W5-rel

Spin

Rozpatrzmy wielkość $\frac{\hbar}{2}\mathbf{\Sigma p}$, gdzie $\mathbf{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} = \mathbf{I_2} \otimes \boldsymbol{\sigma}$ **,** komutuje z hamiltonianem i jest stałą ruchu, ale dla swobodnej cząstki pęd p jest stałą ruchu i jeśli wybierzemy pęd w kierunku osi z to stałą ruchu będzie też

$$\frac{\hbar}{2}\Sigma = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

mający dwie wartości własne s=$\pm\frac{\hbar}{2}$, nazywamy go **operatorem rzutu spinu na kierunek pędu** nasze rozwiązania dla cząstki swobodnej mają już trzy indeksy $\Psi_{p,\lambda,s}(\mathbf{r})$

ze względu na blokową postać macierzy $\mathbf{\Sigma}$ możemy równie dobrze mówić o operatorze $\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}$;

niestety, funkcje $\Psi_\pm$ nie są funkcjami własnymi operatora $\mathbf{\Sigma}$,co łatwo sprawdzić,

$$\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}\Psi_\pm = N\begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}u^\pm \\ \dfrac{c\mathrm{p}^2}{mc^2+\lambda E_p}u^\pm \end{pmatrix}$$

czyli $\mathbf{\Sigma}$ nie może być relatywistycznym operatorem spinu.

Łatwo sprawdzić, że

$$[\boldsymbol{\sigma}\hat{\mathbf{n}}, H] = [\boldsymbol{\sigma}\hat{\mathbf{n}}, \boldsymbol{\alpha}\mathbf{p}] = 2i\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{n}\times\mathbf{p}$$

co oznacza, że komutator zniknie dla gdy $\mathbf{n}\times\mathbf{p} = 0$, a to oznacz, że może istnieć kombinacja liniowa $\Psi_\pm$, która będzie funkcją własną $\mathbf{\Sigma}$;
ale nam chodzi o funkcje własne H_D ,
wprowadzając dwa wektory $\hat{\mathbf{e}}_1 \ i \ \hat{\mathbf{e}}_2$ prostopadłe do $\mathbf{p}$
budujemy operator

$$\boldsymbol{O} = \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{pp} + \beta\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{e}}_1\hat{\mathbf{e}}_1 + \beta\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\mathbf{e}}_2\hat{\mathbf{e}}_2$$

mający jedną składową kartezjańską wzdłuż pędu, komutujący z H_D , ale jego składowe nie komutują między sobą (gdyż, np. $\hat{\mathbf{e}}_1\times\hat{\mathbf{e}}_2 = \mathbf{p}$ i skorzystamy jak zwykle z tożsamości $(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{B}) = \mathbf{AB} + i\boldsymbol{\sigma}[\mathbf{A}\times\mathbf{B}]$ **;**

można pokazać, że

$$O_z\Psi_\pm = \pm\Psi_\pm$$

$\boldsymbol{O}$ nazywamy **relatywistycznym operatorem spinu,** lub „operatorem polaryzacji" ;
można też sprawdzić, że wartość oczekiwana $\boldsymbol{O}$ w stanach $\Psi_\pm$ jest

$$\langle \Psi_\pm | \boldsymbol{O} | \Psi_\pm \rangle = \pm \hat{\mathbf{e}}_z$$

jest tak ponieważ, $\boldsymbol{\sigma}$ działa tylko na $u^{\pm 1/2}$, które są wektorami własnymi $\sigma_{\boldsymbol{z}}$, więc z każdego składnika $\boldsymbol{O}$ wycina tylko z-ową składową (rzyt tego składnika na kierunek z);

Fakt, że wartość średnia $\boldsymbol{O}$ leży na osi z wynikia z tego, że w $\Psi_\pm$ mamy w dużych i małych składowych φ i χ spinory $u^{+1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ i $u^{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, które są spinorami własnymi σ_z .

Cząstka w polu elektromagnetycznym (granica nierelatywistyczna)

Wiemy już (FK2 i powyżej), że wpływ zewnętrznych pól elektromagnetycznych opisujemy w mechanice kwantowej *via* potencjał wektorowy, który w H_D modyfikuje operator pędu

$$\mathbf{p} \to \boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} - e\mathbf{A}$$

jeśli mamy dodatkowo stałe pole ϕ to do energii wnosi ono energię potencjalną równą $-e\phi$

$$H_D(\boldsymbol{\pi})\Psi = (\varepsilon - e\phi)\Psi$$

zatem w przedstawieniu na duże i małe składowe $\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$ równanie przyjmuje postać

(***)

$$c\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p} - \boldsymbol{e}\mathbf{A})\boldsymbol{\chi} = (\varepsilon - e\phi - mc^2)\varphi$$
$$(\varepsilon - e\phi + mc^2)\chi = c\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p} - \boldsymbol{e}\mathbf{A})\,\varphi$$

postępując tak jak poprzednio, tzn. eliminując składową χ i zakładając energie nierelatywistyczne, czyli

$$(\varepsilon - e\phi + mc^2) = \left(mc^2 + E' - e\phi + mc^2\right) \sim 2mc^2$$

i tym samym

$$\chi \approx \frac{\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})}{2mc}\varphi$$

co daje równanie

$$\left(E' - e\phi\right)\varphi = \frac{1}{2m}[\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})]^2\varphi$$

a korzystając ze znanej już tożsamości $(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{B}) = \mathbf{A}\mathbf{B} + i\boldsymbol{\sigma}[\mathbf{A} \times \mathbf{B}]$ dostaniemy

$$[\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p}-e\mathbf{A})]^2 = (\mathbf{p}-e\mathbf{A})^2 + i\boldsymbol{\sigma}[(\mathbf{p}-e\mathbf{A})\times(\mathbf{p}-e\mathbf{A})]$$

ostatni wyraz nie znika – to są operatory a nie tylko wektory – zostają wyrazy mieszane, pamiętając o tym, że $\mathbf{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ dostaniemy

$$\left[\frac{1}{2m}(\mathbf{p}-e\mathbf{A})^2 - \frac{\hbar e}{2m}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{A}+\mathbf{A}\times\boldsymbol{\nabla}) + e\phi\right]\varphi = E'\varphi$$

przy odpowiednim cechowaniu **A** dla stałego pola **B** możemy przyjąć

$$(\boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{A}+\mathbf{A}\times\boldsymbol{\nabla}) = \mathrm{rot}\mathbf{A}$$

ale

$$\mathrm{rot}\mathbf{A} = \mathbf{B}$$

zatem

$$\left[\frac{1}{2m}(\mathbf{p}-e\mathbf{A})^2 - \frac{\hbar e}{2m}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{B} + e\phi\right]\varphi = E'\varphi$$

i to równanie nazywa się **przybliżeniem Pauliego**;

drugi wyraz wygląda jak oddziaływanie jakiegoś momentu magnetycznego z polem **B**

$$\frac{\hbar e}{2m}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{B} = \boldsymbol{\mu}_s\cdot\mathbf{B}$$

gdzie

$$\boldsymbol{\mu}_s = \frac{\hbar e}{2m}\boldsymbol{\sigma} = \frac{e}{m}\mathbf{s}$$

dla

$$\mathbf{s} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}$$

Równanie Diraca w granicy nierelatywistycznej wprowadziło automatycznie spin i związany z nim moment magnetyczny (!)

Wybierając $\mathbf{A} = \mathbf{B}\times\frac{\mathbf{r}}{2}$ wyraz $(\mathbf{p}-e\mathbf{A})^2$ (przy zaniedbaniu małego $\mathbf{A}^2$) prowadzi do

$$\mathbf{p}^2 - 2e\mathbf{A}\mathbf{p} = \mathbf{p}^2 - 2e\frac{1}{2}(\mathbf{B}\times\mathbf{r})\mathbf{p} = \mathbf{p}^2 - e(\mathbf{r}\times\mathbf{p})\mathbf{B} = \mathbf{p}^2 - e\mathbf{L}\mathbf{B}$$

[$2e\mathbf{A}\mathbf{p}$ pojawia się ze względu na cechowanie [**p**,**A**]=0, co daje **pA**=**Ap** , a w rozwinięciu $(\mathbf{p}-e\mathbf{A})^2$ pojawi się **Ap** i **pA**]

ale to jest powyżej mnożone przez $\frac{1}{2m}$ (nb. $\boldsymbol{\mu}_l = \frac{e}{2m}\mathbf{L}$, a $\boldsymbol{\mu}_s = \frac{e}{m}\mathbf{S}$), zatem dostajemy:

$$\left[\frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 - \frac{e}{2m}(\mathbf{L}+\mathbf{2s})\cdot\mathbf{B} + e\phi\right]\varphi = E'\varphi$$

czyli to co wprowadzaliśmy fenomenologicznie w teorii nierelatywistycznej.

<u>Oddziaływanie spin-orbita i dalsze poprawki</u>

Wróćmy do równań (***) na składowe φ, χ, ale $e\phi$ zapiszmy jako pewien potencjał *V*, np. pole centralne itp., oczywiście dla $E' << mc^2$

$$c\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p} - \boldsymbol{e}\mathbf{A})\boldsymbol{\chi} = \left(E' - V\right)\varphi$$
$$\left(E' - V + 2mc^2\right)\chi = c\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p} - \boldsymbol{e}\mathbf{A})\,\varphi$$

podobnie jak poprzednio wyznaczamy χ z drugiego równania i wstawiamy do pierwszego

$$E'\varphi = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})\left(1+\frac{E'-V}{2mc^2}\right)^{-1}(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})\varphi + V\varphi$$

przygotowanie:

$[\mathbf{p}, V(r)]f(r) = \mathbf{p}\big(\mathrm{V(r)f(r)}\big) - \mathrm{V}\mathbf{p}\mathrm{f(r)} = (-\mathrm{i}\hbar\nabla\mathrm{V})\mathrm{f(r)} - \mathrm{i}\hbar\nabla\mathrm{f(r)V} - \mathrm{V}\mathbf{p}\mathrm{f(r)} =$
$-\mathrm{i}\hbar\nabla\mathrm{Vf(r)} + \mathrm{V}\mathbf{p}\mathrm{f(r)} - \mathrm{V}\mathbf{p}\mathrm{f(r)}$

zatem $[\mathbf{p}, V] = -\mathrm{i}\hbar\nabla\mathrm{V}$, zatem $\mathbf{p}V = V\mathbf{p} - \mathrm{i}\hbar\nabla\mathrm{V}$

a nawias przybliżamy jako [1/(1+x) ~ 1-x], czyli jako $\left(1-\frac{E'-V}{2mc^2}\right)$, oraz $(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2$

w rezultacie

(4*)

$$E'\varphi = \left[\left(1-\frac{E'-V}{2mc^2}\right)\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V\right]\varphi - \frac{i\hbar}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\nabla}\mathrm{V})(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p})\varphi$$

ale $(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{B}) = \mathbf{AB} + i\boldsymbol{\sigma}[\mathbf{A}\times\mathbf{B}]$, czyli $(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\nabla}\mathrm{V})(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}) = (\boldsymbol{\nabla}\mathrm{V})\mathbf{p} + i\boldsymbol{\sigma}[\boldsymbol{\nabla}\mathrm{V}\times\mathbf{p}]$

zatem drugi wyraz po prawej stronie (4*)

$$-\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\nabla}\mathrm{V})(\boldsymbol{\nabla}\,\varphi) + \frac{\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\nabla}\mathrm{V}\times\mathbf{p})$$

biorąc sferycznie symetryczny *V*(r) zależny tylko od odległości (*r*) [jak to ma miejsce w atomach], dla którego $\boldsymbol{\nabla}\mathrm{V}\cdot\boldsymbol{\nabla} = \frac{\partial V}{\partial r}\frac{\partial}{\partial r}$, a $\boldsymbol{\nabla}\mathrm{V} = \frac{\mathbf{r}}{r}\frac{\partial V}{\partial r}$, pamiętając, że $\mathbf{r}\times\mathbf{p} = \mathbf{L}$, oraz podstawiając $\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{s}$,

dostanjemy

(5*)

$$E'\varphi = \left(\frac{\mathbf{p^2}}{2m} + V\right)\varphi - \left(\frac{E' - V}{2mc^2}\right)\frac{\mathbf{p^2}}{2m}\varphi - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\frac{\partial V}{\partial r}\frac{\partial \varphi}{\partial r} + \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\partial V}{\partial r}(\mathbf{s}\cdot\mathbf{L})\varphi$$

ten ostatni wyraz to **oddziaływanie spin-orbita** ,
a pierwszy wyraz to nierelatywistyczny hamiltonian,
a całość po prawej stronie to hamiltonian Pauliego H_P .
[Uwaga: to jest równanie tylko na dużą składową]

Dalsze poprawki

Zauważmy przede wszystkim, że przechodząc do granicy nierelatywistycznej:

a) otrzymaliśmy poprawki takie jak oddziaływanie S-O, czy pojawienie się spinu i oddziaływanie jego momentu magnetycznego z zewnętrznym polem **B**,
b) efekty te **tkwią fundamentalnie w równaniu Diraca**, ale ich „klasyczne" postaci uwidaczniają się w granicy nierelatywistycznej,
c) całkowicie nierelatywistyczne równanie dostaniemy przechodząc w przybliżeniu Pauliego z $c \to 0$.

Dwa środkowe wyrazy w (5*) też coś znaczą, ale najpierw:
funkcja φ nie jest unormowana, przypomnijmy normalizację, którą omawialiśmy przy równaniu ciągłości

$$\rho = \Psi^\dagger\Psi = (\varphi^\dagger\varphi + \chi^\dagger\chi) \sim \left(1 + \frac{\mathbf{p}^2}{4m^2c^2}\right)\varphi^\dagger\varphi$$

to powinniśmy brać nie φ, ale $\widetilde{\varphi} = \left(1 + \frac{\mathbf{p}^2}{4m^2c^2}\right)^{1/2}\varphi = \boldsymbol{g}\varphi$, żeby uzyskać unormowanie do 1.
Ale jeśli transformujemy funkcję z φ do $\widetilde{\varphi} = \boldsymbol{g}\varphi$, to powinniśmy też transformować równanie

$$E'\boldsymbol{g}\varphi = \boldsymbol{g}H_P\boldsymbol{g}^{-1}\boldsymbol{g}\varphi$$

rozwijając $\left(1 + \frac{\mathbf{p}^2}{8m^2c^2}\right)^{1/2}$ w szereg względem małych wyrazów ~ v^2/c^2 , przybliżymy ten operator jako $1 + \frac{\mathbf{p}^2}{4m^2c^2} + \theta\left(\frac{v^4}{c^4}\right)$, wówczas

$$\widetilde{H}_P = \boldsymbol{g}H_P\boldsymbol{g}^{-1} = \left(1 + \frac{\mathbf{p}^2}{8m^2c^2}\right)H_P\left(1 - \frac{\mathbf{p}^2}{8m^2c^2}\right) = H_P + \frac{1}{8m^2c^2}[\mathbf{p^2}, H_P] + \theta\left(\frac{v^4}{c^4}\right)$$

oddziaływanie S-O pozostaje bez zmian w H_P , ale inne wyrazy zawierające V(r) będą wnosiły swoje wkłady ;
ostatecznie – bez wyprowadzenia – dostaniemy:

$$\widetilde{H}_P = \frac{\mathbf{p^2}}{2m} + V - \frac{\left(E' - V\right)^2}{2mc^2} - \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\Delta V + \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\partial V}{\partial r}(\mathbf{s}\cdot\mathbf{L})$$

wszystkie poprawki są rzędu $\sim v^2/c$,

drugi wyraz, proporcjonalny w zasadzie do kwadratu energii kinetycznej, to tak zwana ***poprawka na wariację masy*** , wynikająca ze zmienności masy cząstki z prędkością,

trzeci wyraz to tzw. ***poprawka Darwina*** – związana jest z procesami kreacji i anihilacji, dla $V = -Ze/r$, $\Delta V = -4\pi\delta(r)$ - „oddziaływanie kontaktowe"; nie znika tylko w stanach atomowych s .

Atom wodoru

W potencjale kulombowskim, operatorami komutującymi z H_D są J^2 i J_z , gdzie $J=L+S$, rozwiązanie równania Diraca daje

$$E_{nj} = mc^2\left[1 + \left(\frac{Z\alpha}{n - \left(j + \frac{1}{2}\right) + \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right) - Z^2\alpha^2}}\right)^2\right]^{-1/2} - mc^2$$

gdzie $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ nazywa się stałą struktury subtelnej (niemianowana ~ 1/137);
rozwinięcie E_{nj} wzgl. potęg $(Z\alpha)^2$ prowadzi do:

$$E_{nj} = -mc^2\frac{1}{2}\left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2\left[1 + \left(\frac{Z\alpha}{n}\right)^2\left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right)\right] + \cdots$$

pierwszy wyraz to
dokładnie nierelatywistyczna energia elektronu w wodorze: $-\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2n^2}$.

Zerowa masa spoczynkowa

Na początku lat 30. Zeszłego wieku, najpierw Pauli a potem Fermi zapostulowali istnienie neutrino, bezmasowej i bezładunkowej cząstki o spinie ½ występującej w teorii rozpadu β. W 1956 r. po raz pierwszy wykryto neutrino (Reines i Cowan). Dziś wiemy, że neutrino ma masę, bardzo małą, ale nie znamy jej wartości. Początkowo sądzono, że równania Diraca dla cząstek o masie m=0 mogą opisywać neutrino.

Równania Diraca (na składowe φ, χ) dla swobodnej cząstki bezmasowej (m=0) o małej energii, mają postać

$$c\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}\chi = E'\varphi$$
$$c\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}\,\varphi = E'\chi$$

definiując $\mathbf{n} = c\mathbf{p}/E^{'}$ widać, że

$$(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n})\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\chi\\ \varphi\end{pmatrix}$$

czyli

$$(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}) = \begin{pmatrix}0 & \mathbf{I}\\ \mathbf{I} & 0\end{pmatrix} = ozn. = -\gamma_5$$

warto zauważyć, że z drugiej strony
zachodzi związek

$$\gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4$$

gdzie, przypomnijmy, γ_i to macierze Diraca z współzmienniczej postaci równania, tak zawiązane z macierzami $\boldsymbol{\alpha}$ i β:

$$\gamma = -i\beta\boldsymbol{\alpha}, \qquad \gamma_4 = \beta \quad ;$$

zamiast składowych $\varphi,\ \chi$
wprowadźmy ich kombinacje liniowe

$$\Phi = \frac{1}{2}(\varphi + \chi) = 1/2(1 + \boldsymbol{\sigma}\mathbf{n})\varphi$$
$$\mathrm{F} = \frac{1}{2}(\varphi - \chi) = 1/2(1 - \boldsymbol{\sigma}\mathbf{n})\varphi$$

dodając i odejmując te równania
dostajemy

$$\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}\Phi = \Phi, \qquad \boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}\mathrm{F} = -\mathrm{F}$$

Funkcje Φ i F są spinorami dwuskładnikowymi – funkcjami własnymi operatora $\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}$ - rzutu spinu na kierunek pędu (do wartości +1/2 i -1/2 [gdyż $\mathbf{s} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}$]),
Tę własność nazywamy **skrętnością** (*helicity*)

Na koniec zauważmy, że nasze równanie

$$-i\hbar c\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\nabla}\Psi = E^{'}\gamma_5\Psi,$$

jest – poza skrętnością –
podobne do równania jakie w metodzie ciasnego wiązania dla grfenu, w przybliżeniu pi-elektronowym, w którym funkcję wariacyjną buduje się tylko z jednego orbitala 2p_z na każdym atomie węgla i które dla granicznych punktów strefy Brillouina (tzw. punkty **K** Diraca) wygląda tak:

$$-\,i\hbar v_F\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nabla}\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}),$$

gdzie v_F prędkość elektronów na poziomie Fermiego [w szczycie stożka Diraca, stożki – gdyż energia E(**k**) jest w punktach **K** liniowo proporcjonalna do pędu (wektora falowego **k**)]

o takich elektronach w grafenie (układ 2D) mówimy, że są quasi-fermionami Diraca, a opisujące je równania pseudo-relatywistycznymi równaniami Diraca;

w pewnych egzotycznych układach grafenowych i w dwuwymiarowych izolatorach topologicznych mogą pojawiać się rozwiązania równań, które mogą posiadać cechy skrętności.