

Andrzej Raczyński

Mechanika kwantowa cz. 10

1 Elementy fizyki relatywistycznej

1.1 Transformacja Lorentza

Wprowadźmy kontrawariantny czterowektor

$$x = (x^0 = ct, x^1 = x, x^2 = y, x^3 = z) \quad (1)$$

i jego kowariantny odpowiednik

$$x_\mu = g_{\mu\nu}x^\nu, \quad (2)$$

gdzie g jest tensorem metrycznym

$$g = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Wskaźniki greckie przebiegają od 0 do 3, zachodzi sumowanie po powtarzającym się dwukrotnie wskaźniku.

Czterowektor pędu definiujemy jako

$$p^\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \hbar \left(\frac{i}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -i\nabla \right). \quad (4)$$

Transformacja Lorentza ma ogólną postać

$$x'^\mu = a^\mu_\nu x^\nu, \quad (5)$$

gdzie macierz a jest taka, że zachowana jest długość czterowektora $x^\mu x_\mu$, tzn. zachodzi $a^\mu_\nu a_\mu^\rho = \delta_\nu^\rho$ (delta Kroneckera).

Transformacje Lorentza obejmują obroty w płaszczyznach xy , yz , zx , przejście

do układu poruszającego się, czyli pseudoobrotu w płaszczyznach x^0x^j , ($j = 1, 2, 3$), odbicia przestrzenne i czasowe oraz złożenia tych transformacji. W przypadku transformacji do układu poruszającego się z prędkością v wzdłuż osi x macierz a ma postać

$$a = \begin{pmatrix} \cosh \beta & -\sinh \beta & 0 & 0 \\ -\sinh \beta & \cosh \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (6)$$

gdzie $\tanh \beta = \frac{v}{c}$.

Niezmiennikami transformacji Lorentza są w szczególności $x^\mu x_\mu = c^2 t^2 - \mathbf{r}^2$ i klasyczny $p^\mu p_\mu = \frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p}^2 = m^2 c^2$ oraz kwantowy odpowiednik tego ostatniego $-\hbar^2 (\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2)$. Czerowektor potencjału pola elektromagnetycznego ma postać $(\frac{\phi}{c}, \mathbf{A})$.

1.2 Równanie Kleina-Gordona

Równanie K-G opisuje relatywistyczną cząstkę bezspinową, np. pion, mezon K . Otrzymuje się je biorąc relatywistyczny związek między energią i pędem

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}, \quad (7)$$

podnosząc go do kwadratu, zastępując energię i pęd przez odpowiednie operatory i działając na funkcję

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi = 0. \quad (8)$$

W notacji czterowskaźnikowej równanie ma postać

$$\left(\frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x_\mu} + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi = 0 \quad (9)$$

lub

$$(p^\mu p_\mu - m^2 c^2) \psi = 0. \quad (10)$$

Biorąc równanie KG mnożone przez funkcję sprzężoną i równanie sprzężone mnożone przez funkcję niesprzężoną i odejmując, otrzymuje się równanie ciągłości

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \mathbf{j} = 0, \quad (11)$$

gdzie $\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2}(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi)$, oraz $\mathbf{j} = \frac{-i\hbar}{2m}[\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi]$. W notacji czterowskaźnikowej mamy $j = (c\rho, \mathbf{j})$, $j_\mu = \frac{i\hbar}{2m}(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x^\mu} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x^\mu} \psi)$. Równanie ciągłości w notacji niezmienniczej ma postać $\frac{\partial j^\mu}{\partial x^\mu} = 0$.

Dla rozwiązań o energii ujemnej gęstość prawdopodobieństwa nie jest dodatnio określona. Ma to związek z istnieniem antycząstek. Mnożąc gęstość prawdopodobieństwa przez ładunek elementarny e otrzymamy gęstość ładunku, która dla cząstek naładowanych ma dobrze określony sens: całka po całej przestrzeni V daje różnicę ładunku cząstek i antycząstek.

Wzór na gęstość prawdopodobieństwa sprowadza się w przybliżeniu do wzoru nierelatywistycznej mechaniki kwantowej, co można pokazać podstawiając $\psi = \phi \exp(-\frac{i}{\hbar} mc^2 t)$ i zakładając, że ϕ jest wolnozmienną funkcją czasu

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2}(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi) = \frac{i\hbar}{2mc^2}[|\phi|^2 \frac{-2imc^2}{\hbar} + \frac{\partial}{\partial t} |\phi|^2] \approx |\phi|^2. \quad (12)$$

Rozwiązania dla cząstki swobodnej mają postać

$$\psi_p(x) = C \exp(\mp \frac{i}{\hbar} p^\mu x_\mu) = C \exp[\mp \frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)], \quad (13)$$

gdzie $p_0 = \frac{E}{c} = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2 c^2}$. Żądając, aby całka po objętości z gęstości ładunku $e\rho$ dawała $\pm e$ otrzymamy $C = \sqrt{\frac{mc}{p_0 V}}$.

Komentarza wymaga zasada nieoznaczoności. Oszacowania nieoznaczoności dla pojedynczych zmiennych jednej cząstki o masie m dają: nieoznaczoność energii $\Delta E < mc^2$, nieoznaczoność pędu $\Delta p < mc$, nieoznaczoność położenia $\Delta x > \frac{\hbar}{2mc}$ nieoznaczoność czasu $\Delta t \approx \frac{1}{c} \Delta x > \frac{\hbar}{2mc^2}$, $\Delta p > \frac{\hbar}{\Delta x} \approx \frac{\hbar}{c \Delta t}$.

Równanie K-G jest fundamentalne w kwantowej teorii pola, natomiast nie da się go stosować jak równanie Schrödingera, ponieważ ze względu na silne oddziaływania uwzględnić trzeba kreację i anihilację różnych cząstek, w tym cząstek przenoszących oddziaływania.

1.3 Równanie Diraca

Równanie Diraca opisuje cząstki o spinie 1/2. Jego postać można zgadnąć, zakładając, że ma być równaniem 1-go rzędu na kilkuwierszową funkcję,

której każda składowa spełnia równanie K-G. Ma ono ogólną postać

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = c\alpha \mathbf{p} \Psi + \beta mc^2 \Psi \equiv H \Psi, \quad (14)$$

gdzie $\alpha = (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$, α_j oraz β są macierzami kwadratowymi hermitowskimi niezależnymi od czasu lub zmiennych przestrzennych. Podstawiając $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp(-\frac{i}{\hbar}Et)$ otrzymamy stacjonarne równanie Diraca

$$c\alpha \mathbf{p} \psi + \beta mc^2 \psi = E \psi \quad (15)$$

Bardziej szczegółowy zapis ma postać

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_\mu}{\partial t} = c \sum_{j=x,y,z} \alpha_{j\mu\nu} p_j \Psi_\nu + \beta_{\mu\nu} mc^2 \Psi_\nu. \quad (16)$$

Działając na obie strony operatorem $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ otrzymujemy, że każda ze składowych Ψ_μ spełnia równanie K-G po warunkiem, że $\alpha_j^2 = \beta^2 = I$, $\{\alpha_j, \alpha_k\} = 0$ dla $j \neq k$ oraz $\{\alpha_j, \beta\} = 0$, gdzie nawias klamrowy oznacza antykomutator. Wymiar macierzy musi być parzysty, bo z relacji antykomutacji wynika, że $\alpha_j = -\beta \alpha_j \beta$, czyli $Tr \alpha_j = -Tr \alpha_j = 0$, a macierze po sprowadzeniu do postaci diagonalnej mają na głównej przekątnej liczby ± 1 . Ponieważ nie ma czterech antykomutujących macierzy 2×2 , najmniejszym możliwym wymiarem jest cztery. Typowa reprezentacja ma postać

$$\alpha_j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad (17)$$

gdzie σ_j są macierzami Pauliego. Przez unitarną transformację można wybrać inną reprezentację macierzy Diraca.

Jeśli od równania Diraca pomnożonego z lewej strony przez Ψ^\dagger odejmiemy równanie Diraca sprzężone w sposób zespolony i transponowane pomnożone z prawej strony przez Ψ otrzymamy równanie ciągłości

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \mathbf{j} = 0, \quad (18)$$

gdzie $\rho = \Psi^\dagger \Psi$ jest gęstością prawdopodobieństwa znalezienia cząstki, a $\mathbf{j} = c\Psi^\dagger \alpha \Psi$ jest gęstością prądu. Można poszukiwać rozwiązań stacjonarnych w postaci $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp(-iEt)$, które są funkcjami własnymi hamiltonianu.

Równanie Diraca daje się zapisać w sposób współzmienny w postaci

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc)\Psi = 0, \quad (19)$$

gdzie $\gamma^0 = \beta$, $\gamma^j = \beta\alpha_j$.

Równanie ciągłości można napisać jako

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} \bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi = 0, \quad (20)$$

gdzie $\bar{\Psi} = \Psi^\dagger \gamma^0$, a relacje antykomutacji jako $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}$.

Sprzęgając w sposób zespolony i transponując równanie otrzymamy po skorzystaniu z relacji antykomutacji

$$\bar{\Psi}(-\gamma^\mu \overleftarrow{p}_\mu - mc) = 0. \quad (21)$$

Można napisać tożsamość

$$\bar{\Psi}_2(-\gamma^\mu \overleftarrow{p}_\mu - mc)\gamma^\nu a_\nu \Psi_1 + \bar{\Psi}_2 \gamma^\mu a_\mu (\gamma^\nu p_\nu - mc)\Psi_1 = 0 \quad (22)$$

dla dwóch dowolnych rozwiązań równania Diraca i dowolnego czterowektora a . Zachodzi związek

$$\gamma^\mu p_\mu \gamma^\nu a_\nu = p_\mu a_\nu \frac{1}{2}([\gamma^\mu, \gamma^\nu] + \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\}) = p_\mu a_\nu (g^{\mu\nu} + \frac{1}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]). \quad (23)$$

Zachodzi więc

$$\bar{\Psi}_2[-\overleftarrow{p}^\mu a_\mu - \overleftarrow{p}_\mu a_\nu \frac{1}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu] + a_\mu p^\mu + a_\mu p_\nu \frac{1}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu] - 2mc\gamma^\mu a_\mu]\Psi_1 = 0. \quad (24)$$

W szczególności dla $\Psi_1 = \Psi_2 = \Psi$ mamy

$$\bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi = \frac{1}{2mc}[-(p^\mu \bar{\Psi})\Psi + \bar{\Psi} p^\mu \Psi + \frac{1}{2} p_\nu \bar{\Psi} [\gamma^\mu, \gamma^\nu] \Psi]. \quad (25)$$

Otrzymujemy więc nierelatywistyczną gęstość prądu uzupełnioną o część spinową.

1.4 Cząstka swobodna

Można szukać rozwiązania w postaci

$$\Psi = C \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \exp[i(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)], \quad (26)$$

gdzie ϕ i χ są dwuwierszowymi kolumnami. Stacjonarne równanie Diraca rozbija się na dwa równania. Można z jednego z nich obliczyć $\chi = \frac{c\sigma\mathbf{p}}{E+mc^2}\phi$, wstawić do drugiego, otrzymując

$$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4.$$

Skorzystano przy tym z relacji

$$(\sigma\mathbf{a})(\sigma\mathbf{b}) = \mathbf{a}\mathbf{b}I + i\sigma(\mathbf{a} \times \mathbf{b}), \quad (27)$$

która wynika z własności macierzy Pauliego: $\sigma_j^2 = I$, $\sigma_j\sigma_k = i\epsilon_{jks}\sigma_s$, $j \neq k$. Niech pęd skierowany będzie wzdłuż osi z . Przyjmując kolejno $\phi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ oraz $\phi = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ otrzymamy rozwiązania, będące wektorami własnymi pędu, rzutu spinu na oś z (kierunek pędu) i znaku energii (określone są też oczywiście wartością bezwzględną energii i spin 1/2). Operator spinu odniesiony do przestrzeni czterowymiarowej i zapisany w postaci blokowej ma postać

$$\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \end{pmatrix}, \quad (28)$$

Funkcje Ψ zawierają macierzowy czynnik

$$C \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp}{|E|+mc^2} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad C \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{-cp}{|E|+mc^2} \end{pmatrix}, \quad C \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp}{-|E|+mc^2} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad C \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{-cp}{-|E|+mc^2} \end{pmatrix}. \quad (29)$$

Gdy $|E| \ll mc^2$, funkcja χ dla energii dodatnich jest znacznie mniejsza od ϕ (tzw. duża i mała składowa).

Dla pędu skierowanego dowolnie można wybrać funkcje ϕ będące funkcjami własnymi operatora $\frac{1}{p}\sigma\mathbf{p}$ i wtedy wszystkie cztery rozwiązania będą funkcjami własnymi pędu, energii (z jej znakiem) i rzutu spinu na kierunek pędu. Rozwiązania dla cząstki swobodnej nieco inaczej oznaczane i parametryzowane będą przedmiotem późniejszej dyskusji.

1.5 Paradoks Kleina

Rozważmy w jednym wymiarze odbicie cząstki od progu potencjału

$$\begin{aligned} V(z) &= 0 \text{ dla } z < 0, \\ V(z) &= U \text{ dla } z \geq 0. \end{aligned} \quad (30)$$

Rozwiązania dla energii dodatniej mają postać

$$\psi_{pad} = A \exp(ik_1 z) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{\hbar k_1 c}{E+mc^2} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (31)$$

$$\psi_{odb} = B \exp(-ik_1 z) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{-\hbar k_1 c}{E+mc^2} \\ 0 \end{pmatrix} + B' \exp(-ik_1 z) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{\hbar k_1 c}{E+mc^2} \end{pmatrix},$$

$$\psi_{przep} = D \exp(ik_2 z) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{\hbar k_2 c}{E-U+mc^2} \\ 0 \end{pmatrix} + D' \exp(ik_2 z) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{-\hbar k_2 c}{E-U+mc^2} \end{pmatrix},$$

Ciągłość funkcji w $z = 0$ implikuje

$$\begin{aligned} A + B &= D \\ B' &= D' \\ \frac{\hbar k_1 c}{E + mc^2} (A - B) &= D \frac{\hbar k_2 c}{E - U + mc^2}, \\ \frac{\hbar k_1 c}{E + mc^2} B' &= -\frac{\hbar k_2 c}{E - U + mc^2} D', \end{aligned} \quad (32)$$

gdzie

$$(\hbar k_1 c)^2 = E^2 - m^2 c^4, \quad (\hbar k_2 c)^2 = (E - U)^2 - m^2 c^4. \quad (33)$$

Natychmiast widać, że $B' = D' = 0$.

Gęstości prądu cząstek padających i przepuszczonych wynoszą

$$\begin{aligned} c\psi_{pad}^\dagger \alpha_z \psi_{pad} &= c|A|^2 \frac{2\hbar k_1 c}{E + mc^2}, \\ c\psi_{przep}^\dagger \alpha_z \psi_{przep} &= c|D|^2 \frac{2\hbar k_2 c}{E - U + mc^2}. \end{aligned} \quad (34)$$

Prawdopodobieństwo przejścia będące stosunkiem tych gęstości wynosi

$$\frac{|D|^2 k_2}{|A|^2 k_1} \frac{E + mc^2}{E - U + mc^2} = \frac{4r}{(1+r)^2}, \quad (35)$$

gdzie

$$r = \frac{k_2}{k_1} \frac{E + mc^2}{E - U + mc^2}. \quad (36)$$

Dla $U > E + mc^2$ ta liczba może być ujemna. Prawdopodobieństwo odbicia równe $\frac{(1-r)^2}{(1+r)^2}$ jest wtedy większe od 1. Należy to interpretować tak, że w wyniku oddziaływania kreuje się para cząstka-antycząstka - antycząstka porusza się w kierunku cząstki padającej, a dwie cząstki w kierunku odwrotnym.

1.6 Przybliżenia quasi-relatywistyczne

Rozważmy ruch cząstki o ładunku q w polu elektromagnetycznym o potencjale skalarnym U i wektorowym \mathbf{A} . Jak w przypadku nierelatywistycznym, równanie dla cząstki oddziałującej z polem elektromagnetycznym otrzymamy odejmując od pędu kanonicznego $q\mathbf{A}$ dodając do hamiltonianu potencjał skalarny. Stacjonarne równanie Diraca przybiera postać

$$c\alpha(\mathbf{p} - q\mathbf{A})\psi + \beta mc^2\psi + qU\psi = E\psi. \quad (37)$$

Przyjmując rozwiązania w postaci

$$\psi = C \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (38)$$

oraz wprowadzając $E' = E - mc^2$, $E, qU' \ll mc^2$, otrzymujemy

$$\chi \approx \frac{c\sigma(\mathbf{p} - q\mathbf{A})}{2mc^2}\phi \quad (39)$$

i dalej równanie

$$\frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2\phi + i\sigma(\mathbf{p} - q\mathbf{A}) \times (\mathbf{p} - q\mathbf{A})\frac{1}{2m}\phi + qU\phi = E'\phi. \quad (40)$$

Iloczyn wektorowy jednakowych wektorów w drugim wyrazie daje $iq\hbar(\nabla \times \mathbf{A})$. Zakładamy też, że $\nabla \mathbf{A} = 0$ oraz pomijamy wkład od wyrazu A^2 . Stałemu

polu magnetycznemu o indukcji B skierowanemu wzdłuż osi z odpowiada potencjał wektorowy $\mathbf{A} = (-\frac{1}{2}yB, \frac{1}{2}xB, 0)$ skąd wynika $2\mathbf{A}\mathbf{p} = BL_z$. Ostatecznie otrzymujemy równanie

$$\frac{p^2}{2m}\phi - \frac{q}{2m}L_z B\phi - \frac{q\hbar\sigma_z B}{2m}\phi + qU\phi = E'\phi. \quad (41)$$

Drugi i trzeci wyraz dają $-\frac{q}{2m}(\mathbf{L} + 2\mathbf{s})\mathbf{B}$, czyli oddziaływanie z polem magnetycznym w przybliżeniu Pauliego. Moment magnetyczny elektronu wynosi więc $-\frac{e}{2m}(\mathbf{L} + 2\mathbf{s})$. Poprawki kwantoelektrodynamiczne wynikające z oddziaływania z wirtualnymi fotonami powodują, że zamiast czynnika 2 otrzymujemy 2.0023193...(z imponującą dokładnością 12 cyfr po przecinku).

Następnie zbadamy przybliżenie wyższego rzędu w $\frac{1}{c^2}$, bez zewnętrznego pola magnetycznego. Funkcję χ wyliczymy w kolejnym przybliżeniu

$$\chi = \frac{1}{E' + 2mc^2 - qU}c\sigma\mathbf{p}\phi. \quad (42)$$

Równanie na ϕ przybiera postać

$$c\sigma\mathbf{p}\frac{1}{E' + 2mc^2 - qU}c\sigma\mathbf{p}\phi + qU\phi = E'\phi. \quad (43)$$

Rozwijając ułamek na szereg otrzymujemy

$$c\sigma\mathbf{p}\left[\frac{1}{2mc^2} - \frac{1}{4m^2c^4}(E' - qU)\right]c\sigma\mathbf{p}\phi + qU\phi = E'\phi. \quad (44)$$

W porównaniu z przypadkiem nierelatywistycznym mamy dodatkowy operator działający na ϕ

$$\frac{-1}{4m^2c^2}p^2E'\phi + \frac{1}{4m^2c^2}\sigma\mathbf{p}qU\sigma\mathbf{p}\phi. \quad (45)$$

Z dokładnością do wyrazów $\frac{1}{c^2}$ można $p^2E'\phi$ zastąpić przez część hermitowską z $p^2(\frac{P^2}{2m} + qU)\phi$ otrzymując

$$-\frac{p^4}{8m^3c^2}\phi - \frac{1}{8m^2c^2}(p^2qU + qUp^2)\phi + \frac{qUp^2}{4m^2c^2}\phi + \frac{(\mathbf{p}qU)\mathbf{p}}{4m^2c^2}\phi + \frac{i\sigma(\mathbf{p}qU) \times \mathbf{p}}{4m^2c^2}\phi. \quad (46)$$

Ostatecznie otrzymujemy dodatkowy składnik w hamiltonianie w równaniu Schrödingera

$$\left[-\frac{p^4}{8m^3c^2} - \frac{(p^2qU)}{8m^2c^2} + \frac{i\sigma(\mathbf{p}qU) \times \mathbf{p}}{4m^2c^2}\right]\phi, \quad (47)$$

a po podstawieniu $qU = -Ze^2/(4\pi\epsilon_0r)$ i skorzystaniu z relacji $\nabla^2\frac{1}{r} = -4\pi\delta(\mathbf{r})$

$$\left[-\frac{p^4}{8m^3c^2} + \frac{Ze^2\hbar^2}{8m^2c^2\epsilon_0}\delta(\mathbf{r}) + \frac{Ze^2}{8\pi m^2c^2\epsilon_0r^3}\mathbf{sL}\right]\phi. \quad (48)$$

Pozzczególne wyrazy opisują odpowiednio relatywistyczny przyrost masy, poprawkę Darwina i oddziaływanie spin-orbita.

Oddziaływania te uwzględnione metodą rachunku zaburzeń dają poprawkę do energii

$$E_{nj}^{(1)} = E_n\alpha^2Z^2\frac{1}{n}\left(\frac{1}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right), \quad (49)$$

gdzie E_n jest nierelatywistyczną energią własną, $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137}$ jest stałą struktury subtelnej, a j liczbą kwantową kwadratu wypadkowego momentu pędu.

1.7 Atom wodoru - ściśle rozwiązanie

Rozważamy Diracowski elektron z dodatkowym polem kulombowskim. Rozumowanie ma na celu najpierw izolację zmiennych kąto-spinowych z uwzględnieniem zasad zachowania momentu pędu, a potem rozwiązanie równania radialnego metodą wielomianów. Równanie wyjściowe ma postać

$$\left[\alpha\mathbf{p} + \beta mc^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0r} - E\right]\psi = 0. \quad (50)$$

Można sprawdzić, że hamiltonian nie komutuje ze składowymi \mathbf{L} i \mathbf{s} ani z L^2 , komutuje ze składowymi całkowitego momentu pędu \mathbf{j} i w konsekwencji z j^2 . Wprowadzamy operatory radialnej składowej pędu $p_r = \frac{1}{2}\left(\frac{\mathbf{r}}{r}\mathbf{p} + \mathbf{p}\frac{\mathbf{r}}{r}\right) = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$ oraz $\alpha_r = \alpha\frac{\mathbf{r}}{r}$. Zachodzi związek

$$\alpha\mathbf{p} = \alpha_r p_r + \frac{i}{r}\alpha_r(\sigma\mathbf{L} + \hbar), \quad (51)$$

który można sprawdzić bezpośrednim rachunkiem, najlepiej po pomnożeniu obu stron tożsamości z lewej strony przez α_r ($\alpha_r^2 = I$). Wprowadzamy operator $\hbar K = \beta(\sigma \mathbf{L} + \hbar)$. Równanie stacjonarne Diraca przybiera postać

$$[\alpha_r p_r + \frac{ihc}{r} \alpha_r \beta K + \beta mc^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}] \psi = E \psi. \quad (52)$$

Bezpośrednim rachunkiem można sprawdzić, że

$$" \hbar^2 K^2 = j^2 + \frac{\hbar^2}{4}, \quad (53)$$

gdzie skorzystano z relacji

$$(\sigma \mathbf{L} + \hbar)^2 = L^2 + i\sigma \mathbf{L} \times \mathbf{L} + 2\hbar\sigma \mathbf{L} + \hbar^2 = L^2 + \hbar\sigma \mathbf{L} + \hbar^2. \quad (54)$$

Wynika stąd, że wartości własne K są $\pm(j + \frac{1}{2})$. Operator $\hbar K$ komutuje z hamiltonianem, co można sprawdzić badając jego komutatory z α_r i β . Korzysta się przy tym z relacji

$$\begin{aligned} -(\sigma \mathbf{r})(\sigma \mathbf{L}) - (\sigma \mathbf{L})(\sigma \mathbf{r}) - 2\hbar\sigma \mathbf{r} &= -\mathbf{rL} - i\sigma \mathbf{r} \times \mathbf{L} - \mathbf{Lr} - i\sigma(\mathbf{L} \times \mathbf{r}) - 2\hbar\sigma \mathbf{r} = \\ -i\sigma(\mathbf{r} \times \mathbf{L} + \mathbf{L} \times \mathbf{r}) - 2\hbar\sigma \mathbf{r} &= 0. \end{aligned} \quad (55)$$

Można teraz zmienić reprezentację tak, aby w nowej α_r miała postać blokową

$$\alpha_r = \begin{pmatrix} 0 & -iI \\ iI & 0 \end{pmatrix}, \quad (56)$$

co uzyskuje się przez transformację $U\sigma_r U^\dagger$ z

$$U = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & i\sigma_r \end{pmatrix}. \quad (57)$$

Macierz β w tej reprezentacji się nie zmienia. Rozwiązanie równania własnego przed transformacją powinno mieć postać

$$\psi = \begin{pmatrix} \frac{f}{r} \Omega_{jlm_j} \\ \frac{-ig}{r} \Omega_{j'l'm_j} \end{pmatrix}, \quad (58)$$

gdzie $l, l' = j \pm \frac{1}{2}$, $l + l' = 2j$,

$$\Omega_{j,j-\frac{1}{2}m_j} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{j+m_j}{2j}} Y_{j-\frac{1}{2}m_j-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\frac{j-m_j}{2j}} Y_{j-\frac{1}{2}m_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \quad \Omega_{j,j+\frac{1}{2}m_j} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{j+1-m_j}{2j+2}} Y_{j+\frac{1}{2}m_j-\frac{1}{2}} \\ -\sqrt{\frac{j+1+m_j}{2j+2}} Y_{j+\frac{1}{2}m_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}. \quad (59)$$

Funkcje Ω są funkcjami własnymi kwadratu wypadkowego momentu pędu, powstałymi przy dodawaniu orbitalnego momentu pędu i spinu; pierwiastki są odpowiedniki współczynnikami Clebscha-Gordana.

Dla $l = j \pm \frac{1}{2}$ funkcja jest funkcją własną K do wartości własnej $\pm(j + \frac{1}{2})$. W dowodzie korzysta się ze związku $\sigma \mathbf{L} = \frac{1}{\hbar}(j^2 - L^2 - \frac{3}{4}\hbar^2)$.

Zachodzi relacja

$$\frac{\sigma \mathbf{r}}{r} \Omega_{jlm_j} = \Omega_{j'l'm_j}, \quad (60)$$

która wynika stąd, że, jak łatwo można sprawdzić, komutatory $[j_z, \frac{\sigma \mathbf{r}}{r}] = 0$ i $[j^2, \frac{\sigma \mathbf{r}}{r}] = 0$. Stąd wynika, że $\frac{\sigma \mathbf{r}}{r} \Omega_{jlm_j}$ jest unormowaną do 1 funkcją własną j^2 i j_z , ale ma przeciwną parzystość niż Ω_{jlm_j} ; taką funkcją jest $\Omega_{j'l'm_j}$.

Po podziałaniu transformacją U części spinowo-kątowe się upraszczają i otrzymujemy równania radialne

$$\begin{aligned} f' - \frac{\kappa}{r} f &= \frac{mc^2 + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E}{\hbar c} g, \\ g' + \frac{\kappa}{r} g &= \frac{mc^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} - E}{\hbar c} f. \end{aligned} \quad (61)$$

Równanie dla dużych r ma postać

$$f'' = \frac{m^2 c^4 - E^2}{\hbar^2 c^2} f, \quad (62)$$

a więc $f \approx \exp(-\rho)$, gdzie $\rho = \sqrt{\frac{m^2 c^4 - E^2}{\hbar^2 c^2}} r$ (badamy przypadek $E < mc^2$). W nowych zmiennych równania mają postać (nie zmieniono oznaczeń funkcji)

$$\begin{aligned} \frac{df}{d\rho} - \frac{\kappa}{\rho} f &= \frac{Z\alpha}{\rho} g + \frac{1}{A} g, \\ \frac{dg}{d\rho} + \frac{\kappa}{\rho} g &= -\frac{Z\alpha}{\rho} f + Af, \end{aligned} \quad (63)$$

gdzie $A = \sqrt{\frac{mc^2 - E}{mc^2 + E}}$. Poszukujemy rozwiązania w postaci

$$f = \exp(-\rho) \sum_{n=0} a_n \rho^{n+s}, \quad g = \exp(-\rho) \sum_{n=0} b_n \rho^{n+s}, \quad (64)$$

gdzie a_0 i b_0 są różne od zera. Wstawienie do równań daje $s = \sqrt{\kappa^2 - Z^2 \alpha^2}$ oraz

$$\begin{aligned} a_{n+1}(n + s + 1 - \kappa) - Z\alpha b_{n+1} &= a_n + \frac{1}{A} b_n, \\ a_{n+1} Z\alpha + b_{n+1}(n + s + 1 + \kappa) &= A a_n + b_n. \end{aligned} \quad (65)$$

Znając a_n i b_n można wyliczyć a_{n+1} i b_{n+1}

$$\begin{aligned} a_{n+1} &= \frac{(a_n + \frac{1}{A}b_n)(n + s + 1 + \kappa + Z\alpha A)}{(n + s + 1 - \kappa)(n + s + 1 + \kappa) + Z^2\alpha^2}, \\ b_{n+1} &= \frac{(a_n + \frac{1}{A}b_n)[A(n + s + 1 - \kappa) - Z\alpha]}{(n + s + 1 - \kappa)(n + s + 1 + \kappa) + Z^2\alpha^2}. \end{aligned} \quad (66)$$

Dla dużych n $a_{n+1} \approx (a_n + \frac{1}{A}b_n)/n$, $b_{n+1} \approx A(a_n + \frac{1}{A}b_n)/n = Aa_{n+1}$, czyli $a_{n+1} \approx \frac{2}{n}a_n$ jak dla funkcji $\exp(2\rho)$, co prowadzi do funkcji nienormowalnej. Szeregi muszą więc być obcięte i to w tym samym miejscu. Z układu równań wynika że znikanie wyrazu b_{N+1} implikuje znikanie a_{N+1} . Niech zachodzi $a_N + \frac{1}{A}b_N = 0$, czyli

$$(a_{N-1} + \frac{1}{A}b_{N-1})(N + s + \kappa + Z\alpha A) + \frac{1}{A}(a_{N-1} + \frac{1}{A}b_{N-1})[A(N + S - \kappa) - Z\alpha]. \quad (67)$$

Ponieważ nie znika wspólny czynnik obu składników, musi zachodzić

$$N + s + \kappa + Z\alpha A + \frac{1}{A}[A(N + s - \kappa) - Z\alpha], \quad (68)$$

czyli

$$2(N + s) = Z\alpha(\frac{1}{A} - A). \quad (69)$$

Rozwiązanie daje

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{Z^2\alpha^2}{(N + \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - Z^2\alpha^2})^2}}}. \quad (70)$$

Główna liczba kwantowa $n = N + j + \frac{1}{2}$ (($n=1,2,3,\dots$) bo ($N=0,1,2,\dots$)). Rozwinięcie powyższego wyrażenia w szereg względem $Z\alpha$ daje kolejne przybliżenia poziomów energii, w szczególności wyrazy rzędu α^2 dają energię jak w modelu Bohra, wyrazy rzędu α^4 - poprawki struktury subtelnej. Interpretacja rozwiązań ujemnych oraz dla $Z\alpha > 1$ nie jest prosta, ale dotąd nie znaleziono jąder z liczbą atomową większą od 137.

Podsumowując należy podkreślić, że zachowane są, energia oraz kwadrat i rzut wypadkowego momentu pędu. Kwadrat orbitalnego momentu pędu nie charakteryzuje rozwiązania, bo nie komutuje z hamiltonianem; duża i mała składowa mają różne liczby kwantowe l, l' . W przybliżeniu Pauliego mała składowa jest pomijana i liczba l dużej składowej charakteryzuje rozwiązanie nierelatywistyczne.

1.8 Własności transformacyjne równania Diraca

Niezmienniczość teorii względem transformacji Lorentza $x' = ax$ wymaga aby równaniu $(\gamma^\mu p_\mu - mc)\Psi(x) = 0$ odpowiadało w nowym układzie równanie $(\gamma^\mu p'_\mu - mc)\Psi'(x') = 0$ (można tak wybrać reprezentację, aby macierze γ^μ nie zmieniały się. Musi istnieć transformacja S taka, że

$$\Psi'(x') = S(a)\Psi(x) = S(a)\Psi(a^{-1}x'). \quad (71)$$

Odwrotnie $\Psi(x) = S_a^{-1}\Psi'(x')$, co implikuje, że $S(a^{-1}) = S^{-1}(a)$. Spełnione muszą być równania

$$\begin{aligned} (i\hbar\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - mc)S^{-1}(a)\Psi'(x') &= 0, \\ (Si\hbar\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\nu} a^\nu_\mu S^{-1} - mc)\Psi'(x') &= 0, \end{aligned} \quad (72)$$

czyli

$$a^\nu_\mu \gamma^\mu = S^{-1} \gamma^\nu S. \quad (73)$$

Rozważmy najpierw przekształcenia infinitezymalne

$$a^\nu_\mu = \delta^\nu_\mu + \delta\omega^\nu_\mu, \quad (74)$$

przy czym z relacji $a^\mu_\nu a^\rho_\mu = \delta^\rho_\nu$ wynika że $\delta\omega^\rho_\nu + \delta\omega^\rho_\nu = 0$, tzn. $\delta\omega$ jest macierzą antysymetryczną. Jeśli macierz S napiszemy w postaci $= I - \frac{i}{4}\Sigma_{\mu\nu}\delta\omega^{\mu\nu}$, to po podstawieniu do wyprowadzonego wyżej warunku, po opuszczeniu wyrazów kwadratowych w $\delta\omega$ wynika, że

$$\delta\omega^\nu_\mu \gamma^\mu = -\frac{i}{4}\delta\omega^{\mu\beta}(\gamma^\nu \Sigma_{\mu\beta} - \Sigma_{\mu\beta} \gamma^\nu), \quad (75)$$

Można sprawdzić bezpośrednim rachunkiem, że

$$\Sigma_{\mu\beta} = \frac{i}{2}[\gamma_\mu, \gamma_\beta] \quad (76)$$

(należy podnieść wszystkie indeksy i korzystając z relacji antykomutacji przenieść γ^ν do środka iloczynów gamm).

Dla obrotu o kąt ϕ wokół osi z rozważamy N obrotów o kąt $\frac{\phi}{N}$. Mamy $\delta\omega^1_2 = \frac{\phi}{N}$. Stąd

$$\begin{aligned} \Psi'(x') &= \left(1 + \frac{i}{4} \frac{\phi}{N} (-\frac{i}{2} [\gamma_1, \gamma_2] + \frac{i}{2} [\gamma_2, \gamma_1])\right)^N \Psi(x) = \\ &= \left(1 - \frac{\phi}{2N} i\sigma_3\right)^N \Psi(x) \rightarrow \exp(-\frac{i}{2} \sigma_3 \phi) \Psi(x' \cos \phi + y' \sin \phi, -y' \cos \phi + x' \sin \phi, z') = \\ &= \exp(-\frac{i}{2} \sigma_3 \phi) \left(1 + x'^2 \frac{\phi}{N} \frac{\partial}{\partial x'^1} - x'^1 \frac{\phi}{N} \frac{\partial}{\partial x'^2}\right)^N \Psi(x') \rightarrow \exp[-\frac{i}{\hbar} (L_z + s_z) \phi] \Psi(x'). \end{aligned} \quad (77)$$

Wypadkowy moment pędu jest generatorem grupy obrotów. Dla obrotu o kąt ϕ wokół kierunku \mathbf{n} operator miałby postać $\exp(-\frac{i}{\hbar} (\mathbf{L} + \mathbf{s})\mathbf{n}\phi)$.

Podobnie można znaleźć macierz S dla transformacji związanej z przejściem do układu inercjalnego poruszającego się z prędkością v wzdłuż osi X :

$$\begin{aligned} x'^0 &= \cosh \omega x^0 - \sinh \omega x^1, \\ x'^1 &= \cosh \omega x^1 - \sinh \omega x^0, \end{aligned} \quad (78)$$

gdzie $\tanh \omega = \frac{v}{c}$. Dla transformacji infinitezymalnej $\delta\omega^1_0 = \delta\omega^0_1 = -\frac{\omega}{N}$. Stąd

$$\begin{aligned} S &= \left(1 - \frac{i}{4} \frac{i}{2} \frac{\omega}{N} (-[\gamma_1, \gamma_0] - (-1)[\gamma_0, \gamma_1])\right)^N = \\ &= \left(1 + \frac{\omega}{2N} \gamma^1 \gamma^0\right)^N \rightarrow \exp(-\frac{\omega}{2} \alpha_x) = \\ &= \cosh \frac{\omega}{2} I - \alpha_x \sinh \frac{\omega}{2} = . \end{aligned} \quad (79)$$

Jeśli prędkość v ma kierunek \mathbf{n} , to zamiast α_x pojawia się iloczyn skalarny $\mathbf{n}\alpha$.

1.9 Odbicie przestrzenne

Dla odbicia przestrzennego $a^1_1 = a^2_2 = a^3_3 = -1$. Oznacza to, że

$$\begin{aligned} \gamma^0 &= S^{-1} \gamma^0 S, \\ -\gamma^j &= S^{-1} \gamma^j S. \end{aligned} \quad (80)$$

Macierzą spełniającą te relacje jest $S = \gamma^0 \exp(i\phi)$ dla dowolnego ϕ . W szczególności stany o dodatniej i ujemnej energii różnią się parzystością wewnętrzną.

1.10 Cząstka swobodna cd.

W układzie, w którym cząstka spoczywa spełnione jest równanie

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \beta mc^2 \Psi. \quad (81)$$

Rozwiązania mają postać

$$\Psi^r(x) = w^r(0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \epsilon_r mc^2 t\right). \quad (82)$$

gdzie $\epsilon_{1,2} = 1$, $\epsilon_{3,4} = -1$, a $w^r(0)$ jest kolumną mają 1 na miejscu r i zera poza tym. Transformacja do układu laboratoryjnego (poruszającego się z prędkością $-\mathbf{v}$ wzdłuż osi x daje

$$\Psi^r(x) = w^r(\mathbf{p}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \epsilon_r p_\mu x^\mu\right), \quad (83)$$

gdzie $w^r(\mathbf{p})$ są kolumnami macierzy $S = \exp\left(\frac{|\omega|}{2} \alpha_x\right)$. Korzystając z relacji $\tanh |\omega| = \frac{v}{c}$, $\cosh |\omega| = \frac{1}{\sqrt{1-\tanh^2(\omega)}} = \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} = \frac{E}{mc^2}$,

$$\cosh \frac{|\omega|}{2} = \sqrt{\frac{1+\cosh |\omega|}{2}} = \sqrt{\frac{E+mc^2}{2mc^2}},$$

$$\sinh \frac{|\omega|}{2} = \sqrt{\frac{\cosh |\omega|-1}{2}}, \quad \tanh \frac{|\omega|}{2} = \sqrt{\frac{E-mc^2}{E+mc^2}} = \frac{pc}{E+mc^2}, \text{ otrzymujemy}$$

$$w^1(\mathbf{p}) \sim \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{pc}{E+mc^2} \end{pmatrix}, \quad w^2(\mathbf{p}) \sim \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{pc}{E+mc^2} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad w^3(\mathbf{p}) \sim \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{pc}{E+mc^2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad w^4(\mathbf{p}) \sim \begin{pmatrix} \frac{pc}{E+mc^2} \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (84)$$

Dla prędkości (pędu o dowolnym kierunku mamy

$$w^1(\mathbf{p}) \sim \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p_z c}{E+mc^2} \\ \frac{p_+ c}{E+mc^2} \end{pmatrix}, \quad w^2(\mathbf{p}) \sim \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{p_- c}{E+mc^2} \\ \frac{-p_z c}{E+mc^2} \end{pmatrix}, \quad w^3(\mathbf{p}) \sim \begin{pmatrix} \frac{p_z c}{E+mc^2} \\ \frac{p_+ c}{E+mc^2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad w^4(\mathbf{p}) \sim \begin{pmatrix} \frac{p_- c}{E+mc^2} \\ \frac{-p_z c}{E+mc^2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (85)$$

Znak \sim oznacza, że opuszczono czynnik $\sqrt{\frac{E+mc^2}{2mc^2}}$, $p_\pm = p_x \pm ip_y$.

Zachodzą związki

$$\begin{aligned} \bar{w}^r(\mathbf{p}) w^{r'}(\mathbf{p}) &= \delta_{rr'} \epsilon_r, \\ w^{r\dagger}(\epsilon_r \mathbf{p}) w^{r'}(\epsilon_{r'} \mathbf{p}) &= \frac{E}{mc^2} \delta_{rr'}, \end{aligned} \quad (86)$$

(gęstość prawdopodobieństwa jest składową czterowektora)

$$\sum_r \epsilon_r w^r(\mathbf{p}) \bar{w}^r(\mathbf{p}) = I. \quad (87)$$

Funkcje Ψ^r tworzą bazę: każdą funkcję można rozłożyć na całkę po pędach i sumę po r . Duże znaczenie ma wyodrębnienie części o dodatnich i ujemnych energiach.

1.11 Sprzężenie ładunkowe

Rozważmy równanie Diraca dla cząstki i ładunku q w polu elektromagnetycznym o czteropotencjale A . Spełnione jest równanie

$$[\gamma^\mu(p_\mu - qA_\mu) - mc]\Psi = 0.$$

Żądamy, aby spełnione było analogiczne równanie dla antycząstki o ładunku $-q$

$$[\gamma^\mu(p_\mu + qA_\mu) - mc]\Psi_c = 0.$$

Sprzężenie zespolone pierwszego równania daje

$$[\gamma^{\mu*}(-p_\mu - qA_\mu) - mc]\Psi^* = 0.$$

Wprowadzając transformację $\Psi_c = (C\gamma^0)\Psi^*$ mamy

$$[(C\gamma^0)(-\gamma^{\mu*})(C\gamma^0)^{-1}(p_\mu + qA_\mu) - mc](C\gamma^0)\Psi^* = 0.$$

Musi być spełniony związek $(C\gamma^0)\gamma^{\mu*} = -\gamma^\mu(C\gamma^0)$. Łatwo sprawdzić, że związki te spełnia $C\gamma^0 = i\gamma^2$. Dla cząstek swobodnych sprzężenie ładunkowe przeprowadza jedno rozwiązanie swobodne w inne. Każdemu fizycznie realizowalnemu stanowi elektronowemu w polu o potencjale \mathbf{A} odpowiada fizycznie realizowalny stan pozytonu w polu o potencjale $-\mathbf{A}$. Nie można interpretować rozwiązania o energii ujemnej po prostu jako antycząstki, zakłada się natomiast za Dirakiem, że stany o energii ujemnej są zapełnione, a dziurę po cząstce o energii ujemnej widzimy jako antycząstkę o energii dodatniej.

1.12 Swobodna funkcja Greena

Swobodna funkcja Greena (propagator Feynmana) $S_F(x, x')$ spełnia równanie

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc)S_F(x - x') = \delta(x - x'), \quad (88)$$

gdzie δ jest czterowymiarową deltą Diraca: $\delta(x) = \delta(x^0)\delta(x^1)\delta(x^2)\delta(x^3)$. W obrazie Fouriera można napisać

$$S_F(x - x') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^4} \int S_F(p) \exp(-\frac{i}{\hbar}p_\mu(x^\mu - x'^\mu))d^4p \quad (89)$$

i spełnione jest równanie (tu p_μ są już zmiennymi, nie operatorami)

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc)S_F(p) = 1. \quad (90)$$

Można więc napisać

$$S_F(p) = \frac{1}{\gamma^\mu p_\mu - mc} = \frac{\gamma^\mu p_\mu + mc}{p_0^2 - \mathbf{p}^2 - m^2c^2 + i\eta}, \quad (91)$$

gdzie wybrano sposób traktowania osobliwości przez dodanie w mianowniku liczby urojonej o dowolnie małej dodatniej części urojonej η . Mamy

$$S_F(x - x') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^4} \int \frac{\gamma^\mu p_\mu + mc}{p_0^2 - \mathbf{p}^2 - m^2c^2 + i\eta} \exp(-\frac{i}{\hbar}p_\nu(x^\nu - x'^\nu))d^4p. \quad (92)$$

Całkę po p_0 można wykonać metodą residuów, przy czym dla $t > t'$ należy zamknąć kontur w dolnej półpłaszczyźnie, a dla $t < t'$ - w górnej. Otrzymujemy

$$\begin{aligned} S_F(x - x') = & \\ & \theta(t - t') \int d^3p \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \exp(\frac{i}{\hbar}[\mathbf{p}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')]]) \frac{-2\pi i \exp[-\frac{i}{\hbar}|p_0c|(t - t')]}{2\pi\hbar \frac{2|p_0|}{}} (\gamma^0|p_0| - \gamma\mathbf{p} + mc) + \\ & \theta(t' - t) \int d^3p \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \exp(\frac{i}{\hbar}[\mathbf{p}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')]]) \frac{2\pi i \exp[\frac{i}{\hbar}|p_0c|(t - t')]}{2\pi\hbar \frac{-2|p_0|}{}} (-\gamma^0|p_0| - \gamma\mathbf{p} + mc) \end{aligned}$$

W drugiej całce można zamienić zmienną \mathbf{p} na $-\mathbf{p}$, co pozwala zapisać wynik

$$\begin{aligned} S_F(x - x') = & \frac{-i}{\hbar} \theta(t - t') \int d^3p \sum_{r=1,2} \psi_p^r(x) \bar{\psi}_p^r(x') + \\ & \frac{i}{\hbar} \theta(t' - t) \int d^3p \sum_{r=3,4} \psi_p^r(x) \bar{\psi}_p^r(x'), \quad (93) \end{aligned}$$

gdzie

$$\psi_p^r(x) = \sqrt{\frac{mc^2}{E}} w^r(\mathbf{p}) \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \epsilon_r(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)\right], \quad (94)$$

a $E = p_0c = +\sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4}$. Skorzystano z relacji, które można sprawdzić bezpośrednim rachunkiem

$$\begin{aligned} \sum_{r=1,2} w^r(\mathbf{p}) \bar{w}^r(\mathbf{p}) \frac{mc^2}{E} &= \frac{1}{2|p_0|} (\gamma^0 |p_0| - \gamma\mathbf{p} + mc), \\ \sum_{r=3,4} w^r(\mathbf{p}) \bar{w}^r(\mathbf{p}) \frac{mc^2}{E} &= \frac{1}{2|p_0|} (\gamma^0 |p_0| - \gamma\mathbf{p} - mc). \end{aligned} \quad (95)$$

Zachodzi warunek normalizacji

$$\int \psi_p^{r\dagger}(x) \psi_{p'}^{r'}(x) d^3x = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \delta_{rr'}. \quad (96)$$

Niech Ψ^\pm będą paczkami falowymi zbudowanymi ze swobodnych rozwiązań o dodatnich (ujemnych) energiach. Funkcja S_F propaguje te paczki swobodnie odpowiednio w przód i w tył w czasie, tzn.

$$\begin{aligned} \theta(x^0 - x'^0) \Psi^+(x) &= i\hbar \int d^3x' S_F(x - x') \gamma^0 \Psi^+(x'), \\ \theta(x'^0 - x^0) \Psi^-(x) &= -i\hbar \int d^3x' S_F(x - x') \gamma^0 \Psi^-(x'), \end{aligned} \quad (97)$$

co można sprawdzić działając na obie strony operatorem $\gamma^\mu p_\mu - mc$.

Dla ewolucji w polu elektromagnetycznym mamy równanie Diraca ma postać

$$[\gamma^\mu (p_\mu - qA_\mu) - mc] \Psi = 0. \quad (98)$$

Pełna funkcja Greena, spełnia równanie różniczkowe

$$[\gamma^\mu (p_\mu - qA_\mu) - mc] S(x, x') = \delta(x - x') \quad (99)$$

i odpowiadające mu równanie całkowe

$$S(x, x') = S_F(x, x') + \int dx'' S_F(x, x'') q \gamma^\mu A_\mu(x'') S(x'', x'). \quad (100)$$

Słuszność równania całkowego można sprawdzić działając operatorem $\gamma^\mu p_\mu - mc$ na obie strony ostatniego równania.

Iteracja równania całkowego pozwala interpretować ewolucję jako szereg fragmentów ewolucji swobodnej przerywanej oddziaływaniami. Po wszystkich pośrednich punktach czasoprzestrzeni następuje wycałkowanie, w duchu zasady Huygensa. Istotna różnica w porównaniu z opisem nierelatywistycznym jest taka, że ewolucja swobodna odbywa się także wstecz w czasie. Niech ewolucja z punktu 1 do punktu 2 biegnie w przód w czasie ($t_2 > t_1$), od punktu 2 do punktu 3 wstecz w czasie ($t_3 < t_2$), od punktu 3 do 4 znów w przód w czasie $t_4 > t_3$. Można o tym mówić na dwa sposoby.

1. w punkcie dwa cząstka (np. elektron) zmienia się w antycząstkę (pozyton) poruszającą się wstecz w czasie, a w punkcie 3 antycząstka przeszła znów w cząstkę biegnącą w przód w czasie,
2. w punkcie 3 została wykreowana para cząstka-antycząstka, antycząstka ewoluowała w przód w czasie i punkcie 2 uległa anihilacji z cząstką, która tam dotarła z punktu 1; tymczasem cząstka wykreowana w punkcie 3 ewoluowała do punktu 4.

W pierwszym przypadku niedogodnością jest dopuszczenie ewolucji w tył w czasie, w drugim - konieczność zrezygnowania z opisu w kategoriach jednej cząstki

Pełna funkcja spełnia równanie całkowe

$$\Psi_i(x) = \psi_i(x) + \int dx' S_F(x, x') q \gamma^\mu A_\mu(x') \Psi_i(x'), \quad (101)$$

gdzie indeks i oznacza stan początkowy cząstki swobodnej, opisanej funkcją ψ_i , (w którym cząstka pozostawałaby w nieobecności pola). Można to sprawdzić, działając operatorem $\gamma^\mu p_\mu - mc$ na obu stronach równania.

Wstawiając do równania całkowego postać funkcji S_F otrzymujemy asymptotyczną postać funkcji Ψ_i :

dla $t \rightarrow \infty$ jest ona

$$\Psi_i(x) \sim_{t \rightarrow \infty} \psi_i(x) - \frac{i}{\hbar} \sum_{r=1,2} \int d^3p \psi_p^r(x) \int dx' \bar{\psi}_p(x')^r q \gamma^\mu A_\mu(x') \Psi_i(x'), \quad (102)$$

a dla $t \rightarrow -\infty$

$$\Psi_i(x) \sim_{t \rightarrow -\infty} \psi_i(x) + \frac{i}{\hbar} \sum_{r=3,4} \int d^3p \psi_p^r(x) \int dx' \bar{\psi}_p(x')^r q \gamma^\mu A_\mu(x') \Psi_i(x'). \quad (103)$$

Amplituda przejścia (macierz S) otrzymana przez rzut funkcji Ψ_i na stan końcowy ψ_f ma postać

$$S_{fi} = \delta_{fi} - \frac{i}{\hbar} \epsilon_r \int dx' \bar{\psi}_f(x) q \gamma^\mu A_\mu(x) \Psi_i(x). \quad (104)$$

Można opisać 4 typy procesów:

1. Fala padająca ψ_i jest rozwiązaniem o energii dodatniej, a asymptotycznie w $+\infty$ jest superpozycją rozwiązań o energii dodatniej; jest to rozpraszanie cząstki (elektronu);
2. Fala padająca ψ_i jest rozwiązaniem o energii dodatniej, a asymptotycznie w $-\infty$ jest superpozycją rozwiązań o energii ujemnej; jest to anihilacja pary cząstka-antycząstka;
3. Fala padająca ψ_i jest rozwiązaniem o energii ujemnej, a asymptotycznie w ∞ jest superpozycją rozwiązań o energii dodatniej; jest to kreacja pary cząstka-antycząstka;
4. Fala padająca ψ_i jest rozwiązaniem o energii ujemnej, a asymptotycznie w $+\infty$ jest superpozycją rozwiązań o energii ujemnej; jest to rozpraszanie antycząstki.

1.13 Rozpraszanie elektronu na potencjale kulombowskim

Niech cząstka o rzucie spinu $+\frac{\hbar}{2}$ pada wzdłuż osi z , tzn. ψ_i ma postać

$$\psi_i = \sqrt{\frac{mc^2}{E_i}} w^1(\mathbf{p}) \frac{1}{\sqrt{V}} [\exp \frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}_i \mathbf{r} - E_i t)], \quad (105)$$

gdzie przyjęto normalizację w pudle, a wektor \mathbf{p} jest skierowany wzdłuż osi z . Stan końcowy ma postać

$$\psi_f = \sqrt{\frac{mc^2}{E_f}} w^j(\mathbf{q}) \frac{1}{\sqrt{V}} \exp[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{q} \mathbf{r} - E_f t)], \quad (106)$$

gdzie $j = 1, 2$, $E_i^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$, $E_f^2 = q^2 c^2 + m^2 c^4$. Macierz S ma postać w przybliżeniu Borna ($f \neq i$)

$$S_{\mathbf{q}\mathbf{p}} = -\frac{i}{\hbar} \int d^3 r c dt \frac{mc^2}{V} \frac{1}{\sqrt{E_i E_f}} \bar{w}^j(\mathbf{q}) \gamma^0 w^1(\mathbf{p}) \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r c} \exp[\frac{i}{\hbar} ((\mathbf{p} - \mathbf{q}) \mathbf{r} - (E_i - E_f) t)] = \\ -\frac{i}{\hbar} \frac{mc^2}{V} \frac{1}{\sqrt{E_i E_f}} \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0} 2\pi\hbar \delta(E_f - E_i) \frac{4\pi\hbar^2}{|\mathbf{p} - \mathbf{q}|^2} \bar{w}_j(\mathbf{q}) \gamma^0 w_1(\mathbf{p}), \quad (107)$$

gdzie skorzystano z relacji $\int \frac{1}{r} \exp(i\mathbf{a}\mathbf{r})d^3r = \frac{4\pi}{a^2}$ słusznej w granicy zerowego ekranowania. Moduł tego wyrażenia należy podnieść do kwadratu, i scałkować po q z wagą $\frac{Vq^2dq d\Omega}{(2\pi\hbar)^3}$. Argumentacja jest taka sama, jak w przypadku niere-
latywistycznym: na jeden dozwolony stan końcowy przypada objętość $\frac{(2\pi\hbar)^3}{V}$
w przestrzeni pędów. Otrzymujemy uwzględniając, że $c^2q dq = E_f dE_f$

$$|S_{\mathbf{q}\mathbf{p}}|^2 = \frac{4m^2c^2q}{VE_i} \frac{Z^2e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{1}{|\mathbf{p} - \mathbf{q}|^4} |\bar{w}_j(\mathbf{q})\gamma^0 w_1(\mathbf{p})|^2 d\Omega\tau, \quad (108)$$

gdzie τ jest czasem, długim w skali trwania procesu. Gęstość prądu cząstek padających wynosi $c\psi_i^\dagger\alpha_z\psi_i = \frac{pc^2}{E_iV}$. Dzieliąc prawdopodobieństwo przejścia na jednostkę czasu przez gęstość prądu cząstek padających otrzymujemy przekrój czynny na zderzenie

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4Z^2e^4m^2}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{1}{|\mathbf{p} - \mathbf{q}|^4} |\bar{w}_j(\mathbf{q})\gamma^0 w_1(\mathbf{p})|^2. \quad (109)$$

Należy jeszcze wysumować prawdopodobieństwa przejścia po stanach końcowych $j = 1, 2$, korzystając z relacji

$$\begin{aligned} \sum_{j=1,2} |\bar{w}_j(\mathbf{q})\gamma^0 w_1(\mathbf{p})|^2 &= \left(\frac{E + mc^2}{2mc^2}\right)^2 \left[\left(1 + \frac{q_z pc^2}{(E + mc^2)^2}\right)^2 + \frac{(q_x^2 + q_y^2)p^2 c^4}{(E + mc^2)^4} \right] = \\ &= \left(\frac{E + mc^2}{2mc^2}\right)^2 \left[\left(1 + \frac{p^2 c^2}{(E + mc^2)^2}\right)^2 - \frac{4p^2 c^2}{(E + mc^2)^2} \sin^2 \frac{\theta}{2} \right] = \\ &= \frac{4E^2 - 4p^2 c^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}}{4m^2 c^2} = \frac{1 - \frac{v^2}{c^2} \sin^2 \frac{\theta}{2}}{1 - \frac{v^2}{c^2}} \end{aligned} \quad (110)$$

Ostatecznie otrzymujemy przekrój czynny Motta (θ jest kątem między wektorem \mathbf{p} (osią z), a wektorem \mathbf{q}).

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2e^4m^2}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{1}{4p^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}} \frac{1 - \frac{v^2}{c^2} \sin^2 \frac{\theta}{2}}{1 - \frac{v^2}{c^2}}, \quad (111)$$

który w granicy $c \rightarrow \infty$ zmierza do nierelatywistycznego wzoru Rutherforda.

Amplitudy przejść dla bardziej złożonych procesów można obliczać iterując równanie całkowe na pełną funkcję Ψ , wybierając ją tak, aby dla dalekiej przyszłości (przeszłości) sprowadzała się do odpowiedniego rozwiązania o dodatniej (ujemnej) energii.