Capitolo 17

Formulazione covariante dell'equazione di Schroedinger

La meccanica quantistica si applica a sistemi che si muovono con velocità non piccole rispetto alla velocità della luce, tali che le correzioni relativistiche possono risultare non trascurabili. Pertanto le leggi della meccanica quantistica devono essere riformulate su base relativistica, affinchè siano invarianti in forma per trasformazioni di Lorentz. In altri termini l'equazione di Schroedinger dev'essere riformulata in forma covariante, e ciò porta a nuove proprietà dei sistemi quantici.

17.1 Equazione di Klein-Gordon

Il generatore delle trasformazioni di Lorentz, considerate come traslazioni nello spazio tempo, è il quadrivettore energia-impulso. In meccanica classica energia ed impulso sono legati dalla relazione $E = p^2/2m$. Il principio di corrispondenza prescrive che $E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ e $\vec{p} \to -i\hbar\vec{\nabla}$ da cui si ottiene l'equazione di Schroedinger non relativistica. In relatività l'equazione equivalente alla precedente è la relazione di *mass shell*, cioè $E^2/c^2 = m^2c^2 + p^2$. Quest'ultima è invariante, in quanto modulo quadro di quadrivettore. Dal principio di corrispondenza segue allora (poniamo $\hbar = c = 1$)

$$-\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi(x) = (-\nabla^2 + m^2)\psi(x), \tag{17.1}$$

dove $x \equiv (\vec{r}, t)$ Questa prende il nome di equazione di Klein-Gordon (KG). Introducendo la forma quadridimensionale di ∇^2, l'Eq.(1) si scrive:

$$(\Box + m^2)\psi(x) = 0 \tag{17.2}$$

Soluzioni dell'equazione di KG sono le onde piane $\psi(x) = Ce^{-ipx}$, dove $px = Et - \vec{p}\cdot\vec{r}$. L'equazione di KG impone che $E = \pm\sqrt{p^2 + m^2}$. Stati di particella libera a energia negativa dovrebbero essere rigettati come non fisici ed in effetti potrebbero essere esclusi fino a quando non vengono introdotte le interazioni, perchè, in assenza di interazioni, una particella libera ad energia positiva resterà sempre ad energia positiva,ma in presenza di interazioni la transizione a stati ad energia negativa è possibile e quindi questi ultimi non possono essere esclusi. Una seconda difficoltà viene dalla interpretazione probabilistica della funzione d'onda. Moltiplicando l'equazione di KG a sinistra per -iψ^* e la sua complessa coniugata per -iψ e sottraendo membro a membro si ottiene l'analogo relativistico dell'equazione di continuità

$$\frac{\partial}{\partial t}[\frac{i}{2m}(\psi^*\partial_t\psi - \psi\partial_t\psi^*)] + \vec{\nabla}\cdot[\frac{i}{2m}(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*)] = 0, \tag{17.3}$$

definendo densità e corrente di probabilità come segue

$$\rho = \frac{i}{2m}(\psi^* \partial_t \psi - \psi \partial_t \psi^*) \tag{17.4}$$

$$\vec{j} = \frac{1}{2mi}(\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*). \tag{17.5}$$

La densità di probabilità non è definita positiva e dipende dalla derivata rispetto al tempo della funzione d'onda, il che rende problematica la sua interpretazione come probabilità. In particolare per un'onda piana risulta $\rho = (E/m)|\psi|^2$ per cui soluzioni con $E < 0$ hanno probabilità negativa. La difficoltà potrebbe essere superata per particelle cariche, introducendo nella definizione di densità di carica e corrente la carica -q ($q > 0$). In tal caso la densità di carica risulta sempre positiva se associamo $E > 0$ a cariche negative ($-q$) e $E < 0$ a cariche positive ($+q$). Nel caso dell'elettrone $q < 0$ questa considerazione richiede che esista anche l'elettrone con carica positiva, cioè il positrone, che non era stato ancora scoperto al tempo in cui fu avanzata questa ipotesi. Resta comunque il problema delle energie negative. A parte le particelle cariche, c'è un caso in cui l'equazione di KG può mantenere un significato fisico, cioè il caso in cui la massa della particella è nulla e questo accade con i fotoni, per cui la funzione d'onda ψ rappresenta il quadripotenziale $A_i(x)$ del campo e.m. In questo caso l'equazione di KG si identifca con l'equazione di Maxwell per il campo e.m. in assenza di cariche e correnti, cioè $\Box A_i(x) = 0$.

17.2 Equazione di Dirac

Per superare le difficoltà discusse sopra si deve trovare una alternativa all'equazione di KG. Osserviamo, prima di tutto, che vogliamo che la definizione relativistica di densità di probabilità sia ancora definita positiva ed indipendente dalla derivata temporale. Ciò richiede che nella nuova equazione la derivata temporale appaia al primo ordine. Quindi la nuova equazione dev'essere della forma $i\partial_t\psi = \hat{H}\psi$, dove $\hat{H}$ ha il ruolo di Hamiltoniana relativistica della particella libera. Per la covarianza, anche la derivata spaziale deve apparire al primo ordine, e quindi la Hamiltoniana dev'essere lineare nell'operatore impulso. Quindi la Hamiltoniana assume la forma $\hat{H} = \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + m\beta$, con i coefficienti α e β indipendenti dalla posizione e dal tempo, per l'omogeneità dello spazio-tempo. Si ottiene la cosiddetta equazione di **Dirac**

$$i\partial_t \psi(x) = (\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + m\beta)\psi(x) \tag{17.6}$$

La funzione d'onda dev'essere a più componenti, diciamo N, almeno per poter descrivere almeno i diversi stati di spin; di conseguenza α e β sono matrici quadrate di dimensione ancora indeterminata. L'equazione di Dirac deve obbedire la relazione di *mass shell*. Applicando $i\partial_t$ si ha identicamente

$$-\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi(x) = (\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta) i \frac{\partial}{\partial t}\psi(x) = (\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta)^2 \psi(x) = (p^2 + m^2)\psi(x) \tag{17.7}$$

Da questa identità seguono le proprietà delle due matrici incognite

$$\alpha_k^2 = 1 \qquad \beta^2 = 1 \tag{17.8}$$

$$\alpha_k \alpha_l + \alpha_l \alpha_k = 0 \quad (k \neq l) \tag{17.9}$$

$$\alpha_k \beta + \beta \alpha_k = 0\cdot \tag{17.10}$$

Le condizioni di antisimmetria supportano l'idea che α_k e β non siano numeri. Lo studio delle condizioni Eq.(8-10) porta alla conclusione che la dimensione N=4, cosa che non dimostreremo. Ma vedremo che l'interpretazione fisica delle soluzioni dell'equazione di Dirac è consistente con questa conclusione. Esisono diverse rappresentazioni delle matrici α_k e β che soddisfano le condizioni Eq.(8-10). Normalmente si adopera la rappresentazione di Pauli-Dirac che fa uso delle matrici di Pauli

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{1} \end{pmatrix}, \ \alpha_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma_{\mathbf{k}} \\ \sigma_{\mathbf{k}} & \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

17.2.1 Diagonalizzazione della hamiltoniana

Una volta determinate le due matrici α e β, la Hamiltoniana si scrive

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \mathbf{m} & \vec{\mathbf{p}} \cdot \vec{\sigma} \\ \vec{\mathbf{p}} \cdot \vec{\sigma} & -\mathbf{m} \end{pmatrix}$$

dove $\mathbf{m}$ è la matrice identità di dimensione 2x2. Per una particella libera la funzione d'onda è della forma $\psi(x) = u_p e^{-ipx}$ e l'equazione di Dirac assume la forma di equazione agli autovalori $H\psi = E\psi$. Quest'ultima si può decomporre in due equazioni bidimensionali accoppiate

$$(m - E)u_A + \vec{p} \cdot \vec{\sigma} u_B = 0 \tag{17.11}$$

$$(-m - E)u_B + \vec{p} \cdot \vec{\sigma} u_A = 0 \tag{17.12}$$

dove u_A e u_B sono a loro volta vettori a due componenti. Gli autovalori si determinano dall'equazione secolare e sono $E = \pm\sqrt{p^2 + m^2}$ per ogni impulso.

Per impulso $\vec{p} = 0$ le due equazioni sono disaccoppiate. Per $E = m$, $u_B = (0, 0)$ e la prima equazione ammette due soluzioni $u_A = (1, 0)$ oppure $u_A = (0, 1)$. Quindi i due autovettori completi sono: $(1, 0, 0, 0)$ e $(0, 1, 0, 0)$. Analogamente, per $E = -m$, gli altri due autovettori completi sono: $(0, 0, 1, 0)$ e $(0, 0, 0, 1)$. Per impulso $\vec{p} \neq 0$ le due equazioni sono accoppiate. Per $E > 0$ le componenti u_B dei due autovettori ad energia positiva sono legate alle componenti u_A dalla Eq.(12)

$$u_B = \frac{\vec{p} \cdot \vec{\sigma}}{m + E} u_A \equiv \xi u_A \tag{17.13}$$

Quindi il vettore $(1, 0, 0, 0)$ si trasforma in $(1, 0, \xi, 0)$ ed il vettore $(0, 1, 0, 0)$ si trasforma in $(0, 1, 0, \xi)$. Analogamente, per $E < 0$, le componenti u_A dei due autovettori ad energia negativa sono legate alle componenti u_B dalla relazione, Eq.(11)

$$u_A = -\frac{\vec{p} \cdot \vec{\sigma}}{m + |E|} u_B \equiv -\xi u_B \tag{17.14}$$

Pertanto il vettore $(0, 0, 1, 0)$ si trasforma in $(-\xi, 0, 1, 0)$ ed il vettore $(0, 0, 0, 1)$ si trasforma in $(0, -\xi, 0, 1)$. Concludiamo pertanto che l'equazione di Dirac ammette, per ogni impulso p, quattro stati di particella libera: due di energia $E > 0$ e due di energia $E < 0$. La doppia degenerazione segnala l'esistenza di una osservabile, che commuta con la Hamiltoniana, e che distingue le due coppie di stati con la stessa energia. Consideriamo infatti l'operatore

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{p}} \cdot \tilde{\sigma} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \hat{\mathbf{p}} \cdot \tilde{\sigma} \end{pmatrix}$$

che commuta con H. Assumendo, senza perdere in generalità, che l'impulso sia nella direzione dell'asse z, le componenti diagonali di Λ sono $\sigma_{\mathbf{z}}$ e applicando l'operatore $\mathbf{\Lambda}$ ai due stati degeneri si trova che gli autovalori sono ± 1, corrispondenti ai due possibili valori della proiezione lungo z dello spin,cioè $\pm\frac{1}{2}$. In un caso lo spin è parallelo all'asse z, nell'altro è antiparallelo. L'osservabile $\mathbf{\Lambda}$ con autovalori ± 1 prende il nome di elicità.

17.2.2 Equazione di continuità

L'equazione di Dirac risponde ai requisiti di covarianza e pertanto può essere posta in forma covariante. A tale scopo definiamo

$$\gamma^0 = \beta, \quad \gamma^k = \beta\alpha^k \tag{17.15}$$

$$\gamma^\nu\gamma^\mu + \gamma^\mu\gamma^\nu = 2g^{\nu\mu}. \tag{17.16}$$

Moltiplicando l'equazione di Dirac per β, arriviamo alla sua forma covariante:

$$[i\gamma^\mu\partial\mu - m]\psi = 0. \tag{17.17}$$

Per stabilire l'equazione di continuità consideriamo l'equazione aggiunta

$$-i\gamma^\mu\partial\mu\psi^\dagger\gamma^{\mu\dagger} - m\psi^\dagger = 0, \tag{17.18}$$

dove $\psi^\dagger$ è il vettore riga le cui componenti sono le complesse coniugate di quelle di ψ. Applicando la proprietà $\gamma^{\mu\dagger} = \gamma^0\gamma^\mu\gamma^0$ e definendo $\bar{\psi} = \psi^\dagger\gamma^0$, otteniamo l'equazione coniugata della Eq.(17)

$$-i\partial_\mu\bar{\psi}\gamma^\mu = m\bar{\psi} \tag{17.19}$$

Moltiplicando l'Eq.(17) per $\bar{\psi}$ a sinistra e l'Eq.(19) per ψ a destra e sottraendo membro a membro si ottiene l'equazione di conitinuità in forma covariante:

$$i\partial_\mu(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) = 0 \tag{17.20}$$

dove il quadrivettore dentro parentesi va identificato con il quadrivettore densità di carica-corrente $j^\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu\psi$. La componente $j^0 = \bar{\psi}\gamma^0\psi = \psi^\dagger\psi = |\psi|^2$ è la densità di probabilità, ed è definita positiva diversamente da quella che scaturisce dall'equazione di KG. Calcolando il vettore corrente di probabilità $\vec{j}^k$ per i due autostati di energia negativa, si trova che questa risulta opposta all'impulso, contro le aspettative. Tuttavia, se reinterpretiamo la corrente di probabilità come corrente di carica, allora per $E > 0$ una corrente di carica negativa (elettrone) risulta nella direzione dell'impulso; nel caso $E < 0$ la corrente di negativa opposta all'impulso equivale ad una carica positiva (positrone) concorde con l'impulso. Quindi le soluzioni ad energua negativa si possono reinterpretare come particelle di carica positiva, come vedremo dopo. Queste particelle si sono trovate e si chiamano positroni e sono un esempio di antiparticelle.

17.2.3 Mare di Dirac

Nonostante l'equazione di Dirac risolva la difficolta' della interpretazione probabilistica della funzione d'onda di KG, resta il problema degli stati di energia negativa. Dirac ipotizza che gli stati di energia negativa siano tutti occupati da elettroni (mare di Dirac)(vedi fig.1). L'aggiunta di un elettrone non puo' portarlo che in uno stato di energia positiva (sinistra della figura), poiche' tutti gli stati di energia negativa sono occupati e gli elettroni sono fermioni. La sottrazione di un elettrone di energia -E dal mare di Dirac(centro della figura), crea una buca che di un elettrone che puo' essere reinterpretata come una particella di carica opposta di energia +E, d'accordo con la reinterpretazione dell'equazione di continuità. Un processo possibile e' che un fotone di energia maggiore di $2mc^2$ ecciti un elettrone da uno stato con E¡0 ad uno stato con E¿0, lasciando una buca nel mare di Dirac (destra della figura). Lo stato finale e' quello di una particella ed una buca, che si puo' quindi reinterpretare come la formazione di una coppia e^+e^-. La previsione di questo tipo di processo e' il maggiore successo del modello del mare di Dirac, che tuttavia va abbandonato per le grosse contraddizioni cui va incontro. Ma la validità dell'equazione di Dirac verrà riconfermata dalla teoria dei campi quantizzati.

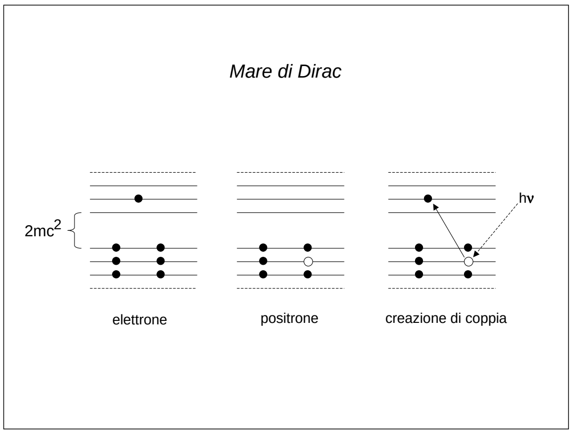

Figura 17.1: Mare di Dirac