27 Równanie Diraka

27.1 Równanie Kleina-Gordona dla cząstki swobodnej

Równanie Schrödingera jest w rzeczywistości operatorowym zapisem klasycznego związku

$$E = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} \tag{27.1}$$

gdzie pęd i energię zatępujemy operatorami

$$\boldsymbol{p} \to -i\hbar\boldsymbol{\nabla},\ E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}. \tag{27.2}$$

Najprostsze uogólnienie tej procedury na przypadek relatywistyczny, polega na użyciu (27.2) we wzorze relatywistycznym

$$E^2 = c^2\boldsymbol{p}^2 + m^2c^4, \tag{27.3}$$

co daje równanie zwane dziś równaniem Kleina-Gordona

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\varphi = \left(-\hbar^2c^2\boldsymbol{\nabla}^2 + m^2c^4\right)\varphi. \tag{27.4}$$

Równanie to dopuszcza rozwiązania w postaci fali płaskiej

$$\varphi = e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} \tag{27.5}$$

gdzie

$$E = \hbar\omega = \pm\sqrt{\hbar^2c^2k^2 + m^2c^4} \tag{27.6}$$

Jak widać pojawiają się rozwiązania o ujemnej energii, których interpretacja nie jest jasna (antycząstki).

Wyprowadźmy teraz równanie ciągłości (poprzez analogię do równania Schrödingera). W przypadku nierelatywistycznym mieliśmy

$$\frac{\partial}{\partial t}P(\boldsymbol{r},t) + \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{S} = 0 \tag{27.7}$$

gdzie

$$P = \psi^*\psi,\ \boldsymbol{S} = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\,\boldsymbol{\nabla}\psi - \psi\,\boldsymbol{\nabla}\psi^*\right) \tag{27.8}$$

Odejmijmy stronami równania

$$\begin{aligned} -\hbar^2\varphi^*\frac{\partial^2}{\partial t^2}\varphi &= \varphi^*\left(-\hbar^2c^2\boldsymbol{\nabla}^2 + m^2c^4\right)\varphi \\ -\hbar^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial t^2}\varphi^* &= \varphi\left(-\hbar^2c^2\boldsymbol{\nabla}^2 + m^2c^4\right)\varphi^* \end{aligned} \tag{27.9}$$

$$\left[\varphi^* \frac{\partial^2}{\partial t^2}\varphi - \varphi \frac{\partial^2}{\partial t^2}\varphi^*\right] = c^2 \left[\varphi^* \boldsymbol{\nabla}^2 \varphi - \varphi \boldsymbol{\nabla}^2 \varphi^*\right]. \tag{27.10}$$

Przepisując te równania jako

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\varphi^* \frac{\partial}{\partial t}\varphi - \varphi \frac{\partial}{\partial t}\varphi^*\right] = c^2 \boldsymbol{\nabla} \left[\varphi^* \boldsymbol{\nabla} \varphi - \varphi \boldsymbol{\nabla} \varphi^*\right] \tag{27.11}$$

widzimy, że gęstość prądu jest identyczna jak w przypadku nierelatywisycznym

$$\boldsymbol{S} = -\frac{i\hbar}{2m}\left[\varphi^* \boldsymbol{\nabla} \varphi - \varphi \boldsymbol{\nabla} \varphi^*\right] \tag{27.12}$$

natomiast odpowiednik gęstości prawdopodobieństwa jest wówczas dany jako

$$P = \frac{i\hbar}{2mc^2}\left[\varphi^* \frac{\partial}{\partial t}\varphi - \varphi \frac{\partial}{\partial t}\varphi^*\right]. \tag{27.13}$$

Tak zdefiniowane P nie jest dodatnio określone, nie można go więc zinterpretować jako gęstości prawdopodobieństwa (po pomnożeniu przez e możnaby jako gęstość ładunku). Jest to związane z tym, że równanie (27.4) jest drugiego rzędu w pochodnych po czasie.

27.2 Równanie Diraka dla cząstki swobodnej

Dirac zaproponował użycie związku liniowego, kosztem wprowadzenia niekomutujących, bezwymiarowych obiektów $\boldsymbol{\alpha}$ i β (macierze):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = \left(c\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{p} + \beta mc^2\right)\psi. \tag{27.14}$$

Podnosząc (operatorowo) równanie (27.14) do kwadratu powinišmy dostać równanie (27.4):

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi = \left(c\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{p} + \beta mc^2\right)\left(c\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{p} + \beta mc^2\right)\psi. \tag{27.15}$$

Rozpiszmy prawą stronę

$$\begin{aligned} & c^2 \alpha_i \alpha_j p_i p_j + mc^3 \left(\alpha_i \beta + \beta \alpha_j\right) + m^2 c^4 \beta^2 \\ & = c^2 \frac{1}{2}\left(\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i\right) p_i p_j + mc^3 \left(\alpha_i \beta + \beta \alpha_j\right) + m^2 c^4 \beta^2. \end{aligned} \tag{27.16}$$

gdzie skorzystaliśmy z faktu, że operator $p_i p_j$ jest symetryczny w indeksach ij. Porównując z (27.4) lub z (27.3) mamy

$$\begin{aligned} \left(\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i\right) &= 2\delta_{ij}, \\ \left(\alpha_i \beta + \beta \alpha_j\right) &= 0, \\ \beta^2 &= 1. \end{aligned} \tag{27.17}$$

Znalezienie rozwiązań równań (27.17) dyskutowane jest w literaturze, tu podamy jedynie ostateczne rozwiązanie. Okazuje się, że najniższy możliwy wymiar macierzy α_i i β jest 4 i mają one postać

$$\alpha_i = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{bmatrix}, \ \beta = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{27.18}$$

gdzie σ_i są macierazmi Pauliego:

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \ \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \ \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \tag{27.19}$$

Sprawdźmy

$$\begin{aligned}(\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i) &= \begin{bmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i \end{bmatrix}\end{aligned} \tag{27.20}$$

Pamiętając, że

$$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k \tag{27.21}$$

dostajemy pierwszą z równości (27.17). Z kolei

$$\begin{aligned}(\alpha_i\beta + \beta\alpha_j) &= \begin{bmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & -\sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{bmatrix} = 0.\end{aligned} \tag{27.22}$$

Wreszcie

$$\beta^2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = 1. \tag{27.23}$$

Oczywiście wybór (27.18) nie jest jednoznaczny. Macierze unitarne równoważne

$$\alpha_i' = U^\dagger\alpha_i U, \ \beta' = U^\dagger\beta U \tag{27.24}$$

także spełniają związki (27.17). Reprezentację macierzy α_i i β daną wzorami (27.18) nazywamy reprezentacją Bjorkena.

Mamy zatem równanie liniowe w pochodnej czasowej, ale funkcja falowa jest czterowymiarowym spinorem. Rozwiązanie swobodnego równania Diraka zapisujemy w postaci fali płaskiej

$$\psi(t, \boldsymbol{r}) = e^{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - Et)/\hbar}u \tag{27.25}$$

gdzie u jest czterowymiarowym (wektorem) spinorem

$$u = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{bmatrix}. \tag{27.26}$$

który warto rozpisać za pomocą dwóch dwukompkonentowych tzw. spinorów Weyla ϕ i η:

$$w = \left[\begin{array}{c} \phi \\ \eta \end{array} \right]. \tag{27.27}$$

Spodziewamy się czterech liniowo niezależnych (ortogonalnych) rozwiązań na w. Po podstawieniu fali płaskiej (27.25) do równania (27.14) (w reprezentacji Diraka (27.18)) otrzymujemy macierzowe równanie na $w(p)$ (tutaj E jak i $\boldsymbol{p}$ są wartościami własnymi operatora energii i pędu):

$$\left[\begin{array}{cc} (E-m) & -\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} \\ -\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} & (E+m) \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} \phi \\ \eta \end{array} \right] = 0. \tag{27.28}$$

Równanie (27.28) przyjmuje postać dwóch sprzężonych równań na spinory ϕ oraz η:

$$\begin{aligned} (E-m)\,\phi &= \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\,\eta, \\ (E+m)\,\eta &= \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\,\phi. \end{aligned} \tag{27.29}$$

Korzystając z drugiego z tych równań mamy

$$\eta = \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E+m}\phi \tag{27.30}$$

lub alternatywnie korzystając z pierwszego:

$$\phi = \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E-m}\eta. \tag{27.31}$$

Aby przy takim wyborze spełnione było równanie pierwsze (drugie), musi zajść

$$\begin{aligned} (E-m)(E+m)\phi &= (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})^2\,\phi, \\ (E+m)(E-m)\eta &= (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})^2\,\eta. \end{aligned} \tag{27.32}$$

Pamiętając, że $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})^2 = p^2$ widzimy, że równania te są spełnione dla dwóch możliwych wartości E:

$$E_\pm = \pm\sqrt{\boldsymbol{p}^2 + m^2}. \tag{27.33}$$

Dla dodatniego pierwiastka, który oznaczymy $E_p = E_+$, istnieją dwa liniowo niezależne rozwiązania, które otrzymujemy przy użyciu dwóch liniowo niezależnych spinorów Weyla

$$\chi^{(1)} = \left[\begin{array}{c} 1 \\ 0 \end{array} \right],\ \chi^{(2)} = \left[\begin{array}{c} 0 \\ 1 \end{array} \right]. \tag{27.34}$$

oraz równania (27.30)

$$w^{(1,2)} = \left[\begin{array}{c} \chi^{(1,2)} \\ \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E_p+m}\chi^{(1,2)} \quad . \end{array} \right] \tag{27.35}$$

Natomiast dla równania o ujemnej energii $E = -E_p$ posłużymy się równaniem (27.31)

$$w^{(3,4)} = \left[\begin{array}{c} \frac{-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E_p+m}\eta \\ \eta \end{array} \right]. \tag{27.36}$$

Z rozwiązaniem tym wiążą się dwie subtelności. Po pierwsze rozwiązania dla ujemnej energii chcemy zinterpretować jako antycząstki o dodatniej energii, stąd jeżeli zmieniając znak E chcemy zachować względny znak między dwoma członami fali płaskiej (27.25), to musimy zmienić znak pędu. Druga subtelność wiąże się z interpretacją rozwiązań równania Diraka o ujemnej energii przy pomocy koncepcji tzw. *morza Diraka.* Koncepcja ta zakłada, że próżnia jest takim rozwiązaniem równania Diraka, w którym wszystkie poziomy o energii ujemnej są zapełnione. Taki stan ma oczywiście nieskończoną energię i ładunek elektryczny, ale ponieważ fizyczne są tylko wzbudzenia, więc przyjmujemy go jako punkt odniesienia. Tej interpretacji możemy „pozbyć się" dopiero w teorii pola.

W tej konwencji cząstka odpowiada po prostu jakiemuś rozwiązaniu o dodatniej energii, a antycząstka odpowiada „opróżnieniu" jednego rozwiązania u ujemnej energii. Takie wzbudzenie (zwane często *dziurą*) ma energię dodatnią, a pęd i spin przeciwny do pędu i spinu opróżnionego poziomu. Zatem nie tylko musimy zmienić kierunek pędu, ale też rzut spinu. Czyli dwa rozwiązania o ujemnej energii o spinie „do góry" oraz „w dół" przyjmują odpowiednio postać

$$w^{(3,4)} = \left[\begin{array}{c} \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E_p+m}\chi^{(2,1)} \\ \chi^{(2,1)} \end{array} \right]. \tag{27.37}$$

Występujące w tych rozwiązaniach wartości własne energii ($E_p > 0$), pędu i spinu odnoszą się do fizycznych wartości energii, pędu i spinu antycząstki.

Rozwiązania (27.35) i (27.37) można unormować

$$w^{(i)} \to \frac{1}{\sqrt{1+p^2/(E_p+m)^2}} w^{(i)}. \tag{27.38}$$

Zwykło się jednak przyjmować inną normalizację:

$$u(p,s) = \sqrt{E_p+m} \left[\begin{array}{c} \chi(s) \\ \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E_p+m}\chi(s) \end{array} \right], \quad v(p,s) = \sqrt{E_p+m} \left[\begin{array}{c} \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E_p+m}\chi(s) \\ \chi(s) \end{array} \right], \tag{27.39}$$

gdzie $s = 1, 2$ numeruje składowe spinowe. Tak unormowane rozwiązania spełniają

$$u^\dagger u = v^\dagger v = 2E_p. \tag{27.40}$$

Aby do końca zrozumieć znaczenie fizyczne rozwiązań (27.35) i (27.37) zdefiniujmy operator spinu (na chwilę przywrócimy $\hbar$):

$$\boldsymbol{\Sigma} = \frac{\hbar}{2} \left[\begin{array}{cc} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{array} \right]. \tag{27.41}$$

Działając tym operatorem na rozwiązania „w spoczynku": $\boldsymbol{p} = 0$, otrzymujemy, że $w^{(1,4)}$ odpowiadają rozwiązaniom o $s_3 = +\hbar/2$ a rozwiązania $w^{(2,3)}$ mają $s_3 = -\hbar/2$. Pojawienie się spinu i rozwiązań o ujemnej energii interpretowanych jako antycząstki jest konsekwencją niezmienniczości relatywistycznej. Istnienie antycząstek zostało potwierdzone doświadczalnie przez Carla Andersona w roku 1932 i doprowadziło do przyznania nagrody Nobla Dirakowi w roku 1933.

Zwróćmy uwagę na dodatniość gęstości prawdopodobieństwa nawet dla $E < 0$:

$$P = \psi^\dagger \psi, \; \boldsymbol{S} = c\psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi, \tag{27.42}$$

co odróżnia te rozwiązania od analogicznych rozwiązań równania Kleina-Gordona.

Równanie Diraka tradycyjnie zapisuje się przy pomocy macierzy γ^μ Diraka zdefiniowanych jako

$$\gamma^0 = \beta, \qquad \boldsymbol{\gamma} = \beta \boldsymbol{\alpha}. \tag{27.43}$$

Mnożąc stronami równanie (27.14) przez β otrzymujemy, pamiętając, że $\beta^2 = 1$:

$$\left(i\gamma^0 \partial_t + i\gamma^k \partial_k - m \right) \psi = 0. \tag{27.44}$$

Często używa się notacji „slash" Diraka

$$\gamma^0 \partial_t + \gamma^k \partial_k = \gamma^\mu \partial_\mu = \not{\partial} \tag{27.45}$$

i wówczas równanie Diraka (27.14) przyjmuje bardzo prostą postać:

$$\left(i\not{\partial} - m \right) \psi = 0. \tag{27.46}$$

Macierze γ^μ spełniają reguły antykomutacji

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}. \tag{27.47}$$

27.3 Oddziaływanie z polem elektromagnetycznym

Oddziaływanie z zewnętrznym polem elektromagnetycznym wprowadzamy stosując *zasadę minimlnego sprzężnia*

$$\begin{aligned} c\boldsymbol{p} &\to c\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}, \\ E &\to E - qV. \end{aligned} \tag{27.48}$$

Równanie Diraka przyjmuje wówczas postać:

$$\left((E - qV) - \boldsymbol{\alpha} \cdot (c\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}) - \beta mc^2 \right) \psi = 0. \tag{27.49}$$

Mnożąc równanie (27.49) przez (pamiętajmy, że zarówno E jak i $\boldsymbol{p}$ są operatorami):

$$\left((E - qV) + \boldsymbol{\alpha} \cdot (c\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}) + \beta mc^2 \right)$$

dostajemy

$$\begin{aligned} D^2 &= \left((E - qV) + \boldsymbol{\alpha} \cdot (c\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}) + \beta mc^2 \right) \left((E - qV) - \boldsymbol{\alpha} \cdot (c\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}) - \beta mc^2 \right) \\ &= (E - qV)^2 - m^2c^4 - (\boldsymbol{\alpha} \cdot (c\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}))^2 \\ &- (E - qV) \; \boldsymbol{\alpha} \cdot (c\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}) + \boldsymbol{\alpha} \cdot (c\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}) \; (E - qV) \, . \end{aligned}$$

Zauważmy, że człony $\boldsymbol{\alpha} \cdot (c\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A})\beta mc^2$ oraz $(E - qV)\,\beta mc^2$ kasują się.

Wyliczmy drugi człon postaci

$$\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{a}\, \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{b}.$$

Ponieważ

$$\alpha_i \alpha_j = \frac{1}{2}\{\alpha_i, \alpha_j\} + \frac{1}{2}[\alpha_i, \alpha_j] = \delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk}\Sigma_k. \tag{27.50}$$

Stąd

$$\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{a}\, \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{b} = \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} + i\,(\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}) \cdot \boldsymbol{\Sigma}. \tag{27.51}$$

Mamy więc

$$(\boldsymbol{\alpha} \cdot (c\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}))^2 = (c\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A})^2 + (c\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}) \times (c\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}) \cdot \boldsymbol{\Sigma}. \tag{27.52}$$

Drugi człon nie znika

$$(c\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}) \times (c\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}) = -qc\,(\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{p} + \boldsymbol{p} \times \boldsymbol{A}) = i\hbar qc\,(\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A}) = i\hbar qc\boldsymbol{B}, \tag{27.53}$$

gdzie $\boldsymbol{B}$ jest polem magnetycznym. Stąd

$$-\,(\boldsymbol{\alpha} \cdot (c\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}))^2 = -(c\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A})^2 + \hbar qc\,\boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{\Sigma}. \tag{27.54}$$

Z kolei

$$\begin{aligned}
&-\,(E - qV)\ \boldsymbol{\alpha} \cdot (c\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}) + \boldsymbol{\alpha} \cdot (c\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A})\ (E - qV) \\
&= q\,\boldsymbol{\alpha} \cdot (E\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}E) + qc\,\boldsymbol{\alpha} \cdot (V\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}V) \\
&= iq\hbar c\,\boldsymbol{\alpha} \cdot \left(\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} V\right) = -iq\hbar c\,\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{E},
\end{aligned} \tag{27.55}$$

gdzie wektor $\boldsymbol{E}$ (w odróznieniu od energii E) oznacza pole elektryczne:

$$\boldsymbol{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} - \boldsymbol{\nabla} V.$$

Wreszcie dokonamy przybliżenia nierelatywistycznego definiując energię *nierelatywistyczną* E'

$$E = E' + mc^2, \tag{27.56}$$

gdzie człon mc^2 uważamy za duży. Wówczas

$$\begin{aligned}
(E - qV)^2 - m^2c^4 &= \left(E' + mc^2 - qV\right)^2 - m^2c^4 \\
&= (E' - qV)^2 + 2mc^2\,(E' - qV)\,.
\end{aligned} \tag{27.57}$$

Zaniedbując pierwszy człon, mamy

$$D^2 = 2mc^2\,(E' - qV) - (c\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A})^2 + \hbar qc\,\boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{\Sigma} - iq\hbar c\,\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{E} \tag{27.58}$$

i w konsekwencji równanie Diraka możemy zapisać jako

$$\left(\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A})^2+qV-\frac{\hbar q}{2mc}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\Sigma}+\frac{iq\hbar}{2mc}\,\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{E}\right)\psi=E'\psi. \tag{27.59}$$

Pierwsze dwa człony w równaniu (27.59) odpowiadają hamiltonianowi cząstki bezspinowej w polu elektromagnetycznym $(V,\boldsymbol{A})$. Drugi człon (dla $q=-e$) ma postać

$$-\frac{\hbar q}{2mc}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\Sigma}=2\frac{e\hbar}{2mc}\frac{1}{\hbar}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}=g_s\mu_B\frac{1}{\hbar}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}, \tag{27.60}$$

gdzie operator spinu ma postać

$$\boldsymbol{S}=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma}.$$

Hamiltonian (27.60) pokrywa się z wcześniej wprowadzonym hamiltonianem Pauliego, z tym że otrzymaliśmy wynik

$$g_s=2. \tag{27.61}$$

Ostatni człon $\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{E}$ zawiera tylko elementy pozadigonalne, a więc miesza górne składowe bispinora Diraka z dolnymi, które są małe, rzędu (v/c) i możemy je zaniedbać.

Systematyczne rozwinięcie równania Diraka w potęgi (v/c) nosi nazwę transformcji Foldy-Wouthuyusen'a i wykracza poza zakres tego wykładu.

27.4 Atom wodoru

Aby zlaeźć rozwiązanie równania Diraka dla potencjału Coulomba

$$V=-\frac{Ze^2}{r}$$

musimy najpierw rozseparować zmienne na część kątową i radialną. Zauważmy, że całkowity moment pędu, który jest jest sumą

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}+\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma} \tag{27.62}$$

komutuje z hamiltonianem

$$H=\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+\beta m+V(r). \tag{27.63}$$

Zatem dobre liczby kwntowe to energia E, J^2 oraz J_z.

Sprawdźmy, że rzeczywiście $\boldsymbol{J}$ komutuje z H. W sposób oczywisty $\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ komutuje z $\beta m+V(r)$. Zbadajmy komutator

$$\left[\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p},(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})_i\right]=\varepsilon_{ijk}\alpha_m\left[p_m,r_jp_k\right]=\varepsilon_{ijk}\alpha_m\left[p_m,r_j\right]p_k=-i\hbar\varepsilon_{ijk}\alpha_jp_k.$$

Z kolei $\boldsymbol{\Sigma}$ komutuje z $V(r)$. Obliczmy dwa komutatory

$$
\begin{aligned}
\frac{\hbar}{2}\left[\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p},\Sigma_i\right] &= p_k\left[\alpha_k,\Sigma_i\right] \\
&= \frac{\hbar}{2}p_k\left\{\begin{bmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i\end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i\end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0\end{bmatrix}\right\} \\
&= \frac{\hbar}{2}p_j\begin{bmatrix} 0 & [\sigma_k,\sigma_i] \\ [\sigma_k,\sigma_i] & 0\end{bmatrix} \\
&= i\hbar\varepsilon_{kij}p_k\alpha_j = i\hbar\varepsilon_{ijk}\alpha_j p_k
\end{aligned}
$$

oraz

$$
m\left[\beta,\Sigma_i\right] = m\left\{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i\end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i\end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1\end{bmatrix}\right\} = 0.
$$

Zatem

$$
\left[\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+\beta m+V(r),(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})_i+\frac{\hbar}{2}\Sigma_i\right] = \left[\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p},(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})_i\right]+\frac{\hbar}{2}\left[\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p},\Sigma_i\right]=0.
$$

Przytoczymy tu tylko rozwiązanie, którego wyprowadzenie można znaleźć w podręcznikach relatywistycznej mechaniki kwantowej

$$
E_n = \frac{mc^2}{\sqrt{1+\gamma^2/(\sqrt{(j+1/2)^2-\gamma^2}+n)^2}}, \quad \gamma=\frac{Ze^2}{\hbar c}. \tag{27.64}
$$

Widzimy, że energia zależy tylko od $n = 0, 1, 2\ldots$ i j. Zakładając, że γ jest małe ($c \to \infty$) rozwińmy energię w potęgi γ

$$
\begin{aligned}
E_n &\simeq mc^2\left(1-\frac{\gamma^2}{2\left(\sqrt{(j+1/2)^2-\gamma^2}+n\right)^2}+\ldots\right) \\
&\simeq mc^2-\frac{Z^2e^4m}{2\hbar^2(j+1/2+n)^2}+\ldots
\end{aligned} \tag{27.65}
$$

Pierwszy człon odpowiada energii spoczynkowej elektronu, drugi energii wiązania, równej energii otrzymanej z równania Schrödingera:

$$
E_n^{\text{Schr.}} - \frac{Z^2e^4m}{2\hbar^2n^2},\ n=1,2,3\ldots
$$

Jednakże klasyfikacja poziomów jest inna, gdyż energia zależy tu od j a nie od l (spin!).