מבוא לתורת הקוונטים היחסותית

באילו תנאים עלינו להתייחס לחלקיק כאל חלקיק יחסותי? ניתן להציע תשובה לשאלה זו ממספר נקודות מבט:

א. יחסות נכנסת לתמונה כאשר האנרגיה של החלקיק גדולה מאנרגית המנוחה שלו mc^2. בגבול זה יחס הדיספרסיה $E=\sqrt{(mc^2)^2+(pc)^2}$, שבאנרגיות נמוכות נתון בקירוב ע"י $E\simeq mc^2+\frac{p^2}{2m}$ - אשר יחד עם רעיוני ששימשו אותנו במשוואת שרדינגר (או חוק ניוטון) משתנה לתחום הליניארי $E\simeq pc$. שימו לב כי עבור חלקיקים חסרי מסה תנאי זה גורר את הצורך לפתח תורה יחסותית למן ההתחלה, ואמנם גם התורה הקלאסית של מקסוול לשדה האלקטרומגנטי (פוטונים) וגם התורה הקוונטית הנגזרת ממנה אותה פיתחנו לא מכבר הן יחסותיות.

ב. פלוקטואציות קוונטיות מאפשרות יצירת זוג חלקיק אנטי-חלקיק מהואקום. נעריך באיזו סקלת אורך הדבר מתאפשר. נתבונן בחלקיק בקופסה באורך L. מעקרון אי הוודאות נובע כי בתנע שלו קיימת אי וודאות $\Delta p\geq\frac{\hbar}{L}$. כתוצאה מכך קיימת פלוקטואציה באנרגיה שלו מסדר גודל $\Delta E\sim\sqrt{(mc^2)^2+\left(\frac{\hbar c}{L}\right)^2}$. קל לבדוק שעבור $L\lesssim\frac{\hbar}{mc}\equiv\lambda_c$ (ה Compton wavelength של החלקיק) $\Delta E>2mc^2$ ויצירת זוג אפשרית.

כיצד יש לבצע את ההכללה היחסותית של משוואת שרדינגר תוך שימוש בכללי הקוונטיזציה המוכרים: $E\to i\hbar\partial_t$, $\vec{p}\to -i\hbar\vec{\nabla}$? אפשרות אחת היא להכיל אותם על יחס הדיספרסיה היחסותי

$$E=\sqrt{m^2c^4+\vec{p}^2c^2}\quad\rightarrow\quad i\hbar\partial_t\psi=\left[m^2c^4-\hbar^2c^2\nabla^2\right]^{1/2}\psi$$

אך כיצד עלינו להבין את את השורש של האופרטור המופיע במשוואה הקוונטית? פירושו בעזרת פיתוח טיילור

$$i\hbar\partial_t\psi=\left[mc^2-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-\frac{\hbar^4}{8m^3c^2}(\nabla^2)^2+\ldots\right]\psi$$

מוליך למשוואה דיפרנציאלית מסדר אינסופי המצריכה אינסוף תנאי גבול כדי להגדיר את ההתפתחות הזמנית של ψ - המשוואה "אינה לוקלית".

דרך חלופית ומקובלת בעיה זו היא להכליל את תהליך הקוונטיזציה על אינווריאנט האנרגיה-תנע:

$$E^2 = m^2c^4 + \vec{p}^2c^2 \quad \longrightarrow \quad -\hbar^2\partial_t^2\psi = \left(-\hbar^2c^2\nabla^2 + m^2c^4\right)\psi$$

$$(\Box + k_c^2)\psi = 0$$ //c

כאשר $\Box = \frac{\partial^2}{\partial(ct)^2} - \nabla^2$; $k_c = \frac{2\pi}{\lambda_c} = \frac{mc}{\hbar}$. זוהי משוואת Klein-Gordon.

קיבלנו לכן שבמחיר הפיכת המשוואה למשוואה דיפרנציאלית מסדר שני בזמן השגנו משוואה לוקלית וסימטרית באופן מפורש. אך כיצד עלינו להבין את ψ? האם ניתן לפרש את ψ כפונקציית הגל ואת $|\psi|^2$ כצפיפות ההסתברות בדומה למתקיים עבור משוואת שרדינגר? שימור ההסתברות כופה על צפיפות ההסתברות ρ וצפיפות זרם ההסתברות $\vec{J}$ לקיים את משוואת הרציפות $\partial_t\rho + \vec{\nabla}\cdot\vec{J} = 0$. ננסה למצוא ביטויים ל-$\rho$ ול-$\vec{J}$ המקיימים את משוואת הרציפות תוך שימוש במשוואת Klein-Gordon. נכפול את המשוואה ל-ψ ב-ψ^* משמאל ונחסר ממנה את המשוואה הצמודה ל-ψ^* לאחר הכפלתה משמאל ב-ψ לקבל

$$\psi^*(\Box + k_c^2)\psi - \psi(\Box + k_c^2)\psi^* = 0$$

$$\Leftarrow \quad \psi^*\Box\psi - \psi\Box\psi^* = 0$$

אותה ניתן לרשום:

$$\frac{1}{c^2}\partial_t\left(\psi^*\partial_t\psi - \psi\partial_t\psi^*\right) - \vec{\nabla}\cdot\left(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right) = 0$$

מכאן לזהות

$$\rho = i\frac{\hbar}{2mc^2}\left(\psi^*\partial_t\psi - \psi\partial_t\psi^*\right) \quad , \quad \vec{J} = -i\frac{\hbar}{2m}\left(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right)$$

כשהכפלנו את הזרם הנשמר קודם, $\frac{i\hbar}{2m}$ כדי לקבל זרם ממשי ובעל יחידות מתאימות.

ניתן להבחין בשלשה קשיים הקשורים למשוואת Klein-Gordon ולפרשנות ההסתברותית שלה:

א. הביטוי שקיבלנו ל ρ אינו מוגדר חיובי ולכן אינו יכול לשמש צפיפות הסתברות. זו היתה הסיבה לדחית המשוואה שהוצעה ב 1926 ועד לאימוצה במסגרת תורת השדות הקוונטית ב 1934.

ב. המשוואה היא מסדר שני בזמן ויש צורך להגדיר את תנאי ההתחלה עבור Ψ ו $\partial_t\Psi$ כדי לחשב את התפתחותה בזמן של Ψ.

ג. למשוואה זו מבוססת משוואת Klein Gordon $E^2=m^2c^4+\vec{p}^2c^2$, ולכן גם לה יש פתרונות עם אנרגיה חיובית ושלילית בתחום $[mc^2,\infty]$, $[-\infty,-mc^2]$. כיצד יש להבין פתרונות עם אנרגיה שלילית? למעשה ניתן להראות כי הופעת של פתרונות כאלה אחראית לשתי הבעיות הקודמות. עבור חלקיק חופשי נוכל לפתור את הבעיה על ידי הוספת התנאי $E>0$ למשוואה אך הדבר אינו אפשרי יותר אם נצמד לדוגמא את החלקיק לשדה אלקטרומגנטי $\vec{P}\to\vec{P}-\frac{e}{c}\vec{A}$. גם אם נתחיל במקרה זה במצב עם $E>0$ השדה יצור מעברים למצבים עם אנרגיות שליליות.

הקשיים הגדולים אלה הניעו את דיראק לחפש משוואה חלופית. כפי שנראה בנושא החדש שלו נפתרו שתי הבעיות הראשונות אך השלישית נשארה ודרשה פרוש למצבי האנרגיה השלילית. דיראק היה הראשון להבין כי הקשיים בפרשנות ההסתברותית של משוואת Klein-Gordon נבעה מהיותה מסדר שני בנגזרת הזמנית. הוא חיפש לכן משוואה לינארית בנגזרת הזמנית. מכיון שאנו דורשים התנהגות זהה לזמן ולמרחב המשוואה חייבת להיות לינארית גם בנגזרות המרחביות, כלומר באופרטור התנע. המשוואה היחידה שניתן לרשום תחת דרישות אלה היא לכן מהצורה

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=H\Psi=\left[c\vec{\alpha}\cdot\vec{P}+mc^2\beta\right]\Psi \qquad (1)$$

דיראק דרש שהמשוואה תוליך לאינואריאנט האנרגיה-תנע $E^2=p^2c^2+m^2c^4$. אם נשתמש במשוואה (1) נקבל

$$H^2\Psi = \Big[\sum_{i,j=x,y,z} c^2\alpha_i\alpha_j\hat{P}_i\hat{P}_j + \sum_i mc^3(\alpha_i\beta + \beta\alpha_i)\hat{P}_i + m^2c^4\beta^2\Big]\Psi$$

כדי לקבל את האינואריאנט אנו זקוקים לדרוש לכן

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = \alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 2\delta_{ij}$$

$$\{\alpha_i, \beta\} = \alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0 \qquad , \quad \beta^2 = 1$$

α_i ו-β הן לכן מטריצות! קבע כי כדי ש-H יהיה הרמיטי כך צריכות להיות גם α ו-β וכי קיימות אינסוף בחירות לדרישות שלה הקשורים זה לזה על ידי טרנספורמציות אוניטריות. הבחירה הקוונטית של דיראק היתה

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

כאשר σ_i הינן מטריצות פאולי:

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

המילטוניאן דיראק באופן מפורש הינו לכן מטריצה 4x4 ופונקציית הגל Ψ הינה ספינור ארבע-ממדי. שימו לב כי מימד ההמילטוניאן אינו משקף את מספר ממדי המרחב-זמן בו חי החלקיק אלא נובע מהאלגברה שכרוכה על המטריצות $\vec{\alpha}$ ו-β, - זהו המימד המינימלי של הצגה מטריציונית של האלגברה.

מהי ההסתברות השמורה המתאימה על ידי תורה זו? ניתן לכתוב את הספינור Ψ בצורה

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix}$$

ובאנלוגיה עם תורת שרדינגר נגדיר את צפיפות ההסתברות?

$$\rho = \Psi^+\Psi = \Psi_1^*\Psi + \Psi_2^*\Psi_2 + \Psi_3^*\Psi_3 + \Psi_4^*\Psi_4$$

גם זה מתנהג היטב כנדרש אך עלינו להראות כי $\frac{\partial\rho}{\partial t}$ נתון על ידי דיברגנץ של וקטור כדי להבטיח שההסתברות תשמר:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \frac{\partial\Psi^+}{\partial t}\cdot\Psi + \Psi^+\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\left[(H\Psi)^+\Psi - \Psi^+H\Psi\right]$$

$$= \frac{i}{\hbar}\Big[i\hbar c\, \vec\nabla\Psi^+\vec\alpha\,\Psi + mc^2\Psi^+\beta\Psi + i\hbar c\, \Psi^+\vec\alpha\cdot\vec\nabla\Psi - mc^2\Psi^+\beta\Psi\Big] = -\vec\nabla\left(\Psi^+c\vec\alpha\Psi\right)$$

וקיבלנו כי שטף ההסתברות הוא

$$\vec J = \Psi^+c\vec\alpha\Psi$$

משוואת דיראק (1) מתארת חלקיק חופשי עבורו אנו מצפים כי התנע $\vec P$ נשמר ואכן מיידי לראות כי

$$[H, P_i] = [c\vec\alpha\cdot\vec P + mc^2\beta,\ P_i] = 0$$

אנו מצפים כי גם התנע הזוויתי נשמר. נבחן את שימור התנע הזוויתי המרחבי:

$$[H, L_i] = [c\vec\alpha\vec P + mc^2\beta,\ \epsilon_{ijk}X_jP_k] \overset{[P_i,X_j] = -i\hbar\delta_{ij}}{=} -i\hbar c\,\epsilon_{ijk}\alpha_jP_k \neq 0$$

באופן מפתיע התנע הזוויתי המרחבי אינו נשמר! מצד שני, ברור כי המערכת אינווריאנטית תחת סיבובים ולכן אנו מצפים למסקנה כי $\vec L$ אינו זהה לוקטור הסיבובים $\vec J$ $\Leftarrow$ לחלקיק דיראק חייב להיות ספין! נבדוק כיצד משתנה האופרטור (או ליתר דיוק השלישיה)

$$\vec\Sigma = \begin{pmatrix} \vec\sigma & 0 \\ 0 & \vec\sigma \end{pmatrix}$$

$$[H,\Sigma_i] = cP_j[\alpha_j,\Sigma_i] = cP_j\left[\begin{pmatrix}0 & \sigma_j\\ \sigma_j & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sigma_i & 0\\ 0 & \sigma_i\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}\sigma_i & 0\\ 0 & \sigma_i\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & \sigma_j\\ \sigma_j & 0\end{pmatrix}\right]$$

$$= cP_j\begin{pmatrix}0 & [\sigma_j,\sigma_i]\\ [\sigma_j,\sigma_i] & 0\end{pmatrix} = 2icP_j\,\epsilon_{jik}\alpha_k = 2ic\,\epsilon_{ijk}\alpha_j P_k$$

ולכן $\vec{J} = \vec{L} + \frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}$ חולף עם ההמילטוניאן ולכן נשמר. החלק הספיני בתנע הזוויתי מקיים

$$\vec{S}^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{4}\left[\begin{pmatrix}\sigma_x^2 & 0\\ 0 & \sigma_x^2\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}\sigma_y^2 & 0\\ 0 & \sigma_y^2\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}\sigma_z^2 & 0\\ 0 & \sigma_z^2\end{pmatrix}\right] = \frac{3}{4}\hbar^2 I = \frac{1}{2}\left(1+\frac{1}{2}\right)\hbar^2 I$$

ולכן לחלקיק דיראק ספין 1/2.

באופן טריוויאלי שימור $\vec{P}$ ו $\vec{J}$ גורר את שימור ה"סליליות" helicity:

$$h = \frac{\vec{J}\cdot\vec{P}}{\hbar|\vec{P}|} = \frac{(\vec{r}\times\vec{P} + \hbar/2\,\vec{\Sigma})\cdot\vec{P}}{\hbar|\vec{P}|} = \frac{1}{2|\vec{P}|}\vec{\Sigma}\cdot\vec{P}$$

קל לבדוק ש $h^2 = \frac{1}{4}I$ ולכן לחלקיקי דיראק helicity $h = \pm\frac{1}{2}$ (מקובל לקרוא ל $h=\frac{1}{2}$ ימני ול $h=-\frac{1}{2}$ שמאלי).

ננסה כעת לפתור את משוואת דיראק לחלקיק חופשי. נחפש פתרון מהצורה $\Psi = e^{-\frac{i}{\hbar}Et + \frac{i}{\hbar}\vec{P}\cdot\vec{X}}\begin{pmatrix}u_A(\vec{P})\\ u_B(\vec{P})\end{pmatrix}$

כאשר $u_A(\vec{P})$ ו $u_B(\vec{P})$ הינם דו-ספינורים קבועים.

נציב במשוואה ונקבל

$$E\begin{pmatrix}u_A\\ u_B\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}mc^2 & c\vec{P}\cdot\vec{\sigma}\\ c\vec{P}\cdot\vec{\sigma} & -mc^2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_A\\ u_B\end{pmatrix}$$

$$u_A = \frac{c}{E - mc^2}\,\vec{P}\cdot\vec{\sigma}\,u_B$$
$$u_B = \frac{c}{E + mc^2}\,\vec{P}\cdot\vec{\sigma}\,u_A$$

(II) ⇐

מהצבת המשוואה השניה בראשונה נקבל

$$1 = \frac{c^2}{E^2-(mc^2)^2}\left(\vec{P}\cdot\vec{\sigma}\right)^2$$

אבל

$$(\vec{P}\cdot\vec{\sigma})^2 = P_i P_j \sigma_i \sigma_j = \frac{1}{2} P_i P_j \{\sigma_i, \sigma_j\} = P_i P_j \delta_{ij} = P^2$$

ולכן

$$E^2 = (Pc)^2 + (mc^2)^2 \Rightarrow E = \pm\sqrt{(Pc)^2+(mc^2)^2}$$

<u>עבור $E>0$</u> נבחר עד כדי מקדם נרמול $u_A = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ ו $u_A = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$. מתוך (II) נקבל בעזרת $\vec{P}\cdot\vec{\sigma} = \begin{pmatrix}P_z & P_x - iP_y\\ P_x + iP_y & -P_z\end{pmatrix}$ את שני הפתרונות הבאים לספינור של פונקצית הגל:

$$N\begin{pmatrix}1\\0\\ \frac{cP_z}{E+mc^2}\\ \frac{c(P_x+iP_y)}{E+mc^2}\end{pmatrix}, \quad N\begin{pmatrix}0\\1\\ \frac{c(P_x-iP_y)}{E+mc^2}\\ -\frac{cP_z}{E+mc^2}\end{pmatrix}$$

כאשר N מקדם נרמול.

פתרונות אלה טובים רק עבור $E<0$
למעשה ניתן לרשום

<u>עבור $E<0$</u> נשים לב כי אם נרשום $E=-|E|$ נקבל כי הפתרונות ל (II) קשורה זה מתקבלים מתוך הפתרונות עבור $E>0$ על ידי $u_A^{E<0}(\vec{P}) = u_B^{E>0}(-\vec{P})$, $u_B^{E<0}(\vec{P}) = u_A^{E>0}(-\vec{P})$
ולכן פונקצית הגל היא אחת מהשתיים

$$N\begin{pmatrix}-\frac{cP_z}{|E|+mc^2}\\ \frac{-c(P_x+iP_y)}{|E|+mc^2}\\ 1\\ 0\end{pmatrix}, \quad N\begin{pmatrix}-\frac{c(P_x-iP_y)}{|E|+mc^2}\\ \frac{cP_z}{|E|+mc^2}\\ 0\\ 1\end{pmatrix}$$

(פתרונות אלה הינם למעשה קומבינציה לינארית של השניים הללו עבור $E<0$)

שים לב כי פונקציות הגל שמצאנו הינן פונקציות עצמיות של $\vec{P}$ אך לא באופן כללי של ה-helicity $\vec{\Sigma}\cdot\vec{P}/2|\vec{P}|$. הן כן כאלה במקרה הפרטי $P_x = P_y = 0$. במקרה זה קל לבדוק שפונקציות הגל עם הרכיב $\binom{1}{0}$ הן בעלות $h = 1/2$ ואלה עם $\binom{0}{1}$ הן בעלות $h = -1/2$. אני משאיר לכם כתרגיל למצוא פונקציות גל עצמיות סימולטניות של H, $\vec{P}$ ו-h במקרה הכללי.

קיבלנו כי ספקטרום דיראק החופשי מורכב מרצף מצבים עם אנרגיות חיוביות $mc^2 \leq E < \infty$ ומרצף מצבים עם אנרגיות שליליות $-\infty < E \leq -mc^2$. המשמעות של האחרון היא בעייתית. אלקטרון עם אנרגיה חיובית יכול ליפול למצב עם אנרגיה שלילית תוך פליטת פוטון ולהמשיך ליפול למצבים עם אנרגיות שליליות הולכות וגדלות (כל זמן שניתן לו תנע על ידי פוטנציאל חיצוני למשל). בעיה דומה קיימת גם באטום המימן כי האלקטרון יכול להמשיך וליפול למצבי אנרגיה שליליים - נראה כי המערכת חסרת מצב יסוד ואינה יציבה. כדי להתגבר על קושי זה הציע דיראק ב 1930 כי כל מצבי האנרגיה השליליים מלאים תחת תנאים רגילים, כלומר שמצב הואקום הינו למעשה מצב של ים אינסופי של אלקטרונים בעלי אנרגיות שליליות - ים דיראק. המשמעות של ים דיראק כזה בתוספת לעקרון האיסור של פאולי פותרת את בעיית חוסר היציבות שתיארנו לעיל.

מדי פעם אחד מהאלקטרונים בים דיראק יכול לבלוע פוטון עם אנרגיה $\hbar\omega > 2mc^2$ ולהפוך למצב עם $E>0$. כתוצאה מכך נוצר "חור" בים דיראק. האנרגיה הנצפית של ים דיראק היא האנרגיה של מצב הואקום פחות האנרגיה השלילית של המצב הריק ולכן היא גדלה חיובית! בצורה שכזו אנו מצפים שהספקטרום של אלקטרון עם אנרגיה שלילית בים דיראק יופיע כספקטרום של חלקיק עם אנרגיה חיובית. בצורה דומה המטען של הים עם החור הוא

$$Q = Q_{vacuum} - (-|e|) = Q_{vacuum} + |e|$$

והמטען הנצפה שלו (המטען ביחס לים דיראק המלא) יהיה לכן $Q_{observed} = Q - Q_{vacuum} = |e|$

ניתן לכן להתייחס לחור בים דיראק כאל חלקיק עם אנרגיה חיובית ומטען חיובי. חלקיק זה - הפוזיטרון אמנם התגלה על ידי C.D. Anderson ב 1932. באופן דומה נקבל

	אנרגיה	מטען	תנע	ספין
מצב אלקטרוני עם $E<0$	$-\lvert E\rvert$	$-\lvert e\rvert$	$\vec{P}$	$\frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}$
מצב פוזיטרון (העדר אלקטרון עם $E<0$)	$\lvert E\rvert$	$\lvert e\rvert$	$-\vec{P}$	$-\frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}$

התחלנו את המסע בבקשה לתאר חד-חלקיק המתיישב עם יחסות פרטית ושימור הסתברות. משוואת דיראק אכן מקיימת דרישות אלה אך שימוש מוצלח בה דורש את הצורך בפונקצית גל רבת חלקיקים. אין אנו יכולים לעסוק בפשטות בפונקצית גל חד-חלקיקית $\psi(\vec{r})$, עלינו לעסוק בפונקצית גל רב-חלקיקית $\psi(\vec{r};\vec{y}_1,\vec{y}_2\cdots)$ עם אינסוף אלקטרונים בעלי אנרגיה שלילית בקואורדינטות $\vec{y}_1,\vec{y}_2,\vec{y}_3\cdots$. למעשה משוואת דיראק היא נקודת המוצא "הקלאסית" לתורת שדות יחסותית בדומה למה שראינו לגבי משוואת שרדינגר בהקשר הלא יחסותי. על ידי קוונטיזציה של תורת השדה הנותנת את משוואת דיראק כמשוואת Euler-Lagrange שלה נגיע לתורת שדות המטפלת באלקטרונים ובפוזיטרונים על בסיס שווה ושבה אין צורך "להתפלל" עם הצבת מושגים כים דיראק.

כדי להמחיש את הפרדוקס של מצבי האנרגיה השלילית נבחן פיזור של חלקיק עם אנרגיה חיובית הנע לאורך ציר z הנתקל במדרגת פוטנציאל ב- $z\geq 0$:

$$eA^0(z)=V(z)=\begin{cases}0 & z<0 \quad \text{אזור I}\\ V_0 & z\geq 0 \quad \text{אזור II}\end{cases}$$

$$\psi_i(z)=Ae^{ik_1z}\begin{pmatrix}1\\0\\ \frac{\hbar c k_1}{E+mc^2}\\0\end{pmatrix}$$

$$k_1=\sqrt{\frac{E^2-m^2c^4}{\hbar^2c^2}}$$

באזור I הגל הנכנס

(אנו משמיטים את התלות הזמנית המשותפת לכל מרכיבי פונקציות הגל באזורים השונים).

הגל המוחזר

$$\Psi_r(z) = Be^{-ik_1 z}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\frac{\hbar c k_1}{E+mc^2} \\ 0 \end{pmatrix} + Ce^{-ik_1 z}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -\frac{\hbar c k_1}{E+mc^2} \end{pmatrix}$$

באזור II הגל המועבר מתקבל מפתרונות המרחב החופשי על ידי ההחלפה $E \to E - V_0$

$$\Psi_t(z) = De^{ik_2 z}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{\hbar c k_2}{E-V_0+mc^2} \\ 0 \end{pmatrix} + Ee^{ik_2 z}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -\frac{\hbar c k_2}{E-V_0+mc^2} \end{pmatrix}$$

כאשר $k_2 = \sqrt{\frac{(E-V_0)^2 - m^2c^4}{\hbar^2 c^2}}$

מתנאי רציפות הפתרון ב $z=0$ נקבל (אין היפוך ספין) $C = E = 0$

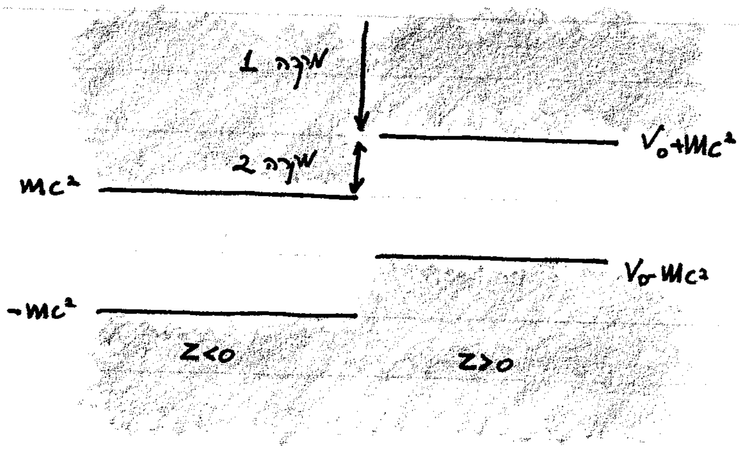
$$B = \frac{1-r}{1+r}A \quad , \quad D = \frac{2A}{1+r} \quad , \quad r = \frac{k_2(E+mc^2)}{k_1(E-V_0+mc^2)}$$

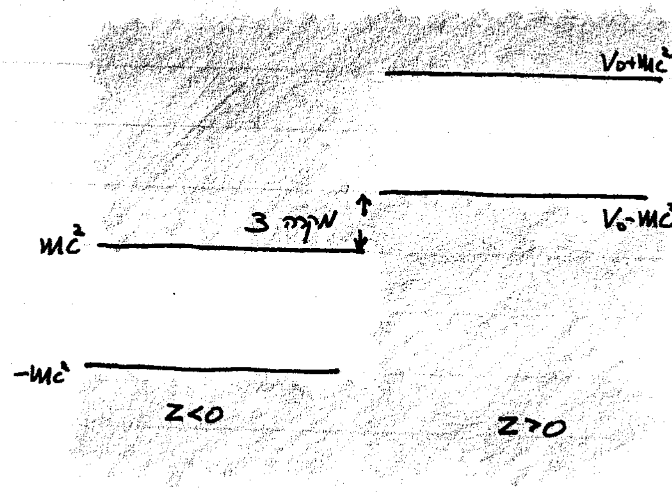
בנוסף מתוך חישוב שטפי ההסתברות נקבל

$$T = \frac{J_t}{J_i} = \frac{4r}{(1+r)^2} \quad , \quad R = -\frac{J_r}{J_i} = \frac{(1-r)^2}{(1+r)^2} = 1 - T$$

כלומר הפתרון מקיים את שימור ההסתברות כנדרש.

נוכל להבחין ב 3 מקרים:





<u>מקרה 1</u>: $E>V_0+mc^2$. כאן k_2 ממשי הגל עובר מעל מחסום הפוטנציאל (וגם מעבר ממש קלאסי) באנלוגיה מלאה עם המקרה של מחסום תרחיש דומה בעזרת משוואת שרדינגר.

<u>מקרה 2</u>: $V_0-mc^2<E<V_0+mc^2$ כאשר $E>mc^2$. במקרה זה k_2 מדומה והגל המוחזר דועך אקספוננציאלית שוב כמו לגבי מחסום הפוטנציאל הלא יחסותי.

<u>מקרה 3</u>: $mc^2<E<V_0-mc^2$ כלומר עבור $V_0>2mc^2$. במקרה זה כמו במקרה 1 $k_2>0$ ממשי אך הפעם $r<0$. כתוצאה מכך $T<0$! $R>1$. קיבלנו את התוצאה המפתיעה שיותר גבוה מוחזר מהמחסום מאשר פוגע בו. כדי לקיים את שימור ההסתברות אנו מקבלים במקביל שבאה כי במחסום פוגע זרם חלקיקים המגיעים מ $z>0$ ונעים לכוון $z<0$. פרדוקס מעניין זה התגלה ב 1929 על ידי Oscar Klein ונקרא לכן פרדוקס קליין.

ניתן להבין את ההתרחשות כבעיה מושגית של יצירת אלקטרון-פוזיטרון בשכבת הגבול. מכיון שהמצב עם k_2 באזור $z>0$ נמצא בפס מצבי האנרגיה השלילית ומאוכלס עם אכלוס קטן מ 1 (עקב "הדלפה" לאזור $z<0$), ניתן להבין זאת כפוזיטרון הנע לכוון $z=\infty$. במקביל בו הגל האלקטרוני נע לכוון $z=-\infty$. האנרגיה ליצירת הזוג באה מהאנרגיה האלקטרוסטטית של הפוזיטרון בפוטנציאל $+|e|V_0$. מכיון שבמקרה זה $V_0>2mc^2$ יש די אנרגיה ליצירת הזוג.

לבסוף ארצה להראות לכם כיצד משוואת שרדינגר ותיקונים יחסותיים לה מתקבלים ממשוואת דיראק.
לצורך כך נכלול בדיון פוטנציאלים אלקטרומגנטיים בעזרת ה-minimal coupling הרגיל:

$$\vec{P} \to \vec{P} - \frac{e}{c}\vec{A} \quad , \quad E \to E - e\phi \qquad (e<0)$$

בתנאים אלה נקבל שהמילטוניאן דיראק הינו מהצורה

$$H = \begin{pmatrix} mc^2 + e\phi & c\vec{\sigma}(\vec{P} - \frac{e}{c}\vec{A}) \\ c\vec{\sigma}(\vec{P} - \frac{e}{c}\vec{A}) & -mc^2 + e\phi \end{pmatrix}$$

נרשום את משוואת דיראק עבור הספינור $\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix}$ (Ψ_{AB} הינם בי-ספינורים)

$$(mc^2 + e\phi)\Psi_A + c\vec{\sigma}(\vec{P} - \frac{e}{c}\vec{A})\Psi_B = E\Psi_A$$

$$c\vec{\sigma}(\vec{P} - \frac{e}{c}\vec{A})\Psi_A - (mc^2 - e\phi)\Psi_B = E\Psi_B$$

נגדיר $W = E - mc^2$ האנרגיה ביחס לאנרגיית המנוחה ונרשום את המשוואה השניה בצורה

$$\Psi_B = \frac{1}{2mc^2 + W - e\phi} c\vec{\sigma}\left(\vec{P} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\Psi_A$$

בגבול הלא יחסותי $e\phi \ll mc^2$, $W \ll mc^2$ נקבל בסדר המוביל

$$\Psi_B \simeq \frac{1}{2mc}\vec{\sigma}\left(\vec{P} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\Psi_A$$

הצבה למשוואה הראשונה תתן לנו את המשוואה ל-Ψ_A:

$$H_{NR}\Psi_A = W\Psi_A$$

$$H_{NR} = \frac{1}{2m}\left[\vec{\sigma}\left(\vec{P} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)\right]^2 + e\phi$$

כאשר

שימוש ב $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k$ מוביל ל

$$H_{NR} = \frac{1}{2m}\left(\vec{P} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + \underbrace{\frac{1}{2m}\, i\epsilon_{ijk}\sigma_k \left(P_i - \frac{e}{c}A_i\right)\left(P_j - \frac{e}{c}A_j\right)}_{-\frac{ie}{2mc}\epsilon_{ijk}\sigma_k \underbrace{\left(P_i A_j - A_j P_i\right)}_{-i\hbar\, \partial_i A_j}} + e\phi$$

$$\Leftarrow \quad \vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$$

$$H_{NR} = \frac{1}{2m}\left(\vec{P} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 - \frac{e}{mc}\vec{S}\cdot\vec{B} + e\phi$$

אנו מזהים את המומנט המגנטי של האלקטרון $\vec{\mu} = \frac{e}{2mc}\vec{\sigma}$ עם היחס הגירומגנטי $g=2$
זו אחת ההצלחות הגדולות של משוואת דירק. הערך המדוד הינו $g \simeq 2.0023$

נבחן כעת את התיקון בסדר הבא ב v/c. לצורך הזה נניח כי $\vec{A}=0$. בסדר זה נמצא

$$\psi_B \simeq \frac{1}{2mc}\left(1 + \frac{V-W}{2mc^2}\right)\vec{\sigma}\cdot\vec{P}\,\psi_A$$

כאשר $V = e\phi$

הצבה למשוואה הראשונה נותנת

$$\left[\frac{1}{2m}(\vec{\sigma}\cdot\vec{P})^2 + \frac{1}{4m^2c^2}(\vec{\sigma}\cdot\vec{P})(V-W)(\vec{\sigma}\cdot\vec{P}) + V\right]\psi_A = W\psi_A$$

נשים לב כי בסדר זה כדי להבטיח ש $\psi = \begin{pmatrix}\psi_A \\ \psi_B\end{pmatrix}$ מנורמלת כנדרש צריך לדרוש

$$1 = \int d^3r\, \psi^+\psi = \int d^3r\left(\psi_A^+\psi_A + \psi_B^+\psi_B\right) \simeq \int d^3r\left[\psi_A^+\psi_A + \frac{1}{(2mc)^2}\psi_A^+\vec{P}^2\psi_A\right]$$

כלומר ש $\psi_s = \left(1 + \frac{1}{8m^2c^2}\vec{P}^2\right)\psi_A$ תהיה מנורמלת.

נציב לכן $\psi_A = \left(1 - \frac{1}{8m^2c^2}\vec{P}^2\right)\psi_s$ ונציב במשוואה ל ψ_A לקבל

$$H_{NR}\Psi_s = W\Psi_s$$

$$H_{NR} = \frac{\vec{P}^2}{2m} - \frac{\vec{P}^4}{8m^3c^2} + \frac{1}{4m^2c^2}(\vec{\sigma}\cdot\vec{P})V(\vec{\sigma}\cdot\vec{P}) + V - \frac{1}{8m^2c^2}\left(V\vec{P}^2 + \vec{P}^2V\right)$$

$$[V, \vec{P}^2] = \hbar^2(\nabla^2 V) + 2i\hbar(\vec{\nabla}V)\cdot\vec{P}$$ נשתמש בזהויות

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{P})V = V(\vec{\sigma}\cdot\vec{P}) + \vec{\sigma}\cdot[\vec{P}, V]$$

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{P})V(\vec{\sigma}\cdot\vec{P}) = V\vec{P}^2 - i\hbar(\vec{\nabla}V)\cdot\vec{P} + \hbar\vec{\sigma}\cdot(\vec{\nabla}V)\times\vec{P}$$

נקבל

$$H_{NR} = \frac{\vec{P}^2}{2m} - \frac{\vec{P}^4}{8m^3c^2} + \underbrace{\frac{\hbar}{4m^2c^2}\vec{\sigma}\cdot(\vec{\nabla}V)\times\vec{P}}_{\text{צימוד ספין-מסלול}} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}(\nabla^2 V)}_{\text{איבר Darwin}}$$

עבור פוטנציאל כדורי איבר ה spin-orbit ניתן לכתיבה :

$$H_{s.o} = \frac{\hbar}{4m^2c^2}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial V}{\partial r}\right)\vec{\sigma}\cdot(\vec{r}\times\vec{P}) = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\partial V}{\partial r}\vec{S}\cdot\vec{L}$$