Relatywistyczna mechanika kwantowa

Rzeszów University of Technology

11 lutego 2023

- W relatywistycznej mechanice kwantowej funkcja falowa elektronu $\Psi(\vec{r}, t) = \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}$ jest bispinorem, w którym ξ i η - spinory. Więc, funkcja falowa Ψ ma 4 składowe.
- Składowe każdego ze spinorów ξ, η zawierają informację o spinie. Natomiast ξ i η odnoszą się odpowiednio do pasma **elektronowego** z energią pokoju mc^2 lub **pozytonowego** z energią pokoju $-mc^2$.
- **Równanie falowe relatywistycznej mechaniki kwantowej** ma postać

$$\left(\gamma^i p_i - mc\right)\Psi = 0 \tag{1}$$

gdzie $\hat{p}_i = (\frac{i\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t}, -\vec{p})$ - 4-wektor pędu, $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$, $\gamma^i = (\gamma^0, \vec{\gamma})$ - 4-wektor składający sie z macierzy Diraca

$$\hat{\gamma}^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad \hat{\vec{\gamma}} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\vec{\sigma}} \\ -\hat{\vec{\sigma}} & 0 \end{pmatrix} \tag{2}$$

gdzie $\mathbb{1} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ - macierz jednostkowa 2×2.

- Operator działający na bispinor w równaniu (1) jest **niezmienniczy przy przekształceniach Lorentza** ponieważ mieści iloczyn skalarny w 4-czasoprzestrzeni Minkowskiego.

- Po przemnożeniu równania (1) z lewej strony na macierz $\hat{\gamma}_0$ dostajemy **równanie falowe w reprezentacji standardowej**

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}\right) \Psi(\vec{r}, t) = 0, \tag{3}$$

gdzie $\hat{H}$ - **hamiltonian Diraca** - macierz 4×4

$$\hat{H} = -i\hbar c\, \hat{\vec{\alpha}} \cdot \vec{\nabla} + mc^2 \hat{\beta} \tag{4}$$

Macierzy $\hat{\alpha}$ i $\hat{\beta}$ w równaniu (4)

$$\hat{\vec{\alpha}} = \hat{\gamma}^0 \vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\vec{\sigma}} \\ \hat{\vec{\sigma}} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\beta} = \hat{\gamma}^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}. \tag{5}$$

Korzystając z (4) i (5) możemy przedstawić hamiltonian Diraca w postaci macierzy 2×2 ze składowymi, które są macierzami w przestrzeni spinowej

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} mc^2 & -i\hbar c\, \hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{\nabla} \\ -i\hbar c\, \hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{\nabla} & -mc^2 \end{pmatrix} \tag{6}$$

- Po podstawieniu $\Psi(\vec{r}, t) = e^{-iEt/\hbar}\, \psi(\vec{r})$ w (3) dostajemy **równanie Diraca dla stanów stacjonarnych**

$$(\hat{H} - E)\, \psi(\vec{r}) = 0 \tag{7}$$

Elektron swobodny

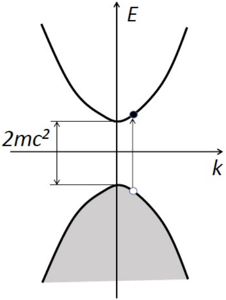
- Równanie Diraca (7) z hamiltonianem (6) ma rozwiązanie w postaci fal płaskich,

$$\psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \varphi_k \\ \chi_k \end{pmatrix} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \tag{8}$$

gdzie φ_k i χ_k - spinory.

- Podstawiamy (8) w równanie (7)

$$\begin{pmatrix} mc^2 - E & \hbar c\,\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{k} \\ \hbar c\,\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{k} & -mc^2 - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_k \\ \chi_k \end{pmatrix} = 0 \tag{9}$$



- Wyznacznik macierzy, która działa na bispinor, powinien być równy zero.

$\Rightarrow$ Z tego dostajemy energię własną elektronu (widmo elektronowe)

$$E(k) = \pm\sqrt{m^2c^4 + c^2\hbar^2k^2} \tag{10}$$

Są to dwa pasma energii - elektronowe i pozytonowe rozdzielone energią próżni $2mc^2$.

- W stanie równowagi świata wszystkie stany elektronowe z $E(k) < 0$ są wypełnione elektronami i tworzą morze Diraca. Wzbudzenie elektronu z pasma pozytonowego w stan z $E(k) > 0$ potrzebuje energii $\geqslant 2mc^2$. W wyniku absorpcji γ-kwantu (fotonu) tej energii generuje się para cząstek elektron-pozyton.

- Równanie falowe (3) jest niezmiennicze przy globalnej transformacji cechowania

$$\Psi \to U\Psi, \qquad \Big(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}\Big) \to U\Big(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}\Big)\, U^{-1} = \Big(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}\Big), \tag{11}$$

gdzie $U = e^{ie\phi}$ - operator unitarny, $U^{\dagger} = U^{-1}$.

- Równanie (3) zmienia się przy lokalnej transformacji $U(\vec{r}, t) = e^{ie\phi(t,\vec{r})}$ ponieważ lokalna transformacja generuje pole cechowania

$$\begin{aligned} e^{ie\phi}\Big[i\hbar\tfrac{\partial}{\partial t} + i\hbar c\hat{\vec{\alpha}}\cdot\vec{\nabla} - mc^2\hat{\beta}\Big]e^{-ie\phi} &= i\hbar\Big(\tfrac{\partial}{\partial t} - ie\,\tfrac{\partial\phi}{\partial t}\Big) + i\hbar c\hat{\vec{\alpha}}\cdot\Big[\vec{\nabla} - ie(\vec{\nabla}\phi)\Big] - mc^2\hat{\beta} \\ &= i\hbar\Big(\tfrac{\partial}{\partial t} - \tfrac{ie\varphi_g}{\hbar}\Big) + i\hbar c\hat{\vec{\alpha}}\cdot\Big(\vec{\nabla} - \tfrac{ie\vec{A}_g}{\hbar c}\Big) - mc^2\hat{\beta} \end{aligned} \tag{12}$$

gdzie $\varphi_g = \hbar\,\partial_t\phi$ i $\vec{A}_g = \hbar c\vec{\nabla}\phi$ - skalarny i wektorowy potencjały pola cechowania.

- Równanie Diraca zostaje niezmienniczym przy lokalnej transformacji jeśli **wprowadzimy w równanie Diraca pole elektromagnetyczne** przez potencjały pola $(\varphi, \vec{A})$

$$\hat{H} = e\varphi - i\hbar c\,\hat{\vec{\alpha}}\cdot\Big(\vec{\nabla} - \frac{ie\vec{A}}{\hbar c}\Big) + mc^2\hat{\beta} \tag{13}$$

i przy przekształceniu lokalnym pole elektromagnetyczne ulega zmianie $\varphi \to (\varphi + \hbar\,\partial_t\phi)$ i $\vec{A} \to (\vec{A} - \hbar c\vec{\nabla}\phi)$.

- Wprowadzimy działanie dla funkcji falowej

$$S[\Psi^\dagger(\vec{r},t),\Psi(\vec{r},t)] = i\int d^3r\,dt\ \ \Psi^\dagger\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}\right)\Psi \tag{14}$$

- Zasada najmniejszego działania $\delta S = 0$ przy wariacji $\delta\Psi^\dagger$ prowadzi do równania falowego. Wariacja S względem $\delta\Psi$ prowadzi do równania, które jest hermitowsko-sprzężone do równania falowego.
- Przedstawimy średnią wartość dowolnej wielkości fizycznej f w postaci całki po torach

$$\overline{f} = \frac{1}{Z}\int \mathcal{D}\Psi^\dagger\,\mathcal{D}\Psi\ (\Psi^\dagger\hat{f}\Psi)\ e^{S(\Psi^\dagger,\Psi)} \tag{15}$$

gdzie całkowanie idzie po wszystkich możliwych $\Psi^\dagger,\Psi$ i oznaczyliśmy

$$Z = \int \mathcal{D}\Psi^\dagger\,\mathcal{D}\Psi\ e^{S(\Psi^\dagger,\Psi)} \tag{16}$$

\- **funkcja partycji** (*partition function*)

- Główny wkład w całkę (15) będzie od tych $\Psi^\dagger,\Psi$, które są rozwiązaniem równania falowego. Natomiast wkład od bliskich torów kompensuje wprowadzenie funkcji partycji Z.