

Mecanica Cuantică

M. Penția

IFIN-HH, Departament Fizică Nucleară,
P.O.Box MG-6, 077125, București-Măgurele, ROMANIA.
e-mail: pentia@nipne.ro

November 5, 2020

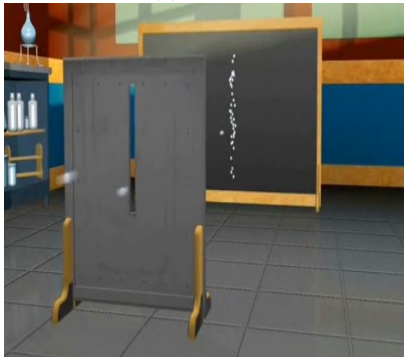
Partea IV

Mecanica Cuantică Nerelativistă

Comportamentul cuantic - experimentul cu două fante

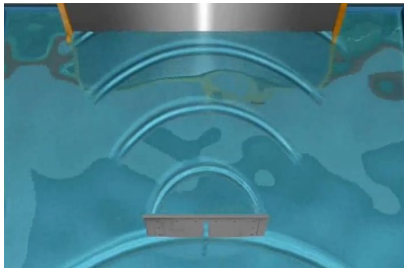
Experimentul cu biluțe (particule mecanice)

<https://www.youtube.com/watch?v=HiAj7S6ko9Q>

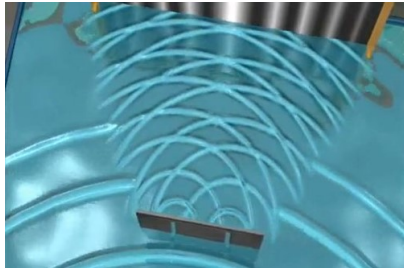


Rezultatul unui asemenea experiment, așa cum ne-am aștepta, este o imagine separată a fiecărei fante, proiectată pe ecran, sub forma unor benzi.

Experimentul cu unde

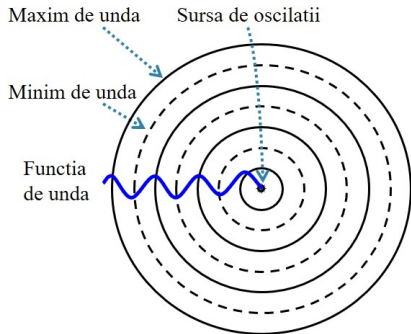


În cazul utilizării unei fante, pe ecran se obține o imagine cu un maxim de intensitate, în aceeași poziție ca în cazul anterior al experimentului cu biluțe.

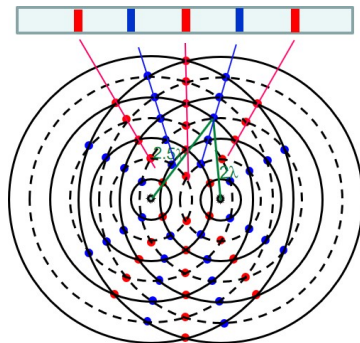


În cazul a două fante, pe ecran vor apărea franje de interferență, cu un maxim principal central și mai multe maxime secundare laterale, cu intensități ce scad spre marginea ecranului.

Producerea, propagarea și interferența undelor

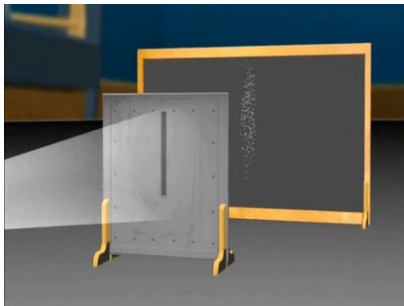


Producerea și propagarea undelor

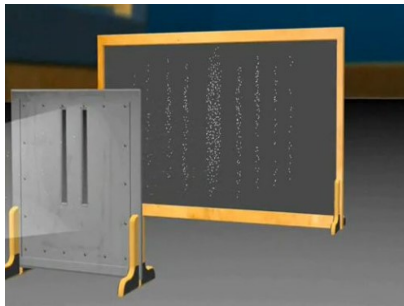


Interferența undelor și detectarea imaginii de interferență.

Experimentul cu fasciculul de electroni (particule cuantice)

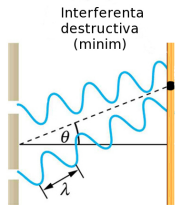
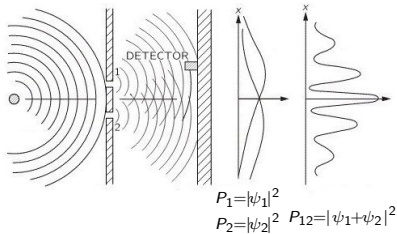
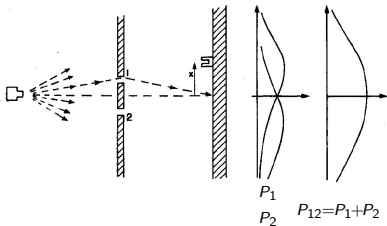
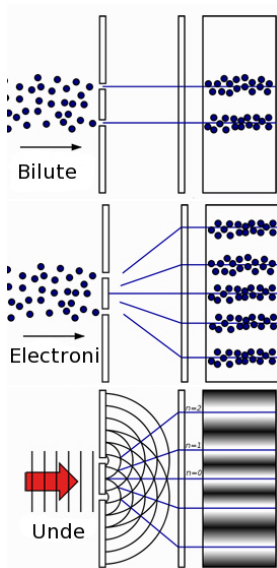


În cazul unei singure fante, pe ecran se obține o imagine cu un maxim de intensitate, în aceeași poziție ca în cazul anterior al experimentului cu biluțe. Deci, electronii se comportă ca particule.



În cazul a două fante, pe ecran apar franje de interferență, cu un maxim principal central și maxime secundare laterale. Deci, electronii se comportă ca unde, ca în cazul experimentului de interferență cu unde.

Ce sunt atunci electronii ? Particule sau unde ?



Observarea electronilor pe ecran (dinamica de particulă)

- ▶ Starea de mișcare a particulelor subatomice este exprimată printr-o funcție de undă $\psi(\vec{r}, t)$, ca funcție complexă (vezi în continuare) luată într-un punct $\vec{r}(x, y, z)$ la momentul t al observării, și descrie distribuția observării incidenței particulelor în acel punct și la acel moment. Pentru o undă plană avem ecuația:

$$\psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} = A \left[\cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) + i \sin(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \right] \quad (1)$$

unde $k = 2\pi/\lambda$ și $\omega = 2\pi\nu$

- ▶ Probabilitatea incidenței particulei în elementul $d^3\vec{r}$ este dată de pătratul amplitudinii de undă

$$P(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} \quad (2)$$

unde $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ este densitatea de probabilitate:

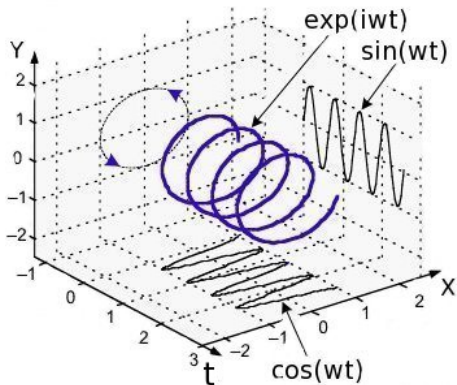
$$\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 \equiv |\langle \psi(\vec{r}, t) | \psi(\vec{r}, t) \rangle|^2 = \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) \quad (3)$$

Descrierea undelor prin funcții complexe

Fie unda plană de forma (1): $\psi = A e^{i(kz - \omega t)}$

Am ales direcția Oz de propagare a undei

pentru $z = \text{const.}$ avem	$x = \text{Re } \psi_a = \cos \omega t$
$\psi_a = a e^{-i\omega t} = a(\cos \omega t - i \sin \omega t)$	$y = \text{Im } \psi_a = -\sin \omega t$
pentru $t = \text{const.}$ avem	$x = \text{Re } \psi_b = \cos kz$
$\psi_b = b e^{ikz} = b(\cos kz + i \sin kz)$	$y = \text{Im } \psi_b = \sin kz$



Interferența undelor în experimentul cu două fante

- ▶ Cele două unde coerente (cu aceeași frecvență), din experimentul cu două fante, ajung să interfere. Funcție de diferența de fază φ a celor două oscilații în momentul întâlnirii pe ecranul detector, produc maxime sau minime de interferență.

Fie una din unde ψ_1 , iar cealaltă $\psi_2 = e^{i\varphi}\psi_1$. Am specificat prin φ diferența de fază între cele două unde.

Să vedem ce semnificație și ce rol are această diferență de fază.

- ▶ Luăm unda ψ_1 de forma (1)

$$\psi_1 = A e^{i(kz - \omega t)}$$

cu direcția de propagare z

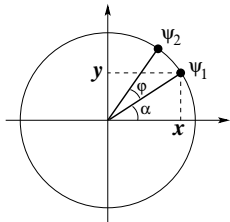
Notăm faza $\alpha = kz - \omega t$

atunci

$$\psi_1 = A e^{i\alpha} = A(\cos \alpha + i \sin \alpha)$$

$$\psi_2 = e^{i\varphi}\psi_1 = A e^{i(\alpha + \varphi)}$$

ψ_2 este ψ_1 rotit cu unghiul φ .



Funcțiile de undă ψ_1 și ψ_2 sunt reprezentate pe cercul trigonometric din Figura.

- In Figura 1 avem câteva exemple de unde cu diferențe de fază $\varphi = \pi/4, \pi/2$ și π care se compun în procesul de interferență ducând la maxime și minime de interferență.

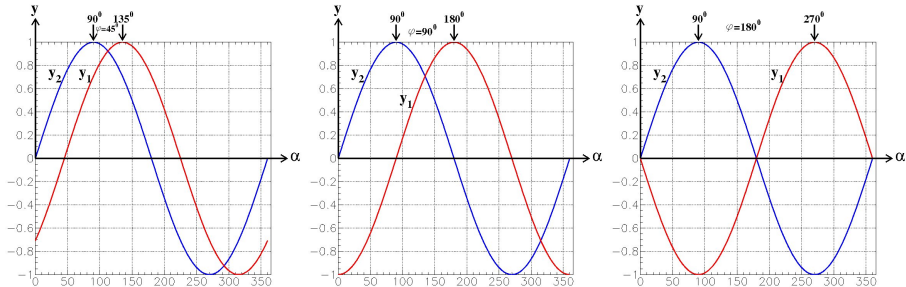
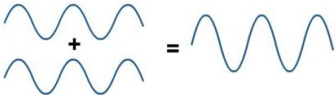


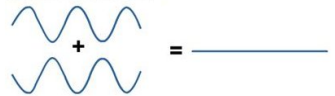
Figura: Componentele $y_1 = A \sin \alpha$ și $y_2 = A \sin(\alpha + \varphi)$ ale undelor $\psi_1 = A e^{i\alpha}$ și $\psi_2 = A e^{i(\alpha + \varphi)}$ pentru diferențele de fază $\varphi = 45^\circ, 90^\circ, 180^\circ$.

- ▶ Densitatea probabilității de particule (fotoni) corespunzătoare acestor unde este dată de amplitudinea rezultantă $|\psi_1 + \psi_2|$ în fiecare punct de interferență. } $\rho = |\psi|^2 = |\psi_1 + \psi_2|^2$
cu $\psi_2 = e^{i\varphi} \psi_1$

- ▶ Undele ψ_1 și $\psi_2 = e^{i\varphi} \psi_1$ și complex conjugata $\psi_2^* = e^{-i\varphi} \psi_1^*$

- ▶ Densitatea de probabilitate } $\rho = |\psi_1 + \psi_2|^2 = \psi_1^2 + \psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1 + \psi_2^2$
 $= |\psi_1|^2 + e^{i\varphi} \psi_1^* \psi_1 + e^{-i\varphi} \psi_1^* \psi_1 + |\psi_1|^2$
 $= 2 |\psi_1|^2 + |\psi_1|^2 \underbrace{(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})}_{2 \cos \varphi} = 2 |\psi_1|^2 (1 + \cos \varphi)$

- ▶ Pt. $\varphi = 0$ } $\rho = 2 |\psi_1|^2 (1+1) = 4 |\psi_1|^2$ | 
 $\psi_1 = \psi_2$ } \Rightarrow maxim de interferență

- ▶ Pt. $\varphi = 180^\circ$ } $\rho = 2 |\psi_1|^2 (1-1) = 0$ | 
 $\psi_1 = -\psi_2$ } \Rightarrow minim de interferență

Cuantificare mărimi fizice: Ecuații cu valori proprii (reale)

- ▶ Folosind relațiile între caracteristicile de undă λ, ν și cele de particulă p, E :

de Broglie: $p = \frac{h}{\lambda} = \hbar \frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k$ și Planck: $E = h\nu = h \frac{\omega}{2\pi} = \hbar\omega$

▶ Unda plană (1) $\psi(x,t) = N e^{-i(\omega t - kx)}$ devine $\psi(x,t) = N e^{-i(Et - px)/\hbar}$ (5)

- ▶ Căutăm ec. diferențială ce are ca soluție funcția de undă (61). Pentru aceasta

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \psi; \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\frac{E^2}{\hbar^2} \psi; \quad \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} p \psi; \quad \nabla^2 \psi \equiv \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{1}{\hbar^2} p^2 \psi = -\frac{2m}{\hbar^2} T \psi \quad (6)$$

- ▶ Rel. (6) fac corespondența: var. dinamice \rightarrow operatori \rightarrow ecuații cu valori proprii

- ▶ Cuantificarea implică transformarea variabilelor dinamice clasice în operatori cuantici necomutativi, conf. (6)

$$E \rightarrow \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad E^2 \rightarrow \hat{E}^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \quad x \rightarrow \hat{x} = x \quad (7)$$

$$p \rightarrow \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad T \rightarrow \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

▶ $[\hat{x}, \hat{p}] \psi = (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}) \psi = \left(-i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} + i\hbar \frac{\partial}{\partial x} x\right) \psi = -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar \psi + i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} = i\hbar \psi$ (8)

- ▶ Cuantificare \rightarrow atribuirea de *valori proprii* discrete pt. fiecare *soluție proprie*

▶ Ecuația cu valori proprii (co-lapsare f.p): pt. energie (61) $\hat{E} \psi_E = E \psi_E$ sau $i\hbar \frac{\partial \psi_E}{\partial t} = E \psi_E$ (9)

▶ Soluția ψ_E pt. *valoarea proprie* $E = E_0$, este: $\psi_E(t) = e^{-iE_0 t/\hbar}$ (10)

▶ Intr-adevăr, dacă înlocuim (10) în (9) avem $\hat{E} \psi_E \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-iE_0 t/\hbar} = i\hbar \left(-\frac{i}{\hbar}\right) E_0 \psi_E = \underbrace{E_0}_{\text{val. pr.}} \underbrace{\psi_E}_{\text{f.pr.}} = E \psi_E$

Deci, particula în starea ψ_E (10) are o energie cuantificată cu *val. proprie* $E = E_0$.

Cuantificare impuls și energie

► Cuantificare → atribuirea de *valori proprii* discrete pt. fiecare *soluție proprie*

► Ecuația cu valori proprii pt. impuls | $\hat{p}\psi_p = p\psi_p$ sau $-i\hbar \frac{\partial \psi_p}{\partial x} = p\psi_p$ (63) (corespondența f.p.-v.p.): (11)

► Soluția ψ_p pt. *valoarea proprie* $p = p_0$, este $\psi_p(x) = e^{i p_0 x / \hbar}$ (12)

► Intr-adevăr, dacă înlocuim (12) în (11) avem $\hat{p}\psi_p \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} e^{i p_0 x / \hbar} = -i\hbar \frac{i}{\hbar} p_0 \psi_p = \underbrace{p_0}_{\text{val.pr}} \underbrace{\psi_p}_{\text{f.pr}} = p\psi_p$

► Cuantificarea energiei (stări staționare): Cuantificarea impulsului: $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

conduce la cuantificarea energiei $\hat{H} \equiv \hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$, adică avem o nouă

► Ec. cu val. proprii pt. energie → Ec. Schrödinger independentă de timp (staționară):

$$\hat{H}\psi_E = E_n\psi_E - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_E}{\partial x^2} = E_n\psi_E \quad \text{sau} \quad \frac{\partial^2 \psi_E}{\partial x^2} + k_n^2 \psi_E = 0 \quad \text{unde} \quad k_n^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E_n \quad (13)$$

► Soluțiile staționare sunt de forma: $\psi_E(x) = \mathcal{A}e^{ikx} + \mathcal{B}e^{-ikx} = C \cos kx + D \sin kx$ (14)

► Exemplu - particula în cutie (vezi mai departe):

$$\left. \begin{array}{l} \text{condițiile} \\ \text{la margine} \\ \text{pt. cutie} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \psi_E(0) = 0 \Rightarrow C = 0 \\ \psi_E(L) = 0 \Rightarrow kL = n\pi \end{array} \left. \vphantom{\begin{array}{l} \text{condițiile} \\ \text{la margine} \\ \text{pt. cutie} \end{array}} \right\} E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2 = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} = n^2 E_1$$

Aplicație - Particula în cutie

- ▶ Căutăm energiile (cuantificate) ale unei particule într-o cutie de lungime L .
- ▶ Trecând la funcții trigonometrice, cu ajutorul relației $e^{i\alpha} = \cos \alpha + i \sin \alpha$

soluția (14) se poate scrie
$$\begin{cases} \psi(x) = C \cos kx + D \sin kx \\ C = A + B ; D = i(A - B) \end{cases}$$

- ▶ Folosind condițiile la margine
$$\left. \begin{cases} \psi(0) = 0 \Rightarrow C = 0 \\ \psi(L) = 0 \Rightarrow kL = n\pi \end{cases} \right\} \Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{L} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

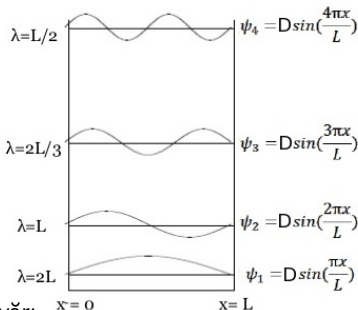
- ▶ iar, *funcțiile proprii* vor fi: $\psi_n(x) = D \sin(k_n x)$

- ▶ iar, *valorile proprii de energie* E_n pt. $V = 0$,

se exprimă din relația $E_n = \frac{p_n^2}{2m}$ cu $p_n = \hbar k_n$

adică
$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$$

$$\Rightarrow E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} = n^2 E_1$$



- ▶ $\psi_n(x)$ sunt funcții proprii ortonormate. Intr-adevăr:

$$\begin{aligned} \psi_n \cdot \psi_m &= \int_0^L \left[\sin(k_n x) \cdot \sin(k_m x) \right] dx = \frac{1}{2} \int_0^L \left[\cos(k_n - k_m)x - \cos(k_n + k_m)x \right] dx \\ &= \frac{1}{2} \left[\sin(k_n - k_m)x - \sin(k_n + k_m)x \right]_0^L = \frac{1}{2} \left[\sin\left(\frac{(n-m)\pi}{L} L\right) - \sin\left(\frac{(n+m)\pi}{L} L\right) \right] = 0 \end{aligned} \quad (15)$$

Cuantificare moment unghiular. Aplicație: atomul Bohr

- ▶ Cuantificarea momentului unghiular: Cuantificarea impulsului: $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ conduce la cuantificarea momentului unghiular $\hat{L} = r\hat{p} = r \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)$. Atunci,

- ▶ Ecuția cu valori proprii pt. moment unghiular este: $\hat{L} \psi_L = l \psi_L$ sau $-i\hbar r \frac{\partial \psi_L}{\partial x} = l \psi_L$ (16)

- ▶ Soluția ψ_L pentru valoarea proprie $l = l_0$ este: $\psi_L(x) = e^{ip_0 x / \hbar}$ (17)

- ▶ Intr-adevăr înlocuind (17) în (16) avem $\hat{L} \psi_L \equiv -i\hbar r \frac{\partial}{\partial x} e^{ip_0 x / \hbar} = -i\hbar r \frac{i}{\hbar} p_0 \psi_L = \underbrace{rp_0}_{\substack{\text{val.pr} \\ \text{f.pr}}} \psi_L = l \psi_L$

Deci, particula în starea ψ_L (17) are mom. ung. cuantificat cu val. prop. $l = rp_0$

- ▶ Exemplu - Cuantificarea momentului unghiular în cazul atomului Bohr.



fiecare orbită circulară poate cuprinde un număr întreg de lungimi de undă ($2\pi r = n\lambda_n$)

- ▶ Atunci, valorile proprii permise (cuantificate) de moment unghiular vor fi:

$$l = rp_n = r \frac{h}{\lambda_n} = r \frac{h}{\left(\frac{2\pi r}{n} \right)} = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar \quad \text{unde am folosit (4)} \quad p_n = \frac{h}{\lambda_n} \text{ (de Broglie)}$$

Ecuția Schrödinger independentă de timp - soluții

- ▶ Dacă pornim de la expresia nerelativistă a Hamiltonianului, adică relația între p și E , și facem înlocuirile cu operatori corespunzători (62), avem

$$\boxed{\frac{p^2}{2m} + V(x) = E} \longrightarrow \hat{p}^2 \psi + V(x)\psi = \hat{E}\psi \quad \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + V(x)\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}} \quad (18)$$

obținem *Ec. Schrödinger dep. de timp pt. particula liberă*, cu soluția unda plană (61).

- ▶ *Ec. Schrödinger* (18) are o infinitate de soluții particulare. Interes fizic prezintă doar cele ce satisfac condițiile la margine. Aceste soluții formează un set complet de *funcții proprii* și *valori proprii* reale.
- ▶ Să studiem întâi stările staționare de energie $E = \text{const}$, cu Hamiltonian-ul

$$\boxed{H \equiv \frac{p^2}{2m} + V = E} \longrightarrow \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V \right) \psi = E\psi \longrightarrow \boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + V\psi = E\psi} \quad (19)$$

Ecuția (19) reprezintă *Ec. Schrödinger independentă de timp (staționară)*

- ▶ Scriem ecuația (19) sub forma $\left. \begin{array}{l} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + k^2 \psi = 0 \quad \text{unde} \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \end{array} \right\} \quad (20)$
- ▶ Sol. generală a ecuației (20) | $\psi = Ae^{rx}$; $\frac{d\psi}{dx} = r\psi$; $\frac{d^2\psi}{dx^2} = r^2\psi$
se află cu *ec. caracteristică* | $r^2 + k^2 = 0$ cu soluțiile $r_{1,2} = \pm ik$ (21)

- ▶ Atunci, ecuația diferențială (20) are soluția $\boxed{\psi(x) = \mathcal{A} e^{ikx} + \mathcal{B} e^{-ikx}} \quad (22)$

Ecuția Schrödinger dependentă de timp - soluții

- ▶ Treceam să rezolvăm ecuația Schrödinger

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}} \quad (18)$$

Căutăm soluția sub formă factorizată: $\psi(x, t) = \psi(x) T(t)$ (23)

- ▶ Inlocuind în ec. Schrödinger (18) $\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)\right) T(t) = i\hbar \psi(x) \frac{dT(t)}{dt}$ (24)

- ▶ Separând dependența de x în stânga, iar cea de t în dreapta, avem
$$\frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)}{\psi(x)} = \frac{i\hbar \frac{dT(t)}{dt}}{T(t)} = ct = E$$

- ▶ Pentru variabila x , regăsim *ecuația Schrödinger independentă de timp* (19):

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = (E - V)\psi(x)}$$

cu sol. generală (22) $\left\{ \begin{array}{l} \psi(x) = \sum_k (\mathcal{A}_k e^{ikx} + \mathcal{B}_k e^{-ikx}) \\ \text{unde } k^2 = 2m(E - V)/\hbar^2 \end{array} \right.$ (25)

- ▶ Pentru variabila t , ecuația diferențială ce dă dependența de timp este,

$$\boxed{i\hbar \frac{dT(t)}{dt} = E T(t)} \quad (26) \quad \text{cu soluția } \left\{ \begin{array}{l} T(t) = e^{-iEt/\hbar} = e^{-i\omega t} \\ \text{unde } \omega = E/\hbar \end{array} \right. \quad (27)$$

- ▶ Sol. generală (23) a ec. Schrödinger este
$$\psi(x, t) = \sum_k \left(\mathcal{A}_k e^{-i(\omega t - kx)} + \underbrace{\mathcal{B}_k e^{-i(\omega t + kx)}}_{\text{omisă ca sol. Sch.}} \right) \quad (28)$$

Densitatea și curentul de probabilitate

▶ Ec. Schrödinger pt. particula liberă
înmulțită la stânga cu $-i\psi^*$

$$-i\psi^* \times \left| i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = 0 \right.$$

▶ Ec. Schrödinger complex conjugată
înmulțită la dreapta cu $i\psi$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} = 0 \left| \times i\psi \right.$$

▶ Adunarea
rezultatelor

$$\underbrace{\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right)}_{\frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi) = \frac{\partial \rho}{\partial t}} - \underbrace{\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \psi \right)}_{\frac{\partial j}{\partial x}} = 0$$

▶ Densitatea și
curentul de probabilitate

$$\begin{cases} \rho = \psi^* \psi = |\psi|^2 \\ j = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right) \end{cases}$$

▶ Ecuația de continuitate

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0$$

Măsurarea în mecanica cuantică

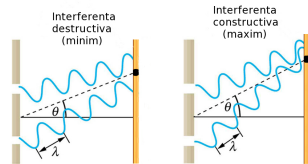
- ▶ Conform interpretării școlii de la Copenhaga a mecanicii cuantice, sistemele fizice nu au proprietăți bine definite înainte de măsurare, iar mecanica cuantică nu poate prezice decât probabilitățile de a obține o valoare sau alta. Prin măsurare, sistemul este afectat, reducând setul de valori probabile la una singură, cea măsurată.

Dacă funcția de undă (de probabilitate) evoluează determinist (conform ecuației Schrödinger), prin măsurare este separată una din stările posibile (ex. poziția de incidență a electronului pe ecran în experimentul cu doua fante): $\hat{X}|x_i\rangle = a_i|x_i\rangle$

Cu alte cuvinte, măsurarea a intervenit și a modificat evoluția deterministă a sistemului descris Schrödinger. Se spune că măsurarea unei mărimi fizice conduce la proiectarea (colapsarea) funcției de undă ψ pe spațiul Hilbert definit de setul complet de *funcții proprii* comune mărimii fizice măsurate. În acest fel, valoarea măsurată este una din *valorile proprii*. La repetarea măsurării, se poate obține o altă *valoare proprie*, cu probabilitatea dată de *funcția proprie* corespunzătoare.

De exemplu:

- ▶ Dacă se măsoară poziția particulei, *stările proprii* posibile sunt $|x_i\rangle$, cu *valorile proprii* a_i : $|\psi\rangle = \sum a_i|x_i\rangle$, iar probabilitatea de a obține poziția x_i este $|a_i|^2$.
- ▶ Dacă se măsoară o altă mărime fizică λ , setul de *stări proprii* posibile este $|\lambda_i\rangle$, iar $|\psi\rangle = \sum b_i|\lambda_i\rangle$, de unde probabilitatea de a obține starea $|\lambda_i\rangle$ este $|b_i|^2$.



Măsurarea în mecanica cuantică

► Funcția proprie ψ_p de impuls \hat{p} nu mai este și funcție proprie de coordonată \hat{x} , nu mai are o valoare proprie x_0 determinată

$$\begin{aligned}\hat{x}\psi_p &= x\psi_p \\ &= x \exp\left[\frac{i}{\hbar}p_0 x\right] \neq x_0\psi_p\end{aligned}\quad (29)$$

► Mărimile (p, x) și (E, t) , sunt observabile complementare, satisfac relația de nedeterminare Heisenberg:

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2 \quad (30)$$

Aceasta înseamnă că cele două mărimi nu pot fi determinate simultan cu precizie. Cu cât determinăm mai precis poziția particulei, cu atât impulsul ei este mai puțin precis, și invers. La fel cu energia și intervalul de timp.

Valori așteptate și relații de comutare

- ▶ Am văzut că în cazul poziției (29) și impulsului (11) unei particule, aceste mărimi nu au simultan valori proprii determinate, în una și aceeași stare ψ .
- ▶ Si celelalte mărimi fizice (operatorii) nu au întotdeauna o valoare determinată. Dacă un operator \hat{A} depinde de x , p și t , valoarea medie (așteptată) este:

$$\langle A \rangle = \int \hat{A}(x, p, t) |\psi(x, t)|^2 dx = \int \psi^*(x, t) \hat{A}(x, p, t) \psi(x, t) dx \equiv \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (31)$$

- ▶ Viteza de schimbare a valorii așteptate (31) a unui operator \hat{A} e dată de:

$$\frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = \frac{d}{dt} \int (\psi^* \hat{A} \psi) dx = \int \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{A} \psi + \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi + \psi^* \hat{A} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) dx = \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* (\hat{A} \hat{H} - \hat{H} \hat{A}) \psi dx$$

unde am folosit ecuația Schrödinger (18) $i\hbar \partial \psi / \partial t = \hat{H} \psi$ și cea complex conjugată $-i\hbar \partial \psi^* / \partial t = \psi^* \hat{H}^\dagger$ precum și proprietatea $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$ (\hat{H} este hermitic).

- ▶ Relația de comutare a doi operatori \hat{A} și \hat{B} se definește prin:
$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (32)$$

Se spune că doi operatori comută dacă relația lor de comutare $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

- ▶ Folosind (32), viteza de variație a valorii așteptate de mai sus, este:
$$\frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle \quad (33)$$

- ▶ Dacă operatorul \hat{A} nu depinde explicit de timp ($\partial \hat{A} / \partial t = 0$), avem:
$$i\hbar \frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle \quad (34)$$

- ▶ În plus, dacă \hat{A} comută cu \hat{H} , \hat{A} e o constantă de mișcare ($d\langle \hat{A} \rangle / dt = 0$).

Descrierea Schrödinger (skip this slide)

- ▶ In descrierea Schrödinger evoluția stării $\psi(t)$ a sistemului cuantic este dată de ecuația Schrödinger (18)

$$i\hbar \frac{\partial \psi_S}{\partial t} = \hat{H} \psi_S \quad (35) \quad \text{cu soluția} \quad \psi_S(t) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right] \psi_S(0) \quad (36)$$

- ▶ Căutăm să exprimăm soluția $\psi_S(t)$ (36) cu un operator de evoluție $\hat{U}(t)$ acționând asupra funcției de stare $\psi_S(0)$ de la momentul inițial $t = 0$.

$$\psi_S(t) = \hat{U}(t) \psi_S(0) \quad (37)$$

- ▶ Operatorul $\hat{U}(t)$ satisface condiția de unitaritate, pt. conservarea normării, $\left| \begin{array}{l} 1 = \langle \psi_S(t) | \psi_S(t) \rangle = \langle \psi_S(0) | \hat{U}^*(t) \hat{U}(t) | \psi_S(0) \rangle \\ \text{adică } \hat{U}^*(t) \hat{U}(t) = I \text{ sau } \hat{U}^*(t) = \hat{U}^{-1}(t) \end{array} \right.$

- ▶ dar $\psi_S(t)$ (37) satisface ec. Schrödinger (35) $\left| \begin{array}{l} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t) \psi_S(0) = \hat{H} \hat{U}(t) \psi_S(0) \end{array} \right. \quad (38)$

$$\begin{array}{l} \text{de unde ec.} \\ \text{pentru } \hat{U}(t) \end{array} \left| \begin{array}{l} i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t)}{\partial t} = \hat{H} \hat{U}(t) \quad (39) \\ \implies \hat{U}(t) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right] \quad (40) \end{array} \right.$$

- ▶ Deci, comportarea funcțiilor de stare este (36) $\left| \begin{array}{l} \text{Comportarea operatorilor} \end{array} \right.$

$$\psi_S(t) = \hat{U}(t) \psi_S(0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right] \psi_S(0) \quad (41)$$

$$\hat{A}_S(t) = \hat{A}_S(0) = \text{const.}$$

Descrierea Schrödinger

- ▶ În descrierea Schrödinger evoluția stării $\psi(t)$ a sistemului cuantic este dată de ecuația Schrödinger (18)

$$i\hbar \frac{\partial \psi_S}{\partial t} = \hat{H} \psi_S \quad (42) \quad \text{cu soluția} \quad \psi_S(t) = \underbrace{\exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right]}_{\hat{U}(t)} \psi_S(0) \quad (43)$$

- ▶ Operatorul $\hat{U}(t)$ satisface condiția de unitaritate, pt. conservarea normării, $\left| \begin{array}{l} 1 = \langle \psi_S(t) | \psi_S(t) \rangle = \langle \psi_S(0) | \hat{U}^*(t) \hat{U}(t) | \psi_S(0) \rangle \\ \text{adică } \hat{U}^*(t) \hat{U}(t) = I \text{ sau } \hat{U}^*(t) = \hat{U}^{-1}(t) \end{array} \right.$

- ▶ Comportarea funcțiilor de stare este (36)

$$\psi_S(t) = \hat{U}(t) \psi_S(0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right] \psi_S(0) \quad (44)$$

- ▶ Comportarea operatorilor

$$\hat{A}_S(t) = \hat{A}_S(0) = \text{const.}$$

Descrierea Heisenberg

- ▶ În descrierea Schrödinger, funcțiile de stare $\psi_S(t)$ variază în timp, iar operatorii (observabilele) sunt constante $\hat{A}_S(t) = \text{const.}$
- ▶ În descrierea Heisenberg, cu o transformare corespunzătoare, dependența de timp se transferă observabilelor, așa cum este în mecanică clasică.
- ▶ La $t=0$ funcțiile de stare și operatorii coincid în cele două descrieri

$$\begin{cases} \psi_H(0) = \psi_H(t) = \psi_S(0) = \text{const.} \\ \hat{A}_H(0) = \hat{A}_S(0) = \hat{A}_S(t) = \text{const.} \end{cases} \quad (45)$$

- ▶ Deci, comportarea funcțiilor de stare $\psi_H(t) = \psi_H(0) \equiv \psi_S(0) = \text{const.}$ (46)

- ▶ Relațiile (36) și (45), fac legătura între $\psi_H(t)$ și $\psi_S(t)$ prin transf. unitară $\hat{U}(t)$

$$\psi_S(t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right]\psi_S(0) = \hat{U}(t)\psi_H(t) \quad (47)$$

- ▶ de unde prin transf. unitară $\hat{U}(t)$

$$\psi_H(t) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right]\psi_S(t) = \text{const.} \quad (48)$$

- ▶ Ecuția Heisenberg, de evoluție a operatorului \hat{A}_H , este dată de relația (34) (pt. variația în timp a valorii medii $\langle \hat{A} \rangle$) și unde înlocuim $\hat{A}_H = \langle \hat{A} \rangle$:

$$i\hbar \frac{d\hat{A}_H}{dt} = [\hat{A}_H, \hat{H}] \quad (49)$$

- ▶ Căutăm operatorii $\hat{A}_H(t)$ astfel ca valorile medii (elementele de matrice) (31) în descrierea Heisenberg și Schrödinger să fie egale, folosind (45) și (47):

$$\langle \psi_H(t) | \hat{A}_H(t) | \psi_H(t) \rangle = \langle \psi_S(t) | \hat{A}_S(t) | \psi_S(t) \rangle = \langle \psi_H(t) | \hat{U}^*(t) \hat{A}_H(0) \hat{U}(t) | \psi_H(t) \rangle$$

de unde

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}^*(t) \hat{A}_H(0) \hat{U}(t) \quad (50)$$

Descrierea Heisenberg (continuare)

- ▶ Cu operatorul $\hat{U}(t)$ din (47) observabila $\hat{A}_H(t)$ (50) din *descrierea Heisenberg* este,

$$\hat{A}_H(t) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right]\hat{A}_H(0)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right] \quad (51)$$

- ▶ Valoarea medie în ambele descrieri $\langle\psi_H(t)|\hat{A}_H(t)|\psi_H(t)\rangle = \langle\psi_S(t)|\hat{A}_S(t)|\psi_S(t)\rangle$ o scriem cu ajutorul *funcțiilor de stare* $\psi_S(0)$ și *operatorilor* $\hat{A}_H(0)$ din (45), avem

$$\langle\psi_S(0)|\hat{A}_H(t)|\psi_S(0)\rangle = \langle\psi_S(t)|\hat{A}_H(0)|\psi_S(t)\rangle \quad (52)$$

Această valoare medie definește rezultatul măsurării mărimii A la momentul t .

- ▶ Dependența de timp se transferă de la *funcția de stare* $\psi_S(t)$ la operator $\hat{A}_H(t)$.
- ▶ Avantajul descrierii Heisenberg, este legat de faptul că întreaga fizică este conținută în operatori, a căror ecuații de mișcare (49) sunt asemănătoare ecuațiilor mecanicii clasice sub forma *ecuațiilor Hamilton*:

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad ; \quad -\dot{p} = \frac{\partial H}{\partial q} \quad (53)$$

- ▶ De exemplu, *operatorul impuls* uni-particulă din *descrierea Schrödinger*,

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q} \quad (54)$$

în *descrierea Heisenberg*, satisface ecuația de mișcare (49)

$$\frac{\partial \hat{p}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{p}(t), \hat{H}] = -\left(\frac{\partial}{\partial q}\hat{H} - \hat{H}\frac{\partial}{\partial q}\right) = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial q} \quad (55)$$

ecuație care coincide cu ecuație Hamilton (53) pentru \hat{p} .

Reprezentări în spațiul de coordonate și cel de impulsuri

- Suma stărilor $\varphi(p)e^{ipx/\hbar}$ de impuls dat, dă starea $\psi(x)$ din sp. de coord. *Transformata Fourier*: suma stărilor $\psi(x)e^{-ipx/\hbar}$ de coord. dată, dă starea $\varphi(p)$ din sp. de impulsuri.
- $$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \varphi(p) e^{ipx/\hbar} dp \quad (56)$$
- $$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx$$

- Deci, reprezentările în spațiul de coordonate și cel de impulsuri sunt legate prin conjugare complexă. Adică, dacă facem simultan schimbările: $\psi(x) \leftrightarrow \varphi(p)$; $x \leftrightarrow p$; $i \leftrightarrow -i$, obținem reprezentarea în spațiul conjugat.

- Op. impuls $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ (57) din sp. de coord. și op. coord. $\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$ (58) din sp. de impulsuri, sunt legați prin conjugare complexă și $x \leftrightarrow p$. Verificare:

- Operatorul impuls \hat{p} ce acționează asupra unei stări proprii $\psi_{p_0}(x)$ în spațiul de coordonate, are ecuația cu valori proprii: $\hat{p}\psi_{p_0}(x) = p_0\psi_{p_0}(x)$ unde $\psi_{p_0}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip_0x/\hbar}$ (vezi (12)). Intr-adevăr, cu $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, avem imediat,
- $$\hat{p}\psi_{p_0} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip_0x/\hbar} \right) = -i\hbar \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(i \frac{p_0}{\hbar} \right) e^{ip_0x/\hbar} = p_0 \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip_0x/\hbar} \equiv p_0 \psi_{p_0}$$

- Operatorul coordonată \hat{x} ce acționează asupra unei stări proprii $\varphi_{x_0}(p)$ în spațiul de impulsuri, are ecuația cu valori proprii: $\hat{x}\varphi_{x_0}(p) = x_0\varphi_{x_0}(p)$ unde $\varphi_{x_0}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx_0/\hbar}$ (φ_{x_0} este transf. Fourier a funcției $\delta(x-x_0)$ vezi 31-Cuantificarea-canonica). Intr-adevăr, cu $\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$, avem imediat,
- $$\hat{x}\varphi_{x_0} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx_0/\hbar} \right) = i\hbar \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(-i \frac{x_0}{\hbar} \right) e^{-ipx_0/\hbar} = x_0 \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx_0/\hbar} \equiv x_0 \varphi_{x_0}$$

Operatorul impuls - operator hermitic

- Un operator este hermitic dacă operatorul adjunct } $\hat{\sigma}^\dagger = \hat{\sigma}$
 (transpus și complex conjugat) este egal cu cel original: }

Aceasta implică } egalitatea produsului scalar: } operator transpus $\hat{\sigma}^T \rightarrow$ acționează la stânga

$$\langle \psi_j | \hat{\sigma} \psi_i \rangle = \langle \psi_j \hat{\sigma}^\dagger | \psi_i \rangle \text{ sau } \int \psi_j^* (\hat{\sigma} \psi_i) dx = \int (\psi_j \hat{\sigma})^* \psi_i dx = \int \hat{\sigma}^* \psi_j^* \psi_i dx$$

- Pentru $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ de verificat: $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_j^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \psi_i dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)^* \psi_j^* \psi_i dx$

- $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_j^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \psi_i dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_j^* d\psi_i$ integrând prin părți: $\int u dv = uv - \int v du$

$$= -i\hbar \left[\underbrace{\psi_j^* \psi_i}_{=0} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i d\psi_j^* \right] = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i \left(i\hbar \frac{d}{dx}\right) \psi_j^* dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)^* \psi_j^* \psi_i dx \quad \text{Q.E.D.}$$

Ecuțiile Hamilton prin comutatori în mecanica cuantică

▶ In spațiul de coordonate }
evaluăm comutatorul } $C_p = [\hat{p}, \hat{H}]$ cu $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ (57)

▶ $C_p \psi = [\hat{p}, \hat{H}] \psi = (\hat{p}\hat{H} - \hat{H}\hat{p}) \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (\hat{H}\psi) - \hat{H}(-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \psi$
 $= -i\hbar \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial x} \psi + \cancel{\hat{H} \frac{\partial \psi}{\partial x}} - \cancel{\hat{H} \frac{\partial \psi}{\partial x}} \right) = -i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial x} \psi$

▶ Deci, ecuația Hamilton pe }
spațiul de coordonate este } $\frac{1}{i\hbar} [\hat{p}, \hat{H}] = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial x}$ (59)

▶ In spațiul de impulsuri }
evaluăm comutatorul } $C_x = [\hat{x}, \hat{H}]$ cu $\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$ (58)

▶ $C_x \varphi = [\hat{x}, \hat{H}] \varphi = (\hat{x}\hat{H} - \hat{H}\hat{x}) \varphi = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} (\hat{H}\varphi) - \hat{H}(i\hbar) \frac{\partial}{\partial p} \varphi$
 $= i\hbar \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial p} \varphi + \cancel{\hat{H} \frac{\partial \varphi}{\partial p}} - \cancel{\hat{H} \frac{\partial \varphi}{\partial p}} \right) = i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial p} \varphi$

▶ Deci, ecuația Hamilton pe }
spațiul de impulsuri este } $\frac{1}{i\hbar} [\hat{x}, \hat{H}] = \frac{\partial \hat{H}}{\partial p}$ (60)

Partea V

Mecanica Cuantică Relativista

Ecuția Klein-Gordon pentru particula liberă relativistă

- ▶ Ecuția de undă plană $\varphi(x,t) = N e^{-i(\omega t - kx)}$ sau $\varphi(x,t) = N e^{-i(Et - px)/\hbar}$ (61)

- ▶ Cuantificarea implică înlocuirea variabilelor în ecuațiile mecanice, cu operatori.

$$E \rightarrow \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad E^2 \rightarrow \hat{E}^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2}$$

$$p \rightarrow \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad T \rightarrow \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$
 (62)

- ▶ Dacă pornim de la relația relativistă între p și E și facem înlocuirile (62),

$$E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \rightarrow \hat{E}^2 \varphi = (\hat{p}^2 c^2 + m^2 c^4) \varphi \quad \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \varphi = 0 \quad (63)$$

am folosit $\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right)^2 \varphi = \left[\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 c^2 + m^2 c^4 \right] \varphi$

obținem *Ec. Klein-Gordon pt. particula liberă*, cu soluția de undă plană (61).

- ▶ Dacă avem particule de masă $m=0$ (fotoni), folosim ω și k în loc de $E = \hbar\omega$ și $p = \hbar k$. Atunci, relațiile (63) devin

$$\omega^2 = k^2 c^2 \rightarrow \hat{\omega}^2 \varphi = (\hat{k}^2 c^2) \varphi \quad \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = 0 \quad (64)$$

- ▶ Ecuția (64) este ecuația diferențială a unei plane, a cărei soluție este dată de prima relație (61).

Ecuția de continuitate

	Ecuția Nerelativistă (Schrödinger)	Ecuția Relativistă - Klein-Gordon	
Relația energie-impuls	$E = \frac{p^2}{2m}$	3-dimensional $\frac{E^2}{c^2} = \vec{p}^2 + m^2 c^2$	4-dimensional $p^2 = m^2 c^2$
Trecerea la operatori diferențiali:	$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$; $p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \equiv -i\hbar \nabla$		$p^\mu \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} \equiv i\hbar \partial^\mu$
Ec. de undă pt. particula liberă	$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = 0$	$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \varphi = 0$	$\left(\partial_\mu \partial^\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \varphi = 0$
Ec. complex conjugată	$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} = 0$	$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi^*}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \varphi^*}{\partial x^2} + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \varphi^* = 0$	$\left(\partial_\mu \partial^\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \varphi^* = 0$
Inmulțirea la stânga a ec. de bază cu $-i\psi^*$ ($-i\varphi^*$) a ec. c.c. la dreapta cu $i\psi$ ($i\varphi$) și adunarea lor	$\underbrace{\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right)}_{\frac{\partial}{\partial t}(\psi^* \psi) = \frac{\partial \rho}{\partial t}}$ $- \underbrace{\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \psi \right)}_{\partial j / \partial x} = 0$	$\underbrace{\frac{i}{c^2} \left(\varphi^* \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \varphi^*}{\partial t^2} \varphi \right)}_{\frac{i}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \frac{\partial \varphi^*}{\partial t} \varphi \right) = \frac{\partial \rho}{\partial (ct)}}$ $- \underbrace{i \left(\varphi^* \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \varphi^*}{\partial x^2} \varphi \right)}_{-i \frac{\partial}{\partial x} \left(\varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \varphi \right) = + \frac{\partial j}{\partial x}} = 0$	$\begin{cases} x^\mu \equiv (ct, \vec{x}); x_\mu \equiv (ct, -\vec{x}) \\ \partial^\mu \equiv \left(\frac{\partial}{\partial (ct)}, -\frac{\partial}{\partial x_\mu} \right); \\ \partial_\mu \equiv \left(\frac{\partial}{\partial (ct)}, \frac{\partial}{\partial x_\mu} \right) \end{cases}$ $\frac{\partial}{\partial x^\mu} \left[\underbrace{i \left(\varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial x_\mu} - \frac{\partial \varphi^*}{\partial x_\mu} \varphi \right)}_{j^\mu} \right] = 0$
Densitatea și curentul de probab.	$\begin{cases} \rho = \psi^* \psi = \psi ^2 \\ j = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right) \end{cases}$	$\begin{cases} \rho = \frac{i}{c} \left(\varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \frac{\partial \varphi^*}{\partial t} \varphi \right) \\ j = -i \left(\varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \varphi \right) \end{cases}$	$j^0 \equiv c\rho \quad ; \quad j^{1,2,3} \equiv \vec{j}$ $j^\mu = i \left(\varphi^* \partial^\mu \varphi - \partial^\mu \varphi^* \varphi \right)$
Ecuția de continuitate	$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0$	$\frac{1}{c} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0$	$\partial_\mu j^\mu = 0$

Densitatea și curentul de probabilitate pentru unda plană

	Ecuția Nerelativistă (Schrödinger)	Ecuția Relativistă - Klein-Gordon	
Ecuția de continuitate	$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$	$\frac{1}{c} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$	cu notația: $j^\mu = (c\rho, \vec{j})$ $\partial_\mu j^\mu = 0$
Densitatea și curentul de probabilitate	$\begin{cases} \rho = \psi^* \psi = \psi ^2 > 0 \\ \vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \vec{\nabla} \psi^* \psi) \end{cases}$	$\begin{cases} c\rho = i \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right) \\ \vec{j} = -i (\psi^* \nabla \psi - \nabla \psi^* \psi) \end{cases}$	$j^\mu = i(\psi^* \partial^\mu \psi - \partial^\mu \psi^* \psi)$
Folosind soluția de undă plană a ecuației de bază $\begin{cases} p \cdot x = p_\mu x^\mu = Et - \vec{p} \cdot \vec{x} \\ k \cdot x = k_\mu x^\mu = \omega t - \vec{k} \cdot \vec{x} = \frac{E}{\hbar} t - \frac{\vec{p}}{\hbar} \cdot \vec{x} \end{cases}$		$\begin{aligned} \psi &= N e^{-i(E \cdot t - \vec{p} \cdot \vec{x})/\hbar} \\ &\equiv N e^{-i(\omega \cdot t - \vec{k} \cdot \vec{x})} \\ \psi^* &= N^* e^{i(E \cdot t - \vec{p} \cdot \vec{x})/\hbar} \\ &\equiv N^* e^{i(\omega \cdot t - \vec{k} \cdot \vec{x})} \end{aligned}$	$\begin{aligned} \psi &= N e^{-i p \cdot x/\hbar} \\ &\equiv N e^{-i k \cdot x} \\ \psi^* &= N^* e^{i p \cdot x/\hbar} \\ &\equiv N^* e^{i k \cdot x} \end{aligned}$
Densitatea și curentul de probabilitate pt. unda plană	$\begin{cases} \rho = N ^2 \\ \vec{j} = \frac{\vec{p}}{m} N ^2 \end{cases}$	$\begin{cases} c\rho = i(-2i\omega) N ^2 = 2\omega N ^2 \\ \vec{j} = -i(2i\vec{k}) N ^2 = 2\vec{k} N ^2 \end{cases}$	$j^\mu = 2 p^\mu N ^2 / \hbar$

► Norma $|N|$ a stărilor K-G de undă plană $\psi = N e^{-i(\omega \cdot t - \vec{k} \cdot \vec{x})}$ se obține prin integrarea densității de probabilitate $\rho = \text{const.}$, pe un volum cutie L^3 : $\int_{L^3} c\rho d^3x = 1$ sau $2\omega |N|^2 L^3 = 1$ astfel $|N|^2 = 1/(2\omega L^3)$ (65)

► $c\rho = j^0$ - comp. time-like } care, din expresiile din tabel, cu $|N|^2$ (65), sunt: $c\rho = \frac{1}{L^3}$ și $\vec{j} = \frac{\vec{k}}{\omega L^3}$ (66)

\vec{j} - comp. space-like }

► Normarea invariantă se obține în cazul în care vom neglija factorul $1/(2\omega)$ în (65), adică $|N|^2 = 1/L^3$ (67)

► densitatea $c\rho$ și curentul de probabilitate \vec{j} , invariante, } care, din expresiile din tabel, cu $|N|^2$ (67), sunt: $c\rho = \frac{2\omega}{L^3}$ și $\vec{j} = \frac{2\vec{k}}{L^3}$ (68)

► Acum $c\rho$ și \vec{j} sunt invariante. $c\rho$ este proportional cu ω . La transformarea Lorentz, elementul de volum suferă o contracție Lorentz $d^3x \rightarrow d^3x \sqrt{1 - \beta^2}$; iar, pentru ca $c\rho d^3x$ să rămână invariant, $c\rho$ se va transforma ca și componenta time-like: $c\rho \rightarrow c\rho/\sqrt{1 - \beta^2}$, iar $\int_{L^3} c\rho d^3x = 2\omega$ este constantă.

Soluția generală a ecuației Klein-Gordon

- ▶ Sol. gen. a ec. Klein Gordon (63) are mai multe componente, nu doar soluția (61) $Ne^{-i(\omega t - kx)}$ a ecuației undelor,

$$\varphi = \sum_k \frac{1}{\sqrt{2\omega_k V}} \left(\underbrace{A_k e^{-i(\omega_k t - kx)}}_{\varphi_+} + \underbrace{B_k^* e^{i(\omega_k t - kx)}}_{\varphi_-} + \underbrace{C_k e^{-i(\omega_k t + kx)} + D_k^* e^{i(\omega_k t + kx)}}_{\text{omise ca sol.K-G}} \right) \quad (69)$$

- ▶ Folosind notațiile 4-dim: $\left\{ \begin{aligned} p \cdot x &= p_\mu x^\mu = Et - p_i x^i \\ (k \cdot x) &= k_\mu x^\mu = \omega t - k_i x^i = \frac{E}{\hbar} t - \frac{p_i}{\hbar} x^i = (p \cdot x) / \hbar \end{aligned} \right.$

- ▶ Sol. generală K-G (69) ca superpoziție discretă de unde plane:

$$\varphi(x) = \sum_k \frac{1}{\sqrt{2\omega_k V}} \left(\underbrace{A_k e^{-i k \cdot x}}_{\varphi_{k+}} + \underbrace{B_k^* e^{i k \cdot x}}_{\varphi_{k-}} \right) \quad (70)$$

- ▶ adică stări proprii ortonormate:

$$\varphi_{k+} = \frac{e^{-i k \cdot x}}{\sqrt{V}} \quad ; \quad \varphi_{k-} = \frac{e^{i k \cdot x}}{\sqrt{V}} \quad (71)$$

Am păstrat doar \sqrt{V} la numitor, pt. a obține ortonormarea stărilor φ_k .

$$\text{Intr-adevăr: } \int \varphi_{k+}^* \cdot \varphi_{k'++} dx = \frac{1}{V} \int e^{i k \cdot x} e^{-i k' \cdot x} d^3 x = \frac{1}{V} \int e^{i(k-k') \cdot x} d^3 x = \delta_{kk'}$$

- ▶ Sol. generală K-G (69) ca superpoziție continuă de unde plane:

$$\varphi(x) = \int \frac{d^3 \vec{k}}{\sqrt{2\omega_k (2\pi)^3}} \left(\underbrace{a(\vec{k}) e^{-i k \cdot x}}_{\varphi_{k+}} + \underbrace{b^*(\vec{k}) e^{i k \cdot x}}_{\varphi_{k-}} \right) \quad (72)$$

Soluții Klein-Gordon de energie pozitivă și negativă

- Sol. gen. (69) a ec. K-G are mai multe componente, la fel și ec. undelor, adică:

$$\varphi = \sum_k \frac{1}{\sqrt{2\omega_k V}} \left(\underbrace{A_k e^{-i(\omega_k t - kx)}}_{\varphi_+} + \underbrace{B_k^* e^{i(\omega_k t - kx)}}_{\varphi_-} + \underbrace{C_k e^{-i(\omega_k t + kx)} + D_k^* e^{i(\omega_k t + kx)}}_{\text{omise ca sol.K-G}} \right)$$

ecuații diferențiale	componente de undă			
	$Ae^{-i(\omega t - kx)}$	$Be^{i(\omega t - kx)}$	$Ce^{-i(\omega t + kx)}$	$De^{i(\omega t + kx)}$
Ec. Klein-Gordon $\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \varphi = 0$	DA ($E > 0; \vec{p} > 0$) particule ; mișcare sens pozitiv în sp.	DA ($E < 0; \vec{p} < 0$) antipartic ; mișcare sens negativ în sp.	DA ($E > 0; \vec{p} < 0$) particule ; mișcare sens negativ în sp.	DA ($E < 0; \vec{p} > 0$) antipartic ; mișcare sens pozitiv în sp.
Ec. propagare unde $\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = 0$	DA	DA	DA	DA

- Sol. K-G de energie pozitivă este:

$$\varphi_+ = \sum_k \frac{A_k e^{-i(\omega_k t - kx)}}{\sqrt{2\omega_k V}}$$

- Sol. K-G de energie negativă este:

$$\varphi_- = \sum_k \frac{B_k^* e^{i(\omega_k t - kx)}}{\sqrt{2\omega_k V}}$$

- Ec. cu val. pr. de $E > 0$:

$$\hat{E}\varphi_+ = E_+ \varphi_+ \quad i\hbar \frac{\partial \varphi_+}{\partial t} = i\hbar(-i\omega_k) \frac{A_k e^{-i(\omega_k t - kx)}}{\sqrt{2\omega_k V}} = \underbrace{\hbar\omega_k}_{E_+} \varphi_+ \Rightarrow E_+ = \hbar\omega_k > 0$$

- Ec. cu val. pr. de $E < 0$:

$$\hat{E}\varphi_- = E_- \varphi_- \quad i\hbar \frac{\partial \varphi_-}{\partial t} = i\hbar(i\omega_k) \frac{B_k^* e^{i(\omega_k t - kx)}}{\sqrt{2\omega_k V}} = \underbrace{-\hbar\omega_k}_{E_-} \varphi_- \Rightarrow E_- = -\hbar\omega_k < 0$$

Probabilitatea și Curentul stărilor K-G de energie pozitivă

- Starea generală Klein-Gordon de energie pozitivă este:

$$\varphi_+ = \sum_k \frac{\mathcal{A}_k e^{-i(\omega_k t - kx)}}{\sqrt{2\omega_k V}}$$

- Probabilitatea: $P_+ = \int_{L^3} c\rho_+ d^3x$. Curentul: $J_+ = \int_{L^3} j_+ d^3x$. Să le evaluăm:

$$c\rho_+ = i \left(\varphi_+^* \frac{\partial \varphi_+}{\partial t} - \frac{\partial \varphi_+^*}{\partial t} \varphi_+ \right) = \begin{cases} i \sum_k \frac{\mathcal{A}_k^* e^{i(\omega_k t - kx)}}{\sqrt{2\omega_k V}} \sum_{k'} (-i\omega_{k'}) \frac{\mathcal{A}_{k'} e^{-i(\omega_{k'} t - k'x)}}{\sqrt{2\omega_{k'} V}} - \\ - i \sum_{k'} (i\omega_{k'}) \frac{\mathcal{A}_{k'}^* e^{i(\omega_{k'} t - k'x)}}{\sqrt{2\omega_{k'} V}} \sum_k \frac{\mathcal{A}_k e^{-i(\omega_k t - kx)}}{\sqrt{2\omega_k V}} \end{cases}$$

$$j_+ = -i \left(\varphi_+^* \frac{\partial \varphi_+}{\partial x} - \frac{\partial \varphi_+^*}{\partial x} \varphi_+ \right) = \begin{cases} -i \sum_k \frac{\mathcal{A}_k^* e^{i(\omega_k t - kx)}}{\sqrt{2\omega_k V}} \sum_{k'} (ik') \frac{\mathcal{A}_{k'} e^{-i(\omega_{k'} t - k'x)}}{\sqrt{2\omega_{k'} V}} - \\ - i \sum_{k'} (-ik') \frac{\mathcal{A}_{k'}^* e^{i(\omega_{k'} t - k'x)}}{\sqrt{2\omega_{k'} V}} \sum_k \frac{\mathcal{A}_k e^{-i(\omega_k t - kx)}}{\sqrt{2\omega_k V}} \end{cases}$$

La integrarea $\int c\rho_+ d^3x$ sau $\int j_+ d^3x$, produsele de stări cu $k \neq k'$ sunt zero (ortonormare).

► $P_+ = \int c\rho_+ d^3x = \int \left[\sum_k \frac{\omega_k}{2\omega_k} \frac{|\mathcal{A}_k|^2}{V} + \sum_k \frac{\omega_k}{2\omega_k} \frac{|\mathcal{A}_k|^2}{V} \right] d^3x = \sum_k \left[\frac{|\mathcal{A}_k|^2}{2V} + \frac{|\mathcal{A}_k|^2}{2V} \right] V = \sum_k |\mathcal{A}_k|^2 = 1$

► $J_+ = \int j_+ d^3x = \int \left[\sum_k \frac{k}{2\omega_k} \frac{|\mathcal{A}_k|^2}{V} + \sum_k \frac{k}{2\omega_k} \frac{|\mathcal{A}_k|^2}{V} \right] d^3x = \sum_k \left[\frac{k}{\omega_k} \frac{|\mathcal{A}_k|^2}{V} \right] V = \sum_k \frac{k}{\omega_k} |\mathcal{A}_k|^2 > 0$

Probabilitatea și Curentul stărilor K-G de energie negativă

- Starea generală Klein-Gordon de energie negativă este:

$$\varphi_- = \sum_k \frac{\mathcal{B}_k^* e^{i(\omega_k t - kx)}}{\sqrt{2\omega_k V}}$$

- Probabilitatea: $P_- = \int_{L^3} c\rho_- d^3x$. Curentul: $J_- = \int_{L^3} j_- d^3x$. Să le evaluăm:

$$c\rho_- = i \left(\varphi_-^* \frac{\partial \varphi_-}{\partial t} - \frac{\partial \varphi_-^*}{\partial t} \varphi_- \right) = \begin{cases} i \sum_k \frac{\mathcal{B}_k e^{-i(\omega_k t - kx)}}{\sqrt{2\omega_k V}} \sum_{k'} \frac{(i\omega_{k'}) \mathcal{B}_{k'}^* e^{i(\omega_{k'} t - k'x)}}{\sqrt{2\omega_{k'} V}} - \\ - i \sum_{k'} \frac{(-i\omega_{k'}) \mathcal{B}_{k'} e^{-i(\omega_{k'} t - k'x)}}{\sqrt{2\omega_{k'} V}} \sum_k \frac{\mathcal{B}_k^* e^{i(\omega_k t - kx)}}{\sqrt{2\omega_k V}} \end{cases}$$

$$j_- = -i \left(\varphi_-^* \frac{\partial \varphi_-}{\partial x} - \frac{\partial \varphi_-^*}{\partial x} \varphi_- \right) = \begin{cases} -i \sum_k \frac{\mathcal{B}_k e^{-i(\omega_k t - kx)}}{\sqrt{2\omega_k V}} \sum_{k'} (-ik') \frac{\mathcal{B}_{k'}^* e^{i(\omega_{k'} t - k'x)}}{\sqrt{2\omega_{k'} V}} - \\ -i \sum_{k'} (ik') \frac{\mathcal{B}_{k'} e^{-i(\omega_{k'} t - k'x)}}{\sqrt{2\omega_{k'} V}} \sum_k \frac{\mathcal{B}_k^* e^{i(\omega_k t - kx)}}{\sqrt{2\omega_k V}} \end{cases}$$

La integrarea $\int c\rho_- d^3x$ sau $\int j_- d^3x$, produsele de stări cu $k \neq k'$ sunt zero (ortonormare).

$$P_- = \int c\rho_- d^3x = \int \left[\sum_k \frac{-\omega_k}{2\omega_k} \frac{|\mathcal{B}_k|^2}{V} - \sum_k \frac{\omega_k}{2\omega_k} \frac{|\mathcal{B}_k|^2}{V} \right] d^3x = \sum_k \left[-\frac{|\mathcal{B}_k|^2}{2V} - \frac{|\mathcal{B}_k|^2}{2V} \right] V = -\sum_k |\mathcal{B}_k|^2 = -1$$

$$J_- = \int j_- d^3x = \int \left[\sum_k \frac{-k}{2\omega_k} \frac{|\mathcal{B}_k|^2}{V} - \sum_k \frac{k}{2\omega_k} \frac{|\mathcal{B}_k|^2}{V} \right] d^3x = \sum_k \left[\frac{-k}{\omega_k} \frac{|\mathcal{B}_k|^2}{V} \right] V = -\sum_k \frac{k}{\omega_k} |\mathcal{B}_k|^2 < 0$$

Ecuatii cuantice relativiste

- ▶ In cazul nerelativist folosind expresia energiei: $E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + U$ și apoi cuantificarea ei prin trecerea (62) la operatori diferențiali: $E \rightarrow \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$; $\vec{p} \rightarrow \hat{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla} \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}$

(în cazul unidimensional) \implies Ecuatia Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U \right) \psi$$

care pentru particula liberă $U=0$ are soluția:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}) e^{-iEt}$$

- ▶ Ec. Schrödinger este o ec. diferențială de ordin I în $\partial/\partial t$ însă de ordin II în $\partial^2/\partial x^2$. Trecerea la cazul relativist implică o tratare echivalentă a spațiului și timpului.
- ▶ In cazul relativist folosind expresia energiei: $p \cdot p \equiv p_\mu p^\mu = \frac{E^2}{c^2} - |\vec{p}|^2 = m^2 c^2$ și apoi trecerea (62) la operatori diferențiali, conduce la ecuația Klein-Gordon (63):

$$\left[\frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right)^2 - m^2 c^2 \right] \psi = 0 \quad \Big| \quad \hbar^2 \quad \text{sau} \quad \left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mathbf{x}^2} + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi = 0 \right] \quad (63)$$

care pentru particula liberă are soluția de undă plană: $\psi(\mathbf{x}, t) = e^{-i(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})}$

- ▶ In această abordare, ec. K-G are o problemă cu densitatea negativă de probabilitate, pt. soluțiile de energie negativă $E = -\sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$. Rezolvarea \rightarrow Ecuatia Dirac. In Teoria Cuantică a Câmpurilor ψ nu mai descrie o probabilitate, ci un câmp de particule de spin 0, cu sarcini pozitive și negative.
- ▶ In loc de o singură ecuație K-G de ordin doi în t și x , Dirac a căutat să o înlocuiască cu două ecuații de ordin întâi în t și în x , ce pot fi privite ca "radical" din ecuația K-G.

Ecuția Dirac pentru particula liberă

► Ecuția de undă relativistă K-G (63) este: $\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\psi = \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi$

► Căutăm ec. Dirac, ec. echivalentă K-G, dar de ordin I în $\partial/\partial t$ și $\partial/\partial x$, ca o ec. radical din ec. K-G. Pt. aceasta, exprimăm operatorul de ordin II K-G, ca pătratul unui operator de ordin I: $A\partial_x + B\partial_y + C\partial_z + \frac{i}{c}D\partial_t$, cu coef. ce trebuie determinați ulterior. Adică,

$$\begin{aligned} \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2 - \frac{1}{c^2} \partial_t^2 &= \left(A\partial_x + B\partial_y + C\partial_z + \frac{i}{c}D\partial_t\right)\left(A\partial_x + B\partial_y + C\partial_z + \frac{i}{c}D\partial_t\right) = \\ &= \underbrace{A^2\partial_x^2 + AB\partial_x\partial_y + AC\partial_x\partial_z + \frac{i}{c}AD\partial_x\partial_t + BA\partial_y\partial_x + B^2\partial_y^2 + BC\partial_y\partial_z + \frac{i}{c}BD\partial_y\partial_t +} \\ &+ \underbrace{CA\partial_z\partial_x + CB\partial_z\partial_y + C^2\partial_z^2 + \frac{i}{c}CD\partial_z\partial_t + \frac{i}{c}\left(DA\partial_t\partial_x + DB\partial_t\partial_y + DC\partial_t\partial_z + \frac{i}{c}D^2\partial_t^2\right)} \end{aligned}$$

► Pt. ca termenii mixti de tip $\partial_i\partial_j = \partial_j\partial_i$ să se anuleze, trebuie ca între coef. să avem:

$$\begin{array}{llll} AB+BA=0 & ; & AC+CA=0 & ; & AD+DA=0 & \text{iar cei la pătrat} \\ BC+CB=0 & ; & BD+DB=0 & ; & CD+DC=0 & A^2=B^2=C^2=D^2=1 \end{array} \quad (73)$$

Din dezvoltarea de mai sus rămâne: $\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2 - \frac{1}{c^2} \partial_t^2 \longrightarrow$ operatorul K-G.

► Atunci, cu operatorul diferențial de ordin I de mai sus, putem scrie ec. Dirac sub forma:

$$\left(A\partial_x + B\partial_y + C\partial_z + \frac{i}{c}D\partial_t\right)\psi = \frac{mc}{\hbar} \psi \quad (74)$$

care prin ridicare la pătrat, ținând cont de relațiile (73), se regăsește ecuația K-G (63).

Matricile gamma - Reprezentarea Dirac-Pauli

- Coeficienții A, B, C, D , pentru ca să satisfacă relațiile de anticomutare și normare (73), trebuie să fie niște matrici, și pot fi scrise sub forma:

$$A=i\gamma^1 ; B=i\gamma^2 ; C=i\gamma^3 ; D=\gamma^0 \text{ la } D \text{ am scos deja în (74) } i \text{ în față} \quad (75)$$

Atunci, relațiile (73) devin, pentru matricile $\gamma^\mu (\mu = 0, 1, 2, 3)$:

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 0 \text{ pt. } \mu \neq \nu (\mu, \nu = 0, 1, 2, 3) ; (\gamma^0)^2 = 1 ; (\gamma^i)^2 = -1 (i=1, 2, 3) \quad (76)$$

- Soluția cea mai simplă pentru matricile γ^μ , care satisfac relațiile de anticomutare (76) sunt matrici unitare 4×4 . Una din reprezentările posibile ale matricilor γ este:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{1} \end{pmatrix} ; \gamma^i = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma^i \\ -\sigma^i & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (77)$$

unde $\mathbf{1}$ e matricea identitate 2×2 , $\mathbf{0}$ matricea nulă 2×2 , iar σ^i matricile de spin Pauli:

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix} ; \sigma^2 = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -i \\ i & \mathbf{0} \end{pmatrix} ; \sigma^3 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{1} \end{pmatrix} \quad (78)$$

- Scrise ca matrici 4×4 , matricile γ^μ în reprezentarea Dirac-Pauli, sunt:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} ; \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} ; \gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} ; \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (79)$$

- De notat că γ^μ nu este un 4-vector. Componentele γ^μ rămân constante la o transformare Lorentz.

Reprezentări chirale (Weyl) matrici gamma

- O altă reprezentare posibilă a matricilor γ^μ este reprezentarea chirală (Weyl):

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix} ; \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\sigma^i \\ \sigma^i & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (80)$$

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} ; \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} ; \quad \gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} ; \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (81)$$

- O altă reprezentare chirală (Weyl) a matricilor γ^μ este:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix} ; \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma^i \\ -\sigma^i & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (82)$$

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} ; \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} ; \quad \gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} ; \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (83)$$

- Pentru cele două reprezentări chirale de mai sus, avem:

$$\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{respectiv} \quad \gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (84)$$

Ecuția Dirac pentru particula liberă (de verific.)

► Ec. Dirac (74) acum se poate scrie $(i\gamma^x \partial_x + i\gamma^y \partial_y + i\gamma^z \partial_z + \frac{i}{c} \gamma^0 \partial_t) \psi = \frac{mc}{\hbar} \psi$ sau

$$\left(\frac{i}{c} \gamma^0 \partial_t + i\vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla} - \frac{mc}{\hbar} \right) \psi = 0 \quad \text{sau} \quad (i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{mc}{\hbar}) \psi = 0 \quad (85)$$

► Explicitând în (85) expresiile (79) ale matricilor γ^μ , ca suma ponderată conform (85), a trei matrici 4×4 (constanta mc/\hbar scrisă ca o matrice diagonală), obținem expresia matriceală a ecuației Dirac:

$$\begin{pmatrix} \frac{i}{c} \partial_t - \frac{mc}{\hbar} & 0 & i\partial_z & i\partial_x + \partial_y \\ 0 & \frac{i}{c} \partial_t - \frac{mc}{\hbar} & i\partial_x - \partial_y & -i\partial_z \\ -i\partial_z & -i\partial_x - \partial_y & -\frac{i}{c} \partial_t - \frac{mc}{\hbar} & 0 \\ -i\partial_x + \partial_y & i\partial_z & 0 & -\frac{i}{c} \partial_t - \frac{mc}{\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi^1 \\ \psi^2 \\ \psi^3 \\ \psi^4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (86)$$

► În QFT ec. Dirac descrie comportarea fermionilor de spin 1/2. Pt. un fermion liber, func. de undă este produsul unei unde plane (61) și a unui *spinor Dirac* $u(p_\mu)$ } $\psi(x^\mu) = u(p_\mu) e^{-i(p_\mu x^\mu)/\hbar} \quad (87)$

► Înlocuind soluția (87) în ecuația Dirac (85) avem: $(\gamma^\mu p_\mu - mc) u(p) = 0 \quad (88)$

► Pentru o particulă în repaus, $\vec{p}=0$, cu γ^0 din (77), avem $(\gamma^0 \frac{E}{c} - mc) u = 0$ sau $\begin{pmatrix} E\mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -E\mathbf{I} \end{pmatrix} u = \begin{pmatrix} mc^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & mc^2 \end{pmatrix} u \quad (89)$

Soluții ecuația Dirac - particula liberă în repaus

- Explicitând (89) obținem ecuațiile cu valori proprii spinoriale:

$$\begin{pmatrix} E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^1 \\ u^2 \\ u^3 \\ u^4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & mc^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & mc^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^1 \\ u^2 \\ u^3 \\ u^4 \end{pmatrix} \quad (90)$$

sau

$$\begin{cases} E_1 u^1 = mc^2 u^1 \\ E_2 u^2 = mc^2 u^2 \\ E_3 u^3 = -mc^2 u^3 \\ E_4 u^4 = -mc^2 u^4 \end{cases} \text{ unde } u^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad u^2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad u^3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad u^4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (91)$$

- Iar funcțiile proprii (87) ale fermionilor liberi în repaus, vor fi: $\psi^\mu = u^\mu e^{-i E_\mu t / \hbar}$,

$$\psi^1 = u^1 e^{-i mc^2 t / \hbar} \quad \psi^2 = u^2 e^{-i mc^2 t / \hbar} \quad \psi^3 = u^3 e^{+i mc^2 t / \hbar} \quad \psi^4 = u^4 e^{+i mc^2 t / \hbar} \quad (92)$$

- Deci, spinorii (91) sunt matrici coloană 1×4 , adică avem patru stări posibile. Deși ne-am fi așteptat să avem doar două stări de spin $1/2$. Cele patru soluții (92) descriu două stări de spin (\uparrow și \downarrow) cu $E = mc^2$ și două stări de spin (\uparrow și \downarrow) cu $E = -mc^2$.

Ecuția Dirac pentru particula liberă (metoda II)

- În lucrarea origină, Dirac a căutat o ecuația relativistă de ordin întâi pornind, la fel ca în cazul Schrödinger sau K-G, de la expresia energiei, însă sub forma unei dependențe lineare de \vec{p} și m (nu pătratică $E^2 = (\vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4)$ ca în cazul K-G), apoi se face trecerea obișnuită la operatori (62) și în final se caută coeficienții $\vec{\alpha}$ și β , adică,

$$E = (c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2) \longrightarrow \hat{E}\psi = (c \vec{\alpha} \cdot \hat{\vec{p}} + \beta mc^2)\psi \quad (93)$$

- Cei patru coeficienți $\alpha_i (i=1, 2, 3)$ și β se determină prin cerința ca particula liberă să satisfacă relația relativistă energie-impuls obișnuită:

$$E^2 = (\vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4) \longrightarrow \hat{E}^2 \psi = (\hat{\vec{p}}^2 c^2 + m^2 c^4)\psi \quad (94)$$

- Ec. (93) și (94) sunt echivalente. Ridicând la pătrat (93) și egalând cu (94), avem:

$$\frac{\hat{E}^2}{c^2} = (\alpha^i \hat{p}_i + \beta mc) (\alpha^j \hat{p}_j + \beta mc) = \underbrace{(\alpha^i)^2 \hat{p}_i^2}_{=1} + \underbrace{(\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i)}_{=0} \hat{p}_i \hat{p}_j + \underbrace{(\alpha^i \beta + \beta \alpha^i)}_{=0} \hat{p}_i mc + \underbrace{\beta^2 m^2 c^2}_{=1}$$

unde am sumat după indicii care se repetă, cu condiția $i > j$ în membrul drept.

Comparând cu $\left\{ \begin{array}{l} \bullet \alpha^1, \alpha^2, \alpha^3, \beta \text{ acești operatori anticomută între ei,} \\ \bullet (\alpha^1)^2 = (\alpha^2)^2 = (\alpha^3)^2 = \beta^2 = 1 \end{array} \right.$ (95)

► Putem găsi o reprezentare matricială 4×4 , dacă alegem $\left. \begin{array}{l} \alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \end{array} \right\}$ (96)

unde elementele sunt matrici 2×2 , care în reprezentarea Dirac-Pauli sunt:

$$0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \text{ iar } \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (97)$$

Ecuția Dirac pentru particula liberă (continuare)

- Legăturile între matricile A, B, C, D și α^i, β , în reprezentarea Dirac-Pauli sunt:

$$A = i\beta\alpha^1, \quad B = i\beta\alpha^2, \quad C = i\beta\alpha^3, \quad D = \beta$$

sau exprimate cu matricile γ^i :

$$A = i\gamma^1, \quad B = i\gamma^2, \quad C = i\gamma^3, \quad D = \gamma^0$$

unde,

$$\gamma^0 = \beta = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix} \quad \gamma^1 = \beta\alpha^1 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ -\sigma_x & 0 \end{pmatrix}$$

$$\gamma^2 = \beta\alpha^2 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_y \\ -\sigma_y & 0 \end{pmatrix} \quad \gamma^3 = \beta\alpha^3 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_z \\ -\sigma_z & 0 \end{pmatrix}$$

cu matricile Pauli: $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

- În notațiile $\partial_0 = \frac{1}{c}\partial_t$, $\gamma^\mu = (\gamma^0, \gamma^1, \gamma^2, \gamma^3)$

Ec. Dirac se poate scrie:

$$i\hbar\gamma^0\frac{\partial\psi}{\partial ct} + i\hbar\gamma^k\frac{\partial\psi}{\partial x^k} - mc\psi = 0 \quad \text{sau} \quad \boxed{i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu\psi - mc\psi = 0} \quad (98)$$

Ecuția Relativistă - Dirac		
Relația energie-impuls	$\frac{E}{c} = \alpha \cdot \mathbf{p} + \beta mc$	In reprezentarea Dirac-Pauli $\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix}, \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix};$ In reprezentarea Weyl $\alpha = \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & -\sigma \end{pmatrix}, \beta = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}$
Trecerea la operatori diferențiali: $E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}; \mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla$		
\Rightarrow	$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial ct} + i\hbar \alpha \cdot \nabla \psi = \beta mc \psi$	înmulțim la stânga cu β și notăm: $\gamma^0 = \beta, \gamma^k = \beta \alpha^k$
Ecuția Dirac	3-dimensional $i\hbar \gamma^0 \frac{\partial \psi}{\partial ct} + i\hbar \gamma^k \frac{\partial \psi}{\partial x^k} - mc \psi = 0$	4-dimensional $(i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu - mc) \psi = 0$
Ecuția Dirac conjugată hermitic	$-i\hbar \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial ct} \gamma^0 - i\hbar \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial x^k} (-\gamma^k) - mc \psi^\dagger = 0$ ψ^\dagger - conj.hermitic (transp.& c.c.) - linie	pt.a reface forma covariantă, înlăturăm minusul de la γ^k . De aceea, deoarece $\gamma^0 \gamma^k = -\gamma^k \gamma^0$, înmulțim ecuația la dreapta cu γ^0 . notăm: $\bar{\psi} \equiv \psi^\dagger \gamma^0$ (spinor adjuncț) - linie
Ecuția Dirac adjuncț	$i\hbar \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial ct} \gamma^0 + i\hbar \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x^k} \gamma^k + mc \bar{\psi} = 0$	$i\hbar \partial_\mu \bar{\psi} \gamma^\mu + mc \bar{\psi} = 0$
Înmulțim ec. de bază cu $\bar{\psi}$ la stânga, apoi ecuația adjuncț cu ψ la dreapta și le adunăm	$i\hbar \bar{\psi} \gamma^0 \frac{\partial \psi}{\partial ct} + i\hbar \bar{\psi} \gamma^k \frac{\partial \psi}{\partial x^k} - mc \bar{\psi} \psi +$ $i\hbar \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial ct} \gamma^0 \psi + i\hbar \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x^k} \gamma^k \psi + mc \bar{\psi} \psi = 0$ $\frac{\partial}{\partial ct} (\bar{\psi} \gamma^0 \psi) + \frac{\partial}{\partial x^k} (\bar{\psi} \gamma^k \psi) = 0$	$\bar{\psi} \gamma^\mu \partial_\mu \psi + (\partial_\mu \bar{\psi}) \gamma^\mu \psi =$ $= \partial_\mu \underbrace{(\bar{\psi} \gamma^\mu \psi)}_{j^\mu} = 0$
Ecuția de continuitate		$\partial_\mu j^\mu = 0$
Densitatea și curentul de probabilitate	$\rho \equiv j^0 = \bar{\psi} \gamma^0 \psi = \psi^\dagger \psi = \sum_{i=1}^3 \psi_i ^2 > 0$ $\vec{j} \equiv j^k = \bar{\psi} \gamma^k \psi = \psi^\dagger \gamma^0 \gamma^k \psi$	$j^\mu = \bar{\psi} \gamma^\mu \psi$ dacă j^μ e 4-curentul de ELECTRONI, se înmulțește cu sarcina $-e$: $j^\mu = -e \bar{\psi} \gamma^\mu \psi$