Εισαγωγή στην εξίσωση Dirac

Ρεύμα Πιθανότητας Schrödinger

Στην κβαντική μηχανική αλά Schrödinger, η πυκνότητα πιθανότητας εκφράζεται: $\rho = \psi^* \psi$

Ξέρουμε ακόμα ότι η εξίσωση συνέχειας απαιτεί: $\dfrac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$ και θα θέλαμε η πιθανότητα ρεύματος, ρ, που έχουμε να ικανοποιεί την εξίσωση αυτή:

Η χρονική παράγωγος της πυκνότητας πιθανότητας είναι: $\dfrac{\partial \rho}{\partial t} = \psi^* \dfrac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \dfrac{\partial \psi^*}{\partial t}$

Τι θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε για το ρεύμα πυκνότητας πιθανότητας J?

Προκύπτει ότι για: $\vec{J} = \dfrac{\hbar}{2mi}\left[\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*\right]$ ικανοποιείται η εξίσωση,

αρκεί η κυματοσυνάρτηση, ψ, να ικανοποιεί την εξίσωση Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi$$

Ρεύμα Πιθανότητας Schrödinger

Το ρεύμα πιθανότητας μπορεί να γραφεί ως:

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right] = \frac{1}{2m}\left[\psi^*\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi - \psi\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi^*\right] = \frac{1}{2m}\left[\psi^*\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi + \left(\psi^*\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi\right)^*\right]$$

$$\Rightarrow \vec{J} = \frac{\hbar}{m}\mathrm{Re}\left[\psi^*\vec{p}\psi\right] \qquad \boxed{\Rightarrow \vec{J} = \hbar\,\mathrm{Re}\left[\psi^*\vec{\upsilon}\psi\right]}$$

Μπορούμε να βρούμε την εξίσωση συνέχειας αρκετά εύκολα με το ακόλουθο τέχνασμα:

πολλαπλασιάζω από αριστερά την εξίσωση Schrödinger με ψ^*

$$i\hbar\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\vec{\nabla}^2\psi + \psi^* V\psi$$

πολλαπλασιάζω από δεξιά την συζυγή εξίσωση Schrödinger με ψ

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi^*\psi + V\psi^*\psi$$

αφαιρούμε και έχουμε:

$$i\hbar\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi^*\vec{\nabla}^2\psi - \vec{\nabla}^2\psi^*\psi\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}\cdot\left(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \vec{\nabla}\psi^*\psi\right)$$

$$\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) = -\vec{\nabla}\cdot\left[\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \vec{\nabla}\psi^*\psi\right)\right] \Rightarrow \frac{\partial\rho}{\partial t} = -\vec{\nabla}\cdot\vec{J}$$

Schrödinger προς σχετικότητα

Η χρονοεξάρτητη εξίσωση Schrödinger γράφεται: $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi$

Η εξίσωση είναι 1ης τάξης ως προς τον χρόνο αλλά 2ης τάξης ως προς τον χώρο

Η σχετικότητα ωστόσο θέτει τον χώρο και τον χρόνο σε ισοδύναμη βάση

Η χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger γράφεται: $\frac{P_{op}^2}{2m}\psi - V\psi = E\psi$

Η εξίσωση Klein-Gordon και οι λύσεις της

Αν χρησιμοποιήσουμε την σχετικιστική εξίσωση της ενέργειας – ορμής, έχουμε: $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$

Αντικαθιστούμε $E \to i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$ και $p \to \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi$

Θεωρούμε την μάζα σαν ένα «δυναμικό» οπότε γράφουμε: $-\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = -\hbar^2c^2\vec{\nabla}^2\psi + m^2c^4\psi$

Αναδιάταξη των όρων οδηγεί στην εξίσωση Klein-Gordon για ελεύθερο σωματίδιο

$$\boxed{\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = \vec{\nabla}^2\psi - \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi}$$

Klein-Gordon

Οι κυματοσυναρτήσεις λύσεις της εξίσωσης Klein-Gordon είναι της μορφής: $\psi(\vec{x},t) = e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}$

όπου $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ και $E = \hbar\omega$ όπως και στις περιπτώσεις της εξίσωσης Schrödinger

αλλά τώρα υπάρχει η σχετικιστική σχέση μεταξύ ενέργειας και ορμής: $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$

Το όρισμα του εκθετικού είναι το εσωτερικό γινόμενο 4-διανυσμάτων:

$$\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega t = \frac{\vec{p}}{\hbar}\cdot\vec{x} - \frac{E/c}{\hbar}ct = -\frac{(E/c,\vec{p})\cdot(ct,\vec{x})}{\hbar}$$

Η εξίσωση Klein-Gordon και οι λύσεις της

Για την εξίσωση Schrödinger του ελεύθερου σωματιδίου, η σχέση ανάμεσα

στην ενέργεια και ορμή είναι: $E = \hbar\omega = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m} = \dfrac{p^2}{2m}$

Η ενέργεια είναι πάντοτε θετική για ελεύθερα σωματίδια (παρόλο που ενέργειες δέσμιας κατάστασης μπορεί να είναι αρνητικές)

Για την εξίσωση Klein-Gordon, η σχέση που υπάρχει είναι στο τετράγωνο της ενέργειας

Επομένως είναι δυνατόν να έχουμε λύσεις με αρνητικές ενέργειες

Αν αγνοήσουμε τις λύσεις αυτές, τότε δεν θα έχουμε «ολοκληρωμένο σύνολο» λύσεων

Χρησιμοποιώντας τον τελεστή D'Alembert: $\Box = \dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2$

μπορούμε να γράψουμε την εξίσωση Klein-Gordon με την μορφή: $\Box\psi + \dfrac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi = 0$

Εφαρμόζοντας την ίδια μέθοδο όπως και στην περίπτωση της εξίσωσης Schrödinger καταλήγουμε σε μια 4-διανυσματική εξίσωση συνέχειας.

Το τμήμα που αναφέρεται στο ρεύμα πυκνότητας είναι το ίδιο: $\vec{J} = \dfrac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right]$

αλλά η πυκνότητα πιθανότητας είναι διαφορετική: $\rho = \dfrac{J_0}{c} = \dfrac{i\hbar}{2mc^2}\left[\psi^*\dfrac{\partial\psi}{\partial t} - \psi\dfrac{\partial\psi^*}{\partial t}\right]$

Klein-Gordon πιθανότητα και ρεύμα

Εφόσον: $\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)} = \frac{\partial}{\partial t} e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{x}-\frac{E}{\hbar}t\right)} \Rightarrow \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\frac{E}{\hbar} e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{x}-\frac{E}{\hbar}t\right)} \Rightarrow \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\frac{E}{\hbar}\psi$

η πυκνότητα πιθανότητας θα γραφεί σαν: $\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2}\left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\right]$

$$\Rightarrow \rho = \frac{i\hbar}{2mc^2}\left[\psi^*\left(-i\frac{E}{\hbar}\psi\right) - \psi\left(+i\frac{E}{\hbar}\psi^*\right)\right] = \frac{i\hbar}{2mc^2}\left(-i\frac{E}{\hbar}\right)\left[\psi^*\psi + \psi\psi^*\right] \boxed{\Rightarrow \rho = \frac{E}{mc^2}\psi^*\psi}$$

Όταν η ενέργεια κυριαρχείται από την ενέργεια της μάζας ηρεμίας θα έχουμε: $E = mc^2$
και καταλήγουμε στην συνηθισμένη πυκνότητα πιθανότητας: $\rho = \psi^*\psi$
Όταν η ενέργεια είναι σχετικιστική η πυκνότητα πιθανότητας είναι μεγαλύτερη, γιατί η κυματοσυνάρτηση έχει συσταλεί σύμφωνα με την συστολή Lorentz.

- Αλλά οι λύσεις της αρνητικής ενέργειας έχουν αρνητική πυκνότητα πιθανότητας

Το γεγονός αυτό έκανε την εξίσωση Klein-Gordon μη αποδεκτή και οδήγησε τον Dirac στην αναζήτηση διαφορετικής εξίσωσης

- Αλλά και πάλι μπορούμε να μετατρέψουμε τα λεμόνια σε λεμονάδα

Ερμηνεύουμε την πυκνότητα πιθανότητας σαν πυκνότητα φορτίου, και επομένως οι λύσεις με αρνητική ενέργεια αντιστοιχούν στα ίδια σωματίδια αλλά με αντίθετο φορτίο δηλαδή σε αντι-σωματίδια

Προβλήματα της εξίσωσης Klein-Gordon

- Η πυκνότητα ρ δεν είναι απαραίτητα θετική
- Η εξίσωση είναι 2ου βαθμού ως προς χρόνο *t*, που σημαίνει ότι χρειάζεται να γνωρίζουμε τόσο το ψ όσο και το $\partial\psi/\partial t$ τη στιγμή *t*=0 ώστε να λύσουμε για t>0. Επομένως υπάρχει ένας επιπλέον βαθμός ελευθερίας που δεν υπάρχει στην εξίσωση Schrödinger
- Η εξίσωση στην οποία $\left(E^2 = p^2c^2 + m^2c^4\right)$ στηρίζεται έχει τόσο θετικές όσο και αρνητικές λύσεις για την ενέργεια E

- Τα παραπάνω προβλήματα σχετίζονται εφόσον μία λύση της εξίσωσης K-G της μορφής $\psi = \Psi(r)e^{\mp iEt/\hbar}$ έχει πυκνότητα $\rho = \pm 2E|\Psi|^2$ και για την γενική λύση

$$\psi = \Psi_+(r)e^{-iEt/\hbar} + \Psi_-(r)e^{+iEt/\hbar}$$

χρειαζόμαστε τόσο την $\psi(t=0) = \Psi_+ + \Psi_-$ όσο και την $\left.\frac{i\hbar}{E}\frac{\partial\psi}{\partial t}\right|_{t=0} = \Psi_+ - \Psi_-$ για να προσδιοριστούν τα Ψ_+ και Ψ_-

Η Εξίσωση Dirac

Το πρόβλημα με την εξίσωση Klein-Gordon είναι ότι είναι μια εξίσωση 2ου βαθμού ως προς χρόνο

Ο Dirac προσπάθησε να βρει έναν τελεστή ο οποίος ήταν 1ου βαθμού ως προς χρόνο (και χώρο) ο οποίος όταν ενεργούσε διπλά θα ικανοποιούσε την: $E^2 = \left(pc\right)^2 + \left(mc^2\right)^2$

Η λύση στην οποία κατέληξε είχε τη μορφή:

$$\left(A\frac{\partial}{\partial x} + B\frac{\partial}{\partial y} + C\frac{\partial}{\partial z} + \frac{i}{c}D\frac{\partial}{\partial t} - \frac{mc}{\hbar} \right)\psi = 0$$

όπου τα A, B, C και D δεν είναι σταθερές αλλά πίνακες που ικανοποιούν τις σχέσεις:

$$A^2 = B^2 = C^2 = D^2 = 1$$

$AB = -BA$ και $AC = -CA$ και $BC = -CB$ και $\cdots$

η αντιμεταθετικότητα έχει σαν αποτέλεσμα όταν ο τελεστής δράσει δυο φορές, όλοι οι όροι που αναμειγνύονται να απαλοίφονται

Η Εξίσωση Dirac

Μετά από μια σειρά από αλλαγές στη σήμανση και αναδιάταξη όρων ώστε η εξίσωση να μοιάζει με την εξίσωση Schrödinger, ο Dirac κατέληξε στην μορφή:

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left(c\frac{\hbar}{i}\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla}+\beta mc^2\right)\psi}$$

με τους πίνακες να ορίζονται από τις:

$$\alpha_1=\begin{bmatrix}0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{bmatrix}\qquad \alpha_2=\begin{bmatrix}0&0&0&-i\\0&0&i&0\\0&-i&0&0\\i&0&0&0\end{bmatrix}\qquad \alpha_3=\begin{bmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&-1\\1&0&0&0\\0&-1&0&0\end{bmatrix}$$

και

$$\beta=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{bmatrix}$$

Η Εξίσωση Dirac

Οι μικρότεροι μεγέθους πίνακες που έχουν αυτές τις σωστές ιδιότητες είναι πίνακες 4x4.

Στην πραγματικότητα υπάρχουν πολλές ομάδες 4x4 πινάκων που θα ικανοποιούσαν τις σωστές ιδιότητες που θέλουμε και οι προαναφερόμενοι απλά είναι αυτοί που χρησιμοποιούνται από σύμβαση

Οι κυματοσυναρτήσεις θα πρέπει επομένως να είναι στην μορφή ενός διανύσματος στήλης αλλά **δεν** είναι τετραδιάνυσμα αν σκεφτόμαστε σε αναλογία με την σχετικότητα

Οι λύσεις για το ελεύθερο σωματίδιο μπορούν να γραφούν με την μορφή: $e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t\right)}$

με τις συνηθισμένες σχέσεις $\vec{p}=\hbar\vec{k}$ και $E=\hbar\omega$ επί ένα διάνυσμα στήλης 4-στοιχείων το οποίο όμως δεν είναι 4-διάνυσμα.

Οι συνιστώσες του πίνακα του διανύσματος είναι ανεξάρτητες του χώρου και χρόνου αλλά εξαρτώνται από την ενέργεια.

Η Εξίσωση Dirac και η εισαγωγή spinor

Η λύση ψ είναι ένας spinor με κανονική εξάρτηση από χώρο και χρόνο και έχει την μορφή:

$$\boxed{e^{\frac{i}{\hbar}\left(\vec{p}\cdot\vec{x}-Et\right)} = e^{\frac{i}{\hbar}\left(\underset{\rightarrow}{P}\cdot\underset{\rightarrow}{x}\right)} = e^{\frac{i}{\hbar}\left(P^{\mu}\cdot x_{\mu}\right)}}$$

επί ένα διάνυσμα στήλης 4-στοιχείων (το οποίο δεν είναι 4-διάνυσμα) και εξαρτάται από την ορμή αλλά όχι από τον χώρο και χρόνο

Για οποιοδήποτε 3-διάστατο διάνυσμα ορμής υπάρχουν 4 διαφορετικές λύσεις

Δύο λύσεις έχουν θετική ενέργεια, την ίδια χωρο-χρονική εξάρτηση αλλά διαφορετικά στοιχεία στον πίνακα των 4-σταθερών στοιχείων

Δύο λύσεις έχουν αρνητική ενέργεια, (διαφορετική χωρο-χρονική εξάρτηση) και αλλά διαφορετικά στοιχεία στον πίνακα των 4-σταθερών στοιχείων

Η λύση για το ηλεκτρόνιο

$$\psi\left(\underset{\rightarrow}{x}\right)=e^{-\frac{i}{\hbar}\left(\underset{\rightarrow}{P}\cdot\underset{\rightarrow}{x}\right)}u^{1,2}\left(\underset{\rightarrow}{p}\right)\Rightarrow\psi\left(\underset{\rightarrow}{x}\right)=e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t\right)}u^{1,2}\left(\underset{\rightarrow}{p}\right)$$ όπου $\vec{p}=\hbar\vec{k}$ και $E=\hbar\omega$

Είναι οι λύσεις για το ηλεκτρόνιο με δυο spinors $u^{1,2}$

Οι spinors $u^{1,2}$ είναι:

$$u^1\left(\underset{\rightarrow}{p}\right)=\sqrt{\frac{E+mc^2}{c}}\begin{bmatrix}1\\0\\\dfrac{cp_z}{E+mc^2}\\\dfrac{c\left(p_x+ip_y\right)}{E+mc^2}\end{bmatrix}$$ και $$u^2\left(\underset{\rightarrow}{p}\right)=\sqrt{\frac{E+mc^2}{c}}\begin{bmatrix}0\\1\\\dfrac{c\left(p_x-ip_y\right)}{E+mc^2}\\\dfrac{-cp_z}{E+mc^2}\end{bmatrix}$$

Η λύση για το ηλεκτρόνιο - spin

Η λύση u^1 αντιστοιχεί σε σωματίδιο το οποίο έχει spin στην +z-διεύθυνση στο σύστημα αναφοράς του κέντρου μάζας του, ενώ η λύση u^2 αντιστοιχεί σε σωματίδιο με spin στην -z-διεύθυνση

Τα spinors u^1 και u^2 δεν είναι μοναδικά. Οποιοσδήποτε γραμμικός συνδυασμός είναι λύση

Οι κατάλληλοι συνδυασμοί μας επιτρέπουν να περιγράψουμε το spin σε οποιαδήποτε διεύθυνση

Αν η ορμή δεν είναι στην $\pm$z-διεύθυνση τότε τα spins των u^1 και u^2 δεν θα είναι ακριβώς στην $\pm$z-διεύθυνση στο σύστημα αναφοράς του εργαστηρίου

Συνδυασμοί του spin ομόρροπα ή αντίρροπα στην διεύθυνση της ορμής είναι ιδιαίτερα χρήσιμοι και θα εξεταστούν σύντομα

Η λύση για το ποζιτρόνιο

Τα $\psi(\underset{\rightarrow}{x}) = e^{+\left(\frac{i}{\hbar}\underset{\rightarrow}{p}\cdot\underset{\rightarrow}{x}\right)} v^{1,2}(\underset{\rightarrow}{p})$ αποτελούν τις λύσεις για το ποζιτρόνιο με 2 spinors $v^{1,2}$

Οι spinors $v^{1,2}$ είναι:

$$v^1(\underset{\rightarrow}{p}) = \sqrt{\frac{E+mc^2}{c}} \begin{bmatrix} \frac{c(p_x - ip_y)}{E+mc^2} \\ \frac{-cp_z}{E+mc^2} \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \text{και} \quad v^2(\underset{\rightarrow}{p}) = -\sqrt{\frac{E+mc^2}{c}} \begin{bmatrix} \frac{cp_z}{E+mc^2} \\ \frac{c(p_x + ip_y)}{E+mc^2} \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Η ενέργεια Ε μιας λύσης ποζιτρονίου είναι θετική και όχι αρνητική

Σχόλια

- Πέρα από τον παράγοντα κανονικοποίησης στην αρχή:
  - τα πρώτα δύο στοιχεία είναι 0, 1 για την περίπτωση του ηλεκτρονίου e^-
  - τα κάτω δύο στοιχεία είναι 0, 1 για την περίπτωση του ποζιτρονίου e^+
  - τα άλλα δύο στοιχεία είναι πολύ μικρά για μη σχετικιστικά σωματίδια
  - αλλά γίνονται συγκρίσιμα για ιδιαίτερα σχετικιστικά σωματίδια
- Δεν είναι ακριβώς spins στην $\pm z$-διεύθυνση αλλά είναι ολοκληρωμένα και ορθογώνια που είναι οι 2 ιδιότητες που χρειαζόμαστε
- Δεν είναι spins ομόρροπα ή αντίρροπα της ορμής p εκτός και αν η ορμή είναι κατά μήκος της z-διεύθυνσης
- Για τα spinors υπάρχουν και άλλες συμβάσεις/επιλογές κανονικοποίησης
- Κάποιες από αυτές δεν δουλεύουν σωστά για σωματίδια μηδενικής μάζας σε αντίθεση με αυτή που επιλέξαμε
- Κάποιες από αυτές απαιτούν τα ολοκληρώματα φασικού χώρου στους χρυσούς κανόνες του Fermi να είναι διαφορετικά για Dirac σωματίδια και άλλοι για άλλα σωματίδια.

Εξίσωση Dirac

Ανταλλοίωτα vs Συναλλοίωτα 4-διανύσματα

- Η σύμβαση που χρησιμοποιείται για τον συμβολισμό είναι να έχουμε τα ελληνικά γράμματα για τους δείκτες των συνειστωσων των 4-διανυσμάτων (0,1,2,3)
- Για τα ανταλλοίωτα (contravariant) 4-διανύσματα έχουμε το δείκτη στο πάνω μέρος

$$\underset{\rightarrow}{P} = P^{\mu} = \left(E/c, p_x, p_y, p_z\right)$$

- Για τα συναλλοίωτα (covariant) 4-διανύσματα έχουμε το δείκτη στο κάτω μέρος και αλλάζουμε το πρόσημο στις χωρικές συνιστώσες

$$\underset{\rightarrow}{P} = P_{\mu} = \left(E/c, -p_x, -p_y, -p_z\right)$$

- Ένα γινόμενο με επαναλαμβανόμενους δείκτες θεωρείτε ότι αθροίζεται ως προς τους δείκτες

$$A^{\mu}B_{\mu} = \sum_{\mu=0}^{3} A^{\mu}B_{\mu} = A^0B_0 + A^1B_1 + A^2B_2 + A^3B_3$$

εσωτερικό γινόμενο

Συνήθως θα έχουμε ένα συναλλοίωτο και ένα ανταλλοίωτο διάνυσμα με δείκτες κάτω και πάνω αντίστοιχα, που σημαίνει ότι το χωρικό τμήμα του ενός 4-διανύσματος θα έχει αρνητικά πρόσημα

- Οι τελεστές του 4-διαφορικού γράφονται:

$$\partial_{\mu} = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla}\right) \quad \text{και} \quad \partial^{\mu} = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, -\vec{\nabla}\right)$$

και μπορούμε να τον χρησιμοποιήσουμε για απλοποίηση των εξισώσεων Klein-Gordon, Dirac ή των εξισώσεων 4-διάνυσμα του δυναμικού Maxwell:

  - Όλα τα πρόσημα είναι «+» όταν γράφουμε την μορφή με το δείκτη κάτω (ανάποδα με την συναλλοίωτη σύμβαση) γιατί προσδίδει τους σωστούς μετασχηματισμούς και με αρνητικό πρόσημο όταν γράφουμε τον δείκτη πάνω

4-διάνυσμα του διαφορικού τελεστή

Γράφουμε για τις γνωστές περιπτώσεις 4-διανύσματος του διαφορικού τελεστή

Maxwell:

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\vec{\nabla}^2\right)\varphi=\frac{1}{\varepsilon_0}\rho \rightarrow \partial_\mu\partial^\mu\varphi=\frac{1}{\varepsilon_0}\rho$$

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\vec{\nabla}^2\right)\vec{A}=\mu_0\vec{J} \rightarrow \partial_\mu\partial^\mu\vec{A}=\mu_0\vec{J}$$

Lorentz συνθήκη: $\frac{1}{c^2}\frac{\partial\varphi}{\partial t}+\vec{\nabla}\cdot\vec{A}=0 \rightarrow \partial_\mu A^\mu=0$ όπου ορίζουμε: $A^\mu=\left(\varphi/c,\vec{A}\right)$

Klein-Gordon: $$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}-\vec{\nabla}^2\psi+\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi=0 \rightarrow \partial_\mu\partial^\mu\psi+\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi=0$$

4-διανυσματική μορφή της εξίσωσης Dirac

Αν επινοήσουμε ένα 4-διάνυσμα 4x4 γάμμα πινάκων: $\gamma^{\mu} = \left(\beta, \beta\vec{\alpha}\right)$

και χρησιμοποιήσουμε το 4-διάνυσμα της κλίσης $\partial_{\mu} = \left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla}\right)$

μπορούμε να γράψουμε την εξίσωση του Dirac σε αρκετά συμπαγή μορφή:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(c\frac{\hbar}{i}\vec{\alpha}\cdot\vec{\nabla} + \beta mc^2\right)\psi \rightarrow i\hbar\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi = mc\psi$$

όπου: $$\gamma^{\mu}\partial_{\mu} = \gamma^{0}\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + \left(\gamma^{1}\frac{\partial}{\partial x} + \gamma^{2}\frac{\partial}{\partial y} + \gamma^{3}\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

Οι γ-πίνακες και το 4-διάνυσμα της κλίσης μπορούν να ληφθούν ότι είναι τα ίδια για όλα τα συστήματα αναφοράς ανεξάρτητα από τον συμβολισμό που ακολουθείται

Οι κυματοσυναρτήσεις έχουν 4 συνιστώσες αλλά δεν είναι 4-διανύσματα – Είναι spinors

Οι γ-πίνακες

Οι 4x4 γ-πίνακες είναι:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Οι κανόνες μεταθετικότητας για τους πίνακες είναι:

$$\gamma^0\gamma^0 = I$$

$$\gamma^j\gamma^j = -I \qquad \text{για: } j = 1,2,3$$

$$\gamma^\mu\gamma^\nu = -\gamma^\nu\gamma^\mu \qquad \text{για: } \mu \neq \nu$$

Οι γ-πίνακες

Χρησιμοποιώντας τον ταυτοτικό πίνακα $I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

και τους πίνακες Pauli: $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

οι γ-πίνακες γράφονται με την μορφή:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad \text{και} \quad \gamma^k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ -\sigma_k & 0 \end{pmatrix}$$

Dirac Πιθανότητα και Ρεύμα

Ο Dirac ήλπιζε ότι θα έπαιρνε ένο νόμο διατήρησης πυκνότητας πιθανότητας και ρεύματος σε αναλογία με την περίπτωση Schrödinger

Ορίζουμε την συζυγή κυματοσυνάρτηση: $\bar{\psi} = \psi^{\dagger}\gamma^{0}$

όπου η $\psi^{\dagger}$ είναι η συζυγής μιγαδικός και ανάστροφος της ψ

$$\Rightarrow \partial_{\mu}\left(\bar{\psi}\gamma^{\mu}\psi\right) = 0$$

Η πυκνότητα πιθανότητας που είναι η 0-συνιστώσα της $\bar{\psi}\gamma^{\mu}\psi$ είναι $\psi^{\dagger}\psi$

δηλαδή η συζυγής ανάστραφη της κυματοσυνάρτησης επί τον εαυτό της

Αυτό εγγυάται ότι θα είναι μια θετική ποσότητα

Επομένως δεν υπάρχει κανένα θέμα να καταλήξουμε σε αρνητική πυκνότητα πιθανότητας επειδή κάποια λύση έχει αρνητική ενέργεια

Πολλές φασματικές γραμμές του υδρογόνου είναι πολύ κοντά μεταξύ τους. Αυτό ονομάζεται λεπτή υφή. Το γεγονός αυτό οφείλεται σε αλληλεπιδράσεις της μαγνητικής ροπής του spin του ηλεκτρονίου με την τροχιακή του κίνηση καθώς και σχετικιστικά φαινόμενα

Μπορεί να υπολογισθεί χρησιμοποιώντας την εξίσωση Schrödinger, αλλά θα πρέπει να εισάξουμε «με το χέρι» την μαγνητική ροπή του ηλεκτρονίου

Ωστόσο αν κανονικοποιήσουμε κατάλληλα την εξίσωση του Dirac ώστε να συμπεριληφθούν οι ΕΜ αλληλεπιδράσεις και λύσουμε το άτομο του υδρογόνου, η λεπτή υφή προκύπτει ακριβώς σωστά

Τόσο η ύπαρξη όσο και η τιμή της μαγνητικής ροπής του ηλεκτρονίου προβλέπεται από την θεωρία του Dirac

Dirac πυκνότητα πιθανότητας

Η εξίσωση Dirac σε συναλλοίωτη μορφή: $\left(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu}-m\right)\psi=0$ **(1)**

Προσπαθούμε να δημιουργήσουμε την πυκνότητα πιθανότητας:

Πολλαπλασιάζουμε την εξίσωση (1) με $\bar{\psi}$: $\bar{\psi}\left(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu}-m\right)\psi=0$

Από την (1) έχουμε ακόμα: $\left[\left(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu}-m\right)\psi\right]^{\dagger}=0 \Rightarrow \left(-i\right)\left(\partial_{\mu}\psi^{\dagger}\right)\left(\gamma^{\mu}\right)^{\dagger}-m\psi^{\dagger}=0$

Από τις ιδιότητες των γ-πινάκων: $\left(\gamma^{\mu}\right)^{\dagger}=\gamma^{0}\gamma^{\mu}\gamma^{0}$

Αντικατάσταση στην προηγούμενη εξίσωση και πολλαπλασιασμός από δεξιά με γ^0:

$$\left(-i\right)\left(\partial_{\mu}\psi^{\dagger}\right)\left(\gamma^{0}\gamma^{\mu}\gamma^{0}\right)-m\psi^{\dagger}=0 \Rightarrow \left(-i\right)\left(\partial_{\mu}\psi^{\dagger}\gamma^{0}\right)\left(\gamma^{\mu}\gamma^{0}\gamma^{0}\right)-m\psi^{\dagger}\gamma^{0}=0$$

$$\Rightarrow \left(-i\right)\left(\partial_{\mu}\bar{\psi}\right)\gamma^{\mu}-m\bar{\psi}=0 \Rightarrow i\left(\partial_{\mu}\bar{\psi}\right)\gamma^{\mu}+m\bar{\psi}=0 \qquad \textbf{(2)}$$

Πολλαπλασιάζουμε την (2) από δεξιά με ψ: $\Rightarrow i\left(\partial_{\mu}\bar{\psi}\right)\gamma^{\mu}\psi+m\bar{\psi}\psi=0$ **(3)**

Προσθέτουμε τις (1) και (3): $\Rightarrow i\bar{\psi}\gamma^{\mu}\partial_{\mu}\psi+i\left(\partial_{\mu}\bar{\psi}\right)\gamma^{\mu}\psi=0 \Rightarrow \partial_{\mu}\left(i\bar{\psi}\gamma^{\mu}\psi\right)=0$

Άρα υπάρχει ένα διατηρούμενο ρεύμα: $J^{\mu}=\bar{\psi}\gamma^{\mu}\psi$ $\quad J^{\mu}=\left(\bar{\psi}\gamma^{0}\psi;\bar{\psi}\gamma^{i}\psi\right)=\left(\rho;\vec{J}\right)$

που ικανοποιεί την εξίσωση συνέχειας: $\partial_{\mu}J^{\mu}=0$ $\quad \rho=\bar{\psi}\gamma^{0}\psi=\psi^{\dagger}\gamma^{0}\gamma^{0}\psi=\psi^{\dagger}\psi>0$

Dirac, spin και Ενέργεια

Για δεδομένη ορμή ελεύθερου σωματιδίου, υπάρχουν δυο λύσεις στην εξίσωση Dirac, με την ίδια ενέργεια αλλά διαφορετικές τιμές για τις 4-συνιστώσες του διανύσματος-στήλης

Μπορούν να ταυτιστούν με δυο διαφορετικές καταστάσεις spin του ½ spin του ηλεκτρονίου

Επομένως η εξίσωση του Dirac προβλέπει spin ½

Μπορεί κάποιος να περίμενε να βρεθούν 4 λύσεις για δεδομένη ορμή σωματιδίου αφού πρόκειται για 4x4 πρόβλημα αντί για τις δυο που βρέθηκαν

Υπάρχουν 2 ακόμα λύσεις αλλά αντιστοιχούν σε αρνητική ενέργεια

Οι λύσεις με αρνητική ενέργεια απαιτούνται ώστε να έχουμε ένα πλήρες σετ λύσεων όπως απαιτείται από την κβαντομηχανική για να έχουν νόημα τα αποτελέσματά μας και ακριβώς για τον ίδιο λόγο που δεν μπορούσαν να αγνοηθούν στην περίπτωση Klein-Gordon

Και αυτή την φορά δεν μπορούμε να ακυρώσουμε το πρόβλημα των λύσεων με αρνητική ενέργεια με την αρνητική πυκνότητα πιθανότητας γιατί η πυκνότητα πιθανότητας είναι πάντοτε θετική

Ο Dirac πρότεινε ότι αν όλες οι καταστάσεις της αρνητικής ενέργειας ήταν ήδη συμπληρωμένες (θάλασσα Dirac), τότε η απαγορευτική αρχή του Pauli θα καθιστούσε αδύνατο να εκπεμφθούν ηλεκτρόνια με αρνητική ενέργεια

Θεωρία οπών

Αν όλες οι καταστάσεις με αρνητική ενέργεια είναι συμπληρωμένες τότε δεν μπορούν να παρατηρηθούν αλλά θα μπορούσε να παρατηρηθεί μια οπή, μια κενή δηλαδή θέση στην θάλασσα του Dirac

Η οπή θα μπορούσε να δημιουργηθεί δίνοντας αρκετή ενέργεια σε ένα ηλεκτρόνιο σε κατάσταση αρνητικής ενέργειας ώστε η τελική του ενέργεια να είναι θετική.

Σαν αποτέλεσμα θα καταλήγαμε με ένα ηλεκτρόνιο με θετική ενέργεια και το συνηθισμένο αρνητικό φορτίο, και μια οπή

Η απουσία του αρνητικού φορτίου θα ισοδυναμούσε με την παρουσία ενός θετικού φορτίου

Μοιάζει ουσιαστικά με δίδυμη γέννεση

Ουσιαστικά, η εξίσωση Dirac, υποδηλώνει ότι η οπή θα είχε ακριβώς την ίδια μάζα με το ηλεκτρόνιο

Όταν ο Dirac, πρότεινε τα παραπάνω, το μόνο γνωστό σωματίδιο με θετικό φορτίο ήταν το πρωτόνιο. Αυτό που συνέβαινε είναι ότι αντί ο Dirac να προτείνει ένα νέο σωματίδιο με θετικό φορτίο και μάζα ίση με την μάζα του ηλεκτρονίου (το ποζιτρόνιο δηλαδή), νόμιζε ότι το πρωτόνιο αποτελούσε την οπή

Ο Oppenheimer ωστόδο υπέδειξε ότι αν τα πρωτόνια ήταν οπές τότε το άτομο του υδρογόνου θα εξαϋλώνονταν

Η ερμηνεία Feynman - Stuckelberg

Ένα κβαντικό επίπεδο κύμα γράφεται με την μορφή: $e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t\right)} = e^{\frac{i}{\hbar}\left(\vec{p}\cdot\vec{x}-Et\right)}$

Είμαστε συνηθισμένοι η ενέργεια να είναι θετική και ο χρόνος να κινείται προς τα εμπρός

Ο Stuckelberg και αργότερα ο Feynman, πρόσεξαν ότι η λύση με την αρνητική ενέργεια η οποία κινείται προς μεταγενέστερους χρόνους, ήταν ισοδύναμη με την λύση της θετικής ενέργειας η οποία κινείται προς προγενέστερους χρόνους.

Αλλά αν κινείται προς προγενέστερους χρόνους, η αντιστοιχία μεταξύ ορμής που βλέπουμε και της k ή p στην εξίσωση θα έπρεπε να αντιστραφούν

Τα $\psi\left(\underset{\rightarrow}{x}\right) = e^{+\left(\frac{i}{\hbar}\underset{\rightarrow}{p}\cdot\underset{\rightarrow}{x}\right)} v^{1,2}\left(\underset{\rightarrow}{p}\right)$ αποτελούν τις λύσεις για το ποζιτρόνιο με 2 spinors $v^{1,2}$

Οι spinors $v^{1,2}$ είναι:

$$v^1\left(\underset{\rightarrow}{p}\right) = \sqrt{\frac{E+mc^2}{c}}\begin{bmatrix} \dfrac{c\left(p_x - ip_y\right)}{E+mc^2} \\ \dfrac{-cp_z}{E+mc^2} \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \text{και} \quad v^2\left(\underset{\rightarrow}{p}\right) = -\sqrt{\frac{E+mc^2}{c}}\begin{bmatrix} \dfrac{cp_z}{E+mc^2} \\ \dfrac{c\left(p_x + ip_y\right)}{E+mc^2} \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Η ενέργεια Ε μιας λύσης ποζιτρονίου είναι θετική και όχι αρνητική