Pauliho rovnice

Přípravná část

Magnetický moment a moment hybnosti

Pohybuje-li se elektron s nábojem $q=-e$ v elektromagnetickém poli s vektorovým potenciálem ***A***, musíme hybnost nahradit výrazem:

$$\left(p+eA\right)^2=-\hbar^2\Delta-i\hbar eA\nabla-ie\hbar divA+e^2A^2 \qquad (0.1)$$

Pro konstantní pole $B=rotA$ mířící podél osy z můžeme vzít vektorový potenciál ve tvaru:

$$A=\frac{B}{2}\left(-y,x,0\right) \qquad (0.2)$$

Vynecháme-li pro slabá magnetická pole člen A^2 v rovnici (0.1) a uvážíme-li podmínku kladenou na vektorový potenciál ***A*** při jeho zavádění ($divA=0$), dostaneme hamiltonián pro vodíku podobný atom v uvažovaném magnetickém poli ve tvaru:

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}-\frac{ie\hbar B}{2m_e}\left(-y\frac{\partial}{\partial x}+x\frac{\partial}{\partial y}\right)=-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}+\frac{eB}{2m_e}L_z \qquad (0.3)$$

Jestliže uvážíme vztah pro moment hybnosti:

$$L=r\times p=\left(x,y,z\right)\times\left(-i\hbar\right)\left(\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial}{\partial y},\frac{\partial}{\partial z}\right)=i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial z},x\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial x},y\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial y}\right) \qquad (0.4)$$

Napíšeme-li potenciální energii odpovídající magnetickému poli ve tvaru $-BM=-BM_z$, vidíme, že operátor magnetického momentu elektronu souvisí s jeho orbitálním momentem hybnosti dle vztahu:

$$M=-\frac{e}{2m_e}L \qquad (0.5)$$

Spin elektronu

Spin je vnitřní moment hybnosti a příslušný moment hybnosti se označuje ***S***. S ním související magnetický moment můžeme napsat ve tvaru:

$$M=-\frac{e}{m_e}S \qquad (0.6)$$

V analogii s orbitálním momentem hybnosti předpokládáme stejné komutační relace:

$$\left[S_x, S_y\right] = i\hbar S_z,\ \left[S_y, S_z\right] = i\hbar S_x,\ \left[S_z, S_x\right] = i\hbar S_y \tag{0.7}$$

Neboť hodnota průmětu spinu na libovolnou osu měření je rovna $\pm\hbar/2$ (Uhlenbeckova-Goudsmitova hypotéza), lze operátory jednotlivých složek spinu reprezentovat hermitovskými maticemi řádu dvě s vlastními čísly xxx (což znamená, že jejich kvadráty jsou jednotkové matice $\sigma^2_{x,y,z} = 1$):

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x,\ S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y,\ S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z \tag{0.8}$$

Z rovnice xxx pro tyto matice vyplývají komutační relace:

$$\left[\sigma_x, \sigma_y\right] = 2i\sigma_z,\ \left[\sigma_y, \sigma_z\right] = 2i\sigma_x,\ \left[\sigma_z, \sigma_x\right] = 2i\sigma_y \tag{0.9}$$

Ze vztahů (0.9) a $\sigma^2_{x,y,z} = 1$ vyplývá, že dané matice antikomutují ($\sigma_k\sigma_l + \sigma_l\sigma_k = 0$) (např. pro dvojici $\sigma_x\sigma_y$ lze odvodit:

$$2i\left(\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x\right) = \left(\sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y\right)\sigma_y + \sigma_y\left(\sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y\right) = 0 \tag{0.10}$$

a analogicky pro ostatní matice. Uvážením těchto vztahů získáme:

$$\left[\sigma_x, \sigma_y\right] = 2\sigma_x\sigma_y = 2i\sigma_z \tag{0.11}$$

neboli:

$$\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z,\ \sigma_y\sigma_z = i\sigma_x,\ \sigma_z\sigma_x = i\sigma_y \tag{0.12}$$

Těmto vztahům vyhovují různé matice. Používá se tato sada matic, které se nazývají Pauliho matice (pomocí těchto matic (a jednotkové) lze vyjádřit všechny hermitovské matice řádu 2):

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y = i\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Pauliho rovnice

Pokud vezmeme do úvahy vztah (0.6), můžeme pro pohyb elektronu v konstantním magnetickém poli ***B*** a skalárním potenciálu *V* napsat tzv. Pauliho rovnici:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left[\frac{\left(-i\hbar\nabla+eA\right)^2}{2m_e}-eV+\frac{e}{m_e}SB\right]\psi \tag{0.13}$$

Při přesnějším relativistickém výpočtu vodíku podobného atomu s pomocí Diracovy rovnice se zavádí operátor celkového momentu:

$$J=L+S \tag{0.14}$$

Energie pak závisí jak na hlavním kvantovém čísle *n*, tak na kvantovém čísle $j=l\pm 1/2$, a lze objasnit tzv. jemnou strukturu hladin. Po uvážení interakce magnetického momentu jádra (vodíku podobného atomu) s magnetickými momenty elektronu lze popsat i hyperjemnou strukturu hladin, kdy je vzhledem k hmotnosti jader rozštěpení hladin o asi tři řády menší než v případě jemné struktury.

Diracova rovnice

Přípravná část

Základy relativistické kvantové mechaniky

Kleinnova-Gordonova rovnice

Vyjdeme z rovnice:

$$E^2=c^2p^2+m_0^2c^4 \tag{0.15}$$

a dosaďme do ní místo klasických veličin operátory:

$$E\rightarrow ih\frac{\partial}{\partial t}\ ,$$

$$p\rightarrow -ih\nabla\ .$$

Dostaneme tak Klein-Gordonovu rovnici pro volnou částici:

$$\left(\Box-\frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\right)\psi=0 \tag{0.16}$$

kde $\Box=\Delta-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}$ je D'Alembertův operátor. Jedná se o rovnici druhého řádu v čase, a proto je potřeba pro určení vlnové funkce zadat jako počáteční podmínku nejen vlnovou funkci v čase t_0, ale i její první derivaci, což ve svých důsledcích znamená, že hustota pravděpodobnosti může nabývat i záporných hodnot. Toto vedlo Diraca k hledání jiné evoluční rovnice.

Diracova rovnice

Dirac zavedl vícekomponentovou vlnovou funkci, která může popisovat vnitřní stupně volnosti částice.

Předpoklady o pohybové rovnici:

Parciální diferenciální rovnice prvního řádu v čase.

Z důvodů relativistické kovariantnosti předpokládáme i první derivace vzhledem k prostorovým proměnným.

Protože prostor a čas jsou homogenní, omezíme se na rovnice s konstantními koeficienty.

Vzhledem k požadavku platnosti principu superpozice budeme předpokládat, že pohybová rovnice je lineární.

Protože neuvažujeme žádné zdroje částic, budeme rovněž předpokládat, že tato rovnice je homogenní (bez pravé strany).

Z předpokladů vyplývá obecný tvar rovnice:

$$\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}+\sum_{k=1}^{3}\alpha_k\frac{\partial}{\partial x_k}+\frac{im_0c}{\hbar}\beta\right)\psi=0, \qquad (0.17)$$

kde α_k a β jsou čtyři konstantní matice tvaru $N\times N$.

Z této rovnice zkusíme odvodit rovnici kontinuity a to tak, že celou rovnici hermitovsky sdružíme a zprava ji vynásobíme ψ . V druhém kroku rovnici (0.17) zleva vynásobíme ψ^+ a po sečtení obou rovnic dostáváme:

$$\frac{1}{c}\left(\psi^+\frac{\partial\psi}{\partial t}+\frac{\partial\psi^+}{\partial t}\psi\right)+\sum_{k=1}^{3}\left(\psi^+\alpha_k\frac{\partial\psi}{\partial x_k}+\frac{\partial\psi^+}{\partial x_k}\alpha_k^+\psi\right)+\frac{im_0c}{\hbar}\left(\psi^+\beta\psi-\psi^+\beta^+\psi\right) \qquad (0.18)$$

Abychom dostali rovnici kontinuity, předpokládejme, že všechny čtyři matice jsou hermitovské ($\alpha_k^+=\alpha_k$, $\beta^+=\beta$). Položíme-li:

$$\rho=\psi^+\psi=\sum_{l=1}^{N}\psi_l^*\psi_l \quad \text{a} \qquad (0.19)$$

$$j_k = c\psi^+ \alpha_k \psi \tag{0.20}$$

pak dostaneme rovnici kontinuity v jejím obvyklém tvaru:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div\left(j\right) = 0 \tag{0.21}$$

Je zřejmé, že $\rho \geq 0$ a lze proto tuto funkci interpretovat jako hustotu pravděpodobnosti.

Dále chceme, abychom v kvadrátu získali Klein-Gordonovu rovnici. Vynásobme proto operátor stojící v rovnici (0.17) před vlnovou funkcí zleva hermitovsky sdruženým operátorem. Abychom dospěli k požadované Kleain-Gordonově rovnici, musí matice splňovat tyto pravidla:

$$\beta^2 = E \tag{0.22}$$

$$\alpha_k \beta + \beta \alpha_k = 0 \tag{0.23}$$

$$\alpha_k \alpha_l + \alpha_l \alpha_k = 2\delta_{kl} E \tag{0.24}$$

kde *E* je jednotková matice. Z rovnice (0.23) vyplývá:

$$\det\left(a_k\right)\det\left(\beta\right) = \left(-1\right)^N \det\left(\beta\right)\det\left(a_k\right), \tag{0.25}$$

a proto musí být dimenze matic (*N*) sudá. Nejnižším řádem, pro který můžeme toto splnit je $N = 4$. Podmínky kladené na matice je neurčují jednoznačně. Jednou z možností jsou matice:

$$a_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \tag{0.26}$$

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{0.27}$$

kde 1, resp. 0 jsou jednotková, resp. Nulová matice řádu dvě a σ_k jsou Pauliho matice.

Požadavek relativistické formulace kvantové mechaniky má závažné fyzikální důsledky. Ukazuje na existenci vnitřního stupně volnosti částice (spinu) a předpovídá existenci antičástice (nábojové sdružení).