambda} = \delta_{\mu}^{\lambda} = \begin{cases} 1 & \text{ha} \quad \mu = \lambda \\ 0 & \text{ha} \quad \mu \neq \lambda \end{cases} . \tag{16}$$

Ekkor

$$x^{\mu} = \delta^{\mu}_{\nu} x^{\nu} = g^{\mu\lambda} g_{\lambda\nu} x^{\nu} = g^{\mu\lambda} x_{\lambda} . \tag{17}$$

A Minkowski-tér esetében nyilvánvalóan fennáll, hogy:

$$g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu} . \tag{18}$$

A

$$ds^2 = c^2 dt^2 - (d\overrightarrow{x})^2 = dx^{\mu} dx_{\mu} . \tag{19}$$

Minkowski-távolság különböző inerciarendszerekben invariáns. (Homogén) Lorentz transzformációnak nevezzük a Minkowski-tér mértéktartó, valós értékű, lineáris transzformációit:

$$\mathbf{e}_{\nu} = \mathbf{e}'_{\mu} \Lambda^{\mu}_{\nu} \tag{20}$$

$$\mathbf{x} = x^{\mu} \mathbf{e}_{\mu} = x^{\mu} \mathbf{e}'_{\nu} \Lambda^{\nu}_{\mu} = x'^{\nu} \mathbf{e}'_{\nu} \Longrightarrow x'^{\nu} = \Lambda^{\nu}_{\mu} x^{\mu} \tag{21}$$

vagy

$$\mathsf{\Lambda} = \{\Lambda^{\mu}_{\nu}\} \Longrightarrow x' = \mathsf{\Lambda} x \tag{22}$$

$$\Downarrow$$

$$x'^{\mu} y'_{\mu} = x'^{\mu} g_{\mu\tau} y'^{\tau} = \Lambda^{\mu}_{\nu} x^{\nu} g_{\mu\tau} \Lambda^{\tau}_{\lambda} y^{\lambda} = x^{\nu} \Lambda^{\mu}_{\nu} g_{\mu\tau} \Lambda^{\tau}_{\lambda} y^{\lambda} = x^{\nu} y_{\nu} , \tag{23}$$

amiből

$$g_{\mu\tau} \Lambda^{\mu}_{\nu} \Lambda^{\tau}_{\lambda} = g_{\nu\lambda} \tag{24}$$

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

$$\left(\mathsf{\Lambda}^T\right)_{\nu}^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu} \tag{25}$$

a fenti azonosság átírható:

$$\left(\mathsf{\Lambda}^T\right)_{\nu}^{\mu} g_{\mu\tau} \Lambda^{\tau}_{\lambda} = g_{\nu\lambda} \tag{26}$$

azaz

$$\mathsf{\Lambda}^T \mathsf{g} \mathsf{\Lambda} = \mathsf{g} . \tag{27}$$

Fennállnak a következő tulajdonságok:
1) $\Lambda^{\mu}_{\nu} = \delta^{\mu}_{\nu}$ megoldás: $\delta^{\tau}_{\mu} g_{\tau\sigma} \delta^{\sigma}_{\nu} = g_{\mu\nu}$
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:

$$\mathsf{\Lambda} = \mathsf{I} + \omega \Longrightarrow \left(\mathsf{I} + \omega^T\right)\mathsf{g}\left(\mathsf{I} + \omega\right) = \mathsf{g} \underset{\text{elsőrendben}}{\Longrightarrow} \omega^T \mathsf{g} = -\mathsf{g}\omega \tag{28}$$

$$\left(\omega^T\right)_\mu^{\ \tau} g_{\tau\nu} = \omega^\tau_{\ \mu} g_{\tau\nu} = g_{\nu\tau}\omega^\tau_{\ \mu} = \omega_{\nu\mu} \quad \text{és} \quad g_{\mu\tau}\omega^\tau_{\ \nu} = \omega_{\mu\nu} \tag{29}$$

$$\Downarrow$$

$$\omega_{\mu\nu} = -\omega_{\nu\mu} \tag{30}$$

Hogyan transzformálódnak a kovariáns vektorkomponensek?

$$x'_\mu = g_{\mu\nu}\, x'^\nu = g_{\mu\nu}\Lambda^\nu_{\ \tau}\, x^\tau = g_{\mu\nu}\Lambda^\nu_{\ \tau} g^{\tau\sigma} x_\sigma = \overline{\Lambda}_\mu^{\ \sigma} x_\sigma \tag{31}$$

ahol

$$\overline{\Lambda}_\mu^{\ \sigma} = g_{\mu\nu}\Lambda^\nu_{\ \tau} g^{\tau\sigma} \tag{32}$$

vagy

$$\overline{\mathsf{\Lambda}} = \mathsf{g}\mathsf{\Lambda}\mathsf{g}^{-1}\ . \tag{33}$$

Fennáll a következő reláció:

$$\left(\mathsf{\Lambda}^T\right)_\mu^{\ \tau}\, \overline{\Lambda}_\tau^{\ \nu} = \underbrace{\Lambda^\tau_{\ \mu}\, g_{\tau\sigma}\Lambda^\sigma_{\ \rho}}_{=g_{\mu\rho}} g^{\rho\nu} = g_{\mu\rho} g^{\rho\nu} = \delta_\mu^{\ \nu} \tag{34}$$

vagy

$$\mathsf{\Lambda}^T\, \overline{\mathsf{\Lambda}} = \mathsf{\Lambda}^T \mathsf{g}\mathsf{\Lambda}\mathsf{g}^{-1} = \mathsf{g}\mathsf{g}^{-1} = \mathsf{I} \Longrightarrow \overline{\mathsf{\Lambda}} = \left(\mathsf{\Lambda}^{-1}\right)^T\ . \tag{35}$$

Négyes-derivált:

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} \Longrightarrow \partial_\mu x^\nu = \delta_\mu^{\ \nu} \tag{36}$$

$$\partial_\mu = \left(\frac{\partial}{c\partial t}, \overrightarrow{\bigtriangledown}\right) \tag{37}$$

$$\partial^\mu = \left(\frac{\partial}{c\partial t}, -\overrightarrow{\bigtriangledown}\right) \tag{38}$$

$$\partial_\mu\partial^\mu = \frac{\partial^2}{c^2\partial t^2} - \Delta \equiv \Box \tag{39}$$

∂_μ kovariáns vektor:

$$\partial'_\mu = \Omega_\mu^{\ \nu}\partial_\nu \to \partial'_\mu x'^\nu = \Omega_\mu^{\ \tau}\partial_\tau \Lambda^\nu_{\ \sigma} x^\sigma = \Omega_\mu^{\ \tau}\Lambda^\nu_{\ \tau} = \Omega_\mu^{\ \tau}\left(\mathsf{\Lambda}^T\right)_\tau^{\ \nu} = \delta_\mu^{\ \nu} \tag{40}$$

$$\Longrightarrow \Omega\, \mathsf{\Lambda}^T = \mathsf{I} \Longrightarrow \Omega = \left(\mathsf{\Lambda}^{-1}\right)^T = \overline{\mathsf{\Lambda}} \tag{41}$$

1.2 Relativisztikus kinematika

Négyes-sebesség:

$$u^\mu = \frac{dx^\mu}{d\tau} = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}\left(c, \overrightarrow{v}\right) \tag{42}$$

ahol

$$\overrightarrow{v} = \frac{d\overrightarrow{r}\,(t)}{dt} \tag{43}$$

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

$$u^\mu u^\nu g_{\mu\nu} = u^\mu u_\mu = c^2 \tag{44}$$

Energia-impulzus négyesvektor:

$$p^\mu = m u^\mu = \left(\frac{E}{c}, \overrightarrow{p}\right) \tag{45}$$

ahol m a részecske nyugalmi tömege és

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \tag{46}$$

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

$$p^\mu p^\nu g_{\mu\nu} = p^\mu p_\mu = m^2 c^2 \tag{47}$$

ami expliciten kiírva az ún. energia-impulzus összefüggés:

$$E^2 - c^2 p^2 = \left(mc^2\right)^2 . \tag{48}$$

1.3 Elektrodinamika

Négyes-potenciál

$$A^\mu = \left(\frac{\phi}{c}, \overrightarrow{A}\right) \ , \ A_\mu = \left(\frac{\phi}{c}, -\overrightarrow{A}\right) \tag{49}$$

Térerősség tenzor

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu \tag{50}$$

$$F^{i0} = \frac{E_i}{c} \quad F^{ij} = -\epsilon_{ijk} B_k \tag{51}$$

Négyes áramsűrűség

$$j^\mu = \left(c\rho, \overrightarrow{j}\right) \tag{52}$$

Kontinuitási egyenlet

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \tag{53}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \overrightarrow{\bigtriangledown} \overrightarrow{j} = 0 \tag{54}$$

Maxwell egyenletek

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = \mu_0 j^\nu \tag{55}$$

$$\epsilon_{\lambda\tau\mu\nu} \partial^\tau F^{\mu\nu} = 0 \tag{56}$$

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

Négyes kinetikus impulzus

$$K^\mu = p^\mu - qA^\mu = \left(\frac{E - q\phi}{c}, \overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right) \tag{57}$$

$$K_\mu = p_\mu - qA_\mu = \left(\frac{E - q\phi}{c}, -\overrightarrow{p} + q\overrightarrow{A}\right) \tag{58}$$

$$\Downarrow$$

$$K^\mu K_\mu = \frac{(E - q\phi)^2}{c^2} - \left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right)^2 = m^2c^2 \tag{59}$$

azaz

$$E = \sqrt{m^2c^4 + c^2\left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right)^2} + q\phi\,. \tag{60}$$

A relativisztikus kvantummechanika feladata az, hogy a (59) összefüggésnek megfelelő, Lorentz-invariáns állapotegyenletet vezessen be úgy, hogy a hullámfüggvényre és operátorokra kirótt kvantummechanikai axiómák (pl. valószínűségi értelmezés, felcserélési relációk) érvényben maradjanak.

1.4 A Klein-Gordon egyenlet

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

$$\left[p^i, x^j\right] = -i\hbar\delta^{ij} = i\hbar g^{ij} \quad (i,j=1,2,3) \tag{61}$$

amit kiterjesztünk a négyesvektorokra,

$$\left[p^\mu, x^\nu\right] = i\hbar g^{\mu\nu} \,. \tag{62}$$

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

$$C^{\mu\nu} \equiv \left[p^\mu, x^\nu\right] \to \mathsf{C} = i\hbar \mathsf{g}^{-1} \tag{63}$$

$$\left[p'^\mu, x'^\nu\right] = \Lambda^\mu_{\ \tau}\Lambda^\nu_{\ \lambda}\left[p^\tau, x^\lambda\right] = \Lambda^\mu_{\ \tau}\left[p^\tau, x^\lambda\right]\left(\Lambda^T\right)_\lambda^{\ \nu} \tag{64}$$

$$\Downarrow$$

$$\mathsf{C}' = \mathsf{\Lambda}\mathsf{C}\mathsf{\Lambda}^T = i\hbar\mathsf{\Lambda}\mathsf{g}^{-1}\mathsf{\Lambda}^T = i\hbar\mathsf{g}^{-1}\mathsf{g}\mathsf{\Lambda}\mathsf{g}^{-1}\mathsf{\Lambda}^T = i\hbar\mathsf{g}^{-1}\overline{\mathsf{\Lambda}}\mathsf{\Lambda}^T = i\hbar\mathsf{g}^{-1} \tag{65}$$

Koordináta reprezentációban ezért a négyesimpulzus operátort a következőképpen definiáljuk,

$$p^\mu = \left(p^0, \frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}\right) \,. \tag{66}$$

ahol

$$\left[p^0, ct\right] = i\hbar \to p^0 = \frac{i\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t} \,. \tag{67}$$

Ez megfelel a nem-relativisztikus kvantummechanika

$$E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \tag{68}$$

megfeleltetésének (Schrödinger egyenlet), hiszen $p^0 = \frac{E}{c}$. Összefoglalva tehát:

$$p^\mu = \left(\frac{i\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}\right) = i\hbar\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, -\overrightarrow{\nabla}\right) = i\hbar\partial^\mu \tag{69}$$

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

A kinetikus impulzus operátora

$$K^\mu = p^\mu - qA^\mu = i\hbar\partial^\mu - qA^\mu = \left(\frac{i\hbar\partial_t - q\phi}{c}, \frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla} - q\overrightarrow{A}\right) \tag{71}$$

$$K_\mu = p_\mu - qA_\mu = i\hbar\partial_\mu - qA_\mu = \left(\frac{i\hbar\partial_t - q\phi}{c}, -\left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla} - q\overrightarrow{A}\right)\right) \tag{72}$$

amit formálisan behelyettesítve a Lorentz-invariáns (59) egyenletbe és hattatva a hullámfüggvényre, a *Klein-Gordon egyenletet* nyerjük:

$$\left[\left(\frac{i\hbar\partial_t - q\phi}{c}\right)^2 - \left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla} - q\overrightarrow{A}\right)^2\right]\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right) = m^2c^2\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right) \quad . \tag{73}$$

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

$$\left[\Box+\kappa^2\right]\psi(\overrightarrow{r},t)=0 \tag{74}$$

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

$$\psi(\overrightarrow{r},t)=\psi(\overrightarrow{r})\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{75}$$

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

$$\left[\left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}-q\overrightarrow{A}\right)^2-\frac{(E-q\phi)^2}{c^2}+m^2c^2\right]\psi(\overrightarrow{r})=0 \quad . \tag{76}$$

Szabad részecskére a

$$\left[-\hbar^2\Delta-\frac{E^2}{c^2}+m^2c^2\right]\psi(\overrightarrow{r})=0 \tag{77}$$

egyenlet megoldása a

$$\psi(\overrightarrow{r})=A\,e^{\frac{i}{\hbar}\overrightarrow{p}\,\overrightarrow{r}} \tag{78}$$

síkhullám, és a (60) egyenletnek megfelelően

$$c^2p^2+m^2c^4-E^2=0 \tag{79}$$

adódik. Ebből következik, hogy a szabad részecske energiája

$$E=\pm\sqrt{m^2c^4+c^2p^2} \tag{80}$$

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

$$E_{n\ell}\simeq mc^2-\frac{m\left(Ze^2\right)^2}{2\hbar^2n^2}+\frac{m\left(Ze^2\right)^4}{4\hbar^4n^4c^2}\left(\frac{3}{2}-\frac{4n}{2\ell+1}\right)+\dots \quad , \tag{81}$$

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 (74) egyenletet konjugálva,

$$\left[\Box+\kappa^2\right]\psi(\overrightarrow{r},t)^*=0 \quad , \tag{82}$$

majd $\psi(\overrightarrow{r},t)$-vel balról beszorozva, ugyanakkor a (74) egyenletet $\psi(\overrightarrow{r},t)^*$-vel balról beszorozva és az így nyert két egyenletet egymásból kivonva nyerjük, hogy

$$\psi(\overrightarrow{r},t)\,\Box\psi(\overrightarrow{r},t)^*-\psi(\overrightarrow{r},t)^*\,\Box\psi(\overrightarrow{r},t)=0 \quad , \tag{83}$$

amit tovább átalakíthatunk a

$$\frac{1}{c^2}\left(\psi\partial_t^2\psi^* - \psi^*\partial_t^2\psi\right) - \left(\psi\Delta\psi^* - \psi^*\Delta\psi\right)$$
$$= \frac{1}{c^2}\partial_t\left(\psi\partial_t\psi^* - \psi^*\partial_t\psi\right) - \overrightarrow{\nabla}\left(\psi\overrightarrow{\nabla}\psi^* - \psi^*\overrightarrow{\nabla}\psi\right) = 0 \tag{84}$$

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

$$\rho\left(\overrightarrow{r},t\right) = \frac{i\hbar}{2mc^2}\left(\psi^*\left(\overrightarrow{r},t\right)\partial_t\psi\left(\overrightarrow{r},t\right) - \psi\left(\overrightarrow{r},t\right)\partial_t\psi^*\left(\overrightarrow{r},t\right)\right)$$
$$= \mathrm{Re}\left(\psi^*\left(\overrightarrow{r},t\right)\frac{i\hbar\partial_t}{mc^2}\psi\left(\overrightarrow{r},t\right)\right) \tag{85}$$

és az áramsűrűséget

$$\overrightarrow{j}\left(\overrightarrow{r},t\right) = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\left(\overrightarrow{r},t\right)\overrightarrow{\nabla}\psi\left(\overrightarrow{r},t\right) - \psi\left(\overrightarrow{r},t\right)\overrightarrow{\nabla}\psi^*\left(\overrightarrow{r},t\right)\right)$$
$$= \mathrm{Re}\left(\psi^*\left(\overrightarrow{r},t\right)\frac{\overrightarrow{p}}{m}\psi\left(\overrightarrow{r},t\right)\right) \tag{86}$$

módon definiálva, valóban adódik, hogy

$$\partial_t\rho\left(\overrightarrow{r},t\right) + \overrightarrow{\nabla}\overrightarrow{j}\left(\overrightarrow{r},t\right) = 0 \quad . \tag{87}$$

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:

$$\rho\left(\overrightarrow{r},t\right) = \frac{E}{mc^2}\left|\psi\left(\overrightarrow{r},t\right)\right|^2 \quad , \tag{88}$$

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.

1.5 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)

$$\underline{\left(\gamma^\mu p_\mu - mc\right)\psi = 0} \quad , \tag{89}$$

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:

$$(\gamma^\nu p_\nu + mc)(\gamma^\mu p_\mu - mc)\psi = \left(\gamma^\nu p_\nu \gamma^\mu p_\mu - m^2c^2\right)\psi = 0 \quad , \tag{90}$$

A p_μ operátorok felcserélhetőségét is figyelembe véve:

$$\gamma^\nu\gamma^\mu p_\mu p_\nu = \frac{1}{2}\left(\gamma^\nu\gamma^\mu p_\mu p_\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu p_\nu p_\mu\right) \tag{91}$$
$$= \frac{1}{2}\left(\gamma^\nu\gamma^\mu + \gamma^\mu\gamma^\nu\right) p_\mu p_\nu \ . \tag{92}$$

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:

$$\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = \underline{\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}} \quad . \tag{93}$$

Ebből egyúttal az is következik, hogy

$$\left(\gamma^0\right)^2 = 1 \quad \text{és} \quad \left(\gamma^i\right)^2 = -1 \quad (i = 1, 2, 3) \tag{94}$$

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

Dirac egyenlete szabad részecskére:

$$\underline{(i\gamma^\mu\partial_\mu - \varkappa)\psi = 0} \, , \tag{95}$$

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

1.6 A Dirac mátrixok

1.6.1 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:

$$\mathrm{Tr}\gamma^0 = -\mathrm{Tr}\gamma^0\left(\gamma^i\right)^2 = -\mathrm{Tr}\gamma^i\gamma^0\gamma^i = \mathrm{Tr}\left(\gamma^i\right)^2\gamma^0 = -\mathrm{Tr}\gamma^0 \, , \tag{96}$$
$$\mathrm{Tr}\gamma^i = \mathrm{Tr}\gamma^i\left(\gamma^0\right)^2 = \mathrm{Tr}\gamma^0\gamma^i\gamma^0 = -\mathrm{Tr}\left(\gamma^0\right)^2\gamma^i = -\mathrm{Tr}\gamma^i \, , \tag{97}$$

ahol felhasználtuk a nyomképzés ciklikus tulajdonságát.

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

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

$$\mathrm{Tr}\gamma^0 = m - (n - m) = 2m - n = 0 \quad , \tag{98}$$
$$\mathrm{Tr}\gamma^i = [m - (n - m)]\, i = (2m - n)\, i = 0 \quad , \tag{99}$$

tehát n páros.

1.6.2 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,

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1_2 & 0 \\ 0 & -1_2 \end{pmatrix} \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \tag{100}$$

eleget tesz a megkövetelt antikommutációs relációknak:

$$\left\{\gamma^i, \gamma^k\right\} = -\begin{pmatrix} \left\{\sigma^i, \sigma^k\right\} & 0 \\ 0 & \left\{\sigma^i, \sigma^k\right\} \end{pmatrix} = -2\delta^{ik}\, 1_4 = 2g^{ik}\, 1_4 \tag{101}$$

$$\left\{\gamma^0, \gamma^i\right\} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix} = 0 \tag{102}$$

A továbbiakban szükségünk lesz még a mátrixok adjungáltjaira vonatkozó összefüggésekre:

$$\left(\gamma^0\right)^\dagger = \gamma^0 \quad \left(\gamma^i\right)^\dagger = -\gamma^i \tag{103}$$

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

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

$$\psi\left(\overrightarrow{r}, t\right) = \begin{pmatrix} \psi_1\left(\overrightarrow{r}, t\right) \\ \psi_2\left(\overrightarrow{r}, t\right) \\ \psi_3\left(\overrightarrow{r}, t\right) \\ \psi_4\left(\overrightarrow{r}, t\right) \end{pmatrix} \quad . \tag{105}$$

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

$$\gamma^5 = i\underbrace{\begin{pmatrix} 1_2 & 0 \\ 0 & -1_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ -\sigma_1 & 0 \end{pmatrix}}_{\begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ \sigma_1 & 0 \end{pmatrix}}\underbrace{\begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ -\sigma_2 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_3 \\ -\sigma_3 & 0 \end{pmatrix}}_{\begin{pmatrix} -i\sigma_1 & 0 \\ 0 & -i\sigma_1 \end{pmatrix}} = \begin{pmatrix} 0 & I_2 \\ I_2 & 0 \end{pmatrix} \quad . \tag{106}$$

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

1.7 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,

$$\left(\gamma^\mu K_\mu - mc\right)\psi = 0 \tag{107}$$

ahol

$$K_\mu = p_\mu - qA_\mu = i\hbar\partial_\mu - qA_\mu = \left(\frac{i\hbar\partial_t - q\phi}{c}, -\left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla} - q\overrightarrow{A}\right)\right) \tag{108}$$

$$\Downarrow$$

$$\underline{\left(\gamma^{\mu}\left(i\hbar\partial_{\mu}-qA_{\mu}\right)-mc\right)\psi=0} \tag{109}$$

vagy

$$\underline{\left(i\gamma^{\mu}\left(\partial_{\mu}+\frac{iq}{\hbar}A_{\mu}\right)-\kappa\right)\psi=0\,.} \tag{110}$$

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

$$\overrightarrow{A}'=\overrightarrow{A}+\overrightarrow{\nabla}\Lambda,\ \phi'=\phi-\partial_t\Lambda\longrightarrow A'_{\mu}=\left(\frac{\phi-\partial_t\Lambda}{c},-\overrightarrow{A}-\overrightarrow{\nabla}\Lambda\right)=A_{\mu}-\partial_{\mu}\Lambda \tag{111}$$

mértéktranszformációval szemben:

$$\left(i\gamma^{\mu}\left(\partial_{\mu}+\frac{iq}{\hbar}A'_{\mu}\right)-\kappa\right)\psi'=0 \tag{112}$$

$$\Downarrow$$

$$\left[i\gamma_{\mu}\left(\partial_{\mu}+\frac{iq}{\hbar}A_{\mu}-\frac{iq}{\hbar}\partial_{\mu}\Lambda\right)-\kappa\right]\psi'=0 \tag{113}$$

alakban írható. Nyilvánvaló, hogy a hullámfüggvény

$$\underline{\psi'=\psi e^{\frac{iq}{\hbar}\Lambda}} \tag{114}$$

transzformációja kielégíti a (113) egyenletet. Ugyanis

$$\left(\partial_{\mu}-\frac{iq}{\hbar}\partial_{\mu}\Lambda\right)\psi e^{\frac{iq}{\hbar}\Lambda}=e^{\frac{iq}{\hbar}\Lambda}\partial_{\mu}\psi\,, \tag{115}$$

és utána $e^{\frac{iq}{\hbar}\Lambda}$-val egyszerűsítve a (109) Dirac egyenlethez jutunk. A (114) transzformáció teljes mértékben ekvivalens a nem-relativisztikus esetben levezetett mértéktranszformációval!

A (109) egyenletben kiírva ∂_{μ} és A_{μ} idő- és térszerű komponenseit kapjuk, hogy

$$\left(\gamma^{\mu}\left(i\hbar\partial_{\mu}-qA_{\mu}\right)-mc\right)\psi=0 \tag{116}$$

$$\left[\gamma^{0}\left(\frac{i\hbar}{c}\partial_t-\frac{q}{c}\phi\right)-\overrightarrow{\gamma}\left(\overrightarrow{p}-q\overrightarrow{A}\right)-mc\right]\psi=0\,, \tag{117}$$

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

$$\left[(-i\hbar\partial_t+q\phi)+c\gamma^0\overrightarrow{\gamma}\left(\overrightarrow{p}-q\overrightarrow{A}\right)+\gamma^0mc^2\right]\psi=0\,, \tag{118}$$

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

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

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

$$\alpha_i=\begin{pmatrix} I_2 & 0\\ 0 & -I_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_i\\ -\sigma_i & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 & \sigma_i\\ \sigma_i & 0\end{pmatrix}, \tag{120}$$

míg a β mátrix nyilvánvalóan

$$\beta = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix} . \tag{121}$$

Az új mátrixokkal a Dirac egyenlet az

$$i\hbar\partial_t\psi = \left[c\overrightarrow{\alpha}\left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right) + q\phi + \beta mc^2\right]\psi\,, \tag{122}$$

alakot ölti, melyből az

$$i\hbar\partial_t\psi = H\psi \tag{123}$$

analógia alapján leolvashatjuk a relativisztikus Hamilton operátort:

$$H = c\overrightarrow{\alpha}\left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right) + q\phi + \beta mc^2\,, \tag{124}$$

mely az $\underline{\alpha}$ és β mátrixok ismeretében nyilvánvalóan hermitikus. A stacionárius 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

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

1.8 A kontinuitási egyenlet

Induljunk ki a Dirac egyenlet

$$i\hbar\partial_t\psi = \left[c\overrightarrow{\alpha}\left(\overrightarrow{p} - q\overrightarrow{A}\right) + q\phi + \beta mc^2\right]\psi \tag{126}$$

alakjából, melyet a hullámfüggvény komponensei szerint kiírunk:

$$i\hbar\partial_t\psi_r = c\overrightarrow{\alpha}_{rs}\overrightarrow{p}\psi_s - q\overrightarrow{A}\psi_s + q\phi\psi_r + mc^2\beta_{rs}\psi_s\,. \tag{127}$$

Konjugáljuk az egyenletek mindkét oldalát:

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

$$= -c\left(\overrightarrow{p}\psi_s^*\right)\overrightarrow{\alpha}_{sr} - q\overrightarrow{A}\psi_s^*\overrightarrow{\alpha}_{sr} + q\phi\psi_r^* + mc^2\psi_s^*\beta_{sr}\,, \tag{129}$$

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

$$-i\hbar\partial_t\psi^\dagger = c\left(-\overrightarrow{p} - \frac{q}{c}\overrightarrow{A}\right)\psi^\dagger\overrightarrow{\alpha} + q\phi\psi^\dagger + mc^2\psi^\dagger\beta\,, \tag{130}$$

ahol

$$\psi^\dagger = \left(\psi_1^*, \psi_2^*, \psi_3^*, \psi_4^*\right) \tag{131}$$

a hullámfüggvény adjungáltja. Az (126) egyenletet ψ^+-szal balról, a (130) egyenletet ψ-vel jobbról beszorozva, majd az így nyert két egyenletet egymásból kivonva kapjuk, hogy

$$i\hbar\left[\psi^\dagger\partial_t\psi + \left(\partial_t\psi^\dagger\right)\psi\right] = c\left[\psi^\dagger\overrightarrow{\alpha}\,\overrightarrow{p}\psi + \left(\overrightarrow{p}\psi^\dagger\right)\overrightarrow{\alpha}\psi\right] \tag{132}$$

$$\Downarrow$$

$$\partial_t\left(\psi^\dagger\psi\right) + \overrightarrow{\nabla}\left(c\psi^\dagger\overrightarrow{\alpha}\psi\right) = 0\,, \tag{133}$$

amiből a megtalálási valószínűségsűrűség és áramsűrűség megfelelő definíciójával,

$$\underline{\rho = \psi^\dagger \psi} \quad \text{és} \quad \underline{\vec{j} = c\psi^\dagger \vec{\alpha} \psi}\,, \tag{134}$$

a

$$\partial_t \rho + \vec{\nabla}\vec{j} = 0 \tag{135}$$

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

$$j^\mu = \left(c\rho, \vec{j}\right) = c\psi^\dagger \gamma^0 \gamma^\mu \psi \tag{136}$$

négyes áramsűrűségvektor kontravariáns négyesvektor és így a kontinuitási egyenlet a kovariáns

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \tag{137}$$

alakban írható, azaz tetszőleges inerciarendszerben érvényes.

1.9 A konjugált spinor, konjugált Dirac egyenlet

A fenti eredményhez eljuthatunk a Dirac egyenlet kovariáns alakjából is,

$$\gamma^\mu \partial_\mu \psi + \frac{iq}{\hbar}\gamma^\mu A_\mu \psi + i\kappa\psi = 0 \tag{138}$$

amit ismételten a hullámfüggvény komponensei szerint írunk fel,

$$\gamma^\mu_{rs}\partial_\mu \psi_s + \frac{iq}{\hbar}\gamma^\mu_{rs} A_\mu \psi_s + i\kappa\psi_r = 0 \tag{139}$$

majd konjugálunk,

$$\left(\gamma^\mu_{rs}\right)^* \partial_\mu \psi^*_s - \frac{iq}{\hbar}\left(\gamma^\mu_{rs}\right)^* A_\mu \psi^*_s - i\kappa\psi^*_r = 0 \tag{140}$$

$$\Downarrow \tag{141}$$

$$\left(\partial_\mu \psi^*_s\right)\left(\gamma^\mu\right)^\dagger_{sr} - \frac{iq}{\hbar} A_\mu \psi^*_s \left(\gamma^\mu\right)^\dagger_{sr} - i\kappa\psi^*_r = 0\,. \tag{142}$$

A hullámfüggvény adjungáltjával,

$$\psi^\dagger = \begin{pmatrix} \psi^*_1 & \psi^*_2 & \psi^*_3 & \psi^*_4 \end{pmatrix} \tag{143}$$

a fenti egyenlet a

$$\left(\partial_\mu \psi^\dagger\right)\left(\gamma^\mu\right)^\dagger - \frac{iq}{\hbar} A_\mu \psi^\dagger \left(\gamma^\mu\right)^\dagger - i\kappa\psi^\dagger = 0 \tag{144}$$

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

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

melyet jobbról γ^0-lal beszorozva és bevezetve a

$$\overline{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0 \tag{146}$$

konjugált spinort, nyerjük a *konjugált Dirac egyenletet*:

$$\underline{\left(\partial_\mu\overline{\psi}\right)\gamma^\mu - \frac{iq}{\hbar}A_\mu\overline{\psi}\gamma^\mu - i\kappa\overline{\psi} = 0\,.} \tag{147}$$

A (138) egyenletet balról $\overline{\psi}$-sal, a (147) egyenletet jobbról ψ-vel beszorozva, majd a két egyenletet összeadva kapjuk, hogy

$$\overline{\psi}\gamma^\mu\partial_\mu\psi + \left(\partial_\mu\overline{\psi}\right)\gamma^\mu\psi = 0\,, \tag{148}$$

azaz

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

illetve

$$\partial_\mu j^\mu = 0\,, \tag{150}$$

ahol

$$j^\mu = c\overline{\psi}\gamma^\mu\psi = c\psi^\dagger\gamma^0\gamma^\mu\psi\,. \tag{151}$$

1.10 A szabad elektron spektruma

Zérus vektor- és skalárpotenciál esetén a (125) egyenlet,

$$\begin{pmatrix} mc^2 I_2 & c\overrightarrow{\sigma}\overrightarrow{p} \\ c\overrightarrow{\sigma}\overrightarrow{p} & -mc^2 I_2 \end{pmatrix}\psi\left(\overrightarrow{r}\right) = E\psi\left(\overrightarrow{r}\right)\ , \tag{152}$$

megoldását kereshetjük a

$$\psi\left(\overrightarrow{r}\right) = Ue^{\frac{i}{\hbar}\overrightarrow{p}\overrightarrow{r}} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar}\overrightarrow{p}\overrightarrow{r}} \tag{153}$$

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

$$H\left(\overrightarrow{p}\right)U = E\,U \tag{154}$$

mátrix sajátértékegyenletet kapjuk, ahol

$$H\left(\overrightarrow{p}\right) = \begin{pmatrix} mc^2 I_2 & c\overrightarrow{\sigma}\overrightarrow{p} \\ c\overrightarrow{\sigma}\overrightarrow{p} & -mc^2 I_2 \end{pmatrix}\ . \tag{155}$$

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,

$$\left(E - mc^2\right)\left(E + mc^2\right) - c^2p^2 = 0\ . \tag{156}$$

Innen a szabad részecske energiája

$$E = \pm\sqrt{m^2c^4 + c^2p^2} \tag{157}$$

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:

$$\left[\begin{pmatrix} mc^2 I_2 & 0 \\ 0 & -mc^2 I_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix}\right] = 0 \quad (i = x, y, z)\ . \tag{158}$$

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

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

$$\left[c\vec{\alpha}\left(\vec{p}-q\vec{A}\right)+q\phi+\beta mc^2\right]\psi=E\psi \tag{159}$$

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

$$\psi=\begin{pmatrix}\chi\\ \varphi\end{pmatrix}, \tag{160}$$

ahol χ és φ az ún. nagy- és kiskomponens. Írjuk ki részletesen a (159) egyenletet:

$$\begin{pmatrix}E-mc^2-q\phi & -c\vec{\sigma}\vec{K}\\ -c\vec{\sigma}\vec{K} & E+mc^2-q\phi\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\chi\\ \varphi\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\ 0\end{pmatrix}$$

$$\Downarrow$$

$$\left(E-mc^2-q\phi\right)\chi-c\vec{\sigma}\vec{K}\varphi=0 \quad , \tag{161}$$

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

A φ kiskomponens kifejezhető a (162) egyenletből,

$$\varphi=\left(E+mc^2-q\phi\right)^{-1}c\vec{\sigma}\vec{K}\chi\ . \tag{163}$$

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

$$\varphi=\frac{1}{2mc}\vec{\sigma}\vec{K}\chi\ . \tag{164}$$

Ezt visszahelyettesítve a (161) 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,

$$\left[E'-q\phi-\frac{1}{2m}\left(\vec{\sigma}\vec{K}\right)\left(\vec{\sigma}\vec{K}\right)\right]\chi=\left[E'-q\phi-\frac{1}{2m}\vec{K}^2-\frac{i}{2m}\left(\vec{K}\times\vec{K}\right)\vec{\sigma}\right]\chi \tag{165}$$

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

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

$$E'\chi=H_P\,\chi\ , \tag{167}$$

ahol bevezettük a Pauli-Schrödinger Hamilton operátort,

$$H_P=\frac{1}{2m}\left(\vec{\sigma}\vec{K}\right)\left(\vec{\sigma}\vec{K}\right)+q\phi=\frac{\vec{K}^2}{2m}+q\phi-\frac{\hbar q}{2m}\vec{B}\vec{\sigma}\ . \tag{168}$$

Lépjünk túl ezen a közelítésen! A

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

$$\simeq\frac{1}{2mc^2}\left(1-\frac{E'-q\phi}{2mc^2}\right)c\vec{\sigma}\vec{K}\chi\ , \tag{169}$$

kifejezést imételten visszahelyettesítve a (161) egyenletbe kapjuk, hogy

$$(E' - q\phi)\,\chi = \frac{1}{2m}\vec{\sigma}\vec{K}\left(1 - \frac{E' - q\phi}{2mc^2}\right)\vec{\sigma}\vec{K}\chi\;, \tag{170}$$

ill. a fenti egyenlete átrendezve és kihasználva H_P definíxióját,

$$\begin{aligned}E'\chi &= H_P\chi - \frac{1}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\vec{K}\;\left(E' - q\phi\right)\;\vec{\sigma}\vec{K}\;\chi \\ &= H_P\chi - \frac{1}{4m^2c^2}\left(\vec{\sigma}\vec{K}\right)\left(\vec{\sigma}\vec{K}\right)\left(E' - q\phi\right)\chi - \frac{1}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\vec{K}\;\left[E' - q\phi, \vec{\sigma}\vec{K}\right]\chi \\ &= H_P\chi - \frac{1}{2mc^2}\left(H_P - q\phi\right)\left(E' - q\phi\right)\chi - \frac{1}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\vec{K}\left[\vec{\sigma}\vec{K}, q\phi\right]\;.\end{aligned} \tag{171}$$

A (171) egyenlet második tagja $1/c^2$ rendig közelíthető mint

$$H_M \equiv -\frac{1}{2mc^2}\left(H_P - q\phi\right)^2\chi \simeq -\frac{1}{8m^3c^2}K^4\chi \quad . \tag{172}$$

Ez a járulék a *relativisztikus tömegnövekedést* (kinetikus energia korrekciót) írja le, hiszen

$$E' - q\phi = \sqrt{m^2c^4 + K^2c^2} - mc^2 \simeq \frac{K^2}{2m} - \frac{1}{8m^3c^2}K^4 + \ldots \tag{173}$$

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

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} \quad , \quad E_n^{(0)} = -\frac{m\left(Ze^2\right)^2}{2\hbar^2n^2} = -\frac{1}{2}mc^2\alpha^2\frac{Z^2}{n^2} \quad , \tag{174}$$

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

$$\begin{aligned}H_1 &= -\frac{p^4}{8m^3c^2} = -\frac{1}{2mc^2}\left(H_0 + \frac{Ze^2}{r}\right)^2 \\ &= -\frac{1}{2mc^2}\left(H_0^2 + 2H_0\frac{Ze^2}{r} + \frac{\left(Ze^2\right)^2}{r^2}\right)\;.\end{aligned} \tag{175}$$

Innen

$$\begin{aligned}\delta E_{n\ell m}^{(1)} &= \left\langle n\ell m\left|H_1\right|n\ell m\right\rangle \\ &= -\frac{1}{2mc^2}\left(\left(E_n^{(0)}\right)^2 + 2E_n^{(0)}\underbrace{\left\langle\frac{Ze^2}{r}\right\rangle_{n\ell m}}_{-2E_n^{(0)}} + Z^2e^4\;\underbrace{\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{n\ell m}}_{Z^2/\left[a_0^2n^3(\ell+1/2)\right]}\right) \\ &= -\frac{1}{2mc^2}\left(-\frac{3}{4}m^2c^4\alpha^4\frac{Z^4}{n^4} + \alpha^4m^2c^4Z^4\frac{1}{n^3\left(\ell+1/2\right)}\right) = \\ &= \underbrace{-\frac{mc^2}{2}\left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2}_{E_n^{(0)}}\left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2\left(\frac{n}{\ell+1/2} - \frac{3}{4}\right)\quad ,\end{aligned} \tag{176}$$

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 (171) egyenlet harmadik tagjával:

$$-\frac{1}{4m^2c^2}\left(\vec{\sigma}\vec{K}\right)\left(\vec{\sigma}\left[\vec{K},q\phi\right]\right)=-\frac{1}{4m^2c^2}\underline{\vec{K}}\left[\vec{K},q\phi\right]-\frac{i}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\left(\vec{K}\times\left[\vec{K},q\phi\right]\right) \tag{177}$$

A jobboldalon álló első kifejezés az ún. *Darwin tag*hoz ad járulékot, mellyel a későbbiekben foglalkozunk. A (177) kifejezés második tagját tovább alakítjuk,

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

$$\Downarrow$$

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

Stacionárius elektromágneses térre szorítkozva, ezt a korrekciót

$$H_{sp}=-\frac{\hbar}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\left(q\vec{\mathcal{E}}\times\vec{K}\right) \tag{178}$$

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

$$\vec{\mathcal{E}}=-\vec{\nabla}\phi\left(r\right)=-\frac{d\phi\left(r\right)}{dr}\frac{1}{r}\vec{r} \tag{179}$$

és zérus mágneses tér esetén,

$$H_{sp}=\frac{\hbar q}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{d\phi\left(r\right)}{dr}\vec{\sigma}\left(\vec{r}\times\vec{p}\right)=\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{d\left(q\phi\left(r\right)\right)}{dr}\vec{L}\vec{S}\ , \tag{180}$$

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

$$H_{sp}=\frac{1}{c^2e^2}\frac{1}{r}\frac{dV\left(r\right)}{dr}\vec{M}_L\vec{M}_S \tag{181}$$

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

$$H_1=\frac{Ze^2}{2m^2c^2}\frac{1}{r^3}\vec{L}\vec{S} \tag{182}$$

perturbáló operátort átírjuk a

$$H_1=\frac{Ze^2}{4m^2c^2}\frac{1}{r^3}\left(J^2-L^2-S^2\right) \tag{183}$$

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

$$|n,\ell,j,m_j\rangle = \sum_{m_s=\pm\frac{1}{2}} C\left(j,m_j;\ell,m_\ell\frac{1}{2}m_s\right)\left|n;\ell,m_\ell,\frac{1}{2}m_s\right\rangle\left|\frac{1}{2},m_s\right\rangle \ , \tag{184}$$

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,

$$\delta E^{(1)}_{n,\ell,j,m_j} = \frac{Z\hbar^2e^2}{4m^2c^2}\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle_{n\ell}\left(j\,(j+1)-\ell\,(\ell+1)-\frac{3}{4}\right) \ , \tag{185}$$

valamint

$$\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle_{n\ell} = \left(\frac{Z}{na_0}\right)^3\frac{1}{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)\ell\,(\ell+1)} \tag{186}$$

felhasználásával,

$$\delta E^{(1)}_{n,\ell,j,m_j} = \underbrace{\frac{Z\hbar^2e^2}{2m^2c^2n}\left(\frac{Z}{na_0}\right)^3}_{-E^{(0)}_n\left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2} n\frac{j\,(j+1)-\ell\,(\ell+1)-\frac{3}{4}}{(2\ell+1)\,\ell\,(\ell+1)} \ . \tag{187}$$

Némi algebrai átalakítás után,

$$\frac{j\,(j+1)-\ell\,(\ell+1)-\frac{3}{4}}{(2\ell+1)\,\ell\,(\ell+1)} \underset{j=\ell+\frac{1}{2}}{=} \frac{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)\left(\ell+\frac{3}{2}\right)-\ell\,(\ell+1)-\frac{3}{4}}{(2\ell+1)\,\ell\,(\ell+1)} = \frac{1}{(2\ell+1)\,(\ell+1)} \tag{188}$$

$$= \frac{1}{\ell+\frac{1}{2}}-\frac{1}{\ell+1} = \frac{1}{\ell+\frac{1}{2}}-\frac{1}{j+\frac{1}{2}} \ , \tag{189}$$

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

$$= \frac{1}{\ell+\frac{1}{2}}-\frac{1}{\ell} = \frac{1}{\ell+\frac{1}{2}}-\frac{1}{j+\frac{1}{2}} \ , \tag{191}$$

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

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

$$\delta E^{(1)}_{n,\ell,j,m_j} = E^{(0)}_n\left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2\left(\frac{n}{j+1/2}-\frac{3}{4}\right) \ , \tag{193}$$

ami megegyezik a H-atom Dirac egyenletből számolt sajátenergiájának $1/c^2$-rendű korrekciójával.

1.11.1 A normálás szerepe

A továbbiakban is 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 elfeledünk, hogy a teljes (négykomponensű) hullámfüggvényt kell normálnunk, azaz

$$\int d^3r\ \psi^+\psi = \int d^3r\ \left(\chi^+\chi + \varphi^+\varphi\right) = 1 \quad . \tag{194}$$

A kiskomponens normája

$$\begin{aligned}\int d^3r\ \varphi^+\varphi &\simeq \frac{1}{4m^2c^2}\int d^3r\ \chi^+\left(\overrightarrow{\sigma}\,\overrightarrow{p}\right)\left(\overrightarrow{\sigma}\,\overrightarrow{p}\right)\chi \\ &\simeq \frac{1}{4m^2c^2}\int d^3r\ \chi^+p^2\chi \quad ,\end{aligned} \tag{195}$$

ezért

$$1 = \int d^3r\ \chi^+\left(1+\frac{p^2}{4m^2c^2}\right)\chi = \int d^3r\ \chi_S^+\chi_S \quad , \tag{196}$$

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

$$\chi_S = \left(1+\frac{p^2}{8m^2c^2}\right)\chi \quad \Longrightarrow \quad \chi = \left(1-\frac{p^2}{8m^2c^2}\right)\chi_S \quad . \tag{197}$$

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,

$$E'\chi = H\chi\ , \tag{198}$$

következik, hogy

$$E'\chi_S = \left(1+\frac{p^2}{8m^2c^2}\right)H\left(1-\frac{p^2}{8m^2c^2}\right)\chi_S \quad , \tag{199}$$

amiből ugyancsak $1/c^2$ rendig az

$$E'\chi_S \simeq \left(H+\left[\frac{p^2}{8m^2c^2},H\right]\right)\chi_S \tag{200}$$

egyenletet kapjuk. Látható, hogy az egyetlen újabb $1/c^2$-rendű korrekcióhoz akkor jutunk, ha a kommutátorba 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 (177) jobboldalának első tagjával ($\overrightarrow{K}$-t $\overrightarrow{p}$-vel helyettesítve):

$$H_D = -\frac{1}{4m^2c^2}\overrightarrow{p}\left[\overrightarrow{p},q\phi\right] + \frac{1}{8m^2c^2}\left[p^2,q\phi\right] = \frac{1}{8m^2c^2}\left(\left[\overrightarrow{p},q\phi\right]\overrightarrow{p} - \overrightarrow{p}\left[\overrightarrow{p},q\phi\right]\right) \tag{201}$$

$$= -\frac{1}{8m^2c^2}\left[\overrightarrow{p},\left[\overrightarrow{p},q\phi\right]\right] = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\left[\overrightarrow{\nabla},\left[\overrightarrow{\nabla},q\phi\right]\right] = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\Delta\left(q\phi\right)\ , \tag{202}$$

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,

$$H_D(\vec{r}) = \frac{Ze^2\hbar^2\pi}{2m^2c^2}\,\delta(\vec{r}) \ , \tag{203}$$

$$\delta E^{(1)}_{n\ell m} = \int d^3r\,\psi_{n\ell m}(\vec{r})^*\,H_D(\vec{r})\,\psi_{n\ell m}(\vec{r}) = \frac{Ze^2\hbar^2\pi}{2m^2c^2}R_{n\ell}(r=0) = 0 \ , \tag{204}$$

ahol $R_{n\ell}(r)$ a radiális valószínűségeloszlás. Pontszerű magot tekintve, a H-atom energiaszintjeihez a Darwin-tag tehát nem ad járulékot. A valóságban, azaz az atommag véges méretét figyelembevéve, az s pályák energiaszintjeit α^2 rendben felfelé tolja el.

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

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

sajátértékegyenlethez jutottunk, ahol χ a normált kétkomponensű hullámfüggvény,

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

a Pauli-Schrödinger Hamilton operátor,

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

a kinetikus energia relativisztikus tömegnövekedés következtében fellépő korrekciója,

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

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

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

a spin-pálya kölcsönhatás.

1.11.2 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

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

közelítést. Ezért

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

$$\sigma_i\left(\overrightarrow{\sigma}\overrightarrow{K}\right)=\sigma_i\sigma_jK_j=\left(\delta_{ij}+i\varepsilon_{ijk}\sigma_k\right)K_j=K_i+i\left(\overrightarrow{K}\times\overrightarrow{\sigma}\right)_i$$

$$\left(\overrightarrow{K}\chi\right)^\dagger\overrightarrow{\sigma}\sigma_i=\left(K_j\chi\right)^\dagger\sigma_j\sigma_i=\left(K_i\chi\right)^\dagger-i\left[\left(\overrightarrow{K}\chi\right)^\dagger\times\overrightarrow{\sigma}\right]_i$$

$$\Downarrow$$

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

Az első tag:

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

megegyezik a nemrelativisztikus eredménnyel.

A második tag:

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

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

$$\Downarrow$$

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

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

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

ahol

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

az elektron spinje miatt fellépő mágnesezettség sűrűség.

1.12 A Dirac egyenlet Lorentz invarianciája

Írjuk fel a

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

Dirac egyenletet a

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

homogén Lorentz transzformáció alkalmazása után:

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

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

$$\Downarrow$$

$$\left[\gamma^{\mu}\ \left(\overline{\Lambda}\right)_{\mu}^{\ \nu}(i\hbar\partial_{\nu}-qA_{\nu}(\mathsf{x}))-mc\right]\psi'(\mathsf{x}')=0\ . \tag{221}$$

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

$$\psi'(\mathsf{x}')=\mathcal{S}(\Lambda)\ \psi(\mathsf{x})\ , \tag{222}$$

a (221) egyenletet a

$$\left[\gamma^{\mu}\,\overline{\Lambda}_{\mu}^{\ \nu}(i\hbar\partial_{\nu}-qA_{\nu}(\mathsf{x}))-mc\right]\mathcal{S}(\Lambda)\ \psi(\mathsf{x})=0 \tag{223}$$

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

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

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

$$\gamma^{\mu}\,\overline{\Lambda}_{\mu}^{\ \nu}\mathcal{S}(\Lambda)-\mathcal{S}(\Lambda)\gamma^{\nu}=0 \tag{225}$$

egyenlőséget, azaz

$$\mathcal{S}(\Lambda)\ \gamma^{\nu}\,\mathcal{S}(\Lambda)^{-1}=\gamma^{\mu}\,\overline{\Lambda}_{\mu}^{\ \nu}\ . \tag{226}$$

Kihasználva, hogy $\Lambda^{T}=\overline{\Lambda}^{-1}$, a fenti összefüggés átírható a

$$\underline{\mathcal{S}(\Lambda)^{-1}\,\gamma^{\mu}\,\mathcal{S}(\Lambda)}=\gamma^{\nu}\left(\overline{\Lambda}^{-1}\right)_{\nu}^{\ \mu}=\gamma^{\nu}\left(\overline{\Lambda}^{-1}\right)_{\nu}^{\ \mu}=\gamma^{\nu}\left(\Lambda^{T}\right)_{\nu}^{\ \mu}=\underline{\Lambda^{\mu}_{\ \nu}\gamma^{\nu}} \tag{227}$$

alakra.

Állítás: A (227) egyenlet megoldása

$$\underline{\mathcal{S}(\Lambda)=e^{\frac{1}{4}\omega_{\mu\nu}\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}}} \tag{228}$$

Bizonyítás: Vezessük be az infinitezimális τ mátrixot,

$$\mathcal{S}(\Lambda)=e^{-\tau}\ . \tag{229}$$

Az ismert Hausdorff kifejtés szerint,

$$e^{\tau}\gamma^{\mu}e^{-\tau}=\gamma^{\mu}+[\tau,\gamma^{\mu}]+\frac{1}{2!}[\tau,[\tau,\gamma^{\mu}]]+\frac{1}{3!}[\tau,[\tau,[\tau,\gamma^{\mu}]]]+\dots\ . \tag{230}$$

Ugyanakkor

$$\Lambda^{\mu}_{\ \nu}\gamma^{\nu}=\left(e^{\omega}\right)^{\mu}_{\ \nu}\gamma_{\nu}=\gamma^{\mu}+\omega^{\mu}_{\ \nu}\gamma^{\nu}+\frac{1}{2!}\left(\omega^{2}\right)^{\mu}_{\ \nu}\gamma^{\nu}+\frac{1}{3!}\left(\omega^{3}\right)^{\mu}_{\ \nu}\gamma^{\nu}+\dots\ . \tag{231}$$

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

$$[\tau,\gamma^{\mu}]=\omega^{\mu}_{\ \nu}\gamma^{\nu}\ , \tag{232}$$

biztosítja. Ugyanis ekkor teljes indukcióval bizonyítható, hogy

$$\underbrace{[\tau,[\tau,\dots[\tau,\gamma^{\mu}]]]}_{n}=\left(\omega^{n}\right)^{\mu}_{\ \nu}\gamma^{\nu}\ , \tag{233}$$

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

$$[\tau, \underbrace{[\tau, [\tau, \ldots [\tau, \gamma^\mu]]]}_{n-1}] = \left[\tau, \left(\omega^{n-1}\right)^\mu_{\ \nu} \gamma^\nu\right] = \left(\omega^{n-1}\right)^\mu_{\ \nu} [\tau, \gamma^\nu] = \left(\omega^{n-1}\right)^\mu_{\ \nu} \omega^\nu_{\ \lambda}\gamma^\lambda = (\omega^n)^\mu_{\ \lambda} \gamma^\lambda \ . \quad (234)$$

Ezek után bizonyítjuk, hogy a (232) egyenlet megoldása $\tau = -\frac{1}{4}\omega_{\mu\nu}\gamma^\mu\gamma^\nu$. A γ^μ mátrixok antikommutációs relációja alapján ugyanis:

$$\begin{aligned}\tau\gamma^\mu &= -\frac{1}{4}\omega_{\lambda\delta}\gamma^\lambda\gamma^\delta\gamma^\mu = \frac{1}{4}\omega_{\lambda\delta}\gamma^\lambda\gamma^\mu\gamma^\delta - \frac{1}{2}\omega_{\lambda\delta}\gamma^\lambda g^{\mu\delta} = -\frac{1}{4}\omega_{\lambda\delta}\gamma^\mu\gamma^\lambda\gamma^\delta + \frac{1}{2}\omega_{\lambda\delta}\gamma^\delta g^{\lambda\mu} - \frac{1}{2}\omega_{\lambda\delta}\gamma^\lambda g^{\mu\delta} \\ &= \gamma^\mu\tau + \frac{1}{2}\omega_{\lambda\delta}\gamma^\delta g^{\lambda\mu} + \frac{1}{2}g^{\mu\delta}\omega_{\delta\lambda}\gamma^\lambda = \gamma^\mu\tau + \omega^\mu_{\ \lambda}\gamma^\lambda \ , \end{aligned} \quad (235)$$

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

Mivel

$$\begin{aligned}\frac{1}{4}\omega_{\mu\nu}\gamma^\mu\gamma^\nu &= \frac{1}{8}\omega_{\mu\nu}\gamma^\mu\gamma^\nu - \frac{1}{8}\omega_{\nu\mu}\gamma^\mu\gamma^\nu && (236) \\ &= \frac{1}{8}\omega_{\mu\nu}\left(\gamma^\mu\gamma^\nu - \gamma^\nu\gamma^\mu\right) = \frac{1}{8}\omega_{\mu\nu}\left[\gamma^\mu, \gamma^\nu\right] && (237)\end{aligned}$$

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

$$\mathcal{S}(\Lambda) = e^{-\frac{i}{\hbar}\omega_{\mu\nu}\sigma^{\mu\nu}} \quad (238)$$

formában is írható, ahol

$$\sigma^{\mu\nu} = \frac{i\hbar}{8}\left[\gamma^\mu, \gamma^\nu\right] \ , \quad (239)$$

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

1.13 Fizikai mennyiségek Lorentz transzformáltja

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

$$O(\mathsf{x}) = \psi(\mathsf{x})^\dagger O\psi(\mathsf{x}) \ . \quad (240)$$

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

$$O(\mathsf{x}) = \overline{\psi}(\mathsf{x})\,\overline{O}\,\psi(\mathsf{x}) \ , \quad (241)$$

alakban is írhatunk, ahol

$$\overline{O} = \gamma^0 O \, . \quad (242)$$

Példa a valószínűségsűrűség és valószínűségi áramsűrűségre,

$$\varrho(\mathsf{x}) = \overline{\psi}(\mathsf{x})\gamma^0\psi(\mathsf{x}) \ , \ j^k(\mathsf{x}) = c\overline{\psi}(\mathsf{x})\gamma^k\psi(\mathsf{x}) \ \ (k = 1, 2, 3) \ , \quad (243)$$

ill. a négyes áramsűrűségre,

$$j^\mu(\mathsf{x}) = \left(c\varrho(\mathsf{x}), \overrightarrow{j}(\mathsf{x})\right) = \overline{\psi}(\mathsf{x})\ (c\gamma^\mu)\ \psi(\mathsf{x}) \ . \quad (244)$$

Segédtétel: Bármely Lorentz transzformációra

$$\mathcal{S}(\Lambda)^{-1} = \gamma^0 \mathcal{S}(\Lambda)^\dagger \gamma^0 \,. \tag{245}$$

Bizonyítás:

$$\gamma^0 \mathcal{S}(\Lambda)^\dagger \gamma^0 = \gamma^0 \left(e^{-\tau}\right)^\dagger \gamma^0 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \gamma^0 \left(-\tau^\dagger\right)^n \gamma^0 \tag{246}$$

Felhasználva, hogy

$$\gamma^\mu = \gamma^0 \left(\gamma^\mu\right)^\dagger \gamma^0 \,, \tag{247}$$

$$\gamma^0 \left(-\tau^\dagger\right) \gamma^0 = \frac{1}{4} \omega_{\mu\nu} \gamma^0 \left(\gamma^\nu\right)^\dagger \left(\gamma^\mu\right)^\dagger \gamma^0 = \frac{1}{4} \omega_{\mu\nu} \gamma^0 \left(\gamma^\nu\right)^\dagger \gamma^0 \gamma^0 \left(\gamma^\mu\right)^\dagger \gamma^0 \tag{248}$$

$$= \frac{1}{4} \omega_{\mu\nu} \gamma^\nu \gamma^\mu = -\frac{1}{4} \omega_{\mu\nu} \gamma^\mu \gamma^\nu = \tau \tag{249}$$

$$\Downarrow$$

$$\gamma^0 \left(-\tau^+\right)^2 \gamma^0 = \left(\gamma^0 \left(-\tau^\dagger\right) \gamma^0\right)^2 = \tau^2 \;\ldots\; \gamma^0 \left(-\tau^+\right)^n \gamma^0 = \tau^n \tag{250}$$

$$\Downarrow$$

$$\gamma^0 \mathcal{S}(\Lambda)^\dagger \gamma^0 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tau^n}{n!} = e^\tau = \mathcal{S}(\Lambda)^{-1} \,. \tag{251}$$

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

$$\begin{aligned} O'(\mathsf{x}') &= \psi'(\mathsf{x}')^\dagger O\, \psi'(\mathsf{x}') \\ &= \left[\mathcal{S}(\Lambda)\, \psi(\mathsf{x})\right]^\dagger O\, \mathcal{S}(\Lambda)\; \psi(\mathsf{x}) \\ &= \psi(\mathsf{x})^\dagger \mathcal{S}(\Lambda)^\dagger O\, \mathcal{S}(\Lambda)\; \psi(\mathsf{x}) \\ &= \overline{\psi}(\mathsf{x})\, \gamma^0 \mathcal{S}(\Lambda)^\dagger \gamma^0 \gamma^0 O\, \mathcal{S}(\Lambda)\; \psi(\mathsf{x}) \\ &= \overline{\psi}(\mathsf{x}) \left(\mathcal{S}(\Lambda)^{-1} \gamma^0 O \mathcal{S}(\Lambda)\right) \psi(\mathsf{x}) \\ &= \overline{\psi}(\mathsf{x}) \left(\mathcal{S}(\Lambda)^{-1} \overline{O} \mathcal{S}(\Lambda)\right) \psi(\mathsf{x}) \,, \end{aligned} \tag{252}$$

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

$$\overline{O}' = \mathcal{S}(\Lambda)^{-1} \overline{O} \mathcal{S}(\Lambda) \tag{253}$$

és ezzel

$$O'(\mathsf{x}') = \overline{\psi}(\mathsf{x})\, \overline{O}' \psi(\mathsf{x}) \,. \tag{254}$$

1.13.1 A négyes áramsűrűségvektor

A (227) és (252) egyenletek alapján,

$$\begin{aligned} j'_\mu(\mathsf{x}') &= c\,\overline{\psi}(\mathsf{x}) \left(\mathcal{S}(\Lambda)^{-1} \gamma^\mu \mathcal{S}(\Lambda)\right) \psi(\mathsf{x}) \\ &= c\,\overline{\psi}(\mathsf{x}) \left(\Lambda^\mu_{\ \nu} \gamma^\nu\right) \psi(\mathsf{x}) = \Lambda^\mu_{\ \nu} \left[c\,\overline{\psi}(\mathsf{x})\; \gamma^\nu\, \psi(\mathsf{x})\right] \\ &= \Lambda^\mu_{\ \nu}\, j^\nu(\mathsf{x}) \,, \end{aligned} \tag{255}$$

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.

1.14 Térbeli forgatások és a spin

Csoportelméleti tanulmányainkból emlékszünk, hogy az $\overrightarrow{n}$ tengely körüli φ szögű térbeli forgatás ($d\overrightarrow{r} = d\varphi\,\overrightarrow{n} \times \overrightarrow{r}$) mátrixa,

$$R(\varphi, \overrightarrow{n}) = \exp\left(-i\overrightarrow{n}\overrightarrow{X}\varphi\right) , \tag{256}$$

ahol

$$(X_k)_{ij} = -i\varepsilon_{ijk} \quad (k = 1, 2, 3) . \tag{257}$$

Az infinitezimális Lorentz transzformáció mátrixa tehát,

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

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

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

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

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

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

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

1.14.1 A teljes impulzusmomentum

A hullámfüggvény transzformációja térbeli forgatásra tehát,

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

illetve

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

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

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

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

ill. véges forgatásra

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

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

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

azaz a relativisztikus kvantumelméletben a térbeli forgatások infinitezimális generátora a

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

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

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

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

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

alakú. Ekkor

$$\left[H,L_i\right]=\left[c\overrightarrow{\alpha}\overrightarrow{p}+q\phi,\varepsilon_{ijk}x_jp_k\right]\quad , \tag{284}$$

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,

$$[c\alpha_l p_l, \varepsilon_{ijk} x_j p_k] = c\varepsilon_{ijk}\alpha_l [p_l, x_j p_k] = c\varepsilon_{ijk}\alpha_l (\underbrace{[p_l, x_j]}_{\frac{\hbar}{i}\delta_{lj}} p_k + x_j \underbrace{[p_l, p_k]}_{0})$$

$$= \frac{\hbar c}{i} (\vec{\alpha} \times \vec{p})_i \tag{285}$$

$$[q\phi, \varepsilon_{ijk} x_j p_k] = q\varepsilon_{ijk} [\phi, x_j p_k] = q\varepsilon_{ijk} (\underbrace{[\phi, x_j]}_{0} p_k + x_j \underbrace{[\phi, p_k]}_{-\frac{\hbar}{i}\partial_k \phi})$$

$$= -\frac{\hbar q}{i} \left(\vec{r} \times \vec{\nabla}\phi\right)_i \quad , \tag{286}$$

kapjuk, hogy

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

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

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

a spin-operátor. Ugyanis

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

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

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

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

így tehát

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

ahol $\vec{F} = -\vec{\nabla}(q\phi)$ 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.

1.14.2 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

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

A transzformált Dirac egyenlet:

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

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:

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

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

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*.

1.15 Kapcsolat a Klein-Gordon egyenlettel: az elektron saját mágneses momentuma

Most vizsgáljuk meg, hogy az elektron spinje milyen formában jelenik meg a Dirac egyenletben, azaz milyen járulékot szolgáltat az részecske energiájához. A Dirac egyenletet kovariáns alakját $(\gamma^\nu K_\mu + mc)$-vel balról beszorozva,

$$(\gamma^\nu K_\nu + mc)\,(\gamma^\mu K_\mu - mc)\,\psi = \left(\gamma^\nu \gamma^\mu K_\nu K_\mu - m^2c^2\right)\psi = 0 \quad , \tag{303}$$

majd az alábbi átalakításokat elvégezve,

$$\gamma^\nu \gamma^\mu K_\nu K_\mu = \frac{1}{2}\left(\{\gamma^\nu, \gamma^\mu\} + [\gamma^\nu, \gamma^\mu]\right) K_\nu K_\mu = \left(g^{\nu\mu} + \frac{1}{2}[\gamma^\nu, \gamma^\mu]\right) K_\nu K_\mu = K^\mu K_\mu + \frac{1}{2}[\gamma^\nu, \gamma^\mu]\, K_\nu K_\mu \tag{304}$$

$$= K^\mu K_\mu + \frac{1}{2}\gamma^\nu \gamma^\mu [K_\nu, K_\mu] \tag{305}$$

a

$$\left(\left(K^\mu K_\mu - m^2c^2\right) + \frac{1}{2}\gamma^\nu \gamma^\mu [K_\nu, K_\mu]\right)\psi = 0 \tag{306}$$

egyenlethez jutunk. Láthatjuk, hogy az első két tag a Klein-Gordon egyenletet adja. A harmadik tagban szétválasztva a tisztán térszerű, illetve a vegyes komponenseket tartalmazó tagokat:

$$\frac{1}{2}\gamma^\nu \gamma^\mu [K_\nu, K_\mu] = \frac{1}{2}\gamma^i \gamma^j [K_i, K_j] + \gamma^0 \gamma^i [K_0, K_i] \ , \tag{307}$$

és kihasználva a kinetikus impulzusok korábban levezetett felcserélési relációját és a spin (260) definícióját,

$$\frac{1}{2}\gamma^i \gamma^j [K_i, K_j] = -\frac{\hbar q}{2i}\varepsilon_{ijk}\,\gamma^i \gamma^j B_k = 2q\vec{S}\vec{B} = \hbar q \vec{\Sigma}\vec{B} \ , \tag{308}$$

másrészt, hogy $\alpha^i = \gamma^0\gamma^i$:

$$\gamma^0\gamma^i [K_0, K_i] = \alpha^i \left(\frac{i\hbar}{c}\partial_t - \frac{q\phi}{c}, i\hbar\partial_i + qA_i\right) = \alpha^i \left(\frac{i\hbar q}{c}[\partial_t, A_i] + \frac{i\hbar q}{c}[\partial_i, \phi]\right)$$
$$= \frac{i\hbar q}{c}\alpha^i\left(\partial_i\phi + \partial_t A_i\right) = -\frac{i\hbar q}{c}\vec{\alpha}\vec{\mathcal{E}} \ . \tag{309}$$

ahol $\vec{\mathcal{E}}$ az elektromos térerősség vektor, a

$$\left(K^\mu K_\mu - m^2c^2 + \hbar q\vec{\Sigma}\vec{B} - \frac{i\hbar q}{c}\vec{\alpha}\vec{\mathcal{E}}\right)\psi = 0 \tag{310}$$

egyenletet nyerjük, ahol tehát expliciten megjelennek a mágneses indukcióhoz és elektromos térerősséghez közvetlenül kapcsolódó tagok.

Hogy ezen tagok jelentését közelebbről lássuk, vizsgáljuk meg a fenti egyenlet *nem-relativisztikus* határesetét! Ehhez a

$$K^\mu K_\mu - m^2c^2 = \left(\frac{i\hbar}{c}\partial_t - \frac{q\phi}{c}\right)^2 - \left(\vec{p} - q\vec{A}\right)^2 - m^2c^2 \tag{311}$$

kifejezés jobboldalának első és harmadik tagját alakítjuk át:

$$\left(\frac{i\hbar}{c}\partial_t - \frac{q\phi}{c}\right)^2 - m^2c^2 + \left(\frac{\hbar}{c}\partial_t + \frac{iq}{c}\phi\right)^2 = -\frac{1}{c^2}\left[mc^2 + (i\hbar\partial_t - q\phi)\right]\left[mc^2 - (i\hbar\partial_t - q\phi)\right]$$
$$\simeq -2m\left[mc^2 - i\hbar\partial_t + q\phi\right] \quad , \tag{312}$$

ahol kihasználtuk, hogy egy *pozitív energiás* (a továbbiakban csak ezzel foglalkozunk), stacionárius megoldás esetén vezető rendben,

$$\left(mc^2 + i\hbar\partial_t - q\phi\right)\psi\left(\overrightarrow{r},t\right) = \left(mc^2 + W - q\phi\right)\psi\left(\overrightarrow{r},t\right) \simeq 2mc^2\psi\left(\overrightarrow{r},t\right)\ . \tag{313}$$

Az egyszerű átrendezések után kapott egyenlet,

$$i\hbar\partial_t\psi = \left[mc^2 + \frac{1}{2m}\left(\overrightarrow{p} - \frac{q}{c}\underline{A}\right)^2 + q\phi - \frac{\hbar q}{2m}\overrightarrow{\Sigma}\overrightarrow{B} + \frac{i\hbar q}{2mc}\overrightarrow{\alpha}\overrightarrow{\mathcal{E}}\right]\psi \quad , \tag{314}$$

stacionárius megoldását a

$$\psi\left(\overrightarrow{r},t\right) = \psi\left(\overrightarrow{r}\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\left(E' + mc^2\right)t\right) \tag{315}$$

alakban keresve ($E \equiv E' + mc^2$) jutunk az

$$\left[\frac{1}{2m}\left(\overrightarrow{p} - \frac{q}{c}\underline{A}\right)^2 + q\phi - \frac{\hbar q}{2m}\overrightarrow{\Sigma}\overrightarrow{B} + \frac{i\hbar q}{2mc}\overrightarrow{\alpha}\overrightarrow{\mathcal{E}}\right]\psi = E'\psi \tag{316}$$

egyenlethez, mely joggal tekinthető a Pauli-Schrödinger egyenlet négykomponensű változatának. Ebben fellelhetjük a

$$H_S = -\overrightarrow{M}_S\,\overrightarrow{B} \tag{317}$$

spin-paramágneses tagot, ahol az elektron saját mágneses momentuma

$$\overrightarrow{M}_S = -2\frac{\hbar e}{2m}\frac{1}{\hbar}\overrightarrow{S} = -\frac{2\mu_B}{\hbar}\overrightarrow{S} \quad , \tag{318}$$

ahogy azt korábban bevezettük. A négykomponensű megoldás valójában egy kétkomponensű megoldásra vezethető vissza

$$\psi = \begin{pmatrix} \widetilde{\psi} \\ -\widetilde{\psi} \end{pmatrix} \quad , \tag{319}$$

$$\Downarrow$$

$$\left(\frac{1}{2m}\left(\overrightarrow{p} - \frac{q}{c}\underline{A}\right)^2 + q\phi - \frac{\hbar q}{2m}\overrightarrow{\sigma}\overrightarrow{B} + \frac{i\hbar q}{2mc}\overrightarrow{\sigma}\overrightarrow{\mathcal{E}}\right)\widetilde{\psi} = E'\widetilde{\psi} \quad , \tag{320}$$

mely már csak az elektromos térerősség közvetlen megjelenése miatt különbözik a két-komponensű Pauli-Schrödinger egyenlettől. H-atom esetén az $\frac{i\hbar q}{2mc}\overrightarrow{\sigma}\overrightarrow{\mathcal{E}}$ tag elhanyagolható a $q\phi$ potenciális energia mellett.

1.16 Zitterbewegung

$$H = c\overrightarrow{\alpha}\overrightarrow{p} + \beta mc^2 \tag{321}$$

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij} \tag{322}$$

$$\{\alpha_i, \beta\} = 0 \tag{323}$$

$$\beta^2 = \mathbb{I} \tag{324}$$

$$[\alpha_i, \alpha_j] = \{\alpha_i, \alpha_j\} - 2\alpha_j\alpha_i = 2\delta_{ij} - 2\alpha_j\alpha_i \tag{325}$$

$$[\beta, \alpha_j] = \{\beta, \alpha_j\} - 2\beta\alpha_i = -2\beta\alpha_i \tag{326}$$

$$[H, p_i] = c\alpha_j [p_j, p_i] = 0 \tag{327}$$

$$[H, x_i] = c\alpha_j [p_j, x_i] = \frac{\hbar}{i} c\alpha_i \tag{328}$$

$$v_i = \frac{dx_i}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, x_i] = c\alpha_i \tag{329}$$

$$[H, \alpha_i] = cp_j [\alpha_j, \alpha_i] + mc^2 [\beta, \alpha_i] = 2cp_i - 2cp_j \alpha_i \alpha_j - 2mc^2 \alpha_i \beta = 2cp_i - 2\alpha_i H \tag{330}$$

$$a_i = \frac{dv_i}{dt} = c\frac{d\alpha_i}{dt} = \frac{ic}{\hbar} [H, \alpha_i] = \frac{2ic^2 p_i}{\hbar} - \frac{2ic\alpha_i H}{\hbar} = \frac{2ic^2 p_i}{\hbar} - \frac{2iv_i H}{\hbar} \tag{331}$$

Heisenberg kép ($t_0 = 0$)

$$A^H(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} A e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \tag{332}$$

$$H^H(t) = H = const. \tag{333}$$

$$\frac{d}{dt} A^H(t) = \frac{i}{\hbar} \left[H, A^H(t)\right] \tag{334}$$

$$\left[H, \overrightarrow{p}^H(t)\right] = e^{\frac{i}{\hbar}Ht} [H, p_i] e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} = 0 \tag{335}$$

$$\overrightarrow{p}^H(t) = \overrightarrow{p} = const. \tag{336}$$

$$v_i^H(t) = c\alpha_j^H(t) \tag{337}$$

$$\frac{d\alpha_i^H(t)}{dt} = \frac{2icp_i}{\hbar} - \frac{2i\alpha_i^H(t) H}{\hbar} \tag{338}$$

$$\frac{dv_i^H(t)}{dt} = -\frac{2i}{\hbar} v_i^H(t) H + \frac{2ic^2}{\hbar} p_i = -\frac{2i}{\hbar} \left(v_i^H(t) - V_i\right) H \tag{339}$$

ahol

$$V_i = c^2 p_i H^{-1} = const. \tag{340}$$

$$\frac{d\left(v_i^H(t) - V_i\right)}{dt} = -\frac{2i}{\hbar} \left(v_i^H(t) - V_i\right) H \tag{341}$$

Kezdeti feltétel:

$$v_i^H(0) = c\alpha_i(0) = c\alpha_i \tag{342}$$

$$v_i^H(t) = V_i + c\left(\alpha_i - \frac{V_i}{c}\right) e^{-\frac{2i}{\hbar}Ht} \tag{343}$$

$$x_i^H(t) = x_i(0) + V_i t + \frac{i\hbar c\left(\alpha_i - \frac{V_i}{c}\right) H^{-1}}{2} \left(e^{-\frac{2i}{\hbar}Ht} - 1\right) \tag{344}$$

$$\langle x_i(t)\rangle = x_i(0) + \langle V_i\rangle\, t + \langle \Delta x_i\rangle + \left\langle x_i^{ZB}(t)\right\rangle \tag{345}$$

$$\langle V_i\rangle = \left\langle c^2 p_i H^{-1}\right\rangle \simeq \frac{c^2 p_i}{E} \simeq \frac{c^2 p_i}{mc^2} = \frac{p_i}{m} \tag{346}$$

$$\langle \Delta x_i\rangle = \frac{-i\hbar c\left(\langle\alpha_i\rangle - \frac{\langle V_i\rangle}{c}\right)}{2E} \simeq \frac{-i\hbar\left(\langle\alpha_i\rangle - \frac{\langle V_i\rangle}{c}\right)}{2mc} = -\frac{i}{2}\lambda_C \left(\langle\alpha_i\rangle - \frac{\langle V_i\rangle}{c}\right) \tag{347}$$

$$\lambda_C = \frac{\hbar}{mc} \simeq 2 \times 10^{-13}\, m \tag{348}$$

$$\left\langle x_{ZB,i}^H(t)\right\rangle \simeq -\langle \Delta x_i\rangle\, e^{-i\omega t} \tag{349}$$

$$\omega = \frac{2E}{\hbar} \simeq \frac{2mc^2}{\hbar} \simeq 10^{21}\, Hz \tag{350}$$