Relativistisen kvanttimekaniikan yhtälöt

LuK-tutkielma
Turun yliopisto
Fysiikka
2025
Fil. yo. Henri Kärpijoki
Tarkastaja:
Iiro Vilja

TURUN YLIOPISTO
Fysiikan laitos

Kärpijoki, Henri Relativistisen kvanttimekaniikan yhtälöt

LuK Tutkielma, 28 s.
Fysiikka
Huhtikuu 2025

Tutkielmassa käsitellään relativististen aaltoyhtälöiden syntyä, tulkitsemista ja soveltamista. Relativistisista aaltoyhtälöistä käsitellään Kleinin-Gordonin yhtälö sekä Diracin yhtälö. Lisäksi motivoidaan kvanttikenttäteorioiden synty relativististen aaltoyhtälöiden ongelmien pohjalta.

Schrödingerin yhtälö osoittautui riittämättömäksi teoriaksi, kun sitä yritettiin soveltaa relativistiseen kontekstiin. Sen vuoksi kehitettiin ensin Kleinin-Gordonin yhtälö, joka kuvaa spin-0 -hiukkasia. Myöhemmin kehitettiin vielä Diracin yhtälö, joka kuvaa spin-1/2 -hiukkasia. Tutkielmassa esitellään näiden yhtälöiden erot ja yhtäläisyydet sekä verrataan niitä Schrödingerin yhtälöön.

Klenin-Gordonin yhtälöllä kyettiin kuvaamaan niin kutsuttu pioniatomi, jossa pioni π^- kiertää positiivisesti varattua ydintä. Diracin yhtälö vastaavasti selitti vetyatomin täsmällisemmin kuin epärelativistinen kvanttimekaniikka. Diracin yhtälö myös ennusti positronin olemassaolon. Tutkielmassa selitetään mistä tämä ennustus käytännössä tulee. Lisäksi esitellään varauskonjugointi eli varauksen merkin vaihdon vaikutus aaltoyhtälön ratkaisuihin.

Asiasanat: Kleinin-Gordonin yhtälö, Diracin yhtälö, varauskonjugointi, pioniatomi, vetyatomi, antihiukkanen, Diracin spinori, Weylin spinori

Sisällys

Keskeiset suureet ja symbolit

Kreikkalaiset aakkoset	$\mu,\ \nu \in \{0,1,2,3\}$
Latinalaiset aakkoset	$i,\ j \in \{1,2,3\}$
Hamiltonin operaattori	$\hat{H}$
Lagrangen tiheys	$\mathcal{L}$
Neliliikemäärä	p^μ
Nelipotentiaali	A^μ
Osittaisderivaatta	∂_μ tai $\frac{\partial}{\partial x^\mu}$
Minkowskin metriikka	$\eta_{\mu\nu} = diag(1,-1,-1,-1)$
d'Alembertin operaattori	$\partial_\nu\partial^\nu = \Box$
Diracin matriisit	γ^μ
Paulin matriisit	σ_i
Paulin vektori	$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3)$
Diracin deltafunktio	$\delta(r)$

Johdanto

N. Bohr julkaisi ensimmäisenä kvanttimekaniikkaan pohjautuvan atomimallin 1913 [1]. Vuosikymmen myöhemmin, 1926, E. Schrödinger ratkaisi kyseisen ongelman kehittämällä uudenlaisen epärelativistisen atomimallin [2]. Se ei kuitenkaan ottanut huomioon suppeaa suhteellisuusteoriaa, jonka A. Esintein oli julkaissut jo vuonna 1905 [3, 4]. Miltei välittömästi W. Gordon ja O. Klein toisistaan riippumattomastiesittivät ensimmäisen relativistisen aaltoyhtälön [5, 6]. Tämä kuitekin hylättiin tulkintaan liittyvien ongelmien vuoksi [7]. P. Dirac onnistui korjaamaan osan tulkintaongelmista omalla aaltoyhtälöllään vuonna 1928 [8]. Diracin ajan suhteen lineaarisessa aaltoyhtälössä oli myös puutteita, joten suoritettiin toinen kvantisaatio. Dirac teki myös tämän ensimmäisenä [9]. Toisen kvantisaation yhteydessä oli syntynyt ensimmäinen kvanttikenttäteoria, joka on toinen fysiikan peruspilareista yleisen suhteellisuusteorian kanssa.

Tässä tutkielmassa esitellään välivaihetta Schrödingerin yhtälöstä kvanttikenttäteoriaan. Erityisesti esitellään relativistisen kvanttimekaniikan aaltoyhtälöiden muoto. Lisäksi ratkaistaan muutama konkreettinen esimerkki, ja selitetään aaltoyhtälöiden ratkaisujen tulkinta. Kuten hyvin tiedetään, teoreettinen fysiikka kehittyi hiukkasmalleista kohti kenttäteoreetista mallia, joten tutkielmassa esitellään myös ongelmat, joita hiukkasmalleihin liittyi.

1 Miksi tarvitaan relativistisia aaltoyhtälöitä

Pian ensimmäisten kvanttimekaanisten atomimallien synnyn jälkeen osoittautui selväksi, ettei kvanttimekaniikan formalismi ollut Lorentzin invariantti eikä kyennyt selittämään korkeaenergisiä systeemejä [7]. Lisäksi samoin kuin epärelativistinen mekaniikka ei kyennyt selittämään taivaankappaleiden tai valon käyttäytymistä, niin epärelativistinen kvanttimekaniikkakaan ei pystynyt selittämään ilmiöitä, jotka lähestyvät relativistista raja-arvoa [10].

Näiden syiden vuoksi tuli tarve yhdistää kvanttimekaniikka ja suppea suhteellisuusteoria. Yksinkertaisuudessaan epärelativistinen kvanttimekaniikka pohjautuu Hilbertin avaruuden rakenteeseen vaatien rajoitetun Hamiltonin operaattorin, kun taas suppea suhteellisuusteoria perustuu Lorentzin kovarianssiin, spektraaliehtoon sekä erityisesti paikallisuuteen (engl. *locality*) [10]. Paikallisuus on välttämätöntä äärelliselle informaationsiirtonopeudelle, joka seuraa Einsteinin kausaalisuudesta. Yhdistettäessä nämä on täytyttävä ehto, että observaabelit tulisi olla paikallisia ja niiden aikaevoluution tulisi sisälty näiden kausaaliseen valokartioon. [10]

Epärelativistisen kvanttimekaniikan ongelma on myös kyvyttömyys kuvata hiukkasten muuttumista toisiksi hiukkasiksi, mikä liittyy vahvasti massan ja energian ekvivalenssiperiaatteeseen. [4]

2 Kleinin-Gordonin yhtälö

Kvanttimekaniikan kehityksen myötä ilmeni nopeasti ristiriita suhteellisuusteorian kanssa. Ne eivät vaikuttaneet sopivan yhteen. Aluksi kvanttimekaniikan yhdistämistä suppeaan suhteellisuusteoriaan yritettiin käyttämällä Schrödingerin yhtälöä

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi\right\rangle = \hat{H}\left|\psi\right\rangle. \tag{1}$$

Tässä Hamiltonin operaattori on muotoa

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V, \tag{2}$$

missä V on potentiaali. [4]

Juuri tätä yhtälön (2) Hamiltonin funktiota pyrittiin muokkaamaan, jotta se vastaisi relativistista tapausta tarkastelemalla liikemäärän neliötä. Suppeasta suhteellisuusteoriasta on yleisesti tunnettuna kaava $(E+V)^2 = c^2\boldsymbol{p}^2 + m^2c^2$. Tästä ajateltiin saatavan relativistinen Hamiltonin operaattori muuttamalla dynaamiset muuttujat operaattoreiksi eli $E \to H$ ja $p_i \to -i\hbar\partial_t$. Hamiltonin operaattoriksi saatiin tällöin [4]

$$\hat{H} = \sqrt{-\hbar^2 c^2 \sum_{i=1}^{3} \partial_i^2 + m^2 c^2} - V. \tag{3}$$

Yhtälössä (3) osittaisderivaattojen summa tarkoittaa summausta avaruudellisten koordinaattien yli. Nyt on ikään kuin saatu relativistinen Schrödingerin yhtälö, mutta neliöjuurioperaattori, jossa neliöjuuren sisällä on paikkaderivaattoja, on vaikea ymmärtää fysikaalisessa mielessä. Neliöimällä kuitekin Schrödingerin yhtälö sekä sijoittamalla saatu Hamiltonin funktio saadaan Kleinin-Gordonin yhtälö

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} |\psi\rangle = [-\hbar^2 c^2 (\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}) + m^2 c^4] |\psi\rangle \tag{4}$$

SI-yksiköissä. [11]

Tutkielmassa tästä eteepäin käytetään pääasiassa luonnollisia yksiköitä ellei erikseen toisin mainita. Luonnolliset yksiköt määritellään edolla $c = \hbar = \varepsilon_0 = 1$, jolloin alkeisvarauksen arvoksi tulee $e = \sqrt{4\pi\alpha}$, missä α on niin kutsuttu hienorakennevakio (engl. *fine-structure constant*). [4]

2.1 Kleinin-Gordonin yhtälön motivointi

Kleinin-Gordonin yhtälön voidaan johtaa myös variaatioperiaatteesta käyttäen Eulerin-Lagrangen yhtälöitä. Tarkastellaan skalaarikenttää

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}(\partial^\mu \phi)(\partial_\mu \phi) - \frac{1}{2} m^2 \phi^2 - V(\phi), \tag{5}$$

jossa m on vakio, ϕ aaltofunktio ja $V(\phi)$ on toista kertalukua oleva funktio ϕ suhteen [4]. Sijoitetaan tämä Eulerin-Lagrangen yhtälöihin

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} = \frac{d}{dx^\nu} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\nu \phi)}. \tag{6}$$

Sijoittamalla Lagrangen tiheys ja laskemalla derivaatat saadaan yhtälö

$$
\begin{aligned}
-m^2\phi - \frac{\partial V}{\partial \phi} &= \frac{d}{dx^\nu}\left(\frac{\partial}{\partial\left(\partial_\nu \phi\right)}\left(\frac{1}{2}\eta^{\alpha\mu}\left(\partial_\alpha\phi\right)\left(\partial_\mu\phi\right)\right)\right) \\
&= \frac{d}{dx^\nu}\left(\frac{1}{2}\eta^{\alpha\mu}\left(\eta^\alpha_\nu \partial_\mu\phi + \eta^\mu_\nu \partial_\alpha\phi\right)\right) \\
&= \partial_\nu \partial^\nu \phi,
\end{aligned}
\tag{7}
$$

josta päädytään Kleinin-Gordonin yhtälön yleiseen kovarianttiin muotoon

$$
\Box\phi + m^2\phi = 0 \tag{8}
$$

yhdistämällä vasen ja oikea puoli, merkitsemällä $\partial_\nu\partial^\nu = \Box$, jota kutsutaan d'Alembertin operaattoriksi, ja asettamalla $V(\phi) = 0$. [4]

2.1.1 Yleinen muoto

Yhtälössä (8) on esitetty Kleinin-Gordonin yhtälön yleinen kovarianttimuoto ilman mittainvarianssia (engl. *gauge invariance*). Mittainvarianssi tarkoittaa, että systeemi on invariantti paikallisissa mittamuunnoksissa. Huomioimalla Kleinin-Gordonin yhtälössä sähkömagneettisen kentän vuorovaikutus spin-0 hiukkasten kanssa on yhtäpitävä mittainvarianssin implementoinnin kanssa sopivan muunnoksen valinnalla [7]. Tämä tullaan näkemään myöhemmin. Tekemällä minimaalinen kytkentä (engl. *minimal coupling*) eli muunnos [7]

$$
\begin{aligned}
i\frac{\partial}{\partial t} &\to i\frac{\partial}{\partial t} - \sqrt{4\pi\alpha}A^0, \\
-i\nabla &\to -i\nabla - \sqrt{4\pi\alpha}\boldsymbol{A} \\
p^\mu &\to p^\mu - \sqrt{4\pi\alpha}A^\mu,
\end{aligned}
\tag{9}
$$

missä kaksi alinta muunnosta ovat käytännössä sama asia eri symbolein. [7]

Sijoittamalla heikko kytkentä yhtälöön (8)

$$
\begin{aligned}
0 &= (\partial_t^2 - \nabla^2 + m^2)\phi \\
&= [(\partial_t + \sqrt{4\pi\alpha} i A^0)^2 - (\nabla - \sqrt{4\pi\alpha} i \boldsymbol{A})^2 - m^2]\phi \\
&= [((p_\mu - \sqrt{4\pi\alpha} A_\mu)((p^u - \sqrt{4\pi\alpha} A^\mu) - m^2]\phi \qquad (10)
\end{aligned}
$$

saadaan yleinen Kleinin Gordonin yhtälön kanoninen ja kovarianttimuoto. [7]

Tiedetään, että Maxwellin yhtälöt ovat invarianttja paikallisissa mittamuunnoksissa, jotka ovat muotoa $A^\mu = A'^\mu - \partial^\mu \chi$, missä $\chi(x)$ on mielivaltainen reaalifunktio. Sijoittamalla paikallinen mittamuunnos ja aaltofunktion vaihemuunnos $\phi(x) \rightarrow \phi'(x) = e^{i\Lambda(x)}\phi(x)$ saadaan yhtälö

$$
\begin{aligned}
0 = e^{-i\Lambda}[(p_\mu - \sqrt{4\pi\alpha} A'_\mu - \sqrt{4\pi\alpha}\partial_\mu \chi + \partial_\mu \Lambda) \\
(p^\mu - \sqrt{4\pi\alpha} A'^\mu - \sqrt{4\pi\alpha}\partial^\mu \chi + \partial^\mu \Lambda) - m^2]\phi'. \qquad (11)
\end{aligned}
$$

Asettamalla $\Lambda = \sqrt{4\pi\alpha}\chi(x)$ päädytään samaan kovarianttiin Kleinin-Gordonin yhtälön kovarianttiin muotoon. Käytännössä tämä tarkoittaa sitä, että vaihesiirto ei vaikuta fysikaalisiin observaabeleihin johtuen näiden bilineaarisesta muodosta

$$
\langle \phi^* | \ldots | \phi \rangle = \langle \phi'^* e^{i\sqrt{4\pi\alpha}\chi(x)} | \ldots | \phi'^* e^{-i\sqrt{4\pi\alpha}\chi(x)} \rangle = \langle \phi'^* | \ldots | \phi' \rangle . \qquad (12)
$$

Lopputuloksena Kleinin-Gordonin yhtälö on riippumaton paikallisista mittamuunnoksista sähkömagneettisessa kentässä. [7]

2.1.2 Yhtälön kaksikomponenttimuoto

Kleinin-Gordonin kaksikomponenttimuoto tarkoittaa Schrödingerin yhtälön tyyppistä muotoa, jossa Hamiltonin operaattori on selvästi nähtävissä. Lisäksi kaksikomponenttimuoto on lineaarinen aikaderivaatan suhteen [7]. Muutetaan Kleinin-Gordonin yhtälö kytketyiksi osittaisdifferentiaaliyhtälöiksi merkitsemällä $\phi = \varphi + \chi$

ja $(i\partial_0 - \sqrt{4\pi\alpha}A^0)\phi = m(\varphi - \chi)$, joista saadaan uudet funktiot muodossa [7]

$$\begin{cases} \varphi = \frac{1}{2m}\left(m + i\partial_0 - \sqrt{4\pi\alpha}A^0\right)\phi \\ \chi = \frac{1}{2m}\left(m - i\partial_0 + \sqrt{4\pi\alpha}A^0\right)\phi \end{cases} . \tag{13}$$

Sijoittamalla nämä funktiot minimaalisesti kytkettyyn Kleinin-Gordonin yhtälöön (10) saadaan yhtälöpari

$$\begin{cases} \left(i\partial_0 - \sqrt{4\pi\alpha}A^0\right)(\varphi + \chi) = m(\varphi - \chi) \\ \left(i\partial_0 - \sqrt{4\pi\alpha}A^0\right)(\varphi - \chi) = \left[\frac{1}{m}\left(\boldsymbol{p} - \sqrt{4\pi\alpha}\boldsymbol{A}\right)^2 + m\right](\varphi + \chi) \end{cases} , \tag{14}$$

joiden summan ja erotuksen laskun jälkeen päädytään yhtälöpariin

$$\begin{cases} 2i\partial_0\varphi - 2\sqrt{4\pi\alpha}A^0\varphi = 2m\varphi + \frac{1}{m}\left(\boldsymbol{p} - \sqrt{4\pi\alpha}\boldsymbol{A}\right)^2(\varphi + \chi) \\ -2i\partial_0\chi + 2\sqrt{4\pi\alpha}A^0\chi = 2m\chi + \frac{1}{m}\left(\boldsymbol{p} - \sqrt{4\pi\alpha}\boldsymbol{A}\right)^2(\varphi + \chi) \end{cases} , \tag{15}$$

josta päädytään Kleinin-Gordonin yhtälön kanssa yhtäpitävään yhtälöpariin [7]

$$\begin{cases} i\partial_0\varphi = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \sqrt{4\pi\alpha}\boldsymbol{A}\right)^2(\varphi + \chi) + \left(m + \sqrt{4\pi\alpha}A^0\right)\varphi \\ i\partial_0\chi = -\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \sqrt{4\pi\alpha}\boldsymbol{A}\right)^2(\varphi + \chi) - \left(m - \sqrt{4\pi\alpha}A^0\right)\varphi \end{cases} . \tag{16}$$

Yhdistämällä komponentit yhdeksi vektoriksi $\psi = (\varphi,\ \chi)^T$ ja huomaamalla tulos

$$\begin{aligned} \frac{\left(p - \sqrt{4\pi\alpha}A\right)^2}{2m}\begin{pmatrix} \varphi + \chi \\ -(\varphi + \chi) \end{pmatrix} &= \frac{\left(p - \sqrt{4\pi\alpha}A\right)^2}{2m}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \\ &= \frac{\sigma_3 + i\sigma_2}{2m}\left(p - \sqrt{4\pi\alpha}A\right)^2\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{17}$$

missä σ_i ovat niin sanotut Paulin-matriisit, saadaan johdettua Kleinin-Gordonin yhtälön kaksikomponenttimuoto. Tätä kutsutaan myös Hamiltonin muodoksi. Kaksikomponenttimuoto on [7]

$$\begin{aligned} i\partial_0\psi &= H\psi \\ H &= \frac{\sigma_3 + i\sigma_2}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \sqrt{4\pi\alpha}\boldsymbol{A}\right)^2 + \sigma_3 m + \sqrt{4\pi\alpha}A^0 I, \end{aligned} \tag{18}$$

missä σ_i ovat Paulin-matriisit ja I on identiteettimatriisi. Paulin-matriisien eksplisiittiset muodot ovat [7]

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \text{ ja } \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{19}$$

2.2 Kleinin-Gordonin yhtälön tulkinta

Johdetaan Kleinin-Gordonin yhtälöstä jatkuvuusyhtälö. Kerrotaan yhtälön (10) viimeinen rivi aaltofunktion kompleksikonjugaatilla ϕ^* vasemmalta puolelta ja lasketaan myös saadun yhtälön kompleksikonjugaatti, jolloin muodostuu yhtälöpari

$$\begin{cases} 0 = \phi^* \left(\partial_t + \sqrt{4\pi\alpha} i A^0\right)^2 \phi - \phi^* \left(\nabla - \sqrt{4\pi\alpha} i A\right)^2 \phi - \phi^* m^2 \phi \\ 0 = \phi \left(\partial_t - \sqrt{4\pi\alpha} i A^0\right)^2 \phi^* - \phi \left(\nabla + \sqrt{4\pi\alpha} i A\right)^2 \phi^* - \phi m^2 \phi^* \end{cases}. \tag{20}$$

Lasketaan yhtälöparin (20) yhälöiden välinen erotus

$$\begin{aligned} 0 = {} & \phi^* \left(\partial_t + \sqrt{4\pi\alpha} i A^0\right)^2 \phi - \phi^* \left(\nabla - \sqrt{4\pi\alpha} i \boldsymbol{A}\right)^2 \phi \\ & - \left(\phi \left(\partial_t - \sqrt{4\pi\alpha} i A^0\right)^2 \phi^* - \phi \left(\nabla + \sqrt{4\pi\alpha} i \boldsymbol{A}\right)^2 \phi^*\right). \end{aligned} \tag{21}$$

Avaamalla sulkeita ja sieventämällä sekä kertomalla puolittain termillä $i/(2m)$ päädytään yhtälöön

$$\begin{aligned} 0 = \partial_t & \left(\frac{i}{2m} \left[\phi^* (\partial_t \phi) - (\partial_t \phi^*) \phi\right] - \frac{\sqrt{4\pi\alpha}}{m} A^0 \phi^* \phi\right) + \\ \nabla & \left(-\frac{i}{2m} \left[\phi^* \nabla (\phi) - \nabla (\phi^*) \phi\right] - \frac{\sqrt{4\pi\alpha}}{m} \boldsymbol{A} \phi^* \phi\right). \end{aligned} \tag{22}$$

Määritellään funktiot $\rho(x)$ ja $\boldsymbol{j}(x)$ seuraavasti

$$\begin{cases} \rho(x) = \frac{i}{2m} \left[\phi^* (\partial_t \phi) - (\partial_t \phi^*) \phi\right] - \frac{\sqrt{4\pi\alpha}}{m} A^0 \phi^* \phi \\ \boldsymbol{j}(x) = -\frac{i}{2m} \left[\phi^* \nabla (\phi) - \nabla (\phi^*) \phi\right] - \frac{\sqrt{4\pi\alpha}}{m} A \phi^* \phi \end{cases}, \tag{23}$$

jolloin on päädytty jatkuvuusyhtälöön [7]

$$\partial_t \rho(x) + \nabla \boldsymbol{j}(x) = 0. \tag{24}$$

Lorentzin kovariantissa muodossa jatkuvuusyhtälö saa muodon [7]

$$\partial_\mu j^\mu = 0,\ j_\mu = \begin{pmatrix} \rho \\ \boldsymbol{j} \end{pmatrix}. \tag{25}$$

Tavanomaisesti integroimalla jatkuvuusyhtälöä ja hyödyntämällä Gaussin lakia saadaan säilymislaki [7]

$$\begin{aligned} \int_V \partial_t \rho(x) d^3x + \int_V \nabla \boldsymbol{j}(x) d^3x = 0 \\ \Rightarrow \partial_t \int_V \rho(x) d^3x = 0 \\ \Leftrightarrow Q = \int_V \rho(x) d^3x. \end{aligned} \tag{26}$$

Selvästi ρ ei ole positiividefiniitti, koska aaltofunktio, sen aikaderivaatta ja aika voivat saada mielivaltaisia arvoja. Tästä syystä se ei voi kuvata todennäköisyystiheyttä. Sen vuoksi myöskään suuretta $\boldsymbol{j}$ ei voi ajatella kuvaavan todennäköisyysvirtaa. Näiden muuttujien fysikaalinen selitys on kuitenkin mielekästä selvittää. [7]

Määritellään dispersiorelaation $E = \pm\sqrt{m^2 + \boldsymbol{p^2}}$ positiivinen juuri Kleinin-Gordonin yhtälön positiiviseksi ratkaisuksi ϕ^+ tai ψ^+. Samoin määritellään negatiivinen ratkaisu ϕ^- tai ψ^- negatiiviseksi juureksi. Kumpikin näistä tarkoittavat siis ratkaisua hiukkaselle, jonka varaus on $+e$ ja nelipotentiaali A^μ. Rajoittumalla nyt yhden hiukkasen tilanteeseen ρ on positiividefiniitti positiivisille ratkaisuille, kun taas negatiivisille ratkaisuille se on negatiividefiniitti. [7] Määritellään varauskonjugointi (engl. *charge conjugation*) muunnoksella [7]

$$\begin{cases} \phi(x) \to \phi_C(x) = \phi^*(x) \\ \psi(x) \to \psi_C(x) = \sigma_1 \psi^*(x) \end{cases}. \tag{27}$$

Tällöin varaus-konjugointi muuttaa positiivisen ratkaisun negatiiviseksi samalla vaihtaen varauksen merkin positiivisesta negatiiviseksi. Vastaavasti negatiivinen ratkaisu muuttuu positiiviseksi vaihtaen nyt merkin päinvastaiseen suuntaan. Täten positiiviset ratkaisut ϕ^+ tai ψ^+ kuvaavat fysikaalisia spin-0 hiukkasia, joiden varaus on $+e$

SI-yksiköissä, kun taas varauskonjugoitu negatiivinen ratkaisu ϕ_C^- tai ψ_C^- kuvaa antihiukkasta, jolla on vastakkainen varaus $-e$. On selvyyden vuoksi huomautettava, että alkuperäinen negatiivinen ratkaisu tarkoittaa negatiivisenergistä ratkaisua varaukselle $+e$. Käytännössä varauskonjugointi siis vaihtaa varauksen. Kummallakin on kuitenkin sama nelipotentiaali A^μ. Esimerkkejä tällaisista hiukkasista ovat pionit $\pi^\pm$. [7]

Luvun alussa esitellyt muuttujat saavat tällöin fysikaalisen merkityksen; Q, ρ ja $\boldsymbol{j}$ ovat sähkövaraus, varaustiheys ja virtatiheys vastaavasti. Tässä varauskonjugointi vaikuttaa täysin teoreettiselta, mutta kokeellisesti on kyetty osoittamaan sen paikkaansapitävyys [7, 16]. Erityisesti kaikille hiukkasille on löydetty vastaavat antihiukkaset. On olemassa myös laajennettu varauskonjugointi, jossa ratkaisua vastaava bosoni muuttuu antibosoniksi, jolla kaikki muut kvanttiluvut ovat täsmälleen samat kuin alkuperäisellä bosonilla paitsi varaus. Tällöin nelipotentiaali vaihtaa myös merkkiä. [7]

Maininnan arvoinen on vielä Feynmanin-Stückelbergin tulkinta. Se tarkoittaa tulkintaa Kleinin-Gordonin yhtälön ratkaisuille tehtäessä CTP-muunnos, joka ei siis ole symmetriamuunnos. CTP-muunnoksessa hiukkasen rata peilautuu, hiukkanen kulkee ajassa taaksepäin ja varaus vaihtuu vastaluvukseen [7]. Tällöin negatiivisesti varatun spin-0 antihiukkasen ratkaisu voidaan tulkita olevan identtinen positiivisesti varatun aika-avaruudessa takaperin kulkevan negatiivisen ratkaisun kanssa [7]. Huomionarvoista on myös aiemmin mainittu rajoittuminen yhteen hiukkaseen, mikä asettaa joitain ehtoja, milloin Kleinin-Gordonin yhtälöitä voidaan soveltaa. Hiukkasen energian ja liikemäärän tulee toteuttaa SI-yksiköissä ehdot $|E - mc^2| < mc^2$, $|\frac{e}{c}A^\mu| < m$, $\Delta E << mc^2$ ja $\Delta p << mc$, jotka kaikki perustuvat siihen ehtoon, että hiukkasten annihilaatiota tai ilmestymistä ei sallita. Lisäksi tarvitaan Heisenbergin epätarkkuusperiaatteeseen perustuva ehto $\Delta >> \lambda_C = \frac{\hbar}{mc}$, missä Δ on hiukkaspaketin leveys ja λ_C hiukkasen De-Broglien aallonpituus. Viimeinen ehto siis tarkoittaa sitä, että hiukkasta vastaavan aaltopulssin leveys tulee olla selvästi suurempi kuin hiukkasen aallopituus. [7]

2.3 Kleinin-Gordonin yhtälön perusratkaisut

Johdetaan Kleinin-Gordonin yhtälön pohjalta ratkaisut spin-0 tasoaallolle sekä niin kutsutulle pioniatomille.

2.3.1 Tasoaalto

Ratkaistaan Kleinin-Gordonin yhtälö vapaalle hiukkaselle ($A^\mu = 0$) kaksikomponenttimuodosta (18). Tehdään yrite, että ratkaisu on muotoa

$$\psi(x) = (\varphi_0,\ \chi_0)^T e^{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-Et)}. \tag{28}$$

Sijoitetaan yrite kaksikomponenttimuotoon, jolloin saadaan yhtälöpari

$$\begin{pmatrix} \left(E - \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - m\right) & -\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} \\ \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} & \left(E + \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + m\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{29}$$

Jotta yhtälöparilla on nollasta eroavia ratkaisuja, on sen kerroinmatriisin determinantin oltava nolla. Helpolla laskulla päädytään tuttuun relativistiseen kokonaisenergian kaavaan $E^2 = \boldsymbol{p}^2 + m^2$. Tästä edelleen saadaan energian ominaisarvoiksi $E^{(\pm)} = \pm\sqrt{\boldsymbol{p}^2 + m^2}$. Lisäksi merkitään $E^{(+)} = p_0$ ja $E^{(-)} = -p_0$ Lopuksi saadaan ratkaisuiksi

$$\begin{cases} E^{(+)} : \psi^{(+)}(x) = \begin{pmatrix} m + p_0 \\ m - p_0 \end{pmatrix} e^{-i(p_0 t - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x})} \\ E^{(-)} : \psi^{(-)}(x) = \begin{pmatrix} m - p_0 \\ m + p_0 \end{pmatrix} e^{i(p_0 t - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x})} \end{cases}, \tag{30}$$

missä ratkaisu $\psi^{(+)}(x)$ kuvastaa materiahiukkasen, kuten edellä esitellyn π^+-hiukkasen käyttäytymistä ja ratkaisu $\psi_C^{(-)}(x) = \psi^{(-)*}(x)$ kuvastaa antimateriahiukkasen käyttäytymistä. [7]

2.3.2 Pioniatomi

Ratkaistaan SI-yksiköissä Kleinin-Gordonin yhtälö vielä pioni-atomille, joka tarkoittaa systeemiä, jossa pioni π^- kiertää äärettömän raskasta positiivisesti varattua ydintä $q = Ze$ [7]. Pionit kuuluvat mesoneihin, jotka ovat hadroneita ja koostuvat kvarkki-antikvarkkiparista [12]. Pionit ovat lisäksi spin-0 hiukkasia. Hadroneihin kuuluvat myös tutummat protoni ja neutroni, jotka koostuvat kolmesta kvarkista [12]. Nyt Coulombin potentiaali saa muodon $eA^0(r) = V(r) = -\frac{Z\hbar c\alpha}{r}$, missä α on aiemmin jo esitelty hienorakennevakio. Radiaalinen Kleinin-Gordonin yhtälö tulee muotoon

$$[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1) - (Z\alpha)^2}{r^2} + \frac{2EZ\alpha}{\hbar cr} - \frac{m^2c^4 - E^2}{\hbar^2c^2}]u_l(r) = 0. \tag{31}$$

Halutaan rajoittua sidottuihin tiloihin (engl. *bound states*) eli energialle pätee $|E| < mc^2$, koska muuten pioni ei olisi sidottu ytimeen. Määritellään muuttujat

$$\rho = \beta r,\ u_l(r) = \hat{u}_l(\rho),\ \beta = 2\sqrt{\frac{m^2c^4 - E^2}{\hbar^2c^2}} \text{ ja } \lambda = \frac{2EZ\alpha}{\beta\hbar c}, \tag{32}$$

jolloin yhtälö (31) tulee muotoon

$$[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l'(l'+1)}{\rho^2} + \frac{\lambda}{\rho}]\hat{u}_l(r) = 0, \tag{33}$$

missä $l'(l'+1) = l(l+1) - (Z\alpha)^2$. Tehdään yrite funktiosta, joka toteuttaa differentiaaliyhtälön (33):

$$\hat{u}_l(\rho) = \rho^{l'+1}e^{-\rho/2}f(\rho), \tag{34}$$

jolloin päädytään differentiaaliyhtälöön

$$\rho f''(\rho) + (2l' + 2 - \rho)f'(\rho) + (\lambda - l' - 1)f(\rho) = 0, \tag{35}$$

joka on Bernoullin differentiaaliyhtälön muotoa ja ratkaistavissa siten sopivalla muuttujanvaihdolla tai sarjakehitelmällä. Joka tapauksessa energian odotusarvot saavat muodon [7]

$$E_{n',l} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{(Z\alpha)^2}{(n' + \frac{1}{2} + \sqrt{(l+\frac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2})^2}}}, \tag{36}$$

missä n' kertoo ratkaisun sarjakehitelmän suurimman potenssin. Edelleen vielä päädytään yhtälöön

$$E_{n,l} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{(Z\alpha)^2}{(n - (l+\frac{1}{2}) + \sqrt{(l+\frac{1}{2})^2 - (Z\alpha)^2})^2}}} \tag{37}$$

sijoittamalla ehto $n = n' + l' + 1$. [7]

3 Diracin yhtälö neljässä ulottuvuudessa

Varauskonjugoinnin yhteydessä oli puhe siitä, että suureet ρ ja $\boldsymbol{j}$ eivät kuvanneet todennäköisyystiheyttä ja -virtaa. Tämä negatiivisten energioiden lisäksi aiheutti Kleinin-Gordonin yhtälön fysikaalisen merkityksen kyseenalaistamista ja johti alunperin sen hylkäämiseen [7]. Tavoitteeksi muodostui ajan suhteen lineaarisen sekä positiividefiniitin aaltoyhtälön löytäminen [7]. Se löytyikin suhteellisen pian Paul Diracin ansiosta [8].

3.1 Diracin yhtälön motivointi

Paul Dirac pyrki muokkaamaan jo aiemmin esitellyn Schrödingerin yhtälön (1) relativistiseen muotoon ilman toisen potenssin termejä [4]. Dirac ei ollut tyytyväinen Kleinin-Gordonin yhtälöön sen toisen kertaluvun aikaderivaatan sekä negatiivisten energiratkaisuiden vuoksi. Hän onnistui muokkaamaan Schrödingerin yhtälöä Diracin yhtälöä käsittelevässä julkaisussaan 1928 [8]. Myöhemmin osoittautui kuitenkin, että Diracin ja Kleinin-Gordonin yhtälö kuvaavat erilaisia hiukkasia. [4]

Dirac postuloi [8], että mikäli ensimmäisen kertaluvun yhtälö on olemassa, on se muotoa

$$i\partial_t |\psi\rangle = H |\psi\rangle = (\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{p} + \beta m) |\psi\rangle . \tag{38}$$

Tässä yhtälössä $\boldsymbol{p}$ on hiukkasen kolmiliikemäärä ja tuntemattomat $\boldsymbol{\alpha}$ sekä β täytyy erikseen määrittää. Nämä tuntemattomat sekä itse aaltofunktio voivat tässä olla matriiseja tai tavallisia lukuja. Dirac päätteli, että H^2 ja $|\psi\rangle$ tulee toteuttaa tavanomainen relativistinen energia-liikemäärärelaatio ja siten myös Kleinin-Gordonin yhtälö

$$-\partial_t^2 |\psi\rangle = H^2 |\psi\rangle = (\boldsymbol{p}^2 + m^2) |\psi\rangle . \tag{39}$$

Ottamalla neliö ensimmäisen kertaluvun yhtälöstä saadaan yhtälö

$$\begin{aligned} -\partial_t^2 |\psi\rangle = H^2 |\psi\rangle &= (\alpha_i p_i + \beta m)(\alpha_j p_j + \beta m) |\psi\rangle \\ &= (\alpha_i^2 p_i^2 + [\alpha_i, \alpha_j]_{+, i \neq j} p_i p_j + [\alpha_i, \beta]_+ p_i m + \beta^2 m^2) |\psi\rangle . \end{aligned} \tag{40}$$

Matriisit α_i ja liikemäärät p_i kommutoivat ja siten niitä voi liikutella vapaasti. Kommutointi johtuu siitä, että matriisit α_i eivät riipu koordinaateista tai derivaatoista. Lisäksi yhtälössä (40) hakasulkeet, joissa alaindeksi on $+$, kuvaavat antikommutaattoreita. Määritellään siis $[\alpha_i, \alpha_j]_+ = \alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i$. Vertaamalla toisen kertaluvun yhtälöön (39) huomataan oikean puolen perusteella antikommutaattorien häviävän: $[\alpha_i, \alpha_j] = [\alpha_i, \beta]_+ = 0, j \neq i$. Lisäksi vertailemalla nähdään, että $\alpha_1^2 = \alpha_2^2 = \alpha_3^2 = \beta^2$. Jotta nämä antikommutoivat, on näiden oltava matriiseja. Lisäksi on osoitettavissa, että niillä ei ole jälkeä, ne ovat hermiittisiä, niiden ominaisarvot kuuluvat joukkoon $\{-1, 1\}$ sekä $dim(\alpha_i) \geq 4$ ja $dim(\beta) \geq 4$, koska vain vähintään neliulotteiset matriisit voivat toteuttaa tarvittavat ehdot tuntemattomille matriiseille. [4]

3.1.1 Diracin spinorit

Dirac ja Pauli johtivat muodot yllä oleville matriiseille. Vielä kertomalla yhtälö (38) suureella β saadaan niin kutsutut Diracin esityksen Diracin matriisit, jotka on esitelty yhtälöissä (41), (42), (43) ja (44). [7]

$$\gamma^0 = \beta = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}, \tag{41}$$

$$\gamma^1 = \beta\alpha_1 = \begin{pmatrix} & & & 1 \\ & & 1 & \\ & -1 & & \\ -1 & & & \end{pmatrix}, \tag{42}$$

$$\gamma^2 = \beta\alpha_2 = \begin{pmatrix} & & & -i \\ & & i & \\ & i & & \\ -i & & & \end{pmatrix}, \tag{43}$$

$$\gamma^3 = \beta\alpha_3 = \begin{pmatrix} & & 1 & \\ & & & -1 \\ -1 & & & \\ & 1 & & \end{pmatrix} \tag{44}$$

Sijoittamalla Diracin matriisit yhtälöön (38) saadaan yhtälö

$$\sum_{\eta=0}^{4} \left(\sum_{\mu=0}^{3} i \left(\gamma^\mu\right)_{\kappa\eta} \partial_\mu - m\delta_{\kappa\eta} \right) |\psi\rangle_\eta = 0, \quad \kappa = 1, 2, 3, 4, \tag{45}$$

joka usein kirjoitetaan vielä tiiviimpään muotoon, jotta indeksit κ ja η häviävät. [4] Lisäksi yhtälössä $|\psi\rangle_\eta$ kuvaa aaltofunktiota, joka on nyt nelivektori. Määritellään $\gamma^\mu = (\gamma^0,\ \gamma^1,\ \gamma^2,\ \gamma^3)$. Tiivistetty muoto on esitelty yhtälössä

$$\left(i\gamma^\mu \partial_\mu - m\right) |\psi\rangle = 0. \tag{46}$$

Koska Diracin matriisit ovat 4×4-matriiseja, ovat myös ratkaisut 4-ulotteisia pystyvektoreita. Näiden komponentit eivät kuitenkaan ole aika-avaruuden komponentteja vaan abstraktin spinoriavaruuden komponentteja. Diracin spinorit ovat ne nelivektorit, jotka voidaan johtaa Diracin yhtälöstä ja jotka kuvaavat fermioneja [4]. Samoin kuin Kleinin-Gordonin yhtälön tapauksessa, tekemällä minimaalista kytkentää vastaava muunnos saadaan Diracin yhtälön yleinen sähkömagneettisen kentän huomioiva muoto [7]. Tämä minimaalisen kytkennän huomioiva muoto on

$$(\gamma^\mu(i\partial_\mu - \sqrt{4\pi\alpha}A_\mu) - m)\,|\psi\rangle = 0. \tag{47}$$

3.1.2 Kiraaliset spinorit

Diracin esityksen Diracin spinorit eivät ole ainoa ratkaisu yhtälölle (38). Muita mahdollisia esityksiä ovat kiraalinen eli Weylen esitys sekä Majorana esitys. Käsitellään tässä lyhyesti Diracin spinoreita Weylen esityksessä. Hermann Weyl julkaisi niistä artikkelissaan *Electrons and gravitation* vuonna 1929 [13]. Kiraalisessa esityksessä Diracin matriisit ovat muodossa [7]

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} & & & -1 \\ & & -1 & \\ & -1 & & \\ -1 & & & \end{pmatrix}, \tag{48}$$

$$\gamma^1 = \begin{pmatrix} & & & 1 \\ & & 1 & \\ & -1 & & \\ -1 & & & \end{pmatrix}, \tag{49}$$

$$\gamma^2 = \begin{pmatrix} & & & -i \\ & & i & \\ & i & & \\ -i & & & \end{pmatrix}, \tag{50}$$

$$\gamma^3 = \begin{pmatrix} & & 1 & \\ & & & -1 \\ -1 & & & \\ & 1 & & \end{pmatrix}. \tag{51}$$

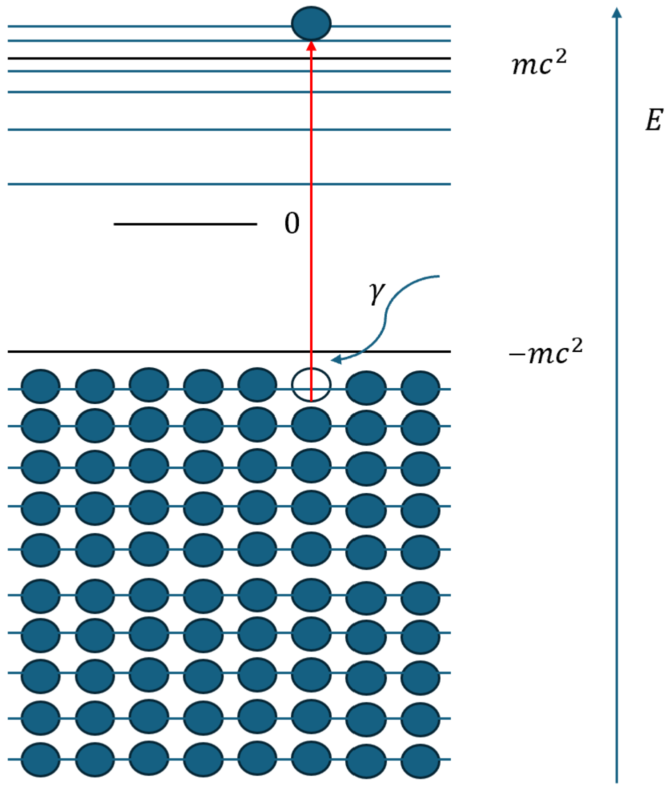
Weyl ei kuitenkaan lähtenyt liikkeelle näistä neliulotteisista matriiseista vaan lähti liikkeelle kahdesta kaksikomponenttispinorista, jotka perustuu Paulin teoriaan. Weyl ajatteli, että Diracin yhtälö antoi liikaa energioita, joten hän pyrki redusoimaan spinoriavaruuden ulottuvuuksia [14]. Se kuitenkin pakotti massan poistamiseen vaikutuksesta. Weyl postuloi kaksi toisistaan riippumatonta differentiaaliyhtälöä

$$\begin{cases} i\frac{\partial}{\partial t}\phi = i\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\phi \\ i\frac{\partial}{\partial t}\chi = -i\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\chi \end{cases}, \tag{52}$$

joissa funktiot ϕ ja χ ovat vasen- ja oikeakätinen Weylin spinori vastaavasti [14]. Alunperin Dirac tutki myös näitä relativistisen aaltoyhtälön kehittämisen yhteydessä, mutta hylkäsi ne johtuen siitä, että ne eivät toteuta pariteetti-invarianssia. Käytännössä pariteetti kuvaa siis hiukkasen radan peilausta tietyn koordinaatiston suhteen. Myöhemmin postuloitiin, että pariteettisymmetria toteutuu kaikissa sähkömagneettisissa ja vahvan vuorovaikutuksen prosesseissa. Pariteettisymmetrian ei kuitenkaan tarvitse toteutua prosesseissa, joita välittää heikko vuorovaikutus. Yhdistelmällä oikea- ja vasenkätinen spinori saadaan bispinori eli Diracin spinori, joka toteuttaa Diracin yhtälön. Siten kyseiselle bispinorille voidaan johtaa Diracin matriisit, jotka on esitetty kaavoissa (48), (49), (50) ja (51). [14]

3.2 Diracin yhtälön tulkinta

Diracin yhtälö kuvaa siis hyvin spin-1/2 -hiukkasten käyttäytymistä, koska se selitti epärelativistista kvanttimekaniikkaa täsmällisemmin positronin ja vetyatomin energiatasot [4, 7]. Osoittautui kuitenkin, että ylemmät kaksi komponenttia antoivat tavanomaiset ratkaisut, kun taas alemmat kaksi antoivat negatiivisia energioita. Nämä negatiiviset energiat aiheuttivat alunperin ongelmia kvanttimekaniikan tulkitsemiselle. Dirac esitti negatiivisten energioiden selitykseksi niin sanotun "elektronimeren" [7]. Tämän mukaan jokainen avaruuden negatiivinen energiatila oli täytetty, eikä niille Paulin kieltosäännön mukaan voinut siirtyä muita hiukkasia. Elektronin virittäminen näiltä negatiivisilta energiatiloilta sai aikaan positiivisen reiän, joka käyttäytyi kuin positiivisesti varautunut spin-1/2 ja elektronin massainen hiukkanen. Hän antoi sille nimeksi positroni [7]. Elektronimerta on havainnollistettu kuvassa 1. [15]



Kuva 1. Kuvassa vaakasuorat viivat kuvaavat energiatasoja. Nollatason yläpuoliset viivat kuvaavat sidottuja positiivisia energioita. Elektroneja kuvataan sinisillä ympyröillä. Kuvassa on havainnollistettu fotonin γ, jonka energia on suurempi kuin $2mc^2$, aikaansaamaa elektronin viritystä ja positiivisesti varatun aukon syntymistä. Kuva on muokattu lähteestä [7]

Vuonna 1933 artikkelissaan *The positive electron* Carl D. Andersson kokeellisesti osoitti positiivisesti varatun elektronin eli positronin olemassaolon [16]. Tämän jälkeen ymmärrettiin negatiivisten energioiden kuvaavan itse asiassa vastakkaisen varauksen hiukkasia eli elektronien tapauksessa positroneita. Diracin esityksessä Diracin spinorit ovat siis bispinoreita, joissa kaksi ensimmäistä komponenttia kuvaavat fermioneita ja kaksi viimeistä komponenttia fermioneiden antihiukkasia.

Modernimmin ajateltuna Diracin ja Weylin representaatiossa voidaan määritellä myös varauskonjugointi C. Rajoitutaan taas yhden hiukkasen tapaukseen. Se määritellään muunnoksella [7]

$$\psi(x) \to \psi_C(x) = i\gamma^2\psi^*(x) \ . \tag{53}$$

Varauskonjugointi muuttaa nyt Diracin yhtälön positiivisenergisen ratkaisun negatiivisenergiseksi samalla vaihtaen positiivisen varauksen negatiiviseksi tai vastaavasti toisinpäin negatiivisenergiselle ratkaisulle [7]. Positiivisenerginen $\psi^{(+)}$ ratkaisu kuvaa spin-1/2-hiukkasta, jolla on positiivinen varaus, kun taas negatiivisenerginen varauskonjugoitu ratkaisu $\psi_C^{(-)}$ kuvaa antihiukkasta, jolla on vastakkaissuuruinen varaus. Kummassakin tapauksessa sähkömagneettinen nelipotentiaali on sama. Diracin yhtälön tapauksessa j^μ ja ρ ovat positiividefiniitteja ja siten kuvaavat todennäköisyysvirtaa ja -tiheyttä. [4, 7]

Diracin yhtälön Weylin formalismi on fysikaalisesti merkittävä asettamalla massa nollaksi eli $m = 0$. Tällöin päädytään yhtälöihin, jotka kuvaavat fermioneja, jotka vuorovaikuttavat heikon vuorovaikutuksen välityksellä. Tällaiset hiukkaset ovat neutriinot. Neutriinojen ajateltiin olevan joko oikea- tai vasenkätisiä ja eroavat siten esimerkiksi elektroneista, jotka ovat sekä oikea- että vasenkätisiä. Tämän vuoksi neutriinoista puhuttiin myös kiraalisina spinoreina. Myöhemmin osoitettiin kuitenkin niiden olevan massallisia ja siksi ne eivät voi olla Weylin spinoreita. [14, 17]

3.3 Diracin yhtälön perusratkaisut

Johdetaan Diracin yhtälöstä ratkaisut tasoaallolle ja vetyatomin hienorakenteelle.

3.3.1 Tasoaalto

Johdetaan Diracin esityksessä Diracin yhtälön ratkaisu vapaalle hiukkaselle yleisessä avaruudessa käyttämällä kaavaa (46) ja sijoittamalla siihen tavalliset tasoaallot $|\psi\rangle = u(p)e^{-ip_\nu x^\nu}$. Suoralla derivoinnilla saadaan [15]

$$\begin{aligned} 0 &= (i\gamma^\mu \partial_\mu - m)u(p)e^{-ip_\nu x^\nu} \\ &= i\gamma^\mu \partial_\mu (u(p)e^{-ip_\nu x^\nu}) - mu(p)e^{-ip_\nu x^\nu} \\ &= i\gamma^\mu(-ip_\mu)u(p)e^{-ip_\nu x^\nu} - mu(p)e^{-ip_\nu x^\nu} \\ &= (\gamma^\mu p_\mu - m)u(p)e^{-ip_\nu x^\nu}. \end{aligned} \tag{54}$$

Esitetään $u(p)$ kahden kaksikomponenttispinorin avulla, jolloin nämä uudet spinorit vastaavat elektronin ja positronin ratkaisua varauskonjugointia vaille $u(p) = (u_A,\ u_B)^T$. Sijoittamalla edelleen tämä yhtälöön (46) saadaan [15]

$$\begin{pmatrix} (E-m)I & -\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} & (-E-m)I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_A \\ u_B \end{pmatrix} = 0, \tag{55}$$

missä $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} = \sigma_1 p_1 + \sigma_2 p_2 + \sigma_3 p_3$, σ_i ovat edelleen Paulin matriiseja ja I on 2×2 identiteetimatriisi. Tämän epätriviaalit ominaisarvot ja niitä vastaavat ominaisvektorit on esitetty alla. Epätriviaalit ominaisarvot saadaan determinantin avulla

$$\begin{vmatrix} (E-m)I & -\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} & (-E-m)I \end{vmatrix} = 0 \tag{56}$$

Käyttämällä lähteessä [7] esitettyä identiteettiä $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}) = \boldsymbol{AB} + i\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$ ja merkitsemällä $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B} = \boldsymbol{p}$ saadaan determinantiksi

$$(E-m)(-E-m) = -(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}) = -\boldsymbol{p}^2, \tag{57}$$

jota sieventämällä päädytään täsmälleen vapaan relativistisen hiukkasen kokonaisenergian kaavaan, kuten pitääkin

$$E^2 = m^2 + \boldsymbol{p}^2. \tag{58}$$

Ominaisvektorit saadaan alkuperäisestä matriisiyhtälöstä (55) kertomalla matriisi kaksikomponenttispinoria esittävän vektorin avulla, jolloin ominaisvektorin komponeteiksi saadaan [15]

$$\begin{cases} u_A = \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E-m} u_B \\ u_B = \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E+m} u_A \end{cases}. \tag{59}$$

Ilmiselvästi sijoittamalla yhtälöparin (59) alempaan yhtälöön ns. Paulin kaksikomponenttispinorit $\chi_1 = (1,\ 0)^T$, $\chi_2 = \begin{pmatrix} 0, & 1 \end{pmatrix}^T$ vektoreiden u_A ja u_B tilalle saadaan positiivista energiaa vastaavat tulokset eli toisin sanoen elektronia kuvaavat tulokset. Samalla tavalla saadaan positronia kuvaavat tulokset. Sijoittamalla nämä komponentit yhtälölle (46) saadaan neljä erillistä ratkaisua [15]

$$u_r^+(\boldsymbol{p}) = \begin{pmatrix} \chi_r \\ \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E+m}\chi_r \end{pmatrix},\ u_r^-(\boldsymbol{p}) = \begin{pmatrix} -\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E+m}\chi_r \\ \chi_r \end{pmatrix} \tag{60}$$

Tässä siis nyt $E = \sqrt{m + \boldsymbol{p}^2}$ ja $r \in \{1,\ 2\}$. Nämä ovat kuitenkin yksittäisratkaisut. Määrittelemälle negatiivisille ratkaisuille vielä uusi funktio $v_r(\boldsymbol{p}) = \varepsilon^{rs} u_s^-(-\boldsymbol{p})$, missä $r, s \in \{1,\ 2\}$ ja ε^{rs} on kaksiulotteinen Levi-Civita symboli, sekä merkitsemällä $u_r(\boldsymbol{p}) = u_r^+(\boldsymbol{p})$ voidaan suhteellisen pitkän algebran ja normituksen jälkeen johtaa yleinen ratkaisu [15]

$$|\psi\rangle = \sum_{r,\boldsymbol{p}} \sqrt{\frac{m}{E(p)V}} [a_r(\boldsymbol{p}) u_r(\boldsymbol{p}) e^{-ip_\mu x^\mu} + b_r^*(\boldsymbol{p}) v_r(\boldsymbol{p}) e^{ip_\mu x^\mu}]. \tag{61}$$

3.3.2 Vetyatomi

Siirrytään seuraavaan tavanomaiseen esimerkkiin eli vetyatomiin. Vetyatomin tapauksessa Coulombin potentiaali saa samanlaisen muodon kuin pioniatomin tapauksessa: $A^0(r) = V(r) = -\frac{\hbar c \alpha}{er}$, jossa α on taas hienorakennevakio. Tällöin magneettija sähkökentälle pätee $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{0}$, $\boldsymbol{E} = -\nabla A^0 = \frac{\boldsymbol{x}}{er}\frac{\partial V}{\partial r}$ ja $\nabla \times \boldsymbol{E} = \boldsymbol{0}$. Tarkastelemalla vain Diracin esityksen positiivisenergistä ratkaisua keskeispotentiaalissa saadaan Hamiltonin operaattori muotoon [7]

$$H''_u = mc^2 + \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(r) - \frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2} + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2 V + \frac{\hbar}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\partial V}{\partial r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}. \tag{62}$$

Yhtälössä (62) yhtäsuuruusmerkin oikealla puolella neljäs termi on liike-energian relativistinen korjaus, viides termi, jota kutsutaan myös Darwinin termiksi, on relativistinen korjaus keskeispotentiaalille ja kuudes termi kuvaa spin-ratavuorovaikutus (engl. *spin-orbit coupling*). Spin-ratavuorovaikutus tarkoittaa energiaa, joka liittyy spinin ja atomin kulmaliikemäärän väliseen vuorovaikutukseen [7]. Sijoitetaan yhtälöön (62) Coulombin potentiaali, jolloin viides ja kuudes termi saavat muodot $\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2 V = \frac{\pi e^2\hbar^2}{2m^2c^2}\delta(r)$ ja $\frac{\hbar}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\partial V}{\partial r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L} = \frac{e^2\hbar}{4m^2c^2r^3}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}$. Kokonaisuudessaan Diracin yhtälö kuvaa siis täsmällisemmin vetyatomia kuin tavallinen Schrödingerin yhtälö. [15]

Johdetaan vetyatomin hienorakennetta kuvaavien energiatasojen kaava. Kaavan johto on esitelty täsmällisemmin lähteessä [7]. Tiedetään, että radiaalisen Diracin yhtälön ratkaisu keskeispotentiaalissa pallokoordinaateissa on muotoa

$$\Psi^{(\omega)}_{J,M} = \frac{1}{r}\begin{pmatrix} F_{J+\omega/2}(r)Y^{J+\omega/2}_{J,M}(\theta,\varphi) \\ iG_{J-\omega/2}(r)Y^{J-\omega/2}_{J,M}(\theta,\varphi)\end{pmatrix}, \tag{63}$$

missä funktiot $Y^l_{J,M}(\theta,\varphi)$ ovat spinoriset palloharmoniset funktiot, jotka kertovat kulmariippuvuuden, ja $\omega = \pm 1$ kuvaa pariteettiin liittyvää eli käytännössä radan peilaamiseen perustuvaa kvanttilukua. J ja M ovat kvanttilukuja, jotka liittyvät kulmaliikemäärän kvanttiutumiseen. Funktiot F_l ja G_l ovat radiaalisen yhtälön ratkaisut, jotka toteuttavat differentiaaliyhtälöparin

$$\begin{cases} \left[-\frac{d}{dr} + \frac{\omega\left(J+\frac{1}{2}\right)}{r}\right] G_{J-\omega/2}(r) = \frac{E-mc^2-V}{c\hbar}F_{J+\omega/2} \\ \left[\frac{d}{dr} + \frac{\omega\left(J+\frac{1}{2}\right)}{r}\right] F_{J+\omega/2}(r) = \frac{E+mc^2-V}{c\hbar}G_{J-\omega/2} \end{cases}. \tag{64}$$

Lisäksi ne toteuttavat seuraavat ehdot

$$\begin{cases} \hat{J}^2 \Psi_{J,M}^{(\omega)}\left(r,\theta,\varphi\right) = \hbar^2 J\left(J+1\right) \Psi_{J,M}^{(\omega)}\left(r,\theta,\varphi\right), \; J = \frac{1}{2}, \, \frac{3}{2}, \, ,,, \\ \hat{J}_z \Psi_{J,M}^{(\omega)}\left(r,\theta,\varphi\right) = \hbar M \Psi_{J,M}^{(\omega)}\left(r,\theta,\varphi\right), \; M = -J, \, ,,,, \, J \\ \left[\Psi_{J,M}^{(\omega)}\right]_P \left(r,\theta,\varphi\right) = \left(-1\right)^{J+\frac{\omega}{2}} \Psi_{J,M}^{(\omega)}\left(r,\theta,\varphi\right), \; \omega = \pm 1 \end{cases} . \tag{65}$$

Tehdään differentiaaliyhtälöpariin (59) sijoitukset

$$\rho = kr, \;\; F(r) = \hat{F}(\rho), \;\; G(r) = \hat{G}(\rho), \;\; k = \sqrt{\frac{m^2c^4 - E^2}{c^2\hbar^2}}, \tag{66}$$

$$\tau = \omega(J + \frac{1}{2}), \;\; \nu = \sqrt{\frac{mc^2 - E}{mc^2 + E}}, \tag{67}$$

jolloin päädytään uuteen differentiaaliyhtälöpariin

$$\begin{cases} \left[-\frac{d}{d\rho} + \frac{\tau}{\rho}\right] \hat{G} = (-\nu + \frac{\alpha}{\rho})\hat{F} \\ \left[\frac{d}{d\rho} + \frac{\tau}{\rho}\right] \hat{F} = (\frac{1}{\nu} + \frac{\alpha}{\rho})\hat{G} \end{cases} . \tag{68}$$

Tehdään yrite, miltä ratkaisu näyttää

$$\begin{cases} \hat{F}\left(\rho\right) = \rho^{\sqrt{\tau^2-\alpha^2}} e^{\,-\rho} \sum_i a_i \rho^i \\ \hat{G}\left(\rho\right) = \rho^{\sqrt{\tau^2-\alpha^2}} e^{\,-\rho} \sum_i b_i \rho^i \end{cases} . \tag{69}$$

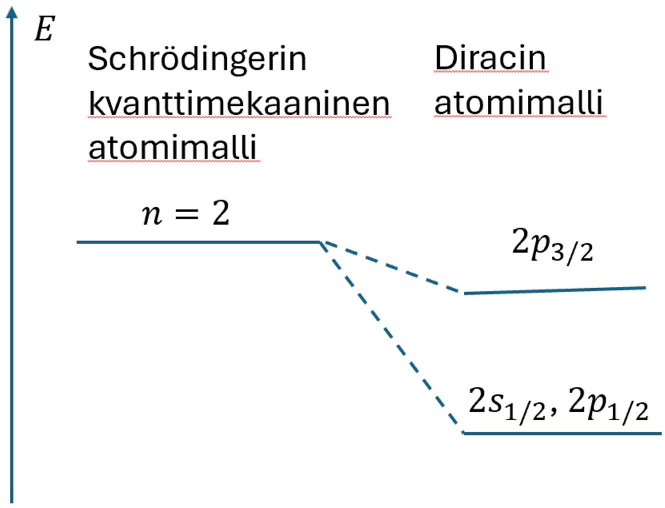
Sijoittamalla nämä differentiaaliyhtälöpariin (63) ja laskemalla hieman algebraa sekä sijoittamalla substituutio takaisin saadaan energoille yhtälö

$$E_{n',l} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{(n' + \frac{1}{2} + \sqrt{(J+\frac{1}{2})^2 - \alpha^2})^2}}}, \tag{70}$$

missä n' kertoo jälleen ratkaisun sarjakehitelmän suurimman potenssin. Asettamalla vielä $n = n' + J + 1$ päädytään pioniatomin energiatasojen kanssa samanlaiseen yhtälöön

$$E_{n',l} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{(n - (J+\frac{1}{2}) + \sqrt{(J+\frac{1}{2})^2 - \alpha^2})^2}}}. \tag{71}$$

Alla kuvassa 2 on esitetty miten vetyatomin hienorakenne vertautuu Schrödingerin esittämään kvanttimekaaniseen atomimalliin pääkvanttiluvulla $n = 2$. [7]



Kuva 2. Kuvassa on havainnollistettu, kuinka pääkvanttiluvun $n = 2$ kolme orbitaalia $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ ja $2p_{3/2}$ jakautuvat kahdeksi energitasoksi relativististen korjausten myötä. Kuva on muokattu lähteestä [7]

.

4 Relativistisen kvanttimekaniikan yhtälöiden ero Schrödingerin yhtälöön

Keskeinen ero Schrödingerin yhtälön ja relativististen aaltoyhtälöiden välillä on niiden sovellettavuusalue. Epärelativististen ja relativististen aaltoyhtälöiden taustalla on erilaiset postulaatit energialle, muunnoksille sekä ulottuvuuksille. Ymmärrettävästi relativistisia aaltoyhtälöitä voidaan käyttää myös hiukkasille, jotka kulkevat lähelle valonnopeutta. Spinin arvosta riippuen eri hiukkasille on myös eri aaltoyhtälö, kun taas tavallinen Schrödingerin yhtälö sopii vain elektronin kuvaamiseen. [4]

Relativistiset aaltoyhtälöt ennustivat antihiukkaset. Lisäksi ne selittävät myös kokeelliset tulokset vetyatomin hienorakenteessa liike-energian ja potentiaalin relativististen korjausten avulla [7]. Tiedetään, että sähkömagneettinen kenttä vaikuttaa atomien energiatasoihin. Erityisesti magneettikentän vaikutusta kutsutaan Zeemannin ilmiöksi. Relativistinen korjaus potentiaaliin saa aikaan aiemmin mainitun spin-ratavuorovaikutuksen, joka ei kuulu epärelativistiseen kvanttimekaniikkaan. Se muuttaa Zeemannin ilmiön energiatasoja, mikä on voitu kokeellisesti todistaa. [18]

5 Relativististen liikeyhtälöiden vaikeudet ja ongelmat

Kleinin-Gordonin yhtälön ja Diracin yhtälön yhteydessä on ongelmana negatiivisten energioiden tulkinta. Negatiiviset energiat kuitenkin voidaan ikään kuin fysikaalisesti tulkita kuitenkin antihiukkasiksi. Toinen keskeinen ongelma on Kleinin-Gordonin yhtälöiden osalta suureiden todennäköisyysluonteen puuttuminen, koska esimerkiksi j^{μ} voi saada sekä positiivisia että negatiivisia arvoja. [4, 11]

Käytännössä relativistisessa kvanttimekaniikassa on edelleen ongelmana hiukkasten muuttuminen toisiksi hiukkasiksi. Lisäksi relativistinen kvanttimekaniikka selittää vain sähkömagneetista vuorovaikutusta eikä huomioi heikkoa tai vahvaa vuorovaikutusta. Relativistinen kvanttimekaniikka ei myöskään selitä Lamb-siirtymää, joka tarkoittaa pientä energiaeroa vetyatomin energiatilojen $2s_{1/2}$ ja $2p_{1/2}$ välillä. [4]

Näiden ongelmien vuoksi kehitettiin kvanttikenttäteoriat ja suoritettiin niin kutsuttu toinen kvantisaatio. Kvanttikenttäteoriat ratkaisivat myös negatiivisten energioiden tulkintaongelman.Tarkastellaan kenttien välittämiä vuorovaikutuksia. Vuorovaikutukset ovat tällöin energian ja liikemäärän siirtoja hiukkaselta kentälle, joka siirtää nämä suureet hiukkaselta toiselle. Kuitekin kvanttimekaniikassa paikka tai liikemäärä eivät ole hyvin määritellyt muuttujat, vaan ne noudattavat todennäköisyysjakaumia. Tämä voidaan korjata ajattelemalla kenttä kvanttioperaattorina. Sen vuoksi kvanttikenttäteoria lyhyesti perustuu kenttäoperaattoreiden ratkaisuun. [4, 10]

6 Yhteenveto

Relativistiset aaltoyhtälöt ovat olleet keskeinen osa kvanttimekaniikan kehitystä kvanttikenttäteorioiksi. Mikäli haluaa ymmärtää historiaa sekä nykyisten teorioiden taustojen, on tunnettava ongelmat, jotka motivoivat uusien teorioiden kehitystä. Lisäksi on tärkeää tietää, mitkä teorioiden ennustukset on kyetty osoittamaan kokeellisesti.

Tässä tutkielmassa perehdyttiin Diracin ja Kleinin-Gordonin yhtälön ratkaisuihin. Erityisesti Kleinin-Gordonin yhtälön mutta myös Diracin yhtälön tulkinnan yhteydessä on huomattava, että vaikka matemaattinen teoria voi alkuun vaikuttaa epäfysikaaliselta, voi se paljastaa merkittäviä asioita maailmankaikkeuden rakenteesta.

Tutkielman tarkoituksena on tarjota kandidaattitason opiskelijoille tiivistetty kokonaisuus relativististen yhtälöiden ymmärryksen tueksi. Tutkielma toivottavasti tarjoaa riittävät tiedot siirtymään epärelativistisesta kvanttimekaniikasta kvanttikenttäteorioiden opiskeluun.

Viitteet

[1] N. Bohr, I. On the constitution of atoms and molecules, The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science 26, 1 (1913).

[2] E. Schrödinger, An Undulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules, Phys. Rev. 28, 1049 (1926).

[3] A. Einstein, Zur Elektrodynamik bewegter Körper, Annalen Der Physik 322, 891 (1905).

[4] R. D. Klauber, Student Friendly Quantum Field Theory. Basic Principles and Quantum Electrodynamics / Robert Klauber, in 1. ed (Sandtrove Press, Fairfield, Iowa, 2013).

[5] O. Klein, Quantentheorie und fünfdimensionale Relativitätstheorie, Z. Physik 37, 895 (1926).

[6] W. Gordon, Der Comptoneffekt nach der Schrödingerschen Theorie, Z. Physik 40, 117 (1926).

[7] A. Wachter, Relativistic Quantum Mechanics (Springer, Dordrecht, Netherlands; New York, 2011).

[8] The quantum theory of the electron, Proc. R. Soc. Lond. A 117, 610 (1928).

[9] The quantum theory of the emission and absorption of radiation, Proc. R. Soc. Lond. A 114, 243 (1927).

[10] F. Strocchi, Relativistic Quantum Mechanics and Field Theory, Foundations of Physics 34, 501 (2004).

[11] P. J. Bussey, Improving Our Understanding of the Klein-Gordon Equation, arXiv:2212.06878.

[12] C. Amsler, Key Historical Experiments in Hadron Physics, arXiv:2503.14689.

[13] H. Weyl, Gravitation and the Electron, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 15, 323 (1929).

[14] J. L. Diaz-Cruz, B. L. Lopez, O. Meza-Aldama, and J. R. Perez, Weyl Spinors and the Helicity Formalism, arXiv:1511.07477.

[15] L. Maiani and O. Benhar, Relativistic Quantum Mechanics, Second edition (CRC Press, Boca Raton, FL, 2024).

[16] C. D. Anderson, The Positive Electron, Phys. Rev. 43, 491 (1933).

[17] N. Schmitz, The Discovery of Neutrino Masses, in Correlations and Fluctuations in QCD (World Scientific, Crete, Greece, 2003), pp. 5–20.

[18] H. Pilkuhn, editor , Relativistic Quantum Mechanics, Second Edition (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2005).